

## CAI 엔진 해석을 위한 multi-zone 연소 모델의 개발

이 경 현<sup>1)</sup> · 임 재 만<sup>2)</sup> · 김 용 래<sup>2)</sup> · 민 경 덕<sup>\*2)</sup>

서울대학교 자동차공학 협동과정<sup>1)</sup> · 서울대학교 기계항공공학부<sup>2)</sup>

### Development of a Multi-zone Combustion Model for the Analysis of CAI Engines

Kyeonghyeon Lee<sup>1)</sup> · Jaeman Lim<sup>2)</sup> · Youngrae Kim<sup>2)</sup> · Kyoungdoug Min<sup>\*2)</sup>

<sup>1)</sup>Interdisciplinary Program in Automotive Engineering, Seoul National University, Seoul 151-744, Korea

<sup>2)</sup>School of Mechanical and Aerospace Engineering, Seoul National University, Seoul 151-744, Korea

(Received 1 January 2008 / Accepted 14 April 2008)

**Abstract** : A combustion of CAI engine is purely dominated by fuel chemical reactions. In order to simulate the combustion of CAI engine, it should be considered the effect of fuel components and chemical kinetics. So it needs enormous computational power. To overcome this problem reduced problem of needing massive computational power, chemical kinetic mechanism and multi-zone method is proposed here in this paper.

A reduced chemical kinetic mechanism for a gasoline surrogate was used in this study for a CAI combustion. This gasoline surrogate was modeled as a blend of iso-octane, n-heptane, and toluene.

For the analysis of CAI combustion, a multi-zone method as combustion model for a CAI engine was developed and incorporated into the computational fluid dynamics code, STAR-CD, for computing efficiency. This coupled multi-zone model can calculate 3 dimensional computational fluid dynamics and multi-zoned chemical reaction simultaneously in one time step. In other words, every computational cell interacts with the adjacent cells during the chemical reaction process. It can enhance the reality of multi-zone model.

A greatly time-saving and yet still relatively accurate CAI combustion simulation model based on the above mentioned two efficient methodologies, is thus proposed.

**Key words** : CAI(CAI), Multi-zone(멀티존), CFD(전산 유체 역학), Reduced chemical kinetic mechanism(축소화 학반응식), Ignition delay(점화지연), Auto ignition(자발화)

#### Nomenclature

CAI : controlled auto ignition  
IEGR : internal exhaust gas recirculation  
CFD : computational fluid dynamics

#### 1. 서 론

전 세계적으로 자동차로 인한 대기오염의 심각성

이 부각됨에 따라 기존의 엔진을 대체할 새로운 기술에 대한 관심이 높아져 가고 있다. 이에 따라 가솔린 엔진의 새로운 형식인 Controlled Auto Ignition 엔진(이하 CAI엔진)에 대한 관심이 높아져 가고 있다.

CAI 엔진은 가솔린 기관의 전통적인 점화방식인 스파크 플러그를 이용한 점화를 압축에 의한 자발화로 대신하는 신 개념의 가솔린 엔진으로 HCCI 엔진의 한 종류이다. 연료의 자발화는 연소가스의 일부분을 가변 밸브 타이밍 기술을 이용해 일부를 배

\*Corresponding author, E-mail: kadmin@snu.ac.kr

기포트로 내보내고 일부는 실린더 내에 남아있도록 하는 Internal Exhaust Gas Recirculation (이하 IEGR)을 사용해 가능하게 한다. IEGR은 압축 초기의 실린더 내부 온도를 500K 이상으로 가열시켜 압축 말기에 균일한 상태의 혼합기의 자발화가 일어날 수 있는 환경을 만드는 역할을 한다.

CAI 엔진은 기연가스(burned gas)의 영향으로 연소말기 온도가 낮기 때문에 NO<sub>x</sub>의 주요 발생 요인인 thermal NO<sub>x</sub>의 발생을 크게 감소시킬 수 있고 부분연소로 인한 CO와 미연탄화수소의 배출량을 감소시킬 수 있다. 또한 스로틀로 인한 펌핑 손실이 없고 낮은 연소 온도로 열전달로 인한 손실이 저감되어 일반 가솔린 엔진에 비해 적은 연료소모율을 보인다.<sup>1)</sup>

CAI 엔진은 새로운 형식의 엔진이므로 최적화를 위해서는 많은 실험이 요구된다. 그래서 그에 따른 개발비용의 증가로 실험을 모사할 수 있는 모델의 필요성이 한층 더 대두되었다.

CAI 엔진은 연료의 자발화 메커니즘에 의해 제어되므로 CAI 엔진의 연소를 모사하기 위해서는 화학 반응 메커니즘의 해석이 필수적이다. 그러나 기존의 상세 화학 반응식은 iso-octane의 경우 857개의 화학종과 3605개의 반응식으로 이루어져<sup>2)</sup> 엔진 계산 격자와 같은 복잡한 형상에서 반응식을 계산하는 것은 현재의 컴퓨터 성능으로는 어렵다.

이 연구에서는 엔진 계산 격자를 비슷한 열적·화학적 성질을 갖는 여러 개의 영역(zone)으로 나누어 반응식을 계산하는 multi-zone 방법을 적용함으로써 엔진 해석에 필요한 시간을 획기적으로 줄일 수 있었다. 이 모델에서는 CFD와의 완전 연동을 통해서 벽면과의 열전달은 물론 zone 간의 열전달도 고려 가능한 장점을 가지고 있다. 또한 이 연구에서는 계산 시간의 단축을 위해 원통형인 엔진 실린더 내부의 일부를 형상화한 섹터 메쉬(sector mesh)에서 화학종과 반응식이 대폭 감소된 축소화학 반응식을 사용하였다.

## 2. Multi-zone 모델

CAI 연소를 모사하기 위해서는 화학 반응 메커니즘을 이용해 화학 반응을 계산해야 한다. 그러나 엔

진의 모든 계산 격자에서 화학 반응을 계산하는 것은 매우 오랜 계산 시간이 소요되기 때문에 짧은 시간에 효율적으로 계산을 수행하기 위해 계산격자들을 여러 개의 zone으로 나누어 계산하는 multi-zone 모델을 개발했다.

### 2.1 Multi-zone Method

#### 2.1.1 Multi-zone 의 개념과 이 모델의 특징

위에서 언급한 바와 같이 계산 격자의 모든 셀에 대해 화학 반응을 계산하는 것은 많은 비용을 필요로 하거나 셀의 개수가 많아지면 계산이 불가능하기 때문에 새로운 접근 방식이 필요하다. 이에 계산량을 줄이면서 적합한 계산 결과를 얻기 위한 방법으로 multi-zone 방법이 제안되었다.<sup>3)</sup>

Multi-zone 방법에서는 셀을 열적·화학적 성질에 따라 여러 개의 zone으로 분류하고 zone 내부의 셀은 동일한 성질을 가진다고 가정하는 데에서 출발한다. 이 경우 화학 반응을 계산하는데 필요한 시간은 zone의 개수와 동일한 셀의 개수를 계산하는데 필요한 시간과 같게 되어 계산 속도에서 기존 방법에 비해 획기적으로 개선될 수 있다.

이 연구에서는 유동 해석을 위해서 상용 계산 코드인 STAR-CD를 사용하였고, multi-zone 방법을 구현하기 위하여 user-subroutine의 형태로 STAR-CD와 연동시켰다. 그로 인해 CFD와 화학 반응을 동시에 계산하면서 매 계산 시간 간격마다 셀의 정보를 읽어 들여 zone의 영역을 새로 나누어 주는 방식으로 두 코드 간의 완전 연동을 이루어 zone 간의 열전달 문제를 해결하였다.<sup>6)</sup>

Gasoline HCCI의 일종인 CAI 엔진에서는 연소에 미치는 난류의 영향을 무시할 수 있음이 알려져 있다.<sup>8,9)</sup> 이는 화염의 전파가 아닌 전체적인 자발화에 의해 동시다발적으로 연소가 시작되는 예혼합 엔진의 특성에 기인한다. 이에 본 연구에서는 난류에 의한 효과를 무시하고 온도 및 농도 장 내부에서 동시에 연소가 진행됨을 가정하였다.

점화 시점에서는 급격한 화학 반응이 일어나므로 화학 반응을 계산하기 위한 계산 시간 간격(time step)은 CFD의 그것보다 매우 작아야 한다. 그러나 필요이상의 작은 시간 간격은 CFD에 있어서 비효

울성을 초래한다. 이러한 시간 간격(time step)의 차이에서 오는 stiffness 문제를 VODE solver를 이용해 해결하였다.<sup>4)</sup>

**2.1.2 영역(zone) 구분의 기준**

화학종의 반응률은 다음과 같이 계산 된다.

$$w_i = M_i \sum_{R=1}^{N_R} [(n_{Ri}'' - n_{Ri}') (k_{fR} \prod [R_k]^{v_{mk}'} - k_{rR} \prod [R_k]^{v_{mk}''})] \quad (1)$$

where  $N_R$  : Number of reactions  
 $k_{fR}$  : Forward reaction constant  
 $k_{rR}$  : Reverse reaction constant

여기에서  $k_{fR}$ 은 일반적인 Arrhenius 형태인 다음과 같이 정의된다.

$$k_{fR} = A_R T^{\beta_R} \exp(-\frac{E_R}{RT}) \quad (2)$$

위 반응률에 대한 수식은 반응률에 영향을 미치는 주요한 두 가지 요인이 온도와 화학종의 조성비임을 알 수 있게 해 multi-zone 모델의 셀 분류 기준을 제시한다. 이에 따라 이 multi-zone 모델은 CFD에서 전달받은 각 셀의 온도와 화학종 조성비 데이터를 이용해 전체 셀을 몇 개의 비슷한 온도 구역(zone)으로 분류하고, 분류된 각 온도 zone을 다시 연료의 농도를 기준으로 다시 분류하였다.

**2.1.3 화학종의 농도와 온도의 계산**

분류된 각 zone에서의 화학종의 농도 변화는 다음과 같이 계산된다.

$$\frac{dY_i}{dt} = \rho w_i M_i \quad (i = 1, \dots, N) \quad (3)$$

2.1.1절에서 언급한 것 바와 같이 각 zone의 화학종 농도는 VODE solver에서 sub time step마다 계산하므로 CFD의 한 time step 내에서도 sub time step마다 온도 계산이 수행되어야 화학종 농도 계산이 가능하다. 온도의 변화량은 다음과 같다.

$$c_v \frac{dT}{dt} = -\rho \sum_{i=1}^N e_i(T) w_i M_i \quad (4)$$

where  $e_i$  : Internal energy of species  $i$   
 $c_v$  : Averaged specific heat at constant volume

$$c_v = \sum_{i=1}^N c_{v,i}(T) Y_i \quad (5)$$

로 계산된다.

엔진 계산임에도 부피 변화에 따른 온도 변화가 없는 것은 multi-zone 코드가 매 계산 시간 간격(time step)마다 CFD 코드와 데이터를 주고받기 때문이다. 계산 격자의 움직임에 따라 CFD 코드에서 압축과 팽창에 의한 온도와 압력의 상승을 계산하기 때문에 중복 계산을 피하기 위하여 multi-zone 코드에서는 부피 변화에 의한 온도 변화를 제거하였다.

본 연구에서 zone의 온도는 생성 엔탈피를 포함한 총 엔탈피(total enthalpy)의 평형으로 구하였다. 총 엔탈피의 평형을 유지하기 위해서는 multi-zone 코드에서 계산된 화학종 조성비의 변화에 따른 화학종의 엔탈피 변화가 온도 변화에 따른 엔탈피의 변화로 상쇄되어야 한다. 식 (3)에 의해서 계산된 49개 화학종의 농도를 이용해 다음 총 엔탈피의 정의에 의해서 온도 T가 계산된다.

$$h \equiv c_p T - c_p^0 T_0 + \sum_{i=1}^n Y_i H_i = h_t + \sum_{i=1}^n Y_i H_i \quad (6)$$

$$T_2 = \frac{1}{c_{p,2}} (c_{p,1} + \sum_{i=1}^N Y_{i,1} H_{i,1} - \sum_{i=1}^N Y_{i,2} H_{i,2}) \quad (7)$$

where  $c_p$  : Mean constant specific heat at T  
 $c_p^0$  : Reference specific heat at  $T_0$   
 $h_t$  : Thermal enthalpy

**2.2 엔진 계산 격자**

일반적으로 CFD 해석에 사용하는 엔진 계산 격자의 경우 셀의 개수가 500,000개이나 본 연구에서는 일반 엔진 계산 격자에서 해석을 하기 전 과도적인 단계로 sector mesh에서 해석을 진행하였다. Sector mesh는 연소실 내부를 중심축에 대해 모든 방향에 대해 대칭적인 모양으로 가정하고 그 일부를 중심축에 대해 단면이 부채꼴 형상을 이루도록 잘라낸 계산 격자이다.

이 연구에서 사용한 sector mesh는 실제 엔진의

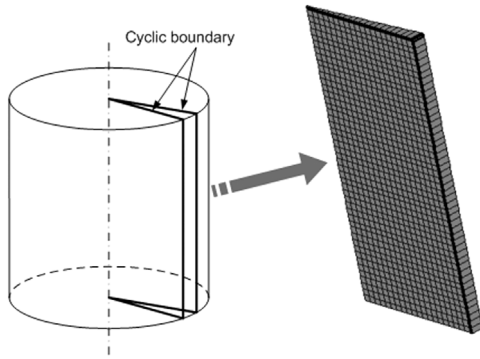


Fig. 1 Geometry of the sector mesh

1/72로서 중심각이 5°이다. 전체 셀의 개수는 1352개이며 벽면에는 열전달 효과를 충분히 고려하기 위하여 0.2 mm 두께의 셀을 5개를 배치하였다. 그리고 잘려진 경계는 cycle boundary로 지정하여 열과 유체의 출입이 셀의 바깥에 셀이 연속해서 있는 것과 동일한 상태로 계산되도록 하였다.

### 2.3 축소 화학 반응식

CAI 연소는 연료의 자발화에 의한 연소 반응이므로 화학반응에 의해 제어된다고 널리 알려져 있다, 그러므로 CAI 연소를 해석하기 위해서는 화학 반응 메커니즘을 사용해야 한다. 그러나 상세 화학 반응 메커니즘의 경우 반응식과 화학종의 수가 많아 계산 시간상의 효율이 떨어지는 단점을 가지고 있다. 가솔린의 상세 화학 반응 메커니즘의 경우 1,328개의 화학종과 5,835개의 반응식으로 이루어져 있다.<sup>7)</sup> 본 연구는 이러한 상세 화학 반응식의 비효율성을 지양하고 CAI 엔진 연소에서 다루어지는 영역에 적합하면서 효율적인 계산을 위하여 gasoline surrogate의 축소화학 반응식을 이용하였다.

가솔린의 대표적인 구성 성분인 iso-octane, n-heptane, toluene의 반응식으로 구성된 축소 화학 반응식은 49개의 화학종과 63개의 반응식으로 이루어져 있다.<sup>1)</sup>

Fig. 2는 gasoline surrogate와 gasoline의 점화지연을 비교한 것이다. 일반적인 CAI 엔진의 TDC에서의 압력인 18 bar 조건에서 900~1000 K 사이의 점화지연을 실제 gasoline과 비교한 결과 점화지연이 두 경우 거의 일치함을 알 수 있었다. 이는 CAI 엔진의 주

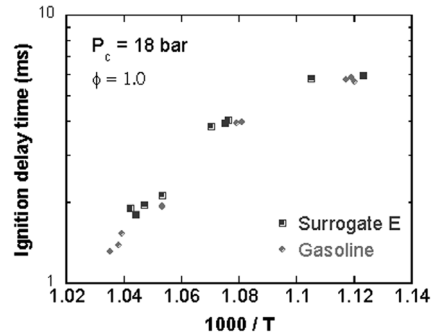


Fig. 2 Comparison of ignition delay time between gasoline and gasoline surrogate at Pi=18 bar

요 작동역역에서의 비교이므로 CAI 엔진의 해석에 상세 화학 반응식을 대신해 축소 화학 반응식을 사용하는 것에 대한 타당성을 입증한다고 할 수 있다.

본 연구에서는 이 gasoline surrogate에 대한 축소 화학 반응식을 화학 반응 계산 소프트웨어인 CHEMKIN을 이용하여 CAI 엔진의 연소 반응에 적용하였다.

## 3. Zone의 구성

Zone을 구성하기 위해서는 zone간의 질량 분포와 zone의 개수를 선정해야 한다.

### 3.1 Zone의 조밀성 검증

점화 지연 시간에 가장 큰 영향을 주는 요인은 2.1.2에 언급한 내용에 따라 온도와 연료의 농도이다. 본 연구에서는 압력 분포는 연소 chamber 내에서 없다고 가정한 후 zone의 구분을 온도와 연료의 농도, 두 가지 기준에 의해 구분하였다.

Zone의 개수는 계산의 속도에 가장 중요한 영향을 미치는 요인이다. Zone의 개수가 많아질수록 계산 속도는 그에 비례하여 저하될 것이며, zone의 개수가 너무 적으면 해석의 분해능이 떨어지게 된다. 따라서 multi-zone 모델의 zone의 조밀성은 계산의 효율성과 결과의 정확성을 결정하는 요인이다. 적절한 zone의 조밀성을 검증하기 위해 온도 zone을 5,10,20으로 나누고 연료 농도 zone을 4,8개로 나누어 5가지 계산 case를 선정하였고(Table 1) 각 case에 대한 계산 시간을 표시하였다(Fig. 3). 그리고 온도

Table 1 Calculation cases

CASE	T zone	T-F zone	Num. of zones
1	5	1	5
2	5	4	20
3	10	4	40
4	10	8	80
5	20	4	80

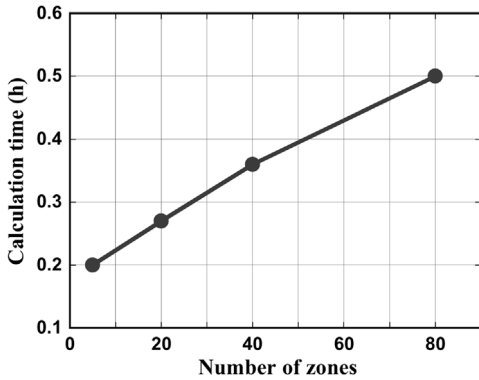


Fig. 3 Relation of the calculation time and the number of zones

zone의 개수를 5개 10개 20개로 변화 시켰을 때 점화 후의 온도 분포를 Fig. 3에서 비교하였다.

전체 격자에 대해 계산을 한 경우 4시간이 소요되었으나 multi-zone method를 적용한 결과 zone의 개수에 따라 0.2 시간에서 0.5시간으로 95%에서 87.5%의 계산 시간 절감 효과를 가져왔다.

Fig. 4에서 5개의 zone의 경우 벽면을 제외한 실린더 내부의 온도 분포를 나타내기에는 온도 분해능이 떨어져 벽면에서 연소실 중심까지 온도분포를 표시하기에는 부족함을 알 수 있다. 온도 zone이 10개일 때와 20개일 때 두 온도 분포는 매우 유사한 형태를 띠고 있다. 이는 10개 이상의 온도 분포를 가지는 것은 해석에 사용된 sector mesh에서는 큰 의미가 없음을 의미한다. 10개의 온도 zone을 가지는 경우 20개의 온도 zone 경우에 비해 해석 시간이 46% 줄어들므로 계산 효율 측면에서 온도 zone의 개수는 10개로 정하였다.

### 3.2 Zone의 질량 결정

3.1에서 결정한 바와 같이 온도에 따라 10개로 구분한 후 각 온도 zone을 연료의 농도를 기준으로 4개

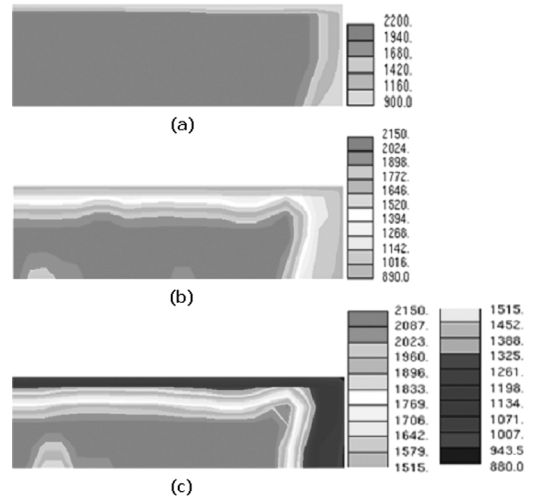


Fig. 4 Temperature distributions depending on the number of zones, (a) 5 temperature zones, (b) 10 temperature zones, (c) 20 temperature zones

씩 구분해 총 40개의 zone이 존재한다. 온도 기준의 1번 zone이 온도가 가장 높은 영역, 10번이 가장 차가운 영역이다. 연료 농도 zone의 1번 zone이 당량비가 높은 영역, 4번이 가장 낮은 영역이다. Table 2는 각 zone의 질량 분포를 나타낸 것이다.

차가운 영역의 zone이 뜨거운 영역의 zone에 비해 질량이 작게 설정한 것은 벽면 근처 셀의 온도 분포를 세밀하게 하기 위함이다.<sup>9)</sup>

Table 2 Classifying of the temperature zones

Temperature zone	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Zone mass (%)	25	15	10	10	10	10	10	5	3	2
Fuel conc. zone	1	2	3	4						
Zone mass (%)	25	25	25	25						

## 4. 모델의 검증

### 4.1 CAI 엔진 실험

Multi-zone 연소 모델을 검증하기 위하여 Continuous Variable Valve Timing(CVVT) system을 갖춘 단기통 CAI 엔진을 이용해 1500 rpm 조건에서 실행된 실험<sup>1)</sup>과 비교하였다. 엔진의 제원은 Table 3과 같다.

Table 3 Specification of the test engine

Bore × Stroke (mm)		86 × 86
Compression ratio		10.5
Displacement volume (cc)		498
Valve timing (ATDC)	IVO / IVC	-302 / -130
	EVO / EVC	145 / 281

위 조건에 대해 해석을 수행하기 위해서 상용 1-D 소프트웨어인 GT-POWER를 이용해 IVC에서 초기 조건을 구하였다.

## 4.2 CAI 엔진 실험

Fig. 5에서 연소 모델과 실험의 압력곡선과 열방출률(heat release rate)을 비교하였다.

점화 시점에서의 압력의 상승 속도가 실험보다 빠름을 알 수 있다. 이것은 계산의 시작 시점이 IVC이후 이므로 밸브가 닫히는 시점에서의 유동이 모두 반영되지 않아 열전달량이 실제보다 줄어든 것이 원인으로 생각된다. 그리고 계산에서는 예혼합을 통해 실린더 내의 혼합기가 완전 균일한 상태이므로 예혼합 화염에 의해서 연소가 진행되는 것으로 가정되나 실제 엔진에서는 연료의 공간적 분포가 존재할 것이므로 예혼합 화염과 확산 화염이 동시에 진행되는 것에서 또 다른 원인을 찾아볼 수 있다.

전체적으로 점화 시점이 실험과 일치하고 곡선의

전체적인 형태가 실험과 유사함을 보이므로 multi-zone 방법이 CAI 엔진의 연소를 잘 모사하고 있음을 확인할 수 있었다.

## 5. 결론

본 연구에서는 CAI 엔진의 연소 현상을 multi-zone 방법을 통해 해석하였다. 가솔린을 모사한 49개의 화학종과 63개의 반응식을 가지는 축소화학반응식을 연소 메커니즘으로 사용하였고, 실제 실린더 내부의 1/72에 해당하는 섹터 메쉬(sector mesh)에서 해석을 진행하였다.

Multi-zone combustion model을 개발하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 기존의 multi-zone 모델이 zone간의 열과 물질의 전달이 고려되지 않는 문제점을 본 연구는 매 timi-step마다 CFD 해석과 연소해석을 동시에 진행하는 방식으로 기존의 문제점을 해결하였다.
- 2) Zone을 분류하는 기준은 온도와 연료의 농도로 정하였다. 계산의 효율성과 정확성 측면에서 온도 zone은 10개, 연료 농도 zone은 4개로 전체 40개로 구성하였다.
- 3) 해석 결과는 전체 격자에 대해 계산을 수행했을 때 대비 90%의 큰 시간 단축을 보인다.
- 4) 단기통 CAI 엔진 실험 결과와 multi-zone 방법의

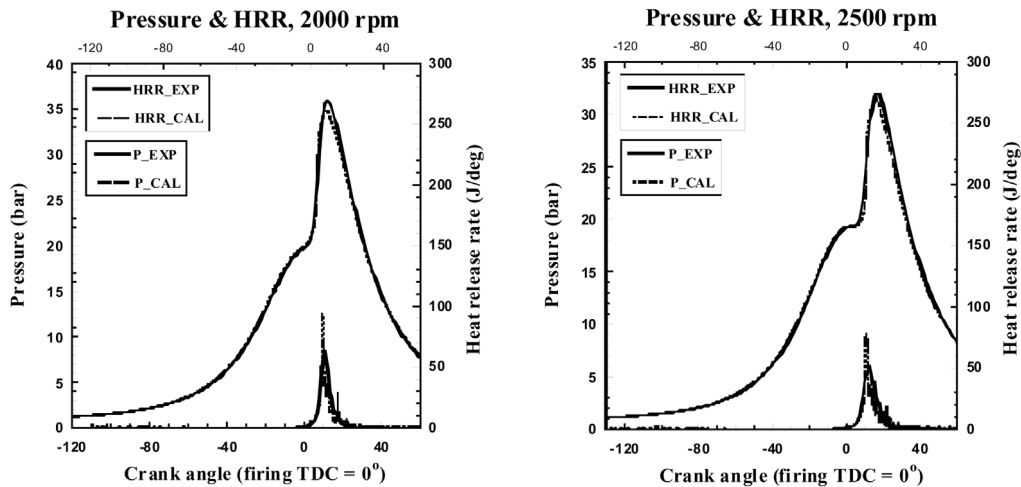


Fig. 5 Comparing pressure curve with the experiment data

결과를 비교한 결과 압력 상승 속도가 빠르지만 전체적으로 점화 시점과 곡선의 형태가 일치해 multi-zone 방법이 효율적이고 유용한 해석 방법임을 확인할 수 있었다.

## 후 기

본 연구는 자동차부품연구원의 지원을 받아서 현대자동차와 산학협동으로 진행되었으며, 산업자원부와 정밀기계설계공동연구소가 지원하였다. 본 연구의 모델 개발을 지원한 현대자동차 선행기술리엔진개발팀에 감사의 뜻을 전한다.

## References

- 1) Y. R. Kim, A Study on the CAI Combustion Characteristics Using a Reduces Chemical Kinetics Mechanism, Ph. D. Dissertation, Seoul National University, 2007.
- 2) R. Ogink and V. Golovitchev, "Gasoline HCCI Modeling: Computer Program Combining Detailed Chemostry and Gas Exchange Processes," SAE 2001-01-3614, 2001.
- 3) S. B. Fiveland and D. N. Assanis, "Development of Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects," SAE 2001-01-1028, 2001.
- 4) P. Brown, "VODE: A Variable Coefficient ODE Solver," SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol.10, 1989.
- 5) S. M. Aceves, J. Martinez-Frias, D. L. Flowers, J. R. Smith, R. W. Dibble, J. F. Wright and R. P. Hessel, "A Decoupled Model of Detiled Chemical Kinetics for Prediction of Iso-Octane HCCI Combustion," SAE 2001-01-3612, 2001.
- 6) S. C. Kong, C. D. Marriott and R. D. Reitz, "Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multi-dimension CFD," SAE 2001-01-1026, 2001.
- 7) C. V. Naik, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, M. Sjöberg, J. E. Dec, J. Orme, H. J. Curran and J. M. Simmie, "Detailed Chemical Kinetic Modeling of Surrogate Fuels for Gasoline and Application to an HCCI Engine," SAE 2005-01-3741, 2005.
- 8) P. M. Najt and D. E. Foster, "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion," SAE 830264, 1983.
- 9) S. M. Aceves, D. L. Flowers, C. K. Westbrook, J. R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen and B. Johansson, "A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions," SAE 2000-01-0327, 2000.