

고압 분위기하에 분사된 메탄가스 제트의 자연발화 및 화염전파 특성 해석

김성구** · 유용욱** · 김용모**

Numerical Analysis for Autoignition Characteristics of Turbulent Gaseous Jets in a High Pressure Environment

Seong-Ku Kim[†], Yongwook Yu^{**}, Yong-Mo Kim^{**}

ABSTRACT

The autoignition and subsequent flame propagation of initially nonpremixed turbulent system have been numerically analyzed. The unsteady flamelet modeling based on the RIF (Representative Interactive Flamelet) concept has been employed to account for the influences of turbulence on these essentially transient combustion processes. In this RIF approach, the partially premixed burning, diffusive combustion and formation of pollutants(NOx, soot) can be consistently modeled by utilizing the comprehensive chemical mechanism. To treat the spatially distributed inhomogeneity of scalar dissipation rate, the multiple RIFs are employed in the framework of EPFM(Eulerian Particle Flamelet Model) approach. Computations are made for the various initial conditions of pressure, temperature, and fuel composition. The present turbulent combustion model reasonably well predicts the essential features of autoignition process in the transient gaseous fuel jets injected into high pressure and temperature environment.

Key Words : Autoignition, turbulent gaseous jets, multiple-RIF model

1. 서 론

고압, 고온하에 분사된 연료제트의 점화현상 및 화염전파특성은 디젤엔진이나 가스터빈 엔진, 액체로켓엔진들을 설계하는 데 있어 매우 중요한 인자이다. 이러한 연소시스템에서, 고속으로 분사되는 연료제트는 강한 난류유동을 형성하고, 이때 난류와 화학반응간의 상호작용은 뒤따르는 연소현상을 결정짓는 중요한 역할을 하게 된다. 따라서 이에 대하여 보다 자세한 현상적 이해와 해석을 위해 최근에 많은 연구가 활발히 진행되고 있다[1-10].

난류연소현상을 모사하는 데 가장 큰 어려움은 난류유동에서 나타나는 시간 및 공간상의 스케일

이 광범위한 스펙트럼으로 존재하며, 별도의 모델링 없이 직접적으로 모사할 수 있는 직접모사해법(Direct Numerical Simulation)은 실제 연소 시스템에서 나타나는 높은 레이놀즈 수 영역에 적용하기에는 실제로 불가능하다는 데 있다. 또한, 이와는 별도로 Arrhenius 타입의 강한 비선형성을 갖는 화학반응 역시 넓은 범위에서의 시간스케일이 공존하고 있으므로, 상세화학반응과 난류간의 상호작용을 적절히 모사하는 것 역시 상당한 어려움이 뒤따른다.

최근 들어, 광계측 기술을 이용한 보다 체계적이고 자세한 실험데이터의 축적을 토대로 난류연소 모델링에 관한 눈부신 발전들이 이루어지고 있으며, 그중에 층류화염편(laminar flamelet) 모델 [1-5], CMC(Conditional Moment Closure) 모델 [6,7], 그리고 PDF(Probability Density Function) transport 모델[8-10]은 난류연소에 관련된 근본적인 현상 뿐만아니라 설계에 유용하게 사용될

* 한국항공우주연구원 추진기관연구부

** 한양대학교 기계공학과

† 연락처, kimsk@kari.re.kr

수 있는 틀을 제공할 수 있는 수준까지 발전하고 있다. 위의 세 모델들은 서로에 대한 우월성과 약점을 동시에 가지고 상호보완적으로 개발되어 가고 있으며, 이에 대해서는 본 논문에서 제시한 참고문헌들을 참고하길 바란다.

본 연구에서는 디젤 엔진 등에서 나타나는 분무 난류연소장을 해석하기 위해 개발되어 온 비정상 층류화염편 모델[2-5]에 초점을 두었다.

층류화염편 모델의 공통적인 가정은 한 지점에서의 난류화염은 층류화염편이라 불리는 본질적으로 1차원적인 국소화염구조들의 앙상블로 구성되어 있으며, 난류유동에 의해 신장(stretching)되거나 주름(wrinkling)지게 됨으로 층류화염편 내의 분자단위 물질 및 열 확산에 영향을 받게 된다는 것이다. 기존의 층류화염편 모델은 대부분 난류유동장내에서 겪게 되는 변화에 대해 층류화염편의 반응속도가 매우 크며, 따라서 층류화염편들은 준정상상태로 존재한다는 가정에 기초하였다[1]. 이러한 가정을 통하여, 난류연소장 계산에 앞서 존재가능한 모든 영역에 걸쳐 층류화염편 방정식의 정상상태 해로부터 라이브리리틀 구성하여 사용하였다. 그러나 이러한 가정은 NOx 생성 및 복사열전달과 같이 특성시간이 매우 큰 물리현상들을 고려하거나 디젤엔진처럼 매우 급격한 유동 및 혼합구배의 변화를 겪게 되는 비정상적인 화염변화를 고려하는 경우에는 적용할 수 없는 단점을 가진다[5].

Pitsch등[2]은 정상상태 층류화염편 라이브리리틀 사용하지 않고 CFD solver와 층류화염편 방정식의 비정상 해를 상호결합하여 국소화염구조의 비정상적 거동을 직접적으로 고려할 수 있는 RIF (Representative Interactive Flamelet) 모델을 제안하였다. 이러한 모델링 개념을 도입하면서, 연소반응에 관련된 복잡한 현상들, 즉 자연발화 및 부분 예혼합 화염전파에서 확산화염으로의 연소 모드 전환, NOx와 soot과 같은 공해배출물질의 생성과정을 각각 별도로 모델링하지 않고 상세화학반응 메카니즘에 의해 직접적으로 고려할 수 있다. 이러한 비정상 층류화염편 모델은 그동안의 많은 연구들[2-5]을 통해 정적연소실 및 실제 디젤엔진내에서의 점화시기와 NOx 및 soot의 생성을 비교적 성공적으로 예측할 수 있었다. 그러나 저자가 알기로는 모든 연구들이 액체연료에만 초점을 맞추어 왔으며, 이 경우 예측결과들은 난류연소모델 뿐만 아니라 액적증발, 미립화 및 액적분열 모델등과 같은 분무모델에 매우 큰 영향을 받는다[4]. 따라서 본 연구에서는 분무모델의 영향을 배제할 수 있도록, 가스연료를 분사하는 경우에 대한 수치해석을 통하여 고압, 고온의 분위기하에 고속으로 분사된 연료제트의 자연발화 및 화염전파 특성에 난류와 화학반응간의 상호작용

이 미치는 영향에 대해 보다 자세히 분석하고 본 연구에서 사용하는 비정상 층류화염편 모델의 예측능력을 검증하고자 하였다. 본 연구에서 해석 대상으로 삼은 실험[11]은 이미 Kim과 Huh가 first-order CMC 모델[6]을 이용하여 해석한 바 있으므로, 두 모델간의 예측결과를 비교하는 것 역시 의미가 있으리라 사료된다.

2. Unsteady Flamelet Modeling

2.1 RIF concept

본 연구에서 사용한 RIF 모델에 대한 내용은 참고문헌[2-5]에 잘 나타나 있으므로 간략하게만 설명하도록 하자. 층류화염편내의 화학종 및 에너지 지배하는 방정식을 혼합분율(mixture fraction) Z 에 대해 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \frac{\chi}{2} \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \frac{1}{\rho c_p} \left(\sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} \right) \quad (2)$$

이때, 공간상에서 혼합분율상으로 좌표변환을 하게 됨에 따라 나타나게 되는 매개 변수인 스칼라 소산율 χ 는 다음과 같이 나타낼 수 있으며, 층류화염편내의 분자단위 확산에 대한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다.

$$\chi \equiv 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \approx \chi_{st} f(Z) = \chi_{st} \frac{Z^2 \ln Z}{Z_{st}^2 \ln Z_{st}} \quad (3)$$

초기에 RIF 모델은 전체 해석영역에 대한 국소화염구조가 하나의 층류화염편(single RIF)으로 대표된다고 가정하였으나, Barths[3]등은 주어진 시간에서 공간상으로 불균일하게 존재하는 스칼라 소산율의 분포를 고려할 수 있도록 확장한 multiple RIF 모델인 EPFM(Eulerian Partilce Flamelet Model) 모델을 제안하였다. 이때, 주어진 시간과 공간에서 각 화학종의 평균질량분율은 다음과 같이 나타난다.

$$\bar{Y}_k(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^N \bar{I}_i(\vec{x}, t) * \int_0^1 Y_k^i(Z, \langle \chi/Z \rangle_i; t) \bar{P}(Z; \vec{x}, t) dZ \quad (4)$$

여기서 $P(Z)$ 는 beta 함수를 사용한 혼합분율에 대한 확률밀도함수(PDF)를 의미하고, $I_i(\mathbf{x}, t)$ 는 주어진 시간 t 와 공간 \mathbf{x} 에서 i 번째 RIF가 발견될 수 있는 확률을 의미하여 다음과 같은 보존방정식을 통해 구해진다[3].

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{I}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \hat{I}_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_1} \frac{\partial \hat{I}_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

식(4)에 나타난 Y_k^i 는 i 번째 RIF에 대해 식(1)과 (2)로 계산된 비정상상태 해를 의미하며, 이를 구하기 위한 조건부 스칼라소산을 $\langle x/Z \rangle_i$ 는 식(3)에서처럼 다음과 같이 나타난다.

$$\langle x/Z \rangle_j = \langle \hat{x}_{st} \rangle_i f(Z) \quad (6)$$

주어진 시간에서 i 번째 RIF이 가지는 평균조건부 스칼라소산율은 다음과 같이 계산된다.

$$\langle \hat{x}_{st} \rangle_i(t) = \frac{\int_V \hat{I}_i \bar{\rho} \langle x_{st} \rangle^{3/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV}{\int_V \hat{I}_i \bar{\rho} \langle x_{st} \rangle^{1/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV} \quad (7)$$

여기서,

$$\langle x_{st} \rangle(\vec{x}, t) = \frac{c_x \tilde{\epsilon} \tilde{Z}^{-\gamma/2}}{\int_0^1 f(Z^*) \tilde{P}(Z^*) dZ^*} \quad (8)$$

2.2 해석 대상 및 조건

Fraser등은 디젤엔진 조건을 모사할 수 있는 고온, 고압의 분위기하에 메탄가스를 분사시켜 자연발화 및 점화지연특성에 대한 실험적 연구를 수행하였다[11]. Fig.1에 나타난 지름이 80mm이고 길이가 29mm인 원형 실린더 연소실로 지름이 0.57mm인 인젝터 오리피스를 통해 7ms동안 36 ± 7 mg의 가스연료가 분사된다. 이때, 고온·고압의 분위기를 만들어주기 위해, Table 1에 나타난 수소-에틸렌-산소-질소의 예혼합기를 미리 연소시킨다. 미리 채워지는 예혼합기의 양과 연소 이후 연소실 벽면을 통한 열전달되는 시간을 조절하여 분사이전에 다양한 분위기 조건을 만들어 주었다. 이러한 과정을 통해, 600K부터 1600K, 5기압에서 80기압까지 초기 압력 P_0 와 초기 온도 T_0 를 변화시켜가며 점화지연특성을 연구하였다. 본 연구에서는 초기 분위기 조건을 $P_0=25, 40, 55$ atm 그리고 $T_0=1200, 1350, 1500$ K로 변화시켜가며 해석을 수행하였다. 실험에서는 또 한가지 중요한 실험인자로서 메탄에 비교적 작은 양의 에탄(2~10%) 또는 프로판(1~4%)를 혼합하여 연료의 조성비 변화에 따른 점화특성을 연구하였다. 본 연구에서는 연료조성비는 에탄이 각각 0, 5.14, 10.6%가 혼합된 세가지 연료조성비에 대해 해석하였다. 해석을 용이하게 하기 위해 연소실 체적과 분사기로부터 맞은 편 벽면까지 길이를 실험과 같게 설정하여 반경이

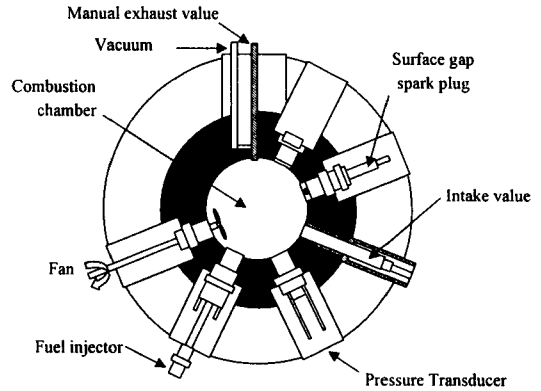


Fig.1 Schematic cross-section of the combustion vessel [11]

24mm, 축방향 길이가 80mm인 축대칭 실린더로 가정하였다. 분사기 출구에서의 조건은 실험에서 제시되어 있는 상류조건(204기압, 444K)을 바탕으로 등엔탈피 과정이라 생각하여 계산하였으며, $P_0=40$ 기압일 때 분사속도는 802 m/s이다. 위에 나열한 해석조건은 CMC 모델을 이용한 Kim과 Huh[6]의 해석적 연구에서와 동일하게 설정한 것이다.

Table 1 Pre-injection condition obtained by burning of a premixed charge of $C_2H_4/H_2/O_2/N_2$ mixture

	Reactants	Products		
Pressure	10.6 atm	40.7 atm		
Temperature	444 K	1146 K		
Mol. Wt.	27.59	28.43		
Species mole fractions	N_2	0.648	N_2	0.666
	O_2	0.278	O_2	0.208
	H_2	0.059	H_2O	0.092
	C_2H_4	0.015	CO_2	0.031
			NO	0.003

2.3 수치 및 물리모델

본 연구에서 시간에 따라 해석해 나가는 절차는 크게 두 부분으로 이루어져 있다. 평균연소유동장의 해석은 KIVA-3V 코드를 본 난류연소모델에 알맞게 수정하여 사용하였으며, 비정상 층류화염면 계산은 CHEMKIN-II[12]를 기반으로 작성한 별도의 서브루틴을 통해 이루어진다. 두가지 부분들이 한 시간중분동안 상호연관적으로 계산을 수행하게 되며, 이러한 해석절차는 Fig.2에 개념적으로 나타내었다.

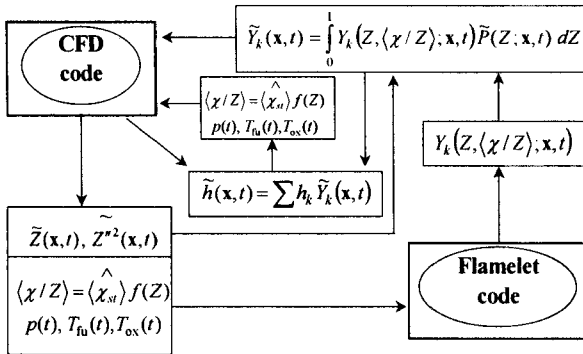


Fig.2 Schematic diagram for solution procedure of RIF (Representative Interactive Flamelet) concept during one time step

식(1)과 (2)로 주어진 비정상 층류화염면 방정식은 stiff ODE solver인 LSODE[13]를 사용하여 계산하는데, 이때 유동장이 해석되는 시간증분에 비하여 화학반응이 갖는 시간스케일이 훨씬 작으므로, 내부에서 자동으로 보다 작은 시간간격으로 나누어 시간적분을 수행하게 된다. 메탄가스의 상세화학반응을 모사하기 위해 GRI-3.00 메커니즘[14]을 사용하였으며, 해석결과에 대한 화학반응식의 영향을 평가하기 위해 필요에 따라 GRI-2.11 메커니즘을 이용해 구한 해석결과도 함께 나타내었다. 본 연구에서 NO_x 생성은 고려 대상이 아니므로, 효율적인 계산을 위해 GRI 메커니즘에서 NO_x 생성에 관련된 부분은 제외시키고 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 균일 혼합기의 점화지연

식(1)과 (2)에서 나타나듯이 고속으로 분사된 연료제트에서 국소화염구조는 주로 화학반응과 난류혼합간의 경쟁적인 상호작용에 의해 결정된다. 따라서 해석을 수행하기 앞서, 균일한 혼합상태에서 난류혼합의 영향을 배제한 채, 화학반응에 의해서만 결정되는 점화지연을 살펴보는 것 또한 유용하리라 생각하였다. 여러 가지 조건하의 균일혼합기에 대해 homogeneous constant-volume reactor 계산을 수행하였다.

Fig.3(a)는 $P_0=40\text{atm}$ 인 경우 순수 메탄연료에 대한 결과를 나타내고 있으며, 초기 온도, T_0 에 대한 점화지연의 의존성이 매우 크다는 것을 알 수 있다. $1/T_0$ 가 증가함에 따라 점화지연시간은 거의 지수함수적(exponential)으로 증가하게 된다. 예를 들어, $T_0=1500\text{K}$ 에서의 점화지연이 0.047ms 인데 반해 $T_0=1200\text{K}$ 으로 감소하면 약 20배정도 큰 0.92ms로 점화지연이 증가된다.

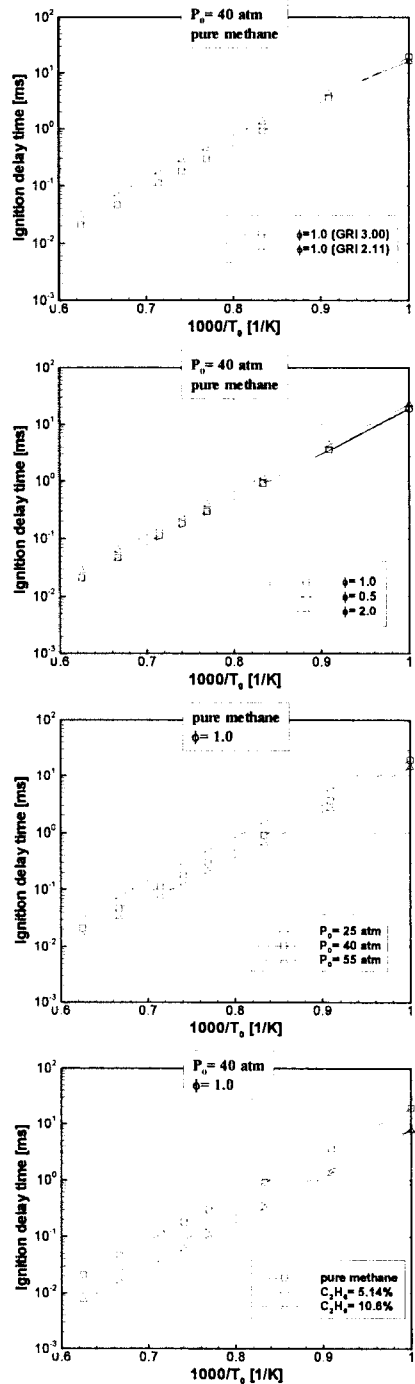


Fig.3 Prediction of homogeneous ignition delay times of methane/ethane-air mixtures

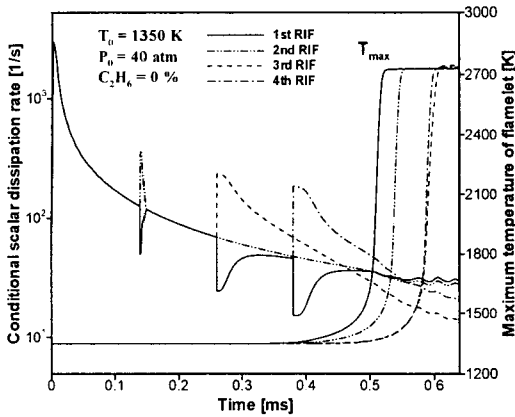


Fig.4 Time evolution of domain-averaged conditional SDR and max. temperature of four RIFs for pure methane jet injected at $T_0=1350$ and $P_0=40$ atm

또한, 높은 초기온도에 대해서는 예측결과가 사용한 반응 메카니즘에 민감하게 나타남을 알 수

있으며, GRI 3.00에 의한 예측된 점화지연시간에 비해 GRI 2.11의 결과는 보다 길게 나타나게 된다. $\phi=0.5, 1.0, 2.0$ 인 세가지 당량비에 대해 계산 결과를 나타낸 Fig.3(b)를 보면, 연료희박조건($\phi=0.5$)이 이론당량비($\phi=1.0$)에서 보다 점화가 빨리 일어나는 것을 알 수 있으며, 실제 문제에서도 이론당량비에서 약간 벗어난 연료희박한 영역에서 점화에 보다 유리한 조건이 형성될 것으로 생각할 수 있다. Fig.3(c)와 Fig.3(d)를 보면, 초기 압력이 증가함에 따라 점화지연이 줄어들게 됨을 알 수 있으며, 메탄에 에탄을 첨가하는 경우 눈에 떨 정도로 점화가 촉진됨을 알 수 있다. 이는 에탄이 첨가되는 경우 점화지연 초기에 라디칼 풀(pool)의 형성을 촉진시키기 때문으로 생각할 수 있다.

3.2 기준조건하에서의 메탄 가스제트의 자연발화 및 화염전파 특성 해석

메탄가스제트가 분사된 이후 나타나게 되는 자연 발화 및 이후 화염전파되어가는 특성을 살펴보기 위해 우선 $P_0=40$ atm이고 $T_0=1350$ K에서의 순수메탄제트인 경우를 기준 조건으로 삼아 해석을 수행하였다.

Fig.4는 평균 조건부 스칼라소산율과 층류화염면내의 최대온도의 시간에 따른 변화를 나타내고 있다. 분사 직후에는 고속의 분사제트에 의해 급격한 난류가 형성되고 혼합구배가 커지기 때문에 스칼라소산율이 매우 높게 나타나게 된다. 이러한 초기 기간을 지나면서 난류가 점차 소산되면서 난류혼합구배가 완화되기 때문에 스칼라소산율은 빠르게 감소하게 된다. 이에 따른 층류화염면내의 영향을 생각해 보면, 높은 스칼라소산율하에서는 반응면으로부터 빠져나가는 열 및 물질 확산이 반응에 의해 생성되는 열 및 반응라디칼의 양에 비해 크기 때문에 국소화염구조는 점화가 지연된다. 그러나 스칼라소산율이 점차 낮아지게 됨에 따라 반응면에서의 반응이 일어날 수 있는 체류시간이 커지게 되고 점차 점화반응에 유리한 조건들이 축적되기 시작하고 어느 순간을 지나면서 반응속도가 매우 빨라지며 점화가 이루어지게 된다. Fig.4에서 보듯이, 자연발화는 스칼라소산율이 초기 최대치에 비해 두 오더정도 낮아지게 되는 0.38ms를 지나면서 시작되고 첫 번째 층류화염면의

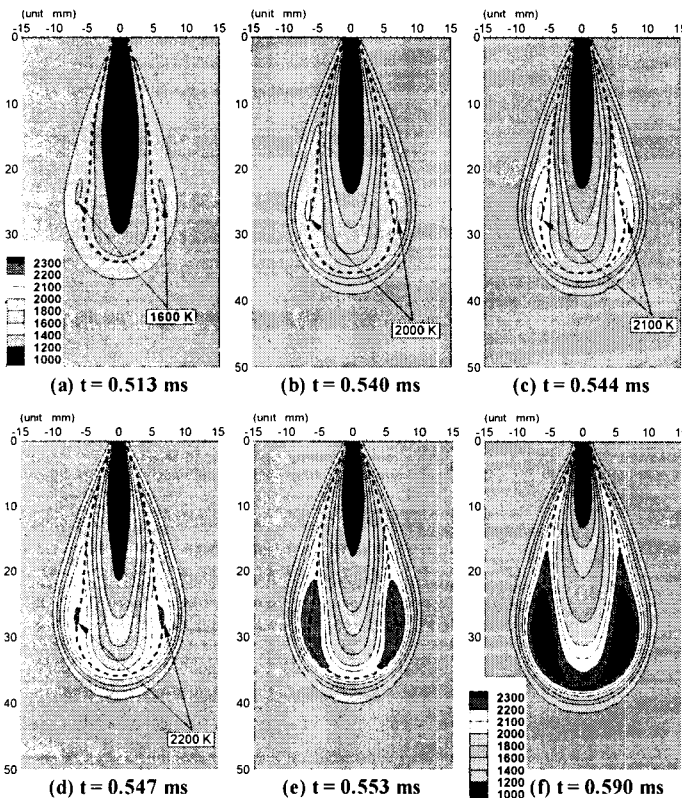


Fig.5 Predicted distributions of mean temperature near autoignition of pure methane jet injected at $T_0=1350$ K and $P_0=40$ atm (dashed line represents mean stoichiometric line)

급격한 온도 상승은 0.51ms 근처에서 일어나게 됨을 알 수 있다. Fig.3(b)에 나타난 동일한 조건 하에서 균일혼합기의 점화지연시간(0.163ms at $\phi = 0.5$)과 비교할 때, 난류와 화학반응간의 상호작용은 난류제트의 자연발화특성에 매우 큰 영향을 미치므로 화학반응에만 의존할 때 보다 점화지연 시간이 현저히 증가함을 알 수 있다.

Fig.5는 자연발화가 일어나는 0.54ms 근방에서 평균온도장을 통해 화염전파특성을 살펴본 결과이다. 이때, 평균 이론당량비선(stoichiometric line)은 점선으로 표시되었다. $t=0.513$ ms에서의 결과인 Fig.5(a)에서 보면 제트 하류의 연료희박한 영역에서 초기 온도(1350K)보다 높은 1600K의 고온영역이 형성됨을 알 수 있다. 이러한 초기 점화영역은 곧바로 이론당량비선으로 달라붙게 되고(Fig.5(b)), 이후 이론당량비선을 따라 각각 상류와 하류로 화염이 전파되어가는 특성을 살펴볼 수 있다. 대류의 영향으로 하류쪽으로의 화염전파가 훨씬 더 빠르게 일어나게 되고, 동시에 이론당량비를 중심으로 각각 연료희박과 과농영역으로 화염이 전파되는 것을 확인할 수 있다.

Fig.6은 국소화염구조상에서 나타나는 화염전파특성을 살펴보기 위해, 첫 번째 층류화염편내에서의 온도, O₂의 질량분율 및 화학반응율을 나타낸 결과이다. 분사 초기에는 화학반응이 없는 순수혼합상태로 존재하기 때문에 반응물과 엔탈피가 선형적인 분포를 갖게 된다. 앞서 설명한 대로, 충분한 시간이 지나 스칼라소산율의 감소로 인해 열 및 반응라디칼이 축적되게 되므로 0.470ms에서 보면 상대적으로 연료희박한 혼합영역에서 온도 상승이 관찰되고, 이후 짧은 시간 안에 이론당량 혼합기의 연료와 산화제가 급격히 소멸됨을 알 수 있다. 그후에는 연료과농한 지역 ($Z > Z_{st}$)과 연료희박영역($Z < Z_{st}$)으로 예혼합화염이 전파하게 되며, 이에 따라 점차 넓어지는 반응영역안의 온도와 반응물의 분포는 확산화염의 분포에 가까워짐을 확인할 수 있다. 상대적으로 긴 시간이 지난 $t=0.650$ ms에서의 결과를 보면, 연료희박한 혼합영역에서의 반응물이 거의 다 타서 이론한계(Burke-Schumann limit)로 존재하는 반면, 연료과농영역에서는 여전히 O₂가 존재하고 있는 것을 알 수 있다. O₂의 반응속도로 살펴보면, 자연발화가 일어나는 시점($t=0.506$ ms)에서 반응율의 최대치는 연료희박혼합영역에서 일어나 빠르게 이론당량혼합기로 이동하게 된다. 이론혼합기에서의 예혼합 반응물이 다 소멸된 이후에는 연료희박한 지역과 연료과농영역으로 화염이 전파되어 가는 것을 볼 수 있으며, 양쪽으로부터 잔류하는 각각의 연료와 산화제가 확산되어 들어오면서 초기의 반응율에 비해 매우 작은 값으로 확산화염이 $Z=Z_{st}$ 에서 유지되고 있다.

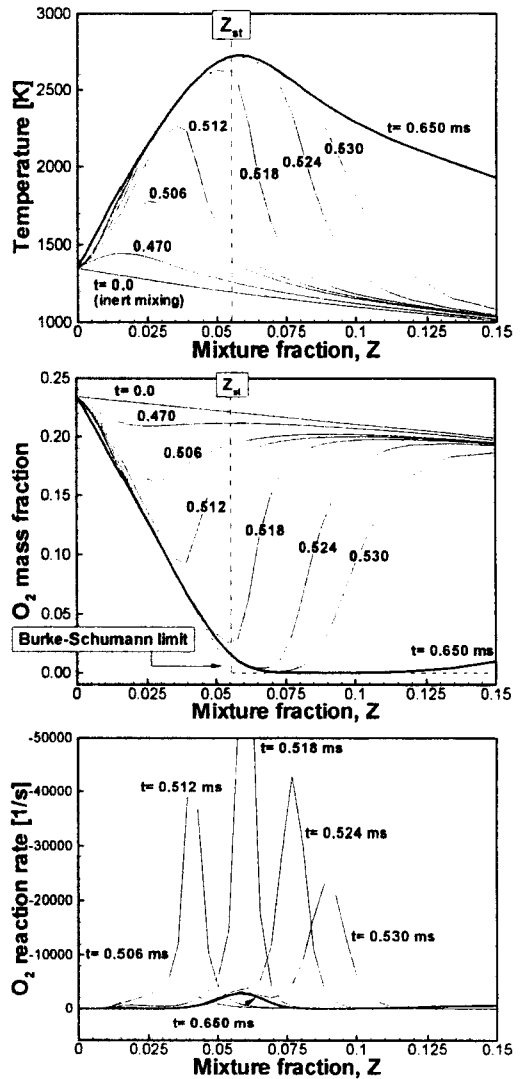


Fig.6 Temporal evolution of local flame structure in terms of temperature(top), O₂(middle), and its reaction rate(bottom) of the first RIF near autoignition of pure methane jet with $T_0=1350$ K and $P_0=40$ atm

결국 반응율의 세 가지 최대치(lean flame propagation + diffusion flame + fuel rich flame propagation)로 관찰되는 예혼합 화염전파에 의한 확산화염으로의 연소모드의 전환은 일반적으로 잘 알려진 삼지화염(triple flame)과 매우 유사한 구조를 가지게 됨을 알 수 있다. 여기서 생각해 볼 것은, 스칼라소산율은 국소화염구조에 두가지 상반된 영향을 미친다는 점이다. 높은 스칼라소산율은 자연발화 이전에는 점화를 지연시키는 반면, 일단 자연발화가 일어난 이후에는 화염전파를 촉진시키므로 화염구조를 보다 빠르게 확산화염으로 전환시키는 역할을 하게 된다.

3.3 초기조건에 따른 메탄가스 제트의 점화지연 특성

마지막으로, 초기온도 및 압력, 그리고 연료조성비에 따른 점화지연시간의 변화를 살펴보자.

Fig.7은 각각의 초기압력에 대해서 순수메탄가스 제트의 점화지연시간을 실험과 비교한 결과이다. 우선 $P_0=40\text{atm}$ 인 경우를 보면 해석결과는 앞서 3.1절에서 언급하였듯이 반응메카니즘에 민감하게 나타남을 알 수 있다. 초기온도가 낮은 경우에는 GRI 3.00 메카니즘에 의한 예측결과가 실험과 잘 일치하고 GRI 2.11의 경우에는 두배 이상 점화지연시간을 과대예측하는 반면에, 초기온도가 높아짐에 따라 반대로 GRI 3.00의 결과는 실험과 GRI 2.11의 결과에 비해 점화지연시간을 상당히 과소예측하는 경향을 보였다. 하지만 이러한 정량적인 불일치에도 불구하고, 예측결과는 실험에서 나타나는 초기온도가 증가함에 따라 점화지연시간이 급격히 작아지게 되는 특성을 정성적으로 잘 예측하였다. Fig.7을 보면, 동일한 GRI 3.00 메카니즘을 사용하는 경우 본 연구에서 사용한 비정상 층류화염면 모델의 결과는 세 가지 초기압력조건에 대해서 모두, first-order CMC 모델을 사용한 Kim과 Huh의 예측결과[6]와 거의 일치하게 나타남을 알 수 있다. 비록 두 연소 모델의 물리적 가정 및 수학적 근거는 서로 완전히 다르지만, CMC 모델이 first-order closure에 기반을 두는 한에는 최종적인 유도되는 수식이 RIF 모델의 비정상 층류화염면 방정식 (1)과 (2)와 매우 유사하게 나타난다는 점을 생각한다면, 이는 그다지 놀랄 만한 사실은 아닐 것이다.

Fig.7에 나타난 결과에 대해 초기압력의 영향을 생각할 때, 초기압력의 증가에 따라 점화지연시간이 줄어들게 되는 경향은 실험과 해석결과가 동일하게 나타나고 있다. 그러나 실험에서 보면, 압력이 증가하게 되는 경우, $1/T_0$ 에 대한 점화지연시간의 로그함수적 기울기가 점차 작아지고 있다. 다시 말해, 초기압력의 증가에 따라 초기온도에 따른 점화지연의 의존성이 줄어들게 된다. 그러나 해석결과를 보면 초기압력의 증가에 대해 점화지연시간 자체는 줄어들지만 실험에서 나타나는 이러한 특성과는 무관하게 세 가지 초기압력 조건에 대해 거의 동일한 기울기를 나타내게 되고, 따라서 $P_0=25\text{atm}$ 인 경우보다 $P_0=55\text{atm}$ 에서 해석결과와 실험의 정량적 불일치가 훨씬 더 커짐을 알 수 있다. 이에 대한 이유는 본 연구에서 사용한 standard k- ϵ 난류모델의 한계와 고압영역에서 화학반응 메카니즘이 가지는 부정확성에 기인한 것으로 사료된다.

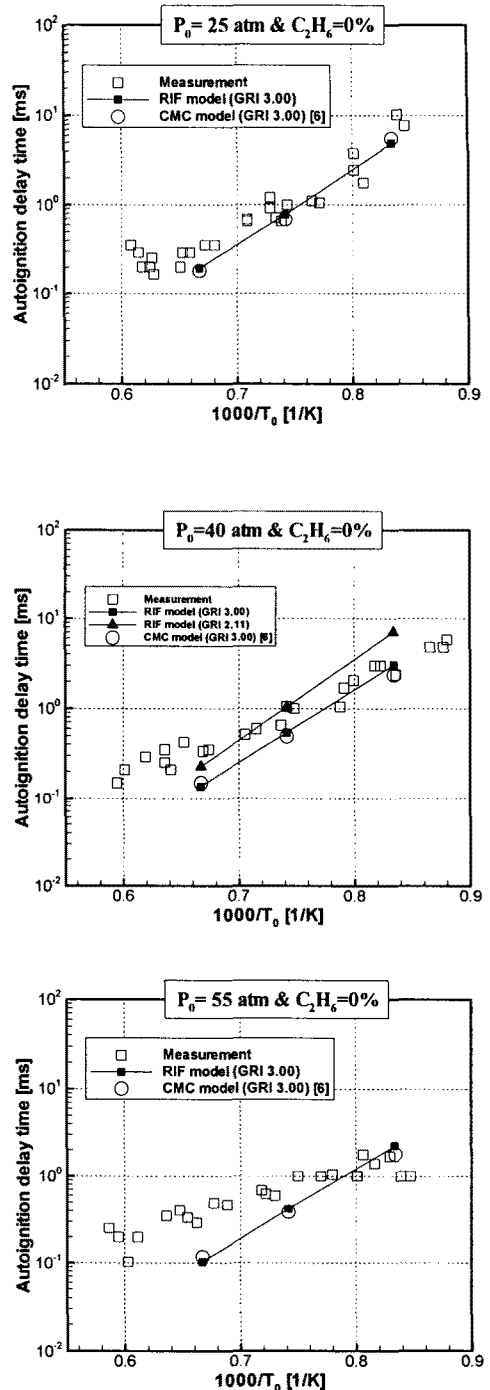


Fig.7 Comparison of autoignition delay time between prediction and measurement for pure methane jet at various initial conditions (CMC results between circle are taken from the previous work of Kim and Huh[6])

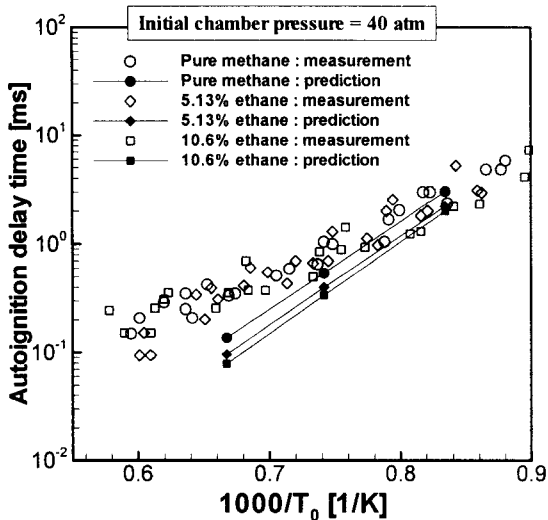


Fig.8 Effect of fuel composition on auto-ignition delay time at $P_0=40\text{atm}$

Fig.8은 $P_0=40\text{atm}$ 으로 고정하고, 메탄에 에탄을 각각 0%, 5.13%, 10.6% 첨가시켜가며 연료조성비를 변화시킬 경우에 대해 해석결과를 실험과 비교한 것이다. 실험에서 밝힌 연료조성비의 영향과 마찬가지로, 에탄이 첨가됨에 따라 점화지연시간이 줄어드는 경향을 잘 예측하였다.

4. 결론

1) 본 연구에서 사용한 비정상 층류화염편 모델은 고압, 고온의 분위기하에 분사된 메탄가스제트의 자연발화 및 화염전파에 관련한 본질적인 특징들을 잘 나타내었으며, 실험에서 나타난 세가지 인자, 초기 온도 및 압력, 그리고 연료조성비에 따른 점화지연 특성을 정성적으로 잘 예측하였다.

2) 층류화염편에 대한 난류유동의 영향을 나타내는 중요한 파라미터인 스칼라소산율은 분사초기에는 강한 난류혼합으로 인해 매우 높게 나타났으며, 이는 국소화염구조내의 분사단위 물질 및 열 확산을 증가시키므로, 동일조건하에서 나타나는 균일혼합기의 점화지연시간 보다 현저히 길게 자연발화를 지연시킨다. 점차 난류혼합이 완화된 스칼라소산율의 감소함에 따라 화학반응에 의해 생성되는 열 및 반응라디칼이 축적되어 연료희박한 혼합영역에서부터 점화가 일어나게 된다. 이때, 이혼합영역에서부터 반응물간의 급격한 소멸이 이루어지고 연료희박한 영역과 연료과농

한 지역으로의 예혼합화염전파를 통해 국소화염구조는 점차 확산화염으로 연소모드의 전환이 이루어짐을 알 수 있었다. 이러한 현상은 평균온도 분포로 나타나는 전체화염구조에서도 그대로 반영되었다.

3) 초기온도의 증가에 따라 점화지연시간은 현저히 감소하였으며, 초기압력의 증가와 에탄의 첨가에 따라서도 자연발화가 촉진되는 경향을 잘 예측하였다. 또한 본 연구에서 사용한 비정상 층류화염편 모델은 1st-order CMC 모델을 사용한 이전 연구결과[6]와 거의 동일한 예측능력을 나타낼 수 있었다. 그러나 실험에서는 초기압력이 증가함에 따라 초기온도에 대한 점화지연의 의존성이 상대적으로 감소하는 경향을 가지는 반면, 해석결과는 초기압력 변화와는 무관하게 온도에 따른 점화지연시간의 기울기를 거의 동일하게 예측하였으며, 압력이 증가하는 경우에는 정량적 불일치가 크게 나타났다. 이는 본 연구에서 사용한 난류모델이 갖는 예측능력의 한계와 고압 조건하에서의 반응메카니즘의 불확실성에 기인한 것으로 사료된다.

참고문헌

- [1] N. Peters, "Turbulent Combustion," Cambridge University Press, 2000.
- [2] H. Pitsch, H. Barths and N. Peters, "Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach," SAE paper 962057, 1996.
- [3] H. Barths, C. Hasse, G. Bikas and N. Peters, "Simulation of Combustion in Direct Injection Diesel Engines Using a Eulerian Particle Flamelet Model," 28th Symp. (Int.) Comb., 2000, pp. 1161-1168.
- [4] Y. W. Yu, S. K. Kim and Y. M. Kim "Numerical Modeling for Auto-ignition and Combustion Processes of Fuel Sprays in High-Pressure Environment," Combustion and Science Technology, Vo. 168, 2001, pp. 85-112.
- [5] 김성구, "Studies on Detailed Structure and NOx Formation of Turbulent Nonpremixed Flames using Flamelet Models," 한양대학교 박사학위 논문, 2001.
- [6] S. H. Kim, K. Y. Huh and R. A. Fraser, "Modeling Autoignition of a Turbulent Methane Jet by the Conditional Moment Closure Model". 28th Symp. (Int.) Comb., 2000, pp. 185-191.

- [7] A. Y. Klimenko and R. W. Bilger, "Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 25, 1999, pp. 595-687.
- [8] P. A. Libby and F. A. Williams, editors, "Turbulent Reacting Flows," *New York, Academic Press*, 1994.
- [9] S. B. Pope, "Turbulent Flows," *Cambridge University Press*, 2000.
- [10] L. Vervisch and D. Veynante, "Turbulent Combustion Modeling," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 28, 2002, pp. 193-266.
- [11] R. A. Fraser, D. L. Siebers and C. F. Edwards, "Autoignition of Methane and Natural Gas in a Simulated Diesel Environment," *SAE paper 910227*, 1991.
- [12] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, "Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," *Technical Report SAND 89-8009B UC-706, Sandia National Laboratories*, 1992.
- [13] K. Radhakrishnan and A. C. Hindmarsh, "Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations," *Lawrence Livermore National Laboratories Report, UCRL-ID-113855*, 1993.
- [14] <http://euler.berkeley.edu/gri-mech/>