

Eulerian 및 Lagrangian CMC 모델을 사용한 디젤분무연소 모델링에 관한 연구

김우태* · 조현수** · 허강열**†

A Study on Diesel Spray Combustion Modeling by Eulerian and Lagrangian Conditional Moment Closure Models

Woo Tae Kim*, Hyun Su Cho**, Kang Y. Huh**†

ABSTRACT

Numerical simulation is performed to evaluate the conditional moment closure (CMC) models for spray development, ignition, and turbulent combustion for the Engine Combustion Network (ECN) test cases. The CMC model is implemented in the open source code, OpenFOAM, to provide conditional flame structures through the solution of Eulerian as well as Lagrangian conditional transport equations. In spite of more accurate treatment of the convective term, Eulerian CMC provides similar ignition delays and lift-off lengths with Lagrangian CMC.

Key Words : Diesel spray combustion, Conditional moment closure, Eulerian, Lagrangian

분무의 발달과 연소는 디젤엔진의 성능특성을 결정하는 중요한 요소 중의 하나이다. 3차원 수치해석은 지배방정식의 해법을 통해 다양한 인자들 간의 상호작용에 대한 상세정보를 제공하여 디젤엔진의 성능향상과 배기가스 저감연구에 유용한 도구로 사용될 수 있다. 연구에 사용되는 수치모델의 신뢰성을 높이기 위해서는 ECN[1] 데이터베이스와 같은 실험결과와의 비교검증이 필요하다. ECN 데이터베이스는 단순형상의 연소실 내에서 산소농도, 주변온도, 주변밀도, 연료종류, 연료의 온도, 분사시간 등의 다양한 조건변화가 미치는 영향에 대한 상세한 정보를 제공해 준다. 여러 연구자들이 다양한 수치모델을 활용하여 분무연소의 ignition delay와 lift-off length 등을 모델링하고 분석하는 연구를 수행하였다.[2-7] 본 연구에서는 공개 소스 CFD 코드인 OpenFOAM[8]에 Eulerian 및 Lagrangian CMC 모델을 구현하고 ECN 데이터베이스 실험치와의 비교를 통해 코드를 검증하는 작업을 수행하였다.

Mixture fraction ξ 에 대한 i 번째 화학종의 conditional mean mass fraction은 아래식과 같이 주어진다. [9]

$$Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) = \langle Y_i(\mathbf{x}, t) | \xi(\mathbf{x}, t) = \eta \rangle \quad (1)$$

$$Y_i(\mathbf{x}, t) = Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) + Y_i''(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

Conditional mean mass fraction $Q_i(\eta, \mathbf{x}, t)$ 와 conditional mean enthalpy $Q_h(\eta, \mathbf{x}, t)$ 에 대한 지배방정식은 다음과 같이 주어진다. [9]

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_i + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u}'' Y_i'' | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta)}{P(\eta) \rho_\eta} = \quad (3)$$

$$\langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle$$

$$\frac{\partial Q_h}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_h + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u}'' h_i'' | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta)}{P(\eta) \rho_\eta} = \quad (4)$$

$$\langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} | \eta \right\rangle - \langle w_{rad} | \eta \rangle$$

각 항 및 변수들에 대한 정의는 참고문헌 [9]에 주어져 있다.

본 연구에 사용된 Lagrangian CMC에서는 conditional mean 변수들의 공간적인 변화를 고려하지 않는 아래의 지배방정식을 풀게 된다.

$$\frac{DQ_i}{Dt} = \langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \quad (5)$$

$$\frac{DQ_h}{Dt} = \langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} | \eta \right\rangle \quad (6)$$

전체의 계산영역에 동일한 화염구조가 적용된다고 가정하였으며 공간적인 의존성은 chamber 내에서 순차적으로 증발하는 연료액적 그룹들을 표현하는 다수의 화염 그룹들을 통해 고려하였다. 이를 통해 계산영역 내에서 시간적 및 공간적으로 변화하는 환경 속에서 다른 증발 및 화학반응

* 공주대학교 기계자동차공학부

** 포항공과대학교 기계공학과

† 연락처, huh@postech.ac.kr

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

Table 1 Simulation cases with different initial concentrations, temperatures and pressures in the chamber

Case	Initial Gas Mole Fraction				Injection Pressure (MPa)	Injected Fuel Mass (g)	Pressure (kPa)	Temperature (K)
	O ₂ (%)	N ₂ (%)	CO ₂ (%)	H ₂ O (%)				
1	10	80.01	6.32	3.67	153.28	18.1	4280	1000
2	12	78.06	6.28	3.65	153.27	17.8	4270	1000
3	15	75.15	6.23	3.62	153.25	17.8	4250	1000
4	21	69.33	6.11	3.56	150.21	17.8	4210	1000
5	21	69.33	6.11	3.56	154.00	17.6	4000	950
6	21	69.33	6.11	3.56	150.21	17.8	4210	1000
7	21	69.33	6.11	3.56	154.64	18.1	4640	1100
8	21	69.33	6.11	3.56	155.06	18.1	5060	1200

이력을 가지는 연료액적 그룹을 고려할 수 있다. 분사된 전체 연료는 N개의 동일한 질량을 가지는 그룹으로 나누어지며 새로운 연료그룹은 바로 이전의 연료그룹이 완전히 증발하고 난 후에 액적의 증발이 일어나는 장소와 시간에 새로이 도입된다.

j번째 연료그룹의 증발된 질량분율 \tilde{F}_j 의 전이방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}\tilde{F}_j)Q_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}\tilde{u}\tilde{F}_j) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_j}{Sc_j} \nabla \tilde{F}_j \right] + \tilde{\rho}\tilde{s}_{F_j} \quad (7)$$

j번째 화염그룹을 위한 local weighting factor는 다음과 같이 주어진다.

$$I_j = \frac{\tilde{F}_j}{\sum_{j=1}^n \tilde{F}_j} \quad (8)$$

i번째 화학종의 Favre mean mass fraction은 다음과 같이 구해진다.

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \left[\sum_{j=1}^n I_j(\mathbf{x}, t) Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) \right] \tilde{F}(\eta, \mathbf{x}, t) d\eta \quad (9)$$

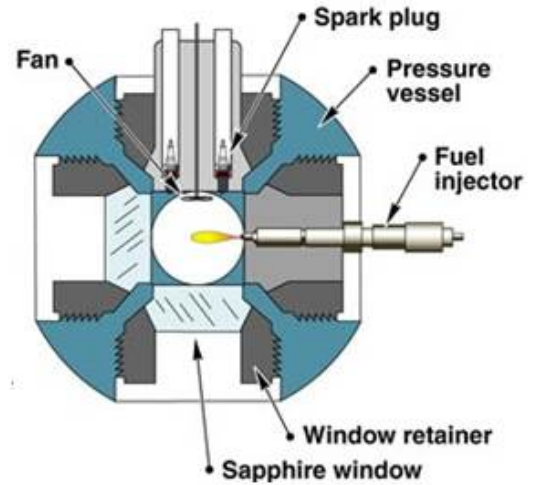
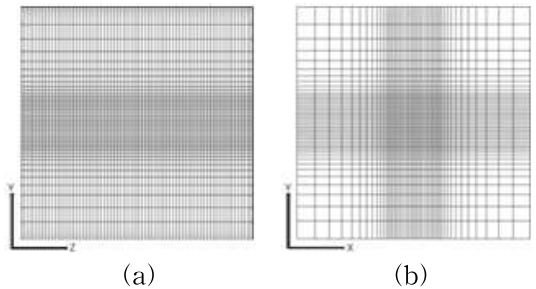
본 연구에 사용된 Eulerian CMC의 지배방정식은 아래와 같다.

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_i = \langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \quad (10)$$

$$\frac{\partial Q_h}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_h = \langle M | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} | \eta \right\rangle \quad (11)$$

여기에서 난류플럭스항과 복사손실항은 무시할 수 있다고 가정하였다. 또한, CMC 격자는 연료 분사방향으로 1차원적으로 구성하였다.

계산에 사용된 기하학적 형상은 Fig. 1과 같이 한 변이 108 mm인 정육면체의 형상이며 47x47x47의 셀 구조를 가진 계산격자가 Fig. 2에 주어졌다. ECN 실험에 사용된 분사기는 Common rail 타입이며 노즐의 출구 직경은 0.1 mm, discharge coefficient가 0.86, 연료분사압력은 150 MPa이다. 계산이 수행된 서로 다른 산소

**Fig. 1** The constant volume chamber**Fig. 2** (a) Meshes along the direction of spray injection and (b) meshes normal to the spray injection direction

농도와 주변온도조건에 따른 8가지의 n-heptane 분무연소 케이스가 Table 1에 주어졌다. Table 2에는 계산에 사용된 주요 물리적 모델이 주어졌다. Conditional equation의 해를 구하기 위하여 η space는 stoichiometric composition 근처에 조밀한 격자를 배치하고 전체 100개의 격자점으로 차별화하였다. Eulerian CMC에서 대류

Table 2 Physical models

CFD Code	OpenFOAM 1.7
Turbulence	RNG k-ε
Spray breakup	KH-RT model [10]
Spray collision	O'Rourke's model [11]
Spray dispersion	Stochastic model [12]
Heat transfer	Ranz-Marshall correlation [13]
Grid type	3D, hexahedral
Chemistry	57 species, 166 reactions [14]

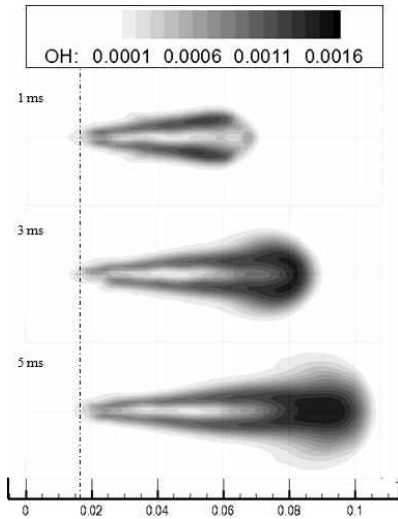


Fig. 3 OH mass fractions at 21% and 1000K by Eulerian CMC

향은 second order upwind scheme으로 차분화하였다. 계산결과의 제시에 있어서 lift-off length는 분사기와 OH mass fraction이 10^{-4} 에 도달하는 위치까지의 거리로 정의하였다. Ignition delay는 분사시작시점과 압력이 급격히 증가하는 시점 간의 시간간격으로 정의하였다.

난류모델이 분무연소에 미치는 영향을 살펴보기 위해 standard k-ε, realizable k-ε, RNG k-ε 세 가지 난류모델을 적용해 보았다. Ignition delay와 lift-off length의 실험치와 비교해본 결과 RNG k-ε이 가장 좋은 결과를 주었으며 분무의 형상 또한 문제가 없었으므로 본 연구에서는 RNG k-ε을 난류모델로 채택하였다. Lagrangian CMC에서 화염 그룹의 개수를 1, 3, 5로 변화시키며 민감도를 분석해 본 결과 OH mass fraction 분포가 거의 동일하게 나타났으므로 계산시간의 부담을 최소화하기 위해 화염그룹의 개수를 1개로 설정하였다. Eulerian CMC에서 격자수에 따른 민감도를 조사하기위해 분무분사방향의 격자개수를 증가시키면서 결과를 비교해본 결과 50 이상에서는 OH mass fraction 분포에서 차이가 크지 않았다. 따라서, 본 연구에서는 75개의 격자를 분무분사방향에 적용하였다.

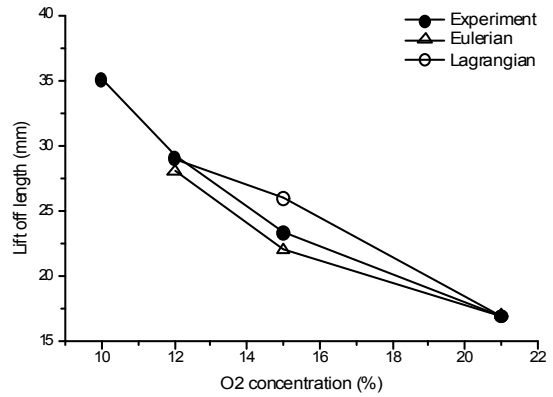


Fig. 4 Lift-off lengths at different oxygen concentrations by Eulerian and Lagrangian CMC

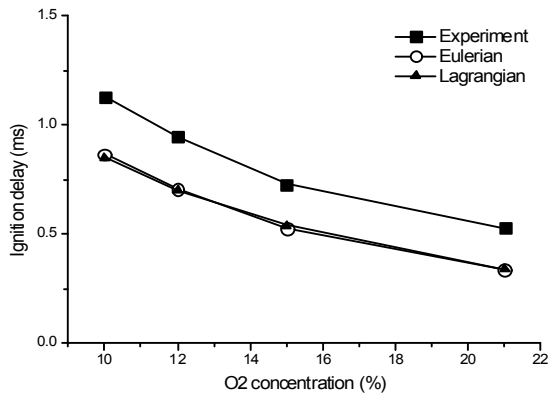


Fig. 5 Ignition delays at different oxygen concentrations by Eulerian and Lagrangian CMC

Fig. 3은 Eulerian CMC에서의 시간에 따른 OH mass fraction 분포의 변화를 나타낸다. Lift-off length가 시간에 따라 변화하지 않는 것을 관찰할 수 있다. Lagrangian CMC도 동일조건에서 거의 유사한 결과를 보여주었다.

Fig. 4와 Fig. 5는 서로 다른 산소농도 조건에서의 lift-off length와 ignition delay의 결과를 보여준다. Lift-off length는 실험치와 두 가지 CMC 접근법이 유사한 결과를 보여주었으며 ignition delay에서는 계산치가 실험치보다 30%정도 작게 예측되는 경향이 나타났다. Fig. 6와 Fig. 7은 서로 다른 주변온도 조건에서의 lift-off length와 ignition delay의 결과를 보여준다. Lift-off length는 실험치와 두 가지 CMC 접근법이 유사한 결과를 보여주었으며 ignition delay에서는 역시 계산치가 실험치보다 30%정도 작게 예측되는 경향이 나타났다. Ignition delay 일정한 비율로 작게 예측되는 이유는 명확히 밝힐 수 없었으나 skeletal n-heptane mechanism 적용된 본 연구에서 정성적인 경향은 잘 예측됨을 확인하였다. Conditional transport equation에서 대류항을 처리하는 두 가지의 다른 방법인 Eulerian CMC와 Lagrangian CMC를 비교한 결과 lift-off

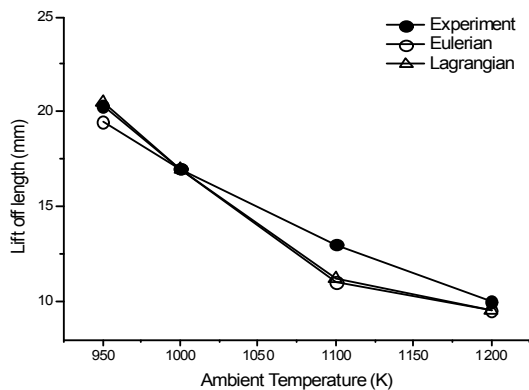


Fig. 6 Lift-off lengths at different ambient temperatures by Eulerian and Lagrangian CMC

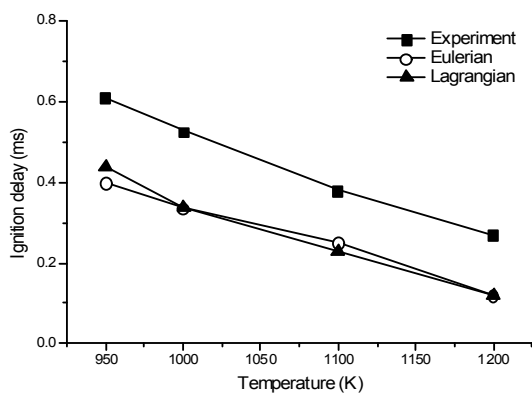


Fig. 7 Ignition delays at different ambient temperatures by Eulerian and Lagrangian CMC

length와 ignition delay의 결과치에서 차이가 크지 않았다.

참고 문헌

[1] SANDIA Engine Combustion Network Database. <http://www.ca.sandia.gov/ecn>, 2006.
 [2] T. Lucchini, G. D’Errico, D. Ettorre, and G. Ferrari, “Numerical Investigation of Non-Reacting and Reacting Diesel Sprays in Constant-Volume Vessels”, SAE Paper No. 2009-01-1971.
 [3] H. Lehtiniemi, F. Mauss, M. Balthasar, and I. Magnusson, “Modeling Diesel Spray Ignition using Detailed Chemistry with a Progress Variable Approach,” *Combustion Science and Technology*, Vol. 178, 2006, pp.1977-1997.
 [4] G. D’Errico, D. Ettorre, and T. Lucchini, “Comparison of Combustion and Pollutant Emission Models for DI Diesel Engines,” SAE Paper No. 2007-24-0045.
 [5] F. Kärrholm, F. Tao, and N. Nordin, “Three-Dimensional Simulation of Diesel Spray

Ignition and Flame Lift-Off Using OpenFOAM and KIVA-3V CFD Codes,” SAE Paper No. 2008-01-0961.

[6] U. Azimov, N. Kawahara, E. Tomita, and K. Tsuboi, “Evaluation of the Flame Lift-off Length in Diesel Spray Combustion Based on Flame Extinction,” *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol. 5, Iss. 2, 2010, pp.238-251.

[7] O. Colin and A. Benkenida, “The 3-Zones Extended Coherent Flame Model (ECFM3Z) for Computing Premixed/Diffusion Combustion,” *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP*, Vol. 59, No. 6, 2004, pp.593-609.

[8] OpenFOAM website <http://www.openfoam.org>, OpenCFD Limited, 2007.

[9] A.Y. Klimenko and R.W. Bilger, “Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion,” *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 25, 1999, pp.595-687.

[10] J.C. Beale and R.D. Reitz, “Modeling Spray Atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor Hybrid Model”, *Atomization and Sprays*, Vol. 9, No. 6, 1999, pp.623-650.

[11] P.J. O’Rourke, *Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays*, 1981.

[12] Z.G. Xu, P.J. Walklate, S.G. Rigby, and G.M. Richardson, “Stochastic Modeling of Turbulent Spray Dispersion in the Near-field of Orchard Sprayers,” *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 1998, pp.74-76.

[13] W.E. Ranz and W.R. Marshall, *Evaporation from Drops, Part I*. *Chemical Engineering Progress*, Vol. 48, No. 3, 1952, pp.141-146.

[14] J.Y. Seo, D.K. Lee, K.Y. Huh, and J.W. Chung, “Combustion simulation of a Diesel Engine in the pHCCI Mode with Split Injections by the Spatially Integrated CMC Model,” *Combustion Science and Technology*, Vol. 182, 2010, pp.1241-1260.