

3중화염의 구조에 미치는 연료종류에 관한 수치해석

박 상 규* · 최 낙 정**

Numerical Analysis on the Triple Flame Structure with Different Kinds of Fuel

S. K. Park · N. J. Choi

Key words : Numerical analysis(수치해석), Methane(메탄), Hydrogen(수소), Fuel-rich premixed flame(과농예혼합화염), Fuel-lean premixed flame (희박예혼합화염), Flame structure(화염구조)

Abstract

This study investigates the effects of different kind fuels on the flame structure by using the numerical simulation in triple flame made by a co-flowing fuels-air and air stream, based on the elementary chemical reaction mechanism. Methane and Hydrogen were used as fuel for this study. In order to interpret the result of the study on numerical simulation, Skeletal chemistry is employed as the elementary chemical reaction mechanism for methane, Gutheil's as an offset elementary chemical reaction mechanism for hydrogen. The result of this study is as follows. In comparison between the apparent burning velocity change of triple flame and the one-dimensional premixed flame, hydrogen fuel flame is higher than methane fuel flame. The flame thrusts out forward in the down stream of the boundary between air-fuel mixture and air stream, and a part of the flow is bent and forks out in this protruding flame so that a triple flame is originated.

1. 서 론

3중화염은 농도구배가 있는 예혼합기에서 형성되는 화염이고, 그 화염구조는 과농 및 희박 2개의 예혼합화염과 그 사이에 형성되는 확산화염의 3개 화염으로 구성된다.

이 화염은 분류확산화염의 선단부에 형성되는 것으로 잘 알려져 있지만 부분적인 소염현상에 의해 연료와 산화제와의 혼합이 이루어진 위치에서 재착화에 의해 형성되는 것이기 때문에 비정상적의 난류확산화염에 있어서 중요한 화염 요소로 된다. 이 화염에 관한 연구는 Phillips⁽¹⁾ 등의 이론적 연구

* 우석대학교 이공대학 자동차공학과(원고접수일 : 98년 10월)

** 익산대학 자동차과

를 시작으로 이에 관한 실험적 연구⁽¹²⁾가 있고, 또한 총괄반응에 기초한 혼합분율의 폭방향 구배 또는 발열에 의한 팽창의 효과 등을 검토한 연구^{(13)~(16)}가 있으며, 이것은 연료와 산화제의 폭이 넓은 혼합상태하에서 3중화염이 형성되기 때문에 그 화염을 정확히 예측하기 위해서는 소반응에 기초한 상세한 해석을 행할 필요가 있다. 이러한 해석은 Prasad 등⁽⁷⁾과 Smooke 등⁽⁶⁾의 수치해석에 의한 기초적 연구가 있을 뿐 화염구조의 상세한 검토는 행하여지지 않고 있다.

최근 山下⁽⁹⁾는 Smooke⁽¹⁰⁾등이 제안하고 있는 메탄-공기의 Skeletal Chemistry를 이용하여 연료분류 확산화염에 있어서 형성되는 통상의 3중화염에 관하여 검토하였다. 그러나, 분류에서는 3중화염의 화염구조를 상세히 검토하는 것이 곤란하기 때문에 본 연구에서는 과농예혼합기와 공기의 평행류 하류에 형성되는 3중화염에 관하여 연료의 종류가 화염구조에 미치는 영향에 대하여 수치계산을 행하였으며 연료는 수소와 메탄을 사용하였다. 그리고 하류쪽에서 명확한 3중화염이 형성되는 경우, 3중화염의 화염구조에 미치는 영향을 Skeletal 반응기구를 이용하여 계산하였고 화염구조의 특성은 이미 잘알려져있는 Mixedness 및 Flame index를 사용하여 3중화염의 화염구조에 미치는 연료의 영향을 수치해석에 의하여 검토하였다.

2. 해석 모델 및 계산방법

2.1 해석모델과 화학반응기구

본 연구에 이용한 2차원 해석모델과 경계조건을 Fig. 1에 도식적으로 나타냈다. 메탄-공기의 과농예혼합기와 순수공기의 농도가 선형적으로 변화하는 혼합기의 평행류를 계산영역의 왼쪽으로부터 유입시켜, 그 하류쪽에 3중화염이 형성되도록 하였다.

Fig.1에서 3중화염이 시작되는 위치를 원점 "0"로 하는 2차원 직각좌표계를 설정하고, 흐름방향을 x좌표, 폭방향을 y좌표로 하였다. 여기서, u와 v는 축방향과 폭방향의 속도성분이고, 또 T와 Y_i는 온도 및 화학종 i의 질량분율이다. 입구측의 p점으

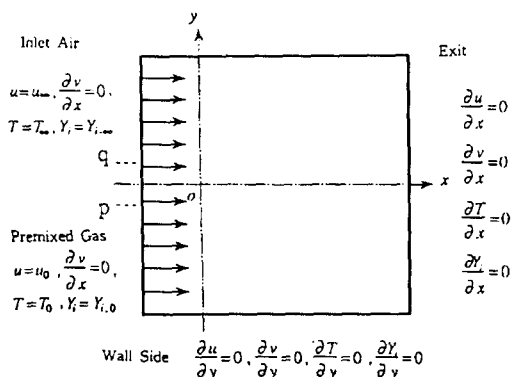


Fig. 1 Boundary condition and analytical model of triple flame

로부터 하부를 과농예혼합기로 하였으며 입구측의 속도 u_0 , 온도 T_0 및 농도 $Y_{i,0}$ 는 일정한 것으로 하였다.

한편, q점의 상부를 공기로하고, p점과 q점 사이의 농도는 선형적으로 변화하며 압력은 대기압으로 하였고 온도는 실온으로서 $T_0 = T_\infty = 300K$ (온도비 $T_\infty/T_0 = 1$)이다.

반응기구는 Smooke⁽¹⁰⁾ 등의 Skeletal Chemistry를 이용하였고, 16개의 화학종에 관하여 35개의 소반응을 고려하였다. 열역학 정수는 각 화학종의 정압비열 $c_{p,i}$ 를 적당한 온도범위에서 최소2승 근사한 온도의 다항식으로 계산하였고⁽¹¹⁾, 수송계수는 Smooke 등의 Simplified transport Model⁽¹⁰⁾을 적용하였다.

2.3 기초방정식과 수치해석법

본 연구의 해석에 사용된 가정은 다음과 같다.

- 혼합기는 이상기체이다.
- Soret효과, Dufour효과 및 압력확산효과는 무시한다.
- 외력은 작용하지 않으며, 체적점성계수 $k=0$ 로 한다.
- 에너지방정식에서 점성일과 Dp/Dt 는 무시한다.
- 압력은 일정하다.

위와 같은 가정하에 다음에 표시한 연속방정식, Navier-Stokes방정식, 에너지방정식, 각 화학종의 연속방정식 및 상태방정식을 본 연구의 지배방정

식으로 하였다.⁽⁹⁾

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

$$\frac{\partial(\rho u_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} u_m) - \nabla \cdot (\mu \nabla u_m) = - \frac{\partial p}{\partial x_m} - \rho g_m + \left(- \frac{\partial \mu}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_m} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} T) - \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = \frac{1}{c_p} \frac{Dp}{Dt} - \frac{1}{c_p} \sum h_i \omega_i - \frac{\rho}{c_p} \sum_i (c_{p,i} Y_i V_i \cdot \nabla T) \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \omega_i \quad (4)$$

$$p = \rho R^0 T \sum_i \frac{Y_i}{m_i} \quad (5)$$

본해석은 기초방정식을 유한체적법⁽¹²⁾에 의해 이산화하고 각각의 유한체적에 대하여 검사체적 선상에 각속도선분을 놓고 중심점에 종속변수인 압력 P, 혼합분율 Z 등을 정의한 엇갈린 격자를 사용하였으며, Fig.2에 격자배열의 일부를 표시하였다. 점선으로 포위된 영역은 P점주위의 유한체적을 표시하고 있으며, 식 (1),(2),(3)을 종속변수

φ를 사용하여 나타내면 다음식 (6)과 같이 일반형으로 된다.

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S \quad (6)$$

여기서, Γ는 확산계수, S는 생성항이며 Γ와 S는 종속변수 φ에 대하여 Table 2와 같다.

식 (6)을 시간 (t - Δt) ~ (t) 에 대하여 적분하고, 비정상항은 종속변수 φ가 유한체적내에서 공간적으로 일정하게, 대류항 및 확산항의 종속변수는 각 방향과 일정하게 하여 적분하고 시간축에 대한 적분은 비정상항 이외의 항에 대해서는 완전음해법을 사용하여 정리하면 이산화 방정식 (7)을 얻는다.

Table 2. Diffusion coefficients and source term of basic equations

| Conservation Equation | φ | Γ | S |
|-----------------------|----------------|-----------------|--|
| Mass | 1 | 0 | 0 |
| Momentum | u _m | μ | $-\frac{\partial p}{\partial x_m} - \rho g_m + \left(- \frac{\partial \mu}{\partial x_m} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_m} \right)$ |
| Energy | T | λ / c_p | $\frac{1}{c_p} \frac{Dp}{Dt} - \frac{1}{c_p} \sum h_i \omega_i - \frac{\rho}{c_p} \sum (c_{p,i} Y_i V_i \cdot \nabla T)$ |
| Species Continuity | Y _i | ρD_i | ω _i |

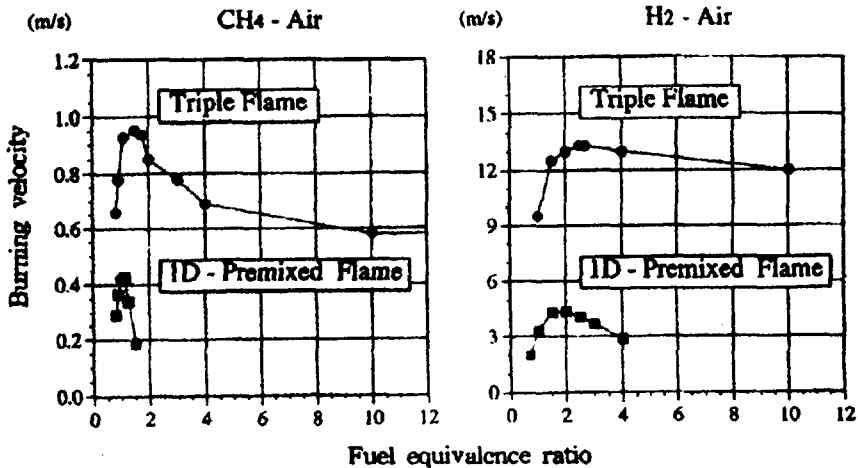


Fig. 2 Control volume on the velocity u

$$\begin{aligned}
 & [(\rho\phi)_t - (\rho\phi)_{t-\Delta t}] \Delta x \Delta y + [(\rho u)_e \phi_e - \Gamma_e \frac{\partial \phi}{\partial x} |_e] \Delta y \Delta t \\
 & - [(\rho u)_w \phi_w - \Gamma_w \frac{\partial \phi}{\partial x} |_w] \Delta y \Delta t \\
 & + [(\rho v)_n \phi_n - \Gamma_n \frac{\partial \phi}{\partial y} |_n] \Delta x \Delta t \\
 & - [(\rho v)_s \phi_s - \Gamma_s \frac{\partial \phi}{\partial y} |_s] \Delta x \Delta t - S \Delta x \Delta y \Delta t = 0
 \end{aligned} \tag{7}$$

위 식 (7)을 일반화하여 간단히 하면 다음 식 (8)과 같이 된다¹²⁾.

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \tag{8}$$

즉, $a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b$ 가 된다. 여기서 첨자 'nb'는 점 p의 인접점을 의미하고 \sum 는 모든 인접점에 대한 합이다.

압력 p는 추측한 압력 p*를 기초로하여 $p = p^* + p'$ 로 계산할 수 있으며, 압력보정치 p'는 압력을 보정하면서 얻을 수 있고 압력보정에 대한 이산화 방정식은 식 (9)와 같다.

$$a_p p'_p = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b \tag{9}$$

단, $b = \frac{-[(\rho^* p)_t - (\rho^* p)_t - \Delta t] \Delta x \Delta y + [(\rho^* u^*)_w - (\rho^* u^*)_e] \Delta y + [(\rho^* v^*)_s - (\rho^* v^*)_n] \Delta x}{\Delta t}$ 이다.

식 (7)과 식 (9)는 SIMPLE법¹²⁾에 의하여 계산을

행하였고 대류항에는 1차풍상법, 시간방향에는 Euler의 완전음해법을 적용하였으며, 시간간격은 $\Delta t = 10 \sim 30 \mu s$ 로 하였다.

u, v, T 및 Y_i 에 대한 경계조건은 Fig.1과 같으며 초기조건은 초기 시각에 연료가 갑자기 분출하도록 하였고 충분히 시간이 경과한후 초기조건의 영향이 완전히 소거된 상태에서 본해석을 행하였다.

본 계산의 연료는 메탄과 수소를 고려하였고 과농예혼합기와 공기의 속도비는 1.0으로 하였다.

착화는 원점근방에 고온부를 설정하고 착화하여 안정된 화염이 형성된후 고온부를 제거하였으며 정상해는 이때부터 충분한 시간이 경과한 후 구하였다. 각시간 Step은 SOR법에 의한 반복계산을 행하였으며, 완화계수는 전부의 변수에 대하여 0.07정도로 하였다. 계산영역의 크기는 $x = -2.7 \sim 9.6$ mm, $y = -6.1 \sim 6.1$ mm로 하였으며, q점 및 p점의 y좌표는 ± 1 mm로 하였다.

계산격자수는 x 및 y방향에 각각 81×121 로 하였으며, 원점부근에서 최소격자간격 $x = 0.1$ mm, $\Delta y = 0.05$ mm로 하고 부등간격 격자를 적용하였다.

3. 계산결과 및 검토

3.1 3중화염의 겉보기 연소속도

3중화염의 겉보기 연소속도와 과농예혼합기의 당량비의 관계를 메탄+공기, 수소+공기 연료의 경우에 대하여 Fig.3에 표시한다. 가로축은 과농예

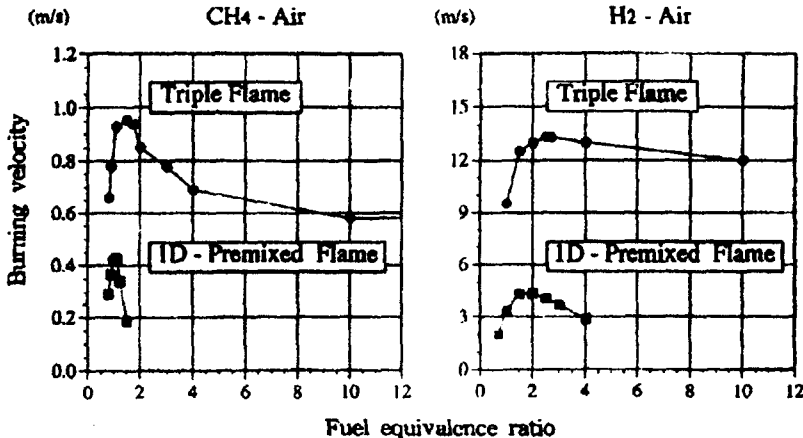


Fig. 3 Effect of different kinds of fuel on the apparent burning velocity

혼합기의 당량비를, 세로축은 걸보기 연소속도를 나타내고 있다. 걸보기 연소속도는 정상적인 3중 화염이 계산영역내에서 형성되는 경우 계산영역의 좌측에서 유입하는 과농예혼합기와 공기평행류의 유입속도로 정의한다. 그림에서 알 수 있는 바와같이 3중화염의 걸보기 연소속도가 1차원에 혼합 화염의 연소속도 보다 크게된다.

Fig.4는 흐름방향의 속도성분과 온도 및 화염위치치를 표시하는 무차원 열발생속도 q/q_{max} 의 분포를 메탄+공기, 수소+공기 연료에 대하여 표시한 것으로 그림에서 알 수 있는 것처럼 흐름방향의 속도성분은 입구로부터 서서히 적게되고 화염전단의 예열대 직전에서 최소로 된다. 이 예열대의

한 온도상승을 수반하여 흐름방향 속도성분은 무차원 열발생속도가 최대로된 직후에 상승하여 최대로 되기 때문에 화염전단에서 흐름방향의 속도성분이 적어지고 입구의 유입속도가 큰곳에서 3중 화염의 전파속도가 0이된다. 그 결과 3중화염의 걸보기 연소속도가 크게 된다고 생각할 수 있다.

3.2 연료의 종류에 따른 화염구조의 비교

당량비가 $\phi=10$ 인 경우 연료의 종류에 따른 3중 화염의 화염형상과 화염구조를 비교하기 위하여 각 연료에 있어서 온도와 속도벡터 및 화학종 OH와 HO_2 의 질량분율을 Fig.5, Fig.6 및 Fig.7에 표시하였다. Fig.5에서 보는 바와 같이 화염형상은

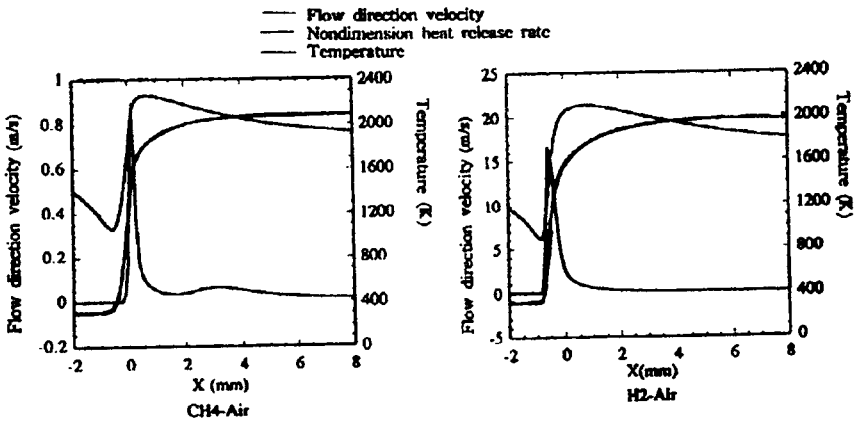


Fig. 4 Spatial distribution of velocity, temperature and q/q_{max} in flow direction($\phi=10$)

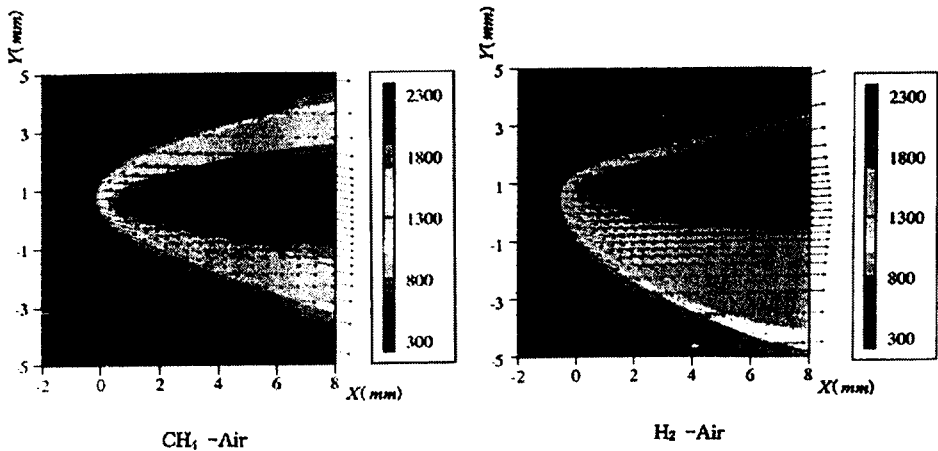


Fig. 5 Spatial distribution of velocity vector and temperature at different kinds of fuel($\phi = 10$)

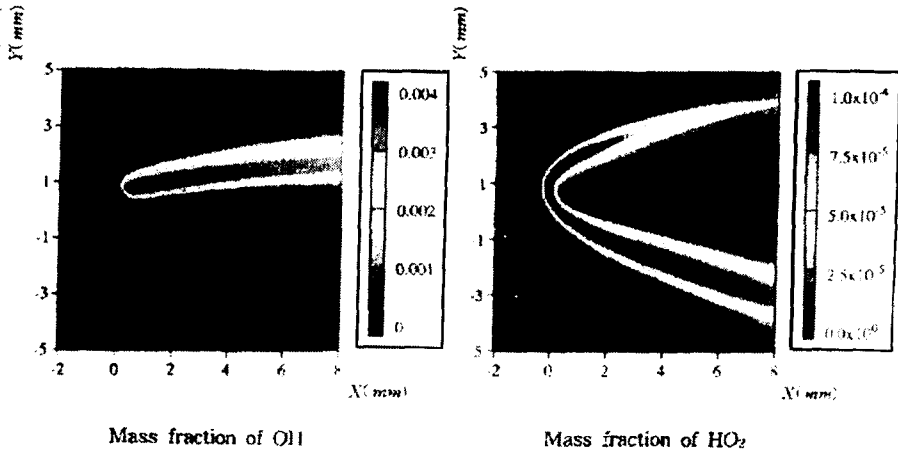


Fig. 6 Spatial distribution of OH and HO₂ mass fraction in CH₄-Air flame($\phi=10$)

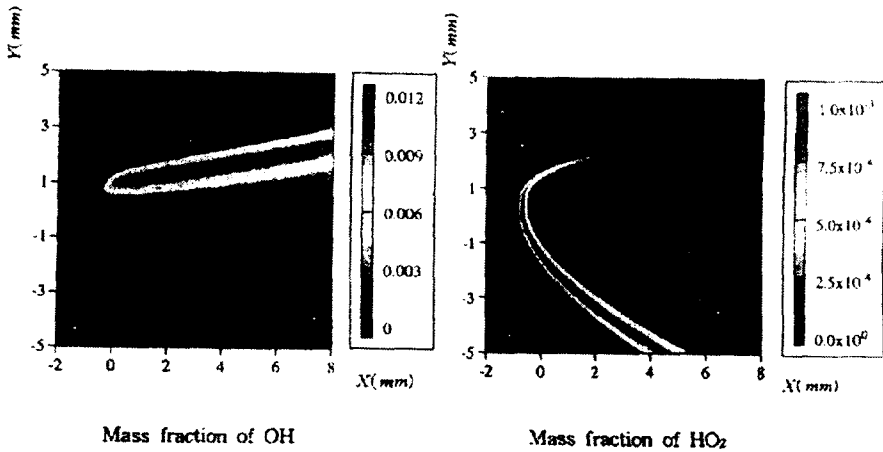


Fig. 7 Spatial distribution of OH and HO₂ mass fraction in H₂-Air flame($\phi=10$)

메탄화염이나 수소화염 모두 상류측에서 불룩하게 돌출되고 이 부분에서 흐름방향의 속도 역시 작게 나타나고 있는데 이것은 하류에 형성되는 화염의 발열에 따른 팽창에 기인하는 유체역학적 효과 때문인 것으로 보인다. Fig.6과 Fig.7은 메탄화염과 수소화염에 있어서 OH와 HO₂의 질량분율을 표시하며, 연료가 메탄인 경우 Fig.6의 질량분율 분포는 Fig.5의 온도분포와 비교하여 적색분포의 영역과 대응하고 있는것을 알 수 있다.

Fig.7의 질량분율 분포에서는 상류에 불룩하게 돌출되어 있는 온도분포형상의 녹색부분에 질량분율이 많이 분포하고 있는 것을 알 수 있다. 또 연료가 수소인 경우 Fig.7과 Fig.5를 비교하면 OH

및 HO₂의 어느쪽의 질량분율도 메탄의 경우와 똑같은 경향을 표시하고 있다.

Fig.8 (a),(b)는 연료가 메탄과 수소인 경우 당량비 $\phi=10$ 에 대하여 무차원 열발생속도 q/q_{max} 와 물리량 Mixedness 및 Flame index의 분포를 표시한다. 이들의 물리량과 q/q_{max} 를 비교하는 것에 의하여 화염구조를 명확하게 알 수 있다. Fig.8 (a),(b)의 q/q_{max} 의 분포로부터 반응이 심하게 일어나고 있는 Fig.8 (a)에서는 3중화염의 형상을 볼 수 있지만 Fig.8 (b)의 경우는 거의 보이지않는 것을 알 수 있다. 그러나 Mixedness 와 Flame index의 분포를 비교하면 어느연료의 경우에도 과농 및 희박 예혼합화염인 2개의 예혼합화염과 확산화염이 공

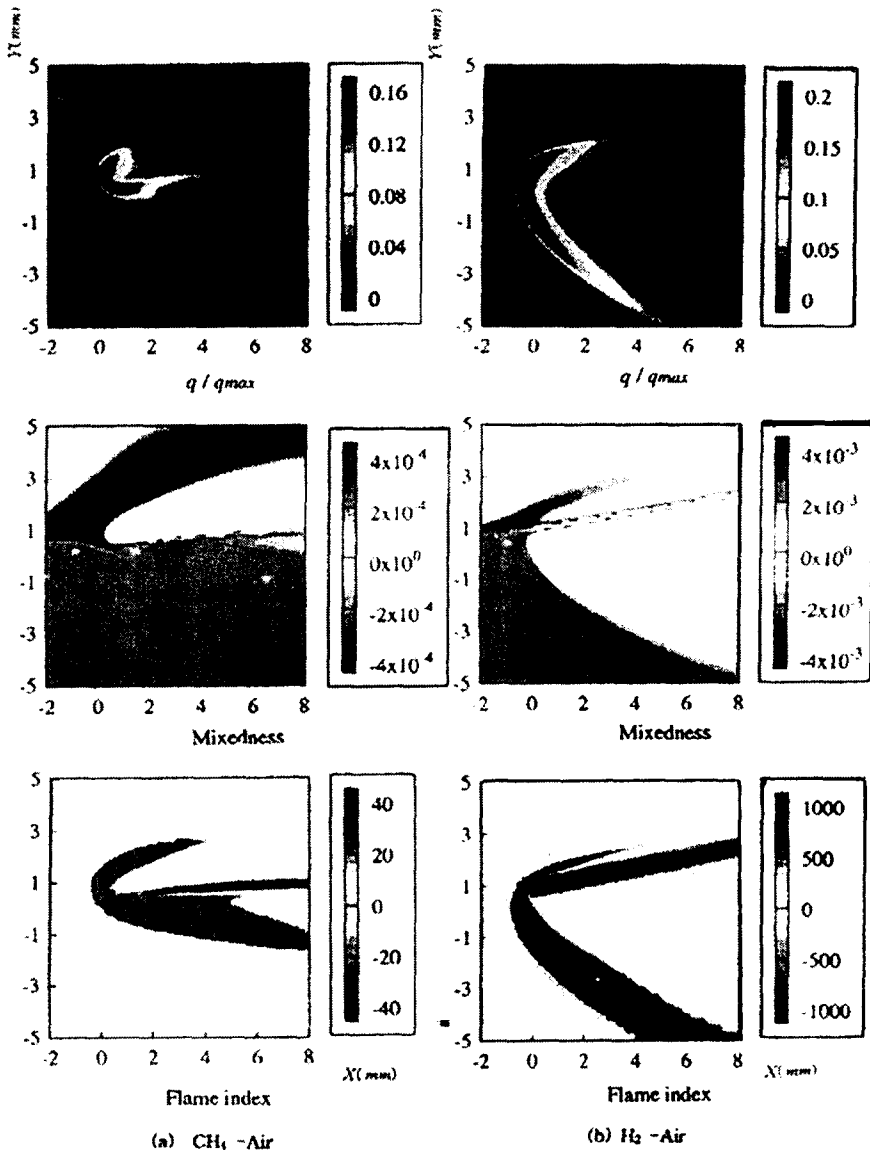


Fig. 8 (a),(b) Spatial distribution of q/q_{max} , mixedness and flame index at different kinds of fuel ($\phi=10$)

존하고있는 것을 알 수 있다. Fig.8 (a)의 Flame Index 분포는 예혼합화염을 표시하는 정의 영역이 상류를 향하여 볼록형상을 하고 있고 그 중간에 확산화염을 표시하는 부의 영역이 아래쪽을 향하여 뻗어있는 것을 알 수 있다. Fig.8 (b) 수소의 경우는 부의 영역이 존재하고 있지만 위쪽에 접근한 위치에 분포하고 있는 것을 알 수 있다. 메탄의 Mixedness 분포는 과농예혼합을 표시하는 정의 영

역이 예혼합화염을 표시하는 영역 아래쪽의 완곡한 부분에 일치하고 있으며, 희박예혼합기를 표시하는 부의 영역이 위쪽의 완곡한부분에 일치하고 있는 것을 알 수 있다. 그리고 수소의 경우는 메탄의 경우와 비슷한 분포를 하고 있지만 희박예혼합기를 표시하는 영역이 좁은 것을 알 수 있다. 이것은 메탄의 경우는 2개의 예혼합화염과 중간에 확산화염이 존재하고 있지만 수소의 경우는 확산화

염이 희박에혼합화염쪽으로 접근하여 존재하고 있기 때문이다. 또 과농에혼합 화염의 분기는 메탄의 경우 하류쪽으로 뻗지 못하고 약해지고 있지만 수소의 경우는 하류까지 존재하며 전방에 위치하고 있다. 이것은 화학반응에 있어서 연료산화제의 양론 관계로부터 수소의 경우는 보다 많은 산소를 필요로 하기 때문에 확산화염이 공기쪽에 형성된다고 볼 수 있으며 또한 수소가 메탄에 비하여 확산속도가 빠르기 때문에 공기에 대한 연료의 확산정도가 많고 양론혼합하는 장소가 희박에혼합기 쪽에 가깝다고 생각할 수 있다.

4. 결 론

연료의 종류에 따라 평행류 하류에 형성되는 3중화염의 화염구조에 관하여 수치해석을 행한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 1차원 예혼합화염의 연소속도와 비교한 3중화염의 결보기 연소속도 변화 비율은 연료종류에 따라 크게 다르며 특히 수소의 변화비율이 크다.
- 2) 연료 종류에 따른 3중화염의 화염구조는 수소의 경우가 메탄에 비하여 확산화염이 희박에혼합 화염쪽으로 접근하고있다.

참고문헌

- (1) Phillips, H., "Flame in a Buoyant Methane Layer", Tenth Symposium(International) on Combustion, pp. 1277~1283, 1965.
- (2) Liebman, I., Corry, J. and Perlee, H. E., "Flame Propagation in Layered Methane-Air Systems", Combustion Science and Technology, Vol. 1, pp. 257~267, 1970.
- (3) Dold, J. W., "Flame Propagation in a Nonuniform Mixture : Analysis of a Slowly Varying Triple Flame", Combustion Flame, Vol. 76, pp. 71~88, 1989.
- (4) Kioni, P. N., Rogg, B., Rogg, K. N. C. and Linan, A., "Flame Spread in Laminar Layers : The Triple Flame", Vol. 95, pp. 276~290, 1993.
- (5) Ruetsch, G. R., Vervisch, L. and Linan, A.,

"Effects of heat release on triple flames", Phys. Fluids, Vol. 7, pp. 1447~1454, 1995

- (6) Domingo, P., Reveillon, J. and Vervisch, L., "Non-premixed flame in ignition in turbulent flows, triple flames", The 26th Symposium (International) on Combustion, pp. 1~5, 1994.
- (7) Prasad, K. and Price, E.W., "A Numerical Study of the Leading Edge of Laminar Diffusion Flames", Combustion Flame, Vol. 90, pp. 155~173, 1992.
- (8) Smooke, M. D. and Giovangigli, V., "Simplified Transport and Reduced Chemistry Models of Premixed and Nonpremixed Combustion", The 24th Symposium(International) on Combustion, pp. 813~839, 1992.
- (9) 堤谷,山下,崔洛挺,竹野, "Triple Flameの火炎構造に與える濃度の影響に關する研究", 第35回 燃焼シンポジウム前刷集, pp. 329~335, 1997
- (10) Smooke, M. D., "Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems", Springer-Verlag, pp. 177~195, 1991.
- (11) Kee, R. J., et. al., CHEMKIN - II, SAND89-8009, 1989.
- (12) Patankar, S. V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Mcgraw-Hill, 1980. Lists of figure

저 자 소 개



박상규 (朴祥奎)

1952년 10월생. 1979년 전북대학교 기계공학과 졸업. 1982년 한양대학교 대학원 기계공학과 졸업(석사). 1991년 일본 동북대학 공학연구과 기계공학전공 졸업(박사). 1997년~현재 우석대학교 이공대학 자동차공학과 교수 당학회 정회원.



최낙정 (崔洛挺)

1956년생. 1981년 동아대학교 기계공학과 졸업. 1992년 한양대학교 대학원 기계공학과 졸업(박사). 1996년~1997년 일본 나고야대학 기계시스템공학과 객원교수. 1993년~현재 국립 익산대학 자동차과 부교수. 당학회 정회원.