<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-B.2009.33.4.248

Multi zone Modeling 을 이용한 흡기관내의 과급이 온도성층화를 갖는 예혼합압축자기착화엔진에 미치는 영향에 관한 연구

권 오 석*• 임 옥 택*

(2008년 10월 20일 접수, 2009년 1월 5일 수정, 2009년 3월 2일 심사완료)

Effect of the Boost Pressure on Thermal Stratification on HCCI Engine Using Multi-Zone Modeling

O Seok kwon and Ock Taeck Lim

Key Words:HCCI(예혼합압축자기착화), Pressure-rise Rate(압력상승률), Knocking(노킹), IMEP(평
균유효압력), Ringing Intensity(노킹강도), Thermal Stratification(온도 성층화), DME(디
메틸에테르), Multi-Zone Model(온도 성층화모델), Single-Zone Mode(온도균일모델)

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, a pressure rise rate is a major limitation for high load range and power reduction. Recently, we were able to reduce the pressure rise rate using thermal stratification. Nevertheless, this was insufficient to produce high power. In this study, the reduction of the pressure rise rate using thermal stratification was confirmed and the HCCI engine power was increased using the boost pressure. The rate and engine power were produced by CHEMKIN and modified SENKIN. As a result of increasing the boost pressure, a higher IMEP was attained while the pressure rise rate increased only slightly in the HCCI with thermal stratification.

-기호설명-

HCCI	: 예혼합압축자기착화엔진(homogeneous
	charge compression ignition)
PRR	: 압력상승률(pressure rise rate)
LTR	: 저온산화반응(low temperature reaction)
HTR	: 고온산화반응(high temperature reaction)
IMEP	: 평균유효압력(indicate mean effective pressure)
RI	: 노킹강도(ringing Intensity)

* 책임저자, 회원, 울산대학교 기계자동차공학부
E-mail: otlim@ulsan.ac.kr
TEL: (052)259-1633 FAX : (052)259-1680
* 울산대학교 기계자동차공학부

1. 서 론

고유가와 지구온난화로 인해서 고효율, 저공해 엔 진이 요구되고 있다. 두 목적을 달성하기 위한 차세 대 엔진으로서 균질한 혼합기를 피스톤의 압축에 의 해서 착화시키는 예혼합압축자기착화(Homogeneous Charge Compression Ignition, 이하 HCCI) 엔진이 주목 을 받고 있다.

매우 희박한 예혼합기를 사용하기 때문에 PM과 NOx의 배기가스가 적게 배출되고 CI엔진처럼 높은 압축비로 인하여 높은 열효율을 가진다. 하지만 이 런 장점에도 불구하고, HCCI 엔진은 여전히 실현되 지 않고 있다. 주된 원인은 연소기간 동안 고부하 영역에서 과도한 압력 상승률로 인하여 노킹이 발생 하기 때문이다. 최근의 논문에서는 온도 성층화, 농 도 성층화, 연소 후각을 이용하여 압력 상승률을 낮 추는 것을 제안하고 있다.⁽¹⁾ 온도 성층화의 경우, 국 부지역의 서로 다른 가스 온도 때문에 연료의 자발 화는 순차적으로 발생한다. 그래서 연속적으로 발생 하는 연소는 열 발생 시기를 분산시켜서 압력 상승 률을 저감시킨다.⁽¹⁾ 초기 온도가 높으면 높을수록 압 력 상승률은 더 많이 감소하지만, HCCI 엔진의 출력 을 높이는 것은 한계가 있다.

당량비를 높이지 않고 출력을 높일 수 있는 방법 은 과급이나 슈퍼차져를 이용하여 초기 압력을 높이 는 것이다.⁽²⁾ 비록 당량비는 같을지라도 부스터에 의 해 초기 압력이 증가할 때, 공기의 밀도가 높아지고 체적효율이 좋아져서 연소효율의 증대 시킬 수 있다. 그리고 단위사이클당 총 투입열량이 증가되므로 출 력이 증가된다.

기존의 선행 연구는 HCCI엔진에서 압력상승률을 저감시키기 위한 온도 성층화 효과에 초점이 맞춰 있다.⁽¹⁾ 본 연구에서는 온도 성층화 효과를 가진 HCCI에서 초기의 압력 변화에 따른 연소특성, 출력 그리고 배출가스에 대해서 알아보고자 한다.

저온산화반응과 고온산화반응을 가지고 있는 DME 연료를 사용하였다. 다른 연료와 비교해서 DME 연료 는 저온산화반응이 일어나는 동안, 많은 열이 발생하 기 때문에 고온산화반응이 일어나기 전에 온도 성층 화를 효과적으로 만들 수 있다. DME 연료의 특성을 n-Butane과 iso-Octane과 비교하여 Table 1에 기술하였다. 수치계산은 여러 학자들에 의해서 검증된 CHEMKIN2 와 변형된 SENKIN을 이용하여 엔진시 험을 모사하고, Curran의 DME모델(Species: 78,

시뮬레이션

Reactions: 336)을 사용 하였다.^(3,4)

본 연구에서, Sandia 실험실에서 계발된 CHEKIN2 와 변형된 SENKIN 프로그램을 이용하여 온도 균일 조건부터 온도 성층화 조건까지 수치계산을 하였 다.^(5,6) 계산에 사용된 Yammar 단기통 엔진의 제원은 Table 2 에 표시되어 있다. 수치계산은 흡기 밸브가 닫힌 직후부터 배기 밸브가 열리기 직전까지 계산되 었다. 단 한번의 압축 행정과 팽창 행정 과정에서 가스의 열역학적 특성을 계산하였다. 모든 가스는 이상기체(1)이고, 열전달과 질량전달은 고려하지 않 는 것으로 가정하였다. 에너지 보존법칙(2)와 질량 보존법칙(3)을 사용하였다. 또한 각 영역의 가스 압 력, 온도 및 화학조성은 완전하게 균일하다고 가정 하였고, 실린더 내 가스 평균온도, T_c 는 총 에너지 보존식(4)을 이용하여 계산하였다.

$$Pv = nRT$$
 (1)

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

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

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

N: Number of zone

 n_i : Number of moles

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

초기 온도의 증가에 따른 단위 사이클당 투입열량, Q_{in}을 계산한 식 (5)은 다음과 같다.

$$Q_{in} = \sum_{i=1}^{N} n_i \cdot \left(Q_{LHV} \cdot \frac{FA_i}{1 + FA_i} \right)$$
(5)

 Q_{LHV} : Low heat value of DME FA_i: Volume ratio of fuel to air of i_{th} zone

실제 엔진의 경우, 실린더 내부의 유동 및 벽면으 로 열전달 등과 같은 요인들이 있다. 이로 인해 초 기 온도 및 온도 성층화 폭이 가지는 효과를 제대로 고려할 수 없다. 따라서 수치계산을 하는 동안, 순 수하게 초기 온도와 온도 성층화 폭이 엔진 연소에 미치는 영향을 알아보기 위해서 열전달, 열손실, 블 로우 오프와 잔류 가스는 고려하지 않았다.

Table 1 Fuel properties

Name	DME	n-But ane	Iso-Octane
Molecular Formula	CH ₃ OCH ₃	C_4H_{10}	C_8H_{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%

 Table 2 Engine specification

Displacement	1133cc
Bore	112mm
Stroke	115mm
Connecting Rod Length	205mm
Compression Ratio	21.6
Number of Valves	2
IVC	48[deg ABDC]
EVO	312[deg ABDC]

온도 성층화를 위한 Multi-zone 모델의 각각의 영역 은 온도 균일 조건을 위한 Single-zone 모델을 기초로 하였다. Fig. 1은 Multi-zone 모델의 계산 순서를 보여 주고 있다. 각 영역의 초기 압력, 온도 그리고 체적이 입력된다. 그리고 흡기 밸브가 닫힌 시점부터 피스톤 의 압축에 의해서 각 존의 압력은 일정하게 증가하게 되고, 각 존의 체적은 변하게 된다. 각 존의 체적 변 화량은 압력으로 다시 환산되는데, 환산된 압력들의 평균값을 다음 계산의 초기 압력 값으로 대입하여 다 시 계산을 한다.

Fig. 2 에서 저온산화반응(LTR)과 고온산화반응 (HTR)의 시작시기 및 종료시기를 정의하였다. 저온 산화반응과 고온산화반응의 시작시기 및 종료시기는 각각 전체 열 발생률(dQ/dt)의 1%가 되는 0.2 kJ/ms를 기준으로 정하였다. 이 정의 방법은 저온산화반응이 끝난 지점과 고온산화반응이 시작되는 지점 사이의 기간을 정의할 수 있다. 이 방법은 게이오 대학의 Iida 연구실에서 사용한 방법과 동일하다.⁽⁷⁾

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 combustion duration

하지만, 다른 형식의 엔진, 실린더내부 그리고 연소실형태가 다른 조건에서는 최대 압력 상승률을 서로 비교하기가 상당히 어렵다.⁽⁸⁾ 예를 들면, Christensen의 논문에서는 자연흡기식과 슈퍼차져를 사용한 조건에서 HCCI 엔진을 실험하였다. 그 결과, 슈퍼차져를 사용한 경우, 자연흡입식 엔진에 비하여 최대 압력 상승률이 더 컸지만 노킹의 발생이 없이 운전이 가능한 것으로 확인되었다.⁽²⁾ 따라서, 본 연구에서는 노킹의 한계를 설정하기 위하여 Eng가 제안한 Ringing Intensity(이하 RI)를 이용 하였고, HCCI 연소에서 노킹이 발생하지 않는 운전 가능한 영역은 RI의 값이 5 MW/m² 이하로 설정하였다.⁽¹⁾

$$RI = \frac{1}{2\gamma} \times \frac{\left(0.05 \times \left(\frac{aF}{dt}\right)_{max}\right)^2}{P_{max}} \times \sqrt{\gamma RT_{max}}$$
(6)

1.00

 $(dP/dt)_{max}$ = 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 압력 변화에 따른 HCCI 연소 특성

Fig. 3은 온도가 균일한 경우로서 Ø_{DME}가 0.280, 초 기 온도, T₀가 383 K, 회전속도가 750 rpm, 압축비가 21.6일 때, 초기 압력 변화(P₀=0.1~0.18 MPa)에 따른 압력, 온도 변화를 압축 이후의 시간에 대해서 보여 주고 있다.

초기압력이 0.1 MPa에서 0.18 MPa까지 0.02 MPa씩 변화될 때, 투입열량, Q_m은 각각 848, 1004, 1171, 1339 그리고 1506 J/cycle이다. 초기 압력이 0.1 MPa에서 0.18 MPa까지 변화될 때, 최고 압력, P_{max}은 각각 11 MPa에서 21 MPa까지 약 10 MPa정도 증가하였다. 그 리고 최고 온도, T_{max}는 2236에서 2290 K까지 약 54K 증가하였다. 초기 압력 변화가 최고 압력에는 큰 영 향을 주었지만 최고 온도에는 거의 영향을 미치지 않는 것을 확인하였다.

Fig. 4는 동일 조건에서 연소가 일어나는 기간 (t = 22 ~ 25ms)을 확대한 그래프이다. 초기 압력이 0.1 MPa에서 0.18 MPa까지 증가함에도 불구하고, 최대 압력 상승률은 22.1, 21.9, 21.4 그리고 23.1 MPa/ms 로 거의 변화가 없었다. 초기 압력 변화는 연소 기간 중 최대 압력 상승률에 크게 영향을 주지 않는 것을 알 수 있었다.

저온산화반응과 고온산화반응은 초기압력과 무관하게 각각 780±10K, 1110±30K 의 일정한 온도에서 발생하였다. 초기 압력이 증가하면서 저온 산화반응의 열 발생률뿐만 아니라 고온산화반응의 열 발생률도 증가하였다.

연소기간 해석에서 초기 압력이 0.1 에서 0.18 MPa 로 증가할 때, 저온산화반응은 약 0.17 ms 진각되었고, 고온산화반응은 약 0.98ms 진각되었다.



Fig. 3 History of pressure and temperature under homogeneous temperature conditions



Fig. 4 History of pressure, temperature and heat release rate under homogeneous temperature conditions

전체 연소 기간은 초기 압력이 0.1 MPa 일 때는 약 2.04ms 이고, 0.18 MPa 일 때는 약 1.27 ms 으로 약 0.77 ms 감소하였다. 초기 압력이 증가함에 따라 전체 연소 기간이 줄어들었다.

초기 온도는 383 K 으로 일정하지만 높은 초기 압력이 혼합기의 온도가 고온산화반응이 시작하는 온도에 빨리 도달할 수 있도록 도와주기 때문에 연소 기간이 줄어들었을 것으로 판단이 된다.

Fig. 5, 6은 초기 압력이 0.1, 0.18 MPa인 경우의 압 력, 열 발생률, 온도 그리고 OH, H₂O₂, HCHO 와 같 은 중간생물의 몰 분율 변화를 보여주고 있다.

열발생 시, DME (CH₃OCH₃)는 감소하기 시작하고, CO, CO₂, HCHO 그리고 H₂O₂는 갑작스럽게 증가하였 다. 고온 산화 반응에 큰 영향을 미치는 H₂O₂와 HCHO의 몰 분율은 저온산화반응과 고온산화반응 사이에서 최고 몰 분율을 유지 하다가 고온산화반응 의 시작 이후 급격히 감소하였다. OH의 몰 분율의 경향은 열 발생률과 비슷하였다. 고온산화반응은 저 온산화반응에서 생성된 H₂O₂가 OH로 분해되는 반응 에 의해서 발생한다.

초기 압력이 0.1 MPa의 경우, H₂O₂와 HCHO의 몰 분율은 약 1.76 ms 동안 최고치를 유지하였다. 그리 고 초기 압력이 0.18 MPa의 경우에는 약 0.96 ms 유 지하였다. 초기 압력이 0.1 MPa에서 0.18 MPa로 증가 할 때, 중간 생성물의 존재기간은 약 0.18 ms 줄어들 었다. 초기 압력이 높을수록, 중간 생성물들의 존



Fig. 5 Radical history at initial pressure 0.1 MPa under homogeneous temperature conditions



Fig. 6 Radical history at initial pressure 0.18 MPa under homogeneous temperature conditions



Fig. 7 RI and IMEP at variable initial pressure under homogeneous

재기간이 감소하는데, 투입열량이 증가할지라도, H₂O₂의 몰 분율은 저온산화반응과 고온산화반응 사이에서 거의 일정한 값을 가지고 있다. 그래서 압력 상승률이 크게 증가하지 않은 것으로 판단된다.

3.2 Ringing intensity 및 IMEP

Fig. 7은 초기 압력 변화에 따른 RI와 IMEP를 보여주고 있다. 수치계산 조건은 당량비, Ø_{DME}는 0.280, 초기 압력, P₀는 0.1, 0.12, 0.14, 0.16 그리고 0.18 MPa, 회전속도는 750 rpm, 압축비가 21.6, 초기 온도, T₀는 383 K이다.

초기 압력이 증가할수록 *RI*는 약 36.01 MW/m²에서 약 21.92 MW/m²까지 약 14.09 MW/m² 감소하였다. 위에 서 언급 했듯이 온도 균일 조건에서는 초기 압력이 증 가할 때 최대 압력 상승률과 최고 온도의 변화는 거의 없지만, 최고 압력은 약 10 MPa 정도 증가하기 때문에, 초기 압력이 증가 할수록 RI는 감소하는 경향을 보여 주고 있다. 그러나 여전히 RI의 값은 5 MW/m² 보다 크 기 때문에 노킹은 전 영역에서 발생하였다.

평균유효압력은 초기 압력이 0.1 MPa 일 때 약 0.493 MPa이며, 0.18 MPa 일 때는 약 0.818 MPa로 약 0.325 MPa, 66% 증가하였다. 높은 초기 압력은 흡입 공기의 밀도를 높여 체적효율이 증가시킨다. 따라서 동일 당량비일지라도 단위 사이클당 투입열량이 많 아져서 평균유효압력은 증가되었다.

3.3 HCCI 연소와 배출가스 특성

Fig. 8은 노킹이 발생하지 않는, 즉 RI가 최대 약 5 MW/m² 의 값을 가질 때 온도가 균일한 경우 (P₀=0.1 MPa, TW=0 K), 온도 성층화 효과만 (P₀=0.1 MPa, TW=100 K) 있는 경우 그리고 온도 성층화 효과와 과 급 효과를 함께 고려했을 경우(P₀=0.18 MPa, TW=100 K)의 최고 온도, 평균유효압력, 일산화탄소(CO), 질소 산화물(NOx)의 몰 분율을 보여 주는 그래프이다.

첫 번째 조건은 온도가 균일한 경우로서, 당량비 는 0.280, 초기 압력, P_0 은 0.1 MPa, 초기 온도, T_0 는 383 K, 투입열량, Q_{in} 은 669 J/cycle이다. 두 번째 조건 은 온도 성층화 효과만 있는 경우로서, 당량비는 0.35, 초기 압력, P_0 은 0.1 MPa, 초기 평균 온도, \overline{T}_0 는 383 K, 온도 성층화 폭, TW은 100 K 그리고 투입 열량, Q_{in} 은 1064 J/cycle이다. 그리고 마지막 조건은 온도 성층화 효과 및 과급 효과를 함께 고려했을 경 우로서, 당량비는 0.35, 초기 압력, P_0 은 0.18 MPa, 초 기 평균 온도, \overline{T}_0 는 383 K, 온도 성층화 폭, TW은 100 K 그리고 투입열량, Q_{in} 은 1889 J/cycle이다.

3.3.1 온도 균일 조건을 고려한 경우 vs. 온도 성층화 조건을 고려한 경우

평균유효압력은 약 0.407에서 약 0.576 MPa까지 증 가 하였다. 이는 당량비가 0.22에서 0.35로 증가하여 투입열량의 증가 때문에 나타난 것으로 확인할 수 있 었다. 최고 온도는 2019에서 2454 K까지 증가하였다. 일산화탄소의 몰 분율은 온도 균일 조건(Ø_{DME}=0.22) 보다 온도 성층화 조건(Ø_{DME}=0.35)에서 더 많이 증가 하였다. 일산화탄소는 연소 시, 모든 탄소(C)를 이산 화탄소(CO₂)로 변화시키기에 충분한 산소가 존재하지 않거나 농후한 연공비에서 운전할 때 발생한다. 당량 비 증가로 인하여 보다 농후한 연공비에서 연소가 발 생하였기 때문에 일산화탄소의 몰 분율이 증가되었다.

온도 균일 조건(Ø_{DME}=0.22)과 온도 성층화 조건 (Ø_{DME}=0.35)에서 질소 산화물(NO_x)의 몰 분율은 비슷 하게 나타났다.

3.3.2 온도 성층화 조건만 고려한 경우 vs. 온도 성층화와 과급의 효과를 모두 고려한 경우

온도 성층화가 존재하는 경우, 초기 압력이 0.18 MPa일 때의 평균유효압력은 0.946 MPa이고, 0.1 MPa 일 때의 평균유효압력은 0.576 MPa이다. 약 0.370 MPa, 64% 증가 하였다. 실린더 내의 최고 온도는 초 기 압력 변화와 상관없이 비슷하게 나타났다.

일산화탄소의 몰 분율은 초기 압력이 0.1 MPa 보다 0.18 MPa인 경우, 몰 분율이 약 55% 감소하였다. 초기 압력이 0.18 MPa로 증가하면서, 공기밀도가 증가되었 다. 따라서 체적효율이 좋아지고 그 결과, 연소효율이 증대되었기 때문에 일산화탄소는 줄어들게 되었다.



Fig. 8 IMEP, maximum gas temperature and CO and NOx emissions under $RI \le 5MW/m^2$

질소 산화물의 몰 분율은 초기 압력이 0.1 MPa 보 다 0.18 MPa 인 경우, 약 65% 증가하였다. 질소산화 물의 몰 분율은 연소 온도가 약 2200 K 이상 지속하 는 기간이 길어졌기 때문에 몰 분율이 증가하였다.

4. 결 론

본 연구에서는 HCCI엔진에서 온도 성층화를 이용 하여 최대 압력 상승률을 저감시키고, 동시에 초기 압력을 변화 시켜 HCCI엔진의 연소 특성, 노킹발생 및 배출가스를 확인하였다.

- 온도 성층화 조건

- (1) 당량비가 같을지라도, 초기 압력이 증가할 때 단 위사이클당 투입열량의 증가로 인하여 평균유효압 력(IMEP)은 증가되었다.
- (2) 초기 압력이 증가할수록, 공기 밀도가 높아지고 체적효율이 좋아지고 그 결과, 연소효율이 증대되 어 일산화탄소(CO)의 몰 분율은 감소되었다.
- (3) 초기 압력이 증가 할수록, 실린더 내부의 온도가 2200 K 이상 지속하는 기간이 길어졌기 때문에 질 소 산화물(NOx)의 몰 분율은 증가되었다.

- 온도 균일 조건

- (4) 초기 압력이 증가할수록, 최고 압력은 증가하지 만, 최고 온도는 크게 변하지 않았다. 저온산화반 응(LTR)과 고온산화반응(HTR)은 진각 되었고, 연 소기간은 감소되었다.
- (5) 투입열량이 증가할지라도, 고온산화반응에 영향 을 미치는H₂O₂의 몰 분율은 저온산화반응과 고온 산화반응 사이에서 거의 일정한 값을 가지고 있다. 따라서 최대 압력 상승률이 크게 증가하지 않았다.

후 기

이 논문은 2009년 울산대학교 연구비에 의하여 연 구되었으며, 이에 감사 드립니다.

참고문헌

- (1) Sjoberg, M., Dec, J. E. 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, 2005-01-0113.
- (2) Christensen, M., Johansson, B., Amneus, P. and Mauss,
 F., 1998, "Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition," *SAE*, 980787.

- (3) Ozaki, J. and Iida, N., 2006, "Effect of Degree of Unmixedness on HCCI Combustion Based on Experiment and Numerical Analysis," SAE 2006-32-0046.
- (4) Sato, S. and Iida, N., 2003, "Analysis of DME Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion," SAE, 2003-01-1825.
- (5) Luz, A. E., Rupley, F. and Miller, J. A., 1989, "CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Pacage for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics," *Sandia National Laboratories Report, SAND* 89-8009B.
- (6) 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*, Vol. 30-3, pp. 229~241.
- (7) Sato, S., Jun D. S., Kwon, S. P., Yamashita, D. and Iida, N., 2005, "Basic Research on the Suitable Fuel for HCCI Engine from the Viewpoint of Chemical Reaction," *SAE* 2005-01-0149.
- (8) Eng, J. A., 2002, "Characterization of Pressure Waves in HCCI Combustion," SAE, 2002-01-2859.