

N-Heptane 연료의 global single-step reaction과 multi-step reaction을 이용한 수치해석적 연구

김창호 · 김충익* · 유홍선**

중앙대학교 기계공학과 대학원, **중앙대학교 기계공학부

Numerical Modeling of n-Heptane with Global single-step and multi-step reaction

Kim, Chang Ho · Kim, Chung Ic · Ryou, Hong sun

Graduate School, Chung-Ang Univ. Department of Mechanical Engineering,
Chung-Ang Univ.*

1. 서론

화재 발생시 부유 중인 분진에 의해 제2차, 3차의 연쇄 착화가 일어날 수 있으며, 고속 확산과 높은 열 방출로 인해 위험을 초래할 수 있다[2]. 분진과 분무의 연소는 그 입자들이 고체나 액체로 물질은 서로 다르나, 연소현상은 거의 같다고 볼수있다.

이러한 연소현상에 대한 논문들은 50년대 Gadsave 와 Spalding에 의해 단일액적 연소의 연구로부터 시작되었으며, 이들은 기상과 액상이 준정상상태의 원구 형태로 가정하여 액적의 온도와 물성치가 일정할 때 액적의 직경에 대한 d^2 -law[3]를 구하였다. 점화시간을 구하기 위해 Bloshenko[4], Birchley와 Riley[5]는 고온의 산화제하에 놓인 액적을 비정상상태로 놓고 계산을 시도하였다. 이것은 단지 점화시간만을 계산했을 뿐 다른 효과는 계산하지 못았다. Abramzon과 Sirignano[10]는 $Le=1$ 의 가정을 사용하지 않았으며, 온도에 의한 열역학적인 물성치들, 그리고 액적 내부순환유동을 고려하는 확장된 모델을 사용하여 액적의 유동현상과 증발현상을 수치적으로 해석하였다. 또한 연소효율의 증대, 미연가스의 발생에 대한 규명, 그리고 연소과정에 관한 상세한 모델을 하기 위하여, 화학반응의 계산을multi-step reaction을 고려한 연구가 진행되어왔다.Warnatz[7]의 32종(species), 96개의 반응식을 바탕으로 Held[8]는 n-heptane과 air의 화염에서 층류에혼합화염속도를 계산하였으며, Curran[11]은 폭넓고 다양한 실험적인 데이터 결과를 비교 및 분석하여 만든 Mechanism(550종,2450 반응식)을 이용하여 n-heptane 산화(Oxidation) 과정에서 화학종들을 분석하였다. 하지만 시간에 대한 화염의 화학종(species)들을 연구하였을 뿐, 공간에서의 화학종들의 분포 및 변화, 그리고 온도의 분포에 대한 연구는 미흡하다.

이에 본 연구는 분진과 분무의 연소의 입자를 해석이 용이한 가연성 미세 액적(n-Heptane droplet)으로 가정[1]하여 규칙적으로 일렬로 배열된 액적을 계산 영역(Figure 1)으로 하는 수치해석을 하였다. 액적의 증발, 점화, 그리고 연소 과정을 일단계반응(global single-step reaction)식과 Card[9]의 다단계반응(multi-step reaction)식을 Chemkin II software code를 이용하여 반응속도를 제어하였고, 일반화된 비직교 좌표계를 사용하였으며, 비정상 2차원 보존방정식들을

적용하여 점화지연시간과 연소반응에 관여하는 종(species)들의 특성 등을 파악함으로써 상세한 연소모델을 해석하고자 한다.

2. 이론 해석

Figure 1.과 같이 고온의 주위 가스에 의해 액적은 증발되면서 주위 가스와 화학반응을 일으킨다. 액적 내부로의 열전달은 단지 열전도에 의해서만 일어나며 주위 유동장에서의 강제 대류나 자연대류는 고려하지 않았다. 일렬의 중심축에 대하여 축대칭이며 모든 액적간의 거리가 일정하므로 액적간의 중간에 대칭면이 존재하는 것으로 생각할 수 있다.

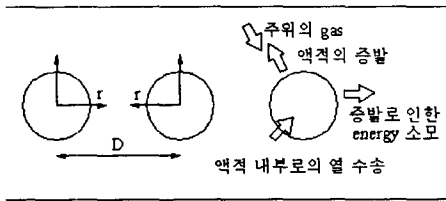


Figure 1. 일렬로 배열된 액적의 개략도.

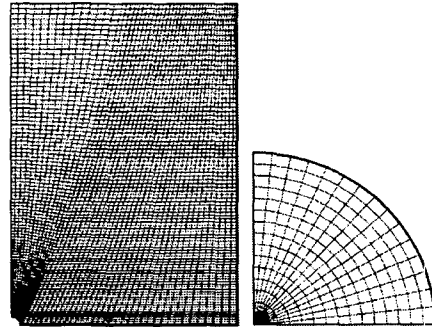


Figure 2. 가스상태의 격자 생성(左), 연료액적의 격자 생성(右)

연료액적의 증발, 점화 및 연소의 전 과정을 통하여 해석을 용이하게 하고 복잡함을 피하기 위하여 계에 큰 영향을 미치지 않으며 일반적으로 사용되는 다음과 같은 가정을 하였다.

- (1) 액적의 모양은 완전한 구형이며 증발하는 동안 형태상의 변형은 무시한다.
- (2) 복사 열전달과 점성에 의한 소산은 무시한다.
- (3) 액적내에서 액체의 유동은 고려하지 않는다.
- (4) 루이스수(Lewis number)는 1이라 가정한다.
- (5) Dufour-Soret 효과는 무시한다.

2.1 지배방정식

액적의 크기는 1mm보다 작다고 놓고 계산하였으므로 중력의 효과는 무시한다고 가정하며(11), 뉴우튼의 이상기체 및 액적에 대한 질량, 운동량, 에너지 및 화학종 보존방정식들을 2차원으로 전개하였다.

액적내에서는 완전한 구형이고 변형을 하진 않는다고 가정하였으므로 구좌표계(Figure 2.b)로 계산하였고, 에너지 방정식은 다음과 같다.

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = K \nabla^2 T \quad (2.1)$$

여기서

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (2.2)$$

기상에서의 지배방정식은 인접해 있는 액적 배열의 영향을 고려해서 해석하기 위해 cartesian 속도성분을 이용한 일반 비직교좌계(Figure 2. left)를 사용하였다. 연속방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(J\rho) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [J \alpha_m^j (\rho U_m)] = 0 \quad (2.3)$$

운동량방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(J\rho U_i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [J \alpha_m^j (\rho U_m U_i - \tau_{mi} + P \delta_m^i)] = 0 \quad (2.4)$$

여기서 U_i 는 cartesian 좌표계의 속도성분이고 J 는 비직교좌표계로의 변환에 따른 Jacobian을 나타낸다. α_m^j 는 비직교 좌표계의 contravariant 기본벡터 e^j , cartesian 단위벡터 i_m 와의 내적이며 아래의 식과 같이 쓸 수 있다.

$$\alpha_m^j = \vec{i}_m \cdot \vec{e}^m \quad (2.5)$$

에너지방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(J\rho T) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [J \alpha_m^j (\rho U_m T - \Gamma_\phi \frac{\partial T}{\partial x^n} \alpha_m^n)] = S_\phi \quad (2.6)$$

화학종방정식 :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(J\rho Y_i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^j} [J \alpha_m^j (\rho U_m Y_i - \Gamma_\phi \frac{\partial T}{\partial x^n} \alpha_m^n)] = S_\phi \quad (2.7)$$

위의 지배방정식에서 $\Gamma_\phi = k/c_p$ 이며, k , c_p 및 ρ 는 공기에 대하여 curve fitting 한 온도의 함수이다.

Number	Reaction	A_i	n_i	E_i
1.	H+O2=>O+OH	2.00E+14	.0	16808.1
2.	O+OH=>H+O2	1.58E+13	.0	690.2
3.	H2+O=>OH+H	1.80E+10	1.0	8830.3
4.	OH+H=>H2+O	8.00E+09	1.0	6763.1
5.	H2+OH=>H2O+H	1.17E+09	1.3	3627.6
6.	H2O+H=>H2+OH	5.09E+09	1.3	18596.8
7.	OH+OH=>H2O+O	6.00E+08	1.3	.0
8.	H2O+O=>OH+OH	5.90E+09	1.3	17037.0
9.	H+OH+M=>H2O+M	2.20E+22	-2.0	.0
10.	H+O2+M=>HO2+M	2.30E+18	-8	.0
11.	H+HO2=>OH+OH	1.50E+14	.0	1004.5
12.	H+HO2=>H2+O2	2.50E+13	.0	700.3
13.	OH+HO2=>H2O+O2	2.00E+13	.0	1000.5
14.	CO+OH=>CO2+H	1.51E+07	1.3	-758.4
15.	CO2+H=>CO+OH	1.57E+09	1.3	22347.8
16.	CH3+O=>CH2O+H	6.80E+13	.0	.0
17.	CH2O+H=>HCO+H2	2.50E+13	.0	3992.8
18.	CH2O+OH=>HCO+H2O	3.00E+13	.0	1195.5
19.	HCO+H=>CO+H2	4.00E+13	.0	.0
20.	HCO+O2=>CO+HO2	3.00E+12	.0	.0
21.	HCO+M=>CO+H+M	1.60E+14	.0	14707.0
22.	CH3HCO+H=>CH3+CO+H2	4.00E+13	.0	4202.0
23.	C3H6+OH=>CH3HCO+CH3	1.00E+13	.0	.0
24.	C7H16+H=>C7H15+H2	6.10E+14	.0	8460.8
25.	C7H16+OH=>C7H15+H2O	1.70E+13	.0	956.0

반응상수 $k_j = A_j T^{n_j} \exp(-E_j/R_u T)$
단위는 moles, cm, K, 그리고 cal/mol.

Table 1. n-Heptane의 반응 메카니즘

	Value
ρ_i	680 kg/m ³
λ_i	0.126 J/m · sec · K
B	5108 m ³ /kmol · sec
c_{pl}	2142 J/kg · K
E	8.4107 J/kmol
L	316680 J/kg
Q	4.473 × 10 ⁷ J/kg
T_b	371.4 K
R_0	5.E-5 m

Table 2. Physical and chemical Properties of n-Heptane

2.2 화학반응의 계산

(1) 일단계반응(Global single-step reaction):

식(2.6)에서 생성항은 $S_\phi = \nu_F M_F \dot{\omega}$ 이며, 식(2.7)의 생성항 $S_\phi = \nu_F M_F \dot{\omega}$ 이고, 성분 i 는 O_x 와 Fuel을 뜻한다.

비가역 2차 Arrhenius의 식에 의해 $\dot{\omega}$ 를 계산하였다.

$$\dot{\omega} = \frac{B\rho^2 Y_o Y_F}{M_o M_F} \exp\left(-\frac{E}{R_u T}\right) \quad (2.8)$$

(2) 다단계반응(Multi-step reaction) :

식(2.6)의 생성항은 $S_\phi = \dot{\omega}_s Q_s / c_p$ 이며, 식(2.7)의 생성항은 $S_\phi = \dot{\omega}_s / c_p$ 이다. $\dot{\omega}_s$ 와 Q_s 는 Card[8]의 Mechanism을 이용하여, 연소반응을 계산할 수 있는 ChemkinII code(Sandia National Laboratories)에 적용하여 계산하였다. 반응 메카니즘(Reaction mechanism)은 Table 1.에 나타나 있다.

2.3 초기조건 및 경계조건

시간 $t=0$ 에서 액적내의 초기온도 T 는 $T_0=300K$, 기상에서의 초기온도는 T_∞ , 그리고 압력은 1기압으로 가정하였다.

액적 중심에서 종속변수 T 의 구배가 0이라는 경계조건을 사용하였다.

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{at } r=0 \quad (2.9)$$

액적표면에서 연료증기의 확산과 액적 내로의 열전도는 액적표면에 수직한 방향으로만 이루어진다고 계산하였으며, 이때 기상과 액상간에 에너지 및 물질전달이 일어난다.

상(phase) 경계면에서 질량보존법칙을 적용하면,

$$u_s = \frac{dR}{dt} \left(1 - \frac{\rho_l}{\rho}\right) \quad (2.10)$$

또한 이때 에너지보존식과 화학종의 보존식을 적용하면,

$$\rho_l L \frac{dR}{dt} = k_l \frac{\partial T}{\partial r} - k \frac{\partial T}{\partial r} \quad (2.11)$$

$$-\rho D \frac{\partial Y_F}{\partial r} = \rho u_s (1 - Y_{FS}) \quad (2.12)$$

$$\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial r} = \rho u_s Y_{OS} \quad (2.13)$$

액적 표면에서의 연료의 농도(Y_{FS})를 계산하기 위하여, 증발된 연료와 공기가 연속적으로 상평형 상태를 유지한다고 하고, Clausius-Clapeyron식을 적용하였다[12].

$$Y_{FS} = \exp\left[-\frac{M_F L}{R_u T_b} \left(\frac{T_b}{T_s} - 1\right)\right] \quad (2.14)$$

액적들간에는 서로 대칭에 의한 경계조건으로 계산하였다.

2.4 수치해석

액적과 기상에서의 지배방정식들을 유한차분법을 이용하여 수치해석하였다. 액적의 경우에는 구좌표계를 사용하여 에너지 보존방정식을 TDMA(Tridiagonal

Matrix Algorithm)방법으로 계산하였다. 기상에서는 증발과 연소현상에 대해 비직교좌표계를 사용하고, 격자계는 비엇갈림하여 모든 지배방정식들의 해를 5개의 대각렬을 갖는 행렬식으로 놓고 SIP(Strongly Implicit Procedure)방법으로 계산하였다. 해석에 이용된 액적은 n-Heptane이다.

3. 결과 및 토의

본 연구에서는 화학반응(Chemical reaction)을 일단계반응(Global single-step reaction)과 다단계반응(Multi-step reaction)으로 구분하여 계산하였다. 수치해석을 하는데 있어서 해석의 편리함과 시간의 절약면에서 일단계반응식을 이용하는 것이 유리하며, 다단계반응은 복잡하고 많은 시간이 소요되지만 연소현상에 대해 영향을 미치는 종(species)들의 거동을 파악함으로써 상세한 연소모델의 해석을 할 수 있다.

3.1 일단계반응(Global single-step reaction)

3.1.1 주위 온도의 변화에 따른 기상의 온도 변화

일단계반응의 계산에서 사용되는 변수들은 Table2에 정리하였다. Figure 3은 일정한 시간이 경과할 때 주위온도의 변화에 따른 기체상의 최고온도분포를 나타내고 있다. 온도는 화학반응율과 밀접한 관계에 있으며, 보다 높은 온도에서 화학반응이 격렬해지므로 초기 주위온도가 1200K일 경우에 대략 0.8msec에서 급격한 온도 상승을 함을 나타내고, 1100K일때는 1.4msec에서 온도 상승을 나타내고 있는 반면에, 873K에서는 더 많은 시간이 경과하여 충분한 산소와 연료증기가 반응하여 착화에 도달함을 알 수 있다. 또한 주위온도가 높을수록 점화지연시간이 짧아짐을 보여주고 있다. Figure 4는 시간이 경과할 때의 주위온도 변화에 따른 액적지름의 변화를 나타내고 있으며, 급격히 온도가 상승할 때 액적지름도 현저히 작아짐을 나타내고 있다. 주위온도의 변화가 점화지연시간을 결정하는 중요한 변수임을 알 수 있다.

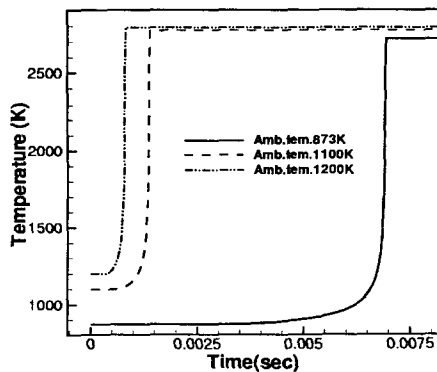


Figure 3. 주위온도의 변화에 따른 최고온도의 변화.

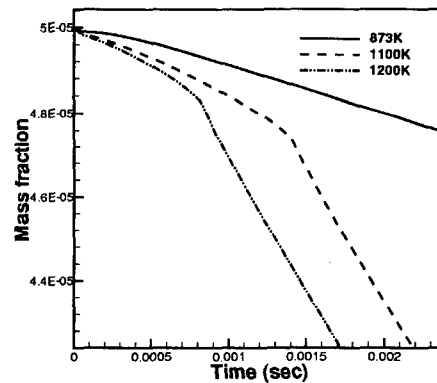


Figure 4. 주위온도의 변화에 따른 액적지름의 변화.

3.1.2 초기 액적 간격의 변화

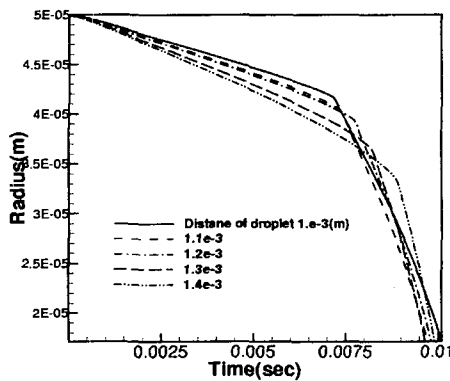


Figure 5. 액적간의 간격의 변화에 따른 액적지름의 변화. ($T_{\infty}=873$ K)

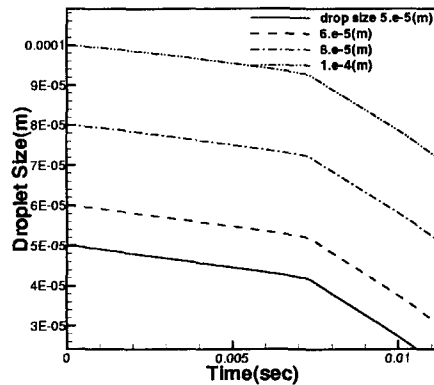


Figure 6. 초기액적의 크기의 변화에 따른 액적의 변화. ($T_{\infty}=873$ K)

Figure 5은 초기 액적 간격의 변화에 따른 액적이 작아지는 변화를 나타낸 그림이다. 액적간의 거리는 착화에 이르는 시간에 중요한 요소로서 액적간격이 멀수록 액적이 증발하는 속도는 커지지만 착화에 이르는 시간은 더 길어짐을 나타내고 있다.

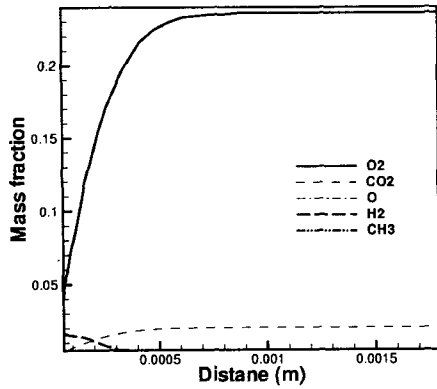
3.1.3 초기 액적의 크기의 변화

Figure 6은 초기 액적의 크기에 따른 액적 크기의 변화를 나타낸 그림이며, 점화지연시간은 액적 크기에 큰 영향을 주지 않음을 보여주고 있다. 크기가 큰 액적은 작은 경우에 비해 증발하는데 필요한 에너지가 더 많이 소모되며, 증발량 자체는 크기가 작은 액적과 비슷하므로 점화에 이르는 시간은 비슷함을 나타내고 있다. 초기액적의 크기는 점화지연시간에 별 영향을 미치지 못함을 보여주고 있다.

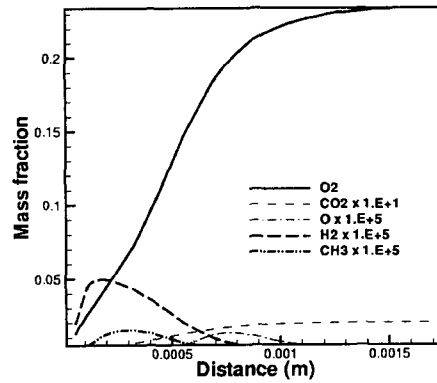
3.2 다단계 반응(Multi-step reaction)

다단계 반응에서의 변수들은 일단계 반응에서 사용했던 데이터를 이용하였으며, 다만 화학반응과정에서 화학반응율 $\dot{\omega}_s$ 와 발열량 Q_s 는 Card[8]의 Mechanism을 이용한 Chemkin II code로 계산하였다.

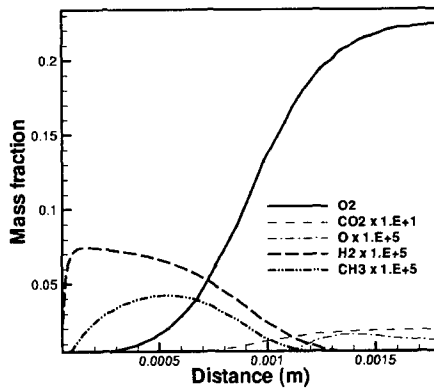
Figure 7은 시간의 변화에 따른 $\theta=56^\circ$ 인 단면의 질량분율을 나타내고 있다. Figure 7(a)는 점화전의 상태를 나타내고 있으며, 액적표면 주위만 연료의 증발로 인해 산소의 농도가 낮음을 알 수 있다. Figure 7(b)는 시간이 1.8msec에서의 질량분율을 나타내고 있는데 착화가 진행되었음을 나타내고 있다. 1.8msec에서 최고 온도는 Figure 7(d)에서 볼 수 있듯이 대략 0.0006m에서 발생함을 알 수 있고 또한 그 지점에서 화학종 O가 생성함을 알 수 있다. Figure 7(c)는 점화후 시간 2.2msec에서 분포도이며, 최고온도의 지점의 변화에 따른 O의 생성 위치가 달라짐을 알 수 있고, 높은 온도일수록 CH_3 와 H_2 의 생성이 많아짐을 알 수 있다. Figure 7(c)는 각 시간 변화에 따른 최고온도 분포를 나타내고 있으며, 착화가 일어난 후 온도가 전구간으로 확산하고 있음을 나타내고 있다.



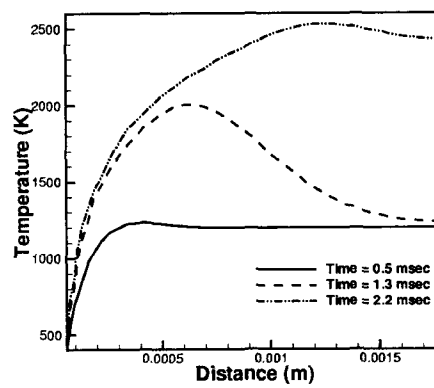
(a) 질량분율 분포도
(Time=0.5msec, $\theta = 56^\circ$ 단면)



(b) 질량분율 분포도
(Time=1.8msec, $\theta = 56^\circ$)



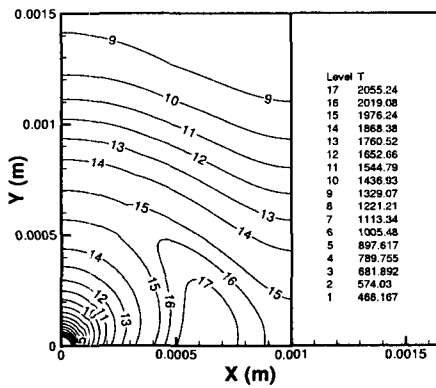
(c) 질량분율 분포도
(Time=2.2msec, $\theta = 56^\circ$)



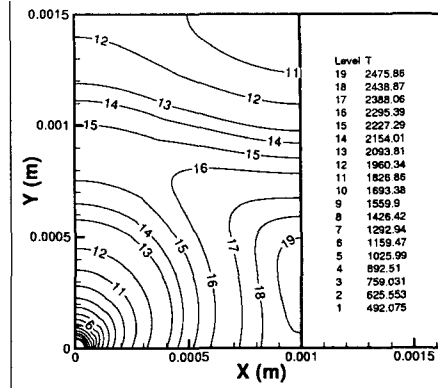
(d) 시간 변화의 따른
최고온도분포. ($\theta = 56^\circ$)

Figure 7. 시간의 변화에 따른 질량분율 분포도. ($T_\infty=1200$ K)

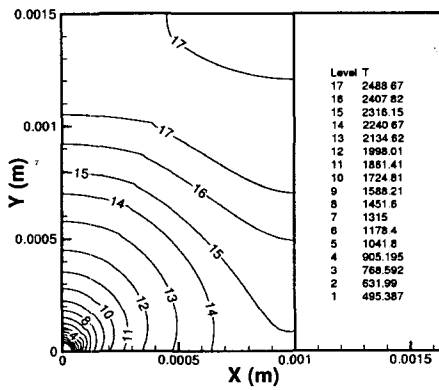
Figure 8은 시간의 변화에 따른 온도분포도를 나타내고 있다. Figure 8(a)는 $t=1.3\text{msec}$ 에서 인접한 또 다른 액적의 영향을 받아, 인접한 액적 방향쪽에서 착화가 발생하고 있음을 나타내고 있다. Figure 8(b)는 착화에 이은 확산의 영향으로 액적 바깥쪽으로 온도가 퍼져 나감을 알 수 있고, Figure 8(c)에서는 온도장이 전 구간에 걸쳐 고르게 분포 되어있음을 알 수 있다. Figure 8(d)는 화학반응 계산에서 일단계반응과 다단계반응의 최고온도분포를 비교 하였다. 일단계반응에서는 착화과정을 비정상상태(Unsteady state) 과정으로 계산하였으며, 다단계반응에서는 준정상상태(Quasisteady state)로 계산하였기 때문에 점화하는 시간의 차이는 있을 수 있다. 일단계반응 계산보다는 다단계반응의 계산시 n-heptane의 단열화염온도인 2251K에 가까움을 알 수 있다.



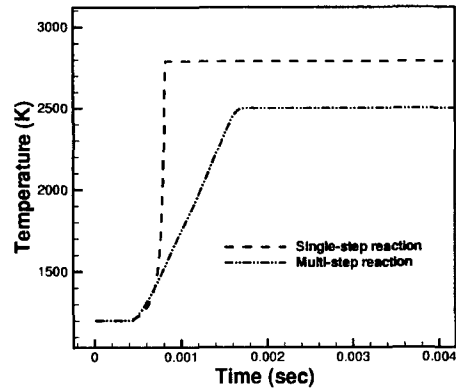
(a) 온도분포도 (Time=1.3 msec)



(b) 온도분포도 (Time=1.8 msec)



(c) 온도분포도 (Time=2.2 msec)



(d) 일단계반응과 다단계반응의 최고온도 비교 ($\theta=56^\circ$)

Figure 8. 시간의 변화에 따른 온도 분포도 ($T_\infty=1200$ K)

4. 결론

고온의 정제된 환경속에서 연료 액적 배열군들의 증발, 집화 및 연소현상에 관한 거동들을 비교좌표계를 고려하여 수치해석하였고, 그 결과로 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) 증발된 액적 연료와 산화제가 발열반응을 하여 착화에 이르면, 온도는 급격히 상승하게 되고 연료증기와 산화제의 농도는 작아지게 된다. 시간의 경과에 따라 연료의 농도가 짙은 부분에서 H_2 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_3H_6 , C_7H_{15} 등의 발생이 증가하게 되고, 최고온도 구역에서 O , CO , CO_2 , H_2O 등이 증가함을 알 수 있다.
- (2) 집화시 액적군 경계에서 모든 변수들이 급격히 변하므로 화염의 형성은 액적간의 경계부분에서부터 발생함을 알 수 있다.

- (3) 점화지연시간은 초기 액적의 크기와는 별 상관 없이, 액적간의 간격의 변화에는 영향을 미치는 것을 관찰하였으며, 무엇보다도 점화지연시간에 영향을 미치는 요소는 주위 온도에 의해 좌우되어짐을 알 수 있다.
- (4) 부유하는 분진 및 가연성 액체 연료의 연소과정 중, 화학반응으로 인해 CH_3 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_3H_6 , C_7H_{15} 등과 같은 분자들이 생성될 수 있고 그로 인해 제2차, 제3차 착화가 발생할 수도 있다. 이와 같은 복잡한 화재 현상을 해석하기 위해 연소에 관련하는 종(species)들의 거동을 파악함으로써 더욱 복잡한 액적 배열에 대한 해석을 가능케 하는 기초 기술과 결과를 얻게 되었다.

참고문헌

- [1] 송기훈; 연료액적의 비정상 증발과 연소에 관한 수치해석적 연구“, 중앙대학교 기계공학과 석사논문, 1995.
- [2] 小野尚道; 미립자군의 화염전파속도에 관한 연구, 일본 동북대학 기계공학부 석사 논문, 1993.
- [3] C. K. Law, Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion; Pro. Energy Combustion Science, Vol. 8, pp. 171~201, 1982.
- [4] V.N. Bloshenko, A.G. Merzhanov, N.I. Peregudov and B.I. Khaikin; Formation of an Unsteady-State Diffusion Combustion Front with the Ignition of a Droplet of Liquid Fuel, Fizika Foreniya I Vzryva, 9, p. 211 (1973).
- [5] J.C.Birchley and N.Riley; Transient Evaporation and Combustion of a Composite Water-Oil Droplet, Comb.Flame, 29, p. 145 (1977).
- [6] Fackson, G.S. and Avedesian, C.T.(1993) Presented at the Eastern States Section Meeting, The Combustion Institute, Princeton, NJ.
- [7] Warnatz, J (1984) Chemistry of high-temperature combustion of alkanes up to octane. Twentieth Symp. (intl.)on Combustion, p.845.
- [8] Held, T.J., Marchese, A.J., and Dryer, F.L., Combust. Sci. and Tech. 123: 107-146, 1997.
- [9] J.M. Card and F.A. Williams; Asymptotic Analysis with Reduced chemistry for the Burning of n-heptane Droplets, Comb. and Flame, 91: 187-199(1992)
- [10] B. Abramzon and W.A. Sirignano; Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 32, No. 9, pp. 1605~1618, 1989.
- [11] Curran, H.J., Gaffuri,P., Pitz, W.J., and Westbrook,C.K., Comb. Flame.14: 149-177,1998
- [12] Anthony J. Marchese; Numerical M. Odeling of Isolated n-Alkane Droplet Flames, Combstion and Flame 116:432-459 (1999).
- [13] K.K. Kuo, Principles of combustion, Wiley-Interscience Pub. 1978.

NOMENCLATURE

- a thermal diffusivity (m^2/sec)
- B frequency factor($m^3/kmol \cdot sec$)

c_p	constant pressure specific heat($J/kg \cdot K$)
D	diffusin coeffiient(m^2/sec)
e^i	contravariant base vectors
e_j	covariant base vectors
E	activation energy($J/kmol$)
L	latent heat(J/kg)
M	molecular weight($kg/kmole$)
P	pressure
Q	heat of reaction(J/kg)
R	droplet radius(m)
R_u	universal gas constant($J/kmole \cdot K$)
r	radial distance(m)
u	Velocity(m/sec)
T	Temperature(K)
t	Time(sec)
U	Cartesian velocity component
x^j	non-orthgonal coordinate
Y_i	mass fraction
Y^m	cartesian coordinate

Greeks :

α^j_m	cartesian component of covariant base vectors
δ	kroncker's delta
Γ	diffusion coefficient
ρ	density(kg/m^3)
ν	number of moles
ω	acentric factor
$\dot{\omega}$	reaction rate($kmole/m^3 \cdot sec$)
κ	conductivity($J/m \cdot sec \cdot K$)
τ	shear stress

Subscripts :

F	fuel
OX	oxygen
l	liquid
0	initial
∞	ambient