

(論 文)

대향류 메탄/공기 예혼합화염의 소염특성에 관한 수치해석적 연구

정대헌* · 정석호**

(1994년 10월 31일 접수)

A Numerical Study on the Extinction of Methane/Air Counterflow Premixed Flames

D. H. Chung and S. H. Chung

Key Words : Premixed Flame(예혼합화염), Extinction(소염), Stretch(스트레치)

Abstract

Methane/Air premixed flames are studied numerically, using a detailed chemical model, to investigate the flame stretch effects on the extinction in a counterflow. The finite difference method, time integration and modified Newton iteration are used, and adaptive grid technique and grid smoothing have been employed to adjust the grid system according to the spatial steepness of the solution profiles. Results show that the flame stretch, or the conventional nondimensionalized stretch having the tangential flow characteristics of the stretched flame alone cannot adequately describes the extinction phenomena. On the other hand, the local flame stretch having both the normal and tangential flow characteristics of the stretched flame can give a proper explanation to the extinction of the symmetric planar premixed flames stabilized in a counter flow. The extinction condition were found to be a constant local stretch regardless of the equivalence ratio.

1. 서 론

화염의 소염특성은 화염의 안정성, 난류화염의 구조 및 가연한계 등과 연관된 중요 변수이기 때문에, 화염이 소염되는 주요 인자들을 규명하고 그 상관관계를 도출하는 것은 난류화염의 모델링 분야에서 매우 중요하다.^(1,2)

소염특성을 결정하는 주요 인자에는 열손실과 화염스트레치가 있다. 열손실은 전도 열손실과 고온 지역에서의 복사 열손실로 구분되는데, 열손실에

의해 화염온도를 강하시키고 이에 따라 화학반응률이 급격히 감소하여 소염이 발생한다. 화염스트레치는 특성 유동시간을 감소시킴으로써 화염에서의 화학반응이 완료되지 못하게 하여 소염을 발생시킨다. 실제의 연소 시스템에서 나타나는 화염은 대부분 난류화염이며, 이 경우에 화염은 화염곡률과 불균일한 유동장에 의해 화염스트레치를 갖게 되는데⁽³⁾ 이때 화염스트레치와 소염현상간의 관계를 규명하는 것은 중요한 과제의 하나이다.

화염스트레치가 소염에 미치는 영향은 이론적, 실험적 방법에 의해 널리 연구되어 왔다. 이론적 연구는, Liñán⁽⁴⁾에 의해 활성화에너지 접합 점근 전개 방법을 이용한 대향류 확산화염의 구조 및 소

*서울대학교 대학원

**정회원, 서울대학교 기계공학과

염해석이 이루어진 이후, 다양한 형태의 화염에 적용되어 왔다.⁽⁵⁾ 확산화염의 경우, 화염스트레치, 연료 및 산화제 농도 등의 조합으로 표시되는 축소된(reduced) Damköhler 수에 대한 소염점이 화염에서 연료 및 산화제 측으로의 열전달 특성을 표시하는 열손실변수(heat loss parameter)만으로 표시된다.

그러나, 예혼합화염의 경우에는 확산화염과는 달리 화염전파속도가 특성치로 존재하기 때문에, 일반적으로 연료, 당량비, 화염스트레치 등에 따른 개별적 특정조건에서의 소염특성이 주로 규명되어 왔으며, 이러한 변수들을 조합하여 하나의 변수로써 소염점을 표시하기 위한 연구는 거의 이루어지지 않았다.

예혼합화염의 경우, 연료와 당량비에 따른 소염스트레치의 변화폭은 매우 큰데, 예를 들어 메탄/공기 예혼합화염의 경우 당량비 $\phi=0.57\sim 1.52$ 범위에서 소염 스트레치는 $92\sim 1773s^{-1}$, 화염전파속도는 $13.0\sim 61.9\text{ cm/s}$ 이며, 프로판/공기 예혼합기의 경우에는 $\phi=0.60\sim 1.92$ 범위에서 소염 스트레치는 $136\sim 1872s^{-1}$, 화염전파속도는 $14.8\sim 62.9\text{ cm/s}$ 의 범위를 갖는다.⁽⁶⁾

본 연구에서는 대향류에서 형성된 스트레치를 받는 층류 예혼합화염에 대해 상세 화학반응(detailed chemistry) 모델을 고려한⁽⁷⁻⁹⁾ 수치해석을 통해 소염특성을 고찰하고 기존의 실험결과와 비교하며, 예혼합화염의 소염특성을 규명한다.

2. 지배방정식 및 경계조건

축대칭 대향류(counterflow) 유동장은 상사해가 존재하며 유동장내에 형성되는 화염은 평면적인 형태를 가진다. 이에 따라 대향류 화염의 지배방정식은 다음과 같은 상미분방정식으로 단순화시킬 수 있다.

$$\frac{dU}{dx} + 2a\rho f' = 0 \quad (1)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\mu \frac{df'}{dx} \right) - U \frac{df'}{dx} + a[\rho_\infty - \rho(f')^2] = 0 \quad (2)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_i u_{ix}) + U \frac{dY_i}{dx} - \omega_i W_i = 0, \quad i=1, 2, \dots, N \quad (3)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - C_p U \frac{dT}{dx} - \sum_{i=1}^N \rho Y_i u_{ix} C_{pi} \frac{dT}{dy}$$

$$- \sum_{i=1}^N \omega_i W_i h_i = 0 \quad (4)$$

여기서, 에너지방정식의 복사열전달, Dufour 효과, 및 압력구배 확산은 무시하였고, $U \equiv \rho u = U(x)$ 를 도입하였으며, x 는 축방향 좌표, U 와 u 는 각각 축방향의 질량유속과 속도, ρ 은 밀도, μ 은 점성계수, T 는 온도, λ 는 열전도계수, Y_i 와 W_i 는 i -화학종의 질량분율 및 분자량, C_{pi} 는 i -화학종의 정압비열, N 은 화학종의 수, h_i 는 i -화학종의 총엔탈피이다. u_{ix} 는 i -화학종의 확산속도로서 Curtiss-Hirschfelder 근사로부터 구해지며, ω_i 는 단위체적당 i -화학종의 생성률이며 a 는 $y=\infty$ 에서의 스트레인율이다. 또한 f 는 유선함수로서

$$f' \equiv - \frac{\rho_\infty}{2a\rho} \frac{dU}{dx} \quad (5)$$

로 정의되며, 이에 따라 반경방향속도 v 는

$$v = - \frac{r}{2\rho} \frac{dU}{dx} \quad (6)$$

이고, r 은 반경방향좌표이다. 상태방정식은

$$\rho = pW/RT \quad (7)$$

이며, W 는 평균분자량, R 은 일반기체상수이다.

본 연구에서는 대칭화염만을 고려하므로 전체 유동장의 반을 풀게 되며, 경계조건으로서 대칭면인 $x=0$ 에 대한 대칭조건과 $x=L$ 에서의 경계값을 준다.

$$x=0 ;$$

$$U=0$$

$$\frac{dY_k}{dx} = 0, \quad \frac{dT}{dx} = 0, \quad \frac{df'}{dx} = 0 \quad (8)$$

$$x=L ;$$

$$U \equiv \rho_L u_L$$

$$Y_k = Y_{k,L}$$

$$T = T_L$$

$$f' = 0 \text{ or } 1 \quad (9)$$

$x=L$ 에서의 경계조건에서 외부 유동장이 포텐셜(potential) 유동인 경우에는 $f'=1$ 이 되며, 플러그(plug) 유동일 경우에는 $f'=0$ 이다. 포텐셜유동 모델은 이론 해석과의 연계를 위해, 플러그유동 모델은 실험과의 비교를 위해 널리 채택되는데 $f'=0$ 이면 반경방향 속도성분이 0임을 의미한다. 포텐셜유

등의 경우에 특성값 a 는 미연기체지역의 포텐셜유동에서의 반경방향 속도성분의 반경방향 구배를 나타낸다.

열역학적 물성치와 상태방정식, 전달물성치의 계산에는 CHEMKIN-II와 TRANSPORT package를 이용하였다.⁽¹⁰⁾ 본 연구에서 사용한 화학반응 메카니즘은 세 종류로서, Smooke,^(11,12) Peters,⁽⁹⁾ Kee 등⁽⁶⁾이 사용한 화학반응 메카니즘이다. 이 메카니즘의 k 단계 반응의 비반응률 상수 k_k 는 다음과 같이 표시되는데

$$k_k = B_k T^{a_k} \exp(-E_k/RT) \quad (10)$$

여기서, E_k 는 k -단계 반응의 활성화에너지이다.

Smooke 메카니즘은 16개 화학종에 대한 52개의 반응단계로 구성되어 있으며, Peters 메카니즘은 C3까지의 33개 화학종에 대한 74단계 메카니즘이며, Kee 등의 메카니즘은 33개 화학종의 134단계 메카니즘이다.

3. 수치해석 방법

수치해석에는 Smooke^(11,12)의 프로그램을 수정하여 사용하였다. 지배방정식을 유한차분법으로 차분화하여 대수방정식을 구성하였으며, 격자계는 먼저 20~30개의 거친 격자에서 시작하여 적응격자법을 이용하여 최적화시켰다. 적응격자법에서는 거친 격자계에서 해를 구한 후, 계산된 해의 값이나 이의 기울기가 급격히 변하는 지역에 새로운 격자점들을 추가하는데, 새로운 격자계에서 초기 추정값은 거친 격자에서의 해를 내삽(interpolation)함으로써 얻어지며, 충분히 정확하게 해가 계산되어 새로운 격자가 필요 없을 때까지 이러한 과정을 반복한다. 그러나, 이 방법은 계산과정 중에 화염이 이동하는 경우, 이전의 격자점들이 계속 남아있는 상태에서 격자점이 추가되므로 필요없는 지역에서도 높은 격자밀도를 갖게되어 계산시간이 길어진다. 이 단점을 보완하기 위해서 Giovangigli 등⁽¹¹⁾이 제안한 격자점 분포함수 개념을 도입하여 매번 새로운 최적 격자계를 구성함으로써 효율을 높였다.

그러나, 이러한 방법을 적용하면 격자간격의 급격한 변화가 수반되고 이는 계산의 정확도와 수렴성에 영향을 미치게 된다. 이를 극복하기 위해서는 분포형태를 부드럽게 만들어 주는 방법으로 격자완만화(grid smoothing)의 개념을 이산계(discrete

system)인 격자분포함수에 대해 적용하여⁽¹⁴⁾

$$w_j = \sum_l w_l \phi_{l-j}, \quad \sum_j \phi_j = 1 \quad (11)$$

로 표시하였는데, 여기서, w_l 은 l 번째 격자밀도, w_j 는 변형된 격자밀도이고 ϕ_l 은 가중치이다. 계산에서는 $l = -5, \dots, 5$ 대해서 $\phi_l = 1/11$, $l \neq -5, \dots, 5$ 에 대해서 $\phi_l = 0$ 으로 하였다. 이렇게 구해진 분포함수로부터 최종적으로 격자계를 구하는 식은

$$\int_{y_k^*}^{y_{k+1}^*} w(y) dy = 1 \quad (12)$$

이다. 이것은 다시

$$W(y) = \int_{y_0}^y w(\eta) d\eta \quad (13)$$

$$y_j^* = W^{-1}(j) \quad (14)$$

로 바꾸어 표현할 수 있으며 y_j^* 는 j 번째 점의 좌표, y_0 는 y 의 왼쪽 경계이며 상첨자 *는 새로 만들어지는 격자점을 나타낸다. 계산값의 수렴이 완료되기 위해서는 격자도 수렴하여야 한다. 격자의 수렴은 분포함수의 일치정도로 판단하며 그 기준은 허용오차 τ 에 대해 다음과 같이 설정하였다.

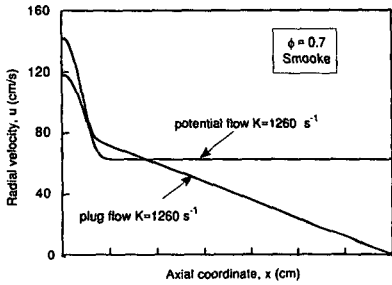
$$\int_{-\infty}^{\infty} (w^* - w)^2 dy / \int_{-\infty}^{\infty} w^2 dy \leq \tau \quad (15)$$

새로운 격자점 구성방법은 여러가지 효율적이지만 변화폭 제한을 완벽하게 이루지 못하는 경우가 생길 수 있으므로 위의 기준을 만족시킨 후에 계속 격자점을 추가하는 원래의 방식을 보조적으로 사용하였다.

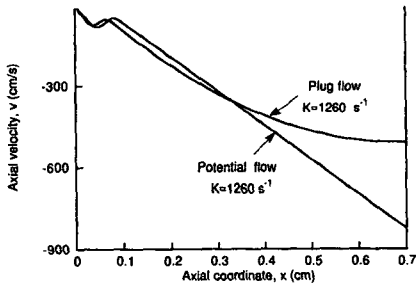
4. 결과 및 검토

축대칭 대향류 버너에 의하여 형성되는 화염을 모델로 하여 메탄/공기 예혼합화염의 당량비와 스트레치를 변화시키며 화염특성을 고찰하였다. 노즐출구 압력은 1 atm, 경계온도는 298.15 K이었으며 계산에 이용된 화학반응 메카니즘은 Smooke 메카니즘(16종, 52단계), Peters 메카니즘(33종, 74단계), Kee 메카니즘(33종, 134단계)의 3가지이다. 화염스트레치 $K = 2a$ 이며 실험결과⁽⁶⁾와의 비교를 위하여 $K = du/dx$ 로 정의하였다. 유동장을 대표하는 K_0 는 포텐셜유동의 경우에는 미연지역의 전류에서, 플러그유동의 경우에는 미연지역의 국소 최대값으로 정의하였다.

Fig. 1에 포텐셜 및 플러그유동의 축방향 및 반경방향속도를 동일한 스트레치, 동일한 당량비에서 비교하였다. 플러그유동의 경우 포텐셜유동에 비하여 화염면이 정체면 쪽으로 접근되어 있으며 노즐 출구에서 반경방향속도는 0이 된다. Fig. 2에 소염시 플러그유동의 축방향 속도분포와 스트레치를 나타내었는데 포텐셜유동의 소염조건인 $K_0=3470s^{-1}$ 보다는 약간 작은 값에서 소염이 발생하며 미연지역의 국소 최대 스트레치는 미연지역의 속도곡선의 변곡점에 해당된다.



(a) Radial velocity



(b) Axial velocity

Fig. 1 Comparison of the velocity fields for methane/air flame, one potential flow and the other potential flow

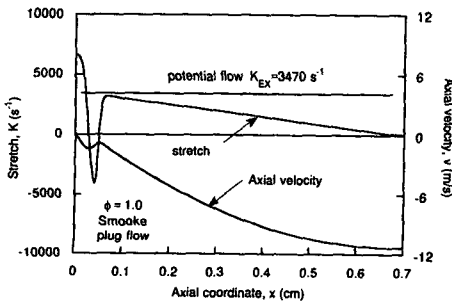
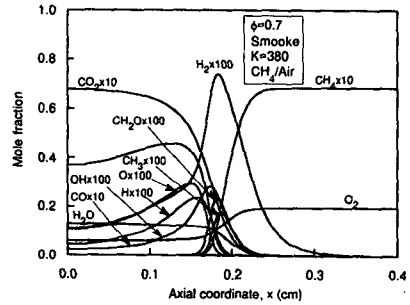
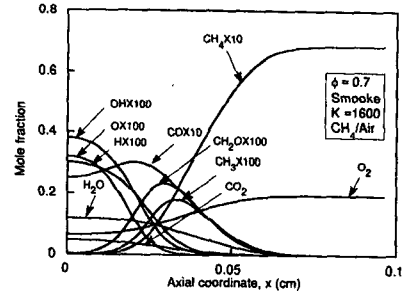


Fig. 2 Computed axial velocity and stretch profiles for methane/air flame in plug flow

Fig. 3에 $\phi=0.7$ 인 경우에 화학종의 분포를 낮은 스트레치의 $K_0=380s^{-1}$ 의 경우와 소염점 근처인 $K_0=1600s^{-1}$ 의 특성을 나타내었다. 낮은 스트레치의 경우에는 H, O 라디칼의 경우 국부적인 최대값을 보이는데 비하여 소염점 근처에서는 이러한 라디칼의 최대값이 정체점에서 발생하고 있다. CO는 메탄이 완전히 소모되는 지점에서 최대값을 보이는데 CO와 H₂는 라디칼에 의해 연료가 분해됨으로써 생성되며, 주 반응지역 이후에서 다시 라디칼과 반응하여 CO₂와 H₂O로 변환된다. 소염점이 가까



(a) Far from extinction



(b) Near extinction

Fig. 3 Mole fraction profiles of selected species showing the structure of lean methane/air flame

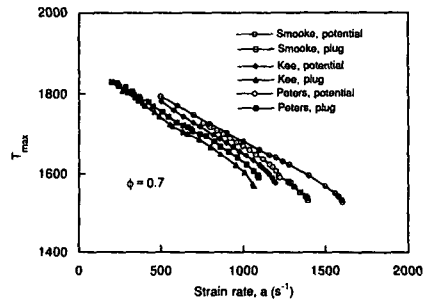


Fig. 4 Computed maximum flame temperature as a function of strain rate for methane/air flame

와져 화염이 정체면으로 접근하면, CO가 모두 산화될 만한 유동시간이 짧아져 CO는 증가하고 CO₂는 감소하게 된다. 이에 따라 소염은 불완전한 화학반응의 결과로 발생한다.

Fig. 4는 $\phi=0.7$ 인 경우 스트레치에 따른 최대온도의 변화를 나타내는데 이는 화염지역 이후에서 CO 및 H₂의 반응으로 인해 정체점에서 얻어진다. 스트레치의 증가에 따라 최대온도는 선형적으로 감소하다가 소염점 근처에서 급격히 감소하며 소염된다.

화염전파속도를 화염면 앞에서 열팽창으로 인해 나타나는 속도분포의 극소값으로 정의한 경우⁽⁹⁾ 스트레치에 따른 화염전파속도를 Fig. 5에 나타내었다. 화염전파속도는 스트레치에 따라 선형에 가깝게 증가하고 있다. 모든 메카니즘이 플러그유동의 경우가 포텐셜유동에 비하여 화염전파속도와 최대온도를 크게 예측하고 있으며, Smooke 메카니즘을 이용한 경우가 Kee나 Peters 메카니즘을 이용한 경우보다, 훨씬 큰 스트레치에서 소염됨을 보여주고 있다.

Fig. 6에 당량비에 따른 소염점의 거동을 나타내었다. 계산결과는 Law 등의 실험과 비교하였다. 당량비에 따른 소염스트레치는 $\phi=1$ 근처에서 최고값을 보이고 있으며 당량비가 1로 부터 벗어남에 따라 급격히 감소하는 특성을 보이고 있다. 실험의 결과는 메탄의 경우 $\phi=0.95$ 근처에서 최대값을 보이나 수치해석의 경우에는 당량비 1.05 부근에서 최대값을 보이고 있다. 소염스트레치의 절대값은 Smooke 메카니즘의 경우 약 2배, Peters와 Kee 메카니즘의 경우 약 1.4 배의 결과를 보이고 있으며 이는 기존의 연구결과와 유사하다. 플러그유동과 포텐셜유동에 따른 차이는 전반적인 정확도로 볼 때 무시할 수 있는 정도이다.

화염스트레치는 유동장의 특성유동시간의 역수를 표시하고 있다. 예혼합화염의 층류화염전파속도는 $S_L = a^{1/2} \omega^{1/2}$ 으로 표시되므로 a/S_L^2 는 특성반응시간의 역수를 표시한다. 따라서, 스트레치를 받는 화염의 국소 Damköhler수는 $(a/S_L^2)/(1/K) = aK/S_L^2$ 이 된다. 스트레치에 따른 이러한 국소 스트레치의 변화를 Fig. 7에 나타내었는데 희박-과농 영역에 걸쳐 소염시의 값이 거의 동일한 값으로 표시되고 있다. 여기에서 a 는 일반적으로 $T^{1.75}$ 에 비례하므로 $\phi=1$ 의 단열화염온도로 무차원화한 값 $T_r = T_{max}(\phi)/T_{max}(\phi=1)$ 로 표시하였다.

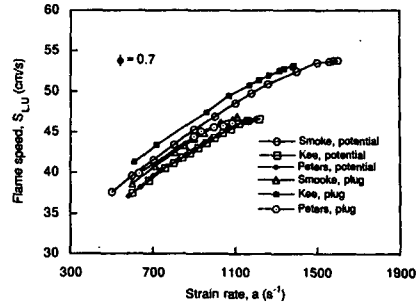


Fig. 5 Computed $S_{L,U}$ as a function of strain rate for methane/air flames

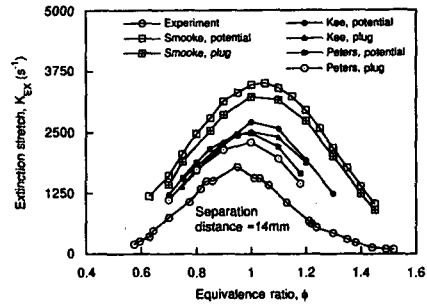


Fig. 6 Comparison of computed extinction limit with experiment for the symmetric counterflow methane/air flames

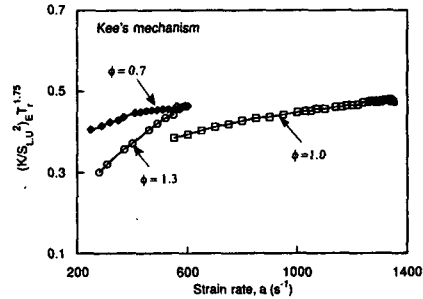


Fig. 7 Variation of local flame stretch as a function of strain rate

이러한 관측을 기본으로 각 메카니즘 및 유동특성에 대하여 소염점에서의 특성을 Fig. 8에 나타내었다. 이 결과는 스트레치에 따른 화염전파속도의 차이 및 소염스트레치의 차이에 무관하게 전 당량비 영역에서 거의 일정한 값을 보이고 있으며 $(K/S_L^2) T_r^{1.75} \approx 0.45$ 정도의 값을 가지는데 국소 화염 스트레치 K_L 은 포텐셜유동의 경우 0.45~0.5, 플러그유동의 경우 0.4~0.45의 값을 나타낸다. Fig. 8에는 Law 등⁽⁶⁾의 실험결과로부터 소염시의 S_L 과

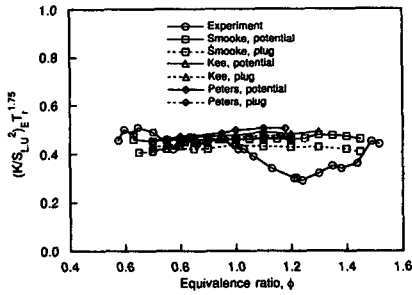


Fig. 8 Extinction limit by local flame stretch ($K/S_{L,0}^2$) $E T_f^{1.75}$ for the symmetric counterflow methane/air flames

K 를 이용하고 화염온도의 경우에는 실험값이 제시되어 있지 않기 때문에 T_f 은 단열화염온도의 비로서 $T_{ad}(\phi)/T_{ad}(\phi=1)$ 를 이용하여 국소 화염스트레치를 도식하였다. 실험의 결과와 수치계산의 결과는 당량비가 1.0 이하의 범위에서는 실험값과 일치하고 있으며 당량비가 1.0 이상의 범위에서는 약간의 차이를 보였다. Fig. 4에 나타난 바와 같이 계산결과에서 소염시의 최대온도와 단열화염온도의 차이는 약 10% 정도로 나타났으나, 어느 온도를 선택하더라도 T_f 에 있어서는 큰 차이가 없었다.

이상의 결과는 소염시의 국소 스트레치가 당량비, 화학반응 메커니즘, 유동가정 등과 거의 무관하게 일정한 값에서 발생함을 보여주고 있다. 이는 난류화염의 층류소화염 모델에서 필요한 소염자료 중에서 화염전파속도와 유동 스트레치의 관계식이 국소 스트레치로서 당량비에 무관하게 모델링될 수 있음을 보여준다.

5. 결 론

대향류 예혼합화염의 소염특성을 수치해석을 통하여 연구하였다. 화염의 소염조건으로 스트레치만에 의한 소염판정 기준은 당량비에 따라 상당히 다르나 새로 정의된 국소 스트레치를 적용하면 당량비에 관계없이 일정한 값에서 소염이 발생함을 확인하였으며 이 결과는 난류 예혼합화염의 모델링에 응용될 수 있다.

후 기

본 연구는 터보동력기계연구센터의 지원으로 이루어졌으며, 이에 감사를 드립니다.

참고문헌

- (1) Peters, N., 1986, "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1231~1250.
- (2) Candel, S., 1994, "Current Progress and Future Trends in Turbulent Combustion," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 98, pp. 245~264.
- (3) Chung, S. H and Law, 1984, "An Invariant Derivation of Flame Stretch," *Combust. Flame*, Vol. 55, pp. 123~125.
- (4) Lin'an, A., 1974, "The Asymptotic Structure of Counterflow Diffusion Flames of Large Activation Energies," *Acta Astronaut.*, Vol. 1, pp. 1007~1039.
- (5) Law, C.K., 1988, "Dynamics of Stretched Flames," *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1381~1402.
- (6) Law, C. K., Zhu, D. L., Yu, G., 1986, "Propagation and Extinction of Stretched Premixed Flames," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1419~1426.
- (7) Chung, S. H., Kim, J. S. and Law, C. K., 1986, "Extinction of Interaction Premixed Flames ; Theory and Experimental Comparison," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1945~1951.
- (8) Kee, R. J., Miller, J. A., Evans, G. H. and Dixon-Lewis, G., 1988, "A Computational Model of the Structure and Extinction of Strained, Opposed Flow, Premixed Methane-Air Flames," *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1473~1494.
- (9) Peters, N., Rogg, B.(Eds.), 1993, *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, Lecture Notes in Physics*, Series m15, Springer-Verlag.
- (10) Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Campbell, D. E., 1953, "The Theory of Flames and

- Detonations," *J. Phys. Chem.*, Vol. 57, p. 403.
- (11) Giovangigli, V. and Smooke, M. D., 1987, "Extinction of Strained Premixed Laminar Flames with Complex Chemistry," *Combust. Sci. Tech.*, 53 : 23-49.
- (12) Giovangigli, V. and Smooke, M. D., 1987, "Calculation of Extinction Limits for Premixed Laminar Flames in Stagnation Point Flow," *J. Computat. Phys.*, Vol. 68, pp. 327~345.
- (13) Chung, S. H., "Interaction of Flames," *Handbook of Heat and Mass Transfer*, Vol. 4 , pp. 863-891, N. P. Chermisinoff (Ed.), Gulfpubl. Co. 1990.
- (14) S. D. Lee and S. H. Chung, 1994, "On the Structure and Extinction of Interacting Lean Methane/Air Premixed Flames," *Combust. Flame*, Vol 98, pp. 80~92.
- (15) Smooke, M. D., 1982, "Solution of burner stabilized Premixed Laminar Flames by Boundary Value Methods," *J. Computat. Phys.*, Vol. 48, pp. 72~105.