

## 내연기관 연소 및 pollutant 모델링

허강열†

### Modeling of Combustion and Pollutant Emissions in IC Engines

Kang Y. Huh

**Abstract.** 내연기관 연소는 난류유동, 분무, 연소, 열전달의 복합적인 현상으로서 열역학적 해석이 주류를 이루어 왔으나 컴퓨터의 발전에 따라 효율 개선과 공해 저감을 목표로 전산유체해석 기법이 적극적으로 도입되고 있다. 내연 기관 연소의 근간을 형성하는 난류 연소 모델링의 기본 개념으로서 가솔린엔진에서의 예혼합연소와 디젤엔진에서의 확산연소에 대한 영역조건평균(zone conditional averaging) 모델과 조건평균단합(conditional moment closure) 모델에 대해 설명하였으며 NOx와 soot 예측에 대한 적용과 엔진 응용 사례를 소개하였다.

**Key Words :** Modeling of turbulent combustion (난류연소모델), Pollutant (배기물질), Zone conditional averaging (영역조건평균), Conditional moment closure (조건평균단합)

#### 1. 서 론

내연기관은 20세기 초에 실용화된 이후 인류의 에너지원과 운송수단으로서 현대 문명과 경제 시스템의 핵심적인 요소를 형성하고 있으며 미래에도 화석 에너지원의 고갈과 환경 문제 등으로 인해 새로운 개선된 형태의 내연기관들이 지속적으로 활용될 것이 확실시 된다. 국내외의 주요 완성차 제조업체의 엔진 개발 과정에서 시제품 제작과 테스트에 소요되는 시간과 비용을 줄이기 위한 방편으로서 전산 모사가 차지하는 비중이 점차 증대되고 있으며 이는 컴퓨터의 비약적 발전과 엔진 내 열유동 현상에 대한 보다 정확한 이해에 의해 뒷받침된 결과라 할 수 있다. 1990년대에는 CRAY 등 슈퍼컴퓨터의 고속 대용량 계산 능력이 필수적이었으나 점차 workstation으로 발전하여 이제는 단일 CPU의 PC나 병렬 PC에서 대부분의 실용적 계산들이 수행되고 있으며 컴퓨터 가격도 급격히 떨어져 전체 개발 비용에서 차지하는 비중은 크지 않다.

이제 내연기관 전산 모사의 관건은 전산 하드웨어

가 아니라 해석 소프트웨어에 있으며 FIRE, FLUENT, STAR-CD 등 관련 상용 프로그램들이 이미 상당 기간에 걸쳐 확립된 위상을 유지하고 있다. 아직 국내에서 자체 개발된 상용 프로그램은 없으나 관련 분야의 국내 연구는 이미 상당한 수준에 도달해 있으며 여러 연구자들에 의해 분무, 난류유동, 연소 등의 모델링 분야에서 국제적으로도 그 수준을 인정받고 있다. 이와 같은 요소 모델들은 내연기관 뿐 아니라 일반 열유동 혹은 에너지 변환 기기에도 적용되는 내용이지만 아직 학술적으로 제대로 이해되고 있지 못하거나 미흡한 부분이 많이 남아 있어 앞으로도 재능있는 젊은 연구자들에 의한 지속적인 노력이 요구된다. 특히 내연기관 모사의 핵심인 난류 연소와 배기가스 생성에 대해서는 난류의 통계적 특성에 입각한 체계적인 접근법이 아직 완전한 형태로 개발되어 있지 못하여 실험적 모델들의 짜깁기식 조합이나 실험적 경험식에 기초한 수치 모사 계산들이 주로 많이 수행되고 있다. 최근 국제 연소 학회를 중심으로 새로운 난류 연소 모델링 기법들이 개발, 검증되고 있으므로 앞으로 이들을 적용한 내연기관 수치 모사의 사례들이 점차 늘어날 것으로 예측된다.

† 포항공과대학교 기계공학과  
E-mail: huh@postech.ac.kr

## 2. 내연기관 연소 모델링

내연기관의 연소 과정은 난류 유동, 분무, 대류 및 복사 열전달, 난류 연소 등으로 이루어져 있으며 일반적으로 Favre 평균된 보존식의 해를 구함으로써 수치적으로 모든 현상을 재현할 수 있다. 이 때에 어려움의 주요 원인은 보존식의 비선형성에 있으며 비선형적 대류항으로 부터의 난류 플럭스와 비선형적 Arrhenius 식에 의한 화학반응 생성항의 정확한 모델링이 문제의 관건이라 할 수 있다. 연소 모델링 관점에서 스파크점화 기관의 예혼합 연소와 압축착화 기관의 확산 연소의 두 가지 연소 모드가 있으며 각각은 연소 진행 특성뿐 아니라 수치적 모사를 위한 접근법에서도 완전히 구별된다.

### 2.1 가솔린엔진에서의 영역조건평균법 (zone conditional averaging)

가솔린 엔진 연소 모드에 해당하는 난류예혼합 연소 특성으로서 기연가스 영역과 미연가스 영역은 확연히 구분되며 밀도 차이로 인해 두 영역에서의 모든 스칼라와 속도값 등에 큰 차이가 있다. 기존의 Favre 평균법에서는 밀도가중 평균을 취함으로써 난류 유동에 의한 밀도 변화를 고려하였으나 두 영역에서의 서로 다른 유동 특성을 적절히 반영하지 못하기 때문에 여러 가지 문제점이 발생하였다. 흔히 사용되는 Eddy Breakup 모델에서는 연소속도를 단순히 난류 시간 스케일에 의해 결정하므로 NOx 생성 등 상대적으로 느린 반응율은 고려할 수 없으며 화학반응 시간 스케일을 고려할 수 있도록 특성 시간 스케일을 정의하는 모델에서도 경우에 따라 임의적으로 결정되는 상수 결정에 따른 문제점 등이 있다.

영역 조건 평균은 기연가스 영역과 미연가스 영역에 대해서 각각의 질량 및 운동량 보존식의 해를 구함으로써 두 영역의 유동 특성을 고려하는 방법이다 (1-3). 영역 조건 평균을 구현하기 위해서 아래와 같이 반응진행변수에 따른 Heaviside 함수를 정의한다.

$$H_c(c, \mathbf{x}, t) = H(c - c^*) = \begin{cases} 1 & \text{if } c(\mathbf{x}, t) \geq c^* \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

순간적으로 모든 영역을 세 개의 서로 다른 영역인 미반응영역(반응가스) ( $\rho = \rho_u$ ), 기반응역(생성가

스) ( $\rho = \rho_b$ ), 그리고 얇은 연소영역 ( $\rho_u < \rho < \rho_b$ )으로 나눈다. iso-c 표면은  $c(\mathbf{x}, t) \leq c^*$  인 영역으로부터  $c(\mathbf{x}, t) \geq c^*$  인 영역을 구분하는 화염면으로 정의 된다. 높은 Damkohler 수의 조건에서 반응영역두께는 난류 속도 scale보다 작고,  $0 < c < 1$ 인 확률은 매우 작아서 무시할 수 있다. 여기서 Heaviside 함수를 레이놀즈 평균하면 평균반응진행 변수가 된다.

$$\langle H_c \cdot \rangle = \bar{c} \quad (2)$$

정의에 따라 임의의 변수  $\Phi$ 에 대해서 다음과 같은 조건평균 관계식이 성립한다.

$$\langle H_c \cdot \Phi \rangle = \bar{c} \langle \Phi \rangle_b \quad (3)$$

$$\langle (1 - H_c) \cdot \Phi \rangle = (1 - \bar{c}) \langle \Phi \rangle_u \quad (4)$$

여기서  $\langle \Phi \rangle_u$  와  $\langle \Phi \rangle_b$  는 각각 반응가스와 생성가스 영역에서 조건평균값을 의미한다. 이와 같은 기본 정의와 관계식으로부터 평균반응진행변수와 조건평균 질량 및 속도 대한 보존식을 다음과 같이 유도할 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \rangle_u \cdot \nabla \bar{c} &= (\langle \mathbf{v} \rangle_u - \langle \mathbf{v} \rangle_{su}) \cdot \nabla \bar{c} + S_{Lu} \sum_f \\ \frac{\partial (\bar{c} \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c} \rho_b \langle \mathbf{v} \rangle_b) &= \rho_b S_{Lb} \sum_f \\ \frac{\partial [(1 - \bar{c}) \rho_u]}{\partial t} + \nabla \cdot [(1 - \bar{c}) \rho_u \langle \mathbf{v} \rangle_u] &= -\rho_b S_{Lb} \sum_f \\ \frac{\partial (\bar{c} \rho_b \langle \mathbf{v} \rangle_b)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{c} \rho_b \langle \mathbf{v} \rangle_b \langle \mathbf{v} \rangle_b) & \\ = -\bar{c} \nabla \cdot \langle \rho \rangle_b - \nabla \cdot \bar{c} \rho_b \langle \mathbf{v}'_b \rangle \langle \mathbf{v}'_b \rangle + \rho_b S_{Lb} \langle \mathbf{v} \rangle_b \sum_f & \\ \frac{\partial [(1 - \bar{c}) \rho_u \langle \mathbf{v} \rangle_u]}{\partial t} + \nabla \cdot [(1 - \bar{c}) \rho_u \langle \mathbf{v} \rangle_u \langle \mathbf{v} \rangle_u] & \\ = -(1 - \bar{c}) \nabla \cdot \langle \rho \rangle_u & \\ - \nabla \cdot [(1 - \bar{c}) \rho_u \langle \mathbf{v}'_u \rangle \langle \mathbf{v}'_u \rangle] - \rho_b S_{Lu} \langle \mathbf{v} \rangle_u \sum_f & \end{aligned} \quad (5)$$

여기서 화염면적밀도  $\sum_f$  는  $\sum$  의 양상을 평균이다.

이와 같은 방식으로 유도된 반응진행변수에 대한 영역조건평균 천이방정식으로부터 화염 선단부에서의 접근해를 취함으로써 난류화염전과 속도를 구하였으며, 다양한 난류 조건과 층류화염전과속도에 대하여 직접수치해법 결과와 일치하는 결과를 얻었다. 또한 가솔린 엔진 연소 진행 과정을 재현하기 위해 위

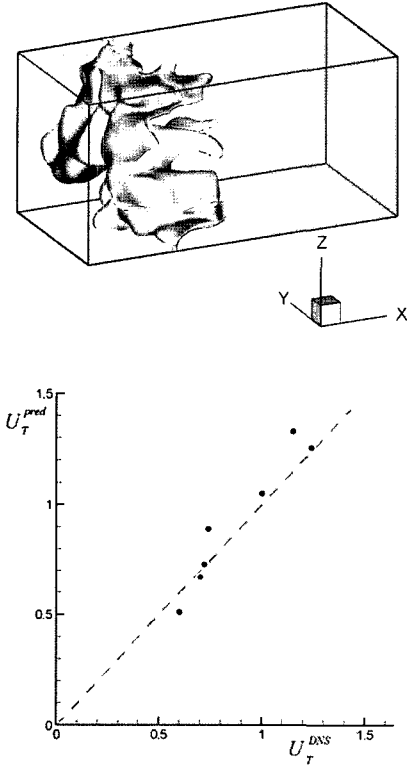


Fig. 1. Flame configuration and comparison of the asymptotic model prediction of turbulent burning velocity with DNS.

에서 주어진 영역조건평균된 질량과 운동량, 에너지 보존식의 해를 직접 구함으로써 Favre 평균으로부터 파생되는 문제점을 해결할 수 있다. 그러나 실용적인 내연기관 해석 계산에 활용하기 위해서는 안정적인 수치 해법 알고리즘과 화염면적 밀도를 결정하기 위한 새로운 관계식 등이 필요하며 이를 위해 앞으로 추가적인 연구가 이루어져야 한다.

## 2.2 디젤엔진에서의 조건평균닫힘법 (conditional moment closure)

디젤엔진의 연소 모드에 해당하는 난류확산연소에서 혼합분율에 대한 조건 평균을 통해 평균 연소 반응율을 구하는 것이 Conditional Moment Closure 방법의 기본 개념이다<sup>(4)</sup>. 혼합분율을 연료와 공기의 상호 조성비를 나타내는 무차원 수로서 연료에서 1, 공기에서 0의 값을 갖도록 정의한다. 예를 들어 화학종  $i$ 의 질량 분율(mass fraction)  $Y_i(\mathbf{x}, t)$ 의 조건 평균  $Q_i(\eta, \mathbf{x}, t)$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) = \langle Y_i | \eta \rangle \equiv \langle Y_i(\mathbf{x}, t) | \xi(\mathbf{x}, t) = \eta \rangle \quad (6)$$

위 식에서  $\eta$ 는 혼합 분율에 대한 sampling variable이며 vertical bar는 조건을 의미한다. 화학종  $i$ 의 밀도가중평균(Favre average)  $\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t)$ 는 혼합분율 확률 밀도함수와 조건 평균의 곱을 적분함으로써 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \int_{\eta=0}^{\eta=1} Q_i(\eta, \mathbf{x}, t) \tilde{P}(\eta, \mathbf{x}, t) d\eta \quad (7)$$

화학종 질량 분율식과 엔탈피 식으로부터 다음의 조건 평균 된 식을 유도할 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_i + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u}'' Y_i'' | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta)}{P(\eta) \rho_\eta} \\ = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \eta^2} + \langle w_i | \eta \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_h}{\partial t} + \langle \mathbf{u} | \eta \rangle \cdot \nabla Q_h + \frac{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u}'' h'' | \eta \rangle P(\eta) \rho_\eta)}{P(\eta) \rho_\eta} \\ = \langle N | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_h}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} \middle| \eta \right\rangle \end{aligned} \quad (9)$$

여기서  $\rho_\eta \equiv \langle \rho | \eta \rangle$ ,  $N \equiv D \nabla \xi g \nabla \xi$ 이며  $D$ 는 혼합 분율의 분자 확산 계수이다.  $Y''$ ,  $h''$ ,  $\mathbf{u}''$ 는 각각의 조건 평균 값에 대한 변동을 나타낸다.

$$Y_i(\mathbf{x}, t) = Q(\xi(\mathbf{x}, t), \mathbf{x}, t) + Y_i''(\mathbf{x}, t) \quad (10)$$

(3), (4)식은 주요 변수로 확률 밀도 함수를 포함하지 않는 비보존 형태(nonconservative form)의 식이다. 조건 평균 엔탈피는 화학 에너지를 포함하고 있기 때문에 식 (4)에는 화학반응 생성항이 없지만 실린더 내 전체 압력의 증가 및 감소에 의한 생성항이 있다. 조건 평균 화학 반응율은 다음과 같이 1st order로 모델링하였다.

$$\langle w_i | \eta \rangle \approx w_i((Q_1, \dots, Q_n), Q_h) \quad (11)$$

난류 유동이 화학 반응에 끼치는 영향(strain effect)을 대표하는 조건 평균 스칼라 소산율은 대항류 화염을 가정하여 다음 식으로 모델링 하였다<sup>(5)</sup>.

$$\langle N|\eta \rangle = C \exp(-2[\text{erf}^{-1}(2\eta-1)]^2)$$

$$C = \frac{\tilde{N}}{\int_0^1 \exp(-2[\text{erf}^{-1}(2\eta-1)]^2) \tilde{P}(\eta) d\eta} \quad (12)$$

$$\tilde{N} \approx \frac{\tilde{\xi}}{k} \tilde{\xi}^{\tilde{\eta}^2}$$

엔진에서 단일 화염 구조를 가정한 CMC 방법은 화염 구조의 공간 분포를 고려하지 못하기 때문에 자발화 직후 실험값과 약간의 차이를 보였다. 본 연구에서는 다음과 같이 CMC 구조 내에서 복수화염 방법을 이용하여 연료의 증발 시점과 위치의 변화, scalar dissipation rate의 공간 분포를 고려한 계산을 수행하였다. Multiple flamelets 방법에서는 분사하는 연료의 질량을 예를 들어 10등분하고 아래 식과 같은 각각의 연료 질량에 대한 보존식의 해를 구한다.

$$\frac{\partial(\tilde{p}\tilde{F}_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{p}\tilde{u}\tilde{F}_j) = \nabla \cdot \left[ \frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{\xi}}} \nabla \tilde{F}_j \right] + \tilde{p}\tilde{S}_{F_j} \quad (13)$$

첫번째 10%의 연료가 증발할 때 첫번째 연료 질량식에 증발 생성항이 주어지며, 다음 10%의 연료가 증발할 때 두 번째 연료 질량식에 생성항이 주어진다. 이와 같은 방법으로 모든 연료 질량 그룹에 대한 보존식의 해를 구하여 실린더 내 각각의 위치에서 해당 연료가 발견될 확률을 다음과 같이 계산한다.

$$I_j(\mathbf{x}, t) = F_j(\mathbf{x}, t) / \sum_{j=1}^{10} F_j(\mathbf{x}, t) \quad (14)$$

한편 각각의 연료 질량 부분 집합에 해당하는 조건 평균 화학종 질량분율을 다음 식을 이용하여 구한다. 이때 조건 평균 스칼라 소산율 또한 독립적으로 계산함으로써 공간에 따라 다른 난류의 영향을 부분적으로 반영하였다.

$$\frac{\partial Q_{ij}}{\partial t} = \langle N_j|\eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{ij}}{\partial \eta^2} + \langle w_{ij}|\eta \rangle \quad (15)$$

$$\frac{\partial Q_{hi}}{\partial t} = \langle N_j|\eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{hi}}{\partial \eta^2} + \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial t} \right| \eta \rangle \quad (16)$$

이렇게 구한 10개의 조건 평균값, 즉 10개의 화염 구조로부터 각각의 조건 평균값을 구하고 여기에 해당 화염구조를 발견할 확률을 곱하여 Favre 평균(unconditional Favre average) 화학종 질량분율을 계산한다.

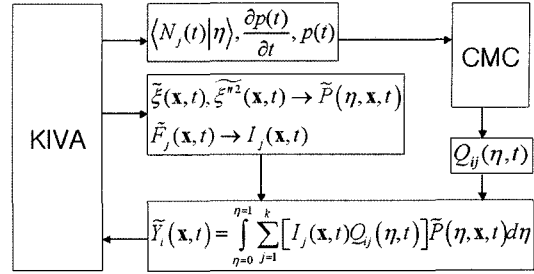


Fig. 2 A schematic diagram depicting the interaction between KIVA and multiple CMC part.

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \int_{\eta=0}^1 \sum_{j=1}^k [I_j(\mathbf{x}, t) Q_{ij}(\eta, t)] \tilde{P}(\eta, \mathbf{x}, t) d\eta \quad (17)$$

다음 그림은 복수화염 방법을 설명한 개략적 algorithm이다. 먼저 KIVA에서 각 화염에 해당하는 조건 평균 스칼라 소산율과 압력 및 압력 증가율을 CMC에 넘겨준다. CMC에서는 이를 이용해 각 화염의 조건 평균 화학종 질량분율을 계산한다. 다시 KIVA에서는 혼합분율의 평균값과 분산값을 이용해 beta 확률밀도 함수를 구하고 적분 계산으로부터 각 화염의 비조건 평균 화학종 질량분율을 구한다. 그리고 해당 연료 질량으로부터 각 화염을 발견할 확률을 계산하여 이를 이용해 최종 평균 화학종 질량분율을 구한다.

### 3. NOx 및 Soot 생성 모델링

일반적으로 NOx는 가솔린 및 디젤 엔진에서 항상 문제가 되는 반면 입자상 물질, soot는 디젤 엔진에서 주로 문제가 된다. 특히 디젤 엔진에서는 삼원촉매제와 같은 효율적인 후처리 방법이 개발되지 못하여 도시 공해의 주범으로 지목되고 있다.

#### 3.1 NOx 모델링

조건평균방법의 장점은 상세 화학반응 메카니즘과 난류 유동에 의한 mixing의 상호 작용에 의한 연소 과정을 정확히 기술할 수 있는 점이다. 따라서 조건 평균 방법을 이용하여 NOx를 예측하기 위해서 NOx의 상세 화학 반응 메카니즘을 필요로 한다. 단순한 Zeldovich 메카니즘에 의한 thermal NOx 외에도 prompt NOx, nitrous oxide, reburn 메카니즘 등을 포함한 상세 반응을 체계적으로 고려할 수 있다. 본 연구에서

사용한 NOx 상세 화학 반응식은 26th Symposium on Combustion에서 발표된 Hewson의 메커니즘<sup>(6)</sup>으로서 52개의 반응식과 13개의 species로 이루어져 있다.

### 3.2 Soot 모델링

Soot와 같은 고체 연소를 정확히 모사하기 위해서 기체 조성의 화학적 반응 특성뿐 아니라 입자 표면에서의 물리적인 반응 특성까지 고려하는 모델이 필요하다. 또한 soot 입자 이전 단계인 precursor의 생성을 모사하는 상세 화학 반응식도 필요하지만 디젤 연료와 같은 복잡한 higher hydrocarbon에 대해서는 검증된 soot precursor의 상세 화학 반응식은 아직 없는 상황이며, 현재 알려진 precursor의 반응식은 실용적인 계산에 적용하기에는 계산시간의 부담이 너무 크다. 따라서 본 연구에서는 대표적 soot precursor로서 acetylene (C2H2)을 사용하고, soot particle number density와 soot mass fraction의 지배방정식을 계산하는 Lindstedt<sup>(7)</sup>의 모델을 사용하였다. 또한 조건 평균 방법에서 Lindstedt의 soot 모델을 적용하는데 있어서 기체에 비해 현저히 낮은 분자 확산 현상 즉 differential diffusion effect를 고려하기 위하여 Kronenburg<sup>(8)</sup>의 방법을 이용하였다.

Soot particle number density와 soot mass fraction의 지배방정식은 다음과 같다.

Ys: soot mass fraction

N: soot number density

[particle number/kg-mixture]

$$\frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_s) - \nabla \cdot [\rho D_s \nabla Y_s] = w_s \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\rho N)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} N) - \nabla \cdot [\rho D_N \nabla N] = w_N \quad (19)$$

$$w_s = 2k_n(T)[C_2H_2]M_2 + 2k_g(T)A_S[C_2H_2]M_S - k_{O_2}(T)A_S[O_2]M_S - k_{OH}(T)A_S[OH]M_S \quad (20)$$

$$w_N = 2k_n(T)[C_2H_2]\frac{N_A}{60} - 2C_a d_p^{1/2} \left(\frac{6\sigma_B T}{\rho_S}\right)^{1/2} (\rho N)^2 \quad (21)$$

위 식에 나타난 것처럼 soot mass fraction의 반응항  $w_s$ 는 4가지 항으로 이루어져 있으며, 각각 soot particle의 nucleation과 growth 및 산소와 산화수소(OH)에 의한 산화반응을 모사한다.

Soot의 분자 확산 계수는 일반 기체 species의 분자

확산 계수 보다 매우 낮으므로 soot의 분자 확산 계수를 0 이라고 가정하면 다음과 같은 식을 쓸 수 있다. Qs+는 혼합분율과 동일한 분자확산계수를 가정하여 구한 soot mass fraction이며, Qs는 분자확산 계수가 0 일때의 soot mass fraction이다. Qn+와 Qn은 각 경우의 soot number density에 해당한다.

$$\frac{\partial Q_{S,i}^+}{\partial t} = \langle N_j | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{S,i}^+}{\partial \eta^2} + \langle w_{S,j} | \eta \rangle \quad (22)$$

$$\frac{\partial Q_{N,i}^+}{\partial t} = \langle N_j | \eta \rangle \frac{\partial^2 Q_{N,i}^+}{\partial \eta^2} + \langle w_{N,j} | \eta \rangle \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{S,i}}{\partial t} &= -\langle M_j | \eta \rangle \frac{\partial Q_{S,i}}{\partial \eta} + \langle w_{S,j} | \eta \rangle \\ &- 0.4 \frac{Q_{S,i} - Q_{S,i}^+}{\tau_K} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{N,i}}{\partial t} &= -\langle M_j | \eta \rangle \frac{\partial Q_{N,i}}{\partial \eta} + \langle w_{N,j} | \eta \rangle \\ &- 0.4 \frac{Q_{N,i} - Q_{N,i}^+}{\tau_K} \end{aligned} \quad (25)$$

$$\langle M_j | \eta \rangle = \langle \nabla \cdot (\rho D_\xi \nabla \xi) | \eta \rangle \quad (26)$$

## 4. 연구 사례-ERC 엔진 실험 데이터와 비교 연구

미국 University of Wisconsin, Engine Research Center에서 HCCI(Homogeneous Charge Compression Ignition) 엔진과 유사한 조건에서 수행된 디젤엔진 실험 데이터를 입수하였다<sup>(9)</sup>. 실험에 사용된 엔진은 Caterpillar single cylinder 2.44 liter 엔진으로서, 운전조건은 3가지 EGR level, 8%, 27%, 40% 각각에 대해서 6가지 분사 시기 -20, -15, -10, -5, 0, 5 ATDC 로 모두 18 가지 케이스이다. 엔진 사양과 운전 조건을 아래 표에 나타내었다. 모두 821rpm, 25% 부분 부하 상태이다. 관련 실험에 대한 자세한 정보는 SAE

Table 1. Caterpillar engine specification

Engine	Caterpillar 3401E
Bore/Stroke	137.2 mm/165.1 mm
Compression Ratio	16.1
Displacement	2.44 Liters
Number of Nozzle Pressure	6
Nozzle Hole Diameter	0.214mm

paper 2003-01-1087에 주어져 있다.

다음 그림은 각 EGR 값에서 -20, -10, 5 CA분사 시기에 대한 연소실 압력을 나타낸다. 실험 데이터와 잘 맞는 결과를 보이고 있으며 high EGR 경우에 +5CA 분사경우는 실험에서보다 두 번째 압력 peak가 더 일찍 일어나고 있다. ERC 연소 모델에 의한 예측도 같은 경향을 보이고 있으므로 실험 데이터에 문제가 있을 가능성이 많다고 생각된다. 8% EGR -20CA 분사 경우는 초기에 압력 증가율이 실험보다 낮게 예측되고 있는데 이는 분무 혼합기 형성 초기에 mixing

rate가 과소 예측되기 때문이다. 점화가 일어나기 전 난류 강도 혹은 혼합분율의 variance 값이 과소 예측되고 이로 인해 예혼합기 형성 속도가 낮게 예측되므로 초기에 급격히 연소하는 예혼합기가 충분치 못하기 때문이다. 다른 케이스들도 공통적으로 같은 경향을 보이고 있으므로 추후 분무 입자 운동에 의한 난류 생성이나 variance transport 식에서의 분무 입자로 인한 생성항을 적절히 고려해 줌으로써 보완이 가능하다.

자발화에 의한 점화 지연기간과 점화 시기는 모든 케이스에서 대체로 정확히 재현하고 있으므로 현재 사용하고 있는 n-heptane 상세 반응 메커니즘과 scalar dissipation rate이 자발화의 입장에서는 적절하다고 판단된다. 그러나 연소실 전체에 대한 평균 scalar dissipation rate 값이 혼합기 형성이나 NOx, soot 생성율에 관여하는 화염 구조를 모두 정확히 나타내지는 못할 가능성이 있으므로 이에 대한 추가의 검증 연구가 필요하다.

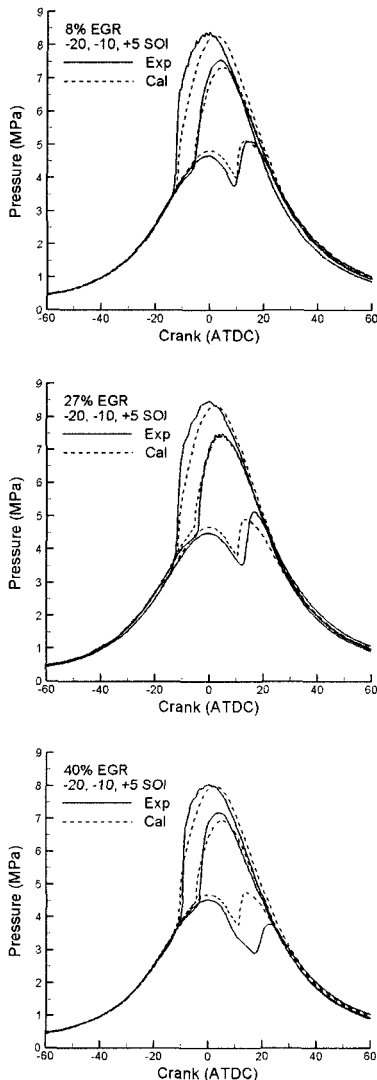


Fig. 3. Comparison of measured and calculated pressure traces.

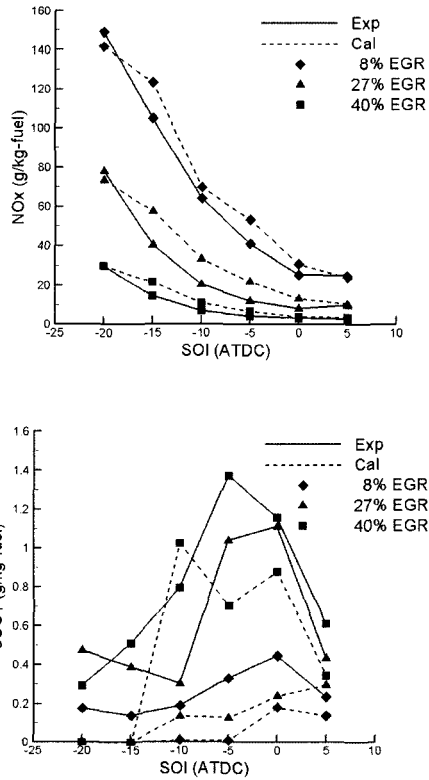


Fig. 4. Comparison of measured and calculated NOx and Soot

NOx를 모든 경우에 대해 실험 측정치와 거의 같은 값을 예측하고 있다. EGR율을 증가시키면 NOx 배출량은 급격히 감소하며 분사시기를 늦출수록 최대 압력과 온도가 낮아지면서 NOx 배출량도 감소하는 경향을 보인다. Soot는 -20 CA 분사 경우에 거의 0에 가까운 값을 예측하였으며, 전반적으로 실험 측정치와 많은 차이를 보이고 있다. EGR과 분사시기에 따른 정성적 경향은 예측할 수 있으나 CMC와 같은 체계적인 난류연소 모델에 의한 soot의 정량적 예측은 아직 어렵다고 판단되며 이는 soot 반응 자체의 복잡성에 기인한 것으로 앞으로 지속적인 연구가 필요한 분야이다. 기존의 soot 모델들은 임의적인 상수를 포함하는 실험 현상적인 모델이 주류를 이루고 있으며 체계적인 일반적 접근법이라 할 수 없고 엔진에 따라 임의적인 상수 결정이 이루어져야 하는 문제점이 있다.

## 5. 결 론

가솔린엔진에서의 예혼합연소와 디젤엔진에서의 확산연소에 대한 영역조건평균(zone conditional averaging) 모델과 조건평균단합(conditional moment closure) 모델에 대해 기술하였다. 위 모델들은 이전 난류 연소모델과 달리 특정 실험값에 맞추어야 하는 임의적인 조정 상수를 포함하지 않으며, 연소현상에서 나타나는 급격한 밀도변화를 적절히 고려할 수 있는 모델들이다. 난류 유동, 분무, 열전달, 난류 연소 등 복잡한 현상을 모두 포함하는 내연기관의 연소과정에 대해 위 모델을 적용하여 연소 압력, NOx 및 soot 예측에 사용하였다. 점화시기 및 전반적인 연소특성과 NOx 예측에 있어서 만족스러운 결과를 얻었으며 기체의 고체화, 입자간의 결합, 고체 표면 연소 등 매우 복잡한 현상을 포함하는 soot는 정성적인 예측이 가능하였다. 갈수록 중요해지는 환경문제에 대응하기 위하여 효율 개선과 배기물질 예측에 대한 지속적인 연구가 필요할 것으로 생각된다.

## 참고문헌

- 1) Eunju Lee, Kang Y. Huh, 2004, "Zone conditional modeling of premixed turbulent flames at a high Damkohler number", *Combustion and Flame*, v138, p. 211-224.
- 2) Eunju Lee, Yong H. Im, Kang Y. Huh, 2005, "Zone conditional analysis of a freely propagation one-dimensional turbulent premixed flame", *Thirtyth Symposium on Combustion*, p. 851-857.
- 3) Kang Y. huh, Seung Hyun Kim, Sooyoub Kim, 2004, "Validation of an asymptotic zone conditional expression for turbulent burning velocity against DNS database", *Proceeding of Summer Program*, Center for Turbulence Reserach, p.269-282.
- 4) A. Y. Klimenko and R. W. Bilger, 1999, "Conditional moment closure for turbulent combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 25, pp. 595-687.
- 5) E. E. O'Brien and T. L. Jiang, 1991, "The conditional dissipation rate of an initial binary scalar in homogeneous turbulence," *Phys. Fluids*, A3, pp. 3121-3123.
- 6) J.C. Hewson, M. Bollig, 1996, "Reduced Mechanisms for NOx Emissions from Hydrocarbon Diffusion Flames", *Twenty-Sixth Symposium on Combustion*, p. 2171-2179.
- 7) P. R. Lindstedt, 1994, "Simplified soot nucleation and surface growth steps for non-premixed flames," *Soot Formation in Combustion Mechanisms and Models*, Springer series in chemical physics 59, p. 417-441.
- 8) A. Kronenburg, R.W. Bilger, and J.H. Kent, 2000, "Modeling Soot Formation in Turbulent Methane-Air Jet Diffusion Flames", *Combustion and Flame*, v121, p. 24-40.
- 9) S. C. Kong, H. J. Kim, R. D. Reitz and Y. M. Kim, 2005, "Comparisons of combustion simulations using a representative interactive flamelet model and direct integration of CFD with detailed chemistry," *ASME ICES 2005-1010*.