

층류 CH₄/Air 예혼합화염의 하류영역에서 NO 농도 예측을 위한 열손실 모델의 검토

황철홍* · 이창언† · 금성민** · 이기만*** · 신명철**** · 김세원****
(2008년 10월 9일 접수, 2009년 5월 13일 수정, 2009년 5월 18일 심사완료)

An Investigation of the Heat Loss Model for Predicting NO Concentration in the Downstream Region of Laminar CH₄/Air Premixed Flames

Cheol-Hong Hwang, Chang-Eon Lee, Sung-Min Kum, Kee-Man Lee, Myung-Chul Shin and Se-Won Kim

Key Words : NO_x(질소산화물), Premixed Flame(예혼합화염), Postflame Region(화염 하류영역), Heat Loss(열손실)

Abstract

One-dimensional modeling of CH₄/air premixed flame was conducted to validate the heat loss model and investigate NO_x formation characteristics in the postflame region. The predicted temperature and NO concentration were compared to experimental data and previous heat loss model results using a constant gradient of temperature (100 K/cm). The following conclusions were drawn. In the heat loss model using steady-state heat transfer equation, the numerical results using the effective heat loss coefficient (h_{eff}) of 1.0 W/m²K were in very good agreement with the experiments in terms of temperature and NO concentration. On the other hand, the calculated values using the constant gradient of temperature (100 K/cm) were lower than that in the experiments. Although the effects of heat loss suppress NO production near the flame region, a significant difference in NO concentration was not found compared to that under adiabatic conditions. In the postflame region, however, there were considerable differences in NO emission index as well as the contribution of NO formation mechanisms. In particular, in the range of $\phi \geq 0.8$, the prompt NO mechanism plays an important role in the NO reduction under the adiabatic condition. On the other hand, the mechanism contributes to the NO production under the heat loss conditions.

1. 서론

예혼합화염은 화염길이가 짧고, 당량비의 조절을 통해 soot 및 NO_x, CO 배출을 제어할 수 있다

는 장점을 갖고 있지만, 본질적인 화염안정성의 문제로 인하여 소형 및 가정용 열기기에 주로 적용되었다. 그러나 최근에는 강화된 환경규제와 더불어 높은 화염안정 메커니즘을 갖는 버너의 개발과 연료/공기의 혼합 제어기술의 발전으로 산업용 연소기기를 포함한 많은 연소시스템에 예혼합화염의 적용이 크게 확대되고 있다. 특히 최근 국내에서도 고효율 청정 연소시스템의 개발을 위하여 예혼합화염을 이용한 많은 실용적 연구들이 진행되고 있다.^(1,2)

일반적으로 연소시스템의 효율과 오염물질 배출

* 회원, Building and Fire Research Lab., NIST
** 회원, 한라대학교 기계자동차공학부
*** 회원, 순천대학교 기계우주항공공학과
**** 회원, 한국생산기술연구원
† 책임저자, 회원, 인하대학교 기계공학과
E-mail : chelee@inha.ac.kr
TEL : (032)860-7323 FAX : (032)868-1716

특성은 버너와 열교환기의 설계 및 운전조건과 복합적으로 관계된다. 특히 버너와 열교환기의 형상 및 공간배치는 열전달 효율에 직접적인 영향을 미친다. 동시에 화염면 하류의 온도를 변화시켜, 추가적인 NO_x, CO 및 soot의 생성에 영향을 줄 수 있다.⁽³⁾ 그러나 예혼합화염에 대한 대부분의 연구들은 화염면 근처의 오염물질 생성특성^(4,5)에 초점을 두고 있으며, 연소가스의 배출과정에서 오염물질의 생성 및 소멸 과정에 초점을 맞춘 연구는 많지 않다. 실제로 NO_x, CO 반응은 온도에 매우 민감하며, 비교적 느린 반응속도를 갖기 때문에, 화염면 하류에서의 상황에 따라 NO_x, CO 배출치 변화는 매우 클 것으로 기대된다. 또한 실용적 측면에서 배출 규제치는 연소시스템 출구에서의 값을 기준으로 시행되고 있음을 고려할 때 화염면 하류영역에서의 열전달 특성을 고려한 NO_x, CO 반응특성의 규명은 저공해 연소시스템 설계에 유용한 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

층류 예혼합화염의 하류영역에서 열손실과 관련된 NO_x 배출에 관한 연구들을 살펴보면, Konnov 등⁽⁶⁾은 다공 평면버너를 이용하여 개방된 CH₄/air 화염에서 특정 하류단면의 축방향 및 반경방향 NO를 측정하였으며, 1차원 수치해석을 이용하여 하류방향의 NO 농도를 당량비에 따라 비교-검토하였다. 이때 하류단면의 온도는 직접 측정되지 않았지만, 화염면 이후에서 1 cm 당 100 K의 온도 감소가 발생한다는 Maaren 등⁽⁷⁾의 실험결과를 이용하여 수치해석을 수행하였다. 이들의 수치해석 결과는 정성적으로 화염면 하류에서의 NO 농도분포를 잘 예측하였으며, 이후 H₂/CO/CO₂⁽⁸⁾, CH₄/H₂⁽⁹⁾ 및 C₂H₆⁽¹⁰⁾의 연료에 대해서도 추가적인 연구가 수행되었다. 그러나 이들의 논문에도 언급되었듯이, 100 K/cm의 열손실 가정은 매우 한정된 실험을 통해 확인된 결과이며, 당량비와 혼합기의 유량에 따라 이는 변화될 수 있다. 특히 화염온도의 절대값, 혼합기의 연료 및 생성물의 성분이 다른 경우에, 복사 열전달뿐만 아니라 대류 열전달 특성이 변경되어, 결과적으로 화염면 하류에서 열손실에 따른 온도변화는 비선형적인 현상을 보일 것으로 사료된다.

이러한 문제점을 개선하기 위하여 본 연구진은 선행연구^(11,12)에서, 연소기기 내에서 열교환기가 설치된 화염면 하류의 열손실을 크게 복사 열손실과 전도-대류 복합 열손실 두 가지 모드로 구분하였다. 이는 혼합기의 온도 및 조성에 따른 복사 열손실을 적절히 고려할 수 있으며, 온도 구배에

의한 전도-대류 열손실을 적절히 모사할 수 있다는 장점을 가지고 있다. 또한 전도-대류 열손실은 혼합기의 유속 및 주변 열교환기의 배치에 따라 크게 변경될 수 있기 때문에 인위적인 유효 열손실계수의 조절을 통해 화염면 하류의 열손실 양을 변화시켰다. 그 결과 가상의 열손실 시나리오를 통해 열손실 및 체류시간의 변화에 따른 NO_x 생성특성 변화를 체계적으로 검토하였다. 그러나 선행 연구결과는 실험결과와의 직접적인 비교 없이 예혼합화염 하류에서 발생하는 실제 열손실을 모사하기 위한 적절한 유효 열전달계수를 선정하는데 어려움이 있었다.

이러한 배경 하에 본 연구에서는 화염면 하류의 온도 및 NO_x에 관한 기존 실험결과를 이용하여 선행연구에서 제안된 Premix code의 열손실 모델의 타당성을 검토하고, 인위적인 열교환이 없는 화염 하류에서의 열손실을 모사하기 위한 유효 열전달계수를 결정하고자 한다. 또한 Konnov 등⁽⁶⁾에 의해 적용되고 있는 100 K/cm의 열손실 모델에 대한 타당성을 동시에 검토하고자 한다. 마지막으로 검증된 열전달 모델을 이용하여 단열조건과 열손실이 고려된 조건에서, 당량비에 따른 화염면 하류에서의 NO_x 생성특성을 규명하고자 한다.

2. 수치해석 방법

2.1 지배방정식 및 경계조건

본 연구에서는 화염대 및 화염 하류영역에서의 NO_x 생성특성을 검토하기 위하여 1차원 자유전파 예혼합화염을 대상으로 하였으며, 지배방정식으로서 연속, 화학종, 에너지 및 상태 방정식은 각각 다음과 같다.

$$\dot{M} = \rho u A \tag{1}$$

$$\dot{M} \frac{dY_k}{dx} = -\frac{d}{dx}(\rho A Y_k V_k) + A \dot{\omega}_k W_k \tag{2}$$

(k = 1, 2, 3, ..., K)

$$\dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda A \frac{dT}{dx} \right) + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K \rho c_{p,k} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k - \frac{A}{c_p} \dot{q}_{rad.} - \frac{A}{c_p} \dot{q}_{cond.,v.} = 0 \tag{3}$$

$$\rho = p \bar{W} / RT \tag{4}$$

여기서 x 는 공간좌표, \dot{M} 는 질량유량, A 는 단면

적, T 는 온도, p 는 압력, u 는 혼합물의 속도, ρ 는 밀도, $Y_k, W_k, c_{p,k}, \dot{\omega}_k, h_k$ 들은 각각 k 번째 화학종의 질량분율, 분자량, 정압비열, 단위 체적당 몰생성율, 비엔탈피이다. V_k 는 k 번째 화학종의 확산속도로서 열확산을 고려한 Fickian 관계를 이용하여 구해진다. 그 외에 \bar{W} 는 혼합물의 평균 분자량, R 은 일반기체 상수(8.315 kJ/kmol-K), λ 는 혼합물의 열전도계수, c_p 는 혼합물의 정압비열, $\dot{q}_{rad.}$ 와 $\dot{q}_{cond,v.}$ 는 복사 및 결합된 전도-대류 열손실을 의미한다.

계산에 이용된 경계조건은 식 (5)~(6)과 같다.

$$x = -\infty \text{ (미연가스 상류 측);}$$

$$T(-\infty) = T_u, \quad Y_k(-\infty) = Y_{k,u} \quad (5)$$

$$x = +\infty \text{ (기연가스 하류 측);}$$

$$\frac{dT}{dx}(+\infty) = 0, \quad \frac{dY_k}{dx}(+\infty) = 0 \quad (6)$$

2.2 계산방법

본 연구에서는 Premix code⁽¹³⁾를 수정하여 계산을 수행하였으며, 열역학 및 전달 물성치는 각각 Chemkin-II⁽¹⁴⁾와 Transport package⁽¹⁵⁾를 사용하였다. 계산은 CH₄/air 화염을 대상으로 하였으며, 당량비 (ϕ)는 실용 연소기에서 주로 적용되는 0.7~1.0의 범위에서 수행되었다. 입구 온도와 압력은 각각 298.15 K과 1 atm으로 하였다. 화염면 하류의 NO_x 특성을 검토하기 위하여 계산영역은 5.5 cm까지 고려하였다.

연료 및 NO_x에 대한 상세 반응기구는 GRI v-3.0⁽¹⁶⁾을 이용하였다. 이 반응기구는 CH₄의 산화반응에 대해 C₂ 반응까지 포함하며, Thermal NO, Prompt NO, N₂O-경유(Intermediate) NO 및 NO₂ 생성기구 등 NO_x의 전 반응경로를 상세하게 묘사하고 있다. 본 연구에서는 Zeldovich 반응에 의해 발생하는 Thermal NO의 역할을 분리하기 위해 Nishio-ka 등⁽¹⁷⁾이 제안한 방법에 의해 동일 화염을 두 번 계산하였다. 즉, GRI v-3.0을 이용하여 NO의 총 발생량(이하, Total NO)을 구하고, 다음에 C₂ 반응에 Thermal NO 반응만을 포함한 반응기구를 이용하여 NO 발생량을 구하였다. 실제 Total NO와 Thermal NO의 차이는 Prompt NO 반응기구와 N₂O-경유 NO 반응기구 등에 의해 발생하는 값으로서 본 연구에서는 편의상 Prompt NO로 표기하였다.

각 화염에서 NO 생성량을 정량적으로 비교하기 위하여, Takeno 등⁽¹⁸⁾이 제안한 NO 배출지수(Emission index)를 이용하였으며, 그 식은 다음과 같다.

ssion index)를 이용하였으며, 그 식은 다음과 같다.

$$EI_{NO} = \left(\int_0^L W_{NO} \dot{\omega}_{NO} dx \right) / \left(- \int_0^L W_{CH_4} \dot{\omega}_{CH_4} dx \right) \quad (7)$$

2.3 열손실 모델

2.3.1 열전달 방정식을 이용한 열손실 모델

실용 연소기에서 열손실은 복사, 대류 및 전도에 의해 이루어지지만, 이들의 기여도를 정확히 예측하는 것은 매우 어렵다. 따라서 본 연구에서는 열손실의 원인을 크게 온도의 의존도에 따라서 복사 열손실과 결합된 전도-대류 열손실로 분리하였다. 즉, 복사 열손실의 경우는 전도 및 대류와는 다르게 온도의 4제곱에 비례하기 때문에 개별적으로 고려되었다.

1차원 정상상태의 조건에서, 전도 및 대류 열전달 방정식은 식 (8)과 같이 표현될 수 있다. 여기서 λ , δ 및 T_∞ 는 각각 열전도계수, 벽면의 두께 및 주변온도를 의미한다. 일반적으로 전도 열전달은 벽면에 근접한 생성물의 조성뿐만 아니라, 연소기 벽면의 재질 및 두께에 의해 영향을 받게 된다. 또한 대류 열전달계수(h)는 생성물의 조성과 속도 및 점성과 같은 유체 물성치에 의존한다고 알려져 있다. 그 결과 실제 연소기에서 대류 및 전도에 의한 열손실 양을 정확히 예측하는 것은 매우 어렵다. 따라서 본 연구에서는 이들의 영향을 복합적으로 고려할 수 있도록 식 (9)과 같이 유효 열손실계수(h_{eff})를 도입하였다. 이때 h_{eff} 의 단위는 W/m^2K 이며, Premix code 내에서는 $erg/(cm^2sK)$ 의 단위로 적용된다.

$$\dot{q}_{cond,v.} = \dot{q}_{cond.} + \dot{q}_{conv.} = -\frac{\lambda}{\delta}(T - T_\infty) - h(T - T_\infty) \quad (8)$$

$$\dot{q}_{cond,v.} = -h_{eff}(T - T_\infty) \quad (9)$$

참고로, 위의 유효 열손실계수는 열교환기가 설치된 화염면 하류의 전도 및 대류 열손실을 포함하고 있으나, 본 논문에서 비교되는 실험결과는 개방된 화염으로서, 벽면 근처의 전도 열손실은 고려되지 않는다. 따라서 이후에 언급되는 유효 열손실계수는 순수하게 대류 열전달에 의해 발생하는 열손실을 반영한다.

복사 열손실 효과를 반영하기 위하여 Optically thin model⁽¹⁹⁾을 이용하였으며, 열손실에 주로 기여하는 것으로 알려진 CO₂, H₂O, CO, CH₄의 4가지

화학종을 고려하였다. 단위 체적당 복사 열손실은 다음 식에 의해 계산되었다.

$$\dot{q}_{rad} = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (10)$$

$$K_p = P_{CO_2} K_{CO_2} + P_{H_2O} K_{H_2O} + P_{CO} K_{CO} + P_{CH_4} K_{CH_4} \quad (11)$$

여기서 σ 는 스테판-볼츠만(Stefan-Boltzmann) 상수, T 와 T_∞ 는 각각 국부 온도와 주위 온도를 나타내며, K_p 는 혼합가스의 플랭크 평균 흡수계수를 나타낸다. 또한 P_k 와 K_k 는 화학종 k 의 분압과 각 가스의 흡수계수를 나타내며, 흡수계수는 다음의 근사식으로 계산하였다.

$$K_k = \sum_{j=0}^4 A_{kj} T^j \quad (k = CO_2, CO, H_2O, CH_4) \quad (12)$$

여기서 A_{kj} 는 온도에 따른 각 화학종의 다항식계수로써 Ju 등⁽²⁰⁾에 의해 사용된 값을 적용하였다.

2.3.2 100 K/cm의 온도구배를 이용한 열손실 모델

서론에서 언급되었듯이 100 K/cm의 일정한 온도구배를 이용한 Konnov 등⁽⁶⁾의 열손실 모델은 실험결과⁽⁷⁾에서 얻어진 온도를 수치계산에 이용하는 방법이다. 먼저, 단열조건에서의 화염구조에 대한 계산이 수행된다. 화염면 이전의 온도분포는 단열조건 결과와 동일하며, 화염면 이후의 온도분포는 식 (13)과 같이 100 K/cm의 가정을 통해 재계산이 이루어진다. 이때 화염면에 대한 명확한 기준이 논문에 제시되지 않았기 때문에, 본 연구에서는 CH 농도가 최대인 지점($x'=0$)을 화염면으

로 가정하였다.

$$T_{heat_loss}(x') = T_{adia.}(x') - 100x' \quad (13)$$

수정된 온도분포는 Premix coded의 “Burner-stabilized flame⁽¹³⁾” 옵션을 이용하여 계산되며, Fig. 1은 $\phi = 1.0$ 의 조건에서 위 모델을 이용한 온도결과를 나타낸 것이다. 그림에서 x 축은 버너 표면으로부터의 높이를 의미하며, 편의를 위해 0.2 cm까지는 확대 도시되었다. 실선은 단열조건에서의 온도를 의미하며, 점선은 열손실이 고려된 온도를 나타낸다. 그림에서 $x=2.5$ cm일 때 열손실이 고려된 온도는 단열조건에서의 온도에 비해 약 250 K 정도 감소되었음을 확인할 수 있다.

3. 결과 및 검토

3.1 화염면 하류의 열손실 모델 검토

개발된 다공 평면버너에서 CH₄/air 예혼합화염의 하류 열손실에 따른 NO 생성특성을 예측하기 위하여, 2가지의 열손실 모델과 Konnov 등⁽⁶⁾의 온도, NO 실험결과를 Fig. 2에 비교-도시하였다. 화염면 하류에서 인위적인 열교환이 없는 경우에도 복사 열손실 및 연소가스 유동에 의한 대류 열손실이 발생하며, 이 조건에서의 NO_x 거동을 규명하기 위해서는 정확한 열손실의 고려가 매우 중요하다. 실험의 NO 농도는 Dry basis로 표기되었으며, 세로의 Error bar는 농도의 측정 오차범위를 나타내며, 가로 Error bar는 Probe 직경크기에 따른 공간에 대한 오차범위를 의미한다.

Fig. 2는 당량비 0.8의 조건에서 하류방향 길이에 따른 온도 및 NO 농도를 도시한 결과이다. Fig. 2(a)에서 온도에 대한 검증을 위하여 동일 조건에서 수행된 Van Maaren 등⁽⁷⁾의 온도 측정값을 추가적으로 도시하였다. 단열조건 경우에는 화염면 이후의 온도는 약 2000 K로 일정하게 유지하나, 복사 열손실과 대류 열손실이 추가적으로 고려되면 생성물의 온도는 하류로 갈수록 점차 감소한다. 실험결과와 비교할 때 복사 열손실만이 고려된 경우는 실험결과보다 다소 높게 예측하나, 대류 열손실이 추가적으로 고려된 유효 열손실계수(h_{eff}) 1.0의 조건에서는 실험결과를 매우 잘 예측하고 있다. 또한 100 K/cm의 온도구배를 이용한 열손실 모델은 실험결과보다 다소 낮게 예측하고 있으며, $h_{eff} = 2.0$ 의 결과와 유사한 온도분포를 보여주고 있다. 각 조건의 열손실 모델에서의 온도구배를

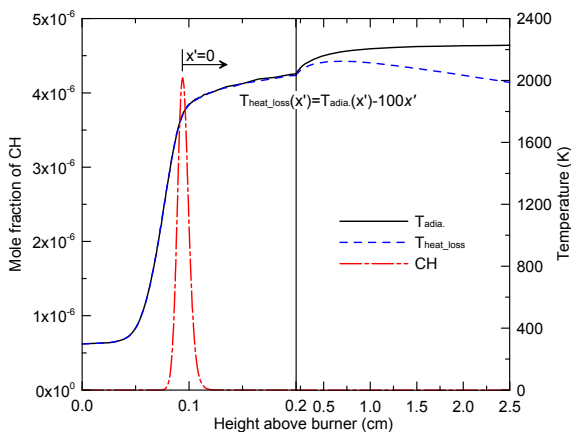


Fig. 1 The profiles of temperature assuming a gradient of 100 K/cm in a CH₄/air premixed flame of $\phi = 1.0$

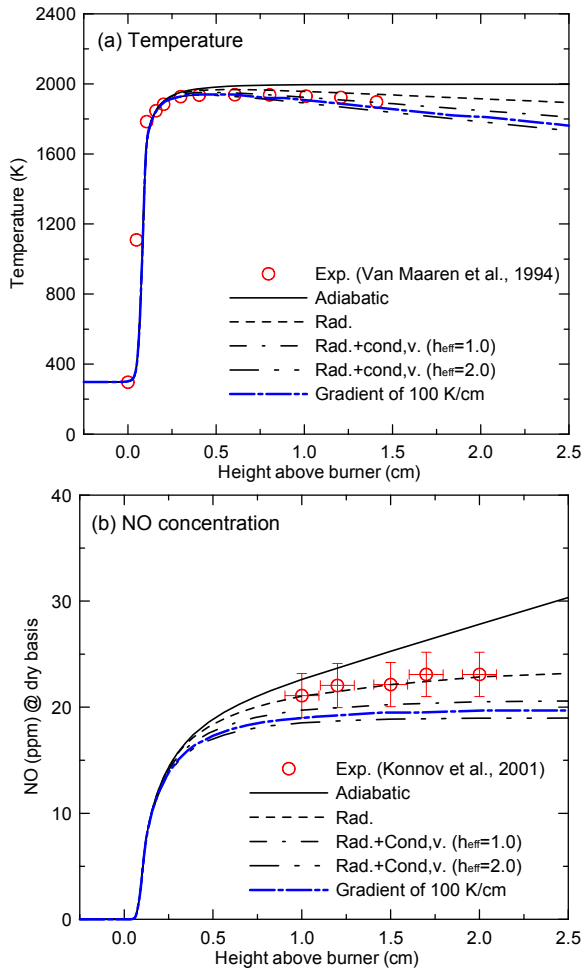


Fig. 2 Axial profiles of temperature and NO concentration for different heat loss scenarios in a CH₄/air premixed flame of $\phi = 0.8$

살펴보면, 단열조건에 비해 복사 열손실만 고려된 경우는 40 K/cm로 온도가 감소되며, $h_{eff} = 1.0$ 과 2.0에 대해 각각 75, 105 K/cm임을 알 수 있다. 결과적으로 당량비 0.8의 조건에서 하류의 온도를 적절히 예측하기 위해서는 40 K/cm ~ 75 K/cm의 온도 감소가 고려되어야 함을 확인할 수 있다.

Fig. 2(b)의 NO 농도를 살펴보면, 단열조건인 경우는 하류로 갈수록 계속적으로 증가되는 반면에, 열손실이 고려되었을 때 하류방향으로의 NO 증가는 점차 둔화됨을 확인할 수 있다. 실험결과와의 비교를 통해 복사 열전달만이 고려된 경우가 실험결과를 매우 잘 예측하며, 유효 열손실계수 (h_{eff}) 1.0의 조건 역시 측정오차 범위 내에서 실험결과를 비교적 잘 예측하고 있음을 볼 수 있다. 반면에 100 K/cm의 열손실 모델과 $h_{eff} = 2.0$ 의 결과는 온도의 예측경향과 유사하게 실험결과를 약 20% 정도 낮게 예측함을 확인할 수 있다.

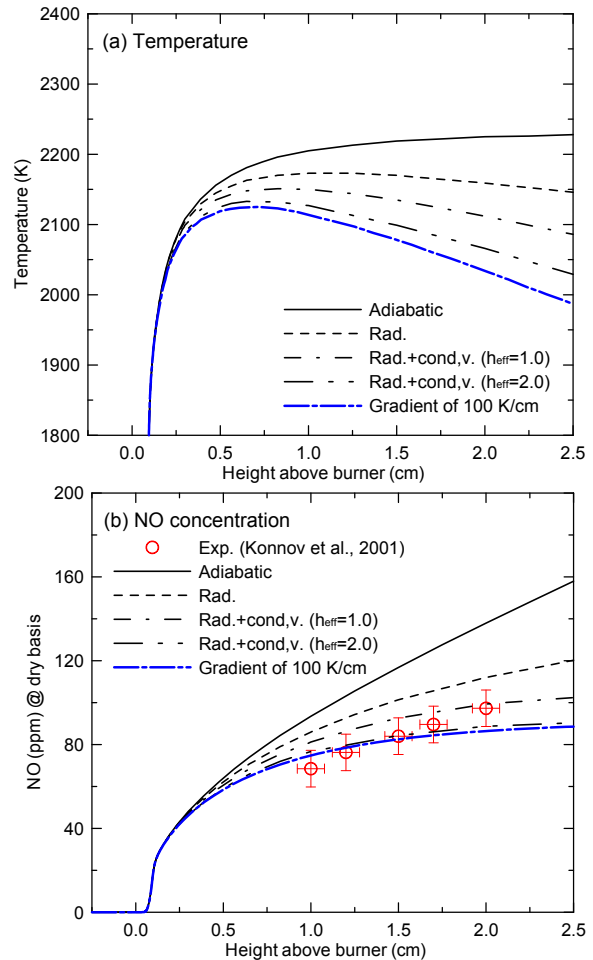


Fig. 3 Axial profiles of temperature and NO concentration for different heat loss scenarios in a CH₄/air premixed flame of $\phi = 1.0$

Fig. 3은 당량비 1.0의 조건에서 하류방향 길이에 따른 온도 및 NO를 도시한 결과이다. 열손실에 따른 온도변화를 보다 명확히 구분하기 위하여 Fig. 3(a)의 y축은 1800 K에서 2400 K으로 확대-도시하였다. 본 조건에 대한 온도 데이터의 부재로 인하여 실험결과와의 비교는 수행되지 않았다. 화염대(0.5cm) 하류에서의 생성물 온도는 단열조건인 경우에는 화염대 보다 다소 증가하나, 복사 및 대류 열손실이 고려되면 하류방향으로 점차 감소되고 있음을 볼 수 있다. 화염대 하류에서의 각 조건의 온도구배를 살펴보면, 복사만 고려된 경우는 30 K/cm이며, $h_{eff} = 1.0, 2.0$ 에 대해 각각 60, 80 K/cm이다. 또한 100 K/cm의 결과는 가장 낮은 온도분포를 보여주고 있다. 추가적으로 본 $\phi = 1.0$ 의 조건에서 각 열손실 모드에 따른 온도 감소율은 $\phi = 0.8$ 의 결과에 비해 다소 낮아짐을 확인할 수 있다. 이와 같은 온도 감소율의 변화는 당량비에

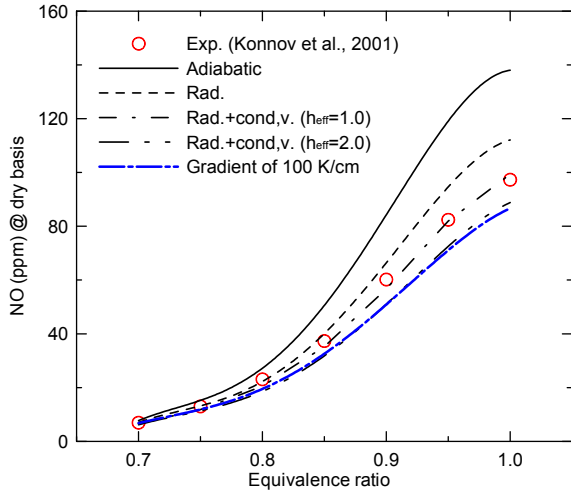


Fig. 4 NO concentrations at 2.0 cm above burner as a function of equivalence ratio for different heat loss scenarios

따른 화염온도 및 생성물의 유속 증가로 인한 체류시간의 변화에 의해 발생하게 된다.⁽¹¹⁾ 즉 위 결과로부터 일정한 온도구배를 이용한 열손실 모델은 다양한 당량비의 조건에서 절대온도 및 체류시간의 변화를 적절히 반영하지 못하고 있음을 확인할 수 있다.

Fig. 3(b)의 NO 농도를 살펴보면, 당량비 0.8의 결과와는 다르게 화염 하류영역에서도 NO 농도들은 비교적 크게 증가함을 알 수 있다. 또 실험 및 계산 결과를 비교해 보면, 열손실이 고려되더라도 실험의 NO 증가율을 정확히 예측하지는 못하고 있다. 그러나 NO 절대량 및 증가율을 종합적으로 고려하면 $h_{eff} = 1.0$ 인 열손실 모델이 가장 적절히 실험결과를 예측하고 있다고 판단된다. 반면에 100 K/cm의 열손실이 고려된 경우는, 온도의 예측 경향과 유사하게 가장 낮은 NO 분포를 보여주며, 실험결과와 가장 큰 차이를 나타내고 있다.

Fig. 4는 다공 평면버너의 층류 예혼합화염에서 당량비 변화($0.7 \leq \phi \leq 1.0$)에 따른 화염면 하류 $x=2.0$ cm에서 계측된 NO 실험결과와, 여러 열손실 모델에서 예측한 NO 농도를 비교-도시한 것이다. 그림에서 알 수 있듯이 단일 혹은 복사열손실만 고려한 경우는 NO 농도를 과대하게 예측하며, 복사 열손실과 유효 열전달 계수(h_{eff})가 1.0인 경우가 당량비에 따른 NO 농도분포를 가장 정확히 예측하고 있음을 볼 수 있다. 반면에 100 K/cm를 이용한 열손실 모델은 전 당량비 조건에 대해 낮은 NO 예측결과를 보여주고 있다. 또한 앞에서 언급한 바와 같이 이 모델은 당량비에 따른 단위 길이 당 체류시간이 고려되지 않았기 때문에

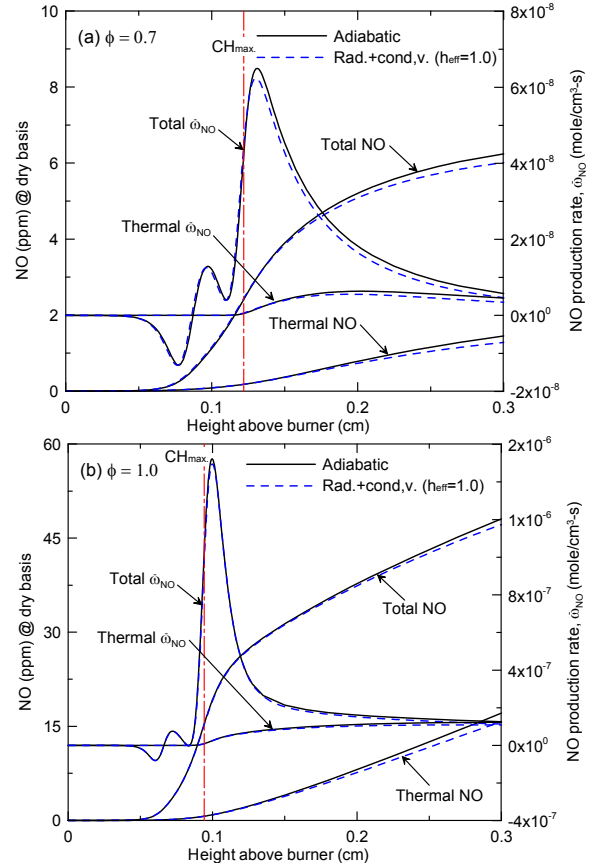


Fig. 5 NO concentration and molar production rate via different NO formation routine near the flame region: (a) $\phi = 0.7$ and (b) $\phi = 1.0$.

하류방향으로 갈수록 더욱 큰 오차를 발생할 수 있음을 짐작할 수 있다.

위 Fig. 4의 결과와 Figs. 2와 3의 결과를 종합해 보면 층류 예혼합화염에 대한 해석은 단일 혹은 복사만을 고려한 경우보다 복사 열손실과 유효 열전달 계수가 $1.0 W/m^2K$ 인 열손실 모델을 적용한 경우가 실제 층류 화염의 하류영역에서의 화염 구조 및 NO 생성 특성을 규명하는데 가장 적합함을 알 수 있다. 이는 인위적인 열전달 기구가 없는 실제 화염에서도 복사열손실 이외에도 대류에 의한 추가적인 손실이 존재함을 고려하면 층류 예혼합화염의 하류 영역을 해석하는데 가장 합리적인 열손실 모델이라 여겨진다.

3.2 화염면 하류의 열손실에 따른 NO 생성특성
앞에서 검토한 예혼합화염의 하류영역에서 열손실 모델을 바탕으로, 화염 하류에서의 열손실이 화염대 및 화염 하류의 NO 생성특성에 미치는 영향을 확인하기 위하여 단일조건과 복사를 포함한 $h_{eff} = 1.0$ 의 유효 열손실계수가 고려된 결과에 대

한 비교-검토가 수행되었다.

Fig. 5는 화염면 근처 ($0.0 \leq x \leq 0.3$)에서 외부로의 열손실이 NO_x 생성특성에 미치는 영향을 확인하기 위하여, 단열 및 $h_{\text{eff}} = 1.0$ 의 두 조건에 대해 $\phi = 0.7$ 과 1.0의 NO 농도 및 몰 생성율을 도시한 것이다. 계산방법에서 언급되었듯이 NO 의 생성기구는 Thermal NO 와 N_2O -경유 NO 를 포함하는 Prompt NO 로 분리되었다. 추가로 화염면의 대략적인 위치를 확인하기 위하여 CH 농도가 최대인 위치를 표기하였다. 먼저 열손실이 고려되지 않는 단열조건에 대해 살펴보고자 한다. Fig. 5(a)의 $\phi = 0.7$ 의 경우에, 화염대에서 Total NO 농도 중 Thermal NO 는 매우 작은 비중을 차지하는 반면, Total NO 와 Thermal NO 의 차이에 해당되는 Prompt NO 가 대부분의 NO 생성에 기여하고 있음을 알 수 있다. 특히 당량비 0.7의 화염면 근처에서는 반응경로 및 상세반응속도 해석을 통해 주로 N_2O -경유 NO 기구에 의해 NO 가 생성됨을 확인하였다. 화염대 하류에서도 NO 농도는 서서히 증가하나 그 증가율은 점차 둔화 된다. 그리고 그 증가율은 Thermal NO 에 의해 발생되고 있음을 NO 농도 및 몰 생성율을 통해 볼 수 있다. 반면에 Fig. 5(b)의 $\phi = 1.0$ 의 경우에도, 화염면 근처에서는 주로 Prompt NO 에 의해 NO 가 생성되는 반면, 하류로 갈수록 Thermal NO 에 의한 NO 생성은 크게 증가한다. 결과적으로 화염면 이후에서 NO 의 생성은 거의 선형적으로 증가되는 결과를 보이고 있다. 특히 $x=0.3$ cm 근처에서는 Total $\dot{\omega}_{\text{NO}}$ 와 Thermal $\dot{\omega}_{\text{NO}}$ 의 값이 같아지면서, 이후의 대부분의 NO 는 Thermal NO 에 의해 발생됨을 확인할 수 있다.

복사 열손실과 대류 열손실이 동시에 고려된 $h_{\text{eff}} = 1.0$ 의 결과를 살펴보면, $\phi = 0.7$ 과 1.0의 두 조건에서 단열조건과 비교할 때 NO 발생특성 및 농도에는 큰 차이를 보이지 않는다. 미세한 차이를 굳이 언급한다면, Fig. 5(a)의 $\phi = 0.7$ 에서는 Total $\dot{\omega}_{\text{NO}}$ 의 최대점에서 알 수 있듯이 열손실에 의해 N_2O -경유 NO 기구에 의한 NO 생성이 다소 감소된다. 그리고 화염면에서 멀어질수록 Thermal NO 의 감소로 인하여 Total NO 가 미소하게 영향을 받고 있음을 확인할 수 있다. $\phi = 1.0$ 의 결과 역시 절대치의 차이를 제외하고 $\phi = 0.7$ 의 경우와 매우 유사한 NO_x 에 대한 열손실의 영향을 보여주고 있다.

화염면 하류에서 열손실에 따른 NO 생성특성 변화를 확인하기 위하여 Fig. 6은 단열 및 $h_{\text{eff}} = 1.0$ 두 조건에 대해 $0.3 \leq x \leq 5.0$ cm의 범위에서 NO 농도 및 몰 생성율을 도시한 결과이다.

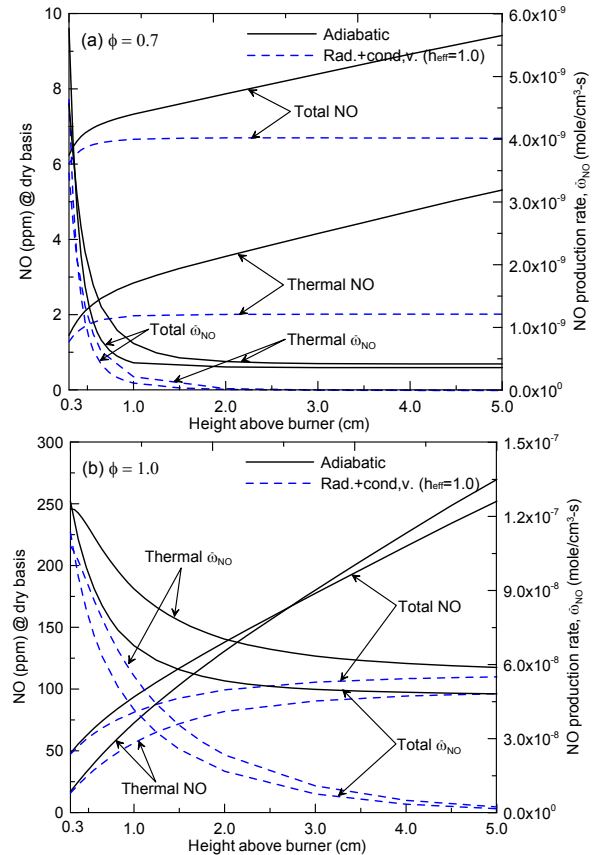


Fig. 6 NO concentration and molar production rate via different NO formation routine in the postflame region: (a) $\phi = 0.7$ and (b) $\phi = 1.0$.

먼저 단열조건에서의 결과를 살펴보면, Fig. 6(a)의 $\phi = 0.7$ 의 경우에 하류의 Total NO 의 증가는 주로 Thermal NO 에 의해 이루어짐을 NO 증가율을 통해 확인할 수 있다. 또한 $x=0.3$ cm 이후에서 Thermal $\dot{\omega}_{\text{NO}}$ 가 Total $\dot{\omega}_{\text{NO}}$ 보다 큰 값을 갖게 되며, 이는 결과적으로 Thermal NO 에 의해 생성된 NO 가 다른 NO 생성기구에 의해 소멸되고 있음을 의미한다. 반면에 열손실이 고려된 경우, Thermal NO 는 $0.4 \leq x \leq 0.5$ cm의 범위에서 거의 일정한 값을 유지하여, Total NO 는 절대량 측면에서 단열에 비해 매우 작은 값을 보여주고 있다.

Fig. 6(b)의 단열조건에 대한 $\phi = 1.0$ 의 결과는 $\phi = 0.7$ 의 경향과 큰 차이를 보이지는 않지만, 절대량 측면에서 하류에서 Thermal NO 의 역할이 크게 증가되었음을 알 수 있다. 특히 $x=2.7$ cm 근처에서 Thermal NO 가 Total NO 보다 증가되어 $\phi = 0.7$ 과 유사하게 하류에서는 Thermal NO 생성기구가 지배적이며, Prompt NO 의 소멸에 의해 최종 Total NO 증가율이 결정되고 있음을 확인할 수 있다. 반면에 열손실이 고려된 경우, 고려된 계산영역

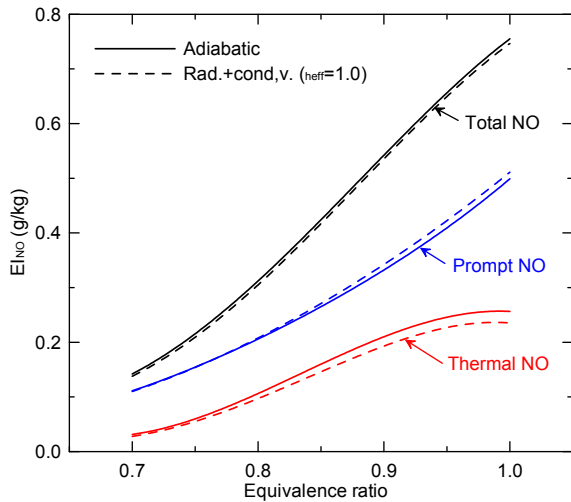


Fig. 7 Variation of EI_{NO} via the different NO formation routines with equivalence ratio for combustor length of $x=0.3$ cm.

내에서는 Thermal $\dot{\omega}_{NO}$ 가 Total $\dot{\omega}_{NO}$ 보다 큰 값을 갖지만, Thermal NO의 의한 영향이 매우 감소되어, Total NO의 증가율은 단열조건에 비해 크게 둔화되었음을 알 수 있다.

Fig. 7은 화염면 근처 ($0.0 \leq x \leq 0.3$)에서 열손실 존재 여부에 따른 EI_{NO}에 대한 NO 생성기구들의 기여도를 확인하기 위하여, 당량비에 따른 EI_{NO}를 도시한 결과이다. 먼저 단열조건을 살펴보면, Total NO에 대한 Prompt NO와 Thermal NO의 역할이 당량비에 따라 크게 변화되고 있음을 볼 수 있다. 즉 당량비가 0.7에서 1.0으로 증가됨에 따라 Thermal NO 경로가 Total NO 생성에 미치는 기여도는 20%에서 35%로 증가하는 반면, Prompt NO에 의한 기여도는 80%에서 65%로 크게 감소되었음을 알 수 있다. 그러나 Fig. 5에서 확인하였듯이 화염면 근처에서는 Thermal NO에 의한 NO 생성보다는 각 당량비에 따라 N₂O-경유 NO 및 Prompt NO에 의해 NO 생성이 주로 이루어진다. 열손실이 고려되었을 때, Total NO는 단열조건에 비해 미소한 NO 감소결과를 보이고 있다. NO 생성기구의 특성을 살펴보면, 열손실에 따른 Thermal NO의 감소를 확인할 수 있으며, 이는 당량비가 증가되어 화염온도가 높은 영역에서 보다 큰 효과가 있음을 알 수 있다. 그러나 열손실이 존재할 때 Prompt NO 경로에 의해 오히려 NO 증가가 발생되고 있으며, 당량비가 증가할수록 효과가 더욱 커지고 있음을 알 수 있다.

Fig. 8은 Fig. 7과 동일한 조건에서 화염면을 포함한 $x=5.0$ cm 하류까지의 EI_{NO}를 나타낸 것이다. 먼저 단열조건을 살펴보면, Total NO는

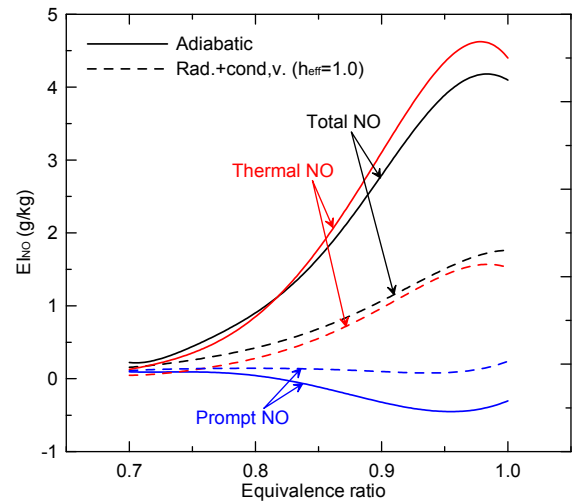


Fig. 8 Variation of EI_{NO} via the different NO formation routines with equivalence ratio for combustor length of $x=5.0$ cm.

$\phi = 0.97$ 근처에서 최고치를 보이고 있다. 이러한 결과는 화염면 하류에서의 Thermal NO의 기여도 증가에 의해 발생하는 것으로서, 본 논문에는 제시되지 않았지만, EI_{NO}의 계산 시 고려되는 연소기의 길이에 따라 최대값이 발생하는 당량비는 보다 희박한 조건에서 존재하게 된다.⁽¹²⁾ 그림에서 Total NO에 대한 NO 생성기구의 기여도를 살펴보면, $\phi = 0.8$ 을 기준으로 이하에서는 Thermal NO 및 Prompt NO 모두 생성에 기여하고 있으나, 이상에서는 Prompt NO는 소멸에 기여하고 있음을 볼 수 있다. 그러나 열손실이 고려되었을 때, 모든 당량비에 대해서 Thermal NO와 Prompt NO는 NO 생성에 기여하고 있음을 확인할 수 있다. 특히 당량비가 희박한 영역에서 0.97에 접근할수록 Thermal NO에 의한 기여도는 증가하며, 동시에 Prompt NO에 의한 기여도는 감소되고 있다. 위 결과로부터 열손실의 고려 여부에 따라 EI_{NO}의 절대치 차이 뿐만 아니라 NO 생성기구의 기여도에도 큰 변화가 있음을 확인할 수 있다.

향후 본 연구에서 고려된 열전달 방정식을 이용한 열손실 모델의 추가검증 및 활용을 위하여 보다 구체적인 온도 측정치와의 비교가 요구되며, CH₄/air 예혼합화염과 상이한 NO_x 생성특성을 갖는 다양한 연료를 대상으로 열손실이 NO_x 생성특성에 미치는 연구를 진행하고자 한다.

4. 결론

1차원 CH₄/Air 예혼합화염을 대상으로 화염면 하류의 열손실 모델에 대한 타당성을 검토하고,

열손실이 NO_x 생성특성에 미치는 영향을 규명하였다. 그 결과는 다음과 같다.

(1) 열전달 방정식을 이용한 열손실 모델의 경우, 복사 및 대류 열손실이 고려된 $h_{eff} = 1.0$ (W/m²K)의 조건이 당량비에 따른 화염면 하류의 온도 및 NO 분포를 매우 잘 예측함을 확인하였다.

(2) 100 K/cm의 온도구배를 이용한 열손실 모델의 경우, 화염면 하류의 온도 및 NO 분포를 낮게 예측하고 있으며, 열손실과 관련된 하류의 체류 시간을 고려하지 않기 때문에 넓은 당량비 및 운전조건에서 큰 오차를 가져올 수 있다.

(3) 화염면 근처, $x \leq 0.3$ cm에서 열손실에 의한 NO 생성특성은 미소한 Thermal NO의 변화를 제외하고 단열조건에 비해 큰 차이를 보이지 않는다.

(4) 화염면 하류에서 열손실의 고려 여부에 따라 EI_{NO}의 절대치는 큰 차이가 발생하며, 동시에 NO 생성기구의 기여도에도 큰 변화가 있음을 알 수 있었다. 특히 $\phi > 0.8$ 에서 단열조건에 경우에 Prompt NO는 NO의 소멸에 기여하지만, 열손실이 고려된 경우에는 NO 생성에 기여함을 확인하였다.

후 기

본 연구는 에너지관리공단의 에너지-자원기술개발 사업을 통해 지원되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Kim, J. H., Lee, H. Y., Hwang, C. H. and Lee, C. E., 2008, "NO_x and CO Emission Characteristics of Premixed Oxidizer-Staging Combustor Using a Cyclone Flow," *Journal of Korean Society of Combustion*, Vol. 13, No. 2, pp. 7~13.
- (2) Ahn, J., Kim, J. J. and Kang, S. B., 2007, "Heat Transfer Characteristics of 0.5 t/h Class Non-Furnace Boiler," *Proceedings of the KSME 2007 Fall Annual Meeting*, pp. 130~135.
- (3) Strenger, M. R. and Churchill, S. W., 1988, "Formation of NO_x and Burnoff of CO During Thermal Quenching of the Products from Combustion in a Thermally Stabilized Burner," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 22, pp. 1183~1191.
- (4) Correa, S. M. and Smooke, M. D., 1990, "NO_x in a Parametrically Varied Methane Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 23, pp. 238~295.
- (5) Drake, M. C., Ratcliffe, J. W., Blint, R. J., Carter, C. D., Laurendeau, N. M., 1990, "Measurements and Modeling of Flamefront NO Formation and Super-Equilibrium Radical Concentrations in Laminar High-Pressure Premixed Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 23, pp. 387~395.
- (6) Konnov, A. A., Dyakov, I. V. and Ruyck, J. De, 2001, "Probe Sampling Measurements and Modeling of Nitric Oxide Formation in Methane-Air Flames," *Combustion Science and Technology*, Vol. 169, pp. 127~153.
- (7) Maaren, A. Van and de Goey, L. P. H., 1994, "Laser Doppler Thermometry in Flat Flames," *Combustion Science and Technology*, Vol. 99, pp. 105~118.
- (8) Konnov, A. A., Dyakov, I. V. and Ruyck, J. De, 2002, "Nitric Oxide Formation in Premixed Flames of H₂+CO+CO₂ and Air," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 29, pp. 2171~2177.
- (9) Coppens, F. H. V., Ruyck, J. De and Konnov, A. A., 2007, "The Effects of Composition on Burning Velocity and Nitric Oxide Formation in Laminar Premixed Flames," *Combustion and Flame*, Vol. 149, pp. 409~417.
- (10) Daykov, I. V., Ruyck, J. De and Konnov, A. A., 2007, "Probe Sampling Measurements and Modeling of Nitric Oxide Formation in Ethane + Air Flames," *Fuel*, Vol. 86, pp. 98~105.
- (11) Hwang, C. H., Hyun, S. H., Tak, Y. J. and Lee, C. E., 2007, "The Effects of Residence Time and Heat Loss on NO_x Formation Characteristics in the Downstream Region of CH₄/Air Premixed Flame," *Transactions of the KSME B*, Vol. 31, No. 1, pp. 99~198.
- (12) Hwang, C. H., Hyun, S. H. and Lee, C. E., 2008, "Effects of Heat Loss on NO_x Emission in the Postflame Region of Premixed CH₄-Air Combustion," *Energy and Fuels*, Vol. 22, pp. 996~1003.
- (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) 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," *SAND89-8009B*.
- (15) Kee, R. J., Dixon-Lewis, Warnatz, G. 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*.
- (16) GRI Mech. Ver. 3.0, web Address: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- (17) Nishioka, M., Nakagawa, S., Ishikawa, Y. and Takeno, T., 1994, "NO Emission Characteristics of Methane-Air Double Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 98, pp. 127~138.
- (18) Takeno, T. and Nishioka, M., 1993, "Species Conservation and Emission Indices for Flames Described by Similarity Solutions," *Combustion and Flame*, Vol. 92, pp. 465~448.
- (19) Tien, C. L., 1968, "Thermal Radiation Properties of Gases," *Advances in Heat Transfer*, Vol. 5, pp. 253~32.
- (20) Ju, Y., Guo, H., Maruta, K. and Liu, F., 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.