

Laminar Flamelet Model을 이용한 비예혼합 난류제트화염의 연소과정 및 NO 생성 해석

김 성 구* · 김 후 중* · 김 용 모**

Laminar Flamelet Modeling of Combustion Processes and NO Formation in Nonpremixed Turbulent Jet Flames

Seong-Ku Kim, Hoo-Joong Kim and Yong-Mo Kim

Key Words: Laminar Flamelet, Nonequilibrium Chemistry, Thermal NO Formation
Radiative Heat Loss.

Abstract

NO_x formation in turbulent flames is strongly coupled with temperature, superequilibrium concentration of O radical, and residence time. This implies that in order to accurately predict NO level, it is necessary to develop sophisticated models able to account for the complex turbulent combustion processes including turbulence/chemistry interaction and radiative heat transfer. The present study numerically investigates the turbulent nonpremixed hydrogen jet flames using the laminar flamelet model. Flamelet library is constructed by solving the modified Peters equations and the turbulent combustion model is extended to nonadiabatic flame by introducing the enthalpy defect. The effects of turbulent fluctuation are taken into account by the presumed joint PDFs for mixture fraction, scalar dissipation rate, and enthalpy defect. The predictive capability of the present model has been validated against the detailed experimental data. Effects of nonequilibrium chemistry and radiative heat loss on the thermal NO formation are discussed in detail.

1. 서 론

비예혼합 난류화염에서 생성되는 질소

산화물(NO_x)는 온도, O 라디칼의 농도 그리고 체류시간에 매우 민감하게 나타난다. 따라서, NO 생성을 예측하기 위해서는 난류와 상세화학반응간의 상호작용

* 한양대학교 대학원

** 한양대학교 기계공학부

및 복사열전달등과 같은 복잡한 물리현상을 정확히 묘사할 수 있는 난류연소모델의 개발이 필수적이다. 최근 들어 광계측기술을 이용한 보다 체계적이고 자세한 실험데이터의 축적을 토대로 난류연소모델링에 대한 활발한 연구가 진행되고 있다[1,2].

그 중에서도 laminar flamelet 모델은 상세화학반응, 편중확산 및 soot 생성 등의 복잡한 물리현상을 난류장과 효과적으로 분리하여 고려할 수 있으므로 많은 연구가 이루어져 왔다[3-6]. 이 모델은 기본적으로 난류연소장을 층류화염편(laminar flamelet)의 집합체로 가정한다. 이때, 층류화염편들은 본질적으로 1차원적이며 난류유동에 의해 신장되거나 주름지게 되며 이것은 층류화염편으로의 분자단위 물질 및 열 확산을 지배하여 화학반응에 영향을 미치게 된다[3]. Peters는 화학종 및 에너지 보존방정식으로부터 층류화염편내 반응면에 수직방향을 주방향으로 하는 좌표변환을 통해, 혼합분율을 매개변수로 층류화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 지배하는 1차원 상미분 연립방정식을 유도하였다. 이와는 별도로, 층류화염편의 화염구조를 묘사할 수 있는 또 다른 한가지 방법은 층류화염편을 층류 대향류확산화염(laminar counterflow diffusion flame)으로 가정하는 것이다. 이때 나타나는 2차원 화염구조는 상사해 변환을 통해 1차원으로 나타낼 수 있으며, Sandia Lab.의 OPPDIF code[11]등을 통해 해석할 수 있다.

그러나, Ferreira는 전체 변형율(global strain rate)를 파라미터로 하는 대향류확산화염 방정식으로는 라디칼들이 비평형 화학반응에 의한 초과평형농도에서 평형상태로 변화해가는 감쇠율을 예측할 수

없음을 밝혔으며, 수정된 Peters 방정식을 통해 이러한 비평형 화학반응에 대한 라디칼의 변화를 예측하였다[4].

본 연구에서는 Ferreira가 제안한 수정된 Peters 방정식을 사용하여 층류화염편내의 혼합과정 및 화학반응을 계산하였으며, 복사열전달의 영향을 고려하여 비단열화염(non-adiabatic flame)으로 확장하였다. 그리고, 상세한 광계측 데이터가 존재하는 비예혼합 수소제트화염에 대한 수치해석결과를 실험결과와의 자세한 비교함으로써 본 난류연소모델의 예측능력을 검증하는 동시에, 수소제트화염내의 NO 생성에 미치는 비평형 화학반응, 복사열손실의 영향을 상세히 고찰하였다.

2. Laminar Flamelet 모델

2.1. Peters 방정식

모든 화학종의 동일한 분자확산을 가정한다면, 유동입자의 혼합상태는 다음과 같이 정의되는 혼합분율, Z 라는 한가지 보존변수에 의해 지배된다.

$$Z = \frac{Z_i - Z_{i,0}}{Z_{i,F} - Z_{i,0}} \quad (1)$$

여기서 Z_i 는 i 원자의 질량분율이다.

서론에서 언급한대로, Peters는 층류화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 묘사할 수 있는 다음과 같은 지배방정식을 유도하였다[3].

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

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = c_p \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^K \frac{h_k \dot{w}_k}{\rho} \quad (3)$$

여기서, χ 는 다음과 같이 정의되는 스칼라소산율(scalar dissipation rate)이다.

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \quad (4)$$

많은 연구에서 식(2)와 (3)가 사용되어 왔으나, 최근 Ferreira는 식(3)가 c_p 가 일정하다는 조건하에 유도된 점을 고려하여 다음과 같이 개선된 에너지 방정식을 제안하였다[4].

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^K h_k \left(\frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{w}_k}{\rho} \right) \quad (5)$$

식(5)는 Peters 변환을 적용한 보다 일반적인 에너지 방정식이며, $\partial c_p / \partial Z = 0$ 인 경우, 식(3)과 동일해진다.

Fig. 1은 식(3)과 (5)의 차이를 살펴보기 위해 수소화염에 대한 각각의 예측결과를 실험데이터와 비교한 결과를 나타낸 것이며, 이를 통해 식(5)가 훨씬 실제에 가까운 결과를 예측함을 알 수 있다.

Peters 방정식에서 알 수 있듯이, 층류 화염면에서 반응물은 분자확산에 의해서만 화염면으로 수송될 수 있으며, 이를 지배하는 변수인 스칼라소산율, χ 는 확산에 의한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다. 난류유동에 의해 층류화염면이 신장되면 화염면의 주방향으로 구배가 커지므로 χ 의 증가로 나타나며, 이는 반응면으로의 분자확산을 증가시킨다. 이때, 반응면으로부터의 열전달 또한 증가하게 되며, 동시에 반응을 할 수 있는 체류시간이 감소하므로 온도는 감소하고 화학반응은 보다 불완전해진다. 이러한 불균형이 증가하다가, χ 가 일정한계를

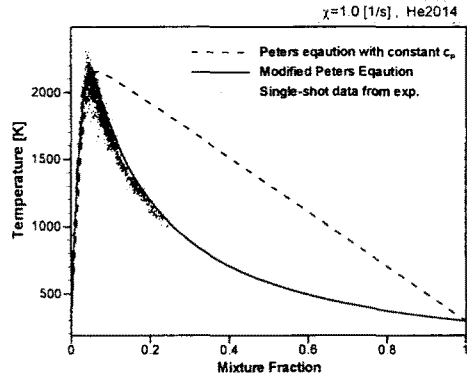


Fig. 1 The effect of variable c_p on the Peters energy equation

벗어나면 더 이상 반응이 유지되지 못하고 층류화염면은 소멸된다. 반대로 χ 가 0에 가까이 가면 층류화염면은 화학평형 상태에 다가감을 알 수 있다.

본 연구에서는 복사열손실을 고려한 비단열화염을 계산하기 위해서, 단열상태에서의 엔탈피와 실제 엔탈피의 차를 나타내는 엔탈피변수(enthalpy defect)를 도입하였다[5].

$$\zeta = h - [h_0 + Z(h_F - h_0)] \quad (6)$$

이때, $\zeta = 0$ 이면 단열화염조건을 나타내며 엔탈피는 혼합분율만의 일차함수로 나타나게 됨을 알 수 있다.

본 연구에서는 편중확산을 고려하지 않았으며, Lewis수를 1이라고 가정하였다. 이때, 식(2)와 식(5)에 의한 층류화염면내의 엔탈피 분포는 혼합분율에 대해 선형적으로 나타나게 된다. 따라서, 식(5)의 양쪽경계점인 연료와 산화체에 동일한 ζ 을 정의함으로써 층류화염면내에서 균일한 엔탈피손실을 가지게끔 할 수 있다.

2.2. 다중확률밀도함수

결과적으로, 비예혼합 난류화염장내의 한 지점은 다양한 스펙트럼의 스칼라소산율과 엔탈피손실을 갖는 층류화염편에 의해 순간적인 열화학적 상태가 정의되므로, 그 지점에서의 평균상태량은 층류화염편내의 혼합상태를 지배하는 혼합분을 Z , 비평형화학반응을 지배하는 스칼라소산율 χ , 그리고 비단열상태를 지배하는 엔탈피변수 ζ 의 다중확률밀도함수를 통해 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\tilde{\varphi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^1 \varphi(Z, \chi, \zeta) \cdot P(Z, \chi, \zeta) dZ d\chi d\zeta \quad (7)$$

Z 와 χ 그리고 ζ 가 각각 통계적으로 독립적(statistically independent)라 가정하면,

$$P(Z, \chi, \zeta) = P(Z) \cdot P(\chi) \cdot P(\zeta) \quad (8)$$

$P(z)$ 는 Beta 함수를 사용하였으며, χ 에 대해서는 다음과 같이 log-normal 분포를 가정하였다[6].

$$P(\chi) = \frac{1}{\chi \sigma \sqrt{2\pi}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\ln \chi - \mu)^2\right\} \quad (9)$$

식(9)에서 나타나는 파라미터, μ , σ 는

$$\tilde{\chi} = \exp(\mu + 0.5\sigma^2), \quad \sigma^2 = 2.0 \quad (10)$$

를 통해 결정하였다.

이때, 평균스칼라소산율은 다음과 같이 모델링하였다.

$$\tilde{\chi} = C_x \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \tilde{Z}^{-2}, \quad C_x = 2.0 \quad (11)$$

본 연구에서는 엔탈피변수 ζ 에 대해서는 난동성분의 영향을 무시한 delta PDF를 사용하였다.

$$P(\zeta) = \delta(\zeta - \tilde{\zeta}) \quad (12)$$

따라서, 평균엔탈피변수는 평균엔탈피를 통해 다음과 같이 구해진다.

$$\tilde{\zeta} = \tilde{h} - [h_0 + Z(h_F - h_0)] \quad (13)$$

이때, 평균엔탈피는 복사열전달등에 의한 생성항을 가지는 수송방정식을 통해 구한다.

2.3. 복사 및 NO 생성 모델

수소화염의 경우, 광학두께가 얇아서 복사열전달은 국부적인 방출(emission)에 의해서만 일어난다고 가정할 수 있다. 따라서, 단위체적당 열손실은 다음과 같이 계산할 수 있다[2,12].

Flame	He (vol%)	Renolds number	Exit Vel. (m/s)	Visible Flame Length(L)	f_{stoich}	T_{ad} [K]	X_{H_2O} in air
A	0	10000	296	180D	0.028	2430	0.0115
B	20	10000	294	150D	0.042	2360	0.013
C	40	8300	256	100D	0.064	2260	0.013

Table 1 Flame conditions and characteristics for the He-diluted H_2 flames

$$\nabla q_r = -4\sigma_B T^4 \sum (P_k \cdot a_{P,k}) \quad (14)$$

수소화염에서는 Zeldovich 메카니즘에 의한 thermal NO만이 생성된다고 할 수 있다. 따라서, NO 생성에 필요한 특성시간은 다른 화학반응의 특성시간보다 훨씬 크므로 laminar flamelet 모델의 기본 가정이 부적절하다. 따라서, NO 생성을 수소의 연소반응과 분리하여 후처리과정을 통해 구하였다. 이때, NO의 평균생성율은 식(15)과 (7)을 통해 구할 수 있다.

$$w_{NO} = M_{NO} (2K_{f_9} [N_2][O]) \quad (15)$$

여기서, $K_{f_9} = 1.84 \times 10^{14} \exp(-38370/T)$ $\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{s}$ 이다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 해석조건

본 연구에서는 복사열손실을 고려한 laminar flamelet 난류연소모델의 예측능력을 검증하기 위해 자세한 광계측데이터가 존재하는 비예혼합 수소난류제트화염을 해석하였다[7,8]. 지름 D가 3.75mm 인 연료노즐을 통해 헬륨으로 희석된 수소연료가 분사되고, 이때 주위공기의 속도 및 온도는 1m/s 와 294K이다. 자세한 해석조건은 Table 1에 나타내었으며, 공기에 포함된 H₂O가 전체 NO_x 배출지수 (NO_x emission index)의 예측에 영향을 미치므로[2] 실험으로부터 제안된 공기내의 수분을 고려하였다. X=1m 와 R=0.2m 인 계산영역을 80×60개의 비균일 격자계로 구성하였으며 본 연구에서 적용한 경계조건 및 수치모델은 참고문헌 12에서와 같다.

Reaction		A	b	E
R1	H+O ₂ = OH+O	2.00E14	0.00	70.30
R2	H ₂ +O = OH+H	5.06E04	2.67	26.30
R3	H ₂ +OH = H ₂ O+H	1.00E08	1.60	13.80
R4	OH+OH = H ₂ O+O	1.50E09	1.14	0.42
R5	H+H+M = H ₂ +M	1.80E18	-1.00	0.00
R6	H+OH+M = H ₂ O+M	2.20E22	-2.00	0.00
R7	O+O+M = O ₂ +M	2.90E17	-1.00	0.00
R8	H+O ₂ +M = HO ₂ +M	2.30E18	-0.80	0.00
R9	HO ₂ +H = OH+OH	1.50E14	0.00	4.20
R10	HO ₂ +H = H ₂ +O ₂	2.50E13	0.00	2.90
R11	HO ₂ +H = H ₂ O+O	3.00E13	0.00	7.20
R12	HO ₂ +O = OH+O ₂	1.80E13	0.00	-1.70
R13	HO ₂ +OH = H ₂ O+O ₂	6.00E13	0.00	0.00
R14	HO ₂ +HO ₂ = H ₂ O ₂ +O ₂	2.50E11	0.00	-5.20
R15	OH+OH+M = H ₂ O ₂ +M	3.25E22	-2.00	0.00
R16	H ₂ O ₂ +H = H ₂ +HO ₂	1.70E12	0.00	15.70
R17	H ₂ O ₂ +H = H ₂ O+OH	1.00E13	0.00	15.00
R18	H ₂ O ₂ +O = OH+HO ₂	2.80E13	0.00	26.80
R19	H ₂ O ₂ +OH = H ₂ O+HO ₂	5.40E12	0.00	4.20

Table 2 Reaction mechanism for H₂-air combustion (unit: mol, cm, s, K, kJ)

3.2. Flamelet Library

주어진 스칼라소산율 χ 과 엔탈피변수 ζ 을 가지는 층류화염편을 해석하기 위해서는 상미분연립방정식인 식(2)와 (5)을 정상상태 해를 구해야만 한다. 본 연구에서는 중앙차분을 통해 이산화한 각 미분방정식을 modified damped Newton 알고리즘[9]을 이용하여 풀었다. 이때, 수소의 연소반응을 모사하기 위해 Table 2에 나타낸 Wanartz등이 제안한 상세화학반응[10,12]을 사용하였다.

Table 1에 나타난 해석조건중 먼저 20%의 헬륨으로 희석된 수소화염에 대해 자세한 해석을 수행하였다. 0부터 무한대에 이르는 스칼라소산율의 적분구간은 거의 화학평형에 도달하는 $\chi = 0.01$ 에서부터 소염이 일어나기 직전인 $\chi = \chi_q$

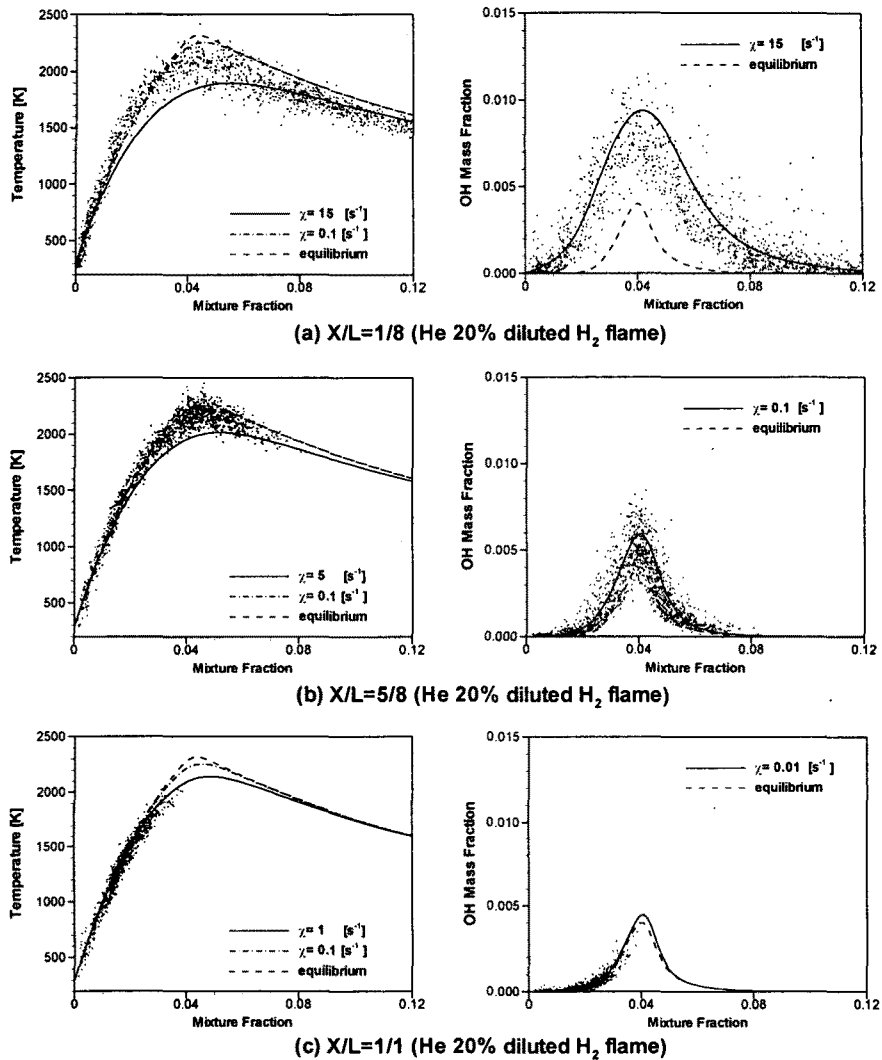


Fig. 2 The effects of scalar dissipation rate as nonequilibrium parameter on temperature and OH radical distributions based on the modified Peters equations (the scatter plots denote the instantaneous single-shot measurements)

까지의 연소영역과 χ_{inert} 인 소염영역으로 크게 구분하였으며, 연소영역은 19개의 지점으로 나누어 계산하였다. 단열화염 조건($\zeta = 0$)인 경우, $\chi_q = 479$ s⁻¹ 직후에서 소염이 일어났으며, 엔탈피변수에 따라 소염한계는 $\zeta = -20$ kJ/kg에서의 $\chi_q = 333$ s⁻¹까지 거의 선형적으로 감소하였다. 소

염영역 근처에서는 편중확산등의 영향이 크게 나타나므로, 위에서 계산된 소염한계값이 정확하지 않을 수도 있으나, 본 연구에서 해석한 수소화염의 경우 국소 소염이 일어나지 않는 화염조건하에서 수행된 실험이므로 계산결과에 큰 영향을 주지 않을 것으로 판단된다.

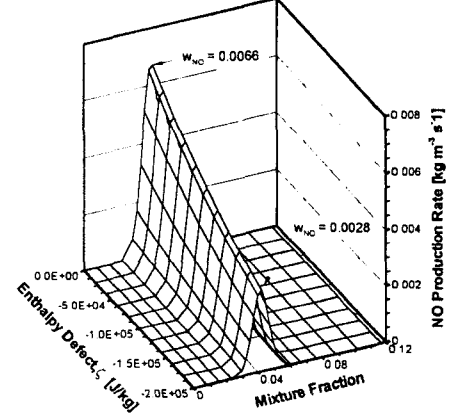
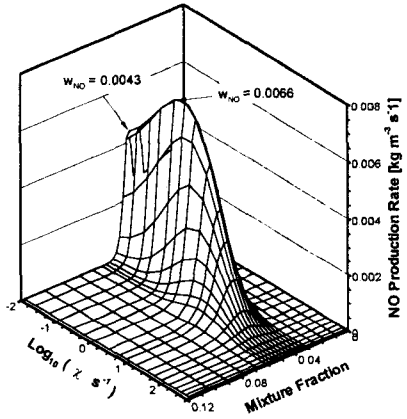
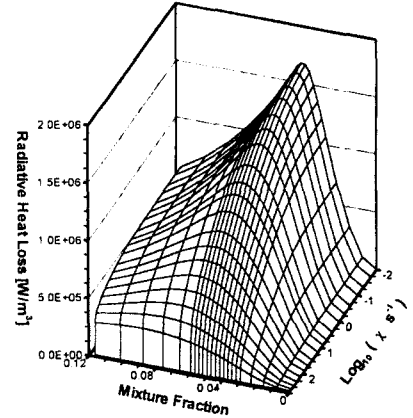
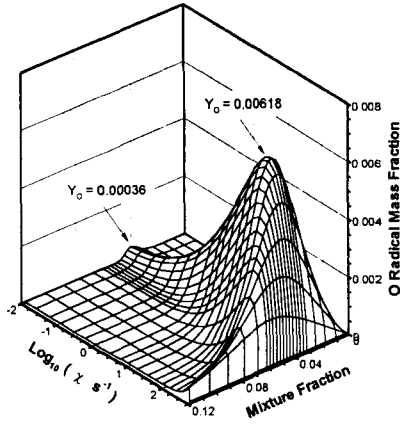


Fig. 3 Flamelet library for O radical and NO production rate at $\zeta = 0$

Fig. 4 Radiative heat loss at $\zeta = 0$ and NO production rate at $\chi = 0.5 \text{ s}^{-1}$

Fig. 2는 식(2)와 (5)를 통해 계산된 층류화염면내의 화염구조를 온도 및 OH 라디칼에 대한 single-shot 실험데이터와 비교한 결과이다. 우선 Fig. 2(a)에 나타난 $X/L=1/8$ 인 위치에서 실험결과를 보면 연료노즐 근방에서 일어나는 급격한 난류혼합으로 인하여 온도 및 OH 분포의 난동성분이 상당히 크게 나타나는 동시에 화학평형상태로부터 이탈이 현저함을 알 수 있다. 이것은 Table 2에 나타난 수소의 반응메카니즘을 통해 설명할 수 있다. two-body shuffle 반응 (R1)~R(4)으로부터 매우 빨리 생성된 라디칼 pool이

비교적 느리게 일어나는 three-body 재결합반응을 통해 소멸되어감으로서 전체 연소반응은 화학평형상태로 도달하게 된다. 따라서, 난류혼합의 특성시간이 라디칼들의 재결합반응의 특성시간보다 작게 된다면 라디칼들은 화학평형상태보다 큰 초과평형농도를 나타내게 되고 온도는 낮아지게 된다. 그러나, 보다 하류로 갈수록 난류혼합이 완됨에 따라 라디칼들의 재결합반응에 필요한 체류시간이 증가하면서 혼합기들의 상태는 보다 화학평형상태에 가까워지는 동시에 난동성분도 줄어들게 되고, 화염끝부분인

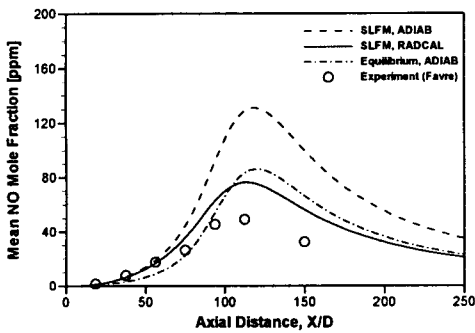
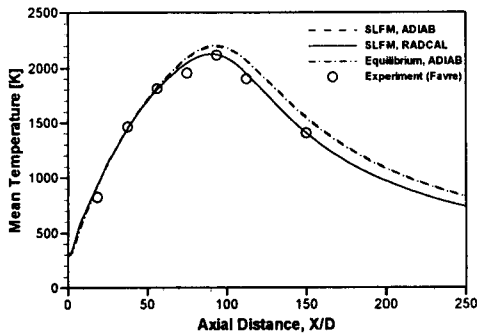


Fig. 5 Centerline profiles of mean temperature and NO (He 20% dilution)

$X/L=1/1$ 지점에서는 거의 화학평형상태에 도달함을 알 수 있다. 본 연구에서 계산된 층류화염면의 화염구조는 스칼라 소산을 χ 에 의해 이러한 비평형화학반응의 영향을 잘 반영하고 있음을 알 수 있다. NO 생성에 큰 영향을 미치는 O 라디칼 경우, OH보다 비평형화학반응에 훨씬 민감하게 나타난다. Fig. 3을 보면 O 라디칼의 최고농도가 평형농도에 비해 17배 가량 높게 나타나고 있음을 알 수 있다. χ 가 증가하면서 평형상태로부터 이탈함에 따라 온도는 감소하는 대신 O 라디칼이 증가하므로, 식(15)로 주어지는 thermal NO의 생성율은 대략 $\chi = 0.5 \text{ s}^{-1}$ 인 영역에서 최고치를 나타내고 있다.

Fig. 4는 단일화염상태에서 식(14)로

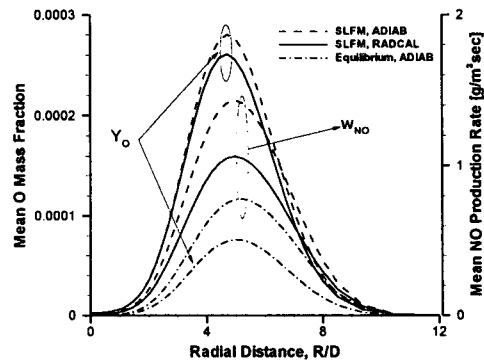
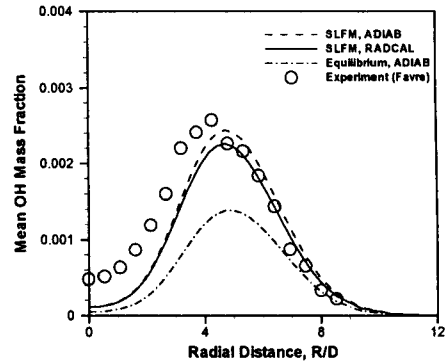
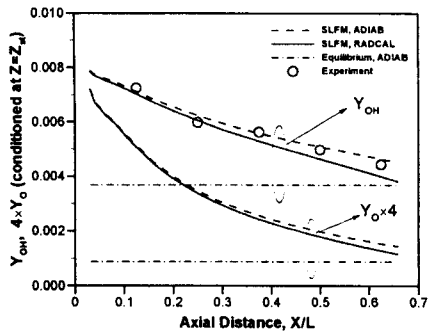


Fig. 6 Radial profiles of Radicals and NO production rate at $X/L=3/8$ (He 20%)

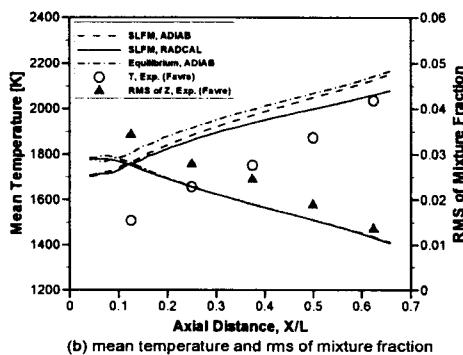
주어지는 복사열손실의 분포를 보여주고 있으며, 엔탈피손실, ζ 가 증가함에 따라 thermal NO 생성량은 거의 선형적으로 감소함을 나타내고 있다.

3.3. 비예혼합 수소 제트화염

Fig. 5은 Flame B (He 20%)의 경우, 중심축을 따른 평균온도 및 NO 분포에 대한 laminar flame 모델과 화학평형 (equilibrium)을 가정한 모델의 예측결과를 비교한 결과이다. 중심축온도는 stoichiometric line이 중심축과 만나는 $X=100D$ 인 지점에서 최고값을 나타내고, 후화염영역(post-flame region)으로 지나면서 NO 분포는 최고치를 갖게 된다. 우선



(a) Decays of superequilibrium radical concentrations



(b) mean temperature and rms of mixture fraction

Fig. 7 Comparisons along the mean stoichiometric mixture fraction line

복사열손실을 고려하지 않은 경우를 살펴보면 평균온도에 대해서는 화학평형모델과 laminar flame 모델의 예측결과는 큰 차이를 보이지 않으며 두 모델 모두 후화염영역에서의 온도를 약 150K까지 과대예측하고 있음을 알 수 있다. 이에 해당하는 NO의 최고농도는 화학평형모델의 예측결과가 이 약 30%정도 낮게 나타나고 있다. 복사열손실을 고려한 laminar flamelet 모델의 경우, 중심축온도에 대한 예측결과가 실험결과와 잘 일치하고 있으며, NO 분포에 대해서는 단열화염의 경우보다 최고치를 약 40%정도 낮게 예측하였으나 실험결과에 비해서는 다소 과대예측하는 결과를 나타내었다. 이러한 NO 예측결과를 자세히 고찰하기

위하여 Fig. 6에서는 $X/L=3/8$ 인 지점에서 반경방향으로 라디칼 및 NO 생성율의 평균분포를 비교하였다. OH에 대한 결과를 보면 laminar flamelet 모델은 초과평형농도를 잘 예측하고 있음을 알 수 있는 반면, 화학평형모델의 경우 약 36%정도 과소예측하고 있다. 이러한 차이는 O 라디칼의 경우 보다 현저해져서, laminar flamelet 모델이 3배 이상 높은 초과평형농도를 예측하고 있다. 따라서 NO의 생성향의 경우, 화학평형모델에 비해 laminar flamelet 모델의 예측결과가 두배 이상 크게 나타나며, 복사열손실을 고려한 경우 약 27%정도 낮아짐을 알 수 있다.

Fig.3에서도 알 수 있듯이 대부분의 thermal NO는 stoichiometry 근방의 좁은 영역에서 생성된다. 따라서, Fig. 7(a)에서는 $Z=Z_{st}$ 인 조건하에서 조건부평균을 취한 라디칼의 분포를 계산하였으며 실험결과와 비교해 보았다. 이때, 해석치는 축방향을 따라가며 평균혼합분율이 Z_{st} 에 해당하는 반경방향 위치에서 계산한 값이다. 연료노즐부근에서는 초과평형농도가 현저하게 나타나고 점차 하류로 갈수록 화학평형값으로 가까워지는 경향을 나타내고 있으며, 앞서 언급한 대로 O 라디칼의 감소율이 OH 보다 훨씬 크게 나타남을 알 수 있다. OH에 대한 실험결과와 비교하였을 때, laminar flamelet 모델은 축방향을 따른 초과평형농도의 감쇠율을 정확히 예측하고 있다. 따라서, 조건부평균값에 한해서는 laminar flamelet 모델이 비평형화학반응의 영향을 정확히 예측한다고 볼 수 있으므로, Fig. 5에서 나타난 NO 생성율의 과대예측결과를 연소모델의 한계로 단정짓기는 어렵다. Fig. 7(b)에 나타낸 평균혼합분율이 Z_{st} 인 선을 따라 혼합분율의 난동성분

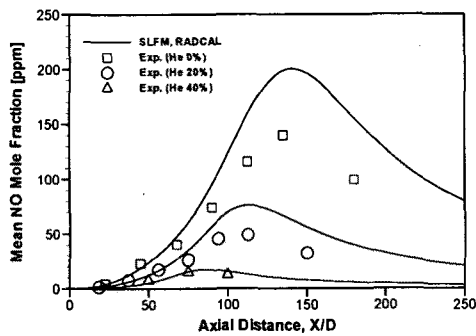
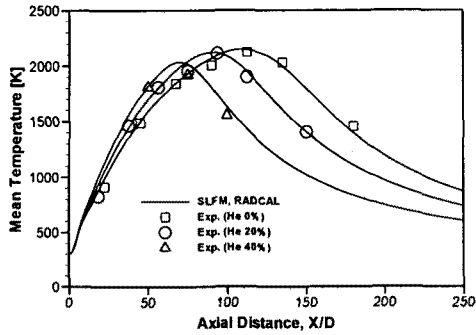


Fig. 8 The effects of helium dilution on the flame structure and NO formation

및 평균온도분포를 비교한 결과를 보면 예측결과는 상류지역에서 혼합분율의 난동성분을 과소예측하고 있으며, 이것은 평균온도가 100K정도 과대예측되는 데 기여함을 알 수 있다. 또한 여기에 나타내지는 않았지만 혼합분율의 평균값 및 난동성분의 반경방향분포를 비교한 결과, 본 연구에서 사용한 수정된 k-ε 난류 모델은 $X/L=3/8$ 까지의 상류영역에서 혼합분율의 반경방향 확산을 다소 과대예측하고 있으며, 이것은 반응층의 바깥영역에서 온도를 과대예측하는 결과를 가져옴을 알 수 있었다. 따라서, 복사열손실을 고려한 laminar flamelet 모델의 경우, NO 생성을 과대예측한 것은 상류영역에서 나타난 이러한 난류모델의 결함

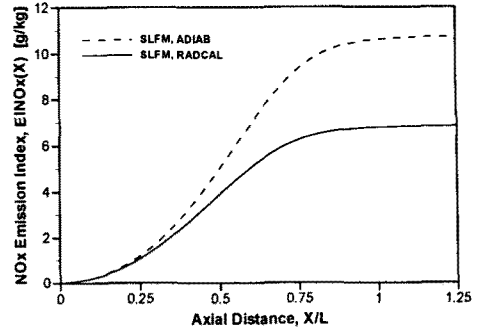


Fig. 9 Axial distribution of NO emission index predicted for He 20% dilution case

과 경계조건의 불확실성이 크게 기여하는 것으로 판단된다.

Fig. 8는 연료의 헬륨첨가에 따른 화염구조 및 NO 생성에 대한 변화를 나타낸 결과이다. Table 1에서도 보듯이, 헬륨첨가는 단일화염온도를 감소시키는 동시에 화학당론적 혼합분율을 증가시키므로, 중심축온도의 경우, 희석률이 높아짐에 따라 최고온도가 감소하고 화염길이 가 눈에 띄게 줄어드는 것을 알 수 있다. 또한 화염길이가 감소함에 따라 NO 생성에 필요한 체류시간의 줄어들게 되며, 이것은 화염온도의 감소와 함께 NO 생성을 현저히 감소시키는 역할을 한다.

Flame	He 0%	He 20%	He 40%
Experiment *	13	4.3	1.6
SLFM, ADIAB	36.02	10.54	2.03
SLFM, RADCAL	17.95	6.69	1.59

Table 3 Overall EINOx comparison [g/kg] : * denotes the result taken from Barlow's work [2]

본 연구에서 사용한 난류연소모델의 중심축온도에 대한 예측결과는 실험결과와 정량적 일치치를 보이고 있으며, 헬륨첨가에 따른 NO 생성량의 급격한 감소를 정성적으로 잘 예측하였다.

Fig. 9는 Flame B에 대해 축방향을 따른 NOx 배출지수의 분포를 나타낸 결과이다. 이를 통해 대부분 NO가 $X/L=0.3$ 에서 0.7사이의 영역에서 생성됨을 알 수 있으며, $X/L=0.8$ 인 지점 이후에서는 거의 변화가 없음을 알 수 있다. 본 연구에서 무시한 편중확산의 영향은 연료노즐 부근의 매우 높은 농도구배를 가지는 영역에서만 한정적으로 나타나므로 전체적인 NO 생성에는 영향을 주지 않을 것으로 판단된다.

헬륨의 희석정도에 따라 복사열손실이 NO 생성에 미치는 영향을 평가하기 위해 전체 NOx 배출지수에 대한 결과를 Table 3에 나타내었다. 여기서, 실험치는 참고문헌 2에서 인용하였다. 복사열손실을 고려한 경우, Flame A, Flame B, 그리고 Flame C에 대하여 NO 생성량에 대한 예측결과는 각각 50, 37, 그리고 22%정도 감소하였으며, 이것은 헬륨의 첨가량이 증가할수록 화염온도가 낮아지고 화염면적이 줄어들게 되므로 점차 복사열전달의 영향이 줄어드는 것을 알 수 있다.

마지막으로 본 연구에서 사용한 복사모델의 정확도를 평가하기 위하여 연소과정을 통해 방출되는 현열엔탈피에 대한 전체 복사열손실의 비로서 복사분율(radiant fraction)을 정의하였다[2]. Table 4는 세가지 화염조건에 대해 복사분율을 비교한 결과이다. 이때, 실험치들은 참고문헌 2에서 밝혔듯이 정확한 값이라기보다는 기준값으로 보는 것이 타당하다. 헬륨 첨가량이 증가할수록 전체 복

Flame	He	He	He
	0%	20%	40%
Measured ※ (sapphire window)	6.1	3.8	2.0
Measured ※ (ZnSe window)	9.5	~5.9	~3.1
SLFM, RADCAL	11.50	7.93	4.16

Table 4 Comparison of radiant fractions: ※ denotes the result taken from Barlow's work [2]

사열손실은 현저하게 감소하는 경향을 나타내고 있으며, 본 연구에서 사용한 복사모델이 다소 과대예측을 하고는 있으나 얇은 광학두께를 갖는 화염이라는 가정이 타당함을 알 수 있다.

4. 결론

(1) 수정된 Peters 방정식을 통하여 계산한 층류화염편의 화염구조는 실험결과와 잘 일치하였으며 스칼라소산율을 파라미터로 하여 비평형화학반응 및 라디칼의 초과평형농도의 변화를 잘 예측하였다.

(2) 엔탈피손실을 도입하여 복사열손실을 고려한 비단열화염계산으로 확장할 수 있었으며 복사열전달을 고려한 경우 중심축 평균온도에 대한 예측결과는 실험치와 정량적으로 일치하였고, NO 생성에 대한 예측능력을 크게 향상시킬 수 있었다.

(3) 본 연구에서 사용한 난류연소모델은 상류에서 현저하게 나타나는 라디칼의 초과평형농도가 하류로 가면서 화학평형상태로 도달하는 감쇠율을 정확히 예측하였다.

(4) 헬륨첨가가 화염구조 및 NO 생성에 미치는 영향을 비교적 정확히 예측할 수 있었다. 그러나, 상류영역에서 반경방향 확산을 과대예측하는 난류모델의 결합으로 NO 생성에 대한 예측결과는 실험치에 비해서 다소 크게 나타났다.

(5) 얇은 광학두께를 갖는 화염이라는 가정한 복사모델은 전체 복사열손실을 다소 과대예측하고는 있으나 수소제트화염에 적용이 가능함을 알 수 있었다.

참고문헌

- (1) The International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames, <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- (2) Barlow, R. S., Smith, N. S. A., Chen, J. Y., and Bilger, R. W. (1999) Nitric Oxide Formation in Dilute Hydrogen Jet Flames: Isolation of the Effects of Radiation and Turbulence-Chemistry Submodels Combustion and Flame, 117, 4.
- (3) Peters, N. (1984) Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, Prog. Energy Combust. Sci., vol. 10, pp.319-339.
- (4) Ferreira, J. C. (1996) Flamelet modelling of stabilization in turbulent non-premixed combustion, PhD Thesis, ETHZ Zuerich Switzerland.
- (5) Marracino, B. and Lentini, D. (1997) Radiation modelling in Non-luminous nonpremixed turbulent flames, Combust. Sci. and Tech., vol. 128, pp. 23-48.
- (6) Lentini, D. (1994) Assessment of the stretched laminar flamelet approach for nonpremixed turbulent combustion, Combust. Sci. and Tech., vol. 100, pp. 95-122.
- (7) Barlow, R. S. and Carter, C. D. (1996) Relationships among nitric oxide, temperature, and mixture fraction in hydrogen jet flames Combustion and Flame, 104, 288.
- (8) Barlow, R. S. (1996) Sandia H2/He Flame Data - Release 1.0
- (9) Grcar, J. F. (1992) The twopnt program for boundary value problems, Sandia Report, SAND91-8320, Livermore.
- (10) Warnatz, J., Maas, U., and Dibble, R. W. (1996) Combustion, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- (11) Lutz, A., Kee, R. J., Grcar, J. F., and Rupley (1996) OPPDIF: A Fortran program for computing opposed-flow diffusion flames, Sandia Report, SAND96-8243, Livermore.
- (12) Kim, S. K., Kim, Y. M., Ahn, K. Y. and Oh, K. (1999) Detailed structure and NOx formation characteristics of turbulent nonpremixed flames, The 2nd Asia-Pacific Conference on Combustion, Tainan, Taiwan.