

MEPDF를 이용한 와류 연소실 내부 예혼합 화염의 대 와동 모사

김남수* · 김용모**

한양대학교 기계공학과

Large Eddy Simulation of Turbulent Premixed Flame in a Swirled Combustor Using Multi-environment Probability Density Function approach

Namsu Kim* and Yongmo Kim**

Department of Mechanical Engineering, Hanyang University

(Received 4 July 2017, Received in revised form 8 August 2017, Accepted 11 August 2017)

ABSTRACT

The multi-environment probability density function model has been applied to simulate a turbulent premixed flame in a swirl combustor. To realistically account for the unsteady flow motion inside the combustor, the formulations are derived for the large eddy simulation. The Flamelet generated manifolds is utilized to simplify a multi-dimensional composition space with reasonable accuracy. The sub grid scale mixing is modeled by the interaction by exchange with the mean mixing model. To validate the present approach, the simulation results are compared with experimental data in terms of mean velocity, temperature, and species mass fractions.

Key Words : Large eddy simulation, Multi-environment probability density function, Flamelet generated manifolds, Swirled combustor, PRECCINSTA

기 호 설 명

Alphabets

C_ϕ : Micromixing constant
F : Joint scalar PDF
p : pressure
P : weight
S : strain rate
Sc : Schmidt's number
T : temperature
u : velocity vector
Z : mixture fraction
Y : progress variable

Greeks

Δ : LES filter size
 μ : viscosity
 ρ : density
 ϕ : composition(abcissa) vector
 ω : reaction rate

Subscripts

RMS : root mean square of a variable
sgs : sub-grid scale property
t : turbulence property
x : axial component of a vector

1. 서론

† Corresponding Author, ymkim@hanyang.ac.kr

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

최근 개발되는 연소기들은 공해물질의 저감을 위해 아주 희박한 혼합조건에서 작동하고 있다. 이들은 비교적 낮은 온도의 화염을 생성하여, 온도에 따라 민감하게 생성량이 변하는 질소산화물의 생성을 억제하는 특성이 있다. 이렇게 희박한 혼합물을 이

용한 연소기의 경우 화염안정화를 위해, 주로 연소기 내부에 강한 와류를 생성한다. 생성된 와류는 연소 생성물의 에너지와 라디칼들이 반응하지 않은 혼합물과 섞여 화염이 유지되는 것을 돕는다. 따라서 연소기 내부의 화염을 예측하기 위해서는 연소 모델뿐만 아니라 정확한 유동의 모사가 필수적이다.

Large Eddy Simulation(LES)은 기존의 Reynolds Averaged Navier-Stokes equations (RANS) 모델과는 달리 큰 스케일의 유체거동은 수치격자를 통해 직접 계산하고 수치격자보다 작은 스케일의 유체거동만 SGS(Sub-Grid Scale) 모델을 통해 모사하여 비정상적이고 복잡한 유동을 실제와 가깝게 모사할 수 있다는 장점이 있다. 또한, 모델링 되는 부분이 상대적으로 작으므로 모델상수를 문제에 따라 바꾸지 않아도 정확도가 민감하게 변하지 않는 장점도 있다. 그러나 LES의 SGS모델들은 수치격자의 크기를 파라미터로 사용하므로 RANS보다 훨씬 더 조밀한 수치격자가 필요하여 계산비용이 증가하게 된다. 따라서 효율적이고 정확한 연소모델이 LES에 기반을 둔 연소기 해석에 요구된다.

수송확률밀도 함수 모델은 추가적인 가정 없이 비선형적인 난류-화학반응 상호작용을 고려할 수 있다는 장점이 있으므로 가장 신뢰할 수 있는 연소 모델이다[1]. 이 모델에서는 다차원의 변수를 고려해야 하므로 수치입자를 도입한 Monte-Carlo 방법이 사용된다. 단위 수치격자 내에서 다차원의 Joint composition Probability Density Function(JPDF)는 수십-수백 개의 수치입자들의 Stochastic Differential Equation (SDE)를 통해 표현된다. 때문에 격자수가 많은 LES에서 수치입자를 사용한 수송확률밀도함수 모델을 사용하는 데는 아주 많은 계산량이 필요하다.

Multi-Environment Probability Density Function (MEPDF)은 수송확률밀도 함수모델의 장점을 유지하면서 수치모사를 효율적으로 진행하기 위해서 개발되었다[2]. MEPDF는 JPDF를 적은 수(2-3)의 weighted Dirac delta function의 합으로 가정하고 이를 조성공간에서 적분하여 JPDF의 차원을 낮추고 Eulerian 수송방정식으로 JPDF를 해석할 수 있다.

탄화수소화합물의 복잡한 화학반응 메커니즘을 정확하게 고려하기 위해서는 수십 개의 화학종과 수백 개의 화학반응으로부터 유도된 ODE를 계산해야만 한다. 이 계산은 반응유동 계산시간의 대부분을 차지할 만큼 계산량이 많다. 따라서 현실적인 LES를 진행하기 위해서 다차원의 화학반응 메커니즘을 적은 수의 파라미터들로 표현하고 데이터베이스화시켜 ODE 계산을 피하는 방법들이 고안되었다. 대표적인 방법들이 Flamelet[3], Flamelet Progress variable [4], 그리고 Flamelet Generated Manifolds(FGM)[5]이다. 이 방법들을 적용하면 적은 수의 변수들을 통

해 온도, 밀도, 그리고 화합물의 농도들에 대한 정보를 알 수 있다.

본 연구에서는 LES 기반의 MEPDF를 이용하여 와류 연소실 내부의 난류 예혼합 화염에 적용하였다. 계산의 효율성을 높이기 위해서 예혼합 화염편 기반의 FGM 라이브러리를 만들어 계산에 이용하였다. 계산된 유동장, 온도, 화학종에 대해서 실험측정값과 비교하여 그 타당성을 검증하였다.

2. 지배방정식

2.1. Large Eddy Simulation

LES에서는 low-pass filtering한 질량과 운동량 보존 방정식을 사용하며 LES filter의 크기는 수치격자의 크기와 같다고 가정하였다.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + 2 \frac{\partial (\mu + \mu_{sgs}) \bar{S}_{ij}}{\partial x_j}. \quad (2)$$

여기서, \sim 와 \cdot 는 각각 Favre filtered 값과 low pass filtered 값, ρ 는 밀도, u_j 는 j 방향의 속도성분, p 는 압력, μ 와 μ_{sgs} 는 각각 분자점성과 모델링되는 SGS 점성, 그리고 S_{ij} 은 변형률을 의미한다. 본 연구에서는 Vreman 모델을 사용하여 μ_{sgs} 을 모델링하였다[6].

2.2. Multi-Environment PDF

MEPDF는 조성공간의 PDF를 weighted Dirac delta function의 합으로 표현한다.

$$F_L(\psi; x, t) \approx \bar{\rho}(x, t) \sum_{n=1}^{N_e} P_n(x, t) \prod_{\alpha=1}^{N_c} \delta[\psi_\alpha - \phi_{\alpha, n}(x, t)]. \quad (3)$$

여기서 ψ 은 조성의 샘플 공간 변수이며 N_e 는 environment의 수 즉, PDF를 근사하는 delta function의 개수를 의미한다. P_n 은 각 delta function의 weight이다. N_c 는 조성공간의 차원의 수를 의미한다. 본 연구에서는 계산의 효율성을 위해서 FGM 기반의 tabulation chemistry를 이용하였다. 라이브러리 데이터는 GRI 3.0 메커니즘[7]과 Cantera[8]의 예혼합 화염 해석틀을 이용하여 형성하였다. 라이브러리 데이터를 사용함으로써 조성공간의 차원의 수를 54에서 2로 크게 줄일 수 있었다. 2차원의 조성공간은 혼합물(Z)과 progress variable(Y)로 표현된다. 혼합물은 Bilger의 정의[3]를 사용하였으며 progress variable은 CO₂, CO₂ 그리고 H₂의 질량분율의 합으로 정의하였다.

식 (3)을 조성공간에서 적분하고 Direct Quadrature Method of Moments(DQMOM) 그리고 Interaction Exchange by Mean(IEM)모델을 이용해서 나머지 항들을 정리하면 PDF의 시간과 공간에 따른 변화를 \bar{P}_n 과 $\bar{P}_n \bar{\phi}_{\alpha,n}$ 에 대한 수송방정식으로 표현할 수 있다[9].

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{P}_n}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \bar{P}_n}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{P}_n}{\partial x_j} \right), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \bar{P}_n \bar{\phi}_{\alpha,n}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \bar{P}_n \bar{\phi}_{\alpha,n}}{\partial x_j} = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{P}_n \bar{\phi}_{\alpha,n}}{\partial x_j} \right) + \bar{P}_n w(\bar{\phi}_n) \\ + b_n + \frac{C_\phi}{2} \frac{(\mu/Sc + \mu_{sgs}/Sc_t)}{\Delta^2} \bar{P}_n (\bar{\phi}_{\alpha,n} - \langle \phi_\alpha \rangle) \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 Sc 와 Sc_t 는 층류, 난류 Schmidt수이며 각각 0.7과 0.4를 사용하였다. b_n 은 DQMOM으로부터 유도되는 항이며, C_ϕ 는 혼합모델상수이며 기본값인 2.0를 사용하였다. Δ 는 filter size이며 $\langle \phi_\alpha \rangle$ 는 스칼라 α 의 순간 평균값으로 $\sum_{n=1}^{N_s} \bar{P}_n \bar{\phi}_{n,\alpha}$ 로 계산된다. $w(\bar{\phi}_n)$ 은 화학반응속도를 의미 한다.

3. 결과 및 검토

3.1. 실험조건

본 연구에서 LES 해석 기법의 검증을 위해 사용된 가스연소기는 Turbomeca의 설계에서 파생된 것

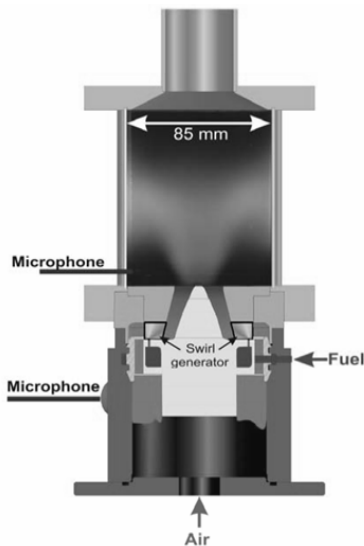


Fig. 1. Schematic of the injector with combustion chamber.

으로 PRECCINSTA burner로 불린다[10]. Fig. 1은 노즐설계와 연소실 내부 구조에 대한 개략적인 그림을 나타낸 것이다. 건조 공기가 대기 온도로 공기실을 통해서 유입되어 선회날을 통해 와류를 생성한다. 연료는 메탄이며 작은 구멍을 통해서 빠른 속도로 유입되고 연소실 내부로 진입하기 전에 공기와 섞여 예혼합 혼합물을 형성한다. 연소실 내부는 가로, 세로, 높이가 각각 85 mm, 85 mm, 114 mm인 직육면체이며 노즐 출구의 위치를 높이가 0인 지점 ($x=0$)으로 하였다.

수치모델의 검증에 사용된 화염은 25 kW의 작동 조건으로 당량비는 0.70이고 레이놀즈수는 35000이며 와류수는 0.6인 난류 예혼합 화염이다. 이때 공기의 유량은 734 g/min이고 메탄의 유량은 30 g/min이다. 실험에 대한 정보는 참고문헌 [10]에 상세히 기술되어 있다.

3.2. 수치모델

수치해석은 오픈소스 코드인 OpenFOAM[11] 기반의 In-house 코드를 사용하여 진행하였다. 총 3.5 백만 개의 수치격자를 이용하여 계산하였으며 이중 1백만 개는 스윌러와 플래넘에 2백만 개는 연소실 내부에 나머지는 그 외의 영역에 사용되었다. 시간과 공간에 2차 정확도를 가지는 수치기법을 사용하였으며 스칼라의 대류항에는 비물리적인 수치해를 피하기 위해 Total Variation Diminishing(TVD)기법을 사용하였다. 계산에서 Courant-Friedrichs-Lewy condition (CFL)은 0.3을 넘지 않도록 time step을 조절하였다. 스윌러를 통해서 강한 난류가 생성되기 때문에 특별히 난류 입구조건을 사용하지 않았다. LES의 평균값은 100 ms 동안의 시간평균(15 flow-through times)을 통해서 얻었다.

3.3. 해석결과 및 고찰

3.3.1. 비반응 유동

연소모델의 검증에 앞서 수치격자와 난류모델의 정확성을 검증하기 위해 비반응 조건에서 연소실

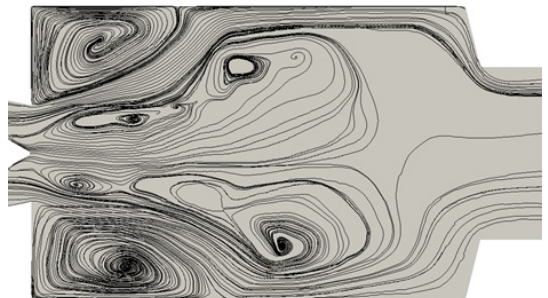


Fig. 2. Mean x-r pseudo-streamline pattern.

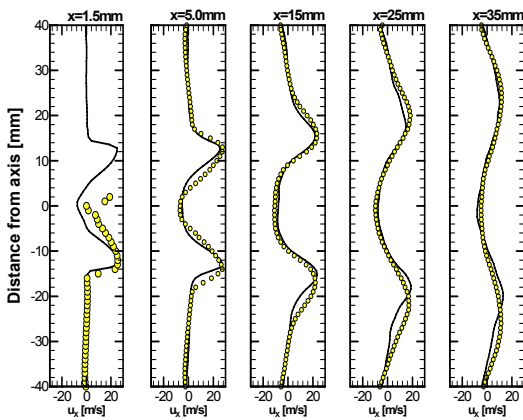


Fig. 3. Average axial velocity profile for cold flow. LES (solid line), EXP(symbols)[10].

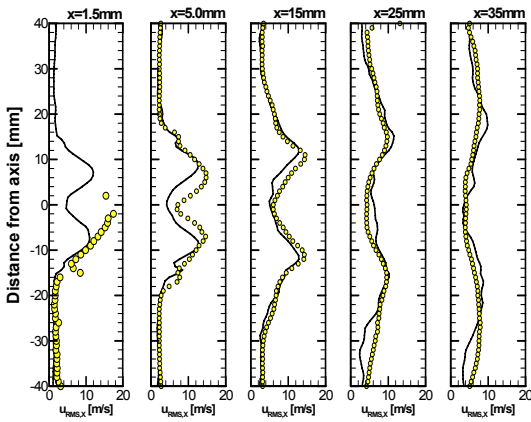


Fig. 4. RMS axial velocity profile for cold flow. LES (solid line), EXP(symbols)[10].

내부의 유동을 모사하였다. 이 조건에서 메탄은 유입되지 않고 공기만 연소실 내부로 유입된다. Fig. 2는 연소실 내부 단면에서의 유선을 그린 것이다. 중심축을 따라 큰 영역에서 역류와 재순환이 관찰되며 연소실 입구 근방의 코너에서도 재순환 영역이 관찰되었다.

Fig. 3과 4는 축방향의 평균속도와 변동속도를 $x=1.5$ mm, 5 mm, 15 mm, 25 mm, 그리고 35 mm에서 반경방향의 분포로 나타낸 것이다. $x=1.5$ mm의 축 근방에서 변동속도를 과소 예측한 것을 제외하면 계산결과는 전반적으로 모든 위치에서 실험값을 잘 예측하고 있다. $x=1.5$ mm에서의 불일치는 다른 수치격자와 수치모델을 이용한 LES 결과에서도 발견되며[12], 이는 입구 근방에서의 계측의 어려움으로 야기된 실험적 오차와 더불어 중앙의 재순환영역이 시작되는 위치가 실험과 수치해석결과에서 차이를 보이는 것으로 사료된다. 반경방향과 접선방향의 속

도 성분도 유사한 정도의 정확도로 예측되었으며, 비반응 유동의 해석에 사용된 수치격자와 수치방법을 연소조건에도 적용하여 계산을 진행하였다.

3.3.2. 반응 유동

연소조건에서는 320 K의 온도이며 당량비 0.70의 메탄/공기 예혼합 혼합물이 연소실 내부로 유입된다. 이 혼합물의 단열 화염온도는 대략 1850 K이며 혼합률은 0.0391로 아주 희박한 혼합물로 희박연소 조건에서의 연소기와 비슷한 작동 조건이다. Fig. 5는 계산된 온도의 순간적인 분포에서 $T=1250$ K인 단면을 나타낸 것이다. 강한 재순환 유동에 의해 화염은 연소실 입구 근방에서 형성되며 큰 스케일의 유동에 의해 화염면이 작은 구조로 부서지는 것이 확인된다.

Fig. 6는 연소실 내부 단면(x-r plane)에서 온도의 평균을 나타낸 것이다. 복잡한 유동 그리고 유동과 화염의 상호작용 때문에 완전히 대칭적인 분포는 얻지 못하였다. 입구 근방에서 급격하게 바뀌는 평균 온도장을 통해 재순환영역의 연소생성물이 연소실로 유입되는 혼합물과 섞이면서 반응이 활발하게 일어나는 것을 볼 수 있다.

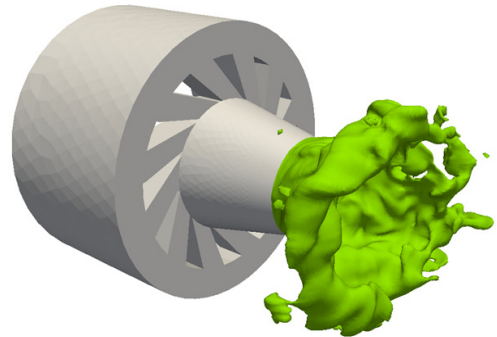


Fig. 5. Instantaneous $T=1250$ K isosurface.

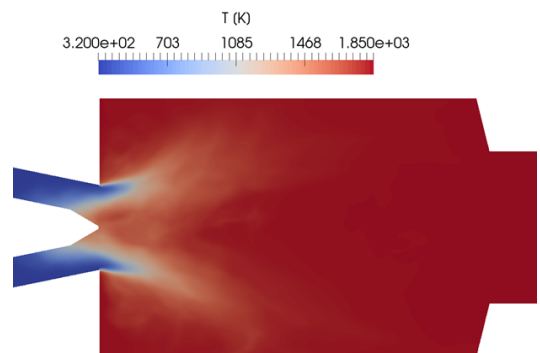


Fig. 6. Mean temperature field in the combustion chamber.

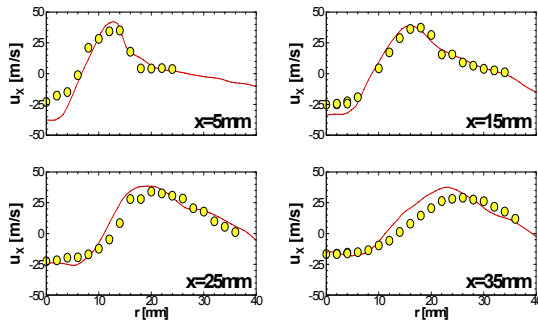


Fig. 7. Average axial velocity profile for reacting flow (25 kW). LES (solid line), EXP(symbols)[10].

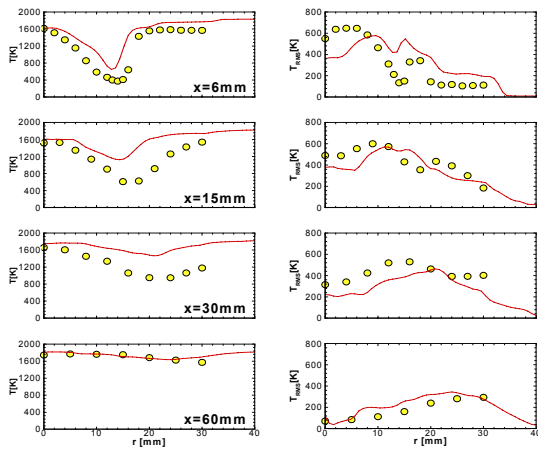


Fig. 8. Mean (left) and RMS (right) temperature profile for reacting flow (25 kW). LES (solid line), EXP (symbols)[10].

Fig. 7은 연소조건에서 축방향의 속도성분을 각각의 위치에서 반경방향의 분포로 나타낸 것이다. 통계적 오차를 최소화하기 위해서 원주방향으로 평균한 값을 사용하였다. $x=5$ mm에서 역류를 과대 예측한 것을 제외하면 전반적으로 실험결과와 일치하는 것을 확인했다. 이를 통해 연소실 내부의 재순환 영역의 크기와 세기가 비교적 정확히 예측되었음을 알 수 있다.

Fig. 8은 평균온도와 온도 섭동의 평균제곱근을 $x=6$ mm, 15 mm, 30 mm, 그리고 60 mm에서 나타낸 것이다. 온도의 평균은 $x=6$ mm와 $x=60$ mm에서 실험값과 비슷한 경향을 보이나 전반적으로 모든 위치에서 온도를 과대 예측하였다. 이러한 과대 예측의 첫 번째 이유는 벽면열전달을 고려하지 않은 것이다. Fig. 2에서 보이듯이 연소실 입구 근방의 코너에서 큰 재순환 영역이 생기고 이 영역에서 유체는 벽면과 비교적 오랜 시간동안 상호작용 하여 무시할 수 없는 열손실이 있을 것으로 예상된다. 특히

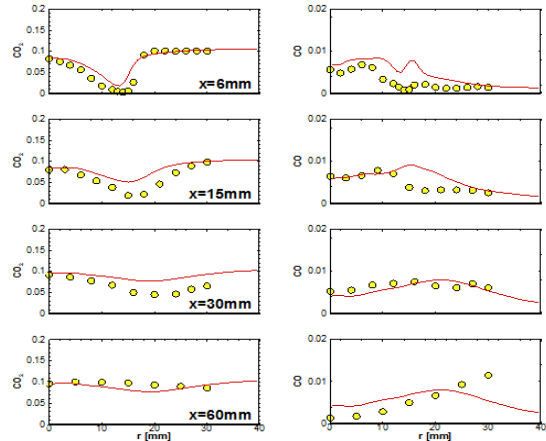


Fig. 9. CO_2 (left) and CO (right) massfraction profile for reacting flow (25 kW). LES (solid line), EXP(symbols)[10].

상대적인 오차의 크기가 $x=15$ mm와 30 mm의 반경방향에서 커지는 경향이 이를 뒷받침 한다. 두 번째 이유는 아주 강한 난류에 의해서 화염면이 수치격자보다 작은 스케일에서 변형되는데 이를 freely-propagating 예혼합 화염에 기반을 둔 라이브러리에서 고려하지 않았기 때문이다. 온도장의 과대예측은 Thickened Flame model[12], Presumed Conditional Moment-Flame Prolongation of ILDM (PCM-FPI)[13], Reaction - Diffusion Manifold (REDIM)[14] 등 다른 연소모델을 이용한 유사한 조건의 LES에서도 발견된다. 이 수치실험들이 공통적으로 열전달을 고려하지 않았기 때문에 벽면 열전달을 무시한 것이 온도 과대예측의 주요한 이유로 사료된다.

다음으로 Fig. 9은 예측된 CO_2 와 CO의 평균 질량분율을 위치에 따라 반경방향으로 나타낸 것이다. CO_2 는 온도와 큰 상관관계를 보이는 화학종이다. 따라서 CO_2 는 온도와 유사하게 벽면 근방에서 과대 예측하는 경향을 보였다. CO의 경우 상류에서는 온도 및 CO_2 와 마찬가지로 과대 예측되었는데 이는 전반적인 반응의 진행이 실험보다 과대예측된 것으로 보인다. CO의 경우 아주 희박한 연소조건 때문에 매우 적은량이 생성되고, 실험에서 밝힌 데이터의 불확실성이 다른 화학종에 비해 높은 것을 감안하면 (systematic uncertainty: $\pm 5\text{-}10\%$, statistical uncertainty: $\pm 20\text{-}50\%$)[10] 비교적 잘 예측된 것으로 사료된다.

4. 결론

MEPDF 모델과 FGM 라이브러리를 이용한 와류 연소기 내부의 LES를 수행한 결과는 다음과 같다.

1) Vreman SGS 모델을 사용하여 와류 연소기 내

부 유동을 실험치에 근사하게 모사할 수 있다. 특히 중심부 및 코너에서 순환영역의 크기와 세기를 잘 예측하였다. 하지만 입구근방에서 중심부의 재순환 영역이 시작되는 위치는 실험과 다르게 예측되었다.

2) 온도와 화학종의 농도를 보다 정확히 예측하기 위해서는 코너 재순환 영역에서 벽면 열전달을 고려해야 하는 것으로 사료된다. Enthalpy defect 개념을 도입한 3차원 라이브러리를 구성할 경우 보다 향상된 예측능력을 보여 줄 것이다.

3) 본 연구에서 개발된 LES 기반의 연소모델을 이용하여 가스터빈 내부의 연소불안정 해석을 수행하고 있다. 라이브러리를 압력과 열손실을 고려할 수 있도록 확장하면 연소기 내부의 복잡한 현상을 정확하고 빠르게 계산할 수 있는 해석기법이 될 것으로 예상된다.

후 기

본 연구는 환경부 글로벌탑 환경기술개발사업 중 Non-CO₂온실가스 저감기술개발 사업단(2013001690-013)의 지원으로 이루어졌습니다.

References

- [1] J. Lee and Y. Kim, Numerical Study on Turbulent Nonpremixed Pilot Stabilized Flame using the Transport Probability Density Function model, J. Korean Soc. Combust., 15 (2010) 15-21.
- [2] R.O. Fox, Computational Models for Turbulent Reacting Flows, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [3] N. Peters, Turbulent Combustion, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [4] C. D. Pierce and P. Moin, Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, J. Fluid Mech. 504 (2004) 73-97.
- [5] J.A. van Oijen, L.P.H. de Goeij, Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds, Combust. Sci. Tech. 161 (2000) 113-137.
- [6] A.W. Vreman, An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications, Phys. Fluids 16 (2004) 3670 - 3681.
- [7] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Soonho, W.C. Gardiner, Jr., V.V. Lissianski, Z. Qin, GRI mechanism, version 3.0.; 1997. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech. (accessed 01.01.16).
- [8] D.G. Goodwin, Cantera C⁺⁺ user's guide, California Institute of Technology, California, U.S.A (2002).
- [9] J. Lee, S. Jeon, Y. Kim, Multi-environment probability density function approach for turbulent CH₄/H₂ flames under the MILD combustion condition, Combust. Flame 162 (2015) 1464 - 1476.
- [10] W. Meier, P. Weigand, X.R. Duan, R. Giezen-danner-Thoben, Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame, Combust. Flame 150 (2007) 2 - 26.
- [11] OpenCFD Ltd, OpenFOAM user guide, version 2.2.0, 2011.
- [12] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinot, U. Meier, C. Berat, Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations, Combust. Flame 141 (2005) 40 - 54.
- [13] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, P. Domingo, Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner, Combust. Flame 155 (2008) 247-266.
- [14] P. Wang, N.A. Platova, J. Frohlich, U. Maas, Large Eddy Simulation of the PRECCINSTA burner, Int. J. Heat Mass Transfer. 70 (2014) 486-495.