

300MW급 Shell형 1단 분류층 석탄 가스화기의 전산수치해석 : 산소/스팀/석탄 주입비, 석탄입자 크기, 주입 노즐 각도가 가스화기 성능에 미치는 영향

송지훈*, 강민웅*, 서동균*, 임성진**, 백민수**, 황정호***[†]

*연세대학교 대학원 기계공학과, **두산중공업 기술연구원 IGCC 개발팀,

***연세대학교 기계공학과, 수소연료전지 협동과정

CFD Modeling for 300MW Shell-Type One-Stage Entrained Flow Coal Gasifier : Effect of O₂/Steam/Coal Ratios, Coal Particle Sizes, and Inlet Angles on the Gasifier Performance

JIHOON SONG*, MINWOONG KANG*, DONGKYUN SEO*, SUNGJIN LIM**, MINSU PAEK**, JUNGHO HWANG***[†]

**Dept. of Mechanical Engineering, Grad. School of Yonsei Univ., 134 Shinchon-dong, Seodaemun-gu, Seoul, 120-749, Korea*

***IGCC Development Team, Corporate R&D Institute, Doosan Heavy Industries and Construction, 463-1 Jeonmin-dong, Yuseong-gu, Daejeon, 305-811, Korea*

****School of Mechanical Engineering and Hydrogen and Fuel Cell Engineering, Yonsei Univ., 134 Shinchon-dong, Seodaemun-gu, Seoul, 120-749, Korea*

ABSTRACT

Coal gasification is heading for a great future as one of the cleanest energy sources, which can produce not only electricity and heat, but also gaseous and liquid fuels from the synthesis. The work focuses on 300MW shell type one-stage entrained flow coal gasifier which is used in the Integrated coal Gasification Combined Cycle(IGCC) plant as a reactor. As constructing an IGCC plant is considerably complicated and expensive compared with a pulverized-coal power plant, it is important to determine optimum design factors and operating conditions using a computational fluid dynamics (CFD) model. In this study, the results of numerical calculations show that O₂/Coal ratio, 0.83, Steam/Coal ratio, 0.05, coal particle diameter, 100 μ m, injection angle, 4° (clockwise) are the most optimum in this research.

KEY WORDS : Coal gasification(석탄 가스화), Entrained flow bed(분류층), IGCC(석탄가스화복합발전), CFD(전산유체역학), O₂/steam/coal ratio(산소/스팀/석탄 주입비), Coal particle size(석탄 입자 크기), Inlet angles(주입 노즐 각도)

[†]Corresponding author : hwangjh@yonsei.ac.kr

[접수일 : 2010.3.10 수정일 : 2010.4.23 게재확정일 : 2010.6.25]

Nomenclature

A_p : char particle surface area
 A_r, A_1, A_2 : pre-exponential factor
 $C_{j,r}$: molar concentration of species j in reaction r
 C_1, C_2 : realizable $k-\epsilon$ model constant
 $D_{i,m}$: mass diffusion coefficient for species i, m^2/s
 $D_{o,r}$: diffusion rate coefficient for reaction r
 E : total energy
 E_1, E_2 : activation energy
 F_D : drag force per unit particle mass
 F_s : momentum source term by particles
 $f_{w,0}$: volatile mass fraction
 G_k, G_b : turbulence kinetic energy due to the mean velocity gradients and buoyancy
 k : turbulence kinetic energy
 k_{eff} : effective thermal conductivity
 $k_{f,r}, k_{b,r}$: forward and backward rate constant for reaction r
 K_r : equilibrium constant for the r^{th} reaction
 m_a : ash content in the particle
 $m_{p,0}$: initial particle mass at injection
 m_s : mass source term arising from particles
 $m_v(t)$: volatile yield up to time t
 $M_{w,i}$: molecular weight of species i
 p : static pressure
 p_n : partial pressure of the gas phase species
 R : universal gas constant
 $R_{char,r}$: rate of char particle surface depletion
 R_i : source term of species i
 $R_{kin,r}$: kinetic rate of reaction r
 R_1, R_2 : devolatilization model kinetic rate
 S_h : heat sources
 S_{ij} : mean strain rate
 S_k, S_ϵ : generalized source term
 Sc_t : turbulent Schmidt number
 T : static temperature
 u, u_p : gas and Particle velocity
 $\overline{u_i}, \overline{u_j}$: mean velocity components
 $\overline{u_i}, \overline{u_j}$: fluctuating velocity components

x_i, x_j : coordinate of directions
 Y_i : mass fraction of species i
 α_1, α_2 : devolatilization model constant
 Γ : finite rate/eddy dissipation third-body rate
 ϵ : turbulence dissipation rate
 η : ratio of turbulence to mean shear time scale
 η_r : shrinking (or effectiveness) factor
 $\eta'_{j,r}, \eta''_{j,r}$: rate exponent for reactant and product species j in reaction r
 μ : dynamic viscosity
 μ_t : turbulent viscosity
 ν : kinematic viscosity
 ρ, ρ_p : gas and particle density
 $\sigma_k, \sigma_\epsilon$: turbulent prandtl numbers for k and ϵ
 $(\tau_{ij})_{\epsilon ff}$: deviatoric stress tensor
 $v'_{i,r}, v''_{i,r}$: stoichiometric coefficient for reactant and product i in reaction r

1. 서 론

2000년도 이후, 가파른 글로벌 경제 성장에 따라 에너지 수요가 증가하고 있는 실정이다. 이에 따라, 화석연료가 세계 에너지 공급을 지배하고 있으며, 석탄에 대한 수요 역시 증가하고 있다¹⁾. 이와 함께, 석탄이 200년 이상 사용할 수 있을 정도의 방대한 양이 매장되어있기 때문에, 석탄 가스화 기술은 전력 생산에서 필수 불가한 선택사항이 되고 있으며, 청정 석탄 기술(clean coal technology, CCT)중 가장 앞서고 있다. 석탄 가스화 기술의 가장 뛰어난 친환경적 특성은 바로 황산화물(SOx), 질소산화물(NOx)과 같은 대기오염물질을 거의 발생하지 않는 점이다²⁾.

특히, 석탄 가스화 복합 발전(integrated coal gasification combined cycle, IGCC)은 21세기 가장 중요한 에너지 공급 기술 중 하나로 간주되고 있으며, 이미 세계 많은 지역에서 상업적으로 가격 경쟁력이 있는 것으로 알려졌다³⁻⁵⁾.

일반적으로 석탄 가스화 기술은 가스화 형태에 따라 크게 고정층(fixed or moving bed), 유동층(fluidized bed), 및 분류층(entrained bed) 으로 구분되며, 이러한 가스화 방식에 따라 생성가스의 조성

및 발열량 그리고 가스화기내의 온도 분포가 크게 달라진다. 고정층은 높은 turndown ratio(작동범위)와 오랜 기간 진행된 연구로 인해 축적된 자료가 많다는 장점이 있다. 반면에, 유동층은 연료와 산화제의 혼합작용이 활발히 일어나며, 이는 열 및 질량 전달을 촉진시킨다. 마지막으로, 분류층은 높은 탄소 전환율과 입자의 체류시간이 짧다는 특징을 갖고 있다. 또한, 설계 형상에 있어도 고정층과 유동층보다 덜 복잡하다는 장점이 있다. 이와 같은 이유로 인해 shell, GE energy, concophilips, texaco, koppers-totzek과 같은 세계 주요 가스화기 제조업체들은 주로 분류층을 사용하며, 이는 IGCC에 많이 사용되고 있다^{6,7)}.

분류층 가스화기는 보통 높은 열전달과 짧은 체류시간으로 인해, 복잡한 열 유동 및 화학반응에 대한 정보를 실험적으로 알아내는 것은 쉽지 않다. 또한, 가스화기의 실제 규모와 작동 조건의 변화로 인한 비용 역시 천문학적인 비용이 소요된다. 따라서 실험실 규모의 모의실험이나 CFD(computational fluid dynamics)를 통한 수치 해석적 연구가 그 어느 경우보다 필요할 것으로 판단된다⁸⁾.

Chen 등⁹⁾은 200ton/day 2단 분류층 석탄 가스화기에 대한 3차원 전산수치해석을 통해 석탄 주입 형태와 석탄 입자의 크기, O₂/coal 비 등과 같은 작동조건에 대해 연구하였으며, reaction engineering international(REI)의 Bockelie 등^{10,11)}은 REI의 in-house tool인 GLACIER를 이용하여 CFD를 수행하였다. 이 연구에서는 1단 및 2단 분류층 석탄 가스화기의 석탄 주입 형태 및 입자의 크기, 운전 압력 등과 같은 작동조건에 대해 비교 연구 하였다. 또한, 부가적으로 벽면에 용융슬래그의 형성 및 거동 현상도 고려하였다. 또한, 미국 국립 에너지 연구소(NETL)의 Zitney와 Guenther¹²⁾도 상용 CFD code인 FLUENT를 사용하여, 상업용 규모의 2단 분류층 석탄 가스화기에 대한 3차원 전산수치해석을 수행하였다. 또한, CFD 모델과 Aspen Plus를 합친 APECS(advanced process engineering co-simulator)에 대한 연구도 진행하였다. 마지막으로 국내에는 Choi 등⁸⁾이 낙하식 1단 분류층 석탄 가스화기 내부의 유동 분포와 O₂/coal 비에 따른 영향을 CFD를 통해 수행하였고,

서혜경¹³⁾등은 1ton/day급 가스화기의 실험 및 CFD 해석을 통해 N₂/coal 비, O₂/coal 비와 같은 운전조건과 생성가스 조성 등을 비교하였다.

국내에서는 2007년부터 “한국형 IGCC 기술 확보를 위한 300MW급 설계기술 자립 및 실증플랜트 건설”을 위한 프로젝트가 한국전력, 서부발전 등을 포함한 5개 발전사와 두산중공업, 대학교 및 연구소 등이 참여하고 있다. 현재 국내에 도입할 가스화공정사로 shell(네덜란드)이 결정되었으며, 2014년 시운전 종료를 목표로 진행 중에 있다. 이와 같은 복합발전 플랜트는 정치, 경제, 환경적으로 시너지효과를 창출 할 수 있기 때문에, 한국형 가스화 플랜트에 대한 설계기술 확보 및 축적이 무엇보다 시급한 시점이다.

본 연구에서는 모델링 및 격자생성 소프트웨어인 GAMBIT을 사용하여 3차원 모델링과 약 64만개의 격자를 생성하였으며, 격자가 생성된 모델을 상용 CFD code인 FLUENT를 사용하여, 300MW급 shell형 1단 분류층 가스화기의 O₂/coal 비, steam/coal 비, 석탄 입자의 직경과 inlet 각도가 가스화기에 미치는 영향을 수치해석을 통해 살펴보았다.

2. Shell형 가스화기의 특성

Fig. 1에 나타낸 것과 같은 형상인 shell형 가스화기는 서론에서 언급한 분류층 가스화기로 입구에 적정의 O₂/coal 비와 steam/coal 비로 연료와 산화제, 스팀이 동시에 주입되어 가스화과정을 통해 고체 연료인 석탄을 이용하여, syngas(합성가스, H₂+CO)를 얻는 데 목적을 둔 반응기이다. 가스화기 내부에서는 다음과 같은 과정을 거친다.

- 1) 석탄의 건조과정
- 2) 탈휘발화 과정(devolatilization)을 통한 휘발성물질(volatile matter)의 방출
- 3) 부분연소 과정(partial oxidation)
- 4) 가스화 과정(gasification)

또한, 가스화과정 후 석탄에 남은 회성분(ash)은 고온으로 용해하여 유리질의 슬래그(slag)로 만들어진다. 이는 가스화기 벽면을 타고 따라 흐르는 용

300MW급 Shell형 1단 분류층 석탄 가스화기의 전산수치해석 : 산소/스팀/석탄 주입비, 석탄입자 크기, 주입 노즐 각도가 가스화기 성능에 미치는 영향

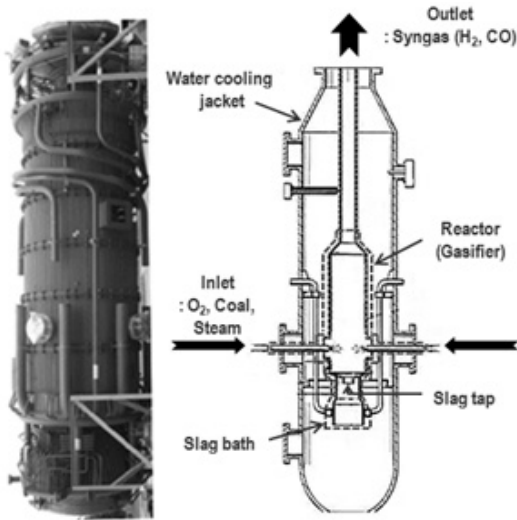


Fig. 1 Prototype of gasifier and water cooling jacket.

용슬래그 형태로 slag bath를 통해 배출된다. 여기서, 출구에서 얻어진 syngas는 gas-cleaning 과정을 거쳐, 복합 사이클을 통해 전력을 생성하게 되는 것이 IGCC(석탄 가스화 복합 발전)이다.

3. 수치 해석 모델

3.1 석탄 선정 및 계산조건

현재 우리나라 미분탄 화력 발전소에서는 인도네시아

Table 1 Properties of tested coal

Proximate analysis (wt%)	Fixed carbon	42.8
	Volatile matter	39.3
	Ash	8.8
	Moisture	9.1
Ultimate analysis (wt%)	Carbon	65.52
	Hydrogen	5.92
	Nitrogen	1.09
	Chlorine	0.03
	Sulfur	0.84
	Oxygen	8.70
Higher/Lower Heating Value (MJ/kg)	29.3 / 27.7	

Table 2 Test conditions

Feed Rates (kg/s)	Coal	24
	O ₂ /Coal	0.75-1.08
	Steam/Coal	0.033-0.075
Coal Particle Sizes (μm)	50-300	
Inlet Angles (°)	0, 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30	
Heat Loss	1.5% of the coal HHV ¹⁴⁾	
Operating pressure (atm)	30	

아, 중국, 호주, 남아프리카공화국 등에서 전량 수입된 다양한 석탄을 사용하고 있다. IGCC 역시 석탄 수급의 문제로 인해 위와 같은 석탄을 사용할 계획이다.

이에 본 연구에서는 인도네시아 석탄을 선정하였으며, 이는 현재 서부발전 산하의 태안화력발전소에서 사용되고 있는 석탄 중 하나이다.

석탄에 대한 공업분석과 원소분석 결과를 Table 1에 표시하였다. 또한, Table 2에 수치해석 시 가스화기의 고정된 조건과 본 연구에서 살펴볼 항목에 대한 변수 범위를 나타내었다.

3.2 가스화기 모델 형상

Fig. 2는 가스화기 해석 형상을 나타낸 것으로 약 64만개의 격자로 구성되어 있다. 실제 가스화기는 평면도 기준으로 4 방향, 상하좌우대칭의 4개의 입구에서 연료와 산화제 및 스팀이 동시에 주입된다. 가스화기 inlet 각도에 따른 형상변화를 살펴보기 위해 0~10°까지 2°씩, 10~0°까지는 10°씩, 총 8가지(0, 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30°) 경우에 대해 수치해석을 수행하였다.

3.3 모델의 물리학적 특성 및 가정

본 가스화기 모델의 물리학적 특성은 아래와 같다.

- 1) 기체의 난류유동과 혼합 및 반응
- 2) 석탄 입자의 유입과 난류에 의한 분산
- 3) 석탄의 탈휘발화(devolatilization), 휘발성분의 부분 연소, char의 부분 연소 및 가스화
- 4) 석탄, char, ash 사이의 대류 및 복사에 의한 열전달

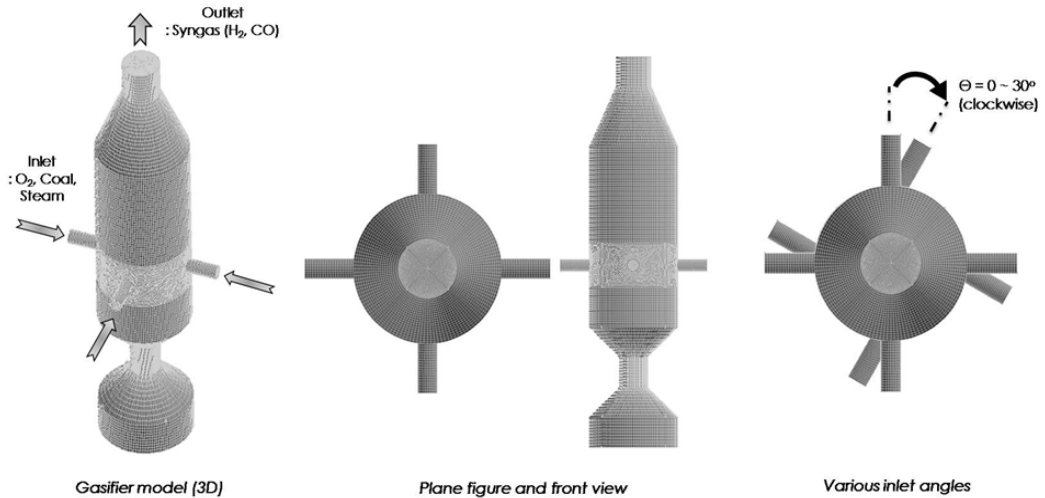


Fig. 2 Simplification and geometry of the gasifier.

다음은 본 연구에서 사용한 가정들이다.

- 1) 3차원, 정상상태유동
- 2) 벽면의 경계조건은 no-slip condition(zero velocity)
- 3) 석탄 입자의 연소 및 반응은 표면에서부터 일어남
- 4) 수냉자켓(water quenching)에 의한 열손실은 석탄의 higher heating value의 1.5%를 heat flux로 계산하여 적용¹⁴⁾
- 5) 슬래깅(slagging)은 고려하지 않음. 즉, ash는

용융되지 않은 입자 상태

- 6) Dilute system(입자의 부피비율이 기체의 부피 비율의 10% 미만인 경우)이기 때문에, 석탄 입자 사이의 상호 작용은 무시

3.4 기체 모델의 지배방정식

본 모델의 기체 상태의 지배방정식은 질량, 운동량, 에너지, 화학종 보존방정식이다. 난류유동에 의해

Table 3 Governing equations for the gas phase

Continuity	$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = m_s$	(1)
Momentum	$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho u_i u_j}) + F_s$	(2)
Energy	$\frac{\partial}{\partial x_i} [u_i(\rho E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i(\tau_{ij})_{eff} \right) + S_h$	(3)
Gas species	$\nabla \cdot (\rho u Y_i) = \nabla \cdot \left((\rho D_{in} + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \nabla Y_i \right) + R_i$	(4)
Turbulence	$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k \overline{u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \epsilon + S_k$	(5)
	$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon \overline{u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + S_\epsilon$	(6)
	where, $\sigma_k = 1.0, \sigma_\epsilon = 1.2, C_1 = \max\left(0.43, \frac{\eta}{\eta + 5}\right), C_2 = 1.9, \eta = S \frac{k}{\epsilon}, S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$	(7)

생성되는 Reynolds 응력을 계산하기 위해 realizable k-ε 난류모델¹⁵⁾을 적용하였다. realizable k-ε 난류 모델은 standard k-ε과 RNG k-ε 난류모델보다 유동의 와류, 회전, 곡률에 대해 더 높은 정확도를 보인다.

기체 모델의 지배방정식은 Table 3에 정리하였다.

3.5 석탄 입자 거동 모델

석탄 입자의 거동은 lagrangian approach를 적용하기 위해, FLUENT에서 DPM(discrete phase method)을 사용하여 입자의 궤적 및 거동을 아래의 식을 사용하여 계산하였다.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p} \quad (8)$$

여기서, $F_D(u - u_p)$ 는 입자의 단위 질량당 항력, u_p 는 입자 속도, ρ_p 는 입자 밀도를 나타낸다.

기체의 난류에 의한 입자 분산은 난류의 순간 변동속도의 영향을 고려한 stochastic trajectory model을 사용하였다. 입자와 기체사이의 열전달은 기체의 에너지 방정식의 생성항(S_h)으로, 물질전달은 기체의 연속방정식의 질량 생성항(m_s)으로 적용되어 계산을 수행하게 된다.

3.6 석탄 반응 메커니즘 모델

3.6.1 탈휘발화(Devolatilization) 모델

탈휘발화 과정은 석탄에서 휘발성분(volatiles)이 방출되는 과정을 말한다. 일반적으로, 이에 대한 모델은 Badzioch의 single rate model, Kobayashi의 two

competing-rates model과 Fletcher의 CPD (chemical percolation devolatilization) model이 주로 사용된다¹⁶⁾.

본 연구에서는 Kobayashi의 two competing rates model을 사용하였으며, 수식은 다음과 같다.

$$\frac{m_v(t)}{(1 - f_{w,0})m_{p,0} - m_a} = \int_0^t \left\{ (\alpha_1 R_1 + \alpha_2 R_2) e^{-\int_0^t (R_1 + R_2) dt} \right\} dt \quad (9)$$

$$R_1 = A_1 e^{-E_1/RT_p}, \quad R_2 = A_2 e^{-E_2/RT_p} \quad (10)$$

여기서 R_1, R_2 는 각각 저온과 고온 범위에서의 탈휘발화 반응식이며, T_p 는 입자의 온도, A_1, A_2 는 pre-exponential factor, E_1, E_2 는 활성화 에너지, α_1, α_2 는 저온 및 고온에서의 무게 가중치, R 은 기체상수이다. 또한, $m_v(t)$ 는 시간 t에서 탈휘발화 된 가스의 질량, $m_{p,0}$ 는 석탄의 초기 질량, m_a 는 석탄 안에 있는 ash의 질량, $f_{w,0}$ 는 휘발성물질의 mass fraction(= $m_v/m_{p,0}$)이다.

석탄이 탈휘발화된 가스는 한 가지 종류로 가정하였다^{17,18)}. 이 가정과 앞의 Table 1의 석탄 분석표를 water-free 상태로 변환한 데이터를 통해 탈휘발화된 가스는 $C_1H_{3.1}O_{0.3}$ 로 표현하였다.

3.6.2 Char 가스화 모델

석탄의 휘발 성분이 전부 방출된 후에, char의 부분연소와 함께 가스화 반응이 시작된다. 이때, O_2, CO_2 와 H_2O 가 char 표면에서 반응하여 CO 와 H_2 를 생성한다.

Char 가스화 모델은 multiple surface reaction

Table 4 Global reactions and reaction rates in the char gasification

$R_{kin,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT}$					
Mechanism	Reaction	A_r	E_r (J/kmol)	β_r	Ref.
Char gasification Reaction	$C(s) + 0.5O_2 \rightarrow CO$	$5.67e+09$ [1/s]	$1.60e+08$	0	19)
	$C(s) + CO_2 \rightarrow 2CO$	$1.60e+12$ [1/s]	$2.24e+07$	0	20)
	$C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$1.33e+03$ [1/s/K]	$1.75e+07$	1	21)

Table 5 Global reactions and reaction rates in the gas phase

$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT}$					
Mechanism	Reaction	A_r	E_r [J/kmol]	β_r	Ref.
Gas Phase Reaction	$C1H_{3.1}O_{0.3} \rightarrow 0.15H_2 + 0.3CO + 0.7CH_4$	$1.60e+15$ [$m^3/kmol/s$]	$1.00e+08$	0	15)
	$C1H_{3.1}O_{0.3} + 1.625O_2 \rightarrow CO_2 + 1.55H_2O$	$2.12e+12$ [$m^{1.5}/kmol^{0.5}/s$]	$2.03e+08$	0	15)
	$CH_4 + 0.5O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	$3.00e+08$ [$m^3/kmol/s$]	$1.26e+08$	0	17)
	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$4.40e+11$ [$m^3/kmol/s$]	$1.68e+08$	0	17)
	$H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$	$1.00e+14$ [$m^3/kmol/s$]	$4.20e+07$	0	19)
	$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	$2.78e+03$ [$m^3/kmol/s$]	$1.26e+07$	0	19)
	$CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$	26.5 [$m^3/kmol/s$]	$6.58e+08$	0	19)
	$CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	$2.20e+12$ [$m^{2.25}/kmol^{0.75}/s$]	$1.67e+08$	0	22)

model¹⁵⁾을 사용하였다.

$$R_{char,r} = A_p \eta_r p_n \frac{R_{kin,r} D_{0,r}}{D_{0,r} + R_{kin,r}} \quad (11)$$

$$R_{kin,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-(E_r/RT)} \quad (12)$$

이 때, $R_{char,r}$ 는 char의 반응율(kg/s), A_p 는 char 표면적(m^2), η_r 은 shrinking 계수, p_n 은 반응 기체의 부분압력(Pa), $D_{o,r}$ 은 반응 기체의 확산계수(s/m), $R_{kin,r}$ 은 화학 반응율을 의미한다. 또한, A_r 는 pre-exponential factor, β_r 은 온도의 지수, E_r 는 활성화 에너지, R은 기체상수이다.

$R_{kin,r}$ 을 계산하기 위한 데이터는 Table 4에 정리하였다.

3.7 난류 혼합 및 화학반응모델

탈휘발화된 가스(휘발성 가스)는 추가적인 열분해 과정을 거치거나, 주위의 O_2 와 반응한다. 이때, 열분해 과정을 통해 생성되는 열분해 가스는 CO , H_2 , CH_4 로 가정하였고, 주위의 O_2 와의 반응은 일반적인 연소반응으로 가정하였다^{17,18)}. 그러므로 화학 반응에 관여하는 기체는 총 6가지(O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 , CH_4) 이다. 이 기체의 물질 전달은 Table 3의 식 (4)에 표현된 화학종 보존 방정식을 통해 나타낸다.

이와 함께, 가스화기에서 난류유동에 의한 기체의 온도, 밀도와 화학종 농도의 변동이 화학반응에 중요한 영향을 미친다. 특히, 탈휘발화와 가스화와 같은 heterogeneous 반응은 난류의 시간 크기(time scale)에 비해 느리다.

따라서 화학 반응율과 난류 혼합율의 크기를 고려하여 화학 반응율과 난류 혼합율 중에서 작은 값을 반응율로 적용하는 finite rate/eddy dissipation model¹⁵⁾을 사용하였다.

finite rate의 계산을 위한 화학종 생성율(R_i)은 다음과 같이 표현된다.

$$R_i = M_{w,i} \Gamma (v''_{i,r} - v'_{i,r}) \quad (13)$$

$$(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta_{b,r}})$$

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT}, \quad k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (14)$$

여기서, $k_{f,r}$ 과 $k_{b,r}$ 은 정반응 및 역반응 지수를 나타내며, Γ 는 third body 계수, $C_{j,r}$ 은 화학종의 몰농도, $\eta_{j,r}$ 은 정반응 지수, $\eta_{b,r}$ 은 역반응 지수를 나타낸다.

정반응, 역반응 반응지수 $k_{f,r}$ 과 $k_{b,r}$ 을 나타내기 위한 데이터는 Table 5에 정리하였다.

3.8 복사 열전달 모델

석탄 가스화기에 정확한 해석을 위해 가스화기

반응로 내부의 온도 분포를 정확히 분석해야한다. 특히, 석탄의 입자와 같은 미세 입자는 복사 특성이 파동수에 강하게 의존하며, 넓은 파동수 영역에서는 복사열전달 방정식을 풀어야한다²³⁾. 따라서 본 연구에서는 복사열전달 방정식을 별다른 근사화 없이 유한 차분법으로 푸는 DO model(discrete ordinate model, 구분중좌표법)¹⁵⁾을 사용하였다.

4. 결과 및 토의

일반적으로 가스화기의 성능은 냉가스 효율(cold gas efficiency, CGE)과 탄소 전환율(carbon conversion efficiency, CCE), 그리고 합성가스(syngas, CO+CH₄)의 함량, 입자의 체류시간 등을 기준으로 표시한다. 본 연구의 수치해석 결과에서는 탄소 전환율이 모든 경우에 99.99%가 나왔으며, 입자의 체류 시간은 3.5~7.5초로 실제 가스화기와 유사한 결과를 보였기 때문에, 냉가스 효율과 합성가스의 함량 및 출구 온도를 기준으로 최적의 설계 변수를 선정하였다^{24,25)}. 여기서, 탄소 전환율(carbon conversion efficiency, CCE)은 다음과 같이 나타낸다.

$$\text{탄소전환율 (CCE)} = \frac{\text{가스로 전환된 탄소량}}{\text{연료 전체 탄소량}}$$

4.1 O₂/Coal 비에 따른 가스화기 성능

가스화기의 설계 변수를 설정함에 있어, 가장 먼저 최적의 O₂/coal 비의 결정이 선행되어야 한다. 이에 따라, 30atm, steam/coal 비 0.72에서 O₂/coal 비를 0.75~1.08까지^{26,27)} 변화시켜 살펴보았다.

Fig. 3은 O₂/coal 비 변화에 따른 합성가스 (syngas, CO+H₂) 및 생성가스(CO₂, CH₄)의 함량을 나타내며, Fig. 4는 출구 온도와 냉가스 효율의 결과를 나타내었다. 여기서, 냉가스 효율(cold gas efficiency, CGE)은 다음과 같이 나타낸다.

$$\begin{aligned} \text{냉가스효율 (CGE)} \\ &= \frac{\text{생산된 가스의 고위발열량}}{\text{반응 연료의 고위발열량}} \end{aligned} \quad (14)$$

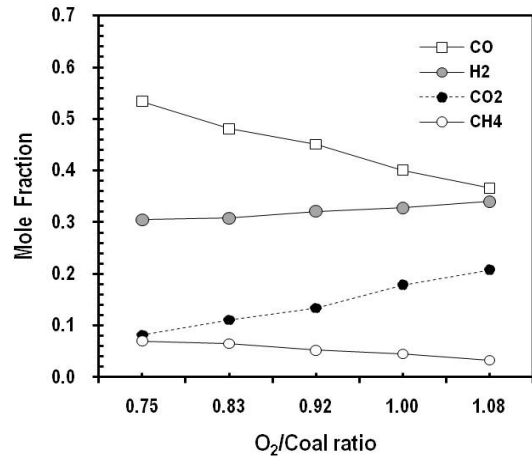


Fig. 3 Mole fractions for O₂/coal ratios.

합성가스의 함량을 기준으로 살펴보았을 때(Fig. 3 참조), O₂/coal 비 0.75일 때가 최적이라 판단된다. 또한, 냉가스 효율의 측면에서도 O₂/coal 비 0.75일 때가 가장 적합한 것으로 보인다.

하지만, 석탄 가스화 후 생성되는 슬래그(slag)의 용융점 온도를 고려하여야한다. 이는 벽면을 따라 흘러내리는 용융 슬래그가 용융점 아래의 온도에서는 고형화 되어 출구 및 용융 배출구(tap hole) 부분을 막기 때문이다.

문헌상에 알려진 슬래그의 용융점은 1000~1500℃

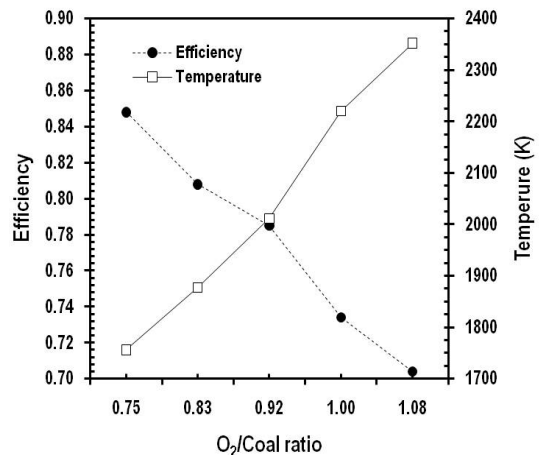


Fig. 4 Efficiency and temperature at outlet for O₂/coal ratios.

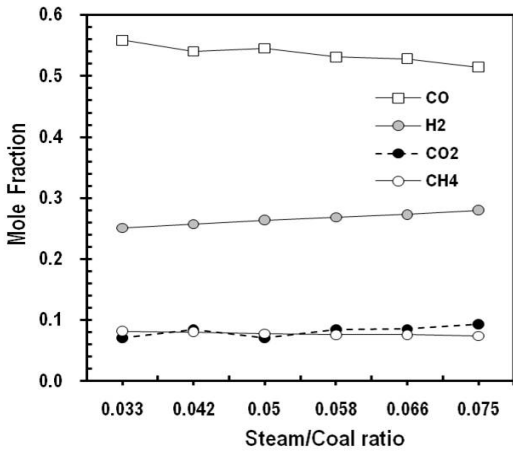


Fig. 5 Mole fractions for steam/coal ratios.

이므로, 1800K 이상이 되어야 원활한 운전이 가능하다²⁸⁾. 따라서 Fig. 4에서 슬래그의 용융 온도(1800K 이상)를 고려하게 되면, 최적의 O₂/coal 비는 0.83이다.

4.2 Steam/Coal 비에 따른 가스화기 성능

O₂/coal 비 0.83과 작동압력 30atm을 고정하여, steam/coal 비를 0.033~0.075까지 달리하여 계산을 수행하였다^{26,27)}.

Fig. 5는 steam/coal 비에 따른 출구의 합성가스

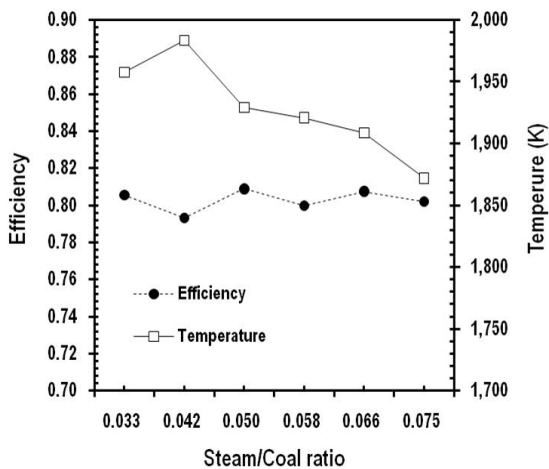


Fig. 6 Efficiency and temperature at outlet for steam/coal ratios.

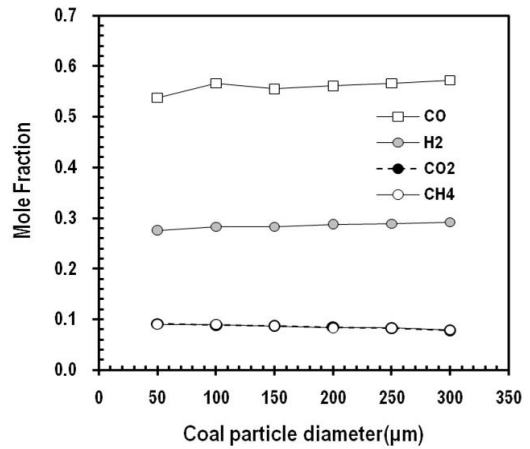


Fig. 7 Mole fractions for coal particle diameters.

량을 나타낸 그래프이다. steam/coal 비가 증가할수록 H₂와 CO₂가 증가한 반면, CO의 양은 줄어들었다. 합성가스의 총 함량을 기준으로 판단하였을 때, steam/coal 비가 0.033~0.05일 때가 최적의 작동 성능을 보였다.

Fig. 6은 냉가스 효율 및 출구 온도를 나타낸다. 이 그래프에서 알 수 있듯이, steam/coal 비가 0.033과 0.05일 때, 가스화기의 성능은 비슷하지만, 냉가스 효율이 0.05일 때 조금 더 높다. 그렇기 때문에, 최적의 steam/coal 비는 0.05이다.

4.3 석탄 입자 크기에 따른 영향

석탄 입자의 직경을 50, 100, 150, 200, 250, 300μm, 총 6가지 경우에 대해 수행하였다. 실제 화력 발전소에서 사용되는 미분탄의 평균직경은 50~100μm이기에 50μm를 최소값으로 정하였다. 또한, 입자 크기에 따라 탄소로 전환하는데 걸리는 시간의 변화는 체류 시간에 비해 미비하기 때문에 고려하지 않았다²⁹⁾.

Fig. 7과 Fig. 8을 통해 알 수 있듯이, 입자의 크기가 증가 할수록 출구 평균온도는 낮아진다. 이는 입자의 크기가 작을수록 전체 표면적이 증가하여 부분연소 및 탈휘발화, 가스화 반응이 더욱 활발하게 일어났기 때문이다.

Fig. 7을 통해 300μm에서 합성가스의 총 함량이

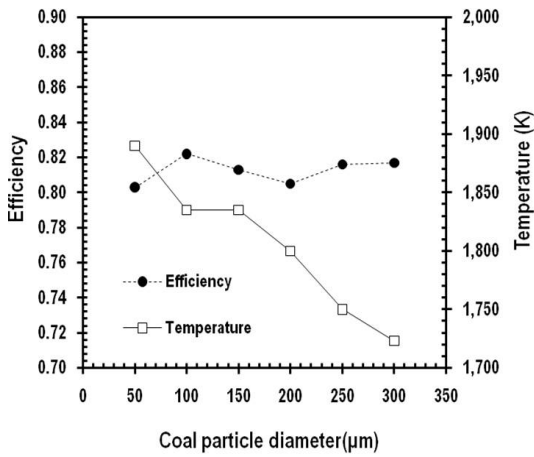


Fig. 8 Efficiency and temperature at outlet for coal particle diameters.

가장 높다. 그러나 Fig. 8을 통해 출구 온도와 냉가스 효율을 살펴보면, 50, 100, 150 μm 에서 출구온도 조건을 만족하며, 그 중에서 100 μm 에서 가장 높은

효율을 갖는 것을 알 수 있다. 따라서 석탄의 입자 직경은 100 μm 에서 최적의 성능을 갖는다.

4.4 Inlet 각도에 따른 영향

가스화기 운전의 작동조건을 선정하는 것과 함께 주입 노즐의 각도의 변화(0, 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30°의 총 8가지 경우)에 의한 영향에 대해 살펴보았다. Fig. 9는 inlet 각도 변화에 따른 속도 분포의 변화를 vector 형태로 나타내었다. 각도가 증가할수록 swirl 유동이 발생되며, 이에 따라 중심부근에 재순환 영역(recirculation zone)이 증가한다. 이 재순환 영역은 화학반응의 혼합을 촉진시켜, 효과적인 반응을 이끈다.

Fig. 10을 통해 inlet의 각도가 4°에서 합성가스의 함량이 가장 높으며, 10° 이후부터는 가스의 조성에 큰 변화가 없다. Fig. 11에서는 각도가 증가할수록 냉가스 효율이 증가하지만, 출구온도는 감소하는 경향을 보였다. 또한, Fig. 9와 마찬가지로 10° 이후

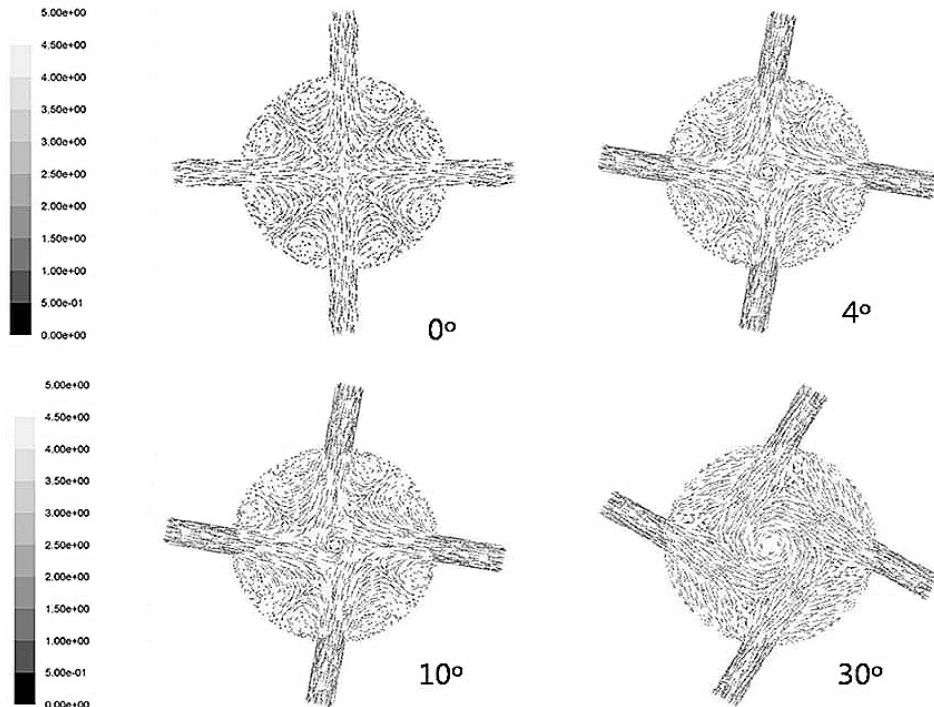


Fig. 9 Velocity distributions for inlet angles.

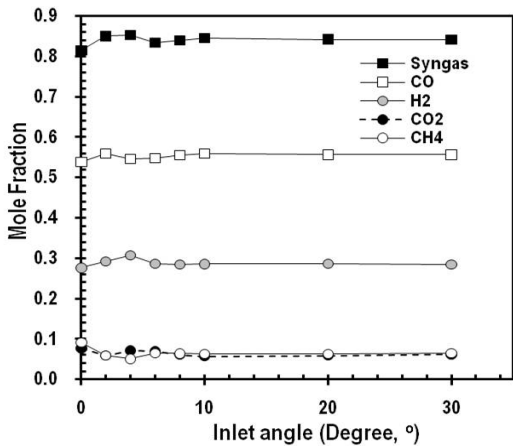


Fig. 10 Mole fractions for inlet angles.

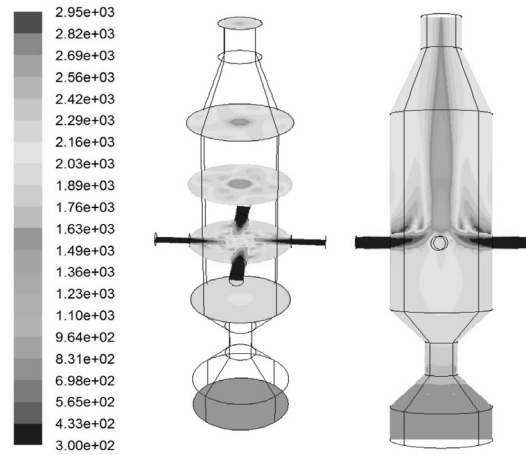


Fig. 12 Temperature distribution of the gasifier at 4°.

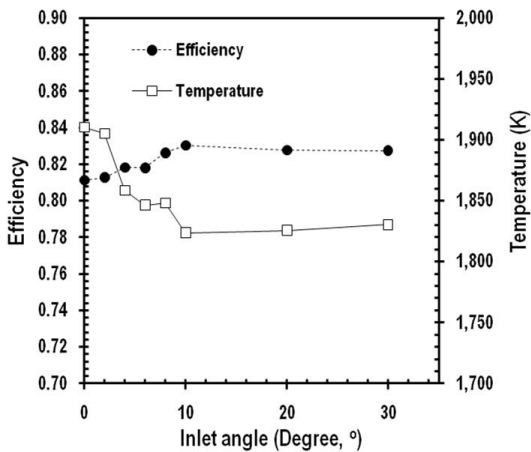


Fig. 11 Efficiency and temperature at outlet for inlet angles.

부터는 출구 온도와 냉가스 효율에 큰 변화가 없다. 즉, 어느 지점을 넘어서게 되면, 각도 변화에 따른 영향이 없는 것으로 판단된다.

위 결과를 통해 합성가스의 함량과 출구 온도 조건을 고려하였을 때, inlet 각도 4°에서 최적의 성능을 나타낸다.

4.5 최적 O₂/Coal 및 Steam/Coal 비, 석탄 입자 크기 및 Inlet 각도 적용

이상에서 O₂/coal 비 0.83, steam/coal 비 0.05과

석탄입자의 직경이 100 μ m, inlet 각도 2-4°에서 가스 화기가 최적의 작동 성능을 보이는 것을 알게 되었다. 이 결과들을 바탕으로 CFD해석을 수행하였으며, Fig. 12에서 Fig. 15까지는 그 결과를 나타낸 그림이다.

Fig. 12에서 Fig. 14의 결과로부터 석탄 주입구 근처에서 부분 연소로 인해 약 3000K까지 온도가 상승함을 알 수 있다. 또한, 이 지역에서 석탄의 탈휘발화 반응이 빠르게 일어나며, 상부에서 가스화의 반응이 주로 형성된다는 것을 관찰 할 수 있다.

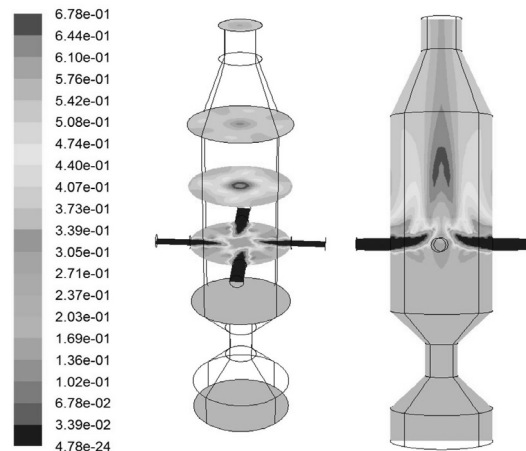


Fig. 13 CO distribution of the gasifier at 4°.

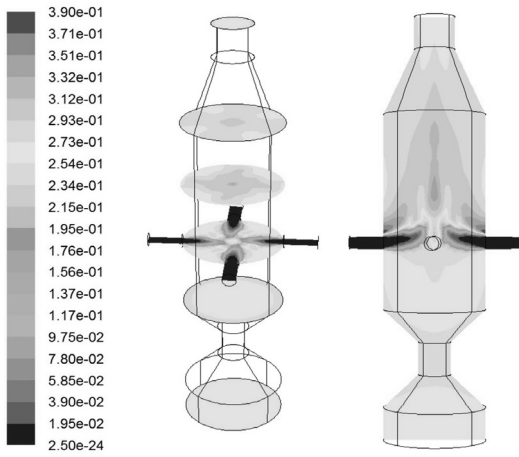


Fig. 14 H₂ distribution of the gasifier at 4°.

Fig. 15는 속도분포를 벡터 형식으로 나타낸 것으로, slag bath 및 가스화기 하단부와 석탄 주입 노즐 윗부분 근방 벽면에서 강력한 재순환(recirculation)이 발생한다. Fig. 13 및 Fig. 14를 통해 알 수 있듯이, 상당량의 합성가스가 재순환 영역 근처에서 발생한다. 이 결과를 통해, 재순환 영역은 화학 반응의 혼합을 촉진시켜, 효과적인 반응을 이끄는 것을 알 수 있다. 이뿐만 아니라, 재순환은 가스화기 중심 부분에서 출구방향으로 강한 유속을 발생시켜, 가스화기 내부에 합성가스가 정체되는 것을 막는

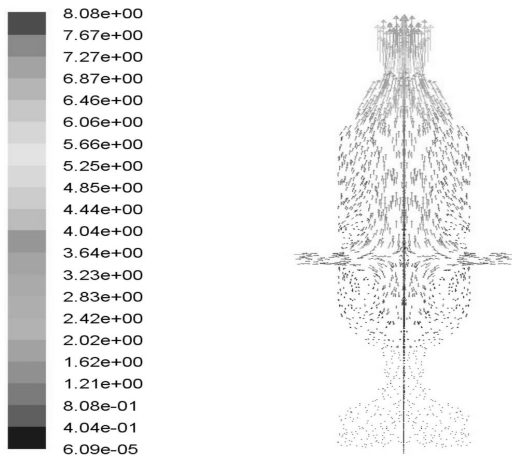


Fig. 15 Velocity distribution of the gasifier at 4°.

역할도 한다.

5. 결 론

본 연구에서는 분류층(entrained flow gasifier) 가스화기의 주요 작동조건 및 inlet 각도에 대한 영향을 살펴보고자, CFD 해석을 수행하였다.

- 1) 300MW sell형 1단 분류층 가스화기의 CFD 모델링을 통해 가스화기 내에서 발생 하는 열 유동 및 화학반응을 해석하였으며, 이를 통해 최적의 작동조건들을 선정하였다.
- 2) CFD해석을 수행한 결과, O₂/coal ratio=0.83, steam/oal ratio=0.05, coal particle size=100μm, inlet angle=4°에서 최적의 작동성능을 발휘한다.
- 3) 최적의 작동조건을 적용한 결과, CO의 mole fraction은 0.546, H₂의 mole fraction은 0.317, CO₂의 mole fraction은 0.070이며, 이때 냉가스 효율은 81.3%이다. 또한, 출구에서 온도는 1865.7K 이다.

후 기

본 연구는 지식경제부, 신재생에너지 센터(2006-N-C012-P-01-0000) 및 두산중공업 지원에 의해 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- 1) A. J. Minchener, "Coal gasification for advanced power generation", Fuel, Vol. 84, 2005, pp. 2222-2235.
- 2) G. J. Stiegel and R. C. Maxwell, "Gasification technologies: the path to clean, affordable energy in the 21st century", Fuel Processing Technology, Vol. 71, 2001, pp. 79-97.
- 3) O. Shinada, A. Yamada and Y. Koyama, "The development of advanced energy technologies in Japan IGCC: A key technology for the 21st century", Energy Conversion and Management,

- Vol. 43, 2002, pp. 1221-1233.
- 4) A. H. Neville, "Operating experience and improvement opportunities for coal-based IGCC plants", *Materials at High Temperatures*, Vol. 20, 2003, pp. 1-6.
 - 5) N. Hauser, "Optimizing costing study for a 500 MW IGCC power plant based on shell gasification", *Gasification Technologies Conference*, San Francisco, CA, 1996, pp. 451-459.
 - 6) L. D. Smooth and P. J. Smith, "Coal combustion and gasification", Plenum Press, 1985, pp. 163-210.
 - 7) R. Hotchkiss, "Coal gasification technologies", *Journal of Power and Energy*, Vol. 217, 2003, pp. 27-33.
 - 8) Y. C. Choi, X. Y. Li, T. H. Park, J. H. Kim, and J. G. Lee, "Numerical study on the coal gasification characteristics in an entrained flow coal gasifier", *Fuel*, Vol. 80, 2001, pp. 2193-2201.
 - 9) C. Chen, M. Horio, and T. Kojima, "Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers", *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, 2000, pp. 3861-3874.
 - 10) M. J. Bockelie, D. A. Swensen, M. K. Denison, Z. Chen, C. L. Senior, and A. F. Sarofim, "CFD Modeling for entrained flow gasifiers in Vision 21 Systems", *Proceedings of the 19th Annual International Pittsburgh Coal Conference*, Pittsburgh, PA, Sep. 24-26, 2002.
 - 11) M. J. Bockelie, D. A. Swensen, M. K. Denison, Z. Chen, C. L. Senior, and A. F. Sarofim, "CFD Modeling for entrained flow gasifiers in Vision 21 Systems", *Proceedings of the Gasification Technologies Conference 2002*, San Francisco, CA, Oct. 28-30, 2002.
 - 12) S. E. Zitney and C. Guenther, "Gasification CFD modeling for advanced power plant simulations", *Conference: 22nd Annual International Pittsburgh Coal Conference*, Pittsburgh, PA, Sept. 12-15, 2005.
 - 13) 서혜경, 정재화, 주지선, "건식 석탄공급형 1 Ton/Day급 가스화시스템 설계조건 및 시운전결과", *한국수소 및 신에너지학회 논문집*, Vol. 20, No. 4, 2009, pp. 352-359.
 - 14) Shell Internationale Research Maatschappij B.V., WIPO/PCT Patent Application No. WO 2006/117355A1, "Method and System for Producing Synthesis Gas", *World Intellectual Property Organization*, Nov. 9, 2006.
 - 15) FLUENT 6.3 User Guide, FLUENT Inc., 2006.
 - 16) 김량균, 이병화, 전충환, 송주현, 장영준, T. H. Fletcher, "CPD 모델을 활용한 석탄 가스화 과정 중 탄종에 따른 휘발분 배출에 관한 이론해석연구", *대한기계학회논문집 B권*, Vol. 33, No.12, 2009, pp. 1000-1006.
 - 17) H. Watanabe and M. Otaka, "Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier", *Fuel*, Vol. 85, 2006, pp. 1935-1943.
 - 18) E. H. Chui, A. J. Majeski, D. Y. Lu, R. Hughes, H. Gao, D. J. McCalden, and E. J. Anthony, "Simulation of entrained flow coal gasification", *Energy Procedia*, Vol. 1, 2009, pp. 503-509.
 - 19) C. D. Blasi, "Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers", *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, 2000, pp. 2931-2944.
 - 20) H. Freund, "Gasification of carbon by CO₂: a transient kinetics experiment", *Fuel*, Vol. 65, 1986, pp. 63-66.
 - 21) N. Arai and M. Hasntani, "A mathematical model of simultaneous formation of volatile - NO and char - NO during the packed bed combustion of coal char particles under an NH₃ - O₂ - Ar gas stream", *Fuel*, Vol. 66, 1987, pp. 1418-1426.
 - 22) C. K. Westbrook and F. L. Dryer, "Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames", *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, 1981, pp. 31-43.
 - 23) 박홍목, "분류상 석탄가스화 반응로 내에서

- 의 복사열전달방정식의 효율적인 수치해법”, 한국과학재단, 1997, KOSEF 971-1109-059-1.
- 24) Dennis, R. A., “The gas turbine handbook”, U. S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory, U. S, 2006.
- 25) Dowd, R. A., “Wabash river coal gasification repowering project-Final technical report”, Wabash river energy Ltd., U. S, 2000.
- 26) 서동균, 이선기, 송순호, 황정호, “분류층 가스화기에서 합성가스 생성을 위한 석탄 슬러리 가스화에 대한 수치해석 연구”, 한국연소학회 추계학술대회 35회 KOSCO Symposium 논문집, 2007, pp. 253-260.
- 27) 강민웅, 서동균, 이선기, 황정호, 임성진, “1단 분류층 가스화기의 가스화 반응에 대한 전산해석”, 한국연소학회 추계학술대회 제 37회 KOSCO Symposium 논문집, 2008, pp. 29-35.
- 28) L. Elliott, S. M. Wang, T. Wall, F. Novak, J. Lucas, H. Hurst, J. Patterson, and J. Happ, “Dissolution of lime into synthetic coal ash slags”, Fuel Processing Technology, Vol. 56, 1998, pp. 45-53.
- 29) Turns, S. R., “An introduction to combustion 2nd edition”, McGraw-Hill, 2006.