

Zone-conditioned CMC 모델을 이용한 부분예혼합 난류연소 모델링

이은주* · 김승현* · 허강열**

Modeling of Partially Premixed Turbulent Combustion by Zone-Conditioned Conditional Moment Closure

Eunju Lee, Seung H. Kim and Kang Y. Huh

ABSTRACT

The zone-conditioned CMC equations are derived by taking an unconditional average of the generic conservation equations multiplied by delta and Heaviside functions in terms of mixture fraction and reaction progress variable. The resulting equations are essentially in the same form as the single zone CMC equations except for separate flow fields for burned and unburned gas. The zone-conditioned two-fluid equations are applied to a stagnating turbulent premixed flame brush of Cheng and Shepherd[5]. It is shown that the flame stretch factor is of crucial importance to accurately reproduce the measured mean reaction progress variable and conditional velocities. Further work is in progress for the relationship between surface and volume averages and extension to partially premixed combustion on the basis of a triple flame structure, e. g. in a lifted turbulent diffusion flame.

Key Words : zone conditioning, CMC(conditional moment closure), partially premixed turbulent combustion, triple flame

1. 서 론

대부분의 산업용 연소기기는 연소 속도를 증대시키기 위해 난류 유동 조건에서 이루어지며 일적으로 연료/공기의 유입 혹은 분포 형태와 열출 화학반응과 난류에 의한 혼합의 두 시간 스케일의 상대적인 비교에 의해 연소 영역이 결정된다. 지금까지 연료/공기가 완전히 혼합된 상태 유입되거나 격리된 상태에서 연소가 이루어지 경우에 대하여 대부분의 연소 연구가 이루어 왔으나, 최근 부분예혼합 연소 기기의 중요성 부각되면서 삼지화염을 기본 구조로 하는 부분예혼합난류연소 모델링에 대한 연구가 국내외

에서 활발히 진행되고 있다.[1]

삼지화염은 가연한계 내의 불균일한 분포의 예혼합기에 대해 국부 조건에 따라 층류예혼합화염에 의한 연소가 먼저 일어나며 그 뒤를 이어 연료가 남아있는 과농영역과 산소가 남아있는 희박영역 간에 난류혼합에 의한 확산연소가 진행되는 화염 구조를 가진다. 따라서 예혼합연소와 확산연소가 공존하는 상황에서 두 가지의 연소 모드 특성을 모두 지니게 되며 국부 당량비 조건이 변함에 따라 화학반응 시간스케일이 난류 시간 스케일에 비해 항상 작다고 가정할 수 없다. 따라서 연료/공기 분포와 시간스케일이 임의적으로 변할 수 있는 일반적인 경우에 적용 가능한 난류 연소 모델이 필요함을 알 수 있다.

Peters 등[2]은 층류화염편 모델과 G-equation 모델을 결합한 형태의 모델로서 난류부상화염, 디젤 엔진, 가솔린 직분식 엔진 연소 등을 모사하였다. Pope 등[3]은 확률밀도함수에 대한 천이

포항공과대학교 기계공학과 대학원

포항공과대학교 기계공학과

연락처, huh@postech.ac.kr

방정식의 해를 Monte Carlo 방법에 의해 구하여 부분예혼합 난류연소에 대한 모사를 수행하였다. 그러나 Favre 평균된 형태의 보존식으로는 예혼합연소 영역에서 미연 가스과 기연 가스의 속도 차이에 의한 countergradient 확산 현상을 제대로 고려할 수 없으며, 또한 이론당량비에서 많이 벗어나 화학반응의 속도가 느린 경우 층류화염편 구조를 가정하기도 또한 어렵다. 본 논문에서는 이와 같은 문제의 해결 방안으로서 예혼합 연소 영역에서는 영역 조건 평균법(zone conditional averaging), 확산 연소 영역에서는 혼합분율에 대한 조건 평균법(conditional moment closure)을 적용하여 전체적으로 이중조건평균(double conditional averaging)한 보존식을 유도하였으며 현재 이를 난류부상화염에 적용하기 위한 연구를 진행 중이다.

2. Zone conditional averaging에 의한 예혼합난류연소 보존식

영역조건평균을 하기 위해 indicator 함수를 이용하는 방법과 delta 함수, Heaviside 함수등을 이용하는 두 가지 방법이 있으나 결과식은 마찬가지이다. 여기서는 다음의 CMC 식 유도 과정과의 일관성을 유지하기 위해 후자의 방법을 선택하였다.

Heaviside 함수의 시간 및 공간 미분은 다음과 같다.

$$\frac{\partial H_{\zeta}}{\partial t} = \delta_{\zeta} \frac{\partial c}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla H_{\zeta} = \delta_{\zeta} \nabla c \quad (2)$$

여기서 Heaviside 함수 $H_{\zeta} \equiv H(c - \zeta)$, delta 함수 $\delta_{\zeta} \equiv \delta(c - \zeta)$ 이며, c 는 반응진행변수 (reaction progress variable), ζ 는 c 의 표본변수 (sample space variable)이다. 위 두 식과 c 보존식[4]을 이용하면 다음과 같은 Heaviside 함수 H_{ζ} 의 보존식을 얻는다.

$$\frac{\partial H_{\zeta}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla H_{\zeta} = S_T \quad (3)$$

여기서 $S_T = \delta_{\zeta}(\nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \omega)/\rho$ 이며 c 에 대한 등가면(iso-surface) $c(\vec{x}_{\zeta}, t) = \zeta$ 를 정의하면 다음과 같이 등가면 \vec{x}_{ζ} 의 변위속도

(displacement speed) S_{ζ} 와 화염 밀도 Σ_{ζ} 의 곱으로 표현할 수 있다.

$$S_T = S_{\zeta} \Sigma_{\zeta} \quad (4)$$

여기서 $d\vec{x}_{\zeta}/dt \equiv \vec{v} + S_{\zeta} \vec{n}_{\zeta}$, $\Sigma_{\zeta} \equiv \delta_{\zeta} |\nabla c|$ 이고 \vec{n}_{ζ} 는 화염면에서 미연가스로 향하는 단위수직 벡터로서 $\vec{n}_{\zeta} \equiv -[\nabla c / |\nabla c|]_{\zeta}$ 이다. 층류화염편 구조에서 반응면 두께는 난류스케일에 비해 매우 얇으며, 화염면 \vec{x}_{ζ} 를 정의하면 다음 식들이 성립한다.

$$\frac{\partial H_{\zeta}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla H_{\zeta} = S_{\zeta} \Sigma_{\zeta} \quad (5)$$

$$\langle H_{\zeta} \rangle = \bar{c} \quad (6)$$

$$\langle \phi H_{\zeta} \rangle = \langle \phi \rangle_b \bar{c} \quad (7)$$

결과적으로 위 세 식을 이용해 연속방정식과 운동량보존식에 각각 H_{ζ} , 및 $1 - H_{\zeta}$ 를 곱한 후 평균하면 다음과 같이 기연영역과 미연영역에 대해 조건평균된 보존식을 얻을 수 있다.

질량

$$\frac{\partial \bar{c} \langle \rho \vec{v} \rangle_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c} \langle \rho \vec{v} \rangle_b) = \langle \rho S \rangle_{sb} \Sigma_f \quad (8)$$

$$\frac{\partial (1 - \bar{c}) \langle \rho \vec{v} \rangle_u}{\partial t} + \nabla \cdot ((1 - \bar{c}) \langle \rho \vec{v} \rangle_u) = -\langle \rho S \rangle_{su} \Sigma_f \quad (9)$$

운동량

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c} \langle \rho \vec{v} \rangle_b}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c} \langle \rho \vec{v} \vec{v} \rangle_b) = \\ -\nabla \cdot (\bar{c} \langle p \rangle_b) + \bar{c} \langle \rho \rangle_b \vec{g} + \langle \rho \vec{v} S \rangle_{sb} \Sigma_f \\ - \langle p \vec{n} \rangle_{sb} \Sigma_f \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (1 - \bar{c}) \langle \rho \vec{v} \rangle_u}{\partial t} + \nabla \cdot ((1 - \bar{c}) \langle \rho \vec{v} \vec{v} \rangle_u) = \\ -\nabla \cdot ((1 - \bar{c}) \langle p \rangle_u) + (1 - \bar{c}) \langle \rho \rangle_u \vec{g} \\ - \langle \rho \vec{v} S \rangle_{su} \Sigma_f + \langle p \vec{n} \rangle_{su} \Sigma_f \end{aligned} \quad (11)$$

경계면

$$\langle \rho S \rangle_{sb} = \langle \rho S \rangle_{su} \quad (12)$$

$$\langle \rho \vec{v} S \rangle_{sb} - \langle p \vec{n} \rangle_{sb} = \langle \rho \vec{v} S \rangle_{su} - \langle p \vec{n} \rangle_{su} \quad (13)$$

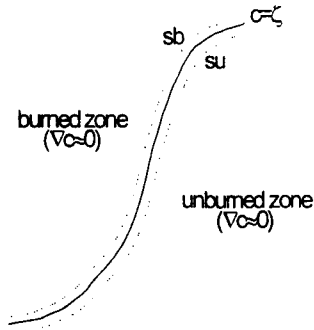


Fig. 1 Zone conditional surface average

여기서 su 및 sb는 Fig. 1에서와 같이 화염면에 접한 미연 및 기연가스에서의 면평균(surface average)을 의미하며 본 연구에서는 체적평균(volume average)로 근사하였다. 즉, 임의의 변수 Φ 에 대해 $\langle \Phi \rangle_{sb} \approx \langle \Phi \rangle_b$, $\langle \Phi \rangle_{su} \approx \langle \Phi \rangle_u$ 이다. 따라서 미연가스와 기연가스 평균압력 사이의 관계는 다음과 같다.

$$\langle p \rangle_u - \langle p \rangle_b \approx \langle p \rangle_{su} - \langle p \rangle_{sb} \quad (14)$$

$$= \langle \rho \rangle_u \langle a^2 \rangle S_{Lu}^0 (\langle \rho \rangle_u / \langle \rho \rangle_b - 1)$$

여기서 S_{Lu}^0 는 unstretched 층류화염속도, a 는 신장인수(stretch factor)로서 $\langle S_{Lu} \rangle = \langle a \rangle S_{Lu}^0$ 이다. 위 식을 이용하면 미지수는 \bar{c} , $\langle \vec{v} \rangle_b$, $\langle \vec{v} \rangle_u$ 와 $\langle p \rangle_u$ 이며 식(8)~(11)은 닫힌계를 형성한다.

3. Zone conditioned CMC에 의한 부분예혼합 난류연소 보존식

혼합분율 ξ 의 분포를 고려하면 c 는 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$c \equiv \frac{T - T_0}{T_e(\xi) - T_0} \quad (15)$$

여기서 T_0 는 미연가스 온도, T_e 는 평형온도이다. 앞 절에서와 유사하게 ξ 에 대한 조건평균을 위해 delta 함수 $\delta_\eta = \delta(\xi - \eta)$ 를 도입하고 ξ 보존식[4]을 이용하면 다음과 같은 delta 함수 δ_η 보존식을 얻는다.

$$\frac{\partial \delta_\eta}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \delta_\eta + \frac{\partial}{\partial \eta} (\delta_\eta \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi)) = 0 \quad (16)$$

여기서 η 는 ξ 의 표본변수이다. 결과적으로 위 식과 H_ξ 의 보존식, 식(5), 화학종 i 의 질량분율 Y_i 보존식[4]을 이용하면 영역 및 혼합분율에 대한 이중조건평균 $Q_{ib} \equiv \langle Y_i | \xi = \eta, c \rangle_{\zeta \geq} = \langle Y_i \rangle_{\eta b}$ 의 보존식을 얻을 수 있다.

$$\langle \vec{v} \rangle_{\eta b} \cdot \nabla Q_{ib} + \frac{\partial Q_{ib}}{\partial t} + \frac{\nabla \cdot (\rho_{\eta b} \langle \vec{v}' Y_i' \rangle_{\eta b} P_{\eta b})}{\rho_{\eta b} P_{\eta b}} \quad (17)$$

$$= \langle \omega_i \rangle_{\eta b} + \langle N \rangle_{\eta b} \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2}$$

여기서 $N \equiv D(\nabla \xi)^2$, $Y_i' = Y_i - Q_{ib}$, $\vec{v}' = \vec{v} - \langle \vec{v} \rangle_{\eta b}$, $P_{\eta b}$ 는 표본변수 ζ, η 에 대한 조인트 확률분포함수 $P(\xi = \eta, c | \zeta)$ 이다.

4. Stagnating Turbulent Premixed Flame 모사 결과

Stagnating 난류예혼합화염에 대한 일반적인 화학반응유동장의 형상이 Fig. 2에 묘사되어 있다. 노즐로부터 분사된 지름 D 의 반응물 제트는 거리 H 에 위치한 벽면에 충돌한다. 테스트 화염[5]에 대한 조건들은 Table 1에 정리되어 있다. 테스트 화염은 stagnating 난류유동장에서

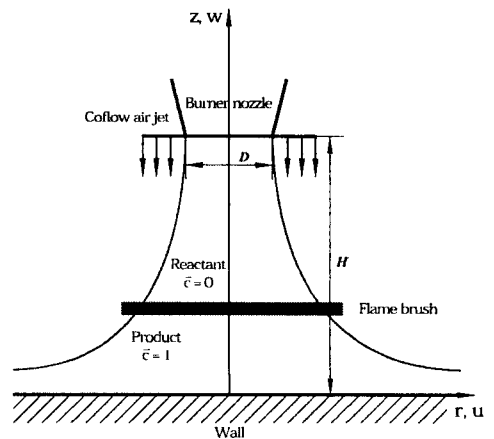


Fig. 2 Flame geometry

Table 1 Experimental conditions [5]

| Gas mixture | Ethylene/Air |
|-----------------|--------------|
| w_0 | 500cm/s |
| H | 10cm |
| D | 5.0cm |
| u' | 40cm/s |
| l_t | 0.3cm |
| ϕ | 1.0 |
| ρ_u/ρ_b | 8.0 |
| $u'/S_{L,u}^0$ | 0.53 |

blowback 범위 내에서 안정화 될 수 있는 극한 조건에 근접하며 화염에 대한 벽면의 영향은 거의 없다. 또한 난류스케일이 화학반응스케일보다 큰 wrinkled flamelet 영역에 속하며, 따라서 미연가스와 기연가스의 속도 차이에 의한 countergradient 확산 현상이 중요한 화염이다. 모든 결과는 주위공기의 영향을 받지 않는 대칭축(z 축)으로 한정되며 계산의 편의를 위해 주위공기를 기연가스로 대체하였다. 따라서 계산영역 내에서 미연가스 및 기연가스의 밀도는 상수이다. 유한체적법 SIMPLE 알고리즘을 사용하여 계산하였으며 대류항은 계산의 안정성을 위해 상류도식을 사용하였다. 노즐출구, 대칭축 및 벽면에서는 속도 및 압력, 반응진행변수에 대해 일반적인 경계조건을 사용하였으며[6] 그 외의 열린 경계면에서는 모든 변수의 수직구배를 0으로 하였다. 본 계산에서는 난류방정식을 풀지 않고 난류조건을 노즐출구에서의 값으로 고정시켰으며 이는 실험에서 조건평균된 축방향 속도의 난류강도가 난류화염 안에서 균일하다는 사실을 반영하기 위한 것이다. 표준 $k-\epsilon$ 난류 모델로써는 stagnating 난류유동장을 모사하기 어려운 것이 잘 알려져 있으며 본 연구의 관심영역인 대칭축상에서의 속도장 분포는 난류분포에 민감하지 않은 것으로 알려져 있다.

Fig. 3은 축 상에서의 속도 및 반응진행변수 분포를 보여준다. 화염면 밀도 $\Sigma_f = \langle \Sigma_f \rangle$ 는 countergradient 확산 현상이 강한 화염일 경우 $\bar{c}(1-\bar{c})$ 에 비례하는 것으로 알려져 있으며[7] 따라서 본 계산에서 Σ_f 는 $4\Sigma_{f,\max}\bar{c}(1-\bar{c})$ 의 형태로 모델링 하였다. 여기서 $\Sigma_{f,\max}$ 값은 가정 $\langle \vec{v} \rangle_b - \langle \vec{v} \rangle_u \approx \langle \vec{n} \rangle S_{L,u}(\rho_u/\rho_b - 1)$ 과 정의식 $\langle \vec{n} \rangle \Sigma_f = \nabla \bar{c}$ 및 실험데이터($\bar{c} = 0.5$ 에서의 $\langle \vec{v} \rangle_b$ 및 $\langle \vec{v} \rangle_u$)로부터 예측할 수 있으며 324m^{-1} 로 정하였다. 화염 선단의 위치가 실험에

비해 15mm정도 상류에 위치해 있으며 따라서 전체 반응물을 맞추기 위해 화염 두께가 3배 정도 더 두꺼워 졌다. 화염 선단의 위치는 대류, 반응물 및 미연가스와 기연가스의 slip 속도, $\langle \vec{v} \rangle_b - \langle \vec{v} \rangle_u$ 에 의해 결정되는 gradient 확산의 밸런스에 의해 결정된다. 따라서 현재 계산결과는 화염 선단에서 $\langle \vec{v} \rangle_b - \langle \vec{v} \rangle_u$ 가 실제에 비해 크게 예측되고 있는 것으로 보이며, 가정 $\langle \vec{v} \rangle_b - \langle \vec{v} \rangle_u \approx \langle \vec{v} \rangle_{sb} - \langle \vec{v} \rangle_{su}$ 는 화염 선단에서는 적용되기 힘든 것으로 판단된다. Fig. 4는 반응진행변수 c 의 난류플럭스를 보여주며 실험데이터에 비해 전체적으로 작게 예측되고 있다. 실험데이터는 없으나 Fig. 3에서의 결과로 볼 때 화염 선단부에서의 난류 플럭스 크기는 실제에 비해 클 것으로 판단된다. 실험과 달리 계산 결과는 $\tilde{c} = 0.65$ 이후에 다시 gradient diffusion 현상이 발생하나 화염 선단 위치의 차이가 커 벽면의 영향을 고려해야 하므로 단순히 모멘텀 식에 문제가 있다고 판단하긴 어렵다. Fig. 5 및 6은 각각 기연가스와 미연가스에서의 모멘텀 밸런스를 보여준다.

5. 결론

삼지화염을 기본 구조로 하는 부분예혼합난류연소 모델링을 위해 예혼합 연소 영역에서는 영역 조건 평균법(zone conditional averaging), 확산 연소 영역에서는 혼합분율에 대한 조건 평균법(conditional moment closure)을 적용하여 전체적으로 이중조건평균(double conditional averaging)한 보존식을 유도하였다.

예혼합 연소 영역의 영역 조건 평균 보존식을 stagnating 난류예혼합화염에 적용하여 계산한 결과 정성적으로 타당한 결과를 얻었으나 mean flame stretch factor의 변화를 반영하여야 정확한 화염 분포를 얻을 수 있을 것으로 판단된다. 또한 보존식의 closure를 위해 도입된 단순화 가정, $\langle \vec{v} \rangle_b - \langle \vec{v} \rangle_u \approx \langle \vec{v} \rangle_{sb} - \langle \vec{v} \rangle_{su}$,는 gradient diffusion이 우세한 화염 선단부에서 적용하기 힘든 것으로 판단되므로 이에 대한 영향 평가와 함께 개선된 모델이 요구된다.

후 기

본 연구에 대한 KAIST 연소기술연구센터의 지원에 감사드립니다.

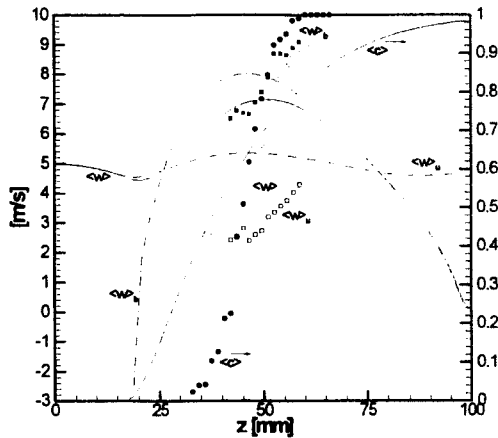


Fig. 3 Axial velocities and Reynolds averaged reaction progress variable profiles at the axis of symmetry: symbol=measurement, line=prediction

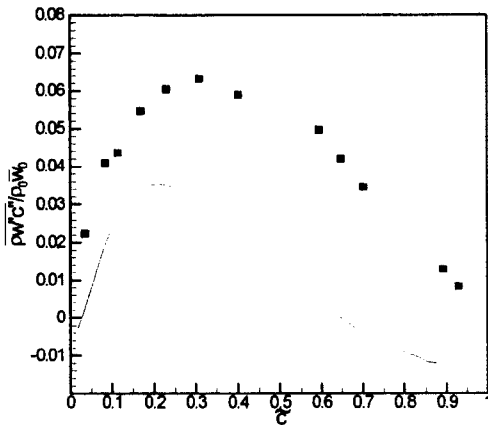


Fig. 4 Turbulent flux of the reaction progress variable: symbol=measurement, line=prediction

참고문헌

- [1] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000, pp. 237-261.
- [2] M. Chen, M. Herrmann and N. Peters, "Flamelet Modeling of Lifted Turbulent Methane/Air and Propane/Air Jet Diffusion Flames," *Proc. Combust. Inst.* Vol. 28, 2000, pp. 167-174.
- [3] J. Xu and S. B. Pope, "PDF Calculations of piloted jet turbulent flames of methane with

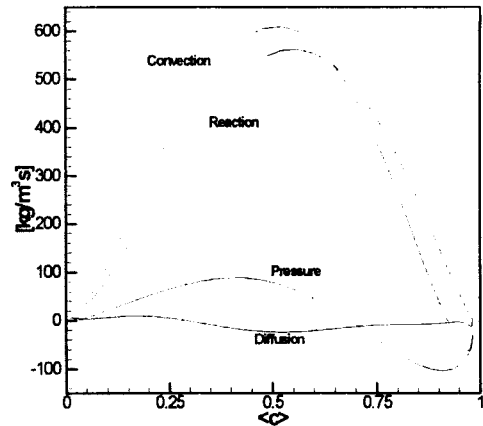


Fig. 5 Momentum balance in burned zone

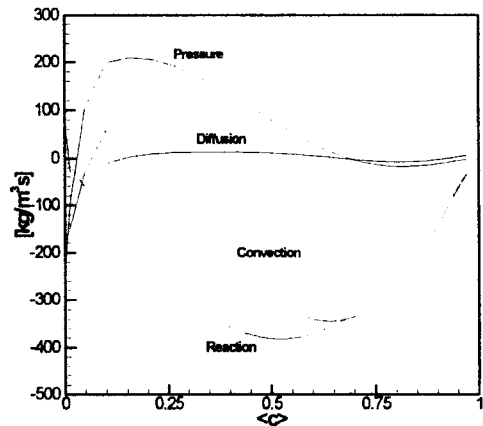


Fig. 6 Momentum balance in unburned zone

local extinction," Report FDA-99-06, Sibley School of Mechanical and Aerospace Engineering, Cornell University, 1999.

- [4] P. A. Libby and F. A. Williams, *Turbulent Reacting Flows*, Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [5] R. K. Cheng and I. G. Shepherd, "The Influence of Burner Geometry on Premixed Turbulent Flame Propagation," *Combust. Flame*, Vol. 85, 1991, pp.7-26.
- [6] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*, Longman, Malaysia, 1995, pp. 192-209.
- [7] G. G. Lee, K. Y. Huh and H. Kobayashi, "Measurement and Analysis of Flame Surface Density for Turbulent Premixed Combustion on a Nozzle-type Burner," *Combust. Flame*, Vol 122, 2000, pp.43-57.