# 단일 와동과 상호작용하는 대향류 비예혼합화염 구조에 대한 수치해석 연구

A Numerical Study on the Structure of a Counterflow Nonpremixed Flame Interacting with a Single Vortex

*오창보*[1], 박 정[2], 이창언[3]
Chang-Bo Oh, Jeong Park and Chang-Eon Lee

**Abstract**

A two-dimensional direct numerical simulations was performed to investigate the flame structure of $CH_4/N_2$-Air counterflow nonpremixed flame interacting with a single vortex. The detailed transport properties and a modified 16-step augmented reduced mechanism based on Miller and Bowman's detailed reaction mechanism were adopted in this calculation. To quantify the strain on flame induced by a vortex, a scalar dissipation rate (SDR) is introduced. Results show that the fuel- and air-side vortex cause an unsteady extinction. In this case, the flame interacting with a vortex is extinguished in much larger SDR than steady flame. It was also found that air-side vortex extinguishes a flame more rapidly than fuel-side vortex.

## 1. 서론

난류화염에 대한 수치계산 연구는 실험에서 얻기 어려운 난류화염의 구체적인 정보를 얻는데 매우 유용하다. 난류화염의 물리적 현상 이해를 목적으로 하는 수치 접근법은 난류화염에 대한 직접적인 해석방법과 화염에 대한 모델링을 통해 이해하고자 하는 방법으로 크게 나누어진다. 이 중에서 난류화염에 대한 직접적인 해석방법은 DNS(Direct Numerical Simulation)로서, 이는 난류유동의 스케일뿐만 아니라 반응대의 스케일까지 모두 분해할 수 있는 격자를 필요로 한다. 화염의 반응대는 급격한 화학반응에 영향을 받기 때문에 일반적으로 유동의 스케일에 비해 매우 작다. 따라서 난류화염에 대한 DNS는 비반응 난류 유동장 해석에 비해 매우 긴 계산 시간을 요구한다. 현재까지 난류화염에 대해 3D DNS를 수행한 경우는 많지 않으며, 진행된 연구들도 작은 영역의 국소화염 해석에 대한 것으로 한정된 경우가 많다[1,2].

난류화염에 대한 모델링을 통해 화염을 이해하고자 하는 연구 중에서 기존에 많이 연구되었던 방법으로는 1D 층류 대향류화염을 대상으로 스트레인율(Strain Rate)을 변화시켜 화염구조를 검토하는 것이 있다[3]. 이는 난류화염에서 와동에 의해 화염에 가해지는 스트레인율과 그 에 따르는 화염구조를 검토하는데 유용하다. 그러나, 이러한 연구들은 난류화염의 비정상(Unsteady), 곡률(Curvature) 및 다차원 유동효과 등을 묘사할 수 없는 한계를 가지고 있다.

난류화염은 다양한 크기와 강도를 갖는 와동들과 상호작용하는 화염들의 집합체로 간주할 수 있다. 이러한 관점에서, 단일 와동과 상호작용하는 화염에 대한 모델링을 통하여 난류화염 구조에 대해 접근하는 방법은 와동에 의한 스트레인율 변화, 비정상 및 곡률효과 그리고 이와 연계된 선택확산(Preferential Diffusion) 등의 영향을 고려할 수 있게 되어, 이 특징들이 복합적으로 나타나는 난류화염 해석에 매우 유리할 것으로 판단된다.

이러한 배경하에, 본 연구에서는 단일 와동과 상호작용하는 $CH_4$ 화염에 대한 수치계산을 통해, 기존 연구에서 얻을 수 없었던 비정상 및 곡률효과 등을 동반하는 화염에서의 다양한 현상들을 고찰하고자 한다.

1) 인하대학교 대학원 기계공학과
(402-751, 인천시 남구 용현동 253)
2) 순천대학교 기계자동차 공학부
(540-742, 전남 순천시 매곡동 315,
Tel : 061-750-3533)
3) 인하대학교 기계공학부 (402-751, 인천시 남구 용현동 253, Tel : 032-860-7323)

## 2. 지배방정식 및 계산방법

### 2.1 지배방정식

본 연구에서 다루는 화염에 대한 지배방정식은 식 (1)~(5)와 같이 연속, 운동량, 화학종, 에너지 및 상태방정식으로 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial (\rho \boldsymbol{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{uu}) = -\nabla p_1 + (\rho - \rho_0)\boldsymbol{g} + \nabla \cdot \mu \left[ (\nabla \boldsymbol{u}) + (\nabla \boldsymbol{u})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \boldsymbol{u})\boldsymbol{I} \right] \tag{2}$$

$$\frac{(\partial \rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{im} \nabla Y_i) + W_i \dot{\omega}_i \quad (i = 1, 2, \cdots N) \tag{3}$$

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{i=1}^{N} W_i h_i^0 \dot{\omega}_i + \rho \sum_{i=1}^{N} (c_{pi} D_{im} \nabla Y_i \cdot \nabla T) \tag{4}$$

$$p_0 = \rho R_0 T \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{Y_i}{W_i} \right) \tag{5}$$

여기서, $p_0$와 $p_1$은 각각 열역학적 압력(Thermo- dynamic Pressure)와 동적 압력(Dynamic Pressure)을 의미한다.

본 계산에서는 Soret과 Dufour 효과 및 복사열전달은 무시하였으며, 열역학적 물성치와 전달 물성치는 각각 CHEMKIN-II [4] 및 TRANFIT Package [5]를 이용하였다.

### 2.2 수치해법

지배방정식은 엇갈림 격자계를 이용하여 차분하였으며, 대류항에 대해서 QUICK법, 확산항에 대해서는 2차 정확도의 중심 차분법을 이용하였다. 열발생에 의한 급격한 밀도변동을 고려하기 위해서 Najm 등이 제시한, 전체적으로 2차 정확도를 갖는 예측-교정자(Predictor-Corrector)법 [6]을 수정하여 시간적분을 수행하였다. 즉, 예측자 단계에서는 2차 정확도의 Adams-Bashforth 법을 이용하였으며, 교정자 단계에서는 2차 정확도의 Quasi-Crank-Nicolson법을 이용하였다. 또한, 속도와 압력의 교정은 밀도변동을 고려하도록 수정된 HSMAC(Highly Simplified Marker And Cell)법[7]을 이용하였다. 계산에 사용된 수치 알고리듬에 대한 자세한 내용은 참고문헌 [8]에 기술되어 있으므로 여기서는 생략한다.

### 2.3 계산조건 및 경계조건

본 연구에서는 계산결과의 검증에 유리하도록 Sung 등의 실험조건[9]과 동일한 화염에 대해 계산을 수행하였다. 먼저 Fig. 1에서 보는 것처럼 L=13mm, D=14mm인 연료 및 공기노즐 사이에 정상상태(Steady-State)의 $CH_4/N_2$-공기 대향류화염을 형성시켰다. 다루고 있는 화염이 축대칭이므로 계산영역은 13mm×7mm로 하였다. 화염-와동 상호작용에 대한 계산에서는 연료 또는 공기측의 2mm 노즐에서 5m/s의 Top-hat 형태의 유속을 갖는 제트를 분출시켜 와동을 형성시키고, 이 와동이 반대편 노즐 방향으로 진행하면서 화염과 작용하도록 하였다.

정상상태의 화염을 얻기 위해 연료 및 공기의 노즐출구 유속은 반경방향 성분은 없고 축방향 유속이 25.5cm/s로 균일하도록 하였으며, 초기온도는 298K으로 하였다. 연료 및 공기의 조성은 각각 체적비를 $CH_4$:$N_2$=23:77, $O_2$:$N_2$=23:77로 하였다. 경계조건으로, 중심축에는 Neumann 조건을 부여하였으며, 반경방향 외부경계에서는 경계바로 안쪽과 경계면에서의 물리량의 변화가 같도록 하였다. 와동이 생성, 진행될 때에는 와동이 존재하는 반대편 노즐경계에서도 반경방향 외부경계와 유사하게 경계조건을 처리하였다.

격자계는 260×70개의 비균일 격자계를 이용하였다. 축방향으로는 0.05mm의 균일한 격자를 이용하였으며, 반경방향으로는 소염이 발생하는 중심축 근처에서 0.05mm의 격자를 가지며, 반경방향으로 점차 크기가 확장되도록 하였다. 최소 격자 크기 0.05mm는 소염점 가까운 화염에서의 열발생 영역(~1.1mm)에 20개 이상의 충분한 격자를 공급할 수 있는 수준으로서, 반응대를 DNS기법으로 묘사하기에 적합함을 확인 할 수 있었다.

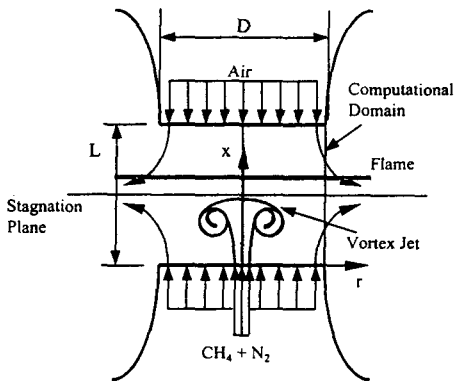



**Fig. 1** Schematic of computational geometry and numerical layout

## 3. 반응기구의 검토

### 3.1 소염점 예측

화염-와동 상호작용이 일어나는 영역에서는 일반적으로 와동에 의한 소염이 관찰되므로 소염점을 적절히 예측할 수 있는 반응기구의 선택이 중요하다. 따라서, 본 계산에 들어가기 전에 대표적인 반응기구들의 소염점 예측성능을 검토하였다.

Fig. 2에는 GRI-3.0(GRI-3.0-Full)[10] 및 Miller와 Bowman의 상세반응기구(MB-Full) [11] 그리고, 이들을 바탕으로 축소된 ARM(Augmented Reduced Mechanism)을 이용하여 소염점을 예측한 결과를 Sung 등[9]의 실험치와 비교 도시하였다. 반응기구의 검토에는 1D 코드인 OPPDIF [12]가 이용되었으며, 화염에 가해지는 스트레인을 정량화하기 위해서 총괄 스트레인율(Global Strain Rate : $a_g$)[13]을 도입하였다. $a_g$ 변화에 따른 최고 화염온도의 변화를 보면, 실험에서는 노즐유속( $u_q$)이 77.5cm/s 정도에서 소염되는 것으로 보고되었으나, 그림에서 보는 것처럼 계산에 이용된 GRI-3.0-Full은 소염점을 작게 예측하고 있으며( $u_q$=61cm/s), MB-Full은 소염점 크게 예측하는 것( $u_q$=97cm/s)을 알 수 있다. 이 결과로부터, 소염점을 정확하게 예측하기 위해서는 좀 더 적절한 반응기구가 필요함을 알 수 있다. 본 연구에서는 MB-Full의 반응식에서 소염에 큰 영향을 준다고 알려진 $CH_4$+H(+M)=$CH_4$(+M)의 반응상수를 Wang 등이 제시한 반응상수[14]로 대체하여 소염점 예측 성능을 향상시켰다. Fig. 2에서와 같이 수정된 MB-Full로 예측된 소염점( $u_q$=78cm/s)은 실험에서 얻어진 소염점을 매우 잘 예측함을 알 수 있다. 또한, 이 수정된 반응기구에 근거한 축소된 MB-ARM[15]도 MB-Full과 거의 비슷한 경향을 보임을 알 수 있다. 이러한 소염점 예측 경향은 2D 계산에서도 1D 결과와 일치하는 것을 확인하였다. 따라서, 2D 화염-와동 상호작용에 대한 해석에서는 계산시간을 고려하여 16단계 MB-ARM(20개 화학종 포함)을 사용하였다. 참고로, GRI-3.0-Full을 근거로 작성된 GRI- 3.0-ARM [16]은 착화시 매우 경직되어 있어서 $\Delta t$를 매우 작게 해야 하기 때문에 계산시간이 길어지게 되어 반응상수 수정 대상에서 제외하였다.

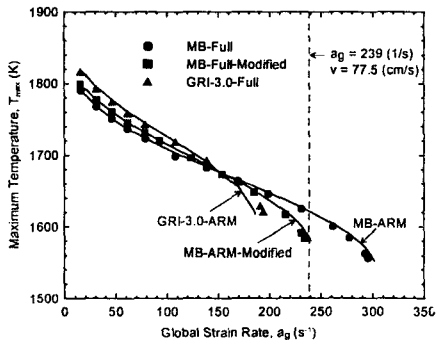
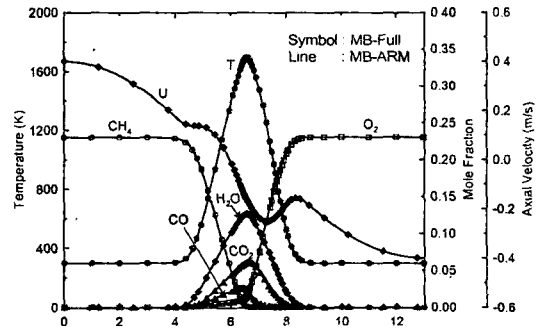


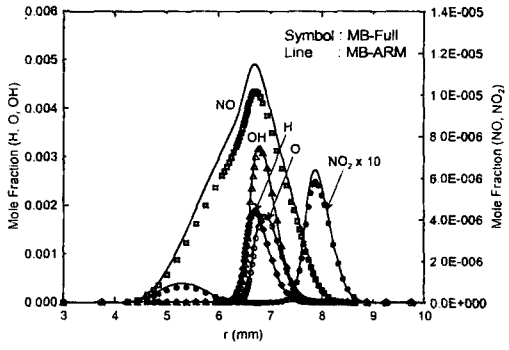

**Fig. 2** Response of predicted maximum temperature to global strain rate (using OPPDIF code)

### 3.2 상세반응기구와 ARM 결과 비교

Fig. 3에는 ARM과 상세반응기구를 이용한 결과를 비교하기 위해, 수정된 MB-Full과 16단계 MB-ARM을 이용한 결과를 나타내었다. 그림의 결과들은 $a_g$=100($s^{-1}$)에 대한 결과이다. 먼저, Fig. 3 (a)에서 주요 화학종 농도를 보면 MF-Full과 MB-ARM으로 계산한 결과는 거의 일치하는 것을 알 수 있다. 또한, Fig. 3 (b)의 주요 라디칼(H, O, OH) 및 NOx의 농도분포를 보면 MB-ARM은 라디칼과 $NO_2$의 분포에서 상세반응기구의 결과와 잘 일치하고 있으며, NO




(a) Temperature, axial velocity and major species




(b) Radicals and NOx

**Fig. 3** Comparision of the results between Miller and Bowman's full mechanism and 16-step ARM(using OPPDIF code)

최고 농도값은 10% 정도 차이를 보이고 있으나 전체적인 분포는 상세반응기구의 결과와 잘 일치하고 있다. 그림에는 도시하지 않았지만, 스트레인율을 변화시킨 화염구조에서도 비슷한 결과를 얻을 수 있었다. Fig. 2의 소염점 예측성능 및 Fig. 3의 화염구조 예측에 대한 결과로부터 본 연구에서 사용된 16단계 MB-ARM는 충분히 $CH_4$ 화염과 와동과의 상호작용을 합리적으로 예측할 수 있다는 것을 확인할 수 있다.

## 4. 결과 및 고찰

Fig. 4에는 수치계산의 타당성의 검토하기 위해서 Sung의 실험[9]과 동일한 조건에 대한 2D 계산 결과를 비교 도시하였다. 또한, 참고로 1D OPPDIF 코드로 계산한 결과(점선)도 함께 도시하였다. 그림에서 실선의 2D 계산결과는 실험결과를 매우 잘 예측하는 것을 보이고 있으며, 이를 통해 본 계산의 타당성을 확인할 수 있다. 그리고, 이 경우에는 1D 계산치도 실험 및 2D 계산결과와도 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 스트레인율을 소염직전까지 변화시킨 화염에 대한 계산에서도 2D와 1D 계산결과는 거의 일치하는 것을 확인하였다. 따라서 본 화염조건의 경우에는 1D 결과로도 정상상태의 대향류화염을 매우 합리적으로 예측하는 것을 알 수 있다.

이후, Fig. 5-8에는 Fig. 4에서 얻은 화염과 와동과의 상호작용에 대한 결과를 도시하였다.

먼저, Fig. 5는 시간에 따른 와도의 전개와 그에 상응하는 화염온도의 분포형상을 도시한 것이다. 그림의 점선은 Bilger의 제안에 따라 정의한 혼합분율(Mixture Fraction : Z)[17]값이 이론혼합비(0.3038)를 갖는 위치로서, 본 연구에서는 이 위치를 화염면으로 정의하였다. (a)의 정상상태

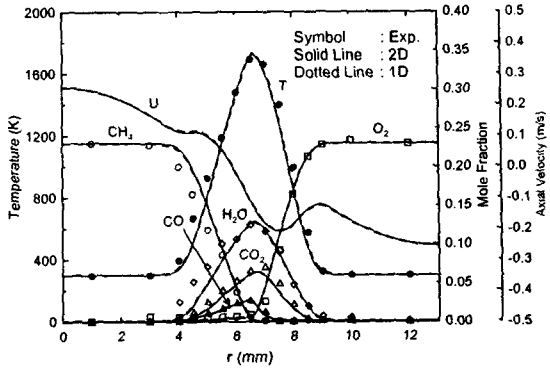



**Fig. 4** Comparison between experimental and computed temperature and major species. (dotted line : 1D OPPDIF, solid line : 2D DNS)

의 화염으로부터 와동을 나타내는 와도가 점차 화염에 가까워지면 화염면이 점차 왜곡되고 있는 것을 알 수 있다. 와동이 생성된 후 3.0ms가 경과한 (c)의 경우에는 와동에 의한 높은 스트레인율에 영향을 받아 중심축 근처에서 최고 화염온도가 1400K 정도로서, (a)의 초기온도인 1730K보다 많이 낮아졌음을 알 수 있다. 3.6ms가 경과한 (d)의 경우는 스트레인율이 더욱 증가하여 화염이 국소소염에 이른 형상을 보여주고 있다. Fig. 5는 연료측 와동과 화염과의 상호작용에 대한 경우이지만, 공기측 와동-화염과의 상호작용에서도 소염에 이르는 시간의 차이를 보이는 것을 제외하면 거의 유사한 현상을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

Fig. 6은 Fig. 5와 동일한 순간에서 화염의 열발생율(Heat Release Rate)을 도시한 것이다. 0ms의 초기의 화염에 대해 와동이 접근하면 화염에

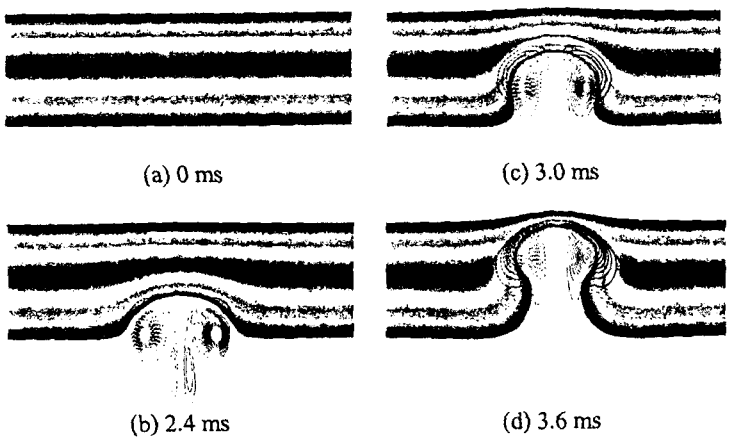



**Fig. 5** Temporal evolution of flame temperature and vorticity profile

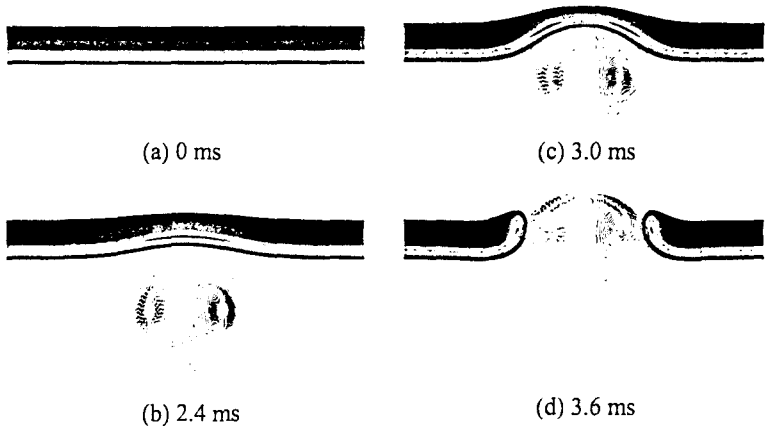



**Fig. 6** Temporal evolution of heat release rate and vorticity profile.

의 열발생율은 점차 증가하는 것을 알 수 있다. 이것은 와동이 화염에 가하는 스트레인율 증가에 따라 연료와 산화제의 구배가 증가하고 화염면에 유입되는 연료-산화제의 양이 증가하므로 이 양을 연소시키면서 발생하는 열은 증가하기 때문이다. 그러나 와동에 의한 스트레인율이 더욱 증가하게 되면, 연료와 산화제의 유입이 더욱 증가하게 되어, 연료와 산화제를 모두 소모할 수 없는 상태가 되어 중심축에서 국소소염이 된다. (d)인 경우에는 소염된 이후, 와동 주위에 에지 화염(Edge Flame)이 생기는 것을 보여주고 있다.

Fig. 7, 8에는 화염-와동 상호작용이 진행되는 동안 시간에 따른 화염의 변화를 관찰하기 위해 중심축 상에서의 대표적 물리량 변화를 도시하였다. 먼저, Fig. 7에는 시간 변화에 따른 열발생율(기호)과 공간에 대해 적분된 열발생율( $\Omega_{HRR}$ : 선)을 도시하였다. 열발생율과 $\Omega_{HRR}$은 시간이 경과하여 와동이 화염에 접근할수록, Fig. 6에서 관찰한 것처럼 점차 증가하게 되어, 최고치를 가진후 급격히 감소하는 것을 알 수 있다. 열발생율 최고치와 $\Omega_{HRR}$의 최고치 위치는 약간 상이하나 전체적인 경향은 비슷하며 두 물리량이 거의 0에 가까워지는 시점은 거의 비슷함을 알 수 있다. $\Omega_{HRR}$은 화염대 전체에서의 열발생량과 관계되므로 화염의 강도와도 직결된다고 할 수 있다. 따라서, 본 논문에서는 $\Omega_{HRR}$가 최고가 되는 시점부터 최고점의 1%에 달하는 기간을 소염기간(연료측 와동 : I~II, 공기측 와동 : I'~II')으로 정의하였으며, $\Omega_{HRR}$가 최고치의 1%가 되는 시점을 화염이 완전히 소염된 것으로 간주하였다. 연료(실선)와 공기측(점선) 와동에 의한 소염기간은 각각 0.47ms, 0.40ms로서 비슷하지만, 공기측 와동에 의한 경우가 화염을 좀 더 일찍 소염시키는 것을 알 수 있다.

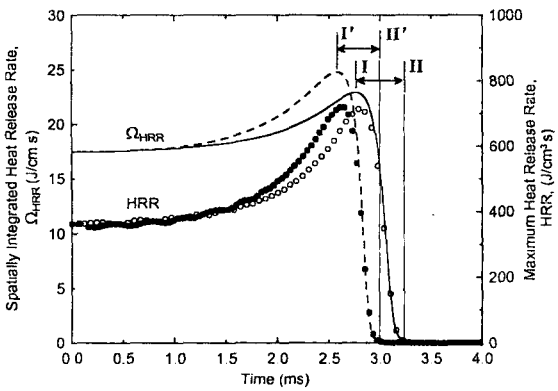



**Fig. 7** Heat release rate and integrated heat release rate variation during the flame-vortex interaction

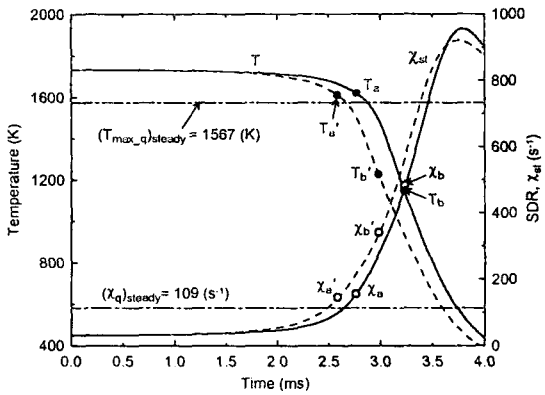



**Fig. 8** Temperature and scalar dissipation rate variation during flame-vortex interaction (a : extinction initiation point, b : full extinction point)

Fig. 8은 시간 변화에 따른 화염온도와 화염면에서의 스칼라 소산율(Scalar Dissipation Rate : SDR, $\chi_{st}$)을 나타낸 것이다. 일점쇄선으로 표시한 두 개의 가로선은 소염되기 직전의 정상상태 화염에 대한 온도 및 $\chi_{st}$ 값을 나타낸다. 시간에 대한 $\chi_{st}$의 변화에서 연료(실선) 및 공기측(점선) 와동-화염 상호작용의 경우, 정상상태의 화염에서보다 훨씬 큰 값의 $\chi_{st}$에서 완전 소염이 일어나는 비정상 효과를 보이고 있다. 정상상태의 화염은 소염이 발생할 경우 화염이 존재할 수 없지만, 비정상 효과가 동반되는 화염-와동 상호작용 형태에서는 완전 소염점에서도 연료측 와동에 의해서는 1148K, 공기측 와동에 의해서는 1231K의 비교적 높은 온도를 보이고 있음을 알 수 있다. 또한, 소염이 시작되는 점에서의 온도는 정상상태 화염의 소염 직전 온도보다는 다소 높으며, $\chi_{st}$ 값도 정상상태 화염의 소염 직전 값보다는 높은 것을 확인 할 수 있다.

위의 결과들에 보는 것처럼 와동과 상호작용하는 화염에서는 정상상태의 화염에서 관찰 할 수 없었던 여러 가지 현상을 관찰 할 수 있었다. 그러나, 연료 및 공기측 와동에 의해 소염시점이 차이를 보이는 이유, 각 와동이 화염에 가하는 스트레인율의 차이 및 그 원인 등과 관련된 구체적인 결론을 얻기 위해서는 향후 좀 더 다양하게 조건을 변화시킨 추가적인 연구가 필요할 것으로 사료된다.

## 5. 결론

연료 및 공기측에서 생성시킨 와동과 $CH_4/N_2$-공기 대향류 비예혼합화염과의 상호작용을 해석하기 위해 16단계 ARM을 적용한 수치계산 연구를 수행하였다.

본 연구에 이용된 16단계 ARM은 실험에서 얻어진 소염점을 잘 예측하도록 수정이 되었으며, 이 수정된 반응기구를 이용하여 대향류화염에 대해 계산한 결과는 상세반응기구를 이용한 결과와 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있었다.

수정된 반응기구를 이용한, 화염-와동 상호작용에 대한 수치계산에서는 와동에 의한 중심축상에서의 국소소염 현상을 관찰할 수 있었다. 또한, 화염-와동 상호작용이 일어날 경우에는 공기측 와동이 연료측 와동보다 화염을 좀 더 일찍 소염시키는 것을 확인하였으며, 본 연구의 계산조건하에서는 와동과 상호작용하는 화염이 정상상태의 화염보다 훨씬 큰 $\chi_{st}$에서 소염되는 비정상 효과를 관찰할 수 있었다.

## 후기

본 연구는 연소기술연구센터(Combustion Engi- neering Research Center ; CERC)의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다. 이에 감사드립니다.

## 참고문헌

[1] Bedat, B, Egolfopoulos, FN and Poinsot, T, *Combust. Flames*, Vol.119, (1999), pp.69-83.
[2] Montgomery, CJ, Kosaly, G and Riley, JJ, *Combust. Flames*, Vol.113, (1997), pp.113-144.
[3] Peters, N and Kee, RJ, *Combust. Flames*, Vol. 68, (1987), pp.17-29.
[4] Kee, RJ, Rupley, FM and Miller, JA, *SAND89-8009B*, (1989)
[5] Kee, RJ, Dixon-Lewis, G, Warnatz, J, Coltrin, ME and Miller, JA, *SAND86-8246*, (1986)
[6] Najm, HN, Wyckoff, PS and Knio, OM, *J. Comput. Physics*, Vol.143, (1998), pp.381-402.
[7] Hirt, CW and Cook, JL, *J. Comput. Physics*, Vol.10, (1972), pp.324-340.
[8] 오창보, 이창언, 대한기계학회논문집 B권, 제25권 제8호, (2001), pp.1087-1096.
[9] Sung, CJ, Liu, JB and Law, CK, *Combust. Flames*, Vol.102, (1995), pp.481-492.
[10] Bowman, CT, Hanson, RK, Davidson, DF, Golden, DM, Frenklach, M and Goldenberg, M, *http://www.me.berkeley.edu/gri_ mech/*
[11] Miller, JA and Bowman, CT, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol.15, (1989), pp.287-338.
[12] Lutz, AE, Kee, RJ, Grcar, JF and Rupley, FM, *SAND96-8243*, (1997).
[13] Seshadri, K and Williams, FA, *J. Heat Mass Trasfer*, Vol.21, (1978), pp.251-253.
[14] Wang, H and Frenklach, M, *Combust. Flames*, Vol.110, (1997), pp.173-221.
[15] Homma, R and Chen, JY, *J. Eng. Gas Turbine Power*, Vol.123, (2001), pp.303-307.
[16] Sung, CJ, Law, CK and Chen, JY, *Combust. Flames*, Vol.125, (2001), pp.906-919.
[17] Bilger, RW, *Proceed. Combust. Inst.*, Vol.22, (1988), pp.475-488.