2712 大韓機械學會論文集 第18卷 第10號, pp. 2712~2723, 1994

〈論 文〉

제트 확산화염의 연소특성과 매연생성에 관한 연구

이교우* · 백승욱**

(1994년 3월 7일 접수)

Combustion Characteristics and Soot Formation in a Jet Diffusion Flame

Gyo-Woo Lee and Seung-Wook Baek

Key Words: Numerical Simulation(수치 시뮬레이션), Jet Diffusion Flame(제트 확산화염) Soot Formation(매연생성), Radiatin(복사), Discrete Ordinate Method(구분 종좌법)

Abstract

Numerical simulation of an axisymmetric ethylene-air jet diffusion flame has been carried out in order to investigate flame dynamics and soot formation. The model solves the time-dependent Navier-Stokes equations and includes models for soot formation, chemical reaction, molecular diffusion, thermal conduction, and radiation. Numerically FCT(Flux Corrected Transport) and DOM(Discrete Ordinate Method) methos are used for convection and radiation trasport respectively. Simulation was conducted for a 5 cm/sec fuel jet flowing into a coflowing air stream. The maximum flame temperature was found to be approximately 2100 K, and was located at an axial position of approximately 5 cm from the base of the flame. The maximum soot volume fraction was about 7×10^{-7}, and was located within the high temperature region where the fuel mole fraction ranges from 0.01 to 0.1. The buoyancy-driven low-frequency(12~13 Hz) structures convected along the outer region of the flame were captured. In case without radiation trasport, the maximum temperature was higher by 150 K than in case with radiation. Also the maximum soot volume fraction reached about 8×10^{-6}. As the hydrocarbon fuel forms many soot particles, the radiation transport becomes to play a more important role.

기호설명

a : 흡수계수(1/cm)
c_v : 비열(erg/g-K)
D_{ik} : 이중확산계수 삭제(cm²/s)
e : 체적당 내부에너지(erg/cm³)
f_v : 매연입자의 체적분율
G : 중력가속도
h : 볼당 엔탈피(erg/molecule)
ΔH_c : 연소열(heat of combustion)
I : 단위텐서(unit tensor)
I : 복사강도
i_m : 구분종좌 복사강도
I_b : 흑체 복사강도
k_c : 열전도도(erg/s-K-cm)
k : Boltzmann 상수
n : 수밀도(cm⁻³)
n_d : 매연입자의 수밀도
N_o : Avogadros 수
P : 압력

*한국과학기술연구원 기전연구부
**정회원, 한국과학기술원 항공우주공학과

P_{o_2} : 산소분자의 분압
Q : 에너지방출률(erg/cm^3·s^{-1})
q_c : 열전도에 의한 열유속(erg/cm^2-s)
q_r : 열복사에 의한 열유속(erg/cm^2-s)
r : 반경방향 좌표
R : 일반 기체상수
R_{ox} : 매연입자의 산화율
s : 산란계수
S : 광경로(optical path)
t : 시간(sec)
T : 온도(K)
$\vec{v}$: 속도(cm/s)
$\vec{v}_k$: 화학종 k의 확산속도
$\vec{v}_t$: 화학종의 열전달속도
w_m : m방향에 대한 구적 가중함수
x : 공간좌표(cm)
X : 몰분율
Y : 질량분율

그리스문자

α : 복사강도와 유동항
β : 소멸계수
Ω : 복사방향
ω : 생성률
μ,ξ,η : 방향 코사인
ζ : 보간계수
ρ : 밀도(g/cm^3)
ρ_{soot} : 매연입자의 밀도
τ : 점성응력텐서/시상수
$\kappa_\lambda(S)$: 불투명성
$\Phi(\Omega' \rightarrow \Omega)$: 산란 위상함수
ψ : 방위각
λ : 파장
ε_λ : 방사율
ε_w : 경계에서의 방사율
γ : 비열비
ν : 동점성계수

하첨자

i, j, k : 개개의 화학종

I. 서 론

매연(soot particles)이란 미연의 연료가 열을 받아서 열분해될 때 생성되는 고체입자로서 연소기관에서 주로 배출되는데, 기체 또는 액체연료의 연소에 의한 매연생성 문제는 실질적인 환경오염 측면에서 중요할 뿐만 아니라 연소공학의 측면에서도 매우 흥미로운 문제이다. 이는 공업발달과 아울러 사회적인 그리고 환경보존의 측면에서 가스연료의 사용이 증가하고 있는 가운데 가스연료의 연소 생성물 중에서 혼경오염의 주된 요인을 차지하고 있는 매연의 생성과 그 배출은 큰 문제점으로 지적되고 있기 때문이다. 매연은 이러한 환경오염 뿐만아니라, 연소에 있어서의 효율, 연소기기의 내구성 및 유지, 보수 문제와도 깊은 관련이 있다. 매연입자는 연료에 포함되어 있는 탄소로부터 생성된다. 1700 K 이하의 낮은 온도에서는 방향족이나 고불포화 지방족 탄화수소에서 발생하고, 그 이상의 온도에서는 일반적으로 사용되는 모든 탄화수소계 연료들이 매연을 발생시킨다. 그러나, 매연입자의 생성은 매우 많은 인자가 결부된 광범위한 문제여서 아직까지 생성의 기본이 되는 핵(nuclei)을 규명하지 못하고 있다. 또 실제 연소기관은 고온(1500~3000 K), 고압(50~100 atm), 연료속의 불순물, 난류, 비정상 현상 등으로 접근이 매우 어렵다. 때문에 지금까지는 대부분 간단한 예혼합화염이나 확산화염에 국한되어 연구되고 있다. 이중에 확산화염은 화염내의 매연입자의 생성, 성장, 산화과정이 뚜렷이 관찰되므로 실험적인 연구를 통하여 매연연구에 중요한 정보를 제공할 수 있다. 일반적으로 매연입자의 생성은 크게 다음의 네 단계로 나눌 수 있다. 첫째, 공범위한 열분해(pyrolysis)와 원자재배열(rearrangement)를 통해서 핵이 형성된다. 둘째, 이 핵이 화학종의 부착으로 인해서 표면성장(surface growth)을 하여 체적분율의 증가를 가져오며 응결(coagulation)을 통해서 수밀도의 감소가 발생한다. 세째로, 가스상태의 탄화수소가 고갈되어 매연의 성장률은 감소하고, 더 이상의 표면성장이나 응결이 없게 되면 매연입자들의 집합(aggregation)이 일어나게 되나. 마지막으로, 매연입자의 산화(oxidation)가 O_2, O, OH, CO_2, H_2O 등에 의해서 활발히 일어나는데 연소기관에서 매연의 배출은 생성과 산화중 어느 과정이 지배적인가에 의존한다.[1] 이와 같이, 연소 본래의 여러 복잡한 측면과 더불어 매연의 생성 및 그 분포를 예측할 수 있는 이론연구는 매우 흥미롭고 또한 시급히 수행되어야 할 과제라고 생각된다.

한편, 무한율(infinite rate)의 반응을 가정하는 Burke-Schumann의 해석적인 결과는 층류 확산화염의 기본적인 정보를 제공해 준다. 일반적인 층류 확산화염에 관한 연구 중 화염면이 시간과 공간에 대해 일정하다고 보는 정상상태 층류 확산화염에 관한 여러 계산연구들이 있지만, 실제로 대다수의 화염은 비정상 현상이며 연료와 산화제의 혼합은 매우 복잡하다. 우선 화염대 밖에서 부력에 의해 유발된, 상대적으로 주파수가 작은(10~20 Hz), 큰 와류가 나타나며, 내부속도가 빠른 경우 속도가 다른 두 유체의 접면에서 Kelvin-Helmholtz 불안정성에 의해서, 주파수가 큰(200 Hz), 작은 구조들이 나타난다.[2,3]

최근에는 비정상 축대칭 계산으로서, 수소-공기,[2,3] 그리고 프로판-공기[4~6] 확산화염이 연구되었다. 참고문헌(2,3)의 연구에서는 반응에 의한 에너지 생성과 점성이 고주파수의 Kelvin-Helmholtz 불안정성을 약화시키며, 중력(부력)에 의해 저주파수의 외부구조(flickering)가 형성됨을 보였다. 참고문헌(4)의 연구는 실험과 계산을 병행하였으며 flame sheet 근사를 사용하였다. 마찬가지로 11~15 Hz의 외부구조를 보이고 있다. 한편 참고문헌(5)에서는 수소 확산화염이 다양한 관점에서 포괄적으로 다루어졌으며 반응모델로는 유한율의 반응을 가정하는 PDR(parametric diffusive reaction) 모델이 쓰여졌다. 그리고, 참고문헌(6)에서는 역시 유한율의 반응을 가정하는 Arrhenius 형태의 반응모델을 사용하여 에틸렌 확산화염을 계산하여 복사와 점성의 영향을 보았고, 매연생성을 연구하였다. 그밖에 실험적인 매연연구로서 Kent와 Honnery[7]가 에틸렌을 연료로 하여 온도, 매연의 체적분율 등을 측정하였다.

본 연구에서는 에틸렌 등을 연료로 하는 층류 확산화염의 수치적 모사를 통하여 연소특성과 부력에 의한 외부구조 그리고 매연의 생성 및 분포를 예측하고, 이를 실험치[7]와 비교하여 검증하고 매연 연구에 기초적인 자료를 제공하고자 한다.

2. 이론전개 및 모델화

본 연구에서 다루고자 하는 물리모델은 Fig. 1에 도시하였다. 축대칭을 가정하며, 직경 1 cm의 관 내부와 외부로 각각 연료와 공기가 일정한 속도로 공급된다. 입구의 경계는 노즐 출구 바로 위에 위치하며, 따라서 계산영역은 노즐을 포함하지 않는다. 공기부는 산화제인 산소 21%와 질소 79%로 가정한다.

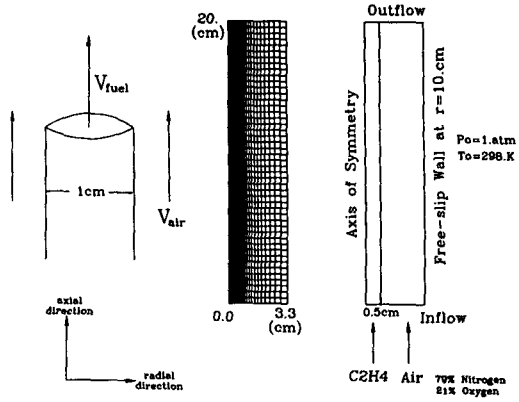

Fig. 1 Computational domain, initial and boundary conditions for a 5 cm/sec fuel jet flowing into a coflowing air stream. Note that the figure only shows the part of the domain with high resolution. The full domain covers an region of 10 cm×20 cm

2.1 지배방정식, 초기 및 경계조건

본 연구에서 쓰인 수치적 모델은 Laskey,[5] Ellzey 등[2,3]과 Kaplan 등[6]에 의해서 수소, 에틸렌 제트 확산화염을 연구하기 위해서 개발된 것에 기초하고 있다. 지배방정식을 생각해 보면, 우선 비정상 Navier-Stokes식을 풀며, 분자확산, 열전도, 점성효과, 중력, 화학반응, 매연생성 등을 고려한다. 또한 매연의 발생이 심한 연료이므로 열복사의 영향을 고려해야 한다. 지배방정식과 보조방정식을 보면 아래와 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\vec{v})=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho\vec{v}}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\vec{v}\vec{v})=-\nabla P+\rho G-\nabla\cdot\tau \tag{2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\nabla\cdot(E\vec{v})=-\nabla\cdot P\vec{v}-\nabla\cdot(q_c+q_r)-\nabla\cdot\sum n_k\vec{v}_k h_k+Q \tag{3}$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t}+\nabla\cdot(n_k\vec{v})=-\nabla\cdot(n_k\vec{v}_k)+\omega_k \tag{4}$$

$$\frac{\partial n_d}{\partial t}+\nabla\cdot(n_d\vec{v})=-\nabla\cdot(\vec{v}_t n_d)+\omega_{n_d} \tag{5}$$

$$\frac{\partial f_v}{\partial t}+\nabla\cdot(f_v\vec{v})=-\nabla\cdot(\vec{v}_t f_v)+\omega_{f_v} \tag{6}$$

$$P=nkT \tag{7}$$

$$de=\rho c_v dT \tag{8}$$

여기서, 좀의 열전달에 의한 식(5)와 (6)에 thermophoresis의 영향을 포함하며 모멘텀식은 압력구배와 중력항 그리고 점성응력항을 포함하며, 에너지식은 열전도, 열복사, 분자확산에 의한 변화, 그리고 화학반응에 의한 에너지 생성을 포함한다. 식(3)의 화학반응에 의한 생성항 Q는 식(14)로 나타나고, 식(4)의 생성항은 화학반응모델에 의해서 계산되며, 식(5)와 (6)의 생성항은 식(15)와 (16)으로 표현된다.

다음으로 경계조건에 대해서 생각해 보면, 본 계산에서 사용된 FCT 알고리즘은 경계조건을 주기 위하여 보조격자(guard cell)을 사용한다. 즉 경계 밖에 별도의 격자를 가정하여 경계에서의 조건을 설정한다. 즉, 아래와 같이 구배(slope) 혹은 값(value)으로 경계 바로 안쪽의 격자와 보조격자의 관계를 나타내 준다. 격자면(cell interface)이 경계(boundary)가 되는 형태이다.

$$\rho_G = S\rho_E + V$$

Fig. 1에서 보듯이 원통형 대칭형상의 계산영역을 가지므로 대칭축이 되는 좌측은 절연된 벽면처럼 다루어질 수 있는 대칭조건으로서, 이 경계를 지나는 반경방향의 유동은 없다. 연료와 산화제가 들어오는 입구에서는 밀도, 모멘텀밀도, 에너지밀도 그리고 화학종의 수밀도는 보조격자에 일정한 값을 주는 dirichlet조건이며, 매연의 수밀도와 체적분율 그리고 압력은 경계 바로 안쪽의 격자와 일정한 비율 가지는 neumann 조건으로 준다. 압력을 neumann으로 준 것은 작은 값이지만 일반적으로 전단층(shear layer)에 중요한 인자이기 때문이다. 하지만 그에 따른 에너지의 변화는 미약하기 때문에 에너지는 dirichlet 조건으로 줄 수 있다. 출구에서는 전형적인 neumann 형태가 되며, 다만 그로 인한 경계로부터의 압력반사를 최소화하기 위하여 입구에서 먼 것처럼 주위값으로 완화(relaxation)되어야 한다. 따라서 에너지 반사도 존재하지만 압력 차이가 작게 되므로 neumann 조건으로 다루어질 수 있다. 유동에 영향이 없도록 충분히 먼 우측은 역시 전형적인 neumann 형태이며 충분히 멀다고 보기 때문에 출구에서와 같은 압력의 완화(relaxation)은 필요치 않다.[8]

초기조건은 Fig. 1에서 언급하듯이 대기압, 298 K 상태이며, 공기는 산소와 질소로 구성된다. 계산영역 중 대칭축에서 반경 0.5 cm까지는 연료인 에틸렌이, 나머지 구간인 반경 10 cm까지는 공기가 채워진 상태이다. 초기속도는 연료와 공기 모두 5 cm/s로 주며, 따라서 초기에 얻어지는 해는 의미가 없고 주기적인 모드가 나타나는 부분부터 해가 될 수 있다.

2.2 수치적 해법

앞서 언급했듯이 수치모델은 비정상 Navier-Stokes 방정식을 풀며, 분자확산, 열복사, 열전도, 점성응력, 화학반응, 중력효과, 매연생성 등을 포함한다. 전체를 몇 개의 과정으로 나누어 살펴보면 다음과 같다.

2.2.1 대류항의 계산

대류항의 계산에는 여러가지 알고리즘이 있지만 본 연구에서는 미국의 NRL(naval research laboratory)에서 개발된 LCP-FCT(laboratory for computational physics-flux corrected transport)를 사용한다. FCT에 대한 일반적인 설명은 참고문헌(8)에 서술되었다. 대략적인 알고리즘을 살펴보면 다음과 같다. FCT 알고리즘은 4차의 위상오차(phase error)를 갖도록 만들어진 외재적인 알고리즘으로서, 예측-수정(predictor-corrector) 두 단계를 사용하여 화염이나 충격파 등 급격한 변화 근처에서 대부분의 대류항 계산방법들이 겪는 파상(ripple) 동안 확산량(diffusion flux)을 보충하여 고차 알고리즘의 특성을 개선하고, 반확산(antidiffusion) 단계에서 적절히 이 확산을 제거한다. 반확산 단계는 물리적으로 타당하도록 새로운 극치를 만들지 말아야 하며, 기존의 극치를 더욱 심화시키지 않도록 제한된다. FCT는 1차원 알고리즘이며 2,3차원으로의 적용이 가능하다.[8]

한편, FCT는 외재적인 방법이기 때문에 안정성을 위해서 CFL조건의 제약을 받는다. 작은 시간증분(timestep)은 물리적 현상이 빨리 발달하는 고속일 경우는 별 문제가 없지만, 저속의 경우 외재적인 방법의 작은 시간증분(timestep)은 매우 비효율적이 된다. 이 때문에 저속의 유동장을 풀기 위해서는 내재적인 방법이 필요하게 된다. CFL조건을 제거하기 위해 여러 방법이 연구되었으며, 그중에 Casulli와 Greenspan은 전체 지배방정식을 모두 내재적으로 바꾸지 않아도 됨을 알아냈고, 이에 따라 Patnaik 등은 압력항을 내재적으로 다루어, 단지 유체속도에만 제한을 받고 그 대신 타원형

(elliptic)의 식을 푸는 BIC(barely implicit correction) 알고리즘을 개발하였다.[9] 본 연구에는 elliptic solver로서 Devore[10]가 개발한 multigrid solver를 사용하였다.

2.2.2 확산항 계산

확산과정은 2차 미분항을 말함인데, 분자의 확산속도가 농도의 구배로 주어지는 분자확산, 열유속이 온도의 구배로 주어지는 열전도, 그리고 점성응력으로 나누어 생각한다. 이와같은 세 확산항(duffusion term)은 모두 외재적인 유한차분방법으로 계산을 하며, 그에 따르는 시간증분의 제한을 줄이기 위해서 하나의 대류항 계산시간 동안 필요에 따라 sub-timestep으로 나누어 계산한다.[2,3]

○분자확산(molecular diffusion)

에너지식에서 분자확산에 의한 에너지변화와 화학종 방정식에서의 농도변화가 여기에 포함된다. 확산속도는 식(11)의 Fick의 법칙을 따른다.

$$\frac{\partial E}{\partial t}=-\nabla\cdot\sum_{k=1}^{nsp}n_k h_k v_k \tag{9}$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t}=-\nabla\cdot n_k v_k \tag{10}$$

$$v_k=-\frac{1}{X_k}D_{km}\nabla X_k \tag{11}$$

또한 확산계수는 이종 혼합물(binary mixture)의 확산계수가 몰분율(mole fraction)에 의해서 아래와 같이 계산되며,[11,12]

$$D_{km}=\frac{1-Y_k}{\sum_{kk=1,\neq k}^{nsp}\frac{X_{kk}}{D_{k,l}}}$$

이종 혼합물의 확산계수는 분자운동학에 의해서 다음과 같이 구해진다.

$$D_{kl}=\frac{A_{kl}}{n}T^{B_{kl}}$$

A와 B는 Kailasanath 등[13]에 의해서 Table화 되었다.

○열전도(thermal diffusion)

에너지식에서 온도구배에 의한 에너지변화를 포함하며, 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial E}{\partial t}=-\nabla\cdot(-k\nabla T) \tag{12}$$

분자확산의 경우와 마찬가지로, 각각의 화학종의 열전도계수는 분자운동학에서 구한 값을 온도의 3차 다항식으로 근사하여 구하며 아래와 같이 혼합물의 열전도계수를 구한다.[14]

$$k=\frac{1}{2}\left[\sum_{k=1}^{nsp}X_k k_k+\frac{1}{\sum_{k=1}^{nsp}\frac{X_k}{k_k}}\right]$$

k_k : 개개의 화학종의 열전도계수

○점성응력(viscous stress)

모멘텀식에서 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial\rho\vec{v}}{\partial t}=-\nabla\cdot\tau$$

$$\tau=\left(\frac{2}{3}-\zeta\right)(\nabla\cdot\vec{v})I-\mu[(\nabla\vec{v})+(\nabla\vec{v})^T] \tag{13}$$

ζ : 벌크 점성계수

bulk viscosity는 작으므로 무시하고 계산한다. 각각의 화학종의 점성계수는 열전도계수의 경우와 같은 방법으로 구하고, 가중계수(weighting factor)와 몰분율(mole fraction)을 이용해서 혼합물(mixture)의 점성계수를 구한다.[15]

$$\mu=\sum_{k=1}^{nsp}\frac{X_k\mu_k}{\sum_{k=1}^{nsp}X_j\Phi_{kj}}$$

$$\Phi_{kj}=\frac{1}{\sqrt{8}}\left(1+\frac{M_k}{M_j}\right)^{-\frac{1}{2}}\left(1+\left(\frac{\mu_k}{\mu_j}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{M_j}{M_k}\right)^{\frac{1}{4}}\right)^2$$

M_k : 각 종의 분자량

2.2.3 화학반응과 에너지생성

개별적인 반응들을 모두 고려한다는 것은 매우 어려운 문제이므로, 본 연구에서는 무한율의 반응을 가정하는 infinite kinetics를 사용하였다. 따라서, 반응은 순간적이며, 격자 내에서 연료와 산화제는 완전히 반응하여 함께 존재하지 못한다고 가정한다. 따라서 식(3)의 생성항은 다음과 같이 반응열과 연료의 농도변화로 결정된다.

$$Q=-\Delta H_c\frac{d[C_2H_4]}{dt} \tag{14}$$

화학종 방정식의 생성항은 연소과정 이후에 각각의 격자에 남아있는 화학종의 수에 의해서 결정된다.

2.2.4 매연의 생성, 성장 및 소멸

매연의 농도와 체적분율의 생성 및 성장은 식(4)와 (5)의 생성항으로 잘 나타나 있다. 이 생성항들은 Moss 등[16]이 이론치를 실험치와 비교하여 계

수를 결정한 아래의 식들에 의해서 표현된다. 수밀도에 관계된 식(15)의 첫항은 생성(nucleation)을, 둘째항은 입자끼리의 응결(coagulation)을 나타내며, 체적분율에 관한 식인 식(16)의 첫항은 표면성장(surface growth)을, 둘째항은 생성(nucleation)을 나타낸다.

$$\frac{dn_d}{dt}=1.0234\times10^{32}\rho^2T^{1/2}X_{fuel}e^{-46100/T}-1.6611\times10^{-9}T^{1/2}n_d^2 \quad (15)$$

$$\frac{df_v}{dt}=2.333\times10^{-11}n_d\rho T^{1/2}X_{fuel}e^{-12600/T}+1.36\times10^{13}\rho^2T^{1/2}X_{fuel}e^{-46100/T} \quad (16)$$

매연입자의 소멸은 Nagle 등[17]이 쓴 다음 식을 사용하여 산화율을 계산하고, 적절히 변환하여 식(15), (16)의 우변에서 빼주었다.

$$R_{ox}=12\left[\left(\frac{kAP_{o_2}}{1+k_ZP_{o_2}}\right)\chi+k_BP_{o_2}(1-\chi)\right] \quad (17)$$

$$\chi=[1+k_T/(k_BP_{o_2})]^{-1}$$

$$k_A=20\exp(-30000/RT)$$

$$k_B=4.46\times10^{-3}\exp(-15200/RT)$$

$$k_T=1.51\times10^{5}\exp(-97000/RT)$$

$$k_Z=21.3\exp(4100/RT)$$

한편 매연입자에 대한 thermophoresis 효과는 Moss 등[16]이 사용한 다음 식으로 동점성계수와 온도의 함수로 속도를 표현하며 식(5), (6)의 우변에서 온도의 변화율이 큰 반경방향이 지배적이므로 아래와 같이 고려한다.

$$v_t=-0.54\nu\frac{\partial}{\partial r}(\ln T) \quad (18)$$

2.2.5 복사 열전달

복사 열전달의 효과는 에너지 보존식에, 다음과 같이 표현되는 복사 열유속의 발산형태로 나타난다.

$$-\nabla\cdot q_r=a(r)\left[\int_{4\pi}I(r,\Omega)\,d\Omega-4\pi I_b\right] \quad (19)$$

여기서, $I(r,\Omega)$를 구하기 위해서 다음과 같은 복사 전달방정식(radiative transfer Eq.)을 gray 가스에 대해서 푼다.

$$(\Omega\cdot\nabla)I(r,\Omega)=-[a(r)+s(r)]I(r,\Omega)+a(r)I_b(r)+\frac{s(r)}{4\pi}\int_{4\pi}I(r,\Omega')\Phi(\Omega'\rightarrow\Omega)\,d\Omega' \quad (20)$$

식(20)에서 보듯이 임의 방향으로의 intensity는 흡수(absorption)와 외부산란(out-scattering)에 의해 감소하고 방출(emission), 내부산란(inscattering)에 의해서 증가한다. 본 연구에서는 식(20)의 intensity를 풀기 위해서 구분종좌법(discrete ordinate method)를 사용하였다. DOM은 광학두께(optical thickness)에 무관하게 쓸 수 있고, 유한체적 알고리즘과의 결합이 용이하다.[18] 이를 이용한 근간의 연구로는 사각 밀폐공간에서 복사와 전도 열전달의 효과를 함께 살핀 것과 고체 연료면에서의 화염의 안정성을 연구한 것 등이 있다.[18,19] 구분종좌법(DOM)은 우선 전체 solid angle을 유한한 수의 ordinate direction으로 나누고 각각의 가중계수(weight factor)를 사용한다. 복사 전달식은 각 방향에 대해 구분되며, 적분항은 quadrature의 합으로 대치

Table 1 Outline of diffusion flame code

Initialize variables *Increment time
1. Thermal radiation Calculate Δe
2. Thermal radiation Calculate Δe (Subcycle as necessary)
3. Molecular diffusion Update n (i, j, k) Calculate Δe (Subcycle as necessary)
4. Viscosity Update ρv (Subcycle as necessary)
5. Chemical Reactions Update n (i, j. k) Calculate Δe
6. Convective transport x-direction transport Update ρ, ρv, E, n (i, j. k) y-direction transport Update ρ, ρv, E. n (i, j. k) Implicit Correction Update p, e, E
Start New Timestep (go to * above)

된다. 이러한 DOM은 Sn근사법으로 불리가도 하며 n은 근사차수를 나타낸다. 본 연구에서는 $n=4$를 쓰며 따라서 12개의 방향이 계산된다. 축대칭의 원통형 형상에 관한 gray가스의 복사전달식(RTE)은 각각의 ordinate drection(m)에 따라서 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{\mu_m}{r}\frac{\partial(ri_m)}{\partial r}+\xi_m\frac{\partial i_m}{\partial z}-\frac{1}{r}\frac{\partial(\eta_m i_m)}{\partial \psi}$$
$$=-\beta i_m+ai_b+\frac{S}{4\pi\sum_{m'}w_{m'}\Phi_{m'}i_{m'}} \quad (21)$$

본 연구에서는 매연입자(soot particles), 그리고 연소 생성물인 H_2O와 CO_2의 복사효과를 고려하였으며, 산란에 의한 효과는 상대적으로 매우 작으므로 무시하였다. 매연입자의 흡수계수(absorption coefficient)는 Kent와 Hennery[7]의 결과에서 다음과 같고, 상수는 연료의 종류에 따라 결정되는데 7을 사용한다.[7]

$$a_{soot}=2.66const.\ f_vT$$

H_2O와 CO_2는 Magnussen과 Hjertager[20]의 결과에서 다음과 같이 사용하였다.

$$a_{CO_2+H_2O}=0.001(X_{CO_2}+X_{H_2O})$$

이상에서 살펴본 각 과정을 Table 1의 순서와 같이 계산한다. 각각의 과정별로 에너지밀도, 모멘텀밀도, 수밀도 등을 계산하고 이를 대류항 알고리즘인 FCT를 통해서 transport시킨다. 이때 얻어진 결과는 아력 correction을 거쳐 새로운 압력, 에너지밀도, 모멘텀밀도를 구하고 다시 새로운 timestep을 시작한다.

3. 결과 및 검토

연료와 산화제의 속도가 입구에서 5 cm/sec인 경우에 대해서 계산을 수행하였으며 계산영역은 10 cm×20 cm를 사용하였다. Fig. 1에서 보는 바와 같이 연료는 직경 1 cm인 관에서 나오며, 같은 속도로 공기가 관외부에서 공급된다. 격자는 축방향으로는 균일하게 주었고 반경방향으로는 1 cm까지는 0.08 cm를 사용하고 그 이후로 10 cm까지 13% 씩 확장하였고 시간증분은 1×10^{-4}sec를 사용하였다. 결과를 살펴보기 위해 편의상 복사 열전달효과의 유무에 따라 다음과 같이 두 경우로 구분하였다.

○Case 1 : 복사 열전달을 고려치 않은 경우

먼저, Fig. 2에서는 주기적으로 변화하는 화염의 전반적인 형상(온도와 매연의 체적분율을 10 ms 간격으로 그렸는데 부력에 의한 외부구조(flickering)가 나타나며 그와 비슷하게 움직이는 매연입자들을 볼 수 있다. 그런, 복사에 의한 열손실이 고려되지 않아서 flume에도 고온부가 여전히 존재하므로 화염대를 빠져나가서도 매연입자는 산화되지 않고 비교적 큰 양으로 남아 있음을 볼 수 있다. Fig. 3은 앞의 Fig. 2와 관련지어 보면 마찬가지로 flume을 따라 고온부가 이동하고 이와 함께 매연입자의 체적분율도 증가함을 보여주며 이것으로 인

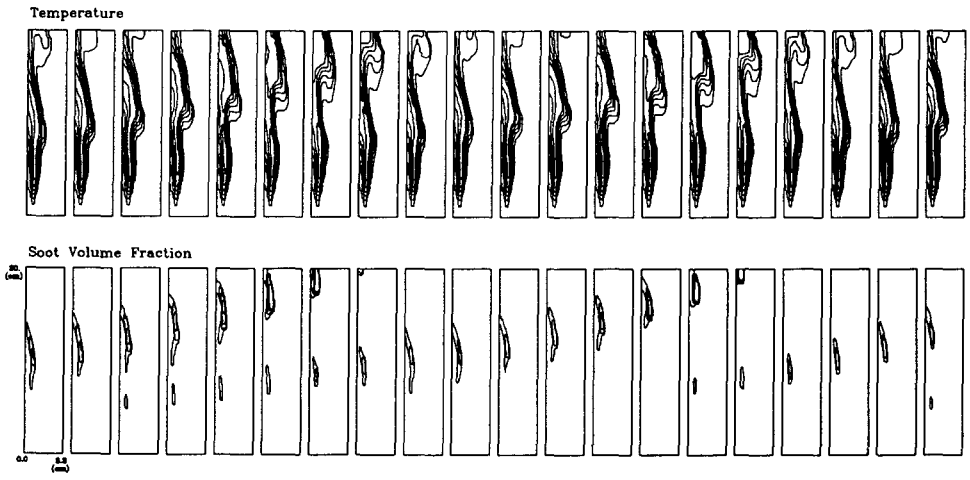

Fig. 2 Time sequence for contours of temperature and soot volume fraction for Case 1. Time interval is 10 ms

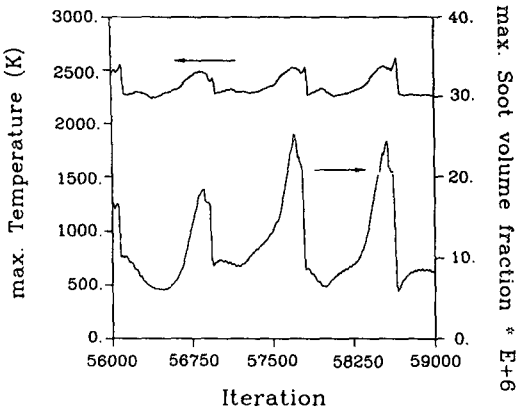

Fig. 3 Temporal variations for maximum temperture and soot volume fraction for Case 1

해 주기가 정확히 예측된다. 또, flume이 아닌 화염의 중앙에서 고온부가 형성될 때를 기준으로 보면 화염의 최고온도는 약 2250 K를 전후해서 나타나며, 매연입자의 체적분율은 $8\sim9\times10^{-6}$ 정도로 계산됨을 볼 수 있다. Fig. 4는 57800 step에서의 여러 연소특성을 보여준다. 우선, 무한율의 반응을 가정하였으므로 연료와 산화제인 산소가 공존하는 지역이 없음을 볼 수 있고, 부력에 의한 외부구조(flickering)가 상부에 나타난다. 연소 생성물인 H_2O와 CO_2의 몰분율의 최고치는 각기 0.14, 0.17 정도로 계산되었고, 화염의 최대온도는 약 9 cm에서 2248 K로 나타났다. 또한 매연입자의 최대체적분율은 고온부의 바로 안쪽에서 9×10^{-6}으로, 연료와 비교할 때 stoichiometric한 지역보다 약간 연료가 많은 곳에서 계산되었다. Fig. 5는 Fig. 2에서 보았던 부력에 의한 flickering을 산소의 곡선으로 나타내었는데 대략 12~13 Hz의 주기를 가진다.

○Case 2 : 속도 : 복사 열전달효과를 고려한 경우

Fig. 6에서는 앞선 Fig. 2와 비교해 보면, 같은 주기성을 가지고 flickering을 하지만 복사 열손실에 의해서 전체적으로 온도가 떨어지고, 특히 flume에서는 온도가 상당히 떨어져 매연입자의 분포는 복사를 뺀 경우와 많은 차이가 나타나고 있다. 이는 Fig. 7에서 더욱 명확히 드러난다. 즉, 화염의 온도는 복사에 의한 손실로 인해 약 150 K 정도 줄어들어 계산되며, flume은 Fig. 3처럼 온도가 증가하지 못하고, 고온부는 화염의 중앙에 안정하게 위치한다. 매연입자 역시 $9\sim10\times10^{-7}$ 정도로 화염대를 벗어나면서 더 이상 성장하지 못하고 점차 소멸된다. 56000 step부터 복사 열전달을 포함하였기에 초기에는 그 영향을 받고 있음을 볼 수 있다. 한편 최대 화염온도는 2100 K를 전후해서 유지되며, 이를 Kent와 Honnery[7]가 수행한 실험결과를

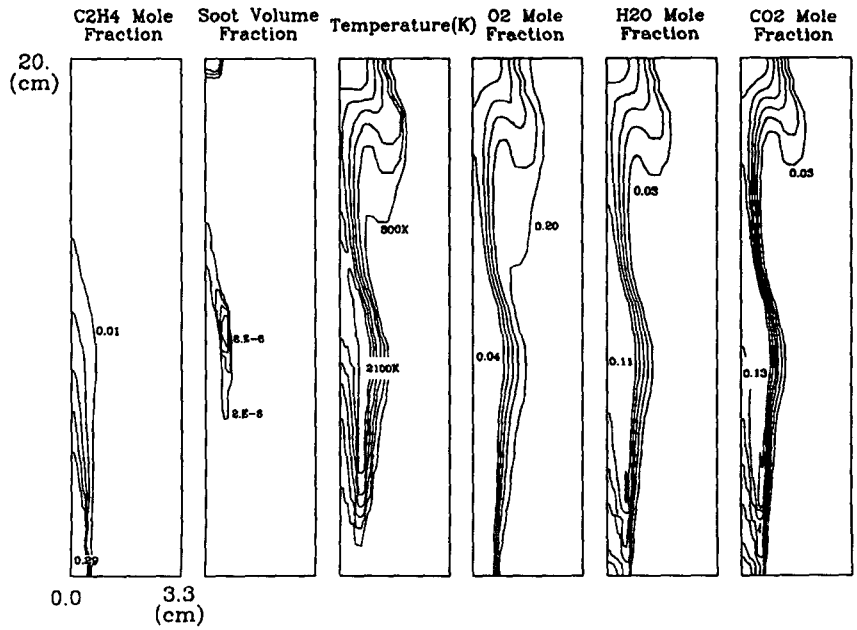

Fig. 4 Instantaneous contours of flame properties for Case 1 at time step 57800

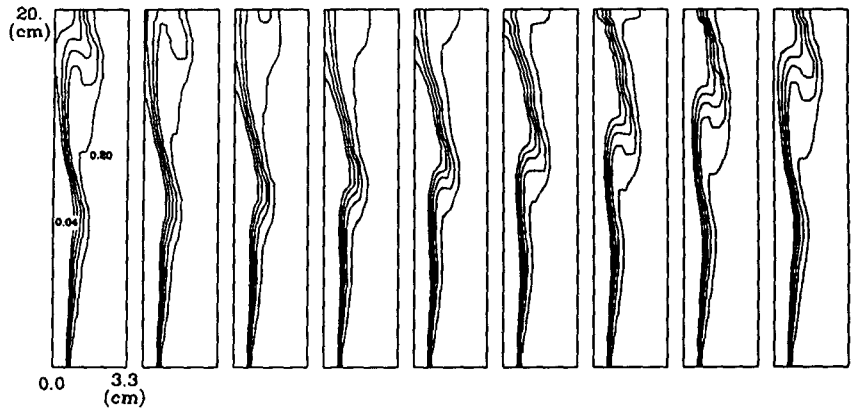

Fig. 5 Instantaneous contours of oxygen mole fraction at 10 ms intervals for Case 1 show formation and passage of buoyancy-driven outer structure. Calculated flicker frequency is 12 ~13 Hz

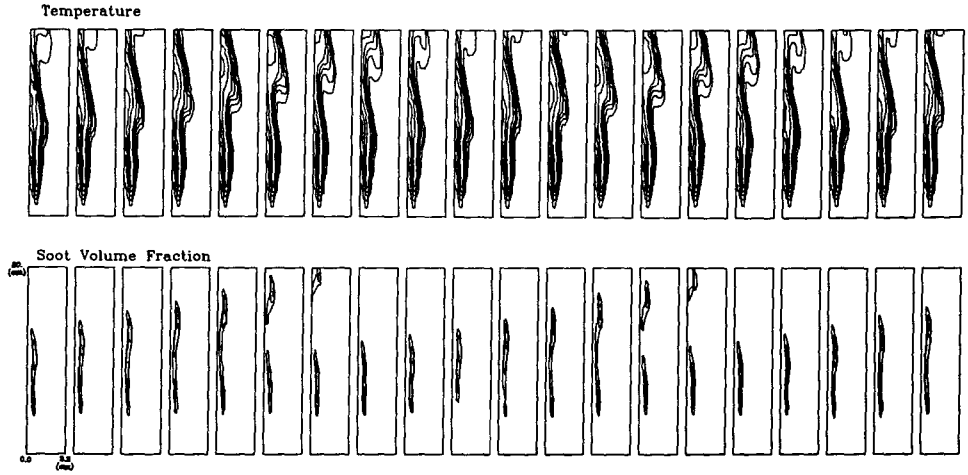

Fig. 6 Time sequence for contours of temperature and soot volume fraction for Case 2. Time interval is 10 ms

비교하면 위치는 차이가 있지만 값은 비슷하다. 위치가 다른 이유는 주위공기가 정체된 경우의 실험결과이기 때문이다. Fig. 8은 Fig. 4와 마찬가지인 57800 step에서의 연소특성과 매연입자의 분포를 나타내었는데, 최대화염의 온도와 매연입자의 체적분율은 Fig. 7에서 본 것처럼 8 cm 정도에서 2095 K와 9×10^{-7}으로 나타났으며 그외의 연소 생성물인 H_2O와 CO_2의 몰분율의 최고치는 고온부의 바로 안쪽에서 각기 0.13과 0.16로 복사가 없는 경우에 비해서 약간 감소하였다. 한편 Fig. 9는 각각 4,6,8 cm의 높이에 대해서 매연입자의 체적분율을 반경방향에 대해서 그렸으며, 이를 Kent와

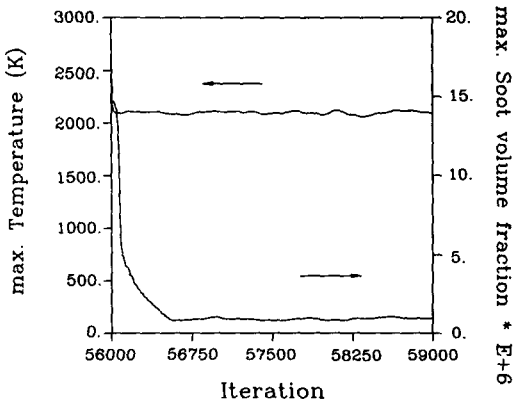

Fig. 7 Temporal variations for maximum temperature and soot volume fraction for Case 2

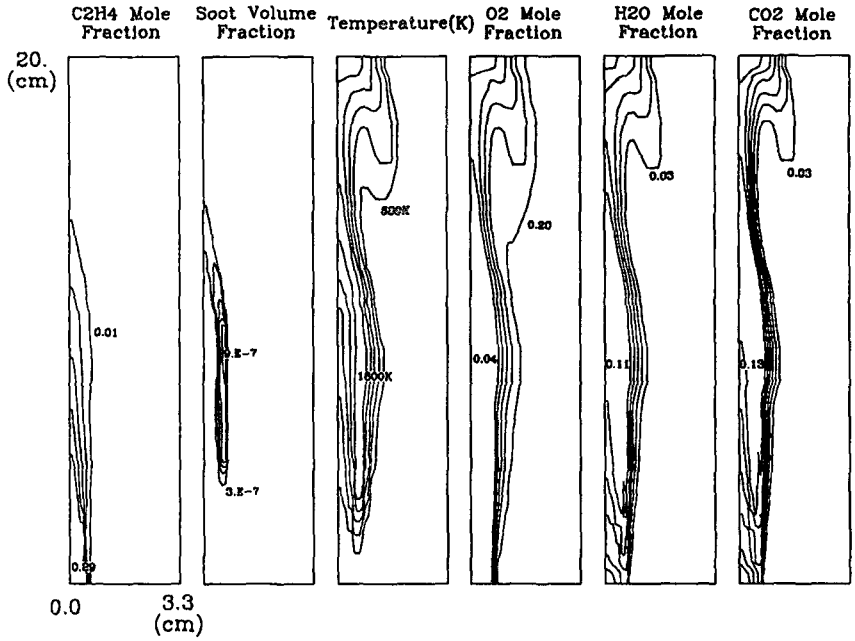

Fig. 8 Instantaneous contours of flame properties for Case 2 at timestep 57800

Honnery[7]의 실험결과와 비교하였다. 계산결과를 실험치와 비교하기 위해서 두 주기에 걸쳐서 10 ms 간격으로 각 지점에서 계산된 값들의 평균치를 구하였다. 평균을 구한 결과는 매연의 경우는 최고치가 5.8 cm에서 6.9×10^{-7}으로 나타나며, 온도는 5 cm에서 2096 K로 계산되었다. 그밖의 생성물들인 H_2O와 CO_2의 몰분율 역시 고온부 바로 안쪽에서 대략 0.13과 0.16으로 나타났다. 계산과 같은 조건인 직경 1 cm인 관을 통해 에틸렌이 분사되는 경우인 Kent와 Honnery의 실험은 앞서 잠시 언급했듯이 주위 공기가 정체된 경우이기 때문에 그림에서 보듯이 매연의 양은 계산결과보다 크게 나타나고 있다. 즉, 두 경우는 화염의 길이, 폭 등이

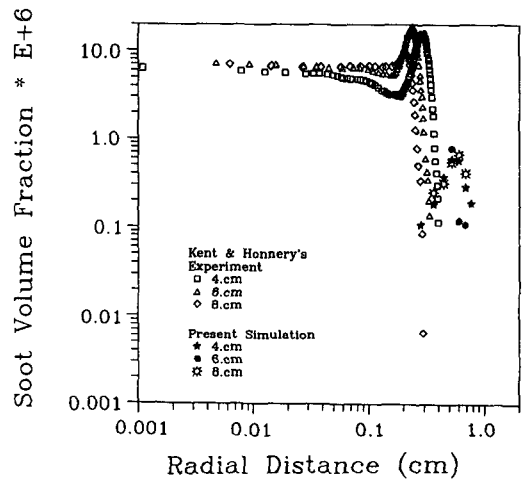

Fig. 9 Comparison of Case 2 with Kent and honnery's experiment[8]

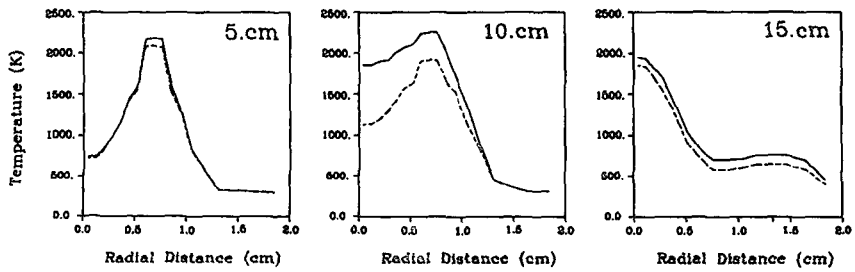

Fig. 10 Comparison of radial profiles of temperature at various heights for Case 1 (——) and Case 2 (----)

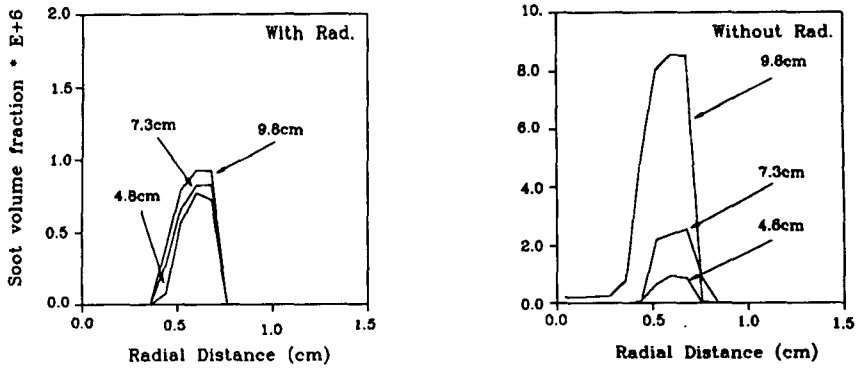

Fig. 11 Comparison of radial profiles of soot volume fraction at various heights for Case 1 and Case 2

달라지므로 같은 위치에서 비교하는 것에 어려움이 있고, 비정상 현상이기에 실험과 비교하기 위해 평균을 취했기에 하류로 갈수록 중앙부로 매연입자가 이동하는 현상이 보이지 않게 되었다. 그러나, 온도는 실험치와 잘 일치하며 복사손실에 대한 매연입자, 온도, 그리고 그밖의 생성물의 분포 등의 경향으로 미루어 전반적으로 계산결과는 타당하다고 보여진다. Figs. 10과 11은 복사 열손실의 효과를 보기 위하여 몇 개의 높이에서 반경방향에 대하여 Case 1과 Case 2의 온도와 매연입자의 체적분율을 나타내었다. 온도의 경우, 복사효과가 포함되면서 고온부의 위치가 상대적으로 낮아지며, 복사손실 때문에 올라갈수록 쉽게 작아진다. 즉, 화염이 상당히 위축되어 나타난다. 매연의 경우는 변화의 폭이 온도에 비해서 상대적으로 크고 온도에 민감하게 반응함을 알 수 있다. 이상의 결과로 보아 탄화수소계의 연료는 반드시 복사 열전달이 고려되어야 함을 알 수 있었다.

4. 결 론

(1) 5 cm/sec로 공급되는 에틸렌 제트 확산화염의 연소특성을 아래와 같이 알 수 있었다.

· 최대 화염온도 : 약 2100 K

· 생성물의 몰분율의 최고치 : (H_2O) — 약 0.13

(CO_2) — 약 0.16

(2) 부력에 의한 외부구조가 5 cm/sec로 연료와 산화제가 공급될 경우는 12~13 Hz로 나타났으며, 이는 서론에서 언급하였듯이 이미 여러 연구에서 알려진 층류 확산화염의 대표적인 범주인 10~20 Hz를 잘 만족시킨다. 또 flickering은 복사의 영향에 거의 무관함을 알 수 있었다.

(3) 매연입자의 체적분율은 고온부의 바로 안쪽에서 생성되며, $7\sim8\times10^{-7}$의 최고치를 가진다.

(4) 복사 열전달의 효과로 전반적으로 화염대가 위축되어 화염이 안정화되고, 최대온도는 약 150 K 정도 감소함을 알 수 있었고, 매연의 체적분율은 온도에 비교적 큰 폭으로 변화하였다. 그밖에 연소생성물인 H_2O와 CO_2는 약간씩 감소하였다. 이러한 결과로 보아 복사 열전달의 효과는 에틸렌과 같이 매연의 생성이 많은 탄화수소 계열의 연료를 쓸 때는 반드시 고려해야 함을 알 수 있었다.

참고문헌

(1) Smith, O. I., 1981, "Fundamentals of Soot FOrmation in Flames with Application to Diesel Engine Particulate Emissions," *Prog. Energy Combust. Sci.*, 7, p. 275.

(2) Ellzey, J. L., Laskey, K. J. and Oran, E. S., 1991, "A Study of Confined Diffusion Flame," *Combust. Flame*, 84, p. 249.

(3) Ellzey, J. L. and Oran, E. S., 1990, "Effect of Heat Release and Gravity on an Unsteady Diffusion Flame," *23th Symposium (Int.) on Combustion*, p. 1635.

(4) Davis, R. W., Moore, E. F., Roquemore, W. M., Chen, L. D., Vilimpoc, V. and Goss, L. P., 1991, "Preliminary Results of a Numerical-Experimental Study of the Dynamic Structure of a Buoyant Jet Diffusion Flame," *Combust. Flame*, 83, p. 263.

(5) Laskey, K. J., 1989, "Numerical Study of Jet Diffusion Flame," Ph. D. Thesis, Carnegie-Mellon Univ.

(6) Kaplan, C. R., Baek, S. W., Oran, E. S., Boris, J. P. and Ellzey, J. L., 1993, "Dynamics of a Strongly Radiating Unsteady Ethylene Jet Diffusion Flame," *Combust. and Flame.*

(7) Kent, J. H. and Honnery, D. R., 1990, "A Soot Formation Rae Map for a Laminar Ethylene Diffusion Flame," Combust. Flame, 79, p. 289.

(8) Oran, E. S. and Boris, J. P., 1987, *Numerical Simulation of Reactive Flow, Elsevier*, New York, p. 264.

(9) Patnaik, G., Guirguis, R. H., Boris, J. P. and Oran, E. S., 1987, "A Barely Implicit Correction for Flux Corrected Transport," *J. Comput. Phys.*, 71, p. 1.

(10) Devore, C. R., 1984, "Vectorization and Implementation of an Efficient Multigrid Algorithm for the Solution of Elliptic Partial Differential Equations," *NRL Memorandum Report* 5504.

(11) Hirschfelder, J. O., Curtis, C. F. and Bird, R. B., 1954, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John-Wiley, New York.

(12) Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., 1960, *Transport Phenomena*, Wiley, New York.

(13) Kailasanath, K., Oran, E. S. and Boris, J. P., 1982, *NRL Memorandum Report* 4910, NRL.

(14) Mathur, S., Tandon, P. K. and Saxena, S. C., 1967, "Thermal Conductivity of Binary, Ternary, and Quaternary Mixture of Real Gases," *Mol. Phys.*, 12, p. 569.

(15) Wilke, C. R., 1950, J. Chem. Phys., 18, p. 578.

(16) Moss, J. B., Stewart, C. D. and Syed, K. J., 1988, "Flowfield Modeling of Soot Formation at Elevated Pressure," *22th Symposiun (Int.) on Combustion*, p. 413.

(17) Siegla, D. C. and Smith, G. W., 1981, "Particulate Carbon Formation During Combustion," *Plenum Press*, p. 299.

(18) Kim, J. S., Baek, S. W., and Kaplan, C. R., 1992, "Effect of Radiation on Diffusion Flame Behavior over a Combustible Soild," *Comb. Sci. Tech.*, 88, p. 133.

(19) Kim, T. Y. and Baek, S. W., 1991, "Analysis of Combined Conductive and Radiative Heat Transfer in a Two-Dimensional Rectangular Enclosure Using the Discrete Ordinate Method," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 34, p. 2265.

(20) Magnussen, B. F. and Hjertager, B. H., "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion," 1977, *16th Symposium (Int.) on Combustion*, p. 719.