

산소부화조건의 메탄 상세반응기구에 대한 실험 및 수치해석 연구

한 지 웅*, 이 창 언†

(2003년 8월 27일 접수, 2003년 12월 27일 심사완료)

Experimental and Numerical Investigations on Detailed Methane Reaction Mechanisms in Oxygen Enriched Conditions

Ji-Woong Han and Chang-Eon Lee

Key Words : Burning Velocity(연소속도), Sensitivity Analysis(민감도해석), Oxygen Enriched Flame(산소부화화염), Detailed Reaction Mechanism(상세반응기구), Schlieren System(슐리렌 시스템)

Abstract

The burning velocities of conventional and oxygen-enriched methane flame in various equivalence ratio were determined by experiments. The validity of existing reaction mechanisms was examined in oxygen-enriched flame on the basis of the experiment results. Modified reaction mechanism is suggested, which was able to predict burning velocity of oxygen enriched flame as well as methane-air flame. Complementary study on reaction mechanisms shows the following results : Present experiment data were found to be more reliable in comparison with existing ones in a oxygen-enrichment condition. It was found that some modification in existing reaction mechanisms is necessary, since discrepancy between measurements and predictions is increasing with oxygen enrichment ratio. The sensitivity analysis was performed to discriminate the dominantly affecting reactions on the burning velocity in various oxygen enrichment and equivalence ratio. A modified GRI 3.0 reaction mechanism based on our experiment results was suggested, in which reaction rate coefficients of (R38) $H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$ in GRI 3.0 reaction mechanisms were corrected based on sensitivity analysis results. This mechanism showed a good agreement in predicting the burning velocity and number density of NO in oxygen-enriched flame and would provide proper reaction information of oxygen-enriched flame at this stage.

1. 서 론

최근 전 세계적으로 기후변화협약 등을 통해 CO₂를 비롯한 온실가스에 대한 규제가 점차 강화되고 있다. 이 규제를 극복하기 위한 한 방편으로 고효율 연소 시스템 개발이 필수적이라 할 수 있다. 이러한 연소 시스템의 하나인 산소부화 연소

법은 기존 산화제인 공기를 완전히 산소로 대체하거나 혹은 산소농도가 높은 산화제를 사용하는 방식으로 폐가스량 감소로 인한 폐열 감소, 연소 및 전열 특성 개선을 통하여 시스템 효율을 향상시키는 새로운 연소기술로서 현재 많은 주목을 받고 있다. (1) 이 연소방식에 대한 연구로서 실험적 방법에 의해서도 현상 분석 및 연소기 설계에 필요한 정보를 얻고 있으나, 연소온도가 연료-공기 화염에 비해 매우 높기 때문에 실험을 수행하는데 많은 어려움이 따른다. 최근 계산기 성능 및 계산 기법의 발달과 더불어 이러한 산소부화 연소법에

* 회원, 인하대학교 대학원 기계공학과
† 책임저자, 회원, 인하대학교 기계공학과
E-mail : chelee@inha.ac.kr
TEL : (032)860-7323, FAX:(032)868-1716

대한 수치해석 연구는 더욱 활발히 진행되리라 예상된다

기존의 산소부화 연소에 대한 수치해석 연구들의⁽²⁻⁴⁾ 대부분은 산소부화 조건에서 검증되지 않은 통상의 반응기구들을 이용하여 수행되었고, 따라서 이들 연구의 신뢰성에는 의심의 여지가 있다고 생각된다. 산소부화 연소에 대한 수치해석 연구를 더욱 활성화시키기 위해서는 우선 반응기구에 대한 검증 및 개선에 연구가 선행되어야 할 것으로 판단된다. 이와 같은 목적으로 이기용 등⁽⁵⁾은 Jahn⁽⁶⁾ 및 Morgan⁽⁷⁾의 실험결과를 근거로 산소부화 조건에서의 기존 메탄반응기구의 예측성능을 검토하고, 새로운 반응기구(이하 LKY 반응기구)를 제시하였다. 그러나, 이 연구의 기준 데이터로 사용한 Jahn의 실험결과, 즉 산소부화조건에서 당량비 변화에 따른 연소속도는 직접상(Direct Photo-graph)을 이용한 계측결과로 현재에는 이 계측법에는 문제점이 있다고 지적되어 있으며,⁽⁸⁾ 또 Morgan의 실험 데이터와도 차이를 나타낸다. 따라서, 이 연구 결과에 대해서는 반응기구 검증에 사용된 기준 데이터의 정확성에 대해 재확인해 볼 필요가 있다.

일반적으로 기존 반응기구를 검증하거나 새로운 반응기구를 제안하기 위해서는 여러 연소조건에서의 화염구조, 소염한계 및 연소속도 등에 대하여 종합적으로 검토하는 것이 가장 바람직하다.⁽⁹⁾ 그러나, 산소부화 화염에서는 실험상의 어려움으로 인해, Naik 등⁽¹⁰⁾의 NO 농도 측정결과를 제외하고, 화염구조에 대한 상세한 실험결과는 거의 찾아 볼 수 없다. 또 산소부화율이 증가할수록 소염한계는 급격히 증가하여 소형노즐의 대항류 화염에서도 그 한계는 일반적으로 난류영역에 존재한다. 따라서, 산소부화 조건에서의 반응기구를 검증하기 위해서는 우선 실험이 비교적 용이한 연소속도를 대상으로 수행하는 것이 가장 현실적이라 할 수 있다.

본 연구에서는 산소부화 조건의 메탄 화염을 대상으로 여러 산소부화율에서의 당량비 변화에 따른 연소속도를 계측하여 산소부화 조건의 반응기구 검증에 사용할 기준 데이터를 제공하고자 한다. 그리고, 이 실험결과를 기준으로 기존 반응기구들의 산소부화조건에서의 적용성을 검증하고자 한다. 또, 메탄 반응기구의 소반응들에 대한 민감도 해석(Sensitivity Analysis)을 통하여, 최종적으로 산소부화 조건까지 정확히 모사할 수 있는 최적화된 새로운 메탄 상세반응기구를 제안하고자 한다.

2. 실험 및 수치해석 방법

2.1 실험장치 및 방법

본 연구에서는 산소부화 예혼합화염의 연소속도를 측정하기 위하여, Fig. 1과 같이 수축부, 직선부, 확산부로 구성되는 노즐타입 연소기를 이용하였다. 노즐 출구에서의 유속 분포가 균일하게 형성되도록 Morel⁽¹¹⁾이 제안한 두 개의 3차 함수를 이용하여 노즐형상을 설계하였으며, 예혼합기가 유입되는 확산부는 흐름의 박리 현상을 방지하기 위하여 확산부의 각도를 7° 이하로 설계하였다. 노즐출구의 직경은 정밀 가공 한계 및 산소 고부화 화염의 빠른 연소속도 등을 고려하여 4mm로 설계하였다.

순도 99.9%의 메탄, 산소, 질소의 공급유량은 질량유량계(MFC Tylan FS280 series)들을 사용하여 정밀하게 제어하였다. 화염면을 가시화 하기 위하여 슐리렌 시스템을 이용하였다. 이 슐리렌 시스템의 광원은 텅스텐-할로젠 램프(Tungsten-Halogen Lamp)를 사용하였으며, 반사경은 초점 거리 3000mm의 오목거울을 사용하였다. 슐리렌상의 측정에는 접사렌즈와 필터를 장착한 Digital camera(FinePix 2400Zoom)를 이용하였으며, 측정시스템의 배치도는 Fig. 2와 같다.

일반적으로 층류 화염면의 두께는 곡률반경에 비해 매우 작기 때문에, 연소속도(S_L)는 미연가스 노즐출구속도(V_u)의 화염면 수직방향성분($V_{u,n}$)과 동일하다. 따라서, 연소속도는 Fig. 3과 같은 슐리



Contraction section Straight section Diffuser section

Fig. 1 Schematics of combustor nozzle

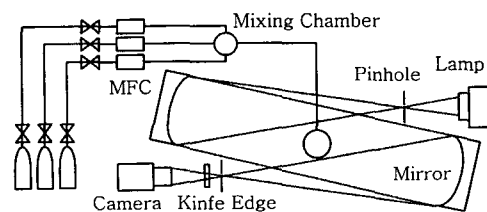
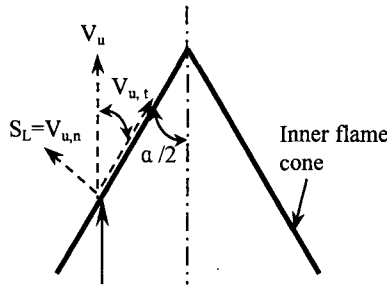
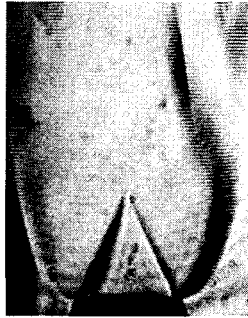


Fig. 2 Schematics of schlieren system



(a) Schematics of laminar burning velocity evaluation



(b) Photograph of Schlieren image

Fig. 3 Schematics of laminar burning velocity evaluation and photographs of schlieren image

렌상의 화염 원추각(α) 및 노즐 출구 유속(V_u)으로부터 식 (1)과 같이 계산될 수 있다.⁽¹²⁾

$$S_L = V_{u,n} = V_u \sin \frac{\alpha}{2} \quad (1)$$

본 연구에서는 다양한 산소부화 조건을 표현하기 위하여, 다음과 같은 산소부화율 정의식⁽¹⁾을 사용하였다.

$$\Omega = \frac{Q_{O_2}}{Q_{O_2} + Q_{N_2}} \quad (2)$$

여기서 Ω 는 산화제 내의 산소비율을 나타내며, $\Omega=0.21$ 인 경우 통상의 메탄-공기 화염을 의미하며, $\Omega=1.0$ 인 경우는 메탄-순산소 화염을 의미한다.

2.2 수치계산방법

2.2.1 지배방정식 및 경계조건

본 연구에서는 1차원 자유전파 예혼합 화염을 대상으로 모델링한 PREMIX Code⁽¹³⁾를 이용하여

연소속도를 계산하였다. 이 1차원 예혼합 화염에 대한 지배방정식은 아래와 같고, 본 연구에서 점성, 중력, 듀퍼 효과(Dufour Effect) 등은 무시하였다.

연속방정식

$$\dot{M} = \rho u A \quad (3)$$

화학종 보존 방정식

$$\dot{M} \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho A Y_k V_k) - A \dot{\omega}_k = 0 \quad (4)$$

에너지 보존 방정식

$$\begin{aligned} \dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda A \frac{dT}{dx} \right) + \frac{A}{c_p} \sum_k \rho c_{pk} Y_k V_k \frac{dT}{dx} \\ + \frac{A}{c_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

상태 방정식

$$P = \frac{\rho R T}{\bar{W}} \quad (6)$$

여기서, x 는 화염에 고정된 공간좌표, \dot{M} 은 질량유량, A 는 단면적, T 는 온도, P 는 압력, u 는 혼합물의 속도, ρ 는 밀도, $Y_k, W_k, C_{pk}, \dot{\omega}_k, h_k$ 들은 각각 k 번째 화학종의 질량분율, 분자량, 정압비열, 단위 체적당 몰생성률, 비엔탈피이며, V_k 는 k 번째 화학종의 확산속도로서 열확산을 고려한 Fickian 관계를 이용하여 구해진다. 그 외에 \bar{W} 는 혼합물의 평균 분자량, R 은 가스상수, λ 는 혼합물의 열전도계수, C_p 는 혼합물의 정압비열을 나타내고 있다. 계산에 이용된 경계조건은 다음과 같다.

$$T(-\infty) = T_u \quad Y_k(-\infty) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{dT}{dx}(\infty) = 0 \quad \frac{dY_k}{dx}(\infty) = 0 \quad (8)$$

2.2.2 반응기구 및 계산방법

본 연구에서는 기존 반응기구들의 산소부화조건에서의 연소속도 예측성능을 비교, 검토하기 위하여, Table 1과 같은 반응기구들을 선정하였다.

GRI 3.0 반응기구⁽¹⁴⁾는 기존의 GRI 2.11 반응기구를 기초로 하여, 천연가스 및 NO의 재반응을 보다 잘 모사할 수 있도록 가장 최근에 수정 보완된 것이다. Miller-Bowman 반응기구(이하 MB 반응

Table 1 Various detailed reaction mechanisms

반응기구	화학종	소반응
GRI 3.0 Mech.	53	325개의 가역반응
MB Mech. (Miller-Bowman)	51	219개의 가역반응
LKY Mech. (Lee Ki Yong)	53	632개의 정반응

기구⁽¹⁵⁾는 질소의 생성 및 소멸과 관련된 다양한 반응들을 상세하게 고려한 반응기구로서 GRI 반응기구와 함께 가장 많이 이용되고 있다. 이기용 반응기구(이하 LKY 반응기구)는 Jahn 및 Morgan 등의 산소부화화염에 대한 실험결과를 기초자료로 하여 산소부화화염을 묘사할 수 있도록 GRI 3.0 반응기구를 수정, 보완한 반응기구이다.

연소장의 계산에서 복사 열손실은 Optically Thin Model⁽¹⁶⁾을 이용하였으며, 복사물성의 계산에서는 열손실에 주로 기여를 하는 것으로 알려진 CO₂, H₂O, CO, CH₄의 4가지 화학종을 고려하였다. 단위 체적당 복사열손실은 다음 식에 의해 계산하였다.

$$\dot{q}_r = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (9)$$

$$K_p = P_{CO_2} K_{CO_2} + P_{H_2O} K_{H_2O} + P_{CO} K_{CO} + P_{CH_4} K_{CH_4} \quad (10)$$

여기서, σ 는 스테판-볼츠만(Stefan-Boltzmann) 상수를, T 와 T_∞ 는 각각 국부 온도와 주위 온도를 나타내며, K_p 는 혼합가스의 플랑크 평균 흡수 계수(이하 흡수계수)를 나타낸다. 또한 P_k 와 K_k 는 화학종 k 의 분압과 각 가스의 흡수 계수를 나타내며, 흡수계수는 다음의 근사식으로 계산하였다.

$$K_k = \sum_{j=0}^5 A_{kj} T^j \quad (11)$$

$$k = CO_2, CO, H_2O, CH_4$$

여기서, A_{kj} 는 온도에 따른 각 화학종의 다항식 계수로써 Ju⁽¹⁶⁾에 의해 사용된 값을 사용하였다. 계산에 사용된 각 화학종들의 기초 물성치는 Chemkin-II Package⁽¹⁷⁾와 Tranfit Package⁽¹⁸⁾를 이용하여 계산하였다. 또한 PREMIX Code의 일부를 수정, 보완하여 각 조건에서의 연소속도에 대한 민감도 계산을 수행하였다.

3. 결과 및 검토

산소부화 화염은 부화율이 증가할수록 연소속도가 급격히 증가하기 때문에(Fig. 5 참조), 이 화염의 연소속도를 측정하기 위해서는 연소기 노즐 직경을 작게 하여 층류유동 속도 범위내에서 가급적 높은 유속을 갖게 하여야 한다. 한편, 연소기 노즐 직경이 너무 작아지면 슬리렌 화상의 화염 원추각에 대한 분해능이 떨어져 정확한 측정결과를 얻기 어렵다. 본 연소속도 측정에는 예비실험을 통해 노즐 직경 4mm인 화염이 유속 및 분해능 측면에서 적합함을 알았고, Fig. 4와 Fig. 5에 제시한 실험 결과는 이 소형 노즐 연소기에 형성되는 예혼합 화염을 대상으로 하여 측정한 것이다.

Fig. 4는 통상의 메탄-공기 화염의 당량비 변화에 따른 연소속도 측정결과를 도시한 것으로, 그림에는 본 연구에서 사용한 측정법의 타당성을 검증하기 위하여 기존의 대표적인 측정 결과들도 첨가하여 도시하였다. 그림 중 Jahn의 결과는 노즐 분류 화염의 직접 사진을 이용하여 측정한 결과이며, Law⁽¹⁹⁾의 결과는 대항류 화염에서의 LDV 유속 측정을 이용하여 측정한 결과이다. 또, Lee 등⁽²⁰⁾의 결과는 노즐 직경이 20mm인 큰 화염을 대상으로 한 측정법과 동일한 방법으로 얻어진 결과이다. 이 그림에서 우선, 당량비가 1.0인 조건에서 비교해 보면, 현 측정결과(Schlieren Photograph, D=4mm)는 41.8[cm/s]로 노즐 직경이 20mm인 경우의 40.1[cm/s]과 거의 차이가 없으며, 또 일반적으로 많이 이용되는 Law의 결과인 40.5[cm/s]와도 거의 일치한다. 그리고 당량비 변화에 따른 분포경향에 있어서도 이들 3가지 결과는 서로 유사함을 알 수 있다. 이 결과로부터, 본 측정법을 이용하여 산소부화 조건에서 얻어진 연소속도 측정결과에는 신뢰성이 있다고 할 수 있다.

그러나 Jahn의 실험결과는, 산소부화 화염의 산소부화율에 따른 체계적인 연소속도 측정결과로 자주 인용되고 있는데, 당량비 1.0에서 33.8[cm/s]로 앞에 언급한 실험 결과들과 큰 차이가 있다. 또, 이와 같은 차이는 당량비 1.0을 전후하여 지속되고 있어, 당량비 변화에 따른 분포 경향에도 많은 차이가 있음을 알 수 있다. 이러한 원인에 대해서는 Fig. 5에서 자세히 설명하겠다.

Fig. 5은 여러 산소부화조건에서 당량비 변화에 따른 연소속도의 측정 결과를 도시한 것으로, 기존의 측정결과로는 저자가 아는 한 첨부한 Jahn의

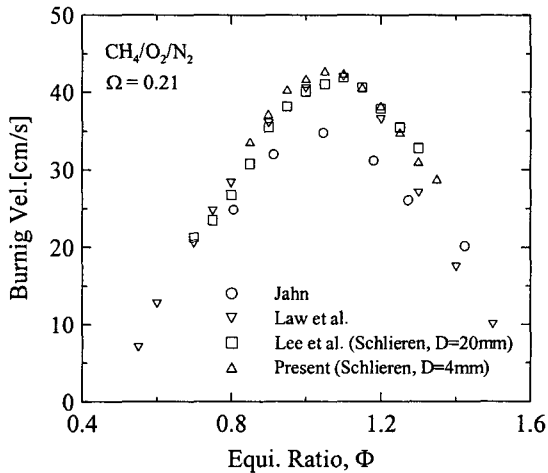


Fig. 4 Validation of present experiments

결과가 유일하다. 본 실험에서는, 앞에서 언급한 바와 같이 노즐 직경 4mm인 소형 노즐 연소기를 이용하였는데, 부화율(Ω)이 0.7 이상의 영역에서 노즐 출구의 유동이 난류로 천이되어 연소속도는 예측할 수 없어, $\Omega=0.4$ 와 $\Omega=0.6$ 인 경우에 대해서만 실험을 수행하였다. 그리고, $\Omega=0.6$ 의 화염 최고 온도는 약 2900K이 되기 때문에, 이 $\Omega=0.6$ 인 범위는 실용적인 측면에서 사용 가능한 고온 화염의 범위를 내포하고 있다고 할 수 있다. 그림에서 Jahn의 측정결과는 본 연구 결과에 비해 낮게 측정되고 있음을 알 수 있다. 이러한 경향은 앞의 Fig. 4에서 명확히 확인할 수 있으며, 본 실험결과가 아닌 다른 모든 결과들에 비해서도 Jahn의 결과는 낮게 나타나고 있다. 여기서, Jahn의 측정은 직접 화염상을 이용한 것으로, 이 경우 화염대는 실제 반응영역의 외측인 기연가스 측에 위치하기 때문에, 화염 원추각은 실제보다 작아져서 연소속도도 실제보다 낮게 측정되며, 또 슐리렌상을 이용하여 산출한 연소속도는 직접상을 이용하여 산출한 연소속도는 보다 정확한 값을 제공한다고 알려져 있다.⁽⁶⁾

위 Fig. 4와 Fig. 5의 결과를 종합해보면 Jahn의 측정결과는 실제 연소속도보다 낮게 예측된 값이라 할 수 있으며, 본 실험에서 얻어진 연소속도가 실제연소속도에 가까우며, 또 Jahn의 결과보다 신뢰성이 높다고 할 수 있다.

따라서, 본 실험결과는 실용적 측면에서 산소부화 조건까지 포함하는 메탄 화염에 대한 체계적이고도, 정확한 연소속도 데이터이며, 산소부화조건까지 포함하는 메탄의 반응기구 검증에 기준 데이터로 활용할 수 있는 자료로 여겨진다.

Fig. 6는 기존 반응기구들의 연소속도 예측 성능

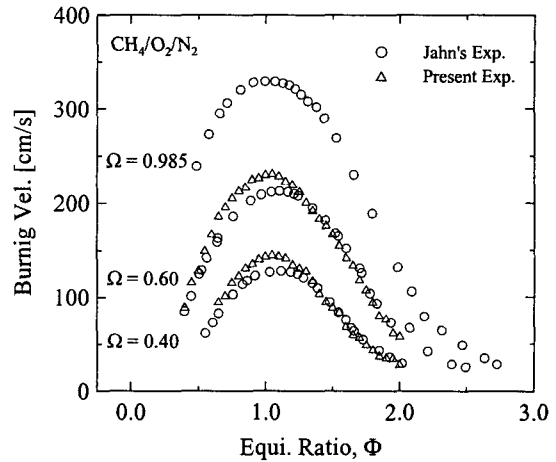


Fig. 5 Burning velocity of oxygen enriched flame

을 검토하기 위하여, (a)통상화염 및 (b)산소부화화염의 당량비 변화에 따른 계산결과를 실험결과와 비교한 것이다. 그림 중 실선은 GRI 3.0 반응기구, 점선은 MB 반응기구, 일점쇄선은 LKY 반응기구를 이용한 계산결과를 각각 나타낸다. 그림(a)의 통상화염에서는 GRI 3.0 반응기구가 MB 및 LKY 반응기구보다 다소 낮게 예측하고는 있으나, 세 반응기구 모두 유사하며 실험결과를 비교적 잘 예측하고 있다고 할 수 있다. 그러나 그림(b)의 산소부화화염에서 $\Omega=0.40$ 인 경우, LKY 반응기구는 실제 연소속도보다 높게, MB 및 GRI 3.0 반응기구는 서로 유사하나 실제 연소속도보다는 낮게 예측함을 알 수 있다. 이러한 경향은 부화율 $\Omega=0.60$ 의 경우에도 나타나며, 그 정량적인 차이는 더욱 커지며, $\Omega=0.985$ 와 같은 고부화 영역에서는 매우 클 것으로 예상된다. 이로부터, 기존의 메탄 반응기구들은 통상화염이나 산소부화율이 낮은 경우에는 연소속도를 정확히 예측할 수 있다고 할 수 있으나, 산소부화율이 높을수록 실제와 계산결과에 차이가 커지기 때문에 기존 반응기구에 보완이 필요함을 알 수 있다.

본 연구에서는 산소부화 조건에서도 적용성이 있도록 GRI 3.0 반응기구를 기본으로 수정 반응기구를 제안하고자 한다. 이와 같이 기존 반응기구를 수정하여 산소부화 조건에서도 연소속도를 정확히 예측하기 위해서는 연소속도에 지배적으로 영향을 주는 주요 반응을 파악할 필요가 있다. 이를 위해 본 연구에서는 연소속도에 대한 민감도 해석을 수행하였다.

Fig. 7에는 통상 화염($\Omega=0.21$) 및 산소부화화염($\Omega=0.6, 0.985$)에서의 지배적인 소반응 10개를 도시

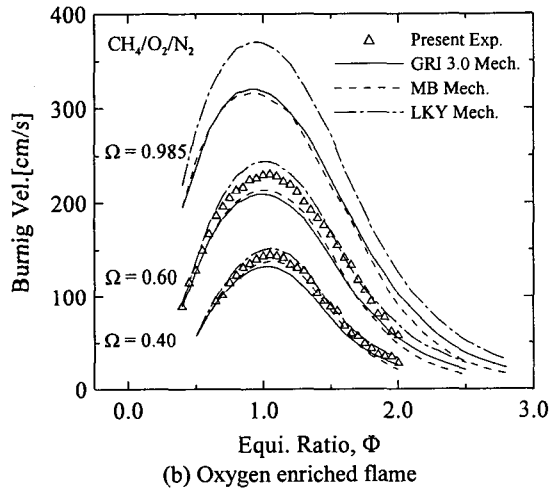
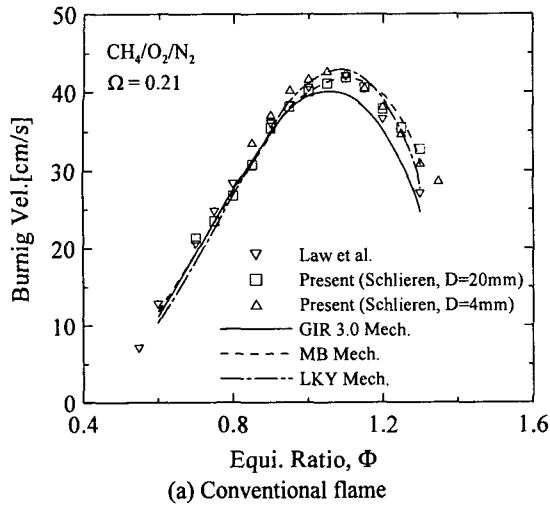


Fig. 6 Comparison of burning velocities using various reaction mechanisms

하였다. 그림에 도시한 상대민감도는 각 조건에서의 최대 민감도를 1로 하여 환산한 상대적인 값이다. 통상화염($\Omega=0.21$)의 경우를 살펴보면, 연쇄분지 반응인 (R38) $H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$ 가 당량비에 관계없이 연소속도를 증대하는 방향으로 최대 민감도 값을 가짐을 알 수 있다. 또, 연소과정의 열발생에 지배적으로 기여하는 (R99) $OH+CO \rightleftharpoons H+CO_2$ 도 희박조건에서는 연소속도 증대에 비교적 큰 역할을 하고 있음을 알 수 있다. 반면에 (R35) $H+O_2+H_2O \rightleftharpoons HO_2+H_2O$ 및 (R52) $H+CH_3(+M) \rightleftharpoons CH_4(+M)$ 는 연소속도를 감소시키는 방향으로 기여하나, (R35)는 희박한 경우에만, (R52)는 과농한 경우에 주로 기여함을 알 수 있다. 이러한 주요 반응들의

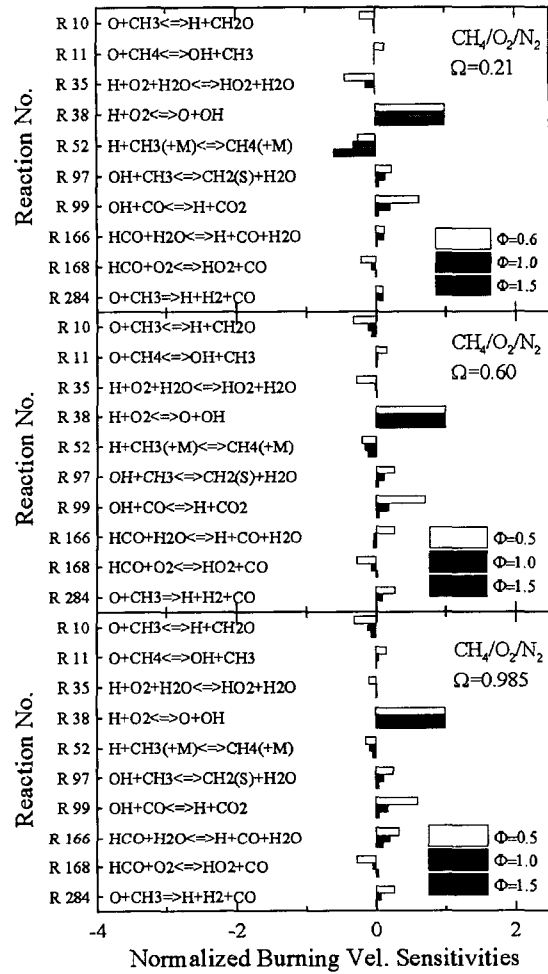


Fig. 7 Normalized burning velocity sensitivities in various oxygen enriched conditions

민감도 경향은 산소부화화염($\Omega=0.6, 0.985$)에서도 유사하나, 산소부화율이 증가할수록 (R38) 이외의 반응들의 기여도는 현저히 감소함을 알 수 있다. 단, (R99)의 기여도는 산소부화조건에서도 비교적 높은 편이나, 이 반응의 기여도는 희박조건에 한정됨을 알 수 있다. 따라서, 본 반응기구의 수정에는 모든 산소부화율 및 당량비에서 공통적으로 연소속도증대에 지배적인 영향을 미치는 (R38)의 반응상수를 다른 반응의 상수로 대체하여 계산을 수행하였다. 그 결과 Yetter 등⁽²¹⁾이 제안한 반응상수로 치환한 수정 GRI 3.0반응기구가 연소속도 예측 성능이 가장 우수하였다. 이 수정된 반응상수는 Table 2과 같다.

Fig. 8은 수정 GRI 3.0 반응기구를 이용하여 연소속도를 계산한 결과를 도시한 것으로, 검증용

Table 2 Modified coefficient information

(R38) H+O ₂ =O+OH	$k = AT^n \exp(-E / RT)$		
	A	n	E
수정전(가역반응)	2.650E+16	-0.6707	17041.0
수정후(정반응)	1.940E+14	0.00	16440.0
수정후(역반응)	1.528E+13	0.00	408.75

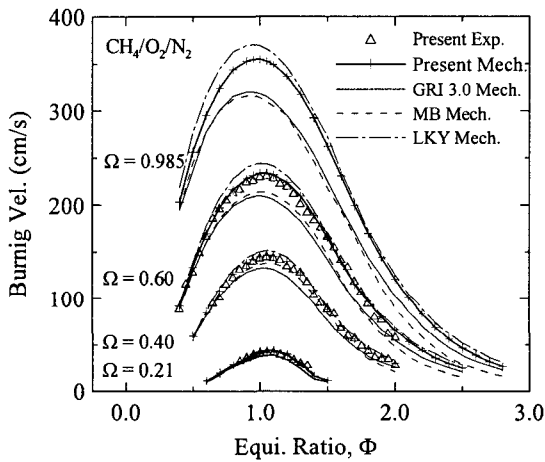


Fig. 8 Comparison of burning velocities using present reaction mechanism

위해 실험결과 및 기존 반응기구의 결과들도 함께 도시하였다. 그림을 보면, Fig. 6(a)에서도 지적한바와 같이, 기존 반응기구 중 MB 및 GRI 3.0 반응기구는 실제 연소속도보다는 낮게, LKY 반응기구는 실제 연소속도보다 높게 예측하며, 이런 차이는 산소부화율이 높아질수록 증가한다. 이에 비해, 수정 GRI 3.0 반응기구는 메탄-공기 조건($\Omega=0.21$)과 산소부화 조건($\Omega=0.4, 0.6$) 모두 실험결과를 잘 예측하고 있으며, 산화제가 순산소의 결과($\Omega=0.985$)도 연소속도를 잘 예측할 수 있을 것으로 예상되어진다. 이로부터 수정 GRI 3.0 반응기구는 통상화염뿐만 아니라 산소부화 조건에 대해서도 기존반응기구에 비해 향상된 예측성능을 보이는 것을 확인할 수 있다.

Fig. 9은 수정 GRI 3.0 반응기구 및 기존반응기구의 산소부화화염에 대한 NO 예측성능을 검토하기 위하여, 스트레인을 20, $\Omega=0.90$ 인 대향류 비예혼합화염을 대상으로 Naik 등⁽¹⁰⁾이 측정 한 중심축

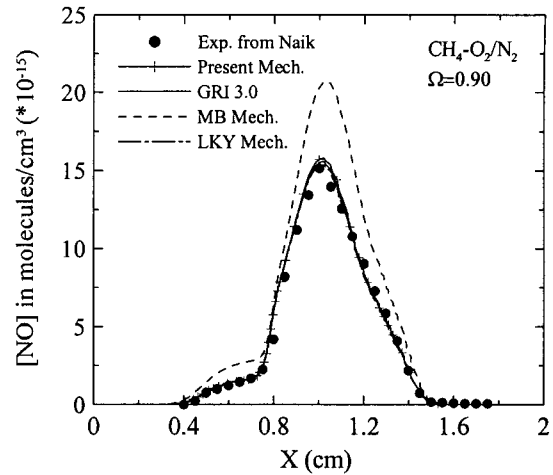


Fig. 9 Comparison of NO number density using present reaction mechanism

상 NO 농도 분포를 계산결과와 비교, 도시한 것이다. 그림 중 NO 농도는 수밀도(Number Density) 값으로 표시하였다. MB 반응기구의 경우 NO 수밀도를 과도하게 예측하여 산소부화화염의 NO 농도를 정확하게 예측할 수 없는 것을 알 수 있다. 그러나, 수정 GRI 반응기구를 포함한 다른 반응기구는 모두 실험결과를 정량적으로 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. 이것으로부터 수정 GRI 3.0 반응기구는 산소부화화염의 연소속도뿐만 아니라 NO 발생량도 비교적 정확히 예측함을 알 수 있다.

따라서 본 연구에서 제안한 수정 GRI 3.0 반응기구는 산소부화 조건까지 정확히 모사할 수 있는 메탄 상세 반응기구라고 할 수 있으며, 추후 화학종의 농도분포, 소염한계 및 착화지연 등에 대한 추가적인 측정을 통하여 수정보완작업이 이루어질 예정이다.

4. 결론

본 연구에서는 산소부화 조건의 메탄 화염을 대상으로 산소부화율에 따른 연소속도를 예측하여, 이를 기준으로 기존 메탄반응기구들의 산소부화 조건에 대한 적용성을 검증하고, 기존 반응기구의 보완 연구를 통하여 다음과 같은 결과를 얻었다.

(1) 본 연구에서 사용한 소형 노즐($D=4mm$)화염 및 솔리렌 시스템을 이용하여 얻어진 연소속도 측정결과는 충분한 신뢰성이 있으며, 산소부화 조건까지 포함한 메탄 반응기구의 검증에 유용한 자료라 사료된다.

(2) 기존 반응기구들은 메탄-공기 화염이나 산소

부화율이 낮은 경우는 연소속도를 정확히 예측하나, 산소부화율이 높을수록 실측 결과와의 차이가 커지기 때문에 반응기구에 수정이 필요함을 알았다.

(3) 연소속도에 대한 민감도 해석을 수행하여 산소부화율 및 당량비 변화에 따른 주요 반응기구를 검토한 후, 기존 GRI 3.0 반응기구 중의 (R38) $H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$ 반응을 산소부화 조건에도 적합하도록 수정한 새로운 메탄 반응기구를 제시하였다.

(4) 수정 메탄 반응기구는 메탄-공기 화염 및 산소부화 화염 모두에 대해서 연소속도를 잘 예측하며, 대향류 비예혼합 화염의 NO 수밀도 실험결과도 잘 예측하였다.

(5) 본 연구에서 제안한 수정 GRI 3.0 반응기구는 기존반응기구에 비해 산소부화 조건에 대해서도 정확한 정보를 제공할 수 있는 메탄 상세 반응기구가 될 수 있다.

후 기

본 연구는 연소기술연구센터(Combustion Engineering Research Center)의 연구비 지원에 의해 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Charles E. and Baukal, Jr., 1998, *Oxygen-Enhanced Combustion*, CRC.
- (2) Hedley, J. T., Pourkashanian, M., Williams, A. and Yap, L. T., 1995, "NO_x Formation in Large-Scale Oxy-Fuel Flames," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 108, pp. 311~322.
- (3) Han, J. W. and Lee, C. E., 2002, "Numerical Study on Flame Structure and NO Formation Characteristics in Oxidizer-Controlled Diffusion Flames," *Transaction of the Korean Society of Mechanical Engineers*, Vol. 26, No. 5, pp. 742~749.
- (4) Sung, C. J. and Law, C. K., 1998, "Dominant Chemistry and Physical Factors Affecting NO Formation and Control in Oxy-Fuel Burning," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 1411~1418.
- (5) Lee, K. Y., Nam, T. H., You, H. S. and Choi, D. S., 2002, "The Flame Structure of Freely Propagating CH₄/O₂/N₂ Premixed Flames on the O₂ Enrichment," *Transaction of the Korean Society of Mechanical Engineers*, Vol. 26, No. 4, pp. 555~560.
- (6) Jahn, G., 1934, "Der Zundvorgang in Gasgemischen," *Ph. D. Thesis*, Oldenbourg, Berlin.
- (7) Morgan, G. H. and Kane, W. R., 1953, "Some Effects of Inert Diluents on Flame Speeds and Temperature," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 4, pp. 313~320.
- (8) Murty Kanury, A., 1977, *Introduction to Combustion Phenomena*, Gordon and Breach Science Publishers.
- (9) Peters, N., and Rogg, B., 1993, *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, Berlin : Springer-Verlag.
- (10) Sameer V. Naik, and Normand M. Laurendeau, 2002, "Quantitative Laser-Saturated Fluorescence Measurements of Nitric Oxide in Counter-Flow Diffusion Flames Under Sooting Oxy-Fuel Conditions," *Combustion Science and Technology*, Vol. 129, pp. 112~119.
- (11) Morel, T., 1975, "Comprehensive Design of Axisymmetric Wind Tunnel Contraction," *Journal of Fluid Engineering*, pp. 225~233.
- (12) Stephen R. Turns, 2000, *An Introduction to Combustion*, 2nd ed., McGraw-Hill
- (13) Kee, R. J., Grcar, J. F., Smooke, M. D. and Miller, J. A., 1994, "A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flame," *SAND 85-8240*.
- (14) Miller & Bowman Mech. Web address : <http://www.galcit.caltech.edu/EDL/mechanisms/library/library.html>
- (15) GRI Mech. Ver. 3.0, Web address : http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html
- (16) Yiguang Ju, Hongsheng Guo, Kaoru Maruta, Fengshan Liu, 1997, "On the Extinction Limit and Flammability Limit of Non-Adiabatic Stretched Methane-Air Premixed Flames," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 342, pp. 315~334.
- (17) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., 1989, "Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," *SAND 89-8009B*.
- (18) Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., 1994, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multi-Component Transport," *SAND86-8246*.
- (19) Law, C. K., "A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities," In: N. Peters and B. Rogg, *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Berlin:Springer-Verlag, pp. 15~26.
- (20) Lee, C. E., Oh, C. B., Jung, I. S. and Park, J. 2002, "A Study on the Determination of Burning Velocities of LFG and LFG-Mixed Fuels," *Fuel*, Vol. 81, pp. 1679~1686.
- (21) Yetter, R. A., Dryer, F. L. and Rabitz, H., 1991, "A Comprehensive Reaction Mechanism for Carbon Monoxide/Hydrogen/Oxygen Kinetics," *Combustion Science and Technology*, Vol. 79, pp. 97~128.