

# 디젤기관 연소실내 NO생성물 예측에 관한 연구

배병열<sup>1)</sup> , 최재성<sup>2)</sup>

## Study of Prediction of NO formation in diesel engines

Bae Byung Ryul , Choi Jae Sung

### Abstract

In view of protecting from air pollution in future, it is important to understand the present NO<sub>x</sub> emission level of diesel engines, and to study its reduction technique. In this study, the computer program was developed to predict the engine performances and exhaust emissions. As the results, it was shown that this computer simulation program is very useful and effective in evaluating NO emission prediction in a diesel engine.

### 1. 서론

디젤기관의 수요가 급증함에 따라 고성능의 디젤기관을 개발하기 위한 연구가 활발하게 진행되고 있다. 그러나 디젤기관에서 배출되는 미립자와 NO<sub>x</sub>가 환경문제의 주범으로 인식되면서 이에 대한 국제적인 규제가 강화되고 있으며, 국내에서도 미립자 및 NO<sub>x</sub> 배출량의 저감에 관한 연구가 시급한 당면 과제로 급부상하고 있다. 현재 이에 관한 연구로는 주로 후처리 방법을 이용하는 연구가 주종을

1)한국해양대학교 기관공학과 석사과정 주기관 전공

2)한국해양대학교 기관공학과 교수

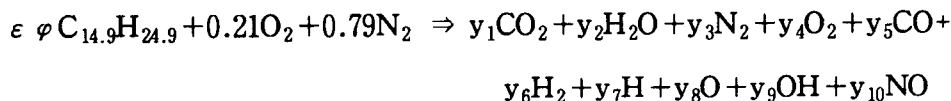
이루고 있으나, 효과적인 대책을 마련하기 위하여는 연소실내에서 이들이 생성되는 특성을 파악하는 것이 선결 과제라 생각된다.

따라서, 본 연구에서는 디젤기관에 있어서 NO<sub>x</sub>의 배출 특성을 파악하기 위하여 연소 과정에 있어서 NO<sub>x</sub>의 생성을 예측할 수 있는 수법을 확립하고 NO<sub>x</sub>의 생성에 영향을 미치는 인자들에 관하여 조사하였다. 또한 NO<sub>x</sub>는 연소 과정동안에 생성되기 때문에 열발생율 형태에 의하여 크게 영향 받을 것으로 판단되어 운전 조건에 따른 열발생율 형태를 가정하여 열발생율 형태의 변화가 NO<sub>x</sub>의 생성에 미치는 영향을 예측하고 열효율과의 관계를 조사 검토하였다.

## 2. 배기 가스 조성 계산

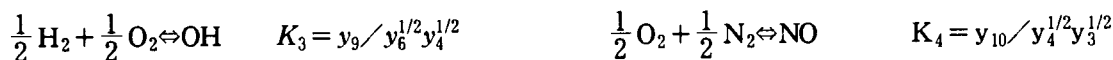
### 2.1 평형 조성 계산

기연 가스 영역에서 각 성분의 반응속도는 NO를 제외하고는 매우 빠르게 진행되기 때문에 각 순간의 상태가 열역학적 평형에 가깝다고 할 수 있으므로 NO를 제외한 각 가스성분과 온도, 압력은 평형열역학 계산을 통하여 계산할 수 있다. 본 연구에서는 연소 생성물을 구성하는 10개의 화학종(CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H, O, OH, NO)을 고려하였다. 당량비가 φ인 디젤연료 C<sub>14.9</sub>H<sub>24.9</sub>가 연소하면 다음과 같은 화학 반응식으로 나타낼 수 있다.



여기에서  $\varepsilon$ : molar fuel-air ratio  $y_i$ : mole fraction

그리고 이들 화학종의 생성에 관해서는 다음과 같은 6개의 반응식을 이용하였다.



(y는 각 화학 종의 mole fraction, K: 평형상수)

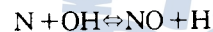
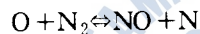
위의 화학 반응식에서 평형상수  $K_1 \sim K_6$  값은 온도만의 함수로 정의하여 Olikara 와 Borman에 의해 개발된 식을 이용하였다.

$$\log K = A \ln(T/1000) + B/T + C + DT + ET^2 \quad (\text{상수 } A, B, C, D, E: \text{Janaf Table})$$

## 2.2 반응 속도에 의한 NO계산

앞에서 기술한 것처럼 10개 생성물중 NO는 각 순간에 평형을 이루고 있다고 할 만큼 충분히 빠르지 못하므로 NO는 반응속도론(Kinetic Theory)을 이용하여 비평형으로 계산하였다.

본 연구에서는 NO의 생성 기구로서 Zeldovich mechanism을 사용하였으며 반응식은 아래와 같고 반응 상수는 [4]에서 실험으로 구한 값을 사용하였다.



위의 Zeldovich mechanism 반응식에서 순반응 속도 상수를  $k^+$ , 역반응 속도 상수를  $k^-$ 라 하면 NO생성율은 다음과 같이 수식화 된다.

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_1^+ [O] [N_2] + k_2^- [N] [O_2] + k_3^- [N] [OH] - k_1^- [NO] [N] - k_2^- [NO] [O] - k_3^- [N] [OH]$$

[ ] : 각 성분의 몰 농도 (molecules/cm<sup>3</sup>)     $k^+$  : 반응 상수 (cm<sup>3</sup>/mole · sec)

[N]은 통상 매우작으므로  $\frac{d[N]}{dt} = 0$ 이라고 볼 수 있으며 O, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H, OH의 반응율은 충분히 빠르므로 평형 농도와 비평형 농도가 같다고 할 수 있으므로가 정위 식을 정리하면

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R_1 (1 - \alpha^2)}{1 + \alpha K}$$

$$\text{여기서 } K = \frac{R_1}{R_2 + R_3}, \quad \alpha = \frac{[NO]}{[NO]_{eq}}, \quad R_i \quad (i = 1, 2, 3) = k_i^+ [ ]_{eq} [ ]_{eq} = k_i^- [ ]_{eq} [ ]_{eq}$$

NO의 비평형 농도는 평형 계산으로 부터 구한 NO의 평형농도  $[NO]_{eq}$ 를 이용

하여 위 식을 적분하여 구할 수 있다.

### 3. 사이클 시뮬레이션 모델

연소실내 가스에 대하여 열역학 제1법칙을 적용하여 나타내면 다음과 같다.

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{dQ_l}{dt} - P\frac{dV}{dt} - \frac{dm_i}{dt} h_i + \frac{dm_f}{dt} h_f$$

여기에서  $dU$ :내부에너지 변화  $\frac{dQ_l}{dt}$ :연소실 벽으로의 손실 열량

$$P\frac{dV}{dt}:\text{팽창일} \quad \frac{dm_i}{dt} h_i:\text{열발생량} \quad \frac{dm_f}{dt} h_f:\text{blowby에 의한 열량}$$

연소실내에서 각 영역별 가스 상태가 균일하고 화학적으로 평형이라 가정하면 다음과 같은 식이 성립한다.

$$U = m u = mu(T, P, \varphi) \quad V = mv = mv(T, P, \varphi) \quad h_i = h = h(T, P, \varphi),$$

위 식을 풀면 시간 변화에 따른 열역학적인 상태를 구할 수 있다.

디젤기관의 연소는 일반적으로 예혼합 연소와 확산연소 2단계로 구분하여 설명된다. 본 연구에서 사용한 연소 함수는 [4]에 의해 개발된 예혼합 연소 부분과 확산 연소 부분에 같은 함수 형태인 Wiebe의 연소 함수를 미분하여 중첩한 근사 함수를 이용하였다.

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\theta} = & \alpha \left[ 6.9(m_p+1) \left(\frac{\theta}{\theta_p}\right)^{m_p} \exp \left\{ -6.9 \left(\frac{\theta}{\theta_p}\right)^{m_p+1} \right\} \right] \\ & + (1-\alpha) \left[ 6.9(m_d+1) \left(\frac{\theta}{\theta_d}\right)^{m_d} \exp \left\{ -6.9 \left(\frac{\theta}{\theta_d}\right)^{m_d+1} \right\} \right] \end{aligned}$$

여기에서  $\alpha$  : 예혼합 연소의 비율   첨자  $p, d$  : 예혼합 연소 및 확산연소

### 4. 해석 결과 및 고찰

이상과 같이 설정한 시뮬레이션 모델을 이용하여 당량비 및 EGR, 점화시기등

운전조건을 여러가지로 변화시켜가며 기관의 제 성능인자와 NO농도를 계산한 결과 다음과 같은 NO생성 특성을 고찰할 수 있었다.

#### 4.1 평균 당량비에 의한 영향

Fig4.1~4.2는 기관회전수 2000rpm, 점화시기를 상사점 30deg전인 운전조건에서 당량비를 0.6부터 0.9까지 변화시켰을때 온도와 NO농도의 변화를 나타내고 있다.

그림 Fig4.1~4.2에서 당량비의 증가에 따라 화염온도와 NO농도의 변화를 나타낸다. Fig4.2에서 당량비가 큰 경우 동결되기까지의 NO의 감소가 크게되는 것은 낮은 산소 농도에 의한 평형상태에로의 역반응이 진행할 수 있는 고온 상태가 상당히 지속되기 때문이라고 생각된다. Fig4.3은 평균당량비 변화에 따른 평균유효 압력(imep)과 열효율(thermal efficiency), NO의 변화를 나타내며 그림에서 당량비가 0.7인 경우 NO가 최대로 되고 이것보다 크거나 작은 경우에는 NO가 감소하는 것을 나타내고 있다. 이것은 당량비가 크게되면 산소가 부족하게 되고 당량비가 적게 되면 공기의 과잉에 따른 열용량이 증대하기 때문에 화염온도가 저하하고 NO는 감소하는 것으로 생각된다. 이러한 결과들로 볼때 NO는 온도와 당량비에 강하게 의존함을 알 수 있다. 즉 온도가 상승하고 산소농도가 높을때 NO의 생성율은 커진다. 그리고 NO생성은 당량비가 큰 경우는 당량비, 다시 말해서 산소 농도에 의존성이 크고 적은 경우는 연소온도의 의존성이 크다고 할 수 있다.

#### 4.2 EGR의 영향

NO배출을 억제하는 수단으로서 배기가스 재순환(Exhaust Gas Recirculation)방식이 가솔린 기관에 주로 채용되어왔으나 최근에는 디젤기관에도 EGR방식을 채택하려는 연구가 진행되고 있다. Fig4.4~4.5은 기타 운전조건을 일정하게 두고 EGR율을 변화시켰을때 온도와 NO의 변화를 나타낸다. 그림에서 EGR율을 증가시키에 따라 연소온도가 감소하여서 NO가 감소하는 것을 알 수 있다. 그림에서 낮은 EGR

울에서는 연소온도의 감소가 적어서 NO 감소 정도가 적고 EGR율이 20%이상되었을 때 연소온도 감소폭이 커져서 NO가 큰폭으로 감소하는 것을 알 수 있다. 그러나 EGR율을 너무 크게 하면 Fig4.6에서 나타난 것처럼 평균유효 압력의 강하가 크게 되며 한편 EGR율의 증가는 매연의 발생을 초래하는 것으로 알려져 있으므로 EGR율 증대에 의한 NO감소는 한계가 있다고 생각된다. Fig4.6은 EGR율에 따른 열효율과 NO 몰 분율에 대해 나타내고 있으며 그림에서 EGR율을 크게할 수록 NO는 감소하지만 지시평균 유효압력도 같이 감소함을 알 수 있다. 그림에서 열효율은 분사되는 연료량이 감소하여 효율이 증가하는 경향을 보인다. 이러한 원인으로 본 논문에서는 EGR에 따른 연소온도의 감소에 의해 NO가 감소하는 것으로 계산하였지만 최근의 연구 사례에는 EGR로 인해 산소 농도가 감소하여 착화 지연이 길어지기 때문에 NO생성에 영향을 주게 되어 NO가 감소한다고 보는 견해도 있으므로 여기에 대한 원인 연구가 보다 더 자세하게 진행되어야 할 것 같다.

#### 4.3 연료 분사 시기의 영향

연소 초기의 급격한 열 발생을 억제시켜 NO를 저감시키는 방법으로서 현재 EGR과 함께 가장 많이 이용되고 있는 방법이 연료분사 시기를 지연시키는 방법이다. Fig4.7~4.8은 다른 물리적 변수를 일정하게 하고 연료 분사 시기(injection timing)를 변화시켰을 때 온도와 NO의 변화를 나타내고 있으며 그림에서 분사 시기를 늦춤에 따라 연소최고 온도와 연소지속 시간이 감소하며 이에 따라 NO농도도 감소하는 경향을 나타낸다. 즉 NO농도는 연소 지속 시간과 연소온도에 관계함을 알 수 있다. Fig4.9는 분사시기에 따른 열효율, 평균유효압력, NO변화를 나타내며 그림에서 분사시기가 늦어짐에 따라 연소온도와 압력이 감소하기 때문에 열효율과 평균유효 압력은 감소하고 NO도 감소함을 나타낸다. 상기 결과들로부터 최적의 분사시기가 존재함을 알 수 있고 분사시기를 과도하게 늦게 하면 효율이 저하되기 때문에 연료 분사 시기의 조절에 의한 NO저감은 한계가 있다고 할 수 있다.

#### 4.4 열발생율 형태(연소특성지수)변화에 따른 영향

연료유의 연소성의 변화는 열발생율 형태에 직접 영향을 미치며 또한 다양한 Wiebe연소 특성 지수를 사용하면 근사적으로 이를 나타낼 수 있으므로 연소실내의 NO생성 특성을 파악하기 위해서 여러 종류의 Wiebe연소 특성 지수를 사용하여 조사하였다. Fig4.10은 연소특성 지수( $md$ )에 의한 열발생율 형태를 나타내고 있다. 그림에서 연소특성 지수가 0.2인 경우 급격한 열발생으로 인해 온도가 상승하여 NO생성이 급격해짐을 알 수 있으며 이는 Fig4.11로 부터도 확인 할 수 있다. 그리고 연소특성지수가 5인 경우는 주연소 기간이 늦어짐에 따라 온도 상승이 둔화되어 NO생성이 늦어지고 NO가 생기자마자 동결됨을 알 수 있다. 그림에서 연소특성 지수가 0.2, 0.5인 경우 동결되기 전에 NO가 감소하는 것은 온도 상승이 빨라져서 NO가 동결되기 전에 역반응이 활발하게 일어나기 때문인 것으로 판단된다. Fig4.12는 연소특성지수 변화에 따른 열효율, 평균유효압력, NO계산 결과를 나타낸다. 그림에서 알 수 있는 바와 같이 열효율과 NO는 트레이드 오프 관계에 있다고 할 수 있다.

### 5. 결론

본 논문에서는 연소 과정에서 NO의 생성을 예측할 수 있는 수법을 개발하여 NO생성에 영향을 미치는 인자들에 대해 고찰하였으며 그 결과는 다음과 같다.

- (1) Injection timing, EGR, 당량비 조절에 의한 NO저감 효과가 확인되었다.
- (2) EGR은 적은 폭의 온도 감소에도 NO의 감소 폭은 크므로 EGR의 효과는 다른 인자들에 비해 크다고 할 수 있다.
- (3) 이상의 결과로부터 본계산방법의 신뢰성이 확인되었으므로 NO예측에 본 프로그램을 이용 할 수 있다고 판단된다.

## 참고문헌

1. C.R. Ferguson., "Internal Combustion Engines" John Wiley and Sons, 1986.
2. JANAF Thermochemical Tables, National Bureau of Standards Publication NSRDS-NBS, 1971.
3. ARCOUMANIS., et. al., "Measurement and Prediction of transient NO<sub>x</sub> emissions in DI diesel engines," IMechE 1992.
4. Sung-Ro Lee, et. al., "Analysis of Combustion and Performance of Diesel Engine by Wiebe's Combustion Function," 大韓機械學會, 1985, pp353~359.
5. P.Eyzat and J.C. Guibet ., "A New Look at Nitrogen Oxides Formation in Internal Combustion Engine," .
6. 水谷辛夫 ., "燃燒工學", 日. 大阪大學. 1989.
7. M. Ishida, et. al., "Diesel Combustion Analysis by Two-Zone Mode 1" , 日本機械學會, 1994.
8. 金子靖雄, et. all. "內燃機關의 燃燒," Vol 11, 1972 . 2 , pp180~187
9. S.C. Kyriakides and J.C. Dent 1945, P.S. Mehta, "Phenomenological Diesel Combustion Model Including Smoke and NO emission , " SAE Paper 860330.
10. Sung-Ro Lee, et. al., "Analysis of Combustion and Performance of Diesel Engine by Wiebe's Combustion Function," 大韓機械學會, 1985, pp353~359.
11. T. Nagai, and M. Kawakami., "Reduction of NO<sub>x</sub> Emission from Medium Speed Diesel Engines" , Bulletin of the M.E.S.J., Vol 19, no 1.



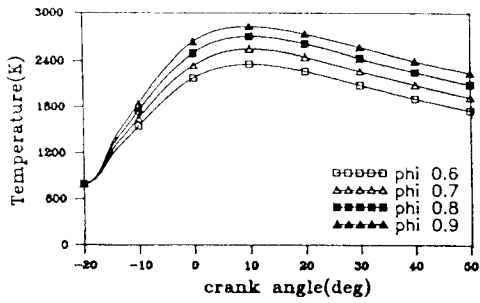


Fig. 4.1 Variation of temperature with equivalence ratio

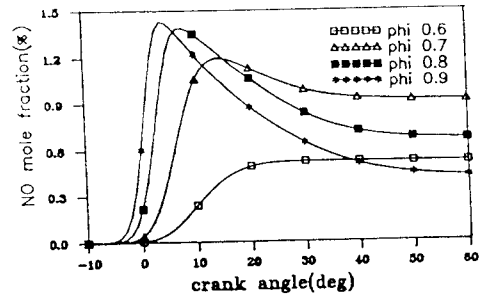


Fig. 4.2 Variation of NO mole fraction with equivalence ratio

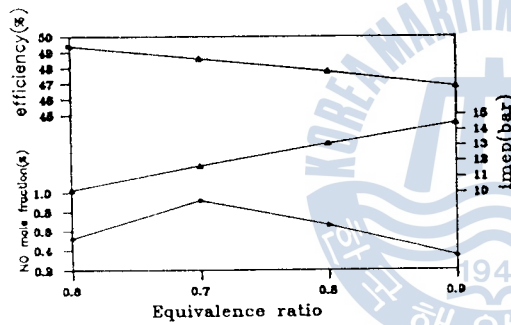


Fig. 4.3 Correlation of equivalence ratio and engine performance

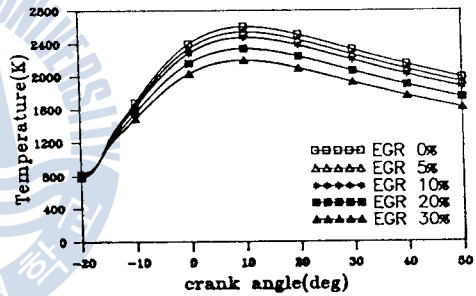


Fig. 4.4 Variation of temperature with EGR

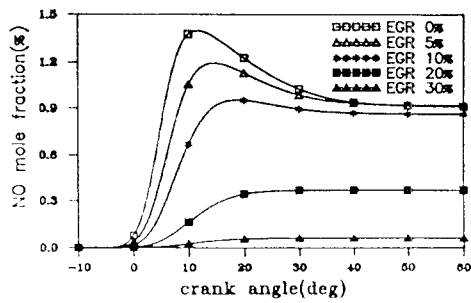


Fig. 4.5 Variation of NO mole fraction with EGR

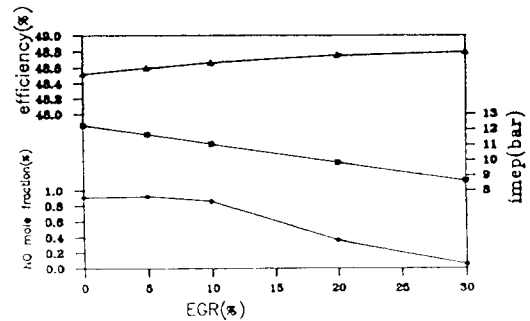


Fig. 4.6 Correlation of EGR and engine performance

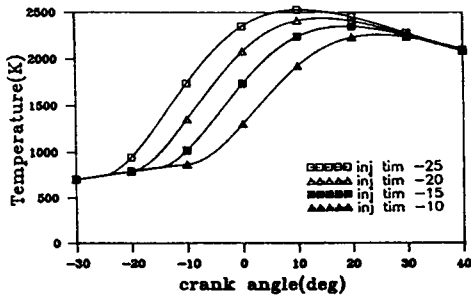


Fig. 4.7 Variation of temperature with injection timing

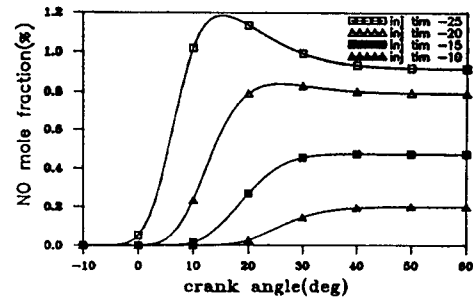


Fig. 4.8 Variation of NO mole fraction with injection timing

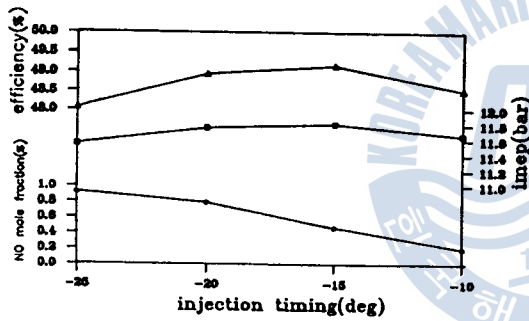


Fig. 4.9 Correlation of injection timing and engine performance

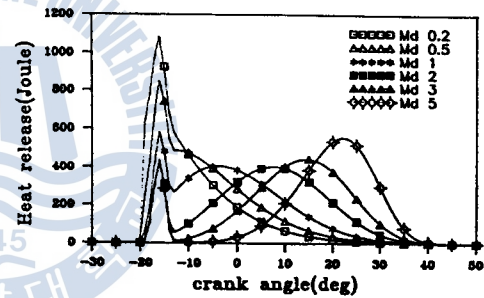


Fig. 4.10 Variation of heat release pattern with combustion property number

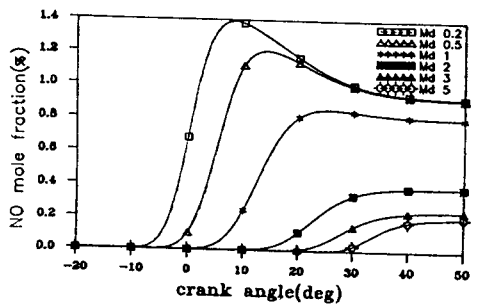


Fig. 4.11 Variation of NO mole fraction with combustion property number

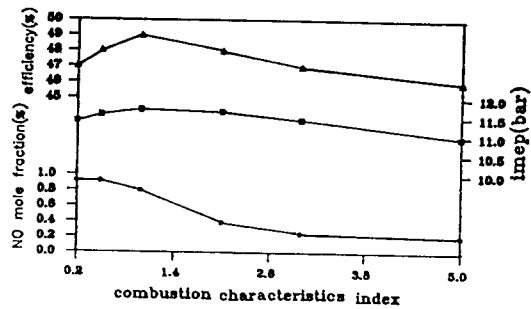


Fig. 4.12 Correlation of combustion property number and engine performance