

# 제트 확산화염구조에 대한 FDS 연소모델의 예측성능 비교 연구

박은정 · 오창보<sup>†</sup>

부경대학교 안전공학부

(2010. 1. 15. 접수 / 2010. 6. 14. 채택)

## A Comparison Study of the Prediction Performance of FDS Combustion Model for the Jet Diffusion Flame Structure

Eun Jung Park · Chang Bo Oh<sup>†</sup>

Department of Safety Engineering, Pukyong National University

(Received January 15, 2010 / Accepted June 14, 2010)

**Abstract :** A prediction performance of Fire Dynamics Simulator(FDS) developed by NIST for the diffusion flame structure was validated with experimental results of a laminar slot jet diffusion flame. Two mixture fraction combustion models and two finite chemistry combustion models were used in the FDS simulation for the validation of the jet diffusion flame structure. In order to enhance the prediction performance of flame structure, DNS and radiation model was applied to the simulation. The reaction rates of the finite chemistry combustion models were appropriately adjusted to the diffusion flame. The mixture fraction combustion model predicted the diffusion flame structure reasonably. A 1-step finite chemistry combustion model cannot predict the flame structure well, but the simulation results of a 2-step model were in good agreement with those of experiment except CO<sub>2</sub> concentration. It was identified that the 2-step model can be used in the investigation of flame suppression limit with further adjustment of reaction rates.

**Key Words :** laminar jet diffusion flame, CH<sub>4</sub>-Air, numerical simulation, FDS, combustion model

### 1. 서론

화재는 제어되지 않은 연소현상으로서 매우 복잡한 물리, 화학적 특성을 가지고 있다. 화재는 그 규모나 복잡성 등으로 인해 실험적으로 구현할 때 제한을 받는 경우가 많기 때문에 화재현상을 접근하기 위한 다양한 방안 중에서 수치해석이 매우 중요한 역할을 하고 있다. 최근에는 컴퓨터와 모델링 기법의 발달로 인해 화재에 대한 수치계산 연구가 활발히 진행되고 있다. 최근에는 미국 NIST에서 개발한 화재해석 코드인 Fire Dynamics Simulator (FDS)<sup>1,2)</sup>가 무상으로 배포되면서 이를 활용한 화재 수치계산 연구가 많이 진행되고 있다.

FDS 화재 해석코드는 기본적으로 유동에 대해서는 대와동모사법(Large Eddy Simulation; LES)을 채택하고 있어 화재에서 발생하는 화염이나 연기의 비정상적 전파과정에 대해서는 비교적 우수한

예측성능을 보이고 있다. 그러나 LES를 적용하더라도 화염에 대한 예측성능은 전적으로 연소모델 성능에 의존하게 된다. 따라서 화재현상 중에서 화염과 관련된 특성이나 소화현상에 대해 신뢰할만한 LES 수치계산 결과를 얻기 위해서는 고급연소모델을 적용할 필요가 있다. 하지만 고급연소모델은 계산시간이 많이 걸리는 단점이 있기 때문에 현재의 컴퓨터 능력을 고려할 때 대규모의 화재현상을 계산하기에는 적합하지 않다. 이러한 점을 고려하여 FDS에서는 기본 연소모델로 계산시간이 적게 소요되는 혼합분율 연소모델(Mixture fraction combustion model)을 적용하고 있다. 그러나 이 혼합분율 연소모델은 화염소화나 특정 화재현상에 대해서는 예측성능이 매우 낮은 한계를 가지고 있다. 이것은 혼합분율 연소모델이 근원적으로 화염 구조를 적절히 모사하는데 많은 한계를 보이기 때문이다.

현재 국내에서도 FDS를 활용한 화재 수치계산 연구가 활발히 진행되고 있는데, 이들 연구 중에는

<sup>†</sup> To whom correspondence should be addressed.  
cboh@pknu.ac.kr

혼합분율 연소모델을 적용한 FDS의 신뢰도를 충분히 검증하지 않고 화재의 수치계산에 적용하는 사례도 많다. FDS를 활용한 화재 수치계산에서 좀 더 신뢰할 수 있는 결과를 얻기 위해서는 FDS에 채택되어 있는 연소모델이 화염의 기본 연소특성에 대해 어떠한 예측성능을 보이는지 구체적으로 검토해볼 필요가 있다.

따라서 본 연구에서는 난류와 같이 불명확성을 포함하지 않으면서 기하학적 형상이 단조롭고, 화재와 비슷한 연소특성을 갖는 층류 제트 확산화염을 대상으로 FDS에 채택되어 있는 연소모델의 예측성능을 비교, 검토하고자 한다. 본 연구의 최종 연구목표는 소화현상 및 화재의 거시적 구조를 포함한 FDS 연소모델의 예측성능을 검토하는 것이지만, 현 단계에서는 층류 제트 확산화염구조에 대한 예측의 정확성을 우선 검토하고자 한다.

## 2. 수치계산 방법

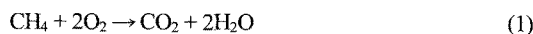
### 2.1. 수치해법

본 연구에서 층류 제트 확산화염구조의 예측에는 FDS 5.0이 이용되었다. 검토된 FDS의 연소모델로는 CO를 고려할 수 없는 1단계 혼합분율 연소모델(MF), CO까지 고려할 수 있는 2단계 혼합분율 연소모델(MF-CO)과 연료의 산화과정을 유한한 화학반응으로 모사할 수 있는 1단계(1-step)<sup>3)</sup> 및 2단계(2-step)<sup>4)</sup> 유한화학반응(Finite chemistry) 연소모델 등 총 4종류이다.

LES 기법은 기본적으로 난류화염에 적용하는 기법이므로 본 연구의 층류 제트 확산화염에 대한 수치계산에는 직접수치모사(Direct Numerical Simulation; DNS) 기법을 적용하였다.

본 연구에서 사용된 연소모델 중 MF와 MF-CO에 대해서는 FDS 매뉴얼<sup>1)</sup>에 자세히 설명되어 있으므로 여기서는 생략한다. 또한 본 연구에 이용된 1단계 및 2단계 유한화학반응 연소모델의 반응식과 반응물은 아래의 식 (1)~(6)과 같다. 원래의 1단계 및 2단계 유한화학반응 연소모델은 예혼합화염에 최적화된 반응기구이므로 본 연구에서는 확산화염의 구조를 좀 더 정확히 예측할 수 있도록 반응물을 적절히 수정하였다.

#### 1단계 유한화학반응 연소모델



$$\text{RR}_1 = 5.5^{13} \exp\left(\frac{-140,000}{RT}\right) [\text{CH}_4]^{1.0} [\text{O}_2]^{1.0} \quad (2)$$

#### 2단계 유한화학반응 연소모델



$$\text{RR}_1 = 4.2^{12} \exp\left(\frac{-99,314}{RT}\right) [\text{CH}_4]^{1.0} [\text{O}_2]^{1.0} \quad (5)$$

$$\text{RR}_2 = 4.2^{12} \exp\left(\frac{-99,314}{RT}\right) [\text{CH}_4]^{1.0} [\text{O}_2]^{1.0} \quad (6)$$

여기서, Pre-exponential factor의 단위는  $\text{cm}^3/\text{mol}/\text{s}$ 이고 지수함수 내부에 들어있는 활성화에너지의 단위는  $\text{kJ}/\text{kmol}$ , 농도를 표시하는 [ ]는 각 화학종의 몰농도로서 단위는  $\text{kmol}/\text{m}^3$ 이다. 식 (3)은  $\text{CH}_4$ 의 산화반응으로서 완전한 연소반응이 아니기 때문에 통상 알려진  $\text{CH}_4$ 의 연소열을 사용할 수 없으며, 그 반응을 통해서만 출입되는 반응열에 대한 정보가 필요하다. 따라서 식 (3)의 반응열은 반응물과 생성물의 엔탈피 균형을 고려하여 계산<sup>5)</sup>하였으며 얻어진 값은  $32,300\text{kJ}/\text{kg}$ 이다. 나머지 반응들에 대해서는 알려진  $\text{CH}_4$ 과  $\text{CO}$ 의 연소열을 사용하였다.

### 2.2. 계산조건

Fig. 1은 본 연구에서 FDS의 연소모델 검증을 위해 도입한 층류 슬릿제트 확산화염에 대한 기하학적 형상과 버너 형상을 보여주고 있다. 이 버너는 Norton 등<sup>6)</sup>의 실험에 이용된 것으로서, 본 연구에서 얻어진 FDS 결과는 이 실험결과와 비교, 검토되었다. 실험과 계산에서 연료로는  $\text{CH}_4$ 이 사용되었으며 주위류인 공기가 연료류 양쪽에서 공급되는 형상을 가지고 있다. FDS 계산에서는 기존 실험과 동일하게 연료 및 공기 분출구의 폭은 각각  $8\text{mm}$ 와  $16\text{mm}$ 로 하였으며 연료 및 공기의 유속은 각각  $11\text{cm}/\text{s}$  및  $21.7\text{cm}/\text{s}$ 로 하였다. 초기 분출되는 연료와 공기의 온도도 실험과 동일한  $328\text{K}$ 로 하였다. 혼합분율 연소모델의 경우에는 별도의 착화과정이 필요 없지만 유한화학반응 연소모델의 경우에는 화염을 형성시키기 위해서 고온을 일시적으로 공급해주는 착화과정을 가져야 한다. 이를 위해서  $0.3\text{s}$ 까지  $1787\text{K}$ 을 주다가 그 후로는  $328\text{K}$ 으로 일정하게 온도를 유지하는 방식으로 확산화염을 형성하였다.

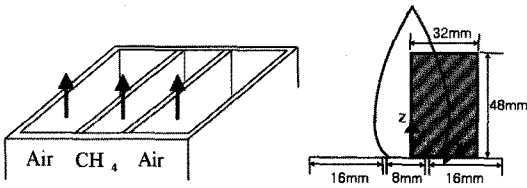


Fig. 1. Geometry of slot burner(LHS) and the simulation domain(RHS).

본 연구에서는 계산시간 절감을 위해 직교좌표계를 이용한 2차원 축대칭 계산을 수행하였다. 사용된 계산영역은  $x \times z = 32\text{mm} \times 48\text{mm}$ 로 하였다. x방향 외측과 z방향 상부의 경계는 개방되도록 경계조건을 처리하였다.

### 2.3. 격자크기

층류 제트 확산화염은 유동의 수직방향 즉, x축 방향으로 온도구배가 크므로 그 방향으로의 격자 크기에 따라 민감한 영향을 받게 된다. 화염구조의 격자에 대한 민감성을 확인하기 위해 Fig. 2에는 2-step으로 계산한 격자 민감도 결과를 도시하였다. 혼합분을 연소모델의 경우 유한화학반응 연소모델보다 격자에 대한 민감도가 낮기 때문에 별도로 검토하지는 않았으며, 1-step의 경우에는 2-step과 유사한 경향을 보이기 때문에 별도로 도시하지는 않았다. 격자의 크기의 영향은 주로 x축 방향에 대해 변화시키면서 검토를 했는데, 화염온도는 격자 크기에 그다지 큰 영향은 없지만 열발생률은 격자 크기에 큰 영향을 받는 것을 알 수 있었다. 특히 x방향 격자의 크기( $\Delta x$ )가 0.5mm인 경우에는 열발생률을 정확히 예측하지 못하였으며  $\Delta x$ 가 0.25mm보다 작으면 큰 차이가 없음을 확인하였다. 또한

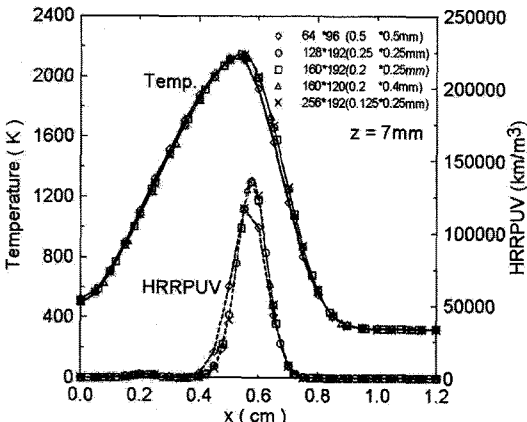


Fig. 2. Result value of laminar diffusion flame by grid size.

축방향 격자의 크기( $\Delta z$ )는 0.4mm보다 작으면 큰 영향이 없음을 확인하였다. 최종적으로 본 연구에서는  $\Delta x = 0.2\text{mm}$ ,  $\Delta z = 0.4\text{mm}$ 로 하여 수치계산에 이용된 격자계는  $N_x \times N_z = 160 \times 120$ 로 구성되어 있다.

### 3. 수치결과 및 고찰

Fig. 3은 혼합분을 연소모델(MF, MF-CO)과 반응물 수정을 하지 않은 유한화학반응 연소모델(1-step, 2-step)로 계산한  $z = 7\text{mm}$  단면에서의 화염온도 및 유속분포를 보여주고 있다. MF와 MF-CO로 계산한 화염온도와 유속은 실험값과 잘 일치하고 있지만 1-step으로 계산한 화염온도는 실험값보다 높게 예측하고 있으며 특히 산화제 측에서 높게 예측하고 있음을 알 수 있다. 또한 화염온도를 높게 예측하여 열팽창 효과를 크게 계산하고 있기 때문에 화염 최고점보다 산화제측에서 유속분포를 실험값보다 높게 예측을 하고 있음을 알 수 있다. 2-step의 원래 반응물로 계산을 수행했을 때에는 반응물이 낮아 화염이 형성되지 않았으므로 그림에 도시할 수 없었다. 1-step은 화염온도를 높게 예측하고 있으며, 2-step은 화염을 형성시키지 못하였기 때문에 이 두 연소모델에 대해서는 확산화염 예측에 적합하도록 수정할 필요가 있음을 확인하였다.

본 연구에서는 복사효과가 화염온도 분포에 미치는 영향을 검토하였다 이를 위해서 복사모델을 포함하지 않은 계산, Gray-gas 모델과 Wide-band 모델을 이용한 3가지 조건으로 계산을 수행하였으며 계산한 화염구조 결과들을 Fig. 4에 도시하였다. 그

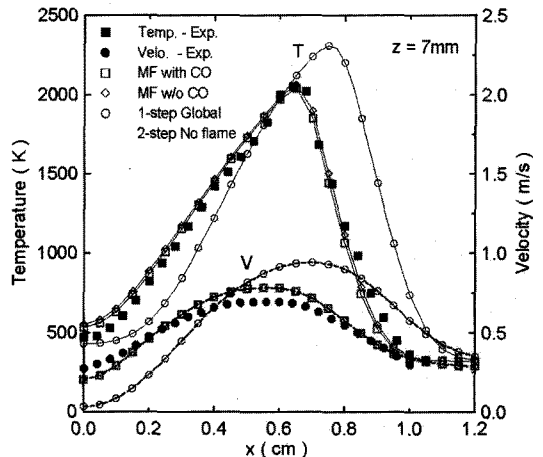


Fig. 3. Comparison of the simulation and experimental results for the temperature and axial velocity.

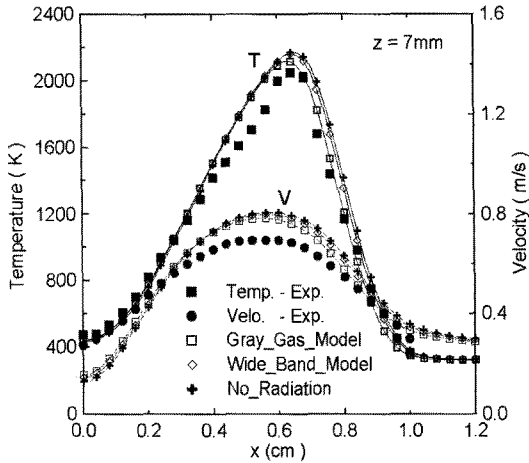


Fig. 4. Effects of radiation on the diffusion flame structure.

림의 결과는 2-step으로 계산한 결과로서 복사효과를 고려한 경우가 화염온도를 좀 더 낮게 예측하여 실험값과 유사함을 알 수 있다. 또한 복사모델 중에서는 Gray-gas 모델이 가장 실험값을 잘 예측하는 것을 알 수 있다. 그림에 도시하지는 않았지만 1-step으로 계산한 결과도 2-step과 유사한 경향을 보였다. 그러나 혼합분율 연소모델로 계산한 경우에는 두가지 복사모델을 포함한 계산결과와 복사를 고려하지 않은 계산결과들 사이에 차이가 거의 없음을 확인하였다. 이후 FDS 연소모델의 검토에는 모두 Gray-gas 복사모델을 포함하여 계산하였다.

Fig. 5에서는 MF와 MF-CO 및 반응물이 수정된 1-step 및 2-step으로 계산한 결과를 도시하였다. 혼합분율 연소모델 결과는 Fig. 3에서의 결과와 동일하다. 먼저 온도와 유속에 대해서 1-step은 원래의 반응물 계산결과보다 온도를 약간 낮게 예측하였

지만 여전히 산화제 측에서 온도가 높았으며, 유속에서도 차이를 보였다. 반면에 2-step은 전체 온도 분포를 잘 예측하는 것을 알 수 있었다. 1-step과 2-step은 이 보다 반응률을 낮게 수정할 경우에는 화염이 소화되기 때문에 추가적인 반응률 수정은 불가능하였다. 산화제 및 H<sub>2</sub>O 농도에 대해 MF와 MF-CO로 계산한 결과는 실험값을 잘 예측하고 있지만 연료(CH<sub>4</sub>) 농도는 높게 예측하고 있음을 알 수 있다. 수정된 1-step은 실험값보다 전체 화염구조를 우측으로 예측하는 것을 알 수 있다. 2-step은 연료와 산화제를 잘 예측하는데 반해 H<sub>2</sub>O는 다소 낮게 예측하고 있음을 알 수 있다.

CO<sub>2</sub> 및 CO 농도에 대한 각 연소모델의 예측성능을 보면 우선 MF와 MF-CO는 약간의 차이는 있지만 CO<sub>2</sub> 농도에 대해서는 비교적 잘 예측하고 있으며, MF-CO는 CO 농도에 대해서도 약간 낮게 예측하고 있음을 알 수 있다. 이에 반해 1-step에는 화학종 CO가 포함되어 있지 않기 때문에 CO 농도를 예측할 수 없었으며 CO<sub>2</sub> 농도에 대해서는 매우 높게 예측하는 것을 알 수 있다. 2-step은 CO 농도에 대해서는 합리적으로 예측하고 있지만 CO<sub>2</sub> 농도에 대해서는 1-step 보다 낮지만 여전히 실험값보다 높게 예측하고 있음을 알 수 있다. 이것은 화염온도의 과대 예측과도 연관된 것으로 사료된다. 그림에는 도시하지 않았지만 z=9mm 단면에서도 z=7mm 단면에서의 결과와 비슷한 수준으로 수치계산이 실험값을 예측하는 것으로 확인되었다.

Fig. 6은 z=11mm 단면에서의 MF와 MF-CO, 수정된 1-step 및 2-step으로 계산한 결과를 보여주고 있다. z=11mm 단면에서도 그림에서 확인할 수 있듯이 화염온도, 유속분포 및 주요 화학종 농도분포에 대한 각 연소모델의 예측성능은 앞 단면들과

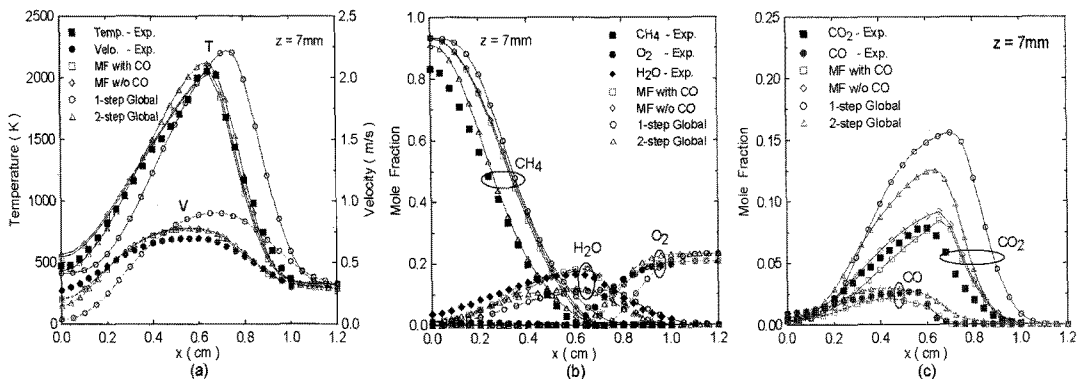


Fig. 5. Comparison of the simulation and experimental results for (a) temperature, z-directional velocity, (b) CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O mole fraction, (c) CO<sub>2</sub> and CO mole fraction,

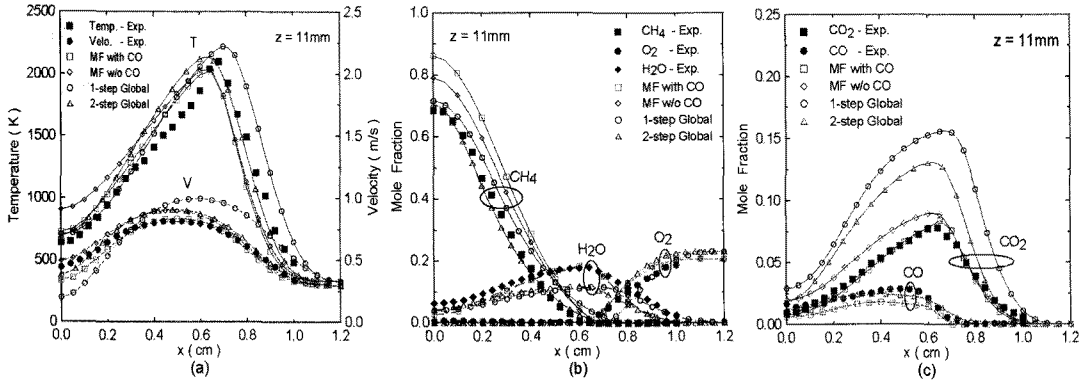


Fig. 6. Comparison of the simulation and experimental results for (a) temperature, z-directional velocity, (b) CH<sub>4</sub>, O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O mole fraction, (c) CO<sub>2</sub> and CO mole fraction.

유사한 정도를 보이고 있음을 확인하였다. 다만, 연료분포와 산화제 분포에 대해서 1-step은 앞의 단면들에서 보다 잘 예측하고 있음을 알 수 있다.

Fig. 7은 FDS로 계산한 층류 슬롯 제트 확산화염의 화염온도 분포와 열발생률 분포를 보여주고 있다. 화염온도는 대략 당량비가 1인 화염면 부분에서 고온으로 예측되고 있으며 1-step은 화염의 폭이 가장 넓고 온도분포가 높게 예측하고 있다. 모든 결과에서 열발생률은 연료노즐 근처의 상류부분에서 가장 높지만 화염 온도는 하류에서 높게 예측되고 있다. 일반적인 확산화염에서는 열발생률이 높은 영역은 화염신장물이 큰 곳으로서 화염온도는 낮게되며 열발생률이 낮은 영역은 화염신장물이 작은 곳으로서 화염온도는 높아지게 된다. 그림의 결과는 일반적인 확산화염의 구조와 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 참고로, 상류의 열발생률이 높은 영역을 선단화염(Edge flame)이라고 하는데 이 부분은 화염의 소화과 직접 관련이 되는 중요한 부분으로서 추후 연구를 통해 보다 구체적으로 검토할 예정이다.

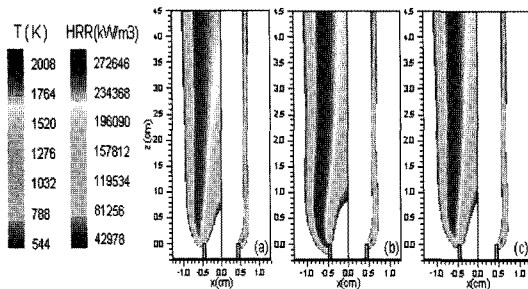


Fig. 7. Flame temperature(LHS) and heat release rate(RHS) of laminar slot jet diffusion flame. (a) CO-MF, (b) 1-step and (c) 2-step.

Fig. 8에는 층류 슬롯 제트 확산화염의 연료(CH<sub>4</sub>) 및 산화제(O<sub>2</sub>) 분포를 도시하였다. 제트 확산화염에서는 고온 화염대를 경계로 내부는 연료가 분포하고 외부는 산화제가 분포하게 된다. 각 그림의 좌측 연료분포에서 흰색은 공기가 분포하는 영역이고 우측 산화제 분포에서 흰색은 연료가 분포하는 영역에 해당된다. 연료와 산화제가 거의 존재하지 않는 영역이 화염대로 볼 수 있기 때문에 연료농도가 대략 0.14 이하의 낮은 영역이 Fig. 7의 고온 화염대와 유사한 것을 알 수 있다. 이상의 결과로부터 제트 확산화염의 연료와 산화제 분포를 잘 확인할 수 있었다.

Fig. 9에는 층류 슬롯 제트 확산화염에서 발생하는 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)와 일산화탄소(CO)의 농도분포를 도시하였다. 1-step은 CO가 포함되어 있지 않아서 그림에 도시할 수는 없었다. CO<sub>2</sub>는 연료 산화 과정에서 발생하기 때문에 고온 화염대에서 농도가 높게 된다. 따라서, CO<sub>2</sub> 농도분포는 Fig. 7의 온도분포와 유사한 형태를 보인다. (a)와 (c) 그림에서 Fig. 7의 온도분포와 다르게 보이는 것은 그림 농

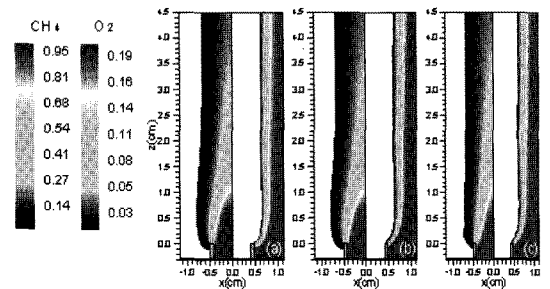


Fig. 8. Computed fuel(CH<sub>4</sub> : LHS) and oxidizer(O<sub>2</sub> : LHS) concentration contours of laminar slot jet diffusion flame. (a) CO-MF, (b) 1-step and (c) 2-step.

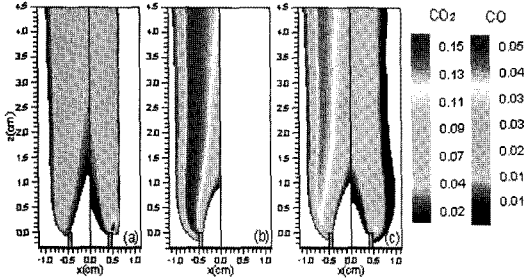


Fig. 9. carbon dioxide(CO<sub>2</sub> : LHS) and carbon monoxide(CO : RHS) mole fraction contours of laminar slot jet diffusion flame. (a) CO-MF, (b) 1-step and (c) 2-step.

도값의 스케일 차이에 기인한 것이며 각 그림의 최고농도를 기준으로 다시 그림을 그린다면 화염온도 분포와 유사한 결과를 확인할 수 있다. CO 농도분포의 경우에는 (a)에서 명확하게 확인할 수 있는 바와 같이 Fig. 7의 열발생률이 높은 부분에서 농도가 가장 높게 예측 되고 있다. 이는 열발생률이 높은 영역이 화염신장률이 높기 때문이다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 슬롯버너에서 형성된 CH<sub>4</sub> 확산 화염의 구조에 대한 실험결과와 4가지 연소모델을 적용한 FDS 수치계산 결과를 비교 검토하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 혼합분율 연소모델들은 연료분포를 제외하면 온도 및 화학종 농도를 잘 예측함을 알 수 있다.
- 2) 1단계 및 2단계 유한화학반응 연소모델은 반응물이 예혼합 화염에 최적화 되어 있기 때문에 확산화염 구조를 예측을 위해서는 반응물을 적절히 수정할 필요가 있음을 알았다.
- 3) 수정된 1단계 유한화학반응 연소모델은 연료, 산화제 농도는 잘 예측하지만, 나머지 온도 및 화학종의 예측성능은 많이 떨어짐을 확인할 수 있었다.

4) 수정된 2단계 유한화학반응 연소모델은 CO<sub>2</sub>를 약간 과대 예측하지만 전체적으로 화염구조를 잘 예측함을 알 수 있었다. 이 반응기구는 추가적인 수정이 적절히 이루어진다면 화염소화 한계를 예측하는 데에도 이용될 수 있을 것으로 판단된다.

**감사의 글 :** 이 논문은 한국과학기술정보연구원의 슈퍼컴퓨팅응용 전략적 자원할당제도를 통해 전산자원을 지원받아 수행된 연구성과입니다(과제번호 : KSC-2009-S02-0011).

#### 참고문헌

- 1) K. McGrattan, B. Kelvin, S. Hostikka and J. Floyd, "Fire Dynamics Simulator(Version 5) User Guide", NIST, Special Publication 1019-5, 2008.
- 2) K. McGrattan, S. Hostikka, J. Floyd, H. Baum, R. Rehm, W. Mell and R. McDermott, "Fire Dynamixs Simulator(Version 5) Technical Reference Guide", NIST, Special Publication 1018-5, 2007.
- 3) M., Bui-Pham, "Incorporating Reduced Kinetic Mechanisms in Numerical Simulations of Non-premixed Flames", University of Colorado, 2002.
- 4) V. DuPont, M. Pourkashanism and A. Williams, "Global Kinetic Mechanism Rate Expressions for Methane", J. Inst. Energy, Vol. 66, pp. 20~28, 1993.
- 5) S. R. Turns, "An Introduction to Combustion- Second Edition", McGRAW-HILL, 2006.
- 6) T. Norton, K. Smyth, J. Miller and M., Smooke, "Comparison of Experimental and Computed Species Concentration and Temperature Profiles in Laminar, Two-Dimensional Methane/Air Diffusion Flames", Combust. Sci. Tech., Vol. 90, pp. 1~34, 1993.