

# CMC model에 의한 near-extinction methane/air turbulent jet diffusion flame의 수치적 모사

강승탁\* · 김승현\* · 허강열\*\*†

## Numerical Study on Methane/Air Turbulent Jet Diffusion Flames Near-Extinction Using Conditional Moment Closure Model

Seung-Tak Kang\*, Seung-Hyun Kim\* and Kang-Yul Huh\*\*†

### ABSTRACT

The first-order conditional moment closure (CMC) model is applied to CH<sub>4</sub>/Air turbulent jet diffusion flames(Sandia Flame D, E and F). The flow and mixing fields are calculated by fast chemistry assumption and a beta function pdf for mixture fraction. Reacting scalar fields are calculated by elliptic CMC formulation. The results for Flame D show reasonable agreement with the measured conditional mean temperature and mass fractions of major species, although with discrepancy on the fuel rich side. The discrepancy tends to increase as the level of local extinction increases. Second-order CMC may be needed for better prediction of these near-extinction flames.

**Key Words** : Conditional moment closure(CMC), Conserved scalar, Mixture fraction, Probability density function(pdf), Scalar dissipation rate

### 1. 서 론

난류와 화학 반응간의 상호작용에 대한 모델링은 난류 연소의 계산에 있어서 근본적으로 중요하다. 일반적으로 화학반응의 속도가 난류시간스케일에 비해 충분히 빠르면 반응 스칼라(reacting scalar)들은 난류 확산 화염에서의 혼합을 기술하는 보존 스칼라(conserved scalar), 즉 혼합분율(mixture fraction)의 함수로 주어진다. 복잡한 난류와 화학 반응의 상호작용은 층류 화염편 모델[1], 확률밀도함수 모델[2], Conditional Moment Closure(CMC) [3-6]와 같은 방법에 의해 모델링 될 수 있다.

잘 알려진 바와 같이 fast chemistry assumption은 탄화수소 화염에 대해 화학종의 농도나 온도의 예측에 있어 만족할 만한 결과를

주지 못하며 층류 화염편 모델의 경우 화염 두께가 난류 길이 스케일보다 작을 때 적용할 수 있다. 그리고 복잡한 화학반응 메커니즘을 수반하는 실제 난류 연소에 대한 PDF계산은 상당한 계산 비용이 들며 분자 확산 항에 대한 추가의 모델링이 필요하다.

CMC 모델은 적절한 비용으로, 다양한 화학적 메커니즘을 수반하는 난류와 화학반응간의 상호작용을 다룰 수 있는 방법이다. CMC 방법은 화학종의 질량분율(mass fraction)에 대한 보존식으로부터 유도되며 그 결과는 엄밀한 이론적 토대를 갖는다. 이 방법의 기본가정은 대부분의 온도와 조성의 섭동이 혼합분율의 섭동에 의한 것이며 조건평균 화학 반응율을 이 변수에 대한 조건평균으로 나타낼 수 있다는 개념에서 비롯된다.

난류제트화염에서 제트분사속도를 충분히 증가시키면 난류시간스케일이 감소하여 국부소멸(local extinction)이 일어난다. 국부소멸이 일어나는 화염에서는 난류시간스케일이 연소반응시간스케일과 비슷해지며 스칼라소산율의 섭동이 화염

\* 포항 공과 대학교 기계공학과 대학원

\*\* 포항 공과 대학교 기계공학과

† 연락처 huh@postech.ac.kr

구조에 큰 영향을 미친다. 본 연구에서는 국부 소염이 일어나는 난류 매탄/공기 제트화염에 일차 CMC 모델을 적용하여 계산하고 그 타당성에 관하여 검증하고자 한다.

## 2. 수학적 모델

### 2.1 유동장과 혼합장(Mixing field)

유동장과 혼합장은 보존 스칼라법과 난류모델에 있어  $k-\epsilon$  모델을 적용하여 계산하였다. 혼합분을 공간상에서의 화염은 임의의 낮은 변형률 ( $100 \text{ s}^{-1}$ )을 갖는 층류 화염편의 구조를 갖는 것으로 가정하였다. Favre pdf는 밀도가중 평균값과 혼합분율의 분산(variance)항으로 나타내어지는 베타 함수 형태를 갖는 것으로 가정하였다. 유동장의 보다 나은 예측을 위해  $\epsilon$  식에서  $C_{\epsilon 1}$ 는 표준 상수 1.44 대신 1.6으로 수정하였다

### 2.2 반응 스칼라장(Reacting scalar field)

화학종  $i$ 의 조건 평균 질량 분율은 다음과 같이 정의된다.

$$Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) = \langle Y_i(\mathbf{x}, t) | \xi(\mathbf{x}, t) = \eta \rangle \quad (1)$$

여기서  $Y_i$ 는 화학종  $i$ 의 질량분율이며  $\eta$ 는 이동하는 혼합분율  $\xi$ 에 대한 표본 공간 변수, 그리고  $\mathbf{x}$ 와  $t$ 는 각각 공간과 시간에 대한 좌표를 의미한다.  $\langle | \rangle$ 는 수직 바의 오른쪽에 있는 조건에 종속되는 앙상블 평균을 의미한다. Reynolds 수가 큰 유동에서  $Q_i$ 의 지배 방정식은 다음과 같다.[6]

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \langle U | \eta \rangle \cdot \nabla Q_i + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u} y_i | \eta \rangle P(\eta) \langle \rho | \eta \rangle)}{P(\eta) \langle \rho | \eta \rangle} \\ = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

여기서  $N \equiv D \nabla \xi \cdot \nabla \xi$  과  $\rho$ 는 각각 스칼라 소산율(scalar dissipation rate)과 밀도를 나타내며 분자확산계수  $D$ 는 모든 화학종에 대해서 같다고 가정한다. 그리고  $\mathbf{u}$ 와  $y_i$ 는 속도와 화학종  $i$ 의 질량 분율의 조건 섭동(conditional fluctuation)을 나타낸다. 우변의 두 번째 항은 조건 평균된 화학 반응 항이다. 여기서 pdf,  $P(\eta)$ 와 Favre pdf 사이에는 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$\langle \rho | \eta \rangle P(\eta) = \bar{\rho} \tilde{P}(\eta) \quad (3)$$

여기서  $\bar{\rho}$ 는 평균 밀도이다. Favre pdf  $\tilde{P}(\eta)$ 는 앞서 말한 것처럼 베타 함수 pdf로 가정되었다. 조건 평균된 속도는 다음과 같이 근사하였다.[7]

$$\langle U | \eta \rangle = \tilde{U} + \frac{\widetilde{\mathbf{u}'' \xi''}}{\xi''^2} (\eta - \xi) \quad (4)$$

여기서 위 첨자,  $''$ 는 비조건 밀도 가중 평균에 대한 요동을 나타낸다. 이러한 선형 모델은 혼합분율과 속도가 jointly Gaussian pdf[7]를 따를 경우 정확한 수식화가 된다. 화학반응이 있는 영역의 부분에서는 조건평균 스칼라 소산율의 정확한 모델링이 상당히 중요하다. 예측된 조건 평균 값들은 조건평균 스칼라 소산율에 상당한 의존성을 갖는다. 조건평균 스칼라 소산율은 다음과 같이 국부 혼합 변수들로 다음과 같이 모델링 된다.

$$\langle N | \eta \rangle = F(\eta, \xi, \widetilde{\xi''^2}, \bar{N}) \quad (5)$$

식(5)의 함수 형태는 이론적인 방법이나 실험적인 조사에 의해 결정될 수 있다. 대항류 혼합 모델에서 조건평균 스칼라 소산율은 다음과 같이 주어진다.

$$\langle N | \eta \rangle = \langle N | \eta = 0.5 \rangle \exp[-2(\text{erf}^{-1}(2\eta - 1))^2] \quad (6)$$

여기서

$$\langle N | \eta = 0.5 \rangle = \int_0^1 \frac{\bar{N}}{\exp[-2(\text{erf}^{-1}(2\eta - 1))^2]} d\eta \quad (7)$$

밀도 가중 평균 스칼라 소산율  $\bar{N}$ 은 속도와 혼합분율에 대한 시간 스케일의 등가로부터 얻어진다[9]. 비선형 조건 평균 화학반응율은 일차 단항의 경우 다음과 같이 근사 되어진다.

$$\langle w_i(Y, h) | \eta \rangle \approx w_i(Q, Q_h) \quad (8)$$

여기서  $Q_h$ 는 엔탈피의 조건평균값이다. 정상 상태에서 식(1)의 닫힌 형태는 조건평균된 난류 플럭스에 대한 구배 확산 가정을 이용하여 다음과 같이 쓸 수 있다.[8]

$$\begin{aligned} \langle U | \eta \rangle - D_i \nabla \ln(\bar{\rho} \tilde{P}(\eta)) \cdot \nabla Q_i - \nabla \cdot D_i \nabla Q_i \\ = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

여기서  $D_i$ 는 난류확산계수(turbulent diffusivity)이다. 조건평균 엔탈피에 대한 식은 다음과 같이 같은 형태를 갖는다.

$$[\langle U | \eta \rangle - D_i \nabla \ln(\bar{\rho} \bar{P}(\eta))] \cdot \nabla Q_h - \nabla \cdot D_i \nabla Q_h = \langle N | \eta \rangle - \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \langle S_R | \eta \rangle \quad (10)$$

조건 평균된 복사 손실은 다음과 같이 가정된다.

$$\langle S_R | \eta \rangle = \sum_i \kappa_i (Q_T^i - T_0^i) \quad (11)$$

여기서  $Q_T$ 와  $T_0$ 는 각각 조건평균온도와 실내온도를 나타낸다. 화학종  $i$ 의 Plank 평균 흡수계수(absorption coefficient),  $\kappa_i$ 는 RADCAL code에 의한 결과를 곡선적합 함으로써 계산된다[9,10]. 혼합분율 공간상에서 식(7)에 대한 경계조건은 다음과 같이 주어진다.

$$Q_i(\mathbf{x}, \eta=0) = Y_{i,O} \quad (12)$$

$$Q_i(\mathbf{x}, \eta=1) = Y_{i,F} \quad (13)$$

여기서  $Y_{i,O}$ 와  $Y_{i,F}$ 는 각각 산화제와 연료의 흐름 내부에서 화학종  $i$ 의 질량분율이다. 벽에 수직인  $Q_i$ 의 구배는 0으로 주었다. 유입구에서의 화학종 질량분율의 조건평균은 유동장 계산에서 가정된 평형상태 부근의 값으로 주어진다.

### 3. 수치적 모사

유동장과 혼합장은 도메인을 축방향과 반경방향에 대해  $70 \times 40$ 의 제어체적으로 나누었고 SIMPLE 알고리즘을 이용하여 계산하였다. 또한 앞서 말하였듯이 임의의 변형률 속도 ( $100 \text{ s}^{-1}$ )를 갖는 층류 화염편에 대해 계산을 수행하였다. 이러한 접근방법에 따르는 오차는 평균 밀도가 Damköhler 수가 큰 경우에 있어서의 연소 모델에 대해서 민감하지 않기 때문에 무시할만하다. CMC 식들은 주어진 유동장과 혼합장이 정상 상태에 도달할 때까지 가상 점진법(fractional step method)에 의해 풀고 있다.[8] 여기서는 두 가지의 가상 점진법이 사용된다. 하나는 물리적 공간상에서의 전달에 대해서이고, 또 다른 하나는 혼합분율 공간상에서의 화학 반응과 확산에 대한 것이다. 전자의 단계에서는 implicit Euler

method를 이용하여 적분되며, 후자는 stiff Ordinary Differential Equation solver, VODE[11]를 이용하여 적분된다. CMC 계산에 있어서는 조건평균 값들이 공간상에서의 변화가 크지 않은 점을 고려하여 축방향과 반경방향으로  $20 \times 10$ 의 격자를 이용하였다. 주어진 연료와 NO의 연소에 대해서는 약 50여 개의 화학종과 200개 이상의 화학반응들로 이루어진 GRI Mech 2.11 메커니즘을 적용하였다.

### 4. 테스트 case

Sandia 국립 연구소에서는 유체의 난류 거동과 화학 반응 과정간의 상호작용에 대한 보다 근본적인 이해를 위한 연구를 수행하고 있으며 이러한 목적의 일환으로 체계적으로 정리된 화염의 인터넷 라이브러리를 구축하여 제공하고 있다. Flame D, E, F에 대한 실험 데이터는 Turbulent Nonpremixed Flame Workshop에서의 test flame으로서 현재 개발 중인 난류 연소 모델들의 성능을 비교하기 위한 검증 자료로서 널리 활용되고 있다. 이들 테스트 flame(Flame D,E,F)에 대한 정보들은 아래 표에 정리하였다.

	Reynolds number	Dimensions	기타
flame D	22400	노즐 직경: 7.2 mm Pilot 직경: 18.2 mm	Main jet: 25% CH <sub>4</sub> , 75% air Fstic=0.351, Lvis~67d Pilot: premixture of CH <sub>4</sub> , air, CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> phi = 0.77
flame E	33600		
flame F	44800		

### 5. 결과

#### 5.1 유동장과 혼합장

Flame D와 Flame F에 대한 반경 방향의 평균 혼합분율의 분포는 각각 Fig. 1, Fig.2와 같다. 평균 혼합분율의 반경방향 분포는 하류(down stream) 영역에서 비교적 잘 일치하고 있음을 볼 수 있다. 그러나,  $x/d=30$  근처의 상류(upstream) 영역에서, 불일치하는 부분은 병행류(co-flow) 속도를 가정하는 부분에 있어서의 약간의 차이와 노즐에서의 경계층에 의한 영향 때문인 것으로 보인다. 보통 초기 조건에서의 약간의 오차는 노즐 근처에서의 CFD 결과에 오차를 발생시키는 원인이 될 수 있으며 k-ε 모델 상수에 대해서도 추가적인 조정이 필요한 것으로 생각된다. 하류 영역에서는 k-ε 난류모델이 혼합분율을 과다 예측하는데 상당한 영향을 미치고 있다. 계산된 화염의 길이는 실험 데이터에서의 길이보다 약간 짧

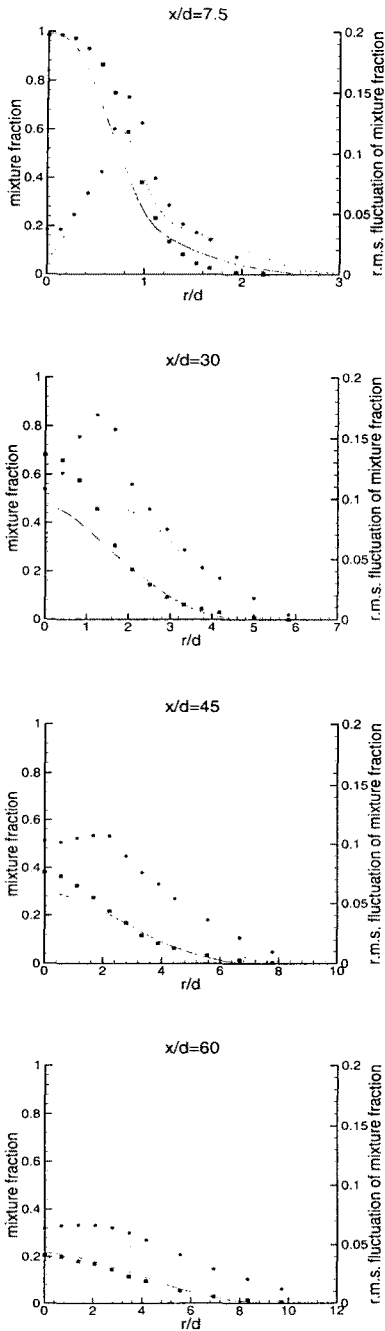


Fig. 1 Radial profiles of Favre averaged mixture fraction and rms of its fluctuations in flame D (symbol : measurements, line : predictions)

게 나타나고 있다. 유동장과 혼합장이 반응 스킬라장과 밀접한 연관성을 갖고 있는 점을 위에서

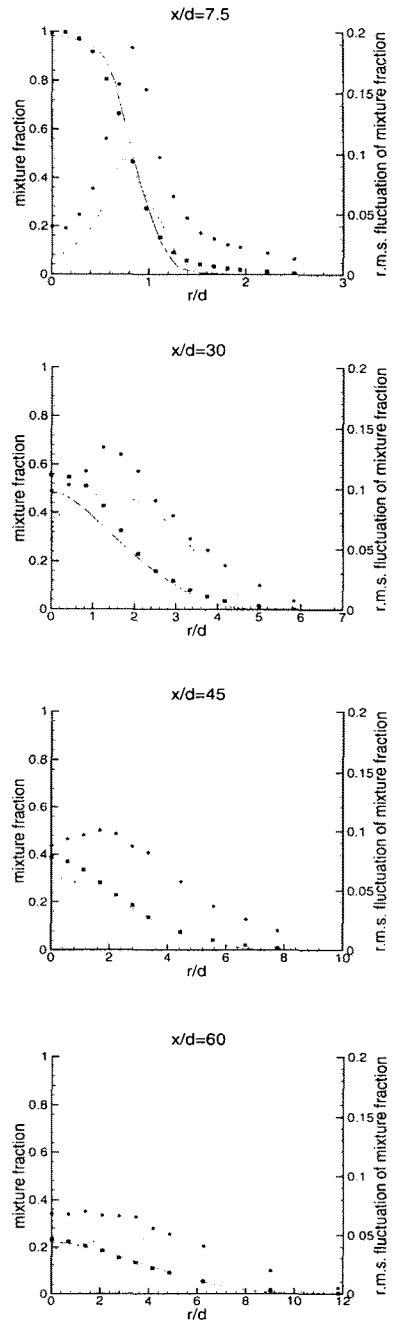


Fig. 2 Radial profiles of Favre averaged mixture fraction and rms of its fluctuations in flame F (symbol : measurements, line : predictions)

의 유동장의 결과와 반응 스킬라장 결과로부터 확인할 수 있다.

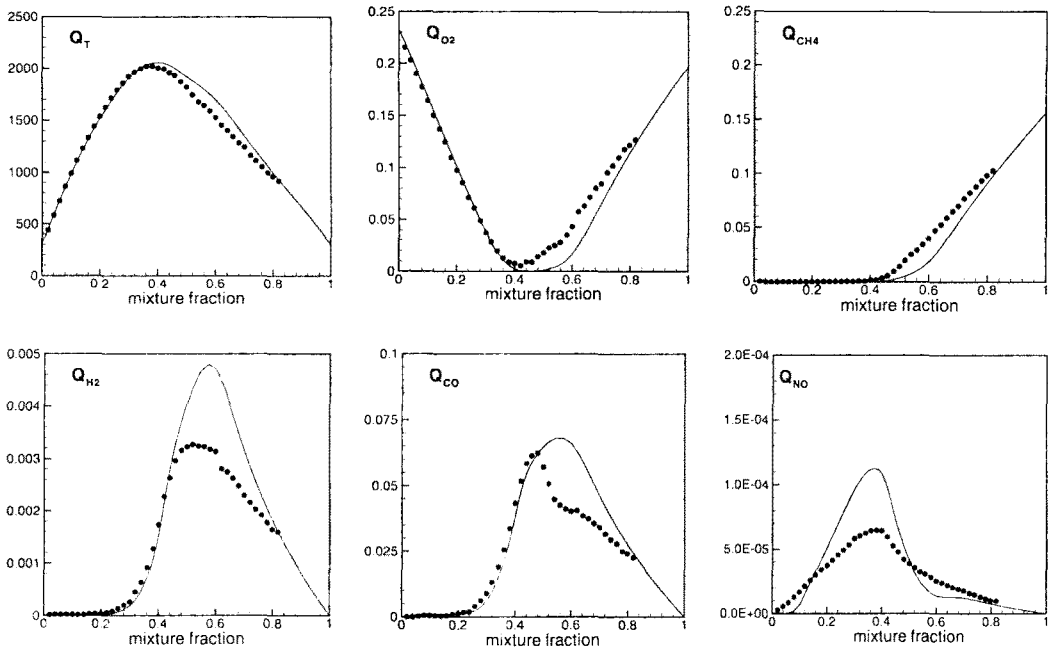


Fig. 3 Conditional mean temperature and mass fractions of O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO, and NO at x/d=30 in flame D (symbol : measurements, line : predictions)

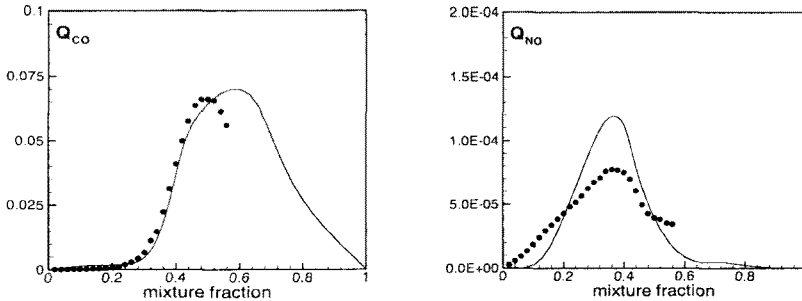


Fig. 4 Conditional mean mass fractions of CO and NO at x/d=45 in flame D (symbol : measurements, line : predictions)

### 5.2 조건평균 반응 스칼라장

Fig. 3은 x/d=30인 위치에서의 Flame D의 경우에 대한 온도와 반응 스칼라의 조건 평균값의 계산 결과와 실험 데이터를 보여주고 있다. CMC 결과는 GRI2.11 메커니즘을 통해 얻은 것이다. 온도에 대한 계산 결과는 연료가 희박한 영역(fuel-lean side)에서 실험 데이터와 좋은 일치성을 보이고 있다. 조건 평균 온도의 최대값도 계산결과와 실험데이터가 서로 일치하고 있음을 알 수 있으며 두 경우 모두 stoichiometric한 위치

보다 약간 희박한 위치에서 나타나고 있다. 그러나 연료비가 상대적으로 큰 영역(fuel-rich side)으로 갈수록 계산 결과와 실험 데이터 사이의 차이가 증가하고 있다.

O<sub>2</sub>에 대한 계산결과 또한 실험데이터와 비교적 잘 일치하고 있음을 볼 수 있는데, 대략  $\eta = 0.42$ 인 위치에서 최소값을 갖고 양방향으로 갈수록 증가하고 있다. 그러나 연료비가 큰 영역에서는 실험 데이터와 비교적으로 큰 차이를 보이고 있다.  $0.4 < \eta < 0.6$ 인 영역에서는 O<sub>2</sub>의 소모가 실제 경우보다 크게 나타나고 있음을 알 수 있으며 이

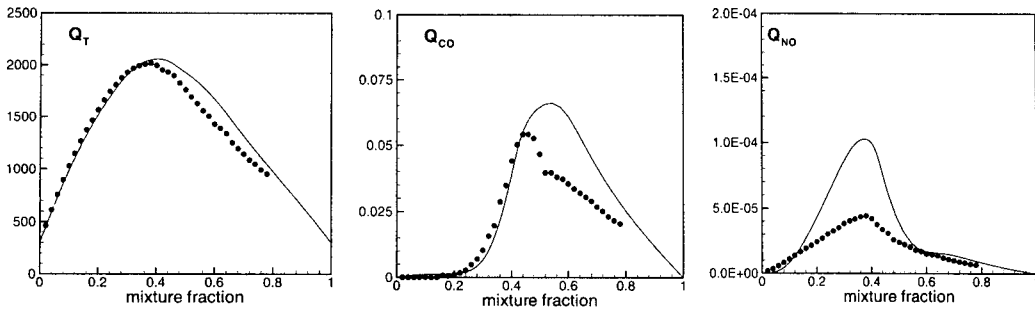


Fig. 5 Conditional mean temperature and mass fractions of CO and NO at  $x/d=30$  in flame E (symbol : measurements, line : predictions)

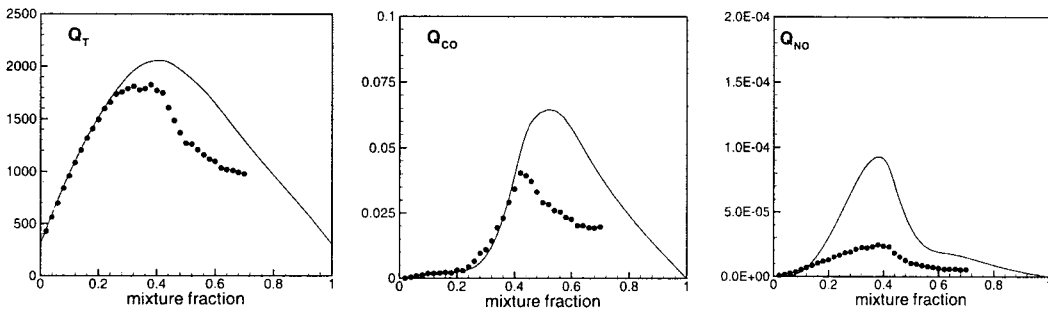


Fig. 6 Conditional mean temperature and mass fractions of CO and NO at  $x/d=30$  in flame F (symbol : measurements, line : predictions)

영역에서는 여기서 이용된 화학반응 모델링이 부적합한 것으로 보인다. 연료비가 큰 영역에서 계산 결과와 실험 데이터가 일치하지 않는 경향은 연료의 분포에서도 나타나고 있으며 여기에서도 연료비가 큰 영역에서의 화학반응 모델의 타당성 문제가 제기될 수 있다.

CO와  $H_2$ 의 계산 결과에서도 연료 희박 영역에서는 실험 데이터와 잘 일치하지만 연료비가 큰 영역에서는 실험 데이터보다 높게 나타나고 있는 것을 볼 수 있으며, NO의 경우 전체적으로 상당히 크게 예측하고 있으나, 실험 데이터에서와 같이 stoichiometric한 위치에서 최대가 되고 연료비가 작은 영역에서는 계산 결과가 높게, 연료비가 큰 영역에서는 낮게 나타나고 있다.

Fig.4는  $x/d=45$ 인 위치에서의 Flame D에 대한 온도와 반응 스칼라의 조건 평균값의 계산 결과와 실험 데이터를 보여주고 있다. 하류(downstream)영역에서의 온도와 반응 스칼라의 조건평균값에 대한 전반적인 경향은 상류(upstream)영역에서와 유사하게 나타난다. 한편 연료의 비가 큰 영역에서 반응 스칼라에 대한 실험 데이터는 제공되고 있지 않다.

Fig. 5와 Fig. 6에서는 Flame E와 Flame F에 대한  $x/d=30$ 인 위치에서의 온도와 반응 스칼라의 질량분율에 대한 조건평균값을 보여주고 있다. 이로부터 Flame D에서 Flame F로 갈수록, 즉 연료제트분사속도가 커짐에 따라서 계산결과와 실험 데이터 값의 차가 커지고 있다는 사실을 알 수 있으며 이것은 Flame F로 갈수록 난류시간 스케일이 감소하여 국부 소멸(extinction)이 증가하게 됨에 따른 것이다. 즉 일차 CMC식에 대한 계산 결과는 스칼라 소산율의 섭동이 작은 경우(Flame D case)에는 대체로 실험 데이터와 잘 일치하지만 섭동이 큰 경우(Flame F case)에 대해서는 이러한 섭동에 대한 추가적인 모델링을 포함하는 이차 CMC식을 이용한 계산이 필요함을 보여준다.

## 6. 결론

1) Favre 평균 유동장의 경우 상류 영역에서 계산 결과와 실험 데이터가 상당한 차이를 보이고 있으며 이는 입구에서의 난류경계 조건과 k-e

모델 상수 조정의 필요상을 나타낸다. 특히 하류 영역에서 실험 결과와 비교적 잘 일치하고 있다.

2) 온도와 반응 스킬라의 조건 평균값의 분포는 Flame D의 경우 NO를 제외한 화학종에 대해 비교적 잘 일치하고 있으며, Flame E, Flame F로 갈수록 계산 결과와 실험 데이터 값 사이의 차가 커지고 있다. 연료가 과농한 영역에서의 불 일치는 화학반응 메커니즘의 부적절성에 기인하는 것으로 판단된다.

3) Flame F로 갈수록 계산 결과와 실험 데이터 값 사이의 차가 커지는 것은 제트분사속도의 증가로 난류시간 스케일이 감소하게 되면서 국부 소멸(extinction)이 발생함에 따른 것이며 국부 소멸이 발생하는 화염에서는 스킬라 소산율의 섭동이 크기 때문에 이차 CMC식을 이용함으로써 계산 결과를 향상시킬 수 있을 것으로 예측된다.

## 참고문헌

- [1] N. Peters, *Twenty-First Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, 1986, pp. 1231-1250.
- [2] S. B. Pope, *Twenty-third Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, pp. 591-612.
- [3] A. Yu. Klimenko, *Fluid Dynamics* 25, 1990, pp. 327-334.
- [4] A. Yu. Klimenko, *Fluid Dynamics* 28(5), 1993, pp. 630-637.
- [5] R. W. Bilger, "Conditional moment method for turbulent reacting flow using Crocco variable conditions," Charles Kolling Report, TNF99, University of Sydney, 1991.
- [6] R. W. Bilger, *Phys. Fluids*, A5, 1993, pp. 436-444.
- [7] V. R. Kuznetsov and V. A. Sabel'nikov, *Turbulence and Combustion*, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1990.
- [8] S. H. Kim, K. Y. Huh, and T. Liu, *Combustion and Flame* 120, 2000, pp. 75-90.
- [9] <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- [10] W. L. Grosshandler, "RADCAL: A Narrow-Band Model for Radiation Calculation in a Combustion Environment," NIST Technical Note 1402, 1993.
- [11] P. N. Brown, G. D. Byrne and A. C. Hindmarsh, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 10, 1989, pp. 1038.