

발전소의 대기오염물질 배출 예측 모델 개발

Development of Predictive Model for Pollutants Emission from Power Plants

김민석, 김경희, 이인범
(Minseok Kim, Kyung-Hee Kim and In-Beum Lee)

Abstract : From the power plant in a steel plant, environment pollutants such as SO_x, NO_x, CO and CO₂ are emitted by combustion reactions of the fuels which are by-product gases, oil and liquefied natural gas(LNG). To reduce the amounts of the pollutants, it is important to build a predictive model for the emission of the pollutants. In this paper, model that predict the amounts of generated pollutants for the used fuel is developed by using Gibbs free energy minimization method[1] with the temperature correction technique. For some data set, the calculation results from this model are compared with the real emission amounts of SO_x, NO_x, and the result of the calculation by both ASPEN PLUS which is a commercial simulation software. This model shows good results and can be applied to other power plants.

Keywords : pollutant emission, predictive model, optimization, Gibbs free energy

I. 서론

환경에 대한 인식이 높아지고, 이에 따른 법적 규제치도 점점 강화되어감에 따라서 환경에 영향을 미치는 모든 산업설비와 생산 등은 위치 설정부터 건설 및 가동중 관리에 이르기까지 모든 것이 환경관리의 범위에 속한다고 할 수 있다. 그 중 발전소는 대기오염을 일으키는 주요 고정오염원 시설로 이에 대한 관리를 소홀히 할 수 없다. 그러므로 현재 환경부에서는 발전소 연동에 센서를 부착하여 TMS(Tele Monitoring System)으로 대기질을 항상 관리하고 있는 실정이다. 대기오염에 관한 기존의 연구들의 방향은 오염물의 거동 및 확산에 대한 연구와, 2차 오염물인 오존과 스모그등에 대한 연구가 대부분이다. 발전소에서 발생하는 오염물의 양은 EPA등에서 나와 있는 발전용량과 사용 연료에 따른 emission factor를 이용하여 개략적인 발생량을 예측하고 있다. 일반적인 발전소에서는 사용 연료가 동일하므로 이를 이용하는 것이 큰 무리는 없다. 그러나 본 연구에서는 연료사용량이 동적으로 변화하는 일반적인 중유 발전소, LNG발전소와 대규모 장치 산업체에 소재하는 자체 발전소에서 연료의 연소에 의해 발생하는 대기오염물질의 발생량을 관측에 앞서서 미리 예측하기 위해 발전소의 조업 패턴, 발생패턴을 분석하고, 오염물 배출량의 산정과 향후 예측을 하여 각 대상 공장의 조업 감시 및 이의 통합관리를 위한 오염물인 황산화물(SO_x), 질산화물(NO_x), 일산화탄소(CO), 이산화탄소(CO₂)에 대한 배출량 예측 모델의 개발을 목표로 하였다.

현재 제철소내의 발전소에서는 다른 단위 공정에서 발생하는 Coke Oven Gas(COG), Blast Furnace Gas

(BFG), Linz Donawitz Gas(LDG)와 같은 부생 가스 및 부속 분에 대한 외부 구입 연료인 중유를 이용하여 제철소에서 필요로 되는 전기를 발전한다. 이들 연료의 각각에 대한 사용량은 부생가스의 발생량과 부하량에 따라 동적으로 변화함에 따라서 시간별로 발생하는 오염물의 양도 변하게 된다. 또한 신규 증설에 따른 전력 수요량이 급증함에 따라서 새로운 연료인 천연액화가스를 사용하게 된다. 이들 부생 가스, 천연가스와 중유들은 발전소내의 여러 버너에서 연소시켜져 에너지화하게 되는데, 이들 연료들은 연소 반응에 의해 산성비와 스모그의 원인인 황산 화합물(SO_x)과 질산화합물(NO_x) 그리고 지구온난화의 주범인 이산화탄소를 다량 포함한 환경 오염 물질을 발생하게 된다.

본 연구에서 연료의 종류와 사용에 따라 발생하는 오염물의 예측 모델을 구축하기 위하여 열역학적인 접근법으로, 가스상의 고온이 연소반응이 물리 화학적 평형상태 계산 방법[1]으로 Gibb's free energy minimization method[2]를 사용하였다. 또 다른 접근방법으로는 기존의 여러 측정 자료로부터 학습화된 신경망을 이용할 수가 있으나, 예측하고자 하는 물질 중에서 CO와 CO₂에 대한 기존의 측정 자료가 없어 이에 대한 신경망을 구축할 수 없고, 공장의 증설시 새로운 발전소에는 신경망을 쓸 수가 없다. 따라서 수치학적 모델을 세울 수 있는 열역학적인 접근법을 통하여 예측모델을 구축하였다. 먼저 발전소의 조업패턴을 분석한 후 연료 투입 패턴을 결정하여 이를 토대로한 기준 시간으로부터 향후 시간까지의 원료 사용 패턴을 알 수가 있다. 연료의 사용에 따른 오염물의 발생 모델은 공정의 특성에 맞도록 열역학적인 반응모델을 이용하여 모델을 구축하였으며, 상용 software인 ASPEN PLUS를 이용하여 모델의 적정성 검사, 현장조업자료를 이용하여 정확성 검토 등을 행하여 모델의 신뢰도를 높이고자 하였다. 연료사용예측모델과 오염물 발생 모델을 결합하여 오염물 배출 예측 모델을 완성하였다.

접수일자 : 1997. 12. 1., 수정완료 : 1998. 7. 10.

김민석, 이인범 : 포항공과대학교 화학공학과

김경희 : 포항공과대학교 환경공학과

※ 본 연구는 한국전력공사의 지원에 의하여 기초전력공항공동 연구소 주관(96-지-06)으로 수행되었습니다.

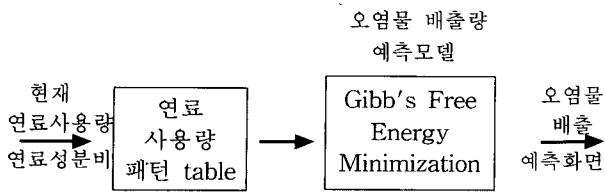


그림 1. 모델 구축 개념도.
Fig. 1. Block diagram of model.

그림 1과 같이 block-diagram을 보면, input은 현재의 연료사용량과 연료의 각 구성 성분들의 성분비 검사치 등이고, 결과 출력은 이들 예측 모델의 결과에 의한 2시간분 예측이며 단위 시간은 5분이다. 즉 5분간격으로 향후의 연료사용량을 예측하고 이에 따라 약 1초 정도의 지연 시간 후에 발생하는 SOx NOx, CO와 CO₂의 오염물질의 양을 5분 간격으로 2시간 분을 화면에 출력하는 것이다. 오염물 배출 예측 모델의 개념도를 그림 2와 같이 나타낼 수 있으며, 개발된 모델은 연료 투입량 예측, SOx, NOx, CO, CO₂등의 대기오염물질 배출의 관계와 이에 따른 대기 오염물질 배출 예측 모델 구축의 개념도를 보인 것이다.

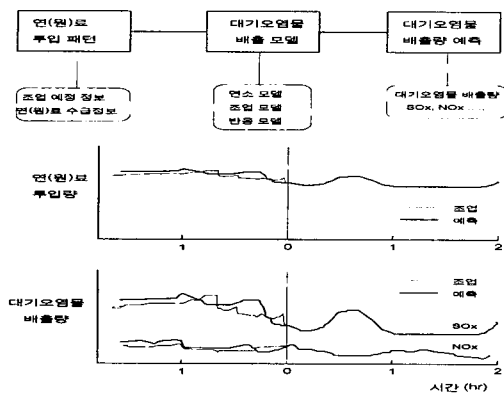


그림 2. 대기 오염물 배출 예측 모델 개념도.
Fig. 2. Structure of prediction model for pollutants emission.

II. 발전소 공정현황

대규모 장치 산업체에 설치되어 있는 자체 발전소를 대상으로 그 발전소에서 생성되는 대기 오염물질의 발생량을 예측하기 위해 본 연구에서는 제철소 내 발전소를 그 대상으로 선정하였다. 대상으로 선정된 발전소에는 모두 8기의 단위 발전소와 LNG 발전소 2기가 있으며, 각각의 단위 발전소에는 각각 여러 버너가 있어 다른 제철공정[10] 상에서 발생하는 부생가스들인 COG, BFG, LDG 그리고 외부 구입 연료인 중유와 천연액화가스를 연소시키게 된다. 이때 생기는 열을 이용하여 증기를 발생시킨 후 그 증기의 힘으로 전기를 발전하고 있다. 연소 반응 시에는 연료 외에 공기를 일정량이상 함께 넣어 연소시키게 되며, 그들 연료에 포함되어 있던 성분들은 연소 반응을 일으켜 CO₂, CO, NOx, SOx, H₂O, Carbon, Dust등이 포함된 배기 가스를 대기에 배출하게 된다. 연료의 사용과 오염물의 발생간에 생기는 지연 시

간은 연소반응이 고온으로 격렬하게 발생하므로 이때 생성되는 각각의 배출물의 생성시간과 측정되기까지 몇 초 안에 생성됨으로 시간 지연에 따른 dynamics를 무시하여도 된다. 버너의 연료로 사용되는 각 부생가스와 중유는 단일 성분이 아니라 Table 1(연료 구성 성분 성분비)에서 볼 수 있듯이 여러 분자들이 각각의 성분비로 구성되어 있는 혼합물이다. 그러나 이 구성 성분비는 각 부생가스 발생 공정[11]의 상황에 따라 약간의 변동이 있기 때문에 제철소에서는 매일 그 성분비를 점검하여 on-line 상으로 그 정보를 공정 컴퓨터에 저장하고 있으므로 본 연구에 의해 개발되는 모델에서는 그 정보를 입력받아 사용하게 된다.

표 1. 연료 구성 성분 성분비.
Table 1. Fuel component composition mole fraction.

	BFG	COG	LDG	OIL	LNG
C	0	0	0	0.554	0
O ₂	0	0.003	0.001	0.0012	0
H ₂	0	0.564	0.020	0.442	0
S ₂	0	0	0	0.0017	0
N ₂	0.541	0.023	0.159	0.00055	0.00008
CO	0.220	0.084	0.642	0	0
CO ₂	0.207	0.310	0.178	0	0
CH ₄	0.032	0.266	0	0	0.890
C ₂ H ₄	0	0.029	0	0	0.0873
C ₃ H ₈	0	0	0	0	0.0167
C ₄ H ₁₀	0	0	0	0	0.00586
H ₂ S	0	0.000428	1.5E-6	0	0
SO ₂	0.000120	0	0	0	0

1. 발생오염물의 종류와 원인

발전소에서는 연료의 연소 및 화학반응에 의하여 주로 발생하는 대기오염물질로는 기체상 물질로 SOx, NOx와 green house gas라는 CO₂와 CO는 연료 중에 포함된 탄소화합물의 연소에 의하여 발생되며 CO는 이 과정에서 불완전 연소에 의하여 생성된다. 황산화물은 보통 SOx라고 하며 SO₂, SO₃가 주성분으로 대기 중에는 연소시 대부분이 SO₂상태로 발생되고, fuel 중에 함유된 황성분의 연소에 의해 산소와 결합하면서 SOx가 발생한다.

질소산화물(NOx)은 SOx와 더불어 산성비와 광화학스모그의 원인으로 환경관리의 주요 대상항목이다. 발생량은 연료의 성분과 연소 온도에 따라서 결정되어지고 발생원과 원인에 따라서 NOx는 3가지로 분류가 된다. 첫째로 연료에 함유된 질소 성분에 의해 발생하는 fuel NOx, 두번째는 연소시 공급되는 공기중의 질소와 산소가 Zeldovich mechanism[3]에 의해 고온에서 결합하여 발생하는 thermal NOx, 마지막으로 연소가 시작되는 저온의 발화점에서 탄화수소의 radicals이 형성되어 이와

공기중의 질소와 결합하여 생성되는 prompt NOx가 있다. 그러나 prompt NOx의 경우에는 탄화수소의 radicals의 생성 및 체류 시간이 극히 짧아서 NOx의 발생량을 계산할 때 대부분 무시한다.

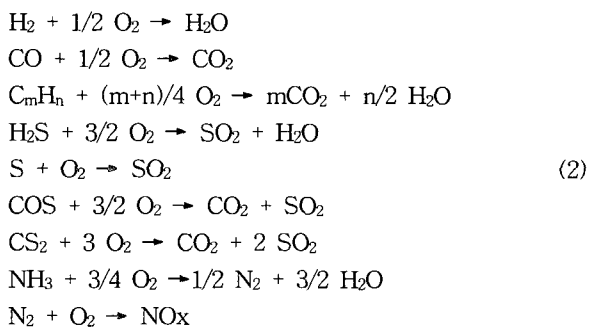
Thermal NOx는 연소 공기중의 질소로부터 생성되며 반응중간체인 질소원자 농도에 대해 의정상태근사법으로 반응속도를 구하면 NO의 생성속도[4]는 (1)과 같다. 이 식에서 thermal NOx의 양은 연소온도와 공기의 농도에 관계됨을 알 수 있다.

$$\frac{d}{dt}[NO] = 6 \times 10^{10} T_{eq}^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{69090}{T_{eq}}\right) \times [O_2]_{eq}^{\frac{1}{2}} [N_2]_{eq}, \text{ mol/m}^3 \text{ sec} \quad (1)$$

Prompt NOx는 탄화수소계 연료의 연소시 발생하는 NOx로 HCN이나 CN등의 중간물질을 경유하여 생성된다고 알려져 있으나 아직까지 제한된 정량적 자료만을 뿐 자세한 모델은 정립되어 있지 않고, 발생하는 양도 적으므로 무시한다. Fuel NOx는 연료내 화학적으로 결합되어 있는 질소성분이 연소시 NOx로 전환되는 것으로 연료 내 질소성분은 열분해하여 중간생성물(HCN, CN, NH2등)을 생성하고, 이 중간생성물은 산소를 함유한 화합물과 반응하여 NO를 생성한다.

2. 이론 공기량

연료들이 연소 반응을 일으키기 위해서는 공기가 함께 버너에 흡입되어지는데, 이때 사용되는 실제 공기량은 측정되어지고 있지 않다. 따라서 각 성분의 연소에 필요한 산소량에 일정비를 곱한 실제 공기량을 계산하여 사용하게 된다. 이론 공기량은 연료 1Nm³/hr의 연소 시에 필요로 되는 공기량으로 정의되며 연료 중의 가연 성분에 대해서만 산출하게 되는데, 실제 버너로 흡입되어지는 공기량은 이론 공기량만 들어가는 것은 아니기 때문에 실제 공기량을 계산하게 된다. 연료투입량에 따른 필요공기량, 연소 후 배가스 총량, 배가스 중의 각 물질들의 양과 성분비에 대한 기본적인 약식 계산이 가능하다. 실제 연소반응을 일으키는 주요반응들은 (2)와 같으며 이를 통하여 이론 공기량을 구할 수 있다.



연소반응의 주요 반응물[5]이 산소와 반응하여 생성될 각 성분들의 이론 공기량은 (3)에 의해 계산되어지며, 가장 이상적인 연소효율은 연료와 이론 공기량이 반응하여 완전반응을 일으킬 때 얻을 수 있다. 하지만 (2)와 같이 연소반응에서 오른쪽으로 반응을 진행시켜 완전반응

을 얻기 위하여 Le Charlier의 원리에 의해 반응물의 양을 높여주며 따라서 반응 제한물인 연료의 완전연소를 위하여 공기의 양이 이론양보다 조금 더 많이 넣어주는 것이다. 따라서 본 연구에서 air ratio를 완전연소를 한다고 가정 하에 여러 문헌에 나와 있는 자료를 토대로 이론양보다 약간 높은 값인 1.2로 설정하였다.

$$\begin{aligned} &\frac{0.5}{0.21} [H_2] + \frac{0.5}{0.21} [CO] + \frac{1.5}{0.21} [H_2S] \\ &+ \frac{m + \frac{n}{4}}{0.21} [C_m H_n] + \frac{0.75}{0.21} [N H_3] \end{aligned} \quad (3)$$

III. 연료사용량 예측 모델

발전소에서 배출되는 오염물질의 배출량을 예측하기 위해서는 무엇보다도 먼저 그 오염물질을 생성시키는 연료들이 향후 얼마나 사용될 것인가를 예측할 수 있어야 한다. 그러나 제철소에서 소모되고 있는 부생가스의 사용량의 추이를 보면 우선적으로 필요한 공정에 부생가스를 먼저 소모시킨 후에 나머지 양에 대하여 발전소의 연료로 보내어지게 되어있다. 따라서 변화 추이가 상황에 따라 매우 다르게 나타나기 때문에 일반적인 수식 모델에 의한 예측 방법을 구축하는 것은 불가능하고, regression method를 이용하기에는 보다 더 많은 data가 필요하다.

그러나 제철소에서 필요한 전력의 수급현황을 보면 자체 발전소로부터 생산되는 것과 외부 구입전력 두 가지가 있다. 조업의 변화로 load가 변하게 되면 우선적으로 구입 전력의 양을 조절하게 됨으로써 자체 발전소의 발전량은 일반적인 발전패턴에서 벗어나지 않는 안정적이라고 추정할 수 있다. 따라서 일반적으로 발전소 운영의 경우에는 매일 같은 시간대에서 연료 사용량은 거의 비슷한 수준으로 나타나는 것으로 조사되었다. 따라서 본 연구에서는 각 시간대를 구분하여 한 달간의 표준적인 연료 사용량을 추출하여 하루분으로 합성하였다. 그 합성된 연료 사용량 data를 이용하여 각각의 연료에 대해 매 5분 간격으로 그 시간에서의 연료 사용량과 2시간 후의 사용량을 (4)를 이용하여 각각의 factor들을 구해 Table 2 연료사용량 예측을 위한 factor table과 같이 목록화 하였다. j는 1, 2, ..., 24, k는 1, 2, ..., 288이다.

$$f_{kj} = \frac{U_{k+j}}{U_k} \quad (4)$$

여기서,

f_{kj} = 현재 시간지수 k일 때 향후 시간 j번째의 연료 사용량 factor

U_k = 5분 간격 시간 지수 k에서 연료사용량

이러한 factor table을 생성해 주는 프로그램을 작성하였는데, 그 프로그램의 Input은 5분 간격으로 하루 분의 연료 사용량을 측정된 data file로서 이와 같은 factor table은 표준적인 날을 위한 것과 발전소 내 어떤 버너의 정수가 미리 예정된 것과 같이 연료 사용량의 변동 상황을 미리 알 수 있는 경우를 위한 factor table을 미리 준

비하여 둘 수 있다.

표 2. 연료사용량 예측을 위한 인자표.
Table 2. The factor table for prediction of fuel usage.

time	2:00	1:55	...	0:10	0:05
0:00	0.808	0.901	...	0.874	0.846
0:05	1.021	1.131	...	1.011	1.040
:	:	:	:	:	:
13:30	1.123	1.233	...	0.886	0.900
:	:	:	:	:	:
23:50	0.948	1.012	...	0.897	0.931
23:55	0.894	0.898	...	0.941	0.984

따라서 여러 벌을 작성하여 그 상황에 맞는 table을 사용함으로써 좀 더 정확한 연료 사용량을 예측할 수 있다. 이렇게 목록화된 factor table을 이용하여 한 시점에서의 현재 연료 사용량을 받아들이면 그로부터 2시간 후까지의 연료 사용량은 (5)를 이용하여 예측할 수 있게 된다.

$$E_{kj} = U_k \times f_{kj} \quad (5)$$

for $j = 1, 2, \dots, 24$ for $k = 1, 2, \dots, 288$

위 (5)를 이용하여 현재 사용량으로부터 2시간 후의 연료량을 예측한 것이 그림 3이다. 이 그림으로부터 이러한 방법에 의한 연료 사용량 예측이 적절함을 알 수 있다. 한편 더 실용적인 모델을 구축하기 위해서는 Kalman filter와 같은 개념으로부터 측정 data로부터 예측치를 보정하는 기능이 필요하나 이는 본 논문의 수준을 벗어나므로 다루지 않는다.

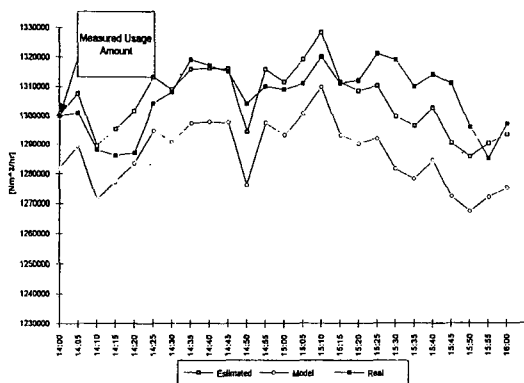


그림 3. factor table방식에 의한 연료 사용량 예측 결과.
Fig. 3. Result of prediction of fuel usage by factor table method.

IV. Gibb's 자유에너지 최소화법

1. 목적함수

연소반응은 고온에서 격렬히 일어나는 반응으로 평형

상태[6]로 가정된다. 또한 반응하는 연료의 성상이 가스상이고, 고온의 저압에서 반응하므로 이상기체로 가정되어진다. 여러 종류의 혼합물에서의 평형조성은 각 성분이 가지는 Gibb's 자유에너지의 합의 최소화로 결정되어진다는 열역학적 이론[7]에 바탕을 둔 Gibb's 자유에너지 최소화법을 이용하여 각 성분의 몰수를 계산하면 우리가 구하고자하는 배출물의 양을 알 수 있게 된다.

이것을 수식화하면 (6)과 같은 목적함수로 정의될 수 있다.

$$\text{Min } F(x) = \sum_{i=0}^N \left(\frac{\Delta G_i}{RT} + \ln \frac{x_i}{x} \right) \quad (6)$$

여기서,

$$\bar{x} = \sum_{i=0}^N x_i, N \text{은 반응물의 개수이고,}$$

이때, ΔG_i 는 반응 온도에 따라 변하는 값으로서, (7)에 의해 결정된다.

$$\Delta G_{i,T} = J - RT \left(\Delta A \ln T + \frac{\Delta B}{2} T + \frac{\Delta C}{6} T^2 + \frac{\Delta D}{2T^2} + I \right) \quad (7)$$

여기서

$$J = \Delta H_{298}^0 - R \left((\Delta A) T + \frac{\Delta B}{2} T^2 + \frac{\Delta C}{3} T^3 - \frac{\Delta D}{T} \right)$$

$$I = -\frac{\Delta G_{298}^0}{RT} + \frac{J}{RT} - \Delta A \ln T - \frac{\Delta B}{2} T - \frac{\Delta C}{6} T^2 - \frac{\Delta D}{2T^2}$$

ΔG_{298}^0 = 표준 상태에서 성분의 Gibb's 자유에너지

ΔH_{298}^0 = 표준 상태에서 성분의 반응열

$\Delta A, \Delta B, \Delta C, \Delta D$ = 각 성분의 열용량 상관계수

위의 식에서 I, J 는 각 성분들에 대해 일정한 값을 가지는 상수가 된다. 또한 $\Delta A, \Delta B, \Delta C, \Delta D$ 들은 단위 원소 화합물인 경우는 모두 0이고 그 이외에는 그 성분들이 화합물로 만들어지게 하는 원소들의 $\Delta A, \Delta B, \Delta C, \Delta D$ 값의 비율에 의해 계산되어진다.

제약조건으로는 연소 반응시의 각 성분들을 구성하는 원자들의 갯수는 반응전과 반응 후가 같아야한다. 따라서 전체 계에서 원소 j 의 몰수를 b_j , i 분자의 1mole당 들어있는 j 원소의 몰수를 a_{ij} 로 두고, 만약에 i 분자의 계에서의 몰수를 x_i 라고 하면 (8)과 같은 물질 수지식을 만족하여야 한다. 이 물질 수지식은 모든 화학 반응에서 항상 고려되어야 하는 것이다.

$$\sum_{i=0}^N a_{ij} x_i = b_j, \text{ for } j = 1, 2, \dots, M \quad (8)$$

2. 최적화 계산

앞에서 구축한 목적함수와 물질 수지식을 함께 고려하는 함수는 비선형을 가지기 때문에 계산하기가 어려운 점이 있다. 물론 비선형 함수에 대한 최적화법이 많이 개발되어 있으나, 계산상의 시간이 많이 걸릴 뿐만 아니라 이러한 최적화법들은 대부분 특정 package program 상에서 가능한 경우가 대부분이기 때문에 본 연구에서 사용하기에는 무리가 따른다. 따라서 이러한 비선형 함

수에 대한 최적해를 쉽게 풀기 위해서는 이들을 선형화하여 푸는 것이 가장 적절하다.

목적 함수와 물질 수지식을 함께 묶어 선형화[8]하면서 구하고자 하는 x 에 대한 초기치로 입력하는 y 를 Taylor expansion으로 함께 고려하게 되면, $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_M$ 과 \bar{x}/y 를 미지수로 가지는 M 개의 (9)와 한 개의 (10)으로 정리되며, 이때 N 은 연료에 분자 형태로 포함 되어 반응에 참여하게 되는 성분들의 종류의 갯수이고, M 은 연소 반응에 참여하는 원자 종류의 갯수이다.

$$a_i \left(\frac{\bar{x}}{y} \right) + \sum_{j=1}^M r_{ij} \pi_j = b_i + \sum_{k=1}^N a_{ik} x_k \left(\frac{\Delta G_i}{RT} + \ln \frac{x_i}{x} \right) \quad (9)$$

$$\text{for } i=1, 2, \dots, M$$

$$\sum_{j=1}^M a_{ij} \pi_j = \sum_{i=1}^N x_i \left(\frac{\Delta G_i}{RT} + \ln \frac{x_i}{x} \right) \quad (10)$$

여기서 $a_j = \sum_{i=1}^N a_{ij} y_i$ 이고, $r_{jk} = r_{kj} = \sum_{i=1}^N (a_{ij} a_{ik}) y_i$ 이며, $j, k = 1, 2, \dots, M$ 이다. x_i 에 대한 초기값으로 y_i 를 추측하여 $\bar{y} = \sum_{i=1}^N y_i$ 가 된다.

이렇게 정리된 $M+1$ 개의 식들을 x_i 에 대해 정리하여 풀면 (11)과 같이 N 개의 식으로 정리된다.

$$x_i = -y_i \left(\frac{\Delta G_i}{RT} + \ln \frac{y_i}{y} \right) + y_i \left(\frac{\bar{x}}{y} \right) + \sum_{j=1}^M (\pi_j a_{ij}) y_j \quad (11)$$

$$\text{for } i=1, 2, \dots, N$$

따라서 이렇게 정리된 각 성분들의 x_i 를 구함으로써 원하는 최적해[9]를 구하게 된다.

3. 온도보정

연소 반응에 의해 발생되는 NOx들은 반응 온도에 따라 그 발생량이 큰 폭으로 변하게 되는 thermal NOx가 대부분이다. 즉, 연소 온도가 높게 되면 NOx의 양은 증가하고 낮으면 감소하게 된다. 따라서 연소 반응의 온도가 발생량 결정에 있어서 매우 중요한 역할을 하게 된다. 그러나 실제로 버너에서의 연소 온도를 결정하게 되는 불꽃 온도는 대부분 측정되지 않고 있으며 대략 1100°C로 가정하고 있다. 따라서 실제 연소 온도를 근사하게라도 알 수 있도록 하는 온도 보정[6]이 필요하다. 이 온도 보정은 연소 시에 각 연료가 가지는 열량의 합과 연소에 의해 배출되는 성분들의 평균 열용량 간의 관계를 (12)로 설정함으로써 구해질 수 있게 된다.

$$T_{comb} = \frac{\gamma \sum_{k=1}^K Q_k M_k}{C_{p,d,av} \sum_{i=1}^N x_i} + 273.15 \quad (12)$$

여기서,

- γ = 연소 반응기의 열효율
- M_k = 각각의 연료의 몰수
- Q_k = 각각의 연료의 연소열
- $C_{p,d,av}$ = 총생성물의 평균열용량

실제 계산에서는 앞의 목적 함수에 대해 구한 최적해를 이용하여 (12)로 온도 보정한 후 다시 목적 함수를

최소화하는 최적해를 구하여 그 차이가 최소가 되도록 계산 반복 연산을 행하여 연소 온도와 반응 후 생성물의 양을 구할 수 있게 된다.

이러한 이론을 바탕으로 대기 오염물 발생 예측 모델을 구축하고 실제 계산하는 과정의 순서에 따라 이루어지게 된다.

- Step 1 : 온도에 대한 Gibb's 자유 에너지 계산
- Step 2 : 각 연료별 투입량(사용 예정량) 입력
- Step 3 : 이론 공기량 계산
- Step 4 : 각 연료의 성분들의 구성량 계산
- Step 5 : 연소 온도 설정 및 Gibb's 자유 에너지 계산
- Step 6 : 초기치 설정
- Step 7 : Gibb's 자유 에너지 최소화 방법에 의한 각 성분별 발생량 계산
- Step 8 : 결과출력
- Step 9 : Step 2로부터 다음의 연료 투입량에 대해 반복 수행

V. 결과

오염물 발생 예측 모델은 열역학적 법칙을 이용한 Gibb's 자유에너지 최소화법이용하여 구축하였다. 이들 모델에 입력하는 입력치로는 현재의 연료 사용량과 연료의 각 구성 성분들의 성분비 검사치 등이고, 결과 출력은 이들 예측 모델의 결과에 의한 오염물 배출 예측량을 5분 단위의 시간 간격으로 계산하여 화면에 출력하게 된다.

이렇게 구축한 오염 물질 예측 모델의 적정성을 검토하기 위해 실제 연료 사용량 data로부터 앞의 방법으로 계산되는 Gibb's 자유 에너지 최소화법에 적용하여 계산되는 결과와 그 연료 사용량에 의해 발전소에서 실제 발생되었던 오염물 배출량 측정치들을 비교한 것을 SOx에 대해서 그림 4에 보였고, NOx에 대한 것이 그림 5이다.

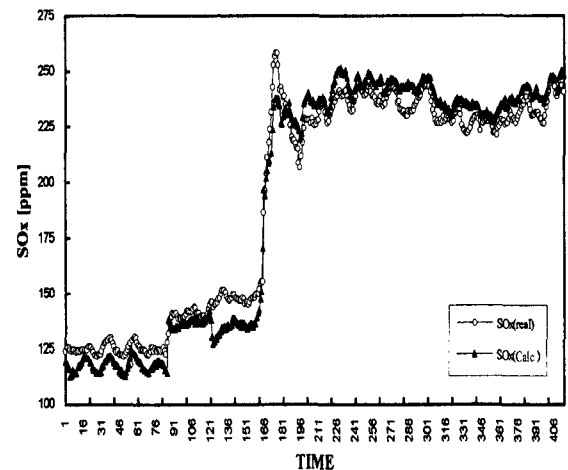


그림 4. 예측 모델에 의한 SOx 발생량 예측 결과.
Fig. 4. Prediction result for SOx emission.

여기서 SOx의 양은 SO2와 SO3의 양을 합하여 ppm단위로 환산한 것이고, NOx는 NO2와 NO3의 양을 합하여 ppm단위로 환산한 것이다. 그림에서 보는 바와 같이 매우 적절히 예측하고 있음을 알 수 있다.

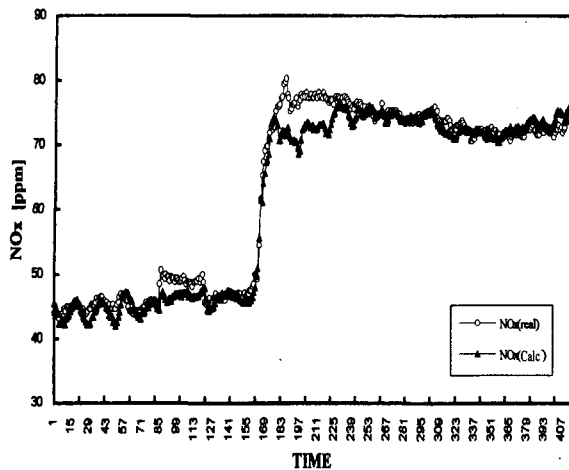


그림 5. 예측 모델에 의한 NOx 발생량 예측 결과.
Fig. 5. Prediction result for NOx emission.

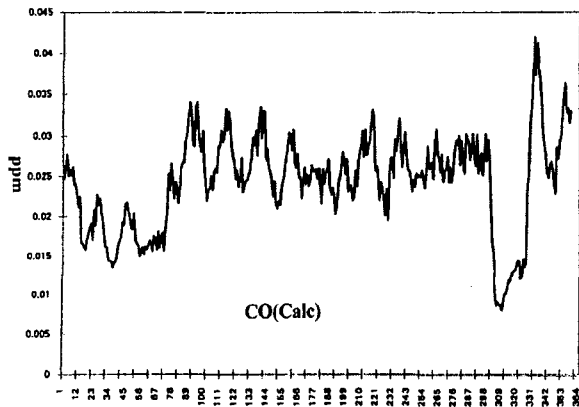


그림 6. 예측 모델에 의한 CO 발생량 예측 결과.
Fig. 6. Prediction result for CO emission.

그림 6과 그림 7에서는 CO와 CO₂의 발생량을 예측한 것으로서, CO는 ppm단위이고 CO₂는 %단위이다. 그런데, CO와 CO₂에 대해서는 현재 발생량이 측정되고 있지 않기 때문에 실제 값과 비교하여 볼 수 없으나, SO_x와 NO_x에 대해 적절히 예측하고 있는 점에서 볼 때 적절한 계산 결과라 할 수 있을 것이다.

예측 모델의 적정성을 검토하기 위한 또 다른 방법으로서는 같은 실제 공정값을 이용하여 본 예측 모델로부터 계산한 결과와 상용 software인 ASPEN PLUS에 포함되어 있는 기능 중에서 본 모델과 같은 방법으로 계산하는 모듈인 RGIBBS 모듈을 이용하여 계산한 결과를 비교하여 보았으며 그 결과가 Table 3에서 볼 수 있다. 반응에 참여한 각 분자들은 반응 후 감소하거나 증가하게 되는데, ASPEN PLUS에서 연소 온도를 처음의 초기치 값이 변하지 않는다는 가정 하에서 결과를 계산하기 때문에, 실제 측정된 초기치 온도와 예측모델에서 얻은 연소온도에서 각각 실행하여 보았다. 본 예측 모델과 ASPEN PLUS와의 결과 값이 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 그러나 ASPEN PLUS의 경우 어느 시스템이나 적용할 수 없고, TMS와 같은 시스템에도 적용이 불가능하지만, 본 예측 프로그램은 공정 조건이 변하는 실제 현장에 직접 적용

할 수 있고, TMS에도 적용할 수 있는 잇점이 있다.

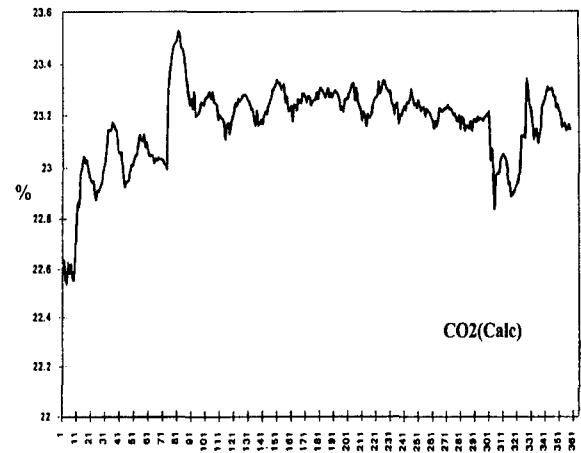


그림 7. 예측 모델에 의한 CO₂ 발생량 예측 결과.
Fig. 7. Prediction result for CO₂ emission.

표 3. 상용 S/W와 예측모델과 비교표.

Table 3. Comparative table between presented model and commercial S/W.

[Kmol/Hr]	입력값	ASPEN PLUS-1	ASPEN PLUS-2	본 예측 모델
C	214.704	0	0	0.000000
O ₂	2243.64	290.799	292.6402	300.294973
H ₂	241.533	0	0	0.000038
S ₂	0.652318	0	0	0.000000
N ₂	12647.9	12646.3	12647.505	12678.78
CO	2137.62	0.0200605	0.00026029	0.000255
CO ₂	1698.79	4325.31	4325.329	4325.32
CH ₄	268.496	0	0	0.000000
C ₂ H ₄	2.85992	0	0	0.000000
H ₂ S	0.0433101	0	0	0.000000
H ₂ O	0	784.289	784.288	784.281331
NO	0	3.21784	0.7858733	0.800697
NO ₂	0	0.00723453	0.00421549	0.004308
SO ₂	0.923046	2.24759	2.177922	2.173296
SO ₃	0	0.0234050	0.0930698	0.097632
온도[K]	1373	1373	1166.5815	1166.5815
SOx[ppm]	127.5	125.802	125.801	125.5228
NOx[ppm]	45	178.653	43.7671	44.495691

위의 연구로 구축된 연료 사용량 예측 모델과 오염물 발생량 예측모델을 하나의 프로그램으로 묶어 현장 data를 이용한 simulation 프로그램을 작성하였다. 이 프로그램에서는 실제 현장에서의 연료 사용값을 온라인으로 입력받는 대신에 이전의 연료 사용량 data를 현재의 순시치 사용량으로 가정하여 그로부터 향후 2시간 동안 사용될 연료 사용량을 예측하고 또한 이로서 발생될 오염물

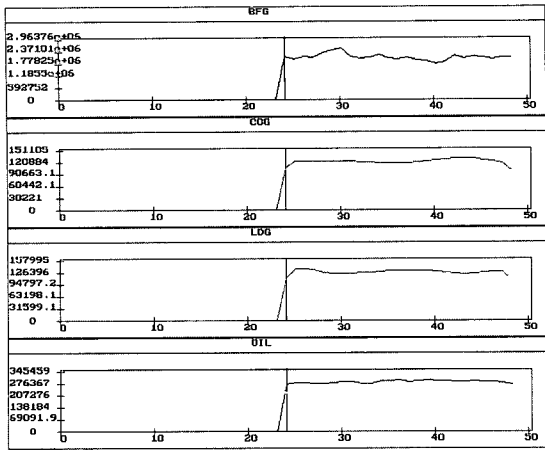


그림 8. 연료 사용량 예측 화면.
Fig. 8. Screen of fuel usage estimation.

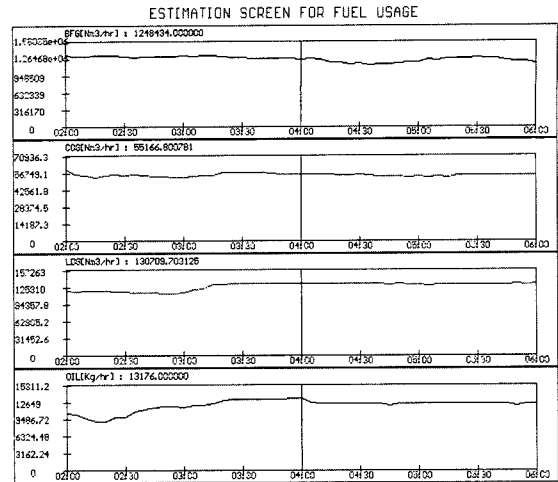


그림 11. 예측된 연료 사용량에 따른 대기 오염물 발생 예측 화면.
Fig. 11. Screen of pollutant emission from estimated fuel usage.

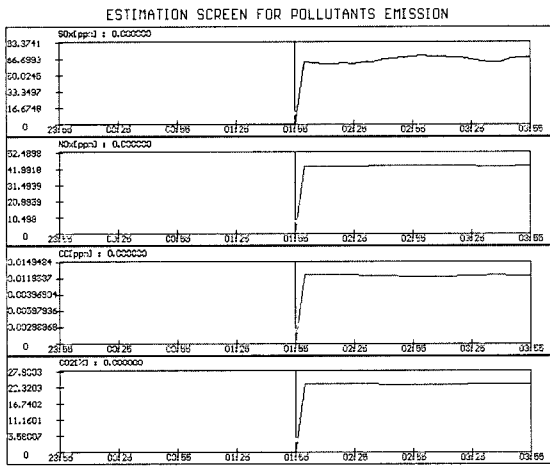


그림 9. 연료 사용량 변화에 따른 대기 오염물 배출 예측 화면.
Fig. 9. Screen of pollutant emission from estimated fuel usage.

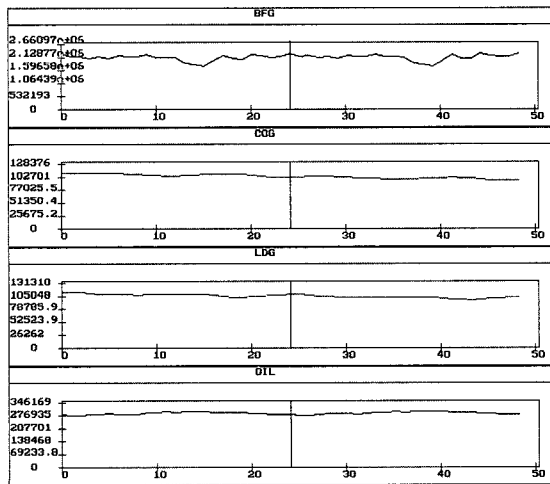


그림 10. 연료 사용량 예측 화면.
Fig. 10. Screen of fuel usage estimation.

질의 양을 예측하여 화면에 그래프로 나타내도록 하고 있다. 동시에 과거 2시간 동안 사용된 연료량과 오염물 발생량도 함께 보여주도록 구성되어 있다. 그 결과를 화면에 보인 것이 그림 8~11이다.

그림 8은 향후 2시간 동안의 연료 사용량을 예측한 것이고, 그림 10은 현재 시각에서 과거 2시간 동안 사용된 연료 사용량과 향후 2시간 사용될 연료량을 예측한 것을 그래프로 화면에 보인 것으로 과거치는 실적치이고, 향후치는 예측치이다. 그림 9와 그림 11도 그 시간에서의 연료 사용량으로부터 계산되는 오염물질 발생량에 대한 것으로 연료 사용량과 마찬가지로 그림 9는 2시간 분의 예측치이고, 그림 11은 과거 실적치와 향후 예측치를 화면에 함께 보인 것이다.

VI. 결론

본 연구에서는 환경 파괴 효과가 큰 대기 오염물질들인 SOx, NOx, CO, CO₂ 등을 다량으로 배출하고 있는 발전소에서 대기 오염물질들의 배출량을 직접 측정치 않고도 예측 계산할 수 있도록 하는 대기 오염물질 배출 예측 모델을 열역학적 관점에서 유도되는 수식들을 이용한 Gibb's 자유에너지 최소화법을 이용하여 예측할 수 있었다. 이렇게 개발된 예측 모델을 중유 발전소와 LNG 발전소, 대규모 장치 산업체 소재 자체 발전소 등에 적용 가능하며 실제로 개발된 예측 모델이 대기 오염물 발생량 측정치와 매우 유사하게 계산해 념을 확인할 수 있었다. 개발된 예측 모델을 통하여 현재 공정의 안정성을 기대할 수 있고, 또한 직접적인 확인없이 연들의 센서의 성능 상황등을 알 수 있다. 또한 오염물 배출 공정에 대해 오염물 배출량을 결정하는 주요 변수들인 연료 사용량 정보를 사용자의 필요에 따라 입력하여 이에 따라 발생이 예상되는 대기 오염물질의 배출량을 예측할 수 있게 됨으로 인해 대기 조건을 고려하여 대기오염의 피해를 최소화하는 방향으로 운전할 수 있도록 조업 조건

을 결정하는 도구로서 사용될 것이다.

참고문헌

- [1] C. W. White and W. D. Seider, "Computation of phase and chemical equilibrium," *AIChE Journal*, vol. 27, no. 3, pp. 466-471, May, 1981.
- [2] W. B. White, S. M. Johnson and G. B. Dantzig, "Chemical equilibrium in complex mixtures," *Journal of Chemical Physics*, vol. 28, no. 5, pp. 751-755, May, 1958.
- [3] Y. B. Zeldovich, P. Y. Sadovnikov and D. A. Frank-Kamenetski, *Oxidation of Nitrogen in Combustion*, Academy of Sciences, USSR, Moscow-Leningrad, 1947.
- [4] *Irvin Glassman Combustion 2nd. edition*, pp. 329, 1986.
- [5] C. P. Fenimore, *13th Symp(Int.) Combustion*, pp. 373, 1971.
- [6] W. R. Smith, R. W. Missen, *Chemical Reaction Equilibrium Analysis*, Wiley-Interscience, 1982.
- [7] W. R. Smith, J. M. Van, H. C. Ness, *Introduction to Chemical Engineering thermodynamics*, McGraw-Hill, 1987.
- [8] G. V. Reklaitis, A. Ravindran, K. M. Ragsdell, *Engineering Optimization Methods and Applications*, Wiley-Interscience, 1983.
- [9] R. L. Burden, J. D. Faires, *Numerical Analysis*, PWS-Kent Publishing, 1989.
- [10] M. Yoshinaga, T. Kubo, *Sumitomo Metals*, vol. 29, no 4, 1977.
- [11] R. W. Young, *Ironmaking and Steelmaking*, vol. 6. no. 321, 1977.



김민석

1991년 포항공대 화공과 졸업. 동대학원 석사(1993), 동대학원 박사(1997). 현재 LG-EDS 시스템, 관심 분야는 공정 합성 및 최적화.



김경희

1993년 홍익대학교 화공과 졸업. 포항공대 환경공학부 석사과정(1996), 관심분야는 환경시스템.



이인범

1977년 연세대학교 화공과 졸업. KAIST 석사(1979), 미국 Purdue대 박사(1987). 현재 포항공과대학교 화학공학과 교수, 관심 분야는 공정 합성, 최적화 및 자동화.