

가스 연료와 공기 혼합물 내 압력파와 화염의 상호 작용에 의한 연소폭발전이 현상 연구

곽민철* · 여재익*

Deflagration to detonation transition by interaction between flame and shock wave in gas mixture

Min-cheol Gwak* · Jai-ick Yoh*

ABSTRACT

This paper presents a numerical investigation of the Deflagration to Detonation Transition (DDT) of flame acceleration by a shock wave in combustible gas mixture. A model consisting of the reactive compressible Navier-Stokes equations is used. The effects of viscosity, thermal conduction, species diffusion, and chemical reactions are included. Using this model, the generation of hot spots by repeated shock and flame interaction in front and back of flame and the change of detonation occurrence by various shock intensities ($M_s=1.1, 1.2, 1.3$) are studied. The simulations show that as the incident shock intensity increases, the Richtmyer-Meshkov (RM) instability becomes stronger and DDT occurrence time is reduced.

초 록

본 연구에서는 가스 연료와 공기 혼합물 내 압력파에 의해 유도되는 화염 가속과 연소폭발전이 현상을 수치적 계산을 통하여 살펴본다. 실험에 기반을 둔 초기 조건 하에서 점성력, 열전달, 물질량 확산, 그리고 화학 반응을 고려한 reactive compressible Navier-Stokes 방정식을 사용하여 계산을 수행하였다. 반복되는 압력파와 화염의 상호 작용에 의해 발생하는 화염의 Richtmyer-Meshkov (RM) 불안정성에 의해 증가된 화염면을 통하여 생기는 hot spot들에 의한 폭굉의 발생을 모델링하였다. 또한 압력파의 강도 변화에 따른 연소폭발전이 현상의 변화를 살펴보았다.

Key Words: Deflagration(폭연), Detonation(폭굉), DDT(연소폭발전이)

1. 서 론

연소폭발 시 발생하는 화염의 종류는 크게 정상적인 폭연과 비정상 폭굉으로 나눌 수 있다. 여기서, 폭연은 아음속 화염으로서 상대적으로 낮은 압력과 밀도의 변화를 가지는 반면 폭굉은

* 서울대학교 기계항공공학부
연락처, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

초음속 화염으로서 큰 압력과 밀도의 변화를 가진다. 이는 빠른 화학 반응을 통한 강한 에너지 발산에 의한 것이다. 비정상 화염인 폭굉의 경우 많은 문제점을 발생시킬 수 있는데 이는 갑작스런 압력의 증가에 의한 구조물 손상 및 인명 피해를 발생시킬 수 있기 때문이다. 예를 들어 자동차의 노킹의 경우, 엔진 수명 단축 및 효율 감소 현상을 유발하고 연료를 이송하는 관에서의 갑작스런 화제가 폭굉으로 발전할 경우, 이송관 뿐만 아니라 주위 구조물 및 인명에 큰 피해를 줄 수 있다[1-2]. 일반적으로 폭연이 폭굉으로 발전하기는 쉽지 않다. 하지만 연소폭발천이(DDT) 현상을 거치면서 폭굉으로 발전할 수 있기 때문에 이에 대한 많은 연구가 진행되고 있다. 여기서 연소폭발천이 현상이란 쉽게 폭연 화염이 폭굉으로 변화되는 현상을 말하는데, 이는 여러 복합적인 원인에 의해 발생되므로 실험적인 연구에서는 경우에 따라서 발생의 유무가 달라진다. 하지만 공통적으로 포함되는 현상이 화염 가속(FA) 과정이다[2-6]. 화염 가속 과정에 필요 조건으로서는 여러 가지가 있다. 예를 들어 화염의 난류화, hot spot의 생성, 그리고 화염 불안정 현상 등을 들 수 있는데 이러한 화염 가속 과정의 조건들은 상호 작용을 통하여 화염면을 증가시켜 화염이 가속되는 현상을 증폭시킨다. 본 연구에서는 화염 가속 과정을 유발 할 수 있는 여러 현상 중 압력과 화염의 상호 작용에 의해 발생될 수 있음을 선행 연구된 실험 자료[7]를 바탕으로 수치적 계산을 수행하였다.

2. 수치적 기법 및 모델링

2.1 지배 방정식

연소폭발천이 현상을 수치적으로 계산하기 위하여 본 연구에서는 reactive Navier-Stokes 식을 사용하였다. 아래의 식(1)-(6)은 이차원 직교 좌표계에서 질량, x축 과 y축 운동량, 에너지, 화학종, 그리고 이상 기체 방정식을 각각 보여주고 있다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + P) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + P) = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x}[u(\rho e + P)] + \frac{\partial}{\partial y}[v(\rho e + P)] \\ & = \frac{\partial(u\tau_{xx} + u_y\tau_{xy} - q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(u_x\tau_{yx} + u_y\tau_{yy} - q_y)}{\partial y} + \rho \sum_{i=1}^n Q_i \dot{w}_i \end{aligned} \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho Y_i u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho Y_i v) = -\frac{\partial d_y}{\partial y} - \frac{\partial d_x}{\partial x} + \rho \dot{w}_i \quad (5)$$

$$P = \frac{\rho RT}{M} \quad (6)$$

여기서, ρ , u , v , P , e , Y_i , R , 와 M 는 각각 밀도, x축과 y축 속도, 압력, 총 에너지 밀도, 반응물의 질량분율, 그리고 물질량이다. 또한 점성 스트레스 계산을 위하여 추가적으로 아래 식(7)을 지배 방정식에 추가하여 계산하였다.

$$\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} = 2\tau_{xy}\Omega_{xy} + 2\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \Sigma\right) \quad (7-1)$$

$$\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} = -2\tau_{xy}\Omega_{xy} + 2\mu\left(\frac{\partial v}{\partial y} - \Sigma\right) \quad (7-2)$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} = \Omega_{xy}(\tau_{yy} - \tau_{xx}) + \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) \quad (7-3)$$

아래의 식 (8)은 계산에서 사용되는 각종 source항을 설명하고 있다.

Thermal conduction

$$\vec{q} = k\nabla T \quad (8-1)$$

Reaction rate

$$\dot{w}_i \equiv \partial Y_i / \partial t|_{Chem} = -A\rho Y_i \exp(-E_a / RT) \quad (8-2)$$

Mass diffusion

$$\vec{d} = \rho D\nabla Y_i \quad (8-3)$$

Spin tensor

$$\Omega_{xy} = -\Omega_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (8-4)$$

Volumetric strain

$$\Sigma = \frac{1}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (8-5)$$

계산을 위하여 본 연구에서 공간 계산 시는 Convex ENO scheme을, 시간 계산 시는 3rd order R-K method를, source항 계산 시는 2nd order FDM를 사용하였다. 그리고 빠른 반응 시 resolution을 확보하기 위하여 mesh size를 0.1x 0.1mm² 이하로 유지하였다.

2.2 초기 조건과 경계 조건 설정

본 연구에서는 acetylene-air 혼합물을 고려하여 강한 압력파와 화염의 상호 작용에 의한 화염 천이 현상을 계산하였다. 아래의 Table 1은 본 연구에서 사용한 모델의 물성치 및 초기 입력 값을 보여주고 있다.

Table 1. Parameters for acetylene-air mixture.

Initial temperature	T_0	293K
Initial pressure	P_0	$1.33 \times 10^4 \text{J/m}^3$
Initial density	ρ_0	$1.58 \times 10^{-1} \text{kg/m}^3$
Initial mass fraction of reactant	Y_0	1
Adiabatic index	γ	1.25
Molecular weight	M	$29 \times 10^{-3} \text{kg/mol}$
Pre-exponential factor	A	$1.0 \times 10^9 \text{m}^3/\text{kg} \cdot \text{s}$
Activation energy	E_a	$29.3RT_0$
Chemical energy release	Q	$35.0RT_0/M$
Adiabatic flame temperature	T_b	2340K
Adiabatic flame density	ρ_b	$1.98 \times 10^{-2} \text{kg/m}^3$

아래의 그림 1은 2차원 모델링의 계략도를 보여준다. 그림에서 계산 영역의 크기는 32x1 cm²이다. 그리고 계산 영역에서 경계 조건은 각각 좌측은 흡입 조건으로, 우측은 벽 조건으로 하였으며 위쪽과 아래쪽은 대칭 조건을 사용하였다. 다음으로 갑자기 발생하는 압력파의 강도는 아래의 식(9)에서와 같이 Mach 수에 따른 압력파 전후의 조건을 사용하여 결정하였다. 여기서 압력비와 밀도비는 Rankine-Hugoniot 관계를 통하여 확인할 수 있다. 그리고 그림에서 빨간 지점 1, 2를 설정하여 그 위치에서의 압력 변화를 확인하였다. 또한 초기 화염을 Table 1에서의 adiabatic flame 조건으로 설정하여 아래 그림의 노란 영역과 같이 배치하였다.

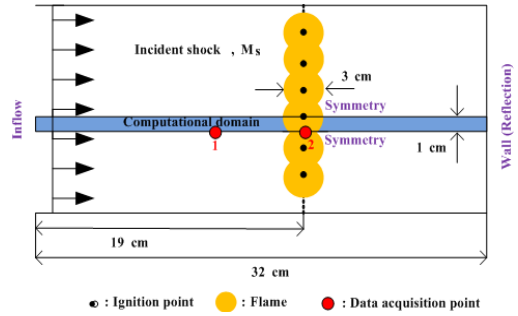


Fig. 1 2D numerical domain

$$\text{압력비} \quad \frac{P_2}{P_1} = \frac{2\gamma M_s^2}{\gamma + 1} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \quad (9-1)$$

$$\text{밀도비} \quad \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{\left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) \frac{P_2}{P_1} + 1}{\left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) + \frac{P_2}{P_1}} \quad (9-2)$$

$$\text{온도비} \quad \frac{T_2}{T_1} = \frac{\left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_s^2 \right) \left(\frac{2\gamma}{\gamma - 1} M_s^2 - 1 \right)}{\frac{(\gamma + 1)^2}{2(\gamma - 1)} M_s^2} \quad (9-3)$$

3. 결과 및 논의

아래의 그림 2는 Ms=1.2의 압력파와 화염의 충돌에 의해 유도되는 연소폭발천이 현상을 시간에 따른 밀도 변화를 통하여 보여준다. 그림에

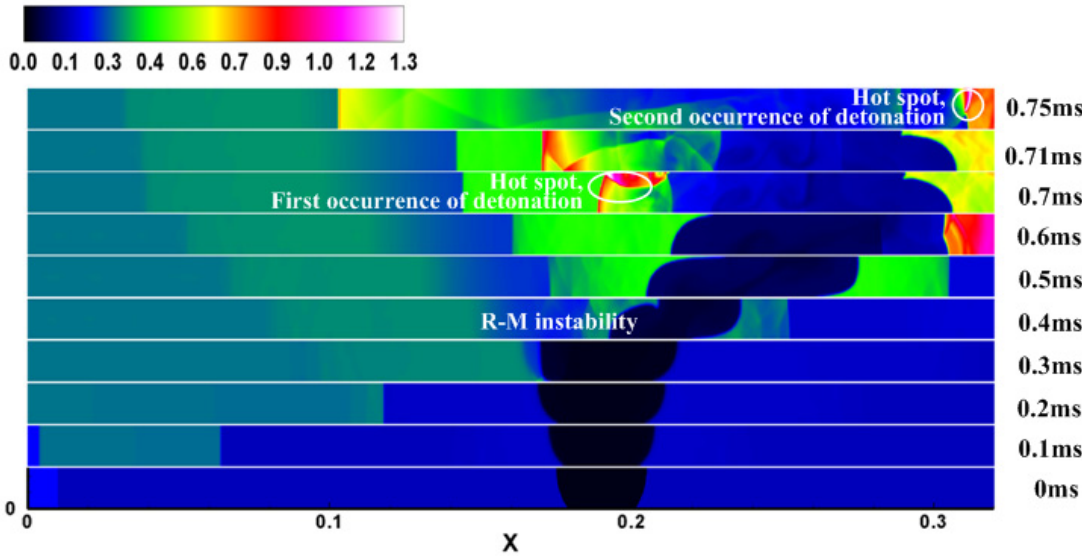
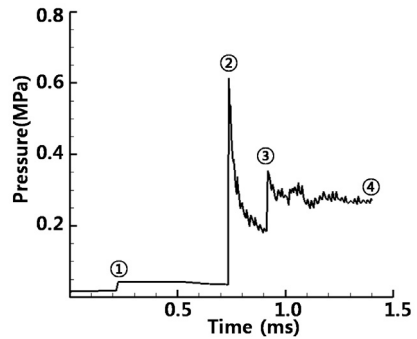


Fig. 2 Time sequences of density fields under $Ms=1.2$ incident shock interacting with an acetylene-air flame [unit: kg/m^3].

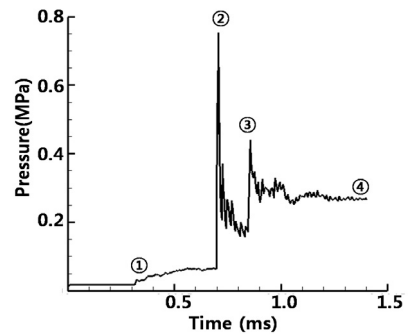
서 좌측에서 우측으로 이동하는 압력파를 확인할 수 있다. 그리고 0.3ms에서 압력파가 화염과 충돌한 후에 R-M instability가 화염에서 발생함을 확인할 수 있다. 0.5~0.6ms에서 압력파가 우측 벽에 부딪쳐 반사되어 밀도가 갑자기 증가하게 된다. 다음으로 0.6~0.7ms에서 화염 좌측에서 첫 번째 폭굉이 발생하여 전파되고 있다. 마지막으로 0.75ms쯤에는 화염 우측에서 두 번째 폭굉의 발생을 확인할 수 있다. 이를 보다 자세히 살펴보기 위하여 Fig. 3을 통하여 설명하도록 하겠다. 이는 앞서 언급하였던 Fig. 1에서의 지점 1, 2에서 획득된 시간에 따른 압력 변화이다.

Figure 3에서 ①은 압력파가 좌측에서 우측으로 전파되는 것을 보여 주고 있으며 ②와 ③은 각각 첫 번째와 두 번째 폭굉에 의한 급격한 압력의 상승을 보여주고 있다. 특히 첫 번째 폭굉인 ②의 경우 증가된 압력값이 0.6~0.8MPa이고 이때의 폭굉 전파 속도가 1887m/s이다. 마지막으로 ④는 폭굉 발생 후의 거의 정상 상태에서의 압력을 보여 주는데 이때의 압력이 0.27MPa이다.

수치적 계산을 통하여 얻어진 결과를 실험값 및 이론값과 비교하면 아래의 Table 2와 같이 정리할 수 있다.



(a) Data acquisition point 1



(b) Data acquisition point 2

Fig. 3 Calculated pressure histories along the tube

Table 2. Comparison of reference and numerical values in acetylene-air simulation.

Peak pressure	0.8MPa [7]	0.6~0.8MPa
Pressure ratio	19.5 [8]	20.3
Detonation velocity	1870m/s [3]	1887m/s

추가적으로 압력파의 강도에 따른 DDT 발생의 변화를 확인하기 위하여 본 연구에서는 강도가 다른 3가지 경우(M=1.1, 1.2, 1.3)에 대한 모델링을 수행하였다. 아래의 그림 4는 폭굉이 발생한 후의 밀도와 온도를 보여주는데 그림에서 확인할 수 있듯이 압력파의 강도가 약해짐에 따라 폭굉이 발생하는데 더 긴 시간이 요구된다. 이는 폭굉으로 발전하기 위해서는 높은 반응률 증가가 필요한데 약한 압력파의 경우, 보다 많은 압력파의 중첩이 요구되기 때문이다. 결국 어느 수준 이하의 약한 압력파에 의해서는 폭굉이 발생하지 않음을 확인할 수 있다.

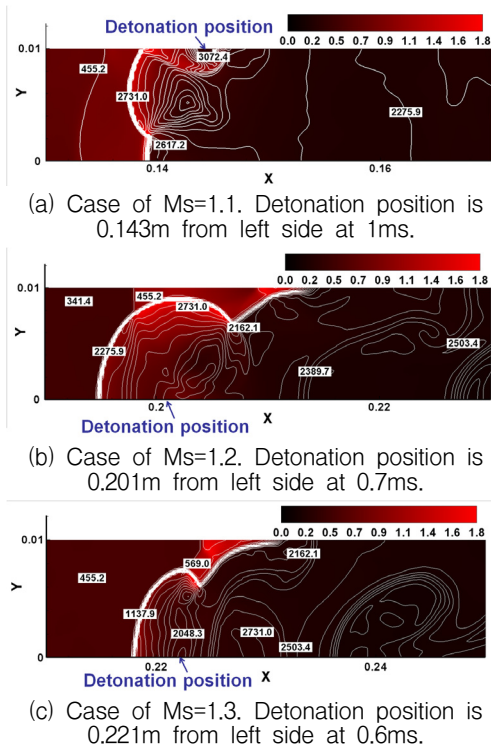


Fig. 4 Comparison of density [flood, unit: kg/m³] and temperature [line, unit: K] fields according to Mach number

4. 결 론

본 연구에서 연소폭발천이 현상을 유발하는 조건 중 압력파와 화염의 상호 작용을 살펴보았다. 이를 해석하기 위하여 acetylene-air 혼합물의 실험 자료를 바탕으로 수치적 계산을 수행하였다. 또한 계산된 결과를 실험값 및 이론값과 비교하였다.

후 기

본 연구는 현대기아 자동차 위탁 연구에 지원을 받아 수행된 것이며, 지원에 대하여 감사 드립니다.

참 고 문 헌

1. Kim, D. H. and Yoh, J. J., "Predictive model of onset of pipe failure due to a detonation of hydrogen-air and hydrocarbon-air mixture," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, 2009, pp. 1613-1619
2. Gwak, M. C. and Yoh, J. J., "Gaseous deflagration-to-detonation impact simulation on copper-based furnace injector," *Combustion Explosion and Shock Waves*, 2010, in press
3. Khokhlov, A. M., Oran, E. S. and Thomas, G. O., "Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: The role of shock-flame interactions in turbulent flames," *Combust. Flame*, vol. 117, 1999, pp. 323-339
4. Oran, E. S. and Khokhlov, A. M., "Deflagration, hot spots, and the transition to detonation," *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, vol. 357, 1999, pp. 3539-3551
5. Ciccarelli, G. and Dorofeev, S., "Flame acceleration and transition to detonation in

- ducts," *Prog. Energy. Combust. Sci.*, vol. 34, 2008, pp. 499-550
6. Lee, J. H. S. and Moen, I. O., "The mechanism of transition from deflagration to detonation in vapor cloud explosions," *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 6, 1980, pp. 359-389
7. Scarinci, T., Lee, J. H., Thamas, G. O., Bambrey, R., and Edwards, D. H., "Amplification of a pressure wave by its passage through a flame front," *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, vol. 152, 1993, pp. 3-24
8. Glassman, I., *Combustion*, 3rd ed., Academic Press, 1996, pp. 243-265