

비에혼합 대향류 화염에서 연소 분위기 압력 영향 연구

이 기 만†

(원고접수일 : 2006년 10월 9일, 심사완료일 : 2006년 11월 24일)

Effects of Combustion Atmosphere Pressure on Non-premixed Counterflow Flame

Kee-Man Lee†

Abstract : The present study is numerically investigated the flame structure of non-premixed counterflow jet flames using the laminar flamelet model. Detailed flame structures with the fuel composition of 40% CO, 30% H₂, 30% N₂ and an oxidizer composition of 79% N₂ and 21% O₂ in a non-premixed counterflow flame are studied numerically. This study is aimed to investigate the effects of axial velocity gradient and combustion atmosphere pressure on flame structure. The results show that the role of axial velocity gradient on combustion processes is globally opposite to that of combustion atmosphere pressure. That is, chemical nonequilibrium effects become dominant with increasing axial velocity gradient, but are suppressed with increasing ambient pressure. Also, the flame strength is globally weakened by the increase of axial velocity gradient but is augmented by the increase of ambient pressure. However, flame extinction is described better on the basis of only chemical reaction and in this study axial velocity gradient and ambient pressure play a similar role conceptually such that the increase of axial velocity gradient and ambient pressure cause flame not to be extinguished and extend the extinction limit, respectively. Consequently, it is suggested that a combustion process like flame extinction is mainly influenced by the competition between the radical formation reaction and the third-body recombination reaction.

Key words : Axial velocity gradient(축 방향 속도구배), Combustion atmosphere pressure(연소 분위기 압력), Chemical nonequilibrium(화학적 불평형), Flamelet model(화염편 모델), Radical formation rate(라디칼 생성율)

1. 서 론

실제 연소기의 대부분은 난류 화염의 형태로 연소가 되는데 이러한 난류 화염을 수치해석하기 위한 모델로 Peters 등에 의해 체계화된 층류 화염

편 모델(laminar flamelet Model)이 널리 적용되고 있다. 이 모델은 Williams이 처음 제안한 이래 Peters에 의해 체계화되어 난류 연소 모델에 적용되어 왔다⁽¹⁾⁻⁽³⁾. 이 화염편(flamelet) 개념에서 난류 화염의 국부적 구조들은 아주 작은 층류

† 책임저자(전남도립 남도대학 기계자동차과), E-mail: kmlee@namdo.ac.kr, Tel: 061) 380-8601

소 화염(화염편)들의 앙상블로 이루어져 있다고 가정된다. 이 경우 1차원 구조들인 이 층류 화염편들은 난류유동에 의해 신장되거나 주름지게 되고, 이러한 현상들은 화염편에서 분자단위의 열 및 물질 확산을 지배하여 연소반응에 영향을 미치게 된다. 이러한 반응 인자들을 이 모델에서는 난류 스칼라 소산율과 화염 스트레치와의 선형적인 연관성으로 유동과 화염 상호작용을 잘 기술하고 있다.

Peters는 화학종 및 에너지 보존 방정식으로부터 층류 화염편 내 반응면에 수직방향을 주 방향으로 하는 좌표변환을 통해 혼합분율(mixture fraction)을 매개 변수로 층류 화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 지배하는 1차원 상미분 연립방정식을 유도하였다⁽³⁾. 그 결과 대향류 형태의 유동 구조를 통해 화염과 유동 간 상호작용에 대한 많은 연구들이 이론적 해석 및 실험적 검증을 통해 화염구조를 이해하고 실제 난류화염 구조를 갖는 연소기 설계 자료로 활용되어 왔다⁽⁴⁾⁻⁽⁹⁾.

한편, 로켓이나 엔진 그리고 많은 실제 산업용 연소기들은 상압보다는 높은 분위기 압력에서 운전되고 있음에도 불구하고 난류 화염 구조에 대한 연소 분위기 압력의 영향에 대해서는 아직까지 많은 연구들이 이루어져 있지 않고 있다. 본 연구에서는 이 점에 착안하여 화석 연료에서 가장 간단한 구조 연료이면서 연소 화학반응 기구에서 기초적 반응구조를 갖는 일산화탄소(CO)와 수소(H₂)를 혼합한 비교적 단순한 구조의 연료를 통해 연소 분위기 압력이 화염 구조에 미치는 영향을 상세한 화학 반응 기구들의 수치해석을 통해 조사하고자 한다.

이를 위해 본 연구에서는 모든 계산들을 연소 주위 압력이 1atm인 경우 스트레인 율에 해당되는 축 방향 속도구배(axial velocity gradient, a 로 표시) 값은 $36.0s^{-1}$ 에서 $5164.0s^{-1}$, 2atm은 $36.0s^{-1}$ 에서 $10437.0s^{-1}$ 그리고 3atm에서는 $36.0s^{-1}$ 에서 $15188.0s^{-1}$ 로 비교적 넓은 범위 값에서 수행하였다.

여기서 주위 압력별 최대 축 방향 속도구배 값은 스트레인 율 증가에 따라 화염 스트레치로 발생된 소염 발생 값으로 소염 한계(extinction limit)를 나타내는 값을 알 수 있다. 초기 연료와 산화제인 공기의 온도는 상온인 300K이며, 연료의 물 분

율은 40%-CO, 30%-H₂, 30%-N₂이며 산화제는 21%-O₂와 79%-N₂로 구성되었다.

2. 수치해법

대향류 비예혼합 화염의 구조는 서로 마주보는 두 노즐에서 한쪽에는 연료가 다른 한쪽에는 산화제가 분출되면 노즐 사이에 정체면이 형성되는데, 분출된 연료는 산화제 측으로 확산이 되면서 반응하여 산화제 측에 화염이 형성되는 구조로 되어 있다.(Fig. 1) 연료와 산화제가 마주 보는 노즐에서 분출이 되기 때문에 정체선을 따라 생성된 화염은 스트레치된 상태로 존재하게 되며 이러한 스트레치된 화염의 지배 변수로 스트레인 율(여기서는 축 방향 속도구배)을 층류 화염편 모델에서 사용하게 된다. 이러한 유동의 대향류 화염은 온도와 농도가 안정적인 장점과 연소장 해석이 용이한 1차원 구조로 되어 있어 층류 화염편 모델을 이용한 난류 화염구조 해석을 위한 유동장 형태로 많이 이용되고 있다.

본 연구에서 고려한 일정 거리 간격의 축 대칭 비예혼합 대향류 화염의 형상을 Fig. 1에 나타내었다. 사용한 계산 코드는 Kee 등이 개발한 모델을 채택하였으며, 질량과 운동량식, 에너지 및 화학종 방정식 등의 지배 방정식과 해석 기법은 Lutz 등이 사용한 방법을 이용하여 계산하였다^{(10),(11)}.

또한 연소 화학반응 모사를 위해 32개 요소 반응 기구들(Table 1)과 15 화학종들 계산은 Drake 등이 제안한 상세 화학반응식을, 그리고 열역학적 물성치와 전달 물성치들은 CHEMKIN Package를 사용하여 계산하였다^{(12),(13)}.

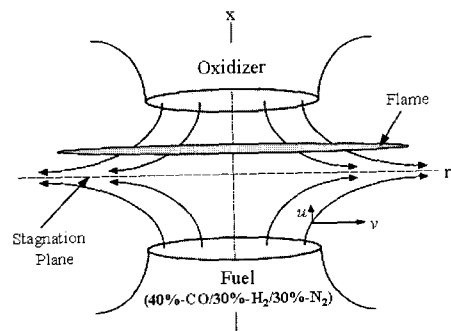


Fig. 1 Schematic drawing of non-premixed counterflow flame

본 계산에서 사용된 대향류 버너간의 거리(L)는 20mm이었으며, 축 방향 속도구배 값에 해당되는 스트레인 율은 Chellian 이 정의한 다음과 같은 식으로 계산된 값을 사용하였다⁽¹⁴⁾.

$$a = \frac{2(-u_o)}{L} \left[1 + \frac{u_f}{(u_o)} \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_o}} \right] \quad (1)$$

여기서 L은 축 대칭 대향류 버너에서 연료 노즐과 산화제 노즐간의 간격을 u와 ρ는 속도와 밀도를 나타내며 하 첨자인 f와 o는 각각 연료와 산화제를 의미한다.

3. 결과 및 고찰

3.1 속도구배와 주위 압력에 따른 반응 특성

스트레인 율이 스트레치된 화염 구조 미치는 영향에 관한 이전의 연구를 살펴보면, 스트레인 율에 해당되는 축 방향 속도구배(이하 속도구배)가 증가함에 따라 최대 화염 온도와 반응대 두께는 감소하며 반응대 위치가 연료 측으로 옮겨져 감을 보고하고 있다⁽⁷⁾. 이러한 이유는 축 방향 속도는 화염 선단에서 유동의 체류시간에 반비례하므로 축 방향 속도의 증가는 특성 화학반응 시간 대비 특성 유동시간으로

정의되는 뎀켈러 수(Damköhler number, Da)의 감소를 의미하므로 화학적 불평형 영향을 더욱 더 심화시키는 꼴이 된다. 이는 속도구배가 증가함에 따라 나타나는 현상들, 즉, 낮은 화염 온도, 화염대에서 연료와 산화제의 물 분율 증가, 연소 반응물들(CO₂, H₂O)의 최대 물분율 감소 그리고 모든 라디칼(radical)들의 최대 물 분율 증가 등으로 입증된다.

그런데 연소 분위기 압력(이하 주위 압력)이 증가하는 경우 대향류 버너 간 거리(x(cm))로 표시된 Fig. 2와 3에서 보여진 바와 같이 주위 압력 증가가 뎀켈러 수(Da)의 증가를 가져와서, 반응대 두께가 감소하는 것을 제외하고는 앞서 보고된 속도구배 증가로 얻어진 현상과는 반대로 나타남을 볼 수 있다. 즉, 화염의 온도가 올라가며(Fig. 2) 화염대에서 연료와 산화제 농도가 감소하고, 연소 반응물들인 CO₂와 H₂O의 물 분율이 증가하고 있으며(Fig. 3(a)) 주요 라디칼 농도들이 주위 압력이 증가함에 따라 감소(Fig. 3(b))하고 있음을 알 수 있다. 상세한 화학 반응 기구들의 수치 해석을 통해 얻어진 이러한 결과들은, 일반적으로 알려진 고압 분위기로 연소를 할 경우 고 부하 연소가 가능한 이유에 대해서 반응기구적으로 설명해 주는 결과인 셈이다.

Table 1 Chemical reactions and rate in the form $k_f = AT^n \exp(-E_a/RT)$

Reactions	A	n	E _a	Reactions	A	n	E _a
(1) H + O ₂ = O + OH	5.1E+16	-8.816	16507.0	(17) CO ₂ + O = CO + O ₂	2.8E+12	0.0	43830.0
(2) OH + H ₂ = H ₂ O + H	1.2E+9	1.3	3630	(18) HCO + M' = H + CO + M'	7.1E+14	0.0	16800.0
(3) H ₂ + O = H + OH	1.8E+10	1.0	8920.0	(19) HCO + H = CO + H ₂	2.0E+14	0.0	0.0
(4) OH + OH = H ₂ O + O	1.5E+9	1.14	0.0	(20) HCO + OH = CO + H ₂ O	5.0E+13	0.0	0.0
(5) H + HO ₂ = OH + OH	1.5E+14	0.0	1000.0	(21) HCO + O ₂ = CO + HO ₂	5.0E+13	0.5	835.0
(6) H + HO ₂ = H ₂ + O ₂	2.5E+13	0.0	690.0	(22) H + H + M' = H ₂ + M'	9.0E+16	-0.6	0.0
(7) H + HO ₂ = H ₂ O + O	1.0E+13	0.0	1073.0	(23) H + OH + M' = H ₂ O + M'	2.2E+22	-2.0	0.0
(8) HO ₂ + OH = H ₂ O + O ₂	1.5E+13	0.0	0.0	(24) O + H + M'' = OH + M''	6.2E+16	-0.6	0.0
(9) HO ₂ + O = O ₂ + OH	2.0E+13	0.0	0.0	(25) CO + O + M = CO ₂ + M	5.8E+13	0.0	0.0
(10) H ₂ O ₂ + OH = H ₂ O + HO ₂	1.0E+13	0.0	1800	(26) HCO + O = CO + OH	3.0E+13	0.0	0.0
(11) HO ₂ + HO ₂ = H ₂ O ₂ + O ₂	2.0E+12	0.0	0.0	(27) HCO + O = CO ₂ + H	3.0E+13	0.0	0.0
(12) H ₂ O ₂ + H = HO ₂ + H ₂	1.7E+12	0.0	3750.0	(28) O + N ₂ = N + NO	1.9E+14	0.0	76250.0
(13) H + O ₂ + M' = HO ₂ + M'	2.3E+18	-0.8	0.0	(29) NO + H = N + OH	1.3E+14	0.0	49200.0
(14) H ₂ O ₂ + M = OH + OH + M'	1.2E+17	0.0	45500.0	(30) O + NO = N + O ₂	2.4E+9	1.0	38640.0
(15) CO + OH = CO ₂ + H	1.5E+7	1.3	-770.0	(31) NO + HO ₂ = NO ₂ + OH	3.02E+12	0.5	2400.0
(16) CO + HO ₂ = CO ₂ + OH	1.5E+14	0.0	23650.0	(32) NO + OH = NO ₂ + H	5.86E+12	0.0	30950.0

Note : K_f is a specific reaction rate constant and A, T, E_a, R are frequency factor, temperature, activation energy and gas constant, respectively. Unit are mole/cm³s and cal/mol. Temperature in Kelvin. M means collision efficiencies equal 1.0 for all species. M' implies the following collision efficiencies: H₂O(6.0), CO₂(1.5), CO(0.4), O₂(0.4) and N₂(0.4). M'' implies the following collision efficiencies: H₂O(6.5), CO₂(1.5), CO(0.75), O₂(0.4) and N₂(0.4). M''' implies the following collision efficiencies: H₂O(5.0), CO₂(1.5), CO(0.4), O₂(0.4) and N₂(0.4).

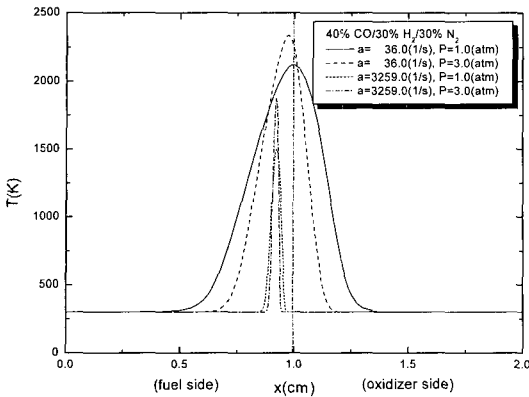


Fig. 2 Flame temperature profile with distance from nozzle exit of fuel

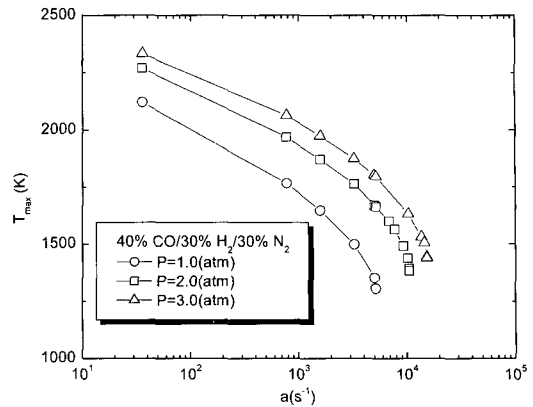


Fig. 4 Variation of maximum flame temperature with axial velocity gradient

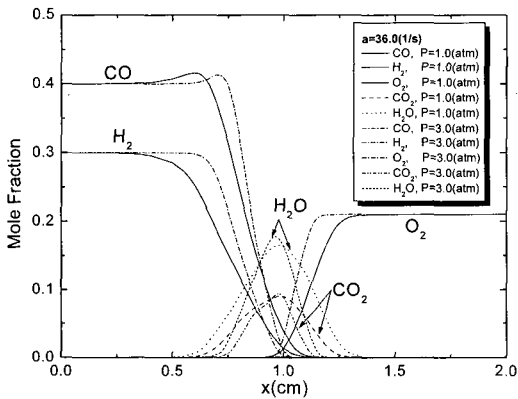


Fig. 3 (a) Mole fraction of major species with axial distance from nozzle exit : P = 1.0atm and 3.0atm at a = 36.0s⁻¹

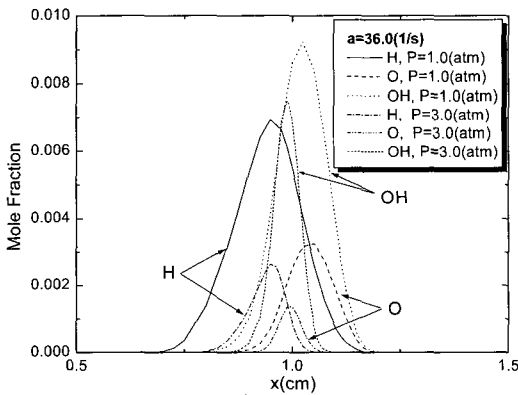


Fig. 3 (b) Mole fraction of major radical species with axial distance from nozzle exit : P = 1.0atm and 3.0atm at a = 36.0s⁻¹

한편, 반응대 두께가 주위 압력과 속도구배 증가에 따라 감소하는 이유는 다음과 같이 판단된다. 반응대 두께는 확산도인 D 와 속도구배를 의미하는 스트레인율인 a 와의 상관관계로 대략 $\sqrt{D/a}$ 로 표시된다. 따라서 일반적으로 물질의 확산도는 주위 압력에 반비례하는 특성을 보이므로, 속도구배가 일정한 경우 주위 압력증가로 반응대 두께가 감소됨을 알 수 있다.

Fig. 4는 계산된 속도구배 값 범위에서 주위 압력 변화에 따른 최대 화염 온도 변화를 보여주고 있다. 주위 압력 증가는 최대 화염 온도를 증가시키며 뎀켈러 수 (Da)의 증가로 소염이 발생하는 속도구배 값이 커져 소염 한계가 넓어짐을 보여주고 있다. 여기에서 볼 수 있듯이, 주위 압력이 1atm에서는 $5164.0s^{-1}$ 인 값이 2atm에서는 $10437.0s^{-1}$, 3atm에서는 $15188.0s^{-1}$ 까지 증가하여 소염 한계가 넓어짐을 알 수 있었다.

3.2 혼합분율에 따른 주요 화학종 분포특성

Fig. 5, 6은 주위 압력이 1, 2, 3atm 그리고 속도 구배 값인 a 가 36.0과 $5164.0s^{-1}$ 인 경우 화학 반응과 무관하게 존재하는 보존 스칼라인 혼합분율 (mixture fraction, Z) 도메인에서 주요 화학종들과 라디칼들의 몰 분율 분포를 보여주고 있다. 혼합분율로 표시된 좌표 축은 산화제 경계에서는

$Z=0$, 연료 경계에서는 $Z=1$ 의 값을 갖으며, 혼합 분율은 혼합기 입의 지점에서 연료로부터 공급된 비율을 의미한다. 또한 화염의 두께가 매우 얇아 화염 면을 극한으로 가정하면 화염의 위치는 $Z=Z_{st}$ 인 지점에 위치하게 된다.

모든 경우에서 주위 압력이 증가함에 따라 화학 반응적으로 비평형 정도를 나타내는 산화제와 연료와의 중첩 정도가 매우 작아짐을 알 수 있다. 예상했던 바와 같이 주요 연소 반응 생성물들(CO_2 , H_2O)의 최대 몰 분율은 속도구배가 증가할수록 감소하였으며, Fig. 5(b)와 6(b)에서 알 수 있듯이 주위 압력 증가에 의해서는 증가함을 볼 수 있다.

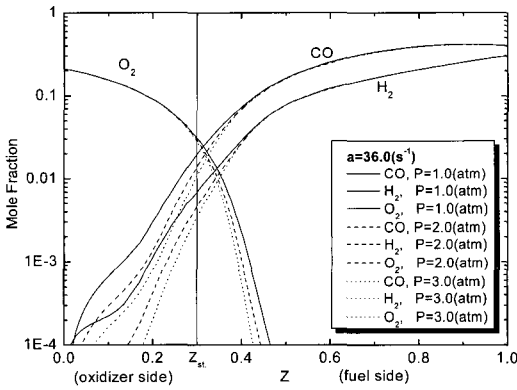


Fig. 5 (a) Variation of mole fraction of fuel and oxidizer with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 36.0s^{-1}$

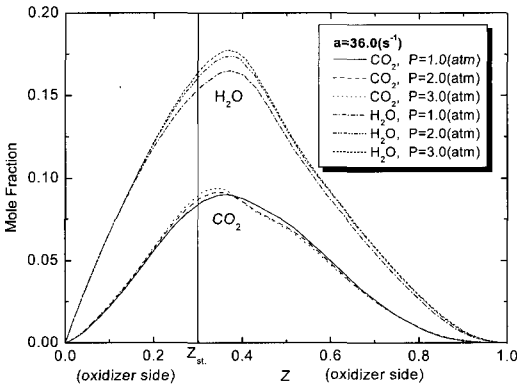


Fig. 5 (b) Variation of CO_2 and H_2O mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 36.0s^{-1}$

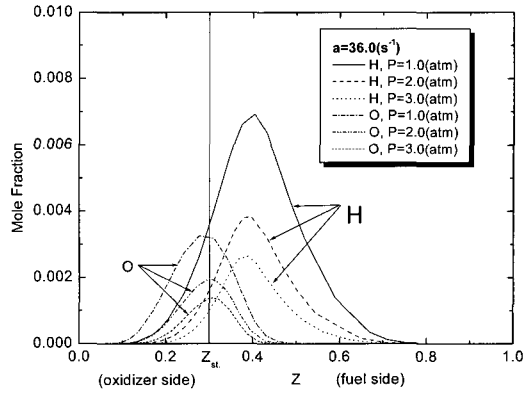


Fig. 5 (c) Variation of H and O mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 36.0s^{-1}$

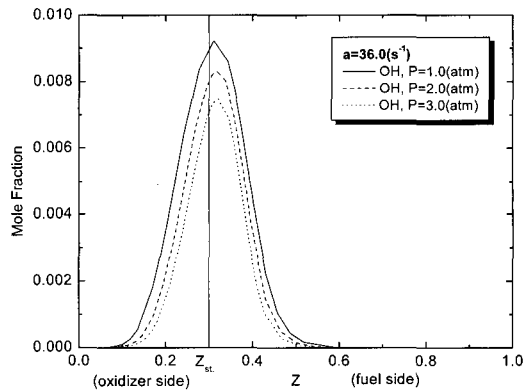


Fig. 5 (d) Variation of OH mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 36.0s^{-1}$

또한 이들 최대 몰 분율의 위치도 속도구배 증가에 따라 연료 과잉 영역으로 조금씩 옮겨가고 있으며, 주위 압력 증가에 따라서는 당량비 라인(Z_{st} 라인) 쪽으로 접근하고 있음을 볼 수 있다. 이러한 현상은 속도구배 증가는 유동의 체류시간 단축을 의미하므로 화염 영역을 정체 면으로 이동시키며, 주위 압력 증가는 덴켈러 수(Da)의 증가를 의미하게 되므로 최대 몰 분율 위치가 화염대로 접근하게 되는 것으로 설명된다.

한편, 주위 압력이 증가함에 따라 속도구배인 $a = 36.0s^{-1}$, $5164.0s^{-1}$ 인 모두에서 O와 H라디칼의 최대 몰 분율은 감소함을 보였으나(Fig. 5(c),

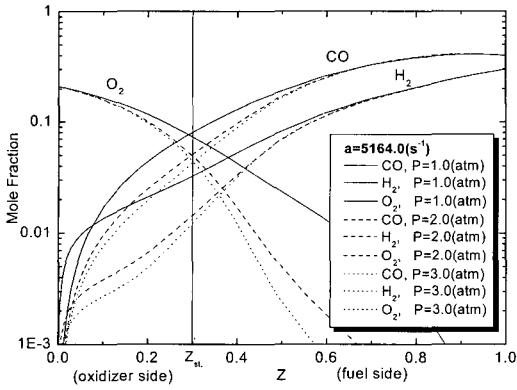


Fig. 6 (a) Variation of mole fraction of fuel and oxidizer with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 5164.0s^{-1}$

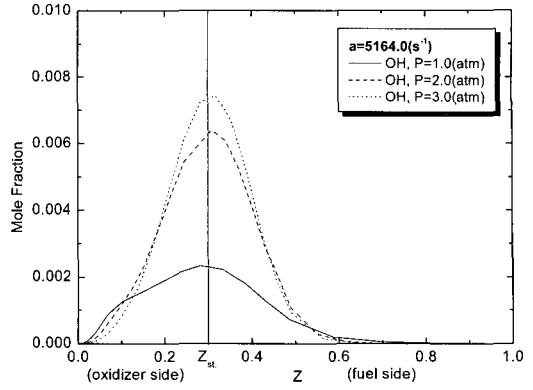


Fig. 6 (d) Variation of OH mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 5164.0s^{-1}$

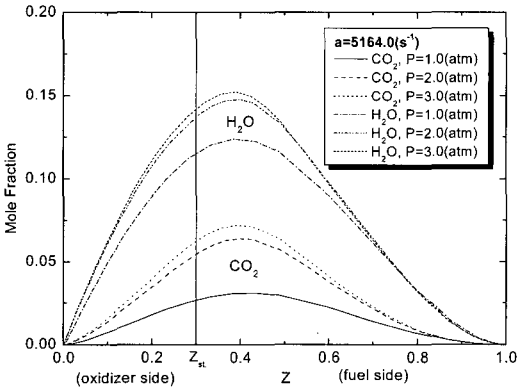


Fig. 6 (b) Variation of CO_2 and H_2O mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 5164.0s^{-1}$

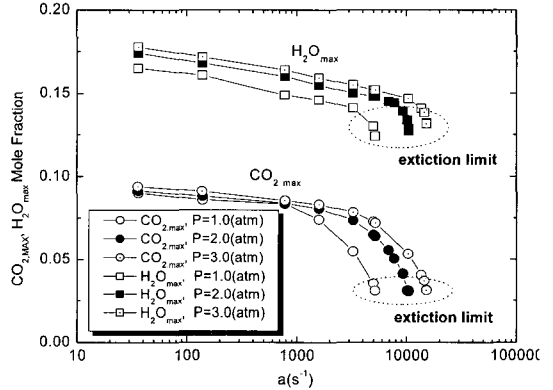


Fig. 7 Variation of maximum mole fraction of major products with axial velocity gradient for $P = 1, 2$ and 3atm

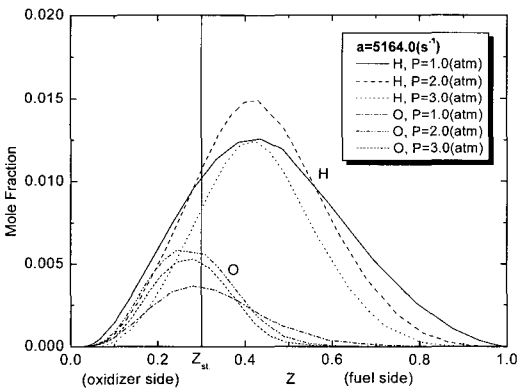


Fig. 6 (c) Variation of H and O mole fraction with mixture fraction for atmosphere pressure of 1, 2 and 3atm at $a = 5164.0s^{-1}$

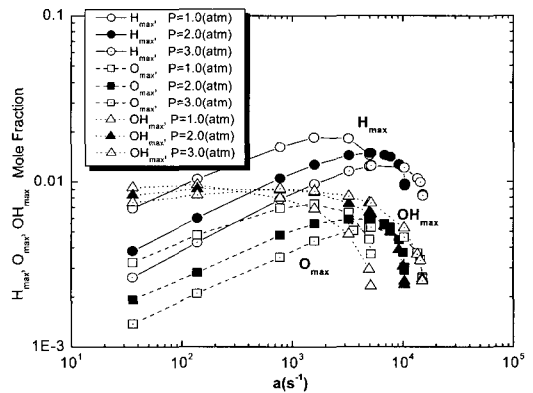


Fig. 8 Variation of maximum mole fraction of H, O and OH with axial velocity gradient for $P = 1, 2$ and 3atm

6(c)) OH라디칼은 $a=36.0s^{-1}$ 인 경우에는 주변 압력의 증가에 따라 감소하였으나 $a=5164.0s^{-1}$ 인 경우에는 증가함을 보이고 있다(Fig. 5(d), 6(d)).

이러한 주요 생성물과 라디칼들이 연소 화학 반응에서 차지하는 역할을 위해 좀더 구체적인 변화를 살펴보기 위하여 Fig. 7과 8에 이들 화학종들의 최대 몰분율 변화를 나타내었다.

3.3 라디칼 반응에 의한 주요 농도 변화

Fig. 7은 CO_2 와 H_2O 의 최대 몰분율이 각 주위 압력별에서 속도구배 증가에 따라 소염 한계 근처를 제외하곤 대부분의 영역에서 단조 감소함을 보여 주고 있다. 즉, 화염 강도는 이 그림과 Fig. 4에서도 확인할 수 있듯이 속도구배가 증가 할수록, 주위 압력이 감소할수록 약해짐을 알 수 있다. 일반적으로 탄화수소와 수소 연료의 고온 연소 반응을 보면, Table 1에 표시된 연소 화학반응 기구에서 (1)번 반응은 한 개의 수소 원자가 O와 OH의 두 개 라디칼 종을 생산하는 화학 반응기구로 연소 반응에서 가장 중요한 연쇄 분기(chain branching) 반응으로 잘 알려져 있다^[15]. 따라서 H원자 생산을 증가시키는 어떠한 타입의 화학 반응속도적 자극은 반응 기구 (1)로부터 정미한 양의 분기 반응을 촉진시켜 결국 연소 반응율을 증가시킬 것이다. 이러한 의미는 거꾸로 H원자 집단을 감소시키는 반응 과정이나 (1)번 반응 기구와 경쟁하는 다른 반응 기구들은 연소 반응율을 억제하는 경향이 된다는 것이다. 그런데, (13)번 반응과 같은 라디칼의 삼중체 재결합(three-body recombination) 반응기구는 라디칼이 소멸되는 연쇄 종료(chain terminating) 반응으로 라디칼 생성 반응인 (1)번 반응과 생성물에서 경쟁을 벌이게 된다.

따라서 라디칼 삼중체의 재결합율이 생성물에 비해 너무 낮을 경우 속도구배 증가에 따라 라디칼 몰 분율들은 증가되고 주요 연소 생성물들인 CO_2 와 H_2O 의 몰 분율들은 감소하게 된다.

Fig. 8에서는 속도구배가 증가함에 따라 모든 주위 압력에서 H와 O의 최대 몰분율이 처음에는 증가하다가 이후에는 감소하고 있음을 보여 주고

있다. 또한 주위 압력에 대한 영향에 대해서는 위에서 다시 논하겠으나, 소염 한계 근처에 해당하는 속도구배 값을 제외하고는 주위 압력이 증가함에 따라 H와 O 최대 몰 분율들이 작아짐을 볼 수 있다. OH인 경우에는 상대적으로 넓은 속도구배 값 범위에 걸쳐서 주위 압력에 따른 몰 분율 변화가 작았으며, 소염한계 근처에서는 마찬가지로 급격하게 떨어짐을 볼 수 있다. H 라디칼은 큰 속도구배 영역에서 생성 반응이 현저함을 보이는 반면, OH 라디칼은 작은 속도구배 영역에서 생성 반응이 주도적임을 알 수 있다.

이를 통해 속도구배 증가와 함께 H 몰 분율이 증가하는 것이 Table 1의 (1)번 반응을 활발하게 하며, 그래서 H와 O_2 간의 충분한 충돌이 일어날 수 있도록 하여 결국 전체 연소 반응율이 (1)번 반응 방향으로 증가되는 것으로 추측된다.

그런데 속도구배가 일정한 경우 주위 압력 증가는 펌켈러 수(Da)의 증가를 의미함에도 불구하고 주위 압력이 증가에 따라 H 몰 분율은 증가가 아니라 감소가 되는 것을 나타냈다. 이는 H 몰 분율 변화만 보면 주위 압력 증가가 오히려 연소 반응율을 낮추는 결과로 인식하여 앞서 논했던 Fig. 2의 결과와 상반되는 것으로 오해할 소지를 갖는다. 따라서 연소 화학 반응에서 주위 압력이 연소 반응에 미치는 영향에 대해서는 다른 각도의 분석이 필요함을 말해 주고 있다.

3.4 주위압력 변화에 따른 소염 특성

Fig. 9, 10에서는 주요 라디칼 생성율과 재결합율의 상대적 비를 통해서 주위 압력 변화가 연소과정에 미치는 영향에 대해서 보여 주고 있다.

먼저, 상세 화학 반응 Table 1에서 (2), (3) 그리고 (15)번 반응의 몰 생성물들은 비록 중요한 연쇄 분기 반응들일지라도 (1)번 반응의 부산물들이다. 따라서 라디칼의 화학 반응기구에서 가장 중요한 연쇄 생성물인 (1)번 연쇄 분기 반응과 삼중체 재결합 반응인 (13)번 연쇄 종료반응 간 상대적 비의 크기를 주의 깊게 살펴 볼 필요가 있다.

Fig. 9와 10에서 (1)번 라디칼 생성율과 (13)번 삼중체 재결합율이 속도구배 증가와 주위 압력 증

가에 따라 각각 증가됨을 볼 수 있다. 그런데 스트레인이 $36.0s^{-1}$ 인 경우 (13)번 반응의 몰 생성율에 대한 (1)번 반응의 H 라디칼 몰 생성을 비는 압력이 1atm에서는 1.357인 반면에 3atm에서는 1.483인 것으로 나타났다. 또한 스트레인이 $5164.0s^{-1}$ 인 경우도 주변 압력이 1atm인 경우 1.293, 3atm인 경우 1.393으로 압력이 증가할수록 크게 나타났다. 이 같은 결과는 주위 압력이 증가함에 따라 (1)번 분기 반응에 의한 H 라디칼 생성율이 (13)번 반응인 H 라디칼의 삼중체 재결합에 의한 소멸율과 비교해서 상대적으로 증가함에 따라 그 결과 전체적인 연소 반응율이 증가되었음을 말해 주고 있다. 이러한 상대적 비는 비록 여기서는 보여주질 않았으나 소염 한계 근처를 제

외하고는 속도구배에 따라 증가되는 것으로 나타났다.

따라서 이와 같은 영향들로 인해, 속도구배인 스트레인이 증가함에도 불구하고 주위 압력이 증가하는 경우, 화염의 소염 현상이 지연되어 소염 한계가 넓어짐을 보여 주고 있다. 이러한 상대 비는 소염 한계 근처에서는 속도구배 증가와 함께 감소되어 결국 화염이 소염되게 된다.

한편, 소염 발생에 대한 이전 연구자들의 결과를 보면, 소염 현상(한계)은 산화제와 연료 측 모두에 대한 열전도가 더 이상 화학 반응으로 인해 생성된 열과 열적 균형이 이루어지질 않을 때 발생하는 것으로 보고하고 있다^{[2], [3]}. 만약 이들의 결과를 본 연구 결과에 적용하여 설명한다면, 모든 속도구배

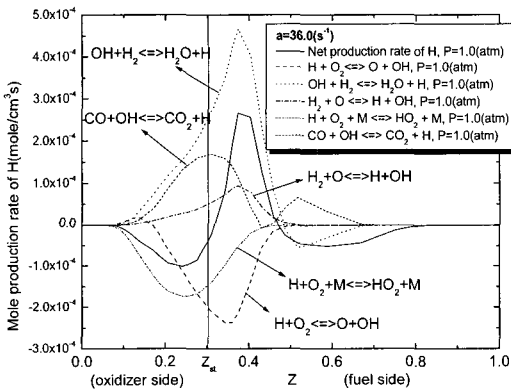


Fig. 9 (a) Variation of mole production rate of H with mixture fraction at $a = 36.0s^{-1}$ and $P = 1.0atm$

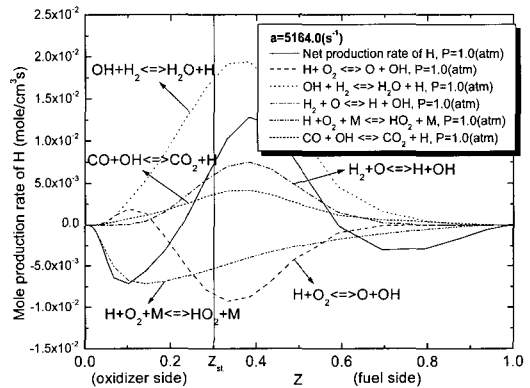


Fig. 10 (a) Variation of mole production rate of H with mixture fraction at $a = 5164.0s^{-1}$ and $P = 1.0atm$

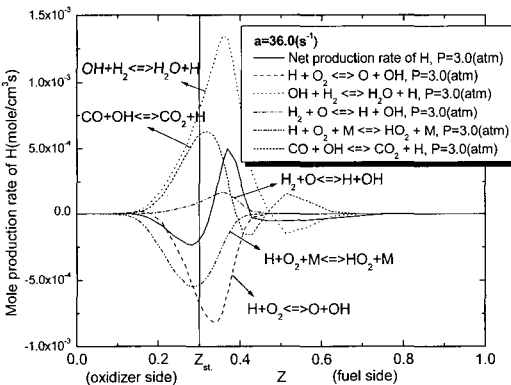


Fig. 9 (b) Variation of mole production rate of H with mixture fraction at $a = 36.0s^{-1}$ and $P = 3.0atm$

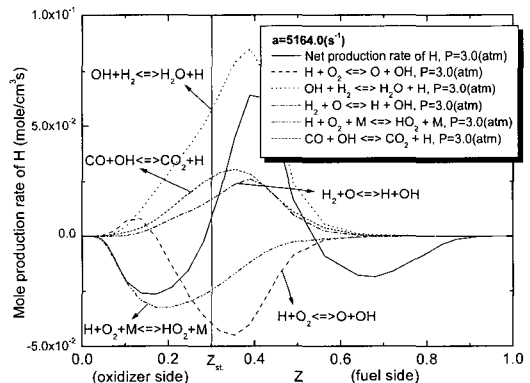


Fig. 10 (b) Variation of mole production rate of H with mixture fraction at $a = 5164.0s^{-1}$ and $P = 3.0atm$

영역에 해당되질 않고 소염 한계 근처에 국한되어 적용될 수 있을 것이다. 이는 화염 응답에서 잘 알려진 S-곡선에 기초하여 자연스럽게 예상할 수 있을 것이다.

일반적으로 S-곡선에서 소염 근처 영역을 제외한 상부 분기(upper branch)의 특성은 혼합기의 확산율로 제어되는 영역이므로 템펠러 수 개념으로 연소 과정이 잘 설명되고 있다. 그러나 소염 한계 근처에서는 연소 특성이 예혼합 화염 특성을 보이므로 연소 과정들이 화학 반응적으로 제어되는 전형적인 well-stirred reactor 개념으로 간주되어 화학 반응 기구로 설명되어 진다.

따라서 소염 한계 근처에서 화염의 꺼짐(소염) 현상은 비록 열적인 불균형 상태로 인해 화염이 소염될 수 있는 열적 소염(thermal quenching)이 되는 상태가 된다 하더라도, 궁극적으로 라디칼의 생성과 소멸 과정인 (1)번 반응과 (13)번 반응과의 경합 결과인 화학적 소염(chemical quenching)으로 나타나게 되는 것이다.

4. 결 론

40% CO, 30% H₂, 30% N₂로 혼합된 연료의 비예혼합 대향류 화염 구조에서 연소 분위기 압력인 주위 압력에 대한 영향을 상세 연소 화학 반응 기구의 수치해석을 통하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) 연소 과정에서 축 방향 속도구배, 즉, 스트레인 율의 역할은 전체적으로 특성 유동시간과 반응시간의 비로 표시되는 템펠러 수를 기초로 하는 주위 압력과 반대되는 작용을 함을 알았다. 즉, 화학적 불평형 영향은 속도구배가 증가함에 따라 우세한 것으로 나타났으나 주위 압력 증가에 따라서는 억제되는 것으로 나타났다.
- (2) 화염 강도는 전체적으로 속도구배가 증가함에 따라 약해지는 것으로 나타났으나 주위 압력이 증가함에 따라서는 강해짐을 보였다. 이는 주위 압력 증가가 반응대를 좁히고 집중화 시

키는데 기인한다는 사실로 증명이 되었다.

- (3) 소염 현상과 관련하여 주위 압력이 증가하는 경우 소염 발생 속도구배 값이 증가하여 결국 소염 한계 영역이 넓어짐을 보였다. 또한, 소염 발생은 비록 반응대에서 열적 불균형으로 화염이 소염 영역 근처에서 꺼질 수 있는 상태로 유도된다 하더라도, 궁극적으로 (1)번과 (13)번 반응과의 경합 결과로 나타남을 알았다.

후 기

본 연구는 지방대학 혁신역량강화사업인 누리(NURI) 조선인력 양성사업단 지원에 의해 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] F.A. Williams, "A review of some theoretical considerations of turbulent flame structure, AGARD Conference Proceeding, Vol.164, pp. 1, 1975.
- [2] N. Peters, "Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion", CST, Vol. 30, pp.1, 1983.
- [3] N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, pp.319, 1984.
- [4] H. Tsuji and I. Yamaoka, "The counterflow diffusion flame in the forward stagnant region of a porous cylinder", Proceedings of the 11th Int. Symposium on Combustion, PA, pp. 979, 1966.
- [5] H. Tsuji, "Counterflow diffusion flame", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 8, pp.93, 1984.

- [6] Dixon-Lewis et al., "Calculation of the structure and extinction limit of a methane-air counterflow diffusion flame in the forward stagnant region of a porous cylinder", Proceedings of the 20th Int. Symposium on Combustion, pp. 1893, 1984.
- [7] M.C. Drake, "Structure of laminar opposed-flow diffusion flame with CO/H₂/N₂ fuel", CST, Vol. 61, pp.187, 1988.
- [8] F. Mauss et al., "A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames", Proceedings of the 23th Int. Symposium on Combustion, pp. 693, 1990.
- [9] N. Darabiha, "Transient behavior of laminar counterflow hydrogen-air diffusion flames with complex chemistry", CST, Vol. 86, pp.163, 1992.
- [10] R.J. Kee, J.A. Miller, G.H. Evans and G. Dixon-Lewis, "A computational model of the structure and extinction of strained, opposed flow, premixed methane-air flame", Proceedings of the 22nd Int. Symposium on Combustion, pp. 1479, 1988.
- [11] A.E. Lutz, R.J. Kee, J.F. Grcar and F.M. Rupley, "OPPDIF : A fortran program for computing opposed-flow diffusion flames", SAND96-8243, 1996.
- [12] M.C. Drake and R. J. Blint, "Structure of laminar opposed-flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuel", CST, Vol. 61, pp.187, 1988.
- [13] R.J. Kee et al., "Chemkin : A general-purpose, problem-independent, transportable, fortran chemical kinetic code package", SAND80-8003, 1980.
- [14] H.K. Chellian, C.K. Law, T. Ueda, M.D. Smooke and F.A. Williams, "An experimental and theoretical investigation of the dilution, pressure and flow-field effects on the extinction condition of methane-air-nitrogen diffusion flames", Proceedings of the 23rd Int. Symposium on Combustion, pp. 503, 1990.
- [15] C.K. Westbrook and F. L. Dryer, "Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, pp.1, 1984.

저 자 소 개



이기만 (李起萬)

1960년 11월생. 1983년 인하대학교 기계공학과 졸업, 1998년 한국과학기술원 기계공학과 졸업(공학박사), 2001년~2002년 일리노이대학교 기계공학과 Post-doc., 1987년~1988년 한국에너지기술연구소 연구원, 1989년~1998년 (주)LG전자 리빙시스템연구소 선임 연구원(팀장), 1998년~현재 도립남도대학 기계자동차과 부교수