

<論 文>

난류 화염 내에서의 매연 입자의 생성 및 재연소

정 종 수* · 신 현 동** · 이 춘 식***

(1989년 6월 27일 접수)

Soot Formation and Combustion in Turbulent Flames

Jongsoo Jurng, Hyun-Dong Shin and Chun Sik Lee

Key Words: Soot Formation(매연 생성), Soot Combustion(매연 연소), 2-Step Formation Model(2단계 생성모델), Eddy Break-up Model, Surface Oxidation(표면 산화 반응), Radiative Heat Transfer(복사 열전달)

Abstract

A new model of the combustion rates of soot particle in turbulent flames has been suggested. This model applies the combustion rate of soot particles in laminar flames and uses local time-averaged quantities in order to consider the effect of the chemical reaction on the soot combustion in turbulent flames. The proposed rate equation has been tested for two propane-air turbulent round-jet diffusion flames and gives better predictions for the soot cocentration field of two flames than the model previously used, especially in low temperature regions. A modified Monte carlo method for analyzing radiative heat transfer of a flame also has been suggested and tested, which reveals good results.

기 호 설 명

a, a', a'' : 각 미소 체적의 흡수 계수 (absorption coefficient)	N : 매연 입자(soot particle)의 수밀도 (개/m ³)
a_s, b_s : 식 (29)의 상수	n_o : 매연 생성 핵의 자발적 생성 속도 (개/m ³ ·s)
C_{EBU} : Eddy break-up 모델 상수	R_i : 화학 반응에 의한 화학종 i 의 단위 체적당 시간 평균 생성 속도
\bar{c}_s : 매연 입자의 시간 평균(time-averaged) 질량 농도(mass concentration)	$R_{n,c}$: 매연 생성 핵의 연소 속도
f : Schvab-Zeldovich 함수	$R_{s,c}$: 매연 입자의 연소 속도
f_n, g_n, g_o : 식 (27)의 상수	$R_{s,f}$: 매연 입자의 생성 속도
h : 정체 엔탈피(stagnation enthalpy)	S_{rad} : 복사 열전달에 의한 에너지 방정식의 생성 항(source term)
l_m : 혼합 거리(mixing length)	$S_{rad,a}$: 복사 에너지의 흡수에 의한 S_{rad}
m_p : 매연 입자의 평균 질량(average mass, g/particle)	$S_{rad,e}$: 복사 에너지의 방출에 의한 S_{rad}
n : 매연 생성 핵(radical nuclei)의 수밀도	u : 축 방향 속도(axial velocity)
	v : 반경 방향 속도(radial velocity)
	w : 매연 입자의 표면 연소(surface oxi-

* 한국과학기술연구원 기계공학부

** 정회원, 한국과학기술원 기계공학과

*** 정회원, 한국과학기술연구원 기계공학부

	ation) 속도
Y	: 질량 분률(mass fraction)
σ	: Prandtl 수 또는 Schmidt 수
ψ	: 유동 함수(stream function)
ω	: 무차원(non-dimensional) 유동 함수
o	: 초기치(initial value)
b	: 흑체(blackbody)
eff	: 유효값(effective)
fu	: 연료(fuel)
i	: 화학종 i
rad	: 복사 열전달(radiative heat transfer)
t	: 난류(turbulent) 성분 : 시간 평균값(time-averaged value)

1. 서 론

화염 내에서의 매연(soot particles)의 생성 및 방출은 매연 입자 자체가 대기 오염원이 된다는 측면 뿐만 아니라, 복사 열전달의 주 매질이 된다는 측면에서 매우 중요하다. 내연 기관(특히 디젤 기관)이나 가스 터빈 연소기의 경우 매연의 생성 및 연소실 벽면에서의 부착(deposition)은 장치의 냉각 및 효율의 측면에서 나쁜 영향을 주게 되므로, 가능한 한 매연의 발생을 억제할 수 있도록 설계하여야 하지만, 로(furnace)와 같이 복사 열전달을 이용하는 경우에는 매연 입자에 의한 복사 열전달량의 증가는 화염으로부터의 열전달 효율을 증가시키는 역할을 하므로, 매연 입자의 생성은 필수적이다. 따라서, 이 경우에는 어떤 방법으로 연소로 내에 매연을 생성시켜 이 매연 입자들을 연소로부터 방출되기 전에 재연소를 시키는가 하는 것이 기술적인 관건이다. 그러므로, 매연의 생성 및 연소의 기구(mechanism)의 규명은 매연 입자 농도의 제어라는 면에서 매우 중요한 의미를 지닌다.

화염 내에서의 매연 입자의 생성(formation) 및 재연소(burning)의 기구(mechanism)를 설명하기 위한 많은 연구가 수행되어 왔는데, Haynes와 Wagner⁽¹⁾는 최근 화염 내에서의 매연 생성에 관한 연구에 대한 개관(review)을 발표하고 있다. 또한, 실제의 공학적인 응용을 위하여 중요한 난류화염에서의 매연 생성 및 연소에 대해서는 몇몇 연구 결과가 발표되어 있으나, 아직까지는 실제 문제에 대하여 효과적으로 적용이 가능한 모델은 거의 없는 것으로 생각된다.

본 연구에서는 저자들이 이미 발표한 난류 화염에서의 매연 농도 분포 해석을 포함한 화염 구조 및 복사 열전달의 해석에 대한 연구⁽²⁾와 관련하여, 난류 화염에서의 생성된 매연 입자의 재연소 속도에 관한 새로운 모델을 제시한다. 구체적인 방법으로, 난류 화염에 대한 난류 지배 방정식의 매듭(closure) 문제로서 문제가 되고 있는 난류 모델과 반응 속도 모델에 대해서는 비교적 잘 정립되어 있다고 할 수 있는 축대칭 분류 유동을 선택하여, 난류 모델과 난류 연소 속도 모델을 고정하고, 난류 화염에서의 매연 생성 및 연소 모델을 검토하였다. 지배 방정식의 해법은 유동 함수를 이용하는 GENMIX형의 해석 방법⁽³⁾을 도입하였으며, 난류 모델로는 Prandtl의 mixing length 모델을, 난류 연소 모델로는 eddy breakup 모델을 이용하였다. 난류 화염에서의 매연의 생성 속도 모델은 저자들이 이미 발표한 논문⁽²⁾에서 제시한 모델로, 층류 화염에서 사용하는 매연 생성 모델을 이용하여, 각 변수의 시간 평균치를 대입함으로써, 난류 화염에서의 시간 평균 매연 생성 속도를 구하는 방법을 사용하였다. 매연의 연소 모델로는 참고문헌⁽²⁾에서 제시한 모델인 주 연소 반응에 유추하여 매연의 연소 속도를 계산하는 eddy breakup(EBU) 매연 입자 연소 속도식과, 본 연구에서 제안하는 모델인, 매연 입자의 연소 반응에서의 화학 반응의 영향을 고려한 kinetic 매연 입자 연소 모델을 매연 입자의 표면 반응 속도식으로부터 유도하여, 이 두 모델을 검토하였다. 복사 열전달의 해석 방법으로는 몬테 카를로 법을 수렴속도를 높일 수 있도록 수정한 해석 방법을 개발하고, 이를 사용하여 복사 열전달의 계산과, 에너지 방정식의 해를 구하는데 사용하였다.

2. 이론 해석 모델

본 연구에 있어서 이론적인 예측을 위하여 사용한 화염의 계산 모델은 앞서 언급하였듯이 기하학적 형상이 비교적 간단하고, 유동의 특성이 비교적 잘 알려져 있고, 유동 및 연소 현상에 관한 수치 해석적 연구가 많이 이루어져 있는 축대칭 원형 분류 확산 화염(axi-symmetric round jet diffusion flame)이다.

이 화염에 대한 이론적 해석을 위해 사용한 기본적인 가정들은, 일반적으로 널리 사용되고 있는 가

정들로 다음과 같다.

(1) 유동은 정상 상태(steady state)로 축대칭이다. 따라서 다음 관계식이 성립한다.

$$\frac{\partial}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \phi} = 0 \quad (1)$$

(2) 경계층 가정(boundary layer assumption)을 만족한다.

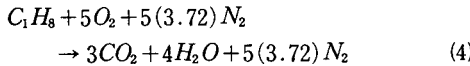
(축 방향의 주 유동의 속도에 비하여 반경 방향의 속도가 상대적으로 작으므로, 이를 무시할 수 있다).

$$u \gg v, \quad \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \ll \left| \frac{\partial u}{\partial r} \right| \quad (2)$$

(3) 각 화학종(species)의 확산 속도는 Fick의 법칙을 따른다. (Fickian diffusion)

$$J_i = -D_i \frac{\partial Y_i}{\partial r} \quad (3)$$

(4) 화염 내의 반응대에서의 화학 반응은 1 단계 전반응(one-step overall reaction)이며, 따라서 화염 내에는 다음 4 종류의 화학종만 존재한다: 연료 Y_{fu} , 산화제 Y_{ox} , 질소 Y_{ni} 및 연소 생성물 Y_{pr}



(5) 화염 내의 혼합기 및 연소 가스는 이상기체 상태방정식(ideal gas law)을 만족한다.

$$P = \bar{\rho}RT \sum \frac{\bar{Y}_i}{W_i} \quad (5)$$

3. 지배 방정식(Governing Equations)

난류 분류 화염(turbulent jet flame)에 대한 열, 물질 및 운동량 전달에 대한 난류 경계층형(turbulent boundary layer type) 지배 방정식은 잘 알려져 있다. 앞 절의 가정들을 사용하면 정상 상태의 유동의 경우, 좌표(r, x, ϕ)로 나타낼 수 있는 원통형 좌표계(cylindrical coordinate)에 대하여, 연속 방정식은

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}r\bar{v}) = 0 \quad (6)$$

이 된다. 한편, 운동량, 화학종 및 에너지 보존 방정식을 정리하면 아래와 같으며, 종속 변수(dependent variables)는 축 방향 속도(axial velocity) \bar{u} , 정체 엔탈피(stagnation enthalpy) h , 각 화학종의 질량 분율(mass fraction) \bar{Y}_i 와 매연 입자(soot particle)의 농도 분포와 관련하여 매연 생성 핵(radical nuclei)의 수밀도 n (number den-

sity, particles/m³), 매연 입자의 수밀도 N (particles/m³) 및 매연 입자의 질량 농도(mass concentration, g/m³) \bar{c}_s (이하 매연 농도, soot concentration이라고 함) 등이 된다.

운동량 보존 방정식

$$\rho\bar{u}\frac{\partial\bar{u}}{\partial x} + \bar{\rho}\bar{v}\frac{\partial\bar{u}}{\partial r} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial\bar{u}}{\partial r}\right) + (\rho_\infty - \bar{\rho})a_{grav} \quad (7)$$

이 식에서 r 은 대칭축으로부터 반경 방향으로의 거리, ρ 는 혼합기의 시간 평균 밀도(time-averaged density, kg/m³), ρ_∞ 는 주위 공기의 밀도치를 나타낸다. 한편 μ_{eff} 는 유효 점성 계수(effective viscosity)로 난류 점성의 효과를 포함하고 있으며, a_{grav} 는 중력 가속도(acceleration due to gravity)를 나타낸다.

화학종 보존 방정식:

$$\bar{\rho}\bar{u}\frac{\partial\bar{Y}_i}{\partial x} + \bar{\rho}\bar{v}\frac{\partial\bar{Y}_i}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\mu_{eff}}{\sigma_{i,eff}}\frac{\partial\bar{Y}_i}{\partial r}\right) + \bar{R}_i \quad (8)$$

식 (8)의 화학종 보존 방정식에서 \bar{R}_i 는 화학 반응에 의한 화학종 i 의 단위 체적당 시간 평균 생성 속도(time-averaged rate of formation)이다. 계산에서 다루는 화학종은 앞서의 가정에서 밝힌대로

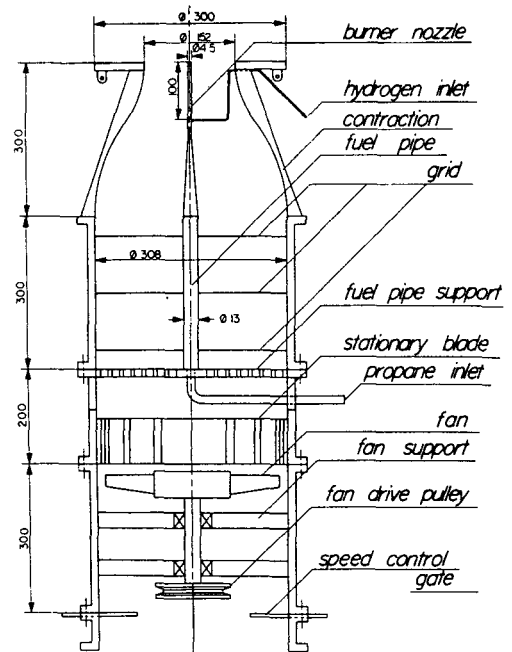


Fig. 1 Experimental apparatus(Choi⁽¹⁴⁾, $Re=11,000$)

4종의 화학종과 매연 생성 핵 및 매연 입자의 농도를 포함하여 모두 6개이다.

에너지 보존 방정식 :

$$\bar{\rho} \bar{u} \frac{\partial h}{\partial x} + \bar{\rho} \bar{v} \frac{\partial h}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{h,eff}} \frac{\partial h}{\partial r} \right) + S_{rad} \quad (9)$$

이 식에서 h 는 정체 엔탈피(stagnation enthalpy)로 다음 식으로 정의된다.

$$h = C_{mix} \bar{T} + H_{fu} \bar{Y}_{fu} \quad (10)$$

여기서, H_{fu} 는 연료의 연소 발열량이며, C_{mix} 는 혼합기의 정압 비열로 각 화학종의 정압 비열 C_{pi} 와 질량 분율 Y_i 로 다음과 같이 정의된다.

$$C_{mix} = \sum_i C_{pi} Y_i \quad (11)$$

한편, 식 (9)의 우변의 마지막 항인 S_{rad} 는 단위 체적당 복사 열전달에 의해 전달되어 흡수되는 복사 에너지와 방출되는 복사 에너지의 차이를 나타내는 항으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} S_{rad} &= S_{rad,e} + S_{rad,a} \\ &= -4aE_b + a \iiint_{V_f} \frac{a' E_b' \exp(-\int_0^L a'' dL)}{\pi L^2} dV' \end{aligned} \quad (12)$$

이 식에서 $S_{rad,e}$ 는 복사에 의한 화염으로부터의 열손실을 나타내며, $S_{rad,a}$ 는 복사 에너지의 흡수에 관련되는 항으로 적분식의 형태로 되어 있다. E_b 는 흑체의 복사능(blackbody emissive power, $E_b = \sigma T^4$), V_f 는 화염 전체 체적을 나타내며, L 은 하나의 미소체적 dV 로부터 다른 미소 체적 dV' 까지의 경로장(path length)을, a, a', a'' 는 화염 내의 체적의 복사 에너지에 대한 흡수 계수로 각각 미소 체적 dV , 미소 체적 dV' 및 경로 L 상에서의 흡수 계수를 나타내고 있다.

2절에서의 가정 (2)와 같이 경계층 가정을 만족하는 경우에는 유동 함수(stream function) Ψ 를 독립 변수로 하여 지배 방정식을 정리하면 해석이 간단해지는 장점이 있으므로, 원통형 좌표계(cylindrical coordinate)에 대하여, 유동 함수 Ψ 를 다음 식과 같이 정의하면

$$\Psi = \int \bar{\rho} r \bar{u} dr \quad (13)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \bar{\rho} r \bar{u} \frac{\partial}{\partial \psi} \quad (14)$$

주 유동의 방향인 축 방향의 거리 x 와 유동 함수 Ψ 를 독립 변수(independent variables)로 하여 앞서 설명한 가정 하에 운동량, 화학종(species), 에

너지 및 매연 농도 등에 대한 지배 방정식을 아래와 같이 요약할 수 있다. 단, 연속 방정식(continuity equation)은 유동 함수 Ψ 를 독립 변수로 사용함으로써 자동으로 만족된다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{h,eff}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \Psi} \right) \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} (\rho_\infty - \bar{\rho}) a_{grav} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{\partial \bar{Y}_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{i,eff}} \frac{\partial \bar{Y}_i}{\partial \Psi} \right) + \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} \bar{R}_i \quad (16)$$

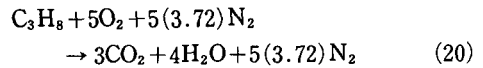
$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{h,eff}} \frac{\partial h}{\partial \Psi} \right) + \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} S_{rad} \quad (17)$$

한편, 산화제인 O_2 에 대한 지배 방정식은 각 화학종의 확산 계수를 같다고 가정하여 Shvab-Zeldovich 함수 f 를 다음과 같이 정의하여 도입하면 $\bar{f} = \bar{Y}_{O_2} - s \bar{Y}_{fu}$ (18)

Shab-Zeldovich 함수 f 는 보존 스칼라(conserved scalar) 량이 되므로, f 에 대해, 반응 속도에 의한 생성항이 없는 지배 방정식을 다음과 같이 얻을 수 있으며 이를 풀면 산화제의 농도 분포를 구할 수 있다.

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{f,eff}} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \Psi} \right) \quad (19)$$

단, 위의 식 (18)에서 Y_{O_2} 및 F_{fu} 는 각각 산화제와 연료의 시간 평균 질량 분율이고, s 는 연료의 이론 당량비(stoichiometric ratio)로 프로판의 연소에 대해 다음과 같은 1 단계 전반응(one-step overall reaction)을 고려하면



이론 당량비 s 는 약 3.64이다.

한편, 매연 생성 핵의 수밀도 n 과 매연 입자의 수밀도 N 에 대한 보존 방정식은 화학종 보존 방정식 (16)과 형태가 동일하며, 다음 식으로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{n,eff}} \frac{\partial n}{\partial \Psi} \right) \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} (\bar{R}_{n,s} - \bar{R}_{n,c}) \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{N,eff}} \frac{\partial N}{\partial \Psi} \right) \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} (\bar{R}_{N,s} - \bar{R}_{N,c}) \end{aligned} \quad (22)$$

이 식으로부터 구한 매연 입자의 수밀도 N 으로부터 매연 입자의 질량 농도를 구하기 위해서는 매연 입자의 평균 질량 m_p 를 다음 식과 같이 곱해야 하

Table 1 Constants for calculation

$\sigma_{n,eff}$	0.7	$f_n - g_n$	0.
$\sigma_{i,eff}$	0.7	g_o	2.37×10^9
$\sigma_{f,eff}$	0.7	a_s	4.20×10^{-20}
$\sigma_{n,eff}$	0.7	b_s	4.20×10^{-20}
$\sigma_{s,eff}$	0.7	c_{sc}	4.0×10^4
C_{EBU}	0.4		

는데,

$$\bar{c} = m_p N \tag{23}$$

매연 입자의 평균 질량의 변화가 그다지 크지 않은 경우에는 다음과 같이 매연의 질량 농도 \bar{c}_s 에 대한 지배 방정식을 직접 풀 수 있다.

$$\frac{\partial \bar{c}_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(r^2 \bar{\rho} \bar{u} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{s,eff}} \frac{\partial \bar{c}_s}{\partial \Psi} \right) + \frac{1}{\bar{\rho} \bar{u}} (\bar{R}_{s,f} - \bar{R}_{s,c}) \tag{24}$$

각각의 스칼라량 (scalar quantity)에 대한 보존 방정식에 있어서 난류 전달 물성치 (turbulent transport property) 들은 각각의 스칼라량 들에 대한 Prandtl 수 및 Schmidt 수를 정의하여 사용하며, 식 (8)의 $\sigma_{i,eff}$, 식 (9)의 $\sigma_{n,eff}$ 및 식 (19)에서의 $\sigma_{f,eff}$ 등은 각각의 스칼라 량에 대한 Prandtl 수 및 Schmidt 수를 나타낸다.

본 연구에 있어서는, 무차원 유동 함수 ω (dimensionless stream function)를 다음 식과 같이 정의하여 다시 지배 방정식을 정리한다.

$$\omega = \frac{\Psi - \Psi_I}{\Psi_E - \Psi_I} \tag{25}$$

이 식에서 Ψ_I 및 Ψ_E 는 각각 내측 경계면과 외측 경계면에서의 유동 함수의 값으로, 버너 노즐로부터의 거리 x 의 함수가 된다. 따라서 무차원 유동 함수 ω 로 식 (15), (16), (17), (19), (21), (22) 및 (24)를 다음과 같은 하나의 식으로 정리할 수 있다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} + (a + b\omega) \frac{\partial \phi}{\partial \Psi} = \frac{\partial}{\partial \omega} \left(C \frac{\partial \phi}{\partial \omega} \right) + R_\phi \tag{26}$$

이 식에서 ϕ 는 \bar{u} , h , \bar{Y}_{fu} , \bar{Y}_{ni} , \bar{f} , n , N 및 \bar{c}_s 등을 나타내며 R_ϕ 는 변수 ϕ 에 해당하는 생성항을 나타낸다.

계산에 실제 사용된 주요한 상수들의 값은 Table 1에 정리되어 있다.

4. 매연 생성 및 연소 속도 모델

난류 화염에 있어서의 매연 생성 및 연소 과정에

Soot formation model

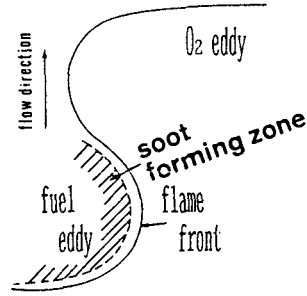


Fig. 2 Soot formation model in turbulent flames

대한 이해는 복사 열전달과 대기 오염 등에 미치는 매연의 중요성으로 보아 매우 중요하다고 할 수 있다. 층류 화염을 위주로 한 매연 생성 및 연소의 화학적 과정에 대한 연구는 비교적 활발한 반면, 난류 화염에서의 매연 생성 및 연소에 대한 연구는 많지 않다. 따라서, 난류 화염에서의 매연 생성 속도에 관한 모델로서 현재 적용 가능한 것은 그다지 많지 않으며, 층류 화염에서의 매연 생성 속도와 난류 화염에서의 생성 속도간의 관련성, 즉 매연의 생성 및 연소 과정에 대한 난류의 영향 등에 대한 연구도 현재 진행 중이다.

층류 화염으로부터 난류 화염으로 천이되면 일반적으로 운동량, 열 및 물질 전달이 증가하고, 연소 반응의 속도나 매연 생성에 대해서도 같은 경향을 보일 것으로 생각된다. 그러나, Magnussen 등이 수행한 난류 확산 화염에서의 매연 입자 농도 분포 등에 대한 실험의 결과는, 난류 확산 화염의 버너 노즐 부근의 매연 생성역이라고 생각되는 위치에서 매연 입자의 시간에 따른 농도 분포가 매우 간헐적인 형태를 나타내고 있으며, 이같은 결과는 난류 화염에서의 매연의 생성에 대해 다음과 같은 가정을 뒷받침 한다⁽³⁾. 즉, Fig.2에 나타낸 것과 같이 매연 입자의 생성은 연료를 많이 포함하고 있는 eddy의 내부에 있는 미연 연료가 eddy의 표면에서 일어나는 연소 반응열을 받아, 가열되어 열분해가 일어나서, 매연 생성 핵의 형성과 매연 입자의 생성이 일어나며, 이렇게 생성된 매연 입자를 포함하여 매연 농도가 높은 eddy와 매연 입자가 거의 없고 산소의 농도가 높은 eddy가 서로 분리되어 있어서, 시간적으로 간헐적인 매연 농도 분포

를 보이는 것으로 생각되며, 매연 입자의 연소 과정은 매연 입자를 포함하고 있는 큰 eddy들이 더 작은 eddy로 깨져 가는 과정에 의해 이루어 진다는 가정을 뒷받침 한다.

4.1 매연 생성 속도 모델

Abbas와 Lockwood⁽⁴⁾는 층류 화염에서의 매연 생성 속도를 난류 화염에서의 매연 생성 속도를 난류 화염에 적용하는 방법으로 혼합 분률(mixture fraction)에 대한 확률 밀도 함수(probability density function, pdf)를 이용하는 방법을 제안하고 있다. 그들은 층류 화염에서의 매연 생성 속도에 관한 식으로 Khan과 Greeves의 1단계 생성에 대한 식을 사용하고, 이 식을 혼합 분률 만의 함수로 나타내서 확률 밀도 함수를 사용한 시간 평균 매연 생성 속도를 구하고 이를 난류 화염에서의 매연 농도 분포의 예측에 적용하였다. 그러나, 확률 밀도 함수를 써서 난류 화염에서의 생성 속도를 구하는 방법은 이들이 사용한 1단계 생성 모델과 같이 매연 생성 속도 식이 간단하게 혼합 분률 만의 함수로 나타낼 수 있는 경우에만 가능한 방법이며, 또한 복사 열전달에 의한 화염으로부터의 열 손실의 값을 엔탈피와 혼합 분률 만의 함수로 나타낼 수 있어야 한다는 단점이 지적된다.

본 연구에서 사용한 난류 화염 내에서의 매연 생성 속도에 관한 모델은 저자들이 이미 발표한 논문⁽²⁾에서 제안하여 해석에 사용한 방법으로, Magnussen 등⁽³⁾의 실험 결과를 토대로, Fig.2와 같은 난류 eddy 내에서의 매연 생성 모델을 가정한다. 이 그림에서 나타낸 것과 같이 연료를 많이 포함하고 있는 eddy의 내부에는 연료의 열 분해에 의해 생성된 중간 생성물(intermediates)이 균일하게(homogeneously) 분포하고 있어서, 이 중간 생성물로부터 생성되는 매연 생성 핵의 분포도 균일하며, 따라서 매연 생성 핵으로부터의 매연 입자의 생성은 연료를 포함하고 있는 난류 eddy의 내부에서 층류적으로 이루어지고, 층류 화염에 있어서의 생성 속도 식에 각 변수 들에 대해 시간 평균값을 적용하여 난류 화염에서의 매연 생성 속도의 시간 평균치를 구할 수 있다고 제안하고⁽²⁾, 층류 화염에서의 매연 생성 속도를 나타내는 2 단계 생성 모델에서, 매연 생성 핵의 자발적 생성 속도에 대해서는 기체 운동론으로부터 유도한 반응 속도식을 사용하고, 이들 식에 각 변수의 시간 평균값을 대입

하여 매연 생성 속도를 구한다⁽²⁾.

2 단계 생성 모델에서 매연 생성 핵의 생성 속도에 대해서는 다음 식 (27)과 (28)를 사용하며⁽⁵⁾,

$$R_{n,f} = n_0 + (f_n - g_n) n - g_0 n N \tag{27}$$

$$n_0 = 6.226 \times 10^{28} Y_{fu} P^2 T^{-1.5} \exp(-28900/T) \tag{28}$$

이 식 들에 각 변수들의 시간 평균치들을 대입하여 사용한다. 한편, 매연 입자의 크기의 변화가 그다지 크지 않다고 가정하면, 매연 농도 \bar{c}_s (g/m³)에 대한 생성 속도의 모델은 다음과 같은 식으로 나타낼 수 있다⁽²⁾.

$$R_{s,f} = (a_s - b_s \bar{c}_s) n \tag{29}$$

식 (27)의 f_n , g_n , g_0 등과 식 (19)의 a_s , b_s 는 각각 매연 생성 속도에 관련된 속도 상수로 참고문헌 (2)에 제시한 값을 수정없이 사용하였다.

4.2 매연 연소 속도 모델

난류 화염 내에서의 매연 입자의 연소 속도는 층류 화염에서의 값과는 상당한 차이가 있다. Magnussen은 화염 내의 국소 조건에서의 시간 평균값을 사용한 층류 화염에서의 연소 속도식과 난류 화염에서의 실험 결과를 비교하여, 실험치가 예측치에 비하여 상당히 작은 값을 나타내고 있다고 보고하고, 따라서 난류 화염에서는 매연 농도가 높고 산소 농도가 낮은 eddy와 산소가 많이 포함되어 있고 매연 입자가 거의 없는 eddy가 서로 분리되어 있으므로, 시간 평균값을 기초로 한 층류 화염에서의 매연 연소 속도를 그대로 사용하는 것을 적절하지 못하다고 주장하였다⁽⁶⁾. 따라서, 저자들이 이미 발표한 참고문헌 (2)에서는 우선, 난류 화염에 있어서의 매연의 연소 속도는 연료의 연소 속도와 마찬가지로 난류 혼합의 지배를 받는다고 가정하고 Eddy breakup 연소 모델을 원용하여 매연 입자의 연소 모델로 사용하였는데, 이 식으로 나타낸 연소 속도는 다음 식과 같다.

$$R_{s,c} = -C_{EBU} c_s \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right| \tag{30}$$

난류 화염에 있어서의 매연 입자의 연소 속도는 시간 평균치를 사용한 층류 화염에서의 연소 속도 식으로 얻어진 값에 비하여 상당히 작으며, 난류 혼합 속도의 지배를 많이 받으므로, 일반적으로는 eddy breakup 모델에 의한 연소 속도식은 좋은 예측 결과를 나타낸다⁽²⁾. 이 모델에서는 화학 반응의 속도가 난류 혼합의 속도에 비하여 매우 빠르다고

가정하여 매연 연소에서 화학 반응 속도, 즉 표면 반응의 영향을 무시하고 있다. 물론, 화염의 주변 반응이 일어나는 고온 영역에서는 온도가 매우 높으므로 매연의 연소 반응도 매우 빨라서 이 가정을 만족한다고 할 수 있다. 그러나, 주변 공기의 유입이 많아서 온도가 크게 낮은 영역에서는 연소 반응 속도에 미치는 표면 반응, 즉 화학 반응 속도의 영향을 무시하지 않는 새로운 연소 속도 모델이 필요하다.

화학 반응의 속도를 고려한 새로운 매연 입자의 연소 속도 모델을 위하여, 층류 화염에서의 매연 입자의 표면 연소 속도를 사용하는데, Nagle과 Strickland-Constable⁽⁷⁾은 산소 분압 범위 10^{-5} – 1 atm., 온도 범위 1100 – 2500 K에서의 pyrographite의 연소 속도에 대한 준실험식(semi-empirical formula)을 발표하였으며, 이 식에 의한 매연 입자의 표면 연소 속도(surface mass oxidation rate)는

$$w = 12 \left[\left\{ \frac{k_A P_{O_2}}{1 + k_Z P_{O_2}} \right\} x + k_B P_{O_2} (1 - x) \right] \quad (31)$$

으로 나타낼 수 있으며, 이 식에서 P_{O_2} 는 국소 산소 분압(local oxygen partial pressure)을, x 는 입자의 전체 표면적중 활성화된 표면적의 비율을 나타내는 값으로, 실험적으로

$$x = \left\{ 1 + \frac{k_T}{k_B P_{O_2}} \right\}^{-1} \quad (32)$$

로 제시되어 있다. 또한, 식 (31), (32)의 k_A , k_B , k_T , k_Z 들은 실험적으로 구한 값으로 다음과 같다⁽⁷⁾.

$$\begin{aligned} k_A &= 20 \exp(-15100/T) \\ k_B &= 4.46 \times 10^{-3} \exp(-7640/T) \\ k_T &= 1.51 \times 10^{-5} \exp(-48800/T) \\ k_Z &= 21.3 \exp(2060/T) \end{aligned} \quad (33)$$

본 연구에서는 식 (31)로 주어진 표면 반응 속도를 이용하여, 이를 매연 입자의 질량 농도의 변화에 관한 식으로 변환하는데, 매연 입자의 직경이 크게 변하지 않는 경우에는, 연소 반응에 의한 매연 질량 농도의 감소 속도는 매연의 농도와 매연 입자의 표면 연소 속도의 곱으로 나타낼 수 있으며, 다음 식과 같이 정리할 수 있다.

$$R_{s,c} = -C_{sc} \bar{w} c_s \quad (34)$$

이 식에서, C_{sc} 는 매연 입자의 평균 직경 및 매연의 밀도에 관련되는 반응 상수로 이론적으로 계산하면 대략 10^4 정도의 크기를 갖는다.

5. 난류 모델링 및 난류 연소 모델링

각 지배 방정식에 있어서의 유효 점성 계수(effective viscosity) μ_{eff} 는 층류 점성 계수(molecular viscosity)의 값에 난류 점성 계수(turbulent viscosity)의 값은 거리 가정(mixing length hypothesis)으로 잘 알려진 다음의 식을 사용하여 구한다⁽⁸⁾.

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right| \quad (35)$$

이 지배 방정식에 있어서의 유효 점성 계수(effective viscosity) μ_{eff} 는 층류 점성 계수(molecular viscosity)의 값에 난류 점성 계수(turbulent viscosity)의 값은 혼합 거리 가정(mixing length hypothesis)으로 잘 알려진 다음의 식을 사용하여 구한다⁽⁸⁾.

이 식에서 l_m 은 소위 혼합 거리(mixing length)를 나타내는데, 분류(jet)의 경우 이 값은 분류의 폭(반경, jet radius)에 비례하며, 다음 식으로 나타낼 수 있다.

$$l_m = 0.075 \delta \quad (36)$$

이 식에서 δ 는 분류의 반경이며, 이 값은 보통 유속이 분류의 중심축에서의 최대 유속의 1% 이하가 되는 위치까지의 거리로 나타낸다⁽¹⁷⁾.

난류 화염에 있어서의 연소 반응 속도에 대해서는 여러가지 모델이 제안되고 있는데, 본 연구에서는 일반적으로 널리 사용되고 있는 eddy breakup 모델에 의한 반응 속도를 사용한다. 이 모델에 의하면 난류 화염에 있어서의 연소 반응의 경우, 난류 혼합의 속도에 비해 화학 반응의 속도가 매우 빠르므로, 난류 연소 속도는 난류 혼합의 속도에 지배를 받게 되며, 난류 혼합의 속도를 주 유동의 평균 속도의 구배를 이용하여 나타내면, 다음 식으로 나타낼 수 있다⁽⁹⁾.

$$R_{ru} = -\bar{\rho} C_{EBU} \bar{Y}_{su} \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right| \quad (37)$$

6. 복사 열전달의 해석(Analysis of the Radiative Heat Transfer)

에너지 보존 방정식에서 복사 열전달에 관련된 S_{rad} 항은 그 형태가 다중 적분의 형태로 되어 있

고, 적분항 내부에 있는 항도 복잡한 위치의 함수로 되어 있다. 이에 반하여 에너지 보존 방정식 상의 다른 항들은 미분의 형태이므로, 복사 열전달을 고려하면 에너지 방정식은 필연적으로 복잡한 비선형(nonlinear) 미분-적분 방정식(integro-differential equation)의 형태를 가지게 된다. 따라서, 기하학적 형상이 매우 간단하고 복사에 관련되는 내부의 매질에 있어서도 흡수 계수 등의 분포가 비교적 균일한 경우를 제외하고는 직접적으로 해석적인 해를 구하는 것이 거의 불가능하므로, 몇몇 종류의 근사적인 해석 방법을 개발하여 사용하고 있다. 일반적으로 알려져 있는 이러한 근사적인 방법 중에서 화염과 같이 위치에 따른 온도 변화 및 화학종의 농도 등의 변화가 큰 경우에도 적용 가능하다고 생각되는 방법으로는 열유속법(flux method)⁽¹⁰⁾, 영역법(zone method)⁽¹¹⁾, 몬테 카를로 법(Monte carlo method)⁽¹²⁾ 및 몬테 카를로 법과 원리상 거의 유사한 방법인 열선 유속법(heat ray method)⁽¹³⁾ 등이 알려져 있으며, 각각의 방법에는 특유의 장단점이 있으므로 각각의 시스템의 해석에 적합한 방법을 선정해야 할 것이다.

본 연구에서는 복사 열전달 해석 방법으로 화염 내의 각 위치에서의 열유속(heat flux)에 대한 높은 정도의 계산이 가능하고, 계산의 공간 해상도가 높으며, 위치에 따른 물성치 등의 변화에 대한 적응성이 뛰어난 몬테 카를로 법을 기본으로 하여, 몬테 카를로 법의 가장 큰 단점인 계산 소요 시간을 단축하기 위한 방법을 도입하여 새로운 해석 방법을 개발하여 사용하였으며, 계산된 복사 열전달 관련 항을 에너지 보존 방정식과 결합하는 방법⁽¹⁶⁾을 사용하여 복사 열전달을 포함한 에너지 보존 방정식의 해석을 수행한다.

몬테 카를로 법은 화염부의 전체적 및 화염을 둘러싸고 있는 벽면 등의 전 면적을 온도 및 물성치가 균일하다고 생각되는 많은 수의 미소 영역으로 분할하고, 각 미소 영역 간의 열교환을 시뮬레이션한다는 면에서는 영역법과 유사하다. 그러나, 영역법에서는 관련 전체 에너지의 전체적인 이동 상황을 동시에 푸는 것에 반해, 몬테 카를로 법은 전체 에너지를 수많은 미소 에너지량으로 나누어, 각각의 미소 에너지량의 이동 상황을 복사 열전달의 물리적인 법칙에 따라서 검토하고 이를 전체적으로 종합하는 방법을 사용한다. 즉, 각 미소 영역으로부터의 복사 에너지의 방출을 각 미소 영역에서 방

출되는 N_i 개의 에너지 속(energy bundle)으로 나타내고, 방출된 각각의 에너지 속의 이동 과정을 수치적으로 추적하여, 에너지 속이 통과 및 흡수되는 과정에 의해 복사 에너지의 전달을 해석하는데, 어느 위치에서의 국소 복사 열유속(local radiative heat flux)은 그 위치에서의 단위 시간 단위 면적당 통과하는 에너지 속의 갯수에 에너지 속이 가진 에너지량을 곱한 값으로 나타낼 수 있다.

본 연구에서 사용한 복사 열전달 해석 방법은 각각의 에너지 속의 이동 경로를 정확히 추적하여 이동 경로 중에 에너지 속이 각각의 미소 체적부에서 잃는 에너지량을 계산하는 방법을 사용하므로써, 에너지 속의 최종 흡수 위치를 통계적인 수치 해석 방법으로 추적하여 이를 기준으로 복사 열전달을 해석하는 중전의 몬테 카를로 법에 비해 계산 시간을 크게 줄일 수 있을 것으로 기대된다.

한편, 본 연구에서는 복사 열전달을 포함하는 에너지 방정식을 풀기 위한 새로운 방법을 제안하고 있다. 화염으로부터의 복사 열전달에 의한 복사 열손실과 화염내 체적의 복사 에너지의 흡수량을 비교해 보면, 방출량이 흡수량에 비하여 매우 크다⁽¹⁶⁾. 이는 복사 열전달의 해석에서 매우 중요한 의미를 가지는데, 일반적으로, 복사 열전달의 계산을 복잡하게 만드는 원인은 바로 복사 에너지의 흡수를 나타내는 복잡한 다중 적분 형태의 항으로, 복사 열전달의 해석은 바로 이 흡수항을 계산한다는 것을 의미한다. 또한 에너지 방정식과 복사 열전달에 관한 식을 결합할 때 문제가 복잡하게 되는 주 원인도 이 적분항이므로, 에너지 방정식의 해석 시에 이 적분항을 간략화(simplification)하거나 무시할 수 있다면, 복사 열전달의 해석은 한층 간단해 질 수 있다. 따라서, 본 연구에서는 복사 열전달을 포함한 에너지 방정식의 해를 다음과 같은 순서에 의하여 구하였다. 일단, 첫 단계에서는 에너지 방정식에서 복사 에너지의 흡수에 관한 적분항은 다른 항들에 비해 충분히 작다고 가정하고 에너지 방정식을 해석하여, 온도 분포를 구한 다음, 구해진 온도 분포를 이용하여 매연 농도 분포 및 각 화학종 분포를 구한다. 다음 단계로는 이렇게 구한 온도, 매연 및 화학종의 농도 분포를 이용하여, 복사 열전달의 흡수를 포함하는 복사 열전달을 해석하고 다시 에너지 방정식을 풀어서 새로운 온도 분포를 구한다. 이러한 과정을 반복적으로 수행하면 정확한 온도 분포 및 복사 열유속 등의 값을

얻을 수 있다.

7. 초기 및 경계 조건

본 연구에서의 수치 계산에서, 사용한 초기 조건은 다음과 같이 설명할 수 있다.

난류 화염의 계산에서는 박형 전단층 가정(thin shear layer assumption)을 사용하여, 분류의 분출관에서의 유동을 직경의 99%까지의 비점성 축류부(potential core) 유동과, 분출관 벽면 부근의 1%의 선형 분포(linear profile)를 갖는 박형 전단층 유동으로 나누어서, 초기조건을 다음과 같이 준다.

$$2r/d < 0.99 :$$

$$Y_{fu} = 1, Y_{ox} = Y_{ni} = Y_{pr} = n = \bar{c}_s = 0$$

$$0.99 \leq 2r/d \leq 1 :$$

$$Y_{fu} = y, Y_{ox} = Y_{ox,\infty}(1-y)$$

$$Y_{ni} = Y_{ni,\infty}(1-y), Y_{pr} = n = \bar{c}_s = 0$$

$$\bar{f} = Y_{ox,\infty}(1-y) - sy, \bar{T} = T_i$$

$$\bar{u} = u_i y + u_\infty(1-y) \tag{38}$$

여기서 $y = 100(1 - 2r/d)$

경계 조건은, 분류의 바깥면에서의 조건은 각 변수의 값이 외부의 주위 공기에서의 변수값과 일치하는 동시에 각 변수의 구배(gradient)가 0이라는 가정을 사용한다.

한편, 박형 전단층 가정을 사용하는 경우 내부의 비점성 축류부에 대해서는 지배 방정식을 풀지 않고, 박형 전단층에 대해서만 풀기 때문에, 전단층의 폭이 넓어져서 분류 축에 도달하기 전까지는 계산 영역 내측의 경계 조건은 비점성 축류부의 각 변수에 대해 외측 조건과 같이, 각 변수의 구배가 0이고 각 변수의 값들이 내측 경계면에서 비점성 축류의 값들과 일치한다는 조건을 사용한다. 일단, 전단층이 확장되어 분류의 대칭축에 도달하게 되면, 대칭 중심축에서의 조건으로 각 변수의 구배가 0이라는 조건을 사용하게 된다.

8. 결과 및 고찰

난류 화염에 대한 본 수치 해석 방법의 적용의 대상으로 삼은 화염은 2종류로 본 연구실에서 각종 실험을 수행한 동축분류 확산화염(coaxial jet diffusion flame)⁽¹⁴⁾과 Nishida의 관내 동축류 확산화염(confined coaxial jet diffusion flame)⁽¹⁵⁾으로 각 화염의 실험 조건에 대해서는 Table 2에 주어져 있다.

본 연구실에서 실험을 수행한 분류 확산화염은 직경이 3mm인 분사 노즐로부터 20m/s의 속도로 프로판을 분출시켜 연소시키며, 화염을 안정시키기 위하여 소량의 수소를 프로판 주위에 흘려보낸다. 분류의 노즐 직경을 기준으로 한 Reynolds 수는 약 11,000으로 난류 확산화염을 형성하는데, Fig. 1은 실험장치의 개략도이다. 이 화염에 대한 실험 결과와 예측 결과를 Fig. 3에 비교하였다. 이 그림은 화염 중심축을 따른 시간 평균 축방향 속도 \bar{u} , 시간 평균 온도 \bar{T} 및 매연 입자의 질량 농도(soot mass concentration)와 기타 화학종 들의 농도 등을 나타내고 있다. $x=100\text{mm}$ (x : 버너 노즐로부터의 높이)까지는 매연 입자는 전혀 발견되지 않다가, $x=150\text{mm}$ 부근으로부터 나타나기 시작하여 급격히 농도가 증가하여 $x=450\text{mm}$ 부근에서 최대치인 0.53 g/m^3 의 값을 나타낸다. 매연 농도는 이후 다시 급격히 감소하여, 화염의 후류부인 $x=800\text{mm}$ 이상에서는 거의 대부분 사라진다. 한편, 화염 내의 온도는 버너 노즐 부근에서부터 매연 입자의 발생을 관찰할 수 있는 $x=150\text{mm}$ 부근까지의 영역에서 매우 급격히 상승한다. 이후, 매연 입자의 발생과 함께 온도의 증가는 완만해지면서 매연 농도의 최대치가 나타나는 $x=450\text{mm}$ 보다 약간 하류 지역인 $x=540\text{mm}$ 부근에서 최대 온도를 나타낸다. 이 이후에는 상당히 빠르게 온도

Table 2 Flame conditions

	Our flame	Nishida's ⁽¹⁵⁾
Fuel jet velocity (m/s)	20.	30.
Surrounding air velocity (m/s)	0.5	0.36
Nozzle diameter (mm)	3.0.	2.0
Fuel jet temperature (K)	300.	323.
Surrounding air temperature (K)	300.	323.
Nozzle Reynolds number	11,000	10,200

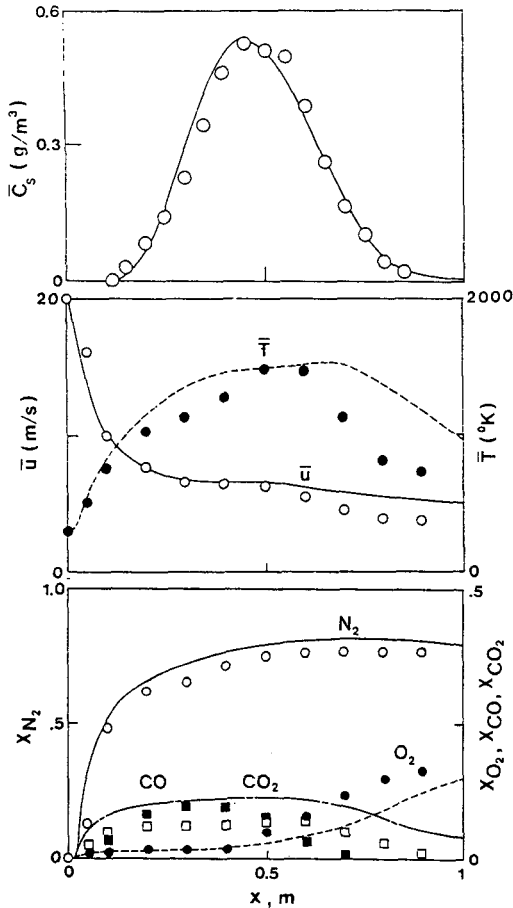


Fig. 3 Predictions of axial profiles of local time-averaged soot mass concentration, temperature, axial velocity, and species mole fractions on the axis of the flame compared with experimental data ($Re=11,000$)

가 떨어지고 있다. 최대 온도값은 약 1600K 정도로, 이론 당량비 상태에서의 단열 화염 온도인 2267K에 비하여 상당히 낮는데, 이렇게 온도가 낮은 것은 대체로 화염으로부터의 복사 열손실에 기인하는 것으로 생각된다.

이 경우에 대해 사용한 매연 입자의 연소 모델은 EBU 모델인데, 수치 해석에 의한 예측 결과는 대체로 실험 결과와 비교하여 좋은 일치를 보이고 있다. 특히 수치 계산의 타당성을 간접적으로 나타낸다고 할 수 있는 평균 유속에 대한 예측은, 속도 및 화염의 변동이 심한 하류부를 제외한 대부분의 영역에서 잘 일치하며, 화학종의 농도 분포에 대한 예측도 대체로 좋은 결과를 보이고 있다. 그런데,

본 연구에서는 화학 반응에 대해 1단계 전 반응 (one-step overall reaction)의 가정을 사용하였으며, 이 가정을 사용하는 경우 중간 생성물인 일산화탄소(CO)의 농도는 계산하지 않으므로, 일산화탄소의 농도에 대한 실험치는 비교할 수 없으며, 일산화탄소의 농도는 이산화탄소(CO₂) 농도의 계산에 포함되기 때문에, 이산화탄소 농도의 예측치가 대체로 실험치에 비하여 큰 값을 나타내고 있는 것을 알 수 있다. 매연 농도에 대해서도 화염 중심 축에서의 축 방향의 농도 분포는 화염 전체에 걸쳐 매우 좋은 예측 결과를 나타내고 있다. 화염의 후류부($x=600\text{mm}$ 이상)에서는 대체로 실험 결과가 계산 결과와 무시할 수 없는 차이를 보이는데, 이러한 차이는, 화염의 후류에서는 외부 공기의 유입이 활발하고 유속 및 화염의 진동(oscillation)이 매우 심해서, 정밀한 실험결과를 얻어 내는 것이 매우 어려우며, 또한 계산에서는 이 부분에서의 공기 유입율(entrainment rate)의 값을 대체로 과소평가(under-estimate) 하기 쉽기 때문인 것으로 생각된다.

Fig.4는 축방향 평균 속도 \bar{u} 와 매연 농도 및 온도 \bar{T} 와 매연 농도 및 온도 \bar{T} 에 대해 각각 $x=200\text{mm}$, 400mm 및 600mm 단면에서의 반경 방향 분포를 실험 결과와 그에 상당하는 예측의 결과를 비교해서 나타낸 그림이다. 화염의 상류부인 $x=200\text{mm}$ 단면에서의 온도 분포와 매연 농도의 분포는 최대값이 주변부에 나타나고 중심부가 낮은 말안장형의 반경 방향 분포를 보이고 있는데, 이 단면에서 대략 화염대의 위치를 나타내는 최대 온도의 위치는 $r=14\text{mm}$ (r : 화염 중심선으로부터의 반경 방향으로의 거리) 부근인데, 매연 농도의 최대치가 나타나는 위치는 이에 비해 약간 안쪽인 $r=12\text{mm}$ 부근이다. 이러한 실험 결과로 미루어 보아, 일반적으로 매연 입자의 생성이 활발하게 일어나는 위치는 화염대보다는 화염대 부근의 연료 과잉역의 예열대(preheat zone)라고 생각되며, 예열대의 연료 과잉역에서는 공급된 연료가 화염으로부터 전달된 열을 받아 열 분해(thermal decomposition)가 활발하여, 매연 생성의 핵이 되는 중간 생성물(intermediates)의 농도가 매우 높기 때문이다. 이렇게 매연 농도의 최대치가 온도의 최대치에 비해 안쪽에 위치하는 현상은 수치 계산에서도 잘 예측이 되고 있다. 각 단면에서의 속도, 온도 및 매연 농도에 대한 반경 방향 분포의 예측도 전체적

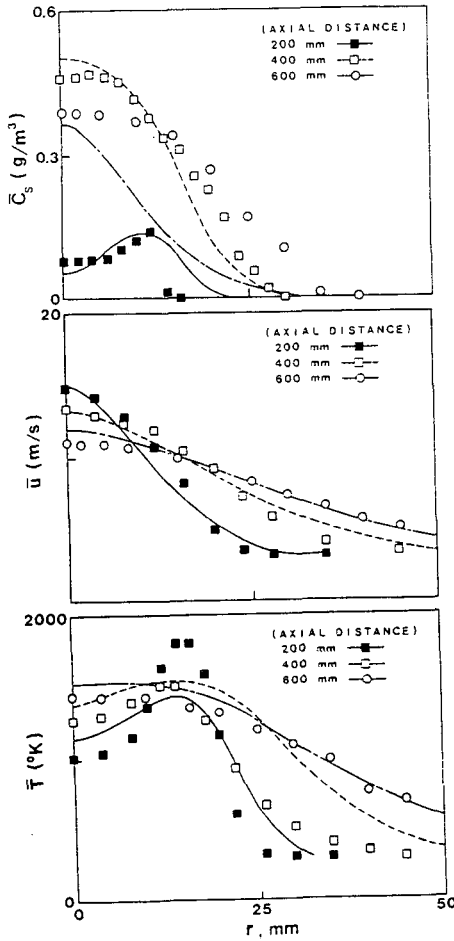


Fig. 4 Predictions of radial profiles of local time-averaged soot mass concentration, axial velocity, and temperature on the axis of the flame at $x=200, 400,$ and 600mm compared with experimental data ($Re=11,000$)

으로 비교적 실험 결과와 잘 일치한다. 속도 분포는 $x=600\text{mm}$ 까지 잘 일치하는 반면 화염 내의 온도 분포는 실험 결과와는 약간의 차이를 나타내고 있다. 화염의 전반부인 $x=200\text{mm}$ 단면에서는 실험 결과는 최대온도 값이 매우 높고, 상당히 급격한 온도 상승 및 저하를 나타내고 있는 반면에 예측치는 이에 비해 완만한 분포를 나타내고 최대 온도 값도 상당히 낮게 나타나고 있다. 화염의 중반부인 $x=400\text{mm}$ 단면에서는 예측된 온도의 레벨이 실험치에 비하여 전체적으로 높은 형태이며, 이러한 경향은 주 연소반응의 모델로 1 단계 전반응

(one-step overall reaction)을 채용함으로써 중간 생성물의 존재를 무시하게 되어, 상대적으로 주 반응의 속도가 크게 예측되어 나타난 현상이라고 생각된다 $x=600\text{mm}$ 단면에서는 실험치와 예측치가 더 잘 일치하는 것으로 보이는데, Fig.3에서 화염 중심축 상의 온도를 보면 $x=600\text{mm}$ 이후의 온도 분포가 실험 결과와 상당한 차이를 보이고 있는 것으로 미루어, 이 단면에서 예측과 실험 결과가 일치하는 현상은 공기 유입율의 과소 평가와 주 연소 반응 속도의 과대 평가가 겹쳐져서 나타나는 결과라고 생각된다.

매연 농도의 반경 방향 분포에 대한 예측치는 $x=200\text{mm}$ 단면과 400mm 단면에서는 실험치와 상당히 잘 일치한다. 그 반면에 비교적 하류측인 $x=600\text{mm}$ 단면에서는 중심축 부근에서는 잘 일치하지만, 반경 방향으로 외측으로 가면서 상당한 차이가 나타난다. 이 단면과 같이 화염의 후류부에서는 매연 입자의 생성이 거의 종료되어, 매연 농도의 결정에 매연 입자의 재연소가 큰 역할을 하는 부분이므로 이러한 결과가 나타나는 것은 매연 입자의 연소 속도가 실제에 비해 크게 예측이 되었기 때문이라고 생각할 수 있다. 이 계산에서 사용한 매연의 연소 속도에 대한 모델은 EBU 모델이다. 이 모델은 앞서 설명한 대로 주로 반응물의 혼합에 비해 상대적으로 화학 반응이 매우 빠른 경우에 적용하는 모델로, 화학 반응의 속도를 반응물의 혼합 속도에 비해 무한대로 가정함으로써 화학 반응 속도의 영향, 즉 반응물의 국소 농도 및 온도의 영향을 배제하여, 난류 혼합의 속도만으로 난류 연소 반응의 속도를 나타내고 있는 점이 특징이다. EBU 모델에 의한 매연 입자의 재연소 속도의 식은 식 (30)에 주어져 있는데, 이 식에는 화학 반응을 나타내는 항이 포함되어 있지 않다. Fig.5는 EBU 모델에 의해 얻어진 매연 입자의 재연소 속도 $R_{s,c}$ 와 온도 분포를 비교한 그림이다. 이 그림에서 보면 $R_{s,c}$ 의 최대값이 나타나는 위치는 온도 구배는 크나, 절대 온도는 낮아지는 비교적 화염의 외측 부분이다. 그런데 화염 하류의 외측 부분은 공기의 유입이 활발하여 온도가 상대적으로 낮아지고 화학 반응의 속도가 비교적 작으므로, 매연 입자의 연소 속도에 대한 화학 반응 속도의 영향을 무시할 수 없게 된다. 따라서, 이 영역에서는 EBU 모델을 사용하여 예측되는 매연의 연소 속도는 실제값에 비하여 상당히 커지고, 따라서 매연 농도는 낮아지는

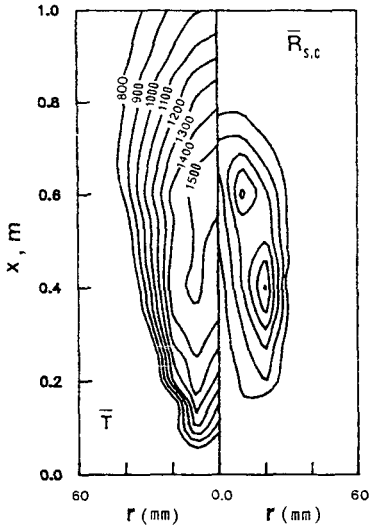


Fig. 5 Comparisons of local soot combustion rates (right) and temperature (left) predicted by EBU model, eq.(30)(right), for the combustion rate of soot particles

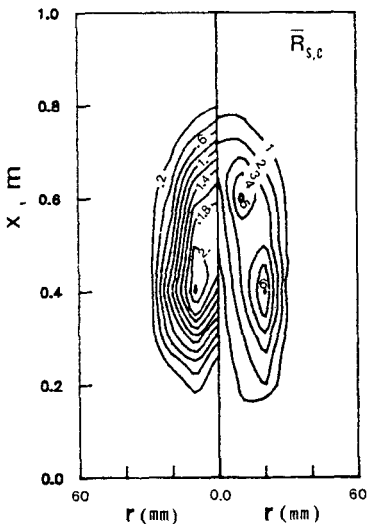


Fig. 6 Comparisons of local soot combustion rates predicted by the kinetic model, eq.(34)(left), and EBU model, eq.(30)(right), of the combustion rate of soot particles

것으로 생각된다. 그러므로 이러한 영역에서 보다 정확하게 매연의 연소 속도를 예측하기 위해서는 매연 입자의 재연소 시의 화학 반응을 고려한 연소 모델이 필요하다.

따라서, 본 연구에서는 매연 입자의 재연소 과정

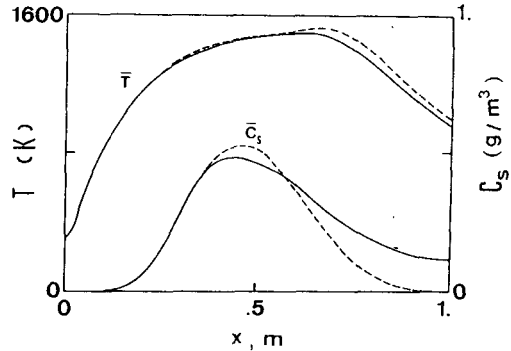


Fig. 7 Predictions of axial profiles of local time-averaged soot mass concentration and temperature, predicted by the kinetic model, eq.(34) (—), and EBU model, eq.(30)(- -), of the combustion rate of soot particles

에서의 화학 반응으로 층류 화염에서의 매연 입자의 표면 연소 반응 속도를 나타내는 Nagle과 Strickland-Constable의 준실험식인 식 (31)를 이용하여 식 (34)의 난류 화염 내에서의 매연 입자의 연소 속도 $R_{s,c}$ 을 구하였다. 이 식에서 매연 입자의 연소에 대한 화학 반응의 영향, 즉 온도 및 산소 농도의 영향은 이 식에서 시간 평균 표면 연소 속도 \bar{w} 에 포함되어 있다. Fig.6은 식 (34)의 화학 반응을 고려한 매연 입자의 연소 속도 예측치 $R_{s,c}$ (좌측)와 EBU 모델에 의한 예측치를 비교한 그림으로, 화학 반응을 고려한 매연 입자 연소 속도 (좌측)는, 최대값이 나타나는 위치가 $r=10\text{mm}$ 로 EBU 모델에 의한 연소 속도(우측) 보다 약간 화염 중심부 쪽이며, 연소 속도의 절대값도 전체적으로 약 1/3정도의 값을 나타낸다. Fig.7은 화학 반응을 고려한 매연 연소 속도 모델을 적용하여 얻은 결과(실선)와 EBU 모델의 계산 결과 (점선) 화염 중심축 상에서의 매연 질량 농도 \bar{c}_s , 온도 \bar{T} 및 속도 \bar{w} 를 나타내고 있으며, Fig.8은 $x=200\text{mm}$ 및 600mm 단면에서의 반경 방향 분포를 나타낸다. 대체로 화염의 전반부에서는 두 경우가 큰 차이를 보이지 않으나, $x=600\text{mm}$ 단면에서와 같이 화염의 후반부에 있어서는 상당한 차이를 나타내고 있으며, 화염의 외측부에서 대체로 실험 결과와 유사하게 높은 매연 농도를 보이고 있다. Fig.9는 매연 입자의 질량 농도 분포의 계산치를 비교한 그림으로 매연 입자의 표면 반응에 의해 화학 반응을 고려하는 kinetic 모델 (좌측)에 의한 결과와 EBU

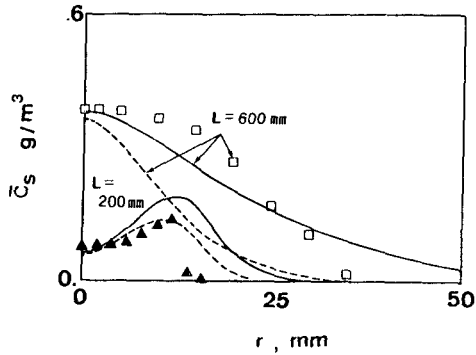


Fig. 8 Comparisons of radial profiles of soot concentration at $x=200\text{mm}$ and 600mm , predicted by the kinetic model, eq.(34)(—), and EBU model, eq.(30)(- -), of the combustion rate of soot particles, compared with experimental data

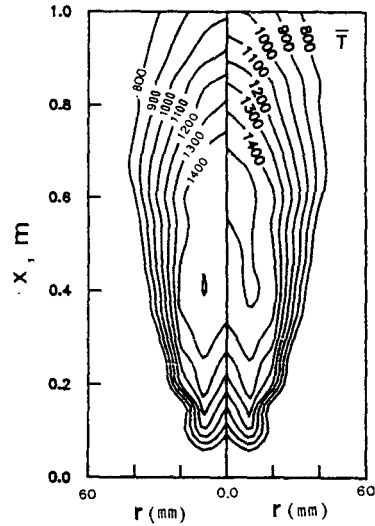


Fig. 10 Comparisons of the temperature field predicted by the kinetic model, eq.(34)(left), and EBU model, eq.(30)(right), of the combustion rate of soot particles

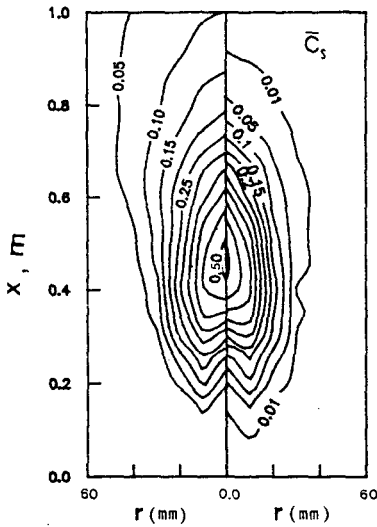


Fig. 9 Comparisons of soot concentration field predicted by the kinetic model, eq.(34)(left), and EBU model, eq.(30)(right), of the combustion rate of soot particles

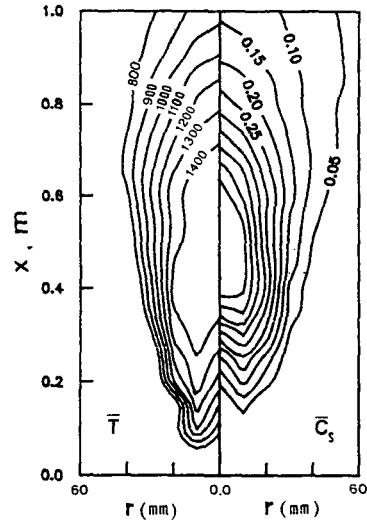


Fig. 11 Predicted soot concentration (right) and temperature (left) fields, without soot combustion

모델(우측)에 의한 결과를 나타내고 있는데, 매연 입자의 연소 속도가 매연 입자의 생성 속도에 비하여 상대적으로 작은 영역인 버너 노즐 부근으로부터 $x=400\text{mm}$ 까지의 구간에서는 두 모델에 의한 계산 결과에 거의 차이가 없으나, 화염의 후류 방향으로 진행함에 따라, 화염의 외측으로부터 EBU

모델에 의한 계산 결과 매연의 질량 농도가 작게 나타나고 있는 것을 볼 수 있으며, 이는 매연 입자의 연소 속도가 크게 예측되기 때문이라고 생각된다. Fig.10은 두 모델에 의한 온도 분포의 계산치를 비교하고 있는데, 전반적으로 온도 분포는 차이가 크지 않다. Fig.11은 매연 입자의 재연소를 무

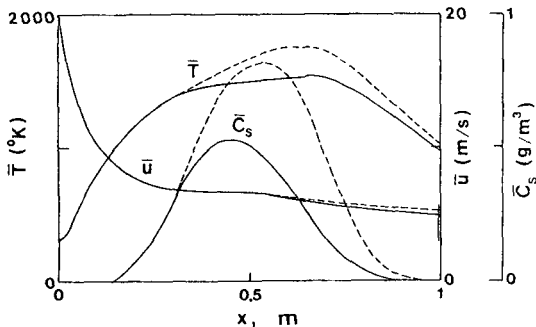


Fig. 12 Comparisons of predictions of axial profiles of time-averaged axial velocity, soot mass concentration, and temperature, with (—) or without (---) radiative heat transfer

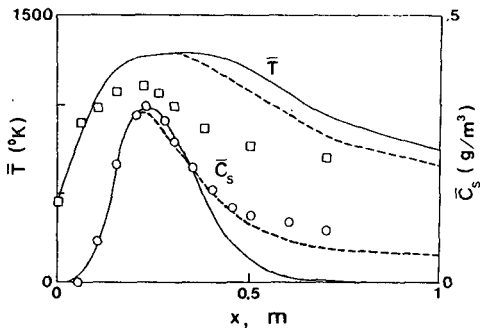


Fig. 13 Axial profiles of time-averaged soot mass concentration and temperature by Nishida¹⁵ ($Re=10,200$) compared with predictions

시하고 계산한 매연 농도 분포(우측)와 온도 분포(좌측)를 나타내는 그림으로, 이 그림의 매연 농도 분포를 Fig.9와 비교하면, 매연 입자의 연소 속도가 작은 화염의 전반부($x=400\text{mm}$ 부근까지)에서는, 매연 입자의 재연소 과정은 매연 농도 분포에 거의 영향을 주지 않는다는 사실을 알 수 있다. 매연 농도 분포에 있어서 큰 차이를 보이지 않고 있는 화염의 전반부에서는 매연의 생성이 지배적이므로, 매연의 연소 속도의 차이가 매연의 농도 분포에 큰 영향을 미치지 않고 있기 때문이라고 생각되며, Fig.12는 매연의 재연소를 무시하고 계산한 경우인데, 화염의 전반부에서는 재연소를 고려한 경우와 비교하여 큰 차이를 보이지 않으므로, 이러한 가정을 뒷받침하고 있다. 그러나, 화학 반응을 고려한 연소 모델을 적용한 계산 결과를 살펴 보면, 화염 말단에서는 매연이 거의 존재하지 않는 실험 결과와는 달리 약간의 매연 입자가 존재하는

것으로 예측하는 문제점을 나타내고 있다.

이 결과는 난류 화염 내에서의 매연의 연소 속도가 매연 입자의 표면 반응에 의한 연소와 매연을 포함하고 있는 eddy의 breakup에 의한 연소 속도의 두 가지 성분으로 이루어져 있으며, 이 두 가지 중 어느 쪽의 연소 속도에 어떻게 지배를 받는가의 문제는 추후 계속적으로 연구가 필요할 것으로 생각된다.

Fig.13은 버어너 노즐 출구에서의 Reynolds 수가 약 10,200인 Nishida의 동축 난류 확산 화염에 대한 계산 결과를 실험 결과와 비교한 그림이다. 매연 농도는 화염의 전반부에서 잘 일치하나, 후반부에서는 실험치보다 작은 값을 나타내고 있으며, 화염의 중심축에서의 온도는 실험치에 비해 계산치가 상당히 높은 것을 알 수 있다.

Fig.14는 복사 열유속에 대한 계산 결과를 나타내는 그림이다. (a)는 본 연구실에서 실험한 난류

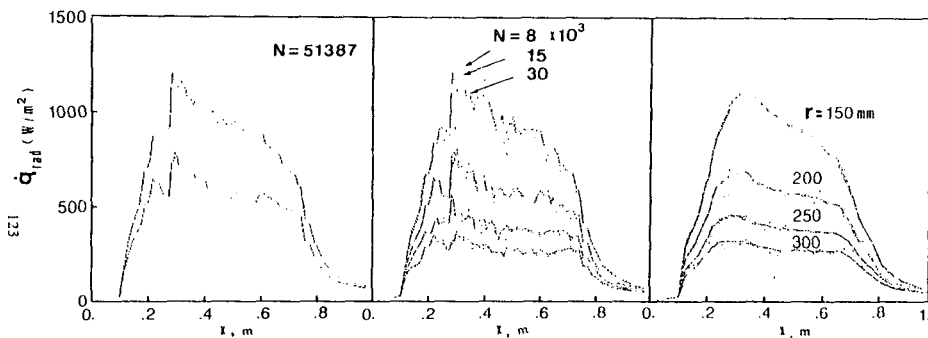


Fig. 14 Predictions of radiative heat flux at $r=150, 200, 250,$ and 300mm ; (a) the raw results of heat flux obtained by Monte Carlo method when $N=51,387$ (b) the raw results when $N=8,000, 15,000,$ and $30,000$ (c) spatially-averaged heat flux

화염에 대하여 화염 중심축으로부터 각각 150mm, 200mm 떨어진 위치에서의 복사 열유속(radiative heat flux)을 나타낸 그림으로, Monte Carlo 법을 이용하여 계산한 결과를, 공간적으로 평균을 취하지 않고 그대로 나타냈다. 이 그림에서는, Monte Carlo 법에 의한 복사 열유속 계산치의 위치에 따른 변동이 매우 심한 것을 알 수 있는데, 이러한 결과는 몬테 카를로 법 특유의 통계적 오차(statistical error)에 의한 것이다. Monte Carlo 법에서는 계산 횟수를 증가시키는 경우에도 이러한 통계적 오차는 크게 감소하지 않는데, (b)는 계산 횟수를 증가시킬 때의 150, 200, 250 및 300mm에서의 복사 열유속의 계산 결과를 보여 주고 있다. 한편, 이렇게 변동이 심한 계산 결과를 공간적인 평균을 취하면, 이러한 통계적 오차에 의한 변동 성분을 억제할 수 있으며, (c)는 공간적인 평균을 취하게 되면, 계산 횟수를 나타내는 에너지속수 N 을 10,000 정도로 하면 충분하며, 이 이상으로 계산 횟수를 증가시켜도, 공간적인 평균을 취한 계산 결과에는 거의 차이가 없다는 것을 나타내고 있다. 이러한 결과를 이용하면 몬테 카를로 법을 사용할 때 항상 문제가 되는 계산 시간을 크게 단축할 수 있을 것으로 생각된다.

복사 열전달의 계산에서 가장 중요한 역할을 하는 화염 내의 흡수 계수의 값은 매연 농도에 의한 흡수 계수와 연소 가스 성분 중 수증기와 이산화탄소에 의한 흡수 계수의 두 가지에 의하여 결정이 된다. 그런데 Fig.15에서 보면 이러한 연소 가스의 흡수 계수는 매연 입자에 의한 흡수 계수에 비해 상당히 작은 값을 가지므로, 매연의 농도가 아주 낮은 화염의 후류부 등을 제외하고는 매연 농도가 상대적으로 높은 휘염의 경우에는 수증기와 이산화탄소에 의한 흡수 계수는 무시할 수 있다.

Fig.16은 화염으로부터의 복사 열전달에 의한 복사 열손실과 화염내 체적의 복사 에너지의 흡수량을 비교한 그림으로, 화염 내에서의 복사 에너지의 방출량은 흡수량에 비하여 매우 큰 것을 알 수 있다. 이러한 사실은 본 연구의 복사 열전달의 해석 방법에서 제시한 가정을 뒷받침하며, 계산에서 매우 중요한 의미를 가진다. 즉, 화염 내부에서 일단 방출된 복사 에너지가 화염 내에서 재흡수되는 비율이 충분히 적다면, 에너지 방정식의 해를 구할 때, 복사 열전달의 흡수항을 무시하여 일단 온도 분포 등을 구하고, 이로부터 구해진 매연 및 화학

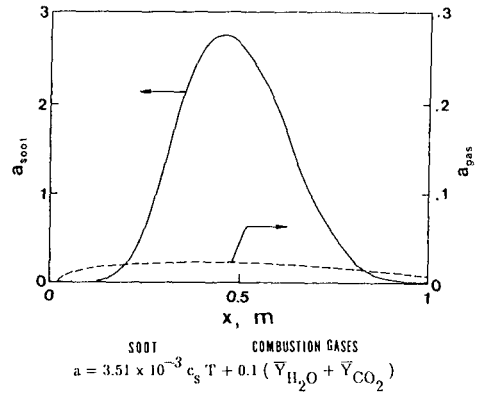


Fig. 15 Comparison of absorption coefficients due to soot particles and molecular gases on the axis of the flame

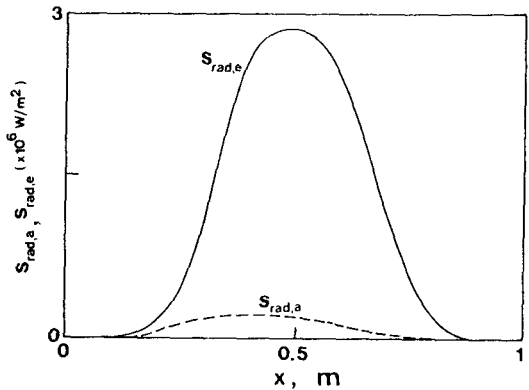


Fig. 16 Comparisons of the emission and absorption rates of radiative energy on the axis of the flame

종의 농도 분포를 이용하여, 복사 열전달의 흡수를 포함시켜 복사 열전달을 해석하고, 새로운 온도 분포를 구하는 방법을 사용할 수 있다.

9. 결 론

본 연구에서는 난류 화염에서의 매연 생성 속도에 대한 모델을 고정하고, 매연 입자의 재연소 속도에 대한 모델을 검토하였다. 난류 지배 방정식의 해법은 유동 함수를 이용하는 GENMIX 형의 해석 방법을 도입하였고, 난류 모델로는 Prandtl의 mixing length 모델을, 난류 연소 모델로는 eddy breakup 모델을 이용하였다. 난류 화염에서의 매연의 생성 속도 모델은 참고문헌 (2)에서 제시한 매연 생성 모델을 그대로 이용하여 매연 생성 속도를

구하였다. 한편, 매연의 연소 모델로는 참고 문헌 (2)에서 사용한 EBU 매연 입자 연소 속도 모델과, 화학 반응을 고려한 새로운 kinetic 매연 입자 연소 모델을 매연 입자의 표면 반응 속도식으로부터 유도하여 제시하고, 이를 검토하였다. 복사 열전달의 해석 방법은 몬테카를로 법을 수정하여 수렴 속도를 높인 해석 방법을 개발하고, 이를 사용하여 복사 열전달의 계산과, 에너지 방정식의 해를 구하였다.

이상의 연구로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 화염 하류의 외측 부분은 공기의 유입이 심하여 중심부에 비하여 온도가 상대적으로 낮아 화학 반응의 속도가 비교적 작아지는 영역으로, 이러한 영역에 있어서는 EBU 모델에 의해 단순한 난류 혼합의 속도에 의하여 결정되는 매연의 연소 속도는 실제에 비하여 상당히 크게 예측되는 것으로 생각되며, 따라서 이러한 영역에서 보다 정확한 매연의 연소 속도의 예측을 위해서는 입자가 재연소되는 속도에 대한 화학 반응의 영향을 고려한 모델의 사용이 필요하며, 층류 화염에서의 매연 입자의 연소 속도를 나타냈던 식 (3)의 매연 입자의 표면 반응 속도식을 이용하여, 이를 매연 농도에 대한 식인 식 (4)로 변환하여 이를 난류 화염 내에서의 매연 입자의 재연소의 속도를 나타내는 식으로 사용하고, 매연 입자의 표면 반응에 의해 화학 반응을 고려하는 kinetic 모델(좌측)에 의한 결과와 EBU 모델(우측)에 의한 결과를 비교하면, 매연 입자의 연소 속도가 매연 입자의 생성 속도에 비하여 상대적으로 작은 영역인 버너 노즐 부근으로부터 $x=400\text{mm}$ 까지의 구간에서는 두 모델의 계산 결과에 거의 차이가 없으나, 화염의 후류 방향으로 진행함에 따라, 화염의 외측으로부터 EBU 모델에 의한 계산 결과보다 매연 입자의 표면 연소 속도를 고려한 모델이 실험 결과와 잘 부합되고 있다.

(2) 화염 구조의 예측에 있어서 복사 열전달의 영향은 상당히 크며, 복사 열전달을 고려한 계산 결과를 이를 무시한 계산 결과와 비교하면, 축 방향 속도 u 는 거의 차이가 없으나, 온도 분포 T 는 화염의 후류부에서 크게 차이가 나서, 최대 300°C 의 차이를 보이고 있으며, 매연 농도의 분포 c_s 에도 큰 차이를 나타내고 있다.

(3) 복사 열전달에 의한 해석 결과로 얻어지는 복사 열유속(radiative heat flux)에 대해 공간적으로 평균을 취하지 않은 계산치는, 화염의 축 방향의

위치에 따라 복사 열유속(radiative heat flux)의 변동이 매우 심하며, 이러한 결과는 몬테 카를로 법 특유의 통계적 오차(statistical error)에 의한 것으로 생각된다. 계산 횟수를 증가시켜도 이러한 통계적 오차는 크게 감소하지 않는데, 이렇게 변동이 심한 결과를 공간적인 평균을 취하여 얻어지는 열유속의 평균치는 계산 횟수를 나타내는 변수인 총에너지속 수 N 을 10,000개 이상으로 하면 계산 회수의 증가의 영향이 크지 않으며, 따라서 몬테 카를로 법에 있어서의 계산 시간을 단축할 수 있을 것이다.

(4) 화염 내에서의 복사 에너지의 방출에 비해 복사 에너지의 흡수량은 상대적으로 작으므로, 복잡한 다중 적분의 형태로 되어 있는 복사 에너지의 흡수량에 관한 적분식을 에너지 방정식에서 분리하여 무시하고 에너지 방정식을 풀어 온도 분포를 일단 구하고, 이를 이용하여 흡수를 포함한 복사 열전달의 해석을 수행하여 복사 열유속과 새로운 온도 분포를 다시 구하는 방법을 사용하여, 화염에서의 복사 열전달을 포함한 해석을 할 수 있다.

본 논문에서 제시하는 매연 입자의 표면 연소 속도를 고려한 모델이 EBU 모델에 의한 계산 결과보다 실험 결과와 잘 부합되고 있다. 그러나, 화학 반응을 고려한 연소 모델을 적용한 계산 결과를 살펴 보면, 실험에서는 화염 말단에서 매연이 거의 존재하지 않는 것과는 달리 약간의 매연 입자가 존재하는 것으로 예측하는 문제점을 나타내고 있다. 이것은 매연의 연소 속도가 매연 입자의 표면 반응에 의한 연소 속도와 eddy의 breakup에 의한 연소 속도의 두 가지 성분으로 이루어져 있으며, 이 두 가지 중 어느 쪽의 연소 속도에 어떻게 지배를 받는가의 문제는 추후 계속적인 연구가 필요할 것으로 생각된다.

참 고 문 헌

- (1) Haynes, B.S. and Wagner, H.Gg., 1981, "Soot Formation", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 7, pp. 229~273.
- (2) Jongsoo Jung, Hyun-Dong Shin, and Chun Sik Lee, 1988, "Predictions of Structure with Soot Concentration of Propane-Air Turbulent Flames", Journal of the Institute of Energy, Vol. 61, No. 449, pp. 155~163.
- (3) Magnussen, B.F., 1971, "The Rate of Combustion

- of Soot in Turbulent Flames”, Thirteenth Symposium(Int.) on Combustion, pp. 869~877.
- (4) Abbas, A.S. and Lockwood, F.C., 1985, “Note : Prediction of Soot Concentrations in Turbulent Diffusion Flames”, Journal of the Institute of Energy, pp. 112~115.
- (5) Tesner, P.A., Snegiriova, T.D., and Knorre, V.G., 1971, “Kinetics of Dispersed Carbon Formation”, Combustion and Flame, Vol. 17, pp. 253~260.
- (6) Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., 1977, “On the Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion”, Sixteenth Symposium(Int.) on Combustion, pp. 719~729.
- (7) Nagle, J. and Strickland-Constable, R.F., 1962, “Oxidation of Carbon Between 1000~2000°C”, Proceedings of the Fifth Conference on Carbon, pp. 154~164.
- (8) Launder, B.E. and Spalding, D.B., 1972, “Mathematical Models of Turbulence”, Academic Press.
- (9) Spalding, D.B., 1977, “Development of the Eddy-Break-up Model of Turbulent Combustion”, Sixteenth Symposium(Int.) on Combustion, pp. 1657~1663.
- (10) Selcuk, N., Siddall, R.G., and Beer, J.M., 1976, “Journal of the Institute of fuel (now Energy)”, Vol. 49.
- (11) Hottel, H.C. and Cohen, E.S., 1958, “Radiant Heat Exchange in a Gas-Filled Enclosure, Allowance of Nonuniformity of Gas Temperature”, AIChE J., Vol. 4, pp. 3~14.
- (12) Vercammen, H.J.A. and Froment, G.F., 1980, “An Improved Zone Method Using Monte Carlo Techniques for the Simulation of Radiation in Industrial Furnaces”, Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 23, pp. 329~337.
- (13) Hayasaka, Hiroshi, Kazuhiko Kudo, Hiroshi Taniguchi, Ichiro Nakamachi, Toshiaki Omori, and Takao Katayama, 1986, “Radiative Heat Transfer Analysis by the Radiative Heat Ray Method”, 일본가계학회논문집(B편), Vol. 52, No. 476, pp. 1734~1740.
- (14) 최항준, 1983, 프로판-공기 난류 분류 확산 화염에서 매연 생성에 관한 연구”, M.S. Thesis, 한국과학기술원.
- (15) Nishida, O., 연소연구(일), 1982, Combustion Society of Japan, Vol. 59, pp. 54~67.
- (16) 정종수, 1989, 축대칭 난류 확산 화염에서의 매연 농도 및 화염 구조 예측에 관한 연구”, Ph.D. Thesis, 한국과학기술원.
- (17) Spalding, D.B., 1977, GENMIX : A General Computer Program for Two-Dimensional Parabolic Phenomena, Pergamon Press, Oxford.