

활성화에너지점근법의 재고찰 (I) - 확산화염의 준정상소화조건

김종수*

Activation Energy Asymptotics Revisited (I) - Quasisteady Extinction Condition of Diffusion Flames

Jong Soo Kim

ABSTRACT

Activation energy asymptotics (AEA) for Linan's diffusion-flame regime is revisited in this paper. The main purpose of the paper is to carefully re-examine each AEA analysis step in order to clarify the some concepts that are often misunderstood among the ordinary practitioners of the AEA. Particular attention is focused on the different AEA regimes arising from the double limit of large Zel'dovich and Damkohler numbers. In addition, the expansion procedures are shown in detail and the method that the turning point condition, commonly known as the Linan's extinction condition, is found is explained.

Key Words : Activation Energy Asymptotics (AEA), Zel'dovich Number, Quasisteady Extinction Condition, Damkohler Number

1. 서론

화학반응의 활성화에너지가 반응시스템의 열에너지보다 한 차수 크다는 점에 기초하는 활성화에너지점근법(Activation Energy Asymptotics, 이하 AEA)은 연소시스템에서 총체적 1차 화학반응이 확산/대류를 포함한 전달현상과 상호작용하는 물리적 과정을 해석하는데 매우 유용한 해석도구로 이용되어 왔으며, 앞으로도 이용될 것이다. 특히 1974년에 발표된 Linan의 논문은 연소시스템에서 발견될 수 있는 4가지의 연소 영역(Regime)에 적용될 수 있는 체계적 해석방법을 제시함으로써 70년대와 80년대 수행된 AEA 해석의 학습서로의 역할을 수행하였으며 [1], 또한 AEA가 광범위하게 보급되는데 결정적인 역할을 하였다.

그러나, 우리가 최근에 다루는 연소의 해석문제는 초기에 시도되었던 점화, 소화 및 전파속도의 예측과 같이 비교적 기본적인 화염구조의 해

석을 통해서 해결될 수 있는 문제가 거의 소진되어 상당히 복잡한 양상을 보이고 있다. 특히 화염의 안정성이나 액적 및 Flame Ball 특성과 같이 외란의 영향에 민감한 시스템에서는 작은 해석상의 오류가 잘못된 예측을 야기할 수 있으므로, 더 이상 Linan의 해석방법을 단순하게 적용하여서는 안되는 경우를 자주 만날 수 있다. 따라서 이러한 문제점을 극복하기 위해서는 보다 정밀한 AEA의 수행이 요구되고 있다.

이러한 필요성에 기인하여, 앞으로 AEA에서 자주 마주칠 수 있는 중대한 오류를 지적하고, 그에 대한 적절한 대응방안을 제시하는 것을 본 논문의 주된 목표로 하고 있다. 논문의 내용은 지금까지 저자가 AEA해석을 수행하면서 터득하였던 내용과 Linan과의 토의를 통해서 얻어진 내용을 주제별로 종합하여 작성한 것이다.

본 논문은 Lewis수가 1인 경우 확산화염의 준정상소화조건을 예측하는 방법론을 보다 체계적으로 서술한 내용이다. 물론 Lewis수가 1인 경우에 대한 해석은 Linan의 1974년 논문에 해석방법이 이미 제시되어있다. 그러나 본 논문은 제시된 해석방법의 중간단계 및 서술되지 않은 부분을 보다 상세하게 설명함으로써, 향후 보다 복잡

* 한국과학기술연구원 대기자원연구센터
kimjs@kist.re.kr

한 AEA 해석을 하는데 유용한 가이드라인으로 활용될 수 있을 것으로 보고 있다.

2. 문제의 정의

2.1 특성길이와 특성시간

접합점근해법을 시도하기 이전에 채택된 모델의 특성길이와 특성시간을 비교하는 것은 문제에 적합한 고유극한 (Distinguished Limit)을 찾는 데 큰 도움이 될 수 있다. 일반적인 화염은 온도가 낮아서 화학반응이 동결된 대류-확산지역과 최고온도부근에 존재하는 확산-반응지역으로 나누어 고려될 수 있다. 대류-확산지역의 특성길이는 연소가 진행되는 연료-산화제의 혼합층에 작용하는 확산계수(D)와 스트레인률(a)을 이용하여 $(D/a)^{1/2}$ 으로 주어질 수 있다. 또한 대류-확산지역의 특성시간은 유동장의 스트레인률(a)의 역수인 $1/a$ 로 주어진다.

한편, 열적 에너지에 대한 활성화에너지의 비율 나타내는 Zel'dovich수 (β)가 매우 큰 경우, 화학반응은 최고온도에서부터 전체의 온도차에 대한 온도차가 $O(1/\beta)$ 의 차수가 되는 얇은 지역에 국한된다. 따라서 이러한 지역에서는 대류가 확산보다 한 차수 작기 때문에 반응과 확산이 균형을 이루는 확산-반응지역이 존재하며, 특성길이는 확산-대류지역보다 한 차수가 작은 $\beta^{-1}(D/a)^{1/2}$ 로 주어지며, 특성시간은 두 차수가 작은 $1/a\beta^2$ 로 주어진다.

따라서 앞으로 소개될 확산화염의 준정상 소화조건은 특성확산시간 보다 매우 큰 가진주기를 갖는 외란이 있는 조건에서는 적용이 될 수 있지만, 특성확산시간과 비슷하거나 작은 가진 주기를 보유하고 있는 외란에 대해서는 적용될 수 없다. 이와 같은 매우 짧은 특성시간을 갖는 외란이 있는 경우에는 화염의 특성곡선을 Damkohler 수와 화염온도의 평면상에 표시할 경우, 준정상해의 궤적을 나타내는 S-곡선으로부터 이탈하여 Limit-Cycle 상에 움직이거나, Limit Cycle이 깨지는 다른 궤적을 보여줄 수 있다. 따라서 비정상 상태에서 적용될 수 있는 소화조건은 S-Curve의 Upper Branch를 중심으로 하는 Limit Cycle이 존재하지 못하고 Lower Branch로 전이되는 비정상 과정이 나타나는 조건을 소화조건으로 지정할 수 있으며, 이런 조건은 앞으로 보여줄 준정상 소화조건으로 도출할 수가 없다는 점에 각별히 유의할 필요가 있다.

또한 가진주기가 특성확산시간과 특성반응시간의 사이의 값을 보이는 경우에는 확산-대류지역은 비정상상태에 놓여있지만 확산-반응지역은 정상상태로 남아있을 수 있다. 따라서 확산-반응지역의 지배방정식은 준정상상태에서 유도된

Linan의 정규방정식 (Canonical Equation)과 동일하다. 그러나 확산-반응지역의 지배방정식에서 얻어진 축소 Damkohler수의 최소치가 소화조건으로 사용되어서는 안된다. 즉, 확산-반응지역의 분기조건 (Bifurcation)은 대류확산지역을 포함하는 화염전체의 분기조건과 다를 수가 있기 때문이다. 보다 정확한 소염조건은 정밀한 안정성 해석을 통해서만이 얻을 수 있기 때문이다.

2.2 지배방정식과 연계함수

연료 (F)와 산화제 (O)가 반응하여 생성물 (P)과 열 (Q)을 발생시키는 $F + O \rightarrow P + Q$ 의 총체적 1단계 화학반응의 경우, 일정밀도조건하에서 연료농도 (Y_F)와 산화제농도 (Y_O) 및 온도 (T)에 대한 지배방정식은 다음과 같이 주어질 수 있다.

$$\frac{d^2 Y_F}{dy^2} + 2y \frac{dY_F}{dy} = w \quad (1)$$

$$\frac{d^2 Y_O}{dy^2} + 2y \frac{dY_O}{dy} = w \quad (2)$$

$$\frac{d^2 T}{dy^2} + 2y \frac{dT}{dy} = -w \quad (3)$$

$$w = DaY_F Y_O \exp[-E^*/R^*T_0^*(1+qT)] \quad (4)$$

여기에서 상첨자 *가 있는 물리량은 유차원 변수이며, E^* 는 활성화에너지, T_0^* 는 산화제유입경계 ($y \rightarrow -\infty$)의 온도 q 는 무차원 발열량이고, y 는 무차원화된 축방향의 좌표계이다. 연료농도는 산화제유입농도와 당량비 (σ)로 무차원화되어, 연료의 유입경계 ($y \rightarrow \infty$)에서 $A_F = \sigma Y_{F\infty}^*/Y_{O\infty}^*$ 로 주어진다. 또한 무차원화된 온도 (T)는 $T = (T^* - T_0^*)/qT_0^*$ 로 주어진다.

위의 식 (1)~(4)에 대한 접합점근해법을 직접 시도하는 것도 가능하지만, 연계함수를 도입함으로써, 해석을 훨씬 쉽고 체계적으로 진행시킬 수 있다. 연계함수는 혼합분률 (Mixture Fraction, Z)과 총엔탈피 (H)에 대해서 다음과 같이 정의될 수 있다 [2].

$$Z = (Y_F - Y_O + 1)/(1 + A_F) \quad (5)$$

$$H = T + (Y_F + Y_O)/2 \quad (6)$$

그러면 혼합분률 (Z)과 총엔탈피 (H)에 대한 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{d^2 Z}{dy^2} + 2y \frac{dZ}{dy} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{d^2 H}{dy^2} + 2y \frac{dH}{dy} = 0 \quad (8)$$

여기서 주목할 사항은 연계함수를 사용하여 주어

진 연료농도 (Y_F)에 대한 산화제의 농도 (Y_O) 및 온도 (T)를 구하는 것이 AEA를 수행하는 과정에서 접합조건 (Matching Condition)을 보다 쉽고 명확하게 구할 수 있는 장점이 있다는 점이다. 특히 Lewis수 (L)가 1이 아닌 경우에는 연계함수의 지배방정식에 $(1-L)$ 에 비례하는 비보존항들이 나타나서 연계함수의 도입을 꺼리는 경우가 있음에도 불구하고, 연계함수의 도입이 명확한 해석에 역시 도움이 되고 있다. Lewis수가 1이 아닌 경우에 대한 구체적인 AEA 해석방법은 본 논문과 연결된 추후의 논문에서 다루어질 예정이다.

연계함수가 도입되는 경우, 식(1), (4), (7), (8)의 연결된 방정식에 다음의 경계조건을 적용할 수 있다.

$$\begin{cases} Y_F = A_F, Z = 1, H = H_\infty & \text{as } y \rightarrow \infty \\ Y_F = 0, Z = 0, H = 1/2 & \text{as } y \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (9)$$

여기에서 $H_\infty = T_\infty + A_F/2$ 로 주어진다.

일반적으로 A_F 는 어떠한 양의 수일 수 있으나, 탄화수소화염에 대해서 무차원화된 연료의 농도 A_F 가 1보다 매우 큰 값을 가지므로, 그에 대한 경우를 중심으로 해석이 진행될 예정이다.

3. 화염구조해석

확산화염의 구조를 해석하기 위해서는 두 가지의 고유극한 (Distinguished Limit)을 이해할 필요가 있다. 확산화염의 구조에 대한 가장 단순한 고유극한이 Burke-Schumann 극한으로서, 이는 Damkohler수 Da 가 무한대에 접근하는 극한이다. 한편, 유산화학반응의 효과가 나타나기 시작하는 첫 번째 극한이 Linan이 제시한 확산화염영역 (Diffusion-Flame Regime)으로서 이는 Damkohler 수 Da 와 Zel'dovich 수 β 가 동시에 무한대로 접근하는 경우에 발생하는 극한의 하나이다. 확산화염영역에서는 화염의 구조가 Burke-Schumann 화염해에서 $O(1/\beta)$ 만큼만 섭동되며, 이때 Da 와 β 사이에는 적절한 차수의 관계가 성립되게 된다. 이러한 영역에서의 화염구조 해석을 통해서 Linan은 확산화염의 소염조건을 파악할 수 있었다. 본 논문에서는 이와 같이 확산화염의 소염조건을 얻는 과정에 대한 정확한 수학적 해법을 소개하여, 추후 진행될 AEA를 적용하는 연구자들에게 화염구조해석의 방법론을 보다 정확히 이해시키고자 한다.

3.1 Burke-Schumann 해

Burke-Schumann극한은 Da 가 무한대로 접근하는 극한이다. 이러한 극한은 식 (1)~(4)에 적용할 경우, 전달항인 좌변이 $O(1)$ 에 머무는 동안

반응항인 우변도 $O(1)$ 에 머물기 위해서는 식(4)의 반응식에서 연료와 산화제 농도의 곱이 "0"으로 접근하여야 한다. 즉,

$$Da \rightarrow \infty \rightarrow Y_F Y_O \rightarrow 0 \quad (10)$$

의 관계가 성립되며, 이와 같은 극한으로부터, Burke-Schumann 극한은 연료와 산화제가 공존할 수 없는 조건이라는 것이 파악될 수 있다. 따라서 연료경계와 접한 대류-확산지역에서는 연료만이, 산화제경계와 접한 대류-확산지역에서는 산화제만 존재할 수 있고, 화염면에서는 연료와 산화제가 동시에 "0"이 된다는 결론에 자연스럽게 도달할 수 있다.

이와 같은 Burke-Schumann 극한은 비가역적 총제적 1차반응에만 적용되며, 일반적인 가역적 다단계 반응에서는 평형조건이 Da 가 무한대로 접근하는 극한에 상응하는 화염구조해가 된다. 또한 Burke-Schumann 극한도 비가역적 총제적 1차반응에 대한 평형조건으로 인식될 수 있다. 이와 같은 관점은 Burke-Schumann 극한에서 매우 작은 섭동이 존재하는 Diffusion-Flame Regime을 Near-Equilibrium Regime 이라고도 하는 점에서도 확인될 수 있다 [1].

식 (7)을 식(9)에 주어진 경계조건에 대해서 풀면, 혼합분률의 분포가

$$Z = 1 - \operatorname{erfc}(y)/2 \quad (11)$$

로 주어지며, 화염면의 위치에서는 연료와 산화제의 농도가 모두 "0"이라는 조건으로부터 당량 혼합분률 $Z_s = 1/(1+A_F)$ 의 조건이 성립되며, 화염면의 위치 y_s 가

$$y_s = \operatorname{erfc}^{-1} \{2A_F/(1+A_F)\} \quad (12)$$

로 주어진다. 또한 연료 및 산화제의 농도는

$$Y_{F,0} = \operatorname{Max}[0, (1+A_F)Z - 1] \quad (13)$$

$$Y_{O,0} = \operatorname{Max}[0, 1 - (1+A_F)Z]$$

으로 주어진다. 위의 식에서 하첨자 "0"은 Burke-Schumann 극한에 해당하는 0차 전개를 나타낸다.

한편 총에너지 H 는

$$H = \frac{1}{2} \frac{\operatorname{erfc}(y)}{2} + \left(\frac{A_F}{2} + T_\infty \right) \left(1 - \frac{\operatorname{erfc}(y)}{2} \right) \quad (14)$$

로서, 식(13)에 주어진 연료와 산화제의 농도를 식(14)에 대입하면 Burke-Schumann 온도분포가 나온다. 또한 식(12)의 화염면의 위치를 대입하면 Burke-Schumann 화염온도가

$$H_{s,0} = (A_F + T_\infty)/(1+A_F) \quad (15)$$

로 주어진다.

다음의 그림1은 총엔탈피 H 의 의미를 그림으로 표현한 것으로서, H 및 화학종의 농도로부터 온도분포를 파악하는 과정을 도식적으로 나타

내고 있다. 특히, 정규화된 연료와 산화제의 구배가 화염면에서는 크기가 동일하므로 H 의 화염면

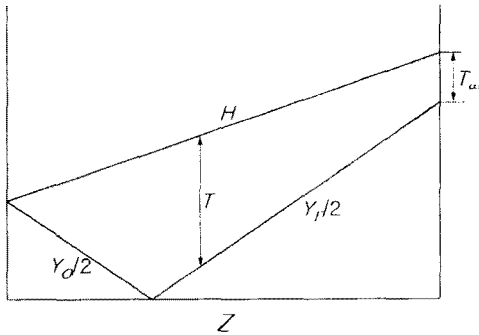


그림 1. 연계함수 (H)와 연료농도, 산화제농도 및 온도와의 관계에 대한 개략도

에서의 구배인 H_s' 은 온도구배의 비대칭성을 측정하는 인자로 해석될 수 있다.

3.2 Diffusion-Flame Regime의 해

화학반응률이 유한해져서 Damkohler수도 유한해지는 경우에는 Burke-Schumann해에서 이탈하는 화염해가 존재한다. 이러한 화염해들 가운데 한 영역이 Diffusion-Flame Regime이다. Linan의 Diffusion Flame Regime은 Zel'dovich수와 Damkohler수가 모두 큰 (그렇지만 유한한) 이중극한에서 존재하는 고유극한의 하나이며, 이 고유극한에 대한 정확한 정의는 점합점근해법을 수행하면서 보다 자세히 설명하고자 한다. Diffusion-Flame Regime의 해는 먼저 화염구조의 외부층인 확산-대류지역에 대한 해석을 수행하고, 이후 내부층은 확산-반응지역에 대한 해석을 수행하여 두 지역의 해를 접합시키는 방법으로 수행할 예정이다. 또한 AEA를 수행하기 위해서는 Zel'dovich 수 β 를 큰 확장변수로 채택하며, Zel'dovich 수의 정확한 정의는 해석과정에서 밝혀질 것이다.

3.2.1 확산-대류지역의 해석

Diffusion-Flame Regime에서는 유한화학반응률에 의해서 반응지역을 통해서 누출되는 화학종의 양이 $O(1/\beta)$ 의 차수로 규정될 수 있다. 이에 따라서 연료농도 (Y_F), 산화제농도 (Y_O) 및 온도 (T)의 분포도 $O(1/\beta)$ 의 차수로 섭동되어야 된다. 그러나 여기에서 연계함수 Z 와 H 를 이용할 경우, 해석을 보다 단순화시킬 수 있다. 연계함수에 대한 지배방정식 (7)과 (8)은 화학반응을 포함하고 있지 않기 때문에 식 (11)과 (14)에 주어진 Z 와 H 의 분포식은 화학반응의 유한함에 관계없이 내부층과 외부층에 대해서 모두 적용될 수 있다. 따라서 연료의 농도에 대한 섭동이 주어진 경우, 그에 대응하는 산화제 및 온도에 대

한 섭동을 연계함수를 이용하여 파악할 수 있다. 확산-대류지역의 외부층의 연료농도장에 적용할 수 있는 가장 적합한 전개는 다음과 같이 주어질 수 있다.

$$Y_F^{out} = Y_{F,0} + \beta^{-1} H_{s,0} Y_{F,1} + \dots \quad (16)$$

위의 식에서 Y_F 의 전개항 앞에 $H_{s,0}$ 를 삽입한 것은 대부분의 변수가 일차적으로 $H_{s,0}$ 와 유사한 크기로 연동되어 있기 때문에 식을 보다 일관성 있게 전개하기 위한 방안이다.

Y_F 에 대한 1차 전개항에 대한 지배방정식은

$$\frac{d^2 Y_{F,1}}{dy^2} + 2y \frac{dY_{F,1}}{dy} = 0 \quad (17)$$

로 주어지며, 여기에서 확산-대류지역에서는 화학반응률이 낮은 온도로 인해서 점근적으로 "0"으로 취급되므로 화학반응의 효과는 고려되지 않는다. 위의 식을 이용하여 확산-대류지역의 연료공급측 ($Z > Z_c$) 및 산화제공급측 ($Z < Z_c$)에 대해서 위의 식을 각각 풀 경우, 1차 전개항에 대한 연료농도는 다음과 같이 주어질 수 있다.

$$Y_{F,1} = \begin{cases} Y^+ [(1 + A_F)/A_F] \text{erfc}(y)/2 & y > y_c \\ Y^- (1 + A_F) [1 - \text{erfc}(y)/2] & y < y_c \end{cases} \quad (18)$$

위의 식에서 Y^+ 와 Y^- 는 화염면의 연료공급측 및 산화제공급측 경계에서 측정될 수 있는 연료농도장의 섭동량으로서, 특히 Y^+ 는 연료의 누출량 그리고 Y^- 는 산화제의 누출량과 직접적으로 접합될 수 있음이 다음에서 보여질 것이다.

참고로 Y_O 와 T 도 식 (16)과 유사하게 다음과 같이 전개될 경우,

$$Y_O^{out} = Y_{O,0} + \beta^{-1} H_{s,0} Y_{O,1} + \dots$$

$$T^{out} = T_0 + \beta^{-1} H_{s,0} T_1 + \dots$$

연계함수 Z 와 H 에 대한 1차전개항은 존재하지 않으므로, 이에 대응하는 Y_O 와 T 분포의 1차 전개는 식 (5)와 (6)으로부터 다음과 같이 주어진다.

$$Y_{O,1} = Y_{F,1}, \quad T_1 = -Y_{F,1}$$

3.2.2 확산-반응지역의 해석

확산-반응지역인 내부층에서도 연계함수가 유효하므로, 오직 하나의 변수에 대한 섭동만을 고려할 수 있다. 연료농도 (Y_F)에 대한 섭동도 Burke-Schumann해인 $Y_F=0$ 에서부터 다음과 같이 고려될 수 있다.

$$Y_F^{in} = \beta^{-1} H_{s,0} (\phi + \xi) \quad (19)$$

위의 식에서 확장좌표 ξ 는

$$\xi = A\beta(y - y_c) - \lambda \quad (20)$$

위의 확장좌표에서 인자 A 와 λ 는 전개식의 단순화를 위해서 추후에 정의될 값들이다.

한편, 식 (19)에 대응하는 산화제농도 (Y_O)는 혼합분율 (Z)를 고려하여 구할 수 있다. 내부층에서 확장변수를 독립변수로 채택할 경우, 혼합분율은

$$Z = (1 + A_F)^{-1} + \beta^{-1} [Z_s'(\xi + \lambda)/A] + \dots \quad (21)$$

로 주어질 수 있으며, 혼합분율에 대한 정의인 식 (5)와 내부층에 대한 Y_F 의 전개식인 식 (19)을 대입할 경우 내부층의 Y_O 를 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$Y_O^* = \beta^{-1} H_{s,0} [\phi + (1 - A^{-1}(1 + A_F)H_{s,0}^{-1}Z_s')\xi - A^{-1}(1 + A_F)H_{s,0}^{-1}Z_s'\lambda] + \dots \quad (22)$$

위의 식을 보다 단순한 형태의 Y_O 전개식인

$$Y_O^* = \beta^{-1} H_{s,0} (\phi - \xi) \quad (23)$$

로 대응시키기 위해서는 인자 A 와 λ 가 다음과 같이 정의된다.

$$A = (1 + A_F)Z_s'/2H_{s,0} \quad (24)$$

$$\lambda = 0$$

위의 식에서 인자 λ 로 대표되는 확장좌표계의 수평이동은 발생하지 않고 있으나, 이는 연료와 산화제의 Lewis 수가 동일하기 때문에 혼합분율에 대한 우변의 비균일성이 없기 때문이다. 그러나 Lewis수가 서로 다른 경우에는 1차 전개에서 나타나는 연료의 누출과 연관된 혼합분율의 비균일성의 효과를 고려하기 위해서 확장좌표의 수평이동이 필요하게 된다 [3].

한편, 내부층에서 고려되는 온도의 전개식은 층엔탈피의 전개를 고려하여 얻어질 수 있다. 내부층에서 층엔탈피는

$$H = H_{s,0} + \beta^{-1} H_{s,0} [2H_s'/(1 + A_F)Z_s'\xi + \dots$$

로 전개되며, 여기에 Y_F 와 Y_O 의 전개식을 대입하면, 내부층에서 온도에 대한 전개식이

$$T^* = H_{s,0} - \beta^{-1} H_{s,0} (\phi + \gamma\xi) \quad (25)$$

로 주어질 수 있다. 이때 열손실인자 γ 는

$$\gamma = -2H_s'/(1 + A_F)Z_s' = 2(1 - A_F - T_\infty)/(1 + A_F) \quad (26)$$

로 정의된다. 그림 1에 주어진 바와 같이, $\gamma = 0$ 인 경우에는 화염면 양쪽으로 온도구배가 같으며, $\gamma = 1$ 인 경우에는 산화제쪽으로 단열조건이 형성되고, $\gamma = -1$ 인 경우에는 연료쪽으로 단열조건이 형성된다.

지금까지의 전개식에서도 확장변수로 채택된 Zel'dovich 수 β 가 아직 정의 되지 않고 있다. Zel'dovich 수를 정의하기 위해서는 식 (25)에 있는 온도의 전개식을 Arrhenius 함수에 대입하여야 하며, 이때 내부층의 확장변수로 표현되는 지

수함수가 $\exp[-(\phi + \gamma\xi)]$ 로 표시될 수 있도록 Zel'dovich 수를 정의하면,

$$\beta = (E^*/R^*T_O^*)qH_{s,0}/(1 + qH_{s,0})^2 \quad (27)$$

로 주어진다.

지금까지 정의된 변수와 인자를 식(1)과 (4)에 대입할 경우, 내부층에서의 지배방정식을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = \Delta(\phi + \xi)(\phi - \xi)\exp[-(\phi + \gamma\xi)] \quad (28)$$

위의 식에서 Δ 는 축소 Damkohler 수로서

$$\Delta \equiv Da \exp(H_{s,0}) \frac{4H_{s,0}^3}{(1 + A_F)^2 Z_s'^2 \beta^3} \times \exp[-(E^*/R^*T_O^*)/(1 + qH_{s,0})] \quad (29)$$

로 정의된다.

위에 제시된 Diffusion-Flame Regime의 내부층에 대한 지배방정식이 의미가 있기 위해서는 축소 Damkohler 수 Δ 가 O(1)의 차수를 갖는 물리량으로 정의가 되어야 한다. 이르기 위해서는 β 가 무한대로 접근함에 따라서 Da 도 식 (29)의 조건에 적합하게 무한대로 동시에 접근하여야 한다. 즉, Diffusion Flame Regime은 β 와 Da 가 동시에 무한대로 접근하는 이중극한에 대한 한 고유극한으로서 특히 축소 Damkohler 수 Δ 가 O(1)의 차수를 갖는 극한을 가르킨다. 만약 화학종의 과도한 누출 등이 발생한 경우에는 변수들 가운데 하나가 Diffusion-Flame Regime에 대응하는 차수를 위반할 수 있게 되며, 이럴 경우에 이중극한의 상황에서 다른 차수를 보유하는 새로운 고유극한이 등장하게 되며, 이러한 경우의 하나가 Linan의 Premixed-Flame Regime이다.

3.2.3 접합조건

내부층의 해와 외부층의 해를 접합함으로써, 두 해석층의 각 해석 차수에 대한 경계조건과 점프조건을 얻을 수 있다. 접합조건은 여러 가지 방법에 의해서 얻을 수 있다. 보다 정통적인 방법으로는 외부층과 내부층의 중간층을 설정하여 외부층의 해와 내부층의 해의 점근적인 확장식이 서로 접합되게 하는 방법을 채택할 수 있다. 그러나 이러한 접합방법은 상당히 사용하기가 어렵기 때문에, 경계층이론에서 채택되고 있는 내부층 및 외부층의 해를 내부층의 경계지역 (즉, $\xi \rightarrow \pm\infty$ 와 $y \rightarrow y_s^+$ 의 이중 극한)에서 기울기와 변위 (Displacement)를 순차적으로 접합시키는 방법을 활용하는 것이 보다 용이하다.

먼저 외부층과 내부층의 경계지역에서 확산-대류지역의 연료농도의 해의 거동을 표현하면 다음과 같이 주어질 수 있다.

$$Y_F^{out} = \begin{cases} \beta^{-1} H_{s,0} (2\xi + Y^+); & y \rightarrow y_s^+, \xi \rightarrow \infty \\ \beta^{-1} H_{s,0} (0\xi + Y^-); & y \rightarrow y_s^-, \xi \rightarrow -\infty \end{cases}$$

(30)

따라서 위의 전개식을 식 (19)에 주어진 내부층 연료농도의 확장식의 기율기와 접합을 하면, 다음과 같은 식 (28)에 대한 경계조건을 얻을 수 있다.

$$\phi_\xi \rightarrow \pm 1 \quad \xi \rightarrow \pm \infty \quad (31)$$

따라서 식(28)과 (31)을 이용하여 내부층에 대한 Y_F , Y_O 및 T 의 분포를 얻을 수 있다. 여기에서 내부층의 Y_F 에 대한 해는 경계지역에서 2차 미분항이 "0"이 되므로 일차식으로 다음과 같이 전개될 수 있다.

$$Y_F^{in} = \begin{cases} \beta^{-1} H_{s,0} [2\xi + (\phi - \xi)(\infty)] & \xi \rightarrow \infty \\ \beta^{-1} H_{s,0} [0\xi + (\phi + \xi)(-\infty)] & \xi \rightarrow -\infty \end{cases}$$

(32)

따라서 식(32)를 식(30)과 접합시키면, 외부층의 1차확장식에 대한 접합조건을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$Y^\pm = (\phi \mp \xi)(\pm \infty) \quad (33)$$

위의 식에서 $(\phi \mp \xi)(\pm \infty)$ 는 확산화염의 AEA에 자주 등장하는 인자이므로, 보다 간단한 표현을 위해서

$$\alpha^\pm = (\phi \mp \xi)(\pm \infty)$$

로 표시되며, 물리적인 관점에서 해석할 경우 $\alpha^+ = (\phi - \xi)(\infty)$ 는 산화제가 반응지역에서 누출되는 양을 $\alpha^- = (\phi + \xi)(-\infty)$ 는 연료가 누출되는 양을 나타낸다. 또한 열손실인자 γ 가 양수인 경우에는 산화제 공급측의 온도구배가 작아서 반응지역을 통과하는 연료는 충분한 반응시간이 있으나, 연료측의 온도구배가 커서 누출되는 산화제가 급격히 반응이 동결되어 더욱 큰 누출량을 나타낸다. 따라서 양수의 γ 에 대해서는 $\alpha^+ = (\phi - \xi)(\infty)$ 가 $\alpha^- = (\phi + \xi)(-\infty)$ 보다 크게 되며 주된 화학종 누출량으로 취급될 수 있다. 한편 음수의 γ 에 대해서는 연료의 누출량인 $\alpha^- = (\phi + \xi)(-\infty)$ 가 주된 누출량으로 취급될 수 있다.

식 (28)과 (31)에 주어진 내부층의 지배방정식은 양수와 음수의 γ 에 대해서 서로 대칭인 특징이 있으므로, 양수의 경우에 대해서만 해석하여도 같은 축소 Damkohler 수를 갖는 경우에는 다음의 대칭성이 보장된다.

$$\alpha^+(\gamma, \Delta) = \alpha^-(-\gamma, \Delta) \quad (34)$$

또한 주어진 γ 에 대해서 큰 누출량을 누출량인자 α 로 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\alpha = \text{Max}(\alpha^+, \alpha^-) \quad (35)$$

다음의 그림 2는 양수의 γ 에 대해서 누출량

인자 α (이 경우에는 산화제누출량 α^+)을 도시

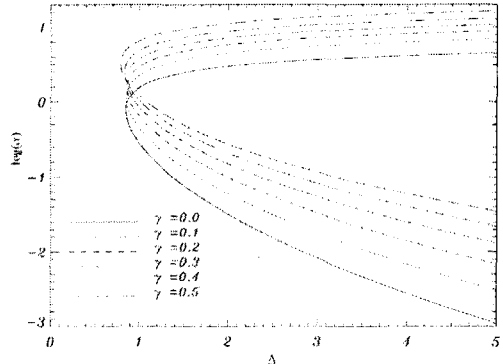


그림 2. 축소 Damkohler수 Δ 에 대한 누출인자 α 의 변화 특성

한 그림이다.

지금까지 설명된 내부층과 외부층의 유산화학 반응효과에 대한 해석 및 접합조건을 적용할 경우, 주어진 축소 Damkohler수 Δ 에 대해서 내부층과 외부층에서 모두 $O(\beta^{-1})$ 까지 균일하게 유효한 화염구조를 얻을 수 있다.

4. 준정상 소화조건

4.1 C-곡선의 전환점과 소염조건

앞의 그림 2에서 보는 바와 같이, 주어진 γ 에 대한 누출인자의 축소 Damkohler수에 대한 함수 $\alpha(\Delta)$ 는 C자 형태의 보이게 되어 C-곡선이라고도 불리운다. C-곡선에는 하나의 특이점이 있는데, 이는 축소 Damkohler수가 최소가 되는 C-곡선의 전환점이다. 통상적으로 C-곡선의 전환점은 확산화염의 소염조건으로 인용되기도 한다.

Linan은 C-곡선의 전환점에 대한 축소 Damkohler 수 Δ_E 를 γ 의 함수로서 다음과 같이 제시하고 있다.

$$\Delta_E = e[(1 - |\gamma|) - (1 - |\gamma|)^2 + 0.26(1 - |\gamma|)^3 + 0.055(1 - |\gamma|)^4]$$

(36)

C-곡선의 전환점이 소염조건으로 적용되는데는 간단한 안정성해석에 근거를 두고 있다. 그림 2의 C-곡선에서 C-곡선은 시간미분항이 "0"이 되는 화염구조해의 궤적으로서 C-곡선 밖에서는 시간변화항이 존재한다는 것을 암시한다. 특히 C-곡선의 우측에서는 누출량의 시간변화율이 음수를 갖게 되며 (즉, 온도의 시간변화율은 양수), 좌측에서는 같은 물리량이 양수를 갖게 된다. 따라서 C-곡선의 아랫줄기 (Lower Branch)에서

(S-곡선에서는 Upper Branch에 해당) 외부의 섭동에 의해서 연소조건이 이탈하였을 경우에는, 증가된 반응물 누출은 음수의 누출량 시간변화률에 의해서, 감소된 반응물 누출은 양수의 누출량 시간변화률에 의해서, 각각 원래의 조건으로 복원된다. 그러나 C-곡선의 윗줄기 (Upper Branch)에서 (S-곡선에서는 Middle Branch에 해당) 외부의 섭동에 의해서 연소조건이 이탈하였을 경우에는, 증가된 반응물 누출은 양수의 누출량 시간변화률에 의해서 감소된 반응물 누출은 음수의 누출량 시간변화률에 의해서 각각 원래의 조건에서 멀어져서 안정성이 상실된다. 결과적으로 아랫줄기를 따라서 축소 Damkohler 수가 감소될 경우, C-곡선의 전환점에서 연소조건이 안정성을 상실하여 동결조건으로 천이되면서 소화되게 된다. 이러한 이유 때문에 C-곡선의 전환점이 소염조건으로 해석될 수 있다.

그러나 C-곡선의 전환점이 꼭 확산화염의 소염조건에 대응될 필요는 없다. 앞에서 서술된 바와 같이 화염의 특성유동시간보다 빠르게 변하는 비정상 외란이 있는 경우에는 축소 Damkohler 수가 순간적으로 최소 Damkohler 수보다 작아지더라도 Damkohler 수가 빠르게 회복될 경우 꼭 소화되지 않을 수 있다. 따라서 비정상 외란의 특성시간이 특성유동시간보다 충분히 길지 않은 경우에는 식 (36)의 조건이 소염조건으로 사용될 수 없다.

또한 Lewis수가 "1"에서 $O(1)$ 의 정도로 이탈하는 경우에도 식 (36)이 소염조건으로 채택될 수 없다. Lewis 수가 "1"에서 멀어질 경우, 식 (8)에 주어진 총엔탈피 H 에 대한 보존 방정식에서 비보존항이 우변에 나타날 수 있다. 비보존항은 화학종과 열에너지의 확산의 차이에서 발생하는 불균형성을 나타내며, Lewis수의 "1"로 부터의 이탈량 $(L-1)$ 에 비례하게 된다. 따라서 Burke-Schumann 극한에서는 화염면에서 아무런 화학종의 누출이 없기 때문에 화염온도의 섭동이 없으나, 유한화학반응물이 고려되는 $O(\mathcal{F}^{-1})$ 에서는 화학종의 누출량 α 와 비례하여 $O(\mathcal{F}^{-1}\alpha)$ 에 비례하여 총엔탈피가 부족하거나 ($L > 1$ 의 경우) 초과하는 ($L < 1$ 의 경우) 초과엔탈피 (Excess Enthalpy) 현상이 발생하게 된다. 따라서 축소 Damkohler 수 Δ 는 Burke-Schumann 극한에서 얻어진 물리량 이외에도 유한화학반응물의 영향을 나타내는 α 에 추가적인 영향을 받게되며, C-곡선의 전환점이 되는 최소 Δ 가 물리적인 Damkohler 수 Da 의 최소조건과 부합될 필요가 없어지게 된다. 이러한 경우 최소 Da 의 조건 (따라서 최소 Δ 조건과 다른 조건)을 1차적으로 준정상 소염조건으로 채택하는 것이 타당할 것이

다. 그러나 최소 Δ 의 조건도 Bifurcation 조건의 하나로 인식될 수 있으므로 이들 조건 근처에서는 화염의 다양한 불안정성이 발생할 수 있기 때문에 구체적인 비선형안정성 해석을 동반하지 않고는 실제 물리적으로 발생할 수 있는 소염조건을 예측하기는 어려운 실정이다, 단지 최소 Da 의 조건이 평면 섭동에 대한 분기조건이라는 점에서 준정상 소염조건으로 채택하는 것이 가장 타당할 따름이다.

4.2 Linan의 소염조건

비록 식 (36)이 Lewis 수가 1에서 이탈량 및 비정상항이 각각 $O(1)$ 보다 낮은 차수에 머무르는 경우에만 적용될 수 있는 한정적인 소염조건일 지라도 소염조건을 1차적으로 추산할 수 있는 매우 유용한 조건식이라는 점은 아직도 유용하다. 단지 식 (36)은 일반적으로 수치해석결과에서 얻어진 근사식일 것이라는 사실과 달리 이론적으로 얻어진 결과이다. 여기에서는 식 (36)을 얻을 수 있는 섭동해석을 간단히 소개하고자 한다.

섭동해석을 위해서 채택하는 고유극한은 열손실인자 γ 가 -1에 접근하는 경우로서, 일반적인 탄화수소에 적용될 수 있는 작은 Z_s (즉, 큰 A_F)의 경우에 발생할 수 있는 극한이다. 이 경우 C-곡선의 전환점은 매우 작은 값을 갖게 되며, 연료의 누출량 α^- 은 매우 큰 값을 갖게 된다.

해석을 보다 쉽게 진행시키기 위해서 먼저 다음과 같은 좌표변환이 수행된다.

$$\eta = 2\xi - \alpha^{-1} = 2\xi - a/m \quad (37)$$

$$\varphi = \phi - \xi$$

여기에서 작은 확장인자 m 은 다음과 같이 정의되며,

$$m \equiv (1 + \gamma)/2 \quad (38)$$

연료 누출량 α^{-1} 은 $O(1/m)$ 의 값을 갖는 것으로 가정되어 $\alpha^- = a/m$ 으로 정의되며 a 는 $O(1)$ 의 값이다. 위와 같은 변수변환을 식 (28)과 (31)에 대입할 경우, 새로운 지배방정식을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\frac{d^2\varphi}{d\eta^2} = \Delta \frac{ae^{-a}}{4m} \varphi \exp[-(\varphi + m\eta)] \times [1 + (m/a)(\varphi + \eta)] \quad (39)$$

$$\varphi_{\infty} \rightarrow 0, (\varphi + \eta)_{-\infty} \rightarrow 0$$

위의 식을 풀기 위해서 작은 확장인자 m 에 대해서 다음과 같이 변수를 확장하여 해를 구할 수 있다.

$$\begin{cases} \varphi = \varphi_0 + m\varphi_1 + \dots \\ \delta = \Delta \frac{ae^{-a}}{4m} = \delta_0 (1 + md + \dots) \end{cases} \quad (40)$$

위의 확장식을 식 (39)에 대입할 경우, $O(1)$ 에

서는

$$\frac{d^2\varphi_0}{d\eta^2} = \delta_0\varphi_0 \exp(-\varphi_0) \quad (41)$$

$$\varphi_0(\eta \rightarrow \infty) \rightarrow 0, (\varphi_0 + \eta)(\eta \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$$

위의 식에 에너지적분을 적용할 경우, $\delta_0 = 1/2$ 의 관계식이 얻어지며, 축소 Damkohler 수 Δ 의 1차 근사식은

$$\Delta = (2m/a) \exp(a) = (2/\alpha^-) \exp(m\alpha^-) \quad (42)$$

로 주어지며, 위의 근사식에 대해서 미분을 할 경우, 최소 Δ 의 조건은 $a = 1$ ($\alpha^- = 1/m$)에서 발생하며, 이 경우에 대응하는 최소 Δ 는

$$\Delta_E = 2em = e(1 + \gamma) \quad (43)$$

로 Δ_E 의 1항 근사식이 주어진다.

보다 정확한 Δ_E 의 조건식을 찾기 위해서는 $O(m)$ 에 대한 해석이 수행되어야 한다. $O(m)$ 에 대한 내부층의 지배방정식은

$$\mathcal{L}(\varphi_1) = \delta_0\varphi_0 \exp(-\varphi_0)[d - \eta + (\varphi_0 + \eta)a] \varphi_1(\eta \rightarrow \pm \infty) \rightarrow 0 \quad (44)$$

위의 식에서 선형작용자 \mathcal{L} 은

$$\mathcal{L} = \frac{d^2}{d\eta^2} - \delta_0(1 - \varphi_0) \exp(-\varphi_0) \quad (45)$$

로 주어진다. 위의 선형미분방정식 (44)는 선형작용자 \mathcal{L} 의 균일해 φ_h ($\mathcal{L}(\varphi_h) = 0$)에 대한 우변 불균일항의 투영이 "0"이 될 경우에만 물리적으로 의미있는 φ_1 의 해가 존재하게 된다. 여기에서 균일해 φ_h 은 선형작용자가 식 (41)의 미분에서 얻어진다는 사실을 이용할 경우, 간단하게

$$\varphi_h = d\varphi_0/d\eta \quad (46)$$

로 주어지게 되며, 식 (45)의 해가 존재하기 위한 적합조건을 적용할 경우,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_0\varphi_0 \exp(-\varphi_0)[d - \eta + (\varphi_0 + \eta)a] \varphi_{0,\eta} d\eta = 0 \quad (47)$$

이 얻어지며, 각 항에 대해서 적분을 실시할 경우 δ 의 확장항인 d 가 다음과 같이 얻어질 수 있다.

$$d = -\nu - (2 - \nu)/a \quad (48)$$

$$\nu = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0 \exp(-\varphi_0) \varphi_{0,\eta} d\eta = 1.3440 \quad (49)$$

위에서 얻어진 d 를 이용할 경우, Δ 의 $O(m)$ 을 포함하는 근사식은

$$\Delta = (2/\alpha^-) \exp(m\alpha^-) \times (1 - 1.344m - 0.656/\alpha^-) \quad (50)$$

으로 주어진다. 위의 근사식에서는 최소 Δ 가

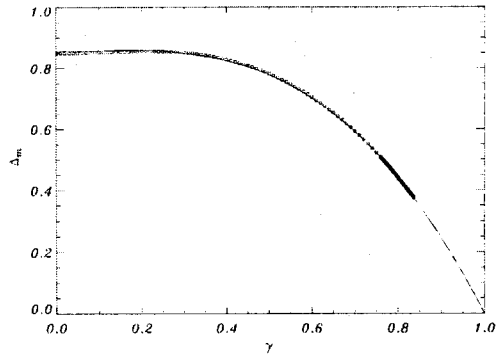


그림 3. Linan의 확산화염 소염조건에 대한 수치결과 (다이아몬드)와 4항 확장식 (실선)의 비교결과

$$\alpha^- = a/m = 1/m - 0.656m \quad (51)$$

에서 발생하며, 이 대응하는 최소 Δ 는

$$\Delta_E = e[(1 + \gamma) - (1 + \gamma)^2] \quad (52)$$

로 주어지며, 식 (36)에 주어진 Linan의 소염조건인 앞 두항을 나타내고 있다. 또한 식 (51)은 C-곡선의 전환점에서의 연료의 누출량에 대한 2항 근사식으로 활용되고 있다.

Linan은 여기에서 $\gamma = 0$ 일 경우 최소 Δ 가 $\Delta_E(\gamma = 0) = 0.856 = 0.315e$ 로 주어지는 것을 수치해석을 통해서 얻었으며, 또한 $\gamma = 0$ 에서 Δ_E 는 대칭이라는 조건을 추가하여 식 (36)의 4항 근사식을 얻었다.

그림 3은 양수의 γ 에 대해서 Δ_E 를 도시한 것으로 수치해와 Linan의 소염조건이 전 영역에 걸쳐서 매우 잘 일치하고 있음을 알 수 있다.

5. 결론

본 논문에서는 AEA를 비가역 총체적 1단계 화학반응물을 가정한 확산화염의 구조 해석에 적용한 경우에 대한 재고찰을 시도하였다. 근본적으로 본 논문은 AEA 해석의 고전인 Linan의 해석법과 다른 점은 없이 Linan의 해석 방법을 충실히 따르고 있다. 그러나 Linan의 AEA 해석방법이 많은 화염의 구조해석에 이용됨에도 불구하고 사용자들이 해석상의 오류를 자주 범한다는 점에서 일반적인 AEA 이용자의 개념적 오류를 개선하고자 본 논문이 작성되었다. 따라서 보다 명백한 해석 방법을 제시하기 위해서 구체적인 함수의 정의에 있어서는 약간의 차이가 있을 수 있으며, 특히 본 논문의 방법이 보다 일반적인 해석을 위해서 유리한 면이 있는 점도 지적하고자 한다.

본 논문에서 특히 주목해야 될 부분은 Diffusion-Flame Regime이 나타나는 고유극한에 대한 내용이다. 즉 Burke-Schumann 극한과 Diffusion-Flame Regime이 나타나는 극한에 대한 근본적 차이를 이해할 필요가 있으며, 이러한 극한이 확고히 이해가 된다면, Premixed-Flame Regime 및 Ignition Regime 등 Zel'dovich 수와 Damkohler 수의 이중극한에서 발생하는 다른 고유극한에 대해서도 이해할 수 있을 것으로 기대되고 있다.

본 논문은 향후 Lewis 수가 1이 아닌 경우에 대한 해석으로 확장될 수 있을 것이다. Lewis 수가 1이 아닌 경우에 확산-대류의 불균형에서 발생하는 초과엔탈피 현상을 올바르게 고려하는 방법이 구체적으로 소개될 예정이다. 특히 초과엔탈피현상은 화염에서 발견되는 고차역학 (Higher Order Dynamics)적 현상의 근본적 원인이 되므로 이에 대한 확고한 이론적 이해 및 해석방법론을 알고 있다는 것은 보다 발전된 연소해석을 위한 기본으로 인식될 수 있다.

후 기

이 연구(논문)은 과학기술부의 지원으로 수행하는 21세기 프론티어연구개발사업(수소에너지사업단)의 일환으로 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] A. Linan, "The Asymptotic structure of counterflow diffusion flame for large activation energies," *Acta Astronautica* 1, 1974, pp. 1107-1039.
- [2] A. Linan and F. A. Williams, "Fundamental Aspects of Combustion," *Oxford University Press*, 1993.
- [3] J. S. Kim and F. A. Williams, "Extinction of Diffusion Flames with Nonunity Lewis Numbers," *J. Engineering Math* 31, 1997, pp. 101-118.