

대향류 확산화염의 고온공기 연소특성에 관한 수치해석

조은성* · 小林秀昭** · 정석호***

A Numerical Analysis of the Characteristics with High Temperature Air Combustion in Counterflow Diffusion Flame

Eun Seong Cho, Hideaki Kobayashi, and Suk Ho Chung

ABSTRACT

High temperature air combustion technology has been utilized by using preheated air over 1100 K and excessive exhaust gas recirculation. Numerical analysis was performed to investigate the combustion characteristics with high temperature deficient oxygen air combustion by adopting a counterflow as a model problem accounting for detailed chemical kinetics. Methane(CH_4) was used as a test fuel and calculated oxidizer conditions were low temperature high oxygen (300K, $X_{\text{O}_2}=0.21$) and high temperature low oxygen (1300K, $X_{\text{O}_2}=0.04$) conditions. The latter case showed that the flame temperature is lower than the former case and its profile showed monotonic decrease from oxidizer to fuel side, without having local maximum flame temperature at high stretch rate. Also, heat release rate was one order lower and it has one peak profile because of low oxygen concentration and heat release rate integral is almost same for stretch rate. High temperature low oxygen air combustion shows low NO emission characteristics.

Key Words : High temperature air combustion, Counterflow, NO_x , Flue gas recirculation

기호설명

a : 스트레이인율 또는 속도구배	W : 분자량
K : 스트레치율, ($=2a$)	ω : 생성률
f : 유동함수	V : 확산속도 ($= \rho v$)
μ : 점성계수	Y : 질량분율
ρ : 밀도	C_p : 정압비열
λ : 열전도율	h : 엔탈피

1. 서 론

산업의 발전에 따라 과다한 에너지소비에 따른 연료 고갈 및 이에 따른 공해물질 배출의 증가를 초래하게 되었고, 이로 인해 연소효율 향상과 저

공해 연소를 실현하기 위한 신 연소기술 개발에 대한 관심이 높아지고 있다. 특히, 1997년 교토협약 이후 이산화탄소(CO_2) 발생의 규제 및 국가간 거래가 도입되어 유해 공해물질 배출뿐만 아니라 에너지 소비량 자체를 규제하려는 추세가 진행되고 있다. 연소효율을 증대시키기 위하여 배기가스를 이용한 열교환 방법을 통한 축열식 연소방법을 이용하였으나 공기온도가 높아짐에 따라大量的 NO_x 가 발생되는 문제점이 나타났다.

이와 관련하여 독일[1] 및 일본[2-4] 등에서 고온공기를 이용한 연소방법에 배기가스 재순환법을

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

† 연락처자 E-mail : teodoro7@snu.ac.kr

TEL : (02)880-7120 FAX : (02)889-1842

** 일본 동북대학교 유체과학연구소

*** 서울대학교 기계항공공학부

적용하여 효율향상, CO_2 및 공해물질 저감을 동시에 실현할 수 있는 연구결과가 보고되고 있다. 이 방법은 고온공기를 이용함에 따라 연소영역이 확대되어 낮은 산소조건에서도 연소가 가능하므로, 기존에 20~30% 정도로 사용되었던 배기가스 재순환량을 300% 이상의 과다 화석시킴으로써 화염의 최고온도를 줄이고 연소영역에서 산소농도가 매우 희박해져 NO_x 발생을 현저히 줄일 수 있다. 고온공기연소의 특징은 자발화 온도 이상의 산화제 공급에 의한 안정되고 소음이 적은 화염이 형성되고, 연소효율향상에 따라 연료 소비를 저감시킬 수 있으며, 로내 전체로 반응영역을 확장시켜 균일한 온도분포로 열전달 효율이 향상되어 로의 소형화가 가능하다.

대향류 확산화염에서 고온공기를 이용한 기존 연구로서는 실험 및 계산을 통한 NO_x 발생특성 연구[5]와 압력과 공기회석에 따른 NO_x 발생특성 연구[6]가 있으며, 본 논문에서는 과다 화석된 고온 저 O_2 산화제를 사용한 경우의 온도, 열발생속도, NO 발생 등의 연소특성을 상온연소와 비교하여 확인하여 보았다. 저 O_2 연소의 경우 고온공기를 사용하더라도 낮은 NO 발생특성을 보이는 것을 알 수 있다.

2. 지배방정식 및 수치해석

대향류 화염은 준 일차원의 화염으로 간주되어, 일차원화염모델을 구축해 해석계산이나 수치계산에 의한 예측과 비교가 용이하여 실험과 수치계산의 양쪽측면으로부터 현상해명을 시험하는 것이 가능하다. 또한, 화염신장의 영향을 조사하는 것이 가능하여 난류화염의 구조해명의 기초 데이터가 되는 것이 기대되어진다. 난류화염은 매우 복잡한 유동장을 형성하나, 화염 일부를 국소적으로 보면 스트레인을 받는 충류화염으로 간주하는 것이 가능하다. 이런 것들이 모여진 것이 난류화염이라고 한다면 다양한 오더의 스트레인을 받는 충류화염을 상세히 조사하는 것에 의해 난류화염의 구조해명에 적용 가능하다.

본 연구에서는 Smooke[7]에 의하여 개발된 코드를 수정하여 사용하였으며, 질량, 운동량, 에너지, 화학종 방정식 및 상태 방정식과 경계 조건은 다음과 같다.

연속방정식 :

$$\frac{dV}{dy} + 2apf' = 0$$

운동량 방정식 :

$$\frac{d}{dy} \left(\mu \frac{df'}{dy} \right) - V \frac{df'}{dy} + a[\rho_\infty - \rho(f')]^2 = 0$$

화학종 방정식 :

$$\frac{d}{dy} (\rho Y_k V_{ky}) + V \frac{dY_k}{dy} - \omega_k W_k = 0$$

에너지 방정식 :

$$\frac{d}{dy} \left(\lambda \frac{dT}{dy} \right) - C_p V \frac{dT}{dy} - \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_{ky} C_{pk} \frac{dT}{dy} - \sum_{k=1}^K \omega_k W_k h_k = 0$$

상태방정식 :

$$\rho = \frac{p \bar{W}}{RT}$$

여기서, $u = axf'$, $V = \rho v$ 이며, u, v 와 x, y 는 각각 축방향, 반경방향의 속도와 좌표이며, p , \bar{W} , R , T 는 각각 압력, 혼합기체의 평균분자량, 일반기체상수, 온도이다. 하첨자 ∞ , k 는 각각 자유 유동, 화학종을 나타낸다.

이 방정식들에 대한 경계 조건들은 버너 노즐 출구에서는 축방향으로 속도 성분만을 가지는 플러그 유동(plug flow)으로 가정하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \text{at } y = -L, \quad f' &= 0 \\ Y_k &= Y_{k-L}, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ T &= T_{-L} \\ V &= V_{-L} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{at } y = L, \quad f' &= 0 \\ Y_k &= Y_{kL}, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ T &= T_L \\ V &= V_L \end{aligned}$$

화학 반응항과 열역학적 물성치의 계산에는 CHEMKIN-II [8]를 이용하였고, 전달 물성치는 Transport Package [9]를 이용하여 계산하였다. 본 연구에서 사용한 화학 반응 메카니즘은 NO 반응을 포함한 53개의 화학종과 325개의 반응단계로 이루어진 GRI 3.0 메카니즘을 이용하였다.

여기에서, 화염의 1-차원성으로부터 복사열전달, Dufour 효과 및 압력구배 확산 효과를 무시하였다. 소염점 근처에서는 최대 온도의 함수로써 화염구조와 스트레인율을 계산하는 역 수치해법[10]을 사용하였다. 이를 이용하며, 소염점을 정확히 예측할 수 있을 뿐만 아니라 소염점 이후의 해도 안정하게 구할 수가 있다.

3. 계산결과 및 검토

계산조건은 산화제의 온도가 300K의 상온 공기조건(XO_2 0.21, $XN2$ 0.79)과 1300K의 고온 공기조건(XO_2 0.04, $XN2$ 0.96)을 주로 다루었으며, 이후 특별한 조건이 써있지 않는 경우 온도에 의한 산화제 조성은 상기와 같다. 고온 공기의 경우 다양한 배기ガ스 재순환에 의하여 온도상승과 더불어 배기ガ스 성분(CO_2 , H_2O)의 첨가가 예상되나 CO_2 의 영향은 별도로 확인하기 위하여 산화제 조성 중 O_2 이외의 나머지 조성은 N_2 로 계산하였다.

3.1 온도 특성

연소상태의 유동조건을 나타내기 위해 스트레치율을 정의하는데 플러그 유동의 양쪽 출구의 속도 및 밀도에 의해 아래 식(1)과 같이 구하였다[11]. 식의 첨자 o, f는 각각 산화제와 연료를 나타낸다.

$$K = 2 \frac{(-u_o)}{L} \left[1 + \frac{u_f}{(-u_o)} \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_o}} \right] \quad (1)$$

Fig. 1은 스트레치율에 따른 상온과 고온조건의 온도분포를 나타낸다. 스트레치율의 증가에 따라 두 조건 모두 최고 온도가 감소하는 경향을 보이고 있으며 상온연소에 비하여 고온연소의 경우가 최고 온도가 낮은 것을 알 수 있다. 고온의 산화제를 공급하여도 O_2 농도가 낮아 활발한 연소를 못하는 것을 알 수 있다. 특히, 고온 연소의 경우 스트레치율 386 [1/s] 이상의 조건에서 온도피크가 사라지는 현상을 보이고 있다. 고온연소의 경우 자발화 온도 이상의 고온공기 공급에 의하여 소염현상이 사라진다고 하는데[5] 본 연구에서는 온도의 피크가 나타나지 않는 스트레치 조건을 고온연소의 소염으로 간주하였다. 역수치 해법으로 구한 소염스트레치는 상온과 고온의 경우 각각 548 [1/s], 398 [1/s]이다.

Fig. 2는 각각의 산화제 O_2 농도조건에서 스트레치율 변화 및 동일 스트레치 조건에서 CO_2 첨가에 따른 소염온도를 계산한 것이다. O_2 농도가 낮을수록 소염되는 산화제의 온도는 상승하고 있으며 스트레치율이 큰 500 [1/s]의 경우 소염되는 온도가 더 높은 것을 알 수 있다. 즉, 난류강도가 큰 화염의 경우 소염에 미치는 온도의 영향이 더 큰 것을 알 수 있다. 스트레치율 200 [1/s]의 조건에서 CO_2 농도 XCO_2 0.2의 경우 소염온도가 스트레치율 500 [1/s]의 소염온도와 비슷하게 높아지는 편, 이것은 CO_2 첨가에 의한 온도감소 영향으로 낮은 스트레치율에서도 쉽게 꺼지는 것을 알 수 있다.

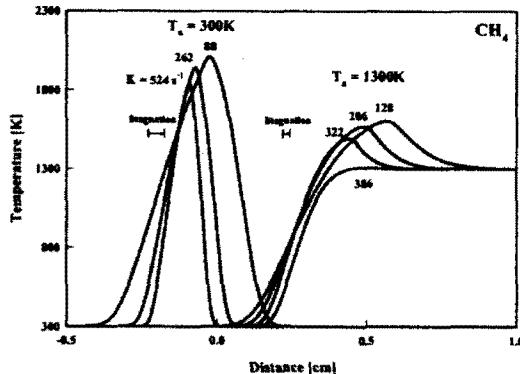


Fig. 1 Temperature distribution with stretch rate.

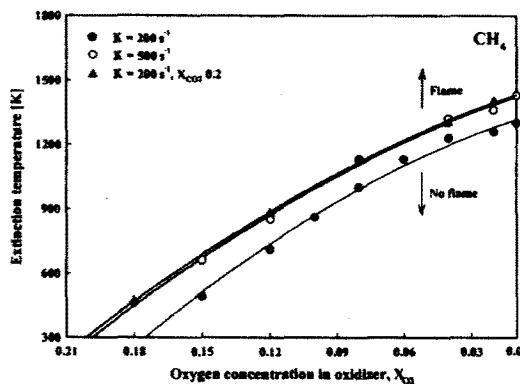


Fig. 2 Extinction temperature for oxygen concentration in oxidizer.

3.2 열발생속도 (Heat Release Rate)

Fig. 3은 스트레치율에 따른 상온과 고온연소에서의 열발생속도를 나타낸다. 고온의 경우 상온연소에 비해 1 오더 정도 발생율이 적게 남을 수 있다. 또한 저 O_2 의 고온연소에서는 상온연소와 같이 피크가 2부분에서 나타나지 않는 것을 알 수 있다.

상온에서 두 개의 피크를 나타내는 특성을 알아보기 위하여 피크사이의 최소점을 나타내는 부분을 경계로 영역 A와 B로 나눠 각각의 값들을 적분해 보았다. Fig. 4에 열발생속도 적분값을 나타내었다. 상온연소의 경우 스트레치율 증가에 따라 열발생속도는 증가하는 경향을 보이고 있으며, 영역 A와 B의 비율을 살펴보면 영역 B의 크기는 스트레치율 증가에 따라 변화가 없는 것을 알 수 있다. 따라서 영역 A 값으로도 전체 열발생속도의 특성을 알 수 있다. 고온연소의 경우 열발생속도 적분값이 스트레치율 증가에 따라 크게 변화가 없으며 소염직전 열발생속도는 거의 0에 가까워지는 것을 볼 수 있다.

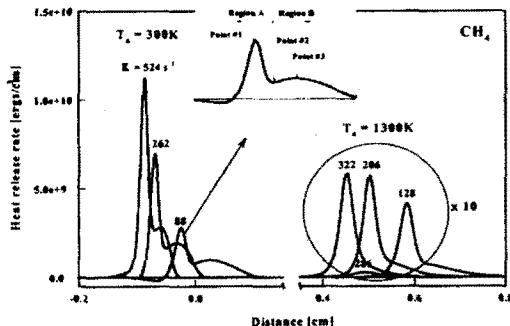


Fig. 3 Heat release rate with stretch rate.

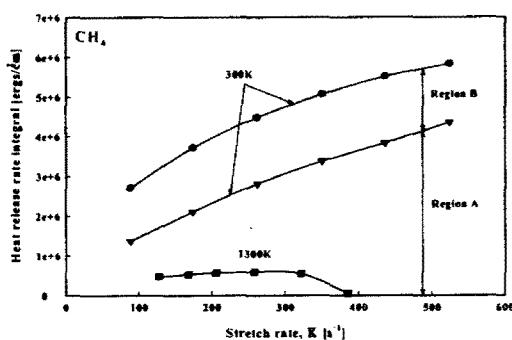


Fig. 4 Heat release rate integral.

상기 Fig. 3에서 상온연소의 경우 열발생속도의 굴곡이 있는 것을 볼 수 있는데 각각의 피크 부분과 최소점 부근을 각각 Point #1~#3로 나타내어 각각의 특징을 살펴보았다.

먼저, 전체영역에 걸쳐 어떠한 화학종이 열발생속도에 영향을 미치는지 확인하기 위하여 주요 화학종에 대한 열발생속도를 확인하여 보았다. Fig. 5는 주요 화학종에 대한 열발생속도 분포를 나타낸 것이다. 전체 열발생속도 분포와 비교해 보면 최고 피크를 나타내는 Point #1의 경우에는 H_2O 와 CO_2 화학종의 기여도가 큰 것을 알 수 있고 피크를 2개 가져오게 하는 Point #2의 열발생속도 감소부분은 단연 H 화학종의 영향이 큰 것을 알 수 있다.

단순히 화학종만으로 그 특성을 알 수 없으므로 보다 정확히 확인하기 위하여 각 지점에서의 주요 화학반응에 대한 영향을 살펴보았다.

Point #1의 최대피크 지점은 CH_3 의 소멸 및 CH_2O , CHO , CO , H_2O 등의 생성에 의한 발열반응에 의해 발생되는 것을 알 수 있었다. 주요 반응은 아래의 식 (2)~(4)와 같다.

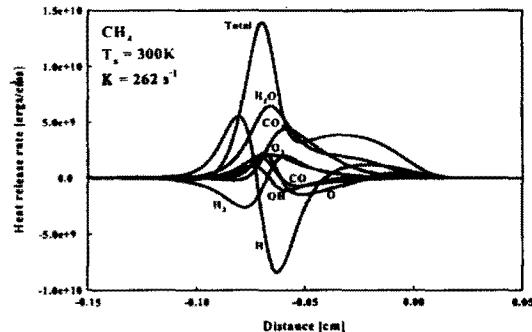
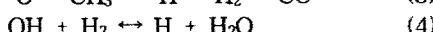
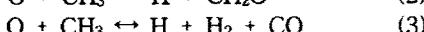
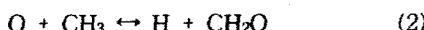
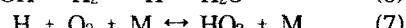
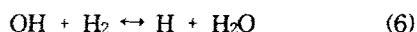


Fig. 5 Heat release rate with species.

특히, 고온연소의 경우 나타나지 않은 Point #2의 경우 Fig. 6에 그 주요 반응을 스트레이인율에 따라 나타내 보았다. 스트레이인율에 따른 반응영향의 변화는 거의 없었다. Point #2에서 열발생속도를 감소시키는 주된 반응으로는 식 (5)의 연쇄분기 반응에 의한 흡열로 인한 저감이 가장 큰 영향을 보이고 있음을 알 수 있다.



Point #3의 산화제 측의 두 번째 peak는 식 (6), (7)과 같은 H_2O 와 HO_2 의 생성에 의한 발열반응으로 나타나는 것을 알 수 있었다.



저 산소농도의 고온공기 연소의 경우 O_2 농도가 적고 또한 국소 화염온도가 낮고 반응 (5)에 의한 흡열반응이 상대적으로 적기 때문에 굴곡이 나타나지 않는 것으로 사료된다. Fig. 7에 나타낸 것과 같이 고온의 경우 산소농도의 증가함에 따라 열발생속도가 저감되는 Point #2 부분이 나타나는 것을 볼 수 있다.

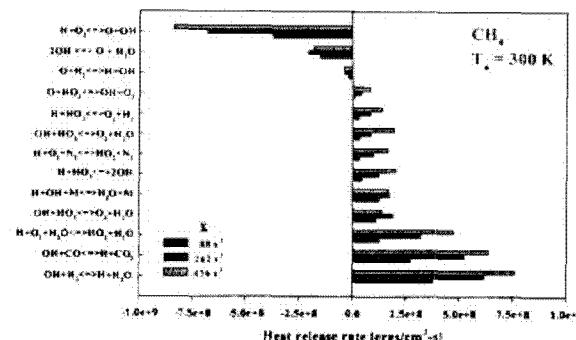


Fig. 6 Heat release rate bar chart for reaction mechanism (Point #2).

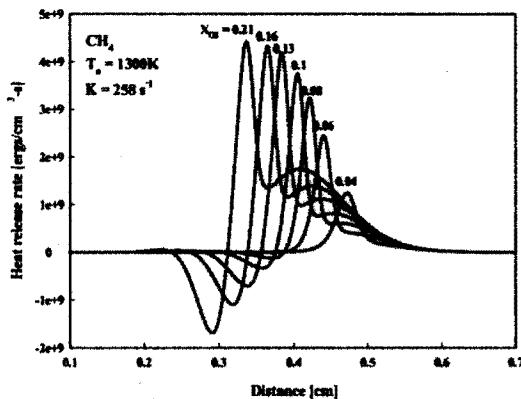


Fig. 7 Heat release rate with oxygen concentration ($T_a = 1300\text{K}$).

3.3 NO 발생 특성

배기 배출물의 값을 구하기 위하여 식 (8)과 같은 배출지수 (Emission Index)를 도입하였다 [12]. 사용연료의 적분량에 대한 NO 발생 적분량의 비로서 배출지수를 구할 수 있다.

$$EI_{NO} = \frac{\int_0^L W_{NO} \omega_{NO} dx}{-\int_0^L W_{CH_4} \omega_{CH_4} dx} \quad (8)$$

Fig. 8은 스트레치율에 따른 EINO의 발생특성을 나타낸다. 스트레치 증가에 따라 EINO 발생은 감소하는 경향을 보이고 있으며 저 산소 농도의 고온공기를 사용한 1300K 조건이 더 낮은 NO 발생을 보이는 것을 알 수 있다. 저 산소농도의 고온공기를 이용할 경우 연소효율의 향상과 더불어 질소산화물의 저감에도 큰 효과가 있음을 알 수 있다.

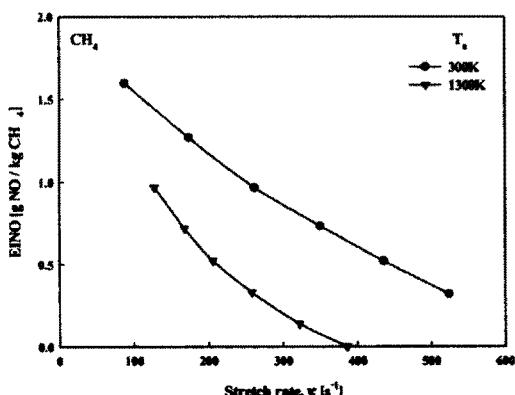


Fig. 8 NO emission index with stretch rate.

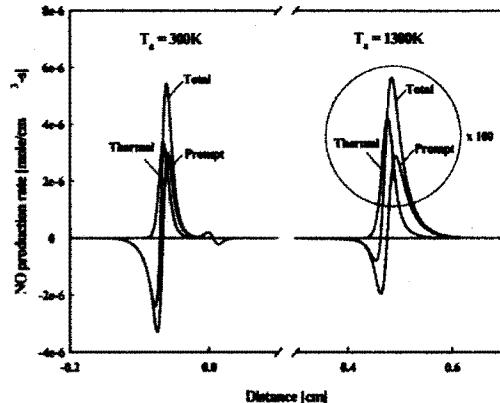


Fig. 9 NO production rate with each mechanism.

전체 NO 발생을 thermal NO와 prompt NO로 나누어[13] 나타내 보았다. Fig. 9는 스트레치율 260 [1/s]에서의 상온과 저 O₂ 고온연소에서의 NO 발생 분포를 나타내고 있다. 두 조건 모두 thermal NO의 경우 생성율이 우세하며 prompt NO의 경우 연료쪽에서 NO 환원반응이 크게 나타나는 것을 알 수 있다. 전체적으로 thermal NO의 생성이 큰 것을 알 수 있다.

Thermal NO 반응식은 식 (9)-(11)과 같다.

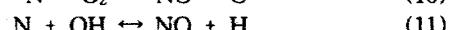
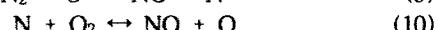


Fig. 10은 Thermal NO 메카니즘의 각각의 생성률을 나타낸 것인데 300K의 경우 (11)번 반응이 1300K의 경우 (10)번 반응이 주요 반응인 것을 알 수 있다. 1300K 조건의 경우 O₂가 낮은 조건임에도 불구하고 (10) 번 반응이 우세한 것은 화염온도가 낮아 고온에서 발생되는 OH 라디칼량이 적어 상대적으로 많은 O₂ 화학종과의 반응이 큰 것으로 사료된다.

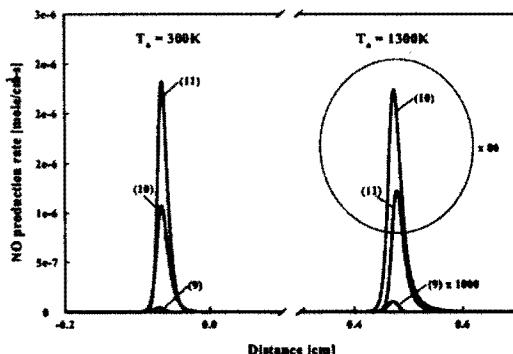


Fig. 10 NO production rate for thermal NO mechanism.

4. 결 론

고온공기를 사용한 저 O₂ 조건에서의 연소특성을 상온연소와 비교하여 대향류 화염에서 수치해석적으로 살펴보았다.

고온연소의 경우 열발생속도의 저하 부분 (Point #2)이 발생하지 않는데 이것은 O₂ 농도가 낮은 요인으로 알 수 있다. 고온연소에서 O₂ 농도를 높일 경우 Point #2 부분이 나타났다.

고온공기를 사용함으로서 연소효율을 높일 수 있는 반면 NO 발생이 큼 것으로 예상되나, 낮은 O₂ 농도로 연소시킴으로서 화염온도를 낮춰 상온연소에 비하여 낮은 NO 분포를 나타내고 있다. 두 조건 모두 Thermal NO의 영향이 크며 상온연소의 경우 NO 주요 반응기구는 N 라디칼과 OH 라디칼과의 반응이며 고온 저 O₂ 연소의 경우는 N과 O₂ 분자와의 반응이다.

후 기

이 논문은 2003년도 두뇌한국21사업과 CERC에 의하여 지원되었음.

참고문헌

- [1] J. A. Wunning and J. G. Wunning, "Flameless Oxidation to Reduce Thermal NO-Formation," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 23, 1997, pp. 81-94.
- [2] M. Katsuki and T. Hasegawa, 1998, "The Science and Technology of Combustion in Highly Preheated Air," *Twenty-Seventh Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 3135-3146.
- [3] T. Niioka, "Fundamentals and Applications of High-Temperature Air Combustion," *Proceedings of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference*, 1999, pp. 1-6.
- [4] K. Maruta, K. Muso, K. Takeda, and T. Niioka, "Reaction Zone Structure in Flameless Combustion," *Twenty-Eighth Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, 2000, pp. 2117-2123.
- [5] R. Fuse, H. Kobayashi, Y. Ju, K. Maruta, and T. Niioka, "NO_x Emission from High-Temperature Air/Methane Counterflow Diffusion Flame," *Int. J. Therm. Sci.*, Vol. 41, 2002, pp. 693-698.
- [6] C. H. Son, I. M. Jeong, and S. H. Chung, "Numerical Study of the Effects of Pressure and Air-Dilution on NO Formation in Laminar Counterflow Diffusion Flames of Methane in High Temperature Air," *Combust. Flame*, Vol. 130, 2002, pp. 83-93.
- [7] M. D. Smook, I. K. Puri, and K. Seshadri, "A Comparison Between Numerical Calculations and Experimental Measurements of the Structure of a Counterflow Diffusion Flame Burning Diluted Methane in Diluted Air," *Twenty-First Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, 1986, pp. 1782-1792.
- [8] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller, "CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical Kinetics," *Sandia National Lab. Report*, SAND89-8009, 1989.
- [9] 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," *Sandia National Lab. Report*, SAND83-8209, 1983.
- [10] C. H. Sohn, S. H. Chung, S. R. Lee, and J. S. Kim, "Structure and Acoustic-Pressure Response of Hydrogen-Oxygen Diffusion Flames at High Pressure," *Combust. Flame*, Vol. 115, 1998, pp. 299-312.
- [11] K. Seshadri and F. A. Williams, "Laminar Flow Between Parallel Plates with Injection of a Reactant at High Reynolds Number," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 21, 1978, pp. 251-253.
- [12] T. Takeno and M. Nishioka, "Species Conservation and Emission Indices for Flmaes Described by Similarity Solutions," *Combust. Flame*, Vol. 92, 1993, pp. 465-448.
- [13] M. Nishioka, S. Nakagawa, Y. Ishikawa, and T. Takeno, "NO Emission Characteristics of Methane-Air Double Flame," *Combust. Flame*, Vol. 98, 1994, pp. 127-138.