

## 에틸렌 첨가에 따른 메탄 화염점파속도와 화학반응 메카니즘 비교 및 선형, 비선형 모델 평가

반규호\*, 양재영\*\*, 박정†, 권오봉\*, 이대근\*\*\*, 김승곤\*\*\*, 곽영태\*\*\*, 노동순\*\*\*, 윤진한\*\*\*, 길상인\*\*\*

### Comparison of Laminar Burning Velocity of CH<sub>4</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/Air Mixtures with Consideration of Chemical Mechanism and Non-linear Stretch Effects

Kyu Ho Van\*, Jae Young Yang\*\*, Jeong Park†, Oh Boong Kwon\*, Dae Keun Lee\*\*\*, Seung Gon Kim\*\*\*, Young Tae Guahk\*\*\*, Dong-Soon Noh\*\*\*, Jin Han Yoon\*\*\*\*, Sang In Keel\*\*\*

#### ABSTRACT

To measure laminar burning velocity in methane/air/ethylene mixture flame, propagating centrally ignited spherical premixed flame to radial direction was measured by high-speed schlieren images with elevated pressure. In this study, The experimentally measured unstretched laminar burning velocities of methane was compared with GRI mech 3.0 to validate experimental data and choose the radius range, respectively. numerical prediction using the PREMIX code with GRI mech 3.0, USC mech II,, and Wang mech were evaluated through comparison with experimental burning velocity with consideration of extrapolation on linear/nonlinear model.

**Key Words** : Laminar burning velocity, Stretch, Markstein length, Equivalence ratio

최근 에너지 소비 증가에 따른 에너지 부족 현상과 화석연료의 고갈, 그로 인한 고유가문제는 세계적인 문제로 대두되었다. 그 결과, 효율적인 에너지 사용을 목적으로 탄화수소연료를 이용한 화염이나 수소화염, 합성가스 화염 등의 기본적인 연소특성에 관한 많은 연구가 진행되어 왔다. 그 중 메탄을 기본으로 한 가연성 가스는 천연가스 및 석탄층 가스, 그리고 셰일가스형태로 저장되어 있으며 연소 시 매연이나 미립자, CO 배출량이 적어 석유의 대체 에너지 많이 사용되어 왔다. 최근 메탄을 사용한 희박연소 조건에서 연료 사용을 줄임과 동시에 오염물질 배출을 줄이기 위한 연구결과가 있다 [1, 2]. 그러나 낮은 열효율과 부분적인 열손실로 인해 낮은 층류전파속도와 실화의 증가는 여전히 개선되어야 할 문제점이다. 에틸렌은 탄화수소 계열로 점화온도가 메탄보다 낮으며, 유기 중합체로서 대량생산이 가

능하다는 장점이 있다. 또한 방향족 탄화수소와 매연 생성의 중요한 역할을 하므로 에틸렌을 이용한 연소특성에 대한 연구가 필요한 시점이다. Liu et al.은 메탄-에틸렌 혼합가스를 이용한 대향류 비예혼합 화염을 통해 점화 온도를 측정하였고 수치해석과 스트레치를 고려한 화염전파속도를 실험적으로 측정하여 온도에 따른 에틸렌이 점화에 미치는 영향을 연구하였다[3]. Delfau et al.은 희박 에틸렌 화염에 대한 실험 및 Premix code를 이용한 UDEL, 수정된 konnov model, UCSD, 그리고 Dagaut model을 비교하여 미연에서의 에틸렌 화학반응 메카니즘을 분석하였다[4]. 또한 Shanshan et al.은 에틸렌이 첨가된 예혼합 메탄화염의 전파속도측정 및 화염구조분석을 통해 H\*, OH\* 라디칼과 전파속도의 연관성을 나타내었다[5]. 하지만 혼합가스의 화염전파속도측정에 앞서 반지름 범위선정과 선형/비선형 모델 선정을 통해 정확한 실험적 결과를 비교해 볼 필요가 있다. 본 연구에서는 에틸렌을 희석한 메탄화염의 전파속도를 정적연소기를 통해 실험적으로 측정하였고, 계산값을 이용한 전파속도를 비교 분석하여 반지름 범위 및 선형/비선형 모델을 선정하였다. 층류화염전파속도에 대한 실험적 측정

\* 부경대학교 기계공학과

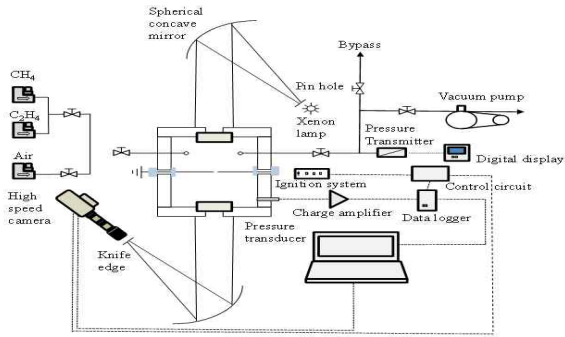
\*\* 경성대학교 산업공학과

\*\*\* 한국에너지기술연구원 신연소연구실

\*\*\*\* 한국기계연구원 환경 에너지 기계시스템

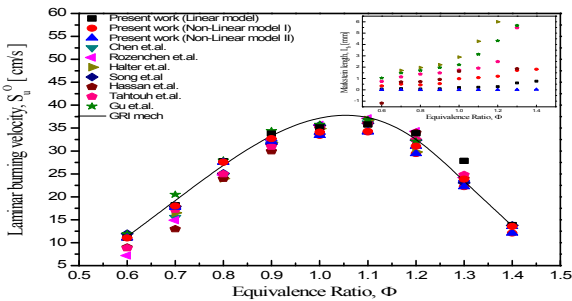
† 박정, [jeongpark@pknu.ac.kr](mailto:jeongpark@pknu.ac.kr)

TEL : (051) 629-6141 FAX : (051) 629-6126

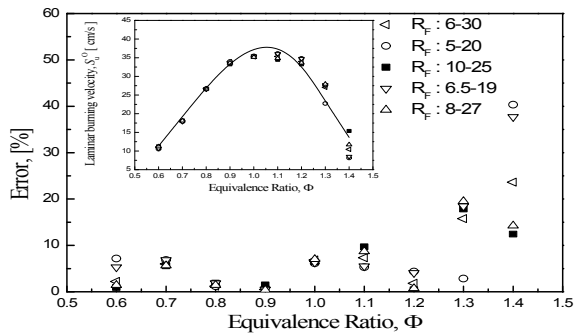


**Fig. 1** Schematic experimental setup and schlieren system.

방법에는 대향류버너, 정적연소기, 분젠버너 등이 있다. 구형으로 전파하는 정적연소기는 스파크 점화 기관과 유사하며 고압과 다양한 초기온도 조건에서의 연구가 용이한 장점이 있다. Figure 1.은 실험에 사용된 정적연소기와 실험장치 개략도이다. 실험방법으로는 진공으로 만든 정적연소 실린더에 초기압력에 상응하는 부분압력으로 각각의 가스를 공급한 뒤 연소기의 중앙부분에서 전극 봉으로 점화를 시킨다. 점화 후 화염은 전파하게 되는데 이를 쉐리렌 시스템을 이용하여 가시화 하였고 초당 10,000장으로 촬영 가능한 고속카메라를 이용하여 이미지를 기록하였다. 획득한 이미지는 매트랩 소프트웨어를 이용하여 영상처리로 화염이 전파할 때의 단위 시간당 픽셀 값을 환산하여 계산하였다. 구형화염이 전파함에 따라 화염면적이 커져 스트레치가 변하게 된다. 따라서 스트레치에 따른 화염의 순간속도가 달라지기 때문에 화염전파속도는 스트레치를 받지 않은 상태에서의 값이 기준이 되며 이는 연소기내의 질량보존관계식을 이용하여 계산하였다. 실험으로 측정된 화염전파속도는 이론값과 PREMIX 코드[6]를 이용하였고 GRI-Mech 3.0[7]을 통해 반응메커니즘으로 사용하였다. Fig. 2는 실험을 수행하기에 앞서 실험적 기법과 데이터의 타당성을 검증하기 위한 메탄 예혼합화염의 전파속도와



**Fig. 2** Unstretched laminar burning velocity of CH<sub>4</sub>-Air premixed flame at  $P_u = 0.1$  MPa and room temperature.



**Fig. 3** Error as a function of equivalence ratio with radius range.

Markstein length 결과이다. 이러한 방법으로 반지름 영역을 선정할 필요가 있다. 반지름 영역 설정은 버너의 반지름 길이가 유사한 연구결과[8]를 기반으로 반지름영역들을 5가지로 제한하였다. Figure 3은 반지름 반경 범위에 대한 층류화염전파속도를 수치해석 결과와 오차를 나타낸 그래프이다.  $10 \ll R_f \ll 25$  mm에서 수치해석 결과의 오차값이 6.56 %로 가장 작으므로 반지름 범위로 선정하였다. 다음은 선형 및 비선형 모델을 비교할 필요가 있다. 선형(LM)과 비선형 모델I(NM(I)), 비선형모델II(NM(II))는 아래와 같이 표현된다.

$$\text{LM: } S_b = S_b^0 - L_b k \quad (1)$$

$$\text{NM(I): } S_b = S_b^0 - S_b^0 L_b \times \left( \frac{2}{R_f} \right) \quad (2)$$

$$\text{NM(II): } \ln(S_b) = \ln(S_b^0) - S_b^0 L_b \times \left( \frac{2}{R_f S_b} \right) \quad (3)$$

식 (1)에서,  $k$ 는 스트레치로  $(2/R_f)/(dR_f/dt)$  로 표현되며  $S_b$ 는 스트레치를 받는 화염전파속도,  $S_b^0$ 는 스트레치를 받지 않는 화염전파속도이고,  $L_b$ 의 음의 기울기는 Markstein length으로 기연가스와 관련되며 선형모델의 보외법으로 구할 수 있다.  $S_b^0$ 를 예측한 후 층류화염전파속도  $S_u^0 = S_b^0(\rho_b/\rho_u)$ 와 같이 질량보존 관계로 계산이 가능하게 된다[8]. NM(I)은 Frankel 과 Shivashinsky에 의해 제안된 모델이며  $S_b$ 와  $2/R_f$ 의 보외법으로  $S_b^0$ 와  $L_b$ 를 구할 수 있다[9]. NM(II)는 Kelley와 Las에 의해 제안된 모델이며 마찬가지로,  $\ln(S_b)$ 와  $2/(R_f S_b)$ 의 보외법으로  $S_b^0$ 와  $L_b$ 를 구할 수 있다[10]. Figure 4는 계산된 화염전파속도를 기준으로 모델에 따른 전파속도 실험값의 차이를 오차값으로 나타낸 그래프이다. NM(II)는 계산된 전파속도의 오차의 평균값이 5.18 %로 가장 근접한 값을 나타냈다. 본 연구에서는 에틸렌이 희석된 메탄화염의 전파속도 측정에 앞서, 반지름

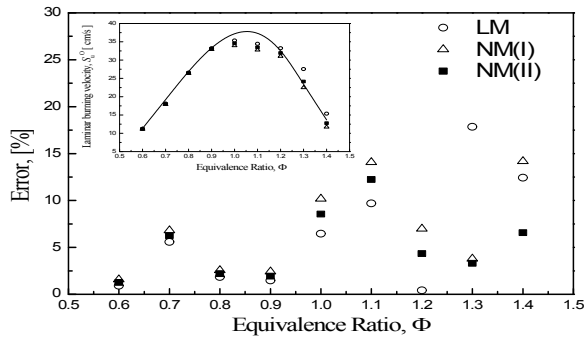


Fig. 4 Error of different model as a function of equivalence ratio.

영역은 언급한 바와 같이  $10 \ll R_F \ll 25$  mm로 선정하였고, 보외법 모델은 NM(II)를 이용하였다. Figure 5는 반지름 영역  $10 \ll R_F \ll 25$  mm, NM(II)를 이용한 에틸렌 첨가에 따른 층류화염 전파속도를 나타낸 그래프이다. 에틸렌 희석률을 30 % 까지 희석시킬 경우 전파속도가 계속해서 증가하는 것을 알 수 있다. 다음과 같은 실험값을 기준으로 화학반응메카니즘을 선정하기 위해 GRI mech 3.0, USC mech II[11], Wang mech[12] 세가지 모델을 이용한 계산값을 비교해 보았다. Figure 6은 1 atm 조건에서 에틸렌을 희석한 메탄 화염 전파속도 실험값과 각 계산값의 차이를 비교한 그래프이다. GRI mech 3.0을 이용한 계산값은 에틸렌이 첨가될수록 전파속도의 차이가 극명해졌다. 반면 Wang mech일 경우, 비교적 높은 당량비 조건에서 실험값과 계산값의 차이가 나타났다. USC mech II를 이용한 계산값과 실험값 차이는 Wang, GRI mech 3.0 보다 작았다. 다음은 압력에 따라 실험값과 계산값을 비교하기 위해 초기압력 2, 3 atm 조건에서 계산하였다. Figure 7은 초기압력 2, 3 atm 조건에서 GRI 3.0 mech, USC mech II, Wang mech와 실험값을 비교한 그래프이다.

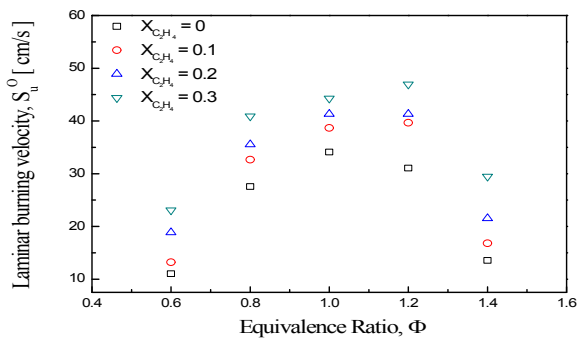


Fig. 5 Unstretched laminar burning velocity of  $CH_4/C_2H_4$ -Air premixed flame at  $P_u = 1$  atm.

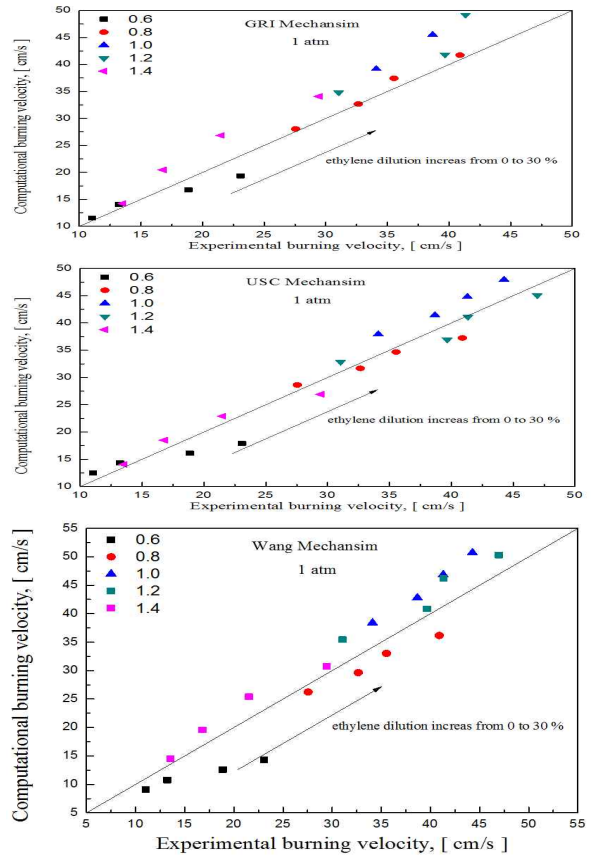
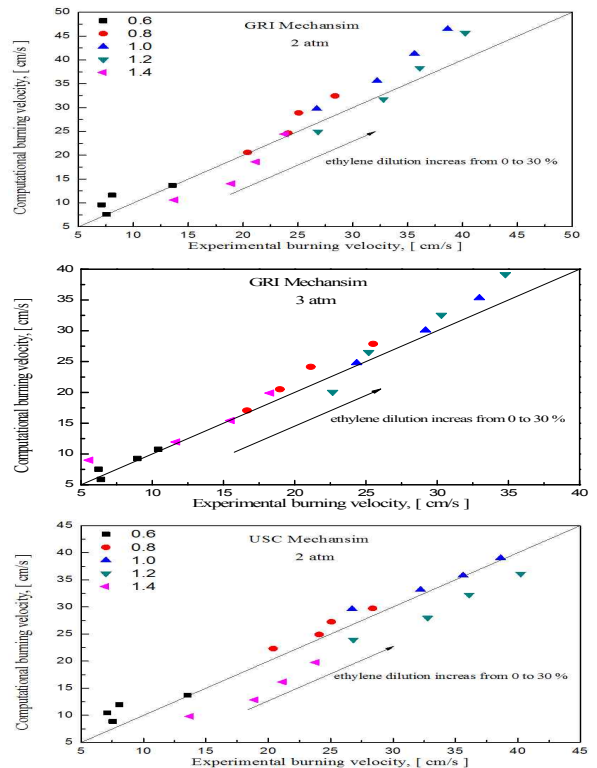
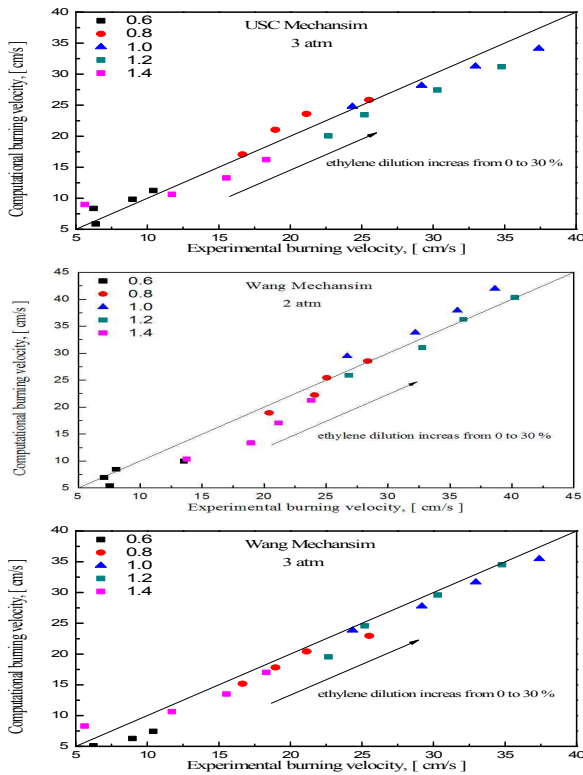


Fig. 6 Comparison of Laminar burning velocity between experiment and calculation at  $P_u = 1$  atm.





**Fig. 7** Comparison of Laminar burning velocity between experiment and calculation at  $P_u = 2$  or  $3$  atm

를 비교한 그래프는 압력이 증가할수록 계산값과 실험값의 차이가 줄었음에도 불구하고 여전히 높은 에틸렌 희석률에서는 오차값이 커졌다. Wang mech의 비교값은 높은 당량비에서 일치하지 않았지만 압력이 증가할수록 잘 일치하는 그래프를 나타내었다. 마지막으로 USC mech II를 비교한 그래프에서는 2 atm에서는 높은 당량비에서 계산값과 실험값이 맞지 않음에도 불구하고 압력과 희석률에 따라 비교적 일치함을 보였다. 또한 오차값의 평균을 나타낸 결과 USC mech II의 오차값이 11%로 가장 작은 것을 알 수 있었다.

## 후 기

본 연구는 에너지기술연구원 기관고유사업의 일환으로 수행되었습니다(B5-2402)

## 참고 문헌

- [1] Cho, E.S., Chung, S.H. "Improvement of flame stability and  $\text{NO}_x$  reduction in hydrogen-added ultra lean premixed combustion", J. Mech. Sci. Technol., Vol 23, 2009, pp. 650-658
- [2] Shy, S.S., Chen., "Effects of  $\text{H}_2$  or  $\text{D}_2$  addition, equivalence ratio, and turbulent

straining on turbulent burning velocities for lean premixed methane combustion., Vol 153, 2008, pp.510-524

[3] W, Liu., A.P. Kelley., C.K. Law., "Flame propagation and counterflow nonpremixed ignition of mixtures of methane and ethylene." Combust. Flame., Vol 157, 2010, pp.1027-1036

[4] Delfau, J.L., Biet, J., Idir. "Experimental and numerical study of premixed, lean ethylene flames." Proc. Combust. Inst., Vol 31, 2007, pp.357-365

[5] Shanshan. C., Yong. J., "Numerical study on laminar burning velocity and flame stability of premixed methane/ethylene/air flames." Catalysis, kinetic and reaction engineering, Vol 20, 2012, pp.914-922.

[6] Kee RJ, Grcar JF, Smooke MD, Miller JA, Report No. SAND85-8240, 1993, Sandia National Laboratories.

[7] Smith GP, Golden DM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer, B, Goldenberg M et al GRI-MECH3.0, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)

[8] Bradley D, Gaskell PH, Gu XJ, "Burning velocities, Markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames: a computational study", Combust Flame, Vol. 104, 1996, pp. 176-198.

[9] F. Halter, T. Tahtouh et al "Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation.", Combust. Flame, Vol 157, 2010, pp. 1822-1832.

[10] A.P. Kelly, C.K. Law, "Nonlinear effects in the extraction of laminar flame speeds from expanding spherical flames.", Combust. Flame.

[11] Wang H, You X, Joshi AV, Davis SG, Davis, A. Laskin, F. Egolfopoulos, C.K. Law. 2007, <[http://ignis.use.edu/USC\\_II.htm](http://ignis.use.edu/USC_II.htm)>.

[12] C.J. Sung, B. Li, and C.K. Law Wang H, "A Kinetic Model for High Pressure Methane and Propane Flames" Proc. Combust. Flame, PA, 1998, pp.1523-1530