

## Bench Scale급 가스화기내 난류 반응장의 수치해석적 연구

나 해령, 유 영돈, 이 진욱, 윤 용승  
고등기술연구원 전력에너지연구소

### 요약문

석탄 가스화기의 최적 운전 조건을 도출하기 위한 연구의 일환으로 PCGC2 프로그램을 사용하여 산화제와 석탄의 비(0.76, 0.88, 1.0), 그리고 가스화기 벽면의 온도 변화(1100, 1500K)등 제반 변수가 가스화 반응에 미치는 영향을 파악하였다. 생성 가스의 분포는 벽면 온도, 산화제와 석탄의 비에 따라 실질적인 차이를 보여 이 두가지 인자가 가스화기 운전의 중요 변수임을 파악하였다. 구체적으로 한 유연탄에 대한 계산 결과, 출구 근처에서 가장 높은 CO 농도가 발견된 조건은 산화제와 석탄의 비가 0.88이며 가스화기 벽면의 온도가 1500K인 경우였다. 기타 석탄가스화 종합컴퓨터코드의 주요 현상학적 모델과 수치모사 결과에 대해 물리적 의미를 설명하였다.

### 1. 서론

최근 고조되고 있는 환경문제에 대한 위기 의식은 분진, CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>등과 같은 주요 오염물질들에 대한 규제를 강화시켰고 이는 에너지 관련 산업 즉, 발전소에서 발생하는 물질 배출에 대한 규제로 이어졌다. 따라서 발전 시스템에서는 전력 생산에 따른 효율을 못지 않게 오염물질들을 환경 규제치 이하로 발생시키는 연소기술이 중요한 관심사로 대두되게 되었다. 이러한 목적 달성을 위해 현재 국내외적으로 활발히 연구되고 있는 석탄가스화복합발전 시스템(IGCC)은 기존의 화력 발전과는 달리 CO<sub>2</sub>, 황화합물 및 분진 등의 오염물질 배출율이 낮아 세계적으로 각광받고 있는 발전기술이며 지속적으로 강화될 환경규제치를 만족시킬 수 있는 중요한 대안으로 기대된다.

본 연구에서는 석탄가스화복합발전 시스템의 핵심 단위 공정중의 하나인 가스화기에 대해서 수치해석적 접근방법을 이용하여 석탄의 가스화 반응의 물리화학적 현상을 관찰함으로써 최적의 가스화기 운전조건을 찾고자 하였다. 수치 계산 및 해석을 위해서 비반응 유동장, 기상 확산화염, 미분탄연소 및 가스화반응에 적용될 수 있는 미국 Brigham Young University의 ACERC(Advanced Combustion Engineering Research Center)에서 개발한 2차원, 고-기상, 복사가 관여된 난류 종합 코드인 PCGC2(Pulverized Coal Gasification and Combustion 2-Dimensional)를 축대칭 좌표계에서 계산을 수행하였다. 수치해석은 상단공급, 상압의 가스화기에 대해서 수행되었으며 가스화기 운전이 커다란 영향을 미칠것이라고 생각되는 산화제와 석탄의 비, 그리고 가스화기 벽면온도를 주요변수로 변화시켜 최적의 운전조건을 찾으려 하였다.

### 2. 수학적 모델 및 해법

석탄 입자의 난류반응을 계산하기 위해 2차원 축대칭 좌표계에서 기체 유동은 오일러리안 좌표계로, 석탄입자궤적은 라그랑지안 방법을 택하였다. 기상반응을 정상상태, 비압축성, 뉴우튼 유체로 가정했을 때 기상 지배방정식은 아래와 같은 편미분 방정식의 형태로 나타내어진다.

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \bar{u} \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v} \phi) - \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x}) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r}) = S_{\phi} + S_{\phi}'$$

윗 식에서  $\phi$ 는 일반 종속변수로서 단위 체적, 단위질량당의 물리량을 나타내며,  $x$ 는 축방향,  $r$ 은 직경방향의 거리를 나타낸다. 그밖에  $u$ ,  $v$ ,  $\rho$ ,  $\Gamma_{\phi}$ ,  $S_{\phi}$ 는 각각 축방향, 직경방향의 속도, 밀도, 확산계수 및 생성항을 나타낸다. 한편 윗 식의 마지막 항인

$S_p'$ 은 석탄입자의 휘발, 반응, 속도 변화에 따른 기상의 질량, 엔탈피, 운동량 생성항을 의미한다. 위의 편미분 방정식을 검사 체적에 기초한 유한 차분 방법(유한 체적 방법)을 사용하여 이산화하였으며 이산화방정식은 형식은 선형이나 계수가 종속변수인 비선형이므로 수립된 해를 얻기 위해 TDMA 알고리즘에 기초한 반복계산을 수행하였다. 난류 모델은 표준  $k-\epsilon$  모델을, 압력과 속도의 연계 문제는 수렴과 정확성이 높은 SIMPLER 알고리즘을 사용하였다. 석탄입자의 궤적, 휘발화, 그리고 석탄입자와 산화제의 고-기상 반응은 라그랑지안 방법이 사용되었다. 난류반응장에서 석탄입자의 궤적은 항력계수가 석탄입자와 공기와의 상대속도의 함수로 나타나 비선형이므로 상대속도 제곱항에 의해 난류변동상관항이 나타난다. 이러한 입자궤적에 대한 난류모델은 난류확산속도  $\vec{v}_{pd}$ 를 모델링함으로써 해결하였다. 즉,  $\vec{v}_p = \vec{v}_{pc} + \vec{v}_{pd}$ 로 이 식에서  $\vec{v}_{pc}$ 는 난류가 없는 평균유동에 의한 입자의 속도를 의미한다. 석탄입자의 반응은 FG-DVC 모델을 사용하여 계산하였다. 여기서 FG는 Functional Group, DVC는 Depolymerization, Vaporization, and Crosslinking를 의미하며 석탄의 열적 분해, 석탄입자의 팽윤, 그리고 황과 질소의 탈휘발화 등을 고려하여 반응을 계산하였다.

이와 같은 수치해석적 방법을 통해 가스화기내 벽면 온도, 산화제와 석탄의 비를 변화시킴으로써 가스화기내 석탄 가스화 반응의 특성을 이해하고 주요한 운전 변수를 찾아 낼 수 있다.

### 3. 결과 및 고찰

그림 1에는 수치해석대상인 가스화기의 개략도를 나타내었다. 일차주입구에서는 Illinois No. 6탄이 미분탄형태로 산화제( $O_2$ )와 함께 유입되고 이차주입구에서는 산화제만이 유입된다. 보통 가스화기내에서 생성가스의 분포를 결정하는 주요 운전변수들은 산화제와 석탄의 비, 스팀과 석탄의 비, 압력, 석탄의 주입량등으로 알려져 있다. 본 연구에서는 석탄과 산화제의 유입 조건과 가스화기내 온도 조건을 변화시켰을때 생성되는 가스 조성 분포 변화를 보기 위해 산화제와 석탄의 비, 가스화기내 벽면 온도를 변수로 선정하여 계산을 수행하였다. 본 연구에서 사용한 산화제와 석탄의 비는 0.76, 0.88, 1.0등이며 고려한 온도는 각각 1100K, 1500K이었다.

그림 2, 3, 4는 계산결과 얻어진 가스화기내 온도 및 생성 가스의 농도 분포를 조건에 따라 비교한 것이다. 그림 2는 가스화기 벽면 온도를 1100K, 1500K로 각각 주었을 때의 온도 분포를 나타낸 것인데 하류방향에서 나타나는 온도분포가 상당한 차이를 보여주고 있다. 구체적으로 연소로 하류영역에서의 온도는 벽면 온도와 실질적으로 거의 같은 온도로 나타나 벽면온도의 중요성을 나타내어 주고 있다. 벽면의 온도가 유동장이나 연료의 농도분포 등에 미치는 구체적인 영향도 검토되었다. 그림 3의 (a)와 (b)는 벽면 온도가 1500K이고 산화제와 석탄(DAF)의 비를 0.76, 0.88, 1.0으로 변화시켰을 때의 CO와  $CO_2$ 의 농도 분포를 각각 나타낸 것이다. (a)와 (b)의 결과를 비교해 보면 초기 반응영역에서 산화반응과 탈휘발화반응에 의해 연소생성물인  $CO_2$ 가 다량 생성되는 반면 하류방향 0.3m 이상부터  $CO_2$ 는 감소하고 가스화반응의 주요 생성 물질인 CO가 증가하는 양상을 보여주고 있다. 이러한 CO의 생성량 증가는 가스화반응의 주요 반응 메카니즘인 흡열 반응인 환반응(즉,  $char+CO_2$ ,  $char+H_2O$ )에 기인한다. 또한 하류방향의 고정된 한 지점( $x=1.5m$ )에서 산화제와 석탄의 비가 0.76, 0.88, 1.0인 경우에 따라 CO의 농도를 비교해보면 각각 약 0.59, 0.64, 0.31정도로, 제한된 조건에서 볼 때 산화제와 석탄의 비가 0.88에서 가장 높은 CO 농도를 나타내었다. 산화제와 석탄의 비에 따라 CO의 농도가 증가하다가 감소하여 비가 0.88에서 최대치를 보이는 것은 산화제와 석탄의 비가 증가함에 따라 가스화 흡열반응에 필요한 열량공급이 이루어져 CO 농도가 증가하나 산화제와 석탄의 비가 더 증가하게 되면 CO가  $CO_2$ 로 완전연소하여 감소하기 때문으로 판단된다.

생성가스의 분포에 대한 가스화기내 벽면 온도의 영향을 그림 4에 나타내었다. 벽면

을 1100K에서 1500K로 가열하면 하류에서의 가스 온도가 기대했던 대로 상승함을 알 수 있었는데 그림 4는 벽면 온도가 1100K보다는 1500K에서 생성되는 CO 농도가 더 높게 나타냄을 보여주고 있다. 즉, 1100K에서는 촉반응이 아직 충분히 일어나고 있지 않음을 알 수 있다. 따라서 높은 벽면 온도는 강력한 흡열반응인 촉반응을 활성화시키므로 가스화기 운전시 필수 조건임을 알 수 있다.

#### 4. 결론

유입되는 산화제와 석탄의 비, 그리고 가스화기 벽면의 온도 변화는 석탄 가스화 반응에 따른 생성가스 분포 특성에 영향을 미치는 중요한 운전 변수이다. 본 연구 결과를 통해 가스화 반응을 충분히 활성화시켜 출구 부근에서 가장 높은 CO 농도를 보인 것은 가스화기내 벽면 온도가 1500K이고 산화제와 석탄이 약 0.88의 비율로 유입되는 조건이었다.

#### 후기

본 논문은 통상산업부 에너지자원기술개발지원센터에서 지원하고 전력연구원에서 주관하는 “석탄가스화 복합발전 기반기술 개발” 과제의 지원을 받아 수행된 것으로서 이에 센터 및 전력연구원 관계자들에게 감사를 드립니다.

#### 참고 문헌

1. N.R. Soelberg, L.D. Smoot and P.O. Hedman, "Entrained Flow Gasification of Coal", Fuel, 1985, pp.776-781.
2. S. Azuhata, P.O. Hedman, L.D. Smoot and W.A. Sowa, "Effects of Flame Type and Pressure on Entrained Coal Gasification", Fuel, 1986, pp.1511-1515.
3. S. Azuhata, P.O. Hedman, L.D. Smoot, "Carbon Conversion in an Atmospheric-Pressure Entrained Coal Gasifier", Fuel, 1986, pp.212-217.
4. R.F. Cope, L.D. Smoot and P.O. Hedman, "Effect of Pressure and Coal Rank on Carbon Conversion in an Entrained-Coal Gasifier", Fuel, 1989, pp.806-808.
5. User's Manual 93-PCGC-2 : Pulverized Coal Gasification and Combustion Model(2-Dimensional) with a Generalized Coal Reactions Submodel(FG-DVC), Brigham Young University and University of Utah, June, 1993.

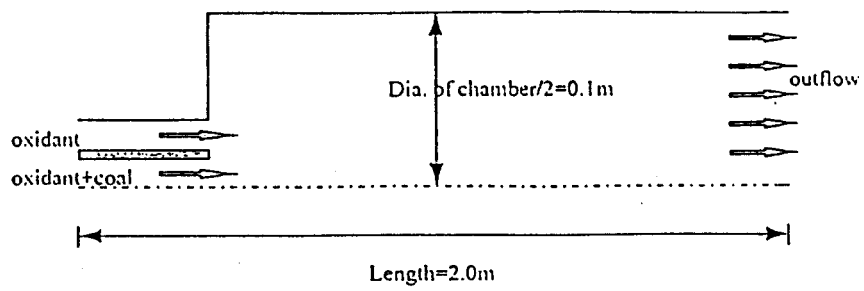


Fig. 1 Schematic diagram of an entrained gasifier

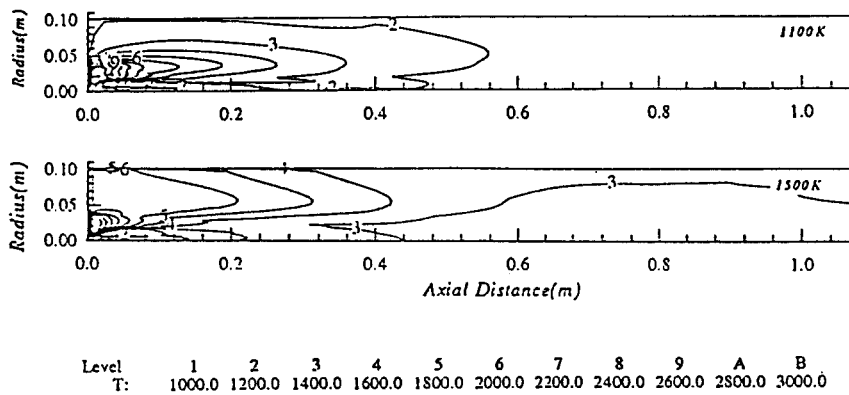
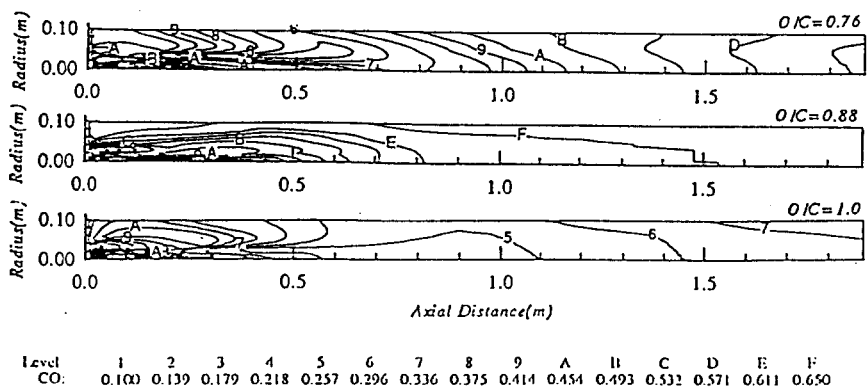
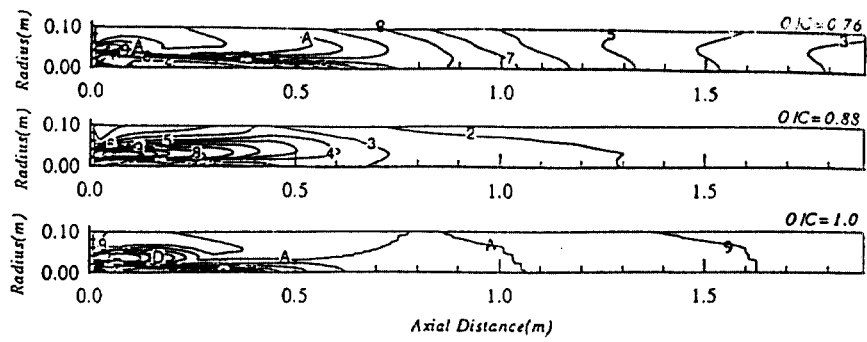


Fig. 2 Temperature contours under two different wall temperatures 1500K at the Oxygen/Coal ratio of 0.76



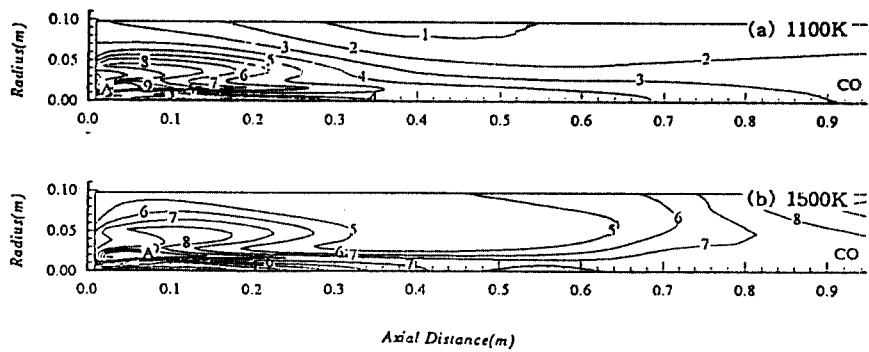
(a) CO concentration contour



Level	1	2	3	4	5	6	7	8	9	A	B	C	D	E	F
CO <sub>2</sub>	0.010	0.034	0.059	0.083	0.107	0.131	0.156	0.180	0.204	0.229	0.253	0.277	0.301	0.326	0.350

(b) CO<sub>2</sub> concentration contour

Fig. 3 CO and CO<sub>2</sub> concentration contours for three different oxygen to carbon ratio at the wall temperature of 1500K



Level	1	2	3	4	5	6	7	8	9	A	B
CO	0.200	0.240	0.280	0.320	0.360	0.400	0.440	0.480	0.520	0.560	0.600

Fig. 4 CO concentration contours for two different wall temperatures at the oxygen to carbon ratio of 0.76