

H₂/CO/CO₂ 합성가스화염에서 선호확산 효과에 관한 연구

김태권† · 박정* · 하지수**

(원고접수일 : 2008년 6월 19일, 원고수정일 : 2008년 7월 23일, 심사완료일 : 2008년 7월 25일)

A Study on Preferential Diffusion Effects in H₂/CO/CO₂ Syn-gas Flames

Tae-Kwon Kim† · Jeong Park* · Ji-Soo Ha**

Abstract : Numerical study is conducted to grasp preferential diffusion effects on flame characteristics in H₂/CO syn-gas diffusion flames diluted with CO₂. The models of Sun et al. and David et al., which have been well known to be best-fitted for H₂/CO synthetic mixture flames, are evaluated for H₂/CO synthetic mixture flames diluted with CO₂. Comparison of flame structures with mixture-averaged species diffusion and suppression of the diffusivities of H₂ and H was made. 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. Importantly-contributing reaction steps to heat release rate are also compared for the three species diffusion models in H₂/CO/CO₂ flames with and without CO₂ dilution.

Key words : CO₂ dilution(CO₂ 희석), Diffusivity(확산계수), Heat release rate(열방출율), Preferential diffusion(선호확산)

1. 서 론

석유 고갈, 에너지 소비의 급격한 증가, 그리고 기후 변화의 심각성에 따라 수소 경제화 사회로의 전환이 시급한 시점에 도달했음은 모두가 인지하는 바이다. 그러나 탄화수소 기반 사회에서 한 번에 수소기반 사회로 전환하기에는 안정성과 과도한 투자비 등 겪어야 할 난관이 많다. 매장량이 200년 이상인 석탄, 폐기물, 바이오 매스 등의 가스화 혹은 열분해로부터 생산되는 H₂/CO를 주성분으로 하는

합성가스가 미국의 FUTUREGEN 등 선진국에서는 대안으로 제시되고 있다. 이러한 맥락에서 많은 연구들이 H₂/CO 합성가스에 대한 화염전파속도, 점화 등 기초연구들이 2000년 들어서서 활발히 진행되고 있다^{[1]-[8]}.

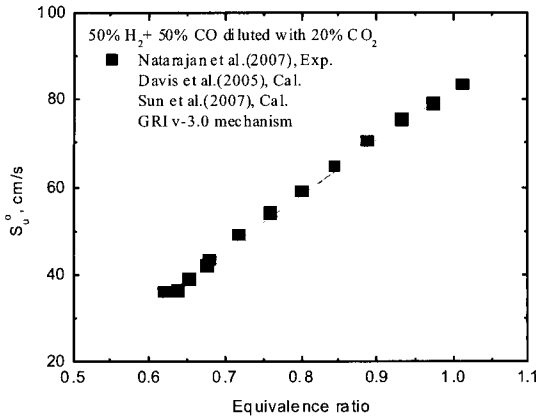
한편, 합성가스의 주성분은 H₂와 CO이지만 연료원의 종류에 따라 가스화 혹은 열분해 과정으로부터 N₂, CO₂, H₂O 등이 포함되며 이러한 희석제들은 버너 설계 혹은 화염 특성을 이해하는데 장애요인이기도 하다. 이러한 점들은 메탄 화염에서 첨

† 교신저자(계명대학교 기계자동차공학부, E-mail:tkkim@kmu.ac.kr, Tel:053)580-5100)

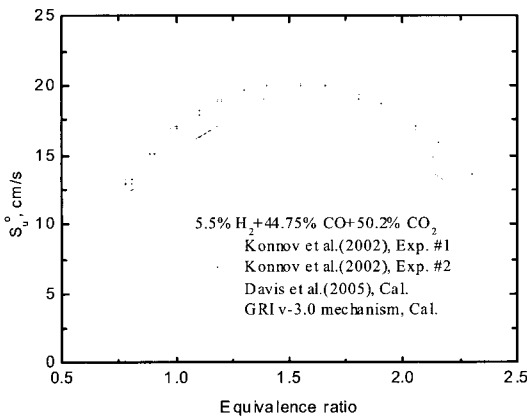
* 부경대학교 기계공학부

** 계명대학교 에너지환경공학과

가되는 CO₂와 H₂O의 화학적 효과가 화염 특성에 상당히 영향을 준다는 보고들로부터 이해할 수 있다⁽⁹⁾⁻⁽¹⁰⁾.



(a)



(b)

Fig. 1 Comparison of reliable measurements of laminar flame speeds with numerical results adopting several reaction mechanisms for (a) 50% H₂/50% CO flame diluted with 20% CO₂, and (b) 5.5% H₂/44.75% CO/50.2% CO₂ flame.

한편, H₂와 H의 선호확산에 대해서는 많은 결과들이 제시되어 왔으나 두 가지 다른 관점에 의해 여전히 명확하지는 않다. 한 그룹에서는 초과단열화염온도가 과농 탄화수소 예혼합화염에서만 나타나고⁽¹¹⁾, 그 원천적 성질은 화학적 효과에 기인한다고 주장하고 있다⁽¹¹⁻¹³⁾. 반면 다른 연구그룹에서는 그

원인을 반응대로부터 예열지역으로 H₂와 H의 선호 확산에 기인하는 것으로 이해하고 있다⁽¹⁴⁾. 이 부분에 대한 답은 아직 명쾌하게 주어지지 않고 있고 대부분은 주로 위에 제시한 예혼합 화염들에서 주로 이루어져 왔다. Drake와 Blint는 CO/H₂/N₂ 층류확산화염에서 선호확산, 연료-산화제의 결합, 라디칼들의 초과평형 등에 대한 화염스트레치 효과를 연구하였다⁽¹⁵⁾. 원통형확산화염에서 양의 화염굴곡은 선호확산을 강화하고 음의 화염굴곡이 선호확산을 약화시키며 이러한 효과들이 화염반경에 대한 화염두께의 비에 비례함을 보인 바 있다⁽¹⁶⁾. 그러나 확산화염에서 수행된 이러한 연구자들은 H₂와 H의 선호확산을 통한 화학반응 효과의 중요성에 대한 인식하에 수행되지 않았고, 확산화염에서 H₂와 H의 선호확산에 관한 화학반응 효과의 중요성에 대한 인식은 최근 소수의 연구들이 보고되고 있다⁽¹⁷⁾. 따라서 더 많은 연구들이 선호 확산과 관련하여 확산화염에서 평가되어야 할 것으로 판단된다.

본 연구에서는 H₂/CO/CO₂ 합성 가스 화염에서 연료 조성 변화와 스트레인을 변화에 따른 화염특성을 분석하는 수치해석 연구를 수행한다. 혼합평균된 화학종 확산을 기반으로 한 경우와 H₂와 H의 확산을 억제한 경우의 화염 특성의 비교 연구가 수행된다. 특별한 관심은 세가지의 확산 모델들에 따른 주요 화염 구조 변화가 스칼라 소산율과 같은 물리변수에 민감한지 화학적 효과에 의해 민감한지를 통해 선호확산이 나타나는 원인이 무엇인지 평가하고자 한다.

2. 수치해석 기법

층류 대향류확산화염은 서로 반대로 충돌하는 사이에서 형성되고 정체점 근처에서 수학적 묘사는 1차원적 상사성을 갖는다. 이와같은 상사성에 근거한 1차원 지배 방정식의 해를 얻기 위해 Kee 등⁽¹⁸⁾에 의해 개발되어 Lutz 등⁽¹⁹⁾에 의해 확장된 Oppdif Code를 수정하여 사용하였다. 1차원 상사성에 근거한 지배방정식은 다음과 같다.

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \tag{1}$$

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0 \quad (2)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{w}_k W_k = 0 \quad (3)$$

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} (\lambda \frac{dT}{dx}) + \frac{\rho}{c_p} \sum_{k=1}^K c_{p_k} V_k Y_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k \dot{w}_k - \frac{\dot{q}_r}{c_p} = 0 \quad (4)$$

여기서 $G(x) = -\frac{\rho v}{r}$, $F(x) = \frac{\rho u}{2}$ 그리고 $H = \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r}$ 는 상수이고 문제의 특성값이 된다. ρ 는 밀도, Y_k 는 화학종 k 의 질량분율, T 는 온도 그리고 λ 는 혼합기의 열전도도이다. 압력 특성값은 해의 일부분으로서 계산된다.

복사 열손실은 주로 CO₂, H₂O, CO, CH₄에 의해 나타나게 되고 광학적 박모형을 사용하였다^[20]. 열화학적 물성치와 전달 물성치를 얻기 위해 Chemkin 코드^[21]와 Tranfit 코드^[22]를 사용하였다. 적응격자(adaptive grid)는 온도의 일차 및 이차 도함수의 가중합수에 따라 재분배된다. 이러한 대수 방정식들은 감쇄뉴튼 알고리즘(damped Newton algorithm)에 의해 해를 구하게 된다. 이러한 알고리즘의 정상상태 해의 수렴이 실패하게 되면 비정상 상태의 방정식을 풀어 해를 안정화시킨 후 다시 해를 수렴시키는 방법을 취하게 된다. 이에 대한 상세한 알고리즘은 Kee 등^[18]에 의해 자세히 묘사되어 있다.

버너 간 간격은 2.0cm 이고 화염대는 연료측과 산화제측 모멘텀 유속(momentum flux)이 균형을 이루는 곳에서 형성되며 전체 신장율(global strain rate)은 다음과 같이 표현된다^[23].

$$a = \frac{2(-u_O)}{L} \left[1 + \frac{u_F}{(-u_O)} \sqrt{\frac{\rho_F}{\rho_O}} \right] \quad (5)$$

F와 O는 연료와 산화제를 나타내고, 분위기 압력은 1기압이고 연료와 산화제측 온도는 300K이다.

Fig. 1은 기존실험결과들과 Davis 등^[6], Sun 등^[8], 그리고 GRI v-3.0 모델을 사용한 수치해석 결과를 비교하여 나타내었다. Davis 등과 Sun 등의 모델은 CO₂ 희석이 없는 H₂/CO 합성가스화염에 대해 실험 결과들을 잘 예측하는 것으로 알려져 있다. Fig. 1a에 나타난 바와 같이 CO₂로 희석한 경우에 Davis 등의 모델과 GRI v-3.0은 Natarajan 등^[5]의 희박연료 조건에서 수행된 화염전파속도에 관한 실험 결과를 잘 예측하고 있으나 Sun 등의 모델은 화염전파속도를 높게 예측하는 것을 알 수 있다. 따라서 Sun 등의 모델은 CO₂로 희석한 경우에 있어서는 개선의 여지가 있는 것으로 판단된다. Fig. 1b에 나타나듯이 CO₂가 과다하게 첨가된 경우에는 Davis 등의 모델보다는 GRI v-3.0 반응 기구가 화염전파속도를 잘 예측하고 있는 것을 알 수 있다. 또한, Davis 등의 모델과 Sun 등의 모델은 NO_x 반응 기구가 아직 확장

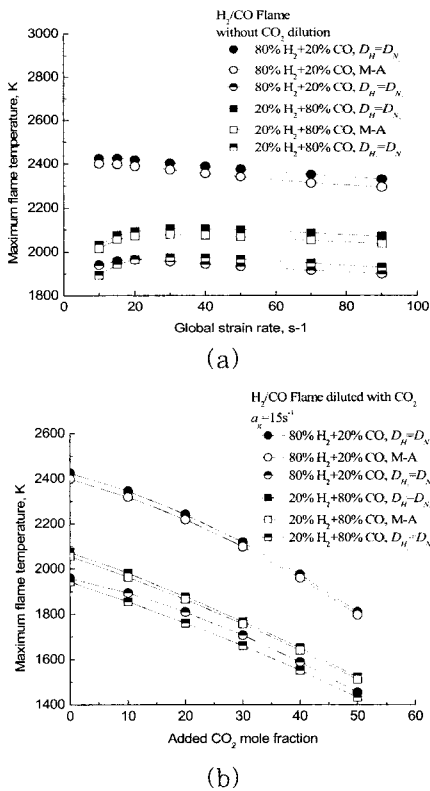


Fig. 2 Variations of maximum flame temperatures with (a) global strain rate and (b) added CO₂ mole fraction for H₂/CO flame for three diffusion model.

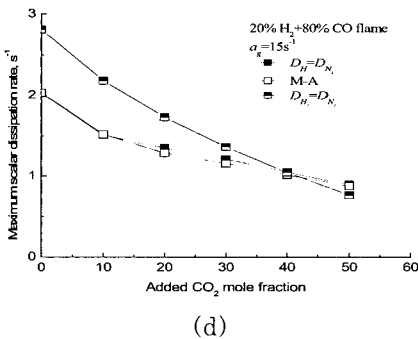
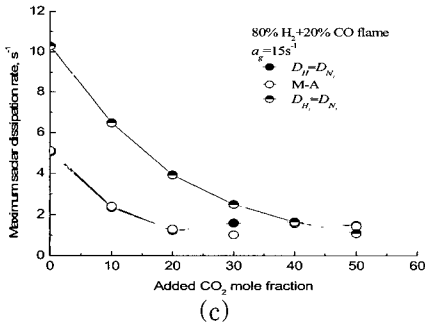
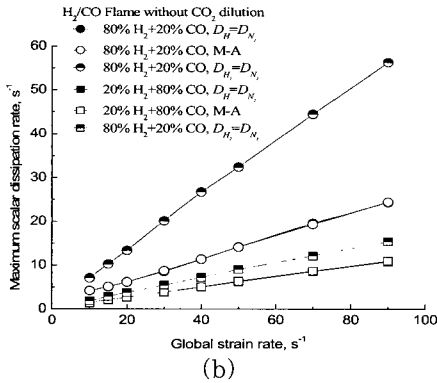
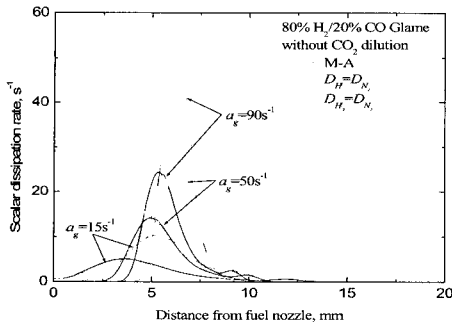


Fig. 3 (a) Spatial distribution of scalar dissipation rate and maximum scalar dissipation rates with (b) global strain rate, and added CO₂ mole fraction for (c) 80% H₂/20% CO and (d) 20% H₂/80% CO.

되어 있지 않기 때문에 본 연구에서는 GRI v-3.0 반응 기구를 채택하였다.

화염 구조에 있어서 H₂와 H의 선호확산효과를 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. 2는 (a) 전체화염신장율과 (b) 첨가되는 CO₂ 몰분율에 따른 최대화염온도의 변화를 나타낸다. Fig. 2에서 M-A는 혼합기 평균 확산율을 사용한 경우를 의미한다. 전체화염신장율이 증가함에 따라 S-곡선 상의 거동으로부터 잘 알려져 있듯이 전체적으로 화염온도는 감소한다. Fig. 2에서 나타내듯이 같은 전체화염신장율에 대해서 혼합기평균 확산모델을 사용하는 경우의 화염온도는 H₂ 확산율을 억제하는 경우보다 높고 H의 확산율을 억제하는 경우보다는 낮게 나타난다. 이러한 경향은 CO₂를 첨가하는 경우에도 마찬가지로 경향을 나타낸다. 한편 일반적으로 화염온도는 스킨라소산율의 증가에 따라 감소하는 경향을 나타낸다. Fig. 3을 살펴보면 H₂의 확산율을 억제한 경우에는 스킨라소산율이 크기 때문에 Fig. 2와 같이 화염온도가 적게 나타난 것은 이해가 된다. 그러나 H의 확산율을 억제한 경우 혼합기 평균확산모델을 사용한 경우 거의 차이가 없음에도 불구하고 Fig. 2에서 H의 확산율을 억제한 경우에 화염온도가 더 크게 나타난 것은 스킨라소산율과 화염온도의 관계로부터의 물리적 과정으로는 설명되지 않는다. 결국 이것은 H와 H₂의 선호확산에 따른 화염온도와 같은 화염구조는 스

칼라소산율과 같은 물리적 과정으로는 설명되지 않으며 화학적 효과에 의해 설명되어야 함을 암시하고 있다. 따라서 모든 화학반응에 관여를 하게 되는 체인운반 라디칼의 대표적인 라디칼로서 H 라디칼들의 변화를 살펴보면 화염구조 변화에 대한 이러한 화학적 효과를 명확히 할 수 있을 것이다.

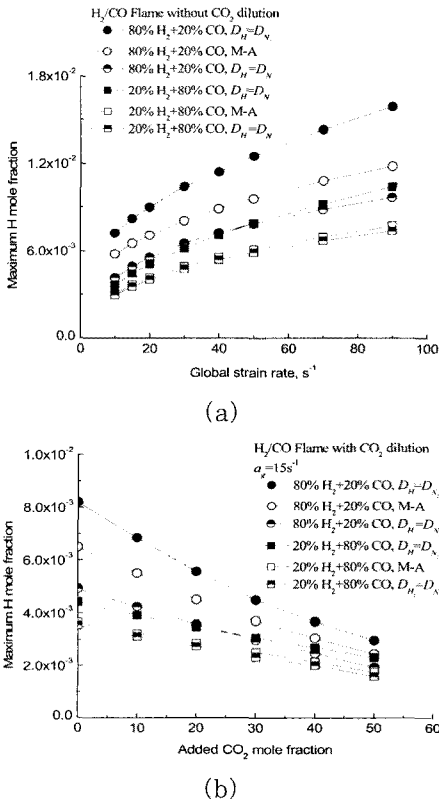
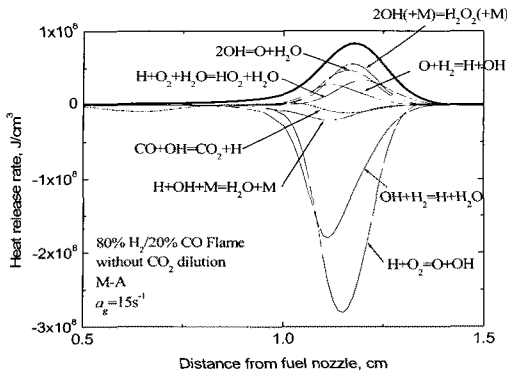


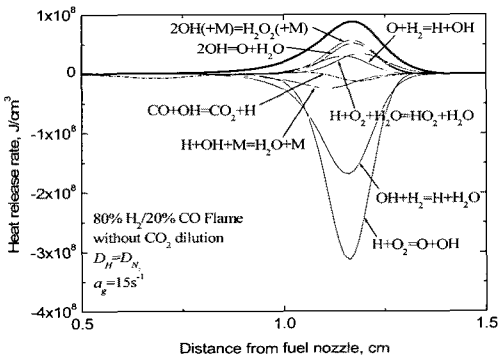
Fig. 4 Variations of maximum H mole fractions with (a) global strain rate and (b) added CO₂ mole fraction for three.

Fig. 4는 (a) 전체화염신장율 그리고 (b) 첨가되는 CO₂ 물분율에 따른 최대 H 물분율의 변화를 나타낸다. CO/H₂/N₂ 대향류화산화염에 관한 기존 연구^[15]에서 화염스트레치가 증가할 때 H, O, OH의 최대물분율이 증가하다가 화염 소화한계 근처에서 급격히 감소한 후 화염 소화가 발생함을 보인다. 즉, 화염스트레치의 증가로 H, O, OH 라디칼들의 증가하게 되고, 전체반응율에 대한 척

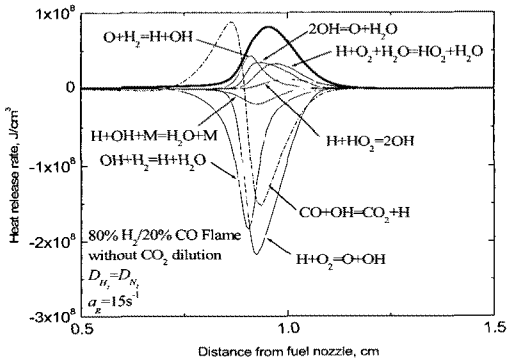
도를 나타내는 체인분기반응인 H+O₂→O+OH의 반응율 증가로 전체 반응율은 증가하게 되어 이것이 최대화염온도의 감소를 보완하게 되는 것으로 이해되었다. 따라서 Drake와 Blint^[15]는 화염 소화기구는 화염소화한계 근처에서 이러한 라디칼들의 빠른 감소와 화염온도 감소로 화염강도가 급격히 떨어질 때 발생하는 것으로 이해하였다. 따라서 Fig. 4에서 H 물분율의 거동은 결국 Fig. 2의 최대화염온도 거동과 유사한 경향을 나타낸다면 결국 이것이 H와 H₂의 선택화산 효과가 물리적 효과가 아닌 화학적 효과에 기인한다는 증거가 된다. Fig. 4a에서 알 수 있는 바와 같이 전체화염신장율에 따른 H의 확산율을 억제한 경우의 최대 H 물분율은 혼합기평균화산모델을 사용한 경우에 비해 높게 나타나고 H₂의 확산율을 억제한 경우의 최대 H 물분율은 혼합기평균화산모델을 사용한 경우에 비해 낮게 나타나 Fig. 2a의 화염온도 거동과 경향이 같다는 것을 알 수 있다. 또한 이러한 경향은 Fig. 4b에 나타난 바와 같이 CO₂를 첨가함에 따라 나타난 결과들도 동일한 경향을 나타내 결국 Fig. 2b와 같은 최대화염온도 경향을 나타내게 된다는 것을 알 수 있다. 요약한다면 H의 확산율을 억제하는 것은 H, O, OH의 물분율을 증가시켜 화염온도를 증가시키게 되며, 이것은 거꾸로 말한다면 반응대 안으로 H의 선택화산이 H, O, OH의 물분율을 유발하고 결국 화학적 효과를 통하여 화염온도를 억제한다는 것을 의미한다. 반면에 반응대 안으로 H₂의 선택화산이 물리적으로는 스칼라 소산율을 감소시켜 물리적 효과에 의해 화염온도를 증가시키고 H, O, OH의 최대물분율을 증가시켜 화학적 효과를 통해 화염온도를 상승시킨다는 것을 의미한다. 결국 본 연구에서와 같이 확산화염으로부터의 결과는 과농탄화수소 예혼합화염에 대한 두가지 상반된 결과들에 대해 Liu와 Gülder^[13] 결과와는 반대의 경향을 Zamashchikov 등^[14]의 결과와는 경향이 일치하는 것으로 나타난다. 결국 이러한 선택화산 효과의 주 원인이 화학적 효과에 의해 우세하게 지배를 받는다면 열방출율에 있어서 중요하게 기여하는 반응들 역시 세가지 확산 모델에 따라서도 상이하게 나타나야 할 것이다.



(a)



(b)

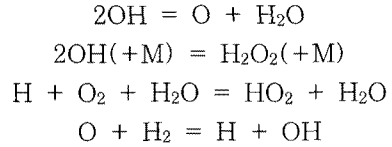


(c)

Fig. 5 Importantly contributing reaction steps to heat release rate with (a) mixture-averaged model, (b) $D_H = D_{N_2}$, and (c) $D_{H_2} = D_{N_2}$ at the global strain rate of 15s⁻¹ for 80% H₂/20% CO.

Fig. 5는 CO₂로 희석하지 않은 80% H₂/20% CO 화염에서 열방출율에 있어서 중요하게 기여하

는 반응들을 나타낸다. Fig. 5에서 굵은 선으로 표시된 곡선은 전체 열방출율의 분포를 나타낸다. Fig. 5에 나타난 바와 같이 발열반응에서 중요하게 기여하는 반응들은 다음과 같다.



흡열반응에 있어서 중요한 반응들은 다음과 같다.

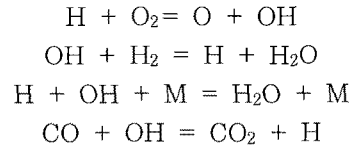
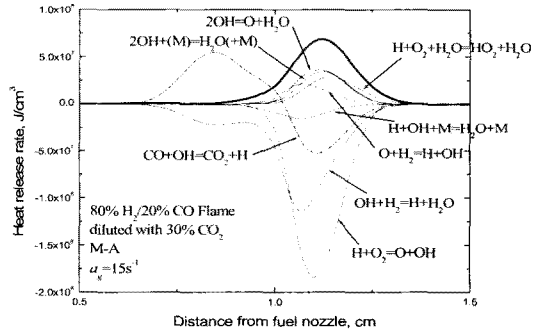


Fig. 5a에 나타난 바와 같이 혼합기평균확산모델을 사용한 경우 가장 중요한 흡열반응들은 $H + O_2 = O + OH$ 와 $OH + H_2 = H + H_2O$ 이다. Fig. 5b에 나타난 바와 같이 H의 확산을 억제한 경우는 발열반응에서는 크게 차이가 나타나지 않지만 $H + O_2 = O + OH$ 와 $OH + H_2 = H + H_2O$ 의 흡열반응의 기여가 크게 나타남을 알 수 있고 특히 전체 반응율의 척도를 나타내는 $H + O_2 = O + OH$ 반응의 열흡수율이 커짐에 따라 반응을 증가로 Fig. 2에서와 같이 혼합기평균확산모델을 사용한 경우에 비해 H의 확산을 억제한 경우에 화염 온도가 높게 나타나는 원인을 알 수 있다. Fig. 5c와 같이 H₂의 확산을 억제한 경우 혼합기평균확산모델을 사용한 경우에 비해 $H + O_2 = O + OH$ 와 $OH + H_2 = H + H_2O$ 반응의 기여가 작아지는 것을 알 수 있고 또한 $H + O_2 = O + OH$ 반응의 열흡수율이 작아짐에 따라 혼합기평균확산모델을 사용한 경우에 비해 Fig. 2와 같이 화염 온도가 작아지게 됨을 알 수 있다. 한편, H₂의 확산을 억제한 경우 CO + OH = CO₂ + H 반응의 기여가 커지는데 연료층에 발열 특성이 나타나고 반응대에서 흡열 특성이 강하게 나타나는 것을 알 수 있다. 이러한 연료층에서의 발열 특성을 상쇄하기 위해 주로 반응대에서 흡열 특성을 나타

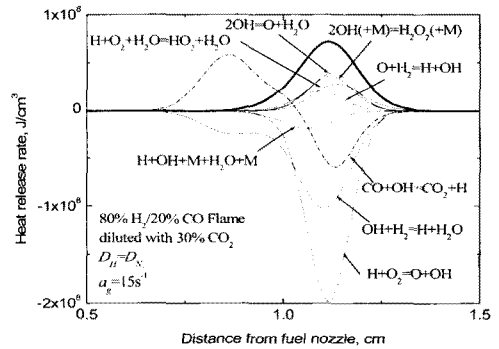
내던 OH + H₂ = H + H₂O 반응의 연료측으로 이동하는 것을 알 수 있다.

Fig. 6은 30% CO₂로 희석한 80% H₂/20% CO 화염에서 열방출율에 있어서 중요하게 기여하는 반응들을 나타낸다. Fig. 5에서와 마찬가지로 발열 반응에 기여하는 중요한 반응들에는 크게 변화가 나타나지 않고 대부분의 두드러진 변화들은 흡열 반응들에서 나타나고 있다. Fig. 6a에 나타난 바와 같이 30% CO₂로 희석한 80% H₂/20% CO 화염에서 혼합기평균확산모델을 사용한 경우 Fig. 5a와 비교하여 CO + OH = CO₂ + H 반응의 기여가 커지는 것을 알 수 있고 연료특에서 발열 특성이 두드러지는 것을 알 수 있다. 또한 이것을 상쇄하기 위해 OH + H₂ = H + H₂O 반응의 흡열 특성은 연료 측으로 이동하는 것을 알 수 있다. 또한 연료측에 나타난 발열 특성은 CO₂ + H → CO + H 을 통한 CO 생성과 관련되며 이러한 CO 생성을 위해 H 원자를 소모하기 때문에 전체 반응율의 척도인 H + O₂ = O + OH 반응과 H 원자에 대해 경제를 하게 되면서 상대적으로 H + O₂ = O + OH 열흡수율은 감소하는 것을 알 수 있다. 결과로서 Fig. 2에 나타나듯이 화염 온도가 80% H₂/20% CO 화염에 비해 30% CO₂로 희석한 경우 화염 온도는 감소하게 된다. H의 확산을 억제한 Fig. 6b의 경우에는 굵은선으로 표시된 전체 열방출율도 증가하고 H + O₂ = O + OH 반응의 열흡수율도 증가하고 이것이 Fig. 2의 화염 온도 증가를 나타내는 원인임을 또한 알 수 있다. 그러나 H의 확산을 억제한 경우는 혼합기평균 확산모델에 비해 전체적으로 증가한 것을 알 수 있다. 한편, Fig. 6c에 나타내었듯이 H₂의 확산을 억제한 경우에는 혼합기평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 전체적으로 모든 반응들의 열방출율들이 감소함을 알 수 있고 특히 H + O₂ = O + OH 반응의 감소로 Fig. 2와 같이 화염온도가 감소한다는 것을 알 수 있다. 그러나, CO + OH = CO₂ + H 반응의 기여는 크게 증가하여 연료특에서의 열방출율과 반응대에서의 열흡수율이 모두 증가하고, 연료측의 열방출율을 상쇄하기 위해 OH + H₂ = H + H₂O 반응이 연료측으로 어긋나서 이동한 것을 알 수 있다. 이상을 정리한다면 H와 H₂의 확산

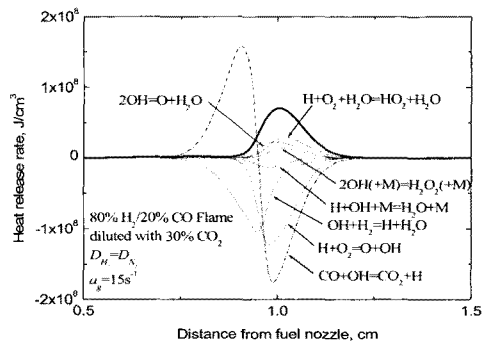
을 억제하는 것으로부터 화염 특성은 두드러진 변화를 겪게되며 이는 앞서 지적한 바와 같이 물리적 특성이 아닌 화학 반응 특성 변화를 통해 이루어지고 있음을 알 수 있다.



(a)



(b)



(c)

Fig. 6 Importantly contributing reaction steps to heat release rate with (a) mixture-averaged model, (b) $D_H = D_{N_2}$, and (c) $D_{H_2} = D_{N_2}$ at the global strain rate of $15s^{-1}$ for 80% H₂/20% CO diluted with 30% CO₂.

4. 결 론

$H_2/CO/CO_2$ 합성가스 화염에 있어서 연료 조성 변화와 CO_2 첨가에 따른 선호확산 특성에 관한 수치 해석 연구로부터 다음과 같은 결론을 얻을 수 있다.

(1) CO_2 가 첨가된 H_2/CO 합성가스화염에서는 Sun 등의 모델은 실험 결과를 과도하게 예측하며, Davis 등의 모델과 GRI v-3.0이 비교적 실험 결과들과 잘 일치한다. 그러나, CO_2 가 과도하게 첨가된 경우에는 Davis 등의 모델보다는 GRI v-3.0이 실험 결과들을 만족스럽게 예측하고 있다.

(2) 화염 온도특성에 관한 스칼라 소산율에 대한 조사와 전체 반응율의 척도와 관련되는 $H + O_2 = O + OH$ 반응에 주 영향을 미치는 H 라디칼의 최대값 변화에 대한 조사로부터 H와 H_2 의 확산을 억제하여 나타나게 되는 선호확산 효과는 스칼라 소산율과 같은 물리적 과정에 의해 지배를 받는 것이 아니라 화학적 효과로서 나타나게 된다.

(3) 선호확산의 주원인이 화학적 효과임을 명확히 하기 위해 조사된 열방출율에 기여하는 주요 반응들에 대한 조사로부터 선호확산 효과는 화학적 효과를 통해 나타난다는 것을 확인할 수 있었다. 즉, H의 확산을 억제하는 경우 전체적으로 열방출율에 영향을 미치는 반응들의 열방출율이 혼합기평균확산모델을 사용한 경우에 비해 증가하고, 특히 중요한 흡열 반응으로 전체반응율의 척도로 나타나는 $H + O_2 = O + OH$ 반응의 열흡수율은 증가한다. H_2 의 확산을 억제한 경우에는 전체적으로 열방출율에 영향을 미치는 반응들의 열방출율이 혼합기평균확산모델을 사용한 경우에 비해 감소한다. 또한, $CO + OH = CO_2 + H$ 반응이 두드러지게 중요해지는데 연료측에서는 발열 특성이 반응대에서는 흡열 특성이 크게 증진된다. 특히 연료측 발열 특성은 $CO_2 + H \rightarrow CO + H$ 을 통한 CO 생성과 관련되며 이것을 상쇄하기 위해 $OH + H_2 = H + H_2O$ 반응의 연료측으로 이동하므로써 화염 특성을 바꾸게 된다는 것을 알 수 있다.

감사의 글

본 연구는 지식경제부-한국산업기술평가원 지정

계명대학교 저공해자동차부품기술개발센터의 지원에 의한 것입니다.

참고문헌

- [1] C. G. Fotache, Y. Tan, C. J. Sung, and C. K. Law, "Ignition of $CO/H_2/N_2$ versus heated air in counterflow: experimental and modeling results", *Combust Flame* Vol. 120, pp. 417-426, 2000.
- [2] C. M. Vagelopoulos and F. N. Egolfopoulos, "Laminar flame speeds and extinction strain rates of mixtures of carbon monoxide with hydrogen, methane, and air", *Proc Combust Inst* Vol. 25, pp. 1317-1323, 1994.
- [3] I. C. Mclean, D. B. Smith, and S. C. Taylor, "The use of carbon monoxide/hydrogen burning velocities to examine the rate of the $CO+OH$ reaction", *Proc Combust Inst* Vol. 25, pp. 749-757, 1994.
- [4] M. J. Brown, I. C. Mclean, D. B. Smith, and S. C. Taylor, "Markstein lengths of CO/H_2 /air flames using expanding spherical flames", *Proc Combust Inst* Vol. 26, pp. 875-881, 1996.
- [5] J. Natarajan, T. Lieuwen, and J. Seitzman, "Laminar flame speeds of H_2/CO mixtures: effects of CO_2 dilution, preheat temperature, and pressure", *Combust Flame* Vol. 151, pp. 104-109, 2007.
- [6] S. G. Davis, A. V. Joshi, H. Wang, and F. Egolfopoulos, "An optimized kinetic model of H_2/CO combustion", *Proc Combust Inst* Vol. 30, pp. 1283-1292, 2005.

- [7] I. G. Zsély, J. Zádor, and T. Turányi, "Uncertainty analysis of updated hydrogen and carbon monoxide oxidation mechanisms", *Proc. Combust Inst* Vol. 30, pp. 1273-1281, 2005.
- [8] H. Sun, S. I. Yang, G. Jomaas, and C. K. Law, "High-pressure laminar flame speeds and kinetic modeling of carbon monoxide /hydrogen combustion", *Proc Combust Inst* Vol. 31, pp. 439-446, 2007.
- [9] D. Zhao, H. Yamashita, K. Kitagawa, N. Arai, and T. Furuhashi, "Behaviour and effect on NO_x formation of OH radical in methane-air diffusion flame with steam addition", *Combust Flame* Vol. 130, p. 352, 2002.
- [10] J. Park, S. I. Keel, Y. H. Yun, and T. K. Kim, "Effects of addition of electrolysis in methane-air diffusion flame", *Int J Hydrogen Energy* Vol. 32, pp. 4059-4070, 2007.
- [11] F. Liu., H. Guo., G. J. Smallwood, and Ö. Gülder., "Numerical study of the superadiabatic flame temperature phenomenon in hydrocarbon premixed flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29, pp.1543-1550, 2002.
- [12] B. Ruf., F. Behrendt., O. Deutchmann., S. Kleditzsch., and J. Warnatz, "Modeling of chemical deposition of diamond films from acetylene-oxygen flames," *Proc. Combust. Inst.* Vol. 28, pp.1455-1461, 2000.
- [13] F. Liu, and Ö. Gülder., "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, 2005.
- [14] V. V. Zamashchikov, I. G. Namyatov, V. A. Bunev, and V. S. Babkin, "On the nature of superadiabatic temperatures in premixed rich hydrocarbon flames," *Combust. Explosion Shock Waves*, Vol. 40: 32-5, 2004.
- [15] M. C. Drake and R. J. Blint, 1988, "Structure of Laminar opposed-flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuel," *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 61, pp. 187-224, 1988.
- [16] P. Wang., S. Hu., and R. Ritz, "Numerical investigation of the curvature effects on diffusion flames," *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, pp.989-996, 2007.
- [17] J. S. Kim, J. Park, O. B. Kwon, E. J. Lee, J. H. Yun, S. I. Keel, "Preferential diffusion effects in opposed-flow diffusion flame with blended fuels of CH₄ and H₂", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 33, pp. 842-850, 2008.
- [18] R. J. Kee, J. A. Miller, G. H. Evans and G. Dixon-Lewis, "A Computational Model of the Structure and Extinction of Strained, Opposed Flow, Premixed Methane-Air Flame," *Proc. Comb. Institut.*, Vol. 22, p. 1479, 1988.
- [19] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar and F. M. Rupley, "A Fortran Program for Computing Opposed-flow Diffusion Flames", SAND 96-8243, 1997.
- [20] Y. Ju, H. Guo, K. Maruta and F. Liu, "On the Extinction Limit and Flammability Limit of Non-adiabatic Stretched Methane-air Premixed Flames", *J Fluid Mech*, Vol. 342, p. 315, 1997.
- [21] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A.

Miller, "Chemkin II: A Fortran Chemical Kinetics Package for Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics", SAND 89-8009B, 1994.

- [22] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin and J. A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-phase Multi-component Transport", SAND 86-8246, 1994.

- [23] H. K. Chellian, C. K. Law, T. Ueda, M. D. Smooke and F. A. Williams, "An Experimental and Theoretical Investigation of the Dilution, Pressure and Flow-field Effects on the Extinction Condition of Methane-Air-Nitrogen Diffusion Flames", Proc. Comb. Institut., Vol. 23, p. 503, 1990.

저 자 소 개



김태권(金兌權)

1957년 8월생. 1979년 경북대학교 기계공학과 졸업(학사). 1981년 경북대학교 기계공학과 졸업(석사). 1992년 한국과학기술원 기계공학과 졸업(박사) 1995년~현재 계명대학교 기계자동차공학부 재직 중.



박정(朴廷)

1964년 10월생. 1987년 서울대학교 기계공학과 졸업(학사). 1990년 한국과학기술원 기계공학과 졸업(석사). 1995년 한국과학기술원 기계공학과 졸업(박사). 2000년~2006년 순천대학교 교수. 2007년~현재 부경대학교 기계공학부 재직 중.



하지수(河芝洙)

1960년 6월생. 1983년 서울대학교 항공공학과 졸업(학사). 1985년 한국과학기술원 항공공학과 졸업(석사). 1991년 한국과학기술원 항공공학과 졸업(박사). 1991년~2006년 현대중공업 엔진연구실 근무. 2007~현재 계명대학교 에너지환경공학과 재직 중.