

## 고온수소 전환 반응기에 관한 수치해석적 연구

서동균<sup>1,†</sup> · 이진향<sup>1</sup> · 지준화<sup>1</sup> · 홍진표<sup>1</sup> · 오석인<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국전력공사 전력연구원, <sup>2</sup>(주) 씨에너지

### Numerical Study on High Temperature CO-Shift Reactor in IGFC

DONG-KYUN SEO<sup>1,†</sup>, JIN-HYANG LEE<sup>1</sup>, JUN-HWA CHI<sup>1</sup>, JIN-PYO HONG<sup>1</sup>, SUK-IN OH<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Clean Combustion Group, Clean Power Generation Laboratory, 105 Munji-ro, Yuseong-gu, Daejeon 34056, Korea

<sup>2</sup>C-Energy, 110-12 Wondosan-gil, Gwangsan-gu, Gwangju 62447, Korea

<sup>†</sup>Corresponding author :  
hongjp147@kepco.co.kr

Received 5 July, 2018  
Revised 14 August, 2018  
Accepted 31 August, 2018

**Abstract >>** In this study a numerical study was conducted to show flow, temperature and gas distributions in a high temperature CO shift reactor which was designed specially for energy saving and then evaluated with the related experiment. Mole fractions of syngas at the end of the catalyst bed were predicted with various assumed pre-exponential factors, were compared with the corresponding experimental results and  $10^8$  was finally selected as the value. With the selection, a base case was examined. It was calculated that the inlet duct attached asymmetrically to the CO shift reactor affects on the distribution of the upward momentum (+z directional). In addition, CO conversion ratio is achieved up to 90% in the catalyst bed and especially it reached up to 70% at the initial part of catalyst bed.

**Key words :** IGFC(석탄가스화연료전지연계복합발전), CO-shift reaction (CO 전환 반응), Reaction constant(반응상수), Numerical analysis(수치해석)

## 1. 서론

8차 전력수급계획에 따르면, 정부는 전원으로서의 석탄의 비중을 2017년 33.5%에서 2030년까지 31.6%로 줄이고 2040년까지 23.4%까지 줄일 계획을 하고 있다. 이는 신정부의 미세먼지 및 이산화탄소 등의 친환경 정책 때문이다<sup>1)</sup>. 석탄가스화 기술은 석탄 원료를 연료로 사용하는 기술로서, 석탄 내의 1차 미세먼지의 원인인 ash를 공정 중에서 슬래깅, 필터링 및

스크러빙 방식을 통해서 제거하는 친환경 기술이다<sup>2)</sup>.

석탄가스화 연료전지 복합발전(IGFC)은 석탄가스화 복합발전(IGCC)과 같은 대표적인 석탄가스화 기술로서 석탄을 고온고압조건에서 가스화하여 합성가스를 생산시킨 후 이를 연료전지의 연료로 사용하여 전기를 생산하는 기술이다. 원래 IGFC의 대상이 되는 연료전지는 고온에서의 운전과 고효율의 특성을 가지는 고체산화물 연료전지(SOFC)로서, 가스화공정에서 나오는 합성가스를 SOFC로 1차로 발전하고

SOFC에서 발생된 부산 합성가스로 복합 발전하는데 적용시킬 수 있다. 그러나 현재 기술로는 발전급 SOFC 개발이 이루어지지 못하고 있는 실정이며, 국내에서는 PEMFC나 PAFC와 같은 기존의 수소연료 전지를 이용한 IGFC 시스템을 개발 중에 있다<sup>3)</sup>.

이러한 수소연료전지를 이용한 IGFC에서 핵심 요소 공정으로는 기존의 가스화공정 및 연료전지 공정 외에 CO 전환공정이 있다. Water gas shift reactor라고도 불리는 CO 전환공정은 일산화탄소와 스팀가스가 반응하여 수소를 생산하는 공정으로서 수소를 생산하는 동시에 여러 공정의 촉매에 피독 성분으로 작용하는 일산화탄소를 제거하는 장점을 가지고 있다<sup>4)</sup>.

CO 전환공정의 성능을 예측하기 위한 모델링 연구는 국내외에서 촉매 및 적용에 따라 다양하게 시도되어 왔다. Haberman과 Young<sup>5)</sup>는 3차원 CFD법을 이용하여 개질기 해석을 수행하였고 이를 통하여 CO 전환공정이 포함된 개질기 내의 화학반응의 중요성을 밝혔다. Chen 등<sup>6)</sup>은 고온 및 저온 CO 전환 반응기를 대상으로 반응식을 세우는 연구를 수행하였다. Saw와 Nandong<sup>7)</sup>은 촉매층의 CO 전환공정 내에 냉각장치의 위치에 따른 CO 전환율에 대한 1차원 모델링을 수행하였다. 국내도 여러 기관에서 관련 연구를 수행하였다. Seo 등<sup>8)</sup>은 CFD 및 실험을 통하여 시스템의 열방출률이 CO 전환공정의 전환율에 미치는 연구를 수행하였다. Park 등<sup>9)</sup>은 CFD를 이용하여 멀티튜브형 CO shift 반응기에 관한 해석을 수행하였다. Seo 등<sup>10)</sup>은 CFD를 이용하여 PEMFC 연료전지의 개질기 해석을 수행하였고 CO 전환공정이 포함된 화학반응식을 사용하여 개질 성능치를 구하였다. Yang 등<sup>11)</sup>은 CFD를 이용하여 SOFC용 열교환형 개질기를 설계하였고 CO 전환공정이 포함된 Xu와 Froment<sup>12)</sup>가 제시한 반응식을 사용하였다. 이처럼 CO 전환공정에 대한 다양한 연구를 수행되었지만 IGFC 시스템 내에서 CO 전환 반응기에 대한 연구는 매우 드물다. 본 연구에서는 IGFC용 반응기를 대상으로 가스화 공정 및 정제공정을 통해서 나오는 정제 합성가스를 대상으로 한다. 일정한

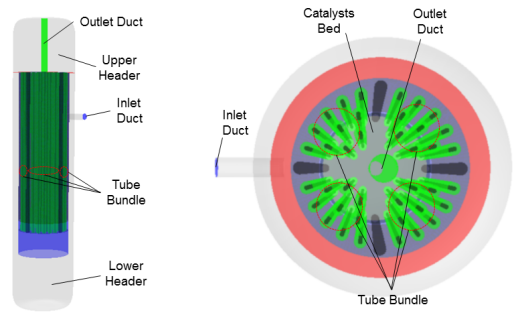


Fig. 1. Overview on high temperature CO conversion reactor

예열 및 스팀믹서(mixer)를 거친 일정한 온도의 합성가스를 대상으로 수치해석적 연구를 수행하였다.

## 2. 해석 대상

본 IGFC에서 사용되는 CO 전환공정은 크게 2단계로서 high temperature CO 전환공정과 low temperature로 구성되어 있다<sup>13)</sup>. 본 논문의 연구 대상은 고온장치로서, 합성가스 예열공정이 별도로 필요하지 않은 에너지 절약형 반응기이다. Fig. 1은 고온 CO 전환 장치의 개요도를 나타낸 것이다.

Fig. 1의 왼쪽 그림은 고온 CO 전환 장치를 옆에서 본 그림이고 오른쪽 그림은 위에서 본 단면도이다. 해당공정은 합성가스 및 스팀이 들어가는 입구부, 고온 전환 반응에 적합한 열을 통해서 예열하는 40개의 튜브로 구성된 튜브번들부, 튜브번들에서 나온 합성가스-스팀이 실질적인 전환 반응이 일어나는 고온 촉매부, 전환된 가스가 나가는 출구부로 구성되어 있다.

## 3. 수치해석

본 공정의 해석을 위하여 전산유체역학(CFD) 방법이 사용되었다. 반응기 형상 및 격자생성을 위해서 Gambit 2.4.6을 사용하였고 해석을 위해서는 ANSYS® FLUENT 6.3.26을 사용하였다. 반응기 특성을 수치적으로 모사하기 위한 지배방정식은 1) 가스영역과 2) 촉매층 영역으로 구분할 수 있다. 가스 영역은 난

**Table 1.** Conservative equations (gas zone)

| Items                     | Equations  |     |
|---------------------------|--|-----|
| Mass                      | $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0$  | (1) |
| Momentum                  | $\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \text{div}(\rho u_i \vec{u})$<br>$= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \text{div}(\tau_{ij}) + B_i$<br>Where, $\tau_{ij} = (\mu + \mu_t) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$  | (2) |
| Energy                    | $\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \text{div}[\vec{u}(\rho E + p)]$<br>$= \text{div}(k \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_k h_k \vec{J}_k + \tau_{ij} \cdot \vec{u}) + S_h$  | (3) |
| Turbulence (Standard k-ε) | $\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} k)$<br>$= \text{div}[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j}] + G_k - \rho \epsilon$<br>$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} \epsilon)$<br>$= \text{div}[(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}] + C_{1\epsilon} C_k \frac{\epsilon}{k} - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$<br>$G_k$ is based on the assumptions on the Boussinesq :<br>$G_k = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = (\mu_t \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ | (4) |
| Species                   | $\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} Y_k) = \text{div}(\vec{J}_k) + R_k$<br>Where, $\vec{J}_k = (\rho D_{k,m} + \frac{\mu_t}{Sc_k}) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$   | (5) |
| Radiation Model           | $\text{div}(\vec{I}_s) + (a + \sigma_s) I = a n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi}$<br>$+ \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I \Phi d\Omega'$   | (6) |
| Equation of State         | $Pv = n R_u T$   | (7) |

류영역으로서 반응이 일어나지 않는 영역이다. 적용되는 지배방정식은 질량, 운동량, 에너지, 난류, 화학종보존식 등이 사용되었다. 난류 유동의 모델링을 위하여 Standard  $\kappa$ - $\epsilon$  난류 모델을 사용하였고 복사 모델은 Discrete Ordinary 모델을 사용하였다. Table 1은 가스영역에 적용된 지배방정식을 요약한 것이다. 촉매층 영역은 반응이 일어나는 영역으로서 공극률 (porosity,  $\gamma$ )이 포함된 식과 화학반응이 포함된 식이 적용된 영역으로서 해당 식은 Table 2에서 정리하였다. 여기서 난류식, 복사식 그리고 상태방정식은 각각 Table 1의 Eq. (4), (6) 그리고 (7)이 적용되었다. 해석의 단순화를 위하여 DO 모델 Eq. (6)에서, 흡수

**Table 2.** Conservative equations (catalysts zone)

| Items             | Equations  |      |
|-------------------|--|------|
| Mass              | $\frac{\partial(\gamma \rho)}{\partial t} + \text{div}(\gamma \rho \vec{u}) = 0$   | (8)  |
| Momentum          | $\frac{\partial(\gamma \rho u_i)}{\partial t} + \text{div}(\gamma \rho u_i \vec{u}) = -\gamma \frac{\partial P}{\partial x_i}$<br>$+ \text{div}(\gamma \tau_{ij}) + \gamma B_i + S_{mom,i}$<br>Where, $\tau_{ij} = (\mu + \mu_t) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$                                   | (9)  |
| Energy            | $\frac{\partial(\gamma \rho E + (1-\gamma) \rho_s E_s)}{\partial t} + \text{div}[\vec{u}(\gamma \rho E + p)]$<br>$= \text{div}(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_k h_k \vec{J}_k + \tau_{ij} \cdot \vec{u}) + S_h$  | (10) |
| Species           | $\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} Y_k) = \text{div}(\vec{J}_k) + R_k$<br>Where, $\vec{J}_k = (\rho D_{k,m} + \frac{\mu_t}{Sc_k}) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$   | (11) |
| Chemical Reaction | $R_k = MW_k \sum_r \widehat{R}_k$ . Where,<br>$\widehat{R}_k = (v''_k - v'_k) (k_f \prod_i [C_i]^{n_i} - k_b \prod_i [C_i]^{m_i})$<br>Where, $k_f = A T^n \exp(-E/RT)$ , $k_b = k_f / K_e$ ,<br>$K_e$ is equilibrium constant, as follow as :<br>$K_e = \exp(\frac{\Delta S^0}{R} - \frac{\Delta H^0}{RT}) (\frac{p_{atm}}{RT})^{\sum_i (v''_i - v'_i)}$ | (12) |

계수(a) 및 산란계수( $\sigma_s$ )는 0으로 설정하였다.

Table 1 및 Table 2에 제시된 지배방정식(transient term 제외)을 풀기 위하여 implicit pressured based solver가 사용되었고, 이때 Gradient법은 Green-Gauss cell을 기준으로 하였다. 차분화(discretization) 방법은 압력의 경우 standard 방식을 사용하였고, 밀도, 운동량, 난류, 화학종, 에너지 그리고 복사방정식은 second order upwind법을 사용하였다. 여기서 속도와 압력의 연계(coupling)를 위해서는 SIMPLE 알고리즘을 적용하였다.

본 고온 CO 전환 반응기 내 촉매에서 일어나는 화학반응식은 아래와 같다:



Table 2의 Eq. (12)에서 화학종 k는 CO, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> 그리고 N<sub>2</sub>로 구성되어 있고 화학반응의 반응상수는 Arrhenius 모델식의 반응상수가 적용되었

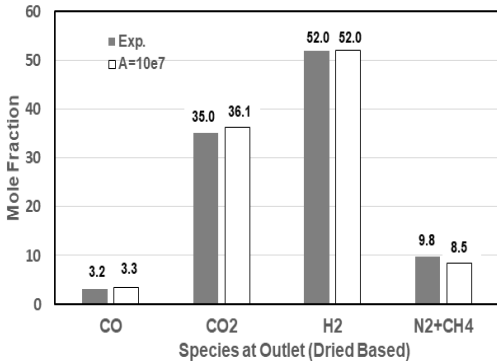


Fig. 2. Comparison of simulation with experiment

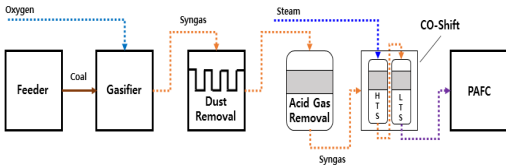


Fig. 3. Overall block flow diagram for IGFC

다. Activation energy 상수는 기존문헌을 참고하여 70,000,000 J/kmol로 설정하였다<sup>6)</sup>. Pre-exponential factor 상수는  $10^6$ - $10^8$  사이 값으로 조정했을 때, 10<sup>7</sup> 일 때 실험값에 가장 접근하였다(Fig. 2). Fig. 2는 계산값과 반응기 후단에서 측정한 측정값을 비교한 것이다. 이때 측정은 Gas Chromatography (Agilent GC)를 사용하였고, 이때 가스는 제습조건에서 분석하였다. 본 연구에서는 촉매층 내에서의 압력손실을 반영하기 위하여 운동량 손실은 아래식과 같다:

$$S_{mon,i} = -\frac{150\mu(1-\gamma)^2}{\theta^2 D^2 \gamma^3} u_i - \frac{1.75\rho(1-\gamma)}{\theta D \gamma^3} u_i^2 \quad (14)$$

여기서 D는 촉매의 크기(0.017 m)이고, L은 촉매의 길이(0.0048)이다.  $\theta$ 는 촉매의 구형도(0.75)이고  $\gamma$ 는 촉매영역의 기공도(0.42)이다. 또한 촉매층 내에서의 열전달을 계산하기 위한 촉매조건으로 밀도( $\rho_c$ )는 7,633 kg/m<sup>3</sup>, 비열( $C_{p,c}$ )은 421 J/kg/K, 열전도계수( $h_c$ )는 80 W/m/K가 사용하였다<sup>5)</sup>.

Table 3. Boundary conditions

| Items |                       | Values   |
|-------|-----------------------|--|
| Inlet | Flow rate             | Syngas: 165 Nm <sup>3</sup> /hr at 529 K (dried)<br>Steam: 143 kg/hr at 529 K  |
|       | Syngas composition    | H <sub>2</sub> : 28.2%, CO: 54.0%, CO <sub>2</sub> :3.6%<br>CH <sub>4</sub> : 1.8%, N <sub>2</sub> : 12.4% (dried, Vol%) |
|       | Turbulence            | Turbulence intensity: 5%<br>Characteristic diameter: 0.0508 m  |
|       | Outer wall conditions | Heat loss: 10 kW   |

### 4. 경계조건 및 해석조건

Fig. 3은 본 파일럿 IGFC 공정의 block flow diagram을 나타낸 것이다. 석탄과 산소가 가스화기에서 가스화한 후에 나오는 합성가스(syngas)는 냉각(cooling), 분진제거(dust removal), 산가스제거(acid gas removal) 공정을 통과한 후에 CO 전환공정에 들어간다. 본 CO 전환공정에 들어가는 합성가스 용량은 160-180 Nm<sup>3</sup>/hr 급으로서, 이는 수소연료전지로 0.25 MW급으로서 10 MW급 실증의 전단계 규모이다. CO 전환공정은 크게 고온공정과 저온공정으로 구분할 수 있는데 본 연구의 대상이 되는 반응기는 이 중에서 고온공정이다. CO 전환공정 중 고온장치에 들어가는 합성가스 및 스팀조건 및 외부벽면에서의 외기방향으로 방열조건은 Table 3과 같다. 해당 조건은 본 해석의 경계조건(boundary conditions)으로 설정되었다.

### 5. 결과 및 토의

Fig. 4는 고온 CO 전환 반응기의 속도분포를 0-2 m/s 범위에서 나타낸 것이다. Fig. 4(a)에서 알 수 있는 바와 같이 최대 속도가 형성되는 구간은 입구덕트와 출구덕트이다. 여기서의 최대 속도는 출구덕트 입구에서 약 9 m/s이다. 반응기 수직단면을 볼 때, 촉매층으로 유입되는 가스(합성가스+스팀)의 속도는 0.4-0.5 m/s로 균일하게 유입되고 있다. Fig. 4(b)는 아래헤더부에서 발생하는 속도벡터를 나타낸 것이다. 입구덕트부 반대 방향에서 아래 방향의 유동이 형성되었고 형성된 데드존 주변으로 유동이 발달되어 올라가다가 촉매층

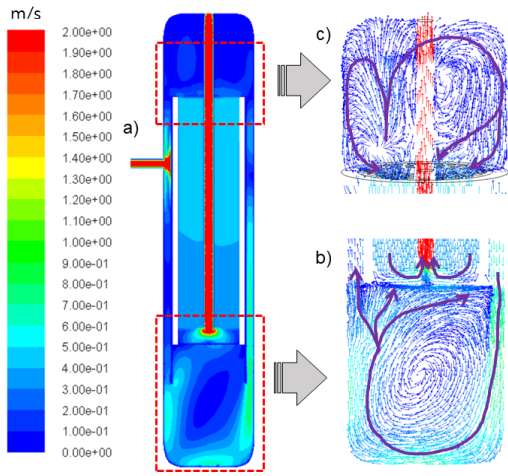


Fig. 4. Velocity distribution for high temp CO-shift reactor. (a) Velocity contour on vertical cross-section, (b) Velocity vector in lower header, (c) Velocity vector in upper header

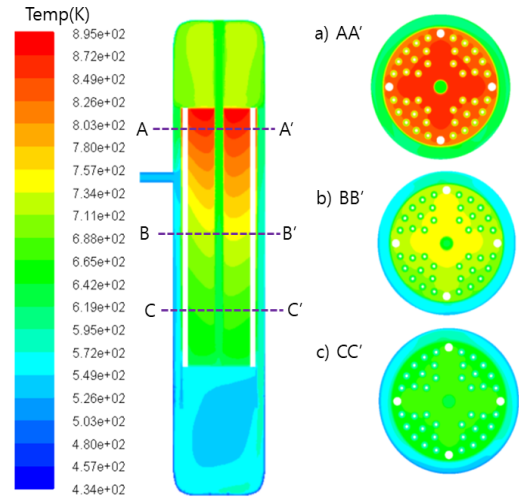


Fig. 6. Temperature distributions for high temp CO shift reactor. (a) Cross-section AA', (b) Cross-section BB', (c) Cross-section CC'

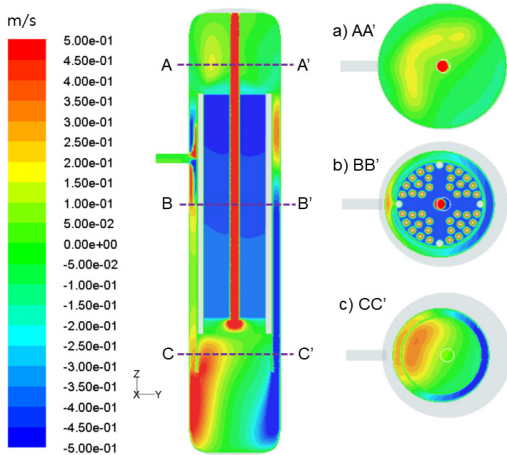


Fig. 5. Z-directional velocity distributions for three cross-section

인근에서 각각의 튜브로 분산되어 올라가는 것을 볼 수 있다. Fig. 4(c)는 위 헤더부에서 발생하는 속도벡터를 나타낸 그림이다. 위 헤더부에서는 입구덕트부 유동은 주로 위 방향으로 흐르고 있고 입구덕트 반대부에서 아래 방향으로 흐르는 것을 알 수 있다. Fig. 5는 z방향의 속도를 나타낸 것으로서 본 반응기의 유동 특성을 잘 보이고 있다. Fig. 5에서 알 수 있는 바와 같이 입구 덕트에 들어간 가스는 반대 방향으로 가면서 동시에 아래 방향으로 내려간다. 내려간 가스는 아래

헤더 아래 벽을 타고 가다가 위 방향으로 흘러가는 것을 알 수 있다. 단면 CC'에서 알 수 있는 바와 같이 z 방향으로 흘러가는 모멘텀은 입구덕트부에 치우쳐 있다는 것을 알 수 있다. 이러한 경향은 단면 BB'를 통과한 후에 단면 AA'까지 유지되는 것을 알 수 있다. 이를 통해서 볼 때 입구덕트의 위치가 모멘텀의 편류에 영향을 미치고 있다는 것을 알 수 있다.

Fig. 6은 고온 CO 전환 반응기의 온도분포를 나타낸 것이다. Fig. 6에서 알 수 있는 바와 같이 최대 온도가 형성되는 구간은 촉매층이 시작되는 곳인 단면 AA'근방으로서 이때의 최대 온도는 895 K(622°C)이다. Fig. 6(a)에서 알 수 있는 바와 같이 고온이 형성되는 촉매층의 고온부는 균일하게 분포함을 알 수 있다. Fig. 6(b)에서 알 수 있는 바와 같이 저온의 합성가스 및 스팀이 주입되는 곳은 국부적으로 낮은 온도를 보이고 있는데 이는 주입부의 저온으로 인해서 냉각되었기 때문이다. 이 지점에서 멀어질수록(예를 들어, CC' 구간) 주입부의 저온의 영향으로부터 떨어지기 때문에 온도는 거의 균일하였다(Fig. 6(c)). 또한 공통적으로 촉매층 사이의 튜브와 촉매 사이의 온도 차이가 있어서 이로 인한 튜브 내의 가스의 예열효과가 있다.

Fig. 7은 고온 CO 전환 반응기의 4개의 Path별 온



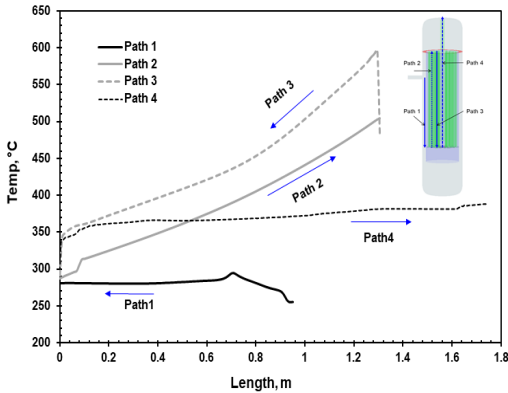


Fig. 7. Temperature variations along four paths

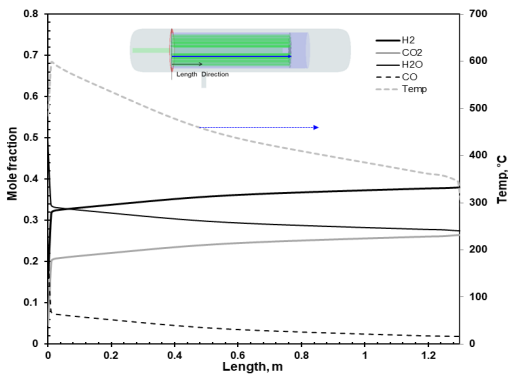


Fig. 8. Gas compositions along 3th path

도변화에 대한 선도이다. Path 1은 입구부에서 아래 헤더부까지 경로로서 초기입구 온도인 256°C에서 시작해서 점차로 온도가 증가하다가 아래 헤더부에 도달할 때는 약 280°C로 일정하게 된다. Path 2는 아래 헤더부에서 위 헤더부까지 연결하는 튜브열 중 하나의 경로로서 촉매층에서 발생하는 발열을 흡수하는 동시에 유입되는 가스를 예열공정이다. 계산 결과 Path 2에 따라서 약 280°C에서 시작하여 촉매층 내의 열을 흡수하면서 약 500°C 이상으로 증가한다. Path 3은 위쪽 헤더부 촉매층 시작부터 아래 헤더부 촉매층 끝부분의 경로로서, 시작부에서 CO 전환 반응으로 발생한 발열로 인하여 온도가 약 600°C까지 증가한 후에 튜브열 축으로의 열전달로 인하여 온도가 떨어져서 촉매층 바로 아래부에 도달할 때는 약 320°C로 냉각된다. 마

지막으로 Path 4는 촉매 아래부에서 출구 측까지의 경로로서, 촉매 층의 반응열을 흡수하면서 320°C에서 388°C까지 증가한다. 본 실험시, CO 전환 반응기 후단에서 정상 상태의 온도가 380-390°C 사이에서 형성된 점을 고려하였을 때, 열전달 모델링이 합리적으로 수행되었다고 판단된다.

Fig. 8은 고온 CO 전환 반응기 내의 촉매층에 해당하는 Path 3 구간의 합성가스 내 가스조성(부피기준) 및 온도의 변화를 나타낸 것이다. 반응이 시작하는 촉매층을 원점으로 데이터를 재구성하였다. 초기에 23.0%로 들어간 CO는 촉매층에 진입하자마자 급격히 반응하여 촉매층 끝단부에서 약 1.8%로 줄어들었다. CO 전환 반응기의 성능을 나타내기 위하여 CO 전환율을 아래 식과 같이 나타낼 수 있다:

$$CO_{Conversion} = \frac{n_{CO,outlet} - n_{CO,inlet}}{n_{CO,inlet}} \quad (15)$$

위 식을 적용할 때 Path 3를 통과한 CO 전환율은 92.3%였다. 특히 Path 3에서 전환되는 CO 전환의 70% 이상은 촉매층에 시작부에서 이루어진 것으로 계산된다. CO와 반응에 함께 참여한 H<sub>2</sub>O도 촉매층 시작점에서 약 49%로 들어갔다가 촉매층 끝단에서는 약 27로 줄어들었다. 반면에 주요 생산물인 H<sub>2</sub>는 초기에 약 13%에서 약 38%로 증가하였고 CO<sub>2</sub>도 약 5%에서 26%로 증가하였다.

## 6. 결론

본 연구에서는 IGFC용 반응기를 대상으로 고온 CO 전환 반응에 대한 수치해석을 수행하였다. 전체 반응기를 촉매부와 가스부로 나누어서 모델링하였다. Activation Energy 70,000,000 J/kmol 기준으로 Pre-exponential factor가 10<sup>7</sup>일 때 출구에서의 온도와 가스조성(제습조건)이 실험값과 매우 근사하였다. 본 반응기는 입구덕트에서 유입된 가스가 입구덕트 반대 방향으로 향하면서 차츰 아래로 흘러내려가다가 데드존을 따라서 위쪽 촉매층 사이의 튜브열로 분산된다. 위로 향하는 강한

모멘텀은 상대적으로 입구덕트측에 치우쳤다. 이는 입구덕트의 위치가 모멘텀의 편류에 영향을 끼침을 알 수 있다. 본 계산에서 촉매층을 통과할 때 약 93% 전환율을 보였고, 특히 촉매층 유입부에서 CO 전환율의 70%가 이루어졌다.

## 후 기

본 연구는 산업통상자원부(MOTIE)와 한국에너지기술평가원(KETEP) 신재생에너지핵심기술 사업의 지원을 받아 수행한 IGFC 적용을 위한 석탄 합성가스 정제 및 전환 기술개발 연구과제이다(No. 20163010050080).

## References

1. "8th Basic Plan for Electricity Supply and Demand", 2017.
2. S. H. Kim, P. Victor, J. H. Yoo, S. H. Lee, Y. J. Rhim, J. H. Lim, S. D. Kim, D. H. Chun, and H. K. Choi, "Comparative Evaluation of Steam Gasification Reactivity of Indonesian Low Rank Coals", *Trans. of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, Vol. 27, No. 6, pp. 693-701.
3. "Commercialization Status of SOFC", *Korea Gas News Paper*, Vol. 1271, 2016.
4. D. S. Newsome, "The water gas shift reaction", *Catalysis Reviews Science and Engineering*, Vol. 21, No. 2, 1980, pp. 275-318.
5. B. A. Haberman and J. B. Young, "Three-dimensional simulation of chemically reacting gas flows in the porous support structure of an integrated-planar solid oxide fuel cell", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 47, 2004, pp. 3617-3629.
6. W. H. Chen, M. R. Lin, T. L. Jiang, and M. H. Chen, "Modeling and simulation of hydrogen generation from high temperature and low temperature water shift reactions", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33, No. 22, 2008, pp. 6644-6656.
7. S. Z. Saw and J. Nandong, "Simulation and control of water gas shift packed bed reactor with inter stage cooling", *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, Vol. 121, 2016.
8. Y. S. Seo, D. J. Seo, Y. T. Seo, and W. L. Yoon, "Investigation of the characteristics of a compact steam reformer integrated with a water-gas shift reactor", *Journal of Power Sources*, Vol. 161, 2006, pp. 1208-1216.
9. J. Park, Y. Choi, K. Kim, and M. Oh, "Rigorous modeling and simulation of multi-tubular reactor for water gas shift reaction", *Korean Chem. Eng. Res.*, Vol. 46, 2008, pp. 931-937.
10. D. K. Seo, I. K. Noh, J. H. Hwang, J. K. Choi, D. H. Shin, and H. S. Kim, "Effect of tip size and aspect ratio on reforming performance in a methane reformer for polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC)", *Trans. of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, Vol. 21, No 5, 2010, pp. 364-374.
11. C. U. Yang, Y. H. Lee, S. G. Park, C. M. Yang, and S. J. Park, "Study on the design parameters of a heat exchange steam reformer (HESR) using CFD", *Trans. of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, Vol. 27, No. 1, 2016, pp. 1-12.
12. J. Xu and G. F. Froment, "Methane steam reforming, methanation and water gas shift. I, intrinsic kinetics", *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Vol. 35, No. 1, 1989, pp. 88-96.
13. H. S. Choi, J. W. Kim, W. H. Kim, S. J. Kim, and D. J. Koh, "Optimization of reaction conditions for the high purity hydrogen production process using by-product gases in steel works", *Trans. of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, Vol. 27, No. 6, 2016, pp. 621-627.