

하이브리드 촉매 연소기의 연소특성에 관한 수치적 연구

황철홍* · 정영식** · 이창언***

Numerical Studies on Combustion Characteristics of a Hybrid Catalytic Combustor

Chul Hong Hwang, Young Sik Jeong and Chang Eon Lee

Key Words: Catalytic Combustion, Hybrid Catalytic Combustor, Platinum(Pt), Methane(CH₄)

Abstract

The hybrid catalytic(catalytic+thermal) combustor of a lean methane-air mixture on platinum catalyst was investigated numerically using a 2-D boundary layer model with detailed homogeneous and heterogeneous chemistries. For the more accurate calculations, the actual surface site density of monolith coated with platinum was decided by the comparison with experimental data. It was found that the homogeneous reactions in the monolith had little effect on the change of temperature profile, methane conversion rate and light off location. However, the radicals such as OH and CO were produced rapidly at exit by homogeneous reactions. Thus the homogeneous reactions were important to predict the productions of CO and NO_x exactly. In thermal combustor, the production of N₂O was more dominant than that of NO due to the relative important of the reaction $N_2+O(+M)\rightarrow N_2O(+M)$. Finally the production of CO and NO_x by amount of methane addition were studied.

1. 서론

촉매연소는 촉매 표면에서의 반응물의 확산, 흡착, 반응, 탈착 및 생성물의 확산 등의 단계를 통해 일어나는 비균질(Heterogeneous)반응, 일반적인 가스반응에 해당하는 균질(Homogeneous)반응과 열 및 물질 전달 과정에 의해 지배되는 매우 복잡한 현상이다. 이러한 촉매연소는 기존의 가스연소에 비해 매우 희박한 조건과 비교적 낮은 온도에서도 높은 연소 효율을 달성할 수 있는 연소방식이다. 또한, 안정화 영역이 넓고 연료의 호환성이 좋으며, 연소 시 발생하는 NO_x, CO 및 미연탄화수소(UHC)의 발생을 최소화하는 면에서 에너지 절약과 환경오염 문제를 동시에 만족시키는 중요한 연소기술이라 할 수 있다.

이 분야의 연구는 크게 고온에서도 높은 활성과 내구성을 가지는 촉매 개발에 관한 연구와 촉매의 비활성 및 손실을 방지하면서도 높은 연소 효율을 얻기 위한 연소기 설계에 관한 연구로 나누어진다. 그러나 고온용 촉매 개발에는 많은 시간과 노력이 요구되기 때문에, 현재는 주로 촉매 연소기 개발에 관한 연구가 이루어지고 있다. 특히, 촉매 내에서 연료의 일부분을 산화시킨 뒤 촉매층 하류에서 완전 연소시키는 “촉매 안정화(Catalytically Stabilized) 연소기”와 추가적으로 연료를 분사하는 “하이브리드(Hybrid) 촉매 연소기”에 관한 연구가 활발히 진행되고 있다.^(1, 2)

복잡한 촉매반응을 해석하기 위한 표면 반응기구로, 초기에는 CH₄의 일단계 총괄반응식이 주로 사용되었으나, 그후 Deutschmann 등⁽³⁾에 의해 주요 화학종의 흡·탈착 반응에 관한 표면 상세 반응기구가 제시되었으며, 최근에 Chou⁽⁴⁾에 의해 저온에서 지배적인 CH₄의 흡착반응이 추가되어 백금 촉매 위에서 CH₄의 표면반응을 비교적 근

* 인하대 기계공학과 대학원

** 인하공업전문대 기계과 겸임교수

*** 인하대 기계공학과

접하게 예측할 수 있게 되었다. 그러나 이들 연구는 촉매 내에서의 가스반응의 영향이 작다는 가정에 의해 표면반응만을 이용하여 해석하고 있으나, 실제 가스반응이 촉매 연소부 및 Thermal 연소부에 미치는 영향에 대한 연구는 아직 미흡한 상태이다. 더욱이 Thermal 연소부에서 상세한 반응기구를 이용한 연구도 역시 부족한 실정이다. 그리고, 촉매 연소기의 공해물질 발생특성에 대해, Schlegel⁽⁵⁾은 실제 운전조건과는 다소 상이한 희박한 예혼합 상태의 촉매 연소와 무촉매 연소를 비교하여 NOx 생성을 검토하였으며, Dalla Betta⁽⁶⁾는 연료조성 및 체류시간에 따른 CO의 발생경향에 대해 연구하였으나, 여러 운전조건에 대해 보다 상세한 검토가 요구되고 있다.

본 연구에서는 Hybrid 촉매 연소기를 촉매 연소부와 Thermal 연소부로 구분하였으며, 우선 표면반응을 고려한 경우와 가스반응까지 동시에 고려한 경우의 차이점을 분석하여 가스반응이 촉매 연소기에 미치는 영향을 검토하였다. 또, Thermal 연소부에서 추가 연료 분사에 따른 CO 및 NOx 생성특성을 상세 반응기구를 이용하여 규명하고자 한다.

2. 수치해석적 방법

2.1 연구대상 및 계산방법

본 연구에서는 Fig. 1과 같이 압력손실이 적고 표면적이 넓은 하니컴 형태의 monolith에 백금을 담지한 촉매 연소기를 연구대상으로 하였다.

촉매 입구부분에서 모든 채널들이 동일한 조건에서 작동되고 변수들의 분포가 균일하며, 전체적으로 단일조건이라는 가정 하에 단일채널 모델을 사용하였다. 일반적으로 촉매 지지체는 정사각형 모양의 셀로 구성되어 있는데, 제조과정에서 모서리 부분에 촉매물질과 피막제가 축적되어 원형에 가까운 단면구조를 형성하므로 2차원 원통형 촉매칭 형상으로 가정하였다. 그리고 단일채널의 직경은 0.15 cm, 길이는 8 cm로 하였으며, 초기조건으로 Bond⁽⁷⁾의 실험조건과 동일하게 당량비는 0.39, 온도는 867 K, 유속은 730 cm/s, 압력은 1 atm으로 하였다.

Thermal 연소부에서 직경은 층류 영역 내에서 자세한 반응을 검토하기 위하여 0.15 cm로 하였으며 길이는 80 cm로 하였다. 그리고 초기 당량

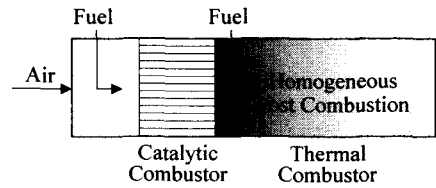


Fig. 1 Schematic of hybrid catalytic combustor

비가 0.39 일 때의 촉매 연소부 출구의 평균값을 초기조건으로 하였고, 고온의 배기가스의 반응만을 해석한 경우와 추가 연료를 균일하게 분사한 경우로 구분하여 계산을 수행하였다.

2.2 지배방정식

본 연구의 계산 대상인 Monolith 내의 촉매연소 현상은 경계층 근사가 가능하여 정상(Steady) 2차원 포물선형 편미분 방정식으로 근사화 할 수 있으며, Von Mises의 좌표변환을 이용하여 원통 좌표를 x 와 ϕ 좌표계로 변환한 후에 총 질량 유량을 이용하여 ϕ 좌표를 무차원 유동함수 ξ 로 변환하면 지배방정식은 식 (1)~(4)로 나타내어진다.⁽⁸⁾

운동량 보존식

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\rho u}{M} \left(\xi \frac{dM}{dx} - \frac{dM_l}{dx} \right) \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{dp}{dx} = \frac{\rho u}{M^2} \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho u \mu r^2 \frac{\partial u}{\partial \xi}) + g(\rho_i - \rho) \quad (1)$$

화학종 보존식

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} - \frac{\rho u}{M} \left(\xi \frac{dM}{dx} - \frac{dM_l}{dx} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} = \dot{\omega}_k W_k - \frac{\rho u}{M} \frac{\partial}{\partial \xi} (r \rho Y_k V_k) \quad (k=1 \sim K_g) \quad (2)$$

에너지 보존식

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\rho u c_p}{M} \left(\xi \frac{dM}{dx} - \frac{dM_l}{dx} \right) \frac{\partial T}{\partial \xi} = \frac{\rho u}{M^2} \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho u \lambda r^2 \frac{\partial T}{\partial \xi}) - \sum_{k=1}^{K_s} \dot{\omega}_k W_k h_k - \frac{\rho^2 u r}{M} \sum_{k=1}^{K_s} Y_k V_k c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial \xi} \quad (3)$$

상태 방정식

$$p = \frac{\rho RT}{W} \quad (4)$$

여기서 x 는 축방향 좌표이고 ξ 는 무차원 유동 함수이다. 또한 u 는 축방향 속도, Y_k 는 화학종 k 의 질량분율, T 는 온도, c_p 는 비열, p 는 압력, μ 는 점성계수 λ 는 열전도도, \bar{W} 는 평균분자량, $\dot{\omega}_k$ 은 생성율이며, 반경방향 확산속도 V_k 는 식 (5)로 계산한다.

$$V_k = \frac{\rho u r}{X_k \bar{W} M} \sum_{j=1}^{K_g} W_j D_{kj} \frac{\partial X_j}{\partial \xi} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{\rho u r}{T M} \frac{\partial T}{\partial \xi} \quad (5)$$

위 식에서 X_k 는 화학종 k 의 몰분율, W_j 는 분자량, D_{kj} 는 다성분 확산 계수, D_k^T 는 열 확산계수이다.

벽면(촉매표면) site fraction 방정식

$$\frac{\partial Z_k}{dt} = \frac{s_k}{\Gamma} = 0 \quad (k = K_g + 1, \dots, K_g + K_s) \quad (6)$$

여기서 Z_k 는 화학종 k 의 surface coverage, Γ 는 촉매의 site density, s_k 는 표면반응에 의한 생성율을 의미한다.

벽면에서의 경계조건

벽면에서의 화학종 보존식에 대한 경계조건은 식 (7)과 같다.

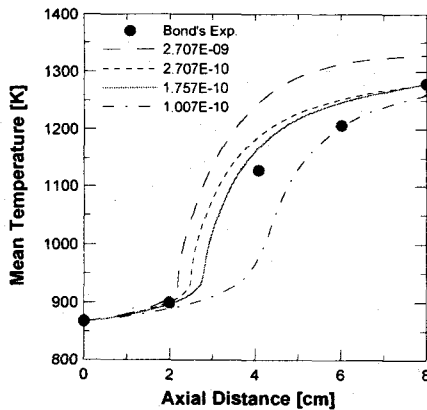


Fig. 2 Relationship between mean temperature and surface site density

$$(J_k + \rho \bar{v} Y_k) \cdot \vec{n} = s_k W_k \quad (k = 1 \sim K_g) \quad (7)$$

여기서, J_k 는 확산 질량유량, \bar{v} 는 평균 스테판 (Stefan) 유속을 나타내며, 식 (8)과 같이 정의된다.

$$\bar{v} = \frac{1}{\rho} \left(\sum_{k=1}^{K_g} s_k W_k \right) \vec{n} \quad (8)$$

벽면에서의 에너지 보존식에 대한 경계조건은 식 (9)와 같으며, 벽면의 축방향에 대한 전도와 복사 열전달의 영향은 무시되었다.

$$\left\{ \lambda \frac{\partial T}{\partial r} - \sum_{k=1}^{K_g} (J_k + \rho Y_k \bar{v}) h_k \cdot \vec{n} \right\}_g = \sum_{k=K_g+1}^{K_g+K_s} s_k W_k h_k \quad (9)$$

본 연구에서는 CRESLAF Code⁽⁸⁾를 수정하여 계산을 수행하였으며, 가스 및 촉매 표면 화학종의 열역학 물성치와 전달물성치는 CHEMKIN-II⁽⁹⁾와 SURFACE CHEMKIN(Ver 4.0)⁽¹⁰⁾ 그리고 TRANFIT Package⁽¹¹⁾를 이용하여 계산하였다.

2.3 표면 및 가스 상세 반응기구

백금 촉매 위에서 CH_4 의 표면반응을 고려하기 위하여 Chou⁽⁴⁾에 의해 제안된 상세 표면반응기구를 이용하였으며, 가스반응에는 49개의 화학종과 279개의 가역반응으로 구성되어 있는 GRI 2.11⁽¹²⁾ 상세 반응기구를 사용하였다.

촉매 연소부에서는 표면반응만을 고려한 경우와 가스반응을 동시에 고려한 경우에 대해 각각 계산을 수행하였으며, Thermal 연소부에서는 Nishioka⁽¹³⁾가 제안한 반응기구 분리법을 이용하여 추가연료 분사에 따른 Thermal NO의 생성특성을 검토하였다.

3. 계산결과 및 검토

3.1 Catalytic Combustor Section

촉매표면의 site density는 단위 면적 당 촉매 활성점의 몰수를 의미하며 표면 반응속도에 중요한 영향을 준다. 실제 담지된 촉매의 이 값을 알아야만 촉매 반응을 수치해석으로 정확히 예측할 수 있다. 일반적으로 사용되는 값은 2.707E-09

mole/cm²으로,⁽³⁾ 이는 순수 백금 표면에서 측정된 값으로 담지된 촉매와는 상당한 차이를 보이고 있다. 그러나 담지된 촉매의 경우, 제조방법과 촉매체에 따라 다양한 값을 가지며, 복잡한 표면 구조에 의한 측정의 어려움 때문에 정확한 데이터가 제공되지 않고 있다. 그러므로 본 논문에서는 Bond⁽⁷⁾의 실험 결과와 비교하여 실제 사용된 촉매의 site density 값을 결정하였다.

Fig. 2는 축방향에 대한 site density의 변화에 따른 평균온도를 도시한 것이다. site density가 1.75E-10일 때 평균온도와 반응개시(light off)점이 실험 결과와 비교적 근접함을 확인할 수 있다. 이 외에도 CH₄의 변환율과 CO의 발생도 비슷한 경향을 보임을 알 수 있었으며, 이 값을 이용하여 촉매반응을 해석하였다.

Fig. 3은 촉매연소에서 가스반응의 역할을 검토하기 위하여 표면반응만을 고려한 경우(Surf)와 가스반응을 동시에 고려한 경우(Both)에 대해 온도분포를 각 축 길이에 대한 단면값으로 나타낸 것이다. 반응기구의 차이에도 불구하고 촉매연소부에서 Surf와 Both에 대해 온도의 차이가 매우 작음을 확인할 수 있었다. 즉 가스반응에 의해 생성된 중간생성물이 표면반응에 의한 온도와 CH₄의 변화에 큰 영향을 주지 못하며, 결국 표면반응만을 고려해도 온도와 반응개시점 및 CH₄의 변환율을 비교적 잘 예측할 수 있음을 알 수 있다.

Fig. 4는 Surf와 Both의 경우에 대해 OH와

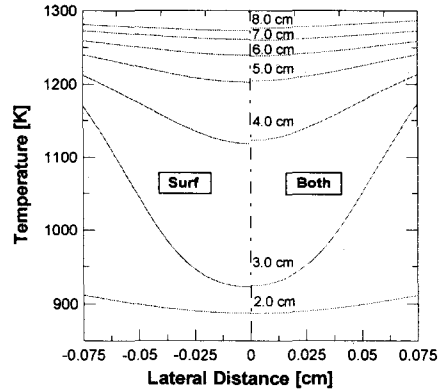
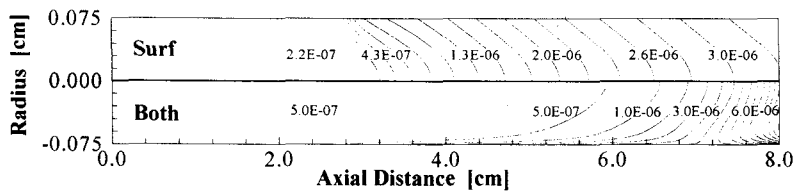
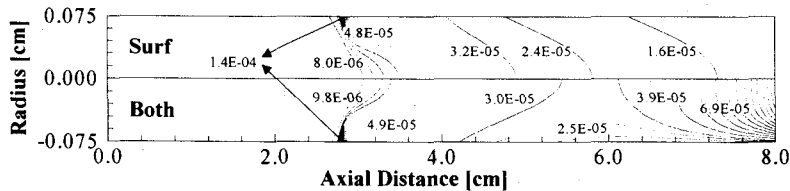


Fig. 3 Radial profiles of temperature at selected axial distance

CO의 물분율을 도시한 것이다. Both의 경우에서 가스반응의 개시를 예측하는데 중요한 화학종인 OH는 7.0 cm 이전에서는 표면반응에 의해 생성된 후 표면근처에서 다시 가스반응에 의해 소멸되지만, 출구 근처에서는 고온에 의해 급격히 생성되어 가스반응이 촉진됨을 알 수 있다. CO의 경우에는 반응개시점에서 표면반응에 의해 급격히 생성되며, 이후 표면의 빠른 산화반응에 의해 다시 소멸된다. 그리고 OH의 경우와 유사하게 출구 근처에서 Both의 경우가 Surf에 비해 CO의 생성량이 급증함을 알 수 있다. 이외에도 O와 H는 비록 매우 작은 양이지만, 유사한 경향을 보임을 확인하였다.



(a) OH mole fraction



(b) CO mole fraction

Fig. 4 Contours of CO and OH mole fraction for Surf and Both

Fig. 5는 촉매 연소부에서의 가스반응이 후류의 Thermal 연소부에 미치는 영향을 검토하기 위하여 Surf와 Both에 대한 촉매 연소부 출구의 평균값을 Thermal 연소부의 초기값으로 계산한 결과로써 Thermal 연소부에서의 CO와 NOx의 평균 몰분율을 촉매방향의 30 cm까지 도시한 것이다. Both의 경우 Surf에 비해 CO와 NOx가 앞부분에서 발생하게 되는데, 이는 위에서 언급했던 것과 같이 촉매 연소부 출구에서 가스반응을 촉진하는 라디칼의 생성에 의해 온도 및 CH₄의 변환율이 Surf에 비해 상류에서 높아지기 때문이다. 위의 내용으로 보아 촉매연소부 내에서 가스반응은 온도, 주요 반응물 및 생성물에 큰 영향을 주지 못하지만, 촉매 연소부 출구의 변화가 Thermal 연소부의 온도 및 주요 화학종의 생성소멸에 미치는 영향을 정확히 예측하기 위해서는 표면반응과 가스반응이 동시에 고려되어야 할 수 있다.

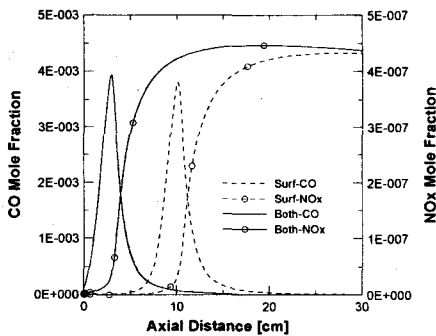


Fig. 5 Profiles of CO and NOx mole fraction for Surf and Both at thermal combustor

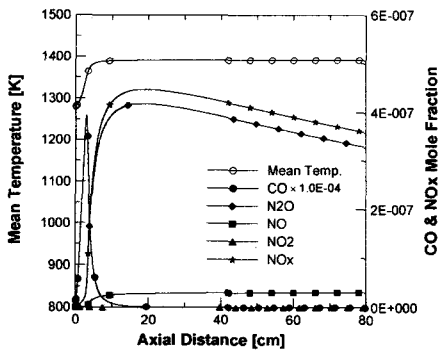


Fig. 6 Profiles of mean temperature, CO and NOx mole fraction

3.2 Thermal Combustor Section

Fig. 6은 Thermal 연소부에서 추가적인 연료의 분사가 없는 경우 평균온도와 고온영역에서 주로 발생하는 CO와 NOx를 촉매방향에 대해 도시한 것이다. 약 5 cm 부분에서 평균온도가 단열온도에 가까운, 약 1400 K에 도달하며, 그 이후 평형온도에 이르며 대부분의 CH₄이 반응하였음을 알 수 있다. CO의 경우 촉매 연소부에서는 희박한 조건과 비교적 낮은 온도에 의해 적은 양이 발생되지만, Thermal 연소부에서는 온도 상승에 따라 급격히 생성되며, 다시 빠른 산화반응에 의해 CO₂로 변환되었음을 짐작할 수 있다. NOx에 대해서, NO₂는 거의 발생되지 않으며 N₂O가 NO에 비해 매우 많은 양이 발생되고 있다. 일반적으로 N₂O는 희박한 조건과 저온영역에서 상대적으로 중요시되는데, 빠른 산화반응에 의해 소멸되는 고온연소와는 다르게 1400 K 이하의 온도에서 매우 느리게 감소됨을 볼 수 있다.

Fig. 7에는 N₂O에 대해 축길이 30 cm 내의 중심축상에서 관련 반응들(R1~R7)의 생성율을 도시하였으며, 이들 각 반응에 의한 생성율의 총합을 (○)로 표시하였다. 전반적으로 모든 반응속도는 평형온도 도달 근방에서 최고점을 이루며, 소멸에는 H와 O의 결합에 의해 N₂를 생성하는 (R3)과 (R1)반응이 크게 기여함을 알 수 있다. 생성에서 N₂가 O(+M)와 결합하여 N₂O로 변환하는 (R7)의 경우 다른 반응에 비해 10배 이상의 생성율을 나타내고 있으며, (R6)의 경우 초기 생성에 미세한 영향을 주고 있다. 즉 주요 소멸반응의 기여에도 불구하고 (R7)의 반응에 의해

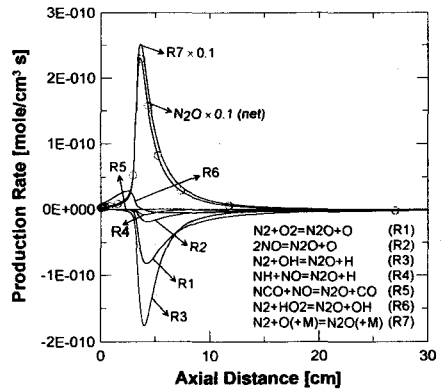
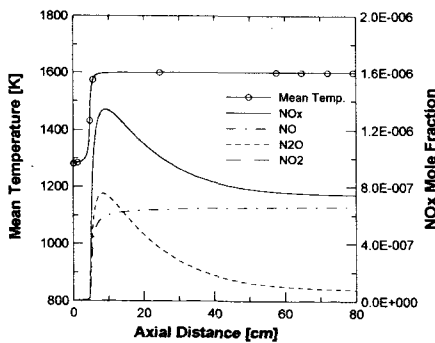


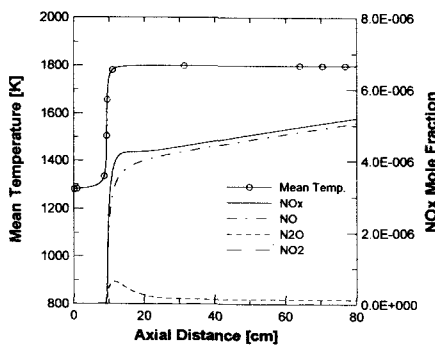
Fig. 7 Profiles of N₂O production rate by each reaction at center line

N_2O 의 생성율이 매우 높음을 확인할 수 있다. 위의 경우, 희박한 조건에서 일반 CH_4 화염의 NO_x 생성특성과 다른 이유는 촉매 연소부에서 거의 NO_x 가 생성되지 않으며, Thermal 연소부에서는 약 1400 K의 배기가스에 의해 NO_x 가 생성되므로 Zeldovich와 Fenimore 반응기구의 영향이 상대적으로 매우 작기 때문이다. 그러나 출구의 높은 온도를 얻기 위해 Thermal 연소부에 추가적으로 연료를 분사하는 경우에는 NO_x 의 발생이 상대적으로 중요시 될 것으로 기대되어진다.

Fig. 8은 촉매 연소부 입구 CH_4 의 25%와 50%의 양을 추가적으로 분사하였을 경우 각각 평균 온도와 NO_x 의 생성경향에 대해 도시한 것이다. 25%의 경우, 1600 K의 평형온도 이후 NO_x 의 생성이 급격히 증가하며, H 라디칼의 결합에 의해 N_2 를 생성하는 N_2O 의 소멸반응에 의해 전체 NO_x 의 양이 감소함을 짐작 할 수 있다. 화염의 온도가 1800 K에 도달하는 50%의 경우, 초기 미



(a) 25% CH_4 addition



(b) 50% CH_4 addition

Fig. 8 Profiles of mean temperature and NO_x when 25% and 50% of initial CH_4 were added

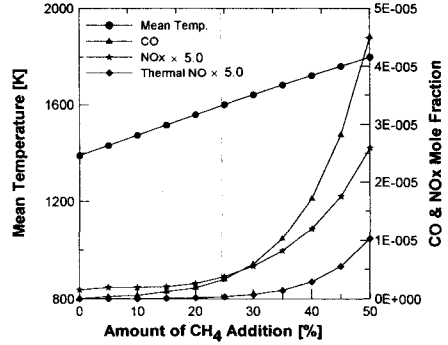


Fig. 9 Profiles of mean temperature, NO_x and CO mole fraction at the exit when CH_4 was added

량의 N_2O 발생을 제외하고 NO 가 전체 NO_x 의 대부분의 양을 차지하고 있다. 이를 통해 추가연료에 의한 화염온도의 증가에 따라 N_2O 에 비해 NO 발생이 중요시됨을 알 수 있다.

Fig. 9는 0~50%의 CH_4 를 추가적으로 분사한 경우 출구에서의 온도, CO, NO_x 와 Zeldovich 반응기구만을 고려한 Thermal NO 의 몰분율을 도시한 것이다. 추가 연료량에 따라 출구 온도는 1400~1800 K으로 증가하며, CO와 NO_x 의 생성은 급증함을 확인할 수 있다. 고온에 의해 발생하는 Thermal NO 는 1600 K 이하에서는 거의 발생되지 않으며, 추가연료 50%에서도 전체 NO_x 량에 비해 상대적으로 작은 양이 발생됨을 알 수 있다. 또 촉매연소의 주요 응용 대상인 가스터빈의 경우, 입구에서 요구되는 온도인 약 1600 K에서 출구의 CO는 약 5.9 ppm, NO_x 는 1.1 ppm으로 오염물질 저감에 대한 촉매연소의 특성을 잘 보여주고 있다.

4. 결론

본 연구에서는 가스반응이 Hybrid 촉매 연소기에 미치는 영향과, Thermal 연소부에서 추가 연료 분사에 따른 CO 및 NO_x 생성특성을 검토하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 촉매연소에서 가스반응은, 촉매 연소부의 온도, 반응개시점 및 CH_4 변환율에는 큰 영향을 주지 못하나, 주요 라디칼 농도에는 상대적으로 많은 영향을 미치며, 이로 인해 Thermal 연소부의

연소 특성에도 중요한 영향을 미침을 알았다. 따라서, Hybrid 촉매연소의 특성을 정확히 예측하기 위해서는 표면반응과 가스반응을 동시에 고려해야 한다.

2. Thermal 연소부에서 추가적인 CH₄의 분사가 없는 경우, NO_x 생성특성은 일반 연소와는 달리 NO보다 N₂O의 발생이 지배적이며, 이는 다음 반응의 상대적인 중요성에 의한 것임을 확인하였다. N₂+O(+M) = N₂O(+M)

3. Thermal 연소부에서 추가적인 CH₄ 분사량이 증가할수록 N₂O에 비해 NO의 발생량이 증가하나, Thermal NO 반응기구에 의한 발생이 지배적이지 못함을 알 수 있었다.

4. 가스터빈의 입구온도에 해당하는 약 1600 K의 경우, 출구에서 최종 NO_x와 CO의 발생량이 약 1.1 ppm과 5.9 ppm으로 매우 작음을 확인하였다.

참고문헌

- (1) S. T. Kolaczkowski, 1995, "Catalytic Stationary Gas Turbine Combustors," Trans IChemE, Vol. 73, pp. 168~190.
- (2) 황철홍, 정영식, 이창연, 2000, "백금 촉매에 의해 안정화된 메탄의 연소 특성," 제20회 KOSCO symposium 논문집, pp. 152~161
- (3) O. Deutschmann, F. Behrendt, J. Wanatz, 1994, "Modeling and Simulation of Heterogeneous Oxidation of Methane on a Platinum Foil," Catalysis Today, Vol. 21, pp. 461~470.
- (4) C. P. Chou, J. Y. Chen, G. H. Evans, W. S. Winters, 1999, "Numerical Studies of Methane Catalytic Combustion Inside a Monolith Honeycomb Reactor Using Multi-Step Surface Reactions," Comb. Sci. Tech., to be submitted.
- (5) A. Schlegel, P. Benz, T. Griffin, W. Weisentein, H. Bockhorn, 1996, "Catalytic Stabilization of Lean Premixed Combustion: Method for Improving NO_x Emissions," Combustion and Flame, Vol. 105, pp. 332~340.
- (6) R. A. Dalla Betta, D. G. Loffler, 1996,

"Selectivity Considerations in Methane Catalytic Combustion," ACS Symposium Series 638, pp 36~47.

- (7) T. C. Bond, R. A. Noguchi, C. Chou, R. K. Mongia, J. Chen, R. W. Dibble, 1996, "Catalytic Oxidation of Natural Gas over Supported Platinum: Flow Reactor Experiments and Detailed Numerical Modeling," 26th Symposium (Int.) on Combustion, pp. 1771~1778.
- (8) M. E. Coltrin, H. K. Moffat, R. J. Kee, F. M. Rupley, 1993, "CRESLAF(Ver 4.0)," Sandia Report SAND93-0478.
- (9) R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, 1989, "Chemkin-II," Sandia Report SAND89-8009B.
- (10) M. E. Coltrin, R. J. Kee, F. M. Rupley, 1994, "SURFACE CHEMKIN(Ver. 4.0)," Sandia Report SAND90-8003C.
- (11) R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Wanatz, M. E. Coltrin, J. A. Miller, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties," 1994, Sandia Report SAND86-8246.
- (12) GRI Mech. Ver. 2.11, available from www.gri.org.
- (13) Nishioka, M., Nakagawa, S., Ishikawa, Y. and Takeno, T., 1994, "NO Emission Characteristics of Methane-Air Double Flame," Combustion and Flame, Vol. 98, pp. 185~203.