

KIVA3V와 SWEEP을 이용한 디젤 엔진에서의 soot 총량 및 입자 크기 분포 예측

이재서* · 허강열**

Prediction of Soot Emissions and Particle Size distribution by KIVA3V and SWEEP in a diesel engine

Jaeseo Lee*, Kang Y. Huh**

ABSTRACT

Computation is performed to predict number density, volume fraction and size distribution of soot particles in typical operating conditions of a diesel engine. KIVA has been integrated with the CMC routine to consider turbulence/chemistry coupling and gas phase kinetics for heat release and soot precursors. The compositions of soot precursors are estimated by tracking Lagrangian particles to consider spatial inhomogeneity and differential diffusion in KIVA. The soot simulator SWEEP is employed as a postprocessing step to calculate conditional and integral quantities of soot particles.

Key Words : Diesel engine, Soot size distribution, SWEEP, CMC

디젤 엔진의 soot 입자의 크기 분포 예측은 강화되고 있는 배기 규제와 인체에 미치는 미세 입자의 악영향으로 그 중요성이 대두되고 있다. 본 연구에서는 난류 연소 모델로서 조건 평균 닫힘법을 이용하여 디젤 엔진 연소를 모사하였으며, soot의 총량과 입자 크기 분포 예측을 위해 SWEEP을 이용하여 다양한 엔진 운전 조건에서 이를 예측하였다.

조건 평균 닫힘법은 디젤 엔진의 열방출, 질소 산화물 등의 예측에 이용되어오고 있다[1]. 화학종 i 의 조건 평균 질량은 식 (1)과 같이 정의한다.

$$Q_i(\eta, X, t) = \langle Y_i | \eta \rangle \equiv \langle Y_i(X, t) | \xi(X, t) = \eta \rangle \quad (1)$$

여기서 η 는 혼합분율 ξ 에 대한 표본 변수이며, 조건 평균된 화학종의 질량과 엔탈피 식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q_h}{\partial t} = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} | \eta \right\rangle \quad (3)$$

식 (3)의 마지막 항은 실린더 압력이 조건 평균된 엔탈피에 미치는 효과를 나타내며, $\langle N | \eta \rangle$ 는 스칼라 소산율이다. Favre 평균된 화학종의 질량 분율은 식 (5)와 같이 모사되며, 이때 확률 밀도함수 $\tilde{P}(\eta)$ 는 베타 함수로 가정되며, 평균 혼합분율과 혼합분율의 분산으로 결정 된다.

$$\tilde{Y}_i(X, t) = \int_{\eta=0}^{\eta=1} Q_i(\eta, X, t) \tilde{P}(\eta, X, t) d\eta \quad (4)$$

Soot 생성 메커니즘은 크게 soot precursor인 pyrene의 생성 및 산화 등의 기체상 물질의 화학 반응과 고체 입자의 물리적 반응으로 나뉜다. 디젤 연소의 연료 반응 메커니즘은 Lawrence Livermore National Laboratory의 n-heptane[2] 메커니즘을 사용하였으며, 여기에 Frenkleach의 기체상의 soot 메커니즘[3]을 추가하여 243개의 화학종과 2029개의 반응을 가지는 메커니즘을 이용하여 디젤 엔진을 모사하였다.

SWEEP[4, 5]은 Monte-Carlo 방법을 기초로 한 soot 예측 프로그램으로 soot의 수 밀도, 부피 분율, 입자 크기 분포 등을 계산한다. Figure 1에서와 보여주는 것 같이 KIVA-CMC에서 계산하

* 포항공과대학교 기계공학과

** 연락처, huh@postech.ac.kr

TEL : (054)279-2841 FAX : (054)-279-3199

는 시간에 따른 온도, 압력, soot 생성에 관여하는 화학종들의 농도 등의 값을 이용하여 SWEEP은 soot를 예측한다. 본 연구에서는 디젤 연소의 공간적인 불균일성을 고려하기 위하여 5000개의 가상 입자들의 주변 온도, 압력, 화학종들의 농도 등의 시간에 따른 변화를 추적하여 soot를 예측하였다. 이러한 Lagrangian 방법을 이용하여 soot의 총량을 예측하였으며 특정 혼합분율을 가지는 조건 평균된 soot의 양 또한 계산하여 그 특성을 비교하였다.

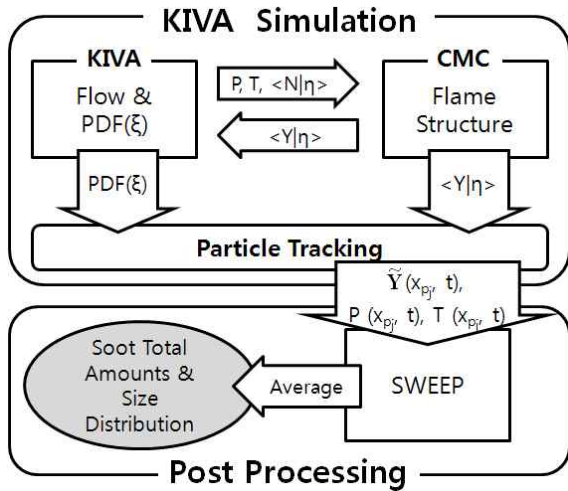


Fig. 1 Coupled simulation procedure of KIVA, CMC, CHEMKIN and SWEEP routines

본 논문에서 모사한 엔진의 제원 및 운전 조건은 table 1에 나타내었다. 연료의 분사 시기, 연료량과 엔진속도를 달리한 다양한 운전 조건에서 soot를 예측하여 모델을 검증하였다.

Table 1 Engine specification and operating conditions

Displacement volume	373.3 cm ³
Stroke × Bore	84.5 × 75.5 mm
Compression ratio	17.8
Number of injection holes	6
Spray angle	156°
Injection pressure	50 Mpa
Injection timing (ATDC)	-15°, -10°, -6°, -2°
Mass of fuel injection	4, 8, 12 mg
Engine speed	1000.1500.2000 rpm

KIVA-CMC를 통해 계산한 실린더 내 연소 압력과 열 방출량을 실험과 비교하여 Fig. 3에 나타냈다. 계산된 값들은 전반적으로 다양한 운전 조건에서 실험 결과와 일치하는 결과를 보였다.

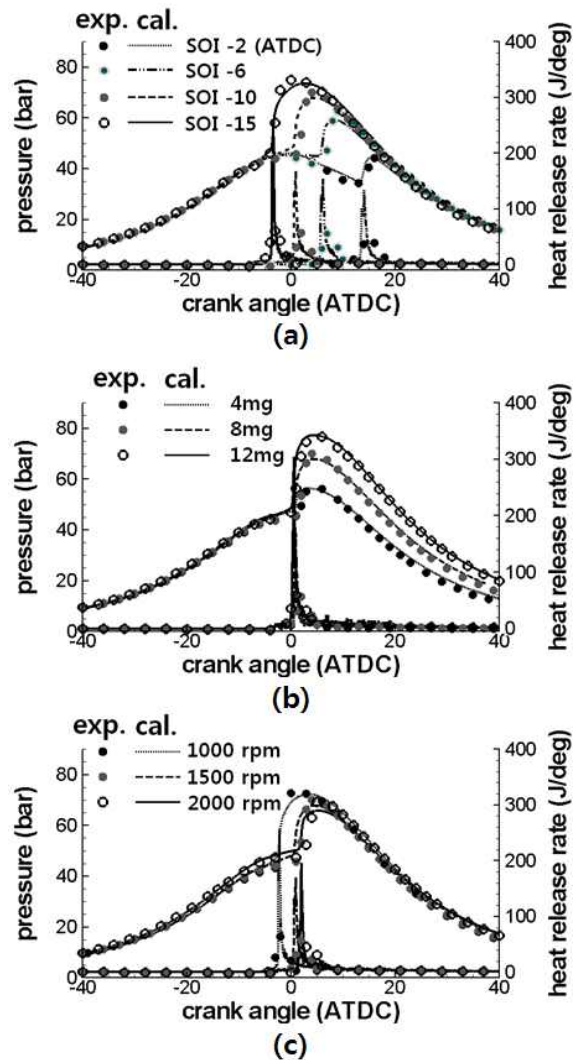


Fig. 2 Measured and calculated cylinder pressures and heat release rates at different (a) injection timings, (b) loads and (c) rpms

Figure 3은 혼합 분율이 stoichiometric 조건의 2배인 0.12를 가질 때 soot 입자의 크기 분포를 나타낸다. Soot 입자의 크기는 연료 분사 시기에는 큰 영향을 받지 않으며 부하가 증가할수록, 엔진 속도가 감소할수록 큰 입자들의 수가 증가한다. 이는 부하가 증가할수록 soot 입자의 성장에 관여하는 pyrene, C₂H₂ 등 화학종들의 농도가 증가하기 때문에 부하에 따라 큰 입자의 수 또한 증가하게 된다. 또한 엔진 속도가 감소할수록 입자의 크기가 성장할 수 있는 시간이 길어지고, 일정한 혼합 분율을 갖는 조건에서는 공기와 연료의 혼합 효과를 고려할 수 없기 때문에 성장 시간이 증가할수록 soot 입자의 크기도 증가하게 된다.

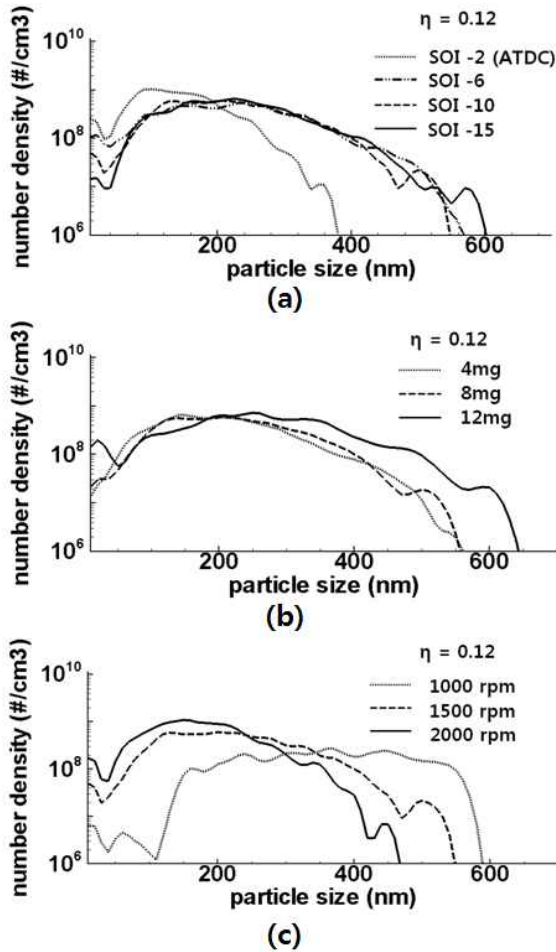


Fig. 3 Conditional soot size distributions at $\eta = 0.12$ for different (a) injection timings, (b) loads and (c) rpms

계산된 soot의 총량과 측정된 soot의 총량은 Fig. 4에 비교하여 나타냈다. 전반적으로 실험치와 일치하는 경향을 보였으며, 분사 시기가 늦어질수록 soot의 양은 계산값과 실험값 모두 약간 감소하였고, 큰 부하를 가질 때 soot의 양은 증가하였고 엔진 속도는 뚜렷한 경향을 보이지 않는다. 연료의 분사 시기가 늦어질수록 Fig. 2에서 보여주듯이 실린더 내의 최고압력은 감소하고 이에 따라 온도 또한 감소하고, 이로 인하여 soot의 양이 감소하게 된다. 부하가 증가하게 되면 soot 생성에 도움을 주는 화학종들의 농도 또한 증가하게 되고 soot의 양은 증가한다. 하지만 엔진 속도는 soot 총량에는 뚜렷한 경향성을 보이지 않는데, 이는 엔진 속도가 감소할수록 온도와 압력이 증가하여 soot 생성을 돕지만, 연료가 공기와 섞일 수 있는 시간 또한 길어지게 되어 soot가 생성되기 좋은 연료가 농후한 조건을 가질 수 없게 되어 이 두 가지 효과가 상충되기 때문으로 볼 수 있다.

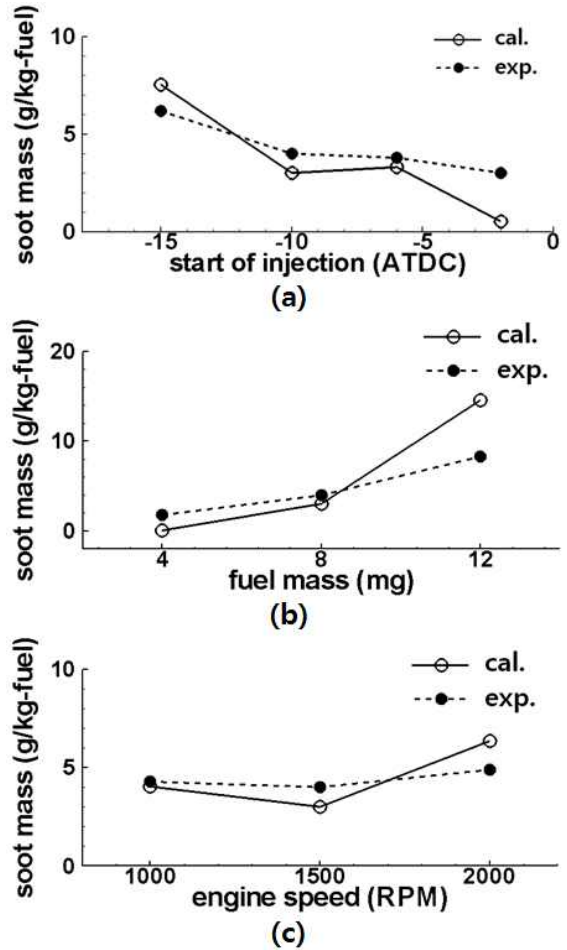
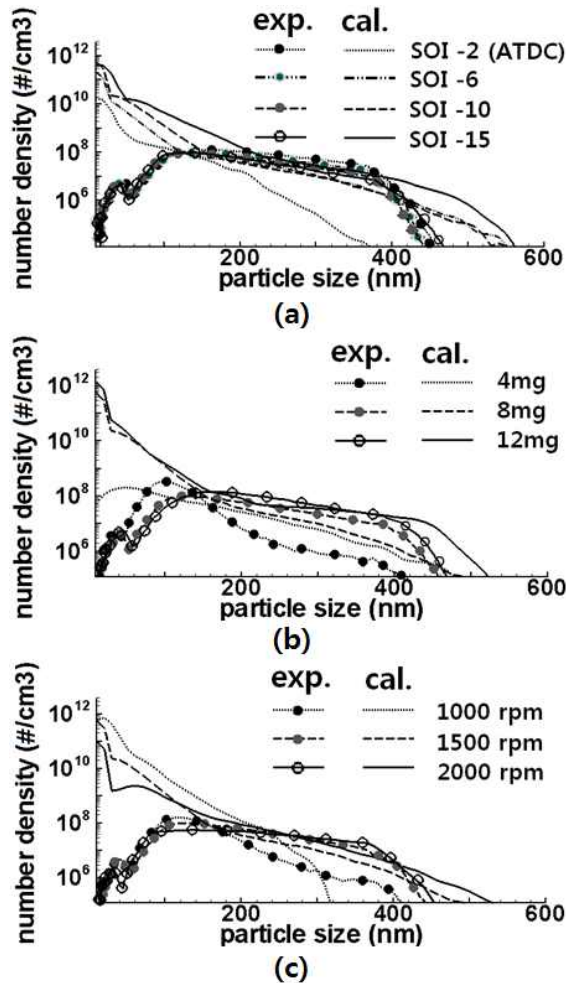


Fig. 4 Measured and calculated mass of soot for different (a) injection timings, (b) loads and (c) rpms

Figure 5은 예측된 soot 입자 크기 분포와 측정된 결과를 비교하여 보여준다. 조건 평균된 결과와 마찬가지로 연료 분사 시기는 soot 입자 크기에 큰 영향을 주지 않고, 부하가 증가할수록 입자의 크기가 증가한다. 하지만 조건 평균된 결과와 반대로 엔진 속도가 증가할수록 큰 입자의 수가 증가하는데 이는 조건 평균된 결과는 특정 혼합 분율에서 계산되기 때문에 연료와 공기의 혼합 효과를 고려할 수 없지만, Lagrangian 방법을 이용한 적분된 결과에서는 이 효과가 고려되기 때문이다. 따라서 엔진 속도가 증가할수록 공기와 연료의 혼합시간은 짧아지게 되어 soot 생성과 성장에 도움이 되는 농후한 조건을 가지게 되어 soot 입자의 크기가 증가 한다.



Vol. 133, 2003, pp. 289-298.

[5] M. S. Celnik, available at http://como.c heng.cam.ac.uk/programs/sweep2_guide.pdf, 2006.

Fig. 5 Measured and calculated soot size distribution for different (a) injection timings, (b) loads and (c) rpms

참고 문헌

- [1] I.S. Han, K.Y. Huh, "Simulation of turbulent combustion in DI diesel engines with Conditional Moment Closure and multiple flame structures", KSAE, 2004, pp.328-333.
- [2] http://www-cmels.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-nc7h16_reduced_mechanism
- [3] H. Wang, M. Frenklach, "A Detailed kinetic modeling study of aromatics formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames", Combust. Flame, Vol. 110, 1997, pp. 173-221.
- [4] M. Balthasar, M. Kraft, "A stochastic approach to calculate the particle size distribution function of soot particles in laminar premixed flames", Combust. Flame,