

파장별 회체가스중합모델을 이용한 대향류 화염에서의 복사 흡수 예측에 관한 연구

김옥중[†] · Raymond Viskanta^{*} · Jay Prabhakar Gore^{*} · Xuelei Zhu^{*}

(2000년 11월 21일 접수, 2001년 2월 21일 심사완료)

A Study on the Prediction of Self-absorption in Opposed Flames Using WSGGM – Based Spectral Model

Ook Joong Kim, Raymond Viskanta, Jay Prabhakar Gore and Xuelei Zhu

Key Words : Radiation(복사), Absorption Coefficient(흡수계수), WSGGM(회체가스중합모델), Self-absorption(복사흡수), Flame Structure(화염구조)

Abstract

WSGGM based low-resolution spectral model for calculating radiation transfer in combustion gases is applied to estimate self-absorption of radiation energy in one-dimensional opposed flow flames. Development of such a model is necessary in order to enable detailed chemistry-radiation interaction calculations including self-absorption. Database of band model parameters which can be applied to various one-dimensional opposed flow diffusion and partially premixed flames is created. For the validation of the model and database, low resolution spectral intensities at fuel exit side are calculated and compared with the results of a narrow band model with those based on the Curtis-Godson approximation. Good agreements have been found between them. The resulting radiation model is coupled to the OPPDIF code to calculate the self-absorption of radiant energy and compared with the results of an optically thin calculation and the results of a discrete ordinates method in conjunction with the statistical narrow band model. Significant self-absorption of radiation is found for the flames considered here particularly for the fuel side of the reacting zone. However, the self-absorption does not have significant effects on the flame structure in this case. Even in the case of the low velocity diffusion flame and the partially premixed flame of low equivalence ratio, the effects of self-absorption of radiation on the flame temperature and production of minor species are not significant.

1. 서론

대향류(opposed or counter flow) 구조의 1차원 화염에서의 복사 효과에 대한 최근의 연구⁽¹⁻⁶⁾에 따르면 복사 열손실은 화염의 구조 즉 화염의 온도와 폭의 크기와 일산화탄소, 일산화질소 등의 연소 가스의 생성에 영향을 줄 수 있음을 알 수 있다. Ju⁽¹⁾ 등은 최근에 CH₄/O₂-N₂-He 화염에서 Lewis

수와 복사 열손실이 화염의 소화(extinction)와 분기(bifurcation)에 미치는 영향을 조사하였다. 이들은 Soufiani⁽⁷⁾ 등의 좁은밴드모델 데이터베이스를 이용하여 H₂O, CO₂ 및 CO에 대한 Planck 평균흡수계수(mean absorption coefficient)를 계산하였으며 이를 평면과 대향류 화염에 적용하여 소화 한계 등을 계산하였다. 대향류 화염에 대하여 복사 열손실을 계산한 결과, Tien⁽⁸⁾의 Planck 평균흡수계수와 화염이 광학적으로 매우 얇다는 근사(optically thin approximation)를 이용하여 구한 결과는 좁은밴드 모델을 구분종좌표법(discrete ordinate method)에 적용하여 계산한 결과에 비해 약 30% 이상 높게 예측함을 발견하였다. 또한 복사 열손실과 Lewis 수가 화염의 소화와 분기에 매우 크게 영향을 미

[†] 책임저자, 회원, 한국기계연구원 열유체환경연구부

E-mail : ojkim@kimm.re.kr

TEL : (042)868-7326 FAX : (042)868-7335

^{*} School of Mechanical Engineering, Purdue University

침을 보였다.

Zhu⁽²⁾ 등은 대항류의 CH₄/Air 확산 화염에서의 화학-복사(chemistry-radiation) 상관 관계에 대하여 연구하였다. 이 연구에서 그들은 좁은밴드모델 프로그램인 RADCAL⁽⁹⁾을 이용하여 CO₂ 등의 연소 가스에 대한 Planck 평균흡수계수를 구하여 광학적으로 얇은 근사 계산을 수행하였으며 복사 열손실이 CO와 NO의 생성 반응을 억제하는 재결합(recombination)을 촉진하는 것을 발견하였다. 그들은 주어진 화염에 대한 복사 효과를 비교하기 위해 복사수(radiation number)라는 무차원수를 사용하였으며, 이 변수에 따라 복사 효과는 속도가 느린 화염일수록 크게 나타남을 보였다.

Daguse⁽³⁾ 등은 대항류의 H₂/O₂/N₂ 층류 확산화염에 대해 연구하였다. 이 연구에서 그들은 복사전달방정식(Radiative Transfer Equation, RTE)을 좁은밴드모델을 적용하여 구분중좌표법으로 해석하였으며 복사로 인해 화염의 온도, 폭 그리고 CO, OH 등의 생성이 감소함을 보였다.

Chan⁽⁴⁾ 등은 CH₄/Air 화염의 구조와 소화에 미치는 복사 효과에 대하여 조사하였다. 복사에너지는 좁은밴드모델 프로그램인 RADCAL⁽⁹⁾을 이용하여 이산화탄소 등의 연소가스에 대한 Planck 평균흡수계수를 구하여 근사 계산을 수행하였으며 낮은 유속의 화염일 경우 화염의 온도와 NO_x의 생성에 복사 효과가 크게 나타남을 보였다.

Shih⁽⁵⁾ 등은 1.013 kPa의 낮은 압력에서 형성되는 H₂/O₂/CO₂ 대항류 제트화염의 연소한계에 대하여 연구하였다. 해석을 위하여 좁은밴드모델을 적용한 구분중좌표법을 1차원 연소 해석 프로그램인 OPPDIF⁽¹⁰⁾ 코드에 결합하였으며 복사 열손실에 따른 회박 가스인 CO₂의 회박 한계량을 예측하였다. 또한 가스의 긴 체류 시간에 따른 복사 손실로 인해 화염의 온도가 상당히 감소됨을 보였다.

Vranos와 Hall⁽⁶⁾은 10.5 기압하의 대항류 확산화염에 대해 CO 생성에 미치는 복사 효과를 연구하였으며 복사 손실이 약 30%까지 CO의 생성을 줄임을 발견하였다. 그들은 계산에 사용한 화염이 광학적으로 매우 얇다는 근사 계산이 화염의 온도와 CO 생성을 예측하는데 매우 타당한 방법임을 주장하였다.

이러한 연구 결과로부터 1차원 대항류 화염의 경우 복사 계산을 위해서 Planck 평균흡수계수와 좁은밴드모델이 연소가스의 복사 물성치 모델로 주로 사용됨을 알 수 있다. 복사전달방정식의 해법으로는 광학적으로 매우 얇다는 근사 방법이 Planck 평균흡수계수와 함께 사용되며 이와 같은 근사가 곤란하여 복사 흡수(self-absorption)를 고려

할 경우에는 구분중좌표법이 좁은밴드모델과 결합하여 사용됨을 알 수 있다. 좁은밴드모델을 사용한 복사해석의 경우 상당한 수의 과정을 고려해야 하며 이를 구분중좌표법과 결합하면 대단히 많은 컴퓨터 메모리와 계산 시간을 요하게 된다. 특히 격자(grid)의 수와 위치를 매 반복 계산 회수마다 바꾸게 되는 경우 정확한 격자 결합(matching)이 불가능해진다.⁽⁵⁾ 한편 화염이 광학적으로 매우 얇다는 근사 계산 방법은 복사 효과를 과대 평가하는 것으로 알려져 있다.^(1,3) 따라서 다양한 형태의 1차원 대항류 화염 해석에 널리 이용되고 있는 OPPDIF⁽¹⁰⁾ 코드에 쉽게 결합시킬 수 있는 가스 복사 모델 및 계산 방법의 개발은 화염에 미치는 복사 효과를 해석하는데 매우 유용하다.

연소 가스의 복사 모델로는 좁은밴드모델,^(7,11) 넓은밴드모델,^(12,13) 회체가스중합모델,^(14,15) LWSGG(spectral line based WSGG) 모델,^(16,17) CK(correlated-k) 모델,^(18,19) CKFG(correlated-k model with fictitious gas) 모델,^(20,21) ADF(absorption distribution function) 모델,⁽²²⁾ ADFFG(absorption distribution function model with fictitious gases) 모델⁽²²⁾ 등이 널리 사용되고 있다. Taine와 Soufiani⁽²²⁾은 이와 같은 모델들에 대하여 선간계산법(line-by-line)과 비교하여 모델의 유용성과 한계 등을 매우 폭 넓게 다루었으며 결과적으로 모든 면에서 만족할 만한 모델은 아직까지 없음을 보였다. Kim과 Song⁽²³⁻²⁵⁾은 최근에 연소가스에 대한 과장별 회체가스중합모델을 제안하였으며 이 모델은 1차원의 불균일한(nonhomogeneous) 온도 분포 문제 해석에 매우 유용함을 보였다.

본 논문의 목적은 개발된 과장별 회체가스중합 모델을 Fig. 1에 보인 바와 같은 대항류의 1차원 화염 문제 해석에 적용하여 화염에 미치는 복사 효과를 살펴보는 것이다. 이를 위하여 다양한 형태의 1차원 대항류 화염에 적용이 가능한 과장별 회체가스중합모델 데이터베이스를 생성하였다. 모델 및 데이터베이스의 유효성 검증을 위하여 몇 가지 화염에 대하여 벽면에서의 복사 강도를 구하고 이를 Curtis-Godon 근사를 활용한 좁은밴드 계산 결과와 비교하여 살펴보았다. 화염내의 복사열원분포(radiative source/sink distribution)를 구하여 광학적으로 얇다고 가정한 근사 계산 결과와 좁은밴드모델이 결합된 구분중좌표법으로 계산한 결과를 비교하였다. 최종적으로 복사 흡수가 화염 온도 및 소수의 연소가스의 생성에 미치는 효과를 살펴보았다.

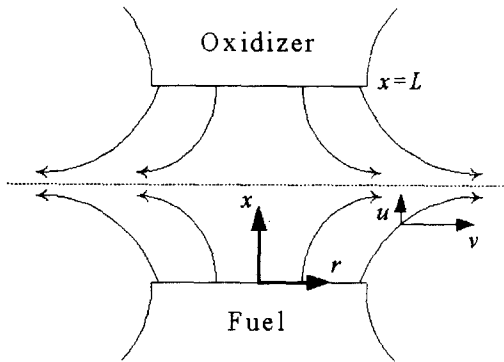


Fig. 1 Schematic of the opposed flow flame

2. 파장별 회체가스중합모델

주어진 경로길이와 온도하에서 회체가스중합모델에 기초한 파장별 평균방사율 $\bar{\epsilon}_{\eta m}$ 은 다음과 같이 표현된다.

$$\bar{\epsilon}_{\eta m}(T, L) = \sum_{i=1}^M (1 - e^{-k_i L}) W_i(\eta) \quad (1)$$

여기서 M 은 회체가스의 수를 나타내며 k_i 는 이산화된 회체가스의 흡수계수이다. L 은 경로길이이며 $W_i(\eta)$ 는 파장별 가중치로서 밴드중심의 파수(band-center wavenumber) η 에 따라 달라지며 임의의 파수에서 그 합은 1이 된다.

Kim 과 Song^(23,24)의 선행 연구에서와 같이 흡수계수와 온도 및 압력과의 관계는 다음과 같은 형태를 선정하였다.

$$k_i = k_{i0} \left(\frac{P_{abs}}{T^2} \right) e^{-\alpha_i/T} \quad (2)$$

여기서 P_{abs} 와 T 는 각각 복사에 참여하는 가스들의 분압의 합과 모델링 온도를 의미하며 k_{i0} 와 α_i 는 모델링 변수를 나타낸다.

모델링 변수인 k_{i0} , α_i 및 $W_i(\eta)$ 는 다음과 같이 정의한 오차에 대한 식을 최소화하는 방법으로 구하였다

$$E_{\eta} = \sum_P \sum_T \sum_L \left(\frac{\bar{\epsilon}_{\eta P}}{\bar{\epsilon}_{\eta T}} + \frac{\bar{\epsilon}_{\eta m}}{\bar{\epsilon}_{\eta P}} - 2 \right) \quad (3)$$

위의 식에서 P , T 와 L 은 각각 모델링 범위 내에서 사용된 가스들의 분압의 합과 온도 및 경로길이를 나타낸다. 그리고 기호의 첨자에서 t 와 m 은 각각 기준치와 모델치를 나타내며 기준치인 $\bar{\epsilon}_{\eta}$ 은 Soufiani 와 Taine⁽⁷⁾의 좁은밴드 프로그램인

SNB 를 이용하여 계산하였다.

식 (1)에 Planck 함수($I_{b\eta}$)를 곱하고 이를 전 복사복사강도(I_b)로 나눈 다음 전 스펙트럼에 대해 적분을 하게 되면 다음과 같은 전 방사율(ϵ_m)에 대한 식을 얻게 된다.

$$\epsilon_m = \sum_{i=1}^M (1 - e^{-k_i L}) W_i(T) \quad (4)$$

여기서 $W_i(T)$ 는 전 방사율에 대한 가중치로서 다음과 같이 주어진다.

$$W_i(T) = \frac{\int_{\eta} W_i(\eta) I_{b\eta} \Delta\eta}{I_b}, i = 1, \dots, M \quad (5)$$

위의 식에서 알 수 있는 바와 같이 파장별 가중치 $W_i(\eta)$ 는 온도에 따라 변화하지 않은 반면 $W_i(T)$ 는 온도의 함수가 된다. 최소화 방법으로는 Conjugate gradient 법⁽²⁶⁾을 사용하였으며 여기에 목적함수의 미분은 해석적인 방법으로 구하여 활용하였다.

모델의 유효성을 검토하기 위하여 연료 출구(Fig. 1 참조)에서의 수직 방향 복사 강도를 계산하였다. 연료 출구 방향에서의 좁은밴드 평균수직복사강도(mean normal spectral intensity)는 흡수계수를 이용할 경우 다음의 식으로 구할 수 있다.

$$\bar{I}_{\eta m}(0) = \sum_{i=1}^M \int_0^L k_i(\eta, s) I_{b\eta}(s) W_i(\eta) \exp\left(-\int_0^s k_i(\eta, s') ds'\right) ds \quad (6)$$

만약 투과율(transmissivity)을 이용할 경우에 식 (6)은 다음의 식 (7)과 같이 된다.

$$\bar{I}_{\eta m}(0) = \int_0^L I_{b\eta}(s) \frac{\partial \tau}{\partial s}(\eta, s) ds \quad (7)$$

여기서 $\tau(\eta, s) = 1 - \epsilon(\eta, s)$ 이며 $\epsilon(\eta, s)$ 은 식 (1)로 주어진다. 전복사강도(total intensity)는 다음과 같이 모든 좁은밴드에 대해 합을 취하면 구할 수 있게 된다

$$I(0) = \sum_{\eta} \bar{I}_{\eta m}(0) \Delta\eta \quad (8)$$

Crosbie 와 Viskanta⁽²⁷⁾가 회체 매질에 대해 적용한 복사 열유속(radiative heat flux) q 에 대한 식은 본 연구에서 제안한 모델의 경우 적용이 가능하며 다음과 같이 표현된다.

$$q(x) = 2\pi \sum_i [I_{b_i}(0) W_i(T_{w,0}) E_3(k_i x) + \int_0^x k_i(x') I_{b_i}(x') W_i(x') E_2\{k_i(x-x')\} dx']$$

$$-I_b(L)W_i(T_{wL})E_3\{k_i(L-x)\} \\ - \int_x^L k_i(x')I_b(x')W_i(x')E_2\{k_i(x'-x)\}dx' \quad (9)$$

여기서 T_{w0} 와 T_{wL} 는 매질의 양 경계면에서의 온도를 나타낸다. 그리고 $E_n(x)$ 은 n 차의 지수적분 함수⁽²⁸⁾(exponential integral function)이다. 최종적으로 복사열원분포는 식 (9)를 좌표 x 에 대해 미분함으로써 다음과 같이 구해진다.

$$dq(x)/dx = Q_{Rad}'' = -2\pi \sum_i^M k_i(0)W_i(T_{w0})E_2(k_i x) \\ + \int_0^x k_i(x')I_b(x')W_i(x')E_1\{k_i(x-x')\}dx' \\ + I_b(L)W_i(T_{wL})E_2\{k_i(L-x)\} \\ + \int_x^L k_i(x')I_b(x')W_i(x')E_1\{k_i(x'-x)\}dx' \\ - 2I_b(x)W_i(x) \quad (10)$$

위의 식 (10)은 포함된 1 차 지수적분함수 때문에 특이성(singularity)이 나타나게 되는데 이를 Abrams⁽²⁹⁾이 제안한 방법에 따라 제거하였다

3. 수치 해법

본 연구에서 고려한 Fig. 1 의 대항류 1 차원 화염 문제는 하나의 bench mark 문제로서 널리 알려져^(2,30,31) 있으므로 여기서는 지배방정식 등에 대해 간단히 언급한다. Fig. 1 의 시스템에 대한 원통좌표계에서의 연속방정식은

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) = 0 \quad (11)$$

으로 나타나며 여기서 u 와 v 는 각각 축방향과 반경방향의 속도이며 ρ 는 혼합기체의 밀도이다. 축방향의 속도를 비롯한 온도, 가스 농도 등의 변수들이 x 만의 함수라는 가정에 따라 두 변수를 다음과 같이 도입하면

$$G(x) = -\frac{\rho v}{r}, \quad F(x) = \frac{\rho u}{2} \quad (12)$$

식 (11)의 연속방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (13)$$

축방향 및 반경방향의 운동량방정식을 만족시키는 고유치(eigenvalue)가 다음과 같이 정의되며,

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = \text{constant} \quad (14)$$

반경 방향의 운동량방정식은 다음과 같이 나타난다.

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0 \quad (15)$$

위의 식 (14)와 (15)에서 p 와 μ 는 각각 압력과 동점성계수를 나타낸다. 에너지와 가스 종(species)의 보존방정식은 각각 다음과 같이 표현된다.

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) \\ + \frac{\rho}{c_p} \sum_k c_{p_k} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p} \sum_k h_k \omega_k + \frac{Q_{Rad}''}{c_p} = 0 \quad (16)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \omega_k W_k = 0, \quad k=1, K \quad (17)$$

위의 식에서 T , c_p , λ 는 각각 온도, 혼합기체의 정압비열 및 열전도도를 나타내며 c_{p_k} 와 Y_k 는 혼합기체에서 k 번째 가스의 정압비열과 질량분율(mass fraction)을 각각 나타낸다. 식 (16) 좌변의 마지막 항에는 식 (10)의 복사열원분포가 포함되어 있음을 알 수 있으며 단열화염일 경우 이 항은 0 이 된다. 그리고 h_k 와 ω_k 는 k 가스 종의 생성엔탈피와 질량생성율(mass production rate)을 나타내며, V_k 는 다음과 같이 정의된 확산속도(diffusion velocity)이다.

$$V_k = -\frac{1}{X_k} D_{km} \frac{dX_k}{dx}, \quad D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^K X_j / D_{jk}} \quad (18)$$

위 식에서 X_k , D_{km} 는 각각 k 가스 종의 몰분율과 확산계수를 나타내며, D_{kj} 는 k 와 j 두 가스 종간의 확산계수, K 는 혼합기체에 존재하는 가스 종의 수를 나타낸다. 이와 같은 지배방정식에 대한 경계 조건은 다음과 같이 표현된다.

$$x=0: \quad F = \frac{\rho_F u_F}{2}, \quad G=0, \quad T=T_F \\ \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \quad (19)$$

$$x=L: \quad F = \frac{\rho_O u_O}{2}, \quad G=0, \quad T=T_O \\ \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_O \quad (20)$$

위의 식에서 첨자 F 와 O 는 각각 연료와 산화제를 나타낸다.

이상에서 살펴 본 문제에 관한 해석 코드로 많이 사용되는 Lutz⁽¹⁰⁾ 등의 OPPDIF 코드를 제안한 모델과 방법에 적합하도록 수정하였다. 비교를 위하여 광학적으로 얇은 근사계산과 좁은밴드모델을 적용한 구분중좌표법 계산프로그램도 OPPDIF 코드에 결합하였다. 근사 계산을 위한 Planck 평균흡수계수는 Ju⁽¹⁾ 등이 제안한 값을 사용하였으며, 구분중좌표법은 Kim⁽³³⁾ 등의 프로그램을 활용하였다. 구분중좌표법 계산을 위한 좁은밴드모델은

Soufiani 와 Taine⁽⁷⁾의 데이터베이스를 이용함으로써 결과적으로 모든 계산에서 연소가스의 복사 물성치 계산을 위한 기본 데이터베이스는 동일하게 취하였다. 구분종좌표법 계산은 Gaussian 구적 적분을 활용한 S₁₀ 계산을 수행하였다.

연소 계산에서는 49 개의 화학종에 대해 279 개의 반응을 고려한 GRI-Mech 2.11 메커니즘⁽³⁴⁾을 사용하였으며 필요한 열역학적 물성치는 CHEMKIN 데이터베이스⁽³⁵⁾를 활용하였다. 계산 시간을 줄이기 위하여 10 번의 주반복(main iteration) 계산 후에 복사열원분포를 계산하여 활용하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 회체가스중합모델의 데이터베이스 생성 및 검증

다양한 1 차원 대향류 화염에 적용이 가능한 가중치와 모델 상수 등의 데이터베이스를 생성하기 위해 Fig. 2 에 보인 바와 같은 전형적인 CH₄/air 확산 화염(Flame I 이라 명명함)을 고려하였다. 이 화염은 연료와 공기 노즐의 간격이 0.02 m이며 V_f 와 V_o로 표시한 연료와 공기의 출구 유속은 모두 0.1 m/s, 전체 압력은 1 기압이다.

모델링 온도와 경로길이 범위로는 각각 500 ~ 2500 K(100 K 간격)와 0.015 ~ 0.04 m(0.015 m 간격)를 잡았다. 6 개의 k_{r0} (3×10^{10} , 3×10^9 , 3×10^8 , 3×10^7 , 3×10^6 and 3×10^5 K²/atm)와 5 개의 α_i (500, 2000, 5000, 8000, 15000 K)의 모델링 상수가 사용되어 결과적으로 30 개의 회체가스가 사용되었다. 전체 스펙트럼 범위 150 ~ 9300 cm⁻¹ 에 대해 25 cm⁻¹ 간격으로 계산을 수행하였다. 복사에 참여하는 연소가스 분압의 변화를 고려하기 위해 Table 1 에 보인 바와 같은 5 가지의 분압 분포를 임의로 선택하여 모델링에 포함하였다. 최종적으로 가중치 $W_i(\eta)$ 와 $W_i(T)$ 를 구하였으며 여기에는 지면 관계로 기록하지 않았다.

식 (6)과 (7)을 이용하여 구한 Fig. 2 의 화염에 대한 연료 출구에서의 파장별 복사 강도를 Fig. 3 에 보였다. 비교를 위하여 Curtis-Godson 근사를 이용한 좁은밴드 계산 결과를 함께 나타내었다.

그림에 나타난 바와 같이 일부(2200 cm⁻¹ ~ 2350 cm⁻¹) 파장 부근을 제외하고는 두 결과가 잘 일치함을 볼 수 있다. Kim 과 Song^(23,24)의 선행 연구에서 밝힌 바와 같이 차이가 비교적 크게 나타난 구간은 온도에 따른 방사율의 변화가 커 모델 방사

율과 기준 방사율의 차이가 다른 구간에 비해 크게 나타나기 때문이다.

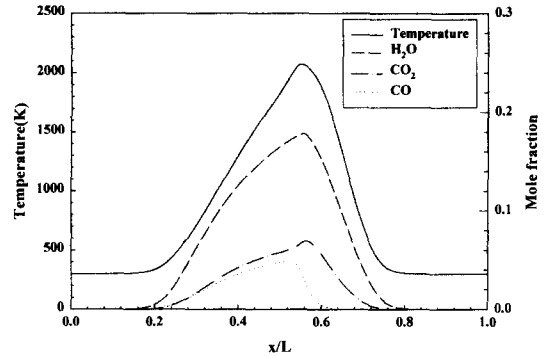


Fig. 2 Temperature and concentration profile

Table 1 Partial pressure distributions considered

No.	Species	CO ₂	H ₂ O	CO
	Partial pressure			
1		0.0095	0.0417	0.0110
2		0.0376	0.1195	0.0366
3		0.0542	0.1658	0.0520
4		0.0679	0.1909	0.0297
5		0.0764	0.1970	0.0107

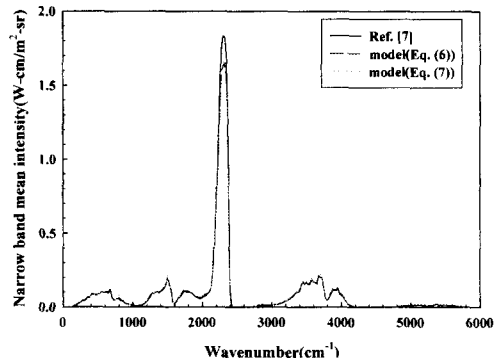


Fig. 3 Narrow band mean intensity at the fuel exit side for the Flame I

Table 2 Operating conditions of each flame

Flames	Flame I	Flame II	Flame III	Flame IV	Flame V
Operating Conditions	Flame I	Flame II	Flame III	Flame IV	Flame V
Kind	Diffusion	Diffusion	Diffusion	Partially pre-mixed	Partially pre-mixed
Fuel and oxidizer velocity (m/s)	0.1	0.3	0.7	0.1	0.1
Fuel and oxidizer temperature (K)	300	300	300	300	300
Total pressure (atm)	1	1	1	1	1
Equivalence ratio	-	-	-	2.0	4.5
Distance between nozzles(m)	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02

그러나 이 일부 구간을 제외하고는 두 결과가 잘 일치하므로 30 개의 회체가스를 사용하여 생성된 모델의 데이터베이스는 온도와 연소가스의 농도가 매우 급격하게 변화하는 화염에 대해서 적용할 수 있음을 알 수 있다.

각각 다른 작동 조건을 가진 4 가지의 화염에 대해서 계산을 수행하였다. Table 2 는 4 가지 화염의 작동 조건을 보인 것이며 Fig. 4 는 화염의 온도와 연소가스의 농도 분포를 보인 것이다. 결과적으로 연료와 공기의 출구 속도가 다른 3 가지의 확산 화염과 당량비가 다른 2 가지의 예혼합 화염을 비교하였다. 여기서 당량비는 이론공연비(메탄의 경우 0.058)에 대한 실제 혼합가스의 공연비를 나타낸다.

Table 3 은 식 (6) ~ (8)을 이용하여 구한 연료 출구속에서의 전복사 강도를 보인 것으로 모든 경우에 대해 Curtis-Godson 근사를 이용한 좁은밴드 계산 결과와 약 5 % 이내의 오차를 보임을 알 수 있다. 식 (6)과 (7)의 결과와 식 (6)과 (8)의 결과에서 발생하는 약간의 오차는 식 (7)과 (8)의 수치적 분방법의 차이에 기인한 것이다

Kim 과 Song^(23,24)의 선행 연구에서와 동일하게 고려한 화염에 대해 과장별 복사 강도를 계산하였으며 다음과 같이 정의한 오차를 이용하여 그 정확도를 평가하였다.

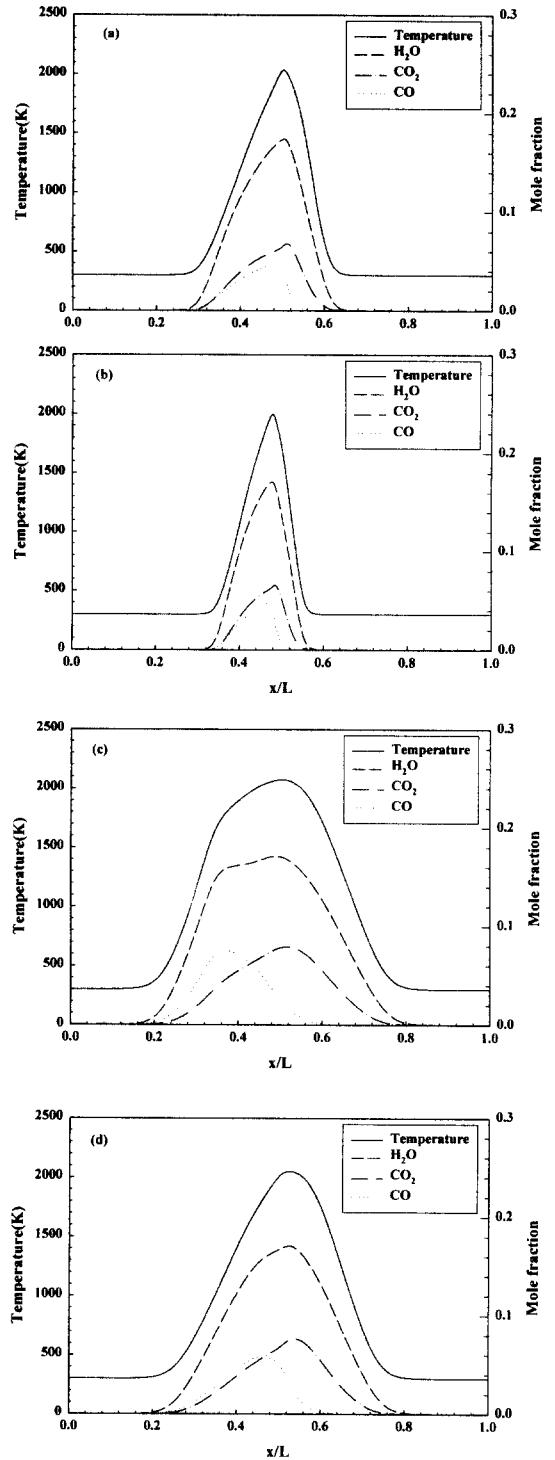


Fig. 4 Temperature and concentration profiles considered (a) Flame II (b) Flame III (c) Flame IV (d) Flame V

$$E = \frac{\sum_{\eta} \left(\frac{\bar{I}_{\eta m}(0)}{\bar{I}_{\eta}(0)} + \frac{\bar{I}_{\eta}(0)}{\bar{I}_{\eta m}(0)} - 2 \right) \bar{I}_{\eta}(0)}{\sum_{\eta} \bar{I}_{\eta}(0)} \quad (21)$$

위 식에서 $\bar{I}_{\eta}(0)$ 는 Soufiani 와 Taine⁽⁷⁾의 좁은 밴드 프로그램인 SNB 로 구한 값을 나타낸다. Table 4 는 각 화염에 대해 식 (21)로 계산한 파장별 오차를 보인 것으로 복사사 강도의 오차 보다 작은 값을 가짐을 알 수 있다. 이와 같은 비교를 통하여 파장별 회체가스중합모델 데이터베이스는 충분한 정확도를 가짐을 알 수 있었으며 이 후의 계산에 이를 활용하였다.

4.2 복사사 화염에 미치는 효과

Fig. 5 는 Flame I 에 대하여 본 연구의 파장별 회체가스중합모델(WSGGM calculation 이라 표시됨)을 이용하여 구한 복사열원분포를 광학적으로 얇다는 가정하의 근사계산(Optically thin calculation 이라 표시됨)과 좁은밴드모델을 적용한 구분중좌표법에 의한 계산 결과(SNB calculation 이라 표시됨)를 함께 나타낸 것이다. 화염의 온도와 연소가스의 농도가 급격히 증가하는 부근에서 상당한 양의 복사 흡수가 예측됨을 알 수 있다. 또한 이 부근에서 파장별 회체가스중합모델을 이용한 계산 결과는 구분중좌표법에 의한 계산 결과와 잘 일치함을 알 수 있다. 반면에 화염의 온도와 연소가스의 농도가 감소하는 부근에서는 복사 흡수가 거의 발생하지 않음을 볼 수 있는데 이는 이 부근의 폭이 매우 짧고 또한 복사 참여 가스의 농도가 상대적으로 낮기 때문이다.

Flame I 에 대한 화염 온도와 소수의 연소가스의 농도 분포 계산 결과를 복사를 고려하지 않은 단일화염의 경우 함께 Fig. 6 ~ Fig. 8 에 보였다. 파장별 회체가스중합모델을 이용한 계산 결과와 구분중좌표법에 의한 계산 결과는 잘 일치한 반면 복사 흡수를 고려하지 않은 근사계산은 복사 효과를 약간 과대 평가하는 것을 알 수 있다. Fig. 9 ~ Fig. 11 은 부분 예혼합 화염인 Flame IV 에 대한 결과로서 본 연구의 회체가스중합모델을 이용한 계산 결과는 구분중좌표법의 계산 결과와 잘 일치하며 복사 흡수의 효과를 잘 나타냄을 알 수 있다.

Table 5 는 각 화염에 대하여 화염의 온도와 농도의 최대치를 계산 방법에 따라 요약해 놓은 것이다. 표에서 알 수 있는 바와 같이 본 연구에서 고려한 화염들의 경우, 최대 온도 및 농도의 면에서 고려한 세 가지의 계산 결과가 크게 차이를 보

이지 않음을 알 수 있다. 파장별 회체가스중합모델을 이용한 계산 결과는 구분중좌표법에 의한 계산 결과와 잘 일치함을 표에서 볼 수 있다.

Table 3 Comparison of computed total intensities ($W/m^2 \cdot sr$) at fuel exit side (Numbers in brackets are percent errors from SNB)

Profiles	Flame I	Flame II	Flame III	Flame IV	Flame V
SNB	556.7	339.5	221.4	798.8	588.4
Eqs. (6), (8)	540.6 (-2.9)	329.4 (-3.0)	216.0 (-2.4)	774.2 (-3.1)	559.9 (-4.8)
Eqs. (7), (8)	566.9 (+1.8)	339.9 (+0.1)	221.0 (+0.2)	809.0 (+1.3)	583.3 (-0.9)

Table 4 Average spectral intensity errors (%) at fuel exit side

Profiles	Flame I	Flame II	Flame III	Flame IV	Flame V
Eq. (6)	0.57	0.83	0.87	1.18	1.43
Eq. (7)	0.98	1.11	1.12	1.56	1.68

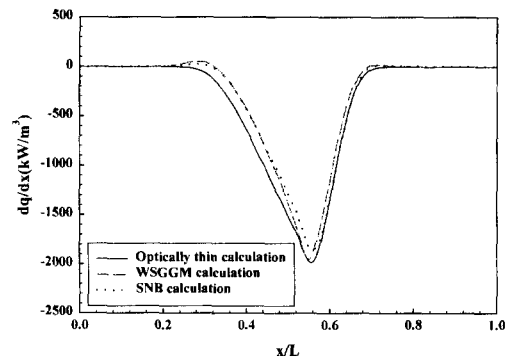


Fig. 5 Radiative source/sink distribution for Flame I

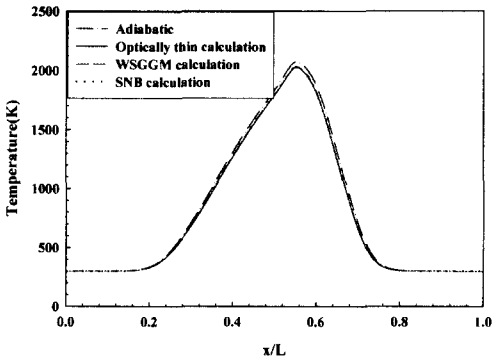


Fig. 6 Prediction of temperature distribution for Flame I

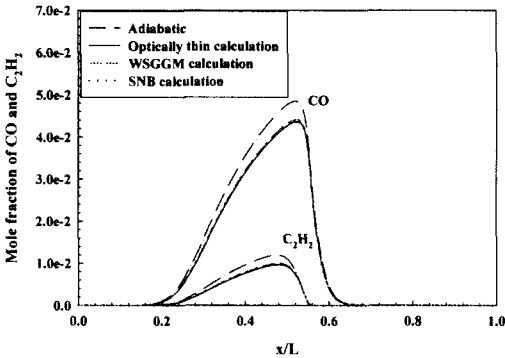


Fig. 7 Predictions of CO and C₂H₂ concentration distribution for Flame I

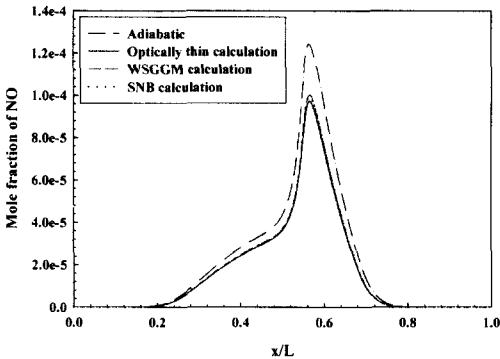


Fig. 8 Prediction of NO distribution for Flame I

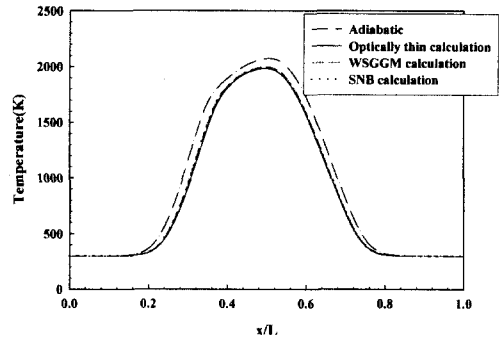


Fig. 9 Prediction of temperature distribution for Flame IV

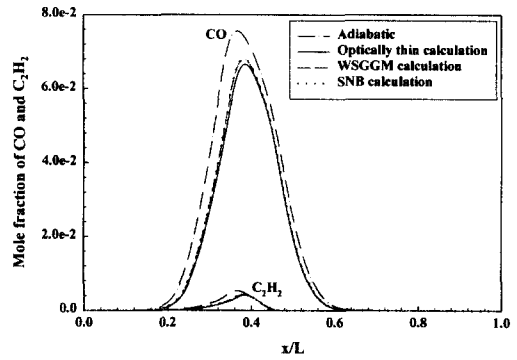


Fig. 10 Predictions of CO and C₂H₂ concentration distribution for Flame IV

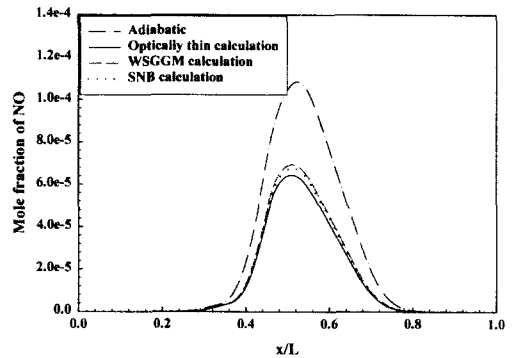


Fig. 11 Prediction of NO distribution for Flame IV

동일한 문제에 대하여 동일한 조건(초기 조건, 격자 수 등)으로 시작하여 해를 구하는 데 필요한 계산 시간은 4 개의 200 MHz CPU 를 가진 64-bit 의 Workstation 에서 실행한 결과, 근사 계산의 경우는 1 분 31 초, 회체가스중합모델을 이용한 경우는 20 분 16 초, 구분종좌표법의 경우는 6 시간 7 분 36 초가 소요되었다.

Table 5 Comparison of the maximum temperature and concentration of minor species for the flames considered

Item	Method	Flame I	Flame II	Flame III	Flame IV	Flame V
Maximum temperature (K)	Adiabatic	2071.8	2034.7	1995.2	2073.1	2049.9
	Optically thin calculation	2026.2	2017.3	1986.9	1982.7	1986.9
	WSGGM calculation	2031.8	2018.7	1987.3	1996.0	1996.4
	SNB calculation	2030.7	2018.7	1987.4	1993.2	1993.2
Maximum concentration of CO	Adiabatic	0.0485	0.0471	0.0469	0.0756	0.0582
	Optically thin calculation	0.0436	0.0456	0.0463	0.0666	0.0502
	WSGGM calculation	0.0441	0.0457	0.0463	0.0679	0.0514
	SNB calculation	0.0440	0.0457	0.0464	0.0682	0.0510
Maximum concentration of C ₂ H ₂	Adiabatic	0.0119	9.197E-3	7.436E-3	5.348E-3	6.028E-3
	Optically thin calculation	0.00964	8.455E-3	7.157E-3	4.185E-3	5.257E-3
	WSGGM calculation	0.00994	8.518E-3	7.172E-3	4.344E-3	6.162E-3
	SNB calculation	0.00989	8.532E-3	7.180E-3	4.389E-3	6.094E-3
Maximum concentration of NO	Adiabatic	1.241E-4	8.474E-5	5.731E-5	1.084E-4	1.160E-4
	Optically thin calculation	9.711E-5	7.748E-5	5.474E-5	6.432E-5	8.300E-5
	WSGGM calculation	1.002E-4	7.796E-5	5.487E-5	6.928E-5	8.733E-5
	SNB calculation	9.957E-5	7.802E-5	5.489E-5	6.763E-5	8.584E-5

면에서 매우 유리한 방법임을 알 수 있었다.

5. 결론

과장별 회체가스중합모델을 1 차원 대향류의 화염 문제에 적용하여 복사 흡수를 예측하였다. 다양한 확산 및 부분 예혼합 화염에 적용이 가능한 데이터베이스를 생성하였으며 그 정확도를 검증하였다. 3 가지의 확산 화염과 2 가지의 부분 예혼합 화염에 대해 연료 출구측에서 전 복사 및 과장별 복사 강도를 구하여 Curtis-Godson 근사를 활용한 좁은밴드 계산과 비교한 결과 수 퍼센트의 오차 내에서 잘 일치하였다. 개발된 모델을 연소 해석 프로그램인 OPPDIF code 와 결합하여 화염내의 복사 흡수를 예측하였다. 계산 결과 온도와 연소 가스의 농도가 증가하는 부근에서 상당한 양의 복사 흡수를 예측하였으며 그 결과는 좁은밴드모델을 적용한 구분중좌표법에 의한 계산 결과와 잘 일치하였다. 그러나 고려한 시스템은 경로길이가 매우 짧고 연소 가스의 분압이 높지 않아 광학적으로 매우 얇은(optically very thin) 경우에 해당하여 화염에서의 이러한 복사 흡수는 온도와 소수 연소가스의 농도 변화에 크게 영향을 미치지 않은 것으로 나타났다. 개발된 모델과 방법은 1 차원 화염 내에서의 복사 문제 해석에 유용하며 특히 계산 시간

후기

본 연구는 한국과학재단(KOSEF)의 후원으로 이루어진 것으로 관계자 여러분께 감사를 드리는 바이며, 특히 구분중좌표법 프로그램을 사용하도록 해 주신 중앙대학교 김태국 교수님께 진심으로 감사사를 드립니다.

참고문헌

- (1) Ju Y., Guo H., Liu F., and Maruta K., 1999, *Journal of Fluid Mechanics*, 379, pp. 165~190.
- (2) Zhu X. L., Lim J., and Gore, J. P., *Combustion and Flame*, submitted.
- (3) Daguse T., Croonenbroek T., Rolon, J. C., Darabita N., and Soufiani A., 1996, *Combustion and Flame*, 106, pp. 271~287.
- (4) Chan S. H., Yin J. Q., and Shi B. J., 1998, *Combustion and Flame*, 112, pp. 445~456.
- (5) Shih S. Y., Bedir H., T'ien J. S., and Sung C. J., 1999, *Journal of Propulsion and Power*, 15, pp. 903~908.
- (6) Vranos A., and Hall R. J., 1993, *Combustion and Flame*, 93, pp. 230~238.
- (7) Soufiani A., and Taine J., 1997, *International*

- Journal of Heat and Mass Transfer*, 40, 987~991.
- (8) Tien C. L., 1968, *Advances in Heat Transfer* 5, Academic Press, New York, pp. 253~324.
- (9) Grosshandler W. L., 1980, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 23, pp. 1447~1457.
- (10) Lutz A. E., Kee R. J., Grcar J. F., and Rupley F. M., 1996, Sandia Report SAND96~8243.
- (11) Ludwig C. B., Malkmus W., Reardon J. E., and Thompson J. A. L., 1973, *Handbook of Infrared Radiation from Combustion Gases*, NASA SP-3080.
- (12) Edwards D. K., 1976, *Advances in Heat Transfer* 12, Academic Press, New York, pp. 115~193.
- (13) Lallemand N., and Webber R., 1995, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39, pp. 3273~3286.
- (14) Hottel H. C., and Sarofim A. F., 1967, *Radiative Transfer*, McGraw-Hill.
- (15) Smith T. F., Shen Z. F., and Friedman J. N., 1982, *Journal of Heat Transfer*, 104, pp. 602~608.
- (16) Denison M. K., and Webb B. W., 1993, *Journal of Heat Transfer*, 115, pp. 1004~1012.
- (17) Denison M. K., and Webb B. W., 1995, *Journal of Heat Transfer*, 117, pp. 359~365.
- (18) Goody R., West R., Chen L., and Crisp D., 1989, *JQSRT*, 42, pp. 539~550.
- (19) Riviere P., Scutaru D., Soufiani A., and Taine J., 1994, *Proceedings of the Tenth International Heat Transfer Conference*, Taylor & Francis, Bristol, UK, pp. 129~134.
- (20) Riviere P., Soufiani A., and Taine J., 1992, *JQSRT*, 48, pp. 187~203.
- (21) Riviere P., Soufiani A., and Taine J., 1995, *JQSRT*, 53, pp. 335~346.
- (22) Taine J., and Soufiani A., 1999, *Advances in Heat Transfer* 33, Academic Press, New York, pp. 295~414.
- (23) Kim O. J., and Song T. H., 1996, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 30, pp. 453~468.
- (24) Kim O. J., and Song T. H., 1997, *Radiation '97 International Symposium on Radiative Transfer*, Kusadasi, Turkey, pp. 445~459.
- (25) Kim O. J., and Song T. H., 2000, *JQSRT*, 64, pp. 379~394.
- (26) Arora J. S., 1989, *Introduction to Optimum Design*, McGraw-Hill.
- (27) Crosbie A. L., and Viskanta R., 1970, *JQSRT*, 10, pp. 487~509.
- (28) Modest M. F., 1993, *Radiative Heat Transfer*, International ed., McGraw-Hill, Singapore, pp. 799 ~ 802.
- (29) Abrams M., 1971, PhD thesis, Purdue University, West Lafayette, IN.
- (30) Nishioka M., Nakagawa S., Ishikawa Y., and Takeno T., 1993, *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 151, pp. 141~162.
- (31) Kee R. J., Miller J. A., Evans G. H., and Dixon-Lewis G., 1988, *Twenty Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp. 1479~1494.
- (32) Lutz A. E., Kee R. J., Grcar J. F., and Rupley F. M., 1996, Sandia Report SAND96~8243.
- (33) Kim T. K., Menart J. A., and Lee H. S., 1991, *Journal of Heat Transfer*, 113, pp. 946 ~ 952
- (34) Bowman C. T., Hanson R. K., Davidson D. F., Gardiner Jr. W. C., Lissianski V., Smith G. P., Golden D. M., Frenkach M., and Goldenberg M., http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- (35) Kee R. J., Rupley F. M., and Miller J. A., 1989, Sandia Report SNAD89-8009.