IGCC 가스터빈 운전조건에서의 석탄가스 층류화염속도에 대한 기초연구

이정원* · 오경택* · 김용모*†

Numerical Investigations on Laminar Flame Speed of Syngas Flames at IGCC Gas Turbine Condition

Jeongwon Lee, Kyungtaek Oh and Yongmo Kim

ABSTRACT

Coal-derived syngas has been utilized by main fuel at IGCC power plant. Research efforts for investigating the characteristics of premixed and nonpremixed flames at gas-turbine condition have been conducted. The present study has been mainly motivated to evaluate the capability of the detailed chemical kinetics to predict the syngas laminar flame speed. Special emphasis is given to the effects of pressure, temperature, syngas composition, and dilution level on the characteristics of premixed and nonpremixed flames. The predicative capability of a number of detailed mechanism for laminar flame speed is compared to experimental data. From these results, detailed kinetics of Davis et al. and Li et al. have the best conformity with the experiments in the all the case of parametric studies.

Key Words : Syngas composition(석탄가스조성), CO_2 dilution effects(CO_2희석조건) Laminar flame speed (층류화염속도), Gas-turbine condition(가스터빈 운전조건)

1. 서 론

석탄가스는 석탄의 가스화로부터 얻어진 여러 가지 조성을 가지고 있는 혼합 연료를 의미한다.

또한 연료의 처리 방법에 따라 조성과 발열량의 상당한 변동성이 발생된다. 주요 구성 성분은 H_2, CO 이고 N_2, CO_2, H_2O가 희석되어 사용 되고 약간의 메탄과 탄화수소를 가지고 있다. 이러한 석탄가스는 IGCC 복합발전에서 연료로서 사용된다. 전 세계적으로 IGCC 발전에 대한 관심이 증대됨으로서 석탄가스에 대한 많은 연구가 수행되고 있다[1-3]. 특히, Sun[4], Davis[5], Frassolda-ti[6], Natarajan[7,13] 등은 고압 및 고온 조건에서 석탄가스의 조성 및 당량비에 따른 층류화염속도에 대한 실험을 수행하고, 상세화학반응기구를 개발하여 그 예측능력을 검증하였다.

또한 Aggawal[8]은 석탄가스의 층류 대향류 화염장에 대한 기초 실험 및 NOx 생성특성에 대한 실험적 보고를 하였다.

* 한양대학교 대학원 기계공학과
** 한양대학교 기계공학부
† 연락저자, ymkim@hanyang.ac.kr

본 연구에서는 실제 IGCC 가스터빈 연소기를 수치모사하기 위한 연구의 일환으로, 현존하는 석탄가스의 상세화학반응기구의 압력, 온도, 당량비, 연료조성 및 CO_2 희석량에 따른 다양한 운전조건에서 층류화염속도의 예측능력을 검증하고 이러한 운전조건 변화가 석탄가스의 층류 화염속도에 미치는 영향에 대하여 조사하였다.

2. 계산방법

본 연구에서는 층류화염속도는 PREMIX 코드[12]를 이용하여 계산하였고, 가스터빈 운전조건에 따른 실험치는 Sun[4], Natarajan[7]등의 실험결과와 비교하였다. PREMIX 코드를 이용한 층류화염속도의 계산에서는 수치 격자는 화염면의 기울기(GRAD)와 곡률(CURV)을 각각 0.2와 0.5로 사용하여 자동격자 생성을 하였으며, 경계조건을 만족시키기 위해 계산영역을 -2 cm에서 10 cm까지 점진적으로 확장하였다. 모든 경우의 연료조성에서 수소의 양은 비활성기체(N_2, He)의 양에 비해 매우 작으므로 수소의 편중확산에 의한 영향을 고려하지 않았으며, 따라서 혼합물 평균 기반의 열 및 화학 물성치를 사용하여 계산을 수

행하였다.

또한 가연한계에 가까운 당량비 조건 및 고압조건에서 층류화염속도의 계산 시에는 초기의 반응물의 질량유량에 따라 국부적인 최소값을 갖는 해에 도달하는 수치결과를 얻어낼 가능성을 가지고 있으며, 이는 실제 물리현상과는 전혀 다른 층류화염속도를 예측하는 경우도 있었다. 따라서 수치적으로 불안정한 당량비 조건 및 고압조건에 따라서 적절한 질량유량의 초기치를 제공하여야 물리적으로 타당한 층류화염속도를 얻어낼 수 있다고 사료된다.

3. 화학반응기구

본 연구에서 사용한 석탄가스의 상세화학반응기구는 Sun[4], Davis[5], Frassoldati[6]에 의해 제안된 고온, 고압에서 예측능력을 높인 반응기구와 기존의 C1 계열의 화염속도에서 사용된 Gri-mech 2.11[9]과 3.0[10] 및 Li[11]의 상세화학반응기구이다. Sun[4]의 반응기구는 총 17개의 화학종과 33개의 화학 반응식으로 이루어져 있으며 $CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$의 반응률 상수를 ab initio theory와 canonical transition state theory를 기초로 하여 계산한 값을 적용한 반응기구이다. Davis[5]의 반응기구는 총 14개의 화학종과 30개의 화학 반응식으로 이루어져 있으며 Gri-mech 3.0을 기초로 하고 반응기구를 최적화 하기 위해 $H + O_2(+M) = HO_2(+M)$ 화학반응식과 $CO + OH = CO_2 + H$ 화학반응식의 반응계수와 OH의 생성 엔탈피를 수정하였다.

Frassoldati[6]의 반응기구는 총 14개의 화학종과 37개의 화학 반응식으로 이루어져 있으며 Davis[5]의 반응기구를 기초로 하여 CO_2 생성 반응인 $CO + OH = CO_2 + H$와 $CO + O + M = CO_2 + M$의 kinetic parameter를 수정하였다.

Gri-mech 2.11[9]의 상세화학 반응기구는 49개의 화학종과 276개의 화학 반응식으로 이루어져 있으며 NOx생성에 대한 반응과 C1 계열 및 C2 계열의 연료의 반응을 고려 할 수 있다.

Gri-mech 3.0[10]의 상세화학 반응기구는 53개의 화학종과 325개의 화학 반응식으로 이루어져 있으며 Gri-mech 2.11[9]의 화학 반응식을 기초로 하고 target 실험을 통해 화학반응식을 수정하여 prompt NO의 예측능력을 확대했고 $H + O_2$와 $OH + CO$의 반응률을 낮춰 넓은 범위의 층류화염 속도의 예측능력을 확대하였다.

Li[11]의 상세화학 반응기구는 21개의 화학종과 85개의 화학반응식으로 이루어져 있으며 CO, CH_2O, CH_3OH에 관한 화학반응식이 주를 이룬다. $CO + OH = CO_2 + H$와 $HCO + M = H + CO + M$ 반응률을 수정하여 예측능력을 향상시켰다.

4. 가스터빈 운전조건 인자가 층류화염속도에 미치는 영향 및 화학반응기구의 예측능력 검증

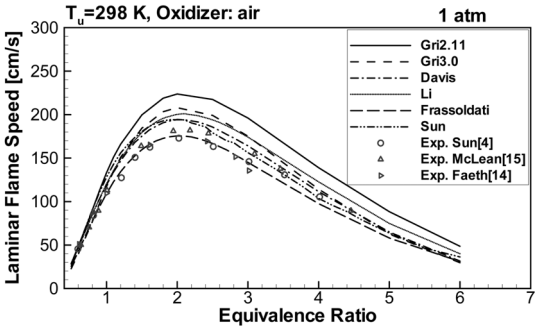
4.1. 압력과 석탄가스 조성에 따른 층류화염속도

Fig. 1은 동일한 대기압 및 상온(298 K), 공기 산화제 조건의 분위기에서 석탄가스의 조성이 변화했을 경우, 상세화학반응기구를 통한 층류화염속도 예측값을 실험치와의 비교한 것이다. 그림에서 볼 수 있듯이 석탄가스의 층류화염속도는 당량비 2.0 이상에서 최대값을 가지며, 연료중의 CO의 농도가 높아질 수록 층류화염속도의 최대값을 가지는 당량비가 증가하며 동시에 층류화염속도는 감소한다는 것을 볼 수 있다. 또한 당량비가 1.0 이하의 희박 예혼합 연소 영역에서는 연료가 농후한 연소영역에 비해 상세화학반응식에 따른 층류화염속도의 민감도가 크게 나타나지 않는 다는 것을 보여준다. 대기압 조건에서의 화학반응기구의 예측능력은 Gri-mech 2.11과 3.0을 제외한 나머지 상세화학 반응기구가 실험에 의한 값과 10% 이내의 오차정확도를 가지고 있다는 것을 알 수 있다. 그러나 연료 중의 H_2의 농도가 낮은 경우에는 각 상세화학반응기구에 따른 오차는 점차로 감소하고 있다는 것을 확인할 수 있었다. 이는 반대로 연료중의 H_2의 농도가 높을수록 H_2에 의한 화학반응상의 비선형성이 강하게 작용하므로 높은 농도의 H_2을 갖는 석탄가스의 조성 조건에서는 이러한 특성이 잘 반영된 화학반응기구를 사용해야 함을 암시한다.

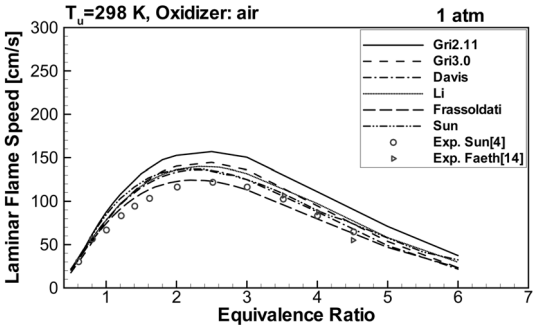
Fig. 2는 동일한 10기압 및 상온(298 K) 조건에서 석탄가스 조성에 따른 영향을 보여주고 있다. 고압 조건에서는 공기 대신에 산소에 He를 희석한 산화제를 사용하였다. 높은 압력에서 공기 산화제를 사용할 때 발생하는 열확산의 불안정성을 해결하고, 혼합 Lewis number를 증가시킴으로 화염면의 증가와 화염면의 주름짐을 억제시키기 위해서 He를 희석한 산소를 산화제로 이용한다.

그림에서 볼 수 있듯이, 고압 조건에서도 연료의 조성에 따른 층류화염속도의 예측능력 및 민감도는 상압인 경우와 유사한 경향을 가지고 있다. 하지만 압력이 증가함에 따라 각 화학반응기구에 따른 민감도는 상대적으로 감소하고 있다는 것을 볼 수 있다. 고압인 조건에서도 상압과 마찬가지로 Gri-mech 2.11과 3.0을 제외한 상세화학반응기구들이 모두 실험치와 비교하여 층류화염속도에 대한 예측능력을 가지고 있다고 사료된다.

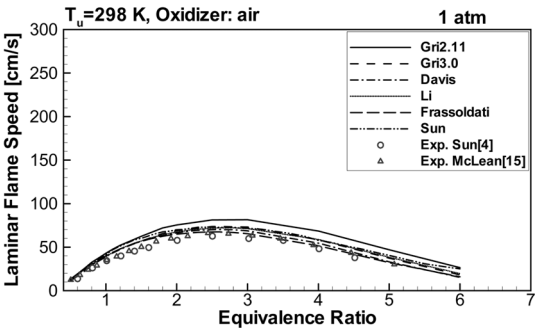
Fig. 3은 20기압에서의 석탄가스의 조성에 따른 층류화염속도를 실험치와 비교한 것이다. 20기압인 경우에는 앞에서 설명한 바와 같이 화학반응기구에 따



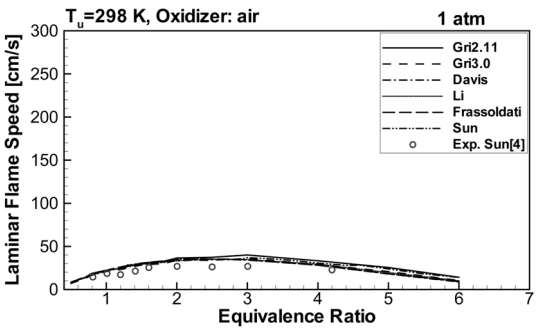
(a) CO : H_2 = 50 : 50



(b) CO : H_2 = 75 : 25



(c) CO : H_2 = 95 : 5

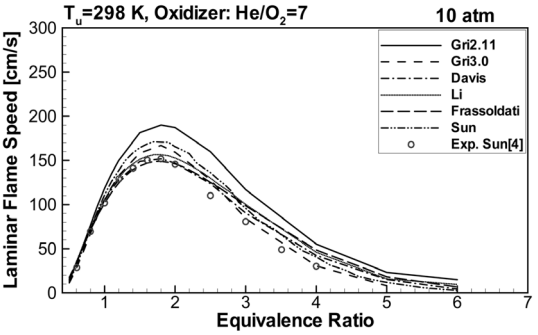


(d) CO : H_2 = 99 : 1

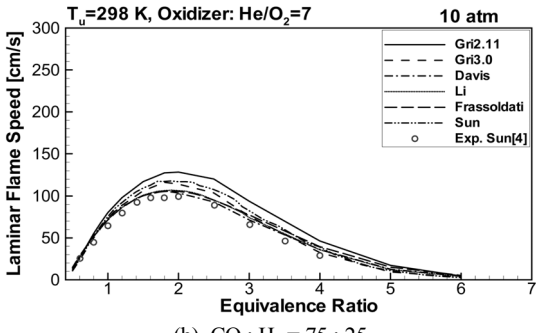
Fig. 1. Effect of Syngas composition on laminar flame speed at atmospheric pressure.

른 민감도가 더 많이 감소하였으며, 압력이 증가할수록 층류 화염속도 또한 감소하고 있다는 것을 볼 수 있다. 20기압인 경우에는 모든 화학반응기구가 실험치에 비해 층류화염속도를 조금 빠르게 예측하고 있다는 것을 볼 수 있다. 이는 화학반응기구의 예측능력에 문제에서 오는 것 뿐만 아니라, 실험에서의 층류화염속도의 계측에서 신장된 화염속도에서 자유전파 화염속도로 변환하는 과정에서 발생하는 오차에 의한 영향이 있는 것으로 사료된다.

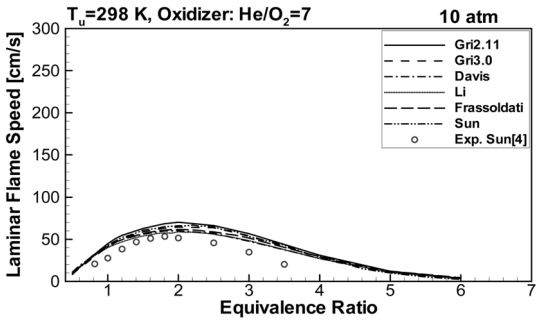
위의 Fig. 1~3으로부터 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측능력에 압력과 연료조성이 미치는 영향을 정리해보면, 전체적으로 대기압일 때는 Frassoldati[6], Davis[5], Li[11], Sun[4]의 상세화학반응기구가 가장 실험과 유사하였고 고압으로 갈수록



(a) CO : H_2 = 50 : 50

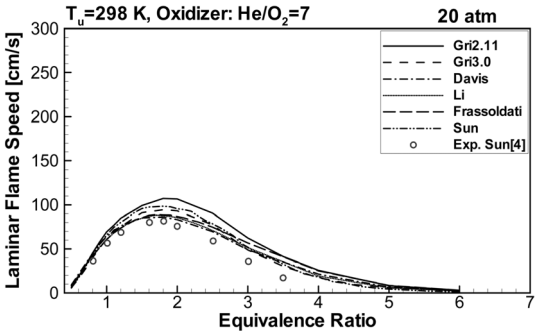


(b) CO : H_2 = 75 : 25

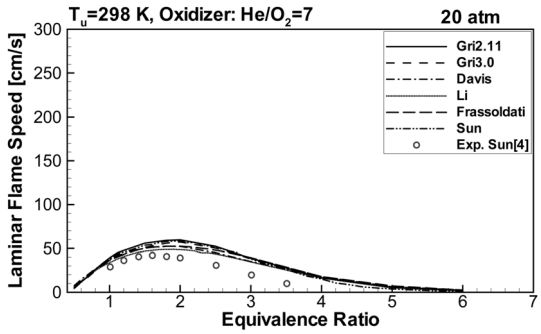


(c) CO : H_2 = 95 : 5

Fig. 2. Effect of Syngas composition on laminar flame speed at 10 atm with He/O_2 = 7



(a) CO : H_2 = 75 : 25



(b) CO : H_2 = 95 : 5

Fig. 3. Effect of Syngas composition on laminar flame speed at 20 atm with He/O_2 = 7.

상세화학반응기구간의 차이가 점차 줄어들고 있음을 확인하였다. 대기압에서 석탄가스의 상세화학반응기구는 2개의 CO_2 생성 반응식($CO + OH = CO_2 + H$, $CO + O + M = CO_2 + M$)에 대한 반응계수 수정의 영향으로 예측능력이 향상되었고 압력이 높아질수록 $CO + OH = CO_2 + H$의 영향은 줄고 $CO + O + M = CO_2 + M$의 영향이 커짐으로 Frassoldati[6], Davis[5], Li[11], Sun[4]의 상세화학 반응기구가 좋은 예측능력을 보이는 것으로 보고되고 있다[5,6].

또한 모든 압력조건 및 연료 조성 조건에서 희박 예혼합 당량비 조건에서는 상세화학반응기구에 따른 층류화학반응속도의 예측능력의 차이는 5% 이내의 차이를 보인다는 것이다. 이는 희박 예혼합 연소기의 해석에 있어서는 화학반응기구에 따른 영향은 난류화염속도의 예측에 있어 크지 않을 것이라는 것을 시사한다. 그러나 예혼합 화염편 구조는 화학반응기구에 따른 민감도는 여전히 존재할 것으로 생각되며, 이에 대한 연구는 추후에 진행해야 할 것이다.

4.2. 가스터빈 운전조건에서 연료조성 및 당량비가 층류 화염 속도 미치는 영향

Fig. 4는 10기압, 혼합물의 온도 600 K일 때, 연료조성 CO : H_2 = 50 : 50과 산소와 헬륨이 1 : 9로 혼합된 산화제 조건에서의 당량비에 따른 층류화염속도에 대한 화학반응기구의 영향을 실험치와 비교하여 보여주고 있다. 그림에서 볼 수 있듯이 희박 예혼합 조건의 당량비 범위에서는 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 차이가 상대적으로 낮다. 그러나 Fig. 2의 상온 조건과 비교하면 미연 혼합물의 온도가 증가함에 따라 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측범위가 10%에서 30% 이상으로 증가하였음을 볼 수 있다. 이러한 화학반응기구에 따른 민감도의 차이는 산화제 중의 He의 희석농도에 의한 영향도 존재하겠지만, 미연 혼합물의 온도 증가로 인한 화학반응의 비선형성의 증가에 기인한다고 사료된다.

화학반응기구의 예측능력은 Gri-mech 2.11을 제외한 모든 화학반응기구에서 20% 이내의 오차범위내에서 실험치와 유사한 층류화염속도를 보여주고 있다.

Fig. 5는 10 기압, 혼합물의 온도 600 K일 때, 당량비를 0.6으로 고정하고 연료 중의 수소의 농도에 따른 층류화염속도를 화학반응기구의 예측결과와 실험치와 비교하여 보여주고 있다. Fig. 1~3의 결과에서는 연료중의 수소의 농도가 높아질수록 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측능력에서의 많은 차

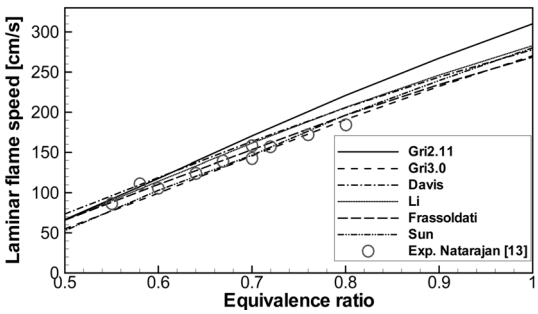


Fig. 4. Effect of Syngas composition on laminar flame speed at CO : H_2 = 50 : 50, P = 10 atm, T = 600 K and Oxidizer : He/O_2 = 9.

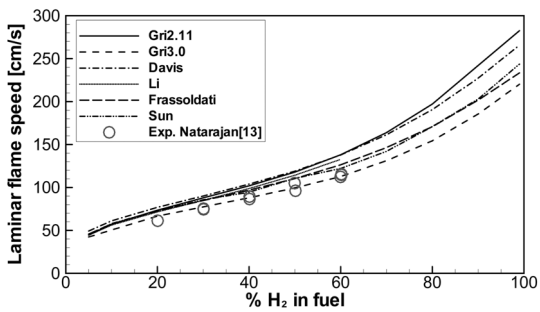


Fig. 5. H_2/CO fuel mixtures on laminar flame speed at P = 10 atm, T = 600 K, Oxidizer : He/O_2 = 9 and equivalence ratio = 0.6.

이를 볼 수 있었다. 이는 그림에서 볼 수 있듯이 고압, 고온의 조건에서도 위의 경향이 유사하게 나타나고 있음을 확인 할 수 있다. 연료중의 수소의 농도가 높을수록 수소의 화학반응에 대한 비선형성이 커지기 때문에 화학반응기구의 예측치의 변동폭이 높아지고 있는 것을 볼 수 있다. 또한 연료에 수소의 함량이 많을수록 층류 화염 속도는 빨라지며, 50% 이상 증가할 경우에는 층류화염 속도가 점차적으로 급격히 증가하는 경향을 나타내는 것으로 보인다.

화학반응기구의 층류화염속도 예측능력에서는 대부분의 상세화학반응기구가 실험치에 비교하여 30% 범위 내에서 높게 예측을 하고 있으며 Gri-mech 3.0 [10] 상세화학반응기구가 실험치와 가장 유사하게 예측하였음을 알 수 있다.

Fig. 6은 15 기압, 혼합물의 온도 600 K일 때, 당량비를 0.6으로 고정하고 연료 중의 수소의 농도에 따른 층류화염속도를 화학반응기구의 예측결과와 실험치와 비교하여 보여주고 있다. 층류화염속도는 10 기압의 경우에 비해 15 기압일 때 더 낮아졌음을 보여준다. 이러한 이유는 H_2의 비율이 높아지면서 H의 주요 산화반응인 HO_2의 생성 및 소멸 반응의 영향이 커지므로 층류화염 속도의 예측능력이 감소하게 된다. 그러나 압력이 높아지면 HO_2의 생성 및 소멸 반응의 영향이 작아지므로 예측능력의 향상을 가져온다[13].

그러나 연료중의 수소의 농도에 대한 층류화염속도에 미치는 영향을 앞의 결과와 동일한 경향을 보여준다는 것을 확인할 수 있다.

Fig. 7은 압력 15 atm, 온도 300 K, 당량비 0.8인 조건에서의 연료 안에 수소 비율에 따른 영향을 보여주고 있다. 압력의 증가와 미연 혼합물의 온도의 영향으로 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측치의 편차가 많이 낮아진 것을 볼 수 있다. 층류화염속도의 예측능력은 대부분의 화학반응기구의 경우에 실험치와 10% 이내로 유사한 경향을 보여주었다. 연료에 수소의 비율이 30% 이하일 때 Gri-mech 3.0[10]이 가장 실험치와 유사한 결과를 보여주었지만, 연료중의 수

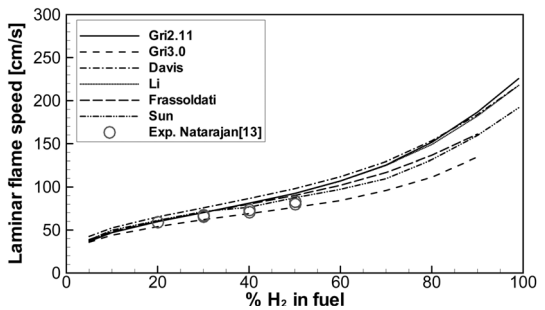


Fig. 6. H_2/CO fuel mixtures on laminar flame speed at P = 15 atm, T = 600 K, Oxidizer : He/O_2 = 9 and equivalence ratio = 0.6.

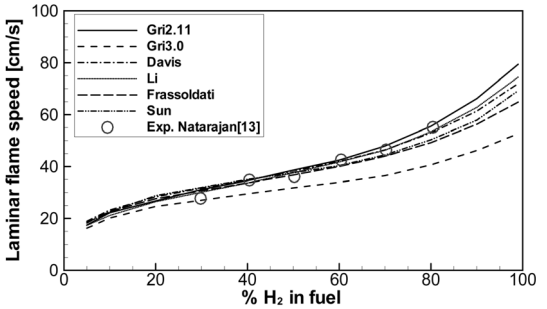


Fig. 7. H_2/CO fuel mixtures on laminar flame speed at P = 15 atm, T = 300 K, Oxidizer : He/O_2 = 9 and equivalence ratio = 0.8.

소의 비율이 30% 이상일 때 Gri-mech 3.0을 제외한 모든 화학반응기구에서 실험치와 유사한 결과를 예측하고 있다.

4.3. 가스터빈 운전조건에서 CO_2 희석량이 층류화염 속도에 미치는 영향

Fig. 8은 대기압, 온도 300 K, 공기 산화제 조건에서 석탄가스의 조성 및 CO_2 희석에 따른 층류화염속도에 미치는 영향을 실험치와 비교하여 보여주고 있다. Fig. 8(a)는 석탄가스의 연료 조성에서 H_2가 95%를 차지하는 경우에 대하여 CO_2의 희석이 있을 때와 없을 때의 층류화염속도의 화학반응기부에 따른 예측능력을 실험치와 비교하였다. CO_2의 희석이 없는 경우와 비교할 때 층류화염속도의 예측특성이 상세화학반응기구에 따라 많이 다르다는 것을 볼 수 있다. 먼저 CO_2의 희석이 없는 경우에는 Davis[5], Li[11], Gri-mech 3.0[10]의 상세화학반응기구가 실험치와 유사한 예측결과를 보여주지만, CO_2의 희석이 있는 경우에는 Davis[5], Li[11]와 Gri-mech 3.0[10]의 상세화학반응기구가 실험치와 가장 유사한 결과를 나타내고 있다. Gri-mech 2.11[9]와 Frassoldati[6] 상세화학반응기구는 두 경우 모두에서 각각 층류화염속도를 과대 예측 또는 과소예측을 하고 있다. 또한 Sun[4]의 상세화학반응기구는 CO_2의 희석을 없을 때는 층류화염속도를 과대예측하는 경향을 보이지만, CO_2의 희석이 있을 경우에는 과소 예측하는 특성을 보인다.

이러한 결과로부터 상압, 상온 조건에서 연료중의 수소의 농도가 높은 경우에는 수소에 의한 화학반응의 비선형성 뿐만 아니라 CO_2의 희석이 화학반응에 미치는 영향을 고려할 수 있는 화학반응기구를 사용해야 한다는 것을 알 수 있다.

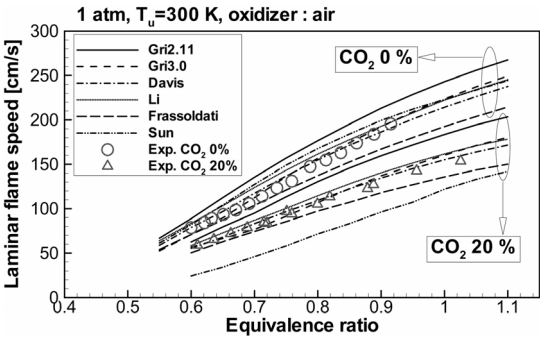
Fig. 8(b)는 석탄가스의 조성에서 CO와 H_2의 동일한 부피비를 갖는 경우에 CO_2의 희석이 층류화염속도에 미치는 영향을 보여준다. 위의 수소의 농도가 높은 때와는 달리 연료중의 CO와 H_2의 농도가 같은 경

우, CO_2가 희석되지 않았을 때 Frassoldati[6], Davis[5], Gri-mech 3.0[10], Li[11]의 상세화학반응기구가 실험치와 비교하여 층류화염속도의 예측능력을 가지고 있는 것으로 나타났다. 또한 CO_2가 희석되었을 때도 위의 상세화학반응기구가 가장 실험과 유사한 결과를 보이고 있다.

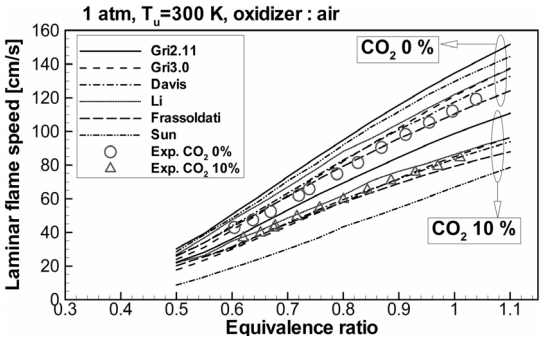
Fig. 8(c)는 석탄가스의 조성중에서 CO가 95%인 일 때의 결과를 보여준다. CO_2가 희석되지 않았을 때 Gri-mech 2.11[9]과 Sun[4]의 상세화학반응기구를 제외한 상세화학반응기구는 실험값과 유사한 결과를 보여준다. 또한 CO_2가 희석되었을 때는 Sun[4], Davis[5], Gri-mech 3.0[10]의 상세화학반응기구는 측정값과 유사한 결과를 보여주지만, Li[11], Frassoldati[6], Gri-mech 2.11[9]은 층류화염속도를 상대적으로 과대 예측을 하고 있다.

연료의 조성 및 CO_2의 희석이 층류화염속도에 미치는 영향은 수소의 함량이 증가할수록 층류화염속도는 증가하며, CO_2의 희석이 생기면 층류화염속도 감소한다. 이러한 이유는 중요 화학반응인 $H_2 + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$의 화학반응을 CO산화의 초기단계에서 $CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$ 반응을 통해 CO를 CO_2로 변환하는 다른 경로를 사용하기 때문이다[4].

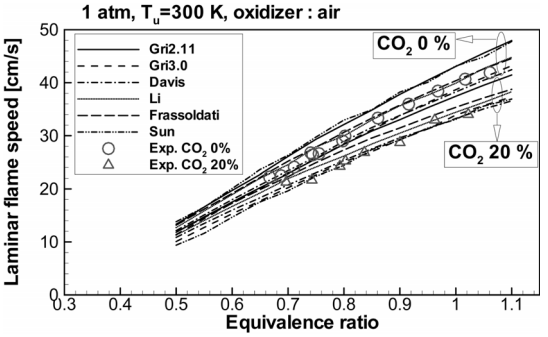
Fig. 9는 대기압, 석탄가스에 20% CO_2를 희석하고, 석탄가스 조성은 $CO : H_2 = 5 : 95$의 비율로 고정하였을 때, 미연 혼합물의 온도가 300 K - 600 K로 변화함에 따른 층류화염속도에 미치는 영향을 보여주고 있다. 그림에서 볼 수 있듯이, 당량비가 증가하고 온도가 올라갈수록 반응률과 열 및 물질 확산이 증가하여 층류 화염 속도가 증가함을 볼 수 있다. 온도 300 K에서는 Frassoldati[6], Davis[5], Li[11], Gri-mech 3.0[10] 상세화학반응기구가 실험과 유사한 결과를 보이며, Gri-mech 2.11[9]의 상세화학반응기구는 층류화염속률 과대 예측을 하며, 반대로 Sun[4]의 상세화학반응기구는 층류화염속도를 과소 예측을 하고 있다. 온도 400 K와 500 K에서는 Frassoldati[6]의 상세화학반응기구가 실험과 가장 유사한 결과를 보이며, Li[11], Davis[5], Gri-mech 3.0[10], Gri-mech 2.11[9] 상세화학반응기구는 당량비가 증가할수록 층류화염속도를 과대 예측을 하는 경향을 보인다. 또한 Sun[4]의 상세화학반응기구는 층류화염속도를 과소 예측하는 경향을 보인다. 온도 600 K에서는 Sun[4]의 상세화학반응기구를 제외한 모든 상세화학반응기구가 실험보다 과대 예측을 하고 있으며 Sun[4]의 상세화학반응기구는 당량비가 낮을 때는 과소 예측을 하지만 당량비가 높아질수록 실험과 유사한 경향을 보인다.



(a) $CO : H_2 = 5 : 95$



(b) $CO : H_2 = 50 : 50$



(c) $CO : H_2 = 95 : 5$

Fig. 8. Effect of CO_2 dilution on laminar flame speed compared to un-dilutied mixture at atmospheric pressure(exp. from ref[7]).

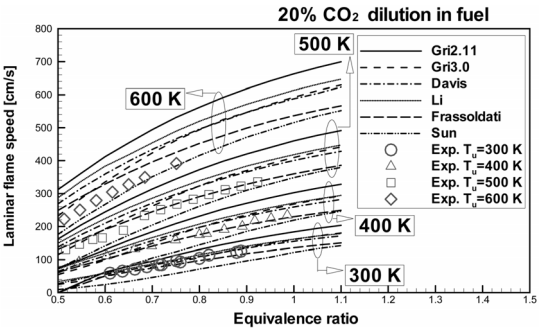


Fig. 9. Effect of CO_2 dilution on laminar flame speed at $CO : H_2 = 5 : 95$, P = 1 atm, T = 300 - 600 K, Oxidizer : air(exp. from ref[7]).

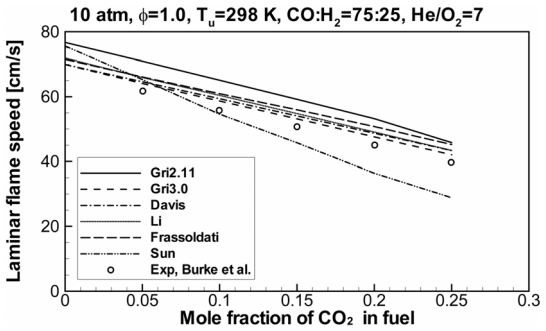


Fig. 10. Effect of CO_2 dilution on laminar flame speed at CO : H_2 = 75 : 25, P = 10 atm, T = 298 K, Oxidizer : He/O_2 = 7(exp. from ref[16]).

H_2의 비율과 온도가 높을수록 H의 주요 산화반응인 HO_2의 생성 및 소멸 반응의 영향이 커지므로 층류화염 속도의 예측능력이 감소하게 된다[13].

Fig. 10은 압력 10 atm, 온도 298 K, 석탄가스 조성은 CO : H_2 = 75 : 25, 산화제는 산소와 헬륨이 3 : 7의 비율로 혼합된 조건에서 석탄가스 안에서 CO_2의 몰분율의 변화에 대한 영향을 보여주고 있다. 석탄가스 안에서 CO_2의 몰분율이 증가함에 따라 층류 화염 속도는 줄어들게 되고 전체적으로 Sun[4]의 상세화학반응기구를 제외한 모든 상세화학반응기구가 실험과 유사한 경향을 보이며 Gri-mech 3.0[10] 상세화학반응기구가 가장 실험과 유사한 결과를 보인다. Sun[4]의 상세화학반응기구는 CO_2의 몰분율이 낮을 때는 과대 예측을 하고 높을 때는 과소 예측을 하는 경향을 보인다.

5. 결 론

본 연구에서는 석탄가스의 상세화학반응기구에 따른 가스터빈 운전조건에서의 층류화염속도의 예측능력을 검증하고 연료와 산화제 혼합물의 당량비, 온도, 압력 및 연료의 조성과 희석기체의 농도가 미치는 영향을 수치적으로 조사하였다.

1) 대기압, 상온 조건에서는 연료중의 수소의 농도가 높을수록 상세화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측능력이 많은 차이를 보이며, 이는 당량비가 증가할수록, 압력이 낮을수록 분명하게 나타난다. 위의 조건에서는 Frassoldati[6], Davis[5], Li[11]의 화학반응기구가 실험치에 가장 근접한 예측능력을 보이는 것으로 판단된다.

2) 석탄가스와 산화제의 혼합기의 온도가 높은 수록 화학반응기구에 따른 층류화염속도의 예측능력에 많이 차이를 보이고 있으며, 온도가 600 K 이상에서는 모든 화학반응기구가 층류화염속도를 과대예측하는 특성을 보였다. 압력이 증가하면 이러한 화학반응기구에 따른 민감도는 감소한다.

또한 연료중의 수소의 농도가 높아질수록 층류화염속도가 증가하는 경향을 보이며, 특히 수소의 농도가 50% 이상인 경우에는 층류화염속도가 급격히 증가하는 특성을 보였다.

3) CO_2의 희석에 따라 층류화염속도는 감소하는 특성을 보이고 있으며, CO_2의 희석 여부에 따라 각 화학반응기구의 층류화염속도 예측능력은 많이 다르게 나타났음을 알 수 있다. 또한 수소의 농도가 높을수록 CO_2의 희석이 층류화염속도의 감소에 더 많은 영향을 주는 것을 볼 수 있다.

4) 석탄가스의 조성, 온도, 압력, CO_2의 희석에 따른 화학반응기구의 층류화염속도 예측능력을 전체적으로 평가하면, Davis, Li의 화학반응기구가 모든 조건변화에 대해 실험치와 비교하여 가장 유사한 결과를 주고 있는 것으로 판단된다.

후 기

본 연구는 2011년도 지식경제부의 재원으로 한국에너지 기술평가원(KEPTEP)의 지원을 받아 수행한 한국형300MW급IGCC실증플랜트기술개발사업 연구과제입니다(No. 2011951010001C).

참고문헌

[1] A. M. Starik, N. S. Titova, A. S. Sharipov and V. E. Kozlov, “Syngas Oxidation Mechanism”, Combustion, Explosion, and Shock Waves, Vol. 46, No. 5, 2010, pp. 491-506

[2] Satish Gadde, Jianfan Wu, Anil Gulati and Gerry McQuiggan, “Syngas capable combustion systems development for advanced gas Turbines”, Proceedings of ASME Turbo Expo, May 8-11, 2006

[3] C. Prathap, Anjan Ray and M. R. Ravi, “ Invesrigation of nitrogen dilution effects on the laminar burning velocity and flame stability of syngas fuel at atmospheric condition”, Combustion and Flame Vol. 155, 2008, pp. 145-160

[4] Hongyan Sun, S. I. Yang, G. Jomaas, C. K. Law, “High-pressure laminar flame speeds and kinetic modeling of carbon monoxide/hydrogen combustion”, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 31, 2007, pp. 439-446

[5] Scott G. Davis, Ameya V. Joshi, Hai Wang and Fokion Egolfopoulos, “An oprimized kinetic model of H_2/CO combustion”, Proceedings of the com-

bustion Institute, Vol. 30, 2005, pp. 1283-1292

[6] A. Frassoldati, T. Faravelli, E. Ranzi, “The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 1 : detailed kinetic modeling of syngas combustion also in presence of nitrogen compounds”, International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 32, 2007, pp. 3471-3485

[7] J. Natarajan, T. Lieuwen, J. Seitzman, “Laminar flame speeds of H_2/CO mixtures : Effect of CO_2 dilution, preheat temperature and pressure”, Combustion and Flame, Vol. 151, 2007, pp. 104-119

[8] Daniel E. Giles, Sibendu Som and Suresh K. Aggarwal, “NOx emission characteristics of counterflow syngas diffusion flames with air stream dilution”, Fuel, Vol. 85, 2006, pp. 1729-1742

[9] Bowman, C. T., Hanson, R. K., Davidson, D. F. Gardiner Jr., W. C., Lissianski, V., Smith, G. P. Golden, D. M., Frenklach, M., Wang, H., and Goldenberg,, M., GRI-Mech version 2.11, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 1995.

[10] Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner Jr., W. C., Lissianski, V., and Qin, Z., GRI-Mech homepage, Gas Research Institute, Chicago, www.me.berkeley.edu/gri_mech/. 1999

[11] Juan Li, Zhenwei Zhao, Andrei kazakov, Frederick L. Dryer, “An updated comprehensive Kinetic model of hydrogen combustion”, International journal of chemical kinetics, Vol. 36, issue 10, 2004

[12] Kee, R. J.; Dixon-Lewis, G.; Warnatz, J.; Coltrin, M. E.; Miller, J. A. Report SAND86-8246; Sandia National Laboratories: Albuquerque, NM, 1986

[13] J. Natarajan, Y. Kochar, T. Lieuwen, J. Seitzman “pressure and preheat dependence of laminar flame speeds of H_2/CO/CO_2/He mixtures”, Proceeding of the combustion institute, Vol. 32, 2009, pp. 1261-1268.

[14] M. I. Hassan, K. T. Aung, G. M. Faeth, “Properties of Laminar Premixed CO/H_2/air Flames at Various Pressures”, Journal of Propulsion and Power, Vol. 13(2), 1997, pp. 239-245

[15] I. C. McLean, D. B. Smith, C. Taylor, “The Use of Carbon Monoxide/Hydrogen Burning Velocities to Examine the Rate of the CO + OH Reactions”, Proceeding of Combustion Institute, Vol. 25, 1994, pp. 749-757

[16] M. P. Burke, X. Qin, Y. Ju, F. L. Dryer, “Measurements of Hydrogen Syngas Flame Speeds at Elevated Pressures”, 5th US combustion meeting, the Western States section of the combustion institute, March 25-28, 2007.

접수일 : 2011. 12. 13
심사완료일 : 2012. 01. 30