

석탄가스 선회난류 연소기의 화염구조 및 공해물질 배출특성 해석

이 정원¹⁾, 강 성모²⁾, 김 용모³⁾

Numerical Study on Flame Structure and Pollutant Formation for Syngas Turbulent Nonpremixed Swirl Burner

Jeongwon Lee, Sungmo Kang, Yongmo Kim

Key words : Syngas(석탄가스), Turbulent nonpremixed swirling flame(선회유동 난류비에혼합 화염), Eulerian Particle Flamelet Model(EPFM), Turbulent-chemistry interaction(난류와 화학반응의 상호작용), Full NOx chemistry(NOx 생성반응식)

Abstract : The present study numerically investigate the effects of the Syngas chemical kinetics on the basic flame properties and the structure of the Syngas diffusion flames. In order to realistically represent the turbulence-chemistry interaction and the spatial inhomogeneity of scalar dissipation rate, the Eulerian Particle Flamelet Model(EPFM) with multiple flamelets has been applied to simulate the combustion processes and NOx formation in the syngas turbulent nonpremixed flames. Due to the ability for interactively describing the transient behaviors of local flame structures with CFD solver, the EPFM model can effectively account for the detailed mechanisms of NOx formation including thermal NO path, prompt and nitrous NOx formation, and reburning process by hydrocarbon radical without any ad-hoc procedure. validation cases include the Syngas turbulent nonpremixed jet and swirling flames. Based on numerical results, the detailed discussion has been made for the sensitivity of the Syngas chemical kinetics as well as the precise structure and NOx formation characteristics of the turbulent Syngas nonpremixed flames.

Nomenclature

Y_i : mass fraction of species i
 Z : mixture fraction
 P : probability density function
 ρ : density
 χ : scalar dissipation rate

subscrip

st : stoichiometry

은 높은 가격 때문에 석탄이나 바이오매스 등과 같은 연료들의 가스화 전처리를 통한 합성가스를 얻는 지속적인 연구가 중요하게 되었다. 여기서 얻어지는 합성가스는 다양한 조성을 가지며 EU나 미국, 중국 등의 나라에서 관심있게 연구를 진행 중에 있으며 발전용 가스터빈에 연료로서 응용하는 많은 연구가 계속되고 있다¹⁾. 이에 따라 최근에 합성가스에 대한 고온, 고압 상태에서의 화학 반응기구^{2),3)}에 대한 연구결과가 많이 나와 있고, EU의 HEGSA(High Efficiency Gas-turbine Syngas Application) 프로젝트에 의해 가스터빈에 적용하기 위한 연구⁴⁾가 진행 중이다. 본 논문에서는

1. 서 론

천연가스나 석유와 같은 연료들은 기존의 발전에 많이 사용되어 왔다. 하지만 이러한 연료들

1) 한양대학교 대학원
2) 한양대학교 기계기술연구소
3) 한양대학교 기계공학부
E-mail : ymkim@hanyang.ac.kr
Tel : (02)2220-0428 Fax : (02)2297-7690

최근에 제안된 화학반응기구에 대한 층류화염속도와 난류 제트화염의 구조 해석을 통해 타당성을 비교 검증하였고, 이를 바탕으로 난류 선회연소기에서의 연소특성과 공해물질 배출 특성을 해석하여 보았다.

2. 물리 및 수치 모델

2.1 난류 연소 모델

층류화염면내의 화학종 및 에너지를 지배하는 방정식을 혼합분율(mixture fraction) Z 에 대해 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{1}{2 c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \chi \frac{1}{2 c_p} \sum_{k=1}^K h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \frac{1}{\rho c_p} \left(\sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot q_{rad} \right) \quad (2)$$

이때, 공간상에서 혼합분율상으로 좌표변환을 하게 됨에 따라 나타나게 되는 매개 변수인 스칼라소산율 χ 는 다음과 같이 나타낼 수 있으며, 층류화염면내의 분자단위 확산에 대한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다.

$$\chi \equiv 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \approx \chi_{st} f(Z) = \chi_{st} \frac{Z^2 \ln Z}{Z_{st}^2 \ln Z_{st}} \quad (3)$$

초기에 RIF 모델은 전체 해석영역에 대한 국소화염구조가 하나의 층류화염면(single RIF)으로 대표된다고 가정하였으나, Barths⁵⁾ 등은 주어진 시간에서 공간상으로 불균일하게 존재하는 스칼라소산율의 분포를 고려할 수 있도록 확장한 EPFM (Eulerian Partilce Flamelet Model) 모델⁵⁾을 사용하여 해석하였다. EPFM에 대한 상세한 내용은 참고문헌 [9,10]에 자세히 기술되어 있다.

3. 결과 및 고찰

3.1 화학반응기구에 따른 층류화염속도

Gri-mech 2.11⁷⁾과 Law²⁾와 Ranzi³⁾등에의 제안된 화학반응기구의 타당성을 검증하기 위하여 다양한 연료조성과 압력에 대하여 층류화염속도를 실험치와 비교하여 보았다.

Fig. 1은 1기압에서 세가지 화학반응기구의 당량비에 따라 각기 다른 연료조성을 가질때의 층류화염속도를 실험치와 비교한 것이다. Fig. 1에서 보는 바와 같이 C. K. Law와 Ranzi의 화학반응기구는 모든 당량비와 조성에 대해서 실험치와 근접한 결과를 보여준다. 하지만 Grimech의 경우에는 당량비 1이하인 영역을 제외하고는 모두 과대예측하고 있다는 것을 보여준다.

Fig. 2는 2기압일 때의 세가지 화학반응기구에 따른 층류 화염속도를 나타낸 것이다. 2기압일 때에도 1기압의 경우와 같은 결과를 보여준다. 이는 합성가스에 대한 해석을 할 때, 특히 수소의 함량이 높은 경우에는 Grimech는 적절하지 못하다는 것을 알 수 있다.

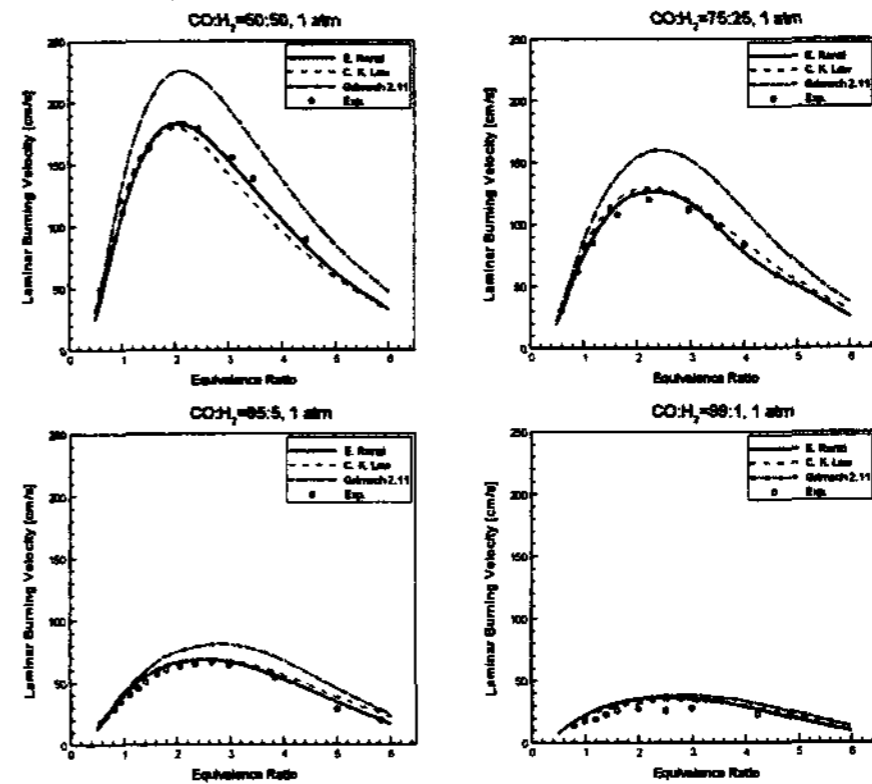


Fig. 1 Effect of syngas kinetics on laminar flame speed for 4 different compositions at atmospheric pressure

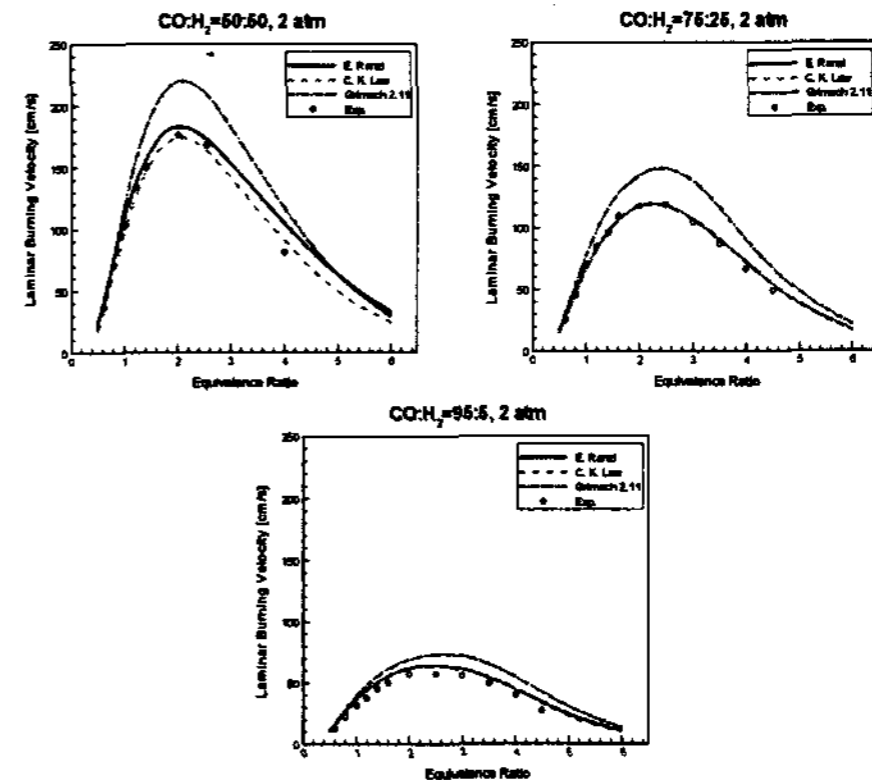


Fig. 2 Effect of syngas kinetics on laminar flame speed for 3 different compositions at P=2.0 atm

3.2 Syngas 난류 제트 화염에서 화학반응기구의 영향

위의 화염면 구조를 이용하여 Sandia의 CHN 제트화염^{6),11)}에 대하여 세가지 화학반응기구의 영향을 비교하여 보았다. 연료의 조성은 CO:H2:N2 = 40:30:20 이고, 연료의 속도는 76 m/s, 동축공기는 0.75 m/s이다. 연료노즐의 직경은 Df=4.58 mm이고 공기는 연료노즐 직경의 3배이다.

Fig. 3(a)는 혼합분율, 혼합분율의 변동량, 온도의 중심선 분포를 나타내고 Fig. 5(b)는 OH와 NO의 질량분율의 중심선 분포를 각각 실험과 비교한 것이다.

Fig. 3(a)에서 볼 수 있듯이 혼합장은 세가지 화학반응기구 모두 동일하지만 온도의 예측에서는 Ranzi의 화학반응기구가 가장 높게 예측하였다. Fig. 3(b)에서는 OH와 NO의 분포는 Ranzi의 화학반응기구가 가장 실험과 근접하게 예측하였으며 C. K. Law와 Grimech은 모두 과대 예측하였다. 특히 NO의 경우는 큰 차이는 NOx 화학반응기구와 큰 관계가 있는 것으로 생각된다. Grimech을 제외하고 각 화학반응기구에 잘 어울리는 NOx 생성기구와 연계한다면 더 좋은 결과를 줄 것으로 생각된다.

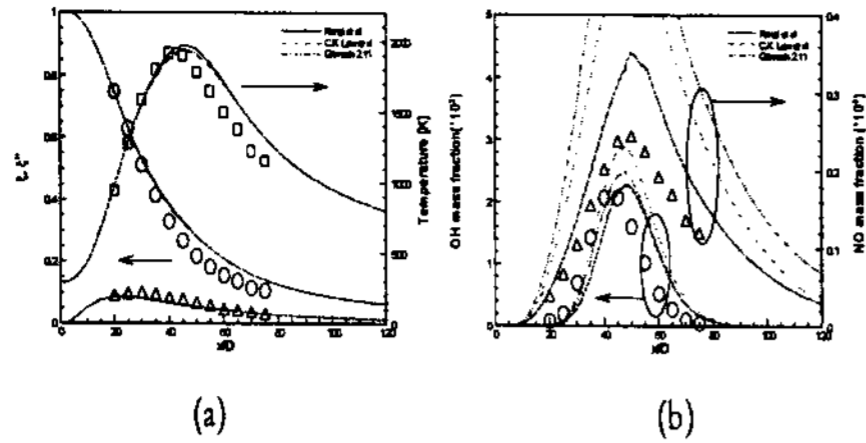


Fig. 3 Centerline profiles of mixture fraction, variance of mixture fraction, temperature(a) and mass fraction of OH and NO(b) for turbulent syngas jet flame at 1 atm

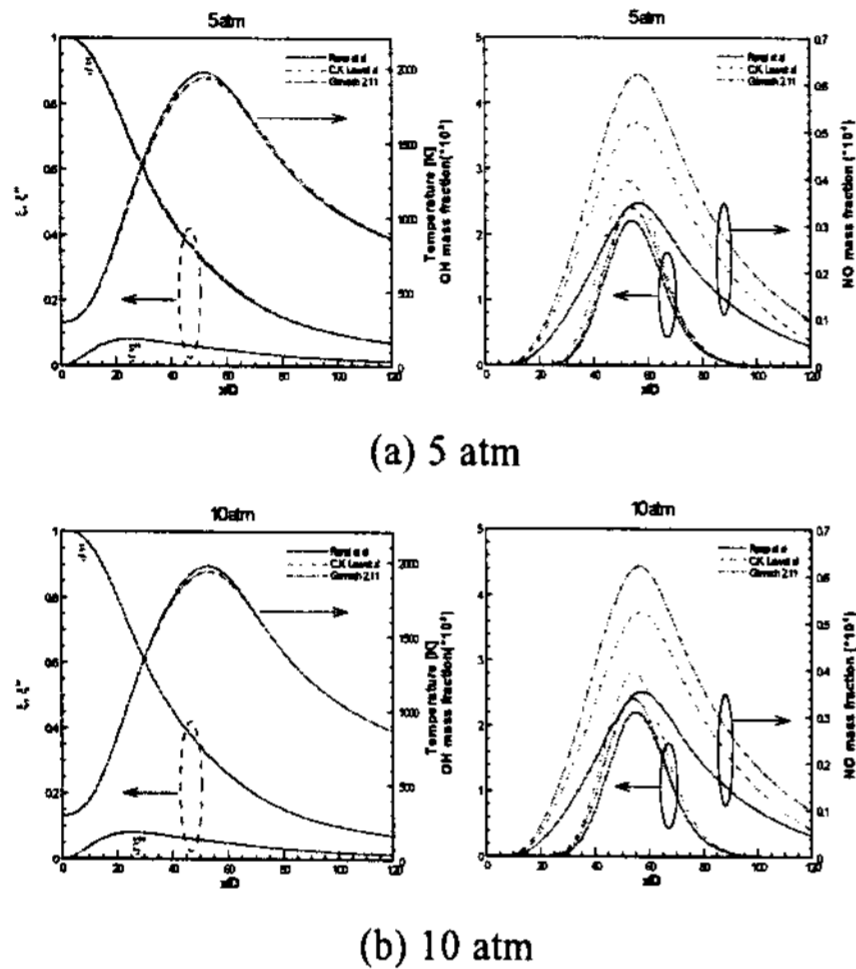


Fig. 4 Centerline profiles of mixture fraction, variance of mixture fraction, temperature and mass fraction of OH and NO for turbulent syngas jet flame at 5, 10 atm

Fig. 4은 각각 압력이 5기압, 10기압일 때에 중심선을 따라 혼합분율, 온도, OH와 NO의 질량 분율을 비교한 것이다. 압력이 상승함에 따라 세 가지 화학반응기구 모두 chemical dissociation이 감소하여 온도가 상승하며, OH와 NO의 생성이 줄어든 것을 확인할 수 있다. 압력이 상승했을 때의 특성은 공통적으로 나타나지만 압력에 대한 민감도는 상대적으로 다르다는 것을 보여준다.

3.3 Syngas 난류 선회 연소기의 해석

EU의 HEGSA 프로젝트에 의해 DLR에서 실험한 석탄가스 난류 선회연소기⁷⁾의 Geometry 및 입구조건, axial vane과 radial swirler는 Fig. 5에 상세히 나타나 있다.

Table 2는 연료의 조성과 연소기의 운전조건을 나타낸다. 연소기의 공연비는 2로 고정하였다.

본 연구에서는 M6의 10 kW의 경우에 대해 Grimech 2.11과 Ranzi의 화학반응기구를 이용하여 난류 선회 연소기 내의 화염구조와 공해물질 생성특성을 알아보려고 한다.

Table 2 Operating Conditions for HEGSA swirl burner

	m6	m7	m6	m7
Load[kW]	10	10	20	20
Pres.	1-1.15 bar			
CO[g/s]	0.581	0.344	1.162	0.687
H2[g/s]	0.029	0.017	0.058	0.034
CH4[g/s]	-	0.074	-	0.148
N2[g/s]	1.256	0.745	2.519	1.490
Tair	293 K / 493 K			
Tfuel	293 K			

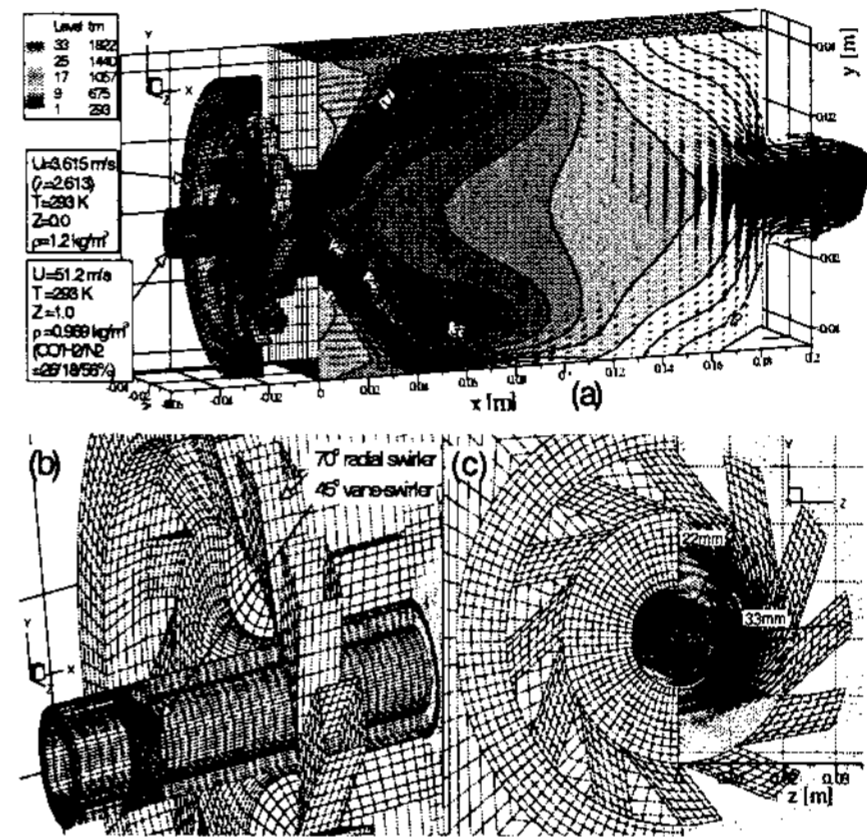


Fig. 5 DLR HEGSA swirl combustor: (a) geometry and inlet condition, (b) axial vane, (c) radial swirler

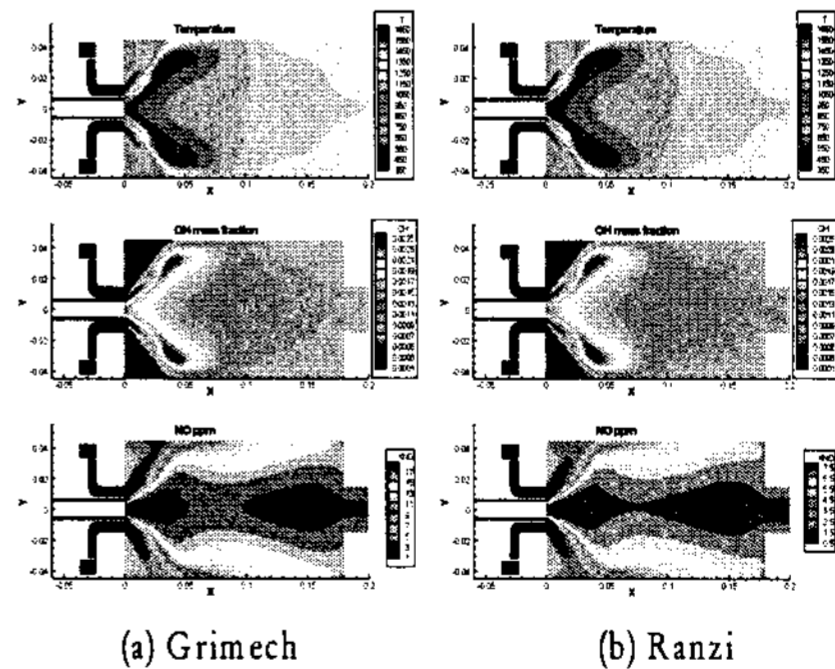


Fig. 6 Contour of Minor species in case of M6, 10 kW

Fig. 6은 온도장과 OH, NO의 희박화학종의 분포를 보여준다. 온도장과 OH 활성종의 분포는 두 화학반응기구가 유사한 분포를 보여준다. 하지만 Ranzi의 결과는 Grimech의 결과보다 조금 더 높은 최대온도와 최대 OH 농도를 나타내는 차이가 있다. NO의 분포는 Grimech의 결과가 2배정도 과대예측하고 있음을 볼 수 있다. 이는 위의 제트 화염의 결과와 마찬가지로 결과로 볼 수 있다. 이러한 NO 분포의 차이는 화학반응기구와 NOx 생성메커니즘의 차이로 기인된다. 이를 통하여 합성가스의 반응유동에는 Grimech 보다 Ranzi의 화학반응기구가 더 적절하다고 할 수 있다.

Fig. 7은 M6의 10 kW와 20 kW의 OH분포를 계산한 결과와 실험에서 OH-PLIF의 이미지와 비교한 결과이다. 두 경우에서 OH의 분포는 잘 예측되었다고 할 수 있다. 그러나 계산결과의 입구 중심의 높은 OH 농도는 벽면에서의 열전달을 계산에 고려하지 않았기 때문에 화염이 벽면에 붙어있는 것으로 예측하였기 때문이라고 사료된다.

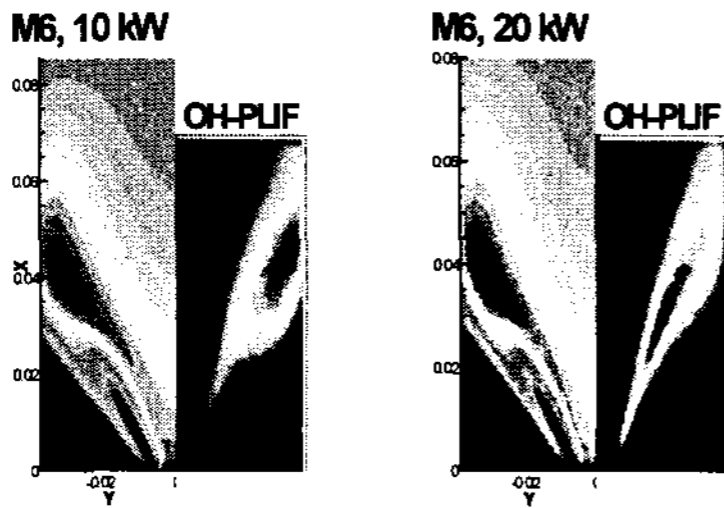


Fig. 7 Comparison of prediction and OH-PLIF for M6

4. 결 론

본 연구에서는 syngas의 kinetics에 대하여 층류화염속도와 확산화염구조에 대해서 비교해보고, 난류제트화염을 통해서 타당성을 검증하여 보았으며, 이를 바탕으로 syngas 난류 선회 연소기에 대하여 Eulerian Particle Flamelet Model을 적용하여 수치해석을 해보았다. 이에 대한 결론은 다음과 같다.

1. 층류화염속도에 대한 세가지 화학반응기구 중에 Grimech를 제외한 Ranzi와 C. K. Law의 화학반응기구는 모두 실험치에 일치하는 결과를 주었으며 이는 syngas의 경우에는 특성이 고려된 화학반응기구를 사용해야 한다는 것을 알 수 있었다.

2. 난류 제트화염을 통한 화학반응기구의 검증에서 Ranzi의 화학반응기구가 가장 실험에 근접한 결과를 주었다. 그러나 세가지 화학반응기구 모두 NO의 예측에서는 과대예측하는 특성을 보여주었으며, 압력이 증가함에 따라 chemical dissociation이 감소하여 NO의 생성이 줄어드는 특성을 알 수 있었다.

3. 난류 선회 연소기의 수치해석을 통하여 화학반응기구가 같은 유동장 및 혼합장을 가지는 화염장에 주는 영향을 확인할 수 있었다. 이를 통하여 syngas의 해석에 있어서는 Ranzi의 화학반응구조가 더 적합함을 알 수 있다.

후 기

본 연구는 “신재생 에너지 기술 개발 사업” 일환으로 수행되었습니다.

References

- [1] F. Bonzani, P. Gobbo, 2007, GT2007-27114, ASME Turbo Expo 2007, ASME
- [2] H. Sun, S. I. Yang, G. Jomaas, C. K. Law, 2007, "High-pressure laminar flame speeds and kinetic modeling of carbon monoxide/hydrogen combustion", Proc Comb Institute, Vol 31, pp 439-446
- [3] A. Frassoldati, T. Faravelli, E. Ranzi, 2007, "The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 1: Detailed kinetic modeling of syngas combustion also in present of nitrogen compounds", Int J Hydrogen Energy
- [4] FP5 Project NNE5-2001-00644 : High Efficient Gas Turbine with Syngas Application (HEGSA), Progress Report, 2004
- [5] H. Barths, C. Hasse, G. Bikas, N. Peters, 2000, "Simulation of Combustion in Direct Injection Diesel Engines Using an Eulerian Particle Flamelet Model", Proc 28th Symp. Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1161-1168.
- [6] TNF Workshop website, <http://public.ca.sandia.gov/TNF/DataArch/SANDchn.html>
- [7] T. Kretschmer, H. Schultz, M. Tsurikov, B. Noll, M. Aigner, 2006, "Numerical Simulation of A Lab-scale Syngas Burner Using Complex Chemistry", 13th Int. Conference on Fluid Flow Technology, Budapest, Hungary
- [8] Grimech, http://me.berkeley.edu/gri_mech/
- [9] Seong-Ku Kim, 2001, "Studies on Detailed Structure and NOx Formation of Turbulent Nonpremixed Flames using Flamelet Models", Ph. D dissertation, Hanyang Univ.
- [10] Seong-Ku Kim, Sungmo Kang, Yongmo Kim, 2006, "Eulerian Particle Flamelet Modeling for Combustion Processes of Bluff-body Stabilized Methanol-Air Turbulent Flames", J. Mechanical science and Technology, Vol 20, No. 9, pp. 1459-1474
- [11] S. Kim, S. Kang, Y. Kim, 2001, "Flamelet Modeling for Combustion Processes and NOx Formation in the Turbulent Nonpremixed CO/H₂/N₂ Jet Flames", Combust. Sci. Tech., Vol 168, pp. 47-83