

부탄 연료의 연소 특성에 관한 수치해석적 연구

최슬기*, 백두성**, 이종선**

*국민대학교, **대진대학교 컴퓨터응용기계설계공학과
e-mail:dsbaik@daejin.ac.kr

Numerical Study on the Characteristics of Butane Fuels

Sul Ki Choi, Doo Sung Baik, Jong-Sun Lee
Kookmin University, Daejin University, Dept. of Computer-aided
Mechanical Design Engineering

요 약

본 연구는 수치해석 코드를 사용하여 액화석유가스의 연소 특성을 파악하고자 한다. 시뮬레이션은 Chemkin 코드를 적용하여 정적연소와 같은 조건에서 모델링되었다. 특히 연소 현상을 파악하기 위해서 당량비를 변화시켰다. 이러한 연구는 LPG 연료를 사용하는 압축착화 디젤엔진의 기초적인 연구에 도움을 줄 것이다.

1. 서론

오늘날 자동차기관의 연구 추세는 연비 절감과 배출가스 저감 및 기관 성능 향상의 방향으로 많은 연구가 진행되고 있다. 현재까지의 주요 규제물질은 행정적으로 규제·관리가 용이하고 대기오염도에도 크게 기여도가 높은 CO, HC, NOx, PM 및 이산화황(SO₂; Sulfur dioxide)이 주요 규제 대상이었다[1]. 미국 및 국내는 HC에서 메탄을 제외한 비 메탄 탄화수소(NMHC; Non Methane Hydrocarbon)에서 NOx와의 공존으로 대기 중에서 오존을 발생시키는 산소를 포함하는 HC인 유기성 용해물질(SOF; Soluble Organic Fraction), 벤조피렌(Bap; Benzopyrene) 및 포름알데히드(formaldehyde) 등을 포함한 비메탄 유기화합물(NMOG; Non Methane Organic Gas)로의 규제를 캘리포니아 주의 대기자원국(CARB; California Air Resources Board)이 1990년에 NMOG 규제를 제안하여 1994년부터 시행하고 있으며 국내에서는 2006년부터 미국의 ULEV(Ultra Low Emission Vehicle) 수준의 규제가 적용된 시점부터 시행하고 있다[2]. 국내 자동차에서 배출되는 오염물질량은 연간 175만 톤으로 국내 전체 오염물질의 39.3%를 차지하며, 이중

CO와 HC의 기여도는 80%를 상회하고 NOx의 경우도 45%를 넘고 있다. 국내에서는 선진국에 비해 디젤기관의 보유비율이 높기 때문에 디젤기관에서 배출되는 오염물질이 자동차 전체 오염물질 배출량의 67%를 차지하고 있다[3].

이에 세계 각국은 대기환경오염, 지구 온난화 현상 및 화석연료의 고갈 등의 문제에 대해 대응하기 위해서 압축천연가스(CNG; Compressed Natural Gas), 액화석유가스(LPG; Liquefied Petroleum Gas), DME(Dimethyl Ether), 바이오디젤, 전기, 하이브리드, 메탄올 및 수소 등을 대체연료 및 청정연료로 사용하는 방안이 계속 연구되고 있다. 국내의 경우도 1990년 초부터 무연가솔린의 사용 등 연료의 품질에 대한 관심이 확대되고 있으며, 환경에 미치는 유해성 문제가 점차 증가하면서 가솔린 및 경유의 대체연료로서 LPG 및 CNG 등 청정 연료의 사용이 점차 확대되고 있는 실정이다. 최근 기관개발 기술은 GDI, common-rail 등이 있으며 청정연료로는 천연가스, LPG, 알코올, DME 등이 있다[4].

따라서 본 연구는 LPG 연료를 압축착화 방식 상용 디젤기관에 작용 시 연소 및 배기가스생성에 미치는 영향을 Chemkin 코드를 사용하여 파악하고자 한다.

2. 계산 방법

복잡한 화학 반응을 해석하기 위한 수치해석 코드로서 각종 가스성상에 대한 반응 및 연소에 대해 화학적 반응, 물리적 현상을 수치해석적인 계산방법에 의해 해석할 수 있도록 개발되어진 코드이다. 본 해석코드를 통해서 0차원 또는 1차원 반응 모델에 이용하여 관심이 있는 system을 구성한 후 상세한 gas-phase, gas-surface 반응을 고려한 해석을 수행이 가능하며 화학반응이 중요한 시스템에 대한 여러 가지 정보를 얻을 수 있다. 즉 다양한 연소반응 시스템(축매 반응기 예 혼합 버너, 엔진, 터빈 연소기 등)을 0 차원 또는 1차원적으로 수치해석으로 모델링 하여 시스템 내부 또는 표면에서 일어나는 화학반응과 화학종의 변화 그리고 열 및 유동현상을 정확하고 상세하게 계산하여 그 반응 시스템을 설계할 수 있다.

또한 장시간 실험을 통하여 결과를 얻는 방법과 달리 Chemkin S/W GUI 환경에서 화학반응이 수반되는 전 공정 화학종과 반응에 관련된 데이터를 이용한 해를 구하므로 그 공정의 문제점을 진단 할 수 있으며 동시에 수정이 가능하므로, 값비싼 실험 단계를 거치지 않고 개발비 절감과 실험 할 수 없는 가상조건에서 일어나는 화학 반응을 예측 할 수 있다는 장점을 가지고 있다. 초기의 Chemkin은 1980년에 미국의 Sandia National Laboratory로부터 발표되었으며 그 후 1990년에 개정된 Chemkin 2가 개선되어 압력 의존이 있는 반응의 기술 방법이 정확해지고 동시에 능률적 방법이 되는 등 계산능력이 증대하였다. 1996년에 개정된 Chemkin 3에서는 비평형의 다양한 여러 가지 유체 계를 다룰 수 있으며 현재는 Chemkin 4.1 까지 개발되어 있는 상태이다.

본 연구에서 사용한 연료의 특성은 표 1과 같으며 일반적으로 LPG의 조성은 보통 50% n-부탄, 30% iso-부탄, 20% 프로판으로 되어있고 최근에는 iso-부탄의 함량이 감소되는 경향이 있다. LPG의 옥탄가는 100정도로 고옥탄가이므로 고압축비의 기관에 적합하고 가스 상이므로 배출가스가 적게 배출된다.

3. 계산 결과 및 고찰

Chemkin 프로그램에서 정적 연소기 내의 분위기 온도 및 압력을 착화온도에 근접하여 750K로 입력

하고 분위기 압력은 22bar의 조건하에서 당량비는 0.5, 1.0, 1.5의 3가지로 조건을 바꾸어 가며 부탄 연료의 배출가스 특성에 관해서 살펴보았다.

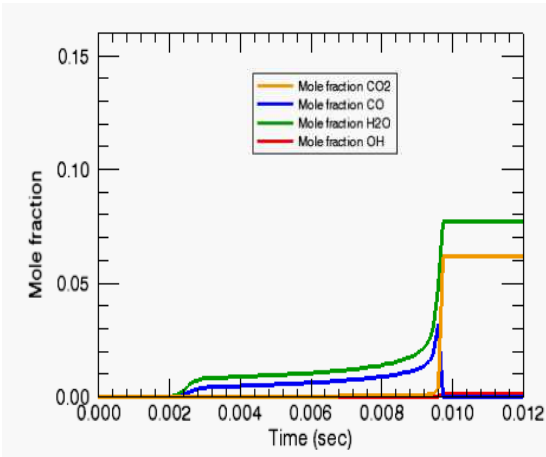
[표 1] LPG 연료 특성

ITEM		LPG	
		Propane	N-butane
Formula		C3H8	C4H10
Molecular weight		44.097	58.124
Boiliry point	1atm, °C	-42.07	-0.50
Melting point	1atm, °C	-188.7	-138.4
Density	Liquid(15°C)Water=1	0.508	0.584
	Gaseous(15°C)Air=1	1.562	2.009
Heating value	kcal/kg	12,047	11,850
Lower Heating value	kcal/kg	11,079	10,926
Complete combustion	kg/kg	15.71	15.49
Vapor pressure	20°C, atm	8.0	2.0
Ignition temperate	°C	481	441
Heat of vaporization	kcal/kg	102.0	92.2
Combustion range	Max.(vol), %	9.50	8.41
	Min.(vol), %	2.37	1.66
Max. Flame velocity	m/s	0.81	0.84
Specific heat	Cp	0.404	0.407
	Cv	0.373	0.370
Octane number	Research law	112.0	96.1
	Motor law	96.0	89.6
Total Heating value	kcal/m ³	22,367	29,805

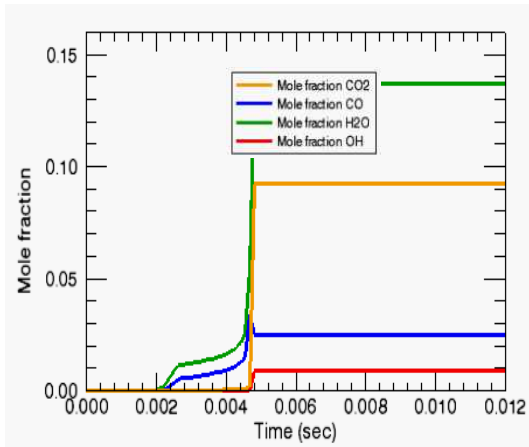
그림 1에서 보면, 당량비 0.5인 고온 희박연소 조건에서 CO₂는 착화 후 0.009초부터 급격히 생성되어 연소 종료 때 잔류했으며 CO는 착화 후 0.002초로부터 천천히 생성되어 0.009초에 0.03몰부터는 일정했다. H₂O는 착화 후 0.002몰부터 천천히 생성되어 0.009초에 0.07몰로 일정했다. OH는 착화 후 생성되지 않다가 0.009초부터 연소가 끝날 때 까지 짧은 시간 동안 생성 후 잔류하였다.

그림 2에서 연료가 n 부탄의 경우, CO₂는 착화

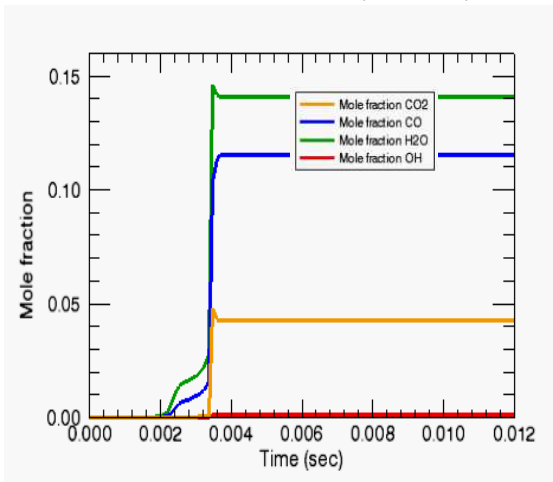
후 0.004초부터 0.008몰이 급격히 생성되어 연소가 끝날 때까지 잔류하였으며 CO는 착화 후 0.002초부터 천천히 생성되어 0.025몰이 생성되어 연소가 종료 때 까지 잔류하였다. H₂O 착화 후 0.002초부터 천천히 생성되어 0.004초에 0.014몰 생성되었고 연소가 끝날 때 까지 잔류하였으며 OH 착화 후 생성되지 않다가 0.045초부터 0.01몰이 연소가 끝날 때 까지 생성 후 잔류하였다.



[그림 1] 부탄의 배출가스량 (φ=0.5, 22bar)



[그림 2] 부탄의 배출가스량 (φ=1, 22bar)



[그림 3] 부탄의 배출가스량 (φ=1.5, 22bar)

그림 3에서 보면 당량비가 1.5인 경우, 즉 고온 농후한 연료인 경우에 있어서 CO₂는 착화 후 0.004초부터 급격히 생성되어 연소가 끝날 때까지 0.05몰로 잔류하였고 CO는 착화 후 0.002초부터 천천히 생성되어 0.12몰이 생성되었으며 H₂O는 착화 후 0.002초부터 천천히 생성되어 0.004초에 0.14몰로 증가했고 OH는 착화 후까지 생성되지 않다가 0.045초부터 0.001몰이 연소가 끝날 때 까지 생성 후 잔류했다.

4. 결론

압축착화방식 액상 부탄 연료의 분무 및 연소특성에 대해서 Chemkin Code를 이용하여 정적연소기와 동일한 조건으로 모델링하였다. 배출물 생성 그래프의 형태가 부탄 연료의 경우 예 연소 구간이 있었으며, 당량비를 비교시 농후한 연료일수록 불완전 연소로 인해서 CO₂보다 CO 배출량이 많음을 확인했다.

참고문헌

- [1] Y. C. Han, K. B. Kim, Y. S. Oh, "A Study on performance and Characteristic of Exhaust emission in CNG Dedicated Engine," Transactions of KSAE, Vol.8, No.3, pp.12~17, 2000.
- [2] Andrea Emilio Catania, Stefano D'Ambrosio, Antonio Mittica, Ezio Spessa, "Performance analysis and comparison of a multivalve SI engine running on either gasoline or CNG," SAE, 2000-05-0086, 2000.
- [3] B. S. Kim, M. Shioji, C. G. park, "Improving Performance and Emissions in a Diesel Engine Dual Fueled with Compressed Natural Gas," SAE, 2000-03-0029, 2000.