Multi-zone 모델링을 통한 온도성층화와 농도성층화가 존재하는 DME HCCI 엔진의 운전영역에 관한 수치해석연구

정 동 원 $^{1)} \cdot$ 임 옥 택 $^{*2)}$

울산대학교 대학원 자동차공학과¹⁾·울산대학교 기계자동차공학부²⁾

Comparison of DME HCCI Operating Ranges for the Thermal Stratification and Fuel Stratification based on a Multi-zone Modeling

Dongwon Jeong¹⁾ • Ocktaeck Lim^{*2)}

¹⁾Graduate 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 8 March 2010 / Accepted 30 November 2010)

Abstract : This work investigates the potential of in-cylinder thermal stratification and fuel stratification for extending the operating ranges in HCCI engines, and the coupling between thermal stratification and fuel stratification. Computational results areemployed. The computations were conducted using both a custom multi-zone version and the standard single-zone version of the Senkin application of the CHEMKINII kinetics rate code, and kinetic mechanism for di-methyl ether (DME). This study shows that the potential of thermal stratification and fuels stratification for extending the high-load operating limit by a staged combustion event with reduced pressure-rise rates is very large. It was also found that those stratification offers good potential to extend low-load limit by a same mechanism in high-load. However, a combination of thermal stratification and fuel stratification. Sufficient condition for combustion (enough temperature for) turns misfire in low-load limit to operate engines, which also leads to knock in high-load limit abruptly due to the too high temperature with high. DME shows a potential for maximizing effect of stratification to lower pressure-rise rate due to the characteristics of low-temperature heat release.

Key words : Thermal stratification(온도 성층화), Fuel stratification(농도 성층화), Pressure-rise rate(압력상승률), Dimethyl-ether(DME; 디메틸에테르), Homogeneous charge compression ignition(HCCI; 예혼합압축착화), Numerical analysis(수치해석)

Nomenclature

: dimethyl ether
: homogeneous charge compression ignition
: high temperature heat release
: low temperature heat release
: pressure-rise rate

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

1. 서 론

예혼합압축착화(Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI) 엔진은 압축비가 높아 열효율이 높고, 희박한 균질 예혼합기에서 연소가 일어나기 때문에 NOx와 PM의 배출이 적다. 하지만 HCCI엔 진이 상용화 되기 위해서는 많은 문제점들을 해결 해야 하며, 그 중 하나가 좁은 운전영역이다. HCCI 엔진에서는 실린더 내의 균일한 예혼합기가 동시

다발적으로 점화되기 때문에 압력 상승률과 열 발 생률이 급격하며, 이는 고부하 영역에서 노킹을 유 도한다. 또한 예혼합기가 희박하여 저부하 영역에 서 영역에서는 실화가 발생하기 쉽다. 최근 좁은 운 전영역을 확장하기 위한 방법으로 예혼합기의 온도 성층화¹⁾ 또는 농도 성층화²⁾, Cooled 배기가스재순환³⁾ 등이 제안되고 있다. 압축행정 전, 예혼합기에 온도 및 농도 성층화가 존재하면 점화시기가 시간적, 공 간적으로 분산되어 압력 상승률이 감소하면서 고부 하 영역에서의 노킹 발생이 억제된다. 또한 성층화 가 존재하면 예혼합기가 희박하더라도 국부적으로 온도가 높고 농후한 영역에서 점화가 일어나면서 연소를 유도하여 실화 발생을 막는다. 위 결과는 저 자의 연구를 통해서도 확인되었으나. 4,5) 초기온도와 초기당량비가 변화되는 조건에서 운전영역을 확인 해 보지 않았으며 온도 성층화와 농도 성층화를 동 시에 적용한 적은 없다.

본 연구에서는 Multi-zone 모델을 이용한 수치해 석을 통해 온도 및 농도 성층화가 압력 상승률 저감 에 미치는 메커니즘을 확인했다. 이를 바탕으로 초 기온도 및 초기당량비를 변화시킨 조건에서, 예혼 합기가 균질한 경우와 온도 및 농도 성층화가 존재 하는 경우에서 나타나는 운전영역을 비교 분석했 다. 마지막으로 예혼합기에 온도 성층화와 농도 성 층화를 동시에 적용시켜 운전영역을 확인하고 위의 경우와 비교하였다.

2. 수치해석

2.1 실험연료

수치해석에 사용된 연료인 Di Methyl Ether (DME) 는 LPG (Liquefied Petroleum Gas)와 유사하며 특성 은 Table 1과 같다. DME가 HCCI엔진에 적용할 수 있는 중요한 특징은 세탄가가 높아 압축착화가 가 능하며, 비등점이 낮아 기화가 빨리 일어나기 때문 에 혼합특성이 우수하여 균질한 예혼합기를 쉽게 형성할 수 있다. DME는 저온 산화반응(LTHR)과 고 온 산화반응(HTHR)의 2 단계 열 발생이 있으며, LTHR 기간에서 발생되는 열의 비율이 비교적 높다 (25~40%).⁶⁾ 연료의 연소시 LTHR이 존재하면 LTHR 기간에서 발생된 열에 의해 HTHR 발생 전 분위기

Tabla	1	Tost	fuele
Table	1	rest	rueis

Fuel	di-methyl ether
Molecular formula	CH ₃ OCH ₃
Low heating value [MJ/kg]	28.8
Molecular mass [g/mol]	46.069
Cetane number	≥55
Boiling point [°C]	-25

온도를 증가시킴에 따라 HTHR의 시점을 앞당기며, LTHR기간에서 발생된 열이 클수록 HTHR이 빨리 발생된다. 또한 LTHR을 가지는 연료가 실린더 내에 농도 성층화되어 있을 경우, 국부적으로 농후한 영 역의 LTHR 기간에서 발생된 열이 희박한 영역의 LTHR 기간에서 발생된 열보다 커지면서 실린더 내 에 온도 성층화를 형성한다. 농도 성층화에 의해 실 린더 내에 형성된 온도의 폭이 증가되면서 온도가 높은 영역부터 HTHR 발생되고, 이에 따라 연소시 점이 분산되면서 연소가 순차적으로 일어나므로 급 격히 발생하는 압력 상승률이 저감된다.

2.2 수치해석 프로그램

수치해석에 사용된 엔진은 YAMMER TS-230-R 시리즈4행정 단기통 디젤엔진으로써 사양은 Table 2 와 같다. 기존의 논문에서⁷⁻⁹⁾ 동일한 엔진을 통해 얻 은 시뮬레이션 및 실험결과가 많고 비교가 용이하 기 때문에 이번 연구에 사용하였다.

수치해석에 사용된 프로그램은 Sandia National Laboratory에서 개발된 CHEKINII와 SENKIN을 일 부 개량한 것이다.^{10,11)} Curran의 미케니즘(화학종수: 79, 단위반응수: 336)을 DME의 반응 미케니즘으로 정하고,¹²⁾ NOx의 반응 스킴으로는 확대 Zeldovich 기구를 고려한 모델을 사용했다. 수치해석의 범위 는 흡입밸브가 닫힌 직후부터 배기 밸브가 열리기

Table 2 Engine specification

Process	1 compression & expansion
Displacement	1132cc
Bore × Stroke	112mm × 115mm
Crank radius	57.5 mm
Compression ratio	8
Intake valve close	ATDC -132°
Exhaust valve close	ATDC 132°

직전까지이며 이하의 가정을 기초로 1회의 압축, 팽 창 행정 중에 닫혀 있는 가스의 열역학적 특성을 계 산했다.

• 기체는 이상기체	(1)
• 에너지는 보존	(2)
• 질량은 보존	(3)

· 전달과 질량 전달은 없음
(4)

2.3 Multi-Zone 모델링

해석 프로그램을 통해 예혼합기의 조건을 임의로 나누어 지정할 수 있으며 Fig. 1에 도식적으로 나타 내었다. Single-zone model은 예혼합기의 온도 및 화 학조성이 균질한 0차원 모델이다. Multi-zone model 은 예혼합기를 여러 조건으로 나눈 경우로, 각 zone 은 Single-zone model과 마찬가지로 모든 조건이 균 질하다. zone 간에는 열량 및 화학종의 이동은 없고 압력이 동일하며 실린더 내의 가스 평균온도, T₀는 총 에너지 보존식 (1)을 이용하여 계산한다. N은 실 린더를 나눈 zone의 수, n_i는 각 zone을 구성하는 화 학조성의 몰수이며 C_{pi}는 온도 계산에 사용되는 정 압비열이다.

Zone의 수가 증가할수록 실제실험결과 모사에 유리하지만, 계산시간은 N² (N: Zone 수)에 비례하 는 반면 N의 증가에 따른 실험결과는 줄어들기 때 문에 적절한 N의 선정이 요구된다. 특히 운전영역 에 관한 연구는 많은 시간을 필요로 하므로, 본 연구 에서는 성층화 조건의 시뮬레이션을 위해 이전 연 구경험과 참고논문을 바탕으로 5-zones model을 이 용하였다.¹⁾





3. 수치해석 결과

Single-zone model과 5-zone model을 이용하여 초 기 온도(T₀ = 330K~470K, △T=10K) 및 초기 당량비 (Φ=0.1~0.4, △Φ=0.05)를 변화시킨 조건에서, 1.예혼 합기가 균질한 경우(Homogeneous), 2.온도 성층화 가 존재하는 경우(Thermal stratification), 3. 농도 성층 화가 존재하는 경우(Fuel stratification), 4.온도 및 농 도 성층화가 존재하는 경우(Thermal+Fuel stratification)로 나누어 수치해석하였다. 각 Zone의 초기온 도와 당량비는 시뮬레이션 프로그램에서 임의로 설 정할 수 있다. 성층화가 존재하는 경우 각 Zone의 체 적이 동일하면 당량비와 온도 변화로 인해 투입열 량의 차이가 난다. 투입열량의 차이는 압력 및 열발 생률의 특성을 변화시키기 때문에 균질한 경우와의 결과비교가 어렵다. 성층화가 존재하더라도 총 투 입열량을 동일하게 만들기 위해 각 존의 체적비 (Volume ratio)를 조절하였다. HCCI 엔진의 노킹 판 단 기준으로 Eng가 제시한 Ringing Intensity(RI) 값 이 5MW/m² 이상이면 노킹이 일어났다고 판단했으 며¹³⁾ 실린더 내 최고 온도가 1000K 이하이면 DME 의 연료특성상 고온산화 반응이 일어나지 않기 때 문에 실화 발생으로 판단하였다.14)

3.1 온도 성층화가 존재하는 경우

Fig. 2는 초기온도 및 초기당량비를 변화시킨 조 건에서 예혼합기가 균질한 경우(Homogeneous)와 예혼합기에 온도 성층화가 존재하는 경우(Thermal stratification)에 나타난 운전영역을 비교하였다. 예 혼합기의 온도 성층화 폭은 △T=40K이다. 예혼합 기에 온도 성층화가 존재하는 경우(옅은회색영역), 균질한 경우(짙은회색영역)의 운전영역보다 고온 고당량비쪽으로 크게 확장되었고, 동시에 저온 저당 량비쪽으로도 확장되었다. 영역이 확장된 To=410K, Φ=0.25을 보면, Fig. 3과 같이 예혼합기의 평균온도 는 동일하지만 예혼합기에 온도 성층화가 존재하면 온도가 높은 zone부터 연소가 순차적으로 일어나기 때문에 압력곡선이 예혼합기가 균질한 경우보다 완 만하다. 확장된 To=380K, Φ=0.2를 보면, Fig. 4와 같 이 예혼합기의 평균온도는 실화 조건이지만 예혼합 기에 온도 성층화가 존재하면 국부적으로 높은 온



Fig. 2 Operating range for various temperatures as a function of equivalence ratios at homogeneous and thermal stratification



Fig. 3 In-cylinder condition in 5-zone model with heat release rate and pressure traces (homogeneous and thermal stratification) at initial temperature 410K, Φ =0.25

도로 인해 연소가 유도되어 운전영역이 확장된다.

3.2 농도 성층화가 존재하는 경우

Fig. 5는 초기온도 및 초기당량비를 변화시킨 조 건에서 예혼합기가 균질한 경우(Homogeneous)와 예혼합기에 농도 성층화가 존재하는 경우(Fuel stratification)에 나타난 운전영역을 비교하였다. 예 혼합기의 농도 성층화 폭은 ΔΦ=0.15이다. 예혼합 기에 농도 성층화가 존재하는 경우(옅은회색영역), 균질한 경우(짙은회색영역)의 운전영역보다 고온 고당량비쪽 뿐만 아니라 저온 저당량비쪽으로도 크 게 확장되었다. 영역이 확장된 To=410K, Φ=0.25을



Fig. 4 In-cylinder condition in 5-zone model with heat release rate and pressure traces (homogeneous and thermal stratification) at initial temperature 380K, Φ =0.2



Fig. 5 Operating range for various temperatures as a function of equivalence ratios at homogeneous and fuel stratification

보면 Fig. 6과 같이 예혼합기의 평균당량비는 동일 하지만 예혼합기에 농도 성층화가 존재하면 농도가 높은 zone부터 연소가 순차적으로 일어나기 대문에 압력곡선이 예혼합기가 균질한 경우보다 완만하다. 온도 성층화가 존재하는 경우와 마찬가지로 영역이 확장된 To=380K, Φ=0.2을 보면 Fig. 7과 같이 농도 성층화가 존재하는 경우 국부적으로 농후한 zone에 의해 운전영역이 확장된다.

3.3 온도 성층화와 농도 성층화가 동시에 존재하는 경우

예혼합기에 온도 성층화와 농도 성층화를 적용시



Fig. 6 In-cylinder condition in 5-zone model with heat release rate and pressure traces (homogeneous and fuel stratification) at initial temperature 410K, Φ =0.25



Fig. 7 In-cylinder condition in 5-zone model with heat release rate and pressure traces (homogeneous and fuel stratification) at initial temperature 380K, Φ=0.2

킬 경우 여러 조합을 고려할 수 있다. 본 연구에서는 예혼합기에 온도 및 농도 성층화가 존재하는 경우 에 나타나는 운전영역을 확인하기 전에 4가지 조건 에서 예혼합기에 온도 성층화와 농도 성층화를 설 정하였다. CASE1은 Zone1에서 Zone5로 갈수록 온 도와 당량비가 증가하는 조건으로 실제 엔진에서 실린더 중앙부에 연료를 분사함으로써 형성될 것이 라 판단된다. 이와 반대로 CASE2는 Zone1에서 Zone5로 갈수록 당량비는 증가하지만 온도는 감소 하는 조건으로 실제 엔진에서 스월을 통해 연료를 실린더 벽면 쪽으로 유도함으로써 가능할 것이라 판단된다. CASE3, CASE4는 앞의 두 경우와 비교를 위해 임으로 잡은 조건이다. Fig. 8은 수치 계산에 사 용된 5-zone 모델의 개략도이며 Table 3은 4가지 경

Zone1	Zone2	Zone3	Zone4	Zone5
160.1J/Cycle	160.1J/Cycle	160.1J/Cycle	160.1J/Cycle	160.1J/Cycle
/		∆ T=40K		
		∆ 		

Fig. 8 Schematic of charge stratification in cylinder

Table 3 Initial temperature and equivalence ratio at each zone in 4 cases

Φ _{avg} =0.25	CASE1		CASE2		CASE3		CASE4	
T _{avg} =400K	Φ_0	T ₀	Φ_0	T_0	Φ_0	T ₀	Φ_0	T ₀
Zone1	0.19	380	0.20	420	0.18	380	0.21	420
Zone2	0.22	390	0.23	410	0.22	400	0.22	400
Zone3	0.25	400	0.25	400	0.26	420	0.24	380
Zone4	0.29	410	0.28	390	0.29	400	0.29	400
Zone5	0.34	420	0.35	380	0.33	380	0.36	420

우에서 적용한 각 Zone의 당량비와 온도이다. 평균 온도(Tave)400K, 평균 당량비(ave) 0.25인 예혼합기 의 온도 성층화 폭은 40K이며 농도 성층화 폭은 0.15이다. 각 Zone의 체적비를 조절하여 투입 열량 (160.1J/cycle)을 동일하게 맞추었다. Fig. 9는 4가지 경우에서 나타난 최대 압력 상승률과 IMEP이다. CASE1인 경우 두 번째로 낮은 최대 압력 상승률을 가지면서 최대 IMEP를 얻은 반면, CASE2인 경우 가장 높은 압력 상승률을 가지면서 최소 IMEP를 얻 었다. CASE3인 경우 가장 낮은 최대 압력 상승률을 가졌지만 IMEP가 CASE1의 경우에 비해 훨씬 낮았 으며, CASE4에 비해 낮은 압력 상승률과 높은 IMEP를 얻었다. CASE1인 경우 온도와 당량비가 제 일 높은 Zone5에서 연소가 먼저 일어나고, 온도와 당량비가 제일 낮은 Zone1의 연소 시점과의 차이가 다른 경우에 비해 가장 크다. 각 Zone의 연소 시점의 차이가 클수록 연소 발생이 분산되어 압력 상승률 이 줄어든다. 또한 당량비가 높을수록 높은 온도를 가지기 때문에 연소를 발생시키기 위한 에너지가 충분하므로 완전 연소가 일어나 IMEP가 높다. 이에 비해 CASE2는 CASE1에 비해 각 Zone의 조건이 반 대이므로 상이한 결과를 나타냈다. Fig. 10은 위의 4 가지 경우와 온도 성층화, 농도 성층화가 존재할 경 우 나타나는 압력 선도이다. 온도 성층화는 CASE3 인 경우의 압력 선도와 가장 유사하며, 농도 성층화



Fig. 9 Maximum pressure rise rate and IMEP at each case



Fig. 10 Pressure traces for each case with fuel stratification and thermal stratification



Fig. 11 Operating range for various temperatures as a function of equivalence ratios at homogeneous and fuel stratification

는 CASE3과 CASE2의 중간 정도의 압력 선도를 나 타냈다.

Fig. 11은 초기 온도 및 초기 당량비를 변화시킨 조건에서 예혼합기가 균질한 경우(Homogeneous)와 예혼합기에 온도 및 농도 성층화가 존재하는 경우 (Fuel stratification)에 나타난 운전영역을 비교하였 다. 예혼합기에 온도 및 농도 성층화가 존재하면 충 분한 연소조건(고온, 고당량비)때문에 실화가 억제 되지만 반대로 과도한 온도와 당량비로 인한 조건 으로 노킹이 쉽게 발생되어, 농도 성층화가 존재하 는 경우에 나타난 운전영역과 유사했다.

4. 결 론

5-zone model을 통한 수치해석을 통해 초기온도 및 초기당량비를 변화시킨 조건에서, 예혼합기가 균질한 경우에 나타나는 운전영역을 온도 및 농도 성층화가 각각 존재하는 경우와, 동시에 존재하는 경우에 나타는 운전영역과 비교하였다.

- 예혼합기에 온도성층화가 존재하는 경우 온도 가 높은 Zone부터 연소가 순차적으로 일어나기 때문에 압력 상승률이 줄어들면서 고온 고당량 비 쪽으로 확장되었다. 실제엔진의 경우 실린더 벽면으로의 열전달, 고온의 잔류가스와의 불완 전한 혼합과 같은 원인으로 예혼합기에 존재하 지만 성층화 폭을 임의로 조절하기 어렵고, 온도 성층화 폭이 클수록 열전달에 의해 효율이 급격 히 떨어질 것으로 예상된다. 시뮬레이션 결과를 통해 흡기유동을 실린더 벽면으로 유도하는 방 법을 제안한다.
- 2) 예혼합기에 농도성층화가 존재하는 경우 당량 비가 높은 Zone부터 연소가 순차적으로 일어나 기 때문에 압력 상승률이 줄어들면서 고부하 영 역쪽으로 확장되었을 뿐만 아니라, 국부적으로 농후한 Zone에서도 연소가 활발히 일어남에 따 라 저부하 영역쪽으로 크게 확장되었다. 실제엔 진의 경우 이른 연료분사를 통한 농도 성층화를 유도하고 있으나 노킹과 높은 NOx 발생이 일어 날 가능성이 높다. 시뮬레이션 결과를 통해 적절 한 농도 성층화 폭을 유지하면서 연소가 일어나 기 위해서 다단분사를 제안한다.
- 3) 예혼합기에 온도성층화 및 농도성층화가 동시 에 존재하는 경우 충분한 연소조건(높은온도, 높 은당량비) 때문에 저부하 영역에서 발생하는 실 화가 억제되지만 고부하 영역에서는 과도한 온 도와 당량비로 인해 노킹이 쉽게 발생되어, 농도 성층화가 존재하는 경우에 나타난 운전영역과 유사했다. 결과 1), 2)를 바탕으로 실린더 벽면으

로의 공기유동과 예혼합기 중심부로의 다단분 사를 제안한다.

후 기

이 논문은 2010년 울산대학교 연구비에 의하여 연구되었음.

References

- 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.
- M. Sjoberg and J. E. Dec, "Smoothing HCCI Heat-Release Rates Using Partial Fuel Stratification with Two-stage Ignition Fuels," SAE 2006-01-0629, 2006.
- S. W. Kim, M. Y. Ki, Y. Lee and K. D. Min, "An Experimental Study of EGR Effect on Reducing the Noise of CAI Engine," KSAE 08-S0006, pp.37-42, 2008.
- O. S. Kweon and O. T. Lim, "Effect of Thermal Stratification for Reducing Pressure Rise Rate in HCCI Combustion based on Multi-zone Modeling," Transactions of KSAE, Vol.17, No.4, pp.37-42, 2009.
- O. T. Lim and O. S. Kweon, "Numerical Analysis for Booster Effect in DME HCCI Engine with Fuel Stratification," Transactions of KSAE, Vol.18, No.5, pp.19-25, 2010.
- C. Arcoumanis, C. S. Bae, R. Crookes and E. Kinoshita, "The Potential of Di-Methyl Ether (DME) as an Alternative Fuel for Compression-

Ignition Engines: A Review," Fuel, Vol.87, No.7, pp.1014-1030, 2008.

- S. Sato and N. Iida, "Analysis of DME Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion," SAE 2003-01-1825, 2003.
- S. Sato, D. S. Jun, S. P. Kweon, D. Yamashita and N. Iida, "Basic Research on the Suitable Fuel for HCCI Engine From the viewpoint of Chemical Reaction," SAE 2005-01-0149, 2005.
- J. Ozaki and N. Iida, "Effect of Degree of Unmixedness on HCCI Combustion based on Experiment and Numerical Analysis," SAE 2006-32-0046, 2006.
- 10) A. E. Luz, F. Rupley and J. A. Miller, CHEM-KIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Pacage for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, Sandia National Laboratories Report, SAND 89-8009B, 1989.
- 11) A. E. Luz, R. J. Kee and J. A. Miller, "SEN-KIN: A FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis," Sandia National Laboratories Report, SAND 87-8248, 1988.
- 12) 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, Int. J. Chemical Kinetics," Vol.30-3, pp.229-241, 1998.
- J. A. Eng, "Characterization of Pressure Waves in HCCI Combustion," SAE 2002-01-2859, 2002.
- 14) H. Yamada, H. Sakanashi, N. I. Choi and A. Tezaki, "Simplified Oxidation Mechanism of DME Applicable for Compression Ignition," SAE 2003-01-1819, 2003.