

# 층류 비예혼합 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 제트 화염에서의 PAH 생성특성 해석

김태훈\* · 김용모\*\*

## Numerical Study of PAH Formation Characteristics in Laminar Non-Premixed C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> Jet Flames

Taehoon Kim\*, Yongmo Kim\*\*

### ABSTRACT

The full transport equation approach for laminar non-premixed flame with detailed chemistry, soot and radiation has an advantage in accuracy and describing for emission pathway, but this approach requires the excessive computational cost especially for a higher-order hydrocarbon fuel flames. On the other hand, the standard flamelet model has an efficiency and accuracy for non-premixed flame, though this model is not suitable for simulating slow processor like soot and radiation in laminar non-premixed flame situation. To overcome this limitation, modified transient flamelet model is developed which coupled with two-equation soot model involved in soot formation and evolution mechanism such as nucleation, surface growth, oxidation and agglomeration.

**Key Words** : Laminar non-premixed flame, Transient flamelet model, PAH formation

일반적으로 층류 비예혼합 화염에서 세부 화학 반응식과 매연입자의 생성과정 및 복사 열전달을 함께 고려함에 있어서 Full Transport Equation (FTE) 방식의 접근법은 수치적인 정확도와 매연입자의 생성 경로를 자세하게 묘사할 수 있다는 점에서 강점을 가진다. 본 연구는 이러한 FTE 방법의 장점을 취하면서 보다 효율적으로 층류 화염장을 예측할 수 있는 MRIF 모델을 제안하였으며 이를 Fig. 1에 도식화 하였다.

화염편 연소모델[1]의 경우, 많은 화학종과 복잡한 화학반응식을 효율적으로 다룰 수 있으며 혼합분율( $Z$ )을 통하여 화염구조를 유동장과 결합하여 비예혼합 화염을 효율적으로 예측할 수 있다. 그리고 매연입자의 모델링은 질량분율과 수밀도를 다루는 two-equation 모델이 공학적으로 가장 널리 쓰이며 이는 간단하면서도 실험값들과 상호 비교가 가능하며 물리적으로도 이해가 쉽다는 장점이 있다. 하지만 이 두 모델들을 다루는데 있어서 기존의 연구에서는 정보가 한 방향으로만 이동되는 방식으로 결합이 되어 매연입자가 생성됨에 따라 나타나는 화염구조의 변화를 제대로 예측하지 못 하는 한계를 보여주었다.

그리하여 본 연구에서는 기존의 화염편 모델과

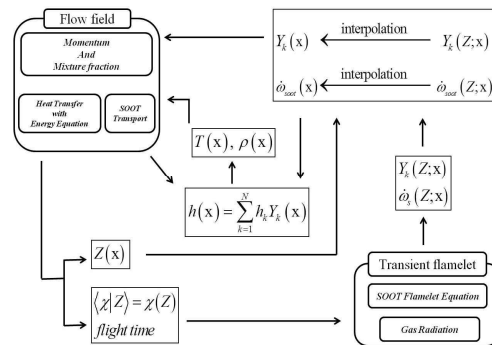


Fig. 1 Solution procedure for Modified Representative Interactive Flamelet model (MRIF).

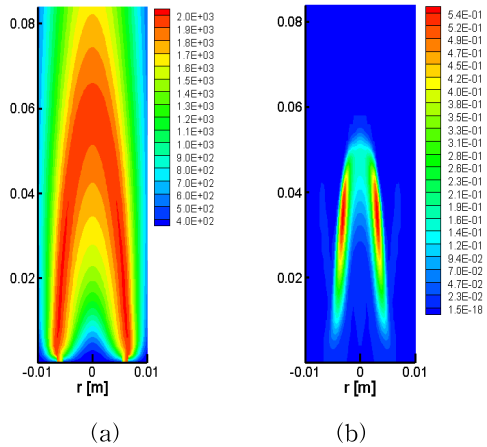
two-equation 매연입자 모델을 양방향으로 정보가 교환되도록 결합하여 혼합분율상에서 기체 연소 생성물 반응과 매연입자 생성 반응 과정이 함께 고려되는 모델을 개발하였다.

본 연구에서 개발한 MRIF 모델의 수치적인 정확성과 타당성을 검증하기 위하여 상압 층류 CH<sub>4</sub>/Air 비예혼합 화염을 FTE 방법으로 계산한 수치해석 결과[2]와 비교하였으며 이때의 연소기 제원 및 매연입자 모델링에 필요한 반응식 및 상수는 D. Carbonell *et al.*[3] 와 동등하게 사용하였다.

\* 한양대학교 기계공학과

† 연락처자, ymkim@hanyang.ac.kr

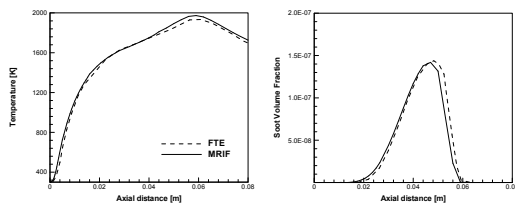
TEL : (02)2297-7690 FAX : (02)2297-7690



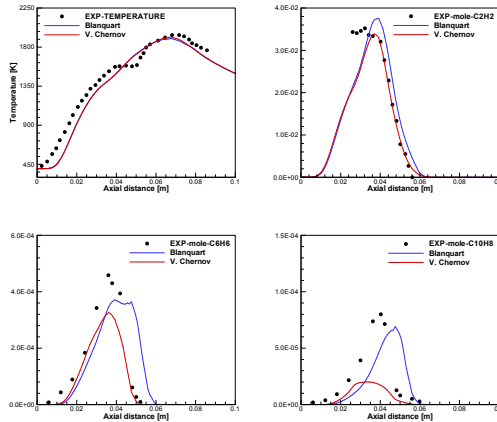
**Fig. 2** Distribution of temperature [K](a) and soot volume fraction(b)

위의 Fig. 2는 본 연구에서 제안한 수정된 화염 편 모델로 계산한 화염장의 온도 분포와 그에 따른 매연입자의 체적비율 분포를 나타낸 것이다. 온도장의 경우, 온도가 높아 밀도가 작은 곳에서 부력에 의하여 속도가 빨라지면서 생성되는 층류 화염장의 특징을 잘 나타내고 있으며 매연입자의 체적분율 또한 작은 확산계수를 가짐으로서 나타나는 실험에서의 매연입자 분포특성과 일치하는 모양을 보여 주고 있다.

다음으로는 본 연구에서 개발한 모델 (MRIF)과 FTE 방식의 결과를 비교하여 본 모델의 타당성을 검증하였다. 먼저 Fig. 3a의 중심축에 따른 온도분포를 보면 최고온도에서 약간의 차이를 보이고는 있지만 전반적으로 점선으로 표현된 FTE 방식과 실선으로 표현한 MRIF의 모델이 일치된 결과를 보여주고 있다. 이와 마찬가지로 Fig. 3b는 매연입자의 체적분율을 중심축에 따라 비교한 그림으로 기체 연소 생성물의 상세 화학 반응식과 결합되어 나타나는 매연입자의 생성 및 산화 특성을 잘 나타내고 있는 것을 확인하였다. 다만 MRIF의 경우 FTE보다 매연입자가 조금 더 빠르게 산화되는 경향을 보여준다.



(a) Temperature (b) Soot volume fraction  
**Fig. 3** Centerline profiles of temperature (a) and soot volume fraction (b) with MRIF and FTE approach



**Fig. 4** Centerline profiles of temperature,  $C_2H_2$ ,  $C_6H_6$  and  $C_{10}H_8$  mole fraction with MRIF and experimental data

다음으로 Fig. 4는 서로 다른 PAH 생성반응을 가지는 두 가지의 화학반응식을 이용하여 층류 비에혼합  $C_2H_4$  제트 화염장에서의 PAH 생성특성을 해석한 결과이다. 이러한 결과들을 바탕으로, 본 연구에서 개발한 MRIF모델이 FTE방식과 비교하여 계산시간은 비약적으로 줄이면서 타당한 결과를 도출할 수 있다는 것을 확인하였다.

## 후 기

본 연구는 2013년 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KEPTEP)의 지원을 받아 수행한 전력 사용 저감을 위한 열화학에너지 이용 고효율 Smart EAF 기술 개발 사업 연구과제입니다.

## 참고 문헌

- [1] N. Peters, "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion", Proceeding 21st Symposium International Combustion, Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1234-1250.
- [2] 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
- [3] D. Carbonell, A. Oliva, C.D. Perez-Segarra, "Implementation of two-equation soot flamelet models for laminar diffusion flames", Combustion and Flame Vol. 157, 2009, pp. 621-632