

고온 고압에서 혼합연료의 층류화염속도 예측 모델에 대한 연구

변정주**

Laminar Flame Speed Model of Fuel Blends at Elevated Temperatures and Pressures

Jung Joo Byun

ABSTRACT

Iso-octane, n-heptane and their blends were tested in a constant volume combustion chamber to measure laminar flame speeds. The experimental apparatus was automatically controlled to enhance the accuracy and data acquisition speed. A large database of laminar flame speeds at elevated temperatures and pressures was established. From this database, laminar flame speeds of iso-octane, n-heptane and their blends were investigated and analysed to derive new correlation to predict laminar flame speeds at any blending ratio. The new flame speed model was successfully applied to these fuels with limited range of errors.

Key Words : Laminar flame speed(층류화염속도), iso-Octane(이소옥탄), n-Heptane(노말헵탄), Fuel blends(혼합연료)

기 호 설 명

C_p : Specific heat	T_f : Flame temperature
E_a : Activation energy	T_{ig} : Ignition temperature
N_{Octane} : Octane number	α : Thermal diffusivity
P : Pressure	δ_r : Reaction zone length
R_u : Universal gas constant	λ : Thermal conductivity
S_L : Laminar flame speed	ρ : Density
T_0 : Unburned air/fuel mixture temperature	

1. 서론

층류화염속도는 연료-공기 혼합물의 연소현상과 화염전파를 이해하는데 있어 기본적으로 요구되는 물성이다. 또한, 층류화염속도는 난류 연소 현상이나 유해 배기가스 형성을 연구하는 모델에 입력 값으로 사용되는 등 그 연구의 중요성 때문에 이에 대한 활발한 연구가 진행되고 있다[1]. 층류화염속도의 값은 고온, 고압에서 연소가 일어나는 내연기관을 설계하는 응용에도 활용된다. 최근에는 한정된 자원과 강화되는 환경규제에 대응하기 위해 연소효율은 높으면서 유해 배기가스를 적게 형성하는 새로운 연료의 개발에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 새로운 연

료개발의 한 방법은 기존의 연료들을 혼합하는 방법이며, 따라서 혼합연료의 층류화염속도에 대한 연구가 요구된다[2]. 이러한 요구로 혼합연료에 대한 개발은 활발하게 진행되었지만, 혼합연료의 층류화염속도를 모든 혼합비에 대한 실험 없이 예측할 수 있는 모델 개발은 이루어지지 않았다.

본 연구에서는 상대적으로 그 물성이 잘 알려진 iso-Octane과 n-Heptane의 혼합연료에 대한 연구를 통해 두 연료의 혼합비에 따른 층류화염속도 예측모델을 개발하였다.

2. 실험 및 층류화염속도 계산

2.1. 실험

Fig. 1은 실험장치의 개략도를, Fig. 2는 실제 사진

* 삼성중공업, 조선해양연구소

† 연락처자, jungjoo.byun@gmail.com

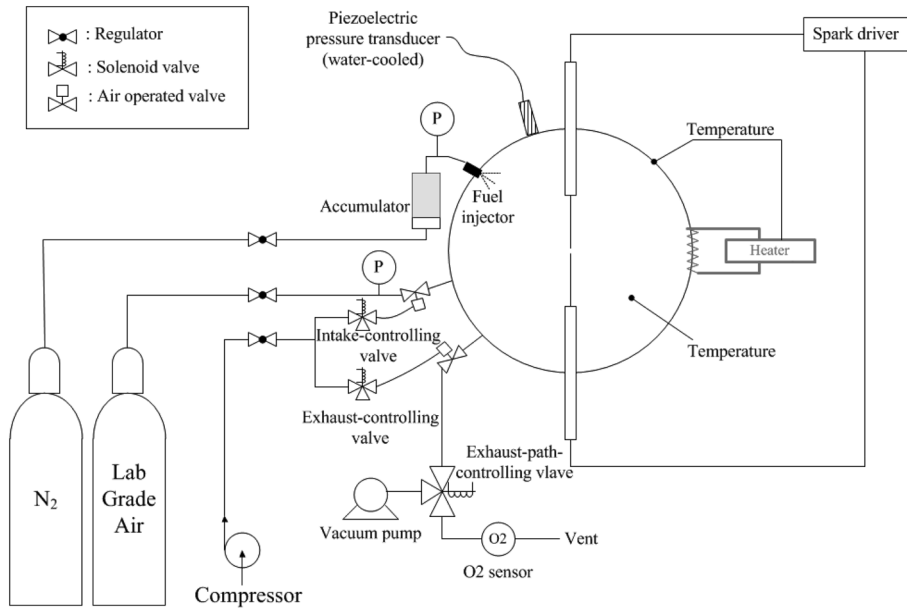


Fig. 1. Schematic diagram of the experimental apparatus.

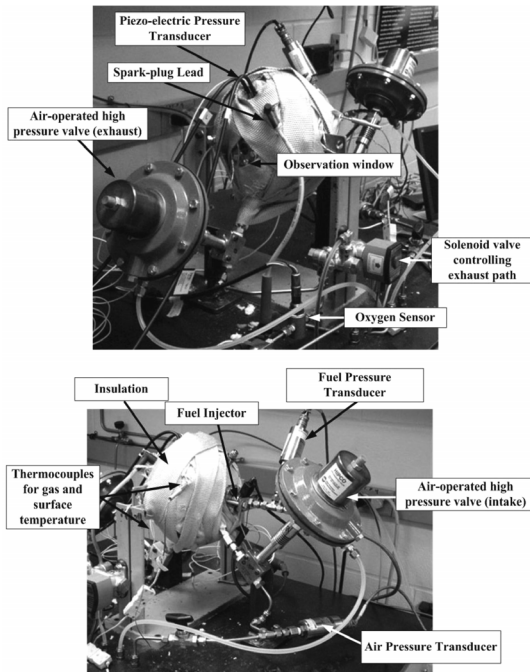


Fig. 2. Picture of the experimental apparatus.

을 보여준다. 그림에서 보는 바와 같이 실험 장치는, 중심에서 연소가 일어나는 정적구형용기와 연료와 공기의 공급, 점화, 압력 측정, 배기 및 당량비 측정 등을 위한 주변의 장치들로 구성되어 있다. 구형 용기는 부피가 약 1 L이며 303 스테인레스 스틸로 제작되었다. 실험의 전 과정은 정확성과 효율성 확보를 위

해 전 과정이 자동으로 제어되며 이를 위해 National Instrument사의 Compact Rio-9004가 사용되었다. 연료의 공급은 아우디사의 직분사 연료분사기를 사용하였고, 공기의 공급은 고온고압용 밸브를 제어함으로써 원하는 압력으로 용기 내부에 공급하였다. 초기 온도는 구형 용기를 싸고 있는 히팅테일을 제어함으로써 원하는 온도로 제어하였다. 혼합된 연료-공기 혼합물은 용기 중심에서 점화플러그에 의해 점화되고, 연소 과정동안의 압력변화는 피에조 압력센서를 이용하여 측정하였다. 이 압력변화 데이터를 이용하여 층류화염속도를 계산하며 이는 다음절에서 설명하였다. 연소가 완료된 후 배기과정 동안 광역산소센서를 이용하여 연료-공기 혼합물의 당량비를 측정하였다.

Table 1은 본 연구에서 수행한 실험의 조건들을 나타낸다. 연료는 iso-Octane과 n-Heptane 그리고 이 두 연료를 다양한 부피 혼합비로 혼합한 연료를 사용하

Table 1. Parameters of the calculated laminar flame speed test

Fuel	iso-Octane, n-Heptane, 25iso-Octane/75n-Heptane, 50iso-Octane/50n-Heptane, 75iso-Octane/25n-Heptane
Initial temperature (°C)	170, 185, 200
Initial pressure (atm gage)	1, 3, 5, 7, 9
Equivalence ratio	7 cases(stoichiometric case is in the middle)

였고, 3개의 초기온도, 5개의 초기압력에서 실험하였다. 당량비는 총 7개의 값으로 실험하였는데, 중간 값은 당량비 1의 값을 사용하였다.

실험 장치 및 실험 과정에 대한 보다 자세한 설명은 동일한 실험 장비를 사용한 이전의 논문에서 확인할 수 있다[3].

2.2. 층류화염속도 계산

한번의 실험을 통해 얻은 압력변화는 Fig. 3과 같다. 이 그림에서 모든 연소 과정은 점화가 일어난 후 약 47 ms 후에 모두 종료되며, 이후 용기 벽면을 통한 열손실에 의해 압력은 감소함을 확인할 수 있다. 층류화염속도의 계산은 점화가 일어난 후부터 압력이 최대값에 이르는 순간까지 계산되며, 층류화염속도로 채택된 구간은 화염초기의 점화플러그 및 화염 스트레치(stretch)의 영향을 받는 구간, 화염 후기의 용기 벽면을 통한 열손실 등의 영향을 받는 구간을 제외한, 반지름이 3.0 cm와 4.5 cm 사이 화염의 속도값으로 한정하였다.

실험을 통해 얻은 연소 과정동안의 용기 내 압력 변화를 이용하여 계산프로그램으로 층류화염속도를 계산하였는데, 그 순서도는 Fig. 4와 같다. 계산 과정에서 구형용기 내부는 2000개의 계산 공간으로 나뉘며 이들 공간들은 서로 혼합되지 않는 미연소영역, 연소영역, 기연소영역으로 구분된다. 매 시간 연소영역에서 연소되는 연료의 질량을 가정하면서 계산을 시작하고, 이 가정된 값을 이용하여 각 영역의 부피값을 계산한다. 각 영역의 계산된 부피 값들의 합이 실제 용기의 부피에 도달할 때까지 새로운 연소 질량값을 가정하며 반복 계산하여 실제 연소되는 연료의 질량을 찾는다. 이 질량을 이용하여 화염 전단에서의 질량 보존을 통해 화염의 속도를 계산한다. 위 전 과정을 점화시작 시점부터 용기 내 압력이 최대에 도달하는

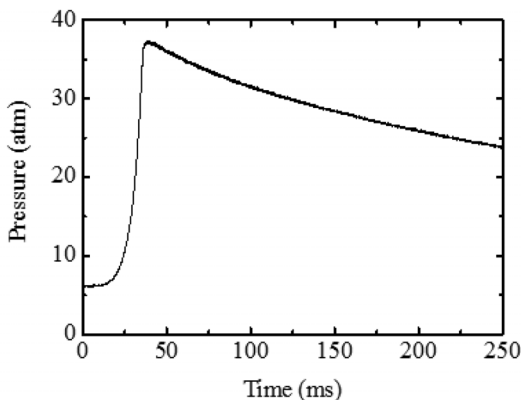


Fig. 3. Experimental result of a representative experiment.

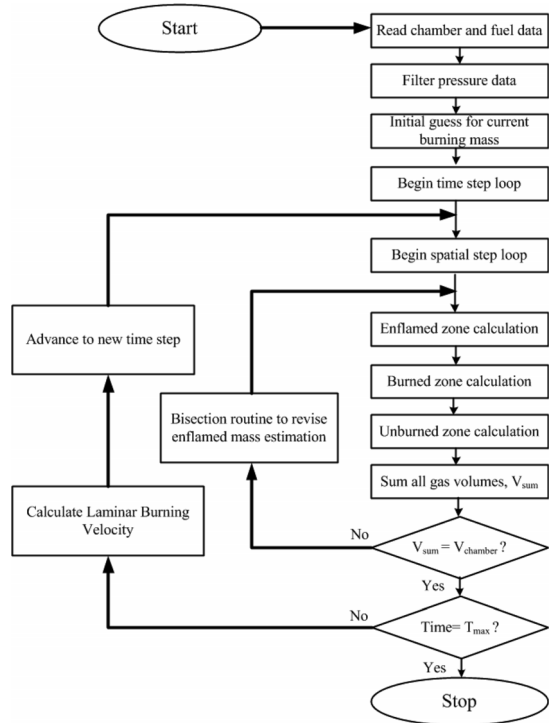


Fig. 4. Flowchart of the computational procedure.

시점까지 진행하여 전 과정 동안의 층류화염속도를 계산한다.

층류화염속도로 채택한 반지름 3.0 cm와 4.5 cm 사이의 기준에 대한 검증과 계산 과정에 대한 보다 자세한 설명은 이전의 논문에서 확인할 수 있다[3].

3. 혼합연료의 층류화염속도 예측 모델

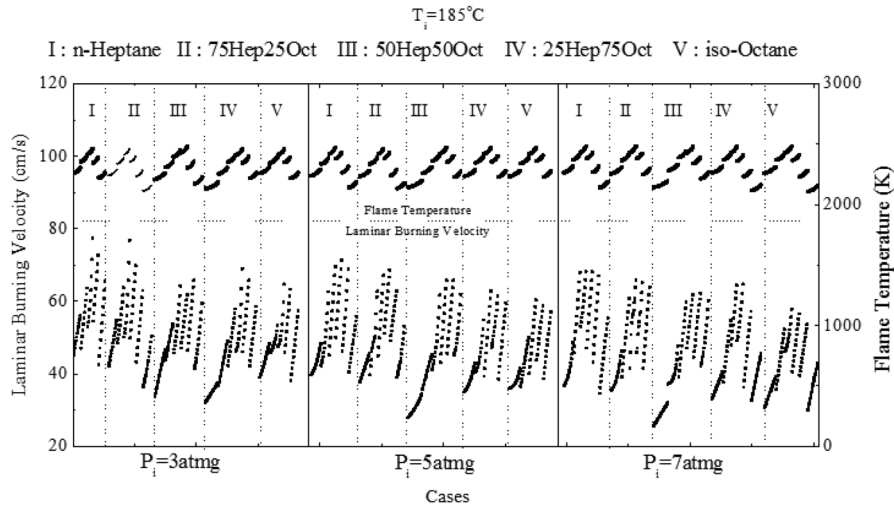
3.1. 층류화염속도 경향 분석

Table 1에 나타낸 조건들을 이용한 실험과 계산으로 각각의 연료-공기 혼합물에 대해 다양한 온도 압력에서 층류화염속도를 계산하였다. Table 2는 각각의 연료에 대한 층류화염속도의 개수와 온도, 압력, 당량비의 범위를 나타내며, 각 연료에 대해 고온, 고압에서 280개 이상의 층류화염속도를 구하였음을 볼 수 있다.

Iso-Octane, n-Heptane의 혼합연료에 대한 층류화염속도 예측 모델을 개발하기 전, 층류화염속도의 정량적인 경향을 알아보기 위해 층류화염속도로 택한 영역, 즉, 화염의 반지름이 3 cm와 4.5 cm 사이 보다 더 넓은 영역인 2.3 cm와 6 cm에 대해 Fig. 5와 같은 선도를 작성하였다. 이 선도는 iso-Octane, n-Heptane 그리고 이들의 혼합연료에 대한, 초기온도 185°C, 초기압력 3, 5, 7 atm에서의 화염온도와 화염속도를 나타낸다. 여기서 화염온도는 Chemical Equilibrium

Table 2. Number of data points, equivalence ratio range, temperature range and pressure range of each tested fuel

Fuel	iso-Octane	25Hep75Oct	50Hep50Oct	75Hep25Oct	n-Heptane
Number of data points	364	322	314	307	288
Equivalence ratio range	0.84-1.20	0.84-1.20	0.84-1.20	0.80-1.18	0.81-1.19
Temperature range (°C)	181-255	186-253	185-254	186-253	181-255
Pressure range (atmg)	2.33-15.89	2.37-15.56	2.43-15.73	2.37-15.69	2.34-15.89

**Fig. 5.** Laminar burning velocity and flame temperature of iso-Octane, n-Heptane and blends ($T_i = 185^\circ\text{C}$, $P_i = 3, 5, 7$ atmg).

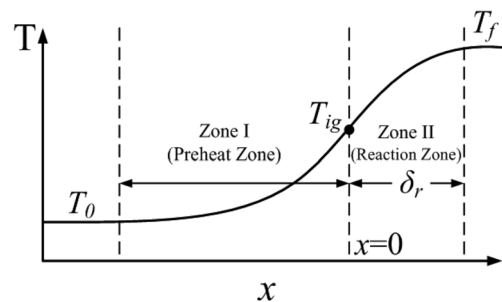
with Applications(CEA) 프로그램의 단일화염온도를 사용하였다[4]. Fig. 5를 통해 n-Heptane이 가장 빠른 화염속도를 보이고 iso-Octane이 가장 느리며, 이들의 혼합물은 그 사이의 빠르기를 보임을 알 수 있다. 또한, 화염온도와 화염속도를 비교해보면, 각 경우에 화염온도와 화염속도가 모두 포물선 모양의 경향을 나타냄을 확인할 수 있고 이를 통해 화염 온도가 화염속도의 결정에 큰 역할을 함을 알 수 있다. 그러나, 전체적인 화염온도와 화염속도를 비교해보면, 비록 화염온도는, iso-Octane, n-Heptane이 비슷한 화염온도를 갖는 특성상, 거의 같은 값들을 보임에도 연료에 따른 화염속도는 구분됨을 확인할 수 있다. 이를 통해 화염온도 외에 다른 인자도 화염속도를 결정함을 알 수 있다.

3.2. 층류화염속도 예측 모델

앞 절에서 살펴본 층류화염속도의 정량적인 경향과 아래에서 설명하는 층류화염 이론에서의 관계식을 이용하여, iso-Octane, n-Heptane의 혼합 연료에 대한 층류화염속도를 예측할 수 있는 관계식을 도출하였다.

Mallard와 Le Chatelier는 1883년 아래와 같은 층류화염 이론을 발표하였다[5]. 이 이론에 의하면, 화염

의 전파에 있어 가장 큰 역할을 하는 인자는 화염 영역에서부터 미연소 영역으로의 열전달이며 이를 Fig. 6과 같은 그림을 이용하여 설명하였다. 그림에서 보는 바와 같이 연소 모델의 영역을 예열 영역(Preheat zone, Zone I)과 반응 영역(Reaction zone, Zone II)으로 나누고, 반응 영역의 열이 예열 영역에 전달되어 연료-공기 혼합물을 가열하여 특정온도, 즉 발화 온도(Ignition temperature, T_{ig})에 이르면 연소가 시작되어 화염이 전파된다고 설명하였다. Mallard와 Le Chatelier는 이 이론을 바탕으로 Zone I와 Zone II 사이의 질

**Fig. 6.** Schematic diagram of the temperature variation across a typical laminar flame by Mallard and Le Chatelier.

량보존, 에너지 보존을 이용하여 아래와 같은 관계식을 도출하였다.

$$S_L = \frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} \frac{1}{\delta_r} \quad (1)$$

여기서, 반응 영역의 길이 δ_r 은 다음과 같이 반응률, $d\epsilon/dt$ 로 표현된다.

$$\delta_r = S_L \frac{1}{d\epsilon/dt} \quad (2)$$

그리고, 반응률 $d\epsilon/dt$ 는 Arrhenius 법칙에 의해, n 차 화학반응에 대해 활성화 에너지 E_a , 기체 상수 R_u , 압력 P 그리고 화염 온도 T_f 와 아래 식 (3)과 같은 관계를 갖는다.

$$\frac{d\epsilon}{dt} \propto e^{-\frac{E_a}{R_u T_f}} P^{n-1} \quad (3)$$

여기서 온도는 화염의 온도 T_f 를 사용하였는데, 이는 앞 절에서 확인한 바와 같이 화염의 온도가 화염 속도의 결정에 큰 역할을 하며, 대부분의 화학반응이 화염온도 근방에서 이루어지기 때문이다. 식 (2), (3)을 식 (1)에 대입하여 다시 정리하면 다음과 같다.

$$S_L = S_{L0} \sqrt{\frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} e^{-\frac{E_a}{R_u T_f}} P^{n-1}}$$

위와 같은 형태의 관계식을 바탕으로 iso-Octane 과 n-Heptane 그리고 이들의 혼합연료에 대한 새로운 층류화염속도 예측 관계식을 아래와 같은 형태의 실험식으로 정의하고 다음에 설명하는 바와 같이 실험결과를 이용하여 완성하였다.

$$S_L = S_{L0} \alpha \left(\frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} \right)^{k_2} k_3 e^{\frac{k_4}{T_f}} P^{k_5}$$

우선 iso-Octane에 대해 S_{L0} 를 24 cm/s, T_{ig} 를 720 K으로 고정한 후, k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 값을 실험을 통해 구한 값과 근사하여 구하였다. Iso-octane을 시작으로 5개의 상수를 구한 이유는 iso-octane이 가장 많은 데이터 값을 갖고 있기 때문이다. N-Heptane의 경우 iso-Octane보다 연소 후단, 즉 고온/고압에서 측정 압력의 급격한 변화를 보이는 현상이 자주 발생하여 이 구간의 값들은 층류화염속도 계산에서 배제하였

Table 3. Fitting result of iso-Octane

k_1	0.20
k_2	1.28
k_3	3.72
k_4	-2022.61
k_5	-8.22E-26 \approx 0

고 이와 같은 이유로 iso-Octane에 비해 약 20% 적은 값들을 갖고 있다. 본 해석과정에 있어 화염속도의 단위는 cm/s, 모든 온도의 단위는 K, 압력의 단위는 atm, 열확산계수의 단위는 m^2/s 를 사용하였다. 열확산 계수 계산을 위한 열전도도와 정압비열의 값은 Yaws 에서의 값을 이용하였다[6]. Table 3은 근사의 결과를 나타내는데, 여기서 압력의 영향을 나타내는 k_5 는 거의 0의 값을 보인다. 이는 층류화염속도 결정에 압력의 영향이 없음을 의미하는 것이 아니라, 연료-공기 혼합물의 물성치인 열확산계수 α 에 이미 압력변화에 따른 영향이 반영된 결과이다. Fig. 7은 근사식으로 계산한 값과 실험을 통해 구한 값의 비교를 나타내며, 그림에서 보는 바와 같이 새로운 모델로 계산한 값과 실험을 통해 구한 값이 한정된 오차내에서 유사한 값을 보임을 확인할 수 있다. 새로운 모델로 계산한 값과 실험을 통해 구한 값 사이의 오차는 대부분의 경우 10% 미만이며 전체 오차의 평균은 6% 이내이다. 위와 같은 방법으로 도출한 관계식의 검증을 위해, Fig. 8과 같이, 온도 347 K, 압력 10 bar인 경우에 대해 기존의 연구 결과들과 비교하였다[7-10]. 그림에서 보는 바와 같이, 하나의 기존 연구 결과를 제외한 모든 기존의 연구 결과들과 유사한 값을 보임을 확인하였다.

iso-Octane에 대한 해석 후, k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 값을 고정한 채, T_{ig} 값을 변수로 채택하여 n-Heptane 그리고 iso-Octane과의 혼합연료에 대한 T_{ig} 값을 실험

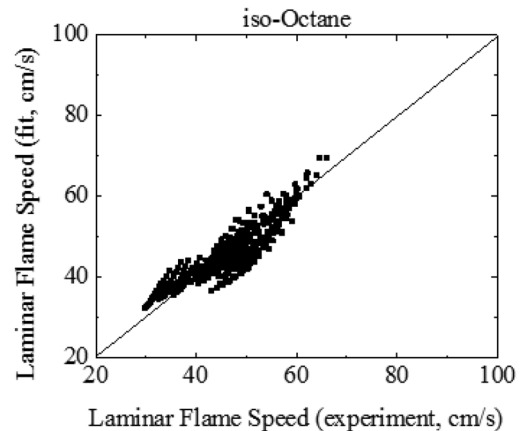


Fig. 7. Fitting result for iso-Octane.

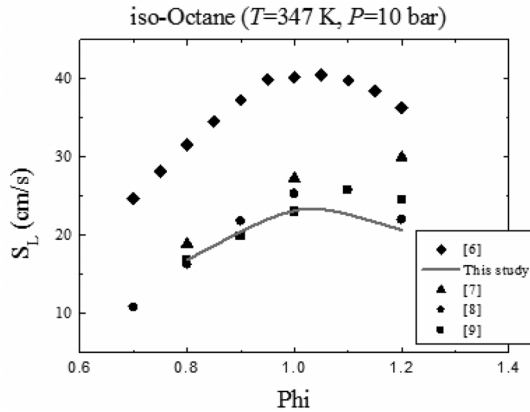


Fig. 8. Laminar flame speeds of this study and previous researches at $T_i = 347$ K, $P_i = 10$ bar.

결과와의 근사를 통해 구하였다. Table 4는 혼합연료의 옥탄가에 대한 T_{ig} 값을 나타내며, Fig. 9는 위와 같이 구한 T_{ig} 를 새로운 관계식에 적용하여 계산한 층류화염속도 값과 실험을 통해 구한 값들을 비교한 선도들이다. 새로운 모델로 계산한 값과 실험을 통해 구한 값 사이의 오차는 iso-Octane의 경우와 같이 대부분의 경우 10% 미만이며 전체 오차의 평균은 6% 이

Table 4. Ignition temperatures with octane number of iso-octane and n-heptane blends

Octane Number	T_{ig} (K)
0	696.09
25	701.17
50	707.98
75	713.59
100	720.00

내임을 확인하였다. 옥탄가에 대한 T_{ig} 값들을 선도로 그려보면 Fig. 10과 같으며 서로 선형의 관계를 가짐을 확인할 수 있다.

위 해석을 통해, iso-Octane과 n-Heptane 그리고 이들의 혼합물에 대한 층류화염속도는 아래와 같은 관계식을 통해 예측할 수 있다.

$$S_L = 24\alpha^{0.20} \left(\frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} \right)^{1.28} \cdot 3.72e^{-\frac{2022.61}{T_f}}$$

$$T_{ig} = 695.72 + 0.241 N_{Octane}$$

위와 같이 구한 iso-Octane, n-Heptane 혼합연료에

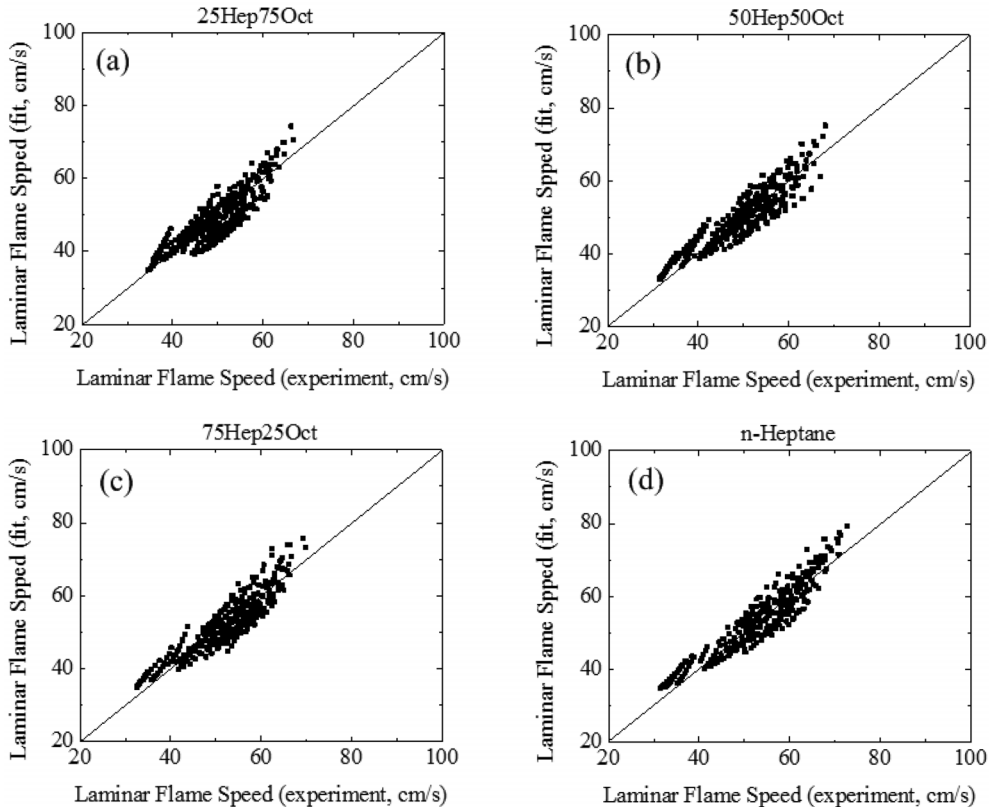


Fig. 9. Fitting result of fuel blends and n-Heptane.

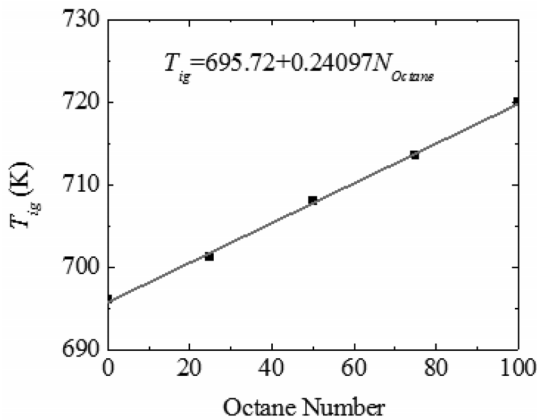


Fig. 10. Ignition temperature versus octane number for iso-Octane, n-Heptane and blends.

대한 층류화염속도 예측모델을 이용하여 Fig. 11과 같이 여러 가지 경우에 대한 층류화염속도를 선도로 나타내었다. Fig. 11의 (a), (b)는 모든 연료에 대해 압력이 10 atm인 경우, 각각 온도 480 K, 520 K에 대해 층류화염속도를 나타낸다. 그림에서 보는 바와 같이 n-Heptane이 가장 빠른 층류화염속도를, iso-Octane이 가장 느린 층류화염속도를 보이며, 혼합연료는 사이

의 값들을 보임을 알 수 있다. 또한 온도와 압력의 영향을 알아보기 위해 n-Heptane에 대해, (c)와 같이 온도가 500 K인 경우 다양한 압력에서, (d)와 같이 압력이 5 atm인 경우 다양한 온도에서의 층류화염속도를 나타내었다. 그림을 통해, 압력이 증가할수록 층류화염속도는 감소하며, 온도가 증가할수록 층류화염속도도 증가함을 확인할 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 iso-Octane과 n-Heptane 그리고 이들의 혼합연료에 대한 층류화염속도를 실험을 통해 구하고 연소이론을 통해 얻은 관계식의 형태를 이용하여 새로운 층류화염속도 예측할 수 있는 관계식을 도출하였다. 연구결과, iso-Octane과 n-Heptane의 혼합연료에 대해, T_{ig} 값을 변수로 갖는 새로운 예측 관계식을 도출하였으며, 이 T_{ig} 값은 혼합연료의 옥탄가와 선형의 관계를 가짐을 확인하였다.

후기

본 연구는 저자가 University of Texas at Austin 박사과정 중 Southwest Research Institute의 지원으로 진

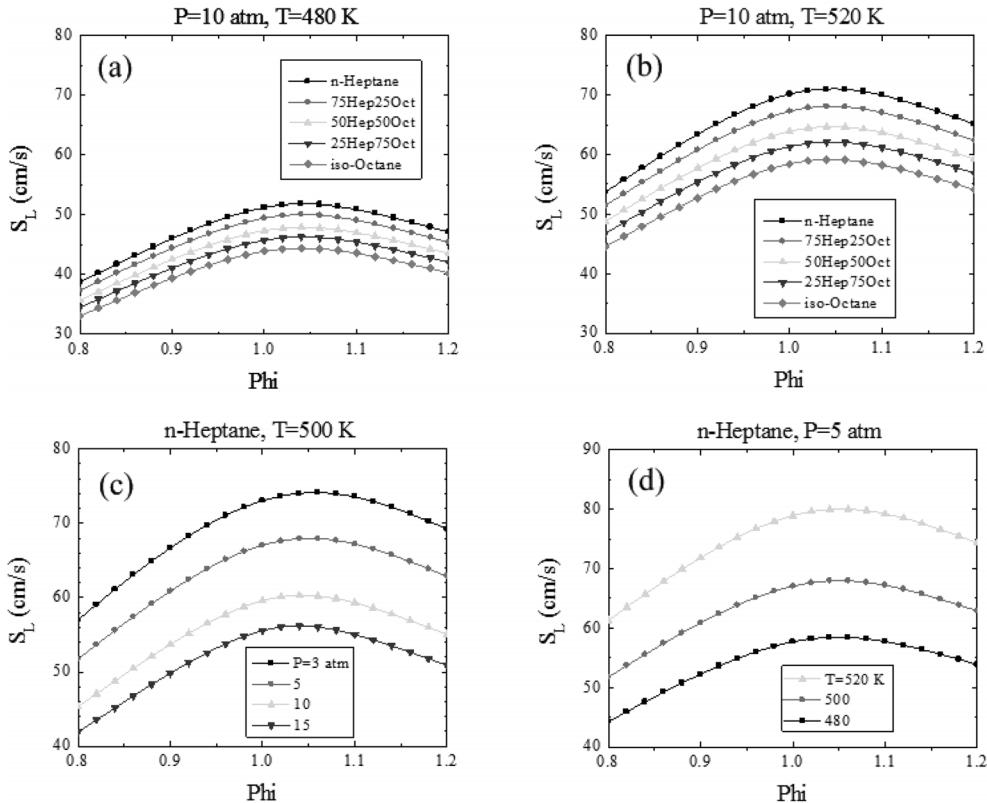


Fig. 11. Laminar flame speeds at various conditions.

행하였으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] V. Karpov, A. Lipatnikov, and V. Zimont, "Test of an Engineering Model of Premixed Turbulent Combustion", 26th International Symposium on Combustion, 1996, pp. 249-257.
- [2] S. G. Bryce, R. Lindsay, I. Galliard, and A. R. Glover, "Fuels development for formula one", SAE Technical Paper 942540, 1994.
- [3] 변정주, "정적 구형 용기 내 연소 압력을 이용한 층류화염속도 측정에 대한 연구", 한국연소학회지, Vol. 17, No. 2, 2012.
- [4] The NASA Computer Program CEA(Chemical Equilibrium with Applications). <http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/>.
- [5] Kenneth K. Kuo, "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, Inc., 2nd edition, 2004.
- [6] Carl L. Yaws, "Chemical Properties Handbook", McGraw-Hill Professional, 1998.
- [7] Omer L. Gulder, "Correlations of laminar combustion data for alternative s.i. engine fuels", SAE Technical Paper 841000, 1984.
- [8] M. Metghalchi and J. C. Keck, "Burning velocities of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature", Combustion and Flame, Vol. 48, 1982.
- [9] S. Jerzembek, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch, "Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline: Experimental and numerical investigation", Combustion and Flame, Vol. 156, No. 2, 2009, pp. 292-301.
- [10] J. Beeckmann, O. Rohl, and N. Peters, "Experimental and numerical investigation of iso-octane, methanol and ethanol regarding laminar burning velocity at elevated pressure and temperature", SAE Technical Paper 2009-01-1774, 2009.

접수일 : 2012. 03. 26
심사완료일 : 2012. 05. 10