

## CMC 모델을 이용한 난류 비예혼합 Syngas 화염장 해석

김군홍\*, 이정원\*, 김용모†, 안국영\*\*

### Fully coupled CMC modeling for three-dimensional turbulent nonpremixed syngas flame

Gunhong Kim, Jungwon Lee, Yongmo Kim, Kook-Young Ahn

#### ABSTRACT

The fully coupled conditional moment closure(CMC) model has been developed to realistically simulate the structure of complex turbulent nonpremixed syngas flame, in which the flame structure could be considerably influenced by the turbulence, transport history, and heat transfer as well. In order to correctly account for the transport effect, the CMC transport equations fully coupled with the flow and mixing fields are numerically solved. The present CMC approach has successfully demonstrated the capability to realistically predict the detailed structure and the overall combustion characteristics. The numerical results obtained in this study clearly reveal the importance of the convective and radiative heat transfer in the precise structure and NOx emission of the present confined combustor with a cooling wall.

**Key Words** : Conditional moment closure (조건 평균법), Nonequilibrium effect(비평형 효과), Turbulent nonpremixed flame(난류비예혼합 화염), Syngas(합성가스), Convective heat transfer (대류 열전달), Radiative heat transfer (복사 열전달), NOx formation characteristics (NOx 생성 특성)

#### 1. 서 론

난류 연소모델링의 가장 큰 난제는 온도와 화학종 농도간의 비선형성이 매우 크게 존재하며 이에 대응하는 평균 화학 반응율을 어떻게 제대로 모델링할 것인가에 있다. 최근 RANS 모델에 기초하는 난류 연소모델 중에서 CMC 모델은 Flamelet 모델과 함께 수치효율성을 유지하면서 상대적으로 정확하게 난류화염장을 해석할 수 있는 유용한 난류연소모델로 인식되어 오고 있다 [1]. CMC 모델은 혼합분율과 같은 보존 스칼라에 대해 조건 평균된 화학종과 온도를 이용함으로써 화학 반응율을 모델링하게 된다. 따라서 혼합분율에 따라 조건 평균화된 모든 반응 스칼라

량들에 대한 수송방정식들이 해석되어야 함으로 수치계산용량은 급격하게 증가하게 된다. 그러나 최근의 향상된 CMC 모델링 결과들과 고성능 컴퓨터의 사용으로 인해 현실적인 연소 시스템에 대한 해석이 수행되어 지고 있으며, CMC 모델의 수치 효율과 안정성을 높이기 위한 연구가 계속적으로 진행되고 있다[2, 3].

본 연구에서는 일반적인 연소 시스템 내에 적용 가능한 비정렬 격자계 CMC 모델을 개발하였다. 개발된 CMC 모델은 혼합 유동장과 상호 결합되어 기존의 후처리 방식의 CMC 계산에 비해 향상된 모델링이 적용되었다. 그리고 현 CMC 모델은 실제 연소 시스템내에 발생하는 난류 비단열 화염장 내의 복잡한 화염구조를 실제적으로 해석할 수 있는 향상된 특징을 보여주고 있다. 열전달에 의한 에너지 손실을 계산하기 위하여 조건 평균법을 직접적으로 적용함에 어려움으로 인해 비단열 화염면 접근법을 이용하여 조건 평균 엔탈피 분포를 계산하였다. 따라서 평균 엔탈

\* 한양대학교 기계공학부 대학원

† 연락저자, ymkim@hanyang.ac.kr  
한양대학교 기계공학부

\*\* 한국기계연구원

피 손실 변수 수송 방정식과 혼합분율 수송 방정식을 이용하여 계산된 조건 평균 엔탈피 분포로부터 CMC 모델의 조건 평균 화학종과 온도 분포를 계산하였다. 또한 현 혼합 유동장과 상호 결합된 CMC 모델의 3차원 계산에 요구되어 지는 과도한 계산 용량을 처리하기 위하여 병렬처리 기법들이 적용되었다.

본 연구에 적용된 난류 합성가스 (CO/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>) 연소기는 확장된 RPV (Reaction Progress Variable) 모델 [4]과 층류 화염면 모델 [5]을 이용하여 수치적으로 연구되었었다. 그러나 기존의 난류 연소모델의 한계로 인하여 3차원 난류 비에 혼합 합성가스 연소기내의 화염구조에 대한 대류 복사 열전달의 영향, 상세한 난류 연소간 상호작용, 그리고 질소산화물 생성 특성 들에 대한 설명이 부족했었다. 본 연구에서 개발된 향상된 CMC 모델과 병렬기법의 적용으로 인하여 상세 화학 반응을 고려한 화염구조 및 NO 생성 특성을 해석하였다. 수치적 결과들을 바탕으로 3차원 비단열 비에 혼합 합성가스 화염장에 대한 상세한 고찰들은 온도 분포, 혼합분율, 그리고 화학종들에 대하여 비조건 평균 그리고 조건 평균 수치들과 확률밀도함수를 이용하여 수행되었었다.

## 2. 수치 모델

### 2.1 CMC 모델

모든 화학종의 질량분율 및 엔탈피의 화학반응 스칼라량들에 대한 조건 평균은 다음과 같이 정의된다[1].

$$Q_i(\eta; x, t) = \langle \Psi_i(x, t) | \xi(x, t) = \eta \rangle \quad (1)$$

여기에서  $\Psi = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n, h)$ ,  $n$ 은 화학종의 수이다.  $\langle \cdot | \xi = \eta \rangle$ 은 혼합분율  $\xi$ 에 대한 조건 평균을 나타내며  $\eta$ 는 혼합분율에 대한 표본 공간에서의 독립적 조건 변수이다. 이상에서 첨자  $i$ 는 수식의 간략화를 위해서 생략되었으며 특별한 언급이 없는 한 모든 변수들은 조건 평균 변수로 사용되었었다. 최근 연구에서 유한체적법을 이용한 CMC 모델이 좀더 실제 연소 시스템내의 난류연소장 해석을 위하여 적용되었다. Cleary와 Kent는 축대칭 좌표계에 대한 보존형 유한체적 수치기법을 적합한 일반 CMC 방정식을 사용하였으며 일반화된 보존식은 아래와 같다[1, 3].

$$\rho P \frac{\partial Q}{\partial t} + \text{div}(\rho P \vec{v} Q) = (\rho P \nabla \cdot Q) + \rho P W + \rho P N \frac{\partial^2 Q}{\partial \eta^2} + Q \text{div}(\rho P \vec{v}) \quad (2)$$

여기에서  $W$ 는 화학종에 대해서는 조건평균 화

학반응율과 엔탈피에 대해서는 조건평균 복사 열 손실율을 각각 나타내며  $D$ 는 난류확산계수로 이는 스칼라량의 난류유통에 대한 일반적인 모델링인  $\langle \vec{v} \Psi | \eta \rangle = -D \nabla Q$ 의 결과로 나타나게 된다. 일반적으로 난류 연소장에 적용되는 질량 혼합이 이루어지는 유동장에 대한 방정식들은 질량 평균 형태식이 사용되기 때문에 CMC 방정식도 질량평균 값들로 표현하는 것이 편리하게 된다. 식(2)의 일반적 PDF는  $\rho_\eta P(\eta) = \bar{\rho} \bar{P}(\eta)$ 에 의해 질량평균 PDF로 대체되어지며  $\bar{\rho}$ 는 유동장의 평균밀도를 나타낸다. 본 연구의 경우에 PDF의 형태는 Beta 함수로 가정하였으며 보존 스칼라량의 평균 및 분산에 대한 방정식의 해로부터 구해지게 된다. 조건평균 속도항은 다음 식으로 근사되었다.

$$\langle \vec{v} | \eta \rangle = \vec{v} + \frac{\vec{v} \xi''}{\xi''^2} (\eta - \bar{\xi}) \quad (3)$$

여기에서  $\vec{v} \xi''$ 는 일반적인 평균 혼합분율,  $\bar{\xi}$  방정식에 사용된 gradient transport assumption에 의해 모델링되어진다.

CMC 모델 예측성능에 대한 조건평균 스칼라 소산율에 대한 모델링 과정이 매우 중요함은 잘 알려져 있으며,  $\langle M | \eta \rangle$ 은 난류 유동장내의 작은 스케일 구조들의 스칼라 혼합과정을 나타내며 화학반응율과 직접적으로 관련되어지게 된다. 난류 유동장이 비등성임에도 불구하고 스칼라 소산율은 Peters의 해석으로부터 구해졌다 [6].

$\langle M | \eta \rangle =$

$$\frac{\tilde{N} \exp(-2(\text{erf}^{-1}(2\eta-1))^2)}{\int_0^1 \exp(-2\exp(\text{erf}^{-1}(2\eta-1))^2) \bar{P}(\eta) d\eta} \quad (4)$$

비조건 평균 스칼라 소산율 모델은 일반적으로 사용되는 아래 식을 적용하였다.

$$\tilde{N} = 2 \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \bar{Z}^2 \quad (5)$$

일차 근사 CMC 모델에 대한 조건 평균 화학종 생성항은 아래와 같이 적용되었다.

$$\langle W_i(Y_j, h) | \eta \rangle = W_i(Q_j, Q_h) \quad (6)$$

CMC 모델에서 연소 유동장내의 화학종들의 질량평균 질량분율은 조건평균값과 질량평균 PDF로부터 아래와 같이 계산되어지게 된다.

$$\bar{Y}_i = \int_0^1 Q_i(\eta) \bar{P}(\eta) d\eta \quad (7)$$

엔탈피는 복사와 벽에 대한 대류의 영향을 받게되어 조건평균 엔탈피  $\langle h | \eta \rangle$  또는 온도분포  $\langle T | \eta \rangle$ 에 대한 CMC 계산을 위해서는 추가적

인 열전달 방정식이 요구되어지게 된다. 이러한 비단열 화염장내의 열전달 현상을 고려하기 위해 Cleary는 대체방법으로 단열 조건평균 온도분포를 단열 평균온도와 비단열 평균온도를 이용하여 스케일링함으로써 비단열 조건평균 온도분포를 가정하였다[3]. 여기에서 질량평균 온도,  $\bar{T}$ 는 평균 엔탈피,  $\bar{h}$  방정식의 해와 질량 평균 화학종 농도,  $\bar{Y}_i$ 로부터 계산되어진다. 그러나 명백하게도 유동장내의 질량평균 값에서 조건평균에 대한 정보를 얻는다는 것은 논란의 여지가 있다. 하지만 Cleary는 이러한 접근법은 허용할 만한 예측 정확도를 유지하면서 수치계산 안정성을 향상시킬 수 있음을 확인하였다. 본 연구에서는 평준화된 엔탈피 손실변수 접근법(normalized enthalpy loss variable approach)을 적용하였으며 아래와 같이 정의된다 [4].

$$i = \frac{h - h_{\min}}{h_{ad} - h_{\min}} = \frac{h - h_{\min}}{U(Z)} \quad (8)$$

여기에서  $h_{ad}$ 는 단열 엔탈피 그리고  $h_{\min}$ 는 순간적으로 주위 온도로 냉각되었을때의 혼합물의 엔탈피로 정의되는 최소 엔탈피를 나타낸다. 결과적으로 엔탈피 손실 변수,  $i$ , 는 단열상태에 대한 복사 및 대류 열손실에 대한 비율을 나타낸다. 이 값은 무차원량이며 엔탈피와 화학종 정보들로부터 구해지게 된다. 이러한 접근법을 이용하여 Cleary의 경우처럼 조건평균 엔탈피 분포를 얻을 수 있다. 질량평균 엔탈피 수송 방정식의 복사 열손실항을 계산하기 위하여 광학 흡수계수에 대하여 Optically Thin 모델을 적용하였다 [7]. 복사 열전달 방정식 해석을 위해서 비정렬 격자계에 대한 축대칭 FVM 복사모델을 적용하였다 [8].

## 2.2 혼합 유동장과 결합된 CMC 모델링

혼합 유동장과 완전 결합된 CMC 모델링에서는 몇가지 피할 수 없는 수치적 어려움들이 나타나게 된다. 이러한 어려움 중 하나는 조건 평균값인  $Q$ 의 과도한 배열크기가 있다.  $Q$ 의 배열은 공간 격자수와 보른 스칼라의 격자수에 직접적으로 연관되어 있다. 이러한 메모리 요구는 현 CMC 모델을 적용함에 있어서 큰 제약으로 다가오게 된다. 이러한 과도한 메모리 제약을 극복할 수 있는 매력적인 방법들로는 단순화된 화학반응과 공간 격자를 나누어 계산하는 병렬기법의 적용이 있다. 최근에 병렬 알고리즘은 CMC 접근법의 수치효율과 적용성을 향상시키는 기법으로 인식되고 있으며 CMC 모델의 메모리 요구와 상세 화학반응으로 인한 ODE(Ordinary differential equation)의 stiffness를 처리하는데 적용되고 있

다.

상세화학 반응을 계산하기 위하여 CMC 모델은 반응 스칼라의 생성율을 계산하기 위하여 operator-splitting 방법이 적용되고 있기 때문에, 분할된 화염장의 공간 격자 계산과 ODE 계산에 대하여 각각의 다른 병렬기법들이 적용되었다. 수송 변수들을 해석하기 위하여 분할된 격자 공간 수와 동일한 계산 노드( $N_p$ )들이 적용되었다. 그리고 ODE 계산에 대해서는 적용가능한 모든 노드( $N_c$ )들이 적용되었다.

## 3. 수치해석 결과 및 고찰

본 연구에서 병렬 기법을 이용한 완전 결합된 CMC 접근법은 대류 복사 열전달을 가지고 있는 3차원 난류 합성가스 화염장 [4]의 구조를 예측하는데 적용하였다. 실험장치는 다양한 열용량에 따른 난류 비단열 비예혼합 화염장을 측정하기 위하여 구성되었고 합성가스 연소기 실험에서 버너는 공기 냉각되는 연소실에 장착되었으며 중앙 연료관과 환형 공기 유입구로 구성되었다. 버너의 내부와 연소실 직경은 각각 0.05m와 0.1m이며 연소실의 총길이는 1m이다. 냉각용 공기유동은 두개의 관 사이를 통과하며 연소실 외벽을 냉각시키게 된다. 원통형 화염 홀더는 버너 중심부에 있는 붐 끝에 장착되어 축방향으로 길이조절이 가능하다. 버너와 화염 홀더의 간격은 현 실험조건에서 0.01m로 고정되었다. 상류 부에 위치한 중앙 연료와 공기 관들은 45각도로 구부러진 공기유입관에 의해 분리되었다. 연소실 구조가 축대칭임에도 불구하고, 화학반응 유동장은 부력의 영향으로 3차원 특성을 가지게 된다. 연료는 40% CO, 40% H<sub>2</sub> 그리고 20% N<sub>2</sub>로 구성되어 있으며 11.9MJ/kg의 열량이 공급되었다. 화학당론적 혼합분율은 0.243이며 단열 화염온도는 2,316K이다. 유입되는 연료와 공기의 온도는 303K로 동일하다. 좀더 자세한 연소기와 실험조건에 대한 설명은 Louis의 논문 [4]에 나와있다.

Figure 1은 8개로 나뉘어진 계산영역을 보여주고 있으며 적용된 사면체 격자계와 화염 홀더부의 확대 그리고 유동경계 조건을 보여주고 있다. 구조적으로 복잡한 합성가스 연소기는 26,636개의 격자수와 127,498개의 셀을 갖는 3차원 비정렬 격자 시스템을 이용하여 정확하게 모델되어졌다. 계산 영역은 축방향으로 0.65m까지 확장되었다. 연료와 공기의 유입속도들은 각각 4.13m/s와 2.88m/s가 적용되었다. 벽면 냉각효과를 고려하기 위하여  $x=0.03m$ 로부터 연소기 출구까지의 고정된 온도조건( $T_w=600K$ )이 적용되었으며 나머지 연소기 상류부에 대해서는 단열조건이 적용

되었다.

확장된  $k-\epsilon$  난류 모델 [9]이 난류유동장을 해석하기 위하여 적용하였다. 비단열 조건하에서 상세 화학반응을 계산하기 위하여, 직접적으로 조건평균 에너지 방정식을 해석하는 대신에 표준화된 엔탈피 손실변수에 대한 평균 에너지 방정식을 해석하였다. 복사 열전달은 비정렬 격자 유한 체적법 [8]을 적용되었으며 복사 제어 각도들은  $6 \times 6$  ( $N_\theta \times N_\phi$ )가 적용되었다. 복사 열전달에 기여하는 세가지 화학종인  $H_2O$ ,  $CO_2$  그리고  $CO$ 가 고려되었으며 좀더 자세한 복사 특성에 대한 정보는 TNF workshop 사이트 [7]에서 제공되어진다. 적용된  $CO/H_2$ 에 대한 상세 화학반응식으로는 13개의 화학종 ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $O$ ,  $H$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CHO$ ,  $CH_2O$ ,  $N_2$ )이 고려된 Warnatz et al 반응식 [10]이 적용되었다. 현 연구에서 NO 생성에 대해서는 열적 NO 화학반응만이 고려되었다. 적용된 CMC 모델의 계산 용량 및 시간을 제어하기 위하여 24개의 계산 노드 ( $N_F=8$ ,  $N_C=24$ )를 가지고 있는 병렬 시스템을 적용하였다.

Figure 2는 대칭면에 대한 속도 벡터, 혼합분율 분포, 평균화된 엔탈피 변수, 그리고 온도분포들을 포함한 전체적인 화염장 특성을 보여주고 있다. 예측된 속도 벡터로부터 bluff-body 화염 홀더는 혼합분율을 증가시키고 하류의 고온의 연소 영역으로부터 지속적인 점화원을 제공함으로써 화염을 안정화시키는 재순환 영역을 형성하는데 중요한 역할을 하고 있음을 알 수 있다. 현 연소기내에서 부력의 영향으로 인해 하류측 유동장이 수직방향으로 휘어지고 있음을 확인할 수 있다. Figure 2b에 나타난 평균 혼합분율 분포는 재순환 영역내의 연료와 공기의 혼합이 상대적으로 느림을 보여주고 있다. 하류 혼합영역( $x > 0.4m$ )내에서 조차 혼합분율은 화학당량적 혼합분율보다 높음을 알 수 있다. 결과적으로 긴 화염장이 연소실 하류부에까지 생성되어지게 됨을 알 수 있다.

또한 이러한 3차원 비단열 난류 bluff-body 화염은 확연히 다른 화염구조를 보여주고 있다. Figure 2c-2e에 나타났듯이 온도와 혼합분율의 편차, 그리고 평균화된 엔탈피 변수 분포들로부터 상류 혼합층과 재순환 영역( $x < 0.065m$ )에서의 온도분포는 열전달효과보다는 주로 비화학평형 효과에 지배되고 있음을 보여주고 있다. 그러나 화학당량비 영역에 인접한 난류 혼합층내의 상대적으로 낮은 온도분포는 이 영역에서 혼합분율의 편차들은 상당히 높기 때문에 비화학평형 효과에 의해 주로 영향을 받지만 화학당량비 영역이 냉각벽에 인접해 있기 때문에 대류열전달에 의해 중심재순환 영역에 비하여 상대적으로 크게

영향을 받게 된다.

수치 결과는 예측된 초고 화염온도 (1,850K)가 단열 화염온도(2,316K)보다 낮게 나타나고 있다. 이러한 낮은 온도는 주로 대류와 복사 열손실의 결과이다. 그러나 혼합분율의 난류변동이 주 연소장 내에서 상당한 수준으로 유지되고 있기 때문에 온도의 감소는 화학비평형 효과도 존재하고 있음을 나타내고 있다. Figure 2e에 나타났듯이 온도장은 하류측으로 갈수록 감소해가며 연소실 출구에서는 대략 1,200K까지 감소되었다. 연소실 벽 ( $T_w=600K$ ) 근처에서 대류열전달로 인하여 큰 온도구배가 존재함을 보여주고 있다. 이러한 대류 열손실로 인하여 개방된 bluff-body 화염과 비교하여, 밀폐된 bluff-body 화염장의 상세화염 구조는 근본적으로 수정되어지게 된다. 하부 벽 근처 영역에 대하여 상부 벽근처 영역이 부력의 영향으로 인하여 더욱 큰 온도 구배를 가지고 있음을 알 수 있다. 이러한 경향들은 엔탈피 손실 변수와 온도 분포들로부터 확인할 수 있다.

Figure 3에는  $O_2$ 와  $CO_2$ 에 대한 예측된 체적분율을 축방향 상류측과 하류측에 대한 실험치와 비교하고 있다. Figure 2e에서 보듯이, 상류측( $x=0.0065m$ )은 고온 영역 전에 재순환 영역에 놓여 있고, 하류측( $x=0.3m$ )은 주 연소 영역 후에 연소 영역에 놓여 있다.

상류측( $x=0.0065m$ )에서는 예측된  $O_2$ 와  $CO_2$ 의 체적분율의 분포가 특히 중심부 ( $-0.02m < r < 0.02m$ )에서 타당하게 실험결과와 잘 일치하고 있다. 그러나 약간 연료가 농후하거나 화학당량 양에 있는 영역 근방에서는  $CO_2$ 의 질량분율이 확연하게 과소예측되고 있다. 하류측( $x=0.3m$ )에서는 예측된  $O_2$ 와  $CO_2$ 의 체적분율 역시 특히 중심부 ( $-0.02m < r < 0.02m$ )에서 실험결과와 잘 일치하지만 바깥 영역( $r > 0.02m$ ,  $r < -0.02m$ )에서는 상당히 과소예측하고 있다. 상류측과 하류측의 이러한 차이는 주로  $k-\epsilon$  난류 모델의 결함에 기인하는 것으로 사료된다.

Figure 4는 두 개의 축방향 위치( $x=0.065m$ ,  $x=0.3m$ )에 따른  $CO$  체적분율의 반경방향 분포의 예측치와 실험치를 보여준다. 두 위치에서  $O_2$ 와  $CO_2$ 의 체적분율 분포는 유사하며, 본 CMC 모델은 예측치와 실험치에서 상당한 일치를 보여준다. 그러나 상류측( $x=0.065m$ )에서  $CO$ 의 높이는 바깥 반경부분( $|r| > 0.02m$ )에서 확연히 과대에 예측하고 있으며 대응하는  $CO_2$  체적분율분포는 과소예측하게 된다. 하류측( $x=0.3m$ )에서는  $CO$ 의 체적분율의 분포가 상당히 잘 재현되고 있다.

Figure 5는 3차원 난류 비예혼합 합성가스 화염에서의 예측된  $NO$ 와  $N$ 의 몰분율(dry ppm)의 구획선을 보여준다.  $NO$ 의 몰분율의 최고치는 고온

영역에 놓여있고 NO의 수준은 고온 영역의 하류측으로 갈수록 온도의 감소와 혼합에 따른 희석에 의해 점차적으로 감소하고 있음을 보여준다. Figure 5b에 나타나듯이, 화학종 N은 거의 고온 영역에 집중되어 있으며, 화학종 N의 몰분율은 고온영역의 하류영역을 따라서 빠르게 감소하고 있다.

Figure 6은 서로 다른 세 위치( $x=0.065\text{m}$ ,  $0.15\text{m}$ ,  $0.3\text{m}$ )에서의 NO 농도의 축방향 분포의 예측치와 실험치를 나타낸다. 세 영역 중에서  $x=0.15\text{m}$  인 지점은 고온 영역에 대응된다. 상류 재순환 영역( $x=0.065\text{m}$ )과 고온 영역( $x=0.15\text{m}$ )에서, 예측된 NO 분포는 실험데이터와 잘 일치한다. 하류측( $x=0.3\text{m}$ )에서는 NO의 수준이 상당히 과소예측된다. 상류측과 하류측의 NO 분포의 오차는 주로  $k-\epsilon$  난류모델에 의한 난류혼합장의 부정확한 예측과 부분적으로는 상세한 NO 화학반응메커니즘을 고려하지 않았기 때문으로 사료된다.

대류 및 복사 열전달을 고려한 복잡한 3차원 난류 비예혼합 화염의 상세한 구조를 조사하기 위하여, 온도와 OH, NO의 몰분율의 조건평균을 분석할 필요가 있다. 또한 별개의 다른 화염영역에서 혼합 상태를 확인하기 위해서는 확률 밀도 함수의 분포를 분석할 필요가 있다. Figure 7은 세 축방향 위치에서 연료가 농후한 중심선 위치와 화학당량비 조건을 가진 상부화염장의 반경방향위치에서 예측된 확률밀도함수 분포와 온도, OH 및 NO의 몰분율의 조건부 평균치를 도시하였다. 수치해석결과에서 보는 것처럼 상류측( $x=0.065\text{m}$ )에서는 화학당량비 위치에서 조건 평균된 온도분포가 연료가 농후한 재순환이 있는 중심선 영역에서 보다 낮게 나타나고 있다. 이러한 경향은 높은 스킨라 소산율과 관련된 난류와 화학반응의 상호작용에 의해 주로 기인된 것이지만 부분적으로는 대류 열전달에 의해 영향을 받게 된다. 이러한 화학당량비 영역에 인접한 상류측의 난류 혼합층내의 온도분포는 이 영역에서 혼합분율의 편차들은 상당히 높기 때문에 비화학평형 효과에 의해 주로 영향을 받지만 화학당량비 영역이 냉각벽에 인접해 있기 때문에 대류열전달에 의해 중심재순환 영역에 비하여 상대적으로 크게 영향을 받게 된다. Figure 7에 나타나듯이, 상류영역에서 화학당량비 영역의 확률밀도함수 편차는 연료가 농후한 중심선 영역의 확률 밀도함수분포 편차보다 훨씬 크게 나타난다. 앞에서 언급한 바와 같이 상류의 화학당량비 영역에서는 상대적으로 높은 스킨라 소산율로 인한 비평형효과 때문에 이 영역에서는 혼합 특성은 연료가 농후한 재순환이 있는 중심선 영역과 비교하여 상대적으로 높은 OH 농도분포를 가지게 된다.

높은 온도분포를 가지는 연소기 입구에서 약간 하류쪽에 위치한 화학당량비 영역( $x=0.15\text{m}$ ,  $r=0.037\text{m}$ )에서, 조건 평균된 온도의 최고치는 화학평형상태조건보다 낮으며 상류영역( $x=0.065\text{m}$ ,  $r=0.043\text{m}$ )의 값과는 거의 같은 수준이다. 그러나 이러한 영역에서의 화학평형조건으로 이탈된 온도의 저감은 비평형 효과보다는 주로 대류 열손실에 기인된 것이다. 순수한 혼합 입구 영역에서의 속도장이 flame holder에 의해 편향되어 기원 혼합기가 부분적으로 저온의 벽면( $T_w=600\text{K}$ )에 부딪치어 대류열전달이 크게 일어나고 있음을 알 수 있으며 연소실 상부의 화학당량비 선이 저온 벽면과 상당히 근접하게 있기 때문에 화학당량비 조건의 화염영역과 저온 벽면 사이에 큰 온도구배가 존재하게 되어 대류열전달이 크게 발생하게 된다. 그러므로 특히 상대적으로 짧은 체류시간을 갖는 고온의 화학당량비 연소영역( $x=0.15\text{m}$ ,  $r=0.037\text{m}$ )에서는 대류에 의한 냉각이 복사에 의한 냉각보다 더 강하게 나타난다. 연소실입구에서 상대적으로 멀리 떨어진 하류영역( $x=0.30\text{m}$ ,  $r=0.035\text{m}$ )에서는 조건 평균된 온도의 최고치는 주로 대류와 복사 냉각 때문에 크게 낮아지게 된다. 이러한 결과는 하류를 따라서 비평형 효과와 비교하여 열전달 효과가 점차적으로 중요해진다는 것을 의미한다.

Figure 2c에서 볼 수 있듯이 혼합분율의 편차는 최하류측으로 갈수록 감소하나 여전히 일정한 크기를 유지하고 있으며, 이러한 경향은 Figure 7에 나타나는 확률밀도함수 분포에서도 확인할 수 있다. 하류영역을 따라서 평균혼합분율의 차와 혼합분율 난동편차가 감소하게 되어 두개의 서로 다른 반경방향의 위치에서 확률밀도 함수의 분포는 서로 접근하고 분포의 폭도 줄어들게 된다. 그러나 연소실입구에서 상대적으로 멀리 떨어진 하류영역( $x=0.3\text{m}$ )에서도 확률밀도함수의 분포의 차이는 여전히 남아있게 된다. 이러한 특성은 3차원 난류 비예혼합 합성가스 화염에 있어서 혼합분율의 평균과 변화율의 상대적으로 약한 감쇠 특성을 가지기 때문이다.

또한 Figure 7에 도시된 조건 평균화된 NO의 몰분율이 하류측을 따라서 크게 변화되고 있음을 보여준다. flame holder 근방의 재순환이 있는 상류중양선 영역( $x=0.065\text{m}$ )의 중심선에서 NO의 조건 평균의 분포는 현저히 높은 최고치와 함께 특히 화학당량적 혼합분율 근방에서 큰 구배를 갖는다. 이러한 재순환이 있는 상류중양선 영역은 상대적으로 긴 체류시간과 낮은 스킨라 소산율을 가지기 때문에 상류의 화학당량비 영역( $x=0.065\text{m}$ ,  $r=0.043\text{m}$ )에 비하여 조건 평균 온도의 최고치는 상대적으로 높게 나타나며, 온도에 민감한 thermal NO의 조건 평균값은 현저히 높은 값

을 가진다. 재순환이 있는 상류중앙선 영역( $x=0.065m$ )에서 혼합분을 공간상의 NO 분포의 높은 구배는 상대적으로 낮은 스칼라 소산율로 인한 것이다.

고온의 화학당량비 연소영역( $x=0.15m$ ,  $r=0.037m$ )에서의 조건평균 NO 분포의 최대치는 상류측( $x=0.065m$ ,  $r=0.043m$ )의 수준보다 단지 미소하게 증가하게 되는 것을 알 수 있으며 이러한 조건 평균 NO 분포의 분포특성은 고온의 화학당량 영역( $x=0.15m$ ,  $r=0.037m$ )의 화염 구조에 지대한 영향을 미치는 대류 열전달에 의한 것이다. 연소실입구에서 상대적으로 멀리 떨어진 하류의 화학당량비 지점( $x=0.3m$ )에서는 조건 평균된 NO 분포의 최고수준은 대류와 복사 열전달로 인해 상당히 감소하게 됨을 알 수 있다.

두 개의 하류측 중심선의 위치( $x=0.15m$ ,  $0.3m$ )에서 조건 평균된 NO의 분포는 두 가지 모드가 나타난다. Figure 2a에서 볼 수 있듯이, 재순환 영역은 입구에서  $x=0.1m$  되는 위치까지 확장된다. 또한  $x=0.15m$ 의 중심선 위치가 재순환 영역의 하류측에 있기 때문에, 상대적으로 고온인 재순환 영역으로 부터의 농후한 혼합물과 대류열전달의 영향을 상대적으로 많이 받으며 수송되어 엔탈피 손실이 상대적으로 많은 혼합기 사이에 혼합과정에 의해 NO 조건 평균 분포의 두 가지 모드가 생성될 수 있다. 연소실입구에서 상대적으로 멀리 떨어진 하류의 중심선 지점( $x=0.3m$ )에서의 조건평균 NO 분포를 분포에 이중모드의 특성도 이러한 혼합특성에 기인한 것이다.

#### 4. 결론

난류유동장과 완전히 결합된 CMC 모델이 3차원 난류 비단열 비예혼합 syngas 화염의 상세구조와 NOx 배출특성 해석에 적용하였다. 수치계산결과로부터 도출된 결론은 아래와 같다.

1. 난류유동장과 완전히 결합된 CMC 모델이 3차원 난류 비단열 비예혼합 syngas 화염의 상세구조와 연소특성을 잘 예측할 수 있음을 보여주고 있으며 완전결합된 CMC 모델의 수치해석에 적용된 비정렬격자 유한체적법 및 병렬계산 방식은 특히 과도하게 밀집된 격자와 상세 화학식의 복잡한 3차원 난류 비예혼합 화염장의 계산에 있어서 계산효율을 현저히 개선하였다.
2. 삼차원 난류 비예혼합 syngas 화염장의 연소실 벽 ( $T_w=600K$ ) 근처에서 대류열전달로 인하여 개방된 bluff-body 화염구조에 비교해보면 밀폐된 bluff-body 화염장의 상세화염구조는 상당히 수정되어지게 된다. 또한 하부 벽근처 영역에 대하여 상부 벽근처 영역이 부력의 영향으로 인하여 더욱 큰 온도 구배를 가지게 된다.

3. 상류측( $x=0.065m$ )에서는 예측된  $O_2$ 와  $CO_2$ 의 체적분율의 분포가 특히 중심부에서 실험결과와 잘 일치하나 약간 연료가 농후하거나 화학당량에 있는 영역 근방에서는  $CO_2$ 의 질량분율이 확연하게 과소예측되고 있다. 하류측( $x=0.3m$ )에서는 예측된  $O_2$ 와  $CO_2$ 의 체적 분율 역시 특히 중심부( $-0.02m < r < 0.02m$ )에서 실험결과와 잘 일치하지만 바깥 영역( $r > 0.02m$ ,  $r < -0.02m$ )에서는 상당히 과소예측하고 있다. 상류측과 하류측의 이러한 차이는 주로  $k-\epsilon$  난류모델의 결합에 기인하는 것으로 사료된다.

4. 상류 재순환 영역( $x=0.065m$ )과 고온 영역( $x=0.15m$ )에서, 예측된 NO 분포는 실험데이터와 잘 일치한다. 하류측( $x=0.3m$ )에서는 NO의 수준이 상당히 과소예측 된다. 상류측과 하류측의 NO 분포의 오차는 주로  $k-\epsilon$  난류모델에 의한 난류혼합장의 부정확한 예측과 부분적으로는 상세한 NO 화학반응메커니즘을 고려하지 않았기 때문으로 사료된다.

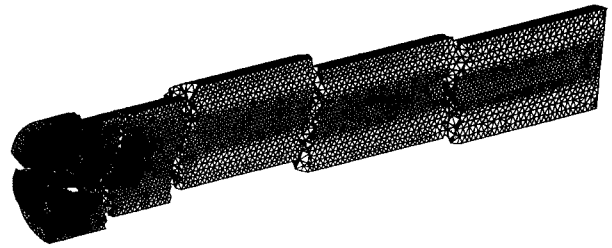
5. 상류측( $x=0.065m$ )에서는 화학당량비 위치에서 조건 평균된 온도의 분포가 화학평형온도보다 상당히 낮게 예측되는 이유는 주로 높은 스칼라 소산율과 관련된 난류와 화학반응의 상호작용에 의해 기인된 것이지만 부분적으로는 대류 열전달에 의해 영향을 받는다. 또한 높은 온도분포를 가지는 연소기 입구에서 약간 하류쪽에 위치한 화학당량비 영역( $x=0.15m$ ,  $r=0.037m$ )에서, 조건 평균된 온도의 최고치는 화학평형상태조건보다 낮으며 상류영역( $x=0.065m$ ,  $r=0.043m$ )의 값과는 거의 같은 수준이다. 그러나 이러한 영역에서의 화학평형조건으로 이탈된 온도의 저감은 비평형 효과보다는 주로 대류 열손실에 기인된 것이다.

6. flame holder 근방의 재순환이 있는 상류중앙선 영역( $x=0.065m$ )의 중심선에서 NO의 조건 평균의 분포는 현저히 높은 최고치와 함께 특히 화학당량적 혼합분을 근방에서 큰 구배를 갖는다. 이러한 재순환이 있는 상류중앙선 영역은 상대적으로 긴 체류시간과 낮은 스칼라 소산율을 가지기 때문에 상류의 화학당량비 영역( $x=0.065m$ ,  $r=0.043m$ )에 비하여 조건 평균 온도의 최고치는 상대적으로 높게 나타나며, 온도에 민감한 thermal NO의 조건 평균값은 현저히 높은 값을 가지게 된다.

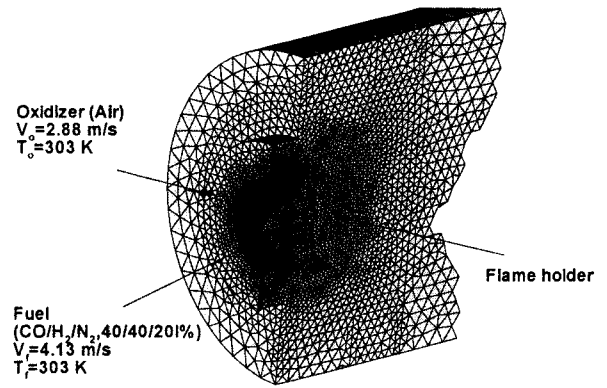
7. 하류측 중심선의 위치( $x=0.15m$ ,  $0.3m$ )에서 조건 평균된 NO의 분포에서 나타나는 두 가지 모드는 상대적으로 고온인 재순환 영역으로 부터의 농후한 혼합물과 대류열전달의 영향을 상대적으로 많이 받으며 수송되어 엔탈피 손실이 상대적으로 많은 혼합기 사이의 혼합에 의해 형성된다.

## 참고문헌

- [1] Klimenko A Y and Bilger R W 1999 Conditional moment closure for turbulent combustion *Prog. Energy Combust. Sci.* 25 595-6
- [2] Kim S H, Huh K Y and Tao L 2000 Application of the elliptic conditional moment closure model to a two-dimensional nonpremixed methanol bluff-body flame *Combust. Flame* 120 75-90
- [3] Cleary M J and Kent J H 2005 Modelling of species in hood fires by conditional moment closure *Combust. Flame* 143 357-3
- [4] Louis J J J, Kok J B W and Klein S A 2001 Modeling and Measurements of a 16-kW Turbulent Nonadiabatic Syngas Diffusion Flame in a Cooled Cylindrical Combustion Chamber *Combust. Flame* 125 1012-10
- [5] Kang S M and Kim Y M 2003 Parallel unstructured-grid finite-volume method for turbulent nonpremixed flames using the flamelet model *Numerical Heat Transfer B* 43 525-547
- [6] Peters N 1986 Laminar flamelet concepts in turbulent combustion *Proc. Combust. Inst.* 21 358-3
- [7] <http://www.ca.sandia.gov/TN>
- [8] Murthy J Y and Mathur S R 1998 A finite volume method for radiative heat transfer using unstructured meshes *AIAA-98-08*
- [9] Chen Y S and Kim S W 1987 *Computations of turbulent flows using an extended k-ε turbulence closure model* Report NASA CR-179204 (NASA-Marshall Space Flight Center, Alabama, US)
- [10] Warnatz J, Mass U and Dibble R W 2001 *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation* 3ed (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag)



(a) 8 partitioned tetrahedral grid



(b) Close-up look of burner part

Figure 1. Partitioned tetrahedral grid arrangement and close-up look of flame-holder, and inlet boundary conditions for the 16 KW syngas diffusion flame

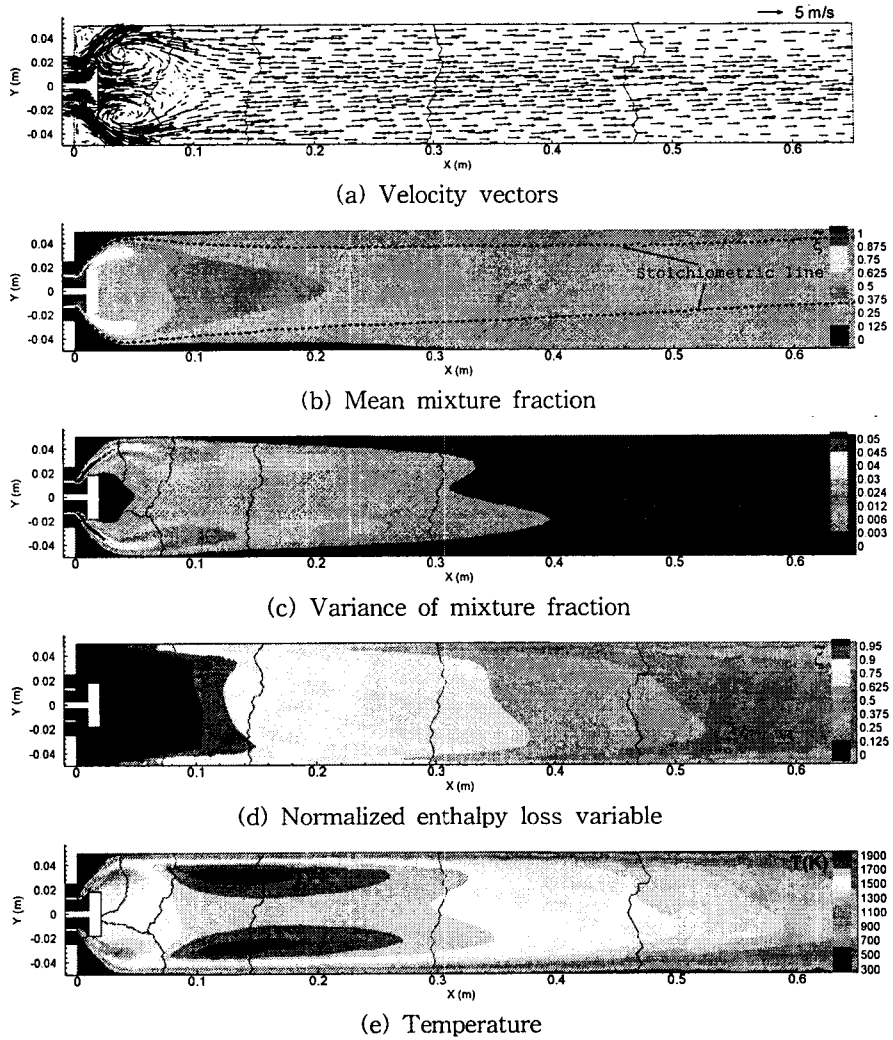


Figure 2. Predicted mean flow and flame fields at symmetric plane

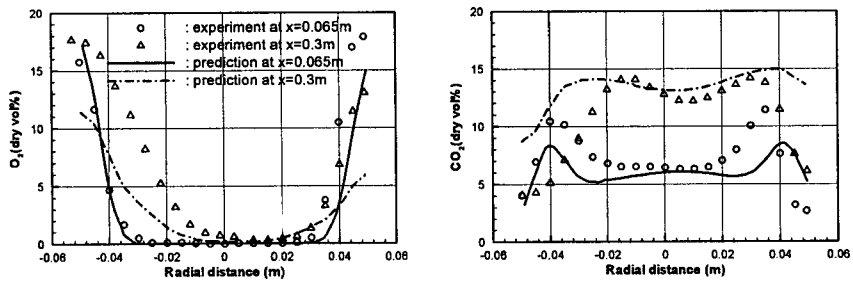


Figure 3. Comparisons of the calculated and measured radial profiles of  $O_2$  and  $CO_2$  species volume fraction (dry %) at two axial locations ( $x=0.065m$  and  $x=0.3m$ ).



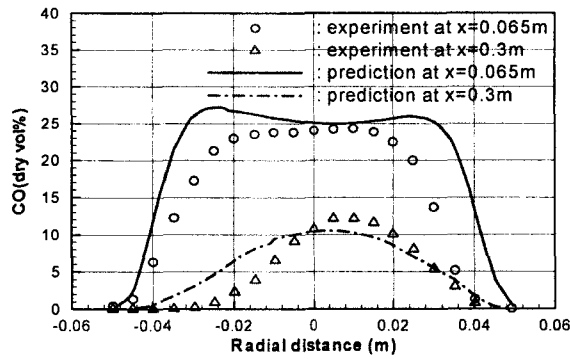


Figure 4. Comparisons of the calculated and measured radial profiles of CO species volume fraction (dry %) at different axial locations ( $x=0.065\text{m}$  and  $0.3\text{m}$ ).

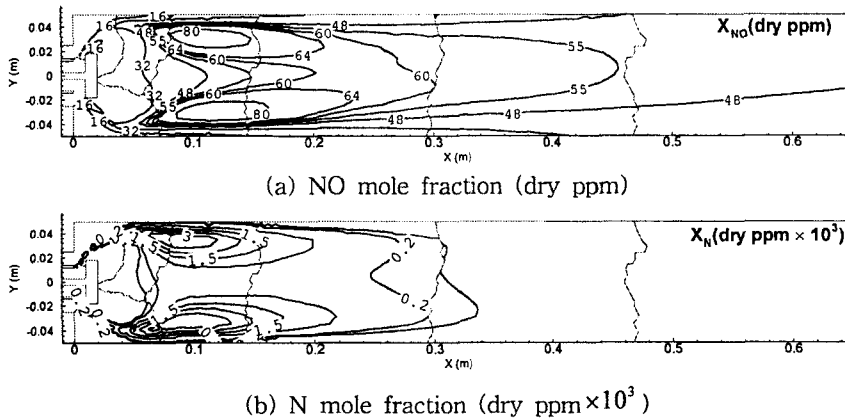


Figure 5. Predicted NO (dry ppm) and N (dry ppm  $\times 10^3$ ) concentrations at symmetric plane

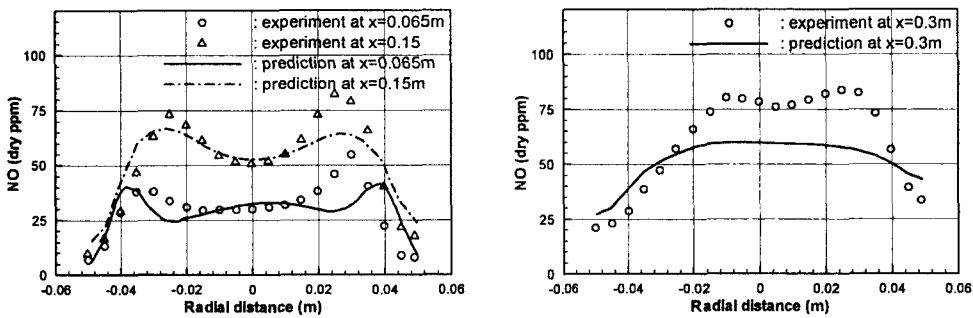
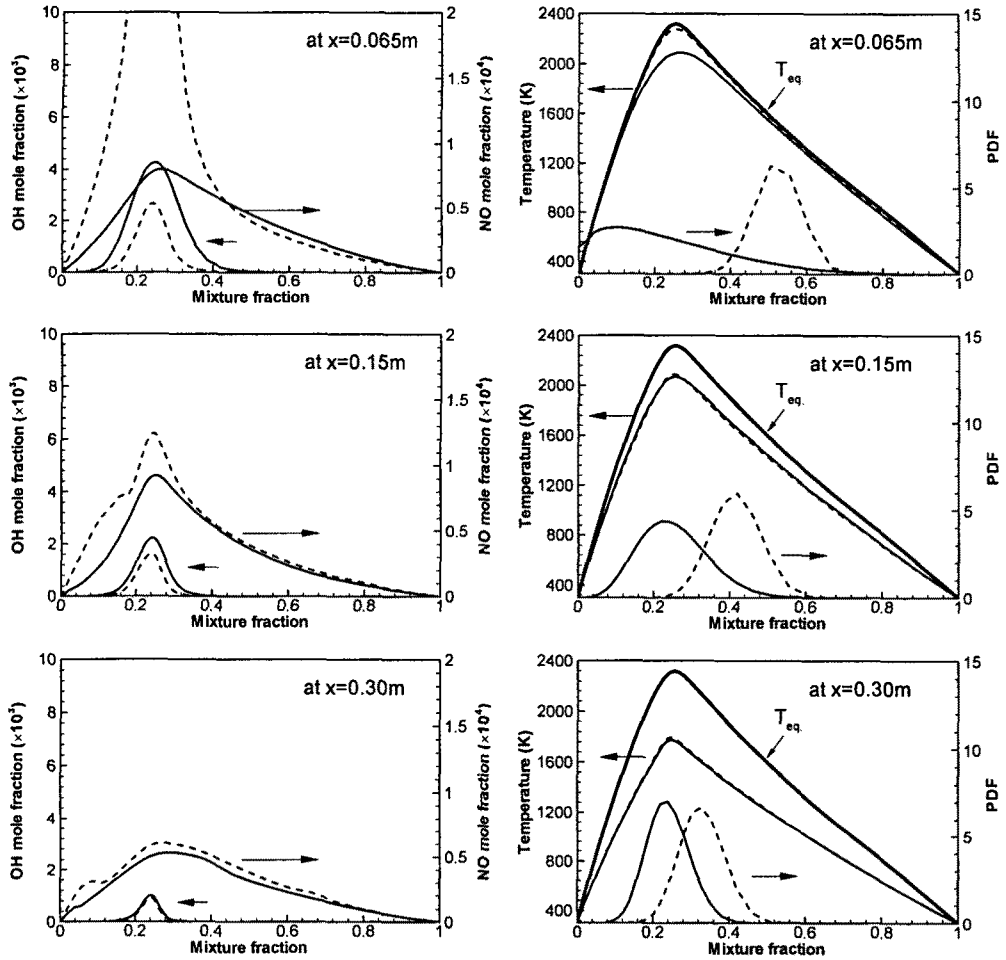


Figure 6. Comparisons of the calculated and measured radial profiles of NO concentration at different axial locations ( $x=0.065\text{m}$ ,  $0.15\text{m}$  and  $0.3\text{m}$ )



(a) Conditional means of NO and OH mole fraction (b) Conditional means of probability density function and temperature

Figure 7. Predicted conditional means of OH and NO mole fraction, temperature, and probability density function at the fuel-rich centerline position and stoichiometric radial position for three axial locations (solid lines: at radial position of stoichiometric mixture fraction, dashed lines: at centerline)