

상용 CFD 코드에서 사용되는 좌 반응속도 모델에 대한 이해

김대희* · 최상민**

Understanding the Use of Coal Char Kinetic Models in commercial CFD Codes

Daehee Kim*, Sangmin Choi**

ABSTRACT

Commercial computational fluid dynamics (CFD) codes traditionally rely on the computational efficiency of the simplified single-film apparent char kinetic model to predict char particle temperatures and char conversion rates in pulverized coal boilers. The aim of this study is to evaluate the reliability of the single-film apparent kinetic model and to suggest the importance of proper use of this model. For this, a parametric study was conducted with a consideration of main parameters such as Stefan flow, product species, particle evolution, and kinetic parameters.

Key Words : Commercial computational fluid dynamic (CFD) code, single-film apparent char kinetic model, Pulverized coal boiler, Parametric study

CFD를 이용한 해석은 석탄 연소 버너와 보일러의 설계 및 최적화를 위해 필수적인 것이 되었고, 상용 CFD 코드를 이용한 해석이 많이 진행되고 있다. 해석하고자 하는 대상의 큰 스케일, 많은 고려사항(난류유동, 복사열전달, 가스 및 석탄 반응, 형상 등)을 포함한 계산의 복잡성으로 인해 석탄 반응 모델은 상용 CFD 코드에서 아주 단순화되어 사용되고 있다. 실제 일어나는 복잡한 석탄 반응 메커니즘을 CFD 해석에 고려하는 것은 매우 어려운 일이며, 계산 효율 및 결과의 신뢰성 양쪽 측면에서 조울할 때 이러한 석탄 반응 모델의 단순화는 당연한 것으로 생각된다. 이러한 상황에서, 사용되는 석탄 반응 속도 모델 및 관련 반응상수에 대한 명확한 이해는 정확한 CFD 해석을 위해 꼭 필요한 것이라 할 수 있다. 특히, 좌 연소는 실제 미분탄 연소에서 장입된 석탄의 연소 종료 시간을 지배하고, 연소 중 좌 입자로부터 보일러 벽면으로의 복사열전달은 보일러 열전달에 크게 영향을 미친다[1,2]. 그러므로 상용 CFD 코드에서 사용되는 좌 반응 속도 모델에 대한 명확한 이해와 이를 바탕으로 한 올바른 사용은 해석 정확도를 위해 꼭 필요하다고 볼 수 있다.

상용 CFD 코드상에 있는 대표적인 좌 연소 모

델은 크게 Smith[1]과 Baum and Street 모델[3] 모델이다. Smith model의 경우 좌 연소율은 고 유반응속도(intrinsic kinetics, 내부표면적 기준)에 결정되어지고 기공을 통한 반응 가스의 확산 정도는 Thiele 계수(η)[4]에 의해 표현되어진다. 이 모델은 진보된 모델이지만, 실제 내부표면적 정의 및 η 값의 도출이 어려운 문제점이 있다. 실제 상용 CFD 코드상에서도 이 η 값은 상수값으로 정의된다. Baum and Street 모델은 총괄반응속도(apparent kinetics, 외부표면적 기준)에 기초한 비교적 단순한 모델이지만, 실험값으로부터 반응상수값의 유도 및 적용이 비교적 쉬워 자주 사용되는 모델이다. 이 모델의 경우, 총괄 반응상수값은 1로 가정되었으며, 입자크기는 변함이 없으며 밀도만 감소한다고 보았다. 또한, 종종 두 반응모델에서의 반응속도값을 혼동하여 사용하는 경우가 많이 있다. (두 모델 모두 경계층에서의 가스 반응은 무시되어졌다.)

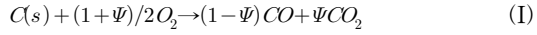
본 연구는 상용 CFD 코드에서 주로 사용되는 단막 총괄반응속도(single-film apparent kinetic model) 모델을 바탕으로 관련 가정 사항과 입력값에 따른 parametric study를 진행하여, 상용 CFD 코드에서의 좌 반응속도 모델의 고려사항 및 올바른 사용의 중요성에 대하여 알아보고자 하였다. 크게 고려된 계산 변수는 (1) Stefan flow 영향[5], (2) 좌 산화반응의 생성물 처리, (3) 반응에 따른 입자의 변화 양상, (4) 참여 반응의 고려 유무, (5) 좌 반응 kinetics 상수 값 등이다. 고려된 좌 반응모델은 단막모델[6] 기초하

* 한국과학기술원 기계공학과

† 연락처, smchoi@kaist.ac.kr

TEL : (042)350-3030 FAX : (042)350-1284

며, 좌 표면에서의 좌 산화반응과 CO₂ 가스화 반응을 고려하였다.



여기서, CO/CO₂ 비는 Arthur 상관관계식[7]에 의해 계산되어졌다. 총괄반응속도 및 확산을 고려한 가스 표면 분압, 그리고 반응 중 좌 입자의 에너지 평형식은 다음과 같다.

$$\dot{m}_C = \sum_{rxn,j} \pi d_p^2 R_{C,rxn,j} \quad (1)$$

$$\text{where, } R_{C,rxn,j} = -A_j \exp\left(-\frac{E_j}{RT_p}\right) P_{i,s}^{n_j} \quad (2)$$

$$P_{O_2,s} = P \left(\frac{P_{O_2,\infty}}{P} - \frac{RT_m \nu_{O_2,I} B m_C}{2\pi d_p P D_{O_2,mix} W_C} \right) \quad (3)$$

$$P_{CO_2,s} = P \left(\frac{P_{CO_2,\infty}}{P} - \frac{RT_m \nu_{CO_2,II} (1-B) \dot{m}_C}{2\pi d_p P D_{CO_2,mix} W_C} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\rho_p d_p c}{6} \frac{dT_p}{dt} = \epsilon \sigma (T_w^4 - T_p^4) + \frac{Nu \lambda}{d_p} (T_g - T_p) + R_{C,I} \left[\frac{(1-\Psi)H_{I,1} + \Psi H_{I,2}}{W_C} \right] + R_{C,II} \frac{H_{II}}{W_C} \quad (5)$$

여기서, $\nu_{i,j}$ 는 반응*j*에서 가스화학종 I의 이론당 량비를 나타내고, B는 전체 탄소 소모질량 중 반응 I에 의해 소모된 질량의 비를 나타낸다. 여기서 Stefan flow에 의한 영향을 고려하면 식 (3)-(5)는 각각 다음과 같이 바뀌게 된다.

$$P_{O_2,s} = P \left[\left(\frac{P_{O_2,\infty}}{P} + \frac{B \nu_{O_2,I}}{1 - B \nu_{O_2,I}} \right) \times \exp\left(-\frac{RT_m m_C}{2\pi d_p P D_{O_2,mix} W_C}\right) - \frac{B \nu_{O_2,I}}{1 - B \nu_{O_2,I}} \right] \quad (6)$$

$$P_{CO_2,s} = P \left[\left(\frac{P_{CO_2,\infty}}{P} + \frac{1-B}{1 - B \nu_{O_2,I}} \right) \times \exp\left(-\frac{RT_m m_C}{2\pi d_p P D_{O_2,mix} W_C}\right) - \frac{1-B}{1 - B \nu_{O_2,I}} \right] \quad (7)$$

$$\frac{\rho_p d_p c}{6} \frac{dT_p}{dt} = \epsilon \sigma (T_w^4 - T_p^4) + \frac{Nu \lambda}{d_p} \left[\frac{\kappa}{e^\kappa - 1} \right] (T_g - T_p) + R_{C,I} \left[\frac{(1-\Psi)H_{I,1} + \Psi H_{I,2}}{W_C} \right] + R_{C,II} \frac{H_{II}}{W_C} \quad (8)$$

$$\text{where, } \kappa = \frac{m_C}{\pi d_p \lambda N W_C} [B \nu_{CO,I} + (1-B) \nu_{CO,II} c_{CO} + B \nu_{CO,I} - (1-B) \nu_{CO_2,II} c_{CO_2} - B \nu_{O_2,I} c_{O_2}] \quad (9)$$

식(9)의 전도항에 붙은 $[\kappa/(e^\kappa - 1)]$ 은 Stefan flow에 의한 전도열전달에의 영향을 고려한 것으로, Nusselt 수의 수정인자로 사용되었다[5].

반응에 따른 입자 크기 및 밀도의 변화는 경험

Table 1 Reaction kinetic constants

Char reaction	$R_C = A \exp(-E/RT) P_{i,s}^n$		
	A (kg/m ² -s-Pa ⁿ)	E (kJ/mol)	n
Oxidation [8]	0.074	57	0.5
Gasification [9]	3.1	131	0.5

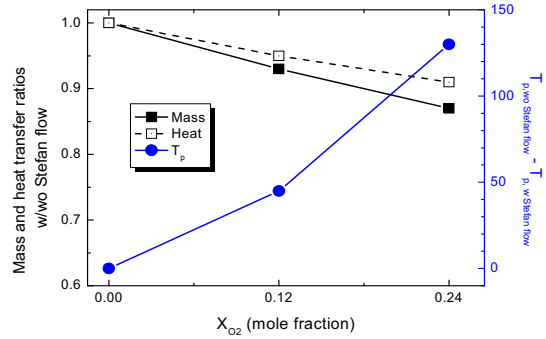


Fig. 1 Evaluation of the influence of Stefan flow on mass (oxygen) and heat (conduction) transfer rates according to oxygen level for a char particle of 100 μm burning at 1600K and N₂ diluent.

식인 Smith 식[1]을 고려하였다. 고려식은 다음과 같다.

$$d_p = d_p^0 U^\alpha \quad (10)$$

$$\rho_p = \rho_p^0 U^\beta \quad (11)$$

여기서, $3\alpha + \beta = 1$ 이고, U는 미연분 비율을 나타낸다. 본 연구에서 기본 α 값은 0.13이 적용되었다. 본 해석에 사용된 기본적인 총괄 반응 상수값은 Table 1과 같다.

좌 입자가 표면에서 산소 또는 이산화탄소와 반응할 때, 반응 전후 가스들의 체적유량차이에 의해 입자 표면으로부터 멀어지는 가스 흐름이 발생하게 되는데, 이를 Stefan flow라 한다. 이전 연구를 통해 이 Stefan flow가 질량 및 열전달에 영향을 미침이 밝혀졌지만, 상용 CFD 코드상에서는 이를 반영하고 있지 않다. Fig. 1은 앞선 모델 설명에서 보여준 식 (3)-(5)와 식(6)-(8)을 각각 이용하여 주위 산소 농도에 따른 산소 질량 유동 및 전도 열전달에의 영향을 평가한 것이다. 그림에서 보는 바와 같이 Stefan flow를 고려 시 질량 및 열전달이 산소 농도 증가에 따라 감소하는 것을 볼 수 있다. 이 영향으로 인해 Stefan flow를 고려하지 않았을 시 입자 온도가 12% O₂에서 약 50 K, 24% O₂에서 약 130 K 높게 나타남을 확인할 수 있다.

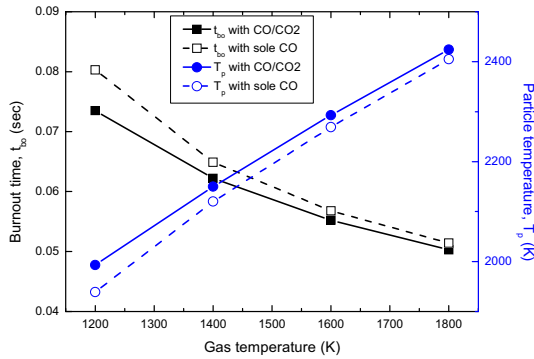


Fig. 2 Evaluation of the influence of the product consideration (CO/CO₂ or sole CO) by char oxidation according to gas temperature for a char particle of 100 μm burning at 21% O₂/N₂.

실제 촉 산화 반응으로 인해 생성되는 물질은 식 (I)에서 보이듯이 CO 또는 CO₂이고 그 생성비율은 일반적으로 입자표면온도에 의해 달라진다고 알려져 있다[7]. 즉 입자 온도가 높으면 대부분 CO가 생성되고, 낮으면 상당량의 CO₂가 함께 생성된다. 하지만, 상용 CFD 코드상에는 CO만을 생성물로 고려하고 있다. Fig. 2는 모델 해석에 촉 산화 반응 생성물을 각각 CO/CO₂로 고려한 경우와 CO만 고려한 경우의 결과를 온도에 따라 나타낸 것이다. 높은 온도 영역에서는 그 고려에 따른 촉 burnout 시간 및 입자온도에 큰 차이가 없지만, 낮은 온도에서는 단순 CO 생성물로 고려시 상당량의 낮은 촉 burnout 시간과 낮은 입자온도를 예측함을 확인할 수 있다.

상용 CFD 코드의 촉 총괄반응속도 (apparent kinetics) 모델에서 촉 입자 크기는 반응이 일어나는 동안 일정하고 밀도는 줄어든다고 가정한다. 하지만 일반적으로 고온의 영역 (Zone II에 해당)에서 촉 입자 및 밀도는 반응 진행과 함께 바뀌게 되므로, 이러한 가정에 따른 해석값의 차이를 살펴 볼 필요성이 있다. Fig. 3은 본 연구에서 실험값으로부터 구한 값 $\alpha=0.13$ 을 적용한 경우와 상용 CFD 코드상의 가정에 해당하는 $\alpha=0$ 을 적용하였을 때의 계산된 carbon conversion 양상 및 입자 온도를 나타낸 것이다. 계산 결과, 상용 CFD 코드에서 가정하듯 일정한 입자크기를 고려한 경우가 초기 입자 온도가 더 빨리 상승하여 carbon conversion이 더 빨리 일어났다. 이는 줄어드는 입자크기를 고려한 경우보다 반응 표면적이 더 크므로 인해 반응율이 더 크게 계산된 결과로 예상된다.

마지막으로 상용 CFD 상에서 가정하고 있는 반응 상수값 가정 및 입력 상수값에 따른 결과를 비교 및 고찰해보았다. 그 결과, 해석 결과는 고

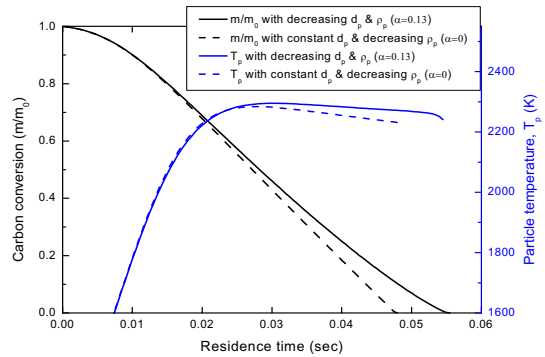


Fig. 3 Evaluation of the influence of particle evolution with reaction progress on the simulation for a char particle of 100 μm burning at 21% O₂/N₂.

려된 반응상수값에 의해 크게 영향을 받음을 알 수 있었고, 이를 통해 해석시 그 반응모델 및 해석 환경에 적합한 반응상수를 사용해야 됨을 알 수 있었다.

본 연구를 통해 미분탄 촉 반응 해석을 위해 주로 사용하는 상용 CFD 코드 상의 단막 총괄 반응속도 모델의 한계, 보완사항 및 올바른 사용의 중요성에 대하여 알아보았다.

후 기

본 연구는 한국과학기술원 가치제조 기계사업단 (BK21)의 지원을 받았으며, 이에 감사드립니다.

참고 문헌

- [1] I. W. Smith, "The combustion rates of coal chars: A review", Proceedings of the Combustion Institute, 1982, Vol. 9, pp. 1045-1065.
- [2] R. Johansson, K. Andersson, B. Leckner, H. Thunman, "Models for gaseous radiative heat transfer applied to oxy-fuel conditions in boilers", Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, Vol. 53, pp. 220-230.
- [3] M. M. Baum, P. J. Street, "Predicting the combustion behavior of coal particles", 1971, Combustion Science Technology, Vol. 3, pp. 231-243.
- [4] E. W. Thiele, "Relation between catalytic activity and size of particle," 1939, Industrial & Engineering Chemistry Research, Vol. 31, pp. 916 - 920.

-
- [5] J. J. Murphy, C. R. Shaddix, "Effects of Stefan Flow on Heat Transfer from Reacting Carbon Particles", 2003, Report No. SAND2002-8072, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, USA.
- [6] S. R. Turns, An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, New York, McGraw-Hill, 2006.
- [7] J. R. Arthur, "Reaction between carbon and oxygen", 1951, Transactions of the Faraday Society, Vol. 47, pp. 164-178.
- [8] R. H. Hurt, R. E. Mitchell, "Unified high-temperature char combustion kinetics for a suite of coal of various rank", 1992, Proceeding of the Combustion Institute, Vol. 24, pp. 1243-1250.
- [9] D. H. Kim, S. H. Choi, C. R. Shaddix, M. Geier, "Effect of CO₂ gasification reaction on char particle combustion in oxy-fuel conditions", 2013, Fuel, submitted.