

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2009.33.5.373

다성분연료 분무에 있어서 증발과정의 해석모델 제안

염정국[†] · 田中 智之^{*}

(2009년 1월 28일 접수, 2009년 2월 19일 수정, 2009년 3월 23일 심사완료)

Propose an Analysis Model of Evaporation Process in Multi-Component Fuel Spray

Jeongkuk Yeom and Tomoyuki Tanaka

Key Words: Distillation Temperature(유출온도), Evaporation(증발), Fuel Injection(연료분사), Multi-Component(다성분), Vapor Distribution(증기분포)

Abstract

The evaporation process of multi-component fuel is different from one of a single component, because the properties of each component affects among the components. In actual engine, the spatial distribution of fuel vapor concentration dominates auto-ignition and initial combustion, and depends on the volatility and diffusivity of each component fuel contained in the multi-component fuel. Then, this study proposes a simplified numerical scheme for analysis of evaporation process of multi-component fuel sprays. Evaporation process is calculated by KIVA-II code based on the simple two-phases region that is approximated by modified saturated liquid-vapor line, which was obtained by connecting the 50% distillation temperature for each component under several pressure fields. Consequently, it can be quantitatively simulated that vapor of low boiling fuel component mostly exists around nozzle and spray tip region, the high boiling fuel component, on the other hand, mostly appears near the spray tip.

기호설명

p : 분사압력, MPa
R : 반경방향 거리, mm
T : 온도, K
Z : 노즐로부터 거리, mm

inj : 분사
p : 파셀
max : 최대
min : 최소

그리스문자

ρ : 주위기체 밀도, kg/m^3

하첨자

a : 주위기체
ct : 임계

1. 서론

실린더 내 연료를 직접 분사하는 디젤기관에서 분사한 액체연료인 경유는 초기에는 운동량을 유지하는 액주(液柱)상태이며, 시간의 경과와 함께 주위기체와의 상호작용에 의해 액사(液絲, ligament)가 발생하여, 그 결과 연료액적이 생성되는 미립화(atomization)의 과정을 거친다.⁽¹⁾ 경유나 가솔린 등의 실제 내연기관용 연료는 다성분이며, 따라서 그 연료들은 다성분연료로서의 증발 특성에 따른 혼합기가 증발·확산·혼합과정을 거쳐 형성되고, 그 혼합기의 화학적특성에 의해 착화

[†] 책임저자, 회원, 동아대학교 기계공학부
E-mail : laser355@dau.ac.kr
TEL : (051)200-7640 FAX : (051)200-7656
^{*} (日本) Doshisha Univ. 대학원 기계공학부

및 연소가 결정된다.

Senda⁽²⁾와 Abraham⁽³⁾ 등은 다성분연료의 액적으로서의 이상성(理想性)과 비이상성(非理想性)을 고려한 기액평형추산(推算)을 이용해서 그 연료의 분류(分溜)특성을 해석하고, 액적으로서 증발특성을 조사했다. 더욱이 다성분연료 분무와 피스톤 캐비티(cavity) 등의 고체벽면과의 간섭과정, 특히 분무의 벽면충돌 후의 분산거동에 큰 영향을 미치는 고액계면의 비등(沸騰)거동을, 다성분연료 중의 각 성분 포화온도와 벽면온도와의 차로써 발생하는 전열면과열도를 고려한 모델에 의해서 해석을 행하였다.⁽⁴⁾

본 연구에서는 다성분연료 분무의 증발과정을 수치계산 하기 위한 모델을 제안한다. 수치해석 코드로써 KIVA-II⁽⁵⁾를 사용하였고, 그 해석을 통하여 각

성분의 분무 내부의 증기농도분포를 명확히 했다.

또한 그러한 기법을 이용해 실제 경우로 가정한 연료분무 경우의 증기농도 공간분포에 대해서도 설명한다.

2. 계산조건 및 과정

Table 1에 계산조건을 나타낸다. 계산영역은 분무 반경방향으로 20mm(23격자), 분무 축방향으로 140mm(70격자), 원주방향으로 각도 θ 가 0.5deg.(1격

Table 1 Computational conditions for KIVA-II

Injection velocity	V_{inj} [m/s]	351
Injection duration	t_{inj} [ms]	1.54
Injection quantity	Q_{inj} [mg]	12.0
Initial droplet temperature	T_{pi} [K]	293
Number of parcel	N_p	1000
Ambient temperature	T_a [K]	700
Ambient density	ρ_a [kg/m ³]	12.3
Maximum time step	dt_{max} [s]	1.0×10^{-6}
Minimum time step	dt_{min} [s]	0.5×10^{-8}
Number of mesh		$23 \times 1 \times 70$ (sector mesh)

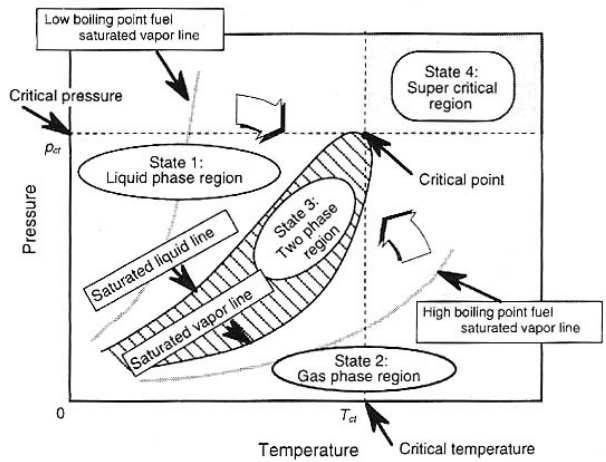


Fig. 1 Pressure-temperature diagram for multi-component fuel

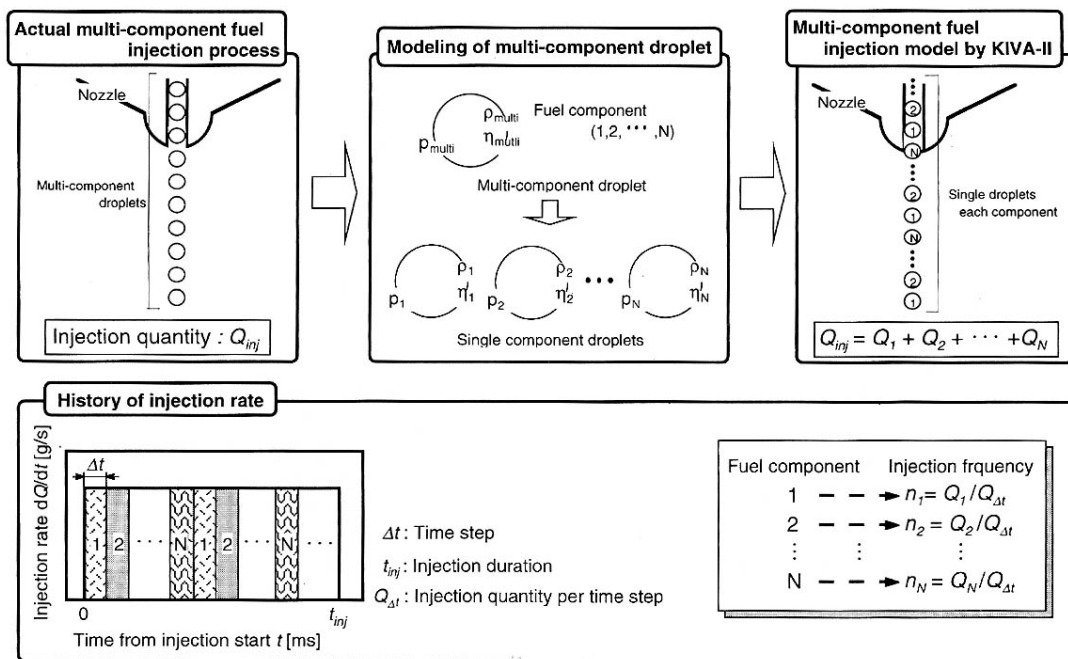


Fig. 2 Concept of separated fuel injection for multi-component fuel

자)의 섹터 격자(sector mesh)이다. 분무반경방향으로의 분할은 분무축에 가까워질수록 좁아지는 부등간격격자이다. KIVA-II를 사용한 계산은 분열모델로써 입경분포에 관한 χ^2 분포함수의 자유도 $\Phi=6$, 분열에너지의 비율 $K=8/9$ 를 적용한 수정 TAB(Taylor Analogy Breakup)모델⁽⁶⁾ 및 액적증발모델은 수정 2영역모델⁽⁷⁾을 사용했다. 또한 본 연구에서는 액적상호간의 충돌·합체(coalescence)현상은 고려하지 않았다.

3. 다성분연료 분무의 증발과정 모델링

다성분연료에 있어서 포화증기압곡선은 Fig. 1에 나타난 것과 같이 각 성분의 포화증기압곡선은 서로 영향을 미쳐 저비점성분(低沸點成分)은 고비점성분(高沸點成分)에, 고비점성분은 저비점성분으로부터 영향을 받아 어떤 폭을 가지는 기-

액 2상(相)영역을 형성한다. 이러한 2상 영역내의 온도, 압력조건에서는 각 성분의 액체와 증기의 존재비율이 화학열역학적인 기·액평형이론에 의해 계산되어진다.⁽²⁾ 본 연구에서는 기·액 2상영역에서의 증발과정을 모의(模擬)할 수 있는 모델을 제안한다. 또한 모델의 구성은 Table 2에 나타난 i-octane, n-tridecane 및 n-hexadecane을 질량분률로 각각 0.33으로 혼합한 연료로 정했다. 편의상 이 연료를 3성분모델 연료라 칭한다.

3.1 분할분사 모델

분할분사모델의 개략을 Fig. 2에 보인다. KIVA-II 코드에서 연료의 분사는 액류분사인 실제 분무 중의 액적과 비교해서 소수의 입자를 분사하는 것으로 가정하여 해석한다. 이 입자를 파셀(parcel)이라 하며, 크기, 속도 및 온도가 동일한 다수의 액적군(droplets)으로 형성된다. KIVA-II 코드에서 다성분연료를 분사할 경우 각 파셀 중의 액적은 다성분연료의 액적으로 고려할 필요가 있다. 그러나 다성분연료 액적의 증발과정은 화학열역학적인 기·액평형에 기초하기 때문에 다차원 해석 코드의 분무계산으로 계산하면 상당히 복잡하게 된다. 그래서 본 연구에서는 Fig. 2에 나타난 것과 같이 N 종류의 연료성분에 의하여 형성

Table 2 3-components model fuel

Fuel component	Mass fraction	Boiling point [K]
i-Octane(C ₈ H ₁₈)	0.33	372
n-Tridecane(C ₁₂ H ₂₈)	0.33	509
n-Hexadecane(C ₁₆ H ₃₄)	0.33	560

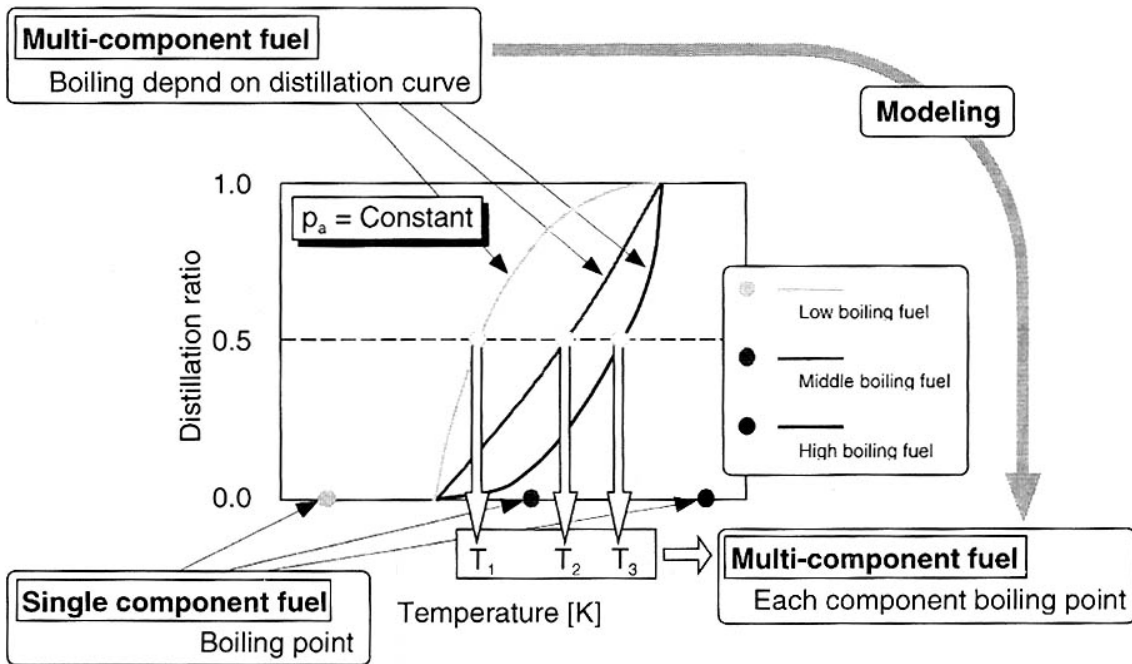


Fig. 3 Concept of evaporation modeling with simplified two-phases region

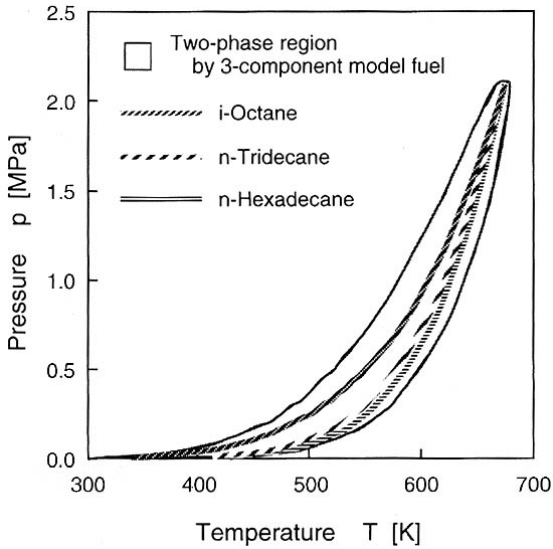


Fig. 4 Two-phases region and modified saturation vapor line taken by 3-components model fuel

된 다성분연료 액적을 N개의 액적 1개씩 각각의 연료특성을 부여한다. 따라서 식 (1)에서 다성분 연료 액적의 질량 $m_{d,multi}$ 는 각 성분 액적의 질량 $m_{d,i}(i=1\sim N)$ 으로 대체할 수 있다.

$$m_{d,multi} = m_{d,1} + m_{d,2} + \dots + m_{d,N} \quad (1)$$

이것을 다성분연료의 분사에 적용하면 Fig. 2중의 우측 상단에 나타난 모델로 연료를 분사하는 것으로 된다. 그래서 전분사량 Q_{inj} 는 각 성분의 질량 Q_i 에 의해 다음 식 (2)로 나타낼 수 있다.

$$Q_{inj} = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_N \quad (2)$$

분사 시 각 성분의 전분사량 Q_{inj} 에 대한 분사 비율 Q_i 를 결정하고, 1회의 분사과정을 시간 간격 Δt 로 분할하여 각각의 연료성상이 다른 연료를 동일한 질량으로 분사시킨다. 각 연료가 분사되는 빈도는 각 성분의 함유율에 의해 결정된다.

3.2 단순 2상영역 모델

Senda⁽²⁾ 등의 연구결과를 기초로 한 다성분연료의 증발과정에 대해서 기술한다. Fig. 3에 보이는 것과 같이 다성분연료의 증발은 가장 비점이 낮은 성분의 포화온도보다도 높은 온도부터 시작하여, 가장 비점이 높은 성분의 포화온도에 도달할 때까지 증발한다. 그리고 분위기압력과 온도에 의해 정해지는 분류(分溜)곡선으로부터 각 성분의 증발량이 결정된다. 이 분류성상은 화학열역학적으로 계산이 가능하다. 따라서 단일성분

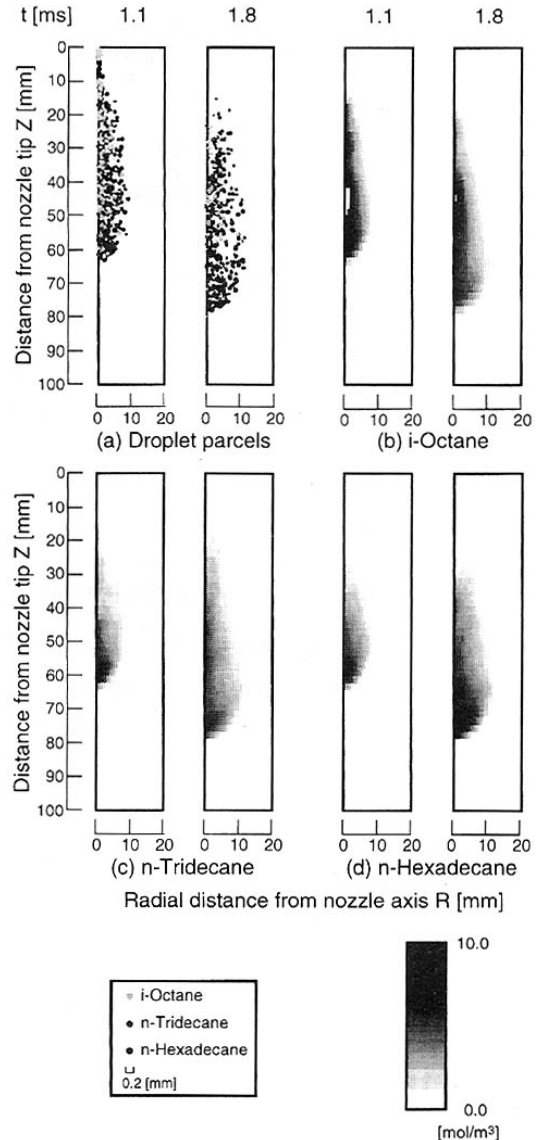
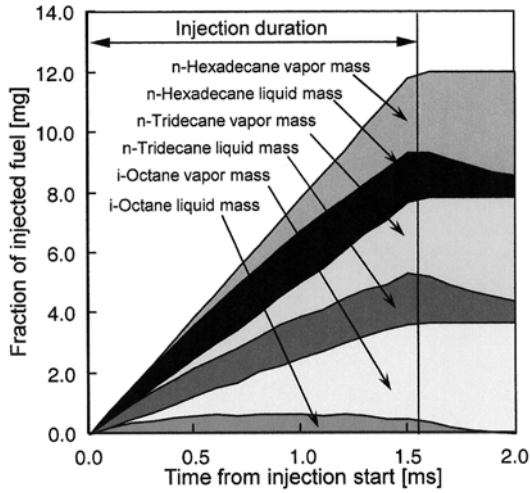


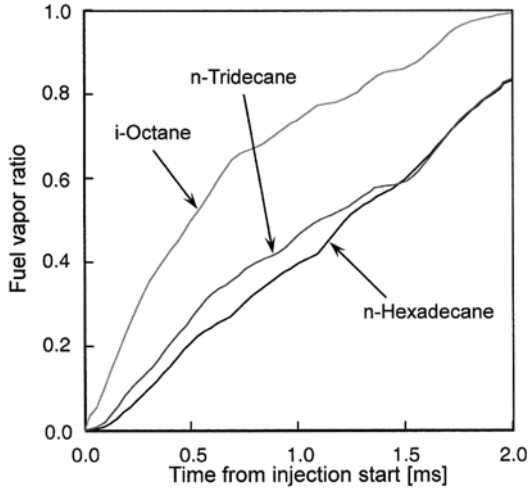
Fig. 5 Distribution of droplet parcels and vapor concentration in fuel spray of 3-components model (with evaporation model using two-phases region)

연료의 증발과정과는 상이하며 동일압력에 있어서도 연료의 포화온도는 일정하지 않고 어떤 온도의 폭을 가지며, 더욱이 그 온도에 의해 연료 중 각 성분의 증발비율이 다르다. 이러한 증발과정의 해석에 있어 화학열역학적 해석의 복잡성으로 인하여 상세한 모델의 도입은 곤란하다.

그래서 본 연구에서는 Fig. 3에 보이는 것과 같이 다성분연료 중 각 연료성분의 각 압력에 대하여 50%의 연료가 증발하는 온도점[50% 유출(溜出)온도]을 그 압력의 대표 증발온도점으로 하고, 각 연료에 있어 다성분 혼합연료의 임계압력까지



(a) Change in fuel mass



(b) Ratio of each fuel vapor

Fig. 6 Temporal change in fuel mass and ratio of fuel vapor by fuel spray of 3-components mixture model

각각의 압력에 대하여 대표온도점을 연결한 포화증기압곡선을 사용했다. 이 포화증기압곡선을 특별히 수정포화증기압곡선으로 부르기로 한다.

Fig. 4에 3성분모델 연료의 기·액 2상영역과 수정포화증기압곡선을 보인다. 각 성분의 수정포화증기압곡선은 기·액 2상영역내에 포함되고, 간단히 기·액 2상영역내에서의 다성분혼합연료 증발을 모의할 수 있다.

3.3 다성분연료 분무의 혼합기형성과정 해석

3.2절에서 나타낸 모델을 이용해서 3성분모델 연료에 대해서 분무증발과정의 수치해석을 행하였다. 그 계산결과를 Fig. 5에 나타낸다. 그림 중

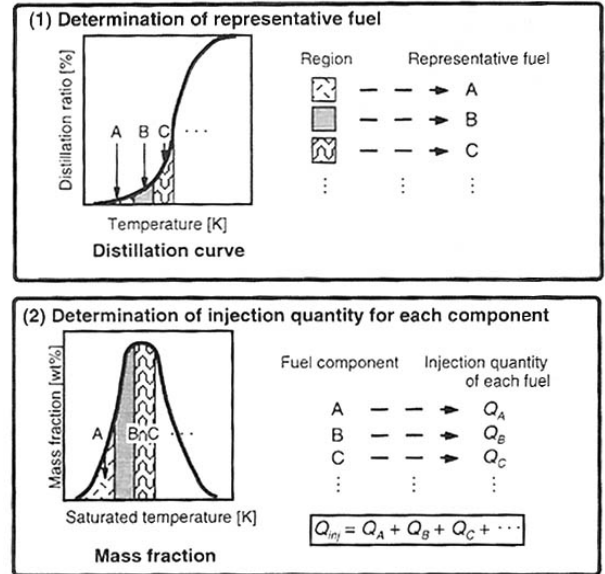


Fig. 7 Schematic diagram of selected gas oil component

에 (a)는 각 성분의 액적과셀분포, (b), (c) 및 (d)는 각 성분의 증기농도분포이다. 횡축은 분무중심축에서 반경방향거리, 종축은 노즐선단에서 분무축방향거리이다. 별도로 계산한 단일성분 연료 분무의 경우를 살펴보면 i-octane, n-tridecane의 증발이 늦고, n-hexadecane의 증발이 빠르다. 이것은 기액 2상영역을 모의하기 위하여 수정포화증기압곡선을 산출한 것에 의해 i-octane, n-tridecane에서는 수정포화증기압곡선이 단일성분시의 포화증기압곡선보다도 고온측으로 상승하고, n-hexadecane에서는 수정포화증기압곡선이 단일성분시의 수정포화증기압곡선보다도 저온측으로 상승하기 때문이다. 여기서 Fig. 5의 다성분연료 분무 중의 증기농도분포에 대해서 고찰하면, 다성분연료 중에 있어서 i-octane성분은 증발이 빠르기 때문에 분사된 액적은 반경방향으로 퍼지는 것보다도 빨리 증발한다. 이 때문에 주로 분무중심부에 있어서 증기가 형성된다. 그러나 증발에 비해서 주위로의 확산이 느리기 때문에 분무중심부에 증기농도의 고농도영역이 형성되어 하류까지 유동해 간다. 더욱이 노즐 근방에서 형성된 증기는 도입기체에 의해 분무선단부로 이동해간다. n-hexadecane의 성분은 증발이 늦기 때문에 노즐근방에서는 증발이 일어나지 않는다. 따라서 분무상류부에서의 증발량이 적고, 주위로의 확산도 진행되기 때문에 분무상류에서는 적은 연료 증기가 형성된다. 이 성분의 대부분이 증발조건에 도달하는 것은

Table 3 Gas oil model fuel

Fuel component	Mass fraction
n-Dodecane(C ₁₂ H ₂₆)	0.1
n-Hexadecane(C ₁₆ H ₃₄)	0.6
n-Tetracosane(C ₂₄ H ₅₀)	0.3

Table 4 Fuel properties

		n-Dodecane (C ₁₂ H ₂₆)	n-Hexadecane (C ₁₆ H ₃₄)	n-Tetracosane (C ₂₄ H ₅₀)
Boiling point	T_b [K]	489	560	664
Density	ρ [kg/m ³]	748	773	799
Critical pressure	p_{cr} [MPa]	1.81	1.42	0.99
Critical temperature	T_{cr} [K]	659	725	817
Critical density	ρ_{cr} [kg/m ³]	237	240	-
Molecular weight		170	226	339

분무선단부 부근까지 도달한 시점이다. 이 때문에 분무선단에 있어 증발이 활발히 일어나고, 분무선단부에서 증기농도가 높아진다. n-tridecane 성분은 i-octane과 n-hexadecane의 중간적인 거동을 보인다. 즉, 연료증기는 중심부분과 선단부분에 있어 i-octane과 n-hexadecane의 중간정도의 증기농도분포를 보이고 있다.

Fig. 6에 단순 2상영역 모델에 기초하는 3성분 모델연료에 의해 구한 분사연료 질량비율과 각 성분 연료 증발률의 시간변화를 나타낸다. 그림에서 알 수 있듯이 저비점인 i-octane의 증발이 신속히 일어나며, 상대적으로 고비점인 연료성분들의 느린 증발을 명확히 알 수 있다. 이러한 결과들로부터 다성분혼합연료 분무 내부에 있어서 저비점 연료는 분사와 동시에 증발이 일어나 그 증기가 분무중심부에 형성되고, 고비점의 연료는 증발지연에 기인해 분무선단부 영역에서 증기의 형성이 일어남을 알 수 있다.

4. 디젤기관에 있어서 혼합기형성 모델의 해석

4.1 경유로 가정한 연료성분의 선정

실제의 디젤기관에 이용되는 경유는 수십 종류의 성분이 혼합된 다성분연료이기 때문에 수치계산을 수행할 때에는 그 연료성분의 선정에 있어서 유의할 필요가 있다. 따라서 경유에 대한 연료성분의 선정 flow-chart를 Fig. 7에 보인다. 다음

에 그 절차를 설명한다.

(1) 계산에서 대상으로 하는 다성분연료의 분류곡선을 몇 개의 영역으로 분할하고, 각 영역에서의 연료분할을 결정한다.

(2) 포화온도를 기준으로 한 연료의 질량분율에 의해 (1)에서 결정한 각 영역에 포함되는 연료성분을 결정한다. 다음으로 각 영역을 대표하는 단일성분연료(A, B, C, ...)를 결정한다.

Miyagawa 등⁽⁷⁾은 흡기관 분사식 가솔린 기관의 연구에서 다성분연료를 모의하기 위해서는 최소한 고비점(高沸點), 중비점(中沸點), 그리고 저비점(低沸點)의 3성분을 고려할 필요가 있는 것을 발표했다. 따라서 본 연구에서는 경유중의 성분을 고비점, 중비점 및 저비점의 3가지 성분으로 분할하고, 전술한 절차에 따라 각 영역에 있어서 혼합비율과 그 대표연료를 설정했다.

어떤 전형적인 성상을 가지는 경유의 분류시험 결과에 의하면 초류점(初溜點, Initial Boiling Point, IBP)은 395K, 종류점(終溜點, Final Boiling Point, FBP)은 684K이다. 본 연구에서는 이 온도차를 3등분하여 저비점영역을 395K ≤ T < 490K, 중비점영역을 490K ≤ T < 585K, 고비점영역을 585K ≤ T < 681K로 설정했다. 각각의 영역에서 질량비율은 0.1, 0.6, 0.3이다. 이것들에 의해 경유 중의 n-paraffin 탄화수소계 중 저비점영역이 탄소수 10~15, 중비점영역이 탄소수 16~21, 고비점영역이 탄소수 22~27로 된다. 또한 저비점영역에서의 대표성분을 n-dodecane, 중비점영역에서의 대표성분을 n-hexadecane, 고비점영역에서의 대표성분을 n-tetracosane으로 하여 이것을 경유성분을 모의한 연료라고 가정한다. 이 혼합연료를 경유모델 연료라 칭한다. 그리고 이 각 혼합연료의 물성치는 미리 물성해석추산방법⁽⁸⁾으로부터 구했다. Table 3에 경유모델연료의 성분과 그 비율을, Table 4에 각 연료성분의 대표적인 성상을 나타낸다.

4.2 경유분무 중의 혼합기형성과정 해석

경유모델연료를 대상으로 하여 3.2절에서 구축한 다성분연료 분무증발모델을 이용하여 수치해석을 실시한다. 분사 시의 조건에서 n-tetracosane은 고체이며, 실제로는 노즐로부터 분사하는 것이 불가능하지만, 여기서는 경유모델연료로서 화학적특성에 의해 혼합연료에 용해되어져 있다고 가정하고 액체로서 분사한다. 그 계산결과를 Fig.

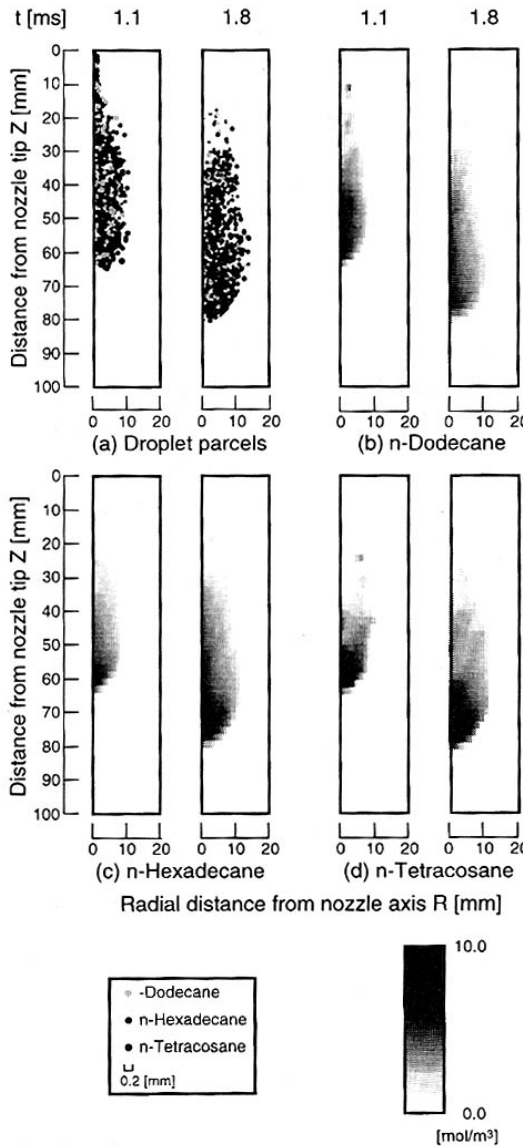


Fig. 8 Distribution of droplet parcels and vapor concentration in fuel spray of gas oil model

8에 나타낸다. 그림 중의 (a)는 각 성분의 액적과 셀분포, (b), (c), (d)는 각 성분의 증기농도분포이다. 그림으로부터 경유모델연료에서는 전술의 3 성분모델연료와는 다르고, 성분비율이 중비점성분으로 치우쳐있기 때문에 성분비율이 낮은 n-dodecane의 증발은 빠르지만, 연료의 분사량이 작기 때문에 증발량이 적고, 주위로의 확산도 급속히 진행되기 때문에 다른 성분과 비교해 높은 증기농도의 영역은 작다. n-hexadecane 성분은 성분비율이 높고 분무선단부의 고농도증기영역에서 증상으로 농도분포가 확인 된다. n-tetracosane에서는 그 증발특성이 낮기 때문에 분무선단부와 분무상류·중류영역에서 농도의 차이가 극단적으로

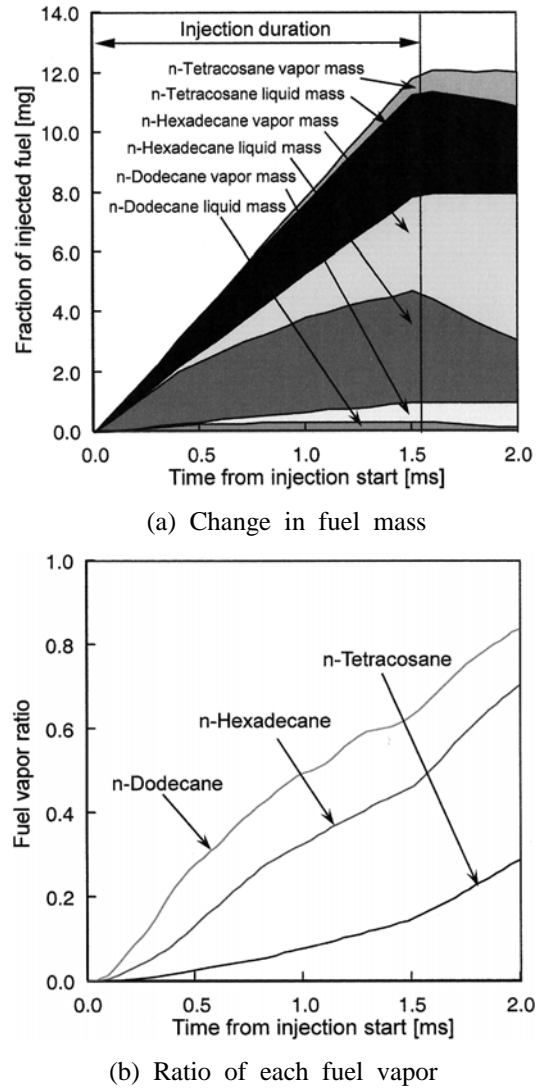


Fig. 9 Temporal change in fuel mass and ratio of fuel vapor by fuel spray of gas oil model

나타나 있다. 그러나 이와 같은 고비점연료도 본 수치해석 연구의 조건에 있어 증발이 일어나고 있는 것이 확인되고, 선단부에 고농도증기가 분포한다.

Fig. 9에 경유연료분무 모델을 이용한 경우의 분사연료 질량비율과 각 성분 연료 증발률의 시간변화를 나타낸다. 전술한 Fig. 6의 결과 경향과 동일하게 각 성분에서 증발률의 차이를 확실히 알 있다. 그리고 분사 후 시간 $t=2.0\text{ms}$ 에 있어 분사연료 전체의 증발은 약 60%이며, 특히 n-tetracosane의 경우에는 약 30%의 증발이 일어났다. 이것으로부터 경유분무 중에는 미연탄화수소 발생의 한 원인인 액상의 연료가 존재함을 예측할 수 있다.

5. 결 론

본 연구에서는 다성분연료의 분무증발과정을 해석하기 위하여 단순 2상영역 모델을 제안했다. 본 모델은 다성분용액의 기·액평형에 있어서 2상영역을 화학열역학적으로 구하지 않고, 함유 각 성분 50% 유출온도의 압력변화로부터 수정포화증기압관계를 구하고, 이것에 의해 2상영역을 근사하여 증발과정의 해석을 행하였다. 즉, 증발의 초기에 있어서는 저비점성분만이 증발하고, 고비점성분의 증기와 공존하지 않는다. 이것은 엄밀한 기·액평형을 재현하고는 있지 않지만, 본 수치해석의 결과에서도 확인할 수 있는 바와 같이, 증발과정 증기 이후의 공존은 근사적으로 표현할 수가 있다.

본 모델의 해석에 의해 저비점성분연료의 증기가 노즐 근방과 분무선단부근 양 영역에 분포하고, 한편 고비점연료가 분무선단부근에 고농도증기로 분포하는 것을 정성적으로 밝혔다. 이러한 결과는 윤⁽⁹⁾ 등의 실험연구를 통해서 얻은 결과인 “연료조성에 관계없이 물성이 비슷하면 액상분무 거동은 유사하나, 증발과정, 혼합기형성과정 그리고 확산은 다르다”고 발표한 것에도 일치한다.

결론적으로 현재 활발히 진행되고 있는 연료설계(fuel design)연구 등에서 중요 고려인자인 연료들의 물성치 변화 특성들을 본 연구와 같은 기초연구의 결과를 통하여 예측할 수 있다. 또한 대체연료를 실제 엔진에 사용 시, 실린더 내 분사연료 분무의 거동특성을 미리 정성적으로 파악할 수 있을 것이다.

후 기

이 논문은 동아대학교 학술연구비 지원에 의하여 연구되었음.

참고문헌

- (1) Azetsu, A., Dodo, S., Someya, T. and Oikawa, C., 1990, "A Study on the Structure of Diesel Spray(2-D Visualization of the Non-evaporating Spray), COMODIA 90(Kyoto), pp. 199~204.
- (2) Senda, J., Takahashi, T. and Fujimoto, H., 1999, "Numerical Analysis and Vapor Concentration Measurement on the Evaporation Process of Multi-component Fuel," *Transactions of the JSME(Series B)*, Vol. 65, No. 640, pp. 4106~4112(in Japanese).
- (3) Abraham, J. and Magi, V., 1998, "A Model for Multicomponent Droplet Vaporization in Sprays," *SAE Paper*, No. 980511.
- (4) Senda, J., Takahashi, T., Tanaka, T. and Fujimoto, H., 2000, "Spray-Wall Interaction Model Considering Superheating Degree of the Wall Surface," *Transactions of the JSME(Series B)*, Vol. 66, No. 642, pp. 604~611.
- (5) Amsden, A. A., O'Rourke, P. I. and Butler, T. D., 1989, "A Computer Program for Chemically Reactive Flows and Sprays," *Los Alamos National Laboratory report LA-11560-MS*.
- (6) Senda, J., Dan, T., Takagishi, S., Kanda, T. and Fujimoto, H., 1997, "Spray Characteristics of Non-Reacting Diesel Fuel Spray by Experiments and Simulations with KLVA-II Code," *The 7th Int. Conf. Liquid and Spray Systems(ICLASS-'97)*, pp. 149~156.
- (7) Miyakawa, H., Nagaoka, M., Osawa K. and Yamada T., 1997, "Spray Vaporization Model for Multicomponent Gasoline," *Proceeding of JSAE*, No. 971, pp. 321~324.
- (8) Ohe, S., 1985, *Estimate Method of Property Constants for Beginner*, Nikkan Engineering Paper Corp., pp. 215~221.
- (9) Yoon, J. K., Myong K. J., Senda, J. and Fujimoto, H., 2006, "A Study on Evaporative Characteristics of Multi-component Mixed Fuels Using Mie Scattered Light and Shadowgraph Images," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 30, No. 7, pp. 682~691.

(1) Azetsu, A., Dodo, S., Someya, T. and Oikawa, C., 1990, "A Study on the Structure of Diesel Spray(2-D