

성층화 혼합기의 연소 모델링 Combustion Modeling for Stratified Charge

김 용 태*, 배 상 수**, 민 경 덕***
Yongtae Kim, Sangsoo Pae, Kyoungdoug Min

ABSTRACT

To simulate the combustion process under stratified charged conditions, like GDI engines, the new combustion model is proposed, which is based on Weller's FAE model and Peters' PDF model for considering primary reactions. In addition to these models, the new laminar burning velocity correlation and diffusion flame model are also included in the proposed model. The former can be applicable to much wider range of equivalence ratio, pressure and temperature than the others, such as Keck's and Gülder's models, and the latter has been derived from water-gas shift reaction and hydrogen oxidation, by which the secondary reactions can be considered after primary reactions.

3-D computation has been performed by using STAR-CD v3.05 in the simple cylindrical geometry under stratified charged condition. Judging from the calculated results, the present model proves to be reasonable to simulate the characteristics of flame propagation and concentrations of products in burned regions.

주요기술용어 : Combustion modeling (연소 모델링), 3-D simulation (3차원 모사), Stratified charge (성층화 혼합기), Gasoline direct injection (가솔린 직접 분사)

1. 서 론

점차 강화되고 있는 자동차 배출물에 대한 규제에 대응하고 열효율과 연료 소비율을 향상시키기 위하여 근본적인 해결책으로 연구, 개발되고 있는 직접 분사식 가솔린 엔진(direct injected gasoline engine)¹⁾에는 성층화 혼합 연소 방식이 적용되고 있다. 그러나, 기존의 균일한 혼합기에

대한 연소 모델로 이를 해석하는 데는 한계가 있음에도 불구하고, 아직까지 성층화 혼합 연소에 적용할 수 있는 확립된 연소 모델이 없다.

따라서 본 연구에서는 대표적인 예혼합 난류 연소 모델인 Weller의 FAE 모델²⁾에 Peters의 확률 밀도함수 개념⁴⁾을 적용하여 성층화 혼합기에 적용할 수 있는 연소 모델을 구성하였다. 또한 여기에 광범위한 당량비에서의 연소율을 모델링하기 위하여 대표적인 탄화 수소 연료인 이소옥탄의 층류화염속도 관계식을 새로이 제시하였다. 동시에 농후와 희박 영역에서 각각 남은 연료와 산화제가 이루는 확산 화염의 특성을 고려함으로써 연소 후 존재하는 성분들에 대해 보다 실제에 근접할 수

* 회원, 서울대학교 대학원

** 회원, 현대자동차 디젤엔진시험팀

*** 회원, 서울대학교 기계항공공학부

있도록 하였다. 이와같은 성층화 혼합기 연소 모델링을 제시하여, 실제 엔진 모사 등에 적용할 수 있는 기반을 제공하고자 한다.

2. 연소 모델링

2.1 FAE 연소 모델의 도입

예혼합 난류 연소 모델은 화염의 구조에 대한 관점에 따라 대표적으로 EBU 모델, TWF 모델 등이 있으나, 본 연구에서는 앞서 언급한 모델들의 단점을 보완한 FAE 모델²⁾을 성층화 혼합기에 적용할 수 있도록 수정하여 적용하였다.

일반적으로 FAE 모델에서의 화염은 기연 영역과 미연 영역의 불연속적인 얇은 층에 존재하며, 미연 영역으로 층류화염속도로 전파된다고 가정하기 때문에 이의 모델링은 매우 중요하다.

2.2 성층화 혼합기 연소 모델링

FAE 모델에서 온도, 압력 및 당량비에 따른 연소율을 결정하는 데 있어서 층류화염속도는 매우 중요하다. 따라서, 당량비 분포가 가연 한계까지 다양하게 존재할 수 있는 성층화 혼합기하에서는 광범위한 당량비에 적용할 수 있는 층류화염속도의 모델링은 성층화 연소 모델링을 위한 기본이 된다. 그러나 기존의 실험을 통한 Keck이나 Gülder 등의 모델링들은 스트레치(stretch)의 영향을 고려하지 못하여 측정값이 크다는 한계를 지니고 있다.³⁾ 따라서 본 연구에서는 상세화학반응 기구를 이용하여 계산된 결과¹⁰⁾를 이용, 이소옥탄에 대하여 식(1)과 같은 새로운 관계식으로 모델링하였으며, 이 때 각 계수들은 Table 1에 정리하였다.¹²⁾

$$S_l = a \exp[-\xi(\phi - 1.07)^2 - \exp\{-\xi(\phi - 1.07)\} - \zeta(\phi - 1.07)] \quad (1)$$

where, ξ (or ζ) = $(A_T + B_T \frac{T}{T_0}) (\frac{P}{P_0})^{\beta_{P,\xi}}$
 $a = C_a (\frac{T}{T_0})^{\alpha_T} (\frac{P}{P_0})^{\beta_{P,a}}$

이러한 모델링 결과 Fig. 1에서 보듯이 기존의

모델링에 비하여 넓은 당량비에서 실험³⁾이나 계산¹⁰⁾과 잘 일치하는 것을 알 수 있다.

Table 1 Correlation coefficients for iso-octane

	C_a	α_T	$\beta_{P,a}$	A_T	B_T	$\beta_{P,\xi}$
iC_8H_{18}	0.95	1.90	-0.27	2.73	-0.45	0.08

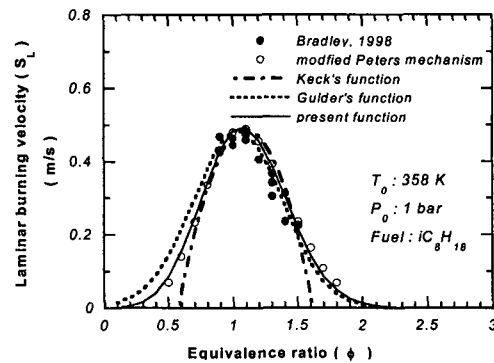


Fig. 1 Comparison of the calculated and measured laminar burning velocities and the results fitted by three models for iso-octane

이러한 층류화염속도를 지배하는 당량비는 대류와 확산에 의하여 각 격자에서 시간에 따라 변동(fluctuation)될 수밖에 없다. 따라서 이론 당량비가 존재할 가능성이 가장 높은 곳에서 화염이 가장 빠르게 전파되는 점에 착안하여, 확률 밀도 함수 개념을 도입하여 공간적인 당량비 분포와 그 변동 정도를 고려할 수 있다.⁴⁾ 결국 성층화 혼합기하에서의 층류화염속도는 당량비로 표현되는 혼합 분율 Z 의 평균값 \bar{Z} 와 그 분산(variance) \bar{Z}''^2 을 도입하여 식(2)와 같이 계산하였다.⁴⁾

$$\bar{S}_{KZ} = \int_0^1 S_{KZ} P_Z(\bar{Z}, \bar{Z}''^2) dZ \quad (2)$$

여기서 함수 $P_Z(\bar{Z}, \bar{Z}''^2)$ 는 베타 확률 밀도 함수로 다음 식(3)과 같이 표현된다.⁴⁾

$$P_Z(\bar{Z}, \bar{Z}''^2) = Z^{a-1} (1-Z)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(a)\Gamma(\beta)} \quad (3)$$

where, $a = \bar{Z}\gamma$, $\beta = (1 - \bar{Z})\gamma$, $\gamma = \frac{\bar{Z}(1 - \bar{Z})}{\bar{Z}''^2} - 1$

한편 계산 격자 수가 많다면 식(2)를 직접 계산하는 것은 비효율적이다. 따라서, 본 연구에서는 식(4)로 단순화하여,¹²⁾ Table 2에 나타난 것과 같이 혼합분율의 평균값이 이론당량비일 때, 분산 변화에 따른 ν 와 η 를 최적화 하여 적용하였다. 그 결과 Fig. 2에서 보듯이, 최적화된 식(4)로 곡선 맞춤한 결과는 식(2)로 계산된 결과를 비교적 잘 반영한다고 판단된다.

$$\bar{S}_{L(Z)} = S_{L,Zst}(P_{Zst}(\bar{Z}, \bar{Z}''^2))^{\nu} \cdot \eta \quad (4)$$

이 때 ν 와 η 의 초기 온도(T_0)와 압력(P_0)에 따른 변화는 무시할 수 있는 데, 이는 화염에 의한 미연 영역에서의 국부적인 온도 상승에 의한 비정상적인 화염 가속을 방지하기 위하여 미연 가스의 압축 과정을 단열 압축 과정으로 가정하여 각 격자의 압력(P)으로부터 미연 가스 온도(T_u)는 식(5)와 같이 계산하였기 때문이다.

$$T_u = T_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\left(\frac{\gamma_u - 1}{\gamma_u} \right)} \quad (5)$$

또한 성층화된 혼합기하에서는 국부적인 농도 구배(gradient)가 존재하므로, 연료와 산화제의 확산을 무시할 수 없다. 따라서, 본 연구에서는 연료와 산화제 그리고 생성물들에 대한 수송방정식인 식(6)도 고려하여 계산하였다^{4),12)}.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{U} \bar{Y}_i) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{D}_{Y_i} \nabla \bar{Y}_i) = S_{c,i} \bar{Y}_{i,u} \quad (6)$$

결국 성층화된 혼합기하에서의 FAE 모델의 진행 변수 \tilde{c} 는 식(7)과 같이 표현할 수 있으므로, 이를 진행 변수에 대한 수송방정식인 식(8)에 대입하여 계산될 수 있다.^{2,12)}

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\bar{Y}_{fuel} - \bar{Y}_{fuel, res}}{\bar{Z} - \bar{Y}_{fuel, res}} \quad (7)$$

$$\bar{Y}_{fuel, res} = \max\left(\bar{Z} - \frac{F}{A} \cdot (1 - \bar{Z}), 0\right)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{U} \tilde{c}) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{D}_c \nabla \tilde{c}) = S_{c,c} \quad (8)$$

Table 2 Values of ν , η at 600 K, 1 MPa

Z''^2	0.0001	0.0003	0.0005	0.001
ν	0.667			
η	0.931	0.927	0.903	0.887

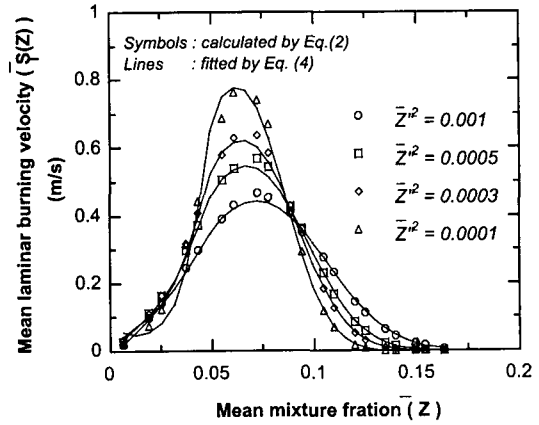


Fig. 2 Mean laminar burning velocity for isoctane

여기서 식(7)의 혼합 분율 \bar{Z} 는 초기 연료의 질량 분율을 나타내고, $\bar{Y}_{fuel, res}$ 는 연소 종료 후의 연료의 질량 분율을 의미한다. 또한 식(8)의 생성항 $S_{c,i}$ 는 식(9)와 같이 계산하였다.^{2,12)}

$$S_{c,i} = S_E + S_I + S_Q \quad (9)$$

여기서 S_E 는 화염면의 증가를 나타내는 화염 주름 인자 \mathcal{E} 에 의한 질량 연소율 즉, 단위 체적 당 난류 화염 속도에 의해서 연소되는 질량을 의미하는 데, 본 연구에서는 난류 화염면의 평형 상태를 가정하여 난류화염속도에 관한 식⁵⁾으로 \mathcal{E} 의 평형 값 \mathcal{E}_{eq} 을 도입함으로써 생성항 S_E 를 식(10)과 식(11)로 계산하였다. 식(10)에서 A 는 경험에 의한 계수로서 실험에 의하여 그 값을 정해야 하지만, 본 연구에서는 층류화염속도와 비교를 통하여 결정하였다.^{5,12)}

$$\mathcal{E}_{eq} = 1 + A \cdot \left(\frac{u'}{u' + S_I} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \exp\left[-\frac{t}{\tau} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \times \left(\frac{u'}{S_I} \right)^{\frac{5}{6}} \left(1 - \exp\left[-\frac{S_I}{u' + S_I} \frac{t}{\tau} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \quad (10)$$

$$S_{\Sigma} = \rho_u \mathcal{E}_{eq} S_I |\nabla \tilde{c}| \quad (11)$$

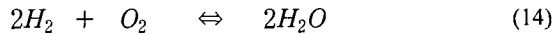
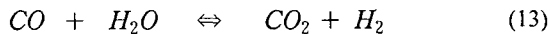
또한 식(9)의 S_I 는 점화에너지에 의한 생성항을, S_Q 는 벽면에서의 소염(quenching)에 의한 생성항을 의미하는 데, 전자는 식(12)와 같이 점화 시기부터 일정 시간 동안 일정량의 질량 연소율을 인가하는 방법으로 모델링하였고, 후자는 Poinot 등이 제안한 모델⁷⁾을 기반으로 하여 벽면 근처에서 화염의 전파 속도를 감소시키는 방법으로 계산하였다.

$$S_I = \frac{\rho_u V_k}{\Delta t V_I} \quad (12)$$

여기서 V_k 는 초기 화염 핵(kernel)의 체적으로, 본 연구에서는 직경이 1mm인 구로 가정하였다.⁶⁾

2.3 확산 화염 모델링

성층화 혼합기의 경우 농후 영역에서 남은 연료에 의해 생성되는 주요 중간생성물은 CO 와 H_2 인 것으로 알려져 있다.⁸⁾ 따라서 기연 영역에서의 주성분인 CO_2 , H_2O , CO , H_2 에 대해 STANJAN 코드¹¹⁾를 이용하여 온도, 압력, 당량비에 따라 평형 농도를 구하여 남아 있는 산화제와의 확산 화염을 다음과 같이 수증기-기체의 전환 반응(water-gas shift reaction)과 수소 산화(hydrogen oxidation)의 두 반응⁹⁾으로 나타내어 계산하였다.



다시 말하여, 식(13)과(14)의 반응률(reaction rate)로부터 기연영역의 확산 화염을 이루는 성분들, 즉 CO_2 , H_2O , CO , H_2 , O_2 등의 반응률을 구한 뒤, 이 값과 STANJAN으로 계산된 평형 농도로부터 각 성분들의 확산화염에 대한 새로운 생성항 S_{D_i} 를 계산하였다.

3. 3차원 비정상 해석

3.1 계산 격자 및 초기·경계 조건

본 연구에 사용된 계산하고 있음을 알 수 있 격자는 직경이 90mm인 원통으로 격자 수는 약 2000개이다. 또한 점화 위치는 원통의 중심이고, 계산의 안정성을 위하여 O-Grid 형태로 격자를 생성하였다. 제시한 성층화 모델링

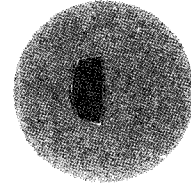


Fig. 4 Initial equivalence ratio distribution

의 타당성 및 그 적용 가능성을 검증하기 위하여, 초기 당량비는 오른쪽 Fig. 3과 같이 진한 영역을 $\phi=1.3$, 흐린 영역을 $\phi=0.9$ 로 하였으며, 벽면의 초기 온도와 압력은 각각 600K, 1MPa로 하였다. 초기 유동 조건은 성층화 혼합기 분포에 의한 화염 전파에 미치는 영향만을 정확히 모사하기 위하여 적용하지 않았다.

3.2 계산 결과

Fig. 4는 점화된 후 시간에 따른 일산화탄소와 수소의 질량분율을 전체 계산 격자에 대해 평균하여 나타낸 것이다. 시간이 0.4ms 정도 지난 후에야 일산화탄소와 수소가 형성되며, 초기에 다량 형성된 후 주변으로의 확산과 산화 반응을 통하여 평

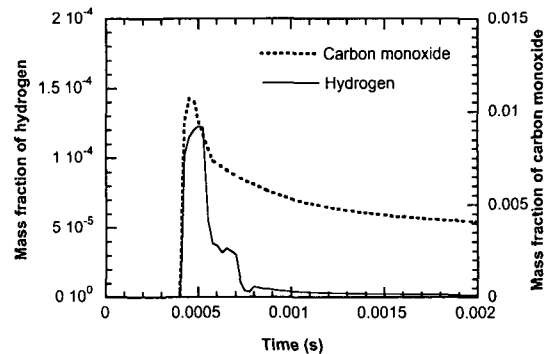


Fig. 4 Variation of carbon monoxide and hydrogen

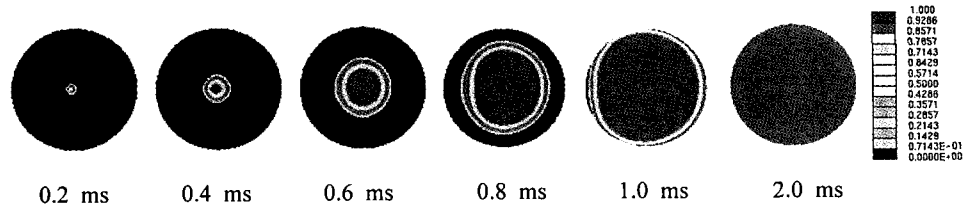


Fig. 5 Variation of progress variable

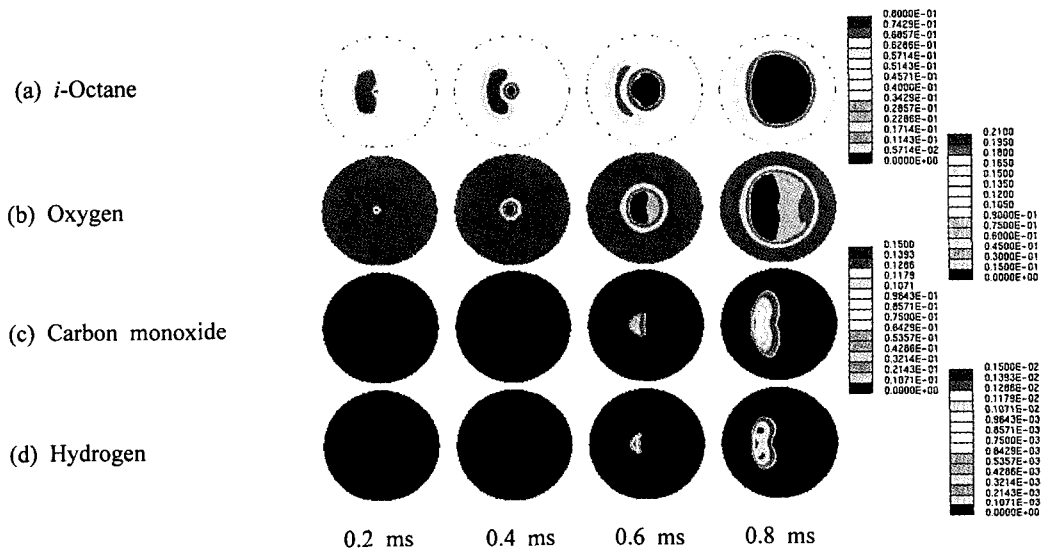


Fig. 6 Variation of iso-octane, oxygen, carbon monoxide, hydrogen

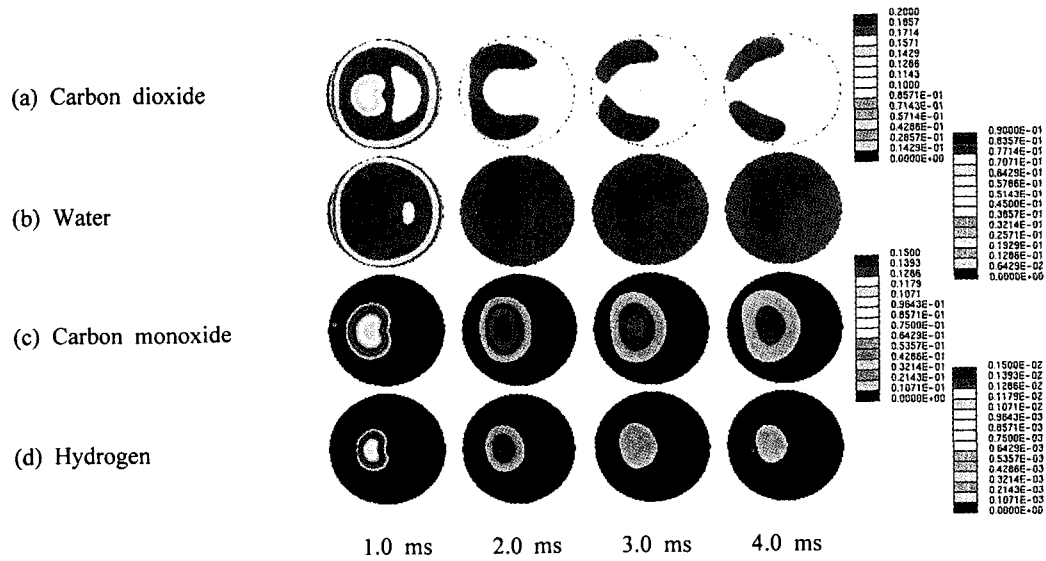


Fig. 7 Variation of carbon dioxide, water, carbon monoxide, hydrogen

형에 도달한 뒤, 급속하게 감소된다. 또한 Fig. 6에서 보듯이 화염에 의하여 연료가 밀려나서 불균일한 일산화탄소와 수소의 생성으로 질량분을 변동시킬 수 있다.

시간에 따른 화염 전파와 관련된 진행 변수의 변화를 Fig. 5에 나타내었는데, 농후한 영역으로 더 느리게 전파된다. 또한 Fig. 6과 Fig. 7은 각 개별 성분들의 농도 변화를 나타낸 것으로, 일산화탄소와 수소는 기연 영역에서 형성된 뒤 주변으로 확산됨과 동시에 이산화탄소와 물, 및 산소와의 산화, 환원 반응으로 평형 상태에 도달한다. 결국 제시한 확산 화염 모델링을 포함한 성층화 모델링이 잘 반영됨을 알 수 있다.

4. 결론

성층화 혼합기에 적용할 수 있는 연소 모델 구성하기 위하여, 기존의 FAE 연소 모델에 확률 밀도함수 개념을 적용하였다. 또한 기존의 관계식들보다 광범위한 당량비에서 실험 및 계산 결과를 반영할 수 있는 이소옥탄의 새로운 층류화염속도 및 이산화탄소와 물, 그리고 일산화탄소와 수소에 대한 평형 농도를 고려하여 남은 연료와 산화제가 이루는 확산 화염도 모델링하였다.

이러한 모델링 결과를 간단한 성층화된 혼합기 조건을 가지는 원통 격자에 적용하여, 실제 성층화 혼합 연소 방식의 엔진 연소 모델에 이용할 수 있음을 확인하였다.

참 고 문 헌

- 1) F. Zhao et al., "Automotive Spark-Ignited Direct-Injection Gasoline Engines", Prog. Energy and Combustion Science, Vol.25, pp.437-562, 1999.
- 2) H. G. Weller et al., "Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark-Ignition Engines", 3rd International Symposium COMODIA 94, pp.163-169, 1994.
- 3) D. Bradley et al., "The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for Iso-Octane-Air and i-Octane- and n-Heptane-Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb", Combust. and Flame, Vol.115, pp.126-144, 1998.
- 4) N. Peters, "Four Lectures on Turbulent Combustion", ERCOFTAC center, 1997.
- 5) R. Herweg and R. R. Maly, "A Fundamental Model for Flame Kernel Formation in S. I. Engines", SAE 922243, 1992.
- 6) P. Kamarados, "Combustion Modeling in Internal Combustion Engines", Ph. D. Thesis, Dept. of Mechanical Engineering Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1994.
- 7) T. J. Poinsot et al., "Direct Simulation and Modeling of Flame-Wall Interaction for Premixed Turbulent Combustion", Combust. and Flame, Vol.95, pp.118-132, 1993.
- 8) D. C. Haworth et al., "Numerical Simulation of Turbulent Propane-Air Combustion with Non-homogeneous Reactants", Combust. and Flame, Vol.121, pp.395-417, 2000.
- 9) S. H. Chung et al., "Asymptotic Structure and Extinction of CO-H₂ Diffusion Flames with Reduced Kinetic Mechanisms", Combust. and Flame, Vol.82, pp.389-410, 1990.
- 10) Müller, U.C., Bollig, M. et al., "Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames", Combust. and Flame, Vol.108, pp.349-356, 1997.
- 11) W.C. Reynolds, "The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis: Implementation in the Interactive Program STANJAN", Dept. of Mechanical Engineering, Stanford Univ., 1986.
- 12) 김 용태, "직접 분사식 가솔린 엔진의 성층화 혼합기에 대한 연소 모델링", 서울대학교 공학석사 학위논문, 2001.