

균일혼합기 가솔린 직분사 엔진의 다중 영역 유사차원 해석을 통한 배기 및 노킹 예측

이재서* · 허강열** · 권혁모** · 박재인**

Quasidimensional Simulation with Multi-zone Combustion Model for Homogeneous GDI Engine Emissions and Knocking

Jaeseo Lee, Kang Y. Huh, Hyuckmo Kwon and Jae In Park

ABSTRACT

A quasidimensional program is developed for a four stroke cycle homogeneous GDI (Gasoline Direct Injection) engine. It includes models for spray, burning rate and chemistry to predict knock and emissions. With early injection a homogeneous GDI engine goes through spark ignited, turbulent premixed combustion as in PFI (Port Fuel Injection) engines. The cylinder charge is divided into unburned and burned zone with the latter divided into multiple zones of equal mass to resolve temperature stratification. Validation is performed against measured pressure traces, NOx and CO emissions at different load and RPM conditions. Comparison is made between an empirical knock model and predictions by the chemistry model in this work.

Key Words : Homogeneous gasoline direct injection(GDI) engine, Quasidimensional analysis, Knocking, NOx and CO

기 호 설 명

Alphabets			
A	: flame wetted wall area	P	: pressure
A_{st}	: constant of turbulent burning velocity	T_g	: temperature of cylinder charge
C_{p_v}	: specific heat of fuel vapor	T_l	: temperature of liquid fuel
d_l	: mean diameter of droplets	T_w	: temperature of cylinder wall
h_{f_i}	: enthalpy of formation of i-th species	V_e	: flame propagation speed
h_{th}	: convective heat transfer coefficient	S_L^0	: unstretched laminar flame velocity
l_t	: integral length scale	S_T	: turbulent burning velocity
m_{fg}	: evaporation mass of liquid fuel	W	: work done by system
Q_{chem}	: heat release by knock in the unburned zone	Y_f	: fuel mass fraction
\dot{Q}_{fgp}	: heat transfer to liquid droplets for evaporation	Y_i	: i-th species mass fraction
\dot{Q}_W	: heat transfer on the wall	$Y_{f,0}$: initial fuel mass fraction
		Y_p	: knock precursor mass fraction
		z	: correction factor
		θ	: auto-ignition delay

1. 서론

최근 가솔린 엔진은 효율과 배기 특성의 향상을

위하여 기존의 PFI(Port Fuel Injection) 방식에서 GDI (Gasoline Direct Injection) 방식의 엔진으로 진화하고 있다. 균일혼합기 GDI 엔진은 흡입 행정 때 연료가 연소기 내로 직접 분사되기 때문에 점화전까지 공기와 연료가 균일하게 혼합된 난류 예혼합 연소라고 가정된다. Poulos[1]는 연소기 형상을 고려할 수 있는 유사차원해석 모델을 통해 가솔린 엔진을 모사하였

* 포항공과대학교, 기계공학과

** 현대기아자동차, 파워트레인 해석팀

† 연락저자, huh@postech.ac.kr

다. 유사차원해석 모델은 화염이 점화 플러그를 중심으로 구 형태로 전파된다는 가정을 기초로 하여 혼합기를 화염면에 따라 미연/기연 영역으로 나누어 가솔린 엔진을 모사한다. 이 연구에서 NOx는 평형 가정과 Zel'dovich 메커니즘을 이용하여 경계층과 단열 영역에서 계산되었다. Han[2]은 이로부터 진전된 형태로서 성층화 된 EGR(Exhaust Gas Recirculation), 강한 tumble 등을 고려한 유사차원해석 모델을 개발하였으며, Rakopoulos 등[3]은 일정한 크랭크 각 간격으로 복수의 기연영역을 나누는 multi-zone 모델을 적용하였다. 최근에는 계산 효율과 진보된 모델의 필요성이 대두됨에 따라 0차원, 1차원 또는 유사차원 모델의 개발이 다양하게 이루어지고 있다. 3차원 CFM(Coherent Flame Model)은 CFMID 모델로 축소되어 가솔린 엔진의 열방출, 배기 물질과 노킹 모사에 적용되기도 하였다[4]. 이 때, 화염면의 구겨짐은 0차원 난류 모델과 평형 과정, 화염 면적 밀도를 이용하여 추정하였다. 유사차원 multi-zone 모델을 이용한 GDI 엔진의 모사[5] 또한 이루어졌으며, 연소는 fractal 모델을 이용하여 모사되었다.

본 연구에서는 유사차원해석 모델을 이용하여 균일혼합기 GDI 엔진을 모사하였으며, 하나의 미연영역과 일정한 질량으로 나뉜 다수의 기연영역을 가진 multi-zone 모델을 적용하였다. 기초 화학 반응 메커니즘을 적용하여 NOx와 CO는 각각의 기연영역에서 독립적으로 계산하였으며, 노킹은 미연영역에서의 자발화 발생 여부로 예측하였다. 이러한 모델들의 검증을 위해 엔진의 부하, 속도에 따른 다양한 운전 조건에서 실험값과 비교하였으며, 노킹 검증을 위해 실험식에 바탕을 둔 IFP 모델[6]과 비교하였다.

2. 지배방정식 및 요소 모델

2.1. 에너지 보존식

실린더 내의 혼합기는 미연/기연 영역으로 나뉘고 기연 영역은 일정한 질량을 가지는 n개의 영역으로 나누는데, 각 영역의 에너지 보존식은 다음과 같다.

$$\frac{d(mh)}{dt} - \frac{d(PV)}{dt} = \frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} + \sum_{in,out} h_j \frac{dm_j}{dt} \quad (1)$$

이 때, Q 는 벽에 의한 열손실, \dot{Q}_W , 액체 연료와의 열전달, \dot{Q}_{fg} , 미연영역에서의 노킹으로 인한 열방출, \dot{Q}_{chem} 의 합이다. 벽과의 열전달은 대류를 통해서만 이루어진다고 가정되며, 다음과 같은 식으로 계산된다.

$$\dot{Q}_W = h_{th} A (T_g - T_w) \quad (2)$$

열전달 계수, h_{th} 는 너셀 수와의 관계식[1]으로 구한다.

2.2. 분무 모델

액체 연료와 실린더 내 공기의 열전달, \dot{Q}_{fg} 는 각 분사 영역에서의 연료와의 열전달 합, $\dot{Q}_{fg} = \sum_{sprayzone} q_i$ 으로 구한다[7].

$$q_i = C_{p_v} (T_g - T_{i,i}) / (e^{z_i} - 1) \frac{dm_{fg}}{dt} \quad (3)$$

연료의 증발량, dm_{fg}/dt 은 Borman 식[8]에 의해 아래와 같이 계산된다.

$$\frac{dm_{fg}}{dt} = \pi d_i N D_v Sh \frac{P}{R_v T_m} \ln \left(\frac{P}{P - P_{v,surf}} \right) \quad (4)$$

Sh 는 Sherwood 수, D_v 는 증기 연료의 확산계수, R_v 는 기체상수, T_m 은 평균온도, $P_{v,surf}$ 는 연료의 포화압력, N 은 각 분사 영역의 연료 액적의 수이다. N 은 SMD(Sauter Mean Diameter), d_{32} 에 의해 결정되는데, 모든 액적은 초기에는 동일한 크기의 SMD를 갖는다고 가정한다.

2.3. 난류 연소 모델

화염 전파 속도는 층류 화염 속도, S_L 과 난류 화염 속도, S_T 의 관계식으로 나타낸다.

$$V_e = K S_T + (1 - K) S_L^0 \quad (5)$$

$$K = \min \left[\left(\frac{\int S_L / l_i dt}{\alpha} \right)^n, 1 \right] \quad (6)$$

초기 화염은 층류 화염 속도로 전파되다가 ($K=0$) 난류에 의해 화염면이 구겨지며 난류 화염 속도 ($K=1$)를 가지게 된다. 이 때, α 는 층류에서 난류 화염 속도로 변하는 시간을, n 은 그 경로를 결정짓는 상수이다. 층류 화염 속도는 Metghalchi와 Keck의 실험식[9]을 적용하였고, 난류 화염속도는 아래와 같다[10].

$$S_T = A_{st} S_L^0 \sqrt{\frac{D_{tu}}{D_\mu} + 1} \quad (7)$$

이 때, D_{tu} , D_{mu} 는 각 난류 확산 계수와 분자 확산 계수이고, A_{st} 는 난류 화염 속도를 결정하는 상수이다.

2.4. 노킹 모델

미연영역에서의 노킹으로 인한 열방출 \dot{Q}_{chem} 은 각 화학종의 생성 엔탈피와 질량 분율의 변화량의 곱으로 계산된다.

$$\frac{dQ_{chem}}{dt} = \sum_i h_{f,i} \frac{dY_{i,u}}{dt} \quad (8)$$

화학 반응은 iso-octane과 n-heptane의 혼합물의 메커니즘을 적용하였으며 58개의 화학종과 214개의 반응으로 이루어져있다. 이 기초 화학 메커니즘은 MultiChem 메커니즘[11]에서 iso-octane과 n-heptane에 관한 화학종과 반응만을 모아 NOx 메커니즘과 합한 것이다. 노킹은 미연영역의 연료가 모두 분해되었을 때, 즉 $Y_f^* = (Y_{f,u}^0 - Y_{f,u})/Y_{f,u}^0$ 이 1이 되었을 때로 가정한다.

화학 반응을 이용한 노킹 예측과 비교하기 위해 간단한 실험식을 이용한 IFP 모델[6] 또한 적용하였다. 노킹 프리커서의 질량 분율은 다음과 같이 착화지연 시간, θ 와 초기 연료 질량 분율, Y_{fuel}^0 의 관계식으로 구한다.

$$\frac{dY_p}{dt} = Y_{fuel}^0 \frac{\sqrt{\alpha^2 \theta^2 + 4(1-\alpha\theta)(Y_p/Y_{fuel}^0)}}{\theta} \quad (9)$$

이 때, 착화 지연 시간, θ 는 아래와 같은 Arrhenius 형태를 가진 식으로 계산된다.

$$\theta = A_{kn} \left(\frac{RON_{eff}}{100} \right) P_{eff}^{-n} e^{\left(\frac{B}{T_{ig}} \right)} \quad (10)$$

A_{kn} 와 B 는 모델 상수이다. 이 모델은 노킹 프리커서의 질량 분율이 초기 연료의 질량 분율과 같을 때, 즉 $\theta^* = Y_p/Y_{fuel}^0 = 1$ 노킹이 일어난다고 가정한다.

3. 유사차원해석 모델의 구조

Fig. 1은 유사차원해석코드의 구조를 나타낸다. 형상정보 테이블의 화염 부피, 면적 등을 통하여 화염

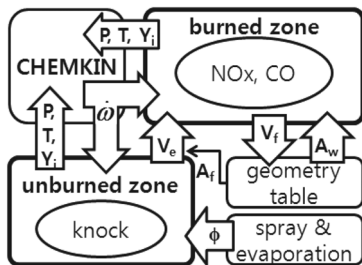


Fig. 1. Structure of the quasidimensional code.

Table 1. Engine specification and operating conditions

Displacement volume	590 cm ³	
Bore	88 mm	
Stroke	97 mm	
Engine speed (RPM)	BMEP (kPa)	ϕ
4000	200	1.0
4000	600	1.0
4000	1000	1.1
2000	600	1.0
3000	600	1.0

전파속도를 구하고, CHEMKIN은 각 영역의 압력, 온도, 화학종의 질량 분율을 받아 NOx, CO와 노킹을 예측한다. 이 때, 각 영역의 온도, 부피와 NOx, CO 등의 화학종들은 독립적으로 계산이 되며 압력은 실린더 내에서 동일하다고 가정된다.

4. 엔진 제원 및 운전 조건

Table 1에는 시험 엔진의 제원 및 운전 조건을 나타내었다. 기준 케이스는 4000 RPM, 부분 부하 600 kPa BMEP(Brake Mean Effective Pressure)이고, 부하에 따라서 200 kPa, 600 kPa, 1000 kPa BMEP, 엔진 속도에 따라서 2000 RPM, 3000 RPM, 4000 RPM 케이스를 계산하였다.

5. 결과 및 토의

5.1. 실린더 압력

Fig. 2는 부하와 RPM에 따른 압력을 측정값과 계산값을 비교하여 나타내었으며 모든 케이스에서 대체로 일치하는 결과를 얻었다. 최고 압력값과 그 시기는 화염 전파 속도의 영향을 많이 받는다. 따라서 화염 전파 속도가 층류에서 난류 화염 전파속도로 변하는 시간과 경로를 결정해 주는 상수, a 와 n 에 따라 압력선도 또한 변하게 된다. a 값이 증가하면 최고 압력값은 감소하고 그 시기는 늦어지게 된다. 이 연구에서는 모든 경우에서 a 는 0.6, n 은 2를 적용하였다.

5.2. NOx 및 CO

Fig. 3은 각 운전 조건에서 NOx의 측정치와 계산치를 나타내었고 모든 경우에서 측정치와 일치하는 결과를 얻었다. Fig. 3(a)에서 보듯이, 부하가 증가하면 NOx 또한 증가하는 경향을 보이는데, 이는 부하가 증가함에 따라 압력이 증가하여 NOx 생성의 중요한 요소인 온도 또한 증가하기 때문으로 보인다. 하지만, 1000 kPa 경우는 이러한 경향이 나타나지 않는데, 이

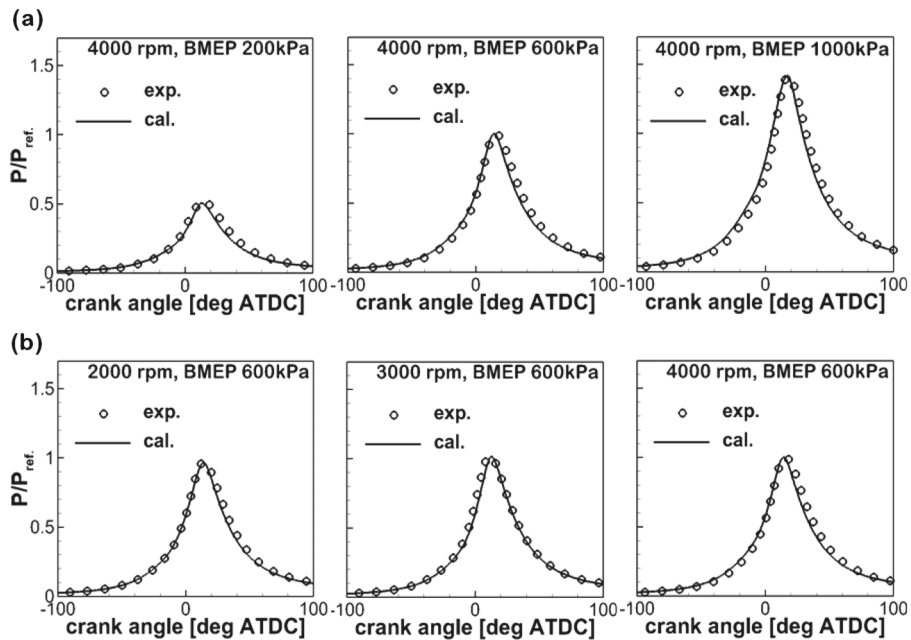


Fig. 2. Measured and calculated pressures trace at different (a) loads and (b) RPM.

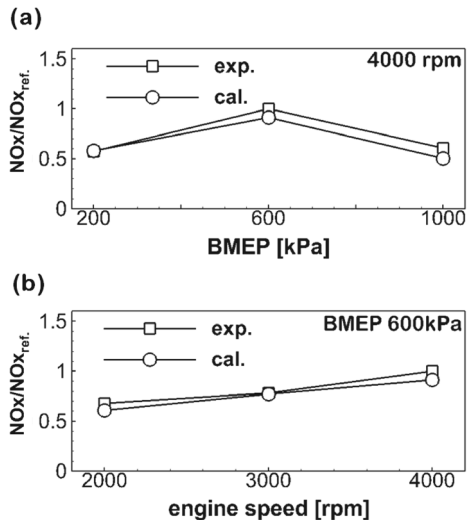


Fig. 3. Measured and calculated NOx concentrations at different (a) loads and (b) RPMs.

경우에는 압력은 증가하지만, 연료가 농후한 조건을 가지기 때문에 NOx의 양이 감소하는 경향을 보인다. Fig. 3(b)에서 엔진 속도가 증가하면 NOx가 증가하는 경향을 보이며, 이 또한 엔진 속도가 증가함에 따라 압력이 증가하기 때문이다.

CO의 측정치와 계산치는 Fig. 4에 비교하여 나타내었다. CO의 경우 NOx와 다르게 일정한 경향을 보이지는 않으며, 계산값이 측정값보다 다소 작게 예측되는 경향을 보인다. 이는 CO의 경우, 균일 혼합기를 가

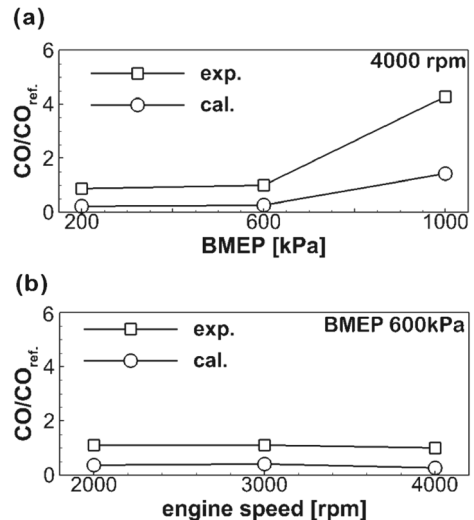


Fig. 4. Measured and calculated CO concentrations at different (a) loads and (b) RPMs.

정하면 고려할 수 없는 crevice 유동, 경계층에서의 quenching과 같은 국부적인 현상에 영향을 받기 때문으로 보인다.

5.3. 노킹

Fig. 5는 4000 RPM, 1000 kPa BMEP 조건에서, 점화시기 변화에 따른 IFP 모델과 화학 반응 메커니즘의 노킹 예측 결과를 보여준다. 이 때 연료의 옥탄가 (RON: Research Octane Number)는 92이다.

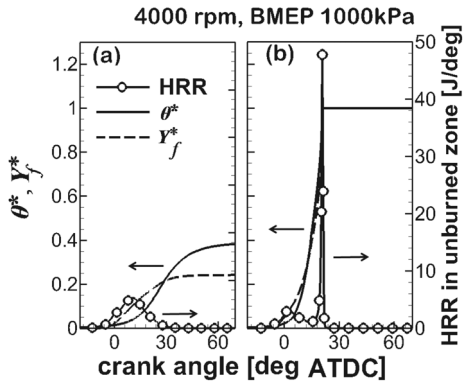


Fig. 5. Variation of θ^* , Y_f^* and heat release rate(HRR) in the unburned zone at 4000 RPM, BMEP 1000 kPa (a) spark timing $+6^\circ$, (b) spark timing -6° .

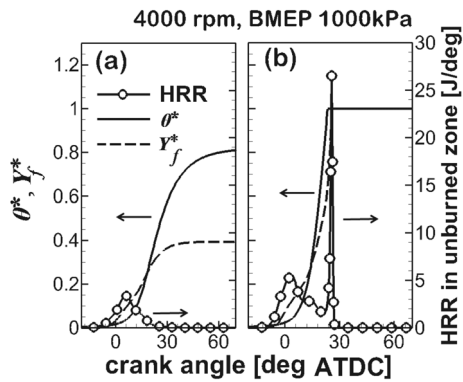


Fig. 6. Variation of θ^* , Y_f^* and heat release rate(HRR) in the unburned zone at 4000 RPM, BMEP 1000 kPa (a) RON 92, (b) RON 84.

IFP 모델에서는 θ^* 가 계산되고, Y_f^* 와 미연 영역에서의 열방출량은 화학 반응 메커니즘을 통해서 계산된다. 노킹은 각 $\theta^*=1$, $Y_f^*=1$ 일 때 발생한다고 가정되어지고, 두 경우 모두 점화시기를 6도 앞당겼을 때 노킹이 발생한다고 예측하였다. 이는 일반적으로 점화시기를 앞으로 당기면 노킹이 발생하는 것과 일치하는 경향을 보인다.

Fig. 6은 4000 RPM, 1000 kPa BMEP 조건에서 기준 점화시기를 가질 때, 옥탄가를 달리하였을 때 노킹 예측을 나타냈다. 이 때, 옥탄가의 변화는 iso-octane과 n-heptane의 몰 분율의 변화 통하여 모사한다. 옥탄가가 감소할수록 연료의 분해가 쉬워지고 노킹이 발생 가능성은 증가하게 된다. 두 모델 모두 옥탄가가 92인 기준 케이스에서는 노킹이 발생하지 않지만, 84인 경우 노킹이 발생하여 이러한 경향과 일치하는 결과를 보인다.

Fig. 7은 4000 RPM, 1000 kPa BMEP 조건에서 옥탄가 92, 84인 경우, 온도와 노킹 관련 화학종의 농도의

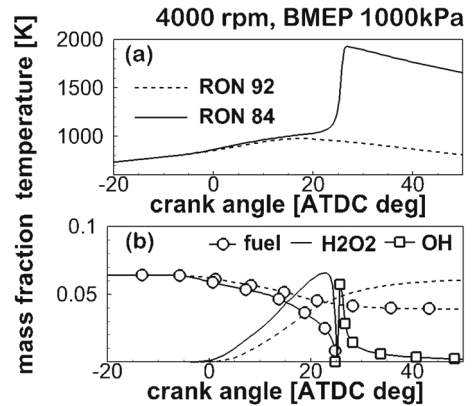


Fig. 7. Comparison of (a) temperature and (b) species mass fraction in the unburned zone for RON92 (dashed line) and RON84(solid line) fuels (H_2O_2 and OH fractions multiplied by 15 and 100 respectively).

변화를 나타냈다. 옥탄가 92인 경우 노킹이 일어나지 않지만, 옥탄가 84인 경우 Fig. 6에서와 같이 급작스러운 열방출량을 보이는 노킹이 일어난다. 노킹이 일어나지 않는 경우, 비교적 낮은 온도의 화학 반응인 연료가 분해되어 H_2O_2 가 생성되는 반응이 작다는 것을 Fig. 7(b)를 보면 알 수 있다. 하지만 노킹이 일어나는 경우, 이와 반대로 분해되는 연료량은 증가하고, 노킹이 일어나기 전까지 H_2O_2 양은 증가하다가 노킹이 발생하면 갑작스럽게 감소한다. H_2O_2 은 OH를 생성하면서 소모되는데, 이 때 OH는 H_2O 로 변하면서 많은 열방출을 하고, 이로 인하여 미연영역의 온도가 올라가 노킹을 발생시킴을 알 수 있다. 이에 반해 옥탄가 92인 경우는 미연영역의 온도는 큰 변화를 보이지 않고, H_2O_2 와 OH 농도 또한 그 변화량이 작아 노킹이 발생하지 않음을 보여 준다.

6. 결론

1) 균일혼합기 가솔린 직분사 엔진의 모사를 위해 진전된 형태의 유사차원해석 코드를 개발하여 실험값과 비교, 검증하였다. 이 코드는 분사 모델, 난류 연소 모델, 다중 기연영역 모델, 배기와 노킹 예측을 위한 화학 반응 메커니즘을 포함하고 있다.

2) 엔진 부하와 속도에 따른 압력은 실험값과 일치하는 경향을 보였으며, 배기 물질 또한 측정 값과 일치하는 결과를 보였다. NO_x 는 실험과 예측값 모두 부하와 엔진 속도가 증가함에 따라 증가하는 경향을 보였다. CO는 특별한 경향을 보이지는 않았고, 계산값이 측정값보다 작게 예측하였다. 이는 crevice 유동이나, 경계층의 quenching 등과 같은 국부적인 현상 때문으로 보인다. 4000 RPM, 1000 kPa BMEP의 경우 연

료가 농후한 운전 조건 때문에 적은 양의 NOx와 많은 양의 CO를 보였다.

3) 노킹은 iso-octane과 n-heptane 혼합물의 메커니즘을 이용하여 예측하였다. 이 모델은 점화 시기와 옥탄가를 달리 하였을 때, 실험식을 이용한 IFP 모델과 비슷한 경향을 보였다. 이는 임의의 튜닝 상수 없이 다양한 운전 조건과 연료에 대하여, 노킹을 예측할 수 있음을 보여준다.

후 기

이 연구는 현대기아자동차의 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] S. G. Poulos, "The effect of chamber geometry on SI engine combustion rates-a modeling study", Master Thesis, MIT, Massachusetts, USA, 1982.
- [2] S. Han, "Design and demonstration of spark ignition engine operating in a stratified-EGR mode", Ph.D. Thesis, MIT, USA, 1997.
- [3] C. D. Rakopoulos and C. N. Michos, *Int. J. Vehicle Design*, Vol. 49, 2009, pp. 3-51.
- [4] S. Richard, S. Bougrine, G. Font, F.-A. Lafossas, F. Le Berr, *Oil & Gas Sci. and Tech.*, Vol. 64, 2009, pp. 223-242.
- [5] G. D'Errico, A. Onorati, SAE paper, 2004-01-0043, 2004.
- [6] S. Bougrine, S. Richard, D. Veynant, SAE paper, 2009-24-0116, 2009.
- [7] A. D. Gosman, R. J. R. Johns, SAE paper, 800091, 1980.
- [8] G. L. Borman, J. H. Johnson, SAE paper 620271, 1962.
- [9] M. Metghalchi, J. C. Keck, *Combustion and Flame*, 38, 1980, pp. 143-154.
- [10] D. Lee, K. Y. Huh, *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 1576-1591.
- [11] Y. Ra, R. D. Reitz, *Combustion and Flame* 158, 2011, pp. 60-90.

논문접수일 : 2013. 02. 28

심사완료일 : 2013. 03. 14