

〈論 文〉

동충류 축대칭 확산화염내의 화염구조 및 매연입자 분포의 예측

이정기* · 김상수**

(1992년 4월 14일 접수)

Predictions on the Flame Structure and Soot Distribution in the Coflowing Laminar Diffusion Flames

Jung Ki Lee and Sang Soo Kim

Key Words : Soot Particle(매연입자), Primary Soot Particle(기본매연입자), Surface Condensation(표면응축), Coagulation(응집), Aggregation(집합)

Abstract

A numerical calculation on the flame structure and the soot particle distribution in a coannular laminar diffusion flame was performed. Flame analysis model utilized basically flame sheet concepts, Shvab-Zel'dovich assumption, and one step overall irreversible reaction. It was also considered the variation of thermodynamics and transport properties, and the stagnation enthalpy was used for solving temperature field. Radiation was taken into account, since it has been found to be important in determining the flame temperature in sooty flames. For soot particle analysis, we adopted the coagulation, surface condensation, and the oxidation model in addition to Tesner's two-step formation model. Equations for primary soot particle excluding the agglomeration process were solved. Based on the results, the regions of soot generation, growth, and oxidation in the flame have been observed and radiation strongly influenced the flame temperature and soot distribution.

기 호 설 명

C_p	: 혼합가스의 정압비열	S_c	: Schmidt 수
d_R	: 핵의 직경	W_i	: i 화학종의 분자량
H	: 정체엔탈피	X_i, Y_i	: i 화학종의 몰분율과 질량분율
h	: 혼합가스의 엔탈피	Y_{cf}	: Shvab-Zel'dovich 함수
L	: 보호벽의 길이	ω_i	: i 화학종의 화학반응율
N_0	: 아보가드로 수	σ	: Stefan-Boltzmann 상수
P	: 압력 $P=P_h+P_m$	$\sigma_{ii}(\epsilon/k)_i$: i 화학종의 충돌직경과 Lennard-Jones 인수
q_R	: 복사 열유속벡터		
R°	: 가스상수		
R_l, R_o	: 연료관과 공기관의 반경		

1. 서 론

* (주)대우자동차 기술연구소
** 정회원, 한국과학기술원 기계공학과

연소현상에 있어서 매연입자(soot particle)는 복

사열전달을 증가시킴으로써 열적효율을 증대시킬 수 있다는 점과 반면에 연소 벽면에서의 부착으로 인한 장치의 효율과 유지에 나쁜영향을 끼칠수 있고 대기중으로 방출되는 경우에는 공공의 건강에 악영향을 끼치기 때문에 그의 생성(formation), 이동(transport) 및 산화(oxidation)과정을 규명하려는 연구가 중요시 되어오고 있다.

매연입자는 탄소를 주로 포함하고 있는 고체입자로서 미연의 연료가 열분해(pyrolysis)의 과정을 거치면서 생성되는 일종의 연소 부산물이다. 지금까지의 매연입자의 생성과 산화에 대한 연구에 따르면⁽¹⁾ Fig. 1에서 보는 바와 같이 매연입자는 발생(generation), 성장(growth), 산화과정을 거치면서 연소시스템내에 존재하게된다.

매연입자는 보통 수백에서 수천 앙스트롬(Å) 정도의 유효지름을 가진 덩어리(agglomerate) 형태로 존재하게 되는데 대략 2(g/cm³) 정도의 밀도를 가지며 구형인 기본매연입자(primary soot particle)가 근간을 이루고 있다.

매연입자가 존재하는 연소시스템 해석시에 매연입자가 강한 흡수계수를 가진다는 점에서 복사효과가 중요하게 고려되어야 하며 가스의 유동외에 브라운운동(Brownian motion)과 열영동효과(thermophoretic effect)에 의한 매연입자의 이동이 고려되어야 한다.⁽²⁾

동충류 축대칭 확산화염(coflowing laminar axisymmetric diffusion flame)에 대한 연구가 화염의 모양과 높이에 관심을 두고 기본적인 이론정립을 한

Burke-Schumann⁽³⁾ 이래로 여러 조건하에서 연구되었다. 화학반응을 고려하고 자연대류효과와 열역학적 및 이동론적 물성치들의 변화를 고려하여 화염의 전반적인 구조의 예측을 시도한 Mitchell⁽⁴⁾과 화염대개념을 포함한 대부분의 가정을 무시하고 화학반응을 42단계로 고려하여 다수화학종(major species)뿐만 아니라 소수화학종까지 고려한 Smooke⁽⁵⁾의 연구결과는 매연생성의 고려를 제외하고는 화염의 해석에 만족할만한 결과를 제시해 주고있다.

한편 Haynes와 Wanger⁽¹⁾가 이전까지의 매연에 대한 연구들을 정리하여 발표한 바 있으며 실험과 이론적인 연구가 계속되고있다. Santoro⁽⁶⁾ 및 Megaridis⁽⁷⁾ 등은 광소멸 및 산란법(light extinction & scattering method)과 입자포집법을 이용하여 매연입자의 체적분율, 수밀도및 크기를 알아냈다. 분자운동론에 입각하여 매연의 생성과 산화과정을 규명함으로써 이론적인 모델들을 이끌어 내려는 노력이 꾸준히 이루어지고 있으며 모델을 이용하여 수치적으로 매연입자를 예측하기 위한 연구가 이루어지고 있다. Magnussen⁽⁸⁾, Moss⁽⁹⁾ 및 Kennedy⁽¹⁰⁾ 등은 매연입자의 각 과정에 대한 모델들을 이용하여 화염내에서 매연입자의 농도분포를 예측하고 실험과 비교한 바 있다. 최근에 Jurng⁽¹¹⁾은 프로판의 난류 확산화염에 대해 해석하고 이전의 연구결과들을 이용하여 화염내에 매연 입자 분포를 해석한 다음 실험결과와 비교하였고 산화과정과 복사효과를 고려함으로써 매연의 기구에 대한 전반적인 예측을 시도하였다.

본 연구의 목적은 동충류 축대칭 확산화염에서 이전까지의 화염해석 방법들을 면밀히 고찰하여 총류 확산화염 방식의 연소문제를 해결하는데 있어서 접근이 용이하고 타당성을 가지는 화염해석 방법을 찾아내는데 있으며 매연 입자에 관한 생성및 산화 모델을 총체적으로 연결하여 실험결과와의 비교를 통해 적절한 모델인수를 결정하며 복사효과와 열영동효과를 고려하여 화염해석과 화염내의 매연입자의 분포를 예측하는데 있다.

2. 이론전개 및 수식화

2.1 화염해석

Fig. 2와 같은 계산형상에 대하여 기본적으로 화염대개념을 적용하며 Shavb-Zel'dovich 가정을 사

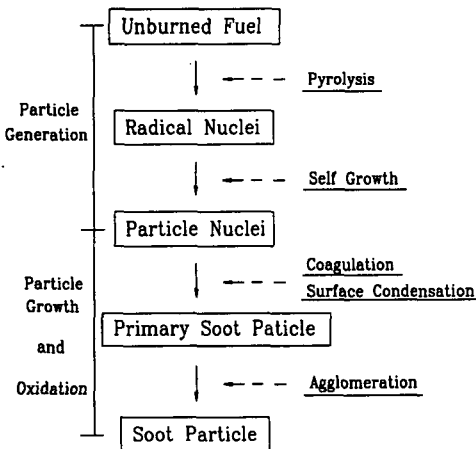
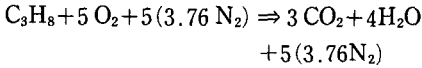


Fig. 1 Pathways of soot formation and oxidation

용하여 해석한다. 중요한 가정사항은 다음과 같다.

- (1) 유동은 Stoke's 가설, $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ 을 만족한다.
- (2) 동일한 확산계수를 가지며 Lewis 수는 1로 가정한다.
- (3) Sc수는 일정한 값($Sc=0.7$)을 갖는다.
- (4) 화학반응은 일단계 비가역 전반응으로 일어난다.



(5) 복사열전달은 반경방향만 존재하며 매연입자의 흡수만을 고려한다.

Shvab-Zel'dovich 함수와 정체엔탈피를 도입하여 지배방정식들은 다음과 같이 표시된다.

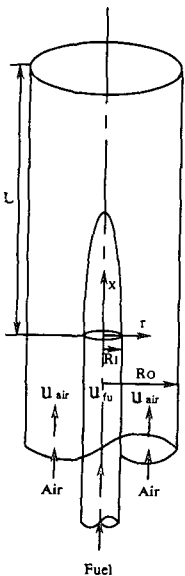
$$\rho \vec{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (1)$$

(1) 운동량방정식

$$\begin{aligned} \phi = u, \Gamma_\phi = \mu \\ S_u = -\frac{\partial P_m}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] \\ - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} [\mu \nabla \cdot \vec{V}] + (\rho_\infty - \rho) g \end{aligned} \quad (2)$$

$\phi = v, \Gamma_\phi = \mu$

$$S_v = -\frac{\partial P_m}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right]$$



Computational Condition	
\	Values
R _i	0.760 cm
R _o	6.50 cm
L	55 cm
u _{in}	1.750 cm/s
u _{air}	9.548 cm/s
Fuel	C ₃ H ₈
Air	O ₂ : 23.2 % N ₂ : 76.8 %

Fig. 2 Computational geometry and condition

$$-2\mu \frac{v}{r^2} - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r \mu \nabla \cdot \vec{V}] + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \nabla \cdot \vec{V} \quad (3)$$

(2) 화학종보존식

$$\phi = Y_{cf}, \Gamma_\phi = \frac{\mu}{SC}, S_\phi = 0 \quad (4)$$

$$\phi = Y_{ni}, \Gamma_\phi = \frac{\mu}{SC}, S_\phi = 0 \quad (5)$$

(3) 에너지방정식

$$\begin{aligned} \phi = H, \Gamma_\phi = \frac{\mu}{SC} \\ S_H = \frac{\mu}{SC} \sum_{i=1}^N C_{pi} \nabla Y_i \cdot \nabla T - 4k_p \sigma (T^4 - T_{wall}^4) \end{aligned} \quad (6)$$

(4) 이상기체 상태방정식

$$P = \rho R^\circ T \sum_{i=1}^N \left(\frac{Y_i}{W_i} \right) \quad (7)$$

다음과 같은 관계식들이 부수적으로 이용된다.

$$Y_{cf} = Y_{fu} - Y_{ox}/S \quad (8)$$

$$H = C_p T + Q_{fu} Y_{fu} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \omega_{fu} = \frac{\omega_{ox}}{S} = -\frac{W_{fu}}{3W_{ca}} \omega_{ca} = -\frac{W_{fu}}{4W_{wa}} \omega_{wa}, \\ \omega_{ni} = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

$$Y_{ca} = (3W_{ca}/4W_{wa}) Y_{wa} \quad (11)$$

복사항은 광학적으로 얇은 매질로 근사화(optically thin limit approximation) 시켜 $\nabla \cdot \vec{q}_R = 4k_p \sigma (T^4 - T_{wall}^4)$ 를 사용하여 나타냈다.⁽¹⁰⁾

경계조건은 입구에서 연료와 공기의 유입에 따른 입구조건을 주었으며 축에서는 대칭조건을 주었고 벽에서는 노슬립조건과 일정한 온도조건을 주었으며 출구에서는 노이만조건과 입구에서 유입되는 양과 출구를 통해 유출되는 양이 같아야 한다는 것으로 부터 속도조건을 주었다.

점성계수는 Lennard-Jones 포텐셜을 이용하고 Chapman-Enskog의 점성식을 사용하여 다음과 같이 얻어진다.^(12,13,14)

$$\mu_i = 2.6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{W_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_{\mu i}} \text{ (kg/m}\cdot\text{s)} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \text{여기서 } \Omega_{\mu i} = 1.147 \left(\frac{T}{(\epsilon/k)_i} \right)^{-0.145} \\ + \left(\frac{T}{(\epsilon/k)_i} + 0.5 \right)^{-2.0} \\ \mu = \frac{\sum_{i=1}^N X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{ij}} \end{aligned} \quad (13)$$

여기서 $\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left[1 + \frac{W_j}{W_i} \right]^{-0.5} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{0.5} \left(\frac{W_j}{W_i} \right)^{0.25} \right]^2$

각 화학종에 대한 σ_i 와 $(\epsilon/k)_i$ 는 Table 1에 제시되어있다.

정압비열과 엔탈피는 Sonntag⁽¹⁵⁾의 데이터를 이용하였으며 주어진 화학반응으로부터 연소열 Q_{fu} 는 다음과 같다.

$$Q_{fu} = h_{fu} + Sh_{ox} - \left(\frac{3W_{ca}}{W_{fu}} \right) h_{ca} - \left(\frac{4W_{wa}}{W_{fu}} \right) h_{wa} \quad (14)$$

한편 매연입자의 파장에 따른 흡수계수가 입사광의 파장에 역비례한다는 사실로부터 $k_\lambda = Cf_v/\lambda$ 로 나타낼 수 있는데⁽¹⁶⁾ 여기서 C 는 상수로써 연료에 따라 보통 3~7의 값을 가지며 f_v 는 매연입자의 체적분율 나타내고 λ 는 입사광의 파장을 나타낸다. 이 식으로 부터 Planck의 평균흡수계수를 정의하여 온도와 매연입자의 체적분율에 따른 매연입자의 흡수계수는 다음과 같이 결정된다. 여기서 C 는 프로판을 고려하여 3을 사용하였다.⁽¹⁶⁾

$$k_p(T) = 266Cf_v T (m^{-1}) \quad (15)$$

2.2 매연입자해석

매연입자를 특성화시키는 중요한 인자로서 가스의 단위체적당 매연입자가 차지하는 체적[m³/m³]을 나타내는 체적분율(f_v), 단위체적당 매연입자의 갯수[수/m³]를 나타내는 수밀도(N) 그리고 직경(D_p)이 있다. 구형이고 크기 분포가 일정한 경우에 세개의 인자는 $f_v = (\pi/6) D_p^3 N$ 의 관계가 있다. 다음에서 매연 입자의 해석을 위한 모델들이 제시되어 있으며 기본적인 가정사항들이 나타나있다.

(1) 발생과정모델

핵과 입자핵이 발생하는 과정으로 Tesner⁽¹⁷⁾의 이 단계 모델을 사용한다.

(가) 핵(radical nuclei)의 발생속도

$$\frac{dn}{dt} = n_o + (f - g)n - g_o N_n \quad (16)$$

여기서 n 은 핵의 수밀도를 나타내고 n_o 는 연료로부터 핵의 자발적인 발생율(수/m³/s)를 나타내며 f 와 g 그리고 g_o 는 실험적으로 결정하는 상수이다. Jurng은 프로판의 경우 핵의 자발적인 발생율을 유도하였는데 그의 식을 사용하면 n_o 는 다음과 같다.

$$n_o = 6.226 \times 10^{28} Y_{fu} P^2 T^{-1.5} \text{EXP}(-28900/T) \quad (17)$$

(나) 입자핵(particle nuclei)의 발생속도

입자핵 수밀도와 체적분율의 발생속도는 다음과 같이 표시된다.

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{nuclei} = (a_N - b_N N) n \quad (18)$$

$$\left(\frac{df_v}{dt} \right)_{nuclei} = (a_f - b_f f_v) n \quad (19)$$

a_N 과 b_N 은 실험과의 비교를 통하여 결정되는 상수이고 입자핵의 직경(d_p)가 일정하다는 가정으로부터 $a_f = (\pi d_p^3/6) a_N$ 이고 $b_f = b_N$ 으로 표시된다.

(2) 성장과정모델

발생과정을 통하여 화염내에 존재하게되는 매연입자의 초기상태인 입자핵은 성장과정을 통하여 크기가 증가하게된다. 성장과정은 표면응축과 응집에 의해서 일어나며 이 과정을 통해서 얻어지는 기본 매연입자들은 단독으로 존재하지 않고 집합과정을 통하여 덩어리 형태로 존재하게 된다.

(가) 표면응축

기상의 화학종이 이미 존재하고있는 입자의 표면에 달라 붙어 입자의 크기가 증가하는 과정으로써 입자의 수밀도는 변하지않고 체적분율만이 증가하는 과정이다. 잔류연료만이 표면응축을 유발시킨다고 보고 자유분자 운동론으로 부터 유도된 다음식을 사용한다.^(2,18)

$$\left(\frac{df_v}{dt} \right)_{cond} = \frac{\alpha_c \pi N W_{fu}^{1/2} X_{fu} P D_p^2}{\rho_s (2\pi R^o T)^{1/2}} \quad (20)$$

여기서 α_c 는 충돌효율(collision efficiency)이며 ρ_s 는 매연입자의 밀도를 표시한다. γ 는 Stewart⁽¹⁹⁾가 제안, 사용한 것으로 연료의 표면응축에 대한 기여도를 표시한다.

(나) 응집

두개이상의 입자들이 충돌하여 서로 달라붙으면 서 입자의 크기가 증가하는 과정으로써 수밀도의

Table 1 Property value

Species	σ (Å)	$\epsilon/k(K)$	W
C ₃ H ₈	5.061	254.0	44.09
O ₂	3.433	113.0	32.00
CO ₂	3.996	190.0	44.01
H ₂ O(g)	2.520	775.0	18.00
N ₂	3.681	91.5	28.02

감소가 되지만 입자의 체적분율은 변화하지 않는다. Smoluchowski 식을 자유분자운동론에서 유도하여 다음과 같은 식을 얻는다.⁽¹⁾

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{coag} = -\frac{6}{5} K_{theory} f_v^{1/6} N^{11/6} \quad (21)$$

$$\text{여기서 } K_{theory} = \frac{5}{12} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_b T}{\rho_s}\right)^{1/2} G \alpha_s$$

여기서 G 는 2이며 α_s 는 5.66(monodisperse)으로 둔다.

(다) 집합

성장과정이 끝난 상태의 매연기본입자가 각각의 상태로는 더 이상 성장을 하지 못하고 서로 달라붙어 있는것으로 수밀도의 감소만을 일으킨다는 점에서는 응집과정과 같지만 접촉만을 하면서 체인을 이루어 연결되어 있다는 점에서 다르다. 이러한 집합과정에 대한 많은 연구가 있었지만 모델로 적용하기에는 어려움이 있다.

(3) 산화과정모델

Neoh⁽²⁰⁾는 매연입자의 표면연소속도(surface mass oxidation rate)를 다음과 같이 나타내었다.

$$W = -\rho_s \frac{D_p}{6} \frac{1}{f_v} \frac{df_v}{dt} \quad (22)$$

O_2 에 의한 산화만을 고려하여 Nagle과 Strickland-Constable의 식을 사용하면 매연입자의 표면연소속도는 다음과 같이 나타내어진다.⁽¹¹⁾

$$\frac{W}{120} = \left(\frac{K_A P_{ox}}{1 + K_z P_{ox}}\right) X + K_B P_{ox} (1 - X) \quad (23)$$

여기서

$$X = \left[1 + \frac{K_T}{K_B P_{ox}}\right]^{-1}, P_{ox} \text{는 산소의 부분압(atm)}$$

$$K_A = 20 \text{EXP}(-15100/T)$$

$$K_B = 4.46 \times 10^{-3} \text{EXP}(-7640/T)$$

$$K_T = 1.51 \times 10^{-5} \text{EXP}(-48800/T)$$

$$K_z = 21.3 \text{EXP}(2060/T)$$

산화과정을 통하여 수밀도는 변화하지 않으며 체적분율의 변화는 다음과 같다.

$$\left(\frac{df_v}{dt}\right)_{oxi} = -\frac{720}{\rho_s} \frac{f_v}{D_p} \left(\frac{K_A P_{ox}}{1 + K_z P_{ox}} X + K_B P_{ox} (1 - X)\right) \quad (24)$$

(4) 이동과정모델

(가) 열영동에 의한 입자의 이동

높은 운동에너지를 가지고 있는 고온의 입자가 저온의 지역으로 이동해가는 현상으로 가스에 부유되어 있는 입자의 크기가 가스의 평균자유행로보다 작을때 자유분자 운동론으로 부터 열영동속도를 다음과 같이 구할수 있다.⁽²⁾

$$\vec{V}_T = -\frac{3\nu \nabla T}{4(1 + \pi\alpha/8) T} \quad (25)$$

여기서 ν 는 가스의 동점성계수이며 α 는 보통 0.9를 가진다.

(나) 브라운 운동에 의한 입자이동

입자의 농도차이에 의하여 입자가 이동되어 가는 현상으로 입자의 확산계수(D_s)를 Stokes-Einstein의 식을 써서 나타내면 $D_s = k_b T / f$ 이다. 여기서 k_b 는 볼츠만 상수이며 f 는 마찰계수로서 Epstein이 자유분자운동으로부터 유도한 다음식을 사용한다.⁽²⁾

$$f = \frac{2}{3} D_p^2 \rho \left(\frac{2\pi k_b T}{m}\right)^{1/2} \left[1 + \frac{\pi\alpha}{8}\right] \quad (26)$$

여기서 m 은 $m = \sum (W_i / N_0) Y_i$ 로 표시되며 α 는 0.9이다.

(5) 지배방정식과 경계조건

본 연구에서는 매연입자의 체적분율에 중점을 두어 해석을 하게되는데 집합을 설명하는 모델의 검증이 불충분하고 집합과정에 대한 지배방정식의 표현이 어려워 매연입자에 대한 해석을 직접하지 않고 기본매연입자에 대한 해석을 통하여 매연입자의 체적분율을 계산하고자 한다. 다음의 지배방정식들은 각각 핵의 수밀도(n), 기본매연입자의 수밀도(N) 그리고 기본매연입자의 체적율(f_v)를 종속변수로 하고 있으며 적절한 생성항을 가진다.

$$\rho(\vec{V} + \vec{V}_T) \cdot \nabla_\phi = \nabla \cdot (\rho D_s \nabla \phi) + S_\phi \quad (27)$$

(가) 핵의 수밀도

$$\phi = n$$

$$S_n = \rho \left(\frac{dn}{dt}\right) = \rho [n_0 + (f - g)n - g_0 N_n] \quad (28)$$

(나) 기본매연입자의 수밀도

$$\phi = N$$

$$S_N = \rho \left(\frac{dN}{dt}\right)_{nuclei} + \rho \left(\frac{dN}{dt}\right)_{coag} \quad (29)$$

(다) 기본매연입자의 체적분율

$$\phi = f_v$$

$$S_{fv} = \rho \left(\frac{df_v}{dt} \right)_{nuclei} + \rho \left(\frac{df_v}{dt} \right)_{cond} + \rho \left(\frac{df_v}{dt} \right)_{oxi} \quad (30)$$

경계조건은 축, 출구와 벽에서는 노이만조건을 주었으며 입구에서는 핵, 매연입자가 존재하지 않는다는 것을 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

SIMPLER⁽²¹⁾ 알고리즘을 사용하여 화염해석과 매연입자해석을 수행하였다. 먼저 화염계산을 수립시키고 매연입자계산을 한 다음 매연입자의 복사효과를 고려하여 전 계산을 반복시킨다. 계산과정이 Fig. 3에 나타나 있다.

3.1 화염해석방식의 비교

본 연구에서 채택한 화염해석 방법의 타당성을 위해서 Mitchell의 실험조건⁽⁴⁾과 동일한 상황하에 계산을 수행하여 실험과 Mitchell계산⁽⁴⁾[Mitchell model] 그리고 Smooke의 계산⁽⁶⁾[Smooke model] 과 비교한 결과가 Fig. 4에 제시되어있다.

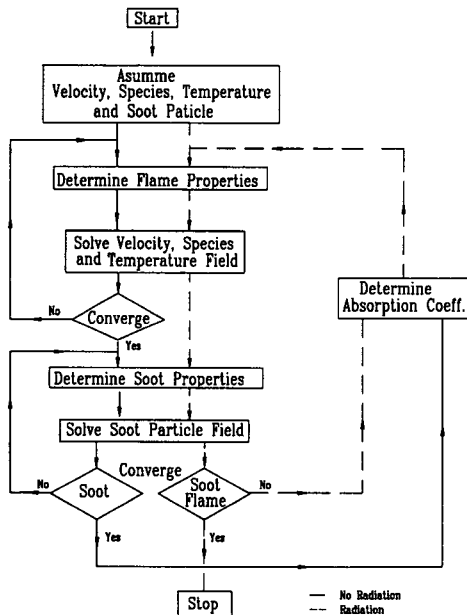


Fig. 3 Calculation flow chart

화학반응을 일단계로하여 다수화학종만을 고려한 본 해석 방식과 Mitchell 방식의 비교를 보면 Shvab-Zel'dovich 가정의 사용여부와 화학반응율의 고려여부에 따라 크게 달라지지 않는다는 것을 알 수 있다. 반면에 소수화학종을 고려한 실험결과 및 Smooke 방식의 결과와 비교해 볼 때 본 연구의 온도결과가 화염의 중앙에서 비교적 높게 예측되는데 이것은 소수화학종들이 상대적으로 연료농도가 높은 중앙에서 연료의 열분해에 의하여 생기면서 필요한 에너지를 흡수함으로써 인해 온도가 감소하는 것을 고려하지 못했기 때문이며 매연입자 존재의 무시와 복사열전달을 고려하지 않은 것도 온도가

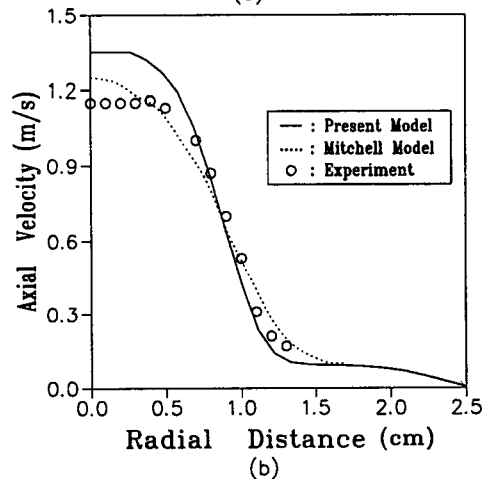
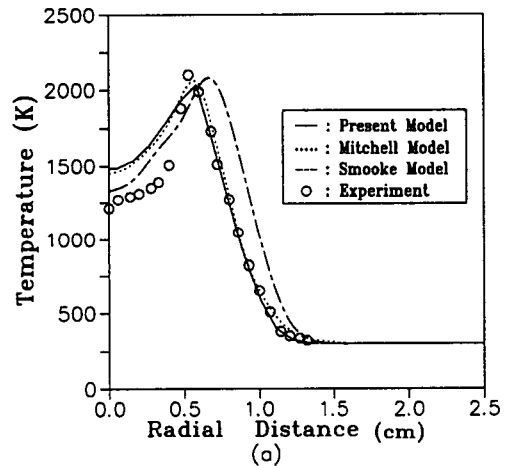


Fig. 4 Comparison of flame analysis methods(present model, mitchell model, smooke model, mitchell experiment) in (a) Temperature and (b) Axial Velocity along the radial direction at x=2.4 cm

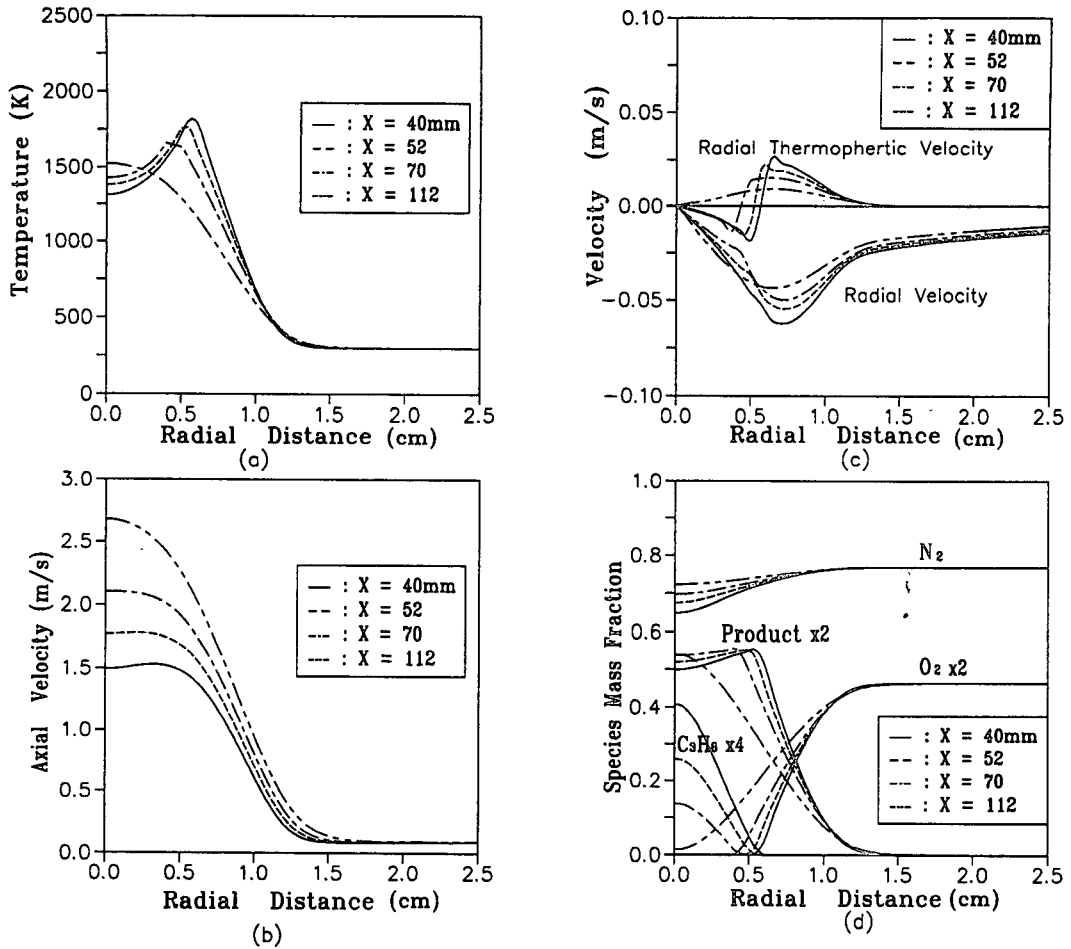


Fig. 5 Profile of (a) Temperature and (b) Axial Velocity along the radial direction at $x = 40, 52, 70, 112$ mm (c) Radial and thermophoretic radial velocity (d) species mass fraction

높게 예측되는 요인으로 작용할 것이라고 생각된다. 한편 온도차이로 인한 속도의 차이가 존재하나 대체로 일치하는 것을 볼 수 있다.

이로부터 본 해석방법은 화염해석 자체만으로도 큰 오류가 없으며 매연입자의 존재와 연계하여 해석하는 경우에는 대체로 화염을 올바르게 예측할 수 있을 것이라 생각된다.

3.2 화염해석결과

본 연구의 대상에서 매연입자의 존재와 복사효과를 고려한 화염해석 결과가 Fig. 5에 나타나있다. 각각은 반경방향에 따른 온도, 속도, 그리고 농도의 변화를 화염의 높이에 따라 네곳 ($x=40, 52, 70, 112$ mm)에서 나타낸 것이다.

Fig. 5의 (a)에서 높이가 증가함에 따라 온도최고점이 화염의 중앙부위로 이동하면서 최고온도가 낮아지고 있음을 알 수 있는데 이것은 반경방향의 온도최고지점인 화염대가 위로 올라가면서 줄어들기 때문이며 연료의 양이 비교적 많은 화염의 아래 부분에서 더 활발히 연소가 일어나기 때문에 아래 부분의 화염에서 더 높은 온도를 보이게된다. Fig. 6의 등온선을 보면 화염대의 아랫부분에서 많은 연료가 연소하면서 최고온도가 나타나며 화염대를 경계로 하여 온도가 감소하고 있음을 볼수있다. (b)는 축방향의 속도를 나타내는 것으로 화염대에서 온도증가로 인해 부피가 커져 속도가 급격히 증가하며 부력의 영향이 가미되어 화염의 후류부로 갈수록 노즐 입구속도의 100~300배 정도의 속도증가

가 나타나는 것을 볼수있다. (c)의 반경방향 유속에 대한 결과를 보면 전체적으로 화염의 중앙을 향하고 있으며 화염대의 아래부분에서 가장 큰값을 가지고 있는것을 알 수 있는데 이것은 화염대에서 연소에 의한 가스의 팽창으로 인해 외부의 공기가 유입되고 있기 때문으로 이러한 효과는 상대적으로 연소가 활발한 화염 아래부분에서 더 크게 나타나고 있다. 한편 Fig. 6의 유선은 전체계산영역중 화염대 근처에 대한 일부분을 나타낸 것으로서, 화염의 아래부분에서 반경방향의 속도로 인하여 유선이 화염쪽으로 들어오는 것을 볼 수 있으며 축방향속도가 지배적인 화염 후류부와 화염내부에서는 축과 평행함을 볼수있다. 이와 같은 결과는 반경방향의 속도를 무시하고 축방향의 유동만이 존재한다고 보아 해석을 하는 경우에 화염밖의 유동장을 예측하는데에는 어려움이 있지만 관심있는 화염내부에서는 문제점이 없음을 보여준다.

매연입자의 이동을 고려하여 온도차에 의해 나타나는 열영동속도를 계산하였는데 축방향의 경우는 유동의 속도에 비해 상대적으로 작아 고려하지 않

아도 되지만 반경방향의 경우에 있어서는 Fig. 5의 (c)에서 보는 바와 같이 유동속도에 비해 크게 작지않음으로 고려되어야 한다. 온도차이에 의하여 나타나는 열영동속도는 화염대를 경계로하여 방향이 달라지며 가스의 반경방향 속도와 합쳐져 매연입자의 이동속도를 규정하게된다.

Fig. 5의 (d)는 각 화학종의 질량분율을 표시한 것으로 연료와 산소가 만나 모두 소멸하는 지점이 화염대가 되며 이 지점에서 연소 생성물인 CO_2 와 H_2O 의 질량분율은 최대가 된다. 화염대개념을 적용하였기 때문에 Mitchell의 실험결과와는 달리 화염안에서는 어떠한 산소도 존재하지 않았다.

3.2 매연입자의 해석

매연입자의 발생, 성장과 산화과정을 고려한 기본매연입자의 해석을 통하여 체적분율을 계산하였으며 모델인수를 변화시켰을때, 그리고 모델인수는 그대로 두고 복사효과와 열영동효과와 고려여부에 따른 결과를 얻었다.

광산란및 소멸법을 이용한 $Ha^{(22)}$ 의 $x=52$ mm 지점에서의 실험결과를 기준으로 하여 발생과정모델에 들어있는 인수들을 변화시킨 결과 인수들이 독립적으로 체적분율에 영향을 주지않는 것으로 나타나 본 연구에서는 그중 한개의 인수인 a_N 만을 변화시키면서 결과를 얻었다. 실험과의 비교를 통하여 a_N 은 3.0×10^5 가 적절하였으며 사용한 실험인수는 Table 2에 제시되어있다.

화염 전반에 대한 매연입자의 해석결과인 Fig. 7로 부터 매연입자의 발생, 성장 및 산화영역을 구분 지을 수 있는데 발생영역에서 핵과 매연입자의

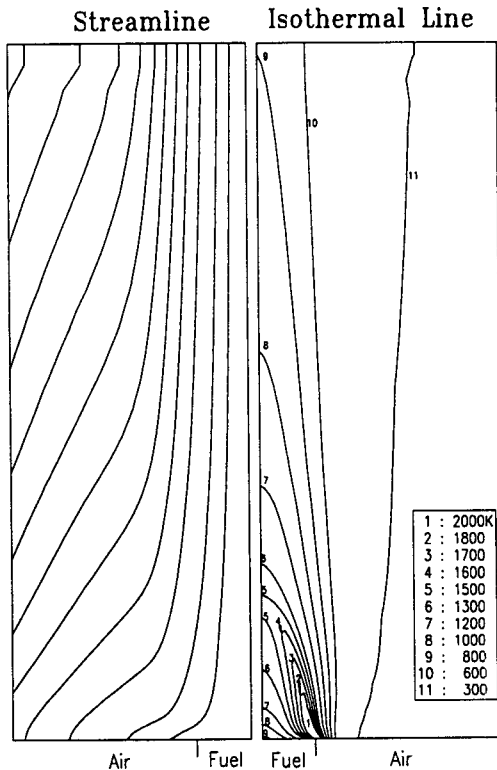


Fig. 6 Streamline and isothermal line of flame

Table 2 Soot model parameter

Symbol	Value	Unit
ρ_{soot}	2.0×10^3	kg/m ³
d_R	15	Å
d_p	60	Å
$f-g$	0.0	1/sec
g_0	2.36×10^{-9}	m ³ /sec
a_N	3.0×10^5	1/sec
b_N	4.2×10^{-20}	m ³ /sec
α	1.0×10^{-3}	
γ	12	

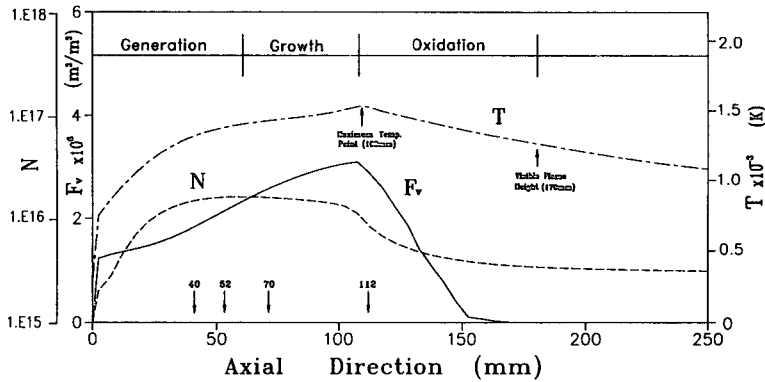


Fig. 7 General description of number density, volume fraction of primary soot particle and flame temperature along the axial direction at $r=0$

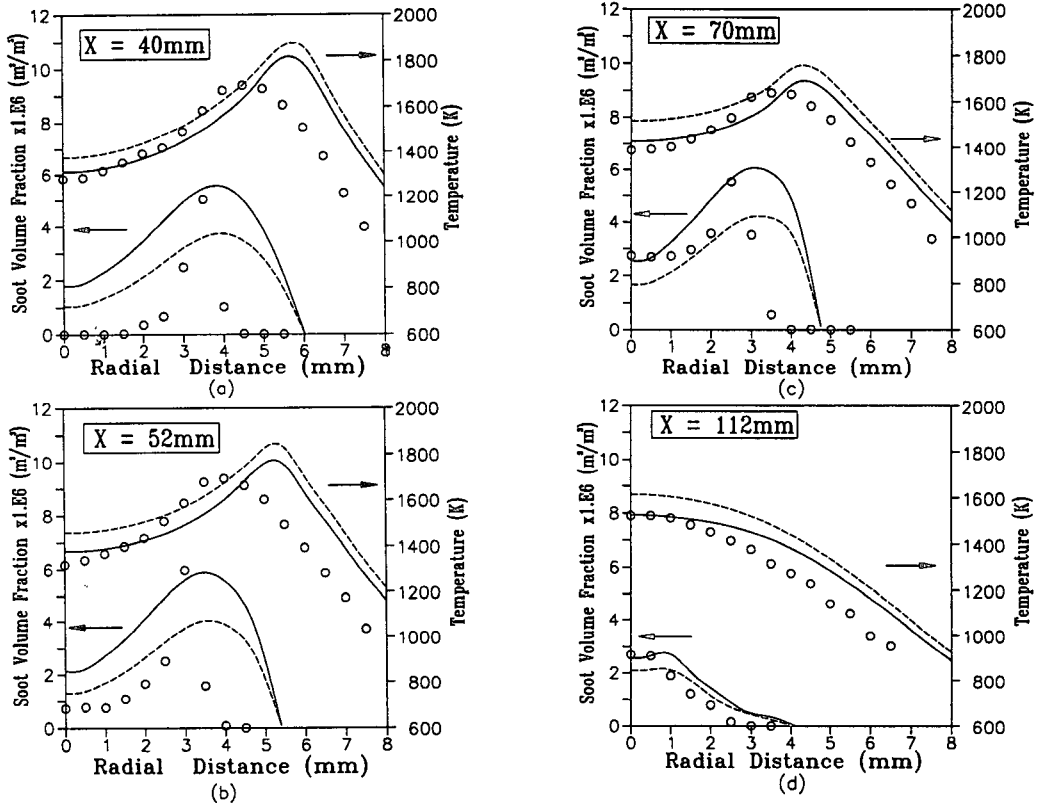


Fig. 8 Comparison of soot volume fraction and temperature profile in (— : present model, -- : model parameter change($a_N=1.0 \times 10^{-5}$), \circ : experiment) at (a) $x=40$ mm (b) $x=52$ mm (c) $x=70$ mm (d) $x=112$ mm

발생으로 인하여 수밀도와 체적분율이 증가를 하게 되다가 성장영역에 이르게 되면 응집과정에 의하여 수밀도는 줄어들게 되고 표면응축에 의하여 체적분

율은 더 증가하게 된다. 체적분율의 증가는 온도의 최고지점에 이를때까지 계속 되다가 산소가 존재하는 산화영역에 도달하게 되면 급격히 감소하기 시

작하여 소멸된다. 연료 분출구로부터 온도 최대지점까지의 거리가 계산상으로 얻어지는 화염높이로써 108 mm 이었고 실제의 가시적인 화염높이 (visible flame height)는 산화에 의해 매연이 대부분 소멸하는 지점으로 170 mm 정도로 나타났다.

Fig. 8의 (a),(b),(c),(d)는 화염의 각 높이에서 반경방향에 따른 매연입자의 체적분율과 온도의 변화를 표시한 것으로 같은 조건하에서의 실험결과 및 $a_N=1.0 \times 10^5$ 로 한 계산결과와 비교한 것이다. 본 연구결과를 실험과 비교해 보면 전반적으로 화염대가 더 바깥쪽에 위치하게 되는데 이것은 버어너 외부 공기의 유입을 제대로 수치화하지 못하여 계산하였기 때문인 것으로 생각되며 이로 인하여 Ha 의 실험결과 보다는 화염폭과 화염높이가 더 크게 예측되었다. (a)와 (b)는 발생영역에서의 계산 결과로써 주된 매연발생역은 화염대와 일치하지 않고 연료예열대 내에서 비교적 온도가 높은 화염대 안쪽임을 알 수 있으며 실험결과와 비교하여 볼 때 전체적인 경향은 일치하지만 중심축 부분에서 높게 예측되고 있음을 볼 수 있다. 이는 발생영역에 있어서 화염의 아래부분에서는 화염대 바로 안쪽에서만 체적분율이 크게 얻어질뿐 중심부근에서는 거의 존재하지 않는다는 이제까지의 확산화염에 대한 연구결과들과 부합되지 않는 것으로, 이는 본 화염해석에서 매연이 미치는 효과는 복사열전달 계산을 위한 흡수계수에만 관계있으므로 온도분포는 실험치와 잘 일치하고 있으나 체적분율의 분포는 많은 차이가 발생함을 볼 수 있다. 열전대를 이용한 온도 측정 결과를 살펴보면 화염대의 이동을 제외하고는 대체적으로 잘 일치하고 있음을 볼 수 있다. (c)는 성장이 지배적인 영역에서의 결과로써 화염대 바로 안쪽에서는 축방향 유동에 의한 매연입자의 이동과 화염의 아래부분보다는 적지만 매연의 발생에 의하여 여전히 많은 매연이 존재하고 있음을 볼 수 있으며 화염의 중앙부위에서는 매연입자의 표면응축에 의하여 체적분율이 증가하게 된다. (d)는 산화영역에서의 결과로써 축부분에서 높고 반경방향으로 갈수록 낮아지는 결과가 얻어졌는데 이것은 화염대가 축에 접근함으로써 인해 반경 방향으로 갈수록 매연입자가 오랫동안 산화과정을 거치기 때문이다. 한편 $a_N=1.0 \times 10^5$ 로 한 경우에는 전체적으로 체적분율이 약간 낮아질뿐 큰 변화는 나타나지 않았으며 매연입자의 복사효과가 줄어들기 때문에 온도가 증가하게 된다.

복사효과를 고려하지 않은 결과들이 열영동 효과를 무시한 경우와 함께 Fig. 9에 나타나 있다. 복사효과를 고려하지 않은 경우는 매연입자의 존재로 인한 열방출 효과가 나타나지 않아 고려한 경우에 비해 상당히 높은 온도를 보이고 있으며 연료의 열분해가 더 활발해지기 때문에 많은 매연입자가 존재하는 것을 알 수 있다. 한편 열영동효과를 고려하지 않은 결과와 비교해보면 열영동효과를 고려하였을때 화염대에서 매연입자의 체적분율이 줄어들고 축에서 증가하는 것을 볼 수 있는데 이것은 매연입자가 상대적으로 큰 열영동속도를 가지는 화염대쪽에서 안쪽으로 이동되었기 때문이다. 그러나 화염안에서는 축방향속도가 지배적이기 때문에 이러한 매연의 이동은 전체적으로 매우 작은 양에 해당되며 매연입자의 분포를 변화시킬 만큼 중요한 역할을 하지는 못하고 있는 것으로 나타났다.

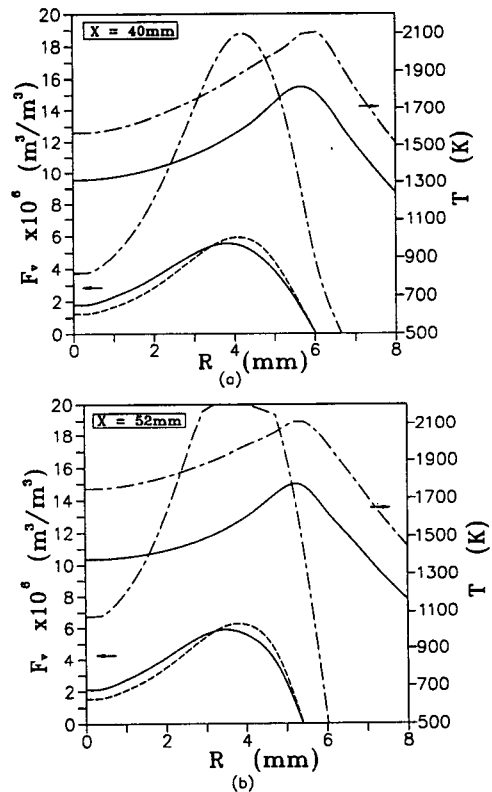


Fig. 9 Comparison of soot volume fraction and temperature profile in (— : present model, - - : neglect radiation effect, - · - : neglect thermophoretic effect) at (a) $x=40$ mm (b) $x=52$ mm

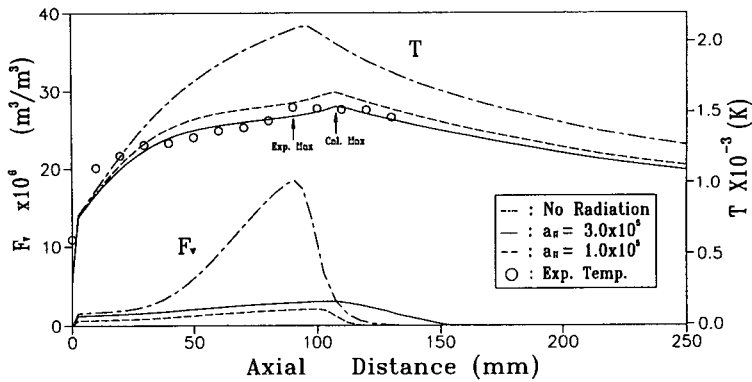


Fig. 10 Comparison of soot volume fraction and temperature profile in (present model, neglect radiation effect, model parameter change ($a_N = 1.0 \times 10^{-5}$), experiment temperature) along the axial direction at $r=0$

Fig. 10은 복사효과의 고려여부와 모델인수의 변 화여부에 따른 온도와 체적분율을 화염축을 따라 나타낸 것이며 실험결과로부터 얻어진 화염온도가 제시되어있다. 반경방향에서 나타난 것과 마찬가지로 축방향에 있어서도 복사 효과는 크게 나타나 매연입자의 성장영역 부근에서 최고온도가 600~700 K 낮아짐을 볼 수 있고 매연입자의 분포정도에도 상당한 영향을 끼치고 있음을 알 수 있다. 이와같이 매연입자의 복사효과는 화염을 해석하는데 있어서 중요하게 고려되어야 하며 복사물성치인 매연입자의 흡수계수결정과 복사열전달을 좀더 정확하게 예측할 수 있는 방법이 필요하리라 생각된다. 한편 모델인수의 변화는 체적분율의 감소외에 별 영향을 끼치지 않으며 실험으로부터 얻어진 온도와 비교하여 볼 때 복사를 고려한 경우의 결과가 화염을 올바르게 예측하고 있음을 볼수있다. Fig. 8에서 보았듯이 화염대가 더 넓게 예측됨으로 인해 온도최고지점이 실험결과보다는 높게 예측되고 있다.

4. 결론

이상의 연구로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 이전의 화염해석결과와 비교를 통해 채택한 화염해석방법의 타당성을 확인하였으며 매연입자의 존재를 고려하여 본 계산조건에서 화염해석을 한 결과 반응이 일어나는 화염대에서 반경방향의 최고 온도가 위치하며 화염 아래부분의 화염대에서 더 높은 온도를 보이고, 화염대에서의 온도증가로 인하여 축방향 속도가 화염안에서 급격히 증가하며

화염의 후류부로 갈수록 부력의 효과가 가미되어 속도가 더 빨라지는 것을 알았다. 반경방향의 속도는 화염내부와 후류부에서는 영향을 미치지 않지만 노즐입구에서의 유선을 변형시킨다는 것을 알 수 있었으며 생성물의 농도는 화염대에서 최대가 되었다.

(2) 화염내에서 매연입자의 발생, 성장 및 산화 영역을 알 수 있었으며 매연입자가 존재하는 경우 가시적인 화염높이보다 더 낮은 곳에 온도최고 지점이 존재하게 된다는 것을 알았다.

(3) 매연입자의 복사효과가 화염구조에 상당한 영향을 미치는 것으로 나타나고 있으며 열영동효과는 축방향유속이 상대적으로 커서 화염내에서 매연입자의 이동에 크게 영향을 미치지 않음을 알았다.

참고문헌

- (1) Haynes, B.S. and Wagner, H.G., 1981, "Soot Formation," Progress in Energy and Combustion Science, Vol.7, No.4, pp. 229~273.
- (2) Friedlander, S.K., 1977, Smoke, Dust and Haze, John Wiley & Sons.
- (3) Burke, S.P. and Schumann, T.E. W., 1928, "Diffusion Flame," 1st Symp.(Int.) on Combustion, Combustion Institute, pp. 2~11.
- (4) Mitchell, R.E., Sarofim, A.F. and Clomburg, L. A., 1980, "Experiemental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames," Combustion and Flame 37, 227~244.

- (5) Smooke, M. D., Mitchell, R.E., and Keyes, D.E., 1989, "Numerical Solution of Two-Dimensional Axisymmetric Laminar Diffusion Flames," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.67, pp. 85~122.
- (6) Santoro, R.J., Semerjian, H.G. and Dobbins, R. A., 1983, "Soot Particle Measurements in Diffusion Flames," *Combustion and Flame*, 51, 203~218.
- (7) Megaridis, C.M. and Dobbins, R.A., 1988, "Soot Aerosol Dynamics in a Laminar Diffusion Flame," 22th Symp. (Int.) on Combust., Combustion Institute, 353~362.
- (8) Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., 1977, "On mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion," 16th Symp. (Int.) on Combust., Combustion Institute, 719~729.
- (9) Moss, J.B., Stewart, C.D. and Syed, K.J., 1988, "Flowfield Modelling of Soot Formation at Elevated Pressure," 22th Symp. (Int.) on Combust., Combustion Institute, pp. 413~423.
- (10) Kennedy, Ian. M. and Kollmann, Wolfgang, 1990, "A Model for Soot Formation in a Laminar Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, 81, 73~85.
- (11) Jurng, J.S., 1987, "Predictions on the Soot Concentration and Flame Structure of the Axisymmetric Turbulent Diffusion Flames," Ph. D. Thesis KAIST.
- (12) Bird, R., B., Stewart, W., E. and Lightfoot, E., N., 1960, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons.
- (13) White, F., M., 1974, *Viscous Fluid Flow*, McGraw-Hill.
- (14) Ried, R.C., Prausnitz, J.M. and Sherwood, T. K., 1977, *The Properties of Gases and Liquids* 3rd Ed.
- (15) Sonntag, V.W., 1982 *Introduction to Thermodynamics*, 2nd Ed., John Wiley & Sons.
- (16) Kent, J.H. and Honnery, D., R., 1990, "A Soot Formation Rate Map for a Laminar Ethylene Diffusion," *Combustion and Flame* 79, 287~298.
- (17) Tesner, P.A., Snegiriova, T.D. and Knorre, V. g., 1971, "Kinetics of Dispersed Carbon Formation," *Combustion and Flame*, 17, 253~260.
- (18) Kent, J.H. and Honnery, D.R., 1991, "Soot Formation Rates in Diffusion Flames-A Unifying Trend," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.75, pp. 167, 177.
- (19) Stewart, C.D., Syed, K.J., and Moss, J.B. 1991, "Modelling Soot Formation in Non-premixed Kerosine-Air Flames," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.75, pp. 211~226.
- (20) Neoh, K. G., Howard, J.B., and Sarofim, A.F., 1981, "Soot Oxidation in Flames," *Particulate Carbon Formation During Combustion*, Plenum Press.
- (21) Patankar, S.V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*.
- (22) 하영철, 1992, 광산란/소멸법을 이용한 층류 확산화염내의 매연입자의 크기 및 농도측정, 한국과학기술원, 석사학위논문.
- (23) 이정기, 1992 "동층류 축대칭 확산화염내의 화염구조 및 매연입자 분포의 예측", 한국과학기술원, 석사학위논문.