CFD기반 Compartmental 모델을 이용한 산업용 규모 광물탄산화 공정 장시간 다이나믹 시뮬레이션

김민준, 박성언, 이종민†
서울대학교
(jongmin@snu.ac.kr†)

복잡한 반응이 포함된 다상 산업용규모 반응기를 CFD를 이용하여 장시간 모사를 하는 것은 긴 전산시간이라는 한계 때문에 쉽지 않은 상황이다. 따라서 본 연구에서는 산업용 규모 고-액-기 3상 반응기를 장시간 모사하기 위해 CFD-based compartmental model을 이용하였다. CFD-based compartmental model이란 well-mixed 되어있지 않은 반응기를 well-mixed된 수백개의 zone으로 나눈 후 각 zone을 CSTR이라고 가정하는 model이다. 이때, CFD를 이용해서 hydrodynamics 및 gas holdup 정보만을 계산하고, MATLAB을 이용하여 앞서 CFD에서 얻은 정보와 kinetics 정보를 이용하여 반응을 모사하게 된다. 본 연구에서는 지름 2.2m 높이 6.0m의 인천 청라사업소의 광물탄산화 반응기를 모사하기 위해 반응기를 324개의 well-mixed zone으로 쪼개어 모사를 진행하였고, 실제 실험 및 반응을 넣은 CFD결과와의 비교를 통해 검증을 진행하였다. 그 결과 이산화탄소 제거효율에 대한 오차율이 5% 내외로 발생하는 것을 확인할 수 있었다. 또한, CFD-based compartmental model을 통해 시간에 따라 온도, pH, 화합물의 농도 등이 어떻게 변하는지 알 수 있었다. 본 연구는 추후 영흥화력발전소에 설치된 4배 규모 확대된 반응기의 최적 운전조건을 찾고, 40배 규모 확대된 반응기의 최적 구조를 제안하는 데 이용될 예정이다.