

성층화 혼합기 연소 모델링을 위한 프로판 및 이소옥탄 연료의 층류 화염 속도

배상수* · 김용태** · 임재만** · 민경덕***

Laminar Burning Velocities of Propane and Iso-Octane Fuels for Stratified Charged Combustion Modeling

Sangsoo Pae, Yongtae Kim, Jaeman Lim and Kyoungdoug Min

Key Words: Laminar Burning Velocity(층류화염속도), Stratified Charged Combustion(성층화연소), Detailed Chemical Reaction Mechanism(상세화학반응기구), Lean Burn(희박연소), Gasoline Direct Injection(가솔린직접분사, GDI)

Abstract

Laminar burning velocities of propane- and iso-octane-air mixtures have been numerically modelled over a wide range of equivalence ratio, pressure and temperature. These correlations are applicable to the modelling of stratified charged combustion like that of lean burn and GDI engine combustion. The numerical models are based on the results calculated by PREMIX code with Sloane's detailed chemical reaction mechanism for propane and FlameMaster code with Peters' for iso-octane. Laminar burning velocity for two fuels showed a pressure and temperature dependence in the following form, in the range of 0.1~4MPa, and 300~1000K, respectively.

$$S_L = \alpha \exp[-\xi(\phi - \phi_m)^2 - \exp\{-\xi(\phi - \phi_m)\} - \xi(\phi - \phi_m)]$$

where $\phi_m = 1.07$, and both of α and ξ are functions of pressure and temperature.

Compared with the results of the existing models, those of the present one showed the good agreement of the recent experiment data, especially in the range of lean and rich sides. Judging from the calculated results of the stratified charged combustion by using STAR-CD, the above modelling prove to be more suitable than the other ones.

1. 서 론

최근의 가솔린 엔진에 관한 연구와 개발 추세는 점차로 강화되는 배출물 규제에 대응하기 위한 고출력과 뿐만 아니라, 환경 문제와 연관된 배기 가스 저감을 위한 연구에 초점을 맞추고 있다. 또한 컴퓨터 성능의 발달과 함께 3차원 모사(simulation)를 통하여 복잡한 엔진 설계에 반영하는 가상엔진(virtual engine)의 개념도 등장하면서 유동 및 연소 모델링의 중요성도 증가하고 있는

추세이다.

이러한 현재 또는 미래의 강화된 배출물 규제를 만족하면서 연료 소비율을 저감시킬 수 있다고 기대되는 가솔린 엔진으로 희박연소(lean burn) 및 가솔린 직접 분사(gasoline direct injection, GDI) 엔진이 있다. 초기 안정된 화염 핵의 형성 및 화염 전파 속도를 증가시킴으로써 사이클 변동을 감소시키기 위하여 성층화(stratified charged) 연소 방식을 채용하고 있다. 따라서, 성층화 연소 모델링에 관한 연구도 최근에 활발히 진행되고 있다^{(1),(2)}. 연소 모델링에서 연소율은 온도, 압력 및 당량비의 함수인 층류화염속도를 이용한 난류화염속도로 표현될 수 있고, 성층화 연소시 당량비 분포는 가연 한계(flammability limit)까지 다양하게 분포하기 때문

* 정희원, 서울대학교 터보·동력기계연구센터

** 서울대학교 대학원 기계항공공학부

*** 정희원, 서울대학교 기계항공공학부

에, 보다 넓은 범위에 적용할 수 있는 층류화염 속도의 모델링은 성층화 연소 모델링을 위한 가장 기본이 된다. 그러나 기존의 실험을 통한 모델링들은 제한된 당량비, 온도 및 압력 범위에서만 적용될 수 있고, 스트레치(stretch)의 영향을 고려하지 못하여 실험 자료들간의 편차가 크다는 한계를 지니고 있다⁽³⁾.

따라서 본 연구에서는 대표적인 탄화수소 연료인 프로판과 이소옥탄에 대하여, 새롭게 층류화염속도를 모델링하고, 이를 Weller 난류 연소 모델⁽⁴⁾ 및 Peters 확률밀도함수모델⁽⁵⁾에 의한 성층화 연소 모델링에 적용하였다. 이를 위하여 각 연료들의 상세화학반응기구^{(6),(7)}(detailed chemical reaction mechanism) 및 상용 연소 및 유동 해석 코드인 STAR-CD를 이용하였다.

2. 층류화염속도의 모델링

2.1 지배 방정식

x 방향에 수직인 방향의 평면 정상 상태 화염에 대하여, 1차원 등압(isobaric) 조건에서 연속 방정식, 화학종 방정식 및 에너지 방정식은 다음과 같다^{(7),(8)}.

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (1)$$

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} = -\frac{dj_i}{dx} - \dot{m}_i \quad (2)$$

$$\rho u c_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{i=1}^n h_i \dot{m}_i - \sum_{j=1}^n c_{mj} j_j \frac{dT}{dx} \quad (3)$$

여기서 u 는 x 방향 속도, ρ 는 밀도, Y_i 는 화학종 i 의 질량분율(mass fraction), c_{mi} 는 화학종 i 의 정압비열, j_i 는 화학종 i 의 확산 플럭스(diffusion flux), \dot{m}_i 는 화학종 i 의 생성율(production rate), T 는 온도, c_p 는 혼합기의 정압비열, λ 는 열전도율(thermal conductivity), h_i 는 화학종 i 의 비엔탈피(specific enthalpy)이다. 또한 화학종 i 의 생성율 \dot{m}_i 는 모든 화학 반응($k = 1, 2, \dots, r$)에 대해서 식(4)로 계산되며, 화학종 i 의 분자량을 W_i 라면, 반응율(reaction rate) ω_k 는 식(5)로 표현된다.

$$\dot{m}_i = W_i \sum_{k=1}^r \nu_{ik} \omega_k \quad (4)$$

$$\omega_k = k_{fk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{kj}} - k_{bk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{kj}} \quad (5)$$

한편 ν_{kj} 와 ν_{jk} 는 각각 화학종 j 와 반응식 k 에 서의 정반응과 역반응의 이론 반응 계수(stoichiometric coefficient)이고, 정반응과 역반응의 반응율 계수(rate coefficient) $k_{fk}(T)$ 와 $k_{bk}(T)$ 는 식(6)과 같이 Arrhenius 형태로 표현된다.

$$k_k = A_k T^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (6)$$

이와 같은 식(1)~식(5)의 해를 구하기 위하여, 프로판은 PREMIX 코드를 이용하여 계산하였고⁽⁸⁾, 이소옥탄은 FlameMaster 코드로 계산된 자료를 이용하였는데⁽⁷⁾, 당량비는 $\phi = 0.5$ 에서 $\phi = 1.0$ 까지 변화시켰다. 이 때 초기 압력은 0.1MPa~4MPa, 초기 온도는 300K~1000K, 당량비는 가연 범위 내에서 최대한 변화시키면서 계산하였다. 결국 층류화염속도 S_L 은 미연 영역에서의 밀도 ρ_u 에 대한 고유치 문제(eigenvalue problem)에 해당하므로, 식(7)과 같이 구할 수 있다.

$$\rho u = \rho_u S_L \quad (7)$$

한편 본 연구에서 사용한 프로판 및 이소옥탄의 상세화학반응기구의 개략적인 특성을 Table 1에 정리하였다.

Table 1 Two detailed chemical reaction mechanisms

Fuel	Name	Species	Reactions	Reference
C ₃ H ₈	Sloane	42	192	6
i-C ₈ H ₁₈	Peters	56	189	7

2.2 모델 함수 선정

기존의 층류화염속도의 모델함수는 단순한 맞춤(fitting)의 경험적 관계식(empirical correlation)과 열적 화염 전파 이론(thermal flame propagation theory)이나 활성 화학종 확산 이론(active species diffusion theory)에 기인한 반경험적 관계식(semiempirical correlation)으로 구분되나, 통상 식(8)과 식(9) 형태로 표현되는 경험적인 관계식을 많이 사용하고 있다^{(9),(10)}.

$$S_{L, Keck} = a(\phi - \phi_m)^2 + \beta \quad (8)$$

$$S_{L, G\ddot{u}lder} = Z\phi^7 \exp(-\xi(\phi - 1.075)^2) \quad (9)$$

Fig. 1은 파라핀(paraffin)계열 연료들의 최대층류화염전파속도로 표준화된(normalized) 층류화염전파속도와 에탄에 대한 각 모델함수의 맞춤 결과를 비교한 것으로⁽¹¹⁾⁽¹²⁾, 희박 영역에서는 연료에 따라 그 특성에 큰 차이가 없으나, 농후 영역에서는 차이가 크다. 이는 동일한 탄소수에서도 연료의 구조 변화에 민감한 점화지연(ignition delay) 특성과 다르게, 층류화염속도는 탄소수에 따라 크게 변화하기 때문이며, 특히 희박영역에서는 거의 일정한 분해(cracking) 기구에 지배되기 때문이다. 한편 농후영역에서는 연료에 포함된 탄소수에 따라 복잡한 수트(soot) 형성을 위한 반응 경로(reaction path)에 의하여 희박영역과는 다른 특성을 보인다.

따라서, 식(8)과 같은 Keck 관계식은 희박과 농후 영역에서 서로 대칭이므로, 탄소수가 작은 메탄 연료나 이론당량비 부근의 제한된 영역을 제외하고는 적용이 어렵다. 또한 Fig. 1에서 보듯이, 식(9)의 Gülder에 의한 관계식도 ϕ^2 항에 의하여 희박영역에서는 실험값보다 크게, 농후영역에서는 작게 되는 문제점을 지닌다.

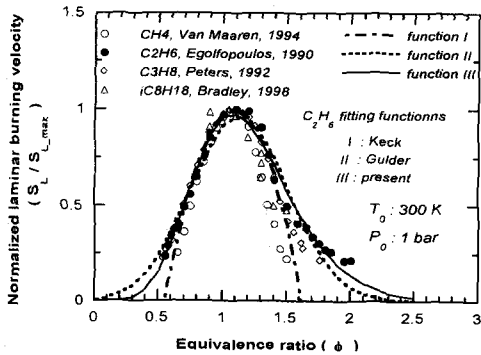


Fig. 1 Comparison of normalized laminar burning velocities for several fuels and the results fitted by three model functions for ethane

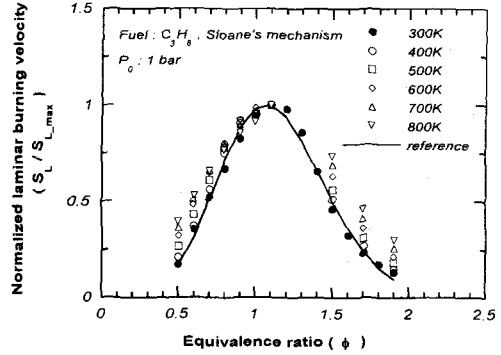
이와같은 각 관계식들의 단점을 보완하기 위하여 본 연구에서는 식(10)의 관계식을 적용하였는데, Fig. 1에서 보듯이 모든 영역에서 다른 두 관계식에 비해 실험 결과와 가장 유사하다.

$$S_{L, \text{present}} = \alpha \exp\left\{-\xi(\phi - \phi_m)^2 - \zeta(\phi - \phi_m)\right\} \quad (10)$$

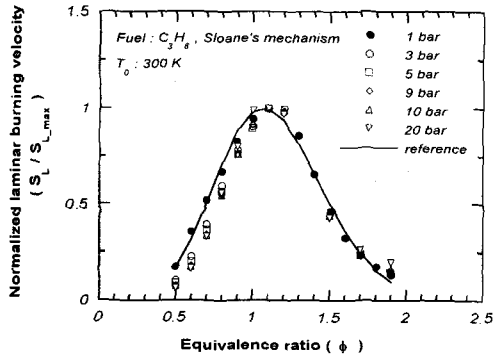
한편 엔진 연소실과 같이 고온·고압 조건에 적용하기 위해서는 온도와 압력에 대한 관계식도 필요하다. 일반적으로 기준 온도와 압력 T_0 및

P_0 조건에서 얻은 관계식이 S_0 라면, S_L 은 식(11)과 같이 표현될 수 있다⁽¹⁰⁾.

$$S_L = S_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha_T} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_P} \quad (11)$$



(a) temperatures varied



(b) pressures varied

Fig. 2 Comparison of the calculated normalized laminar burning velocities for propane as initial temperatures and pressures are varied

그러나, Fig. 2 (a)와 Fig. 2 (b)에서 보듯이 온도와 압력에 따라 Sloane 상세화학반응기구로 계산된 표준화된 층류화염속도가 기준조건과 상이하다. 따라서 단순히 크기만을 고려한 식(11)로 정확한 구현은 어렵다. 이는 당량비에 따른 층류화염속도의 개형(profile)이 온도와 압력에 따라 변하기 때문이며, 이는 온도 변화에 의한 영향이 더 크다.

따라서 본 연구에서는 온도와 압력 변화에 따라 당량비에 대한 층류화염속도 개형 및 크기 변화를 동시에 고려하기 위하여 식(10)의 ξ , ζ 및 α 등을 식(12)와 식(13)처럼 모델링해야 되나, 편의상 ξ 와 ζ 가 동일하다고 가정하여 식(10), 식(12) 및 식(13)의 형태로 모델링하였다.

$$\xi \text{ (or } \zeta) = (A_T + B_T \frac{T}{T_0}) (\frac{P}{P_0})^{\beta_{P,T}} \quad (12)$$

$$\alpha = C_\alpha (\frac{T}{T_0})^{\alpha_T} (\frac{P}{P_0})^{\beta_{P,\alpha}} \quad (13)$$

2.3 상세화학반응기구의 검증

현재까지 발표된 여러 프로판의 상세화학반응기구들을⁽⁶⁾ 이용하여 계산된 층류화염속도를 실험과 비교한 후, 최종적으로 Sloane 상세화학반응기구를 선정하였다. 이는 Fig. 3에서 보듯이 전체 당량비 영역, 특히 이론 당량비 이후 농후 영역에서 실험 결과를 잘 반영하고 있기 때문이다. 또한 Fig. 1의 에탄의 경우와 마찬가지로 프로판도 식(8)이나 식(9)로 모델링한 결과보다 본 연구에서 제시한 식(10)으로 모델링한 것이 실험과 더 일치한다.

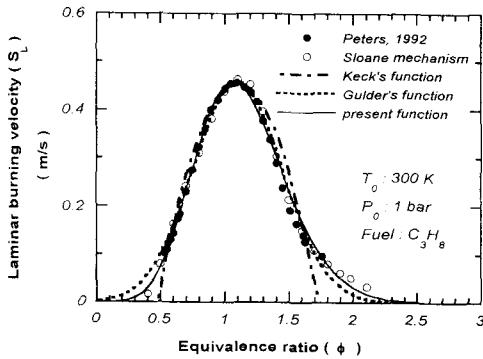


Fig. 3 Comparison of the calculated and measured laminar burning velocities and the results fitted by three model functions for propane

한편 현재까지 검증된 이소옥탄의 여러 상세화학반응기구들은 화학종 및 반응수가 많기 때문에 적용하기 어렵다. 그러나 희박 영역에만 적용하기 위한 상세반응기구는 상대적으로 간단해질 수 있기 때문에, 본 연구에서는 이 영역에서만 모델링한 Peters의 연구 결과를⁽⁷⁾ 식(10)의 형태로 모델링하여 농후 영역까지 확장시켰다. 따라서 이러한 방법의 타당성을 검증하기 위하여 Sloane 상세화학반응기구로 계산된 결과를 전체 당량비 영역과 희박 영역에서만 식(10)으로 곡선 맞춤한 결과 및 그 차를 Fig. 4에 나타내었다. 농후 영역에서 최대 12% 차이가 있으나, 그 절대값은 작기 때문에 전반적으로 층류화염속도의 특성을 반영하고 있다. 따라서 희박 영역만의 곡선 맞춤으로 농후 영역까지 확장시킬 수 있다고 판단된다.

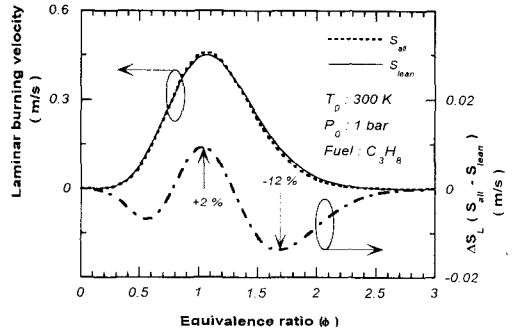


Fig. 4 Comparison of the fitted laminar burning velocities as considering only lean side and both of lean and rich ones, and their difference for propane

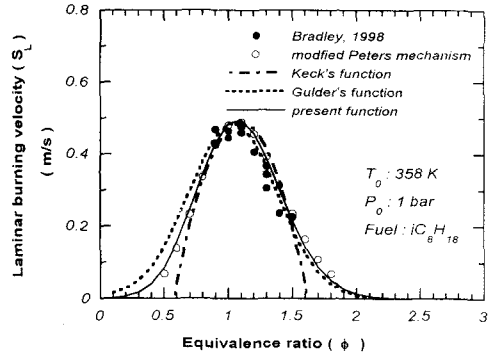


Fig. 5 Comparison of the calculated and measured laminar burning velocities and the results fitted by three model functions for iso-octane

이러한 방법으로 농후영역까지 확장한 뒤 실험과 비교한 것을 Fig. 5에 표시하였는데, Fig. 4와 마찬가지로 전체 당량비 영역에서 비교적 잘 일치하고, 특히 희박과 농후 영역에서 더욱 일치한다.

2.4 최종적인 층류화염속도 모델링

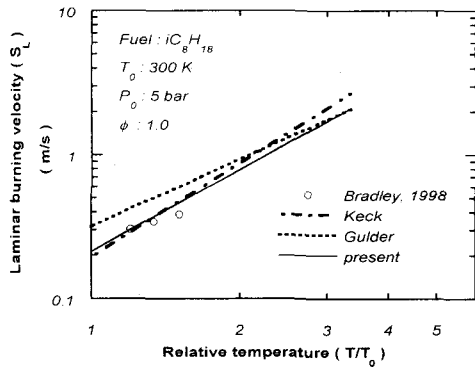
온도와 압력에 따른 영향도 고려하여 프로판과 이소옥탄의 최종적인 모델링 계수들을 Table 2에 정리하였다.

이 중 이소옥탄의 온도와 압력에 따른 모델링 및 기존의 관계식들과 실험 결과와의 비교를 Fig. 6 (a) 및 Fig. 6 (b)에 각각 나타내었다. 모든 경우에 대해서 본 연구에서 제시한 관계식이 기존의 관계식들에 비하여 실험 결과를 잘 반영하고 있다. 이는 앞서 언급한 기존 모델링의 기본 관계식인 식(8)과 식(9)가 가진 단점과 더불어 압력

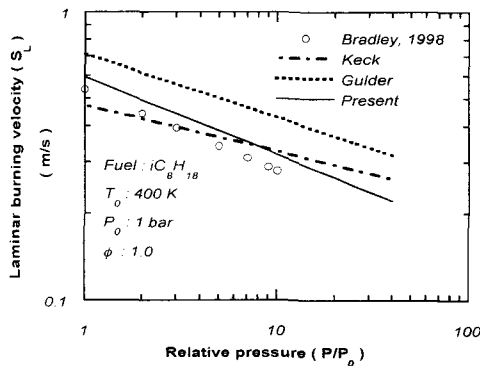
측정⁽¹⁰⁾이나 이온 프로브⁽⁹⁾에 의한 층류화염속도 측정 결과를 이용하여, 스트레치의 영향이 완전하게 배제되지 못했기 때문이다⁽³⁾.

Table 2 The modeling coefficients for propane and iso-octane

	C_a	a_T	$\beta_{P,a}$	A_T	B_T	$\beta_{P,\xi}$
C_3H_8	1.27	1.70	-0.27	2.53	-0.43	0.08
iC_8H_{18}	0.95	1.90	-0.27	2.73	-0.45	0.08



(a) temperatures varied



(b) pressures varied

Fig. 6 Comparison of the calculated normalized laminar burning velocities for iso-octane as initial temperatures and pressures are varied

따라서 전체적으로 층류화염속도가 본 연구의 모델링보다 더 크기 때문에, 온도나 압력에 의한 층류화염속도의 증가나 감소가 각각 실제보다 크거나 작은 특성을 보인다⁽³⁾. 한편 프로판의 경우에도 이와 유사한 경향을 보인다. 이같은 결과로, 본 연구에서 제시한 프로판과 이소옥탄의 층류화염속도 모델링 결과는 적절하다고 사료된다.

3. 성층화 혼합기 난류 연소 모델에 적용

3.1 성층화 혼합기 난류 연소 모델

난류 연소 모델로 Weller 모델⁽⁴⁾을 사용하였고, 성층화된 혼합기하에서의 국소 당량비 분포에 따른 공간적인 화염전파속도를 결정하기 위하여 Peters의 확률밀도분포함수 개념⁽⁵⁾을 적용하였다. 이 때 화염 주름인자(flame wrinkle factor) 및 난류화염전파속도의 결정은 앞서 언급한 층류화염속도 관계식들이 사용되었다. 또한 모든 수송 방정식의 해는 연소 및 유동 해석을 위한 상용 코드인 STAR-CD를 사용하여 구하였고, 용이한 계산을 위하여 지름이 90mm인 원관에 계산 격자를 구성하였다. 이 때 초기 온도와 압력은 직접분사 가솔린 엔진의 부분부하 조건에서 점화시의 조건과 유사한 700K, 0.8MPa로 하였다⁽²⁾.

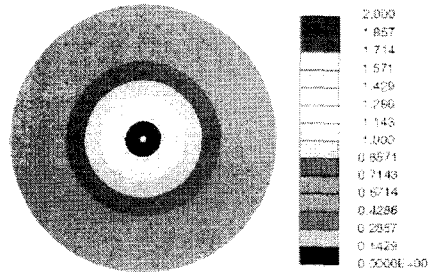


Fig. 7 Initial equivalence distribution of stratified mixture
성층화된 혼합기의 초기 당량비 분포는 실제 엔진과 유사하도록 Fig. 7에 나타낸 것과 같이, 점화 플러그 주위는 $\phi=2.0$ 에서 시작하여 벽면 근처에서 $\phi=0.5$ 까지 변화하도록 하였는데, 이론공연비까지는 공간에 대하여 급격히 변하고, 이후 선형적으로 분포한다고 가정하였다.

3.2 성층화 혼합기 연소 특성

Fig. 8은 Keck 모델, Gulder 모델 및 본 연구에서 제시한 층류화염속도 관계식을 이용하여 계산된 성층화 연소시의 화염전파 특성을 비교한 것이다. 모든 경우 점화플러그에서 $\phi=1.0$ 에 근접함에 따라 화염전파속도가 급격히 증가한다. 상대적으로 좁은 당량비 구간에서만 적용될 수 있는 Keck 모델은 점화 직후 농후한 영역과 벽면 부근의 희박한 영역에서 화염이 정상적으로 진행

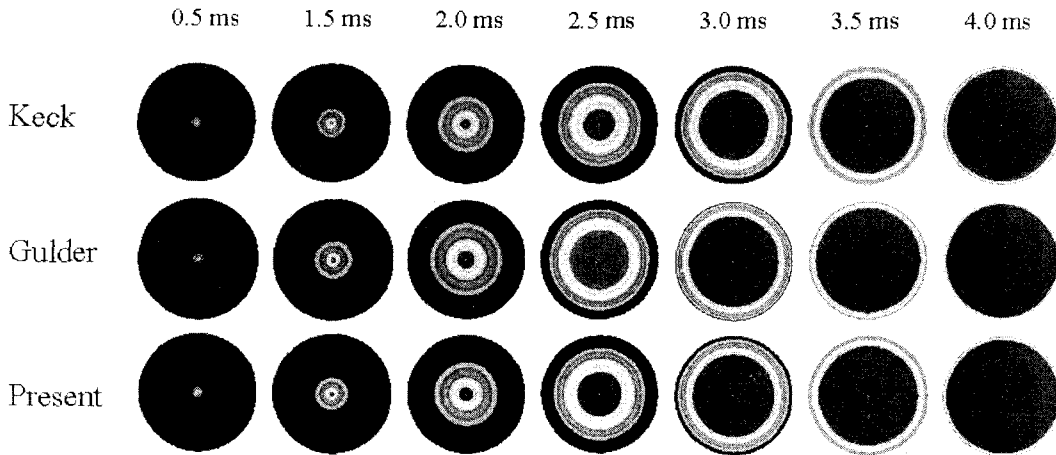


Fig. 8 Comparison of contours of the progress variables calculated by using three laminar burning velocities correlations, which are Keck's, Gülder's, and present, for *iso*-octane according to the time

하지 못하고 있어 가장 느리며, Gülder 모델이 가장 빠른 경향을 보이니, 이는 스트레치의 영향을 보정하지 못한 결과에 기인한다.

4. 결론

상세화학반응기구를 이용하여 새로운 프로판 및 이소옥탄의 층류화염속도 관계식을 제시하였다. 이는 기존의 관계식들보다 더 넓은 당량비, 온도 및 압력 범위에서 실험 결과를 잘 반영한다. 또한 실제 성층화 혼합기 연소 모델링에 이를 적용할 수 있음을 확인하였다.

참고문헌

- (1) Gill, A., Gutheil, E. *et al.*, 1996, "Numerical Investigation of the Combustion Process in a Direct-Injection Stratified Charge Engine," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 115, pp.317~333.
- (2) Haworth, D.C., Blint, R.J. *et al.*, 2000, "Numerical Simulation of the Turbulent Propane-air Combustion with Nonhomogeneous Reactants," *Combust. Flame*, Vol. 121, pp.395~417.
- (3) Bradley, D., Hicks, R.A. *et al.*, 1998, "The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for *Iso*-Octane-Air and *Iso*-Octane-*n*-Heptane-Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb," *Combust. Flame*, Vol. 115,

- pp.126~144.
- (4) Weller, H.G., Uslu S. *et al.*, 1994, "Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark Ignition Engine," *COMODIA 94*, JSME, pp.163~169.
- (5) Keck, J.M., Reissing, J. *et al.*, 1998, "Analyses of the Combustion Process in a Direct Injection Gasoline Engine," *COMODIA 98*, JSME, pp.287~292.
- (6) 배상수, 1999, 정적연소실에서 프로판/공기 혼합기의 농도구배가 화염전파에 미치는 영향, 공학박사학위논문, 서울대학교.
- (7) Müller, U.C., Bollig, M. *et al.*, 1997, "Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames," *Combust. Flame*, Vol. 108, pp.349~356.
- (8) Kee, R.J., Grcar, J.F. *et al.*, 1982, A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames, SAND85-8240, Sandia Nat'l Lab.
- (9) Gülder, O.L., 1984, "Correlations of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels," SAE Paper841000.
- (10) Heywood, J.B., 1988, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, MacGraw-Hill, pp.402~406.
- (11) Peters, N., Rogg, B., 1993, *Reduced Kinetic Mechanisms Applications in Combustion Systems*, Springer-Verlag, pp.137~141.
- (12) Konnov, A.A., 2000, <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov>.