

〈論 文〉

수소 예혼합기의 정상 및 이상연소에 관한 수치해석

손채훈\* · 정석호\*\*

(1994년 10월 31일 접수)

A Numerical Study on Normal and Abnormal Combustion  
in Hydrogen Premixture

Chae-Hoon Sohn and Suk-Ho Chung

**Key Words :** Ignition Energy(점화에너지), Flame Propagation(화염전파), Deflagration Wave(정상 연소파), Blast Wave(블라스트파), Detonation Wave(데토네이션파)

Abstract

Characteristics of the flame propagation for normal and abnormal combustion in hydrogen premixture in a cylindrical constant-volume combustion chamber are studied numerically. A detailed hydrogen oxidation kinetic mechanism, mixture transport properties and a model describing spark ignition process are used. The calculated pressure-time history of the stable deflagration wave propagation agrees well with the experiment. The ignition of the premixture in the unburned gas, initiated by the hot spot, causes a transition from deflagration to detonation under some initial temperature and pressure. Under the initial conditions with high temperature and pressure, excessive ignition energy initiates a strong blast wave and a detonation wave that follows. The chemical reaction in the detonation wave is much more vigorous than that in the deflagration wave and the peak pressure in the detonation wave is much higher than the equilibrium value.

기 호 설 명

$A_k$  :  $k$ -반응단계의 pre-exponential factor

$b_k$  :  $k$ -반응단계의 온도지수

$E_{ig}$  : 점화에너지

$E_k$  :  $k$ -반응단계의 활성화에너지

$h$  : 혼합물의 비엔탈피

$k_k$  :  $k$ -반응단계의 반응률상수

$\bar{M}$  : 혼합물의 분자량

$p$  : 압력

$p_i$  : 초기압력

$r$  : 반경방향좌표

$\bar{R}$  : 일반기체상수

$R_0$  : 연소실 중심에서 외벽까지의 거리

$S_u$  : 연소속도

$t$  : 시간

$T$  : 온도

$T_{eq}$  : 평형온도

$T_i$  : 초기온도

$u$  : 속도

$x$  :  $x$ 방향좌표

$Y_j$  :  $j$ -화학종의 질량분율

그리스문자

$\rho$  : 밀도

\*서울대학교 대학원

\*\*정회원, 서울대학교 기계공학과

$\phi$  : 당량비

### 1. 서 론

탄화수소계 연료는 자원고갈과 이산화탄소, 대기 오염 등의 환경문제와 연관되어 최근 많은 문제점이 제기되고 있다. 이에 따라 대체연료로서 메탄올, 천연가스, 수소 등에 관심이 제고되고 있으며, 특히 수소는 청정연료로서 주목받고 있다. 따라서 수소의 연소특성을 파악하는 것은 중요한 일이며 이와 관련한 연구가 널리 수행되고 있다.

전기점화기관에서 점화시기 및 연소시간 결정에 사용되는 인자인 화염전파속도(또는 연소속도)는 그동안 여러 연구자들에 의해 다양한 실험 혹은 수치계산에 의해 측정되었다. Kooker<sup>(1)</sup>는 고정된 격자계를 사용하여 오존/산소 화염전파를 수치적으로 예측하였고 이웅건<sup>(2)</sup>은 원통형 정적 연소실내에서의 전기점화에 의한 수소/공기 예혼합 화염의 전파를 가시화하고 화염진행에 따른 압력 변화 과정을 측정하였다.

정상(normal) 연소과정에 대한 연구 이외에 연소실 내에서의 이상(abnormal)연소현상에 대한 연구도 여러 연구자들이 수행하였다. Goyal 등<sup>(3)</sup>은 무한평판 형상에서 여러가지 불균등한 온도분포와 압력, 당량비에 대하여 열점(hot spot) 점화 현상을 모사하여 특정 초기조건에서는 강한 압력파가 형성되어 deflagration-to-detonation transition(DDT)이 발생함을 보였으며 Lee<sup>(4)</sup>는 기체상 연료의 DDT 방식 및 직접형성(direct initiation of detonation; DID)방식에 의한 데토네이션 형성 메카니즘을 밝히고 데토네이션 형성을 위한 임계조건을 구하였다. Clarke 등<sup>(5)</sup>은 벽면을 통하여 에너지를 공급하는 경우 충격파가 발생하여 평면 데토네이션파로 천이되어가는 과정을 가상의 연료에 대한 단일 화학반응을 고려하여 수치적으로 연구하였다.

본 연구는 위와 같은 기존의 연구를 바탕으로 전기점화기관에서 산소 및 공기와 예혼합된 수소의 연소 특성을 파악하기 위하여 실린더형의 연소실을 모델로 하여 연소실 내에서 발생하는 정상화염전파 및 이상연소현상을 모사할수 있는 수치해석 코드를 만들고 이를 이용하여 정상연소 및 이상연소과정에서의 연소속도, 화염구조 등을 계산하고 그 결과를 비교, 분석하였다.

### 2. 지배방정식과 경계조건

내연기관 연소실내의 연소과정은 운동량전달, 물질전달, 에너지전달과 같은 전달현상 및 복잡한 화학반응이 복합적으로 관련되어 있는 현상으로서 이를 모사하기 위해서는 질량, 운동량, 에너지, 화학종에 대한 보존식과 이상기체상태 방정식을 서로 연립하여 풀어야 한다. 본 연구에서는 연소실 형상을 원통형 정적 연소실로 단순화하여 해석하였는데 이 경우 반경 방향 좌표와 시간이 독립변수가 되며 미분방정식은 비정상 일차원 포물선형 Navier-Stokes방정식 형태를 갖게 된다. 종속 변수는 밀도( $\rho$ ), 속도( $u$ ), 온도( $T$ ), 압력( $p$ ), 고려한 화학종의 질량분율( $Y_j$ )들이며 사용한 지배방정식은 다음과 같다.

연속방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^a} \frac{\partial (r^a \rho u)}{\partial r} = 0 \tag{1}$$

운동량방정식

$$\rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^a} \frac{\partial (r^a \tau_{rr})}{\partial r} - \frac{\alpha}{r} \tau_{\theta\theta} + \frac{\partial p}{\partial r} = 0 \tag{2}$$

에너지 방정식

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u \frac{\partial h}{\partial r} - \frac{1}{r^a} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^a \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\ + \frac{1}{r^a} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^a \rho \sum_{j=1}^{n_s} h_j Y_j V_j \right) \\ - \frac{\partial p}{\partial t} - u \frac{\partial p}{\partial r} + \tau_{rr} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\alpha u}{r} \tau_{\theta\theta} = \dot{q} \end{aligned} \tag{3}$$

화학종 방정식

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_j}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_j}{\partial r} + \frac{1}{r^a} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^a \rho Y_j V_j \right) = \dot{\omega}_j M_j \\ j=1, \dots, n_s \end{aligned} \tag{4}$$

상태방정식

$$p = \rho \bar{R} T / \bar{M} \tag{5}$$

$$\tau_{rr} = -\mu \left\{ 2 \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{2}{3} \left( \frac{1}{r^a} \frac{\partial (r^a u)}{\partial r} \right) \right\} \tag{6a}$$

$$\tau_{\theta\theta} = -\mu \left\{ 2 \frac{u}{r} - \frac{2}{3} \left( \frac{1}{r^a} \frac{\partial (r^a u)}{\partial r} \right) \right\} \tag{6b}$$

여기서,  $r$ 은 원통 및 구형좌표계에서의 반경, 직교좌표계에서는  $x$ 축을 표시하며  $a$ 는 기하학적 상수로서 직교, 원통 및 구형좌표계의 경우 각각 0, 1 및 2이다.  $\mu$ 는 혼합물의 점성계수,  $\lambda$ 는 혼합물의 열전도도,  $h$ 는 혼합물의 비엔탈피,  $n_s$ 는 고려

한 화학종의 수,  $V_j$ 는  $j$ -화학종의 확산속도,  $\dot{q}$ 는 에너지소스항,  $\omega_j$ 는  $j$ -화학종의 순생성률,  $\bar{R}$ 은 일반기체상수,  $\bar{M}$ 는 혼합물의 평균분자량,  $\tau_{rr}$ ,  $\tau_{\theta\theta}$ 는 각각 반경방향, 횡방향응력이다.

실린더 축을 따라서 대칭이라는 조건과 연소실 벽면에서 벽면이 비축매, 단열이며 불투과 벽이라는 가정을 사용하면 다음의 경계조건을 얻는다.

$$r=0; \frac{\partial \rho}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_j}{\partial r} = 0, u=0 \quad (7a)$$

$$r=R_0; \frac{\partial \rho}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial Y_j}{\partial r} = 0, u=0 \quad (7b)$$

초기조건에 대해서는, 연료/공기 혼합물은 초기에 정지상태로서 공간적으로 균질하고 등온이며 반응물만 존재한다고 가정하였다.

열점평화를 모델링하기 위하여 사용한 초기온도 분포는 아래와 같다.<sup>(3)</sup>

$$T(r, t=0) = T_i + \Delta T \exp\left\{-\left(\frac{r-r_m}{r_h}\right)^{2\nu}\right\} \quad (8)$$

여기서,  $r_h$ 는 열점의 반경,  $r_m$ 은 열점핵의 위치,  $\Delta T$ 는 열점과 주위와의 최대 온도차를 나타내며  $\nu$ 는 곡선모양을 결정하는 계수로서 이 값이 1인 경우는 Gauss분포 곡선을 나타낸다.

전기점화기관에서의 스파크 점화를 모델링하기 위하여는 에너지 소스항을 에너지 보존식을 나타내는 지배방정식의 우변에 도입하였으며 다음과 같은 함수형태를 갖는다.<sup>(6)</sup>

$$0 \leq t \leq \tau_s; \dot{q} = \frac{D_s}{\tau_s} \exp\left\{-\left(\frac{r}{r_s}\right)^\nu\right\} \quad (9)$$

$$t > \tau_s; \dot{q} = 0$$

여기서,  $D_s$ 는 소스에너지를 밀도,  $\tau_s$ 는 에너지가 가해지는 시간,  $r_s$ 는 에너지소스의 반경을 나타낸다.

### 3. 수치해법

지배방정식은 편미분방정식들로 구성되어 있으며 경계 및 초기조건을 이용하여 해석할 수 있는데 이 방정식계를 효율적으로 풀기 위하여 다음과 같은 기법을 도입하였다.

각 독립변수들의 보존성을 엄격히 만족시킬 수 있도록 유한체적법(finite volume method)을 사용하여 차분화하였으며 시간에 대한 적분처리에 있어서 현시법(explicit method), 크랭크-니콜슨법(Crank-

Nicolson method), 암시법(implicit method)을 선택적으로 사용할 수 있도록 하였다. 따라서 이산화된 대수방정식들은 공간에 대하여  $O(\Delta r)^2$ , 시간에 대하여  $O(\Delta t) \sim O(\Delta t)^2$ 의 정확도를 갖게 된다. 계산수행시 주로 크랭크-니콜슨법과 암시법을 사용하였다.

데토네이션파가 발생하는 이상연소의 경우 확산 전달 과정보다 대류항이 우세하여 운동에너지를 무시할 수 없으므로 지배방정식의 이산화과정에서 Pecklet수를 고려하여 대류항을 처리하였다.

정상연소의 경우 문제가 되지 않으나 충격파가 존재하는 데토네이션 문제를 푸는 경우 수치적 불안정성 문제가 나타날 수 있다. 본 연구에서 사용한 격자계로 수  $\mu\text{m}$  정도의 두께를 갖는 충격파를 풀기엔 불가능하며, 결과적으로 해로 얻은 속도, 온도, 압력의 값이 충격파면에서 진동하는 현상이 발생한다. 이러한 문제를 해결하기 위하여 소산효과를 갖는 인공 점성항(artificial viscosity)을 지배방정식의 압력구배항에 추가하는 방법을 사용하였다.<sup>(7)</sup> 인공점성항을 사용하면 수치확산(numerical diffusion)이 존재하여 해의 변화가 완만해지므로 충격파면의 모양은 변하지만, 충격파의 전파 및 파면 전후의 조건은 별 영향을 받지 않는다고 알려져 있다. 본 연구에서 충격파면의 모양은 관심사가 아니다. 이처럼 인공 점성항 사용으로 나타나는 수치확산을 이용하여 충격파를 몇개의 격자점에 분포시키고 수치적 진동을 피하는 것이 인공 점성항 사용의 목적이다. 인공 점성항의 크기는, 해를 크게 왜곡시키지 않고 수치진동이 일어나지 않는 범위 내에서 결정하였다. 화학반응 측면에서, 충격파면에서의 열방출률(또는 화학반응률)은 미미하므로, 화학종들의 질량분율은 충격파에 의해 직접적인 영향을 받지 않는다. 따라서 화학종 방정식에는 인공 점성항을 도입하지 않았다.

이산화된 비선형 대수방정식들을 각각 순차적으로 풀지 않고 식(10)과 같은 알고리즘의 뉴턴방정식을 이용하여 한꺼번에 풀도록 하였으며, 모든 방정식에 대한 수렴된 해를 얻도록 반복 계산하였다.

$$J(\phi^i)(\phi^{i+1} - \phi^i) = -\omega_i F(\phi^i) \quad (10)$$

여기서,  $\phi^i$ 는  $i$ 번째 뉴턴 반복후의 해를 나타내는 벡터,  $F(\phi^i)$ 는 이산화로 구해진 대수 방정식에 대한 잉여 벡터이며  $\omega_i$ 와  $J(\phi^i)$ 는 각각 이때의 감쇠 매개변수(damping parameter) 및 Jacobian 행렬이

다. 이와 같은 뉴턴방법을 사용하는 경우 수렴반경이 작으므로 해의 변화가 급격하지 않도록 시간간격을 작게 주었으며 계산에 필요한 Jacobian 행렬은 수치적으로 구하였다.

연소과정중에 존재하는 화학반응항의 강한 비선형성으로 수렴성이 좋지 않으므로 시간적분시 시간간격을 작게 하여 적분해 나갔으며 또한 연소실의 크기, 화염두께, 압력파의 두께가 서로 다른 특성 길이를 가지므로 해의 변화정도에 따라 불균등한

간격을 갖는 격자계를 구성하는 적응격자방법을 사용하였다. 정상연소의 경우 120~130개의 격자가 사용되었고, 이상연소의 경우에는 140~150개의 격자가 사용되었다.

지배방정식에 포함되어 있는 열역학적 물성치와 화학 반응항 및 전달 물성치의 평가를 위하여 각각 CHEMKIN-Ⅱ<sup>(8)</sup>와 TRANSPORT PACKAGE<sup>(9)</sup>를 이용하였다. 본 연구에서 고려한 화학반응 메카니즘 및 반응률에 대한 계수는 Table 1<sup>(6,10)</sup>에 나타내

Table 1 Kinetic mechanism of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> reaction system (A<sub>k</sub>: mole, cm<sup>3</sup>, sec; E<sub>k</sub>: kJ/mole)

No.	Reaction				A <sub>k</sub>	b <sub>k</sub>	E <sub>k</sub>
1	O <sub>2</sub>	+H	=	OH +O	2.00E+14	0.00	70.30
2	H <sub>2</sub>	+O	=	OH +H	5.06E+04	2.67	26.30
3	H <sub>2</sub>	+OH	=	H <sub>2</sub> O +H	1.00E+08	1.60	13.80
4	OH	+OH	=	H <sub>2</sub> O +O	1.50E+09	1.14	0.42
5	H	+H +M	=	H <sub>2</sub> +M	1.80E+18	-1.00	0.00
6	H	+OH +M	=	H <sub>2</sub> O +M	2.20E+22	-2.00	0.00
7	O	+O +M	=	O <sub>2</sub> +M	2.90E+17	-1.00	0.00
8	H	+O <sub>2</sub> +M	=	HO <sub>2</sub> +M	2.30E+18	-0.80	0.00
9	HO <sub>2</sub>	+H	=	OH +OH	1.50E+14	0.00	4.20
10	HO <sub>2</sub>	+H	=	H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	2.50E+13	0.00	2.90
11	HO <sub>2</sub>	+H	=	H <sub>2</sub> O +O	3.00E+13	0.00	7.20
12	HO <sub>2</sub>	+O	=	OH +O <sub>2</sub>	1.80E+13	0.00	-1.70
13	HO <sub>2</sub>	+OH	=	H <sub>2</sub> O +O <sub>2</sub>	6.00E+13	0.00	0.00
14	HO <sub>2</sub>	+HO <sub>2</sub>	⇒	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	2.50E+11	0.00	-5.20
15	OH	+OH +M	=	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M	3.25E+22	-2.00	0.00
16	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	+H	=	H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	1.70E+12	0.00	15.70
17	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	+H	=	H <sub>2</sub> O +OH	1.00E+13	0.00	15.00
18	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	+O	=	OH +HO <sub>2</sub>	2.80E+13	0.00	26.80
19	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	+OH	=	H <sub>2</sub> O +HO <sub>2</sub>	5.40E+12	0.00	4.20
20	O	+N <sub>2</sub>	=	N +NO	1.90E+14	0.00	319.03
21	O	+NO	=	N +O <sub>2</sub>	2.40E+09	1.00	161.67
22	H	+NO	=	N +OH	1.30E+14	0.00	205.85
23	NO	+HO <sub>2</sub>	=	NO <sub>2</sub> +OH	3.00E+12	0.50	10.04
24	NO	+OH	=	NO <sub>2</sub> +H	5.90E+12	0.00	129.49

있으며 여기서,  $k$ -반응단계에서의 반응률상수  $k_k$ 는 다음의 Arrhenius 형태의 식으로 표현된다.

$$k_k = A_k T^{b_k} \exp(-E_k / \bar{R}T) \quad (11)$$

### 4. 결과 및 검토

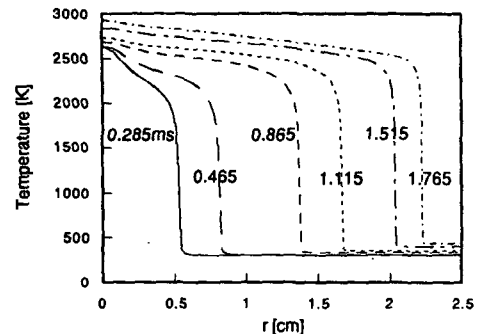
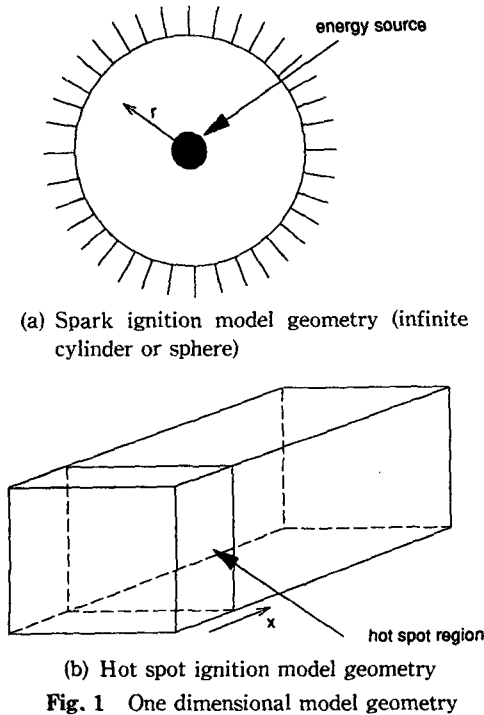
본 연구에서는 수소/산소가 당량비 1.0, 수소/공기가 당량비 1.0, 0.8, 0.6으로 예혼합되어 있는 조건하에서 계산을 수행하였으며 계산모델의 기하학적 형상을 Fig. 1에 나타내었다. 수소 예혼합물이 전극점화에 의해 최소 점화에너지 이상의 에너지를 얻어 점화가 개시되면 화염면이 미연가스로 전파되어 나간다.

#### 4.1 정상연소 특성

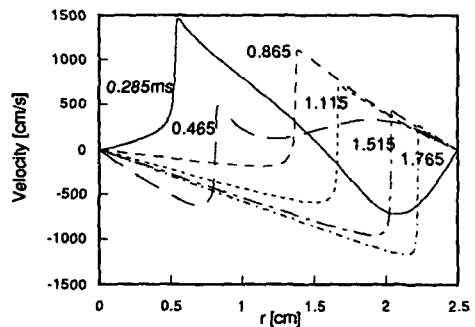
당량비 1.0의 수소/공기 혼합기( $T_i=298.15$  K,  $p_i=1$  atm,  $R_o=2.5$  cm)에서, 정상연소의 경우 점화과정 초기에 압력파와 화염면이 분리되며, 단 시간내에 연소실내의 압력은 균등해지며 이후에도 압력의 공간적 변화는 미소하고 시간에 따라 화염 전파에 의해 미연가스가 압축되므로 미연가스의 압력과 온도가 상승한다. Fig. 2에 계산결과로서 시간

에 따른 온도 및 속도분포를 나타내었다. 초기 점화과정의 영향이 온도, 속도분포에 영향을 미치며 ( $t < 0.5$  ms) 이후 안정적인 연소파가 진행되는데 속도분포의 경우 화염에서 발생하는 가스팽창에 의해 기연지역은 내부로, 미연지역은 외부로 각각 유동이 형성된다.

정적 연소실의 경우 압력-시간 곡선이 중요한 관심사이므로 실험자료<sup>(2)</sup>와 수치해석결과를 Fig. 3(a)에 비교하였는데 압력-시간곡선에서 실험상의 최대압력과 최대압력 도달시간은 수치해석결과와 비교적 잘 일치하고 있으나, 최대압력이 낮고 도달시간이 긴 것은 연소실 측면으로의 열손실에 기인한 결과로 유추된다. 계산결과로부터 시간에 따른 화염 전파속도를 Fig. 3(b)에 나타내었다. 여기서 화염의 위치는 수소이온 농도가 최대인 지점으로 정하였으며 그림에서 보듯이 화염전파속도는 진동을 하면서 미연가스의 온도와 압력이 상승함에 따라 평균적으로 증가한다. 기존의 결과에 따르면 298.15 K, 1 기압에서 당량비 1인 수소/공기 예혼합화염의 전파

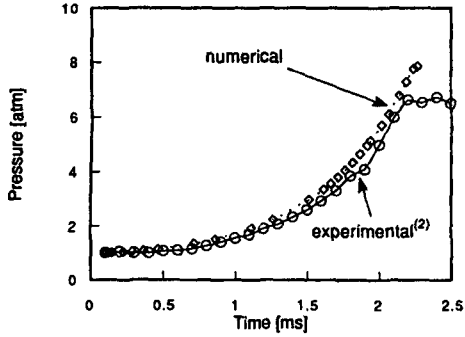


(a) Temperature profiles

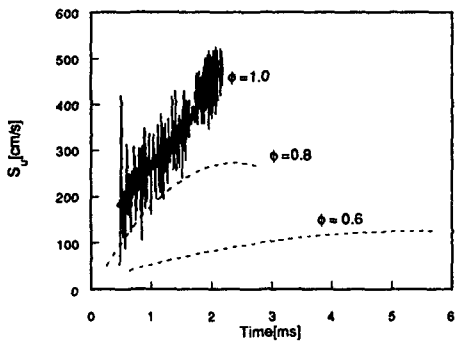


(b) Velocity profiles

Fig. 2 Temperature and velocity profiles for deflagration wave propagation ( $T_i=298.15$  K,  $p_i=1$  atm, stoichiometric  $H_2$ /air mixture)



(a) Pressure vs. time curve



(b) Burning velocity (solid line; numerical data, dashed line; curve fitting)

Fig. 3 Pressure vs. time curve and burning velocity for deflagration wave propagation ( $T_1=298.15$  K,  $p_1=1$  atm, stoichiometric  $H_2$ /air mixture)

속도는 약 230 cm/s 정도이다. 계산결과 초기온도 298.15 K, 초기압력 1기압에서 당량비 1인 수소/공기 예혼합화염은 화염이 전파함에 따라 화염전파속도가 200 내지 500 cm/s에 이를 정도로 빠르게 전파하고 있다. 일반적인 탄화수소의 경우 층류화염 전파속도는 40 내지 100 cm/s 정도이므로 기존의 내연기관에서 수소를 연료로 사용하는 경우 희박연소가 타당할 것으로 판단된다. 전파초기의 화염전파속도는 기존의 결과에 비하여 약간 낮았는데 이는 평면 화염과 달리 원통형 화염이 갖고 있는 곡률효과 때문이다. 즉 전파초기의 상대적으로 큰, 미연가스쪽으로 볼록한 곡률(또는 양의 스트레치)로 평면 화염전파속도보다 낮은 속도로 전파하게 된다. 이와 반면에 확산효과 측면으로 볼때, 수소의 경우 질량확산율이 열확산율보다 커서 현재와 같은 곡률을 가진 화염의 경우 항상 평면화염보다 빠른 속도로 전파하게 되는데 이 효과는 곡률효과

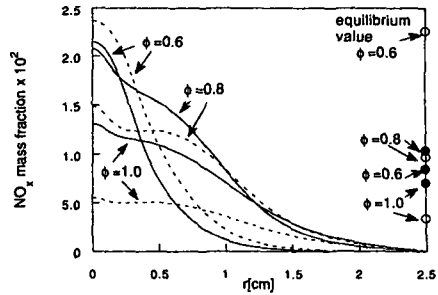


Fig. 4  $NO_x$  mass fraction profiles for deflagration wave propagation ( $T_1=298.15$  K,  $p_1=1$  atm,  $H_2$ /air mixture, solid line and circle; NO, dashed line and void circle;  $NO_2 \times 1000$ )

보다 화염전파속도에 적은 영향을 미친다고 유추된다.

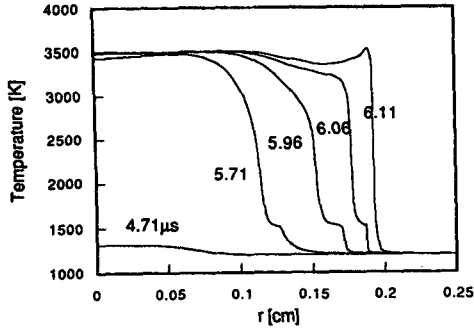
수소연료의 연소에 의해 발생하는 유해 배출물인  $NO_x$ 의 분포를 Fig. 4에 나타내었다. 이는 당량비 1.0, 0.8, 0.6에 대해 화염이 맞은 편에 도달한 시점(각각 약 2.2 ms, 3.0 ms, 6.2 ms)에서의  $NO_x$  분포이며 어느 당량비에서나 중심부에서의  $NO_x$  질량분율은 평형값을 초과하였고 당량비 0.8인 경우 중심부의  $NO_x$  질량분율은 당량비 1.0일 때보다 많았으나 당량비 0.6인 경우에는 잔류시간이 더 길지만 기연가스 온도의 감소로 인하여 당량비 0.8인 경우에 비해 그 다지 크게 증가하지는 않았다.

## 4.2 이상연소 특성

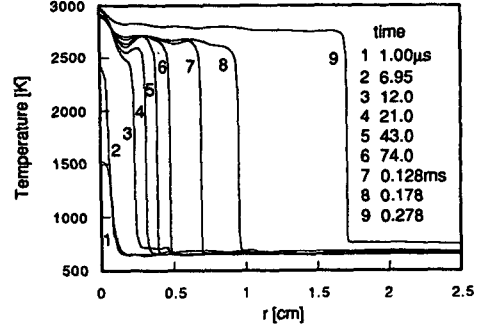
수소 예혼합물의 연소과정에서 발생하는 이상연소현상으로는 미연가스의 자발화 및 데토네이션 형성에 의한 노킹현상이 있으며 이는 연소 안전성과 관련되어 있다.

### 4.2.1 미연가스 자발화

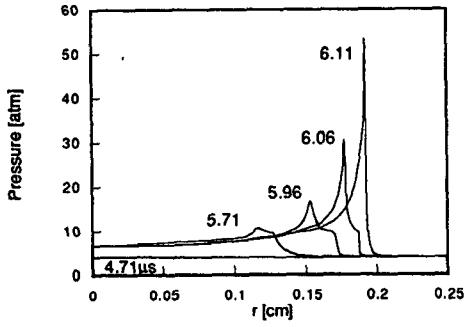
미연가스의 자발화현상은 정상적으로 화염이 도달하기 이전에 미연가스에서 점화가 일어나는 현상이므로, 계산결과에 의하면 미연가스에 존재하는 열점은 주위보다 고온이므로 먼저 점화가 일어나게 되고 이로 인해 압력파가 발생하며 이 압력파의 강도에 따라 주위 수소 예혼합기의 압력과 전파 현상이 달라진다. 즉, 압력파의 강도가 약한 경우 주위 혼합물에 미치는 압축효과는 미약하며 결과적으로 연소파와 분리되어 앞서 전파하며, 강한 압력파는 주위 혼합물을 압축시켜 온도를 상승시키므로 미연가스의 점화지연시간이 짧아져서 자발적인 연



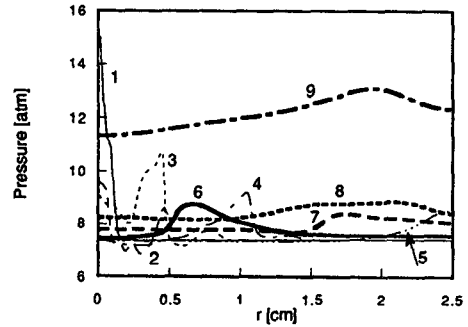
(a) Temperature profiles



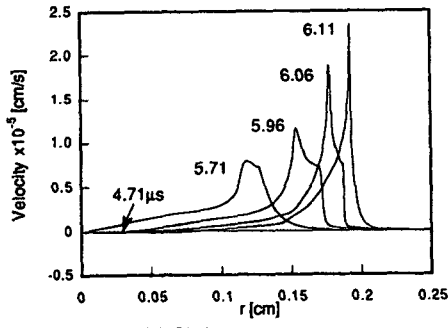
(a) Temperature profiles



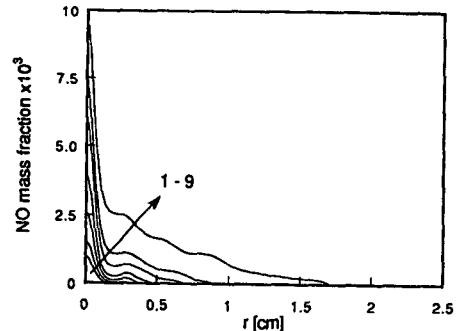
(b) Pressure profiles



(b) Pressure profiles



(c) Velocity profiles



(c) NO mass fraction profiles

Fig. 5 Hot spot ignition process ( $p_1=4$  atm, stoichiometric  $H_2/O_2$  mixture)

Fig. 6 Calculation results for deflagration wave propagation ( $T_1=650$  k,  $p_1=7.5$  atm,  $E_{1g}=50$  mJ/cm)

소가 일어나고 화염과 압력파는 서로 상호 작용을 하며 쌍을 이루어 전파한다. Fig. 5는 직교좌표계에서 당량비 1인 수소/산소 혼합물에 대해 주위의 온도와 압력이 1200 K, 4기압이고 열점이 주위보다 50 K 높은 경우의 계산결과( $R_o=0.42$  cm,  $r_h=0.08$  cm,  $r_m=0$  cm)로서 데토네이션이 확립되어가는 과정을 보여주고 있다.

#### 4.2.2 직접적인 데토네이션 형성

대부분의 연료/산소 혼합물은 데토네이션현상을

일으킬 수 있으며 데토네이션이 형성되는 두가지 방식은 화염 가속에 의한 DDT 방식과 강한 점화기에 의한 직접적인 형성 방식(DID)이 있다. 내연기관의 경우 연소실 크기의 한계성으로 인해 일반적인 연소실내에서 DDT가 일어나기는 어렵지만 점화기가 공급하는 에너지 및 파워에 따라 직접적으로 데토네이션이 개시되는 현상(DID)이 일어난

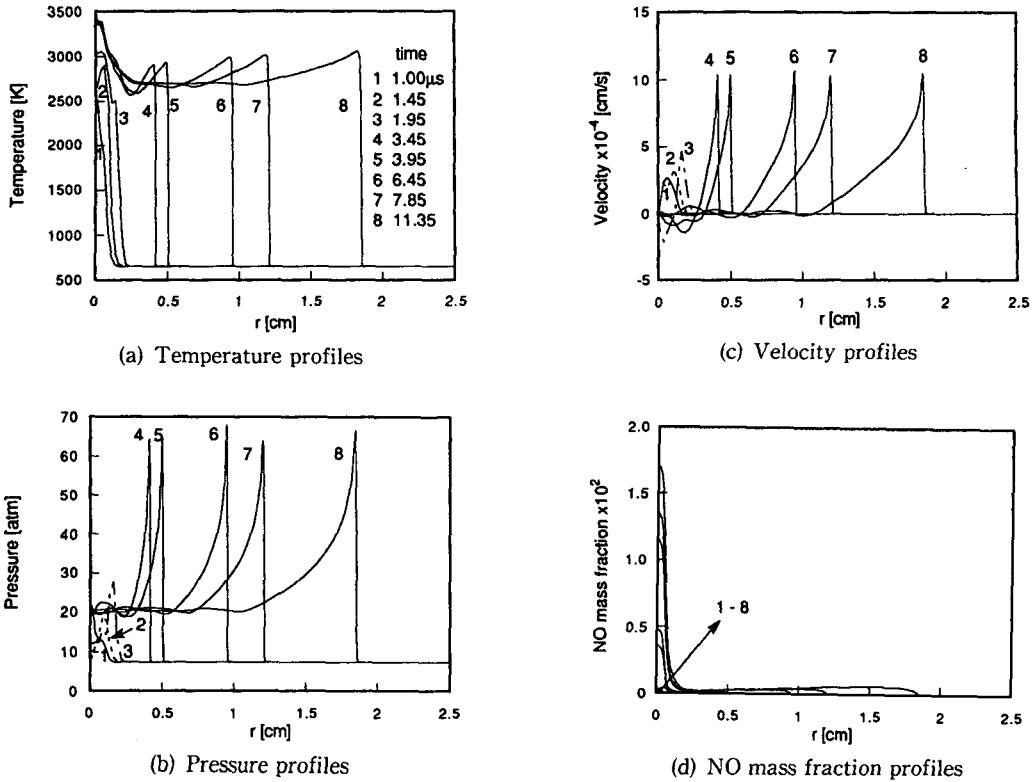


Fig. 7 Calculation results for detonation wave propagation ( $T_1=650$  k,  $p_1=7.5$  atm,  $E_{ig}=80$  mJ/cm)

가능성은 존재한다.

본 연구에서는 수치적 방법으로 수소/공기 혼합물에 대하여 DID 현상을 모사하였다. 이 경우 수치해를 구하는데 있어 정상연소의 경우에 비해 수렴성이 좋지 않았으며 계산시간각격 역시 화염 전파속도를 감안하여 작게 주어야만 발산하지 않고 적분을 진행시켜 나갈 수 있었다. 데토네이션이 발생하는 경우 극부적인 압력은 평형압력을 훨씬 초과하는 고압에 이르고 화염두께가 매우 얇아서 좁은 지역에 많은 격자가 분포되며 이에 따라 해의 수렴성 및 정확성에 영향을 미친다.

점화기에 의해 생성된 블라스트파의 압축효과가 DID 현상에서 중요한 역할을 하며 블라스트파의 강도를 좌우하는 것은 점화에너지와 파워이므로 안정적 연소를 위하여 이러한 인자들의 적절한 선택은 중요한 문제이다. 계산결과는 점화에너지에 따라 점화 후의 화염전파현상이 판이하게 다름을 보여주었으며 이를 Figs. 6, 7에 나타내었다. 이것은 당량비 1.0에 대한 결과이며 Fig. 6은 정상 연소파 형성 및 전파를, Fig. 7은 데토네이션파의 형성 및

전파현상을 보여주는데 초기 온도 및 압력은 동일하며 공급한 점화에너지는 각각 50 mJ/cm, 80 mJ/cm이었다. Fig. 6(b)에서 보듯이 정상연소현상이 발생하는 경우 형성된 압력파의 극부적인 최대값은, Table 2에 나타낸 평형압력보다 작으며 펄스형태로서 점점 감쇠되며 전파한다. 이에 반하여 Fig. 7(b)의 경우는 극부 압력의 최대값이 평형 압력을 훨씬 상회함을 보여준다. 상온, 대기압에서의 정상연소파에 대한 속도분포인 Fig. 2(b)와 Fig. 7(c)에 나타낸 속도분포로부터, 정상 연소파의 경우에는 화염면 전후에서 가스가 팽창하여 화염으로부터 멀어져가지만, 데토네이션이 형성된 경우에는 화염면 뒤의 가스속도는 양의 값을 가지므로 압축파가 형성되며 화염면 부근은 극도로 큰 속도를 갖는데 여타의 부분은 작은 속도분포를 가지며 특히 미연가스의 속도는 화염이 도달할 때까지는 0에 가까와 진혀 화염에 의한 미연가스압축효과는 나타나지 않는다.

정상 및 이상연소의 NO<sub>x</sub> 분포를 나타내는 Fig. 6(c)와 Fig. 7(d)로부터 데토네이션 형성시에는



**Table 2** The wave type, equilibrium temperature and equilibrium pressure for different equivalence ratio, initial temperature, initial pressure and ignition energy

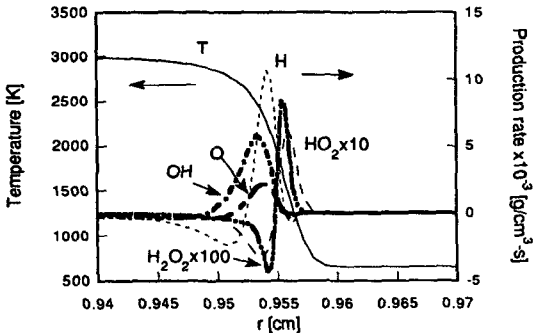
No.	$\phi$	$T_1$ [K]	$p_1$ [atm]	$E_{ig}$ [mJ/cm]	wave type	$T_{eq}$ [K]	$p_{eq}$ [atm]
1	1.0	950	10	20	Detonation	3075	28.4
2	1.0	950	10	30	Detonation	3075	28.4
3	1.0	950	10	50	Detonation	3075	28.4
4	1.0	650	15	100	Deflagration	3004	60.2
5	1.0	650	15	120	Detonation	3004	60.2
6	1.0	650	7.5	50	Deflagration	2962	29.8
7	1.0	650	7.5	80	Detonation	2962	29.8
8	0.8	700	20	200	Detonation	2827	71.1

중심부의 고온 고압상태로 인하여 NO량이 정상연소시보다 많으나 중심부에서 벗어난 지역에서는 반응 시간의 부족으로 NO량이 아주 미소하게 존재한다.

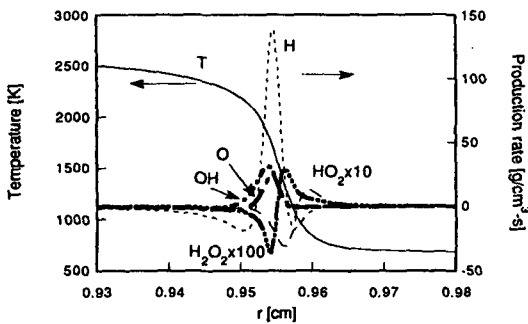
각 계산조건에서 특정 점화에너지를 가한 경우 데토네이션형성 여부 및 평형온도, 압력을 Table 2에 나타내었고 당량비 1에서의 각각의 초기조건에 대한 Chapman-Jouguet 데토네이션속도는 약 1960, 1990, 1970 m/s이며 연소속도는 이와 비교적 잘 일치하였다

Fig. 8에는 화학반응의 결과 생성되는 각 화학종의 생성률을 정상연소의 경우와 이상연소의 경우에 대해 나타내었다. 고온 생성물인 NO<sub>x</sub>를 제외한 나머지 화학종은 모두 화염 부근에서 대부분 생성되고 소모되며 이상연소의 경우 화학반응이 더욱 활발히 일어남을 알 수 있다.

DID가 발생하면 화염이 비정상적인 빠른 전파속도로 전파하며 더욱 심각한 문제는 높은 국부 압력을 가진 압력파가, 외벽에 부딪힌 후 약한 압력파

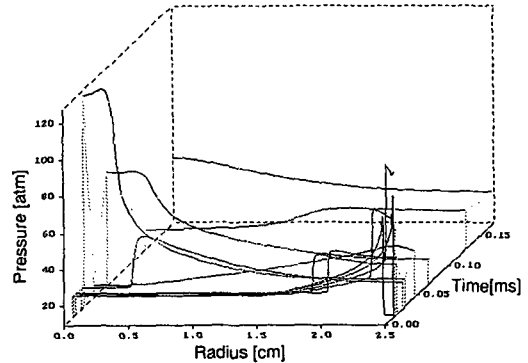


(a) Results for detonation wave ( $E_{ig}=80$  mJ/cm, time= $6.45 \mu s$ )



(b) Results for deflagration wave ( $E_{ig}=50$  mJ/cm, time= $178 \mu s$ )

**Fig. 8** Temperature profile and production rates ( $T_1=650$  K,  $p_1=7.5$  atm)



**Fig. 9** Pressure profiles after the flame reached the outer boundary ( $T_1=950$  k,  $p_1=10$  atm,  $E_{ig}=50$  mJ/cm)

로 감쇠될 때까지 연소실내를 여러번 왕복운동하며 벽에 기계적 손상을 일으키는 점이다. 이러한 압력과 왕복운동현상을 Fig. 9에 나타내었다. 왕복하는 과정에서 압력파의 강도는 점차 감소하나 상당한 시간동안 국부적으로 큰 압력상태를 유지한다.

## 5. 결 론

Navier-Stokes 방정식 형태의 일차원적 연소 모델을 사용하여 수소/산소, 수소/공기 예혼합화염의 연소현상을 수치 해석하였다. 정상연소, 열점점화, 직접적인 데토네이션형성 현상들을 다루어 다음의 결론을 얻었다.

수소연료의 연소를 위한 스파크점화시 점화에너지에 따라 다른 강도의 블라스트파가 발생하며, 점화로 인하여 약한 블라스트파가 형성된 경우에는 단시간내에 연소실내의 압력은 평형을 이루고 정상연소파가 형성되어 전파한다. 주위보다 고온인 열점은 화염도달 이전에 자발화를 일으키며 초기 온도, 압력상태에 따라 국부적인 데토네이션파를 야기할 수 있다. 점화로 인하여 강한 블라스트파가 형성된 경우 이 강한 블라스트파는 전면의 미연가스를 압축시켜 반응을 촉진시키며 계속 화염면과 상호 작용하면서 초음속으로 전파하는 데토네이션파를 형성시킬 가능성이 있다. 그러므로 수소연료를 예혼합상태에서 연소시킨다면 점화에너지를 주의하여 선택해야 하며 특히 고온 고압상태로 압축된 예혼합물은 점화지연시간 경과 후 폭발적인 반응으로 데토네이션이 발생할 가능성이 크므로 스파크 점화방식에 있어서 이러한 이상연소현상을 방지하도록 운전조건을 설정하여야 하겠다.

## 참고문헌

- (1) Kooker, D. E., 1978, "Transient Laminar Flame Propagation in Confined Premixed Gases: Numerical Predictions," *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, pp. 1329~1339.
- (2) 이웅건, 1993, "실린더형 정적 연소실내의 수

소 화염전파에 관한 실험적 연구," 석사학위논문, 서울대학교, 서울.

- (3) Goyal, G., Warnatz, J. and Maas, U., 1990, "Numerical Studies of Hot Spot Ignition in  $H_2O_2$  and  $CH_4$  Air Mixtures," *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, pp. 1767~1773.
- (4) Lee, J. H. S., 1977, "Initiation of Gaseous Detonation," *Annual Reviews of Physical Chemistry*, Vol. 28, pp. 75~104.
- (5) Clarke, J. F., Kassoy, D. R. and Riley, N., 1986, "On the Direct Initiation of a Plane Detonation wave," *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, Vol. 408, pp. 129~148.
- (6) Maas, U. and Warnatz, J., 1988, "Ignition Processes in Hydrogen-Oxygen Mixtures," *Combustion and Flame*, Vol. 74, pp. 53~69.
- (7) Richtmyer, R. and Morton, K., 1967, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics, Edited by Bers, L., Courant, R. and Stoker, J., No. 4, 2nd ed., Interscience Publishers, pp. 311~330.
- (8) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., 1989, "CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics," *Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009*.
- (9) Kee, R. J., Warnatz, J. and Miller, J. A., 1983, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities, Conductivities, and Diffusion Coefficients," *Sandia National Laboratories Report, SAND83-8209*.
- (10) Chung, S. H., Lee, S. R., Mauss, F. and Peters, N., 1993, "Reduced Kinetic Mechanisms and  $NO_x$  Formation in Diffusion Flames of  $CH_4/C_2H_6$  Mixtures," *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics, Edited by Peters, N. and Rogg, B., Springer-Verlag, pp. 308~328.