한국연소학회지, Vol.18, No.4, pp.12-20(2013)

저온연소조건에서 n-heptane/alcohol 혼합연료의 냉염과 열염에 대한 착화지연 관찰

송재혁* · 강기중* · 류승협** · 최경민***† · 김덕줄***

Observation on the Ignition Delay Time of Cool and Thermal Flame of n-heptane/alcohol Blended Fuel at Low Temperature Combustion Regime

Jaehyeok Song, Kijoong Kang, Seunghyup Ryu, Gyungmin Choi and Duckjool Kim

ABSTRACT

The ignition delay time is an important factor to understand the combustion characteristics of internal combustion engine. In this study, ignition delay times of cool and thermal flame were observed separately in homogeneous charge compression ignition(HCCI) engine. This study presents numerical investigation of ignition delay time of n-heptane and alcohol(ethanol and n-butanol) binary fuel. The O_2 concentration in the mixture was set 9-10% to simulate high exhaust gas recirculation(EGR) rate condition. The numerical study on the ignition delay time was performed using CHEMKIN codes with various blending ratios and EGR rates. The results revealed that the ignition delay time increased with increasing the alcohol fraction in the mixture due to a decrease of oxidation of n-heptane at the low temperature. From the numerical analysis, ethanol needed more radical and higher temperature than n-butanol for oxidation. In addition, thermal ignition delay time is sharply increasing with decreasing O_2 fraction, but cool flame ignition delay time changes negligibly for both binary fuels. Also, in high temperature regime, the ignition delay time showed similar tendency with both blends regardless of blending ratio and EGR rate.

Key Words : Homogeneous Charge Compression Ignition(HCCI), n-heptane, Alcohol, Exhaust Gas Recirculation (EGR), Low Temperature Combustion(LTC)

1. 서 론

최근 EURO 5, Tier 3과 같은 환경규제가 강화되고 화석연료 고갈위기에 따른 문제가 대두됨에 따라 전 세계적으로 내연기관의 효율 향상 및 오염물질 배출 저감 방법에 대한 관심이 높아지고 있다. 이에 많은 연구자들에 의해 예혼합 압축착화(Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI)와 관련된 연구가 활발히 진행되고 있다. HCCI 기술은 디젤엔진(CI)과 가솔린엔진(SI)의 장점을 결합한 기술로 연소실 내에 공기와 연료의 예혼합기를 형성한 후 피스톤 압축에 의한 다점 동시 착화를 통해 압축착화기관의 높은 효율을 기대할 수 있으며 연소실 내의 균일한 혼합기 형성으로 연소 시 국소고온부를 차단하여 질소산화물(NOx)과 입자상 물질(particulate matter, PM) 배출을 저감할 수 있는 장점이 있다[1,2].

HCCI 엔진의 연소를 이해하기 위해서는 기관성능에 큰 영향을 미치며 출력, 연료 소비율, 운전 성능의 질을 결정하는 주요 인자인 착화지연에 대한 연구가 필수적이다. 특히 n-heptane의 연소과정 중에 관찰되는 냉염(cool flame)은 실제 착화가 일어나기 이전에 산화반응을 진행시키기 때문에 연료분자들의 화학결합을 변형시키며[3] 전체적인 반응성에 영향을 줄 수 있고 연료의 화학결합이 분해되면서 발생되는 열에 의해 엔진 노킹(knocking) 등의 문제를 일으킬 수 있어 열염에 의한 착화지연과 더불어 그 형성 시기와 과정 등에 대한 연구의 필요성을 인식하였다.

또한 높은 배기재순환(Exhaust Gas Recirculation,

* 부산대학교 대학원 기계공학과
** 현대중공업 엔진기계연구소
***부산대학교 기계공학부
† 연락저자, choigm@pusan.ac.kr

EGR)율을 적용함으로써 저온연소(Low Temperature Combustion, LTC)가 NOx와 그을음(soot) 등 오염 배출물질을 저감하는데 탁월한 효과가 있는 것으로 알려져 있다[4,5]. 압축착화 엔진에서 다점 동시 착화를 위해 실린더 내에 균일한 혼합기를 형성하는 것이 LTC를 위한 필수 선행조건이다. 이는 높은 EGR율을 적용하므로 연소실 내 낮은 산소농도를 유지하여 착화지연을 증대시킴으로서 가능하다[1]. Zheng 등[4]의 연구에서는 EGR율을 55-65%로 설정함으로써 NOx와 soot의 배출량이 크게 감소하는 현상에 대해 보고하였고 Ogawa 등[5]의 선행연구에서는 고부하(high load) 조건에서 40% EGR(16% O_2 조건)을 적용했을 때 NOx는 저감되었으나 soot가 상당히 증가하고 50-55% EGR(12-14% O_2조건)에서 최고치를 보이다가 55-60% EGR(9-10% O_2조건)에서 여전히 소량의 NOx배출을 유지하면서 soot가 급격하게 감소한다고 보고하였다.

한편 화석연료의 고갈에 대한 문제를 해결하기 위한 방법으로 최근 생물학적 원료 물질(목재, 사탕수수 등)의 연소 혹은 발효과정에서 생성되는 바이오연료에 대한 관심이 높아지고 있다. 지난 몇 년 동안 ethanol과 bio-diesel의 사용과 그에 대한 연구가 꾸준히 진행되어 왔으며 연료로서의 효율성이 검증되었다. 최근 연구에 따르면[6] alcohol계 연료 중에서 n-butanol은 기존에 많이 사용되어 온 ethanol에 비해 높은 발열량을 가지고 상대적으로 쉽게 추출 가능하다는 장점을 가지고 있다. ethanol과 n-butanol은 모두 높은 옥탄가를 가지고 있어 착화지연을 증가시키므로 HCCI엔진 구동 시 연료와 공기의 혼합시간을 충분히 확보할 수 있게 도와줄 것이며 n-butanol이 ethanol에 비해 상대적으로 낮은 옥탄가를 가지므로 두 연료의 연소특성은 다소 차이를 보일 것으로 판단되지만 아직까지 n-butanol의 연료로서의 검증과 연소특성에 대한 연구가 많이 진행되지 않아 이에 대한 연구의 필요성이 대두되고 있다.

따라서 본 연구에서는 NOx와 soot 저감에 탁월한 효과가 있는 높은 EGR율을 적용한 9-10% O_2조건을 주요 관찰영역으로 설정하였으며 PRF(Primary Reference Fuel)로 디젤과 비슷한 세탄가를 가지는 n-heptane과 최근 대체에너지원으로 관심이 모아지고 있는 ethanol 및 n-butanol을 혼합한 연료의 착화지연 특성을 조사하였다. 두 혼합연료의 예혼합 압축착화의 특성을 예측하기 위해 상용 소프트웨어인 CHEMKIN-PRO[7]를 이용하여 수치해석을 수행하였으며 연료의 혼합비율변화와 EGR율 변화에 의한 연소실 내 산화제 저감에 따른 착화지연을 냉염과 열염(thermal flame)으로 나누어 관찰하였고 화학종의 몰분율 계산을 통해 두 혼합연료의 연소특성을 자세히 분석하였다.

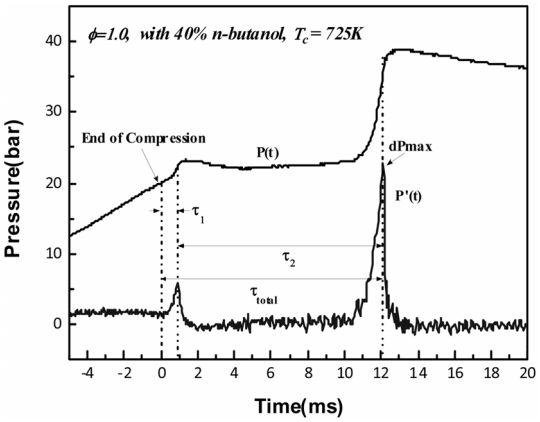


Fig. 1. Definition of Ignition delay time.

2. 수치해석 방법 및 조건

2.1. 수치해석 방법

2.1.1. 반응모델

연소는 압축행정이 끝나고 진행되므로 피스톤이 상사점에 도달했을 때의 압력과 온도를 초기조건으로 하는 정적 연소반응 모듈을 적용하였다. n-heptane/ethanol과 n-heptane/n-butanol 혼합연료는 CNRS[8,9]에서 개발된 반응모델을 각각 사용하였고 565개 화학종과 2589개 화학반응식, 573개 화학종과 2701개 화학 반응식으로 구성되어 있다. 또한 n-heptane에 대한 계산에서는 Mehl 등[10]의 n-heptane 상세반응 모델을 사용하였다.

2.1.2. 착화지연의 정의

폭발연소를 이해하기 위한 중요한 척도인 착화지연 시간은 Fig. 1에 나타낸 것과 같이 정의하였다. P'(t)는 시간변화에 대한 압력의 순간 변화율(dP/dt)을 나타내고 dP_{max}는 P'(t)의 최고값을 의미한다. 착화지연은 압축행정이 종료되는 시점(피스톤이 TDC에 도달한 시점)에서부터 압력의 순간 변화율이 최고치에 이르는 dP_{max}에 도달하기까지 소요된 시간으로 정의하였다. 특히 τ_1은 1차 착화지연으로 압축이 종료된 시점으로부터 냉염(cool flame)이 발생하기까지 소요된 시간을 의미하며 τ_2는 냉염이 발생한 시점부터 착화가 일어나기까지의 시간을 뜻한다. 전체 착화지연은 τ_1과 τ_2를 합산한 값 τ_t로 정의하였다.

2.2. 수치해석 조건

2.2.1. 혼합연료

앞서 서론에서 언급하였듯이 선행연구를 통해 높은 EGR율을 적용하였을 때 NOx와 soot의 배출이 크게 감소하는 것을 확인하였으므로 본 연구에서는 이

Table 1. Fuel properties

Name		n-heptane	n-butanol	ethanol
Molecular formula		C_7H_{16}	C_4H_9OH	C_2H_5OH
Molecular weight		100.21	74.12	46.07
Density	g/m^3	0.68	0.81	0.79
Boiling point	℃	99.4	118	79
Autoignition temperature	℃	285	343	422
Low calorific value	MJ/kg	44.91	34.36	28.85
A/F		15.2	11.1	9.0
Research octane number (RON)		0	96	129
Cetane number (CN)		53	17	11

를 모사한 조건인 O_2 9-10% 조건을 적용하였다. 수치해석에 사용된 연료는 n-heptane/ethanol, n-heptane/n-butanol 혼합연료로 화석연료 고갈과 강화되는 환경규제의 영향으로 최근 관심이 높아지고 있는 대표적인 두 바이오연료 ethanol과 n-butanol의 옥탄가와 자착화 온도의 차이가 디젤과 비슷한 세탄가를 가지며 압축착화엔진의 연료로서 주로 사용되어 온 n-heptane과 혼합했을 때 연소특성의 차이를 비교하고자 하였다. 각 연료의 특성은 Table 1에 나타내었다.

2.2.2. 압축온도 계산

당량비(ϕ)는 HCCI엔진의 구동조건과 이론양론비 조건을 각각 적용하여 0.4, 1.0으로 조절하였고 압축압력(P_c)은 20 bar로 설정하여 착화지연의 변화를 관찰하였다. 압축온도(T_c)는 식 (1)을 이용하여 계산하였으며 희석기체의 비율 변화에 따라 660-1,100 K로 조절하였다[11,12].

$$\int_{T_i}^{T_c} \frac{\gamma(T)}{\gamma(T)-1}\frac{dT}{T} = \ln\left(\frac{P_c}{P_i}\right) \quad (1)$$

여기서 T_i와 P_i는 초기온도와 압력이고 T_c와 P_c는 상사점에서 압축된 혼합기의 온도와 압력이며 $\gamma(T)$는 온도 함수로의 혼합기의 비열비이다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 화학반응

탄화수소계열 연료의 연소 중 화학반응은 온도에 지배적인 영향을 받는다. 고온영역의 연쇄반응은 $H + O_2 = O + OH$을 주 반응으로 하고 전체적인 화학반응은 알킬 라디칼이 β-절단(β-scission)에 의한 급격한 분해를 통해 진행된다. 반면 저온에서는 고온영역의 반응과는 큰 차이를 보이는데 저온에서의 주요 산화반응은 아래에 나타낸 것과 같이 (R1~R5)의 연쇄반응을 통해 이루어진다[13].

$$RH \rightarrow R(\text{H-atom abstraction}) \quad (R1)$$

$$R + O_2 \leftrightarrow RO_2 \quad (R2)$$

$$RO_2 \leftrightarrow QOOH \quad (R3)$$

$$QOOH + O_2 \leftrightarrow O_2QOOH \quad (R4)$$

$$O_2QOOH \rightarrow \text{ketohyroperoxide} + OH` \quad (R5)$$

여기서 R : alkyl species, Q : C_nH_{2n} species

초기 연료에서 수소원자가 분리되어 생성된 알킬기는 산소와 반응하여 RO_2 라디칼을 형성하며 이는 이성질체화 반응을 통해서 저온 연소에 주반응 기구인 QOOH라디칼로 변화한다. 이후 온도가 증가하면 강한 발열반응인 $R + O_2 \rightarrow RO_2$가 $RO_2 \rightarrow R + O_2$로 전환되며 저온 산화반응을 크게 억제하고 QOOH 라디칼의 산화반응 뿐만 아니라 올레핀(conjugate olefin), 고리모양 에테르(cyclic ether species)로 분해가 되는데 이러한 연쇄반응은 전체 시스템의 반응성을 저감시키며 그 결과로 NTC(negative temperature coefficient)영역을 만들게 된다.

또한 ethanol과 n-butanol의 경우 -OH기의 영향으로 고온에서는 반응성이 크게 증가하지만 저온에서는 반응성이 매우 낮다. 한편 저온에서 반응성이 높은 n-heptane 등의 연료와 혼합되어 사용될 경우 n-heptane의 반응에 의해 생성되는 다수의 라디칼에 의해 산화반응이 촉진될 수 있다. 이러한 영향으로 산화반응에 주요한 역할을 하는 OH라디칼이 n-heptane과 alcohol계열 연료들에서 경쟁적으로 소모되므로 n-heptane의 산화반응이 다소 저감되고 특히, alcohol계 연료의 aldehyde를 형성하는 다음과 같은 산화반응은 ($R + O_2 \rightarrow \text{aldehyde} + HO_2$) 혼합연료의 주요 산화반응을 저감시키며 착화지연을 증가시키는 것으로 알려져 있다[12,14].

이러한 alcohol계열의 특성으로 인해 n-heptane과의 혼합연료를 사용했을 때 연소현상에 다소 변화가 있을 것으로 판단하였으며, 또한 본 연구에서는 높은 EGR율을 모사한 9-10% O_2조건으로 계산을 수행하였기 때문에 연료와 반응할 수 있는 산소의 양이 상대적으로 줄어듦에 따라 야기되는 반응성 저감이 두 혼합연료에 미치는 영향을 관찰하고 연소특성을 비교하고자 하였다.

3.2. 혼합비율에 따른 영향

먼저 연료 비율에 따른 혼합연료에 대한 표기는 AY로 나타내었는데 여기서 A는 alcohol을 뜻하며 Y는 전체 연료에서 alcohol계 연료가 차지하는 mol.%를 의미한다. 예를 들어 n-heptane/ n-butanol 혼합연료의 mol.%가 80/20인 경우에는 A20으로 표기하였다. 또한 혼합연료는 n-heptane/ n-butanol을 H/B혼합연료, n-heptane/ethanol은 H/E혼합연료로 각각 명명하였다.

냉염의 형성은 고탄소계 탄화수소 연료에서 관찰되는 현상으로 본 실험의 주 연료로 사용되고 있는 n-heptane의 연소특성이며 이는 실제 착화 시 사용되는 연료의 산화반응을 앞당기고 엔진 내 노킹현상을 유발할 수 있어 이에 대한 자세한 연구가 필요하다[15,16]. Fig. 2는 n-heptane/alcohol 혼합연료에서 압축온도 변화에 따른 냉염 및 열염의 착화지연을 혼합비율에 따라 나타낸 그래프이다. 먼저 냉염에 의한 착화지연(τ_1)을 관찰해 보면 H/E, H/B혼합연료 모두 압축온도 800 K 이상에서는 냉염이 형성되지 않았고 냉염이 형성되는 온도영역에서는 압축온도가 증가함에 따라 τ_1이 크게 감소함을 확인할 수 있었다. 한편 혼합비율 변화에 대해서는 연료 내 alcohol비율이 증가함에 따라 τ_1도 함께 증가하였고 alcohol계 연료의 비율이 상대적으로 가장 높은 A80조건에서는 냉염이 관찰되지 않았다. 그리고 혼합연료에 따른 냉염의 착화지연 시간은 압축온도에 상관없이 H/E혼합연료가 H/B혼합연료에 비해 크게 나타났고 alcohol계 연료 비율이 증가함에 따라 그 차이가 커짐을 확인할 수 있었다. 이에 대한 구체적인 관찰을 위해 연료의 산화반응에 의한 주요 생성물들의 몰분율을 혼합연료와 비율변화에 따라 Fig. 3에 나타내었다. 이는 n-heptane을 연료로 냉염과 NTC현상에 대해 연구한 Law 등[16]의 연구와 동일한 경향을 나타내는 결과로서 본 연구에서 관찰한 H/E, H/B혼합연료의 비교결과는 절대값의 근소한 차이만 있을 뿐 전체적인 경향은 일치함을 확인할 수 있었다. 또한 각 혼합연료 내에서 alcohol연료의 반응성을 확인하기 위해 연료의 초기 산화반응인 수소원자 분리에 의한 알킬기를 함께 나타내었다. 선행연구에 의해[12,17] -OH기의 영향으로 α-탄소의 C-H결합력이 가장 약함을 확인하였고 이를 토대로 각 alcohol연료의 대표 알킬기를 선정하였다.

Fig. 3(a), (b)는 H/E혼합연료 내 ethanol의 비율변화에 따른 화학종 몰분율 변화를 나타낸 그래프로서

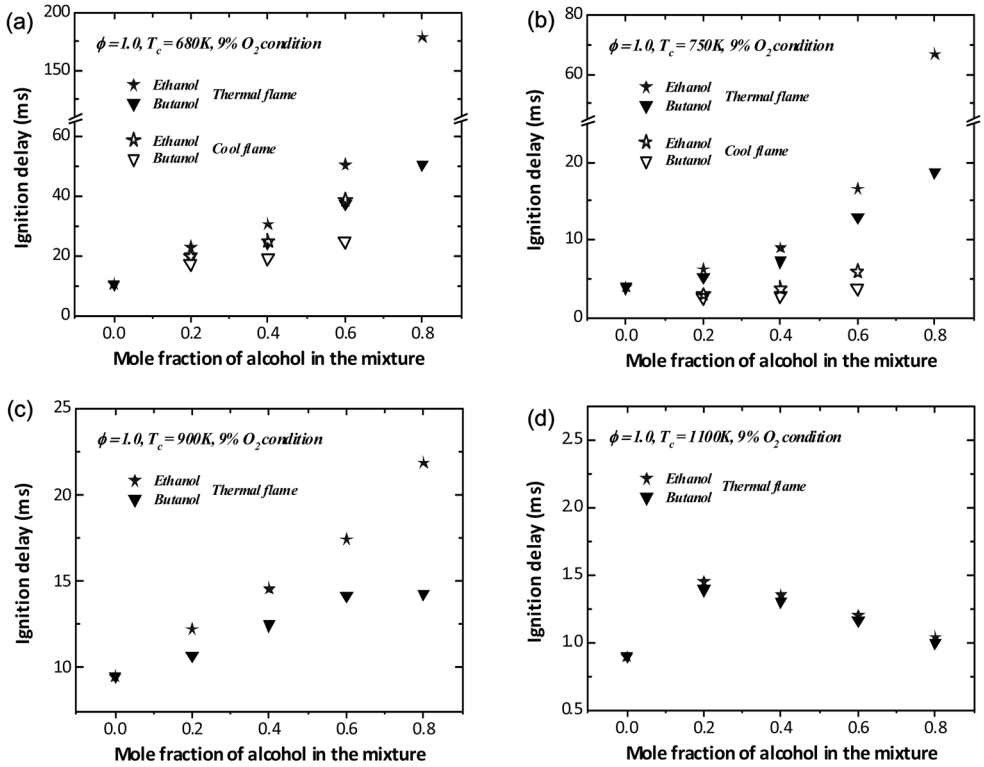


Fig. 2. The cool flame(τ1) and thermal flame(τt) Ignition delay time with changing mole fraction of alcohol fuel in the blend fuel at ϕ = 1.0, 9% O_2 condition and compressed temperature of (a) 680 K, (b)700 K, (c) 900 K and (d) 1100 K.

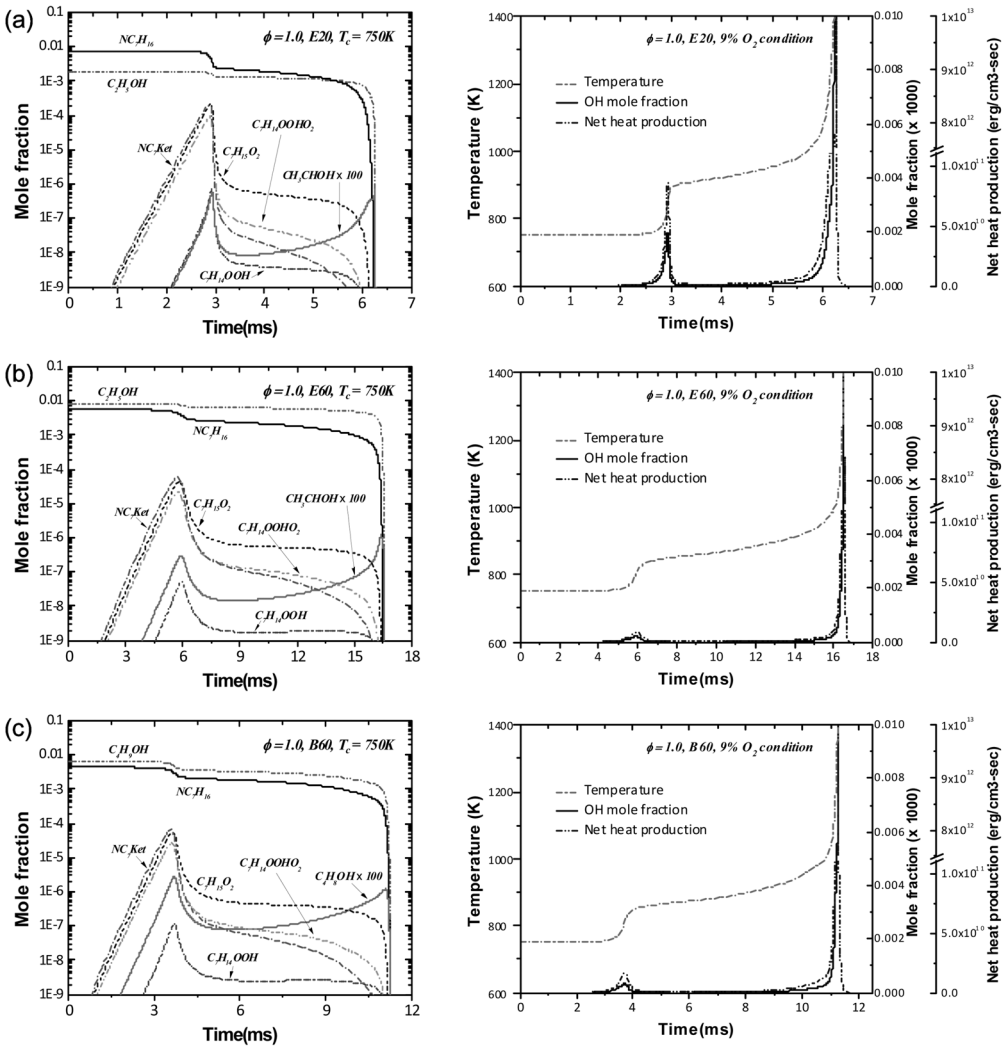


Fig. 3. Computed temperature, net heat production, fuel and important species concentrations for (a) E20, (b) E60 and (c) B60 at ϕ = 1.0 and T_c = 750 K.

이를 통해 ethanol비율 증가에 따라 저온에서의 산화반응이 다소 지연되며 화학종의 생성량도 감소함을 관찰하였고 이는 냉염에 의한 착화지연 증가와 발열량 감소를 각각 의미하며 이는 우측에 표시된 열 방출량 및 OH라디칼의 생성 정도를 통해서도 확인된다. 한편 Fig. 3(b), (c)를 통해 혼합연료 변화에 대한 영향을 살펴보면 n-butanol이 ethanol에 비해 저온에서 더 큰 반응성을 보였으나 n-heptane과 비교하면 그 비중이 상당히 미미한 것을 확인할 수 있었다.

한편 열염에 의한 착화지연(τ_t)에 대해서는 Fig. 2와 4를 통해 자세히 확인할 수 있다. 본 연구팀은 선행연구[18]를 통해 H/B혼합연료의 혼합비율 변화에 따른 열염에 의한 착화지연 변화를 관찰한 바 있고 이번 연구를 통해서는 H/E혼합연료의 착화지연 시

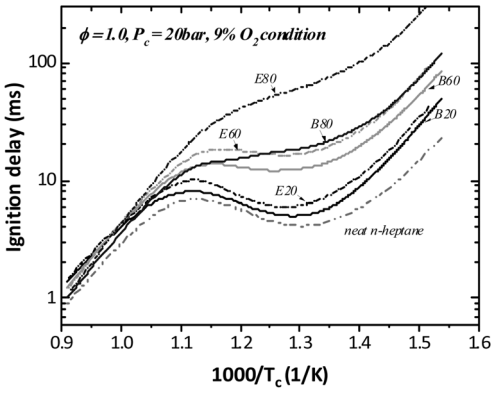


Fig. 4. The ignition delay time with changing blend ratio between n-heptane/n-butanol and n-heptane/ethanol binary fuels.

간의 결과와 비교해 보았으며 이로서 H/E혼합연료와 H/B혼합연료는 서로 열염에 의한 착화지연에 대해 비슷한 경향을 나타내지만 alcohol계 연료의 비율이 증가함에 따라 착화지연의 차이가 증가함을 확인할 수 있었다. 특히 Fig. 2를 통해 alcohol비율 변화에 따른 열염의 착화지연 변화를 자세히 확인할 수 있는데 H/E혼합연료의 결과는 H/B혼합연료로 실험한 선행연구[11,13]들의 n-heptane의 혼합에 의해 착화지연이 급격히 감소되는 결과와 비교해 다소 차이를 보인다. 이는 보다 높은 옥탄가를 가지는 ethanol의 특성과 더불어 Haas 등의 선행연구[14]를 통해 확인된 저온에서 ethanol의 약한 산화반응 때문으로 사료되며 ethanol의 연소를 위해서는 n-butanol과 비교해 보다 높은 온도가 유지되어야 하는 것으로 판단된다. NTC를 형성하는 압축온도 900 K에서는 H/E혼합연료의 경우 비율변화에 따른 착화지연의 선형적인 증가를 확인할 수 있었고 H/B혼합연료의 경우에는 높은 alcohol비율 조건(B60, B80)에서 착화지연이 수렴함을 관찰할 수 있었으며 이는 압축온도 900 K 이상 영역에서부터 n-heptane과 n-butanol이 반응성의 정도가 유사해짐을 의미한다. 또한 상대적 최고온부인 압축온도 1,100 K에서의 결과를 통해 0.5 ms 내의 미미한 변화이지만 alcohol계 연료의 비율이 증가함에 따라 착화지연 시간이 감소함을 확인할 수 있었고 이는 alcohol계 연료 내의 -OH기의 영향으로 고온영역에서 강한 산화반응을 통해 반응성이 증대된다는 선행연구[13]와도 일치하는 결과이다.

3.3. EGR에 따른 영향

Fig. 5는 EGR율에 따른 산소비율 변화가 착화지연에 미치는 영향을 관찰하기 위한 그래프로 n-heptane의 비율이 높은 연료(A20)와 alcohol계 연료의 비율이 높은 연료(A60)를 비교하여 나타내었다. 먼저 냉염에 의한 착화지연을 살펴보면 앞서 살펴본 바와 같이 혼합연료 내 alcohol계 연료가 증가함에 따라 다소 증가하는 경향을 보이지만 두 혼합연료 모두 산소비율에 대해서는 크게 영향을 받지 않으며 거의 일정하게 유지됨을 확인할 수 있었다. 이는 혼합비율 변화에서와는 다른 관찰결과로 EGR에 따른 착화지연의 증가는 냉염의 영향을 거의 받지 않고 반응성의 정도에 따라 지배적인 영향을 받는다는 것이 확인되었다. 여기서 산소비율 감소에 따른 착화지연의 증가는 동일 당량비에서 산소비율이 감소함에 따른 연료의 절대량의 감소와 낮은 산소비율에 의한

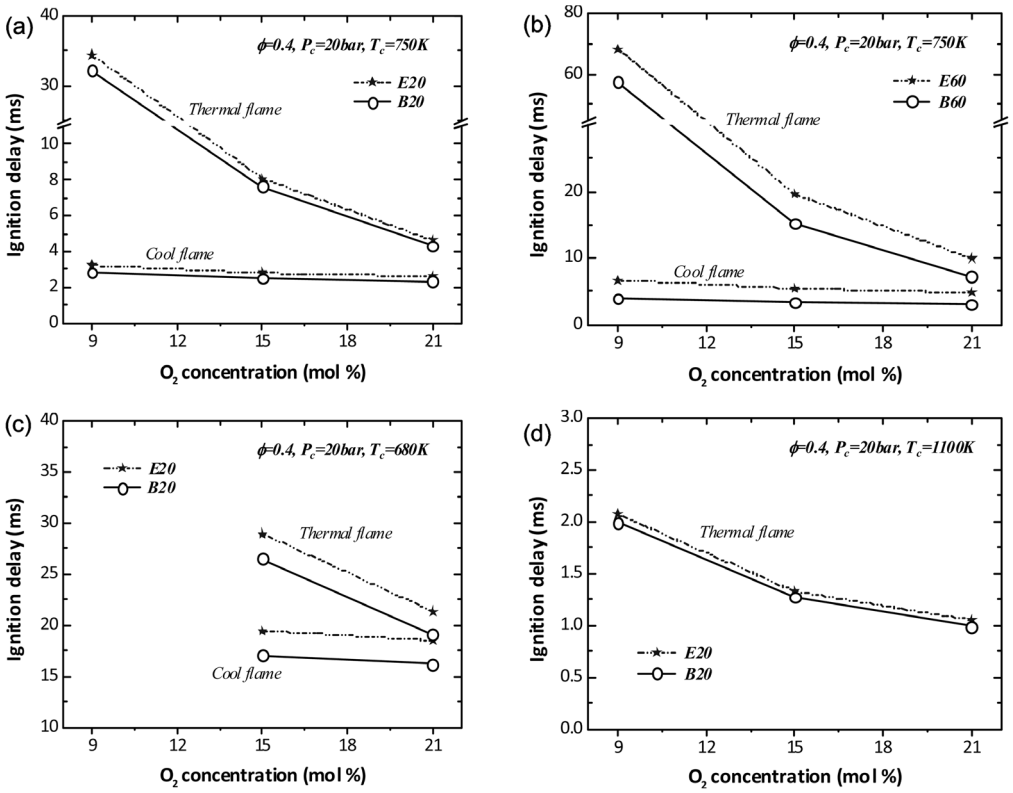
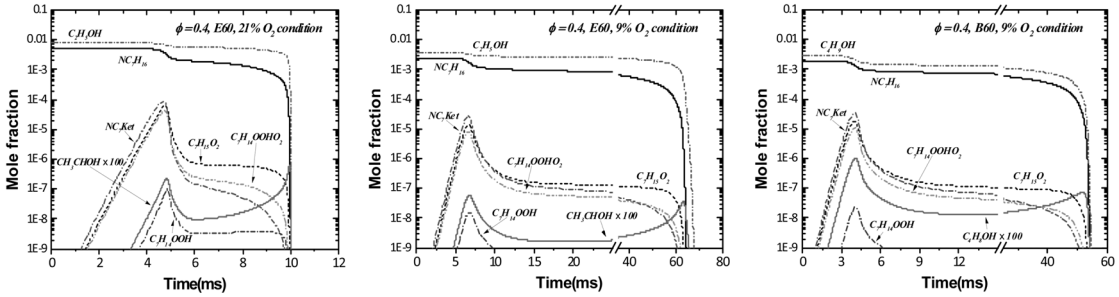


Fig. 5. The cool flame(τ1) and thermal flame(τt) Ignition delay time with changing oxygen fraction at ϕ = 0.4, (a) A20 750 K, (b) A60 750 K, (c) A20 680 K, and (d) A20 1100 K.



(a) E60 21% O_2 (b) E60 9% O_2 (c) B60 9% O_2

Fig. 6. Computed fuel and important species concentrations for (a) E60 21% O_2 condition, (b) E60 and (c) B60 9% O_2 condition at ϕ = 0.4 and T_c = 750 K.

반응성 저감으로 설명할 수 있다. 산소비율 변화에 따라 가장 큰 착화지연의 차이를 보이는 A60 혼합연료 조건으로 연소실 내 산소비율에 따른 생성 화학종의 몰분율 변화와 앞서 열 방출량과 동일한 경향을 보였던 OH라디칼의 생성량을 계산하였고 그 결과는 Fig. 6, 7에 각각 나타내었다. 이를 통해 n-heptane의 주요 저온 산화반응에 의한 생성 화학종들의 몰분율은 연소실 내 산소비율 감소와 함께 크게

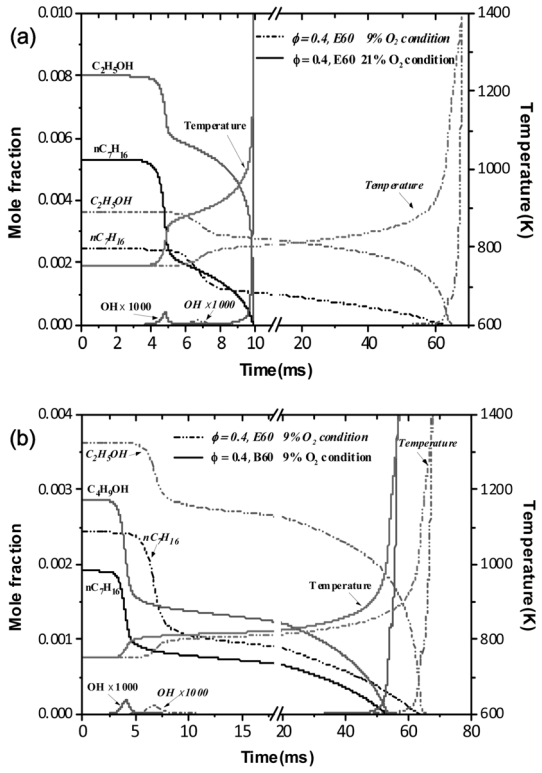


Fig. 7. Computed combustion temperature and species fraction for (a) changing O_2 concentration with E60 and (b) fuel with 9% O_2 condition at ϕ = 0.4 and T_c = 750 K.

저감되며 OH라디칼 감소현상도 뚜렷하게 관찰됨을 확인할 수 있었다. 또한 Fig. 7(a)를 통해 연소과정 동안의 연료소모율을 살펴보면 EGR을 적용하지 않은 조건에서는 냉염으로 인한 n-heptane의 소모율은 55%인데 반해 EGR을 적용한 조건에서는 47%로 약 8% 차이가 나며 연료 양의 절대값을 따져봤을 때 소모양은 약 2.5배의 차이를 보였다. 연료 변화에 대해서는 Fig. 7(b)를 통해 H/B혼합연료의 경우 냉염이 형성되는 시점에서 약 51%의 n-heptane이 소모됨과 더불어 n-butanol은 44.8%가 소모되는 반면 H/E혼합연료의 경우에는 n-heptane은 H/B혼합연료와 비슷하게 52.6% 정도가 냉염 형성 시에 소모되나 ethanol은 21.1%만 소모되며 온도가 증가하여 산화반응이 거의 종료되는 시점에서 급격하게 반응하는 것을 관찰할 수 있었다. 이를 통해 냉염에 의한 연료의 조기 산화반응은 H/B혼합연료에서 더 큰 것을 확인할 수 있으나[19] H/E혼합연료의 경우 상대적으로 많은 잔량의 ethanol이 반응하기까지 충분한 온도를 필요로 하기 때문에 H/B혼합연료에 비해 착화지연이 더 증가하는 것으로 사료된다.

또한 Fig. 5를 통해 연소실 내 산소비율 변화에 따른 열염의 착화지연시간을 살펴보면 압축온도 680 K조건에서 EGR율이 높아짐에 따라 착화가 일어나지 않음을 관찰할 수 있고 저온 산화반응이 매우 약한 H/E혼합연료와 비교해 H/B혼합연료의 착화지연시간의 차이가 750 K조건과 비교해 다소 증가하였다. 또한 상대적으로 고온영역인 1,100 K의 착화지연 결과를 통해 고온영역에서는 EGR율과 혼합연료에 대한 영향이 모두 크게 줄어드는 것을 확인할 수 있었다.

4. 결 론

저온연소 조건에서 HCCI엔진을 모사한 정적모듈을 이용하여 친환경 바이오 연료인 ethanol과 n-butanol을 PRF로 디젤과 비슷한 세탄가를 가지는 n-heptane

과 혼합하여 연료로 사용했을 때 연소특성을 비교 관찰하고자 냉염과 열염에 대한 착화지연과 연소과정 동안의 화학종 몰분율 계산을 통해 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) H/B혼합연료 내 n-butanol의 비율이 증가함에 따라 냉염 및 열염에 의한 착화지연 시간이 증가하였고 압축온도 900 K 이상에서 반응성이 크게 향상됨을 확인하였다.

2) H/E혼합연료의 경우에는 H/B혼합연료와 전체적인 경향은 유사하게 나타났으나 저온에서의 약한 산화반응의 영향으로 혼합연료 내 ethanol의 비율이 증가함에 따라 저온영역에서 착화지연이 비선형적으로 증가하였다.

3) 산화제 비율변화에 대해서는 냉염에 의한 착화지연시간의 변화폭이 크지 않았고 9% O_2 조건의 저온영역에서는 착화가 일어나지 않아 EGR을 적용하였을 때 운전영역이 축소될 수 있음을 확인하였다.

4) EGR율 변화에 따라 두 혼합연료는 착화지연에 동일한 경향을 보였으며 냉염에 의한 연료의 조기 산화반응은 H/B혼합연료에서 더 강했으나 전체적인 착화지연시간은 모든 조건에서 H/E혼합연료가 더 길었다.

후 기

본 연구는 2012년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제(No. 20124010203230)입니다.

참고문헌

[1] X. Lu, D. Han, Z. Huang, “Fuel design and management for the control of advanced compression-ignition combustion modes”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 37, pp. 741-783, 2011.

[2] M. Yao, Z. Zheng, H. Liu, “Progress and recent trends in homogeneous charge compression iginition(HCCI) engines”, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 35, pp. 398-437, 2009.

[3] A Naidja, C. R. Krishna, T. Butcher, D. Mahajan, “Cool flame partial oxidation and its role in combustion and reforming of fuels for fuel cell systems”, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 29, pp. 155-191, 2003.

[4] M. Zheng, M. C Mulenga, G. T Reader, M. Wang, DS-K. Ting, J. Tjong, “Biodiesel engine performance and emissions in low temperature combustion”, Fuel, Vol. 87, pp. 714-722, 2008.

[5] H. Ogawa, T. Li, N. Miyamoto, “Characteristics of low temperature and low oxygen diesel combustion with ultra-high exhaust gas recirculation”, International Journal of Engine Research, Vol. 8, pp. 365-378, 2007.

[6] S. M. Sarathy, S. Vranckx, K. Yasunaga, M. Mehl, P. Oβwald, W. K. Metcalfe, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, K. Kohse-Hoinghaus, R. X. Fernandes, H. J. Curran, “A comprehensive chemical kinetic combustion model for the four butanol isomer”, Combustion, Flame, Vol. 159, pp. 2028-2055, 2012.

[7] CHEMKIN-PRO, Release 15083, Reaction Design, San Diego, 2009.

[8] P. Dagaut, C. Togbe, “Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol/n-heptane mixture in a jet-stirred reactor”, Fuel, Vol. 89, pp. 280-286, 2010.

[9] P. Dagaut, C. Togbe, “Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of butanol/n-heptane mixture in a jet-stirred reactor”, Energy & Fuels, Vol. 23, pp. 3527-3535, 2009.

[10] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, H. J. Curran, “Kinetic Modeling of Gasoline Surrogate Components and Mixture under Engine Conditions”, Proc. Combust. Inst., Vol. 33, No.1, pp. 193-200, 2011.

[11] Y. Zhang, K. Kumar, C-J. Sung, “Autoignition of binary fuel blends of n-butanol and n-heptane in a rapid compression machine”, AIAA, Vol. 92, 2011.

[12] B. W. Weber, K. Kumar, Y. Zhang, C-J. Sung, “Autoignition of n-butanol at elevated pressure and low-to-intermediate temperature”, Combustion, Flame, Vol. 158, pp. 809-819, 2011.

[13] J. Zhang, S. Niu, Y. Zhang, C. Tang, X. Jiang, E. Hu, Z. Huang, “Experimental and modeling study of the auto-ignition of n-heptane/n-butanol mixtures”, Combustion, Flame, Vol. 160, pp. 31-39, 2013.

[14] F. M. Haas, M. Chaos, F. L. Dryer, “Low and intermediate temperature oxidation of ethanol and ethanol-PRF blends: An experimental and modeling study”, Combustion, Flame, Vol. 156, pp. 2346-2350, 2009.

[15] G. Mittal, M. Chaos, C. J. Sung, F. L. Dryer, “Dimethyl ether autoignition in a rapid compression machine: Experiments and chemical kinetic modeling”, Fuel Proc. Tech, Vol. 89, pp. 1244-1254, 2008.

[16] C. K. Law, P. Zhao, “NTC-affected ignition in non-premixed counterflow”, Combustion, Flame, Vol. 159, pp. 1044-1054, 2012.

[17] G. da silva, J. W. Bozzelli, L. Liang, J. T. Farrell, “Ethanol oxidation: Kinetics of the α-hydroxyethyl radical + O_2 reaction”, J. Phys. Chem, Vol. 113, pp. 8923-8933, 2009.

[18] 송재혁, 강기중, Zheng Yang, XingCai Lu, 최경민, 김덕줄, “저온연소조건에서 급속압축기를 이용한 n-heptane/n-butanol 혼합연료의 착화지연에 관한 연구”, 한국연소학회지, Vol. 18, pp. 32-41, 2013.

[19] P. Saisirirat, C. Togbe, S. Chanchaona, F. Foucher, C. Mounaim-Rousselle, P. Dagaut, “Auto-ignition and combustion characteristics in HCCI and JSR using 1-butanol/n-heptane and ethanol/n-heptane blends”, Proc. Combust. Inst., Vol. 33, pp. 3007-3014, 2011.

논문접수일 : 2013. 11. 06
심사완료일 : 2013. 12. 11