

DTF 내 미분탄 휘발화 모델에 관한 수치적 연구

김진남* · 김호영**

Numerical Study on the Devolatilization models of Pulverized Coal in DTF

Jin Nam Kim, Ho Young Kim

ABSTRACT

In order to evaluate the devolatilization models of pulverized coal, various devolatilization models are examined for the numerical analysis of Drop Tube Furnace. The results of analysis are compared with the experimental results. A numerical study was conducted to explore the sensitivities of the predictions to variation of the model parameters. It helps to elucidate the source of the discrepancies. Three different wall temperature conditions of the DTF, 1100, 1300 and 1500°C were considered in this analysis. Two fuels are U.S.A. Alaska coal and Australia Drayton coal. The results of analysis with constant rate model, single kinetic rate model and two competing rate modes well presented fast volatile matter release in the early devolatilization. However, in the latter devolatilization they did not coincide with experimental results which presented tardy volatile matter release on account of pyrolysis of high molecular substance. On the other hand, the results of analysis with DAEM(Distribute Activation Energy Model) coincided with experimental results in overall devolatilization.

Key Words : Devolatilization, Constant rate model, Single kinetic rate model, Two competing rate model, Distributed activation energy model

기 호 설 명

A	arrhenius coefficient	g	gas phase
C_p	specific heat at constant pressure	p	particle phase
E	activation energy	σ	standard deviation
k	thermal conductivity	∞	ambient
m_0	mass of particle	0	initial state

1. 서 론

미분탄의 연소과정은 일반적으로 급격한 휘발과정과 휘발분의 연소 그리고 잔류된 찌(char)의 연소과정으로 진행되므로 미분탄의 휘발분 함량 및 휘발분의 방출속도는 초기 점화에 큰 영향을

미치게 되고 화염의 안정성과 관련해서도 매우 중요하다. 따라서 많은 연구자들이 실험실 규모의 석탄 반응로에서 미분탄의 휘발과정을 실험적, 수치적으로 연구하였다.

Ouyang[1]등은 압력이 가해진 DTF 내에서 반응시간, 입자 공급률, 불활성 분위기, 산화성 분위기를 주요 변수로 하여 석탄의 휘발화 및 연소에 관한 실험적 연구를 하였다.

Fu[2]등은 석탄 휘발분의 최종량은 입자의 크기와 가열 조건에 의존하기 때문에 실험에 의하

* 고려대학교 기계공학과 대학원

† 연락처, jjinnam@korea.ac.kr

** 고려대학교 기계공학과

여 결정되며 휘발화 모델에서의 활성화 에너지와 선지수 계수는 입자의 최종온도에 의존함을 보였다.

강[3]등은 선회형 연소기에서 내부 재순환 영역에서의 산소 농도의 분포를 판단 기준으로 하여 적절한 휘발화 모델과 차 연소 모델을 검증하였다.

Borghii[4]등은 Fluidized Beds에서 석탄의 휘발화 시간은 석탄 입자와 분위기 가스와의 혼합 시간의 함수임을 보였고 차 연소는 입자의 크기에 따른 표면적의 증가와 다공성의 확산에 의존함을 보였다.

조[5]등은 선회형 연소기에서 난류강도, 복사 열전달, 벽면 열손실 등 유동변수들이 석탄가스화에 미치는 민감도를 수치적으로 연구하였다.

현재 미분탄 연소기의 최적 설계는 대부분이 실험에 의존해 오고 있는 실정이며, 이는 미분탄 연소에 대한 정확한 모델의 정립과 해석방법을 확립하지 못하고 있음이 가장 큰 원인이라 할 수 있다. 특히 휘발분의 방출량과 방출 속도는 초기 점화에 매우 중요하므로 본 연구의 목적은 지금까지 개발된 네 가지의 미분탄 휘발화 모델(일정 반응률 모델, 단일 반응률 모델, 2-경쟁률 모델, DAEM)을 사용하여 미분탄의 휘발화 과정을 수치적으로 살펴보고 그 결과를 미분탄 연소에 관한 기초 실험이라 할 수 있는 DTF를 이용한 실험 결과와 비교함으로써 적절한 미분탄 휘발화 모델을 제시하는 것이다. 또한 각 모델에 대한 상수와 DTF의 벽면온도를 1100, 1300, 1500℃로 변화시켜 가면서 미분탄 휘발화 모델에 관한 영향도 살펴보았다.

2. 수치해법

2.1 DTF의 운전 조건 및 미분탄 성상

본 연구에서 사용된 실험결과는 참고문헌 [10]을 이용하였으며 이 때 사용된 DTF는 Fig. 1에 도시된 것과 같이 원통형으로 직경이 60mm, 길이는 600mm이며, 2차 공급기체의 일정한 흐름을 위해 honeycomb를 설치한 것이다. 미분탄의 휘발화 과정만을 살펴기 위하여 불활성 가스인 아르곤 가스를 사용하였다. 본 연구에서는 해석의 편의를 위하여 원통형의 DTF 연소로를 축 대칭 2차원으로 가정하여 계산을 수행하였다. 사용된 미분탄은 휘발분이 많이 함유되어 있는 미국 Alaska 석탄과 휘발분이 상대적으로 적은 호주 Drayton 석탄을 각각 사용하였으며 연소기의 운전 조건과 미분탄의 성상은 Table. 1과 Table. 2에 각각 나타내었다.

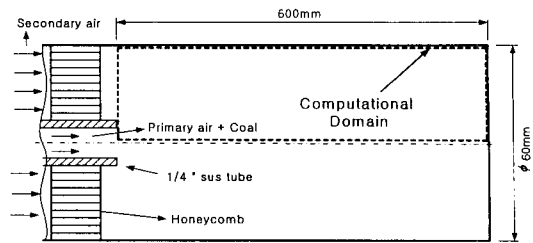


Fig. 1 Schematic diagram of furnace

Table. 1 Operating condition of furnace

Primary Gas	Volume flow rate	0.5 liter/min
	Mean velocity	0.663 m/sec
	Temperature(℃)	80
Secondary Gas	Volume flow rate	2.0 liter/min
	Mean velocity	0.018 m/sec
	Temperature(℃)	900

2.2 기체상 방정식

기체-고체간의 2상 유동장을 해석하기 위하여 연속상인 기체상에 대하여는 Eulerian 방법을 사용하고 단속상인 고체상에 대해서는 Lagrangian 방법을 사용하였다.

축대칭 2차원 원통좌표계의 기체상 방정식은 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i\phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad (1)$$

위 식에서 ϕ 는 종속변수로서 연속방정식에서는 1이고 운동량 보존식에서는 각 방향의 속도성분 (u, v), 에너지 보존에서는 기체상의 엔탈피(h) 그리고 성분보존식에서는 각 화학종의 질량분율 (Y_i)을 나타낸다. S_ϕ 는 기체상의 생성항, 그리고 Γ_ϕ 는 확산 계수를 나타낸다. 기체상의 상태량은 Sutherland's law를 이용하여 계산하였으며 그와 관련된 식은 참고문헌[6]을 이용하였다. 엔탈피는 각 화학종의 비열을 온도의 5차함수로 가정하여 계산하였다.

2.3 고체상 방정식

단일 입자의 운동방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$m_p \frac{d \vec{u}_{p,i}}{dt} = \sum F \quad (2)$$

Table. 2 Characteristics of coals

	Ultimate analysis(wt.%, Dry Ash Free Basis)				
	Carbon	Hydrogen	Nitrogen	Sulphur	Oxygen
Alaska	68.82	6.18	1.27	0.65	23.08
Drayton	79.33	5.54	1.87	0.59	12.67
	Proximate analysis(wt.%, Air Dry Basis)				Calorific Value (kcal/kg)
	Volatile	Moisture	Fixed carbon	Ash	
Alaska	49.39	10.05	31.49	8.18	6050
Drayton	31.82	4.53	52.61	11.04	6920

m_p 는 고체상 입자의 질량이고 $\vec{u}_{p,i}$ 는 각 방향의 속도 성분이며 F 는 고체상에 작용하는 힘이다. 항력과 체적력 만을 고려했을 때 운동방정식은 다음과 같다.

$$m_p \frac{d\vec{u}_{p,i}}{dt} = \frac{1}{2} \rho C_D (\vec{u}_i - \vec{u}_{p,i}) |\vec{u}_i - \vec{u}_{p,i}| A_p + m_p \vec{g} \quad (3)$$

여기서 항력계수 C_D 는 상대 레이놀즈 수 ($Re = \rho |\vec{u}_i - \vec{u}_{p,i}| d_p / \mu$)의 함수로 참고문헌 [7]을 이용하였다.

체적을 따르는 입자의 평균온도는 다음과 같은 에너지 수지(energy balance)에 의해 구해진다.

$$m_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} Q_i \quad (4)$$

위 식에서 h 는 대류 열전달 계수이고 Q_i 은 증발잠열이다. 대류 열전달 계수 h 는 Ranzi & Marshall의 상관식 으로부터 구한다.

$$Nu = \frac{h D_p}{k_\infty} = 2.0 + 0.6 Re_D^{0.5} Pr^{0.33} \quad (5)$$

본 연구에서 휘발화 모델은 다음의 4가지 모델을 적용하였다.

(1) 일정 반응률 모델(Constant rate model)

$$-\frac{1}{f_{v0} m_{p0}} \frac{dm_p}{dt} = A_0 \quad (6)$$

여기서, m_p 는 입자의 질량이고 f_{v0} 는 초기 휘발화물질의 분율이다. m_{p0} 는 초기 입자의 질량이며 A_0 는 일정한 상수이다.

(2) 단일 반응률 모델(Single kinetic rate model)

$$-\frac{dm_p}{dt} = k(m_p - (1 - f_{v0})m_{p0}) \quad (7)$$

여기서 k 는 반응률 상수으로써 다음과 같이 표현된다.

$$k = A_1 \exp(-E/RT_p) \quad (8)$$

(3) 2-경쟁률 모델(two-competing rate model)

$$\frac{m_v(t)}{m_{p,0} - m_a} = \int_0^t (\alpha_1 R_1 + \alpha_2 R_2) \exp\left(-\int_0^t (R_1 + R_2) dt\right) dt \quad (9)$$

여기서 $m_v(t)$ 는 시간 t 에서의 휘발분의 질량이고 m_a 는 재(Ash)의 양이다. 또한 R_1 과 R_2 는 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$R_1 = A_1 \exp(-E_1/RT_p) \quad (10)$$

$$R_2 = A_2 \exp(-E_2/RT_p) \quad (11)$$

(4) DAEM(Distributed Activation Energy Model)

DAEM은 다음과 같은 과정을 통하여 증발하는 휘발분의 양을 결정한다. 이 모델은 독립적이고 평형인 수많은 화학반응에 대한 Vand의 방법을 수정한 것으로 임의의 특정 휘발반응 i 에 대하여 다음과 같이 표현된다.[17]

$$\frac{dV_i}{dt} = k_i (V_i^* - V_i) \quad (12)$$

여기서 V_i 는 특정 휘발 반응에서의 휘발분의 질량이며 V_i^* 은 $t \rightarrow \infty$ 일 때의 V_i 를 나타낸다. 그리고 k_i 는 다음과 같은 식으로 나타낸다.

$$k_i = k_0 \exp(-E_i/RT_p) \quad (13)$$

따라서 식(13)을 적분하면 다음과 같다.

$$V_i = V_i^* - V_i^* \exp\left(-\int_0^t k_i dt\right) \quad (14)$$

이때 식 (14)의 E_i 가 Gaussian Distribution function $f^*(E)$ 의 함수로 표현된다고 하면 휘발분의 총량은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$V = V^* - V^* \int_0^\infty \exp\left(-\int_0^t k(E)dt\right) f^*(E) dE \quad (15)$$

여기서 Gaussian Distribution function은 다음과 같이 표현된다.

$$f^*(E) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (16)$$

여기서 σ 는 표준편차(standard deviation)이며 E_0 는 평균 활성화 에너지를 나타낸다.

회발화 과정동안 부풀음(Swelling)효과에 의하여 입자의 지름이 다음과 같이 변한다.

$$\frac{D_p}{D_{p0}} = 1 + (C_{sw} - 1) \frac{m_{p0} - m_p}{f_{i0} m_{p0}} \quad (17)$$

여기서 D_p 는 입자의 지름, D_{p0} 는 초기 입자의 지름 그리고 C_{sw} 는 부풀음 계수로 10%의 입자 지름의 증가를 고려하였다.[8]

2.4 수치 해석 방법

미분탄이 공급되는 중심축 부근과 입구 쪽에 미세한 격자를 사용하였다. 운동량 방정식의 해석을 위해 엇갈림 격자(staggered grid)를 사용하였다. 방정식들은 유한차분법(Finite Difference Method)을 이용하여 차분화되며, 이 때 대류항은 Power Law Scheme을 사용하였고 압력-속도 조합은 SIMPLE 방법을 이용하였다.

입자의 속도와 궤적은 단순히 적분할 수도 있지만 이 방법은 정확도를 위해 시간 단계를 매우 작게 해야하기 때문에 효과적이지 못하다. 따라서 4차 Runge-Kutta method를 사용하여 입자의 운동 방정식을 적분하는 방법을 사용한다. 이 방법은 입자가 어느 특정 셀(cell)을 지나가는데 걸리는 시간을 추정한 뒤 입자의 운동방정식을 Runge-Kutta method로 적분하고 그 셀의 해당 영역(domain of acceptability) 안에 입자가 놓이는지 확인한 후 그렇지 않을 경우 시간을 다시 계산하여 입자가 해당영역 안에 놓이도록 반복 계산하는 방법이다.[9]

3. 결과 및 고찰

실험에서 미분탄 회발분의 최종량은 벽면온도에 영향을 받았으며 그 결과는 Table. 3과 같다. 따라서 본 연구에서 온도에 따른 회발분 함량을 실험결과에 준하여 설정하였다. 실험결과는 참고 문헌[10]을 이용하였다.

회발화 모델로서 각 모델의 상수값을 변화시켜 한 가지의 일정 반응률 모델 (Case A)[11]과 4가

Table. 3 Fraction of volatile

	Wall Temperature	Fraction of Volatile
Alaska	1100°C	0.658
	1300°C	0.717
	1500°C	0.758
Drayton	1100°C	0.468
	1300°C	0.495
	1500°C	0.579

Table. 4 devolatilization model parameters

	Constant (s ⁻¹)	
Case A	12	
	Pre-exponential factor(s ⁻¹)	Activation Energy(J/Kmol)
Case B	8.36×10 ⁴	7.4×10 ⁷
Case C	5.5×10 ⁵	7.87×10 ⁷
Case D	2.0×10 ⁴	4.94×10 ⁷
Case E	2.3×10 ⁴	2.303×10 ⁸
	A ₁ , A ₂ , α ₁	E ₁ , E ₂ , α ₂
Case F	2×10 ⁵	1.046×10 ⁸
	1.3×10 ⁷	1.674×10 ⁸
	0.3	1.0
Case G	3.7×10 ⁵	7.4×10 ⁷
	1.5×10 ¹³	2.51×10 ⁸
	0.421	0.9
	Standard deviation	Mean activation Energy(J/Kmol)
Case H	1×10 ⁸	3.15×10 ⁸
Case I	2.93×10 ⁷	2.12×10 ⁸

지의 단일 반응률 모델 (Case B ~ E) [12][13][14][15], 2가지의 2-경쟁률 모델 (Case F, G)[16][3] 그리고 2가지의 DAEM (Case H, I) [17][18]을 사용하여 계산하였다. 각 모델별 계수는 Table. 4와 같다.

3.1 유동해석 및 온도분포

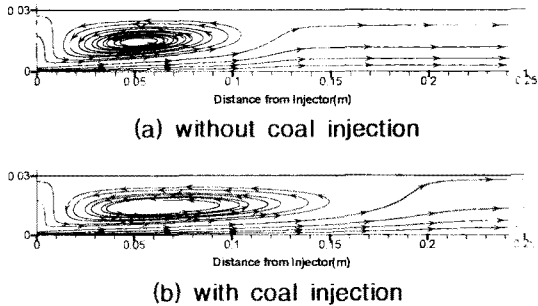


Fig. 2 Stream lines in DTF at wall temperature 1100°C

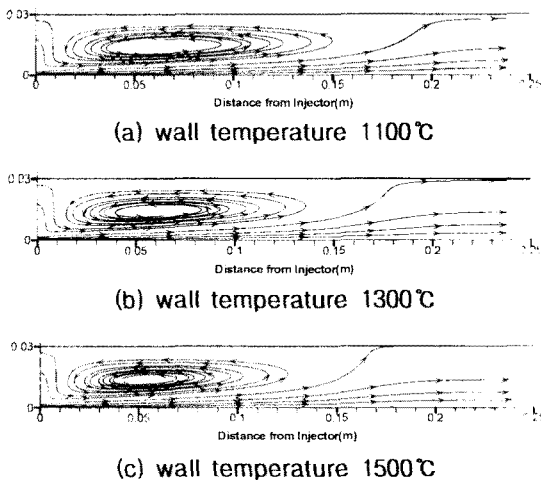


Fig. 3 Stream lines with respect to wall temperature

Fig. 2는 벽면온도가 1100°C일 때 DTF내 유동장을 나타낸 것이다. 이때 미분탄은 Alaska 석탄을 사용하였고 휘발화 모델은 DAEM을 이용하였다. 1차 공급가스의 속도가 2차 공급가스의 속도보다 상대적으로 매우 빨라 입구 쪽에서 와류가 형성됨을 알 수 있다. 또한 미분탄 입자가 존재하는 경우, 입자가 가지고 있는 운동량의 전달로 인해 와류가 형성되는 영역이 더 넓어졌음을 확인할 수 있다

Fig. 3은 벽면온도의 변화에 따른 DTF내 유동장의 변화를 살펴본 것이다. 온도가 증가함에 따라 입자로의 열전달량이 증가하여 초기 미분탄의 휘발분의 방출 속도가 증가하기 때문에 미분탄의 질량감소가 더욱 빨리 이루어지게 된다. 결국 벽면 온도가 증가하면 입자로부터의 운동량 전달이

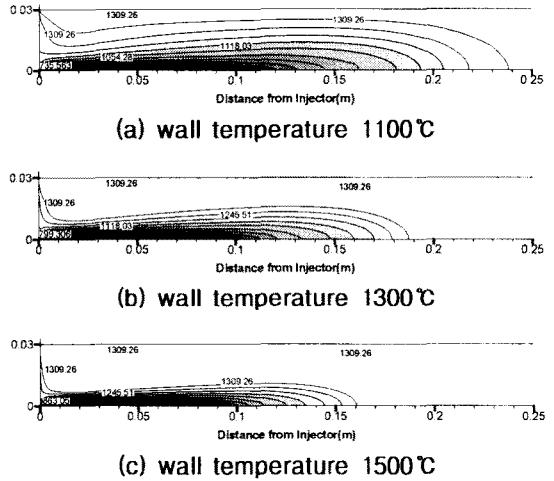


Fig. 4 Temperature contours with respect to wall temperature

상대적으로 줄어들어 와류가 형성되는 영역이 점점 줄어들고 있음을 확인할 수 있다.

Fig. 4는 벽면 온도의 변화에 따른 DTF내 온도분포를 나타낸 것이다. 이때 미분탄은 Alaska 석탄을 사용하였고 휘발화 모델은 DAEM을 이용하였다. 벽면 온도가 증가함에 따라 열전달량이 증가하여 중심부의 온도가 증가함을 확인할 수 있으며 와류가 형성되는 영역이 줄어들기 때문에 DTF내 온도가 평형상태에 도달하는 영역 역시 줄어들고 있다.

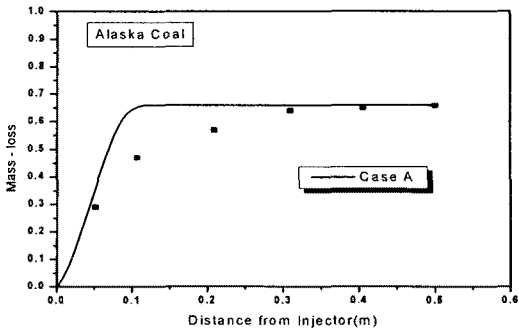
3.2 Alaska 석탄의 휘발화

3.2.1 벽면 온도가 1100°C일 때

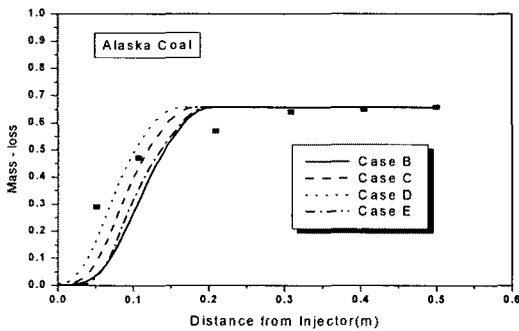
Fig. 5는 DTF의 벽면온도가 1100°C일 때 Alaska 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다.

Case A는 일정 반응률 모델을 이용하여 미분탄의 휘발분 방출량을 계산한 결과이다. 입구쪽의 급격한 질량 감소를 잘 예측하고 있으나 일정 반응률 모델의 개념이 휘발과정이 일정하게 일어난다는 개념아래 만들어진 것이기 때문에 DTF 후류 부분의 낮은 휘발분 방출속도는 잘 예측하지 못하고 있다.

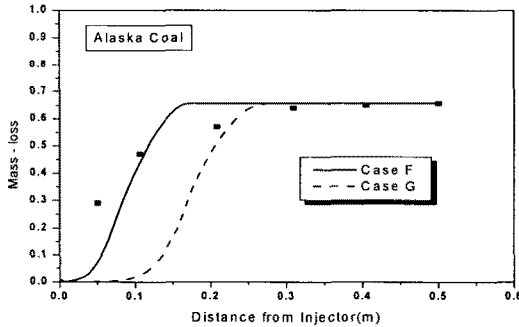
Case B부터 Case E까지는 단일 반응률 모델을 이용하여 계산한 결과로서 단일 반응률 모델에 대한 상수중 선지수계수값과 활성화 에너지값을 바꿔가면서 Case 별로 비교해 보았다. 단일 반응률 모델은 휘발분의 방출 속도가 입자내 남아있는 휘발분의 양에 비례한다는 가정하에 만들어진 모델로서 본 연구에서는 일정 반응률 모델에 비하여 실험결과와 상당한 오차를 보이고 있



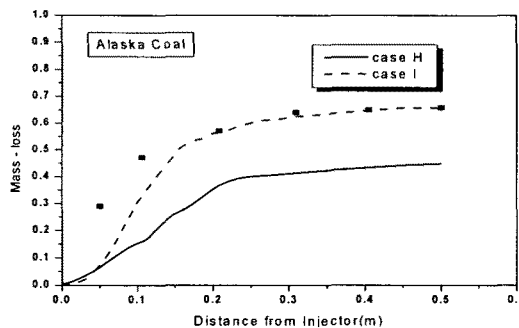
(a) constant rate model



(b) Single kinetic model



(c) Two competing rate model



(d) Distributed Activation Energy model

Fig. 5 Mass-loss of Alaska coal at wall temperature 1100°C

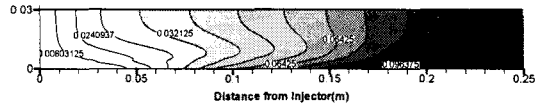


Fig. 6 The volatile contour of case I at wall temperature 1100°C

으나 휘발분의 방출되는 영역이 일정 반응률 모델에 비하여 더 크다. Case 별로 비교해보면 선지수 계수값이 증가함에 따라 휘발분의 방출 속도가 증가하였으며 활성화 에너지값의 증가에 따라 휘발분의 방출 속도가 느려짐을 확인할 수 있다. 단일 반응률 모델은 모든 온도 범위에 적용되므로 반응률의 상수값들을 잘못 채택하면 계산결과에 큰 오류가 나타날 수 있다. 따라서 단일 반응률 모델을 사용할 경우 상수값을 변화시켜 계산의 오류를 좀 더 줄일 수 있을 것으로 생각된다.[3]

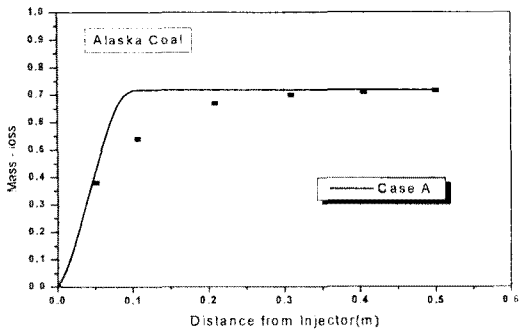
2-경쟁률 모델을 사용하였을 경우 실험 결과와의 오차가 상당히 컸으며 특히 Case G의 경우 그 오차가 더욱 컸다. Case G의 경우 초기의 빠른 휘발분 방출에 대한 가중치를 더욱 높이거나 빠른 휘발분 방출에 대한 활성화 에너지 값을 낮춤으로써 계산의 오차를 줄일 수 있을 것으로 예상된다.

Case H와 Case I는 DAEM을 이용하여 질량 감소를 예측한 결과이다. 다른 모델에 비하여 실험 결과와 상당히 일치함을 확인할 수 있다. 특히 DTF 후류 부분의 낮은 휘발분 방출 속도를 잘 예측하고 있으며 이는 활성화 에너지의 분포가 Gaussian 분포를 따른다는 DAEM의 개념에 의한 것으로 생각된다. 다만 Case H는 Gaussian 분포의 평균 활성화 에너지 값이 높아, 높은 활성화 에너지 값을 가지고 있는 화학반응이 일어나지 않아 미분탄의 질량감소를 실험결과보다 작게 예측하고 있다.

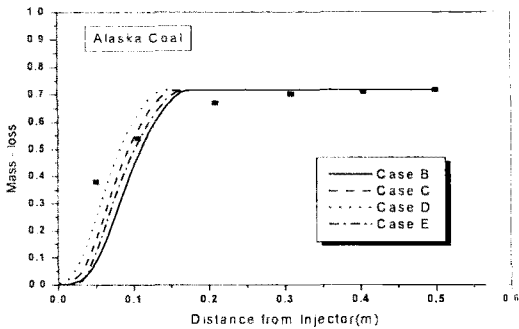
Fig. 6은 실험결과와 가장 일치하는 DAEM, Case I의 Alaska 석탄에 대한 DTF내 휘발분 분포상태를 나타낸 것이다. Fig. 5를 볼 때 휘발분이 가장 많이 방출되는 곳은 0.1m 이내이지만 1차 공급가스의 속도가 매우 빠르기 때문에 휘발분이 뒤쪽으로 밀려 Fig. 6에서 휘발분이 최대가 되는 지점은 입구로부터 0.2m 정도 되는 곳이다. 또한 미분탄 입자가 층류 유동을 타고 흘러가기 때문에 DTF의 중심축 부근에 휘발분의 최대인 지점이 존재하고 있다.

3.2.2 벽면 온도가 1300°C일 때

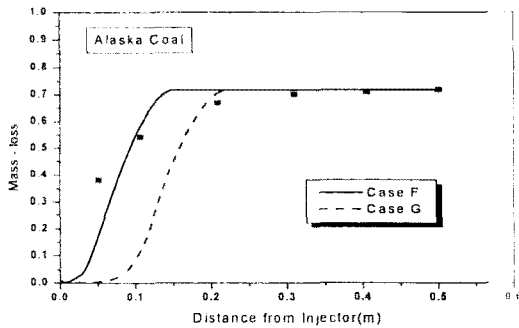
Fig. 7은 DTF의 벽면온도가 1300°C일 때 Alaska 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다. 벽면 온도가 1100°C일 때와 마찬가지로



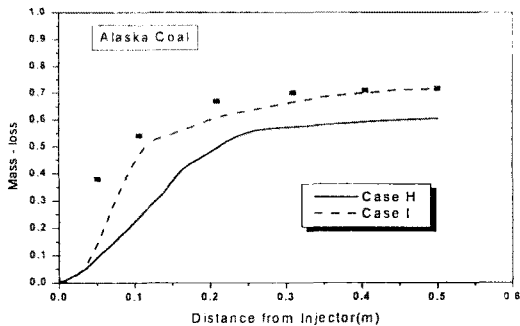
(a) constant rate model



(b) Single kinetic model



(c) Two competing rate model



(d) Distributed Activation Energy model

Fig. 7 Mass-loss of Alaska coal at wall temperature 1300°C

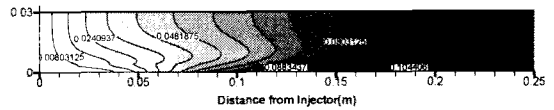


Fig. 8 The volatile contour of case I at wall temperature 1300°C

일정 반응률 모델은 초기 급격한 휘발분의 방출 속도는 잘 예측하고 있으나 DTF 후류 부분의 느린 휘발분 방출 속도는 잘 예측하지 못하고 있다. 또한 벽면 온도가 증가함에 따라 벽면으로부터 전달되는 열전달량의 증가로 인해 질량감소가 1100°C에 비해 증가하였다.

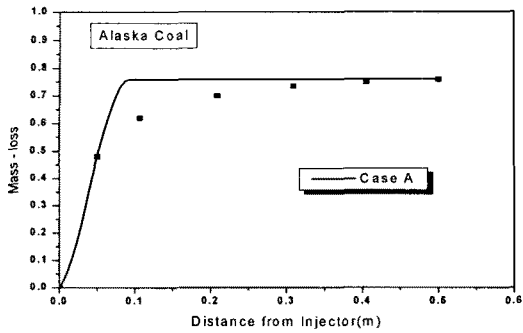
일정 반응률 모델 역시 벽면 온도가 1100°C일 때와 마찬가지로 DTF 후류 부분의 질량감소를 예측하지 못했고 2-경쟁률 모델 또한 실험결과와 상당한 오차를 보이고 있다. 벽면 온도가 1300°C일 때 역시 DAEM의 Case I가 전체적인 Mass-loss 경향이 실험결과와 가장 일치하였다.

Fig. 8은 벽면 온도가 1300°C일 때 DAEM, Case I의 Alaska 석탄에 대한 휘발분 분포 상태를 나타낸 것이다. 벽면 온도가 1100°C일 때에 비하여 휘발분의 방출 속도가 빨라지기 때문에 휘발분이 최대가 되는 지점 역시 입구 쪽(0.18m 내외)으로 더 치우쳐 있으며 그 양 또한 증가했음을 볼 수 있다.

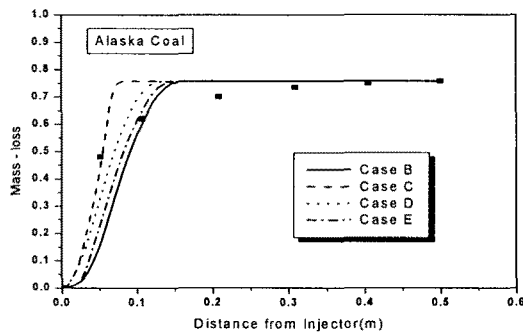
3.2.3 벽면 온도가 1500°C일 때

Fig. 9는 DTF의 벽면온도가 1500°C일 때 Alaska 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다. 벽면 온도가 증가하였기 때문에 이로 인한 Mass-loss도 증가하였으며 벽면 온도가 낮을 때와 마찬가지로 일정 반응률 모델, 단일 반응률 모델, 2-경쟁률 모델은 초기 급격한 휘발분의 방출속도는 잘 예측하고 있으나 DTF 후류의 느린 휘발분 방출속도는 예측하지 못하고 있으며 Case G의 경우 초기 실험결과와의 오차가 줄어들었다. DAEM은 벽면 온도가 1500°C 일 때 더욱 실험결과와 상당히 일치하고 있다. 특히 Case H의 경우 벽면 온도가 올라감에 따라 초기 휘발분의 방출속도도 실험결과와의 오차가 줄어들고 있으며 Case I의 경우 역시 Mass-loss의 오차가 줄어들고 있음을 확인 할 수 있다. 이는 벽면 온도가 올라감에 따라 열전달량이 증가하여 높은 활성화 에너지값을 갖는 화학반응이 일어났기 때문이라고 생각된다.

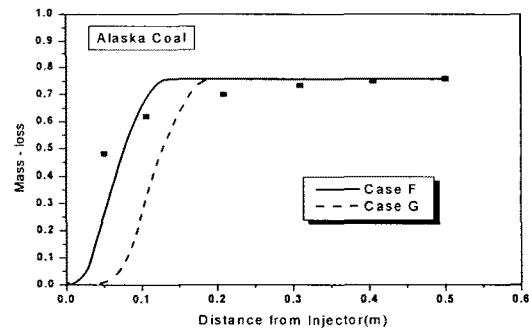
Fig. 10은 벽면 온도가 1500°C일 때 DAEM, case I의 Alaska 석탄에 대한 휘발분 분포 상태를 나타낸 것이다. 열전달량의 증가로 휘발분의 방출 속도가 가장 빠르기 때문에 휘발분이 최대가 되는 지점이 0.15m 정도로 가장 앞쪽에 위치고 있다.



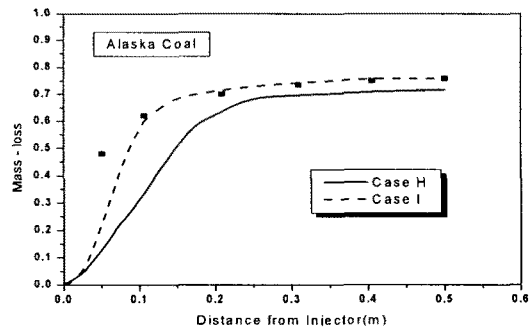
(a) constant rate model



(b) Single kinetic model



(c) Two competing rate model



(d) Distributed Activation Energy model

Fig. 9 Mass-loss of Alaska coal at wall temperature 1500°C

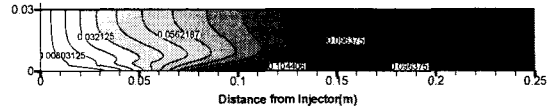
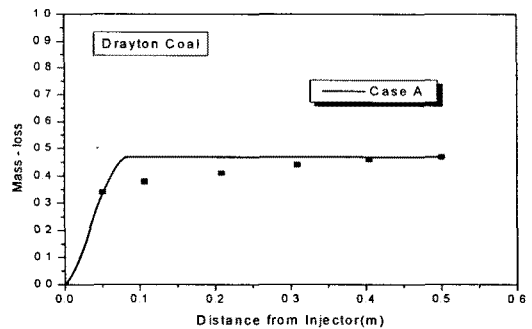


Fig. 10 The volatile contour of case I at wall temperature 1500°C

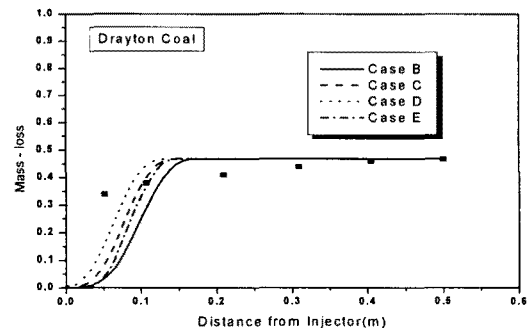
3.3 Drayton 석탄의 휘발화

3.3.1 벽면 온도가 1100°C일 때

Fig. 11은 DTF의 벽면온도가 1100°C일 때 Drayton 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다. Alaska 석탄에서와 마찬가지로 일정 반응률 모델과 단일 반응률 모델은 초기 급격한 질량감소를 잘 예측하고 있으나 DTF 후류 부분의 느린 휘발분 방출 속도는 실험결과와 큰 오차를 보이고 있다. 2-경쟁률 모델은 Drayton 석탄에서도 실험결과와의 오차가 컸으며 DAEM은 Alaska 석탄과 달리 실험결과와 상당한 오차를 보이고 있다. 이는 미분탄의 종류와 온도 등에 따라 각 모델의 적절한 상수값을 선택해야함을 보여주는 것으로 Fu[2]등의 결과와 일치한다고 할 수 있다.



(a) constant rate model



(b) Single kinetic model

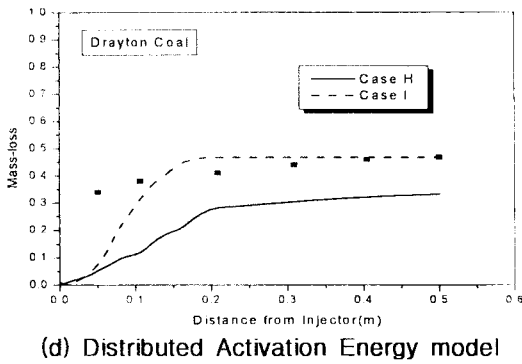
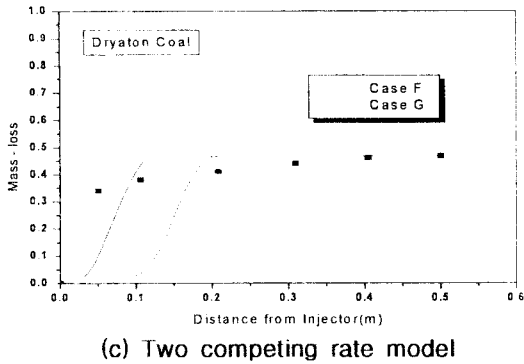


Fig. 11 Mass-loss of Drayton coal at wall temperature 1100°C

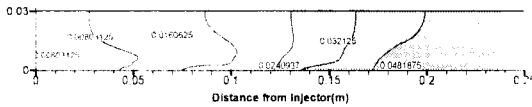


Fig. 12 The volatile contour of case H at wall temperature 1100°C

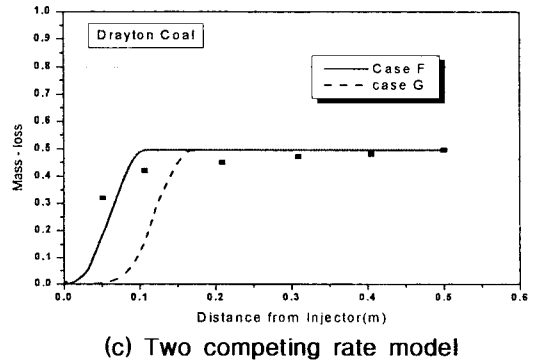
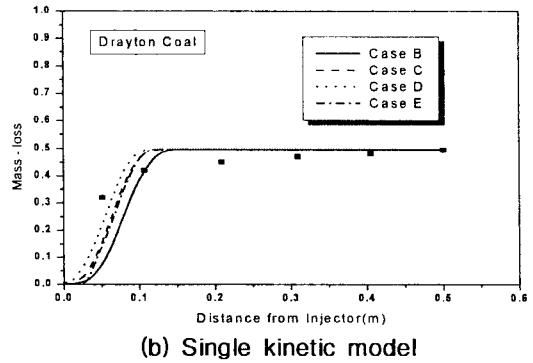
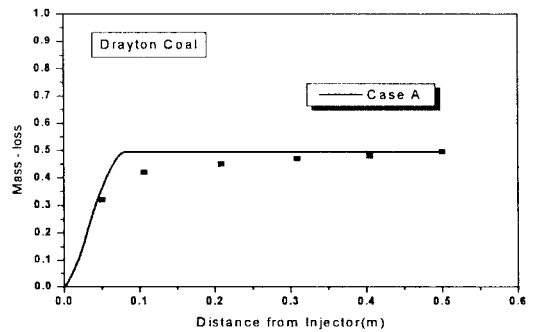
Fig. 12는 Drayton 석탄의 DTF내 휘발분 분포 상태로서 휘발화 모델은 DAEM, case H를 이용한 것이다. Drayton 석탄은 Alaska 석탄에 비하여 상대적으로 휘발분 함량이 작기 때문에 Mass-loss 뿐만 아니라 휘발분 분포 상태를 비교해보더라도 상대적으로 휘발분 값이 작게 예측되고 있다.

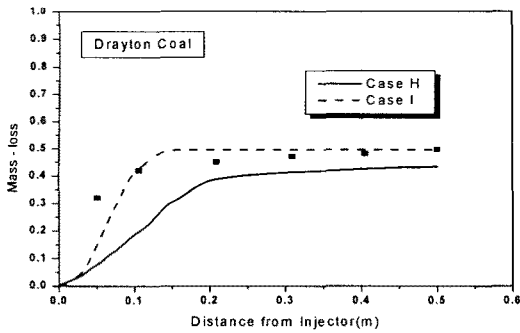
3.3.2 벽면 온도가 1300°C일 때

Fig. 13은 DTF의 벽면온도가 1300°C일 때 Drayton 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다. 벽면 온도가 증가하면서 휘발분의 방출량이 증가하였고 방출 속도 또한 증가하여 DAEM의 Case I의 경우 벽면 온도가 1100°C일 때에 비하여 실험결과와의 오차가 줄어들었다. Alaska 석탄에서 Case H가 실험결과와 잘 일치

한다는 것과 비교해 볼 때 각각의 미분탄에 대한 평균 활성화 에너지 값의 선택이 상당히 중요함을 알 수 있으며 나머지 모델들의 경향은 Alaska 석탄과 비슷하다.

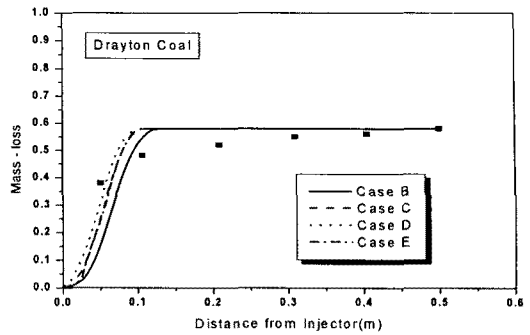
Fig. 14는 벽면 온도가 1300°C일 때 Drayton 석탄의 휘발분 분포 상태를 DAEM, case H를 이용하여 나타낸 것이다. 벽면 온도가 증가함에 따라 Mass-loss를 살펴볼 때 실험결과와의 오차는 줄어들었지만 초기 급격한 휘발분의 방출속도에 대한 오차는 여전히 크기 때문에 입구쪽에서의 휘발분의 분포 상태는 벽면 온도가 1100°C일 때와 비슷하다. 다만 휘발분의 방출량이 증가했음을 Fig. 14를 통해서도 알 수 있다.





(d) Distributed Activation Energy model

Fig. 13 Mass-loss of Drayton coal at wall temperature 1300°C



(b) Single kinetic model

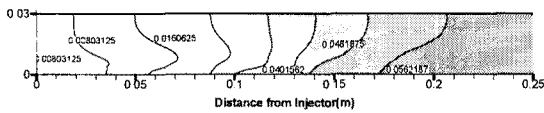
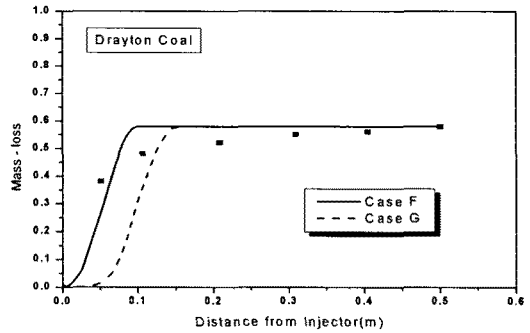


Fig. 14 The volatile contour of case H at wall temperature 1300°C

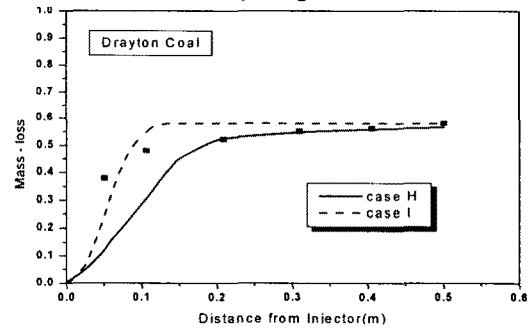


(c) Two competing rate model

3.3.3 벽면 온도가 1500°C일 때

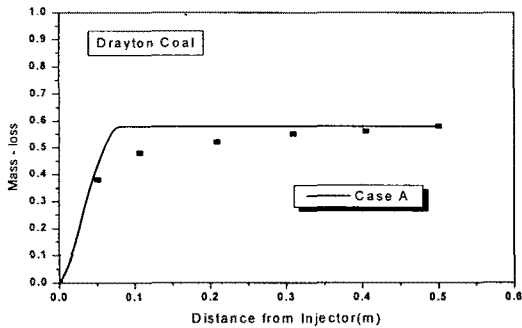
Fig. 15는 DTF의 벽면온도가 1500°C일 때 Drayton 석탄의 휘발과정을 모델별로 계산한 결과이다. 벽면 온도가 증가함에 따라 Case I의 결과와 실험결과에 상당히 근접함을 볼 수 있다. 이는 미분탄의 종류와 온도 그리고 압력에 따라 적절한 상수값을 선택해야함을 다시 한번 보여준 결과이며 초기 급격한 휘발분의 방출에 대한 본자의 평균 활성화 에너지나 표준편차 그리고 본 연구에서는 다루지 않은 DAEM의 선지수 계수값에 대한 적절한 선택이 이루어져야 줄일 수 있다고 본다.

Fig. 16은 벽면 온도가 1500°C일 때 Drayton 석탄에 대한 휘발분 분포 상태를 DAEM, case H를 이용하여 나타낸 것이다. 벽면 온도가 1300°C일 때와 마찬가지로 Mass-loss는 실험결과와의 오차를 줄였으나 초기 급격한 휘발분 방출속



(d) Distributed Activation Energy model

Fig. 15 Mass-loss of Drayton coal at wall temperature 1500°C



(a) constant rate model

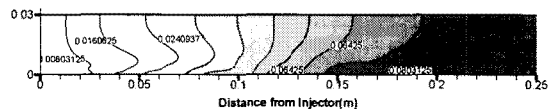


Fig. 16 The volatile contour of case H at wall temperature 1500°C

도를 잘 예측하지 못했고, Drayton 석탄의 휘발분 함량이 상대적으로 Alaska 석탄보다 작기 때문에 휘발분의 분포 상태가 각각의 벽면온도에 대해서 모두 Alaska 석탄의 휘발분 분포상태와 다른 경향을 보이고 있다.

4. 결론

본 연구는 DTF내 미분탄 휘발화 모델에 대한 수치적 연구를 하였다.

(1) 탈휘발과정 중에 방출되는 휘발분은 미분탄의 종류, 최종온도와 압력 등에 따라 큰 차이가 발생한다. 따라서 미분탄 내 휘발분의 함량은 공업분석이 아닌 각각의 실험 조건 하에서 설정되어야 하며 본 연구에서는 DTF의 벽면 온도와 미분탄의 종류에 따라 휘발분 함량을 변화시켰다.

(2) 일정 반응률 모델은 휘발분의 방출 속도가 일정하다는 가정 하에 만들어진 모델로서 그 상수값을 적절히 선택해야 하며 본 연구에서 일정 반응률 모델은 초기의 급격한 질량 감소는 잘 예측하였으나 DTF 후류의 느린 휘발분 방출 속도는 예측하지 못했다.

(3) 단일 반응률 모델은 휘발분의 방출 속도가 미분탄 내 남아있는 휘발분의 양에 비례한다는 가정 하에 만들어진 모델로서 본 연구에서는 실험 결과와의 오차가 컸으며 이를 줄이기 위해서는 적절한 선지수 계수값과 활성화 에너지 값을 선택해야 한다고 본다.

(4) 2-경쟁률 모델은 낮은 온도에서는 느린 반응이 강하게 일어나고 높은 온도에서는 빠른 반응이 강하게 일어난다는 가정 하에 만들어진 모델로서 본 연구에서는 기존에 제시되었던 상수값을 통한 결과는 실험결과와 상당히 큰 오차를 보이고 있다.

(5) DAEM은 활성화 에너지가 Gaussian 분포 함수로 표현된다는 가정 하에 만들어진 모델이기에 DTF 후류의 느린 휘발분 방출 속도를 잘 예측하였으며 전체적으로 다른 모델에 비하여 실험 결과와 상당히 일치하였다. 다만 미분탄의 종류와 벽면 온도에 따라 평균 활성화 에너지 값과 표준편차 그리고 선지수 계수 값을 적절히 선택해야 정확한 탈휘발 과정을 예측할 수 있을 것으로 본다.

후 기

본 연구는 연소기술연구센터(CERC)의 지원에 의하여 수행되었으며 이에 대하여 감사 드립니다.

참고문헌

- [1] Shan Ouyang, Hasina Yeasmi And Joseph Mathews, "A Pressurized Drop-Tube Furnace for Coal Reactivity Studies", American Institute of Physics, Vol. 69, No 8, pp. 3036-3041, 1998.
- [2] Weibiao Fu, Yanping Zhang, Hongqiao Han, And Yuning Duan, "A Study on Devolatilization of Large Coal Particle", Combustion and Flame Vol. 70, pp. 253-266, 1987.
- [3] 강일만, 김호영, 박석호, "Effect of Combustion Models on the Prediction of Pulverized Coal Flame Characteristics", 제 18회 KOSCO Symposium 논문집, pp. 91-98, 1999.
- [4] Giorgio Borghi, Adel F. Sarofim And Janos M. Beer, "A Model of Coal Devolatilization and Combustion in Fluidized Beds", Combustion and Flame, Vol. 61, pp. 1-16, 1985.
- [5] 조한창, 신현동, "Parametric Sensitivity of the Flow Characteristics on Pulverized Coal Gasification", KOSCO Symposium 논문집, Vol. 4, No 1, pp. 1-15, 1999.
- [6] F. M. White, "Fluid Mechanics", McGraw-Hill, Singapore, 1991.
- [7] M. C. Yuen and L. W. Chen, "On Drag of Evaporating liquid droplets", Comb. Sci. and Tech., Vol. 14, pp.147-154, 1976.
- [8] L. D. Smoot and D. T. Pratt, "Pulverized Coal Combustion and Gasification", New York, Plenum Press, 1979.
- [9] Zhou Lixing, "Theory and Numerical Modeling of Turbulent Gas-Particle Flows and Combustion", Science Press and CRC Press, Inc., 1993.
- [10] 한 응, "미분탄의 2단 연소에 의한 NOX 환원 및 저감 특성", 충남대학교, 2001.
- [11] M. M. Baum and P. J. Street, "Predicting the Combustion Behavior of Coal Particles", Combust. Sci. Tech., Vol. 3, No 5, pp. 231-243,

1971.

[12] Badzioch S. and Hawksley, P. G. W, " Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles", Ind. Eng. Chemical Process Des. Develop, Vol 9, No 4, p521, 1970.

[13] Philip M. Goldberg and Robert H. Essenhigh, "Coal Combustion In a Jet-Mix Stirred Reactor", The Seventeenth International Symposium on Combustion, pp. 145-154, 1978.

[14] D. B. Anthony, J. B. Howard, H. C. Hottel and H. P. Meissner, "Rapid Devolatilization of Pulverized Coal", The Fifteenth International Symposium on Combustion, pp. 1303-1317, 1974.

[15] Thomas H. Fletcher, "Time-Resolved Particle Temperature and Mass Loss Measurements of a Bituminous Coal During Devolatilization", Combustion and Flame, Vol. 78, pp. 223-236, 1989.

[16] H. Kobayash, J. B. Howard and A. F. Sarofim, "Coal Devolatilization at High Temperatures", The sixteenth International Symposium on Combustion, pp. 411-425, 1976.

[17] L. D. Smoot and Philip J. Smith, "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, 1985.

[18] F. C. Lockwood, S. M. A. Riziv, "Coal Combustion Model Validation Using Cylindrical Furnace Data", The twentieth Symposium International on Combustion, pp. 513-522, 1984.