

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2010.34.7.679

확산지배 난류 연소현상에서 역해석을 이용한 CH₄/O₂의 초기 질량분율 추정에 관한 연구

이 균 호*† · 백 승 욱**

* 한국항공우주연구원, ** 한국과학기술원 항공우주공학전공

Study on Estimations of Initial Mass Fractions of CH₄/O₂ in Diffusion-Controlled Turbulent Combustion Using Inverse Analysis

Kyun Ho Lee*† and Seung Wook Baek**

* Korea Aerospace Research Institute

** Department of Aerospace Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology

(Received March 18, 2009 ; Revised February 8, 2010 ; Accepted March 22, 2010)

Key Words: Inverse Analysis(역해석), Repulsive Particle Swarm Optimization(반발 입자 군집 최적화), Diffusion-Controlled Turbulent Combustion(확산지배 난류 연소 현상), Initial Mass Fraction(초기 질량분율)

초록: 본 연구에서는 기존의 역열전달 문제(inverse heat transfer problem)와 같이 역해석(inverse analysis)을 통해 미지의 파라미터를 추정(estimation)하는 개념을 복잡한 연소문제에 도입하였다. 기존의 연구에서는 역해석 기법을 연소문제 자체에 보다는 대부분 연소현상을 동반한 복사열전달과 같은 역열전달 문제에 국한해서 적용하고 있기 때문에, 열전달 문제에 한정되어 사용되고 있는 기존의 역해석을 새로운 공학문제에 확장하여 적용함과 동시에 효율적인 연소기 설계 및 최적화 개념을 제시하는데 본 연구의 의의가 있다고 할 수 있다. 이를 위해 실제로 많이 사용하고 있는 축대칭 원통형 연소기 내부로 주입되는 메탄(CH₄)과 산소(O₂) 성분의 초기 질량분율 값을 연소기 입구 근방에서 측정된 개스의 온도 데이터를 이용하여 역추정하였다. 이때, 복잡한 확산지배 연소 현상을 효율적으로 역해석하기 위해 최적화 방법 중의 하나인 반발 입자 군집 최적화 방법을 역해석 기법으로 적용하였다.

Abstract: The major objective of the present study is to extend the applications of inverse analysis to more realistic engineering fields with a complex combustion process rather than the traditional simple heat-transfer problems. In order to do this, the unknown initial mass fractions of CH₄/O₂ are estimated from the temperature measurement data by inverse analysis in the practical diffusion-controlled turbulent combustion problem. In order to ensure efficient inverse analysis, the repulsive particle swarm optimization (RPSO) method, which belongs to the class of stochastic evolutionary global optimization methods, is implemented as an inverse solver. Based on this study, it is expected that useful information can be obtained when inverse analysis is used in the diagnosis, design, or optimization of real combustion systems involving unknown parameters.

- 기호설명 -

G_k : 난류 운동에너지 생성항
 k : 난류 운동에너지, m^2/s^2
 p_i : i^{th} 입자의 최적 위치
 p_g : 군집의 최적 위치
 T : 온도, K

x : 입자 위치
 v : 입자 속도
 Y_i : i^{th} 화학종의 질량분율

그리스문자

μ_{eff} : 유효 점성계수, Ns/m^2
 ρ : 밀도

† Corresponding Author, khlee0406@kaist.ac.kr

- ω : 관성 가중치
 $\dot{\omega}$: 반응률, $kg/(m^3 \cdot s)$

하첨자

- f : 연료
 i : i^{th} 입자 또는 화학종
 o : 산화제

1. 서 론

확산지배 난류 연소현상은 발전소의 로 (furnace), 산업용 보일러 또는 가스 터빈 연소기와 같이 다양한 분야에 적용되고 있는 현상으로 실제적인 연소현상을 이해하는 데 중요한 메커니즘의 하나이다. 확산지배 연소 현상에서는 일반적으로 연료와 산화제를 나누어 빠른 속도로 연소기 내부로 주입시킨 후 난류 운동에너지에 의한 혼합과정을 거침으로써 화학반응을 일으키는 방식을 적용하고 있다. 따라서 이러한 확산지배 연소 현상을 정확하게 해석하기 위해서는 보존 방정식과 더불어 난류 모델 및 연소 모델과 같은 비선형 방정식을 동시에 풀어야 하기 때문에 해를 구하는 과정이 결코 간단하지 않다고 할 수 있다. 기존에 수행되었던 연소관련 연구들을 살펴보면 대표적으로 Lewis와 Smoot는 원통형 연소기에서의 확산지배 연소 현상을 실험적으로 구현한 후 측정결과를 바탕으로 연소현상에 대한 수학적 모델을 정립하였다.⁽¹⁾ Gran 등은 국부적 소멸영향(local extinction effects)를 고려한 확산지배 연소 현상을 해석하였으며,⁽²⁾ Aslanyan과 Maikov는 확률밀도함수(probability density function)를 이용해 난류연소에서의 평균 물성치를 계산하였다.⁽³⁾

한편, 가스 터빈 연소기와 같은 확산지배 연소 시스템에서는 일반적으로 연소기 형상, 연료/산화제의 주입조건 및 유동 물성치, 복합적인 난류 및 연소현상 등과 같은 많은 요인들이 연소기 성능에 영향을 크게 미치므로, 확산지배 연소 시스템을 설계하거나 최적화를 수행하는 것은 매우 복잡한 작업이라고 할 수 있다. 따라서 설계자가 원하는 설계요구사항을 만족하기 위한 미지의 최적조건을 간단하게 추정할 경우 비교적 짧은 시간 내에 효율적으로 연소 시스템을 설계하거나 또는 최적화가 가능해지며, 이를 통해 연소기의

성능을 향상시킬 수 있으리라 기대된다.

이를 위해 본 연구에서는 기존의 역열전달 문제(inverse heat transfer problem)와 같이 역해석(inverse analysis)을 통해 미지의 파라미터를 추정(estimation)하는 개념을 복잡한 연소문제에 도입하였다. 기존의 연구에서는 역해석 기법을 연소 문제 자체에 보다는 대부분 연소현상을 동반한 복사열전달과 같은 역열전달 문제에 국한해서 적용하고 있기 때문에,⁽⁴⁻⁶⁾ 열전달 문제에 한정되어 사용되고 있는 기존의 역해석을 새로운 공학문제에 확장하여 적용함과 동시에 효율적인 연소기 설계 및 최적화 개념을 제시하는데 본 연구의 의의가 있다고 할 수 있다. 이를 위해 실제적으로 많이 사용하고 있는 축대칭 원통형 연소기 내부로 주입되는 메탄(CH_4)과 산소(O_2) 성분의 초기 질량분율 값을 연소기 입구 근방에서 측정한 가스의 온도 데이터를 이용하여 역추정하였다. 이때, 복잡한 확산지배 연소 현상을 효율적으로 역해석하기 위해 최적화 방법 중의 하나인 반발 입자 군집 최적화 방법을 역해석 기법으로 적용하였다.

2. 이론 해석

2.1 지배 방정식

일반적으로 축대칭 연소기 내부의 확산지배 연소현상을 해석하기 위해서는 연소기 내부 유체의 난류 유동, 화학반응 등에 대한 지배방정식을 동시에 계산해야 한다. 이 때, 화학반응 유동장을 지배하는 지배방정식은 연속 방정식, 운동량 방정식, 에너지 방정식 및 각 화학종의 보존방정식으로 구성된다. 우선 본 연구에서 사용한 2차원 정상상태 질량 평균된 연속 방정식과 운동량 방정식은 다음과 같다.^(7,8)

연속 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (1)$$

운동량 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (2)$$

이때, 유효점성계수 μ_{eff} 는 분자와 난류 점성 계

수들의 합으로 표현된다. 한편, 화학반응이 존재하는 경우의 에너지 방정식은 아래의 식과 같이 나타낼 수 있다.

에너지 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{Pr_T} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - H_v \dot{\omega}_f \quad (3)$$

$$h = \sum_k Y_k h_k = \sum_k Y_k \int_{T_{ref}}^T C_{p,k}(T) dT \quad (4)$$

Pr_T는 난류 Prandtl 수이며, H_v· $\dot{\omega}_f$ 는 연료와 산화제의 연소반응에 의해 발생된 반응열 생성항을 의미한다. 또한 엔탈피 h는 식 (4)와 같이 표현되었으며, C_{p,k}는 각 화학종들의 정압비열을 나타낸다. 한편, 화학종의 보존 방정식은 다음과 같다.

화학종 보존 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_T} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_i \quad (5)$$

이때, Y_i와 $\dot{\omega}_i$ 은 각각 ith 화학종의 질량분율(mass fraction)과 반응률(reaction rate)을 의미하며, Sc_T는 난류 Schmidt 수를 나타낸다. 한편, 본 연구에서는 난류영역의 유동해석을 위해 아래와 같이 일반적으로 널리 사용되고 있는 표준 k-ε 난류모델을 사용하였다. 즉,

난류운동에너지 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - \rho \epsilon \quad (6)$$

난류운동에너지 소모율 방정식

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} G_k - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (7)$$

$$G_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (8)$$

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (9)$$

이때, G_k는 난류운동 생성항을, μ_t는 난류 점성계수를 의미한다. 이때, 식 (7)~(9)에 사용한 모델 상수는 각각 다음과 같다.

$$C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, C_\mu = 0.09, \sigma_k = 1.3, C_\epsilon = 1.0 \quad (10)$$

한편, 벽면 부근 경계층 내부는 격자수를 증가하는 대신 벽함수(wall function)를 적용함으로써 계산효율성을 고려하였다. 또한 밀도는 상태방정식에 따라 혼합물들의 성분비를 고려한 다음의 식으로 계산하였다.

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_j \frac{Y_j}{W_j}} \quad (11)$$

이때, R은 기체상수를, W_j는 분자량을 나타낸다.

2.2 연소 모델

본 연구에서는 축대칭 연소기 내부에서 연료와 산화제의 확산지배 연소현상을 고려하였으며, 이때 연료의 주성분인 메탄과 산화제의 주성분인 산소의 화학반응은 다음의 이상화된 비가역 단단계 반응을 한다고 가정하였다.



일반적으로 난류 연소의 수학적 모델링은 유동과 화학반응 간의 상호작용뿐만 아니라 난류 유동과 화학반응 메커니즘에 대한 연관성도 고려되어야 한다. 대표적으로 EBU(eddy break-up) 모델의 경우 예혼합 연소의 반응률을 근거로 모델링되었기 때문에 예혼합 연소와 확산 연소의 두 경우 모두 적용하기에는 일반적이지 못하다는 단점이 있는 것으로 알려져 있다.⁽⁷⁾ 화학반응이 매우 빠른 확산 연소에서 이러한 단점을 보완하기 위해 Magnussen과 Hjertager⁽⁹⁾가 발표한 EDC(eddy dissipation concept) 모델은 기존의 EBU 모델에 1) 다른 크기를 가지는 와류(eddy)들 내부의 연료와 산화제가 혼합되는 시간에 의해 화학반응이 결정된다는 개념, 2)연료의 농도가 산화제 농도보다 높은 지역에서의 지배 인자는 산화제라는 개념, 3)예혼합 난류 화염에서 뜨거운 생성물을 가지고 있는 와류의 효과를 고려하여 생성물의 농도가 최소인 경우를 반영한 개념 등을 추가하였다.

본 연구에서는 축대칭 연소기 내부로 연료와 산화제가 비예혼합(nonpremixed) 상태로 유입된 후 점차 혼합 및 확산에 의해 연소반응이 유발되는 확산지배 연소현상을 고려하였기 때문에, 난류가 화학반응률에 미치는 영향을 고려한 EDC 모델을 사용하여 에너지 방정식 (3)의 연료의 화학반응률 $\dot{\omega}_f$ 을 다음의 식으로부터 계산하였다.^(2,9)

$$\dot{\omega}_f = -C_w \kappa \frac{\epsilon}{k} \min[\hat{Y}_{\min}, \hat{Y}_p, (\hat{Y}_{\min} + \hat{Y}_p) \gamma_\lambda] \quad (13)$$

$$\hat{Y}_{\min} = \min[\hat{Y}_f, \hat{Y}_o] \quad (14)$$

$$\hat{Y}_f = Y_f / 1, \quad \hat{Y}_o = Y_o / s, \quad \hat{Y}_p = (Y_{CO_2} + Y_{H_2O}) / (1 + s) \quad (15)$$

이때, 반응률은 난류 시간 척도(κ/ϵ , turbulent characteristic time scale)와 더불어 연료, 산화제, 생성물의 가장 느린 난류 확산율, 즉 가장 작은 반응률을 가지는 화학종의 농도에 비례한다고 가정하였다. 이때, 규준화(normalized)된 화학종 질량분율은 식 (14)와 같이 정의하였으며, s 는 이론 산소/연료비에 대한 산소의 stoichiometric 계수, γ_λ 는 $C_\lambda (\gamma\epsilon/\kappa^2)^{1/4}$ 이며, 상수 C_w 와 C_λ 는 각각 11.1과 2.1이다.⁽²⁾ 이와 같이 EDC는 난류와 화학반응속도(chemical reaction kinetics)간의 상호작용을 간단한 방법으로 모두 고려하였기 때문에 계산이 비교적 간단하면서도 다단계 화학반응의 경우 반응률을 빠르게 예측할 수 있다는 장점이 있다. 반면에 점화(ignition)와 소멸(extinction), 또는 난류 섭동(fluctuation) 등과 같이 화염의 생성유무를 결정하는 비정상 현상이 화학 반응률에 미치는 영향을 EDC에서는 고려하지 않는다는 단점이 있다. 따라서 본 연구에서는 난류 연소현상에서 화학 반응률 계산시 난류 와류에 의해 연소기 내 국부적인 영역에서 화염이 소멸되는 국소 소멸(local extinction) 현상을 고려하기 위해 Byggstøyl과 Magnussen⁽¹⁰⁾ 및 Gran⁽²⁾이 제시한 국소소멸 모델을 이용하였다. 본 모델은 기존의 EDC 모델을 근거로 화학반응률을 계산하되, 난류 특성시간 척도와 화학 특성시간 척도의 크기를 비교하여 해당 계산영역에서의 소멸 존재 여부를 판단한 후, 이것이 화학반응률에 미치는 영향을 고려할 수 있도록 정의되어 있다. 본 모델에 대한 상세한 설명은 참고문헌을 참고하기 바란다.^(2,10)

2.3 수치해법

앞 절에서 제시한 지배방정식을 풀기 위해 유동과 연소 현상에 광범위하게 적용할 수 있는 수치해석 기법인 유한 체적법(finite volume method, FVM)를 이용하였다. 속도 성분과 기타 종속변수들은 모두 계산 셀의 중앙에서 값을 취하는 비엇갈림 격자계(collocated grid)를 취했으며, 이때 발생할 수 있는 압력진동 문제를 해결하기 위해 모멘텀 보간법을 도입하였다. 지배방정식을 각 계산 셀의 제어체적에 대해 적분을 취하면 아래와

같이 정의될 수 있으며, ϕ 는 종속변수를, S_ϕ 는 생성항을 나타낸다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dS = \int_S \Gamma_\phi \text{grad} \phi \cdot \vec{n} dS + \int_V S_\phi dV \quad (16)$$

최종 차분식은 다음과 같은 대수식으로 이산화되며, 이에 대한 수치계산을 수행하기 위해 잘 알려진 SIMPLE 알고리즘을 이용하였다.⁽¹¹⁾

$$A_P \phi_P = A_E \phi_E + A_W \phi_W + A_N \phi_N + A_S \phi_S + b_P \quad (17)$$

3. 역해석 기법

연소나 열전달 현상을 다루는 접근 방법은 크게 두 가지로 분류될 수 있다. 우선 주어진 경계 조건이나 초기조건들을 가지고 내부 온도나 열유속과 같은 물성치의 분포를 구하는 직접 접근(direct approach) 방법이 있다. 주로 대부분의 연소나 열전달 문제에 적용되고 있으며, 설계자가 원하는 시스템을 설계하기 위해서는 임의의 조건들을 가지고 반복 계산한 후, 그 결과들 중에 최선의 조건을 선택하게 되는 것이 일반적이다. 역접근(inverse approach) 방법은 이와 반대로 특정한 결과를 제공해주는 물성치나 초기 조건 및 경계 조건들을 추정하게 된다. 이러한 역접근적 방법을 이용하면 설계자가 원하는 결과를 제공하는 최적의 설계조건을 반복 계산 없이 찾을 수 있기 때문에 효율적일 뿐 아니라 반복계산에 대한 시간과 수고를 절약할 수 있다는 장점이 있다.⁽¹²⁾

역접근 문제(또는 역해석 문제)는 측정값으로부터 미지의 파라미터를 추정하기 때문에 최종해가 측정오차에 상당히 영향을 받는 ill-posed된 특성을 가지고 있으므로 안정적으로 해를 수립시키기 위해서는 별도의 역해석 기법이 반드시 필요하다. 대표적으로 사용되는 기법으로는 공액구배법(conjugate gradient method) 같은 기울기 기반의 반복법이 있으나 기울기 정보를 구하기 위해 민감도 문제를 풀어야 하므로 파라미터의 수가 많을 경우에는 계산시간이 상당히 증가하며, 서로 의존적인 파라미터들을 동시에 추정할 경우 오히려 불안정한 결과를 주거나 많은 반복이 필요하게 된다. 이러한 이유로 최근에는 기울기 정보 대신 임의의 해집단으로부터 전역 최적값(global optimum)을 찾아가는 탐색적 기법에 대한 관심이 높아지고 있는데, 대표적으로 유전 알고리즘(genetic algorithm, GA)과 입자 군집 최적화(particle swarm

optimization, PSO) 알고리즘이 사용되고 있다.⁽¹²⁻¹⁴⁾

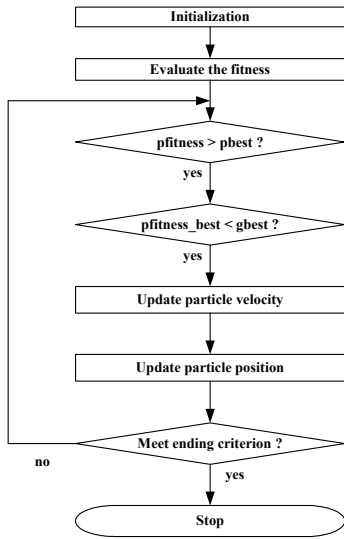


Fig. 1 The flowchart of particle swarm optimization

PSO 알고리즘은 군집을 이루어 이동하는 철새나 곤충들이 서로의 정보를 공유하면서 먹이를 찾아가는 과정을 모사하기 위하여 Kennedy와 Eberhart⁽¹⁵⁾에 의해 개발된 진화형 계산방법으로, 기존의 진화알고리즘에 비해 구성이 간단하며, 효율적으로 해를 찾을 수 있다는 특징을 가지고 있다. PSO 알고리즘의 흐름도를 Fig. 1에 제시하였으며, 다음과 같이 크게 세 단계로 구성된다.

1) 입자들의 초기 위치와 속도를 최적화하고자 하는 변수들의 최대, 최소 범위 안에서 임의로 생성한다.

2) 현재 스텝 k 에서의 위치, 속도 정보와 목적함수 값을 이용하여 $k+1$ 번째의 속도 벡터를 갱신한다.

$$v_{k+1}^i = wv_k^i + c_1 r_1(p_k^i - x_k^i) + c_2 r_2(p_k^g - x_k^i) \quad (18)$$

여기서 r_1, r_2 는 0과 1사이의 난수(random number)이고 w 와 c_1 및 c_2 는 각각 관성 가중치(inertia factor), 자기 신뢰계수(self confidence factor), 군집 신뢰계수(swarm confidence factor)이다. 그리고 p_k^i 는 i 번째 입자의 현재까지의 최적 위치로 인지적 기여도(cognitive contribution)이며, p_k^g 는 k 번째 스텝까지 군집의 최적 위치로 사회적 기여도(social contribution)라고 한다. 즉 $k+1$ 번째 스텝에서 i 번째 입자의 속도 벡터는 k 번째 스텝까지 자신의 최적 위치뿐만 아니라 전체 군집의 최적 위치 정

보가 반영되어 갱신되게 된다.

3) i 번째 입자의 $k+1$ 번째 위치는 2)에서 구한 속도 벡터를 이용하여 새로운 값으로 갱신한다. 이때 단위시간 $\Delta t = 1$ 로 가정하였다.

$$x_{k+1}^i = x_k^i + v_{k+1}^i \cdot \Delta t \quad (19)$$

대표적으로 광범위하게 사용되는 진화방법인 GA과 PSO를 비교해보면 두 방법 모두 임의로 분포시킨 입자들을 이용해 최종 해를 찾아가는 군 탐색 방법(population-based search)에 기반을 두었다는 점에서는 유사하지만 PSO의 경우 군집 내에서 최적값에 가장 근접한 입자를 따라 나머지 입자들끼리 각각의 속도와 위치를 수정해 가면서 더 좋은 해를 탐색해 나가므로 GA보다 지능형(intelligent) 이론에 가까우며, 구성이 비교적 간단하므로 대용량의 메모리가 필요 없다는 장점을 가지고 있다. 또한 연속형과 비연속형 문제에 모두 적용이 가능하므로 다양한 문제에 대해 쉽게 적용이 가능하다. 한편, 해공간이 방대하고 지역 최적값이 많은 복잡한 최적화 문제에 기존의 PSO 알고리즘을 적용할 경우 입자들의 군집이 지역 최적값으로 조기 수렴(early convergence)함으로써 전역 최적값을 찾기가 어려워지기도 한다. 이러한 단점을 개선하기 위해 식 (18)의 전체 군집의 최적 위치 대신 식 (20)과 같이 임의로 선택한 입자들의 최적 위치를 이용한 방법을 반발 입자 군집 최적화(repulsive particle swarm optimization, RPSO) 알고리즘이라고 한다.

$$v_{k+1}^i = wv_k^i + ar_1(p_k^i - x_k^i) + br_2 w(p_k^j - x_k^i) + cr_3 wz \quad (20)$$

여기서 r_1, r_2, r_3 는 0과 1사이의 난수이고 w 는 관성 가중치이다. z 는 입자들의 탐색성능을 향상시키기 위해 도입된 임의속도(random velocity) 성분이며, 계수 c 를 이용하여 그 효과를 조절할 수 있다. 그리고 p_k^i 는 i 번째 입자의 현재까지의 최적 위치이고, $p_k^j(j \neq i)$ 는 군집 내에서 임의로 선택한 j 번째 입자의 현재까지의 최적 위치를 나타낸다. 즉, 자신의 최적 위치뿐만 아니라 다른 입자들의 최적 위치 정보를 반영함으로써 해집단이 지역 최적값으로 일방적으로 수렴하는 것을 방지함과 동시에 새로운 영역을 탐색할 수 있다. 따라서 기존의 PSO 알고리즘에 비해 공간 탐색능력이 뛰어나므로 복잡한 최적화 문제에서 전역 최적값

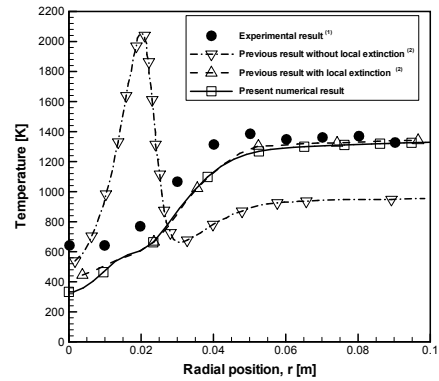
을 보다 효율적으로 찾을 수 있다는 장점이 있다.^(13,14) 본 연구에서는 복잡한 연소문제를 효율적으로 역해석하기 위해 이균호 등^(13,14)이 2차원 비직교 형상의 역복사 해석 결과에서 역해석 성능이 탁월한 것으로 검증된 RPSO 알고리즘을 역해석 기법으로 사용하였다.

4. 결과 및 고찰

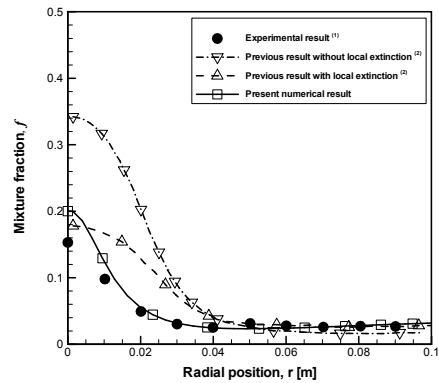
4.1 수치모델 검증

본 연구에서 사용한 수학적 모델의 타당성을 검증하기 위해 Lewis와 Smoot가 원통형 연소기에서 확산지배 연소 현상을 실험적으로 측정된 결과와 비교하였다.⁽¹⁾ Fig. 2(a)는 연소기 입구로부터 축방향으로 0.095m 떨어진 하류에서 측정된 반경방향 온도분포를, Fig. 2(b)는 0.327m 떨어진 하류에서 측정된 반경방향 혼합분율(mixture fraction)의 분포를 나타내고 있다. 화학반응률 계산시 국소 소염현상을 고려하지 않은 경우와 고려한 경우에 대해 예측한 Gran⁽²⁾의 수치결과와 온도측정 값을 비교한 결과, 국소 소염현상을 고려한 결과가 실험적으로 측정된 값들과 유사한 경향을 보이는 것을 확인할 수 있다. 이는 연료와 산화제가 연소기 내부로 유입되면서 확산혼합에 의해 반응이 시작되기 때문에 국소 소염현상을 고려하지 않은 결과에서는 난류에너지의 강도에 상관없이 연소기 입구에서부터 화염이 발생 및 유지되므로 온도가 급격하게 상승하게 된다. 반면에 국소 소염현상을 고려한 경우, 연소기 입구 부근에서는 유동 재순환(recirculation)과 같은 난류에너지가 비교적 크기 때문에 화염이 불안정하게 생성되다가 입구로부터 일정거리 이상 떨어질수록 난류에너지의 감소와 더불어 화염이 안정적으로 유지된다. 따라서 Fig. 2(a)에서 보듯이 국소 소염현상을 고려하지 않은 결과보다 낮은 온도분포가 예측됨을 알 수 있으며, 국소 소염현상을 고려한 본 연구의 수치 해석 결과도 Gran⁽²⁾의 결과와 거의 동일하게 예측되었음을 검증하였다. 마찬가지로 Fig. 2(b)의 혼합분율 분포에서도 국소 소염을 고려한 결과가 그렇지 않은 경우보다 실험 측정값과 유사한 경향을 가지는 것을 알 수 있으며, 또한 본 연구의 수치결과가 Gran⁽²⁾의 결과보다 더 근사하게 유추함을 확인할 수 있다. 이러한 검증결과로부터 본 연구에서 사용한 수학적 모델이 일정 수준이상

타당성을 가진다고 판단된다.



(a) Radial temperature profiles at axial distance $x = 0.095\text{m}$



(b) Radial mixture fraction profiles at axial distance $x = 0.327\text{m}$

Fig. 2 Comparison of experimental measurements and numerical predictions

4.2 역해석 문제

실제적인 확산지배 난류 연소현상을 역해석하기 위해 Fig. 3과 같이 길이 1m, 반경 0.1016m의 축대칭 원통형 연소기 형상을 고려하였다. Fig. 3에서 보듯이 연소기 입구에 연료와 산화제가 각각 나뉘어 동시에 유입되며, 식 (12)와 같이 이상화된 비가역 단단 연소반응 모델을 사용하였기 때문에 연료는 메탄(CH₄)과 질소(N₂)로, 산화제는 산소(O₂)와 질소(N₂)로만 구성되었다고 단순화하였다. 이때, 유입되는 연료와 산화제에 대해서 메탄과 산소가 차지하는 초기 질량분율은 임의의 값을 가지는 미지의 파라미터로 설정하였으며, 이 값들에 따라 식 (11)의 연소가스 밀도와 식 (13)의 연료 화학반응률 예측에 미치는 영향이 달라질 수 있다. 따라서 연소 현상을 실제와 근접하게 예측하기 위해서는 역해석을 통해 연료와 산화제 내에서 메탄(CH₄)과 산소(O₂)의 정확한 질량분율 값

을 추정하는 것이 중요하다고 할 수 있다. 이를

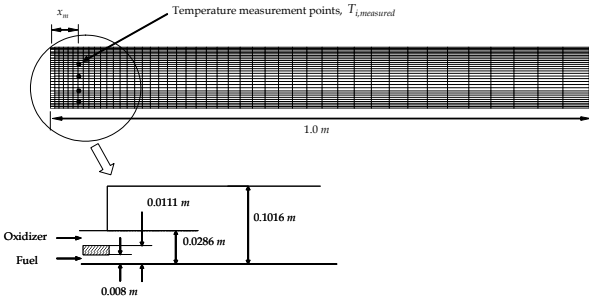


Fig. 3 Configuration of axisymmetric cylindrical combustor for inverse analysis

위해 역해석 해의 정확도를 나타내는 목적함수를 다음의 식 (21)과 같이 측정 온도값 $T_{i,measured}$ 와 역해석을 통해 역추정한 온도값 $T_{i,estimated}$ 의 차이의 제곱합으로 정의하였으며, 목적함수를 최소화 함으로써 정확한 해를 추정하기 위해 RPSO 알고리즘을 역해석 기법으로 적용하였다.

$$f = \sum_{i=1}^4 (T_{i,measured} - T_{i,estimated})^2 \quad (21)$$

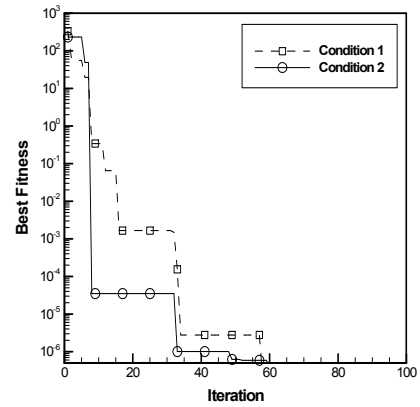
이때, $T_{i,measured}$ 는 직접문제로부터 계산한 가스 온도결과 중 Fig. 3과 같이 연소기 입구에서 측정위치 $x_m = 0.0416m$ 에 위치한 4개 격자점의 가스 온도를 가상적인 측정값(simulated measurement)으로 이용했으며, 이 측정값들에 대해서 측정오차는 없다고 가정하였다. 한편, $(N_x \times N_y) = (47 \times 32)$ 개의 공간 격자계로 연소기를 모델링하였으며, 유입속도 및 온도와 같은 그 외의 초기 및 경계조건 값들은 Table 1과 같이 이미 알고 있다고 가정하였다. 이러한 조건들을 이용해 본 연구에서는 측정오차가 0인 온도 측정값으로부터 역해석을 통해 3 case로 나누어 연료와 산화제에서 메탄과 산소가 차지하는 초기 질량분을 값을 역추정하였으며, 역해석 결과의 객관성을 검증하기 위해 Table 1과 같이 메탄과 산소의 초기 질량분율과 유입속도가 다른 값을 가지는 두 가지 condition을 고려하였다.

첫 번째 경우로, case 1에서는 메탄(CH₄)과 질소(N₂)로만 구성된 연료 내에서 메탄성분의 초기 질량분율 값 Y_{CH_4} 를 역추정하는 경우를 고려하였다. 이때 추정하고자 하는 미지의 Y_{CH_4} 의 실제 값은 두 가지 condition에 대해 각각 0.89(89%)와 0.70(70%)이며, 산화제 내 산소의 질량분율 Y_{O_2} 는 각각 0.21(21%)과 0.30(30%)로서 이미 알고 있

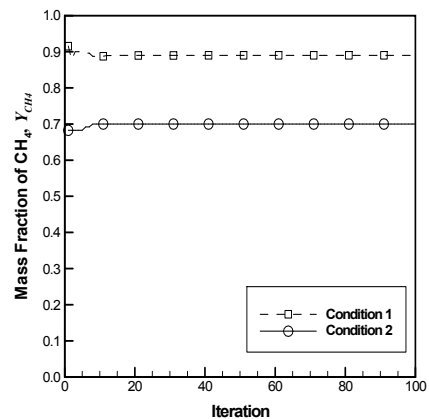
다고 설정하였다. 우선 두 condition에 대해 역해

Table 1 Initial and boundary conditions

Parameter	Condition 1	Condition 2
Primary gas	Fuel (CH ₄ & N ₂)	
Temperature (K)	300	
Inlet Mass Fraction (CH ₄) (%)	0.89	0.70
Inlet Velocity (m/s)	18.1	21.3
Secondary gas	Oxidizer (O ₂ & N ₂)	
Temperature (K)	589	
Inlet Mass Fraction (O ₂) (%)	0.21	0.30
Inlet Velocity (m/s)	30.1	34.3



(a) Best fitness



(b) Inlet mass fraction ($Y_{CH_4} = 0.89 \text{ \& } 0.70$)

Fig. 4 Inverse estimation of an inlet mass fraction of CH₄ (Case 1)

석 해의 정확도를 나타내는 목적함수의 최고 적합도를 계산한 결과, Fig. 4(a)에서 보듯이 반복계

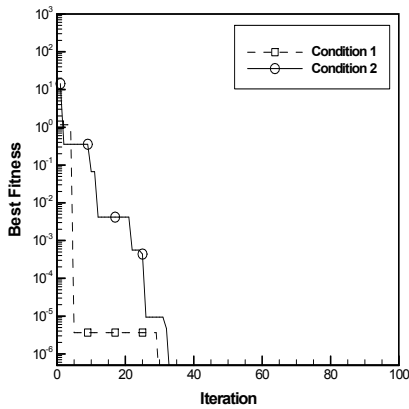
Table 2 Comparison of inverse inlet mass fraction estimation results

Parameter	Case 1		Case 2		Case 3	
	Condition 1 ($Y_{CH_4} = 0.89$)	Condition 2 ($Y_{CH_4} = 0.7$)	Condition 1 ($Y_{O_2} = 0.21$)	Condition 2 ($Y_{O_2} = 0.30$)	Condition 1 ($Y_{CH_4} = 0.89/Y_{O_2} = 0.21$)	Condition 2 ($Y_{CH_4} = 0.7/Y_{O_2} = 0.30$)
x_m (meter)	0.0416	0.0416	0.0416	0.0416	0.0416	0.0416
Y_{CH_4} (CH ₄) (Rel. Error %)	0.8900 (0.0)	0.7000 (0.0)	-	-	0.8900 (0.0)	0.7000 (0.0)
Y_{O_2} (O ₂) (Rel. Error %)	-	-	0.2100 (0.0)	0.3000 (0.0)	0.2100 (0.0)	0.3000 (0.0)
Averaged Rel. Error (%)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

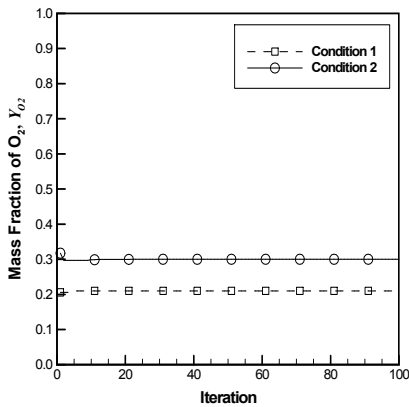
All data are measured after 100 iterations

산을 100번까지 수행하는 동안 약 60번째 계산에

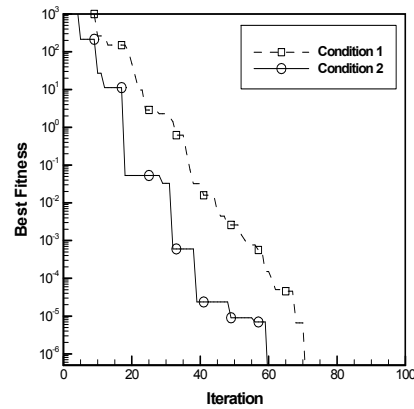
색해 가는 과정을 Fig. 4(b)와 같이 살펴본 결과,



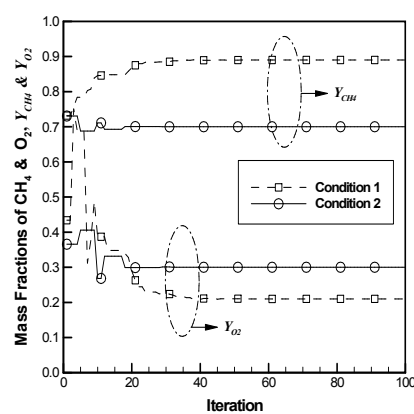
(a) Best fitness



(b) Inlet mass fraction
($Y_{O_2} = 0.21$ & 0.30)



(a) Best fitness



(b) Inlet mass fraction
($Y_{CH_4} = 0.89$ & 0.70 , $Y_{O_2} = 0.21$ & 0.30)

Fig. 5 Inverse estimation of an inlet mass fraction of O₂ (Case 2)

Fig. 6 Inverse estimation of inlet mass fractions of CH₄ and O₂ (Case 3)

서 최고 적합도 값이 10^{-6} 이하로 도달하는 것을 알 수 있다. 또한 미지의 질량분율 값 Y_{CH_4} 를 탐

초기 계산에서 해를 탐색하기 위한 약간의 변동만 있을 뿐 각 condition의 최적값인 0.89와 0.70으로 빠

르게 수렴하였다. 이와 반대로, case 2에서는 산소 (O_2)와 질소(N_2)로만 구성된 산화제 내에서 산소성분의 초기 질량분율 값 Y_{O_2} 를 역추정하는 경우를 고려하였다. 이때 미지의 Y_{O_2} 의 실제 값은 두 가지 condition에 대해 각각 0.21(21%)과 0.30(30%)이 되, 연료 내 메탄의 질량분율 Y_{CH_4} 는 각각 0.89(89%)와 0.70(70%)로 이미 결정되어 있다고 가정하였다. 목적함수의 최고 적합도 결과를 Fig. 5(a)에 제시하였으며, case 1과 비교한 결과, 급격하게 최적값을 찾아가면서 case 1보다는 비교적 적은 약 30번째 계산 단계에서 최고 적합도 값이 10^{-6} 이하로 수렴이 빠른 것을 알 수 있다. 이러한 원인을 파악하기 위해 최적해를 탐색해 가는 과정을 도시한 Fig. 5(b)를 살펴본 결과, 임의로(random) 생성된 미지의 Y_{O_2} 초기 값이 계산 초기단계부터 최적값과 유사한 값으로 설정되었기 때문으로 유추된다. 그 결과 Fig. 4(b)보다 계산 초기단계부터 최적값에 근접하게 수렴하였기 때문에 변동의 폭이 적은 것으로 확인되었다. 마지막으로 메탄과 산소의 초기 질량분율 값인 Y_{CH_4} 와 Y_{O_2} 가 모두 미지의 파라미터이며, 이 값들을 동시에 역추정하는 경우에 대해 고려하였다. 그 결과 Fig. 6(a)에서 보듯이 목적함수의 최고 적합도 분포는 한 가지 값만을 역추정하는 case 1과 2에 비해 다소 완만하게 진행되며, 10^{-6} 이하로 수렴하기 위해서는 계산횟수가 추가로 더 필요한 것을 알 수 있다. 또한 미지의 질량분율 값들을 탐색해 가는 과정을 살펴본 결과, 계산 초기단계에서 case 1과 2보다 비교적 변동 폭이 크게 발생하였으며, 계산이 진행될수록 점차 최적값으로 수렴해 가는 것으로 확인되었다. 이는 한 가지 값만을 역추정하는 경우보다 미지의 변수 값이 2배로 증가하였기 때문에 최적값을 빠르게 유추하는데 필요한 사전정보(prior information)가 부족한 상태이다. 따라서 정확한 최적값을 탐색하기 위해서는 case 1, 2보다 더 많은 계산횟수가 필요하기 때문인 것으로 예측할 수 있다. Table 2에 모든 case의 초기 질량분율을 추정된 역해석 결과를 정리했으며, 추정결과에 대한 정확도를 비교하기 위해 상대오차(relative error)와 그 평균값인 평균상대오차(averaged relative error)를 함께 제시하였다. 그 결과 측정 온도값들에 오차가 없을 경우, 모든 case에 대해 최적값들을 정확하게 역추정하는 것을 알 수 있다. 이러한 이유로는 에너지 방정식인 식 (3)과 화학종 보존 방정식인 식 (5)가 직

접적으로 강하게 연관되어 있기 때문인 것으로 유추된다. 즉, 엔탈피 h 를 계산하기 위해서는 식 (4)와 같이 각 화학종의 질량분율을 함께 고려해야 하며, 또한 연료의 화학반응률 $\dot{\omega}_f$ 가 에너지 방정식과 화학종 보존 방정식에서 동시에 생성항으로 포함되어 있기 때문에, 에너지 방정식으로부터 유추한 온도 측정 값을 이용해 화학종 보존 방정식의 질량분율을 정확하게 역추정하는 것이 가능하다는 결론을 얻을 수 있었다.

5. 결론

본 연구에서는 기존의 역열전달 문제에 사용되었던 역해석 방법을 복잡한 연소문제에 도입함으로써 열전달 문제에 한정되어 사용되고 있는 역해석을 새로운 공학문제에 확장하여 적용하였다. 이를 위해 실제적으로 광범위하게 사용되고 있는 축대칭 원통형 연소기의 확산지배 난류 연소현상을 고려하였으며, 복잡한 연소현상을 효율적으로 역해석하기 위해 최적화 방법 중의 하나인 반발입자 군집 최적화 방법을 역해석 기법으로 적용하였다. 그 결과, 연소기 입구 근처에서 개스의 온도 데이터를 측정 후 이 데이터를 이용하여 역해석을 수행함으로써 연소기로 주입되는 연료와 산화제에 대해 메탄과 산소 성분의 초기 질량분율 값을 정확하게 추정할 수 있었다. 따라서 기존의 열전달 문제뿐만 아니라 복잡한 연소문제에 대해서도 역해석 방법을 충분히 적용할 수 있으리라 판단된다. 현재 질량분율과 더불어 유입 속도 등과 같은 다양한 유입조건들 동시에 추정함으로써 실제적인 연소문제에 대해 역해석 방법의 활용성에 대한 연구를 수행중이며, 이러한 역해석 방법을 이용함으로써 짧은 시간 내에 효율적인 연소기 설계 및 최적화로의 응용이 충분히 가능하리라 판단된다.

후 기

이 연구는 교육과학기술부의 재원으로 한국과학재단 과제(No.2009-0079086)와 "다목적실용위성본체개발사업"의 지원을 받아 수행된 연구임.

참고문헌

(1) Lewis, M. H. and Smoot, L. D., 1981, "Turbulent Gaseous Combustion Part I : Local

- Species Concentration Measurements," *Combust. Flame*, Vol. 42, No. 2, pp. 183~196.
- (2) Gran, I. R., Mellen, M. C., and Magnussen, B. F., 1994, "Numerical Simulation of Local Extinction Effects in Turbulent Combustor Flows of Methane and Air," *25th Symposium (International) on Combustion*, pp. 1283~1291.
- (3) Aslanyan, G. S. and Maikov, I. L., 1998, "Numerical Simulation of Turbulent Gaseous Combustion in Axially Symmetric Combustion Chambers," *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, Vol. 34, pp. 369~377.
- (4) Richards, R. F., Ribail, R. T., Bakkom, A. W., and Plumb, O. A., 1997, "Fire Detection, Location and Heat Release Rate Through Inverse Problem Solution," *Fire Safety Journal*, Vol. 28, No. 4, pp. 323~350.
- (5) Fan, H., Li, B., Yang, L., and Wang, R., 2002, "Simultaneous Estimation of the Temperature and Heat Rate Distributions within the Combustion Region by a New Inverse Radiation Analysis," *J. Quant. Spectrosc. Ra.*, Vol. 74, pp. 75~83.
- (6) Zheng, Y. and Gore, J. P., 2005, "Measurements and Inverse Calculations of Spectral Radiation Intensities of a Turbulent Ethylene/Air Jet Flame," *Proc. of the Combustion Institute*, Vol. 30, pp. 727~734.
- (7) Han, S. H., Kim, D. M., Baek, S. W., and Kim, C. Y., 2006, "3D Unsteady Numerical Analysis of Slab Heating Characteristics in a Reheating Furnace for Steel Mill Company," *J. of the KSC*, Vol. 11, No. 1, pp. 34~42.
- (8) Oh, C. B. and Lee, C. E., 2001, "Numerical Simulation of Unsteady CH₄/Air Jet Diffusion Flame," *Trans. of the KSME(B)*, Vol 25, No. 8, pp.1087~1096.
- (9) Magnussen, B. F. and Hjertager, B. H., 1976, "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Emphasis on Soot Formation and Combustion," *16th Symposium (International) on Combustion*, pp. 719~729.
- (10) Byggstøyl, S. and Magnussen, B. F., 1983, "A Model for Flame Extinction in Turbulent Flow," *4th Symposium (International) on Turbulent Shear Flows*, pp. 1032~1038.
- (11) Ferziger, J. H. and Peric, M., 2001, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer.
- (12) Kim, K. W., Baek, S. W., Kim, M. Y., and Ryou, H. S., 2003, "A Study on a Hybrid Genetic Algorithm for the Analysis of Inverse Radiation," *Trans. of the KSME(B)*, Vol, 10, pp.1516-1523.
- (13) Lee, K. H., Baek, S. W., Kim, K. W., and Kim, M. Y., 2007, "A Study on Inverse Radiation Analysis using RPSO Algorithm," *Trans. of the KSME(B)*, Vol. 31, No. 7, pp.635~643.
- (14) Lee, K. H., Baek, S. W., and Kim, K. W., 2008, "Inverse Radiation Analysis Using Repulsive Particle Swarm Optimization Algorithm," *Int. J. Heat Mass Tran.*, Vol. 51, pp. 2772~2783.
- (15) Kennedy, J. and Eberhart, R., 1995, "Particle Swarm Optimization," *Proc. of the IEEE Int. Conf. Neural Networks*, Perth, Australia, pp. 1942~1945.