

## 코히어런트 화염면 모델을 이용한 스트레치 층류 확산 화염의 수치 계산

### Calculation of Stretched Laminar Diffusion Flame Using the Coherent Flame Sheet Model

정진은\*, 진영욱\*\*  
Jin-Eun Chung, Young-Wook Chin

#### ABSTRACT

The transient process simplified by the 1-D stretched laminar diffusion flame formed at the fuel-oxidizer interface was investigated using the coherent flame sheet model. Under the combustion environment of high temperatures and pressures the results show that the time required to reach the steady state was relatively short compared to the reverse of strain rate. Hence the employment of the tabulation of precalculated steady-flame results in the calculation of turbulent diffusion flames using the coherent flame sheet model is concluded valid. Also upstream temperatures were found to have only a minor effect on the nondimensional flame temperature and nondimensional fuel consumption flux even though the latter is sensitive to pressure changes.

주요기술용어 : Coherent Flame Sheet Model(코히어런트 화염면 모델), 1-D Stretched Laminar Diffusion Flame(1차원 층류 확산화염), Transient Process(과도과정), Strain Rate(스트레인율), Fuel Consumption Flux(연료소비플럭스)

#### 1. 서론

일반적인 연소 시스템에서는 난류 유동장 안에서 연소가 진행된다. 이러한 난류 연소 해석에서 가장 중요한 것은 난류 유동과 연소

와의 상호 작용을 파악하는 것, 즉 난류 변동이 화학 반응률에 미치는 영향이다. 이때 일반적으로 해석을 간단하게 하기 위하여 온도, 속도, 화학종 등을 평균 처리하고, 이에 근거한 유효 반응률을 사용한다. 그러나 이러한 해석 결과는 실제와 상당한 차이를 보이게 된다. 이 문제점을 해소하기 위한 몇 가지 방법이 제안되었다. 그 중 한 방법은 확률밀도함수를 사용하여 유효 반응률을 계산하는 것이다. 이것은 대부분 실용적인 연소장에서 화학

\* 정희원, 한국기술교육대학교 기계공학부

\*\* 한국기술교육대학교 기계공학부

반응은 유동장의 혼합보다 훨씬 빠르게 진행 된다는 점에 초점을 맞추고 있다. 이때 유동의 혼합을 서술하는 보존 스칼라의 확률밀도 함수를 구하고 이를 이용하여 유효한 화학 반응률을 계산한다. 또 다른 방법은 화염 두께가 난류의 Kolmogorov microscale보다 작은 경우에는 난류 유동장 내에 주름상 종류 화염이 존재할 수 있다는 근거하에서 난류 화염을 종류의 화염조각들(flamelets)<sup>[1]</sup>의 집합으로 모델링하고 이로부터 유효한 화학 반응률을 계산한다. 코히어런트 화염면 모델<sup>[2]</sup>도 이러한 시도 중 하나이다.

많은 연소기에서 난류 확산 화염이 발생한다. 이들의 화학 반응 시간척도는 난류 시간 척도에 비해 매우 길고, 따라서 Damköhler 수도 크게 되므로 난류 유동장 내에 주름상 종류 화염이 존재할 수 있다. 이 경우에 실제 연소는 혼합되지 않은 연료와 공기층의 경계에서 종류 확산 연소가 일어나는 것으로 가정할 수 있다. 이들 화염 두께가 에디 크기에 비해 작을 때 화염은 난류 에디의 스트레인 필드 상에서 1차원 종류 확산 화염으로 간주할 수 있다. 그러므로 여기서 화학 반응은 1차원 스트레치 화염 계산에서 간단하게 얻을 수 있다. 이때 전 반응률(overall reaction rates)은 1차원 계산에서 얻어지는 단위 화염 연료소비플럭스에 별도의 관계식으로부터 구해지는 화염밀도를 곱하여 구한다. 이러한 방법으로 화학 반응을 유동과 분리할 수 있다.

W. K. Cheng<sup>[3,4]</sup>은 화염면 모델을 확산화염 연소, 예혼합화염 연소 등의 해석에 사용하였고, O. C. Akinyemi<sup>[5]</sup>은 확산화염 연소 해석에 사용하여 좋은 결과를 보이고 있다.

본 논문에서는 코히어런트 화염면 모델을 사용하여 스트레치 종류 확산 화염의 비정상 1차원 수치해석을 수행한다. 지배방정식을 무차원화하고 적응(adaptive) 격자를 사용한다. 과도과정의 화염면 위치, 온도 및 화학종 분

포 등을 구하고 정상상태로 가정한 계산 결과와 비교·검토하여 계산의 타당성을 살펴보고, 스트레인을, 경계온도와 압력이 화염면 위치, 화염온도 및 연료소비플럭스에 미치는 영향을 파악한다.

## 2. 코히어런트 화염면 모델

Fig. 1은 본 연구에서 사용된 코히어런트 화염면 모델의 개념을 보여준다. Damköhler 수가 충분히 크다는 가정 하에 화염의 두께는 유동 및 혼합 과정에 관련되는 길이 척도에 비해 무시할 만큼 작다. 연료(fuel)와 공기(oxidizer)가 이 반응 지역으로 확산됨에 따라 화염 안에서 연소가 진행된다. 이 화염면 안에 화학 반응률은 확산 과정에 비해 매우 빠르고, 반응층 안에서 연료와 공기가 혼합되는 즉시 연소되고 생성물을 만든다고 가정한다. 따라서 어느 곳에서도 연료와 공기가 동시에 존재하지 않으며, 특히 연료는 Fig. 1에서 보여주는 것처럼 화염면(flame sheet)에 의해 공기와 분리되어 있다.

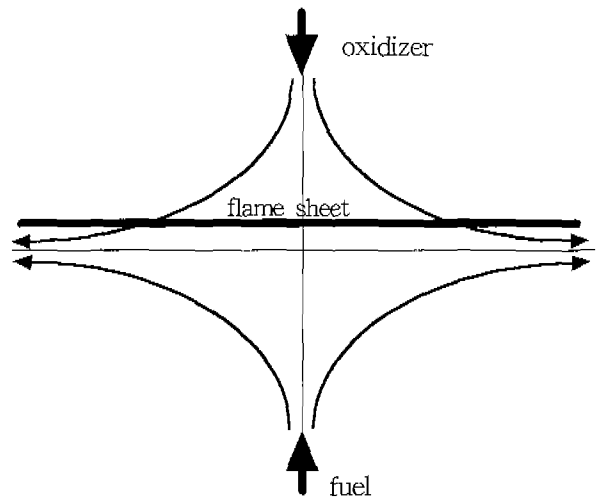


Fig. 1 The Coherent Flame Sheet Model

정체점이 있는 유동에서 화염 전파를 지배

하는 질량, 화학종 및 에너지 보존식을 고려한다. 스트레인율은  $e = \frac{\partial u}{\partial x}$  로 정의되며, 다른 모든 변수들의  $x$ 방향 변화는 없다.  $y$ 축, 즉  $x = 0$  만을 고려하면 항상  $u = 0$  이다. 그리고 화염면인  $y = 0$  을 제외한 영역에서는 화학 반응이 없다. 따라서  $y = 0$  을 제외한 영역의 보존식은 다음과 같이 간단하게 된다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = -\rho e \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial Y_i}{\partial y} = -\frac{\partial J_i}{\partial y}, i=1,2 \quad (2)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} [J_i(h_i - h_3)] \quad (3)$$

여기서  $J_i$ 는 질량확산플럭스이며 다음과 같이 정의된다.

$$J_i = -\rho D_B \frac{\partial Y_i}{\partial y} \quad (4)$$

이때 하첨자 1, 2는 각각 연료와 공기, 그리고 3은 생성물을 나타낸다.  $D_B$ 는  $i$ 화학종과 3화학종 사이의 2원 물질 확산 계수이다.

이들 지배방정식은 다음과 같은 기준량을 사용하여 무차원화한다. 기준량은 하첨자 "0"로 표시하고 무차원화된 양은 상첨자 "\*"로 표시한다. 길이의 기준량으로  $L_o = \sqrt{D_0/e}$  을 사용하고, 나머지 기준량으로 상온 상압에서 공기의 상태량을 사용한다. 무차원화된 지배방정식은 스트레인율을 시간 및 공간 좌표에 포함하므로 계산과 해석을 용이하게 한다.

$$\begin{aligned} T &= T_0 T^*, \quad y = L_0 y^*, \quad \rho = \rho_0 \rho^*, \\ J_i &= \rho_0 L_0 e J_i^*, \quad M = M_0 M^*, \quad D_B = D_0 D_B^*, \\ \lambda &= \lambda_0 \lambda^*, \quad c_p = c_{p0} c_p^*, \quad v = L_0 e v^*, \\ t &= t^*/e \end{aligned} \quad (5)$$

무차원화된 지배방정식은 다음과 같다. 편의상 상첨자 "\*"은 표시하지 않았다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = -\rho \quad (6)$$

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v \frac{\partial Y_i}{\partial y} = -\frac{\partial J_i}{\partial y}, \quad i=1,2 \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v \frac{\partial T}{\partial y} &= \Lambda_0 \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &- \frac{\partial}{\partial y} [J_i(h_i - h_3)] \end{aligned} \quad (8)$$

여기서  $\Lambda_0$ 는 기준량으로 표현된 Lewis 수이며 다음과 같이 정의된다.

$$\Lambda_0 = \frac{\lambda_0 / \rho_0 c_{p0}}{D_0} \quad (9)$$

공기, 연료 및 생성물은 이상기체로 가정하며 이들의 상태방정식을 무차원화하여 상첨자 "\*"를 생략하고 표현하면 다음과 같다.

$$\rho = \frac{pM}{T} \quad (10)$$

여기서 사용된 압력은 대기압을 기준량으로 하여 무차원화하였다.

이들 지배방정식을 해석하는 데 사용된 초기 및 경계 조건은 다음과 같다. 편의상 상첨자 "\*"은 표시하지 않았다.

$$\begin{aligned} Y_1 &= Y_1(-\infty), \quad Y_2 = 0 & @ \\ t &= 0, \quad -\infty < y < 0 \\ Y_1 &= 0, \quad Y_2 = Y_2(\infty) & @ \\ t &= 0, \quad 0 < y < \infty \\ Y_1 &= Y_1(-\infty), \quad T = T(-\infty) & @ \quad y = -\infty \\ Y_2 &= Y_2(\infty), \quad T = T(\infty) & @ \\ y &= \infty \\ T &= T(-\infty) = T(\infty) & @ \\ t &= 0, \quad -\infty < y < \infty \end{aligned} \quad (11)$$

그리고 화염면에서 다음과 같은 경계조건이 추가된다.

$$\begin{aligned} Y_1(y_f) &= Y_2(y_f) = 0 \\ J_1(y_{f-}) &+ \phi J_2(y_{f+}) = 0 \end{aligned}$$

$$HJ_i(y_{f-}) + \left[ \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right]_+ - \frac{1}{A_0} [J_i(h_i - h_3)]_+ - \frac{1}{A_0} \rho c_p \delta \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (12)$$

여기서  $H$ 는 연료의 저발열량  $hv$ 를 무차원화한 값으로 다음과 같이 정의된다. 이때  $\delta$ 는 화염면 근처의 격자 크기이다.

$$H = \left( \frac{hv}{c_p T_0} \right) \frac{1}{A_0} \quad (13)$$

### 3. 수치계산 및 타당성 검토

무차원 지배방정식 (6), (7) 및 (8)을 공간적으로 CDS(central difference scheme), 시간적으로 implicit Euler method를 사용하여 차분화하고, damped Newton algorithm을 사용하여 선형화하여 대수방정식을 만든다. 이들 선형 대수방정식을 TDMA(tridiagonal matrix algorithm)으로 수치해를 구한다. 이때 (11)과 (12)의 초기조건과 경계조건을 사용한다. 또한 정확한 화염면의 위치를 계산하기 위하여 격자 사이의 온도 또는 연료와 공기의 질량분율의 기울기가 기준값 이상이 되면 새로운 격자를 생성하고 기준값 이하가 되면 격자를 소멸하는 간단한 적응 격자법을 사용한다.

연료는  $C_{12}H_{26}$ (n-dodecane)로 가정하여 이에 대한 비열과 엔탈피 자료<sup>[5]</sup>를 계산에 사용하였고 열전도계수는 다음 식으로 가정하였다.

$$\lambda = 0.0226 \left( \frac{T}{433} \right)^{1.786} \quad (14)$$

또한 사용된 기체들의 물질확산계수는 다음과 같은 관계식<sup>[5]</sup>을 이용하였다.

$$D_{ab} = D_{ab,ref} \frac{(T/T_{ref})^{1.5}}{P/P_{ref}} \quad (15)$$

입력자료로 주변온도는 1600 K, 주변압력은 100 atm,공급되는 연료와 공기의 질량분율은

각각 0.353, 0.522를 택하여 계산을 수행한다.

계산의 안정성을 증명하기 위하여 격자크기 및 시간간격을 변화시키면서 결과의 수렴성과 오차를 살펴본다. 그리고 정상상태로 가정한 계산 결과와 비교한다.

비정상 계산이므로 적절한 격자크기와 시간 간격을 선택하여야 계산의 안정성과 수렴성이 확보된다. 계산의 효율을 높이기 위해 적응격자를 사용하였기 때문에 계산 도중에 격자의 크기가 변화한다. Fig. 2는 최소격자 크기가 무차원화된 화염면 위치, 연료소비플럭스 및 화염온도에 미치는 영향을 보여준다. 이때 연료소비플럭스는 연료의 질량유량플럭스이며 화염온도는 경계온도를 기준점으로 하여 무차원화된 온도이다. 각각 오차가 1% 이내이므로 계산 결과는 좋은 수렴성과 안정성을 가지고 있다.

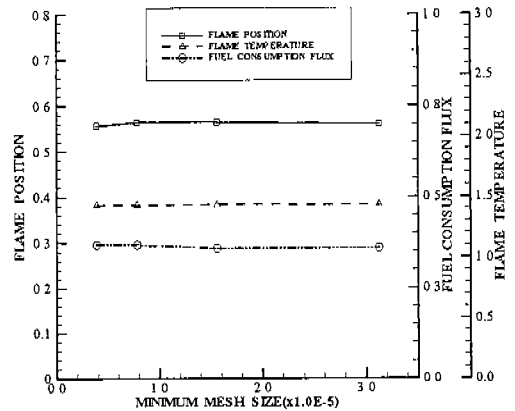


Fig. 2 The effects of the minimum mesh size on nondimensional flame position, fuel consumption flux and flame temperature

Fig. 3는 무차원화된 화염면 위치, 연료소비플럭스 및 화염온도를 무차원화된 시간의 함수로 나타낸다. 이러한 계산 결과를 정상상태로 가정한 계산 결과와 비교하면, 본 연구의 비정상 계산에서 정상상태에 도달하였을 때의

화염온도가 1.434인데 비하여 정상 계산의 화염온도는 1.468<sup>[5]</sup>로 약 2%가량의 차이를 보이고 있다.

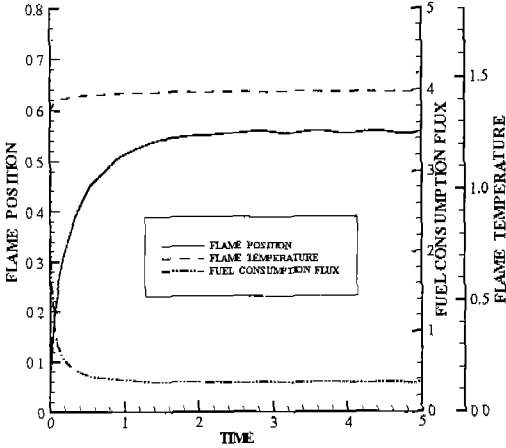


Fig. 3 The variations of nondimensional flame position, fuel consumption flux and flame temperature as a function of time

#### 4. 계산 결과 및 토론

Fig. 3.에서 화염온도와 연료소비플럭스는 스트레인의 역수에 해당하는 무차원 시간 1 훨씬 이전에 정상상태에 도달하며 화염면의 위치는 부차원시간 약 1 정도에서 정상상태에 도달함을 알 수 있다. 그러므로 스트레치 층류화염은 정상상태에 이르는 시간이 스트레인의 역수보다 훨씬 짧은 시간이므로 정상상태로 가정할 수 있다.

또한 이러한 화염의 계산에서 얻어지는 유용한 결과는 연료소비플럭스와 화염온도이다. 본 연구에서는 스트레인을, 주변에서의 압력 및 온도가 이들에 미치는 영향을 살펴본다.

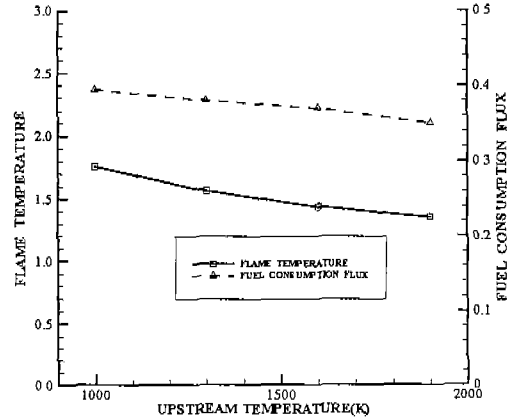


Fig. 4 The effects of the upstream temperature on nondimensional flame temperature and fuel consumption flux

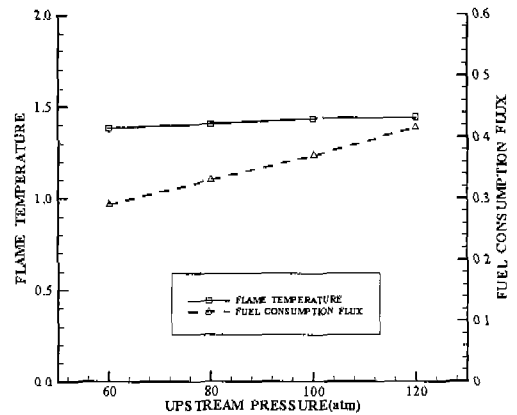


Fig. 5 The effects of the upstream pressure on nondimensional flame temperature and fuel consumption flux

스트레인은 무차원화 과정을 통해 소거되므로 무차원 지배방정식에는 나타나지 않는다. 그러므로 무차원화된 연료소비플럭스와 화염온도는 스트레인과 무관하다. Fig. 4와 5는 주변 온도와 압력이 무차원화된 화염온도와 연료소비플럭스에 미치는 영향을 보여준다. 주변온도가 올라감에 따라 이들은 감소하며 그 기울기는 각각 25%와 11.3%로 적은 편이다. 한편, 경계압력은 화염온도에 거의 영향을 미치지 않는다. 주변압력이 증가함에 따라 연료소비플럭스는 증가하며 그 기울기는 43.4%로 상당히 크다.

## 5. 결론

비정상 1차원 스트레치 층류 확산화염에 코히어런트 화염면 모델을 적용하여 수치 계산을 수행하였으며 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 정상상태에 이르는 시간이 스트레인의 역수보다 훨씬 짧은 시간이므로 스트레치 층류화염은 정상상태로 가정할 수 있다.
2. 스트레인은 무차원화된 화염온도와 연료소비플럭스와 무관하다.
3. 주변온도는 무차원화된 화염온도와 연료소비플럭스에 영향을 미치나 그 정도는 상대적으로 적다.
4. 주변압력은 무차원화된 화염온도에는 영향

을 미치지 않으나 무차원화된 연료소비플럭스에는 상당히 큰 영향을 미친다.

5. 3차원 난류 연소에 대한 수치 해석에서 이러한 결과들은 유용하게 사용될 수 있다.

## 참 고 문 헌

1. N. Peters, "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," Twenty-first Symposium on Combustion, The Combustion Institute, pp.1231-1250, 1986
2. F. E. Marble, J. E. Broadwell, *The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions, Project SQUID*, Report TRW-9-PU, pp.1-23, 1977.
3. W. K. Cheng, "Calculation of Turbulent Diffusion Flame using the Coherent Flame Sheet Model," AIAA 83-1322, 1983.
4. W. K. Cheng, J. A. Diringer, "Numerical Modeling of SI Engine Combustion with a Flame Sheet Model," SAE paper 910268, 1991.
5. O. C. Akinyemi, *A Flame Sheet Model of Combustion and NO Formation in Diesel Engines*, Ph.D Thesis, MIT, pp.20-102, 1997.