

## 오리멀전의 가스화 반응 특성에 관한 수치해석 연구

나혜령 · 이진욱 · 윤용승  
고등기술연구원 재료/공정 연구실

### Numerical Study for the Reacting Characteristics of Orimulsion Gasification

Hye Ryung Na, Jin Wook Lee and Yongseung Yun  
Materials/Processing Laboratory, Institute for Advanced Engineering

#### 요 약

본 연구에서는 오리멀전을 연료로 하는 가스화기를 대상으로 전산유체역학 방법론을 적용하여 연료의 가스화 반응 특성을 파악하고자 하였다. 특히, 산화제의 양에 따른 가스화기내 생성 가스의 농도 분포를 예측해 보고, 분무되는 오리멀전 액적의 직경 및 분사 각도, 그리고 연료 주입구에서의 유입 속도 변화 등 연료의 유입 조건에 따른 반응장의 유동 특성을 고찰해 보았다. 본 연구에서는 산화제와 오리멀전의 비가 0.88일 때 가스화 반응이 가장 활발히 진행되어 연료로서 효율 가치가 있는 CO, H<sub>2</sub>의 농도가 출구에서 높게 나타났으며, 오리멀전 액적의 직경이 작을수록 반응성이 좋았고, 분무 각도가 45°로 유입될 때 혼합 효과가 증대되었다. 따라서, 액적을 연료로 하는 가스화기 운전시 유입되는 액적의 직경은 수십  $\mu\text{m}$ 로 무화시켜 반응시키고, 벽면쪽으로 액적이 치우치지 않도록 적절한 각도로 분무시켜주는 것이 전체 시스템의 효율을 향상시킬 수 있는 방안이라고 판단되었다. 또한 선행된 해석 결과를 토대로 100톤/일급 고온·고압 플랜트에 대한 해석을 수행하여 봄으로써 적절한 오리멀전 가스화기 운전 조건의 기본 자료를 확보하고자 하였다.

**Abstract** — A numerical study for the turbulent reacting flow in an orimulsion gasifier has been carried out to analyze the characteristics of chemical reaction by orimulsion droplets. In this study, our interest has been focused on the effect of oxidizer to orimulsion ratio, which is one of the key parameters of gasification operation, as well as on the distribution of chemical species. In addition, we have conducted numerical calculations to understand the effect of droplet size, spray angle and injection velocity of fuel so as to acquire the basic information on the operating range of orimulsion gasifier. The result of numerical calculations showed that the gas composition of CO and H<sub>2</sub> concentrations was the highest when the oxidizer to orimulsion ratio was about 0.88 and the reactivity of orimulsion increased as the droplet size reduced with proper spray angle. Also, we have carried out the analysis on the orimulsion gasification in the 100 ton/day-scale gasifier based upon the prior study in order to obtain the basic data for the proper operating condition using orimulsion feed.

#### 1. 서 론

환경 오염에 대한 위기 의식은 현재 전세계적으로 공감대를 형성하고 있으며, 이에 대한 해결책으로 오염 물질의 배출 기준 강화 및 환경친화적인 시스템의 연구 개발 등이 제시되고 있다. 현재 활발하게 연구가 진행되고 있는 대표적인 기술의 예가 석탄과 중유 등을 연소시키는 기존의 화력발전시스템을 대체할 수 있는 가스

회복발전시스템이다. 석탄 및 기타 연료를 이용하여 에너지를 생산하는 가스화 기술은 이산화탄소, 황화합물 및 질소화합물 등의 오염 물질 배출율이 기존의 화력발전 에 비하여 현저히 낮아 지속적으로 강화될 환경규제치를 만족시킬 수 있는 중요한 대안으로 부상하고 있다.

특히, 복합발전시스템의 핵심적인 단위 공정인 가스화기에 관련된 분야의 연구는 전체 시스템의 효율을 결정하는 중요한 인자중의 하나로 궁극적인 목적은 가스화

기의 최적 형상 및 최적 운전 조건의 도출에 있다고 하겠다. 이러한 최적 조건의 가스화기 설계를 위해서는 가스화기 내부의 복잡한 물리·화학적 현상에 대한 충분한 이해가 수반되어야 한다. 그러나 가스화기의 특성상 대부분의 경우 두꺼운 내화재에 둘러싸여 있어서 내부의 제반 현상을 육안으로 관찰할 수 있는 부분이 제한적이므로 상세한 관찰이 어렵다. 또한, 새로운 설계 조건에 대한 연구를 수행하기 위하여 설계 및 장치 변경에 의한 연구는 상당한 시간 및 비용이 소모되는 어려움이 있으므로 이러한 실험적인 연구의 제한성을 보완할 수 있는 훌륭한 도구로 활용될 수 있는 것이 전산유체역학을 이용한 방법론이다.

본 연구에서는 새로운 연료 형태인 오리멸전을 이용한 가스화기에 대하여 전산유체역학을 이용한 해석을 수행하였다. 오리멸전은 역청에 약 30%의 물을 첨가한 에멀전 상태의 새로운 연료로 중유와 석탄의 중간 정도의 성질을 가지고 있다고 알려져 있다. 최근에는 대체 연료로서의 오리멸전의 경제적인 유용성이 확인됨에 따라 이에 대한 연구가 선진국을 중심으로 활발히 진행되고 있다. 특히 100 Mw급 Dalhousie 플랜트, 400 Mw급 Sanford 플랜트, 500 Mw급 INCEB 플랜트 등의 상용화급 플랜트에서 오리멸전을 발전에 이용하고 있으며, Texaco사에서는 가스화 방법에 의한 연료로서의 활용을 연구중에 있다<sup>[14][17]</sup>.

본 연구는 새로운 대체 연료로서의 가능성이 있는 오리멸전의 복합발전시스템의 연료로서 활용 가능성을 검토해 보고자 고온의 오리멸전 가스화기내에서 일어나는 내부 현상을 해석하여 반응을 동반한 2상(two-phase) 난류 유동장의 특성을 파악하고자 하였다. 특히 석탄가스화기에서와 마찬가지로 연료의 가스화 특성에 매우 커다란 영향을 줄 수 있는 산소량에 따른 주요한 생성 가스의 조성을 통해 오리멸전의 가스화 반응 특성을 파악하고자 하였다. 또한, 유동장 형성에 변화를 줄 수 있는 오리멸전의 유입 조건을 변화시켜 이때 형성된 유동장의 특성을 파악하여 적절한 오리멸전 가스화기 운전 조건의 기본 자료를 확보하고자 하였다.

## 2. 수학적 모델 및 해법

### 2-1. 기체상 지배방정식

난류반응유동장이 형성되는 가스화기 내부의 기상 지배방정식을 2차원 축대칭 좌표계에서 다음과 같은 편미분방정식의 형태로 나타낼 수 있다<sup>[8][9]</sup>. 즉,

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v \phi) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \Gamma_r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = S_\phi$$

위 식에서  $\phi$ 는 해석하고자 하는 일반 종속 변수로서

각 방향에 대한 속도 성분( $u, v$ ), 레이놀즈응력(Reynolds stress), 엔탈피( $h$ ) 및 각종 화학종( $m_i$ ) 등을 나타낼 수 있다. 그리고,  $x$ 는 축방향,  $r$ 은 직경방향의 거리를 나타내며,  $\rho$ 는 기체의 밀도,  $\Gamma_x$ 와  $\Gamma_r$ 는 종속 변수에 대한 확산 계수와 생성항을 각각 나타낸다. 한편, 연료의 반응에 의한 속도 변화 등에 따른 기상의 질량, 엔탈피, 운동량의 변화량은 생성(소멸)항에 포함된다. 위의 편미분 방정식을 제어 체적에 기초한 유한 체적법을 사용하여 이산화하였으며 이산화된 방정식은 비선형 방정식이므로 수렴된 해를 얻기 위해 반복적으로 계산을 수행하였다<sup>[9]</sup>. 운동량 방정식에서 나타나는 압력과 속도의 연계는 SIMPLER 알고리즘을 사용하였으며, 운동량 난류 모델은 RSM(Reynolds Stress Model)을 사용하였고, 복사 열전달 모델은 복사 강도를 각각 방향여현의 1차 함수로 가정하고 복사에너지의 흡수와 산란을 고려한 P-1 모델을 사용하였다. 가스상 반응장에서 난류에 의해 야기되는 주요 변수들의 변동항은 유동장, 입자 궤적 등에 커다란 영향을 미친다. 여기서는 난류 반응에 대한 현상학적 모델을 위해 가스상 반응은 화학반응속도에 의해서가 아니라 연료와 산화제의 난류 혼합 속도에 의해서 좌우된다고 가정된 'fast chemistry model'을 사용하였는데 그중, 혼합 분율( $f$ )과 확률 밀도 함수(PDF)를 이용한 보존 스칼라 모델<sup>[10]</sup>을 사용하였으며, 반응 생성물의 화학 조성은 주어진 제어체적(control volume) 내에서 열 및 물질수지, 그리고 수치해석적으로 계산된 격자점의 열역학적 상태에 따라 열역학 데이터베이스로부터 결정되도록 하였다.

### 2-2. 입자상 지배방정식

난류 유동장내에서 입자상 물질이 존재하게 되어 입자가 주변의 산화제와 반응할 경우, 물질 및 열전달이 상호간에 일어나게 되어 유동장에 커다란 영향을 미치게 된다. 따라서 난류반응유동장내의 입자 유동 특성 및 진행 상태를 이해하는 것은 매우 필요하다. 본 연구에서는 Lagrangian법<sup>[11]</sup>에 의해서 난류반응유동장내 오리멸전 액적의 입자 궤적을 계산하였다. 오리멸전의 반응은 액적 반응 모델을 설정하여 해석하였으며, 아래와 같이 초기에 유입된 액적의 온도가 상승한 후 증발(vaporization) 및 비등(boiling)을 통해 기화되어 액상에서 기상으로 전달된 후 반응되도록 하였다.

Inert heating:  $T_p < T_{vap}$

Droplet vaporization:  $T_p < T_{bp}$  or  $m_p > (1-f_{v,0})m_{p,0}$

Droplet boiling:  $T_p \geq T_{bp}$  and  $m_p > (1-f_{v,0})m_{p,0}$

Inert heating/cooling:  $m_p \leq (1-f_{v,0})m_{p,0}$

여기서,  $T_p$ ,  $T_{vap}$ ,  $T_{bp}$ 는 각각 액적의 온도, 증발 및 비

등점 온도이며,  $m_{p0}$ ,  $m_p$ ,  $f_{v0}$ 는 각각 액적의 초기 질량, 현재 질량, 그리고 액적에 포함되어 있는 증발분을 나타낸다.

2-3. 경계 및 해석 조건

본 연구의 적용 대상인 2차원화된 상단공급방식의 가스화기를 Fig. 1에 나타내었다. 가스화기의 일차 주입구에서는 오리멸전이 액적 형태로 산화제와 함께 공급되며, 이차 주입구에서는 산화제만이 공급되도록 하였다. 가스화기의 벽면은 단열 조건으로 가정하였는데, 실제 상업용 가스화기의 경우 벽면을 통한 열손실이 1% 미만인 점을 고려할 때, 단순하면서도 비교적 적절한 가정으로 판단된다. 대상 연료는 베네주엘라의 Bitors사에서 생산하는 오리멸전으로 연료의 원소 분석치 및 발열량을 아래의 Table 1에 나타내었다<sup>[2]</sup>. 특이한 점으로는 오리멸전내 Vanadium 함유량이 평균 300 ppm으로서 제거 공정이 필히 요구되는 점이나, 본 연구에서는 Vanadium에 대한 해석은 포함치 않았다.

산화제는 95% 산소로 가정하였으며, 전산해석결과의 상대적인 비교를 위해 설정된 표준 조건은 아래의 Table 2에 정리하였는데, 오리멸전의 처리량과 산화제연료의 공급 무게비는 Texaco사의 pilot plant에서 사용한 자료<sup>[2]</sup>를 이용하였다. 본 연구에서는 아래의 조건을 기준으로 산화제의 공급량에 따른 반응 생성물의 조성 및 분포 변화, 반응하는 액적의 직경, 유입 속도, 그리고 분무 각도의 변화에 따른 가스화기내 유동장의 특성을 파악하

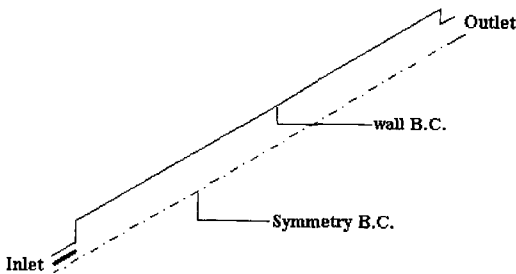


Fig. 1. Schematic diagram of orimulsion gasifier.

Table 1. Ultimate analysis of Bitors's Orimulsion.

원소분석 (WT%, WET)		수분함량 (WT%)
Carbon	60.81	
Hydrogen	7.55	
Nitrogen	0.38	28.59
Sulfur	2.57	
Ash	0.10	
Gross Heating Value (Kcal/kg)		9961.9 (Moisture-Free)
Vanadium (ppm)		300

Table 2. Standard condition for numerical calculations.

Orimulsion loading (kg/hr)	630.0
Oxidizer	95% O <sub>2</sub> +5% N <sub>2</sub>
Oxidizer/Orimulsion (-)*	0.88
Oxidizer injection velocity (m/s)	6.0
Droplet diameter (μm)*	100
Droplet injection velocity (m/s)*	6.0
Spray angle (°)*	0.0

\*Simulation parameters.

여 오리멸전의 가스화 반응 특성을 알고자 하였다.

본 연구에서 오리멸전의 가스화반응을 전산해석하기 위해 사용된 코드는 상용 열유체 해석 소프트웨어인 FLUENT V.4.4이며, HP9000/770 워크스테이션에서 계산을 수행하였다.

3. 수치해석 결과 및 고찰

본 연구는 오리멸전을 이용한 가스화기내 난류반응유동장의 특성을 파악하기 위해 전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, 이하 CFD) 방법에 의한 해석을 수행하였다. Fig. 2와 Fig. 3은 산화제의 공급량에 따른 가스화기내 CO와 H<sub>2</sub> 가스의 조성 분포를 나타낸 것이다. 가스화기내로 공급되는 산화제 즉, 산소량은 연소 생성물인 CO<sub>2</sub> 및 H<sub>2</sub>O의 양을 결정할 뿐 아니라 가스화기의 온도도 결정하므로 가스화 특성에 가장 직접적인 영향을 미친다. 따라서 연소 반응을 적절히 일으켜 가스화기의 온도를 고온으로 유지하면서 연소 생성물인 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O가 탄소 성분과의 흡열 반응인 가스화 반응을 충분히 일으킬 수 있도록 하기 위해서는 적정량의 산소를 공

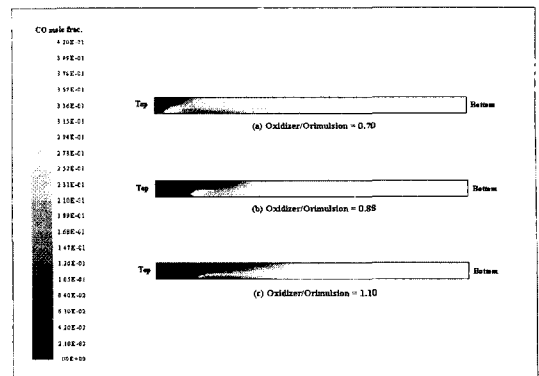


Fig. 2. Contour plots of CO mole fraction in terms of oxidizer to orimulsion ratio.

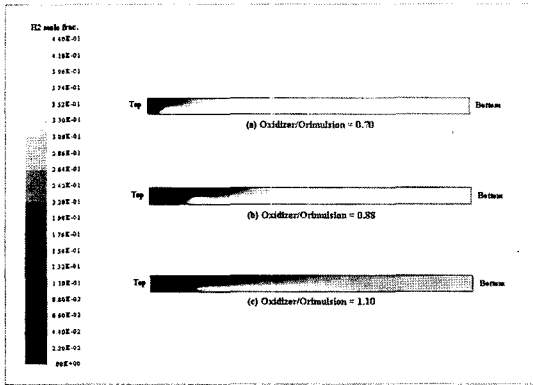


Fig. 3. Contour plots of H<sub>2</sub> mole fraction in terms of oxidizer to orimulsion ratio.

급해 주어야 한다. CFD 해석 결과를 통해 볼 때, 산화제와 오리멸전의 비가 0.88에서 가스화 반응이 가장 활발히 진행되어 연료로서의 가치가 있는 가연성 가스인 CO 및 H<sub>2</sub> 가스의 농도가 출구에서 높게 나타남을 알 수 있다. 즉, 액적 형태의 오리멸전이 가스화기내로 분사되면서 초기 영역에서는 산소와 빠르게 반응함으로써 연소 생성물인 CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O 가스가 주로 생성되나, 후류로 갈수록 CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O는 가스화 반응의 산화제로 작용하여 미반응된 탄소와의 반응을 통해 CO와 H<sub>2</sub> 가스의 농도가 증가하기 시작하는 것이다. 그러나 산화제의 양이 표준 조건보다 적은 Fig. 2의(a)의 경우, 연소에 의한 발열량이 작아 가스화기의 온도가 흡열 반응을 일으키는데 충분하지 않고, CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O의 발생량도 작으므로 미연 탄소가 많이 발생하게 된다. 따라서 가스화기 후류에서 이런 미연 탄소가 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O와 충분하게 반응하지 못하고 빠져나가기 때문에 출구에서의 CO 농도가 낮게 나타남을 알 수 있다. 반면, 표준 조건보다 많은 양의 산화제가 유입되는(c)의 경우, CO의 농도가 산화제와 오리멸전의 비가 0.88일 때에 비해 다소 낮게 나타나고 있는데, 이것은 산화제의 양이 더욱 증가하게 되면 CO, H<sub>2</sub>와 산소와의 연소 반응이 활발해져서 CO<sub>2</sub> 및 H<sub>2</sub>O의 양이 증가하기 때문이다. Fig. 3의 H<sub>2</sub> 가스는 가스화기내 초기 반응 영역에서 중심축 근처에 많이 생성되고 벽쪽으로 갈수록 감소하는 경향을 보인다. 이와 같은 이유는 일차 산화제와 오리멸전이 함께 분사되는 중심축 부근에서는 산소가 부족하여 오리멸전으로부터 증발된 수소 성분이 대부분 H<sub>2</sub> 가스로 전환되는 반면에, 이차 산화제와 만나는 영역에서는 산소가 충분하여 상대적으로 많은 양의 수소 성분이 연소 반응에 관여하기 때문인 것으로 판단된다. 그리고 산화제가 증가할수록 출구에서의 농도 분포가 점차적으로 낮아지는 경향을 보

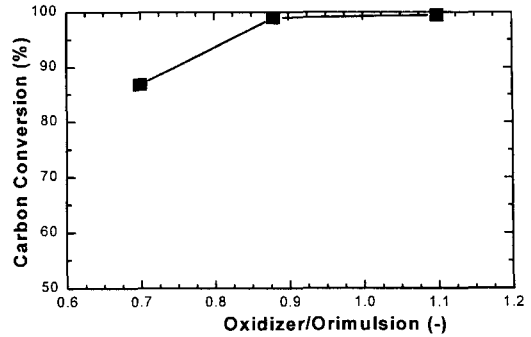


Fig. 4. Comparison of carbon conversion in terms of oxidizer to orimulsion ratio.

여주고 있는데, 이는 산소와의 빠른 반응으로 인한 H<sub>2</sub>O 가스의 생성이 우세하기 때문이다.

Fig. 4는 가스화기의 성능을 평가하기 위한 주요한 자료중의 하나인 탄소 전환율을 산화제의 양에 따라 나타낸 것이다. 이 결과로부터 알 수 있듯이 낮은 산화제/오리멸전의 비에서 가스화기를 운전하게 되면 반응 후 생성 가스로 전환되지 못하고 남아 있는 미반응 탄소가 증가하므로 가스화기 내 탄소 전환율은 낮아지게 된다. 그러나, 산화제의 양이 증가하게 되면 미반응 탄소가 CO 및 CO<sub>2</sub> 등 반응 후 생성되는 가스상내 탄소로 전환되는 양이 많아지므로 탄소 전환율은 증가하게 되는 것이다. 특히, 산화제와 오리멸전의 비가 0.7에서 0.88로 증가하게 되면 탄소 전환율은 급격히 증가하는 경향을 보이는 반면, 0.88에서 1.1로 증가하게 되면 탄소 전환율은 거의 변화가 없음을 알 수 있다. 즉, 0.88의 비 근처에서 이미 미연 탄소가 충분히 반응되었다고 판단되며, 가스화기로 공급되는 산소량을 0.88의 비에 비해 증가시키게 되면 가스화기내 반응이 가스화 반응에서 연소 반응쪽으로 우세하게 진행되기 때문에 효율적인 가스화기 운전이 이루어질 수 없다고 판단된다(Figs. 2, 3 참조). 따라서, 해석 결과를 기초로 할 때 오리멸전 가스화기는 산화제와 연료의 비가 약 0.88 근처에서 운전되는 것이 적당하다고 판단된다.

Fig. 5는 표준 조건에서 중심축을 기준으로 하여 하류 방향의 거리 변화에 따른 생성물의 농도 분포를 나타낸 그래프로서 오리멸전의 반응 후 생성되는 가스 성분중 CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O의 네 성분에 대한 몰분율을 표시하였다. 결과에서 볼 수 있듯이 가스화기의 입구 근처에서는 오리멸전 액적에서 증발되는 탄소 성분은 대부분 산화 반응에 의해 CO로 전환되고, 수소 성분은 대부분 H<sub>2</sub>로 전환되므로 가스화기내 입구 근처에서 CO와 H<sub>2</sub> 가스가 많이 생성된다. 그러나 초기에 다량 생성되었던 CO와 H<sub>2</sub> 가스는 산소와의 빠른 산화 반응에 의

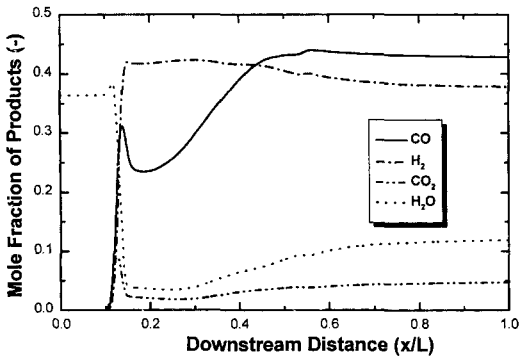


Fig. 5. Distribution of species concentration at the centerline.

해 다시 감소하는 경향을 보이는 반면, 연소 반응의 생성물인 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O가 증가하는 경향을 보인다. 그런데, 가스화기의 약 1/3 지점의 영역에서 보면 CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O는 미반응 탄소 성분과의 가스화 반응에 산화제로 참여하기 때문에 다시 감소하는 반면, 생성물인 CO 및 H<sub>2</sub>는 증가하는 경향을 볼 수 있다. 이 결과로부터 가스화기내로 유입되는 오리멸전 액적은 초기 영역에서 산소와의 연소 반응으로부터 방출되는 열량에 의해 흡열 반응이 충분히 일어날 수 있을 만큼 높은 가스화기 내부 온도가 유지되면, 연소 가스인 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O와 출구쪽으로 가면서 활발한 가스화 반응을 일으킴을 알 수 있다. 그런데, 가스화 반응이 완료된 1/3 지점 이후로 CO<sub>2</sub>와 H<sub>2</sub>O가 다시 증가하고, CO와 H<sub>2</sub>는 감소하는 경향을 보이고 있는데, 이것은 2차원적으로 볼 때 반응 초기에 가스화기의 외벽 쪽으로 치우쳐 높은 농도를 나타내었던 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O와 가스화기 중심측 근처에서 높은 농도를 나타내었던 CO/H<sub>2</sub>가 후류로 갈수록 혼합 및 확산되기 때문에 나타난 결과이다(Figs. 2, 3참조).

Fig. 6에서는 출구에서 산화제와 오리멸전의 비에 따른 주요 생성물의 농도 분포 비교를 통해 산소량이 가스화 반응에 미치는 영향을 명확히 보여주고 있는데, CO의 경우는 산화제의 변화에 따라 표준 조건을 기점으로 증가한 후 감소하는 경향을 보이고 있다. 즉, 산화제의 양이 표준 조건보다 적은 경우는 Fig. 4에서 설명한 바와 같이 탄소 성분의 가스화 반응이 충분히 활성화되지 못하고 배출되는 미연 탄소가 많아지기 때문에 출구에서 배출되는 CO의 농도가 낮아지게 된다. 그런데, 산화제의 양이 증가하게 되면 탄소 성분의 가스화 반응이 활발히 진행되므로 탄소 전환율이 증가하기 시작하고, 결과적으로 CO의 농도도 증가하게 된다. 그러나, 산화제의 양이 더욱 증가하게 되면 가스화 반응에 비해 연소 반응이 점진적으로 우세하게 진행되므로 CO가 CO<sub>2</sub>로 전

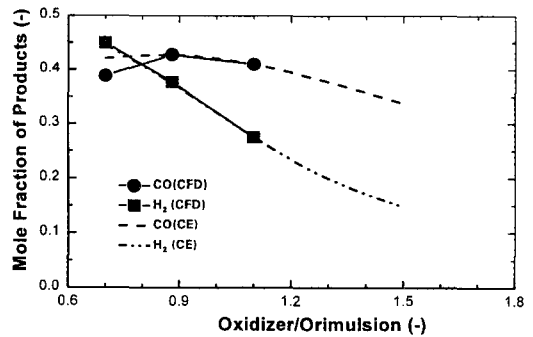


Fig. 6. Comparison of predicted mole fraction of product gases in the exit (CE: Chemical Equilibrium, CFD: Computational Fluid Dynamics).

환되는 비율이 높아지기 때문에 출구에서의 CO 농도가 점차적으로 감소하게 되는 것이다. H<sub>2</sub>의 경우는 산화제의 양이 증가할수록 감소하는 경향을 뚜렷히 나타내주고 있는데, 이는 산소와 H<sub>2</sub>의 반응 속도가 워낙 빠르기 때문에 H<sub>2</sub>O로 전환되는 양이 많아지기 때문이다. 또한 Fig. 6에는 ASPEN 소프트웨어를 이용하여 체류 시간의 개념이 배제된 0차원 해석, 즉, 화학 평형 상태(Chemical Equilibrium, 이하 CE)에서의 해석 결과를 포함하여 CFD 해석 결과와 비교하여 보았다. 결과에서 볼 수 있듯이 해석 방법에 따른 생성물의 출구에서의 농도 분포는 거의 유사함을 보였다. 그런데, 산화제와 오리멸전의 비가 0.7 부근에서는 CFD 해석에 의한 CO 농도가 다소 낮게 나타났는데, 이는 탄소 전환율이 0차원 해석에 비해 낮게 예측되었기 때문이다. 그러므로, CFD 해석시에도 충분한 체류 시간을 주게 되면 탄소 전환율이 증가하여 CO의 농도가 증가할 것으로 예측된다.

Fig. 7은 유입되는 오리멸전 액적의 직경 변화에 따

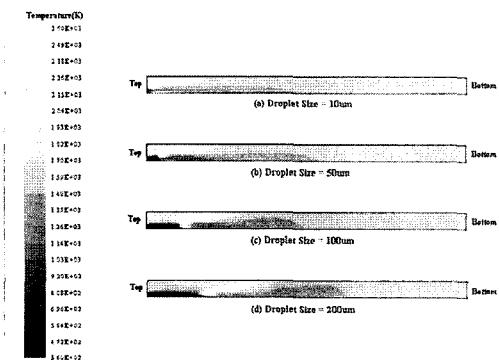


Fig. 7. Temperature contour plots in terms of oriemulsion droplet size.

큰 반응 유동장의 온도 분포를 각각 나타낸 것이다. 결과에서 볼 수 있듯이 분무되는 액적의 직경에 따라 가스화기내 초기 반응 영역의 형상이 큰 차이를 보이는데, 액적의 직경이 작아질 수록 연료와 산화제와의 반응 속도가 현저히 빨라짐을 알 수 있다. 즉, 직경이 10 μm로 가장 작은(a)의 경우, 가스화기내 초기 반응인 산소와의 연소 반응으로 생성된 최대 온도 영역이 입구쪽에서 나타나고, 크기가 증가할 수록 이 영역이 하류쪽으로 이동하는 모습을 볼 수 있다. 그리고, 액적의 직경이 커질 수록 화염의 길이가 길어지는 양상을 보이는 것은 액적과 산화제와의 연소 반응이 완료되는 시간이 증가하기 때문인 것으로 판단된다. 따라서, 가스화기내로 유입되는 연료는 입자가 작을 수록 입구 근처에서 연소 반응이 빠르게 완료된 후, 연소 생성물인 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O와의 충분한 가스화 반응이 이루어질 수 있을 것이라고 판단되므로 오리멀전 가스화기의 운전 조건중 액적의 표면적의 증가가 반응성을 향상시키는 중요한 인자임을 확인할 수 있었다.

Fig. 8은 연료의 유입 속도 변화에 따른 반응 영역의 변화에 대한 결과를 나타낸 것이다. 가스의 유입 속도는 6 m/s이며, 이에 비해 연료의 유입 속도가 현저히 작은(a)의 경우, 연료의 반응이 빠른 속도로 진행되어 입구 근처에서 최대 온도 영역이 형성되는 반면, 연료의 유입 속도가 가스 속도보다 빠른(c)의 경우는 산화제와 연료가 반응되기까지 걸리는 시간이 증가하는 경향을 보인다. 따라서 해석 결과를 통해 볼 때 가스 유입 속도와 비교하여 연료의 유입 속도가 작은 경우는 어느 정도 반응을 향상시키는 역할을 하고 있음을 알 수 있었다. 그러나 실제 가스화기의 운전시(a)의 경우처럼 연료를 가스에 비해 낮은 속도로 유입시키는 것은 입구에 고온 영역이 집중되므로 가스화기 연료 주입 노즐의 손상을

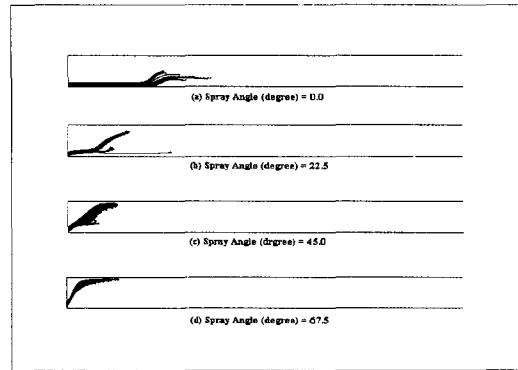


Fig. 9. Patricle trajectory plots in terms of spray angle of orimulsion droplet.

을 가져올 수 있을 것으로 판단된다.

Fig. 9는 표준 조건에서 오리멀전 액적의 유입 각도 변화에 따른 입자의 궤적을 나타낸 것이다. 가스화기내 반응의 효율은 산화제와 연료의 혼합 효과에 따라 주로 결정되므로 본 연구에서는 혼합 효과를 증대시키는 여러가지 방법 중 연료 주입구에서 분무되는 액적의 각도를 조절하여 유동장의 특성을 파악해 보았다. 분무 각도가 0°인 (a)의 경우, 가스화기내로 유입되는 오리멀전 액적의 궤적으로 판단해 볼 때 입구 초기에서 액적이 산화제, 특히 이차 산화제와 충분히 혼합되지 못하므로 액적의 진행 거리가 길어짐을 볼 수 있으나 분무 각도가 커질수록 오리멀전과 산화제의 혼합이 증가하기 때문에 반응이 완료될 때까지의 액적의 진행 거리는 상대적으로 짧아지고 있음을 알 수 있다. 그런데, 유입 각도가 67.5°로 가장 큰 (d)의 경우, 액적들이 가스화기내로 유입되자마자 가스화기 입구의 상단부로 치우치는 양상을 보이는데, 이러한 현상은 벽면에 국부적으로 높은 화염 온도를 형성시킴으로써 가스화기 내벽에 손상을 줄 수 있을 것으로 판단된다. 따라서 입자 궤적의 분포를 볼 때 45° 각도로 분무되는 (c)의 형태를 갖는 것이 산화제와 오리멀전의 혼합을 적절히 일으켜 가스화기내에서의 반응을 효과적으로 일으킬 수 있으리라 판단된다.

또한, 지금까지의 해석 결과를 바탕으로 100톤/일급 오리멀전 가스화기에 대해서 표준 조건의 산화제/오리멀전의 비를 적용하여 CFD 해석을 수행하였다. 28 기압으로 운전되는 고온·고압의 가스화기 내에서 가스화 반응이 충분히 완료될 수 있을 만큼의 체류 시간을 갖는 형상 및 부피를 고려하여 해석을 수행하였다. 앞서 수행된 해석 결과를 보면 오리멀전 가스화기내에서 일어나는 주된 반응은 대부분 1.5초 정도에 종결되므로 설계 여유를 고려하여 체류 시간을 약 3초 정도로 설정하였다. Fig. 10에 나타낸 결과에서 볼 수 있듯이 초기 반

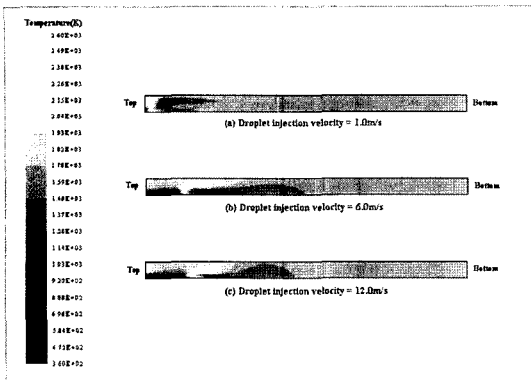


Fig. 8. Temperature contour plots in terms of injection velocity of orimulsion droplet.

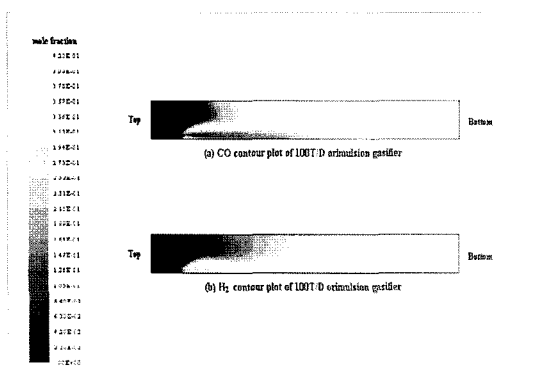


Fig. 10. Contour plots of gasification products in the 100 T/D orimulsion gasifier.

Table 3. Comparison of product gas composition at the gasifier exit (mole fraction).

Products	CE	CFD
CO	0.4323	0.4086
CO <sub>2</sub>	0.0467	0.0488
CH <sub>4</sub>	0.0004	0.0001
COS	0.0003	
H <sub>2</sub>	0.3775	0.3601
H <sub>2</sub> O	0.1194	0.1372
H <sub>2</sub> S	0.0073	0.0084
N <sub>2</sub>	0.0161	0.0160
C(S)		0.0208
SUM	1.0000	1.0000
Temp <sub>exit</sub> (K)	1662	1649

(CE: Chemical Equilibrium, CFD: Computational Fluid Dynamics).

용 영역에서는 연소 생성물인 CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O가 우세하게 생성되다가 감소하며, 후류로 진행될 수록 가스화 반응의 생성물인 CO, H<sub>2</sub>가 높게 생성되고 있음을 알 수 있다. 그리고, 출구에서의 가스화 반응 생성물의 몰분율은 Table 3에 정리된 바와 같이 CO가 약 41%, H<sub>2</sub>가 약 36%로 나타났다. 그러나, 몰분율로 약 2%에 해당하는 미연 탄소분이 반응하지 않고 배출되는 것으로 나타났으나, 국내의 중유 가스화 설비에서도 일부의 미반응 탄소의 재순환 시스템을 채택하고 있는 것으로 미루어 판단해 볼 때 CE 해석과는 달리 일부의 탄소 성분이 가스상으로 전환되지 못하는 본 연구의 해석 결과가 타당성이 있는 것으로 판단된다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 복합발전시스템의 대상 연료로서 오리

멸전을 가지고 CFD 방법론을 통해 가스화 반응의 특성을 파악하고자 하였다. 특히 산화제의 양에 따른 가스화기내 가스화 반응 생성 가스의 농도 분포 특성을 파악해 보았고, 분무되는 오리멸전 액적의 직경 및 각도, 그리고 연료 주입구의 오리멸전 유입 속도 변화에 따른 반응장의 유동 특성을 고찰해 보았다. 그리고 소용량 처리 가스화기에서의 해석 경험을 토대로 하여, 100톤/일 급 규모의 플랜트에 적용될 수 있는 가스화기에 대해 CFD 해석을 수행해 봄으로써 오리멸전 가스화기의 적절한 운전 조건에 대한 기본 자료를 확보하였다.

CFD 해석 결과를 통해 가스화기내로 유입되는 산소량은 연소 생성물의 분포 및 가스화기의 내부 온도를 결정하여 가스화 반응이 효과적으로 일어날 수 있도록 하는 중요한 인자임을 확인할 수 있었다. 본 연구에서는 산화제와 오리멸전의 비가 0.88일 때 가스화 반응이 가장 활발히 진행되었으며 연료로서 효율 가치가 있는 CO, H<sub>2</sub>의 농도가 출구에서 높게 나타남을 알 수 있었다. 오리멸전의 액적이 가스화기내로 유입될 때 연료의 직경 및 분무 각도는 가스화기내의 산화제와 오리멸전의 혼합을 증대시키는 역할을 하는 중요한 인자로서 CFD 해석 결과를 통해 오리멸전 액적의 직경은 작을수록 반응성이 향상되고, 분무 각도가 45°로 유입될 때 혼합 효과가 증대됨을 확인할 수 있었다. 따라서 액적을 연료로 하는 가스화기 운전시 유입되는 액적의 직경은 수십 μm로 무화시켜 반응시키고, 벽면 쪽으로 액적이 치우치지 않도록 적절한 각도로 분무시켜주는 것이 전체 시스템의 효율을 향상시킬 수 있는 방안이라고 판단되었다. 또한 위의 해석 결과를 바탕으로 100 T/D 가스화기에 대해 해석을 수행하여 만족할 만한 결과를 얻을 수 있었다.

향후 오리멸전 가스화 시스템의 보다 효율적인 운전 조건을 제안하기 위해 가스화기 형상의 변경, 그리고 이차 주입구의 선회류의 영향 등 난류반응유동장에 커다란 영향을 미칠 것으로 판단되는 변수들을 고려하여 CFD 해석을 수행하고자 하며, 상용화급의 오리멸전 가스화기에 대해서도 성공적으로 적용할 수 있으리라 판단된다.

#### 감사의 글

본 연구는 산업자원부 산하 에너지관리공단 R&D 본부에서 지원하는 “석탄가스화 복합발전 기반기술 개발 (II)” 연구의 일환으로 수행되었습니다. 이에 감사드립니다.

#### 참고문헌

1. Bitor, “A Presentation to Institute for Advanced Engineering”, January, 1994.

2. Quintana, M.E. and Davis, L.A.: "Pilot Plant Evaluation of Orimulsion as a Feedstock for the Texaco Gasification Process", Texaco Development Co., April, 1990.
3. Kennedy, B.A.: "Evaluation of Handling and Combustion Characteristics of Orimulsion in a Commercial Utility Boiler", NB Power, 1991.
4. Hernandez-Carstens, E. and Rodriguez, R. "Orimulsion: A New Fuel for Power Generation", Bitor America Co., 1991.
5. Sikander Khan: "Orimulsion-Viability as a Repowering Fuel", The 21st International Technical Conference on Coal Utilization & Fuel Systems, March 18-21, 1996.
6. 이승중, 이진욱, 김형택: "오리밀전 사용 분류층 가스 화기의 성능 예측", 한국에너지공학회 춘계학술대회 논문집, pp. 378-385, 1994.
7. 나혜령, 이진욱, 윤용승, "오리밀전 사용할 때 가스화기내 난류반응유동장의 수치해석적 연구", 한국에너지공학회 추계학술대회 논문집, pp. 167-171, 1998.
8. Byron Bird, R., Warren E. Stewart and Edwin N.: Lightfoot, Transport Phenomena, John Wiley and Sons, New York, 1960.
9. Patankar, S.V.: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere publishing, Washington, 1980.
10. Smoot, L.D. and Smith P.J.: Coal Combustion and Gasification, Plenum Press, New York, 1985.
11. Modak, S.A. and Alexander, A.J.: "An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems", J. of Fluid Mech., V.55 (part2), pp. 193-208, 1972.