

다중 혼합기 난류 비예혼합 연소시스템에 대한 수치모델링

김군홍*, 강성모*, 김용모**, 안국영***

Two Conserved Scalar Approach for the Turbulent Nonpremixed Flames

Gun-Hong Kim, Sung-Mo Kang, Yong-Mo Kim, Kook-Young Ahn

ABSTRACT

In the combustion modeling of non-premixed flames, the mixture fraction conserved scalar approach is widely utilized because reactants are mixed at the molecular level before burning and atomic elements are conserved in chemical reactions. In the mixture fraction approach, combustion process is simplified to a mixing problem and the interaction between chemistry and turbulence could be modelled by many sophisticated combustion models including the flamelet model and CMC. However, most of the mixture fraction approach is restricted to one mixture system. In this study, the flamelet model based on the two-feed system is extended to the multiple fuel-feeding systems by the two mixture fraction conserved scalar approach.

Key Words : Conserved Scalar Approach(보존 스칼라 접근법), Flamelet Model(화염편 모델), Secondary Partial Fraction(ρ_{scc} , 이차 부분율)

1. 서론

비 예혼합 화염장에 대한 연소 모델링은 빠른 화학반응을 갖는 연소장을 해석하기 위하여, 단일 또는 2 혼합분율 보존 스칼라에 대한 수송방정식을 포함하게 된다. 이러한 방법은 화학종에 대한 수송방정식을 해석하는 대신에, 주어진 혼합분율 분포에 대한 상세 화학반응과 유동과의 상관계를 모델링하게 된다.

본 연구에서는 단일 혼합분율 접근법에서 개발되어온 연소모델인 층류 화염편 모델을 2 혼합분율 스칼라 보존 접근법을 이용하여 3 유동 연소 시스템에 적용하였다. 2 혼합분율이 존재하는 화염장에 대한 예측 가능성을 확인하기 위하여, 단일 혼합분율 난류 화염장인 H3-Flame에 대해 해석하였고, 예측결과를 단일 화염편 모델 경우

와 동일하였다. 실제적인 연소기 설계에 대한 2 혼합분율 접근법 적용을 위하여 CO₂ 재순환 시스템을 갖는 CH₄-O₂-O₂/CO₂ 산소부화 연소기에 대하여 해석하였다.

현 논문에서는 3 혼합분율 연소 시스템에 대한 보존 스칼라 접근법과 연소모델에 적용에 대한 기초적인 연구를 수행하였으며, 적용 가능성을 확인하였다.

2. 수치 모델

2.1 층류 화염편 모델

층류 화염편 모델은 연소 화학반응이 난류 유동장내의 화염편의 얇은 층에서 빠르게 발생한다는 가정에 기초하고 있다. 화염편 방정식은 Peters에 의한 두 개의 길이 스케일에 대한 개념적 해석을 통하여 유도되거나 화학종 및 에너지 보존방정식으로부터 층류화염편내 반응면에 수직 방향에 대한 좌표변환을 통해 혼합분율을 매개변수로 층류화염편의 혼합과정 및 화학반응을 동시에 지배하는 다음과 같은 1차원 상미분 연립방정

* 한양대학교 기계공학부 대학원

** 한양대학교 기계공학부

*** 한국기계연구원

† 연락처, gunhongkim@ihanyang.ac.kr

식을 유도할 수 있다[1].

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \frac{\chi}{2} \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \frac{1}{\rho c_p} \left(\sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k + q_R \right) \quad (2)$$

여기에서 ρ 는 밀도, T 온도, Y_i i -번째 화학종의 질량분율, χ 스칼라 소산율, c_p 정압비열, t 시간, Z 질량분율, $\dot{\omega}$ 반응율, h 엔탈피, q_R 단위체적당 복사열손실을 각각 나타낸다.

위의 방정식들의 유도과정에서 압력은 일정하고 Lewis 수는 모든 화학종에 대해 1로 동일하다고 가정하였다. 화염면 변형율을 고려하기 위하여 화염면 모델에서 가장 중요한 변수인 스칼라 소산율은 다음 식 (3)과 같이 정의되며, 화염면 방정식을 해석하기 위해서는 혼합분율에 따른 스칼라 소산율 모델링이 요구되어진다. 본 논문에서는 스칼라 소산율에 대한 혼합분율의 의존함수에 대하여 Peters의 이론해석에 따른 화학당론적 스칼라 소산율에 대한 결과물 식 (3)에 같이 표시하였다.

$$\chi = 2D_Z(\nabla Z)^2 \cong \chi_{st} f(Z) = \chi_{st} \exp \left[2 \left\{ \text{erfc}^{-1}(2Z_{st}) \right\}^2 - 2 \left\{ \text{erfc}^{-1}(2Z) \right\}^2 \right] \quad (3)$$

식 (1)-(3)을 이용하여 화학당론적 혼합분율에서의 스칼라 소산율에 대하여 화학평형에 가까운 낮은 값에서 소염이 발생하는 높은 값까지의 범위를 갖는 층류 화염면 라이브러리를 혼합분율에 따라 구성할 수 있다.

본 논문에서는 연소 유동장을 해석하기 위하여 비정렬격자 유동해법(unstructured-grid flow solver)을 사용하였다. 각 보존방정식은 각각의 셀이 바로 검사체적이 되는 셀중심 유한체적법(cell-centered FVM)을 사용하여 이산화되었으며, 대류항과 확산항에 대해 각각 2차 정확도의 흐름차분법과 중앙차분법을 적용하였다. 연속방정식과 운동량방정식을 동시에 만족시키는 유동해를 구하기 위해 압력기준해석법인 SIMPLEC 알고리즘을 사용하였다[2]. 연소 유동장내의 평균 혼합분율(Z)과 난류 유동장에 대한 혼합분율의 변동량(\tilde{Z})을 구하기 위해 아래의 두 수송방정식을 계산하였다.

$$\frac{\partial \bar{\rho} Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} Z \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_Z} \nabla Z \right] \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Z}^2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_{Z'^2}} \nabla \tilde{Z}^2 \right] + \frac{2\mu}{Sc_{Z'^2}} (\nabla Z)^2 - \tilde{\rho} \chi \quad (5)$$

여기에서 난류 연소장인 경우는 $\tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\chi}}{\chi} \tilde{Z}^2$ 이며, 층류 연소장인 경우에는 연소장내의 스칼라 소산율을 구하기 위하여 식 (3)이 적용되었다.

층류 화염면 모델에서는 연소 상태량들은 보존 스칼라인 혼합분율과 스칼라 소산율로부터 결정되어진다. 난류 화염면 경우에 주어진 층류 화염면 라이브러리(ϕ_i^{SLFM})로부터 평균 상태량($\bar{\phi}_i$)은 식 (6)으로부터 결정되어진다. 여기에서, 혼합분율에 대해서는 beta PDF 그리고 스칼라 소산율에 대해서는 log normal 분포를 가정하였다.

$$\bar{\phi}_i = \int \int \phi_i^{SLFM}(Z, \chi_{st}) \tilde{P}(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (6)$$

2.2 다중 혼합기체에 대한 화염면 모델의 확장

위의 층류 화염면 모델에서 기술되었듯이, 대부분의 보존 스칼라 접근법은 단순 연료/공기와 같은 단일 혼합분율에 제한되어 있다. 본 연구에서는 단일 혼합분율의 보존 스칼라 접근법을 2 혼합분율 보존 스칼라 접근법으로 확장하였다. 만약 연료/공기로 구성된 연소 시스템내에 추가적인 이차 유동(다른 종류의 연료, 산화제 또는 불활성 기체)이 존재하게 된다면, 연료와 이차 혼합분율은 연료와 이차 유동의 각각의 질량비로 정의되어 질 수 있다. 단일 혼합분율 접근법에서와 같이, 시스템내의 세가지 혼합분율의 합은 항상 1을 만족한다[3]:

$$f_{fuel} + f_{sec} + f_{ox} = 1 \quad (7)$$

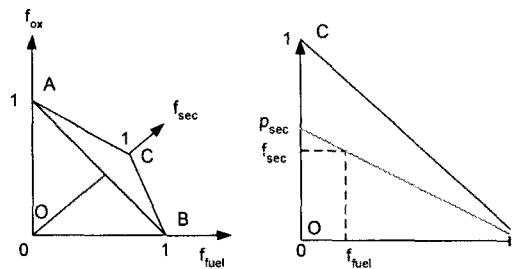


Fig. 1 Relationships of (a) f_{fuel} , f_{sec} , and f_{ox} and (b) f_{fuel} , f_{sec} , and p_{sec} in the three mixture system.

Fig. 1(a)에서 나타났듯이, 두 혼합분율 f_{fuel} 과 f_{sec} 는 독립적으로 존재하지 않게 된다. 두 혼합분율의 상관관계를 구하기 위하여 다음과 같은 방법을 적용하였다[4]. Fig. 1(a)의 OBC 면을 Fig. 1(b)에 나타내었으며, 두 혼합분율의 혼합정도를 나타내는 이차 부분율(p_{sec})은 식 (8)로 정의된다.

$$f_{sec} = p_{sec} \times (1 - f_{fuel}) \quad (8)$$

따라서 혼합정도는 f_{sec} 와 p_{sec} 만으로 결정되어 지

며, 단일 혼합분을 접근법과 동일하게 다양한 p_{sec} 에 대하여 층류 화염편 방정식을 적용할 수 있다. 화염편 방정식(1, 2)과 스칼라 소산율의 식(3)으로부터 층류 화염편 라이브러리는 p_{sec} 에 의해 이차 혼합분율의 영향을 갖는 서로 다른 화염 구조를 갖는 다양한 층류 화염편들로 구성되게 된다.

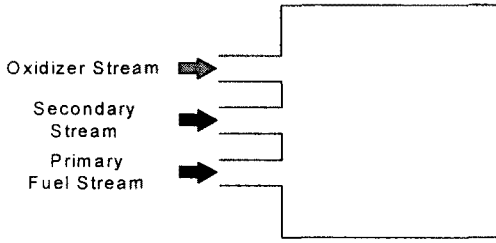


Fig. 2 Schematic Illustration of the Three Mixture System

대표적인 2 혼합분율 보존 스칼라 접근법이 적용되는 경우에 대하여 Fig. 2에 도시하였다. 복수의 혼합분율이 존재하는 유동장내의 혼합을 분포는 단일 보존 스칼라 접근법과 동일하게 적용된다. 혼합분율 방정식(4, 5)을 이용하여 f_{fuel} 의 평균 혼합분율(\bar{f}_{fuel})과 변동치($\overline{f_{fuel}^2}$)를 구하고, 층류 화염의 경우에는 식(3)으로부터, 난류 화염장에 대해서는 f_{fuel} 의 변동치($\overline{f_{fuel}^2}$)와 난류유동 변수들(\bar{k} , $\bar{\epsilon}$)을 이용하여 유동장내의 스칼라 소산율을 결정한다. 그리고 이차 유동의 영향을 고려하기 위하여, f_{sec} 의 평균 혼합분율(\bar{f}_{sec})과 f_{fuel} 의 평균 혼합분율(\bar{f}_{fuel})에 대해 식(8)의 평균 이차 부분율(\bar{p}_{sec})을 구한다. 이차 유동에 따른 난류영향을 고려하기 위하여 주어진 평균 이차 부분율의 변동치($\overline{p_{sec}^2}$)를 구한다.

혼합분율 방정식으로부터 2 혼합분율 분포와 스칼라 소산율 분포가 결정되면, 단일 혼합분율의 층류 화염편 모델에 대해 식(6)에 적용된 과정과 동일하게 식(9)를 이용하여 연소 상태량을 결정할 수 있게 된다.

$$\bar{\psi}_i = \int \int \int \psi_i^{SLFM}(f_{fuel}, p_{sec}, \chi_{st}) \times P(f_{fuel}, p_{sec}, \chi_{st}) df_{fuel} dp_{sec} d\chi_{st} \quad (9)$$

3. 수치 해석

3.1 난류 H₂-N₂/Air 제트 확산화염 (H3 Flame)

다중 혼합기가 존재하는 난류 화염장에 대한 개발된 2 혼합분율 보존 스칼라 접근법의 적용가능성을 확인하기 위하여, 단일 혼합분율 연소 시

스템에 대하여 단일 층류 화염편 모델결과와 비교하였다. 2 혼합분율 시스템을 설정하기 위하여 주위 공기유동중 일부분을 이차 유동으로 가정하였다. 실제 단일 혼합분율 시스템이기 때문에, 공기 유동과 이차 유동의 조성 및 엔탈피가 동일하며, 따라서 이차 유동에 따른 층류 화염편 구조의 변화가 존재하지 않게 된다. 해석 대상 화염은 TNF workshop의 H₂/N₂ 난류 화염인 H3-Flame을 대상으로 하였으며, Fig. 3에 적용된 3 혼합분율 시스템 개략도를 나타내었다[5].

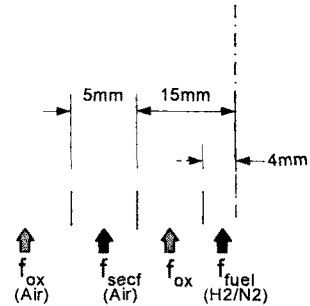


Fig. 3 Three Mixture System of H3-Flame, which is originally Two Mixture System.

앞서 설명되었듯이 2 혼합분율 접근법을 적용하기 위해서 이차 유동을 주위공기 유동의 일부로 가정하였기 때문에, 연료의 혼합분율은 두 접근법 모두 동일하게 된다. 그리고 이차 유동의 영향으로 인해 화염장내 층류 화염편 구조가 변하지 않기 때문에 단일 화염편 모델 결과와 동일해야 한다. Fig. 4에는 실험결과와 두 화염편 모델의 예측결과에 대하여 축방향 연료 혼합분율 분포를 나타내었다. 결과에 나타나듯이 두 접근법 모두 동일한 연소 유동장 결과를 나타내었다. 이러한 H3-Flame에 대한 예측 결과는 주 혼합분율인 f_{fuel} 에 대한 이차 부분율 p_{sec} 의 영향을 직접적으로 확인할 수는 없으나, 전체적인 2 혼합분율 접근법의 수치적 안정성을 확인할 수 있다.

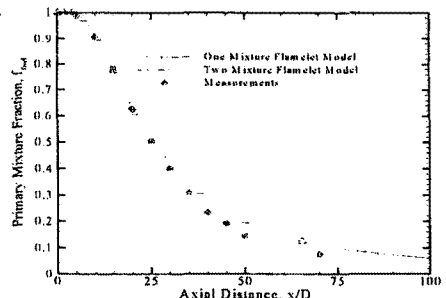


Fig. 4 Numerical Results of Favre-averaged mean values of primary mixture fraction along the centerline.

3.2 산소부화 $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-O}_2/\text{CO}_2$ 연소 시스템

산소부화연소 기술은 고효율 연소기술인 동시에 Zero Emission 연소기술까지 접근할 수 있는 연소기술로서 인식되고 있다. 산소부화 연소의 가장 큰 특징은 넓은 가연범위, 높은 층류 화염 전파 속도, 높은 단열온도, 열전달 효과 그리고 청정의 연소 생성물 등이 있다. 고온의 순산소 연소특성으로 인해 상당량의 중간 생성물인 CO와 H_2 가 존재하게 되며, 이에 대한 저감기술이 요구되어 진다. 본 논문에서는 CO 저감 및 CO_2 회수 효율을 증대시키기 위하여 CO_2 재순환 기술을 본 논문에서 적용하였다. 해석 대상인 실험 실용 연소기의 기본 형상은 Fig. 5에 나타내었다.

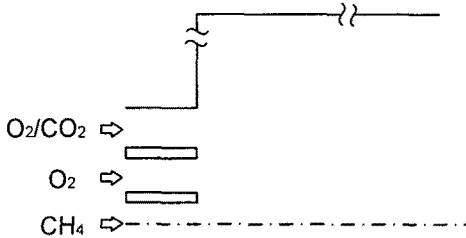


Fig. 5 Oxygen-enriched combustor with CO_2 recirculation

Fig. 5에서 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{CO}_2$ 화염의 안정성을 위하여 이차 O_2 유동이 존재하게 되어 3 혼합물 연소 시스템으로 해석하게 된다. 본 논문에서는 열전달과 층류 화염편 모델을 적용시키기 이전 단계로 단일 화학평형 조건을 이용하여 수치 해석을 수행하였으며, Table 1에 해석조건을 제시하였다.

Table 1. Flame Conditions of $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-O}_2/\text{CO}_2$ combustor

	Species	Flowrate [m^3/hr]
Primary mixture	CH_4	0.82
Secondary mixture	O_2	0.43
Oxidizer mixture	O_2/CO_2	1.74/3.23

2 혼합분을 보존 스칼라 접근법을 적용하여 연소기 내의 2 혼합분율의 혼합상태를 결정하였으며, 이때 미리 저장된 단일 화학평형 라이브러리에서 평균값을 구하였다. Fig. 6에 본 화염에 대한 라이브러리의 온도분포와 CO 분포특성을 나타내었다. 순산소 연소에 대한 CO_2 의 영향으로 화염온도를 낮추고, CO는 증가하다가 CO_2 의 영향이 커질수록 낮은 화염온도로 인해 감소함을 보여주고 있다.

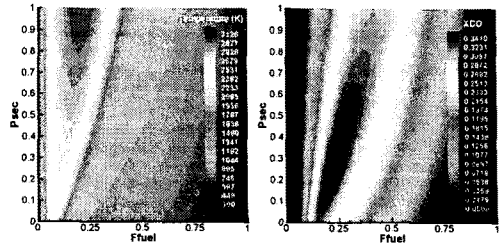


Fig. 6 Characteristics of Temperature and XCO in $\text{CH}_4\text{-O}_2/\text{CO}_2\text{-O}_2$ combustion system

산소부화 연소기에 대하여 단일 화학평형 라이브러리를 적용하여 해석된 결과를 Fig. 7에 나타내었다. 단일 해석결과로 전반적인 연소기 온도 분포가 높게 나타나고 있음을 알 수 있다. CO_2 의 영향으로 O_2 이차 유동의 영향이 크게 나타나는 버너 상류측 부분을 제외하고는 대부분 영역에서 CO와 H_2 가 낮게 분포하고 있음을 확인하였다. 순산소 연소시스템 내의 높은 온도분포와 CO_2 , H_2O 의 높은 농도로 인해 복사열전달 현상의 중요성을 확인할 수 있다.



Fig. 7 Distributions of Temperature, XCO and XH_2

4. 결론

본 논문에서는 2 혼합분율이 존재하는 3 혼합기 연소시스템에 대하여, 2 혼합분을 보존 스칼라 접근법과 층류 화염편 모델의 적용성을 확인하였다. 2 혼합기 난류 연소장인 H3-Flame에 대하여 2 혼합분을 보존 스칼라 접근법을 적용하여, 층류 화염편 모델의 적용성을 확인하였다. 실제 연구중인 3 혼합기 연소시스템인 산소부화 연소기에 대한 기초 연구로서 단일 화학평형 가정하여 2 혼합분을 접근법으로 해석하였다. 실험 결과의 부재와 복사 열전달 영향을 고려하지 않음으로 인해 실질적인 비교분석을 이루어지지 않았다. 그러나 2 혼합분을 보존 스칼라 접근법의 다양한 적용성을 확인할 수 있었으며, 난류연소

모델인 층류 화염편 모델을 적용함으로써 해석능력을 더욱 증가시킬 수 있음을 확인하였다.

후 기

본 연구는 과학기술부 지원으로 수행하는 21세기 프론티어 사업(이산화탄소 저감 및 처리 기술 개발)의 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] N. Peters, Turbulent combustion, 2000, Cambridge, Cambridge University Press.
- [2] S.M. Kang, Y.M. Kim, "Pressure-based unstructured-grid finite-volume method for simulating laminar reacting flows", Numerical Heat Transfer B, 2002, vol.41, pp.53-72.
- [3] D.V. Flores and T.H. Fletcher, "A Two Mixture Fraction Approach for Modeling Turbulent Combustion of Coal Volatiles and Char Oxidation Products", Paper 95S-120, Spring Meeting of the Central States/Western States/Mexican National Sections of the Combustion Institute and the American Flame Research Committee. April 23-26, 1995.
- [4] FLUENT 5 Documentation
- [5] Robert Barlow, <http://www.ca.sandia.gov/TNF/abstract.html>