

축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘 개발

이 상 열¹⁾ · 김 규 진²⁾ · 민 경 덕^{*2)}

서울대학교 협동과정 자동차공학과¹⁾ · 서울대학교 기계항공공학부²⁾

Development of Reduced Normal Dodecane Chemical Kinetics

Sangyul Lee¹⁾ · Gyujin Kim²⁾ · Kyoungdoug Min^{*2)}

¹⁾Interdisciplinary Program in Automotive Engineering, Seoul National University, Seoul 151-744, Korea

²⁾School of Mechanical and Aerospace, Seoul National University, Seoul 151-744, Korea

(Received 14 February 2012 / Revised 3 July 2012 / Accepted 16 July 2012)

Abstract : Generally, a reduced chemical mechanism of n-heptane is used as chemical fuel of a 3-D diesel engine simulation because diesel fuel consists of hundreds of chemical components and various chemical classes so that it is very complex and large to use for the calculation. However, the importance of fuel in a 3-D simulation increases because detailed fuel characteristics are the key factor in the recent engine research such as homogeneous charged compression ignition engine. In this study, normal paraffin, iso paraffin and aromatics were selected to represent diesel characteristics and n-dodecane was used as a representative normal paraffin to describe the heavy molecular weight of diesel oil (C10~C20). Reduced kinetics of iso-octane and toluene which are representative species of iso paraffin and aromatics respectively were developed in the previous study. Some species were selected based on the sensitivity analysis and a mechanism was developed based on the general oxidation scheme. The ignition delay times, maximum pressure and temperature of the new reduced n-dodecane chemical mechanisms were well matched to the detailed mechanism data.

Key words : Diesel oil(디젤 오일), n-dodecane(노멀 도데케인), Reduced diesel surrogate chemical mechanism(축소 디젤 모사 화학반응 메커니즘), Ignition delay time(점화 지연 시간)

Nomenclature

CAI : controlled auto ignition
NTC : negative temperature coefficient
PAH : poly-cyclic aromatic hydrocarbon
USC : university of southern california
EGR : exhaust gas recirculation
HHV : high heating value
LHV : low heating value

1. 서론

유동과 연소 해석을 통한 엔진의 해석은 독립적인 변수 제어나 형상 변경이 용이하다는 등 많은 장점이 있지만 그 중에서도 실험적으로는 확인하기 어려운 엔진 실린더 내부의 공간적인 유동 분포나 화학종의 분포, 배출물의 생성 및 소멸 과정 등을 확인할 수 있기 때문에 오랜 기간 엔진 연구에 있어서 널리 사용되어 왔다. 특히, 현상을 모사하는 모델의 발전과 계산 머신의 발달로 인한 계산 시간의 단축과 정확도의 향상으로 인하여 엔진 해석 분야는 눈부시게 발전하고 있다.

그러나 해석을 이용한 엔진 개발은 몇 가지 한계

*Corresponding author, E-mail: kadmin@snu.ac.kr

점이 존재한다. 우선, 해석의 정확도가 해석에 이용하는 모델이나 화학반응 메커니즘의 정확도에 의존적이라는 한계가 존재한다. 해석 모델과 화학반응 메커니즘은 끊임없이 발전하고 있지만 아직 실제 현상을 완벽하게 모사하는 것은 계산에 드는 비용이나 모델 자체의 정확도에 의해 현실적으로 불가능하다. 특히 상세 화학반응 메커니즘의 경우, 일반적으로 수백 개의 화학종과 수천 개의 화학반응식으로 구성되어 있는데 이는 유동 계산의 계산 속도에 비해 그 계산 속도가 심각하게 느려지며¹⁾ 이로 인하여 엔진 해석 분야에서 응용하여 사용하는 것이 불가능하다. 따라서 거의 같은 정확도를 유지하면서도 해석에 적용을 할 수 있도록 화학종과 화학반응식의 수가 상세 화학반응 메커니즘에 비해 훨씬 줄어든 축소 화학반응 메커니즘의 개발이 필수적이다.

한편, 최근까지의 디젤 엔진의 해석에는 연료로 노멀 헵탄이 주로 사용되었으며^{2,4)} 디젤 실험과 잘 일치하는 결과를 보여왔다. 이는 노멀 헵탄의 점화 지연 특성이 디젤유와 매우 유사하고⁵⁾ 단일 화학종이기 때문에 해석에 적용이 매우 간편하기 때문이다. 그러나 최근 엔진의 해석에서도 배출물의 정량적인 예측의 필요성이 증가하고 있어 이에 관련하여 노멀 헵탄은 몇 가지 한계점이 있다. HHV, LHV에서 디젤유와 차이가 존재하여^{6,7)} 정확한 온도 예측이 어렵게 되고 따라서 고온에서 발생하는 질소산화물의 예측이 정확하지 않을 수 있다. 또한 고분자인 디젤유에 비해 노멀헵탄은 상대적으로 저분자이기 때문에 물리적 특성 또한 차이가 발생한다. 이는 분사 시 액적의 거동이 달라짐을 의미하며 따라서 많은 연구에서 연료의 연소 모델에 노멀헵탄을 사용하면서도 분사 모델에는 디젤유의 평균 분자량인 탄소수(Carbon Number)^{8,12,13)} 유사한 고분자 탄소화합물을 사용하여 모사하는 편이 보다 적절하여⁸⁾ 화학반응에 사용하는 연료와 분사의 모사에 사용하는 연료 간에 괴리가 발생하게 된다. 마지막으로 수트 생성을 유도하는 개시종의 부정확성이다. 수트의 개시종은 폴리엔(polyynes)과 PAH으로 알려져 있다.^{9,10)} 노멀 헵탄은 노멀 파라핀의 한 종류이기 때문에 폴리엔의 한 종류인 C_2H_2 는 메커니즘에 포함

되지만 PAH가 포함되지 않는다. 최근 연구되는 많은 현상학적 수트 모델에서 이 두 가지 성분을 모두 수트의 개시종으로 사용하는데^{11,12)} PAH의 부재는 수트 모델의 정확도와 관계없이 수트 배출의 정확한 예측을 어렵게 한다.

그러나 디젤유는 단일 화학종이 아닌, 수백 가지의 화학종으로 이루어진 고분자 혼합물이다.⁵⁾ 아무리 축소화학 반응식을 사용한다 하더라도 수백 가지의 화학종을 모두 합치는 것은 현실적으로 불가능하다. 따라서 디젤유를 이루는 수백 가지의 화학종을 종류별로 분류하고 종류별로 대표적 화학종을 선정하여 이에 대한 축소화학 반응식을 개발하는 작업이 필요하다.

디젤유의 모사 화학반응에 관한 연구는 이미 활발하게 진행되어 왔다. S. Honnet 등은 80%의 노멀 디케인(n-decane)과 20%의 1-2-4 트라이메틸벤젠(trimethylbenzen)을 이용하여 122개의 화학종과 900여 개의 화학반응식으로 구성된 상세 디젤 모사 화학반응 메커니즘을 개발하고 이를 실험과 비교하였다.¹³⁾ R. Lemaire 등은 수트와 PAH의 관계를 살펴보기 위해 IDEA 모사 화학반응 메커니즘을 개발한 바 있으며¹⁴⁾ Kook과 Pickett은 노멀 도데케인을 이용하여 제트 화염에 관한 연구를 진행한 바 있다.¹⁵⁾ 그러나 이들 연구는 대체로 실험적으로 이루어졌으며, Aachen의 화학반응 메커니즘은 상세 화학반응 메커니즘이기 때문에 일반적인 엔진 해석에 적용하기가 어렵다.

한편, 본 연구실에서는 이미 CAI의 연소 해석을 위해 가솔린의 유사 화학반응을 개발한 바 있다.^{16,17)} 가솔린의 대표 탄소종으로 노멀 파라핀, 이소 파라핀, 방향족을 선정했으며 노멀 파라핀의 대표 화학종으로 노멀 헵탄, 이소 파라핀의 대표 화학종으로 이소옥탄, 방향족의 대표 화학종으로 톨루엔을 선정하여 적용하였다. 본 연구에서 다를 디젤유 역시 가솔린과 그 구성 비율이 다를 뿐, 노멀 파라핀, 이소 파라핀, 방향족으로 이루어진 것은 동일하기 때문에, 이소 파라핀과 방향족은 동일하게 이소옥탄과 톨루엔의 축소 화학반응 메커니즘을 사용하고 디젤유의 특징인 고분자 화학종을 모사하기 위해서 노멀 파라핀의 대표 화학종으로 사용되었던 노멀

해판 대신 노멀 도데케인을 사용하는 것을 목표로 한다. 개발된 화학반응 메커니즘은 공통적인 저분자 화학반응을 묶고 나머지 세 화학종에 대한 반응식을 따로 만들어 모듈화 하였으므로 반응식의 재사용이 가능하다. 이는 축소 도데케인 화학반응 메커니즘의 개발이 곧 디젤유의 축소 모사 화학반응 메커니즘 개발로 연결될 수 있음을 의미한다.

따라서 본 연구에서는 노멀 도데케인의 축소 화학반응 메커니즘을 개발하는 것을 연구의 목표로 하였다.

2. 축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘 개발

2.1 계산 방법

화학반응의 계산에는 CHEMKIN 4.1을 사용하였으며 그 중 정적 연소 반응을 모사할 수 있는 계산 모듈을 사용하였다. 작성된 화학반응 메커니즘에 대한 압력과 온도, 화학종의 농도를 초기값으로 입력하고 일정한 반응 시간에 대하여 계산을 수행하면 변화된 압력, 온도, 화학종의 농도가 계산된다. 점화 지연 시간의 기준은 온도가 1400 K를 넘는 시간을 기준으로 삼았다.

2.2 상세 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘

축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘의 개발을 위해 상세 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘과 점화 지연 시간을 비교하였다. USC-II에서는 350 여가지의 화학종과 2000 여 개의 화학반응식으로 구성된 노멀 도데케인의 상세 화학반응 메커니즘을 개발한 바 있으며¹⁸⁾ Ranzi 등은 360 여 개의 화학종, 만여 개의 화학반응식으로 구성된 노멀 도데케인의 상세 화학반응 메커니즘을 개발한 바 있다.¹⁹⁾ 계산 속도의 문제 등에 의해 본 연구에서는 USC-II의 상세 화학반응 메커니즘을 기본 메커니즘으로 하고 이를 바탕으로 새롭게 개발된 축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘과 점화 지연 시간 등을 비교하였다.

2.3 축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘 개발

화학반응 메커니즘의 축소 과정은 다음과 같이 요약할 수 있다. 우선 민감도 분석에 의해 가장 핵심적인 화학종과 화학반응식을 조사, 선정하였고 화학종의 몰농도와 화학반응식의 반응속도를 조사하였다. 이 결과로부터 낮은 농도와 반응속도를 가지는 화학종과 화학반응식을 단계적으로 제외하였다. 점화지연 시간은 매 단계마다 새롭게 계산되었으며 계산된 점화지연 시간은 USC-II의 상세 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘과 비교되었다. 반응식을 더 줄이기 위해 서로 유사한 화학반응식들은 한 가지만 남기고 모두 제거하였으며 마지막 단계로 반응 속도에 대한 조절 단계를 거쳐 상세 노멀 도데케인의 화학반응 메커니즘과 거의 유사한 점화지연 시간을 계산할 수 있게 되었다.

민감도 분석은 온도나 화학종 농도의 의존성을 의미하는 민감도 계수를 제공한다. 모든 화학종에 대해 몰농도와 생성속도를 계산하였으며 낮은 농도를 가진 화학종과 낮은 민감도 반응식에 포함된 화학종이 모두 제거되었다. 예를 들어, 1-데켄(C₁₀H₂₀)과 C₁₀H₁₉의 알킬기는 몰농도와 생성 속도가 매우 낮다. 이 두 화학종은 C₁₀H₁₉+HCO = C₁₀H₂₀+CO에 포함되어 있으며 이 반응식은 매우 낮은 민감도를 가진다. 따라서 이 반응식이 제거되어도 점화지연 시간에 미치는 영향은 매우 미미하다. 이들 저농도 화학종이 고농도 화학종이나 주요 중간 생성물들(H₂O₂, OH, CO 등)과 반응할 때는 주의를 기울여야 하지만 대체로 별 영향을 미치지 못하는 것이다.

일반적으로, 산화 반응의 첫 번째 단계는 연료로부터 H 원자가 빠져 나오면서 알킬기로 변하는 반응이다. H 원자 추출 반응은 O₂, HO₂, OH, H에 의해서만 발생한다고 가정하였는데, 이는 다른 반응은 점화 지연 시간에 거의 영향을 미치지 않기 때문이다.

또한 많은 알킬기들은 비슷한 종류의 반응식이 존재한다. 예를 들어 PXC₁₂H₂₅는 SXC₁₂H₂₅, S2XC₁₂H₂₅, S3XC₁₂H₂₅, S4XC₁₂H₂₅ 등의 다양한 알킬기들이 비슷한 반응식을 보유하고 있다. 이를 민감도 분석에 의해 가장 민감도가 높은 PXC₁₂H₂₅를 제외한 모든 유사 반응식을 제거하였다.

어떤 반응의 경우 낮은 민감도를 가지지만 저온

Table 1 Reduced n-dodecane chemical kinetics

No	Reactions	A	n	E _a
1	NC12H26 + O2 = PXC12H25 + HO2	4.00E+14	0.0	50930.0
2	NC12H26 + OH = PXC12H25 + H2O	2.73E+07	1.81	868.3
3	NC12H26 + HO2 = PXC12H25 + H2O2	1.21E+06	2.65	17496.0
4	NC12H26 + H = PXC12H25 + H2	6.45E-02	4.70	3679.0
5	PXC12H25 + O2 = PC12H25O2	3.00E+48	-11.66	10000.0
6	PXC12H25 = 2C4H8-1 + pC4H9	6.00E-01	4.0	20000.0
7	PC12H25O2 = P12OOHX2	1.00E+11	0.0	12500.0
8	P12OOHX2 + O2 => OC12OOH + OH	4.00E+11	0.0	0.0
9	OC12OOH => CH2O + 4C2H4 + C2H5 + OH + CO	7.00E+14	0.0	20000.0
10	C5H10 + H = C4H8-1 + CH3	3.20E+22	-2.39	11180.0
11	nC3H7 + H = C2H5 + CH3	3.70E+24	-2.92	12505.0
12	nC3H7 + H = C3H6 + H2	1.80E+12	0.0	0.0
13	nC3H7 + OH = C3H6 + H2O	2.40E+13	0.0	0.0
14	C2H4 + C2H5 = pC4H9	1.50E+11	0.0	7300.0
15	pC4H9 + H = C2H5 + C2H5	3.70E+24	-2.92	12505.0
16	pC4H9 + H = C4H8-1 + H2	1.80E+12	0.0	0.0
17	pC4H9 + OH = C4H8-1 + H2O	2.40E+13	0.0	0.0
18	C4H8-1 + H = C2H4 + C2H5	1.60E+22	-2.39	11180.0
19	C4H8-1 + H = C3H6 + CH3	3.20E+22	-2.39	11180.0
20	O + OH = O2 + H	6.40E+14	-0.5	15002.0
21	H2 + O = H + OH	1.82E+10	1.0	8900.0
22	OH + OH = O + H2O	6.00E+08	1.3	0.0
23	H2O + H = H2 + OH	9.55E+13	0.0	20300.0
24	H2O2 + OH = H2O + HO2	1.00E+13	0.0	1800.0
25	H2O + M = H + OH + M	2.19E+19	0.0	105000.0
26	H + O2 + M = HO2 + M	3.61E+17	-0.70	0.0
27	HO2 + OH = H2O + O2	5.01E+13	0.0	1000.0
28	H2O2 + O2 = HO2 + HO2	3.98E+13	0.0	42640.0
29	H2O2 (+M) = OH + OH (+M)	3.00E+14	0.0	48500.0
30	H2 + M = H + H + M	2.19E+14	0.0	96000.0
31	CO + OH = CO2 + H	6.32E+06	1.50	-497.0
32	CO + HO2 = CO2 + OH	1.51E+14	0.0	23650.0
33	CO + O + M = CO2 + M	6.17E+14	0.0	3000.0
34	HCO + O2 = CO + HO2	3.98E+12	0.0	0.0
35	C3H6 + OH = C2H5 + CH2O	1.00E+12	0.0	0.0
36	C3H6 + OH = CH3 + CH3CHO	1.00E+12	0.0	0.0
37	C2H5 + O2 = C2H4 + HO2	1.00E+12	0.0	5000.0
38	C2H4 + HO2 = CH3CHO + OH	2.20E+13	0.0	17200.0
39	CH3 + HO2 = CH3O + OH	4.30E+13	0.0	0.0
40	CH3CHO + HO2 = CH2CHO + H2O2	3.00E+13	0.0	15000.0
41	CH3O + M = CH2O + H + M	5.01E+13	0.0	21000.0
42	O2 + CH2CHO = OH + 2HCO	2.35E+10	0.0	0.0
43	CH2O + OH = HCO + H2O	3.59E+11	0.0	170.0
44	CH2O + O = HCO + OH	1.010E+20	1.00	35000.0

Table 1 Reduced n-dodecane chemical kinetics (Continue)

No	Reactions	A	n	E _a
45	CH ₃ + HCO = CH ₂ O + CH ₂	3.000E+13	0.00	0.0!CGS
46	CH ₃ + O = CH ₂ O + H	8.000E+13	0.00	0.0!CGS
47	CH ₂ + O ₂ = CO ₂ + H + H	1.600E+12	0.00	1000.0

Note: A units mole_cm_sec_K, Ea units cal/mole
 Species considered (25)
 nC₁₂H₂₆ PXC₁₂H₂₅ PC₁₂H₂₅O₂ P12OOHX2 OC12OOH
 C₅H₁₀ C₄H₈-1 pC₄H₉ nC₃H₇ C₃H₆
 C₃H₆ C₂H₅ C₂H₄ CH₂O
 O O₂ HO₂ H₂O₂ H₂O OH H H₂ CO CH₃ N₂

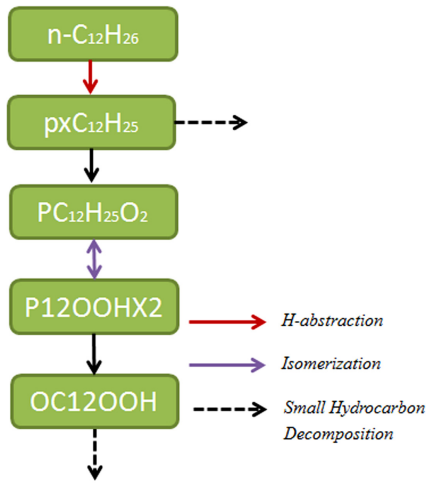


Fig. 1 Major reaction path of parent fuels in the low temperature region

연소에 있어서는 매우 중요한 반응인 경우가 있다. PXC₁₂H₂₅ + O₂ = PC₁₂H₂₅O₂ 반응처럼 저온 연소에 중요한 반응일 경우, 민감도 분석과 관계없이 축소 메커니즘에 포함되었다. 주요 반응 경로는 Fig. 1에 나타나 있다.

이로부터 25개의 화학종과 47개의 화학반응식으로 구성된 축소 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘이 개발되었다. 더불어 이 메커니즘은 몇 가지 계수의 조절이 필요했다. 주요 계수 조절은 NTC 영역과 고온 영역에서 점화 지연을 잘 표현하기 위해 수행되었으며 Table 1의 반응식 (6)에 대해서 주로 행해졌다. 전체 반응식은 Table 1에 표시되어 있다.

3. 축소 화학반응 메커니즘의 검증

3.1 점화 지연 시간 비교

Table 2 Simulation conditions

조건	압력(bar)	당량비	온도(K)
1	20	0.5	750 ~ 1250 (50 K 간격)
2		1	
3		2	
4	40	0.5	
5		1	
6		2	

다양한 조건의 초기 압력과 온도, 당량비에 대해 축소 노멀 도데케인의 점화 지연 시간이 상세 노멀 도데케인 메커니즘의 점화 지연 시간과 비교되었다. 상세 계산 조건은 Table 2에 표시되어 있다.

Fig. 2는 초기 압력 20 bar와 40 bar에서 다양한 온도에 따른 점화 지연을 비교한 그래프이다. 저온 영역과 고온 영역, NTC 영역까지 모든 온도 영역에서 점화 지연이 일치함을 확인하였다. 다만 모든 계산 조건의 NTC에서 개발된 축소 화학 반응의 점화 지연 시간이 상세 화학 반응의 점화 지연 시간보다 약간 길게 나타났다. 그러나 실제로 USC-II 상세 화학 반응 메커니즘은 실험과 비교하여²⁰⁾ NTC에서의 점화지연이 더 짧게 나타나기 때문에 실제로는 보다 정확한 결과를 얻었다고 판단된다.

디젤 엔진에서는 NO_x를 줄이기 위한 방법으로 연소 온도를 낮추기 위해 주로 EGR을 사용한다. 이는 반응에 참가하는 산소의 양이 변화함을 의미하며 당량비의 변화를 초래하게 된다. 초기 당량비가 변화하더라도 개발된 화학반응 메커니즘에 의해 점화지연이 모사될 수 있어야 하며 따라서 당량비에 따른 점화 지연을 비교하였다. Fig. 3은 초기 압력 20 bar와 40 bar에서 다양한 온도와 당량비 0.5, 2 조건

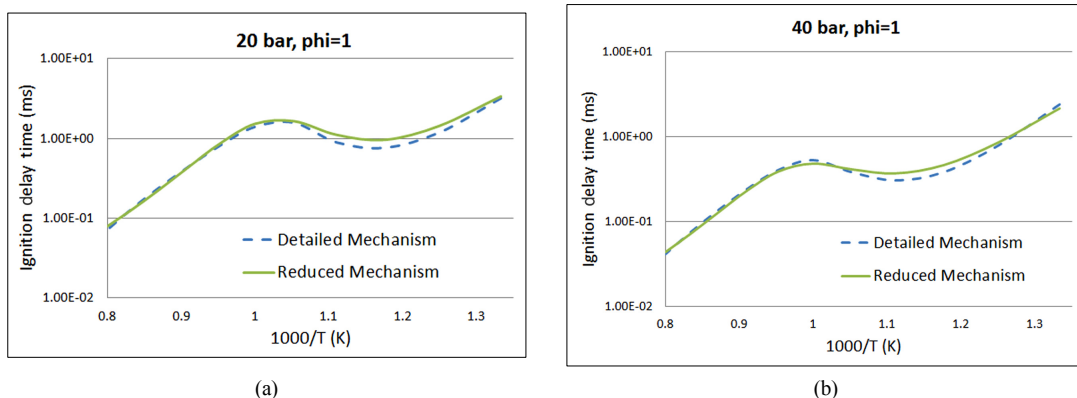


Fig. 2 Ignition delay time of reduced n-dodecane chemical kinetics compared to the detailed n-dodecane chemical kinetics in $\phi = 1$ and initial pressure 20 and 40 bar

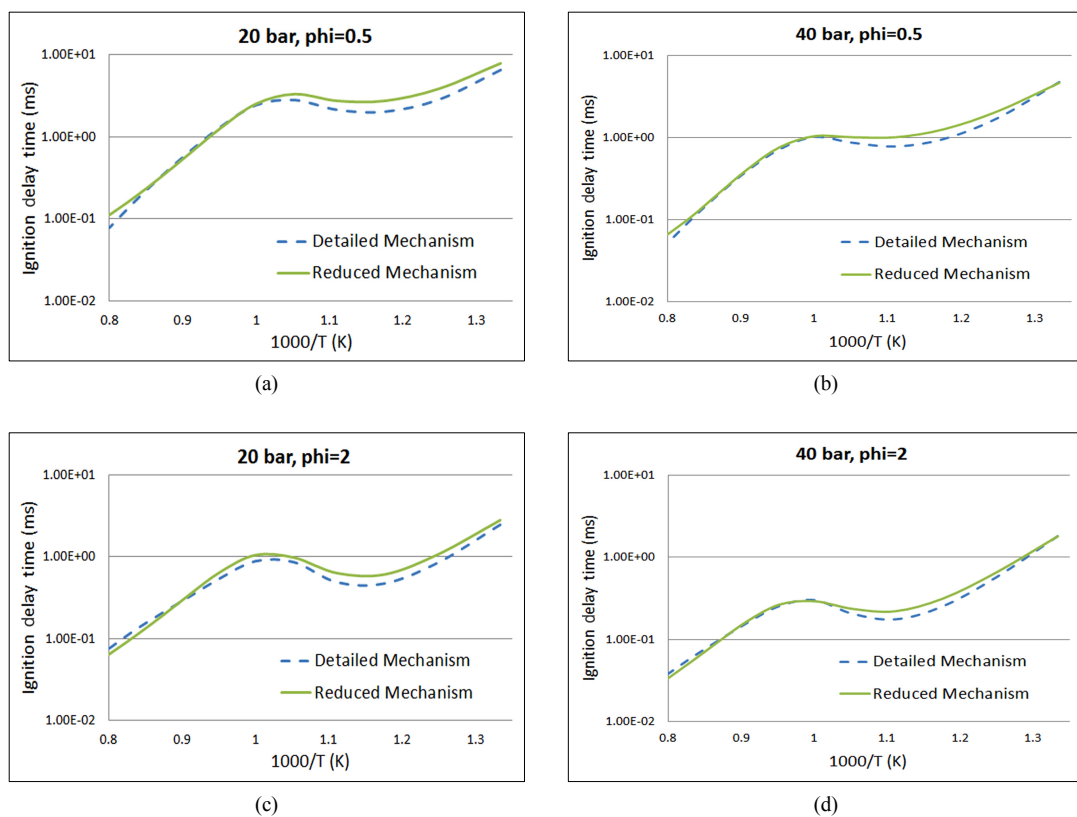


Fig. 3 Ignition delay time of reduced n-dodecane chemical kinetics compared to the detailed n-dodecane chemical kinetics in $\phi = 0.5, 2$ and initial pressure 20 and 40 bar

에서의 점화 지연 시간을 초기 온도에 대해 비교한 그래프이다. 저온 영역과 고온 영역, NTC 영역까지 모든 온도 영역에서 점화 지연이 상세 화학반응 메커니즘의 결과와 잘 일치함을 확인할 수 있다.

3.2 온도와 압력 비교

점화 지연 시간 외에도 화학 반응에 의한 압력과 엔탈피의 증가 혹은 감소분이 축소되기 전의 화학 반응 메커니즘과 비교되어야 한다. 메커니즘의 축

Table 3 Maximum pressure and temperature of reduced n-dodecane chemical kinetics compared to the detailed n-dodecane chemical kinetics in $\phi = 1$ and initial pressure 20 bar

초기 온도(K)	최고온도 (K)		최고압력 (bar)	
	상세	축소	상세	축소
750	2955	2955	85.3	85.3
800	2975	2975	80.6	80.6
850	2996	2996	76.5	76.5
900	3016	3016	72.8	72.8
950	3036	3036	69.6	69.6
1000	3056	3056	66.6	66.6
1050	3076	3076	64.0	64.0
1100	3096	3096	61.6	61.6
1150	3116	3116	59.4	59.4
1200	3136	3136	57.4	57.4
1250	3156	3156	55.5	55.5

소로 인하여 압력이나 엔탈피가 달라진다면 축소 화학반응 메커니즘은 사용할 수 없게 된다.

Table 3은 압력 20 bar에서 상세 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘과 축소 메커니즘의 최고 압력, 온도를 비교해서 보여준다. 즉, 최고 압력, 온도가 두 경우에서 동일한 결과를 보임을 확인할 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 디젤유의 모사를 위한 구성요소의 하나로 노멀 도데케인의 축소 화학반응 메커니즘을 개발하였다.

- 1) 디젤 모사 연료 화학반응 메커니즘을 개발하기 위해 디젤을 모사할 수 있는 대표 화학종을 선별하였다. 노멀 파라핀의 대표 화학종으로 노멀 도데케인, 이소 파라핀의 대표 화학종으로 이소옥탄, 방향족의 대표 화학종으로 톨루엔을 선정하였다.
- 2) 3차원 시뮬레이션에 적용하기 위해서 축소 화학반응 메커니즘을 개발할 필요가 있었다. 세 가지 대표 화학종 중 이소옥탄과 톨루엔은 기존 연구에서 개발된 축소 화학반응 메커니즘이 존재하기 때문에 노멀 도데케인에 대한 축소 화학반응 메커니즘을 개발하였다. 민감도 분석과 일반 산화반응 체계에 의해 개발된 축소 화학반응 메커니즘은 25개의 화학종과 47개의 반응식으로 구

성되었다.

- 3) 개발된 노멀 도데케인의 축소 화학반응 메커니즘이 다양한 초기 온도, 압력, 당량비 조건에서 균일 혼합기 정적연소 반응에 의해 계산되었고 점화 지연 시간이 You 등의 상세 노멀 도데케인 화학반응 메커니즘의 결과와 비교되었다. 연소 시작 기준은 1400 K로 설정하였다. 그 결과, 개발된 축소 화학반응 메커니즘의 점화 지연 시간이 상세 화학반응 메커니즘과 잘 일치하는 것을 확인하였다.
- 4) 점화 지연 시간 이외에도 최고 온도, 압력을 비교하였다. 같은 조건에서 축소 노멀 도데케인 메커니즘과 상세 메커니즘의 최고 온도와 압력이 동일함을 확인하였다.

후 기

본 연구는 현대자동차의 후원과 2차 Brain Korea, 서울대학교 정밀기계설계공동연구소(SNU-IAMD)의 지원으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

References

- 1) S. Aceves, J. Frias, D. Flowers, J. Smith, R. Dibble and J. Wright, "A Decoupled Model of Detailed Fluid Mechanics Followed by Detailed Chemical Kinetics for Prediction of Iso-octane HCCI Combustion," SAE 2001-01-3612, 2001.
- 2) U. B. Azimov and K. S. Kim, "Large-eddy Simulation of Air Entrainment During Diesel Spray Combustion with Multi-dimensional CFD," Int. J. Automotive Technology, Vol.12, No.6, pp.795-812, 2011.
- 3) U. B. Azimov, K. S. Kim, D. S. Jeong and Y. G. Lee, "Evaluation of Low-temperature Diesel Combustion Regimes with n-heptane Fuel in a Constant-volume Chamber," Int. J. Automotive Technology, Vol.10, No.3, pp.265-276, 2009.
- 4) S. Lee, K. Min and J. Chung, "The Effects of Injection Timing and Piston Bowl Shape on PHCCI Combustion with Split Injections," SAE 2010-01-0359, 2010.
- 5) W. J. Pitz, Recent Progress in the Development

- of Diesel Surrogate Fuels, CRC Project No. AVFL-18a, 2009.
- 6) J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, 1988.
 - 7) ARPEL Environmental Guide No.29, *Optimization of Combustion in Boilers and Furnaces*, June 30, 2000.
 - 8) S. Som, D. E. Longman, Z. Luo, M. Plomer and T. Lu, "Three Dimensional Simulations of Diesel Sprays Using n-Dodecane as a Surrogate," Fall Technical Meeting of the Eastern States Section of the Combustion Institute Hosted by the University of Connecticut, Storrs, CT, October, 2011.
 - 9) K. M. Leung, R. P. Lindstedt and W. P. Jones, "A Simplified Reaction Mechanism for Soot Formation in Nonpremixed Flames," *Combust. Flame*, Vol.87, pp.289-305, 1991.
 - 10) M. Fairweather, W. P. Jones and R. P. Lindstedt, "Predictions of Radiative Transfer from a Turbulent Reacting Jet in a Cross-wind," *Combustion, Flame*, Vol.89, pp.45-63, 1992.
 - 11) F. Tao, V. I. Golovitchev and J. Chomiak, "A Phenomenological Model for the Prediction of Soot Formation in Diesel Spray Combustion," *Combust. and Flame*, Vol.136, pp.270-282, 2004.
 - 12) T. Kaminaga, J. Kusaka and Y. Ishii, "A Three-dimensional Numerical Study on Exhaust Gas Emissions from a Medium Duty Diesel Engine Using a Phenomenological Soot Particle Formation Model Combined with Detailed Chemistry," *Int. J. of Engine Res.*, Vol.9, pp.283-296, 2008.
 - 13) S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann and N. Peters, "A Surrogate Fuel for Kerosene," *Proc. Combust. Inst.* Vol.32, No.1, pp.485-492, 2009.
 - 14) R. Lemaire, A. Faccinetto, E. Therssen, M. Ziskind, C. Focsa and P. Desgroux, "Experimental Comparison of Soot Formation in Turbulent Flames of Diesel and Surrogate Dieselfuels," *Proc. Combust. Inst.*, Vol.32, No.1, pp.737-744, 2009.
 - 15) S. Kook and L. M. Pickett, "Combustion and Soot Processes of Conventional and Surrogate Jet Fuels at High-temperature and High-pressure Conditions," U.S. National Combustion Meeting, Ann Arbor, 2009.
 - 16) Y. Kim, *A Study on the CAI Combustion Characteristics Using a Reduced Chemical Kinetic Mechanism*, Ph. D. Dissertation, Seoul National University, 2007.
 - 17) K. Lee, Y. Kim and K. Min, "Development of a Reduced Chemical Kinetic Mechanism for a Gasoline Surrogate for Gasoline HCCI Combustion," *Combustion Theory and Modelling*, Vol.15, No.1, pp.107-124, 2011.
 - 18) X. You, F. Egolfopoulos and H. Wang, "Detailed and Simplified Kinetic Models of n-dodecane Oxidation: The Role of Fuel Cracking in Aliphatic Hydrocarbon Combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.32, No.1, pp.403-410, 2009.
 - 19) E. Ranzi, A. Frassoldati, S. Granata and T. Faravelli, "Wide-Range Kinetic Modeling Study of the Pyrolysis, Partial Oxidation, and Combustion of Heavy n-Alkanes," *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol.44, No.14, pp.5170-5183, 2005.
 - 20) S. S. Vasu, D. F. Davidson, Z. Hong, V. Vasudevan and R. K. Hanson, "n-Dodecane Oxidation at High-pressures: Measurements of Ignition Delay Times and OH Concentration Time-histories," *Proc. of the Combustion Inst.*, Vol.32, pp.173-180, 2009.