

연료의 불균질성을 갖는 DME HCCI엔진에서 과급의 효과에 관한 수치해석

권 오 석¹⁾ · 임 옥 택^{*2)}

울산대학교 기계자동차공학과¹⁾ · 울산대학교 기계자동차공학부²⁾

Numerical Analysis for Booster Effect in DME HCCI Engine with Fuel Stratification

OSeok Kwon¹⁾ · OckTaeck Lim^{*2)}

¹⁾Graduate School of Mechanical and Automotive Engineering, Ulsan University, Ulsan 680-749, Korea

²⁾Department of Mechanical and Automotive Engineering, Ulsan University, Ulsan 680-749, Korea

(Received 23 March 2009 / Accepted 12 November 2009)

Abstract : 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. It was found that fuel stratification offers good potential to achieve a staged combustion event and reduced pressure-rise rates. The engine is fueled with Di-Methyl Ether (DME) which has unique 2-stage heat release. Numerical analysis is conducted with single and multi-zones model and detailed chemical reaction scheme is done by chemkin and senkin. Calculation result shows that proper fuel stratification prolongs combustion duration and reduce pressure rise rate. Besides IMEP, combustion efficiency and indicated thermal efficiency keep constant. However, too wide fuel stratification increases pressure rise rate and CO and NOx emissions in exhaust gas.

Key words : HCCI(예혼합압축자기착화), Fuel stratification(농도 성층화), Pressure rise rate(압력상승률), DME(디메틸에테르), IMEP(평균유효압력), Ringing intensity(노킹강도), Multi-zone(농도 성층화 모델), Single-zone model(농도 균일 모델)

Nomenclature

HCCI : homogeneous charge compression ignition
LTR : low temperature reaction
HTR : high temperature reaction
 Q_{in} : input calorie, J/cycle
IMEP : indicated mean effective pressure, MPa
RI : ringing intensity, MW/m²

1. 서론

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, 이하HCCI) 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 불

*Corresponding author, E-mail: otlim@ulsan.ac.kr

구하고, 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 있다.¹⁻³⁾

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

농도 성층화 효과의 경우, 예혼합기에서 어느 정도의 농도 성층화가 압력 상승률을 저감 시키는지 수치적으로 명확하지 않다. 그리고 국부 지역의 높은 당량비가 오히려 압력상승률을 증가 시키는 결과를 초래하여 농도 성층화의 효과만으로는 압력상승률을 저감시키는데 한계가 있을 것으로 판단이 된다.

본 연구에서는 농도 성층화가 실린더 내의 압력 상승률의 저감에 미치는 영향을 수치적으로 해석하였다. 그리고 과급의 효과를 고려하기 위하여 초기 압력을 높여 단위 사이클 당 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 LTR기간 동안 열발생량의 비율이 크다. 만약 당량비가 높다면 LTR 기간의 열발생량은 증가하는 것을 알 수 있다. 따라서 연소실 내에 DME 농도의 분포가 존재하면 국소지역에서의 LTR 기간의 열발생량의 차이에 의해 HTR 이 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-Butane 및 Mechane과 비교하여 Table 1에 기술하였다.

2. 수치계산

2.1 계산 방법

Table 1 Fuel properties

Name	DME	n-Butane	Mechane
Molecular formula	CH ₃ OCH ₃	C ₄ H ₁₀	C ₈ H ₁₈
Low heat value [MJ/kg]	28.8	45.6	48.3
Self ignition temperature [K]	623	678	905
Low temperature reaction(LTR) [%]	10-30	0-5	0
High temperature reaction(HTR) [%]	70-90 %	95-100 %	100 %

Table 2 Engine specification

Displacement	613 cc
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

본 연구에서, Sandia 실험실에서 개발된 CHEKIN2와 변형된 SENKIN 프로그램을 이용하고, Curran의 DME모델(Species: 78, Reactions: 336)을 사용하였다.^{4,6)} 계산에 사용된 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 이상기체(식 (1))이고, 열전달과 질량전달은 고려하지 않았다. 에너지 보존법칙(식 (2))과 질량 보존법칙(식 (3))을 사용하였다. 또한 각 영역의 가스 압력, 온도 및 화학조성은 완전하게 균일하다고 가정하였고, 실린더 내 가스 평균온도, 는 총 에너지 보존식(식 (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 zone
- n_i : Number of moles
- $C_{p,i}$: Specific heat at constant pressure of i th zone

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

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

- Q_{LHV} : Low Heat Value of DME
- FA_i : Volume ratio of fuel to air of i th zone

0 차원 모델은 각 영역(zone)의 초기 온도가 균일하고 화학 종의 조성이 균질하다. 0 차원 모델을 기반으로 만들어진 멀티 zone 모델은 초기 온도, DME/Air의 당량비를 변화시킴으로써 연소실 내의 온도의 불균일, DME 농도의 불균질을 재현할 수 있다.

실제 엔진의 경우, 실린더 내부의 유동 및 벽면으로 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. 1에서 LTR과 HTR의 시작시기 및 종료시기의 정의를 보여준다. LTR의 시작 시기는 전체 열 발생량의 1%가 되는 지점, LTR의 종료 시기는 LTR 시작 이후 OH의 몰 분율이 최소가 되는 지점으로 정의 하였다. 그리고 HTR의 시작 시기는 HCHO의 몰 분율이 최대가 되는 지점, HTR의 종료 시기는 전체 열발생량의 99%가 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 어렵다.⁹⁾ 예를 들면, Christensen의 논문에서는 자연 흡입식과 슈퍼차저를 사

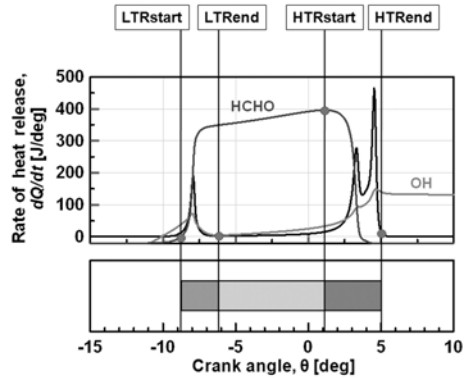


Fig. 1 Definition of combustion duration

용한 조건에서 HCCI 엔진을 실험하였다. 그 결과, 슈퍼차저를 사용한 경우, 자연 흡입식 엔진에 비하여 최대 압력 상승률이 더 컸지만 노킹의 발생이 없이 운전이 가능한 것으로 확인되었다.¹⁰⁾

본 연구에서는 노킹의 한계를 설정하기 위하여 Eng가 제안한 Ringing Intensity(RI)를 이용 하였고, HCCI 연소에서 노킹이 발생하지 않는 운전 가능한 영역은 RI의 값이 5 MW/m² 이하로 설정하였다.^{1,9)}

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

dP/dt_{max} : maximum pressure rise rate, [MPa/ms]

P_{max} : maximum pressure, [MPa]

T_{max} : maximum temperature, [K]

γ : C_p/C_v

R : gas constant of air, [J/kg·K]

RI : ringing intensity, [MW/m²]

3. 단위반응 수치계산의 결과

3.1 2zone model을 이용하여 농도성층화가 HTR 발생 시기에 미치는 영향 조사

실린더 내의 가스 온도를 균일하게 한 상태에서 DME의 농도의 성층화 효과를 조사하였다. 계산 조건은 Fig. 2와 같다. 초기 온도는 353K으로 일정하지만 DME/Air 당량비는 각각 0.23과 0.38로 0.15만큼 다르게 만들어 주었다. 그리고 부피비를 조절하여 각 영역(zone)에서 1사이클 당 투입열량이 293J/cycle로 일정하게 만들었다. 초기 압력은 0.1MPa, 엔

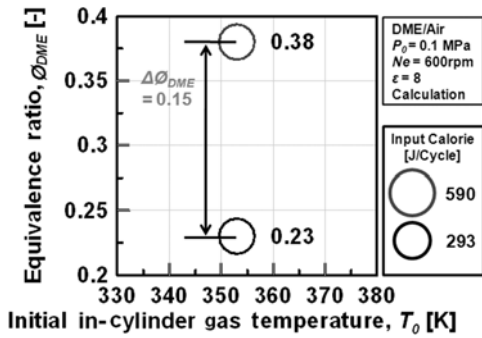


Fig. 2 Calculation condition (fuel stratification, 2 zones)

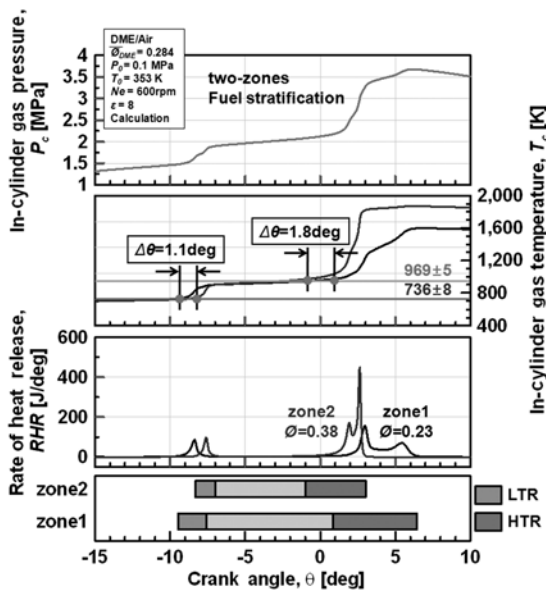


Fig. 3 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (DME, Thermal stratification, 2-zones)

진 회전 속도는 600rpm, 압축비는 8이다.

Fig. 3은 실린더 내 각 영역(zone)에서의 압력, 온도, 열발생률 그리고 연소 기간을 보여준다.

실린더 내의 압력 대하여 그래프가 하나인 이유는 1영역(zone1)과 2영역(zone2)의 압력이 서로 같기 때문이다. 최고 압력은 3.68MPa로 나타났다.

LTR과 HTR은 각각 약 736±8K과 969±5K에서 발생한다. LTR과 HTR의 발생 시기의 온도는 비슷하지만 발생 시기는 약 1.1deg와 1.89deg 정도 차이가 난다. 낮은 당량비를 가지는 1영역(zone1)은 비열이 높기 때문에 온도 상승률이 크다. 따라서 LTR이 먼

저 발생하게 된다. 하지만 HTR은 높은 당량비를 가지는 2영역(zone2)에서 먼저 발생하였다. 높은 당량비를 가지는 2영역(zone2)은 LTR이 끝났을 때 열발생량이 많기 때문에 1영역(zone1)보다 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 예혼합기의 농도성층화가 가스 압력 상승률에 미치는 영향

DME 농도성층화가 실린더 내의 가스 압력상승률에 미치는 영향에 대하여 5zone model을 이용하여 조사하였다. Fig. 4는 5영역(zone5)의 농도성층화 조건을 보여준다. 초기 온도는 353K, 각 영역(zone)의 투입열량은 118 J/cycle이고 DME/Air 당량비의 최대차이는 0.15이다. 여기서 최고 당량비와 최저 당량비의 차이를 농도성층화의 크기(ΔϕDME)로 정의하였다. 초기 압력은 0.1MPa, 엔진회전속도는 600rpm 그리고 압축비는 8이다.

Fig. 5는 농도가 완전히 균질한 경우와 농도성층화의 크기(ΔϕDME)가 0.15인 경우의 실린더 내의 압력을 보여준다. 실린더 내의 당량비가 완전히 균질한 경우보다 농도성층화가 있는 경우에 압력상승률이 감소하였다.

농도성층화 크기(ΔϕDME)가 실린더 내의 압력 상승률에 미치는 영향을 Fig. 6에 나타냈다. 농도성층화 크기(ΔϕDME)가 0.15까지는 압력상승률이 감소하였지만 0.15보다 커지면 오히려 압력상승률이 다시 증가하는 것을 알 수 있다. 따라서 압력상승률을 효과적으로 감소시키기 위해서 적절한 농도성층

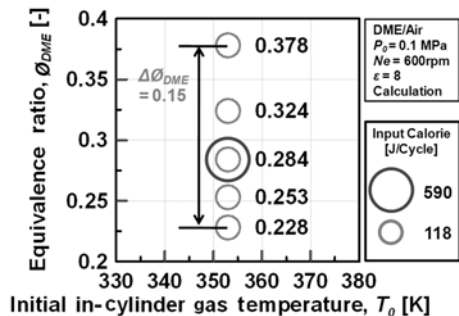


Fig. 4 Calculation condition (fuel stratification, 5 zones)

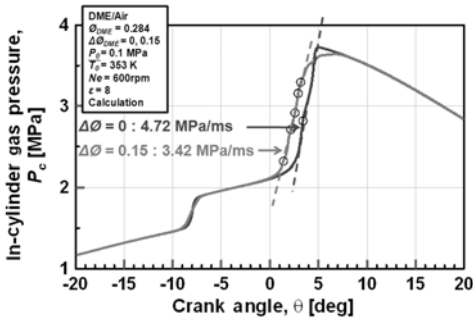


Fig. 5 The effect of fuel stratification on the pressure rise rate (fuel stratification, 5zones)

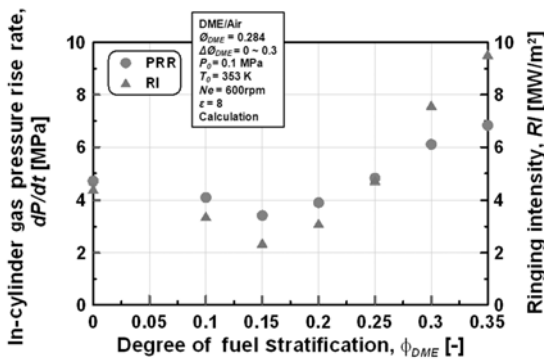


Fig. 6 In-cylinder gas pressure rise rate and ringing intensity as a function of degree of fuel stratification

화 크기($\Delta\phi_{DME}$)가 필요함을 알 수 있다.

3.3 피스톤 팽창효과에 의한 압력 상승률 저감 효과

압력상승률을 효과적으로 저감하기 위해서 농도 성층화 효과와 피스톤 팽창효과를 함께 고려하였다. 피스톤 팽창 효과란 열발생량 중 50%가 발생하는 시기(CA50)가 TDC 이후에 발생하여 피스톤이 팽창하는 과정에서 연소가 발생하는 것이다. 피스톤 팽창 효과를 알아보기 위해서 초기 온도를 조절하여 CA50가 되는 지점을 TDC 이후에 발생하도록 하였다.

Table 3은 초기 온도에 따른 투입열량을 보여준다. 농도가 균일한 조건, 농도성층화 조건의 경우 모두 투입열량은 같다. 압축 시 가스의 평균 온도를 303에서 503K까지 변화시켰을 때, CA50에 대한 최대 압력 상승률의 관계를 Fig. 7에 나타냈다.

Table 3 Input calorie value by initial temperature

Initial temperature, T_0 [K]	Input calorie, Q_{in} [J/cycle]
303	685
323	643
343	606
353	589
383	543
403	515
423	491
453	459
483	430
503	413

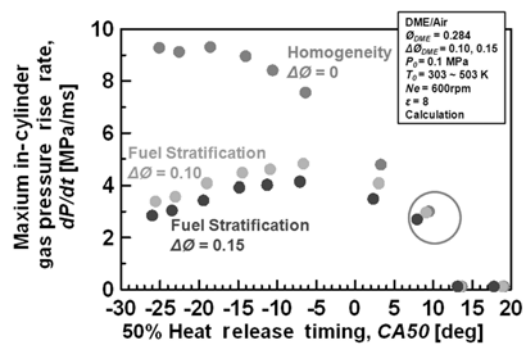


Fig. 7 CA50 and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (fuel stratification, 5 zones)

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

CA50가 10[ATDC deg] 이후에 보이는 점들, 즉 초기 온도가 332K 이하의 조건에서는 압력상승률이 0 MPa/ms으로 나타났다. 그 이유는 초기 온도가 너무 낮아서 연소가 발생하지 않았기 때문이다.

농도 성층화 조건과 균일 조건을 비교하면 농도 성층화 조건일 때 압력상승률은 크게 감소하였다. 하지만 농도성층화 크기($\Delta\phi_{DME}$)에 따른 압력상승률의 저감 효과는 미미하였다. 그리고 CA50가 TDC 이전에 발생할 때는 농도성층화 효과로 인하여 압력 상승률이 저감되었다. 하지만 CA50가 TDC 이후에 발생할 때는 피스톤의 팽창 효과로 인하여 농도성층화 효과가 미미한 것을 알 수 있었다.

3.4 초기 압력 변화에 따른 HCCI 연소 특성 및 배기 가스

농도성층화 효과와 피스톤의 팽창 효과를 동시에 적용하고 초기 압력을 증가시켜 HCCI 연소 특성 및 배기가스를 알아보았다.

DME/Air의 당량비는 0.284, 농도성층화의 크기 ($\Delta\phi_{DME}$)는 0.15, 초기 온도는 343K인 경우에 대하여 초기 압력을 0.1, 0.12, 0.14, 0.16 MPa로 변화시키면서 계산을 실시하였다.

예혼합기의 초기 압력 변화가 압력상승률 및 RI(Ringing Intensity)에 미치는 영향을 Fig. 8에 나타냈다. 예혼합기의 초기 압력이 증가함으로써 압력상승률이 증가하고 더불어 RI도 증가하였다. 초기 압력이 0.14MPa 보다 커지면 RI가 5MW/m²보다 커져 노킹이 발생하였다.

Fig. 9는 동일 조건에서 초기 압력에 변화에 따른

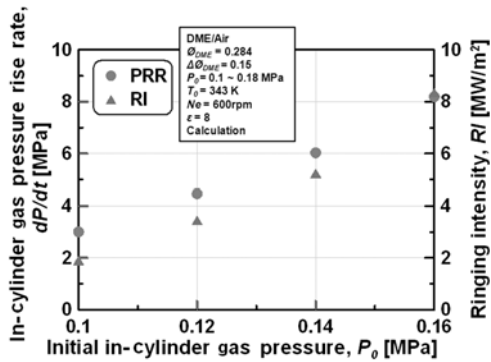


Fig. 8 In-cylinder gas pressure rise rate and RI as a function of degree of initial pressure

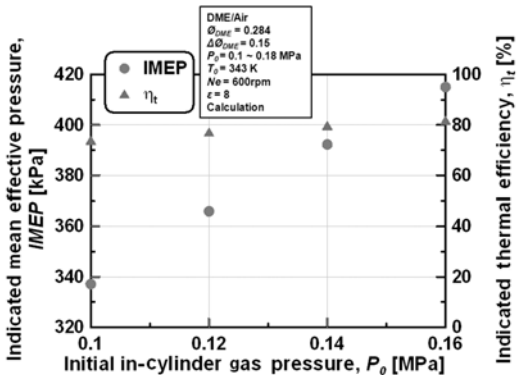


Fig. 9 IMEP and indicated thermal efficiency as a function of degree of initial pressure

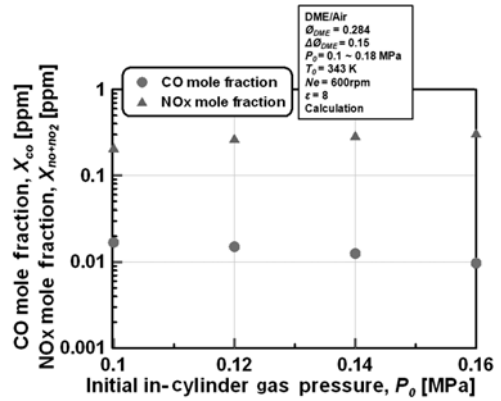


Fig. 10 CO and NOx mole fraction in exhaust gas as a function of degree of initial pressure

IMEP와 도시 열효율을 보여준다. 초기 압력이 증가할수록 투입열량도 증가한다. IEMP는 증가된 투입열량으로 인하여 선형적으로 증가하는 것을 알 수 있다. 초기 압력이 0.14 MPa일 때, IMEP는 392kPa. 약 16% 증가하는 것을 볼 수 있다. 그리고 도시열효율은 74%에서 80%까지 높아졌다.

Fig. 10은 CO와 NOx의 농도에 미치는 영향을 보여준다. 초기 압력의 증가와 더불어 CO는 감소하고 NOx는 증가하였다. CO의 산화에 필요한 온도가 1500K까지 도달하지 않으면 CO의 배출량은 증가한다. 그리고 NOx는 2200K 이상이 되면 크게 증가한다.¹¹⁾

초기 압력이 증가 할수록, 실린더 내부의 낮은 당량비를 가진 영역(zone)의 온도가 1500K 이상 증가하기 때문에 CO의 배출량이 감소하였다. 그리고, NOx의 배출량은 실린더 내부의 높은 당량비를 가진 영역(zone)의 온도가 2000K 이상 증가하기 때문에 증가하였다.

4. 결론

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 당량

비가 낮은 영역 그리고 고온산화반응은 당량비가 높은 영역에서 먼저 발생 하였다. 고온산화반응의 발생시기가 달라짐으로써 압력상승률이 감소하였다.

- 2) DME 연료의 농도 성층화 크기 $\Delta\phi_{DME}$ 가 0.15까지는 압력상승률이 저감하였다. 그러나 0.15보다 과도하게 클 경우, 오히려 최대압력상승률이 증가하였다.
- 3) CA50가 TDC 이전에 발생할 때, 농도성층화 효과는 압력상승률 저감에 기여하였다. 하지만 CA50가 TDC 이후에 발생할 때는 피스톤의 팽창 효과로 인하여 농도성층화 효과가 미미한 것을 알 수 있었다.
- 4) DME/Air의 농도가 불균질 할 때, 초기 압력을 0.14 MPa까지 증가시키면 IMEP는 337에서 392 kPa까지 약 16% 증가하였고 도시 열효율은 74에서 80%까지 증가하였다. CO의 배출량은 실린더 내부의 낮은 당량비를 가진 영역(zone)의 온도가 1500K 이상 증가하기 때문에 감소하였지만, NOx의 농도는 실린더 내부의 높은 당량비를 가진 영역(zone)의 온도가 2000K 이상 증가하기 때문에 오히려 증가하였다.

후 기

본 연구는 2009년도 지식경제부 기술혁신사업인 ‘클린 신연료 동력시스템 개발’에서 수행된 연구입니다. 관계자들의 지원에 깊이 감사드립니다.

References

- 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 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 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, Vol.30, No.3, pp.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 2003-01-1826, 2003.
- 8) O. S. Kwon and O. T. Lim, “Effect of Thermal Stratification for Reducing Pressure Rise Rate in HCCI Combustion Based on Multi-zone Modeling,” Transactions of the KSAE, Vol.17, No.4, pp.32-39, 2009.
- 9) J. A. Eng, “Characterization of Pressure Waves in HCCI Combustion,” SAE 2002-01-2859, 2002.
- 10) M. Christensen, B. Johansson, P. Amneus and F. Mauss, “Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition,” SAE 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 2005-01-3837, 2005.