토모그래피 이용 가상값 및 회전값 적용 비정형 화염 내 OH 라디칼 농도 분포 재구성

김대해*, †

1. 서 론

화염 내 OH 라디칼은 모든 연료의 연소 반응에서 중요한 화학종으로 농도와 그 분포는 화염의 구조, 열부하, 당량비, 연소효율과 같은 연소 특성을 확인할 수 있는 요소이다.[1~3] OH 라디칼은 연소 메커니즘에서 다양한 방식으로 생성되며, 휘발성이 강하지만 정상상태의 화염에서는 농도가 유지됨에 따라 샘플링 방식의 측정 방법으로는 정량적인 측정이 불가능하다. 이에 따라 In-situ 측정이 가능한 TDLAS(Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy) 측정법을 통해 연소 환경의 OH 라디칼의 농도를 계측하고 토모그래피 기법을 적용하여 재구성하였다.[4,5] 본 연구에서는 비정형 형상의 Metal fiber 버너에서 발생하는 OH 농도 값을 측정하였고 가시적 정확성을 파악하고자 하였다. 이는 향후 화염 형상 다변성을 가지는 난류 화염장에서의 측정 가능성 여부 확인이 가능하며 고속 유동, 대형 유동 면적 조건에서 적용이 용이할 것으로 판단된다. 실제 측정값에 근거한 가상 값 적용을 통해 농도 분포를 비교 분석하였다. 또한 레이저 투과 각도에 따라 OH 농도를 측정하였으며, 토모그래피 기법 내 반복 계산법에 따른 재구성 값을 분석하고 반복 계산법 기준 각도별 농도 값 통합 시 농도 분포 재구성에 미치는 영향을 파악하였다. 단 OH 라디칼 측정 정확도를 레이저 측정 방법 외 다른 분석기를 활용하여 비교 분석하기 어려운 상황으로 ICCD(Intensified Charged Coupled Device) 카메라를 이용, 정규화한 OH 라디칼 강도 값과 비교하는 연구를 수행하였다.

2. 본 론

2.1. TDLAS

TDLAS는 그림 1과 같이 가스상 물질이 특정 파장의 에너지를 흡수하는 원리에서 응용이 된 측정 방식으로, Beer-Lambert 법칙에 기반한다.

* 한국생산기술연구원 지속가능기술연구소 지역산업혁신부문(배출저감) / 선임연구원 / kimdh@kitech.re.kr / 교신저자

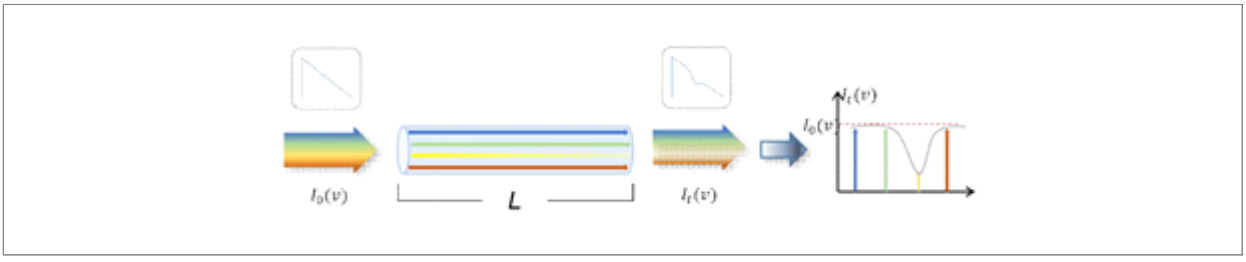


그림 1. TDLAS 개략도

레이저 광이 계측하고자 하는 가스를 투과하여 가스종의 흡수 전이와 공명하게 되면, 레이저 광 파장의 일부분에 흡수가 일어나고, 이를 적분하여 가스의 농도, 온도를 계산할 수 있다. 파장 가변된 광이 계측하고자 하는 가스를 투과한 후 빛의 강도는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\tau_v \equiv \left(\frac{I_t}{I_0}\right) = \exp\left(-k_v \bullet L\right)$$

$$k_v = PX_iS_{i,j}(T)\phi(v - v_0)$$

2.2. 토모그래피

토모그래피는 파원으로부터 발생되는 전자기파가 매질을 투과하여 수신되는 신호를 이용하여 대상의 내부를 재구성하는 방법이다. 본 연구에서는 컴퓨터 단층 촬영 기술로 불리는 토모그래피 기법과 TDLAS 측정법의 결합을 통해 2차원 농도장의 재구성 해석을 진행하였다. 다양한 토모그래피 기법 중 ART, MART, SMART 반복 계산법을 이용하여 OH 라디칼의 농도장을 재구성하였다. ART 알고리즘은 토모그래피 기법 중 고전적으로 가장 많이 사용되는 기법이며, 초기값과 참조 값의 교차하는 단면에서 배열 간 조합을 연립방정식의 형태로 풀어나가는 방법으로 다음과 같은 식을 가진다.

$$\overline{\Phi_i} = \sum_{j=1}^{N} w_{i,j} f_j (i = 1, 2, \ldots, M)$$

MART 알고리즘 역시 ART 알고리즘과 마찬가지로 반복 재구성 방법 중 하나로 ART 기법은 수렴 과정에서 덧셈을 중심으로 구성되지만, MART 기법은 곱셈을 중심으로 계산을 수행하는 재구성 방법이다. 목표 값과 계산된 값의 비를 이용한 배수적 계산으로, ART 기법보다 빠른 수렴 계산 결과를 도출할 수 있다. MART 기법은 다음과 같은 식으로 계산을 수행한다.

$$\overline{f_j^{new}} = \overline{f_j^{old}} \times \left(\frac{\Phi_i}{\sum_{j=1}^{N} \overline{\Phi_i}}\right)^{(\lambda w_{ij})}$$

SMART 알고리즘은 동시 반복 재구성 방법으로 MART 기법과 같이 곱셈을 기반으로 계산을 수행하지만, 가로 축과 세로 축을 동시에 계산하는 식으로, 많은 양의 데이터를 처리할 때 유리하다는 장점이 있다.

$$\overline{x_j^{new}} = \overline{x_j^{old}} \times \exp\left(S_j^{-1} \sum_{i=1}^{I} P_{i,j} \log \frac{y_j}{(Px^k)_i} \right)$$

2.3. 실험 장치 및 방법

Metal fiber 버너는 그림 2(좌)의 화염 형상과 같은 모양으로 제작되었다. 메탈 파이버 버너는 연료와 산화제가 연소 반응이 일어나기 전 미리 혼합되어 화염을 형성하는 예혼합 및 층류 화염의 대표적 버너로 화염 온도, 연소 속도, 길이, 배출가스 등이 균일한 특성을 가진다. 광학계의 구성은 그림 2(우)와 같이 설치하였다. H_2O의 흡수 면적을 제거하면서, OH 라디칼 측정을 위한 두 종류의 레이저를 같은 경로에 투과하는 MUX(Multiplexer), De-MUX(Demultiplexer) 포함하는 WDM(Wavelength Division Multiplexing) 시스템을 이용하였다. MUX는 다수 레이저 사용 시 선택한 단일 레이저 신호만 출력할 수 있는 장치이며, De-MUX는 반대로 레이저 두 대의 신호를 나누어 각 detector로 출력 가능한 장치이다. MUX 시스템을 통하여 경로가 총 16개의 레이저로 분기되고, 화염을 투과한 후 다시 De-MUX를 통해 두 개 파장의 레이저를 분리 후 photo detector로 수신되어 분석을 진행하였다. 즉 발신부 총 16개의 레이저가 x축, y축 기준 8 by 8 형태로 투과되며, 수신부 역시 동일하게 설정하였다. 또한 발신부와 수신부가 회전 가능하도록 설계 반영하였으며 각도 변화에 따라 OH 농도 값을 측정하였다. 회전 각도는 0°, 30°, 45°회전 가능하며, 1.5㎛ 파장 레이저의 파워 한계로 인해 x축 기준 8 path, y축 기준 8 path 총 16개의 path 및 64개의 cell을 형성하도록 하였다. 8 by 8 기준 각도별 OH 농도 분포를 재구성하였고 또한 실제 측정값을 바탕으로 가상 값을 형성, 이를 포함하여 반복 계산을 통해 15 by 15 기준으로 재구성하였다. 가상 값의 경우 그림 2와 같이 1 path와 2 path의 각 cell별 흡수 계수를 평균화하여 가상의 1* path를 설정하였다. 반복적으로 2* path부터 14* path까지 설정하여 기존 8 by 8 형태의 실제 측정값과 가상 값 추가를 통해 15 by 15를 형성하여 OH 농도 분포를 재구성하였다. 이는 추가 레이저 및 광학계를 설치하지 않고 실제 측정값에 근거하여 많은 정보를 재구성 과정에 적용할 수 있는 효과를 얻을 수 있다.

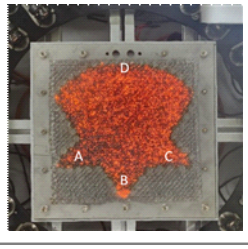
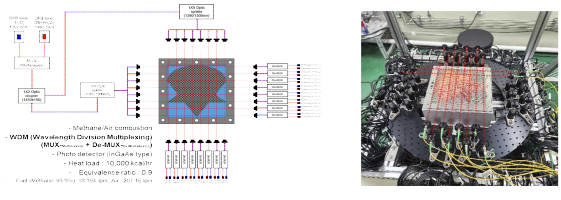
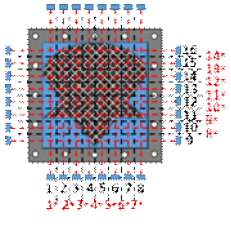
a. Metal fiber burner	b. 광학 실험 장치	c. 가상값 재구성(15 path)
		

그림 2. 토모그래피 실험 장치 및 방법

2.5. 분석 결과

ART, MART, SMART를 적용하여 0°, 30°, 45°3가지 조건으로 회전되어 측정된 OH 농도 값들을 통합하여 재구성 및 mapping을 진행한 결과이며, 8 by 8, 15 by 15로 정리하였다. 각도별 합산 및 평균 결과, OH 라디칼의 재구성 분포도가 가시적으로 버너의 비정형 형상과 매우 유사한 결과를 확인하였다. 또한 재구성 통합 결과 중 SMART 반복 계산법이 가장 내부 농도가 균일하게 재구성되었으며, 이는 15 by 15 분포 결과에서 확인 가능하다. 통합 재구성 결과 분석을 통해 토모그래피 재구성 과정에서는 측정 대상 기준 path 및 cell 증대를 통한 분해능 확보, 다양한 각도에서의 정도 습득이 매우 중요한 분석 인자로 판단된다. 본 연구를 통해 측정한 OH 라디칼 농도 측정 방식 외 정량적 측정 방법 부재로 정확도를 수치적으로 판단하기 어려운 상황이다. 또한 ICCD 기반 OH 라디칼은 화학적·광학적 여기로 생성된 전자적 여기 상태(excited state)로 라디칼 방출을 이미징하여 반응 영역의 공간 분포를 정성적으로 보여준다. 반면 TDLAS는 기저 상태(ground state)의 OH 분자에 의한 흡수를 직접 측정하여 온도 및 광경로 길이 정보를 적용하면 정량적 농도를 제공한다. 두 기법은 서로 다른 분자 상태와 신호 메커니즘을 다루기 때문에 측정 결과를 동일 기준으로 직접 비교하는 것은 본질적으로 어렵다. 따라서 토모그래피 기법 적용 OH 농도 값과 ICCD의 정성적 강도 값을 수치화하여 비교 분석을 진행하였다. ICCD의 intensity 값을 토모그래피 농도 재구성 분포와 동일하게 격자화 하였으며, 정규화를 통한 비교를 위하여 격자 내 cell 결과 값을 cell 최고 값으로 나누어 1 이하의 값이 나오도록 설정하였다. 동일 cell 위치에서의 ICCD 강도 값을 x, 토모그래피 농도 값을 y로 설정하여 Root mean square 값을 도출하였다. SMART 반복 계산법이 비교적 ICDD 강도 값과 유사한 가장 높은 R^2 값을 가지는 것을 확인하였다. 이는 균일 화염 내 OH 라디칼 농도는 균일할 것으로 판단되며, 전체적인 실험 결과 값 중 ART, MART, SMART 순으로 비정형 내 재구성 농도 값이 균일해지는 변화에 따른 결과로 확인된다.

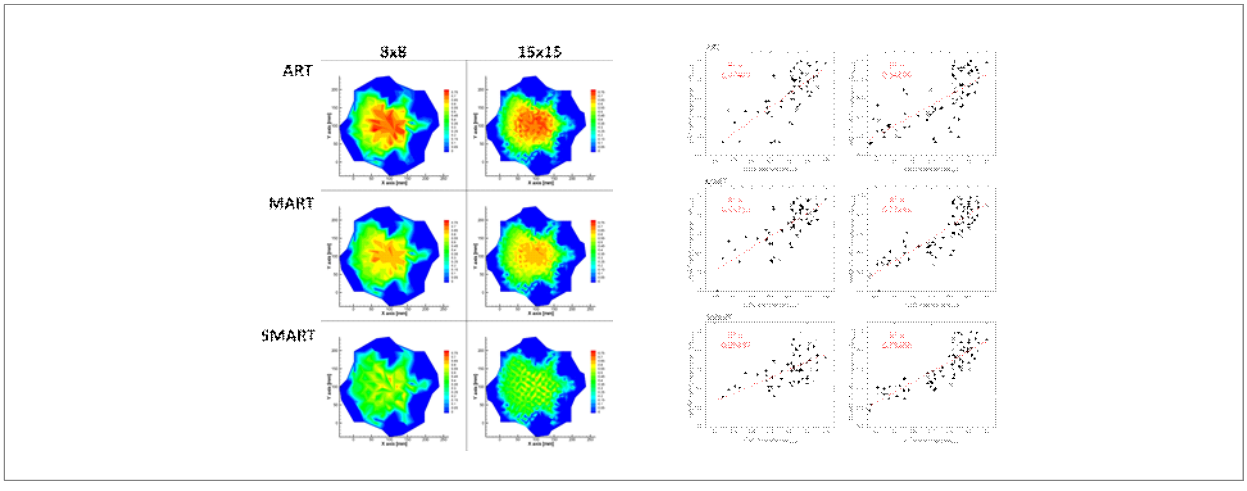


그림 3. 각도별 통합 재구성 결과(좌) 및 ICCD, 토모그래피 Root mean square 도출 값(우)

3. 결 론

본 연구에서는 비정형의 metal fiber 버너를 통해 연소되며, 발생되는 OH 라디칼 농도를 TDLAS 측정 방법 및 토모그래피 기법을 통해 재구성하였다. 또한 ICCD 카메라로 측정 가능한 OH 라디칼 정성적 강도 결과 값과 비교하였다. 결론적으로 비정형 형성 화염에서 TDLAS & 토모그래피 기법 기반 OH 농도 재구성을 실험적으로 검증한 첫 사례 중 하나로 예상된다.

참고문헌

[1] Yamamoto, K., Ozeki, M., Hayashi, N., Yamashita, H., 2015, "Buring velocity and OH concentration in premixed combustion", Proceedings of the Combustion Insitute. 32, 1227-1235.

[2] Khalil, A., Gupta, A., 2014, "Hydroxyl radical distribution in distributed reaction combustion condition", Fuel. 122, 28-35.

[3] He, L., Guo, Q., Gong, Y., Wang, F., Yu, G., 2019, "Investigation of OH* chemiluminescence and heat release in laminar methane-oxygen co-flow diffusion flames", Combustion and Flame. 201, 12-22.

[4] Nguyen, Q. V., Edgar, B. L., Dibble, R. W., Gulati, A., 1995, "Experimental and numerical comparison of extractive and in situ laser measurements of non-equilibrium carbon monoxide in lean-premixed natural gas combustion", Combustion and Flame. 100, 395-406.

[5] So, S., Park, J., Yoo, M., Hwang, J., Kim, D., Lee, C., 2022, "Simultaneous measurement of OH radical, H2O concentration, and temperature in a premixed CH4/air flame using TDLAS with an improved analysis method", Optics Express. 30, 32031-32050.