

< 논문 >

예조건화 기법을 이용한 층류 및 난류 화학반응 유동장 해석

송봉하[†] · 김교순^{*} · 최윤호^{**} · 이병옥^{***}

(2005년 10월 26일 접수, 2006년 3월 2일 심사완료)

Numerical Simulation of Chemically Reacting Laminar and Turbulent Flowfields Using Preconditioning Scheme

Bong-Ha Song, Gyo-Soon Kim, Yun-Ho Choi, Byung-Ohk Rhee

Key Words : Preconditioning Scheme(예조건화 기법), Chemically Reacting Flow(화학반응 유동), Turbulent Flow(난류 유동), Fluids-turbulence System(유동-난류시스템), Multi-species Equation(다화학종 방정식), Upwind Difference(풍상차분), Singularity(특이성)

Abstract

The computations of chemically reacting laminar and turbulent flows are performed using the preconditioned Navier-Stokes solver coupled with turbulent transport and multi-species equations. A low-Reynolds number $k-\epsilon$ turbulence model proposed by Chien is used. The presence of the turbulent kinetic energy term in the momentum equation can materially affect the overall stability of the fluids-turbulence system. Because of this coupling effect, a fully coupled formulation is desirable and this approach is taken in the present study. Choi and Merkle's preconditioning technique is used to overcome the convergence difficulties occurred at low speed flows. The numerical scheme used for the present study is based on the implicit upwind ADI algorithm and is validated through the comparisons of computational and experimental results for laminar methane-air diffusion flame and H_2/O_2 reacting turbulent shear flow. Preconditioning formulation shows better convergence characteristics than that of non-preconditioned system by approximately five times as much.

1. 서론

시간전진기법은 현재 압축성유동을 해석하는 가장 적합한 전산해석기법으로 알려져 있다. 그러나 이와 같은 시간전진기법은 Mach수가 큰 고속유동과 고 Re수 유동 해석에는 적합하지만, Mach수가 작은 저속유동과 저 Re수 유동 해석에서는 수렴성이 저하되는 단점이 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해 다양한 예조건화 기법이 개발되었으며 현재 많은 공학분야의 계산에 널리 사용되고 있다.⁽¹⁻³⁾

비압축성 Euler 방정식에서는 밀도가 상수이므로 밀도를 시간 미분하면 연속방정식이 사라져 시간전진 시스템에 특이성(singularity)이 발생한다. 즉 해에서 압력을 갱신할 방법이 없어진다.

Chorin⁽⁴⁾에 의해 개발된 최초의 예조건화 기법은 비압축성 Euler 방정식의 연속방정식에 가상 압축성 변수로 알려진 압력의 시간 미분항을 추가하여 이러한 문제를 해결하였다. 이후 Turkel⁽⁵⁾은 운동량 방정식에도 압력 미분항을 추가해 비압축성 시스템을 비롯해 압축성 시스템에도 적용이 가능하도록 Chorin의 기법을 체계적으로 확장하였다. Choi와 Merkle⁽⁶⁾은 저 Mach수 영역에 국한되어 있던 그들의 초기 예조건화 시스템을 전 Mach수 영역으로 확장하였다. 이를 위해 에너지 방정식의 종속변수로 엔트로피를 사용하는 Turkel의 예조건화 시스템과 달리 Choi와 Merkle의 경우 종속변수로 온도를 사용하였다. 또한 Choi와 Merkle은 Navier-Stokes 방정식에서 저 Re수 유동의 계산성을 개선하기 위하여 파동시간 스케일(CFL)과 확산시간 스케일(VNN)을 동시에 최적화시키는 새로운 스케일링 변수를 도입하였다.

실질적인 공학계산에서는 실제기체, 다원 화학종, 화학반응, 난류, 플라즈마, 그리고 기/액체 상태 등과 같은 복잡한 물리현상이 포함되어 있다. 이러한 문제들의 대부분은 저속, 강한 확산효과와 비정상

[†] 책임저자, 회원, 아주대학교 대학원 기계공학과

^{*} 아주대학교 대학원 기계공학과

^{**} 회원, 아주대학교 기계공학부

E-mail: ychoi@ajou.ac.kr

TEL: (031)219-2346 FAX: (031)213-7108

^{***} 회원, 아주대학교 기계공학부

상태라는 특징을 가지므로 예조건화 기법은 이러한 유동을 해석할 수 있는 강건하고 수렴성이 좋은 CFD 알고리즘을 만드는 초석이 된다.⁽⁷⁻¹⁰⁾

본 연구에서는 저속의 층류 및 난류 화학반응 유동장을 해석하기 위하여 난류 수송방정식과 다원 화학종 방정식이 연계된 Navier-Stokes 방정식에 Choi와 Merkle⁽⁶⁾의 예조건화 기법을 적용하였다. 본 수치기법의 타당성을 검증하기 위하여 Mitchell 등⁽¹¹⁾의 층류 메탄-공기 확산화염과 Chang 등⁽¹²⁾의 난류 수소-공기 반응 전단유동을 계산하여 그 계산결과를 실험결과와 비교하였으며, 또한 예조건화 기법의 사용 여부에 따른 수렴특성 향상 정도를 비교하였다.

2. 지배방정식

난류 및 화학반응 유동장을 표현하는 Reynolds-Averaged Navier-Stokes 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = H + L(Q_p) \quad (1)$$

$$L = \frac{\partial}{\partial x} \left(R_{xx} \frac{\partial}{\partial x} + R_{xy} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(R_{yx} \frac{\partial}{\partial x} + R_{yy} \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

여기서 Q 는 종속변수벡터, E , F 는 보존형 플럭스벡터, H 는 난류 및 화학반응에 의한 생성항, $L(Q_p)$ 는 점성연산자(L)를 이용하여 점성항을 표현한 것이며, R_{ij} 는 점성항 계수들로 이루어지는 행렬이다.⁽⁶⁾ 비반응 및 반응 유동해석에 많이 사용되는 2 방정식 $k-\epsilon$ 난류모델을 사용하였으며 Chien⁽¹³⁾이 제안한 저 Re수 $k-\epsilon$ 난류모델을 적용하였다. 식 (1)의 구체적인 항은 부록 A와 같다.

현재 대부분의 연구자들은 난류유동을 계산하기 위하여, Navier-Stokes 방정식에서 유동방정식과 난류방정식을 분리하여, 이들 두 방정식에 대한 반복계산을 번갈아 수행함으로써 해를 얻고 있다. 이와 같은 방법의 타당성은 유동방정식에 미치는 난류항의 영향이 주로 난류점성의 정의를 통해서 이루어진다는 데 있다. 즉, 대부분의 CFD 알고리즘은 선형화 과정을 통하여 n 시간단계에서 점성계수를 처리하게 되고, 따라서 계산과정에 시간차가 어쨌든 발생하므로 완전 결합된 시스템을 사용하는 해석방법은 큰 이점이 없다고 주장된다.

이와 같은 주장의 문제점은 운동방정식의 압력구배에 나타나는 난류 운동에너지 항의 영향을 무시하는 데 있다 (부록 A 참조). 즉 난류 운동에너지가 열역학적 압력에 비해 매우 작다고 가정하는 데 있다. 물론 일부 특정한 유동에는 이 항을 무시해도 안정성에 큰 영향을 미치지 않는다. 그러나 일반적으로 한 변수 구배의 크기는 변수의 크기와는 매우 다르므로, 난류 운동에너지와 압력의

상대적인 크기가 아니라, 이들 각각의 구배를 비교하는 것이 타당하다. 예를 들어 저속에서 압력구배는 ρu^2 에 비례한다. 이때 난류 운동에너지의 구배는 실제 압력구배와 같은 차수이거나 더 커질 수 있으므로, 운동방정식에서 난류 운동에너지 항의 존재는 유동-난류시스템의 전체적인 안정성에 영향을 미칠 수 있다.

그러므로 본 연구에서는 유동방정식과 난류방정식이 완전 결합된 방법을 사용하였다. 난류 운동에너지 항의 또 다른 영향은 시스템의 고유값을 변화시키는 점이며, 이는 음속의 정의를 $c_t = \sqrt{\gamma R T} = \sqrt{\gamma(R + \frac{2}{3} \frac{k}{T}) T}$ (k = 난류운동에너지)로 수정하여 표현함으로써 그 영향을 쉽게 나타낼 수 있다. 천음속 유동의 경우 음속의 수정분이 작으므로 수정된 음속이 알고리즘의 성능에는 영향을 미치지 않는다. 그러나 시스템이 예조건화 되었을 때 물리적인 음속은 입자속도와 같은 차수의 가상 음속으로 교체되므로, 난류 운동에너지 항이 시스템에 미치는 영향이 크게 된다.

식 (1)은 Mach수와 Re수에 따라 그 크기가 달라지는 파동 및 점성확산의 두 가지 시간 스케일을 포함하고 있으므로, Mach수가 매우 작은 유동의 경우 음속은 유체의 대류속도보다 훨씬 커지게 된다. 이때 시간스케일에 발생한 불균형을 해소하고 수치 알고리즘의 강직성을 완화시켜 서로 다른 물리현상이 비슷한 비율로 진행될 수 있도록 하기 위해 시간항을 다음과 같이 예조건화 시킨다(참고 문헌 6 참조).

$$\Gamma_p \frac{\partial Q_p}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = H + L(Q_p) \quad (2)$$

$$\Gamma_p = \begin{pmatrix} \rho'_p & 0 & 0 & \rho_T & 0 & 0 & \rho Y_j \\ u\rho'_p & \rho & 0 & u\rho_T & 0 & 0 & u\rho Y_j \\ v\rho'_p & 0 & \rho & v\rho_T & 0 & 0 & v\rho Y_j \\ \left(\begin{matrix} h_0\rho'_p \\ -(1-\rho h_p) \end{matrix} \right) & \rho u & \rho v & \left(\begin{matrix} h_0\rho_T \\ +\rho h_T \end{matrix} \right) & \rho & 0 & \left(\begin{matrix} h_0\rho Y_j \\ +\rho h Y_j \end{matrix} \right) \\ k\rho'_p & 0 & 0 & k\rho_T & \rho & 0 & k\rho Y_j \\ \epsilon\rho'_p & 0 & 0 & \epsilon\rho_T & 0 & \rho & \epsilon\rho Y_j \\ Y_i\rho'_p & 0 & 0 & Y_i\rho_T & Y_i\rho_k & 0 & \left(\begin{matrix} Y_i\rho Y_j \\ +\rho\delta_{ij} \end{matrix} \right) \end{pmatrix} \quad (3)$$

식 (1)의 시간항에 $Q = (\rho, pu, pv, e, \rho k, \rho \epsilon, \rho Y_i)^T$ 로 표현된 종속변수벡터 대신 $Q_p = (p, u, v, T, k, \epsilon, Y_i)^T$ 로 주어지는 원시변수 벡터를 사용해 식 (1)을 예조건화시킨 것이 식 (2)이다. 여기서 Γ_p 는 예조건화 행렬이다.

식 (2)와 같은 간단한 예조건화 방법은 난류유동 해석에 효과적인 방법이 아니다. 그 이유는 압력구배항에 난류 운동에너지가 존재하기 때문이다

완전 결합된 유동-난류 시스템에서 압력구배항이 난류 운동에너지항을 포함하고 있을 때, 시스템의 고유값이 허수가 되는 새로운 문제가 발생한다. 따라서 현재의 시스템은 더 이상 쌍곡선형 방정식이 아니므로, 시간전진기법에 적합하지 않게 되며 해가 발산할 뿐만 아니라 특성곡선에 기초한 풍상차분 기법의 수식화 및 경계조건 지정을 어렵게 한다.

이와 같은 문제점을 해결하여 예조건화식을 난류 시스템에 맞게 수정하기 위하여 다음과 같은 변수의 간단한 변형을 고려한다. 즉 유동 및 난류 방정식이 완전 결합된 시스템에서 $(\partial\rho/\partial p)^{1/2}$ 는 더 이상 실질적인 음속을 의미하지 않는다는 사실을 바탕으로, 음속을 $(\partial\rho/\partial p_i)^{1/2}$ 와 같이 난류압력의 미분항으로 변경하여 실질적인 음속을 정의할 수 있다. 여기서 새로운 변수 p_i 는 난류압력을 의미하며 $p_i = p + \frac{2}{3}\rho k$ 로 정의된다.

ρ_p 가 아닌 난류압력에 의한 미분항 $(\partial\rho/\partial p_i)$ 과 새로운 원시변수 벡터 $\tilde{Q}_p = (p_i, u, v, T, k, \epsilon, Y_i)^T$ 에 기초하여 예조건화 행렬을 재정의한 다음, 새로운 변수 $\tilde{\rho}_p = (\partial\rho/\partial p_i)$ 를 예조건화 매개변수 $\tilde{\rho}'_p$ 로 치환하여 식 (2)를 다시 쓰면 다음과 같은 예조건화 방정식을 구할 수 있다.

$$\tilde{\Gamma}_p \frac{\partial \tilde{Q}_p}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = H + L(Q_p) \tag{4}$$

$$\tilde{\Gamma}_p = \begin{pmatrix} \tilde{\rho}'_p & 0 & 0 & \tilde{\rho}'_T & \tilde{\rho}'_k & 0 & \tilde{\rho}'_{Y_i} \\ u\tilde{\rho}'_p & \rho & 0 & u\tilde{\rho}'_T & u\tilde{\rho}'_k & 0 & u\tilde{\rho}'_{Y_i} \\ v\tilde{\rho}'_p & 0 & \rho & v\tilde{\rho}'_T & v\tilde{\rho}'_k & 0 & v\tilde{\rho}'_{Y_i} \\ \left(\begin{matrix} h_0\tilde{\rho}'_p \\ -(1-\rho\tilde{h}_p) \end{matrix} \right) & \rho u & \rho v & \left(\begin{matrix} h_0\tilde{\rho}'_T \\ +\rho\tilde{h}_T \end{matrix} \right) & \left(\begin{matrix} \frac{5}{3}\rho + \rho\tilde{h}_k \\ +h_0\tilde{\rho}'_k \end{matrix} \right) & 0 & \left(\begin{matrix} h_0\tilde{\rho}'_{Y_i} \\ +\rho\tilde{h}_{Y_i} \end{matrix} \right) \\ k\tilde{\rho}'_p & 0 & 0 & k\tilde{\rho}'_T & \rho + k\tilde{\rho}'_k & 0 & k\tilde{\rho}'_{Y_i} \\ \epsilon\tilde{\rho}'_p & 0 & 0 & \epsilon\tilde{\rho}'_T & \epsilon\tilde{\rho}'_k & \rho & \epsilon\tilde{\rho}'_{Y_i} \\ Y_i\tilde{\rho}'_p & 0 & 0 & Y_i\tilde{\rho}'_T & Y_i\tilde{\rho}'_k & 0 & \left(\begin{matrix} Y_i\tilde{\rho}'_{Y_j} \\ +\rho\delta_{ij} \end{matrix} \right) \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\tilde{\rho}'_p = \varphi\rho'_p, \tilde{\rho}'_T = \varphi\rho'_T, \tilde{\rho}'_k = -\frac{2}{3}\varphi\rho'_p$$

$$\tilde{h}_p = \varphi h_p, \tilde{h}_T = h_T - \frac{2}{3}\varphi k\rho'_T h_p, \tilde{h}_k = -\frac{2}{3}\varphi\rho h_p$$

$$\tilde{\rho}'_{Y_i} = \varphi\rho'_{Y_i}, \tilde{h}_{Y_i} = \varphi h_{Y_i}$$

여기서 $\varphi = 1/(1 + \frac{2}{3}k\rho_p)$ 이며 난류압력 p_i 는 난류 운동에너지의 함수이므로 $\tilde{\rho}'_k$ 와 \tilde{h}_k 는 0이 아니다. 식 (4)의 예조건화 시스템의 모든 고유값은 실수이다.

3. 수치해석 기법

식 (4)에 대한 근사 분해하지 않은 완전 내재적 Navier-Stokes 방정식은 다음 식으로 간단히 표현할 수 있다.

$$[D + T_1 + T_2]\Delta Q_p = -\Delta t R^n \tag{6}$$

여기서 $\Delta Q_p = Q_p^{n+1} - Q_p^n$ 이며 D, T_1 과 T_2 는 Jacobi 또는 Gauss-Seidel 등의 반복 알고리즘을 사용할 때 내재변이 분해된 항들을 나타내며 R^n 은 정상상태 지배방정식의 잔여항을 의미한다.

본 연구에서는 내재적 풍상차분 ADI 알고리즘을 기본으로, 시간항의 경우 1차 정확도의 Euler의 내재적기법을 사용하였고, 내재변의 경우 대류항은 1차 정확도의 풍상차분법, 점성항은 2차 정확도의 중심차분법으로 이산화하였다. 외재변의 경우 대류항은 3차 정확도의 편향 풍상차분법 (upwind biased method)을 적용하였으며 점성항에는 2차 정확도의 중심차분법을 적용하였다.

풍상차분을 사용하는 경우 외재변의 행렬이 일반적으로 대각우위 행렬이 되므로 내재변을 근사 분해하는데 다양한 방법이 존재한다. 따라서 식 (6)의 해는 다양한 근사적인 방법을 통해 효과적으로 얻을 수 있다. 본 연구에서는 ADI기법을 이용하여 식 (6)의 내재변을 근사 분해하였으며, 이는 다음과 같다.

$$[D + T_1]D^{-1}[D + T_2]\Delta Q_p = -\Delta t R^n \tag{7}$$

$D + T_1 = N_1, D + T_2 = N_2$ 로 정의하면 식 (7)은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$N_1 D^{-1} N_2 \Delta Q_p = -\Delta t R^n \tag{8}$$

풍상차분 ADI 알고리즘은 대류항을 풍상차분법으로 차분하는 것을 제외하면 본질적으로 중심차분 ADI 알고리즘과 동일하다. ADI 알고리즘은 x방향으로 계산한 후 y방향으로 계산하는 방식이며, 근사 분해된 식 (8)의 각 항은 다음과 같다.^(14,15)

$$D = \Gamma_p \tag{9}$$

$$N_1 = \left[\begin{matrix} \Gamma_p + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\nabla_x A^+ + \Delta_x A^-) - \\ \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (R_{xxi+1/2} \Delta_x - R_{xxi-1/2} \nabla_x) \end{matrix} \right] \tag{10}$$

$$N_2 = \left[\begin{matrix} \Gamma_p + \frac{\Delta t}{\Delta y} (\nabla_y B^+ + \Delta_y B^-) - \\ \frac{\Delta t}{\Delta y^2} (R_{yyj+1/2} \Delta_y - R_{yyj-1/2} \nabla_y) \end{matrix} \right] \tag{11}$$

$$A_i = \frac{\partial E}{\partial Q_p}, \quad A_i^\pm = \frac{1}{2} \left(A_i \pm \Gamma_p \left| \Gamma_p^{-1} A_i \right|_{i \pm 1/2} \right) \quad (12)$$

$$B_j = \frac{\partial F}{\partial Q_p}, \quad B_j^\pm = \frac{1}{2} \left(B_j \pm \Gamma_p \left| \Gamma_p^{-1} B_j \right|_{j \pm 1/2} \right) \quad (13)$$

여기서 $\Delta_x, \Delta_y, \nabla_x, \nabla_y$ 는 각각 x, y방향으로 1차 정확도의 전향차분과 후향차분을 의미한다.

4. 계산결과

4.1 층류 메탄-공기 반응 유동

복잡한 화학반응 유동에서 예조건화 기법의 효용성을 확인하기 위하여 Mitchell 등⁽¹¹⁾의 저 Mach 수 층류 메탄-공기 비예혼합 화염을 해석하였다. Fig. 1은 실험조건을 도시한 것으로 메탄은 반경 0.635cm의 원관에서 4.5cm/s로 분사되고 공기는 반경 2.54cm 원관에서 9.88cm/s로 분사된다. 연료와 산화제 및 원관의 벽온도는 300K로 유지된다. Mach수는 10^{-4} 이며 101×61 개의 격자를 사용하였다.

화학반응 모델로는 6 화학종(CH₄, O₂, CO, CO₂, H₂O, N₂) 2 단계 일반 반응식 모델을 사용하였다.⁽¹⁶⁾ 이 경우 계산초기(약 500 반복회수)에 화염 형성을 용이하게 하기 위하여 입구 부분에 약

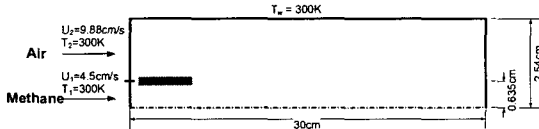


Fig. 1 Schematic of methane-air laminar diffusion flow

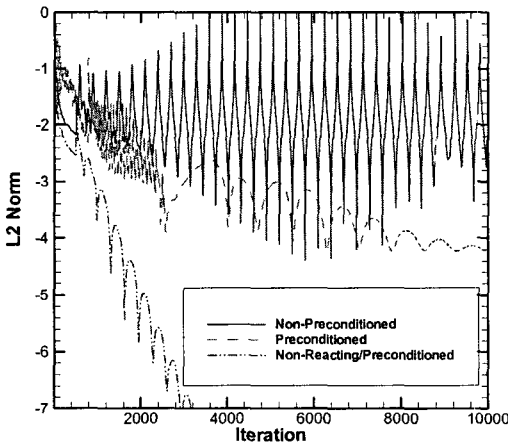


Fig. 2 Comparison of three convergence histories (Reacting non-preconditioned, Reacting preconditioned, Non-reacting preconditioned). For all cases, CFL=5 and VNN=3 are used

2000K의 점화원(Fig. 1의 음영부분)을 두었으며, 불안정한 초기 반응이 수렴특성에 미치는 영향을 최소화하기 위하여 CFL 및 VNN을 1로 설정하였다. 그 이후의 계산단계에서는 점화원을 제거하고 CFL과 VNN을 각각 5와 3으로 증가시켰다.

Fig. 2는 화학반응 유동에 예조건화를 적용한 경우와 아닌 경우 및 화학반응이 없는 일반유동에 예조건화를 적용한 경우에 대해 수렴특성 곡선을 비교한 것이다. 예조건화를 사용한 경우 화학반응 여부에 상관없이 좋은 수렴특성을 보이나, 예조건화를 사용하지 않은 경우는 낮은 유동속도로 인하여 수렴특성이 현저히 떨어지는 것을 볼 수 있다.

Fig. 3은 층류 메탄-공기 유동의 화염온도를 도시한 것이다. 화염형상에 대한 계산결과는 최고온도 2000K, 화염의 길이가 6cm인 실험결과⁽¹¹⁾와 잘 일치한다.

Fig. 4는 하류방향으로 $x=1.2$ cm인 위치에서 사용된 화학종의 반경방향 물분율 변화를 실험결과⁽¹¹⁾와 비교한 것이다. 각 화학종의 정량적 비교에서 발생하는 오차는 사용된 반응메커니즘의 단순성에 기인하는 것으로 판단되며, 이는 2단계 일반 화학반응식을 사용한 경우 발생하는 일반적인 현상이다. 화염의 구조 및 사용된 화학종 물분율의 정성적인 변화는 실험결과를 잘 예측하므로 화학반응 유동장 해석을 위해 본 코드에서 사용한 수치해석 기법은 타당성을 가진다.

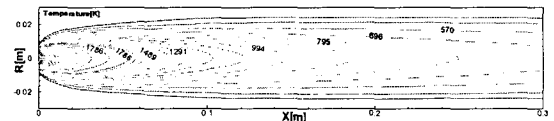


Fig. 3 Temperature contour of methane-air laminar diffusion flame

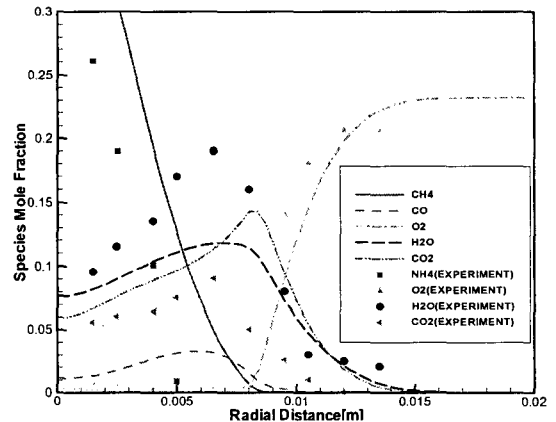


Fig. 4 The variation of species mole fraction in the radial direction at $x=1.2$ cm downstream

4.2 난류 공기-공기 전단유동

난류유동에 적용된 예조건화 기법의 효용성을 확인하기 위하여 Chang 등⁽¹²⁾의 공기-공기 난류 전단유동을 해석하였다. Fig. 5는 실험조건을 도시한 것으로 입구 Mach수는 각각 0.68과 0.4이다. 아랫부분의 공기속도 및 온도는 $U_1=390\text{m/s}$, $T_1=822\text{K}$ 이며 윗부분의 공기속도 및 온도는 $U_2=140\text{m/s}$, $T_2=304.3\text{K}$ 이다. $k-\epsilon$ 난류모델⁽¹³⁾을 사용하였으며 격자수는 81×81 개이며, 두 유동의 혼합층에 격자를 밀집시켜 계산하였다.

Fig. 6은 난류 전단유동 계산에서 예조건화 기법의 사용여부에 따른 수렴특성을 도시한 것으로, 예조건화를 사용하였을 경우 그렇지 않은 경우보다 약 5배 정도로 수렴속도가 증가하는 것을 확인할 수 있다. Fig. 7과 8은 하류방향으로 각각 $x=0.025, 0.075, 0.15, 0.33\text{m}$ 인 위치에서의 반경방향 속도분포 및 RMS 섭동을 실험결과와 비교한 그림이다. 반경방향 속도분포는 실험결과를 잘 예측하는데 반해, RMS 섭동의 경우 전단층의 발달과정에 따라 하류로 갈수록 실험결과와 계산결과 사이에 오차가 발생한다. 이는 하류에서의 강한 난류특성으로 인한 활발한 혼합현상을 $k-\epsilon$ 난류 모델이 과소예측하기 때문이다. 그러나 전반적으로 전단층 주위의 유동방향 및 반경방향 RMS 섭동은 실험결과와 유사한 결과를 보인다.

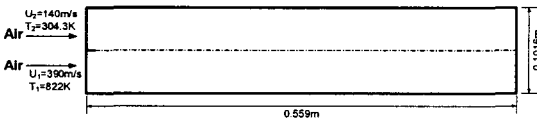


Fig. 5 Schematic of air-air turbulent shear flow

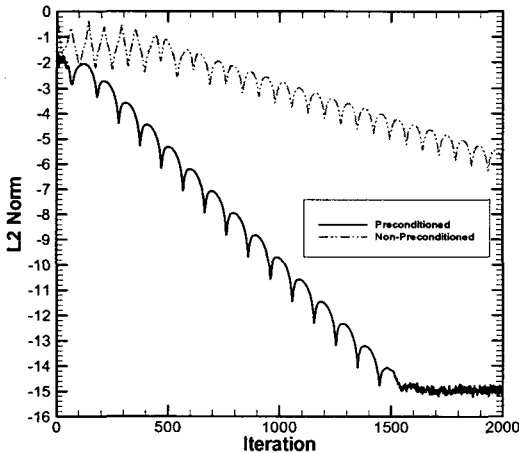


Fig. 6 Comparison of convergence histories (Non-reacting preconditioned, Non-reacting non-preconditioned). For all cases, CFL=14 and VNN=13 are used

4.3 난류 수소-공기 반응 전단유동

다원 화학종과 다단계 반응메커니즘을 이용하여 화학반응 유동장 문제를 해석하기 위하여 Chang 등⁽¹²⁾의 2차원 평판 난류 전단유동의 연소반응을 계산하였다. Fig. 9는 실험조건을 도시한 것으로 입구공기의 속도 및 온도조건은 $U_1=390\text{m/s}$, $T_1=810.9\text{K}$ 이고, 연료의 입구속도 및 온도조건은 $U_2=140\text{m/s}$, $T_2=366.5\text{K}$ 이다. 연료는 96.06%의 질소 질량분율과 3.94%의 수소 질량분율로 구성된다.

빠른 유동속도로 인해 화염이 안정적으로 유지되지 않으므로, 안정적이고 지속적인 화염형성을 위해 두 흐름 사이 1mm 구간에 고온의 수소 점화원을 두었으며, 불안정한 초기 반응을 고려해

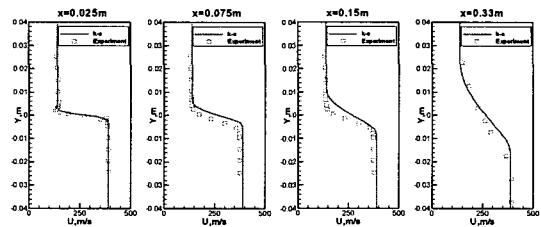


Fig. 7 Comparisons of experimental results and computational results for radial direction velocities at the downstream locations of $x=0.025, 0.075, 0.15$ and 0.33m

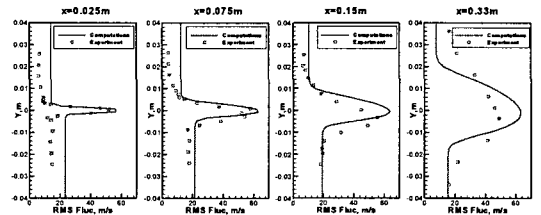


Fig. 8 Comparisons of experimental results and computational results for radial direction RMS fluctuations at the downstream locations of $x=0.025, 0.075, 0.15$ and 0.33m

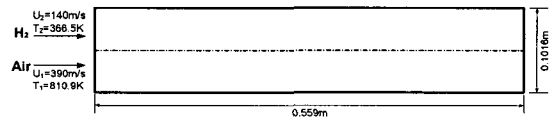


Fig. 9 Schematic of H_2/O_2 turbulent reacting shear flow

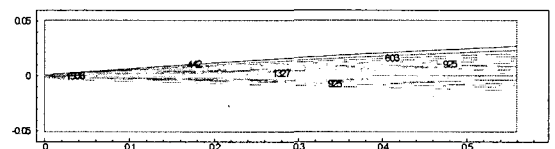


Fig. 10 Temperature contour of H_2/O_2 turbulent reacting shear flow

일정 계산기간 동안(약 500 반복회수) CFL 및 VNN을 1로 설정하였으며 그 이후의 계산단계에서는 각각을 5와 3으로 증가시켰다. 9 화학종(H_2 , O_2 , OH, H_2O , H, O, HO_2 , H_2O_2 , N_2), 18 반응단계로 구성된 반응모델⁽¹⁷⁾과 $k-\epsilon$ 난류모델⁽¹³⁾을 사용하였으며 4.2절의 계산과 동일한 격자를 사용하였다.

Fig. 10은 난류 수소-공기 반응 전단유동의 온도장을 도시한 그림이며, Fig. 11은 본 계산에서 예조

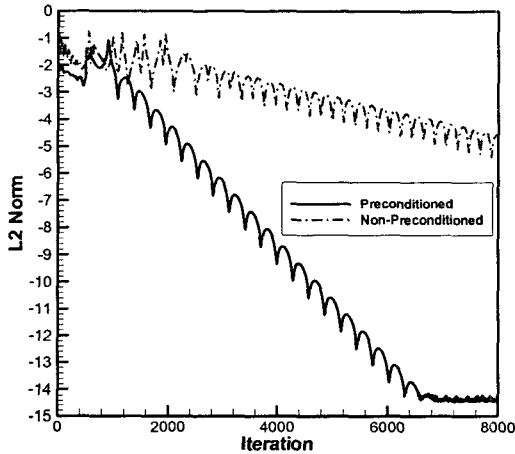


Fig. 11 Comparison of convergence histories (Reacting preconditioned, Reacting non-preconditioned). For all cases, CFL=5 and VNN=3 are used

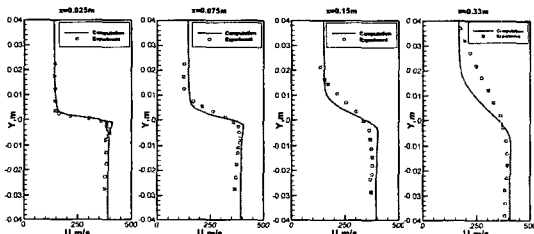


Fig. 12 Comparisons of experimental results and computational results for radial direction velocities at the downstream locations of $x=0.025, 0.075, 0.15$ and $0.33m$

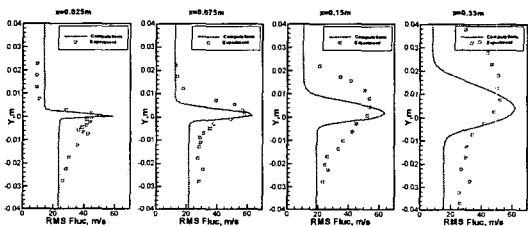


Fig. 13 Comparisons of experimental results and computational results for radial direction RMS fluctuations at the downstream locations of $x=0.025, 0.075, 0.15$ and $0.33m$

간화를 사용한 경우와 그렇지 않은 경우의 수렴속도를 비교한 그림이다. 예조건화 기법을 적용한 경우 약 5 배의 수렴특성 향상효과가 있음을 볼 수 있다. Fig. 12 와 13 은 하류방향 $x=0.025, 0.075, 0.15, 0.33m$ 에서의 반경방향 속도분포 및 RMS 섭동을 실험결과와 비교한 그림이다.

속도분포를 비교한 Fig. 12에서 계산결과는 입구 근처에서 실험결과와 잘 일치하고 있다. 그러나 실험의 경우 하류로 갈수록 상대적으로 빠른 속도의 공기유동이 연료유동 쪽으로 강한 혼합현상을 보이는데 반해 계산결과는 이를 과소예측하여 하류로 갈수록 오차가 커지는 것을 볼 수 있다.

특히 Fig. 13에 보이는 바와 같이 RMS 섭동의 경우 입구 근처에서만 아니라, 하류로 갈수록 실험 결과와의 오차 범위가 커진다. 이러한 오차의 원인은 다음 두 가지 이유로 설명할 수 있다. 첫째, 실험의 경우 수소 점화원이 위치한 부분에서 강한 수직속도 성분이 존재하기 때문이다. 둘째, 혼합층 외부에 존재하는 속도섭동의 강한 비등방성과 실제 반응유동 계산에서 나타나는 비정상성이 원인으로 작용한다. 즉 큰 스케일의 롤업(roll-up) 현상에 의한 비정상 효과는 공기유동과 반응 전단층과의 혼합을 촉진시키는 역할을 하므로 하류로 갈수록 난류 혼합층이 두꺼워지는 것이다.

이러한 복잡한 유동현상을 $k-\epsilon$ 난류모델⁽¹³⁾로 처리하는데 한계가 있으며 일반적으로 $k-\epsilon$ 난류 모델은 비점성 유동특성이 강한 입구유동은 잘 예측하는데 반해 하류로 갈수록 난류혼합층을 과소 예측하는 것으로 알려져 있으므로 난류 모델링에 대한 추가 연구가 필요하다.

5. 결론

본 연구에서는 예조건화 기법, 난류 수송방정식과 다원 화학종 방정식이 연계된 Navier-Stokes 방정식을 지배방정식으로 사용하였다. 내재적 풍상차분 ADI 알고리즘을 기본으로 시간항의 경우 1차 정확도의 Euler의 내재적기법을 사용하였고 내재변의 대류항은 1차 정확도의 풍상차분법, 점성항은 2차 정확도의 중심차분법으로 이산화하였다. 외재변의 경우 대류항은 3차 정확도의 편향 풍상차분법을 적용하였으며 점성항에는 2차 정확도의 중심차분법을 적용하여 해석코드를 구성하였다.

본 코드의 검증을 위하여 층류 및 난류 화학반응 유동장 해석을 시도하였으며, 적용된 예조건화 기법은 저속 유동에서 발생하는 수렴성 문제를 잘 극복하는 것을 볼 수 있었다.

저 Mach수 층류 메탄-공기 비예혼합 화염을 해석하기 위하여 6 화학종($CH_4, O_2, CO, CO_2, H_2O, N_2$) 2 단계 일반 반응식 모델을 사용하였다. 예조건화를 사용한 경우, 화학반응 여부에 상관없이 좋은

수렴특성을 보였다. 화염의 구조 및 사용된 화학종 물질들의 정성적인 변화특성은 실험결과를 잘 예측하므로 화학반응 유동장 해석을 위해 본 코드에서 사용한 수치해석 기법은 타당성을 가진다.

H₂/O₂ 화학반응 난류 전단유동을 해석하기 위하여 9 화학종(H₂, O₂, OH, H₂O, H, O, HO₂, H₂O₂, N₂), 18 반응단계로 구성된 반응모델과 Chien이 제안한 저 Re수 k-ε 난류모델을 사용하였다. 비반응/화학반응 난류 전단유동의 두 가지 경우 모두 예조건화를 사용하였을 때, 그렇지 않은 경우보다 약 5배 정도 더 수렴속도가 증가되는 것을 확인할 수 있었다.

비반응 난류 전단유동 계산결과에서 반경방향 속도 및 RMS 섭동은 실험결과를 잘 예측하였으나, 화학반응 난류 전단유동의 경우 하류로 갈수록 계산결과는 실험결과를 과소예측하고 있다. 실험의 경우 수소 점화원이 위치한 부분에 존재하는 강한 수직속도 성분과 난류 혼합층의 외부에 존재하는 속도섭동의 강한 비등방성 및 실제 반응유동 계산에서 나타나는 비정상성을 이러한 오차가 발생하는 원인으로 들 수 있다.

참고문헌

(1) Merkle, C. L. and Choi, Y. H., 1985, "Computation of Low Speed Flows with Time Marching Procedures," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 25, pp. 293~311.
 (2) Venkateswaran, S., Weiss, J. M., Merkle, C. L. and Choi, Y. H., 1992, "Propulsion-Related Flowfields Using the Preconditioned Navier-Stokes Equations," AIAA paper 92-3437.
 (3) Shuen, J. S., Chen, K. H. and Choi, Y. H., 1992, "A Time Accurate Algorithm for Chemical Non-Equilibrium Viscous Flows at All Speeds," AIAA paper 92-3639.
 (4) Chorin, A. J., 1967, "A Numerical Methods for Solving Incompressible Viscous Flow Problems," *Journal of Computational Physics*, Vol. 2, pp. 12~26.
 (5) Turkel, E., 1987, "Preconditioned Methods for Solving Incompressible Viscous Flow Problems," *Journal of Computational Physics*, Vol. 72, pp. 277~298.
 (6) Choi, Y. H. and Merkle, C.L., 1993, "The Application of Preconditioning in Viscous Flows," *Journal of Computational Physics*, Vol. 105, pp. 207~223.
 (7) Vankateswaran, S., Deshpande, M. and Merkle, C. L., 1995, "The Application of Preconditioning to Reacting Flow Computations," AIAA 95-1673, 12th Computational Fluid Dynamics Conference.
 (8) Buelow, P. E. O., Schwer, D. A., Feng, J., Merkle, C. L. and Choi, D., 1997, "A Preconditioned Dual-Time Diagonalized ADI Scheme for Unsteady Computations," AIAA paper 97-2101.
 (9) Chen, K. -H., Duncan, B., Fricker, D., Lee, J. and

Quealy, A., 1996, "ALLSPD-3D," NASA Lewis Research Center.
 (10) Ryer Jr., R. C., 1998, "The Baseline Solver for the National Combustion Code," AIAA paper 98-3853, 34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit.
 (11) Mitchell, R. E., Sarofim, A. F. and Clomburg, L. A., 1980, "Experimental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames," *Combustion and Flame*, Vol. 37, pp. 227~244.
 (12) Chang, C., Marek, C., Wey, C., Jones, R. and Smith, M., 1993, "Comparison of Reacting and Non-Reacting Shear Layers at a High Subsonic Mach Number," *AIAA Conference Proceedings*, 93-2381.
 (13) Chien, K. Y., 1982, "Predictions of Channel and Boundary Layer Flows with a Low-Reynolds-Number Turbulence Model," *AIAA Journal*, Vol. 20, No. 1, pp. 33~38.
 (14) Taylor, A. C., Ng, W. F. and Walter, R. W., 1992, "Upwind Relaxation Methods for the Navier-Stokes Equations Using Inner Iteration," *Journal of Computational Physics*, Vol. 99, pp. 68~78.
 (15) Thomas, J. L. and Walters, R. W., 1987, "Upwind Relaxation Algorithm for the Navier-Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 25, No. 4, pp. 527~534.
 (16) Charles. K. Westbrook., 1981, "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames," *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, pp. 31~43.
 (17) http://tspcpc110.ecn.purdue.edu/H2O2_files/frame.htm.

Appendix A

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = H + L(Q_p)$$

$$L = \frac{\partial}{\partial x} \left(R_{xx} \frac{\partial}{\partial x} + R_{xy} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(R_{yx} \frac{\partial}{\partial x} + R_{yy} \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$Q = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho k \\ \rho \epsilon \\ \rho Y_i \end{Bmatrix}, \quad Q_p = \begin{Bmatrix} p \\ u \\ v \\ T \\ k \\ \epsilon \\ Y_i \end{Bmatrix}, \quad E = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p + \frac{2}{3} \rho k \\ \rho uv \\ (e + p + \frac{2}{3} \rho k)u \\ \rho uk \\ \rho u \epsilon \\ \rho u Y_i \end{Bmatrix}$$

$$F = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p + \frac{2}{3} \rho k \\ (e + p + \frac{2}{3} \rho k)v \\ \rho vk \\ \rho v \epsilon \\ \rho v Y_i \end{Bmatrix}, \quad H = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ H_k \\ H_\epsilon \\ \omega_i \end{Bmatrix}$$

$$R_{xx} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}\mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}\mu_{eff}u & \mu_{eff}v & \kappa_{eff} & 0 & 0 & \rho(D_j h_j - D_{N_i} h_{N_i}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho D_i \delta_{ij} \end{bmatrix}$$

$$R_{yy} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3}\mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{eff}u & \frac{4}{3}\mu_{eff}v & \kappa_{eff} & 0 & 0 & \rho(D_j h_j - D_{N_i} h_{N_i}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho D_i \delta_{ij} \end{bmatrix}$$

$$R_{xy} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3}\mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{eff}v & -\frac{2}{3}\mu_{eff}u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$R_{yx} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}\mu_{eff} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}\mu_{eff}v & \mu_{eff}u & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t$$

$$\kappa_{eff} = \kappa + \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}$$

$$\mu_k = \mu + \frac{\mu_t}{Pr_k}, Pr_k = 1.0$$

$$\mu_\varepsilon = \mu + \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon}, Pr_\varepsilon = 1.3$$

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon}$$

$$D_k = \frac{1 - X_k}{\sum_k \frac{X_l}{D_{kl}} - \frac{X_k}{D_{kk}}}$$

$$D_{kl} = \frac{0.0266T^{3/2}}{\rho W_{kl}^{1/2}} \sigma_{kl}^2 \Omega_D$$

$$W_{kl} = \frac{2}{\frac{1}{W_k} + \frac{1}{W_l}}, \sigma_{kl} = \frac{1}{2}(\sigma_k + \sigma_l)$$

$$\Omega_D = \frac{1}{\left(\frac{kT}{\varepsilon_\nu}\right)^{0.145}} + \frac{1}{\left(\frac{1}{2} + \frac{kT}{\varepsilon_\nu}\right)^2}$$

Nomenclature

- Q : Vector for dependent variables
- Q_p : Vector for primitive variables
- E, F : Flux vector for x, y coordinate directions
- H : Turbulent and chemical source vector
- L : Operator for representing the viscous terms
- R_{ij} : Viscous coefficient matrices
- μ_{eff} : Effective viscous coefficient
- κ_{eff} : Effective thermal conductivity
- D_k : Mixture diffusion coefficient for species k
- D_{kl} : Binary diffusion coefficient for species k and l
- W_k, W_l : Molecular weight for species k and l
- Ω_D : Dimensionless collision integral
- Γ_p : Preconditioning matrix
- ρ_p, ρ_T, h_p, h_T : Thermodynamic properties

$$\rho_p = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T$$

For ideal gas, $\rho_p = \frac{1}{RT}, \rho_T = -\frac{\rho}{T}$
 $h_p = 0, h_T = C_p$

ρ'_p : Preconditioning parameter

$$\rho'_p = \frac{1}{V_p^2} \frac{\rho'_T(1 - \rho h_p)}{\rho h_T}$$

$$\rho'_T = \rho_T$$

V_p : Artificial sound speed

$$V_p = \left(\frac{\rho h_T}{d'}\right)^{1/2} = \left(\frac{\rho h_T}{\rho h_T \rho'_p + \rho'_T(1 - \rho h_p)}\right)^{1/2}$$