

비정상 CH₄/공기 제트 확산화염에 관한 수치모사

오 창 보* · 이 창 언†

(2001년 1월 31일 접수, 2001년 6월 15일 심사완료)

Numerical Simulation of Unsteady CH₄/Air Jet Diffusion Flame

Chang-Bo Oh and Chang-Eon Lee

Key Words : Unsteady Jet(비정상 제트), Flame-Vortex Interaction(화염-와동 상호작용), Reacting Flow(반응유동), Predictor-Corrector Scheme(예측-교정자법)

Abstract

The dynamic structures of unsteady CH₄/Air jet diffusion flame with a flame-vortex interaction were numerically investigated. A time-dependent, axisymmetric computational model and a low mach number approximation were employed in the present calculation. A two-step global reaction mechanism which considers 6 species, was used to calculate the reaction rates. The predicted results including the gravitational effect show that the large outer vortices and the small inner vortices can be well simulated without any additional disturbances near the nozzle tip. It was found that the temperature and species concentrations have deviated values even for the same mixture fraction in the flame-vortex interaction region. It was also shown that the flame surface is not deformed by the inner vortex in upstream region, while in downstream region, the flame surface is compressed or stretched by the outer vortex roll-up. The present unsteady jet flame configuration accompanying a flame-vortex interaction is expected to give good implications for the unsteady structures of turbulent flames.

기호설명

u : 혼합기 유속
 \hat{u} : 중간단계 속도(Intermediate Velocity)
 g : 중력가속도
 I : 단위 텐서(Unit Tensor)
 T : 온도
 Y_i : 화학종 i 의 질량분율
 c_p : 혼합기의 정압비열
 c_{pi} : 화학종 i 의 정압비열
 W_i : 화학종 i 의 분자량
 \bar{W} : 혼합기의 평균 분자량
 p_0 : 열역학적 압력(Thermodynamic Pressure)

p_1 : 동적 압력(Hydrodynamic Pressure)
 D_{im} : 혼합기 평균확산계수(Mixture-Averaged Diffusion Coefficient)
 R_0 : 일반기체상수(Universal Gas Constant)
 h_i^0 : 화학종 i 의 생성열(Heat of Formation)
 t : 시간
 Z : 혼합분율(Mixture Fraction)
 U : 노즐유속
 \bar{U} : 노즐 대표유속
 d_N : 노즐직경
 Re : Reynolds 수 ($\rho U d_N / \mu$)
 Δx : 축방향 격자거리
 Δr : 반경방향 격자거리
 Δt : 시간 전진 간격

* 회원, 인하대학교 대학원 기계공학과

† 책임저자, 회원, 인하대학교 기계공학과

E-mail : chelee@inha.ac.kr

TEL : (032)860-7323 FAX : (032)868-1716

그리스문자

ρ : 혼합기의 밀도

- ρ_0 : 주위 공기의 밀도(Reference Density)
 $\dot{\omega}_i$: 화학종 i 의 단위체적 당 몰생성률
 μ : 혼합기의 점성계수
 λ : 혼합기의 열전도계수
 ν : 산화제와 공기의 양론혼합 질량비율
 ν'_F : 연료의 양론혼합계수
 ν'_{O_2} : 산소의 양론혼합계수

상첨자

- ~ : 예측자 단계에서 얻은 변수들을 이용하여 계산된 값

1. 서 론

실용 연소기에 이용되는 화염형태는 대부분 난류화염으로서 연소기의 효율적인 설계를 위해서는 난류화염에 대한 구체적인 정보가 요구된다. 이러한 난류화염에 대한 정보를 실험적 방법에만 의존하여 얻는 것은 매우 어려운 작업이며, 수치해석을 병행한 연구가 필수적이다.

현재 난류화염에 대한 수치해석 방법은 크게 DNS(Direct Numerical Simulation), LES(Large Eddy Simulation) 및 난류연소모형을 이용한 연구로 분류할 수 있다. 이 중에서 DNS에 의한 연구는 컴퓨터의 성능상 아직 실용 연소기의 난류화염을 해석할 수 있는 수준은 아니며, LES를 이용한 연구도 현 단계에서는 기하학적 형상이 비교적 단순한 화염에 대한 해석이 주류를 이루고 있다.^(1,2) 따라서 현실적으로, 복잡한 형상의 난류화염을 해석하는 방법으로는 난류연소모형을 이용한 방법이 가장 유용한 것으로 받아들여 지고 있다.⁽³⁾ 그러나, 난류연소모형을 이용한 연구는 화염에서 생기는 열, 물질의 수송 및 반응 등의 물리, 화학적 현상, 그리고 이들의 상호작용을 정량적으로 묘사하는데 한계가 있다. 또한 예측성능을 향상시키기 위해서도 아직 개선의 여지가 많아, 여러 가지 모델화염을 기반으로 다양한 조건에 대한 연구가 선행되어야 한다. 기존에 많이 이용되고 있는 모델화염은 1D 정상(Steady) 대향류화염으로서, 이 화염은 기하학적 형상이 간단하면서도 스트레인율(Strain Rate) 변화에 상응하는 상세한 화염구조를 쉽게 얻을 수 있어 복잡한 난류화염의 국소구조를 파악하는데 많은 도움을 주었다. 그러나 대향류화염에서는 곡률효과(Curvature Effect) 등을 포함한 난류화염의 다차원적인 화염신장, 압축 및 비정상 효과(Unsteady Effect) 등을 동시에 관찰하기 힘들다. 따라서, 난류화염의 정량적 현상파악과 난류연소 모델의 개선을 위해서는 2D, 3D 비정상 화염에 대한 DNS 연구가 반드시 필요하다.

이러한 DNS를 이용한 연구 중에는 반대로 회전하는 한쌍의 와동과 화염간의 상호작용(Vortex-Flame Interaction)에 대한 해석을 통해 난류화염의 특징을 이해하고자 하는 연구,^(4,5) 부력에 의해 생성되는 와동이 동반되는 제트화염을 이용한 연구 등이 포함되어 있다. Katta와 Roquemore⁽⁶⁾는 H₂ 제트 확산화염에 대해 노즐출구에 인위적인 교란을 주어 주기적으로 생성시킨 와동이나 부력에 의해 자연적으로 발생한 와동과 화염간의 상호작용에 대한 수치계산 연구를 수행하였다. 이 연구에서는 선택확산(Preferential Diffusion) 및 화염면 곡률방향에 따라 화염신장을 받는 영역에서 화염온도가 높고, 화염압축 영역에서는 오히려 화염온도가 낮게 나타나는 화염구조를 관찰하였다. 또한 주기적인 가진을 받는 CH₄ 제트화염에 대해 인위적인 소염을 발생시킨 후, 소염된 화염의 구조에 대해 검토하여 정상 대향류화염의 소염과정과는 차이가 있음을 보인 바 있다.⁽⁷⁾ 이와 같이 난류화염의 복잡한 현상을 포함하는 비정상 제트화염에 대한 수치계산을 통해 다양한 조건하에서의 화염면(Flamelet) 구조를 살펴본다면, 기존 대향류화염을 통해 얻을 수 없었던 유용한 정보를 제공하여 복잡한 난류화염의 구조를 이해하는데 많은 기여를 할 것으로 보인다.

본 연구는 이러한 비정상 반응 유동장의 해석에 적합한 수치계산법을 개발하고 이를 활용한 난류 연소모형의 개발을 목적으로 수행중인 연구의 일환으로서, 본 논문에서는 제트화염의 2차원 비정상 거동을 살펴보고, 난류 연소모형과 관련된 국소 화염구조를 관찰하기 위해 화염-와동 상호작용 영역의 혼합분율 좌표에 대한 화염면 구조를 검토하였다.

2. 지배방정식 및 계산방법

2.1 지배방정식

본 연구에서 대상으로 하는 연소장은 비정상 2차원 축대칭 제트 확산화염이다. 유동조건은 음향 속도에 비해 작은 유속을 가지므로 McMurtry 등에 의해 검증된 낮은 마하수 근사법(Low Mach Number Approximation)⁽⁸⁾을 적용하여 다음과 같이 지배방정식을 나타낼 수 있다.

연속방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

운동량방정식

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_1 + (\rho - \rho_0) \mathbf{g} + \nabla \cdot \mu \left[(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2)$$

확산방정식

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{im} \nabla Y_i) + W_i \dot{\omega}_i \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (3)$$

에너지방정식

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \sum_{i=1}^N W_i h_i^0 \dot{\omega}_i + \rho \sum_{i=1}^N \left(c_{pi} D_{im} \nabla Y_i \cdot \nabla T \right) \quad (4)$$

상태방정식

$$p_0 = \rho R_0 T \sum_{i=1}^N \left(\frac{Y_i}{W_i} \right) \quad (5)$$

위 방정식 중에서 p_0 와 p_1 은 각각 열역학적 압력(Thermodynamic Pressure), 동적 압력(Hydrodynamic Pressure)을 의미한다.

본 연구에서는 부력효과를 갖는 화염을 계산하기 위해 운동량방정식에 부력항을 포함하였으며, Soret, Dufour 효과 및 복사열전달은 무시하였다. 위 방정식 중의 열역학적 물성치와 전달 물성치는 각각 CHEMKIN-II⁽⁹⁾ 및 TRANFIT Package⁽¹⁰⁾를 이용하여 계산하였다.

2.2 수치해법

지배방정식은 엇갈림 격자계를 이용하여 차분하였으며, 대류항에 대해서 QUICK 법, 확산항에 대해서는 2 차 정확도의 중앙 차분법을 이용하였다. 열발생에 의한 급격한 밀도변동이 수반되는 반응 유동장에 대해 안정된 해를 얻기 위해서 Najm 등이 제시한 예측-교정자법(Predictor-Corrector Method)⁽⁴⁾을 일부 수정하여 적용하였으며, 속도와 압력의 교정은 밀도변동을 고려하도록 HSMAC 법(Highly Simplified Marker And Cell)⁽¹¹⁾을 수정하여 사용하였다. 본 연구에 사용된 수치계산

알고리즘은 아래와 같다.

예측자 단계(Predictor Step)

1) 식 (4)의 에너지방정식으로부터 $(\partial T / \partial t)^n$ 과 T^{n+1} 을 2 차 정확도의 Adams-Bashforth 법을 이용하여 계산한다.

2) 식 (3)의 확산방정식과 식 (1)의 연속방정식으로부터 $(\partial Y_i / \partial t)^n$ 을 계산한다.

3) $(\partial T / \partial t)^n$, $(\partial Y_i / \partial t)^n$ 및 상태방정식을 미분하여 얻은 식 (6)을 이용하여 $(\partial \rho / \partial t)^n$ 을 계산한다.

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^n = \rho \left(-\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} - \bar{W} \sum_{i=1}^N \frac{1}{W_i} \frac{\partial Y_i}{\partial t} \right)^n \quad (6)$$

4) ρ^{n+1} 와 Y_i^{n+1} 는 식 (7), (8)와 같이 2 차 정확도의 Adams-Bashforth 법으로 계산한다.

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^n - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^{n-1} \quad (7)$$

$$\frac{\rho^{n+1} Y_i^{n+1} - \rho^n Y_i^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \left. \frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} \right|^n - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} \right|^{n-1} \quad (8)$$

5) 운동량방정식에 대해 시간 분할법(Time Splitting Method)을 적용하여 식 (10), (11)로 분할한 후, 중간단계 속도($\hat{\mathbf{u}}$; Intermediate Velocity)를 계산하며, 이때 시간적분은 2 차 정확도의 Adams-Bashforth 법을 이용한다.

$$\mathbf{H} = f(\rho, \mathbf{u}, \mu) \quad (9)$$

$$\frac{\rho^{n+1} \hat{\mathbf{u}} - \rho^n \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \mathbf{H}^n - \frac{1}{2} \mathbf{H}^{n-1} + \nabla p_1^n \quad (10)$$

$$\frac{\rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \rho^{n+1} \hat{\mathbf{u}}}{\Delta t} = \nabla \delta p_1 \quad (11)$$

여기서, \mathbf{H} 는 식 (2)의 운동량방정식 중에서 비정상항(Unsteady Term)을 제외한 나머지를 의미하는 대류, 확산연산자(Convective, Diffusive Operator)이며, δp_1 는 p_1^{n+1} 과 p_1^n 의 차이를 나타낸다.

6) 단계 4)에서 구한 ρ^{n+1} 을 식 (12)에 대입하여 $(\partial \rho / \partial t)^{n+1}$ 을 얻은 후, 식 (13)를 통해 δp_1 을 계산한다.

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^{n+1} = \frac{1}{2\Delta t} (3\rho^{n+1} - 4\rho^n + \rho^{n-1}) \quad (12)$$

$$\nabla^2 \delta p_1 = \frac{1}{\Delta t} \left[\nabla \cdot \left(\rho^{n+1} \hat{u} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right]^{n+1} \quad (13)$$

단, HSMAC 법에서는 δp_1 을 구하기 위해서 각 격자점에서 $\nabla^2 \delta p_1$ 을 2 차 중앙 차분법으로 이산화한 후, 식 (14)와 같이 근사화한 대수식을 이용하여 δp_1 을 계산한다.

$$\delta p_1 = \frac{-\omega \left[\nabla \cdot \left(\rho^{n+1} \hat{u} \right) + \left(\partial \rho / \partial t \right)^{n+1} \right]}{2\Delta t \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta r^2} \right)} \quad (14)$$

위식은 균일 격자계에 대한 것으로서, ω 는 완화인자(Relaxation Factor)를 의미한다. 본 연구에서는 완화인자를 1.8 로 하였다.

7) 새로운 시간 단계에서의 속도 u^{n+1} 와 압력 p_1^{n+1} 은 각각 식 (15), (16)을 이용하여 교정한 후, 연속방정식이 만족할 때까지 6), 7)단계를 반복 수행한 후, 예측자 단계를 완료하게 된다. 단, 최초 반복 계산에서는 우변의 u^{n+1} , p_1^{n+1} 은 각각 \hat{u} , p_1^n 을 의미한다.

$$u^{n+1} = \hat{u}^{n+1} - \Delta t \nabla \delta p_1 \quad (15)$$

$$p_1^{n+1} = p_1^{n+1} + \delta p_1 \quad (16)$$

교정자 단계(Corrector Step)

1) 예측자 단계에서 구한 u^{n+1} , ρ^{n+1} , T^{n+1} 및 Y_i^{n+1} 을 이용하여 예측자 단계와 동일한 과정을 거쳐 n+1 단계의 최종 T^{n+1} 과 $(\partial \tilde{T} / \partial t)^{n+1}$, $(\partial \tilde{Y}_i / \partial t)^{n+1}$ 및 $(\partial \tilde{p} / \partial t)^{n+1}$ 을 계산한다.

Table 1 Inflow boundary conditions

	Component (Mass Fraction)	Velocity (m/sec)	Temperature (K)
Nozzle Fluid	$Y_{CH_4} = 1.0$	4.0	298
Ambient Fluid	$Y_{O_2} = 0.232$ $Y_{N_2} = 0.768$	0.3	298

2) n+1 단계의 최종 ρ^{n+1} 과 Y_i^{n+1} 는 식 (17), (18)과 같이 2 차 정확도의 Quasi-Crank-Nicolson 법을 적용하여 계산한다.

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^n + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} \Big|^{n+1} \quad (17)$$

$$\frac{\rho^{n+1} Y_i^{n+1} - \rho^n Y_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} \right)^n + \frac{\partial (\rho \tilde{Y}_i)}{\partial t} \Big|^{n+1} \quad (18)$$

3) 이후 과정은 예측자 단계와 동일하게 HSMAC 법을 이용하여 n+1 단계에서의 최종 속도와 압력을 계산한다.

4) 다음 시간 단계에서도 동일한 예측-교정자법을 수행하여 계산을 진행한다.

2.3 계산조건 및 화학반응 모델

본 연구의 대상인 화염은 직경 10mm, 림 두께 0.46mm 의 노즐에서 생성되는 CH₄-공기 확산화염이며, 노즐벽면 근처를 제외한 연료노즐의 대표유속은 4m/s 로서 Re=2,300 에 해당한다. Table 1 에 연료 및 주위류 공기의 입구 경계조건을 나타내었다. 노즐출구 속도분포는 연료측 와동을 생성시키기 위해 수축노즐의 유동조건과 유사하게 노즐벽면 근처를 제외하면 균일한 속도분포를 갖도록 식 (19)과 같은 속도분포를 주었다.⁽¹²⁾

$$U = \bar{U} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left\{ 20 \left(\frac{r}{R} - 1 \right) \right\} \right] \quad (19)$$

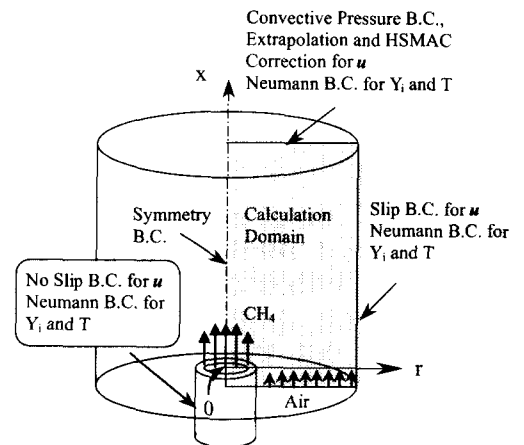


Fig. 1 Schematic of calculation domain and boundary conditions

여기서, r 은 반경방향 거리, R 은 노즐반경, \bar{U} 는 노즐 대표유속으로 4m/s이다.

수치계산 영역은 노즐출구의 중심을 원점으로 하여, $x = -5 \sim 220\text{mm}$, $r = 0 \sim 70\text{mm}$ 로 하였으며, 계산에는 축방향으로 균일격자, 반경방향으로는 비균일 격자로 이루어진 345×110 개의 격자계가 이용되었다. 축방향 격자수의 결정은 Fujiwara 등⁽¹³⁾이 본 연구와 유사한 계산에 적합한 격자조건으로 제시한 $\Delta x^* < 1/Re$ ($\Delta x^* = \Delta x/d_N$)를 만족시키는 범위에서 결정하였다. 또한, 반경방향 격자수는 노즐립 근처의 화염대에서 $\Delta r = 0.15\text{mm}$ 의 격자를 갖도록 결정하였다.

경계조건으로는 Fig. 1에 나타낸 바와 같이 속도에 대해서는 중심축에서 대칭조건, 반경방향 외부경계 및 노즐벽면에 대해 각각 Slip 조건과 No Slip 조건을 주었다. 그리고 각 경계에서 화학종과 온도에 대해서는 Neumann 조건을 부여하였다. 출구경계에서는 와동이 계속하여 경계면을 통과하기 때문에 경계조건 처리가 매우 중요하다. 따라서, 본 연구에서는 HSMAC 법의 출구 경계조건에 적합한 새로운 경계조건을 고안하였다. HSMAC 법은 압력에 대한 경계조건을 필요로 하지 않지만 본 계산에서는 출구경계에서 식 (20)으로 정의된 압력에 대한 대류 경계조건(Convective Boundary Condition)을 부여하고, 경계면 밖의 2 점에 대한 속도 경계조건은 외삽법(Extrapolation)을 이용하여 부여하였다. 그리고 유출경계에 접한 각 단위 격자마다 HSMAC 법에 의해 속도-압력 교정과정을 수행하여, 전 계산영역 및 국소격자에서 연속방정식을 만족하도록 하였다.

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial p_1}{\partial x} = 0 \quad (20)$$

여기서, \bar{U} 는 노즐의 대표유속을 의미한다.

CH₄-공기의 화학반응 계산을 위해서는 Dupont 등⁽¹⁴⁾이 제시한 2 단계 총괄반응식을 이용하였다. 반응에 참여하는 화학종은 CH₄, CO, CO₂, H₂O 및 O₂이며 N₂는 불활성 기체로서 계산에 포함되어 6개의 화학종이 고려되었다. 이용된 화학반응식과 반응속도(Reaction Rate)를 아래에 나타내었다.

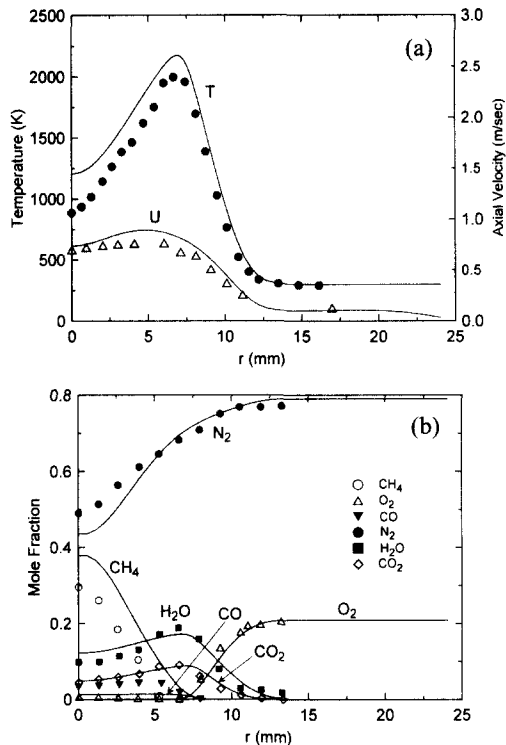
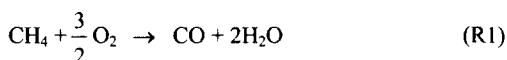


Fig. 2 Comparison between predicted and experimental results for the confined CH₄ laminar jet diffusion flame, (a) Temperature and axial velocity, (b) Major species (CH₄, O₂, CO, CO₂, H₂O and N₂) at $x = 12\text{mm}$

$$RR_1 = 10^{10.0} \exp\left(\frac{-12,019}{T}\right) [\text{CH}_4]^{1.0} [\text{O}_2]^{1.0} \quad (21)$$

$$RR_2 = 10^{10.0} \exp\left(\frac{-12,019}{T}\right) [\text{CO}]^{1.0} [\text{O}_2]^{1.0} \quad (22)$$

여기서, []는 각 화학종의 농도(kmole/m³)를 나타낸다.

반응개시를 위해서는 연료제트가 계산영역 내에 1/3 정도 전개된 후, 노즐출구 하류의 일부 격자에 일시적으로 1,250K의 고온 점화원을 주었다. 시간 전진 간격을 결정하기 위해 Fig. 2의 계산을 통해 검토한 결과 본 계산에 사용한 2 단계 반응기구는 $\Delta t = 10\mu\text{sec}$ 에서도 타당한 결과를 얻을 수 있음을 확인하였다. 따라서, 본 연구에서는 $\Delta t = 10\mu\text{sec}$ 로 일정하게 하였다.

3. 결과 및 고찰

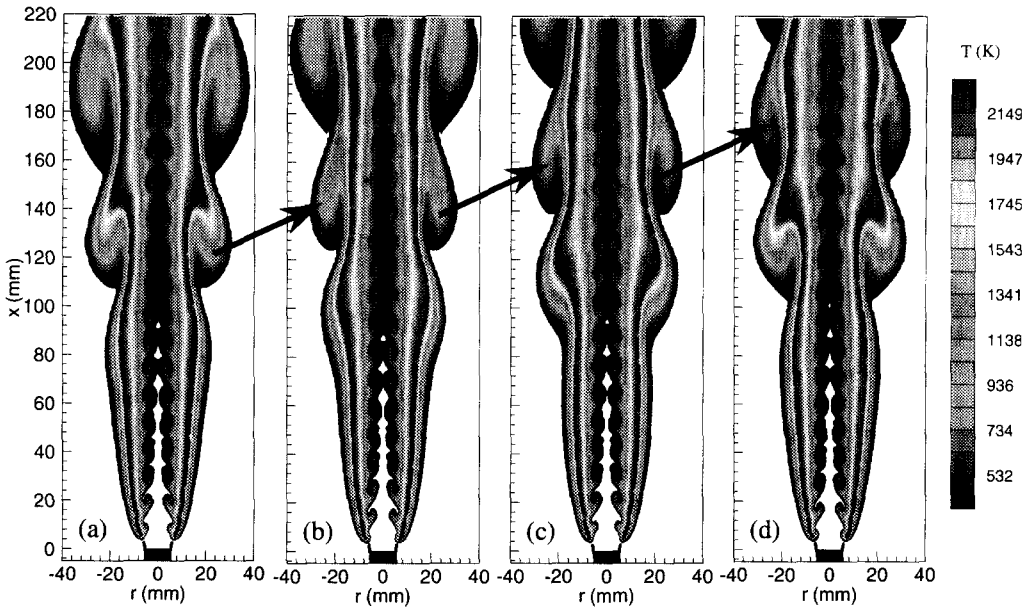


Fig. 3 Computed temperature isopleths of unsteady CH_4/air jet diffusion flame at instants of (a) 0ms, (b) 20ms, (c) 40ms and (d) 60ms

Fig. 2 에는 수치계산 코드 및 반응기구의 타당성을 검토하기 위해서 Mitchell 등⁽¹⁵⁾이 수행한 층류 CH_4 제트화염에 대한 실험결과와 이를 대상으로 계산한 결과를 비교 도시하였다. 실험 및 계산 조건으로 CH_4 연료노즐 및 주위류 공기노즐의 반경은 각각 6.35mm, 25.4mm 이며, 연료유속은 4.5cm/sec, 주위류 유속은 9.88cm/sec 이다. 먼저 Fig. 2 (a)의 화염온도 및 유속분포를 보면, 계산에 의해 예측된 화염온도의 최고치가 다소 높게 예측되고 있으며, 이로 인해 유속분포도 약간 높게 예측되고 있다. 그러나, 계산에서 복사효과를 고려하지 않은 점과 간단한 반응모델인 2 단계 총괄반응기구를 이용한 점을 생각한다면, 전체적으로 실험치를 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. 또한 Fig. 2 (b)의 주요 화학종 농도분포를 보면, 화염대 안에서 CH_4 및 N_2 분포가 실험치와 조금 차이를 보이고는 있으나, 전체적으로 실험치를 비교적 타당하게 예측하고 있음을 확인할 수 있다. 본 연구에서는 계산과의 비교에 적합한 실험 데이터의 부재로 인해 비정상 제트화염 결과와의 직접 비교를 할 수는 없었으나, 본 반응기구 및 코드로 CH_4 화염구조를 비교적 잘 예측하고 있으므로, 이를 적용한 비정상 CH_4 제트 확산화염의 계산결과도 타당할 것으로 판단된다.

Fig. 3 에는 본 연구에서 대상으로 하는 비정상 제트화염의 등온선 분포를 도시하였다. 4 개의 온도 그림은 계산영역에서 화염이 완전히 발달된 특

정시간(0ms)을 기준으로 하여 20ms 간격으로 진행된 화염을 나타낸다. 각 그림에서 굵은 파선은 식 (23)으로 정의된 혼합분율⁽¹⁶⁾로부터 얻은 양론혼합비($Z_{st} = 0.055$)의 위치로서 본 논문에서는 이 위치를 화염면으로 정의하였다.

$$Z = \frac{\nu Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{\nu Y_{F,1} + Y_{O_2,2}} \quad (23)$$

여기서, 하첨자 1 과 2 는 각각 연료류와 공기류를 의미한다.

Fig. 3 의 결과는 비정상 제트화염의 시간 진행에 따른 와동들의 동적 거동을 잘 보여주고 있다. 기존 연구를 통해 화염대 내부의 작은 와동들(이하, 내부와동(Inner Vortex)으로 칭하겠다.)은 고속 연료제트와 저속 주위류의 속도차에 의한 불안정성 및 노즐출구에서 소음 등의 부가적인 교란에 의해서 발생되며, 외부 큰 와동(이하, 외부와동(Outer Vortex)로 칭하겠다.)은 부력효과에 의해 발생하는 것으로 알려져 있다.⁽¹⁷⁾ 이와 같은 화염형태는 실험으로도 확인되었으나,⁽¹⁸⁾ 수치계산 연구에서는 내부와동을 모사하는데 일부 어려움이 있다. 실험에서는 노즐출구 근처의 유동 불안정성이 화염의 고온 점성에 의해서 감소되더라도 소음 등의 교란에 의해서 내부와동이 발생하지만, 수치계산에서는 그러한 교란을 인위적으로 만들어 주지

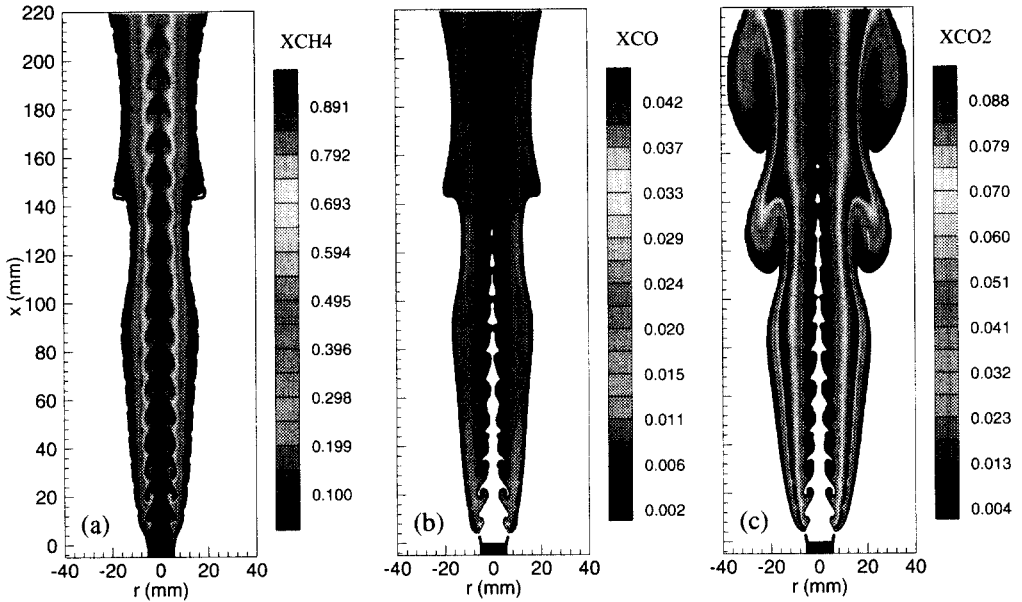


Fig. 4 Isoleths of (a) CH_4 , (b) CO and (c) CO_2 concentrations of unsteady CH_4 /air jet diffusion flame at 0ms

않을 경우 내부와동은 잘 나타나지 않는다. 그러나, 본 연구에서는 인위적인 교란 없이 내부와동을 발생시키기 위해서, 노즐출구 근처의 유동 불안정성이 화염에 의해 저감 되지 않도록 화염이 완전히 노즐에 부착되지 않는 유속조건에 대해 부력효과를 포함한 계산을 수행하였다. 이와 같은 방법으로 Fig. 3 과 같이 인위적인 교란 없이 실험에서 관찰되는 외부와동과 내부와동을 잘 모사할 수 있었다.

Fig. 3 의 계산결과를 바탕으로 시간 진행에 따른 화염전개 과정을 살펴보면 내부와동은 노즐출구의 화염 안정점(Stabilizing Point) 부근에서 발생하여 $x=20\sim 30\text{mm}$ 근처에서 강하게 말리고 있으며, 와동이 하류로 진행하면서 점차 약화되는 것을 알 수 있다. 또한 외부와동은 $x=80\text{mm}$ 근처에서 화염이 외부로 팽창하면서 말리기 시작하여 그림의 화살표가 지시하는 것처럼 $x=120\text{mm}$ 부근에서 강하게 말린 와동이 점차 말림(Roll-up)이 약화되면서 하류로 대류(Convection)되는 것을 알 수 있다. 또한 각 와동의 발생 주기를 검토해 본 결과, 내부와동의 발생 주파수가 외부와동에 비해 매우 높은 것을 확인할 수는 있었으나, 이들 와동의 발생, 소멸 등과 관련된 구체적인 해석은 본 논문의 범주에 두지 않고, 향후 비반응 제트와의 비교를 통해 자세히 검토할 예정이다. 다음으로 와동 영향에 의한 화염면의 변화를 살펴보면, 상류의 화염대 내부에서는 시간이 진행되어 화염이 하류로 전개

되더라도 내부와동과 화염간의 상호작용이 약해 화염면은 거의 변형되지 않고 있다. 반면에 $x=80\text{mm}$ 이후의 하류에서는 외부와동과 화염의 강한 상호작용으로 인해 화염면이 압축, 신장되어 많이 변형되고 있다. 또한 화염면의 변형은 첫번째 외부와동에 의해서 가장 크게 일어나는 것을 알 수 있다. 이와 같은 화염-와동간의 상호작용은 화염구조에 있어서도 많은 영향을 주게 되는데 여기에 관해서는 Fig. 5, 6 에서 자세히 설명하겠다.

Fig. 4 에는 0ms 순간의 제트화염 연료(CH_4), 화염에서 발생하는 중간생성물(CO) 및 연소생성물(CO_2)의 물분율 분포를 도시하였다. Fig. 3 과 마찬가지로 굵은 파선은 양론혼합비 위치 즉, 화염면을 나타낸다. 먼저 CH_4 농도분포를 살펴보면, 화염면 내부의 연료분포는 내부와동 형상을 잘 나타내고 있다. 내부와동의 형상을 Fig. 3(a)의 온도분포와 비교해 보면, 화염대 내부의 온도분포가 연료측의 내부와동과 관련이 있음을 쉽게 알 수 있다. 또한 연료측 와동 말림이 있는 영역에서는 화염대에서 발생하는 연소생성물과 반응에 참여하지 않고 화염대 내부로 수송된 N_2 가 유입되어 CH_4 연료의 농도는 낮아지는 것을 알 수 있다. Fig. 4(b)의 CO 분포는 노즐근처의 화염 안정점 근처에서 최고값을 가지며 하류로 진행할수록 대체적으로 낮아지는 것을 알 수 있다. 또한 전체적으로 CO 는 주로 화염면 내부에 분포하고 있음을 알 수 있다. CO 가 화염 안정점 근처에서 최고값을 갖는

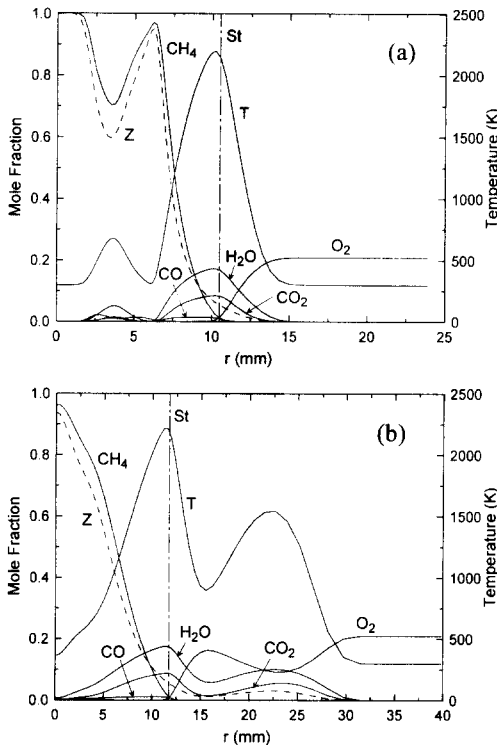


Fig. 5 Radial profiles of temperature, major species (CH_4 , O_2 , CO , CO_2 and H_2O) and mixture fraction at 0ms, (a) $x=20\text{mm}$, (b) $x=130\text{mm}$

이유는 본 연구에서 고려한 2 단계 총괄반응기구에서 CO 의 생성에 관여하는 (R1) 반응이 CH_4 와 O_2 가 처음 만나는 화염 안정점에서 반응속도가 매우 높기 때문으로 판단된다. 그러나 본 연구에 사용된 2 단계 총괄반응기구로 CO 반응을 정확히 예측하는 것은 어렵다고 판단되며, 향후 상세화학반응(Detailed Chemistry)을 고려한 계산을 통해 CO 농도분포에 대해서는 다시 한번 검토할 필요가 있을 것으로 사료된다. 다음으로 Fig. 4(c)에서 연소 생성물인 CO_2 의 결과를 살펴보면, 전체적인 농도 분포가 Fig. 3의 온도분포와 매우 유사하고, CO_2 농도의 최고점은 통상의 화염과 유사하게 양론혼합비 선상에 위치하고 있다. 또한 농도분포는 상류의 내부와동과 하류의 외부와동에 의해 영향을 받아 화염이 말리는 위치에서 같이 말리고 있어 와동에 의한 화학종의 수송이 농도분포에 중요하게 작용하고 있음을 잘 알 수 있다. 그림에 나타내지는 않았지만 H_2O 의 농도분포 또한 그 크기를 제외하면 CO_2 의 분포와 매우 유사한 것을 확인할 수 있었다.

Fig. 5(a), (b)에는 지금까지 언급한 상류단면과

하류단면에서의 화염-와동 상호작용을 살펴보기 위해 0ms의 화염에 대해, 상류단면 중에서 내부와동과 화염의 간섭이 비교적 강한 20mm 단면과 하류단면 중에서 외부와동과 화염간섭이 일어나는 130 mm 단면에 대한 온도, 주요 화학종 농도분포를 도시하였다. 그림에서 파선으로 표시한 것은 혼합분율을, 세로 일점쇄선은 양론혼합비의 위치를 나타낸다. 먼저 Fig. 5(a)의 $x=20\text{mm}$ 단면에 대한 결과를 보면, Fig. 4에서 설명한 것처럼 CO 는 대부분 화염면에서 연료측으로 분포하고 있으며, CO_2 및 H_2O 농도는 양론혼합비선 근처에서 최고치를 보이고 있다. 화염온도 또한 양론혼합비선 근처에서 최고치를 가지나 약간 과농한 쪽으로 분포하고 있음을 알 수 있다. 그림에서 가장 특징적인 현상으로서, 연료측에서는 온도 및 각 화학종의 농도가 다시 한번 증가하는 영역이 나타나고 있다. 이것은 Fig. 4에서 설명한 바와 같이 상류의 화염면 내부에서 내부와동에 의해 화염의 일부가 연료측으로 유입되기 때문이며, 이로 인해 CH_4 농도는 중심축에서 반경방향으로 진행하면서 감소하다가 다시 증가하게 되고, CH_4 농도가 증가하는 $r=6\text{mm}$ 근처에서는 온도 및 화염대에서 주로 발생하는 CO_2 및 H_2O 농도가 다시 감소하게 된다. 또한, 연료측의 혼합분율도 CH_4 의 분포와 유사하게 감소하다가 증가하는 형태로 분포하고 있음을 알 수 있다. $x=130\text{mm}$ 단면의 결과에서는 외부와동 말림의 영향으로 온도는 공기측에서 다시 한번 증가하는 경향을 보이고 있으며, 온도분포의 극점이 존재하는 $r=15\text{mm}$ 근처에서는 외부의 O_2 가 유입되어 농도가 다시 증가하고 있다. 화염면에서 최고치를 갖는 CO_2 및 H_2O 도 화염말림에 의해 공기측에서 다시 농도가 증가하고 있으며, 이러한 경향은 혼합분율 분포에서도 동일하게 나타나고 있음을 알 수 있다. 참고로, 두 단면의 결과에서 O_2 뿐만 아니라 CH_4 의 미소량도 화염면을 투과(Leak)해서 분포하는 것을 알 수 있다. 스트레인이 소염점에 가깝게 매우 큰 경우를 제외하고는 CH_4 의 화염면 투과는 일반적으로 잘 관찰되지 않는 현상이지만 이 결과는 화염에서의 스트레인이 소염점에 가깝기 때문이기보다 본 연구에서 이용한 2 단계 반응기구에서 기인된 것으로 판단된다.

Fig. 6에는 Fig. 5에서 설명한 내부와동 및 외부와동의 영향을 받는 단면과 비교적 와동의 영향이 적은 $x=90\text{mm}$ 단면의 화염구조를 혼합분율을 좌표로 하여 함께 나타내었다. 전체적인 분포경향을 살펴보면, 온도나 CO_2 및 H_2O 는 양론혼합비인 $Z_{st}=0.055$ 근처에서 최고점을 이루며, CO 도 양론

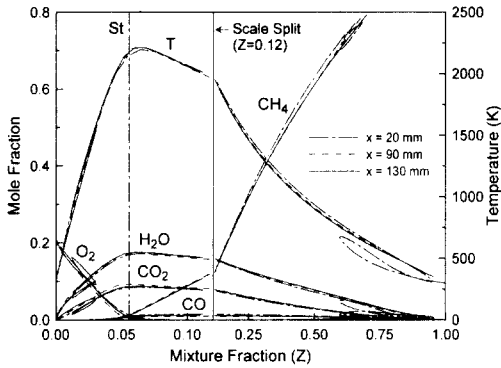


Fig. 6 Temperature and major species(CH₄, O₂, CO, CO₂, and H₂O) concentration in mixture fraction coordinates at 0ms

혼합비를 기준으로 연료측에 분포함을 보여주고 있어 앞에서 지금까지 설명한 화염구조를 다시 한번 확인 할 수 있다. 특이한 점으로, $x=20\text{mm}$ 단면의 연료측($Z=0.75$ 근처)에서는 온도, 및 화학종 농도가 동일 혼합분율에 대해 1 개 이상의 편위된 값을 보이고 있으며, 이러한 경향은 $x=130\text{mm}$ 단면의 공기측($Z=0.02$ 근처)에서도 나타나고 있다. 와동에 의한 영향이 약한 $x=90\text{mm}$ 단면에서는 이러한 경향은 보이지 않는다. 이와 같이 와동의 영향이 존재하는 각 단면에서 동일 혼합분율에 대해 온도나 화학종 농도값이 여러 개의 값을 보이는 이유는 Fig. 5(a), (b)에서 설명한 것처럼 혼합분율 분포가 와동의 말림에 의해서 단조감소하지 못하고 다시 증가하기 때문이다. 이것은 화염-와동간의 상호작용이 화염구조에 많은 영향을 미치고 있음을 보여주는 중요한 현상으로서, 향후 상세반응 기구를 이용하여 주요 라디칼을 포함한 여러 화학종의 농도분포 등에 대해서도 구체적으로 검토할 필요가 있을 것으로 사료된다. 또한 본 연구의 대상인 제트화염에서는 상류영역의 화염면을 변형시킬 정도의 강한 와동-화염의 상호작용을 관찰할 수는 없었지만, 제트화염에 대해 가진 등의 방법으로 상호작용 강도와 빈도를 적절히 조절한다면, 지속적인 화염-와동 상호작용이 존재하는 난류화염의 국소구조를 고찰하기 위한 모델화염으로 이용할 수 있을 것으로 판단된다.

4. 결론

비정상 CH₄-공기 제트 확산화염에 대한 수치계산을 통해 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 노즐출구 근처의 인위적 교란 없이도 화염

이 완전히 노즐에 부착되지 않은 조건에 대해 부력효과를 포함한 계산을 수행하여, 화염면 외부의 큰 와동과 내부의 작은 와동 구조에 대한 수치모사가 가능함을 확인하였다.

(2) 상류의 화염면은 내부와동에 의해 거의 변형되지 않았으나 하류에서는 외부와동에 의해 화염면이 압축, 신장하여 변형되고 있음을 알았다.

(3) 와동의 영향이 존재하는 단면에서 혼합분율 좌표에 대한 온도 및 화학종 농도는 동일 혼합분율에 대해 1 개 이상의 편위된 값을 가짐을 확인하였다.

(4) 본 연구에서 다룬 비정상 제트화염을 대상으로 화염-와동의 상호작용 강도와 빈도를 적절히 조절한다면, 이러한 현상이 지속적으로 발생하는 난류화염의 구조를 이해 하는데 유용하게 이용할 수 있을 것으로 판단된다.

후 기

본 연구는 연소기술연구센터(Combustion Engineering Research Center)의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다. 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Akselvoll, K. and Moin, P., 1996, "Large-eddy Simulation of Turbulent Confined Coannular Jets," *Journal of Fluid Mechanics.*, Vol. 315, pp. 387~411.
- (2) Vervisch, L. and Trounev, A., 1998, "LES Modeling for Lifted Turbulent Jet Flames," *Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program.*
- (3) Pope, S. B., 1999, "A Perspective on Turbulence Modeling," *Modeling Complex Turbulent Flows*, (M. D. Salas, Eds.), Kluwer Academic Publishers.
- (4) Najm, H. N. and Wyckoff P. S., 1997, "Premixed Flame Response to Unsteady Strain Rate and Curvature," *Combustion and Flame*, Vol. 110, pp. 92~112.
- (5) Patnaik, G and Kailasanath, K., 1998, "A Computational Study of Local Quenching in Flame-Vortex Interactions with Radiative Losses," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 711~717.
- (6) Katta, V. R. and Roquemore, W. M., 1995, "On the Structure of a Stretched/Compressed Laminar Flamelet-Influence of Preferential Diffusion," *Combustion and Flame*, Vol. 100, pp. 61~70.
- (7) Katta, V. R., Hsu, K. Y. and Roquemore, W. M., 1998, "Local Extinction in an Unsteady Methane-Air Jet Diffusion Flame," *Proceedings of the Combustion*

- Institute*, Vol. 27, pp. 1121~1129.
- (8) McMurtry, P. A., Jou, W.-H., Riley, J. J. and Metcalfe, R. W., 1986, "Direct Numerical Simulations of a Reacting Mixing Layer with Chemical Heat Release," *AIAA Journal*, Vol. 24, No. 6, pp. 962~970.
- (9) Kee, R. J., Rupley and F. M., Miller, J. A., 1989, "Chemkin-II: A Fortran Chemkin Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," *SAND89-8009B*.
- (10) Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., 1986, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties," *SAND86-8246*.
- (11) Hirt, C. W. and Cook, J. L., 1972, "Calculating Three-Dimensional Flows around Structures and over Rough Terrain," *Journal of Computational Physics*, Vol. 10, pp. 324~340.
- (12) James, S and Madnia, C. K., 1996, "Direct Numerical Simulation of a Laminar Vortex Ring," *Physics of Fluid*, Vol. 8, No. 9, pp. 2400~2414.
- (13) Fujiwara, T., Taki, S. and Arashi, K., "Numerical Analysis of a Reacting Flow in H₂/O₂ Rocket Combustor Part 1 : Analysis of Turbulent Shear Flow," *AIAA 24th Aerospace Science Meeting*, AIAA-86-0528, (1986), pp.1
- (14) Dupont, V., Pourkashanian, M. and Williams, A., 1993, "Modelling of Process Heaters Fired by Natural Gas," *Journal of the Institute of Energy*, Vol. 66, pp. 20-28.
- (15) Mitchell, R. E., Sarofim, A. F. and Clomburg, L. A., 1980, "Experimental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames," *Combustion and Flame*, Vol. 37, pp. 227~244.
- (16) Bray, K.N.C. and Peters, N., 1994, "Laminar Flamelet in Turbulent Flames," *Turbulent Reacting Flows*, (P. A. Libby, F. A. Williams, Eds.), Academic Press., p.69~72.
- (17) Katta, V. R., Goss, L. P. and W. M. Roquemore, 1994, "Numerical Investigations of Transitional H₂/N₂ Jet Diffusion Flames," *AIAA Journal*, Vol. 22, No. 1, pp.84~94.
- (18) Chen-L.-D., Seaba, J. P., Roquemore, W. M. and Goss, L. P., 1988, "Buoyant Diffusion Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 22, pp. 677~684.