

밀폐된 원통형 분무 연소기내의 자연발화 현상에 관한 수치적 연구

최지훈*, 백승욱**
(1999년 1월 7일 접수)

A Numerical Study of Autoignition in a Confined Cylindrical Spray Combustor

Ji Hun Choi and Seung Wook Baek

Key Words : Autoignition (자연발화), Spray Combustion (분무연소), Two Phase (이상), PSI-Cell (Particle Source in Cell), Cylindrical Combustor (원통형 연소기)

Abstract

In this study, the autoignition process of liquid fuel, injected into hot and stagnant air in a 2-D axisymmetric confined cylindrical combustor, has been investigated. Eulerian-Lagrangian scheme was adopted to analyze the two-phase flow and combustion. The unsteady conservation equations were used to solve the transition of the gas field. Interactions between two phases were accounted by using the particle source in cell (PSI-Cell) model, which was used for detailed consideration of the finite rates of transports between phases. And infinite conduction model was adopted for the vaporization of droplets. The results have shown that the process of the autoignition consists of heating up of droplets, vaporization, mixing and ignition. The ignition criteria could be determined by the temporal variations of temperature, reaction rate and species mass fraction. And the effects of various parameters on ignition phenomena are examined. These have shown that the increasing the reaction rate and/or the vaporization rate can reduce the ignition delay time.

기호설명

A	:	Arrhenius 상수, $m^3/mol/s$
A_d	:	액적의 단면적, m^2
B	:	Spalding의 전달 계수
C_d	:	액적의 항력 계수
C_p	:	비열, $J/kg/K$
d	:	액적의 입경, m
D	:	확산 계수, m^2/s
dV_ϕ	:	종속 변수에 대한 제어 체적, m^3
E_a	:	활성화 에너지, J/mol
h	:	엔탈피, J/kg
k	:	기체의 열전도 계수, $W/m/K$
L	:	연료의 증발 잠열, J/kg
n	:	액적군에 포함된 액적의 개수

Nu	:	Nusselt 수
p	:	압력, Pa
Pr	:	Prandtl 수
R_f	:	반응율, $kmol/m^3/s$
R'	:	기체상수, $8.314 J/mol/K$
Re	:	Reynolds 수
S_ϕ	:	종속 변수에 대한 생성항
u	:	축방향 속도, m/s
\bar{U}	:	속도 벡터, m/s
v	:	반경방향 속도, m/s
x	:	축방향 거리, m
y	:	반경방향 거리, m
Y	:	질량 분율
Y_f	:	액적 표면에서의 연료 질량 분율

그리스문자

ϕ	:	종속변수
μ	:	점성, $N\cdot s/m^2$

* 한국과학기술원 항공우주공학과 대학원

** 회원, 한국과학기술원 항공우주공학과

- Γ : 확산 계수
- v : 화학양론비
- θ : 분사각, degree
- ρ : 밀도, kg/m³

하첨자

- c : CO₂
- d : 액적
- f : 연료
- g : 기체장
- h : H₂O
- i : 화학종
- inj : 액적군
- o : 산화제

1. 서론

분무 연소는 다양한 연료에 대한 적용성과 높은 응답성 및 고부하 연소의 구현 등의 이유로 디젤 엔진, 가스 터빈 연소기, 산업용 보일러, 불꽃 점화 기관, 액체 로켓 엔진 등과 같은 실용적 시스템에 광범위하게 응용되고 있다. 분무 연소는 액체연료의 미립화, 미립화된 액적의 메워짐 및 증발, 혼합, 점화, 연소의 과정들로 구성되어지며, 각 과정들에는 상(phase)간의 상호작용, 화학반응, 화염의 전파, 복사 열전달 등의 현상들이 관계한다. 특히 주요 열방출 과정인 연소를 시작하는 과정인 점화는 분무 연소의 전반에 관여하는 중요한 과정으로, 시스템의 성능을 결정하는 주요한 요소이다. 빠르고 잘 제어된 점화는 시스템의 효율 및 오염 물질의 생성에 중요한 영향을 준다. 따라서 자연 발화에 의한 점화 현상을 이해와 점화의 성능 및 점화 지연에 관계하는 물리적 또는 화학적 변수의 영향을 파악하기 위한 접근이 필요하다.

분무 연소를 구성하는 미립화, 혼합, 증발, 점화 및 연소를 수치적으로 모사하기 위해서는 저온 및 고온에서의 화학적 거동과 유체 역학, 상 변화, 이상(two-phase)간 열 및 물질 전달 등을 포함하는 연구가 수행되어야 한다. 또한 점화 현상은 본질적으로 비정상(transient)하에서 일어나는 까닭에, 점화의 연구에서는 다양한 비정상 연소 현상들이 모두 포함되어야 한다. 특히 액체 분무의 경우에 액체가 불연속적인 액적군의 상태로 연속적인 상태의 기체속을 흘러가는 유동 형태를 가지게 되므로, 액적과 기체장 사이의 서로 다른 두 상을 연관시키는 문제에 관한 연구는 중요한 의미를 가진다. 이를 모사하는 모델은 크게 기상과 액상이 동적, 열적 평형 상태에 있다고 가정하는 LHF 모델

과, 두 상간의 열 및 물질 전달을 고려한 SF 모델로 나눌 수 있다.⁽¹⁾ 기상과 액적을 모두 연속체로 생각하여 극부적으로 균일하게 고려하는 LHF 모델과 달리 SF 모델은 오일러리안-라그랑지안 방법(Eulerian-Lagrangian approach)으로, 연속상과 분산상을 구분하여 생각한다. 따라서 액적의 존재로 발생하는 추가적인 방정식들에 대한 복잡성에도 불구하고 실제적인 분무 액적의 정량적 예측을 가능케 한다.⁽²⁾ 본 연구에서 사용된 모델은 SF 모델의 하나로 후술할 것이다.

점화 현상은 무반응 상태에서 반응 상태로 빠르게 천이하는 현상이다. 이러한 천이를 만드는 여러 요소들은 크게 외부적 자극과 내부적 요인으로 구분할 수 있다.⁽³⁾ 외부적 자극에 의한 연소는 열에너지의 교환, 화학적 자극, 충격이나 마찰 따위의 기계적 자극등에 의한 혼합기의 국소 가열이 주 원인이 되지만, 내부적 요인에 의한 연소(자연 발화)는 일반적으로 혼합기의 전체적 가열에 의하게 된다. 연구를 수행하기 위해 자연 발화 특성을 표현하는 방법으로 점화 지연 시간을 사용할 수 있다. 점화는 혼합기에서의 발열반응 시작이나 화염의 출현 등으로 정의할 수 있지만 액체 분무에서의 점화 현상은 액적의 개별 점화와 액적 다발의 점화, 분무의 점화가 복합적으로 연관되기 때문에 점화의 시점을 판단하는 것은 대단히 복잡하며, 원하는 조건에 따라 다양한 방법들이 적용된다. 점화 지연은 이상 특성과 분무 특성등의 다양한 요인들에 의해 복합적으로 지배 받는다. 따라서 각 매개 변수들의 변화에 따른 현상의 추이를 관찰하면, 점화 현상에 관한 구체적인 정보를 얻을 수 있다.

자연발화에 관한 실험적 연구는 정적 밀폐계에서의 점화, 고온 공기 균일 유동에 분무한 액적의 점화 및 충격파관에서 분무의 점화로 구분할 수 있다. 각각의 연구들은 연료 분무의 특성에 따라 액적의 입경 분포와 연료의 조성 등의 영향을 연구하고 있으며, 주변 유동의 성질에 따른 변화도 수행되고 있다. 하지만 이론적 해석을 검증할만한 표준이 정립되어 있지 않으며 점화 기준에 관한 일반적인 정의도 존재하지 않고 있다.⁽⁴⁾ 따라서, 이론적 연구를 위하여 독자적인 조건들이 필요하며, 현상을 해석하기 위하여 물리적으로 타당한 기준의 설정이 요구된다. 자연 발화 현상의 이론적 연구들은 간단한 현상학적인 모델들⁽⁵⁾부터 단단계 또는 단단계 반응을 적용한 파도적 1차원 모델이나 단단계 또는 간소화된 단단계 반응을 적용한 고차원에서의 문제 해석까지를 주로 다루고 있다. 1차원 모델의 경우 단일 액적에 대해 균일한 유

동을 붙여주어 단단계 또는 다단계 반응을 모사하는 형태^(6,9)와 연료와 산화제의 균일한 혼합기가 분포되어 있는 경우^(7,8)를 다루는 형태 등이 보여진다. 그러나 1차원 모델의 경우 실제 연소기 내에서 벌어지는 다양한 현상들을 모두 모사할 수 없다. 실제의 연소기에서 분무 액적들의 거동은 항상 비균일한 조건하에서 이루어지며, 유동장과 액적들 사이에서 다양한 형태로 영향을 주고받게 된다. 따라서 연소기 내의 점화 및 연소 현상을 정확히 모사하기 위해서는 고차원에서 유동장을 포함한 해석과, 유한 전달율에 관한 믿을만한 모델이 모두 포함되는 연구가 요구된다. 고차원 좌표계를 갖는 모델의 경우는 기체연료를 분사하는 경우⁽¹⁰⁾나 액적을 균일 유동에 실어 보내는 방법⁽¹¹⁾ 등이 사용되고 있다. 기체 연료를 이용한 연구는 점화, 연소 현상의 가장 중요한 요소인 액적의 증발을 생략하는 것으로 엄밀한 의미에서 분무 연소의 모사라 할 수 없다. 균일 유동에서의 연구는 정상 상태의 연소를 구현하여 점화 지연을 분무 노즐로부터 화염면까지의 거리와 액적의 운동과의 관계로 표현한 것으로 엄밀한 의미에서의 자연 발화를 표현한 것이라 볼 수 없다.

본 연구에서는 밑폐된 원통형 정적 연소기에서 노즐을 통해 고온 기체 속으로 분무된 액체 연료의 증발과 혼합 및 연소, 주변 기체의 영향 등을 물리적 간략화를 통해, 점화의 관점에서 액적과 기체장 모두 비정상 상태로 모사한다. 유동장의 해석에는 수정된 TEACH 코드를 사용하고, 상간의 유한 전달율의 모사에는 PSI-Cell 모델을, 액적의 증발에는 무한 전도도 모델을 사용한다. 연소기 내부에 분무된 액적이 증발, 혼합하여 점화에 이르기까지의 과정을 관찰하고, 이를 토대로 타당한 점화의 시점을 파악하여 정의하며, 점화에 영향을 미치는 인자들을 파악하고, 각 인자들에 의해 나타나는 영향의 정도를 평가하는 것을 본 연구의 목적으로 한다.

2. 지배방정식

본 연구의 개략도를 Fig. 1에 제시하였다. 분무된 액체 연료는 연소기 내에서 다양한 경험을 하게 된다. 먼저 노즐에 의해 미립화된 액적들은 고요하고 뜨거운 공기를 지나면서 주위로부터 열을 받아 증발 온도에 도달하고, 곧 증발을 시작하여 기체화되어 주변 공기와 섞여 점화가 발생한다. 이와 같은 2차원 축대칭 연소실 내부의 현상들을 체계적으로 해석하기 위하여 이하에 제시하는 방정식들을 해결하여야 한다.

계산을 수행하기 위하여 도입한 가정들은 다음과 같다. (1) 비정상 (unsteady) 축대칭 연소기. (2) 계산 조건의 Re 수가 크지 않으므로 난류 효과를 무시한다. (3) 액적은 항상 구형을 유지한다. (4) 분무는 회박하여 서로 부딪히거나 깨어지지 않는다. (5) 2차 단단계 화학반응으로 가정한다. (6) 액적이 거동하면서 생기는 항력이나 액적으로의 열전달 계수는 실험식을 이용한다. (7) 중력의 효과는 무시한다. (8) Lewis 수는 1로 가정한다. (9) 이상기체로 가정한다. (10) 벽면은 단열 되어있다.

2.1 기체장에 관한 방정식

기체장의 경우, 모든 종속 변수들에 대한 일관적인 형태의 지배 방정식을 오일러리안 해석 기법 (Eulerian approach)에 근거하여 원통형 좌표계에서 식 (1)과 같은 기본 형태로 나타내었다.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u \phi - \Gamma_r \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y \rho v \phi - y \Gamma_\theta \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = S_{\phi,s} + S_{\phi,i} \quad (1)$$

각 방정식에 관한 변수 및 생성항은 Table 1에 나타내었다. 여기에서 $S_{\phi,s}$ 는 기체장에 의한 관련 종속 변수의 생성항으로서 실제 물리적인 생성항 외에 식 (1)의 좌변에서 고려하지 않은 모든 항들을 포함한다. $S_{\phi,i}$ 는 액적에 의한 생성항을 의미한다. 액적에 관한 생성항들에 관하여는 후에 기술할 액적에 관한 방정식에서 자세히 설명할 것이다.

2.2 액적에 관한 방정식

연소기내 액적의 존재는 액적의 증발, 산화제와의 혼합 및 연소, 집단 연소 등과 같은 추가적인 어려움을 야기한다. 또한 액적과 기체장 간의 유한 전달율에 관한 모사가 요구된다. 이것을 다루기 위하여 전체 분무 액적을 나타내는 유한개의 입자를 도입하여 기체장과 액적들 사이에 작용하는 영향을 모사하는, PSI-Cell 모델을 이용하였다⁽¹²⁾. 이 모델에서는 액적의 기체장에 대한 영향을 기체장 보존 방정식에 생성항($S_{\phi,i}$)의 형태로 연관시킨

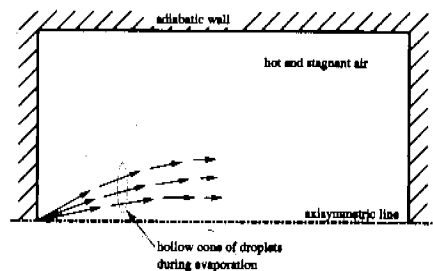


Fig. 1 Schematic of the axisymmetric combustor.

다. 기체장에 분무된 액적의 거동을 관찰하기 위한 격자계는 기체장의 격자계를 그대로 도입하였다. 주어진 제어 체적을 통과하는 액적군은 기체장에 질량의 생성 또는 소멸의 형태로 나타나는 액적의 증발 및 응축, 기체장과의 운동량 교환에 따른 액적의 가속 및 감속, 열에너지 교환으로 인한 액적의 가열 및 냉각 과정을 모두 경험하게 된다. 액적의 경로, 속도 등은 라그랑지안 해석 기법(Lagrangian approach)을 적용하여 아래와 같이 정리된 액적에 대한 지배 방정식들로부터 얻어지며 본 연구에서는 액적이 동일한 크기를 갖는다고 가정하였다.

$$\frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}_{sphere} (1 + 0.3Re^{0.5} Pr^{0.33}) \quad (2)$$

$$\dot{m}_{sphere} = 2\pi\rho_d D \ln(1+B) \quad (3)$$

$$B = \frac{Y_p - Y_f}{1 - Y_f} \quad (4)$$

$$m_d \left(\frac{du_d}{dt} \right) = \frac{1}{2} \rho_s C_d (u - u_d) \mu - u_d A_d - \left(\frac{m_s}{\rho_s} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (5)$$

$$C_d = 24(1 + 0.15Re^{0.687})/Re \quad (6)$$

$$m_d \frac{dT_d}{dt} = \frac{Nu\pi kd}{C_{pd}} (T - T_d) - \frac{L}{C_{pd}} \dot{m}_d \quad (7)$$

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{\rho_d \pi d^3}{6} \right) = \dot{m}_d \quad (8)$$

액적의 질량 보존은 식 (2)와 같이 나타낸다. 이 관계식은 Ranz - Marshall 의 실험식⁽¹⁾이며, Reynolds

수와 Prandtl 수를 적용하였다. 액적이 항상 구형을 유지하고, 준평형 상태로 생각한다고 가정하여 식 (3)과 같은 액적 증발율을 보일 수 있다. 여기에서 B는 식 (4)와 같은 Spalding 의 전달 계수를 나타낸다. Y_p 는 Antoine 의 증기압 방정식⁽¹¹⁾에서 얻어지는 액적 표면에서의 연료 질량 분율이다. 액적의 운동량 보존은 식 (5)로 나타내어진다. 여기서 m_s 는 액적의 부피에 해당하는 주위 기체의 질량을 의미한다. C_d 는 증발하지 않고 남아있는 액적의 항력 계수로 액적의 Re 수 1000 까지 적용 가능하며 1000 이상에서는 0.44 로 고정하는 값으로⁽¹⁾, 식 (6)과 같이 나타낸다. 식 (5)의 우변 첫번째항은 항력에 의한 효과를 나타내고, 두번째항은 주위 기체의 정압력 구배에 의한 효과를 나타낸다. 식 (5)에서는 체적 변화 및 Basset 힘, 액적간의 충돌 등을 무시하였다. 운동량 보존 방정식에서 나타난 du_d/dt 를 2차 엄밀 Runge-Kutta 방법으로 적분하면 속도(u_d)를 얻게 되고, 이 속도를 다시 적분하여 액적의 체적(x_d)을 얻는다. 액적의 에너지 보존 방정식은 식 (7)과 같이 주어진다. 무한대 전도 모델(Infinite-Conduction Model)을 이용한 액적 표면에서의 Nusselt 수는 $Nu=2+0.6Re^{0.5}Pr^{0.33}$ 이고,⁽¹⁾ C_{pd} 는 액적의 비열을 나타낸다. 마지막으로 액적 직경의 변화율을 살펴보면, 식 (8)과 같은 방법을 통하여 나타낸다. 여기에서 우변의 값은 식 (2)의 질량 보존에서 얻은 값을 사용한다. 이상의 액적에 관한 변수들은 액적의 경로를 따라 나타나는 제한 체적에서 계산되고, 그 값들은 기체장의 보존식에 생성항, $S_{w,i}$ 의 형태로 적용된다.

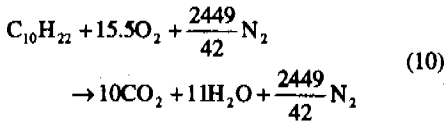
Table 1 Variables and source terms appearing in Eq. (2-2).

Equation	ϕ	Γ_s	$S_{s,i}$	$dV_s S_{s,i}$
Continuity	1	0	0	$\sum n\dot{m}$
Axial Momentum	u	μ	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)$	$\sum \left(n\dot{m}u - \frac{4}{3}\pi\rho_d r_d^3 nF_s \right)$
Radial Momentum	v	μ	$-\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{2\mu v}{y^2} + \frac{\rho v^2}{y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} \left(y\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right)$	$\sum \left(nrv - \frac{4}{3}\pi\rho_d r_d^3 nF_s \right)$
Energy	h	Γ	$\frac{\partial P}{\partial t} + \mu G + W_f QR_f$	$\sum \left\{ -n\dot{m} \left(C_p (T_s - T_s) + L \right) \right\}$
Mass Fraction (fuel)	Y_f	Γ	$-W_f R_f$	$\sum n\dot{m}$
Mass Fraction (other species)	Y_i	Γ	$\mp v_i W_i R_i$ (- for O_2 and for product)	0

$$\Gamma = \frac{\mu}{\sigma_s}, \quad G = 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{v}{y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2, \quad F_s = \frac{\partial \phi_s}{\partial t}$$

2.3 화학반응

분무 연소기에서 분무된 액체연료는 증발한 후 주변의 산화제와 섞인다. 이후 적절한 점화 조건에 도달하면 반응이 진행되기 시작한다. 이와 관련한 반응 역학은 식 (10)과 같은 2차 단단계 화학반응으로 나타내었다. 사용된 산화제는 공기이다. 연료는 n-decane 이며, 이것의 물성치는 Table 2에 나타내었다.^(13,14)



연소 반응율은 아레니우스(Arrhenius) 형태의 반응율(식 (10))로 결정된다.

$$R_f = A[\text{fuel}]^a [O_2]^b \text{Exp} \left[-\frac{E_a}{RT} \right] \quad (11)$$

Arrhenius factor 와 활성화 에너지는 Table 2에 제시하였고, 물농도의 지수 a와 b는 각각 0.25, 1.5를 사용하였다.⁽¹⁴⁾

2.4 경계 조건 및 초기 조건

전체 해의 일부로써 각각의 시간 또는 공간적 위치에서 적합한 초기 조건과 경계 조건의 설정이 필요하다. 본 연구에서 경계 조건은 다음과 같이 주어진다. 벽면에서의 속도는 점착 조건으로 한정하며, 에너지 방정식에 관하여는 단열 벽면 조건을 사용한다. 또한 대칭 경계면을 통한 유량의 순수함은 영이므로 대칭 경계면에 수직하는 유량은 존재하지 않는 것으로 생각하며, 경계면에 수평한 경우는 대칭 조건으로 설정하였다. 마찬가지로 이유로 대칭면에서의 온도 구배는 존재하지 않는 조건을 사용하였다. 초기에 연소기내 유동은 존재하지 않는 것으로 생각하였다. 액적의 속도, 분무 각도, 크기 및 유량, 주변 공기의 온도 등의 기타 변수들에 관하여는 제어 변수로 생각하여 연구를 수행하였다.

3. 수치해석

3.1 유한 차분 방정식

오일러리안 해석 기법에 근거한 질량, 운동량, 에너지, 화학종 등의 모든 종속변수들에 대한 일반적인 지배 방정식의 형태는 식 (1)에 표현하였다. 이 방정식의 계산을 위하여 Patankar의 SIMPLE 알고리즘⁽¹⁵⁾을 사용해 Gosman과 Pun이 개발한 TEACH 코드⁽¹⁶⁾를 수정하여 적용하였다. 수정된 TEACH 코드는 한국과학기술원 항공우주

Table 2 Fuel properties.^(13,14)

Fuel	n-decane (C ₁₀ H ₂₂)	
Molecular weight	142.3	[kg/kmol]
Heat of vaporization	3.619E5	[J/kg]
Boiling point	447.15	[K]
Specific heat	2200.8	[J/kg/K]
Density	733	[kg/m ³]
Activation energy	30	[kcal/mol]
Arrhenius factor	3.8×10 ¹¹	[cm ³ /mol/s]

공학과 추진 및 연소 실험실에서 개량하여 검증, 사용하던 코드⁽¹⁷⁾를 본 연구에서 요구되는 비정상 상태의 모사에 적합하도록 수정한 것이다.

3.2 수치적 알고리즘

전체의 계산 알고리즘은 Fig. 2에 나타나 있다. 먼저 수정된 TEACH 코드를 이용하여 액적과의 관련을 배제한 상태로, 기체의 유동장을 충분히 수렴할 때까지 계산한다. 그리하여 나타난 기체장에 관한 속도 성분, 압력, 온도 등의 정보를 PSIC에 적용하여 액적의 경로뿐만 아니라 액적의 함력, 데워짐 및 증발에 의한 생성항을 계산함으로써 두 상간의 연관성을 결정짓게 된다. 이 생성항들은 기체장 지배 방정식(질량, 운동량, 에너지, 화학종 보존 방정식 등)에 생성항의 형태로 다시 추가된다. 만족할만한 해를 얻기 위해서는 유동장 solver와 PSIC solver 사이의 반복 계산을 필요로 한다. 충분히 수렴되면 초기에 결정된 다음 시간 단계로 이동하여 위의 과정을 반복한다.

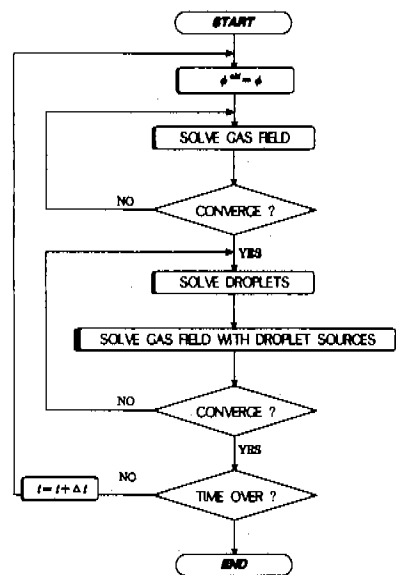


Fig. 2 Computational flow chart.

본 연구를 위하여 세 가지의 시간 증분을 도입하였다.⁽¹⁸⁾ 먼저 본 연구에서는 비정상 상태하의 해석을 수행하므로, 유동장의 시간에 따른 변화를 각 시간 단계에서 관찰하기 위한 기체장 시간 증분(Δt_g)이 필요하다. 다음으로 PSIC 모델에서 사용되는, 액적 시간 증분(Δt_d)이 필요하다. 유동장 시간 증분 동안에 나타나는 액적의 거동을 적분하는 과정을 수행하므로, 액적 시간 증분은 유동장 시간 증분 보다 작은 값을 사용한다. 마지막으로 액적군 시간 증분(Δt_{wg})이 도입된다. PSIC 모델의 경우 유한개의 입자에 대하여 계산을 수행하므로 입자들을 몇 개의 군으로 나누어 모사를 수행한다. 각 군에 포함되는 입자들은 한 개 이상의 입자의 성질로 대표할 수 있다. 이를 위하여 적절한 시간 증분으로 액적군을 한정하여 전체 액적의 거동을 불연속적으로 모사한다.

4. 결과 및 검토

밀폐된 축대칭 원통형 분무 연소기에 관하여 수치해석을 수행하였다. 기준이 되는 조건은 다음과 같이 설정하였다. 반지름이 0.05 m, 길이가 0.1 m인 원통형 연소기내 초기 압력은 1 기압, 초기 온도는 1000 K로 설정하였다. 연소기의 모든 벽면은 단열벽이다. 액체 연료는 n-decane을 사용하였고 유입 질량은 (0.001 kg/s × 1 ms)이다. 액적 입경은 100 μ m, 온도는 300 K, 분사 속도는 15 m/s로 설정하였다. 액적의 입경이 대단히 작고, 분사 속도 또한 작은 값으로 나타난다. 따라서 액적에 대한 Re 수의 값은 상당히 작은 값으로 나타나며, 이는 본 연구에서 난류 효과를 무시한 것이 물리적으로 타당한 가정임을 뒷받침한다. 액적의 분무는 세 곳($y = 0.10, 0.25, 0.40$ mm)에서 각각 네 방향 ($\theta = 10^\circ, 12^\circ, 14^\circ, 16^\circ$)으로 분사되어 12개의 경로를 갖는, 속이 빈 원뿔형이다. 제어 변수의 변화에 따른 영향을 관찰하는 경우에만 특별한 언급을 통하여 몇 가지 조건을 변화시켰으며, 이 경우에도 나머지 조건들은 위의 설정을 따른다.

4.1 분무 연소

Fig. 3 와 Fig. 4 는 각각 시간에 따른($t = 1.0, 4.0, 4.5, 5.0, 10.0$ ms) 반응율 분포와 온도 분포를 도시한 것이다. 액적의 분무가 중단되는 시점인 1.0 ms에서는 액적들이 주변 공기로부터 열을 흡수해 온도가 증가하는 과정이다. 따라서 노즐 주변의 공기는 액적으로 열을 전달하여 온도의 감소가 나타난다. 그러나, 이 과정에서 전달된 열의 대부분은 액적 온도의 증가에 사용되므로 연료의 증발은 미

미하게 나타난다. 따라서 반응을 위한 조건은 만족시키지 못한 상태이다. 이 시간 이후에는 주로 액적의 증발이 일어나게 된다. 전달된 열에 의해 데워진 액적은 증발 온도에 도달하게 되고, 증발 온도에 도달한 액적에 전달된 열은 대부분 액적의 증발에 필요한 증발 잠열로 사용되어, 액적군 주위의 온도 감소가 계속된다. 4.0 ms 에 이르면 증발과 연료와 산화제의 혼합이 활발하게 나타난다. 이 때는 혼합과 더불어 전도 또는 유도된 속도장에 의한 대류로 인한 열전달이 주변 공기로부터 이루어진다. 따라서 혼합기의 온도 회복이 나타나고 약한 정도의 반응이 보여진다. 그러나 이때의 반응은 우리가 관심을 가지는 연소로 판단하기는 미약한 수준이다. 점화 기준에 관한 자세한 설명은 뒤에서 서술하기로 한다.

4.5 ms 의 시기는 비로소 자연 발화가 이루어져서 연소로 진행되는 과정을 보여주고 있다. 이전 시간까지 이루어진 증발, 혼합에 의해 점화 가능한 혼합기가 형성된다. 이어서 주변 기체로부터의 열전달이 이루어지면 혼합기의 온도가 상승하여 반응율이 급격히 증가하게 된다. 이 때를 점화가 이루어진 시기라 볼 수 있다. 점화의 위치는 액적군이 통과하면서 증발된 연료의 누적이 이루어진 위치이며, 액적군의 경로를 따라 주변 공기와의 혼합이 이루어진 지역으로 보인다. 이 위치는 액적군 경로의 위와 아래에서 나타나며, 열전달이 보다 많이 일어나는 중심축에서부터의 거리가 먼, 위쪽에서 보다 활발하게 나타남을 알 수 있다. 온도를 살펴보면 노즐의 주변은 유도된 공기로 채워져 온도를 회복하였고 액적군의 경로를 따라 낮은 온도대가 분포함을 볼 수 있다. 그리고 반응율이 크게 나타나는 곳에서 열 생성이 활발히 일어나고 온대를 형성함을 알 수 있다. 반응율이 크게 나타나는 위치에서는 반응으로 인한 산화제의 감소와 생성물의 증가가 보여진다.

시간이 좀 더 흘러서 5.0 ms 가 되면 그림에 보여지는 바와 같이 반응은 더욱 활발해지며, 그 영역이 넓어짐을 알 수 있다. 화염의 확대는 점화가 이루어진 이후 열생성이 활발해지고, 그에 따른 급격한 열전달이 수행되었기 때문으로 보여진다. 이때 반응율의 분포가 한곳에 집중되지 않고 액적군 경로의 위와 아래의 국소 위치들에서 동시에 나타난다. 이것은 분무 연소가 단순히 확산 화염만의 성질로 표현될 수 없음을 입증한다⁽¹⁹⁾. 온도의 분포에서는 점점 팽창하는 고온대가 보여지고 있다. 이 시기에는 화염에 의해 액적으로의 열전달이 대량으로 이루어지므로 연료 증기의 생성이 더욱 활발해진다. 10.0 ms 가 되면 액적군은 모두

증발하여 소멸되고, 기화된 연료를 둘러싸고 약한 반응이 일어남을 볼 수 있다. 이것은 분무 연소가 초기에 예혼합 화염의 성질을 띠다가 시간이 지난 후 확산 화염의 성질을 지니게 됨을 보여준다. 고온대와 분포가 넓게 나타난다.

Fig. 5는 시간에 대한 액적의 거동을 나타낸 그림이다. 이 그림에서는 시간 0 ms에서 초기에 12가지의 경로를 가지고 출발한 액적군들의 정보를 나타내었다. 액적의 온도 및 입경의 변화가 상당히 급하게 이루어짐을 알 수 있다. 증발 온도에 도달할 때까지 액적의 온도 변화는 거의 선형적으로 이루어진다. 대부분의 액적군들은 3 ms 부근에서 모두 증발 온도에 도달한다. 중심축에서 먼쪽으로 진행되는 액적군의 온도 증가가 약간 더 빠르게 나타나는데, 이것은 중심축에서 멀어질수록

액적의 수밀도가 감소하기 때문이다. 액적 입경의 변화는 액적 온도가 상승하는 동안 거의 일정하게 유지되다가, 액적이 증발 온도에 다르면 증발을 시작하여 빠른 감소로 나타난다. 액적 입경의 감소는 그림에 표시한 바와 같이 d_p 가 시간에 대하여 선형적으로 나타난다. 이것은 액적의 증발에 있어서 d_p -법칙을 상당히 충실히 따르고 있음을 보여준다. 5 ms 이후에 나타나는 급격한 변화는 액적 주변에 본격적 화염이 형성되어 열전달량이 증가함에 따른 증발율의 증가로 보여진다.

이상 기준 상황에서 점화 및 연소 현상의 양상을 살펴보았다. 계산의 결과로서 얻어진 해석은 물리적으로 판단하여 보았을 때 받아들일만한 값으로 보여진다. 이하에서는 이 현상들을 토대로 다양한 요인들을 변화시키면서 점화 현상에

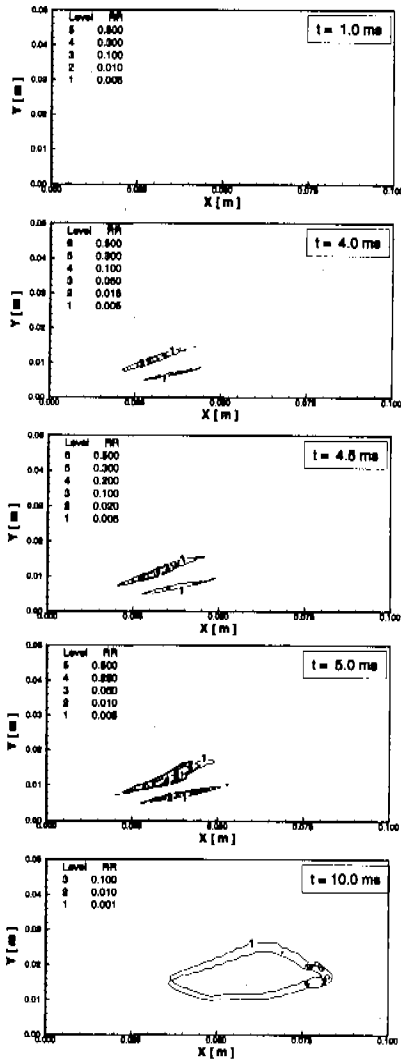


Fig. 3 Reaction rate contours at various times.

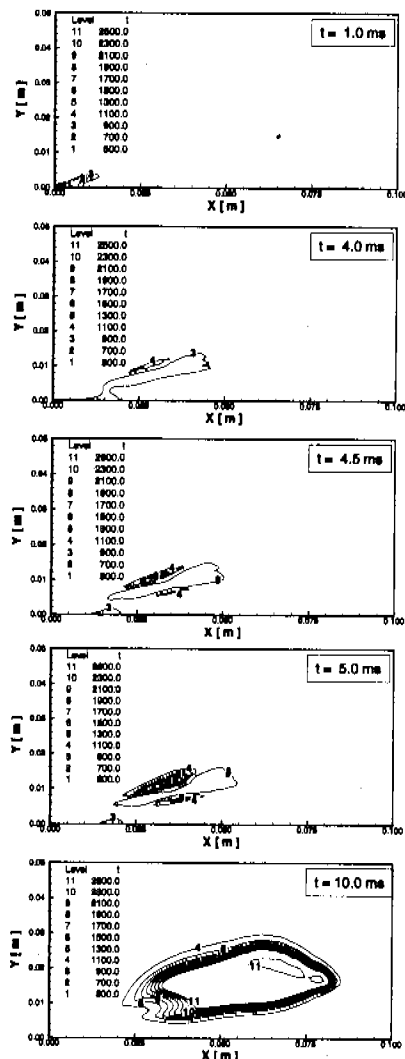


Fig. 4 Temperature contours at various times.

초점을 둔 해석을 보여준다.

4.2 점화 기준의 설정

이론적 모델에서 점화 기준의 설정은 대단히 중요하며 복잡한 문제이다. 많은 연구자들이 점화 기준에 관하여 다양한 방법들을 제시하였지만 아직 명확한 점화 기준에 관한 약속은 정해지지 않은 상태이며 다양한 이론 및 실험 방법에 따라 각기 다른 점화 기준을 사용하고 있다. 화염의 발현, OH기의 화학적 발광, 압력이나 온도 등의 정보, 팽창지와 같은 방법들이 사용되고있다. 그러나 비교하여 분석할 수 있는 표준화된 방법들이나 정량적 정보가 제시되고 있지는 않은 실정이다. 더구나 이러한 기준들은 실험적 방법에서 유효할 뿐 이론적 연구에서는 적용이 어렵다¹⁰⁾. 따라서 본 연구에 맞는 점화 조건을 새로이 설정해야 한다. Fig. 6은 시간에 따른 매 시간마다의 (a) 최고 온도, (b) 이전 시간에서의 값과의 온도 최대 차이, (c) 최대 반응율을 나타내었다. 이 그림에서 주의하여야 할 것은 최대값들과 최대 변화 값이 항상 한 점에서 이루어지는 것이 아니라 전체 계에서 판단한 최대 값을 나타낸다는 점이다. 따라서 그래프가 매끈한 곡선으로 보여지지 않는다. 결과를 살펴보면 각각의 값들이 밀접한 연관성을 지니고 있음을 알 수 있다. 이 연관성은 점화 기준이 수치적 방법으로 구현될 수 있음을 보여주고 있다. 연소가 일어나는 동안에 온도의 최대 변화율, 반응율이 마치 1과 0으로 이루어진 계단 형상의 함수와 같이 나타남이 보여진다. 그리고, 각각의 그래프들에서의 급격한 변화가 모두 일치하는 시간 위치에서 나타난다. 따라서 이것들을 단순화하여 바라보아 0에서 1로의 급격한 천이가 유도되는 지점을 점화의 시점으로 판단할 수 있겠다. (b) 의 값은 각각의

관찰점에서 시간에 따른 온도의 변화를 관찰하여 가장 큰 값을 취한 것이다. 따라서 최대 온도가 일정하게 유지되는 동안을 화염의 전파 및 유지 기간이라 생각할 수 있고, 화염이 전파됨에 따라 (b) 의 값이 나타나는 지점이 이동하게 됨을 알 수 있다. 본 연구에서는 급격하게 나타나는 높은 반응율과 온도의 급격한 변화가 유도되는 지점을 점화의 시점으로 판단하기로 한다. 이러한 관점에서 본다면 기준 조건에서의 점화 위치는 4.2 ms 부근으로 판단되어진다. 즉, 4.2 ms 부근에서 점화해이 형성되어 주변 기체로의 열전달이 증가하고, 이것으로 말미암아 전체적인 화염의 형성이 나타난다고 생각할 수 있다.

4.3 점화 지연에 관계하는 제어변수

점화 현상을 이루는 데에는 다양한 요인들이 작용한다. 이것들은 이상 특성과 분무 특성으로 구분할 수 있다. 이상 특성은 속도, 압력, 온도 등을 포함하고, 분무 특성은 연료, 액적 크기, 액적 입경 분포 등을 포함한다. 이상 특성중 온도에 관한 점화 지연 시간의 거동이 Fig. 7에 표시되어있다. 초기 기체 온도의 값이 증가할수록 점화 지연 시간은 점점 감소하고있음을 볼 수 있다. 초기 기체 온도가 높아지면 기체장과 액적간의 열교환이 보다 활발해져서 액적의 증발과 연료 증기와 공기의 혼합기로 열전달이 유리해진다. 이러한 조건은 반응율의 증가를 초래하게 되어 초기 기체 온도가 높을수록 조속한 점화를 얻을 수 있게 된다. 즉, 주변 기체가 고온을 유지할수록 반응의 조건이 빨리 형성되기 때문에 점화에 도달하는 시간을 줄일 수 있게 된다. 초기 온도 조건이 반응율과 밀접한 관련을 맺고 있음은 그림에 표현한 log 함수 근사를 통하여도 관찰할 수 있다.

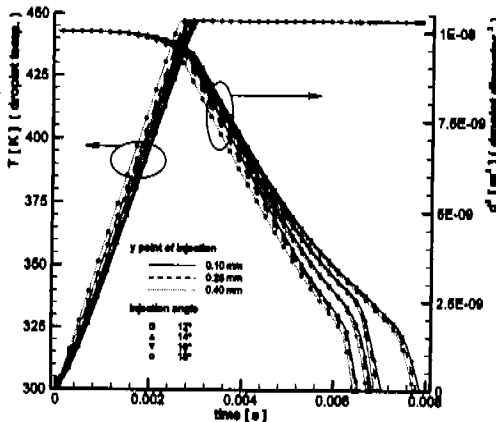


Fig. 5 Droplet history (injected at t=0); temperature And diameter squared vs. Time.

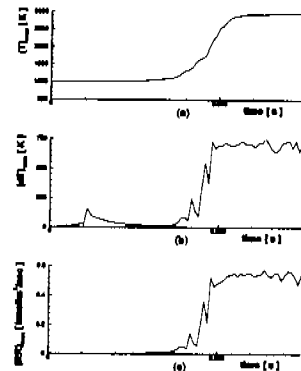


Fig. 6 Comparisons of ignition criteria. (a) maximum temperature (b) maximum variation of temperature (c) maximum reaction rate

Fig. 8 에서는 속도에 따른 점화 지연 시간의 변화를 나타내고 있다. 액적의 분사 속도가 증가할수록 점화 지연시간은 감소로 나타나는데, 이것은 주변 공기와 액적 사이의 상대 속도의 증가에 따른 열전달 증가를 원인으로 생각할 수 있다. 열전달의 증가는 곧 액적의 데워짐과 증발을 촉진시켜, 반응에 필요한 혼합기의 형성을 재촉한다. 따라서 반응의 조건이 일찍 형성되는 고속 분무의 경우가 보다 짧은 점화 지연 시간을 갖게 한다.

분무 특성에 관하여 점화 지연 시간을 계산한 결과가 Fig. 9 와 Fig. 10 에 나타나 있다. 두 그림은 각각 액적의 입경과 분사각에 따른 점화 지연 시간의 양상을 표현한다. 액적의 입경 변화는 분무 연소에서 미립화 성능에 관계된 변수로, 입경이 작아질수록 점화 지연 시간도 짧아지게 됨을 보이고 있다. 액적의 입경이 작아지면 액적의 부피에 비하여 주변 기체와 닿는 표면적이 증가하여 결과적으로는 주변 기체로부터 단위 액적에 주어지는 열전달량이 증가하게 된다. 많은 열량을 전달받은 액적은 점화 지연 시간의 중요한 요소인 물리적 지연을 단축시켜, 결국 점화 지연의 감소를 초래한다. 액적의 입경을 감소시킴으로써 얻어진 증발율의 증가가 곧 점화 지연 시간의 단축으로 나타나게 되는 효과는 그림에 표시한 d^2 에 따른 근사, 즉, 액적의 표면적에 관한 함수로 표현된다.

분사각의 변화는 액적 분무의 공간적 분포를 변화시킨 것이다. 축대칭 연소기에서는 분사각이 클수록 넓은 공간적 분포를 갖는다. 같은 양의 연료가 넓게 분포되어있는 경우 주변 기체로부터의 열전달이 있는 후 주변의 온도 하강이 비교적 적게 된다. 따라서 증발한 기체 연료가 주변 공기와 섞여서 혼합기를 형성했을때, 상대적으로 높은 온도를 유지할 수 있다. 반응율은 혼합기의 조성과 온도에 관계하는 값이므로 액적의 분포가 조밀한 경우에 비하여 상대적으로 높은 반응율을 가지게 된다. 따라서 분사각이 클수록, 즉 액적의 분포가 넓을수록 점화가 빨리 일어나게 된다. 그림에서 보여지는 또 다른 점은 분사 속도가 증가할수록 분사각의 영향이 작게 나타나는 것이다. 이러한 효과는 분사 속도가 증가함으로써 얻어지는 대류 열전달의 효과가 수밀도의 증가에 따른 전도 열전달의 감소보다 큰 영향을 미치게 됨을 의미한다. 또한 유입 질량이 고정된 상태에서의 고속 분무는 수밀도의 절대적 감소를 초래하여 분사각에 따른 수밀도 저하의 상대적 보상도 고려할 수 있다.

이상 점화에 관계하는 몇가지 변수들에 관하여 살펴보았다. 점화 지연 시간에 관계하는 변수들은 모두 반응율이나 증발율 또는 두 가지 모두에 영

향을 주고 있음을 알 수 있다. 즉, 분무 연소의 점화 현상은 반응율과 증발율을 제어하는 변수들을 조정함으로써 원하는 형태로 유도되어질 수 있다.

5. 결론

이상의 연구에서 연소기 내부의 액체 분무 연

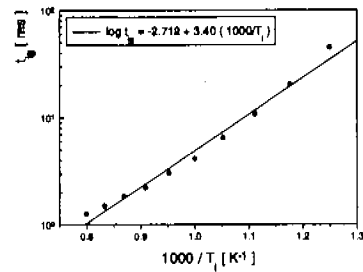


Fig. 7 Ignition delay vs. initial temperature.

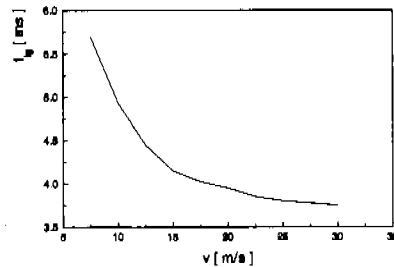


Fig. 8 Ignition delay vs. injection velocity.

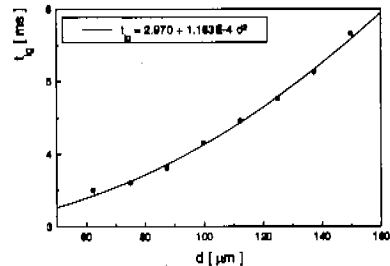


Fig. 9 Ignition delay vs. droplet diameter.

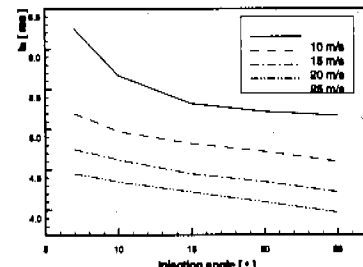


Fig. 10 Ignition delay vs. injection angle for various injection velocities.

소 과정과 자연 발화, 그리고 자연 발화에 관계하는 여러 요소들에 관한 수치적 해석을 수행하였다. 본 연구를 통하여 얻어진 결론은 다음과 같다.

(1) 연소기 내부에서의 액체 분무 연소 과정을 액적의 테워짐, 액적의 증발, 연료 증기와 주변 산화제와의 혼합, 점화, 연소의 단계로 나누어 살펴 보았다. 각각의 과정이 진행되는 동안 각 과정들에서 보여지는 전형적 양상을 관찰 할 수 있었다. 온도와 반응율 분포를 통하여 제시된 결과를 토대로 점화의 과정을 확인하였다.

(2) 연소 과정의 관찰을 통하여 얻어진 결과물 토대로 점화의 시점(ignition criteria)을 판단하였다. 연소기 내부의 온도 및 반응율의 시간에 따른 추이를 관찰하여 일정한 시간 위치에서 급격한 변화가 나타남을 읽어낼 수 있었다. 이 위치의 앞과 뒤에서 각각 큰 변화의 발생 없이 일정한 수준으로 유지됨과 변화의 위치가 각 변수들에 있어 동일하게 나타남을 토대로 관찰하는 변수의 급격한 변화가 나타나는 시간을 점화가 일어나는 위치로 판단 할 수 있었다.

(3) 점화에 영향을 미치는 요소들을 파악하기 위하여 점화 지연 시간을 도입하였다. 이상 특성과 분무 특성의 변화에 따른 점화 지연 시간의 변화를 관찰하여 각 요소들이 점화에 끼치는 영향과 그 방법, 또는 영향의 정도를 조사하였다. 온도가 높을수록 분사 속도가 빨수록 점화의 시기가 앞당겨짐을 알 수 있었다. 또한 액적의 임경이 감소할수록 분무각이 증가할수록 점화가 빨리 일어나게 되었다. 따라서, 점화 시기의 조정은 반응율 또는 증발율에 영향을 미치는 여러 변수들을 제어함으로써 구현될 수 있음을 파악하였다.

본 연구에서는 몇 가지 가정들을 도입하여 문제를 단순화하였다. 이후의 연구들은 좀 더 일반적인 문제를 해석하게 될 것이다. 특히 농후 분무와 정확한 화학 반응을 포함하는 모델들을 도입하여 더욱 일반적인 해석이 수행되어야 할 것이다.

참고문헌

(1) Faeth, G. M., 1983, "Evaporation and Combustion of Spray," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 9, pp. 1-76
 (2) 이상용, 1996, *액체의 미립화*, 민음사, 서울
 (3) Aggarwal, S. K., 1998, "A Review of Spray Ignition Phenomena: Present Status and Future Research," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 24, pp. 565-600
 (4) Sato, J., Konishi, K., Okada, H. and Niioka, T., 1986, "Ignition Process of Fuel Spray Injected into High Pressure High Temperature Atmosphere," *Twenty-first Symposium (international) on Combustion*, pp.

695-702
 (5) Dwyer, H. A. and Sanders, B. R., 1988, "Unsteady Influences in Droplet Dynamics and Combustion," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 58, pp. 253-265
 (6) Sirignano, W. A., 1988, "An Integrated Approach to Spray Combustion Model Development," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 58, pp. 231-251
 (7) Gutheil, E., 1993, "Numerical Investigation of The Ignition of Dilute Fuel Sprays Including Detailed Chemistry," *Combust. Flame*, Vol. 93, pp. 239-254
 (8) Gutheil, E., 1995, "Numerical Analysis of the Autoignition of Methanol, Ethanol, N-Heptane and N-Octane Sprays with Detailed Chemistry," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 105, pp. 265-278
 (9) Aggarwal, S. K. and Sirignano, W. A., 1984, "Ignition of Fuel Sprays: Deterministic Calculations for Idealized Droplet Arrays," *Twentieth Symposium (international) on Combustion*, pp. 1773-1780
 (10) Bi, H. and Aggarwal, S. K., 1998, "Study of Autoignition of Natural Gas in Diesel Environments Using Computational Fluid Dynamics with Detailed Chemical Kinetics," *Combust. Flame*, Vol. 113, pp. 289-302
 (11) Zuo, B. and Van den Bulck, E., 1998, "Fuel Oil Evaporation in Swirling Hot Gas Stream," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 41, No. 12, pp. 1807-1820
 (12) Crowe, C. T., Sharma, M. P. and Stock, D. E., 1977, "The Particle Source in Cell(PSI-Cell) Model for Gas Droplet Flows," *ASME J. Fluid Eng.*, pp. 325-332
 (13) Daubert, T. E. and Danner, R. P., 1989, *Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals*, Hemisphere Pub. Co., New York
 (14) Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., 1984, "Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, pp. 1-57
 (15) Patankar, S. V., 1983, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Pub. Co., New York
 (16) Gosman, A. D. and Pun, W. M., 1973, *Lecture Notes for Course Entitled "Calculation of Recirculating Flows"*, Imperial College of Science and Technology, London, Report No. HTS/74/2
 (17) Choi, C. E. and Baek, S. W., 1996, "Numerical Analysis of a Spray Combustion with Nongray Radiation Using Weighted Sum of Gray Gasses Model," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 115, pp. 297-315
 (18) Raju, M. S. and Sirignano, W. A., 1989, "Spray Combustion in a Centerbody Combustor," *ASME J. Engng for Gas Turbines and Pwr*, Vol. 111, pp. 710-718
 (19) Kamimoto, T. and Kobayashi, H., 1991, "Combustion Process in Diesel Engines," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 17, pp. 163-189