

비에혼합 수소-공기 난류제트화염내의 NOx 생성특성 예측
(Prediction of NOx Formation Characteristics
in Turbulent Nonpremixed Hydrogen-Air Jet Flames)

김 성 구* (한양대 대학원), 김 용 모 (한양대 기계공학과)
안 국 영, 오 군 섭 (한국기계연구원)

S. K. Kim (Graduate School, Hanyang Univ.), Y. M. Kim (Hanyang Univ.)
K. Y. Ahn, K. S. Oh (KIMM)

Key Words : Hydrogen-Air Jet Flame, NO formation(NO 생성), nonequilibrium chemistry(비평형 화학반응),
Radiative Heat Loss(복사열손실), Reaction Progress Variable(반응진행변수), Joint PDF

ABSTRACT : Turbulent nonpremixed H₂-air jet flames are numerically investigated using the joint PDF model. The reaction progress variable is derived by assuming the radicals O, H, and OH to be in partial equilibrium and additional species HO₂ and H₂O₂ in steady state. The model is extended to nonadiabatic flame by introducing additional variable for the transport of enthalpy and radiative source term is calculated using a local, geometry independent model. In terms of flame structure and NO formation, the predicted results are favorably agreed with experimental data. The effects of nonequilibrium chemistry and radiative heat loss on the thermal NO formation are discussed in detail.

1. 서론

최근들어 광계측을 통한 실험방법의 개발을 통하여 난류연소장에 대한 자세한 측정 및 분석이 가능하게 되었으며, 이러한 발전에 바탕으로 이루지는 실험데이터의 축적은 난류연소 및 공해생성 메카니즘에 대한 연구에 있어서 보다 체계적이고 조직적인 연구를 가속화하고 있다[1,2,4,8,9].

비에혼합 수소 제트화염의 경우, 난류구조가 비교적 간단한 한편, 화학반응식이 잘 정립되어 있고, thermal NO만이 생성된다. 또한 soot가 생성되지 않으므로, 복사열손실을 가스복사에만 국한시킬 수 있으며, 비활성기체로 연료를 희석시킬 경우, 복사의 영향을 현저히 줄일 수 있으므로, 난류연소모델 및 NOx 예측모델을 검증하기에 적합하다.

수소 화염의 해석에 있어서 반응진행변수모델 (Reaction Progress Variable Model)이 많이 사용되어 왔다[5,7]. 이 모델의 경우, 혼합과정을 지배하는 혼합분율(mixture fraction)과 화학반응을 지배하는 반응진행변수(reaction progress variable)를 도입함으로써 혼합기가 존재할 수 있는 순간상태를 정의하고 확률밀도함수(Probability Density Function)를 통해 난류난동(turbulent fluctuation)에 의한 영향을 고려하게 된다. 이를 통하여 화학평형반응모델(chemical equilibrium model)로서는 예측할 수 없었던 난류화염내 비평형화학반응(non-equilibrium)의 영향과 라디칼들의 초과평형농도 그리고, NO 생성을 정확히 예측할 수 있다.

본 연구에서는 비평형화학반응과 복사열손실을 고려한 반응진행변수모델을 사용하여 수소 난류제트화염[8,10]을 수치해석하였으며, 화염구조 및 NO 생성특성의 변화를 고찰하였다. 또한, 실험결과와의 자세한 비교를 통하여, 난류연소모델의 예측능력을 검증하였다.

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

2. 물리모델

2.1 화학반응모델(chemistry model)

본 연구에서 Table 1에 나타낸 Warnatz[9]의 화학반응식을 사용하였다. 기존의 RPV 모델[5]의 경우, 비교적 빠르게 일어나는 two-body shuffle reaction(R1-R4)에 의해 생성되는 라디칼(O, OH, H)들이 훨씬 느리게 일어나는 three-body slow recombination(R5-R7)으로 소멸되는 과정을 통해 평형상태로 도달하게 된다는 점은 고려하여 라디칼의 생성과정을 부분평형상태에 있다고 가정하고 나머지 비교적 느리게 일어나는 재결합 반응만을 포함하는 반응진행변수를 도입함으로써 난류연소장내에서 평형상태로부터 이탈을 통해 존재하게 되는 초과평형상태를 예측할 수 있었다. 하지만 이러한 기존의 RPV 모델의 가정은 온도가 1200K 이상만에서 타당하며, 보다 온도가 낮고 희박혼합 상태에서 중요해지는 HO₂와 H₂O₂의 영향을 무시하였기 때문에 라디칼들의 재결합 반응율을 과소 예측하게 되고 결과적으로 평형상태로부터 이탈을 과대예측하는 단점을 가진다[7]. HO₂와 H₂O₂는 전 화염장에 걸쳐 다른 화학종에 비해 매우 작은 양으로 존재하지만 Table 1에 나타낸 추가의 화학반응들(R8~R13, R14~19)을 통해 라디칼들이 소멸됨으로서 연소가 진행되어가는 추가의 반응경로를 제공하므로, 본 연구에서는 HO₂와 H₂O₂에 대해 정상상태 가정을 함으로서 이러한 추가반응식들을 고려하였다[7]. 이때, 비교적 큰 활성화에너지를 갖는 빠른 화학반응식의 영향들을 제거한 복합변수를 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$Y_{H_2}^* = Y_{H_2} + \frac{M_{H_2}}{M_O} Y_O + \frac{3}{2} \frac{M_{H_2}}{M_H} Y_H + \frac{1}{2} \frac{M_{H_2}}{M_{OH}} Y_{OH} - \frac{1}{2} \frac{M_{H_2}}{M_{HO_2}} Y_{HO_2} - \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O_2}} Y_{H_2O_2} \quad (1)$$

여기서, 복합변수의 생성항은 다음과 같다.

$$\dot{w}_{H_2}^* = -2M_{H_2}(w_5 + w_6 + w_7 + w_8 + w_{15}) \quad (2)$$

O, H 그리고 OH 라디칼은 부분평형가정(partial equilibrium)을 통해 다음과 같이 주요 화학종의 농도로 나타나게 된다.

$$Y_O = (M_O K_{c1} K_{c3}) \frac{(Y_{H_2}/M_{H_2})(Y_{O_2}/M_{O_2})}{(Y_{H_2O}/M_{H_2O})} \quad (3)$$

$$Y_H = \left(M_H K_{c1}^{\frac{1}{2}} K_{c3}^{\frac{3}{2}} K_{c4}^{-\frac{1}{2}} \right) \frac{(Y_{H_2}/M_{H_2})^{\frac{3}{2}} (Y_{O_2}/M_{O_2})^{\frac{1}{2}}}{(Y_{H_2O}/M_{H_2O})} \quad (4)$$

$$Y_{OH} = \left(M_{OH} K_{c1}^{\frac{1}{2}} K_{c3}^{\frac{1}{2}} K_{c4}^{-\frac{1}{2}} \right) (Y_{H_2}/M_{H_2})^{\frac{1}{2}} (Y_{O_2}/M_{O_2})^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

HO₂와 H₂O₂에 대해서는 정상상태로 가정하였으므로 각각 다음과 같은 조건들을 만족해야 한다.

$$w_8 - w_9 - w_{10} - \frac{w_{11} - w_{12} - w_{13}}{-2w_{14} + w_{16} + w_{18} + w_{19}} = 0 \quad (6)$$

$$w_{14} + w_{15} - w_{16} - w_{17} - w_{18} - w_{19} = 0 \quad (7)$$

각 화학종에 대해 동일한 확산계수와 Lewis 수가 1이라고 가정하면, 다음과 같이 혼합분율(mixture fraction)을 도입할 수 있다.

$$f = \frac{\phi - \phi_a}{\phi_f - \phi_a}, \quad \phi = Z_H, Z_O, Z_N \quad (8)$$

2.2 비단열화염모델(nonadiabatic flame model)

복사에 의한 열손실은 Thermal NO 생성율에 크게 영향을 미치므로, 비단열화염을 모사하기 위하여, 다음과 같은 엔탈피변수를 도입하였다[7].

$$i = \frac{h - h_{\min}}{h_{\text{ad}} - h_{\min}} = \frac{h - h_{\min}}{U(f)} \quad (9)$$

여기서, 주어진 혼합분율에 대해서, h_{ad}는 단열엔탈피를 의미하며, h_{min}는 최저온도로 냉각되었다고 가정하였을 때의 엔탈피로 정의한다.

복합변수 Y^{*}_{H₂}를 정규화시켜 다음과 같이 반응진행변수(reaction progress variable)를 정의한다.

$$r = \frac{Y_{H_2}^* - Y_{H_2}^{*u}}{Y_{H_2}^{*e} - Y_{H_2}^{*u}} = \frac{Y_{H_2}^* - Y_{H_2}^{*u}}{W(f, i)} \quad (10)$$

이때, Y^{*}_{H₂}에 대한 최대값과 최소값은 비반응상태(frozen state)와 평형상태에서 정의된다. 평형상태에서의 값은 Gibbs 자유에너지 최소화원리를 이용하여 계산하였다.

2.3 복사열손실 모델

확률밀도함수를 통해 난류난동에 의한 영향을 고려하기 위해서는 복사열손실은 lookup table에 포함되어야 한다. 따라서, 화염장내에서 광학두께가 얇다는 가정(optically thin assumption)을 통해 단위체적당 열손실은 다음과 같이 구하였다.

$$Q_{\text{rad}}(T, Y_k) = 4 \sigma \sum (P_k \cdot a_{p,k}) (T^4 - T_b^4) \quad (11)$$

여기서, σ는 Steffan-Boltzmann 상수이며, P_k와 a_{p,k}는 각각 복사에 참여하는 화학종의 분압과 Planck 평균흡수계수를 의미한다. 보다 자세한 내용은 참고문헌 [1]에 나타나있다.

2.4 NO 생성 모델

Thermal NO만이 생성되므로, 잘 알려진 Zel'dovich 메커니즘을 고려하였으며, 생성율은 다음과 같이 간략하게 나타낼 수 있다.

$$w_{NO} = M_{NO} (2K_{19} [N_2][O]) \quad (12)$$

이때, 화학종의 농도[C]의 단위는 mol/cm³이며, K₁₉ = 1.84 × 10¹⁴ exp(-38370/T) cm³/mol-s이다. NO의 농도가 매우 작고 연소반응에 비해 느리게 생성되므로 난류연소장 계산으로부터 분리시켜 후처리과정을 통해 계산하였다.

2.5 난류연소모델

본 연구에서는 밀도가중평균(Favre averaging)을 택하였으며, 연소장에 미치는 난류의 영향을 고려하기 위하여 각 반응율, 온도 및 농도등과 같은 물성치에 대한 평균값은 다음과 같이 결정된다.

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \phi(f,r,i) \tilde{P}(f,r,i) dfdrdi \quad (13)$$

$$\bar{\phi} = \bar{\rho} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{\phi(f,r,i)}{\rho(f,r,i)} \tilde{P}(f,r,i) dfdrdi \quad (14)$$

아래와 같이, f, r 그리고 i는 통계적으로 서로 독립되어 있다고 가정하였다.

$$\tilde{P}(f,r) = \tilde{P}(f) * \tilde{P}(r) * \tilde{P}(i) \quad (15)$$

여기서, 혼합분율에 대한 확률밀도함수는 β 함수로 가정하였고, 반응진행변수와 엔탈피변수에 대한 pdf의 형상은 예측결과에 크게 영향을 미치지 않으므로 단일 δ 함수로 가정하였다.

각 수송 방정식들을 정리하면 Table 2와 같다.

ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
1	0	0
\tilde{u}_i	μ_{eff}	$-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}$
\tilde{k}	μ_{eff}/σ_k	$G_k - \bar{\rho} \tilde{\epsilon}$
$\tilde{\epsilon}$	$\mu_{eff}/\sigma_\epsilon$	$(C_1 G_k - C_2 \bar{\rho} \tilde{\epsilon}) \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}$
\tilde{Y}	μ_{eff}/σ_f	0
\tilde{g}	μ_{eff}/σ_g	$C_{g1} G_g - C_{g2} \bar{\rho} \tilde{g} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}$
\tilde{r}	μ_{eff}/σ_r	$C_g \bar{\rho} \tilde{r} \left(\frac{\tilde{W}_{ff}}{\tilde{W}} + (1-i) \frac{\tilde{U}_{ff}}{\tilde{U}} \frac{\tilde{W}_i}{\tilde{W}} \right) \tilde{g} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} + \tilde{r} \frac{\tilde{W}_i}{\tilde{W}} S_i + \bar{S}_r$
\tilde{i}	μ_{eff}/σ_i	$(i-1) C_g \frac{\tilde{U}_{ff}}{\tilde{U}} \bar{\rho} \tilde{g} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} - \bar{S}_i$
\tilde{Y}_{NO}	μ_{eff}/σ_s	\bar{w}_{NO}

$$\tilde{g} = \tilde{f}^{m_2}, G_k = \mu_t \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right)^2 \right\}$$

$$G_g = \frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}, S_r = \frac{w^* H_2}{W}, S_i = \frac{Q_{rad}}{U}$$

$$\sigma_f = \sigma_r = \sigma_i = \sigma_s = 0.85$$

$$\sigma_g = 0.9, C_g = 1.0, C_{g1} = 2.0, C_{g2} = 2.0$$

Table 2 Governing Transport Equations

3. 수치모델

각 보존방정식은 유한체적법을 통해 이산화하였고 대류항은 TVD 타입의 고차정확도 기법[8]을 도입하여 처리하였으며, 확산항은 중앙차분하였다. 비엇갈림격자계를 사용하였으며, 이때 압력장이 진동하는 문제를 해결하기 위하여 제어체적 경계면에서의 속도를 압력가중보간법을 사용하여 계산하였다. PISO 알고리즘을 사용하여 압력-속도 결합을 만족시켰으며, 내재적 시간전진법을 통하여 정상해를 구하였다[6].

4. 해석결과 및 고찰

4.1 해석모델

본 연구에서 Sandia 연구소와 ETHZ 대학에서 공동으로 실험한 수소/헬륨-공기 비예혼합 제트화염[8,10]에 대한 수치해석을 통하여 화염구조 및 NO 생성특성을 고찰하였으며, 실험데이터와 자세한 비교를 통해 본 연구에서 사용한 화학반응모델 및 복사모델의 영향을 평가, 검증하였다. 지름이 0.6m인 육각공기통로 가운데 위치한 지름 D=3.75mm 인 노즐로부터 수소/헬륨의 혼합가스가 분사된다. 이때, 헬륨의 첨가는 화염을 희석시켜 화학당론적 혼합분율이 커져 화염의 길이가 짧아지는 동시에 화염온도가 낮아지므로 복사열전달의 영향을 감소시키고 NO의 생성을 현저하게 억제시키는 역할을 한다. 본 연구에서 해석한 세가지 실험조건은 Table 4와 같으며, 이때 공기의 입구속도 및 온도는 각각 1m/s와 294K이며, 연료제트의 입구온도는 295K이다.

축방향 1m와 반경방향 0.2m로 설정한 계산영역을 80×60개의 불균일 격자계로 구성하였으며, 유동입구에서의 경계조건은 참고문헌 14와 같다.

원형 제트유동의 경우, 표준 k-ε 난류모델은 반경방향으로 너무 과도한 난류확산계수를 예측하기 때문에 제트의 확산(spreading)을 과대예측하는 결과를 나타낸다. 따라서, 본 연구에서는 이러한 단점을 보완하기 위해, Pope가 제안한 수정항[4]을 사용하였다.

CASE	He (vol%)	Reynolds number	Exit vel. (m/s)	flame length(L)	f _{stoch}	T _{ad} [K]
1	0	10000	296	180D	0.0283	2430
2	20	10000	294	150D	0.043	2360
3	40	8300	256	100D	0.065	2260

Table 3 Experimental conditions for H₂ jet flames

4.2 결과 및 고찰

연료조성에 따른 제트화염구조와 NO 생성을 정성적으로 살펴보기 위하여 평균 온도와 NO의 분포를 대한 수치해석결과를 Fig.1과 Fig.2에 나타내었다. 앞서 언급하였듯이, He를 첨가할수록 화염온도가 낮아지는 동시에 화염길이도 현저히 줄어들고 있음을 알 수 있다. 이때, NO는 화염면을 따라 생성되며, 최대분포는 최고화염온도영역을 지나서 나타나게 된다. He의 첨가량이 증가할 수록 NO의 생성량이 현저하게 줄어들게 되는 데, 이것은 화염온도가 낮아짐과 동시에, 화염길이도 짧아짐으로 NO 생성에 필요한 체류시간이 줄어들기 때문이다.

난류연소모델에 대한 보다 체계적인 분석을 위해, 화학반응식과 복사열손실의 영향을 별도로 분리하여 계산을 수행하였으며, CASE 2를 기준조건으로 밀도가중평균한 실험측정결과와 자세히 비교함으로써 두 물리모델의 영향을 정량적으로 분석하였다.

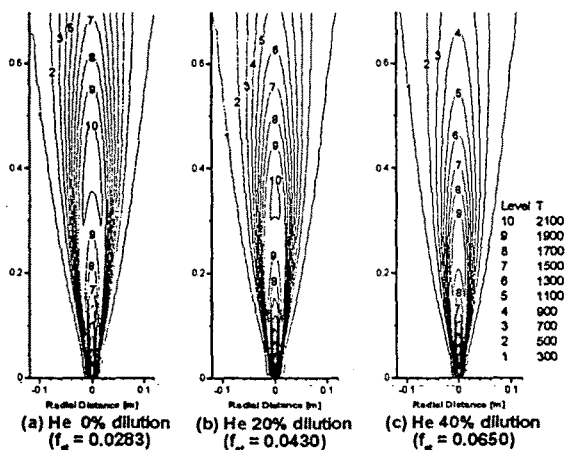


Fig. 1 Temperature fields predicted by RPV model with HO_2 and H_2O_2 chemistry and radiation

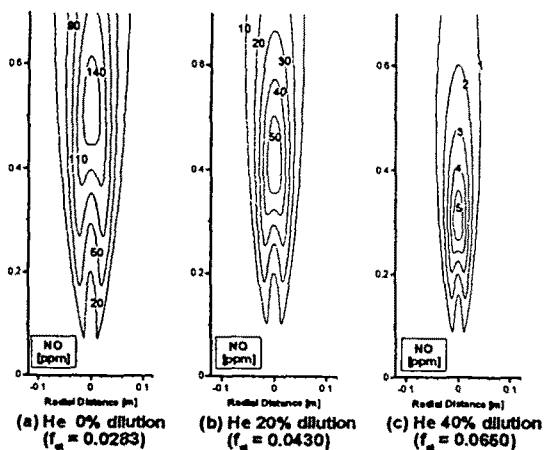


Fig. 2 Temperature fields predicted by RPV model with HO_2 and H_2O_2 chemistry and radiation

화학반응식의 영향

복사열손실은 고려하지 않은 단일화염($i=1$)의 상태에서 세가지 화학반응모델, (1) 화학평형모델, (2) 반응식 (R1~R7)만을 고려한 모델(Model 1), 그리고 (3) HO_2 와 H_2O_2 의 영향을 포함한 모델(Model 2)을 사용하여 계산을 수행하였다.

Fig.3은 CASE 2에 대해 중심축을 따른 평균온도 및 NO 분포를 나타낸 결과이다. 세 모델 모두 최고화염영역 이후에서 온도분포를 상당히 과대예측하고 있으며, 화학평형모델이 가장 높은 온도분포를 나타내었다. NO의 분포 역시 과대예측하고 있으며, Model 1의 경우는 최대값을 2배 이상 크게 예측하고 있다. 이러한 정량적 불일치는 복사열손실을 무시한 결과이다.

$X/L=3/8$ 에서의 평균온도와 OH의 반경방향 분포를 비교한 Fig.4를 보면, 화학평형모델은 비평형 화학반응의 영향을 고려하지 못하므로 초과평형농도를 예측하지 못하고 있는 반면, Model 1은 OH 농도분포를 다소 과대예측하고 있다. 이것은 HO_2 와 H_2O_2 의 영향을 무시함으로써 라디칼들의 재결합반응을 과소예측하여 결과적으로 화학평형으로부터의 이탈 정도를 과대예측하기 때문으로 볼 수 있다.

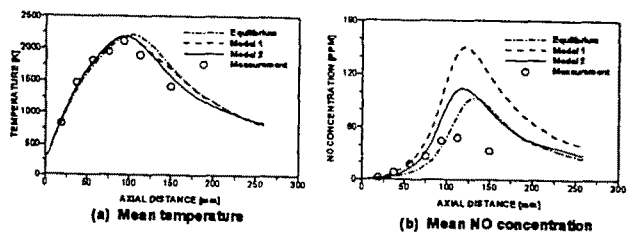


Fig. 3 Mean temperature and NO concentration along the centerline without radiation (20% He)

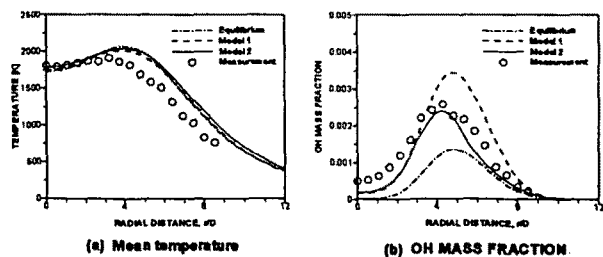


Fig. 4 Radial profiles of mean temperature and OH concentration at $X/L=3/8$ without radiation (20% He)

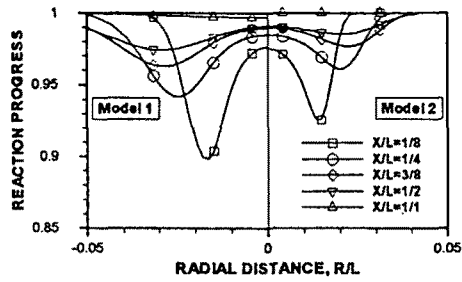


Fig. 5 The effect of chemistry model on reaction progress variable distribution without radiation (20% He)

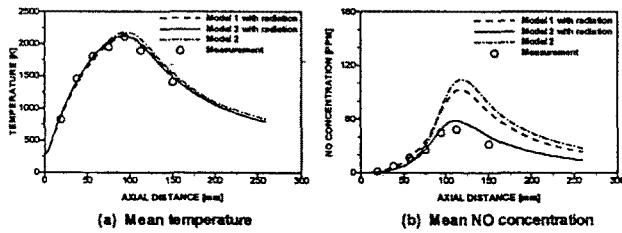


Fig. 6 Mean temperature and NO concentration along the centerline with radiation (20% He)

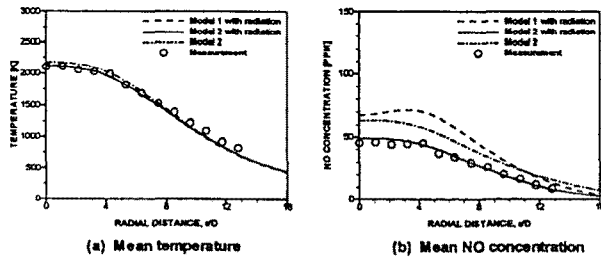


Fig. 7 Radial profiles of mean temperature and NO concentration at $X/L=5/8$ with radiation (20% He)

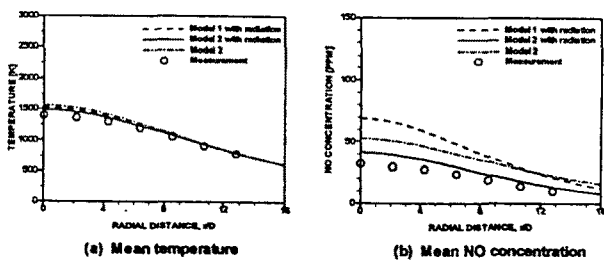


Fig. 8 Radial profiles of mean temperature and NO concentration at $X/L=1/1$ with radiation (20% He)

반응진행변수의 분포를 비교한 Fig.5를 보면, 전단층을 따라 일어나는 활발한 난류혼합에 의해 비평형 화학반응의 영향이 두드러지게 나타나며, 점차 하류로 갈수록 화학평형상태로 도달함을 알 수 있다. 그리고, Model 2는 HO_2 와 H_2O_2 의 화학반응식을 통한 추가적인 연소반응경로를 고려하므로 Model 1에 비해 보다 평형상태에 가까워지는 결과를 나타내고 있다.

복사열손실의 영향

Fig.6은 CASE 2에 대해 중심축 평균온도와 NO 분포에 대한 복사열손실의 영향을 나타낸 결과이다. 복사열손실을 고려한 경우, 최고화염 영역이후에서 온도가 약 100K정도 낮아지며, 훨씬 실험에 근접한 결과를 예측하고 있음을 알 수 있다. 이러한 복사열손실의 영향은 NO 분포에 대해서 보다 현저하게 나타나고 있으며, 복사열손실과 HO_2 와 H_2O_2 의 영향을 함께 고려한 예측결과는 실험과 정량적인 일치를 나타냄을 알 수 있다. Fig.7과 Fig.8에서 최고화염영역인 $X/D=5/8$ 과 화염끝부분인 $X/D=1/1$ 에서의 예측결과를 비교해 보았다. HO_2 와 H_2O_2 의 추가반응식과 복사열손실을 동시에 고려한 모델의 경우 평균온도 및 NO 분포가 실험과 정량적인 일치를 나타내고 있다.

Fig.9와 Fig.10은 각각 CASE 1과 CASE3에서 중심축을 따른 평균온도와 NO 분포를 비교한 결과이다. He 0%인 CASE 1의 경우 복사열손실의 영향이 NO 분포에 2배 가까이 영향을 미치는 반면, He 40%인 CASE 3의 경우, 복사열손실 보다는 화학반응모델의 영향이 더 크게 나타남을 알 수 있다.

위의 결과를 종합할 때, 제트화염내의 전단층을 따라 난류혼합에 의한 비평형 반응영향이 두드러지게 존재하며, 이것은 화염내에서 라디칼의 초과평형농도 및 NO 생성에 많은 영향을 미치게 됨을 알 수 있다. 또한 HO_2 와 H_2O_2 에 의한 추가 화학반응식의 영향을 무시하는 경우 화학평형 상태로부터 이탈정도를 과대예측함으로써 라디칼의 농도 및 NO의 생성율을 과대예측하는 결과를 나타냄을 알 수 있었다. 마지막으로 복사열손실은 순수 수소화염의 경우 가장 크게 나타났으며, 평균온도와 특히 NO 생성에 큰 영향을 미쳤다. 따라서, NO 생성을 정확히 예측하기 위해서는 복사열전달의 고려가 필수적임을 알 수 있었다.

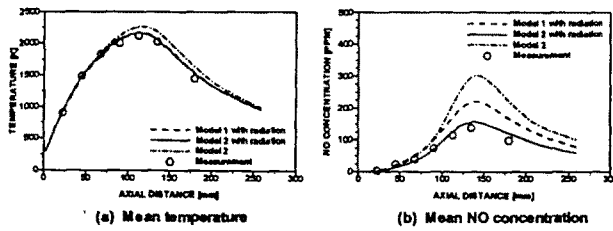


Fig. 9 Mean temperature and NO concentration along the centerline with radiation (0% He)

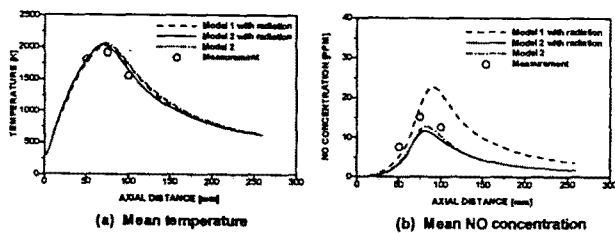


Fig. 10 Mean temperature and NO concentration along the centerline with radiation (40% He)

5. 결론

본 연구에서는 비평형화학반응과 복사열손실을 고려한 난류연소모델을 사용하여, 비에혼합 수소/헬륨-공기 난류제트화염장을 수치해석하였으며, 이를 통하여 얻은 결론 및 향후 연구과제를 요약하면 다음과 같다.

- (1) 반응진행변수를 도입함으로써 전단층을 따라 급격한 난류혼합에 의해 나타나는 비평형 화학반응의 영향을 고려할 수 있었으며, 헬륨 첨가에 따른 화염구조 및 NO 생성특성의 변화를 잘 예측하였다.
- (2) HO_2 와 H_2O_2 에 의한 추가 반응경로를 부가적인 계산의 증가없이 고려할 수 있었으며, 이러한 영향은 라디칼의 재결합반응율을 보다 정확히 예측하여, 라디칼의 초과평형농도 및 NO의 생성에 대한 예측능력을 향상시켰다.
- (3) 엔탈피 수송방정식에 대한 별도의 변수를 도입함으로써 비단열화염을 고려할 수 있었으며, 복사열손실의 영향은 He 첨가를 많은 순수수소화염에서 가장 크게 나타났다. 이때, 복사열손실의 영

향을 무시한 경우 NO의 분포는 2배 정도 과대에 측되었으며, NO 생성을 정확히 예측하기 위해서는 복사열손실의 고려가 필수적임을 알 수 있었다. (4) 반응진행변수는 화학반응메카니즘에 의해 정의되므로, 탄화수소계 연료에 대해서는 반응진행변수를 정의하기가 어렵고 연료가 달라짐에 따라 새로운 변수를 추가 및 도입해야 하는 단점을 가진다. 따라서, 보다 일반적이고 개선된 연소모델에 대한 체계적인 연구를 진행해 나갈 예정이다.

참고문헌

- (1) <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- (2) Masri, A. R., Dibble, R. W. and Barlow, R. S., "The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames Revealed by Raman-Rayleigh-LIF Measurements," Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 22, pp. 307-362, 1996.
- (3) Chang, W. C., "Modeling of NOx Formation in Turbulent Flames - Development of Reduced Mechanisms and Mixing Models," PhD. Dissertation, Univ. of California, Berkeley, 1995.
- (4) Schlatter, M., "Modelling of Turbulence-Chemistry Interactions with Respect to the NOx Formation in Turbulent Non-premixed Flames," PhD Thesis, ETHZ Zuerich Switzerland, 1996.
- (5) Janicka, J. and Kollmann, W., "The Calculation of Mean Radical Concentrations in Turbulent Diffusion Flames," Combustion and Flame, Vol.44, pp.319-336, 1982.
- (6) Kim, Y. M., Shang, C. P., Chen, C. P., and Wang, T. S., "Prediction of Confined Swirling Spray-Combusting Flows," Numerical Heat Transfer, vol. 25, pp. 1-20, 1994.
- (7) Louis, J.J.J., "Turbulent combustion of coal gas," PhD. Thesis, Univ. of Twente, 1997.
- (8) Barlow, R. S., "Sandia H2/He Flame Data -Release 1.0 (1996)
- (9) Warnatz, J., Mass, U., and Dibble, R. W., Combustion, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.
- (10) Barlow, R. S. and Carter, C. D., "Relationships among Nitric Oxide, Temperature, and Mixture Fraction in Hydrogen Jet Flames," Combustion and Flame, vol. 104, pp. 288-299, 1996.