

# 화학 열펌프 시스템 설계를 위한 반응기의 동적 거동 모사

\*김태민, 김성준, 최흥규<sup>o</sup>, 이태희  
연세대학교 공과대학 화학공학과  
<sup>o</sup>한국 이동 에너지 연구소

## Dynamic Behavior Simulation of Reactor for Chemical Heat Pump System Design

Tae-Min Kim, Sung-Joon Kim, Hong-Kyu Choi, Tae-Hee Lee  
Dept. of Chemical Engineering, Yonsei University  
<sup>o</sup>Korea Institute of Mobile Energy

### 요 약

화학 열펌프 시스템의 반응기 설계를 위하여 정적 설계의 결과를 이용하여 시간에 따른 전화율, 온도, 압력, 출력 등의 변화에 대한 모사를 시도하였다. 정적 모사를 통한 설계결과는 동적 거동 모사의 결과와 유사하였으며, 이로부터 정적모사가 동적모사를 위한 적절한 초기치와 기초 설계 정보를 제공함을 알 수 있었다.

본 연구를 통하여 확립된 설계절차와 해석방법에 따른 사례연구를 통하여 향후 실용화될 화학 열펌프 시스템의 개략적인 사양과 바람직한 설계방향을 제시할 수 있었으며, 반응기의 조작에 따른 제어변수의 영향을 평가하는 기준을 마련할 수 있었다.

### 1. 서론

화학 열펌프는 CFC를 사용하지 않으며 압축기가 필요없고 에너지를 장기간 저장할 수 있다. 특히 이 열펌프는 고질의 열을 얻을 수 있으면서 기계적으로 움직이는 부분이 없기 때문에 수명이 길고 소음이 적다는 장점을 가지고 있다. 이 화학 열펌프는 폐열의

회수나 대용량의 지역난방에 사용할 수 있고, 기계식 및 흡수식 열펌프를 대체할 수 있기 때문에 현재 국내외에서 이 열펌프에 관한 본격적인 연구를 진행하고 있다. 프랑스의 Perpignan 대학 Spinner 교수팀이 개발한 고체-기체 가역 화학 열펌프 시스템(reversible chemical heat pump system)인 STELF (systèmes thermochimiques

énergétiques à liant ELF- IMP)는 ELF사가 모듈화하여 상용화 단계에 들어서 있다. 이 시스템의 반응계는 고상 반응이 갖는 열전달과 재생능력 제한의 문제를 흑연을 사용한 IMPEX(Impregnated-expanded graphite)라는 전도성 블록을 이용하여 해결하였으며, 저급 에너지의 축열과 냉동 및 냉난방 시스템에 적합하다.

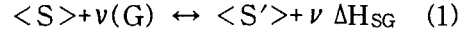
반응기의 설계를 위하여는 우선, 원하는 출력을 얻기 위하여 핵심이 되는 전도성 블록의 제작에 따른 적절한 열의 선택과 열 및 물질 전달에 따른 문제를 일으키지 않는 범위 내에서 최소의 블록 부피와 질량, 최대의 에너지 밀도를 갖는 겔보기 밀도, 잔류 공극률, 흑연 혼합비 등의 제작 변수를 구하여야 하며, 조작조건에 따른 열교환 면적과 이에 대한 적절한 반응기의 지름과 길이, 스테인레스 강의 두께 등을 계산하여야 한다. 정적 설계(static design)를 통하여 얻은 값들을 이용하여 시간에 따른 반응기의 온도, 압력, 전하율 및 출력을 모사할 수 있다. 여기서 계산된 출력이 목적하는 값에 이르지 않을 경우, 반응기의 구조 및 제작변수를 바꾸어 다시 반응기의 거동을 모사하여 원하는 출력을 얻을 수 있도록 계산을 반복한다.

본 연구에서는 이와같은 방법을 기초로 하여 체계적인 반응기의 설계방법 및 절차를 확립하고, 설계사례를 통하여 향후 실용화될 화학 열펌프 시스템 설계 기술의 토대를 마련하고자 한다.

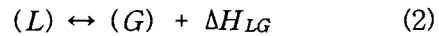
## 2. 화학 열펌프 시스템

화학 열펌프는 기체와 고체간의 가역 화학반응에 따른 열효과에 기초한

것으로, 기체-고체 반응기에 연결된 증발-응축기로 구성되어 있다. 반응기 내에서 염 <S>와 기체 (G)의 반응은 다음과 같이 나타낼 수 있다.



증발-응축기에서는 다음의 상변화가 수반된다.



식 (1)의 평형과 식(2)의 평형은 모두 단변화이므로, 다음의 식 (3)에 의하여 고체-기체 및 액체-기체의 평형선으로부터 Clapeyron 도표상에서 완전한 사이클을 나타낼 수 있다.

$$\ln(P_{eq}) = -\frac{\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R} \quad (3)$$

Fig 1.은 이 사이클의 두가지 주요 상태를 나타낸 것이다. 저압상태에서 반응기는 증발기와 연결되어, 저온  $T_1$ 에서  $Q_{evap}$ 의 열을 흡수하게 되고, 증발한 기체는 반응기 내의 염과 반응하여 중간온도  $T_0$ 에서 열량  $Q_{syn}$ 을 내놓게 된다. 반응기가 응축기와 연결되면 압력은  $P_b$ 에 이르게 되며, 여기서 기체가 분리되기 위하여는 고온  $T_h$ 에서  $Q_{dec}$ 의 열량이 공급되어야 한다. 이때 저온에서 흡수되는 열량  $Q_{evap}$ 는 냉방 혹은 냉동에 이용할 수 있으며, 중간온도에서 배출되는 열량  $Q_{cond}$  및  $Q_{syn}$ 은 난방에 이용할 수 있다. 만약

이러한 시스템을 두개 연결한다면, 각각의 증발-압축기와 반응기 쌍이 서로 반대방향으로 작동하게 되므로 연속에 가까운 냉난방 효과를 얻을 수 있다.

### 3. 시스템의 구성과 모사 방법

#### 3.1 시스템의 구성

화학 열펌프 시스템은 냉기 생성과 반응기 재생을 위한 증발-응축기, 열과 기체가 반응을 일으키는 반응기, 그리고 외부와의 열교환을 위한 열교환기로 구성된다.

작동 중 기체는 증발기-응축기와 반응기를 순환한다. 이때 반응을 조절하기 위하여 증발기-응축기와 반응기의 연결부에 조절 장치를 구성한다.

#### 3.2 모델링

반응기와 증발-응축기에 대한 열수 지식은 다음과 같다.

반응기 :

$$(mC_p)_{salt} \frac{dT_{salt}}{dt} = n_{salt} \Delta H_r \frac{dN}{dt} + U_p S (T_c - T_{salt}) \quad (4)$$

증발-응축기:

$$(mC_p)_{liq} \frac{dT_{liq}}{dt} = \Delta H_v \frac{dm}{dt} + U_p^{ec} S (T_c^{ec} - T_{liq}) \quad (5)$$

증발-응축기와 반응기 모두 열교환기에 흐르는 열교환 유체의 유량이 무

한하다고 보고 외부의 온도 ( $T_c, T_c^{ec}$ )가 일정하다고 가정한다. 이때 반응기와 증발-응축기를 순환하는 기체에 대하여 다음과 같은 관계식을 쓸 수 있다.

$$\frac{dn}{dt} = -n_{salt} M \frac{dN}{dt} \quad (6)$$

그리고 두 반응기 사이의 평형 압력은 증발-응축기의 압력으로 본다.

$$P = f(T_{liq}^{ec}) \quad (7)$$

#### 3.3 모사방법

앞에서 나타낸 미분방정식들을 Runge-Kutta 4th order method로 시간에 따라 모사하였다. 이때 필요한 모든 상수 및 초기치들은 정적 설계의 결과를 이용하였다. 계산에 필요한 전화율의 변화는 반응속도론적으로 고찰된 실험식을 사용하였다. 한 사이클 동안의 전화율은 0.1과 0.9사이의 값을 같도록 하였다.

### 4. 결과 및 토의

모사 결과는 시간에 대한 전화율, 온도, 압력, 출력의 순서로 나타내도록 하였다. 실제 설계를 위하여 6kW 출력의 반응기에 대한 모사를 행하였으며, 이에 대한 결과를 Fig. 2에 나타내었다.

합성반응은 약 7시간 동안 이루어지며, 분해반응은 약 2시간 동안 일어난다. 합성반응 동안 반응기의 온도는 38℃ 정도로 유지되며, 분해반응 동안의 온도는 140℃ 정도로 유지된다. 증발-응축기의 온도는 기체의 증발단계에서 10℃ 정도이며, 응축단계에서는 40℃ 정도가 된다. 이로부터 각각의 온도가

작동온도에서 크게 벗어나지 않음을 알 수 있다.

한편 압력은 고압과 저압 영역에서 각각 16 bar, 5 bar 정도를 나타내어 설계치와 일치함을 보여준다.

반응기와 증발-응축기 모두 반응이 진행됨에 따라 점차 출력이 감소하며, 냉기 생성을 위한 증발-응축기의 평균 출력은 약 6 kW 정도로 목적하는 사양에 근접함을 알 수 있다.

그러나 실제 원하는 출력은 열교환기를 통하여 이루어지므로 더 높은 출력을 나타낼 수 있도록 설계하는 것이 바람직하다. 따라서 향후 설계는 열교환기의 온도 변화에 따른 LMTD를 고려하여 설계하여야 한다.

## 5. 결론

본 연구를 통하여 실제 화학 열펌프 시스템 설계를 위한 반응기의 동적 거동 모사에 대한 체계적인 절차와 해석 방법을 확립하였다. 정적 모사를 통한 설계결과는 동적 거동 모사 결과에 부합하였으며, 이로부터 정적모사가 동적 모사를 위한 적절한 초기치와 기초 설계정보를 제공함을 알 수 있다.

사례연구를 통하여 얻은 결과에 따라 앞으로 실용화될 화학 열펌프 시스템의 개략적인 사양과 설계방향을 제시하였으며, 조작에 따른 제어변수의 영향을 평가하는 기준을 세울 수 있었다.

## 참고문헌

1. Neveu, P. : *ASHRE Trans.*, 98, part I (1992).
2. Lebrun, M. and Spinner, B. *Chem. Eng. Sci.*, 47, 1743 (1990).
3. Lebrun, M. and Spinner, B.

*Chem. Eng. Process.*, 28, 55 (1990).

4. Lebrun, M. : *Chem. Eng. Process.*, 28, 67 (1990).

5. Mazet, N., Amouroux, M. and Spinner, B. : *Chem. Eng. Comm.*, 99, 155 (1991).

6. Mazet, N. and Amouroux, M. : *Chem. Eng. Comm.*, 99, 175 (1991).

7. Goetz, V. and Marty, A. : *Chem. Eng. Sci.*, 47, 4445 (1992).

8. 김성준, 이태희, Neveu, P., 최홍규, 이종호 : *에너지공학*, 3(1), 44 (1994).

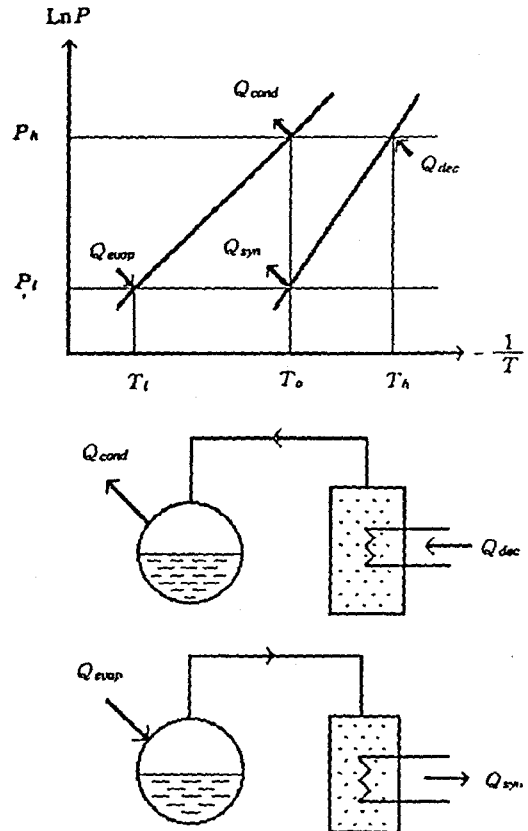


Fig. 1. Basic system of STELF process

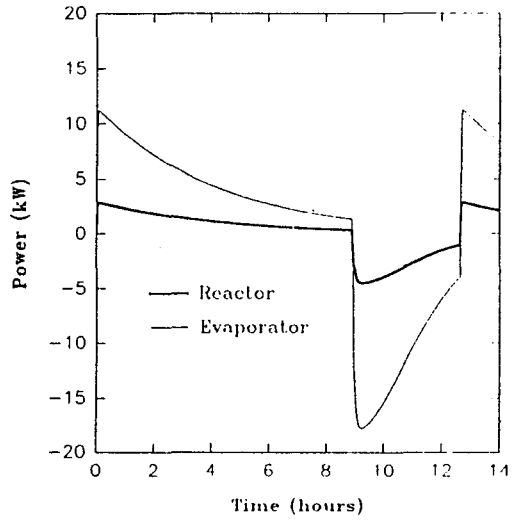
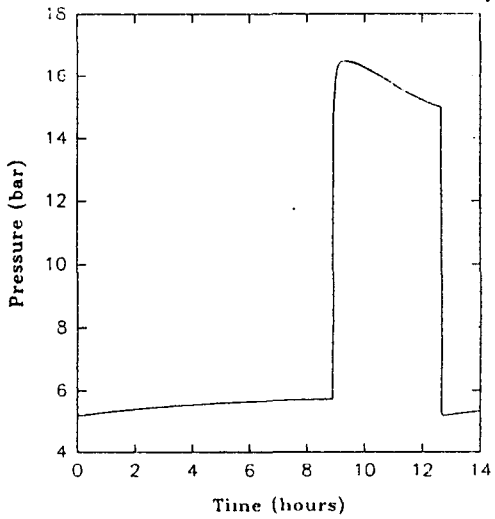
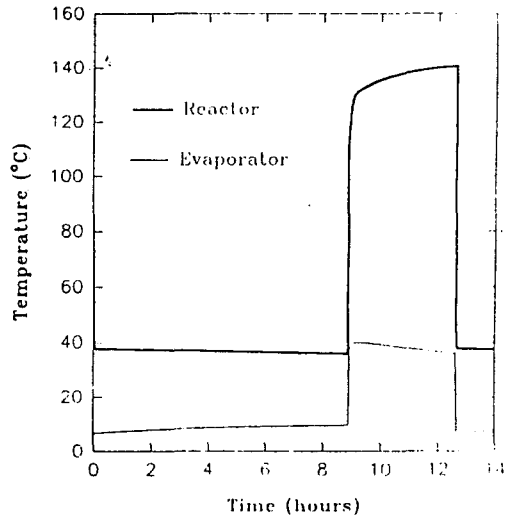
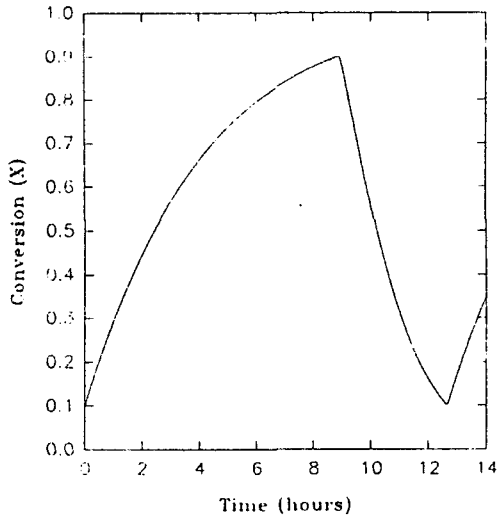


Fig. 2. Simulation results.