

〈논 문〉

국소화염특성을 고려한 예혼합화염의 소염특성에 관한 수치해석

정대헌* · 정석호** · P. Cho***

(1996년 6월 17일 접수)

Numerical Study on Extinction of Premixed Flames Using Local Flame Properties

D. H. Chung, S. H. Chung and P. Cho

Key Words : Stretch(스트레치), Karlovitz Number, Local Karlovitz Number(국소 Karlovitz 수), Lewis Number, Extinction (소염)

Abstract

The extinction of premixed flames under the influence of stretch is studied numerically. A wide range of fuel (hydrogen, ethylene, acetylene, methane, propane and methanol) and air mixtures are established in an opposed jet and their flame properties such as flame speed, flame thickness, thermal diffusivity, and stretch rate at extinction are computed. Computations are made using several chemical kinetic mechanism (Smooke, Kee et al. and Peters). The major result is that, in contrast to the various previous claims of extinction Karlovitz number varying over three orders of magnitude, it is found to be constant around two for all of the mixtures tested. That is, premixed flames are extinguished when the physical flow time decreases (due to increased stretch rate) to the point where it approximately equals the chemical reaction time. Here the relevant chemical reaction time is not the one computed using the one-dimensional flame properties as originally suggested in the formulation of Karlovitz number, but rather it is the one obtained using the stretched flame properties which fully reflect the effect of straining on the flame structure.

1. 서 론

내연기관 연소에서 난류화염을 지배하는것은 주름진 층류소화염(wrinkled laminar flamelet)이며 이는 난류유동에 의하여 변형되고 미연반응물과 기연의 부산물 사이에서 경계층을 형성한다. 이러한

화염은 공기 역학적인 스트레치, 비균일한 유동과 화염의 곡률을 통하여 화염면의 변형에 따라 단열 시스템에서도 소염을 발생시킨다.⁽¹⁾

Bradley⁽²⁾는 Lewis수에 의해 변형된 Karlovitz 수가 실제 엔진에 있어 소염을 예측할 수 있는 적당한 판정기준이라고 제시하였다. Karlovitz수, Ka 는 유동의 특성속도 기울기와 화염의 특성 기울기의 비이다. 그러나 속도의 기울기의 역수는 시간의 단위를 갖기 때문에 Karlovitz수는 두 개의 시간의 비인 화학반응시간과 물리적 유동시간의 비

*KIER 연료 연소부

**서울대학교 기계공학과

***Michigan Technological University

로써 표현된다.

따라서 Karlovitz수는 $Ka = (\delta/S_{L,u})$ 로 표현되며 화학반응시간은 화염의 두께와 화염속도의 비인 $(\delta/S_{L,u})$ 로, 물리적 유동시간은 화염 스트레치의 역수인 $1/x$ 가 된다. 한편 소염은 시간의 비에 따라 즉, 일정한 Karlovitz수에서 발생한다고 예측된다.⁽³⁾

그러나, 현재까지 행하여진 많은 실험에서 소염 Karlovitz수는 0.03~20 사이에서 존재하였다.^(4,5) Karlovitz의 수가 이렇게 넓은 범위에서 존재하는 것은 여러 가지의 이유가 있는데, 이 중 가장 큰 문제는 화염두께에 관한 기본정의의 상이함에 있다.⁽⁶⁾ 결과적으로 화염두께의 계산시에 서로 다른 표현을 사용하여 다른 결과를 나타내고 있는데 이때 화염두께의 계산시에 스트레치의 영향은 주로 무시되어 왔다.

본 연구에서는 예혼합화염의 소염기준을 제시하기 위해서 예혼합화염의 소염 Karlovitz수를 구하기 위한 수치해석을 수행하였다. 특히 스트레치된 예혼합화염^(7,8)의 Lewis수가 1이 아닌 화염의 거동에서 Karlovitz수를 검토하였고, 의미있는 소염기준을 확립하기 위해 그 정의를 변형하였다.

2. Karlovitz수의 결정

Karlovitz수의 결정을 위해서는 화학반응시간 $\delta/S_{L,u}$ 와 물리적 유동시간 $1/x$ 가 필요하다. $1/x$ 는 화염 상류지역의 축방향속도 기울기의 역수이다. 수치적 계산에서는 스트레치를 점차 증가시키면 화염의 구조가 변하게 되고 온도는 점점 강하하며 수렴이 불가능해지는데 이때를 소염점으로 하였다. 이 점은 화염의 온도와 스트레치의 역수의 관계에서 기울기가 무한대로 접근하는 점과 일치한다.

그러나, 특성화학시간을 구하는 것은 용이하지 않다. 본 연구에서 화학반응시간은 화염속도 $S_{L,u}$ 와 화염두께 δ 의 비로 하였으며 δ 는 가장 일반적으로 사용되는 화염두께인 Zel'dovich 특성길이 $\delta = \lambda/(\rho_u C_p S_{L,u})$ 를 채택하였다. 여기서 λ 는 열전도도, C_p 는 비열, ρ_u 는 미연혼합물의 밀도이다. 이 두께는 화염 전파방향으로 지배방정식을 무차원 하는데 사용되는 길이 척도이다. 열확산계수 $\alpha = \lambda/(\rho_u C_p)$ 를 도입하면 화학반응시간은 혼합물의 성질과 화염속도에 의하여 $(\alpha/S_{L,u}^2)$ 로 표현될 수 있다.

소염 Karlovitz수는 화학반응시간과 물리적 유동시간의 비로부터 얻어진다. 그러나 화학반응시간은 어떠한 상태에서 채택하느냐에 따라 상이한 값이 얻어진다. 열확산계수와 화염속도가 스트레치가 없는 1-차원의 상태라면 일반적인 소염 Karlovitz수를 얻을 수 있다.

$$Ka_{ex} = \frac{\delta^0}{S_{L,u}^2} k \quad (1)$$

소염상태에서의 열확산계수와 화염속도의 값을 이용하면 국소 소염 Karlovitz수를 얻는다.⁽⁸⁾

$$Ka_{ex,L} = \frac{\delta}{S_{L,u}} k \quad (2)$$

열확산계수와 화염속도는 서로 다른 연료/공기 혼합물에 대하여 스트레치의 영향을 받는 정도가 다르므로 두 소염 Karlovitz수는 서로 다른 경향을 보일 것으로 예상할 수 있다. 국소값을 사용하여 화염의 특성을 구하는 개념은 Faeth 등^(9,10)에 의하여 Markstein수에 적용된 바 있다.

2. 수치해석 방법

연료/공기 예혼합화염이 대향류 유동장에서 형성 되면 유동장의 중심선에서 속도기울기의 계산을 통해 화염전파속도와 스트레치값을 알 수 있다. 이렇게 스트레치에 따라 얻어진 화염전파속도는 스트레치가 0인 경우로 외삽이 되면 1-차원 화염속도와 화염두께를 알 수 있다. 대향류, 경계층유동에서 연속, 운동량, 화학종, 에너지방정식은 다음과 같다. (Lee와 Chung⁽¹²⁾)

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dx} + 2\alpha\rho f' &= 0 \\ \frac{d}{dx} \left(\mu \frac{df}{dx} - \frac{Udf}{dx} + a[\rho_\infty - \rho(f)^2] \right) &= 0 \\ \frac{d}{dx} (\rho Y_i U_{iy}) - U \frac{dY_i}{dx} - \omega_i W_i &= 0 \\ i &= 1, 2, \dots, K \\ \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - c_p U \frac{dT}{dx} - \sum_{i=1}^N \rho Y_i U_{iy} c_{pi} \frac{dT}{dx} \\ - \sum_{i=1}^N \omega_i W_i h_i &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 x 는 축좌표, u 는 축방향 속도, U_{iy} 는 i -번째 화학종의 확산속도인데 Curtiss-Hirschfelder 근사식으로부터 결정된다.

위의 식에서 복사효과, Dufour 효과는 무시된다. 유선함수 f 와 반경방향속도 v 는 다음과 같다.

$$f' = -\frac{\rho_\infty}{2a\rho} \frac{dU}{dx} \quad (4)$$

$$v = -\frac{r}{2\rho} \frac{dU}{dx} \quad (5)$$

r 은 반경방향좌표이며 상태방정식은

$$\rho = pW/RT \quad (6)$$

W 는 평균 몰 무게이고 R 은 가스상수이다. 계산된 유동장은 두 개의 화염을 생각하기 때문에 유동장의 반단 폭게 되며 결과적으로 경계조건은 대칭면에서 ($x=0$)과 노즐출구 ($x=L$)에서 다음과 같다.

$$\begin{aligned} x=0 : v=0 \\ \frac{dY_k}{dx}=0, \frac{dT}{dx}=0, \frac{df'}{dx}=0 \\ x=L : Y_k=Y_{k,L} \quad k=1, 2, \dots, K \\ T=T_L \\ U=\rho_L u_L \\ f'=0 \text{ 혹은 } 1 \end{aligned} \quad (7)$$

여기서 $f'=1$ 은 포텐셜(potential) 유동의 경우에 $f'=0$ 은 실험과의 비교를 위한 플러그(plug) 유동의 경우이다.

본 연구에서는 Smooke⁽¹³⁾에 의해 개발된 코드를 이용했으며 열역학적 성질과 상태방정식은 CHEM-KIN-II⁽¹⁴⁾에서, 이송성질은 Transport package⁽¹⁵⁾로부터 계산되었다. 이 프로그램에서 세 가지 서로 다른 상세 화학반응 메커니즘인 Smooke,⁽¹³⁾ Peters⁽¹⁶⁾와 Kee et al.⁽¹⁷⁾이 사용되었다. Smooke 반응 메커니즘은 16개의 화학종과 52 개의 반응식을, Peters 반응 메커니즘은 C_3 를 포함하는 33개의 화학종과 74개의 기본반응식을 그리고 Kee et al. 반응 메커니즘은 33 개의 화학종과 134개의 반응식을 포함한다.

이전의 연구⁽¹⁸⁾에서는 Rogg 에 의하여 개발된^(19,20) 코드와 17개의 화학종, 97개의 반응식을 포함하는 Paczko⁽²¹⁾와 Djavdan et al.⁽²²⁾에 의한 화학반응 메커니즘을 부가하여 사용하였는데 그 결과는 계산코드나 반응 메커니즘에 무관하여, 본 연구에서는 Peters 상세 화학반응 메커니즘을 주로 이용하여 결과를 제시하였다.

4. 결과 및 검토

본 연구에서 스트레치된 예혼합화염의 소염은 세 가지 변수로 제시하였다. 즉 스트레치율, Karlovitz수, 국소 Karlovitz수이다. 각각의 변수에 대한 해석을 통하여 소염에 영향을 끼치는 중요한 요소를 파악할 수 있는데 특히 두 Karlovitz수의 차이점을 강조하고자 한다. 스트레치된 화염의 소염상태는 Karlovitz수보다 국소 Karlovitz수를 적용함으로써 더욱 잘 나타나는데 가장 큰 특징은 본 연구에서 취급한 어떤 종류의 연료/공기에 대해서도 당량비에 따라 그 값은 비교적 일정하였다.

수치해석에 의한 축방향속도를 Fig. 1에 나타내었는데 화염의 구조해석에서 널리 이용되고 있는 축대칭 대향류 유동장을 모델로 채택하여 전체 유동장의 반단 해석하였다. 수치결과는 화염지역에서 가파른 속도분포를 보이는데 이는 실험결과와 잘 부합된다.⁽¹⁸⁾

화염은 포텐셜유동일 때 보다 플러그유동의 경우에 정체면에 더 가깝게 위치한다. 주어진 스트레치와 당량비에서 화염속도는 화염면 상류 쪽 유동속도의 최소값으로부터 구해지고 스트레치가 0인 상태로 외삽하게 되면 1-차원 화염속도⁽¹¹⁾가 된다.

당량비를 변화시키기에 따라 메탄/공기 화염의 소염 스트레치를 세 가지 반응 메커니즘을 사용하여 얻은 결과를 Fig. 2에 나타내었다. 수치해석에 의한 소염 스트레치값은 실험에 의한 소염값^(11,18)과 비교되는데 수치해석에 의한 값은 실험에 의한 값보다 대체적으로 큰 값을 갖는다.

Fig. 3에는 Peters 반응 메커니즘을 사용하여 메

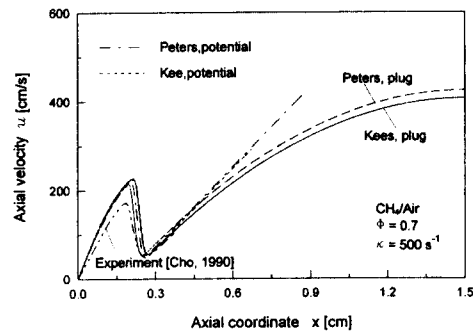


Fig. 1 A comparison of experimental and calculated axial velocity profiles at the centerline of a methane/air flame in an opposed jet flow.

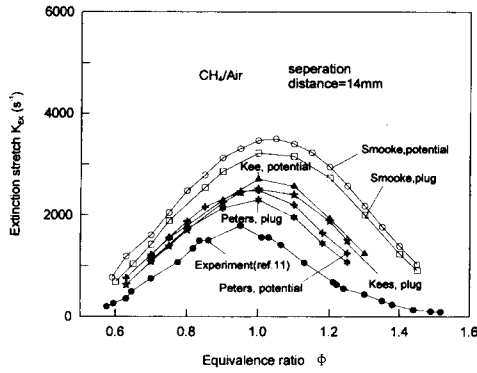


Fig. 2 The variation of experimental and calculated extinction stretch rates, K_{ex} , with equivalence ratio for methane/air flames.

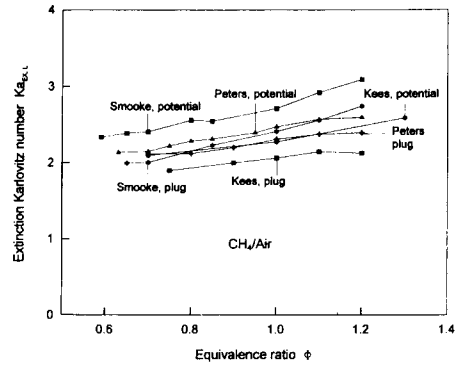


Fig. 4 The variation of local extinction Karlovitz numbers, computed from several different mechanisms for methane/air mixtures, with equivalence ratio.

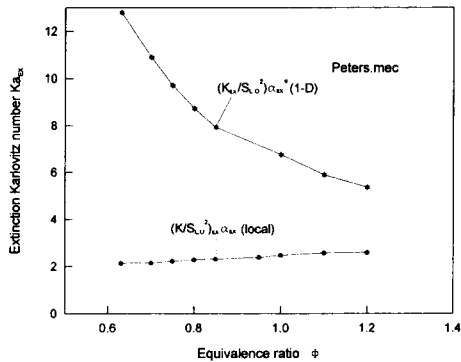


Fig. 3 Extinction Karlovitz number for methane/air flames.

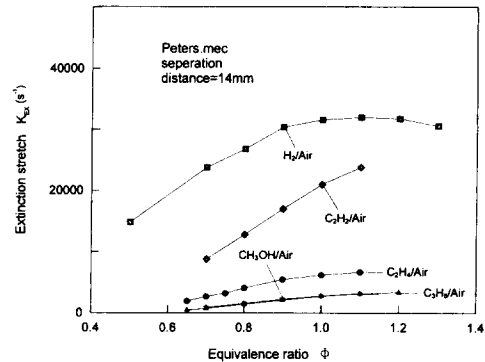


Fig. 5 The variation of extinction stretch rates for five different fuel/air flames with the equivalence ratio.

탄/공기혼합물에 대하여 당량비 ϕ 에 따라 소염 Karlovitz수 Ka_{ex} 를 도시하였는데 그 값은 3~10의 범위내에서 존재하였다. 메탄/공기 화염의 경우 이론당량비 근처에서 소염이 쉽게 발생한다.

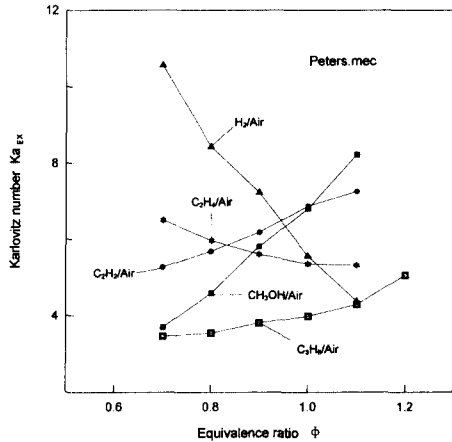
그러나, 국소 소염 Karlovitz수, $Ka_{ex,L}$ 을 계산해 보면 당량비의 넓은 범위에서 그 값은 연료에 무관하게 약 2.2~2.4의 범위에 있다. 반응 메커니즘에 따른 메탄/공기화염의 국소 소염 Karlovitz수의 값이 넓은 범위의 당량비에서 Fig. 4에 도시되어 있다.

Fig. 5에는 에틸렌, 아세틸렌, 프로판, 수소와 메탄올의 소염 Karlovitz수의 값을 도시하였다. Fig. 6은 스트레치가 0인 1-차원 화염과 국소 화염성질을 이용한 Karlovitz수를 나타내고 있는데 국소 화염성질을 이용한 경우 당량비의 넓은 범위에서 상당히 일정하고, H₂를 제외한 나머지 연료

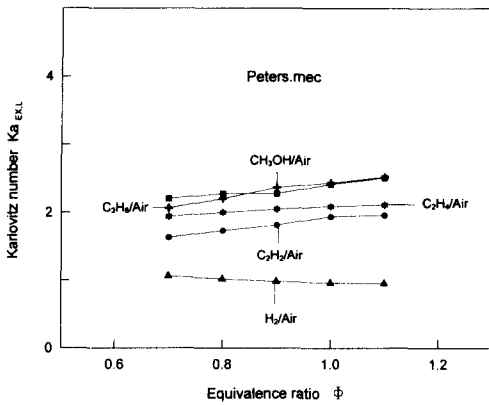
에 대해서는 1.7~2.4의 범위에서 비교적 일정한 값을 나타내고 있다.

국소 화염성질을 이용한 소염 Karlovitz 값이 일정한 이유를 파악하기 위해서는 먼저 Fig. 2에 대한 검토가 필요하다. 이론당량비 근처에서의 높은 온도의 화염은 이론당량비로부터 벗어난 경우의 낮은 온도의 화염보다 소염이 발생하기 어렵다. 당량비에 따른 소염 스트레치의 변화는 혼합물의 단열 화염온도의 경향과 유사하다. 그러나, 최대의 소염 스트레치의 당량비와 최대의 화염온도의 당량비는 서로 일치하지 않는다. 또한 최대의 소염 스트레치 값은 메탄/공기 혼합물의 경우 이론당량비보다 희박한 쪽에, 프로판/공기 혼합물의 경우 이론당량비보다 과농한 쪽에 위치한다.

최대 소염 스트레치의 이동은 확산선호도의 관점



(a) One-dimensional



(b) Local

Fig. 6 Extinction Karlovitz number for hydrogen/air, ethylene/air, ethene/air, and methanol/air flames. Both the one-dimensional and local values are shown. The local extinction Karlovitz numbers are again shown to be fairly constant

에서⁽¹¹⁾ 설명되었다. 이에 따르면 희박한 프로판/공기와 과농한 메탄/공기와 같이 $Le > 1$ 인 혼합물의 경우 화염온도는 스트레치의 증가에 따라 강해지기 때문에 소염은 $Le = 1$ 인 경우에 비해 작은 스트레치값에서 발생한다.

이에 비해 $Le < 1$ 인 경우 불완전한 반응에 의해 전체적인 열적인 반응이 영향을 받기 전까지는 스트레치에 따라 화염온도가 증가하고 $Le = 1$ 인 경우에 비해 소염은 큰 스트레치값에서 발생한다. 이는 스트레치에 의하여 화염이 어떤 일정한 온도에도 도달할 때 소염이 발생하는 것을 의미한다. 한편 확

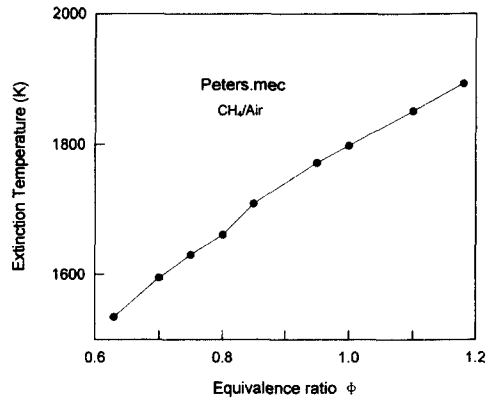


Fig. 7 Flame temperature at extinction for methane/air flames

산선호도에 대한 화염온도의 민감성은 Bunsen 화염⁽²³⁾에서도 관측되는데 대항류 제트 형상에서 화염온도는 Lewis수에 관계 없이 스트레치의 증가에 따라 감소되었다. 더우기 Fig. 7에서 메탄/공기 혼합물에 대해서 소염시 화염온도는 일정한 값에 접근하지 않고 스트레치가 없는 1-차원 단열화염온도와 상관관계도 없다.

이론당량비 근처에서의 화염은 이론당량비에서 떨어진 곳보다 높은 온도에서 소염이 발생한다. 따라서 스트레치된 화염의 소염의 상태는 화염온도의 영향만 받는 것은 아니다. 그러나 Fig. 7에서 소염시 화염온도를 희박한 가연한계까지 외삽시켰을 때 화염온도는 약 1450 K가 된다. 이 결과는 낮은 온도에서 낮은 화학반응성은 1-차원 화염의 경우 소염을 초래하는 원인이 되나 현열(sensible) 엔탈피의 감소만으로는 스트레치된 화염의 소염에 있어 확산선호도 효과를 설명하지 못한다.

혼합물의 Lewis수 효과는 Fig. 8에서 $\alpha/S_L \cdot u^2$ 로 표시되는 화학반응시간으로 더욱 잘 나타난다. Fig. 8에는 1-차원 화염에 대한 화학반응 시간을 표시하는데 이는 단열화염온도의 변화와 일치한다. 즉, 최소 화학반응 시간은 $\phi = 1.1$ 근처에서 얻어지는데, 이때 메탄/공기 화염의 경우 최대의 온도가 존재한다. 그러나 화학반응시간이 국소화염성질을 이용하여 계산된다면 최소값은 메탄/공기 혼합물의 경우 희박한 쪽으로 이동된다. 이 결과는 소염 스트레치값의 이동을 설명한다. Fig. 8에서의 결과는 스트레치된 화염은 1-차원 화염의 경우에 비해 짧은 화학반응시간을 나타낸다. 따라서 화학

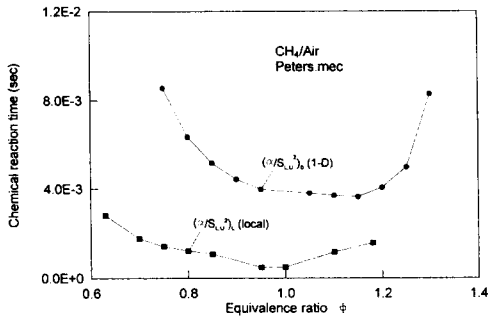


Fig. 8 The chemical reaction time for one-dimensional flame and strained flame at extinction

반응시간의 1-차원 값을 사용하여 계산된다면 국소 소염 Karlovitz수는 지나치게 큰 값을 갖게 된다.

위의 결과는 스트레치된 예혼합화염의 소염 Karlovitz수를 계산할 때 국소 성질의 필요성을 제시하고 있다. 소염 Karlovitz수는 소염 스트레치가 1-차원 화염성질로 나타낼 때 그 값이 크게 변하는 반면에 국소값을 사용하면 Fig. 3 에서와 같이 일정한 값에 도달할 수 있는 것을 나타낸다.

5. 결 론

본 연구는 예혼합화염이 과도한 스트레치에 의하여 반응에 필요한 시간이 허락되지 않음으로 소염이 발생할 수 있는 것을 나타낸다. 서로 다른 공기-연료 혼합물에 대해서 소염에 필요한 시간의 감소는 혼합물의 단열화염온도에 따라 변한다. 따라서 이론당량비에서 멀리 떨어진 곳보다 이론당량비 근처에서 화염을 소염시키는 것은 더욱 큰 스트레치값을 요구한다. 그러나 최대의 소염 스트레치값은 Lewis수가 1이 아닌 효과 때문에 확산선호도의 영향으로 최대의 단열 화염온도와 일치하지 않는다.

본 연구에서 예혼합화염은 물리적 유동시간과 화학반응시간과의 비가 일정할 때까지 감소(증가된 스트레치값에 따라)했을 때 소염이 발생함을 나타낸다. 여기서 화학반응 시간은 국소 화염성질을 이용하여 계산되었다. 결국 국소 소염 Karlovitz수는 넓은 범위의 연료/공기 혼합물에 대하여 비교적 일정한 값을 나타내었다.

후 기

이 연구는 터보동력기계 연구센터와 US

National Science Foundation 에 의하여 지원되었다.

참고문헌

- (1) 정대현, 정석호, 1995 "대향류 메탄/공기 예혼합화염의 소염특성에 관한 수치해석적 연구," 대한 기계학회논문집, 제19권, 제8호, pp. 1982~1988.
- (2) Bradley, D., 1992, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, p. 247
- (3) Peters, N., 1986, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, p. 1231
- (4) Golkap, I., 1987, *Combust. Flame*, 66: 111~119.
- (5) Chomiak, J. and Jarosinski, J., 1982, *Combust. Flame* 48: 241~249.
- (6) Cho, P., 1990, Spring Technical Meeting, Central States Section, *The Combustion Institute*.
- (7) Fu, C. and Cho, P., 1995, *The Sixth International Symposium on Transport Phenomena*, No. 5-A-4.
- (8) Chung, S. H., 1986, Korean Society of Mechanical Engineers Fall Meeting, No. 9-6, Seoul.
- (9) Kwon, S., Tseng, L. -K., and Faeth, G. M., 1992, *Combust. Flame*, 90: 230~246.
- (10) Tseng, L. -K., Ismail, M. A. and Faeth, G. M., 1993, *Combust. Flame*, 95:410~426.
- (11) Law, C. K., Zhu, D. L. and Yu, G., 1988, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, p. 1419
- (12) Lee, S. D. and Chung S. H., 1994, *Combust. Flame*, 98:80.
- (13) Smooke, M. D., 1982, *J. Computat. Phys.*, 48: 72.
- (14) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., 1989, Sandia National Laboratory Report, SAND 89-8009.
- (15) Kee, R. J., Warnatz, J. and Miller, J. A., 1983, Sandia National Laboratory Report, SAND 83-8209.
- (16) Peters, N. and Rogg, B. (Eds.), 1993,

- Reduced Kinetics Mechanisms for Application in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics Series-Verlag.
- (17) Kee, R., 1988, Sandia Report, SAND 85-8240
- (18) Chung, S. H., Chung, D. H., Fu, C. and Cho., P., 1995, *Submitted to Combustion and Flame*.
- (19) Rogg, B., 1993, "RUN-IDL: The Cambridge Universal Laminar Flamelet Computer Code," User Manual.
- (20) Rogg, B., 1993, "RUN-IDL: The Cambridge Universal Laminar Flamelet Computer Code," in: *Reduced Kinetics Mechanism for Application in Combustion Systems*, Appendix C, N. Peters and B. Rogg (Eda.), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg.
- (21) Paczko, G., 1986, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, p. 739.
- (22) Djavdan, E., Darabiha, N., Giovangigli, V. and Candel, S, M., 1991, *Combustion Science and Technology*, 76, p. 287.
- (23) Law, C. K., Cho, P., Mizomoto, M. and Yoshida, H., 1988, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, *The Combustion Institute*, p. 1803.