

석탄가스화공정의 동적모델링 (Dynamic Modeling for the Coal Gasification Process)

유희중, 김원배, 윤용승
고등기술연구원 전력에너지연구소

Abstracts

Dynamic models have been developed for the coal gasification process by using a modular approach method. The complete unit is divided, for the convenience of the analysis, into several sections, viz. the coal feeding system, the gasifier, the gas cooler, the valves, the pumps, etc. The dynamic behaviour of each section is described in mathematical terms and each term is modularized into several submodels consisting of the complete process. To represent the behaviour of the fluid flow, the hydraulic network is proposed. Results for the more important system variables are presented and discussed. These dynamic models enable process and control engineers to quickly review a wide range of alternative operating and control strategies and help operators to easily understand the process dynamics and eventually can be applied to the design of commercial scale IGCC plants.

1. 서론

석탄가스화 복합발전(Integrated Gasification Combined Cycle, IGCC) 플랜트는 플랜트를 구성하는 단위공정을 집적화 및 최적화하여 발전효율을 증가시키고 이에 따라 화석연료를 사용할 때 필수적으로 발생하는 이산화탄소의 배출량을 절감할 수 있으며 이외에 대기오염물질인 황 및 질소산화물의 발생량을 획기적으로 줄일 수 있는 차세대 개념의 발전방식이다. 이러한 석탄가스화 복합발전방식은 플랜트를 구성하는 석탄가스화공정, 생성가스처리공정, 공기분리공정, 가스터빈공정 및 스팀터빈공정 등이 집적화되어 공정들 상호간의 조업연계성이 크기 때문에 플랜트의 제어로직을 포함한 기본설계 및 시운전 단계에 있어서 시스템 전반에 걸친 공정의 동특성과 제어로직에 관한 좀더 면밀한 검토 및 해석이 이루어져야 한다.

본 연구에서는 석탄가스화 복합발전 플랜트에 대한 동적모사기의 개발 및 검증을 위해서 현재 아주대학교 구내에 건설되어 현재 운용중인 3톤/일 용량의 석탄가스화공정을 대상공정으로 하여 실제 시스템의 전반을 모사할 수 있는 동적모사기의 개발을 목표로 대상공정을 구성하는 가스화기 및 주변장치에 대한 일반화된 동적모델을 세우고 이를 모듈화하였다. 이와같이 대단위 공정의 전체 시스템에 대한 동적모사기의 개발을 위해서는 플랜트를 구성하는 단위공정을 개별적으로 일반화하여 모델링하고 모듈화한 다음 모듈화된 블록 각각을 서로 연결하는 모듈화 접근방식이 매우 유용하게 활용될 수 있다.

2. 대상공정 모델링

본 연구에서는 대상공정인 석탄가스화공정의 핵심부인 가스화기를 포함하여 가스화기와 연계된 주변 단위공정인 석탄주입계통, 반응 및 수송가스 공급계통 및 생성가스 냉각계통 등 실공정에 포함된 모든 단위공정을 동적으로 모델링하고 단위공정들 사이에 포함된 밸브 및 펌프 등과 같은 대상공정에 포함된 모든 기기들을 일반적으로 모델링하여 모듈화 한다. 이와같이 모듈화된 단위공정 블록들은 모두 동적인 입출력 변수를 포함하며 단위공정의 입출력변수들을 실제 대상공정과 동일하게 연결하기 때문에 시스템 전반에 대한 동특성을 고려할 수 있으며 이를 이용하여 실제 대상공정과 동일한 환경하에서 공정의 start-up, shut-down, 비상정지운전 등과 같은 순차제어로직을 포함하여 가스화기의 부하, 온도, 압력 및

조성 등의 제어루프에 관한 동적모사가 가능하다. 그러나 이러한 모듈화 접근방식이 대규모 플랜트의 모사에 이용될 경우 방대한 계산자료에 따른 연산 및 수렴속도의 지연으로 인하여 모듈화 접근방식의 가장 큰 장점중의 하나인 시스템전반에 관한 실시간 모사가 불가능 할 수도 있다. 이러한 단점을 보완하기 위하여 본 연구에서는 단위공정을 복잡하고 상세하게 모델링하기 보다는 대부분의 시스템을 열 및 물질수지를 기본으로하는 용진변수계로 가정하고 선형화하여 1차 혹은 2차 함수계로 단순화하였다. 이러한 과정을 통하여 모듈화된 모든 단위공정 블록은 모두 실공정 특성을 보완하기 위한 시상수를 입력계수로 포함하며 이는 실공정 운전자료를 이용하여 모사의 실공정 검증시 이용된다. 본 연구를 통하여 개발된 모사에 포함된 핵심공정의 개략도는 Fig. 1. 과 같으며 본 논문에서 공정의 모델링에 대한 자세한 기술은 대상공정의 핵심부인 가스화기, 가스냉각기 및 단위공정들 사이의 유체의 흐름을 연결하는 수력망 (hydraulic network) 에 대하여 국한하였다.

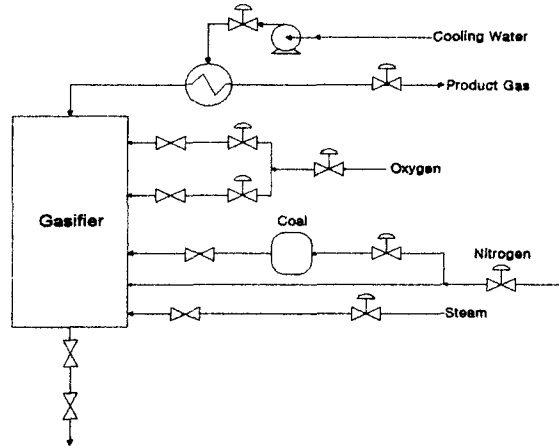
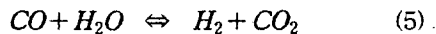
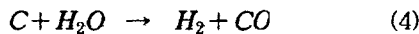
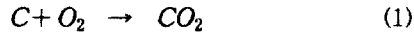


Fig. 1. Schematic diagram for the coal gasification process

2.1. 가스화기 모델링

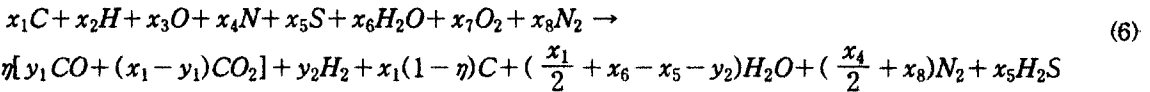
석탄가스화기 내에서의 반응은 일반적으로 연소반응과 가스화반응으로 구분할 수 있으며 이는 식 (1)-식(5) 로 표현할 수 있으며 이외에 화와 H₂의 반응에 의하여 미량의 CH₄가 형성되는 메탄화반응등이 존재하나 본 모델에서는 고려하지 않기로 한다.



즉 제한물질로 주입된 산소와 석탄이 발열반응(연소)하여 CO₂를 생성하며 연소 후 남은 화는 연소후 생성된 CO₂ 및 반응물로서 주입된 스팀과 흡열반응(가스화)을 통하여 CO 및 H₂를 생성한다. 반응후 기상에서 존재하는 가스성분들은 식(5)와 같은 가역적인 water-gas shift 반응에 의하여 온도에 따라 평형상태로 존재한다. 석탄가스화 반응에 대한 동적거동을 일반적으로 모사하기 위해서는 상기의 5가지 평행반응(parallel reaction)에 대한 속도론적 고찰이 선행되어야 한다. 그러나 석탄은 물리화학적 성상이 매우 불균질하여 상기의 반응에 대한 공통적인 속도론적 자료를 얻는다는 것은 매우 힘든 실정이다. 따라서 본 논문에서는 많은 연구결과에 기초한 타당한 다음의 네가지 가정을 통하여 생성가스에 대한 평형조성을 예측하였다.

- 석탄가스화반응에서 촉의 가스화반응은 속도결정반응이며 가스상의 반응은 무한히 빠르게 진행되기 때문에 가스화기내의 가스상은 평형상태로 존재한다.
- 대상공정인 분류층 가스화기에서는 200mesh 잔사가 약 10% 미만인 고분말도 미분탄이 주입되고 고온 및 고압에서 반응되기 때문에, 타공정과 비교하여 반응시간이 매우 짧아 적절한 체류시간을 유지하여 주면 석탄전환율을 99% 이상 얻을 수 있다..
- Ruprecht(1989) 등의 연구결과에 따르면 약 1200℃ 이상의 반응영역에서 가스상은 평형상태로 존재하며 평형조성은 온도에 따른 water-gas shift 반응에 의하여 결정될 수 있다.
- 가스화반응에 존재하는 질소는 아무런 반응도 일으키지 않으며 황은 비가역적으로 모두 H₂S로 전환된다.

상기의 가정을 이용하면 주어진 입력조건에 대하여 생성가스의 열역학적 평형조성의 계산이 가능하다. 가스상의 열역학적 평형조성은 일반적으로 Gibbs 자유에너지 최소화법을 이용하여 계산하는 방법이 널리 이용되고 있으나, 이는 적잖은 열역학적 물성치자료 및 반복계산을 요구하기 때문에 실시간 모사를 행하는 동적모사기의 모델링에는 적합한 방법이 아니다. 따라서 Wen 과 Chaung (1979) 이 분류층 가스화기에 대하여 제시한 water-gas shift 반응에 대한 평형상수를 이용하여 반복계산 없이 쉽게 가스화 반응에 대한 평형조성을 구할 수 있다. 평형조성을 구하기 위해서 가스화반응에 대한 총괄 반응식을 세우면 식(6)와 같다.



식(6)에서 x_i는 입력반응물의 몰수, η는 석탄전환율이며 y₁ 및 y₂는 각각 생성물 CO 및 H₂의 몰수이다. 반응식(6)으로부터 산소의 몰수지를 세우면 식(7)을 얻을 수 있으며 water-gas shift 반응의 평형상수식은 식(8)과 같다.

$$y_2 = \eta(2x_1 - y_1) + \frac{x_2}{2} - x_3 - x_5 - 2x_7 \quad (7)$$

$$\frac{[CO_2][H_2]}{[CO][H_2O]} = K(T) = \text{EXP}\left(-3.968 + \frac{4019}{T}\right) = \frac{(x_1 - y_1)y_2}{y_1(x_2/2 - x_5 + x_6 - y_2)} \quad (8)$$

여기서 T는 반응온도이며 상기의 식(7)과 식(8)을 연립하면 생성물 몰수를 각각 계산가능하며 이로부터 생성가스의 평형조성과 표준반응열을 계산하고 생성가스의 평균 열용량도 구하며 가스화기의 부모모델로 모듈화하여 가스화기 주모델에 연결되었다.

가스화기의 동적거동을 모사하기 위하여 가스화기 동적모델은 가스화기 주변의 비정상상태 열 및 물질수지를 기초로하여 다음의 식(9)-식(11)에 의하여 표현된다. 본 모사에서 대상으로하는 분류층 가스화기는 가스화기 내부로 주입된 석탄 및 가스상이 강한 스웰에 의하여 매우 빠르게 혼합되고 고온 및 고압에 의하여 빠르게 반응하기 때문에 반응기내의 완전혼합을 가정하는 CSTR (continuous stirred tank reactor) 모델을 가정하였다.

$$\frac{dM}{dt} = \sum M_{input,i} - \sum_i M_{output,i} \quad (9)$$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d(MC_p T)}{dt} = \sum H_{input,i} - \sum H_{output,i} + \Delta H_{rxn} - Q_{loss} \quad (10)$$

$$P = \frac{ZMRT}{W_{avg}V} \quad (11)$$

여기서 M, H, T, P 및 V는 각각 가스화기내부의 질량, 엔탈피, 온도, 압력 및 용적을 의미하며 M_{input,i}는 각각 가스화기로 주입되는 석탄, 산소, 질소 및 스팀의 질량흐름을 나타고 M_{output,i} 각각 출구가스, 슬래 및 미반응 석탄의 질량흐름을 나타낸다. H_{input,i}는 입력흐름의 엔탈피를 나타내며 H_{output,i}는 출력흐름의 엔탈피를 나타내고 ΔH_{rxn}은 연소반응을 포함한 가스화기 내부반응의 총괄반응열속이다. Q_{loss}는 가스화기 내부로 부터 대기로의 총괄 열손실 속도, C_p는 생성가스 평균열용량, Z는 압축인자, R은 기체상수 및 W_{avg}는 생성가스 평균분자량을 의미한다. 상기한 바와같은 평형반응모델과 가스화기모델의

상관구조는 Fig.2 와 같다.

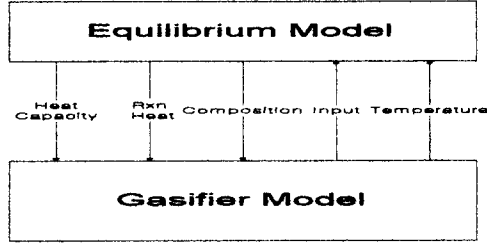


Fig. 2. Structure of the gasifier model

2.2. 생성가스 냉각기 모델링

가스화기로부터 생성된 가스는 가스화기 후단에 설치된 가스냉각기에 의하여 요구되는 온도로 냉각된다. 본 연구에서는 일차적으로 동적모델의 단순화를 위하여 가스냉각기 또한 상기의 가스화기와 같이 CSTR 모델을 가정하며 냉각수의 최소유량을 제한하여 냉각수측의 상변화는 없다고 가정하였다. 본 연구에서 고려된 가스냉각기는 shell and tube 형태이며 열교환량(Q_{exc})을 계산하기 위하여 실질적으로 열교환기의 간이설계에 널리 사용되고 있는 Effectiveness-NTU 방법을 사용한다. 본 모델에서는 생성가스는 shell 측으로 냉각수는 tube 측으로 흐르게 되며 열교환량의 계산은 식(12)에서 식(15)과 같다.

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{\text{actual heat transfer between the two fluids } (Q_{exc})}{\text{maximum possible heat transfer } (Q_{max})} \quad (12) \\ &= 2[1 + C + (1 + C^2)^{1/2} \frac{1 + \exp(-N(1 + C^2)^{1/2})}{1 - \exp(-N(1 + C^2)^{1/2})}]^{-1} \end{aligned}$$

$$NTU(N) = \frac{UA}{C_{min}} \quad (13)$$

$$C = \frac{C_{min}}{C_{max}} = \frac{(MC_p)_{max}}{(MC_p)_{min}} \quad (14)$$

$$Q_{exc} = \epsilon C_{min} (T_{gin} - T_{win}) \quad (15)$$

여기서 ϵ 는 effectiveness, N 은 NTU(number of transfer unit), M 은 질량유량, C_p 는 열용량, UA 는 총괄열전달계를 나타낸다.

냉각기의 모델은 shell 측과 tube 측이 독립적으로 모델링되며 이는 식(16)에서 식(19)와 같다.

$$\frac{dM_g}{dt} = M_{gin} - M_{gout} \quad (16)$$

$$\frac{dH_g}{dt} = \frac{d(M_g C_p T)}{dt} = H_{gin} - H_{gout} - Q_{exc} \quad (17)$$

$$\frac{dH_w}{dt} = H_{win} - H_{wout} + Q_{exc} \quad (18)$$

$$P_t = \frac{Z M_g R T}{W_{avg} V_t} \quad (19)$$

여기서 M_g 는 tube 측 가스질량, M_{gin} 및 M_{gout} 은 각각 tube 측 입출구가스의 질량흐름, H_g 및 H_w 는 각각 가스 및 냉각수의 엔탈피를 의미하며 P_t 및 V_t 는 각각 tube 측의 압력과 용적을 나타낸다.

2.3. 수력망(Hydraulic Network) 모델링

대상공정 전체시스템에 대한 동적모사기 개발을 위해서는 단위공정 상호간을 연결하는 배관자체의 용량에 의한 공정지연, 압력변동 및 흐름변동 등은 매우 중요한 공정변수로서 작용할 수 있다. 또한 배관 사이에 설치된 밸브 및 펌프등과 같은 공정기기의 작동에 따라 실제 현상과 유사한 동특성을 보일 수 있

도록 모델링 하는 작업 또한 매우 중요한 분야중의 하나이다. 본 연구에서는 공정상의 압력점 및 유체의 유량을 동적으로 계산하기 위하여 식(20) 에서 식(24) 와 같이 유체의 물질수지 및 유체의 흐름방정식을 기본으로 하여 수렴방 모델이 구성된다.

$$\sum W_{im} = \sum W_{mj} \quad (20)$$

$$W_{im} = C_{im} \sqrt{P_{source} + P_i - P_m} \quad (21)$$

$$W_{mj} = C_{mj} \sqrt{P_{source} + P_m - P_j} \quad (22)$$

$$B_{im} = \frac{C_{im}}{\sqrt{P_{source} + P_i - P_m}} \quad (23)$$

$$B_{mj} = \frac{C_{mj}}{\sqrt{P_{source} + P_m - P_j}} \quad (24)$$

여기서 하첨자 i, m 및 j 는 각각 대상공정에 설정된 기준압력 node 이며 im 및 mj 는 각각 흐름방향을 나타낸다. 또한 W 는 흐름속도를 의미하며 P_{source} 는 공정의 배관상에 설치된 펌프 및 압축기 등에 의해 생성되는 압력이며 B 와 C 는 압력 node 의 특성계수이다. 본 연구에서는 이와같이 구성된 수렴방 대수 방정식에 대하여 초기 정상상태 자료를 이용하여 각각의 계수 B_i 를 식(23)와 식(24) 을 사용하여 계산하고 이를 이용하여 식(21)와 식(22) 를 선형화 하면 선형연립대수방정식을 구성할 수 있어 모사기의 반복 계산 매번마다 node 압력 및 흐름속도를 재계산하도록 구성되어 필요한 단위공정들에 연결된다.

3. 모델링 결과

실제 석탄가스화복합발전 플랜트공정의 주요출력 및 제어변수는 대부분 가스화공정에서 얻어질 수 있다. 따라서 본 연구의 대상공정이 bench 급 석탄가스화 공정이라 할지라도 본 모사기에 의한 가스화 공정의 동특성 해석결과는 석탄가스화복합발전 플랜트의 기본공정설계 및 제어기 설계시 많은 도움을 줄 수 있다.

첫 번째로 가스화기모델의 정상상태 출력값에 대한 모델의 신뢰성을 검증하기 위하여 본 팀에서 대상 공정의 기본설계 당시에 3가지 탄종에 대하여 실시한 정상상태 case study 결과와 비교하였다. Table 1. 에서 보여지는 바와 같이 본 동적모사기에 의해 계산된 정상상태 값은 기본설계 case study 결과와 매우 잘 일치함을 알 수 있어 평형조정 계산모델의 신뢰성을 검증할 수 있었다.

Table 1. Calculation results for the equilibrium composition at steady state

	Coal A		Coal B		Coal C	
	Model	Case	Model	Case	Model	Case
CO%	53.76	54.06	61.10	61.18	55.74	56.03
CO ₂ %	7.53	7.40	0.36	0.36	6.22	6.10
H ₂ %	27.49	27.28	27.85	27.74	27.22	27.10
N ₂ %	11.13	11.16	10.43	10.44	10.78	10.80
H ₂ S%	0.09	0.09	0.27	0.27	0.05	0.05

석탄가스화공정에서 가장 중요한 조작변수는 입력변수인 산소/석탄 비이다. 본 연구에서 개발된 가스화기 모델을 검증하기 위하여 산소/석탄의 비가 계단으로 10% 감소했을 경우 실공정 운전자료의 동적 응답특성과 비교하였다. 초기 가스화기의 운전압력 및 평균온도가 1170kPa, 1305℃ 이고 가스화기 출구에 설치된 제어밸브의 열림패도가 55% 인 정상상태 조건하에서 산소/석탄 비를 -10% 계단변화 시켰을 때 시스템의 주요출력 변수인 가스화기 온도, 압력 및 생성가스의 조성에 대한 동적 응답특성은 Fig. 3 과 같다. 앞의 2.1장에서 설명된 가스화기의 모델을 통해서 예측할 수 있었던 바와같이 모든 변수들이 산소/석탄의 조작변수에 대하여 종속적인 관계로 변화됨을 볼 수 있다. 가스화공정의 시상수는 약 150초 이며 dead time 특성은 나타나지 않았다. 산소/석탄의 비가 10% 계단감소 하였을 때 가스화기의 압력 및 온도는 각각 초기값대비 3.5% 및 7.5% 로 감소하였고 출가가스의 조성은 CO 및 H₂ 가 각각 초기값

대비 3.7% 및 11.6% 증가한 반면 CO₂ 조성은 초기값대비 31.4% 감소하는 특성을 나타내었다. Fig. 3에서 볼 수 있는 바와같이 본 연구에서 개발된 가스화기 모델은 실공정의 동특성을 모든 조업변수에 대하여 신뢰성있게 예측함을 알 수 있다.

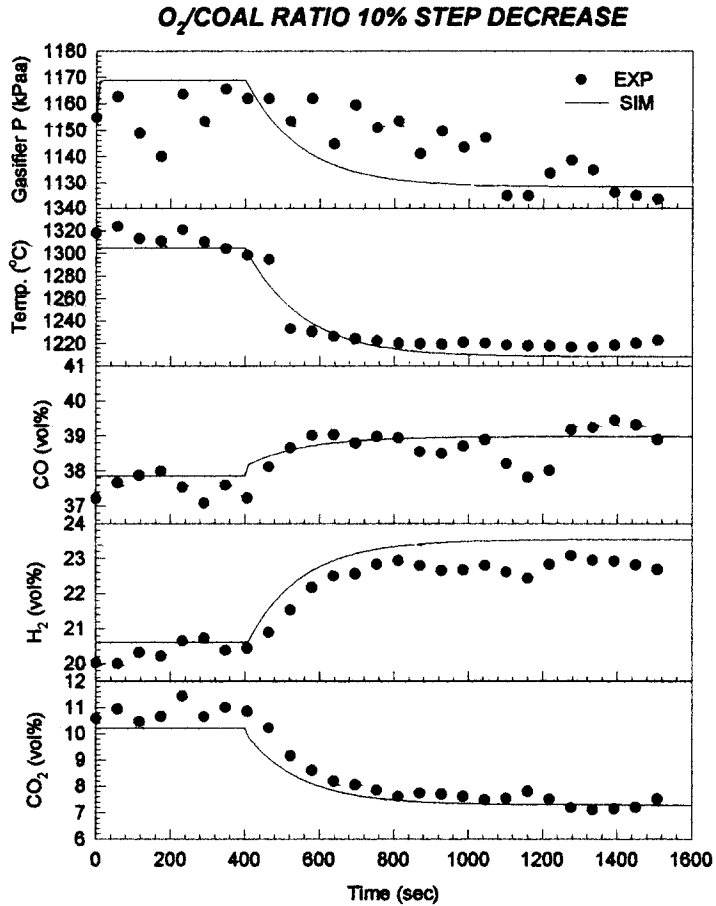


Fig. 3. Dynamic responses of the gasifier model (O₂/coal ratio 10% step decrease)

4. 결론

3톤/일 급 석탄가스화공정의 전반을 모사할 수 있는 동적모사기 개발을 위하여 모듈화 접근방식을 사용하였으며, 대단위 플랜트의 시스템 전반에 걸친 동적모사를 위해서는 많은 장점을 갖는 방법으로서 평가되었다.

석탄가스화기의 동적모델을 개발하기 위하여 고온 및 고압의 분류층 가스화기에서 진행되는 가스화반응에 대하여 기고상반응의 속도론적 접근방식을 대신하여 탄소전환율 및 가스상의 열역학적 평형을 가정하고 모델을 단순화하였다. 이렇게 얻어진 모델을 사용하여 신뢰성있는 출구가스조성의 결과를 얻었다.

본 가스화기 모델의 검증용 위하여 가장중요한 조작변수중의 하나인 산소/석탄 비의 계단변화에 대한 실공정 운전자료와 가스화기모델에의해서 예측된 가스화기 압력, 온도 및 출구가스조성등과 같은 조업변수의 동적 응답특성을 비교하였으며 매우 신뢰성있는 예측결과를 얻을 수 있었다.

개발된 모델들의 모듈화를 통하여 실제공정과 동일한 환경하에서 석탄가스화공정의 start-up, shut-down 및 비상정지 운전등과 같은 순차로직을 포함하여 가스화기의 부하, 온도, 압력 및 조성 등의 제어루프에 관한 동적모사에 이용할 수 있다.

이러한 형태의 동적모사기는 석탄가스화복합발전 플랜트와 같은 단위공정이 집적된 플랜트의 설계단계에 있어서 경제적으로 시스템 전반에 관한 동특성 해석 및 제어로직 설계에 적합하며 또한 운전화면의 예비설계 및 운전자의 조업훈련에 효과적으로 이용될 수 있다.

참고문헌

- [1] P. Schoen, "Dynamic Modeling and Control of Integrated Coal Gasification Combined Cycle Units", Delft Univ.Thesis, Netherlands, 1993
- [2] S. Gonzalez, et al., "Modularization Guidelines in the Development of Large-Scale System Models for Simulation", IEEE Transactions on systems, vol. smc-15, No. 5, 1985
- [3] Ruprecht, P. et a., "A Computer Model of Entrained Coal Gasification", Fuel, Vol 67, June, 739, 1988
- [4] Wen, C.Y. and Chaung, T. Z., "Entrainment Coal Gasification Modeling", Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., vol 18, No. 4, 1979 .
- [5] Holman, J.P., "Heat Transfer", McGraw-Hill Co., 1972

감 사

본 연구는 통상산업부에서 지원하고 전력연구원이 주관하는 '석탄가스화 복합발전 기반기술개발' 과제의 '97년도 사업으로 지원되었습니다. 이에 감사드립니다.