

전기점화 기관 간극 체적 내 미연탄화수소의 산화 모델링

최희명* · 김세준* · 민경덕**

Modeling of Piston Crevice Hydrocarbon Oxidation in SI Engines

Hoimyoung Choi, Sejun Kim and Kyungdoug Min

Key Words: Piston Crevice(피스톤 틈새체적), Unburned Hydrocarbon(미연탄화수소), 4-step Oxidation Model(4단계 산화 반응 모델), 3-Dimensional Simulation(3차원 시뮬레이션), Moving Mesh(이동 격자)

Abstract

Combustion chamber crevices in SI engines are identified as the largest contributor to the engine-out hydrocarbon emissions. The largest of crevice region is the piston ring pack crevice. To predict and understand the oxidation process of piston crevice hydrocarbons, a 3-dimensional numerical simulation method was developed. A engine shaped computational mesh with moving grid for piston and valve motions was constructed. And a 4-step oxidation model involving 7 species was used and the 16 coefficients in the rate expressions were optimized based on the results from a detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation condition of engine combustion chamber. Propane was used as a fuel in order to eliminate oil layer absorption and liquid fuel effect.

1. 서 론

세계적으로 환경에 대한 관심이 높아져감에 따라 도시지역 대기오염의 주된 원인으로 인식되고 있는 자동차의 배기가스에 대한 규제가 계속적으로 강화되고 있다. 지금까지 알려진 바에 의하면 자동차의 배기가스 중 미연탄화수소 성분의 경우, 연료 중의 일부는 벽면에서의 소염(quenching), 윤활유층에서의 흡수 및 방출, 퇴적층(deposit)에서의 흡수 및 방출, 틈새 체적(crevice volume)에서의 미연소, 연소 불량 등의 원인으로 주연소 과정을 겪지 않게 된다. 이러한 미연탄화수소는 팽창 과정에서 실린더 내의 압력이 감소하며 피스톤이 하강함에 따라 연소실 내부로 유입되어 고온의 기연 가스와 혼합되고, 연소 후 팽창 행정 말기와 배기 과정 중에 연소실이나 배

기관에서 2차 산화 과정을 겪는 것으로 알려져 있다⁽¹⁾⁽²⁾. 틈새 체적은 연소실 부피의 1~2% 정도만을 차지하지만 미연탄화수소 배출에 있어서는 큰 비중을 차지한다. 특히 밸브의 틈새, 점화 플러그의 틈새, 피스톤 링 주위의 틈새 등으로 구성되는 연소실 내부 틈새 체적들 중 피스톤 틈새 체적은 가장 큰 부피를 차지하며 연소화염이 가장 늦게 도착하므로 가장 큰 영향을 미치게 된다⁽²⁾. 그리고 배기가스 중 미연탄화수소는 촉매변환기가 충분히 작용하지 못하는 시동초기에 많이 배출되는데, 이 경우에는 2차 산화가 중요한 미연탄화수소 저감 역할을 담당하므로 미연탄화수소의 배출경로와 이에 따른 산화를 주목해야 할 필요가 있다.

틈새 체적을 빠져 나와서 연소실 내부와 배기관에서 2차 산화 과정을 거치는 미연탄화수소를 직접적으로 접근하여 측정하는 것은 고온 고압의 연소실 조건과 빠르게 운동하는 피스톤에 의해 실험하기가 매우 어렵다. 따라서 틈새 체적에서의 미연탄화수소의 배출을 줄이기 위한 연구를 수행하는데 있어서 수치적 방법을 이용하는 것이 중요하다.

* 회원, 서울대학교 대학원 기계항공공학부

** 회원, 서울대학교 기계항공공학부

E-mail : kadmin@snu.ac.kr

TEL : (02)880-1661 FAX : (02)883-0179

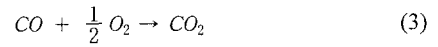
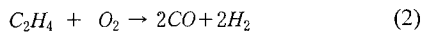
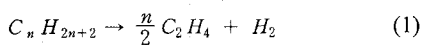
미연탄화수소의 연소실 내 산화 과정에 대해서는 상세화학반응 메커니즘에 맞춘 1-단계 모델을 이용하거나⁽³⁾ 상세화학반응 메커니즘을 이용한 모델⁽⁴⁾에 의해 어느 정도 알려져 있으나, 이들은 확산(diffusion)을 주로 고려하여 계산한 결과들로 피스톤 틈새 체적으로부터 연소실로 나오는 미연탄화수소의 유동에 대한 고려가 부족하였다.

본 연구에서는 연소실 내의 틈새 체적 중 가장 큰 비중을 차지하는 피스톤 틈새 체적이 미연탄화수소 배출에 미치는 영향을 알아보기 위하여 실제 엔진의 형상을 가지며 피스톤 및 밸브 운동을 고려할 수 있는 이동 격자(moving mesh)를 구성하고 미연탄화수소 산화 모델을 첨가하여 미연탄화수소의 틈새 체적으로부터의 거동과 연소실 내의 산화 및 배기 포트로의 배출을 계산하였다. 연료로는 율활유에 의한 흡수, 방출의 효과를 배제하기 위해 프로판(C₃H₈)을 사용하였다.

2. 미연탄화수소의 산화 계산

2.1 미연탄화수소 산화 모델

탄화수소의 산화 과정은 실제로 있어서 매우 복잡한 경로를 통해 이루어지고 있다. 수소나 메탄 등 간단한 구조의 단일 성분 연료라도 산화되기까지 수많은 반응 단계를 통해 수십 가지 이상의 화학종 및 라디칼(radical)의 형태를 거쳐 최종적으로 수증기와 이산화탄소 등으로 변환되는 것으로 알려져 있다. 프로판 연료의 산화에 대해서는 Dagaut의 메커니즘⁽⁵⁾이 많이 사용되고 있으며, 모든 화학종의 농도와 반응률을 상당히 실제적으로 예측할 수 있는 장점이 있으나, 본 연구에서는 비정상 유동과 함께 계산해야 하므로 상세 화학 반응 메커니즘을 사용하는 것은 계산 시간상 어려움이 따른다. 따라서 계산 시간을 줄일 수 있으며, 통상의 1단계 모델에 비해 산화 중간 과정을 모사할 수 있는 Hautman의 4단계 산화 반응 모델⁽⁶⁾을 사용하였다. 이 모델은 연료의 열분해, CO 및 H₂의 산화 반응 등을 나타내는 식 (1)~(4)의 반응식과 각 반응식에 대한 반응률을 나타내는 식 (5)~(9)로 구성된다.



$$S = \min(7.93 \exp(-2.48\phi), 1) \quad (5)$$

$$\frac{d[C_n H_{2n+2}]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [C_n H_{2n+2}]^{a_1} [O_2]^{b_1} [C_2 H_4]^{c_1} \quad (6)$$

$$\frac{d[C_2 H_4]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [CH_4]^{a_2} [O_2]^{b_2} [C_n H_{2n+2}]^{c_2} \quad (7)$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = \left\{ -10^x \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [CO]^{a_3} [O_2]^{b_3} [H_2O]^{c_3} \right\} \times S \quad (8)$$

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [H_2]^{a_4} [O_2]^{b_4} [C_2 H_4]^{c_4} \quad (10)$$

Hautman⁽⁶⁾은 난류 단열 반응로(turbulent adiabatic flow reactor)를 이용하여 각 식에 나타난 4개의 활성화 에너지(activation energy)와 각 화학종의 농도 영향을 나타내는 16 개의 계수를 제시하였다. 실험에서의 온도 범위는 960~1146 K, 연료의 초기 물분율은 0.3 가량이었다. 그러나, 이는 전기점화 기관의 연소실 내부 온도 압력 조건과 다른데, 이 경우 Hautman이 제시한 반응속도 식의 연소실 내부 산화에의 적용에 대한 부적

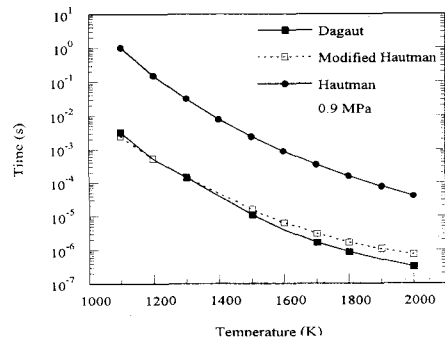


Fig. 1 THC 50 % burning time at 0.9 MPa with Dagaut's, Hautman's, and Hautman's model with modified coefficients; initial mole fraction of propane is 0.04

합성은 Fig. 1을 통해 알 수 있다. Fig. 1은 Dagaut⁽⁵⁾가 제안한 상세 화학 반응 메커니즘과 Hautman⁽⁶⁾의 4단계 산화 반응 모델로 연료 50% 연소 시간을 0.9 MPa 조건에서 계산하여 비교한 것이다. 연료 50% 연소 시간의 차이는 대략 100 배에 이르며, 온도가 높아짐에 따라 그 차이는 더욱 커진다.

따라서 연소실 내부 산화 과정에 4단계 산화 모델을 적용하기 위해서는 4단계 산화 모델의 수정이 필요하다. 본 연구에서는 Hautman이 제시한 4단계 산화 반응 모델을 실제 산화 과정을 잘 예측하는 것으로 알려진 Dagaut의 상세 화학반응 메커니즘과 같은 결과를 나타내도록 최적화하였는데, 4단계 산화 반응식에 나타나는 변수 중 활성화 에너지를 나타내는 4개의 상수를 제외한 나머지 16개의 변수를 수정하여 두 모델의 연료 50%, 전체 탄화수소(THC)의 50%, 90% 산화 시간 계산 결과의 차이가 최소화되도록 하였다. 이를 최적화하기 위하여 Powell이 제안한 함수 최소화 알고리즘인 Direction set method⁽⁷⁾를 사용하였다.

2.2 3차원 CFD 시뮬레이션

틈새 체적에 의한 미연탄화수소 발생 및 산화를 실제 엔진 상황에 가깝게 시뮬레이션하기 위해 실제 전기점화 기관의 형상을 가진 이동 격자를 구성하고 전사이클에 걸친 계산을 수행하였다. Fig. 2와 같이 3차원 격자는 4밸브 엔진의 대칭성을 고려하여 전체 엔진의 절반 부분이 구성되었으며, 피스톤 틈새 체적 부위는 보다 세밀한 격자로 이루어져 있다. 피스톤 틈새의 크기는 $6 \times 0.3 \text{ mm}$ 이며, 상사점 연소실 체적의 0.85%에 해당하는 크기이다. 엔진의 일반적인 사양은 Table 1에 나타나 있다. 구성된 격자는 피스톤과 밸브의 움직임에 따라 매 스텝마다 재정렬되며 셀(cell)의 형상을 정상적으로 유지하기 위해 조건에 따라 연소실과 밸브 주위의 격자가 활성화되거나 비활성화된다. CFD 계산은 상용 프로그램인 STAR-CD를 이용하였으며, 물성치 계산과 연소 및 산화 모델은 부프로그램(subroutine)의 형태로 추가하였다. 3차원 격자의 구성을 위해서는 역시 상용 프로그램인 ICE를 사용하였다.

계산은 흡기 행정부터 시작하여 압축, 연소, 팽창, 배기 과정을 모두 포함하여 수행되어 연소실 내 유동의 영향을 실제 엔진과 유사하게 모사할

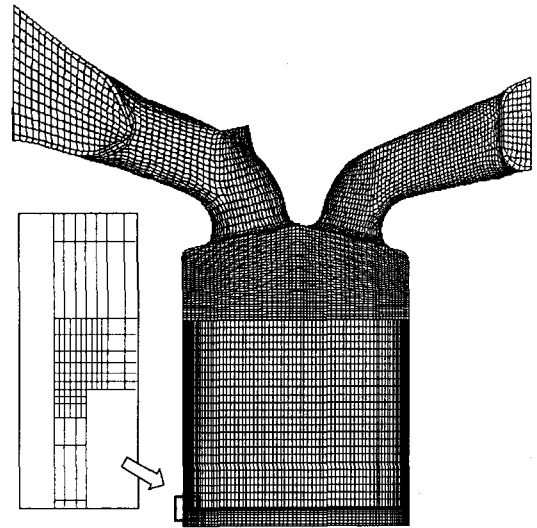


Fig. 2 The computational mesh at BDC; 221,601 cells including refined crevice cells

수 있고, 연소 과정을 벗어난 미연탄화수소의 발생부터 틈새 체적으로부터의 배출 및 산화, 배기관으로의 배출의 전과정을 정량적으로 예측할 수 있다. 계산에 적용된 운전조건은 흡기 압력 0.04 MPa, 당량비 1.0, 엔진 회전수 1500 rpm이다. 연소실과 피스톤, 흡배기 포트 벽면 온도는 각각 400, 450, 373, 500 K으로 설정하였다.

난류 모델은 표준 k-ε 모델을 사용하였으며, 연

Table 1 Specifications of computational SI engine

항목		사양
형식		직렬 4기통 DOHC
연소실 형상		펜트루프(pent-roof)
흡/배기 밸브 수		각 2 개
배기량		1,795 cm ³
보어×스트로크		82×84 mm
압축비		9.14
밸브 여닫힘 시기	IVO	6° BTDC
	IVC	46° ATDC
	EVO	50° BBDC
	EVC	10° ATDC
격자수	연소실(BDC)	221,601
	연소실(TDC)	92,723
	흡기관	28,489
	배기관	32,240

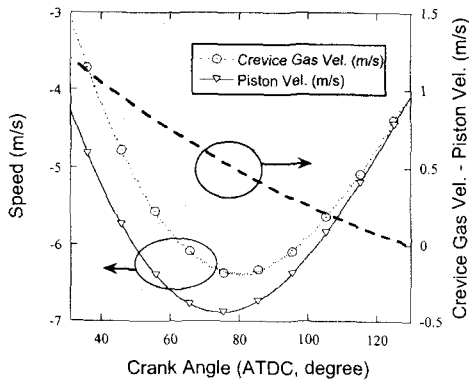


Fig. 3 The piston velocity, the crevice gas velocity and the relative crevice gas velocity

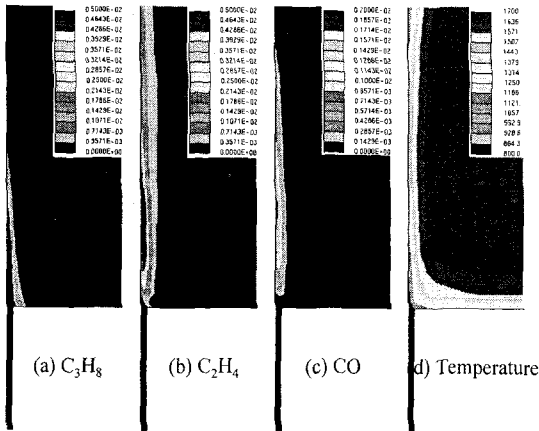


Fig. 4 The distribution of propane, ethylene, carbon monoxide (mass fraction) and temperature (K) near the piston crevice at ATDC 115° in expansion stroke

소 모델은 예혼합 난류 연소 모델인 FAE(Flame Area Evolution) 모델⁽⁸⁾을 적용하였다. 연소 화염은 틸새 체적 안으로 전파되지 못하며, 연소율이 98.5 %에 이르면 연소 과정이 끝나고 미연탄화수소의 산화가 시작되도록 하였다.

3. 결과 및 토의

3.1 흡기유동 및 연소

본 연구에서 전 사이클의 잔류 가스량은 11.5 %이며, 흡기 유동에 의한 텀블비는 압축 말기에 2.3의 최대값을 가지는 것으로 계산되었다. 연소

기간 중에 기연 가스 온도는 2,600 K까지 상승하며 연소실 압력은 ATDC 16° 에 2.09 MPa까지 상승하였다.

3.2 미연탄화수소의 발생 및 산화

계산 결과 연소 과정을 지나고 나서 연소실 전체의 연료중 0.763 %가 미연 상태로 남게 되는데, 이중 97.1 %는 피스톤 틸새 체적 안에 존재하고 나머지 2.9 %는 틸새 체적 밖에 존재한다. 산화 과정이 시작되면 틸새 체적 밖의 연료는 고온의 기연 가스로 확산되며 1 ms 이내에 급속히 산화된다.

Fig. 3에서 보듯이 기관의 팽창 과정에서 피스톤의 하강과 함께 틸새 체적 내의 미연탄화수소 가스도 하강하지만, 연소실 압력이 감소하며 가스가 팽창하게 되므로 가스의 속도는 피스톤의 속도보다 느려지고 피스톤에 대한 상대적인 속도는 피스톤 운동과 반대 방향으로 나타난다. 따라서, 틸새 체적 내 가스는 틸새 체적에서 나와 실린더 벽면에 얇은 층으로 묻게 된다. 실린더 벽면에 묻은 가스는 고온의 기연 가스 쪽으로 확산되어 산화가 시작된다. 산화가 시작되면 그에 따른 온도 상승이 산화를 더욱 촉진시킨다. Fig. 4는 ATDC 115° 에서 피스톤 틸새 체적 주위의 온도 및 미연탄화수소 분포를 나타낸 것인데, 틸새 체적에서 위쪽으로 약 5 mm 떨어진 부분에서 산화가 가장 활발하여 온도가 국부적으로 상승하고 있음을 알 수 있다. 연료인 프로판은 실린더 벽면에서 0.5 mm 안에 남아있고, 중간 생성물인 에틸렌(C₂H₄)과 일산화탄소(CO)가 프로판의 전면에서 걸쳐 넓게 존재하고 있다. 그러나 팽창 과정이 진행됨에 따라 연소실 내부 온도는 급격히 떨어지게 되므로, 산화율은 팽창 과정 초기에 가장 크며 팽창 과정 중 계속하여 감소한다.

본 연구에서 배기 밸브가 열리기 전까지 팽창 과정 중에 틸새 체적 안의 연료중 75.5 %가 연소실 내로 배출되었고 배출된 연료중 88.0 %가 산화되었으며, 중간 생성물이면서 비연료 탄화수소를 대표하는 성분인 에틸렌은 산화된 연료의 17.2 %에 해당하는 만큼 생성되어, 결과적으로 초기 틸새 체적에서 발생한 미연탄화수소의 산화율은 총탄화수소(THC) 기준으로 53.4 %가 되었다. Fig. 5를 보면 배기 밸브가 열리기 전까지 에틸렌의 질량이 계속 증가하여 미연 연료의 30.0

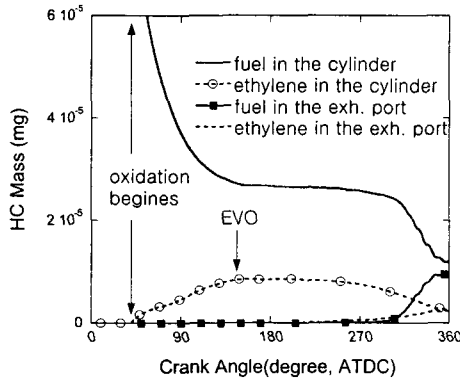


Fig. 5 Mass of fuel and ethylene in cylinder and exhaust port during expansion and exhaust strokes

%가 되는데 결과적으로 배기관으로 배출되는 미연탄화수소의 23.9 %를 차지한다. 이러한 결과는 기존의 실험 결과와 잘 일치한다⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾.

산화후 연소실 벽면에 존재하는 미연탄화수소는 대체로 벽면에서 0.5 mm 두께 안에 대부분 존재하는데, 연소실 내 유동에 의해 그 분포가 영향을 받는다. Fig. 6은 팽창 과정 말기의 연소실 유동과 미연탄화수소 분포의 단면도인데, 배기 밸브쪽에서 흡기 밸브쪽으로 존재하는 스윙형 유동에 의해 흡기 밸브쪽의 미연탄화수소 분포가 보다 두꺼운 것을 볼 수 있다. 그러나 팽창 과정에서는 피스톤 하강에 의한 실린더 축방향 유동이 지배적이므로 팽창 과정 중의 유동장에 의한 미연탄화수소 분포의 영향은 크지 않다.

3.3 미연탄화수소의 배출

배기 과정에서는 블로다운(blowdown)을 비롯한 급격한 유동이 발생하므로 미연탄화수소의 분포가 유동의 영향을 크게 받는다. Fig. 7은 배기가스가 배기 밸브 주위를 지날 때의 미연탄화수소 분포를 나타낸 것이며, 피스톤의 상승에 의해 연소실 실린더 벽면의 미연탄화수소가 급격 모여지는 두께와 모양이 위치에 따라 각각 다르게 되고 이에 따라 배기 포트에 배출되는 시각과 위치 각각의 위치와 유동의 영향으로 달라지는 것을 보이고 있다. 또한 배기가스가 배기 밸브의 바깥-아래쪽을 주로 지나서 배출됨을 보여준다. 특히 피스톤 틈새 체적 미연탄화수소는 연소실 아래쪽에서 발생하는 관계로 Fig. 8과 같이 배기 과정의

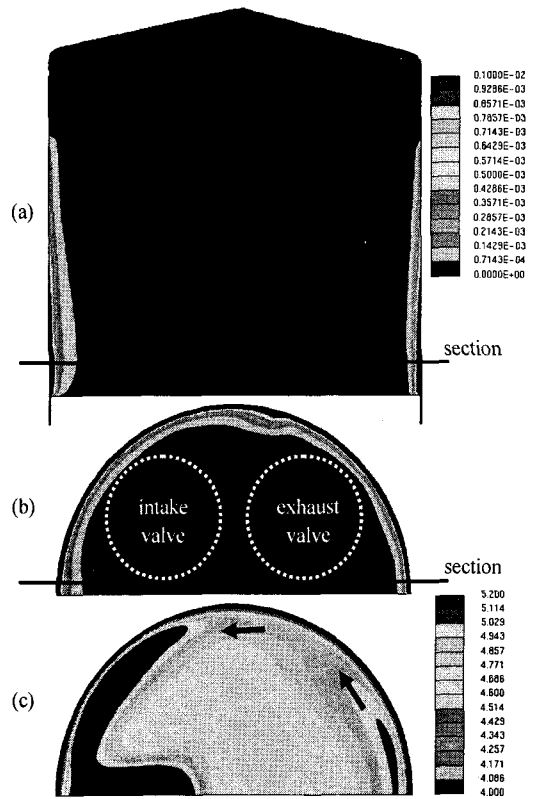


Fig. 6 Sectional THC distribution and velocity at ATDC 115° in expansion stroke; (a) vertical section view of THC, (b) horizontal section view of THC and (c) horizontal section view of velocity distributions

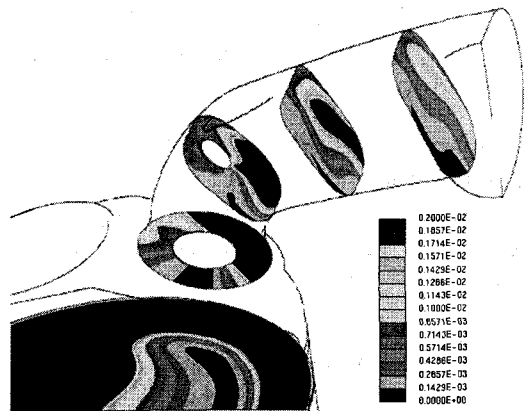


Fig. 7 The multi sectional view of THC distribution (mass fraction) at ATDC 300° in exhaust stroke

후반부에 대량으로 배출된다. 이상의 결과들은 최희명⁽⁹⁾과 박종범 등⁽¹⁰⁾의 측정 실험에서도 보여진 바 있다. 본 연구의 계산 조건에서는 배기 과정에서 연소실 밖으로 배출되지 않은 미연탄화수소가 총탄화수소 기준으로 초기 틈새 체적 미연탄화수소의 18.9 %로, 산화되지 않은 미연탄화수소의 40.9 %가 연소실에 잔류하여 다음 사이클로 넘어갔다.

4. 결론

엔진 형상을 가지며 피스톤과 밸브의 운동을 모사할 수 있는 이동 격자를 구성하고 4단계 산화 모델의 계수를 엔진 조건에 맞도록 수정하여 피스톤 틈새 체적에서 발생하는 미연탄화수소의 산화 및 배출 과정을 3차원으로 계산하였다. 본 연구를 통해 피스톤 틈새 체적에서 발생한 미연탄화수소의 산화율 및 연소실 내 분포와 배기시 분포를 파악할 수 있었으며 연료과 비연료 탄화수소의 발생 비율을 정량적으로 계산할 수 있었다.

본 연구의 계산 조건에서 피스톤 틈새 체적으로부터 발생한 미연탄화수소는 팽창 과정 중 총탄화수소 기준으로 53.4 %가 산화되었으며 27.7 %는 배기 과정의 말기에 배기 포트에 배출되고 18.9 %는 연소실에 남았다.

참고문헌

- (1) Heywood, J. B., 1988, "Internal Combustion Engine Fundamentals," McGRAW-HILL.
- (2) Cheng, W. K., Hamrin, D., Heywood, J. B., Hochgreb, S., Min, K., and Norris, M., 1993, "An Overview of Hydrocarbon Emissions Mechanism in Spark-Ignition Engines," SAE Paper No. 932708.
- (3) Min, K. and Cheng, W. K., 1995, "Oxidation of the Piston Crevice Hydrocarbon During the Expansion Process in a Spark Ignition Engine," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 106, pp. 307~326.
- (4) Wu, K. C. and Hochgreb, S., 1997, "Numerical Simulation of Post-Flame Oxidation of Hydrocarbons in Spark Ignition Engines," SAE

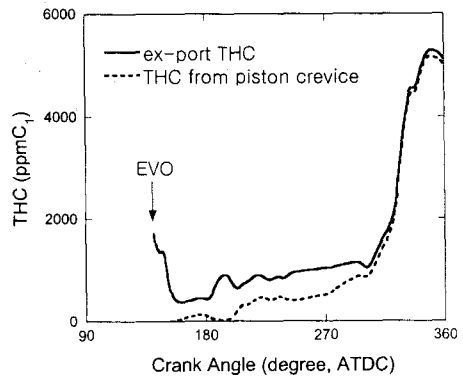


Fig. 8 THC concentration and piston crevice HC concentration behind exhaust valve in exhaust stroke

Paper No. 970886.

- (5) Dagaut, P. et al., 1987, "Kinetic Modeling of Propane Oxidation," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 56, pp. 21~63.
- (6) Hautman, D. J. et al., 1981, "A Multiple-Step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 25, pp. 219~235.
- (7) Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. and Flannery, B. P., 1992, "NUMERICAL RECIPES in C," 2nd Ed., *Cambridge Univ. Press*, pp. 412~420.
- (8) Weller, H. G., Uslu, S., Gosman, A. D., Maly, R. R., Herweg, R. and Heel, B., 1994, "Prediction of Combustion in Homogenous Charge Spark-Ignition Engines," *International Symposium COMODIA 94*, pp. 163~169.
- (9) 최희명, 1998, "LPG 연료 엔진의 배기관 내 개별 탄화수소 배출 특성," 공학석사 학위논문, 서울대학교.
- (10) Park, J., Choi, H., Cho, H., Min, K., and Kim, E. S., 1998, "Estimation of Hydrocarbon Oxidation by measuring HC Concentrations in an SI Engine Exhaust Port," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 140, pp. 351~367.