

<論 文>

활성화 에너지가 매우 큰 경우에 점근법을 이용한 반무한체의 점화에 관한 연구

백 승 욱*

(1989년 3월 4일 접수)

Asymptotic Analysis of Ignition of a Semi-Infinite Body for a Large Activation Energy

Seoung Wook Baek

Key Words: Semi-Infinite Body(반무한체), Ignition(점화), Asymptotic Analysis(점근법), Activation Energy(활성화 에너지), Convective Heat Transfer Coefficient(대류열 전달계수)

Abstract

The ignition of solid particle under strong convective heating has been investigated by applying an asymptotic analysis to a semi-infinite body for varying values of gas recovery temperature and convective heat transfer coefficient. It was found that if the scale of the reaction zone is much smaller than the characteristic length of the body size, then infinite body theory can be used to estimate the ignition delay time. Furthermore, the convective heat transfer coefficient was found to have more influence on predicting the ignition delay times of particle exposed to an incident shock wave rather than the gas recovery temperature.

1. 서 론

고체입자의 점화현상의 폭발(detonation) 현상과의 관계성은 유도부(induction zone)에 있고 이는 그 혼합물의 폭발성(detonability)과 연소성(flammability)과도 관계가 있다⁽¹⁾. 이러한 고체입자의 점화현상은 입사압축파⁽¹⁾와 반사압축파⁽²⁾를 이용하여 실험적으로 수행된 바 있다.

고체입자의 점화현상에 관해서 이론적으로, Bradley⁽³⁾는 일정한 열전달률에 노출되어 있는 고체연료에 대하여 에너지식을 수치적으로 해석하였고 Linan과 Williams^(4,5), Niioka와 Williams⁽⁶⁾는

반무한체 연료의 점화에 대해 점합점근법을 적용하여 해석하였다. 또한 산화제의 확산현상을 고려하면서 복사, 전도 및 대류 등의 여러 형태의 점화조건 상태하에서의 점화현상도 반무한체 연료에 대하여 점합점근법에 의해 해석되었다.⁽⁷⁻⁹⁾ 구형체의 고체입자의 점화에 대하여는 일정한 상수값의 대류열전달계수(convective heat transfer coefficient)와 외부기체온도에 노출되었을 경우에 대하여 점합점근법을 이용하여 해석되었다⁽¹⁰⁾. 이 경우 좌표계는 구좌표계가 이용되었으나, 일정한 평균상수값의 대류열전달계수와 외부기체온도일 경우로 제한되었으므로 이 두 변수가 시간에 따라 급격하게 변하는 경우를 수반하는 입사압축파에 의한 점화 등에 시간에 따른 변화를 적용하기가 매우 곤란하였다.

그러므로 본 연구에서는 반무한체에 대하여 활성

*정회원, 한국과학기술원 기계공학과

화 에너지가 매우 큰 경우의 점근법을 적용하여 이 두 변수의 시간에 따른 변화가 점화지연시간에 미치는 영향을 해석적으로 알아보고 참고문헌 (1)의 실험치와 비교하고자 한다.

2. 이론 및 점근해석

참고문헌 (1)에서의 실험은 산화제의 입자표면에서의 확산의 영향을 최소화하기 위하여 순수한 산소가 사용되었다. 그리하여 입자의 온도상승이 점화현상을 지배하는 결과가 얻어졌다. 그러므로 Fig. 1에서와 같이 반무한체의 표면이 온도 T_f 인 고온기체의 대류열전달에 의해 가열될 때, 반무한체 내부의 온도분포를 나타내는 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad x > 0, t > 0 \quad (1)$$

여기서 T 와 α 는 온도 및 열확산 계수이고 t 와 x 는 시간 및 거리 변수이다. 본 연구에서는 기하학형상으로 구형태보다 반무한체가 사용되었는데, 이는 Poland⁽¹¹⁾ 등이 보였듯이 화학반응이 일어나는 층의 두께가 고체입자의 특성길이보다 작을 때는 반무한체를 이용하여 점화현상을 해석할 수 있다는 데 기인한다. 또한 참고문헌 (2)의 입사압축파에 대한 온도변화곡선에서와 같이 입자중심의 온도는 점화시간까지 초기온도에서 거의 변하지 않으므로 입자중심에서의 경계조건도 일치하게 된다.

반무한체 표면에서의 경계조건으로는 Arrhenius 형태의 발열반응이 표면에서만 일어난다는 가정하에서, 비정상 기체온도 $T_f(t)$ 와 상수값을 가지는 대류열전달계수 h 를 이용하여 다음과 같이 나타낼

수 있다.

$$-k_c \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = h[T_f(t) - T(0, t)] + u''$$

여기서 u'' 은 단위면적당 단위시간당 발열량을 의미하는데, 참고문헌 (10)의 단위질량당 발열량, u''' 을 부피의 표면적에 대한 비인 L_{vs} 를 이용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u'' = L_{vs} Q \rho_c S_i P_{O_2} A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

여기서 E 와 R 은 고체연료의 활성화 에너지 및 일반기체상수이고, Q 와 ρ_c 는 고체연료의 단위질량당 발열량 및 밀도이다. A , S_i 와 P_{O_2} 는 각각 반응상수, 단위질량당 내부면적 및 산소의 분압을 의미한다. 이 때 초기조건으로 $T(x, 0) = T_i$ 가 사용되었다. 식 (1)을 무차원 온도인 $\phi = T/T_i$ 를 이용하여 변형하면 다음의 식과 같이 된다.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2)$$

또한 경계조건은 다음의 변수

$$B_o = \frac{h}{k_c}, \quad E' = \frac{E}{RT_i}, \quad \phi_f = \frac{T_f}{T_i},$$

$$\tilde{A} = \frac{L_{vs} Q \rho_c S_i A}{k_c T_i}$$

을 이용하여 다음의 식 (3)으로 표시되고

$$-\frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = B_o[\phi_f(t) - \phi(0, t)] + \tilde{A} \exp\left(-\frac{E'}{\phi}\right) \quad (3)$$

초기조건은

$$\phi(x, 0) = 1 \quad (4)$$

이 된다. 이 때 식 (2)와 경계조건 (3) 및 초기조건 (4)에 대한 비정상 해는 다음의 적분방정식 (integral equation)의 해인 $\phi(x, t)$ 로 나타낼 수 있다.

$$\phi(x, t) = 1 + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \exp\left(\frac{-x^2}{4\alpha(t-\zeta)}\right) \frac{B_o[\phi_f(\zeta) - \phi(0, \zeta)] + \tilde{A} \exp(-E'/\phi)}{\sqrt{t-\zeta}} d\zeta \quad (5)$$

그러므로 표면 $x=0$ 에서의 비정상해는 다음과 같이 된다.

$$\phi(0, t) = 1 + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \frac{B_o[\phi_f(\zeta) - \phi(0, \zeta)] + \tilde{A} \exp(-E'/\phi)}{\sqrt{t-\zeta}} d\zeta \quad (6)$$

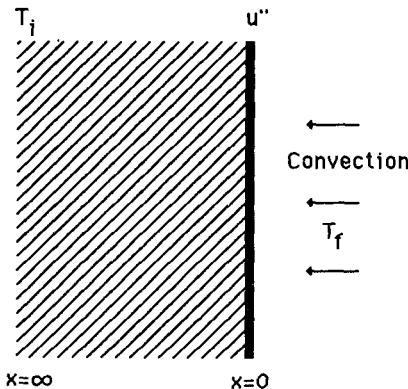


Fig. 1 Schematic of the problem

이 때 반응항인 u'' 이 없을 때의 표현, $x=0$ 에서의 비정상해인 ϕ_1 는 비활성온도(inert temperature)로서 다음과 같은 적분방정식의 해가 된다.

$$\phi_1(0, t) = 1 + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \frac{B_0[\phi_f(\xi) - \phi_1(0, \xi)]}{\sqrt{t-\xi}} d\xi \quad (7)$$

적분방정식 (7)의 해는 다음과 같다⁽¹²⁾.

$$\phi_1(0, t) = 1 + \frac{2B_0}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-B_0\eta) \int_{\frac{\eta}{2\sqrt{\alpha t}}}^\infty \phi_f\left(t_c - \frac{\eta^2}{4\alpha\mu^2}\right) \exp(-\mu^2) d\mu d\eta \quad (8)$$

식 (8)에서 표현에서의 비활성 점화온도(inert ignition temperature) ϕ_c 에 해당하는 점화지연시간(ignition delay time) t_c 는 다음의 관계식을 만족한다.

$$\begin{aligned} \phi_c &= \phi_1(0, t_c) \\ &= 1 + \frac{2B_0}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \exp(-B_0\eta) \int_{\frac{\eta}{2\sqrt{\alpha t_c}}}^\infty \phi_f\left(t_c - \frac{\eta^2}{4\alpha\mu^2}\right) \exp(-\mu^2) d\mu d\eta \quad (9) \end{aligned}$$

이러한 화학반응을 수반하지 않는 비활성 문제에서 화학반응을 수반하는 문제로 전이하기 위해서 무차원온도 ϕ 의 비활성온도 ϕ_c 로부터의 이탈 정도를 나타내는 Φ 을 도입하면

$$\Phi = \phi - \phi_c = O(\phi_c^2/E') \quad (10)$$

이 된다. Φ 에 대한 적분방정식은 식 (6)로부터 식 (7)을 감함으로써 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \Phi(0, t) &= \phi(0, t) - \phi_1(0, t) \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \frac{B_0(\phi_1 - \phi) + \tilde{A} \exp\left(-\frac{E'}{\phi}\right)}{\sqrt{t-\xi}} d\xi \quad (11) \end{aligned}$$

식 (11)의 지수항을 비활성 점화온도 ϕ_c 에 대하여 선형화하고 식 (10)를 감함으로써 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{aligned} \Phi(0, t) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \left[-B_0\Phi(0, \xi) + \tilde{A} \exp\left[-\frac{E'}{\phi_c} \left(1 - \frac{\Phi + \phi_1 - \phi_c}{\phi_c}\right)\right] \right] \frac{d\xi}{\sqrt{t-\xi}} \quad (12) \end{aligned}$$

식 (12)의 지수항의 $\phi_1 - \phi_c$ 을 $\phi_c'(t-t_c)$ 로 나타내면 다음의 식과 같다.

$$\Phi(0, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^t \left[-B_0\Phi(0, \xi) \right] \frac{d\xi}{\sqrt{t-\xi}}$$

$$+ \frac{\tilde{A} \exp\left(-\frac{E'}{\phi_c}\right) \exp\left[\frac{E'}{\phi_c^2} \{\Phi + \phi_c'(\xi - t_c)\}\right]}{\sqrt{t-\xi}} d\xi \quad (13)$$

여기서 식 (13)의 ϕ_c' 는 다음과 같다.

$$\phi_c' = \frac{d\phi_1}{dt}(0, t_c)$$

이 때 다음의 변수

$$\Psi = \Phi \frac{E'}{\phi_c^2}$$

$$z = \phi_c'(t-t_c) \frac{E'}{\phi_c^2} + \ln \left[\tilde{A} \exp\left(-\frac{E'}{\phi_c}\right) \sqrt{\frac{\phi_c^2}{E' \phi_c'}} \right]$$

를 도입하여 식 (13)를 다음과 같이 변형한다.

$$\begin{aligned} \Psi(0, z) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^z \left[-B_0\Psi(0, z_0) \sqrt{\frac{\phi_c^2}{E' \phi_c'} + \frac{E'}{\phi_c^2}} \exp(\Psi + z_0) \right] \frac{dz_0}{\sqrt{z-z_0}} \quad (14) \end{aligned}$$

여기서 $(E'/\phi_c^2)^{1/2} \rightarrow \infty$ 을 만족할 정도의 큰 활성화에너지값에 대해서 식 (14)의 분자에 있는 첫째 항은 둘째항에 비해 무시할 만큼 작다. 그러므로 그 둘째항을 무시하면 식 (14)은 다음식과 같이 된다.

$$\begin{aligned} \Psi(0, z) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^z \frac{\exp\left[\Psi + z_0 + \ln\left(\frac{\sqrt{\alpha E'}}{\phi_c^2}\right)\right]}{\sqrt{z-z_0}} dz_0 \quad (15) \end{aligned}$$

여기서 다음의 변수

$$\begin{aligned} y &= z + \ln\left(\frac{\sqrt{\alpha E'}}{\phi_c^2}\right) \\ &= \frac{E'}{\phi_c^2} \phi_c'(t-t_c) + \ln \left[\tilde{A} \sqrt{\alpha} \right] \\ &\quad \exp\left(-\frac{E'}{\phi_c}\right) \sqrt{\frac{E'}{\phi_c^2 \phi_c'}} \quad (16) \end{aligned}$$

을 도입하면 식 (15)는 다음과 같이 된다.

$$\Psi(0, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^y \frac{\exp(\Psi + y_0)}{\sqrt{y-y_0}} dy_0 \quad (17)$$

식 (17)은 수치해석에 의하여 풀면 $y = -0.431$ 에서 Ψ 의 값이 무한대로 접근한다⁽¹³⁾. 그러므로 $t = t_c$ 에서의 $y = -0.431$ 에 대해 식 (16)로부터 다음식이 얻어진다.

$$\ln \left[\tilde{A} \sqrt{\alpha} \exp\left(-\frac{E'}{\phi_c}\right) \sqrt{\frac{E'}{\phi_c^2 \phi_c'}} \right] = -0.431 \quad (18)$$

이 때 점화지연시간 t_c 는 식 (9)과 그 미분식 그리고 식 (18)로부터 구할 수 있다.

지금까지의 해석은 시간에 따라 변하는 기체온도

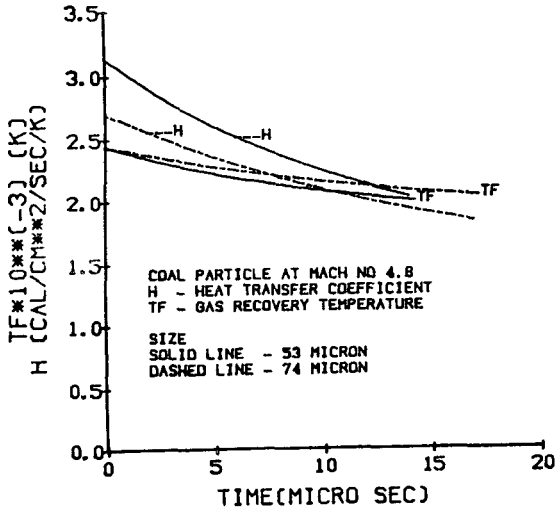


Fig. 2 Variation of convective heat transfer coefficient and gas recovery temperature with time for 53 and 74 micron coal particles at $M=4.8$

$T_f(t)$ 와 상수값인 대류열전달계수 h 에 대한 것이 있는데 대류열전달계수가 시간에 따라 변한다 하더라도 식 (18)에 이르는 위의 해석은 식 (14)의 적분항의 분자에서 첫째항이 무시될 수 있으면 여전히 유효하다. 그러나 대류열전달계수 $h(t)$ 를 고려한 변화에 대한 영향은 ϕ_c 와 ϕ'_c 의 계산에 고려되어야 한다. 이 때 $h(t)$ 는 Fox⁽¹⁴⁾ 등을 따라 실험에 의한 경험식⁽¹⁰⁾이 사용되었고 $T_f(t)$ 는 Schaaf와 Chambre⁽¹⁵⁾를 따라 정온도 T 와 정체온도 T_0 를 이용하여 $T_f = T + 0.92(T_0 - T)$ 가 사용되었다. 입사압축파의 마하수가 4.8일 때 두 가지 크기의 석탄입자에 대해 $h(t)$ 와 $T_f(t)$ 의 시간에 따른 변화가 Fig. 2에 나타나 있다.

3. 결과 및 결론

Fig. 3에 직경이 53 μ m인 석탄입자의 입사압축파에 의한 점화에 있어서 참고문헌 (1)에서 발췌한 실험결과치와 수치해석에 의한 결과, 그리고 참고문헌 (10)의 구좌표에서 평균상수값인 기체온도 및 대류열전달계수에 대해 얻어진 접합점근법에 의한 결과를 본 연구에서의 결과와 비교하기 위하여 수록하였다. 그림에서 종축은 로그눈금의 점화지연시간으로 나타나 있고 횡축은 입사압축파에 의해 가열된 기체의 온도가 초기온도 295K에 의해 역으로

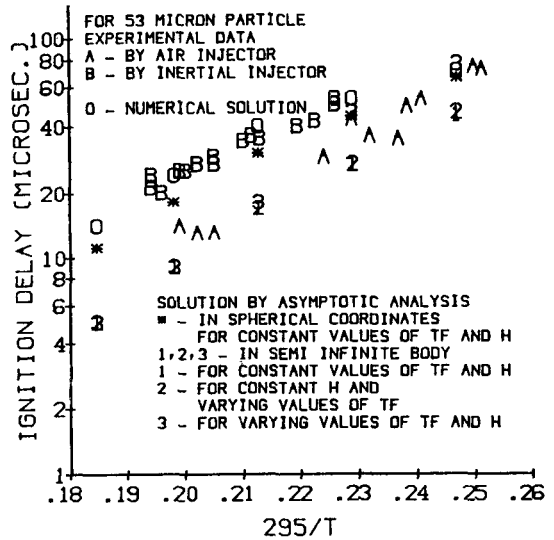


Fig. 3 Comparison of measured and asymptotically computed ignition delays of coal dust

무차원화된 형태로 나타나 있다.

본 연구의 해석방법에 따라 우선 평균상수값의 기체온도 T_f 와 대류열전달계수 h 에 대한 결과가 기호 1로 표시되어 있다. 이 결과는 앞에서 언급된 결과와 비교하여 조금 짧은 점화지연시간을 나타내나 앞에 언급된 결과와 비교하여 대체로 만족한 결과를 보여준다. 이로부터 앞에서 언급되었듯이 화학반응이 일어나는 층의 두께가 고체입자의 특성길이보다 작을 때는 반무한체를 이용하여 점화현상을 해석할 수 있음을 알 수 있다. 또한 시간에 대한 평균상수값 h 와 시간에 대한 변화를 고려한 $T_f(t)$ 에 대해 얻어진 결과는 그림에 기호 2로 나타나 있는데, 이로부터 시간에 따른 변화를 고려한 기체온도의 점화지연시간에 대한 영향은 거의 무시할 수 있음을 알 수 있다. 마지막으로 두 변수 $h(t)$ 와 $T_f(t)$ 모두에 대해 시간에 대한 변화를 고려한 경우, 계산된 점화지연시간이 기호 3으로 나타나 있는데, 입사압축파의 강도가 강해질수록 실험치에 근접해 감을 알 수 있다. 이로부터 시간에 따른 대류열전달계수의 점화지연시간에 영향이 시간에 따른 기체온도의 영향보다 더 크다는 것을 알 수 있다. 그러므로 본 연구의 고체입자의 점화지연시간 예측 해석 방법에 있어서, 입자로의 시간에 따른 대류열전달 변화가 심할 경우, 대류열전달계수가 매우 중요한 인자임을 알 수 있다.

참 고 문 헌

- (1) Sichel, M., Baek, S. W., Kauffman, C. W., Maker, B., Nicholls, J. A., and Wolanski, P., 1985, "The Shock Wave Ignition of Dusts", *AIAA Journal*, Vol. 23, No. 9, pp. 1374~1380.
- (2) Baek, S. W. and Kauffman, C. W., 1987, "On Ignition of Dust Particles in Hot Stagnant Oxygen Gas", *Combustion Science and Technology*, Vol. 56, pp. 149~158.
- (3) Bradley, H. H., Jr, 1970, "Theory of Ignition of a Reactive Solid by Constant Energy Flux", *Combustion Science and Technology*, Vol. 2, pp. 11~20.
- (4) Linan, A. and Williams, F. A., 1971, "Theory of Ignition of a Reactive Solid by Constant Energy Flux", *Combustion Science and Technology*, Vol. 3, pp. 91~98.
- (5) Linan, A. and Williams, F. A., 1972, "Radiant Ignition of a Reactive Solid with In-Depth Absorption", *Combustion and Flame*, Vol. 18, pp. 85~97.
- (6) Niioka, T. and Williams, F. A., 1977, "Ignition of a Reactive Solid in a Hot Stagnation Point Flow", *Combustion and Flame*, Vol. 29, pp. 43~54.
- (7) Kindelan, M. and Linan, A., 1976, "Gasification Effects in the Heterogeneous Ignition of a Condensed Fuel by a Hot Gas", AFOSR Technical Report 73-2535, European Office of Aerospace Research and Development.
- (8) Bradley, H. H., Jr and Williams, F. A., 1970, "Theory of Radiant and Hypergolic Ignition of Solid Propellants", *Combustion Science and Technology*, Vol. 2, pp. 41~52.
- (9) Niioka, T., 1978, "Heterogeneous Ignition of a Solid Fuel in a Hot Stagnation Point Flow", *Combustion Science and Technology*, Vol. 18, pp. 207~215.
- (10) 백승욱, 1986, 접합점근법을 이용한 고체 ;자의 점화에 관한 연구, 대한기계학회논문집, 제10권, 제 4 호, pp. 471~476.
- (11) Poland, J., Hindash, I. O., and Kassoy, D. R., 1982, "Ignition Processes in Confined Thermal Explosions", *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, pp. 215~223.
- (12) Carslaw, H. S. and Jaeger, J. C., 1959, "Conduction of Heat in Solids", Oxford.
- (13) Linan, A. and Crespo, A., 1972, "An Asymptotic Analysis of Radiant and Hypergolic Heterogeneous Ignition of Solid Propellants", *Combustion Science and Technology*, Vol. 6, pp. 223~232.
- (14) Fox, T. W., Rackett, C. W. and Nicholls, J. A., 1977, "Shock Wave Ignition of Magnesium Powders", *Proceeding of 11th International Symposium on Shock Tubes and Waves*, University of Washington.
- (15) Schaaf, S. A. and Chambre, P. L., 1961, "Flow of Rarefied Gases", Princeton University Press".