

Linear Eddy Model을 이용한 스칼라의 혼합특성 해석

김 후중* · 김 용모*** 안 국영**

Analysis for Scalar Mixing Characteristics using Linear Eddy Model

Hoo-Joong Kim, Yongmo Kim and Kook-Young Ahn

ABSTRACT

The present study is focused on the small scale turbulent mixing processes in the scalar field. In order to deal with molecular mixing in turbulent flow, the linear eddy model is addressed. In each realization, the molecular mixing term is implemented deterministically, and turbulent stirring is represented by a sequence of instantaneous, statistically independent rearrangement event called by triplet map. The LEM approach is applied with relatively simple conditions. The characteristics of scalar mixing and PDF profiles are addressed in detail.

Key Words : LEM, Turbulent Stirring, Triplet Map, Random Sequence, Scalar Mixing

1. 서 론

공업용 버너나 가스터빈, 내연기관과 같은 실제적인 연소시스템에서의 연소현상은 난류 유동 환경에 영향을 받게 된다. 난류는 다양한 시간척도와 길이척도를 가지므로 그 자체 만 예측하는 것도 매우 어려운 일이며 연소현상이 여기에 더해지게 되면 물리적 현상의 복잡한 정도는 대단히 증가하게 된다.

이러한 여러 물리적 현상을 정확히 예측하기 위하여 난류의 최소 척도인 Kolmogorov scale까지 해결하는 DNS(Direct Numerical Simulation)을 이용하였으나 이는 많은 컴퓨터 용량 및 계산시간을 요구하기 때문에 단순한 형상 및 낮은 레이놀즈수를 가지는 유동에 극히 제한되어 사용되어

왔다. 난류 연소 유동장을 해석하기 위한 차선의 방법인 LES(Large Eddy Simulation)과 RANS등을 이용할 경우, 난류와 화학반응의 상호작용을 적절히 표현하는 모델이 요구 되어진다. 최근 몇 년에 걸쳐 난류와 화학반응을 분리해 다루는 laminar flamelet 모델[1]에 기반을 둔 presumed PDF(probability density function) 방법이 많은 연소현상에 적용되어 비교적 만족할만한 결과를 얻어왔다. 그러나, 실제적인 PDF는 가끔 이러한 두 개의 parameter로 대표되지 않는다. 따라서 이러한 문제점을 해결하기 위하여 PDF transport 모델 [2]이 사용되고 있다. PDF transport 모델은 화학반응에 의한 생성항을 모델링할 필요가 없는 장점을 가지는 반면 혼합모델을 개선해야 될 필요성을 가지고 있으며 또한 많은 계산시간을 요구한다.

따라서 본 연구에서는 분자의 확산항과 난류에 의한 대류항을 분리해서 다루며 3차원적인 특성을 가지는 난류를 스칼라의 구배가 존재하는 방향으로 좌표축을 평행하게 가짐으로써 1차원적 해석으로 줄일 수 있고 난류에 의한 혼합의 영향

* 한양대학교 기계공학부

** 한양대학교 기계공학부

*** 한국기계연구원

† 연락처, ymkim@hanyang.ac.kr

을 통계적으로 다룰 수 있는 LEM(Linear Eddy Model)[3.4.5]을 이용하여 단순한 형태의 LEM 계산영역에서 스칼라의 혼합특성과 이와 관련된 확률분포특성을 살펴보고자 한다.

2. 물리 및 수치모델

2.1 Linear Eddy Model (LEM)

Kerstein의 LEM은 분자의 확산항과 난류의 의한 대류 수송항을 분리하여 다루며 난류에 의한 대류 수송항과 관련된 모든 길이 척도를 해결하기 위하여 채택되었다. 난류와 관련된 모든 길이척도를 수치 비용을 줄이면서 해결하기 위해서 난류에 의한 대류로 인한 혼합을 단순화시켜 표현하는 것이 필요하다. 이를 위하여 난류 대류는 스칼라의 구배가 발생하는 선을 따라 스칼라장의 공간적인 재배열을 불규칙적인 절차를 통해 표현할 수 있으며 이러한 불규칙적인 재배열과정의 통계적인 특성은 난류유동의 물리적인 특성과 관계를 맺어야한다. 각각의 재배열과정은 단일 와동의 작용을 대표하는 것으로 볼 수 있다.

2.1.1 분자 확산

LEM에서 분자 확산 과정은 다음과 같은 확산 방정식의 시간 적분을 통해 이루어진다.

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{u_i \cdot \nabla_i}{\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} (\rho Y_i \bar{V}_i) \quad (1)$$

여기서 Y_i , ∇_i , \bar{V}_i 그리고 u_i 는 각각 k 번째 화학종의 질량분율, 분자량, 확산속도 그리고 물 생성률을 나타낸다. 여기서 주목할 점은 식 (1)에 대류항을 포함하고 있지 않다는 점이며 난류에 의한 대류항은 다음 절에 기술한 바와 같이 분자 확산과 분리해서 다룬다.

본 연구에서는 각 화학종의 난류와 분자운동의 거동을 다루기 보다는 스칼라의 혼합에 대한 영향을 살펴보기 위하여 혼합물의 혼합의 정도를 나타내는 혼합분율(mixture fraction)에 대한 다음과 같은 방정식의 시간적분을 통해 분자혼합의 영향을 살펴보았다.

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = D_M \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} \quad (2)$$

2.1.2 난류에 의한 대류

LEM에서 난류에 의한 대류의 영향은 스칼라 양의 연속적이고 순간적인 재배열과정을 통해 이루어지며 이러한 재배열과정은 난류 와동에 의한 혼합과정과 일치한다. 난류 와동의 길이 척도 (length scale), l 과 재배열 과정의 빈도수 (frequency) λ_M 는 Kolmogorov의 scaling law에 따

라 결정된다. 주어진 길이척도와 빈도수에 의해 스칼라 양의 재배열에 대한 mapping이 이루어지며 이 과정은 Kerstein에 의해 제안된 triplet map을 이용하였으며 이는 난류의 작은척도(small scale)에 의한 혼합과정을 모사하기 위하여 개발되었다.

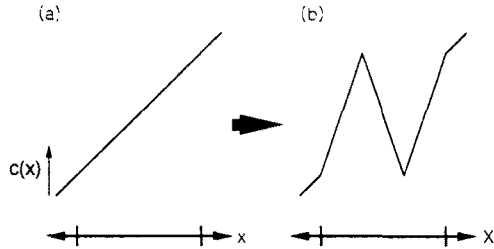


Fig. 1 (a) Scalar field $c(x,t)$ prior to map. In this example, c is linear in the spatial coordinate x . (b) Scalar field after applying the triplet map. The triplet map captures compressive strain and rotational folding effects, and causes no property discontinuities.

Fig.1은 $c(x)=x$ 인 스칼라장에 triplet map이 미치는 영향에 대하여 나타난 것이다. Mapping에 필요한 주어진 길이 척도, l 안에서 스칼라 장이 1/3로 압축되며 그로 인해 스칼라의 구배가 3배로 증가 하였으며 원래의 스칼라장은 압축된 스칼라장의 세 개의 이웃하는 영역에 복사되는 형태로 대체되며 가운데 복사 값은 스칼라장의 불연속성을 없애주기 위하여 반대로 뒤집어져 복사되었다. 따라서 시간 t_0 에 주어진 영역 $[x_0, x_0 + l]$ 에 triplet map을 적용하면 $c(x, t_0)$ 인 스칼라장은 $\hat{c}(x, t_0)$ 로 변환되며 이를 수식으로 나타내면 다음과 같다.

$$c(x, t_0) = \begin{cases} c(3x - 2x_0, t_0) & x_0 \leq x \leq x_0 + l/3 \\ c(-3x + 4x_0 + 2l, t_0) & x_0 + l/3 \leq x \leq x_0 + 2l/3 \\ c(3x - 2x_0 - 2l, t_0) & x_0 + 2l/3 \leq x \leq x_0 + l \\ c(x, t_0) & \text{otherwise} \end{cases}$$

이러한 mapping 과정은 l 의 크기를 가지는 영역의 스칼라의 구배를 배가 시켜주며 난류 유동장에서 압축 변형률에 의한 혼합의 영향을 잘 나타내어 준다.

Fig.2는 triplet map 채택의 근본적인 합당성을 보여주고 있다. 하나의 시계방향의 난류 와동이 초기에 균일한 구배를 가지는 2차원의 스칼라장에 미치는 영향을 고려하면 난류와동이 등 스칼라선을 변형시켜 어느정도의 시간이 지나면 Fig.2(b)의 형태로 스칼라장이 분포한다. 따라서 x 축을 초기의 구배방향과 평행하게 일치시키면, 초기의 일차원적인 선형분포는 triplet map을 적

용하여 얻어진 분포인 Fig.1(b)와 유사한 분포를 형성하고 있음을 알 수 있다.

난류와의 크기, l 은 $\eta < l < L$ 의 영역안의 power-law 분포, $f(l)$ 로부터 random하게 선택된다. 여기서 η 는 Kolmogorov microscale이다. $f(l)$ 과 빈도수 λ_M 의 관계식은 유체입자의 random walk의 확산계수와 난류 확산계수가 같다는 식으로부터 유도되며 Kerstein은 높은 Reynolds 수를 가지는 유동장에 대하여 다음과 같은 관계식을 도출하였다.

$$f(l) = \frac{5}{3L} \frac{1}{(L/\eta)^{5/3} - 1} \left(\frac{l}{L}\right)^{-8/5}$$

$$\lambda_M = \frac{54}{4} \frac{\nu Re_L}{L^3} \frac{(L/\eta)^{5/3} - 1}{1 - (\eta/L)^{1/3}}$$

여기서, Re_L 은 integral length scale에 기초한 Reynolds 수이다.

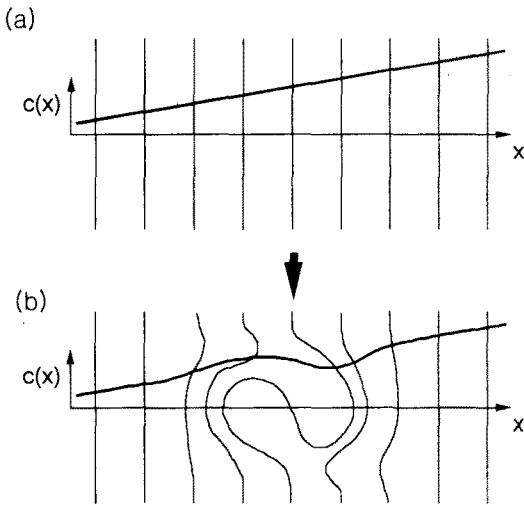


Fig.2 Schematic illustration of the effect of a single, clockwise eddy on a two dimensional scalar field that initially has a uniform concentration gradient. (a) Initial scalar isopleths (vertical line) and scalar profile $c(x)$ (b) Scalar isopleths and scalar profile at a later time.

3. 결과 및 고찰

LEM을 이용하여 스칼라의 혼합특성을 살펴보기 위하여 Fig.3과 같은 초기 혼합분율의 분포를 가지는 스칼라장을 해석영역으로 선택하였다. 평균 혼합분율은 0.5, 난류의 integral length scale은 1cm, 그리고 난류 Reynolds 수, 즉 $u/L/\nu$ 는 500을 이용하였으며 LEM 계산영역의 cell수는 648개로 하였다.

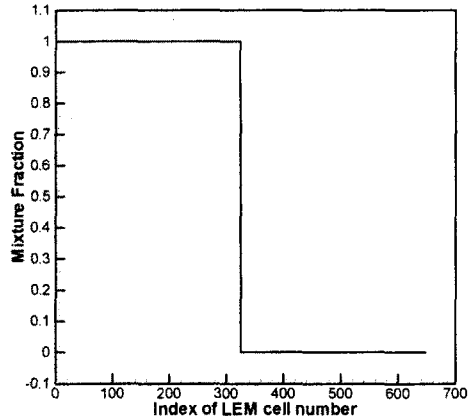


Fig.3 Initial profiles of mixture fraction in LEM domain; LEM domain size is equal to integral length scale.

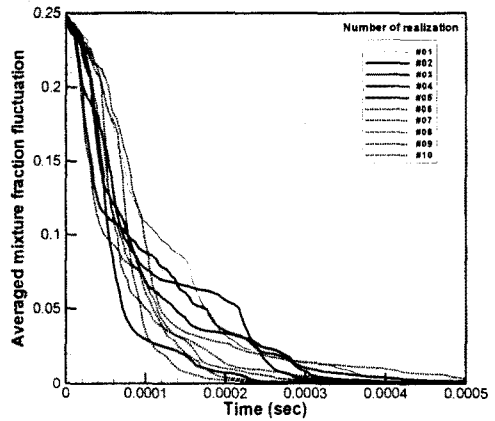


Fig.4 Time evolution of averaged mixture fraction fluctuation.

Fig.4는 시간에 따르는 혼합분율의 난동성분의 평균을 나타낸 것이다. 여기서 혼합분율의 난동성분의 평균은 다음과 같은 식을 통해 계산하였다.

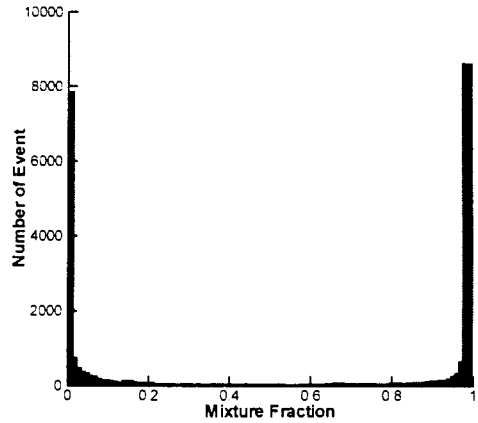
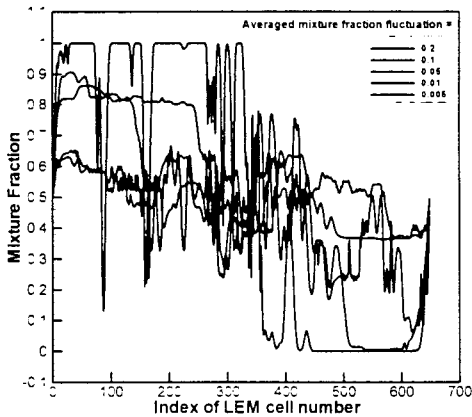
$$\tilde{Z}^{\prime 2} = \frac{\sum_{i=1}^{nlem} (Z - \tilde{Z})^2}{nlem} \quad \tilde{Z} = \frac{\sum_{i=1}^{nlem} Z}{nlem}$$

여기서, $nlem$ 은 LEM cell의 개수를 나타낸다. 시간이 지남에 따라 난류와 분자혼합의 영향으로 혼합분율의 난동성분의 평균이 점차 감소함을 살펴 볼 수 있다. LEM은 기본적으로 난류의 불규칙적인 특성을 수치적으로 모사하기 때문의 각각의 실행마다 그 결과 값이 다르게 나타남을

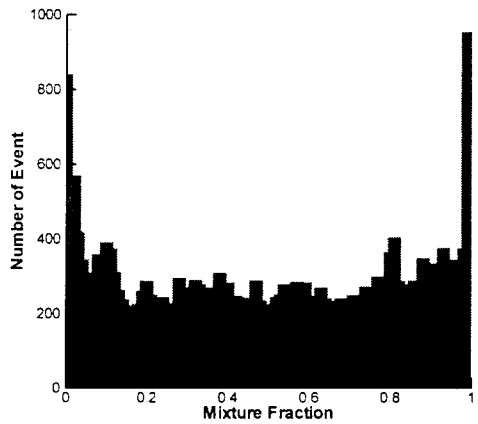
Fig.4를 통해 살펴볼 수 있다. 따라서 통계적으로 다루기 위해서는 혼합의 수치적산의 실행으로는 부족하고 계산의 정확도는 실행횟수의 제곱근에 비례하므로 97% 이상의 정확도를 얻기 위해서는 적어도 수치적산의 실행횟수가 1000번은 넘어야 할 것을 주목할 필요가 있다. ($97\% \approx \sqrt{1000}$)

Fig.5는 첫 번째 실행과정에서 얻은 순간적인 혼합분율의 분포특성을 다섯 개의 서로 다른 혼합분율의 난동성분의 평균에 대하여 나타낸 것이다. 혼합분율의 난동성분의 평균이 작아질수록 순간적인 혼합분율의 분포가 평균 혼합분율에 가까워져 감을 살펴볼 수 있다. 혼합분율의 난동성분의 평균값이 큰 경우 스칼라의 혼합은 난류에 의한 혼합, 즉 스칼라 값의 재배치 과정에 의해 지배를 받으며 이러한 triplet map 과정을 통해 발생한 스칼라의 구배의 불연속성이 분자혼합과정의 의해 완화되고 있음을 보여준다. 또한 triplet map 과정으로 인해 발생한 스칼라의 구배의 증가로 인해 분자확산의 정도도 증가되어 스칼라의 혼합이 타르틱 진행되어 감을 살펴볼 수 있다.

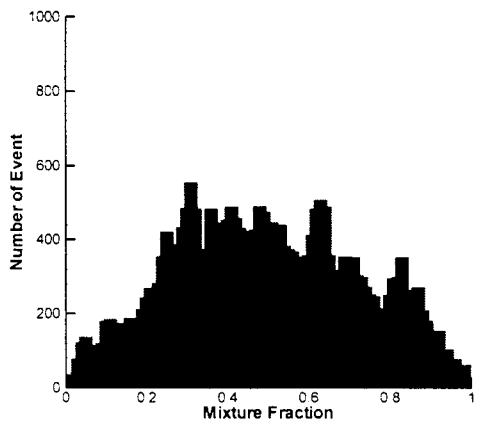
서로 다른 혼합분율의 난동성분의 평균값을 가지는 경우의 대하여 혼합분율의 확률분포특성을 Fig.6에 나타내었다. 혼합분율의 난동성분 평균값이 0.2인 경우, 즉 스칼라 혼합의 초기 단계에서 확률분포특성은 혼합분율이 0과 1에서 peak를 이르는 double delta function의 형태를 띤다. 스칼라 혼합이 점차 진행되면서 혼합분율의 전 영역에 걸쳐 event가 골고루 분포하다가 혼합이 거의 이루어지면 평균이 평균혼합분율을 가지는 Gaussian pdf 분포와 비슷한 확률분포특성을 보여 주고 있으며 혼합분율의 난동이 감소할수록 확률 분포함수의 편차가 감소해가는 경향을 잘 나타내고 있다.



(a) Averaged mixture fraction fluctuation = 0.2

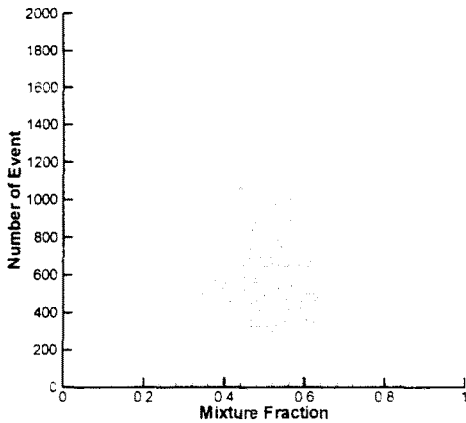


(b) Averaged mixture fraction fluctuation = 0.1

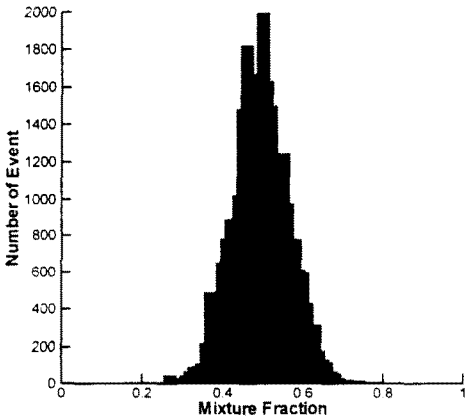


(c) Averaged mixture fraction fluctuation = 0.05

Fig.5 Instantaneous profiles of mixture fraction with five different averaged mixture fraction fluctuation.



(d) Averaged mixture fraction fluctuation = 0.01



(e) Averaged mixture fraction fluctuation = 0.005

Fig.6 Numbers of event along the mixture fraction coordinate

4. 결론

본 연구에서는 스칼라의 혼합특성을 살펴보기 위해 분자 확산과 난류에 의한 스칼라의 혼합을 분리하여 다루는 LEM을 이용하여 수치계산을 수행하였다. 혼합의 초기단계에는 난류에 의한 혼합이 지배적이며 이로 인해 발생하는 증가된 스칼라의 구배로 인해 분자확산에 의한 혼합이 점차 증가됨을 알 수 있었다. 초기의 혼합분율의 분포 특성은 0과 1에서 peak를 가지는 double delta function의 형태를 가지다가 스칼라 혼합이 점차 진행되면서 혼합분율의 긴 영역에 걸쳐 event가 골고루 분포하다가 혼합이 거의 이루어지면 평균이 평균혼합분율을 가지는 Gaussian pdf 분포와 비슷한 확률분포특성을 보여 주고 있으며 혼합분율의 난동이 감소할수록 확률밀도함수의

편차가 감소해가는 경향을 잘 나타내었다.

후 기

이 연구(논문)은 과학기술부 지원으로 수행하는 21세기 프론티어 사업(이산 화탄소 저감 및 처리 기술개발)의 일환으로 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] Peters, N., Turbulent Combustion, Cambridge University Press, 2000.
- [2] Pope, S. B., "PDF Method for Turbulent Reactive Flows," Prog. Energy Comb. Sci. 11, pp.119-192, 1985.
- [3] Kerstein, A. R., "Linear Eddy Model of Turbulent Scalar Transport and Mixing," Comb. Sci. Tech., 60, pp.391-421, 1988.
- [4] Kerstein, A. R., "Linear Eddy Model of Turbulent Transport II. Application to Shear Layer Mixing," Comb. Flame, 75, pp.397-413, 1989.
- [5] Kerstein, A. R., "Linear Eddy Modelling of Turbulent Transport. Part 6. Microstructure of Diffusive Scalar Mixing Fields," JFM, 231, pp.361-394, 1991.