

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2010.34.5.449

화학반응수치해석을 이용한 HCCI기관의 예혼합기의 성층화성이 연소시의 압력 상승률에 미치는 영향

임 옥 택*†

* 울산대학교 기계자동차공학부

Numerical Analysis of Effect of Inhomogeneous Pre-mixture on Pressure Rise Rate in HCCI Engine by Using Multizone Chemical Kinetics

Ock Taeck Lim**

* Dept. of Mechanical and Automotive Engineering, Ulsan Univ.

(Received February 16, 2009 ; Revised February 20, 2010 ; Accepted February 20, 2010)

Key Words: Knocking(노킹), Numerical Analysis(수치해석), Thermal Stratification(열적성층화), Fuel Stratification(연료성층화), Pressure Rise Rate(압력상승률), Homogeneous Charge Compression Ignition(HCCI; 예혼합압축자기착화)

초록: HCCI 엔진은 고효율, 저공해를 실현할 수 있는 차세대 내연기관이다. 그러나 HCCI 엔진이 상용화되기 위해서는 몇 가지 문제점들이 해결되어야 한다. 그 중에서 가장 큰 문제점은 과도한 압력 상승률이 노킹을 발생시키기 때문에 운전영역이 제한되는 것이다. 이번 연구의 목적은 HCCI 엔진에서 압력상승률 저감을 위하여 온도 성층화와 농도 성층화 효과를 조사하는 것이다. 그리고 Multi-zone 모델을 이용한 화학반응 수치해석을 통하여 연소 및 배기가스 특성에 미치는 영향을 알아보았다. 수치해석에서 2 단계 열발생을 가지는 DME와 1단계 열발생을 가지는 메탄을 사용하였다.

Abstract: The HCCI engine is a prospective internal combustion engine with which high diesel-like efficiencies and very low NOx and particulate emissions can be achieved. However, several technical issues must be resolved before HCCI engines can be used for different applications. One of the issues concerning the HCCI engine is that the operating range of this engine is limited by the rapid pressure rise caused by the release of excessive heat. This heat release is because of the self-accelerated combustion reaction occurring in the engine and the resulting engine knock in the high-load region. The purpose of this study is to evaluate the role of thermal stratification and fuel stratification in reducing the pressure rise rate in an HCCI engine. The concentrations of NOx and CO in the exhaust gas are also evaluated to confirm combustion completeness and NOx emission. The computation is carried out with the help of a multizone code, by using the information on the detailed chemical kinetics and the effect of thermal and fuel stratification on the onset of ignition and rate of combustion. The engine is fueled with dimethyl ether (DME), which allows heat release to occur in two stages, as opposed to methane, which allows for heat release in a single stage.

- 기호설명 -

- CA50 : 총열발생이 50%가 되는 크랭크 각도(CAD)
- HCCI : 예혼합압축자기착화(Homogeneous Charge Compression Ignition)
- HTR : 고온산화반응(High Temperature Reaction)
- LTR : 저온산화반응(Low Temperature Reaction)
- PRR : 압력상승률(Mpa/ms) (Pressure Rise Rate)
- T : 연소실내 가스온도(Temperature)

- 0 : 초기값(Initial)
- Φ : 당량비(Equivalence Ratio)

1. 서론

예혼합압축자기착화(Homogeneous Charge Compression Ignition: 이하 HCCI)은 공기와 연료의 예혼합기를 연소실로 투입하여 피스톤에 의한 단열압축에 의해서 착화 및 연소시키는 기관을 일컫는다. 희박한 예혼합기를 사용하여 다점 동시착화의 벌크(bulk) 연소

† Corresponding Author, otlim@ulsan.ac.kr

Table 1 Engine specifications

Process	Only 1 Compression & Expansion
Bore × Stroke	112mm × 115mm
Displacement	1132cc
Length of Conrod	205mm
Crank Radius	57.5mm
Intake Valve Close Timing	ATDC -132°
Exhaust Valve Open Timing	ATDC -132°
Compression Ratio	8.0(DME)/21.6(methane)

가 가능하기 때문에 NO_x와 PM의 생성이 적고, 고압축비를 사용하므로 고효율인 기관으로서 주목 받고 있다. 그러나, HCCI 기관은 부하를 올리는 경우 급격한 국소의 열발생 및 압력상승이 발생되어 노킹으로 인한 출력제한이 수반된다. 그 때문에, HCCI 연소기관의 고 부하 운전이 가능 하려면 노킹의 회피가 주요한 과제로 되어 있다. 급격한 압력 상승을 저감 해 노킹을 회피하는 방법으로서 연소 위상을 지연화시키는 방법,⁽¹⁾ 예혼합기의 온도 및 연료 농도의 성층화에 의해서 착화시기를 시간적·공간적으로 분산시키는 방법⁽²⁻⁴⁾이 유효하다고 알려져 있다. 본 연구에서는 서로 다른 저온산화반응의 발열특성을 갖는 연료들에 따른 예혼합기의 온도 및 농도의 성층화를 주었을 경우 연소시의 연소실내 가스 압력 상승률에 미치는 영향과 배기 특성을 조사하고는 것을 목적으로 해서 화학반응 수치 해석을 실시했다.

2. 화학반응 수치계산의 계산

2.1 연료

본 연구에서는, 연료로서 디메틸에테르(Di-Methyl Ether: DME)와 메탄(Methane)을 선택했다. 상세한 화학반응을 고려할 수 있는 상세반응모델을 이용하여 Multi-zone model 방법으로 연소실내의 온도 및 농도의 성층화성이 연소실내 가스 압력 상승률 및 배기에 미치는 영향에 대해 화학반응 수치 해석을 실시했다. DME는 저온 산화 반응(Low Temperature Reaction: LTR) 및 고온 산화 반응(High Temperature Reaction: HTR)으로 불리는 2단의 열발생을 가져, 전체의 열발생에 있어서의 LTR 기간의 열발생의 비율이 큰 연료이다. 한편, 메탄은 연소 시에 1단의 열발생뿐이고 자발화 온도가 높은 연료이다.

2.2 계산방법과 LTR, HTR 발현 시기, 50% 열 발생 시기의 정의

본 연구에서 사용한 엔진재원을 Table 1에 나타낸

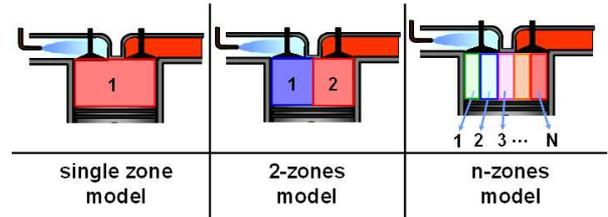


Fig. 1 Concept of multi-zone model

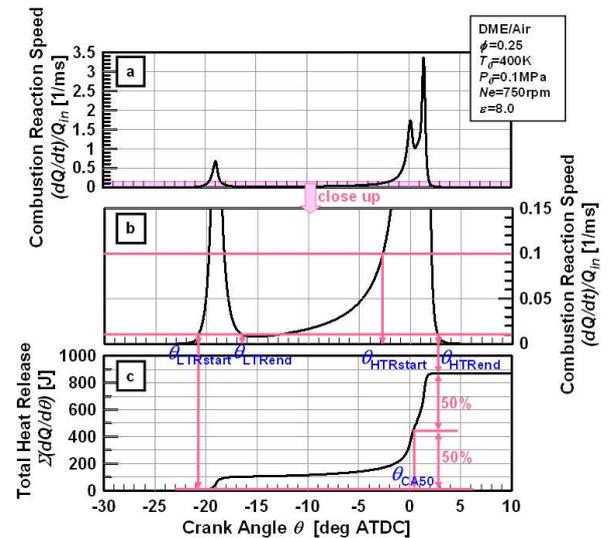


Fig. 2 Definitions of LTR start, LTR end, HTR start, HTR end and 50% heat release timing

다. 흡입기밸브가 닫은 직후부터 배기밸브가 열리기 직전까지의 1 회의 압축행정으로부터 팽창 행정을 계산 시간조건으로 하였고, 밀폐계의 가스를 계산 대상으로 하였다. 계산 코드는 Sandia National Laboratory로 개발된 CHEMKINI⁽⁵⁾ 및 SENKIN⁽⁶⁾를 연구실에서 일부 수정하여 사용하였고, 또 DME의 반응모델로서 Curran 등의 모델(화학종수: 79, 화학반응 수: 351),⁽⁷⁾ 메탄의 반응 모델로서 GRI-Mech3.0의 모델(화학종수: 53, 화학반응 수: 325),⁽⁸⁾ 또한 NO_x 모델로서 확대Zeldvich 기구의 모델을 사용했다. 열손실과 잔류 가스는 고려하지 않았고, 모든 화학 종의 기체는 이상기체, 단열변화, 질량 보존의 가정하에서 계산을 실시했다. 구축한 Multi-zone 모델은 각각의 zone의 압축 시작 전에 가스 온도, 연료/공기 당량비를 변화시키는 것으로, 연소실내의 온도 및 농도의 성층화를 재현할 수 있다.

Fig. 1에 나타내듯이 계산상의 zone 각각은 가스온도와 화학 종의 조성이 균일한 1차원 모델이며, 각 zone 간의 열량 및 화학 종의 이동이 없고 압력이 균일한 단열변화가 일어난다고 가정했다. Fig. 2는

LTR 및 HTR 발현 시기, 종료시기, 50%열발생 시기의 정의를 나타낸다. Fig. 2(a), (b)에 나타낸 것처럼 열발생률 dQ/dt [J/ms]를 1 사이클의 투입 열량 Q_{in} [J]로 나눈 값을 연소반응속도 $(dQ/dt) / Q_{in}$ [1/ms]로서 정의해, LTR 발현 시기 LTR_{start} , LTR 종료시기 LTR_{end} 및 HTR 종료시기 HTR_{end} 는 DME로 0.01 1/ms, 메탄으로 0.0225 1/ms, HTR 발현 시기 HTR_{end} 는 DME로 0.1 1/ms, 메탄으로 0.0225 1/ms를 반응을 일으키는 최소의 물리량으로서 정의했다. Fig. 2(c)는 열발생률의 적분한 이력을 나타낸 것이다. LTR 발현 시기부터 HTR 종료시기까지의 열발생률의 총 적분값을 100%로 해서 50%의 열발생이 완료했던 시기를 50% 열발생 시기(CA50)로 정의했다.

3. 2 zone 모델을 이용한 압력 상승률 저감 메커니즘의 조사

3.1 예혼합기의 온도 성층화가 압력 상승률에 미치는 영향

DME/공기 및 메탄/공기 당량비 $\phi=0.25$ 로 연료 농도가 균일한 조건에서 각각의 zone의 압축시작시의 가스 온도를 $T_0=380K$ (zone1), $420K$ (zone2)로 했을 때의 계산 조건을 Fig. 3, 4에 도시하였다.

이 때 각 zone의 1 사이클의 투입 열량이 같게 되도록 체적비를 변화시켰다. 연료에 DME를 이용했을 때의 연소실내 가스 압력, 각 zone의 연소실내 가스 온도, 열발생률을 Fig. 5에서 보여주고 있고, LTR과 HTR를 확대한 것을 Fig. 6가 나타낸다. 이 때, 연소실내 가스 압력은 일정한 유익 그래프는 한 개이지만, 각 zone의 연소실내 가스 온도, 열발생률의 이력을 나타내고 있다. LTR 발현 온도는 744 ± 3 K, HTR 발현 온도는 1007 ± 5 K로 거의 일정했다. LTR 발현 전에는 피스톤이 상승하는 것에 따라 연소실내 가스 온도차가 거의 같은 차이인 40 K가 되었던 온도 차는 zone2의 LTR 발현 전에 65.7 K가 되었다. LTR 발현온도가 거의 일정하기 때문에 zone2에 대해 먼저 LTR이 나타난 후, zone1가 9.3 deg 늦게 LTR이 나타났다. zone1, zone2간의 온도 차는 LTR 발현 이후에도 유지되어 zone2에 대해 먼저 HTR이 나타나고, 4.3 deg 늦어 zone1에 대해 HTR이 나타났다. 또한 연료로 메탄을 사용했을 때의 연소실내 가스 압력, 각 zone의 연소실내 가스 온도, 열발생률 이력을 Fig. 7에 나타내었다. HTR 발현 온도는 1177 ± 3 K였다. 메탄을 이용했을 경우에도 DME의 경우와 같게,

압축시작 전에 가스 온도의 높은 zone2에 대해 먼저 HTR이 나타나고 4.5 deg 늦어 zone1에 대해 HTR이 나타났다.

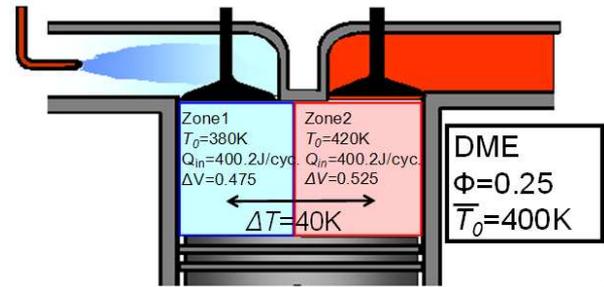


Fig. 3 Calculation condition (DME, Thermal stratification, 2-zones)

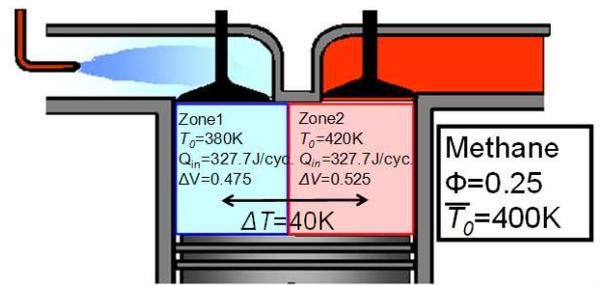


Fig. 4 Calculation condition (Methane, Thermal stratification, 2-zones)

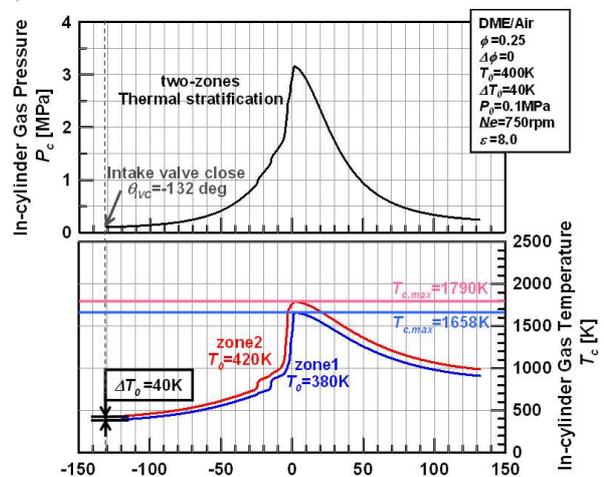


Fig. 5 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature

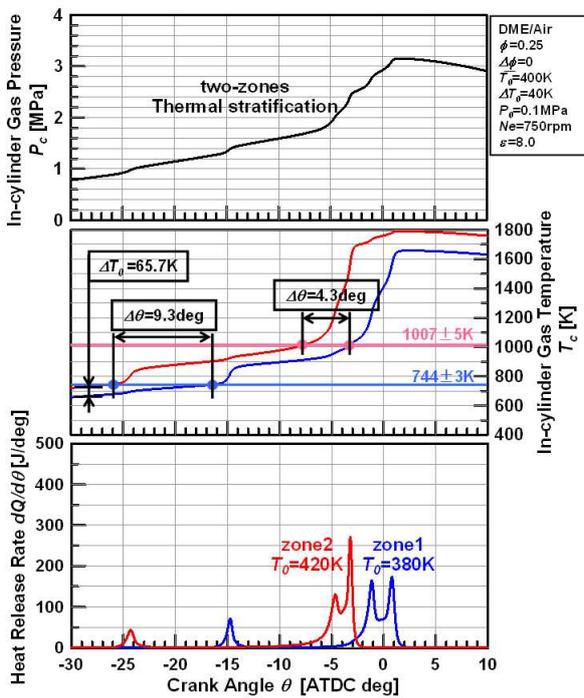


Fig. 6 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (DME, Thermal stratification, 2-zones)

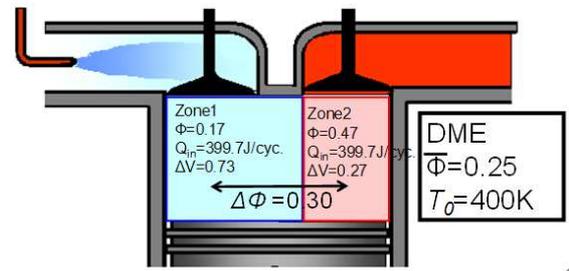


Fig. 8 Calculation condition (DME, Fuel stratification, 2-zones)

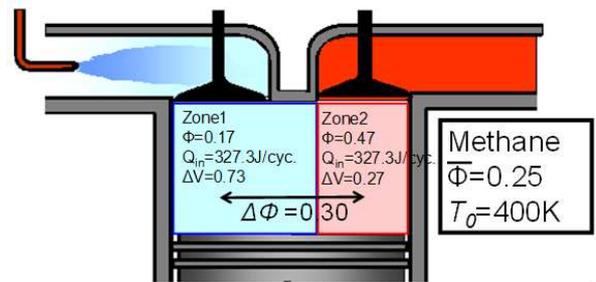


Fig. 9 Calculation condition (Methane, Fuel stratification, 2-zones)

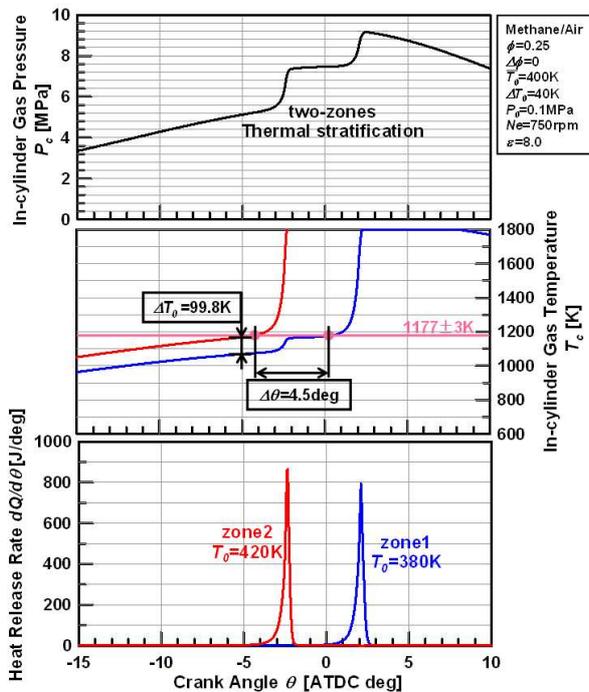


Fig. 7 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (Methane, Thermal stratification, 2-zones)

3.2 예혼합기의 농도 성층화가 압력 상승률에 미치는 영향

압축 시작 시 평균가스온도 $T_0=400\text{ K}$ 로 균일한 조건으로 가정하고, 각각의 zone의 DME 및 메탄의 당량비를 $\phi=0.17$ (zone1), 0.47 (zone2)로 했을 때의 계산 조건을 Fig. 8, 9에 나타내었다. DME를 사용했을 때의 연소실내 가스 압력, 각 zone의 연소실내 가스 온도, 열발생률을 Fig. 10에서 표시하고, 그 확대그림을 Fig. 11에 나타낸다. LTR 발현 온도는 $747\pm 3\text{ K}$, HTR 발현 온도는 $1009\pm 1\text{ K}$ 였다. LTR 발현 전에는 피스톤이 상승하는 것에 따라 연소실내 가스온도차는 확대된다. 이것은 당량비의 차이 따라 예혼합기의 비열비가 달라지고 이에 따른 온도 상승률이 다르기 때문에 있다. 압축시작 전에 0 K 였던 온도 차이는 zone1의 LTR 발현 전에는 17.3 K 가 되었고, LTR 발현 시기는 zone2가 2.3 deg 늦었다. 그러나 당량비가 높은 zone에서 LTR중의 열 발생량이 많기 때문에, zone2의 LTR 종료 시에 가스온도이력이 역전되어 더 높아졌다. 이 가스 온도의 역전에 의해서 HTR는 zone2로 먼저 나타나 zone1는 2.3 deg 늦게 나타났다.

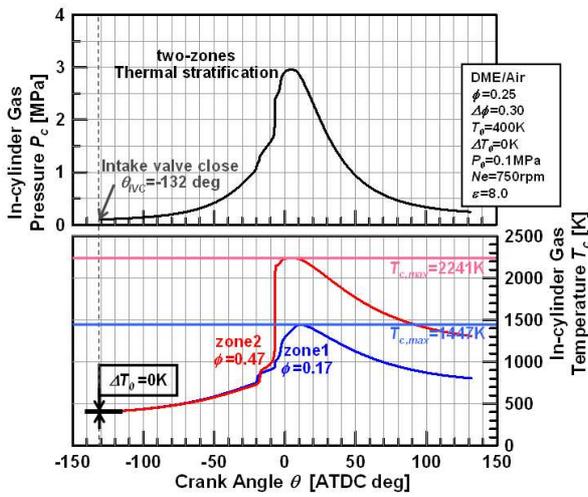


Fig. 10 Histories of in-cylinder gas pressure and in-cylinder gas temperature (DME, Fuel stratification, 2-zones)

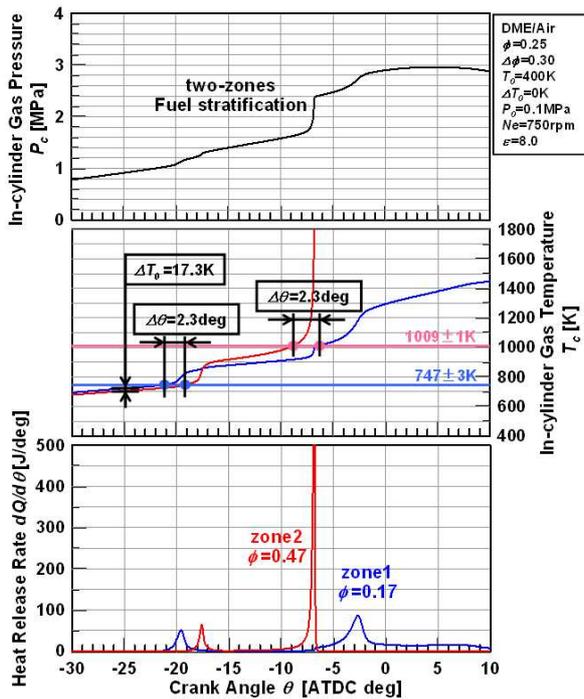


Fig. 11 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (DME, Fuel stratification, 2-zones)

메탄을 사용했을 때의 연소실내 가스 압력, 각 zone의 연소실내 가스 온도, 열발생률을 Fig. 12에 나타내고 있다. HTR 발현 온도는 1163 ± 11 K였다. DME의 경우는 피스톤이 상승하는 것에 따라 예혼합기 내의 고 당량비 부분과 저 당량비 부분의 비열비의 차이에 의해 연소실내 가스온도

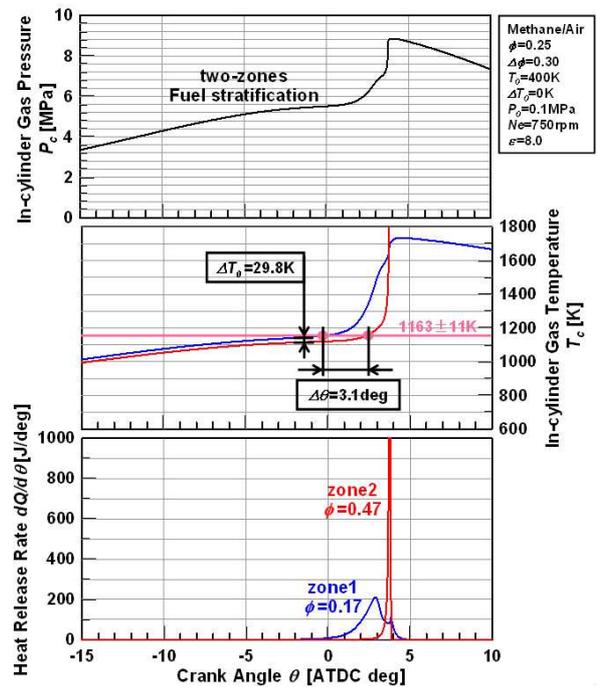


Fig. 12 Histories of in-cylinder gas pressure, in-cylinder gas temperature and heat release rate (Methane, Fuel stratification, 2-zones)

차이가 확대되지만, 메탄은 LTR을 가지지 않고 1단의 열발생만 존재하기 때문에, 농도가 낮은 zone1에 대해 먼저 HTR이 나타나, 3.1 deg 늦어 zone2에 대해 HTR이 나타났다.

4. Multi-zone 모델에 의한 최대압력 상승률 저감 효과, 배기 특성의 검증

2 zone 모델의 결과를 바탕으로 성층화의 폭을 확대 및 다양화 시키기 위해서 5 zone 모델을 이용해 화학반응 수치계산을 실시해서 보다 넓은 온도 분포, 연료 농도 분포가 생겼을 경우에 있어서의 연소실내 가스 압력 상승률의 저감 효과와 열발생률, 배기특성에 대해 조사했다.

DME 및 메탄의 평균당량비(ϕ)=0.25로 하고 압축 시작 전에 평균가스온도를 $T_0=300$ K에서 500 K의 사이에 변화시켰을 때의 CA50%와 최대 압력 상승률의 관계를 Fig. 13-16에 나타내었다. 온도 성층화 조건에서 예혼합기 전체의 평균가스 온도가 압축시작 전에 평균가스온도 T_0 가 되도록 각 zone에서 5 K씩 온도차이를 주었고, 온도가 제일 낮은 zone과 제일 높은 zone의 가스 온도차

$T_0=20$ K가 되는 조건과 각 zone에서 10 K씩 온도 차이를 주어서 가스온도차 $T_0=40$ K가 되는 조건에 대하여 계산을 실시했다. 반면에 농도 성층화 조건에 대해서는, 예혼합기 전체의 평균 당량비가 $\phi=0.25$ 가 되도록 당량비를 설정해서 당량비가 제일 낮은 zone과 높은 zone의 당량비 차가 $\Delta\phi=0.10$ 로 $\Delta\phi=0.30$ 의 조건에 대하여 계산을 실시해서, 예혼합기의 온도 및 농도가 균일의 경우의 결과와 비교했다. 예혼합기에 온도차가 있는 경우와 농도차가 있는 경우를 비교하면 온도차가 있는 경우에는 그 온도차의 대소에 관계없이, 균일 예혼합기의 조건에 비해 최대압력 상승률이 50%이하까지 저감되었고, 온도차가 클수록 그 저감율이 보다 컸다. 하지만, 농도차이가 있는 경우에는, 균일 예혼합기의 경우와 비교해서 최대압력 상승률이 저감되고는 있지만 그 저감율이 농도 폭에 의해서 크게 달라졌다. 연료가 DME와 메탄의 경우에는는 보다 최대압력 상승률의 저감 효과를 크게 볼 수 있는 그 농도의 폭에서 차이가 나타나는 것을 알았다. 이는 앞 절에서도 언급하였듯이, DME는 LTR특성을 갖기 때문에 LTR 종료시에, 가스 온도 이력이 역전되어서, LTR 발현 전에 피스톤의 압축으로만 의해 작성되었던 온도차의 효과가 사라지기 때문에, DME와 메탄에서는 다른 결과를 볼 수 있었다고 생각할 수 있다.

압축시작전의 가스평균온도 $T_0=400$ K의 조건에 있어서의 각 zone의 연소실내 최고 가스 온도와 연소 효율, 배기중의 NO_x , CO농도를 Fig. 17-20에 나타내었다. 예혼합기에 온도성층화, 농도성층화가 있는 조건의 결과들과 압축 시작 전에 가스 온도가 $T_0=400$ K, 당량비=0.25의 온도 및 농도 균일의 조건에 있어서의 결과를 비교해, 예혼합기의 온도성층화, 농도 성층화가 배기특성에게 주는 영향을 검토했다. 연소실내 최고가스 온도가 2100 K이상이면 NO_x 농도가 높아지고, 1500 K이하에서는 CO농도가 높아졌다. 예혼합기에 온도성층화가 있는 경우에는, 연료가 DME의 경우도 메탄의 경우도, 각 zone의 최고 온도가 모두 1500 K이상 2100 K이하였기 때문에, 배기가스중의 NO_x , CO농도는 균일 예혼합기의 경우와 비교해 거의 같은 수준이었다. 그러나, 예혼합기에 농도성층화를 갖는 조건에서는, 당량비의 높은 zone에 있어 최고 온도가 2100 K를 넘어 당량비의 낮은 zone에 있고는 최고 온도가 1500 K

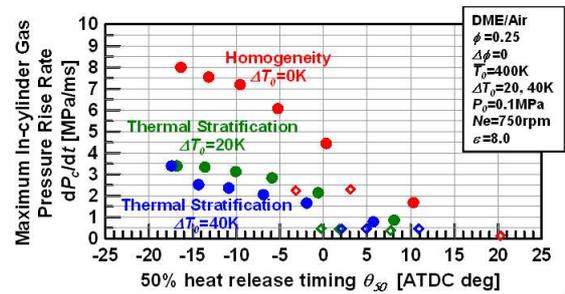


Fig. 13 50% heat release timing and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (DME, Thermal stratification, and 5-zone)

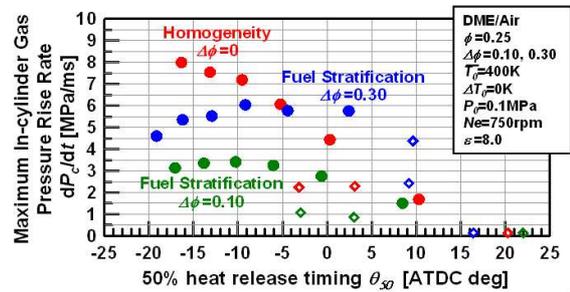


Fig. 14 50% heat release timing and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (DME, Fuel stratification, and 5-zone)

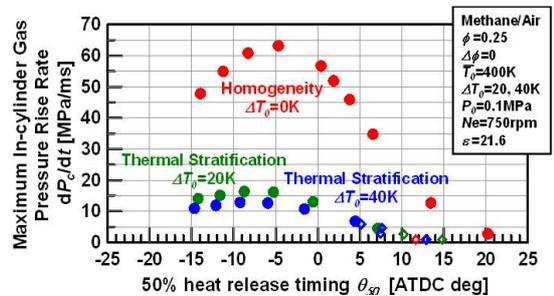


Fig. 15 50% heat release timing and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (Methane, Thermal stratification, and 5-zone)

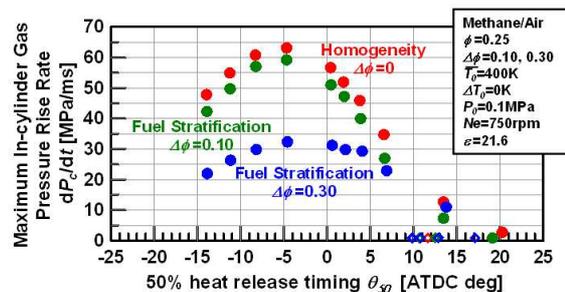


Fig. 16 50% heat release timing and maximum in-cylinder gas pressure rise rate (Methane, Fuel stratification, and 5-zone)

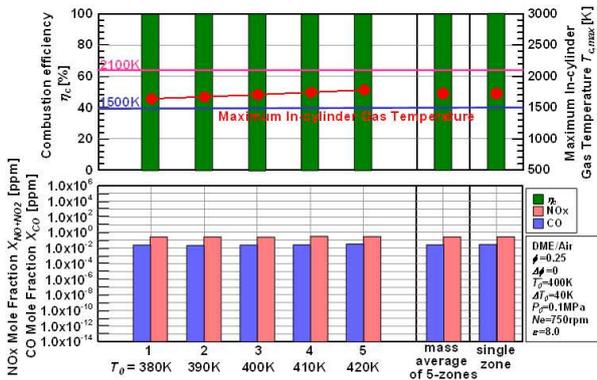


Fig. 17 CO and NOx mole fraction in exhaust gas, combustion efficiency and maximum in-cylinder gas temperature (DME, Thermal stratification, 5-zones)

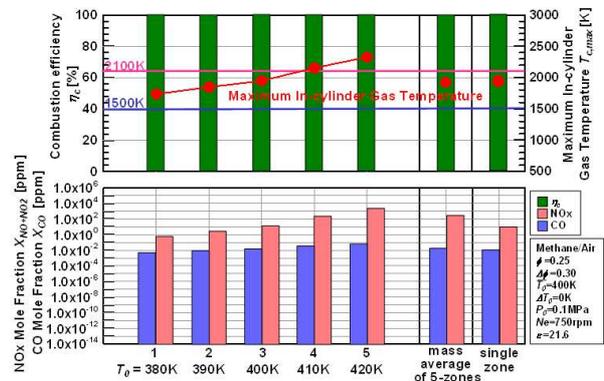


Fig. 20 CO and NOx mole fraction in exhaust gas, combustion efficiency and maximum in-cylinder gas temperature (Methane, Fuel stratification, 5-zones)

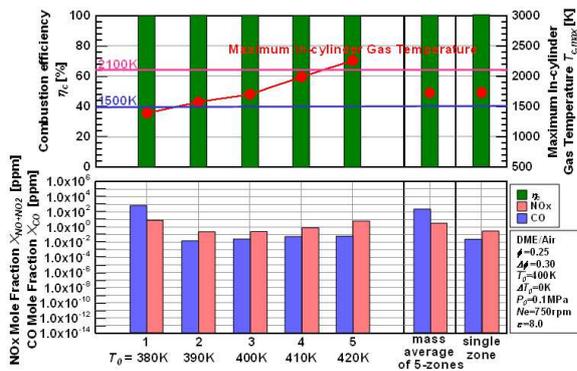


Fig. 18 CO and NOx mole fraction in exhaust gas, combustion efficiency and maximum in-cylinder gas temperature (DME, Fuel stratification, 5-zones)

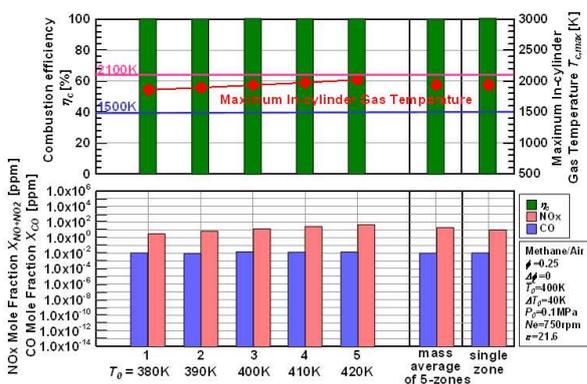


Fig. 19 CO and NOx mole fraction in exhaust gas, combustion efficiency and maximum in-cylinder gas temperature (Methane, Thermal stratification, 5-zones)

이하 혹은 거기에 가까운 값을 나타냈기 때문에 배기가스중의 NOx, CO농도는 어느 쪽이나 균일

예혼합기의 경우와 비교해 많아지고 있는 것을 알 수 있었다.

5. 결론

본 연구에서는 화학반응 수치계산을 이용하여 연소실 내부의 예혼합기에 온도성층화 또는 농도성층화를 주어서 압력상승율의 저감의 메커니즘과 그에 따른 저감 효과 그리고 연소 및 배기특성을 확인하고 아래와 같은 결과를 얻을 수 있었다.

(1) 예혼합기 중에 온도 분포가 있는 조건에서는 피스톤 압축에 의해 연소실내 연소가스의 온도차가 확대되고 LTR, HTR이 나타날 때는 연소실내 가스 온도가 높은 zone에 있어 먼저 나타났다.

(2) 예혼합기 중에 연료 농도 분포가 있는 조건에서는 피스톤 압축에 의해 연소실내 연소가스의 온도차가 발생되고, LTR은 연료 농도가 낮은 zone, HTR은 연료 농도가 높은 zone에 있어 먼저 나타났다.

(3) 예혼합기의 온도 및 농도의 성층화가 있는 조건에서는, 균일조건에 비해 최대압력 상승률이 큰 폭으로 저하되었다. 특히, 예혼합기에 온도성층 조건에서는 균일조건과 동일한 정도의 NOx, CO배출량에 억제한 채로 최대압력 상승률을 저감할 수 있다.

(4) 예혼합기의 농도성층화조건에서는 NOx, CO농도를 균일조건과 비교하여 동일한 수준으로 배출하면서도 압력상승율의 저감을 위해서는 각

존의 최고온도를 1500K이상 2100K이하의 범위에
서 작동하는 것이 필요하다.

후 기

이 논문이 있도록 물심양면으로 응원해 주신
일본 게이오대학(KEIO University)의 이이다 노리
마사 (Norimasa, IIDA) 교수님께 감사를 드립니다.
본 연구는 2009년도 지식경제부 기술혁신사업 인
‘클린 신연료 동력시스템 개발’에서 수행된 연구
입니다. 관계자들의 지원에 심심한 감사를 드립
니다.

참고문헌

- (1) Yamashita, D., Kweon, S., Sato, S. and Iida, N., 2005, "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
- (2) Sjoberg, M., John E. D. and Cernansky, N. P., 2005, "Potential of Thermal Stratification and Combustion Retard for Reducing Pressure-Rise Rates in HCCI Engines, Based on Multi-Zone Modeling and Experiments," *SAE paper* 2005-01-0113
- (3) Kwon, O. S. and Lim O. T., 2009, "Effect of the Boost Pressure on Thermal Stratification on HCCI Engine Using Multi-Zone Modeling," *Trans. of the KSME (B)*, Vol. 33, No. 3 (accepted)
- (4) Kumano K. and Iida, N., 2004, "Analysis of the Effect of Charge Inhomogeneity on HCCI Combustion by Chemiluminescence Measurement," *SAE paper*, 2004-01-1902
- (5) Luz A.E., Rupley F. and Miller J.A., 1989, "CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics," *Sandia National Laboratories Report*, SAND89-8009B
- (6) Luz A.E., Kee R.J. and Miller J.A., 1988, "SENKIN: A FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis," *Sandia National Laboratories Report*, SAND87-8248
- (7) Curran, H.J., Pitz, W.J., Westbrook, C.K., Dagaut, P.B., Boettner, J-C and Cathonnet, M., 1998, "A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation," *International Journal Chemical Kinetics*, 30-3, pp. 229~241
- (8) GRI-Mech3.0, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech