

# 바이오디젤의 저온 연소 해석을 위한 축소 화학반응 메커니즘의 3D CFD 최적화 연구

송 윤 석<sup>1)</sup> · 서 청 원<sup>1)</sup> · 신 종 규<sup>2)</sup> · 서 현 규<sup>\*3)</sup>

공주대학교 기계공학과 대학원<sup>1)</sup> · 공주대학교 기계시스템공학과<sup>2)</sup> · 공주대학교 기계자동차공학부<sup>\*3)</sup>

## Optimization Study of Reduced Chemical Reaction Mechanism for 3D CFD Analysis of Low-temperature Biodiesel Combustion

Yun Seok Song<sup>1)</sup> · Chung Won Seo<sup>1)</sup> · Jong Gyu Shin<sup>2)</sup> · Hyun Kyu Suh<sup>\*3)</sup>

Graduate School of Mechanical Engineering, Kongju National University<sup>1)</sup>

Department of Mechanical System Engineering, Kongju National University<sup>2)</sup>

Department of Mechanical and Automotive Engineering, Eco-Sustainable Energy Research Institute, Kongju National University<sup>\*3)</sup>

**Key words** : A-factor(선지수합수 인자), Combustion characteristics(연소 특성), Cylinder pressure(실린더 압력), Combustion efficiency(연소 효율), Low temperature combustion(저온 연소), Mechanism reduction(축소화 메커니즘)

\* 서현규, E-mail. hksuh@kongju.ac.kr

본 연구는 3D CFD(Computational Fluid Dynamics) 해석에 최적화된 바이오디젤 화학반응 메커니즘 개발을 위해 메커니즘 축소 및 반응 속도 개선을 수행하였다. 또한, 3D CFD 엔진 해석을 통해 바이오디젤의 저온 연소(Low temperature combustion) 시 발생하는 배기 배출물, 연소 효율 및 실린더 압력과 같은 저온 연소 특성을 분석하였다.

메커니즘 축소는 저온 연소 조건과 3D CFD 해석의 최적화를 고려하여 기존 0D 해석에서 사용되었던 700K~1,900K의 온도와 1~4MPa의 압력 조건이 아닌 실제 저온 연소 과정에서 연료의 산화가 시작되는 700K~1,000K의 저온 영역과 4~6MPa의 압력 조건에서 축소를 수행하였다. 메커니즘 축소로 발생한 실린더 압력(Cylinder pressure)의 오차는 연료 산화 시기와 밀접한 관련이 있는 Methyl 9-decenoate( $C_{11}H_{20}O_2$ ), Methyl decanoate( $C_{11}H_{22}O_2$ ), n-heptane( $C_7H_{16}$ ),  $CH_2O$ (Formaldehyde) 및 OH(hydroxyl)와 같은 연료 및 Radical 화학종들의 생성/소멸 반응식을 선정하여 화학 반응 속도를 결정하는 아레니우스 식(Arrhenius equation)의 선지수합수 인자(A-factor, Pre-exponential factor)의 수정을 통해 실린더 압력 오차가 개선된 축소 메커니즘을 개발하였다.

연구 결과, 개발된 바이오디젤 축소 화학반응 메커니즘은 저온 영역 최적화로 인해 기존 10%의 실린더 압력 오차가 5%로 감소 되었으며, 3D CFD 해석 최적화로 인해 90%의 해석 시간이 단축되었다. 개발된 바이오디젤 축소 화학반응 메커니즘은 3D CFD 해석을 통해 CI 엔진의 저온 연소 데이터베이스 구축에 사용되며, 차후 CI 엔진 머신러닝 모델 개발에 활용될 예정이다.

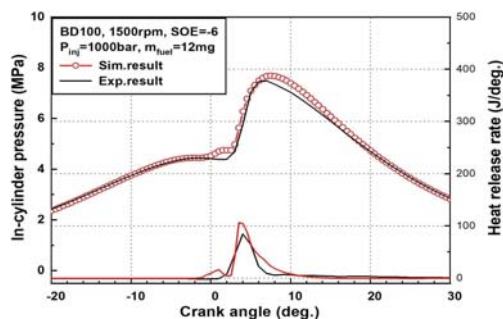


Fig. 1 Comparison of cylinder pressure between simulation and experiment result

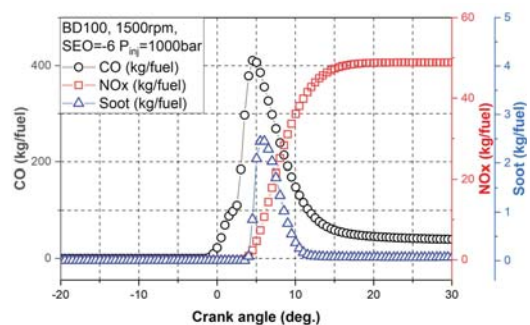


Fig. 2 Exhaust emissions result according to crank angle in 3D CFD analysis (CO, Soot, NO<sub>x</sub>)