

HCCI 엔진 해석을 위한 Diesel Surrogate 반응 기구에 관한 연구

이 원 준¹⁾ · 이 승 로²⁾ · 이 창 언^{*2)}

인하대학교 대학원 기계공학과¹⁾ · 인하대학교 기계공학과²⁾

A Study on the Detailed Diesel Surrogate Chemical Mechanism for Analysis of HCCI Engine

Wonjun Lee¹⁾ · Seungro Lee²⁾ · Chang-Eon Lee^{*2)}

¹⁾Department of Mechanical Engineering, Graduate School, Inha University, Incheon 402-751, Korea

²⁾Department of Mechanical Engineering, Inha University, Incheon 402-751, Korea

(Received 3 August 2010 / Accepted 13 February 2011)

Abstract : Homogeneous charge compression ignition (HCCI) was the best concept able to provide low NOx and PM in diesel engine emissions. This new alternative combustion process was mainly controlled by chemical kinetics in comparison with the conventional combustion in internal combustion engine. In this paper, detailed kinetic reaction mechanisms of diesel surrogate was investigated to understand the diesel HCCI engine combustion. It was tested two existing mechanisms and two new mechanisms for the comparison of experimental result. The best mechanism for diesel surrogate was suggested through this comparison.

Key words : HCCI(예혼합 압축 착화), N-heptane(헵탄), Toluene(톨루엔), Reaction mechanism(반응기구), Diesel surrogate(디젤 대용)

Nomenclature

L_C : connecting rod length
 L_A : crank arm radius
 V_C : clearance volume
 D : cylinder bore diameter
 C : compression ratio
 V_d : displacement volume
 P_m : motored cylinder pressure
 P : instantaneous cylinder pressure
 T_r : working-fluid temperature
 V_r : working-fluid volume
 P_r : working-fluid pressure

\overline{S}_p : piston speed(= $2L_A\omega$)
 ω : average cylinder gas velocity

1. 서론

전 세계적으로 대기오염 규제의 강화로 인해 자동차의 유해가스를 줄이기 위한 많은 노력들이 이루어지고 있다. 그 중 균질 예혼합 압축착화(HCCI) 연소 방식은 현재 디젤 엔진에서 발생하는 NOx와 PM을 획기적으로 줄일 수 있는 기술로 많은 연구가 이루어지고 있다.^{1,2)} 하지만 현재 균질 예혼합 연소 방식은 특별한 점화 장치 없이 연료의 화학적인 특성만으로 점화가 이루어지기 때문에 점화시기의 조절 및 좁은 운전 영역에 대한 과제가 남아 있다.³⁾ 이 문제를 해결하기 위해서는 연료의 화학적 특성에 대한 연구가 필요하지만, 현재 디젤 연료의 수치 해

*Corresponding author, E-mail: chelee@inha.ac.kr

석적 연구를 위한 반응 기구가 체계적으로 확립되어 있지 않은 실정이다.⁴⁾ 이에 대한 방안으로 디젤 surrogate에 대한 연구가 활발하게 이루어지고 있으며, 그중 디젤과 세탄가가 같은 헵탄과 방향족 탄화수소인 톨루엔을 혼합한 반응기구가 주목 받고 있다.^{5,6)} 하지만 현재 개발된 디젤 대응 반응 기구는 정확성에 대한 검증이 다소 부족한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 디젤 surrogate의 정확한 연소특성을 살펴보기 위해 기존의 반응 기구를 검증하고, 보다 정확한 상세 반응 기구를 제안하고자 한다.

2. 디젤 대응 연료의 연소특성

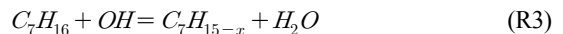
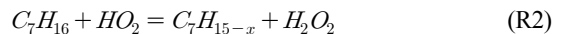
본 연구에서는 디젤 연료의 연소 특성을 모사하기 위한 디젤 대응 연료로 헵탄/톨루엔 혼합 연료를 사용하였다. 일반적으로 디젤 연료는 37%의 알케인계 탄화수소, 34%의 나프텐계 탄화수소와 29%의 방향족 탄화수소로 구성되어 있다. 헵탄은 디젤 연료의 알케인계 탄화수소를 대표하는 연료로 디젤과 세탄가가 56으로 같고, 2단계 점화 특성이 잘 나타나기 때문에 디젤 surrogate로 매우 적합하다고 알려져 있다. 그리고 톨루엔은 디젤 연료중의 방향족 탄화수소를 대표하는 연료이다. 디젤 연료의 방향족 탄화수소는 9~14개의 탄소 원자들로 구성되어 있어 분자구조가 단순한 벤젠의 경우 디젤 대응 연료로 적합하지 않으며, 분자구조가 복잡한 톨루엔이 디젤 대응 연료로 적합하다고 알려져 있다.⁷⁾

디젤 대응 연료인 헵탄/톨루엔 혼합 연료의 산화 과정은 헵탄의 1차 산화 과정에 의해 반응이 시작되며, 이때 발생하는 OH라디칼과 산소원자에 의해 톨루엔의 탈 수소화 반응이 일어난다. 여기서 다량의 OH라디칼과 산소 원자가 소모되고, 이로 인해 헵탄의 1차 산화에 필요한 OH라디칼과 산소원자의 부족으로 반응이 지연된다. 따라서 혼합연료의 2차 산화 과정은 헵탄의 산화 과정에 비해 다소 지연되어 진다.⁸⁾ 디젤 대응 연료의 연소 특성에 대한 이해를 돕기 위해 아래에 헵탄과 톨루엔의 반응 특성에 대해서도 간략히 기술하겠다.

2.1 헵탄의 반응 특성

Fig. 1은 헵탄의 HCCI 연소과정에서 crank angle

degree(이하CAD)에 따른 온도 변화를 나타낸 것이다. 그림과 같이 헵탄은 1차 산화과정인 냉염(Cool Flame)과 2차 산화과정인 열염(Hot Flame)으로 구분되는 2단계 발화 특성을 가지고 있다. 냉염은 700K~900K에서 발생하며, 이때 생성된 중간 생성물은 2차 발화 시점에 큰 영향을 미치게 된다. 1차와 2차 발화사이에는 온도가 증가함에도 불구하고 반응이 억제되는 NTC(Negative Temperature Coefficient) 현상이 나타나며, 이로 인해 1차와 2차 발화 구간이 뚜렷하게 구분된다. 즉, 헵탄의 1차 산화과정은 (R1)~(R3)의 탈 수소화 반응에 의해 시작되며, 이때 생성된 H₂O₂와 HO₂ 라디칼은 2차 산화 반응의 OH 라디칼의 형성에 가장 큰 영향을 미친다. (R1)~(R3) 반응식의 C₇H_{15-x}는 이성질체인 C₇H₁₅₋₁~C₇H₁₅₋₄을 총칭한다.



탈 수소화 반응에서 생성된 HO₂는(R4)반응에 의해 H₂O₂를 생성하며, (R2)반응에서 생성된 H₂O₂와 함께 (R5)반응에 의해 OH 라디칼을 생성한다.

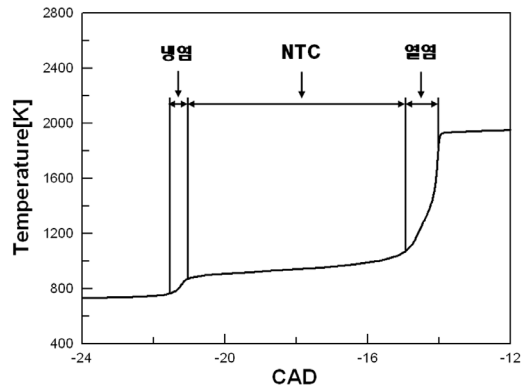
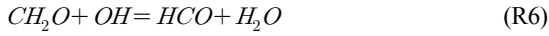


Fig. 1 Combustion characteristic of heptane



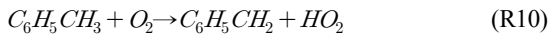
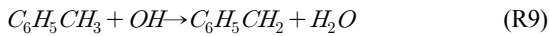
2차 산화과정인 열염은 주로 (R6)~(R8)의 산화 반

응에 의해 일어난다. 즉, 1차 산화 반응에서 생성된 CH₂O와 OH가 결합해 HCO를 형성하고, 이후 산소와 결합해 CO를 생성한다. 그리고 CO는 OH와 결합해 CO₂를 생성한다.⁸⁾

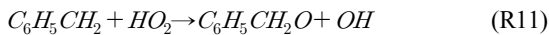


2.2 톨루엔의 반응 특성

톨루엔은 방향족 탄화수소로 헵탄에 비해 반응의 시작점이 다소 늦다. 톨루엔은 1000K 근방의 온도에서 OH, O₂에 의해 (R9),(R10)의 탈 수소화 반응이 개시되며, 이때 안정한 중간 화합물인 C₆H₅CH₂를 생성한다. 이 반응에 다량의 OH, O₂가 소모되기 때문에 헵탄/톨루엔 혼합연료의 2차 산화 반응이 지연된다.



이후 (R11),(R12)등의 주요 산화 과정을 거쳐 CH₂O라디칼이 생성되며, 이하의 산화과정은 헵탄의 2차 산화 과정과 동일하다.⁶⁾



3. 수치해석 방법 및 반응 기구

3.1 수치해석 방법

모사 계산은 Sandia National Lab.에서 개발한 CHEMKIN-PACKAGE의 SENKIN모형을 수정하여 수행하였다.⁹⁾ 정적 연소 모델인 SENKIN모형을 대상으로 하여 시간변화 즉 크랭크 각도에 따른 실린더 내부의 체적변화를 고려하여, 엔진 연소장을 모사하였다. 사용된 식은 다음과 같다.

$$\frac{d(V/V_c)}{dt} = \Omega \left(\frac{C-1}{2} \right) \sin\theta \left[1 + \frac{\cos\theta}{\sqrt{R^2 - \sin^2\theta}} \right] \quad (1)$$

$$R = \frac{L_C}{L_A} \quad (2)$$

Table 1 Specifications of the engine

Compression ratio	16.7
Bore	127mm
Stroke	154mm
Connecting rod length	255mm
Inlet valve opening	367CAD ATC
Inlet valve closing	581CAD ATC
Exhaust valve opening	121CAD ATC
Exhaust valve closing	349CAD ATC

$$C = \frac{V_{s,max} + V_c}{V_c} \quad (3)$$

$$V_{s,max} = \frac{\pi}{2} D^2 L_A \quad (4)$$

열전달 모델은 Woschni correlation을 사용하였다.¹⁰⁾

$$w = \left[C_1 \bar{S}_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (P - P_m) \right] \quad (5)$$

모사계산에 사용된 엔진 제원은 Table 1에 상세히 표기 하였다.¹¹⁾ 압축비는 10.2로 고정하였으며, 엔진 스피드는 900 RPM, 당량비는 0.3, 초기온도는 380 K로 계산을 수행하였다.

3.2 반응 메커니즘

본 연구에서는 기존의 2개 반응기구와 새롭게 제안한 2개 반응 기구를 검토하였으며, 이들 반응기구의 특징은 Table 2에 요약되어 있다.

Table 2 Diesel surrogate mechanism

Name	Species	Steps	Mechanism
Andrae	137	633	iso-octane,n-heptane skeletal mechanism+Alzueta benzene, Sivaramakrishnan toluene
Hernandez	644	2,796	LLNL n-heptane detailed version2+ LLNL toluene + Andrae surrogate mechanism
NEW1	736	3,082	LLNL n-heptane detailed version3+LLNL toluene+ Andrae surrogate mechanism
NEW2	743	3,279	LLNL n-heptane detailed version3+Alzueta benzene, Sivaramakrishnan toluene+ Andrae surrogate mechanism

기존의 Andrae의 반응 기구는 iso-octane, n-heptane skeletal mechanism과 Alzueta benzene, Sivaramakrishnan toluene의 반응 기구를 조합한 137 화학종과 633 반응식으로 구성되어 있다.⁶⁾ 또 Hernandez의 반응 기구는 Lawrence Livermore National Laboratory(이하 LLNL) n-heptane detailed version2, LLNL toluene과 Andrae surrogate 반응 기구를 조합한 644 화학종과 2,796 반응식으로 구성되어 있다.⁷⁾

제안된 첫 번째 반응 기구는 Hernandez가 제안한 반응 기구에 n-heptane 반응 기구를 LLNL에서 새롭게 제안한 version3 반응 기구를 조합한 것으로 736 화학종과 3,082 반응식으로 구성되어 있다. 두 번째 반응 기구는 LLNL n-heptane detailed version3, Alzueta benzene, Sivaramakrishnan toluene, Andrae surrogate 반응 기구를 조합한 것으로 743 화학종과 3,279 반응식으로 구성되어 있다. 새롭게 제안된 두 개의 반응 기구는 같은 n-heptane 반응 기구를 사용하였지만 서로 다른 toluene, benzene 반응 기구를 사용하였다. 각각의 반응 기구의 차이가 전체 혼합연료의 반응에 미치는 영향을 확인하였다.

본 연구에서는 위에 언급한 4개의 반응 기구의 정확성을 검증하기 위해 실제 실험과의 비교 검토하여 가장 정확성이 높은 반응 기구를 제안하였다. 또한 각 반응기구의 차이점 분석을 위해 중간 생성물의 생성과 소멸을 분석하였으며, 혼합 반응 기구에서 각 연료의 반응기구가 전체 반응에 미치는 영향을 살펴보았다.

4. 결과 및 고찰

4.1 반응 기구 검증

Fig. 2는 기존에 제안된 2개의 반응 기구와 새롭게 제안한 2개의 반응 기구를 실험조건과 동일한 조건에서 계산을 수행하여 비교한 결과이다. 실험은 헵탄 35%와 톨루엔 65%혼합 연료를 사용하여 HCCI 엔진에서 압축비 16.7, 엔진 스피드 1200RPM, 당량비 0.33, 초기온도 393K, 초기 압력 1bar에서 수행한 것이다.¹¹⁾ 4개의 반응 기구를 모두 실험과 같은 조건에서 계산을 수행하였고, 그 결과 모두 비슷한 압력 선도를 나타내는 것을 확인 할 수 있다. 하지만

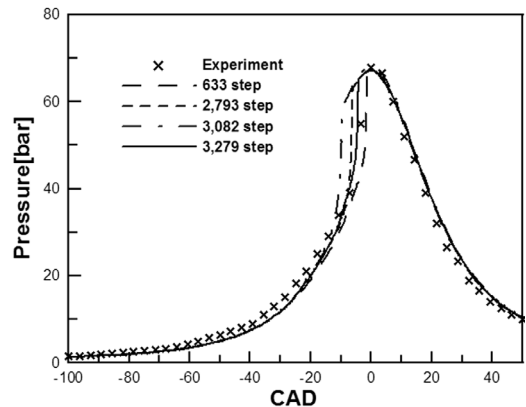


Fig. 2 Comparison of modeling and experimental

HCCI 엔진 연소 해석에서 가장 중요한 점화시기에 있어서 다소 차이를 보이는 것을 확인할 수 있다. 점화 시기가 가장 빠른 3,082 step과 점화 시기가 가장 늦은 633step의 경우 2차 산화 반응이 8CAD차이가 발생하며, 실험 결과와도 최대 6CAD의 차이가 발생할 수 있다. 4개의 반응기구중 실험 결과와 가장 비슷한 결과를 보여주는 것은 본 논문에서 새롭게 제안된 3,279 step으로 실험결과의 2차 산화 시기와 1 CAD차이로 매우 정확한 모사를 보여준다. 이 반응 기구는 기존 반응 기구에 사용된 헵탄반응기구보다 정확도가 높은 LLNL의 version3 반응 기구를 사용하였고 n-heptane과 toluene의 연계반응에 관한 반응을 추가한 결과로 사료된다.

4.2 1차 산화 반응

이전 연구 결과에 따르면 디젤 연료의 경우 헵탄 50%와 톨루엔 50%를 사용할 경우 디젤 연료와 가장 비슷한 점화 특성을 갖는 것으로 알려졌다.⁷⁾ 이때 계산에 사용된 반응 기구는 2,793 step이며, Fig.3은 이전 실험조건과 동일한 조건에서 헵탄 50%와 톨루엔 50%의 조성비를 사용하여 계산을 수행한 결과이다. 4개의 반응 기구 모두 비슷한 압력 선도를 나타내지만 1차, 2차 산화시기에 있어서 다소 차이를 보이는 것을 확인 할 수 있다. 2,793 step의 경우 기존 연구에서 실제 디젤 연료의 점화 타이밍과 가장 유사한 모사율을 보여주었고, 3,279 step의 경우 2,793 step과 매우 비슷한 압력 선도를 나타내는 것을 확인할 수 있다. Fig. 4는 각 반응기구의 차이의

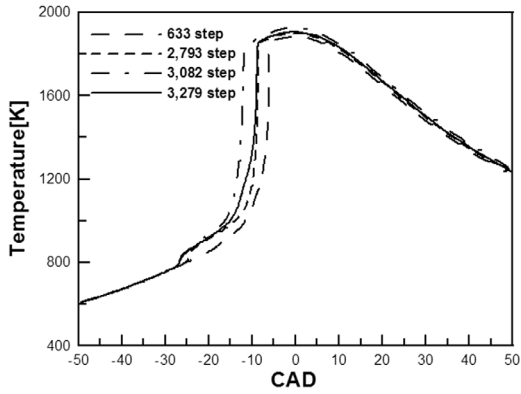


Fig. 3 Combustion characteristics of the mechanism

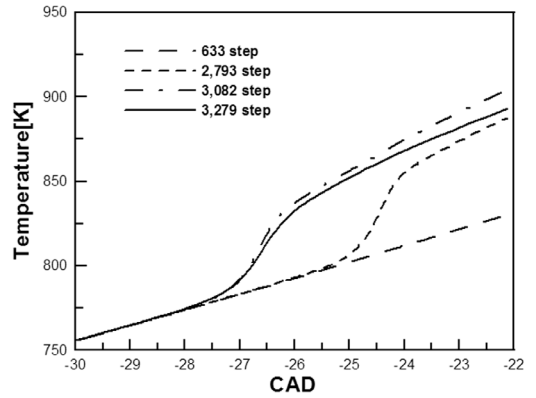


Fig. 5 1st combustion characteristics of the each mechanism in initial temperature 380K

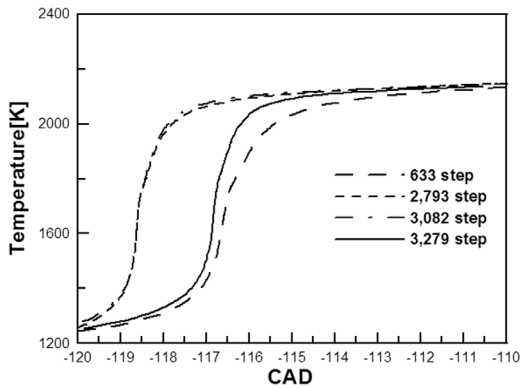
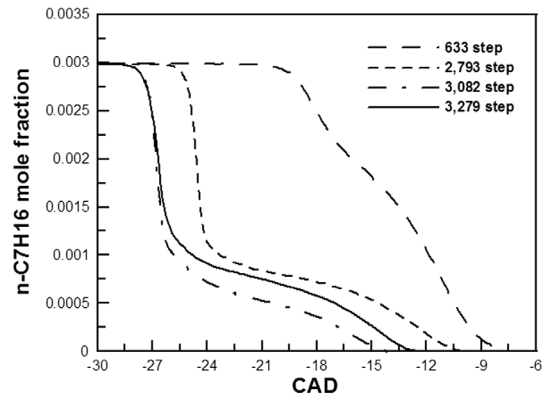


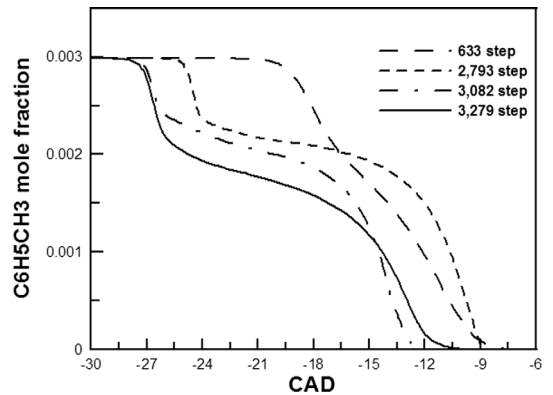
Fig. 4 Combustion characteristics of the each mechanism in initial temperature 1200K

원인을 확인하기 위해 1차 산화 반응이 끝나고 2차 산화 반응이 시작되기 전인 1,200 K를 초기 온도로 하여 계산을 수행하였다. 초기온도가 380 K일 경우 점화시기의 차이가 최고 8 CAD 차이가 발생하였지만 1,200 K일 경우 최고 2 CAD의 차이가 발생하는 것을 알 수 있다. 이것은 각 반응 기구의 차이가 1차 산화 반응의 차이에 의해 더 큰 영향을 받는 것을 알 수 있다.

Fig. 5는 1차 산화 지역에서의 4개의 반응 기구의 온도선도이다. 같은 헵탄 반응 기구를 사용한 3,082 step과 3,279 step의 경우 1차 산화 반응시점에 동일한 결과를 보이며, LLNL VERSION2의 헵탄 반응 기구를 사용한 2,793 step의 경우 반응 시작점이 다소 늦는 것을 알 수 있다. 더욱이 축소 반응 기구를 사용한 633 step은 1차 산화 반응이 나타나지 않았으며, 이로 인해 633 step의 경우 2차 산화 과정이 일어



(a) N-heptane mole fraction



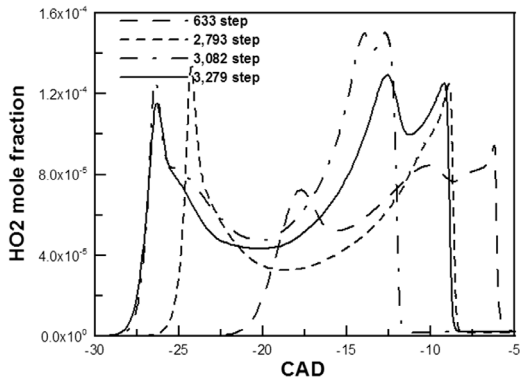
(b) Toluene mole fraction

Fig. 6 N-heptane and Toluene mole fraction of the each mechanism

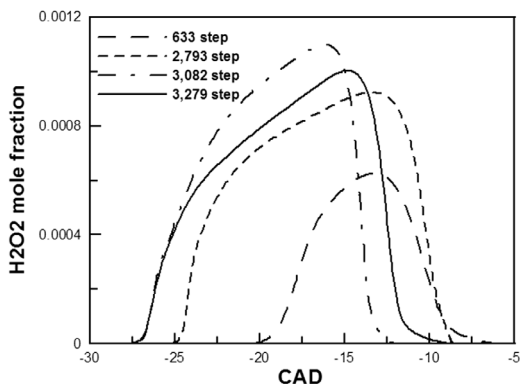
나는 시점이 3개의 반응 기구에 비해 다소 늦어지는 것을 확인할 수 있다.

Fig. 6은 각 반응기구별 연료의 소모율을 나타낸 것이다. 헵탄의 경우 사용된 반응 기구에 따라 같은 경향을 나타내지만 톨루엔의 경우 같은 반응 기구를 사용한 633 step과 3,279 step이 많은 차이를 나타내는 것을 알 수 있다. 더욱이 3,279 step과 3,082 step의 경우 다른 톨루엔 반응 기구를 사용했지만 톨루엔의 해리 시점이 동일하다. 이것은 톨루엔의 해리는 헵탄의 1차 산화에 따른 온도 변화에 더욱 민감하다는 것을 확인할 수 있다. 그리고 같은 헵탄 반응 기구를 사용하였지만 다른 반응 경로를 보이는 것으로 보아, 헵탄의 해리 과정은 톨루엔의 반응 기구에 영향을 받는 것을 알 수 있다. 이것은 톨루엔의 탈수소화 반응이 헵탄의 1차 산화 반응을 억제시키는 결과로 사료된다.

Fig. 7은 1차 산화 과정에서 생성되어 2차 산화 과



(a) HO₂ radical mole fraction



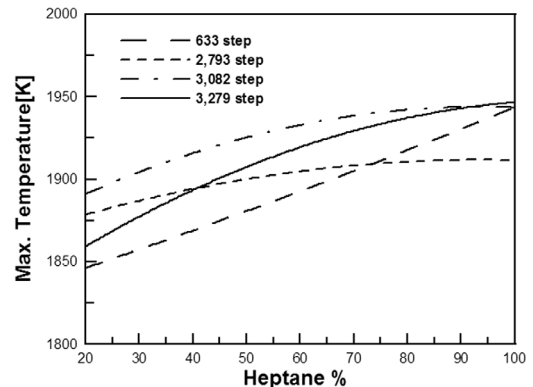
(b) H₂O₂ radical mole fraction

Fig. 7 HO₂ and H₂O₂ radical mole fraction of the each mechanism

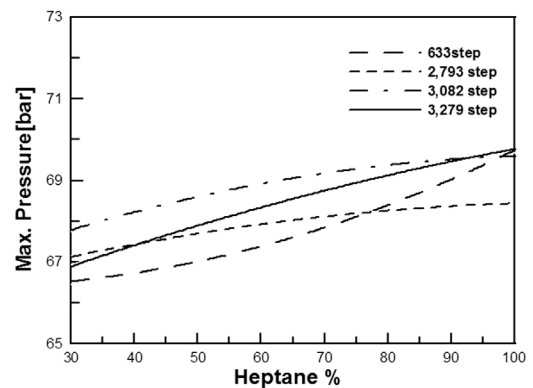
정에 가장 큰 영향을 미치는 H₂O₂와 HO₂ 라디칼을 표시한 것이다. HO₂ 라디칼의 경우 생성 시점에서 같은 헵탄 반응 기구를 사용한 3,082step과 3,279step이 같은 것으로 보아 헵탄 반응 기구에 의해 결정되어지며 반응 경로는 톨루엔 반응 기구에 의해 결정되어지는 것을 확인할 수 있다. H₂O₂의 경우 생성시점은 1차 산화 반응 시점을 나타내고 감소 시점은 2차 산화 반응 시점을 나타낸다. 또 그 양에 차이에 따라 온도 변화가 다소 생기는 데 이것은 H₂O₂의 해리 반응이 OH 라디칼에 생성에 가장 큰 영향을 주기 때문이다.

4.3 혼합비율에 따른 반응기구 특성

Fig. 8은 각 반응 기구의 혼합비에 따른 차이를 확인하기 위해 혼합비별 최고 온도와 압력을 비교하



(a) Maximum temperature



(b) Maximum pressure

Fig. 8 Maximum temperature and pressure according to fuel composition

었다. 점화 시기는 전체 열 발생률에 10%가 되는 지점으로 하였다. 이는 1차 산화 반응 구간에서 전체 열 발생률의 약 5%에 해당하는 열이 발생하기 때문에 2차 산화반응 지점을 확인하기 위해 10% 지점으로 결정하였다. 조성에 따른 최고 온도와 압력은 반응기구 별로 다소 차이가 있지만 그 양의 차이가 크지 않은 것을 알 수 있다. 하지만 톨루엔 반응 기구에 따라 조성별 최고 온도, 압력 변화의 차이를 보이는데 633 step과 3,279 step의 경우 조성변화에 따라 다소 큰 변화를 보여주지만 LLNL에서 제안한 톨루엔 반응 기구를 사용한 2,793 step과 3,082 step의 경우는 조성 변화에 거의 영향을 받지 않는 것으로 보인다.

Fig. 9는 조성에 따른 2차 산화 시점을 표시한 것이다. 점화 타이밍은 조성에 따라 다소 차이를 보이는 것을 알 수 있다. 3,279 step의 경우 헵탄의 조성이 35%, 50%일 때의 실제 실험 결과와 가장 비슷한 결과를 보이는 것을 이전 결과에서 확인하였고, 헵탄 100%의 계산을 수행하였을 때도 가장 정확한 값을 보여준다. 2,793 step의 경우 헵탄 50%의 경우 실제 실험과 비슷한 결과를 보여주지만 조성에 변화에 따라 정확성이 가장 높은 3,279 step과 다소 차이를 보이며 더욱이 헵탄의 조성이 증가함에 따라 많은 차이를 보인다. 633 step의 경우 헵탄의 조성이 증가함에 따라 3,279 step과 비슷한 점화시기를 갖지만 헵탄 50%의 지점에서 큰 차이가 발생해 디젤 대응 반응기구로 다소 부적합하다. 그리고 3,082 step의 경우 역시 실제 실험 결과와 큰 차이를 보이며, 조성변

화에 따른 결과에서도 3,279 step과 많은 차이를 보인다. 그리고 633 step과 3,279 step의 경우 조성에 따라 점화 타이밍이 매우 민감하게 변하는 것을 확인할 수 있는데, 이것은 조합에 사용한 톨루엔 반응 기구의 영향임을 확인할 수 있다.

5. 결론

본 연구에서는 HCCI 디젤 엔진의 화학적 반응 특성의 연구를 위한 기존 반응 기구의 검증 및 새로운 반응 기구를 제안하였다. 기존의 반응 기구의 경우 실제 실험결과와 다소 차이를 보이는 것을 알 수 있었고, 본 논문에서 새롭게 제안한 3,279 step의 경우가 가장 높은 정확성을 보여주었으며, 자세한 결과는 다음과 같다.

- 1) 검토된 4개의 반응기구 모두 실험과 비슷한 압력 선도 및 온도선도를 보이지만 점화 시점에서 다소 차이를 보이며, 실제 실험 결과를 가장 정확하게 모사한 반응 기구는 본 논문에서 새롭게 제안된 3,279 step이다.
- 2) Andrae에 의해 제안된 633 step의 축소 반응기구의 경우 1차 산화 반응이 나타나지 않으며 이로 인해 2차 산화 반응이 다소 늦어져 HCCI엔진 연구를 위한 디젤 대응 반응기구로 다소 부적합하다.
- 3) 혼합반응 기구의 경우 헵탄 반응 기구에 의해 반응이 시작되며, 톨루엔의 해리 시점 역시 헵탄 반응 기구의 지배를 받는다. 톨루엔 반응 기구는 1차 산화 반응 시작 후 반응 시간과 반응 경로에 영향을 미치며 2차 산화 반응 즉 점화 타이밍에 큰 영향을 미친다.
- 4) 조성에 따른 각 반응기구의 최고 압력 및 온도는 모두 비슷하지만 점화 타이밍은 다소 차이를 나타내며, 조성 변화에도 가장 정확한 점화시기를 보여주는 것은 본 논문에서 제안한 3,279 step의 반응기구이다.

후 기

본 연구는 산업자원부 지정 인하대학교 자동차동력계부품 지역혁신센터의 지원에 의한 것입니다.

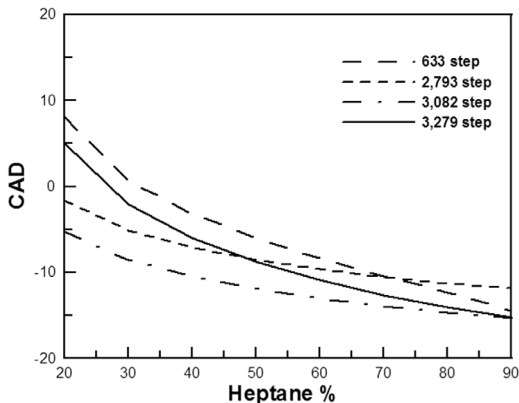


Fig. 9 Ignition timing according to fuel composition

References

- 1) I. Orlandini, A. Kulzer, F. Weberbauer and M. Rauscher, "Simulation of Self Ignition in HCCI and Partial HCCI Engines Using a Reduced Order Model," SAE 2005-01-02159, 2005.
- 2) Y. Sun and R. Reitz, "Modeling Diesel Engine NO_x and Soot Reduction with Optimized Two-stage Combustion," SAE 2006-01-0027, 2006.
- 3) G. Bression and D. Soleri, "A Study of Methods to Lower HC and CO Emissions in Diesel HCCI," SAE 2008-01-0034, 2008.
- 4) B. H. Song, D. K. Kim and N. H. Cho, "A Cycle Simulation Method for Chemical Kinetics," Transactions of KSAE, Vol.11, No.6, pp.51-58, 2003.
- 5) F. Maroteaux and L. Noel, "Development of a Reduced N-heptane Oxidation Mechanism for HCCI Combustion Modeling," Combustion and Flame, Vol.146, No.1-2, pp.246-267, 2006.
- 6) J. C. G. Andraee, T. Brinck and G. T. Kalghatgi, "HCCI Experiments with Toluene Reference Fuels Modeled by a Semidetailed Chemical Kinetic Model," Combustion and Flame, Vol.155, No.4, pp.696-712, 2008.
- 7) J. J. Hernandez, J. Sanz-Argent, J. Benajes and S. Molina, "Selection of a Diesel Fuel Surrogate for the Prediction of Auto-ignition under HCCI Engine Conditions," Fuel, Vol.87, No.6, pp.655-665, 2008.
- 8) Z. Zheng and M. Yao, "Numerical Study on the Chemical Reaction Kinetics of N-heptane for HCCI Combustion Process," Fuel, Vol.85, No.17-18, pp.2605-2615, 2006.
- 9) R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical Kinetics, SAND89-8009, Sandia National Laboratories, Livermore, California, 1989.
- 10) B. J. Heywood, Internal Combustion Engine Fundamentals, pp.678-680, McGraw-Hill Inc., Singapore, 1988.
- 11) J. Andrae, D. Johansson, P. Bjornbom, P. Risberg and G. Kalghatgi, "CO-oxidation in the Auto-ignition of Primary Reference Fuels and N-heptane/Toluene Blends," Combustion and Flame, Vol.140, No.4, pp.267-286, 2005.