

# DME 연료의 증발, 점화 및 분무연소특성 해석

유용욱\* · 이정원 · 김용모\*\*†

## Numerical Modeling for Vaporization, Auto-Ignition and Combustion Processes of Dimethyl Ether (DME) Fuel Sprays

Yong-Wook Yu, Jeong-Won Lee, Yongmo Kim

### ABSTRACT

The present study is mainly motivated to investigate the vaporization, auto-ignition and combustion processes in high-pressure engine conditions. In order to realistically simulate the dimethyl ether (DME) spray dynamics and vaporization characteristics in high-pressure and high-temperature environment, the high-pressure vaporization model is utilized. The interaction between chemistry and turbulence is treated by employing the Representative Interaction Flamelet (RIF) model. The detailed chemistry of 336 elementary steps and 78 chemical species is used for the DME/air reaction. Numerical results indicate that the RIF approach, together with the high-pressure vaporization model, successfully predicts the essential feature of ignition and spray combustion processes.

**Key Words** : Dimethyl Ether(DME), Flamelet model, Auto-ignition, High-pressure Vaporization Model, Detailed Chemistry

### 기 호 설 명

f	: fugacity, bar	$P_r$	: reduced pressure, bar
h	: enthalpy, cal/g	T	: temperature, K
L	: latent heat of vaporization, cal/g	$X_i$	: mole fraction of the i-th species
P	: pressure, bar	$Y_i$	: mass fraction of the i-th species
		$\rho$	: mass density, g/cm <sup>3</sup>

### 1. 서 론

DME(dimethyl ether: 화학식  $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ )는 가장 간단한 에테르이다. 또한 분자량도 46g/mole로 작은 편에 속한다. 하지만 분자량이 작은 다른 연료들과는 다르게 DME는 자발화 온도가 낮아서 압축착화 엔진에 적합하다. 무엇보다도 DME의 큰 장점은 C-C 연결이 없고, 산소

원자의 함유량이 크다는 것이다. 이로 인해 DME를 연료로 사용한 연소에서는 soot을 거의 배출하지 않을 뿐만 아니라, NO<sub>x</sub> 발생량도 디젤 연료에 비해 20%나 급감시킬 수 있다. 또한 세탄가가 높고 연료특성도 좋기 때문에 새로운 연료로서 많은 연구가 활발히 이루어지고 있다.[1-3]

그러나 DME는 디젤연료와 비교하면 상대적으로 높은 증기압, Cetane 수, 함산소 성분 그리고 상대적으로 낮은 발열량 및 액체밀도 등으로 인하여 액적의 증발, 분무의 침투길이, 점화 및 난류

\* 현대기아자동차

\*\* 한양대학교 기계공학과

† 연락처: vmkim@hanvang.ac.kr

연소과정에 있어서 디젤유와는 상이한 분무연소 특성을 가질 것으로 예상된다. DME 연료를 실제 엔진(Diesel, HCCI, 가스터빈 연소기등)에 적용할 수 있는 최적연소조건을 도출하기 위해서는 DME 분무의 증발, 자발화 및 연소특성을 체계적으로 파악하는 것이 선결과제이다.

본 연구에서는 고압상태에서 DME 액적의 증발 특성에 영향을 미치는 효과들을 고려한 증발모델과 자발화 및 난류화염장을 제대로 모사할 수 있는 상세화학모델 기반의 Representative Interactive Flamelet 모델을 이용하여, 고온 고압의 정적연소실에 분사된 DME의 증발, 점화 및 난류연소특성을 수치해석하였다.

## 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 기상과 액상의 지배방정식은 질량, 운동량, 열전달률을 나타내는 상호 관련된 생성항으로 결합된다. 본 연구에서 사용한 물리 및 수치 모델은 혼합 분율의 변화에 분무의 증발 영향을 고려한 Flamelet 모델[4], 파동 불안정 액적분열과 TAB 모델을 조합한 액적분열모델[5], 난류에 의한 액적의 dispersion을 고려한 stochastic 액적 추적모델[6], O'Rourke의 액적충돌모델[7], 고압 상태에서 적용할 수 있는 액적증발모델, 그리고 k-ε 난류 모델을 사용하였다. 고압증발모델과 RIF모델에 대해서는 아래에 기술하였다.

### 2.1 고압증발모델

본 연구에서는 고압상태에서 일어날 수 있는 실제 기체의 거동, 온도, 압력에 따른 상태량 및 증발잠열의 변화, 주위기체가 액적으로 용해되는 현상, stefan 유동, 등, 고압상태에서 액적증발특성에 중요한 영향을 미치는 효과들을 정확히 모사하기 위해 고압증발모델을 사용하였다. 액적과 기체장 간의 전단력에 의해 발생하는 액적 내부 유동을 고려하기 위해 막이론 및 유효전도도 모델[8]을 사용하였다.

각 성분에 대한 증기 - 액체 평형조건은 다음과 같이 기술할 수 있다.

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

여기서 첨자 v, l은 각각 증기와 액체상태를 나타내고  $f_i$ 는 i - 성분의 퓨가시티로 다음 관계식

으로부터 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.

순수 물질에 대한 증발 잠열과 혼합기의 증발 엔탈피 간의 차이는 Peng-Robinson 상태방정식을 사용하여 결정한다. 상변화에 필요로 하는 에너지는 다음과 같이 나타난다.

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

$\overline{H}_i$ 는 성분 i의 부분 엔탈피이고, 같은 온도에서의 이상기체 엔탈피  $H_i^0$ 는 다음의 열역학적 관계에 의해서 나타난다.

$$(\overline{H}_i - H_i^0)_T = -R_u T^2 \left( \frac{\partial \ln \phi_i}{\partial T} \right)$$

(4)

$\phi_i$ 는 퓨가시티 계수로서 아래와 같이 정의 된다.

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

액적증발모델에서 열역학적 상태량을 정확하게 계산하는 것이 무엇보다 중요하다. 본 연구에서는 열역학적 상태량을 온도와 압력의 함수로써 계산하였고 적절한 혼합법칙을 이용하여 혼합물의 상태량을 구했다.[9]

### 2.2 난류연소모델

본 연구에서 사용한 RIF 모델에 대한 내용은 참고문헌[10]에 잘 나타나 있으므로 간단히 설명한다. 층류화염면내의 화학종 및 에너지를 지배하는 방정식을 혼합분율(mixture fraction)  $Z$ 에 대해 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{X}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\tilde{\omega}_k}{\rho} \quad (6)$$

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

이때, 공간상에서 혼합분율상으로 좌표변환을 하게 됨에 따라 나타나게 되는 매개 변수인 스칼라 소산율  $\chi$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있으며, 층류 화염면내의 분자단위 확산에 대한 특성시간의 역수로 해석할 수 있다.

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

초기에 RIF 모델은 전체 해석영역에 대한 국소 화염구조가 하나의 층류화염면(single RIF)으로 대표된다고 가정하였으나, Barths[10]등은 주어진 시간에서 공간상으로 불균일하게 존재하는 스칼라 소산율의 분포를 고려할 수 있도록 확장한 multiple RIF 모델인 EPFM(Eulerian Partilce Flamelet Model) 모델을 제안하였다. 이때, 주어진 시간과 공간에서 각 화학종의 평균질량분율은 다음과 같이 나타난다.

$$\begin{aligned} \bar{Y}_k(\vec{x}, t) &= \sum_{i=1}^N \bar{I}_i(\vec{x}, t) \\ &* \int_0^1 Y_k^i(Z, \langle \chi/Z \rangle_i; t) \bar{P}(Z; \vec{x}, t) dZ \end{aligned} \quad (9)$$

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

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

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

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

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

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

여기서,

$$\langle \chi_{st} \rangle_i(\vec{x}, t) = \frac{c_x \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \bar{Z}^{r_2}}{\int f(Z^*) \bar{P}(Z^*) dZ^*} \quad (13)$$

최근에는 증발이 난류 분무 연소에 미치는 영향에 자세한 정보는 참고문헌[10,11]에 자세히 기술되어 있다. 본 연구에서는 78개 화학종과 336단계의 반응식으로 이루어진 상세화학반응식[12]을 이용하였다.

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 DME 단일액적의 증발특성

DME는 대기압의 상온에서 기체상태로 존재하고, 또한 증발이 매우 빠르기 때문에 증발과정을 실험을 통해 측정한다는 것이 매우 어렵고, 그래서 현재까지 DME 액적증발에 대한 실험결과를 얻을 수가 없다. 따라서 Teng et al.의 수치해석 결과[1]와 비교를 통해서 DME의 증발 특성을 알아보려고 한다.

먼저 고압의 영향을 제대로 예측하는지 확인하기 위하여 압력의 영향을 많이 받는 액상과 기상간의 상평형 및 증발엔탈피를 계산하여 보았다. Fig. 1은  $Pr=0.5, 1.0, 1.5$  ( $P_c=54\text{bar}$ )에 대해서 DME와 질소간의 상평형을 온도에 따라 나타내었다. 여기서 왼쪽 부분이 기체상태이고, 오른쪽 부분이 액체상태이다. 온도가 올라감에 따라 기체량이 증가하는 것을 알 수 있으며, 압력이 임계값을 넘지 않는 상태에서는 액체가 모두 기체로 변하는 것을 잘 나타내고 있고,  $Pr=1$ 일 때는 임계온도( $T_c=400.1\text{K}$ )도 제대로 예측하고 있다. 또한 임계압력을 넘어선 상태 ( $Pr=1.5$ )에서는 액

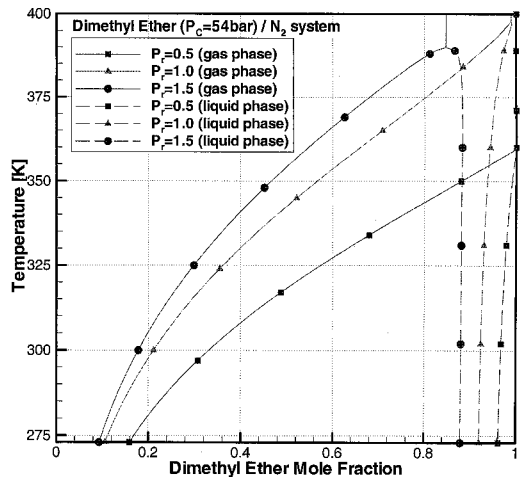


Fig. 1 High pressure phase equilibrium, DME/nitrogen system

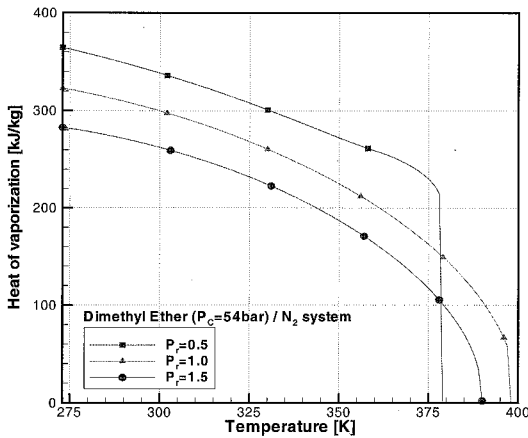


Fig. 2 Effect of pressure on latent heat of vaporization of DME in an equilibrium mixture of DME and nitrogen

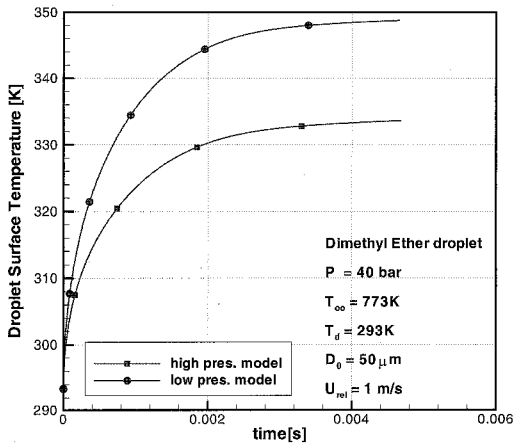


Fig. 3 Comparison of low pressure model and high pressure model for droplet surface temperature history of DME droplet evaporating in nitrogen atmospheres

체 상태와 기체 상태가 붙는 것을 볼 수 있는데 이는 임계상태에 도달하여 액상과 기상의 구분이 없어졌음을 뜻한다.

Fig. 2는 온도변화에 따른 증발엔탈피를  $Pr=0.5, 1.0, 1.5$ 에 대해서 나타내 보았다. 증발엔탈피란 액체가 기화할 때 필요한 에너지를 말하는 것으로 온도 또는 압력이 올라감에 따라 작아지고, 임계상태를 넘어서게 되면 액상과 기상의 구분이 없어지므로 0이 된다. 저압에서는 압력의 영향이 거의 무시될 정도이지만 압력이 올라감에 따라 오차를 많이 내포하게 되므로 퓨가시티를 이용하여 증발엔탈피를 계산하여야 한다. 온도와 압력이 증가함에 따라 증발엔탈피는 점점 줄어다가 임계상태에 도달하거나, 끓는점에 도달하게

되면 증발엔탈피는 0이 된다.

위의 고압에서의 계산의 정확성을 바탕으로 Teng et al.의 수치결과와 비교하여 보았다. 0.05mm 지름을 가진 초기온도 293K의 DME 액적이 40bar, 773K의 질소 기체장에 초기상대속도 1m/s의 속도로 낙하한다고 가정하여 저압모델과 고압모델을 이용하여 계산하였다.

여기서 모델 구분은 상평형 계산시 Clausius-Clapeyron 방정식을 이용했는지 퓨가시티를 이용했는지에 따라 구분한다. 일반적으로 압력이 올라감에 따라 주위 기체가 액적내부로 녹아 들어가는 현상이 발생한다. 고압모델은 이를 예측해낼 수 있는데 반하여 저압모델은 액적내부에는 오직 연료성분만 존재한다고 가정한다. 모든 계산에 대해서 액적내부에는 51개의 격자를 사용하였다.

Fig. 3과 같이 두 모델은 증발시간에는 큰 차이가 없지만 습구온도에서 큰 차이를 나타낸다. 습구온도란 증발이 거의 끝났을 때의 액적의 온도를 말한다. Teng et al.은 0.005, 0.01, 0.015mm 지름을 가진 293K의 DME 액적이 40bar, 773K의 기체장에서 증발한다는 조건에서 355K의 습구 온도를 얻었다. 저압모델은 Teng et al.의 결과와 비슷한 온도로 습구온도를 높게 예측함에 반해서 고압모델은 보다 낮게 예측하고 있다. 이는 상평형을 정확히 예측하지 못함으로 인해 상평형 결과에 매우 민감한 액적내부로의 열전달량을 제대로 계산하지 못한 결과로 사료된다.

Fig. 4에서는 위 결과를 잘 뒷받침 해준다. 저압 모델은 열전달량을 작게 예측하게 되어 증발량이 초기에는 작게 나타난다. 이에 비해서 고압모델은 액적증발이 증발 초기에 주로 일어남을 보여

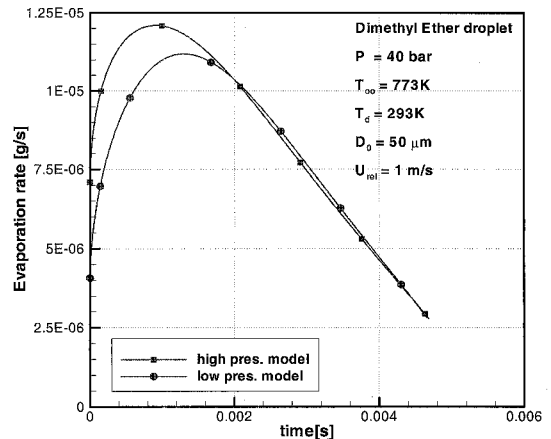


Fig. 4 Comparison of low pressure model and high pressure model for evaporation rate history of DME droplet evaporating in nitrogen atmospheres

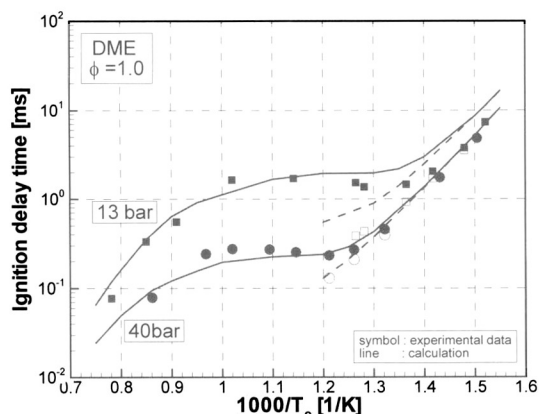


Fig. 5 Predicted and measured ignition delay times of homogeneous DME/air mixtures.

주고 있다. 이러한 차이는 엔진 내에서의 분무의 증발, 혼합과정, 점화 및 연소를 포함한 분무연소 과정에 큰 영향을 미칠 것으로 사료된다.

### 3.2 DME 자발화 특성

Fig. 5는 고압의 shock tube에 DME와 공기가 균일하게 섞여있을 때 자발화가 일어나는 시간을 실험치[13]와 계산치를 비교한 것이다. 여기서, 점화시간은 가장 큰 온도구배가 나타난 때로 정의하였고 이는 CH 화학종의 물분율이 가장 클 때와 일치한다.

당량비 1.0에 대해서 압력조건 13bar, 40bar의 경우 650K~1300K 영역에 대한 예측된 점화시기가 실험치와 잘 일치하고 있음을 알 수 있다. 다만 압력이 13bar일 때 저온화염의 점화시기가 크게 차이를 보이지만 본 연구에서는 디젤엔진 조건에서 DME의 점화와 연소과정을 해석하기 때문에 본 연구에서 사용하는 DME 상세화학반응모델은 충분한 정확도를 유지하고 있다고 판단된다.

### 3.3 DME 분무의 연소 특성

DME 디젤엔진의 분무연소과정을 해석하기 전에 본 연구에서 사용한 수치 및 물리모델의 예측능력을 검증하기 위해 spray의 분무관통거리를 예측하여 Wakai[3]의 결과와 비교해보았다. 연소실내 압력은 1.5MPa, 온도는 293K이다. Fig. 6에서 보는 바와 같이 본 연구에 사용된 수치 및 물리모델은 분무관통거리를 매우 잘 예측하고 있다. 이러한 분무관련 수치 및 물리모델의 정확성을 바탕으로 정적 연소실 조건에서 DME 분무의 점화 및 연소과정을 수치적으로 해석하였다.

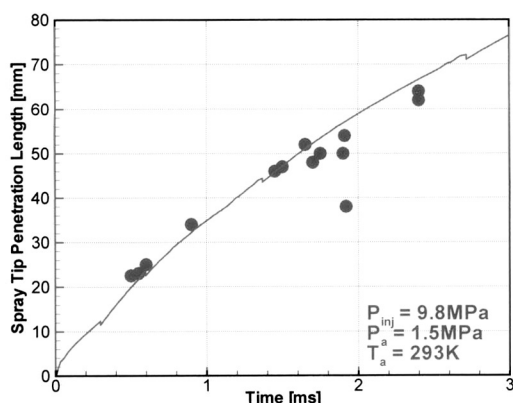


Fig. 6 Temporal variation of spray tip penetration of DME (symbol : experiment, line : calculation)

Fig. 7은 압력 3.1MPa, 주위 온도 823K의 정적연소실에 DME를 분사하였을 때 시간에 따른 자발화 과정시의 분무화염장을 나타내었다. 그림에서 보는 바와 같이 화학적으로 자발화가 일어날 수 있는 조건이 충족되었다 할지라도 스칼라 소산율이 크면, 즉 유동이 크다면 자발화가 일어나지 않는 것을 알 수 있다. 자발화가 일어난 시간은 열발생량이 최대값에 도달했을 때로 정의하였을 때 2.081ms로 예측되었다.

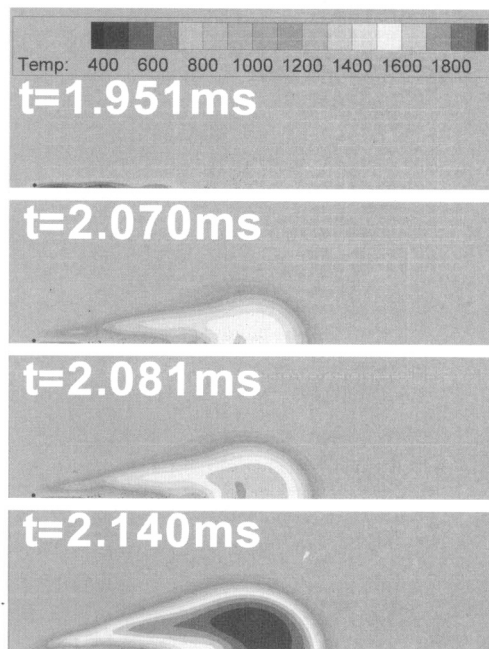


Fig. 7 The instantaneous distribution patterns of temperature and droplets near auto-ignition in the transient spray field.

Fig. 8은 압력 3.1MPa, 4.1MPa이고 주위 온도가 773K, 823K, 873K일 때의 점화지연시간을 나타내었다. 점화지연시간은 앞에서 정의한 바와 같다. 정성적으로는 결과가 잘 나타나나 Wakai et al. 결과와 비교시 모든 경우에 있어서 약 1ms 정도 일찍 점화된 것으로 나타난다. 이는 injection pressure를 포함한 실험조건이 불명확성과 부분적으로는 점화지연시간의 정의의 차이에 의한 것으로 사료되며 추후연구에서 이러한 문제점을 정확히 규명할 예정이다.

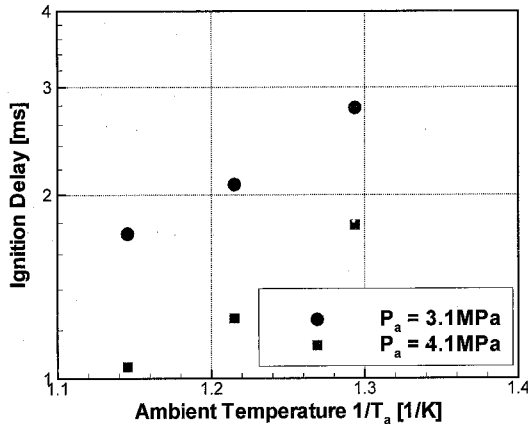


Fig. 8 Ignition delay under various ambient pressure

#### 4. 결론

본 연구에서 수행한 DME의 단일 액적의 상평형 및 고압 증발 해석, 자발화 특성 및 분무연소 해석으로부터 다음과 같은 결론을 내릴 수 있다.

- 1) 본 연구에서 개발한 고압증발모델과 상세화학모델 기반의 Representative Interactive Flamelet 모델은 고온 고압의 정적연소실에 분사된 DME의 증발, 점화 및 난류연소특성을 대체로 잘 예측하였다.
- 2) 저압증발 모델은 습구온도를 높게 예측함에 반해서 고압증발 모델은 보다 낮게 예측하고 있다. 또한 저압모델은 열전달량을 작게 예측하게 되어 증발량이 초기에는 작게 나타나는 데 비해 고압모델은 액적증발이 증발 초기에 주로 일어남을 보여주고 있다.
- 3) 연소가 일어나지 않는 조건에서 DME spray의 분무관통거리에 대한 계산결과는 Wakai 등의 실험치를 잘 예측하였다.
- 4) 본 연구에서 사용한 비정상 층류화염편 모델은 고압, 고온의 분위기하에 분사된 DME 분무의 자연발화 및 화염전파에 관련한 본질적인 특

징들을 잘 나타내었으나 실험치에 비해 점화시기를 짧게 예측하였다.

#### 후 기

본 연구는 환경부 Eco-STAR project (무·저공해 자동차사업단)의 지원으로 수행되었으며, 이에 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] HKK Corp., Environmental Business - DME Project, 2000 (available via <http://www.nkk.co.jp/en/environment>).
- [3] Wakai, K., Nishida, K., Yoshizaki, T., and Hiroyasu, H., "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, pp.537-542, 1998
- [4] Peters, N., "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 10, pp.319-339, 1984
- [5] Beatrice, C., Belardini, P., Bertoli, C., Cameretti, M. C., and Cirillo, N., "Fuel Jet Models for Multidimensional Diesel Combustion Calculation: An Update", SAE paper 950086, 1995.
- [6] Y. M. Kim, and H. M. Shang, and C. P. Chen, "Studies on Droplet-Turbulence Interaction," KSME J., Vol. 8, No. 4, pp. 364~374, 1994
- [7] P. J. O'Rourke, "Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays," Los Alamos National Laboratory report LA-9069-T, 1981
- [8] B. Abramzon, W. A. Sirignano, "Approximate Theory of a Single Droplet Vaporization in a Convective Field: Effects of Variable Properties, Stefan Flow and Transient Liquid Heating", Proceedings of Second ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference, Vol.1, pp.11-18, 1987.
- [9] R.C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, The Properties of Gases & Liquids, Forth Edition, McGraw - Hill, 1987.

- [10] Y. Yu, S.K. Kim and Y.M. Kim, "Numerical Modeling for Auto-ignition and Combustion Processes of Fuel Sprays in High-Pressure Environment", *Combustion Science and Technology*, Vol.168, pp.85-112, 2001
- [11] F.X. Demoulin and R. Borghi, "Presumed pdf modeling of turbulent spray combustion", *Combust. Sci. and Tech.*, 2000
- [12] LLNL site.([http://www-cmls.llnl.gov/?url=science\\_and\\_technology-chemistry-combustion-dme](http://www-cmls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-dme))
- [13] Pfahl, U., Fieweger, K. and Adomeit, G., "Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions", *Twenty-Sixth Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.781-789. 1996