

CH₄ 비예혼합화염의 수치계산에 적용하기 위한 확장된 축소반응기구의 비정상 응답특성 검토

오창보* · 박 정** · 이창언†

(2002년 8월 23일 접수, 2002년 12월 14일 심사완료)

An Investigation of Unsteady Response of Augmented Reduced Mechanism for Numerical Simulation of CH₄ Nonpremixed Flames

Chang-Bo Oh, Jeong Park and Chang-Eon Lee

Key Words : Augmented Reduced Mechanism(확장된 축소 반응기구), Full Mechanism(상세반응기구), Extinction Point(소멸점), Unsteady Effect (비정상 효과), 화염편방정식(Flamelet Equation)

Abstract

The extinction behavior and the unsteady response of augmented reduced mechanism(ARM) have been investigated by adopting an OPPDIF code and a numerical solver for the flamelet equations. By comparing the performance of the ARM based on Miller and Bowman's mechanism(MB-ARM) with that of the ARM based on GRI-Mech 3.0(GRI-3.0-ARM), it is identified that the MB-ARM is more suitable for the unsteady calculation because it is relatively less stiff than GRI-3.0-ARM during an ignition process. The steady results using the MB-ARM, which is modified to predict reasonably the extinction point of experiment, are in excellent agreement with those from full mechanism. Under the sinusoidal transient disturbances of scalar dissipation rate, the unsteady responses of the flame temperature and species concentrations using a modified MB-ARM show in very close agreement with those from full mechanism. It is presumed that above modified MB-ARM is very suitable for the unsteady simulation of turbulent flames because it gives not only a low computational cost but also a good prediction performance for flame structure, extinction point and unsteady response.

1. 서론

근래에 난류화염과 같이 복잡한 화염에 대한 수치계산에 적용하기 위해 축소반응기구(Reduced mechanism : RM)들이 다수 작성되어 제공되고 있다. RM은 원래의 상세반응기구(Full mechanism : FM)에 비해 계산시간을 절감시키면서도 FM과 비

슷한 수준으로 화염 해석이 가능하게 하는 등의 장점을 가지고 있다. 그러나, RM이 계산에서 실제 현상에 부합하는 물리적인 정보를 제공하기 위해서는 다양한 연소조건 하에서 국소 화염구조, 연소속도, 점화 지연시간, 소멸점 예측성능 등에 대해 FM과의 엄밀한 비교 검증이 선행되어야 한다.

최근, 일부 연구자들에 의해서 FM과 유사한 수준의 화염예측 성능을 10~20 단계의 반응식 내에 구현한 소위, 확장된 축소반응기구(Augmented reduced mechanism : ARM)가 제안되고 있다. ARM의 작성은 주로 Chen 연구그룹에 의해 개발된 CARM (Computer-assisted reduction mechanism) 코드로 제작되며, CHEMKIN Package에서 이용되는

† 책임저자, 회원, 인하대학교 기계공학부

E-mail : chelee@inha.ac.kr

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

* 회원, 인하대학교 기계공학부

** 회원, 순천대학교 기계자동차공학부

CKWYP 서브루틴의 형식으로 제공되고 있다. CH₄ 연료에 대한 대표적인 ARM 을 예로 들자면, Sung 등이 GRI-Mech 2.11⁽¹⁾을 근거로 개발한 12 단계 ARM⁽²⁾과 GRI-Mech 3.0⁽³⁾에서 작성된 14, 15 및 17 단계 ARM⁽⁴⁾ 그리고, Homma 등이 Miller 와 Bowman 의 FM⁽⁵⁾을 근거로 작성한 16 단계 ARM⁽⁶⁾ 등이 있다. 이들 ARM 은 작성과 동시에 FM 과 엄밀한 비교 검토가 이루어져 제공되고 있으므로, 대부분의 연소현상 해석에 별다른 어려움 없이 적용 가능하다. 일반적으로 RM 은 난류화염과 같은 복잡한 화염의 수치계산 시간을 절감하기 위해서 사용된다. 그러나, 난류화염은 주파수가 10kHz 에 이르는 넓은 주파수 영역의 교란을 받을 수 있다고 알려져 있어,⁽⁷⁾ 먼저, 이러한 높은 주파수의 비정상 교란 상태에서도 실제 화염의 현상을 물리적 합당하게 추종할 수 있는지 검토되어야 한다.

Chen 등⁽⁸⁾은 CH₄ 화염에 대한 4, 5 단계 RM 과 Skeletal 반응기구에 대해서 완전 혼합 반응기 Perfectly stirred reactor : PSR) 모델⁽⁹⁾과 화염편(Flamelet) 모델⁽¹⁰⁾을 이용한 비정상 응답특성을 검토한 바 있다. 이 연구에서 RM 의 응답특성은 5kHz 의 높은 주파수의 교란상태에서는 Skeletal 반응기구를 추종하는 능력이 저하되며, CH₄ 화학종을 포함한 RM 의 비정상 추종성은 비교적 우수함을 보인 바 있다. 또한, PSR 코드를 이용하여 10 단계 RM 의 비정상 응답특성을 GRI-Mech 2.1 과 비교하여 비정상 추종성이 양호함을 확인한 바 있다.⁽¹¹⁾ 이들 연구로부터, 기존에 검토된 RM 보다 고려되는 화학종과 반응식의 단계가 많은 ARM 의 비정상 응답특성은 매우 양호할 것으로 예상된다. 그러나, 아직까지 여기에 대해서 구체적으로 평가된 바 없으므로, ARM 을 수치계산에 적용하기 위해서는 반드시 비정상 응답특성에 검토가 선행될 필요가 있다.

따라서 본 연구에서는 CH₄ 화염의 소염점 예측 성능이 우수한 ARM 을 대표적으로 선정하여, 저, 고 주파수의 인위적인 비정상 교란 조건하에서 ARM 의 비정상 응답특성을 상세반응기구의 결과와 비교 평가하였다. 또한, 이러한 평가를 통해 ARM 의 난류화염에 대한 수치계산에 적용 가능성을 검토하였다.

2. 수치해석 방법

2.1 지배방정식

본 연구에서는 난류화염과 같이 국소소염이 존

재하는 경우에 대해 ARM 을 적용한다는 가정하에, 우선 소염점 예측 성능이 양호한 ARM 을 비정상 응답특성을 검토할 대표 반응기구로 선택하였다. 소염점 예측성능의 검토에는 정상(Steady) 대향류 화염의 해석에 많이 사용되어지고 있는 OPPDIF 코드를 사용하였다. OPPDIF 의 지배방정식은 다른 문헌⁽¹²⁾에 잘 제시되어 있으므로 여기서는 생략한다. 비정상 거동의 검토에는 공간에 대해서는 혼합분을 좌표상에서 1 차원으로 표현되어 상세반응기구를 적용하더라도 계산시간을 절감할 수 있는 Peters 가 제안한 비정상 화염편방정식⁽¹⁰⁾, (1)~(2)를 이용하였다.

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \rho \frac{\chi(t)}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \sum_{i=1}^K \frac{h_i \dot{\omega}_i}{c_p} \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \rho \frac{\chi(t)}{2} \frac{1}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i \quad (2)$$

여기서, T 는 온도, Y_i 는 화학종 i 의 질량분율, ρ 는 혼합기의 밀도, χ 는 스칼라 소산율(Scalar dissipation rate), Z 는 혼합분율(Mixture fraction), Le_i 는 화학종 i 의 Lewis 수, c_p 혼합기의 정압비열, h_i 와 $\dot{\omega}_i$ 는 각각 화학종 i 의 생성 엔탈피와 단위체적당 몰 생성률을 의미한다. 식 (1)과 (2)에서 열역학적 물성치는 CHEMKIN-II Package⁽¹³⁾로, 전달물성치는 TRANFIT Package⁽¹⁴⁾를 이용하여 계산하였다.

2.2 경계조건 및 계산방법

본 연구에서 소염점 예측 성능을 검토하기 위해서는 Sung 등의 대향류 비예혼합화염에 대한 실험과 동일 조건⁽¹⁵⁾에 대한 계산을 수행하였다. 노즐 간격은 13mm 로 고정하였으며, 연료 및 공기의 조성은 각각 체적비를 CH₄:N₂=23:77, O₂:N₂=23:77 이며, 초기 유입온도는 298K 으로 하였다. 소염점을 얻기 위해서 연료 및 공기의 노즐유속을 5cm/s 부터 화염이 존재하지 않는 소염점까지 유속을 점차 증가시키면서 계산을 수행하였다. 화염에 가해지는 스트레인율(Strain rate)의 정의는 식 (3)과 같이 정의되는 총괄 스트레인율(Global strain rate)⁽¹⁶⁾을 도입하였다.

$$a_g = \frac{2|u_o|}{L} \left(1 + \frac{|u_F| \sqrt{\rho_F}}{|u_o| \sqrt{\rho_o}} \right) \quad (3)$$

여기서, L 은 연료 및 공기노즐 사이의 거리, u_F ,

Table 1 17-step GRI-3.0-ARM and 16-step MB-ARM based on GRI-Mech 3.0 and Miller and Bowman's reaction mechanism, respectively

	17-step GRI-3.0-ARM		16-step MB-ARM
21 Species	CH ₄ , CH ₃ , CH ₂ O, CO, CO ₂ , H ₂ , H ₂ O, H, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , O ₂ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₆ , HCN, NH ₃ , NO, NO ₂ , N ₂ O, N ₂	20 Species	CH ₄ , CH ₃ , CH ₂ O, CO, CO ₂ , H ₂ , H ₂ O, H, O, OH, HO ₂ , H ₂ O ₂ , O ₂ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₆ , HCN, NO, NO ₂ , N ₂
C1 Reactions	(R 1) CH ₄ +H=CH ₃ +H ₂ (R 2) CH ₃ +OH=CH ₂ O+H ₂ (R 3) CH ₂ O=CO+H ₂ (R 4) CO+OH+H=CO ₂ +H	C1 Reactions	(R 1) CH ₄ +OH=CH ₃ +H ₂ O (R 2) CH ₃ +O=CH ₂ O+H (R 3) CH ₂ O+O=CO+H ₂ O (R 4) CO+OH=CO ₂ +H
C2 Reactions	(R 5) C ₂ H ₆ =C ₂ H ₄ +H ₂ (R 6) C ₂ H ₄ +OH=CH ₃ +CO+H ₂ (R 7) C ₂ H ₂ +O ₂ =2CO+H ₂	C2 Reactions	(R 5) 2CH ₃ =C ₂ H ₆ (R 6) C ₂ H ₆ =C ₂ H ₄ +H ₂ (R 7) C ₂ H ₄ +C ₂ H ₂ +H ₂
H-O Reactions	(R 8) H+OH=H ₂ O (R 9) 2H ₂ +O ₂ =2H+2OH (R10) 2H=H ₂	H-O Reactions	(R 8) H+O ₂ =O+OH (R 9) O+H ₂ =H+OH (R10) H+H ₂ O=OH+H ₂ (R11) H+OH=H ₂ O
HO ₂ -H ₂ O ₂ Reactions	(R11) HO ₂ +H=H ₂ +O ₂ (R12) H ₂ O ₂ +H=H ₂ +HO ₂	HO ₂ -H ₂ O ₂ Reactions	(R12) H+O ₂ =HO ₂ (R13) 2HO ₂ =H ₂ O ₂ +O ₂
NOx Reactions	(R13) N ₂ +O ₂ =2NO (R14) HCN+H+O ₂ =H ₂ +CO+NO (R15) NH ₃ +3H+H ₂ O=4H ₂ +NO (R16) HO ₂ +NO=OH+NO ₂ (R17) H ₂ +O ₂ +N ₂ =H+OH+N ₂ O	NOx Reactions	(R14) N ₂ +CH ₃ +O ₂ =HCN+NO+H ₂ O (R15) N ₂ +O=NO+N (R16) NO+HO ₂ +NO ₂ +OH

u_0 는 연료 및 산화제류의 유속, ρ_F , ρ_O 는 연료 및 산화제류의 밀도를 나타낸다.

ARM 의 비정상 거동을 고찰할 경우에도 연료 및 공기의 조성은 소염점 검토의 경우와 동일하게 하였다. 화염편방정식의 차분은 확산항에 대해서는 2 차 정확도의 중심 차분법을 적용하였으며, 시간적분은 1 차 정확도의 Euler 외재적(Explicit) 방법과 경직된 방정식을 푸는데 용이하게 개발된 CHEMKIN-II Package 의 DVODE Solver 를 이용한 내재적(Implicit) 방법을 병행 사용하였다. 정상해(Steady solution)를 얻는 과정에서 계산시간을 절감할 수 있도록 내재적 방법 및 외재적 방법의 두 가지를 이용하여 효율적으로 수행하였고, 최종 비정상 거동의 해석에는 DVODE 를 이용하여 내재적으로 처리하였다.

화염이 받는 비정상 교란을 모사하기 위해서 스퀴라 소산율인 χ 를 시간에 대해 Sine 파형으로 변동을 주었다. 계산에 이용된 $\chi(t)$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$\chi(t) = \chi_{mean} + \Delta\chi \sin(2\pi ft) \quad (4)$$

본 연구에서 χ 는 혼합분율 좌표상에서 일정하다

고 가정하였다. 또한 위의 정의식에서 χ_{mean} 은 15 로 하였으며, χ 값이 본 계산에 이용된 연료와 공기의 조성에 대해 얻어진 소염점 $\chi_q=29$ 에 이를 수 있도록 $\Delta\chi=14$ 로 하였다. 또한, 주파수(f)는 화염에 가해지는 교란의 주파수로서 200Hz 와 5kHz 의 두 조건에 대해 계산을 수행하였다.

2.3 반응기구의 선정

본 연구에서 고려한 반응기구는 GRI-Mech 3.0 (GRI-3.0-Full), Miller 와 Bowman 의 반응기구(MB-Full) 그리고, 이들을 바탕으로 축소된 ARM 을 이용하여 계산을 수행하였다. GRI-3.0-Full 은 53 개 화학종과 325 개의 가역반응으로 구성되어 있으며, MB-Full 은 46 개 224 개의 가역반응으로 구성되어 있다. 이 두 반응기구는 다른 자료^(3, 5)에 자세히 나와 있으므로 여기서는 지면 관계상 생략한다.

다음으로 ARM 을 언급하자면, GRI-3.0-Full 을 바탕으로 축소된 GRI-3.0-ARM 은 17 단계의 반응식과 21 개의 화학종으로 구성되어 있으며, MB-Full 로부터 축소된 MB-ARM 은 16 단계 반응식 및 20 개의 화학종으로 구성되어 있다. 이들 ARM 에 관한 자세한 내용은 Table 1 에 기술되어 있다.

참고로, 본 연구에서 사용된 MB-Full 은 원래의

Miller 와 Bowman 반응기구에서 C_3H_2 , C_4H_2 , C_2N_2 , C_3H_3 및 C_4H_3 5 개의 화학종과 이들이 관련된 반응식은 제외되었으며, 나머지 반응식들도 일부 침삭되었다. 침삭 수정된 MB-Full 은 Homma 등에 의해서 작성된 16 단계 MB-ARM 의 CHEMKIN 형식 CKWYP 서브루틴에서 역으로 추출하여 작성하였다.

3. 결과 및 검토

Fig. 1 은 FM 및 ARM 을 이용한 소염점 예측성능을 Sung 등의 실험결과⁽¹⁵⁾와 비교 도시한 것이다. 소염점 예측에는 GRI-3.0-Full, MB-Full 및 이들의 축소반응기구인 GRI-3.0-ARM 과 MB-ARM 을 이용하였다. 스트레인을(유속) 변화에 따른 최고 화염온도의 변화를 보면, 실험에서는 연료 및 공기속 노즐의 유속(u_q)이 77.5cm/s 에서 소염되는 것으로 보고되었으나, 그림에서 보는 것처럼 GRI-3.0-Full 은 소염점을 작게 예측하고 있으며 ($u_q=61$ cm/s), MB-Full 은 소염점을 너무 크게 예측하는 것($u_q=97$ cm/s)을 알 수 있다. 이 결과로부터, 소염점을 실험에서 얻은 값과 유사한 값을 갖도록 하기 위해서는 좀 더 적절한 반응기구를 선택하거나, 반응상수의 일부를 수정할 필요가 있음을 알 수 있다. 본 연구에서는 MB-Full 에서 CH_4 화염의 소염에 중요한 역할을 하는 것으로 알려진⁽¹⁷⁾ $CH_3+H(+M)=CH_4(+M)$ 의 반응상수를 Flanklach 등⁽¹⁸⁾이 제시한 값으로 대체하여 소염점 예측성능을 향상시켰다. 그림에서 보는 바와 같이 수정된 MB-Full(Modified-MB-Full)로 예측된 소염점($u_q=78$ cm/s)은 실험에서 얻어진 소염점을 매우 잘 예측

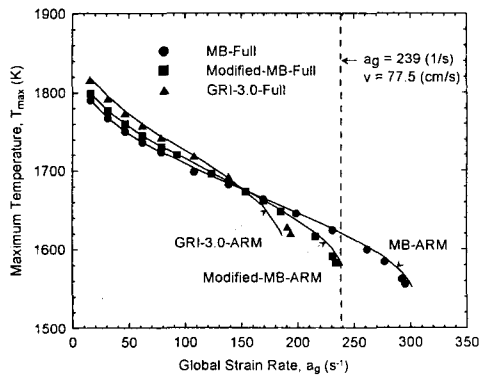
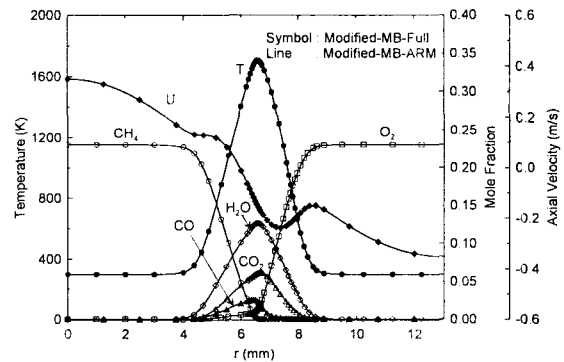


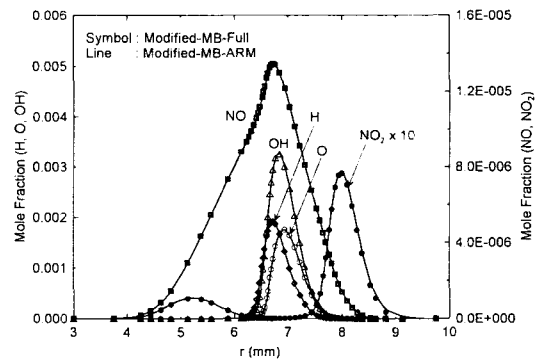
Fig. 1 Response of predicted maximum temperature to global strain rate(using OPPDIF code)

하는 것을 알 수 있다. 또한, Modified-MB-Full 을 근거로 축소된 Modified-MB-ARM 도 실험에서 얻은 소염점을 매우 잘 예측하는 것을 확인할 수 있다. 참고로, GRI-3.0-ARM 을 이용할 경우, OPPDIF 를 이용한 정상 화염 계산에서는 별다른 어려움이 없었지만, 비정상 화염에 대한 계산에서는 착화 과정에서 매우 경직되어 있음을 알 수 있었다. 즉, 본 연구의 계산 조건하에서 전진시간은 MB-ARM 의 경우에는 $\Delta t=0.25 \mu\text{sec}$, GRI-3.0-ARM 의 경우에는 $\Delta t=0.01 \mu\text{sec}$ 의 조건에서 안정된 해를 얻을 수 있었다. 매 시간 단계마다 소요되는 CPU 시간 (Pentium-III, 800MHz 기준)은 GRI-3.0-ARM 이 약 2.5sec/step 정도이며, MB-ARM 이 약 3.5sec/step 정도이므로 GRI-3.0-ARM 을 이용한 경우가 착화를 필요로 하는 수치계산에서는 계산시간이 많이 길어질 가능성이 존재한다. 따라서, 소염점 예측성능 향상을 위한 반응상수 수정 대상에서 GRI-3.0-ARM 은 제외하였다.

Fig. 2 (a), (b)는 OPPDIF 코드로 Modified-MB-ARM 을 이용하여 계산한 결과로서, Fig. 2 (a)는 온



(a) Flame temperature, major species concentrations and axial velocity



(b) Radicals and NOx (NO, NO₂)

Fig. 2 Comparison of results between full and augmented reduced mechanism(using OPPDIF code)

도, 주요 화학종의 농도 및 축방향 속도, Fig. 2 (b)는 주요 라디칼과 NO_x 분포를 나타낸다. 두 결과는 모두 스트레인이율 100(s⁻¹)일 경우에 해당된다. 먼저, Fig. 2 (a)에서 온도, 각 화학종 농도 및 유속 분포는 FM 과 ARM 의 결과가 매우 잘 일치하는 것을 확인할 수 있다. Fig. 2 (b)의 주요 라디칼(OH, O, H) 및 NO_x(NO, NO₂) 분포도 FM 과 ARM 의 결과가 거의 유사함을 알 수 있다. 이러한 경향은 스트레인이율이 변화하더라도 비슷한 수준으로 일치하는 것을 확인할 수 있었다. 이 두 그림의 결과로부터 Modified-MB-ARM 은 정상상태의 화염구조 예측 성능에서 FM 의 경향을 매우 잘 추종하는 것을 알 수 있다.

Fig. 3 ~ Fig. 9 의 그림들은 비정상 교란조건 하에서 Modified-MB-ARM 의 비정상 응답특성을 FM 의 결과와 비교한 결과들이다.

먼저, Fig. 3 은 이후의 그림에서 주어지는 각 물리량의 변화와 비교하기 위해서, 식 (4)로 표현된 스칼라 소산율의 변화를 시간과 주파수의 곱으로 표현되는 무차원 좌표상에 도시한 것이다. 일단, 무차원 좌표상의 동일한 점에서는 다른 주파수의 교란을 받더라도 동일한 주기의 상태에 있는 화염을 의미한다. 또한, 각 주파수에 대해서 무차원 좌표는 단순히 진행 시간을 의미하는 것으로 볼 수 있다. 본 연구에서는 $f=200\text{Hz}$ 및 5kHz 의 교란에 대해 각각 4 사이클의 범위에 대해 검토하였기 때문에 그림에서 무차원 좌표가 1.0, 2.0, 3.0 및 4.0 이 될 경우에 주파수와 상관없이 한 주기가 끝나는 점이 된다.

Fig. 4 에는 $f=200\text{Hz}$ 및 5kHz 의 경우에 대해 화염온도의 무차원 좌표상에서의 변동을 도시하였다. 우선, 시간 경과에 따른 화염온도의 거동을 Fig. 3 의 스칼라 소산율 변동과 비교해 보면, 화염온도

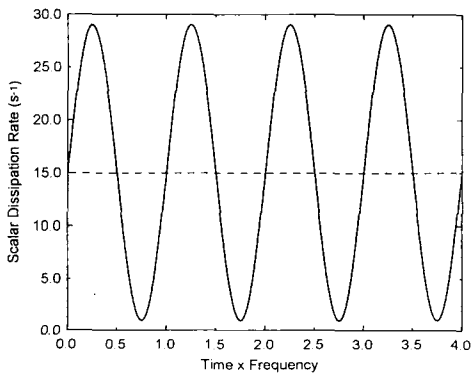


Fig. 3 Variation of scalar dissipation rate under the sinusoidal disturbance

극소점 위치는 스칼라 소산율의 극대점($\chi=29$) 위치보다 약간 이후에 위치하며, $f=5\text{kHz}$ 의 경우가 $f=200\text{Hz}$ 보다 더 이후에 위치하는 것을 알 수 있다. 또한, 정상상태의 소염 직전의 온도는 1580K 정도지만, $f=200\text{Hz}$ 의 극소점 온도는 1592K, $f=5\text{kHz}$ 의 경우는 1627~1630K 정도로서, 정상상태 소염점 온도와 차이를 보이며, 아직 소염은 발생하지 않았음을 알 수 있다. 스칼라 소산율이 가장 작은 값을 가질 경우에도 화염온도의 극대점 위치는 앞의 경우와 동일한 경향을 보인다. 이것은 화염에 가해지는 교란의 특성시간이 화염의 특성 화학반응시간 보다 짧게 되면 화염이 충분히 교란에 적응하지 못하게 되어 나타나는 비정상 효과에 기인하는 것으로, 주파수가 높은 5kHz 에서 현저하게 나타나며, 200Hz 의 경우에는 비정상 효과가 그다지 크지 않음을 알 수 있다. 이와 같은 이유로 인해, 화염온도의 변동폭도 $f=200\text{Hz}$ 인 경우가

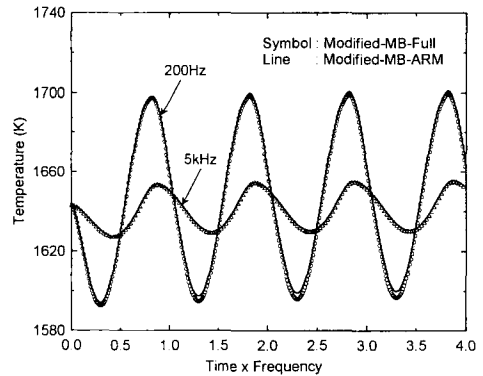


Fig. 4 Comparison of the maximum flame temperature profiles from full and augmented reduced mechanisms

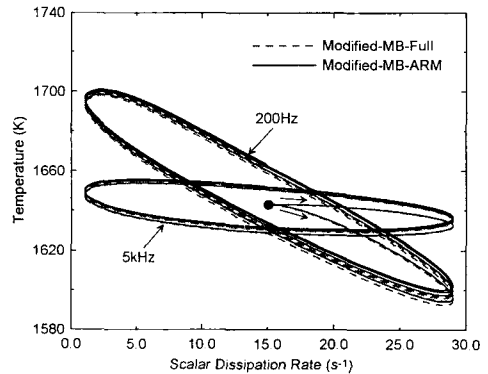


Fig. 5 Comparison of the maximum flame temperature profiles from full and augmented reduced mechanisms in scalar dissipation rate coordinate

$f=5\text{kHz}$ 인 경우보다 훨씬 크게 뒹을 알 수 있다.

다음으로, ARM의 비정상 응답특성을 FM의 결과와 비교해 보았을 때, 두 주파수의 교란에 대해, ARM의 결과는 FM을 이용한 결과와 위상(Phase)의 차이가 거의 없는 상태로 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 따라서, ARM을 이용한 화염온도의 전체적인 비정상 거동은 매우 양호하게 예측됨을 알 수 있다.

Fig. 5에는 Fig. 4와 동일한 결과에 대해, 화염온도를 스칼라 소산율의 변화에 대해 나타내었다. Fig. 4에서도 확인할 수 있었던 것처럼, 화염온도의 최저점은 가장 높은 스칼라 소산율값을 갖는 위치에 위치하지 않는 것을 알 수 있으며, 그 경향은 $f=5\text{kHz}$ 에서 더욱 두드러진다. 또한, ARM의 FM에 대한 추종성을 보면, $f=200\text{Hz}$ 보다 $f=5\text{kHz}$ 에서 더 양호한 것을 알 수 있다. 이것은 $f=200\text{Hz}$ 인 경우에는 교란의 특성시간이 크기 때문에 화학반응에 의한 기여가 $f=5\text{kHz}$ 보다 더 컸기 때문으로 판단된다.

Fig. 6에는 화염의 거동과 연관성이 깊은 OH 라디칼의 시간 경과에 따른 농도 최고값의 변화를 나타낸 것이다. Fig. 4의 온도변화와 마찬가지로, ARM으로 계산한 OH 농도의 비정상 응답특성은 FM의 결과를 매우 잘 추종하는 것을 알 수 있다. 그림에 도시하지는 않았지만, 그 외 라디칼들의 비정상 응답특성도 FM과 거의 유사한 것을 확인할 수 있었다. OH 농도의 비정상 교란에 대한 추종 경향을 살펴보면, $f=5\text{kHz}$ 인 경우에 OH 농도는 주어진 섭동과 유사한 Sine 파형의 응답특성을 보이고 있으나, $f=200\text{Hz}$ 인 경우의 응답특성은 단순한 Sine 파형이 아니며, 한 주기 내에 2개의 극대점과 1개의 극소점을 갖는 형태를 보이고 있음

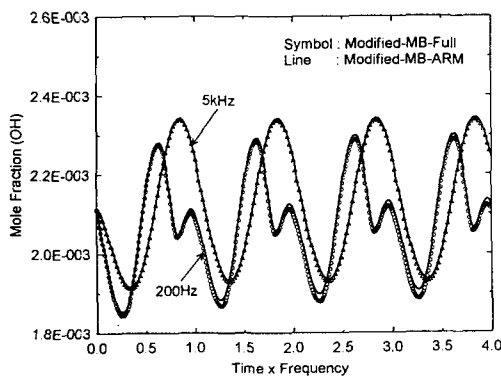


Fig. 6 Comparison of the maximum OH concentration profiles from full and augmented reduced mechanisms

을 알 수 있다. 이것은 앞에서도 언급한 바와 같이, OH의 생성 또는, 소멸과 관련된 특성 화학반응시간이 $f=200\text{Hz}$ 인 경우의 교란 특성시간과 비슷한 크기를 갖기 때문으로 추정되나, 이에 대한 구체적인 해석은 본 논문의 범위를 넘기 때문에 여기서는 다루지 않겠다.

Fig. 7은 화학종의 생성시간과 소멸시간의 차이가 커서 비정상 상태에서 특이한 거동을 보이는 것으로 알려진⁽¹⁹⁾ CO 농도 최고값의 시간변화에 대한 거동을 나타낸다. ARM으로 계산한 CO 농도 또한, 각 주파수 조건에 대해서 FM의 결과를 잘 추종하는 것을 알 수 있다. Fig. 6의 OH의 경우처럼 $f=5\text{kHz}$ 의 경우에는 Sine 파형의 거동을 보이지만, $f=200\text{Hz}$ 의 낮은 주파수 조건에서는 단순한 Sine 파의 응답형태는 아닌 것을 알 수 있다. 그림에는 없지만, 그 외의 주요 화학종(CO_2 , H_2O)의 비정상 거동은 두 주파수 조건에 대해서 단순한 Sine 파의 응답형태를 보이며, ARM과 FM의 결과

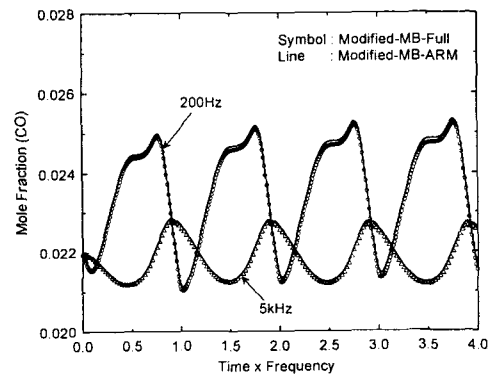


Fig. 7 Comparison of the maximum CO concentration profiles from full and augmented reduced mechanisms

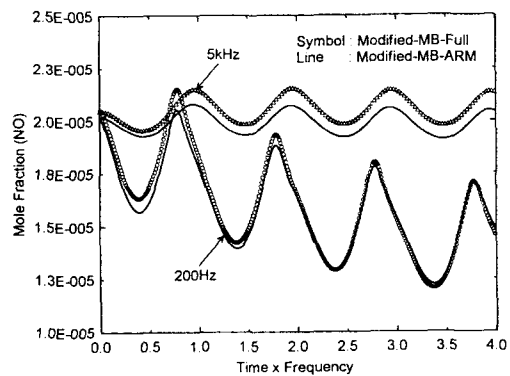


Fig. 8 Comparison of the maximum NO concentration profiles from full and augmented reduced mechanisms

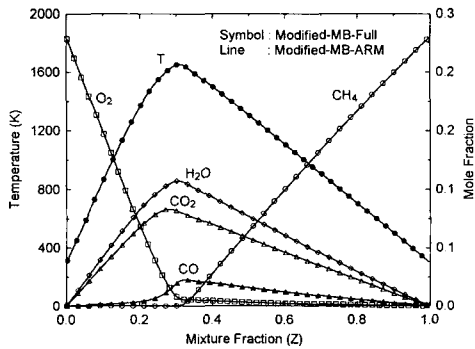
가 매우 잘 일치하는 것을 확인하였다.

Fig. 8 은 일반적으로 생성시간이 느리다고 알려진 NO 농도의 비정상 거동을 보여주고 있다. ARM 과 FM 에 의한 정상상태 결과의 차이로 인해 출발점에서의 절대적인 NO 농도 크기는 약간 차이를 보이고 있지만, 비정상 교란에 대해 두 결과간에 위상 차이가 보이지 않으므로 ARM 은 상세반응기구의 비정상 응답특성을 잘 추종하는 것을 알 수 있다. NO 농도의 전체적인 거동을 살펴보면, $f=5\text{kHz}$ 의 경우에는 비정상 효과가 매우 커서, 이 효과에 덜 민감하다고 알려진 NO 농도는 거의 동일한 진폭 내에서 변화하고 있지만, $f=200\text{Hz}$ 인 경우에는 비정상 효과가 작기 때문에 교란에 의해 농도값이 변동함과 동시에 그 평균적인 거동은 점차 감소하는 경향을 갖는 것으로 판단된다.

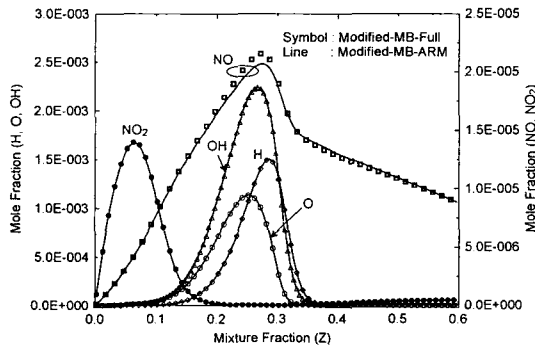
Fig. 4 ~ Fig. 8 에서는 온도 및 주요 화학종 농도 최고값의 비정상 교란에 대한 응답특성을 고찰하였다. 그러나, 주기적 교란을 받는 상황에서 농도

최고값의 응답특성 뿐만 아니라, 전체적인 화염구조 또한 ARM 의 결과가 상세반응기구의 결과와 잘 일치하는지 검토할 필요가 있다. 따라서, Fig. 9 (a), (b)에는 $f=5\text{kHz}$ 의 교란을 받는 경우, 두 주기가 경과했을 때의 ARM 과 FM 으로 계산한 전체적인 화염구조를 도시하였다. 그림의 결과들은 화염편방정식을 이용해 얻어진 것이므로 혼합분율 공간좌표상의 화염구조를 나타낸다. Fig. 9 (a)에서 ARM 으로 계산한 온도 및 주요 화학종의 농도는 FM 으로 계산한 결과와 매우 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 또한, Fig. 9 (b)에서 ARM 으로 계산한 주요 라디칼의 및 NO₂ 농도 또한 FM 의 결과와 잘 일치한다. NO 인 경우에는 농도의 최고점 근처에서 약간의 차이를 보이고는 있으나, 전체적으로 FM 을 잘 추종하고 있으므로, 주기적 교란을 받는 특정 시간의 화염구조도 ARM 에 의해서 매우 잘 예측되고 있음을 확인할 수 있다.

이상의 결과로부터, Modified-MB-ARM 으로 계산한 소염점이 실험과 잘 일치하는 등, 소염점 예측 성능이 우수하며, Modified-MB-FM 과 비정상 응답특성을 비교한 경우에도 우수한 추종 성능을 보임을 알 수 있었다. 따라서, 난류화염과 같이 국소소염과 와동에 의한 저, 고주파의 교란이 존재하는 복잡한 화염의 수치계산에서도 합리적인 예측이 가능할 것으로 판단되며, 계산시간을 줄일 수 있기 때문에 DNS 와 같이 많은 계산시간을 요구하는 수치계산에 적합할 것으로 사료된다. 또한, CH₄ 화염에 대해 개발된 다른 ARM 들도 반응상수에 있어서는 차이가 있지만, 거의 비슷한 화학종을 포함하고 있으며, 고려하는 반응식의 단계도 유사기 때문에 비정상 추종성능은 MB-ARM 과 큰 차이는 없을 것으로 보이며, 난류화염의 수치계산에 ARM 을 적용하는 것은 매우 유의할 것으로 판단된다.



(a) Flame temperature and major species concentrations



(b) Radical and NO_x concentrations

Fig. 9 Comparison of the flame structure in mixture fraction coordinate from full and augmented reduced mechanisms ($f=5\text{kHz}$)

4. 결론

GRI-Mech 3.0과 Miller와 Bowman의 상세반응기구 및 이를 바탕으로 작성된 ARM의 소염점 예측 성능과 비정상 응답특성에 대한 검토를 수행하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) GRI-Mech 3.0에서 축소된 17단계 ARM은 Miller와 Bowman의 반응기구에서 축소된 16단계 ARM보다 경직되어 있어서, 비정상 계산에서 착화시 전진시간(Δt)이 작아지므로 계산시간이 더 증가할 수 있음을 알았다.

(2) 16단계 MB-ARM은 실험에서 얻어진 소염점을 잘 예측하도록 반응상수의 일부가 수정되었으

며, 이 수정된 반응기구를 이용한 대향류화염에 대한 계산결과는 상세반응기구를 이용한 결과와 매우 잘 일치하는 것을 확인할 수 있었다.

(3) 수정된 16단계 MB-ARM을 이용하여 비정상 교란상태에서의 응답특성을 상세반응기구의 결과와 비교했을 경우, 화염온도, 주요 화학종, 라디칼 및 NO_x 등의 농도가 상세반응기구의 결과를 잘 추종하는 것을 확인하였다.

(4) 본 연구의 수정된 16단계 MB-ARM은 CH₄ 화염의 화염구조, 소염점 예측성능 및 비정상 추종성이 우수하면서 상세반응기구에 비해 계산시간을 절감시킬 수 있으므로 난류화염과 같이 복잡한 화염의 수치계산에 적합할 것으로 판단된다.

후 기

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

참고문헌

- (1) Simith, G. P., Goden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, W. C., Jr., Kissianski, V. and Qin, Z., http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- (2) Sung, C. J., Law, C. K. and Chen, J.-Y., 1998, "An Augmented Reduced Mechanism for Methane Oxidation with Comprehensive Global Parametric Validation," *Proceedings of Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 295~304.
- (3) Bowman, C. T., Hanson, R. K., Davidsion, D. F., Gardiner, W. C., Jr., Lissianski, V., Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M. and Goldenberg, M., http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- (4) Sung, C. J., Law, C. K. and Chen, J.-Y., 2001, "Augmented Reduced Mechanisms for NO Emission in Methane Oxidation," *Combustion and Flame*, Vol. 125, pp. 906~919.
- (5) Miller, J. A. and Bowman, C. T., 1989, "Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 15, pp. 287~228.
- (6) Homma, R. and Chen, J.-Y., 2001, "Reduced Mechanism for Prediction of NO₂ Formation and Ignition Delay in Methane-Air Combustion," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 123, pp. 303~307.
- (7) Boukhalfa, A. and Galp, I., 1988, "Time Scales and the Scalar Field in Turbulent Premixed Conical Flames," *Proceedings of Combustion Institute*, Vol. 22, pp. 755~761.
- (8) Chen, J.-Y., Kaiser, T. and Kollmann, W., 1993, "Transient Behavior of Simplified Reaction Mechanisms for Methane Nonpremixed Combustion," *Combustion Science and Technology*, Vol. 92, pp. 313~347.
- (9) Glarborg, P., Kee, R. J., Grcar, J. F. and Miller, J. A., 1992, "PSR : A Fortran Program for Modeling Well-Stirred Reactors," *SAND86-8209*.
- (10) Peters, N., 1984, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-premixed Turbulent Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 10, pp. 319~339.
- (11) Chen, J.-Y., 1997, "Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modelling of Turbulent Combustion," Workshop on Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics, CERMICS-ENPC Cite Descartes - Champus sur Marne, France, September 2nd, pp. 1~25.
- (12) Lutz, A. E., Kee, R. J., Grcar, J. F. and Rupley, F. M., 1997, "OPPDIF : A Fortran Program for Computing Opposed-Flow Diffusion Flames," *SAND96-8243*.
- (13) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., 1989, "Chemkin-II : A Fortran Chemical Kinetic Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," *Sandia Report*, SAND89-8009B.
- (14) 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," *Sandia Report*, SAND86-8246.
- (15) Sung, C. J., Liu, J. B. and Law, C. K., 1995, "Structural Response of Counterflow Diffusion Flames to Strain Rate Variations," *Combustion and Flame*, Vol. 102, pp. 481~492.
- (16) Seshadri, K. and Williams, F. A., 1978, "Laminar Flow between Parallel Plates with Injection of a Reactant at High Reynolds Number," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 21, pp. 251~253.
- (17) Katta, V. R., Hsu, K. Y. and Roquemore, W. M., 1998, "Local Extinction in an Unsteady Methane-Air Jet Diffusion Flame," *Proceedings of Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 1121~1129.
- (18) Frenklach, M., Wang, H., Goldenberg, M., Smith, G. P., Golden, D. M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Gardiner, W. C., and Lissianski, V., 1995, "GRI-Mech - An Optimized Detailed Chemical Reaction Mechanism for Methane Combustion." *GRI Technical Report No. GRI-95/0058*, November 1.
- (19) Im, H. G., Chen, J. H. and Chen, J.-Y., 1999, "Chemical Response of Methane/Air Diffusion Flames to Unsteady Strain Rate," *Combustion and Flame*, Vol. 118, pp. 204~212.