

비정상 층류화염편 모델을 이용한 비예혼합 난류화염 해석

김 성 구* · 강 성 모* · 김 용 모**

Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Nonpremixed Flames

Seong-Ku Kim, Sungmo Kang and Yong-Mo Kim

Key Words: Flamelet, Transient effect of local flame structure, Nonequilibrium, Slow processes, Thermal NO Formation, Radiation.

Abstract

The present study is focused on modeling the transient behavior of the local flame structure which is especially important for slow reaction processes, such as NO_x formation in the radiating flame field. The recently developed unsteady flamelet model has been applied to analyze a steady, turbulent jet flame. Numerical results are compared with experimental data and numerical results of the conventional steady flamelet model. The numerical result reveals that the unsteady flamelet model correctly predicts the nonequilibrium effect upstream and the subsequent decay of the superequilibrium radical concentrations the further downstream.

1. 서 론

최근 들어 광계측기술을 이용한 보다

체계적이고 자세한 실험데이터의 축적을 토대로 난류연소모델링에 대한 활발한 연구가 진행되어 왔다[1-7].

그 중에서도 층류화염편 (laminar flamelet) 모델은 상세화학반응, 편중확산

* 한양대학교 대학원

** 한양대학교 기계공학부

및 soot 생성 등의 복잡한 물리현상을 난류장과 효과적으로 분리하여 고려할 수 있으므로 많은 연구가 이루어져 왔다 [3-7,12].

그러나, 층류화염편 모델을 적용하는데 있어 대부분 연구에서 층류화염편 자체에 대해서 정상상태로 가정하고 화염 계산에 앞서 별도로 flamelet library를 구성하는 방법을 사용하여 왔다. 이러한 경우는 난류화염장내에서 층류화염편의 응답속도가 무한히 커서 주위로부터 가해지는 변화에 바로 적응할 수 있다는 가정을 바탕으로 하게 된다. 그러나, 국부소염 및 재점화, 자발화와 같은 본질적으로 천이상태의 물리현상들이나 스칼라소산율이 공간적, 시간적으로 급격히 변화하여 더 이상 층류화염편들이 이러한 변화를 따라잡지 못하는 경우에는 정상상태의 층류화염편 모델을 적용하는데 한계가 존재한다. 또한, NOx 생성과 같이 느리게 일어나는 물리현상에 대해서는 정상상태 층류화염편 계산으로부터 직접 계산할 수 없게 되므로, 각각의 생성항을 별도로 모델링한 후 후처리 과정을 통해 구해야하는 단점을 가진다.

최근 들어, 이러한 단점을 개선한 비정상 층류화염편 모델에 대한 연구들이 진행되고 있다. Ferreira는 난류부상화염내에서 일어나는 국부소염 및 재점화를 통한 화염안정화현상을 해석하기 위하여 flamelet library에 체류시간 및 반응진행 변수를 추가함으로써 층류화염편의 비정상 거동을 고려하였다[3]. Pitsch와 Peters는 디젤분무연소시 자발화 및 공해물질 생성을 예측하기 위하여 더 이상 flamelet library에 의존하지 않고 유동장과 동시에 결합해서 층류화염편 계산을 수행하는 RIF(Representative Interactive Flamelet) 모델[4]을 제안함으로써 자발

화, 부분 예혼합화염에서 확산화염모드의 전환, 그리고 NOx 및 soot 생성을 개별적으로 모델링하지 않고 상세화학반응메카니즘에 의해 해석하였다. Pitsch는 정상상태 난류화염장내에서 층류화염편의 비정상적 거동이 라그랑지 관점[5]에서 처리함으로써 NOx 생성 및 복사열전달과 같은 느리게 일어나는 물리현상들을 해석하였고, Stanford 대학의 CTR(Center for Turbulent Research)에서는 메탄 pilot 화염을 해석하는 데 있어서 라그랑지 층류화염편모델을 LES(Large Eddy Simulation)와 결합함으로써 난류연소모델링에 새로운 가능성을 보였다.[6].

본 연구에서는 비정상 층류화염편 모델을 이용하여 상세한 광계측 데이터가 존재하는 정상상태 난류제트화염[8]을 해석하였으며, 기존의 정상 층류화염편모델[12]과 비교, 고찰하였다.

2. Laminar Flamelet 모델

2.1. 층류화염편 방정식

본 연구에서는 난류화염내의 미세구조를 본질적으로 1차원구조를 가지는 층류화염편(laminar flamelet)의 집합체로 생각하였으며, 모든 화학종의 동일한 분자확산을 가정하였다. 이때, 화학종 및 에너지 보존방정식으로부터 층류화염편내 반응면에 수직방향을 주방향으로 하는 좌표변환을 통해, 혼합분율을 매개변수로 층류화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 지배하는 다음과 같은 1차원 상미분 연립방정식을 유도할 수 있다[5].

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{\chi}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \\ & - \frac{\chi}{2} \frac{\partial T}{\partial Z} \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{c_{pk}}{c_p} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \quad (2) \\ & - \frac{1}{\rho c_p} \left(\sum_{k=1}^N h_k \dot{m}_k - \frac{\partial p}{\partial t} + \dot{q}_{rad} \right) \end{aligned}$$

여기서, \dot{q}_{rad} 는 단위체적당 복사열손실률을 의미하며, χ 는 다음과 같이 정의되는 스칼라소산율(scalar dissipation rate)이다.

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \quad (3)$$

난류유동은 층류화염면들을 신장시키거나 주름지게 함으로써 층류화염면으로의 분자단위 물질 및 열 확산을 지배하여 화학반응에 영향을 미치게 된다[3]. 식 (1)과 (2)에서 알 수 있듯이, 층류화염면에서 반응물은 분자확산에 의해서만 화염면으로 수송될 수 있으며, 이를 지배하는 변수인 스칼라소산율, χ 는 확산에 의한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다. 난류유동에 의해 층류화염면이 신장되면 화염면의 주방향으로 구배가 커지므로 χ 가 증가하여 반응면으로의 분자확산이 증가된다. 이때, 반응면으로부터의 열전달 또한 증가하게 되며, 동시에 반응을 할 수 있는 체류시간이 감소하므로 온도는 감소하고 화학반응은 보다 불완전해진다. 이러한 불균형이 증가하다가, χ 가 일정한계를 넘어서면 더 이상 반응이 유지되지 못하고 층류화염면은 소멸된다. 반대로 χ 가 0에 가까이가면 층류화염면은 화학평형상태에 다가감을 알 수 있다.

앞서 언급하였듯이, 느리게 일어나는 물리현상을 포함하는 경우, 층류화염면 내에서 천이상태의 거동을 묘사하는 것

이 중요해진다. Pitsch는 연소장내로 유입된 층류화염면들이 대류수송에 의해 연소장내를 거처가면서 겪게 되는 변화들을 고려할 수 있는 라그랑지 관점에서 층류화염면의 거동을 고려하였다. 이때, 층류화염면들은 노즐출구로부터 유입되어 화학당론선을 따라 하류로 이동해간다고 가정한다. 따라서, 각 축방향 위치에 해당하는 층류화염면의 체류시간은 다음과 같이 나타난다고 생각할 수 있다.

$$t = \int_0^x \frac{1}{u(x') |(\dot{Z} = Z_{st})} dx' \quad (4)$$

본 연구에서 해석하고자 하는 제트화염의 경우, 하나의 층류화염면만을 사용하였고 이는 유동계산과 결합하여 동시적으로 계산된다.

앞서도 설명하였듯이, 난류에 의한 미세화염구조의 변화는 스칼라소산율에 의해 지배되게 된다. 따라서, 스칼라소산율을 적절히 모델링하는 것이 가장 중요한 문제이다.

층류화염면내에서 스칼라소산율은 일정하지 않으며, Pitsch는 DNS 계산결과와의 비교를 통하여 이를 다음과 같이 모델링하였다[5].

$$\chi = \chi_{st} f(Z) = \chi_{st} \frac{Z^2}{Z_{st}^2} \frac{\ln Z}{\ln Z_{st}} \quad (5)$$

일반적으로 스칼라소산율의 Favre 평균값은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\tilde{\chi} = c_x \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \overline{Z}^{-2} \quad (6)$$

따라서, 화학당론상태에 대한 스칼라소

산율의 조건부평균값은 다음과 같이 나타나게 된다.

$$\langle x_{st} \rangle = \frac{c_x \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{Z}^{-2}}{\int_0^1 f(Z) \tilde{P}(Z) dZ} \quad (7)$$

만약, 계산하고자 하는 층류화염편이 일정한 영역을 대표하는 경우 이에 해당하는 스칼라산율은 다음과 같이 유도할 수 있다[5].

$$\langle x_{st} \rangle = \frac{\int_V \langle x_{st} \rangle^{3/2} \tilde{\rho} \tilde{P}(Z_{st}) dV'}{\int_V \langle x_{st} \rangle^{1/2} \tilde{\rho} \tilde{P}(Z_{st}) dV'} \quad (8)$$

이때, 혼합분율에 대한 확률밀도함수 $P(Z)$ 는 beta 함수를 사용하였으며, 본 연구에서는 축방향을 따라 계산을 진행하였으며, 이때 각 축방향위치층분에 해당하는 반경방향 격자점들은 동일한 영역으로 생각하였다.

2.2. NOx 생성 및 복사열전달

여기서는 NOx 생성 및 복사열손실을 고려하는 데 있어서 정상 층류화염편모델과 비정상 층류화염편모델의 차이를 설명하고자 하며, 본 연구에서 사용한 정상 층류화염편 모델에 대한 자세한 내용은 참고문헌 [12]에 잘 나타나 있다.

NO 생성에 필요한 특성시간은 다른 화학반응의 특성시간보다 훨씬 크므로 앞서 설명한 대로 정상 층류화염편 모델을 사용하는 경우, 층류화염편내의 화학반응에 포함시켜 이로부터 직접적으로 계산하는 것은 부적절하다. 따라서, 층류화염편내의 연소반응은 Wanartz 등이 제안한 수소에 대한 상세화학반응[10]으로 계산하였으며, NO 생성을 수소의 연소반

응과 분리하여 후처리과정을 통해 구하였다. 이때, NO의 생성량은 화염계산에 앞서 flamelet library에 포함되어야 하므로, thermal NO만을 고려하여 다음과 같이 계산하였다.

$$w_{NO} = M_{NO}(2K_{f_9}[N_2][O]) \quad (9)$$

여기서, $K_{f_9} = 1.84 \times 10^{14} \exp(-38370/T)$ $\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{s}$ 이며, 온도 및 N_2 와 O 라디칼의 농도는 정상상태 층류화염편 계산해로부터 구한다. 비정상 층류화염편 모델을 사용하는 경우, 위와 같이 NOx 생성에 대해 별도의 모델링이 필요없으므로 수소연소반응식에 Zeldovich 메커니즘을 추가하여 식(1)과 (2)로부터 직접적으로 계산하였다. 또한 NO_2 반응경로를 고려하는 경우, 7개의 화학종과 60개의 화학반응을 추가하여 계산하였다.

수소화염의 경우, 광학두께가 얇아서 복사열전달은 국부적인 방출(emission)에 의해서만 일어난다고 가정할 수 있다. 따라서, 단위체적당 열손실은 다음과 같이 계산할 수 있다[1,12].

$$\dot{q}_{rad} = -4\sigma_B T^4 \sum (P_k \cdot a_{p,k}) \quad (10)$$

정상 층류화염편모델을 사용하는 경우, NOx 생성과 마찬가지로 복사에 의한 열손실을 층류화염편 계산에 포함해서 계산하는 것이 불가능하므로, 식(2)에서

\dot{q}_{rad} 를 생략하는 대신, 단열상태에서의 엔탈피와 실제 엔탈피의 차를 나타내는 엔탈피변수(enthalpy defect)[7,12]를 도입하여 양쪽 경계값에 적용하였다. 비정상 층류화염편모델을 사용하는 경우에는 식(2)에 나타나는 복사열전달항을 층류화염편에 대한 에너지방정식에 직접 포함시

켜 복사열전달을 고려할 수 있다.

2.3. 수치해법

본 연구에서는 화학당론선을 따라 급격한 구배를 갖는 반응면을 효과적으로 해석하기 위해 비정렬격자 유동해법 (unstructured-grid flow solver)을 사용하였다. 각 보존방정식은 각각의 셀이 바로 검사체적이 되는 셀중심 유한체적법 (cell-centered FVM)을 사용하여 이산화하였으며, 대류항과 확산항에 대해 각각 2차정확도의 흐름차분법과 중앙차분법을 적용하였다. 연속방정식과 운동량방정식을 동시에 만족시키는 유동해를 구하기 위해 압력기준해석법인 SIMPLEC 알고리즘을 사용하였다. 보다 자세한 내용은 참고문헌 [11]에 잘 나타나 있다.

층류화염면의 거동을 해석하기 위해서는 연립미분방정식을 계산하여야 한다. 비정상해와 정상상태 해 모두 동일한 층류화염면 방정식 (1)과 (2)을 통해 계산하였고, 이때 층류화염면내에서의 스칼라 소산율의 분포는 식(5)를 사용하였다. 정상상태의 해만을 구해야하는 경우는 효율적인 계산을 위해 modified damped Newton 알고리즘[9]을 사용하였으나, 비정상계산을 하는 경우에는 시간에 대한 정확도를 보장하기 위해 stiff ODE solver 인 LSODE를 이용하여 시간적분하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 해석조건

본 연구에서 해석한 비예혼합 수소난류제트화염은 지름 D 가 3.75mm인 연료노즐을 통해 헬륨이 20% 첨가된 수소연료가 294m/s로 분사되고, 이때 주위공기의 속도 및 온도는 1m/s 와 294K이다. 이때, 실험에서 구한 화염길이 $L=150D$ 이

다. 자세한 해석조건 및 경계조건은 참고문헌 [8,12]에 나타나있다.

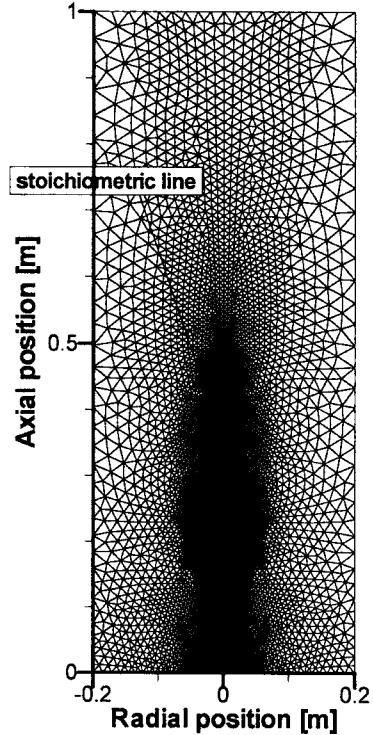


Fig. 1 The triangular mesh for the 20% He-diluted H₂ flame.

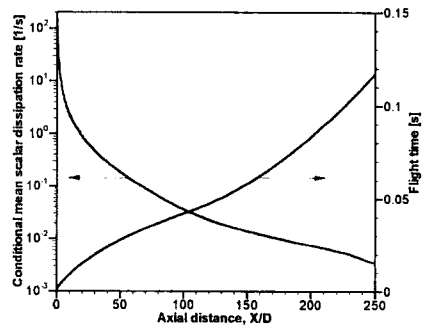


Fig. 2 Radially averaged scalar dissipation rate conditioned on stoichiometry and flight time as a function of axial distance.

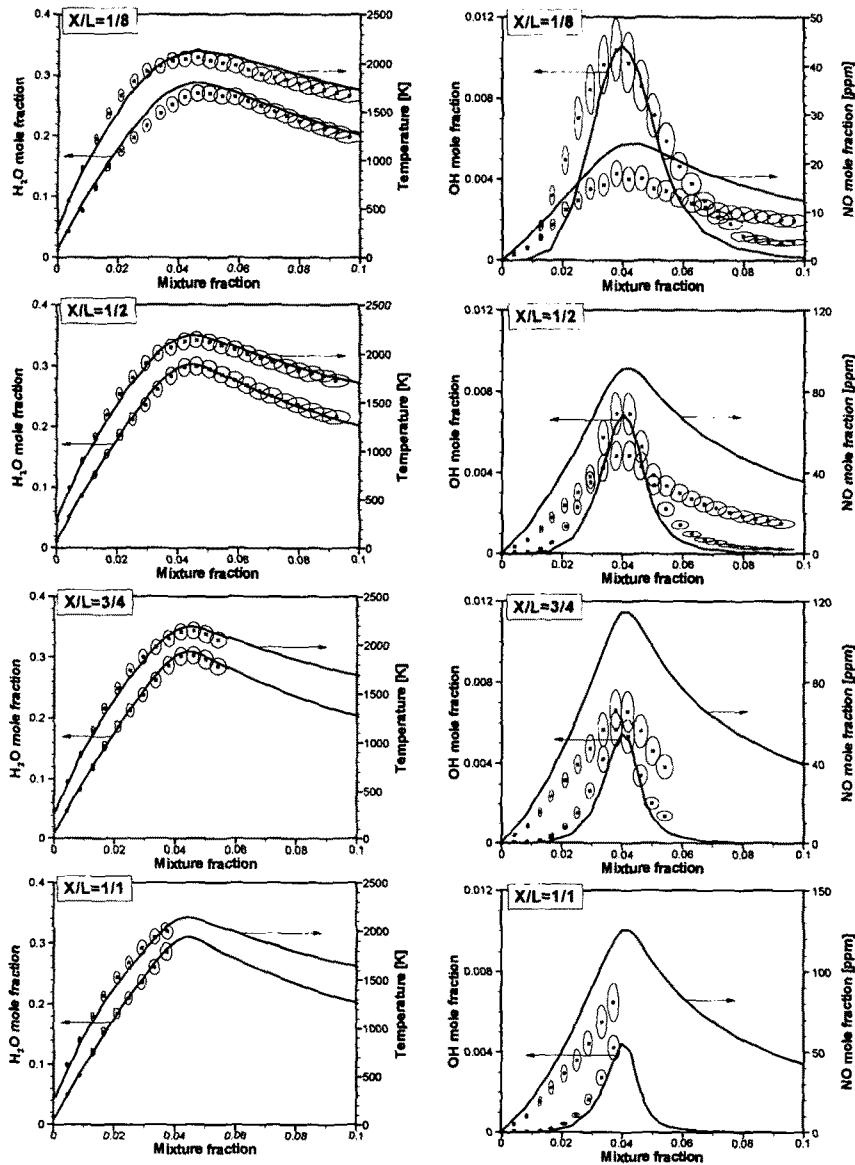


Fig. 3 Measured and predicted conditional means.

Fig. 1에서 보듯이, $X=1m$ 와 $R=0.2m$ 인 축대칭 계산영역에 대해 화학당론선을 따라 격자를 조밀하게 밀집시킨 비정렬격자계를 구성하였으며, 이때 격자점과 셀의 수는 각각 5768와 10876개이다.

Fig. 2는 각각 식(4)와 (8)을 통해 계산한 축방향 위치에 따른 체류시간과 flamelet의 스칼라소산율의 조건부평균값을 나타낸 결과이다. 연료노즐 근방에서는 전단층내에서의 급격한 난류혼합으로 인하여 스칼라소산율은 $\langle \chi_{st} \rangle = 170s^{-1}$

정도의 큰 값이 존재하는 반면 점차 하류로 가면서 난류혼합이 점차 완화됨에 따라 급격하게 감소하여 화염길이에 해당하는 $X=150D$ 의 위치에서는 약 $0.014s^{-1}$ 까지 줄어드는 것을 알 수 있다. 이러한 스칼라소산율의 변화가 국소화염구조에 미치는 영향을 살펴보기 위하여 Fig. 3에서는 각 축방향 위치에서의 비정상 층류화염편 계산결과를 실험에서 측정된 조건부평균값과 비교한 결과이다. 여기서, 점으로 나타낸 실험결과를 둘러싸고 있는 타원은 각 상태량에 대한 측정오차를 간단하게 나타낸 것이다[2]. 수소의 연소 반응은 크게 두 가지로 나누어, 매우 빠르게 라디칼들을 형성하는 two-body shuffle 반응과 이후에 느리게 진행되면서 라디칼 pool을 소멸시켜 화학평형상태를 이루게 하는 삼체 재결합반응으로 생각할 수 있다. $X/L=1/8$ 인 위치에서는 연료노즐 근방의 전단층을 통해 일어나는 급격한 난류혼합으로 인해 라디칼들의 재결합반응이 가지는 특성시간 보다 난류혼합에 의한 특성시간이 작아지게 되므로, OH 농도분포에서 볼 수 있듯이 미처 다 소멸되지 못한 라디칼들이 화학평형상태보다 훨씬 큰 초과평형농도로 존재하게 된다. 이 영역에서는 Fig. 2에서처럼 매우 높은 스칼라소산율을 갖게 되므로 층류화염편의 반응면을 따른 확산을 증가시켜 수치결과 역시는 이러한 비평형 화학반응의 영향을 잘 예측하고 있다. 그러나, 보다 하류로 갈수록 난류혼합이 완화에 따라 라디칼들의 재결합반응에 필요한 체류시간이 증가하면서 혼합기들의 상태는 보다 화학평형상태에 가까워지는 동시에 난동성분도 줄어들게 되고, 화염끝부분인 $X/L=1/1$ 지점에서는 거의 화학평형상태에 도달함을 알 수 있다. 스칼라소산율의 변화에 따라 라그랑

지 관점에서 계산된 비정상 층류화염편의 화염구조는 비평형화학반응에 의해 상류영역에서 현저히 존재하는 라디칼의 초과평형농도와 하류로 가면서 화학평형상태로 도달해 가는 감쇠율을 정확히 예측하고 있음을 알 수 있다. NO 생성에 큰 영향을 미치는 O 라디칼 경우, OH보다 비평형화학반응에 훨씬 민감하게 나타난다. Fig. 4를 보면 상류지역에서 O 라디칼의 초과평형농도가 화염끝부분인 $X=150D$ 인 영역에서의 농도에 비해 23배 가량 높게 나타나고 있음을 알 수 있다. Fig. 3은 또한 비정상 층류화염편 계산을 통한 NO 농도분포를 나타내고 있다. 실험결과와 비교할 때 전체적으로 과대예측하고 있으나 전반적으로 타당한 결과를 예측하고 있음을 알 수 있다.

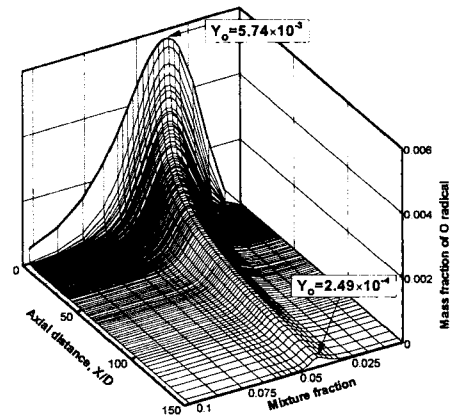


Fig. 4 Lagrangian development of the representative flamelet ; the decay of superequilibrium radical concentration.

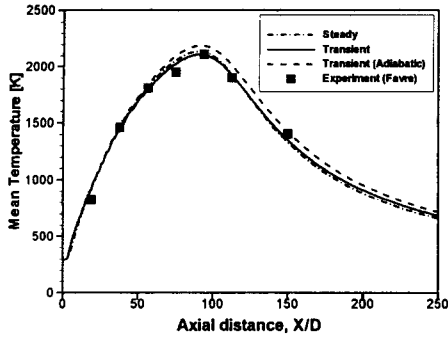


Fig. 5 Centerline profiles of mean temperature.

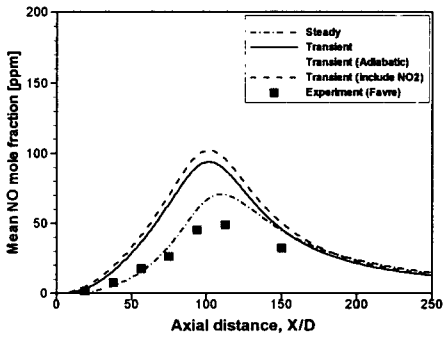


Fig. 6 Centerline profiles of mean NO concentration.

Table 1 Comparison of overall EINOx [g/kg] : ※ denotes the result taken from Barlow's work [2]

	EINOx
Experiment ※	4.3
Steady flamelet	6.36
Transient flamelet	5.27
Transient flamelet (include NO ₂ chemistry)	5.94
Transient flamelt (adiabatic condition)	7.55

제트화염의 경우, 고온 영역은 화학당론선을 따라 분포하게 되고, Fig.5에서 보듯이 중심축 온도는 화학당론선과 중심축과 만나는 $X=100D$ 인 지점에서 최고값을 나타내게 된다. 복사열손실을 고려한 정상 및 비정상 모델의 경우 거의 유사한 결과를 나타내고 있음을 알 수 있으며, 식(2)에서 \dot{q}_{rad} 을 무시한 비정상 층류화염모델의 경우는 후화염영역 (post-flame region)에서 대략 100K 정도 온도를 과대예측하게 됨을 알 수 있다. Fig. 6에 나타낸 중심축을 따른 NO 농도 분포에 대한 결과를 보면 모든 수치결과가 실험에 비해 최고값을 과대예측하는 결과를 보여주고 있으며, 모두 정상상태 모델에서 후처리과정을 통해 구한 경우가 보다 실험에 가까운 결과를 나타내고 있다. 그리고, NO₂ 반응경로를 포함시킨 경우, thermal NO 생성만을 고려한 경우에 비해 최고값이 30% 정도 증가함을 알 수 있다. 각 모델에 의해 예측된 전체 NOx 배출지수에 대한 결과를 Table 1에 나타내었다. 본 연구에서 사용한 난류연소모델은 실험과 비교할 때, 전체 NOx 생성을 타당하게 예측할 수 있음을 알 수 있다.

4. 결론

(1) 비정상 층류화염편 계산결과는 실험에서 나타난 화염구조와 잘 일치하였으며 스칼라소산율을 파라미터로 하여 비평형화학반응 및 라디칼의 초과평형농도의 감쇠를 잘 예측하였다.

(2) 비정상 층류화염편 모델은 기존의 층류화염편 모델과 달리, NOx 생성을 별도의 모델링없이 연료의 연소반응메카니즘에 포함하여 해석할 수 있었으며, 이

는 탄화수소계 연료의 연소과정에서 수반되는 prompt 및 fuel NOx 생성을 예측하는데 큰 이점을 가질 것으로 사료된다. 본 연구에서 해석한 수소제트화염에 대해 NO₂ 생성메카니즘을 고려한 경우가 thermal NO만을 고려한 경우보다 전체 NOx 배출지수의 예측결과가 약 13% 정도 증가하였다.

(3) 본 연구를 통해 결과를 바탕으로 앞으로는, 편중확산의 영향 해석, 탄화수소계 연료의 연소반응 및 공해물질 생성 메카니즘 해석, 그리고, 다중 층류화염편(multiple flamelets)으로 확장을 통해 실제 연소기내의 복잡한 난류화염장에 적용등을 체계적으로 진행해 나갈 예정이다.

참고문헌

- (1) The International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames, <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- (2) Barlow, R. S., Smith, N. S. A., Chen, J. Y., and Bilger, R. W. (1999) Nitric Oxide Formation in Dilute Hydrogen Jet Flames: Isolation of the Effects of Radiation and Turbulence-Chemistry Submodels, *Combustion and Flame*, 117, 4.
- (3) Ferreira, J. C. (1996) Flamelet modelling of stabilization in turbulent non-premixed combustion, PhD Thesis, ETHZ Zuerich Switzerland.
- (4) Pitsch, H., Barths, H., and Peters, N. (1996) Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach, SAE paper 962057.
- (5) Pitsch, H., Chen, M., and Peters, N. (1998) Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames, the 27th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1057-1064.
- (6) Moin, P., Pierce, C., and Pitsch, H. (2000) Large Eddy Simulations of Turbulent Diffusion Flames, *Advances in Turbulent Research-2000*, Seoul, Korea, March 24, pp. 105-114.
- (7) Marracino, B. and Lentini, D. (1997) Radiation modelling in Non-luminous nonpremixed turbulent flames, *Combust. Sci. and Tech.*, vol. 128, pp. 23-48.
- (8) Barlow, R. S. and Carter, C. D. (1996) Relationships among nitric oxide, temperature, and mixture fraction in hydrogen jet flames *Combustion and Flame*, 104, 288.
- (9) Grcar, J. F. (1992) The twopnt program for boundary value problems, Sandia Report, SAND91-8320, Livermore.
- (10) Warnatz, J., Maas, U., and Dibble, R. W. (1996) *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- (11) 김용모 (1999) 비정렬수치격자를 이용한 비압축성 유동해석, 대한기계학회 99년도 유체공학부문 춘계학술강연회 강연집, pp. 128~140.
- (12) 김성구, 김후중, 김용모 (1999) Laminar Flamelet Model을 이용한 비예혼합 난류제트화염의 연소과정 및 NO 생성 해석, 제19회 KOSCO symposium 논문집, pp. 93~104.