

<논 문>

수소 확산화염의 구조에 미치는 Lewis 수의 영향

김후중* · 김용모** · 안국영***

(1996년 7월 25일 접수)

Effects of Lewis Number on Hydrogen Diffusion Flame Structure

H. J. Kim, Y. M. Kim and K. Y. Ahn

Key Words : Laminar Diffusion Flame(층류확산화염), Detailed Chemical Kinetics(상세화학반응), Variable Transport Property(가변 수송물성치), Preferential Diffusion(편중 확산)

Abstract

An axisymmetric laminar jet diffusion flame has been numerically modelled. The present study employs the refined physical submodels to account for the detailed chemical kinetics and the variable transport properties. It is found that preferential diffusion resulting from variable transport properties significantly influences the hydrogen diffusion flame structure in terms of the spatial distribution for temperature, species concentration, thermal and mass diffusivity, Lewis number, and NO concentration. The preferential diffusion effects on the diffusion flame in the high-pressure environment are also discussed in detail.

1. 서 론

실제적인 연소기에서 가장 널리 채택되고 있는 확산화염에 대한 연구는 Burke-Schumann의 flame-sheet모델⁽¹⁾을 시작으로 지난 60여년 동안 제트의 확산화염에 대한 실험 및 이론적 연구가 많이 행해졌으며 또한 많은 발전을 하였다. 그러나, 이러한 연구들의 대부분은 화학반응을 일단계 비가역반응으로 가정하였기 때문에 실제적인 확산화염의 구조를 해석하는 데는 많은 한계를 가지고 있다. 또한 난류화염장에서 난류유동과 화학반응간의 상호작용을 해석할 수 있는 flamelet 모델⁽²⁻³⁾의 경우에는 난류화염장을 유동장내의 미세한 층류화염 요소들의 집합으로 가정하여 난류유동과 상세화학

반응을 분리하여 계산하기 때문에 가변수송상태량과 상세한 화학반응 메커니즘을 고려한 층류화염장의 해석은 필수적인 요소이다.

확산화염의 상세한 구조를 해석하기 위해서는 열 방출을 일으키는 화학반응과 결합된 운동량, 열, 그리고 화학종의 수송 과정에 대한 정확한 수학적 모델이 요구된다. 특히, 물질확산과 열확산 중에서의 물리적 현상이 다른 현상보다 지배적으로 나타나는 편중확산(preferential diffusion) 현상은 층류 확산화염의 구조에 지대한 영향을 미치는 것으로 알려져 있다. 이러한 편중확산 현상은 청정연료및 고속추진기관의 연료로써 중요성이 부각되는 수소를 연료로 사용하는 연소유동장에서 현저하게 나타나게 된다. 수소확산화염에 대한 열 및 화학종의 편중확산의 영향이 많은 실험^(4,5)에 의해 밝혀졌으나 세부적인 과정과 편중적인 확산의 효과는 상세한 화학반응 메커니즘과 여러 개의 구성요소에 대한 물성치의 전달과정 등에 대한 정교한 모델링과

*한양대학교 대학원 기계공학과

**회원, 한양대학교 기계공학과

***회원, 한국기체연구원

함께 수치모델의 정확성이 요구되기 때문에 해석에 많은 어려움이 있다. 층류 확산화염장에 대한 최근의 수치해석연구⁽⁶⁻⁹⁾는 개선된 물리 및 수치모델들을 이용하여 수치효율을 개선하면서 화염구조를 상세하게 해석하는데 중점을 두고 있다.

본 연구에서는 중심 원관에서 연료 혼합물이 분출되고 중심 원관 주위의 환형원관에서 공기가 분출되는 유동형태로 수직으로 형성되는 화염에 대하여 상세 화학반응 모델과 각 화학종에 대한 가변물성치를 고려하여 화염장내에서 변하는 Lewis 수의 영향으로 생기는 편중확산이 층류 확산화염구조에 미치는 영향과 이에 따른 NO의 분포특성, 화염영역에서 중간생성 화학종과 라디칼의 농도분포가 확산화염장에 미치는 영향, 그리고 고성능 및 고속추진기관에서 나타나는 높은 압력의 연소조건에서 편중확산의 영향을 살펴보았다.

2. 지배방정식

Ns 개의 화학종을 포함하는 화학반응이 수반된 축대칭 유동장의 지배방정식을 원통좌표계에서 나타내면 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho v)}{\partial r} = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho \Phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \Phi)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho v \Phi)}{\partial r} \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma^\circ \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\Gamma^\circ \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \\ & - \frac{\rho v \Phi}{r} + \frac{\Gamma^\circ}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + S^\circ \end{aligned} \quad (2)$$

여기서, ρ 는 밀도, u, v 는 각각 속도벡터의 축방향과 반경방향의 속도, p 는 압력을 나타낸다. 식 (2)는 Φ 의 위치에 들어가는 변수에 따라 운동량, 화학종, 에너지 방정식을 나타낸다. Table 1에는 식 (2)에서 사용되는 수송확산계수, Γ° 와 생성항, S° 가 주어져 있으며 여기서 μ, λ 와 c_p 는 각각 혼합물의 점성계수, 열전도계수, 정압비열을 나타내며 Y_i 와 $\dot{\omega}_i$ 는 i 번째 화학종의 질량분율과 질량생성률을 나타내며 ρ_0 는 공기의 밀도를 g 는 중력가속도를 각각 나타낸다. 수송물성치, D_{i-N_2} 는 i 번째 화학종과 질소와의 혼합물에서 그 화학종의 질량확산계수를 나타낸다. 엔탈피 H 는 다음과 같이 정의된다.

$$H \equiv \int_{T_0}^T c_p dT \equiv \sum_{i=1}^{N_s} Y_i H_i \equiv \sum_{i=1}^{N_s} Y_i (h_i - h_{fi}^0) \quad (3)$$

여기서, h 와 h_{fi}^0 는 전체엔탈피와 표준상태(온도 T_0)에서 생성엔탈피를 나타낸다. Le_i 는 i 번째 화학종의 Lewis 수를 나타내며 다음과 같이 정의된다.

$$Le_i \equiv \frac{\lambda}{\rho D_{i-N_2} c_p} \quad (4)$$

그리고 이상기체 상태방정식은 다음과 같다.

$$p = \rho T R_0 \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{Y_i}{M_i} \right) \quad (5)$$

여기서, R_0 는 일반 기체상수, T 는 온도, M_i 는 i 번째 화학종의 분자량을 각각 나타낸다.

Table 1 Transport coefficient and source terms appearing in governing equations

Φ	Γ°	S°
u	μ	$-\frac{\partial p}{\partial z} + (\rho_0 - \rho)g + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial z}$ $-\frac{2}{3} \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right\}$
v	μ	$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - 2\mu \frac{v}{r^2}$ $-\frac{2}{3} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{v}{r} \right) \right\}$
Y_i ($i=1 \sim N_s-1$)	ρD_{i-N_2}	$\dot{\omega}_i$
H	$\frac{\lambda}{c_p}$	$\nabla \left[\frac{\lambda}{c_p} \sum_{i=1}^{N_s} \{ (Le_i^{-1} - 1) H_i \nabla Y_i \} \right] - \sum_{i=1}^{N_s} (h_{fi}^0 \dot{\omega}_i)$

3. 화학반응식

본 연구에서 사용되는 화학반응모델은 H_2 , O_2 , O , H , OH , HO_2 , H_2O , N_2 , NO , N 과 같은 10개의 화학종을 포함하며 H_2/O_2 반응식과 확장된 Zel'dovich NO_x 생성 반응식이 결합된 화학반응식을 사용하였으며 각 반응식의 preexponential factor, 온도지수, 그리고 활성화 에너지를 Table 2에 자세히 기술하였다. 여기서, M 은 분자간의 충돌과정에서 생성되는 과도한 에너지를 흡수하는 thirdbody를 나타낸다.

이러한 화학반응 베커니즘에서 화학종 i 의 생성률은 다음 식에 의해 결정된다.

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{k=1}^M \left[(\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \left\{ k_{f,k} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu'_{j,k}} - k_{r,k} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu''_{j,k}} \right\} \right] \quad i=1, \dots, N \quad (6)$$

여기서 M 은 기본반응식의 개수이며 N 은 화학반응에 포함된 화학종의 개수이며 $\nu'_{i,k}$ 와 $\nu''_{i,k}$ ($k=1, \dots, M$)는 k 번째 반응의 반응물과 생성물의 화학

당량계수를 나타낸다. 식 (6)에서 나타나는 k 번째 반응의 순반응상수는 다음과 같은 Arrhenius 형태를 갖는다.

$$k_{f,k} = A_k T^{\beta_k} \exp(-E_k/RT) \quad (7)$$

여기서, A_k 는 preexponential factor, β_k 는 온도지수, 그리고 E_k 는 활성화에너지를 나타낸다. 역반응상수, $k_{r,k}$ 는 화학평형상수와 순반응상수를 이용하여 구한다.

Thirdbody가 화학반응에 참여할 경우에 반응률은 다음 식과 같이 결정된다.

$$q_k = \left(\sum_{i=1}^N \alpha_{i,k} [X_i] \right) \left(k_{f,k} \prod_{i=1}^N [X_i]^{\nu'_{i,k}} - k_{r,k} \prod_{i=1}^N [X_i]^{\nu''_{i,k}} \right) \quad (8)$$

여기서, $\alpha_{i,k}$ 는 thirdbody efficiency를 나타내며 Table 2에서 값이 주어지지 않은 화학종에 대한 thirdbody efficiency는 1이다.

4. 열역학적 상태량과 수송상태량

지배방정식을 풀기 위해서는 Table 1에 나타나

Table 2 Chemical kinetics for H_2-O_2 combustion⁽¹⁰⁾

No.	Reaction	A_i	β_i	E_i
1.	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2OH$	1.7E13	0.000	47780.
2.	$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	5.2E13	0.000	6500.
3.	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	1.22E17	-0.907	16620.
4.	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	1.8E10	1.000	8826.
5.	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	2.0E15	0.000	-870.
6.	$OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	1.2E13	0.000	0.
7.	$H + HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	6.0E13	0.000	0.
8.	$O + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + OH$	1.0E13	0.000	0.
9.	$2OH \rightleftharpoons O + H_2O$	1.7E06	2.030	-1190.
10.	$H_2 + M' \rightleftharpoons 2H + M'$	2.23E12	0.500	92600.
11.	$O_2 + M \rightleftharpoons 2O + M$	1.85E11	0.500	95560.
12.	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	7.5E23	-2.600	0.
13.	$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	1.3E13	0.000	0.
14.	$O + N_2 \rightleftharpoons NO + N$	1.4E14	0.000	75800.
15.	$N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$	6.4E09	1.000	6280.
16.	$OH + N \rightleftharpoons NO + H$	4.0E13	0.000	0.

Unit : mol/cm³, s⁻¹, K, cal/mol

Third body efficiency for M : $\alpha(H_2O) = 20$.

Third body efficiency for M' : $\alpha(H_2O) = 5$.

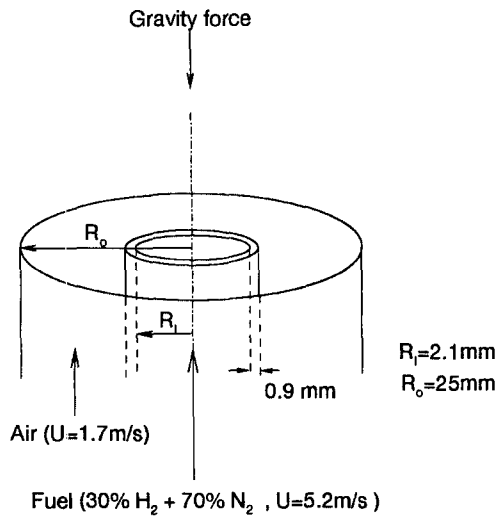


Fig. 1 Schematic diagram of laminar coaxial jet system

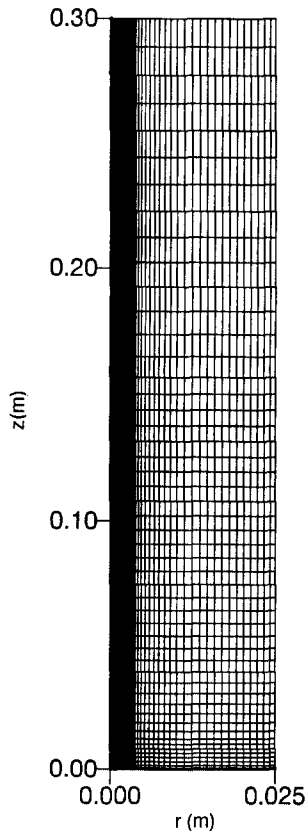


Fig. 2 Grid system (50×49 mesh)

는 열역학적 상태량과 전달 상태량에 대한 정보를 필요로 하게되며 이러한 상태량들은 온도나 화학종의 조성비에 따라 결정된다. 엔탈피, h 와 비열, c_p 는 JANAF 데이터⁽¹¹⁾를 이용하여 구하며 개개의 화학종에 대하여 점성계수와 열 전도계수는 Chapman-Enskog의 충돌이론으로 혼합물에 대한 점성계수와 열전도계수는 Wilke의 공식으로 구한다. 또한 Chapman-Enskog의 이론과 Lennard-Jones 포텐셜을 이용하여 상호확산계수(binary diffusion coefficient)를 계산한다.⁽¹²⁾

5. 수치모델링

Eulerian 좌표계에서 기상보존방정식들은 개선된 PISO 알고리즘⁽¹³⁾과 유사한 유동해석법으로 다루어지나 본 연구에서 사용된 수치모델은 분리오차 (splitting error)를 줄일 수 있는 알고리즘을 사용하였다. 밀도, 온도, 그리고 질량분율에 있어서의 급격하고 큰 변화를 반영하기 위해 화학종 질량분율과 에너지에 대한 보존방정식은 속도-압력-밀도장의 결합을 다루기 위해 예측/복수교정 계산절차 내에서 계산하였다. 수치확산의 영향을 최소화하기 위해 대류항은 공간에 대한 2차정확도를 가지는 TVD(Total Variation Diminishing) 풍상차분법⁽¹⁴⁾을 사용하였다. 수치안정성과 정확성에 큰 영향을 미치는 화학반응 생성항은 유체역학적 연산자와 화학반응 연산자가 동일한 예측 및 복수교정 수치절차

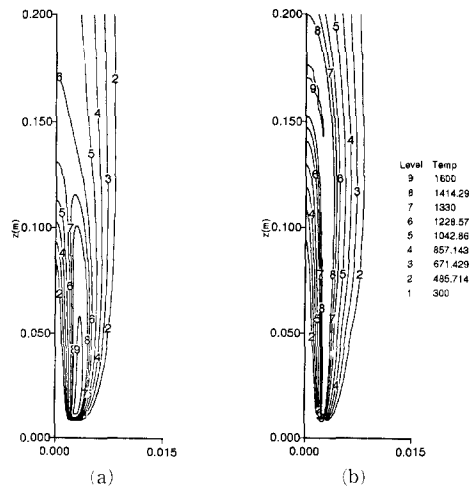


Fig. 3 Steady-state flame calculated (a) without and (b) with $Le_t=1$ assumption

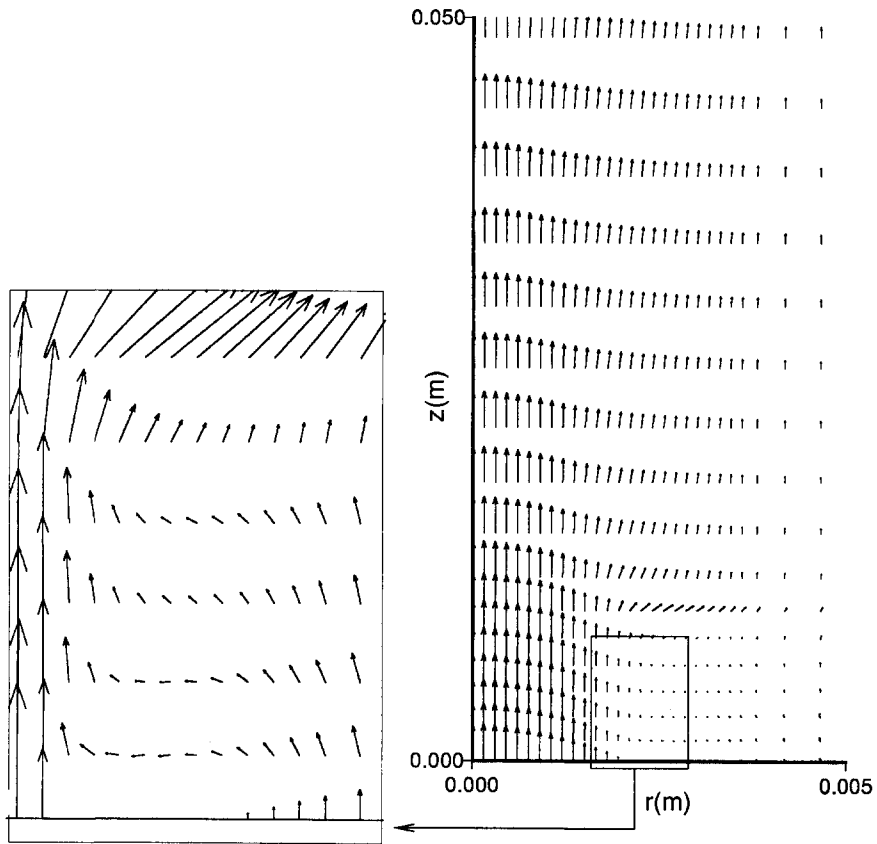


Fig. 4 Velocity vector near the nozzle exit

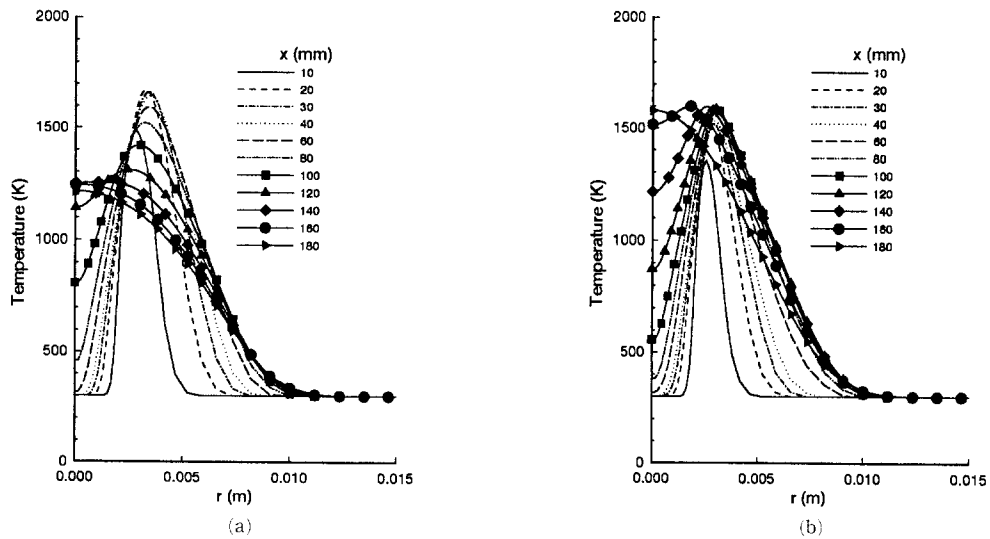


Fig. 5 Radial distribution of temperature calculated with (a) non unitary Lewis number and (b) unitary Lewis number assumption

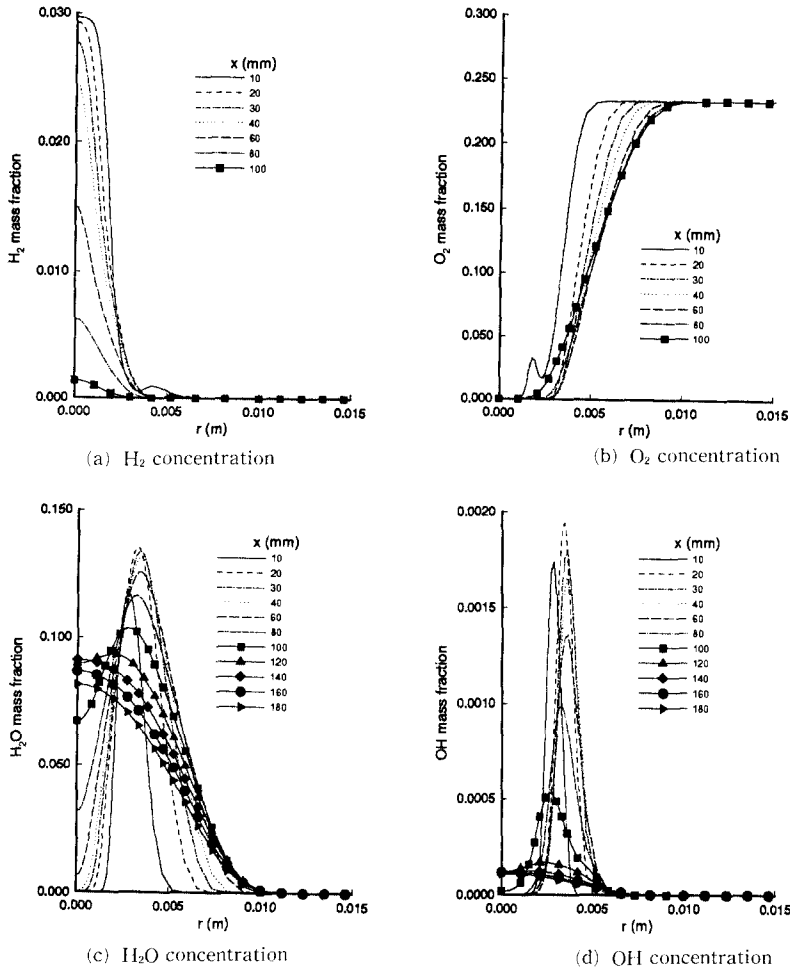


Fig. 6 Radial profiles of concentration calculated with non-unitary Lewis number assumption

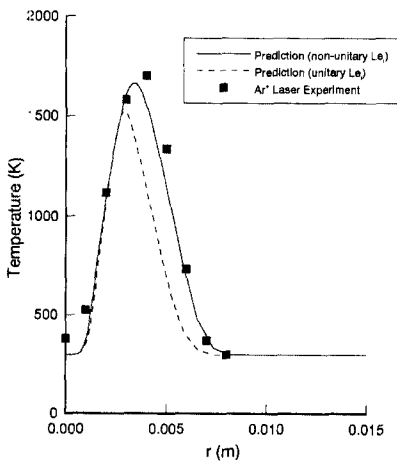


Fig. 7 Comparison of measured and computed temperature profiles at $z=30$ mm

내에서 처리되게하여 두 연산자간의 강한 수치적 결합을 갖게 하였다.

6. 결과 및 고찰

Fig. 1은 본 연구에서 적용된 층류 제트 확산화염에 대하여 수치계산 결과를 Komiyama 등⁽¹⁵⁾의 실험결과와 비교하기 위해 실험에서 사용된 형상과 조건을 나타낸 것이다. 이에 해당하는 수치적 경계 조건은 다음과 같다. 연료는 H_2 와 N_2 가 0.3:0.7의 몰 분율을 가지며 내부지름이 4.2 mm이고 외부지름이 6.0 mm인 노즐에서 온도와 평균속도가 각각 300 K, 5.2 m/s로 분출되며 외부 환형원판에서는 공기가 300 K의 온도와 1.7 m/s의 평균속도를 가지고 분출되며 속도분포는 포물선 형태로 가정하였

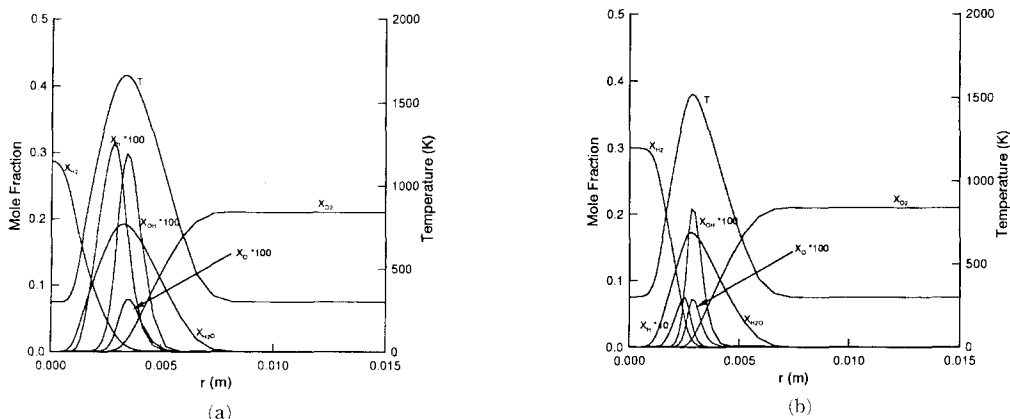


Fig. 8 Radial distribution of temperature and mole fraction of different species at $z=30$ mm in (a) non unitary Lewis number and (b) unitary Lewis number simulation

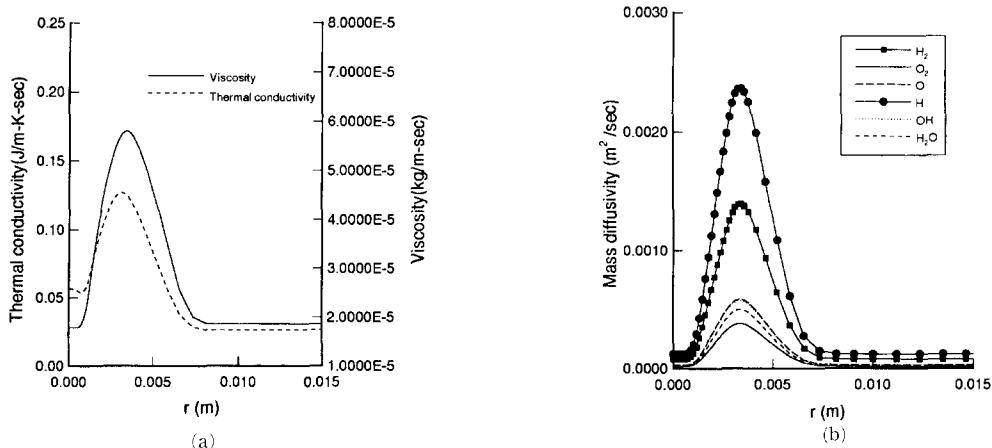


Fig. 9 (a) Thermal conductivity and viscosity and (b) mass diffusivity across flame at $z=30$ mm

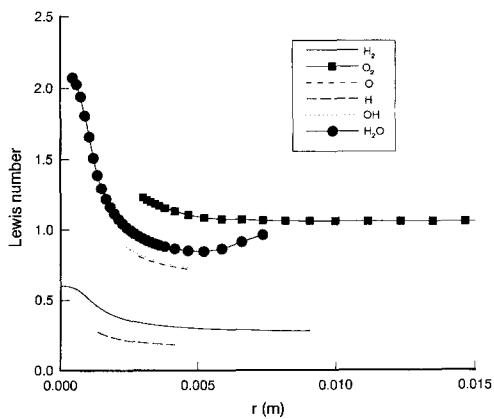


Fig. 10 Lewis number for different species in mixture across flame at $z=30$ mm

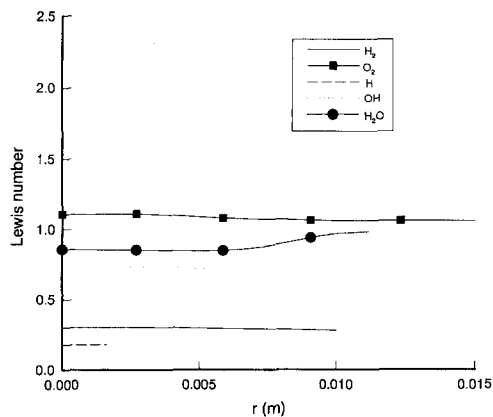


Fig. 11 Lewis number for different species in mixture across flame at $z=120$ mm

다. 대칭에서는 모든 변수의 구배가 0으로 되게 경계조건을 부가하였으며 출구조건은 외압조건을 이용하였다. 주어진 지배방정식은 비균일 직교격자체를 이용하여 계산되며 계산영역은 Fig. 2에 나타나 있다.

우선 Lewis 수가 1이라는 가정에서 생기는 차이를 살펴보기 위하여 정상상태의 해를 Fig. 3에 나타내었다. Lewis 수가 1이라는 조건은 모든 화학종의 극부적인 확산계수, D_{i-N_2} 를 $D_{O_2-N_2}$ 와 같게 놓고 Lewis수의 정의로부터 λ/c_p 와 ρD_{i-N_2} 를 같게 함으로써 얻을 수 있다. 이 그림은 Lewis 수가 1이라는 가정과 이 가정을 사용하지 않을 때, 즉 편중확산이 존재할 때 화염내부 구조의 차이를 보여주고 있다. 편중확산을 가지는 경우에 상류부분에서 높은 온도를 가지며 여러 실험에서 관찰된 바 있는 연료가 고갈되는 축방향 위치에서 최대온도가 중심축에 위치하지 않고 중심축에서 약간 떨어진 위치에 존재하는 화염 끝의 개방 (flame tip opening) 현상이 나타났다. 두 경우 모두 화염이 노즐 입구에서 약간 떨어진 하류부분에서 생기는데 이것은 Fig. 4에서 보듯이 노즐의 가장자리 부분의 두께가 얇아 재순환 영역이 아주 미소하고 재순환되는 속도도 아주 작아서 연소된 뜨거운 가스를 재순환 영역 안에 충분히 유입시키지 못한다. 또한 연료측의 분출속도가 공기측의 분출속도보다 빨라 연료가 재순환 지역으로 유입되는 양보다는 공기가 유입되는 양이 많게 되어 연료의 양이 아주 작게 되고 이로 인해 연소되는데 적절한 연료와 공기의 혼합조건을 만들어주지 못한 결과로 인한 것으로 사료된다.

Lewis 수가 1이 아닌 경우와 Lewis 수가 1인 경우에 대하여 축방향의 여러 위치에서 반경방향의 온도분포를 Fig. 5에 나타내었다. 편중확산이 존재하는 경우 반경방향의 온도분포를 살펴보면 노즐출구에서부터 화염 끝(flame tip)까지는 최고온도의 위치가 중심축에서 떨어진 부분에 위치하고 축방향의 위치에 따라 반경방향의 위치가 조금씩 달라지는 것을 볼 수 있다. 그러나, 화염 끝의 하류에서는 최고온도가 중심축에 위치하게 된다. 또한 화염 끝의 하류부분의 최고온도는 상류의 최고온도보다 낮게 나타났다. 반면에 Lewis 수가 1이라는 가정을 사용한 경우에 대해서는 최고온도가 거의 일정하게 나타났다. 이것으로부터 열과 화학종의 편중확산이 화염온도에 중요한 요소로 작용함을 알 수

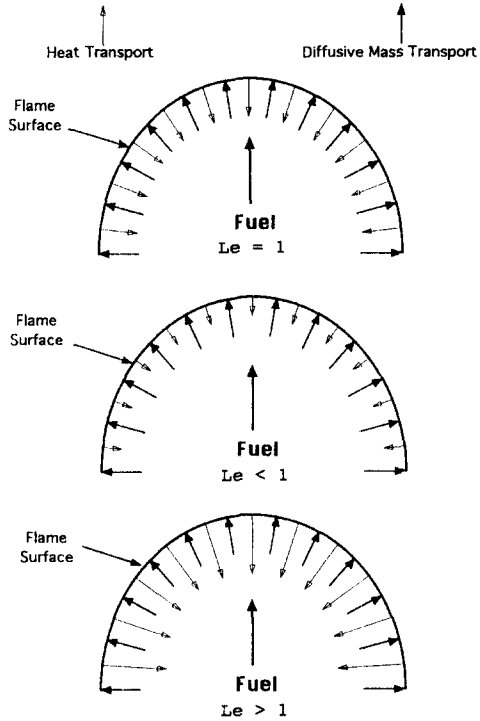


Fig. 12 Diffusive-heat and diffusive-mass transport near the flame tip for different Lewis number

있다. Fig. 6은 Lewis 수가 1이 아닌 경우에 대하여 축방향의 여러 지점에서 화학종의 반경방향의 분포를 나타낸 것이다. 예상한 대로 화염면에서 연료와 산소는 거의 고갈되어 있으며 연소에 의한 열 방출을 주도하는 주 생성물인 H_2O 의 농도분포는 온도분포와 비슷한 경향을 보이고 있다. 또한 화학반응에 중요한 역할을 하는 OH 라디칼은 온도가 높은 상류쪽에서의 농도가 하류쪽보다 훨씬 크게 나타났다.

Fig. 7은 수치계산 결과와 Komiyama 등⁽¹⁵⁾의 실험값을 노즐출구의 하류 30 mm인 지점에서 비교한 것이다. Lewis 수가 1이 아니라는 가정을 사용한 경우에는 최고온도를 약간 낮게 예측하였으며 그것의 위치 또한 약간 중심 축방향으로 이동된 결과를 보였다. 이러한 차이는 본 연구에서 가정한 연료와 공기유입부의 속도분포와 실험시의 입구속도분포간의 약간의 차이 때문으로 사료된다. 그러나, 최고 온도값과 위치 이외의 화염영역의 두께나 화염영역의 바로 안쪽이나 바깥쪽의 온도 등에 대해서는 정성적뿐만 아니라 정량적으로도 잘 예측하고 있음을

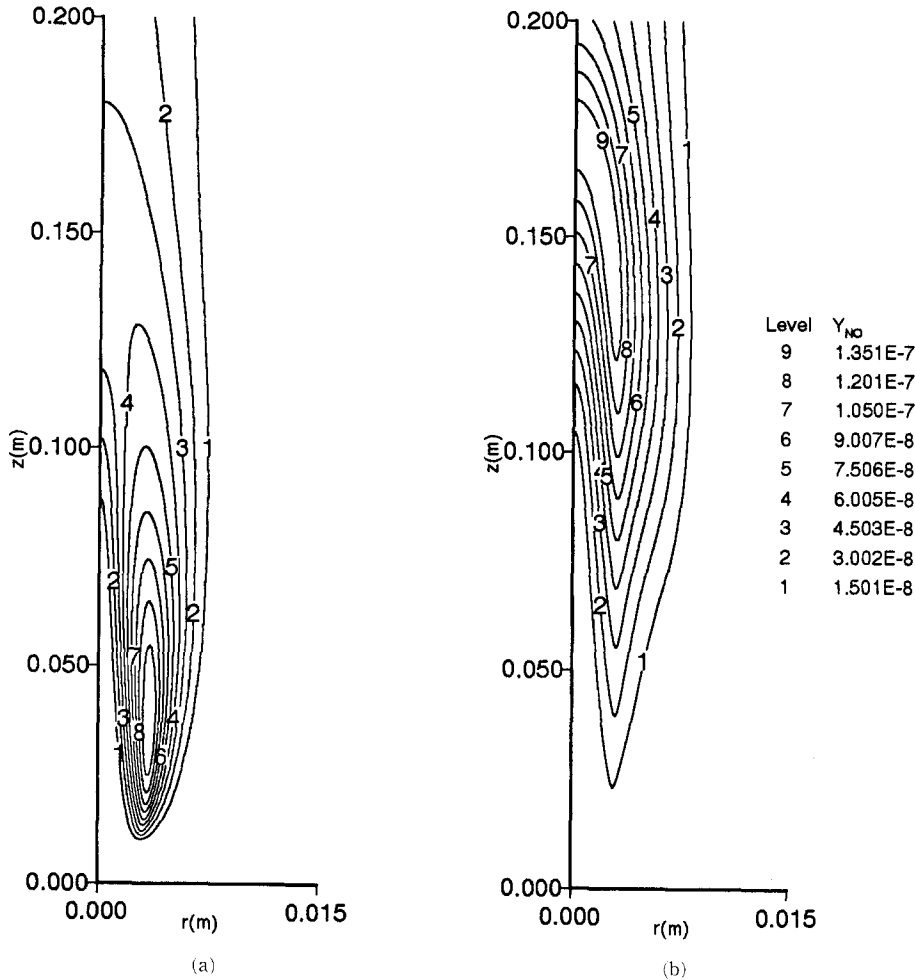


Fig. 13 Contour of NO mass fraction calculated (a) without and (b) with $Le_7=1$ assumption

알 수 있다. Lewis 수가 1이라는 가정하에서 수행된 계산은 최고온도뿐 아니라 화염의 두께도 제대로 예측하지 못했다. Fig. 8은 노즐출구 하류 30 mm인 지점에서 화학종의 몰분율, 온도를 나타낸 것이다. 두 경우 모두 연소에 중요한 영향을 미치는 OH 라디칼의 최대농도의 위치는 화염영역의 산소 쪽으로 치우쳐 있으며 H 라디칼은 화염영역의 연료 쪽으로 치우쳐 있고 수소와 산소가 공존하는 영역에서 최고온도를 가지게 된다. 그러나, Lewis 수가 1인 경우에서는 수송물성치의 잘못된 예측으로 인해 수소연료, 중간생성 화학종 및 라디칼의 확산을 과소하게 예측하게 되어 화염의 폭 및 최고온도를 과소 예측하게 됨을 알 수 있다.

앞에서 나타난 바와 같이 Lewis 수의 영향을 고

려한 경우와 그렇지 않은 경우는 상이한 화염구조를 가진다. 이러한 이유로 각 수송물성치 및 Lewis 수의 분포와 이것들이 화염구조에 미치는 영향을 살펴보면 다음과 같다. Fig. 9는 노즐출구 하류 30 mm인 지점에서 열전도계수, 점성계수 그리고 물질확산계수를 나타낸 것으로 화염영역에서 큰 값을 가지게 된다. 이것은 이러한 물성치들이 온도의 함수임을 잘 나타내어 주고 있다. 열전도계수와 화학종의 Lewis 수는 각각의 화학종이 충분히 존재할 때에만 에너지방정식에 영향을 줄 수 있게 된다. 그러므로, 화학종의 몰 분율이 작은 경우에는 ($<10^{-4}$) Lewis 수를 Fig. 10에 나타내지 않았다. H_2-O_2 연소 결과 단지 O_2 의 Lewis 수만 1에 가까운 값을 가지고 있음을 볼 수 있다. 그리고 H_2O

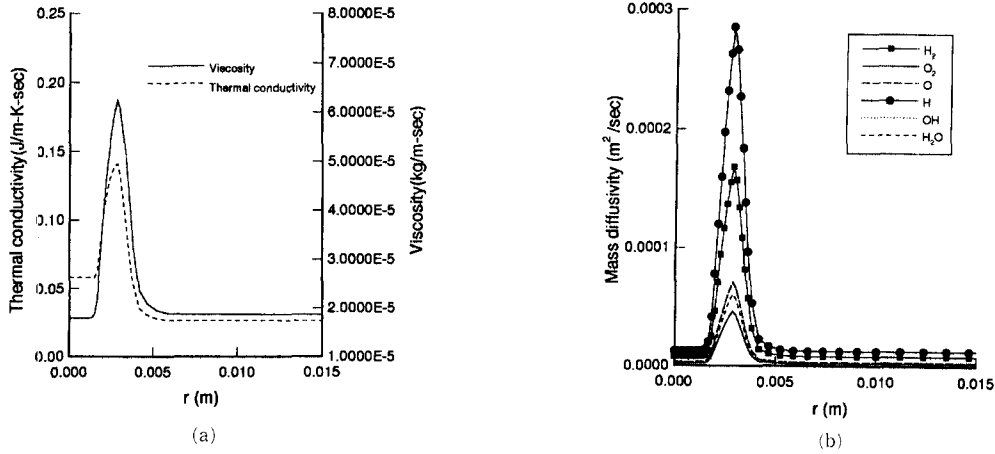


Fig. 14 (a) Thermal conductivity and viscosity and (b) mass diffusivity across flame at $z=30$ mm (Ambient pressure=1 Mpa)

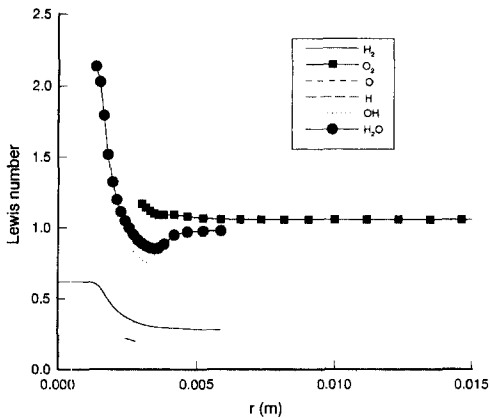


Fig. 15 Lewis number for different species in mixture across flame at $z=30$ mm (Ambient pressure=1 Mpa)

의 Lewis 수는 연료 쪽에서는 1보다 큰 값을 가지고 있으며 화염면과 공기 쪽에서는 거의 1에 근접하는 값을 갖는다. H_2 를 포함하여 다른 모든 화학종의 Lewis 수는 1보다 작은 값을 가지고 있다. 이로 인해 화염영역에서 연료(H_2)가 농후한 영역으로 열전달되는 양보다 연료가 농후한 영역에서 화염영역으로 물질확산되는 양이 더 크게 된다. 이 결과로써 노즐출구에서 가까운 영역에서는 질량확산율보다 상대적으로 낮은 열전도율로 인한 열 손실의 감소로 높은 화염온도를 가지게 된다. Fig. 11은 화염의 하류부분에서 각 화학종의 Lewis를 나타낸 것이다. O_2 와 H_2O 의 Lewis 수는 거의 1에 근접하는 값을 갖는 반면에 연료와 라디칼의

Lewis 수는 상류의 경우와 마찬가지로 1보다 작은 값을 가지고 있다. 화염유동장의 하류에서는 연료가 유입되는 화염면은 오목한 형상을 가지게 된다. Fig. 12에서 보듯이 이러한 형상의 화염면은 두 가지 작용을 하는데 화염으로부터 전달되는 열을 유입되는 연료에 모아주어 화염의 온도를 상승시켜주는 효과와 유입되는 연료의 확산을 분산시켜 화염의 온도를 떨어뜨리는 작용을 한다. 본 연구와 같은 연료의 Lewis 수가 1보다 작은 수소확산화염의 경우에는 물질확산의 영향이 지배적으로 되어 상류에서 높은 물질확산으로 인한 하류에서의 낮은 연료의 농도와 화염의 형상으로 인한 온도감소 효과로 하류에서 온도는 Lewis 수가 1이라는 가정으로 구한 온도보다 작은 값을 가지게 된다. Fig. 5의 온도분포는 이 영향을 잘 보여주고 있다.

본 연구에서 사용된 화학반응식 중 마지막 3개의 반응식은 Zel'dovich의 NO 생성 메커니즘을 적용한 것이다. Zel'dovich 메커니즘으로 생성되는 thermal NOx는 온도에 민감하기 때문에 예측한 대로 Fig. 13에서 보는 바와 같이 온도분포와 NO의 농도분포가 비슷한 경향을 나타내고 있음을 보여주고 있다. Lewis 수가 1이 아니라는 가정으로 계산한 경우에 대해서는 상류에서 높은 온도를 가지게 되므로 N_2 의 분자결합을 끊어 주는데 충분한 에너지가 존재하게 되어 이 영역에서 높은 NO 농도를 가진다. 반면에 Lewis 수가 1이라는 가정하에서 계산된 결과는 하류부분에서 높은 NO 농도를 가진다. Lewis 수가 1이라는 가정은 수송상태

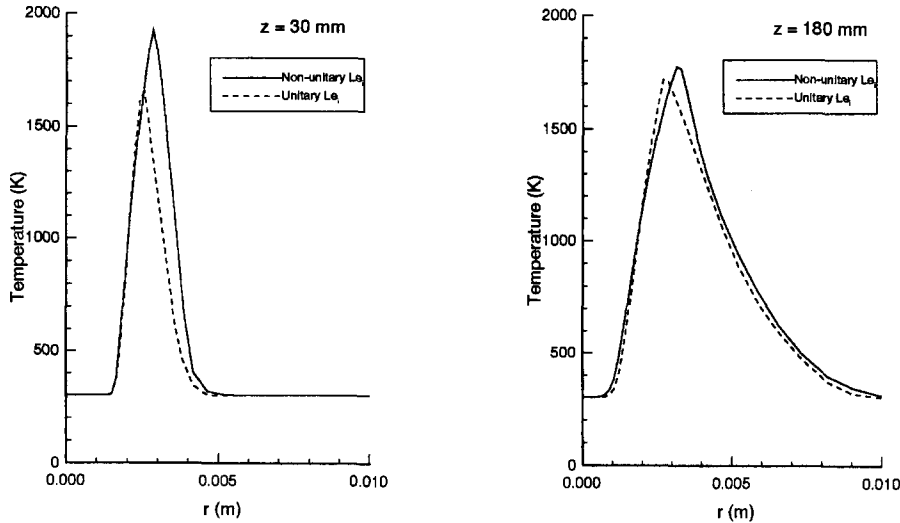


Fig. 16 Radial profiles of temperature (Ambient pressure=1 Mpa)

량을 정확하게 계산하지 못하고 이로 인해 화염구조를 제대로 예측하지 못해 NO의 분포에서 많은 차이를 가지게 된다.

고압상태에서 연소가 일어나는 가스터빈 연소기, 가솔린 및 디젤엔진, 그리고 로켓엔진의 경우에는 저압연소에 비해서 현저하게 다른 화염구조를 가지게 된다. 본 연구에서는 이러한 고압상태에서의 화염구조를 해석하기 위해 연소실 압력이 1MPa인 경우에 대하여 계산을 수행하였다. Fig. 14는 각각의 수송물성치를 나타낸 것이다. 각 물성치들은 온도의 함수이므로 온도에 따라 변화하며, 열전도계수나 점성계수는 압력에 큰 영향을 받지않으나 물질확산계수는 압력에 반비례 하므로 압력이 증가함에 따라 감소함을 알 수 있다. 이런 물성치로부터 Lewis 수의 분포를 구하면 Fig. 15와 같다. 압력이 증가한 경우 Lewis 수는 압력증가로 인한 밀도상승과 물질확산계수의 감소가 상쇄되어 압력이 낮은 경우와 비슷한 경향을 가진다. 물질확산계수의 감소로 인해 화염 근처에서 농도구배는 증가하게 되어 단위면적 당 물질확산 양은 증가하게 되므로 화학양론적인 조건을 만족시키기 위해 화염의 면적은 줄어들어야 한다. 이러한 이유로 화염의 위치는 낮은 압력의 경우보다 중심축 쪽으로 이동하고 또한 최고온도도 상승되며 화염의 폭도 감소하게 된다.

Fig. 16은 두 축방향 위치에서 반경방향의 온도 분포를 나타낸 것으로 이러한 현상을 잘 보여주고

있다. 또한 낮은 압력의 경우와 마찬가지로 Lewis 수가 1인 경우에는 상대적으로 낮은 최고온도와 좁은 화염폭을 가지며 최고온도를 가지는 화염면이 중심축에 훨씬 가깝게 형성됨을 알 수 있다. 연료노즐 출구에서 가까운 축방향 30 mm인 위치에서 온도분포를 살펴보면 Lewis 수가 1인 경우와 1이 아닌 경우 최고온도의 차는 압력이 낮은 경우보다 더 큰값을 가지며 이는 높은 압력의 연소조건에서 편중확산의 영향이 더 크게 나타남을 보여준다. 상대적으로 연료 노즐 출구에서 많이 떨어진 z=180 mm인 경우를 비교하면 화염의 최고온도의 차는 감소하지만 최고온도를 가지는 화염면의 위치의 차이는 하류쪽으로 갈수록 크게됨을 알 수 있다. Fig. 17은 압력이 높은 경우 Lewis 수의 차이로 인한 NO의 농도 분포특성을 나타내고 있다. 화염길이 크게 신장되는 고압상태의 경우에는 화염폭의 감소와 화염면 온도의 상승으로 인해 NO는 저압상태에 비해 축방향을 따라 훨씬 더 길고 좁은 영역에 걸쳐 분포하며 높은 농도분포를 가지고 있음을 알 수 있다. 그러나 압력이 낮은 경우와 마찬가지로 Lewis 수가 1인 경우와 그렇지 않은 경우 화염구조의 차이로 인해 Lewis 수가 1인 경우 연료노즐로부터 상대적으로 하류쪽에서 높은 온도를 예측함으로써 높은 NO의 농도를 가지며 연료노즐과 가까운 상류쪽의 화염장에서 NO의 농도분포를 과소 예측함을 알 수 있다.

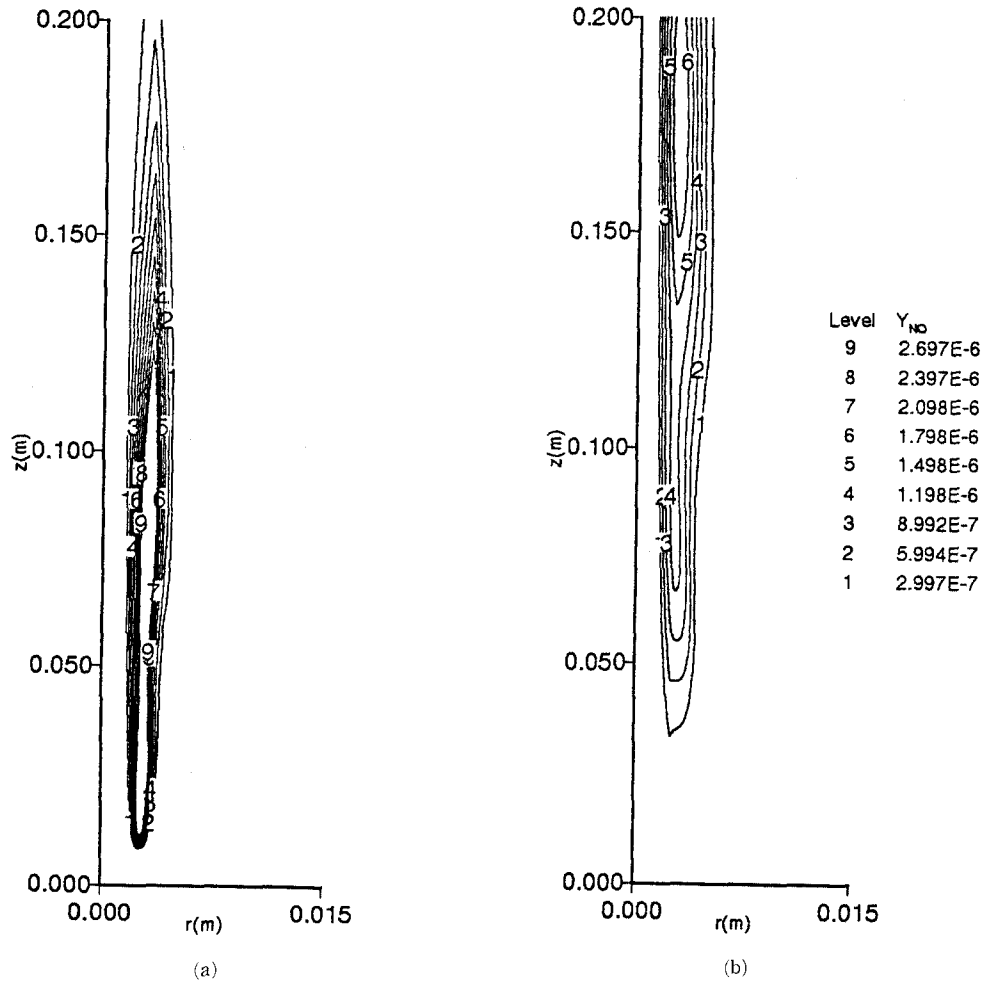


Fig. 17 Contour of NO mass fraction calculated (a) without and (b) with $Le_i=1$ assumption (Ambient pressure=1 Mpa)

7. 결 론

상세한 화학반응 메커니즘 및 가변물성치를 고려하여 수소 확산화염의 구조를 해석한 결과를 요약하면 다음과 같다.

(1) 상세 화학반응모델과 각 화학종의 전달과정을 층류 수소 확산화염에 적용하여 계산을 수행한 예측결과는 온도분포에 대한 실험치와 잘 일치하였다.

(2) 열 및 화학종에 대한 편중된 확산은 화염구조에 상당한 영향을 미치게 되며 이러한 현상은 Lewis 수가 1이라는 가정의 결과보다 상류에서는

높은 온도, 그리고 화염 끝(flame tip)부분 근처에서 낮은 온도를 예측하였고 또한 여러 실험에서 관찰된 화염 끝 열림(flame tip opening)현상을 잘 예측하였다.

(3) 수소 확산화염의 NO 분포특성은 Lewis 수에 따른 화염구조의 차이로 인해 현저하게 다른 NO 분포를 가지게 되며 특히 Lewis 수를 1로 가정하는 경우 고온의 화염영역이 연료 노즐로부터 상대적으로 하류쪽에 형성되기 때문에 연료노즐과 가까운 상류쪽의 화염장에서 NO 분포를 과소예측하였다.

(4) 높은 압력하에서의 연소는 물질확산양의 증가로 인해 온도구배가 커지고 화염의 위치가 이동

되며 또한 최고온도도 상승되는 결과를 낳았으며 고압하에서 편중확산의 영향이 더 크게 작용함을 알 수 있었다.

참고문헌

- (1) Burke, S. P. and Schumann, T. E. W., 1928, *Indust. Eng. Chem.*, Vol. 20, pp. 998~1004.
- (2) Veynante, D., Lacas, F. and Candel, S., 1991, "Numerical Simulation of the Transient Post Ignition Regime of a Turbulent Diffusion Flame," *AIAA Journal*, Vol. 29, pp848~851.
- (3) Peters, N., 1984, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non Premixed Turbulent Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 16, pp319~339.
- (4) Mizomoto, M., Asaka, Y., Ikai, S. and Law, C. K., 1984, *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 1933.
- (5) Law, C. K., Cho, P., Mizomoto, M. and Yoshida, H., 1986, *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 1803.
- (6) Katta, V. R., Goss, L. P. and Roquemore, W. M., 1994, "Effect of Nonunity Lewis Number and Finite-Rate Chemistry on the Dynamics of a Hydrogen-Air Jet Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 96, pp. 60~74.
- (7) Katta, V. R. and Roquemore, W. M., 1995, "On the Structure of a Stretched/Compressed Laminar Flamelet-Influence of Preferential Diffusion," *Combustion and Flame*, Vol. 100, pp 61~70.
- (8) Chen, L. D., Vilimpoc, V., Goss, L. P., Davis, R. W., Moore, E. F. and Roquemore, W. M., 1992, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 303.
- (9) Toshimi, T., Zhe, X. and Masaharu, K., 1995., "Preferential Diffusion Effects in Diffusion Flames," *Modeling in Combustion Science* (Edited by Buckmaster, J. and Takeno, T.), Springer-Verlag, Berlin, pp. 107~117.
- (10) Kee, R. J., Miller, J. A. and Jefferson, T. H., 1980, "CHEMKIN : A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package," *Sandia Report*, SAND80-8003.
- (11) Chase, M., 1986, *JANAF Thermodynamic Tables*, 3rd edition, American Chemical Society and American Institute of Physics for the National Bureau of Standards.
- (12) 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 Report*, SAND83-8920.
- (13) Kim, Y. M., Chen, C. P., Ziebarth, J. P., and Chen, Y. S., 1994, "Prediction of Fast Transient Spray-Combustion Flows," *Numerical Heat Transfer*, Vol. 25, pp. 21~42.
- (14) Chakravarthy, S. R. and Osher, S., 1985, "A New Class of High Accuracy TVD schemes for Hypersonic Conservation Laws," AIAA-85-0363, 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno, NV.
- (15) Komiyama, M., Kema, T. and Takagi, T., 1990, "Measurements of OH Concentration and Temperature in Diffusion Flame by Excimer Laser-Induced Fluorescence and Rayleigh Scattering," *Trans. of JSME*, Vol. 56, No. 523, pp. 810~816.