

난류확산연소에서 conditional moment closure modeling

허 강 열*

Conditional moment closure modeling in turbulent nonpremixed combustion

Kang Yul Huh

Key Words : turbulent nonpremixed combustion, conditional moment closure, laminar flamelet model, pdf, conditional scalar dissipation rate

Abstract

A brief introduction is given on the conditional moment closure model for turbulent nonpremixed combustion. It is based on the transport equations derived through a rigorous mathematical procedure for the conditionally averaged quantities and appropriate modeling forms for conditional scalar dissipation rate, conditional mean velocity and reaction rate. Examples are given for prediction of NO and OH in bluffbody flames, soot distribution in jet flames and autoignition of a methane/ethane jet to predict the ignition delay with respect to initial temperature, pressure and fuel composition. Conditional averaging may also be a powerful modeling concept in other approaches involved in turbulent combustion problems in various different regimes.

1. 서론

내연기관의 핵심 물리 현상은 연소 과정이나 이에 대한 직접적인 해석이나 예측이 어렵기 때문에 전단계 과정인 난류 유동이나 분무를 통해 연소 특성을 간접적으로 판단하는 경우가 많이 있다. 그러나 최근 난류 연소에

대해 많은 연구가 이루어져 전산 유체 해법에서도 연소 모사를 포함시키는 것이 일반화되고 있다. 내연기관 연소는 난류로 인해 국부 농도 및 온도 변화가 큰 상태에서 이루어지므로 반드시 이를 고려하기 위한 난류 연소 모델이 필요하게 된다. 난류연소 모델링의 근본적 문제는 대류항의 비선형성과 함께 일반적으로 Arrhenius 형태 화학반응률의 비선형성과 난류 유동의 상호 결합에 있다고 할 수 있다.

연료와 공기가 미리 혼합되어 연소가 진행되는 난류예혼합 연소에서는 대부분의 경우 기연가스와 미연가스를 혼합시키는 큰 난류 에디들의 시간 스케일이 화학반응 시간 스케일보다 훨씬 크며 전체적인 연소 속도를 결정한다. 연료와 공기가 분리된 상태에서 유입되어 상호 간 혼합과 연소가 동시에 일어나는 난류확산 연소에서도 연소반응의 시간 스케일에 비해 연료/공기 혼합 속도를 결정하는 난류 에디의 시간 스케일이 훨씬 크므로 단순화를 위해 국부 조성에 따른 열역학적 평형 상태를 가정하기도 한다. 그러나 실제로 연소 시 모든 화학반응의 속도가 넓은 범위에 걸친 에디들의 시간스케일에 비해 항상 무시될 수 있을 만큼 작은 것은 아니므로 그와 같은 영향을 고려하기 위해 다양한 난류 연소 모델들이 제안되어 있다.

예혼합 laminar flamelet 모델(LFM)에서는 화염에 대한 strain rate이나 curvature등이 층류화염속도에 미치는 영향을 화학반응과 유동 시간 스케일의 상호 작용으로서 고려하는 반면 비혼합 laminar flamelet 모델에서는 화염에 작용하는 strain rate을 결정하는 변수로서 스칼라소산율(scalar dissipation rate)에 따라 화염 구조와 연소 속도가 변하는 것을 고려하고 있다. 그러나 integral length scale로부터 Kolmogorov scale에 이르기까지의 모든 에디들이 화염 두께에 비해 크다는 laminar flamelet 모델의 가정이 타당한가에 대해서는 현재 많은 논란이 있다. Conditional moment closure(CMC) 모델은 이와 같은 문제점을 극복하기 위해 Bilger에 의해 제안, 발전되고 있는 새로운 모델로서 난류확산 연소에 대해

적용한 다양한 결과들이 발표되고 있다. CMC의 기본 개념은 laminar flamelet과 같이 화염 구조를 미리 가정하지 않고 혼합분율에 대한 조건 평균 보존식을 유도하여 푸는 방법으로서 조건 평균 농도 및 온도의 변화를 무시할 경우 화학반응항은 1st order closure로써 나타내지며 Favre 평균값은 혼합분율에 대한 pdf를 가중 평균함으로써 구할 수 있다. 다음에서 CMC 모델의 보존식과 주요 항들의 모델링, 적용 사례들에 관해 간략히 정리해 보고자 하였다.

2. 관련보존식

혼합분율, ξ , 에 대한 i 번째 화학종의 질량분율, Y_i , 의 조건평균과 난류 fluctuation은 다음과 같이 정의된다.

$$Y_i(\mathbf{x}, t) = Q_i(\eta; \mathbf{x}, t) + y_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

여기서

$$Q_i(\eta; \mathbf{x}, t) \equiv \langle Y_i(\mathbf{x}, t) | \xi(\mathbf{x}, t) = \eta \rangle \quad (2)$$

로 정의되는 조건평균, Q_i , 에 대한 보존식은 joint pdf 방법과 decomposition 방법의 두 가지에 의해 유도해 낼 수 있다. 이 중 전자의 방법이 더욱 엄밀한 수학적인 과정에 기초하고 있으며 후자는 물리적인 기초에 근거하여 비교적 쉽게 이해할 수 있는 장점이 있다. Q_i 에 대한 보존식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \langle \mathbf{U} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_i + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u} y_i | \eta \rangle P(\eta) \langle \rho | \eta \rangle)}{P(\eta) \langle \rho | \eta \rangle} \\ = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle \omega_i | \eta \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 Lewis 수는 1로 하였으며

* 포항공과대학교 기계공학과

조건평균스칼라소산율, 는 다음과 같이 정의된다.

$$N \equiv D \nabla \xi \cdot \nabla \xi \quad (4)$$

식 (3)에서 추가의 모델링이 필요한 항들은 조건평균속도, 화학반응항, 그리고 조건평균스칼라소산율 등이다. 확률밀도함수, $P(\eta)$, 는 식 (3)과 밀접히 연관되어 있는 다음의 pdf 천이방정식을 만족한다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\eta) \rho_\eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{U} | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta) \\ = - \frac{\partial^2 \langle N | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta}{\partial \eta^2} \end{aligned} \quad (5)$$

식(3)의 난류확산항에 대해 gradient transport 가정을 도입하면

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_i}{\partial t} + [\langle U | \eta \rangle - D_i \nabla \ln(\bar{\rho} \tilde{P}(\eta))] \cdot \nabla Q_i \\ = \nabla \cdot D_i \nabla Q_i + \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle \omega_i | \eta \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

로 표현되며 여기서 Dt 는 난류확산계수이다. Q_i 에 대한 경계조건으로서는

$$\begin{aligned} Q_i(\mathbf{x}, \eta = 0) &= Y_{i,Oxid} \\ Q_i(\mathbf{x}, \eta = 0) &= Y_{i,Fuel} \end{aligned}$$

를 만족한다. $Y_{i,Oxid}$, $Y_{i,Fuel}$ 는 영역 내로 유입되는 산화제와 연료에서의 i 번째 화학종의 질량분율을 나타낸다. 조건평균 온도에 대한 보존식도 Q_i 와 유사하게 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial Q_T}{\partial t} + [\langle \mathbf{U} | \eta \rangle - D_i \nabla \ln(\langle \rho \rangle \tilde{P}(\eta))] \cdot \nabla Q_T$$

$$\begin{aligned} = \langle N | \eta \rangle \left(\frac{\partial^2 Q_T}{\partial \eta^2} + \frac{1}{c_\eta} \left(\frac{\partial c_\eta}{\partial \eta} + \sum_i c_{\eta,i} \frac{\partial Q_i}{\partial \eta} \right) \frac{\partial Q_T}{\partial \eta} \right) \\ + \nabla \cdot D_i \nabla Q_T + \frac{1}{\rho_i c_\eta} \frac{\partial P}{\partial t} + \langle \omega_T | \eta \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

c_η 는 정압상태에서의 조건평균 비열, 조건평균 압력은 용기 내의 평균압력으로 하였으며 복사열전달의 영향은 무시하였다. Favre 평균값은 조건평균값과 혼합분율에 대한 Favre 확률밀도함수를 곱하여 적분함으로써 다음과 같이 구해진다.

$$\tilde{\phi} = \int \langle \phi | \eta \rangle \tilde{P}(\eta) d\eta \quad (8)$$

그 외의 CMC 보존식의 유도 과정과 물리적 의미에 대해서 Bilger[1]에 자세히 기술되어 있다.

3. 주요 submodel

3.1. 확률밀도함수

기존의 단순 pdf 와 Favre pdf 는 다음과 같이 관계지어진다.

$$\langle \rho | \eta \rangle P(\eta) = \bar{\rho} \tilde{P}(\eta). \quad (9)$$

대부분의 응용 CMC 계산에서는 pdf 천이방정식의 해를 직접 구하지 않고 Favre pdf를 beta 함수 형태를 갖는 것으로 가정하여 각 위치에서의 혼합분율의 평균과 variance의 두 변수에 의해 결정한다. 따라서 난류의 영향은 혼합분율의 평균과 variance 보존식을 통해 pdf를 결정하는 데에 주된 역할을 하게 되며 이 부분은 이미 난류확산 연소 모사에 널리 활용되고

있는 평형 가정에 기초한 assumed pdf 방법과 동일하다. Autoignition과 같은 과도 상태에 대해서도 같은 가정에 기초하여 혼합분율에 대한 pdf에 대해 해를 구하고 있으나 혼합분율 보존식과 CMC 식간의 연계를 매 시간 스텝에서 만족시켜 주어야 한다.

3.2. 화학반응항

비선형 Arrhenius 형태의 생성항에 대해 다음과 같이 first-order closure에 의해 조건평균된 농도 및 온도로 나타내었으며 난류에 의한 conditional fluctuation은 무시하였다.

$$\langle \omega_i(\mathbf{Y}, T, P) | \eta \rangle \approx \omega_i(\mathbf{Q}, Q_T, P) \quad (10)$$

여기서 우변의 \mathbf{Q}, Q_T, P 등은 조건평균된 온도, 농도, 압력을 나타낸다. 그러나 화학반응의 시간 스케일이 난류 시간 스케일만큼 커지게 되는 점화/소염 조건에서는 이와 같은 가정의 오류가 커지게 되며 따라서 second-order closure 등의 더 높은 정확도가 필요하게 된다[2]. 이 경우 second conditional moment들에 대한 추가의 CMC 보존식의 해를 구하여야 하며 이에 따른 추가의 closure 가정 역시 필요하게 된다.

3.3. 조건평균스칼라소산율

식 (3)에서 가장 중요한 항 중의 하나는 혼합분율 공간 상에서의 확산을 결정하는 조건평균스칼라소산율이다. 이 항은 LFM에서는 이론공연비에서의 scalar dissipation rate의 형태로 나타나며[3] CMC에서와 마찬가지로 정상 상태에서의 층류 화염편 구조를 결정하는 가장 중요한 역할을 한다. 조건평균스칼라소산율은 특히 화학 반응 영역인 stoichiometric 조성

근처에서 정확한 모델링이 요구되며 pdf 천이방정식과 모순되지 않기 위해 혼합분율의 양쪽 경계인 0, 1에서는 반드시 0이 되어야 한다. 가장 간단한 형태로서

$$\langle N | \eta \rangle = C \exp(-2(\text{erf}^{-1}(2\eta - 1))^2) \quad (11)$$

는 균일 난류장에서 amplitude mapping closure 방법[4]이나 대항류 층류 화염에 대한 관계식으로부터 구해질 수 있다. 상수 C는 다음과 같이 결정되며

$$C = \int \frac{\tilde{N}}{\exp(-2(\text{erf}^{-1}(2\eta - 1))^2)} \tilde{P}(\eta) d\eta \quad (12)$$

여기서 평균스칼라소산율, \tilde{N} , 는 속도와 혼합분율의 시간 스케일의 비가 일정하다는 가정 하에 다음과 같이 근사하였다.

$$\tilde{N} = \frac{\varepsilon}{k} \tilde{\xi}^{-2} \quad (13)$$

3.4. 조건평균속도

조건평균속도는 다음과 같이 혼합분율에 대해 선형으로 근사하였다[4].

$$\langle \mathbf{U} | \eta \rangle = \tilde{\mathbf{U}} + \frac{\mathbf{u}'' \xi''}{\xi''^2} (\eta - \tilde{\xi}) \quad (14)$$

이 식은 속도와 혼합분율이 모두 Gaussian 분포를 가질 때 유도되는 형태로서 여러 유동장에서의 실험을 통해 검증되었다[5, 6]. 그러나 비균일 유동장의 경우 속도와 혼합분율은 일반적으로 Gaussian 분포를 가지지 않으며 실험 결과에서도 의 절대값이

큰 영역에서는 선형 관계와 차이를 보이고 있다[6].

4. LFM 및 pdf 방법과의 차이점

LFM은 기본적으로 난류 유동 속에 존재하는 화염편이 같은 크기의 scalar dissipation rate이 작용하는 층류 화염편과 같은 구조를 갖는다는 가정에서 출발한다. 따라서 만약 난류 에디의 영향이 단순히 화염을 굴곡시키면서 화염에 걸리는 stretch를 변화시키는 외에 작은 에디들이 화염편 속으로 직접 침투하여 확산속도를 증가시킬 경우에는 화염의 구조가 변하게 되므로 LFM의 가정 자체가 성립되지 않는다.

반면 CMC는 LFM와 달리 화염 구조에 대한 임의적인 가정에서 출발하는 것이 아니고 엄밀한 수학적 유도 과정에 따라 조건 평균값에 대한 보존식을 유도하였으므로 해의 정확도를 결정하는 것은 보존식 자체가 아니라 조건 평균된 관련 각 항들을 어떻게 실제적으로 모델링하는가에 달려 있다. 따라서 CMC 모델의 Damkohler number 상의 적용 범위가 LFM에 비해 더 넓다는 것을 알 수 있다. CMC에서 1st order closure에 의해 화학반응항을 항상 정확히 모사할 수 있는 것은 아니며 점화와 소멸이 발생하는 조건에서는 화학반응의 시간 스케일이 상대적으로 커지므로 higher order closure에 의해서도 오차가 과도하게 커질 가능성을 배제할 수 없다. 그러나 열방출 반응이 비교적 빨리 진행되는 대부분의 연소 경우에 있어서는 조건 평균값과 열역학 평형값과의 차이가 그다지 큰 것이 아니므로 실제로 LFM에 의해 계산된 결과와도 큰 차이를 주는 것은 아니다[7]. 따라서 공학 설계에서 중요한 Favre 혹은 Reynolds 평균값을

결정하는 주 요인은 난류에 의해 결정되는 혼합분율에 대한 확률분포함수로서 조건 평균값보다 난류 모델이 최종 결과에 더 큰 영향을 미친다.

조건 평균된 CMC 식과 pdf 에 대한 컨 이방정식은 서로 밀접한 관련이 있는 adjoint 식으로서 완벽한 조건평균과 확률밀도 해는 두 식을 동시에 만족시켜야 한다. Pdf 식에서도 CMC 식에서와 마찬가지로 혼합분율이 독립 변수가 되면서 전체적으로 차원이 하나 더 증가하게 되므로 일반적으로 3 차원 문제라면 4 차원 문제가 되는 셈이며 모든 위치에서의 확률밀도함수를 구하기 위해 이산화에 의한 deterministic 수치해법보다 Monte Carlo 방식의 stochastic 확률적 방법이 더욱 효율적임이 알려져 있다. 그러나 공간상에서의 미분을 포함하는 층류확산항 외에는 화학반응항에 대해서도 임의적인 모델링이 전혀 필요없으므로 가장 이상적인 난류연소 해석 방법으로서 인식되어 왔다. 비교적 간단한 제트 화염이나 소염 조건 근처에서의 화염에 대해서 다른 모델보다 좋은 결과를 보이는 반면 복잡한 bluffbody 화염 등에서는 아직 뚜렷한 결과를 내지 못하고 있으며 과도한 계산 부담으로 인해 실용적인 공학 계산에는 아직 많은 어려움이 있을 것으로 예상된다

5. 응용사례

5.1 Bluffbody 화염에서의 OH 와 NO 분포예측

Bluffbody 화염은 단순 제트와 달리 재순환영역에 의해 화염 안정화가 이루어지며 elliptic 편미분방정식에

의해 기술된다. 복잡한 공간분포로 인하여 난류확산 연소 중 모델 검증을 위한 중요한 테스트 케이스로서, 또한 실용적으로 많이 응용되고 있는 화염안정화 방법으로서 큰 의미를 지닌다. 여기서는 평형 혹은 일정 strain rate의 층류화염을 가정함으로써 얻어지는 혼합분율에 대한 함수로부터 유동장과 혼합분율의 공간 분포를 계산하였으며 이로부터 얻어진 유동장에 기초하여 CMC 식의 해를 구하였다.

연료는 CH₄/H₂와 H₂/CO가 사용되었으며 각각의 경우에 대한 자세한 실험 조건과 경계 조건등은 Dally et al. [8]에 자세히 주어져 있다. CH₄/H₂ 연소는 GRI Mech[9] 과 Miller-Bowman mechanism[10]에 의해 주어지며 H₂/CO 연소는 N₂를 포함하는 32개의 단위반응과 12개의 화학종으로 이루어져 있다. 각각의 반응율의 시간적분은 CHEMKIN-II 패키지를 이용하였으며 CMC 식은 조건평균의 공간 의존성이 상대적으로 약하다는 점을 이용하여 유동 계산 시보다 더 적은 격자 수가 이용되었다. 그림 1과 2 는 조건평균온도와 평형 가정이 성립되지 않는 OH radical과 NO의 조건평균농도 분포에 대한 실험 및 예측 결과를 나타낸다.

5.2. Soot 분포예측

Soot 는 일반적으로 불완전연소에 의한 연소 부산물로서 연료가 과농한 영역에서 PAH(polycyclic aromatic hydrocarbon)를 거쳐 주로 생성된다. 1.0 에 가까운 emissivity 로 인해 복사열전달의 주요 매개체로서 작용하며 또한 대기 오염의 한 요인으로서 정확한 예측이 요구된다. Soot 의 반응 메카니즘에 대한 연구는

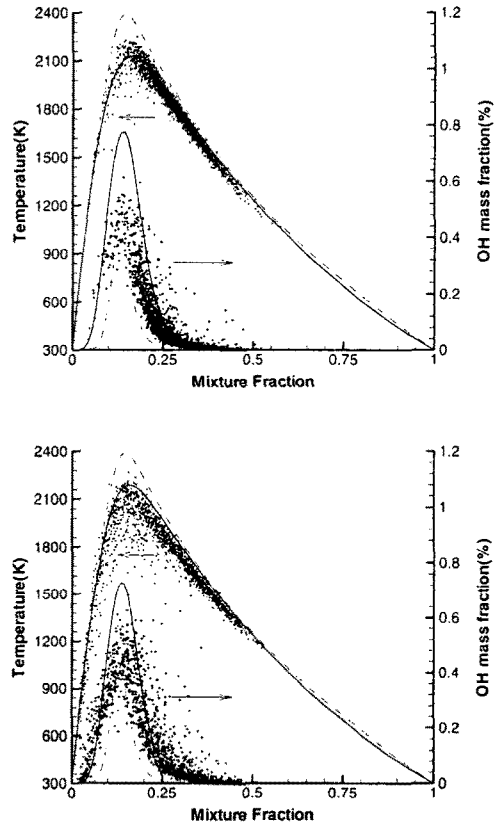


Fig 1. Conditional mean temperatures and OH mass fractions in (a) CH₄/H₂ and (b) H₂/CO flames

이미 많이 이루어져 있으며 Kronenburg 등은 층류연소 데이터에 기초한 가장 간단한 형태의 반응 메카니즘을 사용하였다. Kronenburg 등은 영국 Cranfield 대학의 Moss 교수팀에서 측정된 데이터와 CMC 결과를 비교하여 좋은 결과를 얻었으며 생성항에 대한 first-order closure 와 soot 의 경우 분자운동에 의한 확산이 없으므로 다른 기체상태 화학종에 대한 differential diffusion 을 고려하기 위한 모델이 중요한 역할을 하고 있다. 메탄과 공기의 난류확산 제트 화염에 대해 대기압과 3 기압 하에서 예측 및

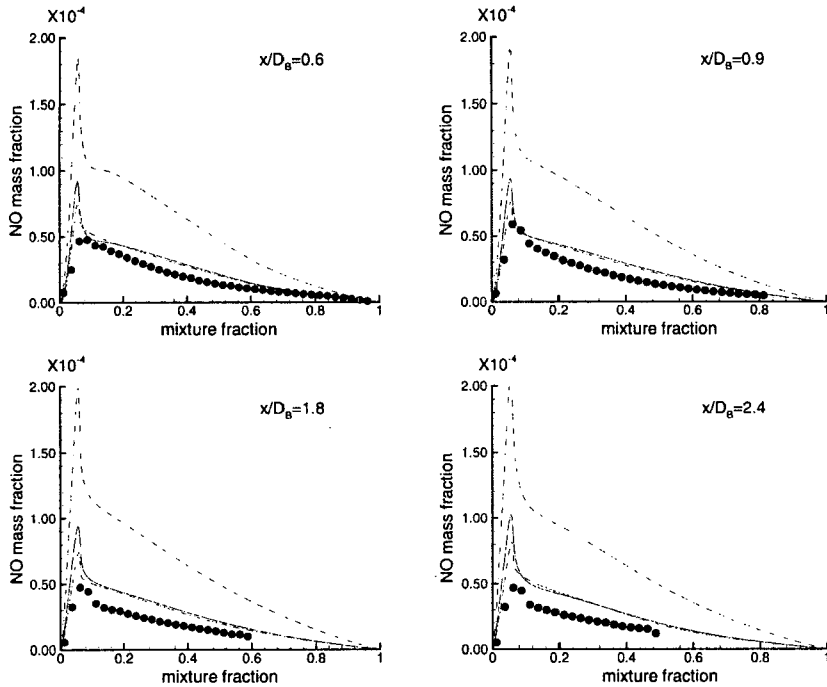


Fig 2. Conditional mean NO mass fraction in a CH₄/H₂ flame(symbol:measurement, solid line: CMC with GRI Mech 2.11, dashed line: CMC with GRI Mech 3.0, dashed dotted line: CMC with Miller-Bowman mechanism)

실험 결과를 비교하였으며 그림 3 에 대기압에서의 결과가 주어져 있다. 다른 경우와 마찬가지로 조정된 계수를 사용한 k-e 난류 모델이 사용되었으며 혼합분율, 온도, soot 의 수밀도와 체적 비 등이 측정 데이터와 부합하는 결과를 보이고 있다.

5.3. Jet autoignition 예측

점화지연기간의 정확한 예측은 디젤 엔진 및 가솔린 노킹 현상 등에서 매우 중요한 의미를 지닌다. Ignition/extinction 과정은 화학반응과 난류혼합 과정이 서로 비슷한 정도의 시간 스케일을 가지게 되므로 실제적인 모사가 가장 어려운 문제라 할 수 있다. 여기서는 가장 간단한 형태로서 first-order CMC

식에 의한 과도 상태의 해를 구하여 실험 측정 결과와 비교하였으며 최대 국소 온도에 의해 임의적으로 결정한 점화 시점에 의한 점화지연 기간에 대해 정성적으로 측정 데이터와 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있었다.

점화지연기간은 초기 온도에 대해 매우 민감한 변화를 보이며 온도가 증가함에 따라 급격히 감소한다. 초기 압력에 대해서는 압력이 증가함에 따라 약간 감소하는 경향을 보이며 연료 중 매탄에 비해 에탄의 비율이 증가하면서 약간 감소한다. 처음 점화가 발생하는 위치는 제트 선단부 주변으로서 스칼라소산율이 작기 때문에 주위로의 열손실이 적으면서 화학반응 속도가 최대가 되는 혼합분율의 위치에 해당한다. 일반적으로 이와 같은

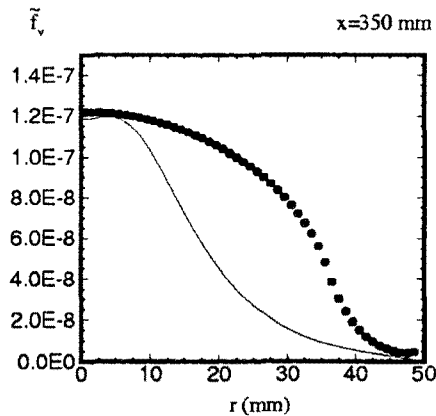
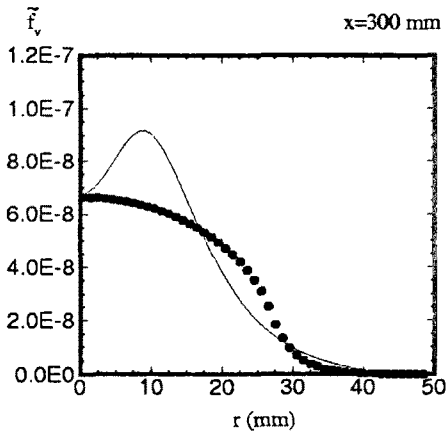


Fig 3. Soot volume fraction distributions at the atmospheric pressure at different axial locations (symbol: measurement, line: calculation) [11]

문제에서는 second-order 이상의 반응항 모사가 필요한 것으로 보고되고 있으며 k-e 난류 모델도 만족스럽지는 못한 것으로 판단된다. 여기서는 결과의 정확도보다는 정성적으로 점화지연시간에 대한 변화의 경향을 재현하는 데에 의미를 두고 있다.

6. 결론

난류확산 연소는 디젤엔진, 가스터빈을

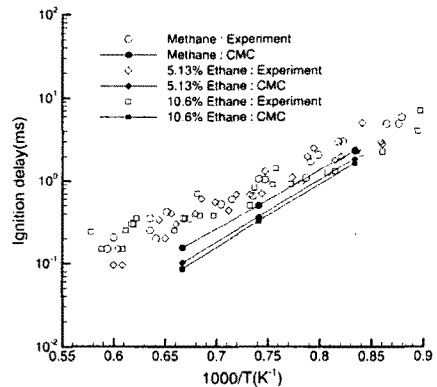
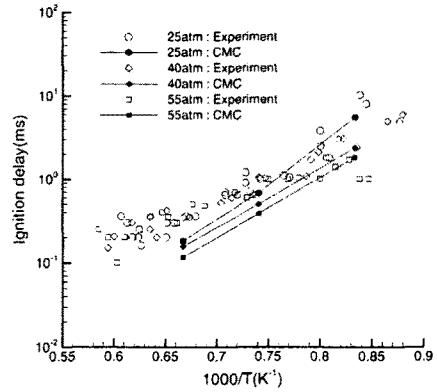


Fig4. Ignition delays in a turbulent methane/ethane jet

포함하여 광범위한 연소기에서 활용되고 있는 연소 모드로서 매우 중요한 공학적 의미를 지닌다. 연소온도에 비해 activation 온도가 한 order 정도 크기 때문에 연소 영역이 층류화염면 내의 좁은 영역에 국한된다는 가정에 기초한 LFM과는 달리 CMC 모델은 이와 같은 화염구조에 대한 가정 없이 유도된 조건평균 보존식에 대한 일반해를 구하는 방법이다. 이미 여러 경우에 대해 실험 측정 데이터와 비교하여 좋은 결과를 보이고 있으며 적절한 조건평균변수에 대한 모델이 수반될 경우 적용 범위도 LFM보다 넓기

때문에 앞으로 많은 가능성을 지닌 방법으로서 받아들여지고 있다. 특히 반응 속도가 비교적 느린 OH radical, NO, soot 등의 생성 및 공간 분포 예측에 적용될 수 있으며 점화/소음을 수반한 문제에서도 적용 가능성이 입증되고 있다. Conditional averaging 개념은 난류확산 연소 외에도 난류예혼합 연소에서 zone conditional averaging에 의한 two-fluid 모델의 유도, 그 외 여러 난류연소 상황에서 double conditioning 등의 형태로서 확장 가능한 매우 유용한 방법이다.

참고문헌

- (1) Bilger, R. W., Phys. Fluids, A5:436-444(1993).
- (2) Mastorakos, E. and Bilger, R. W., Phys. Fluids 10(6):1246-1248(1998).
- (3) Peters, N., Prog. Energy Combust Sci. 10:319(1984).
- (4) O'Brien, E. E., and Jiang, T. L., Phys. Fluids A3:3121-3123(1991).
- (5) Kuznetsov, V. R, and Sabel'nikov, V. A. *Turbulence and Combustion*, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1990.
- (6) Li, J. D., and Bilger, R. W., Phys. Fluids 6:605-610(1994).
- (7) Kim, S. H., Huh, K. Y., and Liu, T., *Combust. Flame* 120:75-90(2000)
- (8) Dally, B. B., Masri, A. R., Barlow, R. S., Fiechtner, G. J. and Fletcher, D. F., Proc. Combust. Inst, 26:2191-2197 (1996).
- (9) <http://euler.me.berkeley.edu/gri-mech/>
- (10) Miller, J. A. and Bowman, C. T., Prog. Energy Combust. Sci., 15:287-338(1989).
- (11) Kronenburg, A., Bilger, R. W. and Kent, J. H., *Combustion & Flame* 121:24-40 (2000).