

조건 평균법에 의한 난류 예혼합 화염편 구조와 전파 속도 예측

박영도* · 허강열*†

*포항공과대학교

Conditional Flamelet Structure and Burning Velocity of Turbulent Premixed Flames

Yeongdo Park* and Kang Y. Huh*†

*Pohang University of Science and Technology

(Received 26 November 2021, Received in revised form 10 December 2021, Accepted 15 December 2021)

ABSTRACT

A governing equation is derived from the equation of the reaction progress variable for the conditional flamelet structure and the turbulent burning velocity in turbulent premixed combustion. Direct numerical simulations are conducted for constant density flames to validate the newly derived conditional flamelet equation. Good agreement is shown between the conditional flamelet equation and the flamelet structures and turbulent burning velocities from DNS. They are validated for laboratory flames as well by numerical solutions of the modified laminar premixed flame code in Cantera. Reasonable agreement is shown with a tuning constant for turbulent diffusivity to consider the uncertainty involved in each experimental setup and conditions in the references.

Key Words : Flamelet structure, Turbulent Burning Velocity, Turbulent Premixed Combustion, Direct Numerical Simulation, Cantera

1. 서 론

지난 수십 년간 난류 예혼합 화염의 화염편 구조와 (flamelet structure) 화염 전파 속도(turbulent burning velocity)를 모델링하기 위한 많은 시도들이 있었다. 난류 예혼합 화염 브러시는 일반적으로 난류에 의해 변형된 구조를 가지지만 충분히 얇아서 두께를 무시할 수 있는 층류 화염편들의 집합으로 생각되었다[1]. 그러한 가정에 따르면 Karlovitz 수(Ka)와 Markstein 수(Ma)에 의해 표현되는 스트레치(flame stretch)가 화염편 두께와 내부 구조를 변형시키는 중요한 인자가 된다. 하지만 스트레치 효과만으로는 작은 음수 값까지 포함하는 화염편 displacement speed의 넓은 변화 범위를[2,3] 설명하지 못하며, 화염편

두께의 영향을 고려해야만 그러한 변화를 설명할 수 있다. 화염편 두께는 스트레치와 화염편에 침투할 수 있는 작은 크기의 와류에 의해 영향을 받는다고 알려져 있으며[4] 또한 직접 수치 모사(direct numerical simulation, DNS) 결과를 통해 국소적인 곡률의 절대값이 커질수록 화염편이 두꺼워지는 경향이 있음을 보였다[5].

Kha 등은[6] 난류 예혼합 화염 브러시에서 층류 화염 두께의 영향, 혹은 분자 확산의 영향을 무시할 수 없는 선단부 영역(leading edge)의 존재를 확인하였다. Kim and Huh는[7] 화학반응과 밀도 변화가 거의 일어나지 않는 선단부 영역에서는 분자 확산과 난류 확산의 합이 반응 진행 변수의(reaction progress variable, c) 구배에 비례하며 화염편을 이용한 설명이 유효하지 않음을 보였다.

조건 평균의 한 형태인 CMC(conditional moment closure)법은 대류와 화학 반응, 스칼라 소산의 효과가 함께 작용하는 난류 확산 연소의 화염 구조를 파악하는 데 매우 효과적인 방법이다. 난류 확산 화염은 보존 스칼라인 혼합분율에 대한 방정식으로 나타내질 수 있으며 수학적

†Corresponding Author, huh@postech.ac.kr

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

으로 엄밀한 절차에 따라 혼합분율에 대한 조건 평균을 적용하여 조건부 화염면 구조에 대한 지배 방정식을 유도할 수 있다[8].

이와 같은 조건 평균 방법을 난류 예혼합 연소에 적용하려는 시도로서 예혼합 화염의 화염면 구조를 비보존 스칼라 반응 진행 변수 c 를 활용하여 기술하려는 시도들이 있었다[9-12]. 예혼합 연소에서의 조건부 스칼라 소산율은 스트레치가 없는 층류 화염과 거의 같다고 알려져 있으며 난류에 의해 두꺼워진 화염면에서 감소하는 경향이 있다[13]. 이에 따라 조건부 스칼라 소산율을 베타 확률 밀도 함수와 파브르 평균된 스칼라 소산율을 이용해 대수적으로 계산하는 닫힘 방법이 제안되었다[14]. 최근 측정에 의하면 화염면의 예열(preheat) 구간이 난류에 의해 두꺼워지지만 화학종 분포는 c 의 함수로서 대부분 경우 층류 화염과 거의 동일한 것으로 나타났다[10]. Lipatnikov와[15] Lee and Huh는[11] 2개의 델타 함수로써 나타낸 확률 밀도 함수와 미연 영역과 기연 영역을 분리하여 조건 평균을 질량 및 운동량 보존식에 적용하고 영역 경계면에서의 전달 현상에 대한 닫힘 관계를 사용해 2상(two-phase) 형태의 조건 평균 방정식을 유도하였다.

본 연구에서는 난류요동을 포함하는 반응 진행 변수 c 가 독립 조건 변수 c^* 와 같다는 조건으로 평균을 적용하여 통계적 정상 상태에서 평판형 일차원 난류 예혼합 화염의 조건부 화염면 구조와 전파 속도를 모델링하고 이를 DNS 결과와 문헌상의 실험 결과를 통해 검증하였다.

2. 이론적 배경

2.1 조건부 화염면 구조의 지배 방정식

반응 진행 변수 c 의 순간 수송 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D_m \nabla c) + \dot{w}_c \quad (1)$$

$\rho, D_m, \mathbf{v}, \dot{w}_c$ 는 각각 밀도, 분자 확산 계수, 속도 벡터, 화학 반응에 의한 c 생성율을 나타낸다. 식 (1)에 델타 함수 $\delta(c^* - c)$ 를 곱하고 단순 평균을 적용하면 도메인 내의 임의 위치 \mathbf{x} 를 통과하는 화염면 내부의 $c = c^*$ 인 위치에서 조건평균식을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial c}{\partial t} \middle| c^* \right\rangle + \langle u \rangle \left\langle \frac{\partial c}{\partial x} \middle| c^* \right\rangle \\ & = D_m^* \langle \nabla^2 c | c^* \rangle + \frac{1}{P(c^*)} \langle \mathbf{v}' \cdot (\nabla c \delta_c) \rangle \\ & + \langle \dot{w}_c | c^* \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

통계적 정상 상태에서 1-D 화염을 가정하면 시간 미분 항과 y, z 방향의 평균 속도 $\langle v \rangle, \langle w \rangle$ 는 0이 된다. 연쇄 법칙에 따른 다음의 미분 과정을 적용하였다.

$$\frac{\partial \delta_c}{\partial t} = - \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial \delta_c}{\partial c^*} \quad (3)$$

$$\nabla \delta_c = - \nabla c \frac{\partial \delta_c}{\partial c^*} \quad (4)$$

식 (2)에서 $\langle \partial c / \partial x | c^* \rangle = dc^* / dx^*$ 를 만족하는 x^* 를 정의하면 새로운 좌표 x^* 의 함수로서 화염면 구조 $c^*(x^*)$ 를 구할 수 있다. x^* 좌표에서 난류 화염 속도 S_T 로 진행되는 평균적인 화염면 구조에 대하여 DNS에서 검증된 다음의 모델을 도입한다.

$$\begin{aligned} & D_m^* \langle \nabla^2 c | c^* \rangle + \frac{1}{P(c^*)} \langle \mathbf{v}' \cdot (\nabla c \delta_c) \rangle \\ & = (D_m + D_t) \frac{\partial^2 c^*}{\partial x^{*2}} \end{aligned} \quad (5)$$

좌변 첫 번째 항은 분자 확산이고 두 번째 항은 난류 수송에 의한 선속(turbulent flux)이며 이들의 통계적 합을 확산항 형태로 나타낼 수 있다고 가정하였으며 DNS 결과를 통해 타당성을 검증할 것이다. 정상 상태에서 $\langle u \rangle$ 는 S_T 와 같아지므로 x^* 좌표에 대한 화염면 구조의 최종식을 다음과 같이 간단히 나타낼 수 있다.

$$S_T \frac{dc^*}{dx^*} = (D_t + D_m^*) \frac{d^2 c^*}{dx^{*2}} + \langle \dot{w}_c | c^* \rangle \quad (6)$$

2.2 다수의 화학종과 에너지 방정식을 고려한 난류 화염 속도 예측

조건부 화염면 구조에 대한 식 (6)은 층류 예혼합 화염의 지배 방정식과 같은 구조로서 분자 확산과 난류 확산이 더해진 총 확산 계수를 가진다. 실제 화염은 에너지와 복수의 화학종들이 서로 다른 분자 확산 계수를 가진다. 분자 확산 계수는 화학종에 따라 큰 차이가 있을 수 있으며 또한 온도에 의해서도 크게 변화한다. 식 (6)은 다음과 같이 실제 화염에 대한 식으로 확장될 수 있다.

$$S_T \frac{dY_i^*}{dx^*} = (D_t + D_i^*) \frac{d^2 Y_i^*}{dx^{*2}} + \langle \dot{w}_i | c^* \rangle \quad (7)$$

$$S_T \frac{dT^*}{dx^*} = (D_i + D_T^*) \frac{d^2 T^*}{dx^{*2}} + \langle \dot{w}_T | c^* \rangle \quad (8)$$

Y_i 는 i 번째 화학종의 질량분율이며 T 는 온도이다. 분자 확산 계수 D_i^* 와 D_T^* 는 c^* 혹은 온도의 함수이다. CHEMKIN[16] 혹은 Cantera[17] 등의 층류 예혼합 화염 코드를 활용하면 임의의 반응 메커니즘과 열역학 특성 및 수송 계수 등을 반영하여 식(7), (8)의 해를 구하고 전파 속도 S_T 를 쉽게 얻을 수 있다.

3. 연구 방법

3.1 조건부 화염면 방정식의 수치 해석

3.1.1 단일 반응 스칼라

식(1)에 식(6)의 확산 계수를 적용하고 1차원 도메인에 대해 시간 적분을 수행한다. 여기서는 후술할 직접 수치 모사의 유한차분(finite difference, FD) 코드를 1차원 문제에 대해 간략화하여 사용하였다. 동시에 수렴하는 해를 얻기 위해 화염의 위치를 정하고 화염이 위치에서 벗어나는 만큼 입구 속도를 조정해 준다. 이를 통해 정상 상태를 갖게 하는 입구 속도를 찾아 해가 수렴하게 된다.

난류 확산 계수 D_i^* 는 DNS 난류 화염의 선단부(Leading Edge)에서 $D_i = -\langle u'c' \rangle / \langle \partial c / \partial x \rangle$ 로 계산하였다. 이는 단순 평균된 c 의 난류 수송 선속을 단순 평균된 c 의 구배로 나눈 값이다.

3.1.2 복수 화학종과 온도를 고려한 화염면 방정식

조건부 화염면 방정식(7), (8)은 그 구조가 정상 상태의 1차원 층류 예혼합 화염의 지배 방정식과 동일하다. 정상 상태의 1차원 층류 예혼합 화염의 방정식은 고유치(eigenvalue) 문제가 되며 층류 예혼합 화염 계산에 많이 사용되는 CHEMKIN PREMIX나[16] Cantera에서[17] 사용하는 표준적인 해법은 정상 상태를 가정하고 $c = c^*$ 인 x 의 위치를 임의로 정하여 화염의 위치를 고정된 구속 조건식을 추가하여 입구 속도를 포함한 해를 Newton 법을 사용해 구하는 것이다. 이 연구에서는 Cantera를 사용하여 해를 구하였고 주어진 온도와 조성에서 화학종의 수송 계수를 계산하는 방법인 mixture-averaged 공식을[18] 구현한 Cantera의 C++ 클래스 Cantera::MixTransport를 수정하여 분자 확산 계수에 난류 확산 계수가 더해질 수 있도록 하였다. 열역학 및 수송 특성을 포함한 반응 메커니즘은 합성 가스의 경우 Davis 메커니즘을[19] 사용하였고

그 외의 탄화수소 연료에는 GRI 3.0 메커니즘을[20] 사용하였다.

3.2 직접 수치 모사(DNS)

3.2.1 DNS를 위한 수치 해법

균일한 등방성 난류를 생성하는 HIT3D 코드를[21,22] 이용하여 비압축성 난류 예혼합 화염의 DNS를 수행하였다. HIT3D는 pseudospectral 방법으로 속도와 압력 방정식을 적분하는 코드이며 여기에 반응 스칼라 식을 적분하는 유한차분 코드를 연결하여 전체 DNS 코드를 구성하였다. 유한차분 코드는 6차 정확도의 compact FD scheme으로[23] 공간차분을 계산하고 4차 정확도의 Runge-Kutta 방법으로[24] 시간 적분을 수행한다. 또한 HIT3D에는 결정론적 forcing 방법이[25] 새로 추가되어 난류의 세기가 시뮬레이션 시간 동안 감소하지 않도록 하였다. DNS 방법에 대한 추가적인 정보는 이전의 논문들에[7] 주어져 있다. 난류 화염 브러시가 계산 도메인에서 벗어나지 않고 고정된 위치에 머무르도록 평균 입구 속도는 평균 consumption speed와 같아지게 제어되었다. 반응 스칼라 식의 화학 반응 항은 Arrhenius 형태의 반응 계수를 사용한 비가역적 단분자 반응으로 계산하였다. 화학 반응에 의한 반응 진행 변수 c 의 생성물의 구체적인 형태는 다음과 같다[26].

$$\dot{w}_c = A(1-c) \exp\left(-\frac{\beta}{\alpha}\right) \exp\left[-\frac{\beta(1-c)}{1-\alpha(1-c)}\right] \quad (9)$$

A , α , β 는 각각 지수 앞 인자, 열 방출 파라미터, Zel'dovich 수로 $\alpha = (T_b - T_u) / T_b$, $\beta = E_a(T_b - T_u) / (RT_b^2)$ 이다.

3.2.2 DNS 결과 후처리

식(2)은 조건 평균된 항으로 구성되어 있어서 검증을 위해 조건 평균 통계량을 계산할 필요가 있다. 저장된 DNS 데이터에 계산에 사용된 것과 동일한 유한차분 방법을 적용하여 c 의 미분값을 구하고 조건 변수인 c^* 의 격자를 설정하여 각 격자 내부에 c 값이 포함되는 위치의 값들을 더하여 평균 내는 방법으로 모든 c^* 격자에 대해 조건 평균 통계량을 계산하였다.

본 연구에서 수행한 x 방향으로 진행되는 통계적 정상 상태의 1-D 화염의 DNS 데이터에서 x 방향의 i 번째 격자 점 x_i 위치에서의 단순 평균은 다음과 같이 계산된다.

$$\langle \phi \rangle |_{x=x_i} = \frac{1}{N_y N_z N_t} \sum_{j,k,l} \phi(x_i, y_j, z_k, t_l) \quad (10)$$

i, j, k 는 각각 x, y, z 방향 격자의 번호이며 l 은 저장된 DNS 순간 solution field 데이터의 번호이다. N_y, N_z 는 y, z 방향의 격자 개수이고 N_t 는 저장된 DNS solution field의 개수이다. 유사하게 x_i 에서 조건 변수 c^* 의 격자의 m 번째 격자값과 같은 조건에 대한 조건 평균은 다음과 같이 계산된다.

$$\begin{aligned} \langle \phi | c = c_m^* \rangle |_{x=x_i} \\ = \frac{1}{N_{m,i}} \sum_{j,k,l} \phi(x_i, y_j, z_k, t_l) f_m(c(x_i, y_j, z_k, t_l)) \end{aligned} \quad (11)$$

함수 f_m 은 c^* 격자의 m 번째 격자에 포함되는 조건을 나타낸 것으로 다음과 같이 정의된다.

$$f_m(c) = \begin{cases} 1 & \text{if } c_m^* \leq c < c_{m+1}^* \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (12)$$

여기서 $N_{m,i}$ 는 $x = x_i$ 위치에서 조건을 만족하는 격자 점의 개수이고 다음과 같이 정의된다.

$$N_{m,i} = \sum_{j,k,l} f_m(c(x_i, y_j, z_k, t_l)) \quad (13)$$

4. 결 과

4.1 DNS 결과와의 비교

4.1.1 DNS 케이스 파라미터 구성

Fig. 1은 본 연구에서 계산된 모든 비압축성 고정 확산 계수 DNS 화염이 속하는 영역을 표시한 것이다. DNS 화염의 파라미터 값은 Table 1~3에서 찾을 수 있다. Table 2에 F1~8의 파라미터 값이, Table 3에 F10~F13의 파라미터 값이 열거되어 있으며 기호의 의미는 Table 1에 정리되어 있다. F1, F8을 제외한 대부분 케이스가 thickened-wrinkled flame 영역에 있으며 F1, F8은 wrinkled flamelet 영역에 있다.

DNS 케이스의 파라미터 구성은 F12, F13을 제외하면 F4를 기준으로 단일 파라미터 변화를 가지도록 구성되었다. 구체적인 파라미터를 살펴보면 F1, F2, F3, F4은 난류 강도가 변화하는 집합이다. 그리고 F4와 F8은 층류 화염 특성이 다르게 구성되었고 F4와 F10은 적분 길이 스케일

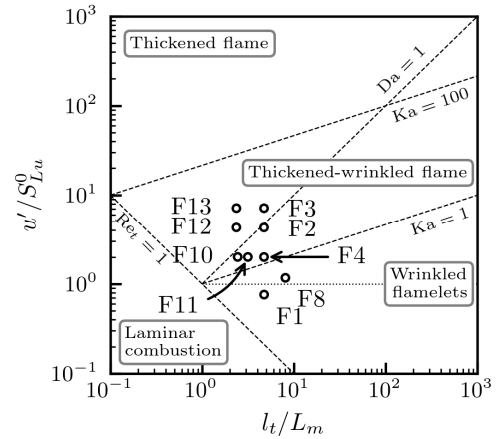


Fig. 1. DNS cases in the turbulent premixed combustion regime map by Peters [4].

Table 1. List of the parameters specifying DNS case characteristics

| Symbol | Input Parameters |
|------------|--|
| S_{Lu}^0 | Unstretched laminar flame speed (cm/s) |
| L_m | Laminar flamelet thickness |
| Da | Damköhler number |
| Ka | Karlovitz number |
| u' | Turbulence intensity (cm/s) |
| l_t | Integral length scale (cm) |
| Re_t | Turbulent Reynolds number, |
| D_m | Molecular diffusivity (cm ² /s) |
| ν | Kinematic viscosity (cm ² /s) |

Table 2. DNS case specifications for F1~F5

| Parameter | Case | | | | |
|------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| | F1 | F2 | F3 | F4 | F8 |
| S_{Lu}^0 | 0.210 | 0.210 | 0.210 | 0.210 | 0.359 |
| L_m | 0.127 | 0.127 | 0.127 | 0.127 | 0.0743 |
| Da | 6.2 | 1.1 | 0.66 | 2.4 | 6.9 |
| Ka | 0.81 | 4.6 | 7.6 | 2.2 | 0.74 |
| u' | 0.16 | 0.90 | 1.50 | 0.42 | 0.42 |
| l_t | 0.60 | 0.60 | 0.60 | 0.60 | 0.60 |
| Re_t | 4.8 | 27 | 45 | 13 | 13 |
| D_m | 0.0267 | 0.0267 | 0.0267 | 0.0267 | 0.0267 |
| ν | 0.020 | 0.020 | 0.020 | 0.020 | 0.020 |

Table 3. DNS case specifications for F10~F13

| Parameter | Case | | | |
|------------|--------|--------|--------|--------|
| | F10 | F11 | F12 | F13 |
| S_{La}^0 | 0.210 | 0.210 | 0.210 | 0.210 |
| L_m | 0.127 | 0.190 | 0.254 | 0.254 |
| Da | 1.2 | 1.6 | 0.55 | 0.33 |
| Ka | 4.1 | 3.1 | 9.1 | 15 |
| u' | 0.42 | 0.42 | 0.90 | 1.50 |
| l_t | 0.30 | 0.60 | 0.60 | 0.60 |
| Re_t | 6.5 | 8.4 | 13.5 | 22.5 |
| D_m | 0.0267 | 0.0400 | 0.0533 | 0.0533 |
| ν | 0.020 | 0.030 | 0.040 | 0.040 |

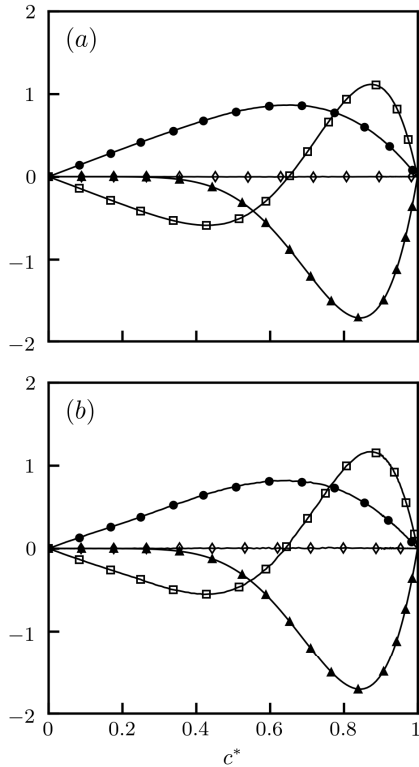


Fig. 2. Balance of Eq. (2) for (a) F1 and (b) F2 DNS cases.

의 차이를 보인다. F4와 F11을 비교하면 층류 화염의 두께만이 다르다. F12와 F13은 각각 F2와 F3과 같은 난류 특성에서 층류 화염의 두께가 2배인 케이스이다.

4.1.2 DNS를 이용한 검증 결과

식 (2)의 밸런스와 (6)에서 사용된 모델의 검증을 위해 DNS 데이터에서 조건 평균 통계량을 계산하여 식 (2)의 각 항들을 계산하였다. 또한 화염면 방정식의 해로부터 방정식 (6)의 확산 항을 계산하였다. 얻어진 결과를 Fig. 2와 Fig. 3에 c^* 에 대한 선도로 나타내었다. Fig. 2과 Fig. 3의 (a)는 F1 케이스에 해당하고 (b)는 F2 케이스에 해당한다. Fig. 2에서 식 (2)의 밸런스가 두 DNS 케이스에서 모두 잘 맞는 것을 확인할 수 있다.

Fig 3은 식 (2)의 분자 확산항과 난류 수송항의 합과 그에 대한 모델인 식 (6)의 확산항을 함께 나타낸 것이다. 난류가 강해짐에 따라 조금의 차이는 생기지만 두 케이스 모두 잘 일치하는 것을 알 수 있다.

Fig. 4는 모든 DNS 케이스의 난류 화염 속도와 화염면 방정식의 해에서 구해진 난류 화염 속도를 비교한 것이다.

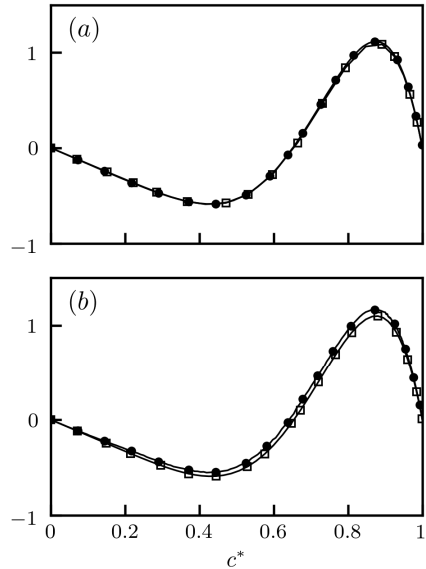


Fig. 3. Comparison of diffusive transport in Eq. (2) and its model in Eq. (6) for DNS cases (a) F1 and (b) F2.

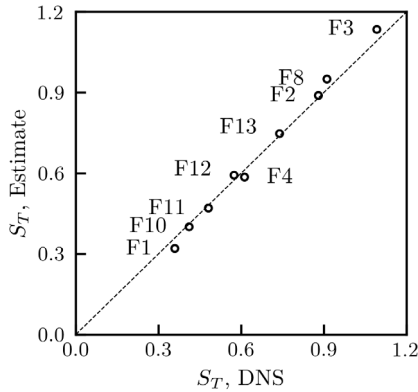


Fig. 4. S_T estimations by solving conditional flamelet equation are compared with S_T of DNS cases.

모든 케이스에서 예측값이 DNS 결과와 잘 일치하는 것을 확인할 수 있다.

4.2 실험 결과와의 비교

Table 4는 식 (7)과 (8)을 검증하기 위해 선정된 실험 케이스들의 화염 파라미터를 나열한 것이다. 4개의 문헌에서[3, 27-29] 난류 화염 속도 측정 데이터가 수집되었다. Table 4의 각 행의 파라미터를 가지는 화염에 대해서 난류 강도에 따른 난류 화염 속도가 측정되었다. 난류 강도의 범위는 출처에 따라 상이하다. 같은 출처에서 가져온 데이터의 파라미터는 연속된 번호를 가진다. 1-5는 Aldredge et al.[27], 6-8은 Kido et al.[3], 9-13은 Wang et al.[28], 17-21은 Kobayashi et al.[29]이다.

Aldredge et al.은[27] 역방향으로 회전하는 실린더로 구성된 Taylor-Couette 유동 기구를 이용해 메탄-공기 화염의 난류 화염 속도를 측정하였다. 적분 길이 스케일을 실린더 사이의 거리의 절반인 0.55cm로 고정한 채로 1.05m/s까지 난류 강도를 늘려가며 난류 화염 속도를 측정하였다.

Kido et al.은[3] 구형의 연소실 내부에서 자라는 메탄-질소-산소 화염의 난류 화염 속도를 측정하였다. Kido et al.은 당량비를 0.7, 0.9, 0.98로 달리하되 동일한 15cm/s의 층류 화염 속도를 가지도록 혼합기체의 질소 혼합비를 정하고 각각의 혼합기체에 대해 난류 강도를 증가시키며 실험을 수행하였다.

Wang et al.은[28] 최대 1.0 MPa까지 범위로 압력을 달리하며 합성 가스-CO₂-공기 그리고 메탄-공기 Bunsen 화염의 난류 화염 속도를 측정하였다. 합성 가스 혼합기체의 수소 함유량은 20%, 35%이고 이산화탄소 함유량은

Table 4. Flame parameters of experimental cases to validate the extended conditional flamelet equations (7) and (8)

| # | Fuel | ϕ | P, MPa | S_{Lu}^0 , cm/s | δ_f , mm | L_e , cm |
|----|-----------------|--------|--------|-------------------|-----------------|------------|
| 1 | CH4 | 0.8 | 0.1 | 14.1 | 53.8 | 0.55 |
| 2 | CH4 | 0.9 | 0.1 | 18 | 47.4 | 0.55 |
| 3 | CH4 | 1 | 0.1 | 33.6 | 44.6 | 0.55 |
| 4 | CH4 | 1.1 | 0.1 | 48.1 | 43.6 | 0.55 |
| 5 | CH4 | 1.2 | 0.1 | 46.1 | 47.2 | 0.55 |
| 6 | CH4 | 0.7 | 0.1 | 15.1 | 71.9 | 0.3 |
| 7 | CH4 | 0.9 | 0.1 | 14.9 | 76.2 | 0.3 |
| 8 | CH4 | 0.98 | 0.1 | 14.8 | 79.7 | 0.3 |
| 9 | 35%H2 /65%CO | 0.7 | 0.5 | 18.4 | 17.9 | 2 |
| 10 | 35%H2 /65%CO | 0.7 | 1 | 13.5 | 11.4 | 2 |
| 11 | 20%H2 /80%CO | 0.7 | 0.5 | 15.3 | 21.2 | 2 |
| 12 | CH4 | 1 | 0.5 | 18.8 | 15.5 | 2 |
| 13 | CH4 | 1 | 1 | 13.4 | 10.6 | 2 |
| 14 | C2H4 | 0.7 | 0.1 | 35.7 | 34.5 | 2 |
| 15 | C2H4 | 0.7 | 0.5 | 24.3 | 10.6 | 2 |
| 16 | C2H4 | 0.7 | 1 | 20.3 | 6.9 | 2 |
| 17 | C3H8 | 0.9 | 0.1 | 39.5 | 36.5 | 2 |
| 18 | C3H8 | 0.9 | 0.5 | 26 | 10.9 | 2 |

30%이다.

Kobayashi et al.은[29] C₂H₄-공기와 C₃H₈-공기 Bunsen 화염의 난류 화염 속도를 측정하였다. 두 혼합 기체의 당량비는 각각 0.7, 0.9이다. 0.1MPa ~ 1MPa 범위의 압력에서 실험이 수행되었다.

식 (7)과 (8)의 해를 Cantera를 이용해 구하면 난류 확산 계수에 대한 S_T 를 직접 얻을 수 있다. 난류 확산 계수 D_t 는 다음과 같이 특성 길이 scale l^* 과 특성 속도 scale u^* 의 곱으로 나타낼 수 있다.

$$D_t = l^* u^* \quad (14)$$

특성 길이 scale이 실험 장치의 형상과 크기에 의해 정해지고 특성 속도 scale이 난류 강도에 비례한다고 가정하면 난류 강도와 난류 확산 계수 사이에 다음의 관계가 성립한다.

$$D_t = C u' \quad (15)$$

여기서 C 는 각 실험 setup에 대하여 예측값과 측정값이 가장 잘 일치하도록 하는 상수로서 결정하였다.

각 실험 데이터 출처에 대해서 Cantera 계산에서 얻은 D_i 에 대한 S_T 변화 곡선과 난류 강도에 대한 S_T 측정 결과를 나타낸 그림 (a)와 Cantera의 예측값과 실험 측정값을 비교한 (b)로 결과를 나타내었다.

Fig. 5, 6, 7, 8 공통으로 Cantera 계산 결과를 나타내는 선의 모양은 아래에서부터 $-$, \cdots , $- \cdot - \cdot -$, $- \cdot \cdot - \cdot \cdot -$ 순으로 그려져 있으며 각 선 모양에 대응하는 측정값의 표시 기호는 순서대로 \triangle , \circ , \square , \diamond , ∇ 이다. 각 그림에는 선 모양과 표시 기호의 종류가 대응하는 Table 3의 화염 번호와 함께 범례로 포함되어 있다.

Fig. 5는 Aldredge et al.의[27] 데이터에서 가져온 당량비를 달리하는 압력 0.1MPa의 메탄-공기 화염 5 케이스의 (Table 4의 1-5 화염) 난류 화염 속도 측정값과 화염면 방정식 (7), (8)의 예측값을 비교하고 있다. 당량비는 0.8에서

1.2까지 변화한다. 희박 화염의 경우는 예측과 다소 차이를 보이지만 당량비 1 이상의 화염들은 비교적 예측된 경향과 일치하는 것으로 보인다.

Fig. 6은 Kido et al.의[3] 데이터에서 가져온 3가지의 질소로 희석된 메탄-공기 화염에 대한 결과이다(Table 4의 6-8 화염). 0.7, 0.9, 0.98 3가지의 당량비로 혼합된 메탄-공기 혼합기체들이 15cm/s의 층류 화염 속도를 가지도록 질소로 희석되어 사용되었다. 난류 강도가 증가함에 따라 측정값의 변화가 예측값과는 전혀 다른 경향으로 바뀌는 것을 볼 수 있다. Kido et al.에서 실험한 화염은 대량의 질소가 혼합되어 다른 실험의 화염에 비해 층류 화염 두께가 매우 크다. 이러한 점으로 인해 다른 실험의 화염들보다 낮은 난류 강도에서 다른 regime으로 천이하게 된 것이 그러한 차이의 원인일 수 있다.

Fig. 7은 Wang et al.의[28] 데이터에서 가져온 당량비를 달리하는, 압력 0.1MPa의 메탄-공기 화염 5 케이스의

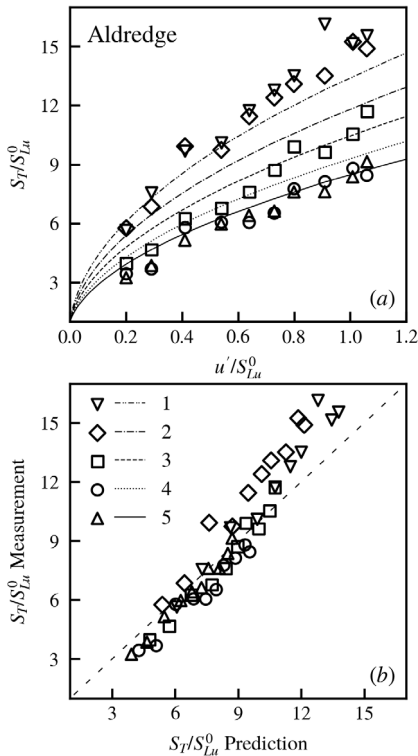


Fig. 5. (a) S_T/S_{Lu}^0 predictions by Equations (7) and (8) and S_T/S_{Lu}^0 measurements with respect to turbulent intensity for flames in Aldredge et al. [27], (b) S_T/S_{Lu}^0 predictions vs. S_T/S_{Lu}^0 measurements.

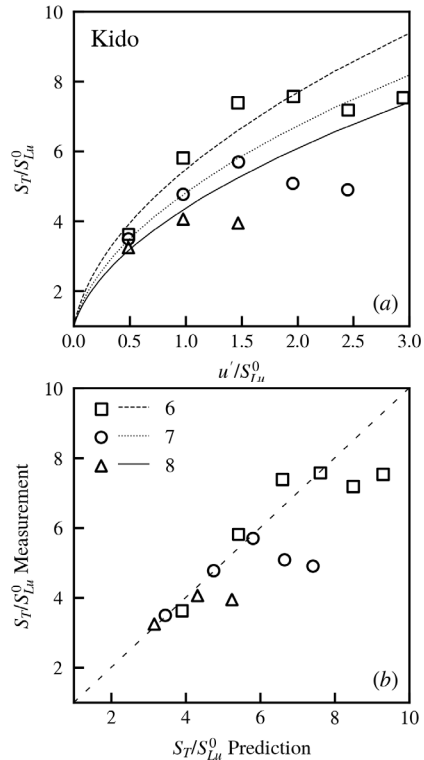


Fig. 6. (a) S_T/S_{Lu}^0 predictions by Equations (7) and (8) and S_T/S_{Lu}^0 measurements with respect to turbulent intensity for flames in Kido et al. [3], (b) S_T/S_{Lu}^0 predictions vs. S_T/S_{Lu}^0 measurements.

(Table 4의 9-13 화염) 난류 화염 속도 측정값과 화염편 방정식 (7), (8)의 예측값을 비교하고 있다. 당량비는 0.8에서 1.2까지 변화한다.

Fig. 8은 Kobayashi et al.의[29] 데이터에서 가져온 압력을 달리하는 C₂H₄-공기 화염 3 케이스(Table 4의 14-16 화염) C₃H₈-공기 화염 2 케이스의(Table 4의 17-18 화염) 난류 화염 속도 측정값과 화염편 방정식 (7), (8)의 예측값을 비교하고 있다. C₂H₄-공기 화염의 경우 당량비 0.7의 혼합 기체를 압력 0.1 MPa, 0.5 MPa, 1 MPa에서 실험하였고 C₃H₈-공기 화염의 경우는 당량비 0.9의 혼합 기체를 압력 0.1 MPa, 0.5 MPa에서 실험하였다.

Fig. 9는 Fig. 5, 6, 7, 8의 (b)에 나타난 측정값과 예측값 비교 지점을 한데 모아 그린 것이다. 4개의 출처에서 가져온 127개의 측정값이 그림에 표시되어 있다. 각 그림에서 특별히 언급한 측정값들을 제외하면 전반적으로 20% 오차 범위 안에 있는 것으로 보인다.

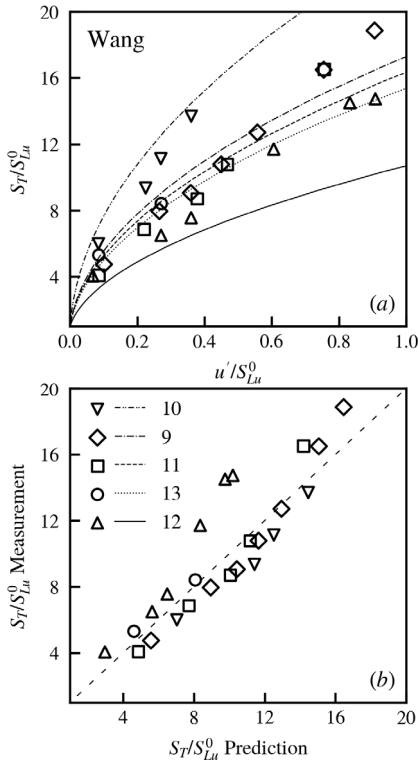


Fig. 7. (a) S_T/S_{Lu}^0 predictions by Equations (7) and (8) and S_T/S_{Lu}^0 measurements with respect to turbulent intensity for flames in Wang et al. [28], (b) S_T/S_{Lu}^0 predictions vs. S_T/S_{Lu}^0 measurements.

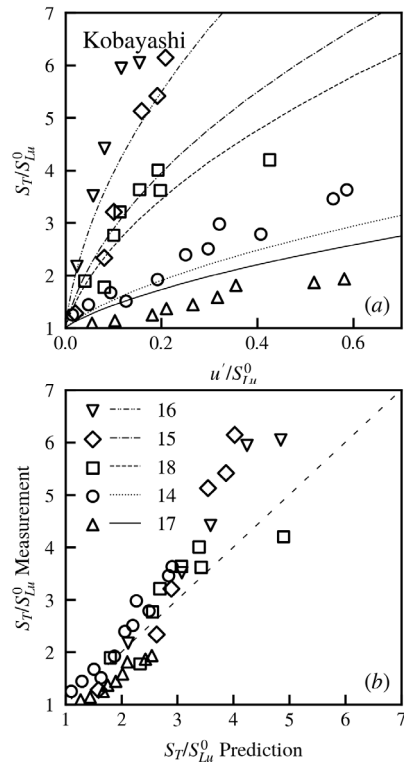


Fig. 8. (a) S_T/S_{Lu}^0 predictions by Equations (7) and (8) and S_T/S_{Lu}^0 measurements with respect to turbulent intensity for flames in Kobayashi et al. [29], (b) S_T/S_{Lu}^0 predictions vs. S_T/S_{Lu}^0 measurements.

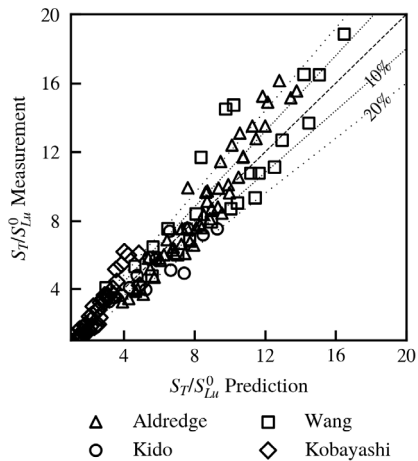


Fig. 9. S_T/S_{Lu}^0 predictions vs. S_T/S_{Lu}^0 measurements for all flames in Aldredge et al. [27], Kido et al. [3], Wang et al. [28] and Kobayashi et al. [29].

5. 결론

- (1) 반응 진행 변수의 수송 방정식에 조건 평균법을 적용하여 난류 예혼합 화염의 화염면 구조와 화염 전파 속도 S_T 에 대한 새로운 조건 평균 수송 방정식을 유도하였다. 유도된 수송 방정식에 확산 모델을 도입하여 층류 예혼합 화염의 방정식과 같은 형태의 통계적 1차원 방정식을 유도하였다.
- (2) DNS 결과를 활용하여 조건 평균된 방정식과 모델링된 화염면 방정식의 밸런스를 검증하였으며 조건 평균된 항과 모델링한 확산항의 크기를 각각 비교하여 잘 일치하는 것을 확인하였다. 그를 통해 새로이 제시된 1차원 방정식 (6)의 타당성을 검증하였다.
- (3) 반응 진행 변수에 대한 화염면 방정식을 확장하여 실제적인 화학 반응 메커니즘과 열역학 및 수송 특성을 반영하여 실제 화염의 난류 화염 속도를 예측할 수 있음을 확인하였다. 실험조건의 불확실성을 고려하기 위해 각 실험 기구에 공통되는 임의 상수를 도입하여 예측값과 측정값을 비교적 정확하게 일치시킬 수 있었으며 타당한 정성적 경향을 재현할 수 있었다.

후 기

본 연구는 2021년도 한국연구재단 중견연구과제의 지원 (No. 2017R1A2B3009756)으로 수행되었습니다.

References

- [1] S.B. Pope, Turbulent Premixed Flames, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 19 (1987) 237-270.
- [2] J.H. Chen, H.G. Im, Correlation of flame speed with stretch in turbulent premixed methane/air flames, *Symp. (Int.) Combust.* 27 (1998) 819-826.
- [3] H. Kido, M. Nakahara, K. Nakashima, J. Hashimoto, Influence of local flame displacement velocity on turbulent burning velocity, *Proc. Combust. Inst.* 29 (2002) 1855-1861.
- [4] N. Peters, The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence, *J. Fluid Mech.* 384 (1999) 107-132.
- [5] J. Kwon, Y. Park, K.Y. Huh, Flamelet characteristics at the leading edge and through the flame brush of statistically steady incompressible turbulent premixed flames, *Combust. Flame.* 164 (2016) 85-98.
- [6] K.Q.N. Kha, V. Robin, A. Mura, M. Champion, Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames, *J. Fluid Mech.* 787 (2016) 116-147.
- [7] D. Kim, K.Y. Huh, Conditional relationships for the layered brush structure of turbulent premixed flames in statistical steadiness, *Combust. Flame.* 204 (2019) 103-115.
- [8] A.Y. Klimenko, R.W. Bilger, Conditional moment closure for turbulent combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.* 25 (1999) 595-687.
- [9] S. Amzin, N. Swaminathan, J.W. Rogerson, J.H. Kent, Conditional moment closure for turbulent premixed flames, *Combust. Sci. Technol.* 184 (2012) 1743-1767.
- [10] M.M. Kamal, R.S. Barlow, S. Hochgreb, Conditional analysis of turbulent premixed and stratified flames on local equivalence ratio and progress of reaction, *Combust. Flame.* 162 (2015) 3896-3913.
- [11] E. Lee, K.Y. Huh, Zone conditional modeling of premixed turbulent flames at a high Damköhler number, *Combust. Flame.* 138 (2004) 211-224.
- [12] N. Chakraborty, A.N. Lipatnikov, Statistics of Conditional Fluid Velocity in the Corrugated Flamelets Regime of Turbulent Premixed Combustion: A Direct Numerical Simulation Study, *J. Combust.* 2011 (2011) 1-13.
- [13] S. Chaudhuri, H. Kolla, H.L. Dave, E.R. Hawkes, J.H. Chen, C.K. Law, Flame thickness and conditional scalar dissipation rate in a premixed temporal turbulent reacting jet, *Combust. Flame.* 184 (2017) 273-285.
- [14] H. Kolla, J.W. Rogerson, N. Chakraborty, N. Swaminathan, Scalar dissipation rate modeling and its validation, *Combust. Sci. Technol.* 181 (2009) 518-535.
- [15] A. Lipatnikov, *Fundamentals of Premixed Turbulent Combustion*, CRC Press, 2012.
- [16] R.J. Kee, J. Warnatz, J.A. Miller, Fortran computer-code package for the evaluation of gas-phase viscosities, conductivities, and diffusion coefficients. [CHEMKIN], United States, 1983.
- [17] D.G. Goodwin, R.L. Speth, H.K. Moffat, B.W. Weber, Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes, (2021).
- [18] R.J. Kee, M.E. Coltrin, P. Glarborg, *Chemically Reacting Flow*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken,

- NJ, USA, 2003.
- [19] S.G. Davis, A. V. Joshi, H. Wang, F. Egolfopoulos, An optimized kinetic model of H₂/CO combustion, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005).
- [20] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, J. Gardiner, William C., V. V. Lissianski, Z. Qin, *GRI-Mech 3.0*, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [21] S.G. Chumakov, Scaling properties of subgrid-scale energy dissipation, *Phys. Fluids.* 19 (2007).
- [22] S.G. Chumakov, A priori study of subgrid-scale flux of a passive scalar in isotropic homogeneous turbulence, *Phys. Rev. E.* 78 (2008).
- [23] S.K. Lele, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *J. Comput. Phys.* 103 (1992) 16-42.
- [24] C.A. Kennedy, M.H. Carpenter, R.M. Lewis, Low-storage, explicit Runge-Kutta schemes for the compressible Navier-Stokes equations, *Appl. Numer. Math.* 35 (2000) 177-219.
- [25] L. Guichard, J. Réveillon, R. Hauguel, Direct Numerical Simulation of Statistically Stationary One- and Two-Phase Turbulent Combustion: A Turbulent Injection Procedure, *Flow, Turbul. Combust. Former. Applied Sci. Res.* 73 (2004) 133-167.
- [26] F.A. Williams, *Combustion Theory*, CRC Press, 2018.
- [27] R.C. Aldredge, V. Vaezi, P.D. Ronney, Premixed-flame propagation in turbulent Taylor-Couette flow, *Combust. Flame.* 115 (1998) 395-405.
- [28] J. Wang, M. Zhang, Y. Xie, Z. Huang, T. Kudo, H. Kobayashi, Correlation of turbulent burning velocity for syngas/air mixtures at high pressure up to 1.0 MPa, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 50 (2013) 90-96.
- [29] H. Kobayashi, Y. Kawabata, K. Maruta, Experimental study on general correlation of turbulent burning velocity at high pressure, *Symp. (Int.) Combust.* 27 (1998) 941-948.

저자정보

박영도

포항공과대학교 기계공학과 통합과정이며, 관심분야는 층류 및 난류 화염 구조 해석이다.



허강열

포항공과대학교 기계공학과 교수이며, 관심분야는 층류 및 난류 연소 해석 및 연소모델 개발이다.

