

열·유체 일반적 컴퓨터 프로그램의 연소과정 연구에의 응용

An Application of General-Purpose Computer Program in Heat Transfer and Fluid Flow to Combustion Process

이 재 현*
Jae-Heon Lee

1. 서 론

복잡한 연소과정의 예측을 위한 이론적인 연구는 Gosman, Spalding, Patankar 등의 수치해석 방법을 이용하여 진행된 것들이 많다. 현재 이 분야에 응용되는 일반적인 Program으로는 Boundary Layer Type의 방정식을 이용한 One-Dimensional Program (GENMIX 4, Revised GENMIX) 등이 있으나 Parabolic Type이므로 주방향에 수직된 방향으로 동일한 값이 2개 이상 존재할 수 있는 Elliptic 현상을 설명하기에는 어려움이 있다. 그러므로 비록 기억용량 (Computation Storage) 및 계산시간 (Running Time)에 불리한 점이 있기는 하나 Elliptic 상황을 해석해야만 할 경우가 있다.

본 해설은 Patankar의 Elliptic "SIMPLE" Program을 연소 해석과정에 이용되는 방법을 간단한 연소과정의 예로서 설명하는 것으로 연소과정의 연구보다도 Program의 응용성에 중점을 두었다. 따라서 실제의 물리적인 연소 mechanism에서 많은 가정을 도입하여 문제를 단순화 시켰으며 실제의 연소문제에 충분한 접근을 위해서는 turbulence-modeling과 radiation heat flux가 본 해설에 덧붙여져서 논의되어야 한다. 이에 관한 정보는 참고문헌 [1], [2]에서 얻을 수 있다.

2. 연소모델

원통 연소실은 직경 20cm이며 길이는 1m로서

수평으로 놓여 있으며 연소실 입구에서는 원통의 중심선을 따라 CH₄ gas가 공기-연료비 20으로 유지하면서 유입되며 그 주위로 연소용 선회 공기가 축방향속도 50m/s로 유입된다. 연소실 외벽의 냉각을 위하여 냉각용 공기가 20m/s로 외벽 주위로 유입된다. 그림 1에는 고려하는 모델을 표시하였다. 상세한 연소조건을 나열하면 아래와 같다.

- (1) 연소실 반경 : 20cm.
- (2) 연소실 길이 : 100cm.
- (3) 연소과정 : $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$.
- (4) 연료유입 : 연소실 입구에서 반경 2.5cm의 Tube 이용.
- (5) 연소용 공기유입 :
 - (a) 연소실 입구에서 내경 2.5cm, 외경 5cm인 증공원통 이용.
 - (b) x 방향 유입속도 ; 50m/s,
 - (c) Swirl 속도 ; x 방향 속도의 20%로서 원주방향의 속도성분만 갖는다.
- (6) 냉각공기유입 :
 - (a) 연소실 입구에서 내경 17.5cm, 외경 20cm인 증공원통 이용.
 - (b) x 방향 유입속도 ; 20m/s.
- (7) 공기연료비 : 20

3. 계산목적

상기 모델에 연소가 진행되어 정상 상태일 때 아래의 사항을 알고자 한다.

*한양대학교 공과대학

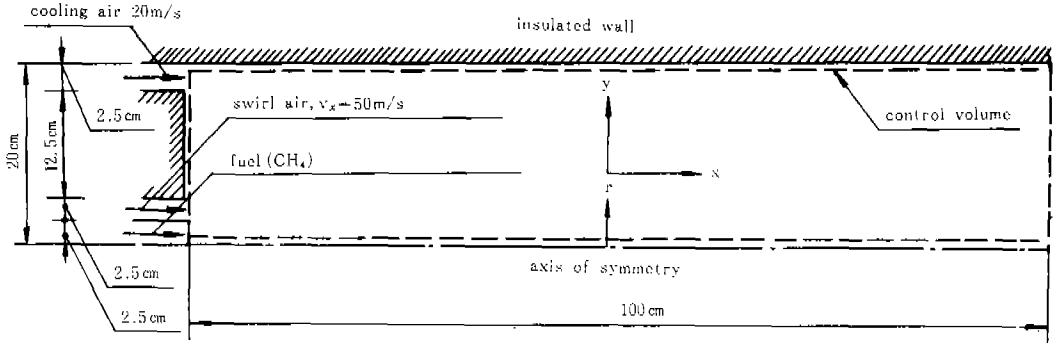


Fig. 1 Schematic diagram of combustion chamber

- (1) x 방향 속도분포
- (2) r 방향 속도분포
- (3) 각 화학성분의 분율분포
- (4) 온도분포
- (5) Swirl의 속도분포
- (6) 평균밀도 및 압력분포

4. 이론식 전개

본 Program은 직교좌표계, 원통좌표계 및 극좌표계에 적용되며 일반적인 종속변수 ϕ 에 대하여 밀도가 ρ , 속도가 v 일때 기본 방정식은 아래와 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j}) + S \dots (1)$$

응용되는 방정식이 운동량 방정식일 경우에는 Source Term인 S는 압력구배와 여러 힘의 합이며 압력구배항을 별도로 취급하며 연속방정식을 이용하여 압력을 수정하는 방법을 취한다. 기타 에너지방정식, 화학량 방정식 등에서의 S는 에너지 발생률, 화학량 증가율 등이 된다. Γ 는 일반적인 Diffusion계수를 나타낸다.

A. 운동량 방정식 (r 과 y 좌표는 같음)

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v u) &= - \frac{\partial p}{\partial x} \\ + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon_m \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \rho \epsilon_m \frac{\partial u}{\partial y}) &\dots (2) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v v)$$

$$\begin{aligned} &= - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon_m \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \rho \epsilon_m \frac{\partial v}{\partial y}) \\ &\frac{\rho \epsilon_m v}{r^2} + \rho \frac{v \theta^2}{r} \dots (3) \end{aligned}$$

여기서 u 는 x방향의 속도, v 는 r방향속도, ϵ_m 은 와확산계수 (eddy diffusivity)이며 $\rho \epsilon_m$ 은 $(10^{-1})[\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})]$ 이다. $v\theta$ 는 swirl의 원주방향 속도이며 $\rho v \theta^2 / r$ 은 $v\theta$ 에 의한 원심력을 나타낸다.

압력 p 는 "SIMPLE" (3)방법에 의해 결정되며 이때 압력수정방정식이 이용되며 이 방정식은 Program내부에서 계산되도록 되어 있다.

○초기조건 :

- ① v ; 전체구간에서 zero
- ② u ; $x=0$ 에서 zero, $y=20\text{cm}$ 에서 zero 및 이외의 구간에서 20m/sec

○경계조건 :

- ① u ; 냉각공기 입구속도 20m/sec, 연소용 공기 입구속도 50m/sec, 연료 입구속도 및 $x=100\text{cm}$ 에서의 출구 경계조건은 아래와 같다.

a) 연료 입구속도, $u(2,2)$:

$$\begin{aligned} u(2,2) &= \frac{u(2,3) * YCVR(3)}{YCVR(2) * ARFU} * RATIO \\ &+ \frac{u(2,M2) * YCVR(M2)}{YCVR(2) * ARFU} * RATIO \end{aligned}$$

여기서 YCVR (3), YCVR (2) 및 YCVR (M2)는 각각 연소용 공기, 연료 및 냉각용 공기가 도입되는 면적이며 원주방향의 각도는 1 rad이다. 또한, RATIO = $1/(W_{ru} * (0.232/W_{ox} + 0.768/W_{pr}))$ 로서 연료의 분자량에 대한 공기의 평균 분자량의 비율이네

공기연료비 (ARFU)를 이 비율로 나누면 공기연료 체적비가 된다.

b) 출구 경계조건 $u(L1, J)$:

$$u(L1, J) = u(L2, J) * FACTOR$$

여기서 FACTOR는 출구 직전의 속도 $u(L2, J)$ 를 이용하여 계산한 출구 직전의 질량유량과 입구의 질량유량과의 비율이며 이 FACTOR를 이용하면 입구와 출구의 질량 보존을 이룰 수 있다.

② v ; 초기조건을 그대로 이용

B. 화학량 방정식

연소과정은 $CH_4 + 2O_2 + 3.76(2N_2) = CO_2 + 2H_2O + 3.76(2N_2)$ 이며 잉여공기가 공급되므로 연소 생성물은 대부분 N_2 라고 보아도 무방하다. 따라서 연소과정을 아래와 같이 분수 있다. 즉,

연료+산소=연소 생성물

그러므로 연료의 질량분율(Mass Fraction) m_{fu} , 산소의 질량분율 m_{ox} 및 생성물의 질량분율 m_{pr} 의 합은 1이라 볼 수 있다. 즉,

$$m_{fu} + m_{ox} + m_{pr} = 1 \quad \dots\dots\dots(4)$$

가) m_{fu} 의 질량보존 방정식 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{fu}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u m_{fu}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v m_{fu}) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma \frac{\partial m_{fu}}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \Gamma \frac{\partial m_{fu}}{\partial y}) + S_{fu} \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(5)$$

나) m_{ox} 의 질량보존 방정식 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{ox}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u m_{ox}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v m_{ox}) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma \frac{\partial m_{ox}}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \Gamma \frac{\partial m_{ox}}{\partial y}) + S_{ox} \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(6)$$

식(5) 및 (6)에서 Γ 는 난류질량 확산계수 (turbulent mass diffusion coefficient)이다. 이는 와 확산계수의 Turbulent Schmidt Number에 대한 비율이며 $O(10^{-1}) [kg/(m \cdot s)]$ 이다. 이 값은 연료 및 산소에 모두 근사적으로 사용할 수 있다. 또 S는 각 성분의 생성율이며 $S = k \cdot m_{fu} \cdot m_{ox} \cdot \exp(-E/RT)$ 의 형식으로 표시된다. 그러나 CH_4 의

생성율과 O_2 의 생성율은 그 비율이 4이므로 $S_{ru} = (1/4) \cdot S_{ox}$ 이다. 이때 $i = 4$ 라고 두고 식(5) - (1/i) × 식(6)을 하면 간편한 형식의 방정식을 얻을 수 있다. 이어서

$$m_{fx} = m_{fu} - m_{ox}/i \quad \dots\dots\dots(7)$$

를 정의한다. m_{fx} 의 물리적인 의미는 연소 후에 남아 있는 연료의 질량분율을 뜻할 수 있다. 결과된 m_{fx} 방정식은 아래와 같다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho m_{fx}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u m_{fx}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v m_{fx}) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} (\Gamma \frac{\partial m_{fx}}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r \Gamma \frac{\partial m_{fx}}{\partial y}) \quad \dots\dots\dots(8) \end{aligned}$$

식(5)와 식(6)을 동시에 푸는 대신 Source Term이 없는 식(8)만을 풀고 m_{fu} 와 m_{ox} 는 분리적 의미로부터 구한다. 만약 연소율이 아주 크다고 가정하고, m_{fu} 와 m_{ox} 가 동시에 zero가 될 수 없음을 이용하면, 연소 완료 이전의 위치에서 즉, $m_{fx} > 0$ 이면 $m_{fu} = m_{fx}$ 이며 $m_{ox} = 0$ 이다. 또한 연소 완료 이후의 위치에서, 즉 $m_{fx} < 0$ 이면 $m_{fu} = 0$ 이며 $m_{ox} = -i \cdot m_{fx}$ 이다.

○ 초기조건 :

① 연료 입구위치 $m_{fu} = 1$, $m_{ox} = 0$ 이므로

$$m_{fx} = 1$$

② 나머지 전 구간에서 $m_{fu} = 0$ 이므로

$$m_{fx} = -0.232/i$$

여기서 0.232는 순수 공기중의 산소의 질량분율이다.

○ 경계조건 :

① 출구에서는 m_{fx} 의 변화가 더이상 없다. 즉

$$m_{fx}(L1, J) = m_{fx}(L2, J)$$

② 나머지 경계조건은 초기조건을 이용한다.

C. 에너지 방정식

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u h) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (\rho r v h) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon_H \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \epsilon_H \frac{\partial h}{\partial y}) + S_h \quad \dots\dots\dots(9) \end{aligned}$$

여기서 h 및 S_h 는 각각 엔탈피 및 Enthalphy Product (W/m^3)을 나타낸다.

CH_4 의 발열량은 $H_{ru} = 3 \times 10^7 [J/kg]$ 정도이며

연료의 생성을 S_{ru} 을 이용하면 $S_h = -S_{ru} * H_{ru}$ 가 된다.

ϵ_H 는 와열확산계수(eddy thermal diffusivity)이며 ϵ_t/Pr_t (와확산계수/난류Prandtl수)와 관계 둘 수 있다.

또 난류 Prandtl수는 난류 Schmidt수와 그 수 치값이 근사하므로 $\rho\epsilon_H$ 는 식(8)의 Γ 와 같이 둘 수 있다.

식(9)는 S_h 를 포함하므로 수정엔탈피 \tilde{h} 를 아 배와 같이 정의한다.

$$\tilde{h} = C_p T + m_{ru} \cdot H_{ru} \dots\dots\dots(10)$$

식(9)+ H_{ru} * 식(5)이면

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\tilde{h}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y}) \dots\dots\dots(11)$$

식(11)은 식(9)보다 간단하므로 이를 이용하여 온 도분포를 알 수 있다.

○초기조건 :

- ① 전구간에서 $\tilde{h} = C_p * T_m$.
여기서 T_m 는 전 System의 초기온도이며 또한 연료 및 공기의 유입온도이다.

○경계조건 :

- ① 연료 유입구에서 $\tilde{h} = C_p * T_m + H_{ru}$
- ② 출구에서 \tilde{h} 는 더이상 변화가 없다. 즉 $\tilde{h}(L1, J) = \tilde{h}(L2, J)$

- ③ $y=20\text{cm}$ 인 벽에서 \tilde{h} 의 계산은 불필요하다.
- ④ 나머지 구간에서는 초기조건을 이용한다.

D. Swirl 속도 분포

Swirl 속도 v_θ 는 원주방향에 독립적이므로 식 이 간단하게 되며 rv_θ 를 종속변수로 할 때 아래 와 같이 2차원으로 쓸 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho rv_\theta) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u rv_\theta) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v rv_\theta) = \frac{\partial}{\partial x}(\rho \epsilon_m \frac{\partial rv_\theta}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y}(r \rho \epsilon_m \frac{\partial rv_\theta}{\partial y}) + S_\theta \dots(12)$$

식(12)에서 $S_\theta = -(2/r) \frac{\partial}{\partial r}(\mu rv_\theta)$ 이며 이는 v_θ 를 포함하므로 차분식에서는 아래와 같이 처리한다.

$$\text{즉 } (S_\theta)_j = -\frac{2}{r} \frac{1}{\Delta y} [(\rho \epsilon_m rv_\theta)_j - (\rho \epsilon_m rv_\theta)_{j-1}]$$

$$= \frac{2}{r} \frac{\mu}{\Delta y} (rv_\theta)_{j-1} - \frac{2}{r} \frac{\rho \epsilon_m}{\Delta y} (rv_\theta)_j$$

식(14)에서 $(2\rho\epsilon_m/r\Delta y)(rv_\theta)_{j-1}$ 는 Constant Source Term이 되며 $-\frac{\rho\epsilon_m}{r\Delta y}$ 는 계산 수행시 $(rv_\theta)_j$ 의 계수로 포함되어진다.

○초기조건 :

- ① 연소용 공기입구에서의 v_θ 는 x 축방향 속도 의 20%로 한다.
- ② 나머지 구간의 v_θ 는 zero이다.

○경계조건 :

- ① u, v 등의 경계조건에 의해 자동적으로 결 정된다.

E. 밀도의 계산

모든 방정식에 사용되는 밀도가 위치에 따라 결정되어야 하므로 완전 가스식에 의하여 밀도 를 계산한다.

$$\rho = \frac{P\bar{W}}{RT} = \frac{P/R}{T/\bar{W}} \dots\dots\dots(14)$$

여기서 P, R, T 및 \bar{W} 는 각각 System 평균압력, 만유기체상수, 절대온도 및 평균분자량이다. P/R은 초기에 $O(10)(\text{kg}\cdot\text{mol}\cdot\text{k}/\text{m}^3)$ 으로 정해준다. 계산수행중 온도T와 평균분자량 \bar{W} 는 위치에 따 라 변하므로 각 위치에 따라 밀도가 변화하게 된다.

5. 계산과정

6개의 방정식, 즉 u 방정식(2), v 방정식(3), 압 력수정방정식, m_{rx} 방정식(7), \tilde{h} 방정식(11) 및 rv_θ 방정식(12)을 차례로 풀게 되며 이 풀이는 속도, 온도 및 산소의 질량분율이 수렴될 때까지 계속 된다.

계산된 값은 Under-relaxation에 의해 재조정 된다.

수렴판정에서는 온도와 같이 수렴이 비교적 빠 른 변수의 계산결과치가 거의 변동이 없는 반복 횟수 이후에서 속도와 같이 수렴이 늦은 변수의 매회 반복계산 후의 결과치가 바로 전 결과치에 서 부터 0.3% 이하의 변동을 보일 때 충분히 수 령되었다고 간주하였다.

6. 계산결과

30회의 반복계산 후에 u , v , Stream function, m_{fx} , m_{ox} , T , rv_θ , P 및 밀도 등의 변수들이 수렴되었다.

결과치들의 분석을 위하여 Stream Line의 분포, 등온선의 분포, Swirl 속도의 분포, 등압선의 분포, 등밀도선의 분포, 등산소질량분율선 및 등엔탈피분율선 등을 도시하였으며 그림 2 ~ 그림 8에서 보는 바와 같다.

참고 문헌

1. S. V. Patankar and B. Spalding, Simultaneous

Prediction of Flow Patterns and Radiation for Three-Dimensional Flames, *Heat Transfer in Flames*, Chapter 4, N.H. Afgan and J.M. Beer, Editors, SCRIPTA Book Company (1973)

2. W. Richter and R. Quack, A Mathematical Model of a Low-Volatile Pulverised Fuel Flame. *Heat Transfer in Flames*, Chapter 5, N.H. Afgan and J.M. Beer, Editors, SCRIPTA Book Company (1973)

3. S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill(1980)

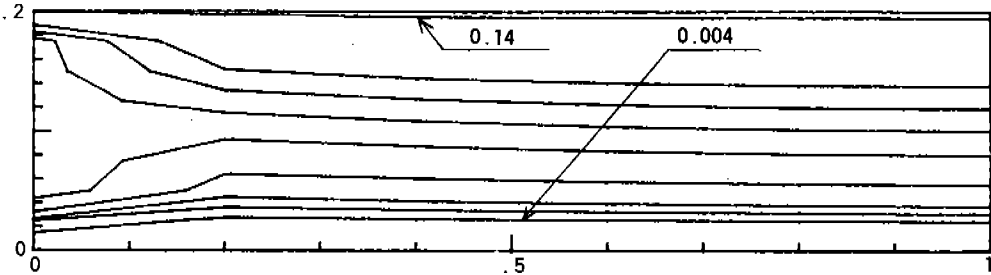


Fig. 2 Distributions of stream line
Stream function (m^2/s); 0.14, 0.1, 0.08, 0.06, 0.04, 0.02, 0.01, 0.007, 0.004

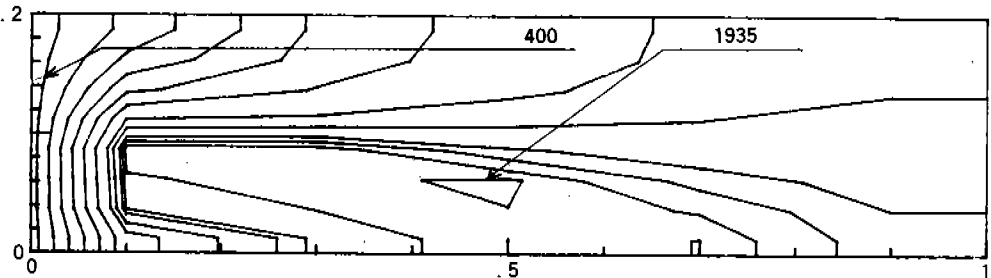


Fig. 3 Distributions of isotherm
Temperature (K); 1935, 1900, 1850, 1800, 1700, 1600, 1400, 1200, 1000, 800, 600, 400

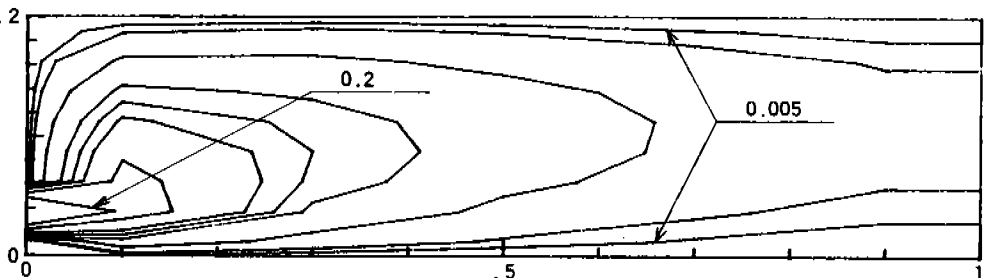


Fig. 4 Distributions of iso-swirl velocity line
 rv_θ (m^2/s); 0.2, 0.15, 0.1, 0.08, 0.06, 0.03, 0.01, 0.005

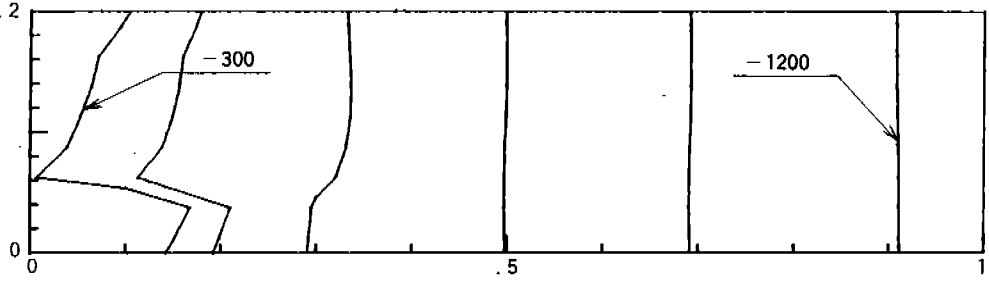


Fig. 5 Distributions of isobaric line
Relative pressure [N/m²]; -1200, -1000, -800, -600, -400, -300

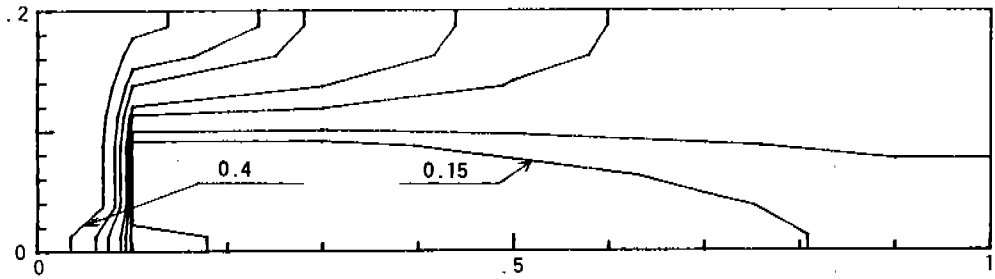


Fig. 6 Distributions of iso-density line
Density [kg/m³]; 0.4, 0.3, 0.25, 0.2, 0.18, 0.16, 0.15

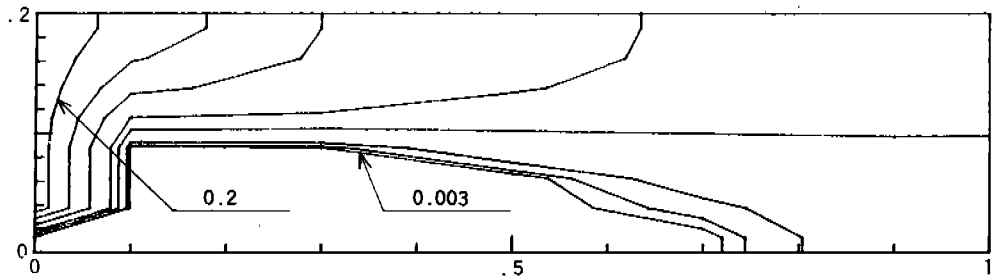


Fig. 7 Distributions of iso-fraction of oxygen
Oxygen [kg/kg]; 0.2, 0.15, 0.1, 0.05, 0.03, 0.01, 0.005, 0.003

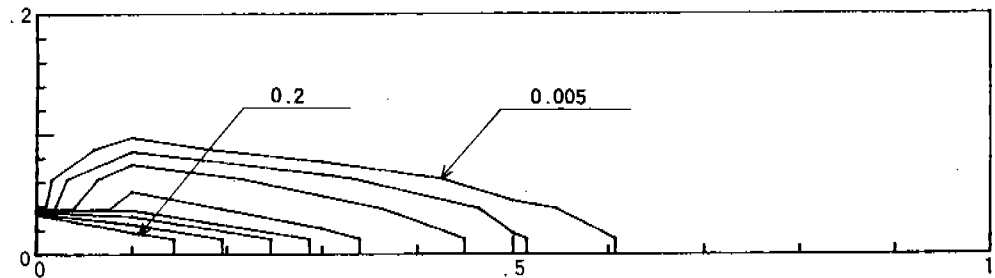


Fig. 8 Distributions of iso-fraction of fuel
CH₄ [kg/kg]; 0.2, 0.15, 0.1, 0.06, 0.04, 0.02, 0.01, 0.005.