

<학술논문>

메탄-수소 대향류확산화염에서 H₂와 H의 선호확산을 통한 화학적 효과에 관한 연구

박 정[†] · 권오봉* · 이의주** · 윤진한*** · 길상인***
(2007년 8월 2일 접수, 2007년 10월 1일 심사완료)

A Study on Chemical Effects Through Preferential Diffusion of H₂ and H in CH₄-H₂ Counterflow Diffusion Flames

Jeong Park, Oh Boong Kwon, Eui Ju Lee, Jin Han Yun and Sang In Keel

Key Words: Chemical Kinetics(화학반응론), Diffusivity Suppression(확산을 억제), Flame Structure(화염구조), Preferential Diffusion(선호확산)

Abstract

Numerical study on preferential diffusion effects in flame structure in CH₄-H₂ diffusion flames is conducted with detailed chemistry. Comparison of flame structures with mixture-averaged species diffusion and suppression of the diffusivities of H₂ and H was made. Discernible differences in flame structures are displayed with three species diffusion models. The behaviors of maximum flame temperatures with those species diffusion models are not explained by scalar dissipation rate but by the nature of chemical kinetics. It is seen that the modification of flame structure is mainly due to the preferential diffusion of H₂ and thereby the nature of chemical kinetics. It is also found that the behaviors of major species with the three species diffusion models are addressed to the nature of chemical kinetics, and this is evident by examining importantly contributing reaction steps to the production and destruction of those chemical species.

1. 서 론

탄화수소-수소 혼합연료는 여러 장점으로 주목을 받고 있다. 먼저 탄화수소화염에 첨가제로서 수소를 사용하는 것은 버너의 성능을 향상시키고, 회박가연한계를 확장하며, 회박연소를 통하여 환경오염물질을 줄일 수가 있다.⁽¹⁻¹⁰⁾ 둘째로 수소 화염에 첨가제로서 탄화수소를 사용하는 것은 폭발을 억제하고 노킹을 방지할 수 있다.⁽¹¹⁾ 셋째로

수소-탄화수소를 연료로 사용하는 것은 수소경제 화사회로 가는 중간단계에서의 해법으로 제안될 수 있다.^(11,12) 특히 이러한 제안은 화석연료를 수소로 대체하기 위해서는 당장 엄청난 시설투자비를 감당해야 하고 수소화염의 폭발에 대한 충분한 연구가 아직 미흡하다는 측면에서 어느 정도 이산화탄소 배출을 허용하되 기존 탄화수소에 비해 충분히 그 배출을 줄일 수 있다는 측면에서 긍정적으로 평가된다.

초과단열화염온도에 대한 H와 H₂의 선호확산 효과에 대해서는 많은 연구 대상이었으나 두 가지 다른 관점에 의해 여전히 명확하지는 않다. 한 그룹에서는 초과단열화염온도가 과농 탄화수소 예혼합화염에서만 나타나고,⁽¹³⁾ 그 원천적 성질은 화학적 효과에 기인한다고 주장하고 있다.⁽¹³⁻¹⁵⁾ 반면 다른 연구그룹에서는 그 원인을 반

† 책임저자, 회원, 부경대학교 기계공학부
E-mail : jeongpark@pknu.ac.kr
TEL : (051)620-1601 FAX : (051)620-1531

* 부경대학교 기계공학부

** 부경대학교 안전공학부

*** 한국기계연구원 청정환경기계연구센터

응대로부터 예열지역으로 수소분자 및 원자의 선호확산에 기인하는 것으로 이해하고 있다.⁽¹⁶⁾ 따라서 아직 이 부분에 대한 명쾌한 답은 주어지지 않고 있다.

Drake와 Blint는 CO/H₂/N₂ 층류확산화염에서 선호확산, 연료-산화제의 결합, 라디칼들의 초과평형 등에 대한 화염스트레치 효과를 연구하였다.⁽¹⁷⁾ 원통형확산화염에서 양의 화염굴곡은 선호확산을 강화하고 음의 화염굴곡이 선호확산을 약화시키며 이러한 효과들이 화염반경에 대한 화염 두께의 비에 비례함을 보인 바 있고,⁽¹⁸⁾ 유사한 결과는 마이크로 연료 및 공기제트로 충돌되는 수소/질소-공기 대향류화염에서 얻어진 바 있다.⁽¹⁹⁾ 그러나 이러한 연구자들은 H₂와 H의 선호확산을 통한 화학반응 효과의 중요성을 인식하지는 못하였고, 화학반응 효과의 중요성에 대한 인식은 최근 소수의 연구들이 보고되고 있다.⁽¹³⁻¹⁵⁾

본 연구에서는 혼합평균된 화학종 확산을 기반으로 한 경우와 H₂와 H의 확산을 억제한 경우의 화염 구조를 비교하는 수치해석 연구를 메탄/수소-공기 대향류확산화염에 대해 수행한다. 특별한 관심은 세 가지의 확산 모델들에 따른 주요 화염 구조 변화가 스칼라 소산율과 같은 물리변수에 민감한지 화학적 효과에 의해 민감한지를 살펴보고자 한다.

2. 수치해석 방법

메탄/수소-공기 대향류 확산화염은 OPPDIF 코드⁽²⁰⁾를 사용하여 해를 얻었고, 열화학 및 전달물성치들은 CHEMKIN II⁽²¹⁾와 TLIB⁽²²⁾ 데이터베이스로부터 얻었다. 복사열손실을 묘사하기 위해 광학박모델을 사용하였고 CO₂, H₂O, CO, CH₄에 대한 플랑크 평균 흡수계수는 온도에 대한 다항식으로 근사적으로 나타내었다.⁽²³⁾ 대향류화염의 노즐 사이의 간격은 2cm이고 분위기 압력은 1기압, 경계 온도는 300K로 하였다. 메탄/수소-공기 확산화염에 대한 실험은 문헌상에 거의 보고되지 않으며, 메탄/수소-공기 예혼합화염의 연료 혼합기 조성에 따른 실험과 수치해석⁽⁶⁾에서 GRI v-3.0 기구가 적절함을 제시한 바가 있기 때문에 본 연구에서도 GRI v-3.0을 사용하였다.

연료측에 메탄에 수소를 첨가함으로써 메탄-공기 확산화염은 메탄/수소-공기 확산화염을 거쳐

수소-공기 확산화염으로 변하게 됨으로써 화염

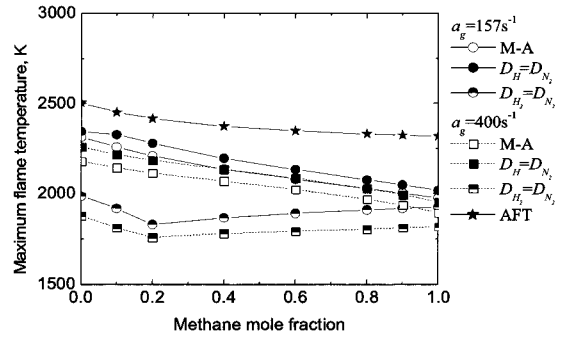


Fig. 1 Variation of maximum flame temperature with methane mole fraction for three species diffusion models in CH₄-H₂ flames

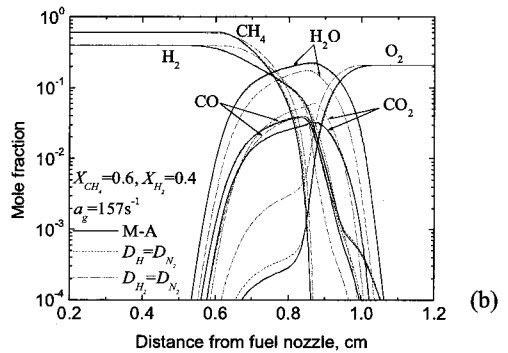
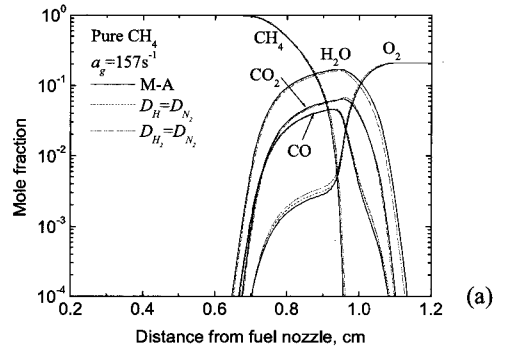


Fig. 2 Spatial distributions of major flame structures for three species diffusion models in (a) a pure CH₄ and (b) a CH₄-H₂ flame

구조를 비교할 수 있게 된다. 따라서 온도와 연료 및 산화제측 조성의 경계 조건이 주어지면 화염 구조는 다음과 같이 정의된 전체화염신장률에 의해 결정된다.

$$a_g = \frac{2(-u_o)}{L} \left[1 + \frac{u_F}{(-u_o)} \sqrt{\frac{\rho_F}{\rho_O}} \right] \quad (1)$$

여기서 하첨자 F와 O는 각각 연료와 공기를, L은 노즐 간의 간격을 나타낸다. 화염 구조에 있어서 H₂와 H의 선택확산효과를 조사하기 위해 화학종의 확산계수를 다음과 같이 처리하여 계산을 수행하고 비교하게 된다.

- (1) 혼합기평균 화학종 확산(Mixture-averaged species diffusion)
 - (2) $D_H = D_{N_2}$ 를 가정한 혼합기평균 화학종 확산
 - (3) $D_{H_2} = D_{N_2}$ 를 가정한 혼합기평균 화학종 확산
- 화학종의 열확산항은 고려하지 않았고, 혼합기평균 화학종 확산의 경우와 다성분 화학종 확산의 경우와 몇가지 조건에서 테스트 결과 온도 분포와 최대온도가 거의 차이가 나지 않았기 때문에 본 연구에서는 다성분 화학종 확산의 경우는 제외하였다.

3. 결과 및 논의

Fig. 1은 메탄-수소 대항류확산화염에서 전체화염신장률 $157s^{-1}$ 와 $400s^{-1}$ 에서 세 가지 확산 모델에 대해 메탄몰분율에 따른 최대화염온도를 나타낸다. Fig. 1에서 비교를 위해 단일화염온도를 나타내었고 AFT는 단일화염온도를 나타낸다. M-A는 혼합기 평균 확산율을 사용한 경우를 의미한다. 모든 경우에 있어서 최대화염온도는 단일화염온도보다 낮아 초과단열화염온도 현상은 나타나지 않는데 이것은 선택된 전체화염신장률이 적절히 크기 때문이다. 일반적으로 전체반응물에 대한 지시자 역할을 하는 체인분기반응인 $H+O_2 \rightarrow O+OH$ 의 반응물은 미연탄화수소와 H원자의 반응물에 비해 작고 H 원자에 대해 서로 경쟁하게 된다. 따라서 미연탄화수소의 존재는 지적된 체인분기반응의 반응물을 감소시키게 되고 화염 온도도 또한 감소하게 된다.⁽²⁶⁾ 따라서 화염온도는 메탄몰분율이 증가함에 따라 감소하게 된다. 또한 전체화염신장률이 증가함에 따라 S-곡선상의 거동으로부터 잘 알려져 있듯이 전체적으로 화염온도는 감소한다. Fig. 1에서 나타나듯이 같은 전체화염신장률에 대해서 혼합기평균확산모델을 사용하는 경우의 화염온도는 H₂ 확산율을 억제하는 경우보다 높고 H의 확산율을 억제하는 경우보다는 낮게 나타난다. 또한, Fig. 2(a)에서 보

여지듯이 메탄화염에서는 세 가지 확산모델에 대해서 화염구조가 민감하게 변하지는 않으나 Fig. 2(b)에 나타나듯이 메탄-수소화염에서는 혼합기 평균확

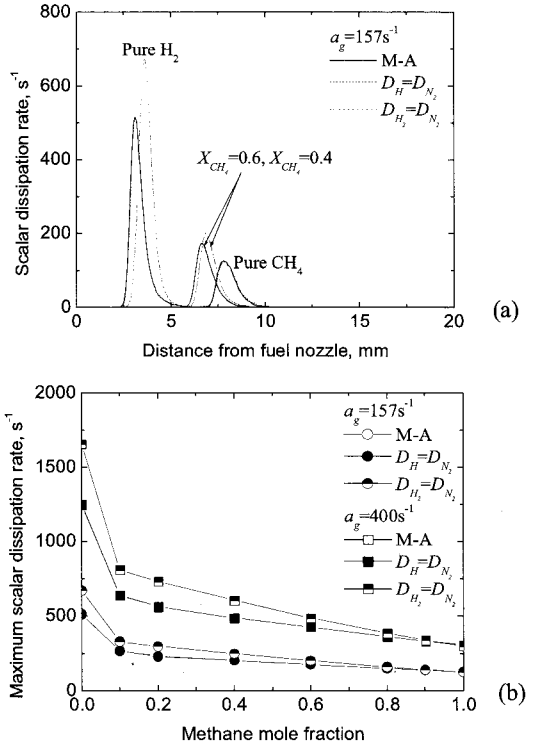


Fig. 3 (a) Spatial distributions of scalar dissipation rates and (b) Variations of maximum scalar dissipation with methane mole fraction for three species diffusion models at the global strain rate of $157s^{-1}$

산모델과 H의 확산을 억제한 모델 사이의 화염구조 차이가 적으나, H₂를 억제한 확산모델은 다른 확산모델들에 비해 H₂O는 적게 생성되고 CO₂는 많이 생성되는 것을 볼 수 있다. 또한, H₂를 억제한 확산모델은 반응대에서 H₂의 투과는 적어지고 O₂의 투과는 많아지는 것을 볼 수 있다. 또한 Fig. 1과 Fig. 2를 비교해 보면 같은 전체화염신장률에 대해서 혼합기평균확산모델과 H 확산율을 억제한 모델 사이의 주화학종의 분포가 거의 차이가 작음에도 불구하고 H 확산율을 억제한 모델의 경우에 최대화염온도가 더 높게 나타나는 것은 H와 H₂ 같은 분자량이 작은 화학종들이 반응대로 확산이 더 빨리 될 것이라는 물리적 과정으로는 명백하지 않다.

한편 과농 탄화수소 예혼합화염에 관한 기존 연구들에서는 상반된 결과들을 보여주고 있는데 초과화염온도는 반응대로부터 예열대로 H₂의 선

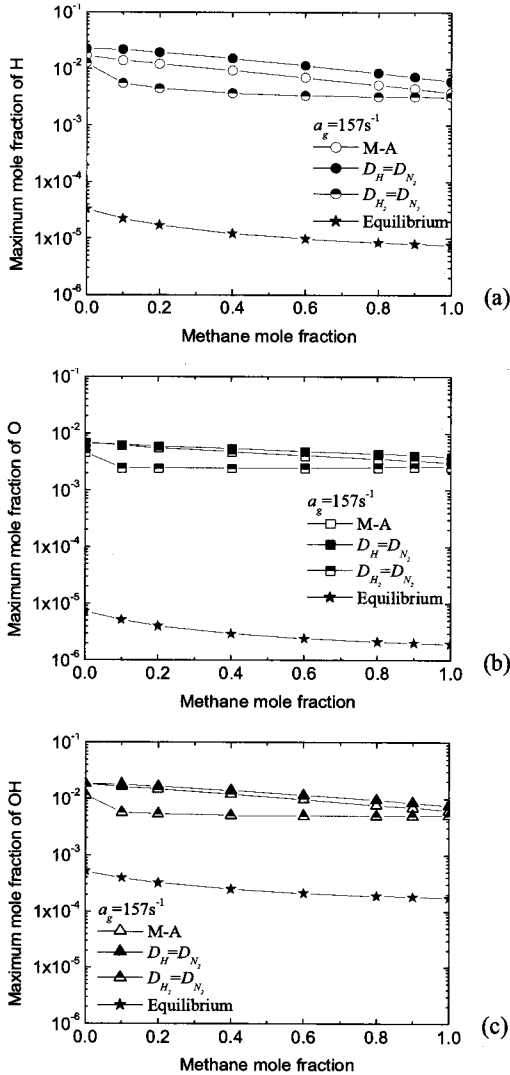


Fig. 4 Variations of maximum mole fractions of (a) H, (b) O, and (c) OH with methane mole fraction for three species diffusion models at the global strain rate of 157s⁻¹

호확산에 기인한다는 주장⁽¹⁵⁾과 H의 선호확산에 기인한다는 주장⁽¹⁶⁾ 사이에서 여전히 논란의 여지가 있었다. 연료와 산화제측 경계조건으로 조성비가 결정된 경우에 있어서 결국 이러한 복잡한 화염온도 거동이 H와 H₂의 선호확산에 의한 화학적 효과에 기인하지 않는다면 스칼라소산율에

의해서 설명될 수 있어야 한다.

Fig. 3은 메탄-수소 확산화염에 대해 157s⁻¹의 전체화염신장률인 경우 세 가지 확산모델들을 사용한 (a) 스칼라 소산율의 분포와 (b) 메탄몰분율에 따른 최대스칼라소산율의 변화를 나타내었다. 스칼라소산율을 계산하기 위해 Bilger⁽²⁷⁾에 의해 제안된 혼합분율을 사용하였다. Fig. 3(a)의 메탄 화염의 경우 세 가지 확산모델에 대해 스칼라소산율 분포 사이에 차이는 거의 없으나, 수소화염과 메탄-수소화염에 대해서는 H₂ 확산율을 억제 한 경우가 나머지와 상이한 것을 볼 수 있다. 이것은 Fig. 3(b)에서 더 명확히 나타나는데 모든 경우에 있어서 H의 확산을 억제한 경우는 M-A의 경우와 거의 차이가 없는 반면 H₂의 확산을 억제 한 경우는 나머지 두 경우와 최대스칼라소산율이 상이한 것을 알 수 있다. 한편 Fig. 1과 비교하면 같은 메탄몰분율에 대해 H₂의 확산을 억제한 경우가 다른 경우와 비교하여 화염온도가 낮은 것은 Fig. 3(b)에 보인 바와 같이 스칼라소산율이 크기 때문인 것은 이해될 수 있다. 그러나 같은 메탄몰분율에 대해 H 확산율을 억제한 경우가 M-A의 경우인 경우와 비교하여 스칼라소산율이 차이가 거의 없음에도 불구하고 화염온도가 더 큰 것은 이해되지 않는다. 결국 이것은 H와 H₂의 선호확산에 따른 화염온도와 같은 화염구조는 스칼라소산율과 같은 물리적 과정으로는 설명되지 않으며 화학적 효과에 의해 설명되어야 함을 암시하고 있다. 따라서 모든 화학반응에 관여를 하게 되는 H, O, OH 라디칼들의 변화를 살펴보면 화염구조 변화에 대한 이러한 화학적 효과를 명확히 할 수 있을 것이다.

Fig. 4는 메탄-수소 확산화염의 전체화염신장률에서 157s⁻¹인 경우 세 가지 확산모델들을 사용한 메탄몰분율에 따른 (a) H, (b) O, (c) OH 라디칼들의 최대몰분율 변화를 나타낸다. 모든 화염조건들에서 이러한 라디칼들의 최대몰분율은 각각의 평형 값을 초과하고 있다. 이러한 초과평형 현상은 반응대 안에서 이체(two body)라디칼형성 반응의 결과로서 나타나는 것으로 알려져 있다. H₂의 확산을 억제한 경우의 라디칼들의 최대몰분율 거동을 제외하고, 라디칼들의 최대몰분율은 메탄몰분율의 증가에 따라 감소한다. 또한, 전체적으로 라디칼들의 최대몰분율의 거동은 Fig. 1에 제시된 최대화염온도 거동과 경향이 유사하게 나

타난다. 즉, 혼합기평균 확산모델을 사용한 H, O, OH의 최대몰분율은 H₂의 확산을 억제한 경우보다 크고, H의 확산을 억제한 경우보다 작게 나타

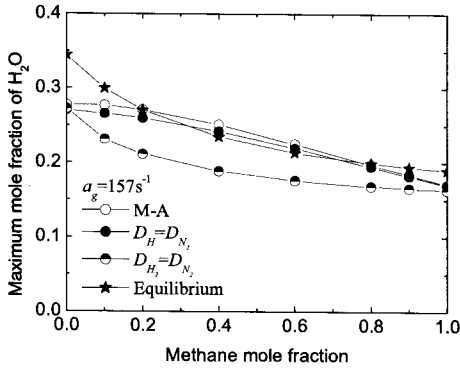


Fig. 5 Variations of maximum H₂O mole fractions with methane mole fraction for three species diffusion models at the global strain rate of 157s⁻¹

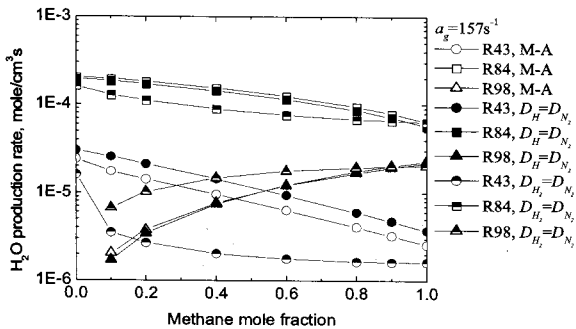


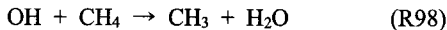
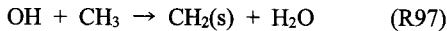
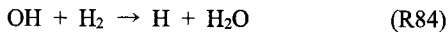
Fig. 6 Variations of maximum production and destruction rates of H₂O for importantly contributing reaction steps with methane mole fraction for three species diffusion models at the global strain rate of 157s⁻¹

난다. 한편, CO/H₂/N₂ 대항류확산화염에 관한 기존⁽¹⁷⁾에서 화염스트레치가 증가할 때 H, O, OH의 최대몰분율 증가하다가 화염 소화한계 근처에서 급격히 감소한 후 화염 소화가 발생함을 보인바 있다. 즉, 화염스트레치의 증가로 H, O, OH 라디칼들의 증가하게 되고, 전체반응률에 대한 척도를 나타내는 체인분기반응인 H+O₂→O+OH의 반응률 증가로 전체 반응률은 증가하게 되어 이것이 최대화염온도의 감소를 보완하게 되는 것으로 이해되었다. 따라서 Drake와 Blint⁽¹⁷⁾는 화염 소화

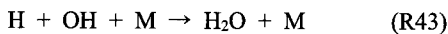
기구는 화염소화한계 근처에서 이러한 라디칼들의 빠른 감소와 화염온도 감소로 화염강도가 급격히 떨어질 때 발생하는 것으로 이해하였다. Figs. 1, 2, 3에 나타나듯이 H의 확산율을 억제한 경우와 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 스칼라 소산율이 거의 일치하고 있음에도 불구하고 H의 확산율을 억제한 경우의 최대화염온도와 H, O, OH 라디칼들의 최대몰분율이 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 더 크다. 이것은 H, O, OH 라디칼들이 증가함에 따라 체인분기반응인 H+O₂→O+OH의 반응률 증가하여 결국 화염온도를 증가시킨 것으로 이해할 수 있다. 결국 화학적 효과에 의해 화염 온도가 증가한 것으로 이해된다. 반면에 H₂의 확산을 억제한 경우의 최대화염온도와 이러한 라디칼들의 최대몰분율들이 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 작다. 또한 H₂의 확산을 억제한 경우의 스칼라소산율이 H의 확산을 억제한 경우와 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 훨씬 크다는 것을 알 수 있다. 결국 H₂의 확산을 억제한 경우 화학적 효과에 의해 체인분기반응인 H+O₂→O+OH의 반응률을 감소시키고 첨가적으로 스칼라 소산율이 훨씬 큰 물리적 효과에 의해 화염온도 역시 감소한 것으로 이해된다. 요약한다면 H의 확산율을 억제하는 것은 H, O, OH의 몰분율을 증가시켜 화염온도를 증가시키게 되며, 이것은 거꾸로 말한다면 반응대 안으로 H의 선호확산이 H, O, OH의 몰분율을 유발하고 결국 화학적 효과를 통하여 화염온도를 억제한다는 것을 의미한다. 반면에 반응대 안으로 H₂의 선호확산이 물리적으로는 스칼라소산율을 감소시켜 물리적 효과에 의해 화염온도를 증가시키고 H, O, OH의 최대몰분율을 증가시켜 화학적 효과를 통해 화염온도를 상승시킨다는 것을 의미한다. 결국 본연구에서와 같은 확산화염으로부터의 결과는 과농탄화수소에 혼합화염에 대한 두 가지 상반된 결과들에 대해 Liu와 Gülder⁽¹⁵⁾ 결과와는 반대의 경향을 Zamashchikov 등⁽¹⁶⁾의 결과와는 경향이 일치하는 것으로 나타난다.

Fig. 5는 메탄-수소 확산화염에 대해 157s⁻¹의 전체화염신장률인 경우 세 가지 확산모델들을 사용한 메탄몰분율에 따른 H₂O 최대몰분율의 변화를 나타낸다. 수소화염과 메탄화염에 있어서 최대 H₂O 몰분율은 평형값 이하로 나타난다. 그러

나 메탄-수소 화염에서는 혼합기평균 확산모델과 H의 확산을 억제한 경우는 메탄몰분율이 0.4와 0.6인 경우 초과평형 상태를 나타내고 다른 조건들에서는 평형값보다 낮게 나타난다. 그리고 H₂의 확산을 억제한 경우는 모든 조건에서 평형값보다 낮게 나타난다. 평형값보다 낮게 나타나는 이유는 앞서 논한 바와 같이 화염 스트레치가 적절히 높기 때문이다. 그러나 메탄몰분율이 0.4와 0.6인 경우 초과평형 상태를 나타내는 이유에 대해서는 잘 이해되지 않는다. 더우기 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우의 H₂O 최대몰분율이 H의 확산을 억제한 경우에 비해 거의 일치하거나 크고, H₂의 확산을 억제한 경우에 비해 낮게 나타나는 것 역시 스칼라소산율과 같은 물리적 효과로는 이해되지 않는다. 이러한 것들을 명확히 이해하기 위해서는 H₂O 생성에 중요하게 기여하는 반응단계들에 대한 상세한 조사가 요구된다. 현재의 연구에서 순수 메탄화염에서 H₂O 생성에 중요하게 기여하는 반응단계는 다음과 같다.



순수 수소화염에서는 (R84)에 첨가해서 (R43)이 중요하게 H₂O 생성에 기여하게 된다.



여기서 반응번호는 GRI v-3.0의 반응번호의 순서를 나타낸다. 두 가지를 조합해서 판단해보면 4가지 반응 단계들이 메탄-수소화염에 대해 H₂O 생성에 대해 중요하게 기여할 것으로 판단되며 현재의 수치해석 결과에서 언급된 4가지 반응단계들이 중요하게 나타났다.

Fig. 6은 메탄-수소 확산화염에 대해 157s⁻¹의 전체화염신장률인 경우 세 가지 확산모델들을 사용한 H₂O 생성에 중요하게 기여하는 반응단계들의 H₂O 생성률을 나타낸다. Fig. 6에서 H₂O 생성에 관한 (R97)의 반응 기여도는 (R98)과 유사한 경향을 나타내고 H₂O 생성에 대한 상대적 기여도가 적기 때문에 그래프의 복잡성을 피하기 생략하였다. Fig. 6에 나타난 바와 같이 H₂O 생성에 대한 (R84)의 기여도가 가장 크다는 것을 알 수

있다. 메탄몰분율이 증가함에 따라 (R43)과 (R84)의 반응 기여도는 줄어들고 (R98)의 기여도는 증가한다. 결국 순수 메탄화염에 대해서는 (R43)의 기여는 무시할만하고 순수 수소화염에서는 (R97)과 (R98)의 반응 기여도는 영이 된다. 그러나 메탄몰분율 증가에 따라 (R84)는 모든 경우에 대해 감소하나 메탄몰분율이 0.4와 0.6인 경우에는 H₂O 생성에 대한 (R43), (R97), (R98)의 반응 기여도는 중요해진다는 것을 알 수 있다. 결과적으로 이것이 Fig. 5에서 나타난 바와 같이 혼합기평균 확산 모델을 사용한 경우와 H의 확산을 억제한 경우에 있어서 메탄몰분율이 0.4와 0.6에 대해 최대 H₂O 몰분율이 초과평형 상태를 나타내는 직접적인 원인이 된다는 것을 알 수 있다. 한편 Fig. 5에서 H의 확산을 억제한 경우의 H₂O 몰분율이 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 거의 일치하거나 크게 나타났고, H₂의 확산을 억제한 경우에 비해 작게 나타났다. 이것은 (R43), (R97), (R98)의 H₂O 생성률들의 세 가지 확산 모델들 사이의 차이가 (R84)의 세 가지 확산모델들 사이의 차이에 비해 훨씬 작기 때문에 결국 (R84)의 경향을 따르기 때문이다.

4. 결론

순수 수소화염, 순수 메탄화염을 포함하는 메탄-수소 확산화염에서 화염 구조에 있어서 H₂와 H의 반응대로의 선호확산 효과에 관한 수치해석을 상세 반응 기구를 사용하여 수행하였다. 이것을 위해 혼합기평균 확산모델, H의 확산을 억제하는 모델, H₂의 확산을 억제하는 모델을 사용하여 화염구조를 비교하였고 다음과 같은 결론을 얻었다.

H의 확산을 억제하는 경우는 화염온도를 증가시키고 H₂의 확산을 억제하는 경우는 화염온도를 감소시킨다. 이것은 스칼라소산율과 같은 물리적 효과에 의해 설명이 되지 않는다. H, O, OH 라디칼의 최대몰분율의 경향은 최대화염온도의 경향과 유사하게 나타난다. 결국 H의 확산을 억제하는 경우 스칼라 소산율은 거의 변화가 없는 반면 H 라디칼의 증가가 전체 반응물의 척도인 체인분기 반응 H+O₂→O+OH의 반응률을 증가시키고 이것이 화염온도 증가의 직접적 원인을 알 수 있어 화학적 효과가 화염온도 증가의 원인을 보

여준다. 반면 H₂의 확산을 억제하는 경우 스칼라 소산율의 증가에 의한 물리적 효과가 화염온도를 감소시키고, H 라디칼의 감소에 따른 체인분기반응인 H+O₂→O+OH의 반응률을 감소시켜 전체 반응률 감소를 유발하고 이러한 화학적 효과에 의해 화염온도가 감소한다는 것을 알 수 있다. 메탄-수소 확산화염에 관한 현재의 연구결과들은 과농 탄화수소 예혼합화염들에 대한 기존 연구들과 비교한다면 두 가지 상반된 결과들에 대해 Liu와 Gülder⁽¹⁵⁾ 결과와는 반대의 경향을 Zamashchikov 등⁽¹⁶⁾의 결과와는 경향이 일치하는 것으로 나타난다.

한편 H₂와 H의 선호확산을 통한 화염구조에 미치는 화학적 효과의 중요성은 최대 H₂O 몰분율 거동과 H₂O 생성에 중요하게 기여하는 반응 단계들에 대한 조사에서도 확인된다.

후 기

본 연구는 2007년도 한국기계연구원 기본과제의 위탁연구로 수행되었고 이에 감사드립니다.

참고문헌

(1) Yu, G., Law, C. K. and Wu, C. K., 1986, "Laminar Flame Speeds of Hydrocarbon+Air Mixtures with Hydrogen Addition," *Combust. Flame* Vol 63, pp. 339~347.
 (2) Yamaoka, I. and Tsuji, H., 1992, "An Anomalous Behavior of Methane-air and Methane-hydrogen-air Flames with Nitrogen in a Stagnation Flow," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 24, pp. 145~512.
 (3) Bade Shresha, S. O. and Karim, G. A., 1999, "Hydrogen as an Additive to Methane for Spark Ignition Engine Applications," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 24, pp. 577~586.
 (4) Bauer, C. G. and Forest, T. W., 2001, "Effect of Hydrogen Addition on the Performance of Methane-fueled Vehicles. Part I: Effect on SI Engine Performance," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 26, pp. 55~70.
 (5) Ren, J-Y., Qin, W., Egolfopoulos, F. N. and

Tsotsis, T. T., 2001, "Methane Reforming and its Potential Effect on the Efficiency and Pollutant Emissions of Lean Methane-air Combustion," *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 56, pp. 1541~1549.
 (6) Ren, J-Y., Qin, W., Egolfopoulos, F. N. and Tsotsis, T. T., 2001, "Strain-rate Effects on Hydrogen-enriched Lean Premixed Combustion," *Combust. Flame*, Vol. 124, pp. 717-20.
 (7) Schefer, R. W., Wicksall, M., and Agrawal, A. K., 2002, "Combustion of Hydrogen-enriched Methane in a Premixed Swirl-stabilized Burner," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29, pp. 843~852.
 (8) Halter, F., Chauveau, C., Djebaili-Chaumeix, N., and Gokalp, I., 2005, "Characterization of the Effects of Pressure and Hydrogen Concentration on Laminar Burning Velocities of Methane-hydrogen-air Mixtures," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 30, pp. 201~208.
 (9) Dagaut, P. and Nicolle, A., 2005, "Experimental and Detailed Kinetic Modeling of Hydrogen-enriched Natural Gas Blend Oxidation Over Extended Temperature and Equivalence Ratio Ranges," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 30, pp. 2631~2638.
 (10) Di Sarli, V. and Di Benedetto, A., 2007, "Laminar Burning Velocity of Hydrogen-methane/Air Premixed Flames," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 32, pp. 637~646
 (11) Law, C. K. and Kwon, O. C., 2004, "Effects of Hydrocarbon Substitution on Atmospheric Hydrogen-air Flame Propagation," *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 29, pp. 867~879.
 (12) Park, J., Keel, S. I., Yun, J. H. and Kim, T. K., 2007, "Effects of Addition of Electrolysis Products in Methane-air Diffusion Flames," *Int. J. Hydrogen Energy*, to be Appeared.
 (13) Liu, F., Guo, H., Smallwood, G. J. and Gülder, Ö., 2002, "Numerical Study of the Superadiabatic Flame Temperature Phenomenon in Hydrocarbon Premixed Flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29: pp. 1543~1550.
 (14) Ruf, B., Behrendt, F., Deutchmann, O., Kleditzsch, S. and Warnatz, J., 2000, "Modeling of Chemical Deposition of Diamond Films from Acetylene-oxygen Flames," *Proc. Combust. Inst.*

- Vol. 28, pp. 1455~1461.
- (15) Liu, F. and Gülder, Ö., 2005, "Effects of H₂ and H Preferential Diffusion and Unity Lewis Number on Superadiabatic Flame Temperatures in Rich Premixed Methane Flames," *Combust. Flame* Vol. 143, pp. 264~281.
- (16) Zamashchikov, V. V., Namyatov, I. G., Bunev, V. A. and Babkin V. S., 2004, "On the Nature of Superadiabatic Emperatures in Premixed Rich Hydrocarbon Flames," *Combust. Explosion Shock Waves*, Vol. 40: 32-5.
- (17) Drake, M. C. and Blint, R. J., 1988, "Structure of Laminar Opposed-flow Diffusion Flames with CO/H₂/N₂ Fuel," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 61, pp. 187~224.
- (18) Wang, P., Hu, S. and Pitz, R., 2007, "Numerical Investigation of the Curvature Effects on Diffusion Flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, pp. 989~996.
- (19) Takagi, T., Yoshikawa, Y., Komiyama, M. and Kinoshita, S., 1996, "Studies on Strained Non-premixed Flames Affected by Flame Curvature and Preferential Diffusion," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 26, pp. 1103~1110.
- (20) Lutz, A. E., Kee, R. J., Grcar, J. F. and Rupley, F. M., 1997, "A Fortran Program for Computing Opposed-flow Diffusion Flames," *Sandia National Laboratories Report*, SAND 96-8243.
- (21) Kee, R. J., Rupley, F. M., and Miller, J. A., 1989, "Chemkin II: a Fortran Chemical Kinetics Package for Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics," *Sandia National Laboratories Report*, SAND 89-8009B.
- (22) Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., 1994, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-phase Multi-component Transport," *Sandia National Laboratories Report*, SAND86-8246.
- (23) Ju, Y., Guo, H., Maruta, K. and Liu, F., 1997, "On the Extinction Limit and Flammability Limit Non-adiabatic Stretched Methane-air Premixed Flames," *J. Fluid Mech.*, Vol. 342, pp. 315~334.
- (24) Chellian, H. K., Law, C. K., Ueda, T., Smooke, M. D. and Williams, F. A., 1990, "An Experimental and Theoretical Investigation of the Dilution, Pressure and Flow-field Effects on the Extinction Condition of Methane-air-nitrogen Diffusion Flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 23, p. 503.
- (25) Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, N. W., Eiteneer, M. B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Dong, S., Gardiner, W. C., Lissianski, -V. V. Jr. and Qin, Z. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- (26) Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., 1984, "Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, pp. 1~57.
- (27) Bilger, R. W., 1988, "The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 22, pp. 475~488.