

농도성층화가 DME HCCI 엔진의 운전 영역 확장에 미치는 영향에 관한 수치해석 연구

권오석*, 정동원*, 백영순**, 임옥택***†

*울산대학교 대학원 기계자동차공학부, **한국가스공사, ***울산대학교 기계자동차공학과

Effect of the Fuel Stratification on the Operating Range for a DME HCCI Engine based on Numerical Analysis

OSEOK KWON*, DONGWON JEONG*, YOUNGSOON BACK**, OCKTAECK LIM***†

*Grad. School of Mechanical & Automotive Engineering, Ulsan Univ.,
Mugeo-dong, Ulsan 680-749, Korea

**KOGAS, 93 Dolmaro(215. Jeongja-dong), Bundang-gu, Seongnam,
Gyeonggi-do, 463-754, Korea

***School of Mechanical & Automotive Engineering, Ulsan Univ.
Mugeo-dong, Ulsan 680-749, Korea

ABSTRACT

The operating range of HCCI engine is narrow due to excessive rate of pressure rise on high load. The fuel stratification is proposed to solve the problem. The purpose of this study is to gain a better understanding of the effects of fuel stratification on reducing the pressure-rise rate at high load in HCCI combustion and to investigate that the operating range is expanded for fuel stratification in the preceding condition of initial temperature and equivalence ratios. The engine is fueled with Di-Methyl Ether (DME) which has unique 2-stage heat release. The computations were conducted using SENKIN application of the CHEMKINIII kinetics rate code. Calculation result shows that proper fuel stratification prolongs combustion duration and reduce pressure rise rate.

KEY WORDS : HCCI(예혼합압축자기착화), Fuel stratification(농도성층화), Pressure rise rate(압력상승률), DME(디메틸에테르), IEMP(평균유효압력), Ringing intensity(노킹강도)

Nomenclature

IMEP : indicated mean effective pressure, MPa

LTR : low temperature reaction

HTR : high temperature reaction

HCCI : homogeneous charge compression ignition

RI : ringing intensity, MW/m²

†Corresponding author : otlim@ulsan.ac.kr

1. 서 론

최근에는 에너지 고갈, 고유가 그리고 지구 온난화 문제로 인하여 고효율, 저공해 엔진이 요구되고 있다. 두 목적을 달성하기 위한 차세대 엔진으로서 균질한 혼합기를 피스톤의 압축에 의해서 착화시키는 예혼합압축자기착화 (homogeneous charge compression ignition, 이하 HCCI) 엔진이 주목을 받고 있다.

기존의 SI 기관이나 DI 기관과는 달리, 희박하고 균질한 예혼합기를 연소시키기 때문에 PM과 NOx의 배기가스가 적게 배출되고 높은 압축비로 인하여 높은 열효율을 가진다. 하지만 이런 장점에도 불구하고, HCCI 엔진은 여전히 실현되지 않고 있다. 주된 원인은 고부하 영역에서 짧은 연소기간 동안 급격한 열 발생 및 실린더 내부의 과도한 압력 상승률로 인하여 노킹이 발생하기 때문이다. 최근의 논문에서는 온도 성층화, 농도 성층화, 실린더 내부의 피스톤 팽창 효과를 이용하여 압력 상승률을 낮추는 것을 제안하고 있다¹⁻³⁾.

온도성층화의 효과는 국부 지역의 서로 다른 가스 온도 때문에 연료의 자발화가 순차적으로 발생한다. 그래서 열 발생 시기를 분산시켜서 압력 상승률을 저감시킨다.

농도성층화 효과의 경우, 실린더 내의 국부 지역의 높은 당량비가 오히려 최대압력상승률을 증가시키는 결과를 초래한다. 따라서 어느 정도의 농도성층화가 최대압력상승률을 저감 시키는지 수치적으로 명확하지 않다.

본 연구에서는 농도성층화 효과가 실린더 내의 최대압력상승률의 저감에 미치는 영향을 수치적으로 해석하였다. 그리고 높은 출력을 위하여 초기압력을 높여 단위 사이클당 총 투입열량을 증가시킨 후 연소특성, 출력, 배기가스를 조사하였다.

DME는 저온 산화 반응(low temperature reaction: 이하 LTR) 및 고온 산화 반응(high temperature reaction: 이하 HTR)으로 불리는 2 단계의 열발생을 가진다. DME는 다른 연료보다 LTR 기간 동안 열발생량의 비율이 크다. 만약 당량비가

Table 1 Fuel properties

Name	DME	n-Butane
Molecular Formula	CH ₃ OCH ₃	C ₄ H ₁₀
Low heat Value	14,143 kcal/m ³	26,504 kcal/m ³
Cetane number	55-60	< 10
Low Temperature Reaction	10-30%	0-5%
High Temperature Reaction	70-90%	95-100%

Table 2 Engine specification

Displacement	613cc
Bore	82.4 mm
Stroke	115 mm
Connecting Rod Length	254 mm
Compression Ratio	8
Number of Valves	2
IVC	34 [deg ABDC]
EVO	326 [deg ABDC]

높다면 LTR 기간의 열발생량은 증가하는 것을 알 수 있다. 따라서 연소실 내에 DME 농도의 분포가 존재하면 국소지역에서의 LTR 기간의 열발생량의 차이에 의해 HTR이 발생하기 전에 온도 차이가 생긴다고 생각할 수 있다. 즉 DME를 사용하여 HCCI 연소를 실시했을 경우, 연소실내의 DME 농도 분포가 실린더 내 가스 압력 상승률의 저감에 기여하는 것으로 예상된다. DME 연료의 특성을 n-Butane과 비교하여 Table 1에 기술하였다.

2. 수치해석 방법

본 연구에서, Sandia 실험실에서 개발된 CHEKIN2와 변형된 SENKIN 프로그램을 이용하고, Curran의 DME모델(species: 78, reactions: 336)을 사용하였다⁴⁻⁶⁾. 계산에 사용된 OAE 단기통 엔진의 제원은 Table 2에 표시되어 있다. 수치계산은 흡기 밸브가 닫힌 직후부터 배기 밸브가 열리기 직전까지, 단 한번의 압축 행정과 팽창 행정 과정에서 가스의 열역학적 특성을 계산하였다. 모든 가스는 이

상기체(1)이고, 열전달과 질량전달은 고려하지 않았다. 에너지 보존법칙(2)과 질량 보존법칙(3)을 사용하였다. 또한 각 영역의 가스 압력, 온도 및 화학조성은 완전하게 균일하다고 가정하였고, 실린더 내 가스 평균온도, \bar{T}_c 는 총 에너지 보존식(4)을 이용하여 계산하였다.

$$pv = nRT \tag{1}$$

$$C_v \frac{dT}{dt} + P \frac{dV}{dt} + q_{REAC} = 0 \tag{2}$$

$$\frac{dm}{dt} = 0 \tag{3}$$

$$\bar{T}_c = \frac{\sum_{i=1}^N (n_i \cdot C_{p,i} \cdot T_{c,i})}{\sum_{i=1}^N (n_i \cdot C_{p,i})} \tag{4}$$

N : number of zones
 n_i : number of moles
 $C_{p,i}$: Specific heat at constant pressure of ith zone

초기 온도의 증가에 따른 단위 사이클당 투입열량, Q_{in} 을 계산한 식 (5)는 다음과 같다.

$$Q_{in} = \sum_{i=1}^N n_i \cdot (Q_{LHV} \cdot \frac{FA_i}{1 + FA_i}) \tag{5}$$

Q_{LHV} : low heat value of DME
 FA_i : volume of fuel to air i th zone

0차원 모델은 각 zone의 초기 온도가 균일하고 화학 종의 조성이 균질하다. 0 차원 모델을 기반으로 만들어진 멀티 zone 모델은 초기 온도, DME/Air의 당량비를 변화 시킴으로써 연소실 내의 온도의 불균일, DME 농도의 불균질을 재현할 수 있다. 실제 엔진의 경우, 실린더 내부의 유동 및 벽면

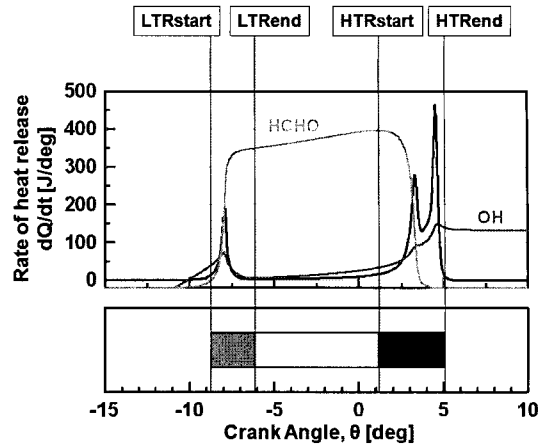


Fig. 1 Definition of combustion duration.

으로 열전달 등과 같은 요인들이 있다. 하지만 수치계산을 하는 동안, 초기 온도 및 농도의 불균질 정도가 엔진 연소에 미치는 영향을 알아보기 위해서 열전달, 열손실, 블로우 오프와 잔류 가스는 고려하지 않았다.

Fig. 1에서는 LTR과 HTR의 시작시기 및 종료시기의 정의를 보여준다. LTR의 시작시기와 HTR의 종료시기는 전체 열 발생률(dQ/dt)의 1%가 되는 14 J/deg를 기준으로 정하였다. 그리고 LTR의 종료시기와 HTR의 시작시기는 LTR 시작 이후 OH가 최소가 되는 지점과 HCHO가 최대가 되는 지점으로 정의하였다. DME 연료의 LTR은 OH의 생성이 감소되면서 종료되고, HTR은 LTR 기간 동안 생성된 HCHO의 분해 과정을 통해서 발생한다^{7,8)}.

기존의 HCCI 연소에서 노킹의 발생 없이 작동 가능한 영역을 규정하기 위해서, 사용된 기본적인 기준은 최대 압력 상승률의 한계를 설정하는 것이다. 하지만, 다른 형식의 엔진, 실린더 내부 그리고 연소실 형태가 다른 조건에서는 최대 압력 상승률을 서로 비교하기가 상당히 어렵다⁹⁾. 예를 들면, Christensen의 논문에서는 자연 흡입식과 슈퍼차저를 사용한 조건에서 HCCI 엔진을 실험하였다. 그 결과, 슈퍼차저를 사용한 경우, 자연 흡입식 엔진에 비하여 최대 압력 상승률이 더 컸지만 노킹의 발생이 없이 운전이 가능한 것으로 확인되었다¹⁰⁾.

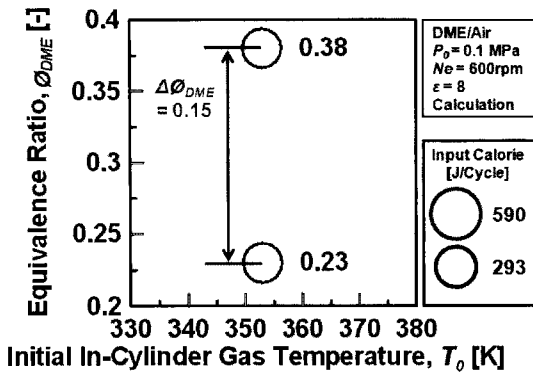


Fig. 2 Calculation condition (fuel stratification, 2 zones).

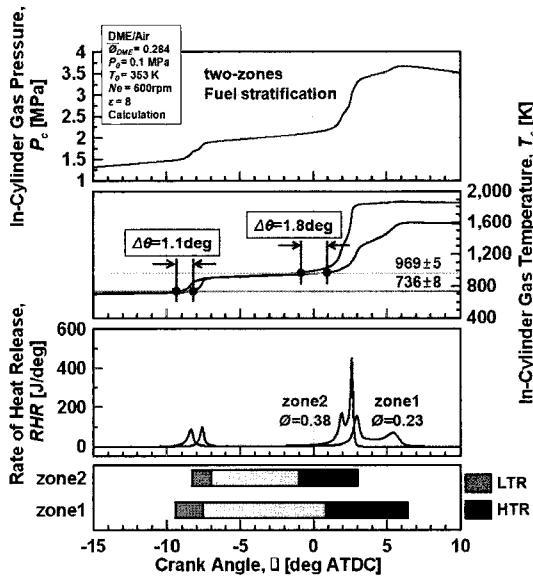


Fig. 3 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (DME, thermal stratification, 2-zones).

본 연구에서는 노킹의 한계를 설정하기 위하여 Eng가 제안한 Ringing Intensity(RI)를 이용 하였고, HCCI 연소에서 노킹이 발생하지 않는 운전 가능한 영역은 RI의 값이 5MW/m^2 이하로 설정하였다^{1,9)}.

$$RI = \frac{1}{2\gamma} \times \frac{(0.05 \times (\frac{dP}{dt})_{\max})^2}{P_{\max}} \times \sqrt{\gamma R T_{\max}} \quad (6)$$

$(dP/dt)_{\max}$ = maximum pressure rise rate

P_{\max} : maximum pressure

T_{\max} : maximum temperature

γ : C_p/C_v

R : gas constant of air

3. 단위반응 수치계산의 결과

3.1 농도 성층화가 HTR 발생 시기에 미치는 영향

실린더 내의 가스 온도를 균일하게 한 상태에서 DME의 농도의 성층화 효과를 조사하였다. 계산 조건은 Fig. 2와 같다. 초기 온도는 353K으로 일정 하지만 DME/Air 당량비는 각각 0.23과 0.38로 0.15만큼 다르게 만들어 주었다. 그리고 부피비를 조절 하여 각 zone에서 1사이클 당 투입열량이 293J/cycle로 일정하게 만들었다. 초기 압력은 0.1MPa, 엔진 회전 속도는 600rpm, 압축비는 8이다.

Fig. 3은 실린더 내 각 zone에서의 압력, 온도, 열발생을 그리고 연소 기간을 보여준다.

실린더 내의 압력 대하여 그래프가 하나인 이유는 zone1과 zone2의 압력이 서로 같기 때문이다. 최고 압력은 3.68MPa로 나타났다.

LTR과 HTR은 각각 약 $736 \pm 8\text{K}$ 과 $969 \pm 5\text{K}$ 에서 발생한다. LTR과 HTR의 발생 시기의 온도는 비슷하지만 발생 시기는 약 1.1deg와 1.8deg 정도 차이가 난다. 낮은 당량비는 가지는 zone1은 비열이 높기 때문에 온도 상승률이 크다. 따라서 LTR이 먼저 발생하게 된다. 하지만 HTR은 높은 당량비는 가지는 zone2에서 먼저 발생하였다. 높은 당량비를 가지는 zone2는 LTR이 끝났을 때 열발생량이 많기 때문에 zone1보다 실린더 내의 온도가 더 높다. 그 결과, HTR이 약 1.8deg 먼저 발생하였다. LTR 발생의 시간적, 공간적 차이로 인하여 HTR의 발생시기는 큰 영향을 받게 되었다.

3.2 실린더 내의 농도성층화가 최대압력상승률에 미치는 영향

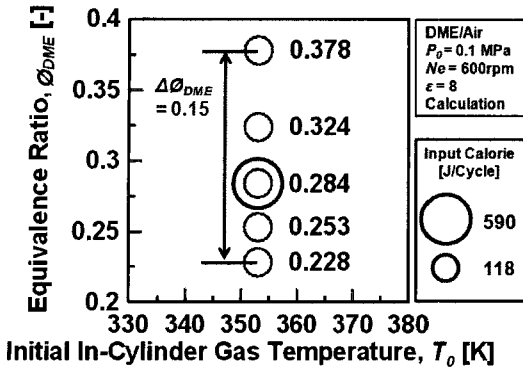


Fig. 4 Calculation condition (fuel stratification, 5 zones).

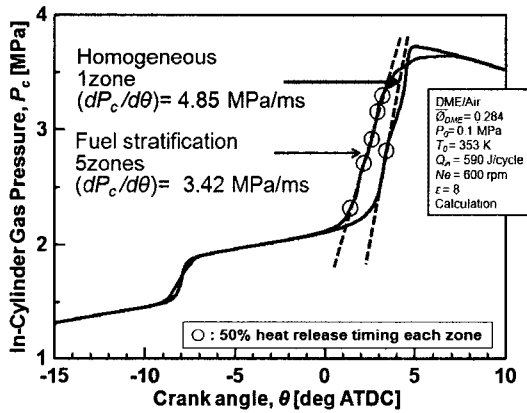


Fig. 5 The effect of fuel stratification on the pressure rise rate (fuel stratification, 5zones).

DME 농도성층화가 실린더 내의 가스 압력상승률에 미치는 영향에 대하여 5zone model을 이용하여 조사하였다.

Fig. 4는 5zone의 농도성층화 조건을 보여준다. 초기 온도는 353K, 각 zone의 투입열량은 118 J/cycle이고 DME/Air 당량비의 최대차이는 0.15이다. 여기서 최고 당량비와 최저 당량비의 차이를 농도성층화의 크기(ΔQ_{DME})로 정의하였다. 초기 압력은 0.1MPa, 엔진회전속도는 600rpm 그리고 압축비는 8이다

Fig. 5는 농도가 완전히 균질한 경우와 농도성층화의 크기 (ΔQ_{DME})가 0.15인 경우의 실린더 내의 최대압력상승률을 보여준다. 실린더 내의 당량

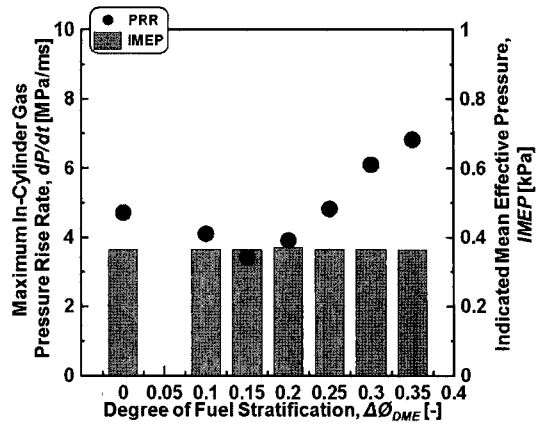


Fig. 6 In-cylinder gas pressure rise rate and IMEP as a function of degree of fuel stratification.

비가 완전히 균질한 경우보다 농도성층화 효과가 있는 경우에 최대압력상승률이 감소하였다.

실린더 내부에 농도성층화가 존재하면 고당량비 영역에서 저당량비 영역으로 CA50가 순차적으로 발생한다. 따라서 최대압력상승률이 약 29% 감소하였다.

농도성층화 크기(ΔQ_{DME})가 실린더 내의 압력상승률에 미치는 영향을 Fig. 6에 나타냈다. 농도성층화 크기(ΔQ_{DME})가 0.15까지는 압력상승률이 감소하였지만 0.15보다 커지면 오히려 압력상승률이 다시 증가하는 것을 알 수 있다.

따라서 최대압력상승률을 효과적으로 감소시키기 위해서 적절한 농도성층화 크기(ΔQ_{DME})가 필요함을 알 수 있다.

3.3 피스톤 팽창효과에 의한 최대압력상승률 저감

최대압력상승률을 효과적으로 저감하기 위해서 농도성층화 효과와 피스톤 팽창효과를 함께 고려하였다. 피스톤 팽창 효과를 알아보기 위해서 초기 온도를 조절하여 열발생 시기 50%(CA50)가 되는 지점을 TDC 이후에 발생하도록 하였다.

가스의 평균 온도를 303에서 503K까지 변화시켰을 때, 50% 열발생 시기(CA50)에 대한 최대 압력 상승률의 관계를 Fig. 7에 나타냈다.

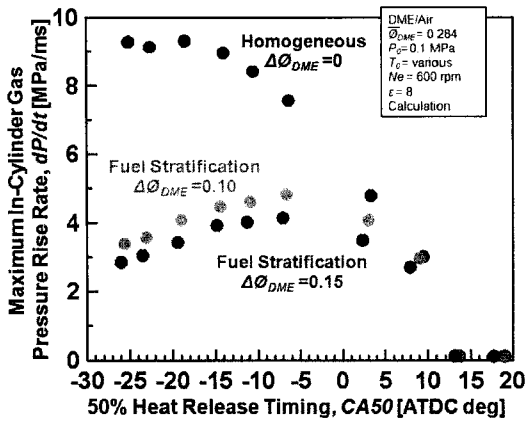


Fig. 7 CA50 and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (fuel stratification, 5 zones).

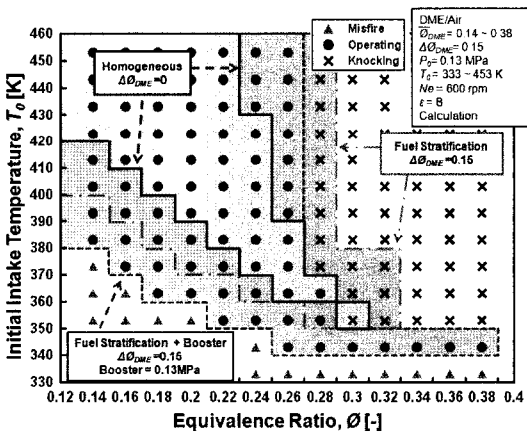


Fig. 8 The operating range for various initial intake temperature under fuel stratification and booster.

DME/Air의 평균 당량비는 0.284, 초기 평균 온도는 303~503K, 초기 압력은 0.1MPa, 엔진회전속도 600rpm, 압축비는 8이다. 농도성층화 크기(ΔQ_{DME})가 0.10과 0.15의 조건에 대해서 분석하였다.

CA50가 10[ATDC deg] 이후에 보이는 점들, 즉 초기 온도가 332K 이하의 조건에서는 최대압력상승률이 상당히 낮게 나타났다. 약 0.03MPa/ms로 나타났다. 그 이유는 초기 온도가 너무 낮아서 연소가 발생하지 않았기 때문이다. 모터링 데이터와 비교했을 때, 최고 압력과 최고 온도가 거의 일치하였다. 그래서 연소가 일어나지 않은 것으로 판

단하였다.

농도성층화 조건과 농도균일조건을 비교하면 농도성층화 조건일 때 최대압력상승률은 전반적으로 감소하였다. CA50가 TDC 이전에 발생하는 조건에서는 농도성층화 효과로 인하여 압력 상승률이 크게 저감되었지만 CA50가 TDC 이후에 발생할 때는 농도성층화 효과가 미미하였고, 오히려 피스톤의 팽창 효과로 인하여 최대압력상승률이 저감되었다.

3.4 농도성층화 및 초기압력변화에 따른 HCCI 엔진의 운전 영역 확대

DME/Air 당량비와 초기온도를 변화에 따른 DME HCCI 엔진의 운전 영역에 관하여 수치해석을 실시했다. Fig. 8에서 실린더 내의 당량비가 균일한 조건($\Delta Q_{DME}=0$)은 검은색 실선으로, 농도성층화 조건($\Delta Q_{DME}=0.15$)은 하늘색 파선으로 그리고 농도성층화조건과 부스터 조건($\Delta Q_{DME}=0.15 + P_0=0.13MPa$)은 빨간색 점선으로 운전 가능한 영역을 표시하였다. 파랑색 삼각형은 실화(Misfire) 영역이며 검은색 X 표시는 노킹(Knocking) 발생 영역이다.

위에서 언급 했듯이, 노킹은 RI 값이 $5MW/m^2$ 이상이면 노킹으로 판단했으며 실화는 연소실 내의 최고온도와 최고압력을 모터링의 결과 값과 비교를 하여 판단하였다.

실린더 내부에 농도성층화가 존재하면 실린더 내의 최대압력상승률이 저감되어 노킹 발생 가능성이 줄어든다. 그리하여 고당량비, 높은 초기온도 영역으로 운전 영역이 확대 되었다. 또한 저당량비, 저온 영역에서도 확대가 되었는데, 그 이유는 실린더 내의 다섯 개의 영역 중 고당량비 영역에서 연소가 발생하였기 때문이라고 판단이 된다.

농도성층화가 존재하는 조건에서 초기압력을 0.13MPa로 증가 시켰을 경우에 고당량비, 고온 영역에서는 운전 영역이 감소하였지만 저당량비, 저온 영역에서는 운전 영역이 오히려 증가하였다.

고당량비, 고온 영역에서는 높은 초기압력이 최대압력상승률을 증가시켜 노킹이 발생하였다. 그

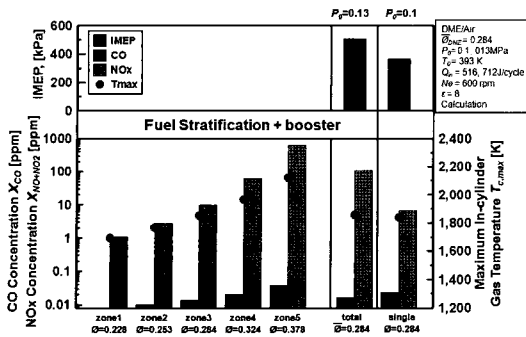


Fig. 9 IMEP, maximum gas temperature and CO and NOx emissions.

리고 높은 초기압력으로 인하여 저당량비, 저온 영역에서는 단순 농도성층화 조건보다 투입열량이 훨씬 높아졌다. 따라서 실화가 발생했던 영역에서도 연소가 가능하게 되었다.

3.5 초기압력변화에 따른 HCCI 연소특성 및 배기가스 특성

Fig. 9에서는 농도가 균일한 조건($P_0=0.1\text{MPa}$, $\Delta Q_{DME}=0$)과 농도성층화와 부스터 효과를 고려한 조건($P_0=0.13\text{MPa}$, $\Delta Q_{DME}=0.15$)의 평균유효압력, 실린더 내의 최고온도 그리고 CO와 NOx의 몰 분율을 비교하였다.

농도가 균일한 조건이 경우, DME/Air의 당량비는 0.284, 초기압력은 0.1MPa, 초기온도는 393K, 투입열량은 516J/cycle이다. 그리고 농도성층화와 부스터 효과를 고려한 경우, DME/Air의 당량비는 0.284, 농도성층화 크기는 $\Delta Q_{DME}=0.15$, 초기압력은 0.13MPa, 초기온도는 393K, 투입열량은 712J/cycle이다.

평균유효압력은 약 312에서 약 424kPa까지 증가 하였다. 이는 높은 초기압력이 투입열량을 증가 시켰기 때문에 평균유효압력이 증가된 것으로 판단된다.

일산화탄소(CO)은 농도균일조건 ($P_0=0.1\text{MPa}$, $\Delta Q_{DME}=0$) 보다 농도성층화 및 부스터 조건($P_0=0.13\text{MPa}$, $\Delta Q_{DME}=0.15$)에서 감소하였다. 농도성층화로 인하여 저당량비 영역에서 고당량비 영역으로 증

가할 수록 CO의 발생량은 증가하지만, 저당량비 영역에서 발생하는 CO의 양이 상대적으로 적다. 그러므로 농도성층화 및 부스터 조건의 경우, 실린더 전체에서 발생하는 CO의 양은 농도균일조건보다 적게 발생한다.

질소 산화물(NOx)은 농도균일조건보다 농도성층화 및 부스터 조건에서 많이 발생하였다. NOx는 실린더 내부의 온도가 높을수록 많이 발생한다. 두 조건 모두, 실린더 내의 평균최고온도는 비슷하다. 하지만, 농도성층화 및 부스터 조건은 고당량비 영역에서 실린더 내의 최고온도가 높기 때문에 NOx가 많이 발생하였다.

4. 결 론

이번 연구에서는 농도 성층화와 피스톤 팽창 효과가 실린더 내의 압력 상승률의 저감에 미치는 영향을 수치적으로 해석하였다. 그리고 높은 출력을 위하여 초기압력을 높여 단위 사이클당 총 투입열량을 증가시킨 후 연소특성, 출력, 배기가스를 조사하였다. 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 1) 농도 성층화 조건의 경우, 저온산화반응은 당량비가 낮은 zone 그리고 고온산화반응은 당량비가 높은 zone에서 먼저 발생 하였다. 고온산화반응의 발생시기가 달라짐으로써 압력상승률이 감소하였다.
- 2) DME 연료의 농도 성층화 크기가 임계 값까지는 최대압력상승률은 저감하였다. 그러나 임계 값보다 클 경우, 오히려 최대압력상승률이 증가 하였다.
- 3) 농도성층화 효과는 CA50가 TDC 이전에 발생할 때, 최대압력상승률을 효과적으로 저감시킬 수 있었다.
- 4) DME/Air의 농도가 불균질 할 때, 초기압력을 증가시키면 평균유효압력은 약 36% 증가하였다. CO의 몰 분율은 감소하였으며 NOx의 몰 분율은 오히려 증가하였다.

참 고 문 헌

- 1) M. Sjoberg, J. E. Dec, and N. P. Cernansky, "Potential of Thermal Stratification and Combustion Retard for Reducing Pressure-Rise Rates in HCCI Engines, Based on Multi-Zone Modeling and Experiments", SAE paper 2005-01-0113, 2005.
- 2) J. Ozaki and N. Iida, "Effect of Degree of Unmixedness on HCCI Combustion Based on Experiment and Numerical Analysis", SAE paper 2006-32-0046, 2006.
- 3) D. Yamashita, S. Kweon, S. Sato and N. Iida, "The Study on Auto-ignition and Combustion Process of the fuel Blended with Methane and DME in HCCI Engines", Transaction of JSAE, Vol. 36, No. 6, pp. 85-90, 2005.
- 4) A. E. Luz, F. Rupley and J. A. Miller, "CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics", Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B, 1989.
- 5) A. E. Luz, R. J. Kee and J. A. Miller, "SENKIN: A FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis", Sandia National Laboratories Report, SAND87-8248, 1988.
- 6) H. J. Curran, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, P. B. Dagaut, J. C Boettner and M. Cathonnet, "A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation", International Journal Chemical Kinetics, 30-3, 229-241, 1998.
- 7) M. Konno, Z. Chen and K. Miki, "Computational and Experimental Study on the Influence of Formaldehyde on HCCI Combustion Fueled with Dimethyl Ether", SAE paper, 2003-01-1826, 2003.
- 8) 권오석, 임옥택, "예혼합압축착화연소에서 Multi zone Modeling을 이용한 압력상승률 저감을 위한 열성층화의 효과에 관한 연구", Transaction of the KSAE(accepted), 2009.
- 9) J. A. Eng, "Characterization of Pressure Waves in HCCI Combustion", SAE paper, 2002-01-2859, 2002.
- 10) M. Christensen, B. Johansson, P. Amneus, and F. Mauss, "Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition", SAE paper, 980787, 1998.
- 11) S. H. Kook, C. S. Bae, P. C. Miles, D. Choi and L. M. Pickett, "The Influence of Charge Dilution and Injection Timing on Low-Temperature Diesel Combustion and Emissions", SAE paper, 2005-01-3837, 2005.