

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2010.34.4.365

제트 혼합 반응기 내 희박 예혼합 메탄-공기 연소의 NO 생성 예측을 위한 화학 반응기 모델링

이보람* · 박정규*† · 이도용* · 이민철** · 박원식**

* 건국대학교 기계공학부 , ** 한국전력공사 전력연구원

A Chemical Reactor Modeling for Prediction of NO Formation of Methane-Air Lean Premixed Combustion in Jet Stirred Reactor

Bo-Rahm Lee*, Jung-Kyu Park*†, Do-Yong Lee*, Min-Chul Lee** and Won-Shik Park**

* Dept. of Mechanical Engineering, Konkuk Univ.,

** Korea Electric Power Research Institute.

(Received August 17, 2009 ; Revised February 1, 2010 ; Accepted February 8, 2010)

Key Words: Lean Premixed Combustion(희박 예혼합 연소), Perfectly Stirred Reactor(완전혼합반응기), Jet Stirred Reactor(제트혼합반응기), NO formation pathway(NO 생성경로)

초록: 제트 혼합 반응기(JSR) 내의 NOx와 같은 배출물질을 예측하기 위해서 화학반응기 모델을 개발했다. 본 연구에서는 JSR에 대한 화학반응기 모델로서 two-PSR 모델이 채택되었다. CHEMKIN 코드와 4가지 NO 생성 메커니즘을 포함한 GRI 3.0 메탄-공기 연소 메커니즘을 이용해서 JSR내의 희박 예혼합 메탄-공기 연소의 NO 생성 예측을 실시하였다. 모델의 검증을 위해서 계산된 결과를 Rutar의 실험 데이터와 비교하였다. NO 생성의 중요 파라미터와 4 가지 NO 경로의 기여도를 조사하였다. 화염 영역에서는 prompt 메커니즘이 주된 경로이고, 화염후 영역에서는 Zeldovich 메커니즘이 주된 경로이다. 희박 예혼합 조건에서는 N2O 메커니즘이 화염 및 화염후 영역 모두에서 중요한 경로이다.

Abstract: A chemical reactor model (CRM) was developed for a jet stirred reactor (JSR) to predict the emission of exhaust such as NOx. In this study, a two-PSR model was chosen as the chemical reactor model for the JSR. The predictions of NO formation in lean premixed methane-air combustion in the JSR were carried out by using CHEMKIN and GRI 3.0 methane-air combustion mechanism which include the four NO formation mechanisms. The calculated results were compared with Rutar's experimental data for the validation of the model. The effects of important parameters on NO formation and the contributions of the four NO pathways were investigated. In the flame region, the major pathway is the prompt mechanism, and in the post flame region, the major pathway is the Zelodovich mechanism. Under the lean premixed condition, the N2O mechanism is the important pathway in both flame and postflame regions.

1. 서 론

최근 들어 내연기관 생산자들은 환경오염물질을 줄이는 기술에 관심을 더욱 높이고 있고, 궁극적으로 제로 배출(zero emission)에 목표를 두고 있다. 가스터빈의 연소기 기술에서 가장 큰 관심사인 초저 NOx화를 이루기 위해서는 화염내의 복잡한 NOx 생성과정에 대한 이해가 필요하다.

희박 예혼합 가스터빈 연소기는 초저 NOx 배출을 달성할 수 있는 경제적인 방법이다. 천연가스를 연소시키는 희박 예혼합 연소실에서 NOx

생성은 Zeldovich 와 prompt 메커니즘이 지배적인 확산화염의 상황과 매우 다르다. 이 때문에 농후하고, 확산화염에 적합한 NOx 예측 모델을 희박 예혼합 화염에 적용했을 경우 완전히 받아들일 수 없는 결과를 준다.^(1,2) 많은 연구들이 PSR(Perfectly Stirred Reactor) 또는 PSR-PFR 등의 단순화학 반응기 모델을 이용해서 메탄 산화 메커니즘과 Nitrous oxide, Zeldovich, Prompt, NNH 메커니즘 등의 NO 메커니즘을 결합하여 NOx 생성에 관한 연구를 실시한 바 있다.⁽²⁻⁷⁾ 이 연구들은 그동안 중요하게 고려되었던 Zeldovich 메커니즘과 비교하여 N2O 메커니즘이 상대적으로 중요한 역할을 하는 것을 보여준다.

본 연구에서는 가스터빈에서의 NOx 생성 예측

† Corresponding Author, jungkyup@konkuk.ac.kr

모델링을 구축하기 위한 기초연구로서 JSR에서의 화학반응기 모델을 개발하고 이를 검증하려 한다. 또한 본 연구에서는 가스터빈 연소기에서 NO 생성에 주요한 파라미터들의 영향을 고찰하고, 네 가지 NO 생성 메커니즘의 기여도를 분석한다.

2. 가스터빈 NO_x 생성에 영향을 미치는 주요 파라미터

2.1 연소온도

Fig. 1⁽⁸⁾은 여러 실험 연소기에 대해서 연소온도에 따른 NO_x의 증가를 보여준다. 발표된 데이터들은 양적으로 상당한 차이를 보인다. 차이에도 불구하고 어느 연소기 실험에 대해서도 온도를 증가시키면 NO_x가 지수적으로 증가하는 것을 볼 수 있다.

2.2 당량비

당량비가 NO 생성에 끼치는 일차적인 영향은 화염온도에 끼치는 영향으로 나타난다. 현재 사용되고 있는 가스 터빈은 일반적으로 공기-연료를 이론공연비보다 희박하게 혼합하여 화염온도를 줄임으로써 NO_x 생성을 줄일 수 있도록 희박 예혼합 상태로 작동된다. 희박 상태로 가스터빈 엔진을 작동하는 동안의 주요 약점은 연소를 불안정하게 해서, 화염소멸(flameout)과 화염진동 그리고 소음을 발생시키는 것이다.

2.3 연소기 체류시간

연소기 체류시간은 혼합기가 연소실에서 체류하는 평균시간이다. 온도와 자유 활성기 농도가 일정할 때, 그리고 NO 농도가 충분히 낮아서 역반응이 무시될 때, NO_x 배출은 체류시간과 함께 선형적으로 증가한다.⁽⁹⁾ 이것은 반응에 필요한 시간의 증가라는 단순한 결과이다. 하지만 온도, 자유 활성기 농도 및 NO 농도의 변화는 체류시간 영향을 모호하게 한다. 가스터빈 연소기들에서 NO_x의 체류시간에 대한 의존성은 연소기내의 유체역학에 의해 보다 복잡하게 된다.

2.4 연소압력

Fig. 1에 제시된 실험 데이터는 연소압력에 관한 다른 경향을 보인다. 기존의 압력 데이터의 큰 차이를 설명하기 위해서 Rutar 등⁽¹⁰⁾과 Monghia 등⁽¹¹⁾

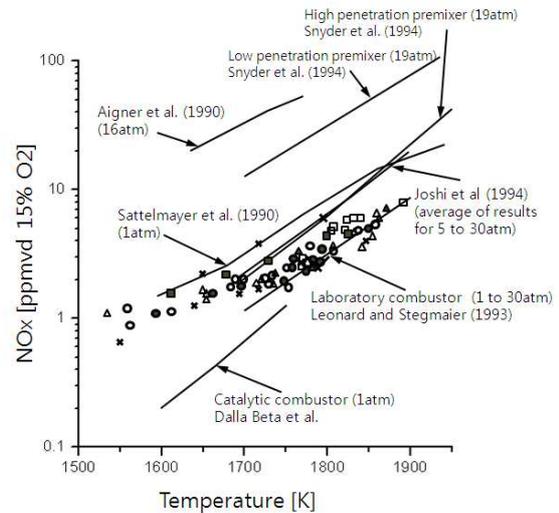


Fig. 1 Published lean-premixed natural gas NO_x experimental data

은 입구 연료와 공기의 비혼합성(unmixedness)에 대한 압력의 영향을 연구했다. 비혼합성이 작거나 완전 예혼합인 경우 압력에 독립적이다. 이것은 앞에 언급한 연소기는 열악한 예혼합기(premixer)를 장착하고 있었을 것을 암시한다. 완전 예혼합 반응기가 사용됐다고 가정한 Steele의 연구⁽¹²⁾는 연소압력에 따라 NO_x가 약간 감소하는 것을 관찰했다.

2.5 입구 공기온도

공기 예열에 대한 실험 데이터는 NO_x에 대해서도 큰 차이를 보여준다. 어떤 연구는 입구온도가 증가함에 따라 약간의 NO_x 증가를 보여주는 반면에, 다른 연구는 매우 큰 NO_x 증가를 보여준다.⁽¹³⁾ 연료와 공기의 비혼합성을 증가시키기에 따라 NO_x 발생은 입구온도에 더 의존하게 된다는 것을 발견했다.

3. NO_x 생성 모델링

본 연구에서는 JSR에 대하여 CFD 해석을 실시하고, 이 결과를 토대로 화학 반응기 모델을 구성하였다. 또한 화학 반응기 모델의 검증을 위하여 모델로 예측한 NO_x와 CO 생성량을 Rutar의 실험값⁽³⁾과 비교하여보았다.

3.1 CFD 해석

화염의 형상을 예측해보고, 각 요소의 체적을 결정하기 위해 JSR에 대한 CFD 해석을 실행하였

다. 해석은 Star-CD Ver.4.02를 사용하였으며, Cyclic boundary 조건을 이용하여 JSR 전체 형상의 4분의 1, 즉 90° 부분 모델(22만 cell)에 대해 해석하였다. 난류 모델은 k-ε 모델을 사용하였으며, 연소 해석은 EBU(Eddy Break-Up) 모델을 사용하였다. JSR 형상의 외부는 열전달이 없는 단열 조건으로 설정하였다. 혼합기는 예혼합 상태로 연소실로 분출되며, 제트 입구 속도는 체류시간과 압력 조건에 맞추어 Rutar의 실험 조건⁽³⁾으로부터 얻었으며, 각 조건에 따라 85~207m/s 이다.

Fig. 2는 비예열 조건, 압력 6.5atm, 체류시간 4ms일 때의 CFD 해석 결과를 보여준다. Fig. 2 (a)는 온도 분포를 보여주며, 온도 변화가 급격한 부분이 화염영역일 것이라고 추정한다. Fig. 2 (b)는 CO 농도를 나타낸다. 화염의 영역은 CO 농도를 바탕으로 결정되었는데, CO 최대치의 20%인 지점을 화염의 경계로 보았다.⁽¹⁴⁾

Fig. 3은 유동벡터와 색으로 구분된 온도가 표시된 JSR의 단면이다. 혼합기 제트는 입구에서 연소실 끝까지 빠른 속도로 분출되며, 제트 가장자리에 화염이 자리하게 된다. 또한 출구가 입구와 가까이 위치한 JSR의 형상에 의하여 반응물이 재순환하는 모습이 나타난다.

3.2 화학 반응기 모델링

CFD 해석에서 얻은 JSR내 혼합기 유동의 모습을 바탕으로 혼합기가 들어가 점화되지 않은 부분은 mixer로, 반응이 활발한 화염영역은 PSR1로, 반응물이 순환하며 출구로 빠져나가는 화염 후 영역은 PSR2로 정의하였으며, Fig. 4에 화학 반응

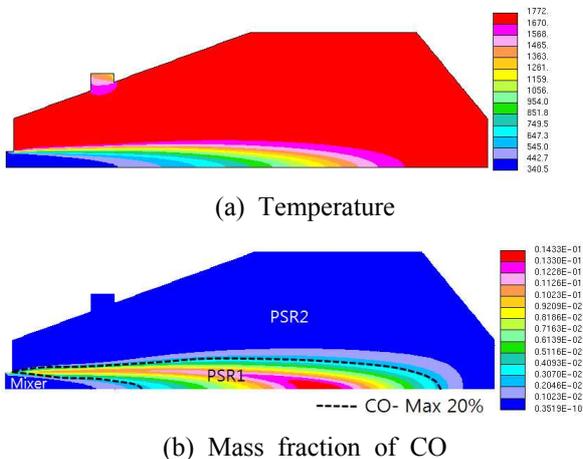


Fig. 2 The result of CFD for JSR

기 모델의 개략도를 나타내었다. 유동에 의해 화염 후 영역에서 화염 영역으로 반응물이 재순환하는 CFD 결과를 화학 반응기 모델에 포함시키지 않고 세 반응기를 직렬로 연결하였다. 각 반응기의 체적은 CFD 해석을 바탕으로 결정한다. 압력변화와 체류시간 변화에 따라 화염의 체적이 변화하며, 이것을 적용하여 각 모델링 조건에 따라 화학 반응기 모델 요소 각각의 체적을 정하였다. Fig. 5는 CFD 해석으로 정해진 화염의 체적, 즉 PSR1의 체적비를 나타낸다. 화염의 크기는 압력이 증가함에 따라 커지며, 체류시간이 증가하면 작아진다.

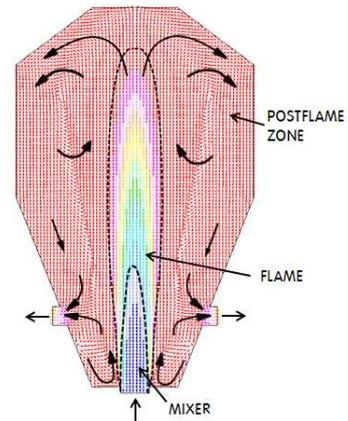


Fig. 3 Temperature distribution and flow pattern in JSR

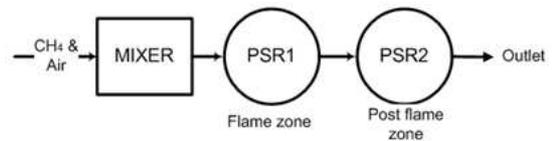


Fig. 4 Schematic of the three element chemical reaction model

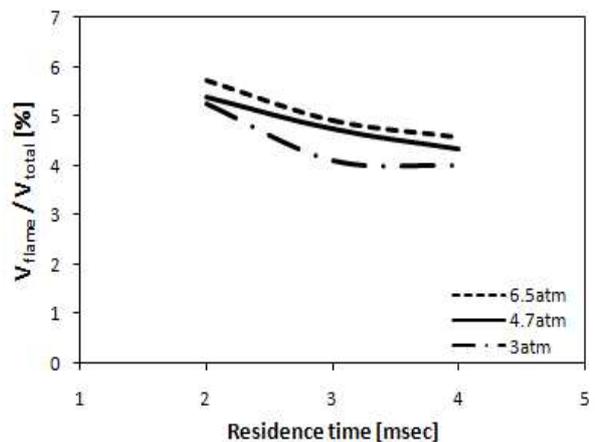


Fig. 5 Flame volume

화학 반응기 모델을 이용하여 메탄-공기 희박 예혼합 연소에서의 NOx 생성을 예측하기 위해, GRI 3.0 메탄 연소 메커니즘⁽¹⁵⁾을 사용하여 상용 프로그램인 CHEMKIN CODE를 통하여 해석하고, 모델을 검증하기 위해서 Rutar의 JSR 실험데이터⁽³⁾와 비교하였다.

3.3 모델과 실험 데이터와의 비교

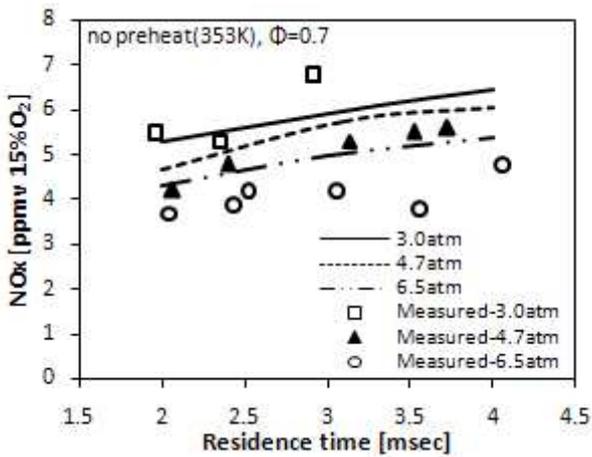
Rutar는 실험 변수로 반응기 체류시간과 압력을 사용하여, 이들의 증가에 따른 배기가스 농도 값을 얻었다. 체류시간은 연소실 내에서 혼합기가 머무르는 시간을 말하며 다음 식에 의해 정의된다.

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}} \quad (1)$$

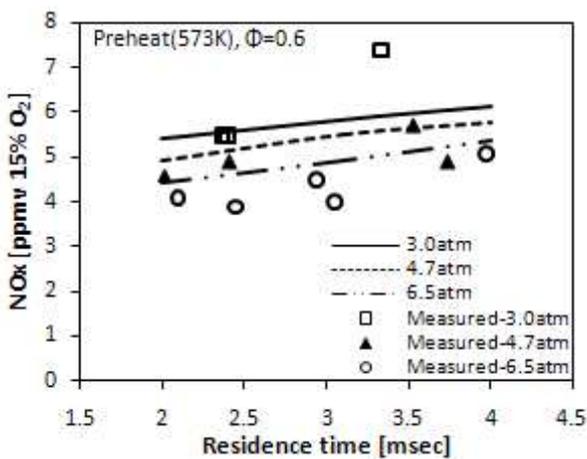
이 식의 분자는 연소실 체적과 기체 밀도의 곱으로 이루어져있다. 분모는 질량유량(연료와 공

기)을 나타낸다. 또한 반응기내 연소 온도를 일정하게(약 1800K) 유지하기 위해, 비예열의 경우 당량비 0.7, 예열의 경우는 당량비 0.6으로 실험조건을 달리하였다. 배기 해석을 위한 가스 샘플링은 JSR의 2/3 지점인 재순환 영역(화염 후 영역)에서 이루어졌다.⁽³⁾

Fig. 6은 화학 반응기 모델로 예측한 NOx와 실험데이터⁽³⁾를 비교한 그래프이다. 화학 반응기 모델을 이용해 예측한 값은 선으로, 실험치는 점으로 표시하였다. Fig. 6(a)는 비예열 입구 조건(353K)에서의 결과이다. 예측 결과를 보면 반응기 체류시간이 증가함에 따라 NOx가 완만히 증가하며, 압력이 증가함에 따라 NOx가 감소하는 것을 볼 수 있다. Rutar의 실험치도 같은 경향을 보이고 있다. Fig. 6(b)는 예열(573K), 당량비 0.6인 혼합기의 경우를 보여준다. NOx의 생성 경향은 전반적으로 비예열 조건과 유사하다. 체류 시간이

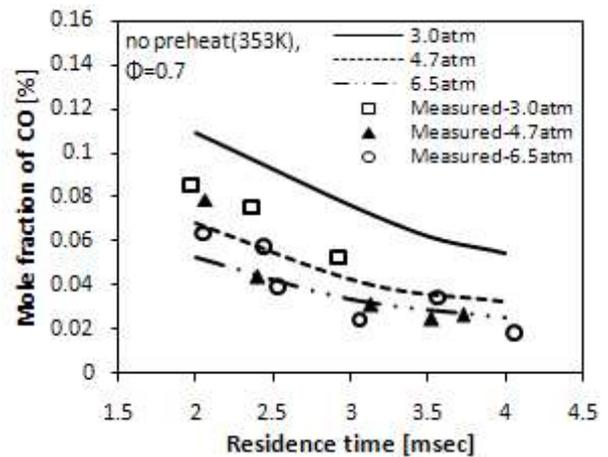


(a) Unheated cases

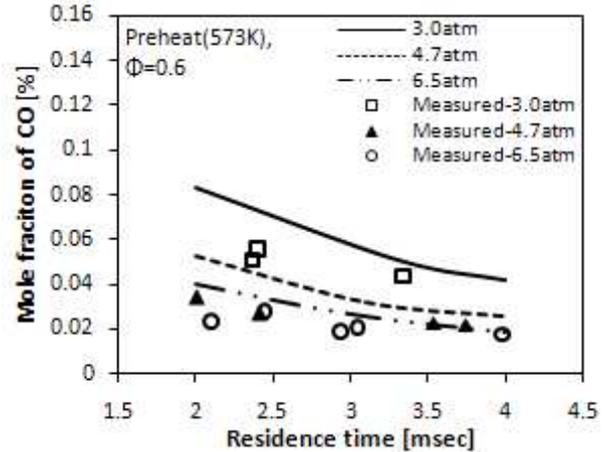


(b) Pre-heated cases

Fig. 6 Comparison of modeled with measured NOx



(a) Unheated cases



(b) Pre-heated cases

Fig. 7 Comparison of modeled and measured CO

증가함에 따라, 혼합기 압력이 감소함에 따라 NOx가 증가한다. 전체적인 NOx 생성량도 비예열 조건과 거의 비슷하다. 그러나 비예열과 예열 조건 모두 3 atm의 실험 측정치가 3 ms에서 급격히 커지는데, 이는 실험에서 열손실을 보완하기 위하여 체류시간이 증가함에 따라 혼합기를 더욱 과농하게 하였기 때문에 발생한 결과이다.⁽³⁾

Fig. 7(a)는 비예열(353K), 당량비 0.7 조건에서, (b)는 예열(573K), 당량비 0.6 조건에서 모델에 의한 CO 생성 예측치와 실험 데이터(Rutar)를 비교한 그래프이다. 두 경우 모두 체류 시간과 압력이 증가함에 따라 CO 생성량이 감소하는 것을 알 수 있다. 또한 비예열의 경우가 예열 조건보다 CO 생성이 더 많다.

4. 결과 및 토론

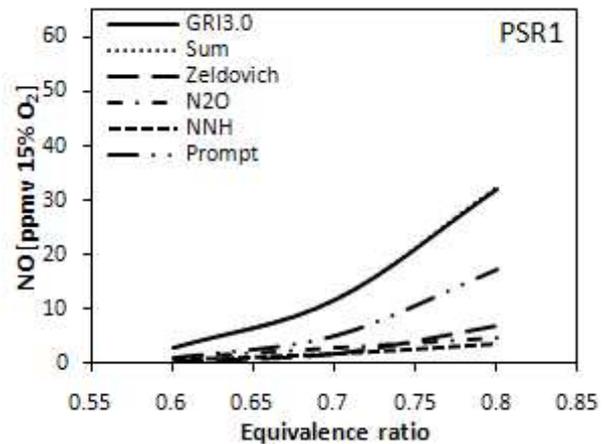
본 연구에서 사용된 GRI 3.0은 네 가지 NO 생성 메커니즘(Zeldovich, N₂O, Prompt, NNH)이 모두 포함된 메탄-공기 연소 메커니즘이며, 각 메커니즘의 기여도를 분석하기 위해 GRI 3.0 메커니즘에서 네 메커니즘을 분리하여 계산하였다. 각 메커니즘에 의한 NO생성량을 합한 값을 도시하여 비교해 보면, PSR1에서는 각 메커니즘의 예측치를 합한 값과 GRI 3.0 메커니즘의 예측치가 잘 일치한다. 그러나 PSR2에서는 PSR1에서의 결과를 PSR2의 입구 조건으로 입력하여 계산하는 과정에서 발생한 오차의 누적으로 인하여 네 메커니즘의 합과 GRI 3.0 메커니즘 값 사이에 1~6% 정도의 오차가 발생하였다.

4.1 당량비의 영향

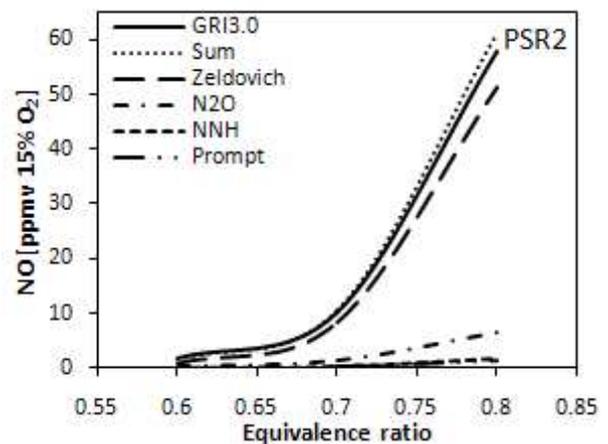
Fig. 8은 입구온도 573K, 압력 6.5atm, 체류시간 3ms인 조건에서 당량비 변화(0.6-0.8)에 따른 화염 영역과 화염 후 영역에서의 NO 생성의 변화 및 각 생성경로의 기여도를 보여준다. Fig. 8(a)에서 볼 수 있듯이 화염영역(PSR1)에서는 당량비 증가

에 따라 네 가지 메커니즘을 통한 NO 생성이 모두 증가하나 Prompt 메커니즘을 통한 NO 생성이 월등히 크게 증가한다. 이것은 Table 1에서 볼 수 있듯이 Prompt 메커니즘의 주요 활성기인 CH활성기가 당량비가 0.6에서 0.8로 변할 때 약 10배 정도 증가하는 것으로 설명할 수 있다.

Fig. 8(b)는 화염 후 영역의 NO생성을 나타낸다. 화염 후 영역(PSR2)에서도 당량비가 증가함



(a) Flame zone (PSR1)



(b) Post flame zone (PSR2)

Fig. 8 NO formed by each of four pathway in chemical reaction model versus equivalence ratio at 6.5atm, 3ms, 573K(inlet temperature)

Table 1 PSR's Temperatures and the radical concentrations for various equivalence ratios

Equivalence ratio	Temperature [K]		CH [mole/cm ³]		NNH [mole/cm ³]		O [mole/cm ³]		H [mole/cm ³]		N ₂ O [mole/cm ³]	
	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2
0.6	1792	1879	3.24E-07	3.96E-12	2.75E-08	2.28E-11	7.85E-03	3.45E-05	2.81E-03	2.15E-06	2.53E-05	5.64E-07
0.7	1964	2048	1.15E-06	9.21E-12	5.98E-08	9.19E-11	1.26E-02	7.53E-05	5.44E-03	7.79E-06	2.27E-05	4.98E-07
0.8	2102	2200	3.06E-06	2.36E-11	1.15E-07	4.15E-10	1.59E-02	1.57E-04	9.65E-03	3.26E-05	1.69E-05	5.12E-07

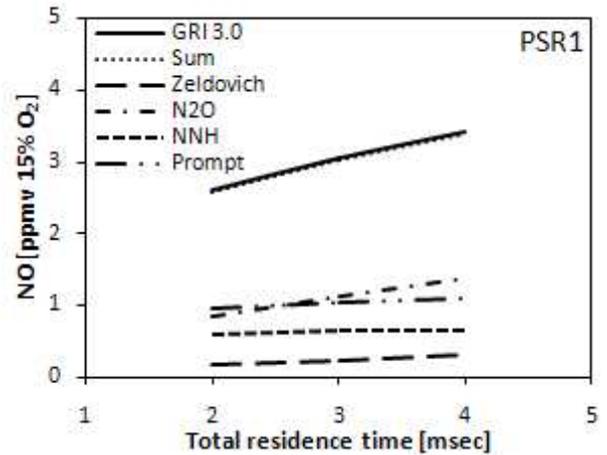
에 따라 NO 생성량이 더욱 급격히 늘어나고 있다. 특히 당량비 0.7 이후에서 NO 생성량이 매우 가파른 것을 볼 수 있다. 당량비가 증가하면 Table 1에서 볼 수 있듯이 연소온도가 2000K 이상으로 높아지기 때문에 Zeldovich 메커니즘을 통한 NO 생성이 크게 증가한다. 화염 후 영역에서 Zeldovich 메커니즘에 의해 생성되는 NO는 전체의 60~80%에 이른다. N₂O 메커니즘을 통한 NO 생성이 두 번째의 기여도를 나타낸다. 다른 메커니즘을 통한 기여도는 미미하다.

4.2 체류시간의 영향

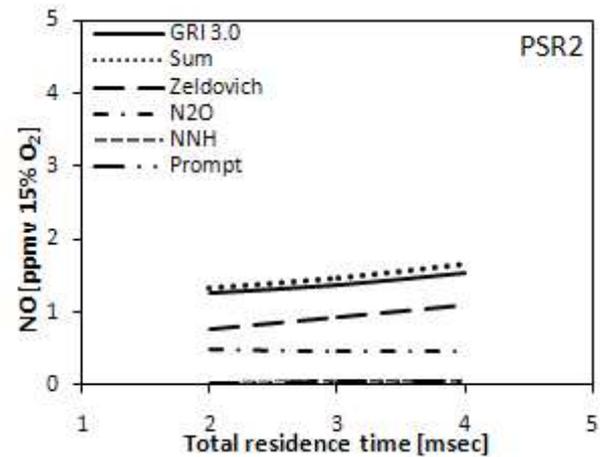
Fig. 9는 혼합기 온도 573K, 압력 6.5atm, 당량비 0.6의 경우에 대해서 체류시간(2-4ms) 변화에 따른 화염 영역과 화염 후 영역에서의 NO 생성의 변화 및 각 메커니즘의 기여도를 보여준다.

Fig. 9(a)에서 볼 수 있듯이 화염 영역(PSR1)에서는 prompt와 N₂O 메커니즘이 가장 우세하며 두 메커니즘에 의해 생성된 NO는 전체의 70%에 이른다. NNH와 prompt 메커니즘에 의해 생성되는 NO의 값은 체류시간이 증가해도 거의 증가하지 않는데, 이것은 반응에 관여하는 주요 활성기의 감소와 체류시간 증가에 의한 효과가 상쇄되기 때문으로 생각된다. Table 2에 나타난 것과 같이 prompt와 NNH 메커니즘의 주요 활성기인 CH, NNH 활성기는 체류시간이 증가함에 따라 감소하는 경향을 보인다. 반면 N₂O 중간생성물과 O 활성기는 체류시간이 늘어남에 따라 약간 증가하는 경향을 보이며, 이로 인해 N₂O 메커니즘에 의해서 생성된 NO는 체류시간에 따라 약간 증가한다. 또한 연소온도도 약간 상승하여 Zeldovich 메커니즘에 의한 NO 생성도 약간 증가한다. 이에 따라 전체 NO 생성이 증가하는 것으로 보인다.

Fig. 9(b)에 나타난 것과 같이 화염 후 영역에서는 Zeldovich 메커니즘이 NO 생성의 주요 메커니즘이다. 두 번째로 기여정도가 큰 메커니즘은 N₂O 메커니즘인데, Zeldovich와 N₂O 메커니즘은



(a) Flame zone (PSR1)



(b) Post flame zone (PSR2)

Fig. 9 NO formed by each of four pathway in chemical reaction model versus residence time at 6.5atm, Φ=0.6, 573K(inlet temperature)

로 생성된 NO는 전체 NO에서 94%정도의 비율을 차지한다. 이에 반해 NNH와 Prompt 메커니즘으로 생성되는 NO는 매우 작다. 화염 후 영역은 반응 온도가 높고 체류시간이 증가함에 따라 반응에 필요한 시간이 늘어나기 때문에 Zeldovich 메커니즘에 의한 NO 생성은 체류시간에 따라 약간 증가한다. 다른 세 메커니즘은 Table 2에서 볼 수 있듯 반응에 필요한 주요 활성기의 감소정도

Table 2 PSR's Temperatures and the radical concentrations for various residence times

Residence time[msec]	Temperature [K]		CH [mole/cm ³]		NNH [mole/cm ³]		O [mole/cm ³]		H [mole/cm ³]		N ₂ O [mole/cm ³]	
	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2
2	1775	1877	3.42E-07	8.29E-12	2.67E-08	3.36E-11	7.03E-03	4.40E-05	2.78E-03	3.18E-06	2.00E-05	6.93E-07
3	1792	1879	3.24E-07	3.96E-12	2.75E-08	2.28E-11	7.86E-03	3.45E-05	2.81E-03	2.15E-06	2.53E-05	5.64E-07
4	1808	1880	2.64E-07	1.97E-12	2.48E-08	1.67E-11	7.77E-03	2.86E-05	2.50E-03	1.57E-06	2.95E-05	4.77E-07

가 크기 때문에 체류시간이 증가했음에도 NO 생성량이 변하지 않거나 약간 감소하는 모습을 보인다. 이로 인해 체류시간에 따른 전체 NO 생성의 증가는 미미하다.

4.3 연소압력의 영향

Fig. 10은 혼합기 온도 573K, 체류시간 3ms, 당량비 0.6의 조건에서 연소압력이 3.0atm에서 6.5atm까지 변화할 때, 각 메커니즘의 NO 생성 기여도를 살펴보았다.

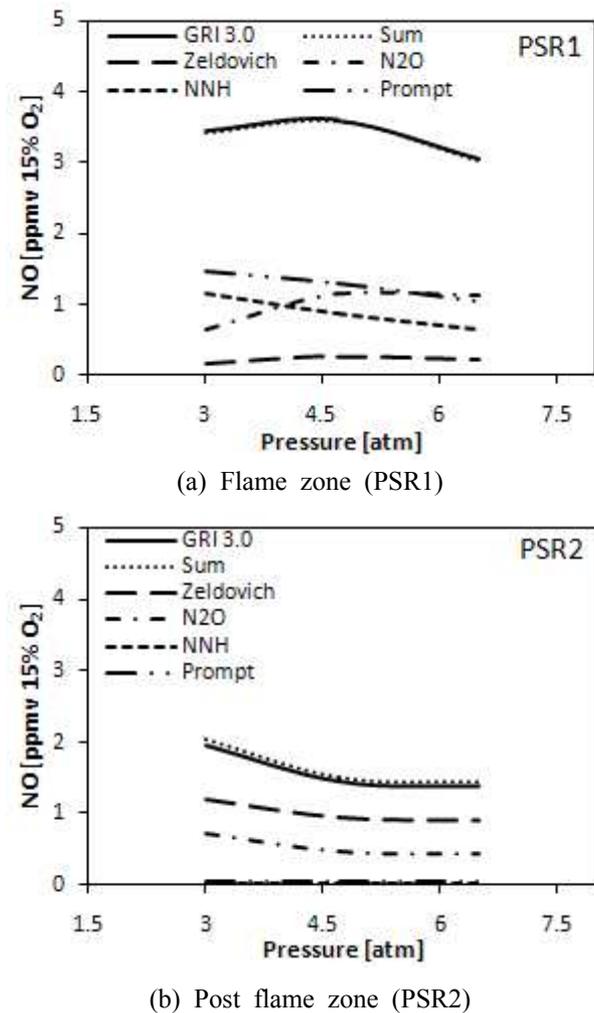


Fig. 10 NO formed by each of four pathway in chemical reaction model versus pressure at $\Phi=0.6$, 3ms, 573K(inlet temperature)

Fig. 10(a)는 화염 영역(PSR1)에서의 NO 생성 메커니즘을 나타낸다. 모델링 결과 압력이 커질수록 Prompt 메커니즘과 NNH 메커니즘으로 생성되는 NO의 양은 감소하는데, 이것은 Table 3에 나타났듯이, 압력이 증가하면서 CH, NNH, O와 H 등의 활성기 농도가 감소하기 때문이다. 5atm 이하에서는 압력 증가에 따른 N₂O 메커니즘에 의한 NO 생성 증가를 뚜렷이 볼 수 있다. 이것은 Table 3에 나타났듯이 압력에 따른 N₂O 활성기 증가 경향과 관련이 있다. 연소온도는 1800K이기 때문에 Zeldovich 메커니즘의 기여도는 낮다. 압력이 증가하면서 5atm 이하에서는 N₂O 메커니즘으로 생성되는 NO의 증가량이 Prompt, NNH 메커니즘으로 생성되는 NO의 감소량과 거의 비슷해서 변화가 없어 보이지만, 5atm 이상에서는 N₂O 메커니즘으로 생성되는 NO의 증가량이 Prompt, NNH 메커니즘으로 생성되는 NO의 감소량보다 적기 때문에 전체 NO 생성량은 약간 감소한다.

Fig. 10(b)는 화염 후 영역(PSR2)에서의 압력에 따른 NO 발생 메커니즘을 나타낸 것이다. 화염 후 영역에서는 압력이 증가하여도 각 메커니즘의 기여 순위는 변하지 않는 것을 볼 수 있다. 모델링 된 압력의 전 구간에서 Zeldovich 메커니즘이 지배적이고 N₂O 메커니즘이 2차적으로 중요하며, NNH 메커니즘과 Prompt 메커니즘의 영향은 매우 작다. 압력이 증가함에 따라 N₂O 메커니즘으로 생성되는 NO는 5atm 이하에서는 다소 감소한다. 이에 따라 5atm 이하에서 전체 NO 생성량이 약간 감소한다. 이것은 Table 3에 나타났듯이 압력이 변하면서 화염 후 영역에서의 N₂O 농도의 감소 경향과 관련이 있다.

4.4 입구온도의 영향

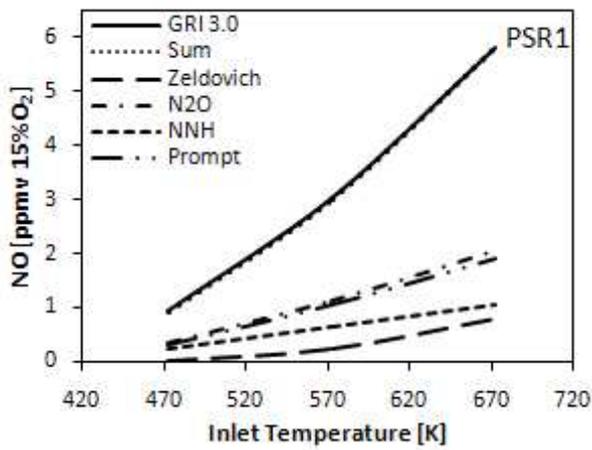
Fig. 11은 압력 6.5atm, 체류시간 3ms, 당량비 0.6의 조건에서 입구온도가 473K에서 773K까지 변화할 때 NO생성의 변화와 각 메커니즘의 NO 생성 기여도를 살펴본 것이다.

Table 3 PSR's Temperatures and the radical concentrations for various reactor pressures

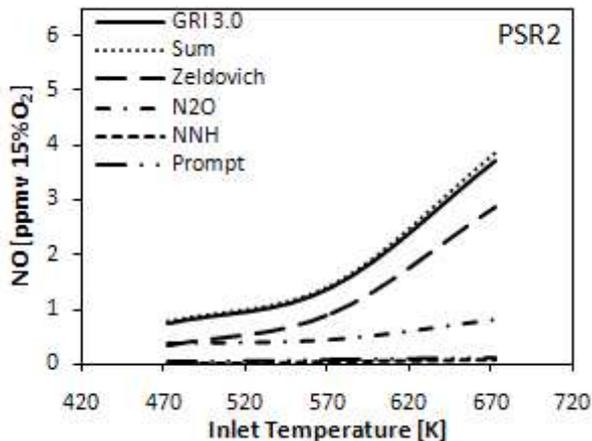
Pressure [atm]	Temperature [K]		CH [mole/cm ³]		NNH [mole/cm ³]		O [mole/cm ³]		H [mole/cm ³]		N ₂ O [mole/cm ³]	
	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2
3	1742	1874	1.44E-06	1.49E-11	5.12E-08	4.49E-11	2.47E-02	9.37E-05	1.19E-02	9.22E-06	1.51E-05	5.89E-07
4.7	1786	1878	4.47E-07	5.70E-12	2.81E-08	2.68E-11	1.06E-02	4.86E-05	4.00E-03	3.50E-06	1.90E-05	5.56E-07
6.5	1792	1879	3.24E-07	3.96E-12	2.75E-08	2.28E-11	7.85E-03	3.42E-05	2.81E-03	2.15E-06	2.53E-05	5.64E-07

Table 4 PSR's Temperatures and the radical concentrations for various inlet temperature

Inlet temperature[K]	Temperature [K]		CH [mole/cm ³]		NNH [mole/cm ³]		O [mole/cm ³]		H [mole/cm ³]		N ₂ O [mole/cm ³]	
	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2	PSR1	PSR2
473	1671	1799	1.51E-07	5.54E-12	1.69E-08	2.02E-11	4.11E-03	2.90E-05	1.93E-03	2.03E-06	1.84E-05	7.07E-07
573	1792	1879	3.24E-07	3.96E-12	2.75E-08	2.28E-11	7.86E-03	3.45E-05	2.81E-03	2.15E-06	2.53E-05	5.64E-07
673	1882	1960	4.74E-07	4.42E-12	3.67E-08	3.77E-11	1.08E-02	5.11E-05	3.51E-03	3.35E-06	2.74E-05	5.39E-07



(a) Flame zone (PSR1)



(b) Post flame zone (PSR2)

Fig. 11 NO formed by each of four pathway in chemical reaction model versus inlet temperature at 6.5atm, $\Phi=0.6$, 3ms

Fig. 11(a)에서 볼 수 있듯이 화염 영역(PSR1)에서는 입구온도가 상승함에 따라 네 메커니즘을 통한 NO 생성이 모두 증가한다. 이것은 Table 4에 따르면 PSR1에서의 주요 활성기들의 농도의 증가로 설명된다. 그 중에서도 Prompt, N₂O 메커니즘이 NO 생성의 주요 메커니즘으로 작용하고 증가하는 정도가 비슷한데, 이것은 CH, O와 H활성기 농도의 증가와 관련이 있는 것으로 보인다.

입구온도가 600K이상이 되면서 Zeldovich 메커니즘에 의한 NO 생성이 크게 증가하는데, 이것은 Table 4에서 볼 수 있듯이 입구 공기 온도가 600K로 상승하면 화염 영역의 연소온도도 1800K 이상으로 상승하는 것에 기인하는 것으로 보인다.

Fig. 11(b)에 나타난 화염 후 영역(PSR2)에서는 입구 온도가 상승함에 따라 Zeldovich 메커니즘에 의한 NO 생성이 눈에 띄게 증가하는 것을 볼 수 있는데, 이것은 Table 4에서도 볼 수 있듯이 연소온도의 큰 증가에 따른 것이다. N₂O 메커니즘에 의한 NO 생성이 두 번째의 기여도를 나타낸다. 입구온도가 550K이하에서는 N₂O의 기여도가 Zeldovich 메커니즘의 기여도와 비슷한 정도의 크기를 보이거나 입구온도가 550K이상 상승하면 N₂O 메커니즘의 기여도는 Zeldovich 메커니즘의 기여도에 비하면 적은 수준이라 할 수 있다. 입구 온도 증가에 따른 NNH와 Prompt 메커니즘에 의한 NO 생성량의 증가 정도는 매우 적다.

5. 결론

본 연구에서는 JSR에 대한 CFD 해석을 토대로 화학 반응기 모델을 구성하고, 이를 이용하여 메탄-공기의 희박 예혼합 연소의 NO 생성을 예측하여 실험치와 비교하여 모델을 검증하였다. 또한 화염 영역과 화염 후 영역으로 나누어 주요 파라미터들이 NO 생성에 미치는 영향을 고찰하고, NO 생성 과정에 대한 네 가지 NO 생성 메커니즘의 역할을 분석하였다.

(1) 화학 반응기 모델로 예측한 NOx 생성은 Rutar의 JSR 실험 데이터와 비교적 잘 일치한다.

(2) NO 생성은 당량비, 입구 온도, 체류시간의 증가에 따라 증가하는데, 이것은 Zeldovich 메커니즘과 N₂O 메커니즘에 의한 NO 생성의 증가와 관련이 크다. 반면에 압력의 증가에 따라서는 NO가 다소 감소하는데, 이것은 CH, O, NNH 등의 라디칼의 감소에 따른 prompt 경로와 NNH 경

로에 의한 NO 생성 감소와 관련이 있다.

(3) 화염 영역(PSR1)에서는 Prompt 메커니즘이 NO 생성의 주요 메커니즘으로 작용한다. 희박한 연소(당량비 0.6이하)에서는 N₂O 메커니즘의 기여도도 상당히 크다.

(4) 화염 후 영역(PSR2)은 화염에 비해 높은 반응 온도로 인해서 Zeldovich 메커니즘이 NO 생성의 주요 메커니즘으로 작용한다. Zeldovich 메커니즘은 당량비와 입구 온도 변화에 따라 NO 생성량이 급격히 변화한다. 희박한 연소(당량비 0.6 이하)와 낮은 입구온도(600K이하)에서는 N₂O 메커니즘의 기여도도 중요하다.

후 기

본 연구는 전력산업연구개발사업의 연구비 지원으로 이루어진 것으로, 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) DuPont, V., Pourkashanian, M., and Williams, A., 1993, "Modelling Process Heaters Fired By Natural Gas," *Journal of the Institute of Energy*, Vol.66, No.466, pp. 20~28.
- (2) Michaud, M.G., Westmoreland, P.R., and Feitelberg, A.S., 1992, Proceedings of the Twenty-fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 879~887.
- (3) Rutar, T.S., 2000, "NO_x and CO Formation for Lean-Premixed Methane-Air Combustion in a Jet-Stirred Reactors Operated at Elevated Pressure," Ph.D. dissertation, University of Washington.
- (4) Miller, J.A., and Bowman, C.T., 1989, "Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol.15, No.4, pp. 287~338.
- (5) Harrington, J. E., Smith, G. P., Berg, P. A., Jeffries, J. B., and Crosley, D. R., 1996, Twenty-sixth Symposium(International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 2133~2138.
- (6) Steele, R.C., Tonouchi, J.H., Nicol,D.G., Malte, P.C., and Pratt, D.T., 1998, "Characterization of NO_x, N₂O, and CO for Lean-Premixed Combustion in a High-Pressure Jet-Stirred Reactor," *ASME J. Eng. Gas Turbine Power*, Vol.120, pp. 303~310.
- (7) Lee, B.R., Kim, H., Park, J.K., Lee, M.C. and Park, W.S., 2009, "A Study on NO_x Formation Pathway of Methane-Air Lean Premixed Combustion by using PSR Model," *Transactions of KSAE*, Vol. 17, NO. 5, pp. 46~52.
- (8) Steele, R.C., 1995, "NO_x and N₂O in Lean-Premixed Jet Stirred Reactors Operated from 1 to 7 atm," Ph.D. Dissertation, University of Washington, Seattle, WA.
- (9) Heywood, J.B., 1988 "Internal Combustion Engine Fundamentals," McGraw-hill International Editions, v.2 no.1 pp.572~586.
- (10) Rutar, T., Martin, S.M., Nicol, D.G., Malte, P.C., and Pratt, D.T., 1997, "Effects of Incomplete Premixing on NO_x Formation at Temperature and Pressure Conditions of LP Combustion Turbines," ASME Paper NO.97-GT-335, ASME.
- (11) Mongia, R.K., Tomita, E., Hsu, F.K., Talbot, L., and Dibble, R.W., 1996, "Use of an Optical Probe of Time-Resolved In-Situ Measurement of Local Air-to-Fuel Ratio and Extent of Fuel Mixing with Application to Low NO_x Emissions in Premixed Gas Turbines," Twenty-Sixth symposium (International) on Combustion, pp. 2749~2757.
- (12) Steel, R.C., 1995, "NO_x and N₂O Formation in Lean-Premixed Jet-Stirred Reactors Operated from 1 to 7atm," Ph.D Thesis, University of Washington.
- (13) Steel, R.C., Tarrett, A.C., Malte, P.C., Tonouchi, J. H., and Nicol, D. G., 1997, "Variables Affecting NO_x Formation in Lean-Premixed Combustion," *Transactions of the ASME, Journal of Engineering for Gas Turbine and Power*, Vol. 119, pp. 102~107.
- (14) Novosselov, Igor V., 2006, "Chemical Reactor Networks for Combustion Systems Modeling," Ph.D. dissertation, University of Washington.
- (15) http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html.