

## 난류 탄화수소화염의 직접수치해석 및 이차 조건모멘트닫힘 모델링

김승현\* 허강열\* R.W.Bilger\*\*

### Direct Numerical Simulation and Second-Order Conditional Moment Closure Modelling of a Turbulent Hydrocarbon Flame

Seung Hyun Kim, Kang Y. Huh and Robert W. Bilger

**Key Words:** turbulent diffusion flames, direct numerical simulation, conditional moment closure.

#### Abstract

A second-order conditional moment closure(CMC) model is applied to the prediction of local extinction in a turbulent hydrocarbon diffusion flame and compared with direct numerical simulation(DNS) results for the flame. Combustion of a hydrocarbon fuel is described by a simple two-step mechanism. A second-order correction for conditional mean reaction rate terms is made by the assumed pdf method. The results show that the second-order closure is necessary for accurate prediction of intermediate species, while first-order CMC gives good predictions for fuel, oxidant, product and temperature. Conditional variances and covariances are well predicted during an extinction process while they are overpredicted during a reignition process.

#### 1. 서 론

CMC(Conditional Moment Closure)모델

\* 포항공과대학교 기계공학과

\*\* School of Aerospace, Mechanical and Mechatronic Engineering, The University of Sydney

[1-3]의 기본가정은 조건평균화학반응율을 화학종 및 온도의 조건모멘트(conditional moments)를 이용하여 근사할 수 있다는 것이다. 일차닫힘에서 조건평균화학반응율은 화학종 및 온도의 조건평균치를 이용하여 계산된다. 일차닫힘을 적용한 CMC모델은 난류제트[4], bluff-body[5], 균질난류[6]에서의 연소반응 등에 성공적으로 적용되어 왔다. 그러나, 점화 및 소멸이 일어나는 상황에

서는 화학종 및 온도의 조건섭동치가 커서 일차달힘근사의 적확성에 문제가 제기된다.

이차달힘에서는 근사의 정확도를 높이기 위해 조건평균분산을 이용한다. Mastorakos 와 Bilger [7]는 균질난류상에서 단일비가역반응에 의한 점화 지연 예측에 이차달힘을 적용하였다. Kronenberg 등 [8]은 이차달힘을 난류수소제트화염에 적용하여 NO 예측결과를 개선한 바 있다. 본 연구에서는 균질난류 상에서 일어나는 이단반응(two-step reactions)에 이차달힘 CMC모형을 적용하고 직접수치 해석(Direct Numerical Simulation) 결과와 비교하였다.

## 2. 물리적 모델

### 2.1. CMC모형

반응진행도변수,  $C_i$ , 의 조건평균 및 분산은 다음과 같이 정의된다.

$$Q_{C_i} \equiv \langle C_i | \eta \rangle \quad (1)$$

$$G_{ij} \equiv \langle C_i C_j | \eta \rangle \quad (2)$$

여기서  $\eta$ 는 혼합분율,  $\xi$ , 의 표본공간변수이며  $\langle \cdot | \eta \rangle$ 는  $\xi = \eta$ 일 때의 앙상블 평균(ensemble averaging)이다. 위 첨자, ', 는 조건섭동치를 나타낸다.

$Q_{C_i}$ 의 지배방정식은 다음과 같다[1-3].

$$\frac{\partial Q_{C_i}}{\partial t} = \langle M \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{C_i}}{\partial \eta^2} + \langle \omega_i | \eta \rangle \quad (3)$$

여기서  $N$ 은 스칼라소산율,  $\omega_i$ 는  $C_i$ 에

대한 화학반응생성항이다.

조건평균스칼라소산율은 Girimaji [9]의 모델을 적용하여 다음과 같이 계산하였다.

$$\langle M \eta \rangle = -2 \bar{N} \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\bar{\xi}'^2} \frac{I(\eta)}{P(\eta)} \quad (4)$$

$$I(\eta) = \bar{\xi} \int_0^\eta [\ln \psi - \overline{\ln \xi}] P(\psi) (\eta - \psi) d\psi + (1 - \bar{\xi}) \int_0^\eta [\ln(1 - \psi) - \overline{\ln(1 - \xi)}] P(\psi) d\psi \quad (5)$$

여기서  $\bar{N}$ 과  $\bar{\xi}$ 는 각각 평균스칼라소산율과 평균혼합분율이다.  $\bar{\xi}'^2$ 는 혼합분율의 분산이다. 확률밀도함수  $P(\eta)$ 는  $\beta$  확률밀도함수로 모델링하였다.

$G_{ij}$ 의 지배방정식은 다음과 같다[10].

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{ij}}{\partial t} = & \langle M \eta \rangle \frac{\partial^2 G_{ij}}{\partial \eta^2} + [\langle C_i \omega_j | \eta \rangle + \langle C_j \omega_i | \eta \rangle] \\ & + \left[ \langle C_i N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{C_j}}{\partial \eta^2} + \langle C_j N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{C_i}}{\partial \eta^2} \right] \\ & - 2 \langle \nabla C_i \cdot \nabla C_j | \eta \rangle + F_{g_{ij}} \end{aligned} \quad (6)$$

여기서

$$F_{g_{ij}} \equiv \frac{1}{\rho_\eta P(\eta)} \left( - \frac{\partial^2 \rho_\eta P(\eta) \langle N g_{ij} \rangle}{\partial \eta^2} + 2 \frac{\partial \rho_\eta P(\eta) \langle \nabla \xi \cdot \nabla g_{ij} \rangle}{\partial \eta} \right) \quad (7)$$

$$g_{ij} \equiv \langle C_i C_j | \eta \rangle - G_{ij} \quad (8)$$

식 (6)의 3번째 항은 생성항이며 스칼

라-스칼라소산율상관항은 다음과 같이 모델링하였다[11].

$$\langle C_i N | \eta \rangle = R_i \sqrt{G_{ii}} \langle M | \eta \rangle \quad (9)$$

여기서,  $R$ 은 상관계수이며 화학종에 따라 다른 값을 가진다.

소산항은 다음과 같이 근사하였다[12].

$$2 \langle \nabla C_i \cdot \nabla C_j | \eta \rangle = 2 \frac{\partial \ln c_i^{SLFM}}{\partial \eta} \frac{\partial c_j^{SLFM}}{\partial \eta} \langle M | \eta \rangle G_{ij} \quad (10)$$

여기서  $c_i^{SLFM}$ 는 정상층류화염편모델 (Steady Laminar Flamelet Model)로 근사한 조건섭동치이다.

난류전달항은 gradient transport 모델을 적용하였다 [10].

$$F_{g_{ij}} \equiv \frac{1}{\rho_\tau P(\eta)} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( D_g \rho_\tau P(\eta) \langle M | \eta \rangle \frac{\partial G_{ij}}{\partial \eta} \right) \quad (11)$$

여기서  $D_g$ 는 상수로 본 연구에서는 1을 사용하였다.

## 2.2. 이단반응의 이차달형

탄화수소연료의 이단반응은 다음과 같다 [13].



여기서,  $F$ ,  $O$ ,  $I$ 와  $P$ 는 각각 연료, 산화제, 중간생성물, 연소생성물을 나타낸다. 각 단계에 대한 화학반응율은 다음

과 같이 주어진다.

$$\omega_I = A_I \exp(-T_{aI}/T) T^{nI} Y_F Y_R \quad (12)$$

$$\omega_{II} = A_{II} \exp(-T_{aII}/T) T^{nII} Y_O Y_R \quad (13)$$

$$Y_R = K_r Y_I \sqrt{Y_I Y_O} \exp\left(-\lambda \sqrt{\frac{15}{4}} \frac{Y_F}{Y_O}\right) \quad (14)$$

여기서 상수  $A_i$ 는 해석하고자 하는 화염의 난류와 연소반응 시간척도의 비에 적합하게 수정하였으며  $T_i$ ,  $n_i$ 는 화염구조를 유지하기 위해 메탄화염에 적용되는 값을 그대로 적용하였다. 상수  $K_r$ 은 화학반응들의 평형상수로부터 구해진다. 각 단계에 대한 반응도변수(reaction progress variable)는 다음과 같이 정의된다.

$$C_1 \equiv Y_F \quad (15)$$

$$C_2 \equiv Y_O + Y_P \quad (16)$$

각 화학종의 확산계수 및 열전도도가 같고 복사에 의한 열손실을 무시하면, 화학종 질량분율과 온도는 위의 두 반응진행도변수와 혼합분율(mixture fraction)로부터 다음과 같이 주어진다.

$$Y_F = C_1 \quad (17)$$

$$Y_O = C_1 - C_2 - 3\xi + 2 \quad (18)$$

$$Y_P = -C_1 + 2C_2 + 3\xi - 2 \quad (19)$$

$$Y_I = 1 - C_1 - C_2 \quad (20)$$

$$Y_\tau = 3C_2 - 2C_1 + 5\xi - 3 \quad (21)$$

여기서  $Y_\tau$ 는 normalized 온도이다 [12].

질량분율과 온도가 반응진행도변수와 혼합분율에 의해 결정되므로 조건평균화

확반응율은 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\langle \omega_i | \eta \rangle = \int \int \omega_i(\xi_1, \xi_2 | \eta) P(\xi_1, \xi_2 | \eta) d\xi_1 d\xi_2 \quad (22)$$

여기서  $\xi_i$ 는  $C_i$ 의 표본공간변수이다. 조건확률밀도함수,  $P(\xi_1, \xi_2 | \eta)$ , 는 그 형태를 가정하여 반응진행도의 조건평균치와 조건분산으로부터 구한다. Pope [14]는 다차원의 표본공간에서 최대엔트로피를 가지는 다음과 같은 형태를 제안하였다.

$$P^a(\xi) = \exp(\alpha_0 + \alpha_i \xi_i + \beta_{jk} \xi_j \xi_k) \quad (23)$$

여기서 상수  $\alpha_0$ ,  $\alpha_i$ 와  $\beta_{jk}$ 는 다음의 식들에 의해 결정된다.

$$\int_{\Omega_\eta} P(\xi | \eta) d\xi = 1 \quad (24)$$

$$\int_{\Omega_\eta} \xi_i P(\xi | \eta) d\xi = Q_{C_i} \quad (25)$$

$$\int_{\Omega_\eta} (\xi_i - Q_{C_i})(\xi_j - Q_{C_j}) P(\xi | \eta) d\xi = G_{ij} \quad (26)$$

여기서  $\Omega_\eta$ 는 혼합분율  $\eta$ 에서의 반응진행도변수의 표본공간을 나타낸다.

식 (6)의 두 번째 항도 확률밀도함수로부터 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\langle C_i \omega_j | \eta \rangle = \int \int (\xi_i - Q_{C_i}) (\omega_j(\xi_1, \xi_2 | \eta) - \langle \omega_j | \eta \rangle) P(\xi_1, \xi_2 | \eta) d\xi_1 d\xi_2 \quad (27)$$

### 3. 직접수치해석

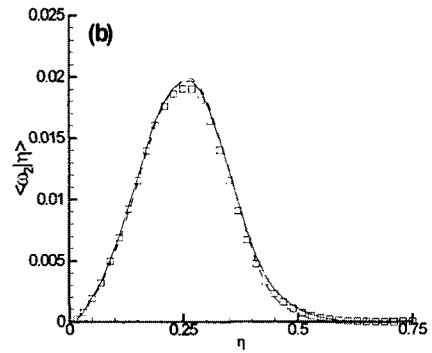
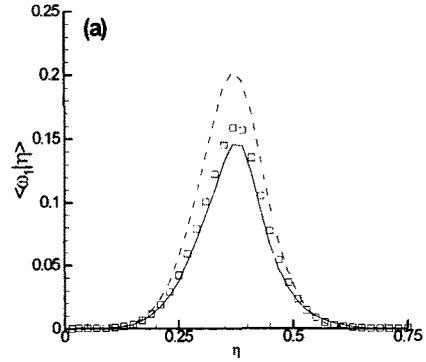


Fig. 1. Comparison of the predicted conditional mean reaction rates with those from DNS at  $t^*=1.11$  (a)first reaction (b)second reaction (symbols:DNS, solid lines:second-order, dashed lines:first-order)

균질난류 상에서 이단반응을 가지는 균질난류유동을 Pseudo spectral방법 [13]을 적용하여  $128^3$  격자 상에서 직접수치 해석하였다. 초기 속도장은 감쇠등방난류를 난류적분시간척도의 2-3배 정도의 시간동안 계산하여 얻었으며 초기 난류 레이놀즈수는 33이다. 이단반응의 반응상수는 Swaminathan과 Bilger [6, 13]의 R3에 해당하는 값을 사용하였다. 혼합분율은 Eswaran과 Pope [15]의 방법을 적용하여 초기화하였고 반응진행도변수는 혼

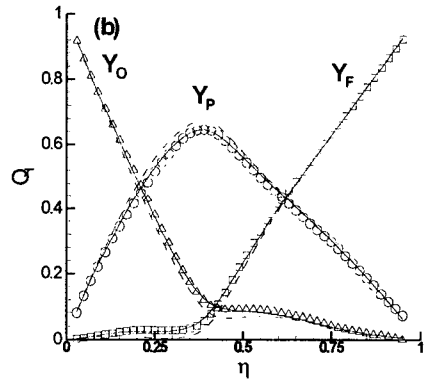
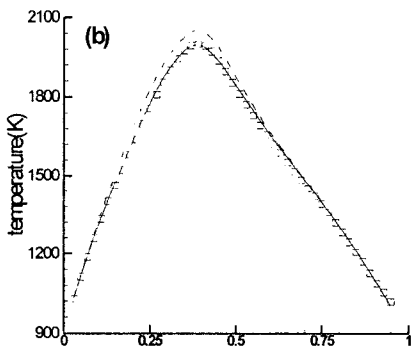
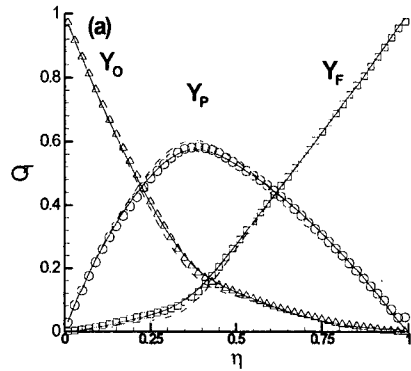
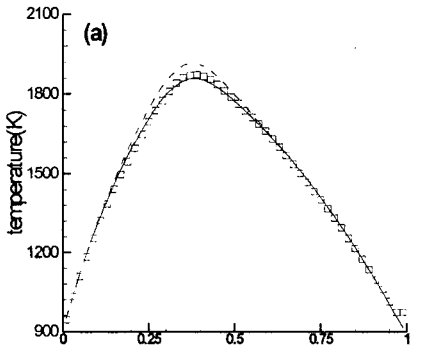


Fig. 2. Comparison of the predicted conditional mean temperature with that from DNS at (a)  $t^*=1.11$  (b)  $t^*=1.56$  (symbols;DNS, solid lines;second-order CMC, dashed lines;first-order CMC)

합분율분포로부터 완전연소상태를 가정하여 초기화하였다.

#### 4. 결과 및 토론

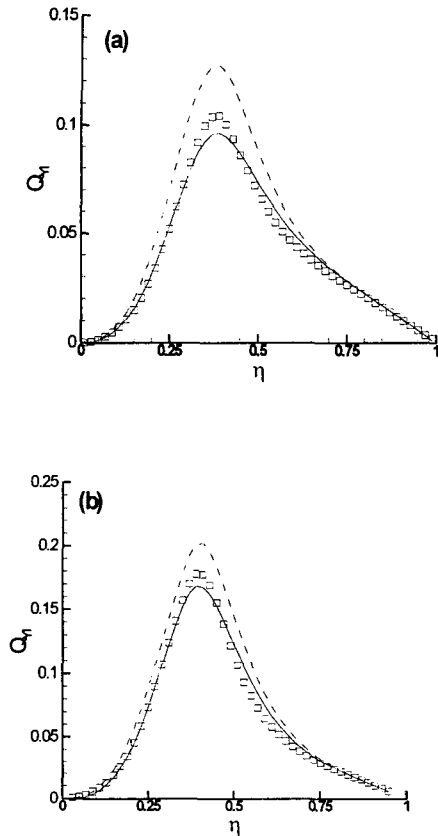
그림 1에는 국부소염이 활발히 일어나는 상황에서의 조건평균화학반응율을 나타내었다. 첫 번째 반응에 대하여 일차단힘은 DNS결과에 비해 조건평균화학반응율을 크게 예측하는 반면 이차단힘은 DNS결과를 잘 재현하고 있다. 두 번째 반응은 이차단힘과 일차단힘 모두 DNS

Fig. 3. Comparison of the predicted conditional mean mass fractions of fuel, oxidant and product with those from DNS at (a)  $t^*=1.11$  (b)  $t^*=1.56$  (symbols;DNS, solid lines;second-order CMC, dashed lines;first-order CMC)

결과를 잘 재현하고 있다. 조건섭동치의 영향은 각 반응에 관련된 활성화온도 등에 따라 다르다. 일반적으로 활성화온도가 높으면 조건섭동치의 영향이 커 일차단힘의 오차가 클 수 있다.

그림 2에는 조건평균온도를 나타내었다. 이차단힘 CMC결과는 DNS결과와 잘 일치하고 있다. 일차단힘 CMC는 DNS결과보다 조건평균온도를 약간 높게 예측하고 있으나 오차는 그리 크지 않다.

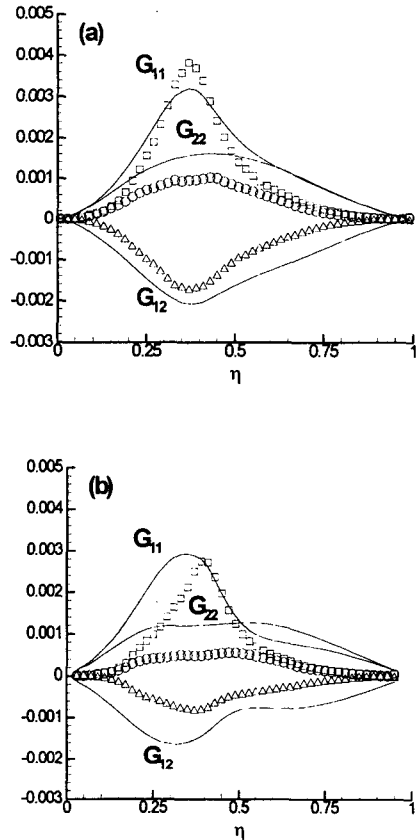
그림 3에는 연료, 산화제와 연소생성



**Fig. 4.** Comparison of the predicted conditional mean intermediate mass fraction with that from DNS at (a)  $t^*=1.11$  (b)  $t^*=1.56$  (symbols;DNS, solid lines;second-order CMC, dashed lines:first-order CMC)

물의 조건평균질량분율을 나타내었다. 이차달힘 CMC가 일차달힘 CMC에 비해 좋은 결과를 주지만 일차달힘 CMC결과도 비교적 DNS결과와 잘 일치하고 있다.

그림 4에는 중간생성물의 조건평균질량분율을 나타내었다. 일차달힘 CMC결과는 DNS결과에 비해 높은 반면 이차달힘 CMC는 DNS결과와 잘 일치하고 있다. Roomina와 Bilger [16]는 난류메탄제트화염의 일차 CMC계산에서 CO의 농도



**Fig. 5.** Comparison of the predicted conditional variances and covariance with those from DNS at (a)  $t^*=1.11$  (b)  $t^*=1.56$  (symbols;DNS, lines;CMC)

가 높게 예측됨을 보고하였다. 본 연구의 결과는 CO의 오차가 조건섭동치의 영향을 무시한 것에 기인함을 보여 준다.

그림 5에는 조건분산을 나타내었다. 국부소염이 진행되어 조건섭동치가 최대치가 될 때까지는 CMC결과가 DNS결과와 비교적 잘 일치하지만 재점화가 일어나는 시점에서는 CMC모델이 조건분산을 높게 예측하고 있다. 조건분산은 조건분산식의 항들에 대한 모델에 민감하며 이에 대한 연구가 필요하다.

## 5. 결론

이단반응이 일어나는 균질난류유동에 대하여 직접수치해석과 CMC모형을 적용하여 계산하였다. 이차 CMC모형의 조건평균치 결과는 DNS결과와 잘 일치하였으나 조건분산은 재점화기간동안 DNS결과에 비해 높게 예측되었다. 일차 CMC모형은 연료, 산화제, 연소생성물의 질량분율 및 온도의 조건평균치를 비교적 잘 예측한 반면 중간생성물의 조건평균질량분율은 DNS결과에 비해 높게 예측하였다. 확률밀도함수를 적용한 이차 CMC모형은 DNS결과를 잘 예측하나 조건분산식 항 등의 모델링 개선에 관한 연구가 필요하다.

## 참고문헌

- [1] Bilger, R. W., Phys. Fluids, 5:436-444(1993).
- [2] Klimenko, A. Y., Fluid Dyn., 25:327(1990).
- [3] Klimenko, A. Y. and Bilger, R. W., Prog. Energy Combust. Sci., 25:595-687(1999).
- [4] Smith, N. S. A., Bilger, R. W. and Chen, J. Y., Proc. Combust. Inst., 24:263-269(1992).
- [5] Kim, S. H., Huh, K. Y. and Liu, T., Combust. Flame, 120:75-90(2000).
- [6] Swaminathan, N. and Bilger, R. W., Combust. Flame, 116:519-545(1999).
- [7] Mastorakos, E. and Bilger, R. W., Phys. Fluids, 10:1246-1248(1998).
- [8] Kronenberg, A., Bilger, R. W. and Kent, J. H., Proc. Combust. Inst.,

27:1097-1104(1998).

- [9] Girimaji, S. S., Phys. Fluids, 4:2529-2537(1992).
- [10] Kim, S. H., Phys. Fluids(submitted).
- [11] Li, J. D. and Bilger, R. W., Phys. Fluids, 5:3255-3264(1993).
- [12] Swaminathan, N. and Bilger, R. W., Phys. Fluids, 11:2679-2695(1999).
- [13] Swaminathan, N. and Bilger, R. W., Combust. Sci. Tech., 127:167(1997).
- [14] Pope, S. B., J. Non-Equilib. Thermodyn., 4:309-320(1978).
- [15] Eswaran, V. and Pope, S. B., Phys. Fluids, 31:506-520(1988).
- [16] Roomina, M. R. and Bilger, R. W., Combust. Flame, 125:1176-1195(2001).