상용 미분탄 보일러 연소해석에서 석탄 탈휘발 모델 및 난류반응속도의 영향 평가

양주향* · 김정은* · 류창국*†

Effects of coal devolatilization model and turbulent reaction rate in numerical simulations of a large-scale pulverized-coal-fired boiler

JooHyang Yang*, Jung-en A. Kim*, Changkook Ryu*†

ABSTRACT

Predicting coal combustion by computational fluid dynamics (CFD) requires a combination of complicated flow and reaction models for turbulence, radiation, particle flows, heterogeneous combustion, and gaseous reactions. There are various levels of models available for each of the phenomena, but the use of advanced models are significantly restricted in a large-scale boiler due to the computational costs and the balance of accuracy between adopted models. In this study, the influence of coal devolatilization model and turbulent mixing rate was assessed in CFD for a commercial boiler at 500 MWe capacity. For coal devolatilization, two models were compared: i) a simple model assuming single volatile compound based on proximate analysis and ii) advanced model of FLASHCHAIN with multiple volatile species. It was found out that the influence of the model was observed near the flames but the overall gas temperature and heat transfer rate to the boiler were very similar. The devolatilization rate was found not significant since the difference in near-flame temperature became noticeable when it was multiplied by 10 or 0.1. In contrast, the influence of turbulent mixing rate (constant A in the Magnussen model) was found very large. Considering the heat transfer rate and flame temperature, a value of 1.0 was recommended for the rate constant.

Key words: Boiler, CFD, Pulverized coal, Devolatilization, Turbulent reaction rate

석탄화력 보일러에 대한 전산유동해석(CFD) 기술은 순산소 연소와 같은 새로운 연소기술의 개발, 저 NOx화, 바이오매스와의 혼소, 운전조건 최적화 등의 연구개발에 있어 여러 대안을 평가하고 성능을 예측하는데 유용하게 활용된다. 미분탄 연소에 대한 해석은 지배방정식인 질량, 운동량, 난류, 에너지, 화학종 보존식이 서로 연계되어 있고, 각 식에는 입자, 석탄연소, 가스반응, 복사열전달 등 다양한 세부모델이 생성항(source term)으로서 큰 영향을 미치게 된다. 따라서 세밀하고 균형 잡힌 세부모델들의 설정과 입력값(모델 계수, 경계조건 등)의 결정이 필요하다. 그러나, 대형 보일러의 경우 복잡한 형상으로 인해 고급모델의 사용이 제한적이고 해석결과의 검증할 수 있는 계측자료가 극히 부족하여, 해석의 신뢰성, 소요시간, 수렴성 등의 측면에서 적절한 모델 설정 및 계수들의 결정이 쉽지 않다.

본 연구는 미분탄보일러에 대한 CFD 해석을 구성하는 여러 모델 중 석탄 탈휘발 모델과 난류 가스반응의 영향을 분석하기 위한 것이다. 이를 위해 국내 상용 운전중인 500 MWe급 보일러를 대상으로 탈휘발 모델 및 반응속도와 난류혼합속도를 바꾸어가면서 화염형태 및 온도분포와 벽면 열유속의 변화를 평가하였다.

Fig. 1은 대상 보일러의 구조를 나타낸 것이다. 이 보일러는 전벽 및 후벽에 각각 12개의 스월버너가 설치된 전형적인 대향류 방식으로서, 복사부에 대해 총 829,321개의 육면체 셀로 격자로 구성하였다. 대상 탄종은 공업분석 결과 총 수분 10%, 휘발분 26.5%, 고정탄소 49.3%, 회분

* 성균관대학교 기계공학부
† E-mail : cryu@me.skku.ac.kr
Tel : (031)299-4841 Fax : (031)299-5889

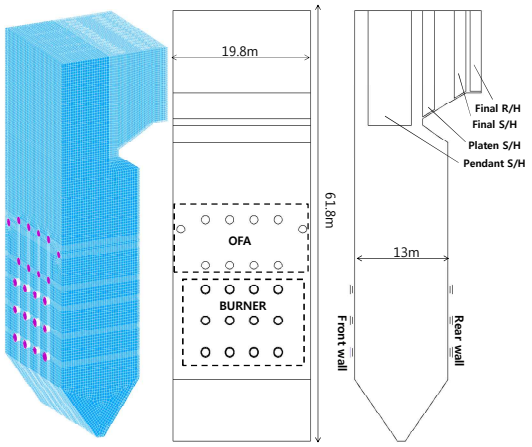

Fig. 1 Schematic of opposed-firing pulverized coal boiler at 500 MWe capacity

14.2%로 구성되며, 고위발열량은 25.24 MJ/kg이다. 운전 조건은 석탄 46.6 kg/s (입열량 1177 MWth), 과잉 공기비 10% (총 공기유량 421.5 kg/s)로서 각 버너 및 OFA 포트의 공기 유량 배분은 홍 등[1]의 논문에 제시된 값을 사용하였다.

석탄 탈휘발 모델은 고급모델인 FLASH-CHAIN[2]과 단순 모델의 두 가지에 대해 영향을 평가하였다. FLASHCHAIN은 석탄 네트워크 모델에 기반하여 석탄 입자 크기 및 승온율, 반응조건에 따른 탈휘발의 진행속도와 휘발분 조성을 예측하는 모델이다. 대상 탄종에 대해 예측된 휘발분 조성은 Table 1과 같다. 반면, 단순모델은 공업분석의 휘발성분 및 고정탄소를 각각 실제 연소분위기에서의 휘발분과 촤로 설정하고, 원소분석결과로부터 촤의 탄소를 제외한 나머지 가연분을 하나의 휘발분 화학종($C_xH_yO_zN_nS_s$)으로 설정하게 된다. 실제 보일러의 승온율은 10^4 K/s 수준으로 매우 높아 공업분석의 휘발분(26.5 % 또는 30.9 %daf)에 비해 휘발분의 발생이 증가하게 되는데 Table 2와 같이 FLASH-CHAIN은 46.78 %로 예측하였다. 이로 인해 휘발분에 비해 반응속도가 느린 촤의 함량이 감소된다. 두 탈휘발 모델은 버너 근처의 화염 형태나 온도분포에 영향을 주지만 전체 가연분의 발열량과 원소조성은 동일하다.

탈휘발 속도는 single-rate model을 적용하였다. FLASHCHAIN을 통해 예측된 반응상수는 A_P =5799 s^{-1}, E=33.08 MJ/kmol이다. 탈휘발 속도의 영향은 위 A_P 값에 각각 10, 0.1을 곱하여 설정한 두 경우를 추가하여 비교하였다.

촤 반응의 경우 다음과 같이 산화반응(C1)와 CO_2, H_2O에 의한 가스화반응(C2, C3)으로 구성하고, Unreacted core shrinking model

Table 1 Volatiles composition (wt.%daf) predicted by FLASHCHAIN (Tar: $C_xH_yO_zN_nS_s$)

Tar	H_2	CH_4	C_nH_m	CO	CO_2	H_2O	Total
36.67	1.37	2.00	1.84	2.7	2.4	5.2	46.78

(UCSM)[3]를 이용하여 해석하였다.

(C1) $C(s) + O_2 \rightarrow CO$
(C2) $C(s) + CO_2 \rightarrow 2CO$
(C3) $C(s) + H_2O \rightarrow CO+H_2$

가스 반응 모델은 휘발분을 이루는 화학종들과 촤 반응의 생성물이 최종 연소생성물인 CO2, H2O로 전환되는 반응으로서, 전체 반응구성은 Jones-Lindstedt mechanism[4]에 기반한 7개의 반응식을 적용하였다. 아래는 대표적인 반응식을 나타낸 것이다.

(R1) $C_xH_yO_zN_nS_s + (x/2+y/4-z/2+s)O_2 \rightarrow xCO+0.5yH_2+0.5nN_2+sSO_2$
(R2) $C_xH_y + 0.5xO_2 \rightarrow xCO+0.5yH2$
(R3) $CO + H_2O \rightarrow CO_2+H_2$
(R4) $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$

난류 유동장에서의 가스반응속도는 화학반응속도와 난류혼합속도 중 최솟값에 의해 결정되는 kinetic-rate/eddy-dissipation-rate model[5]을 적용하였다.

$$R = \min[R_{kinetic}, \min(A\rho\frac{\epsilon}{k}\min_R(\frac{Y_R}{\nu_R M_R}), AB\rho\frac{\epsilon}{k}\frac{\sum Y_P}{\sum \nu_P M_P})] \quad (1)$$

여기에서 반응물과 생성물의 두 난류혼합속도에 적용된 상수 A, B는 각각 4와 0.5가 추천되는 값이다. 그러나 작은 규모의 화염과 달리 대형 보일러에서 강한 난류 유동장에서 혼합속도에 적용하기 위해서는 두 상수에 대한 평가가 필요하다. 이 연구에서는 두 항 모두에 곱해지는 A값을 0.5, 1, 2, 4로 바꾸어 이에 따른 영향을 분석하였다.

이 외에 복사열전달은 구분종좌법을 적용하고 CO와 H_2O의 흡수계수는 회색기체가중합법(Weighted sum of gray gases model)으로부터 구하였다. 미분탄은 Rosin-Rammler 분포(평균입

Table 2 Summary of models and parameters tested (italic: reference values)

Parameter	Models/Values
Volatiles composition	*FLASHCHAIN*, Single volatile species
Pre-exponential factor (A_P = 5799 s^{-1})	*1A_P*, 0.1A_P, 10A_P
Magnussen constant A	0.5, *1*, 2, 4

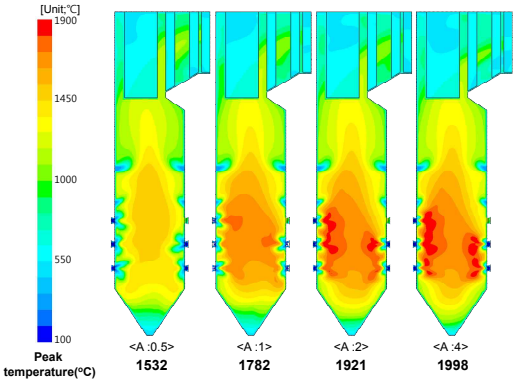

Fig. 2 Temperature distribution for different values of Magnussen constant A.

경 55 ㎛)를 가지는 입자들에 대해 난류의 영향을 고려하여 개별 입자의 궤적을 추적하면서 연소 및 가스유동장과의 상호작용을 계산하는 Lagrangian method를 적용하였다. 연소실 벽면의 경계조건은 입출구 평균스팀온도 600 K이고, 유효열전달 계수 1500 W/m^2·K, 방사율 0.7로서 일반적으로 적용되는 값이다. CFD 해석은 상용코드인 ANSYS Fluent 6.3을 이용하였다. Table 2는 전술한 해석 경우들을 요약한 것이다.

Fig. 2는 Magnussen 상수 A의 변화에 따른 연소로 내 수직평면의 온도 분포와 최고 온도를 나타낸 것이다. A 값이 증가함에 따라 가스 난류 반응 속도가 빨라져, 온도가 높아짐을 알 수 있다. A=0.5인 경우 평면 온도 분포와 최고 온도가 지나치게 낮다. 반면, A=2, 4인 경우 최고온도가 1900℃가 넘고 버너 근처에서는 1800℃ 이상의

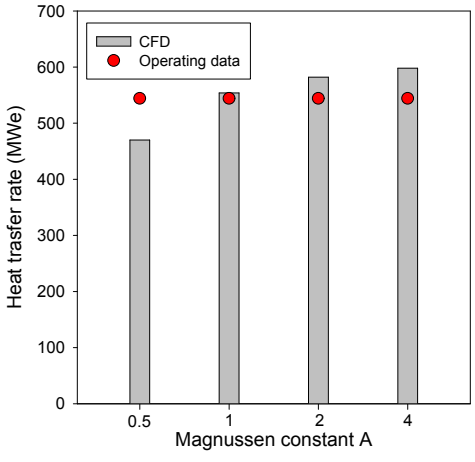

Fig. 3 Heat transfer rate of membrane wall for different values of Magnussen constant A

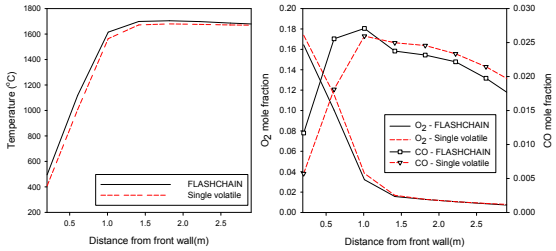

Fig. 4 Temperature distribution and CO, O_2 concentrations along burner axis from front wall

고온영역이 넓게 형성되어 온도가 과도한 것으로 판단된다. 보통 화염부의 온도는 1600℃ 내외로 보기 때문에 A=1인 경우가 적절하다고 판단되지만 계측자료가 존재하지 않으므로 간접자료로서 벽면 전열량을 활용하였다. Fig. 3은 Magnussen 상수 A의 변화에 따른 벽면 전열량을 CFD결과와 비교한 것으로 운전 자료와 유사한 A=1인 경우가 적절하다고 판단된다.

Fig. 4은 FLASHCHAIN의 휘발분 조성을 적용한 것과 휘발분 조성을 하나의 단일 화학종(Single volatile)으로 적용하였을 때, 전벽에서의 온도와 CO, O_2의 몰분율을 비교한 그래프이다. FLASHCHAIN을 적용한 경우 휘발분에 CO가 포함되어 있기 때문에 탈휘발과 동시에 CO가 생성된다. 하나의 단일 화학종으로 적용한 경우 휘발분의 연소과정을 거쳐서 CO가 생성되기 때문에 상대적으로 느리게 생성된다. 이에 따라, FLASHCHAIN을 적용한 경우가 초기 온도가 높고 버너와 인접한 곳에서 빠르게 반응이 진행되는 것으로 나타났다.

Fig. 5는 탈휘발 속도의 반응 상수 A값의 변화

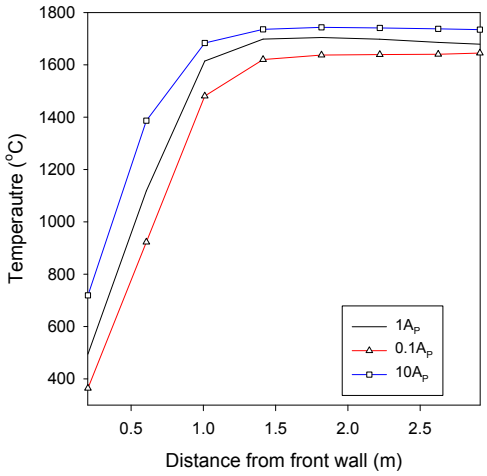

Fig. 5 Temperature profiles for different values of A_P along burner axis from front wall

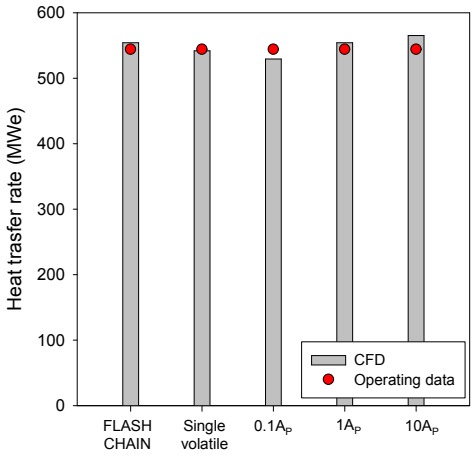

Fig. 6 Heat transfer rate of membrane wall for different devolatilization models and A_P values

에 따른 온도변화를 나타낸 것이다. $0.1A_P$를 적용한 경우, 버너영역에서 온도가 낮아지고 탈휘발 과정이 느려짐에 따라 모든 반응들이 $10A_P$를 적용한 경우보다 느려지고, 버너영역에서 넓게 진행되었다. $10A_P$를 적용한 경우, 버너영역에서 온도가 증가하였고 모든 반응이 버너영역에 인접한 곳에서 일어났다. 탈휘발 속도는 버너영역에서의 세부적인 화염의 형상이나 온도분포에 영향을 끼치나, 이는 10, 0.1을 곱하여 적용한 경우이므로 일정 범위 안에서의 A_P값의 변화는 큰 영향을 주지 않을 것으로 예측된다.

탈휘발 모델과 반응상수를 평가하기 위하여 벽면 전열량과 비교한 결과 Fig.6과 같다. FLASHCHAIN을 사용한 경우 단순화한 화학종을 적용한 것보다 전열량이 2% 더 높게 예측되었으며, 화학종을 단순화한 경우가 벽면 전열량을 더 정확하게 예측하였다. 반응상수를 변화시킨 경우 A_P값에 따라 3 - 4%의 차이를 보였다.

본 연구에서는 석탄 탈휘발 모델 및 가스난류반응 상수가 미분탄 보일러 연소 해석에 미치는 영향을 평가하였다. 온도 분포나 벽면 전열량을 고려했을 때, Magnussen 상수 A는 1.0이 적절할 것으로 판단된다. 탈휘발 모델의 경우 FLASHCHAIN과 단순 모델을 비교하였을 때, 전열량은 큰 차이가 없었다. 그러나 개별 버너에서 세부적인 화염 형태와 반응 특성을 관찰하는 데는 FLASHCHAIN과 같이 다양한 휘발분을 고려하는 것이 더 적절한 것으로 판단된다. 탈휘발 반응 속도 상수(A_P)는 10배 증가 또는 감소시킨 경우 전열량에 의미있는 변화가 나타나 연소특성에 민감한 인자로 판단되지 않는다. 그러나, 탈휘발 반응 속도 상수의 변화폭이 탄종에 따라 매우 크기 때문에 실험을 통해 결정하지 않을 경우 신중한 선택이 필요하다.

후 기

본 연구는 2013년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술 평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구과제입니다.(No. 20131010101830)

참고 문헌

[1] 홍재현, 김정은, 류창국, 김영주, 전산유동해석을 이용한 500MWe급 대향류 석탄 보일러의운전특성 분석, 2011 연소학회 추계학술대회.

[2] Niksa S. PC Coal Lab version 4.1: user guide and tutorial, Niksa Energy Associates LLC, Belmont, CA, United states

[3] Wen C. Y., Chaung T. Z., "Entrainment Coal Gasification Modeling. Industrial and Enggeneering Chemistry Process and Development"., 1979, Vol. 10(1), pp. 684-695

[4] W. P. Jones and R.P. Lindstedt, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion", Combust Flame 1988, Vol. 73, pp. 233 - 249

[5] B. F. Magnussen and B.H. Hjertager, "On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion", In 16th Symp. (Int'l.) on Combustion. 1976, Vol. 16, pp.719-729