

화염편 및 조건평균법 모델을 이용한 재순환 비예혼합 난류 화염장의 해석

김군홍* · 강성모* · 김용모†
(2004년 7월 22일 접수, 2004년 10월 15일 심사완료)

Flamelet and Conditional Moment Closure Modeling for the Turbulent Recirculating Nonpremixed Flames

Gunhong Kim, Sungmo Kang and Yongmo Kim

Key Words: Flamelet Model(화염편 모델), Conditional Moment Closure Model(조건평균법 모델), NOx Formation Characteristics(NOx 생성특성)

Abstract

The conditional moment closure(CMC) model has been implemented in context with the unstructured-grid finite-volume method which efficiently handle the physically and geometrically complex turbulent reacting flows. The validation cases include a turbulent nonpremixed CO/H₂/N₂ Jet flame and a turbulent nonpremixed H₂/CO flame stabilized on an axisymmetric bluff-body burner. In terms of mean flame field, minor species and NO formation, numerical results has the overall agreement with expermental data. The detailed discussion has been made for the turbulence-chemistry interaction and NOx formation characteristics as well as the comparative performance for CMC and flamelet model.

1. 서 론

난류 연소모델링의 가장 큰 난제는 온도와 화학종 농도간의 비선형성이 매우 크게 존재하며 이에 대응하는 평균 화학 반응을 어떻게 제대로 모델링할 것인가에 있다. 최근 RANS모델에 기초하는 난류 연소모델 중에서 CMC모델(Conditional Moment Closure Model)은 화염편 모델(Flamelet Model)과 함께 수치효율성을 유지하면서 상대적으로 정확하게 난류화염장을 해석할 수 있는 유용한 난류연소모델로 인식되어 오고 있다.⁽¹⁾ CMC 모델은 혼합분율과 같은 보존 스칼라에 대해 조건평균된 화학종과 온도를 이용함으로써 화학 반응을 모델링하게 된다. 따라서 혼

합 분율에 따라 조건평균화된 모든 반응 스칼라량들에 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 개발하였으며 난류 CO/H₂/N₂-공기 제트 화염과 재순환 영역이 존재하는 H₂/CO bluff-body 화염장에 대한 해석을 수행함으로써 개발된 CMC 모델의 예측능력을 검증하였다. 또한 CMC 모델의 특성을 살펴보기 위하여 우수한 예측성능을 보여주고 있는 기존의 화염편 모델들과 동일한 화염장들에 대하여 예측, 비교하였다. 난류 제트 화염장에 대해서는 CMC 모델과 화염편 모델 모두 거의 동일한 예측성능을 보여주고 있으나 CMC 모델의 경우가 모델링 특성으로 인해 화염구조를 좀 더 잘

† 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : ymkim@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2290-0428 FAX : (02)2297-0339

* 회원, 한양대학교 대학원 기계공학과

예측함을 보여주었다. 그러나 재순환이 존재하는 H₂/CO Bluff-Body 화염장의 경우에는 CMC 모델이 비평형 화학반응 현상이나 NO 생성에 대하여 향상된 예측결과를 보여주었다. 결과적으로 개발된 CMC 모델은 전반적으로 기존의 화염편 모델들에 비해 좀더 나은 예측 결과를 보여주고 있음을 확인하였다. 그러나 CMC 모델의 복잡성과 계산용량 및 계산시간에 따른 어려움들로 인하여 적용상의 한계를 넓히기 위하여 지속적인 연구가 필요함을 확인하였다.

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 ξ 에 대한 조건 평균을 나타내며 η 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 사용되었다. 최근 연구에서 유한체적법을 이용한 CMC 모델이 좀더 실제 연소 시스템내의 난류연소장 해석을 위하여 적용되었다. Cleary와 Kent는 축대칭 좌표계에 대한 보존형 유한체적 수치기법에 적합한 일반 CMC 방정식을 사용하였으며 일반화된 보존식은 아래와 같다.^(1,3)

$$\begin{aligned} \text{div}(\rho \vec{P} \vec{v} Q) &= \text{div}(\rho P D \nabla Q) + \rho P W \\ &+ \rho P N \frac{\partial^2 Q}{\partial \eta^2} + Q \text{div}(\rho \vec{P} \vec{v}) \end{aligned} \quad (2)$$

여기에서 W 는 화학종에 대해서는 조건평균 화학반응율과 엔탈피에 대해서는 조건평균 복사 열손실율을 각각 나타내며 D 는 난류확산계수로 이는 스칼라량의 난류유동에 대한 일반적인 모델링인 $\langle \vec{v} \psi | \eta \rangle = -D \nabla Q$ 의 결과로 나타난다. 일반적으로 난류 연소장에 적용되는 질량 혼합이 이루어지는 유동장에 대한 방정식들은 질량 평균 형태식이 사용되기 때문에 CMC 방정식도 질량 평균 값들로 표현하는 것이 유용하다. 식 (2)의 일반적 PDF는 $\rho_r P(\eta) = \bar{\rho} \bar{P}(\eta)$ 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 계산되었다. 조건평균 속도항은 다음 식으로 근사되었다.

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

여기에서 $v \sqrt{\bar{Z}}$ 는 일반적인 평균 혼합분율(\bar{Z}) 방정식에 사용된 Gradient Transport Assumption에 의해 모델링되었다.

CMC 모델 예측성능에 대한 조건평균 스칼라 소산율($\langle M \eta \rangle$)에 대한 모델링 과정이 매우 중요함은 잘 알려져 있다. 조건평균 스칼라 소산율은 난류 유동장내의 작은 스케일 구조들의 스칼라 혼합과정을 나타내며, 따라서 화학반응율에 직접적으로 영향을 미치게 된다. 조건평균 스칼라 소산율을 구하기 위하여 균일 유동장내의 대향류 층류 화염 모델링으로부터 얻어지는 일반적인 AMC (Amplitude Mapping Closure) 모델이 적용되었다.⁽⁴⁾

$$\begin{aligned} \langle M \eta \rangle &= \\ &= \frac{\tilde{N} \exp(-2(\text{erf}^{-1}(2\eta-1))^2)}{\int_0^1 \exp(-2(\text{erf}^{-1}(2\eta-1))^2) \tilde{P}(\eta) d\eta} \end{aligned} \quad (4)$$

연소 유동장내의 비조건 평균 스칼라 소산율 모델은 일반적으로 사용되는 아래 식을 적용하였다.

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

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 계산되어진다.

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

엔탈피는 복사와 벽에 대한 대류의 영향을 받게되어 조건평균 엔탈피 $\langle h | \eta \rangle$ 또는 온도분포 $\langle T | \eta \rangle$ 에 대한 CMC 계산을 위해서는 추가적인 열전달 방정식이 요구되어진다. 이러한 비단열 화염장내의 열전달 현상을 고려하기 위해 Cleary는 대체방법으로 단열 조건평균 온도분포를 단열

평균온도와 비단열 평균온도를 이용하여 스케일링함으로써 비단열 조건평균 온도분포를 가정하였다.⁽³⁾ 본 연구에서는 질량평균 온도(\bar{T})는 평균 엔탈피(\bar{h}) 방정식의 해와 질량 평균 화학종 농도, \bar{Y}_i 로부터 계산되었다. 그러나 유동장내의 질량평균 값에서 조건평균에 대한 정보를 얻는다는 것은 분명 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.⁽⁵⁾

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

여기에서 h_{ad} 는 단열 엔탈피 그리고 h_{\min} 는 순간적으로 주위 온도로 생각되었을 때의 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 얻어진다. 따라서 평준화된 엔탈피 손실변수 접근법을 이용하여 Cleary의 경우처럼 연소 유동장내의 조건평균 엔탈피 분포를 얻을 수 있다. 질량평균 엔탈피 수송 방정식의 복사 열손실항을 계산하기 위하여 얇은 광학두께 모델과 회색가스 가중합모델(WSGGM)을 적용하였다.^(6,7) 복사 열전달 방정식 해석을 위해서 비정렬 격자계에 대한 축대칭 유한체적법 복사모델을 적용하였다.⁽⁸⁾

2.2 화염편 모델

CMC 모델 방정식들은 처음부터 화학반응 스칼라들의 수송방정식들로부터 유도되었지만, 반면에 화염편 모델은 얇은 화학반응 영역에 대한 가정으로부터 유도되었다. 일반적인 화염편 모델에 대한 식은 다음과 같은 형태로 표현된다.^(9,10)

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial t}\right)_{FM} = W + N \frac{\partial^2 Q}{\partial \Gamma^2} \quad (9)$$

여기에서 첨자 'FM'은 Klimenko에 의해 폭넓게 논의되어졌듯이 비정상 화염편에 대한 시간미분항으로 해석되어질 수 있다. 정상 화염편 모델(Steady Flamelet Model)에 대해서 화염편 방정식(9)의 비정상항은 항상 영이 된다. 그러나 비정상 화염편 모델의 경우에는 화염편 시간 미분항에

대한 해석은 사용되는 기준 좌표에 의존하게 된다. 일반적으로 만약 고정된 기준좌표계가 적용되었을 경우에는 오일러 화염편 모델(Eulerian Flamelet Model)이라 명명되어지며 화염편을 따라 움직이는 기준좌표계의 경우에는 라그랑지 화염편 모델(Lagrangian Flamelet Model)로 불리워진다. Pitsch는 난류 H_2/N_2 확산 제트화염에 대하여 화염구조는 비정상 효과에 대한 영향이 무시될 수 있지만 NO 생성반응과 같은 느린 화학반응에 경우에는 반드시 고려되어야 함을 보여주었으며, 다음과 같이 정의된 화염편 시간함수에 의한 비정상 화염편 모델을 제안하였다.⁽¹¹⁾

$$t_{FM} = \int_0^x [u(x')](\bar{Z} = Z_{st})^{-1} dx' \quad (10)$$

여기에서 x 는 연료노즐로부터의 축방향 거리이며 $u(x)|(\bar{Z} = Z_{st})$ 는 $\bar{Z} = Z_{st}$ 인 반경방향 위치에서의 축방향 속도를 나타낸다. 따라서 이러한 비정상 화염편 모델은 위에서 설명되었듯이 라그랑지 화염편 모델(LFM)로 분류되어질 수 있다. 이러한 비정상 화염편 모델 접근법은 난류 제트 화염에 대한 1차 근사 CMC 모델들과 매우 유사한 형태를 가지고 있으며, 이는 일반 CMC 방정식(2)에서 난류 확산항을 소거함으로써 유도되어질 수 있다.⁽¹⁾ 제트 화염장에 대한 LFM과 CMC 모델의 차이는 조건 평균량(예, 조건평균 속도와 조건평균 스칼라 소산율)들을 모델링하는 방법에 있게 된다. 제트 화염장에 대한 단순화된 CMC 모델은 반경방향에 대한 적분을 통해 조건평균량들을 얻게 되는 반면에, Pitsch에 의해 제안된 LFM은 화학 당론적 반경방향 위치에서의 화학당론적 조건평균량만을 고려하게 된다. 그러므로 LFM은 일반적인 제트 화염장에 대해서만 적용 가능한 한계를 갖게 되며, 복잡한 형상과 유동조건을 갖는 연소 시스템내에 적용 가능한 좀더 일반적인 비정상 화염편 모델이 제안되었다. Barths et al은 가스 터빈 연소기 해석을 위하여 RIF(Representative Interactive Flamelet) 개념을 이용한 비정상 화염편 모델을 적용하였다.⁽¹²⁾ 제안된 일반적 비정상 화염편 모델은 스칼라 소산율에 대한 공간분포를 고려하기 위하여 다중 화염편들을 고려할 수 있도록 확장된 것이다. 다중 화염편들의 비정상 거동을 고려하기 위하여 대표 입자(Marker Particle)들의 질량가중 확률분포에 대한 비정상 오일러 수송방정식을 도입하였으며 오

일러 입자 화염편 모델(Eulerian Particle Flamelet Model, EPFM)로 명명되었다. 비정상 화염편들의 거동에 대한 대표 입자들은 난류유동장으로 유입되어 전체 유동장으로 수송되어진다. 주어진 시간과 위치에 대해 n번째 대표 입자가 발견될 확률 $I_n(x, t)$ 은 다음과 같은 오일러 수송방정식으로 부터 계산되었다.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{I}_n}{\partial t} + \text{div}(\bar{\rho} \bar{v} \bar{I}_n) = \text{div}(D \nabla \bar{I}_n) \quad (11)$$

따라서 비정상 화염편 모델에 경우에는 화학종의 질량분율은 화염편 비행시간에 따른 적분과 모든 대표 입자들에 대한 합으로부터 얻어지게 된다.

3. 수치 해석

3.1 난류 CO/H₂/N₂ 제트 확산화염

개발된 CMC 모델의 타당성을 검증하기 위하여 일차적으로 난류 CO/H₂/N₂-공기 확산 제트 화염장에 대하여 정상 화염편 모델(SFM)과 비정상 화염편 모델인 LFM과 예측특성을 비교하였다.⁽¹³⁾ 연료 조성은 CO/H₂/N₂ 혼합물로서 각각 40%/30%/30%의 몰 조성비를 갖으며, 평균속도 76m/s로 직경 4.58mm의 노즐을 통해 분출된다. 주위 공기유동은 0.75m/s로 균일하게 유지되었다. 앞서 논의되었듯이 레이놀즈수가 큰 축대칭 제트 화염의 경우에 CMC 방정식에서 난류확산항의 영향이 무시될 수 있으며 반경방향에 따른 조건평균 값들의 영향이 작다는 가정으로부터 일반 CMC 방정식 (2)은 아래와 같이 단순화 되어진다.

$$\bar{v} \frac{\partial Q}{\partial x} = W + N \frac{\partial^2 Q}{\partial r^2} \quad (12)$$

여기에서 앞서 설명되었듯이 조건평균 속도와 스칼라 소산율은 반경방향에 대한 조건평균치를 적용하였다. 위와 같은 단순화된 1차원 CMC 모델은 비정상 화염편 모델인 LFM과 동일한 형태를 취하고 있다. 그러나 LFM은 반경방향에 대하여 또는 혼합분을 샘플 공간에 대하여 동일한 체류시간이 적용되며 동일한 화학당론적 조건평균 스칼라 소산율이 가정되어진다. 식 (9)의 비정상항과 식 (12)의 왼쪽 편에 위치한 대류항은 1차원 문제인 경우에는 비정상항으로 표현되어질 수 있기 있으며 두 모델에 대한 주요한 차를 다음 관계식으로 설명되어질 수 있다.⁽¹⁰⁾

$$\left[\frac{\partial \langle Q \eta \rangle}{\partial t} \right]_{FM} \neq \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \eta \right\rangle_{CMC} \quad (13)$$

본 해석에서 CMC 모델과 LFM 해석은 동일하게 후처리 과정으로 수행되었으며 혼합-유동장은 SFM 그리고 복사 열손실을 고려하기 위하여 유한체적법 복사모델과 얇은 광학두께 가정이 적용되었다. 유동해석을 위해서 제트 유동의 spreading rate을 고려한 Pope의 수정모델을 표준 k-ε 모델에 추가로 적용하였다.⁽¹⁴⁾ CMC 모델에서 조건평균을 위해 보존 스칼라인 질량분을 샘플 공간은 45개로 구분되었다. LFM과 CMC 모델 계산에서 복사영향을 고려하기 위하여 얇은 광학두께 가정이 적용되었다.

본 연구에서는 Warnatz에 의한 CO/H₂ 화학 반응 메카니즘에 대하여 13개의 화학종(H₂, O₂, H₂O, O, H, OH, HO₂, H₂O₂, CO, CO₂, CHO, CH₂O, N₂)과 36개의 반응식을 사용하였다.⁽¹⁵⁾ 상세 화학반응을 고려한 질소산화물 생성율을 예측하기 위하여 열적 그리고 nitrous 경로를 포함하고 있는 66개의 비가역 반응과 9개의 추가 화학종(NO, N, NO₂, NH₃, NH₂, NH, HNO, N₂H, N₂O)

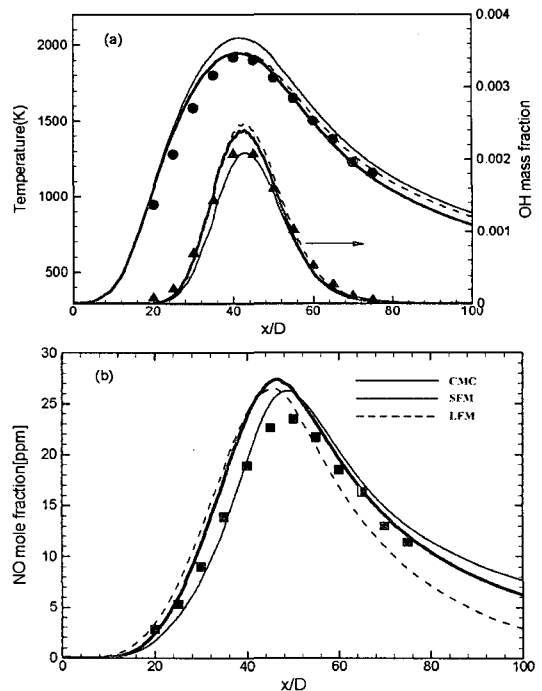


Fig. 1 Axial profiles of (a) temperature and OH mole fraction, (b) NO mole fraction (Symbol: measurement, Line: Prediction)

들이 고려되었다. 사용된 상세 질소화합물 화학반응 메카니즘은 Hewson에 의해 탄화수소계 연료에 대한 질소산화물 생성 상세반응 메카니즘의 일부이다.⁽¹⁶⁾

Fig. 1에 세 가지 난류연소모델들의 결과들을 실험치와 비교하였다 Fig. 1(a)의 결과로부터 복사효과로 인해 세 모델 모두 각각 다른 온도분포를 예측하고 있으나 OH 화학종에 대하여 LFM과 CMC 모델이 비평형 화학반응에 대한 동일한 예측능력을 가지고 있으며, 실험치와 유사하게 나타나고 있음을 확인할 수 있다. 느린 화학반응인 NO 생성에 대한 예측능력을 확인하기 위하여 Hewson의 상세 질소산화물 화학반응을 고려하였으며 이에 대한 결과는 Fig. 1(b)에 나타내었다. SFM의 경우에는 후처리 과정을 통해 열적 질소산화물 생성만을 고려하였다. LFM과 CMC 모델 모두 열적 질소산화물만을 고려한 후처리 과정의 예측치 보다 상류 측에서는 크게 예측되고 있으며 하류 측에서는 낮게 예측되고 있다. 난류 H₂/N₂ 확산 화염에 대한 Pitsch의 연구결과에 의하면 추가적인 질소산화물 생성경로의 존재로 열적 질소산화물만 고려한 후처리 방법의 예측치보다 상세 질소산화물 화학반응을 고려한 LFM의 결과가 더 높게 예측되며 이는 상류 측에 NO 예측결과에서 같은 경향을 보여주고 있다.⁽¹¹⁾ 그러나 해석된 CO/H₂/N₂ 화염장은 복사영향이 하류로 갈수록 크게 나타남을 추방향 온도예측결과로부터 확인할 수 있으며 이에 따라 LFM과 CMC 모델의 경우에 모두 SFM의 결과보다 낮게 예측되고 있다. 이러한 결과는 LFM을 이용한 Kim의 해석결과와도 일치한다.⁽¹⁷⁾ 온도분포에서 CMC 모델이 LFM보다 하류 측으로 갈수록 다소 낮게 예측되며 NO의 경우에는 온도분포의 영향으로 다소 높게 예측됨을 확인할 수 있다. 난류 제트 화염에서는 하류 쪽으로 갈수록 스칼라 소산율이 급격하게 감소하게 되어 거의 화학평형상태에 도달하게 되므로 이 영역에서는 두 모델 모두에 대하여 스칼라 소산율의 영향이 거의 존재하지 않게 된다. 따라서 CMC 모델의 경우에 LFM의 결과보다 낮은 온도분포와 높은 NO 농도가 예측된 원인은 반경방향에 대해 조건평균된 속도분포를 적용한 결과로 해석되어 진다. LFM의 경우에는 반경방향 화학당론적 위치의 추방향 속도로 고정된 조건평균 속도가 사용되기 때문에 보다 상대적으로

작은 체류시간을 갖게 되며 이로 인하여 복사영향이 CMC 모델의 경우보다 약하게 나타남을 알 수 있다. 이는 식 (13)에 나타내었듯이 LFM과 CMC의 조건평균 비정상항에 대한 두 난류 연소 모델의 모델링 특성으로 설명되어질 수 있다.

3.2 난류 H₂/CO bluff-body 화염

상세 실험결과와 비교할 수 있는 bluff-body에 의해 안정된 H₂/CO-공기 화염장에 대해 비정렬 격자계 유한체적법을 이용하여 개발된 일반 CMC 모델을 적용하였다.⁽¹⁸⁾ 사용된 버너구조는 50mm의 bluff-body와 직경 3.6mm의 연료출구가 중심부에 위치하고 있다. 연료는 H₂/CO가 부피비로 1:1로 조성되어있으며 연료분출속도는 134m/s로 화염날림 속도의 약 18%에 해당된다. 주위 공기는 40m/s로 고정되어있다. 유동과 질량혼합장에 대한 예측성을 향상시키기 위하여 표준 k-ε 모델 상수인 C_{ε1}를 1.44에서 1.67로 수정하였다. 유동장 해석을 위하여 13,102개의 삼각형 격자계를 적용하였으며 재순환 영역내에 집중적으로 배치되었다.⁽¹⁹⁾ CMC 모델은 보존 스칼라(혼합분율) 공간에 대한 추가적인 좌표가 존재함으로 인해 현 연구에서는 CMC 계산영역에 2,873개의 삼각형 격자를 적용하여 수치 계산적 어려움을 완화시켰다. 그리고 혼합분율 좌표는 45개로 구분되어졌다. 이러한 체적평균 CMC 방정식은 다차원 복잡형상 시스템에 적용하는데 더욱 유용하며 또한 느린 화학반응인 질소산화물과 매연을 계산하는데 효과적으로 적용되어질 수 있다.

Fig. 2은 bluff-body 버너에 대한 예측된 유동구조를 나타내고 있으며 크게 재순환 영역, 화염목 영역, 그리고 제트화염 형태의 후류영역인 세 영역으로 구분되어진다. Bluff-Body로 인한 재순환 영역내에는 두개의 재순환 구조가 존재하고 있음을 알 수 있다. 점선으로 표시된 예측된 화학당론적 혼합분율 분포선으로부터 내부 재순환 구조가 연료질량을 외부 재순환 영역으로 전달하는데

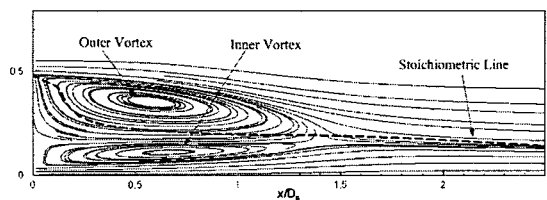


Fig. 2 Predicted streamline for the bluff-body flame

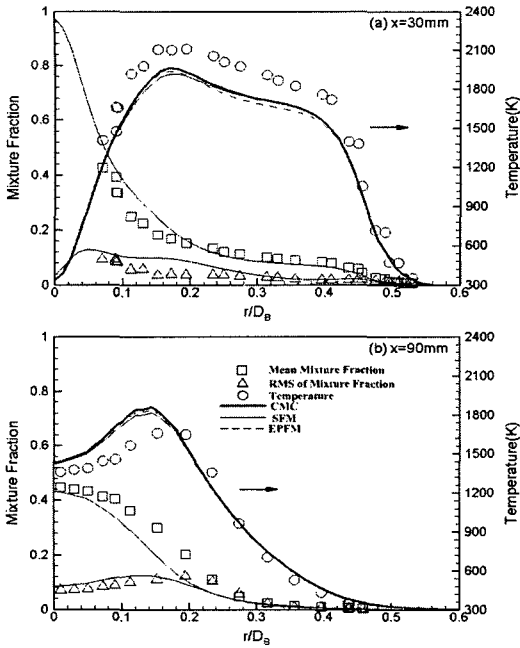


Fig. 3 Radial profiles of mean and rms of mixture fraction and temperature (Symbol: measurement, Line: Prediction)

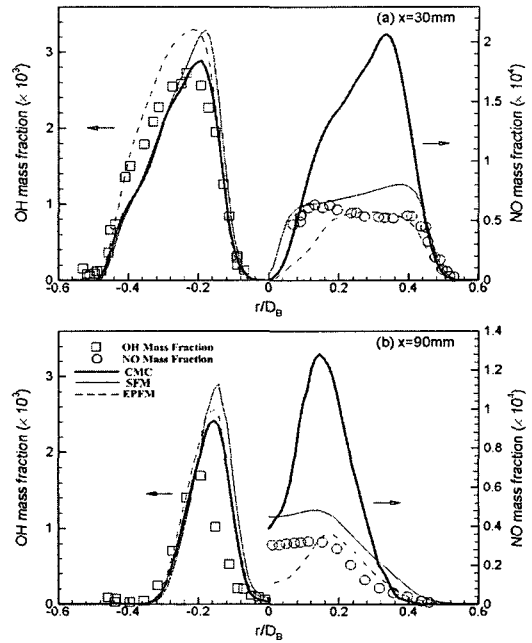


Fig. 5 Radial profiles of OH and NO mass fractions (Symbol: measurement, Line: Prediction)

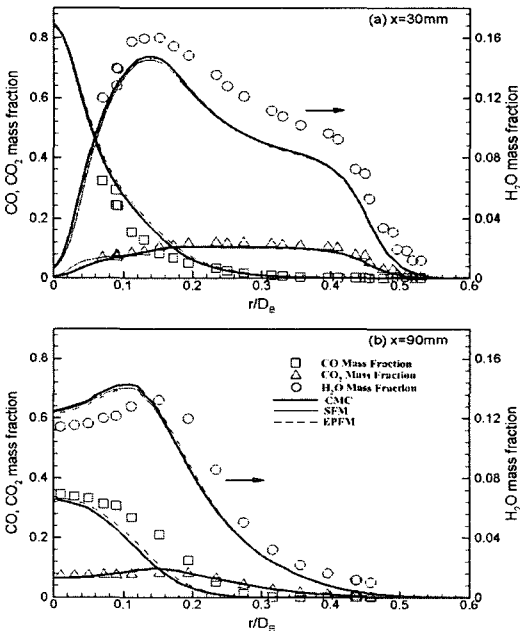


Fig. 4 Radial profiles of major species (CO, CO₂, H₂O) mass fractions (Symbol: measurement, Line: Prediction)

중요한 역할을 담당하고 있음을 알 수 있다. Fig. 3에서 서로 다른 축방향 위치에 대하여 혼합분율의 평균과 변동치에 대한 반경방향 결과들을 예시하였다. 수정된 $k-\epsilon$ 유동모델을 적용하였으나 예측치와 계측치간의 차가 존재함을 확인할 수 있다. 또한 서로 다른 연소모델에 의한 온도 예측치도 같이 실험치와 비교되었다. 예측된 온도 분포에 있어서 미미한 차이는 본 연구에 적용된 CMC 모델과 EPFM에 대한 후처리 해석접근법의 타당성을 인식시켜 준다. 본 해석에 사용된 펜티엄 4 3GHz급 컴퓨터에 대하여 EPFM과 CMC 모델의 해석시간은 각각 약 3시간과 15일정도로 많이 차가 존재하였다. CMC 모델의 해석시간 중 대부분은 조건평균 반응율을 구하기 위한 stiff ODE 방정식을 해석하는데 요구되었다. 축방향 위치에 대한 주 화학종 농도에 대한 결과비교를 Fig. 4에 나타내었다. 세 연소모델간의 예측치의 차가 미미하게 나타나고 있으며, 실험결과를 정성적 그리고 정량적으로 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. 실험치와의 주오차 원인은 $k-\epsilon$ 모델의 혼합-유동장 예측능력의 한계로 판단되어 진다. 그러나 난류 CO/H₂/N₂-공기 제트 화염장 해석결과와는 달리 OH와 특히 NO에 대한 세 가지 연

소모델의 예측특성은 Fig. 5에 나타내었듯이 확연한 차를 보여주고 있다. 앞서 예시된 제트 화염장의 경우와 마찬가지로 NO 생성율의 느린 화학반응 특성으로 인해 SFM의 경우에는 열적 질소산화물만을 고려한 후처리 과정을 통해 NO가 예측되었다. 현재 예시된 축방향 위치에 대한 OH 및 NO 예측특성을 살펴보면 EPFM의 경우 재순환 영역 내에서 타 연소모델들에 비해 과대 예측되며 하류로 갈수록 세 모델들은 모두 비슷한 OH 예측성능을 보여주고 있으며 NO의 경우에는 모든 결과에서 확연히 다른 예측특성을 나타내고 있다. EPFM의 경우에는 열적 질소산화물만 고려된 SFM의 경우보다 오히려 낮은 예측치를 보여주고 있다. 이러한 상세 질소산화물 화학반응을 고려한 비정상 화염편의 NO 예측 결과는 Pitsch의 난류 H_2/N_2 확산화염 해석의 결과와 본 연구에서 해석된 $CO/H_2/N_2$ -공기 난류 화염 해석 결과와도 상반되는 경우로써 재순환 영역내 긴 체류시간으로 인한 복사 열전달 효과가 크게 나타난 원인으로 판단된다. 이에 비해 CMC 모델의 경우에는 SFM의 열적 질소산화물 예측치보다 높게 예측하고 있으나 실험치에 비해 과도하게 예측함을 확인할 수 있다. Fairweather *et al*은 난류 비예혼합 H_2 , H_2/He 화염장들에 대한 NO 생성특성을 예측하기 위한 CMC 모델에 대해 다양한 해석을 수행하였다.⁽²⁰⁾ 그의 연구결과에 따르면 정확한 NO 생성특성을 예측하기 위해서는 가정된 PDF 형태와 반경방향에 따른 체적평균 조건평균량들의 적용특성에 대한 연구가 요구됨이 확인되었다. 또한 2차 근사 화학반응 영향과 분자 확산의 효과 또한 정확한 NO의 예측정도에 중요하게 고려되어야 함이 설명되었다. 이에 추가적으로 Kim은 CH_4/H_2 bluff-body 화염장(HM1)에 대한 CMC 모델의 NO 생성특성 예측에 있어서 상세 화학반응 메커니즘에 따라 주 화학종에 대한 예측치가 같더라도 서로 다른 NO 생성특성이 예측됨을 확인하였다.⁽²¹⁾

질량 평균된 수치결과들보다 조건평균 예측치들은 화염구조 해석을 위한 유용한 정보를 제공할 수 있다. Fig. 6에 주어진 축방향 위치에 따른 반경방향의 화학당론적 위치내의 조건평균 OH 질량분율들에 대하여 각 연소모델들과 실험치가 서로 비교되었다. OH의 예측결과에 대해 모든 경우에 대해 EPFM의 예측치가 다소 높게 나타나

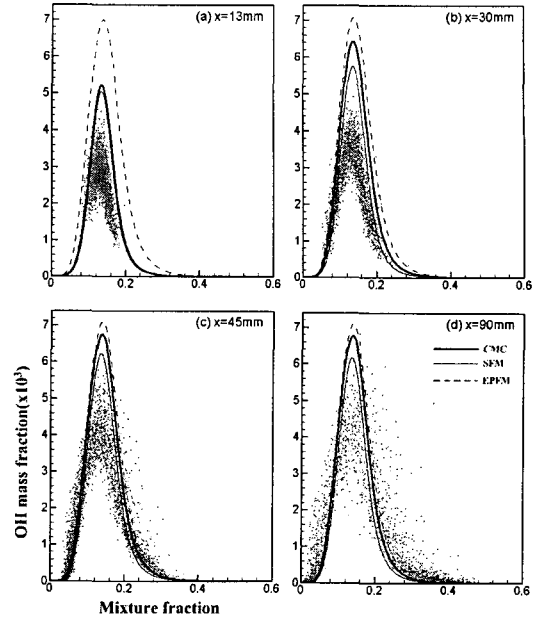


Fig. 6 Comparison of measured and predicted conditional OH mass fraction at near stoichiometric positions of different axial locations

고 있으며 CMC 모델의 경우에는 실험치와 정성적, 정량적으로 약간 개선된 결과를 나타내고 있다. SFM의 경우에는 화학당론적 스칼라 소산율에 대해 화염편 라이브리리 결과를 적용하였다. EPFM 해석에서는 6개의 대표 입자들이 적용되었으며 재순환영역내에서 넓은 영역내에 대표 입자들이 분포함으로 인해 국부적인 화염특성을 예측하는데 한계를 가지고 있음을 보여주고 있다.

4. 결론

본 논문에서는 일반적인 비예혼합 연소 시스템에 적용 가능한 비정렬 격자계 유동 모델과 결합된 CMC 모델 개발과 예측특성에 대한 연구를 수행하였다. 기존의 난류 연소모델인 화염편 모델들에 대한 예측 결과를 비교함으로써 현 CMC 모델의 적용가능성과 예측능력을 확인할 수 있었다. 난류 $CO/H_2/N_2$ -공기 제트 화염장에 대한 비정상 화염편 모델인 LFM과의 결과비교를 통해 CMC 모델 검증과 예측성능을 체계적으로 검증하였다.

재순환 영역이 존재하는 H_2/CO bluff-body 화염

장에 대해 상세 질소산화물 화학반응을 고려한 CMC 모델을 적용하여 SFM과 비정상 화염편 모델인 EPFM들과 예측능력을 비교하였으며 현 연구에서 개발된 CMC 모델의 수치 안정성과 조건 평균 실험결과에 대해 CMC 모델의 국부 화염구조 예측능력을 검증하였다. 추가적으로 예측능력의 개선을 위하여 CMC 모델 연구가 지속적으로 수행되어야 함을 확인하였다.

후 기

이 연구(논문)는 과학기술부 지원으로 수행하는 21세기 프론티어 사업(이산화탄소 저감 및 처리 기술개발)의 일환으로 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) Klimenko, A. Y. and Bilger, R. W., 1999, "Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 25, pp. 595~687.
- (2) Kim, S. H., Huh, K. Y. and Liu, T., 2000, "Application of the Elliptic Conditional Moment Closure Model to a Two-Dimensional Nonpremixed Methanol Bluff-Body Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 120, pp. 75~90.
- (3) Cleary, M. J. and Kent, J. H., 2003, "A Numerical Method for Conditional Moment Closure," *Australian Symposium on Combustion*.
- (4) O'Brien, E. E. and Jiang, T. L., 1991, "The Conditional Dissipation Rate of an Initially Binary Scalar in Homogenous Turbulence," *Phys. Fluids*, A3 (12), pp. 3121~3123.
- (5) Coelho, P. J., Teerling, O. J. and Roekaerts, D., 2003, "Spectral Radiative Effects and Turbulence/Radiation Interaction in a Non-Luminous Turbulent Jet Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, Vol. 133, pp. 75~91.
- (6) <http://www.ca.sandia.gov/TNF/radiation.html>.
- (7) Smith, T. F., Shen, Z. F. and Friedman, J. N., 1982, "Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model," *ASME J. Heat Transfer*, Vol. 104, pp. 602~608.
- (8) Murthy, J. Y. and Mathur, S. R., 1998, "Radiative Heat Transfer in Axisymmetric Geometries Using an Unstructured Finite-Volume-Method," *Numerical Heat Transfer(B)*, Vol. 33, pp. 397~416.
- (9) Peters, N., 2000, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, Cambridge.
- (10) Klimenko, A. Y., 2001, "On the Relation Between the Conditional Moment Closure and Unsteady Flamelets," *Combust. Theory Modelling*, Vol. 5, pp. 275~294.
- (11) Pitsch, H., Chen, M. and Peters, N., 1998, "Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames," *27th Int. Symp. on Combustion* (Pittsburgh, PA: Combustion Institute), pp. 1057~1064.
- (12) Barths, H., Peters, N., Brehm, N., Mack, A., Pfitzner, M. and Smiljanovski, V., 1998, "Simulation of Pollutant Formation in a Gas-Turbine Combustor Using Unsteady Flamelets," *27th Int. Symp. on Combustion* (Pittsburgh, PA: Combustion Institute), pp. 1841~1847.
- (13) Barlow, R. S., Fiechtner, G. J., Carter, C. D. and Flury, M., 1998, "Sandia/ETH-Zurich CO/H₂/N₂ Flame Data-Release1.0," available on the web at <http://www.ca.sandia.gov/TNF>.
- (14) Pope, S. B., 1978, "An Explanation of the Turbulent Round Jet/Plane Jet Anomaly," *AIAA Journal*, Vol. 16, pp. 279~281.
- (15) Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R. W., 2001, *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- (16) Hewson, J. C., 1997, "Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames," *PhD Thesis, University of California*, San Diego.
- (17) Kim, S. K., Kang, S. M. and Kim, Y. M., 2001, "Flamelet Modeling for Combustion Processes and NO_x Formation in the Turbulent Nonpremixed CO/H₂/N₂ Jet Flames," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 168, pp. 47~83.
- (18) Dally, B. B., Masri, A. R., Barlow, R. S. and Fiechtner, G. J., 1998, "Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilised Nonpremixed Flames," *Combustion and Flame*, Vol. 114, pp. 119~148 and the experimental data are available on the web at <http://www.mech.eng.usyd.edu.au/thermofluids/>.

- (19) Kang, S. M. and Kim, Y. M., 2002, "Pressure- based Unstructured-Grid Finite-Volume Method for Simulating Laminar Reacting Flows," *Numerical Heat Transfer(B)*, Vol. 41, pp. 53~72.
- (20) Fairweather, M. and Woolley, R. M., 2003, "First-Order Conditional Moment Closure Modeling of Turbulent, Nonpremixed Hydrogen Flames," *Combustion and Flame*, Vol. 133, pp. 393~405.
- (21) Kim, S. H., 2003, "Modeling of Turbulent Nonpremixed Flames by the Conditional Moment Closure Method," *PhD Thesis, Pohang Univerisy of Science and Technology, Korea.*