

화염편 모델을 이용한 층류확산화염장의 매연 생성 및 산화과정 해석

김 군 홍¹⁾ · 김 후 중¹⁾ · 김 용 모^{*2)}

한양대학교 기계공학부 대학원¹⁾ · 한양대학교 기계공학부²⁾

Flamelet Modelling of Soot Formation and Oxidation in a Laminar CH₄-Air Diffusion Flame

Gunhong Kim¹⁾ · Hoojoong Kim¹⁾ · Yongmo Kim^{*2)}

Department of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

(Received 22 July 2004 / Accepted 12 November 2004)

Abstract : By utilizing a semi-empirical soot model, the applicability of the laminar flamelet concept for simulating the formation and oxidation of soot in the laminar diffusion flame has been studied. The source terms for two transport equations of the soot formation and oxidation are calculated in the mixture fraction/scalar dissipation rate space for laminar flamelets and stored in a library. In this study, emphasis is given to the interaction associated with radiation and soot formation. The radiative heat loss is obtained by solving the radiative transfer equation using the unstructured grid finite volume method with the WSGGM. The calculated temperatures and soot volume fractions agree relatively well with the experimental data and the previous numerical results of Kaplan et al. using the detailed chemistry.

Key words : Nonadiabatic flamelet model(비단열 화염편 모델), Soot formation and oxidation(매연 생성 및 산화 반응), WSGGM(회색가스 가중합 모델)

1. 서 론

매연은 탄소화합물의 불완전 연소에 의해 발생하는 공해물질로 잘 알려져 있다. 매연입자가 건강에 미치는 유해성은 현재 여러 나라에서 사회적 문제로 대두되고 있으며 여러 가지 매연 배출원에 대한 규제들이 제시되고 있다. 따라서 연소기 내의 매연 발생을 억제하기 위한 많은 노력들이 진행되고 있으며, 매연 배출 저감에 대한 연소기술의 개발에 있어서 매연 입자의 생성, 성장 그리고 산화 반응에 대한 연구들이 매우 중요하다. 지난 수십년 동안 수치적으로 매연을 예측하기 위한 많은 연구들이 진행되어 왔으나 실제 연소 시스템 내에서의 매연 생성,

성장 및 산화반응에 대한 모델링은 여전히 매우 어려운 문제로 남아있다. 이러한 매연의 생성과정들에 대한 상세 화학 반응 모델들이 제시되고 있지만, 여전히 매우 복잡하고 현실적으로 다차원 연소 시스템에 적용하기에는 많은 계산시간이 소요된다.¹⁾ 그리고 단순 실험식에 의한 매연 모델들은 연소 상황이 변함에 따라 예측 능력의 정확도에 많은 문제가 있다. 이러한 상세모델 및 단순 실험모델들의 단점들을 극복하기 위하여 Moss와 Lindsted 연구그룹들에 의해 예측능력과 계산시간 상에 많은 이점을 갖는 준 실험적 모델이 제시되었다.^{2,3)} 이러한 매연 모델은 매연생성 과정에 대한 준-실험적 가정에 기초하여, 매연 생성율과 산화율을 단순 화학반응으로 모델링하며, 매연 수밀도와 질량분율을 구하기

*To whom correspondence should be addressed.
ymkim@hanyang.ac.kr

위하여 각각에 대한 수송방정식을 추가로 해석하게 된다.

본 연구에서는 층류 화염편 모델을 이용하여 층류 연소 유동장을 해석하였으며, 매연의 생성과 산화과정에 따른 매연분포를 예측하기 위하여 준 실험적 매연 모델방식을 적용하였다.^{4,6)} 준 실험적 모델에 의해 예측된 매연과 연소 유동장 간의 상호 영향은 에너지 방정식의 복사열전달에 의해 고려된다. 따라서 매연 예측능력을 향상시키기 위해서 회색 가스 가중합 복사모델과 화염편내 상세 화학 반응에 대한 복사영향을 고려할 수 있는 비단열 층류 화염편 모델에 대한 연구가 선행되었다.^{7,8)}

연소장 내의 매연 분포는 매연 생성반응과 산화반응이 경쟁적으로 일어나는 결과이다. 일반적으로 준 실험적 모델은 매연의 최대 체적분율 예측에 우수한 것으로 알려져 있으며, 이러한 사실은 매연핵 생성율과 표면성장율에 대한 단순반응 가정이 상당히 효과적임을 나타낸다. 그러나 현재까지 연구결과에 따르면 매연 산화반응 모델에 대하여 문제점이 있다고 알려져 있다. 이에 대해 산화과정에 대한 이해를 높이는 노력은 화염내의 매연 분포 예측에 결정적 역할을 한다.

본 논문에서는 Mitchell/Santoro 버너의 정상상태 층류 매탄 공기 확산화염에 대해 층류 화염편 모델 접근법에 일반적인 준 실험적 매연 모델들을 적용하여 화염장내 매연 예측특성에 대해 연구하였다.⁹⁾ 일반적으로 알려졌듯이, 층류 제트화염에 대한 화염편 모델 적용의 어려움은 특히 화염 곡률이 있는 지역에서의 Lewis 수의 영향으로 인해 편중 확산에 의한 영향을 제대로 고려하지 못하는 데 있다. 그러나 온도장과 농도장에 대한 편중확산 영향은 실제 복사 열전달에 의한 열손실, 매연 모델링에 소요되는 계산시간 그리고 실제 예측능력들을 고려하였을 때 상대적으로 중요도가 낮아진다. 따라서 본 연구에서 매연 예측에 대한 화학종의 편중확산이 고려되지 않았다.

2. 수치 모델

2.1 비단열 층류 화염편 모델

층류 화염편 모델은 연소 화학반응이 난류 유동

장내에의 화염편의 얇은 층에서 빠르게 발생한다는 가정에 기초하고 있다. 화염편 방정식은 Peters에 의한 두 개의 길이 스케일에 대한 개념적 해석을 통하여 유도되거나 화학종 및 에너지 보존방정식으로 부터 층류 화염편내 반응면에 수직방향에 대한 좌표 변환을 통해 혼합분율을 매개변수로 층류화염편의 혼합과정 및 화학반응을 동시에 지배하는 다음과 같은 1차원 상미분 연립방정식을 유도할 수 있다.¹⁰⁾

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{x}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \frac{\dot{\omega}_i}{\rho} \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{x}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \frac{x}{2} \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \frac{1}{\rho c_p} \left(\sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k + q_R \right) \quad (2)$$

여기에서 ρ 는 밀도, T 온도, Y_i i -번째 화학종의 질량분율, x 스칼라 소산율, c_p 정압비열, t 시간, Z 질량분율, $\dot{\omega}$ 반응율, h 엔탈피, q_R 단위체적당 복사열손실을 각각 나타낸다. 위의 방정식들의 유도과정에서 압력은 일정하고 Lewis 수는 모든 화학종에 대해 1로 동일하다고 가정하였다. Peters 화염편 방정식에서 알 수 있듯이 층류 화염편에서 반응물은 분자 확산에 의해서만 화염면으로 수송될 수 있으며, 이를 지배하는 변수인 스칼라 소산율, x 는 확산에 의한 특성시간의 역수로 해석될 수 있다. 따라서 층류 화염편 모델에 있어서 난류에 의한 미세화염구조의 변화는 스칼라 소산율에 의해 지배되게 된다. 스칼라 소산율에 대한 혼합분율의 의존함수에 대하여 Peters의 이론해석에 따른 화학당론적 스칼라 소산율은 식 (3)으로 표현된다.

$$x = 2D_Z(\nabla Z)^2 \cong x_{st} f(Z) = x_{st} \exp[2\{\text{erfc}^{-1}(2Z_{st})\}^2 - 2\{\text{erfc}^{-1}(2Z)\}^2] \quad (3)$$

식 (1)-(3)을 이용하여 화학당론적 혼합분율에서의 스칼라 소산율은 화학평형에 가까운 낮은 값에서 소염이 발생하는 높은 값까지의 범위를 갖는 층류 화염편 라이브러리를 구성하였다.

층류 화염편내의 온도 및 화학종 조성에 대한 열전달 영향을 고려하기 위하여 화염편내의 엔탈피를 조절하는 엔탈피 Defect 접근법을 적용하였다.⁸⁾ 엔탈피 defect 변수(ζ)는 식 (4)와 같이 비단열 화염편과 단열 화염편의 엔탈피 차로 정의된다.

$$\zeta = h - h_{ad} \quad (4)$$

메탄-공기에 대한 층류 화염편의 온도와 화학종 분포에 대한 영향을 Fig. 1과 Fig. 2에 각각 예시하였다. 열손실을 나타내는 엔탈피 Defect 변수(ζ)가 감소함에 따라 화염편들의 온도는 엔탈피와 온도의 비례성에 따라 감소하는 경향을 보여준다. Fig. 2에서는, 상세 화학반응에 대한 엔탈피 Defect에 대한 영향으로 인해 CO의 몰분율 분포를 보여주고 있다. 열손실이 증가함에 따라 CO의 생성이 감소하게 되며 CO₂ 분포에 영향을 미칠 수 있다.

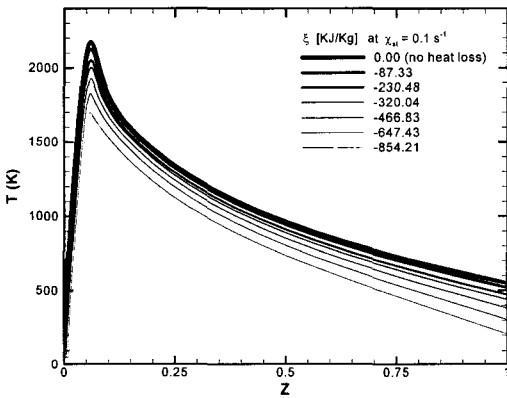


Fig. 1 Temperature of flamelets with a variable enthalpy defect

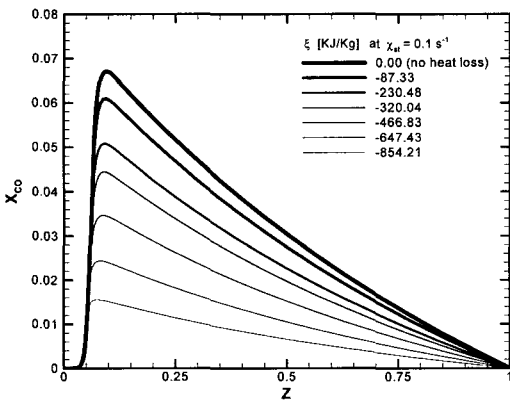


Fig. 2 CO mole fraction of flamelets with a variable enthalpy defect

열전달 현상이 고려되는 화염장에 대한 예측능력을 향상시키기 위해서는, 비단열 층류 화염편 모델의 필요성을 Fig. 1과 Fig. 2로부터 확인할 수 있다.

이를 위해 보존 스칼라인 혼합분율(Z)과 유동장내의 엔탈피 defect (ζ)을 얻기 위한 엔탈피 방정식이 필요로 하게 된다. 층류 화염장인 경우, 아래 식들과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Z) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) \\ = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_Z \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - \nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} \end{aligned} \quad (6)$$

위의 식 (6)에서 복사 열손실 항은 추가적인 적절한 열전달 방정식으로부터 구해질 수 있다. 본 연구에서는 복사 열손실을 고려하기 위하여 FVM 복사 모델을 적용하였으며, 연소장내 회색 가스들에 대해 Smith의 회색 가스 가중합 복사 모델(WSGGM)을 적용하였다.^{11,7)} 매연에 대한 흡수 계수는 아래 식으로부터 구하였다.¹²⁾

$$k_s = 2.66 \cdot \text{const} \cdot f_v \cdot T, \text{ m}^{-1} \quad (7)$$

여기에서 f_v 는 매연의 체적분율, T 는 연소장의 온도, 그리고 $\text{const}=700$ 을 사용하였다.

2.2 준실험적 매연 모델

수십 년 동안 실제 연소 시스템 내의 복잡한 매연 생성 및 산화 화학반응을 예측하기 위하여 단순화된 접근법들이 많은 연구자들에 의해 제시되었다. 본 연구에서는 층류 화염편 모델에 적용 가능한 준실험적 매연모델들을 이용하였다. 준 실험적 모델에서는 매연입자 생성, 입자응집, 표면성장, 그리고 기체 화학종들에 의한 산화과정들에 대한 단순한 메카니즘을 가정하며, 각 반응들에 대한 반응율을 실험 데이터와 비교하여 적절하게 모델링하게 된다.¹⁾ 준 실험적 매연 모델에서는 매연 입자 수밀도와 체적분율에 대한 추가적인 수송방정식을 도입함으로써 매연 생성 및 산화과정을 모델링 하게 된다. 층류 화염에 대한 일반적인 매연 보존 방정식 형태는 식 (8)로 표현된다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi_s) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi_s) = \nabla \cdot (\rho V_t \phi_s) + S_s \quad (8)$$

여기에서 ϕ_s 는 각 매연 모델에 따른 매연 수밀도와 체적분율에 해당하는 변수이며, S_s 는 각 매연 모

텔 변수에 따른 매연의 생성과 소멸항이다. 층류 연소장내의 매연입자에 대한 식 (8)은 대류와 연소 유동장내의 온도차에 의한 입자거동을 나타내는 thermophoresis에 대한 속도항을 포함하고 있으며, thermophoresis에 의한 매연 입자의 속도는 아래와 같이 정의된다.

$$V_t = -0.55 \nu \nabla (\ln T) \quad (9)$$

매탄 확산화염장내의 매연의 생성에 대하여, 본 연구에서는 Syed *et al.*과 Leung *et al.*에 의해 제시된 준실험적 매연 모델을 적용하였다.^{2,3)}

Syed *et al.*의 매연 모델에서 매연 보존 방정식 (8)의 변수들에 대하여 수 밀도에 대한 질량가중 평균 ($\psi_n = N / (\rho N_a)$), 그리고 질량분율 ($\psi_n = \rho f_n / \rho$)을 도입하였다. 여기에서 N 은 매연 입자 수, N_a 는 아보가드로 수 (6.02252×10^{26} [1/kmol]), f_n 는 매연의 체적분율, ρ 는 연소장의 밀도, ρ_n 는 매연 입자 밀도(1800 [kg/m³])이다. 각 변수들에 대한 식 (8)의 생성 및 소멸항은 아래와 같다.

$$S_{\psi_n} = \alpha - \beta \rho^2 (\psi_n)^2 \quad (10)$$

$$S_{\psi_n} = N_a^2 \gamma \rho (\psi_n)^{1/3} (\psi_v)^{2/3} + \delta - N_a^{1/3} w_{ox} \rho (\psi_n)^{1/3} (\psi_v)^{2/3} \quad (11)$$

여기에서 α 와 β 는 각각 매연 입자핵 생성율과 매연 입자 부착율이며 γ 는 매연 표면 성장률, 그리고 δ 는 매연 체적분율에 대한 입자핵 생성의 영향을 나타낸다. w_{ox} 는 화학종들에 의한 매연의 산화율이다. 매연 반응율인 α , β , γ , 그리고 δ 들에 대하여 Moss *et al.*에 의해 Arrhenius 형태의 단순 반응식들이 다음과 같이 제안되었다.¹³⁾

$$\begin{aligned} \alpha &= C_\alpha \rho^2 T^{-1/2} X_f \exp(-T_a/T) \\ \beta &= C_\beta T^{1/2} \\ \gamma &= C_\gamma \rho T^{1/2} X_f \exp(-T_\gamma/T) \\ \delta &= C_\delta \alpha \end{aligned} \quad (12)$$

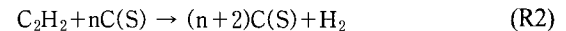
여기에서 T 는 기체 온도, 그리고 X_f 는 매연 전구 물질(precursor)의 몰분율이며, 본 연구에서 C₂H₂만을 가정하였다. 모델 상수인 C_α, C_β, C_γ, C_δ 그리고 매연 핵 생성과 표면 성장에 대한 활성화 온도인 T_a와

T_γ들은 실험에 의해서 결정되어 진다. 층류 매탄-공기 확산화염에 대해서 Syed *et al.*에 의해 Table 1의 모델 상수들이 제안되었다.

Table 1 Soot model parameters²⁾

T _a	T _β	C _α	C _β	C _γ	C _δ
4.61×10 ⁴	1.26×10 ⁴	6.54×10 ⁴	1.37×10 ⁷	0.1	144
K	K	m ³ kg ² K ^{1/2} s	m ³ /K ^{1/2} s	m ³ /kg ^{2/3} K ^{1/2} s	kg

아세틸렌(C₂H₂)이 매연 핵화와 표면 성장에 관여하는 화학종으로 가정하여 단순화된 매연의 핵화와 성장 반응기구가 Leung *et al.*에 의해 제안되었다.³⁾ 매연 생성 과정에 탄소원자가 보존됨을 이용하여, 핵화와 표면 성장 과정들을 다음 반응식으로 가정하였다.



위 반응식들의 핵화와 성장에 대한 반응율은 아래와 같이 표현되어진다.

$$r_1 = k_1(T)[C_2H_2] \quad (\text{kmol m}^{-3} \text{ s}^{-1})$$

$$r_2 = k_2(T)f(A_s)[C_2H_2] \quad (\text{kmol m}^{-3} \text{ s}^{-1})$$

여기에서 $f(A_s)$ 는 단위 체적당 매연 표면적에 대한 표면 성장의 의존성을 나타내며, [C₂H₂]는 아세틸렌의 몰농도를 나타낸다. $f(A_s)$ 는 매연 표면적에 대해 선형적 의존성을 가정하여, $f(A_s) = A_s$ 를 적용한다. 단위 체적당 매연의 표면적(A_s)는 완전 구형가정으로부터 $A_s = \pi(6/\pi)^{2/3}(\rho_s)^{-2/3}(Y_s)^{2/3}\rho N^{1/3}$ 에 의해 계산되어 진다. Y_s는 매연의 질량분율을 나타낸다. 매연의 핵화와 성장에 대한 화학적 계수들은 Leung *et al.*의 제안에 따라 $k_1 = 1.7 \exp(-7548/T)$ (s⁻¹)과 $k_2 = 6 \exp(-6038/T)$ (ms⁻¹)를 사용하였다.¹⁴⁾

매연 보존 방정식 (8)에서 Leung *et al.*이 제안한 매연 모델에 대한 변수들은 수 밀도의 $\psi_n = N$, 그리고 매연 질량분율의 $\psi_n = Y_s$ 들이며, 각 생성 및 소멸항은 다음과 같다. 식 (14)는 매연의 핵화와 매연 입자의 증착으로 인한 매연입자의 수밀도의 증가와

감소를 나타낸다.

$$S_{\phi_s} = 2r_1M_S + 2r_2M_S - (w_{ox}\rho)(N)^{1/3}(Y_S)^{2/3} \quad (13)$$

$$S_{\phi_s} = \frac{2}{C_{min}} N_A r_1 - 2C_a \left(\frac{6M_{C(S)}}{\pi\rho_{C(S)}} \right)^{1/6} \left(\frac{6\chi T}{\rho_{C(S)}} \right)^{1/2} [C(S)]^{1/6} [\rho N]^{11/6} \quad (14)$$

여기에서 $M_{C(S)}$ 는 매연 분자량(12gmol^{-1}), χ 는 볼츠만 상수($1.38 \times 10^{-23}\text{JK}^{-1}$), C_{min} 은 초기 매연 입자 내의 탄소 원자들의 수(700), 그리고 C_a 는 매연의 응집율(agglomeration rate) 상수값으로 참고문헌에 따라 3 또는 9가 사용되며, 본 해석에서는 3를 적용하였다.^{3,14)}

본 연구에서는 연소장 내의 매연 산화반응에 가장 중요한 화학종들로 알려진 OH, O 그리고 O_2 를 고려하였다. 두 매연 모델에 대하여 식 (15)의 동일한 산화율이 적용되었다.

$$w_{ox} = C_{ox} \cdot (W_{NSC} + W_{OH} + W_O) \quad (15)$$

여기에서 $C_{ox} = \pi^{1/3} \rho_s^{2/3} \rho_s^{-2/3}$ 로 모델상수이다. 각 화학종에 대한 산화율들은 아래에 제시되었다.

Nagle and Strickland-Constable¹⁵⁾

$$W_{NSC} = 120 \left[\frac{k_A P_{O_2} \chi}{1 + k_2 P_{O_2}} + k_B P_{O_2} (1 - \chi) \right]$$

여기에서 $k_A = 20 \exp(-15098/T)$

$$k_B = 4.46 \times 10^{-3} \exp(-7650/T)$$

$$k_T = 1.51 \times 10^5 \exp(-48817/T)$$

$$k_2 = 21.3 \exp(2063/T)$$

$$\chi = \left(1 + \left(\frac{k_T}{k_B P_{O_2}} \right) \right)^{-1}$$

Fenimore and Jones¹⁵⁾

$$W_{OH} = \phi_{OH} (127E3) T^{-1/2} P_{OH}$$

Bradley *et al.*¹⁶⁾

$$W_O = \phi_O (5.54E1) T^{-1/2} P_O$$

위의 OH와 O 화학종 산화율식에서 매연입자와의 충돌효율을 나타내는 ϕ_{OH} 와 ϕ_O 는 각각 0.2 그리고 0.1로 가정하였다.

이상의 준 실험적 매연모델을 층류 화염편 모델에 적용하기 위하여 매연 생성 및 산화 반응율들은 화염편 라이브러리로 각각 구성되어야 한다. 따라

서 매연이 존재하는 화염장을 해석은 유동, 혼합분율, 복사 열전달 모델을 포함한 에너지 방정식과 매연 수송방정식을 해석하게 된다. 준 실험적 매연모델은 직접적으로 연소장 내의 상산화화학반응에 영향을 끼치지 못하고 후처리 과정을 통해 매연분포를 구하기 때문에, 복사영향을 통해 간접적으로 연소 유동장에 영향을 미치게 된다.

3. 수치 해석

비단열 화염편 모델과 준 실험적 매연 모델들의 매연 생성에 대한 예측능력을 확인하기 위하여, Mitchell/Santoro 버너의 정상상태 층류 메탄 공기 확산화염에 대해 수치해석을 수행하였다.⁹⁾ 본 연구에 사용된 층류 축대칭 동축버너에서 연료인 메탄은 직경 11.1mm의 중앙관을 통해 분출되고 주위에 공기가 분출된다. 연료인 메탄과 공기의 평균 유속은 각각 7.8 cm/s과 7.9 cm/s 이다. 실제 화염이 형성될 때 연료는 550K, 그리고 공기는 330K로 예열된다. Smyth의 제안으로부터 수치 해석 영역과 경계 조건들은 Kaplan *et al.*의 수치방법을 그대로 적용하였다.¹⁷⁾

두 준 실험적 매연모델을 적용함에 있어서 실험 결과와 비교하여 매연의 표면 성장율에 대한 상수 값들이 수정되었다. Syed *et al.* 모델에 대하여 Table 1의 C_V 를 0.36으로, 그리고 Leung *et al.*의 경우에는 $k_2 = 20 \exp(-6038/T)(\text{ms}^{-1})$ 을 적용하였다. 복사 열전달 효과를 고려하기 위하여 Smith의 회색가스 가중합 모델과 축대칭 복사 유한체적법을 이용하였다. Fig. 3에는 해석된 층류 메탄 화염장 온도 분포 및 각 매연모델에 따른 매연의 체적분율 분포를 나타내었다. 화염장내에서 화학당론적 혼합분율 분포선 내부에 C_2H_2 가 존재함으로 인해 고온영역 이전에 매연의 핵화 및 성장과정이 이루어지게 되며, 생성된 매연들은 화학당론적 혼합율 근처에서 OH, O 그리고 O_2 화학종들에 의해 산화됨을 두 매연모델 결과로부터 확인할 수 있다.

층류 화염편 모델을 이용한 층류 확산화염에 대한 해석 정확도를 확인하기 위하여, Fig. 4에서 실험치와 Kaplan *et al.*의 상산화화학반응 해석 결과들에 대하여 온도분포를 비교하였다. Kaplan *et al.*의 결과

화염편 모델을 이용한 층류산화염장의 매연 생성 및 산화과정 해석

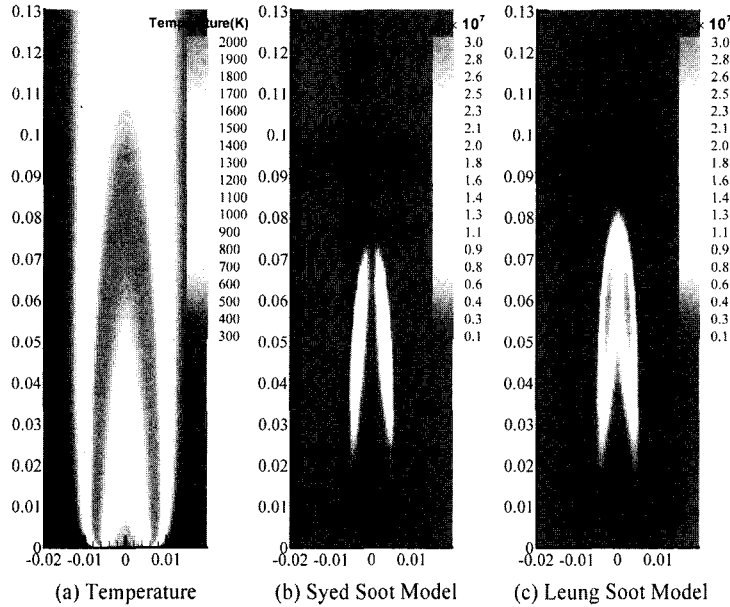


Fig. 3 the predicted fields of temperature and soot volume fraction

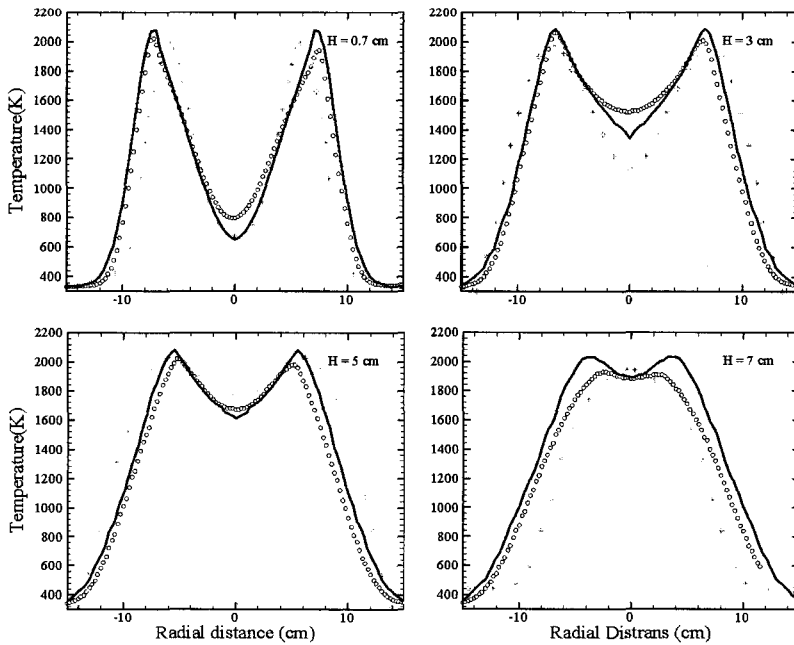


Fig. 4 Temperature profiles at various heights

에 대해 전반적으로 예측치의 차는 크지 않으나, 화염 높이를 다소 크게 예측함을 보여주고 있다. 두 매연모델의 경우에 온도분포 차는 미소하여, 예측치 비교를 위해서 Syed *et al.* 모델결과를 나타내었다.

매연 분포에 대한 비교를 위하여, 화염 높이에 따른 매연 체적분율 결과를 Fig. 5에 나타내었다. 두 매연모델은 모두 매연생성 및 산화과정에 대해 단순 반응을 가정하나 반응율에 대한 표현식의 차로 인

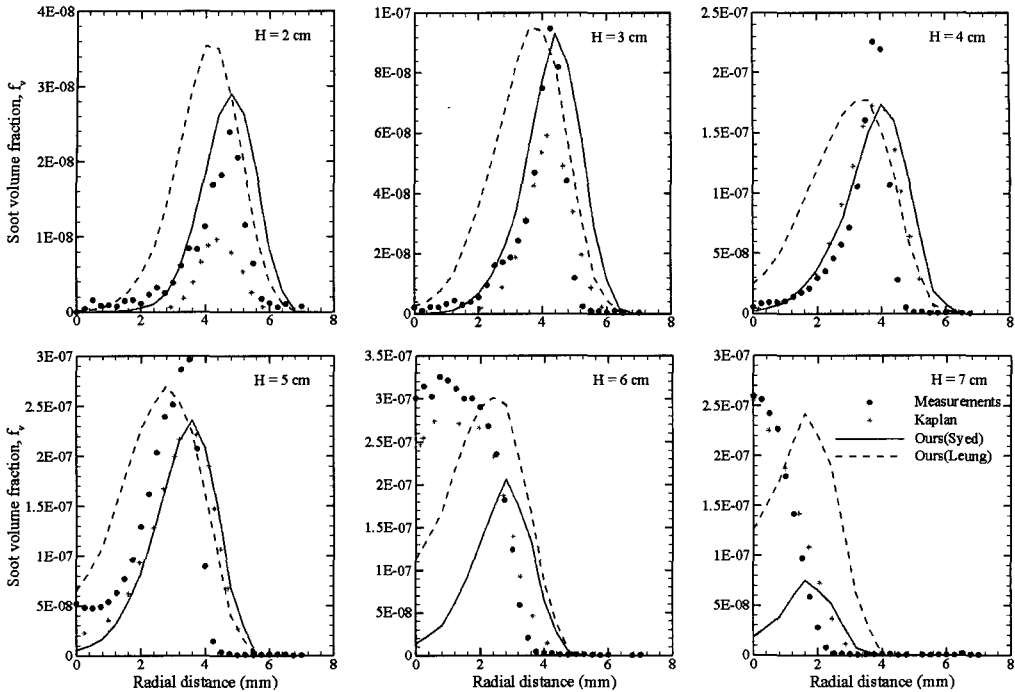


Fig. 5 Soot volume fraction profiles at various heights

해 예측특성의 차를 확연히 보여주고 있다. 화염장 상류에 결과를 보면 Syed *et al.* 모델은 실험치와 최대치 분포가 유사하나, Leung *et al.* 모델 결과의 경우 안쪽에 최대치가 분포함을 알 수 있다. 그러나 하류로 갈수록 차가 없어지는 경향을 보인다. Fig. 4에 나타났듯이 화염길이를 길게 예측함으로써 하류 측에서의 매연분포의 차가 존재하며, 매연 산화반응이 과도하게 발생함을 알 수 있다. 이는 특히 OH 산화반응에 대해 단순 반응율을 고려함에 따른 결과로 판단된다.

4. 결론

정상상태의 층류 메탄/공기 확산화염내의 매연 분포를 예측하기 위하여, 화염편에 대한 열전달 효과를 고려할 수 있는 비단열 층류 화염편 모델과 Syed *et al.*과 Leung *et al.*에 의해 제시된 준 실험적 매연모델을 적용하였다. 해석된 결과로부터 매연 생성반응은 화염온도와 C_2H_2 의 농도분포에 민감하며, 산화반응도 온도와 OH, O, 그리고 O_2 농도분포에 많은 영향을 받음을 확인할 수 있었다. 온도 분포

에 대한 예측 정확도에 비해 매연 체적분율에 대한 해석결과는 하류 측으로 갈수록 실험결과에 비해 낮게 예측되는 경향이 확인되었다. 또한 Syed *et al.*의 경우가 Leung *et al.* 매연 모델에 비해 상대적으로 산화반응에 민감함을 확인하였다. 이상에서 준 실험적 모델의 예측능력을 향상시키기 위해서는 매연 산화반응에 대한 추가적인 연구가 필요하다고 사료 된다.

후 기

본 연구는 산업자원부의 차세대신기술 사업으로 수행되는 “가스터빈/연료전지 혼합형 고효율 발전 시스템 개발” 과제의 연구 결과물이며, 연구를 지원해 주신 관계자 여러분께 감사사를 드립니다.

Reference

- 1) I. M. Kennedy, “Models of Soot Formation and Oxidation,” Prog. Energy Combust. Sci., Vol.23, pp.95-132, 1997.
- 2) K. J. Syed, C. D. Stewart and J. B. Moss,

- “Modelling Soot Formation and Thermal Radiation in Buoyant Turbulent Diffusion Flames,” 23rd Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1533-1541, 1990.
- 3) K. M. Leung, R. P. Lindstedt and W. P. Jones, “A Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames,” *Combustion and Flame*, Vol.87, pp.289-305, 1991.
 - 4) M. Balthasar, A. Heyl, F. Mauss, F. Schmitt, and H. Bockhorn, “Flamelet Modeling of Soot Formation in Laminar Ethyne/Air Diffusion Flames,” 26th Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.2369-2377, 1996.
 - 5) S. K. Kim, S. M. Kang and Y. M. Kim, “Flamelet Modeling for Combustion Processes and NO_x Formation in the Turbulent Nonpremixed CO/H₂/N₂ Jet Flames,” *Comb. Sci. and Tech.*, Vol.168, pp.47-83, 2001.
 - 6) H. J. Kim, Y. M. Kim and M. W. Yoon, “Numerical Analysis for the Soot Formation Processes in Acetylene-Air Nonpremixed Turbulent Jet Flame,” *Transactions of KSAE* Vol.10, No.6, pp.80-89, 2002.
 - 7) T. F. Smith, Z. F. Shen and J. N. Friedman, “Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model,” *ASME J. Heat Transfer*, Vol.104, pp.602-608, 1982.
 - 8) B. Marracino and D. Lentini, “Radiation Modeling in Non-luminous Nonpremixed Turbulent Flames,” *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.128, pp.23-48, 1997.
 - 9) K. C. Smyth, <http://www.bfrl.nist.gov>, 1999.
 - 10) N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge, Cambridge University Press, 2000.
 - 11) J. Y. Murthy and S. R. Mathur, “Radiative Heat Transfer in Axisymmetric Geometries using an Unstructured Finite-Volume-Method,” *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol.33, pp.397-416, 1998.
 - 12) J. H. Kent and D. R. Honnery, “A Soot Formation Rate Map for a Laminar Ethylene Diffusion Flame,” *Combustion and Flame*, Vol.79, pp.287-298, 1990.
 - 13) J. B. Moss, C. Stewart and K. Syed, “Flowfield Modelling of Soot Formation at Elevated Pressure,” 22nd Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.413-423, 1988.
 - 14) F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood and O. L. Gulder, “Numerical Modelling of Soot Formation and Oxidation in Laminar Coflow Non-smoking and Smoking Ethylene Diffusion Flames,” *Combust. Theory Modelling*, Vol.7, pp.301-315, 2003.
 - 15) J. B. Moss, C. D. Stewart and K. J. Young, “Modelling Soot Formation and Burnout in a High Temperature Laminar Diffusion Flame Burning under Oxygen-Enriched Conditions,” *Combustion and Flame*, Vol.101, pp.491-500, 1995.
 - 16) D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik and E. M. Mushi, “The Oxidation of Graphite Powder in Flame Reaction Zones,” 20th Symp (Int) Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.931-940, 1984.
 - 17) C. R. Kaplan, G. Patnaik and K. Kailasanath, “Universal Relationships in Sooting Methane-Air Diffusion Flames,” *Combust. Sci. and Tech.*, Vol.131, pp.39-65, 1998.