

석탄가스 난류비에혼합 화염장의 해석

이 정원¹⁾, 김 창환¹⁾, 김 용모²⁾

Numerical Analysis for the Detailed Structure of Syngas Turbulent Nonpremixed Flames

Jeongwon Lee, Changhwan Kim and Yongmo Kim

Key words : Syngas(석탄가스), Flame structure(화염구조), Dilution effect(희석효과), Two-mixture fraction model(이중 혼합분율 모델), Turbulent jet flame(난류제트화염)

Abstract : The present study numerically investigate the detailed structure of the syngas diffusion flames. In order to realistically represent the turbulence-chemistry interaction, the transient flamelet model has been applied to simulate the combustion processes and NO_x formation in the syngas turbulent nonpremixed flames. The single mixture fraction formulation is extended to account for the effects of the secondary inlet mixture. Computations are the wide range of syngas compositions and oxidizer dilutions. Based on numerical results, the detailed discussion has been made for the effects of syngas composition and oxidizer dilution on the structure of the syngas-air and syngas-oxygen turbulent nonpremixed flames.

1. 서론

H₂와 CO로 주로 구성된 Syngas의 연소특성¹⁾에 대한 연구결과는 잘 정립되어 있지 않으며 이러한 혼합물의 성능특성은 구성물의 전체적인 특성에 대한 지식으로부터 단순히 추론할 수 없다. 특히 CO와 H₂는 분명하게 다른 수송특성과 화염속도를 갖는다. 다음으로 상대적으로 질량기준으로 같은 양의 H₂에 비해 더 많은 발열을 하는 CO의 반응식은 H₂의 산화와 강하게 연관되어 있다. 예를 들면, $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$ 의 반응과정은 많은 조건 하에서 CO의 산화에 지배적인 역할을 한다. 그리고 H₂뿐만 아니라 wet-CO 연소의 주된 branching 반응은 $H + O_2 \rightarrow O + OH$ 로 되기 때문에 CO/air 화염에 H₂의 첨가는 혼합기의 화염속도의 증가를 가져온다.

또한 Syngas는 연료의 조성뿐만 아니라 희석의 다양성을 가진다. 예를 들면, CO₂의 조성은 일반적으로 1.6-30%까지 변화한다. 연료에서의 CO₂의 존재는 적어도 혼합물의 비열과 단열 화염온도, 화학 반응률, 그리고 복사 열전달에 의해 화염특성에 영향을 미친다. CO₂의 단위 몰당의 비열은 연료(H₂, CO)가 나타내는 비열보다 크기 때문에 CO₂의 첨가는 예열영역에서의 반응물의 온도와 단열화염온도를 낮추며 이로써 층류화염속도를 감소시킨다. 특히 CO₂는 공기보다 단위몰당 비

열이 크기 때문에, 같은 양의 공기에 의해 희석된 경우보다 더 단열화염온도와 층류화염속도를 낮추게 된다. 그러므로 CO₂ 희석 혼합물의 가연한계와 소염 신장율은 좁아지게 된다. CO₂ 희석의 또 다른 효과는 산소나 질소보다 더 효과적인 복사의 흡수와 방사체로써 CO₂의 증가된 복사 수준을 통해서 나타난다. CO₂의 희석은 화염으로부터의 복사손실로 인하여 화염 온도와 화염속도가 감소하게 된다²⁾.

Syngas는 많은 양의 H₂와 CO를 함유하고 있으며 화학 당량비 조건으로부터 천연가스에 비하여 완전연소를 위해 필요한 훨씬 작은 공기 체적 유량을 필요로 하기 때문에 Syngas의 화염 온도는 더욱 높게 된다. 또한 Syngas는 수소의 농도가 높기 때문에 큰 화염 속도와 짧은 점화 지연시간을 가진다. 이러한 Syngas의 특성 때문에 예혼합 연소에서 flashback이나 자발화를 피하기가 용이하지 않다. 이러한 화염안정성 문제를 해결하기 위해 Syngas 비에혼합 화염가스터빈 연소기를 이용하는 경우 질소(N₂), CO₂ 혹은 H₂O를 주입하여 화염 온도를 저감시켜 NO_x배출을 제어할 수 있다.

1) 한양대학교 대학원

2) 한양대학교 기계공학부

E-mail : ymkim@hanyang.ac.kr

Tel : (02)2220-0428 Fax : (02)2297-0339

본 연구에서는 석탄가스의 연료조성 및 N₂, CO₂, H₂O의 주입에 의한 희석이 Syngas 비예혼합 화염 가스터빈 연소기의 상세 화염구조 및 연소특성에 미치는 영향을 체계적으로 해석하였다.

2. 비단열 확산화염편 모델

본 연구에서는 난류비예혼합 화염장의 난류와 화학반응 및 NO_x를 포함한 공해물질 생성메커니즘을 제대로 나타내기 위하여 비정상 화염편 모델³⁾을 사용하였다. 열손실이 고려되어야 되는 경우에는 국부적인 엔탈피의 값은 혼합분을 만이 아니라 엔탈피 에너지 방정식에 추가적으로 의존되게 된다. 따라서 화학평형 모델을 이용하여 비단열 비예혼합 화염장을 예측하기 위해서는 화학평형 라이브러리는 반드시 모든 가능한 에너지 상태들에 대한 값들을 가지고 있어야 된다. 이를 위하여 열손실 또는 획득을 나타내는 추가적인 변수가 요구되어 진다. 본 연구에서는 평준화된 엔탈피 손실변수 접근법^{4), 5), 6)}을 이용하였으며, 아래와 같이 정의되어진다.

$$\zeta = \frac{h - h_{\min}}{h_{ad} - h_{\min}} = \frac{h - h_{\min}}{U(Z)} \quad (1)$$

여기에서 h_{ad} 는 단열상태의 엔탈피 그리고 h_{\min} 은 순간적으로 주위의 온도로 냉각되었을 때의 엔탈피로서 혼합물의 최저 엔탈피를 나타낸다. 따라서 엔탈피 손실변수 ζ 는 복사 또는 대류에 의한 국부 열손실들을 나타낸다. 이러한 열손실에 해당하는 무차원량은 엔탈피와 화학종 농도의 국부적인 값들로부터 얻어지게 된다. 이러한 방법을 이용하여 비단열 화학평형 데이터베이스가 단열 상태로부터 최대 냉각된 상태까지 구성하였다.

3. 수치결과 및 토의

3.1 Syngas 상세화염구조 해석

Syngas 난류확산화염의 구조를 알아보기 위해서 다양한 연료조성과 희석가스의 조성에 따른 상세화염구조를 계산하여 보았다. 산화제에 따른 영향을 비교를 위하여 순산소연소시의 화염구조와 공기를 산화제로 하였을 때의 화염구조를 계산하였다.

본 연구에서 사용한 상세화학반응기구는 CH₄에 대해서는 Grimech 3.0⁷⁾을 사용하였고, H₂/CO에 대해서는 Warnatz이 제안한 반응기구⁸⁾를 사용하였다. Fig. 1은 산화제의 종류에 따른 다양한 syngas 조성에 대한 화염구조를 나타내고 있다. 위의 다섯 경우 모두에서 순산소-석탄가스 연소를 하는 경우가 공기-석탄가스 연소에 비하여 화염온도가 크게 증가하고 혼합분을 공간에서의 화염폭이 훨씬 두꺼워 짐을 알 수 있다. 또한 석탄가스의 조성에서 H₂에 비하여 CO의 함량이 상대적으로 높을수록 혼합분을 공간의 화염폭이 더 두꺼워질뿐만 아니라 최대화염온도를 갖는 화학당량비 조건에서의 혼합분율이 점점 증가하게 된다.

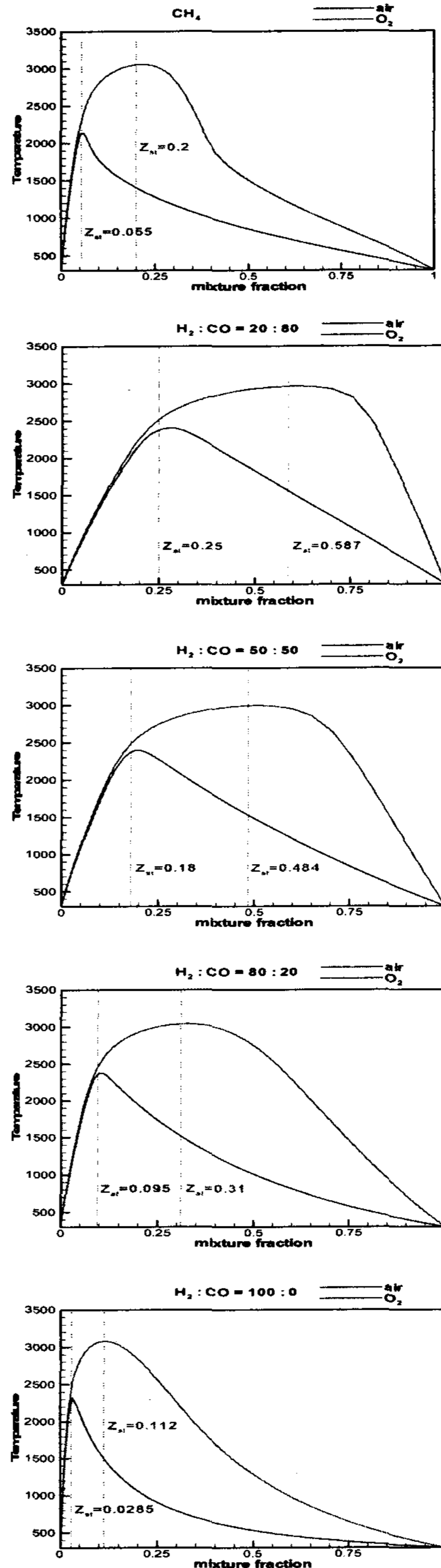


Fig. 1 Flamelet structure of methane, hydrogen, and syngas with three compositions.

메탄화염에 비해서 석탄가스화염이 혼합분을 공간의 화염폭이 더 두껍고 화염온도가 높게 됨을 알 수 있다.

Fig. 2에서는 산화제에 CO₂, H₂O, 그리고 N₂ 희석가스가 순산소-메탄 및 순산소-석탄가스 화염 구조에 미치는 영향을 비교한 것이다. 세 가지 희석가스의 희석량이 늘어남에 따라 syngas와 CH₄의 최대 화염온도가 현저히 낮아지고 있으며 최대 화염온도에 대응하는 화학당량비 조건에서의 혼합분율은 점점 감소하게 됨을 알 수 있다. 세 가지의 희석가스중 CO₂의 경우가 비열이 가장 크기 때문에 희석으로 인한 화염온도의 저감이 가장 크게 나타났으며 다음으로는 H₂O, 그리고 N₂ 순으로 희석에 의한 화염온도 저감효과가 낮다. 또한 화학당량비 조건에서의 혼합분율은 세 가지의 희석가스중 CO₂의 경우가 분자량이 가장 크기 때문에 희석으로 인한 희석으로 인하여 가장 크게 감소하였으며 다음으로는 N₂, 그리고 H₂O 순으로 희석에 의한 화학당량비 조건에서의 혼합분율의 저감효과가 낮다.

3.2 석탄가스 난류 비예혼화염 화염장 해석

난류화염장에서의 syngas의 조성과 희석가스에 의한 영향을 알아보기 위해 Sandia 질소 희석 수소 제트화염⁹⁾에서 연료조성과 희석가스의 추가 조건을 수정하여 난류 비예혼합 화염에서의 특성을 계산하여 보았다. 연료 노즐의 직경(d_f)은 8 mm이고 연료 노즐의 속도(U_f)는 34.5 m/s이다. 산화제 속도(U_{air})는 0.3 m/s이다. 연료의 조성은 위에서 기술한 화염편 라이브러리(20%H₂/80%CO, 50%H₂/50%CO, 80%H₂/20%CO)에 대응되게 채택하였으며, 산화제는 공기와 공기량의 30%의 CO₂로 희석한 두 가지 경우에 대하여 계산을 수행하였다.

Fig. 3는 산화제로 공기만을 사용하였을 경우에 각각 연료조성에 따른 제트화염의 온도장을 나타낸 것이다. 석탄가스 연료중의 CO의 함량이 늘어남에 따라 고온영역이 줄어들고 화염길이 짧아짐을 알 수 있으며 이는 화학당론적 혼합분율이 증가하는 것에 직접적으로 기인한다.

Fig. 4에서는 석탄가스(80%H₂/20%CO)와 공기의 부피의 30%에 CO₂로 희석한 산화제를 이용한 경우의 난류 비예혼합화염의 온도장과 NO질량분율 분포를 도시하였다. 산화제에 CO₂가 희석됨으로 인해서 화염장의 온도가 더 낮아지고 있으며 고온영역과 화염길이 증가하게 됨을 알 수 있다. 또한 이러한 현상들은 산화제의 희석효과로 인한 화학당론적 혼합분율이 감소하는 것에 직접적으로 영향을 미친다. Fig. 4(b)에서 보는 바와 같이 온도에 민감한 thermal NO의 경우 상대적으로 긴 화학특성시간 때문에 고온영역으로부터 약간 하류영역에서 크게 분포하고 있음을 알 수 있다. Fig. 4는 이 때의 NO의 질량분율의 분포를 나타낸 것이다. 희석하지 않은 경우(fig. 3)와 비교해보면 희석된 경우에는 화염온도의 감소로 인해 NO의 농도도 감소하고 있다는 것을 알 수 있다.

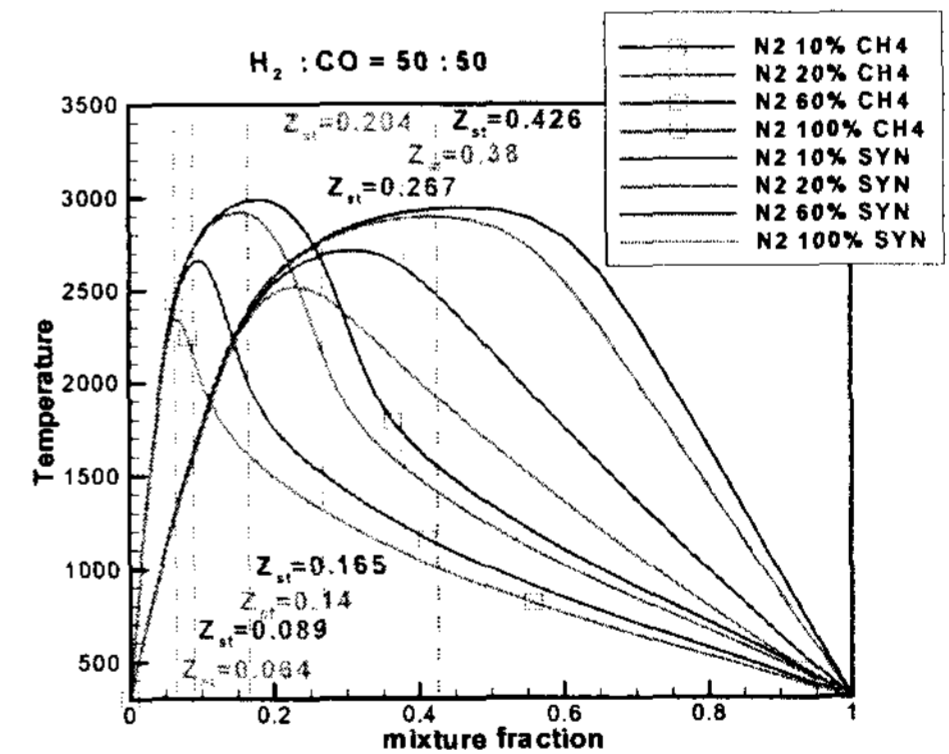
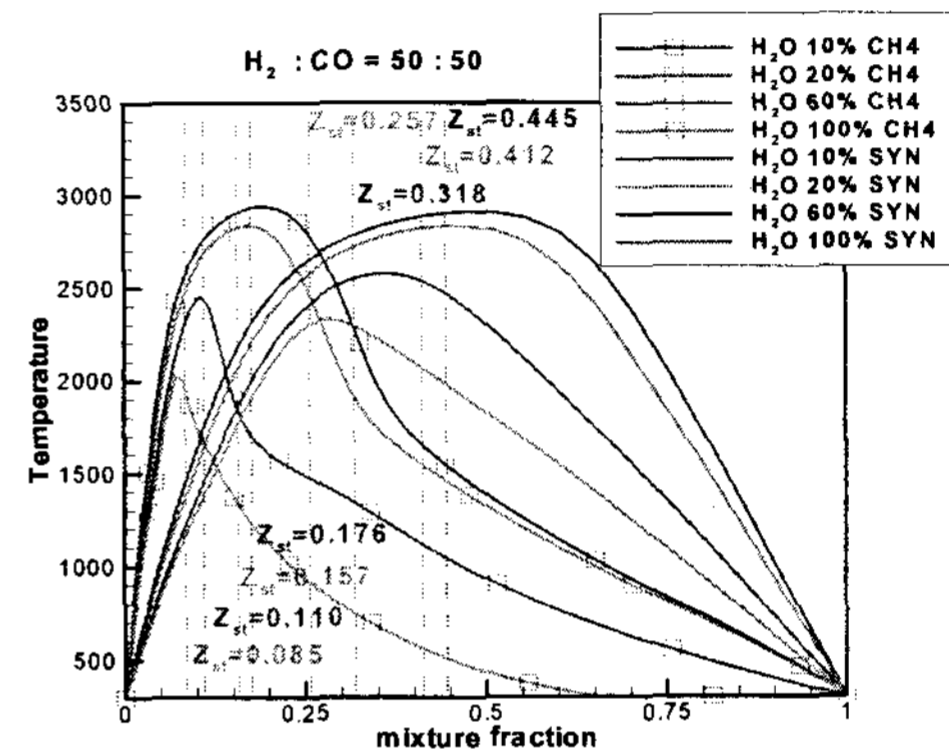
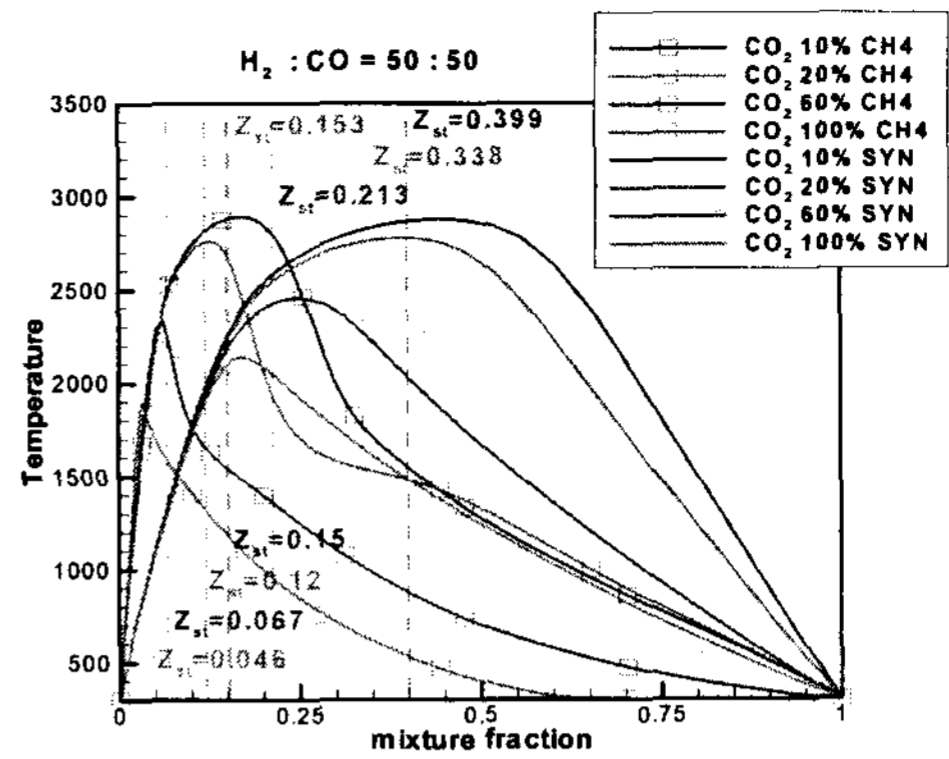
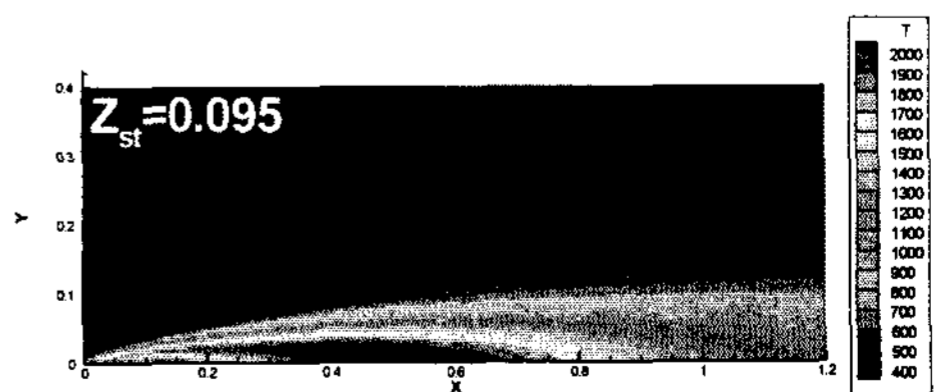
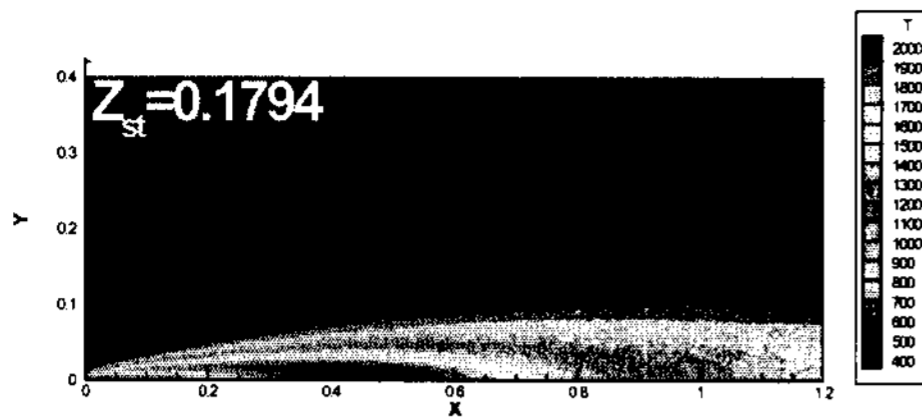


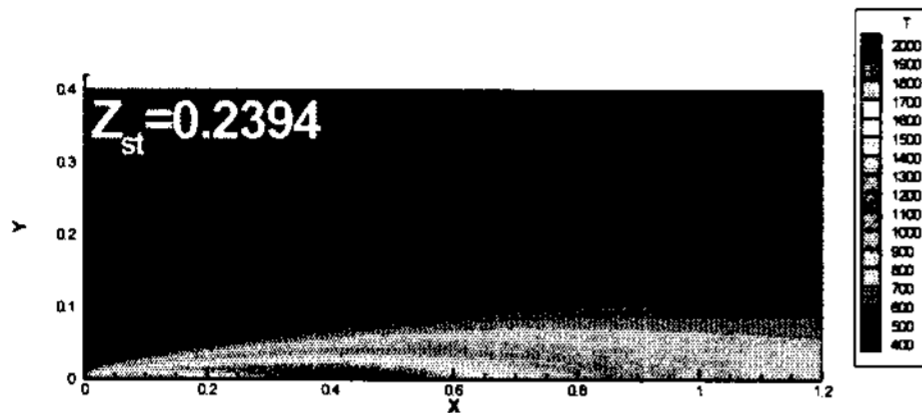
Fig. 2 Dilution Effect on flamelet structure.



(a) H2/CO(80:20)

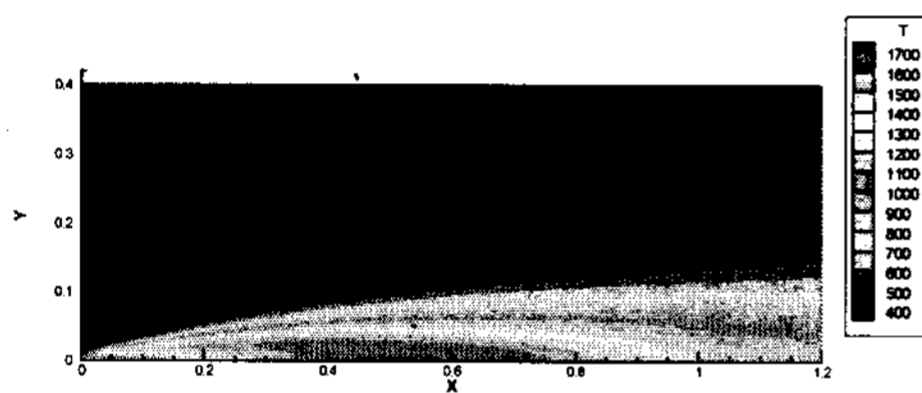


(b) H2/CO(50:50)

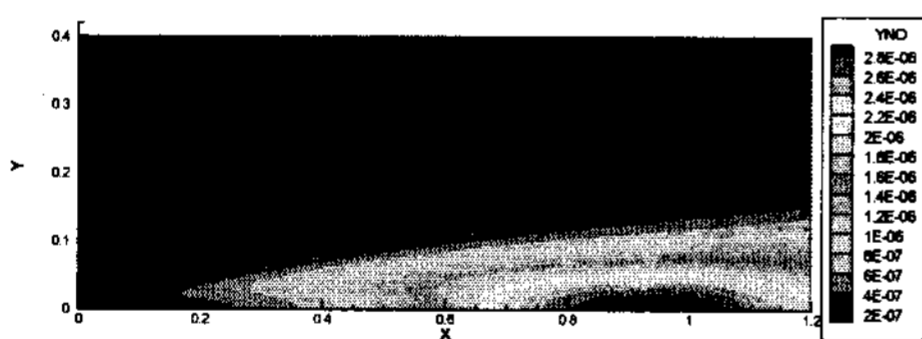


(c) H2/CO(20:80)

Fig. 3 Contours of temperature and NO mass fraction in Syngas gas(80%H2/20%CO) with out CO2 dilution



(a) Temperature



(b) NO mass fraction

Fig. 4 Contours of temperature and NO mass fraction in Syngas gas(80%H2/20%CO) with CO2 dilution

4. 결론

본 연구에서는 석탄가스의 연료조성 및 N₂, CO₂, H₂O의 주입에 의한 희석이 Syngas 비예혼합 화염가스터빈 연소기의 상세 화염구조 및 연소특성에 미치는 영향을 체계적으로 해석하였으며 수치계산결과로부터 아래와 같은 결론을 도출하였다.

- 1) 석탄가스의 화염구조는 CO의 함량이 높을수록 혼합분을 공간에서 화염폭이 증가되며 화학당론적 혼합분율이 증가하였다.
- 2) 산화제에 CO₂, H₂O, N₂의 기체로 희석하였을 때 화염온도가 감소하였으며 비열이 가장 큰 CO₂

로 희석한 경우가 희석에 의한 온도 감소가 가장 크게 나타났다.

- 3) 희석을 하지 않은 난류 비예혼합 화염장에서는 각각 연료의 조성에 따라 온도장과 NO의 농도장에 미치는 영향을 알 수 있었다. 연료중의 CO의 함량이 높은 수록 화염길이가 고온영역이 감소하였고 고온영역에서의 체류시간의 감소로 인해 NO농도가 감소함을 알 수 있었다.
- 4) 희석을 한 경우에는 희석하지 않은 경우에 비해 화염온도와 NO의 농도가 감소하였다.
- 5) 다중혼합기를 이용한 화염편 모델을 적용하여 순산소 모델연소기에 대하여 적용하여 보았다. secondary nozzle의 희석효과는 희석량이 증가할수록 화염길이는 증가하고 화염의 온도는 낮아지는 특성을 알 수 있다.

후기

본 연구는 “신재생 에너지 기술개발 사업”의 일환으로 수행되었습니다.

References

- [1] V. Iyer, J. Haynes, P. May, A. Anand, 2005, "Evaluation of Emissions Performance of Existing Combustion Technologies for Syngas Combustion," , ASME Turbo Expo 2005, GT2005-68513.
- [2] J. Natarajan, S. Nandula, T. Lieuwen, J. Seitzman, 2005, "Laminar Flame Speeds of Synthetic Gas Fuel Mixtures" , ASME Turbo Expo 2005, GT2005-68517.
- [3] N. Peters, Turbulent Combustion, Cambridge University Press.
- [4] J. J. J. Louis, J. B. M. Kok, S. A. Klein, 2001, "Modeling and Measurements of a 16-kW Turbulent Nonadiabatic Syngas Diffusion Flame in a Cooled Cylindrical Combustion Chamber", Combust. Flame, vol 125, pp 1012-1031.
- [5] K. J. Young, J. B. Moss, 1995, "Modeling Sooting Turbulent Jet Flames Using an Extended Flamelet Technique", Combust. Sci. Tech., vol 105, pp 33-53.
- [6] P. J. Coelho, O. J. Teerling, F. Aguille, 2003, "Spectral Radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous Turbulent Jet Diffusion Flames", Combust. Flame, vol 133, pp 75-91.
- [7] http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [8] J. Warnatz, U. Mass, R. W. Dibble, 2001, "Combustion : Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation 3ED", Berlin Heidelberg, Springer-Verlag.
- [9] <http://www.tu-darmstadt.de/fb/mb/ekt/flamebase.html>