

## 상세 화학 반응 모델 및 RIF 모델을 이용한 디젤 분무의 자발화 과정 해석

Numerical Simulation of Auto-ignition Process of Diesel Sprays Using  
Detailed Chemistry and Representative Flamelet Model

유용욱\*, 김성구\*, 김용모\*, 손정락\*\*  
Y. W. Yu, S. K. Kim, Y. M. Kim, J. L. Sohn

### ABSTRACT

The interaction between chemistry and turbulence is treated by employing the Representative Interactive Flamelet (RIF) Model. The detailed chemistry of 114 elementary steps and 44 chemical species is adopted for the n-heptane/air reaction. In order to account for the spatial inhomogeneity of the scalar dissipation rate, the multi-RIF is used. The effect of the number of RIF on ignition delay is discussed in detail. Numerical results indicate that the present RIF approach successfully predicts the ignition delay time as well as the essential features of a spray auto-ignition process.

주요기술용어 : RIF(Representative Interactive Flamelet), Auto-ignition(자발화), detailed chemistry(상세화학반응), fuel spray(연료분무)

#### Nomenclature

$c_p$  : Specific heat at constant pressure  
 $D_z$  : Mass diffusion coefficient  
 $h$  : Enthalpy  
 $\dot{m}_i$  : Chemical production rate of species I  
 $q_{rad}'''$  : Radiative heat flux  
 $t$  : Time  
 $T$  : Temperature  
 $u_i$  : Velocity component in cartesian coordinates  
 $x_j$  : Cartesian coordinate component  
 $Y_i$  : Mass fraction of the  $i^{th}$  species  
 $Z$  : Mixture fraction  
 $Z'^2$  : Variance of the mixture fraction  
 $\rho$  : Mass density

$\chi$  : Scalar dissipation rate

#### Superscripts

$\overline{\phi}$  : Reynolds averaged value  
 $\overline{\phi}$  : Favre averaged value

### 1. 서론

최근들어 환경 보존에 대한 관심이 높아져가면서, 전세계적으로 자동차 배기가스를 점점 더 규제해나가는 추세이다. 이러한 규제에 대응하기 위해서 실험적으로나 수치적으로 많은 연구가 이루어지고 있다. 하지만 디젤엔진 내에서 발생하는 연료 분무의 운동 및 증발, 자발화, 예혼합화염 및 확산화염 등은 그 자체만으로도 매우 복잡하고 실험 계측을 하기에 어려움이 많다. 수치적으로도 많은 모델들이 나와있으

\* 한양대학교 기계공학부

\*\* 영남대학교 기계공학부

나 아직까지는 매우 단순한 모델이라 할 수 있고 특히, NOx나 Soot에 대한 예측능력은 한계를 가지고 있다. 이에 Pitsch 등<sup>(3)</sup>은 유동장과 화염장을 분리해서 계산하는 Representative Interactive Flamelet (RIF) 모델을 처음으로 제안하여 NOx나 Soot에 대한 예측을 시도하였다. 이 모델은 n-heptane의 상산화화학반응 및 NOx나 Soot의 생성 메커니즘까지 포함하고 있다. 그후 Wan 등<sup>(4)</sup>은 RIF model을 이용하여 자발화 지연시간 및 위치를 예측하였다. 여기서 그들은 전체영역을 축방향으로 몇 개로 잘라 각각의 영역에 층류화염면 모델을 적용하였다. Pitsch 등<sup>(5)</sup>은 상산화화학반응을 14단계로 줄여 자발화 과정에 대해서 상세히 연구하였다. 또한 Barths 등<sup>(6)</sup>은 확률분포를 이용한 여러개의 층류화염면 모델을 통해 수치 해석하였다.

본 연구에서는 유동장과 화염장을 분리해서 계산함으로써 인해 상산화화학반응을 고려할 수 있는 RIF 모델<sup>(1-6)</sup>을 이용하여 자발화 지연시간을 알아 보았다. 여기에 사용한 연료는 n-heptane으로, 자발화를 예측할 수 있는 저온에서의 탄소고리의 끊김, 고온에서의 연료의 산화 등을 고려한 44 화학종, 114 화학반응<sup>(5)</sup>을 이용하였다. RIF 모델을 이용함으로써 Shell 점화모델<sup>(7)</sup>에서 계수를 조절해야 하는 문제를 없앴고, 자발화와 예혼합연소, 확산연소 등을 동일한 난류 연소모델을 사용하여 동시에 처리하였다.

## 2. 분무연소장 해석 모델

액상과 기상에서 발생하는 중요한 물리 현상들은 비정상, 다차원 연립방정식으로 모델링된다. Eulerian-Lagrangian 다상 유동해석방법은 기상의 지배방정식에 대해서 Euler 좌표계로 표시되는 반면 액상의 지배방정식은 Lagrangian 좌표계로 표현되며 기상과 액상의 지배방정식은 질량, 운동량, 열전달률을 나타내는 상호 관련된 생성항으로 결합된다. 본 연구에서 사용한 물리 및 수치 모델은 파동 불안정 액적분열모델<sup>(8)</sup>, 난류에 의한 액적의 dispersion을 고려해 주기 위한 stochastic 액적추적모델<sup>(9)</sup>, O'Rourke의 액적충돌모델<sup>(10)</sup>, 액적중발모델, 그리고 k-ε 난류 모델 등이 포함된다.

### 2.1 액적 분열 모델

미립화과정과 액적분열과정을 액체제트에 대해 선

형안정성 해석결과를 이용한 Reitz의 파동 분열 모델(wave instability model)을 사용하였다. 이 방법은 액체의 관성력, 표면장력, 그리고 액체제트에 작용하는 공기역학적 힘의 서로 다른 조합의 영향으로 인한 다양한 미립화영역뿐만 아니라 액적의 분무침투길이를 예측할 수 있다. 이 모델에서의 액적의 평균크기와 분열속도는 다음과 같다.

$$r = \begin{cases} B_0 \Lambda & \text{if } B_0 \Lambda \leq a \\ \min \left\{ (3\pi a^2 W / 2\Omega)^{0.33}, (3a^2 \Lambda / 4)^{0.33} \right\} & \text{if } B_0 \Lambda > a \end{cases} \quad (1)$$

$$\frac{da}{dt} = -\frac{(a-r)}{\tau_b} \quad (2)$$

$$\tau_b = 3.726 B_1 a / \Lambda \Omega \quad (3)$$

여기서  $B_0=0.61$

이 모델에서 중요한 매개변수인 가장 빠르게 성장하는 파의 파장,  $\Lambda$ 와 파의 최대성장율,  $\Omega$ 는 원형제트의 표면파동 분산방정식의 수치적 해를 적합곡선(curve fitting)을 통하여 얻은 관계식에 의해 각각 결정된다. 액적분열과정에 대한 지배방정식은 미립화과정의 해석에 사용되는 식과 동일하며 더 미세한 액적그룹들은 그것의 질량이 분열되기 전의 액적질량의 20%에 도달할 때 생성된다. 미립화과정에서 분열 상수는  $B_1=5$ 을 사용하고 액적의 2차 분열에 대해서는 O'Rourke와 Amsden<sup>(11)</sup>에 의하여 제안된 값,  $B_1=1.73$ 을 사용하였다.

### 2.2 연소모델

난류의 시간 및 길이 척도가 화학반응의 그것에 비해서 크다고 가정하면 난류장 해석과 화학반응 해석을 분리할 수 있다. 이때 화학반응이 일어나는 얇은 층을 여러 대항류 확산 화염들의 조합으로 생각할 수 있고, 이를 층류화염면(flamelet)이라 한다. 이렇게 생각함으로써 화학반응에 대해서는 새로운 독립변수, 혼합분율  $Z$ 에 의해 1차원 문제로 변환시킬 수 있다. 층류화염면 방정식은 다음과 같이 나타난다.<sup>(11)</sup>

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \frac{\rho x}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - \dot{m}_i = 0 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\rho x}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{\rho x}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \\ & + \frac{\rho x}{2} \frac{\partial T}{\partial Z} \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{c_{pk}}{c_p}\right) \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \quad (5) \\ & + \frac{1}{c_p} \left( \sum_{k=1}^N h_k \dot{m}_k - \frac{\partial b}{\partial t} + \dot{q}_{rad} \right) = 0 \end{aligned}$$

여기서 스칼라 소산율(scalar dissipation rate)  $\chi$ 는 다음과 같이 정의한다.

$$\chi = 2D_A \left( \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \quad (6)$$

위 식들(Eqs. (4) and (5))에서 유동장의 영향을 반영할 수 있는 변수는 스칼라 소산율  $\chi$ 이다.

난류연소물 제대로 다루기 위해서 일반적으로 평균 혼합분율  $\bar{Z}$ 와 혼합분율의 분산  $\overline{Z'^2}$ 에 대한 방정식을 풀어야한다. 여기서,  $\bar{\phi}$ 는  $\phi$ 의 favre 평균을 의미한다.

이전에는 준정상상태라는 가정하에 위 식들을 이용하였다. 하지만 스칼라 소산율은 급격하게 변하는 유동장에 대해서 층류화염면이 제대로 반응하지 못하므로, 비정상상태에 대해서 설명할 수 있는 새로운 층류화염면 모델이 제안되었다. 각각의 층류화염면은 자신의 영역에서 통계적으로 평균된, 스칼라 소산율에 대응하는, 변수에 의해 CFD code와 상호작용을 하게된다. 이를 Representative Interactive Flamelet (RIF) 모델이라 한다.

본 연구에서 기상과 액상의 상호작용을 모사하기 위하여 KIVA II code<sup>(12)</sup>를 층류화염면 모델과 상호작용할 수 있도록 수정하여 사용하였고, 화학반응에 대해서는 아래와 같이 나타난 평균 혼합분율  $\bar{Z}$ 와 혼합분율의 분산  $\overline{Z'^2}$ 에 대한 방정식을 사용하였다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \bar{Z}) \quad (7) \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\sigma_Z} \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right] + \bar{\rho} \chi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \overline{Z'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \overline{Z'^2}) \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\sigma_{Z^2}} \frac{\partial \overline{Z'^2}}{\partial x_j} \right] + \frac{2\mu}{\sigma_{Z^2}} \left[ \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \right]^2 - \bar{\rho} \chi \quad (8) \end{aligned}$$

화학반응에 의한 생성항을 없애주기 위해서 에너지 보존방정식은 다음과 같이 총엔탈피에 대해서 나타낸다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{D\tilde{h}}{Dt} \quad (9) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\sigma_h} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \dot{Q}^s \end{aligned}$$

총엔탈피의 정의는 다음과 같다.

$$\tilde{h} = \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k h_k(T) \quad (10)$$

따라서, 각 화학종의 질량분율을 안다면 온도를 계산할 수 있다.

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 균일한 n-heptane/air 예혼합기의 자발화

먼저 균일한 n-heptane/air 혼합물에 대해서 Ciezki et al.<sup>(13)</sup>이 shock tube에서 행한 실험결과와 Minetti et al.<sup>(14)</sup>이 급속압축기(rapid compression machine)에서 행한 실험결과를 44 화학종 114 화학반응식으로 수치적으로 구한 자발화 지연시간을 비교하였다. 수치적으로 자발화가 일어나는 순간은 시간에 따른 온도구배가 가장 큰 부분으로 정의하였으며 이는 CH 라디칼의 분포가 가장 클 때와 일치한다.

Fig. 1에 당량비와 압력 및 온도에 따른 자발화 지연 시간을 실험치와 비교하여 나타내었다. 약 600K 정도부터 시작해서 온도가 올라감에 따라 자발화 지연시간은 줄어든다. 하지만 대략 1000K 정도에서 지연시간이 다시 커지는 현상이 나타난다. 이를 negative temperature coefficient (NTC) 현상이라 한다. 거기서 다시 온도가 증가하게 되면 다시 자발화 지연시간은 짧아진다.

모든 경우에 대하여 실험치와 잘 일치하고 있다. 또한, 다단 자발화의 1단계 지연시간  $t_{1d}$ 도 나타내었다.  $t_{1d}$ 은 OH 라디칼의 분포가 가장 많을 때로 정의하였다. 1단계 지연시간도 실험치<sup>(13)</sup>와 비교적 잘 일치함을 알 수 있다.

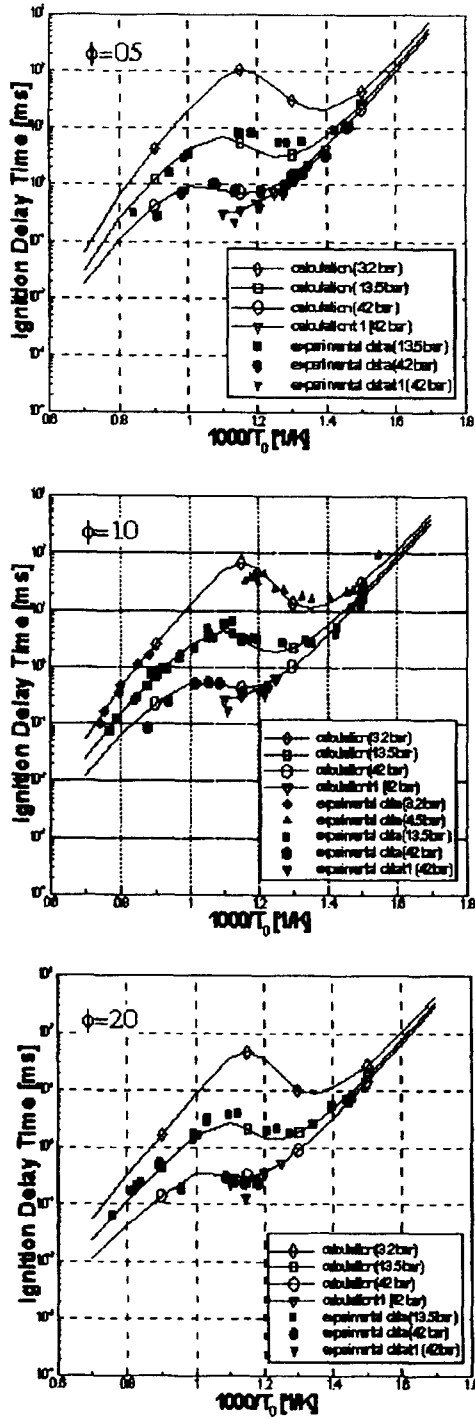


Fig. 1 Homogeneous ignition delay times of n-heptane/air mixtures in a comparison of numerical simulations with experimental data<sup>(12,13)</sup>

### 3.2 고압연소실에서의 디젤분무의 자발화

Koss et al.<sup>(15)</sup>가 온도가 800K인 공기로 채워져 있는 고압연소실에 300K의 n-heptane 액체연료 6mg을 직경이 0.2mm인 노즐을 이용하여 1.4ms 동안 분사하여 실험한 것을 수치해석하였다. 노즐에서 분무가 분사되는 동안 분무의 분사속도는 일정하다고 가정하였다.

고압연소실을 축대칭이라 가정하여 4cm×9cm의 2차원 계산 영역을 구성하였다. 비등간격격자를 반지름 방향으로 60개, 축방향으로 80개 사용하였다.

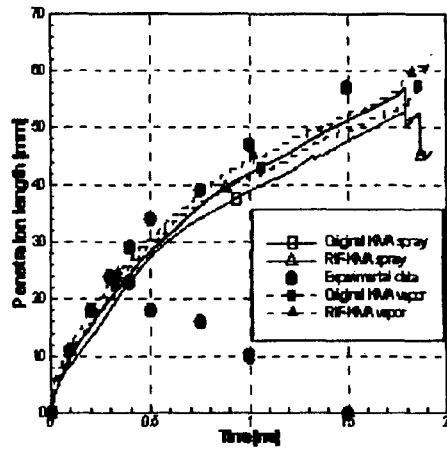


Fig. 2 Penetration length of spray and vapor.

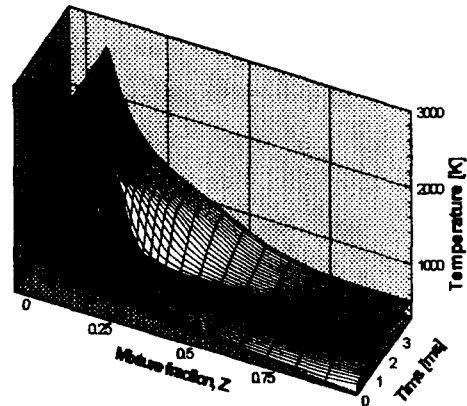


Fig. 3 Temperature development of the representative interactive flamelet.

먼저 층류화염면 모델의 적용을 위해서 수정한 KIVA II code가 유동장에 대해서 제대로 계산 되는지 알아보기 위하여 분무 및 연료증기의 침투길이를 기존의 KIVA 결과와 비교해 보았다. Fig.2에서 보는 바와 같이 연료증기에 대한 침투 길이는 수정된 프로그램과 기존의 것이 모두 실험치와 잘 일치함을 알 수 있다. 하지만 분무의 침투길이가 실험치보다 과도예측되는 것은 분무 모델들이 연소실 내부의 고압을 제대로 반영하지 못하기 때문으로 여겨진다. 따라서 분무 모델에 대해서 고압의 영향을 고려할 수 있는 모델의 개발은 필수적이라 할 수 있다.

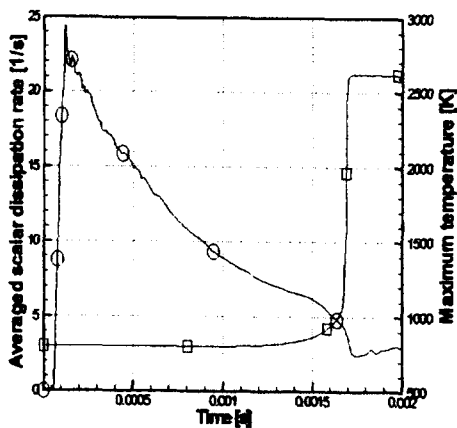


Fig. 4 Evolution of the averaged scalar dissipation rate and maximum temperature

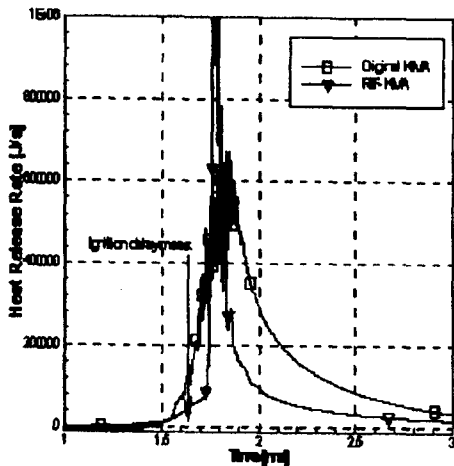


Fig. 5 comparison of heat release rate.

RIF에서의 시간과 혼합분율  $Z$ 에 따른 온도 분포의 발달과정을 Fig. 3에 나타내었다. 또한 시간에 따른 스칼라 소산율과 층류화염면에서의 최고온도를 Fig. 4에 나타내었다. 여기서 연료가 계속 분사됨에도 불구하고 스칼라 소산율이 줄어드는 이유는 계산 영역 전체를 대표하는 값이기 때문이다. 처음 연료분무의 분사에 의해 스칼라 소산율은 매우 높게 나타나지만 시간이 지남에 따라 난류소산과 혼합에 의해 평균된 스칼라 소산율은 점점 줄어들게 된다. 고온 고압하에서 연료분무의 증발에 의해 화학반응이 일어나서 라디칼이 생성되고 열도 발생하지만 스칼라 소산율이 충분히 줄어들기 전까지는 자발화되지 못하고 주위로 확산된다. Fig.3과 Fig.4를 통해 스칼라 소산율이 어느 정도 감소한 후에 다소 연료과농지역 ( $Z=0.07$ )에서 먼저 연소가 되어 주위로 확산된다는 것을 알 수 있다.

Fig. 5는 두 프로그램 간의 열발생률을 비교한 것이다. 기존의 KIVA 모델의 결과는 Shell 모델을 첨가한 것으로 자발화 지연시간을 실험치와 일치시키기 위하여 계수를 조절한 것이다. 하지만 층류화염면 모델을 이용한 결과는 저온 및 고온에서의 연료 산화 과정을 포함한 상세화학반응을 이용해서 계산하였다. 자발화 지연시간의 실험결과는 대략 1.63ms 정도이고, 층류화염면을 하나 사용한 본 계산의 결과는 1.75ms이다. Shell 점화모델을 이용한 모델이 실험치와 더 잘 맞는 결과를 나타내고 있지만 그 결과는 어디까지나 계수 조절에 의해 시행착오를 거친 것이다. 또한 Shell 점화모델은 상세 화학반응 메커니즘을 제대로 나타낼 수 없기 때문에 적용성에 많은 한계를 가진다. 층류화염면을 하나 사용하는 경우는 앞에서 말한 바와같이 전체 영역을 평균한 스칼라 소산율을 사용함으로써 자발화 지연시간이 늘어나는 단점이 있다.

지금까지의 결과들은 RIF를 1개 사용한 경우에 대한 것이다. 하지만 층류화염면 계산에 영향을 미치는 스칼라 소산율은 Fig. 4에서 보는 바와 같이 시간에 대해서 변화함과 동시에 공간적으로 비균일하게 존재한다. 따라서 이러한 스칼라 소산율의 공간적 비균일성을 고려하기 위해 계산 영역을 분할하여 여러 개의 층류화염면을 사용하였다. 본 연구에서는 비교적 간단하게 계산격자에서의 스칼라 소산율 크기에 따라 4개의 그룹으로 나누어 각각 층류화염면 모델

을 적용하였다. 그 결과 자발화 지연시간은 1.70ms으로 1개물 사용했을 때보다 더 실험치에 가까운 결과를 예측하였다. 하지만 RIF 모델의 예측능력을 향상하기 위해서는 분무자발화 및 연소과정에 관련된 물리모델에 대한 체계적인 검증과 개선이 필요하다고 사료된다.

#### 4. 결 론

1. 균일한 n-heptane/air 예혼합기에 대해서 상세 화학반응을 사용해서 자발화 지연시간을 수치해석한 결과는 실험치와 매우 잘 일치하였다.

2. Representative Interactive Flamelet(RIF) 모델은 자발화 및 예혼합화염, 확산화염 등 난류와 화학반응간의 상호작용을 어떠한 조정없이 잘 예측하였다.

3. RIF 모델의 예측능력을 향상하기 위해서는 분무자발화 및 연소과정에 관련된 물리모델에 대한 체계적인 검증과 개선이 필요하다고 사료되며, 추후 연구에서는 배가스(NOx, Soot과 UHC) 생성 및 산화 과정에 대한 모델링을 추가하고 고압의 영향을 고려한 분무 모델을 사용하여 디젤엔진 분무화염장을 해석함이 요구된다.

#### 참 고 문 헌

- Peters, N., "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 10, pp.319-339, 1984.
- Pitsch, H. Wan, Y.P. and Peters, N., "Numerical Investigation of Soot Formation and Oxidation Under Diesel Engine Conditions", SAE paper 952357, 1995.
- Pitsch, H., Barths, H. and Peters, N., "Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach", SAE paper 962057, 1996.
- Wan, Y.P., Pitsch, H. and Peters, N., "Simulation of Autoignition Delay and Location of Fuel Sprays Under Diesel-Engine Relevant Conditions", SAE paper 971590, 1997.
- Pitsch, H. and Peters, N., "Investigation of the Ignition Process of Sprays Under Diesel Conditions Using Reduced n-Heptane Chemistry", SAE paper 982464, 1998.
- Barths, H., Antoni, C., and Peters, N., "Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets", SAE paper 982459, 1998.
- Halstead, M.P., Kirsch, L.J., Prothero, A. and Quinn, C.P., "A Mathematical Model for Hydrocarbon Autoignition at High Pressures", Proc. R. Soc. Lond., A. 346, pp.515-538, 1975.
- Reitz, R. D., "Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays," Atomization and Sprays Technology, 3, pp. 309~337, 1987.
- Kim, Y. M., and Shang, H. M. and Chen, C. P., "Studies on Droplet-Turbulence Interaction," KSME J., Vol. 8, No. 4, pp. 364~374, 1994.
- O'Rourke, P. J., Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays, Los Alamos National Laboratory report LA-9069-T, 1981.
- O'Rourke, P. J., and Amsden, A. A., "The TAB Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup", SAE paper 872089, 1987.
- Amsden, A.A., O'Rourke, P.J. and Butler, T. D., "KIVA II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays", Los Alamos National Labs, LA-11560-MS, 1989.
- Ciezki, H.K. and Adomeit G., "Shock-Tube Investigation of Self-Ignition of n-Heptane-Air Mixtures

- Under Engine Relevant Conditions",  
Combust. Flame, Vol. 93, pp.421-433,1993.
14. Minetti, R., Carlier, M., Ribaucour, M.,  
Therssen, E. and Soche, L.R., "A Rapid  
Compression Machine Investigation of  
Oxidation and Auto-Ignition of n-Heptane  
: Measurement and Modeling", Combust.  
Flame, 102, pp.298-309, 1995.
15. Koss, H.J., Bruggemann, D., Wiartalla, A.,  
Backer, H. and Breuer, A., "Investigation  
of the Influence of Turbulence and Type  
of Fuel on the Evaporation and Mixture  
Formation in Fuel Sprays", IDEA Final  
Report, 1993.