

메탄-수소 종류확산화염에서 H₂와 H의 선호확산이 NO 거동에 미치는 영향에 관한 연구

박 정[†], 권오봉*, 윤진한**, 길상인**

*부경대학교 기계공학부, **한국기계연구원 청정환경기계연구센터

A Study on NO Emission Behavior through Preferential Diffusion of H₂ and H In CH₄-H₂ Laminar Diffusion Flames

Jeong Park[†], Oh Boong Kwon*, Jin Han Yun**, Sang In Keel**

*School of Mechanical Engineering, Pukyong National University,
San 100 Yongdang-dong Nam-gu Busan 608-739, Korea

**Environment & Energy Research Division, Korea Institute of Machinery and Materials,
171 Jang-dong Yuseong-gu Daejeon 305-343, Korea

ABSTRACT

A study has been conducted to clarify NO emission behavior through preferential diffusion effects of H₂ and H in methane-hydrogen diffusion flames. A comparison is made by employing three species diffusion models. Special concerns are focused on what is the deterministic role of the preferential diffusion effects in flame structure and NO emission. The behavior of maximum flame temperatures with three species diffusion models is not explained by scalar dissipation rate but the nature of chemical kinetics. The preferential diffusion of H into reaction zone suppresses the populations of the chain carrier radicals and then flame temperature while that of H₂ produces the increase of flame temperature. These preferential diffusion effects of H₂ and H are also discussed about NO emissions through the three species diffusion models.

KEY WORDS : chain carrier radicals(체인운반라디칼), Fenimore NO(페니모어 NO), preferential diffusion effects(선호확산효과), scalar dissipation rate(스칼라 소산율), thermal NO(열적 NO)

1. 서 론

메탄은 타 탄화수소 연료에 비해 공해물질이 상대적으로 적으며 회박연소를 시키는 경우 그 이상

으로 공해물질 배출을 줄일 수 있다. 그러나 연소 불안정성과 출력이 좋지 않고 점화에도 어려움이 있어 반응성이 좋은 수소를 첨가함으로써 이러한 어려움을 극복하고자 하는 연구들이 있었다¹⁻⁹⁾. 메탄화염에 수소 첨가 효과에 관한 실험과 수치해석 연구들에서 점화성은 향상되었고, 메탄과 공기의

[†]Corresponding author : jeongpark@pknu.ac.kr

희박 가연 한계는 확장된다는 것이 보고되었다. 반대로 수소화염에 첨가제로서 탄화수소를 사용하는 것은 수소 저장 탱크에서 폭발 위험을 억제할 수 있고, 낮은 에너지 밀도를 증가시키기 위해 과급기를 사용하는 수소 자동차 엔진에서는 노킹으로 인해 제한적인 운전범위를 확장할 수 있음이 제안되었다¹⁰⁾. 이러한 연구는 열-물질 확산 불안정성과 공기역학적 불안정성 모두의 억제제로서 프로판의 잠재력을 제시하지만, 완전한 수소 경제화 사회를 구현하기 위해서는 여전히 안전성의 문제는 남아 있고 더 많은 연구가 요구된다. 게다가 이미 탄화수소 연료로 부하 조정이 이루어져 있고 시설들이 구축된 상태에서 당장 수소를 사용하는 것도 막대한 투자비를 요하기 때문에 현실성은 없어 보인다. 따라서 메탄-수소 혼합 연료는 완전한 수소 경제화 사회로 가는 중간 단계의 해법이 될 수 있을 것이다^{11,12)}.

한편 화염 구조는 연료에 H와 H₂ 같이 확산계수가 큰 화학종을 포함할 때 선호확산에 의해 영향을 받는 것으로 알려져 있다. 선호확산 효과의 증거로서 층류 제트화염의 정점 열림(tip-opening) 현상¹³⁾, 과농 예혼합화염들¹⁴⁻¹⁷⁾과 CO/H₂/N₂ 층류 대향류확산화염에서 스트레인이올이 작은 경우¹⁸⁾에 나타나는 초과단열 화염온도 등을 들 수 있다. 선호확산 효과와 관련하여 초과단열 화염온도는 수소화염에서는 나타나지 않으며 과농 예혼합화염에서만 나타난다는 것이 알려졌고¹⁴⁾, 초과단열 화염온도는 물리적 과정이 아닌 화학반응의 성질에 기인하는 것으로 보고되었다^{14,15)}. 반면 다른 주장은 H₂의 선호확산에 따른 물리적 과정으로 이해하였다¹⁶⁾. 자유 전파하는 과농 메탄/공기 혹은 메탄/산소 예혼합 화염들에서¹⁷⁾ 초과단열 화염온도는 H₂의 선호확산이 아니라 H의 선호확산과 관련되는 것으로 보고하고 있다. 원통형 확산화염에서¹⁹⁾ 양의 곡률이 선호확산을 강화시키며 음의 곡률은 선호확산을 약화시키는 것을 보였다. 또한 마이크로 연료 혹은 공기의 대향으로 분사되는 제트에 의해 변형되는 H₂/N₂-공기 대향류확산화염에서²⁰⁾ 유사한 경향들이 관찰되었다. 이상의 문헌에 대한 조사

로부터 확산화염에 있어서 H와 H₂의 선호확산에 대한 연구들은 화학반응의 중요한 역할을 이해를 간과하였다. 또한, 확산화염에 있어서 선호확산과 관련하여 화학 반응의 역할의 중요성에 대해 그리고 H₂와 H의 선호확산이 NO 배출에 미치는 영향에 대해 문헌상에 보고된 예가 없다.

본 연구는 확산화염에 있어서 H₂와 H의 선호확산에 따른 화염구조와 NO 배출의 화학적 성질의 중요성에 대한 이해가 부족하다는 점에서 수행하였다. H₂와 H의 선호확산을 명확히 하기 위해 상세 반응 기구를 사용하여 세 가지 화학종 확산모델에 대해 수치해석을 수행하였다. 본 연구의 목적은 (1) H₂와 H의 선호확산이 있고 없는 메탄-수소 확산화염에서 화염구조를 비교하는 것이고, (2) 화염 구조 변화에 대한 H₂와 H의 선호확산의 화학적 성질의 중요성을 조사하는 것이고, (3) NO 배출 특성에 대한 H₂와 H의 선호확산 효과를 조사하는 것이다.

2. 수치해석 방법

층류 대향류 확산화염은 Fig. 1에 보인 바와 같이 서로 반대로 충돌하는 사이에서 형성되고 정체점 근처에서 수학적 묘사는 1차원적 상사성을 갖는다. 이와 같은 상사성에 근거한 1차원 지배 방정식의 해를 얻기 위해 Oppdif Code를 사용하였다²¹⁾. 복사 열손실은 주로 CO₂, H₂O, CO, CH₄에 의해 나타나게 되고 광학적 박모델을 사용하였다²²⁾. 열 화학적 물성치와 전달 물성치를 얻기 위해 Chemkin 코드²³⁾와 Tranfit 코드²⁴⁾를 사용하였다.

버너 간 간격은 2.0 cm이고 화염대는 연료 측과 산화제 측 모멘텀 유속(momentum flux)이 균형을 이루는 곳에서 형성되며 전체 신장율(global strain rate)은 다음과 같이 표현된다²⁵⁾.

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

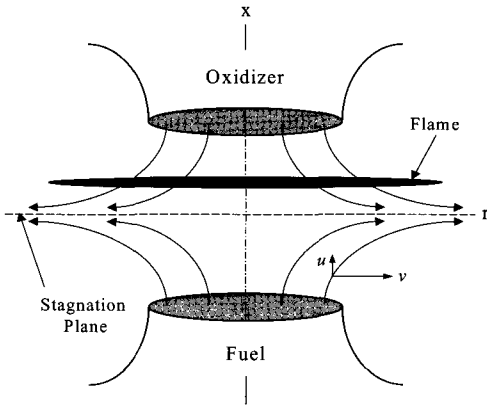


Fig. 1 Schematic of opposed jet diffusion flame

여기서 하첨자 F와 O는 각각 연료와 공기를, L은 노즐 간의 간격을 나타낸다. 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, M-A)
 - (2) $D_H = D_{N_2}$ 를 가정한 혼합기평균 화학종 확산
 - (3) $D_{H_2} = D_{N_2}$ 를 가정한 혼합기평균 화학종 확산
- 화학종의 열확산 항은 고려하지 않았고, 혼합기 평균 화학종 확산의 경우와 다성분 화학종 확산의 경우와 몇 가지 조건에서 테스트 결과 온도 분포와 최대온도가 거의 차이가 나지 않았기 때문에 본 연구에서는 다성분 화학종 확산의 경우는 제외하였다.

기존 연구⁷⁾에서 메탄-수소-공기 예혼합 화염의 여러 가지 연료 조합에 대해 실험과 수치해석으로부터 GRI v-3.0 기구²⁶⁾가 적절하다는 것이 알려진 바 있다. 따라서 본 연구에서는 53개의 화학종과 325개의 반응 단계를 갖는 GRI v-3.0 기구를 사용하였다. 계산에 사용된 경계 조건의 온도는 300 K이고 분위기 압력은 1 atm이다.

3. 결과 및 논의

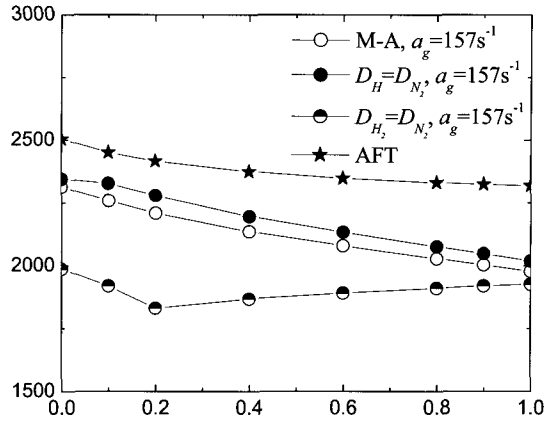


Fig. 2 Variations of maximum flame temperatures calculated using the three species diffusion models at the global strain rate of $157s^{-1}$ in CH₄-H₂ flames

Fig. 2는 메탄-수소 대항류 확산화염에서 전체 화염신장율 $157s^{-1}$ 에서 세 가지 확산 모델에 대해 메탄몰분율에 따른 최대 화염온도를 나타낸다. Fig. 2에서 비교를 위해 단일 화염온도를 나타내었고 AFT는 단일 화염온도를 나타낸다. M-A는 혼합기 평균 확산율을 사용한 경우를 의미한다. 모든 경우에 있어서 최대 화염온도는 단일 화염온도보다 낮아 초과단열 화염온도 현상은 나타나지 않는데 이것은 선택한 전체 화염 신장율이 적절히 크기 때문이다¹⁸⁾. 일반적으로 전체 반응율에 대한 지시자 역할을 하는 체인 분기 반응인 $H+O_2 \rightarrow O+OH$ 의 반응율은 미연 탄화수소와 H원자의 반응율에 비해 작고 H 원자에 대해 서로 경쟁을 하게 된다. 따라서 미연 탄화수소의 존재는 지적된 체인 분기 반응의 반응율을 감소시키게 되고 화염 온도도 또한 감소하게 된다²⁷⁾. 따라서 화염 온도는 메탄 몰분율이 증가함에 따라 감소하게 된다.

과농 탄화수소 예혼합 화염에 대한 기존 연구들에서 초과단열 화염온도에 대한 상반된 해석을 내놓았다. 즉, 초과단열 화염온도는 반응대로부터 열대로 H₂의 선호확산에 기인한다고 주장한¹⁶⁾ 반면 H의 선호확산에 기인한다고 보고하였다. Fig. 2에서 나타나듯이 같은 메탄-수소 확산화염에서 전체 화염 신장율에 대해서 혼합기 평균 확

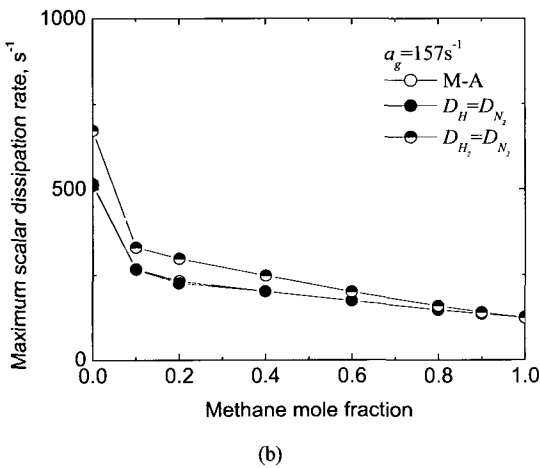
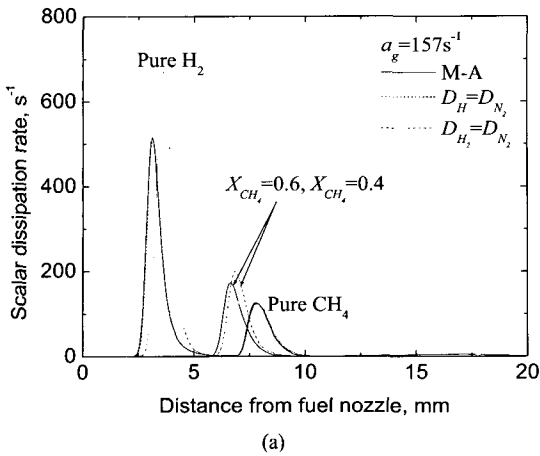
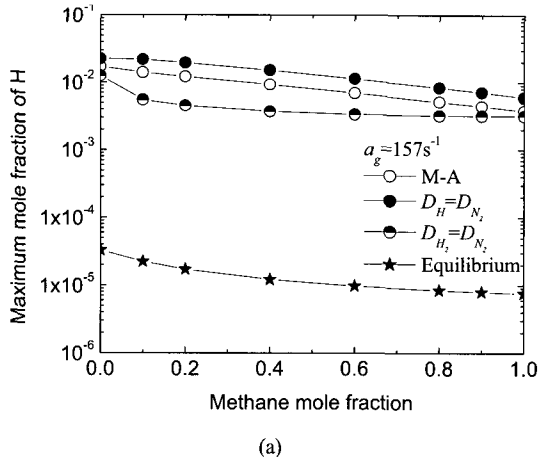


Fig. 3 (a) Spatial distributions of scalar dissipation rates and (b) Variations of maximum scalar dissipation with methane mole fraction for three species diffusion models at the global strain rate of 157s⁻¹

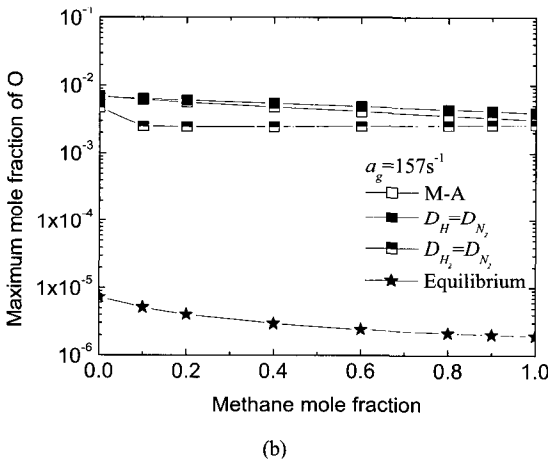
산모델을 사용하는 경우의 화염온도는 H₂ 확산을 억제하는 경우보다 높고 H의 확산을 억제하는 경우보다는 낮게 나타난다. 이러한 복잡한 최대 화염 온도 거동이 화학적 성질에 의한 것이 아니라면 스칼라 소산율에 의해 설명되어야 한다. 또한 H₂의 확산율을 억제하는 것은 특이한 거동을 보이는데 화염온도가 메탄 물분율에 따라 감소하다가 메탄 물분율이 0.2에서 최소를 나타낸 후 다시 증가하게 된다. 이러한 특이한 거동 역시 화학적 성질에 의한 것이 아니라면 물리적 과정으로 이해하여야 하므로 스칼라 소산율에 의해 설명되어야 한다.

Fig. 3은 전체 화염 신장율 157s⁻¹에서 세 가지 화학종 확산 모델에 대해 (a) 스칼라 소산율의 분포와 (b) 최대 소산율의 변화를 나타낸다. 스칼라 소산율을 계산하기 위해 Bilger²⁸⁾에 의해 제안된 혼합 분율을 사용하였다. Fig. 3 (a)의 메탄화염의 경우 세 가지 확산모델에 대해 스칼라 소산율 분포 사이에 차이는 거의 없으나, 수소 화염과 메탄-수소 화염에 대해서는 H₂ 확산율을 억제한 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 억제한 경우는 나머지 두 경우와 최대 스칼라 소산율이 상이한 것을 알 수 있다. 한편 Fig. 2와 비교하면 같은 메탄 물분율에 대해 H₂의 확산을 억제한 경우가 다른 경우와 비교하여 화염 온도가 낮은 것은 Fig. 3 (b)에 보인 바와 같이 스칼라 소산율이 크기 때문인 것으로 이해될 수 있다. 그러나 같은 메탄 물분율에 대해 H 확산율을 억제한 경우가 M-A의 경우인 경우와 비교하여 스칼라 소산율이 차이가 거의 없음에도 불구하고 화염온도가 더 큰 것은 이해되지 않는다. 결국 이것은 H와 H₂의 선택확산에 따른 화염 온도는 스칼라 소산율과 같은 물리적 변수에 따른 화염 거동으로는 설명되지 않으며 화학적 효과에 의해 설명되어야 함을 암시하고 있다. 따라서 모든 화학 반응에 관여를 하는 H, O, OH 라디칼들의 변화를 살펴보면 화염구조 변화에 대한 이러한 화학적 효과를 명확히 할 수 있을 것이다.

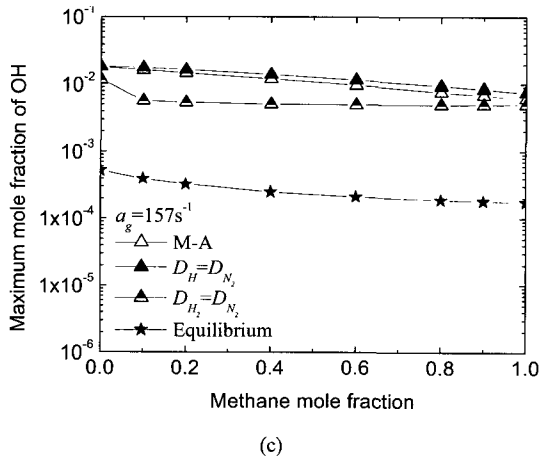
Fig. 4는 메탄-수소 확산화염의 전체 화염 신장율에서 157s⁻¹인 경우 세 가지 확산모델들을 사용한 메탄 물분율에 따른 (a) H, (b) O, (c) OH 라디칼들의 최대 물분율 변화를 나타낸다. 모든 화염조건들에서 이러한 라디칼들의 최대 물분율은 각각의 평형 값을 초과하고 있다. 이러한 초과 평형 현상은 반응대 안에서 이체(two body) 라디칼 형성 반응의 결과로서 나타나는 것으로 알려져 있다. H₂의 확산을 억제한 경우의 라디칼들의 최대 물분율 거동을 제외하고, 라디칼들의 최대 물분율은 메탄 물분율의 증가에 따라 감소한다. 또한, 전체적



(a)



(b)



(c)

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 $157s^{-1}$

으로 라디칼들의 최대 몰분율의 거동은 Fig. 2에 제시된 최대 화염온도 거동과 경향이 유사하게 나타난다. 즉, 혼합기 평균 확산모델을 사용한 H, O, OH의 최대 몰분율은 H_2 의 확산을 억제한 경우보다 크고, H의 확산을 억제한 경우보다 작게 나타난다. 한편, CO/ H_2 / N_2 대향류 확산화염에 관한 기존¹⁸⁾에서 화염 스트레치가 증가할 때 H, O, OH의 최대 몰분율은 증가하다가 화염 소화한계 근처에서 급격히 감소한 후 화염 소화가 발생함을 보인 바 있다. 즉, 화염 스트레치의 증가로 H O, OH 라디칼들의 증가하게 되고, 전체 반응율에 대한 척도를 나타내는 체인 분기 반응인 $H+O_2 \rightarrow O+OH$ 의 반응율 증가로 전체 반응율은 증가하게 되어 이것이 최대 화염온도의 감소를 보완하게 되는 것으로 이해되었다. 따라서 Drake와 Blint¹⁸⁾는 화염 소화 기구는 화염소화한계 근처에서 이러한 라디칼들의 빠른 감소와 화염온도 감소로 화염강도가 급격히 떨어질 때 발생하는 것으로 이해하였다.

Figs. 2, 3, 4에 나타나듯이 H의 확산율을 억제한 경우와 혼합기 평균 확산 모델(M-A)을 사용한 경우에 스칼라 소산율이 거의 일치하고 있음에도 불구하고 H의 확산율을 억제한 경우의 최대 화염온도와 H, O, OH 라디칼들의 최대 몰분율이 M-A를 사용한 경우에 비해 더 크다. 이것은 H, O, OH 라디칼들이 증가함에 따라 체인 분기 반응인 $H+O_2 \rightarrow O+OH$ 의 반응율 증가하여 결국 화염 온도를 증가시킨 것으로 이해할 수 있다. 결국 화학적 과정에 의해 화염 온도가 증가한 것으로 이해된다.

반면에 H_2 의 확산을 억제한 경우의 최대 화염온도와 이러한 라디칼들의 최대 몰분율들이 혼합기 평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 작다. 또한 H_2 의 확산을 억제한 경우의 스칼라 소산율이 H의 확산을 억제한 경우와 혼합기 평균 확산모델을 사용한 경우에 비해 훨씬 크다는 것을 알 수 있다. 결국 H_2 의 확산을 억제한 경우 화학적 효과에 의해 체인분기반응인 $H+O_2 \rightarrow O+OH$ 의 반응율을 감소시키고 첨가적으로 스칼라 소산율이 훨씬 큰 물리적 효과에 의해 화염온도 역시 감소한 것으로

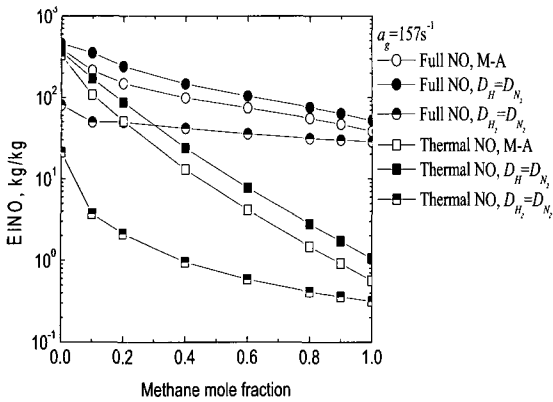


Fig. 5 Variations of emission indices of NO through the full and thermal mechanisms with methane mole fraction at the global strain rate of $157s^{-1}$ in methane-hydrogen flames

이해된다. 요약한다면 H의 확산율을 억제하는 것은 H, O, OH의 물분율을 증가시켜 화염온도를 증가시키게 되며, 이것은 역으로 말한다면 반응대 안으로 H의 선택확산이 H, O, OH의 물분율을 유발하고 결국 화학적 과정을 통하여 화염 온도를 억제한다는 것을 의미한다. 반면에 반응대 안으로 H₂의 선택확산이 물리적으로는 스칼라 소산율을 감소시켜 물리적 효과에 의해 화염온도를 증가시키고 H, O, OH의 최대물분율을 증가시켜 화학적 효과를 통해 화염온도를 상승시킨다는 것을 의미한다. 결국 본 연구에서와 같은 확산 화염으로부터의 결과는 과농 탄화수소 예혼합 화염에 대한 두 가지 상반된 결과들에 대해 Liu와 Gülder¹⁶⁾의 연구에서 제시된 결과와는 반대의 경향을 나타내고 Zamashchikov 등¹⁷⁾의 연구 결과와는 경향이 일치하는 것으로 나타난다.

Fig. 5는 메탄-수소 확산화염의 전체 화염 신장율이 $157s^{-1}$ 인 경우 메탄 물분율에 따른 전체 NO와 열적 NO(thermal NO)의 배출지수를 나타낸다. 전체 NO와 열적 NO 모두 배출 지수는 메탄 물분율에 따라 감소한다. 본 연구에서 N₂O 기구와 NO₂ 기구에 의한 NO 생성은 무시할만하며 이것은 메탄 확산화염에 관한 기존 연구의 결과와 일치한다²⁰⁾. 따라서 Fig. 5에서 전체 NO와 열적 NO 사이의 차이는 페니모어 NO(Fenimore NO)에 기

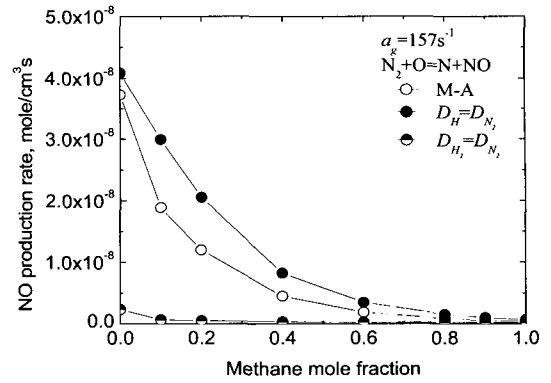
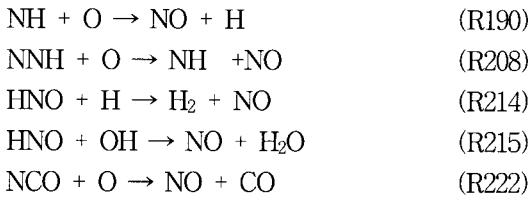


Fig. 6 Variations of NO production rate of the precursor reaction step of thermal NO using the three species diffusion models with methane mole fraction at the global strain rate of $157s^{-1}$

인한다. 순수 수소인 경우 전체 NO와 열적 NO 사이의 차이가 나는 것은 NH-, NNH, HNO-관련 반응에 기인한다. Fig. 5에 나타난 바와 같이 순수 메탄 화염과 메탄-수소 화염에서 메탄 물분율이 큰 경우에 대해 페이모어 NO는 열적 NO에 비해 크며 이러한 경향은 마찬가지로 순수 메탄에 대한 기존 연구²⁰⁾와 일치한다. 반대로 메탄 물분율이 감소함에 따라 열적 NO의 기여가 커지는 것을 알 수 있다. 일반적으로 열적 NO(Zeldovich NO)는 화염 온도와 밀접한 관련이 있는 것으로 알려져 있다. M-A와 H의 확산을 억제한 경우 열적 NO의 경향은 Fig. 2의 화염 온도의 경향과 유사하다. 그러나 H₂의 확산을 억제한 경우 열적 NO는 화염 온도의 경향과는 상이하다. 이것은 H₂의 확산을 억제하는 경우 Zeldovich 기구가 화염 온도와의 상관성만으로는 설명되지 않는다는 것을 의미한다. 이것을 명확히 보이기 위해 Fig. 6에 열적 No의 지시자(indicator) 반응인 N₂+O → NO+N의 반응율을 나타내었고 이 역시 Fig. 2의 H₂의 확산계수를 억제한 경우는 상이하고 Fig. 5의 결과와 일치하고 있음을 알 수 있다. 이러한 특이한 거동에도 불구하고 M-A인 경우의 열적 NO의 배출 지수는 H₂의 확산계수를 억제한 경우보다 크고 H의 확산계수를 억제한 경우보다는 작은 점은 같은 화염 신장율에 대해서 전체적인 경향은 Fig. 2의 화

염온도의 경우와 일치하는 것을 알 수 있다. 결과적으로 반응대로 H의 선택확산은 열적 NO를 억제하며, 반대로 H₂의 선택확산은 열적 NO를 증가시킨다는 것을 알 수 있다.

Fig. 7은 순수 메탄화염과 메탄-수소화염에 대해 전체 화염 신장율이 157s⁻¹인 경우 페니모어 NO에 중요하게 기여하는 반응 단계들의 생성을 및 소모율을 나타낸다. 페니모어 NO 생성은 다음과 같은 반응들에 주로 관련된다²⁹⁾.



NO 소모에 관련된 중요한 반응은 다음과 같다²⁹⁾.

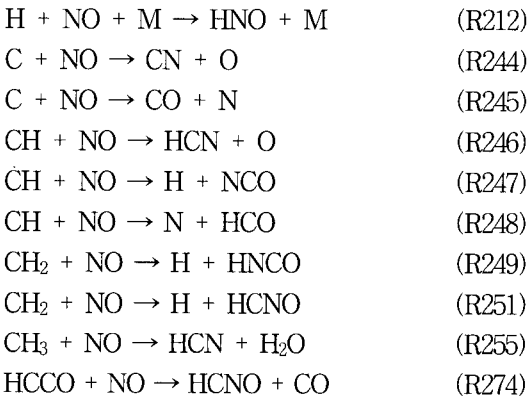


Fig. 7 (a)의 순수 메탄 화염에 대해 HNO 관련 반응인 R214가 다른 NO 생성 반응에 비해 NO 생성에 있어서 중요한 것을 알 수 있고 반면에 HNO 관련 반응인 R212는 NO를 소모한다는 것을 알 수 있다. 이러한 HNO 관련 반응의 페니모어 NO 생성에 있어서의 중요성은 이미 기존 연구에서 잘 알려져 있다^{29,30)}.

Fig. 7 (a)에 보인 바와 같이 NO 소모에 있어서 중요하게 기여하는 반응단계들은 R244, R245, R246, R249, R255, 그리고 R277이다. R246과 R255

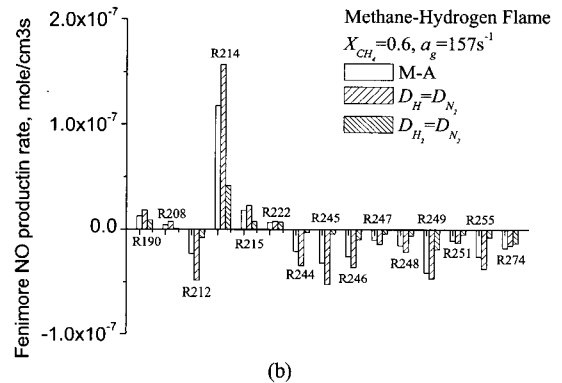
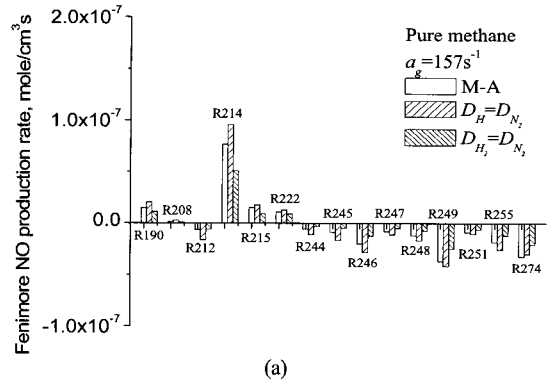


Fig. 7 Production and destruction rates of importantly contributing reaction steps to Fenimore NO at the global strain rate of 157 s⁻¹ for pure methane flame and CH₄-H₂ flame

는 재연소(reburning) 기구로 R274는 HCN 재순환 경로(recycle route)로 알려져 있다²⁹⁾. 전체적으로 위에서 언급된 반응 단계들은 수소 첨가에 따라 점차로 NO 생성 및 소모율들이 점차로 증가하는 것을 알 수 있다. 그러나 R190과 같은 NH 관련 반응은 수소 첨가에 따라 상대적으로 억제되는 것을 볼 수 있다. 또한 메탄 화염에서 중요한 NO 생성과 관련된 것으로 알려진 R222는 수소 첨가에 따라 거의 변화가 없고, HCN 재순환 경로 반응인 R277 역시 수소 첨가에 따라 거의 변화가 없거나 오히려 감소한다.

한편 모든 경우에 있어서 M-A를 사용한 경우 NO의 생성과 소모율은 H의 확산을 억제한 경우에 비해 작고 H₂의 확산을 억제한 경우에 비해 크다. 그러나 예외적으로 H의 확산을 억제한 경우의

HCN 재순환 통로를 통한 페니모어 NO의 소모율은 M-A의 경우보다 작고 H₂의 확산을 억제한 경우보다 크다. 정리한다면 이러한 거동들이 세 가지 화학종 확산 모델에 대해 Fig. 5와 같은 경향을 나타내는 요인임을 알 수 있다. 결과적으로 반응대로 H의 선택확산은 페니모어 NO를 억제하고 H₂의 선택확산은 페니모어 NO를 증가시킨다는 것을 알 수 있다.

4. 결 론

메탄-수소 확산 화염에서 H와 H₂의 선택확산이 화염구조와 NO 배출에 미치는 영향을 파악하기 위한 수치 해석을 수행하였다. 선택확산을 명확히 하기 위해 세 가지 화학종 확산모델을 사용하였고 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다. M-A의 화학종 확산 모델을 사용한 경우의 최대 화염 온도는 H의 확산을 억제한 경우보다 작고 H₂의 확산을 억제한 경우보다 크다. 이러한 경향은 잘 알려진 스칼라 소산율에 따른 거동(S-curve의 상부 가지 거동)에 의해 설명되지 않으며 중요 체인 분기 반응인 H+O₂ → O+OH에 직접적 관련이 있는 H, O, OH 라디칼들의 거동에 의해 더 잘 설명된다. 이것이 H₂와 H의 선택확산이 화학적 과정과 관련된다는 직접적 증거일 수가 있다.

결론적으로 H의 선택확산은 H, O, OH와 화염 온도를 억제하며, H₂의 선택확산은 H, O, OH와 화염 온도를 증가시킨다. 이러한 것들은 또한 직접적으로 열적 NO와 페이모어 NO에 영향을 미쳐 H의 선택확산은 열적 NO와 페니모어 NO를 억제하고 H₂의 선택확산은 열적 NO와 페니모어 NO를 증가시킨다는 것을 알 수 있다.

후 기

본 연구는 2007년도 한국기계연구원 기본 과제의 위탁연구로 수행되었고 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- 1) G. Yu, C. K. Law, and C. K. Wu, "Laminar flame speeds of hydrocarbon+air mixtures with hydrogen addition", *Combust. Flame*, Vol. 63, 1984, pp. 339-347.
- 2) G. A. Karim, I. Wierzba, and Y. Al-Alousi, "Methane-hydrogen mixtures as fuels", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 21, 1996, pp. 625-631.
- 3) C. G. Fotache, T. G. Kreutz, and C. K. Law, "Ignition of hydrogen-enriched methane by heated air", *Combust. Flame*, Vol. 110, 1997, pp. 429-440.
- 4) M. Karbasi and I. Wierzba, "The effects of hydrogen addition on the stability limits of methane jet diffusion flames", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 23, 1998, pp. 123-129.
- 5) S. O. Bade Shresha and G. A. Karim, "Hydrogen as an additive to methane for spark ignition engine applications", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 24, 1999, pp. 577-586.
- 6) C. G. Bauer and T. W. Forest, "Effect of hydrogen addition on the performance of methane-fueled vehicles. Part I: effect on S.I. engine performance", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 32, 2007, pp. 55-70.
- 7) J. -Y. Ren, W. Qin, F. N. Egolfopoulos, and T. T. Tsotsis, "Strain-rate Effects on hydrogen-enhanced lean premixed combustion", *Combust. Flame*, Vol. 124, 2001, pp. 717-720.
- 8) F. Halter, C. Chauveau, N. Djebaili-Chaumeix, and I. Gokalp, "Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane-hydrogen-air mixtures", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 30, 2005, pp. 201-208.
- 9) P. Dagaut and A. Nicolle, "Experimental and detailed kinetic modeling study of hydrogen-enriched natural gas blend oxidation over extended temperature and equivalence ratio ranges", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 30,

- 2005, pp. 2631-2638.
- 10) C. K. Law and O. C. Kwon, "Effects of hydrocarbon substitution on atmospheric hydrogen-air flame propagation", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 29, 2004, pp. 867-879.
 - 11) V. Di Sarli and A. Di Benedette., "Laminar burning velocity of hydrogen-methane/air premixed flames", *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 32, 2007, pp. 637-646.
 - 12) J. Park, S. I. Keel, and J. H. Yun, "Addition effects of H₂ and H₂O on flame structure and pollutant emission in methane-air diffusion flames", *Energy & Fuels*, in press.
 - 13) S. Ishizuka and Y. Sakai, "Structure and tip-opening of laminar diffusion flames", *Proc. Combust. Inst.* Vol. 25, 1986, pp. 2821-1828.
 - 14) Liu, F., Guo, H., Smallwood, G. J., and Gülder, Ö., "Numerical study of the superadiabatic flame temperature phenomenon in hydrocarbon premixed flames", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29, 2002, pp. 1543-1550.
 - 15) Ruf, B., Behrendt, F., Deutchmann, O., Kleditzsch, S., and Warnatz, J., "Modeling of chemical deposition of diamond films from acetylene-oxygen flames", *Proc. Combust. Inst.* Vol. 28, 2000, pp. 1455-1461.
 - 16) Liu, F. and Gülder, Ö., "Effects of H₂ and H preferential diffusion and unity Lewis number on superadiabatic flame temperatures in rich premixed methane flames", *Combust. Flame* Vol. 143, 2005, pp. 264-281.
 - 17) Zamashchikov, V. V., Namyatov, I. G., Bunev, V. A., and Babkin V. S., "On the nature of superadiabatic temperatures in premixed rich hydrocarbon flames", *Combust. Explosion Shock Waves*, Vol. 40, 2004, pp. 32-5.
 - 18) Drake, M. C. and Blint, R. J., "Structure of Laminar opposed-flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuel", *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 61, 1988, pp. 187-224.
 - 19) Wang, P., Hu, S., and Pitz, R., "Numerical investigation of the curvature effects on diffusion flames", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, 2007, pp. 989-996.
 - 20) Takagi, T., Yoshikawa, Y., Komiyama, M., and Kinoshita, S., "Studies on strained non-premixed flames affected by flame curvature and preferential diffusion", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 26, 1996, pp. 1103-1110.
 - 21) Lutz, A. E., Kee, R. J., Grcar, J. F., and Rupley, F. M., "A fortran program for computing opposed-flow diffusion flames", Sandia National Laboratories Report, SAND 96-8243, 1997.
 - 22) Ju, Y., Guo, H., Maruta, K., and Liu, F., "On the extinction limit and flammability limit non-adiabatic stretched methane-air premixed flames", *J. Fluid Mech.*, Vol. 342, 1997, pp. 315-334.
 - 23) Kee, R. J., Rupley, F. M., and Miller, J. A., "Chemkin II: a fortran chemical kinetics package for analysis of gas phase chemical kinetics", Sandia National Laboratories Report, SAND 89-8009B, 1989.
 - 24) Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E., and Miller, J. A., "A fortran computer code package for the evaluation of gas-phase multi-component transport", Sandia National Laboratories Report, SAND 86-8246, 1994.
 - 25) Chellian, H. K., Law, C. K., Ueda, T., Smooke, M. D., and Williams, F. A., "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, 1990, p. 503.
 - 26) G. P. Smith, D. M. Golden, N. W. Frenklach,

- M. B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Dong, W. C. Gardiner, Jr.-VV. Lissianski, and Z. Qin, "The "GRI-Mech 3.0" chemical kinetic mechanism", <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>, 2007.
- 27) Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., "Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, 1984, pp. 1-57.
- 28) R. W. Bilger, "The structure of turbulent nonpremixed flames", *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 22, pp. 475-488.
- 29) M. Nishioka, S. Nakagawa, Y. Ishikawa, and T. Takeno, "NO emission characteristics of methane-air double flame", *Combust. Flame*, Vol. 98, 1994, pp. 127-36.
- 30) J. Park, J. S. Park, H. P. Kim, J. S. Kim, J. G. Choi, H. C. Cho, K. W. Cho, H. S. Park, "NO emission behavior in oxy-fuel combustion recirculated with carbon dioxide", *Energy & Fuels*, Vol. 21, 2007, pp. 121-129.