

혼합비율 변화 및 EGR 적용이 노말헵탄/수소 혼합연료의 점화지연시간에 미치는 영향

심태영* · 강기중* · 최경민*** · 김덕줄**

Effects of Fuel Composition and EGR on Autoignition

Delay of n-heptane/hydrogen

Taeyoung Shim*, Kijoong Kang*, Gyungmin Choi***, Duckjool Kim**

Key Words : Ignition delay, Hydrogen addition, HCCI, EGR, LTC

최근 전 세계적으로 지구 온난화 및 대기오염 등의 환경문제와 화석연료의 고갈 문제로 많은 문제에 직면해 있다. 이에, 기존 화석연료 기반 동력장치의 대안으로 수소연료전지, 대체연료에 대한 많은 연구가 진행되고 있다. 특히, 대체연료는 기존의 내연기관 구조에 큰 변경 없이 적용이 가능하며 상용화까지의 기간이 짧다는 장점이 있어 친환경 대체 연료에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.

수소는 연소효율과 배출특성에서 일반적인 화석연료에 큰 장점을 가지고 있다고 알려져 있다. 예를 들면, 가솔린 대비 2.6배의 단위 질량당 에너지 방출을 가지며, 입자상 물질 배출과 온실가스 배출을 크게 줄일 수 있고 다른 탄화수소 연료와 비교하였을 때 더 넓은 가연한계를 가진다. 그러나 수소연소는 노킹, 데토네이션, 화염안정성, 역화 등의 문제를 야기할 수 있으며 수소를 화석연료와 혼합해서 사용할 경우 수소의 내노킹성 때문에 저온에서의 점화지연이 길어질 수 있어 엔진 부조, 일산화탄소 및 탄화수소 과다배출등의 문제를 야기할 수 있다. 이러한 관점에서 대체연료로서 수소첨가에 대한 연구는 매우 중요하고 시급한 연구과제의 하나로 판단된다.

최근에는 기존의 연소 방식인 SI와 CI방식을 혼합한 형태의 엔진인 예혼합압축착화(HCCI)엔진에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다. HCCI엔진은 SI엔진처럼 예혼합기를 사용하고 CI엔진처럼 압축열을 이용하여 점화하는 방식을 사용한다. 그렇기 때문에 SI엔진 비해 연료경제성이 좋고 CI엔진의 문제점인 입자상물질 및 질

산화물 발생이 적다는 장점을 가진다. 하지만 HCCI엔진의 운전영역은 저부하와 고부하에서 제한된다. 저부하에서는 낮은 연소온도로 인하여 일산화탄소와 탄화수소가 과다 배출되고 고부하에서는 급속연소와 연소압력 과다상승으로 소음 및 엔진손상이 유발된다. 따라서 이러한 문제를 해결하기 위해서는 배기가스 재순환을 통한 산소농도 조절 및 수소 첨가를 통한 연료의 조성 조절을 통하여 점화지연제어하는 연소제어기법이 필요하다.

한편, 대부분의 수소/탄화수소계연료 혼합연료에 대한 이전 연구는 메탄/수소 혼합연료에 집중되어 있다. 기초 연구로는 수소첨가가 가연성[1], 층류화염속도[2], 난류화염속도[3], 화염안정성[4], NOx 배출[1], 점화지연시간[5, 6]등에 미치는 영향에 관한 연구가 수행되었다. 메탄/공기 혼합기에 수소 첨가가 점화지연에 미치는 영향에 관한 연구도 수행되었다. Levinsky등[5]은 급속압축기를 이용하여 중저온영역인 950~1060K 조건에서 당량비 1.0의 메탄/수소 혼합연료의 점화지연시간에 대한 연구를 수행하였다. 또한, Huang [6] 등은 충격파관을 이용하여 고온영역인 1000~1300K조건에서 메탄/수소 혼합연료의 점화지연 연구를 수행하였다. Herzler 등[7]과 Gauthier [8] 등은 충격파관을 이용하여 디젤과 HCCI엔진 구동 조건에서 헵탄 단일연료의 점화지연특성에 대해 보고하였으며, Curran 등[9]은 헵탄에 대한 Kinetic모델링에 대한 연구를 수행하였다. 이와 같이 헵탄은 정표준연료 중의 하나이며 디젤연료의 대리연료이기 때문에 단일연료에 대한 연구는 많이 수행되어 왔지만 헵탄/수소 혼합연료에 대한 연구는 거의 이루어지고 있지 않고 있으며 메탄/수소 혼합연료 관련 연구와 비교하였을 때도 매우 부족한 실정이다.

따라서 본 연구에서는 위 연소제어기법의 기

* 부산대학교 기계공학부 대학원

** 부산대학교 기계공학부

† 연락저자, choigm@pusan.ac.kr

TEL : (051)510-2476 FAX : (051)516-9598

Table 1 Fuel Properties

Name		n-heptane	hydrogen
Molecular Formula		C ₇ H ₁₆	H ₂
Molecular Weight		100.21	2.016
Density	g/L	0.68	0.089
Boiling Point	°C	99.4	-252.87
Autoignition Temperature	°C	285	500
Low Calorific Value	MJ/kg	44.91	119.961
A/F		15.2	34.51

초연구로써 정표준연료인 노말헵탄과 최근 대체 에너지원으로 관심이 모아지고 있는 수소를 혼합하여 혼합비율변화와 배기가스 재순환을 통한 연소실 내 산소농도 변화가 점화 지연에 미치는 영향에 대해 수치적으로 고찰하였다.

해석프로그램으로는 CHEMKIN-PRO[10]를 사용하였으며 피스톤이 상사점에 도달했을 때의 압력과 온도를 초기조건으로 하는 정적 연소반응 모듈을 적용하였다. 노말헵탄/수소 혼합연료에 대한 화학반응모델은 Mehl 등과 Aggarwal 등의 선행연구에서 충분히 검증된 654개의 화학종과 2827개의 화학 반응으로 이루어진 LLNL 모델을 사용하였다[11,12].

폭발연소를 이해하기 위한 중요한 척도인 점화 지연시간은 Fig. 1에 나타낸 것과 같이 정의하였다. P'(t)는 시간변화에 따른 압력의 순간변화율 (dP/dt)을 나타내고 dP_{max}는 P'(t)의 최고값을 나타낸다. 점화 지연은 압축행정이 종료되는 시점으로부터 dP_{max}에 도달하기까지 소요된 시간으로 정의하였다.

수치해석에 사용된 연료는 노말헵탄/수소 혼합연료로 각 연료에 대한 특성은 Table 1에 나타나 있다.

Fig. 2는 압력 15atm, 당량비 1, 산소농도 21% 조건에서 압축온도와 노말헵탄/수소 혼합연료의 혼합비율 변화에 따른 점화 지연시간을 나타낸 그래프이다. 온도가 증가함에 따라 점화 지연시간이 감소하는 것을 확인할 수 있으며, 노말헵탄의 점화특성인 2단 착화와 NTC 영역을 각 혼합연료 조건에서 확인할 수 있었다. 상대적 저온영역과 중온영역(T<1000K)에서는 혼합물 내의 수소 농도가 증가함에 따라 점화 지연 시간이 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 하지만 상대적 고온영역(T>1000K)에서는 혼합물 내의 수소 농도가 증가함에 따라 점화 지연 시간이 증가하는 역전 현상이 나타남을 확인할 수 있었다. 이를 통해

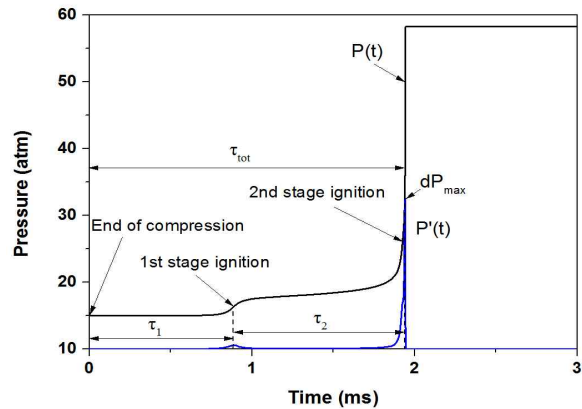


Fig. 1 Definition of ignition delay time

상대적인 저온영역과 중온영역에서는 헵탄이 지배적인 역할을 하며, 상대적 고온영역에서는 헵탄이 지배적인 역할을 한다는 것을 확인할 수 있다. 본 연구에서는 헵탄이 지배적인 중저온 영역에 초점을 맞추어 연구를 진행하였다.

중저온 영역에서 혼합물 내의 수소 농도가 증가함에 따라 점화 지연 시간이 증가하는 현상의 원인을 분석하기 위해 경로분석과 민감도분석이 수행되었다. 경로 분석 결과 순수 수소의 연소과정에서 가장 큰 영향을 미치는 반응은 $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$ 라는 것을 확인할 수 있었다. 이 반응에서는 OH라디칼이 소모가 되는데 OH라디칼의 경우 헵탄의 초기 수소 추출반응에 사용된다. 때문에 혼합물 내에서 두 반응이 경쟁적으로 OH라디칼을 소모할 것이라고 판단된다.

Fig. 3은 앞서 언급한 두 반응의 생성율을 나타낸 그림이다. 그림에서도 확인할 수 있듯이 혼합물 내의 수소 농도가 증가함에 따라 $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$ 반응의 생성율은 증가하고

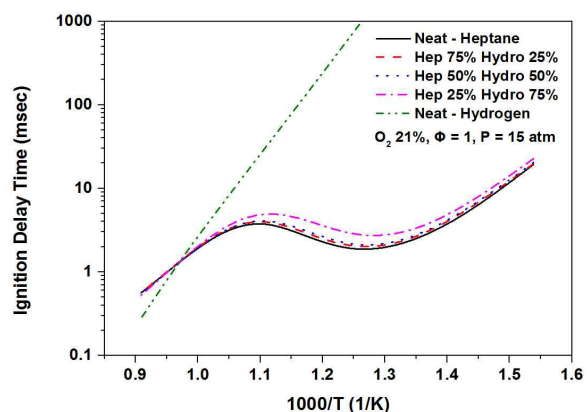


Fig. 2 Ignition delay time with changing mole fraction of hydrogen fuel in blend fuel at $O_2 = 21\%$, $\Phi = 1$, $P_C = 15\text{atm}$ and various T_C

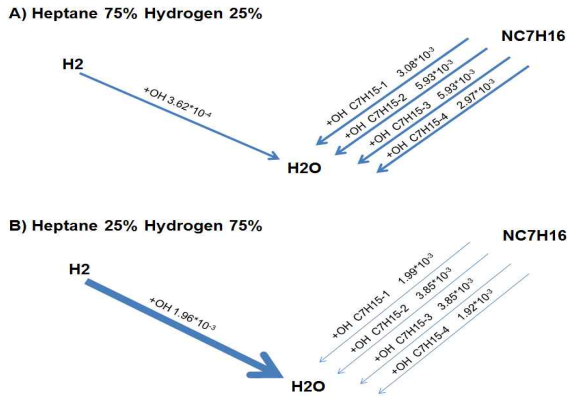


Fig. 3 Rate of production of reactions($H_2+OH \rightleftharpoons H_2O+H$ and $RH+OH \rightleftharpoons R+H_2O$) for A) n-heptane 75%, hydrogen 25% and B) n-heptane 25% hydrogen 75% with $O_2 = 21\%$, $\Phi = 1$, $P_c = 15atm$ and $T = 800K$

헵탄의 초기 수소 추출반응의 생성율을 감소하는 것을 확인할 수 있다. 헵탄의 초기 수소 추출 반응이 감소함에 따라 전체적인 헵탄반응의 생성율 또한 감소하게 된다.

Fig. 4는 민감도 분석 결과를 나타내고 있다. 양의 값을 가지는 반응들은 점화지연을 증가시키는데 영향을 미치는 반응들이며, 음의 값을 가지는 반응들은 점화지연을 감소시키는데 영향을 미치는 반응들이다. 그림에서도 확인할 수 있듯이 혼합물내의 수소의 농도가 증가함에 따라 앞서 언급한 R3($H_2+OH \rightleftharpoons H_2O+H$)반응이 급격히 증가하는 것을 확인할 수 있다. 또한 대부분의 음의 값을 가지는 반응들은 헵탄의 반응임을 확인할 수 있다. 이를 통해 혼합물 내의 수소 농도가

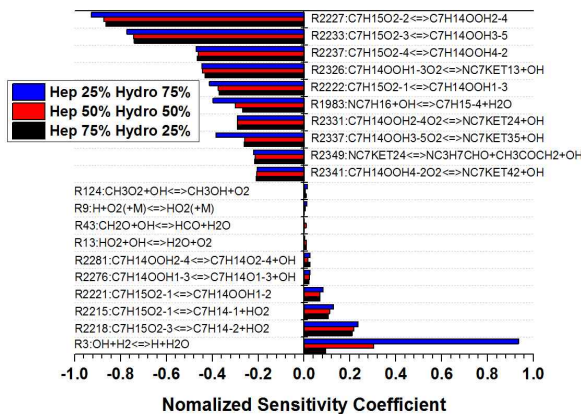


Fig. 4 Ignition delay time sensitivity analysis for various fuel composition at $O_2 = 21\%$, $\Phi = 1$, $P_c = 15atm$ and $T = 800K$

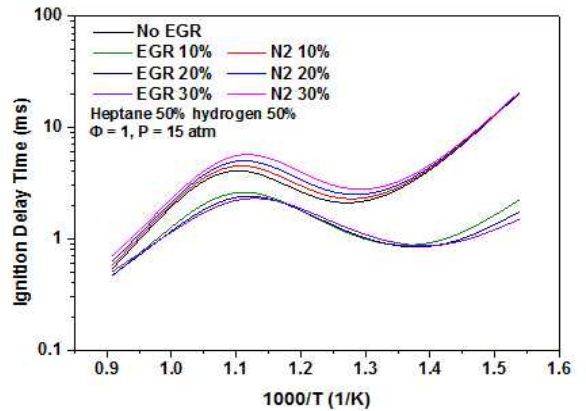


Fig. 5 Ignition delay time with changing EGR rate and N_2 dilution rate at n-heptane 50%, hydrogen 50%, $\Phi = 1$, $P_c = 15atm$ and various T_c

증가함에 따라 R3반응의 민감도와 생성율이 증가하고, 동시에 점화지연시간을 감소시키는데 기여를 하는 헵탄 반응의 생성율이 감소함을 알 수 있다. 이러한 원인으로 혼합물 내의 수소 농도가 증가함에 따라 점화지연시간이 증가하는 것이라고 판단된다.

Fig. 5은 압력 15atm, 당량비 1, 혼합비율 5:5인 조건에서 EGR적용에 따른 점화지연 시간을 나타내고 있다. 보다 명확한 분석을 위해 혼합물을 EGR 가스와 같은 비율로 N_2 를 사용하여 희석한 경우와 비교하였다. N_2 희석 비율이 증가함에 따라 즉, 혼합물 내의 산소 농도가 감소함에 따라 점화지연시간이 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 하지만 EGR을 적용하였을 경우 혼합물 내의 산소농도가 감소함에도 불구하고 점화지연시간이 감소하는 것을 확인할 수 있었다. 이러한 원인을 분석하고자 중간 화학종 분석을 진행하였다.

Fig. 6는 시간에 따른 헵탄의 소모율과 주요 중간 화학종들의 생성량 및 소모량을 나타내고 있다. A)와 B)에서 확인할 수 있듯이 혼합물을 N_2 로 희석을 함에 따라 즉, 혼합물 내의 산소 농도가 감소함에 따라 주요 중간 화학종의 생성과 소비에 걸리는 시간이 증가하는 것을 확인할 수 있다. 이를 통해 전체적인 점화지연 시간이 증가하는 것을 확인할 수 있다. 하지만 C)의 경우 주요 중간 화학종들의 소비에 걸리는 시간은 B)의 경우와 크게 차이가 나지 않지만 생성에 걸리는 시간이 급격하게 감소하는 것을 확인할 수 있다. 이는 EGR 가스 내에 포함되어 있던 소량의 중간생성물이 중간생성물의 생성에 걸리는 시간을 감소시켰기 때문이라고 판단된다. 이러한 이유로 EGR을 적용하였을 경우 산소농도가 감소함에도 불구하고 전체적인 점화지연시간이 감소

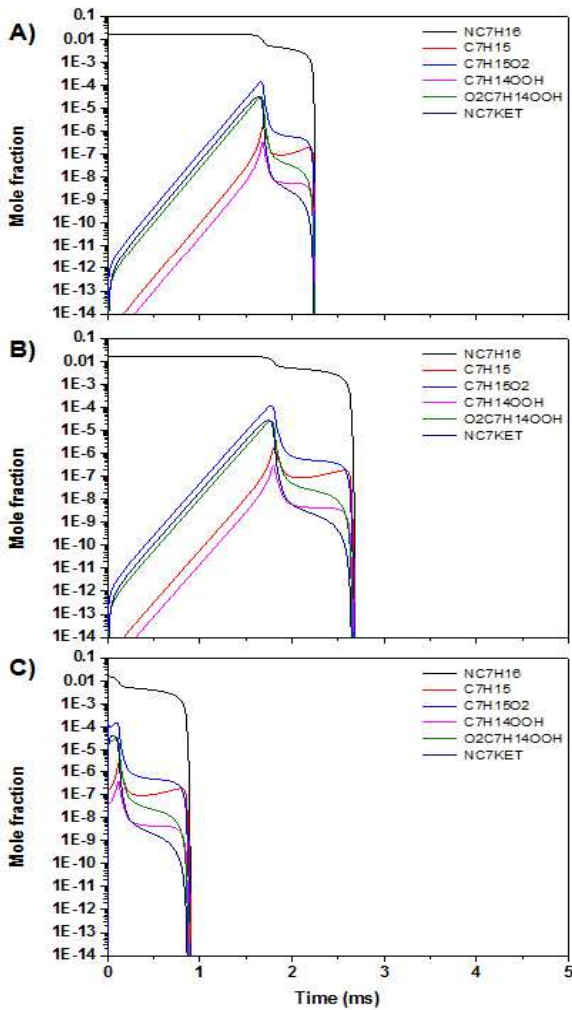


Fig. 6 Computed consumption of n-heptane and important species concentrations for A) no EGR, B) 30% N₂ dilution rate, C) 30% EGR rate at n-heptane 50%, hydrogen 50%, $\Phi = 1$, $P_c = 15\text{atm}$ and $T_c = 750\text{K}$

한다고 판단된다.

후 기

본 연구는 2014년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제(No.20144010200780)입니다.

참고 문헌

[1] Guo H, Smallwood GJ, Liu F, Ju Y, Gulder OL, "The effect of hydrogen addition on flammability limit and NO_x emission in ultra-lean counterflow CH₄/air premixed flames", Proc. Combust. Inst., Vol. 30, 2005, pp.303-311

[2] Yu G, Law CK, Wu CK, "Laminar flame speeds of hydrocarbon+air mixtures with hydrogen addition", Combustion and flame, Vol. 63, 1986, pp.339-347

[3] Shy SS, Chen YC, Yang CH, Liu CC, Huang CM, "Effects of H₂ or CO₂ addition, equivalence ratio, and turbulent straining on turbulent burning velocities of for lean premixed methane combustion", Combustion and flame, Vol. 153, 2008, pp. 510-524.

[4] Tuncer O, Acharya S, Uhm JH, "Dynamics, NO_x and flashback characteristics of confined premixed hydrogen-enriched methane flames", Int. J. hydrogen energy, Vol. 34, 2009, pp. 496-506

[5] Gersen S, Anikin NB, Nokhova AV, Levinsky HB, "Ignition properties of methane/hydrogen mixtures in a rapid compression machine", Int. J. hydrogen energy, Vol. 33, 2008, pp. 1957-1964

[6] Huang J, Bushe WK, Hill PG, Munshi SR, "Shock initiated ignition in homogeneous methane-hydrogen-air mixture at high pressure", Int. J. chem. kinet., Vol. 38, 2006, pp. 221-233

[7] Herzler J, Jerig L, Roth P, "Shock tube study of the ignition of lean n-heptane/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures", Proc. Combust. Inst. Vol. 30, 2005, pp. 1147-1153

[8] Gauthier BM, Davidson DF, Hanson RK, "Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures", Combustion and Flame, Vol. 139, 2004, pp. 300-311

[9] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, "A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation", Combustion and flame, Vol. 114, 1998, pp. 149-177

[10] Reaction Design. <http://www.reactiondesign.com/products/chemkin/>

[11] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, H. J. Curran, "Kinetic Modeling of Gasoline Surrogate Components and Mixtures under Engine Conditions", Proc. Combust. Inst. Vol. 33, 2011, pp.193-200.

[12] S. K. Aggarwal, O. Awomolo, K. Akber, "Ignition characteristics of heptane - hydrogen and heptane - methane fuel blends at elevated pressures", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 36, 2011, pp.15392-15402.