

연료/산화제의 2차원 혼합층에서 삼지화염의 전파 특성에 관한 수치해석

김준홍* · 김홍집** · 정석호***

Numerical Study on Tribrachial Flame Propagation in a 2-D Mixing Layer

Jun Hong Kim, Hong Jip Kim and Suk Ho Chung

ABSTRACT

Propagation characteristics of tribrachial flames have been studied numerically in a two-dimensional fuel/oxidizer mixing layer. A flame is initiated by imposing a high temperature ignition source. Subsequent propagation of a tribrachial flame is traced. The flow redirection effect at the leading edge of a tribrachial flame increases the propagation speed beyond the corresponding stoichiometric laminar burning velocity. The effect of mixture fraction gradient on the propagation speed of a tribrachial flame is analyzed in a mixing layer considering that mixture fraction gradient increases as a tribrachial flame propagates toward upstream. As the flame curvature at the leading edge increases with decreasing mixture fraction gradient, the flow redirection effect becomes more pronounced on the flame propagation speed. As a result, the propagation speed of a tribrachial flame increases with decreasing mixture fraction gradient.

Key Words : Fuel/oxidizer mixing layer(연료/산화제의 혼합층), Tribrachial flame propagation(삼지화염 전파), Damköhler number, Mixture fraction gradient(혼합분율구배)

기 호 설 명

c_p : 정압비열	T : 온도
D_k : 화학종 k의 확산계수	u : x-방향 속도
h_k^o : 화학종 k의 형성엔탈피	v : y-방향 속도
N_1 : x방향 그리드수	v_{min} : 화염선단의 y-방향 속도
N_2 : y방향 그리드수	ν : 속도벡터
p : 압력	ω_k : k 화학종의 생성율
Q : 무차원 열방출율	ω_T : 에너지방정식의 생성율
S_d : 화염이동속도 [cm/s]	W_k : k 화학종의 분자량
S_F : 화염전파속도 [cm/s]	Y_k : k 화학종의 질량분율
S_L : 국부 화염전파속도 [cm/s]	Z : 혼합분율
t : 시간	하첨자

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

** 한국원자력연구소

*** 서울대학교 기계항공공학부

F : 연료	o : 외기 상태
i : x 방향의 노드 또는 텐서	O : 산화제
ign : 점화위치	P : 생성물
j : y 방향의 노드 또는 텐서	Ref : 기준 상태

1. 서 론

비에혼합 제트에서의 화염안정화에 대한 연구는 실용 연소기에서의 연소현상에 대한 중요한 연구 중 하나가 되고 있다. 화염 안정화의 형태로는 노즐 부착화염과 부상화염의 두가지로 나눌 수 있다. 비에혼합 제트와 같은 연료/산화제 혼합층에서 부상화염이 안정화되기 위해서는 연료와 산화제가 부분예혼합 조건이 되어야 한다.

이와 같은 부분예혼합 조건을 만족하는 층류제트의 부상화염 [1, 2]과 혼합층에서의 화염 전파 [3-6]에서는 화염선단이 삼지화염(삼중화염)의 형태로 관측되고 있다. 삼지화염은 연료/산화제의 농도장에서 이론당량비선에 수직 한 방향으로 연료의 농도구배가 존재할 때 생성될 수 있으며, 화염 선단을 기준으로 과농예혼합화염, 희박 예혼합화염 그리고 확산화염이 하나의 위치로부터 뻗어나오는 형태를 띠고 있다. 삼지화염의 중요한 연구중의 하나로는 삼지화염 전파특성에 관한 것이다. Lee 와 Chung [1, 2]은 층류제트에서의 삼지화염 전파속도와 그 위치에서의 유동속도 간의 균형으로 인해 안정화가 된다고 설명하였고, 이러한 냉간제트 이론을 적용하여 층류부상화염 높이를 예측한 결과, 실험적 결과와 잘 일치함을 보였다.

또한, 2 차원 혼합층에서의 정지 삼지화염 전파에 대해서도 많은 이론과 수치해석적 연구가 수행되고 있다 [4-6]. 이들 연구에 따르면, 혼합층에서의 혼합분율구배가 증가할수록 삼지화염의 전파속도는 감소하게 됨을 밝혔으며, 최근에는 Ko 와 Chung [7]이 메탄 제트에서의 비정상 화염전파에 대한 관측을 통해서 삼지화염 전파 속도에 대한 혼합분율구배의 영향을 실험적으로 고찰하였다. 본 연구에서는 위와 같은 층류제트의 실험적 연구와 비교해 연료와 산화제의 2 차원 혼합층에 대해서 삼지화염 전파에 대한 고찰을 하기로 한다.

2. 수치해법

2.1 지배방정식

정성적 분석과 효율적인 계산을 하기 위해서, 적절한 가정들을 통해서 문제를 간략화 하였다. 화학종들의 전달계수들은 모두 동일하며, 온도만의 함수로 가정한다. Soret-Dufour 효과는 무시하며, 복사열손실, 부력효과와 압력 구배에 의한 확산효과는 무시한다. 화학반응은 1 차 총체반응으로 고려하며, 낮은 마하수 가정 (Low Mach number approximation)을 적용하였다. 이에 의해 간략화된 무차원 지배방정식은 다음과 같다 [8].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla p^{(0)} = 0 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \\ = -\nabla p^{(1)} + (1/Re) \Pi \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \\ = \left[(1/Re Pr) \left(\lambda / c_p \right) \nabla T + Da \omega_T \right] / \rho \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_k) \\ = (1/Re Sc) \left(\rho D \nabla Y_k \right) + Da \omega_k \end{aligned} \quad (5)$$

$$p^{(0)} = \rho T \left(\sum_k Y_k / W_k \right) / (1/W_k) \quad (6)$$

여기서 $p^{(0)}$ 와 $p^{(1)}$ 는 각각 낮은 마하수 가정으로부터 유도되는 0차 계수와 1차 계수의 압력 항들이며 [8], 이를 제외한 다른 변수들은 0차 계수를 나타낸다. 점성소산항 Π , 생성항 ω_T 와 ω_k 는 각각 다음과 같다.

$$\Pi_i = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (7)$$

$$\omega_\tau = \frac{Q}{W_F(v'_F - v''_F)} \times (\rho Y_F)(\rho Y_O) \exp \left[-\beta' \left(\frac{1}{T} - 1 \right) \right] \quad (8)$$

$$\omega_k = -\frac{W_k(v'_k - v''_k)}{W_F(v'_F - v''_F)} \times (\rho Y_F)(\rho Y_O) \exp \left[-\beta' \left(\frac{1}{T} - 1 \right) \right] \quad (9)$$

여기서, μ 는 $T^{0.75}$ 에 비례하는 점성계수를 나타내며, β' 은 무차원 활성화 에너지이다. 무차원 열방출율인 Q 는 다음과 같이 정의된다.

$$Q = \frac{h_F^o v'_F W_F + h_O^o v'_O W_O - h_P^o v''_P W_P}{c_{p,ref} T_{ref}} \frac{1}{c_p} \quad (10)$$

여기서, h_k^o 는 k 화학종의 형성엔탈피이며, v'_k 와 v''_k 는 각각 반응물과 생성물에 대한 반응계수를 나타낸다.

열전도계수 λ 와 확산계수 D 는 Prandtl 수 $Pr = \mu c_p / \lambda$ 와 Schmid 수 $Sc = \mu / \rho D$ 가 일정하다는 가정을 이용하여 온도에 대한 함수로 표현하였다. Reynolds 수는 $Re \equiv \rho_{ref} U_{ref} L_{ref} / \mu_{ref}$ 로 정의되며, Damköhler 수는 다음과 같이 정의된다.

$$Da \equiv \frac{L_{ref} / U_{ref}}{\left[\frac{W_F(v'_F - v''_F)}{W_F W_O} B \rho_{ref} \exp(-\beta') \right]^{-1}} \quad (11)$$

여기서, 기준길이 L_{ref} 은 계산영역의 가로 길이로 정의되며, B 는 Arrhenius 식의 충돌계수를 나타낸다.

공간에 대한 차분은 HSMAC에 대하여 2차 정확도의 중앙 차분법을 적용하였으며, 시간 차분법으로는 급격한 밀도변화에 적합한 예측/

복수교정(predictor-corrector)법을 사용하였다 [9]. 예측단계에서는 T , ρY_F , ρY_O 들을 계산하기 위해서 식(4), (5)에 대한 시간적분법으로 Adams-Bashforth 방법을 사용하였고, 식(6)으로부터 ρ 를 계산하였다. 연속방정식을 만족하기 위해서 식(1), (3)으로부터 유도된 $\rho^{(1)}$ 에 대한 Poisson 식은 y 방향에 대해 discrete quarter-wave cosine 급수로 푸리에 변환을 한다. 변환된 각각의 cosine 푸리에 모드에 대해 x 방향의 공간에 대한 삼각대각행렬의 해를 구하고, 이를 빠른 푸리에 역변환(FFT)으로 적용하여 압력 $\rho^{(1)}$ 을 구하면, 밀도 ρ 와 압력 $\rho^{(1)}$ 으로부터 예측단계의 속도성분은 대수적으로 계산된다. 교정단계에서는 quasi-Crank-Nicolson 방법을 적용하여 예측단계에서와 같은 절차를 통해 다음 시간단계의 값들을 구하였다.

계산영역에 대한 개략도는 Fig. 1과 같다. 왼쪽과 오른쪽 면에 대한 경계조건으로는 y 방향속도와 온도, 화학종에 대해서 Neumann 조건을, x 방향속도에 대해서는 Dirichlet 조건을 적용하였다. 입구조건으로서는 y 방향속도와 온도, 화학종에 대해서 다음과 같은 hyper-tangential 형태로 설정하였다.

$$\phi_{in}(x) = \frac{1}{2}(\phi_{in,l} + \phi_{in,r}) + \frac{1}{2}(\phi_{in,l} - \phi_{in,r}) \tanh[2L_{ref}x/\delta_\phi] \quad (12)$$

여기서, ϕ_n 는 y 방향속도와 온도, 화학종에 해당하는 입구조건의 변수, δ_ϕ 는 ϕ_n 의 입구에서의 혼합층 두께를 나타내며, 하첨자 l 과 r 은 각각 왼쪽과 오른쪽 벽의 경계를 나타낸다. 유출 경계조건으로는 Mahalingam 등[8]이 제안한 대류경계조건을 사용하였다.

화염을 모사하기 위해서, 하나의 시간간격 동안에 국부적으로 고온을 설정함으로써 화학 반응을 초기화하였다. 화염해석의 간략화를 위해, 모든 화학종의 분자량은 동일하게 하였으며, 연료와 산화제의 반응계수 ν_F , ν_O 들 모두 1로 설정하였다. 화염지역 내에서는 모든 변수들이 매우 급격하게 변화하므로, 화염구조를 제대로 모사하기 위해서는 화염두께 내에 최소한 10~20 정도의 그리드가 존재해야 한다[11]. 따라서, 본 연구에서는 128×256 개의 그리드를 설정하였다. 코드의 검증용 위해서, 후향계단 유동장에서의 유선의 재부착 길이를 여러 가지 Reynolds 수에 대해서 계산하였으며 기존의 연구결과와 잘 일치함을 확인하였다[12].

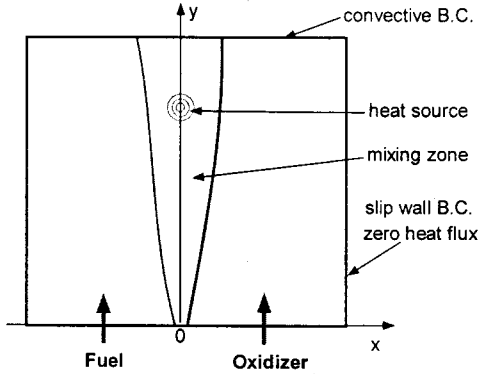


Fig.1 Schematic of computational domain

3. 결과 및 분석

3.1 화염 구조

Fig. 1 의 개략도처럼 연료와 산화제를 따로 공급하게 되면, $x = 0$ 의 위치를 중심으로 부분 예혼합 상태가 시작되며, 후류로 갈에 따라서 화학종들의 확산현상에 의해 예혼합 영역은 점차 넓어지게 된다. Fig. 2 는 초기 점화 후에 화염이 안정화된 시점에서의 전형적인 반응율, 유선, 그리고 연료의 질량분율 분포를 보여주고 있다. 반응율 분포에서 보듯이 화염선단은 과농 예혼합 화염, 희박 예혼합화염 그리고 확산화염 꼬리로 구성되어있는 삼지화염의 구조를 가지고 있다. 또한 연료의 질량분율 분포를 볼 때, 확산화염 꼬리는 과농 및 희박 예혼합화염 쪽으로부터의 미연가스로 인해 형성되는 것을 알 수 있다.

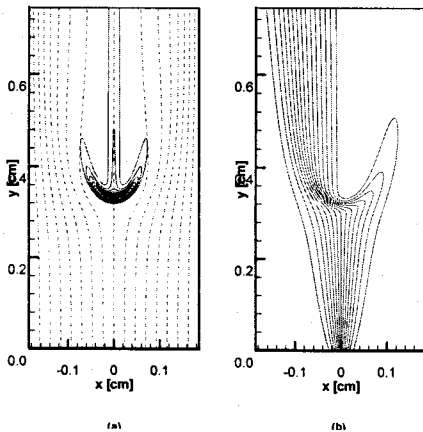


Fig.2 Contours of (a) reaction rate (solid line) and streamline (dashed line) and (b) fuel mass fraction

기존의 연구 결과들에 의하면[4-6], 삼지 화염이 당량비가 1 인 평면화염 전파속도보다 빠른 전파특성을 가지고 있는 원인을 화염선단의 곡률에 의한 유동 굴절현상[6]으로 설명하고 있다. 화염면에 수직인 속도성분은 열팽창에 의해 속도가 증가하며 화염면에 접하는 속도 성분은 보존되므로, 상류의 미연가스 쪽으로 볼록한 화염의 선단에서는 유선이 확장되게 된다. 따라서, 질량보존에 의해 삼지화염 선단의 수직 속도성분은 감소하게 된다. Fig. 3 은 이론당량비 선을 따른 반응율과 축 방향속도를 나타낸 것이다. 반응율이 증가하기 시작하는 삼중점 선단에서의 축 방향속도는 유동굴절현상에 의해 입구유속보다 작음을 알 수 있으며, 이 삼중점의 후류로는 열팽창에 의해 속도가 급격히 증가함을 볼 수 있다. 정지된 삼지화염 선단의 축방향 속도의 최소값은 이론당량비의 층류화염 전파속도와 비슷한 정도이므로[6], 삼지화염의 전파속도는 층류화염 전파속도보다 빠르다.

화염 고정 좌표계에서 보면, 상류 유동속도 v_{up} 은 화염전파속도 S_f 가 된다. 따라서, S_d 를 삼지화염의 이동속도라고 한다면 S_f 는 $S_f = S_d + v_{up}$ 의 식으로부터 계산할 수 있다. 또한, 삼중점에서의 국부 화염전파속도[13]를 S_L 로 정의하고 삼중점에서의 최소 축 방향속도를 v_{min} 이라고 한다면, 화염전파속도 S_f 는 $S_f = S_L + (v_{up} - v_{min})$ 의 식으로 계산이 가능하다. 이 식에서 화염전파속도는 국부 화염 전파속도와 유동굴절현상으로 발생하는 속도 결손량의 합으로 표현된다는 것을 알 수 있다.

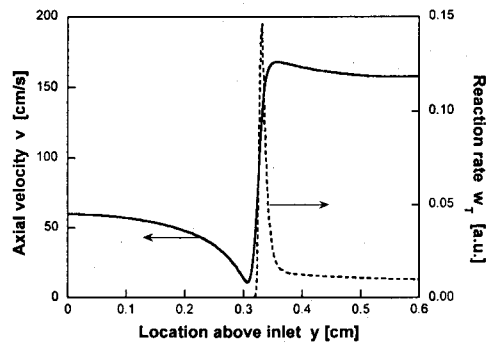


Fig.3 Reaction rate (solid line) and axial velocity (dashed line) along stoichiometric line

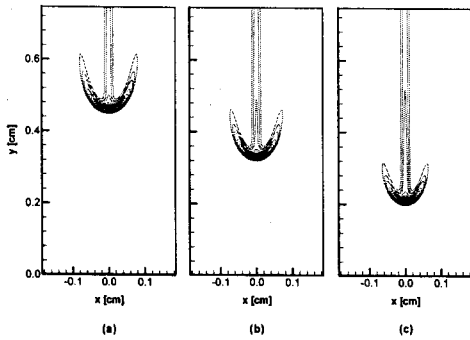


Fig.4 Contour of reaction rate with time for $Da = 747$: (a) $t = 5$ ms, (b) 10 ms, and (c) 15 ms

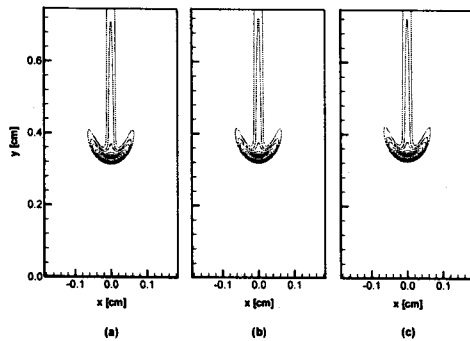


Fig.5 Contour of reaction rate with time for $Da = 450$: (a) $t = 5$ ms, (b) 10 ms, and (c) 15 ms

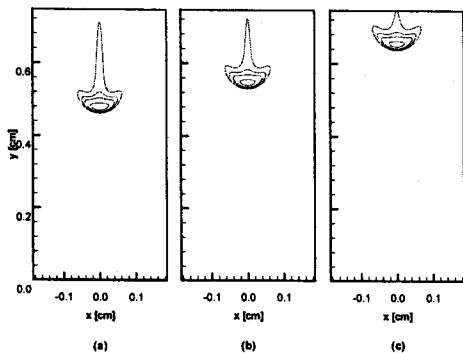


Fig.6 Contour of reaction rate with time for $Da = 100$: (a) $t = 5$ ms, (b) 10 ms, and (c) 15 ms

3.2 Damköhler 수에 따른 영향

Fig. 4~6 은 각각 $Da = 747, 450, 100$ 인 경우의 시간에 따른 반응율 분포를 나타낸 것이다. $Da = 747$ 의 경우는 화염이 상류로 전파하게 되며, $Da = 450$ 의 경우는 부상 높이 0.32 cm의 정지부상화염을, $Da = 100$ 에서는 화염 날림을 보여주고 있다. 반응율 분포에서 보듯이 Damköhler 수가 증가할수록 삼지화염의 예혼합 화염 선단은 점차 강해지는 것을 알 수 있다. 반대로 Damköhler 수가 감소할수록, 초기 점화에 의해 화염이 발생되었지만 화염은 자체적으로 유지되지 못하고 점차 화염날림이 발생하게 된다. 여기서, 후퇴하는 화염의 선단은 후류의 기연 가스와의 상호작용으로 인해 삼지화염의 형상이 뚜렷하지 못함을 볼 수 있다.

3.3 혼합분율구배에 따른 영향

본 연구는 혼합분율구배의 변화에 따른 삼지화염 전파특성을 고찰하였다. 비반응 유동장에서 확산현상에 의해 형성된 혼합층은 상류 쪽으로 갈수록 폭이 좁아지기 때문에, 삼지화염이 상류 쪽으로 전파함에 따라 삼중점에서의 혼합분율구배는 점차 증가하게 된다. 여기서 혼합분율 (mixture fraction) Z 는 $Z = (1 + Y_f - Y_o)/2$ 로 정의되며, 입구에서의 혼합분율구배 $\partial Z / \partial x|_{x=0}$ 는 식(12)에 의해서 입구 혼합층두께 δ_f 와 반비례 관계를 가진다.

삼중점에서의 혼합분율이 증가하게 되면, 화염의 가연구간의 폭이 점차 좁아지게 된다. Fig. 4 에서도 볼 수 있듯이, 화염 선단이 상류로 전파됨에 따라서 예혼합화염의 날개는 점차 좁아지게 된다. 따라서 예혼합화염으로부터의 미연 가스들이 증가하게 되고, 화염 선단 근처의 확산화염이 점차 강해지는 것을 볼 수 있다. 그 결과, 혼합분율구배가 증가함에 따라 국부 화염 전파속도 S_L 은 점차 감소하고 있음을 Fig. 7 에서 확인할 수가 있다. Fig. 8 은 예혼합화염 날개의 곡률이 혼합분율의 증가에 따라 감소하고 있는 것을 보여주는데, 이에따라 유동굴절효과는 약해지게 된다. 따라서, 혼합분율이 증가할수록 국부 화염전파속도와 유동굴절효과가 모두 감소되며, Fig. 9 와 같이 결과적으로 삼지화염 전파속도는 감소하게 된다. Fig. 7, 8 에서 입구 혼합층 두께에 따른 곡선의 경향이 약간씩 차이가 나는데, 이는 비점착조건의 벽면이 삼지화염에 영향을 미치는 것으로 판단된다.

따라서, 비점착조건의 벽면이 화염전파속도에 미치는 영향에 대해서도 알아보았다. 계산영역의 수평방향 폭을 $L_{ref}, 2L_{ref}, 4L_{ref}$ 의 세가지 경우로

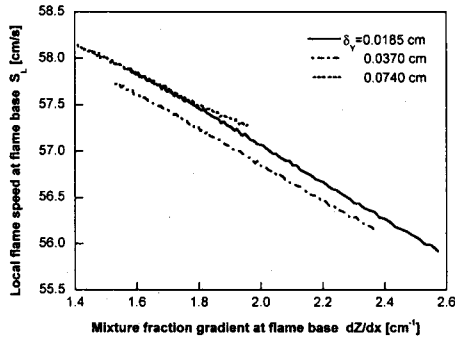


Fig.7 Local flame speed with mass fraction gradient for various mixing layer thickness

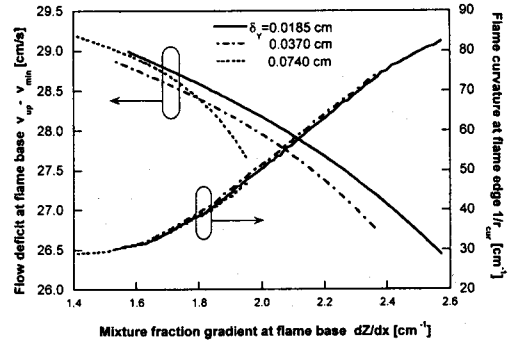


Fig.8 Flow deficit from flow redirection effect and flame curvature with mass fraction gradient for various mixing layer thickness

변화시키며 계산하였다. 여기서, L_{ref} 은 기준길이를 나타낸다. 벽면간의 수평방향의 폭이 줄어들수록, Fig. 2 에서의 유선에서 볼 수 있듯이 열방출율에 의한 팽창가스가 옆면의 벽에 의해 압박이 되기 때문에, 화염 앞단의 유선 확장이 약화되어 화염전파는 상대적으로 감소된다. 그러므로, 화염전파속도는 수평방향의 벽면폭이 커짐에 따라서 커지게 된다. Fig. 9 에서 볼 수 있듯이, 폭을 늘려감에 따라 옆 벽면 속도에 대한 영향이 점차 약해지며 $4L_{ref}$ 의 경우는 이러한 영향이 거의 없다고 생각할 수 있다. 폭 $4L_{ref}$ 인 경우의 혼합분율에 따른 화염전파속도의 변화는 축 대칭제트에서의 화염전파 실험결과 [7]와 정성적으로 동일한 거동을 보인다.

4. 결론

비예혼합 연료/산화제의 2 차원 유동의 혼합층에서 화염은 삼지화염 구조를 가지고 전파됨을 수치해석적 방법으로 확인하였고, 이 삼지화염의 전파특성을 고찰하였다.

Damköhler 수가 증가할수록, 삼지화염 선단의 예혼합화염 날개의 강도가 강해지게 되어 삼지화염 전파속도가 증가함을 볼 수 있었다. 삼중점에서 혼합분율구배가 감소함에 따라서, 예혼합화염선단은 점차 넓어지고 화염의 곡률이 작아짐을 볼 수 있었다. 그 결과 국부 화염전파속도는 증가하게 되며 유동굴절현상도 또한 강화됨을 알 수 있었으며, 이러한 영향으로 인해 전체적인 삼지화염 전파속도는 증가함을 알 수 있었으며, 축대칭 층류제트에서의 실험결과들과 정성적으로 같은 거동을 볼 수 있었다.

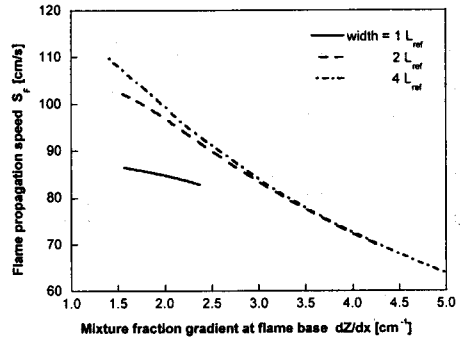


Fig.9 Flame propagation speed with mass fraction gradient at various computational widths for $\delta\gamma = 0.0370$ cm

후기

본 연구는 기계분야 BK-21 사업의 지원으로 이루어졌으며 이에 감사 드립니다.

참고문헌

[1] B. J. Lee, M. S. Cha, and S. H. Chung, "Characteristics of Laminar Lifted Flames in a Partially Premixed Jet," *Combust. Sci. Technol.*, Vol. 127, 1997, pp. 55-70.
 [2] B. J. Lee, and S. H. Chung, "Stabilization of

Lifted Tribachial Flames in a Laminar Nonpremixed Jet," *Combust. Flame*, Vol. 109, 1997, pp. 163-172.

[3] H. Phillips, "Flame in a Buoyant Methane Layer," *Proceedings of Combustion Institute*, Vol. 10, 1965, pp. 1277-1283.

[4] J. W. Dold, "Flame Propagation in a Nonuniform Mixture: Analysis of a Slowly Varying Triple Flame," *Combust. Flame*, Vol. 76, 1989, pp. 71-88.

[5] P. N. Kioni, B. Rogg, K. N. C. Bray, and A. Liñán, "Effect of Heat Release on Triple Flames," *Combust. Flame*, Vol. 95, 1993, pp. 276-290.

[6] G. R. Ruetsch, L. Vervisch, and A. Liñán, "Effects of Heat Release on Triple Flames," *Phys. Fluids*, Vol. 7, 1995, pp. 1447-1454.

[7] Y. S. Ko, and S. H. Chung, "Propagation of Unsteady Tribachial Flames in Laminar Non-premixed Jets," *Combust. Flame*, Vol. 118, 1999, pp. 151-163.

[8] S. Mahalingam, B. J. Cantwell, and J. H. Ferziger, "Non-premixed Combustion: Full Numerical Simulation of A Coflowing Axisymmetric Jet, Inviscid and Viscous Stability Analysis," *Report TF-43*, Thermosciences Division, Stanford University, Stanford, CA., 1989.

[9] H. N. Najm, P. S. Wyckoff, and O. M. Knio, "A Semi-implicit Numerical Scheme for Reacting Flow (I. Stiff Chemistry)," *Journal of Comp. Phys.*, Vol. 143, 1988, pp. 381-402.

[10] J. Kim, and P. Moin, "Application of a Fractional-Step Method to Incompressible Navier-Stokes Equations," *Journal of Comp. Phys.*, Vol. 59, 1985, pp. 308-323.

[11] T. Poinso, S. Candel, and A. Trouvé, "Applications of Direct Numerical Simulation to Premixed Turbulent Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 21, 1996, pp. 531-576.

[12] H. Le, and P. Moin, "Direct Numerical Simulation of Turbulent Flow over a Backward-facing Step," *Report TF-58*, Thermosciences Division, Stanford University, Stanford, CA, 1995.

[13] H. G. Im, and J. H. Chen, "Structure and Propagation of Triple Flames in Partially Premixed Hydrogen-Air Mixtures," *Combust. and Flame*, Vol. 119, 1999, pp. 436-454.