

## 화염편모델을 이용한 층류화산화염장의 매연 생성 및 산화과정 해석

김군홍\*, 김후종\*, 김용모\*\*, 김성구\*\*\*

## Flamelet Modelling of Soot Formation and Oxidation in a Laminar CH<sub>4</sub>-Air Diffusion Flame

Gun-Hong Kim, Sung-Mo Kang, Yong-Mo Kim, Seung-Ku Kim

### ABSTRACT

By utilizing a semi-empirical soot model, the applicability of the laminar flamelet concept for simulating the formation and oxidation of soot in the laminar diffusion flame has been studied. The source terms for two transport equations of the soot formation and oxidation are calculated in the mixture fraction/scalar dissipation rate space for laminar flamelets and stored in a library. In this study, emphasis is given to the interaction associated with radiation and soot formation. The radiative heat loss is obtained by solving the radiative transfer equation using the unstructured grid finite volume method with the WSGGM. The calculated temperatures and soot volume fractions agree relatively well with the experimental data and the previous numerical results of Kaplan et al. using the detailed chemistry.

**Key Words :** Nonadiabatic flamelet model(비단열 화염편 모델), Soot Formation and Oxidation(매연 생성 및 산화반응), WSGGM(화색가스 가중합 모델)

### 1. 서 론

매연은 탄화화합물의 불완전 연소에 의한 공해 물질로 잘 알려져 있다. 매연입자의 건강에 유해한 영향은 현재 여러 나라에서 사회적 문제로 대두되고 있으며 여러 가지 매연 배출원에 대한 규제들이 제시되고 있다. 일반적으로 연소기의 운영상의 관점에서 보면, 매연 생성은 대부분의 연소기에서 바람직하지 않다. 그러므로, 매연 입자 생성, 성장 그리고 산화 반응에 대한 정량적 이해와 매연 생성 및 산화과정에 대한 모델에 대한 연구들은 매연 배출 저감에 대한 연소기술의 개

발에 매우 중요하다.

그러나 수십년에 걸쳐 매연 모델에 대한 많은 연구들이 진행되어 왔음에도 불구하고, 현재까지 실제 연소 시스템 내에서 매연 생성 및 산화반응 모델링은 여전히 매우 어려운 문제이다. 매연 생성 및 산화과정에 대한 상세 화학 반응 모델들이 제시되고 있지만, 여전히 매우 복잡하고 현실적으로 다차원 연소 시스템에 적용하기에는 많은 계산시간이 소요된다[1]. 그리고 단순 실험식에 의한 매연 모델들은 연소 상황이 변함에 따라 예측 능력의 정확도에 많은 문제가 있다. Moss와 Lindsted 연구그룹들에 의해 매연 생성 및 산화과정에 대한 단순한 일차원 반응으로 모델링된 단순화된 준-실험적 모델들은 실제적으로 예측 능력과 계산시간상에 많은 이점이 있다. 이러한 매연 모델은 매연생성 과정에 대한 준-실험적 가정에 기초하여, 매연 생성율과 산화율을 단순화학반응 모델링함으로써 매연 수밀도와 질량분

\* 한양대학교 기계공학부 대학원

\*\* 한양대학교 기계공학부

\*\*\* 한국항공우주연구원

† 연락처자, gunhongkim@ihanyang.ac.kr

율에 대한 두 개의 수송방정식을 후처리 과정으로 해석하게 된다[2, 3].

본 연구에서는 층류 화염편 모델을 이용하여 매연의 생성과 산화과정에 따른 매연분포를 예측하기 위하여 준실험적 매연 모델방식을 적용하였다[4, 5]. 준실험적 모델에서는 매연 반응에 대해 후처리 과정으로 처리되며, 연소 유동장에 대한 매연입자의 영향들은 복사효과에 의해 고려되게 된다. 따라서 매연 예측능력을 향상시키기 위해서 회색 가스 가중합 복사모델과 화염편내 상세화학 반응에 대한 복사영향을 고려할 수 있는 비단열 층류 화염편 모델에 대한 연구들이 선행되었다[6, 7].

일반적으로 준실험적 모델들은 중첩된 매연의 최대 체적 분율을 예측하는데는 우수한 것으로 알려져 있으며, 이러한 사실은 매연핵 생성율과 표면성장을 위한 단순반응 가정이 상당히 효과적임을 나타낸다. 그러나 현재까지 연구결과에 따르면 매연 산화반응에 대해서는 심각한 문제점들이 존재함이 알려져 있다. 매연 핵화와 표면성장 현상들을 이해하기 위한 연구도 매우 중요하지만, 매연 산화과정에 대한 이해를 높이는 노력들도 화염내의 매연 분포를 이해하는데 결정적인 역할을 하고 있다. 왜냐하면, 매연 분포는 두 매연생성반응과 산화반응이 경쟁적으로 일어나는 결과이기 때문이다.

본 논문에서, Mitchell/Santoro 버너의 정상상태 층류 메탄 공기 확산화염에 대해 층류 화염편 모델 접근법에 일반적인 준실험적 매연 모델들을 적용하여 화염장내 매연 예측특성에 대해 연구하였다[8]. 일반적으로 알려졌듯이, 층류 제트화염에 대한 화염편 모델 적용의 어려움은 특히 화염곡률이 있는 지역에서의 Lewis 수의 영향으로 인해 편중 확산에 의한 영향을 제대로 고려하지 못하는데 있다. 그러나 이러한 편중확산에 의한 온도장과 농도장에 대한 영향은 실제 복사 열전달에 의한 열손실, 매연 모델링에 소요되는 계산시간 그리고 실제 예측능력들을 고려했을 때 이러한 화염편 모델을 적절히 활용할 수 있으리라 사료된다.

## 2. 수치 모델

### 2.1 비단열 층류 화염편 모델

층류 화염편 모델은 연소 화학반응이 난류 유동장내에의 화염편의 얇은 층에서 빠르게 발생한다는 가정에 기초하고 있다. 화염편 방정식은 Peters에 의한 두 개의 길이 스케일에 대한 개념적 해석을 통하여 유도되거나 화학종 및 에너지 보존방정식으로부터 층류화염편내 반응면에 수직 방향에 대한 좌표변환을 통해 혼합분율을 매개변

수로 층류화염편의 혼합과정 및 화학반응을 동시에 지배하는 다음과 같은 1차원 상미분 연립방정식을 유도할 수 있다[9].

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{x}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\omega_i}{\rho} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{x}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \frac{x}{2} \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \\ &\quad - \frac{1}{\rho c_p} \left( \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k + q_R \right) \end{aligned} \quad (2)$$

여기에서  $\rho$ 는 밀도,  $T$  온도,  $Y_i$  i-번째 화학종의 질량분율,  $x$  스칼라 소산율,  $c_p$  정압비열,  $t$  시간,  $Z$  질량분율,  $\omega$  반응율,  $h$  엔탈피,  $q_R$  단위체적당 복사열손실을 각각 나타낸다. 위의 방정식들의 유도과정에서 압력은 일정하고 Lewis 수는 모든 화학종에 대해 1로 동일하다고 가정하였다. Peters 화염편 방정식에서 알 수 있듯이 층류 화염편에서 반응물은 분자확산에 의해서만 화염면으로 수송될 수 있으며, 이를 지배하는 변수인 스칼라 소산율,  $x$ 는 확산에 의한 특성시간의 역수로 해석될 수 있다. 따라서 층류 화염편 모델에 있어서 난류에 의한 미세화염구조의 변환는 스칼라 소산율에 의해 지배되게 된다. 스칼라 소산율에 대한 혼합분율의 의존함수에 대하여 Peters의 이론해석에 따른 화학당론적 스칼라 소산율에 대한 식 (3)으로 표현된다.

$$\begin{aligned} x &= 2D_Z(\nabla Z)^2 \approx x_{st}f(Z) \\ &= x_{st} \exp [2\{\text{erfc}^{-1}(2Z_{st})\}^2 - 2\{\text{erfc}^{-1}(2Z)\}^2] \end{aligned} \quad (3)$$

식 (1)-(3)을 이용하여 화학당론적 혼합분율에서의 스칼라 소산율에 대하여 화학평형에 가까운 낮은 값에서 소염이 발생하는 높은 값까지의 범위를 갖는 층류 화염편 라이브러리를 구성하였다.

층류 화염편내의 온도 및 화학종 조성에 대한 열전달 영향을 고려하기 위하여 화염편내의 엔탈피를 조절하는 엔탈피 Defect 접근법을 적용하였다[7]. 엔탈피 Defect 변수( $\zeta$ )는 식 (4)와 같이 비단열 화염편과 단열 화염편의 엔탈피 차로 정의된다.

$$\zeta = h - h_{ad} \quad (4)$$

메탄-공기애에 대한 층류 화염편의 온도와 화학종 분포에 대한 영향을 Fig. 1과 Fig. 2에 각각 예시하였다. 열손실을 나타내는 엔탈피 Defect 변수( $\zeta$ )가 감소함에 따라 화염편들의 온도는 엔탈피와 온도의 비례성에 따라 감소하는 경향을 보여준다. Fig. 2에서는, 상세 화학반응에 대한 엔탈피 Defect에 대한 영향으로 인해 CO의 몰분율 분포를 보여주고 있다. 열손실이 증가함에 따라 CO의 생성이 감소하게 되며 CO<sub>2</sub> 분포에 영향을 미침을 알 수 있다.

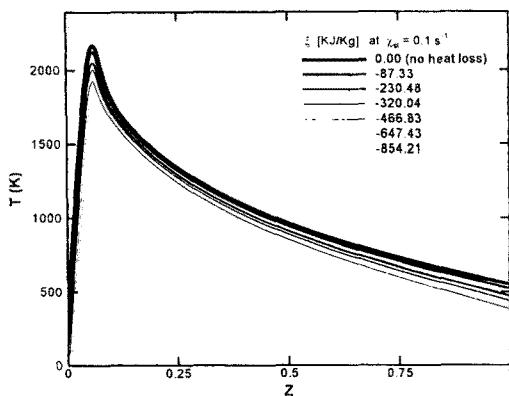


Fig. 1. Temperature of flamelets with a variable enthalpy defect.

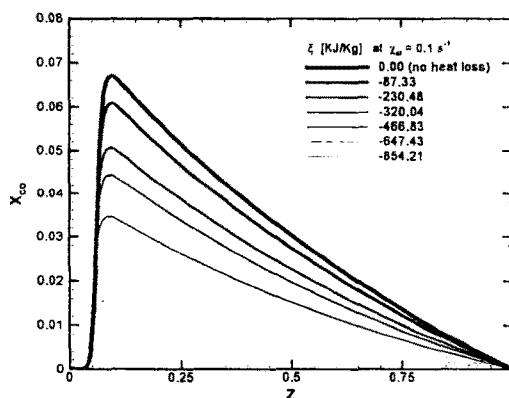


Fig. 2. CO mole fraction of flamelets with a variable enthalpy defect.

열전달 현상이 고려되는 화염장에 대한 예측능력을 향상시키기 위해서는, 비단열 층류 화염편 모델의 필요성을 Fig. 1과 Fig. 2로부터 확인할 수 있다. 이를 위해 보존 스칼라인 혼합분율( $Z$ )과 유동장내의 엔탈피 defect ( $\xi$ )을 얻기 위한 엔탈피 방정식이 필요로 하게 된다. 층류 화염장인 경우, 아래 식들과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_i}\right) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) &= \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_h \frac{\partial h}{\partial x_i}\right) - \nabla \cdot q_{rad} \end{aligned} \quad (6)$$

위의 식(6)에서 복사 열손실 항은 추가적인 적절한 열전달 방정식으로부터 구해질 수 있다. 본 연구에서는 복사 열손실을 고려하기 위하여 FVM 복사모델을 적용하였으며, 연소장내 희색 가스들에 대해 Smith WSGGM 복사 모델을 적

용하였다[10, 6]. 매연에 대한 흡수 계수는 아래 식으로부터 구하였다[11].

$$k_s = 2.66 \cdot \text{const} \cdot f_v \cdot T, \text{ m}^{-1} \quad (7)$$

여기에서 const=700을 사용하였다.

## 2.2 준실험적 매연 모델

수십년동안 많은 연구자들에 의해 실제 연소 시스템내에 적용가능한 복잡한 매연 생성 및 산화 화학반응을 단순화시키기 위한 접근법들이 제시되었다. 본 연구에서는 층류 화염편 모델에 적용가능한 준실험적 모델들을 이용하였다. 준실험적 모델에서는 매연입자 생성, 입자응집, 표면성장, 그리고 기체 화학종들에 의한 산화과정들에 대한 단순한 메카니즘을 가정하며, 각 반응들에 대한 반응율을 실험 데이터와 비교하여 적절하게 모델링하게 된다[1]. 준실험적 매연 모델에서는 매연 입자 수밀도와 체적분율에 대한 추가적인 수송방정식을 도입함으로써 매연 생성 및 산화과정을 모델링하게 된다. 층류 화염에 대한 일반적인 매연 보존 방정식 형태는 식 (8)로 표현된다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \psi_s) + \nabla \cdot (\rho u \psi_s) = \nabla \cdot (\rho V_t \psi_s) + S_s \quad (8)$$

여기에서  $\psi_s$ 는 각 매연 모델에 따른 매연 수밀도와 체적분율에 해당하는 변수이며,  $S_s$ 는 각 매연 모델 변수에 따른 매연의 생성과 소멸항이다. 층류 연소장내의 매연입자에 대한 식 (8)은 대류와 thermophoresis에 대한 속도항들을 포함하고 있으며, thermophoresis에 따른 매연 입자의 속도는 아래와 같이 정의된다.

$$V_t = -0.55 \nu v (\ln T) \quad (9)$$

메탄 확산화염장내의 매연의 생성에 대하여, 본 연구에서는 Syed *et al*과 Leung *et al*에 의해 제시된 준실험적 매연 모델을 적용하였다[2, 3]. Syed *et al*의 매연 모델에서 매연 보존 방정식 (8)에 변수에 대하여 수 밀도의  $\phi_n = (N / (\rho N_a))$ , 그리고 매연 체적분율의  $\psi_r = (\rho f_r / \rho)$ 들을 도입하였다. 여기에서  $N$ 은 매연 입자 수,  $N_a$ 는 아보가드로 수 ( $6.02252E26 [1/kmol]$ ),  $\rho$ 는 밀도,  $\rho_a$ 는 매연 입자 밀도( $1800 [kg/m^3]$ )이다. 각 변수들에 대한 식(8)의 생성 및 소멸항은 아래와 같다.

$$S_{\phi_n} = \alpha - \beta \rho^2 (\phi_n)^2 \quad (10)$$

$$S_{\psi_r} = N_a^2 \gamma \rho (\phi_n)^{1/3} (\psi_r)^{2/3} + \delta - N_a^{1/3} w_{ox} \rho (\phi_n)^{1/3} (\psi_r)^{2/3} \quad (11)$$

여기에서  $\alpha$ 와  $\beta$ 는 각각 매연 입자핵 생성율과 매연 입자 부착율이며  $\gamma$ 는 매연 표면 성장률, 그리고  $\delta$ 는 매연 체적분율에 대한 입자핵 생성의 영향을 나타낸다.  $w_{ox}$ 는 화학종들에 의한 매연의 산화율이다.

매연 반응율인  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , 그리고  $\delta$ 들에 대하여 Moss *et al*에 의해 Arrhenius 형태의 단순 반응식들이 다음과 같이 제안되었다[12].

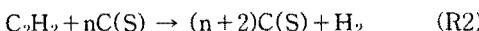
$$\begin{aligned}\alpha &= C_\alpha \rho^2 T^{1/2} X_i \exp(-T_\alpha/T) \\ \beta &= C_\beta T^{1/2} \\ \gamma &= C_\gamma \rho T^{1/2} X_i \exp(-T_\gamma/T) \\ \delta &= C_\delta \alpha\end{aligned}\quad (12)$$

여기에서  $T$ 는 기체 온도, 그리고  $X_i$ 는 매연 precursor의 물분율이며, 본 연구에서  $C_2H_2$ 만을 가정하였다. 모델 상수인  $C_\alpha$ ,  $C_\beta$ ,  $C_\gamma$ ,  $C_\delta$  그리고 매연핵 생성과 표면 성장에 대한 활성화 온도인  $T_\alpha$ 와  $T_\gamma$ 들은 실험에 의해서 결정되어 진다. 층류 메탄-공기 혼합화염에 대해서 Syed *et al*에 의해 Table 1의 모델 상수들이 제안되었다.

Table 1. Soot Model Parameters (Syed *et al*)

$T_\alpha$	$T_\beta$	$C_\alpha$	$C_\beta$	$C_\gamma$	$C_\delta$
4.61E4	1.26E4	6.54E4	1.37E7	0.1	144
K	K	$m^3 kg^{-2} K^{1/2} s$	$m^3 /K^{1/2} s$	$m^3 /kg^{2.5} K^{1/2} s$	kg

아세틸렌( $C_2H_2$ )이 매연 핵화와 표면 성장에 관여하는 화학종으로 가정하여 단순화된 매연의 핵화와 성장 반응기구가 Leung *et al*에 의해 제안하였다. 매연 생성과정에 탄소원자가 보존됨을 이용하여, 핵화와 표면성장 과정들을 다음 반응식으로 가정하였다.



위 반응식들의 핵화와 성장에 대한 반응율은 아래와 같이 표현되어진다.

$$r_1 = k_1(T)[C_2H_2] \quad (kmol m^{-3} s^{-1})$$

$$r_2 = k_2(T)f(A_s)[C_2H_2] \quad (kmol m^{-3} s^{-1})$$

여기에서  $f(A_s)$ 는 단위 체적당 매연 표면적에 대한 표면성장의 의존성을 나타내며,  $[C_2H_2]$ 는 아세틸렌의 물농도를 나타낸다.  $f(A_s)$ 는 매연 표면적에 대해 선형적 의존성을 가정하여,  $f(A_s) = A_s$ 를 적용한다. 단위 체적당 매연의 표면적( $A_s$ )은  $A_s = \pi(6/\pi)^{2/3} \rho_{C(S)}^{2/3} Y_S^{2/3} \rho N^{1/3}$ 으로부터 계산되어 진다. 현 논문에 적용된 매연의 핵화와 성장에 대한 화학적 계수들은  $k_1 = 1.7 \exp(-7548/T)(s^{-1})$ 과

$$k_2 = 6 \exp(-6038/T)(ms^{-1})$$

매연 보존 방정식 (8)에서 Leung *et al*이 제안한 매연 모델에 대한 변수들은 수 밀도의  $\psi_n =$

$N$ , 그리고 매연 체적분율의  $\psi_v = Y_S$ 들이며 각 생성 및 소멸항은 다음과 같다. 식 (14)는 매연의 핵화와 매연 입자의 증착으로 인한 매연입자의 수밀도의 증가와 감소를 나타낸다.

$$S_\phi = 2r_1 M_S + 2r_2 M_S - (w_{ox} \rho)(N)^{1/3}(Y_S)^{2/3} \quad (13)$$

$$\begin{aligned}S_\phi &= \frac{2}{C_{min}} N_A r_1 \\ &- 2C_\alpha \left( \frac{6M_{C(S)}}{\pi \rho_{C(S)}} \right)^{1/6} \left( \frac{6xT}{\rho_{C(S)}} \right)^{1/2} [C(S)]^{1/6} [\rho N]^{11/6}\end{aligned}\quad (14)$$

여기에서  $M_{C(S)}$ 는 매연 분자량( $12g/mol^{-1}$ ),  $x$ 는 볼쓰만 상수( $1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ ),  $C_{min}$ 은 초기 매연 입자내의 탄소 원자들의 수(700), 그리고  $C_\alpha$ 는 참고문헌에 따라 3 또는 9가 사용되며, 현 해석에서는 3을 적용하였다[13].

본 연구에서는 연소장내의 매연 산화반응에 가장 중요한 화학종들로 알려진 OH, O 그리고 O<sub>2</sub>를 고려하였다. 두 매연 모델에 대하여 식 (15)의 동일한 산화율이 적용되었다.

$$w_{ox} = C_{ox} \cdot (W_{NSC} + W_{OH} + W_O) \quad (15)$$

여기에서  $C_{ox} = \pi^{1/3} 6^{2/3} \rho_s^{2/3}$ 로 모델상수이다. 각 화학종에 대한 산화율들은 아래에 제시되었다.

Nagle and Strickland-Constable [14]

$$W_{NSC} = 120 \left[ \frac{k_A P_{O_2} x}{1 + k_z P_{O_2}} + k_B P_{O_2} (1 - x) \right]$$

where  $k_A = 20 \exp(-15098/T)$

$$k_B = 4.46 \times 10^{-3} \exp(-7650/T)$$

$$k_T = 1.51 \times 10^5 \exp(-48817/T)$$

$$k_z = 21.3 \exp(2063/T)$$

$$\text{and } x = \left\{ 1 + \left( \frac{k_T}{k_B P_{O_2}} \right) \right\}^{-1}$$

Fenimore and Jones [14]

$$W_{OH} = \phi_{OH} (127E3) T^{1/2} P_{OH}$$

Bradley *et al* [15]

$$W_O = \phi_O (5.54E1) T^{1/2} P_O$$

위의 OH와 O 화학종 산화율식에서 매연입자와의 충돌효율을 나타내는  $\phi_{OH}$ 와  $\phi_O$ 는 각각 0.2 그리고 0.1로 가정하였다.

준실험적 매연모델을 층류 혼합화염 모델에 적용하기 위하여 매연 생성 및 산화 반응율을 혼합화 라이브러리로 구성하였다. 따라서 매연이 존재하는 혼합장을 해석하기 위해서는 유동, 혼합분율, 복사 열전달 모델을 포함한 에너지 방정식과 매연 수송방정식을 해석하게 된다. 준실험적 매연 모델은 직접적으로 연소장내의 상세화학반응에 영향을 끼치지 못하고 후처리 과정을 통해 매연 분포를 구하기 때문에, 복사영향을 통해 간접적으로 연소 유동장에 영향을 미치게 된다.

### 3. 수치 해석

비단열 혼합화염 모델과 준실험적 매연 모델들의 매연 생성에 대한 예측능력을 확인하기 위하여,

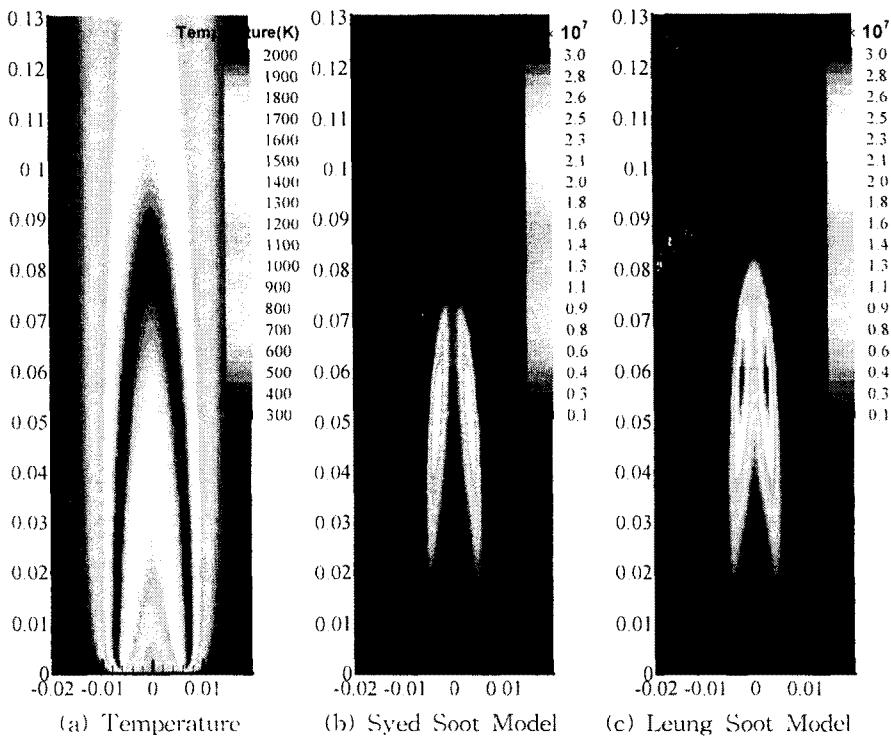


Fig. 3 the Predicted Fields of Temperature and Soot Volume Fraction

Mitchell/Santoro 버너의 성상상태 층류 메탄 공기 화산화염에 대해 수치해석을 수행하였다. 본 화염에 대한 매연 체적 분율과 온도 데이터들을 그 밖에 유용한 정보들은 인터넷을 통해 자유롭게 얻을 수 있다. 층류 축내청 농축버너에서 연료는 직경 11.1mm의 중앙관을 통해 분출되고 주위에 공기가 분출된다. 연료인 메탄과 공기의 평균 유속은 각각 7.8 cm/s와 7.9 cm/s이다. 실제 화염이 형성될 때 연료는 550K, 그리고 공기는 330K로 예열된다. Smyth의 제안으로부터 수치해석 영역과 경계 조건들은 Kaplan *et al*의 수치방법을 그대로 적용하였다[16].

두 준실험적 매연모델을 적용함에 있어서 실험 결과와 비교하여 매연의 표면성장을에 대한 상수값들을 수정하였다. Syed *et al* 모델에 대하여 Table 1의  $C_v$ 를 0.36으로, 그리고 Leung *et al*의 경우에는  $k_2 = 20 \exp(-6038/T)(\text{ms}^{-1})$ 을 적용하였다. 복사 열전달 효과를 고려하기 위하여 Smith의 희색가스 가중합 모델과 축내청 복사 유한체적법을 이용하였다. Fig. 3에는 해석된 층류 메탄 화염상 온도 분포 및 각 매연모델에 따른 매연의 체적분율 분포를 나타내었다. 화염장내에서 화학당론적 혼합분율 분포선 내부에  $\text{C}_2\text{H}_2$ 가 존재함으로 인해 고온영역 이전에 매연

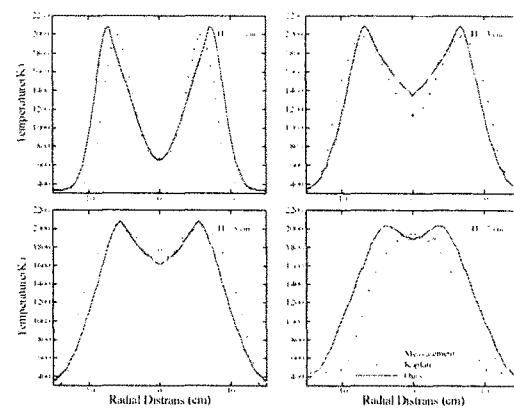


Fig. 4 Temperature profiles at various heights

의 해화 및 성장하게 되며 화학당론적 혼합율 근처에서 OH, O 그리고  $\text{O}_2$ 에 의해 산화됨을 두 매연모델 결과로부터 확인할 수 있다.

층류 화염편 모델을 이용한 층류 화산화염에 대한 예측정도를 확인하기 위하여 Fig. 4에서 실험치, Kaplan *et al*의 상세화학반응 결과와 온도분포를 비교하였다. Kaplan *et al*의 결과에 대해

전반적으로 예측치의 차는 크지 않으나, 화염 높이를 다소 크게 예측함을 보여주고 있다. 두 매연모델의 경우에 온도분포 차는 미소하여, 예측치 비교를 위해서 Syed *et al* 모델결과를 나타내었다.

매연 분포에 대한 비교를 위하여, 화염 높이에 따른 매연 체적분율 결과를 Fig. 5에 나타내었다. 두 매연모델은 모두 매연생성 및 산화과정에 대해 단순 반응을 가정하나 반응율에 대한 표현식의 차로 인해 예측특성의 차를 확인해 보여주고 있다. 화염장 상류에 결과를 보면 Syed *et al* 모델은 실험치와 최대치 분포가 유사하나, Leung *et al* 모델 결과의 경우 안쪽에 최대치가 분포함을 알 수 있다. 그러나 하류로 갈수록 차가 없어지는 경향을 보인다. Fig. 4에 나타났듯이 화염길이를 길게 예측함으로 인해 하류측에서의 매연분포의 차가 존재하며, 매연 산화반응이 과도하게 발생함을 알 수 있다. 이는 특히 OH 산화반응에 대해 단순 반응율을 고려함에 따른 결과로 판단된다.

#### 4. 결 론

정상상태의 층류 메탄 공기 확산화염내의 매연분포를 예측하기 위하여, 화염편내 열전달 영향을 고려한 비단열 층류 화염편 모델에 Syed *et al*과 Leung *et al*에 의해 제시된 준실험적 매연

모델을 적용하였다. 매연 생성반응은 화염온도와 precursor인  $C_2H_2$ 의 농도분포에 민감하며, 또한 매연 산화반응도 온도와 OH, O, 그리고  $O_2$  농도분포에 많은 영향을 받음을 확인하였다. 예측된 온도 분포와 비교하면, 매연 체적분율 분포의 예측 능력은 하류측으로 갈수록 실험치에 비해 낮게 예측되는 것으로 확인되었다. 매연 예측결과로부터 Syed *et al*의 경우가 Leung *et al* 매연 모델에 비해 상대적으로 산화반응에 민감함을 확인하였다. 이상에서 준실험적 모델의 예측능력을 향상시키기 위해서는 매연 산화반응에 대한 추가적인 연구가 필요하다고 사료된다.

#### 참고문헌

- [1] Ian M. Kennedy, "Models of Soot Formation and Oxidation", Prog. Energy Combust. Sci., 1997, Vol. 23, pp. 95-132.
- [2] K.J. Syed, C.D. Stewart, J.B. Moss, "Modelling Soot Formation and Thermal Radiation in Buoyant Turbulent Diffusion Flames", 23rd Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp. 1533-1541.
- [3] K.M. Leung, R.P. Lindstedt and W.P. Jones, "A Simplified Reaction Mechanism for

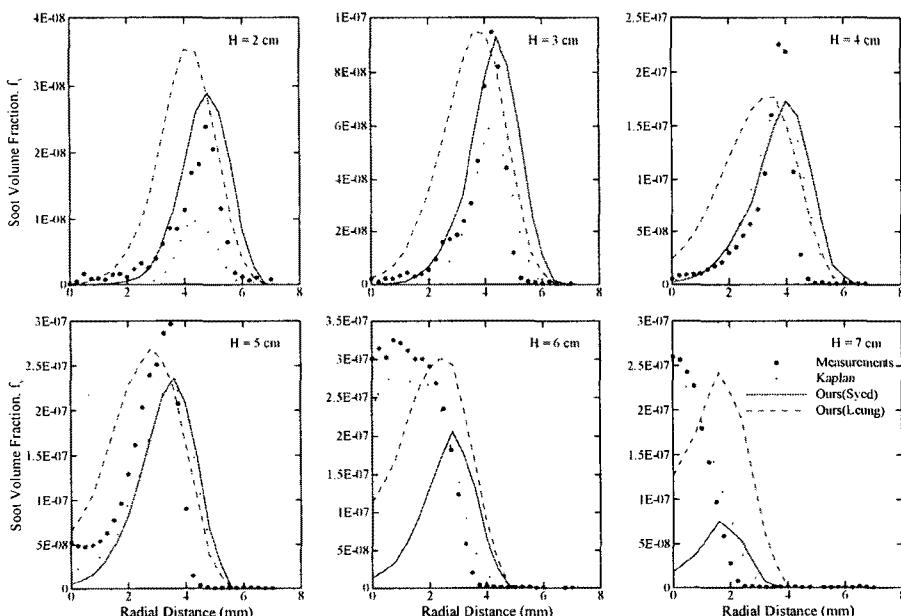


Fig. 5 Soot volume fraction profiles at various heights

- Soot Formation in Nonpremixed Flames", Combustion and Flame, 1991, Vol. 87, pp. 289-305.
- [4] M. Balthasar, A. Heyl, F. Mauss, F. Schmitt and H. Bockhorn, "Flamelet Modeling of Soot Formation in Laminar Ethyne/Air Diffusion Fleames", 26th Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, pp. 2369-2377.
- [5] S.K. Kim, S.M. Kang, Y.M. Kim, "Flamelet Moddeling for combustion processes and NOx formation in the turbulent nonpremixed CO/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet flames", Comb Sci and Tech, 2001, Vol.168, pp.47-83.
- [6] T.F. Smith, Z.F. Shen, J.N. Friedman, "Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model", ASME J Heat Transfer 1982, Vol. 104, pp602-608.
- [7] B. Marracino, D. Lentini, "Radiation modeling in non-luminous nonpremixed turbulent flames", Combust. Sci. and Tech., 1997, Vol.128, pp.23-48.
- [8] K.C. Smyth, <http://www.bfrl.nist.gov>(1999)
- [9] N. Peters, Turbulent combustion, 2000, Cambridge, Cambridge University Press.
- [10] J.Y. Murthy, S.R. Mathur, "Radiative Heat Transfer in Axisymmetric Geometries using an Unstructured Finite-Volume-Method", Numerical Heat Transfer, Part B, 1998, Vol. 33, pp. 397-416.
- [11] J.H. Kent and D.R. Honnery, "A Soot Formation Rate Map for a Laminar Ethylene Diffusion Flame", Combustion and Flame, 1990, Vol. 79, pp. 287-298.
- [12] J.B. Moss, C. Stewart, K. Syed, "Flowfield modelling of soot formation at elevated pressure", 22nd Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988, pp. 413-423.
- [13] F. Liu, H. Guo, G.J. Smallwood and O.L. Gulder, "Numerical modelling of soot formation and oxidation in laminar coflow non-smoking and smoking ethylene diffusion flames", Combust. Theory Modelling, 2003, Vol. 7, pp. 301-315.
- [14] J.B. Moss, C.D. Stewart, and K.J. Young, "Modelling Soot Formation and Burnout in a High Temperature Laminar Diffusion Flame Burning under Oxygen-Enriched Conditions", Combustion and Flame, 1995, Vol. 101, pp. 491-500.
- [15] D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik, E.M. Mushi, "The Oxidation of Graphite Powder in Flame Reaction Zones", 20th Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1984, pp. 931-940.
- [16] C.R. Kaplan, G. Patnaik, and K. Kailasanath, "Universal Relationships in Sooting Methane-Air Diffusion Flames", Combust. Sci. and Tech., 1998, Vol. 131, pp. 39-65.