

분류 및 대향류 확산 소화염의 구조 및 NO_x 생성특성 비교 검토

오창보*, 김종수*, 이창언**, 이기만***

A Study on Structures and NO_x Formation Characteristics in Coflow and Counterflow Diffusion Flamelet

C. B. Oh*, J. S. Kim*, C. E. Lee**, K. M. Lee***

Key Words: Coflow Flame, Counterflow Flame, NO_x Formation, Laminar Flamelet Model.

Abstract

Flame structures and NO_x formation characteristics in the flamelets of coflow and counterflow diffusion flame are numerically studied. Calculations were carried out twice with the C₂-Full and C₂-Thermal Mechanism for each flame. Mixture fractions and scalar dissipation rates are used as the parameters to compare the flamelet structures and NO_x formation characteristics quantitatively. It was found that there is a similarity in flame temperature and stable species profiles except radical profiles between two flamelets. And there are some differences in NO_x concentration and production rates. These results imply that the flow effects must be considered in calculations for NO_x formation of turbulent flames using Laminar Flamelet Model.

1. 서 론

최근에 계산기의 성능 향상과 새로운 수치계산법의 발전에 힘입어 연소장의 종합적인 정보를 획득하기 위한 수치계산적 연구가 활발하게 진행되고 있다. 그중에서 층류화염에 대한 계산은 축적

된 다성분 전달물성치 (Multicomponent Transport Property)와 상세반응기구 (Detailed Reaction Mechanism)를 이용하여 상당히 정확히 예측하는 단계에 이르고 있다. 또한 난류화염에 대한 수치 예측능력도 많이 향상되어 연소장 해석에 많은 기여를 하고 있으나, 아직까지 난류화염에서 오염물질 생성까지 포함한 수치계산은 계산기 성능, 모델링 측면에서 미흡한 점이 많다. 따라서 이들 난류화염을 보다 정확히 예측할 수 있는 발전된 계산법과 연소모델의 개발이 시급한 실정이다.

현재까지 난류 확산화염의 연소모델

* 인하대학교 기계공학과 대학원

** 인하대학교 기계공학과

*** 전남 도립 담양대학교 기계공학과

⁽¹⁾⁽²⁾로서는 보존스칼라(Conserved Scalar Approach)법이 많이 사용되어 왔다. 그러나 이 모델은 선택확산(Differential Diffusion)에 의해 영향을 받는 오염물질 생성 및 소멸(Extinction)과 같은 비평형현상(Nonequilibrium Phenomena)을 적절히 표현하지 못하는 결점이 있다⁽³⁾. 따라서 최근에는 연료의 상세한 반응과정, 난류에 의한 연료-공기 혼합과정, 반응과 유동간의 상호작용을 종합적으로 고려할 수 있는 연소모델로서 소위 층류소화염 모델(Laminar Flamelet Model)^{(3)~(5)}에 대해 많은 연구가 진행 중이다.

층류소화염모델이란 난류화염에서 국부적으로 불규칙하게 변동하는 화염구조가 층류 소화염의 집합체로 이루어져 있으며, 이 소화염(Flamelet)들의 구조는 동일한 스칼라 소산율(Scalar Dissipation Rate)을 갖는 층류화염의 구조와 일치한다고 가정하는 것이다. 층류소화염모델을 이용하여 난류 연소장을 수치계산하기 위해서는 연료와 산화제의 혼합정도를 나타내는 혼합분율과 화염신장(Flame Stretch)의 정도를 나타내는 스칼라 소산율에 따른 화학종 농도 및 온도 등의 화염구조를 미리 데이터 베이스화 할 필요가 있다. 이 데이터 베이스화의 방법으로는 통상적으로 연료의 상세반응기구, 전달물성치를 이용한 층류화염의 계산결과를 이용하고 있으며, 계산대상 층류화염으로서는 산화제 및 연료의 주흐름 방향이 화염면에 수직인 준1차원 대향류 화염을 주로 이용하고 있다. 그러나 이와 같은 1차원 화염구조가 난류 연소장의 소화염 구조를 적절히 표현할 수 있을지, 또한 다차원 유동 형태를 갖는 화염과의 차이는 없는지에 대해 많은 의문들이 제기되고 있다⁽⁶⁾. 본 연구실에서도 층류소화염모델을 이용하여 난류화염에

대한 수치계산 연구를 위하여 소화염 구조에 대한 데이터 베이스화를 진행하고 있는데, 대향류화염과 분류화염중 어떠한 화염이 소화염으로 적합한지에 대해 연구할 필요성을 느끼게 되었다. 이와 유사한 연구로 Smooke⁽⁶⁾와 Nishioka⁽⁷⁾는 대향류화염과 간단한 화염형태를 가지면서 유동의 다차원효과를 관찰할 수 있는 축대칭 분류 확산화염을 대상으로 비교 연구를 수행하였다. 이들 결과에 의하면 NO 및 NO₂ 농도 분포에 있어서는 두 화염간에 차이를 보이고 있으나, 온도 및 주요 화학종 분포는 잘 일치하고 있어 대향류 화염으로도 다차원 화염을 예측할 수 있음을 지적하고 있다. 그러나 Nishioka는 분류화염 상류의 화염면에 수직인 실제 좌표를 사용하여 화염구조를 해석하였는데, 층류화염소모델에 이용하기 위해서는 스칼라 소산율과 혼합분율을 이용하여 화염구조를 해석해 볼 필요가 있다. 그리고 NO 및 NO₂ 농도 분포의 차이에 대해서는 각 반응기구의 역할을 고려하여 자세히 검토할 필요가 있다.

위와 같은 배경 하에 본 연구에서는 NOx생성까지 포함한 Miller와 Bowman의 반응기구⁽⁸⁾를 이용하여 대향류와 분류 확산화염에 대한 수치계산을 수행하고, 그 계산결과들을 층류소화염모델의 데이터 베이스로 사용할 수 있도록 혼합분율과 스칼라 소산율을 도입하여 비교 검토함으로써, NOx 생성특성을 포함한 두 화염구조간의 차이점을 관찰하고, 난류화염의 연소 모델에 필요한 기초자료를 제공하고자 한다.

2. 계산대상 화염

2.1 분류화염

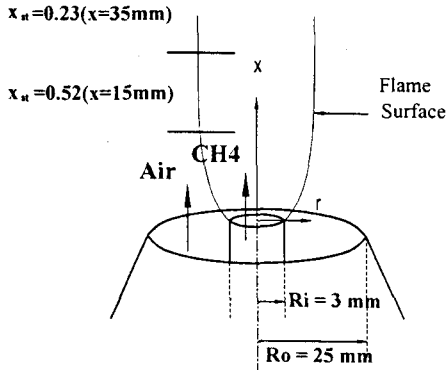


Fig.1 Schematic of coflow diffusion flame combustor

분류화염의 계산 대상은 Fig. 1과 같이 직경 6mm인 연료 노즐과 그와 동축으로 설치된 직경 50mm인 주위류 노즐로 구성된 연소기에서 형성되는 CH₄ 층류화염으로 하였다. 이러한 축대칭 분류화염은 경계층근사가 가능하므로 2차원 포물선형(Parabolic) 편미분방정식을 이용하여 계산을 수행하였다. 지배 방정식 및 계산방법에 대해서는 문헌(9)에 자세히 설명되어 있으므로 여기서는 생략하겠다.

본 연구에서는 대향류와 분류화염에서 형성되는 소화염 구조 및 NOx 생성의 차이점을 정량적으로 비교 검토하기 위하여 분류화염의 소화염으로는 Fig. 1에 도시한 두 단면을 이용하였다. 분류화염의 소화염은 원칙적으로 화염면에 수직인 단면을 이용해야 하지만, 온도분포로 확인한 결과, 본 연구에서 선택한 단면은 화염면과 거의 수직한 단면이므로 화학종 농도 및 온도 등의 값은 그대로 이용하였다.

2.2 대향류화염

대향류 화염은 Fig. 2와 같은 반경 R 인 원통 다공형 연소기(Tsuji⁽¹⁰⁾ 버너)로

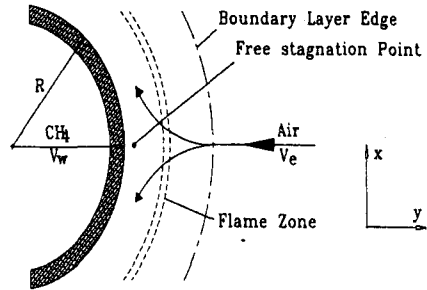


Fig. 2 Schematic of counterflow diffusion flame combustor

부터 y방향으로 CH₄ 연료가 V_w 속도로 분출되며, 반대 방향에서 V_e의 속도로 공기가 분출되면서 형성되는 층류화염이다. 이러한 대향류 화염형태의 지배 방정식은 식(1)~(3)으로 정의된 무차원 속도 f, V 및 밀도가중(Density-Weighted) y축 좌표 η를 도입하면 다음과 같은 방정식으로 단순화시킬 수 있다⁽¹¹⁾.

$$f = \frac{u}{u_e} \tag{1}$$

$$V = \frac{\rho v}{\sqrt{\rho_e \mu_e a}} \tag{2}$$

$$\eta = \sqrt{\frac{a}{\rho_e \mu_e}} \int_0^y \rho dy \tag{3}$$

질량보존식

$$f + \frac{dV}{d\eta} = 0 \tag{4}$$

운동량보존식

$$\begin{aligned} (f')^2 + V \frac{df}{d\eta} - \frac{\rho}{\rho_e} \\ = \frac{d}{d\eta} \left(C \frac{df}{d\eta} \right) \end{aligned} \tag{5}$$

화학종보존식

$$V \frac{dY_i}{d\eta} - \frac{\dot{m}_i M_i}{\rho a} + \frac{1}{\sqrt{\rho_e \mu_e a}} \frac{d}{d\eta} (\rho Y_i V_{in}) = 0 \quad (6)$$

에너지보존식

$$V \frac{dT}{d\eta} = \frac{1}{\rho_e \mu_e c_p} \frac{d}{d\eta} \left(\rho \lambda \frac{dT}{d\eta} \right) - \frac{1}{c_p \sqrt{\rho_e \mu_e a}} \sum_{i=1}^n \rho Y_i V_{in} c_{pi} \frac{dT}{d\eta} - \frac{1}{\rho a c_p} \sum_{i=1}^n \dot{m}_i M_i h_i \quad (7)$$

위 식들에서 a 는 화염의 접선방향의 속도구배, c_p 는 혼합물의 정압비열, μ 와 λ 는 혼합물의 점성계수와 열전도도, C_p 와 h_i 는 화학종 i 의 비열과 엔탈피, M_i 와 Y_i 는 화학종 i 의 분자량과 질량분율이다. V_{in} 는 화학종 i 의 확산속도,

\dot{m}_i 는 단위 체적당 화학종 i 의 생성율이다. 위의 보존식에서 복사 열전달 및 Soret 효과는 무시하였다. 두 화염의 수치계산에 필요한 열역학적 물성치 및 전달물성치는 미국 Sandia Laboratory에서 개발한 CHEMKin과 TRANFIT Package⁽¹²⁾⁽¹³⁾를 이용하여 계산하였다.

3. 계산방법

3.1 분류화염

축대칭 분류화염의 계산에는 Spalding의 GENMIX Code⁽¹⁴⁾를 기본으로 하여, 열역학적 물성치와 전달 물성치는 CHEMKin과 TRANFIT Package를 이용할 수 있도록 개량하여 사용하였다. 계

산조건은 CH₄ 연료와 주위류인 공기유속이 각각 0.5m/s, 0.3m/s 이며, 노즐 초기 온도는 연료 및 주위류 모두 300K로 하였다.

3.2 대향류화염

대향류 화염의 계산에는 적응 격자법(Adaptive Gridding Method)과 감쇠 뉴턴 알고리즘(Modified Newton Algorithm)을 사용한 Rogg의 RUN-1DL Code⁽¹¹⁾를 사용하였다. RUN-1DL을 실행시키기 위한 초기 데이터는 화염면 모델(Flame Sheet Model)을 이용하였으며, 스트레인을(Strain Rate)을 변화시키면서 계산을 수행할 때는 전(前)단계의 계산결과를 다음 단계의 초기 데이터로 사용하였다. 대향류 확산화염에 대한 연료측과 산화제측의 경계조건은 다음과 같다.

$\eta=0$ 일 때(연료측),

$$X_{CH_4} = 1, X_{k \neq CH_4} = 0$$

$$T_w = 300K$$

$$v_w = 0.05m/sec$$

$$f = 0$$

$\eta = \eta_e$ 일 때(산화제 측),

$$X_{O_2} = 0.21, X_{N_2} = 0.79, X_{k \neq N_2, O_2} = 0$$

$$T = 300K$$

$$f = 1$$

계산에 이용된 반응기구는 두 화염 모두 Miller와 Bowman의 반응기구⁽⁸⁾이다. 이 반응기구는 CH₄의 산화반응을 C₂ 반응까지 묘사하고 있는 것으로서, 51개의 화학종과 235개의 가역반응으로 구성되어 있으며, NO_x 반응경로도 구체적으로

잘 묘사하고 있다. 본 연구에서는 각 화염에서의 NO_x 생성에 미치는 Thermal NO 및 Prompt NO 기구의 역할을 분리하여 검토하기 위해 다음과 같은 Nishioka 반응기구 분리법⁽¹⁵⁾을 이용하여 두 번 계산을 수행하였다. Nishioka 분리법은, 우선 원래의 Miller와 Bowman의 반응기구(이하 C₂-Full Mechanism으로 칭함)로 계산한 NO를 Full NO로 정의하며, 다음으로 C₂ 반응에 Thermal NO 반응만을 포함시켜 36개 화학종과 154개의 가역반응으로 이루어진 반응기구(이하 C₂-Thermal Mechanism으로 칭함)로 계산한 NO를 Thermal NO라 정의하였다. 그리고 위 Full NO에서 Thermal NO를 뺀 값을 Prompt NO로 정의하여 NO 생성에 미치는 Prompt NO 기구와 Thermal NO 기구의 역할을 검토하였다. 그리고 대항류와 분류화염에서 형성되는 소화염 구조 및 NO_x 생성의 차이점을 정량적으로 비교하기 위한 파라메타로는 (8)식과 같이 정의된 혼합분율(Z)과 (9)식과 같이 정의된 양론 혼합비에서의 스킨라 소산율(χ_{st})을 이용하였다.

$$Z = (Z_C + Z_H) / 2 \quad (8)$$

$$\chi_{st} = (2\lambda / \rho C_p) (\nabla Z)_{st}^2 \quad (9)$$

여기서 Z_C 와 Z_H 는 각각 탄소와 수소를 Conserved Scalar로 사용한 경우의 혼합분율을 의미한다.

4. 계산결과 및 고찰

4.1 소화염 구조의 비교 검토

Fig. 3, 4는 본 연구에 이용한 분류 및

대항류 소화염에 대한 계산 결과의 타당성을 검토하기 위해 도시한 것이다. Fig. 3은 분류 확산화염에 대한 Mitchell⁽¹⁶⁾의 실험(축방향 거리 12mm 단면)를 대상으로 계산한 결과를 도시한 것이다. 계산 결과를 보면, 화학종 농도분포는 중심축 부근에서 약간의 차이가 있으며, 또 화염온도도 중심축 부근과 최고 온도값에서 다소 상이한 경향이 있으나, 계산 결과는 전체적으로 실험치를 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. Fig. 4는 대항류 확산화염인 Tsuji⁽¹⁰⁾의 실험을 대상으로 계산한 결과를 도시한 것으로, 실험결과와 스트레인이 100인 경우의 온도 및 속

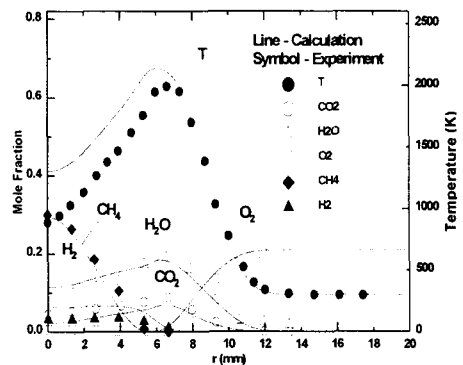


Fig.3 Comparison of numerical and experimental results (coflow flame)

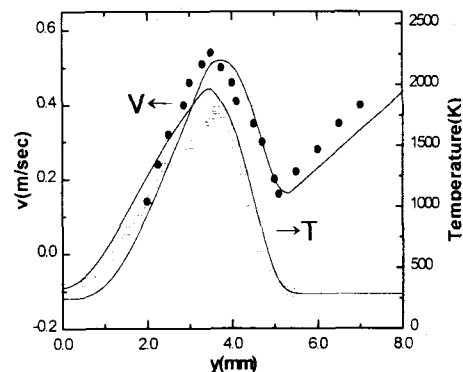
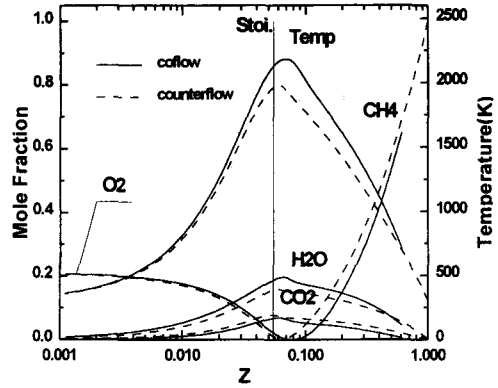
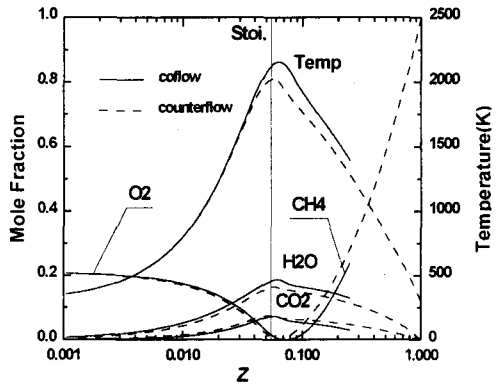


Fig.4 Comparison of numerical and experimental results (counter flame)

도분포를 나타내며, 그림에서 $y=0$ 인 점은 연소기 표면을 나타낸다. 이 경우에도 계산 결과는 전체적으로 실험치를 잘 예측하고 있다고 할 수 있다. 단 분류 및 대향류화염 모두 온도의 최고값에서 약 200K 정도 차이가 나는데, 이 차이는 온도측정 및 수치계산에 복사효과를 고려하지 않았기 때문인 것으로 사료된다. NO_x 농도에 대해서는 계산결과의 검토에 적합한 실험결과를 구할 수 없어 직접 비교할 수는 없었으나, 계산에 이용한 NO_x 반응기구는 이미 여러 화염을 대상으로 충분히 검증된 것이다. 위 비교 결과들로 미루어 볼 때 본 계산에서 얻어진 계산 결과를 이용하여 분류 및 대향류 소화염에서의 화염구조 및 NO_x 생성특성이 차이를 정성적으로 논하는 데에는 별 문제점이 없으리라 사료된다. Fig. 5, 6은 동일한 소산율을 갖는 분류 및 대향류 소화염의 구조를 혼합분율을 파라미터로 하여 비교한 것으로, 각 소산율의 괄호내 값은 분류 소화염 단면의 축방향 거리를 나타낸다. Fig. 5는 화염 온도 및 안정 화학종 농도를 도시한 것으로, 실선은 분류 화염, 점선은 대향류 화염의 경우이며, Z 축상의 세로 실선은 연료 공기 혼합비가 양론 혼합비($Z_{st}=0.0552$)인 곳으로 화염대를 의미한다. 그림을 살펴보면, 공기 과잉영역($Z=0\sim 0.0552$)에서는 온도 및 안정 화학종 모두가 거의 유사한 분포를 나타낸다. 그리고 연료 과잉영역($Z=0.0552\sim 1$)에서도 전체적인 분포경향은 유사하나, 정량적인 측면에서 다소 차이가 있다. 즉, 분류의 경우가 대향류화염에 비해 온도 및 생성물인 H₂O의 농도가 다소 높게 나타



(a) $\chi_{st}=0.52(15\text{mm})$



(b) $\chi_{st}=0.23(35\text{mm})$

Fig.5 Concentration of stable species and temperature (coflow : line, counterflow : dashed line)

나고, 연료인 CH₄ 농도는 다소 낮게 나타나고 있음을 알 수 있다. 이들 분포로부터 연료 과잉영역에서는 분류화염의 경우가 대향류화염에 비해 연료의 산화가 더욱 활발히 진행되고 있음을 알 수 있다. 그런데 생성물중의 하나인 CO₂의 농도분포를 살펴보면 오히려 대향류의 경우가 분류화염에 비해 약간 높게 나타나고 있음을 알 수 있는데, 그 이유에 대해서는 Fig. 6에서 설명하겠다. 그림 (a), (b)를 비교해 보면 앞에서 언급한

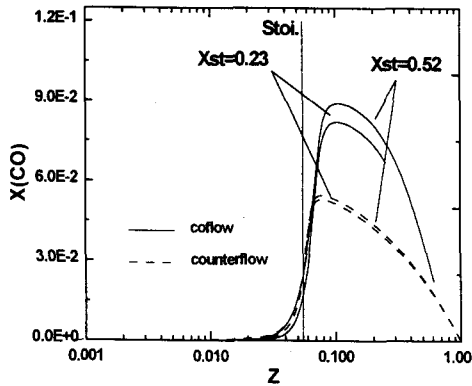
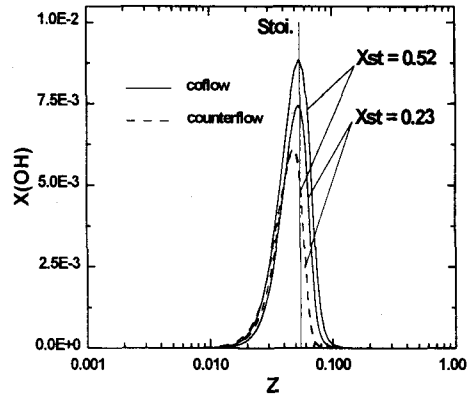
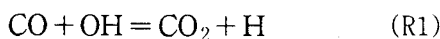
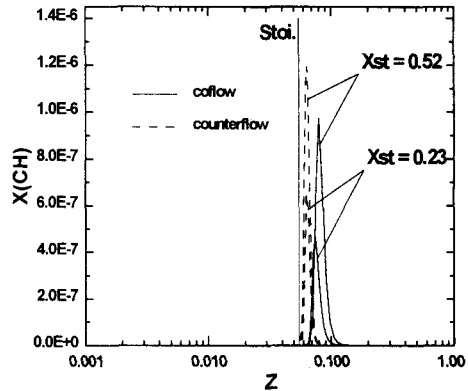


Fig.6 CO concentration (coflow : line, counterflow : dashed line)

경향은 스칼라 소산율이 변하여도 별차이는 없으나, 소산율이 증가할수록 즉, 화염이 신장될수록 화염대 내측에서의 각종 농도 및 온도 분포의 차이가 증가함을 알 수 있다. Fig. 6은 위 두 소화염의 CO 농도를 비교한 것으로, CO 농도의 경우도 화염대 외측의 공기 과잉영역에서는 두 농도분포가 거의 일치하지만, 화염대 내측에서는 분류화염의 CO 농도가 대항류화염에 비해 상당히 높게 예측되며, 또 소산율이 증가할수록 두 화염간의 농도차는 더 커짐을 알 수 있다. CO 및 CO₂의 농도는 아래의 (R1) 반응에 많은 영향을 받게 되는데, 이 CO-OH 반응은 CH₄가 존재하는 영역에서는 (R2)의 CH₄-OH 반응에 비해 느리다⁽¹⁷⁾. 분류화염에서는 CH₄의 산화가 대항류화염보다 활발하므로 (R2)가 (R1)보다 중요하게 되어 Fig. 5, 6에서 보는 바와 같이 CO 농도는 대항류보다 높고, CO₂ 농도는 낮게 예측되는 것으로 판단된다.



(a)OH concentration



(b)CH concentration

Fig.7 Concentration of OH and CH radical (coflow : line, counterflow : dashed line)

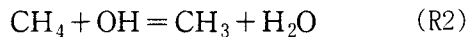
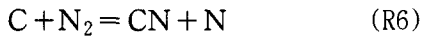
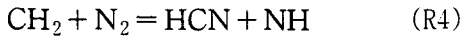
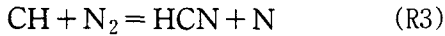


Fig. 7의 (a)에는 앞에서와 마찬가지로 소산율이 0.23, 0.52인 대항류 및 분류화염에서 CH₄의 산화과정에서 중요한 역할을 수행하는 OH 및 CH 라디칼의 농도분포를 도시하였다. 여기서 CH라디칼은 아래의 Prompt NO 개시반응 (R3)~(R6)중에서 가장 중요한 역할을 하는 (R3)반응에 관여하고 있어, Prompt NO

의 생성특성을 파악하는데 필요한 화학종이다⁽²⁾.



그림을 보면 OH 및 CH 라디칼의 전체적인 분포경향은 서로 비슷하지만, 존재 영역은 분류화염의 경우가 대향류화염보다 연료 과잉영역으로 이동되며, 절대치에 있어서는 분류화염의 경우가 OH 농도는 다소 높게 나타나며, CH 농도는 반대로 다소 낮게 나타나고 있음을 알 수 있다. 일반적으로 OH 라디칼이 존재하는 영역은 반응영역과 일치하며, 농도가 높을수록 연료 산화반응이 활발해진다. 이 OH 농도 분포로부터 분류화염의 경우가 대향류화염에 비해 좀 더 과농한 영역으로 반응영역이 확대됨과 동시에 반응이 촉진됨을 알 수 있다. 그 결과로 CH 라디칼 농도분포도 대향류화염보다 연료 과잉영역으로 확대된다고 판단된다. 그리고 대향류화염의 경우에는 소산율이 변하여도 이들 라디칼의 존재 위치가 거의 변하지 않으나, 분류화염의 경우 라디칼의 존재 위치는 소산율에 따라 다소 차이가 있어 소산율 변화에 민감함을 알 수 있다. 이상의 소화염 구조에 대한 결과로부터, 유동형태가 다르더라도 혼합분율로 정리된 온도 및 안정 화학종의 전체적인 분포 경향은 대략 일치하는 것을 알 수 있었다. 단, 연료 과농 영역에서는 그 절대량에서 다소 차이가 나며, 특히 라디칼의 농도분포에서는 그

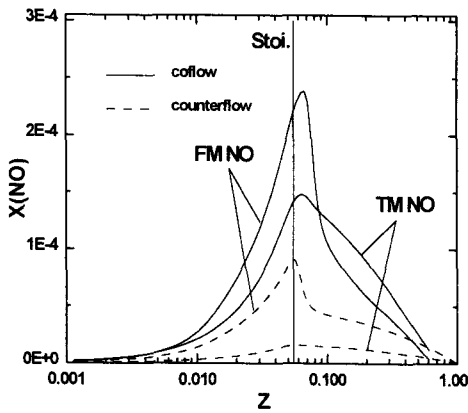
분포위치 및 최고치에 있어서 상당한 차이가 있음을 알았다. 이와 같은 차이는 두 소화염의 유동형태의 상이함에 기인하는 것으로 판단되나, 이를 보다 정확히 검토하기 위해서는 Budget 계산 등을 이용한 추가적인 연구가 필요할 것으로 판단된다. 그리고 위에 언급한 라디칼 농도분포의 차이는 공해물질의 생성특성에 많은 영향을 미치리라 예상된다.

4.2 NO 생성특성 비교 검토

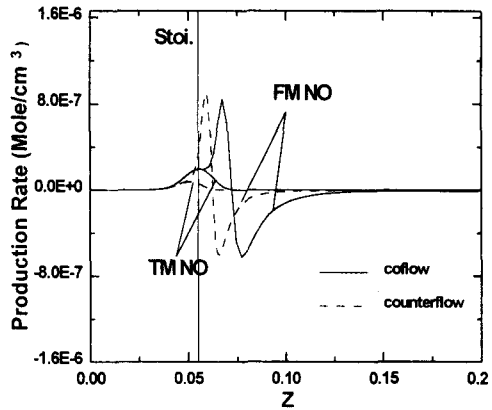
Fig. 8은 동일한 소산율을 갖는 대향류 및 분류 화염에서의 각종 NO 농도를 비교하여 도시한 것이다. 그림에서 TM NO는 C₂-Thermal Mechanism으로 계산한 Thermal NO를 의미하여, FM NO는 C₂-Full Mechanism으로 계산한 Total NO를 의미한다. 또한 Prompt NO는 FM NO에서 TM NO를 뺀 값으로 정의된다. 우선 점선으로 표시된 대향류화염의 분포를 살펴보면, 반응장 전 영역에 걸쳐서 Full NO가 Thermal NO보다 높게 예측됨을 알 수 있다. 그리고 소산율이 감소하면 즉 소화염이 평형상태로 접근하면 Thermal NO 농도가 상당히 증가함을 알 수 있다. 다음에 실선으로 표시된 분류화염의 분포를 살펴보면, Thermal NO, Full NO 농도가 대향류화염보다 높게 나타나고 있으며, 이 경우도 소산율이 감소하면 Thermal NO 농도가 약간 증가하고는 있으나 대향류화염보다 증가정도는 크지 않음을 알 수 있다. 그리고 두 소화염간의 NO 생성특성을 비교해 보면 현격한 차이가 있음을 알 수 있다. 즉, 대향류화염에서는 Full NO가 반응장 전 영역에서 Thermal NO에 비해 항상 높게 예측되고 있으나, 분류화염의 연료 과잉영역인 화염대 내측에서는 Full NO가 화

염대를 경계로 급속히 감소하여 Thermal NO보다 오히려 낮게 예측되는 농도분포의 역전현상이 나타나고 있음을 알 수 있다. Prompt NO 기구는 NO의 생성뿐만 아니라 소멸시키는 작용도 하는 것으로 알려져 있는데⁽⁷⁾⁽⁹⁾, 위에 언급한 역전 현상은 이 Prompt NO 기구에 의한 NO 소멸 작용이 분류화염에서 더 활발해짐을 의미한다. 이에 대해서는 다음의 각 NO 생성기구에 의한 NO 생성을 분포를

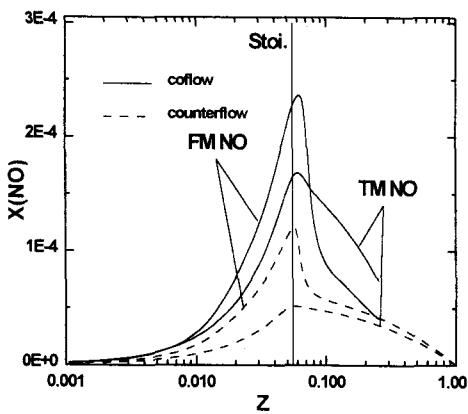
이용하여 자세히 설명하겠다. Fig. 9의 (a), (b)는 Full NO 및 Thermal NO 생성 기구에 의한 NO 생성율을 도시한 것으로, 여기서 Z 축은 앞 그림들과는 달리 로그좌표가 아니다. 우선 Thermal NO의 생성을 분포를 보면 두 화염 모두 반응장의 전 영역에서 항상 양의 값을 가지나, 그 절대치에 있어서는 분류화염의 NO 생성율이 대향류화염의 그것보다 높게 예측되고 있음을 알 수 있다. 이와



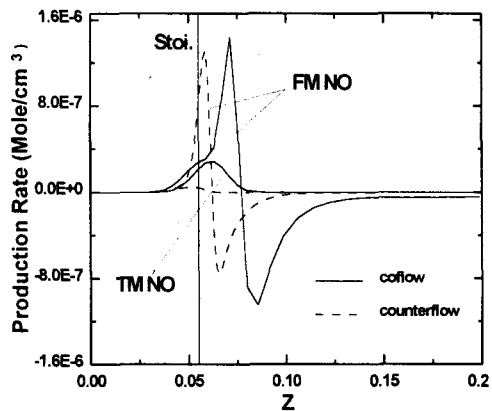
(a) $\chi_{st} = 0.52$



(a) $\chi_{st} = 0.52$



(b) $\chi_{st} = 0.23$



(b) $\chi_{st} = 0.23$

Fig.8 NO concentration (coflow : line, counterflow : dashed line)

Fig.9 NO production rates (coflow : line, counterflow : dashed line)

같이 분류화염의 Thermal NO 생성율이 높게 나타나는 이유는 앞에 기술한 화염 구조에서 보았던 것처럼 Thermal NO의 생성에 기여하는 OH 라디칼 농도 및 화염온도가 대항류화염에 비해 더 높기 때문인 것으로 보인다. 이러한 Thermal NO의 생성을 분포로 인해, Fig. 8에 도시한 바와 같이 분류화염의 Thermal NO 농도가 대항류화염보다 더 높게 예측되는 것으로 판단된다. 다음에 Full NO의 생성을 분포를 보면 화염대를 기준으로 산화제측에서는 양의 값을, 연료측에서는 음의 값을 갖는 경향은 두 화염에서 동일하다. 그러나 이 생성을 분포를 정량적으로 비교해 보면 생성과 소멸의 최고치들은 두 화염에서 대동소이하나 분포 영역에서는 큰 차이가 있으며, 특히 음의 분포 영역은 분류화염의 경우가 연료 과잉영역의 상당히 넓은 지역에 분포하고 있음을 알 수 있다. Full NO의 생성율이 음의 값을 갖게 되는 원인은 연료 산화 과정에서 생성되는 CH, CH₂, CH₃와 특히 HCCO 등의 화학종이 Prompt NO 기구에 의해 NO의 소멸에 기여하기 때문이며⁽⁷⁾⁽⁹⁾, Fig. 9의 Full NO의 음의 생성을 분포는, Fig. 8에 나타난 Full NO 농도의 급속한 감소현상 및 농도분포의 역전현상을 잘 설명해주는 것이라 생각된다. 특히 분류화염에서 Prompt NO 저감 효과가 더 큰 이유는 화염구조 비교에서 보았듯이 연료의 산화가 화염대 내부의 넓은 영역에서 활발하여 위에 언급한 화학종들의 농도가 더 높기 때문인 것으로 판단된다. NO₂에 대해서는 NO와 동일한 해석을 통하여 두 소화염간에 농도 및 생성특성에서 약간의 차이점 확인하였으나, 그 절대량이 최대 10ppm 정도로 NO 농도에 비해 매우 미소하기 때문에 자세한 내용은 생략하겠다.

5. 결론

본 연구에서는 CH₄ 분류 확산화염과 대항류 확산화염을 대상으로 NO_x 반응까지 포함하고 있는 상세반응기구를 이용하여 각각 수치계산을 수행하였다. 여기서 얻어진 결과를 이용하여 동일한 소산율을 갖는 두 소화염의 구조 및 NO_x 생성특성을 혼합분율을 파라메타로 하여 비교한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 혼합분율로 정리된 두 소화염 구조는 온도 및 안정 화학종의 전체적인 분포 경향은 대략 일치하나, 라디칼 농도 분포에서는 그 존재 위치에 상당한 차이가 있음을 알았다.

(2) 두 소화염의 NO 농도 분포에는 상당한 차이가 있으며, 또 NO의 생성에 기여하는 각종 반응기구의 기여도면에서도 차이가 있음을 알았다.

(3) 위 결과로부터 층류소화염연소모형을 이용하여 난류화염을 수치계산할 때 NO 농도를 정확히 예측하기 위해서는 소화염 구조에 유동효과를 고려해야 할 필요성이 있음을 알았다.

후기

본 연구는 한국과학재단 핵심전문 연구비(971-1005-030-1)지원으로 수행되었으며 도움을 주신 분들께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) F. C. Lockwood and A.S.Naguib, 1975, "The Prediction of the Fluctuation in the Properties of Free, Round-Jet, Turbulent, Diffusion Flames", *Comb. and Flame*, Vol.24, pp.109
- (2) R. W. Bilger, 1980, "Turbulent Flows with Nonpremixed Flames", 22nd Symp.(Int.) on Comb., pp.475
- (3) N. Peters, 1984, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion", *Prog. Energy Comb.Sci.*, Vol.10, pp.319-339
- (4) Peyman Givi, 1989, "Modeling-Free Simulation of Turbulent Reactive Flows", *Prog. Energy Comb.Sci.*, Vol.15, pp.1-107
- (5) D. C. Haworth, M. C. Drake and R.T. Blint, 1991, "Stretched Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent Jet Diffusion Flame", *Comb. and Flame*, Vol.83, pp.185
- (6) M. D. Smooke, Y. Xu, Zurn, P. Lin, J. H Frank and M. B. Long, 1992, "Computational and Experimental Study of OH and CH Radicals in Axisymmetric Laminar Diffusion Flames", 24th Symp.(Int.) on Comb., pp.813- 821,
- (7) M. Nishioka, Y. Takemoto, H. Yamashita and T. Takeno, 1996, "Effects of Multidimensionality on a Diffusion Flame", 26th Symp. (Int.) on Comb., pp.1071-1077
- (8) J. A. Miller and C. T. Bowman, 1984, "Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion", *Prog. Energy Comb. Sci.*, Vol.15, pp.287-338
- (9) 오창보, 이창언, 1998, "CH₄-공기 분류 확산화염의 NO_x 생성특성에 관한 수치해석", *대한기계학회논문집 B권*, 제22권, 제2호, pp.193-204
- (10) H., Tsuji and I. Yamaoka, 1971, 13th Symp.(Int.) on Comb., pp.723
- (11) B. Rogg and W. Wang, 1995, RUN-1DL, The Laminar Flame and Flamelet Code, User Manual
- (12) R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, 1989, "Chemkin-II : A Fortran Chemical Package for the Analysis of the Gas Phase Kinetics", Sandia Report SAND89-8009B
- (13) R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin, J. A. Miller, 1986, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of the Gas-Phase Multicomponent Transport Properties", Sandia Report SAND86-8246
- (14) D. B. Spalding, 1977, GENMIX : A General Computer Program for Two-Dimensional Parabolic Phenomena, Pergamon Press
- (15) M. Nishioka, S. Nakagawa, Y. Ishikawa and T. Takeno, 1994, "NO Emission Characteristics of Methane-Air Double Flame", *Comb. and Flame*, Vol. 98 , pp.127~138
- (16) R. E. Mitchell, A. F. Sarofim, L.A.C-lomburg, 1980, "Experimental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames", *Comb. and Flame*, Vol.37, pp.227~244
- (17) M. D. Smooke, A. A. Turnbill, R. E. Mitchell and Keyes, 1984, "Solution of Two-Dimensional Axisymmetric Laminar Diffusion Flames by Adaptive Bo-

oundary Value Methods", *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, C.-M. Brauner and C. Schmidt Laine' (Eds.), Martinus Nijhoff Publishers, p.261 ~ 300