

자동차용 촉매변환기의 최적설계를 위한 열 및 유동특성에 대한 수치적 연구

정수진* · 김우승**
(1998년 10월 29일 접수)

Numerical Analysis of Thermal and Flow Characteristics for an Optimum Design of Automotive Catalytic Converter

Soo-Jin Jeong and Woo-Seung Kim

Key Words: Catalytic Converter(촉매변환기), Light-Off(저온 활성화), Mass Transfer(물질전달), Chemical Reaction(화학반응), Equivalent Continuum Approach(연속체적 접근)

Abstract

In the present work, the effect of a flow maldistribution on the thermal and conversion response of a monolith catalytic converter is investigated. To achieve this goal, a combined chemical reaction and multi-dimensional fluid dynamic mathematical model has been developed. The present results show that flow uniformity within the monolith brick has a great impact on light-off performance of the catalytic converter. In the case of lower flow uniformity, large portions of the monolith remain cold due to locally concentrated high velocities and CO, HC are unconverted during warm-up period, which leads to retardation of light-off. It has been also found that the heat-up pattern of the monolith is similar to the flow distribution profile, in the early stage of the reaction. It may be concluded that flow maldistribution can cause a significant retardation of the light-off and hence can eventually worsen the conversion efficiency of automotive catalytic converter.

기호설명

A	: 단면적(m ²)	k	: 난류 에너지(m ² /s ²)
a _c	: 단위체적 당 촉매의 표면적 비	K _{mi}	: 화학종 i의 물질전달 계수(m/s)
a _v	: 모노리스의 단위체적 당 표면적 비(m ² /m ³)	k _r	: 형상계수
C _{g,i}	: 화학종 i의 농도(mol/mol)	K _s	: 모노리스의 열전도 계수(W/mK)
C _p	: 정압비열 (J/kgK)	L	: 모노리스 길이
C _{s,i}	: 모노리스 표면에서의 화학종 i의 농도 (mol/mol)	M _i	: 화학종 i의 분자중량
D _h	: 채널의 수력직경(m)	M _{Rg}	: 배기가스의 몰 질량 kg/kmol
G	: 모노리스의 비등방성 열전도 상수	P	: 압력(N/m ²)
h	: 대류열전달 계수(W/m ² K)	r	: 반경방향 좌표
h _g	: 가스의 엔탈피(J/kg)	r _i	: 화학종 i의 본질적 반응률(mol/m ² Pt · s)
ΔH _i	: 화학종 i의 반응열 (J/mol)	R _i	: 화학종 i의 단위체적 당 반응률(mol/m ³ s)
		S _h	: 엔탈피 생성량
		T	: 온도(K)
		T _m	: 혼합가스의 온도 (K)
		t	: 시간(sec)
		U	: 채널내의 축방향 대표 속도(m/s)

* 회원, 한양대학교 대학원 기계공학과

** 회원, 한양대학교 기계공학과

U_i	: 시간평균 속도(m/s)
v_{mag}	: $\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$
v_{in}	: 입구유속
x	: 축방향 좌표
ρ	: 밀도(kg/m ³)
σ_{ij}	: 혼합물 ij에 대한 Lennard-Jones 상수
Ω_D	: 확산충돌계수(collison integral for diffusion)
ϵ	: 다공률
ϵ	: 난류 에너지 소산율(m ² /s ³)
γ	: 유속 불균일도

하첨자

b	: brick
g	: gas
i	: inlet
s	: solid

약어

CO	: Carbon monoxide
cpai	: cells per square inch
HC	: hydrocarbon
Pt	: Platinum

1. 서론

점차 증가하고 있는 환경에 대한 관심과 엄격한 배출물 규제에 인하여 최근 자동차 설계에 있어서 배출물 처리장치의 성능 향상과 신제품 개발의 중요성이 증대되고 있다. 따라서 자동차의 배출물 처리 장치로 가장 많이 쓰이고 있는 촉매 변환기에 대한 연구가 국, 내외적으로 활발히 진행되고 있다.

촉매 변환기의 성능은 촉매 자체의 특성 뿐만 아니라 엔진 배기계의 기하학적 형상 및 운전조건에 따라 많은 영향을 받는다. 특히 극고속 촉매의 조성과의 ECU와 산소센서 간의 제어 특성으로 인한 공연비의 맥동현상, 그리고 모노리스를 통과하는 배기가스의 유속 분포 등은 촉매 변환기의 성능을 좌우하는 주요 인자이다.

성능에 관련된 많은 인자 중 가장 중요한 것은 유속 분포이다.⁽¹⁻³⁾ 실제로 배기관의 곡률 및 내경 등 배기계의 복잡한 형상으로 인하여 촉매 변환기

의 내부 유동은 매우 복잡하며 국부적으로 편중되어 있으며 이러한 유속 분포가 촉매 변환기의 수명 및 성능에 미치는 영향은 매우 크다.

유속 분포의 또다른 중요성은 이것이 활성화(Light-off) 성능에 직접적인 연관이 있다는 사실이다. 시동 후 수십 초 이내에 배출물의 80% 이상이 정화되지 않고 배출되기 때문에 이러한 저온시 촉매 변환기의 거동은 촉매 변환기의 성능 향상의 가장 중요한 인자이며 따라서 많은 연구가 진행되어져 왔다.^(4,5)

70년 초반에 Kuo⁽⁶⁾ 및 Hawthorn⁽⁷⁾ 등은 한 개의 모노리시 채널만을 대표하여 해석하는 단일관 모델(single channel model)을 개발하였다. 그들은 채널이 단일 되었다고 가정하여 Nusselt(Nu) 및 Sherwood(Sh)수의 관계를 이용, 채널 벽과 가스와의 열 및 물질 전달을 해석하였고 washcoat 층을 얇은 막으로 간주하여 층의 깊이 방향으로의 온도 및 농도 분포가 일정하다고 가정하여 산화반응을 해석하였다.

80년대 초반에 Cavendish,⁽⁸⁾ Fueyo,⁽⁹⁾ Heck,⁽¹⁰⁾ Young⁽¹¹⁾ 등은 단일관 모델을 이용하여 모노리시 내의 급격한 온도 상승을 비정상 해석을 통해 연구하였으며 관의 입구부에서의 급격한 Nu 및 Sh 수의 변화를 고려하기 위하여 단일관 모델을 2차원적으로 고려하여 해석한 후 Graetz 문제⁽¹¹⁾로부터 점근법적으로 얻은 Nu 및 Sh 수를 이용한 기존의 단일관 모델의 해석결과와 비교하였다.

80년대 후반에는 Ryan⁽²⁶⁾이 역시 단일관 모델을 사용하여 채널 내에서 일어나는 복사열 전달 효과를 수치적으로 해석하여 자동차용 촉매 변환기의 경우 복사효과가 미미하다고 보고하였다.

이러한 수학적 모델들은 채널 내의 열적 거동 및 변환 특성 등을 해석하는데 많은 공헌을 하였지만 1차원적 해석에 따른 많은 제약이 따랐다. 특히 모노리스를 통과하는 3차원적 유속 분포에 대한 고려를 할 수 없었다. 그러나 80년대 말부터 컴퓨터의 급격한 성능 향상과 수치해법의 발달로 전산 유체 역학 기법이 급성장 하게 됨에 따라 Will,⁽¹³⁾ Lai,⁽²⁾ Baxendale,⁽¹⁴⁾ Weltens,⁽¹⁵⁾ Jeong⁽¹⁶⁾ 등은 촉매 변환기를 등온, 비압축, 3차원적으로 고려하고 모노리스를 다공성 물질로 모델링하여 유입 확대부의 확대각, 모노리시 내의 채널의 밀집도 등 기하학적 변화에 따른 유속 분포의 균일도 및 압력강하에 미치는 영향에 대한 연구를 통해 유

입배기관 및 확대부의 형상은 유속 균일도에 많은 영향을 미치며 채널의 형상과 밀집도, 그리고 압력강하 사이의 상관관계를 밝혔다.

그러나 이러한 연구는 배기가스물 상온의 비반응(non-reacting) 유체로 가정하였기 때문에 유속 분포가 모노리스 내의 온도분포 및 화학종의 농도분포, 그리고 변환특성에 미치는 영향을 고려할 수 없었다. 따라서 Oh,⁽⁹⁾ Zygourakis,⁽¹⁷⁾ Karvounis⁽³⁾ 등은 모노리스를 연속체(equivalent continuum)로 가정하여 2차원적 해석을 수행하여 불균일한 유속분포가 모노리스 내의 온도 및 농도분포에 미치는 영향에 대하여 연구하였으나 이러한 연구들은 모노리스만을 대상으로 한 연구이므로 입구 유속분포를 경계조건으로 지정해 주어야 하고 마찰손실을 고려하지 않아 입구 유속분포가 모노리스 전체에 걸쳐 일정하게 유지된다고 가정하였기 때문에 실 설계에 적용하는데 많은 제약이 있었다.

따라서 본 연구에서는 유체역학적인 계산과 모노리스 내의 열 및 물질전달에 대한 계산을 동시에 연계하여 수행할 수 있는 통합적인 수치해석 방법을 적용하여 유입 배기관과 모노리스의 단면적 비의 변화에 따른 유속분포의 균일도 변화가 모노리스 내의 열적 거동 및 변환효율에 미치는 영향을 해석하여 결과적으로 유속균일도가 촉매변환기의 저온 활성화 특성에 미치는 영향을 연구하였다.

2. 수학적 모델링

촉매변환기의 통합적인 해석을 위해서는 모노리스 내에서의 화학반응으로 인한 열 및 물질전달과 입, 출구 확대판에서의 난류유동 및 모노리스 채널 내에서의 압력강하를 서로 연계해서 풀어야 한다. Jasper⁽¹⁸⁾ 등은 수많은 채널로 구성되어 있는 모노리스를 형상 그대로 격자를 구성하는데 약 10⁷ 차수 정도의 계산격자가 필요하다고 보고하였다. 이러한 격자는 현재의 컴퓨터의 계산 속도로는 해석이 불가능하다. 따라서 이러한 과도한 계산격자 형성을 제한하기 위하여 본 연구에서는 Flytzani -Stephanopoulos⁽¹⁹⁾ 등과 Zygourakis⁽¹⁷⁾ 가 사용한 바와 같이 모노리스를 연속체로 간주하여 계산하였다. 연속체 모델에서는 각 채널에서의 국부적 유동특성의 해석보다는 모노리스를

통과하는 유동장의 각 변수들의 평균분포를 고려한다. 즉 모노리스 내의 각 채널 내에서 발생하는 산화반응 처럼 충분히 빠른 반응에서는 체적 평균된 기체상태와 채널 벽면에서의 고체상태를 각각 분리하여 농도 및 에너지 방정식을 계산하며 이 방정식들은 각 상의 인접 면에서 물질 및 에너지 전송에 의해 연계되어 계산된다.

2.1 유체역학적 모델링

촉매변환기의 열, 유동 해석을 위해서는 난류영역인 배기관 및 입, 출구 확대부와 모노리스 내의 층류영역을 동시에 해석하여야 한다. 그러므로 본 연구에서는 해석 영역을 2가지로 분류하였다. 즉 화학반응이 일어나며 층류인 모노리스 부분과 그 밖의 자유흐름 영역이다. 본 연구에서는 Fig. 1과 같은 촉매변환기 내를 흐르는 유동을 축대칭 2차원 비정상 압축성 난류유동으로 고려하였으며 자유흐름 영역의 지배방정식은 아래와 같다.

연속 방정식:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i) = 0 \quad (1)$$

운동량 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j U_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\sigma_{ij}) \quad (2)$$

여기서,

$$\sigma_{ij} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_{eff} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right)$$

$$\mu_{eff} = \mu_i + \mu_t, \quad \mu_t = C_{DK} k^2 / \varepsilon$$

에너지 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(J_{h,j}) + \frac{Dh}{Dt} + s_h \quad (3)$$

여기서

$$h = \int_{T_w}^T c_p dT,$$

$$J_{h,j} = -\frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j}$$

이다.

한편 와점성 계수 μ_t 를 계산하기 위하여 표준 k-ε 모델을 사용하였다.

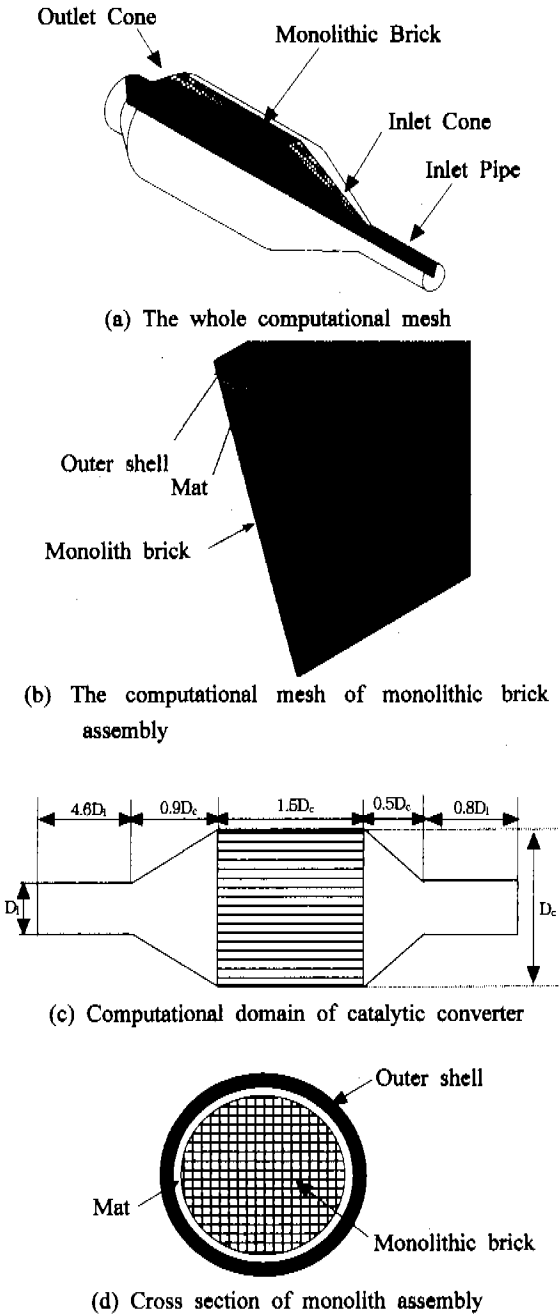


Fig. 1 Computational mesh and geometry of catalytic converter.

농도 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_{g,i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j c_{g,i}) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(J_{c,i}) \quad (4)$$

여기서

$$J_{c,i} = -\frac{\mu g_i}{\sigma_f} \frac{\partial c_{g,i}}{\partial x_j}$$

식 (2),(3),(4)에 포함되어 있는 상수들은 Hjertager⁽²⁰⁾이 연소물 수반한 난류유동에 사용하여 타당성이 검증된 값을 사용하였다.

유체가 모노리스를 통과할 때 마찰 및 전이손실로 인하여 압력강하가 일어나게 되며 화학반응으로 인하여 급격한 온도상승을 경험하게 된다. 모노리스를 구성하고 있는 채널들의 수력직경은 1mm 정도의 차수(order)를 지니고 있고 UBC(Under body catalytic converter)⁽²⁹⁾의 경우 배기관으로부터 유입되는 Re수는 3000 ~ 100,000 정도이므로 채널 내의 Re수는 1000이하이다. 따라서 채널 내의 유동은 층류로 가정할 수 있다.

본 연구에서는 모노리스를 연속체로 모델링하여 일방향성의 다공성 물질로 가정하였으며 유체와 압력강하는 Hagen-Poiseuille 방정식으로부터 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{k_r \mu U}{d^2} \quad (5)$$

모노리스 채널 입구에서 유체는 유동 단면적의 급격한 감소와 유동방향의 변화로 난류강도가 급격히 감소하며 경계층이 발달하기 시작한다. 따라서 이러한 입구영역을 고려하기 위하여 Lai^(2,21)는 식 (5)에 여분의 계수 D_1 을 첨가하였다.

$$\Delta P = -\frac{D_1 k_r \mu U L}{d^2} \quad (6)$$

여기서

$$D_1 = \left[1 + 0.0445 \frac{\rho U a^2}{\mu L} \right]^{0.5} \quad (7)$$

한편 모노리스 전후의 급,확대 축소판으로 인한 압력손실을 구하기 위하여 Benedict⁽²⁷⁾가 제안한 아래의 식을 사용하였다.

축소 손실:

$$\Delta P_c = \left((0.975 C_c)^{-2} - \frac{2}{C_c} + 1 \right) \frac{\rho U^2}{2} \quad (8)$$

여기서

$C_c = 0.6137 + 0.1332 \alpha - 0.2609 \alpha^2 + 0.51146 \alpha^3$ 이며, α 는 모노리스의 다공률을 나타낸다.

확대 손실:

$$\Delta P_e = (1 - \alpha)^2 \frac{\rho U^2}{2} \quad (9)$$

모노리스 내의 유동은 1차원으로 고려하였으며

따라서 반경 방향으로의 대류 및 확산에 의한 물질전달은 무시하였다.

2.2 반응 촉매 모델

모노리스 내에서는 산화반응과 대류와 확산에 의한 물질전달, 그리고 반응열에 의한 벽과 벽사이의 비등방성 열전도등 복잡한 현상들이 일어나게 된다. 이러한 현상들은 연속체로 모노리스를 모델링 함으로써 식 (1)-(4)를 수정하여 표현할 수 있다.

모노리스 채널 내의 유동은 층류이며, 유동방향은 축방향으로 일방향이므로 채널 내에서의 가스의 에너지 방정식은 아래와 같다.

가스의 에너지 방정식:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_g) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U h_g) = h a_v(T_s - T_g) + s_h \quad (10)$$

채널 내에서 대류는 축방향으로만 가능하므로 식 (10)에 확산항은 무시하여 나타내었고 우측 첫 번째 항은 채널벽면과 가스 사이의 열전달을 의미한다.

채널 내 가스의 농도방정식은 식 (4)의 확산항을 무시하여 아래와 같이 나타낼 수 있다.⁽⁸⁾

가스의 농도 방정식:

$$\frac{\partial(\rho c_{g,i})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U c_{g,i}) = \rho K_{m,i} a_v(c_{g,i} - c_{s,i}) \quad (11)$$

식 (11)의 우측의 생성항은 가스와 모노리스 표면에서의 물질전달을 의미한다. 이때 채널 벽과 가스와의 상호 열전달을 결정하는 계수 h, $K_{m,i}$ 는 Hawthorn⁽⁷⁾과 Votruba⁽²²⁾등이 제안한 Nu수와 Sh수의 아래와 같은 상관관계로부터 구할 수 있다.

$$Nu = 3.66(1 + 0.095 Re Pr \frac{D_h}{L})^{0.46} \quad (12)$$

$$Sh = 0.705 \left(Re \frac{d_h}{L} \right)^{0.43} Sc^{0.56} \quad (13)$$

식 (13)에 포함되어 있는 Schmidt수(Sc)를 구하기 위하여 공기와 각 화학종 간의 2종 혼합물의 확산계수를 구한 후 Wilke⁽¹²⁾가 제안한 방법으로 배기가스의 다종 혼합물에 대한 각 화학종의 확산계수를 구한다.

우선 이종 혼합물(binary mixture)의 경우의 확

산계수는 아래식으로 부터 구한다.

$$D_{ij} = 0.002628 \frac{\sqrt{T_m^3(M_i + M_j)/2M_iM_j}}{P \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (14)$$

식 (14)로부터 구한 이종 혼합물의 확산계수를 이용하여 n 개의 요소로 구성된 혼합물에서 1개의 요소만 확산한다고 가정하여 식 (15)로부터 그 요소의 확산계수를 구한다.

$$D_{1m} = (1 - y_1) / \sum_{j=2}^m \left(\frac{y_j}{D_{1j}} \right) \quad (15)$$

여기서 y_1 은 확산되는 화학종을 의미하며, y_j 와 D_{1j} 는 각각 화학종 j의 몰분율과 화학종 1과 j의 2종 확산계수이다.

가스와 고체의 경계인 모노리스의 표면에서의 화학종의 농도($c_{s,i}$)는 아래의 식으로 표현할 수 있다.

$$\frac{M_{R,i}}{10^3} R_i = \rho K_{m,i} a_v (c_{g,i} - c_{s,i}) \quad (16)$$

식 (16)에서는 화학반응이 매우 빠르게 일어난다는 가정하에 비정상항을 무시하였다. 따라서 임의의 시간 단계에서의 모노리스에서의 농도는 다음단계에 영향을 미치지 않는다.

본 연구에서는 washcoat의 층은 매우 얇고 귀금속 농도는 전 표면에 걸쳐 일정하다고 가정하였다. 따라서 화학반응은 전 채널표면에 걸쳐서 균일하게 일어난다고 가정하였다.

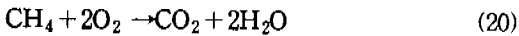
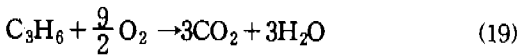
모노리스 채널 내에서 일어나는 열전달은 아래의 식 (17)와 같이 2차원 열전도 방정식에 의하여 계산되어 진다.

$$\begin{aligned} (1 - \epsilon) \rho_s C_m \frac{\partial T_s}{\partial t} &= (1 - \epsilon) k_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \\ &+ k_g G \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + h a_v (T_g - T_s) \\ &+ a_c \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i) R_i (c_{i,s}, T_s) \end{aligned} \quad (17)$$

본 연구에서는 모노리스를 연속체로 간주하였기 때문에 가스와 고체가 공존하는 반경방향으로의 열전도의 비등방성 효과를 고려해야만 한다. 따라서 식 (17)의 G항은 k_{or}/k_o 로 정의되며 k_{or} 는 가스와 고체 벽면으로 구성된 복합체의 반경방향으로의 유효 열전도 계수이다. 식 (17)의 우측의 세 번째 항은 모노리스 표면과 가스와의 열전달을 나타내며 네 번째 항은 모노리스 표면에서의 화학반응으로 인한 발열현상을 표현한 것이다.

2.3 화학반응 속도 모델

대부분의 촉매변환기는 CO, HC, NO의 배출물들을 산화시키기 위하여 이른 공연비에서 작동하도록 되어있다. 따라서 충분한 산소가 존재한다는 가정아래 이러한 배출물들의 산화반응 속도식(Kinetics)을 이용하여 모노리스 내의 온도분포 및 변환특성을 해석한다. 본 연구에서는 Voltz⁽²³⁾와 Oh⁽⁸⁾등이 제안한 반응식을 사용하였으며, 본 연구에서는 CO, C₃H₆, CH₄, H₂의 산화반응을 고려하였다.



각 화학반응에 대한 반응률은 본질적 반응률(intrinsic reaction rate) 형이며 귀금속의 단위 표면적과 시간 당 반응하는 몰수로 나타내어지며, 반응률 방정식은 Langmuir-Hinshelwood 형식의 아래와 같은 반응 속도식을 사용하였다.

$$R_i(c_{i0}, T_s) = \frac{k_i c_i c_{\text{O}_2}}{G} \quad (22)$$

$$i = 1(\text{CO}), 2(\text{C}_3\text{H}_6), 3(\text{CH}_4), 4(\text{H}_2)$$

$$G = \frac{T_s (1 + K_1 c_1 + K_2 c_2)^2 (1 + K_3 c_3^2 c_4^2)}{(1 + K_4 c_5^2)^7}$$

여기서 k_i 는 반응상수^(4,21)이며, K_1, K_2, K_3, K_4 는 흡착평형상수(adsorption equilibrium constant)^(4,21)이다. 흡착(adsorption)을 나타내는 식(22)의 G항은 CO, C₃H₆ 뿐만아니라 비반응 화학종인 NO의 억제효과(inhibition effect)를 의미한다.

2.4 해석 모델 및 물성치

본 연구에서 해석한 촉매변환기는 Fig. 1(a)에 나타낸 것과 같이 각각 1개의 유,출입 배기관 및 모노리스로 구성되어 있다. 모노리스는 Fig. 1(b)에 나타낸 것과 같이 400cps의 밀도로 사각형 단면의 채널이 밀집되어 있고 모노리스와 0.5mm 두께의 외부 박판(outer shell) 사이에 보온 및 진동억제를 위한 5mm 두께의 보온재(mat)가 채워져 있다.

촉매변환기는 2차원 축대칭으로 계산하여

Fig.1(a)와 같이 유동방향과 반경방향으로 각각 132×50개의 계산셀을 생성하였다. Fig.1(d)에 모노리스 단면에서의 보온재 및 외부 박판의 구성을 확대하여 나타내었다.

배기가스의 열전도 상수와 모노리스의 정압비열은 온도에 따라 아래의 실험식으로 계산하였다.⁽⁵⁾

$$k_g = 2.269 \times 10^{-4} T_g^{0.832} \quad \text{J/m} \cdot \text{s} \cdot \text{K} \quad (23)$$

$$c_m = 1071 + 0.156 T_s - \frac{3435 \times 10^{-4}}{T_s^2} \quad \text{JKg}^{-1} \text{K}^{-1} \quad (24)$$

그밖의 모노리스와 보온재의 물성치는 Oh⁽⁵⁾와 동일값을 사용하였으며 모노리스를 구성하는 주요인자는 아래 Table 1에 나타내었다.

2.5 모노리스 내 유속분포의 균일도 지수

촉매변환기에 있어서 배기관으로부터 유입되는 가스의 유속분포의 균일도(uniformity)는 변환효율과 수명에 많은 영향을 미친다. 그러므로 이에 대한 지표(index)를 설정하는 것이 매우 중요하다. 따라서 본 연구에서는 Herman⁽¹⁵⁾등이 제안한 아래의 식으로부터 모노리스 내를 통과하는 유속의 균일도를 표시하였다.

$$\bar{\omega} = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i}{n} \quad (25)$$

$$\omega_i = \frac{\sqrt{(\omega_i - \bar{\omega})^2}}{\bar{\omega}}, \quad \omega = \frac{\sum_{i=1}^n \omega_i^2}{n} \quad (26)$$

이때 n 은 담체표면에 분포하는 총 계산셀을 의미하며 ω_i 는 각 셀에서의 국부 속도(m/s)이다. 결국 각 셀에서의 국부속도는 평균속도와 차이가 있으며 이로 인한 비균일도는 식 (27)과 같이 표현할 수 있다.

Table 1 Parameters of monolith for numerical computation.

Cell density	400 cpsi
Hydraulic dia.	1.1×10^{-3} m
Void fraction	0.76
Reactor length	152×10^{-3} m
Gas-solid contact area	$2521 \text{ m}^2/\text{m}^3$

$$\gamma = 1 - \frac{1}{2} \omega \quad (27)$$

2.6 초기 및 경계조건

비정상 열유동 해석을 수행하기 전 촉매변환기의 초기온도는 상온(300K)이라고 가정한다. 이 경우 초기조건은 아래와 같다.

$$c_i(x, r, 0) = c_i^{in}(x, r), \quad 0 \leq x \leq L \quad (28)$$

$$c_{s,i}(x, r, 0) = c_{s,i}^{in}(x, r), \quad 0 \leq x \leq L \quad (29)$$

$$T_s(x, r, 0) = T_{\infty}(x, r), \quad 0 \leq x \leq L \quad (30)$$

배기관으로의 유입유량은 23.1 g/s로 일정하게 주었고, 이때 유입가스에 포함되어 있는 각 화학종의 농도비율 Table 2에 나타내었으며 이 농도비는 전 계산시간에 걸쳐 일정하게 고정시켰다. 그러나 유입온도는 초기에 비정상적 상태가 존재하므로 Fig. 2와 같이 시간에 따라 변화 시켰다. 이 수치들은 Naoki⁽²⁴⁾ 등이 2.2 l 가솔린 엔진, 1200rpm의 상태에서 실험적으로 얻은 값이다. 유입부의 난류강도는 유입속도의 2%로 가정하였고, 입구에서 가스의 압력파로 인한 맥동현상은 무시하였다.

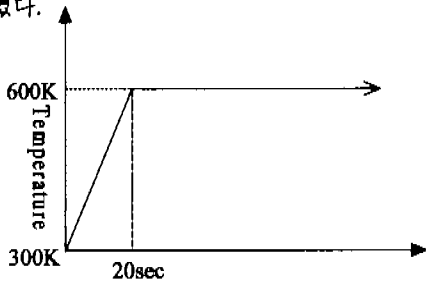


Fig. 2 Temporal variation of the inlet gas temperature during light-off.

Table 2 Concentrations of species in the inlet gas.

CO	0.5%
HC (86%:C ₃ H ₈ , 14%:CH ₄)	2207 ppm
H ₂	0.39%
NO	825 ppm
O ₂	2.06%

배기관의 유출조건은 균일 압력조건을 주었으며 배기관 및 모노리스 표면에서의 외부와의 열손실은 식 (31)과 같이 대류 경계 조건을 적용하였으며, 대류열전달 계수(h_{∞})는 Rich⁽²⁵⁾의 실험식을 사용하였다.

$$k_s \frac{\partial T_{surr}}{\partial r} = h_{\infty} (T_{air} - T_{surr}) \quad \text{at } r = R \quad (31)$$

$$Nu^{0.5} = 0.60 + \frac{0.38 Ra_d^{1/6}}{[1 + (0.559 / Pr)^{9/16}]^{4/27}} \quad (32)$$

벽조건은 점착조건을 적용하였으며, 벽면에서의 난류계산은 벽함수를 사용하였다.

2.7 수치해석

촉매변환기 내의 열 및 유동 현상은 모노리스 영역과 그 밖의 자유흐름 영역이 서로 상이하므로 본 연구에서의 수치계산은 모노리스 영역과 자유흐름 영역으로 분류하였다. 먼저 열 및 물질 전달 그리고 화학반응이 일어나는 모노리스 영역의 계산을 위하여 지배방정식들은 유한체적법을 사용하여 차분화 하였고, 매 시간 증분마다 식 (10)과 (11)로부터 가스의 온도와 농도를 계산하고 식 (16)으로부터 모노리스 표면에서의 농도 ($c_{s,i}$)를 구한다. 이때 식 (16)은 식 (18)-(22)의 화학 반응식을 이용하고 Newton-Raphson법을 적용하여 해를 구하게 된다. 이들의 계산결과를 이용하여 열전도 방정식인 식 (17)의 오른쪽항에 존재하는 2개의 생성항이 계산되어 진다.

3차원 난류영역인 자유흐름 영역은 식 (1)-(4)에 의하여 계산되어 지며 이들 지배방정식들을 계산하기 위하여 유한체적법을 사용하는 상용 프로그램인 STAR-CD⁽²⁶⁾를 사용하였다. 이때 대류항 및 비정상항의 차분은 상류차분법 및 완전 암시도식을 각각 사용하였고 압력장을 계산하기 위하여 PISO 알고리즘을 사용하였다.

모노리스 영역의 계산과 자유흐름 영역과의 연계는 STAR-CD의 사용자프로그램을 작성하여 수행하였다. 모노리스 내의 압력강하는 Lal⁽²⁾와 같이 운동량 방정식에 식 (6)-(9)를 일본의 생성항으로 첨가하여 처리하였다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에서는 CO, C₃H₆, CH₄, H₂의 4가지의 화학종에 대하여 모노리스 내에서의 화학반응을 고려하였으며, 이의 반응률은 온도에 밀접한 관계가 있다.

따라서 본 연구에서는 배기관과 모노리스 단면적 비에 따른 유속 균일도의 변화 및 유속 균일도가 모노리스 내의 온도 및 농도 분포에 미치는 영향을 연구하였다.

단면적비에 따른 유속 균일도의 변화를 알아보기 위하여 A₁/A₀=0.12, 0.15, 0.2, 0.25, 0.35, 0.53, 0.76의 7가지 경우에 대하여 정상상태의 유동해석을 수행하였다. 각각의 경우에 대한 유속 균일도는 식 (27)에 의하여 Fig. 3에 나타내었다. 계산 결과, 단면적 비가 작아질수록 균일도는 낮아짐을 볼 수 있고, 면적비 0.25와 0.53사이에서는 균일도의 큰 변동은 없었다. 그러나 0.25를 기점으로 하여 균일도가 급격히 떨어지고 있음을 알 수 있다.

Fig. 4에 면적비가 0.2,0.35,0.537인 경우에 대하여 비정상 상태의 열유동 해석을 수행하여 20초 때의 입구 확대부의 속도장 및 유선분포와 모노리스 내에서의 온도분포를 나타내었다.

Fig. 4(a),(c),(e)는 중심선을 기준으로 상면에는 속도장을, 하면에는 유선분포를 나타내었다. 그림에서 보듯이 배기관을 통과한 가스는 확대판으로 인한 유동단면적의 급격한 변화로 인하여 박리가 일어나고 있으며 단면적비가 작을수록 넓은 재순환 영역이 존재함을 확인할 수 있다. 이러한 재순환 영역은 결국 유입유동을 방해하여 빠른 유

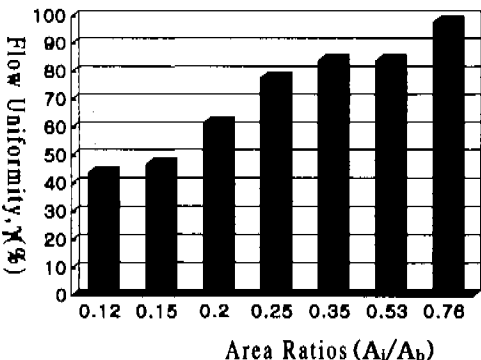


Fig.3 Flow uniformity with respect to area ratios.

속을 모노리스 중심부로 집중시키고 있음을 알 수 있다. 따라서 단면적비가 감소 할 수록 유속 균일도는 저하된다. Fig. 4(b),(d),(f)는 각각의 경우에 대한 모노리스 채널 벽의 온도분포를 나타낸 것이다. 단면적비가 0.2인 경우, 빠른 유속이 중심부를 통과하므로 배기가스의 유속이 온반하는 대부분의 대류 열유속이 중심부를 통과하므로 모노리스 상류 중심부에서 높은 온도상승을 보인다. 그러나 아직 화학반응 온도에 의한 발열보다는 배기가스 열에 의한 온도상승이 지배적이므로 채널 벽으로의 열손실이 크다. 따라서 축방향으로 큰 온도구배를 보인다. 반경방향의 온도구배 역시 급격하게 변하고 있는데 이는 모노리스 외곽부분을 통과하는 유속은 중심부에 비하여 약하므로 배기가스에 의한 유입 열유속이 작으며 외부의 열손실이 크기 때문이다.

단면적비가 0.35인 경우 역시 모노리스 중심부에 높은 온도분포가 형성되어 있으며 유속의 불균일로 인한 횡방향의 온도구배가 형성되어 있으나 단면적비가 0.2인 경우보다는 보다 완화되어 있음을 확인할 수 있다.

유속 균일도가 가장 높은 단면적비가 0.53인 경우는 균일한 유속분포로 인하여 반경방향 온도구배가 상당히 완화되어 있음을 볼 수 있다. 그러나 아직 모노리스 내부가 반응온도에 도달하지 못하여 화학반응에 의한 온도상승이 미약하므로 배기가스에 의한 축방향 온도분포는 급격한 온도구배를 지니고 있음을 볼 수 있다. 따라서 모노리스를 통과하는 유속의 불균일성은 원업 초기에 모노리스 채널에서 반경방향 온도구배에 많은 영향을 미침을 알 수 있다.

촉매변환기를 통과하는 다양한 유속 균일도에 대해서 모노리스 내에 분포하는 온도 및 농도장의 시간에 따른 변화를 살펴보기 위하여 Fig. 5와 Fig. 6에 단면적비가 0.2와 0.35인 경우에 대한 모노리스 내의 CO,C₃H₆의 농도분포(촉매변환기의 중심축을 기준으로 상부:CO, 하부:C₃H₆) 및 채널 벽의 온도분포를 나타내었다. 우선 단면적비가 0.2인 경우, 20초에서는 모노리스 중심부로 유속이 집중됨에 따라 고열의 배기가스가 주로 대류 열전달에 의하여 중심축 부분을 가열함으로써 이 부분에 높은 온도가 분포되어 있다. 그러므로 CO 및 C₃H₆의 농도구배는 모노리스 상류에 높게 형성되어 있음을 볼 수 있다.

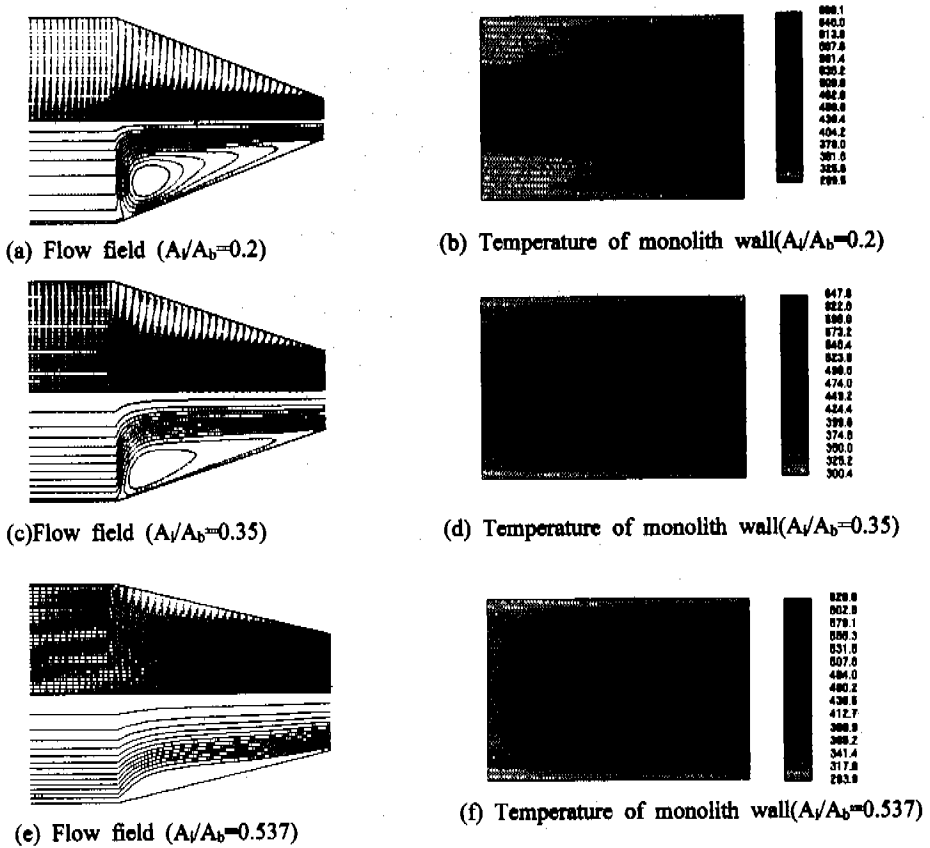


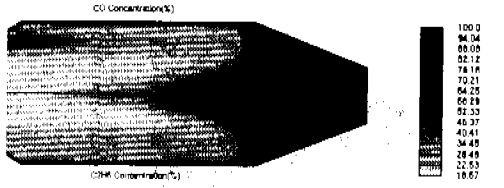
Fig. 4 Distribution of flow field and temperature of monolith wall in catalytic converter at 20 sec.

그러나 중심부분에는 하류까지 변환되지 못한 배기가스 화학종들의 농도가 높게 분포하고 있음을 볼 수 있는데 이는 중심부에는 빠른 유속이 통과함에 따라 가스가 채널벽과 접촉하는 시간이 극히 짧아 각 화학종들에 대한 화학반응이 일어나지 못하기 때문이며 활성화 초기에는 화학반응에 의한 반응열보다 채널 벽면으로의 열손실이 커서 하류로 충분한 열량이 공급될 수 없기 때문이다. 모노리스 외곽부분은 거의 온도상승이 이루어지지 않았음을 볼 수 있다.

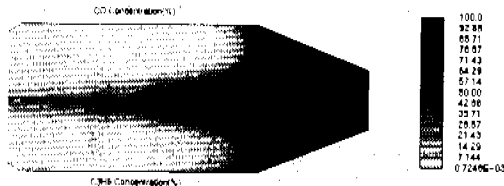
시간이 보다 경과한 30초의 경우 채널 입구부분의 온도분포는 반경방향으로 전파되어 있으나 하류부분의 경우 외곽부분의 온도상승은 미미함을 확인할 수 있다. 이는 외곽부분과 중심부의 유속편차가 심하기 때문에 대부분의 열유속이 중심부로 집중되므로 외곽부분으로의 유입 대류 열유속이 충분하지 않아 반응열보다 열손실이 많아 온도분포가 하류방향으로 급격히 감소하기 때문이다. 그러나 20 초의 경우, 보다 입구 중심

부에서 활성화가 진행되기 시작하므로 반응률이 급격히 증가하여 산화 반응열이 대류에 의하여 하류로 전파되어 중심축을 중심으로 온도상승이 가속되기 시작한다. 이 시간에 CO의 농도분포를 보면 모노리스 입구 부분에서 급격히 활성화가 일어나므로 이 부분에 큰 농도구배가 존재하나 빠른 유속이 통과하는 중심부의 경우 짧은 잔류시간으로 인하여 활성화되지 못하여 높은 농도가 분포되어 있다. C₃H₆의 경우는 전체적인 분포 형상이 CO의 경우와 유사하나 입구부분에 존재하는 반응 영역이 두껍고, 중심부에서의 잔류농도 역시 높고 하류쪽으로 넓게 분포한다. 이는 마치 축방향 온도구배가 C₃H₆에 미치는 영향이 약한 것처럼 보인다. 그러나 이는 CO에 비하여 배기가스 중의 C₃H₆의 농도가 매우 미약하여 산화반응 시 발열량이 작기 때문으로 생각되어 진다.

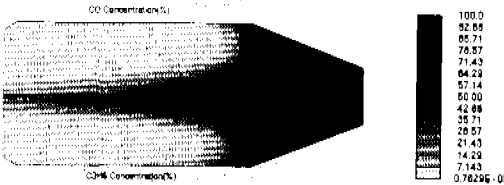
60초에 도달하면, 상류부분에서 모노리스 채널 벽면의 온도는 충분히 상승하여 발열 반응인



(a) CO,C₃H₆(%) concentration, t=20sec



(c) CO,C₃H₆(%) concentration, t=30sec



(e) CO,C₃H₆(%) concentration, t=60sec

Fig. 5 Distribution of CO,C₃H₆(%) concentration and temperature of monolith wall(A₁/A₂=0.2).



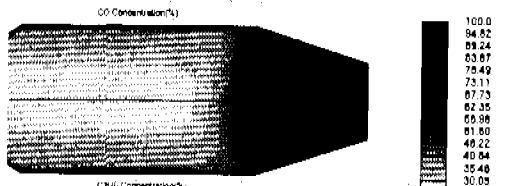
(b) Temperature of monolith wall, t=20sec



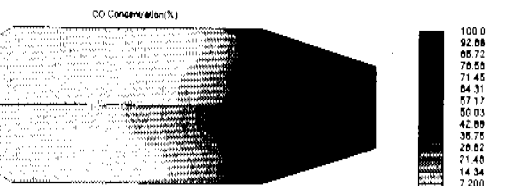
(d) Temperature of monolith wall, t=30sec



(f) Temperature of monolith wall, t=60sec



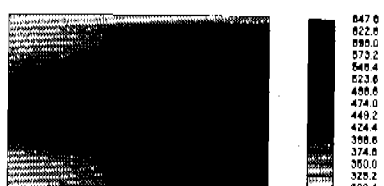
(a) CO,C₃H₆(%) concentration, t=20sec



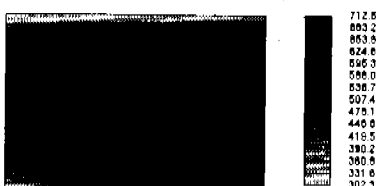
(c) CO,C₃H₆(%) concentration, t=30sec



(e) CO,C₃H₆(%) concentration, t=60sec



(b) Temperature of monolith wall, t=20sec



(d) Temperature of monolith wall, t=30sec



(f) Temperature of monolith wall, t=60sec

Fig. 6 Distribution of CO,C₃H₆(%) concentration and temperature of monolith wall(A₁/A₂=0.35).

촉매의 산화반응률이 증가하여 채널 벽의 온도상승을 가속시키며 따라서 높은 온도의 기체와 채널 벽면과의 대류열전달에 의한 하류에서의 온도상승이 이루어져 있음을 확인할 수 있다. 또한 인접한 채널 간의 반경방향으로의 열전도로 인하여 외곽 영역으로도 온도의 상승이 이루어져 있다. 그러나 반경방향으로의 온도상승은 축방향에 비하여 매우 느리고 또한 입구 유속분포의 불균일로 인한 유입 열유속의 부족으로 인하여 모노리스 하류의 외곽부분은 아직 낮은 온도로 남아 있음을 볼 수 있다. 그러므로 이러한 온도분포의 불균일은 유입속도의 균일도와 직접적인 연관을 지니며 열손실에 의한 반경방향으로 온도구배를 증가시켜 촉매변환기의 효율을 저하시킬 수 있음을 알 수 있다. 한편 이러한 온도분포의 불균일은 모노리스 채널 내의 열용력을 발생시켜 빠른 노화를 가져올 것이다.

Fig. 6에 단면적비가 0.35인 경우의 농도분포 및 온도장을 시간의 변화에 따라 나타내었다. 이 경우는 Fig. 3에서 나타난 바와 같이 Fig. 5의 경우보다 높은 유속 균일도를 지니고 있다. 따라서 20초 일때의 온도장에서 알 수 있듯이 초기 온도장의 반경방향 구배가 단면적비가 0.2인 경우보다 완화되어 있음을 볼 수 있다. 한편 30초 일때의 온도장으로부터 알 수 있듯이 초기상태의 입구 모노리스 영역에서 보다 균일한 평방향 속도구배는 결국 높은 온도의 배기가스를 모노리스 입구단면적에 골고루 유입시킴으로써 하류쪽으로 보다 균일한 대류 열유속을 전파시킬 수 있게 된다. 그러므로 모노리스 내에 고온 활성화영역이 분포함으로써 모노리스 내의 변환효율을 높일 수 있음을 확인할 수 있다. 결과적으로 60초의 경우 모노리스 내에는 벽근처에서 외부와의 열손실로 인한 큰 온도구배를 제외하고는 모노리스 전 영역에서 고온 온도분포를 나타내고 있음을 알 수 있다. 이는 반경방향으로의 유속분포가 보다 균일하기 때문이며, 모노리스 내로 유입되는 속도분포의 균일도의 중요성을 나타낸다. CO 및 C_3H_6 농도장의 시간에 따른 변화는 초기 20초의 경우 모노리스 상류부분에서의 급격한 반응을 증가로 인하여 입구부분에 큰 구배의 온도구배를 형성하는 반응면이 존재하고 있고 하류에 활성화 영역이 분포하고 있다. 30초의 경우 하류에서의 온도상승 및 반경방향으로의 열전도로 인하여 활

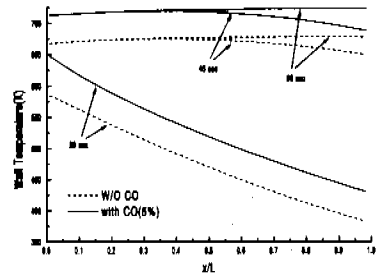


Fig. 7 Temperature profile along the center axis for both cases with and without CO.

성화 영역은 점차 반경방향 및 상류로 확대되어 있음을 볼 수 있다. 60초의 경우에는 30초의 경우와 비교해 볼 때 온도분포에 큰 변화가 없음을 볼 수 있다. 이는 모노리스 상류와 중간부분에서 CO 및 C_3H_6 의 급격한 산화반응으로 인하여 하류에서는 더 이상 산화시킬 화학종들이 거의 존재하지 않기 때문이다.

Fig. 7은 CO의 산화반응이 모노리스 내의 온도에 미치는 영향을 알아보기 위하여 유입가스의 CO의 존재 유무에 따른 온도상승을 축방향의 거리에 따라 시간 별로 나타내었다.

20초에서는 고온의 배기가스에 의한 상류에서의 산화반응에 따른 온도상승이 나타나지만 벽으로의 열손실이 커서 하류로 갈수록 낮은 온도분포를 보이며 결국 화학반응은 소멸되게 된다. 초기에 이러한 축방향 온도구배 형상은 CO의 유무에 관계없이 나타나며 입구에서의 온도차는 화학반응에 따른 발열량에 기인한 것이다. 40초의 경우 상류에서의 활성화로 인한 산화반응에 따른 발열량이 계속해서 배기가스에 의하여 하류로 전송되므로 20초의 경우보다 하류부분의 온도상승이 두드러짐을 확인할 수 있으며 이것은 하류에서 보다 활발하게 산화반응을 일으키기 때문이다. 그러나 CO가 없는 20초의 경우, C_3H_6 및 H_2 등의 미미한 산화반응 만이 일어나며 벽면으로의 열손실이 상대적으로 커지게 되므로 축방향의 온도구배는 CO 존재의 경우와 유사하지만 절대치는 낮게 형성되어 있음을 볼 수 있다. 60초의 경우, 모노리스 입구에서 CO가 있는 경우는 하류로 진행할수록 대류열전달에 의한 벽온도의 상승으로 반응률이 상승하므로 CO의 반응열로 인하여 하류에서의 온도가 상류보다 약간 높게 상승되어 있음을 확인할 수 있다. 그러나 CO가 없는 경우

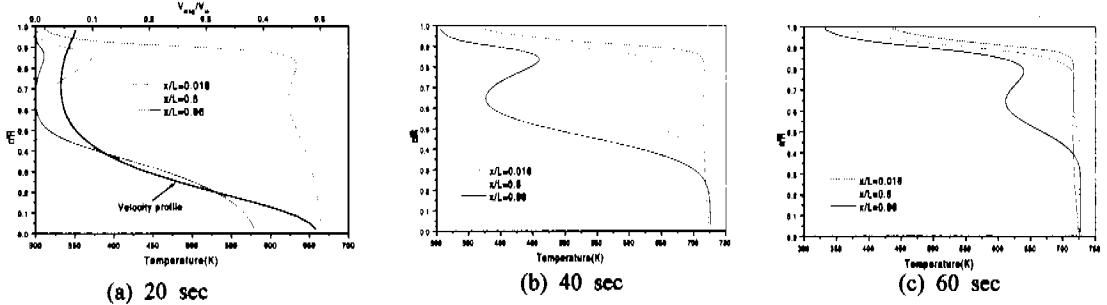


Fig. 8 Thermal variation of radial wall temperature profile with respect to axial positions(Ai/Ab=0.2).

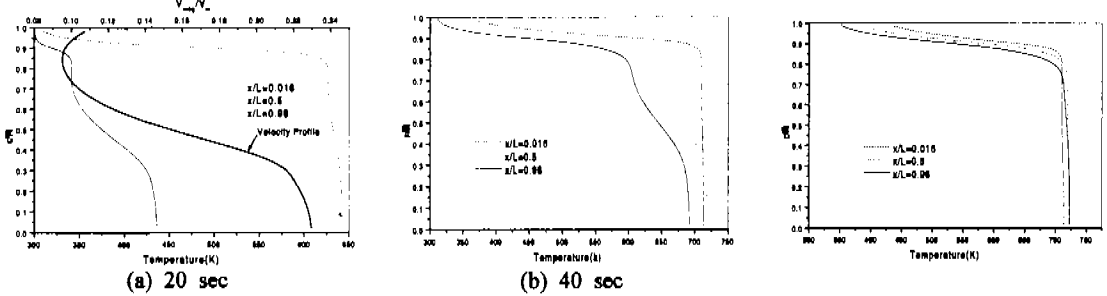


Fig. 9 Thermal variation of radial wall temperature profile with respect to axial positions(Ai/Ab=0.35).

는 하류로 진행함에 따라 반응열 보다 벽면으로의 열손실이 상대적으로 증가하므로 CO가 존재하는 경우보다 전반적으로 낮은 온도분포를 나타내고 있다. 이러한 결과로부터 CO는 모노리스 내의 온도변화에 가장 많은 영향을 미치는 주요 화학종임을 알 수 있고 모노리스 내의 최대온도의 위치와 크기는 화학반응에 의한 발열량과 대류열 전달의 비에 의하여 결정되어 짐을 알 수 있다.

Fig. 8은 단면적비가 0.2인 경우에 모노리스 내의 입구에서의 무차원화된 유입속도분포 (v_{max}/v_{in}) 및 세 지점의 축방향 위치 ($x/L = 0.016, 0.5, 0.96$)에서의 반경방향으로의 온도분포를 시간에 따라 나타낸 것이다. 초기($t=20sec$)에는 중심선에 집중된 빠른 유속으로 인하여 하류로 진행할수록 횡방향 온도구배가 점차 증가하고 있음을 볼 수 있다.

이는 높은 온도의 배기가스가 대류열전달에 의하여 모노리스 중심부에서 축방향으로 빠르게 전파되고 있음에 반하여 반경방향으로의 열전달은 상당히 느리게 전파되기 때문이다. 좀 더 활성화가 진행된 40초에서는 산화반응에 의한 발열량이 하류로 전파되어 반경방향으로의 열전도가 이루어져 온도구배는 다소 완화되었으나 이 경우에도

외곽부분에서의 낮은 유속분포로 인한 온도강화 현상이 나타나고 있음을 알 수 있다. 시간이 상당히 진행된 60초의 경우는 모노리스 중간까지는 벽근처에서의 열손실로 인한 큰 온도구배를 제외하고는 반경방향으로 비교적 균일한 온도분포를 나타내고 있으나, 하류영역에서는 $r/R=0.6$ 부근에서의 온도강화가 잔류하고 있음을 볼 수 있다.

모노리스 내의 속도분포가 보다 균일하게 되는 단면적비가 0.35인 경우의 속도 및 온도분포를 시간에 따라 Fig. 9에 나타내었다. 단면적비가 0.2인 경우보다 반경방향으로의 유입속도분포가 균일하기 때문에 초기 20초에서의 반경방향으로의 유입 열유속의 불균일로 인한 온도구배는 단면적비가 0.2인 경우보다 완화되어 있다. 시간이 경과하여 벽면의 온도 상승으로 인해 산화반응물이 증가하여 하류쪽의 채널 벽의 온도가 상승한 40초의 경우 하류 영역을 제외한 나머지 모노리스 영역에서의 반경방향 온도분포는 균일하게 발달되어 있으며, 보다 시간이 경과하여 60초에 도달하면 하류로의 충분한 대류열유속의 공급으로 인하여 전체 모노리스에서 균일한 온도분포가 형성되어 있음을 알 수 있다.

Fig. 8 및 Fig. 9으로부터 알 수 있듯이 단면적

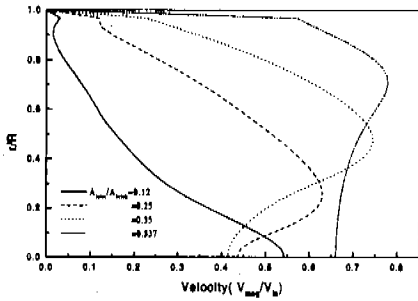


Fig. 10 Flow distribution profiles at the face of monolith for various area ratios.

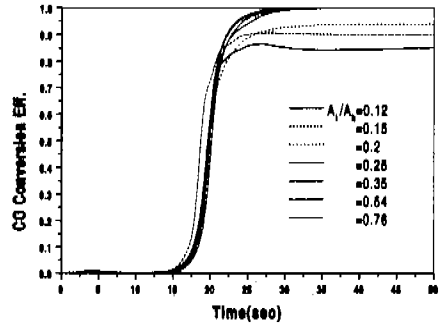
비의 변화에 따른 자유흐름 영역의 입구 확대부에서의 난류유동특성은 모노리스로 유입되는 유속분포 뿐만 아니라 모노리스 내의 횡방향 온도 분포에 직접적인 상관관계가 있음을 확인하였다.

따라서 촉매변환기의 최적설계 시 모노리스의 유입 유속분포는 주요 설계인자임을 알 수 있으며 촉매변환기를 최적화 하기 위하여 본 연구에서 제안한 자유흐름 영역과 모노리스 영역의 연계를 통한 통합적 해석은 효과적인 설계 방법이 될 수 있을 것이다.

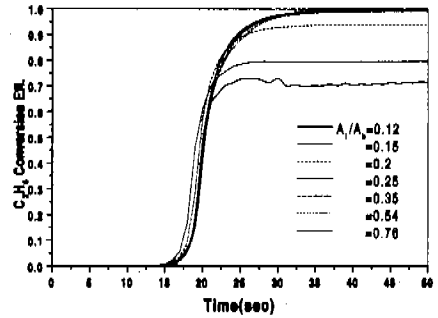
Fig. 10에 단면적비($A_1/A_0=0.12, 0.25, 0.35, 0.537$)의 변화에 따른 모노리스 입구에서의 속도 분포를 나타내었다. 그림으로부터 단면적비가 작아질수록 최고 유속의 분포위치가 모노리스 중심부로 집중되고 있음을 알 수 있으며 이는 워업 초기에 모노리스 내의 반경방향 온도구배를 심화시키는 결과를 가져온다.

유속의 균일도와 촉매변환기의 성능과의 관계를 파악하기 위하여 Fig.11에 단면적비(A_1/A_0)에 따른 CO 및 C_3H_6 의 변환효율을 시간에 따라 각각 나타내었다. CO와 C_3H_6 의 변환곡선은 동일한 경향을 나타내고 있으며 유속의 균일도가 70% 이하로 급격히 감소하는 단면적비 0.2인 경우에는 활성화가 완료된 최대효율이 급격히 떨어지고 있음을 볼 수 있다. 이는 입구에서의 반경방향으로의 편중된 속도분포에 따른 유입 열유속의 국부적인 집중이 결국 모노리스 내의 온도분포의 심한 불균일을 가져와 촉매변환기의 변환효율을 떨어뜨리기 때문이다.

따라서 촉매변환기의 형상변경 및 설계 시 유동 특성의 변동 뿐만 아니라 모노리스 내의 열 및 화학적 거동을 예측하여 설계의 중요 기준인자인 유속의 균일도가 촉매변환기의 성능에 미치



(a) CO



(b) C_3H_6

Fig. 11 Comparison of CO and C_3H_6 conversion efficiency during converter warm-up period.

는 영향을 세밀히 검토하여야 한다

4. 결론

본 연구에서는 자동차 촉매변환기의 모노리스 내의 유속분포가 촉매변환기의 열 및 화학적 거동에 미치는 영향을 해석하기 위하여 유체역학적인 계산과 화학반응으로 인한 열 및 물질전달에 관한 계산을 서로 연계하여 통합적인 수치해석을 수행하였다. 이러한 통합적인 수치해석을 통하여 배기관 및 모노리스의 단면적 비의 변화에 따른 유속균일도의 변동이 촉매변환기 모노리스 내의 열 및 화학적 거동에 미치는 영향을 해석하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 본 연구의 경우, 단면적비가 0.25 이하인 경우 유속 균일도가 급격히 저하하게 되며 이는 유입 열유속의 국부적인 집중을 가져와 모노리스 내의 온도분포에 심한 불균일을 가져오고 촉매변환기의 최대 변환효율이 급격히 저하됨을 확인할 수 있었다.

(2) 단면적비가 작아질 수록 유입가스의 유속불균일로 인한 유입 열유속의 중심부와의 편차는 반경방향으로의 온도상승을 축방향에 비하여 매우 느리게 하며 이러한 반경방향의 큰 온도 구배는 농도분포를 불균일하게 하므로 모노리스의 효율을 떨어뜨린다.

(3) 워업 초기에는 모노리스 중심부를 빠르게 통과하는 높은 온도의 배기가스가 대류열전달에 의하여 중심부의 온도를 빠르게 상승시키나 이에 반해 반경방향으로의 온도상승은 매우 느리므로 채널 하류로 갈수록 반경방향 온도구배는 증가한다. 그러나 시간이 경과할수록 상류에서의 화학적 발열량의 대류전송과 유입 배기가스의 열량으로 인하여 하류에서의 반경방향으로의 온도구배는 점차 완화된다. 그러나 모노리스 내의 유속균일도가 낮을 수록 모노리스 외곽부의 낮은 유입 열량과 외부로의 많은 열손실로 인하여 중심부와 큰 온도구배를 나타낸다.

(4) 본 연구를 통하여 촉매변환기의 형상 최적 설계 시 단면적비의 변화는 모노리스 내의 유속균일도에 많은 영향을 미치므로 이에 따른 유입 유속분포는 주요 설계인자임을 확인하였다.

참고문헌

- (1) Bella, G., Rocco, V. and Maggiore, M., 1991, "A Study of Inlet Flow Distortion Effects on Automotive Catalytic Converters," *J. of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 113, pp.419-426.
- (2) Lai, M. C. and Kim, J. Y., 1991, "Three-dimensional Simulations of Automotive Catalytic Converter Internal Flow," *SAE Paper No. 9100200*.
- (3) Karvounis, E. and Assanis, D.N.,1993,"The Effect of Inlet Flow Distribution on Catalytic Conversion Efficiency", *Int. J. Heat and Mass Transfer* Vol. 36, No.6, pp.1495-1504.
- (4) Kaiser, F.W, Maus, W., Swars, H. and Poruck, R.,1993, "Optimization of an Converter System, Calculations and Application," *SAE Paper No. 930184*.
- (5) Oh, Se H., David L. and Van Ostron,1988, "A Three-dimensional Model for the Analysis of Transient Thermal and Conversion Characteristics of Monolithic Catalytic Converters," *SAE Paper No.880282*.
- (6) Kuo, J.C.W., Morgan, C.R., and Lassen, H.G., 1971, "Mathematical Modeling of CO and HC Catalytic Convert Systems," *SAE Paper No.710289*.
- (7) Hawthorne, R.D.,1973,"Afterburner catalyts- Effects of Heat and Mass Transfer between Gas and Catalyst Surface," *71st AICHE National Meeting*, Dallas, Feb.
- (8) Oh, S.H. and Cavendish,J.C., 1982, "Transients of Monolithic Catalytic Converters:Response to Step Changes in Freestream Temperature as Related to Controlling Automobile Emissions," *Ind. Eng. Chem. Production, Research and Development*, Vol. 21, pp. 29-37.
- (9) Fueyo,N.,1987, "1-D Simulation of a Catalytic Converter for Cars," *PHOENICS Demonstration Report PDR/CFDU/IC/35*,CHARM Ltd.
- (10) Heck, R. H., Wei, J. and Katzer, J. R., 1976, "Mathematical Modelling of Monolith Catalysts," *AICHE Journal*, Vol. 22, pp. 477-484.
- (11) Young, L. C. and Finlayson, B. A., 1976, "Mathematical Models of the Monolith Catalytic Converters: Part I. Development of Model and Application of Orthogonal Collocation," *AICHE Journal*, Vol. 22, No. 2, pp. 331-343.
- (12) Wilke,C.R., 1950, *Chem.Eng.Progr.*, Vol. 46, No. 95.
- (13) Will, N. S. and Bennett, C. J., 1992, "Flow Maldistributions in Automotive Converter Canisters and Their Effect on Emission Control," *SAE Paper, No.922339*.
- (14) Baxendale, A. J., 1993, "The Role of Computational Fluid Dynamics in Exhaust System Design and Development," *SAE/IMEchE Vehicle Thermal Management Systems Conference*, Paper 931072.
- (15) Weltens, H., Bressler, H., Terres, F., Neumaier, H. and Rammoser, D., 1993, "Optimization of Catalytic Converter Gas Flow Distribution by CFD Predictions," *SAE Paper No. 930780*.
- (16) Jeong, S-J and Kim, T-H, 1997, "CFD Investigation of the 3-Dimensional Unsteady Flow

- in the Catalytic Converter," *SAE Paper No.971025*.
- (17) Zygourakis, K., 1989, "Transient Operation of Monolith Catalytic Converters ; A Two-Dimensional Reactor Model and The Effects of Radially Non-uniform Flow Distributions," *Chemical Engineering Science*, Vol.44, No.9, pp. 2075~2086.
- (18) Jasper, T. S., Benjamin, S. F., Grigis, N.S. and Cuttler, D.H., 1992, "Computational Fluid Dynamics and its Application to Catalyst Exhaust Systems," *25th ISATA*.
- (19) Flytzani-Stephanopoulos, M., Voecks, G.E. and Charng, T., 1988, "Modelling of Heat Transfer in non-adiabatic Monolith Reactors and Experimental Comparisons of Metal Monoliths with Packed Beds," *Chemical Engineering Science*, Vol. 41, pp.1203~1212.
- (20) Bjorn H. Hjertager, 1982, "Simulation of Transient Compressible Turbulent Reactive Flows," *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, pp. 159~170.
- (21) Lai, M.C. and Kim, J.Y., 1992, "Numerical and Experimental Characterization of Automotive Catalytic Converter Internal Flows," *Journal of Fluid and Structures*, Vol. 6, No. 4, pp. 451~470.
- (22) Vortuba, J., Mikus, O., Nguen Khue, Hlavacek, V. and Skrivanek, J., 1975, "Heat and Mass Transfer in Honeycomb Catalysts-II," *Chemical Engineering Science*, Vol. 30, pp. 201~206.
- (23) Voltz, S.E., Morgan, C. R., Lieberman D. and Jacob S. M., 1973, "Kinetic Study of Carbon Monoxide and Propylene Oxidation on Platinum Catalysts," *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.*, Vol. 12, No. 4, pp. 294~301.
- (24) Naoki Baba and Katsuyuki Oksawa and Shigeki Sugiura, 1996, "Numerical Approach for Improving the Conversion Characteristics of Exhaust Catalysts under Warming-up Condition," *SAE Paper No.962076*.
- (25) Rich, B.R., 1953, "An Investigation of Heat Transfer from an Inclined Flat Plate in Free Convection," *Trans. ASME*, Vol. 75, pp.489~499.
- (26) Ryan, M. J., Becker, E.R. and Zygourakis, K., 1991, "Light-off Performance of Catalytic Converters : The Effect of Heat/Mass Transfer Characteristics," *SAE Paper No.910610*.
- (27) Benedict, R.P., Carlucci, N.A. and Swetz, S.D., 1966, "Flow Losses in Abrupt Enlargements and Contractions," *ASME Journal of Eng. for Power*, Vol.88, No.1, pp.73~81.
- (28) STAR-CD Ver.3.0 Manual, 1997, Computational Fluid Dynamics Ltd.
- (29) Benjamin, S.F., Clarkson, R.J., N.Haimad, and Grigis, N.S., 1996, "An Experimental and Predictive Study of the Flow Field in Axisymmetric Automotive Exhaust Catalyst Systems," *SAE Paper No.961208*.
- (30) Young, L.C. and Finlayson, B.A., 1976, "Mathematical Models of the Monolith Catalytic Converter: Part II. Application to Automobile Exhaust," *AIChE Journal*, Vol. 22, No. 2, pp. 343~353.
- (31) Jeong, S-J and Kim, W.S., 1998, "A Numerical Approach to Investigate Transient Thermal and Conversion Characteristics of Automotive Catalytic Converter," *SAE Paper 980881*.