

# 반응 메커니즘 기반의 수소 첨가 바이오가스 HCCI 엔진 성능 및 배출가스에 대한 수치 해석적 연구

박정수  
조선대학교 기계공학과

## Numerical analysis on performances and emission characteristics of HCCI engine fueled with hydrogen added biogas

Jungsoo Park

Department of Mechanical Engineering, Chosun University

**요약** 본 연구에서는 바이오가스 기반 예혼합 압축착화(Homogeneous charged compression ignition, HCCI) 엔진에 수소를 첨가하였을 때, 연소실 내부 압력, 온도 배출가스에 미치는 영향에 대해 살펴보았다. 자세히는 수소 첨가량과 과다공기량( $\lambda$ ) 변화에 따른 연소실 압력 온도, 그리고 생성물로서의 NO, CO<sub>2</sub> 배출 특성을 화학 반응 해석 프로그램을 사용하여 고찰하였다. 대상의 엔진은 2300cc 바이오가스 엔진 발전기로서 압축비 13:1, 발전량 15kW 급이다. 과급압은 1.2bar 고정 조건이며, rpm은 1800rpm의 정속 조건이다. 엔진 연소 방식은 예혼합 압축 착화를 모사하였다. 본 연구를 진행하기에 앞서 바이오가스의 주요 조성인 메탄의 연소 및 산화 메커니즘에 대한 선행 연구에 대한 고찰을 통하여 연소반응 메커니즘을 규명하기 위한 반응 메커니즘 연구 기술의 경향을 살펴보고, 본 연구에 적용 가능한 반응 메커니즘을 선정하여 해석을 진행하였다. 수소를 첨가할 때 NO는 증가하는 반면, CO<sub>2</sub> 등의 배출량은 감소하였고 실린더 내부 압력이 상승하며, 상승 구간이 진각 됨을 알 수 있었다. 또한, 희박영역에서 수소 첨가가 가연 한계를 증가시켰다.

**Abstract** In this research, numerical analysis was performed to determine the effects of hydrogen on biogas combustion for homogeneous charged compression ignition (HCCI) engines. The target engine specifications were a 2300cc displacement volume, 13:1 compression ratio, 15kW of electricity, and 1.2 bar boost pressure. The engine speed was fixed to 1800rpm. By varying the excess air ratio and hydrogen contents, the cylinder pressure, nitric oxide, and carbon dioxide were measured as a function of the hydrogen contents. According to preliminary studies related to the reaction mechanism for methane combustion and oxidation, a GRI 3.0 mechanism as the base mechanism was selected for HCCI combustion calculations describing the detailed reaction mechanism. By adding hydrogen, NO was increased while CO<sub>2</sub> was decreased. The cylinder pressure was also increased, having advanced timing for the maximum cylinder pressure and pressure rise region. Furthermore, lean operation limits were extended by adding hydrogen to the HCCI engine.

**Keywords** : HCCI, Reaction mechanism, Engine generator, Biogas, Hydrogen

### 1. 서론

기존 내연기관 기반의 발전 시스템은 성능 및 효율의 향상과 환경적인 문제를 동시에 고려하여 기술 발전을

이뤄왔다. 최근 강화된 배출가스 규제와 더불어, 차세대 연료에 대한 관심이 함께 증가하는 가운데, 수첨 바이오가스의 적용에 대해 연구가 진행되어 왔다. 바이오가스(Biogas)란 미생물 등을 사용하여 바이오매스(Biomass)

\*Corresponding Author : Jungsoo Park(Chosun Univ.)

Tel: +82-10-3146-3227 email: j.park@chosun.ac.kr

Received October 1, 2018

Revised November 22, 2018

Accepted December 7, 2018

Published December 31, 2018

에서 만들어낸 연료로서 수소, 메탄 등의 가스 상태로 이루어져 있다. 바이오메스는 식물이나 음식물 쓰레기, 가축 분뇨 등으로 적절히 이용함으로써 재생 에너지원으로 기존 화석 연료를 대체할 수 있다[1].

기존의 메탄 혹은 메탄이 주성분인 천연가스와 유사한 연료 특성을 지닌 바이오가스는 메탄 성분 외에 CO<sub>2</sub>도 다량 포함되어 있어 연소 후에 배출되는 온실가스의 문제가 있다. 또 CO<sub>2</sub>의 높은 비열로 인하여 연소온도를 낮추게 되고 이로 인해 연료사용에 있어서 효율이 떨어지게 된다[2]. 따라서, 이를 보상하기 위한 대안으로 수소를 첨가하는 방식이 있으며, 연소 효율 증진을 도모할 수 있다[3, 4]. 수소와 바이오가스 기반의 연료를 엔진에 첨가하기 위해서는 연료 적용성이 탁월한 연소 방식을 채택해야 하며, 신연소 기술로서 HCCI(Homogeneous charged compression ignition, 균일 예혼합 압축 착화) 방식은 이러한 요구 조건을 만족시킬 수 있다.

반면, HCCI 엔진은 예혼합 방식에 압축 착화 연소 방식을 적용한 것으로, 연소 시기의 대부분이 화학 반응에 의해 지배되기 때문에, 개념 설계를 통한 엔진 설계 시, 화학 반응이 반드시 고려되어야 한다[5]. 메탄 기반의 연소 및 산화 반응에 대한 반응 메커니즘은 현재까지 상당한 규명이 되었으며, 이를 바탕으로 신연소 기술인 HCCI 연소 해석을 통해 개념설계 접근을 하는 것은 매우 바람직하다.

본 연구에서는 HCCI 연소 방식 기반의 엔진 발전기를 대상으로 화학 반응 메커니즘을 적용하여 연소 현상 및 배출 가스 특성을 파악하고자 하였다. 자세한, 대체 연료로서 바이오가스를 사용함에 있어 수소를 첨가함에 따라 달라지는 연소실 내부의 압력과 온도 등의 열역학적 상태량을 살펴보고, 수소의 첨가량과 과다공기량 ( $\lambda$ )에 따른 NO, CO<sub>2</sub> 배출 경향성을 수치 해석적으로 고찰하였다.

## 2. 연구 방법

### 2.1 대상 엔진 발전기

대상의 엔진은 2300cc 가스엔진 발전기이며, wastegate 타입의 터보차저가 장착되어 과급압 1.2bar의 상태로 흡기 조건이 고정되었다.

발전기에서 생산되는 전력은 15kW으로서 1800rpm

의 정속 조건에서 전력이 생산되며, 주 연료인 바이오가스의 조성은 메탄과 이산화탄소의 체적 비율 6:4이다. 이는 통상 landfill gas로 일컫는 바이오가스의 대표 조성이다.

자세한 엔진 제원은 Table 1에 나타내었다. 본 제원에 해당하는 실험 결과는 선행 연구 결과로부터 추출하였으며, 본 연구의 수치 해석 결과의 대조군으로 활용되었다 [6].

Table 1. Engine generator specifications

Item	Specification
Cooling type	Vertical water-cooled
Bore	88mm
Stroke	94mm
Displacement	2300cc
Compression ratio	13 : 1
Intake system	Waste-gate turbocharger
Maximum power	30 kW
Engine operating speed	1800rpm
Boost pressure	1.2 bar
Electric power	15kW
Fuel composition(vol. %)	CH <sub>4</sub> : CO <sub>2</sub> = 6 : 4

### 2.2 수치해석

본 연구에서는 화학 반응 해석 프로그램인 CHEMKIN을 사용하였다.

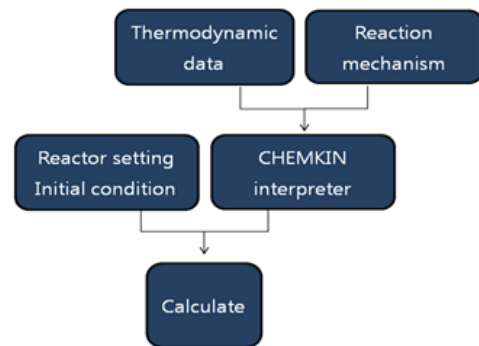


Fig. 1. Calculation process of CHEMKIN

CHEMKIN의 해석 과정을 Fig. 1에 나타내었다.

입력 데이터로서 반응 메커니즘과 열역학적인 데이터가 입력되었으며, 대상 엔진 발전기의 제원을 모사하였다. 주요 입력 데이터인 메탄의 반응 메커니즘은 Table 2와 같이 다양하게 존재하며, 반응 메커니즘 별로 주요 구성 화학종과 요소 반응(Elementary reaction)수가 다르다. 본 연구에서는 보다 적정량의 화학종을 모사한 요소 반응을 고려하기 위해, GRI 3.0 메커니즘을 선택하였다.

Table 2. General features of different mechanisms

Mechanism	# of species	# of elementary reactions
GRI 3.0	53	325
Konnov 0.5	127	1207
Leeds 1.5	37	175
NIST	34	240

반응 메커니즘 데이터는 화학종에 따라 생성될 수 있는 요소 반응 별, A-factor 및 활성화 에너지 정보를 포함하고 있으며, 이에 따라, Arrhenius 방정식을 통해, 반응 상수를 계산한다. Arrhenius 방정식은 아래의 식 (1)과 같다.

$$k = A e^{-Ea/RT} \quad (1)$$

여기서, A는 A-factor, Ea는 활성화 에너지, R은 기체 상수를 의미한다. 온도 T는 엔진의 행정 과정 중에 변화하는 온도 조건이다.

Table 3는 수치해석에 사용된 변수들의 조건을 나타내고 있다. 수소 첨가율은 부피 비율 기준 0%부터 5% 단위로 15%까지 선정하였고, 과다공기량은 1.0부터 3.0까지의 변화범위에서 계산하였다.

Table 3. Variable ranges

Variable	Ranges
Excess air ratio( $\lambda$ )	1.0 / 1.2 / 1.4 / 1.6 / 1.8 / 2.0 / 2.5 / 3.0
H <sub>2</sub> contents(vol. %)	0 / 5 / 10 / 15
Engine speed	1800rpm

수치해석을 통하여 압력과 온도분포, CO<sub>2</sub>와 NO의 배출량을 예측하였다. 생성물로서의 질소산화물의 경우, NO와 NO<sub>2</sub>를 모두 포함하고 있지만, 내연기관과 같이 NOx의 생성이 열적 생성 메커니즘(Thermal NOx mechanism)에 집중되어 있는 경우, NO량이 지배적이며

로 NO<sub>2</sub>는 제외하였다[4].

### 3. 해석 결과

#### 3.1 기초해석을 통한 신뢰도 확보

Fig.1은 바이오가스 및 수첨 바이오가스 연료 적용시의 실험 및 해석 결과 비교를 나타낸다. 해석 결과에서 볼 수 있듯, 해석 결과의 오차범위 3%이내이며, 이는 화학 반응 모사가 예측 경향성에 신뢰도를 부여함을 나타낸다.

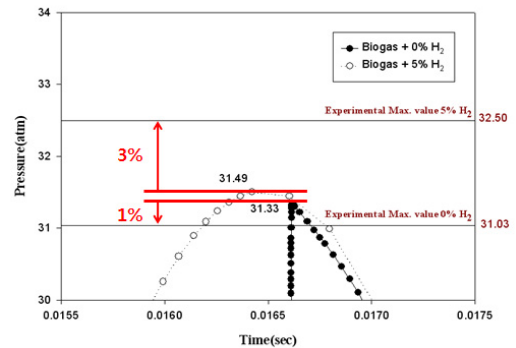


Fig. 2. Comparison of maximum pressure between experimental and numerical results [6]

#### 3.2 수소첨가에 따른 효과

Fig. 3과 4는 수소 첨가율 변화 시의 실린더 온도 및 압력 변화를 나타낸다. 본 해석에서 과다공기량은 1.2로 고정되었다. 수소의 조성이 증가함에 따라 점화시기가 빨라져 높은 온도를 유지하는 시간이 증가하며, 압력이 상승함을 알 수 있다.

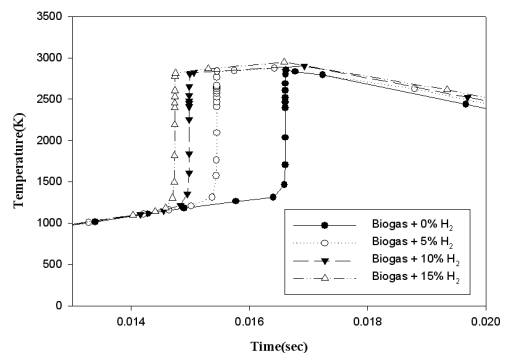


Fig. 3. Fundamental effect of hydrogen addition on cylinder temperature

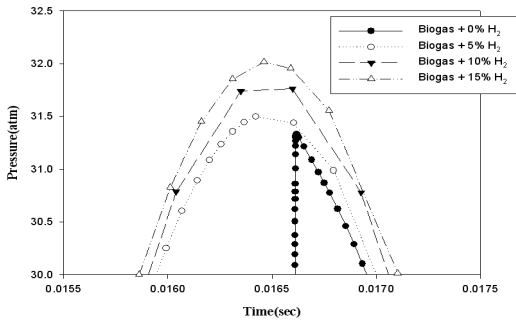


Fig. 4. Fundamental effect of hydrogen addition on cylinder pressure

수소가 0%일 경우 압력분포를 보면 시간이 0.0166초 일 때 갑자기 증가하게 되는데 이는 메탄에 비해 상대적으로 착화점이 낮은 수소의 영향이 없기 때문이라고 생각된다.

수소가 포함되어 있는 조건에서는 수소의 빠른 연소 속도와 화염 전파 속도에 기인하여 수소 미첨가 조건보다 온도가 더 빨리 증가하게 되고 그에 따라 메탄의 연소도 빨라지게 되어 결과적으로 완만한 압력분포를 보이게 된다. 이는 수소 첨가 시, 실린더 내부 거동이 진각된 상태에서 구현됨을 알 수 있다. 수소 15% 첨가 시, 최대압력은 약2%, 온도는 약3% 증가하였으며, 이는 열효율 증가에 영향을 미칠 것으로 판단된다.

Fig. 5와 6은 수소 첨가율에 따른 NO와 CO<sub>2</sub> 변화를 나타낸다. 열적 NO 생성 메커니즘 특성에 따라, NO의 특성에 따라, 연소 온도에 강하게 의존하는 경향을 보인다. 또한 수소가 첨가됨에 따라 높은 온도가 지속되는 시간이 길어지고 NO도 더 빠른 시간에 더 많이 생성되는 것도 알 수 있다.

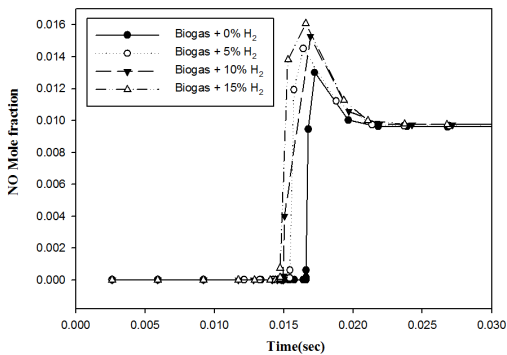


Fig. 5. Fundamental effect of hydrogen addition on NO mole fraction

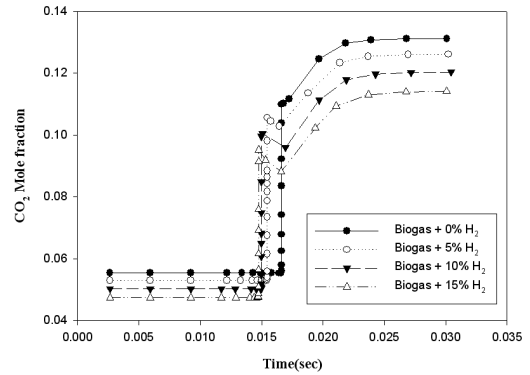


Fig. 6. Fundamental effect of hydrogen addition on CO<sub>2</sub> mole fraction

CO<sub>2</sub>는 수소가 첨가되면서 감소하는 것을 알 수 있는데 이는 앞에서 언급한 수소 첨가에 따른 바이오가스 체적 효율 감소 때문으로 판단된다.

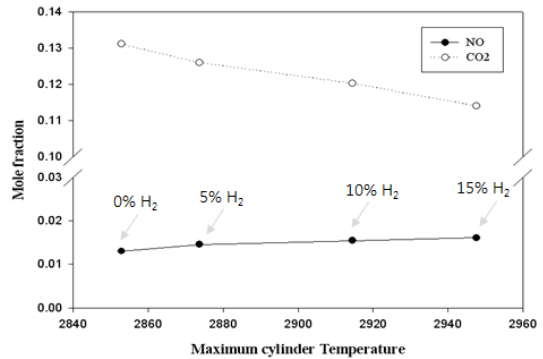


Fig. 7. NO and CO<sub>2</sub> trend as a function of maximum cylinder temperature

Fig. 7은 연소 최대 온도에 따른 NO와 CO<sub>2</sub> 경향을 보여준다. 수소 첨가율에 따라 수소의 발열량에 기인하여 최대 온도가 상승함을 알 수 있다. 그에 따른 NO 증가가 수반되는 것을 알 수 있으며, CO<sub>2</sub> 감소이유는 앞서 설명하였다.

### 3.3 과다공기량에 따른 수첨 효과

Fig. 8과 9는 과다공기량에 따라 수소 첨가가 미치는 영향을 연소 최대압 및 온도 관점에서 나타내었다.

이론 공연비를 기준으로 희박 영역에서의 효과를 파악하기 위해  $\lambda=1$ 부터 증가시켰으며, 변화 범위는 Table 3에 나타내었다. 해석 결과, 연소 온도 및 연소 압력 모

두 희박 영역으로 갈수록 감소하였으며, 고정된  $\lambda$  조건에서 수소 첨가에 따라 압력 및 온도 향상을 모색할 수 있음을 보여준다. 이는 희박 영역에서 저하된 연소 성능을 수소 첨가를 통해 보상할 수 있음을 보여준다. 이론공 연비 조건에서 바이오가스 단일 연소 시에 떨어진 최대 압력은 HCCI 연소의 특성상 요구되는 희박 조건이 구비되지 않았기 때문인데, 그럼에도 불구하고, 수소를 첨가할 경우, 트리거(Trigger) 역할을 수행함으로써, 연소 현상을 구현할 수 있다.

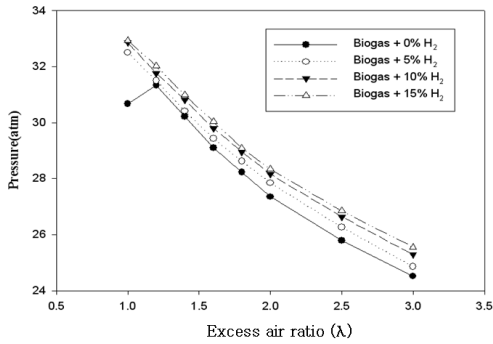


Fig. 8. Maximum pressure changes with various H<sub>2</sub> addition and excess air ratio

일반적으로 HCCI 엔진의 연소는 기존의 내연기관 시스템에서 일부 운전 조건이 만족되어야 연소를 구현할 수 있다. 이를테면, 가열을 통한 흡기 온도 상승, 일정 압축비 구현, 초희박 영역이 그것이다. 이 중, 가열을 통한 흡기 온도 상승은 히터 등의 부가적인 장치를 통해 구현 가능하기 때문에, 효율을 저해하는 요인이 될 수 밖에 없다. 하지만 수소 적용 시, 수소의 트리거 역할을 이용한 온도 상승 분으로 흡기 온도 상승 역할을 대신 할 수 있다.

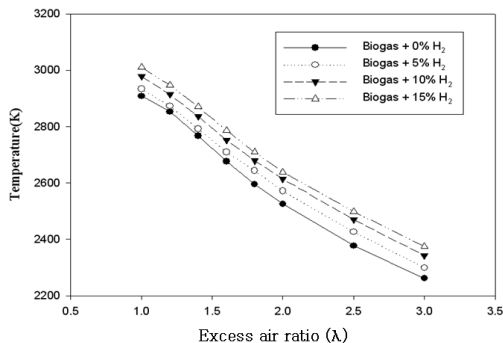


Fig. 9. Maximum temperature changes with various H<sub>2</sub> addition and excess air ratio

Fig. 9에서 볼 수 있듯, 15% 수소 첨가를 통해 연소 최대 온도를 평균 100K 이상 증가시킬 수 있다.

Fig. 10은 과다공기량에 따라 수소 첨가가 미치는 영향을 NO 관점에서 나타내었다. NO의 경우,  $1.4 < \lambda < 1.6$  영역에서 생성량이 최대가 됨을 보이는 반면, 이 영역을 벗어난 희박 영역에서는 급격히 감소하며, 희박 연소의 장점을 보여주고 있다. 과다공기량에 따른 이러한 경향성은 타 선행 연구 결과를 통해서도 그 유사성이 확인되며, 이는 연료가 과다공기량에 따라 지나는 화염 속도의 최대 영역에 의존함을 보여준다. (Fig. 11)

Fig. 12는 과다공기량에 따라 수소 첨가가 미치는 영향을 CO<sub>2</sub> 관점에서 나타내었다. 상대적으로 연료량이 희박한 희박영역으로 갈수록, 탄소 기반의 생성물이 감소함에 따라, CO<sub>2</sub>가 감소함을 보이며, 수소 첨가시 추가적인 CO<sub>2</sub> 저감 효과를 누릴 수 있음을 보여준다.

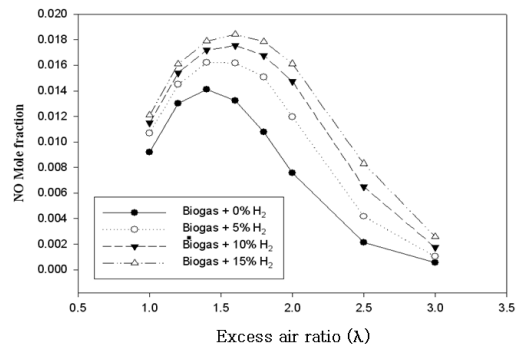


Fig. 10. NO changes with various H<sub>2</sub> addition and excess air ratio

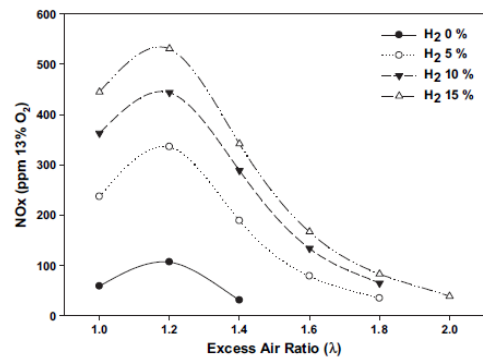


Fig. 11. Similar trend of NO<sub>x</sub> emission for varying biogas-hydrogen blends as a function of excess air ratio[6]

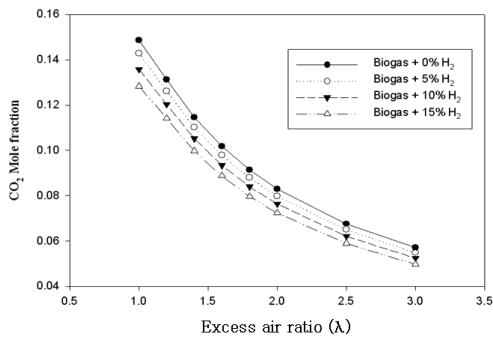


Fig. 12. CO<sub>2</sub> changes with various H<sub>2</sub> addition and excess air ratio

#### 4. 결론

본 연구에서는 CHEMKIN을 이용하여, 상세 화학반응 기반의 연소 해석을 수행하였다. 대상 엔진의 연소 방식은 균일 예혼합 압축착화이며, 연료는 수소가 첨가된 바이오가스이다.

요약하면, 수소 첨가량이 증가할수록, 수소의 높은 발열량과 빠른 화염 속도에 기인하여 최대 압력 및 온도가 증가함을 알 수 있었다. 또한, NO의 증가 및 CO<sub>2</sub>의 감소도 수반되었으며, 온도에 강한 의존성을 지님을 알 수 있었다. 이는 과다공기량 변화에 따라서 역시 동일한 경향을 보였다.

본 연구는 민감도 분석과 최적화 과정을 수행하지 않은 기초 해석 결과이므로, 향후, NO<sub>x</sub> 와 CO<sub>x</sub>를 고려한 운전영역 최적화 과정이 필수적으로 수행되어야 한다.

#### References

[1] R.J. Crookes, “Comparative bio-fuel performance in internal combustion engines”, *Biomass & Bioenergy*, vol. 30, no. 5 pp. 461-468, May, 2006.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2005.11.022>

[2] Z.L. Wei, C.W. Leung, C.S. Cheung, Z.H. Huang, “Effects of equivalence ratio, H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> addition on the heat release characteristics of premixed laminar biogas-hydrogen flame”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 15 pp. 6567-6580, April, 2014.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.170>

[3] J. Yue, “Effect of hydrogen addition on performance of low heat value engine”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 35 pp. 15800-15804,

September, 2016.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.03.172>

[4] J. Park, J. Choi, “A numerical investigation of lean operation characteristics of spark ignition gas engine fueled with biogas and added hydrogen under various boost pressures”, *Applied Thermal Engineering*, vol. 117, no.5 pp. 225-234, May, 2017.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.01.115>

[5] K. Sudheesh, J. M. Mallikarjunaj, “Diethyl ether as an ignition improver for biogas homogeneous charge compression ignition (HCCI) operation - An experimental investigation”, *Energy*, vol. 35, no. 9 pp.3614-3622, September, 2010.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2010.04.052>

[6] K.T. Lee, T. Kim, S. Song, K.M. Chun, “. Generating efficiency and NO<sub>x</sub> emissions of a gas engine generator fueled with a biogas-hydrogen blend and using an exhaust gas recirculation system”, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 11pp. 5723-5730, June, 2010.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.03.076>

박 정 수(Jungsoo Park)

[정회원]



- 2007년 8월 : 연세대학교 기계공학과 (기계공학학사)
- 2014년 2월 : 연세대학교 공과대학원 기계공학과 (기계공학박사)
- 2014년 9월 ~ 2016년 8월 : 두산중공업 기술연구원 선임연구원
- 2016년 9월 ~ 현재 : 조선대학교 기계공학과 교수

<관심분야>

과워트레인 해석 및 최적화, 연소 시스템 해석 및 설계