

대향류 확산화염에 대한 직접수치모사의 검증

박 외 철

부경대학교 안전공학과

(2001. 9. 7. 접수 / 2001. 12. 12. 채택)

An Evaluation of a Direct Numerical Simulation for Counterflow Diffusion Flames

Woe-Chul Park

Department of Safety Engineering, Pukyong National University

(Received September 7, 2001 / Accepted December 12, 2001)

Abstract : A direct numerical simulation (DNS) was applied to nonpremixed counter-flow diffusion flames between oxidizer and fuel ducts. The objective of this study is to evaluate the numerical method for simulation of axisymmetric counterflow diffusion flames. Effects of computational domain size and grid size were scrutinized, and then the method was applied to air-methane diffusion flames. The results at zero gravity conditions were in good agreement with those obtained by the one-dimension flame code OPPDIF. It was confirmed that the numerical method is applicable to the diffusion flames at the normal gravity conditions since the results clearly showed the effects of buoyancy and velocity ratio.

Key Words : direct numerical simulation, counterflow diffusion flame, mixture fraction combustion model

기호설명

c_p : 정압비열
 D : 덕트의 지름(15mm) 또는 확산계수 (식 5)
 g : 중력가속도, 9.81m/s^2
 H : y방향 계산영역의 크기
 h : 엔탈피
 L : 덕트간 거리(15mm)
 M : 분자량
 Q : 단위체적당 열발생률
 R : 기체상수
 s : $\nu_o M_o / \nu_f M_f$
 T : 온도
 t : 시간
 u : 속도
 V : 덕트선단의 평균유속
 v : y방향 속도

W : r방향 계산영역의 크기
 w : 단위체적당 화학종 생성률
 Y : 질량분율(mass fraction)
 Z : 혼합분율(mixture fraction)
 δ_{ij} : 크로네커 델타(Kronecker delta)
 λ : 열전도계수
 μ : 점성계수
 ν : 화학양론계수(stoichiometric coefficient)
 ρ : 밀도
 τ : 전단응력

아래첨자

τ : 전단응력
 A : 공기
 F : 가연성가스(CH_4)
 f : 화염표면
 o : 산소
 in : 덕트내 또는 대기중

1. 서론

화석연료의 효과적 이용에서부터 소화 및 소화약제의 개발, 환경문제에 이르기까지 연소의 응용범위는 넓고 다양하다. 특히 소화에 관한 연구에 있어서 화염의 구조와 화학적, 물리적 원리의 이해, 복사를 포함한 열전달의 영향을 규명하는데 많은 연구가 수행되어 왔다. 이와 관련한 기초연구로서 가연성 가스의 대항류 확산화염에 관한 연구¹⁻³⁾를 들 수 있다. 구조가 간단하고, 소규모 실험장치로써도 소화의 원리와 화염의 구조를 밝히는데 적합하기 때문이다. 최근에는 우주공간의 무중력상태에서의 소화와 관련한 연구^{4,5)}도 보고되었다.

지금까지 대항류 확산화염에 관한 많은 실험이 수행되었으나, 수치적 연구는 부력이 없는 1차원 화염에 국한되어 왔다. 대항류 확산화염은 대부분 축대칭, 즉 2차원임에도 불구하고, 1차원 수치법^{6,7)}으로 모사해왔다. 1차원으로 가정하여 개발된 수치법의 결과와 실험에서 얻은 중심선상의 온도분포 및 속도분포를 서로 비교할 수 있는 것은 화염의 두께가 얇고, 따라서 반경방향의 열전달이 축방향에 비해 훨씬 작기 때문이다. 그러나 1차원 화염으로 가정할 수 있는 것은 엄밀히 말해 부력이 없는 무중력 상태에서의 고변형률 화염뿐이다. 정상중력(normal gravity, $g=9.81\text{m/s}^2$)에서는 부력의 존재로 인해 저변형률 뿐만 아니라 고변형률에서도 화염이 2차원이다. 변형률이 작은 경우에는 부력의 영향이 크고 무중력 상태에서도 화염의 두께가 두꺼워 반경방향 복사 열전달이 증가하게 된다. 따라서 부력의 효과를 포함하는 수치법 개발의 필요성이 대두되어 왔다. 본 연구는 화재모사용 코드인 Fire Dynamics Simulator (FDS)⁸⁾를 대항류 확산화염에 적용하기 위한 검증이 목적이다. FDS에는 Large Eddy Simulation(LES)과 직접수치모사(Direct Numerical Simulation, DNS)를 선택할 수 있도록 되어 있는데, 대항류 확산화염에 적합한 직접수치모사를 적용하였다.

본 연구의 대상은 층류화염에 국한되어 있어, 직접수치모사를 난류의 미세한 유동구조 해석에 적용하는 경우보다 훨씬 더 큰 격자를 사용할 수 있다. 본 연구에서는 적합한 계산영역의 크기와 격자크기를 결정하기 위해 화염의 형태와 닥트 중심선상의 온도 및 속도분포의 변화를 조사하였다. 선택한 크기의 계산영역과 격자를 사용하여 무중력상태에서 계산한 결과를 현재 널리 사용되고 있는 1차원 화

염코드의 결과와 비교하였다.

2. 직접수치모사 및 연소모델

대항류 확산화염의 실험장치는 흐름의 방향이 정반대인 두개의 원형닥트로 구성되어 있다. 공기 또는 공기와 가스 소화약제가 유입되는 쪽이 공기닥트(oxidizer duct), 가연성 기체, 가연성 기체와 불연성 기체, 또는 가연성 기체와 가스 소화약제가 유입되는 쪽이 연료닥트(fuel duct)이다. 정상중력상태에서는 부력에 의해 화염이 위쪽으로 향하므로, 일반적으로 무중력상태에서의 실험 외에는 두 닥트를 수직으로 배열한다. 본 연구에서는 Fig. 1과 같이 상부닥트에 공기, 하부닥트에 메탄과 질소의 혼합가스가 유입되는 경우를 대상으로 하였다. 화염은 질소가스를 사용하여 주위 공기로부터 차단된다. 지름 D와 닥트간 거리 L이 각각 15mm이고, 화염은 부력에 의해 두 닥트의 중심보다 약간 위쪽에 위치하게 된다. 계산영역의 크기를 $W \times H$ 로 표시하였다.

유체를 이상기체로 가정하여 텐서(tensor)로 표시한 지배방정식⁸⁾은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{2}$$

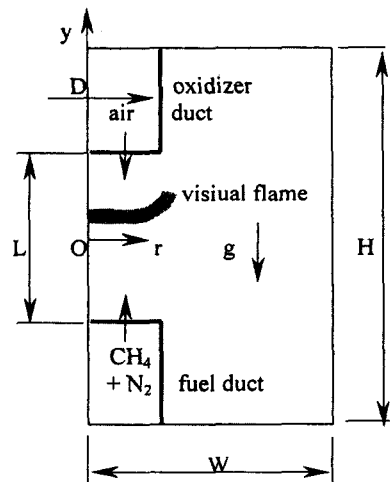


Fig. 1. Schematic diagram of the computational domain(D=15 mm, L=15mm)

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_i}{\partial x_i} - \frac{Dp}{Dt} = Q + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial (u_i \tau_{ij})}{\partial x_i} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + w_i \quad (4)$$

여기서,

$$p = \rho R T \quad (5)$$

$$h = c_p T \quad (6)$$

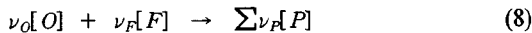
이고, 전단응력 텐서는

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2 \partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (7)$$

이다.

경계조건으로, 벽면에서의 유속이 0, 닥트 출구에서 균일유속, 벽면과 주위 질소차폐가스의 온도 25°C를 적용하였다.

본 연구에서 연소모델은 혼합분율 연소모델⁹⁾을 사용한다. 연소반응



에서 O는 산소, F는 연료, P는 생성물이고,

$$s = \nu_O M_O / \nu_F M_F \quad (9)$$

라고 하면, 혼합분율 Z는

$$Z = [s Y_F - (Y_O - Y_{O,e})] / (s Y_{F,e} + Y_{O,in}) \quad (10)$$

으로 정의된다. 이 정의에 따라 산소가 전혀 없거나 연성 가스만 있는 영역에서는 Z=1, 가연성 가스가 없고 공기만 있는 곳에는 Z=0이 된다. 화염의 표면에서는 YF=0이므로 식(10)로부터

$$Z_f = Y_{O,in} / (s Y_{F,in} + Y_{O,in}) \quad (11)$$

가 된다. 산소와 메탄의 화학반응은



이므로 $\nu_O=2$, $\nu_F=1$, $M_O=32$, $M_F=16$ 으로 식(9)에서 s는 4가 된다. 또 $Y_{F,in}$ 은 연료닥트에서의 메탄의 질량분율이고, 상부의 공기닥트에는 공기만 흐르므로 $Y_{O,in}=0.23$ 이다. 화염을 질소로 차폐하지 않는 경우에는 식(11)에서 $Z_f=0$ 이 된다. 식(4)의 화학종 수송 방정식으로부터 각 화학종의 질량분율을 구하지만, 혼합분율 연소모델에서는 식(12) 외의 화학반응을 사용하지 않고, 혼합분율 Z에 의해 화염의 위치와 온도 분포 등을 나타낸다. 이것은 산소의 소모량에 열 발생률이 비례한다는 원리에 기초한 것이다.

이 식들의 미지수는 explicit method를 사용하여 속도와 온도, 화학종의 질량분율 등의 해를 구한다. 각 격자에서의 CFL수(Courant-Friedrich-Lewy number, 예: y-방향 CFL수는 $v \Delta t / \Delta y$, 여기서 v는 y 방향 유속, Δt 와 Δy 는 각각 계산시간간격과 y방향 격자의 크기)가 0.5 이하로 되도록 계산시간간격을 결정하므로, 해의 이산이나 불안정의 문제는 발생하지 않는다. 직접수치모사와 연소모델에 관한 상세한 내용은 web에 공개되어 있는 McGrattan 등⁸⁾에 기술되어 있다.

3. 결과 및 토의

하부 닥트(Fig. 1 참조)에는 메탄 20vol%와 질소 80 vol%의 혼합가스, 상부 닥트에는 공기가 흐르고, 화염은 질소로 차폐된다. 이 경우 메탄의 질량분율($Y_{F,in}$)은 0.125이고, 혼합분율(Z_f)은 0.3151이다. 변형률(global strain rate)의 정의는

$$a_g = 2V_A [1 + (V_F / V_A)(\rho_F / \rho_A^{0.5})] / L \quad (13)$$

를 사용하였다. 변형률 a_g 가 $40s^{-1}$, 두 닥트간의 거리(L) 15mm, 속도비(V_A/V_F) 1과 연료(20%CH₄+80%N₂) 및 공기의 밀도(압력 1atm, 온도 25°C)를 위의 식에 대입하면 $V_F=V_A=0.264m/s$ 가 된다. 실험에서 닥트 선단에서의 속도분포를 균일하게 하기 위해 닥트의 내부에 망(screen)을 넣으므로, 닥트 선단에서의 속도분포가 균일한 것으로 가정하였다. 벽면과 질소차폐가스의 온도는 25°C이다.

본 연구에서 계산시작 후 약 0.7초에 화염이 평형 상태에 이르므로, 온도와 속도의 평균값은 0.9초와 1.0초 사이의 값으로부터 구하였다. 격자수 80×80

의 경우 1초까지 계산하는데 P3-650Mhz PC에서 약 1시간이 소요되었다.

3.1. 계산영역의 크기

일반적으로 계산영역을 충분히 크게 잡지 않으면 정확한 해를 구할 수 없거나 수렴이 곤란하게 된다. 적정 크기의 계산영역을 결정하기 위해 r, y방향 격자크기를 모두 0.5mm로 하고, 계산영역의 크기에 따라 화염의 형태와 중심선상의 온도분포, 속도분포를 비교하였다.

y방향의 계산영역을 $H/D=2.67(H=40mm)$ 로 유지하면서 r방향 계산영역의 크기 W/D 를 1.33, 2.0, 2.67

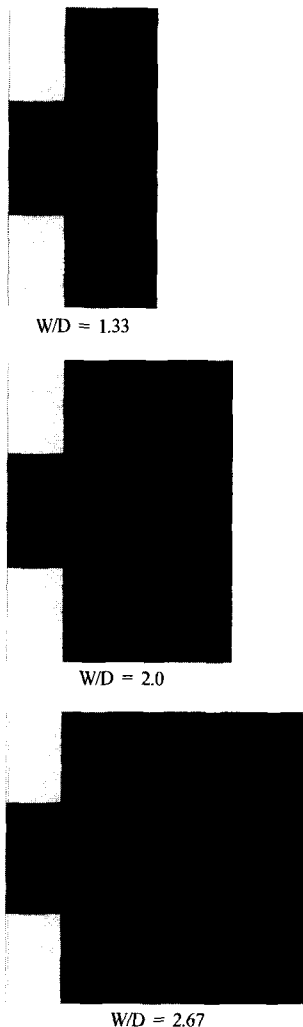


Fig. 2. Flames for different r-direction computational domain sizes($H/D=2.67$)

로 했을 때 각각의 화염형태를 Fig. 2에 비교하였다. 화염은 부력에 의해 위로 향하고 상부닥트의 출구 근처에서 둥근 모양을 나타낸다. 이 화염의 형태는 부력을 고려하지 않는 1차원 화염코드 OPPDIF⁷⁾로는 얻을 수 없다. 화염의 형태는 식(13)에 정의된 변형율의 값에 따라 크게 달라진다. 세가지 계산영역의 경우 모두 화염의 형태에 큰 차이가 없음을 알 수 있다.

위 세 화염의 중심선상의 온도분포와 축방향 속도분포를 Fig. 3에 비교하였다. 화염의 위치와 두께, 각 위치에서의 온도 및 속도분포, 정체점의 위치가 모두 잘 일치하고 있다. 이것으로부터 반경방향 계산영역의 크기는 영향이 작고, 닥트지름의 2배 이상으로 잡는다면 충분함을 알 수 있다. 화염의 중심, 즉 최고온도의 위치가 두 닥트의 중심(7.5mm)에서 상부닥트 쪽으로 약 2mm 이동한 것은 부력이 존재하기 때문이다. 이에 따라 속도분포에서 정체점($v=0$)의 위치도 상부닥트 쪽으로 이동하였다.

한편, r방향의 계산영역을 $W/D=2.67(W=40mm)$ 로

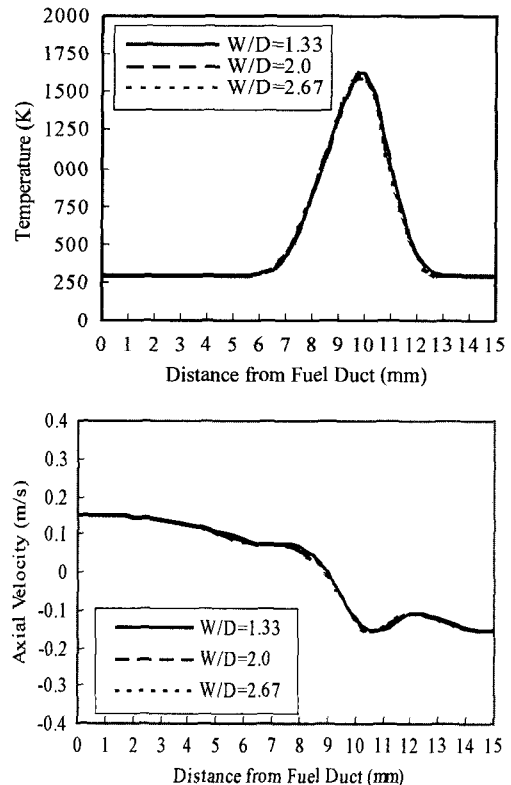


Fig. 3. Comparison of temperature and velocity for r-direction computational domain sizes($H/L=2.67$)

유지하면서 y방향의 크기가 H/L=1.6, 2.0, 2.4, 2.67, 3.33인 경우를 서로 비교하였다. Fig. 4는 이 중에서 H/L이 1.6, 2.0, 2.67일 때의 화염을 비교한 것이다. H/L=2.0과 2.67의 화염은 차이가 없으나, H/L=1.6인 경우에는 화염의 고온부(가운데 검은 띠)의 곡률반경이 다른 두 경우에 비해 더 크다. 이는 축방향 계산 영역을 작게 잡으면 화염의 형태가 잘못 나타나게 됨을 의미한다. H/L=2.4와 3.33에서도 H/L=2.0의 화염과 차이가 없었다.

Fig. 5에는 y방향 계산영역의 크기에 따른 온도분포와 y방향속도가 나타나 있다. H/L=2.0, 2.67일 때 온도와 속도 모두 거의 일치하지만, H/L=1.6에서는 2.67의 온도분포와 차이가 있음을 알 수 있다. 따라서 축방향 계산영역은 반경방향 계산영역에 비해 민감하며, H/L > 2.0으로 잡을 필요가 있음을 알 수 있다.

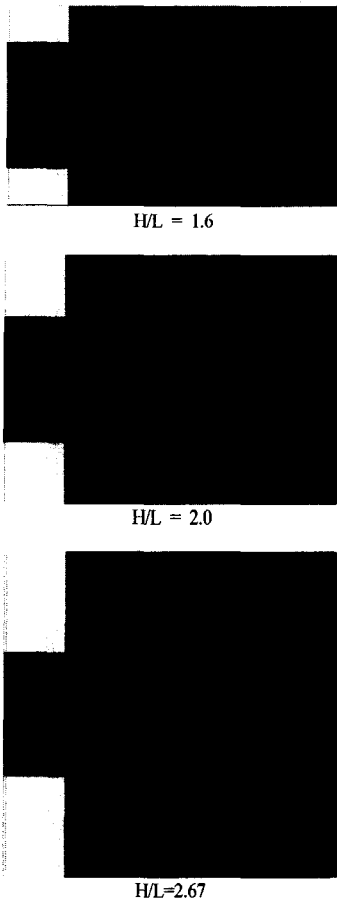


Fig. 4. Flames for different y-direction computational domain (W/D=2.67)

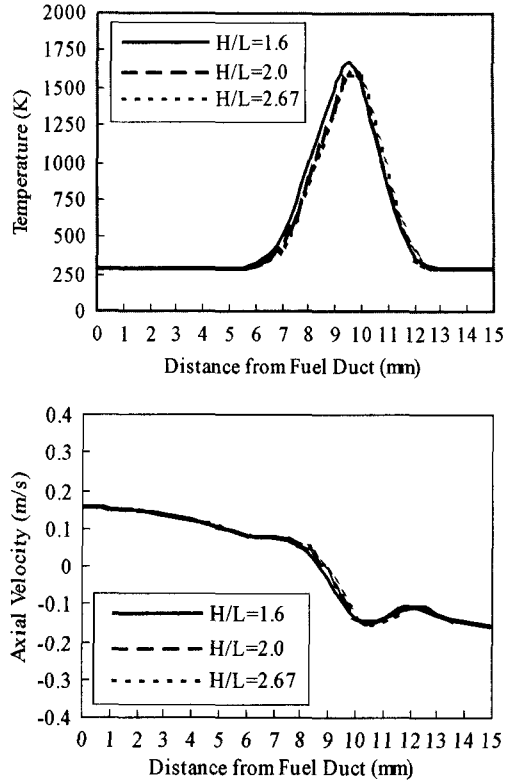


Fig. 5. Comparison of temperature and velocity for y-direction computational domain sizes(W/D=2.67)

3.2. 격자의 크기

위에서 계산영역의 크기에 대한 조사를 토대로 W/D=2.67(W=40mm), H/L=2.67(H=40mm)로 계산영역을 충분히 크게 잡고, 이 계산영역 내에서 격자크기에 따른 온도 및 속도분포를 조사하였다. Fig. 6은 격자수가 40×40, 80×80, 120×120일 때 각각의 중심선상의 온도분포와 축방향 속도분포를 비교한 것이다. 최고온도는 격자가 많을 수록 높음을 볼 수 있다. 최고온도 주위를 제외하면 80×80과 120×120은 거의 비슷한 온도분포를 나타내는데 비해 40×40의 경우에는 오차가 크게 나타나 있다. 80×80과 120×120에서는 속도분포가 거의 일치하지만, 40×40에서는 오차가 크다. 따라서 80×80(격자크기 0.5mm×0.5mm) 이상의 격자가 필요하고, 정확한 최고온도를 계산하기 위해서는 격자크기가 0.5mm보다 작게 할 필요가 있음을 알 수 있다. 그림에는 나타나 있지 않으나 80×320의 격자(격자크기 0.5mm×0.125mm) 이상에서는 격자크기를 작게 잡아도 최고온도의 증가가 거의 없었다. 한편, 0.5mm×0.5mm

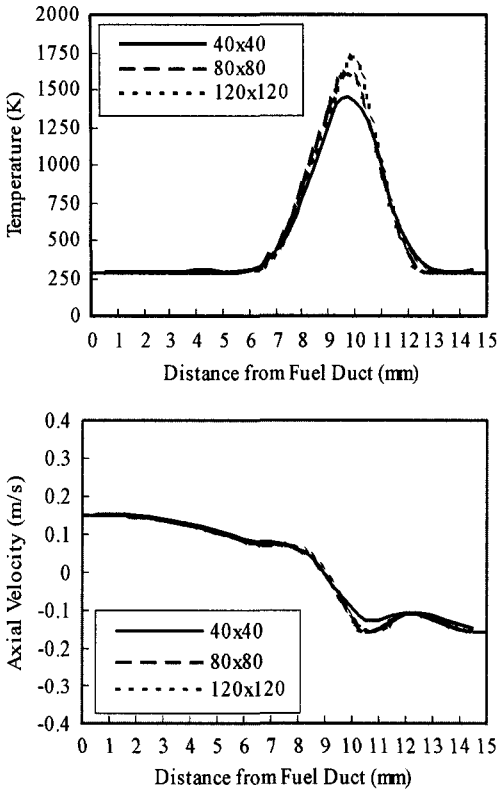


Fig. 6. Comparison of temperature and velocity for different numbers of grids($W/D=2.67$, $H/L=2.67$)

이하의 격자크기에서는 격자의 크기가 달라도 화염의 형태에는 변함이 없었다.

3.3. OPPDIF와의 비교

위에서 계산영역과 격자크기의 조사결과에 따라 $W/D=2.67$ ($W=0$ mm), $H/L=2.67$ ($H=40$ mm), 80×80 격자(격자크기 $0.5\text{mm} \times 0.5\text{mm}$)를 선택했다. $D=15\text{mm}$, $L=15\text{mm}$ 이고, $a_g=40\text{s}^{-1}$, CH_4 80%와 N_2 20%의 혼합 가연성 가스의 확산화염($Y_F=0.6957$, $Z_F=0.07635$)에서 두 가지 속도비 $V_A/V_F=1$ 과 2의 경우를 비교대상으로 하였다. 1차원 코드인 OPPDIF⁷⁾는 대항류 확산화염의 모사에 흔히 사용되고 있으나, 부력항을 포함하지 않아 사실상 무중력 상태에서의 화염을 모사한다. 본 연구에서는 $g=0$ 로 하여 계산한 결과를 OPPDIF의 결과와 비교하였다.

Fig. 7은 공기와 가연성 가스의 유속비 V_A/V_F 가 1($V_A=0.1746\text{m/s}$, $V_F=0.1746\text{m/s}$)인 경우, 화염의 형태와 중심선상의 온도분포 및 축방향 속도를 나타낸 그림이다. 화염은 직접수치모사를 사용하여 얻은 것

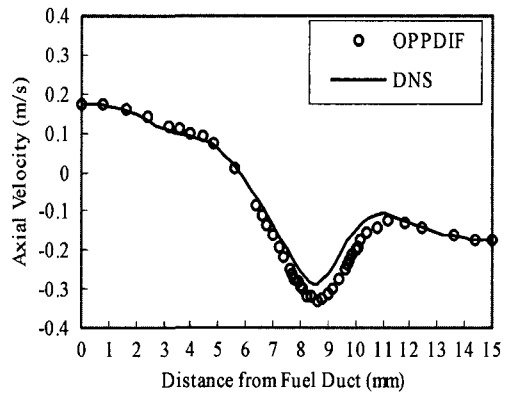
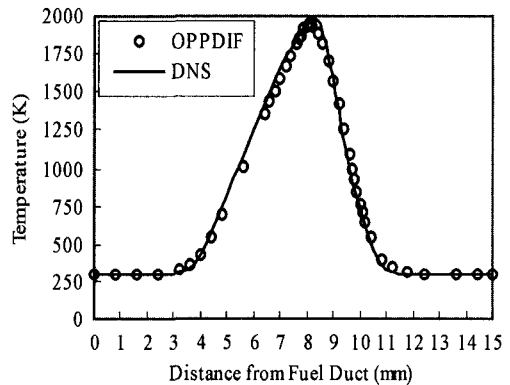
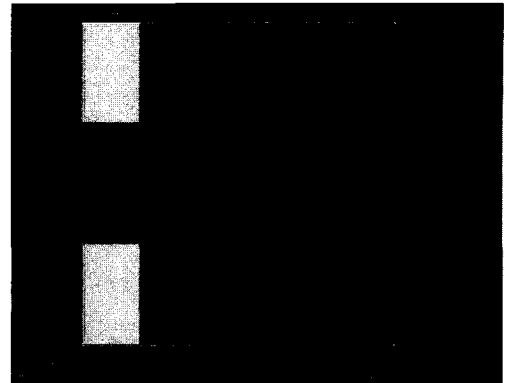


Fig. 7. Flame and comparison of temperature and velocity with OPPDIF: $a_g=40\text{s}^{-1}$, $V_A/V_F=1$, $g=0$ (flame, T and v from top)

으로, 왼쪽 공기다트 방향으로 약간 휘어져 있는 것은 산소와의 연소에 의한 것으로 보인다. 앞에서 언급한 바와 같이 OPPDIF에서는 이러한 화염의 형태를 볼 수 없다. 중심선상의 온도분포는 OPPDIF와 잘 일치함을 알 수 있다. 최고온도와 화염의 위치도 거의 같게 나타나 있다. 화염의 중심(최고온도 지점)이 두 다트의 중간에 있지 않고 공기다트 쪽으로 약

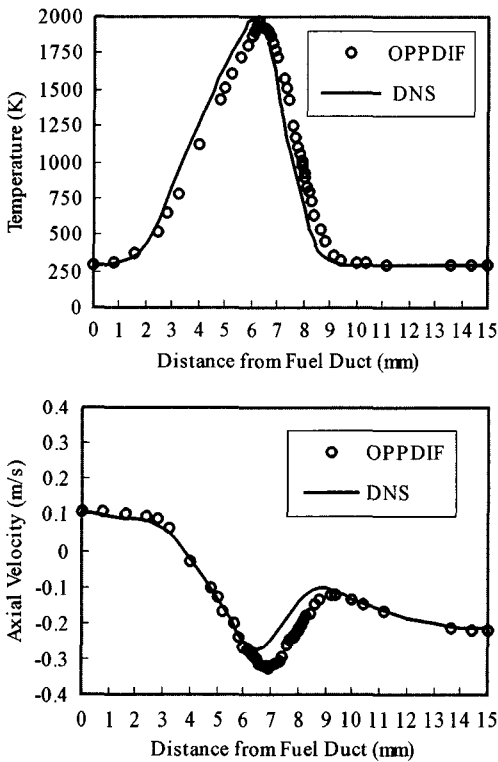
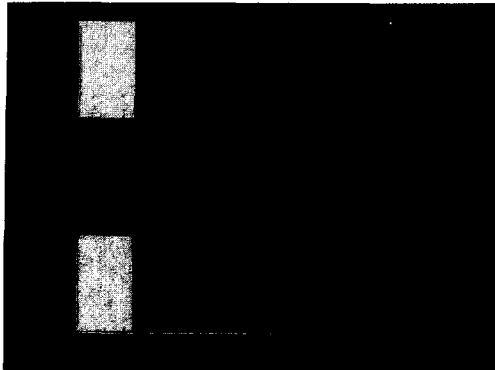


Fig. 8. Flame and comparison of temperature and velocity with OPPDIF: $a_p=40s^{-1}$, $V_A/V_F=2$, $g=0$ (flame, T and v from top)

간 이동한 것은 메탄의 산소와의 화학반응 때문이다. 중심선상의 축방향 속도분포도 거의 일치한다. 한편, 앞의 정상중력에서의 경우와 비교해보면, 화염의 형태와 그 위치, 정체점의 위치가 모두 무중력 상태에서의 상당히 다름을 알 수 있다. 이것은 정상중력($g=9.81m/s^2$) 상태에서 본 수치법의 계산결과가 축정치와 잘 일치한다면 1차원 수치법으로 해석할 수 없는 정상중력에서의 화염을 모사할 수 있음을 나타낸다.

Fig. 8은 위와 같은 조건에서 $V_A/V_F=2$ 인 경우를 비교한 것이다. 공기다트의 평균유속은 0.2208m/s, 연료다트의 평균유속은 0.1104m/s으로, 공기의 유속이 혼합가스의 2배이다. 동일한 변형률에서 유속비의 증가는 공기의 유속 증가와 연료 유속의 감소를 의미한다.(식13 참조) 이에 따라 직접수치모사로 얻은 화염은 예상대로 중심에서 아래쪽 대각선 방향으로 경사를 이루며 형성되어 있다. 화염의 경사도는 속도비가 증가할수록 커진다. 앞의 $V_A/V_F=1$ 의 경우에 비해 화염의 위치가 아래 연료다트 쪽으로 이동한 것은 상부 다트의 공기유속이 $V_A/V_F=1$ 에 비해 훨씬 더 크고 하부 다트의 유속은 작기 때문이다. 중심선상의 온도분포는 유속비가 1.0인 경우(Fig. 7)에 비해 오차가 약간 더 크지만, 잘 일치하고 있음을 볼 수 있다. 축방향 속도 역시 두 수치법이 거의 같은 결과를 나타내었다. 그러나 공기다트측의 속도는 오차가 다소 증가하였는데, 이는 온도분포에서 약간 증가한 오차와 밀접한 관계가 있다. 연소로 인해 온도가 상승하면 그 영향으로 공기의 팽창이 일어나기 때문이다. 본 수치법은 속도비의 값이 달라도 온도와 속도분포를 비교적 잘 예측하는 것으로 나타났다.

4. 결 론

직접수치모사(DNS)와 혼합분율 연소모델을 메탄-공기 축대칭 대향류 확산화염에 적용한 결과 다음의 결론을 얻었다.

- 1) 반경방향 계산영역의 크기는 결과에 큰 영향을 미치지 않으며, 다트지름의 2배 이상이면 적합한 것으로 나타났다.
- 2) 축방향 계산영역은 반경방향 계산영역보다 민감하며, 다트간격의 2배 이상이 바람직하였다.
- 3) 격자의 크기는 0.5mm 이하가 적합하지만, 최고온도의 정확한 계산이 필요한 경우에는 격자크기가 훨씬 더 작아야 함을 알 수 있었다.
- 4) 무중력 상태에서의 중심축선상의 온도분포와 축방향 속도분포의 계산결과가 1차원 화염코드인 OPPDIF와 잘 일치하였다.
- 5) 본 수치법은 부력에 의한 화염의 형태와 온도 및 속도분포, 속도비의 영향을 뚜렷이 나타냄에 따라 기존의 1차원 화염코드로는 불가능한 정상중력 상태에서의 대향류 확산화염에 대한 적용가능성을 확인하였다.

참고문헌

- 1) I. K. Puri and K. Seshadri, "Extinction of Diffusion Flames Burning Diluted Methane and Diluted Propane in Diluted Air," *Combustion and Flames*, Vol. 65, pp. 137~150, 1986.
- 2) A. Hamins, D. Trees, K. Sashadri and H. Chelliah, "Extinction of Nonpremixed Flames with Halogenated Fire Suppressants," *Combustion and Flames*, Vol. 99, pp. 221~230, 1994.
- 3) K. Y. Lee, D. J. Cha, A. Hamins and I. K. Puri, "Heat Release Mechanisms in Inhibited Laminar Counterflow flames," *Combustion and Flames*, Vol. 105, pp. 27~40, 1996.
- 4) K. Maruta, M. Yoshida, H. Guo, Y. Ju and T. Niioka, *Combustion and Flames*, "Extinction of Low-Stretched Diffusion Flame in Microgravity," Vol. 112, pp. 181~187, 1998.
- 5) A. Hamins, M. Bundy, I. K. Puri, K. B. McGrattan and W. C. Park, "Suppression of Low Strain Rate Nonpremixed Flames by an Agent," *Proc. 6th Int'l Microgravity Combustion Workshop*, pp. 101~103, 2001.
- 6) B. Rogg, A Computer Program for the Simulation of One-Dimensional Chemically Reacting Flows, Technical Report CUED/A-THERMO/TR39, Univ. of Cambridge, Dept. of Engng., 1991.
- 7) A. Lutz, R. J. Kee, J. Grcar and F. M. Rupley, "A Fortran Program Computing Opposed Flow Diffusion Flames," SAND96-8243, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1997.
- 8) K. B. McGrattan, H. R. Baum, R. G. Rehm, A. Hamins, G. P. Forney, J. E. Floyd, S. Hostikka, *Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide V.2*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 2001(also <http://burn.cfr.nist.gov/~gforney/fdsCD>).
- 9) J. E. Floyd, K. B. McGrattan and H. R. Baum, "A Mixture Fraction Combustion Model for Fire Simulation Using CFD," *Proc. Int'l Conf. on Engineered Fire Protection Design*, pp. 279~290, 2001.