

## 다공성 char 입자의 반응 모델링 및 모사

김기현, 박준용, 오 민\*, 김신혁  
한밭대학교 화학공학과  
(oh\_min@hotmail.com\*)

다공성 char 입자의 반응에 대한 연구는 석탄으로 부터 합성가스를 얻는 가스화 공정을 위한 기초 연구로 매우 중요한 위치를 차지하고 있으며, 최근엔 단일입자 가스화에 대한 이론적 실험적 연구가 매우 활발하게 진행되고 있다. 본 연구에서는 단일 char 입자의 가스화에 대한 동적거동을 예측하기 위한 종합적인 수학적 모델을 제시하고 이에 대한 동적 모사를 수행하였다. 가스화과정에서 일어나는 현상을 고려하여 전체 수학적 모델은 다공성 입자 해석에 많이 사용되고 있는 DGM(Dusty Gas Mode)에 기초하여 수립되었으며 1) 입자의 물리적 구조적 모델 2) 가스화 및 연소의 반응 모델 3) pore 구조에서 확산 모델 4) 입자 주변에 대한 film 모델 5) 열전달 모델 6) micro pore의 파쇄를 비롯한 구조 변환 모델 등으로 구성된다. Char 입자는 다공성으로 macro 및 micro pore로 구성되며 macro pore를 통해 확산된 가스가 micro pore의 반응 활성 부분에서 반응을 일으킨다. 가스의 확산은 다성분 확산 모델인 Maxwell-Stefan 모형을 사용하였으며, micro pore 에서는 직경이 매우 작은 점을 고려하여 Knudsen diffusion 을 고려하였다. 반응이 진행됨에 따라 입자 전체의 공극이 점차 커지게 되며 일정 한계점을 지나게 되면 입자의 구조가 붕괴되는 물리적 현상이 일어나게 되는데 이를 입자의 크기가 전환률의 함수로 표현되는 moving boundary problem 으로 문제를 구성하여 모델링과 모사를 수행하였다. Char 입자의 반응은 온도에 매우 민감하므로 다양한 온도 범위에서 모사를 수행하였으며 이에 대한 결과를 비교, 분석하였다.