

메탄/순산소 혼합층에서 edge flame의 구조

최상규* · 김준홍* · 정석호** · 김종수***

Structure of Edge Flame in a Methane-Oxygen Mixing Layer

S. K. Choi*, J. Kim*, S. H. Chung** and J. S. Kim***

ABSTRACT

Structure of edge flame established in a mixing layer, formed between two uniformly flowing pure CH₄ and pure O₂ streams, is numerically investigated by employing a detailed methane-oxidation mechanism. The numerical results exhibited the most outstanding distinction of using pure oxygen in the fuel-rich premixed-flame front, through which the carbon-containing compound is found to leak mainly in the form of CO instead of HC compounds, contrary to the rich CH₄-air premixed flames in which CH₄ as well as C₂H_m leakage can occur. Moreover, while passing through the rich premixed flame, a major route for CO production, in addition to the direct CH₄ decomposition, is found to be C₂H_m compound formation followed by their decomposition into CO. Beyond the rich premixed flame front, CO is further oxidized into CO₂ in a broad diffusion-flame-like reaction zone located around moderately fuel-rich side of the stoichiometric mixture by the OH radical from the fuel-lean premixed-flame front. Since the secondary CO production through C₂H_m decomposition has a relatively strong reaction intensity, an additional heat-release branch appears and the resulting heat-release profile can no longer be seen as a tribrachial structure.

Key Words : Oxy-fuel combustion, Methane oxidation, Edge flame, Mixing layer

1. 서 론

1997년 채택되어 2005년부터 발효되기 시작한 교토의정서를 통해서 유럽연합을 중심으로 하는 선진국들은 지구 온난화에 대한 방지책으로 2008-2012년 기간 동안 각국의 1990년 기준량에서 5.2%를 감축한 수준으로 탄소 배출량을 낮추는 협약을 하였고, 이에 대응하기 위해서 전 세계적으로 CO₂ 배출 저감 및 처리 방안의 개발을 경주하고 있다. CO₂의 주요 배출원이 산업 및 발전용 화석연료의 연소이기 때문에, 산업용 연소기로부터 발생하는 CO₂ 연소가스를 효율적으로 회수하기 위한 방안의 하나로써 순산소 연소시스템을 적용하는 시도가 진행되고 있다.

순산소 연소는 연료의 산화제로서 공기 대신에 순수 산소나 고농도의 산소를 공급하는 연소기술이다. 순산소 연소는 기존 공기연소에 비해 화염 안정성, 열전달 및 공해배출저감 측면에서 우수하다[1, 2]. 특히 순산소 화염의 온도는 공기화염 온도보다 상당히 높아서 고집적 열에너지를 이용하여 가열로의 부피당 성능을 향상시킬 수 있으며, 열전달 효과도 향상되기 때문에 제품의 질과 생산성도 모두 개선시킬 수 있는 장점이 있다. 더욱이 순수 산소와 연료가 반응하기 때문에 배출연소가스로부터 CO₂ 회수를 위해서는 H₂O만을 응축하면 되므로 회수가 용이하고 저렴하다. 따라서 경제적인 CO₂ 회수방법 및 고효율 연소 측면에서 우수한 순산소 연소기술을 용해로나 화력 발전소와 같은 연소시스템에 적용하기 위해 전 세계적으로 기술개발이 진행되고 있다.

또한 순산소 연소는 미분탄 발전 및 IGCC 등에도 청정 석탄이용기술로 응용되고 있는 추세이다. IGCC는 배가스 대신 가스화된 혼합가스를

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

† 연락처, E-mail : mole0@snu.ac.kr

** 서울대학교 기계항공공학부

*** 한국과학기술연구원 환경공정연구부

정제하여 연소시키기 때문에 SOx, NOx 및 분진 등의 배출량을 크게 감소시킬 수 있어서 가장 상업적으로 실용화에 근접한 차세대 석탄 발전방식이다. IGCC 기술에서 가장 핵심적인 부분이 석탄의 가스화 공정인데, 이는 화석연료에 O₂ 와 H₂O 를 주입하여 부분산화반응을 발생시켜 합성가스(Syngas)를 생산하는 공정이다. 그러나 아직 이 부분산화반응의 연소현상 및 제어에 대한 이해도가 낮은 실정이어서 실용화단계에서도 많은 연구가 필요한 핵심기술로 인식되고 있다.

순산소 연소에 대한 기술개발은 주로 산업기반을 중심으로 이루어졌기 때문에, 기초적인 화염구조나 특성에 대한 연구보다는 실용 연소기 개발에 치중되는 편이었다. 순산소 화염구조에 대한 기초연구 중에서는 Kennedy 등[3]이 메탄/순산소 대향류 확산화염에 대한 연구를 통해 화염구조의 이해도를 높여주었다. 순산소 화염의 온도는 반응 라디칼 생성과 재결합간의 균형을 이루는 crossover 온도보다 상당히 높고, 고온 영역 또한 넓게 분포하기 때문에, crossover 온도 영역에 위치한 연료 분해층은 가장 높은 온도를 가지고 있는 이론당량비 영역으로부터 상당히 떨어진 곳에 위치하게 된다. 확산화염의 총체활성화 에너지는 화염온도와 crossover 온도 차이에 반비례하기 때문에[4], 순산소 총류 화염의 경우는 총체활성화 에너지가 크지 않아서 공기화염처럼 얇은 화염구조를 가지지 않는다. 따라서 강한 난류가 작용하는 순산소 화염 조건에서는 총류화염소모델을 적용하기가 적절하지 않을 것이다. 그러므로 순산소 난류화염의 예측을 위한 개선된 모델이나 새로운 모델이 필요할 것이며, 이를 위해서는 순산소 화염구조에 대한 정확한 이해가 필요하다.

본 연구에서는 메탄과 순산소의 평행한 두 균일유동의 혼합층에서 전파되는 선단화염(edge flame)의 구조를 파악하는데 중점을 두고 있다. Edge flame은 연료의 과농, 희박 예혼합화염으로 이루어진 선단(front)과 이론당량비 예혼합화염의 후류에 위치하는 확산화염으로 구성된다. 따라서 이 총류화염 요소들에 대한 구조뿐만 아니라 이들 간의 상호작용에 대한 연구도 가능하다. 특히 edge flame은 순산소 연소의 과농조건부터 희박조건까지 모두 포함하는 구조이기 때문에 앞서 언급한 IGCC의 핵심기술인 부분산화반응을 이해할 수 있는 기본적인 모델로서도 유용하다. 지금까지의 선단화염 구조에 대한 연구로는 주로 1차 총체화학반응의 가정을 기반으로 한 연구가 수행되었으나[5-7], 본 연구에서는 상세화학반응 메커니즘이 적용된 수치모사방법을 이용하여 CH₄/O₂ edge flame의 구조를 살펴보았다. 따라서 본 연구를 통하여 순산소 edge-flame의 상세구조, 즉

연소반응의 중간생성물이나 라디칼 및 기본 화염구조와 상호작용에 대한 새로운 정보를 파악하여 순산소 연소기 설계에 대한 유용한 자료로서 제시하고자 하였으며, 특히 순산소 조건에서 CH₄ 연료가 어떠한 형태의 부분산화반응에 의해서 CO 와 H₂ 로 전환될 수 있는가에 대해 중점적으로 살펴보려고 한다.

2. 수치 해석 방법

메탄/순산소 혼합층에서 edge flame의 구조를 모사하기 위하여, 직교 (x,y) 좌표계에서 비정상 운동량, 화학종, 에너지 보존 방정식을 계산하였다. 낮은 마하수 근사법[8]을 기반으로 한 직접수치모사 기법을 사용하였고, 부력과 복사 열전달은 무시되었다. 공간적으로는 엇갈린 격자계를 이용하여 2차 정확도의 중앙 차분법을 적용하였고, 시간차분법으로는 4차 정확도의 6단계 Runge-Kutta 기법이 사용되었다[9].

화학반응 메커니즘은 질소 반응을 제외한 GRI-Mech 2.11 [10] 메커니즘으로 적용하였다. GRI-Mech 2.11의 유효성을 검증하기 위하여, edge flame의 결과를 GRI-Mech 3.0 [11] 메커니즘을 이용하여 동일계산을 수행하였는데, 특성 화학반응 시간보다 충분히 긴 4.0 μs 동안 계산하였다. GRI-Mech 2.11 과 3.0 은 C2 반응까지 거의 차이를 보이지 않았으므로 계산의 효율을 위하여 GRI-Mech 2.11을 사용하였다. GRI-Mech 3.0 은 온도범위 1000 K~2500 K, 압력범위 10 Torr~10 atm, 당량비 0.1~5.0 에서 최적화되어 있다. 순산소 연소에서의 최고온도(~3200 K)가 최적화된 온도 범위를 초과하지만, 예측값은 큰 차이를 보이지는 않을 것으로 예상되었다[3]. 열역학적 물성치와 전달 물성치는 각각 CHEMKIN[12]과 TRANSPORT package [13]를 이용하여 계산되었다.

계산 영역은 2 cm × 3 cm 의 혼합층이고, 192 × 512 개의 비균일 격자를 사용하였으며 계산 결과가 그리드 수에 비의존적임을 확인하였다. 반응 영역에 격자를 집중하기 위하여 -4 mm < x < +4 mm 의 범위에 128 개의 균일 격자(Δx = 0.063 mm)를 배치하였고, 바깥쪽으로 64 개의 비균일 격자를 구성하였다. y-축 방향으로는 화염 선단의 전파를 상세히 모사하기 위하여 512 개의 균일 격자(Δy = 0.059 mm)를 배치하였다. 양쪽 벽면에서 경계 조건의 영향을 최소화하기 위하여, x = ±1 cm 에서 slip-wall 경계 조건을 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 edge flame의 전체 구조

메탄/순산소 혼합층에서 edge-flame의 비정상 전파를 모사하기 위하여, $y = 0$ 에서 $T = 298.15$ K, $u = 40$ cm/s 의 균일한 온도와 유속으로 $x < 0$ 에서는 순수 메탄, $x > 0$ 에서는 순수 산소를 공급하였다. $x = 0$ 에서 CH_4 와 O_2 의 입구 농도 분포는 혼합 두께 1.0 mm 의 error function으로 설정하였다. 초기 화염을 형성시키기 위하여 $x = 0.17$ cm, $y = 2.70$ cm 위치에 폭 3 mm, 온도 2000 K 의 점화원을 주었고, 초기 점화 거동이 edge flame 전파에 미치는 영향을 배제하기 위하여 점화 후 $t = 0.9$ ms 시점에서의 데이터를 이용하였다.

$t = 0.9$ ms 에서 연료와 산화제의 혼합분율 Z_{mix} 를 Fig. 1(a) 에, 온도 T 를 (b) 에, 열방출률 ω_T 를 (c) 에 나타내었다. 굵은 실선은 이론당량비에 해당하는 혼합분율 $Z_{st} = 0.200$ 을 나타낸다. 혼합분율 $Z_{mix} = (\xi_{mix} - \xi_{mix,0}) / (\xi_{mix,F} - \xi_{mix,0})$ 로 규준화하였다. 여기에서 아래첨자 F 와 O 는 각각 연료와 산화제를 나타낸다. 국부 혼합분율 ξ_{mix} 는 원자 단위의 산화 평형식 $\xi_{mix} = 2\xi_C / W_C + 0.5\xi_H / W_H - \xi_O / W_O$ 으로 정의되었다. 여

기에서 ξ_i 와 W_i 는 각각 i -원자의 질량 분율과 원자량을 나타낸다. Z_{mix} 의 정의에 대한 적합성을 검증하기 위하여, C, H, O 원자에 기반한 혼합분율 $Z_i = (\xi_i - \xi_{i,0}) / (\xi_{i,F} - \xi_{i,0})$ 를 $y = 2.2$ cm 위치에서 Z_{mix} 와 비교하여 Fig. 1a 의 상단에 나타내었다. Z_i 와 Z_{mix} 가 연료 과농한 예혼합 화염 지역에서 약간의 차이를 제외하고는 거의 같으므로, Z_{mix} 는 메탄/순산소 혼합층에서 C, H, O 의 비율을 나타내는 적절한 인자로 볼 수 있다.

Fig. 1b 의 온도분포에서와 같이, 최대 화염온도(~ 3000 K)는 $Z = Z_{st}$ 의 이론당량비선을 따라감을 볼 수 있다. 수평 방향 단면을 따른 온도 분포는 Fig. 1b 의 상단에 나타난 바와 같이, 양쪽 예혼합화염에서 급격히 증가하여 넓은 고온 영역이 유지됨을 알 수 있다. 화염 앞단 부분에서는 Liu 등[14]의 결과와 같이 이론당량비 지점으로부터 약간 과농한 예혼합화염 바로 뒤쪽으로 super-equilibrium 화염온도가 나타남이 관찰되었다.

열방출율은 Fig. 1c 에 나타난 바와 같이 바깥쪽의 예혼합화염 영역에서 가장 높지만, 매우 과농한 예혼합화염 바로 안쪽에서도 낮고 강한 발열 반응이 나타나고, $Z = Z_{st}$ 의 주위로 넓고 미약한 반응 지역이 추가적으로 관찰되었다. Fig. 1c 의 윗부분에 표시한 $y = 2.2$ cm 의 단면은

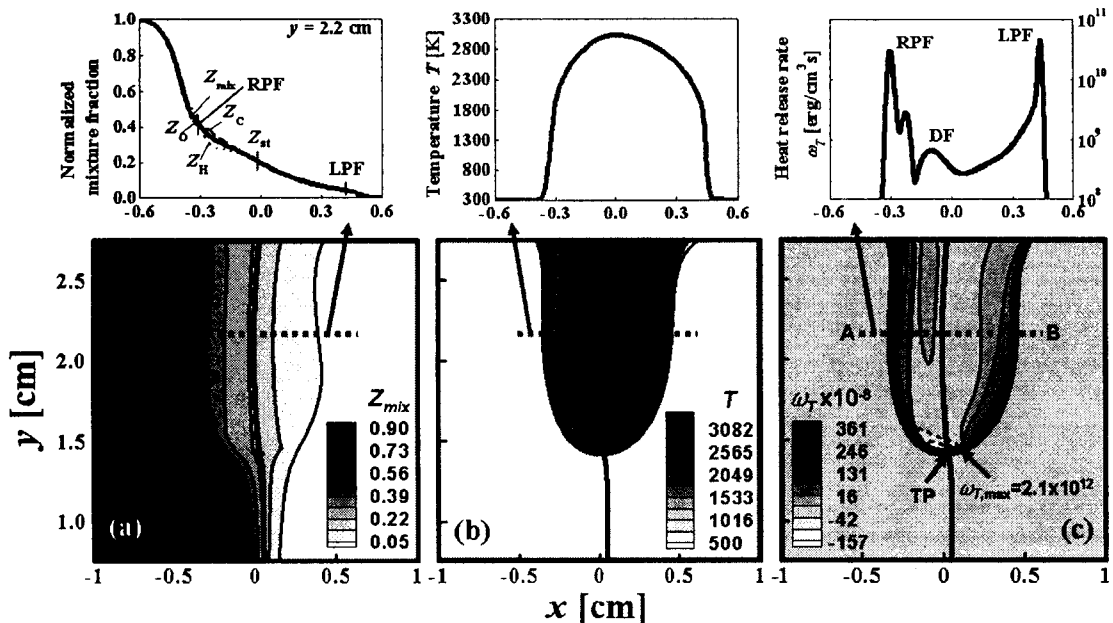


Fig. 1 Contours of the mixture fraction (a), temperature (b), and heat release rate(c) for the edge-flame snapshot at $t = 0.9$ ms after ignition and their horizontal profiles at the cross-section of $y = 2.2$ cm.

이러한 여러 개의 열방출 지역을 분명하게 보이고 있다. 이는 탄화수소/공기 혼합층에서 나타나는 과농 예혼합 화염, 희박 예혼합 화염, 그리고 $Z = Z_{st}$ 를 따라 이어지는 확산화염으로 이루어진 삼지화염과는 상이한 구조이다.

3.2 연료 과농 지역의 화염구조

메탄 산화과정에서, Peters와 Williams[4]가 제시한 3단계 축소 메커니즘은 화염 구조 해석에 매우 유용하다. 메탄 산화과정의 축소 화학반응은 연료 소모($CH_4 + O_2 \rightarrow CO + H_2 + H_2O$), water-gas shift($CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$), O_2 소모($O_2 + 2H_2 \rightarrow 2H_2O$) 로 구성되는데, H_2 의 평형 상태 또는 water-gas shift 반응의 평형 상태를 고려하면 3단계 메커니즘을 2단계로 축소할 수 있다. 이러한 축소 메커니즘은 희박 예혼합화염으로부터 약간 과농한 예혼합화염까지 적용될 수 있으므로, 매우 과농한 예혼합화염에서는 세심한 주의가 필요하다.

Figure 1c 에 나타난 바와 같이, 메탄/공기 화염과 가장 뚜렷한 차이점을 보이는 연료 과농지역의 구조를 자세히 관찰하기 위하여, 선단화염 후류부분의 CH_4 , CO , H_2 , C_2H_m , CO_2 , H_2O 의 질량 분율과 반응율을 Fig. 2 에 각각 flood와 line의 형태로 확대하여 나타내었다. 반응율에서 실선은 화학종 생성을, 점선은 소모를 나타내고, 각각의 숫자는 해당 위치에서의 화학종 생성 또는

소모율($g/cm^3 \cdot s$)을 나타낸다. 과농 예혼합화염과 희박 예혼합화염 사이에 위치하는 확산 화염 영역의 반응율은 예혼합화염에 비해 1/10~1/100 정도로 작기 때문에, 확산화염 영역의 반응율을 기준으로 확대하여 나타내었다. 연료인 CH_4 는 바깥쪽의 예혼합화염 전 영역에서 소모 반응만이 존재하는데, 이는 과농한 메탄/공기 예혼합화염에서 반응하지 않은 일부 CH_4 가 화염 영역을 통과하는 것과는 상이한 현상이다. 이에 대해서는 뒤의 3.3 에서 논의할 것이다. 주요 중간 생성물인 CO 와 H_2 는 CH_4 가 소모되는 지역에서 형성되기 시작하여, CH_4 가 완전히 소모된 후에도 일정 범위에서 생성이 계속됨을 알 수 있다. 이 연료 과농지역에서 CO 와 H_2 의 생성은 메탄/공기 화염과 구별되는 주요한 특성이다.

주요 화학종의 질량 분율과 반응율을 상세히 살펴보기 위하여, Fig. 1c 에서 단면 A-B 를 따른 분포를 Fig. 3 에 나타내었다. Z_{st} 좌측으로 연료 과농한 예혼합 화염에서는, CH_4 의 최대 소모 지점과 CO , H_2 , C_2H_m , H_2O 의 최대생성물 지점이 거의 일치함을 알 수 있다. CH_4 가 소모되는 주요 반응은 그 중요도에 따라 다음과 같다.

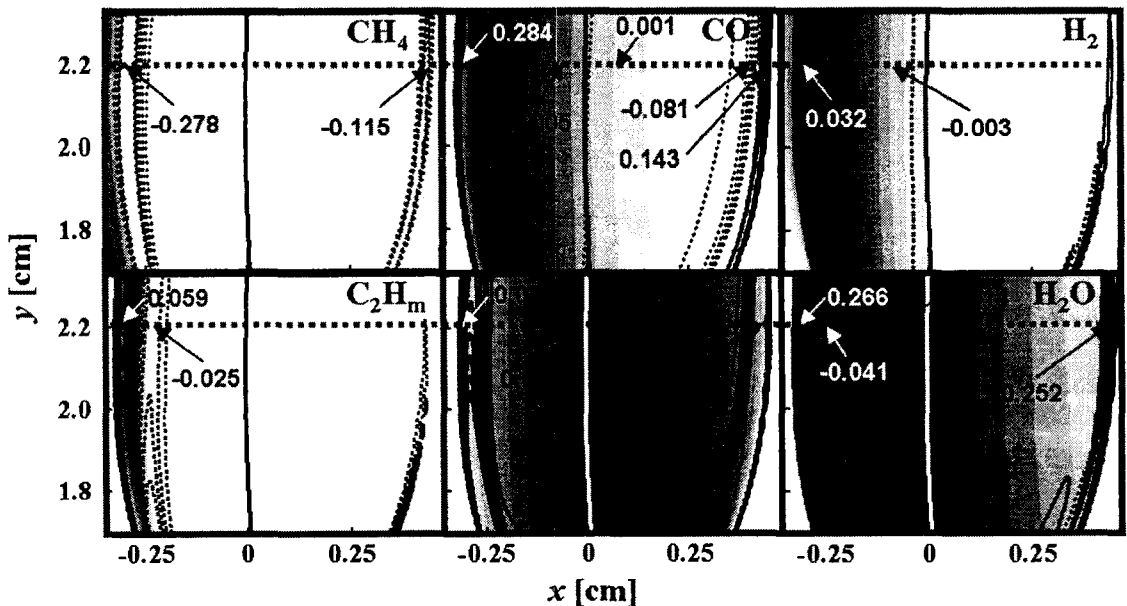
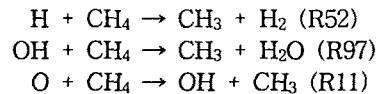
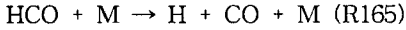
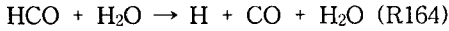


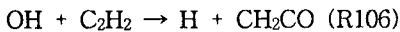
Fig. 2 The mass fraction (flood contours) and reaction rates (solid line contours: production, dotted-line contours: consumption) for CH_4 , C_2H_m , CO , H_2 , CO_2 and H_2O in the downstream diffusion-flame region.

CH₄ 는 H, OH, O 라디칼에 의하여 분해되면서 CH₃ 를 생성한다. 한편 동일한 위치에서 주요한 CO 생성 반응은 다음과 같다.

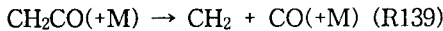


CH₄ 가 분해되는 주요 경로는 CH₄→CH₃→CH₂O→HCO→CO 이므로, HCO 를 통한 CO 의 생성은 CH₄ 의 소모율로 결정된다. 또한, R52 에 의하여 H₂ 도 생성된다.

CH₄ 가 소모됨과 동시에 H₂ 와 C₂H_m 은 증가하다가 CH₄ 가 완전히 소모될 때 최고 농도를 나타낸다. CO 의 농도 또한 증가하지만, 그 최대 지점은 H₂ 와 C₂H_m 의 최대 농도 위치보다 약간 오른쪽으로 치우쳐 있으며, C₂H_m 이 완전히 소모되는 지점과 일치한다. 즉, CO 는 CH₄ 가 완전히 소모된 이후에도 C₂H_m 의 산화과정을 통하여 재차 생성됨을 유추할 수 있다. Fig. 3b 에 나타난 것처럼, CO 와 H₂, C₂H_m 은 일차적으로 연료 과농한 예혼합화염에서 CH₄ 의 빠른 소모로 인해 생성된다. 그러나 하나의 최대 생성을 지점만을 가지는 H₂ 와 C₂H_m 과는 달리, CO 는 C₂H_m 의 최대소모율 위치에서 이차적인 최대점을 나타낸다. 여기에서 C₂H_m 을 포함한 주요 반응은 다음과 같다.



R23 을 통한 CO 의 직접 생성 이외에도, R21 과 R106 에서 생성된 HCCO 와 CH₂CO 는 각각 다음의 반응을 통하여 CO 를 생성한다.



즉, CO 는 처음에 C₁-경로를 통하여 생성되고, C₂-경로를 통하여 재차 생성된다고 볼 수 있다. 결론적으로, 과농 예혼합화염에서의 주요 반응은 총체적으로 CH₄ + O₂ → CO + H₂ + H₂O 로 나타낼 수 있는 부분산화과정임을 알 수 있다. 여기에서 C₂H_m 은 CO 생성뿐만 아니라 soot 생성에도 중요한 중간 생성물임을 고려할 필요가 있다. soot와 CO 생성의 상호 작용은 가스화 과정에서 매우 중요한 문제이나, 본 연구에서는 soot 생성을 고려하지 않았고 따라서 복사 열전달도 무시되었기 때문에, 복사 열손실이 2차적인 CO 생성에 어떠한 영향을 미칠 것인지는 분명하지 않

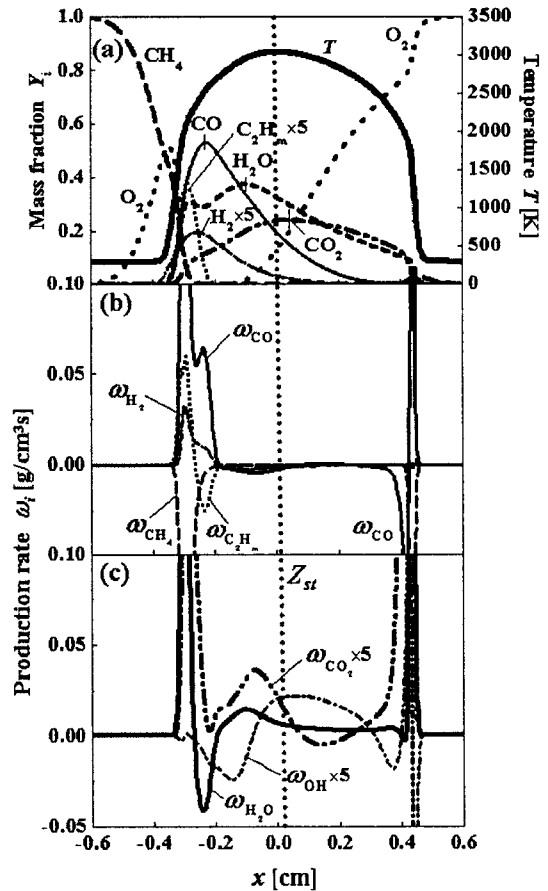


Fig. 3 The profiles of the temperature and mass fractions (a) and of the production rates (b), (c) for CH₄, C₂H_m, CO, H₂, OH, CO₂ and H₂O along the horizontal cross-section A-B marked in Fig. 1c.

며, 따라서 향후 부분산화반응에서 soot 성장과 복사열전달에 의한 열손실 효과의 영향에 대한 연구가 필요하다.

3.3 메탄/공기 과농 예혼합화염과의 비교

앞서 밝혀낸 메탄/순산소 edge flame에서 관측되는 과농지역의 부분산화반응 특성이 메탄/공기 화염에서는 어떤 차이를 보이는지 살펴보기 위해서, $\phi = 2.0$ 에서의 메탄/공기 예혼합기와 메탄/순산소 예혼합기의 화염구조를 비교 조사해 보았다. 구조의 변화는 1차원 코드(PREMIX)[15]를 이용하여 GRI-Mech 2.11 과 3.0 에 대하여 계산, 비교하였으며 거의 동일한 결과를 얻었다. 실제로 $\phi = 2.0$ 은 메탄/공기 예혼합화염의 가연 과농 한계를 넘어서는 것이지만, 순산소 연소와의 비교를 위해 같은 당량비에서 계산하였다.

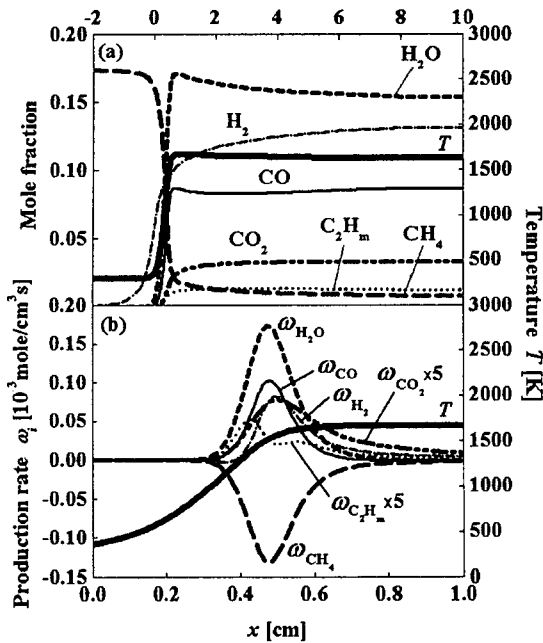


Fig. 4 The profiles of the temperature and mole fractions (a) and of the production rates (b) for CH_4 , C_2H_m , CO , H_2 , CO_2 and H_2O of 1-D CH_4/air premixed flame at $\phi = 2.0$ calculated by GRI-Mech 2.11.

Figure 4, 5 는 각각 $\phi = 2.0$ 인 메탄/공기, 메탄/순산소 1차원 평면 화염에서 주요 화학종의 농도와 반응율을 나타낸다. 앞에서 언급했듯이, 메탄/공기 예혼합화염에서는 잉여 CH_4 가 주 반응영역을 통과하여 후류 부분에도 계속 존재하지만, 메탄/순산소 화염에서는 모두 소모된다. 또한 생성된 C_2H_m 도 메탄/공기 화염의 경우 전 화염영역에서 생성 반응만이 존재해서(Fig. 4b) 후류 부분에 계속적으로 잔류하지만(Fig. 4a), 메탄/순산소 화염에서는 R23, R21, R106 과 같은 산화반응에 의해서 Fig. 5 에서처럼 후류에서는 소모가 되는 것은 주목할 만한 차이점이다.

메탄/공기 화염도 하나의 반응층으로 구성된 것처럼 보이지만, 메탄/순산소 화염과는 달리 생성된 CO 가 미약하게 소모되고, 이것은 Fig. 4a 에서 CO 의 농도가 일시적으로 감소하는 사실로도 알 수 있다. 하지만 메탄/순산소 화염에서는 CH_4 가 완전히 소모된 이후에도 C_2H_m 의 반응을 통하여 CO 가 지속적으로 생성되고, 이는 후류 부분에서 CO 농도의 완만한 증가로 나타난다.

회박 연료의 예혼합화염 영역에서는 Fig. 3b 의 오른쪽 부분에서 볼 수 있듯이, 일반적으로 CO 가 좁은 영역 내에서 생성되고 소모되는 2층

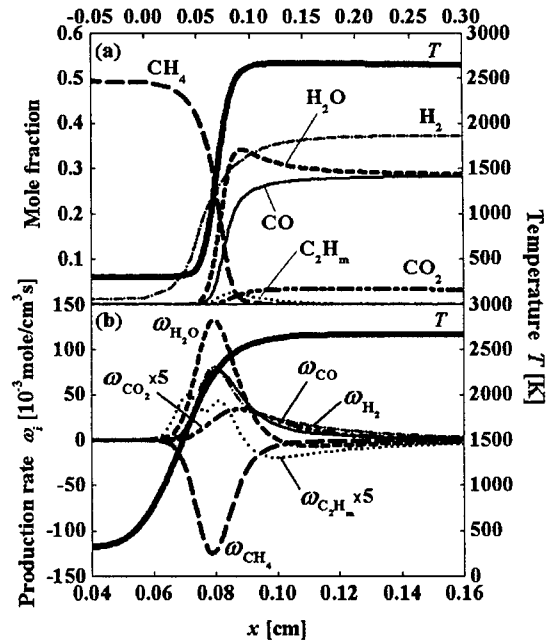


Fig. 5 The profiles of the temperature and mole fractions (a) and of the production rates (b) for CH_4 , C_2H_m , CO , H_2 , CO_2 and H_2O of 1-D CH_4/O_2 premixed flame at $\phi = 2.0$ calculated by GRI-Mech 2.11.

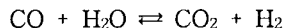
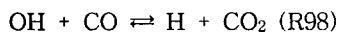
의 층상 구조를 가진다. 그러나 전술한 바와 같이, 메탄/순산소의 매우 과농한 예혼합 화염은 하나의 넓은 반응 영역으로 구성됨을 알 수 있다. 메탄/순산소 예혼합 화염의 앞단에서, 두 개의 층에서 하나로 천이되는 부분은 $\phi = 1.75$ 부근이다. 반면 메탄/공기 예혼합 화염에서는 당량비가 과농 한계를 넘을 때에도 두 개의 층을 유지한다.

3.4 확산화염 지역의 구조

확산화염의 반응 영역은 Fig. 3 에서 볼 수 있듯이, 과농 예혼합화염과 회박 예혼합화염 사이에 넓게 분포되어 있다. Figure 3c 에서, 최종 생성물인 H_2O 와 CO_2 는 이론당량비 Z_{st} 보다 약간 왼쪽에서 국부적으로 최대 생성율을 보인다. 그러나 Fig. 3a 를 보면 CO_2 의 질량 분율은 생성율과 달리 Z_{st} 보다 약간 오른쪽에서 최대가 된다. 이는 Fig. 2 에 숫자로 표시한 CO_2 의 생성율이 과농 예혼합화염에서보다 회박 예혼합화염에서 5배 이상 크기 때문인 것으로 생각되는데, 과농 예혼합화염에서는 CO 의 생성이 매우 강하기 때문에 CO_2 는 상대적으로 적게 생성된다.

H_2O 의 농도는 H_2 최고점 부근에서 일시적으로 감소하며, 또한 이 지역에서 H_2O 소모 반응

이 나타남을 알 수 있다. 이는 다음과 같은 water-gas shift 반응[4]으로 설명할 수 있다.



H₂O 가 소모되는 주요 반응은 R83 (H + H₂O → OH + H₂)이며 이어서 CO₂ 생성 반응인 R98 (OH + CO → H + CO₂) 이 일어난다. 이는 Fig. 3b, 3c 에서와 같이 H₂O 가 소모되는 지역이 CO 소모와 CO₂ 생성 지역보다 먼저 나타나는 결과와 일치한다. 과농 예혼합화염에서의 1차 생성을 거쳐 Z_{st} 에 도달하기에 앞서, H₂O 와 CO₂ 는 각각 R83 의 역반응 (OH + H₂ → H + H₂O) 과 R98 에 의하여 2차적으로 생성된다. 즉, CO 와 H₂ 는 주로 Z_{st} 근처에서 최대농도를 나타내는 OH 라디칼에 의하여 산화된다.

4. 결 론

순수 메탄과 산소로 형성된 혼합층에서 edge flame의 구조를 GRI-Mech 2.11 을 이용하여 수치해석적으로 연구하였고, 메탄/공기 화염과는 달리 과농 예혼합 화염에서 HC 화학종이 아닌 CO 가 누출되는 상이한 구조를 관찰할 수 있었다. 특히, CO 는 CH₄ 의 분해에 의해 직접적으로 형성될 뿐만 아니라 C₂H_m 을 통하여서도 생성된다. 이러한 경로로 생성된 CO 는 약간 과농한 부근의 넓은 지역에 걸쳐 확산 화염과 비슷한 형태로 희박 예혼합화염에서 형성된 OH 에 의해 산화되며, 이 영역에서 화염 온도는 최대를 나타낸다.

메탄/순산소 edge flame이 메탄/공기 화염과는 구조적인 차이를 보이지만, 상세 화학 반응을 적용한 메탄/공기 edge flame의 경우와 구체적인 비교를 하기 위해서는 메탄/공기 edge flame에 대한 수치해석을 상세 화학 반응을 적용하여 수행하는 것이 필요하다. 또한, 메탄/순산소 edge flame에 적용 가능한 축소 반응 메커니즘의 개발도 필요할 것으로 생각된다. edge flame은 기본적인 층류 화염의 구조를 모두 포함하고 있으므로 메탄/순산소 edge flame에 대한 축소 반응 메커니즘은 많은 경우에서 폭넓게 사용될 수 있을 것이다.

후 기

본 연구는 과학기술부의 이산화탄소저감 및 처리

기술개발사업단(CDRS)의 지원으로 이루어졌으며, 계산자원은 한국과학기술정보연구원의 '제 7 차 슈퍼컴퓨팅 응용연구 전략지원 프로그램'을 통해 지원받았기에 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] C.E. Baukal, "Oxygen-enhanced Combustion," CRC Press, Boca Raton, FL, 1998.
- [2] C.E. Baukal, "Industrial Burners Handbook," CRC Press, Boca Raton, FL, 2003.
- [3] A. Beltrame, P. Porshnev, W. Merchan-Merchan, A. Saveliev, A. Fridman, L.A. Kennedy, O. Petrova, S. Zhdanok, F. Amouri, and O. Charon, "Soot and NO Formation in Methane-Oxygen Enriched Diffusion Flames," *Combust. Flame* 124, 295-310, 2001.
- [4] N. Peters and F.A. Williams, "The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames," *Combust. Flame* 68 (2), 185-207, 1987.
- [5] J.W. Dold, "Flame Propagation in a Nonuniform Mixture: Analysis of a Slowly Varying Triple Flame," *Combust. Flame* 76, 71-88, 1989.
- [6] S.H. Won, J. Kim, K.J. Hong, M.S. Cha, S.H. Chung, "Stabilization Mechanism of Lifted Flame Edge in the Near Field of Coflow Jets for Diluted Methane," *Proc. Combust. Inst.* 30, 339-347, 2005.
- [7] J. Buckmaster, "Edge-flames," *Prog. Energy Combust. Sci.* 28, 435-475, 2002.
- [8] H.N. Najm, P.S. Wyckoff, and O.M. Knio, "A Semi-implicit Numerical Scheme for Reacting Flow: I. Stiff Chemistry," *J. Comp. Phys.* 143, 381-402, 1998.
- [9] C.A. Kennedy, M.H. Carpenter, and R.M. Lewis, "Low-storage, Explicit Runge-Kutta Schemes for the Compressible Navier-Stokes Equations," *App. Num. Math.* 35, 177-219, 2000.
- [10] C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, W.C. Gardiner, Jr., V. Lissianski, G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach and M. Goldenberg, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [11] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner, V.V. Lissianski, and Z. Qin http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

- [12] R.J. Kee, F.M. Rupley, and E. Meeks, J.A. Miller, "CHEMKIN-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical and Plasma Kinetics," Report No. SAND96-8216, Sandia National Laboratories, 1996.
- [13] R.J. Kee, J. Warnatz, and J.A. Miller, "A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas-phase Viscosities, Conductivities and Diffusion Coefficients," Report No. SAND83-8209, Sandia National Laboratories, 1983.
- [14] F. Liu, H. Guo, G.J. Smallwood, and Ö.L. Gülder, "Numerical Study of the Superadiabatic Flame Temperature Phenomenon in Hydrocarbon Premixed Flames," *Proc. Combust. Inst.* 29, 1543-1550, 2002.
- [15] R.J. Kee, J.F. Grcar, M.D. Smooke, and J.A. Miller, "PREMIX : A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-dimensional Premixed Flames," Report No. SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.