

난류연소 모델링을 이용한 수소-공기 비예혼합 화염의 NO_x 생성 분석

박양호* · 문희장** · 김성룡* · 윤영빈* · 정인석*

Analysis of NO Formation in Nonpremixed Hydrogen-Air Flames Considering Turbulence-Chemistry Interaction

Y. H. Park, H. J. Moon, S. Y. Kim, Y. Yoon, and I. S. Jeung.

Key Words : NO_x, EINO_x, Nonequilibrium effect, Lagrange IEM model, Assumed PDF model, One-half power dependence.

Abstract

Numerical analysis on the characteristics of nitrogen oxides (NO_x) formation in turbulent nonpremixed hydrogen-air flames was carried out. Lagrange IEM model and Assumed PDF model were applied to consider turbulence-chemistry interaction known to affect the production of NO_x. Partial equilibrium assumption was used to predict nonequilibrium effect to which one-half power dependence between EINO_x normalized by flame residence time and global strain rate is attributed. As a result, such one-half power dependence could be reproduced only by reaction model including HO₂ and H₂O₂, which means its dependence on Damkohler number; nonequilibrium effect. This dependence was shown better in the region of higher global strain. Besides, the improvement of turbulence model is required to predict mean flow properties quantitatively in the radial direction.

	기호설명	τ_{ex}	Turbulent Mixing exchange Time
EINO _x	NO _x emission index defined as NO _x [g]/H ₂ [kg]	τ_r	Flame residence time defined as $L_f^3/(D_F^2 U_F)$
D_F	Diameter of fuel nozzle		
U_F	Fuel injection velocity		
L_f	Flame length		

1. 서론

현재 NO_x 생성에 관한 많은 연구들은 비교적 NO_x 생성 과정이 탄화수소

* 서울대학교 항공우주공학과

** 대한항공(주) 항공기술연구원

계열 연료보다 간단한 수소-공기 화염을 중심으로 진행되고 있다. 수소 화염의 경우 화학반응 과정이 탄화수소계열보다 간단하며, Zeldovich 과정을 통해서만 NO_x가 생성될 뿐만 아니라, Soot이 발생하지 않기 때문에 이에 대한 연구가 비교적 용이하다. 또한 대부분의 연구가 부력을 무시할 수 있는 레이놀즈가 큰 영역에 집중되어 있으며, 심지어는 희석가스를 첨가하여 복사 열손실의 영향이 적은 영역에까지 문제를 단순화시키고 있다.

수소-공기 비예혼합 화염에 대한 이론적인 연구들은 Bilger와 Beck [1] 그리고 Peters와 Donnerhack [2] 등에 의해 이루어졌다. Peters와 Donnerhack은 평형 화학 반응 가정하에 난류확산화염에 대한 차원 분석을 수행하여 EINO_x가 $L_r^3/(D_f^2 U_f)$ 로 정의되는 화염 체류시간(τ_r)에 비례함을 제안하였다. 여기서 EINO_x는 단위 연료의 kg 당 생성되는 NO_x의 g 수로 정의된다. 그러나 이후의 많은 연구자들 [3,4,5]은 그 결론이 실제 결과에서 많이 벗어난다는 사실을 발견하였다.

Chen과 Driscoll [3,4]은 실험을 통해, 부력과 복사 열손실의 효과가 적은 영역에서 EINO_x와 화염체류시간의 비(EINO_x/ τ_r)가 총유동변형율(global strain rate, U_f/D_f)의 1/2 승에 비례하는 사실(1/2 비례관계)을 발견하였다. 이 결과는 이전의 Bilger와 Beck [1] 그리고 Peters와 Donnerhack [2]의 결과와 상반된다. 그들은 이러한 1/2 비례관계가 Damkohler 수에 따른 화염 두께의 변화에 기인한다고 생각하였다.

Chen과 Kollmann [5]은 확률밀도함수(Probability Density Function) 모델링을 이용한 수치해석을 통해 1/2 비례관계를

확인하였고, 그 원인이 NO 비평형 반응에 기인함을 주장하였다. Schlatter 등 [6]은 PEUL(Probabilistic Eulerian Lagrangian) 모델을 이용하여 1/2 비례관계를 보였으며, 이의 원인이 반응속도가 느린 삼체 재결합반응(three body recombination reaction)에 의해 지배되는 라디칼의 농도 차이에 기인함을 주장하였다. 또한 Sanders [7]와 Schlatter [6]은 층류화염편 모델(laminar flamelet model)을 수치해석을 수행하였지만 1/2 비례관계를 포착하는데 실패하였다. 그리고 Kim 등 [8]과 Chen 등 [9]은 무차원화 변수간의 통계학적 독립성을 가정한 Assumed PDF를 이용하여 수소 화염을 수치해석하였다.

이런 많은 연구에도 불구하고 아직 NO_x의 생성 특성에 대한 이해는 명확하지 않을 뿐만 아니라, 상반되는 견해도 존재한다. 본 연구의 목적은 수소-공기 비예혼합 화염에서의 NO_x 생성 과정의 보다 정확한 이해에 있다. 이를 위해 Barlow와 Carter [10]의 실험과 Driscoll 등 [3,4]의 실험을 수치 모사하였으며 난류와 화학반응간의 상호작용을 고려하기 위하여 널리 사용되고 있는 Assumed PDF 모델과 Lagrangian 기법에 기초한 IEM(Interaction by Exchange with the Mean) 모델이 사용되었으며, 1/2 비례관계에 중요하다고 알려진 비평형 효과를 고려하기 위하여 부분평형(partial equilibrium) 반응 모델을 사용하였다.

2. 지배방정식과 수치기법

2.1 지배방정식과 예조건화 기법

본 연구에서는 축대칭 압축성 보존방

정식을 사용하였으며, 저속에서의 유동의 고유치의 심각한 차이로 인한 수렴의 저하와 정확성의 문제를 해결하기 위하여 예조건화 기법을 사용하였다.

$$\Gamma \frac{\partial \mathbf{Q}_v}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} + \mathbf{H}_v + \mathbf{W} \quad (2-1)$$

$$\mathbf{Q}_v = \{p \ u \ v \ T \ k \ \varepsilon \ g \ Y_{N_2} \ Y_{H_2}^*\}^T \quad (2-2)$$

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u/\varepsilon_p c^2 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v/\varepsilon_p c^2 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ H/\varepsilon_p c^2 - 1 & \rho u & \rho v & \rho c_p & \frac{5}{3}\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ g/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ Y_{N_2}/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ Y_{H_2}^*/\varepsilon_p c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 \end{bmatrix} \quad (2-3)$$

예조건화 행렬은 Choi 와 Merkle [11]에 의해 제안된 것을 사용하였으며 저마하수 영역에서 특성치의 경직성을 완화하기 위해 사용하는 예조건화 변수 ε_p 은 아래와 같이 결정된다.

$$\varepsilon_p = \text{Min}(1, \text{Max}(10^{-10}, M^2)) \quad (2-4)$$

난류유동장의 모사를 위해 $k-\varepsilon$ 난류 모델이 사용되었으며, 난류 Schmidt 수 (Sc_T)와 Prandtl 수(Pr_T)는 모두 0.85 로 고정하였다.

2.2 수치기법

시간 미분항에는 Euler 후방 차분을 적용하고 시간 적분은 LU 근사화 과정을 거쳐서 이루어진다. 그리고 고차의 공간 정확도를 위해 MUSCL (Monotone Upstream-Centered Schemes for Conservation Laws) 형태의 변수 외삽 기

법을 이용하였으며 TVD 성질을 만족시키기 위해 Koren 제한자를 사용하였다.

3. 계산 모델링

3.1 화학 반응 모델

화학 반응 모델로는 Warnatz [12] 의 7 화학종 7 반응 모델과 9 화학종 19 반응 모델을 사용하였다. 9 화학종 19 반응 모델은 1200K 이하의 저온의 영역에서 중요하다고 알려진 HO_2 와 H_2O_2 의 영향을 고려함으로써, NOx 의 생성에 중요한 재결합 반응율에 새로운 경로를 제공하여 평형상태로부터의 과대 이탈이라는 기존의 화학 반응모델이 가졌던 문제점을 개선하였다. 평형 화학 반응으로는 NOx 를 정확히 예측할 수 없으며 NOx 의 1/2 비례관계는 화학 반응의 비평형 효과에 지배되는 것으로 알려져 있다. 이러한 화학 반응의 비평형 효과를 고려함과 동시에 계산시간의 절약을 위해 부분 평형(partial equilibrium) 가정을 사용하였다. 이를 위해 다음과 같은 복합 변수(combined variable)를 사용하였다 [8, 13, 14].

$$Y_{H_2}^* = Y_{H_2} + \frac{M_{H_2}}{M_O} Y_{O} + \frac{3}{2} \frac{M_{H_2}}{M_H} Y_H + \frac{1}{2} \frac{M_{H_2}}{M_{OH}} Y_{OH} - \frac{1}{2} \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} Y_{H_2O} - \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} Y_{H_2O} \quad (3-1)$$

이때 복합변수 $Y_{H_2}^*$ 에 대한 생성항은 다음과 같다.

$$\dot{w}_{H_2}^* = -2M_{H_2} (\dot{w}_O + \dot{w}_H + \dot{w}_{OH} + \dot{w}_{H_2O}) \quad (3-2)$$

H, O, 그리고 OH 의 농도는 부분 평형 가정에서, 그리고 HO_2 와 H_2O_2 의 농도는 정상상태의 가정을 통해서 구할 수 있다.

3.2 복사 열손실 모델

NOx의 생성은 온도장에 매우 민감하기 때문에, 광학적 두께가 얇다는 가정(optically thin assumption)하에 다음과 같이 복사 열손실량을 고려하였다 [15].

$$\Phi(T, p_{H_2O}) = 4\sigma p_{H_2O} K_{p,H_2O} (T^4 - T_b^4) \quad (3-3)$$

여기서 σ 는 Stefan-Boltzmann 상수이며, p_{H_2O} 는 H_2O 의 분압을 의미한다. 그리고 T_b 와 K_{p,H_2O} 는 각각 주위 온도와 Plank 평균 흡수 계수(Plank mean absorption coefficient)를 나타낸다.

3.3 연소 모델

3.3.1 Assumed PDF 모델

밀도가중평균은 다음과 같이 계산되어진다.

$$\tilde{\phi} = \iiint \phi(f, r, T^*) \tilde{P}(f, r, T^*) df dr dT^* \quad (3-4)$$

위의 적분은 통계적인 독립을 가정한 다음의 식을 이용하여 간단히 계산할 수 있다.

$$\tilde{P}(f, r, T^*) = \tilde{P}(f) \tilde{P}(r) \tilde{P}(T^*) \quad (3-5)$$

통계학적 독립성 가정을 사용하기 위해 다음과 같은 3개의 무차원화 변수를 도입하였다. 모든 확산 계수가 같다는 가정하에 다음과 같이 연료의 혼합 정도를 나타내는 혼합분율을 도입하였다.

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{Z} - \tilde{Z}^o}{\tilde{Z}^u - \tilde{Z}^o} \quad (3-6)$$

화학 반응의 비평형 정도를 나타내기 위해 다음과 같은 반응진행변수(reaction progress variable)를 사용하였다.

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{Y}_{H_2}^* - \tilde{Y}_{H_2}^{*u}}{\tilde{Y}_{H_2}^{*e} - \tilde{Y}_{H_2}^{*u}} = \frac{\tilde{Y}_{H_2}^* - \tilde{Y}_{H_2}^{*u}}{U(\tilde{f})} \quad (3-7)$$

여기서 상첨자 'e'와 'u'는 각각 평형

상태와 비반응 상태를 나타내며, $\tilde{Y}_{H_2}^{*e}$ 은 다음과 같이 계산되어진다.

$$\tilde{Y}_{H_2}^{*e} = \int Y_{H_2}^{*e}(f) \tilde{P}(f) df \quad (3-8)$$

복사 열손실을 고려할 경우 엔탈피는 더 이상 보존 변수가 아니기 때문에, 다음과 같은 온도에 대한 무차원화 변수를 도입하였다.

$$\tilde{T}^* = \frac{\tilde{T} - \tilde{T}^{\min}}{\tilde{T}^{\max} - \tilde{T}^{\min}} = \frac{\tilde{T} - \tilde{T}^{\min}}{W(\tilde{f}, \tilde{r})} \quad (3-9)$$

여기서 T^{\min} 는 주위의 온도를 의미하며, T^{\max} 는 주어진 혼합분율과 반응진행변수에 대한 단일화염 온도를 나타내며 다음과 같이 계산되어진다.

$$\tilde{T}^{\max} = \int T^{\max}(f, r) \tilde{P}(f, r) df dr \quad (3-10)$$

확률밀도 함수로서 혼합분율에 대해서는 β 함수를 가정하였고 반응진행 변수와 무차원화 온도 변수에 대해서는 간단한 δ 함수를 가정하였다.

3.3.2 Lagrange IEM 모델

유체 입자 하나의 거동을 나타내는 Lagrangian 지배방정식은 Villermaux [16]에 의해서 다음과 같이 모델되었다.

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{\tilde{Y}_i - Y_i}{\tau_{ex}} + \dot{w} \quad (3-11)$$

우변의 첫번째 확산항은 IEM (Interaction by Exchange with the Mean) 모델로 변환되어 혼합특성을 지배하고, 두번째 항은 화학 반응 생성항을 의미한다. 이 방법은 무차원화 변수간의 독립성을 가정하지 않아 서로간의 영향을 고려할 수 있다. IEM 모델의 τ_{ex} (turbulent mixing exchange time)는 다음과 같이 정의된다.

$$\tau_{ex} = C_i \frac{k}{\varepsilon} \quad (3-12)$$

화학 반응 생성항은 다음과 같이 계산되어지며, 식 (3-14)의 2개의 조건부

확률은 매 격자마다 식 (3-11)의 계산을 통해 얻어진다 [17].

$$\tilde{\omega}_i = \iiint \tilde{\omega}_i(f, Y_i, h) \tilde{P}(f, Y_i, h) df dY_i dh \quad (3-13)$$

$$\tilde{\omega}_i = \int \tilde{\omega}_i(f, Y_i, h) \tilde{P}(Y_i | f) \tilde{P}(h | f) \tilde{P}(f) df \quad (3-14)$$

3.4 NOx 생성 모델

NOx의 생성은 유동장의 특성에 거의 영향을 주지 않으므로 후처리 과정을 통해 계산되어졌다. N 라디칼에 대한 정상상태 가정과 $[NO]/[NO]_{eq} \ll 1$ 의 가정에 Zeldovich 과정은 다음과 같이 단순화된다.

$$S_{NO} = M_{NO} (2K_p [N_2][O]) \quad (3-15)$$

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

4. 결과 및 분석

본 논문에서는 7 화학종 7 반응을 사용하는 Assumed PDF 모델(Model A) 및 IEM 모델(Model B), 그리고 9 화학종 19 반응을 사용하는 Assumed PDF 모델(Model C)을 난류연소 모델로 채택하여 수치모사를 수행하였다.

4.1 Mean flow properties

평균유동장에 대한 수치 모델들의 예측능력을 정량적으로 검증하기 위해 Barlow와 Carter [10]가 수행한 순수 수소 산화 화염 실험을 수치 모사하여 비교하였다. 실험장치는 0.6m의 육각 공기통로, 3.75mm의 연료 노즐 내경, 그리고 4.8mm의 연료 노즐 외경으로 구성되어 있으며 296m/s의 연료속도와 0~5m/s의 공기속도를 갖는 유동장 ($Re=10,000$)에 해당된다.

표준 $k-\epsilon$ 난류 모델은 축대칭 유동장에서 많은 오차를 야기하는 것으로 알

려져 있기 때문에 이를 보완하기 위해 Pope의 수정항 [18]을 사용하였다. 그러나 본 연구 결과, Pope의 수정항은 화염길이를 매우 과대 예측하는 것으로 나타났다. NOx 생성량은 화염길이의 3승에 비례하고 화염길이의 예측값에 따라 EINOx의 절대량에 큰 영향을 미치는 관계로 정확한 화염길이의 모사를 위해 표준 모델과 Pope 모델간 적정상수값인, $C_{11}=1.48$, 을 사용하였으며 이후의 모든 계산은 이 값으로 고정하였다.

실험의 화염 길이는 67.5cm이며, 본 수치 해석의 화염길이는 중심축을 따라 당량비에 해당되는 지점의 1.33배 되는 거리로 정하였다 [10]. 그림 1은 중심축에 따른 화염의 온도와 속도 분포를 나타낸다. 사용된 3 모델 모두, 화염 전반부의 온도장은 실험치를 정확히 모사하는 반면, 후반부에서는 실험치와 차이가 나는 것을 알 수 있으며 Assumed PDF 모델과 IEM 모델의 경우 온도가 다소 과대 예측되는 것을 볼 수 있다. Pope의 수정항보다 작은 C_{11} 을 사용한 관계로 속도장이 다소 빨리 퍼지는(spreading) 현상을 볼 수 있으나 중심축 방향으로 혼합분율이 정확히 예측되고 있음을 그림 2를 통해 볼 수 있으며 이는 당량비에 해당하는 지점($3/4 L_c$)을 실험 결과에 일치하도록 C_{11} 을 보정하였기 때문이다.

그림 3은 Model C를 이용하여 계산된 반경 방향의 온도 분포를 나타낸다. 중심축에 가까운 영역에서는 실험치와 일치하는 결과를 보여주고 있으나, 중심축에서 멀어질수록 온도가 과대 예측되는 현상을 볼 수 있으며 이러한 경향성은 연소모델이나 화학 반응모델에 기인하기 보다는 $k-\epsilon$ 난류 모델에 의한 효과로 사료된다. $k-\epsilon$ 모델은 반경 방향으로 연료의 혼합을 과대 예측하여 중심축으로부터 더욱 떨어진 지점까지 혼합을 증진시키기 때문에 온도가 높게

예측되는 것이며 그림 1의 속도장이 중심축 방향으로 빨리 감소하고 있는 것을 통하여 확인할 수 있다. 따라서 반경 방향으로의 정확성을 위해 난류 모델의 개선이 요구된다.

4.2 EINOx 1/2 비례 관계

NOx의 1/2 비례관계에 대한 분석을 위해 Driscoll 등[4]의 실험을 수치모사하였다. 노즐 내경은 1.6, 2.6, 그리고 3.7 mm이며 레이놀즈 수의 범위는 3,000-10,000 사이에 해당된다. 주위 공기 속도는 0.5m/s로 가정하였으며, 각 노즐에 대해 연료속도 2가지를 수치모사하였다.

그림 4는 EINOx/ τ 와 총유동변형률과의 관계를 나타낸 그림으로 Model A와 Model B는 0.8-0.9사이의 기울기를 보여주고 있으나, Model C는 0.5에 가까운 기울기를 보여주고 있다. 세 모델 모두 저 유동변형률($U_F/D_F < 10^5$)에서 높은 기울기를 나타내고 있으며 Chen 등[5]은 이러한 현상을 저 유동변형률에서 화염체류시간의 증가로 인한 복사열손실의 과대 예측에 기인한다고 설명하였다.

HO_2 와 H_2O_2 의 반응을 추가한 Model C의 경우, 1/2 비례관계를 잘 포착할 수 있을 뿐만 아니라 NOx의 절대량 또한 실험치에 근접하는 결과를 보여주고 있으며 본연구에 적용된 확산화염에 대하여 비평형효과를 과대예측하는 Model A와 Model B에 비하여 HO_2 와 H_2O_2 의 영향이 NOx 생성특성에 미치는 영향이 큰 것을 알 수 있다. 비평형 효과의 과대 예측은 온도를 과소 평가할지라도 O 라디칼을 과대 예측함으로써 전체적으로는 NOx를 과대 평가하게 된다. HO_2 와 H_2O_2 가 1200K 이하의 저온 영역에서만 중요한 것으로 알려져 있으나 NOx를 정확히 예측하기 위해서는 고온 환경에서 비평형 효과의 정확

한 모사가 중요하다. 이러한 결과는 보다 복잡한 화학 반응 모델을 사용할수록 1/2 비례관계에 근접한다는 Chen 등[19]의 연구에서도 언급되었으며, Model C의 결과는 1/2 비례관계가 비평형 효과, 즉 Damkohler 수에 의존함을 의미한다.

Model A와 Model B의 비교에서는 IEM 모델이 Assumed PDF 모델보다 정량적으로 NOx의 과대예측을 보여주고 있다. 이는 전자가 후자보다 평형으로부터의 이탈을 과대 예측하고 있음을 의미하며, 수치 결과에서 온도가 낮아지고 O 라디칼의 농도가 커진다는 사실에서 유추할 수 있다. 또한 서로 다른 연소모델을 사용함에도 불구하고 거의 일치하는 기울기 보여주는데, 이는 1/2 비례관계에 대해 난류 연소모델보다는 화학반응 모델의 선정이 더 중요함을 의미한다.

1/2 비례관계가 평형 화학반응에서는 얻어질 수 없음은 다음의 식을 통해서 설명될 수 있다. EINOx는 다음과 같이 계산되어진다.

$$EINOx = \frac{M_{NO_2}}{M_{NO}} \frac{4 \int \tilde{w}_{NO}(\bar{x}) dV}{\pi U_F \rho_F D_F^2} \quad (4-1)$$

NOx는 대부분 당량비 주위의 매우 좁은 영역에서 생성되기 때문에 식 (4-1)은 다음과 같이 간략화 될 수 있다.

$$EINOx \approx \frac{\int \dot{w}_{NO}(Z(\bar{x}|Z=Z_w)) P(Z(\bar{x}|Z=Z_w)) \Delta Z_w dV}{U_F \rho_F D_F^2} \quad (4-2)$$

단열 조건에서 평형 화학 반응이 가정된다면, $\dot{w}_{NO}(Z(\bar{x}|Z=Z_w))$ 는 상수가 되기 때문에, 식 (4-2)는 결국 다음과 같이 된다.

$$EINOx \approx \frac{V_I}{U_F \rho_F D_F^2} \quad (4-3)$$

이는 EINOx가 화염 체류 시간에 선형적으로 비례함을 의미하지만, 실험적, 수치적으로 잘못된 것임이 밝혀졌다.

단열 조건에서도 1/2 비례 관계가 잘 묘사되고, 또한 NO_x 가 당량비 부근의 영역에서 대부분 생성된다는 사실은 널리 알려져 있으므로 가장 잘못된 가정은 화학 평형 가정이라 사료된다. 이는 본 수치결과에서도 확인할 수 있었다. 그림 5의 혼합분율과 혼합분율의 분산은 속도가 변화하더라도 중심축 방향으로 변하지 않음을 볼 수 있다. 만약 화학 평형이 가정된다면 NO_x의 생성량은 전적으로 혼합분율과 이의 PDF로 결정되어지기 때문에 NO_x의 생성은 속도에 무관해야 한다. 그러나 Model C를 사용한 그림 6에서 연료 속도에 따라 NO_x의 생성량이 변하는 것을 볼 수 있다.

이는 혼합분율이 같더라도 연료속도가 달라지면 Damkohler 수도 변하여 NO_x 생성 또한 변하게 됨을 의미한다.

5. 결론

난류 수소-공기 비예혼합 화염에서의 NO_x 생성 특성을 분석하기 위해 7 화학종 7 반응을 사용하는 Assumed PDF 모델(Model A), IEM 모델(Model B), 그리고 9 화학종 19 반응을 사용하는 Assumed PDF 모델(Model C)의 수치해석이 수행되었다. HO₂와 H₂O₂을 포함하여 비평형 효과를 보다 정확히 고려한 화학 반응 모델만이 1/2 비례관계에 근접할 수 있었다. 또한 낮은 총유동변형률에서는 높은 총유동변형률보다 높은 비례관계를 보여주는데, 이는 저 총유동변형률에서 화염체류시간의 증가로 인한 복사열손실의 과대예측에 기인하는 것으로 사료된다. 보다 정확한 수치모사를 위해서는 $k-\epsilon$ 난류 모델의 혼합 예측능력이 개선되어야 하며 본연구의 유동영역에서는 난류 연소모델보다는 비평형화학반응의 정확한 모사가 NO_x 1/2 비례관계 예측에 보다 중요한 것임을 알 수 있었다.

참고문헌

- (1) R. W. Bilger and R. E. Beck, "Further Experiments on Turbulent Jet Diffusion Flames", 15th Symposium (International) on Combustion, 1974, pp. 541-552.
- (2) N. Peters and S. Donnerhack, "Structure and Similarity of Nitric Oxide Production in Turbulent Diffusion Flames", 18th Symposium (International) on Combustion, 1981, pp. 33-42.
- (3) R. H. Chen and J. F. Driscoll, "Nitric Oxide Levels of Jet Diffusion Flames", 23rd Symposium (International) on Combustion, 1990, pp. 281-288.
- (4) J. F. Driscoll, R. H. Chen and Y. Yoon, "Nitric Oxide Levels of Jet Diffusion Flames : Effects of Residence Time and Damkohler Number". Combustion and Flame, 1992, Vol.88, pp. 37-49.
- (5) J. Y. Chen and W. Kollmann, "PDF Modeling and Analysis of Thermal NO Formation in Turbulent Nonpremixed Hydrogen-Air Jet Flames", Combustion and Flame, 1992. Vol.88, pp. 397-412.
- (6) M. Schlatter, J. C. Ferreira, M. Flury and J. Gass, "Analysis of Turbulence-Chemistry Interaction with respect to NO Formation in Turbulent Nonpremixed Hydrogen-Air Flames". 26th Symposium (International) on Combustion, 1996, pp. 2215-2222.
- (7) J. P. H. Sanders, J. Y. Chen, and I. Gökalp, "Flamelet-Based Modeling of NO Formation in Turbulent Hydrogen Jet Diffusion Flames". Combustion and Flame, 1997, Vol.111, pp. 1-15.
- (8) S.-K. Kim, Y.-M. Kim, K.-Y. Ahn and K. Oh, "Detailed structure and NO_x formation characteristics of turbulent nonpremixed flames", The Second Asia-Pacific Conference on Combustion, 1999, pp. 496-499.
- (9) C. S. Chen, K. C. Chang, and J. Y. Chen, "Application of a Robust β -pdf Treatment to Analysis of Thermal NO Formation in Nonpremixed Hydrogen-Air Flame", Combustion and Flame, 1994, pp.

375-390.

- (10) R. S. Barlow and C. D. Carter, "Relationship among Nitric Oxide, Temperature, and Mixture Fraction in Hydrogen Jet Flames", *Combustion and Flame*, 1996, Vol.104, pp.288-299.
- (11) Y. Choi and C. L. Merkle, "The Application of Preconditioning in Viscous Flows", *Journal of Computational Physics*, 1993, Vol.105, pp. 207-223.
- (12) J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble, *Combustion*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.
- (13) G. Dixon-Lewis, F. A. Goldsworthy, and J. B. Greenberg, "Flame Structure and Flame Reaction Kinetics IX. Calculation of Properties of Multi-radical Premixed Flames", *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1975, Vol. 346, pp. 261-278.
- (14) J. J. Louis, "Turbulent Combustion of Coal Gas", Ph. D. Dissertation, U. of Twente, 1997.
- (15) <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- (16) J. Villiermaux, "Micromixing Phenomena in Stirred Reactors", *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, 1986, pp. 707-768.
- (17) R. Borghi, "Turbulent Combustion Modelling", 1989, *Prog. Energy. Combust. Sci.*, Vol. 14, pp. 245-292.
- (18) S. B. Pope, "An Explanation of the Turbulent Round Jet/Plane Jet Anomaly", *AIAA J.* Vol. 16, No. 3, 279-281.
- (19) J. Y. Chen, W. C. Chang, and M. Koszykowski, "Numerical Simulation and Scaling of NOx Emissions from Turbulent Hydrogen-Air Jet Flames with Various Amounts of Helium Dilution", *Combust. Sci. and Tech.*, 1995, Vol. 110-111, pp. 505-529.

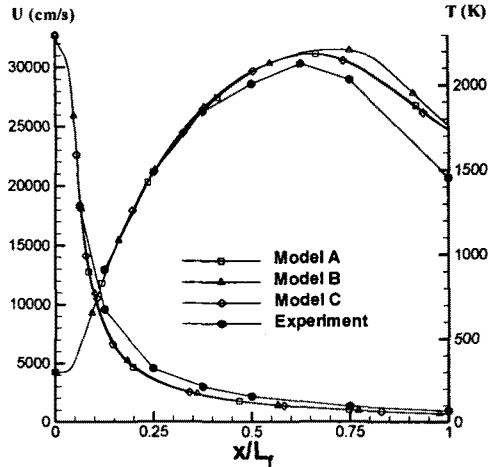


그림 1 : 중심축 방향으로의
속도와 온도 분포

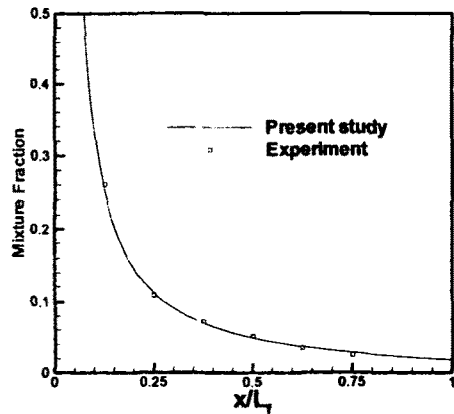


그림 2 : 중심축 방향으로의
혼합분율 분포

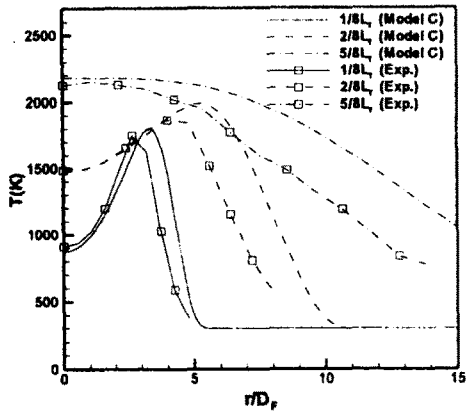


그림 3: 반경 방향으로의 온도 분포

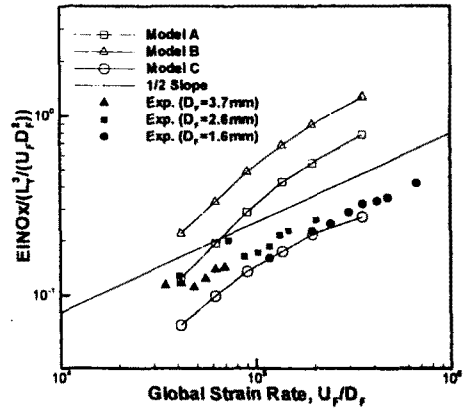


그림 4: $EINOx/\tau$, 와 충유동변형률 사이의 1/2 비례관계

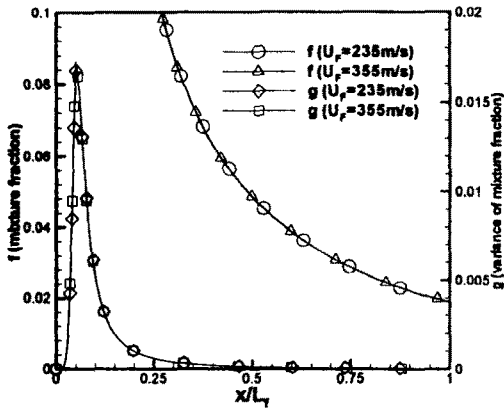


그림 5: 중심축 방향으로의 혼합분율과 혼합분율의 분산의 분포

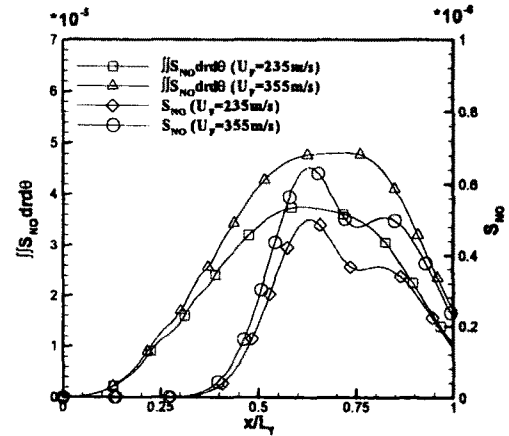


그림 6: Model C 를 이용한 중심축 방향으로의 $\int S_{NO} dV d\theta$ 와 S_{NO} 분포