난류 부분 예혼합 화염장에 대한 수치 모델링

김후중* · 김용모**† · 안국영***

Numerical Modeling for Turbulent Partially Premixed Flames

Hoojoong Kim, Yomgmo Kim and Kookyoung Ahn

ABSTRACT

The present study is focused on the subgrid scale combustion model in context with a Large Eddy Simulation. In order to deal with detailed chemical kinetic, the level-set method based on a flamelet model is addressed. In this model, the flame front is treated as an interface, represented by an iso-surface of a scalar field G. This iso-surface is convected by the velocity field and its filtered quantities are include the turbulent burning velocity, which is to be modelled. For modelling the turbulent burning velocity, an equation for the length-scale of the sub-filter flame front fluctuations was developed. The formulations and issues for the turbulent premixed and partially premixed flames are addressed in detail.

Key Words : Large Eddy Simulation(LES), Level-Set Method, Flamelet Model, Partially Premixed Flame

1. 서 론

공업용 버너나 가스터빈, 내연기관과 같은 실제적인 연소기에서 연소현상은 난류 유동 환경에 영향을 받게 된다. 난류는 다양한 시간 척도와 길리 척도를 가지므로 그 자체만 예측하는 것도 매우 어려운 일이며 연소 현상이 여기에 더해지게 되면 물리적 현상의 복잡한 정도는 대단히 증가하게 된다.

지금까지의 연소모델링은 주로 RANS(Reynolds Averaged Navier-Stokes)에 적용되어 비교적 단순한 물리적 현상이 발생하는 형상에 대해서는 잘 예측하여 왔다. 그러나 이러한 정보들은 대부분 시간평균 된 값들이며 대부분의 난류화염, 특히 난류 부상 화염장이나 스월이 존재하는 화염장에서 발생하는 국부적인 화염의 소화나 재점화, 그 이후의 화염의 전파특성을 예측하는데 많은 한계를 보이고 있다. 이를 해결하기 위하여 많은 연구자들이 난류의 최소 척도인 Kolmogorov scale까지 해결하는 DNS (Direct Numerical Simulation)을 적용하였으나 이는 많은 컴퓨터 용량 및 시간을 요구하기 때문에 단순한 형상 및 낮은 레이놀즈수를 가지는 유동에 극히 제한되어 진행되어 왔다. 이러한 이유로 최근에는 큰 난류구조는 직접 계산하고 작은 난류구조는 모델링을 하는 LES (Large Eddy Simulation)을 사용함으로써 점 더 작은 수의 격자를 가지고 높은 레이놀즈 수를 가지는 유동장까지 확대하여 해석하고 있다. 그러나 이러한 LES 방법에서 화학반응에 의한 반응영역의 두께가 LES의 격자크기 보다 작기 때문에 이로 인해 발생하는 비 선형적인 반응률과 관계된 화학적 생성항의 모델링이 필요로 하게된다.

따라서 본 연구에서는 예 혼합 화염과 부분 예혼합 화염에 대한 LES 방법에 적용할 수 있는 subgrid scale 연소모델을 제시하고자 한다.

* 한양대학교 기계기술연구소
** 한양대학교 기계공학부
*** 한국기계 연구원
† 연락저자, ymkim@hanyang.ac.kr

2. 물리 및 수치모델

2.1 LES 지배방정식

난류 연소 유동장을 해석하기 위하여 본 연구에서는 LES를 이용하였으며 연속방정식과 운동량 방정식에 밀도 가중 평균과 공간 평균법을 적용하면 다음과 같은 LES 방정식들을 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t}+\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i}=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t}+\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j}=-\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{1}{Re}\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)-\frac{\partial\tau_{ij}^{SGS}}{\partial x_j} \tag{2}$$

여기서, ρ는 밀도, u_i는 x_i 방향의 속도성분, 그리고 p는 압력을 나타낸다. 위 방정식에서 subgrid stress tensor는 다음과 같다.

$$\tau_{ij}^{SGS}=\bar{\rho}(\widetilde{u_iu_j}-\tilde{u}_i\tilde{u}_j) \tag{3}$$

Subgrid stress tensor는 다음과 같은 형태인 Smagorinsky eddy viscosity로 모델링 하였다.

$$\tau_{ij}^{SGS}-\frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk}^{SGS}=-2\bar{\rho}\nu_t\tilde{S}_{ij}$$
$$\nu_t=C\Delta^2|\tilde{S}| \tag{4}$$

위 식에서 모델상수, C를 결정하기 위하여 dynamic subgrid 모델을 적용하였으며 이는 LES 방정식을 통해 결정할 수 있는 값에 test filter(방정식을 유도하기 위한 filter보다 더 큰 크기의 필터이며 $\hat{\phi}$ 로 나타내었다)를 통해 다시 평균을 취한 stress tensor를 필요로하며 다음과 같다.

$$T_{ij}=\bar{\rho}(\widehat{\widetilde{u_iu_j}}-\hat{\tilde{u}}_i\hat{\tilde{u}}_j) \tag{5}$$

Germano[1]의 동일성에 따라 식(5)는 식(4)와 비슷한 형태로 모델할 수 있다.

$$T_{ij}-\frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk}=-2\bar{\rho}\hat{\nu}_t\hat{\tilde{S}}_{ij}$$
$$\hat{\nu}_t=C\hat{\Delta}^2|\hat{\tilde{S}}| \tag{6}$$

위 두 식 모두 계산할 수 없는 항, 즉 $\widetilde{u_iu_j}$를 포함하고 있으나 두식의 차는 이 항을 제거할 수 있으며 다음과 같이 표현된다.

$$L_{ij}=T_{ij}-\hat{\tau}_{ij}=\widehat{\tilde{u}_i\tilde{u}_j}-\hat{\tilde{u}}_i\hat{\tilde{u}}_j \tag{7}$$

두 식이 모델링 된 형태로 다시 적용하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$L_{ij}-\frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk}=-C\Delta^2M_{ij}$$
$$M_{ij}=2\left[(\hat{\Delta}/\Delta)^2|\hat{\tilde{S}}|\hat{\tilde{S}}_{ij}-\widehat{|\tilde{S}|\tilde{S}_{ij}}\right] \tag{8}$$

위 식을 통해 모델상수, C는 다음과 같은 식으로 결정된다.

$$C=-\frac{L_{mn}M_{mn}}{\Delta^2M_{kl}M_{kl}} \tag{9}$$

2.2 Level Set 방법

2.2.1 G 방정식의 유도

Wiliams[2]는 화염편모델에 기초한 G 방정식을 제안하였으며 기연 가스와 미연가스의 경계인 화염면의 변화과정을 묘사하기 위하여 level-set 방법을 사용하였다. 스칼라 양인 G는 $G=G_0$에서 화염면임을 나타내며 이러한 화염면의 순간적이고 국부적인 위치는 다음과 같은 음함수적 방법으로 표현된다.

$$G(x,t)-G_0=0 \tag{10}$$

여기서 G가 G_0보다 크면 기연가스이고 그렇지 않으면 미연가스이다. 식 (10)을 미분하게 되면

$$\frac{\partial G}{\partial t}+\frac{dx_f}{dt}\cdot\nabla G=0 \tag{11}$$

이며 여기서 x_f는 화염면의 위치이다.

화염면의 전파속도는 국부적인 유동속도와 화염면에 수직한 방향의 층류 화염속도의 합으로 결정된다.

$$\frac{dx_f}{dt}=v+s_Ln \tag{12}$$

여기서 v는 국부적인 유동속도이며 s_L은 층류화염속도이며 화염면에 대한 수직벡터는 다음과 같다.

$$n=-\frac{\nabla G}{|\nabla G|} \tag{13}$$

식(11)과 식(12)를 결합하면 순간적인 G 방정식을 얻을 수 있으며 다음과 같다.

$$\frac{\partial G}{\partial t}+v\cdot\nabla G=s_L|\nabla G| \tag{14}$$

위 식은 단지 화염면을 묘사하는 식(10)과 식(12)로부터 유도되었기 때문에 식(14)는 화염면에서만 유효하며 그 이외의 G값은 임의적으로 계산되며 일반적으로 화염면과의 거리를 나타내는 함수이다.

2.2.2 Filtered 화염면의 위치에 대한 G 방정식

필터링한 화염면의 위치를 얻기 위하여 필터링한

화염면을 음함수적으로 표현하면 다음과 같다.

$$\tilde{G}(x,t) - G_0 = 0 \tag{15}$$

이 식을 미분하고 $\tilde{G}$의 변위에 대한 속도를 필터링한 속도와 관계지으면 결과식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} + \frac{d\tilde{x}_f}{dt}\cdot\nabla\tilde{G} = 0 \tag{16}$$

필터링한 변위속도는 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{d\tilde{x}_f}{dt} = \tilde{v} + \overline{(s_L + s_\kappa)n} \tag{17}$$

여기서 s_L은 unstrained 예혼합 화염에 대한 층류 화염속도이며 s_K는 화염면의 곡률이 화염면의 변위속도에 미치는 영향을 나타낸 항으로 다음과 같다.

$$s_\kappa = -D_T\nabla\cdot n = D_T\nabla\cdot\left(\frac{\nabla G}{|\nabla G|}\right) \tag{18}$$

여기서 D_T는 온도의 확산계수이다.

식(16)과 식(18)로부터 필터링한 G 방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial\tilde{G}}{\partial t} + \tilde{v}\cdot\nabla\tilde{G} = -\overline{(s_L + s_\kappa)n}\cdot\nabla\tilde{G} \tag{19}$$

식(19)의 우변에 나타나는 G의 생성항은 난류화염속도와 필터링된 화염면의 수직벡터에 의해 다음과 같이 모델링 된다.

$$\overline{(s_L + s_\kappa)n} = s_T\tilde{n} = -s_T\frac{\nabla\tilde{G}}{|\nabla\tilde{G}|} \tag{20}$$

2.2.3 Sub-Filter 화염면 두께에 대한 방정식

난류화염속도를 모델링 하기 위하여 화염면의 두께와 관련되는 sub-filter 화염면의 난동길이에 대한 방정식을 유도할 필요가 있다. 화염면의 난동길이는 순간적인 화염면의 위치와 필터링된 화염면의 위치의 최단거리로 정의되며 이를 식으로 표현하면 다음과 같다.

$$l = |x_f - \tilde{x}_f| \tag{21}$$

이 식을 필터링된 화염면에 대한 수직벡터의 항으로 표현하면 다음과 같다.

$$\tilde{l}n = x_f - \tilde{x}_f \tag{22}$$

식 (22)를 미분하고 식 (17)을 적용하면 다음과 같다.

$$\frac{d(\tilde{l}n)}{dt} = \frac{d(x_f - \tilde{x}_f)}{dt} = v - \tilde{v} + s_L n - \widetilde{s_L n} + s_\kappa n - \widetilde{s_\kappa n} \tag{23}$$

위 식의 양변에 $2\tilde{l}n$ 를 곱하고 필터링을 하면 다음과 같다.

$$\frac{d\tilde{l}^2}{dt} = 2\overline{\tilde{n}\cdot lv'} + 2\overline{\tilde{n}\cdot l(s_L n)'} + 2\overline{\tilde{n}\cdot l(s_\kappa n)'} \tag{24}$$

여기서, $v' = v - \tilde{v}$는 sub-filter 난동속도이고 $(s_L n)' = s_L n - \widetilde{s_L n}$과 $(s_\kappa n)' = s_\kappa n - \widetilde{s_\kappa n}$는 난류화염속도의 난동정도를 표현하게 된다.

식(23)을 Eulerian 좌표계에서 표현하면 다음과 같다.

$$\frac{\partial\tilde{l}^2}{\partial t} + \left(\tilde{v} + \widetilde{s_L n}\right)\cdot\nabla\tilde{l}^2 = 2\overline{\tilde{n}\cdot lv'}$$
$$2\overline{\tilde{n}\cdot l(s_L n)'} + 2\overline{\tilde{n}\cdot l(s_\kappa n)'} \tag{25}$$

위식의 우변의 첫 번째 항은 난류에 의한 화염면의 주름지는 현상에 의한 난동길이의 생성항이고 두 번째 항은 화염면의 전파로 인한 난동길이의 소멸항이며 세 번째 항은 화염면의 곡률에 의한 난동길이의 소멸항이다.

화염면의 난동길이는 단지 화염면에서만 존재하므로 화염면 이외에서 이에 대한 공간적인 미분값은 정의 될 수 없다. 따라서 난동길이는 G의 난동으로 표현해야 하며 화염면 근처에서 난동길이는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$l = \frac{G'}{|\tilde{G}|} \tag{26}$$

따라서, 식(25)의 우변의 첫 번째 항은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\overline{\tilde{n}\cdot lv'} = \frac{\tilde{n}}{|\nabla\tilde{G}|}\cdot\overline{G'v'} = -\frac{\tilde{n}}{|\nabla\tilde{G}|}D_{t,G}\cdot\tilde{G} \tag{27}$$

필터링된 화염면에 수직벡터의 정의에 따라 식(27)은 다음과 같이 단순화 할 수 있다.

$$\overline{\tilde{n}\cdot lv'} = D_{t,G} \tag{28}$$

식(28)에 나타나는 G에 대한 난류 확산계수는 소산을 나타내는 것이 아니라 난류에 의한 혼합을 통해 화염면의 생성을 나타내며 일정한 Schmidt 수의 가정하에 다음과 같은 Smagorinsky 난류확산계수 형태로 모델할 수 있다.

$$D_{t,G} = \frac{C\Delta v'_\Delta}{Sc_{t,G}} \tag{29}$$

여기서, $C\Delta$는 필터 폭, Δ에 의해 특성화되는 길이척도이다.

식(25)의 우변의 두 번째 항과 세 번째 항은 소산항이며 이러한 소산항은 난류의 small scale에서 발생하게 된다. 따라서 이러한 항들은 RANS에 근간을 둔 Peters[3]에 의해 제안된 scale 관계식을 적용할 수 있다.

$$\overline{\tilde{n}\cdot l(s_L n)'} = c_2 C\Delta\,\tilde{n}\cdot\widetilde{s_L n} = -c_2 C\Delta s_T \tag{30}$$

$$\overline{\tilde{n}\cdot l(s_{,}n)'} = c_1\frac{l_F}{s_L}(\tilde{n}\cdot\widetilde{s_{,}n})^2 = -c_3\frac{l_F}{s_L}s_T^2 \quad (31)$$

식(28), 식(30), 그리고 식(31)을 식(25)에 대입하고 생성항이 소멸항과 평형을 이룬다고 가정하면 다음과 같은 식을 얻을 수 있다.

$$D_{t,G} - c_2 C\Delta s_T - c_3\frac{l_F}{s_L}s_T^2 = 0 \quad (32)$$

식(32)를 대수적으로 정리하면 다음과 같은 난류 화염속도를 얻을 수 있다.

$$\frac{s_T - s_L}{s_L} = -\frac{b_3^2 C}{2b_1 Sc_{t,G}}\frac{\Delta}{l_F} + \sqrt{\left(\frac{b_3^2 C}{2b_1 Sc_{t,G}}\frac{\Delta}{l_F}\right)^2 + \frac{b_3^2 D_t}{s_L l_F}} \quad (33)$$

여기서 상수는 Peters[3]에 의해 제안된 값을 적용하며 그 값은 b_1=2.0, b_3=1.0이다.

2.2.4 예혼합 화염에 대한 수치모델

난류 예혼합 화염장을 해석하기 위해서는 환산온도($\theta = (T - T_u)/(T_b - T_u)$)에 대한 방정식을 계산함으로써 유동장에서의 온도장을 구할 수 있다.

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{\theta}}{\partial t} + \bar{\rho}\tilde{v}\cdot\nabla\tilde{\theta} = \nabla\cdot(\bar{\rho}D_t^{\theta}\nabla\tilde{\theta}) + \overline{\rho w} \quad (35)$$

환산온도에 대한 방정식에 나타나는 생성항은 다음과 같은 형태로 모델링 할 수 있다.

$$\overline{\rho w} = p_b(\theta_{flamelet} - \tilde{\theta})\overline{\frac{\rho}{T_b - T_u}\frac{dT}{dt}}\Big|_{G=G_0} \quad (36)$$

화염이 존재하는 영역과 존재하지 않는 영역을 구별하기 위하여 식 (37)에 burning probability를 적용하였으며 Gaussian 분포를 가진다고 가정하였으며 이 분포의 독립변수로써 필터링된 G값과 이것의 난동성분이 사용되었다. 따라서 burning probability는 다음과 같은 식으로 결정된다.

$$p_b = \int_{\xi=G_0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi G'^2}}\exp\left[-\frac{(G-\xi)^2}{2G'^2}\right]d\xi \quad (37)$$

2.2.5 부분 예혼합 화염에 대한 수치모델

지금까지 난류 예혼합 화염에 대한 LES 수치모델링에 대하여 살펴보았다. 난류 예혼합 화염에 대한 모델을 부분 예혼합 화염에 적용하기 위해서는 국부적인 영역에서 혼합정도를 나타내는 보존 스칼라 양인 혼합분율, 그리고 열손실을 고려하기 위해서는 엔탈피 방정식이 포함되어야 하며 이는 다음과 같다.

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho}\tilde{v}\cdot\nabla\tilde{Z} = \nabla\cdot(\bar{\rho}D_t^{Z}\nabla\tilde{Z}) \quad (38)$$

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{H}}{\partial t} + \bar{\rho}\tilde{v}\cdot\nabla\tilde{H} = \nabla\cdot(\bar{\rho}D_t^{H}\nabla\tilde{H}) \quad (39)$$

위식에 나타나는 $\theta_{flamelet}(Z)$, $T(Z), s_L(Z)$는 모두 혼합분율의 함수이며 flamelet 방정식을 계산함으로써 얻을 수 있으며 난류 연소 유동장을 계산할시에는 국부적으로 얻어지는 혼합분율을 통해 얻을 수 있다.

3. 결 론

본 연구에서는 LES subgrid-scale 모델과 결합된 flamelet model 및 level set approach를 이용하여 난류 예혼합 및 부분예혼합 화염장을 모델링할 때의 상세한 수식과 절차를 제시하였다. 상세 화학반응 모델의 영향을 고려하기 위하여 flamelet 모델에 기반한 level-set 방법을 이용하여 모델링하였으며 화염면을 나타내기 위하여 스칼라 양인 G를 이용하였고 난류 연소 속도를 모델하기 위하여 필터링된 화염면의 난동 길이 척도, 즉 난류 화염의 두께에 관한 방정식을 유도하였다. 계산된 G값과 이의 난동량을 통해 burning probability를 결정하였고 필터링된 에너지 방정식의 생성항으로 사용하였다. 부분 예혼합 화염장을 해석하기 위해서 새로운 변수인 혼합분율의 도입이 필요하며 flamelet 방정식을 이용하여 혼합분율의 함수로써 온도, 층류화염속도, 환산온도등의 library를 구성하게 된다.

후 기

"이 연구는 과학기술부 지원으로 수행하는 21세기 프론티어 사업(이산화 탄소 저감 및 처리기술 개발)의 일환으로 수행되었습니다."

참고문헌

[1] Germano, M., "Turbulence : the filtering approach," J. Fluid Mech., vol. 238, pp.325-336, 1992.

[2] Wiliams, F. A. Turbulent Combustion. In The Mathematics of Combustion (ed. J. D. Buckmaster), pp.197-1318, 1985.

[3] Peters, N., Turbulent Combustion, Cambridge University Press., 2000.