

층류 고압 비예혼합 화염에서 상세화학반응과 결합된 매연입자 생성 모델링

김태훈* · 전상태* · 김용모**

Modeling for Soot Formation Coupled with Detailed Chemistry in Laminar Pressurized Non-premixed Flames

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

ABSTRACT

In laminar non-premixed flame situation, the flamelet model is not suitable for simulating slow processor like soot and radiation. Thus in this study, we overcome this limitation by using the transient flamelet model. Also, for soot formation on laminar non-premixed flame, transient flamelet coupled with two-equation soot model has been adopted due to its inherent advantages in terms of accuracy and availability. Based on numerical results, the detailed discussion has been made for the precise structure and soot formation processes in the pressurized methane air flames.

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

화석연료를 연소시켜 에너지를 이용함에 따라 발생하는 환경오염의 원인중 하나인 매연입자의 생성과 산화 과정을 이해하기 위하여 많은 노력이 있었지만 아직까지 많은 부분들이 미지의 영역으로 남아있다. Soot 모델링은 서로 밀접하게 연관되어 있는 많은 수의 편미분방정식을 물리 및 화학적인 조건하에 다루어 하기에 그 활용 목적에 따라 다양한 접근 방법들이 시도 되어왔다. 일반적으로 층류 비예혼합 화염에서 세부 화학반응 메커니즘과 soot 및 NOx의 생성 과정을 함께 고려함에 있어서 Full Transport Equation 방식의 접근법은 수치적인 정확도와 공해물질의 생성 경로를 묘사할 수 있다는 점에서 강점을 가진다. 하지만 복잡한 연료성분이나 고려해야할 화학반응식이 많아지게 되면 수치적인 계산시간이 기하급수적으로 증가하여 사실상 공학적으로 다루기가 힘들어진다. 따라서 본 연구에서는 다양한 연료의 상세화학반응을 보다 쉽게 다룰 수 있는 화염편 연소모델[1]과 two-equation soot 모델[2]을 이용하여 보다 효율적으로 매연입자의 생성 과정을 예측할 수 있는 모델을 개발하였다. 본 연구에서 개발한 비정상 화염편 모델 기반의 two-equation soot 모델을 검증하기 위하여 고압

에서의 층류 비예혼합 메탄/공기 화염을 검증사례로 선택하였으며 화염 구조 및 soot 생성 과정과 압력에 따른 실험값들과 비교를 통하여 모델의 타당성을 살펴보았다. 수치해석을 위한 실험값들은 Toronto 대학에서 Hyun I. Joo et al[3]에 의하여 수행된 값을 사용하였다. 다음 Fig. 1은 고압에서 층류 비예혼합 화염을 실험하기 위하여 설계된 연소실이며, Fig. 2는 수치해석을 위하여 단순화된 연소실의 모양과 치수를 나타내며 해석을 수행한 수치적 격자를 대략적으로 표시하였다. 연료는 메탄이 300K의 온도로 질량유량 55mg/s로 분사되며, 산화제의 경우는 공기가 질량유량 0.4g/s로 300K을 유지하며 분사된다. 분사기의 치수와 같은 자세한 조건은 Table 1에 표시하였으며 연소기내의 압력을 10atm에서 60atm까지 증가시키면서 연소현상과 soot 분포를 살펴보았다. 이때 상세화학반응모델은 GRI Mech 3.0이 사용되었으며, 기체 연소 생성물과 soot에 의한 복사열전달은 광학복사 모델을 통하여 고려하였으며 수치실험 조건은 모든 압력에서 동일하게 사용되었다.

Table 1 Numerical conditions

	Nozzle Diameter	Mass flow rate
Fuel (Methane)	3.0 [mm]	0.55 [mg/s]
Oxidizer (Air)	40.0 [mm]	0.4 [g/s]

* 한양대학교 기계공학과

† 연락저자, ymkim@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2297-7690 FAX : (02)2297-7690

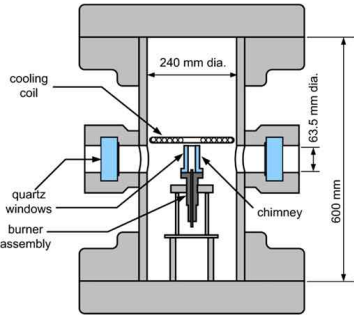


Fig. 1 Schematic of high pressure combustion chamber [3]

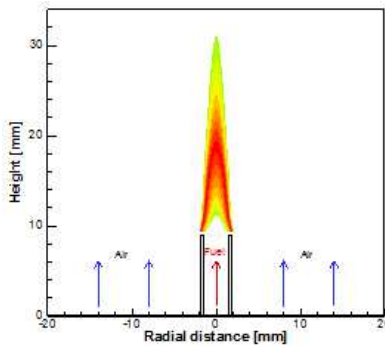


Fig. 2. Schematic of modified domain

다음의 Fig. 3은 압력에 따른 soot의 체적분율과 그 최대치를 표시하였는데 10atm에서 60atm까지의 결과로부터 압력이 증가하면서 화학반응이 가속화 되면서 화염의 두께가 점점 얇아지고, 혼합물의 밀도가 증가하면서 전체적인 soot 체적분율이 증가하는 것을 알 수 있다. 낮은 압력에서는 soot이 화염의 끝단에 주로 존재하지만, 압력이 증가하면서 그 위치가 노즐의 출구와 가까워지며, 앞서 압력에 따른 화염 두께의 변화와 같이 압력증가는 soot의 분포영역을 얇게 하며, soot의 체적분율의 최대치를 증가시킨다. 하지만 압력이 증가하면서 soot의 체적분율 예측도가 떨어지는 것을 반경방향의 soot 체적분율 분포 실험값과 비교하면서 알 수 있었는데 이는 현재 사용하고 있는 soot의 물리모델에서 압력에 따른 효과가 따로 고려된 점이 없다는 것과 응집율과 관련하여 고압에서 아직 검증된 모델이 없다는 것은 현 모델의 한계점이라고 생각된다.

나아가 대부분의 고압연소들이 높은 연소압력으로 인하여 실험값 측정에 어려움을 가지는 것과 마찬가지로 증류 고압 비예혼합 화염 또한 유동 및 화학종들의 정량적인 정보가 부족하여 해석결과와 자세히 비교하여 분석하는데 한계를 가졌으며 보다 정확한 모델의 검증을 위하여 soot 모델과 관계있는 화학종에 대한 자세한 실험값을 얻을 수 있는 실험이 진행되어야 하겠다.

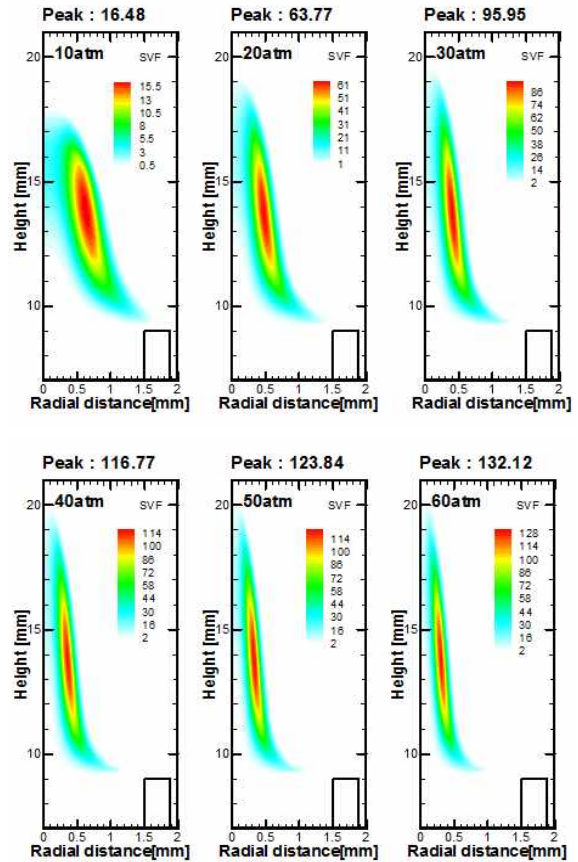


Fig. 3 Soot volume fraction at 10 - 60atm

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] Hyun I. Joo, Omer L. Gulder, "Soot formation and temperature field structure in co-flow laminar methane-air diffusion flames at pressures from 10 to 60 atm", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 32, 2009, pp. 769-775.