

## DME 연료 디젤엔진의 연소 및 공해물질 배출 특성 해석

유용욱\* · 이정원\*\* · 김용모†

### Numerical Studies on the Combustion Characteristics and Pollutant Formation for the DME Fueled Diesel Engine

Yongwook Yu, Jeongwon Lee and Yongmo Kim

**Key Words:** Dimethyl Ether(DME), Flamelet model(화염편 모델), Auto-ignition(자발화), High pressure vaporization model(고압증발모델), Detailed chemistry(상세화학반응식)

#### Abstract

The present study is mainly motivated to investigate the vaporization, auto-ignition and combustion processes in high-pressure diesel engines. In order to realistically simulate the dimethyl ether (DME) fueled diesel engine, the high pressure vaporization model is utilized and the interaction between turbulence and chemistry is treated by employing the Representative Interactive Flamelet (RIF) model. The detailed chemistry consisted of 336 elementary reaction steps and 78 species is used for DME/air reaction. Numerical results indicate that the RIF model with high pressure vaporization model successfully predicts the essential feature of the combustion processes and pollutants formations in the DME fueled diesel engines.

#### 1. 서 론

DME(dimethyl ether)는 가장 간단한 에테르로서, 분자량도 46g/mole로 작은 편에 속한다. 하지만 분자량이 작은 다른 연료에 비해 자발화 온도가 낮아 압축착화 엔진에 적당하다. 또한 DME는 C-C 결합이 없고 산소원자의 함유량이 크다는 특징이 있다. 이러한 특성 때문에 DME연료로 사용한 연소에서는 soot이 거의 배출되지 않을 뿐만 아니라, NOx의 발생량도 디젤연료에 비해 20%나 낮출 수 있다. 또한 세탄가가 높고 연료특성도 좋기 때문에 대체연료로서 많은 연구가 활발히 진행되고 있다<sup>(1-3)</sup>.

그러나 DME는 디젤연료와 비교하면 상대적으로 높은 증기압, 세탄가, 함산소 성분 그리고 상대적으로 낮은 발열량 및 액체밀도 등으로 인하여 액적의 증발, 분무의 침투길이, 점화 및 난류연소과정에 있어서 디젤유와는 상이한 분무연소특성을 가질 것으로 예상되며, 선행연구<sup>(4)</sup>를 통하여 고찰하였다.

본 연구에서는 DME연료를 사용하는 디젤엔진에서의 고압상태에서 액적의 증발을 제대로 예측할 수 있는 고압증발모델과 자발화 및 난류화염장을 제대로 모사할 수 있는 Representative Interactive Flamelet 모델을 이용하여, 디젤 엔진에서의 DME분무의 증발, 자발화 및 연소특성, 공해물질 생성특성에 대해 수치적으로 해석하여 실험치와 비교하여 검증하여 보았다.

본 연구에서의 예측능력을 바탕으로 실제 DME연료 엔진의 설계에서 최적의 연소실 형상 및 분사 조건을 찾는 데 기여할 수 있을 것이라 사료된다.

(2008년 3월 12일 접수 ~ 2008년 3월 24일 심사완료)

†교신저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : ymkim@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2220-0428 FAX : (02)2297-0339

\*현대자동차

\*\*한양대학교 대학원 기계공학과

### 2. 지배방정식

액상과 기상에서 발생하는 중요한 물리 현상들은 비정상, 다차원 연립방정식으로 모델링된다. Eulerian-Lagrangian 다상 유동해석방법은 기상의 지배방정식은 Euler 좌표계로 표시되는 반면 액상의 지배방정식은 Lagrangian 좌표계로 표현되며 액상과 기상의 지배방정식은 질량, 운동량, 열전달률을 나타내는 상호 관련된 생성항으로 결합된다. 본 연구에서 사용한 물리 및 수치 모델은 혼합분율의 변화에 분무의 증발영향을 고려한 Flamelet 모델<sup>(5)</sup>, KH-RT 액적분열 모델<sup>(6)</sup>, 난류에 의한 액적의 dispersion을 고려해 주기 위한 stochastic 액적추적모델<sup>(7)</sup>, 고압상태에서 적용할 수 있는 액적증발모델, 그리고 k-ε 난류모델을 사용하였다. 고압증발모델과 RIF 모델에 대해서는 아래에 기술하였다.

### 3. 고압증발모델

본 연구에서는 고압상태에서 일어날 수 있는 실제기체의 거동, 온도, 압력에 따른 상태량 및 증발잠열의 변화, 주위기체가 액적으로 용해되는 현상, Stefan 유동 등 고압상태에서 액적의 증발특성에 중요한 영향을 미치는 효과들을 정확히 모사하기 위해 고압증발모델을 사용하였다. 액적과 기체장 간의 전단력에 의해 발생하는 액적 내부 유동을 고려하기 위하여 막이론 및 유효전도도 모델<sup>(8)</sup>을 사용하였다.

각 성분에 대한 증기-액체 평형조건은 다음과 같이 기술할 수 있다.

$$T^v = T^l; P^v = P^l; f_i^v = f_i^l \quad (1)$$

여기서 아래첨자  $v, l$ 은 각각 증기와 액체상태를 나타내고  $f_i$ 는  $i$ -성분의 퓨가시티로 다음 관계식으로부터 계산할 수 있다.

$$R_u T \ln \left( \frac{f_i}{X_i P} \right) = \int_V \left\{ \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_j} - \frac{R_u T}{V} \right\} dV - R_u T \ln Z \quad (2)$$

여기서,  $X_i$ 는  $i$ -성분의 몰분율,  $V$ 는 전체부피, 그리고  $Z$ 는 압축계수이다.

순수물질에 대한 증발잠열과 혼합기의 증발 엔탈피 간의 차이는 Peng-Robinson 상태방정식을 사용하여 결정한다. 상변화에 필요한 에너지는 다음과 같이 나타난다.

$$\Delta h = \sum_{i=1,2} Y_i^l \bar{H}_i(T, P, Y_i^v) - \sum_{i=1,2} Y_i^l H_{i,i}(T, P) \quad (3)$$

여기서  $\bar{H}_i$ 는 성분  $i$ 의 부분엔탈피이고, 같은 온도에서의 이상기체 엔탈피  $H_i^0$ 는 다음의 열역학적 관계에 의해서 나타난다.

$$(\bar{H}_i - H_i^0)_T = -R_u T^2 \left( \frac{\partial \ln \phi}{\partial T} \right) \quad (4)$$

는 퓨가시티 계수로서 아래와 같이 정의된다.

$$\phi_i = \frac{f_i}{Y_i P} \quad (5)$$

액적증발모델에서 열역학적 상태량을 정확하게 계산하는 것이 무엇보다 중요하다 할수있다. 본 연구에서는 열역학적 상태량을 온도와 압력의 함수로써 계산하였고 적절한 혼합법칙을 이용하여 혼합물의 상태량을 구했다<sup>(9)</sup>.

### 2.2 난류연소모델

본 연구에서 사용한 RIF 모델에 대한 내용은 참고문헌<sup>(10)</sup>에 상세히 나타나 있으므로 간략하게만 설명하도록 한다. 층류화염면내의 화학종 및 에너지를 지배하는 방정식을 혼합분율(mixture fraction,  $Z$ )에 대해 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad (6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\chi}{2c_p} \frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} - \frac{\chi}{2c_p} \sum_{k=1}^K h_k \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \frac{1}{\rho c_p} \left( \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot q_{rad} \right) \quad (7)$$

이 때, 공간상에서 혼합분율상으로 좌표변환을 하게 됨에 따라 나타나게 되는 매개변수인 스칼라소산율  $\chi$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있으며, 층류화염면내의 분자단위 확산에 대한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다.

$$\chi = 2D \left( \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2 \approx \chi_{st} f(Z) = \chi_{st} \frac{Z^2 \ln Z}{Z_{st}^2 \ln Z_{st}} \quad (8)$$

초기에 RIF모델은 전체해석영역에 대한 국소화염구조가 하나의 층류화염면(single RIF)로 대표된다고 가정하였으나, Barths[10]등은 주어진 시간에서 공간상으로 불균일하게 존재하는 스칼라소산율의 분포를 고려할 수 있도록 확장한 multiple RIF 모델인 EPFM(Eulerian Particle Flamelet Model) 모델을 제안하였다. 이 때, 주어진 시간과 공간에서 각 화학종의 평균질량분율은 다음과 같이 나타난다.

$$\tilde{Y}_k(x, t) = \sum_{i=1}^N \tilde{I}_i(x, t) \times \int_0^1 Y_k^i(Z, \langle \chi/Z \rangle_i; t) \tilde{P}(Z; x, t) dZ \quad (9)$$

여기서  $P(Z)$ 는 beta 함수를 사용한 혼합분율에 대한 확률밀도함수(PDF)를 의미하고,  $I_i(x, t)$ 는 주어진 시간  $t$ 와 공간  $x$ 에서  $i$ 번째 RIF가 발견될 수 있는 확률을 의미하며 다음과 같은 보존방정식을 통해 구해진다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho} \tilde{I}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{I}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{eff}}{\sigma_j} \frac{\partial \tilde{I}_i}{\partial x_j} \right) \quad (10)$$

식(9)에 나타난  $Y_k^i$ 는  $i$ 번째 RIF에 대해 식(6)과 (7)로 계산된 비정상 해를 의미하며, 이를 구하기 위한 조건부 스칼라소산율  $\langle \chi/Z \rangle_i$ 는 식(8)에서 처럼 다음과 같이 나타난다.

$$\langle \chi/Z \rangle_i = \langle \hat{\chi}_{st} \rangle_i f(Z) \quad (11)$$

주어진 시간에서  $i$ 번째 RIF가 가지는 평균조건부 스칼라소산율은 다음과 같이 계산된다.

$$\langle \hat{\chi}_{st} \rangle_i(t) = \frac{\int_V \tilde{I}_i \tilde{\rho} \langle \chi_{st} \rangle_i^{3/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV}{\int_V \tilde{I}_i \tilde{\rho} \langle \chi_{st} \rangle_i^{1/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV} \quad (12)$$

여기서,

$$\langle \chi_{st} \rangle_i(x, t) = \frac{c_\chi \tilde{\varepsilon} \tilde{Z}^{n^2}}{\int_0^1 f(Z^*) \tilde{P}(Z^*) dZ^*} \quad (13)$$

최근에는 증발이 난류 분무연소에 미치는 영향에 자세한 정보는 참고문헌(10-12)에 자세히 기술되어있다. 본 연구에서는 78개의 화학종과 336단계의 반응식으로 이루어진 상세화학반응식(13)를 이용하였다.

### 결과 및 고찰

#### 3.1 고압 정적 연소실 내의 DME 분무 및 점화지연 해석

본 연구에서 사용한 고압증발모델 및 RIF난류연소모델의 예측성을 검증하기 위하여 고압 정적 연소실내의 DME 분무 화염의 실험결과(Wakai *et al.* (1998)<sup>(3)</sup>, Kim *et al.* (2007)<sup>(14)</sup>)와 해석결과를 비교하여 보았다.

Wakai 등에 의한 실험은 4가지 분위기 압력(1.1, 2.1, 3.1, 4.1 MPa)과 4가지 분위기 온도(773K, 823K, 873K, 923K)에 대하여 9.8 MPa의 동일한 분사압력으로 수행하였으며, Kim 등에 의한 실험은 2가지 분위기 압력(2.1, 4.1 MPa)과 2가지 분사압력(40, 60 MPa)에 대하여

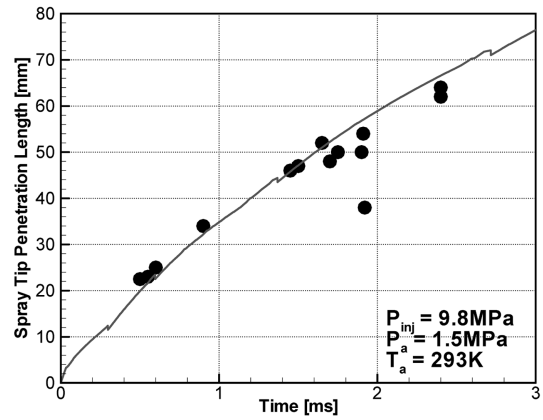


Fig. 1 Temporal variation of spray tip penetration of DME (dot : experiment (Wakai<sup>(3)</sup>), line : calculation)

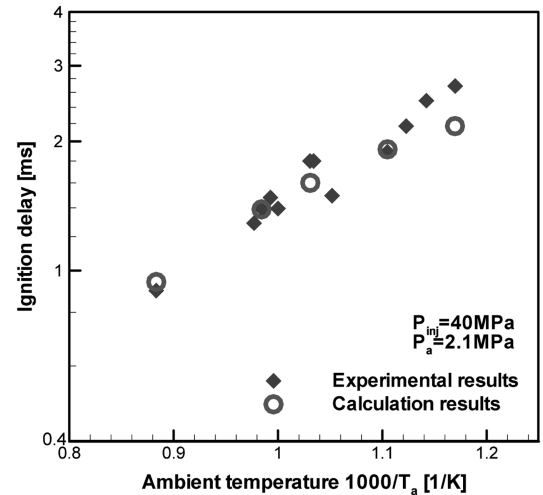


Fig. 2 Predicted and measured ignition delay times of injected DME spray at constant chamber (Kim<sup>(14)</sup>)

수행되었다.

Figure 1은 분사압력이 9.8 MPa이고 분위기 압력과 온도가 각각 1.5 MPa, 293K인 경우, 분무 관통거리에 대한 Wakai의 실험값과 예측값을 비교한 것이다. Fig. 1에서 볼 수 있듯이 예측값은 실험결과와 잘 일치하며, 이는 본 연구에서 사용한 고압증발모델이 DME 분무에 대해 예측능력을 가지고 있음을 보여준다.

Figure 2는 분위기 압력이 2.1 MPa이고 분사압력이 40 MPa인 경우에 각각 분위기 온도에서의 점화지연시간을 Kim의 실험결과와 해석결과를 비교한 것이다. 해석 결과는 Kim 등의 측정값과 대체로 잘 일치하고 있음을 볼 수 있다. 이는 본 연구에서 사용한 RIF 난류연소

모델과 상세화학반응식이 적절하다는 것을 보여준다.

### 3.2 엔진 제원 및 시험조건

DME연료를 사용하는 디젤엔진에서의 난류 분무연소 과정의 해석에 대한 모델의 예측성을 검증하기 위하여, Kim<sup>(15)</sup>의 실험결과를 검증대상으로 선택하였다. 표 1과 2에는 엔진의 제원과 실험조건을 각각 나타내었다. 오리피스 직경은 128 microns이고 분무각은 78°이다. 수치계산은 6개의 injector nozzle 중 1개에 해당하는 60° sector에 대하여 수행되었으며, Fig. 3에는 TDC에서의 계산격자를 나타내었다. 실험에 따르면, injection time 대신에 start time of energizing 이 사용되었다. 이에 해당하는 injection delay는 실험적으로 제공되었다. 수치계산에서는 injection time을 사용하였고 실험에서의 injection delay를 이용하여 보정하였다.

### 3.3 해석 결과 및 고찰

Figure 4와 5은 single RIF와 multiple RIF를 사용하였

Table 1 Engine specifications

Bore (cm)	75
Stroke (cm)	84.5
Compression ratio	17.8
Displacement volume (cm <sup>3</sup> )	373.3
Injection nozzles	6
Injector hole diameter (mm)	0.128
Spray inclination angle (deg)	78

Table 2 Experimental conditions for test engine

Engine speed (rpm)	1,500
Injection pressure (MPa)	35, 50
Injection mass (mg/cycle)	4, 8, 12
Start of energizing	6°, 4°, 2° BTDC

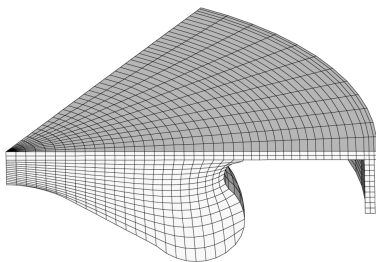


Fig. 3 Computational domain at top dead center

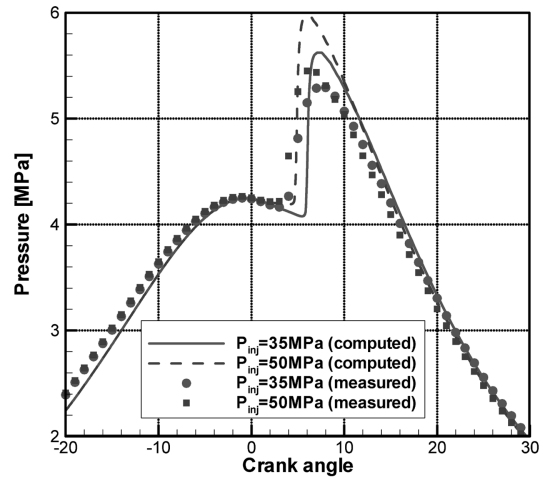


Fig. 4 Cylinder pressure histories calculated by single RIF model for two different injection pressures (injected mass=8 mg, SOE=4° BTDC)

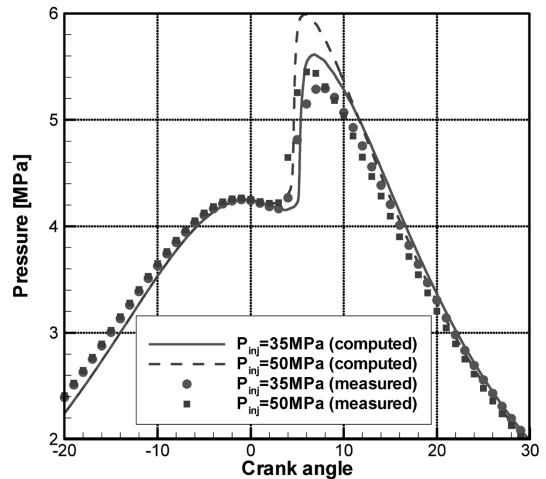


Fig. 5 Cylinder pressure histories calculated by multiple RIF model for two different injection pressures (injected mass=8 mg, SOE=4° BTDC)

을 때, 분무압이 35 MPa와 50 MPa에 대하여 실린더 압력을 실험치와 비교한 것이다.

Figure 4에서 보면 예측된 점화지연시간은 실험결과와 잘 일치하고 있다. 그러나 실린더 압력은 두 분무압력에 대해 상당히 과대예측하고 있다. 공간적 스칼라 소산율의 불균일성을 무시함에 따른 오차를 줄이기 위하여 10개의 화염편을 사용한 multiple RIF를 사용한 결과는 Fig. 5과 같다. Multiple RIF를 이용한 결과는 점화지연시간의 예측을 single RIF에 비하여 조금 앞당기고 있

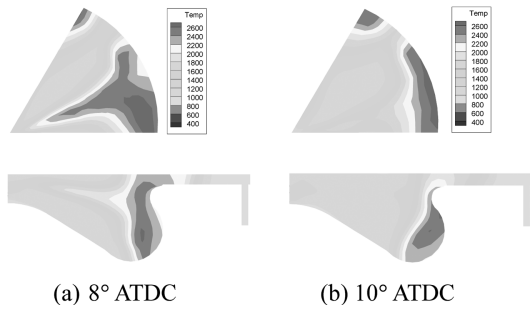


Fig. 6 Instantaneous contours of mean temperature ( $P_{inj}=35$  MPa, injected mass=8 mg, SOE=4° BTDC)

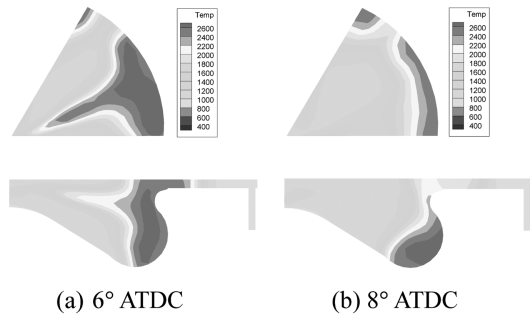


Fig. 7 Instantaneous contours of mean temperature ( $P_{inj}=50$  MPa, injected mass=8 mg, SOE=4° BTDC)

다. 스칼라 소산율의 공간적 불균일성을 포함하였기 때문에 점화지연시간의 예측에 있어서도 실험결과와 더 잘 일치하고 있다. 그러나 여전히 실린더 압력은 과대에 축하고 있다. 이러한 실린더 압력의 차이의 원인을 규명하기 위하여 두 분사압력에 대하여 순간적인 화염장을 Fig. 6와 7에 나타내었다.

Figure 6와 7에서 볼 수 있듯이, 상대적으로 작은 크기를 가지는 DME 연료 디젤엔진에서 빠르게 증발하는 DME 분무 난류부상화염이 실린더 벽면에 충돌하는 것을 볼 수 있다. 이러한 화염은 벽면에서의 열전달량이 매우 높게 나타나게 된다. 그러나 high-Re수 난류 k- $\epsilon$  모델에서는 이러한 벽면근처에서의 열전달을 정확히 예측할 수 없다. 때문에 화염의 벽면충돌 상황에서 벽면에서의 열손실을 과소예측하는 것이 직접적으로 실린더 압력의 과대예측을 일으킨 것으로 사료된다.

Figure 8은 세가지 분사질량에 대하여 NOx의 배출특성에 대한 예측값과 실험값을 나타낸 것이다. SOE가 BTDC 2°와 4°인 경우에 예측된 NOx의 배출량은 정량적으로나 정성적으로 모두 실험치와 잘 일치한다. 해석과 실험 모두에서 분무질량이 증가할수록 NOx의 배출

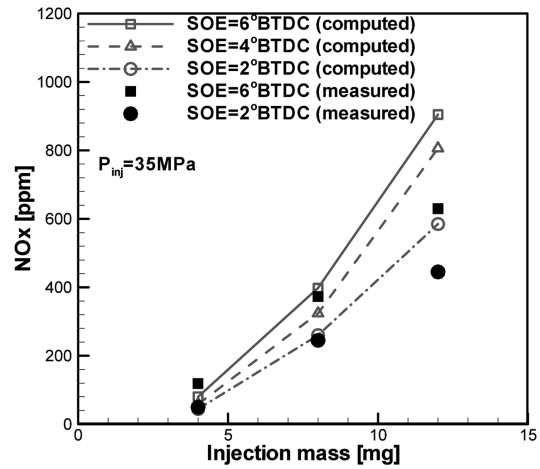


Fig. 8 NOx emissions for DME fuel as function of injected mass ( $P_{inj}=35$  MPa)

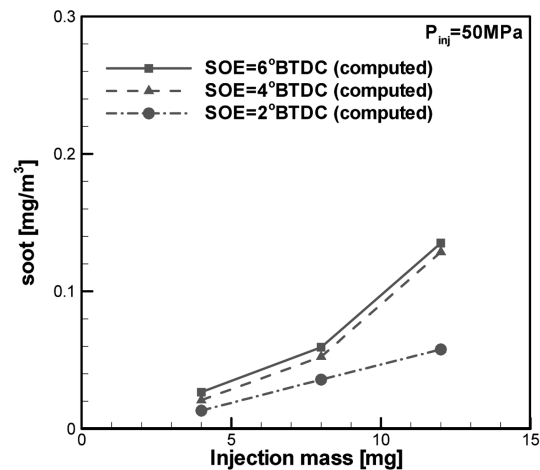


Fig. 9 Soot emissions for DME fuel as function of injected mass ( $P_{inj}=50$  MPa)

또한 증가한다는 것을 보여준다.

Figure 9은 예측된 soot의 배출특성을 세가지 분사질량에 대하여 나타내었다. 실험에서는 세가지 분사질량에 대해서 soot의 배출량이 사실상 0이었다. 해석결과에서는 분사질량이 낮을 때는 soot의 배출량이 0.08 mg/m<sup>3</sup>이었고, 가장 큰 분사질량을 가질 때에는 soot의 배출량이 0.28 mg/m<sup>3</sup> 이하인 것으로 예측되었다.

#### 4. 결 론

1) 본 연구에서 개발한 고압증발모델과 상세화학반응

모델 기반의 RIF 모델은 DME 연료를 사용하는 정적연소실 및 디젤엔진에서 증발, 점화 지연 및 난류연소특성을 잘 예측하였다.

2) 정적 연소실내의 DME 분무 화염에서 분무관통거리 및 점화지연에 대해 실험에 비교하여 잘 일치하는 결과를 보여주었다.

3) DME연료 디젤엔진 해석에서 두 분사압에 대한 점화지연시간의 예측결과는 실험결과와 잘 일치하였으며, 특히 스칼라 소산율의 공간적 불균일성을 고려한 multiple RIF의 경우는 실험치와 더 잘 일치하는 결과를 보여주었다.

4) 하지만, 실린더 압력에 있어서 두 분사압에 대하여 모두 과대예측하였는데, 이는 DME 난류 분무화염이 실린더 벽면에 충돌하면서 커진 벽면에 의한 열손실을 과소예측하였기 때문인 것으로 사료되며, 이것은 k-ε 난류 모델의 벽면근방에서의 열전달을 과소예측하는 단점에서부터 기인한다.

5) NOx의 생성특성 예측은 실험치와 잘 일치하였고 분사질량이 증가할수록 NOx의 생성량도 증가하고 있음을 알 수 있었다. Soot의 생성특성은 낮은 분사질량일 때는 0.08 mg/m<sup>3</sup> 이하로 매우 낮게 배출되었고, 가장 높은 분사질량일 때에도 0.28 mg/m<sup>3</sup> 이하로 배출되는 것으로 예측하였다.

## 후 기

본 연구는 환경부 Eco-STAR Project(무저공해 자동차사업단)의 연구지원을 받아 수행되었으며 관계자 여러분께 감사드립니다.

## 참고문헌

- (1) H. Teng, J. C. McCandless, J. B. Schneyer, "Compression Ignition Delay (Physical+Chemical) of Dimethyl Ether - An alternative Fuel for Compression Ignition Engines", SAE 2003-01-0759, 2003.
- (2) NKK Corp., Environmental Business - DME Project, 2000 (<http://www.nkk.co.jp/en/environment>).
- (3) K. Wakai, K. Nishida, T. Kobayashi, H. Hiroyasu, "Spray and Ignition Characteristics of Dimethyl Ether Injected by a D.I. Diesel Injector", the fourth International Symposium COMODIA 98, July 20-23, Kyoto, Japan, 1998, pp. 537~542.
- (4) 이정원, 유연숙, 김용모, "DME 연료의 점화 및 연소 특성 해석", 한국액체미립화학회지, Vol. 10, No. 9, 2006, pp. 16~25.
- (5) N. Peters, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-premixed Turbulent Combustion", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 10, 1984, pp. 319~339.
- (6) M. A. Patterson and R. D. Reitz, "Modeling of the Effects of Fuel Spray Characteristics on the Diesel Engine Combustion and Emission", SAE Paper 1998, 980131.
- (7) Y. M. Kim, H. M. Shang, C. P. Chen, "Studies on Droplet-Turbulence Interaction", KSME J., Vol. 8, No. 4, 1994, pp. 364~374.
- (8) P. J. O'Rourke, "Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays", Los Alamos National Laboratory report LA-9069-T, 1981
- (9) R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, "The Properties of Gases & Liquids", Forth Edition, McGraw-Hill, 1987.
- (10) H. Barths, C. Hasse, G. Bikas and N. Peters, "Simulation of Combustion in Direct Injection Diesel Engines using a Eulerian Particle Flamelet Model", 28<sup>th</sup> Symposium on Combustion, Combustion Institute, Pittsburgh, 2000, pp. 1161~1168.
- (11) Y. Yu, S. K. Kim, Y. M. Kim, "Numerical Modeling for Auto-ignition and Combustion Processes of Fuel Sprays in High-Pressure Environment", Combust. Sci. and Tech., Vol. 168, 2001, pp. 85~112.
- (12) F. X. Demouline, R. Borghi, "Presumed PDF Modeling of turbulent spray combustion", Combust. Sci. and Tech., 2000.
- (13) LLNL site
- (14) Y. Kim, J. Lim and K. Min, "A Study of the Dimethyl Ether Spray Characteristics and Ignition Delay", Int. J. Engine Res., Vol. 8, pp. 337~246.
- (15) M. Y. Kim, S. H. Bang, C. S. Lee, "Experimental Investigation of Spray and Combustion Characteristics of Dimethyl Ether in a Common-Rail Diesel Engine", Energy and Fuel Journal, Vol. 21, No. 2, pp. 793~800.