

오픈 소스 OpenFOAM을 이용한 층류 수소 제트 화염장 내의 다종 확산 수치해석 모델 개발

김군홍^{*†}

Numerical modelling for multicomponent diffusion in laminar hydrogen jet flame by using opensource OpenFOAM

Gunhong Kim^{*†}

ABSTRACT

The present study focuses mainly on modeling the ordinary diffusion flux of species. According to CHEMKIN, both the mixture-averaged approach, Fick's formula, and the full multicomponent approach are implemented in the framework of opensource OpenFOAM. Also the Stefan-Maxwell approach is coded and validated together against measurements of laminar hydrogen jet flame. In the case of viscosity and conductivity of mixture, the mixture-averaged approach is applied and thermal diffusion is not considered in this work.

Results show that there are no distinct deviations in three different approaches of diffusion of species in the present hydrogen flame condition.

Key Words : Multicomponent diffusion, Hydrogen jet flame, OpenFoam

연소 유동장에서 화학반응에 의한 화학종의 생성과 소멸은 화학종들의 대류, 확산, 또는 전도에 의한 이송과 균형을 이루게 된다. 따라서 화학종, 운동량 그리고 에너지 방정식에서 다종 혼합물의 이송 물성치들은 매우 중요하며, 확산 계수, 점도, 열 전도계수, 그리고 열 확산 계수에 대한 적절한 수치 모델이 필요하게 된다.

이러한 기체상 혼합물의 물성치를 계산하기 위하여, CHEMKIN 프로그램의 TRANSPORT 라이브러리에서는 기체 동역학으로부터 유도되는 Dixon-Lewis의 상세 다종 접근법(full multicomponent approach)과 Kee, et al.에 의해 적용된 Fick 법칙 기반의 혼합물 평균법(mixture-averaged approach)이 사용되어지고 있다[1,2]. 그리고 Dixon-Lewis의 상세 다종 접근법과 더불어 가장 일반적으로 적용되어지고 있는 Stefan-Maxwell 방정식을 적용한 접근법이 있으며[3,4], 최근에 오픈 소스 OpenFOAM[5] 기반으로 적용되고 있다[6]. 국내에서도 연소 분야에 OpenFOAM 적용 사례가 있지만[7], 확산 현상이 중요한 화염장에 대한 적용 사례는 없다.

본 연구에서는 위에서 언급된 세 가지의 확산 모델을 오픈 소스인 OpenFOAM 기반으로 개발

하였다. 그리고 유체 물성치인 점성과 열전도 계수에 대한 혼합물 물성치 모델을 추가로 적용하였다. 화학종들에 대한 물성치인 상호 확산 계수(binary diffusion coefficient), 점성(viscosity), 열전도 계수(conductivity)들은 CHEMKIN 라이브러리를 적용하여 사전 계산을 통해 데이터로 적용되었으며, 이러한 방식은 CHEMKIN과 동일하다. 개발된 연소 코드와 확산 모델의 예측 특성을 평가하기 위하여, 수소 층류 제트 화염장에 대해 해석을 수행하였다. 해석 결과로부터 현재 연소 조건 하에서는 확산 모델간의 유의미한 차이를 발견하기가 어려웠다. 측정 데이터와 비교 평가를 통해 현재 개발된 연소 코드는 수소 확산 화염 구조를 잘 예측하고 있음을 확인 할 수 있었다.

개발된 OpenFOAM 기반의 연소 코드의 예측도를 평가하기 위해 적용된 층류 수소 제트 화염은 Toro *et al*에 의해 다양한 광계측 기법을 적용하여 수행되었다[8]. 축대칭 동축 버너는 직경 9mm의 직관을 통해 직경 95mm의 주변 공기 유동으로 분출되는 일반 구조를 가지고 있다. 해석 화염 조건은 연료 측은 50%H₂/50%N₂의 조성과 50 cm/s의 분출 속도를 가지고 있으며, 주변 공기 측은 연료 평균 속도와 동일한 속도로 유지되었다. 레이저를 이용한 광계측 기법인 Spontaneous Raman Scattering, CASR, 그리고

* 경원이앤씨

† 연락저자, scurry.kim@kwenc.kr

TEL: (031)737-2987 FAX: (031)-737-2989

LIF 측정 기법을 통해, 주 화학종인 H_2 , O_2 , H_2O , N_2 와 중간 생성물인 OH 농도 그리고 온도가 축 방향과 반경 방향에 대하여 측정되었다.

해석 격자는 2차원 축대칭 버너 형상에 대해 5,300개의 사각형 단면 격자가 적용되었다. 연료관 입구에서 속도는 Toro *et al*의 측정 결과로부터 완전 발달된 층류 유동을 가정하여 적용하였으며, 주변 공기 유입 속도는 일정하다고 가정하였다. 연료관의 두께는 참고 문헌 자료가 부재하여 1.5mm로 가정하여 적용하였다. 현재 해석 조건에서는 복사 열전달에 의한 열손실과 연료관에서의 열전달 영향은 고려되지 않았다. 적용된 상세 화학반응 메카니즘은 GRI-Mech 2.11[9] 내의 H_2 - O_2 서브 메카니즘을 적용하였으며, 9개의 화학종(H_2 , O_2 , OH, O, H, H_2O , HO_2 , H_2O_2 , N_2)이 고려되었다.

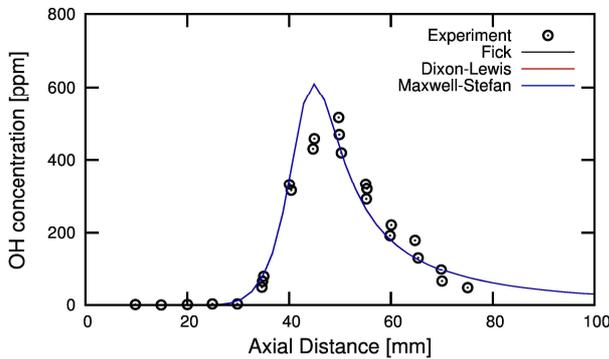


Fig. 1 Axial profiles of OH concentration

수소 연소장 내의 다종 확산 모델에 대한 예측도를 평가하기 위하여, Fig. 1에 축 방향에 대한 OH 중간 생성물에 대한 결과를 비교하였다. 해석 결과에서 Fick 모델은 Fick 법칙 기반의 단순한 확산 모델이며, Dixon-Lewis 모델과 Maxwell-Stefan 모델은 각기 다른 상세 다종 확산 모델이다. 해석 결과로부터 적용된 세 가지 확산 모델간의 결과 차이는 미미한 것으로 예측되었다. 이러한 경향은 모든 해석 결과에서 동일하게 나타나고 있으며, 이는 확산 모델간의 유의미한 특성을 파악하기에는 질소 희석된 수소 연료의 확산 화염 구조가 적절하지 않은 것으로 판단되어진다. Fig. 1에서 OH 농도 측정 결과와 최대치 지점이 상류 측으로 다소 과소 예측되고 있지만, 농도 수준은 대략적으로 일치되는 경향을 보여주고 있다.

적용된 모든 확산 모델의 예측도가 거의 동일하여, 측정 결과와 비교를 위해서는 Fick 모델 결과만을 나타내었다. Fig. 2에서 축 방향으로의 온도 분포를 보면, 최대 온도치를 다소 과대 예

측하고 있음을 알 수 있다. 이는 복사 열전달을 고려하지 않은 단일 화염 해석 조건을 적용한 결과로 판단된다. 전체적인 온도나 주요 화학종(H_2 , O_2 , H_2O , N_2)은 측정치를 잘 추종하고 있다.

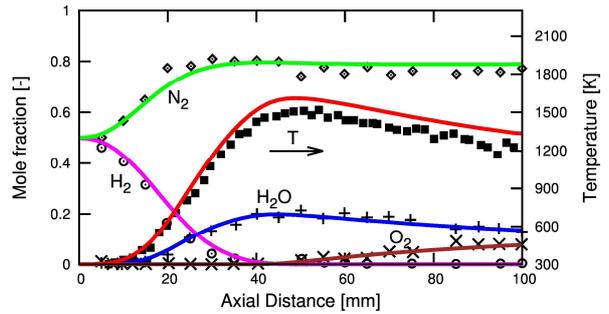


Fig. 2 Axial profiles of temperature and major species

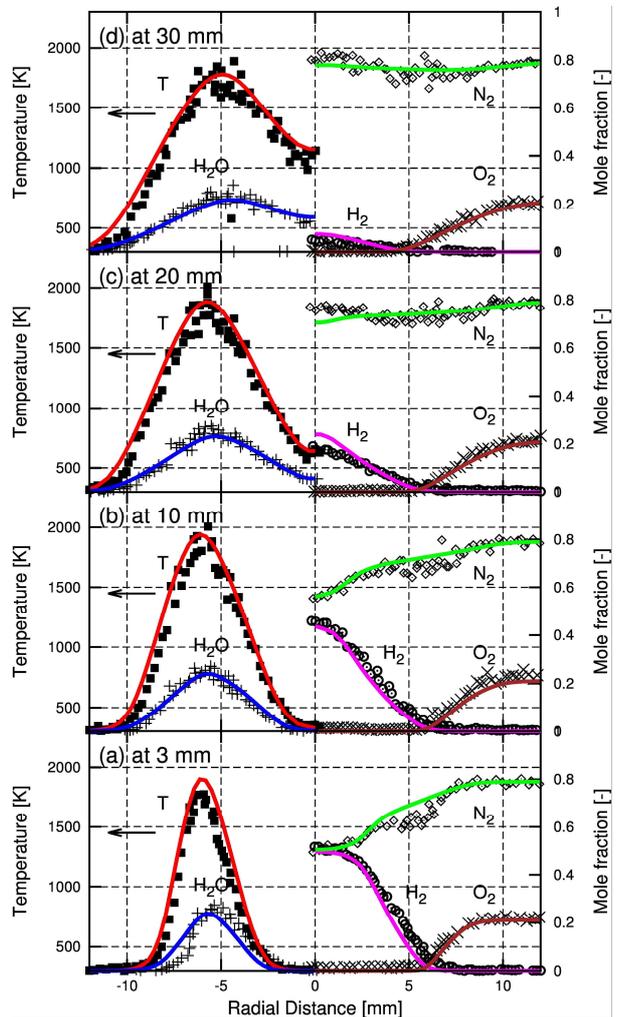


Fig. 3 Radial profiles of temperature and major species

반경 방향에 대한 온도와 주요 화학종들에 대한 결과 비교를 Fig. 3에 나타내었다. 모든 경우에서 측정 결과를 잘 추종하고 있음을 알 수 있다. Fig. 2의 축 방향과 Fig. 3의 반경 방향에 대한 결과로부터 개발된 연소 코드가 수소 확산 화염구조를 잘 예측하고 있음을 보여준다.

Fig. 4에는 중간 생성물인 OH 화학종에 대한 높이별 반경 방향 해석 결과를 LIF 측정 결과와 비교하였다. 최대치 지점을 보면, 모든 높이에서 화염 반응 영역을 대략 1mm 이내로 과소 예측하는 결과를 보여주고 있다. 연료관 직경이 9mm이기 때문에, 1mm 정도의 화염 크기를 과소 예측하는 결과는 무시할 수 있는 정도는 아닌 것으로 판단된다. 이러한 해석 결과는 Fig. 3에서의 연료인 수소가 화염 반응대에서 높이별 차이는 있지만 낮게 예측된 결과라고 판단되어 지지만, 온도나 주요 화학종 분포로부터 충분히 설명되어 지기는 어려운 것으로 판단된다. 적용된 확산 모델의 예측정도가 주요한 원인으로 생각되어 질 수 있으며, 또한 열확산 모델의 미적용도 고려되어 질 수 있을 것으로 판단된다. Toro *et al*에 의해 수행된 연소 해석 결과들을 보면, OH 농도는 반경 방향에 대해 매우 잘 일치하는 결과를 보여주는 반면에 온도 분포는 다소 반경 방향으로 과대 예측되는 결과를 보여주고 있다. 현재 해석 결과는 이와 반대 경향인 온도분포 예측도는 우수하지만 OH 농도는 다소 반경방향으로 과소 예측되는 결과를 나타내어주고 있다. 이러한 타 연구자의 해석 결과의 경향 차이는 현재 적용된 연소 모델에 의한 것보다는 입구 경계조건이나 격자 등의 해석 조건에 의한 것으로 판단되어 진다. 추가적으로 상세한 분석을 위해서는 측정 데이터 오차에 대한 고려도 필요할 것으로 판단된다. Toro *et al*은 반경 방향에 대해 예측도가 다소 낮게 나타나는 것에 대한 원인을 충분히 밝히지 못하였기 때문에, 추가적인 해석 조건에 대한 연구를 수행하지는 않았다.

본 연구를 통하여 상세 확산 모델을 적용한 OpenFOAM 기반 연소 코드를 개발하였으며, 수소 제트 확산 화염장에 대한 검증을 통하여 예측도를 평가하였다. 분출 속도가 낮고 질소 희석된 수소 확산 화염에 대해서는 세가지 확산 모델 특성을 확인할 수 없었으며, 예측 결과는 실험 측정 결과를 잘 추종함을 확인하였다.

Acknowledgement

G. Kim acknowledges the work of Valerio Novaresio concerning the opensource library of multicomponent diffusion.

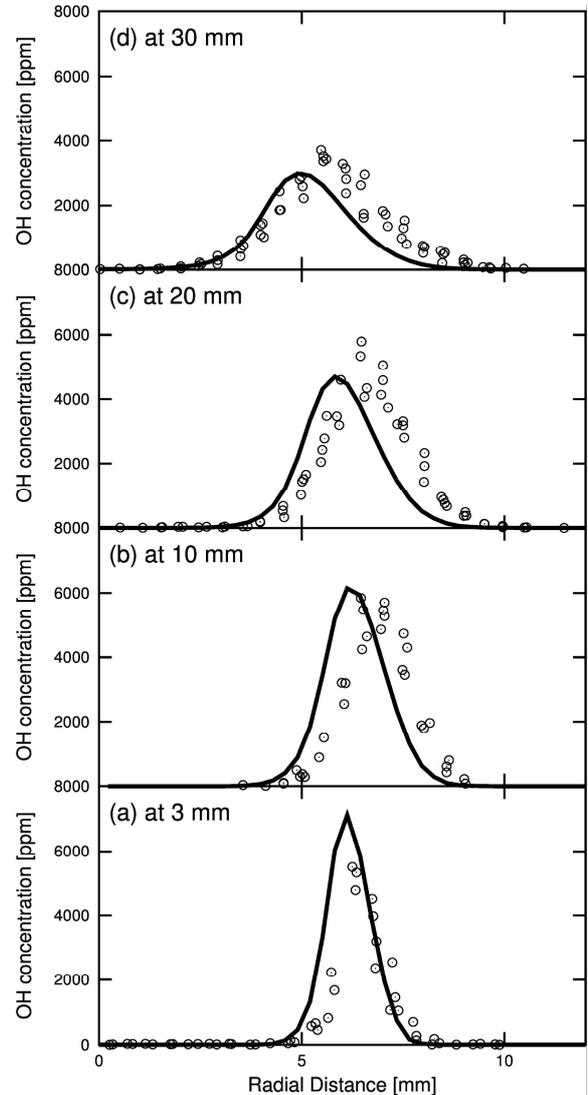


Fig. 4 Radial profiles of OH concentration

Reference

- [1] G. Dixon-Lewis, "Flame Structure and Flame Reaction Kinetics. II. Transport Phenomena in Multicomponent Systems," *Proceedings of the Royal Society A*. 307, 1968, pp. 111-135.
- [2] R.J. Kee, J. Warnatz, and J.A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Viscosities, Conductivities, and Diffusion Coefficients," *Sandia National Laboratories Report SAND83-8209*, 1983.
- [3] H.J. Merk, "The Macroscopic Equations for Simultaneous Heat and Mass Transfer in Isotropic, Continuous and Closed Systems,"

Appl. Sci. Res. 8, 1958, pp. 73-99.

[4] C.F. Curtiss and R. Byron Bird, "Multicomponent Diffusion," *Ind. Eng. Chem. Res.* 38, 1999, pp. 2515-2522.

[5] OpenCFD, <http://www.openfoam.org>.

[6] V. Novaresio, M. Garcia-Camprubi, S. Izquierdo, P. Asinari, N. Fueyo, "An open-source library for the numerical modeling of mass-transfer in solid oxide fuel cells," *Computer Physics Communications* 183, 2012, pp. 125-146.

[7] 한가람, 임성한, 허강열, "OpenFOAM을 이용한 난류연소현상 해석 및 내연기관에의 적용," *한국연소학회지* 41, 2010, pp. 319-330.

[8] V.V. Toro, A.V. Mokhov, H.B. Levinsky, M.D. Smooke, "Combined experimental and computational study of laminar hydrogen-air diffusion flames," *Proc. Combust. Inst.* 30, 2005, pp. 485-492.

[9] C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, W.C. Gardiner, Jr., V. Lissianski, G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach and M. Goldenberg, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.