

# 와동과 상호작용하는 대향류 비예혼합화염의 비정상 응답특성

오창보\* · 박 정\*\* · 이창언\*\*\*

## Unsteady Response of Counterflow Nonpremixed Flames Interacting with a Vortex

Chang Bo Oh, Jeong Park and Chang Eon Lee

### ABSTRACT

A two-dimensional direct numerical simulation is performed to investigate the flame structure of  $\text{CH}_4/\text{N}_2$ -Air counterflow nonpremixed flame interacting with a single vortex. The detailed transport properties and a modified 16-step augmented reduced mechanism based on Miller and Bowman's detailed reaction mechanism are adopted in this calculation. To quantify the strain on flame induced by a vortex, a scalar dissipation rate (SDR) is introduced. Results show that the fuel and air-side vortex cause an unsteady extinction. In this case, the flame interacting with a vortex is extinguished at much larger SDR than steady flame. It is also found that air-side vortex extinguishes a flame more rapidly than fuel-side vortex. The unsteady effect induced by flame-vortex interaction does not lead to a transient OH overshoot of the maximum steady concentration observed in experiment, while  $\text{HO}_2$  radical increases more than the maximum steady concentration with increasing SDR. In addition, it is seen that NO and  $\text{NO}_2$  are not sensitive to the unsteady variation of SDR.

**Key Words** : Unsteady Response, Flame-Vortex Interaction, Augmented Reduced Mechanism, Extinction

### 1. 서 론

난류는 다양한 크기와 강도를 갖는 와동들에 의해 특징지어지며, 난류화염은 이러한 와동들과 상호작용하는 화염으로 모델링될 수 있다. 이렇게 난류화염을 와동과 상호작용하는 화염으로 간단히 모델링하여 화염구조를 이해하고자 하는 접근 방법은 난류화염을 직접 해석하는 방법에 비해 몇가지 장점을 갖는다. 첫째는 난류화염의 구조에 미치는 여러 인자들의 영향을 독립적으로 살펴볼 수 있으며, 둘째로 수치계산의 경우에는

2차원 해석도 가능하므로 계산시간을 줄일 수 있고, 이로 인해 좀 더 자세한 화학반응을 고려할 수 있다.

난류화염에 대한 모델링을 통해 화염을 이해하고자 하는 연구 중에서 기존에 많이 연구되었던 방법으로는 1D 층류 대향류화염을 대상으로 스트레인율(Strain Rate)을 변화시켜 화염구조를 검토하는 것이 있다[1]. 이는 난류화염에서 와동에 의해 화염에 가해지는 스트레인율과 그에 따르는 화염구조를 검토하는데 유용하다. 그러나, 이러한 연구들은 난류화염의 비정상효과, 곡률효과, 소염 및 재점화에 따르는 현상, 그리고 다차원 유동효과 등을 묘사할 수 없는 한계를 가지고 있다. 이러한 인자들의 영향은 화염-와동 상호작용에 대한 해석에서 고려될 수 있다.

화염-와동 상호작용에 대해 기존에 진행된 연구를 보면, Takagi 등[2]은  $\text{H}_2/\text{N}_2$  대향류 비예혼

\* 인하대학교 대학원 기계공학과

\*\* 순천대학교 기계자동차공학부

\*\*\* 인하대학교 기계공학부

합화염에 대해 미세 와동제트를 분사하여 이 와동이 화염에 미치는 영향을 검토하였다. 이 연구에서 공기측 와동이 생성될 경우에는 와동이 화염에 접근하면서 온도가 오히려 증가하며, 이는 와동에 의한 화염의 곡률과  $H_2$ 의 선택확산(Preferential Diffusion)에 기인함을 보였다. 또한, Katta 등[3]도  $H_2/N_2$  대향류 비예혼합화염-와동간의 상호작용에 대한 수치계산을 통해, 실험에서 얻어진 와동에 의한 환형(Annular) 소염이 곡률과 선택확산효과가 연관된 현상임을 보인 바 있다.  $CH_4$  화염에 대한 예로는, Katta 등[4]이 제트화염에서 주기적으로 생성되는 와동에 의한 화염의 국소 소염현상을 관찰하여, 정상상태 화염의 소염과는 반응경로가 달라짐을 지적한 바 있다. 그러나, 지금까지 진행된 연구는 대부분  $H_2$  화염에 대한 것이 주를 이루고 있어 화염의 곡률과 선택확산과 연관된 현상을 관찰하는 경우가 많았으며,  $CH_4$  화염에 대한 수치계산 연구인 경우에는 반응기구가 좀 더 복잡해지기 때문에 아직까지 많은 연구가 진행되지 못한 상태이다.

한편, Barlow 등[5]은  $CH_4$  난류 비예혼합화염의 실험에서는 OH 및  $H_2$  등의 일부 화학종 농도가 정상상태의 화염편에서 얻어지는 농도 최고치를 초과하는 현상을 관찰한 바 있다. Barlow와 Chen [6]은 이러한 현상이 특정한 비정상 스트레인의 역력(History)에 기인하는 것으로 보았다. Mahaligam 등[7]은 난류 비예혼합화염에 대한 3D DNS를 수행하여, 난류화염에서의 라디칼 농도가 정상상태 화염편에서의 농도 최고치보다 증가하는 것은 비정상효과에 의한 것으로 판단하였다. 그러나, Im 등[8]이 수행한 비정상 스트레인을 받는 화염에 대한 계산에서는 OH 농도는 정상상태의 농도치를 잘 추종하며, 실험에서 알려진 것처럼 정상상태의 농도 최고치를 초과하는 현상은 관찰되지 않았다. 따라서,  $CH_4$  난류화염에서 관찰되는 OH의 분포가 단순히 비정상효과에서 기인하는 것인지에 대해 아직 명확하지 않으며, 좀 더 검토해 볼 필요가 있다.

이러한 배경하에, 본 연구에서는 단일 와동과 상호작용하는  $CH_4$  화염에 대한 수치계산을 통해, 1D 정상상태의 대향류화염에서 얻을 수 없었던 비정상효과 등을 동반하는 화염에서의 다양한 현상들을 고찰하고자 한다. 더불어, 비정상효과를 받는 화염편을 검토하여  $CH_4$  난류 비예혼합화염에 대한 실험에서 얻어진 현상들을 고찰하고자 한다.

## 2. 지배방정식 및 계산방법

### 2.1 지배방정식

본 연구에서 다루는 화염에 대한 지배방정식은 식 (1)-(5)와 같이 연속, 운동량, 화학종, 에너지 및 상태방정식으로 나타낼 수 있다.

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

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_1 + (\rho - \rho_0) \mathbf{g} + \nabla \cdot \mu \left[ (\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{im} \nabla Y_i) + W_i \dot{\omega}_i \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (3)$$

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{i=1}^N W_i h_i^0 \dot{\omega}_i + \rho \sum_{i=1}^N (c_{pi} D_{im} \nabla Y_i \cdot \nabla T) \quad (4)$$

$$p_0 = \rho R_0 T \sum_{i=1}^N \left( \frac{Y_i}{W_i} \right) \quad (5)$$

여기서,  $p_0$ 와  $p_1$ 은 각각 열역학적 압력(Thermodynamic Pressure)와 동적 압력(Dynamic Pressure)을 의미한다.

본 계산에서는 Soret과 Dufour 효과 및 복사열 전달은 무시하였으며, 열역학적 물성치와 전달 물성치는 각각 CHEMKIN-II [9] 및 TRANFIT Package [10]를 이용하였다.

### 2.2 수치해법

본 연구의 수치해석 기법은 낮은 마하수 근사법(Low Mach Number Approximation)을 적용한 DNS를 바탕으로 하고 있다.

지배방정식은 엇갈림 격자계를 이용하여 차분하였으며, 대류항에 대해서 QUICK법, 확산항에 대해서는 2차 정확도의 중심 차분법을 이용하였다. 열발생에 의한 급격한 밀도변동을 고려하기 위해서 Najm 등이 제시한, 전체적으로 2차 정확도를 갖는 예측-교정자(Predictor-Corrector)법[11]을 수정하여 시간적분을 수행하였다. 화학종과 에너지 방정식의 예측자 단계에서는 2차 정확도의 Adams-Bashforth법, 교정자 단계에서는 2차 정확도의 Quasi-Crank-Nicolson법을 이용하였으며, 운동량방정식에 대해서는 예측자, 교정자 단계에서 모두 2차 정확도의 Adams-Bashforth법을 이용하였다. 또한, 속도와 압력의 교정은 밀도변화를 고려할 수 있는 HSMAC (Highly Simplified Marker And Cell)법[12]을 이용하였다. 계산에 사용된 수치 알고리즘에 대한 자세한 내용은 참고문헌 [13]에 기술되어 있으므로 여기서는 생략한다.

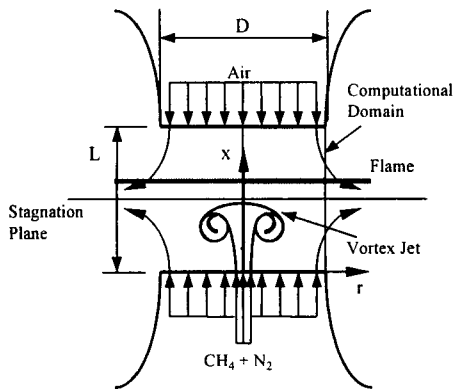


Fig. 1 Schematic of computational geometry and numerical layout

### 2.3 계산조건 및 경계조건

본 연구에서는 계산결과 검증에 유리하도록 Sung 등의 실험조건[14]과 동일한 화염에 대해 계산을 수행하였다. 먼저 Fig. 1에서 보는 것처럼  $L=13\text{mm}$ ,  $D=14\text{mm}$ 인 연료 및 공기노즐 사이에 정상상태(Steady-State)의  $\text{CH}_4/\text{N}_2$ -공기 대향류화염을 형성시켰다. 다루고 있는 화염이 축대칭이므로 계산영역은  $13\text{mm} \times 7\text{mm}$ 로 하였다. 화염-와동 상호작용에 대한 계산에서는 연료 또는 공기측의 2mm 노즐에서 5m/s의 Top-hat 형태의 유속을 갖는 제트를 분출시켜 와동을 형성시키고, 이 와동

이 반대편 노즐 방향으로 진행하면서 화염과 작용하도록 하였다.

정상상태의 화염을 얻기 위해 연료 및 공기의 노즐출구 유속은 반경방향 성분은 없고 축방향 유속이 25.5cm/s로 균일하도록 하였으며, 초기온도는 298K으로 하였다. 연료 및 공기의 조성은 각각 체적비를  $\text{CH}_4:\text{N}_2=23:77$ ,  $\text{O}_2:\text{N}_2=23:77$ 로 하였다. 경계조건으로, 중심축에는 Neumann 조건을 부여하였으며, 반경방향 외부경계에서는 경계 바로 안쪽과 경계면에서의 물리량의 변화가 같도록 하였다. 와동이 생성, 진행될 때에는 와동이 존재하는 반대편 노즐경계에서도 반경방향 외부경계와 유사하게 경계조건을 처리하였다.

격자계는  $260 \times 70$ 개의 비균일 격자계를 이용하였다. 축방향으로는 0.05mm의 균일한 격자를 이용하였으며, 반경방향으로는 소염이 발생하는 중심축 근처에서 0.05mm의 격자를 가지며, 반경방향으로 점차 크기가 확장되도록 하였다.

### 3. 반응기구의 검토

본 연구에서는 다루는 화염-와동 상호작용에 대한 해석에서는 와동에 의한 소염이 관찰되므로 소염점을 적절히 예측할 수 있는 반응기구의 선택이 중요하다. 따라서, 화염-와동 상호작용에 대한 계산에 들어가기 전에 대표적인 반응기구들의 소염점 예측성능을 검토하고 적절한 반응기구를

Table 1 17-step and 16-step augmented reduced mechanism based on GRI-3.0 and Miller and Bowman's detailed reaction mechanism, respectively.

17-step ARM based on GRI-3.0		16-step ARM based on Miller and Bowman's mech.	
21 species	$\text{CH}_4, \text{CH}_3, \text{CH}_2\text{O}, \text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{H}, \text{OH}, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{O}_2, \text{C}_2\text{H}_2, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{H}_6, \text{HCN}, \text{NH}_3, \text{NO}, \text{NO}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{N}_2$	20 species	$\text{CH}_4, \text{CH}_3, \text{CH}_2\text{O}, \text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{H}, \text{O}, \text{OH}, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{O}_2, \text{C}_2\text{H}_2, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{H}_6, \text{HCN}, \text{NO}, \text{NO}_2, \text{N}_2$
C1 reactions	(R1) $\text{CH}_4 + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{H}_2$ (R2) $\text{CH}_3 + \text{OH} = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$ (R3) $\text{CH}_2\text{O} = \text{CO} + \text{H}_2$ (R4) $\text{CO} + \text{OH} + \text{H} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$	C1 reactions	(R1) $\text{CH}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ (R2) $\text{CH}_3 + \text{O} = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$ (R3) $\text{CH}_2\text{O} + \text{O} = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ (R4) $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$
C2 reactions	(R5) $\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$ (R6) $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{CO} + \text{H}_2$ (R7) $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{CO} + \text{H}_2$	C2 reactions	(R5) $2\text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_6$ (R6) $\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$ (R7) $\text{C}_2\text{H}_4 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
H-O reactions	(R8) $\text{H} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O}$ (R9) $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H} + 2\text{OH}$ (R10) $2\text{H} = \text{H}_2$	H-O reactions	(R8) $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ (R9) $\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$ (R10) $\text{H} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{H}_2$ (R11) $\text{H} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O}$
$\text{HO}_2$ - $\text{H}_2\text{O}_2$ reactions	(R11) $\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2 + \text{O}_2$ (R12) $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{H}_2 + \text{HO}_2$	$\text{HO}_2$ - $\text{H}_2\text{O}_2$ reactions	(R12) $\text{H} + \text{O}_2 = \text{HO}_2$ (R13) $2\text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
$\text{NO}_x$ reactions	(R13) $\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{NO}$ (R14) $\text{HCN} + \text{H} + \text{O}_2 = \text{H}_2 + \text{CO} + \text{NO}$ (R15) $\text{NH}_3 + 3\text{H} + \text{H}_2\text{O} = 4\text{H}_2 + \text{NO}$ (R16) $\text{HO}_2 + \text{NO} = \text{OH} + \text{NO}_2$ (R17) $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{H} + \text{OH} + \text{N}_2\text{O}$	$\text{NO}_x$ reactions	(R14) $\text{N}_2 + \text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{HCN} + \text{NO} + \text{H}_2\text{O}$ (R15) $\text{N}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{N}$ (R16) $\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$

선택하였다.

Fig. 2에는 GRI-3.0(GRI-3.0-Full)[15] 및 Miller와 Bowman의 상세반응기구(MB-Full) [16] 그리고, 이들을 바탕으로 축소된 ARM(Augmented Reduced Mechanism)을 이용하여 소염점을 예측한 결과를 Sung 등[14]의 실험치와 비교 도시하였다. 참고로, 계산에 이용된 두 개의 ARM은 Table 1에 수록하였다.

반응기구의 검토에는 1D 코드인 OPPDIF [17]가 이용되었으며, 화염에 가해지는 스트레인을 정량화하기 위해서 식(6)과 같이 정의된 총괄 스트레인을(Global Strain Rate :  $a_g$ )[18]을 도입하였다.

$$a_g = \frac{2|u_0|}{L} \left( 1 + \frac{|u_F| \sqrt{\rho_F}}{|u_0| \sqrt{\rho_0}} \right) \quad (6)$$

여기서,  $L$ 은 두 개의 노즐간격,  $u_F, u_0$ 는 연료 및 산화제류의 유속,  $\rho_F, \rho_0$ 는 연료 및 산화제류의 밀도를 나타낸다.

$a_g$  변화에 따른 최고 화염온도의 변화를 보면, 실험에서는 노즐유속( $u_q$ )이 77.5cm/s 정도에서 소염되는 것으로 보고되었으나, 그림에서 보는 것처럼 계산에 이용된 GRI-3.0-Full은 소염점을 작게 예측하고 있으며 ( $u_q=61$ cm/s), MB-Full은 소염점 크게 예측하는 것( $u_q=97$ cm/s)을 알 수 있다. 이 결과로부터, 소염점을 정확하게 예측하기 위해서는 좀 더 적절한 반응기구가 필요함을 알 수 있다. 본 연구에서는 MB-Full의 반응식에서 소염에 큰 영향을 준다고 알려진  $CH_3+H(+M)=CH_4(+M)$ 의 반응상수를 Wang 등[19]이 제시한 반응상수로 대체하여 소염점 예측 성능을 향상시켰다. Fig. 2에서와 같이 수정된 MB-Full로 예측

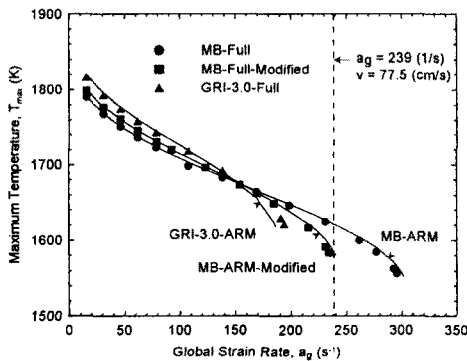


Fig. 2 Response of predicted maximum temperature to global strain rate (using OPPDIF code)

된 소염점( $u_q=78$ cm/s)은 실험에서 얻어진 소염점을 매우 잘 예측함을 알 수 있다. 또한, 이 수정된 반응기구에 근거한 축소된 MB-ARM[20]도 MB-Full과 거의 비슷한 경향을 보임을 알 수 있다. 이러한 소염점 예측 경향은 2D 계산에서도 1D 결과와 일치하는 것을 확인하였다. 따라서, 2D 화염-와동 상호작용에 대한 해석에서는 계산 시간을 고려하여 16단계 MB-ARM (20개 화학종 포함)을 사용하였다. 참고로, GRI-3.0-Full을 근거로 작성된 17단계 GRI-3.0-ARM [21]은 착화시 매우 경직(Stiff)되어 있어서  $\Delta t$ 를 매우 작게 해야 하기 때문에 계산시간이 길어지게 되어 반응상수 수정 대상에서 제외하였다.

그림으로 나타내지는 않았지만, MB-Full과 16단계 MB-ARM으로 계산한 화염을 비교해 보았을 때, 온도, 유속 및 주요 화학종 농도분포는 거의 일치하는 것을 확인하였다. 또한, 주요 라디칼(OH, O, H)들도 잘 일치하였으며, 다른 화학종들도 16단계 MB-ARM의 결과가 MB-Full로 계산한 결과를 매우 잘 추종하는 것을 확인할 수 있었다. 이러한 결과로부터 16단계 MB-ARM은 상세반응기구를 대신하여 수치계산에 이용되어도 화염구조를 매우 타당하게 예측할 수 있음을 확인할 수 있었다.

#### 4. 결과 및 검토

Fig. 3에는 수치계산의 타당성의 검토하기 위해서 Sung의 실험[14]과 동일한 조건에 대한 2D 계산 결과를 비교 도시하였다. 그림에서 온도, 중심축 유속 및 주요 화학종 분포를 보면, 2D로 계산한 결과는 실험결과를 매우 잘 예측하는 것을 확인할 수 있다. 스트레인을 더 증가시킨 화염에 대한 계산에서도 2D 계산과 실험결과는 잘

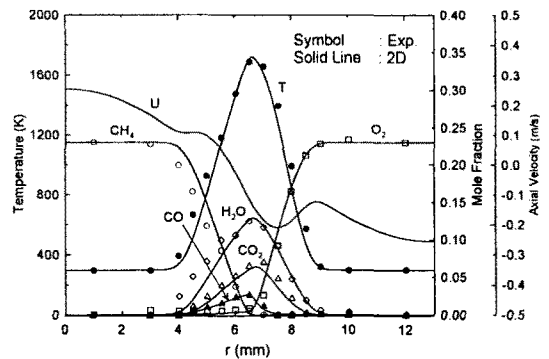


Fig. 3 Comparison between experimental and computed temperature and major species. (dotted line : 1D OPPDIF, solid line : 2D DNS)

일치하는 것을 확인하였다. 따라서, 이 결과는 본 계산의 타당성을 보여주는 것으로 Fig. 3에서 얻어진 것과 동일한 화염에 와동을 접근시켜 화염-와동 상호작용에 대한 해석을 수행하더라도 타당한 결과를 얻을 수 있을 것으로 판단된다.

이후, Fig. 4-11은 Fig. 3에서 보여주는 정상상태의 화염과 와동과의 상호작용에 대한 결과를 나타낸다.

먼저, Fig. 4는 시간에 따른 와도의 전개와 그에 상응하는 화염온도의 분포형상을 도시한 것이다. 그림의 점선은 Bilger의 제안에 따라 정의한 혼합분율(Mixture Fraction :  $Z_{MF}$ )[22]값이 이론혼합비(0.3038)를 갖는 위치로서, 본 연구에서는 이 위치를 화염면으로 정의하였다. (a)의 정상상태의 화염으로부터 와동을 나타내는 와도가 점차 화염에 가까워지면 화염면이 점차 왜곡되고 있는 것을 알 수 있다. 와동이 생성된 후 3.0ms가 경과한 (c)의 경우에는 와동에 의한 높은 스트레인을 받아 중심축 근처에서 최고 화염온도가 1400K 정도로서, (a)의 초기온도인 1730K보다 많이 낮아졌음을 알 수 있다. 3.6ms가 경과한 (d)의 경우는 스트레인이 더욱 증가하여 화염이

국소소멸에 이른 형상을 보여주고 있다. Fig. 4는 연료측 와동과 화염과의 상호작용에 대한 경우이지만, 공기측 와동-화염과의 상호작용에서도 소멸에 이르는 시간의 차이를 보이는 것을 제외하면 거의 유사한 현상을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

Fig. 5은 Fig. 4와 동일한 순간에서 화염의 열발생율(Heat Release Rate : HRR)을 도시한 것이다. 그림에서 검은색 부분은 HRR값이 높은 영역을 나타낸다. 0ms의 초기의 화염에 대해 와동이 접근하면 화염에의 열발생율은 점차 증가하는 것을 알 수 있다. 이것은 와동이 화염에 가하는 스트레인을 증가에 따라 연료와 산화제의 구배가 증가하고 화염면에 유입되는 연료-산화제의 양이 증가하므로 이 양을 연소시키면서 발생하는 열은 증가하기 때문이다. 그러나 와동에 의한 스트레인이 더욱 증가하게 되면, 연료와 산화제의 유입이 더욱 증가하게 되어, 연료와 산화제를 모두 소모할 수 없는 상태가 되며, 급격한 온도구배에 의한 열손실에 의해 국소소멸이 된다. (d)인 경우에는 소멸된 이후, 와동 주위에서 퇴각하는 에지 화염(Edge Flame)을 잘 보여주고 있다.

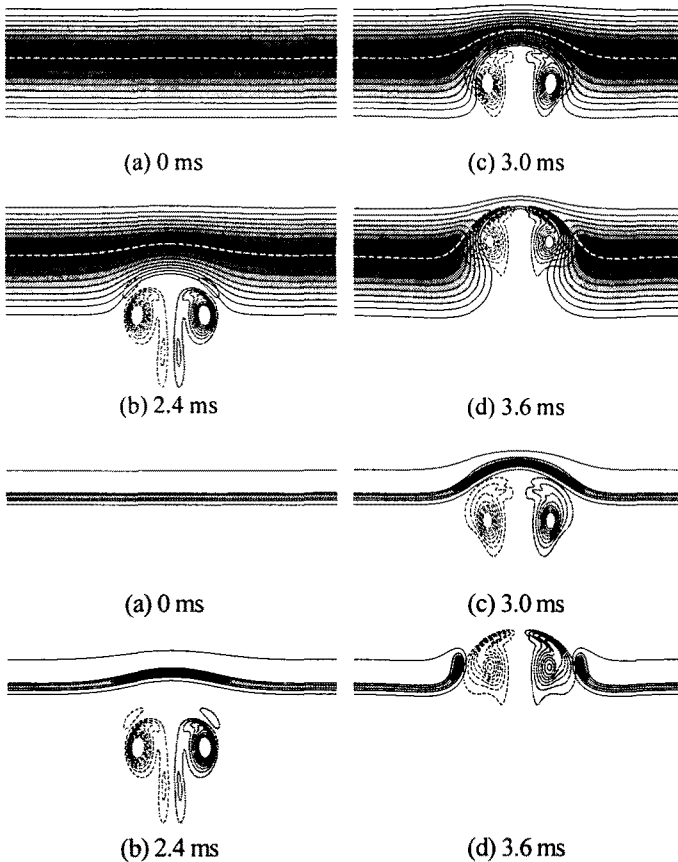


Fig. 4 Temporal evolution of temperature, flame surface and vorticity profile.

Fig. 5 Temporal evolution of heat release rate and vorticity profile.

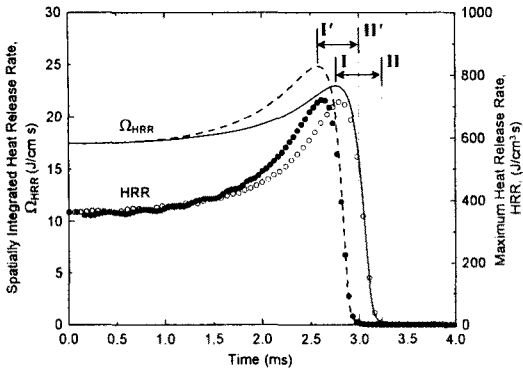


Fig. 6 Heat release rate and integrated heat release rate variation during the flame-vortex interaction (opened symbol : fuel-side , filled symbol : air-side vortex)

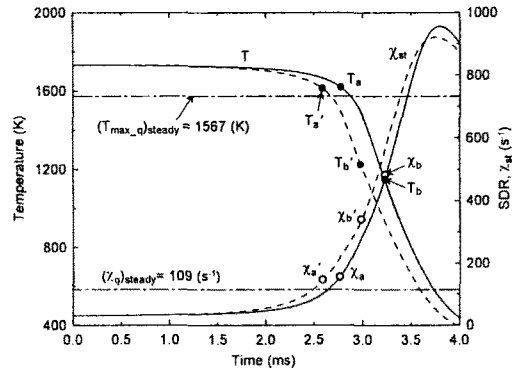


Fig. 7 Temperature and scalar dissipation rate variation during flame-vortex interaction (a : extinction initiation point, b : full extinction point)

Fig. 6, 7에는 화염-와동 상호작용이 진행되는 동안 시간에 따른 화염의 변화를 관찰하기 위해 중심축 상에서의 대표적 물리량 변화를 도시하였다. 먼저, Fig. 6에는 시간 변화에 따른 열발생율(기호)과 공간에 대해 적분된 열발생율( $\Omega_{HRR}$ : 선)을 도시하였다. 열발생율과  $\Omega_{HRR}$ 은 시간이 경과하여 와동이 화염에 접근할수록, Fig. 5에서 관찰한 것처럼 점차 증가하게 되어, 최고치를 가진 후 급격히 감소하는 것을 알 수 있다. 연료 및 공기측 와동에 대한 각각의 경우, 열발생율 최고치와  $\Omega_{HRR}$ 의 최고치 위치는 약간 상이하나 전체적인 경향은 비슷하며 두 물리량이 거의 0에 가까워지는 시점은 거의 비슷함을 알 수 있다.  $\Omega_{HRR}$ 은 화염대 전체에서의 열발생량과 관계되므로 화염의 강도와도 직결된다고 할 수 있다. 따라서, 본 논문에서는  $\Omega_{HRR}$ 가 최고가 되는 시점부터 최고점의 1%에 달하는 기간을 소멸기간(연료측 와동 : I-II, 공기측 와동 : I'-II')으로 정의하였으며,  $\Omega_{HRR}$ 가 최고치의 1%가 되는 시점을 화염이 완전히 소멸된 것으로 간주하였다. 연료(실선)와 공기측(점선) 와동에 의한 소멸기간은 각각 0.47ms, 0.40ms로서 비슷하지만, 공기측 와동에 의한 경우가 화염을 좀 더 일찍 소멸시키는 것을 알 수 있다.

Fig. 7은 시간 변화에 따른 화염온도와 화염면에서의 스칼라 소산율(Scalar Dissipation Rate : SDR,  $\chi_{st}$ )을 나타낸 것이다. 일점쇄선으로 표시한 두 개의 가로선은 소멸되기 직전의 정상상태 화염에 대한 온도 및  $\chi_{st}$  값을 나타낸다. 시간에 대한  $\chi_{st}$ 의 변화에서 연료(실선) 및 공기측(점선) 와동-화염 상호작용의 경우, 정상상태의 화염에서보다 훨씬 큰 값의  $\chi_{st}$ ( $\chi_b$  및  $\chi_b'$ )에서 완전

소멸이 일어나는 비정상 효과를 보이고 있다. 정상상태의 화염은 소멸이 발생할 경우 화염이 존재할 수 없지만, 비정상 효과가 동반되는 화염-와동 상호작용 형태에서는 완전 소멸점에서도 연료측 와동에 의해서는 1148K, 공기측 와동에 의해서는 1231K의 비교적 높은 온도를 보이고 있음을 알 수 있다. 또한, 소멸이 시작되는 점에서의 온도는 정상상태 화염의 소멸 직전 온도보다는 다소 높으며,  $\chi_{st}$  값도 정상상태 화염의 소멸 직전 값보다는 높은 것을 확인 할 수 있다.

다음의 Fig. 8-9에는 중심축상에서 대표적인 라디칼(OH 및 HO<sub>2</sub>) 농도의 최고치를 화염면에서의 SDR 변화에 대해 나타내었다. 그림에서 기호는 OPPDIF를 이용한 1D 정상 대항류화염에 대한 결과이고, 실선은 연료측 와동, 점선은 공기측 와동과 화염이 상호작용하는 경우이다.

먼저, OH 농도 최고치를 보면, 정상상태의 화염인 경우와 와동에 의해 화염이 스트레치된 경우 모두  $\chi_{st}$ 가 증가하면 OH 농도는 작아지고 있음을 알 수 있다. 와동이 존재하는 두가지의 경우를 비교해 보면, 공기측 와동의 경우가 연료측 와동의 경우보다 좀 더 정상상태 화염의 결과와 유사함을 알 수 있다. Fig. 6에서 확인한 바와 같이, 공기측 와동이 연료측 와동보다 화염을 일찍 소멸시키기 때문에 OH 농도 최고치도 공기측 와동의 경우가 먼저 감소하는 것을 알 수 있다. 그림에는 포함하지 않았지만, H와 O 라디칼의 경우에도 OH와 유사하게 공기측 와동에 의한 경우가 정상상태의 농도 최고치와 좀 더 가까운 것을 확인하였다.

본 연구에서는 계산영역의 한계로 인하여 와동이 화염에 접근하면서 소멸되는 시점까지만 계산에 포함하였으며, 재점화되는 기간은 계산범위에 포함하지 않았다. 즉, 대부분 와동에 의해 화염이

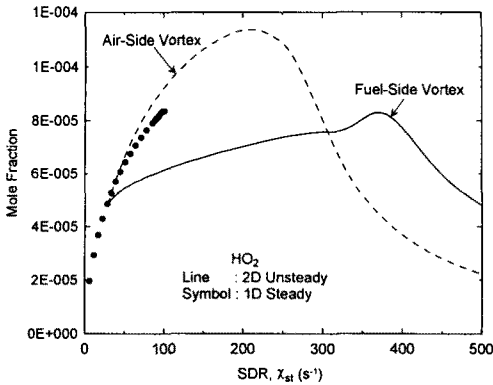


Fig. 9 Response of the Maximum  $\text{HO}_2$  mole fraction to the scalar dissipation rate.

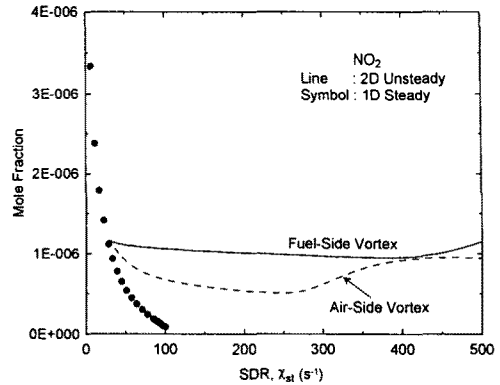


Fig. 11 Response of the Maximum  $\text{NO}_2$  mole fraction to the scalar dissipation rate.

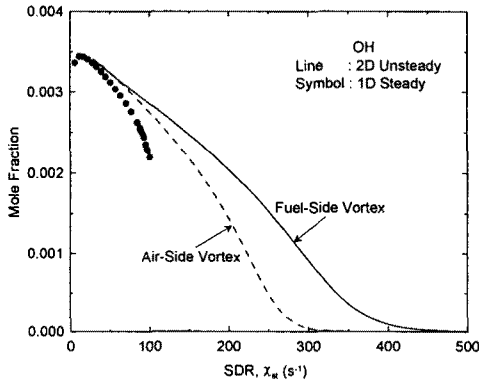


Fig. 8 Response of the Maximum  $\text{OH}$  mole fraction to the scalar dissipation rate.

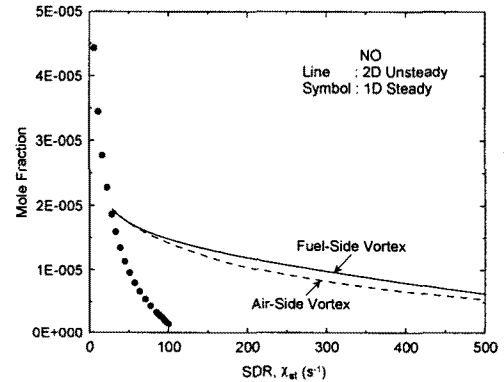


Fig. 10 Response of the Maximum  $\text{NO}$  mole fraction to the scalar dissipation rate.

계속 스트레치되는 영역이 고려되고 있다. 이 경우, 연료 및 공기측 와동의 경우는 비정상효과를 포함하는 결과이지만, 정상상태의 화염 최고치보다 높은 농도값은 보이고 있지 않다. Mahalingam 등[7]은 난류 비에혼합화염에 대해 라디칼과 비슷한 역할을 하는 중간 생성물을 포함한 총괄 2단계의 반응기구를 적용한 3D DNS를 수행한 바 있다. 이들 연구에서는 기존에 실험에서  $\text{OH}$  라디칼의 농도가 정상상태의 농도보다 높게 나타나는 이유는 비정상 효과에 기인한다고 주장한 바 있다. 그러나, Fig. 8에서 보는 바와 같이, 비정상 효과가 존재하는 화염에서도  $\text{OH}$  라디칼의 농도가 정상상태의 화염의 최고치보다 높게 나타나는 경우는 보이지 않는다. 또한, 스칼라 소산율이 주기적으로 변하는 비정상 화염에 대해 Im 등[8]이 수행한 수치계산에서도 이와 같은 정상상태 농도를 초과하는  $\text{OH}$  농도는 보이지 않았다. 따라서, 기존에  $\text{CH}_4$  난류 비에혼합화염에 대

한 실험연구에서 확인된,  $\text{OH}$  농도가 정상상태의 농도치보다 높게 나타나는 이유는 단순히 비정상 효과에 기인하는 것이 아닐 가능성이 높다.

Fig. 9의  $\text{HO}_2$  농도를 보면,  $\chi_{st}$ 가 증가할수록 공기측 와동에 의한 경우는 급격히 증가하며, 그 경향은 정상상태의 화염에 대한 결과와 유사하며, 좀 더 큰  $\chi_{st}$ 에서는 정상상태의 농도 최고값보다 더 높은 값을 가지는 것을 확인할 수 있다. 그러나, 연료측 와동에 의한 경우에는 농도의 증가 정도가 매우 완만하며, 정상상태의 최고치보다 높은 경향은 보이지 않는다. Mahalingam [7]의 계산에서 라디칼과 비슷한 역할을 하는 화학종이라면 정상상태의 농도보다 높게 예측되는 것도 가능할 것으로 생각된다. 그러나, 난류화염에서 초과(Overshoot)  $\text{OH}$  농도가 비정상 효과에서 기인하는 것인지에 대해서는 좀 더 검토할 필요가 있을 것으로 판단된다.

Fig. 10-11에는 중심축 상에서의 NO와 NO<sub>2</sub> 농도의 최고치를  $\chi_{st}$  변화에 대해 도시하였다. NO와 NO<sub>2</sub> 농도를 보면, 와동에 의해 화염이 비정상 효과를 받는 경우에는 정상상태 화염에 비해 농도값의 변화폭이 작음을 알 수 있다. 즉, 정상상태 화염에서는 소염점에 가까운  $\chi_{st}=100$  (s<sup>-1</sup>)인 경우에는 농도값이 거의 0에 가까워 지지만, 와동과 상호작용하는 화염에서는 원래 정상상태의 화염에 비해 농도가 미소하게 줄어드는 것을 알 수 있다. 이것은 NOx의 생성과 소멸에 소요되는 화학반응 시간이 길기 때문에 와동에 의한 순간적인 화염변화에 응답하지 못하기 때문이다. 이러한 경향은 비정상 거동을 보이는 화염에서의 NOx 생성특징을 이해하는데 중요할 것으로 판단된다. 향후, 곡률효과 등과 더불어 자세히 검토해 볼 필요가 있을 것으로 생각된다.

이와 같이, 와동과 상호작용하는 화염에서는 정상상태의 화염에서 관찰할 수 없었던 여러 가지 현상을 관찰할 수 있었다. 그러나, 난류화염의 OH 농도가 정상상태의 값을 초과해서 나타나는 현상이 비정상 효과에 기인하는지에 대해 좀 더 자세히 알아보기 위해서는 와동 제트의 유속을 좀 더 다양하게 변화시키면서 화염-와동 상호작용에 대한 해석을 수행할 필요가 있다. 또한, 와동의 크기를 변화시켜 와동에 의한 곡률이 화염에 미치는 영향 등에 대해서도 추가적으로 검토해 보면, 난류화염의 물리적인 현상을 이해하는데 좀 더 기여할 수 있을 것으로 사료된다.

## 5. 결론

연료 및 공기축에서 생성시킨 와동과 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub>-공기 대향류 비예혼합화염과의 상호작용을 해석하기 위해 16단계 ARM을 적용한 수치계산 연구를 수행하였다.

본 연구에 이용된 16단계 ARM은 실험에서 얻어진 소염점을 잘 예측하도록 수정이 되었으며, 이 수정된 반응기구를 이용하여 대향류화염에 대해 계산한 결과는 상세반응기구를 이용한 결과와 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있었다.

수정된 반응기구를 이용한, 화염-와동 상호작용에 대한 수치계산에서는 와동에 의한 중심축 상에서의 국소소염 현상을 관찰할 수 있었다. 또한, 화염-와동 상호작용이 일어날 경우에는 공기축 와동이 연료축 와동보다 화염을 좀 더 일찍 소염시키는 것을 확인하였으며, 본 연구의 계산 조건하에서는 와동과 상호작용하는 화염이 정상상태의 화염보다 훨씬 큰  $\chi_{st}$ 에서 소염되는 비정상 효과를 관찰할 수 있었다.

비정상 효과가 동반되는 화염-와동 상호작용

의 경우에는 HO<sub>2</sub>의 농도가 정상상태의 화염에서 보다 높은 값을 보이는 것을 관찰할 수 있었지만, OH 농도는 정상상태의 최고치보다 높은 값을 보이지 않음을 확인하였다.

NOx의 경우에는 반응에 필요한 시간이 길기 때문에 비정상 효과에 민감하지 않아 스칼라 소산을 변화에 따른 농도변화의 폭이 정상상태 화염에 비해 작게 나타남을 확인하였다.

## 후 기

본 연구는 연소기술연구센터(CERC)의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다.

## 참고문헌

- [1] N. Peters, and R. J. Kee, "The Computation of Stretched Laminar Methane-Air Diffusion Flames Using a Reduced Four-Step Mechanism", *Combust. Flame*, Vol. 68, 1987, pp. 17-29.
- [2] T. Takagi, Y. Yoshikawa, K. Yoshida, M. Komiyama and S. Kinoshita, "Studies on Strained Non-Premixed Flames Affected by Flame Curvature and Preferential Diffusion", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 26, 1996, pp. 1103-1110.
- [3] V. R. Katta, C. D. Carter, G. J. Fiechtner, W. M. Roquemore, J. R. Gord and J. C. Rolon, "Interaction of a Vortex with a Flat Flame Formed Between Opposing Jets of Hydrogen and Air", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 27, 1998, pp. 587-594.
- [4] V. R. Katta, K. Y. Hsu and W. M. Roquemore, "Local Extinction in an Unsteady Methane-Air Jet Diffusion Flame", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 27, 1998, pp. 1121-1129.
- [5] R. S. Barlow, R. W. Dibble, S. H. Starner and R. W. Bilger, "Piloted Diffusion Flames of Nitrogen-Diluted Methane Near Extinction: OH Measurements", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 23, 1990, pp. 583-589.
- [6] R. S. Barlow and J.-Y. Chen, "On the Transient Flamelets and Their Relationship to Turbulent Methane-Air Jet Flames", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 24, 1992, pp. 231-237.
- [7] S. Mahaligam, J. H. Chen and L. Vervisch, "Finite-Rate Chemistry and Transient Effects in Direct Numerical Simulations of Turbulent Nonpremixed Flames", *Combust. Flame*, Vol.



- 102, 1995, pp. 285-297.
- [8] H. G. Im, J. H. Chen and J.-Y. Chen, "Chemical Response of Methane/Air Diffusion Flames to Unsteady Strain Rate", *Combust. Flame*, Vol. 118, 1999, pp. 204-212.
- [9] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, "A Fortran Chemical Kinetic Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics", *SAND89-8009B*, 1989.
- [10] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin and J. A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multipoint Transport Properties", *SAND86-8246*, 1986.
- [11] H. B. Najm, P. S. Wyckoff and O. M. Knio, "A Semi-implicit Numerical Scheme for Reacting Flow", I. Stiff Chemistry, *J. Comput. Physics*, Vol. 143, 1998, pp. 381-402.
- [12] C. W. Hirt and J. L. Cook, "Calculating Three-Dimensional Flows around Structures and over Rough Terrain", *J. Comput. Physics*, Vol. 10, 1972, pp. 324-340.
- [13] 오창보, 이창연, "비정상  $\text{CH}_4$ /공기 제트 확산 화염에 관한 수치모사", *대한기계학회논문집 B 권*, 제25권 제8호, 2001, pp. 1087-1096.
- [14] C. J. Sung, J. B. Liu and C. K. Law, "Structural Response of Counterflow Diffusion Flames to Strain Rate Variations", *Combust. Flame*, Vol. 102, 1995, pp. 481-492.
- [15] C. T. Bowman, R. K. Hanson, D. F. Davidson, D. M. Golden, M. Frenklach and M. Goldenberg, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)
- [16] J. A. Miller and C. T. Bowman, "Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 15, 1989, pp. 287-338.
- [17] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley, "OPPDIF : A Fortran Program for Computing Opposed-Flow Diffusion Flames", *SAND96-8243*, 1997.
- [18] K. Seshadri and F. A. Williams, "Laminar Flow between Parallel Plates with Injection of a Reactant at High Reynolds Number", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 21, 1978, pp. 251-253.
- [19] H. Wang and M. Frenklach, "A Detailed Kinetics Modeling Study of Aromatic Formation in Laminar Premixed Acetylene and Ethylene Flames", *Combust. Flames*, Vol. 110, 1997, pp. 173-221.
- [20] R. Homma and J.-Y. Chen, "Reduced Mechanism for Prediction of  $\text{NO}_2$  Formation and Ignition Delay in Methane-Air Combustion" *J. Eng. Gas Turbine Power*, Vol. 123, 2001, pp. 303-307.
- [21] C. J. Sung, C. K. Law and J.-Y. Chen, "Augmented Reduced Mechanisms for  $\text{NO}$  Emission in Methane Oxidation", *Combust. Flames*, Vol. 125, 2001, pp. 906-919.
- [22] R. W. Bilger, "The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames", *Proceed. Combust. Inst.*, Vol. 22, 1988, pp. 475-488.