

화염온도 제어법을 이용한 확산화염의 소화 및 점화특성 검토

오창보[†] · 이의주 · 황철홍^{*}

부경대학교 안전공학부 · *대전대학교 소방방재학과

(2010. 9. 22. 접수 / 2011. 1. 19. 채택)

An Investigation of the Extinction and Ignition Characteristics Using a Flame-Controlling Method

Chang Bo Oh[†] · Eui Ju Lee · Cheol Hong Hwang^{*}

Division of Safety Engineering, Pukyong National University

*Department of Fire and Disaster Prevention, Daejeon University

(Received September 22, 2010 / Accepted January 19, 2011)

Abstract : Extinction and ignition characteristics of CH₄-air counterflow diffusion flame were numerically investigated using a Flame-Controlling Method(FCM). A skeletal reaction mechanism, which adopts 17 species and 58 reactions, was used in the simulation. The extinction and ignition conditions of the CH₄-air diffusion flames were investigated with varying the global strain rate. Upper and middle branches of S-curve for the peak temperature in the inverse of the global strain rate space were obtained with the FCM. The structures of diffusion flames in the upper and middle branches of S-curve were compared. It was found that the global strain rate was not correlated with the local strain rate well in the low global strain rate region. It is expected that the FCM is very useful to obtaining the extinction and ignition condition of diffusion flame, such as fires.

Key Words : extinction, ignition, counterflow flame, diffusion flame, flame-controlling method, S-curve

1. 서 론

화재는 연료와 산화제가 반대방향에서 확산과정을 통해 화염면으로 유입, 혼합되어 연소되는 확산화염의 전형적인 특징을 갖는다. 예혼합화염이 고유 물성치인 연소속도를 갖는 것에 반해 확산화염은 이론적으로 당량비가 0에서 무한대까지의 혼합특성을 보이며, 특정한 길이나 속도 스케일을 갖지 않기 때문에 해석에 있어서도 매우 복잡한 특성을 가지고 있다. 따라서 이러한 복잡한 확산화염의 특성을 가지고 있는 화재의 경우에는 화염 자체만 보더라도 해석이 용이하지 않은 어려움이 있다. 화재현상 중에서 우리의 관심을 끄는 것들은 매우 다양하다. 이러한 현상 중에서 화재의 안전관리와 직결되는 물리, 화학적 특성 중의 하나가 바로 점화과정과 화재의 소화특성이다.

화재에서 보이는 화염은 화재가 발생한 구역의

유동구조와도 매우 밀접한 연관이 있는데, 물리적으로는 유동장의 속도구배 중에서 화염면에 접선 방향 성분(화염신장률; Flame stretch)이 화염의 특성에 직접 영향을 주는 인자가 된다. 화재의 소화특성도 이 화염신장률의 직접적인 영향을 받게 되어 높은 신장률을 갖는 화염은 낮은 스트레인율의 화염보다 더 쉽게 소화되는 특징을 보이게 된다.

한편, 화재가 시작되기 위해서는 가연물과 산화제가 미리 혼합된 상태, 또는 혼합이 진행 중인 혼합층(Mixing layer)에서 고온의 점화원에 의해 연쇄화학반응이 개시되어야 하는데 이를 점화과정이라고 한다. 따라서 화재의 개시단계와 소화과정을 이해하고 이를 제어하기 위해서는 확산화염의 점화 및 소화특성을 검토하는 것이 매우 중요하다.

점화특성을 이해하기 위한 기존의 연구들 중에서는 연료와 산화제가 미리 완전히 혼합되어 있는 상태(예혼합상태)에 대해서 검토한 연구들이 많지만^[1-3] 확산화염이 형성될 경우와 같이 연료와 산화제가 아직 충분히 혼합되지 않은 상태에서 점화되는 조건에 대해서도 검토할 필요가 있다.

[†] To whom correspondence should be addressed.
cboh@pknu.ac.kr

연료와 산화제가 충분히 혼합되지 않은 혼합층에서의 점화특성에 대해서는 1990년대 중반에 이르러서야 본격적으로 연구가 진행되기 시작했다⁴⁾. 이들 연구 중에서 큰 관심을 갖게 하는 것은 혼합층에서의 점화특성 연구에 대향류 확산화염을 이용하였다는 점이다. 대향류 확산화염은 연료와 산화제의 유속을 변화시키므로써 화염신장률을 쉽게 변화되고, 결과적으로 혼합층 내부의 연료와 산화제의 확산혼합 정도를 쉽게 제어할 수 있는 장점이 있다. 또한, 연료류나 산화제류의 온도를 다르게 조절하여 각각의 온도에 따른 점화특성을 볼 수 있는 특징도 가지고 있다.

이들 대향류 혼합층에서의 점화특성 연구가 더욱 활발해진 계기로는 바로 수치해석적으로 점화특성을 검토할 수 있는 화염온도 제어법(Flame-Controlling Method)의 개발⁵⁾을 들 수 있다. 점화과정은 물리적으로 비정상(Unsteady)적인 과정이기 때문에 수치해석적으로 검토하기 위해서는 비정상 계산을 수행하는 것이 당연하지만 이 화염온도 제어법은 정상상태 수치계산을 수행하지만 확산화염의 소화와 점화특성을 검토할 수 있는 특이한 특징을 가지고 있다.

본 연구에서는 화재의 국소구조와 유사한 대향류 확산화염의 소화와 점화특성 검토를 위해서 화염온도 제어법을 적용한 수치계산을 수행하였다. 우선, 현단계에서는 다양한 연료와 연소조건에 대한 직접적인 검토에 앞서 화학반응기구가 간단한 CH₄ 연료에서 기인한 확산화염의 소화 및 점화특성에 대한 검토를 진행하여 하여 향후 진행할 연구의 방향을 설정하고자 한다.

2. S-곡선 거동

유동장에 영향을 받는 확산화염의 소화 및 점화특성은 Fig. 1에 보이는 ‘S-곡선’을 통해 물리적으로 잘 이해할 수 있다⁶⁾. 그림에서 총괄 스트레인율(Global strain rate; a_g)의 역수 또는 Damköhler 수(Da)에 대해 최고온도로 표현되는 S-곡선은 Upper Branch(U.B.), Middle Branch(M.B.)와 Lower Branch(L.B.)로 구별된다. 우선 U.B.를 따라서 관찰을 해보면, 이 선상에서는 이미 화염이 형성된 조건을 의미하는데 총괄 스트레인율이 충분히 커지게 되면 (A)점에서 화염은 소화되어 공급되는 연료 또는 산화제의 온도 즉, 반응물의 온도인 L.B.로 떨어지게 된다. 이번에는 L.B.를 따라가 보면 반응물의

온도가 충분히 높더라도 총괄 스트레인율이 높으면 점화가 되지 않다가 충분히 총괄 스트레인율이 낮은 (B)점에서 점화되어 최고온도는 화염온도인 U.B.의 점으로 도약을하게 된다. 이때 (B)점의 온도는 이 연료와 산화제의 공급조건에서 화염을 형성시킬 수 있는 최소 점화온도가 된다. 중간의 점선으로 표현된 M.B.는 실제로는 구현시킬 수 없는 가상의 선으로서 M.B.보다 약간이라도 온도가 높으면 U.B.로 도약(점화)되어 화염이 형성되며 M.B.보다 약간이라도 낮으면 L.B.로 떨어지게 되어 소화되게 된다. 따라서 M.B.는 각 총괄 스트레인율에 대한 최소 점화온도 지시선으로 이해될 수 있다.

반면에 연료와 산화제가 상온과 같이 충분히 높지 않은 상태로 공급되는 혼합층(또는 확산화염)에서는 Fig. 2와 같은 소화 및 점화특성을 보이게 된다. 이 그림에서는 L.B.는 Fig. 1에서처럼 M.B.와 연결되어 있지 못하고 떨어져 있게 된다. 이 그림에서도 소화점과 소화특성은 Fig. 1에서 설명한 바와 동일하다. 또한, M.B.는 각 총괄 스트레인율 조건에 대한 최소 점화온도 지시선을 나타내는데, M.B.가 L.B.와 떨어져 있다는 것은 연료나 산화제의 온도가 충분히 낮을 경우에는 어떠한 총괄 스트레인율 조건에서도 연료와 산화제의 공급온도에서는 점화시킬 수 없음을 의미한다. 참고로 대향류 확산화염에서는 연료와 산화제의 유속을 무한정 낮출 수 없기 때문에 a_g 값은 임계값 이하로 떨어질 수 없으며 이는 곧 $1/a_g$ 값도 특정값 이상으로 높일 수 없음을 의미한다.

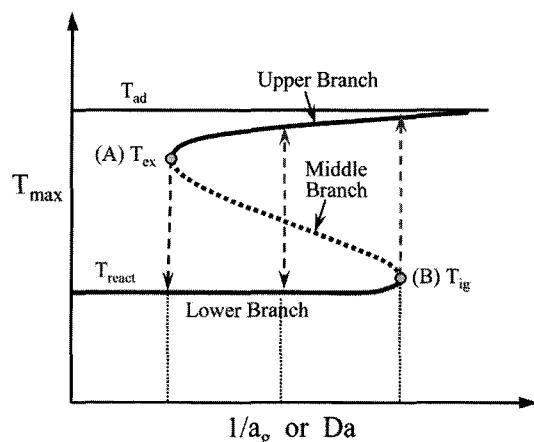


Fig. 1. Schematic of illustration of the dependence of the maximum temperature on the inverse of the global strain rate for diffusion flames for high-temperature reactants.

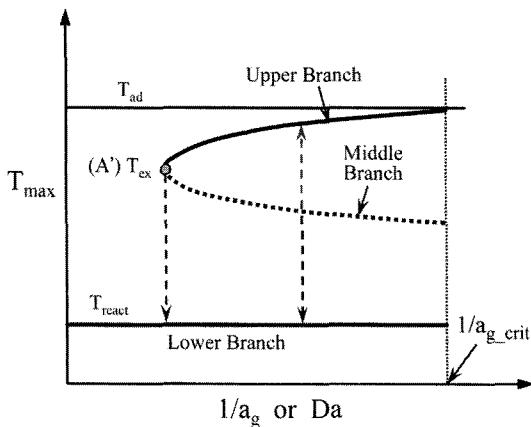


Fig. 2. Schematic of illustration of the dependence of the maximum temperature on the inverse of the global strain rate for diffusion flames for low-temperature reactants.

3. 수치계산 방법

3.1. 지배방정식 및 계산조건

본 연구에서는 대향류 확산화염의 소화 및 점화 특성을 수치해석적으로 검토하기 위해 Nishioka 등이 개발한 코드⁵⁾를 사용하였다. 계산에 사용된 지배방정식은 Kee 등이 유도한 정상상태의 연속방정식, 반경방향 운동량보존식, 화학종보존식, 에너지보존식과 상태방정식이다⁷⁾. 지배방정식과 경계조건에 대해서는 참고문헌 8)을 참조하기 바란다.

수치계산은 수정된 Newton법을 이용하여 초기의 가정값을 이용하여 반복계산을 통해 해를 얻게 된다. 같은 대향류 화염에 대한 계산일지라도 화염온도 제어법의 계산방법이 단순하지 않다. 따라서 본 연구에서는 본 계산법의 타당성을 검토하는 측면에서 수행된 것으로서 초기 연구임을 고려하여 비교적 간단한 탄화수소인 CH₄을 연료로 사용하였으며 화학반응기구도 17개 화학종(CH₄, CH₃, CH₂, CH, CH₂O, HCO, CO₂, CO, H₂, H, O, OH, HO₂, H₂O₂, H₂O, O₂, N₂)과 58개 소반응으로 구성된 skeletal 반응기구⁹⁾를 사용하였다.

대향류 화염을 형성시키기 위한 연료와 공기 노즐간의 간격(L)은 1.5 cm로 하였다. 연료류는 순수한 CH₄, 공기류는 O₂와 N₂기 0.21 : 0.79의 부피비를 갖도록 하였으며 연료와 공기류의 공급온도는 300 K으로 하였다. 화염온도 제어법을 시작할 때 필요한 초기 대향류 확산화염구조 데이터는 OPPDIF 코드⁸⁾를 통하여 얻어진 결과를 이용하였다. 계산 시 열역학적 물성치와 전달 물성치는 CHEMKIN-II¹⁰⁾

와 TRANFIT¹¹⁾ Package로 각각 계산하였다.

확산화염을 가장 잘 특징지을 수 있는 변수인 스트레인율은 다음 식 (1)과 같이 정의되는 총괄 스트레인율(Global strain rate; a_g)¹²⁾을 사용하였다.

$$a_g = \frac{2V_a}{L} \left(1 + \frac{V_f \sqrt{\rho_f}}{V_a \sqrt{\rho_a}} \right) \quad (1)$$

여기서, V_f와 V_a는 각각 연료류와 공기류의 속도이며, ρ_f와 ρ_a는 각각 연료류와 공기류의 밀도이다.

3.2. 화염온도 제어법

본 연구에서 사용한 화염온도 제어법은 스트레인율 변화에 대한 화염 최고온도 변화를 S-곡선 형태로 얻을 수 있는 유용한 방법이다. 기존에도 S-곡선을 얻을 수 있는 Arc Length법이나 연속계산법 등이 있었지만 이 화염온도 제어법은 사용이 비교적 간단하고, 확산화염 뿐만 아니라 예혼합화염의 소화 및 점화특성 검토에 많이 이용되어 방법론적으로 검증이 된 상태이다⁵⁾.

화염온도 제어법은 두 가지 구체적인 방법으로 구성되어 있다. 첫번째는 1점 화염온도 제어법(1-point flame controlling method)이고 두번째는 2점 화염온도 제어법(2-point flame-controlling method)이다. Fig. 3에 도시된 화염온도 분포를 이용하여 이 두가지 방법으로 S-곡선을 얻는 방법을 설명하고자 한다. 우선 실선으로 표시된 낮은 스트레인율의 화염을 얻은 후 화염대의 온도구배가 큰 적당한 위치를 한 곳(x=0.75 cm) 선택하여 그곳의 온도를 (A)에서 (A')으로 낮추어 지정한 후 공기류의 유속만을 경계조건으로 주게되면 점선으로 표시된

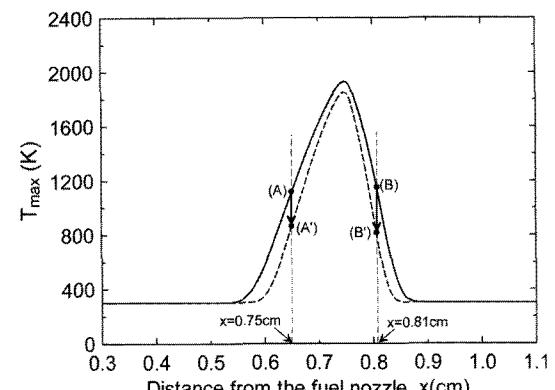


Fig. 3. Schematic of 1-point and 2-point flame-controlling method for diffusion flame.

화염을 찾아내게 된다. 이 화염은 실선으로 표시된 화염보다 얇기 때문에 스트레이인율은 증가한 조건이 된다. 이 경우 특정 위치에서의 화염온도를 지정했기 때문에 이 조건은 하나의 경계조건이 되며 기준의 연료류 유속에 대한 경계조건은 생략하여야 해를 얻을 수 있다. 이러한 방법을 1점 화염온도 제어법이라고 하며, 화염온도 최고점을 기준으로 양 측의 적당한 위치($x=0.75 \text{ cm}$, 0.81 cm)와 그 곳에서의 온도를 지정하여 그 조건에 부합한 화염구조를 얻는 경우를 2점 화염온도 제어법이라고 한다. 소염점 근처에서는 1점 화염온도 제어법으로는 해를 얻기 힘든 경우가 생기기 때문에 본 연구에서는 소염점 근처에서는 2점 화염온도 제어법을 사용하였고 그 이후의 조건에서는 1점 화염온도 제어법을 사용하였다.

4. 결과 및 고찰

Fig. 4는 Fig. 2에서 보았던 그림과 유사한 것으로서 CH_4 -공기 확산화염에 대한 S-곡선 중의 일부를 나타낸다. 이미 알고 있는 바와 같이 초기 연료와 공기의 유입온도는 300 K 로서 상온 근처이기 때문에 정확한 S-곡선 거동은 보이지 않는 것을 알 수 있다. 초기에 $a_g=25(1/\text{s})$ 의 화염에서 스트레이인율(a_g)을 점차 증가시키면 $a_g=455.3(1/\text{s})$ 에서 소염이 발생하게 되며, 이때 화염온도는 $1,764 \text{ K}$ 이다. 통상적으로 이러한 소화점을 S-곡선의 높은 스트레이인율 조건에서의 전환점(Turning Point; T.P.)라고 칭한다. 그림에서 보이는 결과에 따르면 a_g 가 $455.3(1/\text{s})$ 보다 큰 조건에서는 CH_4 -공기 확산화염이 형성될 수 없고 항상 소화됨을 알 수 있다. 그림에서 점선으로 표시한 M.B.는 화염온도 제어법과 같은 특별한 수치해석 기법을 통하지 않고서는 정상상태 수치계산을 통해서는 얻을 수 없는 해이다. 본 수치계산을 통해 얻어진 M.B.는 다양한 스트레이인율 조건에서의 연료와 공기 확산 혼합층에서의 점화온도에 대한 매우 유익한 정보를 제공할 수 있다. 이미 알고 있는 사항이지만 실제 유동장의 확산화염 점화온도는 유동장의 조건(스트레이인율)에 매우 밀접하게 연관되어 있음을 알 수 있다.

참고로, M.B.의 값은 화학반응기구에 따라 약간의 차이를 보일 수도 있는데, 이는 향후 별도의 반응기구를 이용한 추가적인 수치계산과 실험과의 비교를 통해 검증할 예정이다.

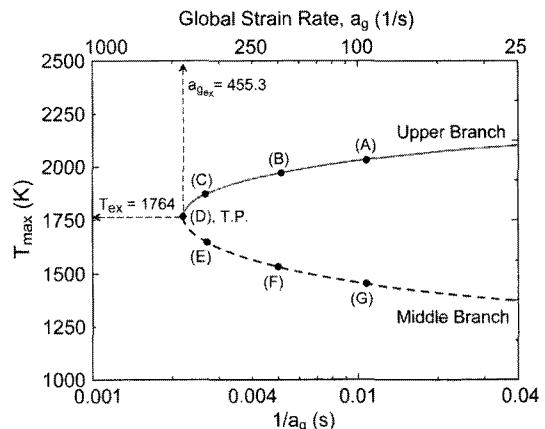


Fig. 4. Response of the maximum temperature to the inverse of the global strain rate.

Fig. 5에는 Fig. 4에서 얻어진 U.B.와 M.B.상에 서의 화염구조를 검토하기 위해 Fig. 4에 표시된 점들에 대한 화염온도분포를 도시하였다. (A)와 (G), (B)와 (F) 및 (C)와 (E)점들은 총괄 스트레이인율은 서로 비슷하면서도 U.B.상에 있는 실제 존재하는 화염과 M.B.상에 위치하는 실제로 존재하지 않는 수치계산으로만 존재하는 가상의 화염을 보여주는 위치이다. (A) 위치의 화염에서 점차 스트레이인율이 증가하게 되면 화염온도는 줄어들고 화염두께는 점차 얇아지게 되어 (D)의 화염구조에서 소염되게 된다. 이후 특정 위치의 온도를 고정하는 화염온도 제어법을 적용할 경우 점선으로 표시되는 M.B.상의 가상의 화염구조를 얻게 된다. 이 가상의 화염구조는 총괄 스트레이인율이 다시 점차 작아지게 되면 화염두께는 증가하지만 화염온도는 여전히 감소하는 특이한 거동을 보이게 된다.

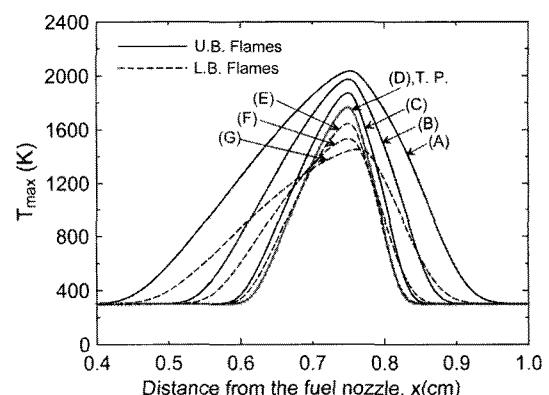


Fig. 5. Response of the temperature distribution of diffusion flame to the inverse of the global strain rate.

Fig. 6(a)와 (b)에는 $a_g=50(1/s)$ 로 동일하지만 U.B.에 있는 실제 존재하는 화염과 M.B.에 있는 가상의 화염구조를 비교 도시하였다. 그림에서 화염온도분포는 각각 최고온도가 1.0이도록 무차원화 시킨 후 화염면을 이동시켜 일치시킨 결과이며, 축방향 유속(u)은 원래의 데이터를 그대로 도시한 것이다. 실제 확산화염에서는 스트레인율이 동일한 조건일 경우 화염온도와 두께가 거의 유사한 특징을 보이지만 그림의 결과에서는 M.B.에 존재하는 화염은 U.B.에 존재하는 화염보다 상대적인 두께가 얇게 나타나고 있음을 알 수 있다. 또한, 전체적인 유속분포도 크게 차이가 나고 있음을 알 수 있다.

Fig. 6(a)의 그림은 총괄 스트레인율(a_g)이 동일한 두 조건에 대한 화염구조를 보여주고 있지만 실제로 확산화염에서 중요한 스트레인율은 화염면이나 열확산층의 산화제측에서 정의되는 국소(Local) 스트레인율이다¹²⁾. 따라서 이 두 화염의 국소 스트레인율(a_L)을 Fig. 6(b)에 도시하였다. 그림에서 심볼로 표시된 위치인 열확산층의 산화제측 국소 스트레

인율은 35.6과 37.6(1/s)으로 비슷하지만, 화염온도 최고인 위치(화염면)에서 U.B.와 M.B.의 화염에 대해 얻어진 국소 스트레인율값은 각각 73.4와 56.2(1/s)로서 차이를 보인다. 이는 U.B.의 값을 기준으로 볼 때 23% 정도의 차이를 보이는 것으로서, 총괄 스트레인율은 동일하지만 화염면의 국소 스트레인율은 비교적 큰 차이를 보이는 것을 알 수 있다. 즉, Fig. 6의 결과로부터 낮은 총괄 스트레인율 조건에 있는 U.B.의 화염과 M.B.의 화염은 서로 총괄 스트레인율 값은 같지만 화염면의 국소 스트레인율 값과 화염두께에는 큰 차이를 보이게 됨을 알 수 있다.

Fig. 7(a)와 (b)에는 $a_g=375(1/s)$ 인 U.B.의 화염과 M.B.의 화염구조를 비교 도시하였다. Fig. 6의 낮은 총괄 스트레인율의 화염과는 달리 높은 총괄 스트레인율 조건에서는 U.B.의 화염과 M.B.의 화염면에서 얻어진 국소 스트레인율 값이 각각 455와 443(1/s)으로 많이 유사함을 알 수 있다. 또한, 전체적인 유속분포나 Fig. 7(b)에서 보이는 열확산층

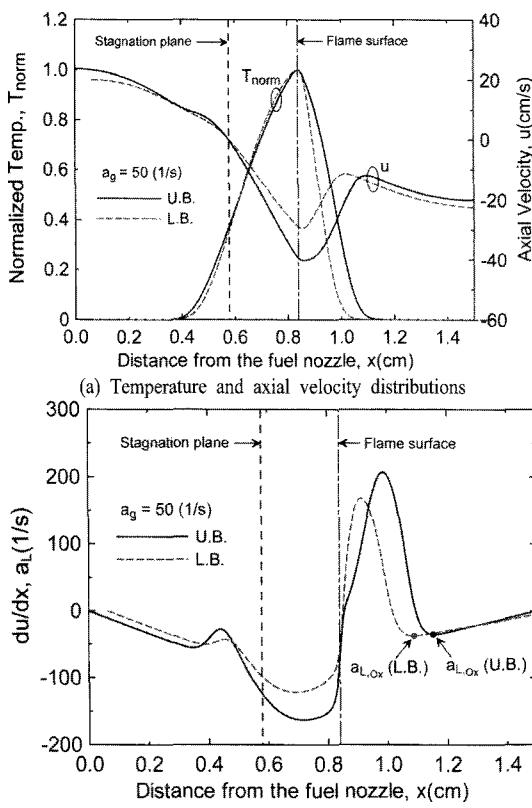


Fig. 6. Comparison of the structures of diffusion flames at $a_g=50(1/s)$ on the upper and middle branches.

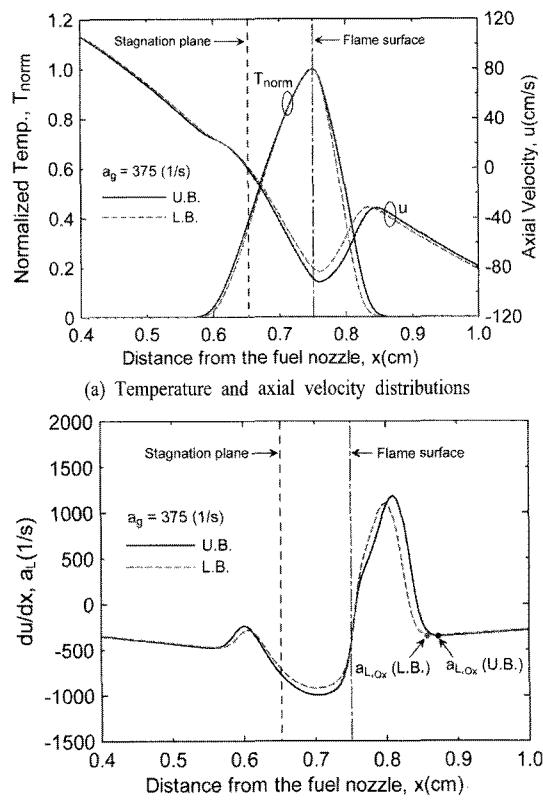


Fig. 7. Comparison of the structures of diffusion flames at $a_g=375(1/s)$ on the upper and middle branches.

의 산화제축 위치에서의 국소 스트레인율 값들도 각각 349와 347(1/s)로서 거의 동일한 것을 알 수 있다. 이러한 결과들을 볼 때 유속이 높은 조건에서는 총괄 스트레인율이 국소 스트레인율을 충분히 대표할 수 있지만 낮은 유속조건을 포함한 모든 유동조건에 대해서 국소 스트레인율을 충분히 대표할 수 있을지에 대해서는 추가적인 검토가 필요할 것으로 보인다.

4. 결 론

본 연구에서는 CH₄-공기 대향류 확산화염을 대상으로 정상상태 계산으로도 소화와 점화조건을 얻을 수 있는 화염온도 제어법을 적용한 수치계산을 수행하였다.

수치계산 결과를 통해 통상적으로 잘 알려진 확산화염의 S-곡선의 거동을 확인할 수 있었으며 상온으로 공급되는 CH₄-공기 확산화염의 소화조건과 점화조건에 대한 정보를 얻을 수 있었다. 확산화염의 점화온도는 총괄 스트레인율 조건에 따라서 달라지게 되며, 총괄 스트레인율 조건이 커질 수록 점화온도도 증가하는 것을 확인할 수 있었다.

또한, S-곡선상에서 실제 존재할 수 있는 Upper Branch의 확산화염과 Middle Branch의 확산화염 비교를 통하여 총괄 스트레인율은 유속이 높은 조건에서는 국소 스트레인율은 잘 대표하지만 유속이 낮은 조건에서는 국소 스트레인율을 잘 대표하지 못하는 것을 확인할 수 있었다.

본 연구에 사용하였던 화염온도 제어법은 다양한 유동장에서 연료와 공기가 혼합되는 상태의 점화특성을 수치적으로 검토하는데 매우 유익할 것으로 보인다.

감사의 글 : 이 논문은 2010년 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업 지원을 받아 수행된 것임(과제번호 : 2010-0012480).

참고문헌

- 1) F. A. Williams, "Detailed and Reduced Chemistry for Hydrogen Auto-ignition", Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 21, pp. 131~135, 2008.
- 2) 이의주, 오창보, "수소/공기/HFP 혼합기의 화학반응 및 점화지연 특성", 한국안전학회지, Vol. 25, No. 1, pp. 17~21, 2010.
- 3) G. D. Alamo, F. A. Williams and A. L. Sanchez, "Hydrogen-Oxygen Induction Times above Crossover Temperatures", Combustion Science and Technology, Vol. 176, pp. 1599~1626, 2004.
- 4) T. G. Kreutz and C. K. Law, "Ignition in Nonpremixed Counterflowing Hydrogen versus Heated Air: Computational Study with Detailed Chemistry", Combustion and Flame, Vol. 104, pp. 157~175, 1996.
- 5) M. Nishioka, C. K. Law and T. Takeno, "A Flame-Controlling Continuation Method for Generating S-Curve Responses with Detailed Chemistry", Combustion and Flame, Vol. 104, pp. 328~342, 1996.
- 6) F. A. Williams, "Combustion Theory", 2nd Eds. Addison-Wesley Publishing Company, 1985.
- 7) R. J. Kee, J. A. Miller and G. H. Evans, "A Computational Model of the Structure and Extinction of Strained, Opposed Flow, Premixed Methane-Air Flames", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 22, pp. 1479~1494, 1988.
- 8) A. E. Jutz, R. J. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley, "OPPDIF : A Fortran Program for Computing Opposed-Flow Diffusion Flames", Sandia Report, SAND96-8243, 1997.
- 9) R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke and J. A. Miller, "A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames", Sandia Report, SAND85-8240, pp. 47, 1985.
- 10) 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.
- 11) 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.
- 12) H. K. Chelliah, C. K. Law, T. Ueda, M. D. Smooke, 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 Combustion Institute, Vol. 23, pp. 503~511, 1990.