

# 메탄을 Bluff-Body 난류 화염내의 화염구조 및 NO<sub>x</sub> 생성 특성에 대한 수치적 연구

이준규\* · 김성구\* · 김용모\*\* 김세원\*\*\*

## Flamelet Modeling of Structures and NO<sub>x</sub> Formation Characteristics in Bluff-Body stabilized Methanol Flames

Joon Kyu Lee, Seung-Ku Kim, Yong-Mo Kim, Sae Won Kim

**Key Words :** Bluff-Body Stabilized Flames, Steady Laminar Flamelet Model, Eulerian Particle Flamelet Model, Thermal NO<sub>x</sub> Formation

### Abstract

This paper computes the bluff-body stabilized jet and flame. This study numerically investigates the nonpremixed C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-air jet for the nonreacting case and the nonpremixed CH<sub>3</sub>OH-air turbulent flames for the reacting case using the laminar flamelet model on modified KIVA2 code. And this study predicts NO<sub>x</sub> formation characteristics using Eulerian Particle Flamelet Model. In the present study, the turbulent combustion model is applied to analyze both nonreacting and reacting case. And both standard k-ε model and modified k-ε model are used in nonreacting case. Calculations are compared with experimental data in terms of velocity, mixture fraction, mixture fraction Root Mean Square and Temperature. The present model correctly predicts the essential features of flame structures and NO<sub>x</sub> formation characteristics in the bluff-body stabilized flames.

### 1. 서론

Bluff-Body 연소기는 많은 공학 문제 적용에서 광범위하게 사용 되어져 왔다. 이러한 형태의 화염장은 탁월한 난류 혼합 특성과 향상된 화염 안정성을 가지고 있기 때문에 실험적으로나 이론적으로 연구되어져 왔다. 또한, Bluff-Body 안정화 화염은 난류 재순환 연소 유동에서의 난류와 화학반응간의 상호작용을 연구하는데 있어서 매우 유용하다고 할 수 있다. 게다가, 넓은 영역의 입구유동 조건에서 화염안정화를 유지하는 능력 뿐만 아니라 구조가 간단하고 경계 조건이 명확하게 정의 되어 있기 때문에 현재 연소 레이저 측정이나 수치해석에 대해서 많은 연구가 진행중이다[1-3]. 최근의 레이저 측정 기술이나 수치해석등에 의해 연

소과정에 대한 이해가 현저히 발전되었다고는 하나 화학반응과 유동간의 복잡한 상호작용으로 인하여 연소 반응 유동에 대한 연소과정과 공해물질 생성등에 관한 예측은 여전히 중요한 문제로 남아 있다.

비에혼합 난류화염장내에서 일어나는 복잡한 물리적 현상들을 모사하기 위해 층류화염편 모델[4]은 널리 사용되어 왔으며, 여러 분야에 대해 그 적용성이 확대되고 있다[5]. 이에 대한 이유로서, 층류 화염편 모델은 상세 화학반응, 편중확산 및 soot 생성과 같은 복잡한 연소 현상들을 난류 유동장과 분리하여 고려할 수 있다는 점을 들 수 있다. 층류화염편 모델들의 공통된 특징은 난류 화염내의 국소 화염구조를 본질적으로 1 차원적인 층류 화염구조를 가지는 층류화염편의 앙상블로 가정하는 것이다. 이때, 난류유동은 층류화염편들을 신장시키거나 주름지게 함으로써 층류화염편내의 물질 및 열에 대한 분자 단위 확산을 지배하여 화학반응에 영향을 미치게 된다. 층류화염편을 층

\* 한양대학교 대학원

\*\* 한양대학교 기계공학부

\*\*\* 생산기술연구원

류 대향류 확산화염으로 가정하는 것과는 다른 방법으로 Peters 는 화학종 및 에너지 보존 방정식으로부터 층류화염편내 반응면에 수직방향을 주성분으로 하는 좌표 변환을 통해, 혼합분율을 매개변수로 층류화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 지배하는 1 차원 상미분 연립방정식을 유도하였다[4]. 그리고, Ferreira 는 수정된 Peters 방정식을 통해 비평형 화학반응에 대한 라디칼의 변화를 예측하였다[6].

층류화염편 모델을 사용하는 일반적인 방법은 층류화염편들의 난류장에 대한 반응속도가 무한히 빠르다고 가정하는 것이며, 이때, 난류화염계산에 앞서 층류화염편 방정식의 정상상태 해를 구함으로써 순간적인 열화학적 상태량들을 테이블화 시킨 층류화염편 라이브러리를 구성할 수 있다. 그러나, 이러한 정상상태 가정으로 인하여 부상화염내의 국소소염 및 재점화, 그리고 고압분사된 분무연소시 자발화 및 연소현상등과 같이 본질적으로 비정상적인 연소 현상들과 복사열전달 및 NOx 생성등과 같이 매우 느리게 일어나는 물리현상을 고려하기 위해서는 별도의 모델링이 필요하게 된다.

본 연구에서는 먼저 화학반응이 일어나지 않는 경우를 통해서 일반적인 k-ε 모델과 Turpin 등이 제안한 수정된 k-ε 모델[7]을 구분지어 비교하였고, Ferreira 가 제안한 수정된 Peters 방정식을 사용하여 층류화염편내의 혼합과정 및 화학반응을 계산하였으며, Barths 등이 제안한 여러 개의 층류화염편들이 각각 주어진 공간 및 시간에 따라 분포할 수 있는 확률 밀도 함수를 구함으로써, 공간적으로 스칼라소산율의 비균일 분포를 고려할 수 있도록 확장한 multi-RIF 모델인 Eulerian Particle Flamelet 모델[8]을 사용하여 NOx 생성 특성을 파악하였다. 그리고, 상세한 광계측 데이터가 존재하는 메탄을 Bluff-Body 화염에 대해 수치해석 결과를 실험결과와 자세히 비교함으로써 본 난류연소모델의 예측능력을 검증하였다

## 2. 물리적 모델

### 2.1 난류모델

난류 해석을 위한 k-ε 모델에서의 상수값은 아래와 같다.

$$C_{\mu} = 0.09 \quad C_{\epsilon 1} = 1.44 \quad C_{\epsilon 2} = 1.92 \\ \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_{\epsilon} = 1.3$$

이러한 상수값들은 벽면경계 유동이나 2 차원 평면 제트 유동등에서는 비교적 정확한 예측값을 보여주고 있으나, 축대칭 문제에 대해서는 실험치와 잘 맞지 않는 결과를 보여준다. 이에 Turpin 등은 새로운 상수값들을 제시하였고[7], 그러한 수정된 k-ε 모델에서의 상수값은 다음과 같다.

$$C_{\mu} = 0.09 \quad C_{\epsilon 1} = 1.5 \quad C_{\epsilon 2} = 1.82 \\ \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_{\epsilon} = 1.7$$

### 2.2 층류화염편모델

#### 2.2.1 Peters 방정식

모든 화학종의 동일한 분자 확산을 가정한다면, 유동입자의 혼합상태는 혼합분율, Z 라는 한가지 보존 변수에 의해 지배된다. Peters 는 층류 화염편의 혼합과정과 화학반응을 동시에 묘사할 수 있는 다음과 같은 지배방정식을 유도하였다.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{w}_k}{\rho} \quad (1)$$

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = c_p \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^K \frac{h_k \dot{w}_k}{\rho} + \frac{\dot{w}_k}{\rho} \quad (2)$$

많은 연구에서 식(1)과 (2)가 사용되어 왔으나, 최근 Ferreira 는 식(2)가  $c_p$  가 일정하다는 조건하에 유도된 점을 고려하여 다음과 같이 개선된 에너지 방정식을 제안하였다.

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \sum_{k=1}^K h_k \left( \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{w}_k}{\rho} \right) \quad (3)$$

식(3)은 Peters 변환을 적용한 보다 일반적인 에너지 방정식이며,  $\partial c_p / \partial Z = 0$  인 경우, 식(2)와 동일해진다.

Peters 방정식에서 알 수 있듯이, 층류화염편에서 반응물은 분자확산에 의해서만 화염면으로 수송될 수 있으며, 이를 지배하는 변수인 스칼라소산율,  $\chi$  는 확산에 의한 특성 시간의 역수로 해석할 수 있다. 난류유동에 의해 층류화염편이 신장되던 화염편의 주방향으로 구배가 커지므로  $\chi$  가 증가하여 반응면으로의 분자확산이 증가된다. 이때, 반응면으로부터의 열전달 또한 증가하게 되며, 동시에 반응을 할 수 있는 체류시간이 감소하므로 온도는

감소하고 화학반응은 보다 불완전해진다. 이러한 불균형이 증가하다가,  $\chi$  가 일정한계를 넘어서면 더 이상 반응이 유지되지 못하고 층류화염편은 화학평형상태에 다가감을 알 수 있다.

### 2.2.2 Steady Laminar Flamelet Model

비에혼합 난류화염장내의 한 지점은 다양한 스펙트럼의 스칼라소산율을 갖는 층류화염편에 의해 순간적인 열화학적 상태량이 정의되므로, 그 지점에서의 평균 상태량은 층류 화염편내의 혼합상태를 지배하는 혼합분율  $Z$ , 비평형화학반응을 지배하는 스칼라소산율  $\chi$  의 다중확률밀도함수를 통해 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\tilde{\phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(Z, \chi) \cdot P(Z, \chi) dZ d\chi \quad (4)$$

$Z$  와  $\chi$  가 각각 통계적으로 독립적이라 가정하면,

$$P(Z, \chi) = P(Z) * P(\chi) \quad (5)$$

이며, 이때  $P(Z)$ 는 Beta 함수를 사용하였고,  $P(\chi)$ 에 대해서는 Log normal 분포를 사용하였다.

## 3. 해석조건

### 3.1 Masri bluff-body 연소장치

본 연구에서는 정상상태 층류화염편모델을 이용하여 자세한 광계측데이터[10]가 존재하는 비에혼합 난류 bluff-body 화염을 해석하였다. 연료 노즐의 지름과 bluff-body 의 지름은 각각 3.6mm 와 50mm 이며,  $X=230\text{mm}$  와  $R=100\text{mm}$  인 계산영역을  $75 \times 63$  개의 비균일 격자계로 구성하였다. 이러한 형상을 가지고 화학반응이 일어나지 않는 경우와 화학반응이 일어나는 경우를 구분지어 해석하였다.

#### 3.1.1 화학반응이 일어나지 않는 경우

bluff-body 연소기 안으로 노즐을 통하여 61m/s 의 속도를 가지고 에틸렌( $C_2H_4$ )이 들어오게 되고, 20m/s 의 속도로 공기가 들어오게 된다. 에틸렌과 공기의 온도는 300K 이며, 이때의 압력은 1.013bar 로 가정되어진다. 또한 bluff-body 표면에서의 온도는 300K 로 가정되어진다. 난류유동 예측모델에 따라 일반적인  $k-\epsilon$  모델(NR\_S)과 수정된  $k-\epsilon$  모델(NR\_M)을 구분지어 비교하였다.

#### 3.1.2 화학반응이 일어나는 경우

bluff-body 연소기 안으로 노즐을 통하여 80m/s 의 속도를 가지고 메탄올( $CH_3OH$ )이 들어오게 되고, 40m/s 의 속도로 공기가 들어오게 된다(ML1). 연료 입구 속도차에 따른 재순환영역의 형태 및 다른 측정값들을 비교하기 위하여 121m/s 의 속도를 가지고 들어오는 메탄올( $CH_3OH$ ) 또한 계산되어진다(ML2).

상온에서 액체상태인 메탄올은 100K 가열시켜 373K 기체상태로 들어오게 되고 공기의 온도는 300K 이며, 이때의 압력은 1.013bar 로 가정되어진다. 또한, bluff-body 표면에서의 온도는 700K 로 일정하게 가정되어진다. 화학당량비 혼합분율은 0.1350 이며, 단열 화염 온도는 2200 K 이다.

## 4. 결과 및 고찰

주어진 스칼라소산율  $\chi$  을 가지는 층류화염편을 해석하기 위해서는 상미분연립방정식인 식(1)과 (3)에 대한 정상상태 해를 구해야만 한다. 본 연구에서는 중앙차분을 통해 이산화한 각 미분방정식에 대하여 modified damped Newton 알고리즘을 이용하여 층류 화염편 라이브러리를 구성하였고, 또한 난류 유동과 화학반응간의 상호 작용을 모사하기 위하여 분무해석을 포함한 2 차원 또는 3 차원 비정상상태 화학반응 수치해석에 이용되는 이미 검증된 KIVA2 코드[11]를 수정하여 적용하였다.

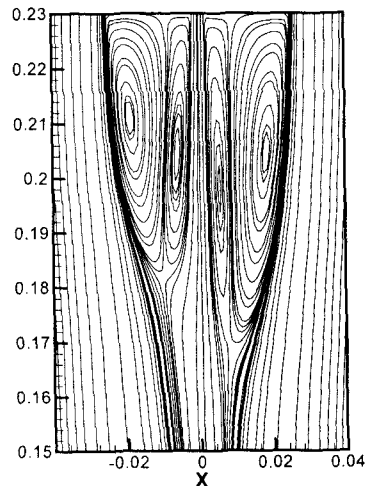


Fig. 1 Recirculation zone of Stream line for the standard  $k-\epsilon$  model(left) and modified  $k-\epsilon$  model(right)

이때, 메탄올의 연소반응을 모사하기 위해 Wanartz 등이 제안한 상세화학반응[9]을 사용하였다. 화학 반응이 일어나지 않는 경우 난류 모델에 대하여 일반적인 k-ε모델과 수정된 k-ε모델을 구분하여 적용하였다. Fig. 1 에서 보이는 바와 같이 수정된 k-ε모델을 사용한 경우 재순환 영역이 축방향하류로 진전됨을 볼 수 있는데, 이것은 난류 소산율에 대한 상수값의 보정으로 인한 결과라고 판단되며, 광계측측정을 통한 재순환 영역의 측정 길이와 거의 일치 하고 있다.

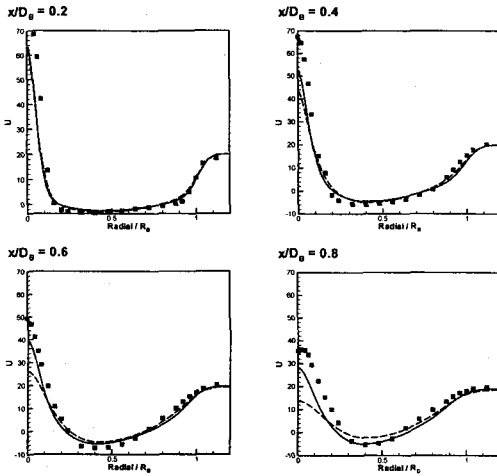


Fig. 2 Radial profiles of mean axial velocity in the non-reacting case( solid line : modified k-ε model, dashed line : standard k-ε model )

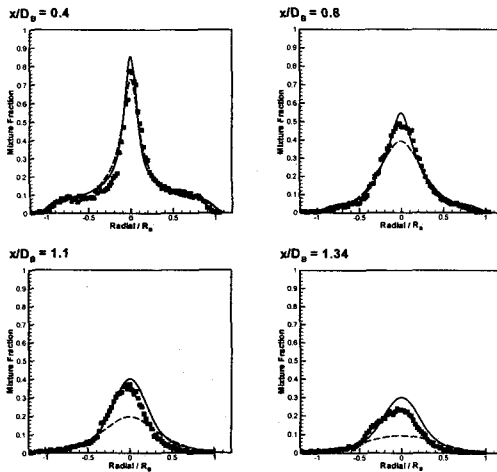


Fig. 3 Radial profiles of mean mixture fraction in the non-reacting case ( solid line : modified k-ε model, dashed line : standard k-ε model )

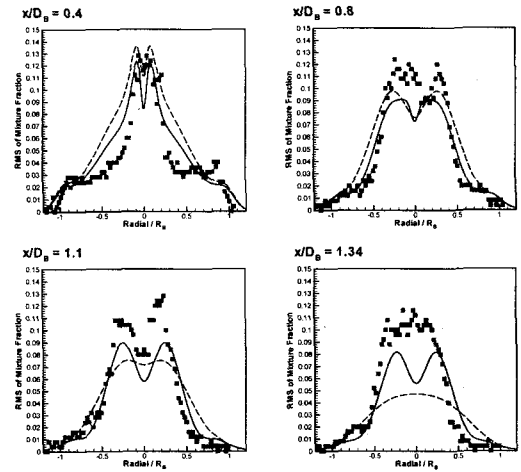


Fig. 4 Radial profiles of mean mixture fraction RMS in the nonreacting case ( solid line : modified k-ε model, dashed line : standard k-ε model )

Fig. 2, Fig. 3 과 Fig. 4 은 각기 다른 축방향위치에서 반경방향으로의 속도, 혼합분율, 혼합분율 RMS 값을 나타내고 있으며, 축방향뿐만 아니라 반경 방향에서 특히, bluff-body 지름근처에서 수정된 k-ε모델은 일반적인 k-ε모델보다 더 나은 예측 성능을 보여줌을 알 수 있다. 이는 재순환 영역의 예측 성능과도 관계가 있다고 하겠다.

이상의 결과에서 난류 소산율에 대한 상수 값의 보정을 통한 수정된 k-ε모델의 예측성능이 일반적인 k-ε모델보다 더 나은 것으로 알 수 있으므로 화학반응이 있는 경우에 대해서도 더 나은 예측성능을 기대 할 수 있다고 판단되었다. 따라서, 화학반응이 있는 경우에 대해서는 수정된 k-ε 모델만을 적용하였으며, Masri 의 메탄올 bluff-body 광계측 데이터와의 비교를 통해 주어진 해석 조건에 따른 정확한 예측 성능여부와 혼합분율, 온도등을 비교 분석하였다. 메탄올 bluff-body 의 화염(ML1)은 80m/s 의 연료제트 속도를 가지며, 화염(ML2)는 121m/s 의 연료제트 속도를 가진다. ML1 화염에서는 bluff-body 지름과 거의 같은 길이로 퍼져나가는 외부 vortex 영역을 볼 수 있다. 그러나, ML2 화염에서는 외부 vortex 영역을 볼 수 없으며, 재순환 영역 또한 짧게 나타난다.

먼저, 상미분원립방정식의 정상상태 해를 구하여 flamellet library 를 구성하였다. Fig. 5 는 그 결과를 보여주고 있으며, 혼합분율과 스칼라소산율에 따른 O 라디칼의 농도와 thermal NO 생성율을 보여주고 있다. 스칼라소산율이 증가하면서 평형상

태로부터 이탈함에 따라 온도는 감소하는 대신 O 라디칼이 증가하므로, thermal NO의 생성율은 대략  $\chi = 0.9 \text{ s}^{-1}$  인 영역에서 최고치를 나타내고 있다.

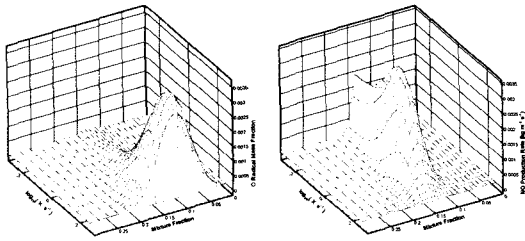


Fig. 5 Flamelet library for O radical and NO production rate

Fig. 6 은 각기 다른 축방향 위치에서 반경방향으로의 혼합분율을 나타내고 있다.

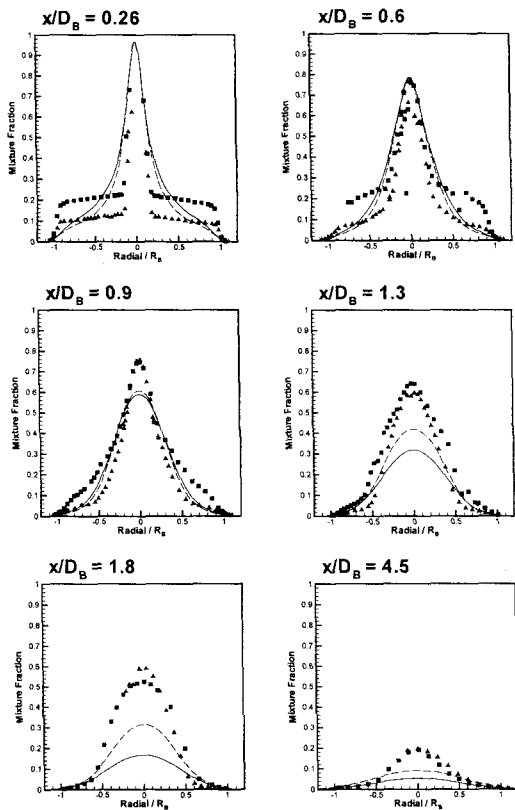


Fig. 6 Radial profiles of mean mixture fraction in the reacting case ( solid line : ML1 flame, dashed line : ML2 Flame, squares : Masri data of ML1, deltas : Masri data of ML2 )

ML1 화염의 경우,  $x/D_B=0.26$ 의 위치에서 중심축으로부터 반경방향으로 갈수록 실험데이터는 화학당량비보다 높은값으로 평평한 곡선을 그리고 있는데 반하여, 수치해석 결과는 bluff-body 영역 이후의 데이터를 정확히 예측하지 못하고 있다. 이것은 외부 vortex 영역을 정확히 예측하지 못한 결과라 생각되어지며, 내부 vortex 에서 외부 vortex 로 순간적으로 빠르게 돌아들어가는 연료의 속도를 정확히 예측하지 못한 결과라 판단된다.  $x/D_B=1.3$ 의 위치에서부터 ML2 화염의 혼합분율의 값이 더 크게 나타내어지고 있는 것은 재순환 영역의 길이가 실험치와 비교했을 때 짧게 예측되어지기 때문이다.

Fig. 7 은 각기 다른 축방향 위치에서 반경방향으로의 온도분포를 나타내고 있다. 초기 온도는 조금 낮게 예측하고 있으나, 축방향으로 갈수록 실험 데이터와 비교적 잘 일치하는 결과를 보이고 있다.

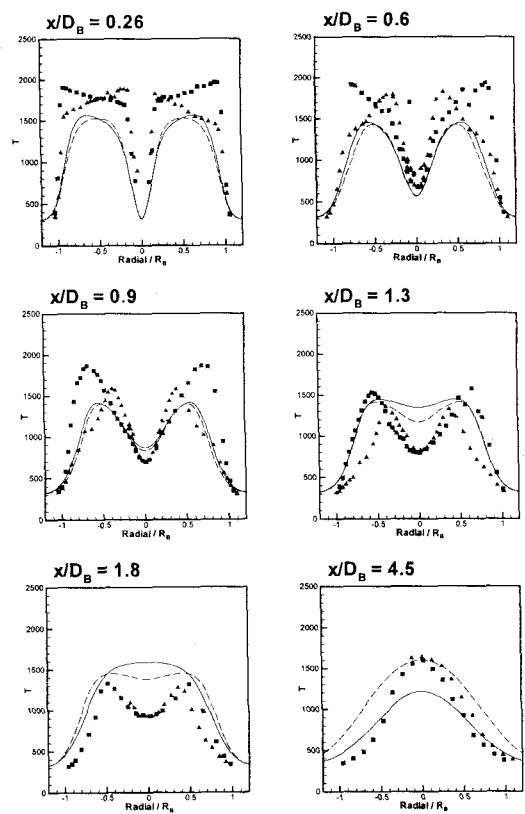


Fig. 7 Radial profiles of mean Temperature in the reacting case ( solid line : ML1 flame, dashed line : ML2 Flame, squares : Masri data of ML1, deltas : Masri data of ML2 )

초기 축방향위치에서의 온도를 낮게 예측하는 이유는 그 위치에서의 혼합분율과 혼합분율 RMS 값을 정확히 예측하지 못했기 때문이라 판단된다. ML1 화염의 경우 외부 vortex 의 공기 유입구 근처에서, ML2 화염의 경우 재순환영역의 내부 vortex 에서 최고온도가 존재하는 위치의 예측을 볼 수 있었으며, 이러한 관찰은 ML2 화염의 외부 vortex 의 소멸과 관계가 있다고 하겠다.

## 5. 결론

- (1) 화학반응이 일어나지 않는 경우, 실험데이터와 비교했을때, 수정된 k-ε모델이 일반적인 k-ε모델보다 정량적으로 더 나은 예측성능을 보임을 알 수 있었다.
- (2) 난류 비예혼합 bluff-body 화염 구조를 해석하기 위하여 본 연구에서 사용한 정상상태 층류 화염편 모델은 실험데이터와의 비교를 통해서 각기 다른 축방향 위치에 반경방향으로의 속도, 혼합분율, 혼합분율 RMS, 온도등의 예측값을 정성적으로 잘 일치시키는 것을 볼 수 있었다.
- (3) 화학반응이 일어나는 경우 노즐을 통해 들어가는 연료의 각기 다른 속도에 따라 bluff-body 부근 영역에서의 예측값이 달라짐을 볼 수 있었으며, 이는 bluff-body 연소기내의 재순환영역의 형태 및 특성에 따른 것이다.
- (4) 본 연구에서는 기체상태의 메탄올을 노즐을 통하여 bluff-body 연소기로 들어가는 연료로 사용하였으나, 실제 메탄올은 상온에서 액체상태로 존재하므로 bluff-body 연소기내에 액체연료 분무연소 모델을 첨가시키는 것 또한 일반적인 연소기의 수치해석을 위해 필요한 일이라고 사료된다.

## 참고문헌

- (1) B.B.Dally, A.R.Masri (1998), Instantaneous and Mean Structure of Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flames, Combustion and Flame 114:119-148
- (2) Web page for the International workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames, <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop.html>
- (3) S.K.Kim, Y.M.Kim, K.Y.Ahn, K.Oh (2000),

Numerical Modeling for the H2/CO Bluff-Body Stabilized Flames

- (4) Peters,N. (1984) Laminar Diffusion Flamelet Models in Nonpremixed Turbulent Combustion, Prog. Energy Combust. Sci., vol. 10, pp.319-339
- (5) Peters.N (2000) Turbulent combustion, Cambridge university press.
- (6) Ferreira,J.C. (1996) Flamelet Modeling of stabilization in Turbulent Nonpremixed Combustion, PhD Thesis, ETHZ Zuerich Switzerland.
- (7) G.Turpin, J.Troyes, Validation of a Two-equation Turbulence Model for Axisymmetric reacting and Non-Reacting Flows, AIAA 2000-3463
- (8) Barths H., Hasse C.,Bikas G., and Pters N., Simulation of Combustion in DI Diesel Engines using an Eulerian Particle Flamelet Model, Proc.Combust. Inst., vol.28
- (9) Warnatz.J., Maas.U. and Dibble.R.W., 1996, Combustion, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- (10) Combustion data base, <http://www.mech.eng.usyd.edu.au/research/energy/#data>, The University of Sydney and the combustion research facility, Sandia National Laboratories
- (11) A.A.Amsden, P.J.O'rourke, and T.D.Butler, KIVA2: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays. Los Alamos National Laboratory report LA-1156-MS (May 1989)