

## 고정층 가스화기 모델링에 관한 연구

이중원\*, 김미영, 지준화, 김시문  
한국전력 전력연구원  
(joongwonlee@kepcoco.kr\*)

### A Study of Moving Bed Coal Gasifier Modeling

Joongwon Lee\*, Mi-Yeong Kim, Junhwa Chi, Si-moon Kim  
Korea Electric Power Corporation Research Institute  
(joongwonlee@kepcoco.kr\*)

#### 서론

석탄 가스화 복합발전(IGCC: Integrated Gasification Combined Cycle) 시스템은 미분화, 가스화, 가스냉각 및 가스정제, 가스터빈 및 복합사이클 발전시스템 그리고 산소분리 공정을 포함하는 복잡한 공정이다. 또한 시스템을 구성하는 옵션이 다양하여 다양한 시스템을 만들어 낼 수 있다. 핵심 단위 공정인 가스화기 대하여 사용코드인 ASPEN Plus를 이용하여 성능해석 모델 개발을 수행하였다.

#### 이론

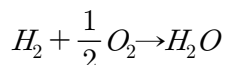
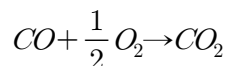
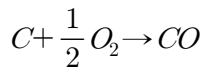
석탄 가스화 복합발전(IGCC: Integrated gasification combined cycle)이란 석탄, 바이오매스 등의 에너지 원료를 고온고압 조건에서 반응 당량 이하의 산소( $O_2$ )나 수증기( $H_2O$ )와의 반응을 이용하여 불완전 연소시킴으로써 일산화탄소(CO)와 수소( $H_2$ )가 주성분인 합성가스를 생산(가스화)하는 공정을 포함하며, 이때 생성된 합성가스와 열로 가스터빈과 증기터빈을 함께 구동(복합 발전)시키는 전기 생산 공정을 말한다. 이 중 가스화 기술은 연료로부터 합성가스를 생산하는 핵심이 되는 기술로, 실질적인 상용 공정에서 가스화 반응기 내에서의 반응시간은 3~6초에 불과하다.

가스화 반응기는 크게 고정층 가스화기(Moving-bed gasifier), 유동층 가스화기(Fluid-bed gasifier), 분류층 가스화기(Entrained-flow gasifier)로 분류된다. 본 연구에서 사용하고자 하는 가스화기의 형태는 고정층 가스화기로 석탄층이 반응기 내에서 자중에 의해 서서히 하강하면서 석탄층의 진행 방향과 반대방향으로 주입되는 분사기체에 의해 가스화되는 구조를 따른다.

IGCC 공정에 대한 모델링은 플랜트 혹은 실험실에서 얻어진 데이터와 모사를 통해 생성된 결과 값을 비교하는 방식을 통하여 검증하였다. 본 연구에서 사용하고자 하는 ASPEN Plus의 경우 모델링을 수행함에 있어 가장 유용하게 사용되는 공정 틀이다. 화학적 물리적 성질을 통해 예측한 열역학적 모델을 제공하고 여러 공정에서 기존에 사용되는 단위 모델들을 제공하고 있다. 하지만 사용자의 편의에 따라 수정이나 변경이 힘든 부분은 단점이다. 이러한 부분을 개선하기 위해 서브루틴(Sub-routine)이나 계산 블록(Calculation block)등을 사용하여 사용자에게 필요한 내용을 입력하는 방법을 제공하고 있다. 상용틀에서 사용되는 반응기 모델은 여러 가지 형태가 있다. 사용자마다 다른 반응식을 적용하는 것과 마찬가지로 모델링하고자 하는 목적에 따라 여러 종류의 반응기 모델을 사용하고 있다. 일반적으로 연구에 있어 가장 많이 사용되는 방법은 ASPEN Plus를 이용한 Gibbs 반응기 모델이다. 그 결과가 실제 값과 크게 차이가 나지는 않지만 여러 가정이 모델링에 사용되고 있어 보다 정확한 모델링을 위해서는 다른 반응기 모델을 사용하거나 직접 수학적인 모델을 구성하여 연산을 하는 방식이 필요하다.

가스화(Gasification)에 대해 기본적으로 C, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>이 존재하는 곳에서는 하기와 같은 반응이 이루어지는 것으로 알려져 있다. 크게 연소 반응(Combustion Reaction), Boudouard 반응, 탄소-스팀반응 (Carbon-steam reaction), 메탄화반응 (Methanation Reaction)으로 구성되며 각 반응은 하기와 같다.

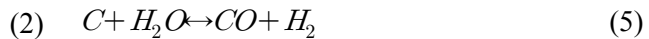
- 연소반응



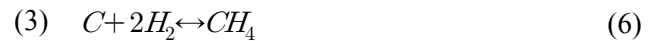
- Boudouard 반응



- Carbon-steam 반응

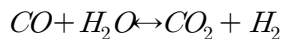


- Methanation 반응

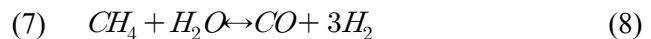


반응 (1), (2), (3)의 경우 가스화 조건에서 이루어지는 균일계의(Homogeneous) 연소반응이나, (4), (5), (6)의 경우에는 불균일계(Heterogeneous)의 반응이다. (4)~(6)의 식의 가감을 통하여 CO Shift 반응식과 메탄 개질반응(Steam methane reforming reaction)의 형태로 새롭게 쓸 수도 있다.

- CO Shift Reaction



- 메탄 개질반응(Steam methane reforming)



반응 (4)~(8)은 가역 반응으로, 동시에 정반응과 역반응이 서로 다른 속도로 일어나는 것을 의미한다.

## 실험

전체 모사는 석탄 건조(Coal Drying)를 위한 부분, 열분해(Pyrolysis), 연소 및 가스화(Char Gasification and Combustion)부분으로 구성되어 있다. 전체적인 모든 과정은 실질적으로 가스화기에서 모두 일어나지만 모사과정에 있어 각 반응들을 정확하게 모사하기 위해 상기와 같이 세부적으로 나누어 모사하였다.

### 1. 석탄 건조 (Coal Drying)

원료인 석탄에 있는 수분 함량을 제거하는 공정이다. 이는 분석값(Proximate analysis)의 수분함량값을 기준으로 계산할 수 있도록 구성하였다.

### 2. 석탄 열분해 (Coal Pyrolysis)

석탄의 열분해 시 황성분을 포함한 가스의 조성 및 양을 측정하기 위한 석탄의 열분해 실험은 TGA(Thermogravimetric Analyser)나 DTF(Drop tube furnace) 또는 Flash pyrolyzer 등을 통해 생성되는 가스를 GC(Gas Chromatography), MS(Mass Spectrometry) 혹은 FT-IR 등으로 측정할 수 있다. 석탄의 열분해와 관련된 연구는 지난 1960년대부터 꾸준히 이루어져 많은 사용모델들이 있다. 본 모델에서는 기존에 알려져 있는 실험값을 기준으로 사용하였다.

### 3. 가스화 및 연소 (Char Gasification and combustion)

본 연구에서는 다음의 6가지의 가스화 반응식을 적용하였다.



식(9)의  $\phi$ 는 석탄 입자의 지름에 의해 결정되는 값이다. 지름이 0.005cm 이하로 가정하는 경우 온도에 의한 함수로 정의되어 설명될 수 있다.<sup>1)</sup> 반응속도의 경우 미반응 수축핵 모델의 식을 적용하여 Wen and Wang이 실험을 통해 구한 값들을 식 (9)~(12)에 반영하였다.<sup>1)</sup> 기존 일반적으로 사용되고 있는 Gibbs 반응기(그림 1) 뿐 만 아니라 여기에서 제안하는 고정층 반응기를 보다 정확하게 모사할 수 있도록 탄층의 진행 방향과 반대방향으로 주입되는 분사기체에 의해 가스화되는 구조(그림 2)를 갖도록 모사하였다.

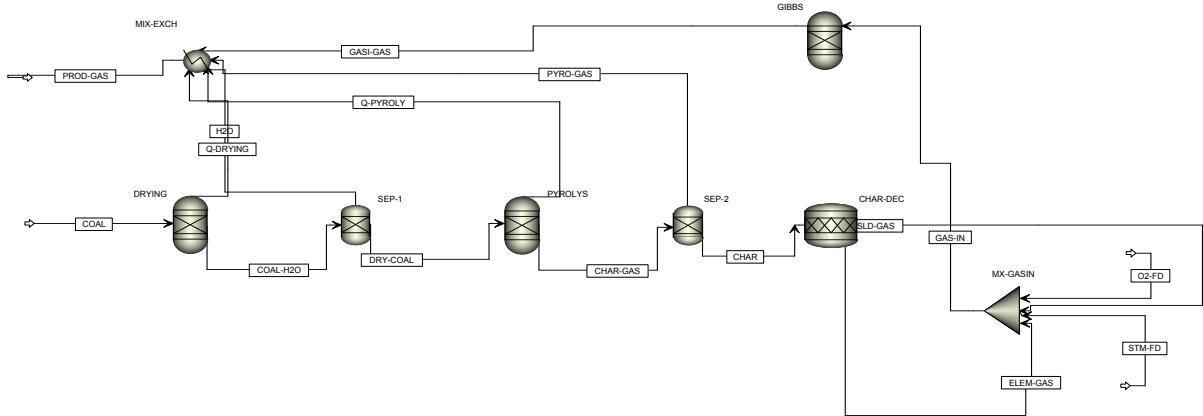


그림 1 Simulation Diagram for moving bed coal gasifier using Gibbs reactor

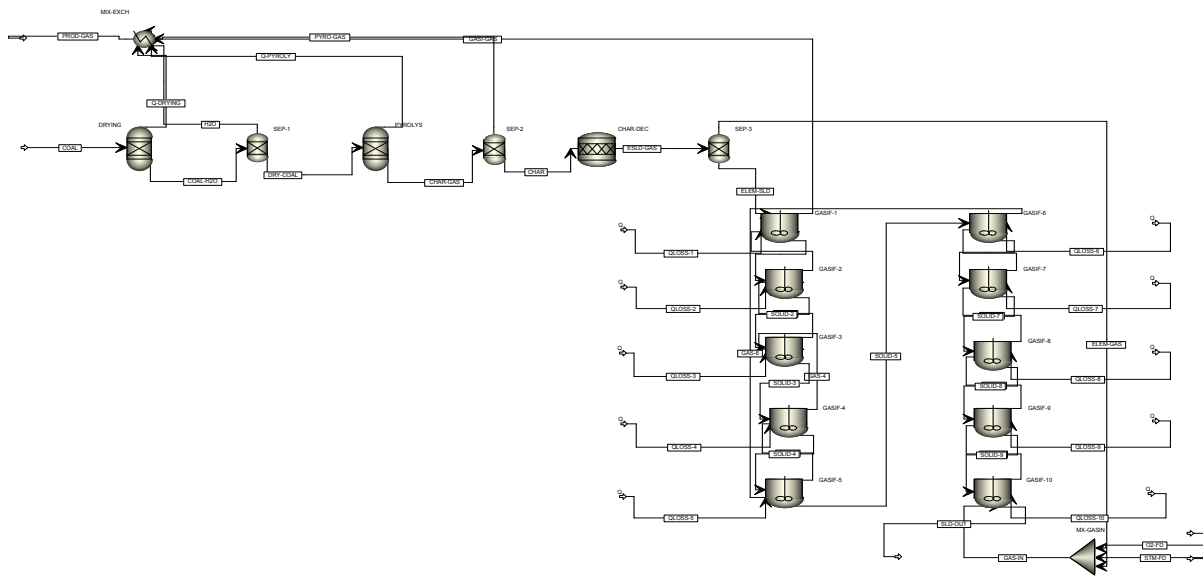


그림 2 Simulation Diagram for moving bed coal gasifier using CSTR Reactor

**결과**

시뮬레이션 결과의 비교는 이미 공개되어있는 문헌의 값들과 비교하기 위해 동일한 조건을 사용하였다. 주요 입력 조건을 Table 1, 2에 나타내었다.

이러한 입력 값을 바탕으로 모사 결과를 비교하여 보면 다음과 같다. 우선 Table 3에 기존에 연구되었던 실험값 그리고 그 결과를 통해 수립된 모델들의 값, 금번 모사 결과를 통해 얻은 결과를 정리하였다.

Table 1 Feed Stock Condition

Feedstock	Parameter	값
석탄	공급속도	19597 kg/hr
	온도	25 °C
	압력	35 atm
	입자지름	2.0 cm
산소	온도	371 °C
	압력	35 atm

Table 2 Feed Analysis

분석종류	성분	값(%)
공업분석	Moisture	4.58
	FC	39.16
	VM	52.72
	ASH	8.12
원소분석	ASH	8.12
	C	77.76
	H	5.24
	N	1.47
	Cl	0.0
	S	2.62
	O	4.79

Table 3 Comparison of Experimental and Modeling Results

성분	Experiment	Gibbs	CSTR
CO	27.16	15.39	28.57
H2	38.12	44.03	37.71
CO2	22.84	29.81	21.98
CH4	9.34	7.89	9.00
H2S	0.81	0.72	0.28
N2	1.70	1.51	1.72

## 토론

ASPEN Plus를 이용한 모사 결과, 시도한 CSTR을 사용한 예측값이 실험값과 유사한 의미있는 결과를 얻을 수 있었다.

가스화 반응 모사는 탄종에 따라 운전 조건에 따라, 가스화기 형태에 따라 다른 결과를 얻게 된다. 하지만 모사를 통해 상기 내역을 모두 반영하는 것은 어려운 일이다. 사용 예정인 탄종의 물성치를 정확하게 분석하고 그 탄종을 통해 운전 범위 내에서의 반응 속도 데이터를 취득하는 것이 무엇보다 중요하다. 그 이후에는 가스화기 유형에 따라 가능한 최대한 유사하도록 취득한 데이터를 모사기에 적용하는 것이다. 본 연구를 통해 기존에 연구되어 왔던 Gibbs 반응기 뿐 만 아니라 Continuous Stirred Tank Reactor(CSTR)를 통해 실험값인 속도데이터 적용이 가능함을 확인해 보았다. Continuous Stirred Tank Reactor(CSTR)을 이용한 모사 접근 방법 또한 유용하고 실질적인 속도데이터를 구하는 경우 보다 합리적인 모사를 수행할 수 있을 것이다.

향후에는 이러한 결과를 바탕으로 탄종의 변화, 열분해(Pyrolysis) 결과에 따른 변경에 따른 합성가스의 조성 변경 뿐 만 아니라 기타 운전 변수에 따른 민감도 분석(Sensitivity Analysis)을 수행할 예정이다.

## 참고 문헌

1. C-Y. Wen, T-Z Chung, "Entrained coal gasification modeling", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 18 (1979), 684-695
2. Christopher Higman and Maarten van der Burgt, GASIFICATION, 2nd ed., Gulf Professional Publishing(2008)
3. <http://support.aspentech.com> (ASPEN Plus Model for Moving Bed Coal Gasifier)