

◎ 논문

다단 반응을 고려한 수소-공기 예혼합 화염의 발생 및 전파

한 조 영^{*1}, 백 승 욱^{*2}

Onset and Propagation of Hydrogen-Air Premixed Flame with Multiple Kinetics

Cho Young Han and Seung Wook Baek

Flame onset and propagation within hydrogen premixed gas mixture are numerically investigated in a rectangular enclosure. A detailed chemistry for hydrogen reaction is applied to anticipate the thermochemical behavior of intermediate species appropriately. To facilitate computation, 10 species and 16 elementary reaction steps for hydrogen combustion are taken into account. On the basis of 30 % of hydrogen concentration in hydrogen-air mixture, the effects of position and quantity of ignition sources on the flame evolution are analyzed. From the simulation results, the methods to decrease the potential hazard caused by the flame propagation are suggested.

Key Words: 화염 전파(Flame Propagation), 수소(Hydrogen), 점화(Ignition), 다단반응(Multiple Kinetics), 예혼합(Premixed)

1. 서 론

예혼합상태의 연료와 산화제는 전기적인 스파크, 점화 플러그 또는 가열된 벽면 등의 외부적인 에너지가 가해질 때 혼합물의 열물리적인 성질을 지배하는 대류 및 확산 등의 이동현상과 열화학적 측면인 연료의 연소현상이 유발되면서 이 두 가지 요소의 상호작용이 강하게 연관된다. 그 상호작용이 폭연파(deflagration wave)나 폭굉파(detonation wave)의 필요한 요건을 갖출 수 있는나 하는 문제는 외부에서 주어지는 에너지의 강도, 지속도 및 양적인 요소 등에 의해 결정된

다. 또한 연소현상은 외부요건에 못지않게 혼합물의 화학적 성질이나 초기조건 등과 같은 내부적인 면에 의해서도 많은 영향을 받는데 그들은 점화지연시간(ignition delay)과 연소열 등을 결정하기 때문이다. 따라서 연소현상은 특정한 연료와 산화제가 결합된 상태에서 일어나는 복합적인 현상으로 이동현상(transport phenomena)과 흔히 잘 알려져 있지 않은 화학적 인자들에 의해 강하게 지배받는다.

이론적으로는 세부적인 수치적 시뮬레이션을 통해 연소현상을 연구하는 것이 가능하지만 계산량이 매우 많은 여러 가지 화학종의 다차원 비정상상태의 계산을 필요로 하므로, 실제로는 단순화시킨 몇 가지 제한된 경우에 한하여 연구가 진행되어져왔다. 또한 지배방정식의 다차원 해를 얻기 위한 복잡성이나 비용에 못지않게 화학반응을 기술하는 많은 수의 상미방 방정식을 적분해야 하는 것도 까다로운 문제이다. 후자의 문제는 대부분의 경우에 있어 실제적으로 계산하는데 필

* 2003년 12월 29일 접수

*1 정회원, 한국항공우주연구원 다목적위성사업단
위성기술실 위성기초기술그룹

*2 정회원, 한국과학기술원 항공우주공학과

요로 하는 화학반응의 모델을 갖고 있지 못하다는 데 더욱 문제의 어려움이 있다. 그러나 수소의 경우는 구체적인 화학반응기구가 비교적 잘 알려져 있으므로 그 같은 어려움은 비교적 덜하다.

점화현상 및 화염전파에 관련된 성질들은 실험적인 방법뿐 아니라 이론적으로도 적지않은 연구들이 행해졌다. Lewis and Von Elbe[1]는 전기적인 스파크를 점화원으로 하여 점화현상에 대해 광범위한 자료를 제시하고 있으며, Merzhanov[2]는 평면 슬랩, 실린더와 구형에 대해 온점에 의한 열폭발이 일어나는 임계조건을 수치적으로 계산하였다. Dixon-Lewis and Shepherd[3]는 시간에 따른 변화를 고려한 화염 모델을 채용해서 초기 활성기(radical) 농도의 변화와 초기 점화원의 기하학적 변화에 따른 영향을 연구했는데, 균일하게 예혼합되어 있는 60% 수소-공기 혼합물에서 에너지가 수소원자의 활성기 형태와 온도의 형태로 저장되어 있는 경우로서, 수소 원자 활성기 형태의 에너지가 화염을 생성하는데 있어 보다 효과적임을 보여주고 있다.

한편 Xiong and Law[4]는 정상상태 모델에 섭동 기법(perturbation technique)을 써서 가연 가스를 점화시킬 수 있는 온점의 임계 크기와 온도를 예측하였다. 가열된 벽면에 형성된 경계층에서의 점화현상에 대해서는 Cairnie et al.[5]이 연구하였는데 이들은 자연대류 경계층 흐름에서 연료-공기 혼합물의 점화에 대해 상세한 고찰이 가능한 실험적 기술을 제시하고 후류쪽의 온도장을 수학적 모델에서 얻은 결과와 비교하면서 점화현상에 대한 그 모델이 비실제적임을 보여주었다. 그들은 이것이 연료의 산화과정을 종래의 많은 연구에서와 같이 간단한 단단(one-step) 반응으로 반응기구를 가정한 까닭이라고 지적하면서 보다 상세하고 실제에 가까운 다단(multi-step) 화학반응모델의 필요성에 대해 언급하고 있다.

앞서 기술한 바와 같이 연소는 물리적 측면과 열화학적 측면이 연계되는 매우 복잡한 현상이며, 대부분의 경우에 있어 과도한 가열과정에 의해 촉발되는 본질적으로 비정상적인 현상이다. 그러므로 임의의 연소현상을 예측하거나 이해하려면 상세한 화학반응기구가 알려져 있어야만 한다. 그러나 유감스럽게도 짧은 시간 동안에 화학종의 농도를 측정한다는 것은 매우 어려운 일이며 위험한 일이기도 하다. 따라서 이제까지의 많은 연구들이 거시적으로 아레니우스(Arrhenius)

형태의 화학반응으로 간단화해서 계산할 뿐이었다. 한편, Kumar[6]는 수소를 다단반응의 화학반응 모델로 계산하여 실험결과와 비교하였으나 단순히 점화모델을 제시하는데 그쳤다.

수소는 그 자체가 가지는 연료로서의 우수성으로 인해 극초음속 비행체 추진 기관의 연료 및 우주 추진 기관의 연료로 채택되고 있으며 한편으로는 차세대 에너지원인 연료 전지의 주연료로도 사용되고 있다. 그러나 수소는 기존의 탄화수소계 연료와는 달리 매우 가볍고 확산이 빠른 특성이 있어 다른 연료들이 내포하지 않은 커다란 폭발과 손상을 초래할 수 있는 사고의 위험성을 지니고 있다[6].

본 연구에서는 수소와 공기의 예혼합 기체가 고온의 벽면으로 모사된 점화원(ignition source)에 노출되어 있는 경우의 점화 및 화염전파 문제를 2차원 비정상 상태로 예측한다. 이를 위해 계산에서 가정하는 점화원의 위치 및 수량을 변수로 하여 수치해석적으로 화염의 공간적 거동을 고찰함으로써, 불의의 사고 발생시 화염의 생성과 진행에 따른 인명 사상 및 물적 손실의 최소화를 기하기 위해 반드시 필요한 화염 거동예측에 대한 기초 자료를 제공하고자 한다.

2. 이론 모델

2.1 지배방정식

직교 좌표계에서 화학 반응 유동장에 대한 2차원 비정상 Navier-Stokes 방정식 및 화학종 보존 방정식은 다음과 같다.

- 연속방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

- 운동방정식

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \\ - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \mu \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_j \end{aligned} \quad (2)$$

- 에너지방정식

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial t} (\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}) + \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \Phi + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \sum_k - Y_k \nabla_k h_k) - \sum_k \Delta h'_{f,k} \omega_k \quad (3)$$

여기서 확산속도는 다음의 Fick's Law를 따른다.

$$Y_k \nabla_k = D_{kl} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (4)$$

- 화학종 보존방정식

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho D_{kl} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}) + \omega_k \quad (5)$$

- 이상기체 상태방정식

$$p = \bar{R}_u \rho T \quad (6)$$

이상의 식들에서 하첨자 i, j 는 x, y 좌표를 의미하며 하첨자 k 는 화학종을 나타낸다. 식 (2)의 f_j 는 중력에 의한 외력이며 σ_{ij} 는 응력 텐서이고, 식 (3)의 Φ 는 소산함수항으로 각각 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$f_j = \begin{cases} f_x = -g \sin \phi \\ f_y = -g \cos \phi \end{cases} \quad (7)$$

$$\sigma_{ij} = (\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}) - \frac{2}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \quad (8)$$

$$\Phi = \sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = 2(\frac{\partial u_l}{\partial x_l})^2 + [(1 - \delta_{ij}) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}]^2 - \frac{2}{3} (\frac{\partial u_i}{\partial x_i})^2 \quad (9)$$

엔탈피 및 기체상수는 각각 다음과 같이 정의된다.

$$h = \sum_k Y_k h_k = \sum_k Y_k \int_{T_0}^T C_{p,k}(T) dT \quad (10)$$

$$\bar{R}_u = R_u \sum_k \frac{Y_k}{W_k} \quad (11)$$

2.2 열역학 및 이송모델

각 화학종의 질량분율이 변하므로 혼합기체의 물성치는 이같은 영향을 고려해주어야 한다.

2.2.1 정압비열

정압비열은 온도의 다항식으로 나타내진다.

$$\frac{C_{p,i}}{R_u} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (12)$$

계수들은 300 K에서 5000 K까지 범위의 온도 에 대해 나와 있는 McBride et al.[7]의 열역학 테이블을 이용했다.

2.2.2 열전도 및 확산계수

다종의 화학종이 고려되는 자연점화에 있어 각 화학종들의 열전도 계수 및 확산계수 등은 이 동현상을 지배하는 중요한 요소이며 계산에서 많은 시간을 요구하는 부분이다. 통상적으로 그 계수들은 실험적으로 구하기는 어렵고 분자운동론에서 유도된 식에 의해 구해지는데 그들의 지배 방정식은 매우 복잡하다. 본 연구에서는 화염의 모델링에 Warnatz[8]가 이용했던 식이 사용된다.

2.3 화학모델

연소현상에서 물리적 조건과 더불어 중요한 요소 중의 하나인 열화학적(thermochemical) 정보는 다단 반응 모델의 경우 ω_i 를 매개로 하여 지배방정식에 전달된다. 그 열화학적 정보는 주목하는 각도에 따라 두 가지로 대별된다.

첫째로, 본 연구와 같이 고온의 점화원으로부터 제공되는 열은 전도에 의해 전달되는 경우로 그 에너지의 공급에 따라 예혼합물은 가능한 여러 가지 반응들 중에서 활성화 에너지(activation energy)가 낮은 것부터 반응이 시작된다. 그 반응들의 결과로 열이 생성되면, 점화원에서 주어지는 외부 에너지원과 더불어 점점 에너지가 증

대되고 결국에는 연쇄반응을 매개하는 반응이 일어나 매우 짧은 시간에 많은 발열반응이 일어난다. 결과적으로 그들로부터 나오는 막대한 양 ($\sum h_i \omega_i$)의 에너지로 인해 연소가 이루어진다고 보는 것이 열화학적 측면에 중점을 둔 입장이며 또한 다단 반응 모델의 필요성에 대한 이론적 근거를 제공하는 해석이다.

둘째로, 그간의 연구에서 종종 채용하는 단일 반응 모델은 상세한 열화학적 고려보다는 오직 열의 출입과 전파라는 요소만을 고려하는 입장으로 열적 이론(thermal theory)의 이론적 근간을 이룬다.

수소는 탄화수소계 연료보다 매우 높은 연소열을 낸다. 수소와 산소의 반응은 9개의 반응 화학종을 가지고서 28개 또는 그 이상의 동시반응이 일어난다고 알려져 있다(Rogers and Schexnayder[9]).그러나 28개 또는 그 이상의 화학반응을 유체 유동(flow)과 연계해 해석한다면 컴퓨터 시간과 용량면에서 비용이 너무 많이 소요되므로 효율적이지 못하다. 이러한 이유 때문에 본 연구에서는 10개의 화학종($H_2, O_2, N_2, H, O, N, OH, HO_2, H_2O, NO$)과 16개의 기본 반응 단계 모델을 채택하며, 이를 Table 1에 나타내었다. 또한 화학종의 질량 변화율($\omega, \partial\omega/\partial T, \partial\omega/\partial Y_i$ 등)은 CHEMKIN 부프로그램 (Kee et al.[10])을 이용하여 구한다.

Table 1 Rate constants for elementary reactions $k = aT^b \exp(-E/RT)$.

No	REACTIONS	a	b	E
1	$H_2 + O_2 = 2OH$	1.70E+13	0	47780
2	$H_2 + OH = H_2O + H$	5.20E+13	0	6500
3	$H + O_2 = OH + O$	1.22E+17	-0.907	16620
4	$O + H_2 = OH + H$	1.80E+10	1	8826
5	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	2.00E+15	0	-870
	$H_2O / 20./$			
6	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	1.20E+13	0	0
7	$H + HO_2 = 2OH$	6.00E+13	0	0
8	$O + HO_2 = O_2 + OH$	1.00E+13	0	0
9	$2OH = O + H_2O$	1.70E+06	2.03	-1190
10	$H_2 + M = 2H + M$	2.23E+12	0.5	92600
	$H_2O / 5/$			
11	$O_2 + M = 2O + M$	1.85E+11	0.5	95560
12	$H + OH + M = H_2O + M$	7.50E+23	-2.6	0
	$H_2O / 20.0/$			
13	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	1.30E+13	0	0
14	$O + N_2 = NO + N$	1.40E+14	0	75800
15	$N + O_2 = NO + O$	6.40E+09	1	6280
16	$OH + N = NO + H$	4.00E+13	0	0

* M stands for the third-body

3. 수치 해석

3.1 압축성 SIMPLER 방법

Karki and Patankar[11]에 의해 제안된 압축성 형태의 SIMPLER 알고리즘은 기존의 SIMPLER 알고리즘(Patankar[12])과 마찬가지로 두개의 압력 보정식을 풀어내는 방법으로 첫번째 압력보정식(p'' -방정식)은 압력과 밀도장을 개선시키고, 두번째 압력 보정식(p' -방정식)은 질량보존을 만족시키기 위해 속도장을 보정한다. 따라서 본 연구에서는 압축성 형태의 SIMPLER 방법에 의거해 운동량 보존식과 두개의 압력보정식 및 여타의 보존방정식들을 아래에 기술한 반복 과정을 거쳐 수치계산한다.

- ① 상태방정식을 이용하여 현재 계산된 온도와 압력으로 밀도를 계산한다.
- ② 운동량 방정식의 계수들을 계산된 종속변수들로써 계산한다.
- ③ p'' -방정식을 계산하여 현존하는 압력장을 보정한다.
- ④ 보정된 압력으로 운동량 방정식을 풀어써 속도장을 구해낸다. 이 때 구한 속도는 질량 보존식을 만족시키지 못한다.
- ⑤ p' -방정식을 계산하여 유량과 속도장을 보정한다. 이 때 압력은 보정하지 않는다.
- ⑥ 에너지를 비롯한 다른 종속변수들을 계산하고 필요시 에너지로부터 온도를 구해낸다.
- ⑦ ①~⑥의 과정을 수렴시까지 반복계산한다.
- ⑧ 다음 시간대로 시간을 증분시킨다.

3.2 수치해석 모델 및 조건

본 연구에서 사용된 모델은 0.1 m × 0.1 m의 2차원 밀폐 직각공동으로 초기에 일정한 온도(900 K)의 균일한 수소와 공기의 혼합물이 공동 내부에 존재하고, 계산조건에 따라 1000 K의 고온 표면으로 모사된 점화원이 존재한다. 계산 시간의 단축을 위해 초기 수소와 공기 혼합물의 온도를 900 K로 주었으며 이는 정성적인 영향을 평가하는 계산이므로 수용 가능한 가정이라 판단된다. 물체 표면에서는 단열조건과 점성으로 인한 유동 부착조건을 적용하였고 압력과 각 질량분율의 구배는 0으로 가정하였다. 공동내부의 초기압력은 대기압(100 kPa)으로 가정했다.

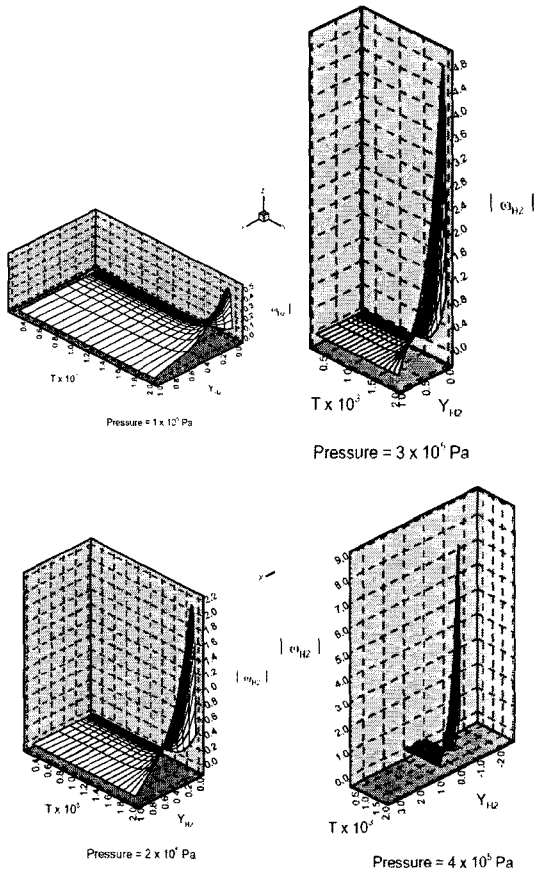


Fig. 1 Relation of hydrogen mass fraction, mixture temperature, and hydrogen reaction rate

연소현상을 기술하는 지배방정식들은 취급하기가 매우 까다로우며(stiff), 완전한 화염의 생성 후의 계산 과정은 고도의 수치적 기법을 요하는 동시에 수치적 불안정성을 발생시키기 때문에 해를 구하기 위해서는 시간 증분을 어느 정도 이상으로 증가시킬 수 없다. 따라서 적절한 검증 계산 후 시간 증분은 10^{-6} 초로 하였고 41×41 의 격자 조합을 채택해 계산을 수행했다.

4. 결과 및 검토

4.1 수소 질량분율, 혼합물 온도 및 압력과 반응율간의 상관관계

먼저 수소 질량분율, 혼합물 온도 및 압력과 수소반응율 간의 상관관계를 알아보기 위해 수소

와 공기 혼합물의 압력이 각각 100, 200, 300, 400 kPa 의 경우에 대해서 수소 질량분율-온도-수소 반응율의 상관관계를 Fig. 1에 도시했다.

수소기체가 공기와 완전히 반응하는 당량비의 몰농도(molar concentration)는 0.29577이다. 이는 0.0284의 수소 질량분율을 의미한다. 각각의 경우 수소기체의 당량비 근처를 전후로 하여 연료과잉 영역과 연료희박영역에서 수소반응율이 감소함을 볼 수 있다. 이것은 통상적으로 거론되는 U자형 분포(Kailasanath et al.[13])에 일치한다. 예혼합기체에서 화학반응이 발생할 때 당량비 근처를 중심으로 연료 과잉 영역에서는 반응에 참가하지 못한 연료가 남아있고 연료희박 영역에서는 산화제가 남게 된다. 이러한 미반응물들은 화학반응의 결과 방출되는 감지엔탈피(sensible enthalpy)를 흡수하여 에너지 흡수원 역할을 하게 된다. 결과적으로 전체 혼합물의 활성화에너지를 높이는 결과를 초래하여 연소를 지연시키게 된다. 이 지연효과는 온도가 높아질수록 그 영향이 감소하는 것을 볼 수 있다.

예혼합기체의 압력 변화에 따른 수소반응율의 변화를 보면 압력이 증가함에 따라 수소반응율이 급격히 증가함을 알 수 있다. 이것은 개개의 기본 화학반응이 그 반응의 반응 관련 분자수(molecularity)에 비례하기 때문이다.

4.2 점화원 위치 및 수량의 영향

30 %의 수소 몰농도(0.0284의 수소 질량분율)를 기본으로 하여 주어진 초기조건 및 경계조건 하에서 점화원의 위치와 수량을 변화시켜가며 각각의 화학반응모델을 채용한 지배방정식의 계산을 수행하였다. 본 연구에서 점화원의 위치 및 수량의 영향을 해석하기 위해 부여한 점화원의 조건은 Table 2와 같다. 세 경우 모두 초기조건은 동일하다. CASE 1과 CASE 2의 비교는 점화원 위치의 영향을 논의하기 위하여, CASE 1과 CASE 3의 비교는 점화원 수량의 효과를 판별하기 위한 자료로 활용된다.

Table 2 Condition of ignition sources

	점화원 위치	점화원 수량
CASE 1	상단 중앙	1
CASE 2	우측 상단 모서리	1
CASE 3	상단 1/3과 2/3 지점	2

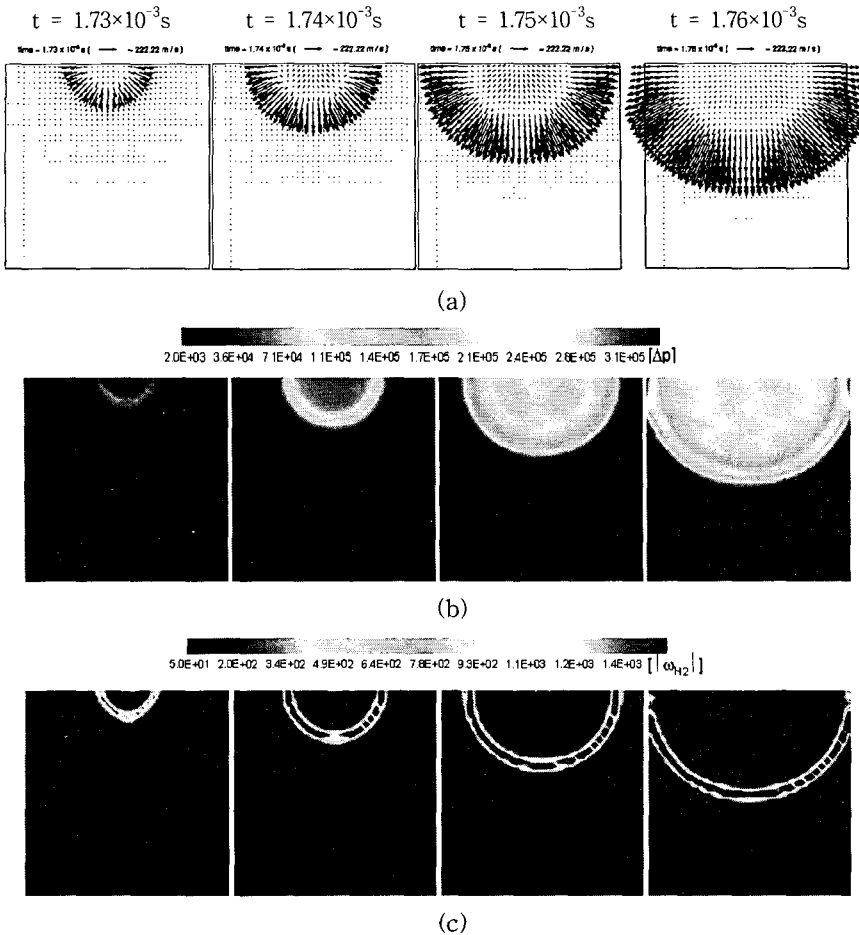


Fig. 2 Transient fields of CASE 1: (a) velocity, (b) pressure variation, and (c) hydrogen reaction rate

4.2.1 점화원 위치의 영향

CASE 1은 Table 2에 기술한 바와 같이 상단 중앙에 점화원이 위치하는 경우이고 CASE 2는 우측 상단에 점화원이 위치하는 경우이다. Fig. 2 (a)에 도시된 CASE 1의 속도 벡터는 상단 중앙으로부터 반응대(reaction zone)가 생성되어 반구 형태로 반응대가 진행함을 보여준다. 반응대에 의한 열적 팽창으로 인해 반응대 진행 방향 후류로는 반응대 진행 방향과 반대로 속도가 나타남을 볼 수 있다. Fig. 3 (a)에 도시된 CASE 2의 속도 벡터 역시 그 같은 현상을 잘 묘사한다. 그러나 점화원의 위치적 차이로 인해 사분구 형태로 반응대가 진행됨을 볼 수 있다.

여기서 주목해야 할 점은 반응대, 즉 화염의

기하학적 형상의 차이이다. 연소반응 진행시 두 경우 모두 고온의 화염부가 전파됨은 Fig. 2 (c)와 Fig. 3 (c)의 수소반응율에 의해 알 수 있지만, 반응이 진행되는 동안의 조건은 전혀 다르다. CASE 1의 경우 반구형의 화염이 공동 중앙부까지 진행되는데 걸리는 시간은 1.76×10^{-3} 초이다. 그러나 CASE 2의 경우는 사분구 형태의 화염이 중앙부까지 전파되는데 걸리는 시간이 그보다 짧은 1.565×10^{-3} 초이다. 즉 화염전파 속도는 점화원이 우측 모서리에 존재하는 경우가 더 빠르다.

이같은 현상은 Fig. 2 (b)와 (c)의 CASE 1에서의 압력변화 및 수소반응율과 Fig. 3 (b)와 (c)의 CASE 2에서의 압력변화 및 수소반응율을 비교해보면 그 이유를 알 수 있다. Fig. 2 (b)와

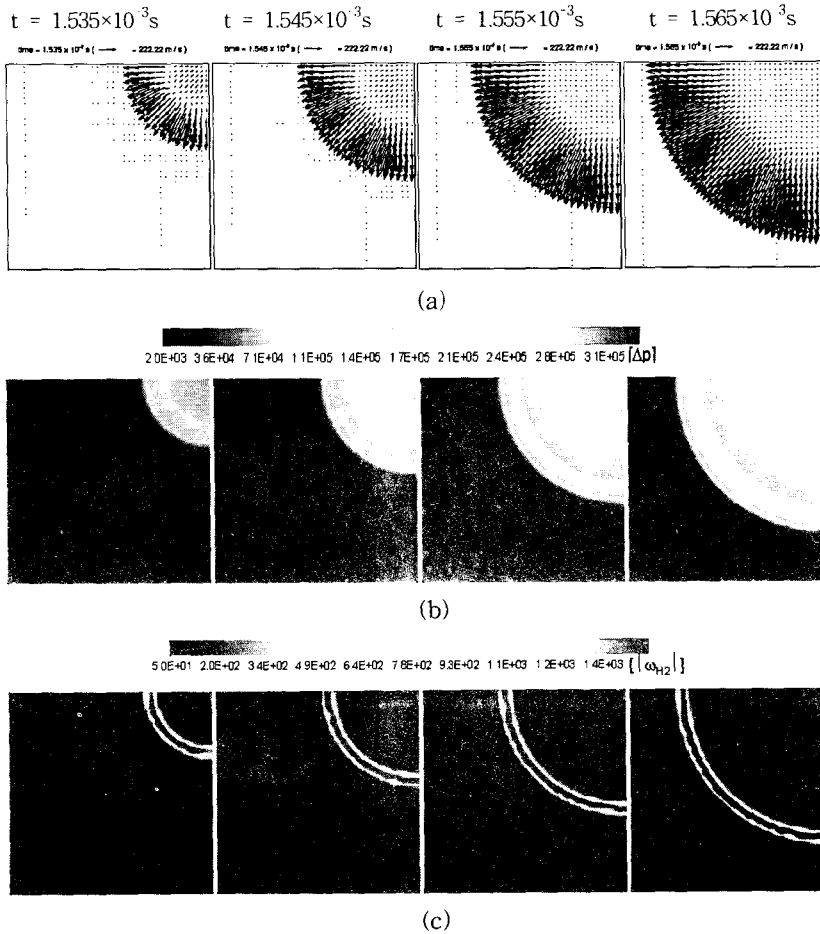


Fig. 3 Transient fields of CASE 2: (a) velocity, (b) pressure variation, and (c) hydrogen reaction rate

Fig. 3 (b)의 압력변화를 비교하면 화염대의 기하학적인 형상의 차이로 인해 점화원이 우측 모서리에 존재하는 경우가 압력축적(pressure buildup)이 더 빨리 일어나고, 따라서 화염대를 전파시키는 구동력인 압력변화가 더 커지게 된다. 따라서 4.1절에서 언급했듯 압력의 증가로 인해 반응은 더 빨리 일어나게 되고 Fig. 3 (c)의 수소반응율에서 보듯 화염전파는 더 빨리 진행되게 된다. 이러한 화염전파의 관점에서 보면 밀폐 공간에서 확산 및 대류에 의해 점화원 부근으로 가연 혼합물이 생성되는 경우 전술한 기하학적인 형상효과가 나타날 수 있는 모서리 부위에서의 점화원의 발생을 억제하는 것이 중대한 사고를 방지하는데 효과적인 것이다.

4.2.2 점화원 수량의 영향

점화원 수량의 영향을 해석하기 위해 CASE 1과 CASE 3의 결과를 비교 및 검토한다. CASE 1은 상단 중앙에 한개의 점화원이 위치하는 경우이고 CASE 3는 상단 1/3과 2/3지점에 모두 두개의 점화원이 위치하는 경우이다. Fig. 2 (a)에 도시된 CASE 1의 속도장은 상단 중앙으로부터 화염이 생성되어 반구 형태로 화염이 진행됨을 보여주며 Fig. 4 (a)에 도시된 CASE 3의 속도장은 두개의 점화원으로부터 화염이 생성되어 각기 진행하다 합쳐져 하나의 형태로 화염이 진행됨을 나타내고 있다.

여기에서 고려해야 할 사항은 점화원의 수량에 따른 화염전파 현상의 차이이다. 연소반응 진

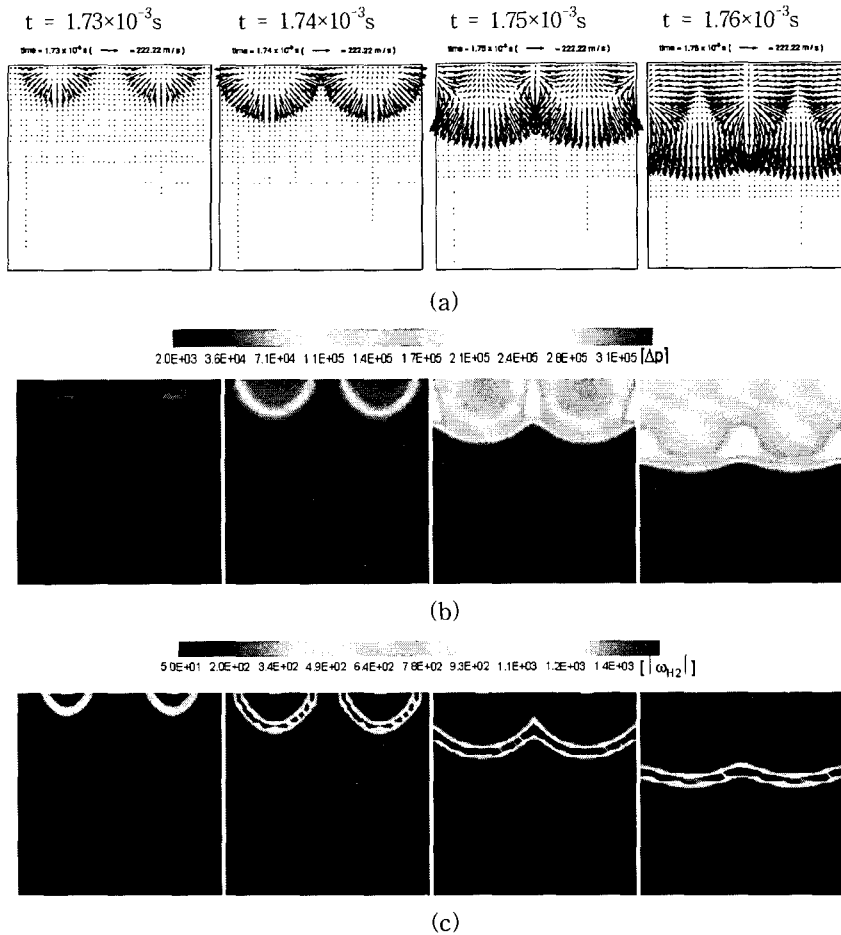


Fig. 4 Transient fields of CASE 3: (a) velocity, (b) pressure variation, and (c) hydrogen reaction rate

행시 두 경우 모두 고온의 화염부가 전파됨은 Fig. 2 (c)와 Fig. 4 (c)의 수소반응율에 의해 알 수 있으며, CASE 1에서 반구형의 화염이 공동 중앙부까지 진행되는 데 걸리는 시간과 CASE 3의 경우 합쳐진 형태의 화염이 중앙부까지 전파되는 데 걸리는 시간은 거의 동일하다. 그러나 두 경우의 수소반응율의 크기를 비교해보면 점화원이 두 개 있는 CASE 3의 경우가 최대 반응율이 더 높음을 확인했다. 이는 Fig. 2 (b)와 Fig. 4 (b)를 비교해 볼 때 반응율의 주요한 매개변수인 화염부의 압력변화가 점화원이 하나만 존재하는 CASE 1에 비해 점화원이 두 개 존재하는 CASE 3의 경우가 더 큰 이유에도 관련이 있다. 따라서 사고 방지를 위해서는 점화원의 수량을 줄이는

것이 당연하며, 만일의 경우 화염이 발생되어 진행하더라도 서로 중첩하지 않을 수 있도록 점화원의 발생을 사전에 예측해 조절함이 바람직하다.

5. 결 론

수치해석 모델로 선정된 직사각형 밀폐공동 내부에서 30 %의 수소 몰농도(0.0284의 수소 질량분율)를 기본으로 하여 주어진 초기조건 및 경계조건 하에서 점화원의 위치와 수량을 변화시켜 가며 각각의 화학반응모델을 채용한 지배방정식을 수치해석적으로 해석했다.

먼저 수소 질량분율, 혼합물 온도 및 압력과 반응율간의 상관관계를 알아본 결과 수소기체의

당량비 근처를 전후로 하여 연료과잉 영역과 연료희박 영역에서 수소반응율은 감소하며, 예혼합 기체의 압력이 증가함에 따라 수소반응율이 급격히 증가함을 알 수 있었다.

점화원의 위치를 매개변수로 하여 계산을 수행한 결과, 화염전파의 관점에서 볼 때 밀폐공간에서 확산 및 대류에 의해 점화원 부근으로 가연 혼합물이 생성되는 경우 기하학적인 형상효과가 나타날 수 있는 모서리 부위에서 점화원의 발생을 억제하는 것이 중대한 사고를 방지하는데 효과적일 수 있다는 결론을 얻었다.

한편 점화원의 수량을 변수로 하여 계산한 결과 점화원이 두개 존재하는 경우 각각의 점화원에서 화염이 발생하고 각기 진행하다가 화염이 합쳐지는 현상이 발생하고 이로 인해 화염의 강도가 점화원이 하나인 경우에 비해 더 강해짐을 알았다. 따라서 사고 방지를 위해서는 점화원의 수량을 줄이는 것도 당연하지만 만일의 경우 화염이 발생되어 진행하더라도 서로 증첩하지 않을 수 있도록 점화원의 발생 부위를 사전에 예측해 조절함이 바람직하다.

참고문헌

- [1] Lewis, B. and von Elbe, G., *Combustion, Flames and Explosions of Gases*, Academic Press, New York (1969), p.323-367.
- [2] Merzhanov, A.G., "On Critical Conditions for Thermal Explosion of a Hot Spot," *Combustion and Flame*, Vol.10, (1966), p.341-348.
- [3] Dixon-Lewis, G. and Shepherd, I.G., "Some Aspects of Ignition by Localized Sources, and of Cylindrical and Spherical Flames," *Fifteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, (1975), p.1483-1491.
- [4] Xiong, T.Y. and Law, C.K., "Transient Ignition of a Combustible by a Hot Body," *AIAA J.*, Vol.23, (1985), p.889-892.
- [5] Cairnie, L.R., Harrison, A.J. and Morgan, P.A., "Autoignition in a Free Convection Boundary Layer," *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, Combustion Institute, Pittsburgh, (1981), p. 1799-1806.
- [6] Kumar, R.K., "Ignition of Hydrogen-Oxygen-Diluent Mixtures Adjacent to a Hot, Nonreactive Surface," *Combustion and Flame*, Vol.75, (1989), p.197-215.
- [7] McBride, B., Gordon, S. and Reno, M., "Coefficients for Calculating Thermodynamics and Transport Properties of Individual Species," *NASA TM 4513*, NASA (1993).
- [8] Warnatz, J., "Calculation of the Structure of Laminar Flat Flames I," *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, Vol.82, (1978), p.192-200.
- [9] Rogers, R.C. and Schexnayder, C.J. Jr., "Chemical Kinetic Analysis of Hydrogen-Air Ignition and Reaction Times," *NASA TP-1856*, NASA (1981).
- [10] Kee, R.J., Miller, J.A. and Jefferson, T.H., "CHEMKIN: A general purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Packages," *Sandia Report 80-8003*, Sandia (1980).
- [11] Karki, K.C. and Patankar, S.V., "Pressure Based Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds in Arbitrary Configurations," *AIAA J.*, Vol.27, (1989), p.1167-1174.
- [12] Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw Hill, New York, (1980).
- [13] Kailasanath, K., Oran, E.S. and Boris, J.P., "A Theoretical Study of the Ignition of Premixed Gases," *Combustion and Flame*, Vol.47, (1982), p.173-190.