

Multi Zone Modeling을 이용한 온도 성층화의 효과를 갖는 예혼합압축자기착화엔진의 압력상승률 저감에 대한 모사

권 오 석¹⁾ · 임 옥 택^{*2)}

울산대학교 기계자동차공학부 대학원¹⁾ · 울산대학교 기계자동차공학부²⁾

Effect of Thermal Stratification for Reducing Pressure Rise Rate in HCCI Combustion Based on Multi-zone Modeling

O Seok Kwon¹⁾ · Ock Taeck 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 28 July 2008 / Accepted 20 March 2009)

Abstract : The HCCI engine is a next generation engine, with high efficiency and low emissions. The engine may be an alternative to SI and DI engines; however, HCCI's operating range is limited by an excessive rate of pressure rise during combustion and the resulting engine knock in high-load. The purpose of this study was to gain a understanding of the effect of only initial temperature and thermal stratification for reducing the pressure-rise rate in HCCI combustion. And we confirmed characteristics of combustion, knocking and emissions. The engine was fueled with Di-Methyl Ether. The computations were conducted using both a single-zone model and a multi-zone model by CHEMKIN and modified SENKIN.

Key words : HCCI(예혼합압축자기착화), Pressure-rise rate(압력상승률), Knocking(노킹), IMEP(평균유효압력), Ringing Intensity(노킹강도), Thermal stratification(온도 성층화), DME(디메틸에테르), Multi-zone model(온도 성층화모델), Single-zone mode(온도균일모델)

Nomenclature

HCCI(homogeneous charge compression ignition):

예혼합압축자기착화엔진

PRR(pressure rise rate): 압력상승률

LTR(low temperature reaction): 저온산화반응

HTR(high temperature reaction): 고온산화반응

TW(thermal width): 온도 성층화 폭

IMEP(indicate mean effective pressure):

도시평균유효압력

RI(ringing Intensity): 노킹강도

CA10: 총 열발생량의 10%가 되는 지점

CA50: 총 열발생량의 50%가 되는 지점

CA90: 총 열발생량의 90%가 되는 지점

1. 서론

최근 자동차 엔진 연소 기술은 석유고갈로 인한 자원문제와 배기가스로 인한 환경문제 때문에 고효율과 저배출성이 중요시되고 있다. 예혼합압축자기착화(Homogeneous Charge Compression Ignition, 이하 HCCI)엔진은 두 목적에 도달할 수 있는 새로운 엔진 연소 방식으로써, HCCI 엔진은 높은 압축비로 인해 CI엔진과 동등한 열효율을 갖고, 균질하고 희

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

박한 예혼합기의 연소로 인해 기존의 엔진보다 PM과 NOx의 배출이 적다.

하지만 여러 장점에도 불구하고, HCCI 엔진은 아직까지 실용화를 하기 위해서 해결되어야 할 문제점들이 많이 있다. 특히, HCCI 엔진은 고 부하 영역에서 가파른 압력 상승으로 인하여 발생하는 knocking을 제어해야만 한다.

이 문제를 해결하기 위하여 농도 성층화와 온도 성층화 그리고 연소후각이 제안되고 있다.¹⁻⁴⁾ 특히, 다양한 분사 방법과 가변밸브시기의 변화를 통해서 고온의 내부 잔류가스의 양을 조절한다면 초기 온도의 변화 및 연소실 내부 온도의 성층화를 유도할 수 있다. 따라서 고온 영역에서 착화가 먼저 발생하여 저온 영역으로 착화가 이어지는 시간적, 공간적 착화 지연을 통하여 최대압력상승률을 저감할 수 있을 것으로 판단이 된다.

본 논문에서는 온도 성층화의 폭과 초기평균온도가 최대 압력 상승률, IMEP, 배기가스 배출에 어떤 영향을 미치는지 알아보고자 한다.

수치계산을 하는 동안, 저온산화반응과 고온산화반응을 가지고 있는 DME 연료를 사용하였다. 다른 연료와 비교해서 DME 연료는 저온산화반응이 일어나는 동안, 많은 열이 발생하기 때문에 고온산화반응이 일어나기 전에 온도 성층화를 효과적으로 만들 수 있다. DME 연료의 특성을 n-Butane과 iso-Octane과 비교하여 Table 1에 기술하였다.

수치계산은 CHEMKIN2와 변형된 SENKIN을 이용하여 엔진시험을 모사하였고,^{5,6)} 화학반응모델은 Curran의 DME모델(Species: 78, Reactions: 336)을 사용하였다.⁷⁾

Table 1 Fuel properties

Name	DME	n-Butane	Iso-Octane
Molecular formula	CH ₃ OCH ₃	C ₄ H ₁₀	C ₈ H ₁₈
Low heat value	14,143 kcal/m ³	26,504 kcal/m ³	47,832 kcal/m ³
Cetane number	55-60	< 10	< 10
Low temperature reaction(LTR)	10-30%	0-5%	0-5%
High temperature reaction(HTR)	70-90%	95-100%	95-100%

2. 시뮬레이션

본 연구에서는 Sandia 실험실에서 개발된 CHEKIN2와 변형된 SENKIN 프로그램을 이용하여 온도 균일 조건(single zone model)부터 온도 성층화 조건(multi zone model)까지 수치계산을 하였다. 계산에 사용된 게이오 대학의 Yammur 단기통 엔진의 제원은 Table 2에 표시되어 있다.⁸⁾ 수치계산은 흡기 밸브가 닫힌 직후부터 배기 밸브가 열리기 직전까지 계산되었다. 단 한 번의 압축 행정과 팽창 행정 과정에서 가스의 열역학적 특성을 계산하였다. 모든 가스는 이상기체(1)이고, 열전달과 질량전달은 고려하지 않았다. 에너지 보존의 법칙(2)과 질량 보존의 법칙(3)을 사용하였다. 또한 각 영역의 가스 압력, 온도 및 화학조성은 완전하게 균일하다고 가정하였다. 실린더 내의 가스평균온도는 총 에너지 보존식(4)를 이용하여 계산하였다.

$$Pv = nRT \quad (1)$$

$$C_v \frac{dT}{dt} + P \frac{dv}{dt} + q_{REAC} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (3)$$

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

N : Number of zone

n_i : Number of moles

$C_{p,i}$: Specific heat at constant pressure of ith zone

Table 2 Engine specification

Displacement	1133 cc
Bore	112 mm
Stroke	115 mm
Connecting rod length	205 mm
Compression ratio	21.6
Number of valves	2
IVC	48 deg ABDC
EVO	312 deg ABDC

실제 엔진의 경우, 실린더 내부의 유동 및 벽면으로 열전달 등과 같은 요인들이 있다. 이로 인해 초기 온도 및 온도 성층화 폭이 가지는 효과를 제대로 고려할 수 없다. 따라서 수치계산을 하는 동안, 순수하게 초기 온도와 온도 성층화 폭이 엔진 연소에 미치는 영향을 알아보기 위해서 열전달, 열손실, 블로우 오프와 잔류 가스는 고려하지 않았다.

온도 성층화를 위한 Multi-zone 모델의 각 영역은 온도 균일 조건을 위한 Single-zone 모델을 기초로 하였다. Fig. 1은 Multi-zone 모델의 계산 순서를 보여주고 있다. 각 영역의 초기 압력, 온도 그리고 체적이 입력된다. 그리고 흡기 밸브가 닫힌 시점부터 피스톤의 압축에 의해서 각 영역의 압력은 일정하게 증가하게 되고, 각 영역의 체적은 변하게 된다. 각 영역의 체적 변화량은 압력으로 다시 환산되는데, 환산된 압력들의 평균값을 다음 계산의 초기 압력 값으로 대입하여 다시 계산을 한다.

Fig. 2는 온도 성층화 폭(TW=60 K)의 정의를 보여준다. 멀티 존 모델 경우, 실린더 내부를 동일한 체적을 가진 5개 영역으로 나눴다. 그리고 피스톤의 압축 시, 실린더 내부의 온도를 서로 불균일하게 만들기 위해서 각 영역의 초기 온도를 다르게 설정하였다. 온도가 가장 낮은 영역과 가장 높은 영역의 온도 차이를 온도 성층화 폭으로 정의하였다. 온도 성층화 폭이 60 K인 경우, 온도가 가장 낮은 영역은 323 K이고, 가장 높은 영역은 383K이다. 실린더 내부의 평균온도는 353 K이다.

Fig. 3에서 저온산화반응(LTR)과 고온산화반응(HTR)의 시작 시기 및 종료 시기를 정의하였다. 온도 균일 조건에서는 저온산화반응과 고온산화반응의 시작 시기 및 종료 시기를 각각 열 발생률(dQ/dt)의 최소값, 0.1 kJ/ms으로 기준을 정하였다. 하지만 온도 성층화 조건에서는 저온산화반응과 고온산화반응 사이에서 경계가 불분명하다. 따라서 온도 성층화 조건의 경우, 연소기간은 전체 열 발생률의 적분을 100%로 하여 10%, 50%, 90%의 열 발생 시기를 각각 10%, 50%, 90% 열 발생 시기(CA10, CA50, CA90)로 정의하였다.

기존의 HCCI 연소에서 노킹의 발생 없이 작동 가능한 영역을 규정하기 위해서, 사용된 기본적인 기준은 최대 압력 상승률의 한계를 설정하는 것이다.

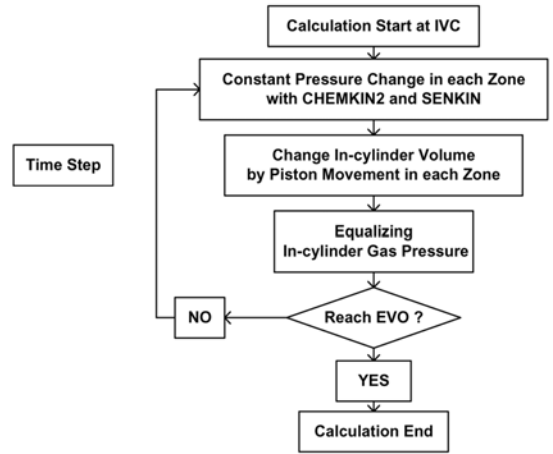


Fig. 1 Algorithm flow diagram for multi-zone model

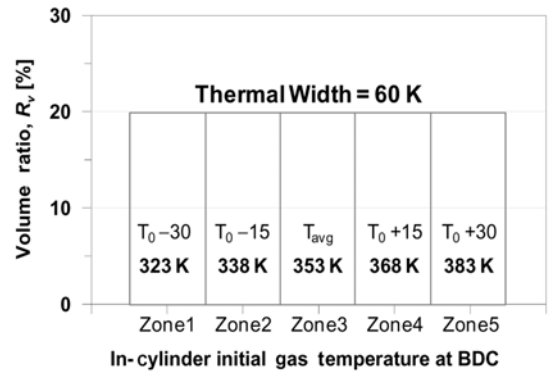


Fig. 2 Definition of a thermal width

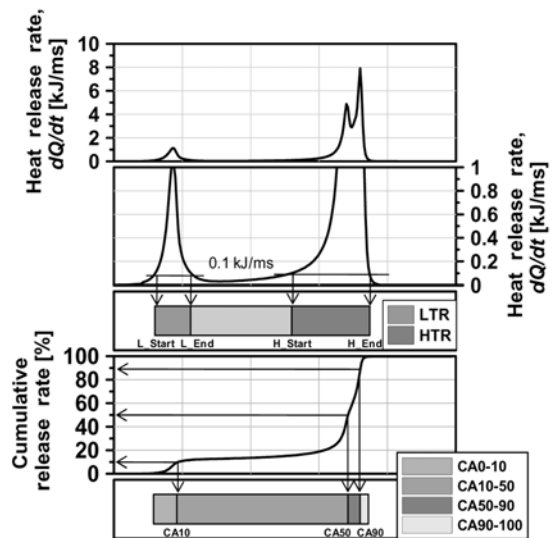


Fig. 3 Definition of combustion duration

하지만, 다른 형식의 엔진, 실린더내부 그리고 연소실의 형태가 다른 조건에서는 최대 압력 상승률을 서로 비교하기가 상당히 어렵다.⁹⁾ 예를 들면, Christensen의 논문에서는 자연흡기식과 슈퍼차저를 사용한 조건에서 HCCI 엔진을 실험하였다. 그 결과, 슈퍼차저를 사용한 경우, 자연흡기식 엔진에 비하여 최대 압력 상승률이 더 컸지만 노킹의 발생이 없이 운전이 가능한 것으로 확인되었다.¹⁰⁾ 따라서, 본 연구에서는 노킹의 한계를 설정하기 위하여 Eng가 제안한 Ringing Intensity(이하 RI)를 이용하였고, HCCI 연소에서 노킹이 발생하지 않는 운전 가능한 영역은 RI의 값이 5 MW/m² 이하로 설정하였다.¹⁾

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

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. 소반응 수치계산 결과

3.1 온도 균일 조건에서 초기 온도의 변화에 따른 HCCI 연소 특성

Fig. 4는 온도 균일 조건에서 초기 온도 293, 353, 413, 473 K일 때 압력, 온도, 열 발생률 그리고 연소 시간을 보여준다.

초기 온도가 293 K일 때, 최대 압력상승률은 34 MPa/ms로 나타났다. 하지만 초기 온도가 473 K까지 증가하면, 최대 압력상승률은 19 MPa/ms까지 감소하였다. 초기 온도가 증가할수록 최대 압력 상승률은 감소하는 것을 알 수 있다.

최고 온도는 1913 에서 2472 K까지 약 560 K 증가하였다. 초기 온도의 변화와는 무관하게 저온산화반응과 고온산화반응은 각각 775 ± 10, 1150 ± 50 K의 일정한 온도에서 발생하였다.

초기 온도가 증가하면서 고온산화반응에서의 열 발생률은 증가하지만 저온산화반응에서의 열 발생률은 감소하였다.

연소기간 해석에서 초기 온도가 293에서 473 K으

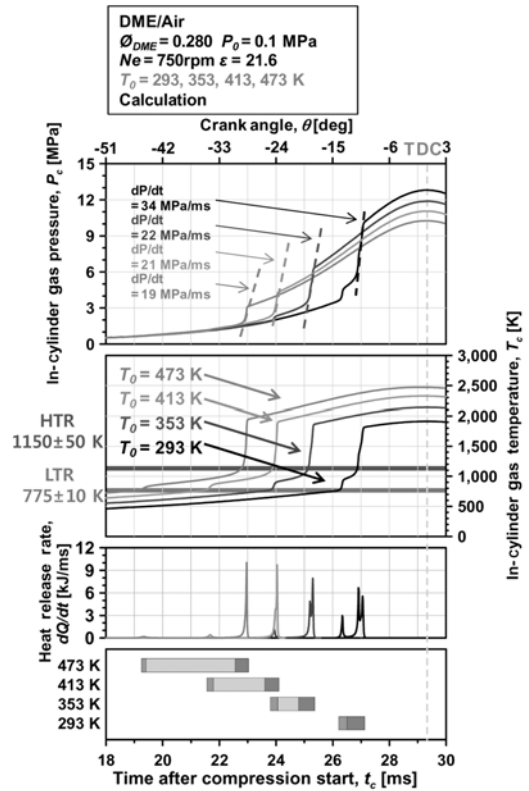


Fig. 4 History of pressure, temperature, heat release rate and combustion duration under single zone calculation results

로 증가할 때 저온산화반응은 6.96 ms, 고온산화반응은 3.95 ms 진각되었다. 전체 연소 기간은 초기 온도가 293 K 일 때는 약 0.92 ms이고, 474 K일 때는 약 3.78 ms으로 약 2.86 ms가 증가되었다. 초기 온도가 증가함에 따라 전체 연소 기간은 증가하였다.

만약 실린더 내부에 온도가 불균질하게 존재한다면(각 영역의 초기 온도가 다르다면), 연소는 고온영역에서 저온영역으로 순차적으로 발생하고 따라서 순간적으로 발생하는 최대 압력 상승률을 감소시킬 수 있을 것으로 기대된다.

Fig. 5, 6은 초기 온도 293, 473 K인 경우의 압력, 열발생률, 온도 그리고 H₂O₂, HCHO 등과 같은 중간생물의 몰 분율을 보여주고 있다.

열 발생 시, DME (CH₃OCH₃)는 감소하기 시작하고, CO, CO₂, HCHO 그리고 H₂O₂는 갑작스럽게 증가한다. 고온 산화 반응에 큰 영향을 미치는 H₂O₂와

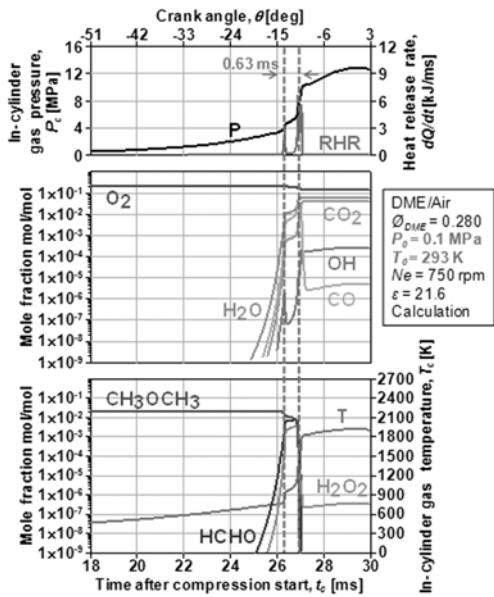


Fig. 5 Radical history at initial temperature of 293K under homogeneous temperature condition

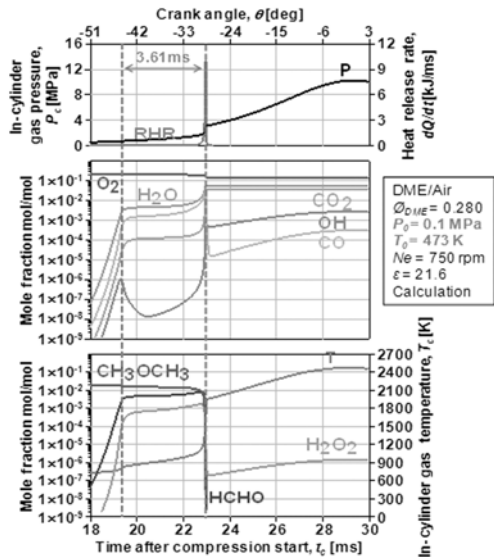


Fig. 6 Radical history at initial temperature of 473K under homogeneous temperature condition

HCHO의 몰 분율은 저온산화반응과 고온산화반응 사이에서 최고 몰 분율을 유지하다가 고온산화반응의 시작 이후 급격히 감소한다. OH의 몰 분율의 경향은 열 발생률과 비슷하다. 고온산화반응은 저온산화반응에서 생성된 H₂O₂가 OH로 분해되는

반응에 의해서 발생한다.⁸⁾

초기 온도가 293 K의 경우, H₂O₂와 HCHO의 몰 분율은 약 0.63 ms 동안 최고치를 유지하였다. 그리고 초기 온도가 473 K의 경우에는 약 3.61 ms 유지하였다. 초기 온도가 293 K에서 473 K으로 증가할 때, 중간 생성물의 존재기간은 약 2.98 ms 증가하였고 H₂O₂와 HCHO는 천천히 소비되는 것을 확인할 수 있었다. 초기 온도가 증가 할수록 중간 생성물들의 존재 기간이 길어져서 급격한 반응이 발생되지 않았다. 그 결과, 최대 압력 상승률을 감소시키는 것으로 생각된다.

3.2 온도 성층화 조건에서 온도 성층화 폭의 변화에 따른 HCCI 연소

Fig. 7은 온도 성층화 당량비 0.280, 초기 압력은 0.1 MPa, 초기 평균 온도는 353 K, 온도 성층화 폭 (TW)이 0, 20, 40, 60 그리고 80 K인 경우의 압력, 온도, 열 발생률 그리고 연소기간을 보이고 있다.

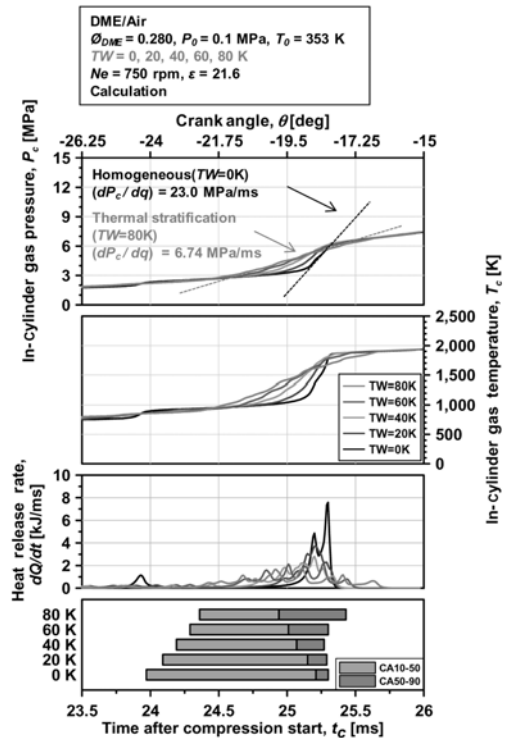


Fig. 7 History of pressure, temperature, heat release rate and combustion duration at average initial temperature 353K with thermal stratification

온도가 균일한 경우(TW=0 K)의 최대압력상승률은 23.0 MPa/ms 나타났지만, 온도 성층화 폭이 80 K 일 때는 6.74 MPa/ms로 나타났다. 온도 성층화 효과 가 최대압력상승률을 낮추는 것을 알 수 있다.

열발생률 그래프를 보면, 온도 성층화 폭이 클수록 CA10-50 기간이 짧아지고 CA50-90 기간은 길어지며 열발생률이 작아지는 것을 확인 할 수 있다.

3.3 최대 압력 상승률 & 노킹 분석

Fig. 8은 초기평균온도와 온도 성층화 폭에 따른 최대압력상승률과 Ringing Intensity를 보여주고 있다.

당량비는 0.280, 초기압력은 0.1 MPa, 초기평균온도는 273, 293, 323, 353, 413 그리고 473 K, 온도 성층화 폭은 0, 20, 40, 60 그리고 80 K이다.

온도 성층화 폭이 0 K인 경우, 초기평균온도가 273에서 473 K까지 증가할 때, 최대압력상승률은 40.9 MPa/ms에서 19.2 MPa/ms까지 감소하였다. 그리고 초기평균온도 273 K에서 온도 성층화 폭이 0 K 부터 80 K까지 증가할 때 최대압력상승률은 40.9

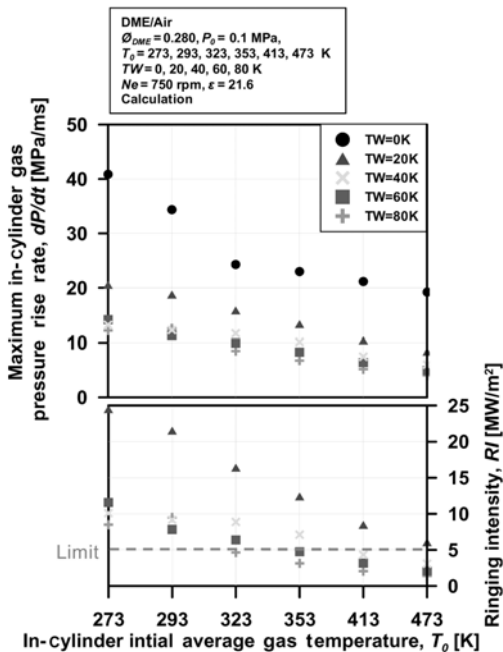


Fig. 8 Maximum pressure raise rate and Ringing Intensity at average initial temperature 273, 293, 323, 353, 413 and 473 K with thermal stratification under multi zone calculation results

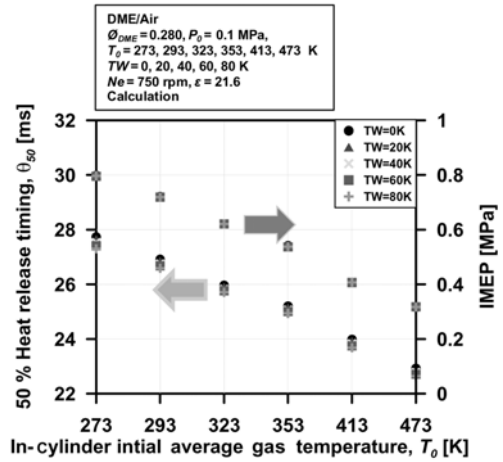


Fig. 9 CA50 and IMEP at average initial temperature 273, 293, 323, 353, 413 and 473K with thermal stratification under multi zone calculation results

MPa/ms에서 12.2 MPa/ms까지 감소하였다.

초기평균온도가 증가 할수록, 온도 성층화 폭이 클수록 최대압력상승률이 많이 감소하였다. 그러나 초기평균온도가 323 K, 온도 성층화 폭이 60 K 이상이 되면, 최대압력상승률의 저감효과는 점점 둔화 되는 것을 알 수 있었다.

Ringing Intensity의 경우도 최대압력상승률의 감소로 인하여 비슷한 경향을 보였다. 온도가 균일한 경우(TW=0 K) 및 온도 성층화 폭이 20 K일 때는 모든 초기평균온도 조건에서 노킹이 발생하였고, 초기평균온도가 353 K 이상, 온도 성층화 폭이 60 K 이상부터 노킹이 발생하지 않았다.

Fig. 9는 초기평균온도가 273, 293, 323, 353 그리고 413 K이고, 온도 성층화 폭이 0, 20, 40, 60 그리고 80 K인 경우의 CA50과 IMEP를 보여주고 있다. 초기평균온도가 증가 할수록, CA50의 발생 시기는 진각되고, IMEP는 감소하였다. 그러나 동일한 초기평균온도조건에서는 온도 성층화 폭의 크기는 CA50의 발생 시기 및 IMEP에는 영향을 크게 미치지 않는 것을 확인하였다.

3.4 온도 균일 조건과 온도 성층화 조건에서 배출가스특성의 비교

Fig. 10은 온도 균일 조건(당량비 0.280, 초기압력 0.1MPa, 초기 온도 353 K, 온도 성층화 폭 0 K)과 온

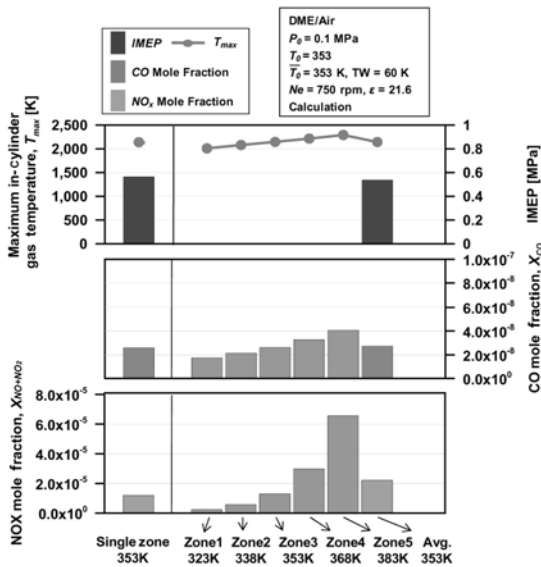


Fig. 10 IMEP, maximum gas temperature and CO and NOx mole fraction under homogeneous temperature and thermal stratification

도 성층화조건(당량비 0.280, 초기압력 0.1MPa, 초기평균온도 353 K, 온도 성층화 폭 60K)에서의 IMEP, 최대온도, CO와 NOx의 몰 분율을 보여준다. CO와 NOx의 몰 분율은 배기밸브가 열리는 시점에서의 계산된 값을 취하였다.

온도 균일 조건에서의 IMEP는 0.565 MPa이고 온도 성층화조건에서의 IMEP는 0.537 MPa이었다. 온도 성층화의 폭에 상관없이 IMEP는 비슷하게 나타났다.

온도 성층화조건에서 각 존의 초기평균온도가 증가할수록, 최고 온도가 증가하고 CO와 NOx의 몰 분율 또한 증가하였다.

온도 균일 조건과 온도 성층화 조건에서의 CO의 몰 분율은 비슷하게 나타났다. 하지만 NOx의 몰 분율은 온도 균일 조건보다 온도 성층화조건에서 많이 발생하였다. NOx는 연소온도가 2200 K보다 높을 때 많이 발생하는데, 4 번째와 5 번째의 영역에서의 연소온도가 2200 K보다 높기 때문에, NOx의 몰 분율이 높게 나타났을 것으로 판단이 된다.¹¹⁾

4. 결론

본 연구에서는 온도 성층화 효과가 HCCI 엔진에

서 최대압력상승률의 저감에 관한 효과 및 배출물의 특성을 분석하였다. 이를 통하여 아래와 같은 결론을 얻을 수 있었다.

- 온도 균일 조건

- 1) 초기 온도가 높을수록, 저온산화반응 후에 H₂O₂와 HCHO와 같은 중간 생성물들의 존재 기간이 길어져서 최대압력상승률은 저감되었다.

- 온도 성층화조건

- 2) 초기평균온도가 높을수록, 온도 성층화 폭이 클수록, 최대압력상승률은 크게 감소하였다.
- 3) 초기 평균온도가 높으면, CA50 발생 시기는 진각되고, IMEP는 감소하였다. 그러나 온도 성층화 폭은 CA50 발생시기와 IMEP에 영향을 크게 미치지 않는 것으로 확인되었다.
- 4) 온도 성층화조건은 온도 균일 조건에 비해, 최대 압력상승률을 저감시키면서 비슷한 IMEP를 얻었다. CO의 몰 분율은 비슷하지만, NOx의 몰 분율은 높은 연소온도로 인하여 온도 균일 조건보다 조금 많이 발생하였다.

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) O. T. Lim, "Research about Thermal Stratification Effect on HCCI Combustion Fueled with Primary Reference Fuel," Transactions of KSAE, Vol.16, No.5, pp.157-163, 2008.
- 3) K. Kumano and N. Iida, "Analysis of the Effect of Charge Inhomogeneity on HCCI Combustion by Chemiluminescence Measurement," SAE 2004-01-1902, 2004.
- 4) 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.

- 5) 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, SAND 89-8009B, 1989.
- 6) 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, SAND 87-8248, 1988
- 7) 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.30-3, pp.229-241, 1998.
- 8) S. Sato and N. Iida, "Analysis of DME Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion," SAE 2003-01-1825, 2003.
- 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) K. Akihama, Y. Takatori, K. Inagaki, S. Sasaki and A. M. Dean, "Mechanism of the Smokeless Rich Diesel Combustion by Reducing Temperature," SAE 2001-01-0655, 2001.