

바이오디젤 엔진의 연소과정 모델링

최민기* · 차준표* · 박성욱**†

Modeling of Biodiesel Combustion on Compression Ignition Engine

Mingi Choi*, Junepyo Cha*, Sungwook Park**†

ABSTRACT

Modeling of biodiesel combustion on compression ignition engine was conducted by using the KIVA3v-Release 2 code coupled with Chemkin chemistry solver2. In order to calculate the chemical kinetics of combustion of biodiesel, a reduced mechanism of methyl decanoate and methyl 9-decanoate was used. It is composed of 123 species and 394 reactions. Also, the experiments were performed on a single-cylinder engine. The simulation results agreed well with experiments results. And soot concentrations of biodiesel were lower than those of diesel.

Key Words : biodiesel, methyl decanoate, KIVA3V-Release2, Chemkin chemistry solver2

바이오디젤 연료가 화석연료의 대체 에너지로 주목받은 이후 전세계적으로 관련 연구가 지속되고 있다. 본 연구는 압축착화엔진에서 배기배출물 저감효과가 있는 바이오디젤의 연소과정을 모델링한 것이다.

일반적으로 압축착화엔진에서 연료의 연소과정을 모델링하기 위해서는 연료의 물리, 화학적 특성을 우선 분석하여야 한다. 연료의 분무과정과 연소과정을 예측하기 위하여 각각 물리, 화학적 특성의 이해가 필요하다. 바이오디젤은 에스테르화 과정을 거쳐 만들어진 연료로서 주로 메틸에스테르로 구성되어있다. 17개 이상의 긴 탄소체인형태로서 그 중 몇 개의 이중결합을 포함하기도 한다. 따라서 바이오디젤의 연소과정을 모델링하기 위해서는 정확도가 높은 화학반응기구가 필요하다.

Brakora[1] 등은 methyl butanoate ($C_5H_{10}O_2$)의 연소반응식을 이용하여 바이오디젤의 연소과정을 모델링하였다. methyl butanoate는 계산시간이 짧은 장점이 있지만 이중결합을 포함한 긴 탄소체인을 가진 바이오디젤의 연소과정을 예측하는데 정확도가 다소 떨어진다. 최근 Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)의 Herbinet [2]등은 methyl decanoate ($C_{11}H_{22}O_2$)와 methyl 9

-decanoate($C_{11}H_{20}O_2$)을 이용한 바이오디젤의 상세반응기구를 제안하였다. 이는 바이오디젤의 긴 탄소체인과 이중결합을 고려할 수 있어 더욱 정확한 연소예측이 가능한 것으로 평가되고 있고 Luo[3] 등은 LLNL에서 제안한 상세반응기구를 이용하여 123종 394개 반응식의 축소반응기구를 제안하였다.

본 연구는 Chemkin chemistry solver II[4]가 연동된 KIVA-3V Release2 code [5]를 사용하여 수치해석을 수행하였고 Luo 등이 제안한 축소반응기구를 사용하여 바이오디젤의 연소과정을 모델링 하였다.

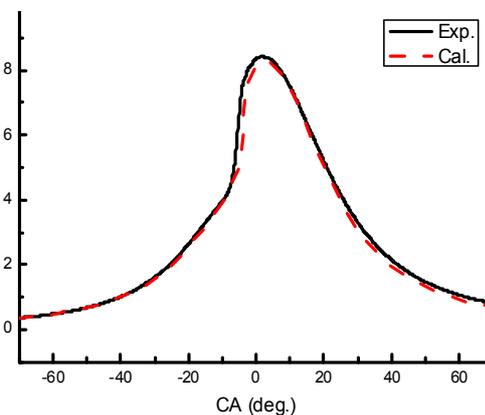


Fig. 1 Validation of in-cylinder pressure in engine experiment

* 한양대학교 대학원

** 한양대학교 기계공학부

† 연락처, parks@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2220-0430 FAX : (02)-2220-4588

연료분무모델은 KH-RT (Kelvin-Helmholtz - Rayleigh-Taylor) [6] 모델을 사용하였고 배기 배출물 중 NOx와 soot은 각각 Reduced GRI (Gas Research Institute) NOx 메커니즘 [7] 과 2-step phenomenological 모델 [8] 을 사용하였다. 또한 수치해석 모델의 신뢰성을 확보하기 위해서 단기통 실험을 동시에 수행하였다.

Figure 1 은 실린더 내의 압력변화를 크랭크 각도에 따라서 도시한 것이다. 실선은 단기통엔진 실험으로 취득한 데이터이고 점선은 수치해석을 통해서 취득한 데이터이다. 그림에 나타난 것처럼 바이오디젤의 연소모델링의 결과가 실험과 일치하는 것을 볼 수 있다. 따라서 methyl decanoate의 축소반응기구를 이용한 바이오디젤 연소모델링의 신뢰성을 확보하였다고 볼 수 있다. 바이오디젤은 연료에 산소가 포함된 함산소 연료이기 때문에 soot저감에 큰 효과가 있고 수치해석과 단기통 엔진의 실험결과 또한 디젤연료에 비해 soot배출이 줄어든 것을 확인할 수 있었다.

후 기

본 연구는 2012년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단 과학기술국제화사업(2011-0025295)의 지원을 받아 수행되었으며, 연구에 지원해 주신 기관에 감사드립니다.

참고 문헌

[1] Brakora, Jessica L., Ra, Youngchul, Reitz, Rolf D., McFarlane, Joanna Daw, C. Stuart, "Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for Biodiesel-Fueled Engine Simulations", SAE technical paper, 10.4271/2008-01-1378

[2] Herbinet, O., Pitz, W. J., Westbrook, C. K., "Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate", Combustion and Flame, 2008, 154(3), pp.507~528.

[3] Luo, Zhaoyu, Plomer, Max, Lu, Tianfeng, Som, Sibendu, Longman, Douglas E., "A reduced mechanism for biodiesel surrogates with low temperature chemistry for compression ignition engine applications", Combustion Theory and Modelling, 2011, 16(2), pp.369~385.

[4] R.J. Kee, Rupley, F.M. and J.A. Miller, "Chemkin-II : A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics.", Sandia Report 89-8009, 1989, Sandia National Laboratories.

[5] A.A. Amsden, "KIVA-3V Release 2 : Improvement to KIVA-3V.", Los Alamos National Laboratory Report, 1999, No.LA-UR-99-915.

[6] J.C. Beale and R.D. Reitz, "Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor hybrid model.", Atomization and Sprays, 1999, 9(6), pp.623~650.

[7] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, C. William, J. Gardiner, V.V. Lissianski and Z. Qin, "GRI-Mech 3.0", Gas Research Institute, 2005.

[8] H. Hiroyasu and T. Kadota, "Models for Combustion and Formation of Nitric Oxide and Soot in Direct Injection Diesel Engines.", SAE technical paper, 10.4271/760129, 1976.