

<논문> SAE NO. 943755

CI기관의 벽유동 세라믹 모노리스 필터트랩에 관한 수학적해석 및 시뮬레이션

Mathematical Analysis and Simulation on a Wall-Flow
Ceramic Monolith filter trap in CI Engine

한 영 출,* 최 규 훈,** 방 성 환
Y. C. Han, K. H. Choi, S. H. Bang

ABSTRACT

In order to reduce particulate emissions from diesel vehicles, mathematical model is established and analyzed on ceramic wall-flow monolith filter.

A wall-flow monolith filter placed in the exhaust stream of a diesel engine can effectively limit the emission of diesel particulates through the monolith. The accumulated particulates can then be periodically combusted inside the monolith by directing hot gas to the monolith while normal engine exhaust is routed around the monolith system. The resulting low flow rates through the monolith require consideration of gas dynamics through the channels as well as particulate combustion to analyze this regeneration process.

A mathematical model of the regeneration is formulated as a system of nonlinear partial differential equations describing the conservation of mass, momentum and energy. Numerical solutions are obtained by using a finite difference techniques for the spatial discretization.

So we can use filter simulation program for the purpose of filter design and actual filter regeneration

주요기술용어 : Wall-flow Ceramic Filter Trap(벽유동 세라믹 필터트랩), Regeneration(재생), Exhaust Stream(배기유동), Particulate(입자상물질)

기 호 설 명	G _r (t) : 입구의 질량속도, 0.272g/cm ² · s
a ₃ : 필터압력강하에 있어서 매개변수, 28.45	h _i : 채널 i에서 열전달계수, cal/cm ² · s · K
C _{pg} : 가스열용량, 0.28cal/g · K	k : 반응율, cm/s
C _{pp} , C _{ps} : 입자층과 기질층 열용량	L : 모노리스의 길이, 25.4cm
D : 평방채널의 길이, 0.211cm	M _o , M _{ox} : 탄소와 산소의 분자량, 12.0, 32g/gmole
	P _{atm} : 대기압, 1.013×10 ⁶ g/cm · s ²

* 정회원, 국민대학교
 ** 정회원, 기아자동차 기술센터
 *** 국민대 대학원 기계공학과

- P_i : 채널 i 에서 압력, $g/cm \cdot s^2$
- R : 가스상수, $2.87 \times 10^6 \text{ cm}^2/s^2 \cdot K$
- r : z 에 수직인 채널의 방향, cm
- S_p : 축적층의 비표면적, $5.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$
- T : 온도, K
- T_b : 초기온도, $600K$
- T_s, T_i, T_w : 입구가스와 채널가스 및 벽온도, K
- t : 시간, s
- v_i, v_w : 채널에서 가스속도와 벽에서 피상속도, cm/s
- w : 입자층두께, cm
- w_b : 초기입자층두께분포, cm
- w_s : 기질층의 두께, $4.76 \times 10^{-2} \text{ cm}$
- x : 벽을 통한 거리, cm
- $Y_i(t)$: 입구산소농도, 0.154
- Y_i, Y_w : 채널과 벽에서 산소농도
- z : 축방향거리, cm
- $-\Delta H$: 탄화수소의 반응열, $9.4 \times 10^4 \text{ cal/gmol}$
- α, β : 벽을 가로지르는 유동에 대한 상수, $1.78 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}, 5.75 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$
- λ_p, λ_w : 기질층과 축적층의 열전도계수, $2.0 \times 10^{-3}, 5.0 \times 10^{-3} \text{ cal/cm} \cdot s \cdot K$
- μ : 가스점성계수, $g/cm \cdot s$
- ρ_i, ρ_w : 채널과 벽에서 밀도, g/cm^3
- ρ_p : 축적층의 체적밀도, 0.55 g/cm^3
- Φ : 벽압력강하에서 두께함수
- $\omega_1, \omega_2, \omega_3$: 벽두께 함수의 상수, $2.12 \times 10^{-4}, 0.224, 4.05 \times 10^{-2} \text{ cm}$

1. 서 론

급격한 산업발전에 의한 공해문제가 심각한 사회문제로 대두되고 있으며 그 가운데 디젤 자동차에 의한 매연의 공해가 높은 비율을 차지하고 있다. 따라서 이에 대한 시급한 저감대책이 요구되고 있는 실정이다.

디젤자동차의 입자상물질 배출을 저감시키는 기술로서는 기관자체의 설계변수나 운전변수를 변화시키는 기관개량 기술, 기관에서 배출된 입자상물질을 별도의 장치로서 저감시키는 후처리 기술등이 있다.

이중 어떠한 방법이든 간에 완전한 매연저감 달성을 위한 기술은 없는 바 보다 구체적인 저감기술연구가 필요하다. 본 연구에서는 디젤 자동차 배출물 저감방법중 특별한 장치없이 매연을 줄일 수 있으며 앞으로 현실 가능성이 높은 후처리 방법에서 벽유동형 모노리스 필터에 관하여 열재생에 관한 물성들의 관계를 수학적을 모델을 설정하여 디젤자동차 매연저감방법의 일환으로 모색함으로서 대기오염 방지기술에 기여하고자 한다.

여기에서 디젤동력 차량의 입자상물질의 배출을 기준치 이하로 감소시키기 위하여 배출가스를 여과하는 시스템에 개발에 관한 연구가 진행되고 있다. 필터트랩의 여과는 배출가스를 Fig.1과 같은 필터에 통과 시킴으로서 매우 효과적으로 이루어질 수 있다. 채널의 벽들은 다공성 세라믹 물질을 사출법을 사용하여 얻어지며, 다음과 같은 유동 형태를 얻기 위하여 인접하는 반대쪽의 끝을 막는다.

벽들의 다공성은 배출가스의 입자상물질이 쉽게 걸릴 수 있거나 긴 채널의 상류 측면의 다공이 쉽게 막힐 수 있는 것을 선택한다. 더욱 많은 입자상 물질을 포함한 배출가스가 필터를 통하여 흐름에 따라서, 먼저 축적된 입자층은 뒤따르는 배출가스의 입자상 물질을 여과한다. 이 과정은 채널 상류면에 축적된 입자상물질층의 덩어리를 형성한다. 이 입자상물질층은 재생과정을 통하여 연소되어야 한다.

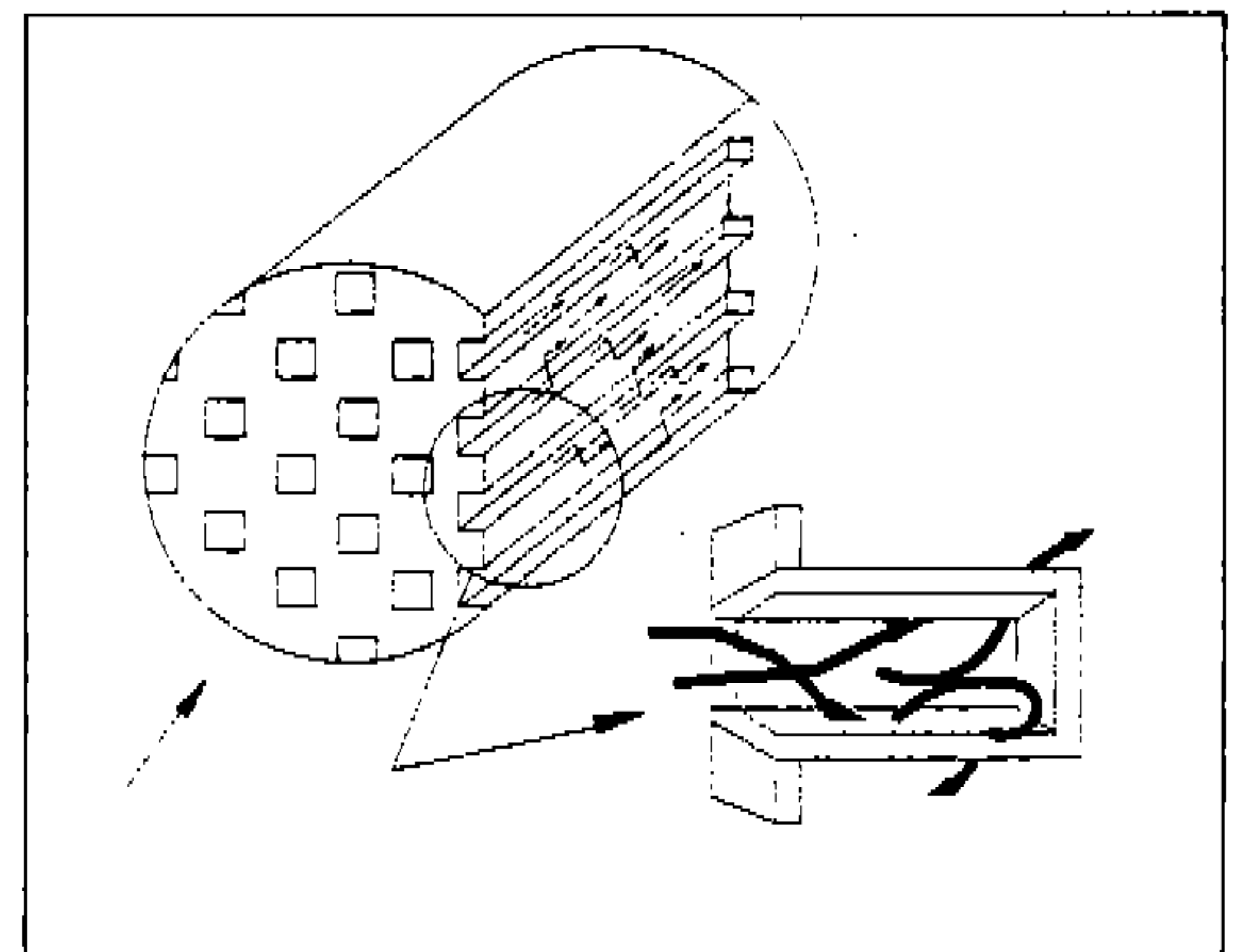


Fig.1 Sectional view of a wall-flow monolith

2. 수학적 모델의 해석

특수한 모델 수식화를 하기에 앞서 이 재생체 계에 대한 입자상물질층과 재질층(단체의 벽)에서 일어나는 반응, 산소 소모 및 열축적 등은 벽체계의 각 국부점에 걸쳐서 수행하고자 한다. 본 모델의 주도니 장점은, 다차원 압축성 유체유동의 개념과 수치적인 복잡성을 소개하지 않고, 복잡한 필터 형상에 대하여 질량과 에너지 전달을 실제적으로 재현하는 것이다. 이것은 비다공질 벽을 흐르는 층류 유동에 상당하는 종축성분만을 구성하는 길고 가는 채널의 각 종축점에 대한 유동을 고려함으로써 완성되었다. 따라서 이 모델은 단일 공간 변수만을 가지고 필터의 전면에 유입되는 가스의 상태값들이 균일하다고 가정한다. 그러나 시간종속이며 필터의 둘레는 완전히 단열되어 있다고 가정한다. 이 필터 모델은 단일입구채널과 단일출구 채널로 이루어져 있다. 이 입·출구 채널과 벽체계의 개괄도는 Fig.2에 나타내었다. 채널의 하류에 대한 거리는 z 로써 측정된다. x 는 벽을 통한 거리이다. 나머지 독립변수는 시간 t 이다.

가스의 밀도, 속도 및 온도는 채널 반경에 따라 변하므로 그의 평균값을 취한다. 그러므로 ρ_i, v_i, T_i ($i=1, 2$ 는 채널의 입구와 출구를 각각 나타낸다.)는 채널 단면에 대하여 평균된 1차원의 채널 유동변수이다. 벽 체계내의 열전달은 너무 커서 입구 채널 근처의 매우 얇은 경계층을 제외하고는 가스와 벽온도는 같다고 가정한다. 벽에서 x 방향의 열전도가 지배적이고 반응에 의한 열은 입자상물질층에서만 생성되기 때문에 x 방향의 벽온도는 일정하다고 본다. 많은 질량유동을 때문에

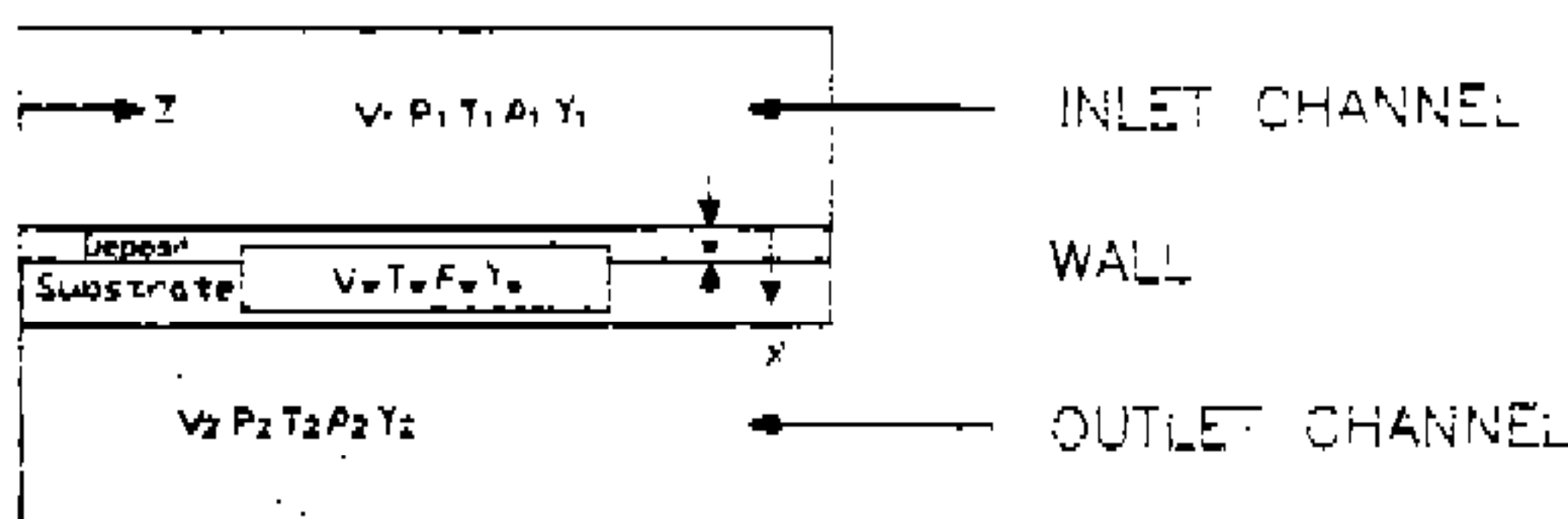


Fig.2 Schematic diagram of single inlet and outlet channels with bordering wall. Vertical height is greatly exaggerated.¹⁾

채널내에서는 대류만이 고려되었다. 그래서 상호열전달은 입구채널 계면과 벽의 내부에서만 허용되었다.

2.1 필터트랩의 경계 조건과 초기 조건

채널 입구에 대한 경계조건

$$T_1(0, t) = T_f(t) \tag{1}$$

$$\rho_1(0, t)v_1(0, t) = G_f(t) \tag{2}$$

막힌 채널끝에 대한 조건

$$\rho_1(L, t)v_1(L, t) = 0 \tag{3}$$

$$\rho_2(0, t)v_2(0, t) = 0 \tag{4}$$

$$T_2(0, t) = T_w(0, t) \tag{5}$$

$$p_2(L, t) = p_{atm} \tag{6}$$

채널 전면이나 후면에서 고체로부터 국부 열손실을 무시할 경우

$$\frac{\partial T_w(0, t)}{\partial z} = 0 \tag{7}$$

$$\frac{\partial T_w(L, t)}{\partial z} = 0 \tag{8}$$

벽의 온도는 일정하다고 가정한다면

$$T_w(z, 0) = T_b \tag{9}$$

2.2 필터트랩의 수학적 모델 해석을 위한 지배방정식

필터의 수학적 모델 해석을 위한 지배방정식은 다음과 같다.

① 상태 방정식

배기가스는 이상기체라고 가정하였으므로, 상태 방정식은 다음과 같다.

$$p_{alm} = R\rho_i T_i$$

$$p_{alm} = R\rho_w T_w \quad (10)$$

② 채널가스의 질량 보존의 법칙

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho_i v_i) = (-1)^i (4/D) \rho_w v_w \quad (11)$$

이 식의 오른쪽 항은 체적요소의 모서리를 통해서 질량유동이 빠져나가거나 들어오는 것을 나타낸다.

③ 채널가스의 z-방향 운동량 보존의 법칙

$$\frac{\partial p_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_i v_i^2) = -a_3 \mu(T_i) v_i / D^2 \quad (12)$$

왼쪽의 두 항은 압력에 의한 힘과 z방향운동량의 대류열전달을 나타낸다.²⁾

④ 채널 가스의 에너지 보존의 법칙

축적과 점성효과를 무시한, 가스의 내부 에너지의 미분형태는 다음과 같다.

$$\nabla \cdot (\rho \bar{v} e) = -\nabla \cdot \bar{q} - p \cdot \nabla \bar{v} \quad (13)$$

r방향에 있어서 열전달 계수 h_i ³⁾를 사용하고, 벽을 통한 대류열전달을 고려하면 다음과 같다.

$$C_{pg} \rho_i v_i \frac{\partial T_i}{\partial z} = (4/D) [h_i + (-1)^i C_{pg} \rho_w v_w] \cdot (T_w - T_i) \quad (14)$$

⑤ 채널 가스에서 산소 보존의 법칙

$$Y_1(z, t) = Y_1(0, t) \quad (15)$$

⑥ 입자상 물질 균형^{4, 5)}

$$\rho_p \frac{\partial w}{\partial t} = -(M_s/M_{ox}) Y_1(0, t) \rho_w v_w [1 - \exp(-S_p k(T_w) w/v_w)] \quad (16)$$

왼쪽항은 채널의 미소 벽면적에 대한 국부적인 입자상물질층 두께의 소모율이다. 오른쪽항은 위치 z에서 입자상물질층 두께에 걸친 전체 반응율에 비례한다.

⑦ 벽에 대한 유동 저항

채널벽은 다공성 매질이기 때문에, 유동에 의하여 발생하는 유동저항에 대한 보정이 필요하다. 한편 많은 연구자들⁶⁾에 의해서 다음과 같은 같은식을 제안하기도 하였다. 즉, 연료의 미립자를 포함한 배출가스가 채널벽을 통과 할 경우의 유동방정식은 다음과 같다.

$$-\nabla p = \alpha \mu v + \beta \rho v^2 \quad (17)$$

여기서 α 와 β 는 매질의 특성계수이다.

윗 식을 모노리스 채널벽을 통과 할 경우 저항식을 나타내면 다음과 같다.

$$p_1 - p_2 = (\alpha \mu(T_w) v_w + \beta \rho_w^2) (w_s + \phi_w) \quad (18)$$

여기서

$$\phi_w = \begin{cases} (2\omega_2 - \omega_3)(w/\omega_1) - (\omega_2 - \omega_3)(w/\omega_1)^2, & w < \omega_1 \\ \omega_2 + \omega_3(w/\omega_1 - 1), & \geq \omega_1 \end{cases} \quad (19)$$

⑧ 벽에서 에너지 보존법칙

$$H_{ACCUM} = H_{CHAN1} - H_{CHAN2} + H_{REACT} - H_{COND} \quad (20)$$

$$\therefore H_{ACCUM} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_p w C_{pp}(T_w) T_w + \rho_s w_s C_{ps}(T_w) T_w)$$

$$H_{CHAN1} = -h_i(T_w - T_1) + C_{pg} \rho_w v_w T_w$$

$$H_{CHAN2} = h_2(T_w - T_2) + C_{pg} \rho_w v_w T_w$$

$$H_{REACT} = (\Delta H/M_{ox}) \rho_w v_w Y_1(0, t)$$

$$[1 - \exp(-S_p k(T_w) w/v_w)]$$

$$H_{COND} = -\lambda_p \frac{\partial}{\partial z} \left(w \frac{\partial T_w}{\partial z} \right) - \lambda_s w_s \frac{\partial^2 T_w}{\partial z^2}$$

열 축적율은 입구채널1에서 전달된 열율로부터 채널 2로 빼앗기는 열율을 빼고 반응에 의한 열율을 보탠 뒤 전도에 의한 열율을 뺀 것이다. 복사 열전달은 무시하였다. 그 이유는 서로 마주보는 벽들의 온도는 거의 같기 때문이다.

이상으로 모델링의 수식화를 마무리한다.

3. 디젤 입자상물질 필터의 동적 시뮬레이션

초기조건 주어지면 공간에 대하여 \bar{w} 와 \bar{T}_w 를 제외한 나머지 변수들이 반복계산됨에 따라 수렴한다. 수렴에 대한 검사는 다음의 두가지 조건을 동시에 행하였다. 첫째, 그 시간대에 따른 정상상태에 대한 검사로써 각 격자점에 대한 \bar{v}_w 의

변화가 10^{-5} 보다 작도록 하였다. 둘째, 질량 보존의 법칙의 만족에 대한 검사로써 벽을 통한 $\bar{\rho}_w \bar{v}_w$ 값이 초기시간일때의 값과 비교하여 10^{-7} 의 오차를 만족하도록 하였다. 주어진 시간대에서 두가지 조건을 만족하면 다음 시간대에서 \bar{w} 와 \bar{T}_w 를 구한 후 위의 과정을 다시 반복한다. 격자점은 채널의 전체길이에 대하여 41개의 등간격 격자점을 사용하였다. \bar{p}_1 의 채널 끝점에 대한 경계조건은 그 때의 \bar{v}_w 값을 사용하여 식(18)에서 구한다. 식(18)의 \bar{v}_w 는 근의 공식을 사용하여 구한다. 식(14)의 \bar{T}_1 과 \bar{T}_2 는 뉴턴-랩슨의 반복법을 사용하여 구한다. 프로그램은 포트란77언어로 작성되었으며 컴파일러는 F77L3를 사용하였다. 프로그램의 알고리즘⁷⁾은 Fig.3에 나타내었다.

4. 디젤 입자상물질 필터의 최적 상태값 변수의 계산

디젤입자상 물질의 열적재생에 관한 필터의 최적 상태값 변수를 구하기 위하여 앞에 나타내었던 식들을 조합하여 수치계산을 하였다. 필터의 열적 재생에 영향을 미치는 인자는 입자상 물질의 초기 축적량, 산소농도, 필터의 여과 면적으로 크게 나눌 수 있다. 이 세가지 인자 중 두가지를 고정시킨 후, 나머지 한가지 인자를 변화시켜 가면서 각각의 최고 벽온도, 최고 벽온도 구배, 필터벽을 통한 최고 압력차의 변화를 통하여 알아보았다. 필터의 경계조건⁸⁾은 600K에서 950K로 접근하는 형태를 선택하였다.

4.1 입자상 물질의 초기 축적량

필터의 여과면적을 9800cm^2 , 산소농도 5%로 고정시킨 후, 입자상 물질의 초기 축적량을 변화시켜 가면서 계산하여 보았다. 초기 축적량을 증가시킬수록 Fig.4 (a), 4(b)로부터 최고 벽온도 및 최고 벽온도 구배가 대수 곡선 형태로 증가함을 알 수 있다. 그러나 압력강하는 Fig.4(c)를 통하여 축적량의 변화에 대하여 선형적인 변화를 보임을 알 수 있다.

Fig.4 (a)를 통하여 40g이상에서는 최고 벽온도 변화가 완만해짐을 알 수 있으며, 최고 벽온도

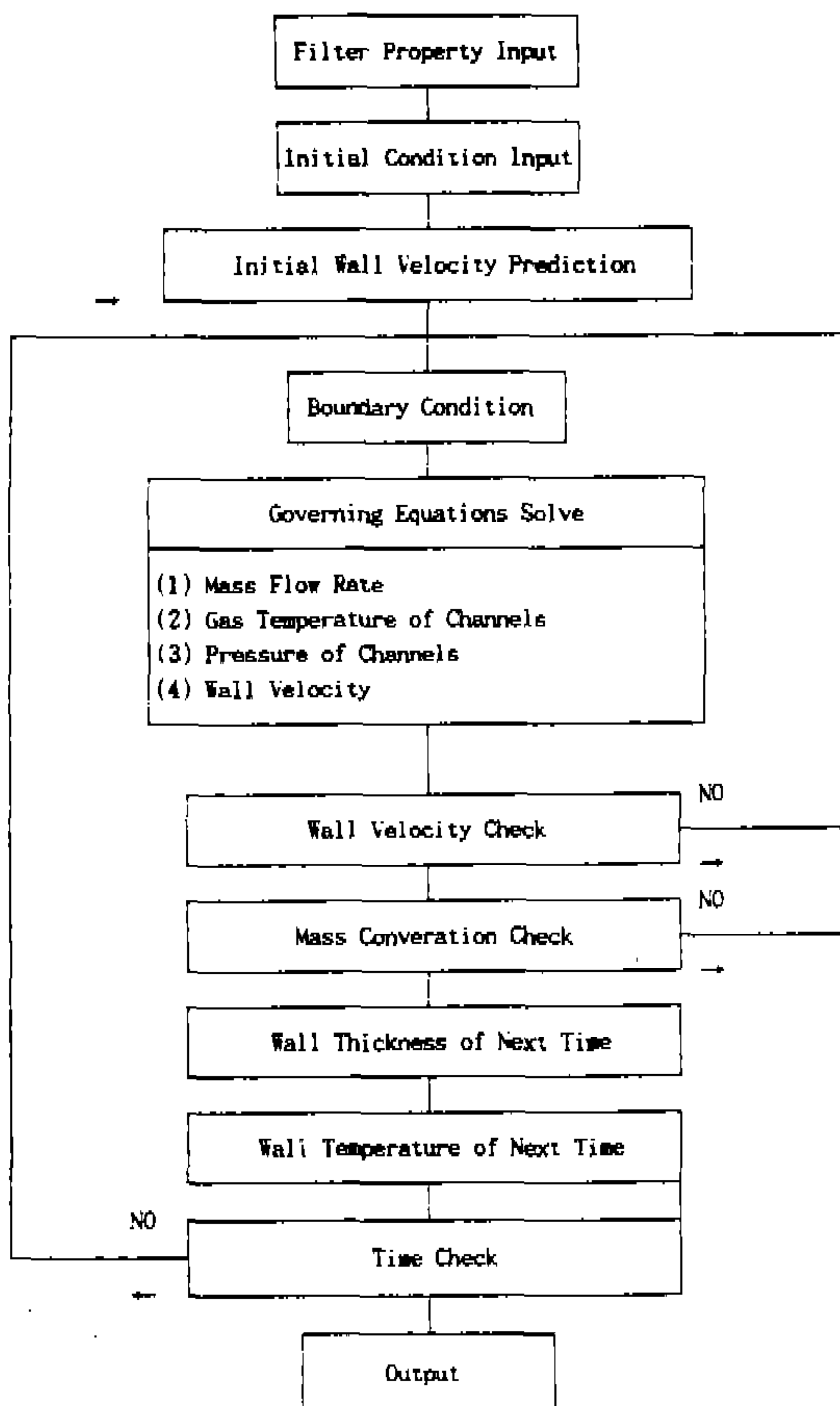


Fig.3 Filter trap simulation algorithm

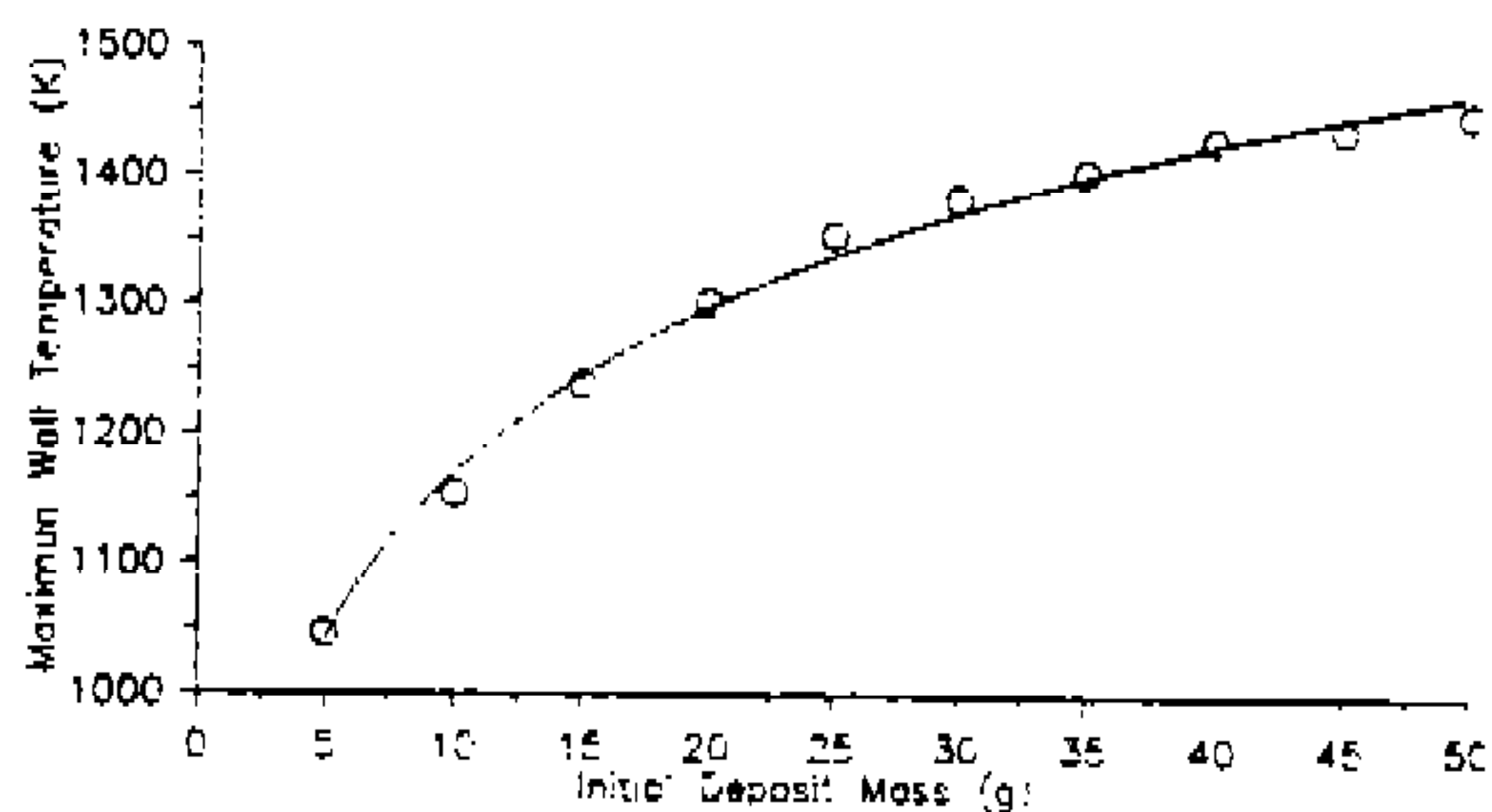


Fig.4 (a) Maximum wall temperature variations as initial deposit mass.

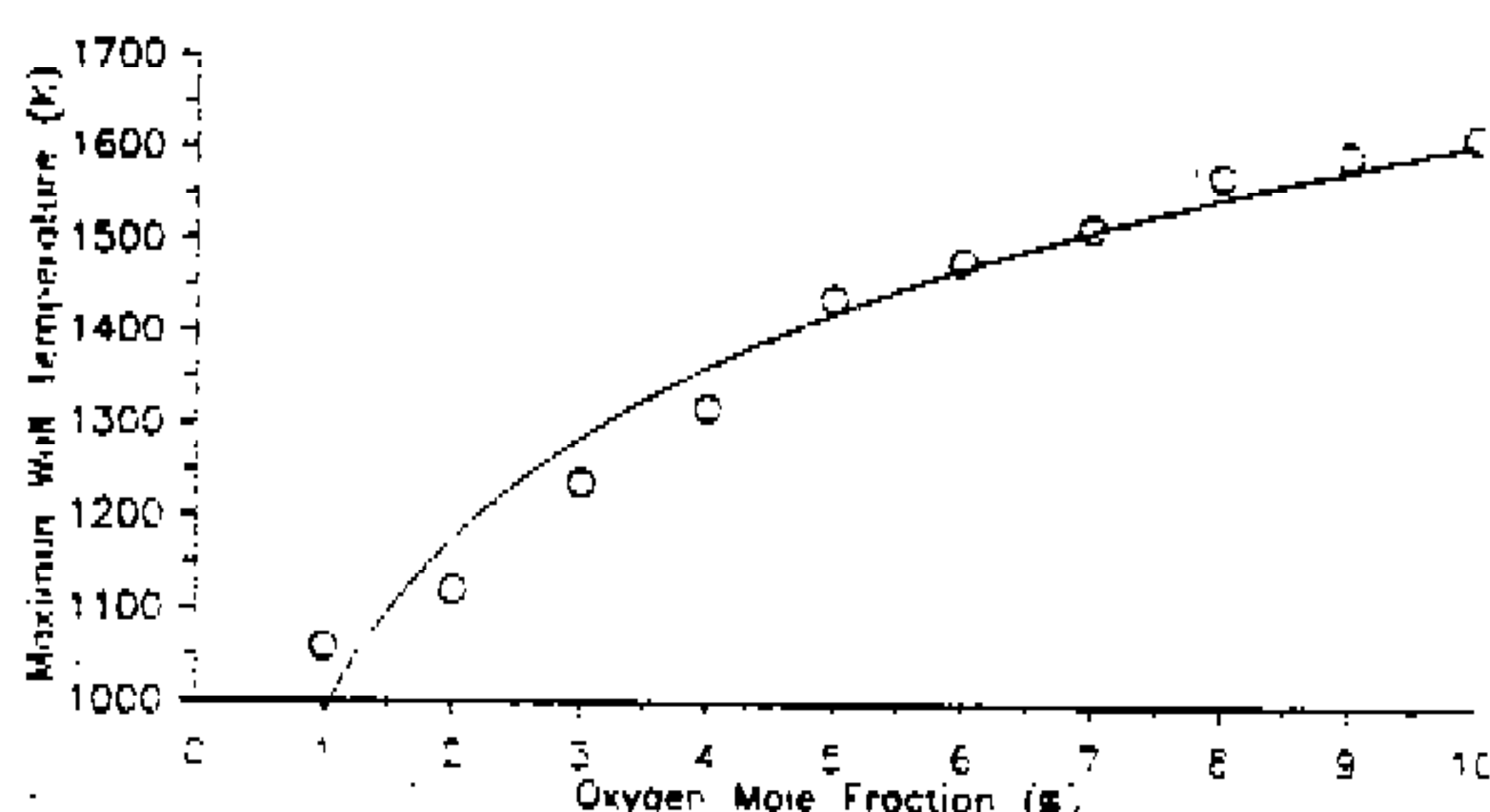


Fig.5 (a) Maximum wall temperature variations as oxygen mole fraction.

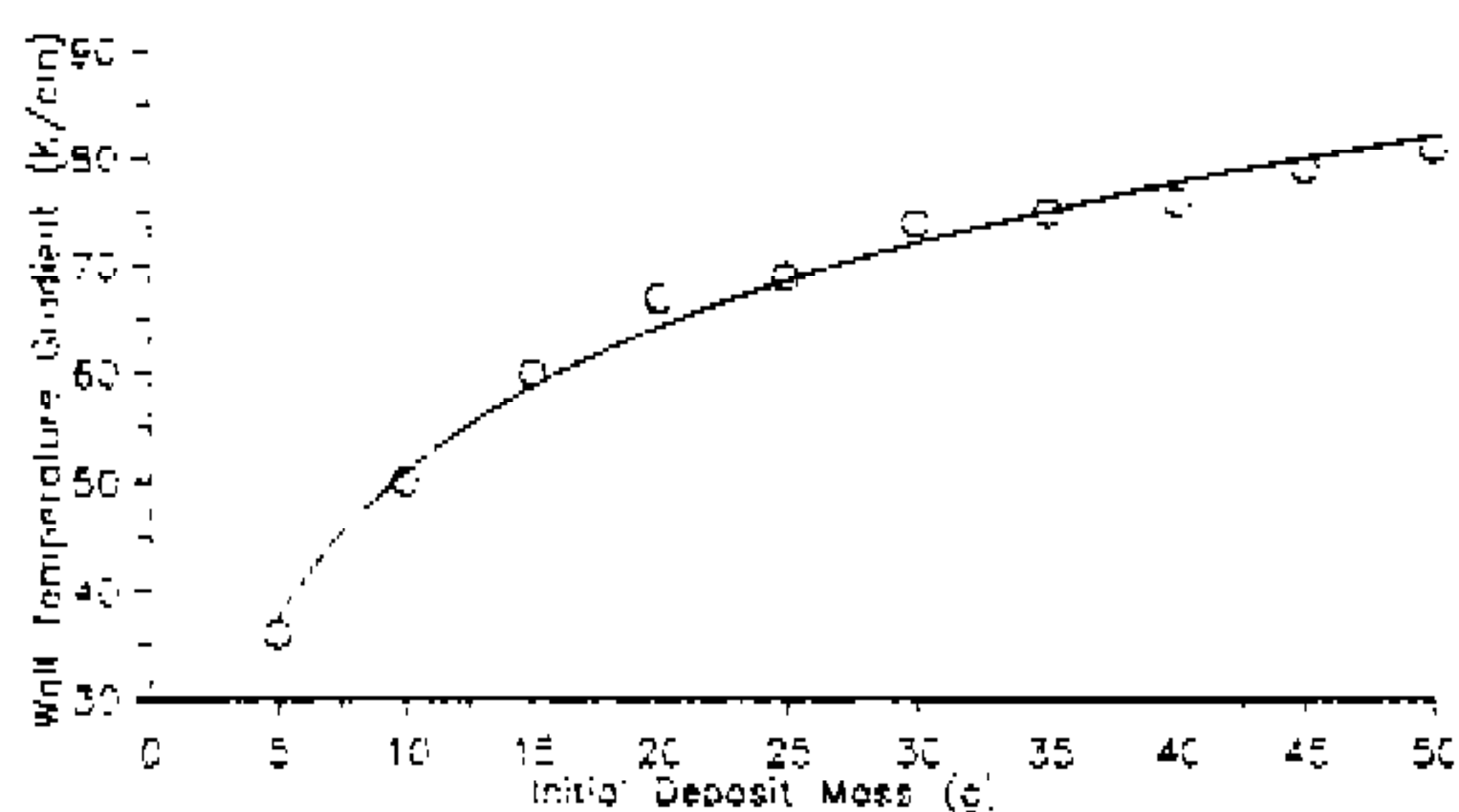


Fig.4 (b) Maximum gradient variations of wall temperature as initial deposit mass.

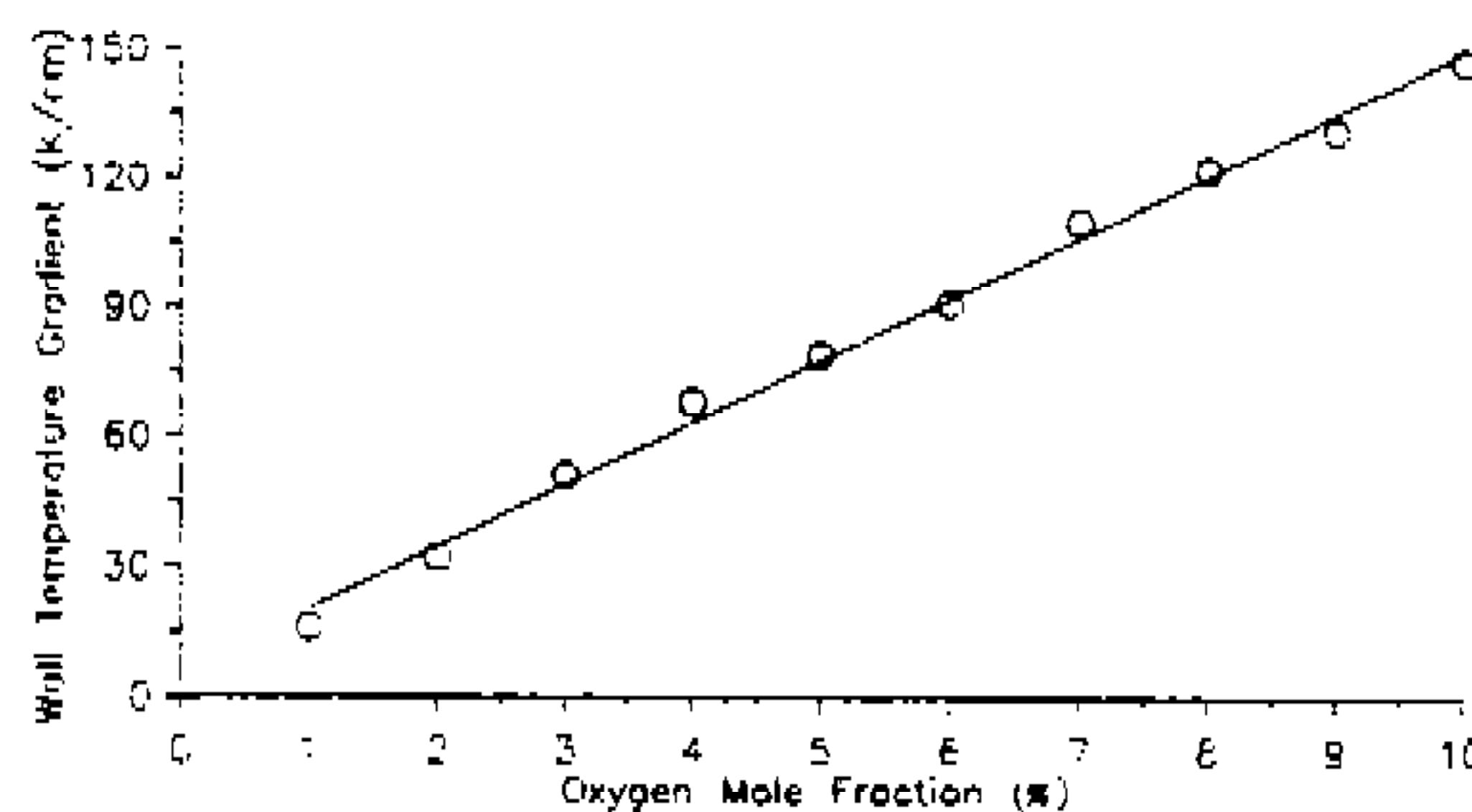


Fig.5 (b) Maximum gradient variations of wall temperature as oxygen mole fraction.

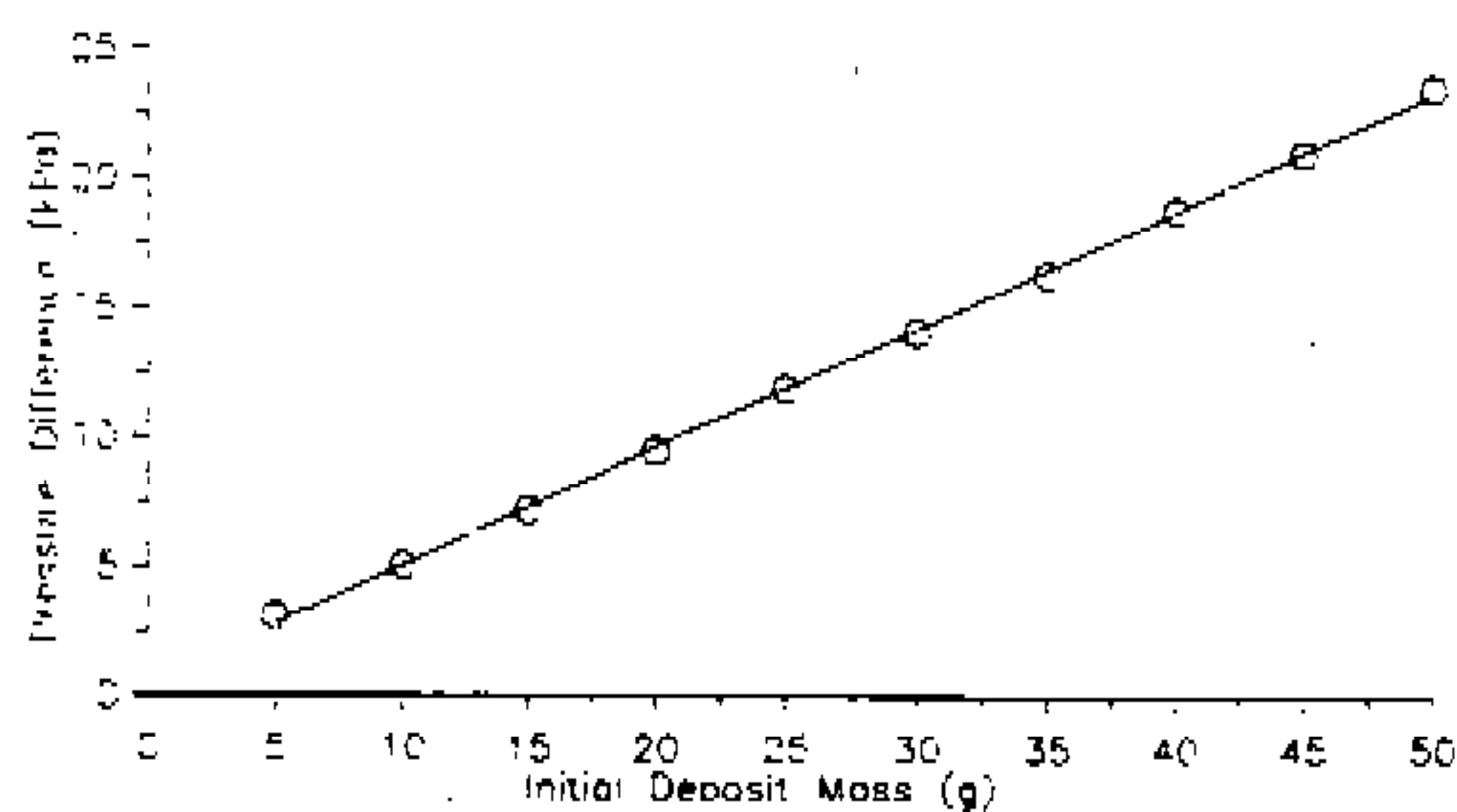


Fig.4 (c) Pressure difference variations through filter wall as initial deposit mass.

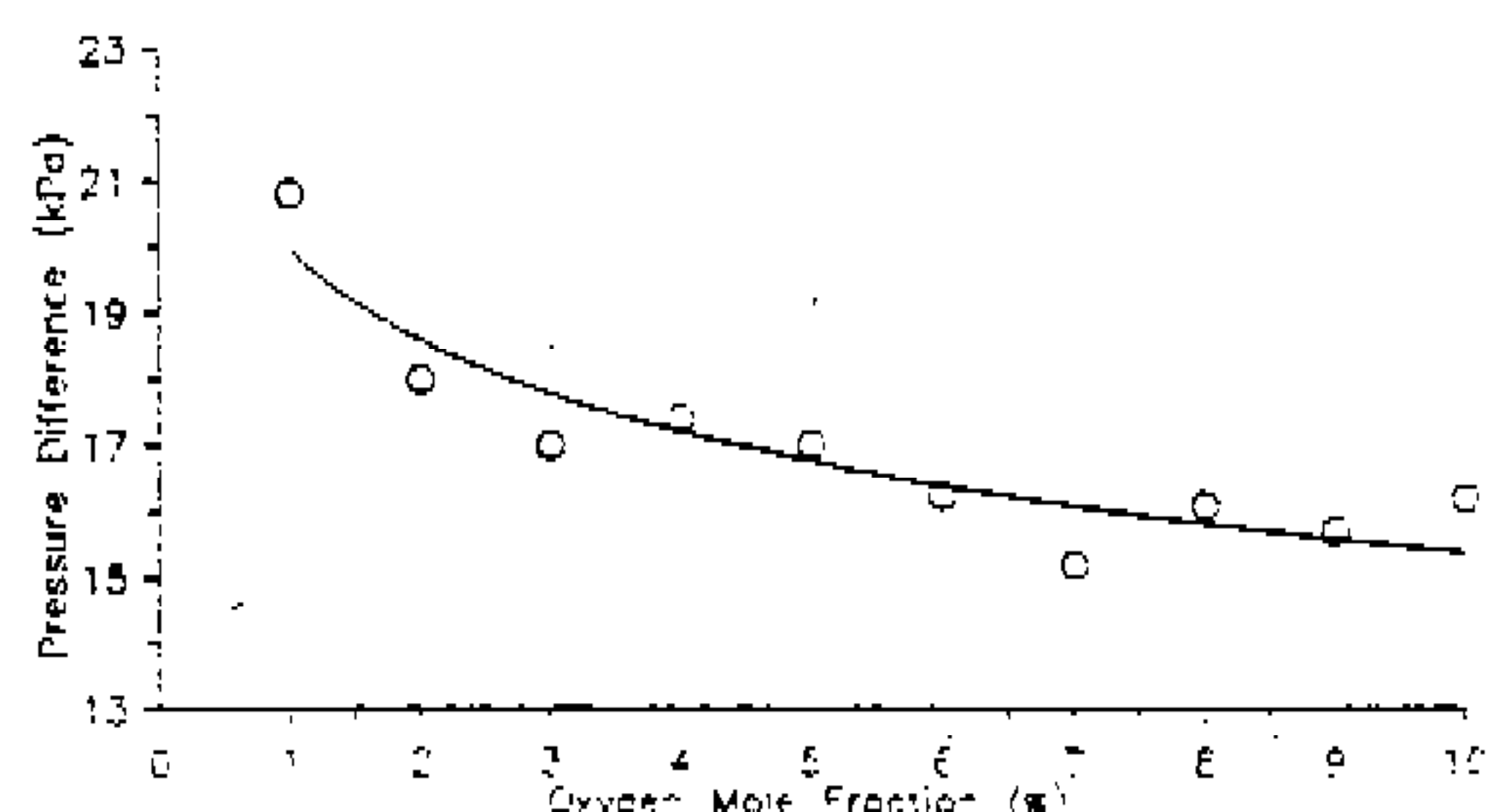


Fig.5 (c) Pressure difference variations through filter wall as oxygen mole fraction.

구배는 초기 축적량 25g이상에서 완만해짐을 Fig. 4 (b)에서 알 수 있다. 따라서, 입자상 물질의 재생주기를 고려하여 초기 축적량으로서 50g을 선택할 수 있다. 그러나 최고 벽온도 및 최고 벽온도 구배가 허용치 이상을 나타내며, 필터의 안전재생에 위협한 영향을 줄 수 있다. 이러한 위험한 상태는 나머지 두가지 인자를 변화시킴으로서 조절할 수 있다.

4.2 산소 농도

Fig.5는 필터의 여과면적을 9800cm², 초기 축적량을 50g으로 일정하게 하고, 산소 농도를 변화시켜가면서 최대벽온도, 최대벽온도구배 및 압력강하를 계산하였다. 산소농도는 일반적으로 5%가 적당하며, 그 이상의 값에서는 과도한 벽온도나 벽온도 구배를 초래한다. 산소농도의 변화에 따라 최고 벽온도와 벽을 통한 압력강하는 대수 곡선적인 변화를 나타내며, 최고 벽온도 구배는 선형적인 변화를 나타냈다.

4.3 필터의 여과면적

초기 축적량을 50g, 산소 농도를 5%로 고정시킨 후 필터의 여과면적을 변화시키면서 계산하였다. 최고 벽온도, 최고 벽온도 구배 및 압력 강하를 안전한 상태로하기 위해서는 9800cm²의 3배인 29400cm²의 여과 면적이 필요함을 Fig.6 (a), 6 (b), 6 (c)를 통해서 알 수 있다.

4.4 표본 계산

Fig.7, 8, 9, 10은 입자상 물질의 초기 축적량

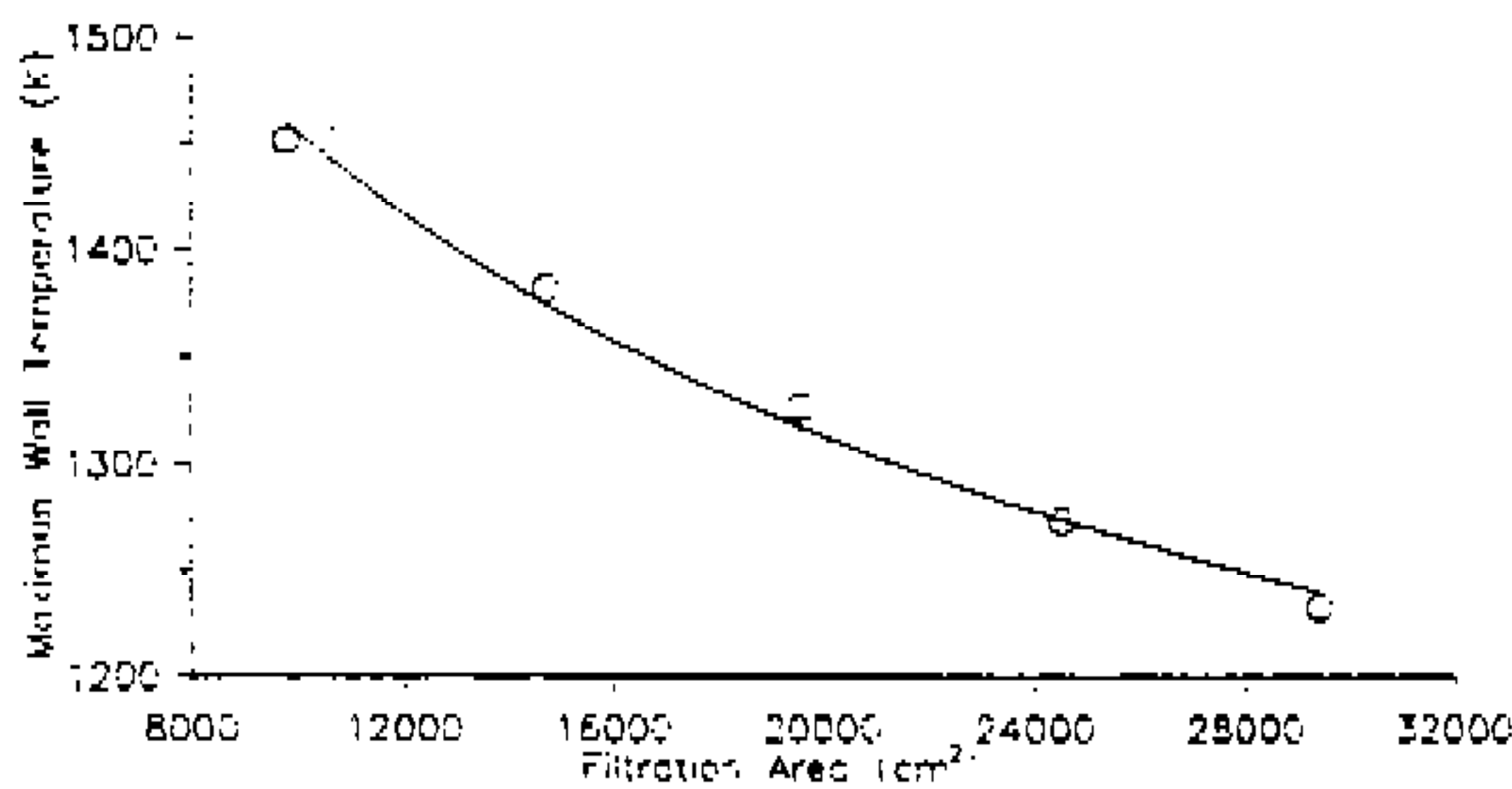


Fig.6 (a) Maximum wall temperature variations as filtration area.

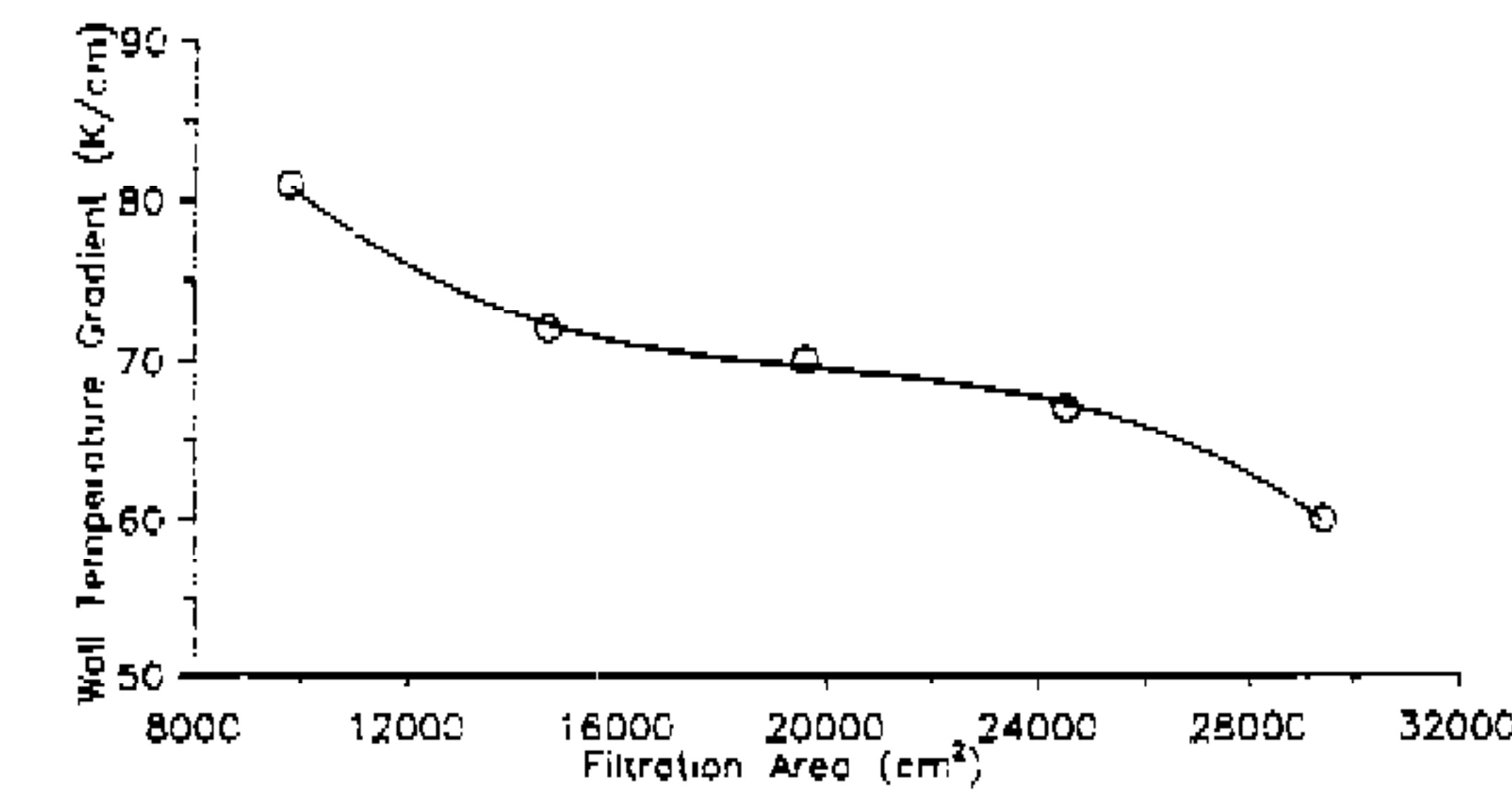


Fig.6 (b) Maximum gradient variations of wall temperature as filtration area.

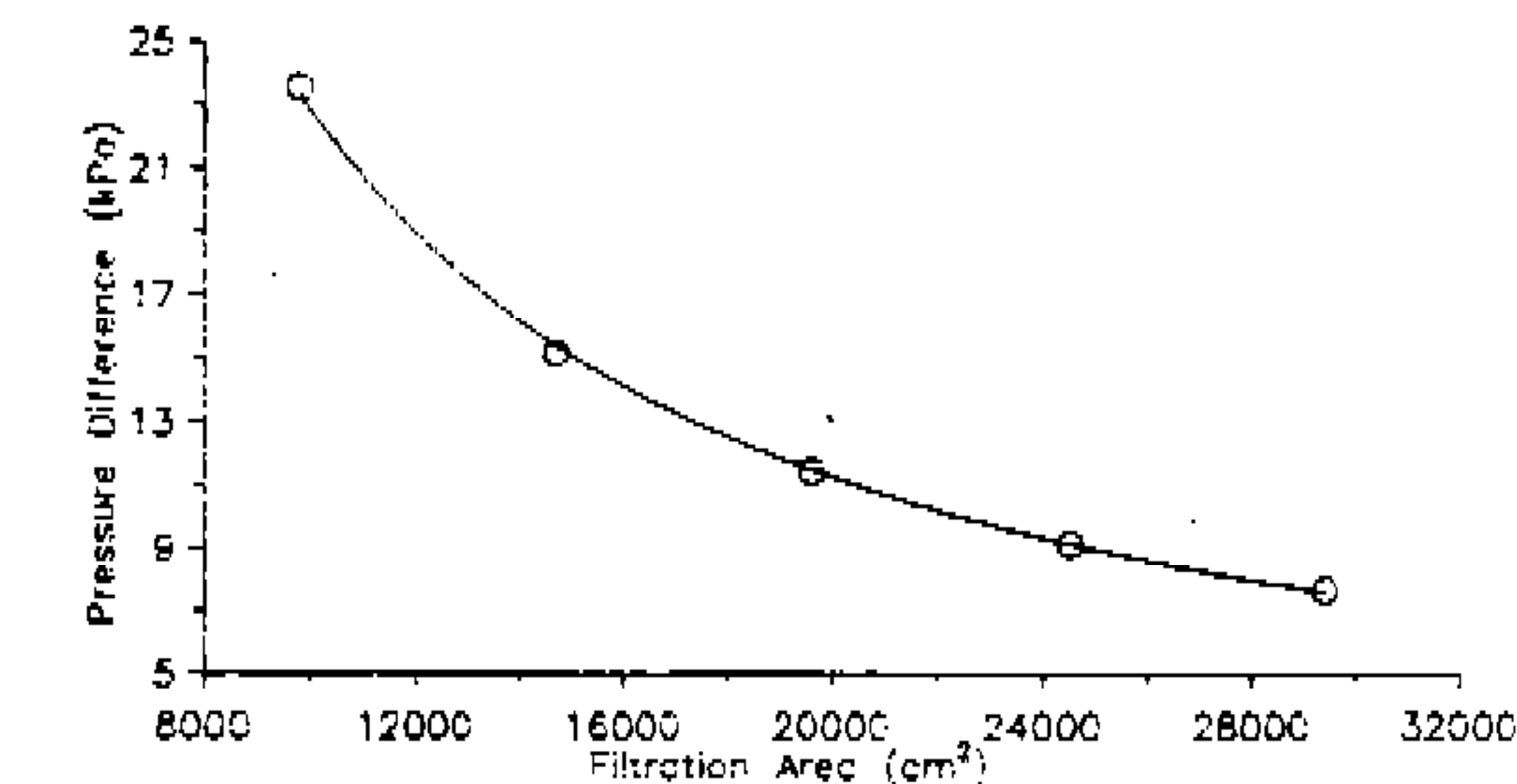


Fig.6 (c) Pressure difference variations through filter wall as filtration area.

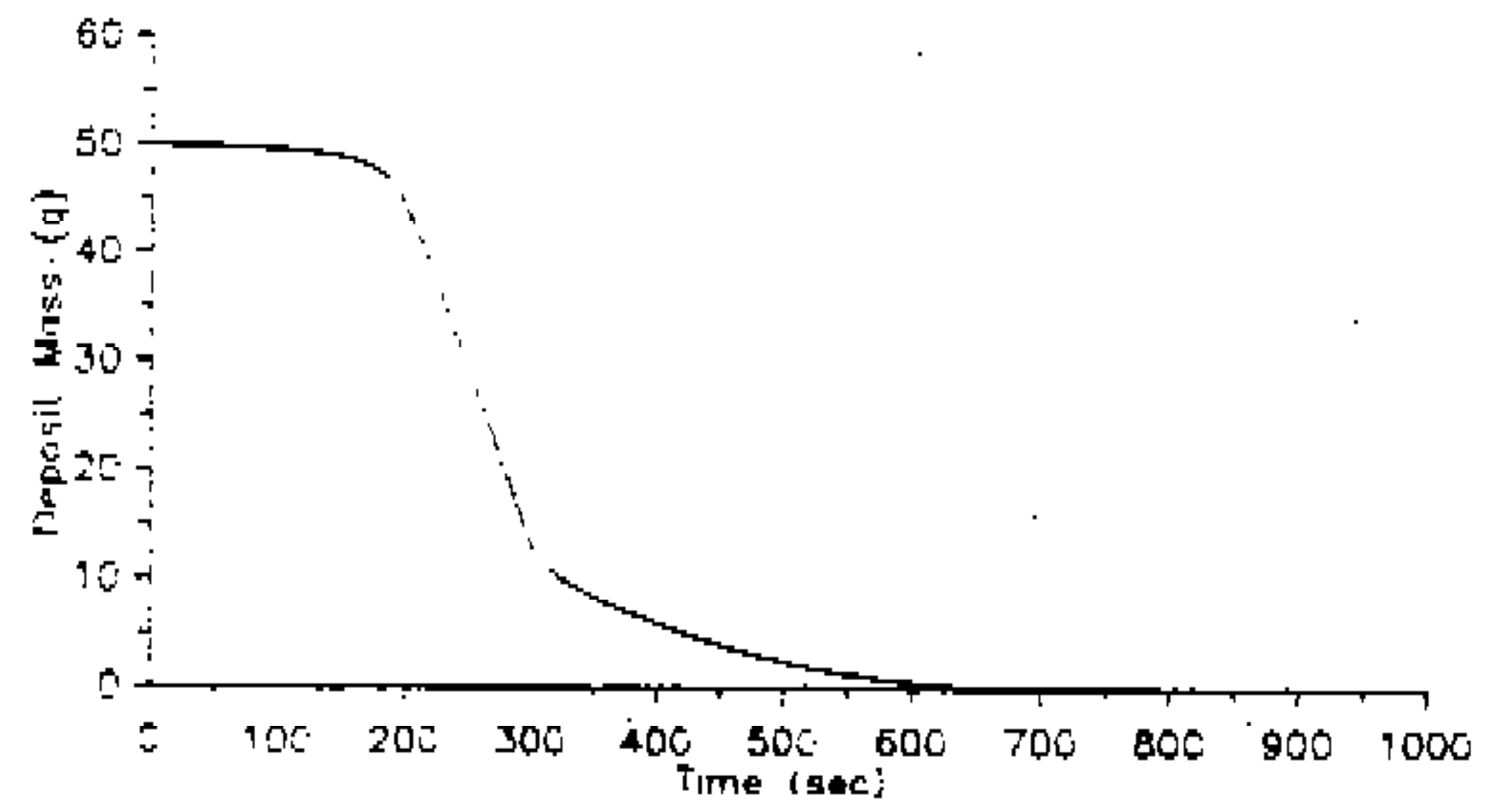


Fig.7 Deposit remaining in the filter as a function of the time since the start of regeneration.

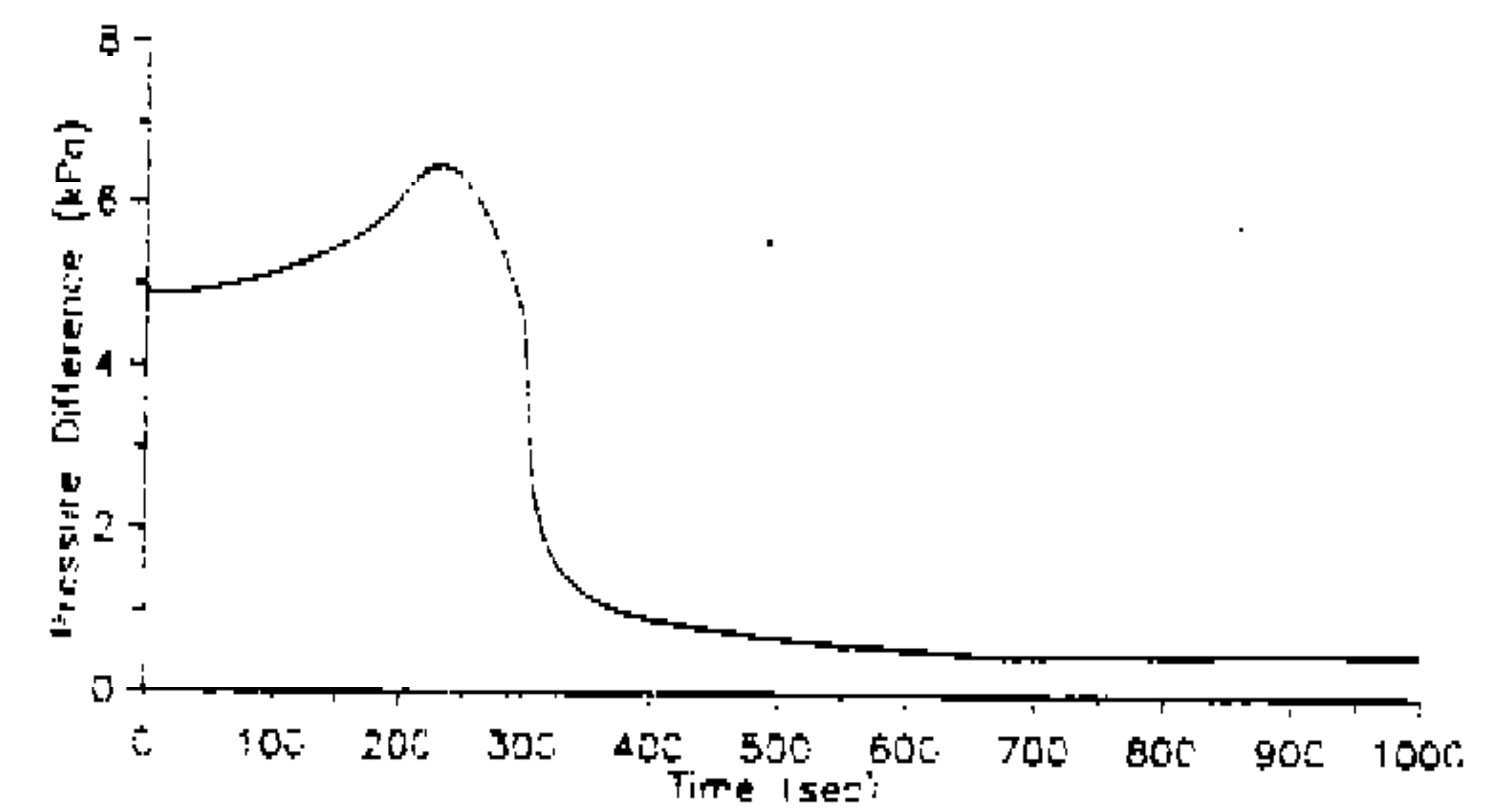


Fig.8 Time dependence of the pressure difference across the monolith.

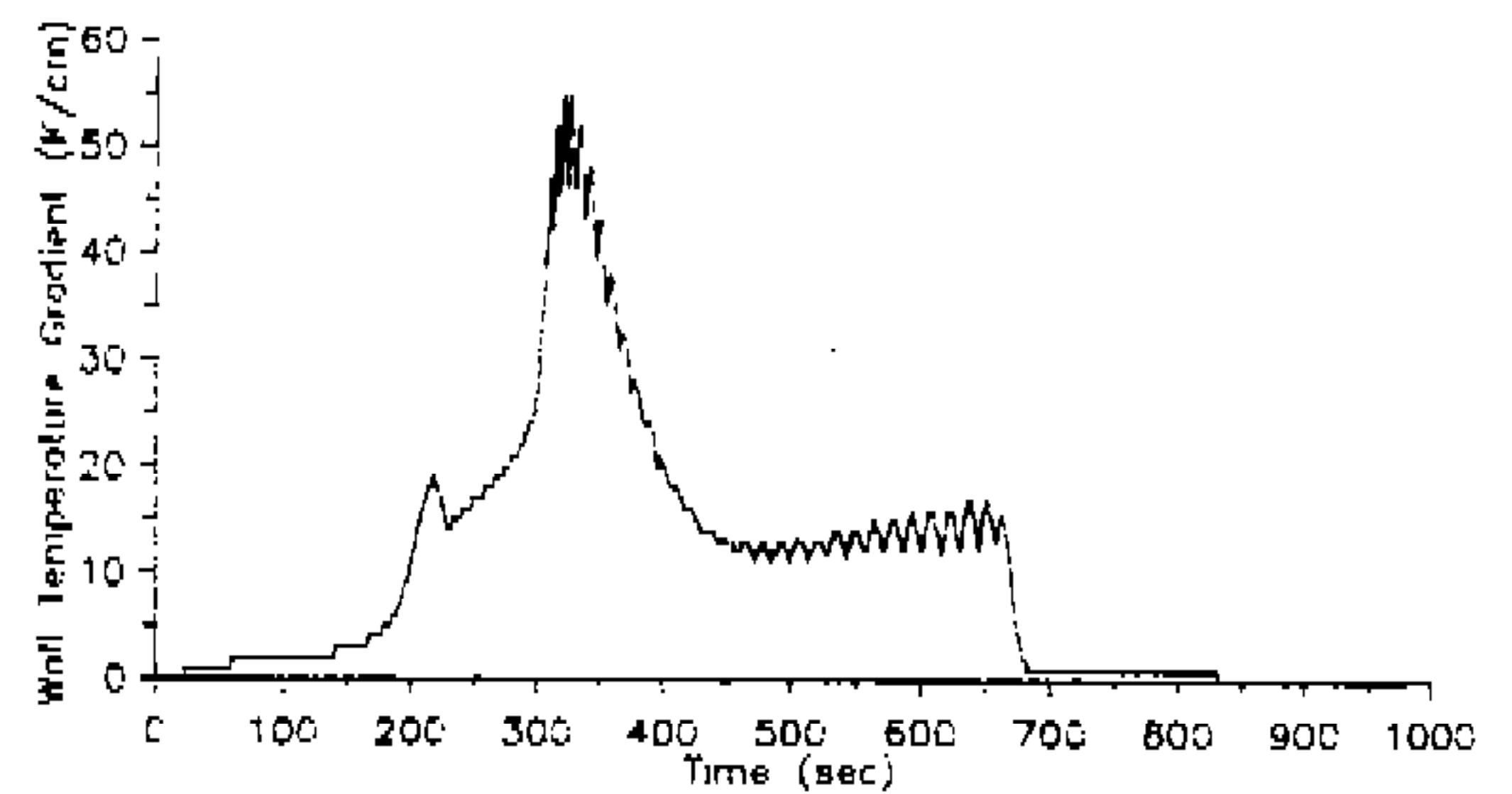


Fig.9 Transient behavior of absolute value of maximum temperature gradient.

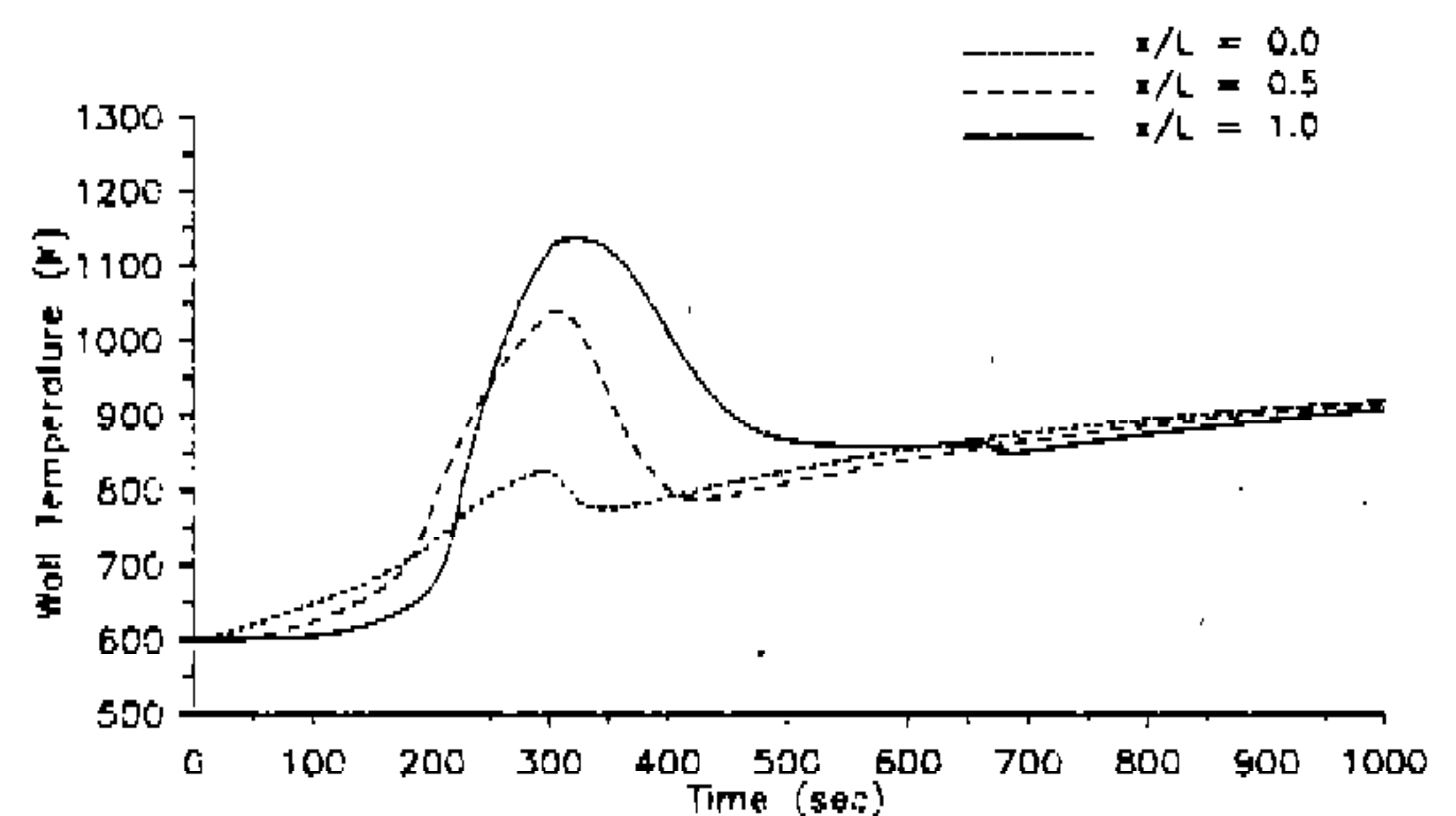


Fig.10 Filter wall temperature variations in the filter at the 3 points as a function of time.

50, 산소 농도 5%, 필터의 여과 면적 29400cm^2 에서의 계산결과이다. Fig.7에서 필터의 재생 시간은 대략 650초이다. Fig.8에서는 시간에 따른 압력구배의 변화를 보여주고 있다. 초기에는 압력강하는 증가하나 시간이 지남에 따라 점점 감소한다. 즉, 채널 전면의 매연층이 완전히 연소되기까지는 유동저항의 감소는 일어나지 않는다.

Fig.9에서는 시간에 따른 최고벽온도 구배를 보여주고 있다. 이 온도구배곡선은 필터의 균열을 일으키는 열응력을 찾는 데 사용된다. 최고온도 구배를 감소시키기 위해서는 입구온도를 서서히 증가시키면 된다. Fig.10에서는 시간과 필터의 거리에 따라서 온도가 상승함을 볼 수 있다. 즉 필터 앞부분에서 뒷부분으로 연소가 됨을 알 수 있다.

5. 결 론

본 연구를 통하여 디젤 입자상 물질을 저장하는 세라믹 필터재생에 대한 수학적 해석 및 시뮬레이션 프로그램의 완성과 그에 따른 본 필터트랩의 최적값을 계산하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 디젤 입자상 물질의 열적 재생은 초기 입자상 물질의 부하량, 필터의 여과 면적 및 입구 가스의 산소 농도에 의하여 영향을 받음을 알 수 있었다.
- 2) 본 필터사용시 40g이상에서는 최고 벽온도 변화가 완만해짐을 알 수 있었고, 최고벽온도 구배는 초기 축적량 25g이상에서 완만해짐을 알 수 있었다.
- 3) 산소농도는 일반적으로 5%가 적당하며 그 이상의 값에서는 과도한 벽온도나 벽온도 구배를 초래함을 발견할 수 있었다.
- 4) 50g의 축적량과 5%의 산소농도에서 최고 벽온도, 최고 벽온도 구배 및 압력강하를 안전한 상태로하기 위해서는 9800cm^2 의 3

배인 29400cm^2 의 여과 면적이 필요함을 알 수 있었다.

- 5) 재생에 영향을 미치는 요소들을 분석하여 최적조건을 상태값들을 수치계산으로 구할 수 있으며, 이를 필터의 설계와 실제의 재생 운전에 대하여 이용할 수 있다.

참 고 문 헌

1. Edward J. Bissett., Mathematical Model of the Thermal Regeneration of a Wall-Flow Monolith Diesel Particulate Filter, p.2. Pergamon Press Ltd. 1984.
2. Shah R.K. and London A.L., Laminar Flow Forced Convection in Ducts : a Sourcebook for Compact Heat Exchanger Analytical Data, pp. 196-205. Academic Press. New York 1978.
3. Bird R.B., Stewart W.E. and Lightfoot E.N., Transport Phenomena. pp.23-257. Wiley, New York 1960.
4. Field M.A., Gill D.W., Morgan B.B and Hawksley P.G.w., Combustion of Pulverized Coal, pp. 329-345, BCURA Leatherhead. Cheroy and Sons, Ltd., Banbury 1967.
5. Murphy M.J., Hillenbrand L.J., and Trayser D. A., Assessment of diesel Particulate control-direct and catalytic oxidation. SAE Paper 910112 1981.
6. MacDonald I.F., EI-Sayed M.S., Mow K. and Dullien F.A.L., Ind Engng Chem. Fundls
7. 강호인, 조재명, 한영출, CI기관에서 세라믹 모노리스 필터의 열재생에 관한 수학적 해석, 한국자동차 공학회지, 제14권 6호, 1992.
8. 김종필, 디젤기관에서 전기히터식 세라믹 필터트랩의 재생성능에 관한 연구, 국민대학교 석사학위 논문, 1993.