

균일 예혼합 압축착화 엔진 연소과정의 Two-Zone 모델링

이명훈¹⁾ · 김군홍²⁾ · 김용모³⁾

고등기술연구원¹⁾ · 한양대학교 대학원²⁾ · 한양대학교 기계공학부³⁾

Two-zone Modeling for Combustion Processes of HCCI Engine

Myunghoon Lee¹⁾ · Kunhong Kim²⁾ · Yongmo Kim³⁾

¹⁾Institute for Advanced Engineering, 633-2 Goan-ri, Baegam-myeon, Yongin-si, Gyeonggi 449-863, Korea

^{2,3)}Department of Mechanical Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

(Received 4 October 2004 / Accepted 24 January 2004)

Abstract : The Homogeneous Charge Compression Ignition(HCCI) combustion is currently under intensive investigation because of its potential to increase thermal efficiency while greatly decreasing NOx and P.M. In order to account for the thermal boundary layer effects, the two-zone model has been developed to analyze the combustion characteristics of HCCI engine. The detailed chemistry are represented by the GRI mechanism 3.0 involving 53 species and 325 reactions. The present combustion model has been validated against the experimental results. Computations are also made for the wide-range operating conditions of HCCI engine.

Key words : HCCI(균일 예혼합 압축착화), Thermal boundary layer(열 경계층), Well mixed reactor(완전혼합반응기), Detailed chemical reaction mechanism(상세 화학반응 메커니즘)

Nomenclature

P : cylinder gas pressure [Pa]

T : temperature [K]

C_p : specific heat at constant pressure

Y_i : mass fraction of the i-th species

ρ : density [g/cm^3]

M_k : molecular weight of species k

$\bar{\omega}_k$: chemical production of species k [$kmol/m^3s$]

e : outlet

k : species

i, j, k : index

Subscripts

i : inlet

1. 서론

최근 산업의 발달과 경제 발전에 따른 각종 산업용 물자 및 교통량의 급격한 증가는 자동차의 수요를 더욱 증가시키게 되었고, 이와 같은 자동차의 증가는 배출가스에 의한 환경오염을 증가시키는 요인이 되고 있다. 이러한 자동차에 의한 환경오염 문제에 대응하기 위해 세계 주요 자동차 생산국에서는 배출 가스에 의한 규제를 더욱 강화하고 있다. 따라서 자동차의 배출가스 중의 지구 온난화의 원인이 되고 있는 CO₂를 비롯하여 질소 산화물(NO_x), 입자상 물질(P.M.)등의 유해물질의 저감 기술은 매우 중

*To whom correspondence should be addressed.
ymkim@hanyang.ac.kr, mhlee@iae.re.kr

요한 연구과제가 되고 있다. 균일 예혼합 압축착화(HCCI)엔진은 이러한 유해 배기가스인 NOx와 P.M.을 동시에 저감 할 수 있다는 장점 때문에 최근 활발히 연구되고 있다. HCCI엔진은 연료와 공기와의 충분한 혼합을 통해 균일 혼합기를 형성하여 이를 압축 착화하는 연소과정을 겪는데 열발생의 개념에서 살펴봤을 때 기존 디젤 기관에 비하여 상사점 이전에 급격한 열발생이 상대적으로 적어 고온영역의 범위가 좁아 NOx의 발생이 상대적으로 적어지고, 또한 확산 연소기간이 짧음으로 P.M.을 현저히 저감시킬 수 있다.

그러나 HCCI 엔진의 기본적인 문제점은 미연 탄화수소와 일산화 탄소의 과도한 배출, 높은 실린더 압력, 그리고 엔진의 시동 및 연소제어의 어려움에 있다. HCCI엔진의 연소특성은 화학 반응에 의해 전적으로 영향을 받기 때문에 HCCI엔진의 연소 모델링을 하는데 상세 화학반응 모델을 풀히 사용해야 한다. 직접 수치모사법(Direct Numerical Simulation) 등은 과도한 수치계산시간이 소요되기 때문에 HCCI엔진의 연소특성을 해석하는 데에는 적용하기엔 무리이다.

이러한 이유로 유동장을 단순화시킨 single-zone 모델을 주로 사용하고 있으며, 이 모델은 간단하고 계산 시간이 짧다는 장점 때문에 다양한 연료 및 넓은 운전조건에 대한 parametric 연구를 하는데 유용하게 활용되고 있다. 그러나 single-zone 모델은 실린더내의 화학조성비와 온도가 균일하다는 가정에서 출발했기 때문에 실린더 최대압력을 과대예측하고 미연탄화수소(UHC)와 일산화탄소(CO)의 배출이 과소 예측되는 문제점이 있다. 이러한 single-zone 모델의 문제점을 보완한 것이 실린더 내부의 온도 불균일함을 고려한 Multi-zone 모델이다.

본 연구에서는 실린더 벽면에서의 저온부와 고온영역인 중심부분을 두 부분으로 나눠서 해석하는 Two-zone 모델을 사용하여 HCCI엔진의 연소 특성에 대하여 parametric study를 수행하였다.

2. HCCI 엔진 모델링

2.1 완전 혼합 반응기 이론

엔진에서의 화학반응을 모델링 하는 한 방법은

완전혼합 반응기(Well Mixed Reactor)이다. 완전혼합 반응기 이론은 반응기안의 연료와 공기가 완벽하게 예혼합 되어 있다고 가정하는 것에 기초를 둔다. 즉, 반응기 안에서는 모든 열역학적 상태량(압력, 온도, 화학조성)이 균일하다는 것을 의미한다.

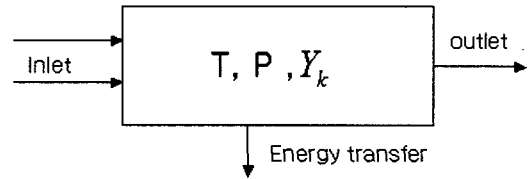


Fig. 1 Well mixed reactor model

다음은 완전 혼합 반응기에 대한 지배 방정식이다.
- 질량 보존식

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_e + \sum_{i=1}^{N_i} \dot{m}_i \quad (1)$$

- 화학종 보존식

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{N_i} \dot{m}_i (Y_{k,i} - Y_k) + \frac{\dot{\omega}_k M_k}{\rho} \quad (2)$$

- 에너지 보존식

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{C_p} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^S \dot{m}_i \left[\sum_{k=1}^N (h_{k,i} - h_k) \right] - \sum_{k=1}^N \frac{\dot{\omega}_k h_k M_k}{C_p m} - \frac{\dot{Q}_{loss}}{C_p m} + \frac{1}{C_p m} \frac{dp}{dt} \quad (3)$$

where, N: the number of species

S: the number of streams

반응기의 부피는 slider-crank formula 식⁴⁾을 이용했다.

$$V = V_c + \frac{\pi B}{4} (l + a - a \cos \theta - (l^2 - a^2 \sin^2 \theta)^{1/2}) \quad (4)$$

where, B : bore (cm)

l : connecting rod length (cm)

a : crank radius (cm)

θ : crank angle (°)

V_c : clearance volume[cm³]이다.

2.2 Single-zone 모델

엔진 실린더 내를 완전 혼합반응기로 가정하는

모델로 실린더 내의 모든 열역학적 상태량이 균일하다는 가정에 바탕을 둔 모델이다. 이러한 가정으로 인해 실린더 최고 압력을 과대 예측하는 경향을 보이고 CO와 UHC 등은 과소 예측하여 실제 엔진과는 차이를 보이지만 자발화 시점은 비교적 잘 예측하기 때문에 single-zone 모델은 다양한 연료 및 넓은 운전조건에 대한 parametric study를 하는데 유용하게 활용된다.

2.3 Two-zone 모델

Two-zone 모델은 single-zone 모델이 안고 있던 연소과정에서의 압력상승의 과대 예측과 HC, CO의 과소 예측하는 경향을 극복하기 위한 모델로 Fig. 2에서처럼 온도 구배에 의한 열 경계층 부분과 중심 부분으로 나눠 고려하게 되는데 두 부분 사이의 \dot{m} 와 열 경계층 두께(δ_t)는 Fiveland 와 Assanis¹⁾이 제시한 식을 이용하였다.

$$\dot{m} = \overline{A} \left[\rho_c \frac{d\delta_t}{dt} + \delta_t \frac{d\rho_c}{dt} \right] \tag{5}$$

$$\frac{d\delta_t}{dt} = \frac{1}{\left(\frac{C_p P}{R} \right)} \left[-\delta_t \frac{C_p}{R} \frac{dp}{dt} + C_p T_c \frac{d}{dt} \int_0^{\delta_t} \rho dy + q_w \right] \tag{6}$$

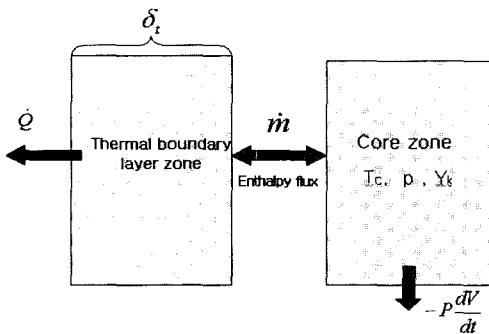


Fig. 2 Two-zone model

2.4 열전달 모델

Fig. 3은 본 연구에서 사용된 열전달 모델에 대한 개념도이다. 대류 열전달 계수는 다음과 같은 Woschni correlation⁴⁾을 사용하였고, 복사 열전달은 Annand와 MA(1971)⁸⁾가 제안한 식을 사용하였다.

$$h_c = 3.26 B^{-0.2} P^{0.8} T^{-0.55} w \tag{7}$$

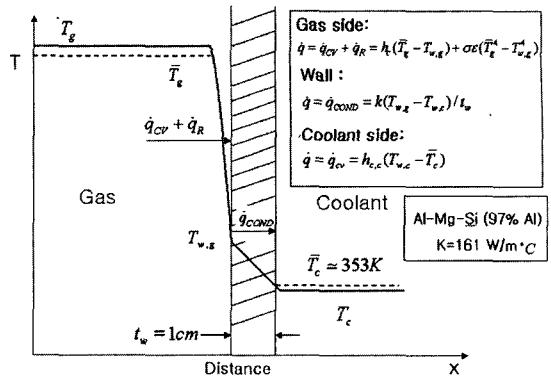


Fig. 3 Temperature distribution and heat flow across the combustion chamber wall

where, $w = C_1 S_P + C_2 \frac{V_d T_x}{P_r V_r} (P - P_m)$ (8)

2.5 The CHEMKIN Chemical Kinetics Package

엔진 simulation 해석에서의 상세 화학반응을 풀기 위하여 Sandia National Laboratories에서 개발된 CHEMKIN-II 패키지를 사용하였다.⁵⁾ CHEMKIN library를 구동시키기 위해 우선, interpreter를 이용해 본 연구에서 사용될 화학반응 메카니즘을 읽어 들여서 data linking file들과 gas-phase subroutine library를 만들어 낸다. 이는 사용자의 Code에 화학반응을 계산하는데 필요한 열역학적 상태량과 production rate, 상태방정식에 대한 정보를 제공하게 된다. HCCI 엔진 실린더의 체적이 변화하는 혼합 반응기 User's Code가 만들어졌고, 위에서 만들어진 data를 CHEMKIN Subroutine들이 읽어들이는 다음 이를 ODE-solver로 보내져 싸이클의 한 time step을 수행한다. 이는 다시 전체적인 엔진 싸이클이 완성 될 때까지 각 time step을 반복한다. 본 연구에서는 stiff한 화학반응을 풀기 위한 Solver로는 DVODE가 사용되었다.

3. 결과 및 고찰

해석 결과의 타당성을 검증하기 위하여 Michael Y. Au⁷⁾의 VW TDI 디젤 엔진을 HCCI모드로 시험한 결과와 비교, 검증하였다. 시험에 사용된 엔진 데이터는 Table 1과 같고, 사용된 연료는 Propane(C_3H_8)이다. 연료에 대한 해석에서 쓰인 상세 화학반응 메

커니즘으로는 GRI 3.0(53화합종과 325 반응단계)⁹⁾를 사용했다.

Table 1 Engine data for VW TDI engine

Engine parameter	Value
Displacement	1.896 liter
Bore	7.95 cm
Stroke	9.55 cm
Connecting rod length	14.4 cm
Compression ratio	19.5:1

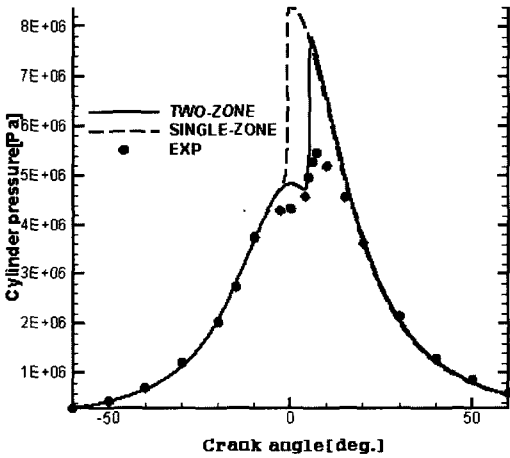


Fig. 4 Comparable pressure trace from engine runs and simulations at equivalence ratio=0.3, $P_i = 3.0$ bar and $T_i = 580$ K

Fig. 4는 해석 결과와 시험결과의 비교를 보여준다. 우선 single-zone 모델의 경우 실린더 내의 압력 상승 최고치가 과대 예측하게 되는데 이는 single-zone 모델 자체의 실린더 내의 온도, 압력 그리고 화학종들이 균일하다는 가정에서 기인한다. 실제 엔진 실린더 내부는 벽면 근처의 저온부로 인한 온도의 불균일함이 존재 하므로 이를 고려 한 것이 Two-zone 모델이다. 벽근처 온도 구배로 인한 열전달과 열경계층을 고려한 결과 엔진 시험의 자발화 시점을 거의 정확히 예측하였고, single-zone의 최고 압력치 보다는 낮은 최고 압력 치를 보였다. 그러나 실린더 최고 압력은 여전히 실험값 보다는 과대 예측을 함을 볼 수 있다. 이는 본 연구의 Two-zone 모델은 난류의 혼합에 의한 열전달 효과를 고려하지

않았고, 실린더 벽 주위의 저온 부 뿐만 아니라 오일 링 주위의 틈새체적, 그리고 중심부내에서도 불균일한 온도를 고려해주지 않은 것에 기인한다. 즉, Aceves et al.¹¹⁾가 수행했던 multi-zone 모델링 이라면 지금의 Two-zone 결과를 계선 시킬 수 있을 거라 생각한다.

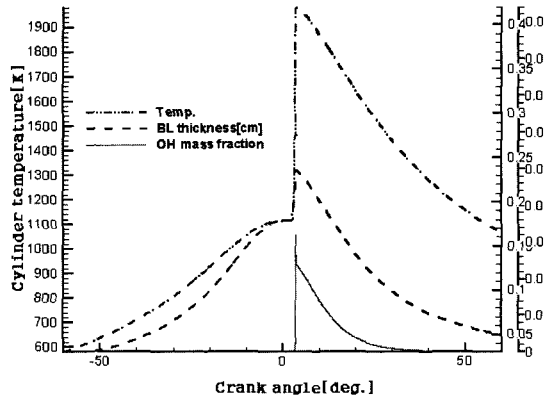


Fig. 5 Boundary layer thickness and auto ignition time at equivalence ratio=0.3, $P_i = 3.0$ bar and $T_i = 580$ K

Fig. 5는 벽 근처의 온도 구배에 의한 열 경계층의 두께의 변화를 나타내고 있다. 여러 다른 조건에서 열 경계층을 측정 한 Lyford-Pike와 Heywood¹¹⁾은 압축 행정기간동안의 대략 열 경계층 두께가 2mm라는 결과와 비교 해봤을 때, 본 연구에서의 약 2.4mm의 해석치는 의미가 있다. 착화시점은 OH라디칼의 질량 분율이 최대인 곳으로 정의하였다. 이 경우에는 ATDC 3.54°에서 OH 라디칼이 최대값을 갖고, 이 지점에서 착화됨을 확인 할 수 있다.

Fig. 6은 엔진의 rpm이 자발화 시점에 미치는 영향을 나타내고 있다. rpm이 증가 할수록 자발화는 지연이 됨을 알 수 있는데 2500rpm이상의 고속의 운전 조건에서는 착화가 되는데 필요한 화학반응 시간이 충분하지 않기 때문이다.

Fig. 7에서는 초기의 흡기 온도가 자발화 시점에 영향을 주는 것을 볼 수 있다. 흡기 온도가 증가하면 화학반응의 증가로 인하여 자발화 시점이 TDC 이전으로 앞 당겨짐을 볼 수 있다. 그러나 500K 이하의 조건에서는 착화를 시키는 데 실패했다. 이처럼 초기의 흡기 온도가 너무 낮게 되면 착화시키기 어

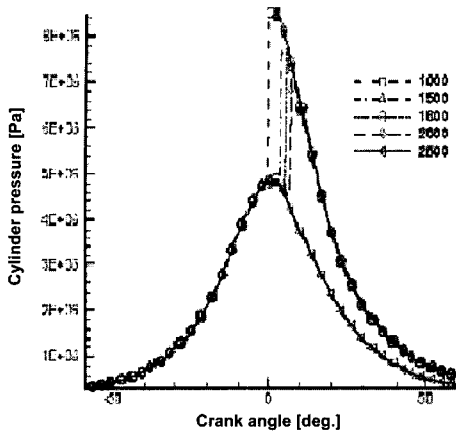


Fig. 6 Effect of RPM on ignition timing and cylinder pressure profile at equivalence ratio=0.3, $P_i=3.0$ bar and $T_i=580$ K

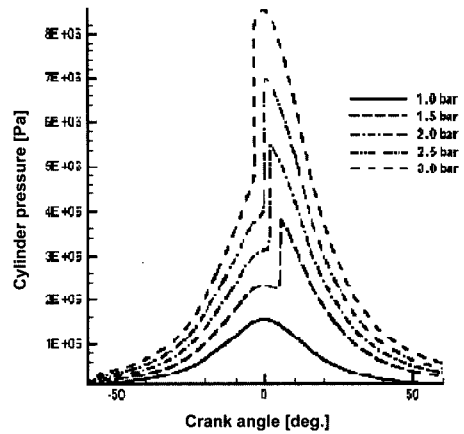


Fig. 8 Effect of volumetric compression ratio on ignition timing and cylinder pressure profile at equivalence ratio=0.3, $P_i=3.0$ bar and $T_i=580$ K

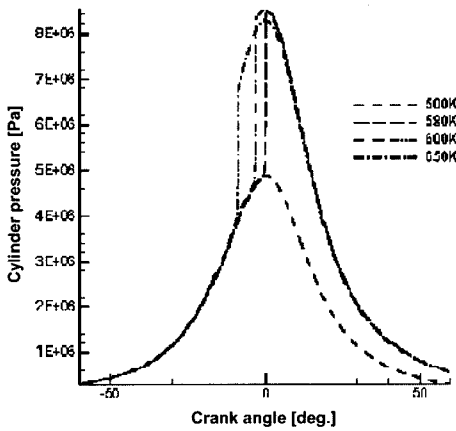


Fig. 7 Effect of initial manifold temperature on ignition timing and cylinder pressure profile at equivalence ratio=0.3, $P_i=3.0$ bar

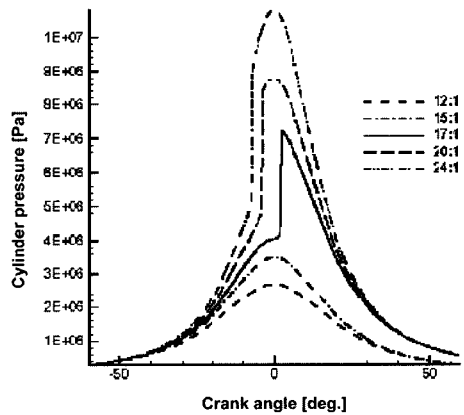


Fig. 9 Effect of initial pressure on ignition timing and cylinder pressure profile at equivalence ratio=0.3 and $T_i=580$ K

럼기 때문에 흡기 온도를 반드시 높여 주입해줘야 운전이 가능하다. 그러나 온도를 높인다는 것은 열 효율과 체적효율을 떨어뜨리기 때문에 무작정 높일 수도 없다. 따라서 이러한 문제점 때문에 HCCI 엔진은 고 압축비를 통해 문제를 해결하고자 한다.

Fig. 8은 압축비가 미치는 영향에 대해 나타내고 있다. 압축비가 증가할수록 실린더 내의 압력이 증가하고 화학반응도 활발해지기 때문에 착화시점이 빨라진다. 그러나 고 압축비는 실린더내의 압력을 극히 증가시킬 뿐 아니라 초기에 압축 행정 시 착화가 일어남으로 인하여 피스톤 일(net piston work)을

감소시킨다. 이러한 점에서 위와 같은 운전조건에서는 17:1이 가장 좋은 압축비라고 판단된다.

Fig. 9에서는 초기 압력이 자발화에 미치는 영향을 볼 수 있는데 온도와 마찬가지로 1.5bar 이하에서는 착화하는데 어려움이 있기 때문에 초기압력을 높여서 착화를 쉽게 해야 한다. 그러나 압력 또한 많이 올리는 것은 효율적 측면에서 좋지 않기 때문에 최적의 초기 압력을 찾는 것이 중요하다.

4. 결론

HCCI 엔진의 연소특성 및 엔진성능 해석을 실린

더 내부의 Two-zone 모델링을 통하여 기존의 시험 결과와 비교하고 또 다양한 운전조건에 따른 영향을 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) Two-zone 모델은 single-zone 모델에 비하여 자발화 시점을 정확히 예측하였고, 연소 최고 압력 또한 낮게 예측하였으나 시험결과에 비교해 볼 때 여전히 높은 결과를 보였다. 이를 개선하기 위해서는 열 경계층에서 온도장의 난류난동이 화학 반응에 미치는 영향을 고려할 수 있는 PaSR 연소 모델링이 요구된다.
- 2) 여러 운전조건에 따라 HCCI엔진의 연소특성을 살펴보았다. HCCI 엔진의 효율을 극대화 시키기 위한 최적의 운전 조건을 찾기 위하여 유전자 알고리즘을 이용한 최적설계가 요구된다.

후 기

본 연구는 환경부 Eco-STAR project (무, 저공해 자동차사업단)의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

References

- 1) S. B. Fiveland and D. N. Assanis, "Development of a Two-zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects," SAE 2001-01-1028, 2001.
- 2) Jostein Kolbu, "Study of a Homogeneous Charge Compression Ignition(HCCI) Combustion Process," Master Thesis in Dep. of Applied Mechanics and Fluid Dynamics, Norwegian University of Science and Technology, 2001.
- 3) Christensen, Magnus, Anders Hultqvist and Bengt Johansson, "Demonstrating the Multi Fuel Capability of a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine with Variable Compression Ratio," SAE 1999-01-3679, 1999.
- 4) J. B. Heywood, Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill Inc., New York, 1988.
- 5) R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics.SAND89-8009, Sandia National Laboratories, Livermore, California, 1989.
- 6) S. B. Fiveland and D. N. Assanis, "A Four-Stroke Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies," SAE 2000-01-0332, 2000.
- 7) M. Y. Au, J. W. Girard, R. Dibble, D. Flowers, S. Aceves, J. Martinez-Frias, R. Smith, C. Seibel and U. Maas, "1.9-Liter Four Cylinder HCCI Engine Operation with Exhaust Gas Recirculation," SAE 01FL-159, 2001.
- 8) D. N. Assanis and J. B. Heywood, "Development and Use of a Computer Simulation of the Turbocompounded Diesel System for Engine Performance and Component Heat Transfer Studies," SAE 860329, 1986.
- 9) G. P. Smith, G. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, T. Bowman, R. Hanson, S. Song, G. C. Gardiner Jr., V. Lissianski, and Z. Qin, GRI-MECH 3.0, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- 10) E. J. Lyford-Pike and J. B. Heywood, "Thermal Boundary Layer Thickness in the Cylinder of a Spark-Ignition Engine," International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.27, No.10, pp.1873-1878, 1984.
- 11) Aceves, M. Salvador, D. L. Flowers, C. K. Westbrokk, J. R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen and B. Johansson, "A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emission," SAE 2000-01-0327, 2000.
- 12) B. H. Song, D. K. Kim, N. H. Cho, "A Cycle Simulation Method for an HCCI Engine using Detailed Chemical Kinetics (in Korean)," Transactions of KSAE, Vol.11, No.6, pp.51-58, 2003.