

화염 구조에 미치는 연료 및 당량비에 관한 연구

A Study on the Influence of Equivalence Ratio and Kinds of fuel in Flame Structure

박상규*, 최낙정**, 山下博史***
S.K. Park, N.J. Choi, H. Yamashita

ABSTRACT

In order to clarify the effect of equivalence ratio and kinds of fuel in flame structure, a numerical simulation of triple flame developed in a co-flowing methane-air and air stream was carried out by the elementary chemical reaction mechanism. The following conclusions were obtained.

Equivalence ratio at which the apparent burning velocity is maximum is a little larger than that of the one-dimensional premixed flame. Apparent burning velocities are two times higher than that of the one-dimensional premixed flame for the methane-air. The flame thrusts out forward in the downstream of the boundary between mixture and air stream, and a part of the flow is bent and forks out in this protruding flame so that a triple flame is originated; this triple flame is composed of fuel rich and lean premixed flame branches and a diffusion flame branch. Near the equivalence ratio at which the burning velocity of one-dimensional premixed flame is the largest, the effect of one-dimensional premixed flame becomes large and the fuel rich premixed flame advances and becomes vertical to the flow direction.

주요기술용어 : Numerical analysis(수치해석), Fuel-rich premixed flame(과농예혼합화염), Fuel-lean premixed flame(희박예혼합화염), Flame structure(화염구조), Diffusion flame(확산화염), Equivalence ratio(당량비), Kinds of fuel(연료의 종류)

기호설명

C_p : 정압비열	$J/(kg \cdot K)$
D : 확산계수	m^2/s
h : 엔탈피	J/kg
p : 압력	Pa
R^0 : 분출연료 가스정수	$J/(K \cdot mol)$
t : 시간	Sec
λ : 열전도율	$W/(m \cdot K)$
μ : 점도	$Pa \cdot s$
ρ : 밀도	kg/m^3
ω : 무차원 물생성속도	

1. 서론

연료와 산화제의 폭넓은 혼합상태하에서 형성되는 Triple flame은 농도구배가 있는 예혼합기에서 형성되는 화염이고, 그 화염구조는 과농 및 희박 2개의 예혼합화염과 그 사이에 형성되는 확산화염의 3개 화염으로 구성된다. 이 화염은 떠오르는 분류 확산 화염의 화염끝부분에 형성된다고 알려져 있지만 국소적인 소염현상에 의해 연료와 산화제의 혼합이 이루어진 위치에서 재착화에 의해 형성되기 때문에 비정상 난류 확산 화염에 있어서 중요한 요소의 하나로 알려져 있다. 이 화염에 대한 연구로는 Phillips 등⁽¹⁾과 Lieberman 등⁽²⁾의 연구를 시작으로 총괄반응에 기초한 점근해석, 상사해, 직접수치해석 등 이론적인 연구가 주로 행하여지고 있으며⁽³⁾⁻⁽⁶⁾, 혼합분

* 우석대학교, 자동차공학과

** 익산대학, 자동차과

*** 나고야대학 기계공학과

울의 폭방향 구배나 발열에 의한 팽창의 효과 등이 검토되고 있다.

그러나 본래 Triple flame은 화염을 정확히 예측하기 위해서는 소반응에 기초하여 상세한 해석을 할 필요가 있다. 이러한 해석은 Prasad, Price⁽⁷⁾와 Smooke, 등⁽⁸⁾의 수치해석에 의한 기초적 연구가 있을 뿐, 화염구조의 상세한 검토는 행하여지지 않고 있다. 그리고山下⁽⁹⁾는 Smooke⁽¹⁰⁾가 제안하고 있는 메탄-공기의 Skeletal Chemistry를 이용하여 연료분류 확산화염에 있어서 형성되는 통상의 Triple flame에 관하여 검토하였다. 그러나 분류에서는 연료와 산화제의 혼합이 불충분하고 예혼합화염에 비하여 확산화염의 영향이 크기 때문에 Triple flame구조를 상세히 검토하는 것은 어렵다. 따라서 본 연구에서는 메탄과 수소의 혼합기 입구에서의 당량비 변화에 대한 과농예혼합기와 공기의 평행류 하류에 형성되는 Triple flame 구조를 모델로 하여 수치계산을 수행하였다. 또한 입구에서의 유입속도를 Triple flame의 걸보기 연소속도로 정의하고 물리량 Mixedness 및 Flame index를 사용하여 화염구조를 평가하였다.

2. 해석 모델

본 연구에 이용한 2차원 해석모델과 경계조건을 Fig. 1에 표시한다. 연료-공기의 과농예혼합기, 순수공기 사이를 농도가 선형적으로 변화하는 혼합기의 평행류를 계산영역의 좌측으로부터 유입시켜, 그 하류측에 Triple flame이 형성되도록 하였다.

Triple flame이 시작되는 위치를 원점"o"로 하는 2차원 직각좌표계를 설정하고, 흐름방향을 x 좌표, 폭방향을 y좌표로 하였다. 여기서 u와 v는 축방향과 폭방향의 속도성분이고, 또 T와 Y_i는 온도 및 화학종 i의 질량분율이다. 입구의 p점에서 하부를 과농예혼합기로 하고 일정한 속도 u₀, 온도 T₀, 농도 Y_{i,0}로 하였다.

한편, q점의 상부를 공기로 하고, u_∞, T_∞, Y_{i,∞}(Y_{O_{2,∞}} = 0.232, Y_{N_{2,∞}} = 0.768)로 하

였으며, p점과 q점 사이의 농도는 선형적으로 변화하도록 하였다. 압력은 대기압이고 온도는 실온으로서 T₀ = T_∞ = 300 K(온도비 T_∞/T₀ = 1)이다.

유입속도는 메탄은 u₀ = u_∞ = 0.58~0.95 m/s (u_∞/u₀ = 1.0)이고, 수소의 경우 u₀ = u_∞ = 11.0~14 m/s로 하였으며, Triple flame의 선단이 y축상에 위치하도록 미세 조정하면서 결정하였다.

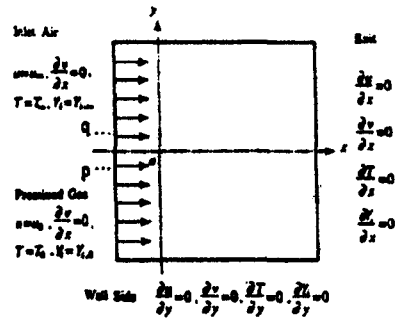


Fig. 1 Boundary condition and analytical model of triple flame

반응기구는 메탄의 경우는 Smooke⁽⁸⁾ 등의 Skeletal Chemistry를 이용하였고, 16개의 화학종에 관하여 35개의 소반응을 고려하였으며⁽¹⁰⁾, 수소의 경우는 9개의 화학종에 대하여 소반응을 고려한 Gutheil 등의 상세 소반응기구⁽¹¹⁾를 사용하였다. 열역학 정수는 각 화학종의 정압 비열 C_{p,i}를 적당한 온도범위에서 최소 자승법에 의해 근사 값을 구한 온도의 다항식으로 계산하였다⁽¹²⁾.

본 연구의 해석을 위하여 적용한 가정은 다음과 같다.

- 혼합기는 이상기체로 한다.
- Soret효과, Dufour효과 및 압력확산효과는 무시한다.
- 외력은 작용하지 않으며, 체적팽창계수 α = 0으로 한다.
- 에너지방정식에서 점성일과 D_p/D_t는 무시한다.
- 상태방정식에서 압력은 일정하다.

위와 같은 가정하에 다음에 표시한 연속방정식, Navier-Stokes 방정식, 에너지방정식, 각 화학종의 연속방정식 및 상태방정식을 본 연구의 지배 방정식으로 이용하였다⁽⁹⁾.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho u_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} u_m) - \nabla \cdot (\mu \nabla u_m) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial x_m} - \rho g_m + \left(-\frac{\partial \mu}{\partial x_m} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \mu}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_m} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} T) - \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \\ & = \frac{1}{c_p} \frac{Dp}{Dt} - \frac{1}{c_p} \sum_i h_i \omega_i - \frac{e}{c_p} \sum_i c_{p,i} Y_i V_i \cdot \nabla T \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) \\ & = -\omega_i - \nabla \cdot (\rho (Y_i V_i + D_i \nabla Y_i)) \end{aligned} \quad (4)$$

$$p = \rho R^0 T \sum_i \frac{Y_i}{m_i} \quad (5)$$

그리고, 혼합분을 Z는 연료 메탄(CH₄), 수소(H₂), 산화제 O₂로 하는 총괄1단계 비가역 반응에 기초하여 다음 식과 같이 질량분율로서 정의하고, 순수 연료는 1, 공기에서는 0이 되도록 정규화 하였다.

$$Z = \frac{Y_N - Y_{N_{2,\infty}}}{Y_{N_{2,0}} - Y_{N_{2,\infty}}} \cdot Y_{N_{2,0}} = \frac{j}{\phi + j(i+1)},$$

$$Y_{N_{2,\infty}} = 0.768, \quad i = \frac{Y_{N_{2,\infty}}}{Y_{O_{2,\infty}}}$$

여기서, j는 단위질량의 연료를 완전연소시킬 때 필요한 산화제의 질량으로 메탄의 경우는 4이며, 수소는 8이다. 입구측에서 혼합분율의 폭 방향구배 $-\partial Z / \partial y|_{inlet}$ 는 다음과 같이 표시된다.

$$-\frac{\partial Z}{\partial y} \Big|_{inlet} = -\frac{Z_q - Z_p}{y_q - y_p},$$

$$Z_p = Z|_{y_{m,p}}, \quad Z_q = Z|_{y_{m,q}}$$

본 해석의 경우 비교를 위하여 $-\partial Z / \partial y|_{inlet}$ 의 값을 Table 1에 표시하였으며, 이 값은 ϕ 가

크면 클수록 크게 된다.

Table. 1 Equivalence ratio and $-\partial Z / \partial y|_{inlet}$

ϕ	1	2	4	10	∞	
$1/\phi$	1	0.5	0.25	0.1	0	
$-\partial Z / \partial y _{inlet}$ (m ⁻¹)	CH ₄	27	52	94	184	500
	H ₂	14	27	52	112	500

3. 수치계산방법

기초방정식의 이산화는 유한체적법⁽¹³⁾를 이용하였으며, 압력의 계산은 Patankar의 SIMPLE법⁽¹³⁾(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)을 적용하였다. 대류항에는 1차풍상법(1st upwind method), 시간방향에는 Euler의 완전음해법(Implicit method)을 적용하고, 시간간격 $\Delta t = 10 \sim 30 \mu s$ 로 하였다.

착화를 위하여 초기시각에서 원점 근방에 고온부를 설정하고 안정된 화염이 형성된 후 이것을 제거하였으며, 정상해는 이때부터 충분한 시간이 경과한 후 구하였다. 각 시간 간격은 SOR(Successive over-relaxation method)에 의한 반복계산을 행하고, 완화계수는 전부의 변수에 대하여 0.07 정도로 하였다. 계산영역의 크기는 $x = -2.7 \sim 9.6 \text{ mm}$, $y = -6.1 \sim 6.1 \text{ mm}$ 로 하였으며, q점 및 p점의 y좌표는 $\pm 1 \text{ mm}$ 로 하였다.

계산격자수는 x 및 y방향에 각각 81×121 로 하였으며, 원점부근에서 최소격자간격 $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$, $\Delta y = 0.05 \text{ mm}$ 로 하고 부등간격 격자를 적용하였다.

4. 계산결과 및 검토

4.1 화염의 걸보기 연소속도

Fig. 2는 계산영역에 유입하는 평행류의 유입속도 u_0 를 Triple Flame의 걸보기 연소속도로 정의하고 u_0 와 Triple Flame의 화염속도 $u_b (= \rho u_i / \rho_{t_0})$ 와 일차원 예혼합화염의 연소속도를 비교하였다. 어느 연료의 경우에도 u_0 는 일차원 예혼합화염의 최대 연소속도 보다 크지

않은 것을 알 수 있고, u_{f0} 와 u_0 를 비교하면 당량비에 대한 관계는 정성적으로 비슷하지만 값은 일치하지 않는다.

또 일차원 예혼합화염의 연소속도는 메탄의 경우 당량비 증가와 함께 증가하고 당량비가 1.1의 경우 최대가 되고, 당량비가 증가함에 따라 감소하는 것을 알 수 있다. 수소의 경우에는 당량비 2.0일 때 최대가 되고 그 이상의 당량비에서는 연소속도가 감소하는 것을 알 수 있으며, Triple Flame의 겹보기 연소속도는 메탄의 경우 당량비 증가와 함께 증가하고 당량비 1.5일 때 최대값이 된다. 1.5이상의 당량비에서는 1차원 예혼합 화염의 연소속도 변화와는 다르게 완만한 감소를 하고 있으며 수소의 경우도 같은 경향을 표시하고 있다. 어떤 연료의 경우에도 일차원 예혼합화염과 Triple Flame의 연소속도가 최대로 되는 당량비가 존재하고 최대 연소속도를 갖는 당량비가 1차원 예혼합화염의 경우에 비해 Triple Flame의 경우가 약간 큰 값을 갖고 있는 것을 알 수 있다.

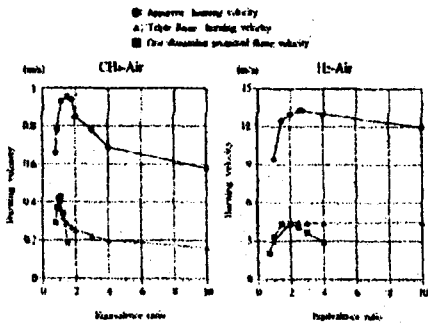


Fig. 2 Relation of equivalence ratio and burning velocity

Fig. 3(a),(b)는 각연료에 따른 온도분포와 속도벡터를 표시한 것으로 그림에서 알 수 있는 바와 같이 화염의 상류측에 불룩하게 돌출한 부분이 있는데 이것은 입구로 유입한 평행류 하류에 형성되는 화염의 발열로 인한 유체역학적 효과때문인 것으로 보인다. 따라서 화염끝에서 흐름방향의 속도성분이 적게 되고 있다.

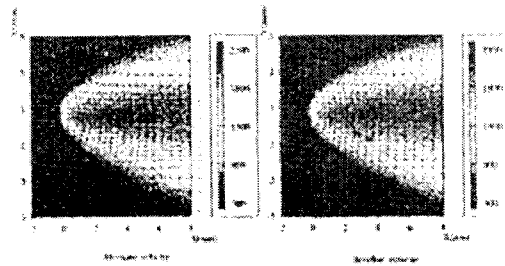


Fig. 3(a) Spatial distribution of temperature and velocity vector(CH₄)

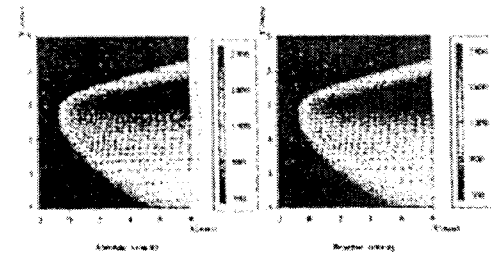


Fig. 3(b) Spatial distribution of temperature and velocity vector(H₂)

Fig. 4(a)~(d)는 최대 연소속도가 되는 당량비 근방에 있어서 질대속도벡터를 표시한 것이다. 입구에 수직하게 유입한 평행류의 유입속도가 화염의 상류측에 불룩하게 돌출한 부분에서 양쪽으로 구부러지는 것에 의해 증가하고 있으며 메탄, 수소의 경우도 겹보기 연소속도가 최대가 되는 당량비에서 평행류가 양쪽으로 크게 구부러지는 것을 알 수 있다. 어느 연료에서도 당량비가 적게 되면 일차원 예혼합화염의 경우에는 연소속도가 보다 큰 경우에 상당하기 때문에 과농예혼합기 쪽의 화염이 전진하고 거기에 수반하여 흐름의 방향이 한 방향으로 기울어지고 있는 것을 알 수 있다. 그 결과 화염의 흐름에 대하여 영향을 주는 당량비는 메탄이 1.5, 수소는 2.5일 때 가장 크게 되지만 당량비에 의한 일차원 예혼합화염적 효과와 유체역학적 효과가 중복되고 Triple Flame에서는 일차원 예혼합화염의 연소속도가 최대로 되는 당량비에서 유체역학적 효과가 약하게 되기 때문에 최대 연소속도를 갖는 당량비가 일차원 예혼합화염의 경우에 비하여 약간 크게 된다고 생각할 수 있다. 또

한 일차원 예혼합화염의 연소속도에 대한 Triple Flame의 걸보기 연소속도의 변화의 비율이 메탄의 경우에는 2배 강하고, 수소의 경우에는 3배 강하며 수소인 경우가 유체역학적 효과와 변화의 비율이 큰 것을 알 수 있다.

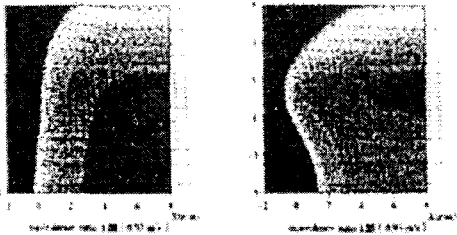


Fig. 4(a) Comparison of absolute velocity for different equivalence ratios (CH₄-Air)

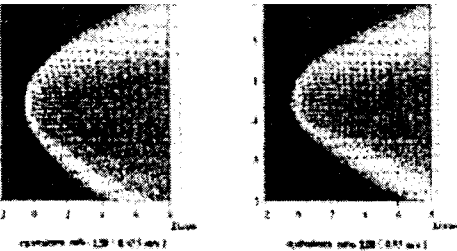


Fig. 4(b) Comparison of absolute velocity for different equivalence ratios (CH₄-Air)

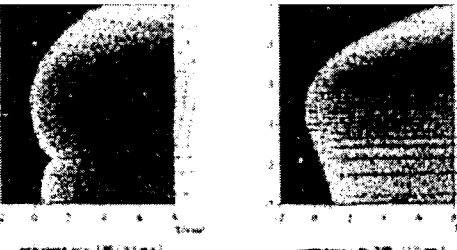


Fig. 4(c) Comparison of absolute velocity for different equivalence ratios (H₂-Air)

4.2 화염구조에 미치는 물리량

Fig. 5~8은 연료의 종류에 의한 화염의 구조를 명확히 하기 위하여 다음식으로 정의된 2개의 물리량 Mixedness 및 Flame index의 분포를

표시하였다.

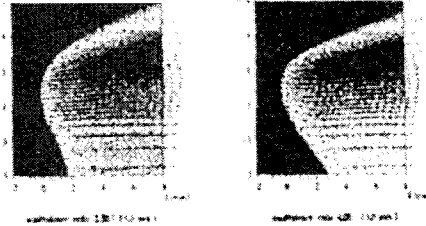


Fig. 4(d) Comparison of absolute velocity for different equivalence ratios (H₂-Air)

Mixedness :

$$Z_{\phi} = \frac{Y_o}{j} (Y_o/j \leq Y_F) \quad : \text{과농예혼합기}$$

$$Z_{\phi} = -Y_F (Y_o/j \geq Y_F) \quad : \text{희박예혼합기}$$

Flame index :

$$G_{FO} = \text{grad } Y_F \cdot \text{grad } Y_O \quad (a/a_{\text{max}} > 0.001)$$

$$G_{FO} > 0 \quad : \text{예혼합화염}$$

$$F_{FO} > 0 \quad : \text{확산화염}$$

Fig. 5, Fig. 6 은 메탄의 경우 각 당량비에 있어서 Mixedness 분포와 Flame index의 분포를 표시하였다. Fig.5에서 알 수 있는 것처럼 극소당량비 증가하면 과농예혼합기와 희박예혼합기의 분포 및 확산화염이 존재하는 것을 확인할 수 있고 예혼합기의 당량비가 1.0의 경우 과농예혼합기가 존재하지 않기 때문에 확산화염은 존재하지 않는다.

Fig. 6 은 당량비가 크게되면 확산화염의 분포를 표시하는 음(-)의 영역이 강조되고 당량비가 4.0의 경우 예혼합화염을 표시하는 정(+)의 영역이 음(-)의 영역보다 강조되어 나타나고 있다. 한편 당량비가 1.0, 2.0과 같이 양론혼합기에 가까워지면 확산화염은 거의 소멸되고 예혼합화염만이 되는 것을 알 수 있다

Fig. 7, Fig. 8은 수소의 경우 각 당량비에 있어서 Mixedness 분포와 Flame index의 분포를 표시하였다. Fig. 5 와 같이 과농과 희박예혼합기, 확산화염이 존재하는 양론혼합기의 부분이 표시되어 있으며 희박예혼합기와 확산화염의 거리가 가까워진 구조로 되어있는 것을 알 수 있다.

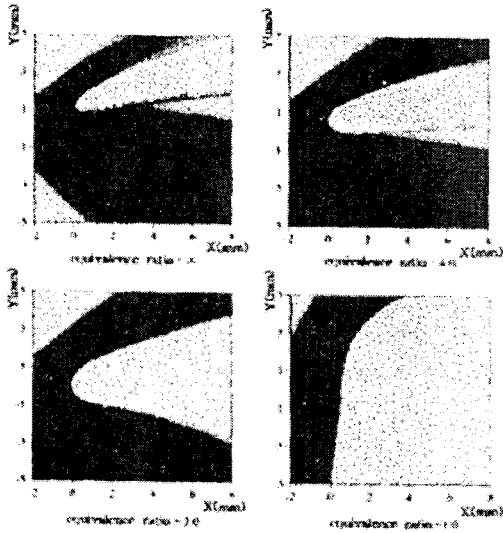


Fig. 5 Spatial distribution of physical quantity (mixedness) for different equivalence ratios (CH₄)

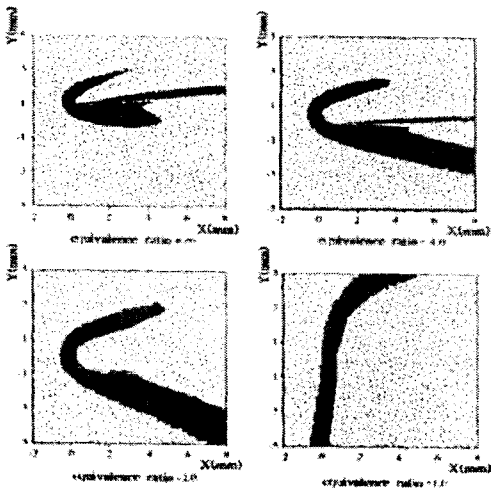


Fig. 6 Spatial distribution of physical quantity (flame index) for different equivalence ratios (CH₄)

Fig. 8은 수소-공기계에서 형성되는 Triple flame은 당량비가 양혼합비보다 클 때 확산화염이 희박한 쪽에 존재하고 강하게 형성되어있는 것을 알 수 있다. 수소-공기계의 Triple flame은 메탄-공기계와 같이 과농예혼합기의 당

량비가 적어짐에 따라 과농예혼합기측의 화염이 전진하고 흐름방향에 대하여 거의 수직이 되며 확산화염은 적게된다. 또한 1.0에 가까워지면 메탄, 공기계에서 나타나지 않았던 비정상 잔물결형상의 화염이 나타나는 것을 알 수 있고 이 현상은 메탄보다 수소가 유입속도가 크고 화염이 불안정하기 때문이라고 생각된다.

5. 결론

본 연구는 화염구조에 영향을 미치는 연료의 종류 및 당량비의 효과를 조사하기 위하여 Triple flame을 선택하였으며 상세한 소반용기구를 고려한 수치해석 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) Triple flame의 걸보기 연소속도가 최대가 되는 당량비는 연료의 종류에 따라 다르다.
- (2) 1차원 예혼합화염의 연소속도에 대한 Triple flame의 걸보기 연소속도의 변화의 비율은 수소가 크다.
- (3) 과농예혼합기의 당량비와 연료의 종류에 따라 Triple flame의 화염구조는 다르다.

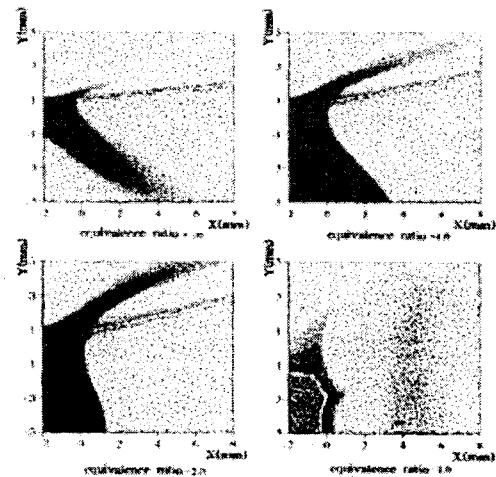


Fig. 7 Spatial distribution of physical quantity (mixedness) for different equivalence ratios (H₂)

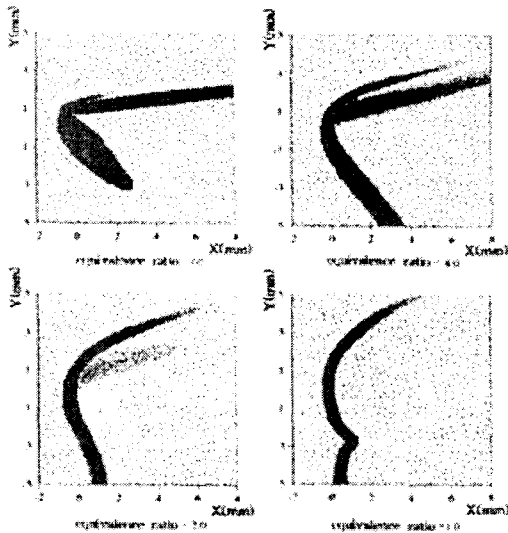


Fig. 8 Spatial distribution of physical quantity (flame index) for different equivalence ratios (H_2)

참 고 문 헌

(1) Phillips, H., "Flame in a Buoyant Methane Layer", Tenth Symposium(International) on Combustion, The combustion institute, pittsburgh, pp. 1277~1283, 1965.
 (2) Liebman, I., Corry, J. and Perlee, H. E., "Flame Propagation in Layered Methane-Air Systems", Combustion Science and Technology, Vol. 1, pp. 257~267, 1970.
 (3) Dold, J. W., "Flame Propagation in a Nonuniform Mixture : Analysis of a Slowly Varying Triple Flame", Combustion and Flame, Vol. 76, pp. 71~88, 1989.
 (4) Kioni, P. N., Rogg, B., K. N. C. Bray and Linan, A., "Flame Spread in Laminar Mixing Layers : The Triple Flame", Combustion and flame, Vol. 95, pp. 276~290, 1993.
 (5) Ruetsh, G. R., Vervisch, L. and Linan, A., "Effects of heat release on triple flames", Phys. Fluids, Vol. 7, pp. 1447~1454, 1995
 (6) Domingo, P. and Vervisch, L.,

"Non-premixed flame in ignition in turbulent flows, triple flames", The 26th Symposium(International) on Combustion, The combustion institute, pittsburgh pp. 233-240, 1996.

(7) Prasad, K. and Price, E.W., "A Numerical Study of the Leading Edge of Laminar Diffusion Flames", Combustion and flame, Vol. 90, pp. 155~173, 1992.

(8) Smooke, M.D., Xu, Y., R.M., Lin,P., Frank, H. and Long, M. B., The 24th Symposium (International) on Combustion, The combustion institute, Pittsburgh, pp. 813~821, 1992.

(9) 山下博史, "噴流擴散火炎における Triple Flameに関する研究", 第33回燃焼シンポジウム前刷集, pp. 341~343, 1995.

(10) Smooke, M. D., "Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames", Springer-Verlag, 1991.

(11) Gutheil, E., Balakrishnam, G. and Williams, F.A., "Reduced Kinetic Mechanisms for applications in combustion systems", Eds. Peter, N. and Rogg, B., Springer-Verlag, pp.177, 1993,

(12) Kee, R. J., Rupley, F.M. and Miller, J.A., CHEMKIN-II: A Fortran chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase chemical kinetics, SAND89-8009, 1989.

(13) Patankar, S. V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, 1980.