

비정상 화염편 모델을 이용한 대기압 층류 비예혼합 CH₄/Air 화염장의 매연입자 생성 특성 및 화염구조 해석

김태훈* · 전상태* · 김용모**

Unsteady Flamelet Modeling for Flame Structure and Soot Formation of Laminar Non-premixed CH₄/Air Flame

Taehoon Kim*, Sangtae Jeon*, Yongmo Kim**

ABSTRACT

The two-equation soot model based on the transient laminar flamelet model is implemented for soot formation of laminar non-premixed CH₄/Air flame with detailed chemical reaction mechanism and complex thermodynamic properties. The soot model represents nucleation, growth and oxidation with gas-phase chemistry. This represented unsteady flamelet soot model has been tested and compared using well verified reference calculation result obtained solving the Full Transport Equations method.

Key Words : Laminar non-premixed flame, Transient flamelet model, Two equation soot model

Soot은 탄화수소 연료가 연소되기 위하여 열분해과정을 거치는 중 산화제에 의하여 산화되지 못한 수백만 개의 탄소 원자 입자들이 엉기면서 생성되는 덩어리 구조를 가지는 매연입자이다. 이 매연입자는 가스터빈, 내연기관과 같은 연소기기의 불완전한 연소로 인하여 발생하는 주요 공해물질로 대기오염 및 인간의 건강에 직접적으로 악영향을 줄뿐만 아니라 연소성능을 저하시킨다. 이러한 매연입자의 크기분포 및 수밀도와 체적분율에 따른 복사 열전달 영향은 매연입자가 많이 발생하는 비예혼합 화염의 화염구조를 정확히 예측하기 위해서 필요하다. 매연입자에 의한 복사 열전달의 경우 화염장의 기체 생성물에 의한 복사효과 보다 상대적으로 열손실이 크기 때문에 매연입자가 많이 발생하는 화염에서 이를 고려하지 않으면 화염 온도를 과대 예측하게 된다. 비예혼합 화염에서 온도장의 과대예측은 다시 화학종의 농도와 매연생성물의 잘못된 예측을 야기하므로 매연입자와 화염장의 상호작용을 고려할 수 있는 매연입자 생성 및 산화모델을 개발할 필요가 있다.

일반적으로 층류 비예혼합 화염에서 세부 화학반응 메커니즘과 soot 및 NO_x의 생성 과정을 함

께 고려함에 있어서 Full Transport Equation 방식의 접근법은 수치적인 정확도와 공해물질의 생성 경로를 자세하게 묘사할 수 있다는 점에서 강점을 가진다. 하지만 케로신과 같이 복잡한 연료 성분을 가지고 있어서 고려해야할 화학종들이 많아지게 되면 수치적인 계산시간이 기하급수적으로 증가하여 공학적으로 다루기가 힘들게 된다.

반면, 본 연구에서 사용하는 화염편 연소모델[1]의 경우, 케로신 연소에서 나타나는 많은 화학종과 복잡한 화학반응 메커니즘을 효율적으로 다룰 수 있으며 혼합분율(Z)과 스칼라 소산율(χ)을 통하여 화염구조를 유동장과 결합하여 비예혼합 화염을 효율적으로 예측할 수 있다. 마찬가지로 two-equation soot 모델의 경우, soot의 질량분율과 수밀도를 다루는 공학적으로 가장 널리 쓰이는 soot모델로 비교적 간단하면서도 실험값들과 상호 비교가 가능하며 물리적으로 이해가 쉽다는 장점이 있다. 하지만 이 두 모델들을 다루는데 있어서 기존의 연구에서는 정보가 한 방향으로만 이동되는 방식으로 결합이 되어 soot이 생성됨에 따라 나타나는 화염구조의 변화를 제대로 예측하지 못 하는 한계를 보여주었다.

그리하여 본 연구에서는 기존의 화염편 모델과 two-equation soot 모델을 양방향으로 정보가 교환되도록 결합하여 혼합분율상에서 기체 연소 생성물 반응과 soot 생성 반응 과정이 함께 고려되는 모델을 개발하였다. 혼합분율상에서 화염편 모델과 함께 고려되는 soot의 질량분율(Y_s) 및

* 한양대학교 기계공학과
† 연락처, ymkim@hanyang.ac.kr
TEL : (02)2297-7690 FAX : (02)2297-7690

수밀도(N_s)의 분포는 다음의 식으로 표현하였으며 이때 사용된 soot 생성 및 산화의 물리 모델은(w_{Y_s}, w_{N_s}) K.M. Leung et al [2]에서 검증된 화학반응식을 사용하였다. 여기서 ρ, D_z 는 각각 혼합물의 밀도와 확산계수를 나타낸다.

$$\rho \left(\frac{\partial Y_s}{\partial t} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \rho \chi}{\partial Z} + \frac{\chi}{D_z} \frac{\partial}{\partial Z} (\rho D_z) \right) \frac{\partial Y_s}{\partial Z} \quad (1)$$

$$= - \sqrt{\frac{\chi}{2D_z}} \frac{\partial}{\partial Z} (\rho Y_s V_s) + \dot{w}_{Y_s}$$

$$\rho \left(\frac{\partial N_s}{\partial t} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \rho \chi}{\partial Z} + \frac{\chi}{D_z} \frac{\partial}{\partial Z} (\rho D_z) \right) \frac{\partial N_s}{\partial Z} \quad (2)$$

$$= - \sqrt{\frac{\chi}{2D_z}} \frac{\partial}{\partial Z} (\rho N_s V_s) + \dot{w}_{N_s}$$

본 연구에서 개발한 모델과 Full Transport Equation 모델과의 수치적인 정확도를 비교하기 위하여 R. Consul et al[3]에서 수행한 상압 층류 CH₄/Air 비예혼합 화염의 수치적인 결과와 비교하였다. 아래의 Fig. 1은 본 연구에서 검증사례로 선택한 상압 층류 비예혼합 화염의 연소기를 나타낸 것으로 연소기의 자세한 수치 및 해석 조건은 M.D. Smooke et al[4]에 표시 되어있다.

다음의 Fig. 2는 각각 Full Transport Equation 모델(a)과 본 연구에서 개발한 soot 모델을 이용하여 계산한 soot의 체적분율(b)을 비교한 것으로 전체적인 soot의 분포 형태나 최대값이 나타나는 위치와 확산되는 특성이 매우 유사하게 나타나는 것을 확인하였다. 그림에서 볼 수 있듯이 노즐로부터 0.06m 이후로는 soot이 산화되어 나타나지 않는 특성과 연소기의 중심축에서 벗어난 연료가 과농 상태이며 온도가 높은 반경 방향에서 최대의 체적분율이 나타나는 공통점을 보여주고 있다. 이러한 결과는 본 연구에서 개발한 모델이 Full Transport Equation과 비교하여 계산

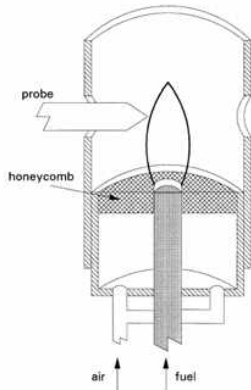


Fig. 1 Simple schematic of burner [4]

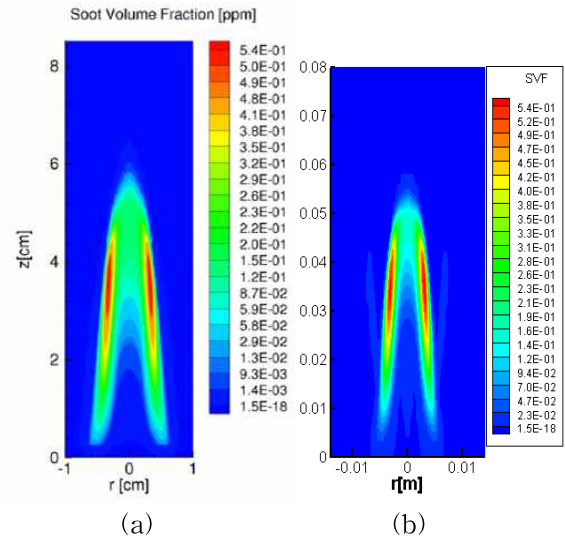


Fig. 2 Soot Volume fraction distribution

시간은 비약적으로 줄이면서 비슷한 결과를 도출할 수 있다는 것을 확인하였다. 이를 보다 자세하게 비교 분석하기 위하여 중심축 및 반경 방향에 따라 온도, 화학종, soot 체적분율 및 수밀도 값들을 비교하였다.

후 기

본 연구는 한국연구재단을 통해 교육과학기술부의 우주기초원천기술개발 사업 (NSL, National Space Lab) 으로부터 지원받아 수행 되었습니다 (No.20120009100).

참고 문헌

- [1] N. Peters, "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion", Proceeding 21st Symposium International Combustion, Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1234-1250.
- [2] K.M. Leung, R.P. Lindstedt, W.P. Jones, "A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames", Combustion and Flame., Vol. 87, 1991, pp. 289-305.
- [3] R. Consul, C. Perez-Segarra, K. Claramunt, J. Cadafalch, A. Oliva, "Detailed numerical simulation of laminar flames by a parallel multiblock algorithm using loosely coupled computers", Combustion Theory and Modeling Vol.7, 2003, pp. 525-544
- [4] M.D. Smooke, C.S. McEnally, L.D. Pfefferle, "Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame ", Combustion and Flame., Vol. 117, 1999, pp. 117-139