

DME 및 n-Heptane 연료의 디젤엔진 조건에서 분무연소특성 해석

유용욱* · 석준호* · 이상길** · 김용모†

Numerical Study on the Characteristics of Spray Combustion Processes in the DME and n-heptane Fueled Diesel-like Engine Conditions

Yongwook Yu, Junho Suk, Sangkil Lee and Yongmo Kim

Key Words: Fuel Sprays(연료분무), Flamelet model(화염편모델), Auto-ignition(자발화), High pressure vaporization(고압증발모델), Turbulence-chemistry interaction(난류와 화학반응의 상호작용)

Abstract

In the present study, in order to understand the overall spray combustion characteristics of DME fuel as well as to identify the distinctive differences of DME combustion processes against the conventional hydrocarbon liquid fuels, the sequence of the comparative analysis have been systematically made for DME and n-heptane liquid fuels. To realistically represent the physical processes involved in the spray combustion, this study employs the hybrid breakup model, the stochastic droplet tracking model, collision model, high-pressure evaporation model, and transient flamelet model with detailed chemistry. Based on numerical results, the detailed discussions are made in terms of the autoignition, spray combustion processes, flame structure, and turbulence-chemistry interaction in the n-heptane and DME fueled spray combustion processes.

1. 서 론

DME(dimethyl ether)는 가장 간단한 에테르로써 분자량도 46 g/mole 로 작은 편에 속하지만 분자량이 작은 다른 연료들과는 다르게 DME 는 자발화 온도가 낮아서 압축착화 엔진에 적당하다. 무엇보다도 DME의 큰 장점은 C-C 연결이 없고, 산소원자의 함유량이 크다는 데 있다. 이로 인해 DME를 연료로 사용한 연소에서는 soot을 거의 배출하지 않을 뿐만 아니라, NO_x 발생량도 디젤연료에 비해 20%나 급감시킬 수 있다. 또한 세탄가가 높고 연료특성도 좋기 때문에 새로운 연료로서 많은 연구가 활발히 이루어지고 있다.⁽¹⁻⁹⁾

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 난류연소과정에 있어서 디젤 유와는 상이한 분무연소 특성을 가질 것으로 예상된다. DME 연료를 실제 엔진(Diesel, HCCL, 가스터빈 연소기 등)에 적용할 수 있는 최적 연소조건을 도출하기 위해서는 DME 분무의 증발, 자발화 및 연소특성을 체계적으로 파악하는 것이 선결과제이다.

본 연구에서는 액체고압상태에서 DME 액적의 증발특성에 영향을 미치는 효과들을 고려한 고압증발모델⁽¹⁰⁾과 자발화 및 난류화염장을 제대로 모사할 수 있는 상세화학모델 기반의 Representative Interactive Flamelet(RIF) 모델⁽¹¹⁻¹⁴⁾을 기존의 분무모델과 결합한 포괄적인 수치모델을 이용하여, 고온 고압의 정적연소기에서 분사된 DME 및 n-Heptane 분무의 증발, 점화 및 난류연소특성을 체계적으로 해석하였다. 특히 디젤엔진의 연료로써 통상적으로 사용되고 있는 탄소수소액체연료와 DME

(2008년 6월 19일 접수 ~ 2008년 6월 23일 심사완료)

*한양대학교 대학원 기계공학과

**육군사관학교 무기기계공학과

†책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : ymkim@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2220-0428 FAX : (02)2297-0339

연료의 분무연소특성에 있어서 차이점을 체계적으로 해석하기 위해 동일한 연소조건에서 n-heptane과 DME 분무화염구조를 상세히 비교하였다.

2. 수치 및 물리 모델

액상과 기상에서 발생하는 중요한 물리 현상들은 비정상, 다차원 연립방정식으로 모델링된다. Eulerian-Lagrangian 다상 유동해석방법에서 기상의 지배방정식은 Euler 좌표계로 표시되는 반면 액상의 지배방정식은 Lagrangian 좌표계로 표현되며 액상과 기상의 지배방정식은 질량, 운동량, 열전달률을 나타내는 상호 관련된 생성항으로 결합된다. 본 연구에서 사용한 물리 및 수치 모델은 혼합분율의 변화에 분무의 증발영향을 고려한 Flamelet 모델⁽¹¹⁾, KH-RT 액적분열 모델⁽¹⁵⁾, 난류에 의한 액적의 dispersion을 고려해 주기 위한 stochastic 액적추적 모델⁽¹⁶⁾, 액적간의 충돌영향을 고려한 액적충돌모델⁽¹⁷⁾, 고압상태에서 적용할 수 있는 액적증발모델⁽¹⁰⁾, 그리고 k-ε 난류모델을 사용하였다. 고압증발모델과 RIF 모델에 대해서는 아래에 기술하였다.

본 연구에서는 고압상태에서 일어날 수 있는 실제기체의 거동, 온도, 압력에 따른 상태량 및 증발잠열의 변화, 주위기체가 액적으로 용해되는 현상, Stefan 유동 등 고압상태에서 액적의 증발특성에 중요한 영향을 미치는 효과들을 정확히 모사하기 위해 고압증발모델을 사용하였다. 액적과 기체장 간의 전단력에 의해 발생하는 액적 내부 유동을 고려하기 위하여 막이론 및 유효전도도 모델⁽¹⁸⁾을 사용하였다.

최근에는 증발이 난류 분무연소에 미치는 영향에 자세한 정보는 참고문헌⁽¹⁰⁻¹⁴⁾에 자세히 기술되어있다. 또한 DME의 화학반응모델로는 78개의 화학종과 336단계의 상세화학반응메커니즘⁽¹⁹⁾을 사용하였고 n-heptane의 경우 43개의 화학종과 185단계의 skeletal 메커니즘⁽²⁰⁾을 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

먼저 DME분무연소 특성해석을 위한 포괄적인 수치 모델의 예측능력을 검증하기 위해 고온·고압의 공기로 채워진 정적 실린더에서 DME분무가 주입되어 일어나는 물리적 과정을 수치적으로 해석하였다. 수치모델의

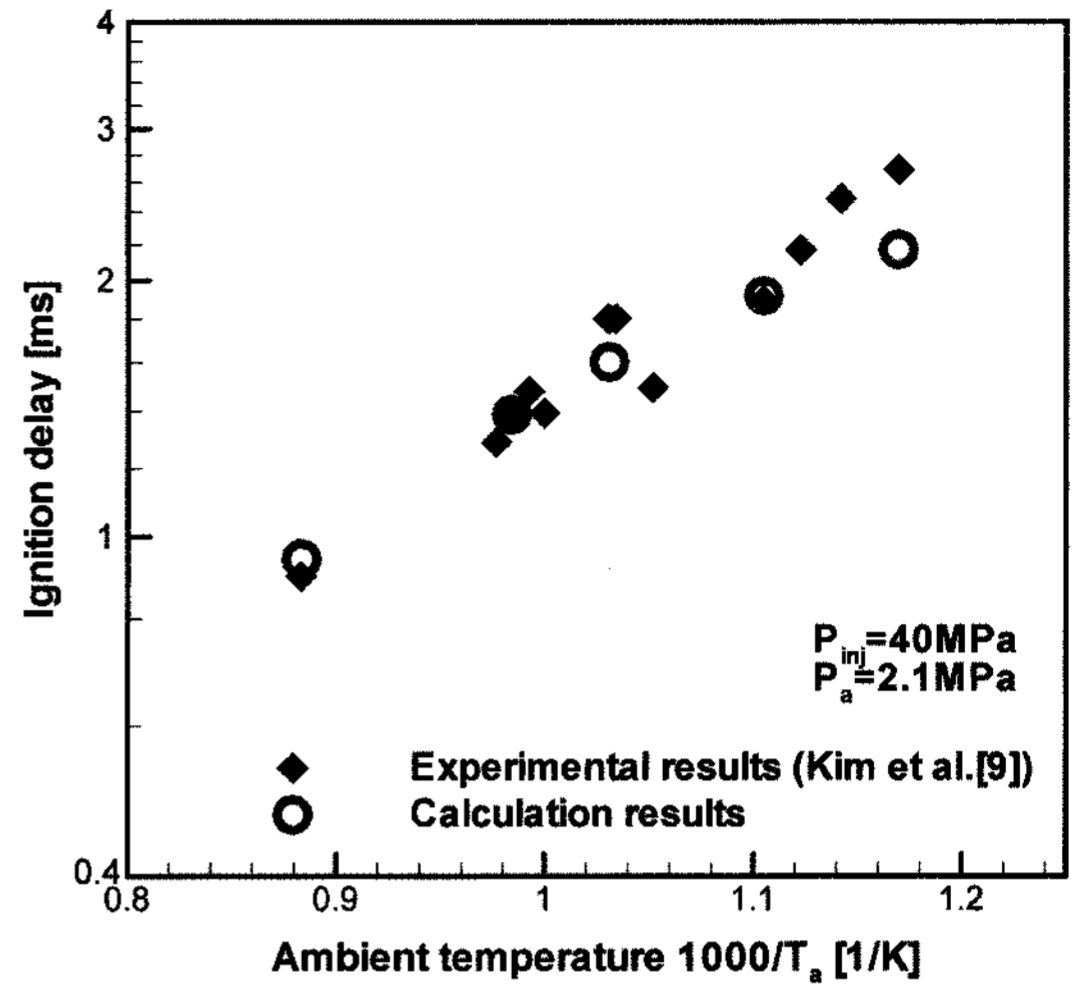


Fig. 1 Predicted and measured ignition delay times of infected DME spray at constant volume chamber

예측결과의 정확도를 평가하기 위해 최근에 수행된 실험결과⁽⁹⁾를 이용하였다. 이 실험은 정적 실린더 내의 초기압력 및 분사압력이 각각 2.1 MPa과 40 MPa이다. 반경방향, 40 mm 축방향, 90 mm로 되어있는 계산영역을 60×80의 비균일 격자계를 이용하여 차분하였다. DME 액체제트의 노즐유입속도는 연료유입 기간 동안 235 m/s로 일정하다고 가정하였다. 노즐의 직경은 0.22 mm 이고 유입된 DME의 총질량은 6.9 mg이다.

Figure 1에서 보는 바와 같이 넓은 구간의 초기온도에 따른 점화지연시기의 측정치⁽⁹⁾와 예측치가 대체로 일치하고 있음을 알 수 있다. 특히 초기온도, 1,132K(1000/T=0.88)에서 예측된 점화지연시기(0.941 ms)는 실험치(0.898 ms)와 잘 일치하고 있음을 알 수 있다. 그러나 상대적으로 낮은 온도조건(T<900K)에서는 실험치와 약간의 차이가 있음을 알 수 있다. DME 분무의 자발화 과정을 체계적으로 분석하기 위하여 실린더 초기조건(2.1 MPa, 1,132K)에 대응하는 순간적인 분무 화염장을 Figure 2에 도시하였다. 이 경우 연료분무의 주입기간은 상대적으로 짧은 0.64 ms이며 자발화는 대략 0.94 ms 근방에서 일어났다. 이 경우 DME 연료증기 제트 꼬리근방의 화학당량비 조건을 가지는 위치에서 자발화가 일어났다.

이러한 상대적으로 짧은 연료분무 주입기간의 점화위치 및 점화지연 특성은 상대적 긴 연료분무 주입기간의 경우에 비하여 큰 차이를 가지게 된다. 즉 연료분무의 주입기간 동안에는 연료분무의 증발에 의한 냉각효과와 강한 난류에 의한 스칼라소산율의 증대로 인하여 DME

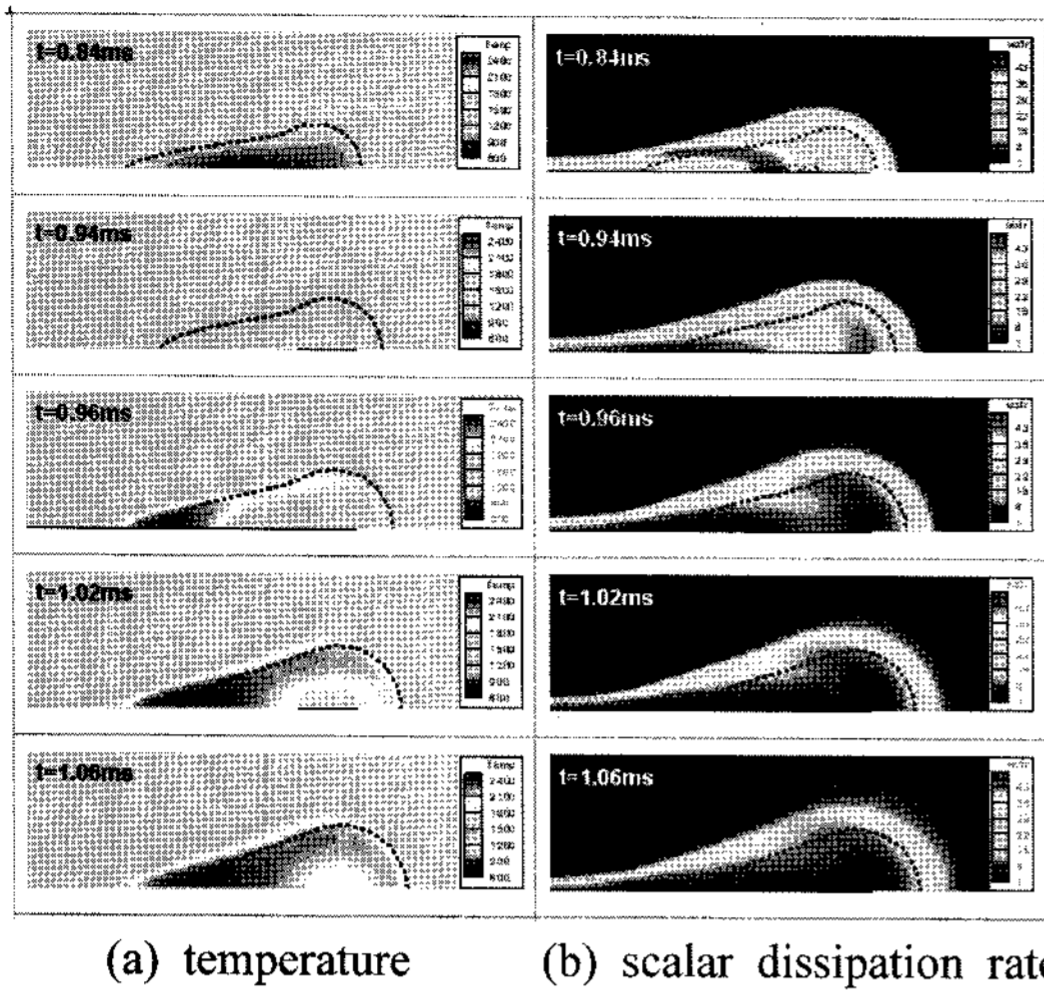


Fig. 2 The instantaneous distribution patterns of temperature and droplets near auto-ignition in the transient spray field

연료증기 제트 꼬리근방의 화학당량비 조건을 가지는 위치에서 자발화가 불가능하다. 그러나 액체연료의 유입이 완료된 후에는 DME 연료증기 제트 꼬리근방의 화학당량비 조건을 가지는 위치근방에서 스칼라소산율이 급격히 감소하게 되어 자발화 조건을 충족하게 되며 이러한 특성을 Figure 2에 잘 나타내고 있음을 알 수 있다. 반면에 상대적 긴 연료분무 주입기간의 경우에는 상대적으로 낮은 스칼라 소산율을 가지는 DME 연료증기 제트 머리부분의 화학당량비 조건을 가지는 위치근방에서 자발화가 쉽게 발생할 가능성이 있다.

디젤엔진의 연료로써 통상적으로 사용되고 있는 탄소 수소액체연료와의 분무연소특성에 있어서 차이점을 체계적으로 해석하기 위해 동일한 연소조건, 즉 동일한 주

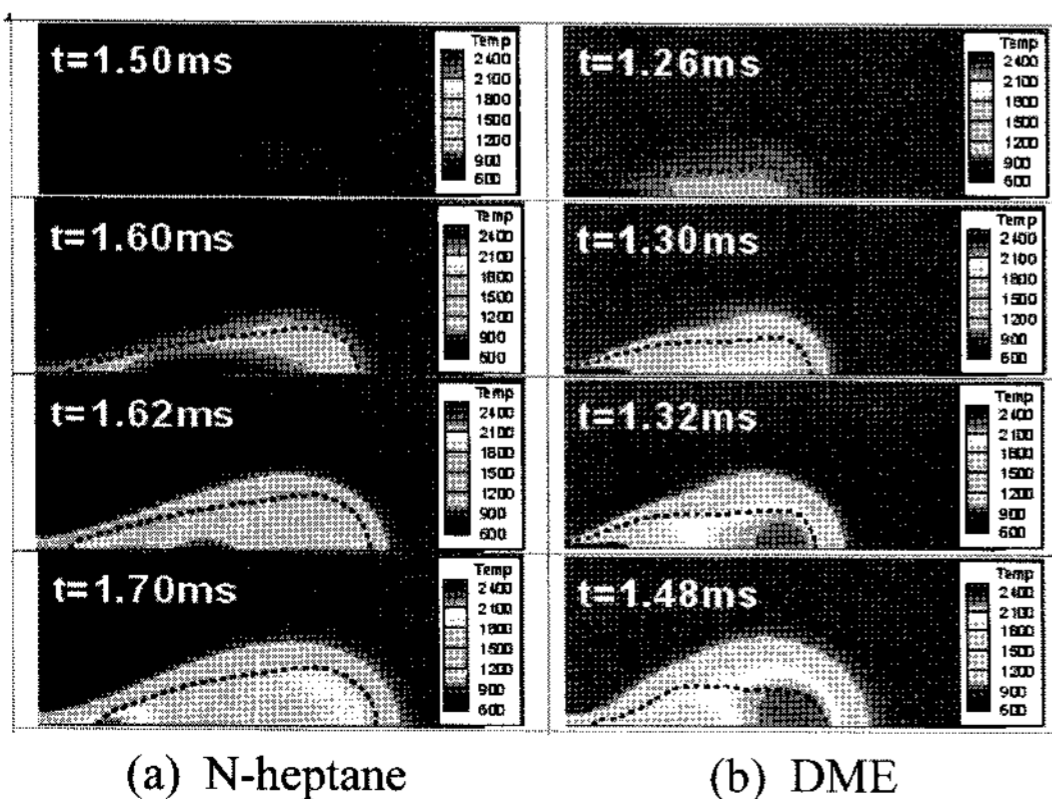


Fig. 3 The instantaneous distribution patterns of temperature distribution of n-heptane and DME spray flames

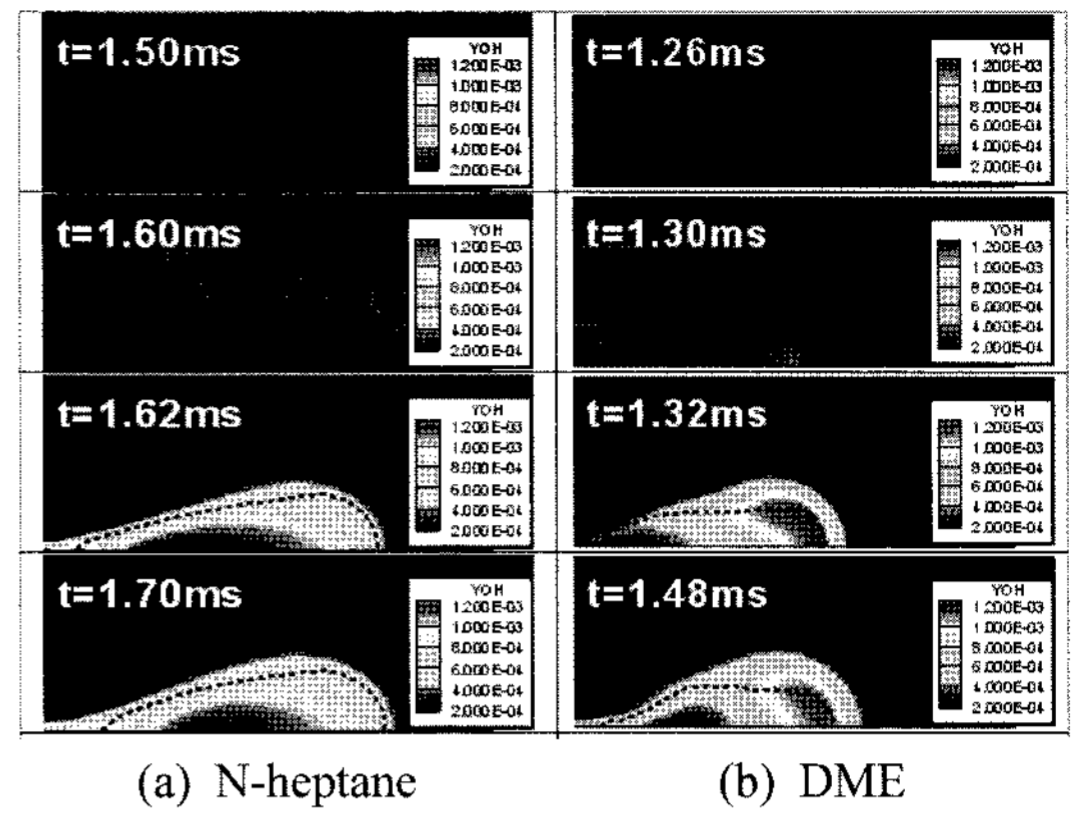


Fig. 4 The instantaneous contours of OH radical mass fraction of n-heptane and DME spray flames

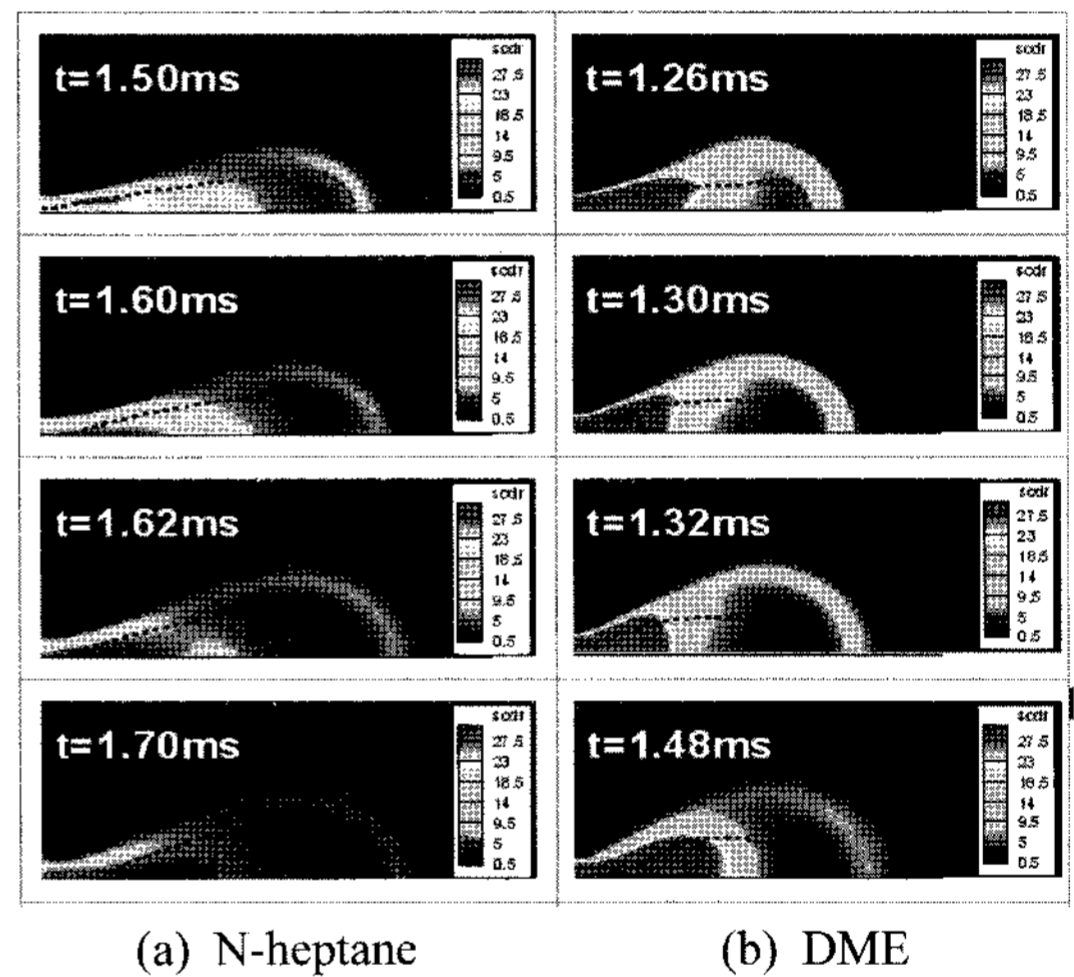


Fig. 5 The instantaneous distribution patterns of scalar dissipation rate of n-heptane and DME spray flames

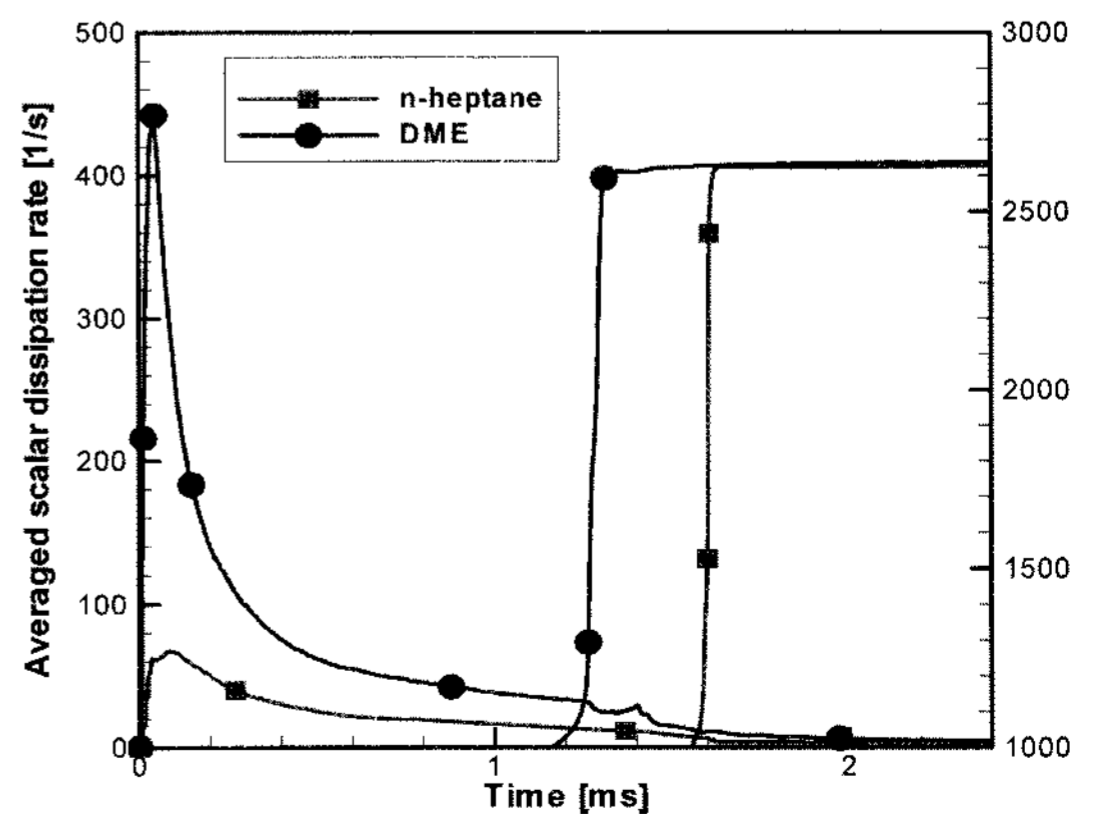


Fig. 6 Temporal evolutions of the scalar dissipation rate and the maximum temperatures

입연료질량(6 mg), 주입기간(1.4 ms), 주입속도(225 m/s), 초기 연소실 압력 및 온도(P=4.1 MPa, T=823K)에서의 n-heptane 과 DME 연료의 분무연소과정을 수치적으로

로 해석하였다. Figure 3-5은 n-heptane과 DME 분무화염장의 순간적인 온도, OH 라디칼, 그리고 스칼라 소산율을 도시하였다. 예상한 바와 같이 DME 분무의 점화

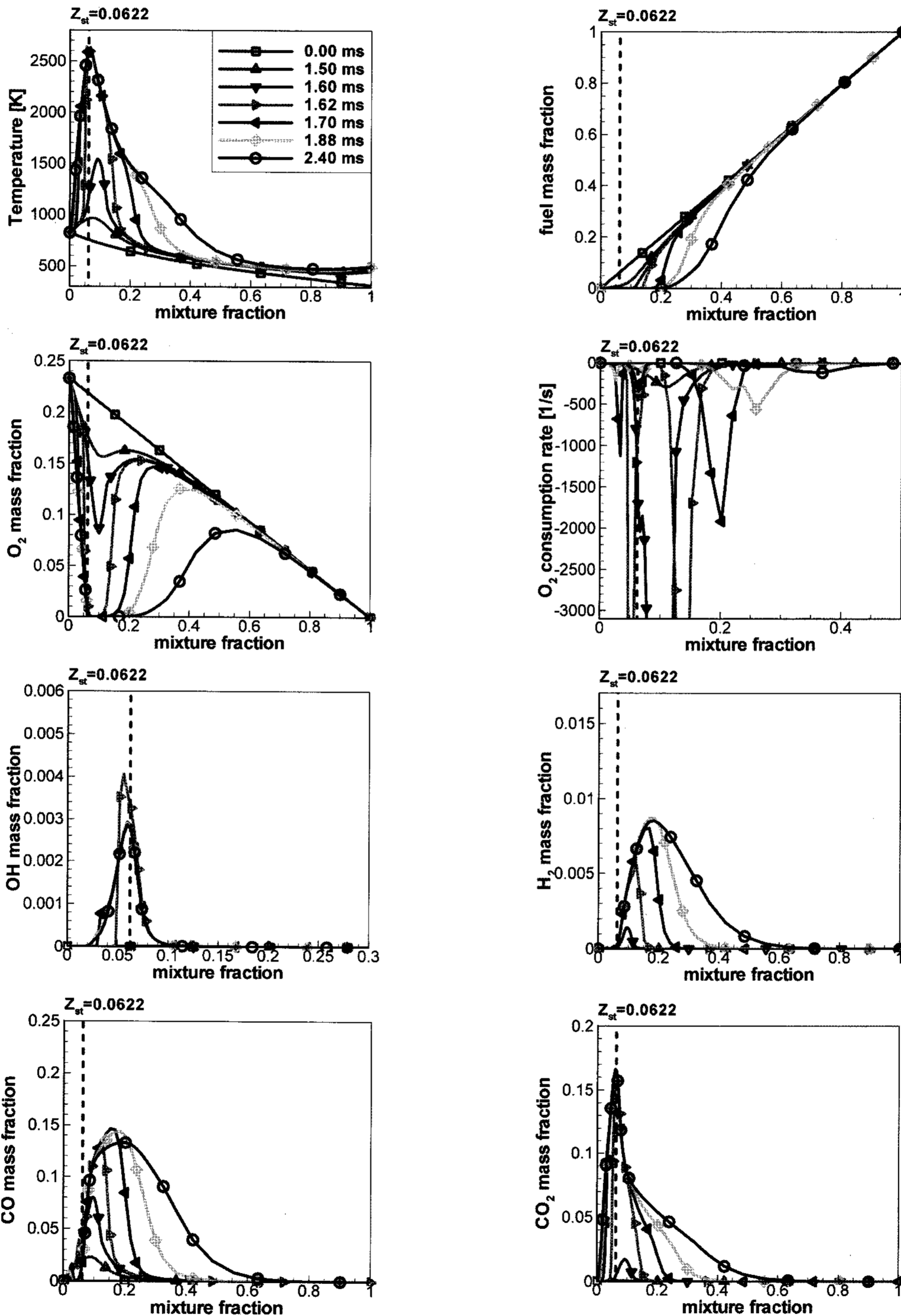


Fig. 7 Time evolutions of temperature and mass fraction of various species in the interactive flamelet for n-heptane spray

자연시간(1.303 ms)은 n-heptane 분무의 점화자연시간 (1.602 ms)에 비해 현저히 짧게 예측되었다. 이러한 n-heptane과 DME의 분무연소특성에 있어서 두드러진 차

이점은 DME 연료분무제트는 연료주입기간 동안에 자발화가 일어나는 반면에 n-heptane 연료분무제트는 연료주입이 끝난 후에 자발화가 일어나는 점이다. 이러한

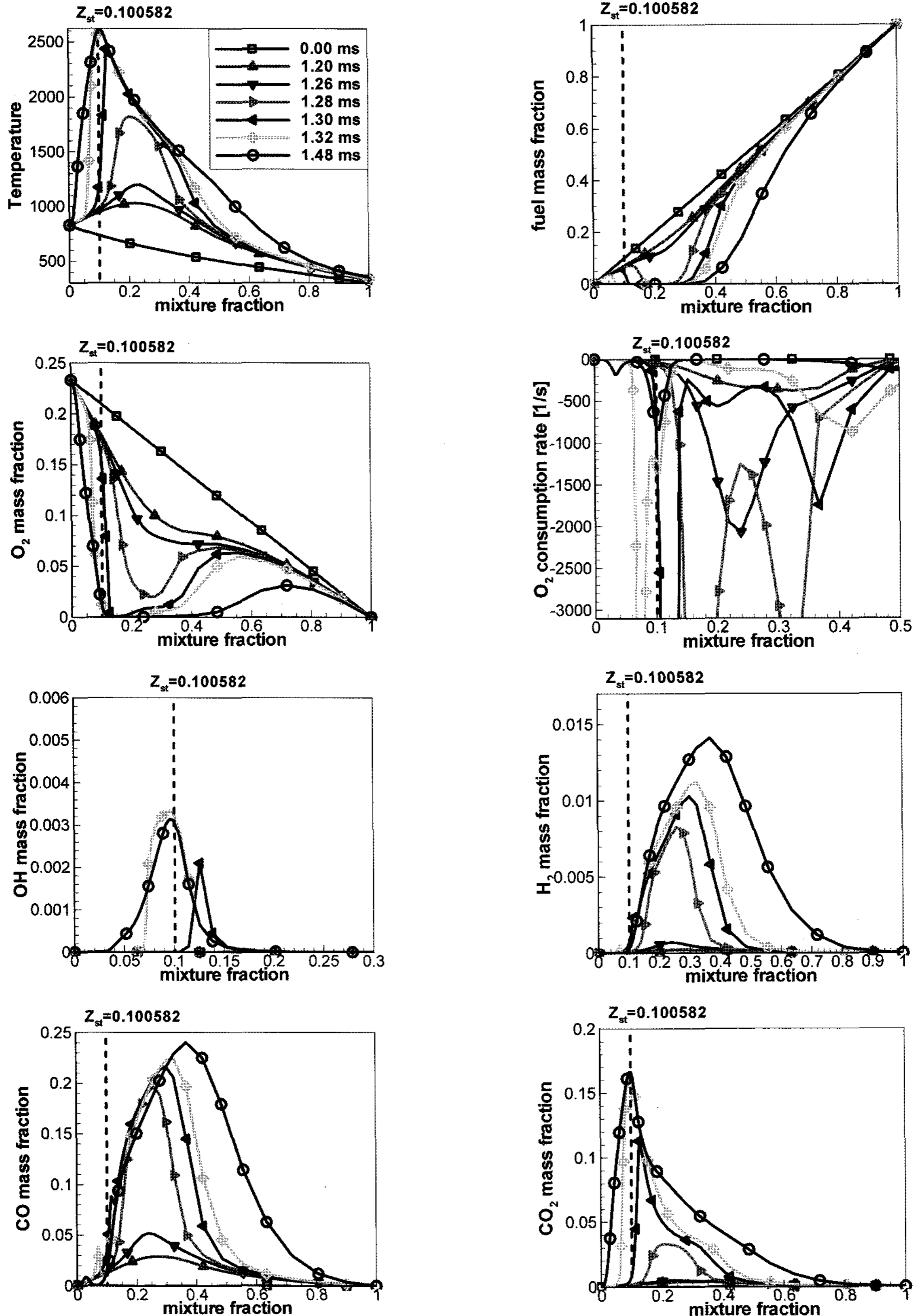


Fig. 8 Time evolution of temperature and mass fraction of various species in the interactive flamelet for DME spray.

연료주입기간 연료주입기간 전후에서 일어나는 상이한 자발화 시기로 인하여 상이한 자발화 위치를 가지게 된다. 연료주입기간 동안에 자발화가 일어나는 DME 연료 분무제트의 경우에는 상대적으로 낮은 스칼라 소산율을 가지는 DME 연료증기 제트 머리부분의 화학당량비 조건에서 약간 연료가 농후한 위치근방에서 자발화가 일어나고 있음을 알 수 있다. 반면에 연료주입이 끝난 후에 자발화가 일어나는 n-heptane 연료분무제트의 경우에는 스칼라소산율이 급격히 감소하게 되어 자발화 조건을 충족하게 되는 연료증기 제트 꼬리영역의 화학당량비 조건을 가지는 위치근방에서 자발화가 일어나고 있음을 알 수 있다. 그리고 DME 연료분무제트는 n-heptane 연료분무제트에 비해서 상대적으로 높은 증발율과 짧은 분무관통거리를 가지므로 DME 분무화염장은 상대적으로 인젝터와 근접한 상류영역에 형성됨을 알 수 있다.

Figure 6에서 도시된 바와 같이 DME 연료분무제트는 연료주입 초기에 특히 상대적으로 높은 증발률을 가지기 때문에 연료주입 초기에 스칼라소산율이 현저히 증가하게 됨을 알 수 있다. 연료주입 초기의 DME 연료분무제트의 최대 스칼라 소산율은 n-heptane 연료분무제트의 최대 스칼라 소산율의 7배 정도로 높게 나타나게 된다. 이러한 n-heptane과 DME의 분무연소특성에 있어서의 확연한 차이점은 연료액적의 증발특성, 분무거동, 그리고 균일 혼합기의 점화특성과 밀접하게 연계되어 있다. 그러나 이러한 수치계산 조건과 달리 실제적인 분무연소 시스템에서는 n-heptane과 DME 연료의 주입조건을 동일하게 설정하는 것은 용이하지 않다. 추후연구에서는 DME 분무연소특성 및 화염구조에 대한 정확한 이해를 위하여 연소가 일어나지 않고 증발만 일어나는 경우와 증발과 연소과정을 수반하는 n-heptane과 DME 분무제트에 대한 체계적인 실험 및 해석 연구가 수행될 필요가 있다.

Figure 7-8에서는 n-heptane과 DME 점화과정 및 분무연소특성을 상세히 분석하기 위해 초기 연소실 조건 (4.1MPa, 823K)에서 혼합분을 공간의 순간적인 화염구조를 온도, 화학종 질량분율(연료증기, O₂, H₂, OH, CO, and CO₂), 그리고 산소 소모율에 대하여 도시하였다. n-heptane 분무화염에 비해, DME 분무화염은 혼합분을 공간에서 산소와 연료증기의 비평형 반응영역이 현저히 넓게 분포하고 있다. 이러한 수치해석 결과로부터 DME 연료를 사용하는 엔진에서의 화염구조 및 공해물질 생성특성은 난류와 화학반응의 상호작용에 더욱 민감하게

영향을 받을 것임을 알 수 있다. 반응율이 상대적으로 낮은 점화초기를 지나면 반응율이 세개의 위치에서 정점을 이루며 전파하게 된다. 화학당량비 조건 근방에 위치한 반응율의 정점을 가지는 영역은 확산화염 특성을 가지며 연료 희박 및 농후 영역에서 위치한 정점은 예혼합화염 특성을 가지며 전파하게 된다. 이러한 삼지화염 구조를 가지는 복잡한 반응과정은 아주 짧은 기간 동안에 일어난다.

n-heptane 분무화염에 비해, DME분무화염은 혼합분을 공간상에서 연료가 농후한 영역에서 현저히 넓은 고온의 화염장을 형성하고 있다. 이와 같이 상이한 DME 분무화염의 구조는 합산소 연료의 연소특성과 기본적으로 관련되어 있는 것으로 사료된다. 두 연료의 혼합분을 공간상에서 대응하는 산소 및 연료증기 질량분율, 그리고 산소 소모율의 분포에 이러한 경향을 잘 나타내고 있다. 또한 DME 분무화염은 n-heptane 분무화염에 비해 연료가 농후한 영역에서 OH 라디칼이 훨씬 넓게 분포하고 있음을 알 수 있으며 이러한 DME 분무화염의 OH 특성은 직접분사식 디젤엔진의 실제적인 화염장에서 매연입자의 산화에 중요한 역할을 할 것으로 예상된다. 더욱이 DME 분무화염장에서는 연료가 농후한 영역에서 수소가 훨씬 높게 그리고 넓게 분포하고 있기 때문에 매연입자의 생성을 현저히 저감할 수 있는 또 하나의 특성을 가지고 있음을 알 수 있다.

4. 결 론

수치계산결과로부터 고온·고압 정적연소기에서 분사된 DME 및 n-Heptane 분무화염장의 특성을 아래에 요약하였다.

1) 본 연구에서 개발한 고압증발모델과 상세화학 모델 기반의 Representative Interactive Flamelet 모델은 고온 고압의 정적연소실내의 DME의 증발, 점화 및 난류연소특성을 대체로 잘 예측하였다.

2) 연료주입기간 동안에 자발화가 일어나는 DME 연료분무제트의 경우에는 상대적으로 낮은 스칼라 소산율을 가지는 DME 연료증기 제트 머리부분의 화학당량비 조건에서 약간 연료가 농후한 위치근방에서 자발화가 일어나는 반면에 연료주입이 끝난 후에 자발화가 일어나는 n-heptane 연료분무제트의 경우에는 스칼라소산율이 급격히 감소하게 되어 자발화 조건을 충족하게 되는 연료증기 제트 꼬리영역의 화학당량비 조건을 가지는

위치근방에서 자발화가 일어나게 된다.

3) DME 연료분무제트는 n-heptane 연료분무제트에 비해서 상대적으로 높은 증발율과 짧은 분무관통거리를 가지므로 DME 분무화염장은 상대적으로 인젝터와 근접한 상류영역에 형성되게 된다.

4) 연료주입 초기의 DME 연료분무제트의 최대 스칼라 소산율은 n-heptane 연료분무제트의 최대 스칼라 소산율의 7배 정도로 높게 나타나게 된다. 이러한 n-heptane과 DME 의 분무연소특성에 있어서의 확연한 차이점은 연료액적의 증발특성, 분무거동, 그리고 균일 혼합기의 점화특성과 밀접하게 연계되어 있다.

5) n-heptane 분무화염에 비해, DME 분무화염은 혼합분을 공간에서 산소와 연료증기의 비평형 반응영역이 현저히 넓게 분포하고 있다. 이러한 수치해석 결과로부터 DME 연료를 사용하는 엔진에서의 화염구조 및 공해물질 생성특성은 난류와 화학반응의 상호작용에 더욱 민감하게 영향을 받을 것임을 알 수 있다.

6) n-heptane 분무화염에 비해, DME 분무화염은 혼합분을 공간상에서 연료가 농후에 영역에서 현저히 넓은 고온의 화염장을 형성하고 있다. 이러한 현격히 상이한 DME 분무화염의 구조는 함산소 연료의 연소특성과 기본적으로 관련되어 있는 것으로 사료된다.

7) DME 분무화염은 n-heptane 분무화염에 비해 연료가 농후한 영역에서 OH 라디칼 및 수소가 훨씬 높게 그리고 넓게 분포하고 있음을 알 수 있으며 이러한 DME 분무화염의 특성은 직접분사식 디젤엔진의 실제적인 화염장에서 매연입자의 산화와 매연입자의 생성억제에 중요한 역할을 할 것으로 예상된다.

후 기

본 연구는 환경부 Eco-STAR Project(무저공해 자동차사업단)의 연구지원을 받아 수행되었으며 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

(1) Arcoumanis, C. (2000) "The Second European Auto-Oil Programme (AOLII)", European Commission, vol. 2, Alternative Fuels for Transportation.
 (2) Sorenson, S. C., Glensvig, M. and Abata, D. (1998)

"Di-methyl Ether in the Diesel Fuel Injection Systems", SAE Paper 981159.
 (3) Wakai, K., Nishida, K., Yoshizaki, T. and Hiroyasu, H. (1998) "Spray and Ignition Characteristics of Di-methyl Ether Injected by a DI Diesel Injector", Proceedings of the Fourth International Symposium COMO-DIA '98, pp. 537~542.
 (4) Kajitani, S., Chen, Z., Oguma, M. and Konno, M. (2002) "A Study of Low Compression-ratio Di-methyl Ether Diesel Engines", Int. J. Engine Res., Vol. 2, pp. 1~11.
 (5) Wakai, K., Nishida, K., Yoshizaki, T. and Hiroyasu, H. (1999) "Ignition Delays of DME and Diesel Fuel Sprays Injected by a D.I. Diesel Injector", SAE Paper 1999-01-3600.
 (6) Teng, H., McCandless, J. C., Schneyer, J. B. (2001) "Thermo-chemical Characteristics of Di-methyl Ether - An Alternative Fuel for Compression-Ignition Engines", SAE Paper 2001-01-0154.
 (7) Golovitchev, V. I., Nordin, N. and Chomiak, J. (1998) "Neat Di-methyl Ether: Is It Really Diesel Fuel of Promise?" SAE Paper 982537.
 (8) Golovitchev, V. I., Nordin, N., Chomiak, J., Nishida, N. and Wakai, K. (1999) "Evaluation of Ignition Quality of DME at Diesel Engine Conditions", Proceedings of the Fourth International Conference of Internal Combustion Engines 99 (ICE99): Experiments and Modeling, pp. 299~306.
 (9) Kim, Y., Lim, J. and Min, K. (2007) "A Study of the Dimethyl Ether Spray Characteristics and Ignition Delay", Int. J. Engine Res., Vol. 8, pp. 337~346.
 (10) Yu, Y., Kim, S. K. and Kim, Y. (2001) "Numerical Modeling for Autoignition and Combustion Processes of Fuel Spays in High-Pressure Environment", Combustion Science and Technology, Vol. 168, pp. 85~112.
 (11) Pitsch, H., Barths, H. and Peters, N. (1996) "Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach", SAE Paper 962057.
 (12) Barths, H., Antoni, C., and Peters, N. (1998) "Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI-Diesel Engines Using Multiple Interactive Flamelets", SAE Paper 982456.
 (13) Kim, S. K., Yu, Y., Ahn, J. H. and Kim, Y. (2004) "Numerical Investigation of the Autoignition of Turbulent Gaseous Jets in a High-Pressure Environment Using

- the Multiple-RIF Model”, *Fuel*, Vol. 83, pp. 375~386.
- (14) Yu, Y. W., Lee, J. and Kim, Y. (2008) “Numerical Studies on the Combustion Characteristics and Pollutant Formation for the DME Fueled Diesel Engine”, *Journal of ILASS-KOREA*, Vol. 13, No. 1, pp. 28~33.
- (15) Patterson, M. A. and Reitz, R. D. (1998). “Modeling of the Effects of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission”, SAE Paper 980131.
- (16) Amsden, A. A., O'Rourke, P. J. and Butler, T. D. (1989) “KIVA II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays”: Los Alamos National Labs, LA-11560-MS.
- (17) O'Rourke, P. J. (1981) “Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays”, Los Alamos National Laboratory report LA-9069-T.
- (18) Abramzon, B. and Sirignano, W. A. (1987) “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.
- (19) LLNL site
- (20) S. Liu, J. C. Hewson, J. H. Chen and H. Pitsch (2004) “Effects of Strain Rate on High-Pressure Nonpremixed n-Heptane Autoignition in Counterflow”, *Combustion and Flame*, Vol. 137, pp. 320~339.