

상세화학반응기구를 이용한 탄화 수소 및 메탄올 연료의 층류 화염 속도 모델링

배 상 수* · 민 경 덕†

(2000년 12월 1일 접수, 2001년 8월 14일 심사완료)

Modeling of Laminar Burning Velocities for Hydrocarbon and Methanol Fuels by Using Detailed Chemical Reaction Mechanisms

Sangsoo Pae and Kyoungdoug Min

Key Words: Laminar Burning Velocity(층류화염속도), Stratified Charged Combustion(성층화연소), Detailed Chemical Reaction Mechanism(상세화학반응기구), Lean Burn(희박연소), Gasoline Direct Injection(가솔린직접분사, GDI)

Abstract

In order to be applicable to the combustion modelling of stratified charged combustion like that of lean burn and GDI engine, the correlations of laminar burning velocities for several hydrocarbon fuels and methanol are needed over a wide range of equivalence ratio, pressure and temperature. In this study, these correlations are modeled in the following form based on the experimental and Müller's modeling results for several fuels, where α , ξ , and ζ are functions of pressure and temperature,

$S_L = \alpha \exp[-\xi(\phi - \phi_m)^2 - \exp\{-\zeta(\phi - \phi_m)\} - \zeta(\phi - \phi_m)]$. By using the results calculated by PREMIX code with Sloane's detailed chemical reaction mechanism for propane, it is verified that the coefficients of the above modeling can be determined by considering laminar burning velocity data only in a range of equivalence ratio less than ϕ_m . Therefore, Müller's modeling results can be adopted for modeling of the pressure and temperature dependency. Compared with the results of the existing Keck' and Gülder's models, those of the present one showed the good agreement of the recent experimental data, especially in the range of lean and rich sides.

1. 서 론

최근의 가솔린 엔진에 관한 연구와 개발 추세는 점차로 강화되는 배출물 규제에 대응하기 위한 고출력화 뿐만 아니라, 환경 문제와 연관된 배기 가스 저감을 위한 연구에 초점을 맞추고 있다. 또한 컴퓨터 성능의 발달과 함께 3차원 모사(simulation)를 통하여 복잡한 엔진 설계에 반영되는 가상엔진(virtual engine)의 개념도 등장하면서 유동 및 연소 모델링의 중요성도 증가하고

있는 추세이다.

이러한 연소 모델링시 온도, 압력 및 당량비의 함수인 층류화염속도로부터 연소율 및 난류화염속도 등을 도출할 수 있기 때문에 이의 모델링은 연소 현상을 파악하기 위하여 가장 기본이 된다.

그러나 열손실이나 부력의 영향을 배제하고 스트레치가 없는 평면 화염을 형성하여 이로부터 고온-고압 조건에서의 층류화염속도를 측정하는 것은 매우 어렵기 때문에 동일한 연료에 대해서도 그 측정값의 편차는 다양하다.^(1,6,10,11)

이에 반하여 실험적으로 검증된 다양한 탄화수소 연료들의 상세화학반응기구들^(2,3)을 이용하여 수치적으로 계산하면, 화염면의 변형을 초래하는 스트레치의 영향을 배제한 다양한 조건에서 층류화염속도를 결정할 수 있기 때문에 대단히

* 회원, 현대·기아연구 개발본부 디젤엔진시험팀

† 책임저자, 회원, 서울대학교 기계항공공학부

Email : kadmin@smu.ac.kr

TEL : (02)880-1661 FAX : (02)883-0179

유용한 수단이 될 수 있고, 이소 옥탄까지 계산된 층류화염속도가 발표되어 있다.^(3,4) 그러나 C₅ 이상의 탄화수소에 있어서 농후 영역의 특성도 포함한 상세화학반응기구는 그 복잡성으로 인하여 수치적인 계산이 어렵지만, 이론 당량비 이하의 희박 영역에서의 특성은 비교적 간단히 표현될 수 있고 그 결과도 신뢰할 수 있다.⁽⁴⁾

한편 최근에 관심이 집중되고 있는 희박 연소 및 가솔린 직접 분사 엔진은 성층화 연소 방식을 적용하고 있기 때문에 성층화 난류 연소 모델링에 관한 연구도 최근에 활발히 진행되고 있다.⁽⁵⁾ 특히 성층화 연소시 당량비 분포는 가연 한계(inflammability limit)까지 다양하게 분포하기 때문에, 보다 넓은 당량비 및 온도와 압력 조건에서 적용할 수 있는 층류화염속도의 모델링은 매우 중요하다고 할 수 있다.^(13,14) 따라서 측정이 용이한 상온, 대기압 조건에서의 결과와 고온·고압 조건에서 이론 당량비 이하의 희박 영역 특성만을 반영한 상세화학기구를 계산된 결과를 통합적으로 적용할 수 있다면 다양한 조건에서 정확한 층류화염속도의 모델링이 가능할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 상온, 대기압 조건에서의 메탄올⁽⁸⁾ 및 여러 탄화수소 연료의 층류화염속도의 측정값^(6,7,9~11)과 프로판의 상세화학반응기구⁽²⁾를 PREMIX 코드⁽¹²⁾에 적용하여 계산된 결과를 이용하여 보다 넓은 당량비에 적용할 수 있는 층류화염속도의 모델 함수를 선정하였다. 또한 실제 엔진 연소실처럼 고온·고압 조건에 적용하기 위하여 Müller 등이 제시한 이론 당량비 및 희박영역에서의 모델링 결과⁽⁴⁾를 제시한 모델 함수에 적용하여 농후 영역까지 확장시킬 수 있음을 고찰한 뒤, 기존의 실험 결과와 층류화염속도 관계식들^(13,14)과의 비교를 통한 검증 후 성층화 연소 모델링에 적용될 수 있는 새로운 층류화염속도 관계식의 도출을 목적으로 한다.

2. 층류화염속도의 모델링

2.1 지배방정식

프로판의 층류화염속도를 계산하기 위해 x 방향에 수직인 평면 정상 상태 화염의 식 (1)~식 (3)과 같은 1차원 등압(isobaric) 조건에서 연속 방정식, 화학종 방정식 및 에너지 방정식⁽⁴⁾의 해를 PREMIX 코드로 계산하였다.⁽¹²⁾

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (1)$$

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} = -\frac{dj_i}{dx} - \dot{m}_i \quad (2)$$

$$\rho u c_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{i=1}^n h_i \dot{m}_i - \sum_{i=1}^n c_{bi} j_i \frac{dT}{dx} \quad (3)$$

$$\dot{m}_i = W_i \sum_{k=1}^n \nu_{ik} \omega_k \quad (4)$$

$$\omega_k = k_{fk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{kj}} - k_{bk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{kj}} \quad (5)$$

여기서 u 는 x 방향 속도, ρ 는 밀도, Y_i 는 화학종 i 의 질량분율(mass fraction), c_{bi} 는 화학종 i 의 정압비열, j_i 는 화학종 i 의 확산 플럭스(diffusion flux), \dot{m}_i 는 화학종 i 의 생성률(production rate), T 는 온도, c_p 는 혼합기의 정압비열, λ 는 열전도율(thermal conductivity), h_i 는 화학종 i 의 비엔탈피(specific enthalpy)이다. 또한 \dot{m}_i 는 화학종 i 의 생성률, W_i 는 화학종 i 의 분자량이며, ω_k , ν_{kj} 및 ν_{kj} 는 각각 화학종 j 와 반응식 k 에서의 반응물 및 정반응과 역반응의 이론 반응 계수(stoichiometric coefficient)이다. 한편 반응물 계수 $k_k(T)$ 는 식 (6)과 같은 Arrhenius 형태로 표현된다.

$$k_k(T) = A_k T^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \quad (6)$$

결국 층류화염속도 S_L 은 미연 영역에서의 밀도 ρ_u 에 대한 고유치 문제(eigenvalue problem)에 해당하므로, 식 (7)으로부터 계산될 수 있다.

$$\rho u = \rho_u S_L \quad (7)$$

계산시 당량비는 $\phi=0.5$ 에서 $\phi=2.0$ 까지 변화시켰고, 초기 압력은 0.1MPa~4MPa, 초기 온도는 300K~1000K 범위에서 변화시켰으며, 사용한 프로판의 상세화학반응기구는 42개 화학종 및 192개의 반응식으로 구성되어 있다.⁽²⁾

한편 Müller 등의 모델링 결과⁽⁴⁾를 적용시 초기 압력과 온도 조건은 프로판의 계산 조건과 동일하나, 당량비는 층류화염속도가 0.05m/s 이상인 당량비에서 $\phi=1.0$ 까지 고려하였고,⁽⁴⁾ 피팅(fitting)시 농후 조건까지 필요할 경우에는 Müller 등의 결과를 외삽(extrapolation)하여 적용하였다.

2.2 모델 함수의 선정

기존의 층류화염속도의 모델 함수는 단순한 피팅에 의한 경험적 관계식(empirical correlation)과 열적 화염 전파 이론(thermal flame propagation theory)과 활성 화학종 확산 이론(active species diffusion theory)에 기인한 반경험적 관계식(semiempirical correlation)으로 구분되나, 통상 식 (8)과 식 (9) 형태로 표현되는 경험적인 관계식을 많이 사용하고 있다.^(13,14)

$$S_{L,Keck} = \alpha (\phi - \phi_m)^2 + \beta \quad (8)$$

$$S_{L,Gulder} = Z\phi^7 \exp(-\xi(\phi - \phi_m)^2) \quad (9)$$

이러한 모델 함수들의 특성을 파악하기 위하여 Fig. 1은 파라핀(paraffin) 계열 연료들의 최대 층류화염속도로 규준화된(normalized) 속도를 비교한 것으로, 최대 층류화염속도를 가지는 당량비를 기준으로 비대칭적인 특성을 보이며, 특히 농후 영역에서 연료에 따른 변동이 크다.

따라서, 식 (8)과 같은 Keck의 모델 함수⁽¹⁴⁾는 희박과 농후 영역에서 서로 대칭이므로, 탄소수가 작은 메탄 연료나 이론당량비 부근의 제한된 당량비 영역을 제외하고는 적용이 어렵고, 식 (9)의 Gulder의 모델 함수⁽¹³⁾도 ϕ^7 항에 의하여 희박 영역에서는 실험값보다 크게, 농후 영역에서는 작게 되는 문제점을 지닌다. 본 연구에서는 이와 같은 각 모델 함수들의 단점을 보완하여 식 (10)과 같은 모델 함수를 도입하였는데, ξ 와 ζ 의 상대적인 크기에 따라 희박과 농후 영역에서의 비

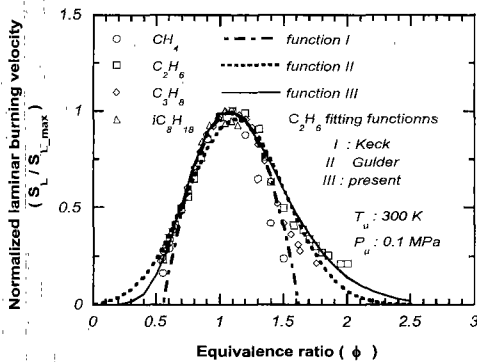


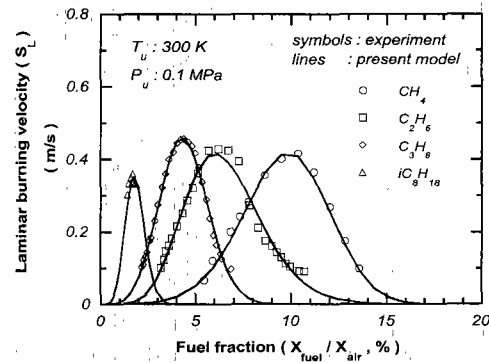
Fig. 1 Comparison of normalized laminar burning velocities for several fuels and the results fitted by three model functions for ethane (CH₄, C₂H₆, C₃H₈ : Egolfopoulos *et al.*, 1990 iC₈H₁₈ : Heimel *et al.*, 1959)

대칭적인 특성을 반영시킬 있다.

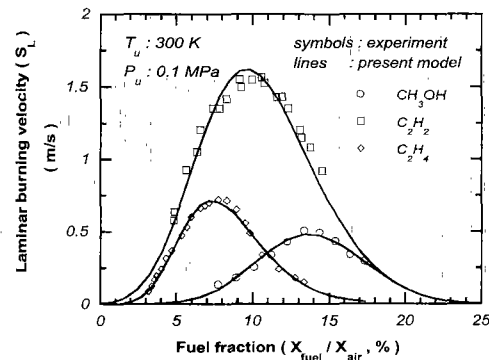
이러한 당량비에 따른 비대칭적인 특성은 Fig. 1의 에탄(ethane)에 대한 모델링 결과에서 보듯이 전체적인 당량비 영역에서 다른 두 모델 함수에 비해 실험 결과를 잘 반영하고 있다.

이러한 모델 함수의 특성을 파라핀계 연료들과 메탄올, 아세틸렌 및 에틸렌에 대하여 비교한 것을 Fig. 2(a)와 Fig. 2(b)에 각각 표시하였는데, 희박과 농후 영역에서 모두 실험 결과를 잘 반영하고 있으므로, 식 (10)의 형태로 제시한 모델 함수는 층류화염속도의 모델링으로 적절하다.

$$S_{L,new} = \alpha_0 \frac{\exp[-\xi_0(\phi - \phi_m)^2] - \exp\{-\zeta_0(\phi - \phi_m)\}}{\exp\{-\xi_0(\phi - \phi_m)\} - \zeta_0(\phi - \phi_m)} \quad (10)$$

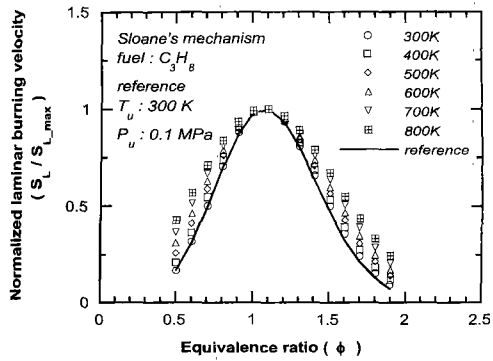


(a) CH₄, C₂H₆, C₃H₈, and iC₈H₁₈

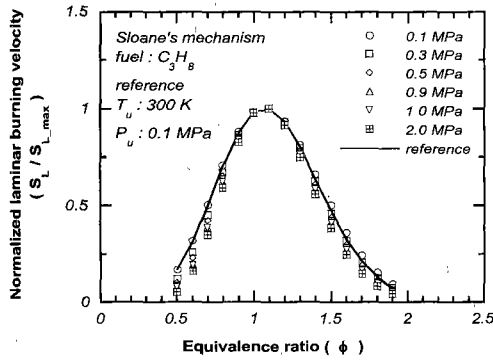


(b) CH₃OH, C₂H₂, and C₂H₄

Fig. 2 Comparison of the measured and the present model laminar burning velocities for several fuels (CH₄, C₂H₆, C₃H₈ : Egolfopoulos *et al.*, 1990 C₂H₂, C₂H₄ : Egolfopoulos *et al.*, 1990 CH₃OH : Egolfopoulos *et al.*, 1992 iC₈H₁₈ : Heimel *et al.*, 1959)



(a) Temperatures varied



(b) Pressures varied

Fig. 3 Comparison of calculated normalized laminar burning velocities for propane as the initial temperatures and pressures are varied

2.3 온도와 압력의 영향

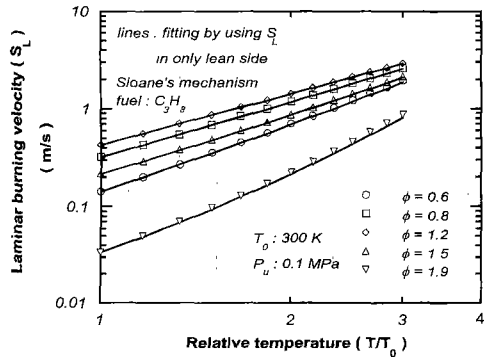
엔진 연소실과 같이 고온·고압 조건에도 적용할 수 있는 층류화염속도를 모델링하기 위해서는 온도와 압력의 영향도 고려해야 한다.

이를 위하여 기준 온도와 압력 T_0 및 P_0 조건에서 얻은 관계식이 S_0 라 할 때 S_L 은 식(11)과 같이 모델링하는 것이 일반적이다.^(10,11,13,14)

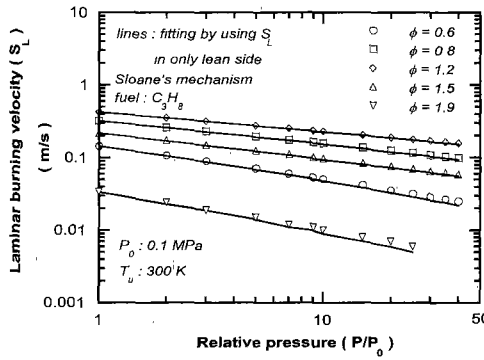
$$S_L = S_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha_T} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_P} \quad (11)$$

이 때 온도와 압력에 대한 지수 α_T 와 β_P 는 상수⁽¹³⁾나 당량비에 대해서 선형 함수⁽¹⁴⁾ 혹은 개별 당량비에 대하여 상수로 가정^(10,11)한다.

그러나, Fig. 3(a)와 Fig. 3(b)에 표시한 온도와 압력에 따라 Sloane 상세화학반응기구로 계산된 표준화된 층류화염속도의 개형에서 보듯이, 온도나 압력의 증가에 따라 기준 조건에서의 개형보다 넓어지거나 좁아지므로 식 (11)로 표현되는 기



(a) Temperatures varied



(b) Pressures varied

Fig. 4 Comparison of the fitted laminar burning velocities for propane by using the calculated S_L in only lean side (lines) and in all sides (symbols), respectively

준의 모델링으로는 이러한 특성이 반영될 수 없기 때문에 이를 반영시킬 수 있는 모델링이 필요하며, 특히 온도에 의한 개형 변화는 더 크다.

또한 Fig. 1에서 보듯이 희박 영역에서의 특성은 연료에 따라 큰 변화가 없고, 식 (10)의 모델 함수에 의하여 농후 영역의 특성도 표현할 수 있기 때문에, Müller 등의 모델⁽⁴⁾에 의한 온도와 압력에 따른 개형 변화 특성이 고찰될 수 있다.

따라서 이러한 특성을 고찰하기 위하여 Fig. 3에서 계산된 층류화염속도를 모델 함수로 피팅시, 층류화염속도가 최대인 당량비보다 희박할 때의 자료만을 사용하거나 모든 자료를 이용한 경우에 대하여 온도와 압력의 변화에 따른 경향을 Fig. 4에 비교하였다.

층류화염속도가 최대인 지점의 당량비보다 작은 자료만을 이용한 경우의 모델링 결과가 약간 작은 $\phi = 0.6$ 과 $\phi = 1.9$ 를 제외하고는 대부분의 당량비에 대해서 온도와 압력에 따라 1% 미만의 피팅 오차를 보

이며, 메탄과 메탄올의 압력과 온도에 따라 측정된 결과에 대해서 비교한 Fig. 5에서도 동일한 경향을 보인다. 이는 모델 함수와 기준 조건에서 결정된 개형에 희박과 농후 영역에서의 특성이 반영되어 있고, Fig. 3에서 보듯이 온도와 압력 변화에 따라 두 영역에서의 개형 변화가 유사하기 때문에 층류화염속도가 최대 차점의 당량비보다 작은 자료만을 이용하여도 전반적인 당량비의 특성을 반영할 수 있다는 것을 의미한다. 따라서 본 연구에서는 온도와 압력에 따른 층류화염속도를 모델링하기 위하여 기준 조건인 $T_u=300$ K, $P_u=0.1$ MPa에서의 측정된 자료와 Müller 등의 모델링 결과⁽⁴⁾를 수정하여 적용하였다.

이러한 온도와 압력 변화에 따른 층류화염속도의 크기 및 개형 변화는 식 (10)으로 표현되는 모델 함수의 α , ξ 및 ζ 등에 그 영향이 반영될 수 있기 때문에, 최종적으로 식 (12)와 식 (13)의 형태로 연료에 따른 층류화염속도를 모델링하였다.

$$S_{L, new} = \alpha \exp\left[-\frac{\xi(\phi - \phi_m)^2}{\exp\{-\zeta(\phi - \phi_m)\} - \zeta(\phi - \phi_m)}\right] \quad (12)$$

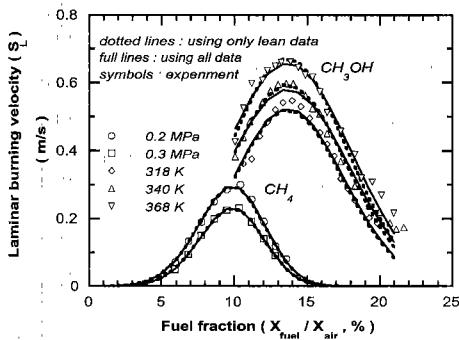


Fig. 5 Comparison of the fitted laminar burning velocities for methane and ethanol by using the measured S_L (symbols) in only lean side (dotted lines) and in all sides (full lines), respectively (CH_4 : Egolfopoulos et al., 1989, CH_3OH : Egolfopoulos et al., 1992)

where $\alpha = \alpha_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha_T} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_P}$
 $\xi = \xi_0 \left[1 - C_T \left(\frac{T}{T_0} - 1\right)\right] \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_{C_T}}$ (13)
 $\zeta = \zeta_0 \left[1 - C_T \left(\frac{T}{T_0} - 1\right)\right] \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\beta_{C_T}}$

여기서 α_0 , ξ_0 , ζ_0 및 ϕ_m 의 선정을 위하여 이소옥탄과 노말 헵탄은 기준 조건인 $T_u=300$ K, $P_u=0.1$ MPa에서의 실험값⁽⁹⁾과 Müller 등의 모델링 결과⁽⁴⁾를 동시에 사용하였고, 그 외의 연료에 대해서는 기존의 실험 결과를 기준으로 2% 미만의 피팅 오차 범위에서 결정하였다. 또한 온도와 압력에 대한 영향을 반영하기 위한 α_T , β_P , C_T 및 β_{C_T} 등의 결정은 Müller 등의 모델링 결과를 ϕ_m 까지 확장시켜 1% 미만의 피팅 오차 범위내에서 선정하였고, 노말 헵탄에 대한 계산 결과는 기존의 실험 결과⁽⁹⁾를 기준으로 수정하여 적용하였다.

이러한 과정으로 결정된 각 연료별 모델링 계수들을 Table 1에 정리하였다.

3. 기존 모델링들과의 비교

본 연구에서 새롭게 제시한 층류화염속도의 모델링 결과를 기존의 실험 결과 및 모델링들^(13,14)과 비교하여 검증하였는데, Fig. 6, Fig. 7 및 Fig. 8에 표시하였다.

먼저 기준 조건인 $T_u=300$ K, $P_u=0.1$ MPa에서의 메탄, 메탄올, 프로판 및 이소옥탄에 대한 실험 및 기존의 모델링들과 비교한 Fig. 6(a)~Fig. 6(d)을 보면 Keck 등의 모델링 결과는 모든 연료에 대해서 전반적으로 층류화염속도가 작다.

이는 모델링시 실험 조건이 $\phi=0.8$ 에서 $\phi=1.2$ 로 제한적이며, 모델링 함수가 식 (8)로 표현되는 이차 함수의 특성에 기인한다.

Table 1 The modeling coefficients for several fuels

	ϕ_m	α_0	ξ_0	ζ_0	α_T	β_P	C_T	β_{C_T}
CH_4	1.042	1.139	6.242	0.902	1.982	-0.518	0.258	0.161
CH_3OH	1.130	1.314	1.874	2.199	1.812	-0.336	0.205	0.068
C_2H_2	1.263	4.412	0.240	1.706	1.808	-0.158	0.115	0.067
C_2H_4	1.130	1.946	0.127	2.272	1.865	-0.264	0.135	0.069
C_2H_6	1.070	1.132	0.645	2.462	1.925	-0.344	0.144	0.107
C_3H_8	1.070	1.254	2.607	1.955	1.703	-0.264	0.237	0.077
nC_7H_{16}	1.120	1.070	0.510	2.450	2.046	-0.327	0.149	0.084
iC_8H_{18}	1.070	0.961	2.664	2.080	1.808	-0.268	0.187	0.093

또한 식 (9)로 표현되는 Gülder 등의 모델링은 메탄올과 프로판의 결과를 비교한 Fig. 6(b)와 Fig. 6(c)에서 보듯이, 모델링 함수의 특성상 희박 영역에서는 크게, 농후 영역에서는 작게 모델링 되고 있다. 그러나 Fig. 6(a)와 Fig. 6(d)에 표시한 메탄과 이소 옥탄에 대해서는 모델링에 사용한 실험 결과에 의하여 각각 농후 영역과 희박 영역에서 본 연구의 모델링보다 더 크다.

한편 Müller 등의 모델링은 프로판 및 노말 헵탄을 제외하고는 기존의 실험 결과를 잘 반영하고 있다. 특히 노말 헵탄에 대한 결과를 비교한 Fig. 6(h)를 보면, Müller 등의 모델링이 실험과 큰 차이가 있기 때문에 대기압 조건에서 미연 가스 온도에 대한 HeimeI 등의 실험 결과⁽⁹⁾를 기준으로 수정하였고, 프로판은 Sloane 상세화학기구조 계산하여^(2,12) 모델링에 적용하였다.

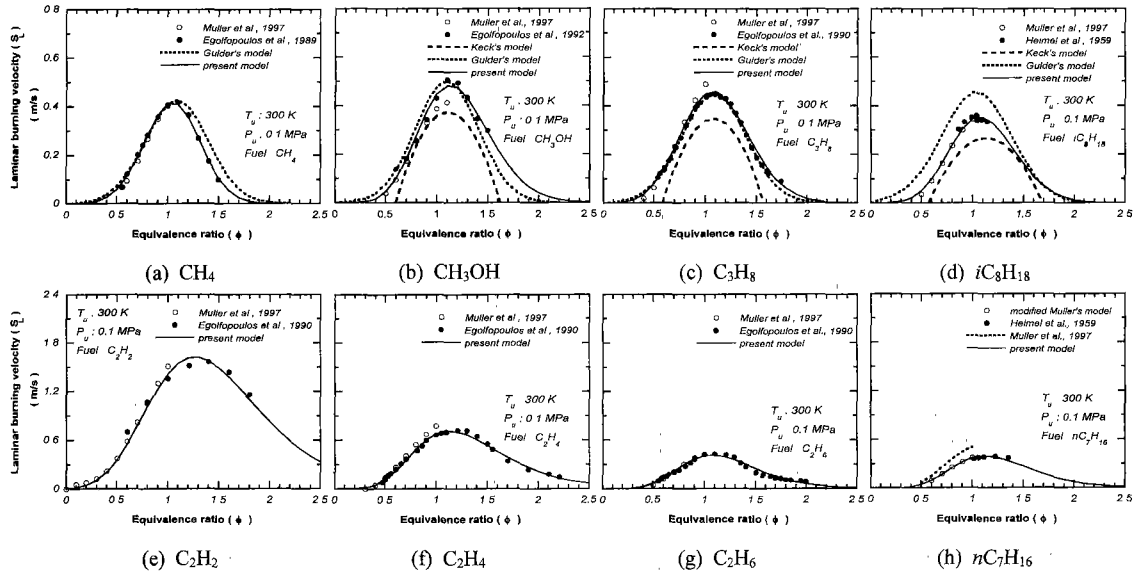


Fig. 6 Comparison of the measured and the modeled laminar burning velocities of several fuels at $T_u=300\text{ K}$ and $P_u=0.1\text{ MPa}$

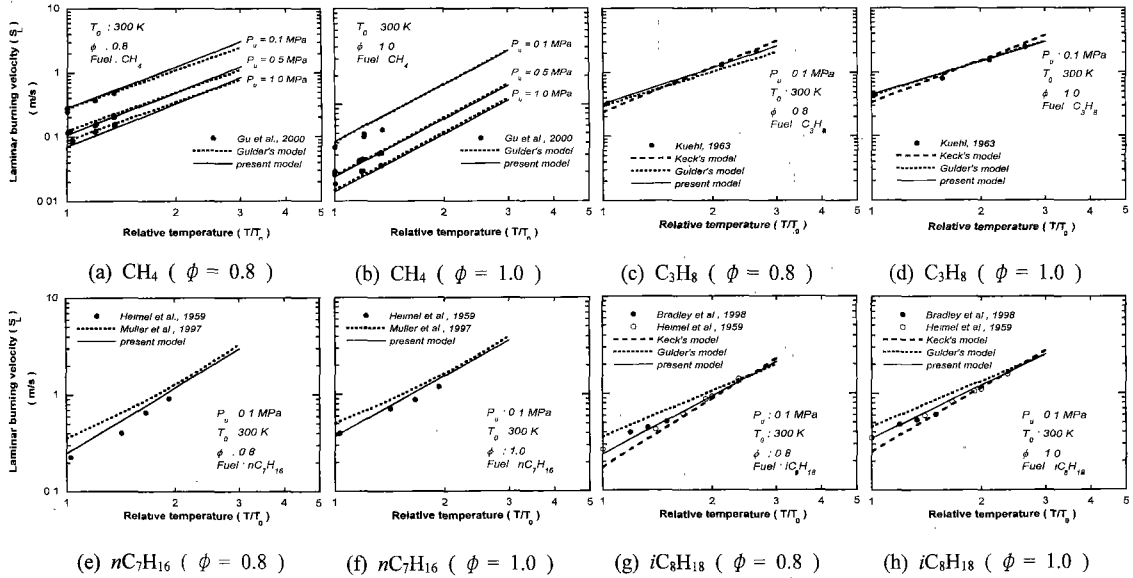


Fig. 7 Comparison of the measured and the modeled laminar burning velocities of several fuels at $P_u=0.1\text{ MPa}$ as the relative unburned gas temperatures are varied

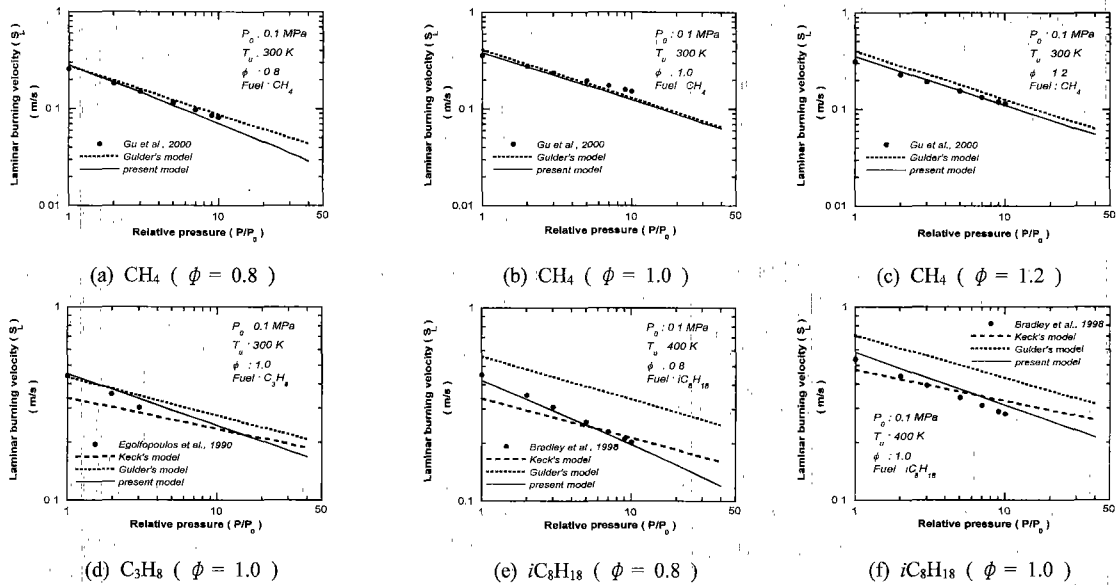


Fig. 8 Comparison of the measured and the modeled laminar burning velocities of several fuels at $T_u=300$ K as the relative unburned gas pressures are varied

또한 메탄, 프로판, 노말 헵탄 및 이소 옥탄에 대한 온도에 따른 모델링 결과를 $\phi=0.8$ 과 $\phi=1.0$ 에 대하여 기존의 실험 결과와 모델링들 간에 비교한 것을 Fig. 7에 표시하였다.

먼저 메탄과 프로판은 Fig. 7(a), Fig. 7(b) 및 Fig. 7(c)와 Fig. 7(d)에 비교한 것처럼 Gulder 모델과 큰 차이는 없으나, 모델 함수의 특성에 의하여 희박한 당량비 조건에서 역시 작게 모델링됨을 알 수 있다. 또 이소 옥탄에 대해서 비교한 Fig. 7(g)와 Fig. 7(h)에서 보면, 스트레치나 구획식 화염(cellular flame)으로의 변환 등을 고려하여 측정된 Bradley 등의 결과⁽¹⁰⁾와 비교할 때, Fig. 6(d)에서와 같이 Gulder 모델은 반영하고 있지 못하여 가장 크며, 본 연구의 모델은 Keck 모델에 비하여 상대적으로 잘 반영하고 있다. 특히 고온으로 갈수록 Heimel 등의 측정 결과⁽⁹⁾와 잘 일치한다. 따라서 본 연구에서 제시한 모델은 온도에 대하여 기존의 모델들과 비교할 때 타당함을 알 수 있다. 한편 노말 헵탄의 경우는 앞서 언급한 것처럼 Heimel 등의 실험 결과를 기준으로 Müller 등의 모델 계수 중 기연 가스 온도 지수 $n=2.3$ 을 $n=2.78$ 로 수정하여 적용하였으며, 그 결과를 Fig. 7(e)와 Fig. 7(f)에 나타내었다.

온도에 의한 영향과 더불어 압력에 의한 영향

도 비교하였는데, 특히 고압 조건에서 층류화염 속도를 증가시킬 수 있는 스트레치에 의한 화염면의 변형이나 구획식 화염에 대한 영향의 배치가 중요하므로, 이를 고려한 Gu와 Bradley 등의 이소 옥탄⁽¹⁰⁾과 메탄⁽¹¹⁾에 대한 측정 결과를 이용하였고, 그 결과를 Fig. 8에 나타내었다.

먼저 $\phi=0.8$, $\phi=1.0$ 및 $\phi=1.2$ 에서 메탄에 대한 측정 결과와 비교한 Fig. 8(a)와 Fig. 8(b) 및 Fig. 8(c)에서 보면 이론 당량비를 제외하고는 Gulder 모델에 비하여 본 연구에서 제시한 모델이 실험 결과를 더 잘 반영하고 있다. 또한 $\phi=0.8$ 및 $\phi=1.0$ 에서의 이소 옥탄과 비교한 Fig. 8(e)와 Fig. 8(f)를 보면, Keck이나 Gulder 모델에 비하여 본 연구의 모델이 실험 결과와 가장 일치하고 있다. 한편 Fig. 8(d)에 나타낸 프로판에 대해서도 비록 비교적 저압 조건에서의 측정 결과일지라도 전반적인 경향은 본 연구에서 제시된 모델이 가장 유사함을 알 수 있다.

따라서 본 연구에서 제시한 모델 함수를 이용하여 기준 조건인 $T_u=300$ K, $P_u=0.1$ MPa에서의 측정 결과와 온도와 압력에 따른 Müller 등의 모델링을 수정, 적용하여 스트레치 등과 관련된 영향을 배제한 본 연구의 모델링은 실험 결과에 의한 비교를 통하여 타당함을 검증할 수 있다.

결국 희박 영역에서 적용할 수 있는 검증된 상세화학반응기구에 의한 계산과 기준 조건에서의 실험 결과를 이용하여, 본 연구에서 제시한 모델 함수 및 방법을 적용하면 다른 연료에 대한 층류 화염속도 모델링이 가능함을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 메탄, 메탄올, 아세틸렌, 에틸렌, 에탄, 프로판, 노말 헵탄 및 이소 옥탄에 대하여 엔진 연소실과 같은 고온·고압 조건 및 상층화 연소 모델링과 같은 넓은 당량비 범위에 적용할 수 있는 새로운 층류화염속도 관계식을 모델링하였다. 이를 위하여 기존의 실험 및 모델링 결과를 이용하였는데, 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1). 희박 영역과 농후 영역에서의 층류화염속도 특성을 반영하기 위한 새로운 모델 함수를 제시하였다.

(2). 프로판의 상세화학반응기구로 계산된 층류화염속도의 온도와 압력에 따른 특성에서 알 수 있듯이, 층류화염속도의 온도와 압력에 대한 모델링시 크기 변화와 함께 당량비에 따른 개형 변화도 동시에 고려해야 한다.

(3). 본 연구에서 제시한 모델 함수로 층류화염속도의 모델링시 전체 당량비에 대하여 고려한 경우와 층류화염속도가 최대인 당량비 이하만을 고려한 경우간의 모델링 오차는 1% 미만이므로, 후자의 방법을 적용하는 것은 타당하다.

(4). 본 연구에서 제시한 모델은 기존의 모델들과 비교할 때 실험 결과를 더 잘 반영하며, 특히 스트레치에 의한 화염면의 변형 등의 영향을 완전히 배제할 수 있다.

참고문헌

- (1) Rallis, C.J., and Garforth, A.M., 1980, "The Determination of Laminar Burning Velocity," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 6, pp. 303~329.
- (2) Sloane, T.M., 1992, "Ignition and Flame Propagation Modeling with an Improved Propane Oxidation Mechanism," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 83, pp. 77~96.
- (3) Warnatz, J., 1984, "Chemistry of High Temperature Combustion of Alkanes up to Octane," *20th Symposium (International) on Combustion*, pp. 845~856.
- (4) Müller, U.C., Bollig, M. *et al.*, 1997, "Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames," *Combust. Flame*, Vol. 108, pp. 349~356.
- (5) Haworth, D.C., Blint, R.J. *et al.*, 2000, "Numerical Simulation of the Turbulent Propane-air Combustion with Nonhomogeneous Reactants," *Combust. Flame*, Vol. 121, pp. 395~417.
- (6) Egolfopoulos, F.N., Cho, P., and Law, C.K., 1989, "Laminar Flame Speeds of Methane-Air Mixtures under Reduced and Elevated Pressures," *Combust. Flame*, Vol. 76, pp. 375~391.
- (7) Egolfopoulos, F.N., Xhu, D.X., and Law, C.K., 1990, "Experimental and Numerical Determination of Laminar Flame Speeds: Mixtures of C₂-Hydrocarbons with Oxygen and Nitrogen," *23rd Symposium (International) on Combustion*, pp. 471~478.
- (8) Egolfopoulos, F.N., Xhu, D.X., and Law, C.K., 1992, "A Comprehensive Study of Methanol Kinetics in Freely-Propagating and Burner-Stabilized Flames, Flow and Static Reactors, and Shock Tubes," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 83, pp. 33~75.
- (9) HeimeL, S., and Weast, R.C., 1959, "Effect of Initial Mixture Temperature on the Burning Velocity of Benzene-Air, n-Heptane-Air, and Isooctane-Air Mixtures," *6th Symposium (International) on Combustion*, pp. 296~302.
- (10) Bradley, D., Hicks, R.A. *et al.*, 1998, "The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for Iso-Octane-Air and Iso-Octane-n-Heptane-Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb," *Combust. Flame*, Vol. 115, pp. 126~144.
- (11) Gu, X.J., Haq, M.Z., Lawes, M., and Woolley, R., 2000, "Laminar Burning Velocity and Markstein Lengths of Methane-Air Mixtures," *Combust. Flame*, Vol. 121, pp. 41~58.
- (12) Kee, R.J., Grcar, J.F. *et al.*, 1982, A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One Dimensional Premixed Flames, SAND85-8240, Sandia Nat'l Lab.
- (13) Gülder, O.L., 1984, "Correlations of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels," SAE Paper 841000.
- (14) Heywood, J.B., 1988, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, pp. 402~406.
- (15) Kuehl, D.K., 1963, "Burning Velocities of Propane Air Mixtures," *8th Symposium (International) on Combustion*, pp. 510~521.

- (1) Rallis, C.J., and Garforth, A.M., 1980, "The Determination of Laminar Burning Velocity," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 6, pp. 303~329.
- (2) Sloane, T.M., 1992, "Ignition and Flame Propagation Modeling with an Improved Propane Oxidation Mechanism," *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 83, pp. 77~96.
- (3) Warnatz, J., 1984, "Chemistry of High Temperature Combustion of Alkanes up to Octane,"