

## DME HCCI 운전조건에서 Methanol 분율에 따른 HCCI엔진연소 특성에 관한 수치해석적 연구

이효원<sup>1</sup> · 임옥택<sup>2†</sup> · 박규열<sup>2</sup> · 조원준<sup>3</sup> · 백영순<sup>3</sup>

<sup>1</sup>울산대학교 기계공학과 대학원, <sup>2</sup>울산대학교 기계공학부, <sup>3</sup>한국가스공사 연구개발원 DME기술연구센터

### A Computational Study on DME HCCI Combustions Characteristics with Methanol Concentrations

HYOWON LEE<sup>1</sup>, OCKTAECK LIM<sup>2†</sup>, KYUYEOL PARK<sup>2</sup>, WONJUN CHO<sup>3</sup>, YOUNGSOON BAEK<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Graduate of Institute of Mechanical Engineering, Ulsan University, Mugeo-dong, Nam-gu, Ulsan 680-749, Korea

<sup>2</sup>Department of Mechanical Engineering, Ulsan University, Mugeo-dong, Nam-gu, Ulsan 680-749, Korea

<sup>3</sup>DME Technology Research Center, KOGAS R&D Division, Yeonsu-gu, Incheon, 406-840, Korea

**Abstract** >> In Dimethyl Ether (DME) indirect production processes, DME have a reforming process to separate Methanol. DME has a high cetane number and Methanol has a high octane number. Each fuel has a different combustion characteristics and reactivity. So, this paper was investigated on the combustion characteristics of DME and Methanol. Basically, Methanol has a effect of retarding ignition. However, Within 10% of total carbon mole number in DME, Methanol slightly changed the onset timing of Low Temperature Reaction (LTR) with increasing thermal-ignition preparation range. It means that controlling combustion phasing of DME can be possible without eliminated LTR. In case of IMEP, the ranges.

**Key words** : Dimethyl Ether(디메틸에테르), Methanol(메탄올), Low Temperature Reaction(저온반응), High Temperature Reaction(고온반응), Indicated Mean Effective Pressure(지시평균유효압력), Crank Angle of 10% and 50% burn point(전체 열발생량 중 10% 과 50% 열발생량 각)

### 1. 서 론

본 연구에서는 DME 내의 메탄올이 압축착화연소 조건에서 주 연료인 DME의 연소특성에 어떠한 영향을 미치는지에 대해 연구하였다.

기본적인 간접합성법에 의해 DME를 생산하게 되면, 개질 단계 이전의 DME내에 메탄올이 포함되어

된다. 따라서, 메탄올의 적절한 첨가가 DME의 연소 특성에 향상에 도움이 된다면, 메탄올은 DME의 혼합연료로써 사용이 용이해질 것이며, 생산단가 또한 낮출 수 있는 방향으로 생산될 것이다.

1) DME (세탄가 55)와 메탄올(옥탄가 106)은 서로 반대되는 연료특성(Two and Single stage)을 가지지만, 두 연료를 적절히 혼합한다면 점화타이밍 및 CA10과 CA50 (전체 열발생량 중 10%와 50% 가 되는 지점)을 조절할 수 있다. 점화타이밍 조

<sup>†</sup>Corresponding author : otlim@ulsan.ac.kr

[ 접수일 : 2013.10.30 수정일 : 2014.2.14 게재확정일 : 2014.2.28 ]

Copyright © 2014 KHNES

절에 대한 메커니즘은 저온반응구간에서 메탄올의 OH라디칼 반응과 DME의 OH라디칼 반응의 연관성으로 설명할 수 있다. 두 연료의 저온반응은 거의 비슷한 온도에서 시작되며, 두 연료는 약간의 차이는 있지만, 거의 동시에 OH라디칼을 소모하게 된다. 즉, DME의 OH라디칼 반응에 필요한 양이 메탄올과 반응을 하게 되면서, 점화타이밍을 조절할 수 있다.

- 2) DME내의 메탄올이 점화타이밍 뿐만 아니라, 연소특성을 변화시키므로, 압력 및 온도, 그리고 연소상의 변화에 대한 영향에 대해 분석하였다.

## 2. 목 적

첫 번째 목적은 DME연료 내에서 메탄올 분율에 따른 자발화 특성을 파악하는 것이며, 두 번째 목적은 점화 타이밍 및 연소특성을 최적하기 위한, 메탄올과 DME의 최적 혼합비를 찾는 것이다.

- 1) 메탄올의 영향을 이해하고자, 엔진속도 1200rpm 당량비 1.0, 자연흡기상태를 가정하였다.
- 2) 메탄올의 분율을 15% 이내까지만 혼합하여, 연소 특성 변화에 대해 연구하였다<sup>1)</sup>.

## 3. 수치해석

### 3.1 수치해석모델 및 연료

본 연구에 사용된 프로그램은 연소해석을 위한 상용프로그램인 CHEMKIN-PRO를 사용하였다. 화학 반응모델은 Curran의 DME scheme을 사용하였다.

### 3.2 연소의 범위 정의

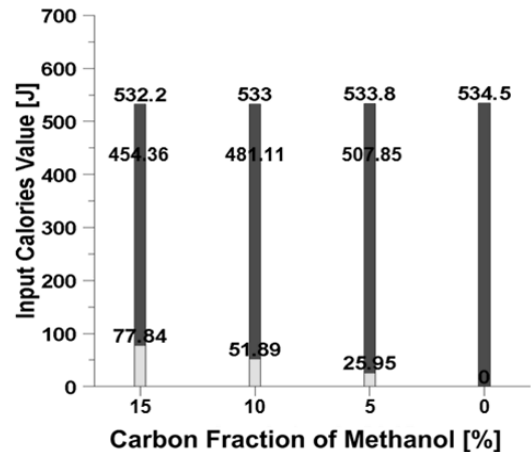
연소의 각 범위에 해당하는 주요 반응들을 아래에 정의하였다<sup>2,3)</sup>.

**Table 1** Model Specifications

List	Model
Compression ratio	8.4
Displacement [cc]	311.3
Pressure at TDC [bar]	13.7
Engine Speed [rpm]	1200
IVC [CA]	249
EVO [CA]	471

**Table 2** Fuel Properties

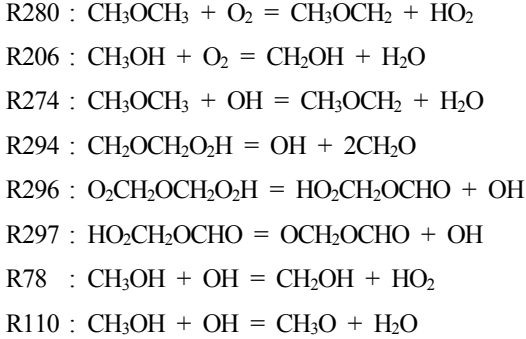
Chemical	DME	Methanol
Constituents	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH
Molecular weight [g/mol]	46.07	32.04
Cetane number	55	5
RON	35	106
MON	13	104
Ignition point [K]	623.15	658.15
Low heating value [MJ/kg]	28.8	20.1



**Fig. 1** Input Calories Value at each case

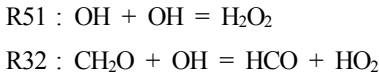
### 3.2.1 Fuel series 반응들

Fuel series 반응그룹은 두 가지의 범위를 포함하고 있는데, 하나는 LTO (low temperature oxidation, 저온 산화반응)이며, 나머지 하나는 NTC (negative temperature coefficient, OH라디칼이 최대가 되는 지점부터 최저가 되는 지점까지)임이다. 이 두 가지 모두, 저온반응에 속한다.



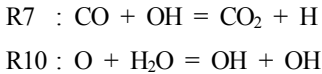
3.2.2 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> loop reactions

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 반응그룹은 TIP (thermal-ignition preparation, OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>라디칼의 분율이 같아질 때까지이며, 이후 주 연소가 시작되게 됨)와 같이 정의할 수 있다. 이는 고온반응에 속한다.



3.2.3 Hydrogen-oxygen system reactions

H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> system 그룹은 TI (thermal ignition, 주 연소가 일어나는 구간임)와 같이 정의할 수 있으며, 고온반응에 속한다.



OH라디칼 분율이 최대가 될 때, 저온반응의 열발생률은 최대가 되며, 이것은 OH라디칼의 반응이 저온반응의 중요한 역할을 한다는 것을 알 수 있다<sup>6,7)</sup>.

DME의 경우 750-1000K 구간에서 저온반응이 발생하여, 반응 R294, 296, 297의해 OH라디칼의 생성하고, R274에 의해 OH라디칼을 소비하게 된다. 하지만, 메탄올의 경우에는 저온반응이 없고, 1600K이상에서 OH라디칼이 생성되기 때문에, 저온구간에서 OH라디칼을 생성하지 않는다. 따라서, 메탄올의 분

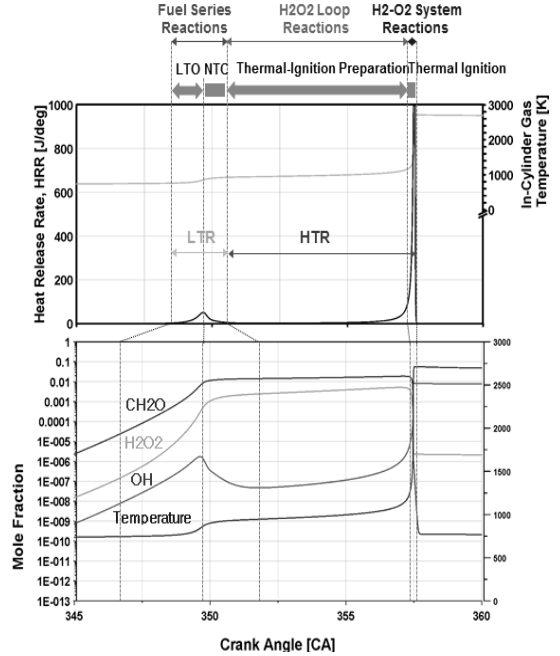


Fig. 2 Defining the ranges of combustion

율을 증가시키게 되면, DME의 양을 줄어들어, 저온 열발생량 역시 줄어들게 된다.

약 1000K 이하에서 OH라디칼은 LTO와 NTC 그리고 TIP 구간에서 증감되는 현상을 보여준다. Fig. 2에 OH이외의 중요한 지표가 될 수 있는 성분을 몰분율로 단위로 표시하였다.

4. 수치해석결과

4.1 점화 지연

점화지연시간은 메탄올 분율이 증가함에 따라 더욱 지연시키게 된다. Fig. 3에서는 DME와 메탄올 100%는 800K과 1000K사이에서 완전히 다른 연소양상을 보여주고 있다. 이 온도범위에서, DME의 점화지연은 거의 일정하다. 즉, 저온반응이 발생한다는 것이다. 하지만, 메탄올의 점화지연은 선형적으로 증가하고 있다. 또한, 메탄올의 분율이 50%이상 이 되면, 점화지연의 양상은 완전히 선형적으로 변하였다.

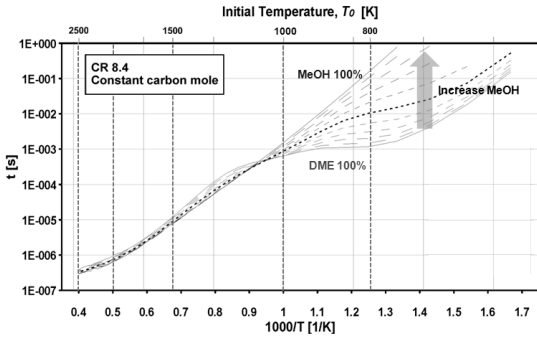


Fig. 3 Ignition delay by increasing MeOH

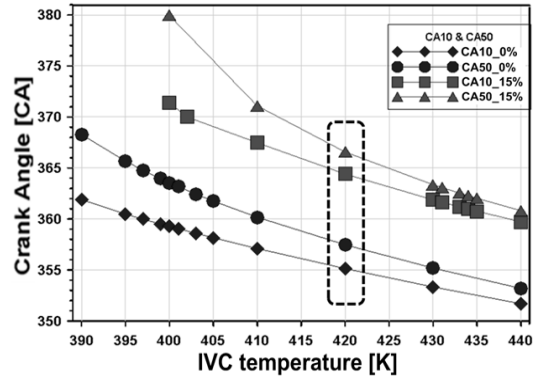


Fig. 5 CA10 and CA50 of Methanol 0% and 15%

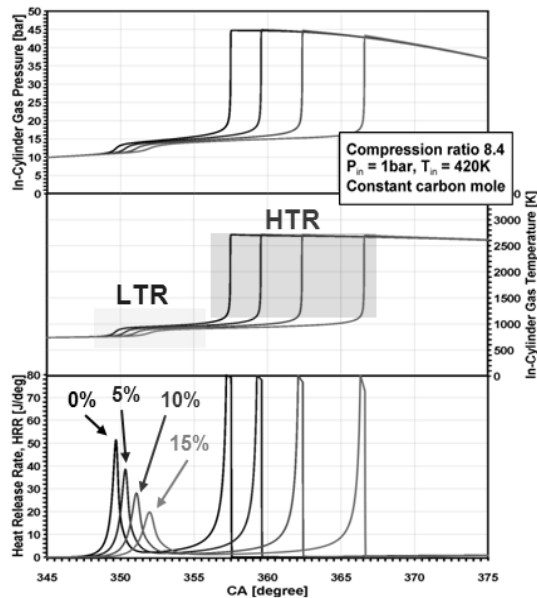


Fig. 4 Pressure, Temperature and Heat Release Rate

4.2 메탄올 첨가에 따른 압력상승률 및 최대온도 변화

실린더 내부의 최대 압력상승률과 온도는 메탄올의 분율을 증가시키에 따라서 감소하고 있다. 이는 메탄올의 첨가에 따라 대부분의 케이스의 CA50가 TDC이후로 지각되기 때문이며, 메탄올분율이 15%이상일경우, 표에 나타난 모든 조건에서 CA50가 TDC이후로 지각되며, 이러한 현상은 두 연료가 가지는 각 반응그룹의 여러화합 반응들과 관련되어있다. 특히, OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 변화를 통해서 설명이 가능하다<sup>2,3)</sup>.

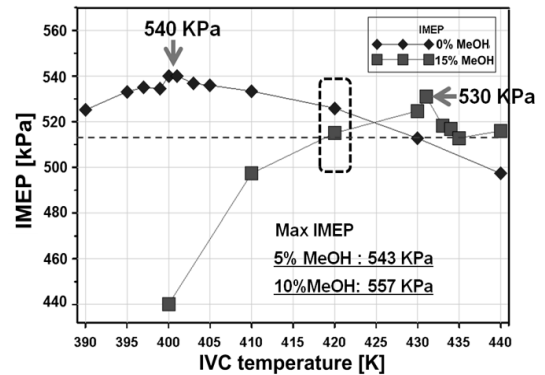


Fig. 6 IMEP of Methanol 0% and 15%

4.3 CA10, CA50과 IMEP

연소상과 IMEP는 메탄올의 분율에 따라 영향을 받고 있다. 메탄올 15% 경우에는 초기온도가 최소 약 400K이상 되어야 하며, IMEP는 DME100%보다 낮게 나타난다. 이러한 메탄올의 효과에 대해 근본적으로 이해하기 위해서 메탄올 0%와 메탄올 5%의 두 경우에서 초기온도 420K일때를 비교하였다.

4.4 연소의 각 구간들의 변화

Fig. 7는 각 구간들(LTO, NTC, TIP and TI)의 변화를 보여준다. 메탄올 5%와 10% 경우, LTO의 시작 타이밍은 거의 변화지 않지만, LTO 기간은 증가하고 있다. 각 LTR구간의 길이를 비교해보면, 메탄올 0%

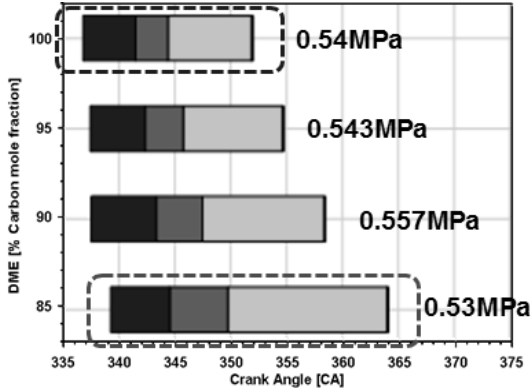


Fig. 7 Ranges of combustion and Maximum IMEP

일 때 3.54CA, 95%일때는 3.69CA, 10%일 경우에는 4.48CA 그리고 15% 경우에는 3.96CA로 나타났다. 즉, 10%까지는 LTR구간 길이가 증가하지만, 15%부터는 다시 감소하는 경향을 보인다. 즉, 메탄올 15% 이상부터는 메탄올에 의한 OH라디칼의 소모가 LTO를 억제하기 시작했다. 즉, 메탄올 5%와 10%에서의 LTO 구간은 LTO의 시작시기 변화없이 조절이 가능하며, 이러한 구간의 변화는 NTC와 TIP시작시기를 지각시키고, 기간을 연장시켰다. 결과적으로, TIP의 조절을 통해서 최적화된 연소상과 최대의 IMEP를 얻을 수 있다.

Fig. 7에서는 메탄올 첨가에 따른 각 구간의 변화와 최대 IMEP를 나타내고 있다. 메탄올 5%와 10%일 때는 0.543MPa과 0.557MPa 그리고 메탄올 0%와 메탄올 15%일때는 0.54MPa과 0.53MPa을 나타내고 있다. 위 그림에서는 TI구간의 길이가 약 0.1CA이하로 매우 짧기 때문에 거의 나타나지 않는다.

4.5 주요 성분(OH, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, Fuels)의 변화

NTC 구간 이후부터, OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 물분율이 일정하게 보여지는 구간이 메탄올 15% 경우에 길게 나타나는 것을 볼 수 있다. 이는 TIP구간의 연장을 보여주고 있는 것으로써, CA10과 CA50이 TDC 이후에 나타나는 지표이자 원인이다. 심지어, TIP구

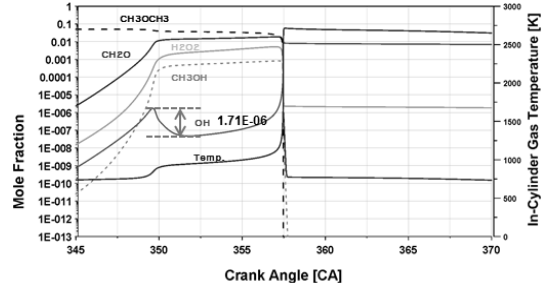


Fig. 8 Transition of Main constituents of Methanol 0%

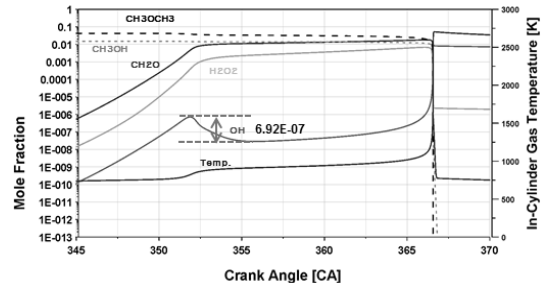


Fig. 9 Transition of Main Components of Methanol 15%

간이 365CA이후로 발생하고, 열발생률 역시 감소하더라도, 실린더내부의 온도는 거의 일정한 상태를 유지하고 있다. 즉, 팽창행정에서의 피스톤 냉각효과에도 불구하고, TIP구간에서 더 많은 열발생으로 인하여, 실린더 내부의 최대온도는 거의 감소하지 않았다. TI구간의 감소 및 최대온도의 감소는 TI구간의 열발생량의 감소를 보여준다. 이는 TI구간의 시작은 CA50와 거의 비슷한 시기에 발생되는데, TI구간의 시작이 TDC이후에 발생되게되면, 피스톤의 팽창효과와 의하여, 압력상승률을 줄어들었다. 결론적으로, TIP구간은 최적화된 연소상과 최대의 IMEP를 얻기 위한 가장 중요한 요인이었다.

4.6 OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>에 연관된 주요반응의 변화

Fig. 10과 11에서는 OH라디칼과 관련된 반응들을 나타내고 있다. R78과 R110은 메탄올에 의한 OH 반응들이며, R274, R294, R296과 R297은 DME에 의한 OH반응들이다.

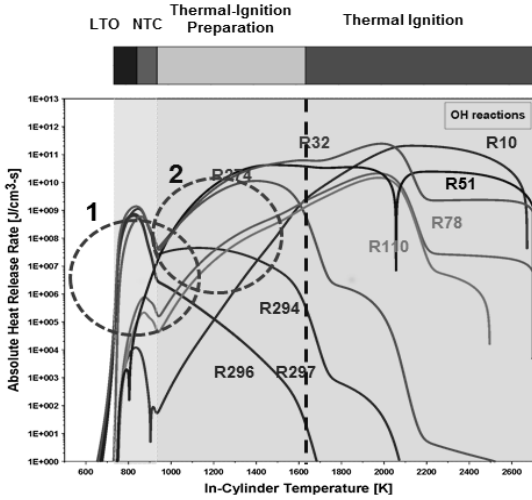


Fig. 10 Main Reactions of Methanol 0%

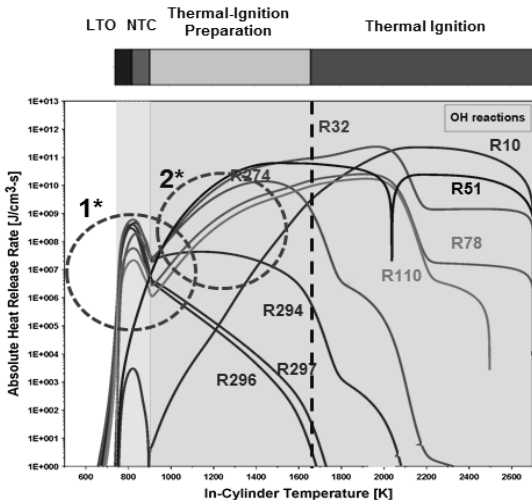


Fig. 11 Main Reactions of Methanol 15%

여기서, R51은 OH와 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 변화에 중요한 지표이며, TIP와 TI를 구분하는데 매우 중요한 반응이다. Fig. 10과 11을 비교해보면, R78과 R110은 LTO, NTC 그리고 TIP구간에서 반응의 변화를 볼 수 있다. 저온 반응 구간에서는 R78과 R110은 DME에 의한 OH반응의 억제반응인 동시에, TIP구간에서 메탄올 0%일 때 보다 더욱 활성화되었다. 하지만, R51반응은 메탄올 0%와 메탄올 15%에서 거의 차이가 없었다. 즉, 메탄올의 첨가에 따라 R78과 R110에 의한 TIP구간

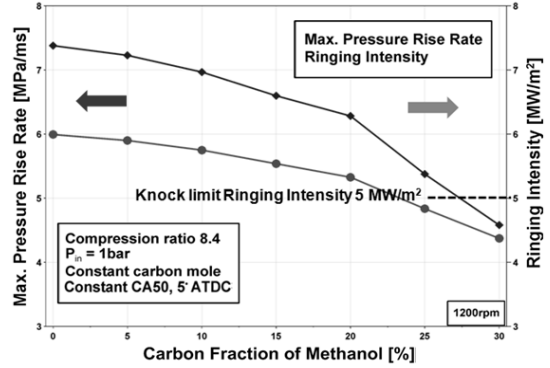


Fig. 12 Pressure Rise Rate and Ringing Intensity on the basis of constant CA50

에서의 OH 반응은 OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 몰수가 같아지는 시점까지 더 많은 시간을 필요로 하여, TIP구간의 길이는 연장되었다.

#### 4.7 연소 한계

Fig. 12에서는 각 연료조건에 대한 연소의 한계를 보여주고 있다. 또한, 동일한 CA50 조건을 적용하여 압력상승률과 RI (Ringing Intensity)를 비교하였다. 약 30%부터 RI 5 MW/m<sup>2</sup>이하가 되게 된다. 이는 아래의 식을 근거로 판단되었다.

$$Ringing\ Intensity \approx \frac{1}{2\gamma} \left( \frac{\beta \frac{dP}{dt}_{max}}{P_{max}} \right)^2 \sqrt{\gamma RT}$$

#### 5. 결론

메탄올은 DME의 HCCI 연소조건에서 연소상을 조절하는데 유용한 연료로써, 본 연구에서는 일정한 탄소 몰 수에서의 메탄올의 분율증가에 따른 연소특성에 대해서 연구하였다.

메탄올 분율의 증가에 따른 연소상의 지각, 그리고 이러한 연소상의 변화는 메탄올 분율과 초기온도에 따라 변화였다. 즉, 메탄올의 효과에 대해 명확히

하기 위해서 아래의 메커니즘에 대해 수치해석적으로 분석하였다.

- 1) 메탄올에 의한 점화지연: 메탄올은 옥탄가가 높은 연료로써, single-stage 연료의 특성을 Fig. 3에 보여주고 있다. 메탄올 분율이 50%이상부터는, 점화지연은 메탄올에 의해 완전히 선형적으로 변하였다.
- 2) 저온반응에서 메탄올에 의한 OH라디칼 소비: 메탄올의 반응에는 OH라디칼과 연관된 2가지의 주요 두 반응이 메탄올 첨가 분율의 증가에 따라서, 두 반응이 더욱 활성화 되었다. 하지만, 메탄올의 5% 와 10%첨가조건에서는 LTO시작시기의 변화 없이, TIP 구간의 시작시기가 지각되었다. 즉, TIP 의 시작시기 조절이 가능하였다.
- 3) TIP구간에서 메탄올에 의한 OH라디칼 반응: TIP 구간은 OH라디칼과 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>의 몰수가 같아지는 지점까지이며, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 몰분율은 R51과 밀접한 관계를 가지지만, 메탄올이 첨가된 경우와 메탄올 0% 경우의 차이는 없었다. 즉, 메탄올에 의한 OH반응으로 TIP구간으로 조절하여, 효율을 최적화 할 수 있도록 연소상을 조절할 수 있었다. 메탄올의 분율이 10%이하에서는 메탄올 0%일 때 보다 더 높은 IMEP를 나타냈다. 특히, 메탄올 10%일 때에 가장 높은 IMEP 0.557MPa를 보였다.
- 4) TDC이후로의 CA50 지각: 메탄올첨가분율 증가에 의한 TDC이후로의 CA50 지각은 압력상승률을 메탄올 0%인 경우보다 감소시켰다.
- 5) PRR 감소와 IMEP의 증가: 메탄올의 분율이 30% 이상이게 되면 RI가 5MW/m<sup>2</sup>로 노킹을 억제할 수 있게 된다. 또한, 메탄올의 분율이 10%이하일 경우에는 IMEP 역시 증가하게 된다. 즉, 10% 이하일 경우, RI는 감소하고, IMEP는 증가하게 된다.

## 후 기

본 연구는 2012년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(20122020100270), 한국가스공사 연구개발원의 ‘친환경 DME 연료 실증보급을 위한 기술개발’과 교육부와 한국연구재단의 지역혁신인력양성사업과 산학협력 선도대학(LINC) 육성사업의 연구결과 임.

## References

1. DME Handbook, Japna DME Forum, 2006.
2. Kazunari Kuwahara and Hiromitsu Ando, "Role of Heat Accumulation by Reaction Loop Initiated by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Decomposition for Thermal Ignition," SAE paper 2007-01-0908, 2007.
3. Hiromitsu Ando, Yasuyuki Sakai and Kazunari Kuwahara, "Universal Rule of Hydrocarbon Oxidation," SAE paper 2009-01-0948, 2009.
4. Adam B. Dempsey, N. Ryan Walker and Rolf Reitz, "Effect of Cetane Improvers on Gasoline, Ethanol, and Methanol Reactivity and the Implications for RCCI Combustion," SAE paper 2013-01-1678, 2013.
5. Troels Dyhr Pedersen, Jesper Schramm and Tadanori Tanai and Toshio Sato, "Controlling the Heat Release in HCCI combustion of DME with Methanol and EGR," SAE paper 2010-01-1489, 2010.
6. Zunqing Zheng, Mingfa Yao, Zheng Chen and NO Zhang, "Experimental Study on HCCI Combustion of Dimethyl Ether (DME)/Methanol Dual Fuel," SAE paper 2004-01-2993, 2004.
7. Nilesh Bhana and Daniele Cipolat, "Opimization of the Performance of a Methanol/Dimethyl Ether Fuelled Compression Ignition Engine," SAE paper 2006-01-1986, 2006.
8. Troels Dyhr Pedersen and Jesper Schramm, "A study on the effects of compression ratio, engine speed and equivalence ratio on HCCI combustion of DME," SAE paper 2007-01-1860, 2007.

9. Pilling, M.J., "Low Temperature Combustion and Autoignition," Elsevir Science B.V., 1997, 24.
10. Fischer, S.L., Dryer, F.L. and Curran, H.J., "The Reaction Kinetics of Dimethyle Ether I: High-Temperature Pyrolysis and Oxidation in Flow Reactors," Int. J. Chem. Kinetics., 32, 713-740, 2000.
11. Troels Dyhr Pedersen, Doctoral Thesis of Technical Univ. of Denmark, "Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion of Dimethyl Ether", 2007.
12. Heywood, J.B., Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill, 1988.
13. Curran, H. J., S. L. Fischer, and F. L. Dryer, "Dimethyl Ether Chemical kinetic mechanism," Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, 2000.
14. J.A. Eng, "Characterization of Pressure Waves in HCCI Combustion," SAE paper 2002-01-2859, 2002.