

# 와동과 상호작용하는 화염편에서의 오염물질 생성특성

오창보<sup>†</sup> · 이의주

부경대학교 안전공학부

(2009. 10. 19. 접수 / 2010. 1. 11. 채택)

## Pollutant Formation Characteristics in a Flamelet Interacting with a Vortex

Chang Bo Oh<sup>†</sup> · Eui Ju Lee

Division of Safety Engineering, Pukyong National University

(Received October 19, 2009 / Accepted January 11, 2010)

**Abstract** : Flame structure of diffusion flame interacting with a single vortex was investigated with direct numerical simulation (DNS). A well-known counterflow diffusion flame was used as an initial flat flame and single vortices were made by issuing a high-velocity jet abruptly in fuel- and air-side. The variations in the maximum concentration of major species (CO and CO<sub>2</sub>) and NO<sub>x</sub> (NO and NO<sub>2</sub>) with the stoichiometric scalar dissipation rate were investigated. Unsteady effects in the species concentration variation of the flame interacting with a vortex were identified by comparing with that of steady flame. NO<sub>2</sub> formation characteristics of the flame interacting with a vortex were well understood by investigating the HO<sub>2</sub> formation. To enhance the prediction performance in the fire simulation, current turbulent combustion modelings are needed to be modified by adopting the unsteady effects in the species concentrations of diffusion flame interacting with a vortex.

**Key Words** : flame-vortex interaction, counterflow flame, unsteady effects, nitrogen oxides, numerical simulation

### 1. 서론

우리가 주변에서 흔히 접할 수 있는 화재는 통상 난류화염의 형태를 보이고 있다. 또한 화재에서 관찰되는 화염은 근원적으로 난류, 즉 다양한 크기와 강도를 갖는 와동들(Eddy 또는 Vortex)과 상호작용하는 화염으로 볼 수 있다. 현재 화재에 대한 수치해석 기법에서 중요한 부분을 차지하고 있는 연소모델(혹은 화재모델)들은 대부분 난류화염을 화염과 와동의 상호작용으로 보는 견해로부터 출발하고 있다. 화재해석에 사용 가능한, 매우 간단한 모델인 와소산모델(Eddy Dissipation Model; EDM)을 포함하여 고급 연소모델의 일종인 화염편모델(Laminar Flamelet Model; LFM), 조건 모멘트 닫힘 모델(Conditional Moment Closure Model; CMC), 선형와동모델(Linear Eddy Model; LEM) 등이 바로 그러한 모델들이다<sup>1-3)</sup>.

이들 모델 중에서 고급모델에 속하는 LFM, CMC, LEM 등은 난류(와동)의 영향을 화염에 도입한 모

델 층류화염을 이용하여 확률 등의 수학적 도구를 적용함으로써 난류화염을 묘사하는 특징을 가지고 있다<sup>1,2)</sup>. 그러한 모델 층류화염 중에서 가장 대표적인 것이 층류 대향류화염이다. 이 화염은 비록 층류화염이지만 와동에 의해서 화염에 가해지는 화염 신장(Flame stretch) 효과를 매우 잘 반영할 수 있으며, 수학적으로 1차원 화염으로 근사가 가능하여 매우 간단한 수치계산을 통해서 화염구조를 얻을 수 있는 장점이 있다<sup>1)</sup>. 이러한 이유로 현재까지도 층류 대향류화염은 층류화염구조 자체에 대한 연구뿐만 아니라 난류화염구조를 유추하기 위해서도 널리 연구되고 있다. 그러나, 이 화염은 와동에 의한 곡률효과나 기하학적 형상에 의한 영향 등 복잡한 난류화염의 다차원 화염 특징을 모사할 수 없는 단점이 있다.

이에 대한 대안의 하나로서 최근에 제시된 모델 화염이 바로 와동과 상호작용하는 화염이다<sup>4)</sup>. 이 모델화염은 대향류화염과 같이 와동에 의한 화염신장 효과를 직접 반영할 수도 있으며, 와동에 의한 화염의 곡률효과와 다차원의 기하학적 화염에서 발생할 수 있는 다양한 현상을 모사할 수 있는 장점

<sup>†</sup> To whom correspondence should be addressed.  
cboh@pknu.ac.kr

이 있다. 또한 이 모델화염은 와동이 화염에 접근하는 과정을 필수적으로 구현해야 하므로 비정상해석을 수행하는 것이 기본이며 이에 따라 와동의 비정상 전개과정에 따른 화염의 비정상효과(Unsteady effects)를 관찰할 수 있는 장점이 있다.

최근, 화염과 와동의 상호작용을 통해 난류화염의 구조를 유추해보고자 하는 일련의 시도가 이루어진 바 있다. 이들 연구 중에는 난류화산화염의 연소영역(Combustion regime) 구분을 시도한 연구도 있으며, 곡률효과, 비정상효과, 전화과정 등을 검토한 연구도 일부 진행된 바 있다<sup>4)</sup>.

기존의 연구 외에도 화재공학의 관점에서 봤을 때 화염에서 발생하는 CO 등의 오염물질의 생성 특성은 매우 중요하며, 특히 NOx의 생성특성은 화재공학뿐만 아니라 연소공학 관점에서도 매우 중요하다. 그러나 현재까지 화염-와동 상호작용 과정에서 화염에서 많이 발생할 수 있는 이들 오염물질에 대한 연구는 아직까지 진행된 바 없다.

따라서 본 연구에서는 매우 정교한 수치 계산도구인 직접수치모사(Direct Numerical Simulation; DNS)를 이용하여 다양한 강도를 갖는 와동과 상호작용하는 화산화염에서 CO 및 NOx 등의 오염물질 생성특성을 검토하고자 한다. 또한 얻어진 결과를 기존에 화염 모델링에 많이 사용되었던 1차원 대향류 화염 결과와 비교하여 난류화염 이해와 모델링 과정에 필요한 중요한 정보를 제공하고자 한다.

## 2. 수치계산 방법

### 2.1. 모델화염

와동과 상호작용하는 모델화염(화염판; Flamelet)의 구상도는 Fig. 1에서 보는 바와 같다. 초기에 1차원 화염과 같이 평평했던 화염이 와동이 접근하면서 굽어지게 되고 결국 소멸에 이르게 된다. 소멸에 이르는 과정에 비정상적으로 전개되는 와동에 의

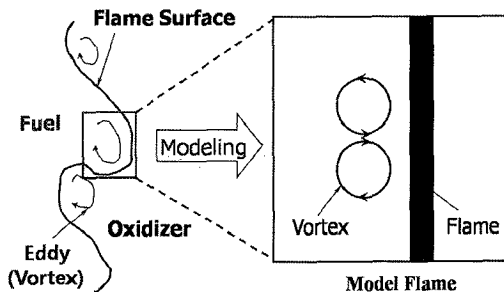


Fig. 1. Configuration of the flame-vortex interaction.

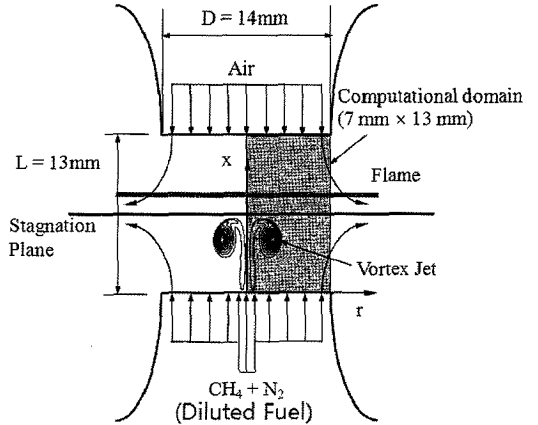


Fig. 2. Schematic of computational geometry and numerical layout for the simulation of flame-vortex interaction.

해 화염은 비정상효과를 받게 된다. 이러한 모델화염을 통해 곡률효과, 비정상효과 및 소멸과정을 갖는 난류화염에 대한 유익한 정보를 얻을 수 있는 것으로 알려져 있다.

본 연구에서는 대향류 유동장에서 형성된 1차원 화염과 고속으로 짧은 순간 분출되는 연료류에 의해서 형성된 와동과의 상호작용을 고찰하였다. 1차원 대향류화염은 기존의 Sung 등의 실험연구<sup>5)</sup>에서 얻은 조건과 동일하게 하여 얻은 화염이다. 자세한 기하학적 형상은 Fig. 2에 보는 바와 같다.

### 2.2. 지배방정식 및 수치해법

본 연구에서는 와동과 상호작용하는 화염에 대한 비정상 수치계산을 위해서 아래 (1)~(5)로 표현되는 연속, 운동량, 화학종, 에너지 및 상태방정식을 이용하였다.

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

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_1 + (\rho - \rho_0) \mathbf{g} + \nabla \cdot \mu \left[ (\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{im} \nabla Y_i) + W_i \dot{\omega}_i, \quad (i = 1, 2, 3 \dots N) \quad (3)$$

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{i=1}^N W_i h_i^0 \dot{\omega}_i + \rho \sum_{i=1}^N (c_{p_i} D_{im} \nabla Y_i \cdot \nabla T) \quad (4)$$

$$p_0 = \rho R_0 T \sum_{i=1}^N \left( \frac{Y_i}{W_i} \right) \quad (5)$$

본 연구의 수치해법은 DNS에 기반을 두고 있다. 계산에 이용된 코드는 본 저자들이 직접 개발한 2차원 연소 DNS 코드인 REFLWS 2D<sup>6)</sup>이다. 이 코드에서는 밀도변동이 동반되는 화염대에 대한 비정상 계산이 가능하며, 1단계 총괄반응기구(Global reaction mechanism)부터 상세반응기구(Detailed reaction mechanism)까지 고려할 수 있도록 작성되어 있다. 또한 지배방정식 중 열역학적 물성치와 전달 물성치는 CHEMKIN-II<sup>7)</sup> 및 TRANFIT Package<sup>8)</sup>를 이용하여 매우 자세하게 계산할 수 있다. REFLWS 2D 코드는 기존의 선행연구를 통해서 제트 확산화염구조<sup>9)</sup>, 대향류 화염구조 및 소화한계<sup>10,11)</sup> 등에 대한 예측성능이 검증되었다. 계산방법 및 코드에 관한 자세한 내용은 오 등<sup>6)</sup>의 논문을 참고하기 바란다.

### 2.3. 계산조건

본 연구에서 와동이 상호작용할 화염을 형성시키기 위해서 Fig. 2에서 보는 바와 같이 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub>가 연료로서 하부에서 상부로 분사되며 공기가 상부에서 하부로 분사되도록 하였다. 대향류화염을 형성시키기 위한 연료 및 공기노즐 출구사이의 간격(L)은 13mm이며, 각 노즐의 직경(D)은 14mm이다. 본 연구에서는 2차원 축대칭 계산을 수행하게 되므로 계산영역은  $x \times r = 13\text{mm} \times 7\text{mm}$ 로 하였다. 와동이 생성되기 전의 정상상태 화염을 얻기 위해 연료 및 공기의 노즐출구 유속은 반경방향 성분은 없고 축방향 유속이 25.5cm/s로 균일하도록 하였으며, 초기온도는 298K으로 하였다. 연료류 및 공기류의 조성은 각각 체적비로 CH<sub>4</sub>:N<sub>2</sub>=23:77 및 O<sub>2</sub>:N<sub>2</sub>=23:77이 되도록 하였다.

경계조건으로서 중심축에서는 Neumann 조건, 반경방향 외부경계에서는 1차 오더의 외삽법(Extrapolation)을 이용하였다. 정상상태의 1차원 화염을 형성한 후 단일와동의 생성을 위해 연료측과 공기측 노즐 내부에 있는 2mm 내경의 와동노즐에서 시간 및 공간적으로 최대 2m/s, 5m/s, 10m/s를 보이는 Top-hot 형태의 와동 제트유속( $v_{jet}$ ) 분포를 갖도록 제트를 순간적으로 분출시켰다. 이 세가지 유속에 따라 와동의 강도는 3가지로 구별되며 동일한  $v_{jet}$ 를 가질 경우 연료 및 공기측 와동은 동일한 강도를 가짐을 확인하였다.  $v_{jet}$  크기에 따른 와동의 강도를 순환(Circulation;  $\Gamma_C$ )값을 이용하여 표현하

면  $v_{jet}$ 이 커질수록  $\Gamma_C$ 는 커지며, 각  $v_{jet}$ 에 해당하는  $\Gamma_C$ 는 70cm<sup>2</sup>/s, 167cm<sup>2</sup>/s 및 330cm<sup>2</sup>/s이다.

계산에 이용된 격자계는  $N_x \times N_r = 260 \times 70$ 개로 구성되어 있다. 축방향으로는 0.05mm의 균일한 격자를 이용하였으며, 반경방향으로는 소염이 발생하는 중심축 근처에서 0.05mm의 격자를 가지며, 반경방향으로 점차 크기가 확장되도록 하였다.

연소반응 계산을 위해서는 중심축 근처에서 와동에 의해서 발생하는 소염현상을 적절히 잘 예측할 수 있는 Miller와 Bowman의 상세반응기구(MB-Full)를 바탕으로 구성된 확장된 축소반응기구(Augmented reduced mechanism; MB-ARM)<sup>12)</sup>를 이용하였다. MB-ARM은 CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H, O, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, HCN, NO, NO<sub>2</sub> 및 N<sub>2</sub>의 20개 화학종을 포함한 16단계의 반응식으로 이루어져 있다. 이 반응기구는 선행연구를 통해 소염과 비정상 효과가 동반되는 화염-와동 상호작용의 해석에 적용하는 것이 매우 적합하다는 것을 확인하였다.

## 3. 결과 및 고찰

### 3.1. 스칼라소산을 변화에 따른 물리량 변화

연료측 또는 공기측에서 형성된 와동이 1차원 정상상태의 화염에 접근하게 되면 와동에 의해 화염은 변형되며 신장된다. 또한 와동의 강도가 충분히 강해지게 되면 화염은 비정상효과를 받을 수도 있다. 이러한 현상들은 기존의 연구결과들을 통해서도 충분히 잘 알려져 있다. 와동이 화염에 접근하면서 화염이 신장되는 정도는 화염면에서의 스트레인율(Strain rate)로 표현되거나 식 (6)으로 정의되는 스칼라소산율(Scalar Dissipation Rate; SDR,  $\chi$ )로 표현된다.

$$\chi = 2D_z \left[ \left( \frac{\partial Z}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial r} \right)^2 \right] \quad (6)$$

여기서, Z는 혼합분율(Mixture fraction)이고  $D_z$ 는 혼합분율의 확산계수로서 본 연구에서는 각 화학종의 Le 수가 1로 일정하다는 가정하에 계산한 값을 이용하였다. 여기서는 가장 화염을 잘 대표할 수 있는 화염면, 즉 양론혼합비(Stoichiometric) 위치에서의 SDR값( $\chi_{st}$ )을 이용한다.

Fig. 3은 와동이 전개되기 전의 정상상태 대향류 화염에서의 SDR값을 보여주고 있다. 그림의 점선

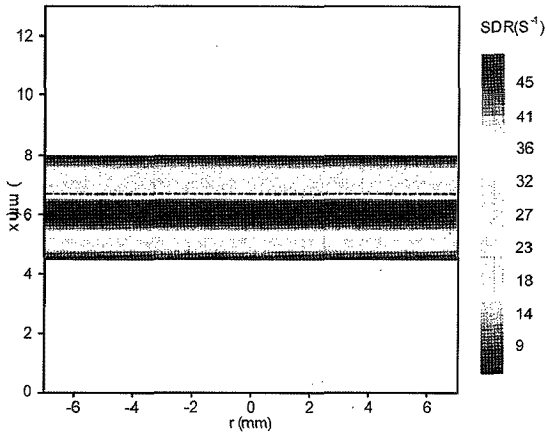


Fig. 3. Initial flat diffusion flame before a vortex is developed.

이 화염면의 위치이며,  $\chi_{st}$  값은 바로 이 화염면의 위치에서 얻어진 SDR 값을 나타낸다.

Fig. 4는 연료 및 공기측 와동이 초기의 정상상태 화염에 접근하게 될 때의 와동형상과 SDR 분포를 보여주고 있다. 와동이 화염에 접근하게 되면 와동

머리 앞에서 스트레인이 증가하기 때문에 SDR도 증가하며,  $\chi_{st}$ 도 점차 증가하게 된다. 그러다가 소염이 이루어진 후 어느 시점이 지나면 와동에 의한 영향이 줄어들고 SDR 값은 다시 점차 감소하는 특징을 갖는다. Fig. 4의 결과를 통해 연료측 와동이 진행될 경우 SDR 값은 화염면 위치를 경계로 주로 연료측에서 높아지고 있으며, 공기측 와동의 경우에는 화염면 근처에서 높아지고 있음을 알 수 있다. 또한 SDR 값은 와동이 강할수록 화염을 신장시키는 효과가 크기 때문에 큰 값을 갖게 되며, 화염면에서의 SDR 값인  $\chi_{st}$ 도 같은 경향을 갖게 된다. 본 연구에서 와동이 전개되기 전의 초기의 평평한 정상상태 화염의  $\chi_{st}$  값은  $34s^{-1}$ 이다.

Fig. 5는  $\chi_{st}$  변화에 따른 열발생율(Heat Release Rate; HRR)의 변화를 보여주고 있다. 그림에서 가로축의  $\chi_{st}$  값이 커지는 것은 와동의 화염에 접근해 가는 것을 의미하며 일정한  $\chi_{st}$  이상이 되었을 때 HRR 값이 0에 접근하는 것은 화염이 소멸되었음을 의미한다. 그림에서 심볼은 정상상태 계산을 통해

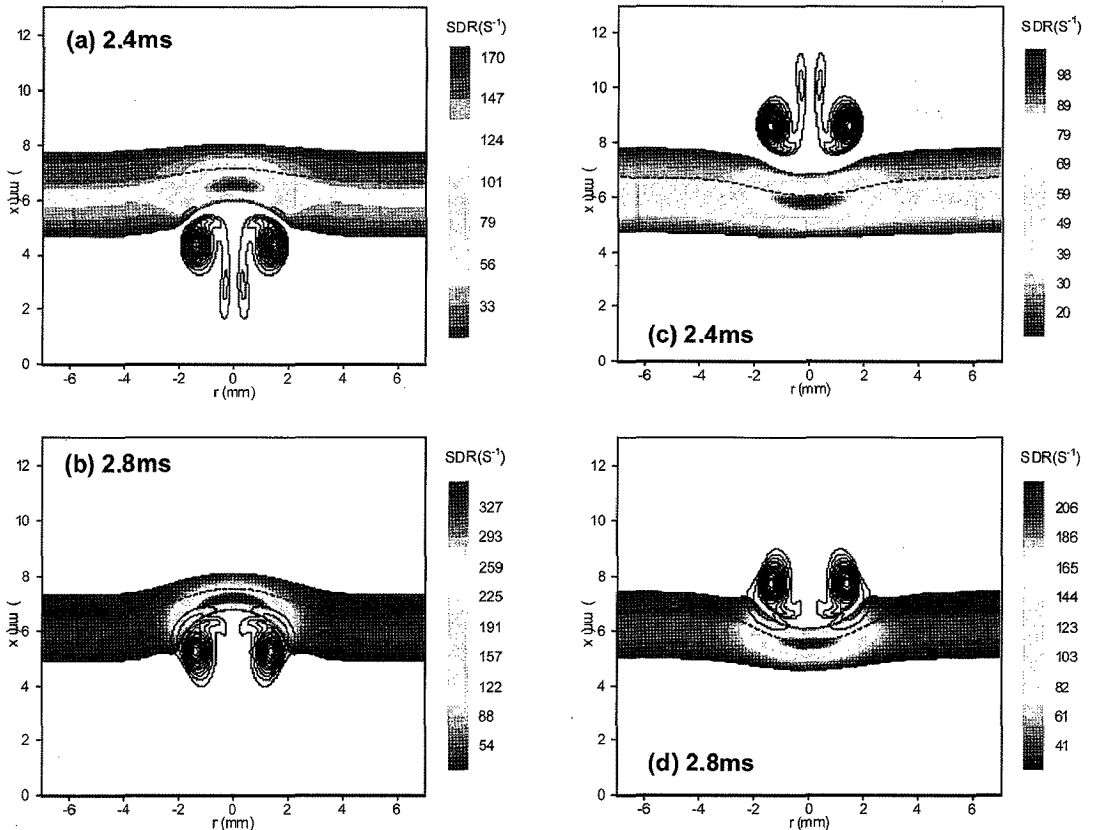


Fig. 4. Scalar dissipation rate (SDR) distribution during a vortex development, Each time means a vortex passage time after the vortex was formed, (a) and (b) : by fuel-side vortex, (c) and (d) : by air-side vortex.

얻어진 1차원 대향류화염의 HRR을 의미한다. 이 화염은 정상상태 계산을 통해 얻어졌기 때문에  $\chi_{st}$ 를 증가시키면서 계산을 수행하다가 계산이 발산하는 점이 바로 소염이 발생하는 조건이다. 따라서 정상상태 대향류화염은 그림의 가장 큰  $\chi_{st}$ 값의 위치를 소염점으로 볼 수 있으며 이 소염점에서의 SDR값( $\chi_{st}$ )은  $109s^{-1}$ 가 된다. 중요한 점은 모든 와동 생성 조건(실선 및 점선)에서 와동전개 초기의 HRR 값은 정상상태 1차원 화염값과 큰 차이를 보이지 않다가 정상상태의 소염점인  $\chi_{st}=109s^{-1}$  보다 훨씬 큰 값에서 소염에 이르고 있음을 알 수 있다. 이러한 경향은  $v_{jet}$ 이 커질수록  $\chi_{st}$ 값이 더욱 커지는 것을 알 수 있어 모든 와동생성 조건에 대해 화염이 비정상효과를 보이고 있음을 알 수 있다. 참고로  $v_{jet}=2m/s$ 조건에서 연료 및 공기측 와동에 의한 소염점은 각각  $200s^{-1}$  및  $182s^{-1}$ 이다. 또한,  $v_{jet}=5m/s$ 의 연료 및 공기측 와동에 의한 소염점은 각각  $488s^{-1}$  및  $337s^{-1}$ 이며,  $v_{jet}=10m/s$ 의 연료 및 공기측 와동에 의한 소염점은 각각  $1286s^{-1}$  및  $673s^{-1}$ 이다. Fig. 5의 결과를 통해 동일한  $v_{jet}$ 으로 와동을 생성시켰지만 공기측에서 생성된 와동이 화염을 좀 더 일찍 소염시키는 것을 확인할 수 있다. 이것은 기존의 연구를 통해 공기측 와동의 강도가 화염과 상호작용하는 동안에는 좀 더 크기 때문으로 확인한 바 있다<sup>10)</sup>.

Fig. 6에는  $\chi_{st}$  변화에 따른 화염대에서의 CO<sub>2</sub> 농도 최고값의 변화를 나타내었다. 그림에 도시하지는 않았지만 CO<sub>2</sub>의 변화는 화염온도나 H<sub>2</sub>O의 변화와 매우 유사한 것을 알 수 있었다. 따라서 화염의 거시적 변화를 잘 나타내는 화학종 중의 하나

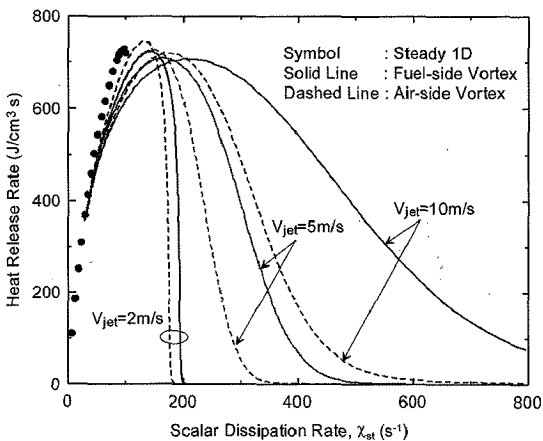


Fig. 5. Variation of peak heat release rate (HRR) with stoichiometric scalar dissipation rate.

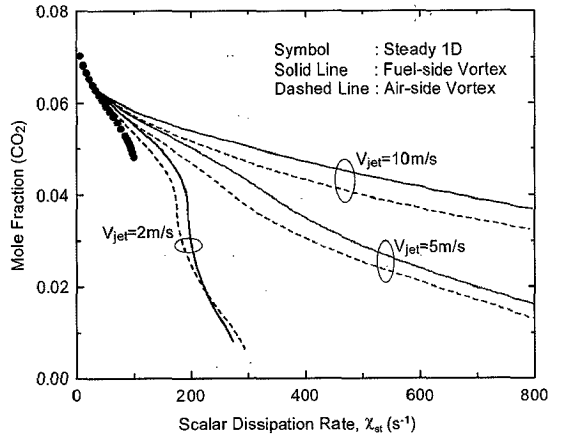


Fig. 6. Variation of peak CO<sub>2</sub> concentration with stoichiometric scalar dissipation rate.

임을 알 수 있었다. 와동의 강도에 따라서 차이는 있지만  $\chi_{st}$ 가 증가하면 정상상태 화염과 마찬가지로 점차 감소하는 것을 알 수 있다. 그러나 감소하는 정도는 와동의 강도, 즉  $v_{jet}$ 값에 따라 달라지게 된다. 즉, 와동의 강도에 따라 동일한  $\chi_{st}$ 값을 갖더라도 CO<sub>2</sub> 농도가 다르기 때문에 난류 연소모델링에서 각 화학종의 농도를 정확하게 계산하기 위해서는 이러한 비정상효과를 충분히 고려해야 함을 알 수 있다.

Fig. 7에는 화염에서 발생하는 대표적인 오염물질 중의 하나인 CO의 농도변화를 도시하였다. 심볼로 표시된 정상상태 화염은  $\chi_{st}$ 값이 증가할수록 CO 농도도 점차 증가되는 경향을 보인다. 그러나 와동과 상호작용하는 화염, 즉  $v_{jet}=2m/s$  조건에서는 낮은  $\chi_{st}$ 값에서는 정상상태 화염처럼 증가하는

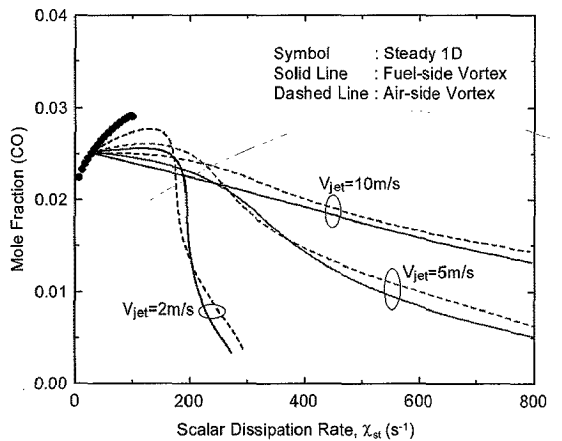


Fig. 7. Variation of peak CO concentration with stoichiometric scalar dissipation rate.

경향을 보이다가  $\chi_{st}$  값이 더 커지게 되면 급격히 감소하고 있으며  $v_{jet}=5m/s$ ,  $10m/s$  조건에서는 초기의 CO 농도 증가구간은 거의 보이지 않고  $\chi_{st}$  값이 커지게 되면 서서히 CO 농도가 작아지는 것을 알 수 있다. 이는 난류강도가 강할 경우 정상상태의 대향류화염 결과를 이용한 난류화염에 대한 모델링 결과가 실제 화염에서 발생하는 CO의 양을 정확하게 예측하는데 한계를 보일 수 있음을 암시하는 것으로서 이에 대해서는 향후 추가적인 연구가 더 필요할 것으로 생각된다.

Fig. 8에는 NO의 최고농도 변화를 각각 도시하였다. NO는 모든 와동 유속조건에 대해  $\chi_{st}$ 가 증가할수록 감소하지만,  $v_{jet}$ 가 증가할수록 비정상 효과가 크기 때문에  $\chi_{st}$ 의 변화에 곧바로 응답하지 못하여 농도변화는 작게 된다. 또한 NO의 생성시간은 다른 화학종들에 비해 매우 늦기 때문에  $v_{jet}=2m/s$ 의 조건인 경우에도 NO 농도변화에 미치는 비정상 효과는 작지 않고 정상상태의 값과 큰 차이를 보인다. 따라서 동일  $\chi_{st}$ 에 대해서 NO 농도는 서로 큰 차이를 보일 수 있기 때문에, NO 농도 예측에서  $\chi_{st}$ 의 시간 이력을 고려하는 것은 매우 중요할 것으로 판단된다. 이러한 NO 농도와  $\chi_{st}$ 의 관계는 Santoro 등<sup>13)</sup>이 수행한 화염-와동 상호작용에 대한 실험결과와도 잘 일치하고 있다.

Fig. 9와 10에는  $NO_2$  농도와  $NO_2$  생성에 중요한  $HO_2$  라디칼 농도의 최고값의 변화를 각각 도시하였다. 우선  $\chi_{st}$  변화에 따른  $NO_2$  농도의 변화를 보면,  $NO_2$ 는 생성속도가 비교적 느리기 때문에 NO 처럼 비정상 효과가 크게 나타나며,  $\chi_{st}$ 의 증가에 대해  $NO_2$  농도의 변화는 크지 않음을 알 수 있다.

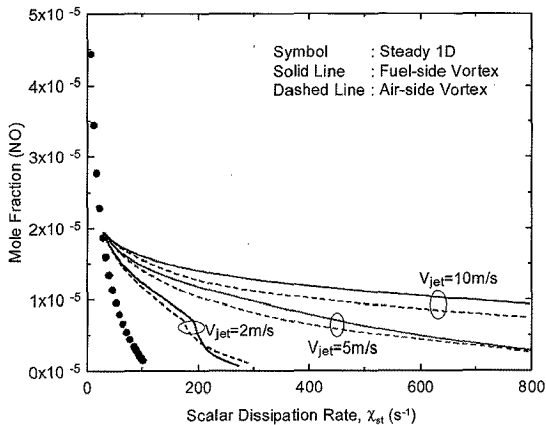


Fig. 8. Variation of peak NO concentration with stoichiometric scalar dissipation rate.

또한  $NO_2$ 는  $\chi_{st}$ 가 작은 영역( $\chi_{st} < 180s^{-1}$ )에서는 같은 방향 와동조건에 대해서는  $\chi_{st}$ 가 증가하더라도  $v_{jet}$  조건에 상관없이 거의 유사한 변화경향을 보인다. 그리고  $\chi_{st}$ 가 증가하여 각  $v_{jet}$  조건에 대한 소염점( $\chi_{st}$ ) 근처가 되면  $NO_2$  농도는 증가한 후 다시 감소하는 것을 알 수 있다. 이때,  $NO_2$  농도 증가는 와동의 강도가 작을수록 급격하게 나타난다.

다음으로, 와동의 방향에 따른  $NO_2$  변화를 살펴보면, 공기측 와동에 의한 경우가 연료측 와동보다 정상상태의 화염과 비교적 더 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 지금까지 설명한  $NO_2$  변화경향을 Fig. 10의  $HO_2$  라디칼 변화와 비교해 보면,  $NO_2$  농도가 서서히 감소하다가 다시 증가하는 순간은  $HO_2$  농도가 감소하는 순간과 잘 일치한다. 그리고  $HO_2$  농도 최고값은  $NO_2$ 와 유사하게 공기측 와동의 경우가 정상상태의 화염과 잘 일치하는 것을 알 수

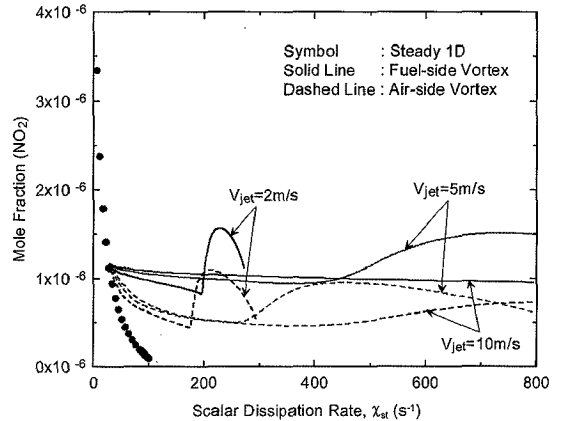


Fig. 9. Variation of peak  $NO_2$  concentration with stoichiometric scalar dissipation rate.

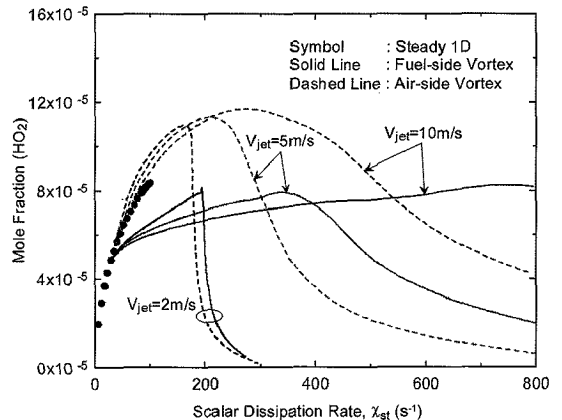


Fig. 10. Variation of peak  $HO_2$  concentration with stoichiometric scalar dissipation rate.

있다. 참고로 다른 화학종과 달리 NO<sub>2</sub>의 농도가  $\chi_{st}$ 가 증가하여도 0으로 떨어지지 않는 이유는 소염시의 급냉에 의해 NO<sub>2</sub>는 많이 생성되기 때문에 와동이 화염을 관통하지 않는 상태라면 일정수준의 농도를 유지하기 때문이다.

이하에서는 지금까지 관찰한 NO<sub>2</sub> 및 HO<sub>2</sub> 농도 변화에 대한 이유를 고찰하고자 한다. 일반적으로 화염에서 NO<sub>2</sub> 생성과 소멸에 중요한 반응은 각각 (R1)과 (R2)와 같다<sup>14)</sup>. 또한, NO<sub>2</sub> 생성에 중요한 HO<sub>2</sub> 라디칼은 주로 (R3)의 반응을 통해 생성된다<sup>15)</sup>.



(R3) 식은 H와 O<sub>2</sub>가 만나서 HO<sub>2</sub>를 생성시키는 반응이므로 HO<sub>2</sub>는 주로 화염면을 기준으로 공기층의 화염온도 구배가 큰 위치(급냉되는 위치)에서 농도 최고값을 갖는다<sup>14,15)</sup>. 그러나, 화염에서의 스트레인율(또는  $\chi_{st}$ )이 증가되면 O<sub>2</sub>의 일부가 화염면을 통과하여 연료층으로 투과되므로 연료층에서도 미량의 HO<sub>2</sub>는 관찰된다<sup>16,17)</sup>. NO<sub>2</sub> 농도는 HO<sub>2</sub> 위치와 연관되므로 공기층에서 높은 농도를 가지며, 연료층에서 작은 농도의 NO<sub>2</sub>가 존재하게 된다. 그림에 도시하지는 않았지만 본 연구에서 다루는 화염에서도 연료층에서는 낮은 농도, 공기층에서는 높은 농도의 NO<sub>2</sub> 및 HO<sub>2</sub>를 관찰할 수 있었다. 이러한 이유로 Fig. 10의 HO<sub>2</sub> 농도는 공기층의 농도 최고값을 의미하는 것을 알 수 있다.

지금 설명한 HO<sub>2</sub> 및 NO<sub>2</sub> 농도분포 경향을 이용하면 Fig. 9와 10의 농도 변화경향에 대한 설명이 가능해진다. 즉, HO<sub>2</sub> 및 NO<sub>2</sub> 농도는 공기층 와동의 경우가 정상상태의 화염결과와 더 유사하게 나타나는데 그 이유는 다음과 같이 설명될 수 있다. 그림에 보이는 정상상태 화염은 연료 및 공기층 유속을 동시에 증가시키면서 소염점까지 계산한 결과이다. 본 연구의 연료조성에서는 화염이 정체면을 기준으로 공기층에 형성되므로, 화염이 받는 스트레인율은 공기층에서 얻어진 값으로 특징지어진다. 이에 반해 연료층 와동이 진행할 경우에는 정체면이 공기층으로 이동하기 때문에 화염은 연료층 스트레인율에 직접 영향을 받으며, 공기층 와동의 경우에는 정상상태 화염과 마찬가지로 공기층 스트

레인율에 직접적인 영향을 받는다. 즉, 연료층 와동이 진행하면 연료층의 온도구배는 급증하지만, 공기층 온도구배 증가는 이보다 작다. 공기층 와동의 경우에는 이와 반대의 온도구배 분포를 보인다. 따라서, 화염온도의 구배에 직접적인 영향을 받는 HO<sub>2</sub> 라디칼은 온도구배 증가 방식이 비슷한 공기층 와동의 경우와 정상상태 화염의 경우가 서로 유사한 경향을 보이게 된다. 그리고, HO<sub>2</sub> 라디칼은 반응속도가 빠르기 때문에  $\chi_{st}$ 가 작은 구간에서  $\chi_{st}$ 의 증가 경향을 잘 추종하지만, NO<sub>2</sub>는 반응속도가 느리기 때문에 비정상 효과에 의해 HO<sub>2</sub>보다는 정상상태 화염과 차이를 보이는 것으로 사료된다. 또한, 와동 유속조건이 작은 경우가 NO<sub>2</sub> 증가량이 가장 큰 이유는, 유속이 작은 경우가 고속의 와동 유속조건에 비해 특성 와동시간이 크기 때문에 NO<sub>2</sub> 생성에 필요한 반응이 좀 더 오래 지속되기 때문으로 판단된다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 와동과 상호작용하는 대항류 화염에 대해 DNS를 수행하였다. 계산에서 얻어진 화염구조를 난류 연소모델링 개념과 관련시키기 위해서 화염면에서 정의된 스칼라소산율( $\chi_{st}$ ) 변화에 대한 주요 화학종의 변화를 위주로 검토하였다.

수치계산 결과를 통해 와동과 상호작용하는 대항류 확산화염에서 CO<sub>2</sub> 농도는 정상상태 화염과 유사하게  $\chi_{st}$ 가 증가하면 소염조건에 접근하기 때문에 감소하는 특징을 보여주었다. 그러나 CO<sub>2</sub> 농도는 동일한  $\chi_{st}$ 값에 대해서 정상상태 화염의 값과 차이를 보이는 비정상 효과를 보이며,  $v_{jet}$ 이 커질수록 정상상태 화염과는 더욱 차이를 보임을 확인할 수 있었다.

$\chi_{st}$  변화에 따른 CO의 농도변화는 와동과 상호작용하는 화염에서는 전체적으로 정상상태 화염에서의 값과 많이 다른 경향을 보였으며,  $v_{jet}$ 가 커질수록 경향은 더욱 차이를 보였다.

와동과 상호작용하는 화염에서의 NO 농도 또한 비정상 효과를 받게 되고  $v_{jet}$ 가 커질수록 비정상 효과가 더욱 커진다는 것은 다른 화학종과 유사하다. 또한 NO<sub>2</sub> 농도에는 HO<sub>2</sub> 및 NO 농도분포가 중요하게 작용함을 알 수 있었으며, NO<sub>2</sub> 생성에 중요한 HO<sub>2</sub> 라디칼은 공기층의 화염온도 구배가 큰 위치에 주로 분포하기 때문에 연료층 와동과 공기층 와동에 의해서 받는 영향의 정도가 다르다. 따

라서, NO<sub>2</sub> 농도를 정확히 예측하기 위해서는 비정상 효과와 와동의 방향이 동시에 고려되어야 한다. 통상의 정상상태 대향류화염 결과를 이용한 연소모델링에서는 이러한 효과를 고려할 수 없기 때문에 화재에서 발생하는 오염물질을 정확히 예측하기 위해서는 향후 연소모델링에 이러한 효과를 고려할 수 있는 방안이 검토될 필요가 있을 것으로 판단된다.

### 참고문헌

- 1) N. Peters, "Turbulent Combustion", Cambridge University Press, 2000.
- 2) V. Novozhilov, "Computational Fluid Dynamics Modeling of Compartment Fires", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 27, pp. 611~666, 2001.
- 3) G. H. Yeoh and K. K. Yuen, "Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering", Elsevier, 2009.
- 4) P.-H. Renard, D. Thévenin, J. C. Rolon and S. Candel, "Dynamics of Flame/vortex Interactions", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 26, pp. 225~282, 1986.
- 5) C. J. Sung, J. B. Liu and C. K. Law, "Structural Response of Counterflow Diffusion Flames to Strain Rate Variations", Combustion and Flame, Vol. 102, pp. 481~492, 1995.
- 6) 오창보, 이창언, "비정상 CH<sub>4</sub>/공기 제트 확산화염에 관한 수치모사", 대한기계학회논문집 B권, 제 25권 제8호, pp. 1087~1096, 2001.
- 7) R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, "Chemkin-II : A Fortran Chemical Kinetic Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics", Sandia Report, SAND89-8009B, 1989.
- 8) R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin and J. A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties", Sandia Report, SAND86-8246, 1986.
- 9) C.-H. Hwang, C. B. Oh and C.-E. Lee, "Effects of CO<sub>2</sub> Dilution on the Interactions of a CH<sub>4</sub>-air Nonpremixed Jet Flame with a Single Vortex", International Journal of Thermal Science, Vol. 48, pp. 1423~1431, 2009.
- 10) C. B. Oh, C. E. Lee and J. Park, "Numerical Investigation of Extinction in a Counterflow Nonpremixed Flame Perturbed by a Vortex", Combustion and Flame, Vol. 138, pp. 225~241, 2004.
- 11) C. B. Oh, A. Hamins, M. Bundy and J. Park, "The Two-dimensional Structure of Low Strain Rate Counterflow Nonpremixed Methane Flames in Normal and Microgravity", Combustion Theory and Modelling, Vol. 12, No. 2, pp. 283~302, 2008.
- 12) R. Homma and J.-Y. Chen, "Reduced Mechanism for Prediction of NO<sub>2</sub> Formation and Ignition Delay in Methane-Air Combustion", Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 123, pp. 303~307, 2001.
- 13) V. S. Santoro, D. C. Kyritsis, M. D. Smooke and A. Gomez, "Nitric Oxide Formation During Flame/Vortex Interaction", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 29, pp. 2227~2233, 2000.
- 14) T. Sano, "NO<sub>2</sub> Formation in the Mixing Region of Hot Burned Gas with Cool Air", Combustion Science and Technology, Vol. 38, pp. 129~144, 1984.
- 15) M. Hori, "Experimental Study of Nitrogen Dioxide Formation in Combustion Systems", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 21, pp. 1181~1188, 1986.
- 16) M. C. Drake and R. J. Blint, "Calculations of NO<sub>x</sub> Formation Pathways in Propagating Laminar, High Pressure Premixed CH<sub>4</sub>/Air Flames", Combustion Science and Technology, Vol. 75, pp. 261~285, 1991.
- 17) 오창보, 이창언, "CH<sub>4</sub>-공기 분류 확산화염의 NO<sub>x</sub> 생성특성에 관한 수치해석", 대한기계학회논문집 B권, 제22권 제2호, pp. 193~204, 1998.