튜브 내 고압 수소의 파열막 형상에 따른 자발 점화 현상에 대한 수치해석

이형진* · 김성돈** · 김세환*** · 정인석****

Numerical Investigation on the Self-Ignition of High-pressure Hydrogen in a Tube Influenced by Burst Diaphragm Shape

Hyoung Jin Lee, Sung Don Kim, Sei Hwan Kim and In-Seuck Jeung

ABSTRACT

Numerical simulations are conducted to investigate the feature of spontaneous ignition of hydrogen within a certain length of downstream tube released by the failure of pressure boundaries of various geometric assumption. The results show that the ignition feature can be varied with the shape of pressure boundary. The ignition at the contact region are developed at the spherical pressure boundaries due to multi-dimensional shock interactions, whereas the local ignition is developed in limited area such as boundary layer at the planar pressure boundary conditions. The spontaneous ignition inside the tube can be generated from the reaction region of only boundary layer regardless of existence of the reaction of core region.

Key Words : High pressure hydrogen gas, Pressure boundary, Spontaneous ignition

1. 서론

고압 수소는 차세대 청정 에너지원으로 여러 산업에서 그 활용성이 증가되고 있으나, 시스템에 적용하는데 있어 안정성 문제가 끊임없이 제기되고 있다. 실제 뚜렷한 점화원이 없음에도 불구하고 고압 수소 가스가 누출된 경우 점화 및 폭발 등 다양한 사고 사례가 보고되고 있으며, 대부분의 사고가 파이프나 밸브를 포함하고 있는 배관 시스템에서 발생되고 있다[1]. 이에 최근 자발 점화의 메커니즘과 원인을 밝히고자 수많은 실험적 또는 수치적 연구가 수행되어져 오고 있다. 누출되는 고압 수소의 자발 점화의 원인으로 Reverse Joule-Thompson 효과, 정전기 발전, 확산 점화, 급속 단열압축, 고온표면 점화 등 다양한 가설들이 제시되었다[1]. 그러나 여러 가설 중, Wolanski & Wojciki [2]의 수소와 산소를 이용한 충격파 튜브를 통한 실험적 연구 결과 이후, Dryer[3] 등의 수소와 공기를 이용한 실험 결과를 근거로 확산 점화 메커니즘이 가장 가능성이 높은 것

으로 여겨지고 있다.

최근에는 튜브 내 설치된 격막을 고압의 수소를 이용하여 파열시킴으로써 수소를 급속히 누출시키는 방법으로 튜브 내에 발생하는 수소의 자발점화 메커니즘을 보다 명확히 밝히고자 다양한 실험적/수치적 연구가 활발히 진행되고 있다. 또한, 이와 더불어 튜브 길이 및 파열 압력에 따른 자발 점화 현상에 대한 경향성 및 점화 한계 조건을 파악하기 위한 연구도 진행되고 있다[3-9]. 현재까지 수행된 연구 결과를 종합하면 튜브 내 수소의 자발점화 현상은 파열 압력이 높을수록, 튜브 길이가 길수록 그 가능성이 높은 것으로 밝혀졌다. 이러한 결과는 기존 연구 결과로부터 제시된 다음의 자발 점화 메커니즘으로부터 설명될 수 있다. 격막을 통해 분리되어 있던 고압의 수소가 파열되면, 압력차에 의해 충격파가 발생한다. 발생한 충격파는 하류로 흐르면서 튜브 벽에서 반사되어 다차원적 상호간섭이 발생한다. 이러한 다차원적 충격파/충격파 또는 충격파/경계층 상호작용 때문에 충격파에 의해 유도된 유동에서는 튜브 벽 경계층영역이나 튜브 중앙영역(core region)의 수소와 공기의 접촉면(contact surface)에 복잡한 수소/공기 혼합 영역이 형성된다. 이후, 점화는 2개 영역에서 분리되어 발생한다. 1차적으로 고온의 경계층에서 형성된 혼합 영역에서 점화 현상이 발생한

* (주)LIG NEX1, PGM R&D Lab.

** (주)뉴로스

***서울대학교 기계항공공학부

† 연락저자, enjis@snu.ac.kr

후, 충격과 상호작용에 의해 형성된 튜브 중앙 영역의 혼합 영역에서 2차적으로 점화된다. 이후, 2개의 반응영역이 하류로 전파되면서 하나의 화염으로 합쳐지게 된 후 튜브 단면전체를 채우게 된다. 합쳐진 화염은 튜브를 빠져나간 후 튜브 바깥에 화염이 존재할 수 있을 정도의 에너지를 공급하는 역할을 하게 되며 확산화염이 지속적으로 유지한다. 이러한 점화 메커니즘에 대한 고찰은 참고문헌 [7-8] 보다 자세하게 기술되어 있다. 이와 같은 메커니즘에 의하면 튜브 내 고압 수소의 자발 점화가 발생하기 위해서는 1)공기를 충분히 가열할 수 있는 강한 충격파가 발생되기 위한 높은 파열 압력, 2)수소/공기 혼합이 발생되도록 충격파의 다차원적 상호작용이 발생될 수 있는 파열막 형상, 3)수소와 공기가 충분히 혼합될 수 있는 튜브 길이가 반드시 필요한 것으로 여겨진다. 이중 충분히 높은 압력에서 격막이 파열된다면 혼합을 유도할 수 있는 파열막 형상은 점화에 있어 매우 중요한 요인이 된다.

그러나 이러한 메커니즘은 모두 궁형 파열막 형상의 연구결과로부터 유추된 것이다. 튜브 내 형성되는 유동의 발달 및 점화 메커니즘은 파열막의 형상에 따라 민감하게 달라질 수 있다. 실제, 튜브 내부 가시화를 통한 실험적 연구를 수행한 연구결과 [9]는 기존의 수치해석 결과 또는 앞서 언급한 메커니즘과 다른 점화 양상을 보여준다. 따라서 파열막의 형상에 대한 영향을 살펴보는 것은 튜브 내 누출되는 고압 수소의 자발 점화 현상을 분석하는데 반드시 필요하다. 이에 본 연구에서는 계산 자원의 한계를 고려하여 2차원 수치해석을 통해 격막의 형상을 모사하는 파열막 형상을 다르게 적용함으로써 튜브 내 발생하는 고압 수소의 자발 점화 현상에 대한 발생 메커니즘 및 그 경향성을 분석하고자 하였다.

2. 수치해석 방법

2.1. 수치기법

수치해석은 화학종을 고려한 비정상, 압축성 축대칭 Navier-Stokes방정식을 사용하였다. 지배방정식의 차분은 유한차분법을 기반으로 각 셀의 경계에서는 Euler 방정식의 rotational invariance 특성을 이용하여 셀 경계에서의 Riemann problem이 1차원 시스템이 되도록 하였다[10]. 근사리만 해법으로는 Toro에 의한 Harten-Lax-van Leer contact(HLLC) 기법[10]을 사용하였으며 강한 충격파가 발생하는 경우 Harten-Lax-van Leer(HLL) 기법으로 변환하여 근사리만 해법의 수치적 불안정성 발생을 억제하도록 하였다[12]. HLL 기법은 매우 강건하며 엔트로피 조건을 만족함과 동시에 충격파 해석에 문제가 없으며 po-

sitivity 보존 특성을 만족한다. 따라서 강한 충격파 발생 시 수치적 불안정성 제거를 위해 국부적으로 사용하여도 문제가 없으며[12,14] 전체적인 해의 정확도에 큰 영향을 미치지 않는 것으로 알려져 있다[11-12]. 수치플럭스의 고차정확도는 Weighted Average Flux(WAF) 기법을[10,12] 사용하였으며 TVD 특성은 MINBEE(Minmod) limiter[10,12]를 사용하여 구현하였다. 점성플럭스의 계산은 Crank-Nicolson 방법을 적용하였다. 화학종의 비열 및 비열비는 NASA의 열역학 데이터 베이스[13]를 사용하였으며 각 화학종의 전달계수(점성계수, 열전도계수, 확산계수)는 기체 운동학 이론[14-15]를 이용하여 계산하였다. 혼합물의 전달계수는 Mixture-Averaged Method[14-15]를 사용하였다. 화학반응을 위한 소스항은 RADAU5[16]를 이용하여 Stiff ODE를 계산하도록 하였다. 수소-공기 화학반응 모델은 고압유동을 고려하여 Mueller [17]의 메커니즘에 기반한 Li 등[18]이 제안한 9화합종(H_2 , O_2 , H , O , OH , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , N_2), 19단계 모델을 사용하였다. 점성플럭스 및 화학반응의 계산과 고차의 시간적분은 splitting method (Strang splitting) [10,19]를 적용하였다.

2.2. 해석 방법

Fig. 1은 본 연구에서 수행된 해석 영역을 나타낸다. 해석된 튜브의 직경은 10.9 mm로 축대칭 경계조건을 이용하여 해석 시간을 절감하였다. 길이 방향으로는 격막으로부터 상류, 하류 100 mm를 해석 대상으로 하였으며 해석 영역에 대한 경계조건은 다음과 같다. 튜브 벽면에서는 단일 점착 조건을 적용하였고, 튜브 양 끝단에서는 충격파 또는 팽창파가 반사되어 주 유동을 교란하지 않도록 외삽 조건을 적용하였다. 튜브 중앙의 대칭축에 대해서는 비점착 경계 조건을 적용하였다. 초기 온도 조건으로는 수소와 공기 영역 모두 300 K로 설정하였고 수소의 초기 압력은 10 MPa, 공기의 초기 압력은 0.1 MPa로 고정하였다. 10 mm의 균일한 정렬 격자계를 이용하여 해석하였으며 본 해석에서는 총 800만개의 격자가 사용되었다.

본 연구에서는 Fig. 2와 같이 파열막 형상을 모사하는 조건으로 크게 궁형과 평면형 두 가지로 구분

Fig. 1. Computational domain.

Fig. 2. Busting shape of rupture disk.

하고, 각각의 형상에 대해 격막 파열 후 격막의 가장자리 테두리가 남는 형상과 없는 형상으로 구분하여 총 4가지 형상에 대해 적용하였다. 실제 현실에서 적용되는 격막은 모두 파열 압력까지 차츰 부풀어 오른 후 파열되는 궁형 형상이지만, 형상이 점화에 미치는 영향을 보다 명확히 분석할 수 있도록 비현실적인 평면형 파열막 조건을 비교 대상으로 하였다. 자세한 형상에 대한 정보는 다음과 같다.

- (a) 부분 궁형: 일반적으로 스틸 또는 두꺼운 마일러(Mylar)재질의 격막이 파열되는 조건으로 파열 후 격막 가장자리에 테두리가 형성되는 경우
- (b) 완전 궁형: 얇은 마일러 필름의 격막이 파열될 때의 모사 조건으로 격막 파열 후 가장자리 테두리 부분이 남지 않는 조건
- (c) 부분 평면: 궁형 압력 파열막 형상 조건의 영향을 파악하기 위한 가상의 평면 파열 조건 중 테두리가 존재하는 조건
- (d) 완전 평면: 가상의 평면 조건 중 테두리가 남지 않는 조건

3. 결과 및 논의

3.1. 궁형 파열막 형상

Figure 3에 10 MPa의 파열 압력에 대한 부분 궁형 파열막 형상에 대한 결과를 제시하였다. (a)에 수치적 쉘리엔 이미지와 OH 선도를 겹쳐 표현함으로써 초기 유동의 형성 과정 및 점화 메커니즘을 2 ms 간격으로 자세히 제시하였다. 그림에 제시된 쉘리엔 이미지는 유동장의 밀도 구배를 촬영하는 쉘리엔 가시화 기법의 기본 원리를 이용하여 모든 해석 영역에 대해 식 (1)과 같이 적용하여 표현하였다.

$$|\nabla \rho| = \sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)^2} \quad (1)$$

Fig. 3에 제시된 10 MPa 파열 압력 및 부분 궁형 파열막 형상 조건이 적용된 수치해석의 결과는 기존의 8.9 MPa의 파열 압력과 12 mm의 튜브 직경이 적용된 연구 결과[7]와 매우 유사하며 앞서 언급한 점화 메커니즘을 따라 점화되는 양상을 보여준다.

본 논문에서는 해석 시작 순간을 격막 파열 시점, 즉 0 ms 시점으로 간주하였다. 부분 궁형 파열막 조건의 경우, 궁형 충격파의 발생 및 반사와 함께 격막 가장자리로부터 발생한 유동 교란에 의해 튜브 내 복잡한 유동장이 형성된다. 격막 파열 후 우선적으로, 격막의 가장자리로부터 유도된 교란 때문에 경계층 영역에 혼합 및 반응영역이 발생하기 시작한다. 한편, 격막 파열로 인해 발생한 충격파는 6 ms 시점에 튜브 벽면에 반사되어 튜브 중앙 영역에 큰 압력의 제트를 형성한다. 8 ms에서는 튜브 중앙 영역에 충격파 상호작용으로 발생한 제트로 인해 진행되는 충격파의 형상이 달라진다. 동시에 유동이 동그랗게 말려지는 원형의 와류(vortex ring)도 함께 발생한다. 형성된 와류는 충격파에 의해 데워진 공기와 고압 영역으로부터 팽창되는 차가운 수소의 혼합을 유도하고 일정 시간 후 연소 반응이 발생되도록 한다. 따라서 이러한 와류는 수소의 자발 점화에 있어 매우 중요한 영향을 미치는 것으로 보인다. 이후 중앙의 와류에 의해 형성된 혼합 영역이 하류로 흐르면서 점차 그 영역이 확산됨에 따라 반응영역 역시 발달하게 된다.

Fig. 3(b)와 (c)에 혼합 및 반응영역을 비교 관찰할 수 있도록 수치적 쉘리엔 이미지, 당량비, OH 분포 및 축방향 속도성분 선도를 10 ms 시간 간격으로 제시하였다. 특히, (b)의 경우, 쉘리엔 이미지 위에 당량비를 겹쳐 표현하였다. 이로써 순수 수소 및 공기만 있는 영역, 즉 당량비가 0 또는 1인 영역은 투명하게 처리하여 혼합영역의 관찰을 용이하도록 하였다. 앞서 (a)에서 언급한 바와 같이 10 ms에서 발생한 튜브 중앙의 와류에 의한 혼합 영역은 점차적으로 유동이 하류로 전파되면서 그 영역이 증대된다. 격막 파열 후, 40 ms 정도에서 경계층 영역에서 발달하고 있는 반응 영역과 튜브 중앙 영역에서 발달하고 있는 반응 영역이 합쳐지면서 큰 화염으로 전파됨을 알 수 있다. 기 수행된 연구결과[8]에 의하면 자발 점화된 화염이 튜브 밖에서 안정화 되기 위해서는 튜브 내 화염이 튜브 단면 전체로 전파되어 충분한 에너지를 지속적으로 공급할 수 있어야 한다. 반면, 점화 영역이 튜브 경계층 부분에만 국소적으로 존재하는 경우, 튜브 밖으로 나온 화염은 급속히 팽창되면서 소멸된다. 이러한 기존 결과에 의하면, 10 MPa 파열 조건에서는 경계층에서 발생하는 혼합 영역과 충격파의 상호작용으로 인해 발생하는 중앙 영역의 혼합 영역 모두 자발 점화를 발생시키는데 있어 중요한 요소가 됨을 유추할 수 있다.

Fig. 4에 완전 궁형 파열막 형상 조건에 대한 수치해석 결과를 Fig. 3과 동일한 방식으로 제시하였다. 격막 파열 후, 초기 6 ms까지는 유동의 발달이 Fig.

(a) Initial flow development and ignition process

(b) Schlieren image and equivalence ratio

(c) OH radical distribution and axial velocity

Fig. 3. Partial spherical bursting shape.

(a) Initial flow development and ignition process

(b) Schlieren image and equivalence ratio

(c) OH radical distribution and axial velocity

Fig. 4. Full spherical bursting shape.

3의 부분 궁형 파열막 형상 조건과 유사하며 큰 차이를 보이지 않는다. 그러나 튜브 중앙 영역에 충격파와 상호작용으로 인한 제트 영역이 형성되는 8 ms 이후에는 유동의 발달이 다르게 관찰된다. Fig. 4(b)에 보이는 바와 같이 튜브 중앙에 형성된 원형 와류에 의한 혼합 및 반응 영역이 격막 파열 후 20 ms 이후에는 점차 소멸된다. 대신 Fig. 4(a)와 (b)에 보이는 바와 같이 경계층에서 시작한 반응영역만이 점차 발달된다. 즉, 튜브 중앙에서 형성된 혼합 및 반응영역이 점차 소멸됨으로써 경계층으로부터 형성된 혼합 및 반응 영역과 합쳐지지 못한다. 이로 인해 튜브 내 반응영역은 경계층으로부터 발달된 영역으로만 형성된다. 이 때문에 부분 궁형 파열막 조건에 비해 반응 영역이 대체로 적어보이며, 튜브 전체로 화염이 전파되는 걸리는 시간 역시 10 ms 이상 느리게 나타난다.

이는 완전 궁형 파열막의 경우, (c)의 축방향 속도에 보이는 바와 같이 튜브 중앙 와류 형성 영역에 국소적으로 매우 빠른 속도 영역이 존재하기 때문인 것으로 보인다. 완전 궁형 조건의 경우, 격막 파열 후 유동 형성 초기 단계에 충격파의 반사 작용 등 유동의 발달이 부분 궁형 압력 조건의 경우와 다르게 관찰된다. 이는 튜브 중앙 영역에 와류를 발생시키는 제트가 매우 미약하게 발생하기 때문이다. 이로 인해 부분 궁형 압력에 비해 튜브 중앙에 수소가 침투하지 못하며 와류 영역 또한 미약하게 발생한다. 동시에 공기 영역은 매우 빠르게 하류로 전파되면서 튜브 중앙의 반응영역이 급속히 소멸된다.

이러한 결과는 튜브 내 발생하는 점화 양상이 튜브 중앙에서 발생한 반응영역에 대한 중요성을 강조한 기존의 결과와 상당히 다르다. 다시 말해, 튜브 내 자발 점화에는 파열 격막의 형상에 따라 튜브 내 중앙에서 발생할 수 있는 반응보다는 경계층에서 시작하는 반응이 더 큰 역할을 할 수 있으며 경계층에서 발생하는 반응 영역만으로도 자발 점화가 가능할 수 있음을 제시한다.

3.2. 평면형 파열막 형상

Fig. 5는 부분 평면 파열막 형상에 대한 수치해석 결과이다. 부분 평면 파열막 조건은 격막 파열 후 초기 유동 발달 과정이 이전 궁형 파열막 조건과 다르게 관찰된다. 초기 파열막 형상 조건이 평면이므로 파열 후 평면형 충격파가 발생하며 튜브 내 충격파/충격파 및 충격파/경계층 상호작용이 발생되지 않는다. 단지, 튜브 벽에 존재하는 격막의 가장자리로부터 유동의 교란이 발생하면서 충격파가 형성되고 이로부터 벽면에 반사되는 충격파들이 관찰된다. 4 ms 시점에 튜브 중앙으로 반사되어 온 충격파가 모이

(a) Initial flow development and ignition process

(b) Schlieren image and equivalence ratio

(c) OH radical distribution and axial velocity

Fig. 5. Partial plane bursting shape.

긴 하지만, 제트가 전혀 형성되지 않으면서 수소/공기 접촉면의 형상이 변화되지 않는다.

이러한 이유로 튜브 내 중앙영역에 수소가 침투하지 않으며 와류 영역 및 그로 인한 혼합 영역이 발생하지 않고 반응 영역 또한 발생하지 않는다. 다만, 격막 가장자리의 테두리로부터 발생한 왜란 때문에 미약하지만 경계층에 영역에서는 혼합 영역 및 반응영역이 40 ms 이후 발생한다. 이후 이러한 반응 영역이 하류로 점차 발달됨을 (b)와 (c)로부터 관찰할 수 있다.

따라서 평면 파열막 형상 조건이 적용된 경우, 발생한 반응영역이 협소하며 튜브 전체에 화염이 전파되는데 걸리는 시간이 상당히 긴 것으로 나타난다. 실제 해석 결과, 부분 평면 파열막 형상의 결과 격막 파열 후 70 ms에도 화염이 튜브 전체로 확산되지 못하고 있다. 즉, 평면 파열막 조건이 적용되는 경우, 수소와 공기가 혼합 및 점화 된 후 화염이 튜브 전체로 전파되는데 긴 튜브의 길이가 필요할 것으로 판단된다.

Fig. 6에 완전 평면 파열막 형상 조건을 적용한 수치해석 결과를 제시하였다. (a)는 쉐리렌 이미지로서 생성된 충격파는 어떠한 간섭없이 하류로 전파되며

(a) Schlieren image

(b) Density and temperature contours

Fig. 6. Full plane bursting shape.

유동 역시 특별한 특성이 나타나지 않는다. 앞서 제시한 궁형 및 부분 평면 파열막 조건의 수치해석 결과로 예측할 수 있듯이, 완전 평면 파열막이 적용된 경우는 수소와 공기의 혼합 과정 및 반응 과정이 공기와 수소의 얇은 접촉면을 제외하고는 나타나지 않았다. 이는 충격파/충격파 또는 충격파/경계층 상호작용에 의한 튜브 중앙영역에 혼합 영역이나 격막 가장자리에 의한 유동 왜란이 존재하지 않으면서 수소와 공기가 혼합되는 현상이 나타나지 않기 때문이다. 따라서 완전 평면 파열막 형상 조건이 적용된 경우, 튜브 내 점화 현상이 발생하지 않는다.

이상의 결과로부터 평면형 파열막 형상 조건이 적용되는 경우, 충격파간 상호작용이 발생하지 않으며, 이 때문에 궁형 형상 조건에 비해 혼합 및 반응 영역의 발생이 미미한 것으로 판단된다.

4. 결론

본 논문에서는 수치해석을 통해 파이프 내 고압 수소 가스의 누출에 의한 자발점화 현상에 대한 파열막 형상의 영향을 파악하였다. 본 논문에 제시된 수치적 결과는 2차원 해석의 결과로 실제 3차원 난류 유동을 완전히 모사할 수 없는 한계가 있으나, 본 논문에서 다루고자 하는 유동 및 연소 현상의 경향성을 파악하는 것은 가능하였다.

수치해석 결과는 파열막 형상에 따라 점화 양상이 다르게 발생함을 보였다. 궁형 파열막 조건의 경우, 충격파 간 상호작용에 의해 튜브 중앙에 와류에 의한 혼합 및 반응 영역이 발생한다. 그러나, 부분 궁형 파열막 조건에서만 중앙의 혼합 영역이 자발 점화에 영향을 미친 것으로 나타났다. 완전 궁형 조건의 경우, 중앙의 와류가 빠르게 소멸되면서 전체적인 자발 점화에 큰 역할을 하지 못하는 것으로 관찰되었다. 이 경우, 경계층에서 생성된 반응 영역만이 지속적으로 발달하고 튜브 전체로 전파되면서 자발 점화를 유도하는 중요한 요인으로 작용하였다. 이러한 현상은 비현실적이지만 평면 파열막 조건의 결과로부터 보다 명확하게 나타난다. 평면 파열막 형상 조건이 적용되는 경우, 충격파간 상호작용이 발생하지 않기 때문에 튜브 중앙 영역에 혼합 및 반응 영역이 발생하지 않는다. 다만, 부분 평면 파열막 조건의 경우, 격막 외부 가장자리 영역에서 발생하는 유동의 교란 때문에 경계층 영역에서 시작된 반응 영역이 발달하는 것으로 관찰되었다.

이상의 연구 결과는 튜브 내 누출되는 고압 수소의 기존의 점화 메커니즘과 달리, 파열되는 격막의 형상에 따라 튜브 내 중앙에서의 반응영역보다는 경계층에서 발달하는 반응영역이 자발점화에 있어 보다 중요한 요인이 될 수 있음을 보여준다. 따라서 파

열 압력이 충분히 높아 초기 발생하는 충격파의 강도가 충분히 크면, 튜브 중앙의 반응영역 발생 유무와 무관하게 경계층의 반응으로부터 자발 점화가 발생할 수 있을 것으로 보인다. 그러나, 본 연구 결과는 파열 압력 10 MPa에만 해당하는 결과로 보다 일반적인 점화 양상을 파악하기 위해서는 고압의 파열 조건에 대한 분석도 함께 요구될 것으로 판단된다.

참고문헌

- [1] Astbury GR, Haworth SJ. 2007, Spontaneous ignition of hydrogen leaks : a review of postulated mechanism, *Int J Hydrogen Energy*, Vol. 32, No. 13 pp. 2178-2185
- [2] Wolanski H, Wojcicki S. 1973, Investigation into the mechanism of the diffusion ignition of a combustible gas flowing into an oxidizing atmosphere, In *proceedings of the 14th symposium on combustion*, pp. 1217
- [3] Dryer FL, Chaos M, Zhao Z, Stein JN, Alpert JY, Homer CJ. 2007, Spontaneous ignition of pressurized releases of hydrogen and natural gas into air, *Combust Sci Tech*, Vol. 179, No. 4, pp. 663-694
- [4] Mogi T, Kim D, Shiina H, Horiguchi S. (2008). Self-ignition and explosion during discharge of highpressure hydrogen. *J Loss Prevent Proc*. 21 (2):199-204.
- [5] Golub VV, Baklanov DI, Golovastov SV, Ivanov MF, Laskin IN, Saveliev AS, Semin NV, Volodin VV. 2008, Mechanisms of high-pressure hydrogen gas self-ignition in tubes, *J of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 21, pp.185-198
- [6] Xu BP, El H, Wen JX, Demele S, Tam VHY, Donchev T. 2008. Numerical study on the spontaneous ignition of pressurized hydrogen release through a tube into air. *J Loss Prevent Proc*. 21 (2):205-213.
- [7] Lee BJ, Jeung IS. 2009, Numerical study of spontaneous ignition of pressurized hydrogen released by the failure of a rupture disk into a tube, *Int J Hydrogen Energy*, Vol. 34, pp.8763-8769
- [8] Lee HJ, Kim YR, Kim SH, Jeung IS. 2011, Experimental investigation on the self-ignition of pressurized hydrogen released by the failure of a rupture disk through tubes, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 33 pp. 2351-2358
- [9] Kim YR, Lee HJ, Kim SH, Jeung IS. 2012, A flow visualization study on self-ignition of high pressure hydrogen gas released into a tube, *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, No. 2, 2013, 2057-2064
- [10] Toro EF. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. Springer 1999.
- [11] Quirk JJ. A Contribution to the Great Riemann Solver Debate. *Int J Numer Method Fluid* 1994; 18:555-574.
- [12] Kim SD, Lee BJ, Lee HJ, Jeung I-S. Robust HLLC Riemann solver with weighted average flux scheme for strong shock. *J Computational Physics* 2009; 228(20):7634-7642
- [13] http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/vers-ion30/files30/thermo30.dat.
- [14] Law CK. *Combustion Physics*. Cambridge University Press 2006.
- [15] Kee RJ, Coltrin ME, Glarborg P. *Chemically reacting flow: theory and practice*. Wiley-Interscience 2003.
- [16] Hairer E, Wanner G. *Solving ordinary differential equations II: stiff and differential-algebraic problems*. Springer; 2004.
- [17] Mueller MA, Yetter RA, Rryer FL. Flow reactor studies and kinetic modeling of the H₂/O₂/NO_x and CO/H₂O/O₂/NO_x reactions. *Int J Chem Kinet* 1999;31(10):705-24.
- [18] Li JL, Zhao Z, Kazakov A, Dryer FL. An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion. *Int J Chem Kinet* 2004;36(10):566-75.
- [19] Oran ES, Boris JP. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. Cambridge University Press 2001.