

WSR에서 매연 생성에 관한 CO 첨가 효과

정태희 · 이의주[†]

부경대학교 안전공학과

Effects of CO Addition on Soot Formation in the Well Stirred Reactor

Tae-Hee Jeong · Eui-Ju Lee[†]

Department of Safety Engineering, Pukyong National University

(Received July 23, 2012; Revised September 13, 2012; Accepted October 12, 2012)

요 약

본 연구에서는 WSR에서 혼합기의 CO첨가 효과에 따른 매연의 생성특성을 규명하기 위하여 수치해석 연구를 수행하였다. 연료는 에틸렌을 사용하였으며, 산화제는 순수 공기를 이용하였다. 서로 다른 당량비 조건($\phi=2.0, 2.5, 3.0$)에서 CO의 농도를 변화시켜가며 매연 생성 특성을 조사하였다. 10%의 CO 첨가 경우에는 가장 작은 양의 CO를 유입하는 데도 불구하고, 배출되는 CO의 몰분율이 다른 당량비 경우에 비해서 최대값을 나타낸다. 이는 초기 매연이 생성되는 지점에서는 매우 적은양의 CO가 매연이나 다른 탄소화합물로 변화함을 의미한다. 매연부피분율은 CO의 첨가량이 증가함에 따라 감소되는데 매연생성에서 중요 화합종인 pyrene과 아세틸렌의 생성이 CO의 첨가에 의해 저하되기 때문이다. 또한 당량비가 2.5인 경우에 가장 많은 매연이 생성됨을 확인 할 수 있는데, 이는 연료과잉조건과 연소온도의 적절한 기여로서 설명되어 질 수 있다. 또한, 표면성장율과 중요 화합종의 농도는 매연생성에 대한 HACA(hydrogen abstraction and carbon addition)기구를 정당화한다.

ABSTRACT

Numerical investigation was performed to study on the soot formation characteristics in the WSR according to the CO addition. Ethylene and pure air were used as a fuel and an oxidizer, respectively, and three different equivalence ratios (2.0, 2.5, 3.0) were used in the calculation. The resulted CO mole fraction of 10% CO addition showed the maximum value in spite of the least CO supply. This means that the conversion of CO to soot and other carbon compounds is weakened under incipient soot formation. The soot volume fraction was decreased with increasing the CO addition because the important species for soot formation such as pyrene and acetylene, were decreased with the addition of CO. When the equivalence ratio was 2.5, the soot volume fraction shows the highest value, which results from the contribution of fuel rich condition and reacting temperature. Furthermore, surface growth rate and species concentrations justified the HACA mechanism for soot formation.

Keywords : WSR (well stirred reactor), Soot formation, Method of moment

1. 서 론

대부분의 가연물은 탄화수소계열이므로, 이러한 물질이 접화 후 화재가 발생하면 매연의 생성 및 배출은 필수불가결하다. 화재에서 생성된 매연은 인체에 매우 유해할 뿐만 아니라 피난시 가시도 감소와 플래쉬오버(flashover) 등 화재 성장에 두드러진 역할을 함으로 매연생성에 관한 연구는 화재 연구에서 매우 중요하다고 할 수 있다. 또한 매연과 더불어 배출되는 일산화탄소도 인명피해에 가장 큰 원인이고, 화재시 연료로부터 변환되는 탄소화합물이므로 매

연의 생성과 밀접한 관계가 있음은 이미 알려져 있는 사실이다. 따라서 성장된 구획실 화재와 같이 일산화탄소의 농도가 대기에 비해 상당히 과농한 상태에서 매연 생성의 특성은 화재안전 연구에 있어 큰 의미를 갖는다. 그리고, 일반적인 최근의 연소기 개발에 관련하여서는 고온 공기 연소와 더불어 연료 과잉 연소기법이 개발되고 있고, 저급한 합성가스(syngas)를 사용한 연소기의 개발이 진행되면서 일산화탄소가 첨가된 혼합기의 연소특성이 매우 중요하게 되고 있다.

일반적인 탄화수소계열 연료의 연소과정 중 매연 생성

[†]Corresponding Author, E-Mail: ejlee@pknu.ac.kr
TEL: +82-51-629-6471, FAX: +82-51-629-6463

ISSN: 1738-7167
DOI: <http://dx.doi.org/10.7731/KIFSE.2012.26.5.035>

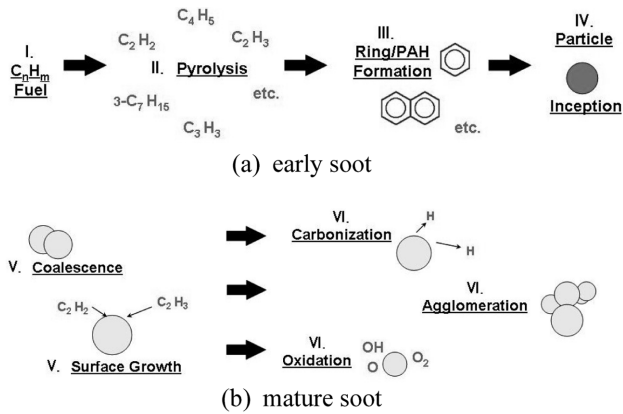


Figure 1. Process of soot evolution.

은 크게 2가지 단계로 구분할 수 있다. 즉, 연료로부터 초기 매연 입자(incipient soot)가 만들어지는 초기 단계와 만들어진 입자들간의 충돌이나 반응 등에 의해서 성장하는 단계로 나누어진다. 이 중 초기매연 단계에서는 연료의 열분해, PAH(polycyclic aromatic hydrocarbon)의 생성, 초기 매연입자 생성의 과정을 겪으므로 주로 화학반응이 지배적인 단계이다. 이 후의 과정은 입자의 표면반응과 응축(condensation), 응고(coagulation), 응집(agglomeration) 등의 과정을 거쳐 성장하거나 산화되는 복잡한 과정으로 구성되어 있는데 이는 주로 입자 동역학(particle aerodynamics)이 주된 과정으로 인식하고 있고^(1,2) 개략적인 매연생성 과정을 Figure 1에 도시하였다.

이러한 매연 형성에 대한 연구는 수십 년간 꾸준히 진행되어 왔고, 다양한 첨가제 또는 희석효과에 대해 많은 연구가 진행되었다⁽³⁻⁶⁾. 하지만, 연소장에 매연생성에 대한 일산화탄소 첨가 효과에 관한 연구는 많지 않으며, 특히 화학적 효과에 대해서는 매우 소수의 연구만이 존재한다. CO는 탄소원자를 포함하고 있지만 매연이 거의 발생하지 않는 화염(non-sooting flames)으로 알려져 있다. 그러므로 탄화수소계연료에 일산화탄소의 첨가는 희석효과(dilution effect)가 두드러질 것으로 예상된다. 그러나 탄소를 함유하고 있는 일산화탄소는 매연생성 반응기구에 참여하므로 실질적으로는 복잡한 효과가 있을 것으로 기대된다. Du 등⁽⁴⁾은 에틸렌/공기 대향류 확산화염에서 CO의 첨가시 매연 생성이 선형적으로 감소함을 관찰하였고, CO의 첨가가 초기 매연 입자(incipient soot)의 생성을 촉진시킨다고 하였다.

또한, Guo 등⁽³⁾은 제트확산화염에서 연료측에 CO를 첨가하여 매연의 표면 성장률과 같은 자세한 화학반응 기구를 실험과 수치해석을 통해 고찰하였다.

위와 같은 연구들에서 실험적으로는 확산화염이나 예혼합화염에서 모두 제트화염이나 슬릿버너에서 형성된 화염을 일반적으로 사용하였고, 일부 기초적 연구로서는 대향류 화염에서 연구가 수행되어 졌다⁽³⁻⁷⁾. 이러한 연소 유동장은 온도 또는, 급격한 농도 구배를 가지고 있으므로, 화

염에서 비균일성이 매연 초기 입자의 연구에 어려움이 따르고 있다. 그러므로, 본 연구에서는 매연 생성에 대한 반응연구를 위해 균질한 유동장인 WSR(well-stirred reactor)를 이용하였고⁽⁸⁻¹⁵⁾, 혼합기에 CO를 첨가하여 매연생성에 미치는 효과를 수치해석 연구를 통해 고찰하였다.

2. 수치해석 방법

매연생성에 대한 CO 첨가 영향연구를 위해 CHEMKIN의 PSR 프로그램을 사용하였다⁽¹³⁾. PSR은 길이적 차원이 없고, 연료와 산화제가 초기부터 완전 혼합되어있다고 가정하므로 확산과 같은 유체의 이동(transport) 물리량에 대한 고려가 필요없다. 따라서 순수한 화학반응로(chemical reactor)로 생각할 수 있고, 화학반응에 대한 고찰을 하기 위해 많이 사용되고 있다.

연료와 산화제는 에틸렌/공기 혼합기를 사용하였다. 혼합기의 초기온도는 298 K, 압력은 1 atm 상태의 정압조건에서 계산하였다. 지배방정식은 정압비열을 고려한 단열(adiabatic) 시스템에서 화학종 보존 방정식(1)과 정상상태 에너지 방정식(2)으로 구성할 수 있다⁽¹⁶⁾.

$$\frac{1}{\tau}(Y_k - Y_k^*) - \frac{\dot{\omega}_k W_k}{\rho} = 0, \quad k=1, N_{\text{gas}} \quad (1)$$

$$\frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^K Y_k^*(h_k^* - h_k) - \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k - \frac{\dot{Q}_{\text{loss}}}{\rho V} = 0 \quad (2)$$

여기서 T는 온도, Y_k 는 K 화학종의 질량분율, t 는 독립변수인 시간을 의미한다. 또한, ρ 는 밀도, h_k 는 화학종의 단위질량당 엔탈피(specific enthalpy), $\dot{\omega}_k$ 는 화학종의 몰생성율(molar production rate) 그리고, W_k 는 화학종의 분자량을 각각 의미한다. 상첨자 *는 입구조건을 나타내며, WSR로 유입되는 질량유량, \dot{m} 은 일반적으로 식(3)과 같이 밀도와 반응로 체적, V를 이용한 평균 체류시간(residence time)으로 정의하여 사용된다.

$$\tau_0 = \rho V / \dot{m} \quad (3)$$

본 연구에서는 단열조건을 이용하여 벽면으로의 열손실을 무시하였다($\dot{Q}_{\text{loss}} = 0$).

매연 모델은 Frenklach와 공동연구자들에 의해 개발된 모멘트 방법(method of moment)을 사용하였다⁽¹⁷⁾. 이 방법에서는 매연생성을 매연 입자크기 분포함수(PSDF, particle size distribution function)를 특성화한 모멘트 방정식을 풀어 표현한다. PSDF의 r^{th} 농도 모멘트는 다음과 같이 정의한다.

$$M_r = \sum_{i=1}^{\infty} i^r N_i \quad (4)$$

여기서 N_i 는 size 입자의 수밀도(cm^{-3})를 의미한다. PSR

코드에서는 매연 분포 모멘트를 마치 화학종처럼 취급하여 앞의 (1)과 같은 형태로 r^{th} 모멘트 방정식을 덧붙여 연동하여 푼다. 이 방정식의 형태는 다음과 같다.

$$\frac{1}{\tau}(M_r - M_r^*) - Q_r = 0, \quad r=0, \quad N_{\text{moments}} \quad (5)$$

여기서 M_r 은 r th 모멘트(cm^{-3}), Q_r 은 r th 모멘트의 생성율($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$), 그리고 N_{moments} 는 모멘트의 수를 의미하는데, 본 연구에서는 6개의 농도 모멘트를 고려하였다. 표면반응모델(surface reaction model)은 Kazakov et al.⁽¹⁸⁾ 모델로 매연 입자 생성이나 표면 성장, 산화를 계산하는데 사용되었다.

본 연구에서는 체류시간을 0.01 ms로 고정하였고, 반응기구는 PAH 중 4개의 고리(ring)구조로 되어있는 pyrene (A4)까지 포함되어 있는 ABF model을 사용한다. 이 모델은 107개의 화학종(species)과 542개의 반응식(reactions)으로 구성되어 있다⁽¹⁹⁾. 사용 연료는 에틸렌(C_2H_4)-일산화탄소(CO)를 혼합하였으며, 산화제는 공기를 이용하였다. 매연 생성에 관한 CO 효과를 확인하기 위해 CO를 10~50% 범위에서 10% 증가시켰다. WSR로의 유입되는 혼합기의 당량비, ϕ 는 2.0, 2.5, 3.5의 세 가지 조건에서 계산하였는데 1.9 이하에서는 매연이 생성되지 않기 때문에 매연이 생성되는 가장 작은 당량비 조건을 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

WSR에서 매연 생성 특성에 대한 CO 첨가 효과를 알아보기 위해 관심 화학종들, 그리고 매연의 여러 특성을 비교하였다. 먼저 당량비에 따른 CO 첨가 시 단열화염온도를 Table 1에 도시하였다. Table 1에서 보듯이 당량비가 커질수록 단열화염온도가 감소함을 볼 수 있다. 이는 연료과잉 조건에서 당량비가 커질수록 산화제가 부족해 연료가 마치 희석제의 역할을 하기 때문이다. 또한 표에는 같은 당량비에서 CO 첨가에 따른 단열화염온도의 변화량(variance)을 도시하였다. 변동량은 당량비가 커짐에 따라 줄어드는데 전체적으로 CO 물분율에 상관없이 일정함을 알 수 있다. 이는 C_2H_4 에 비해 CO의 발열량이 작으며, 비열과 같은 CO의 열적 물리량(thermal properties)이 질소와 유사하기 때문으로 상쇄되기 때문이다. 따라서 본 연구는 매연의 온도특성을 같은 당량비에 대해서 자연적으로 제거된 효과를 관찰 할 수 있다는 큰 이점이 있다.

Table 1. Adiabatic Temperatures Regardless of CO Mole Fractions According to the Equivalence Ratios

	2.0	2.5	3.0
(K)	1927	1748	1559
Variance (K)	9	2	1

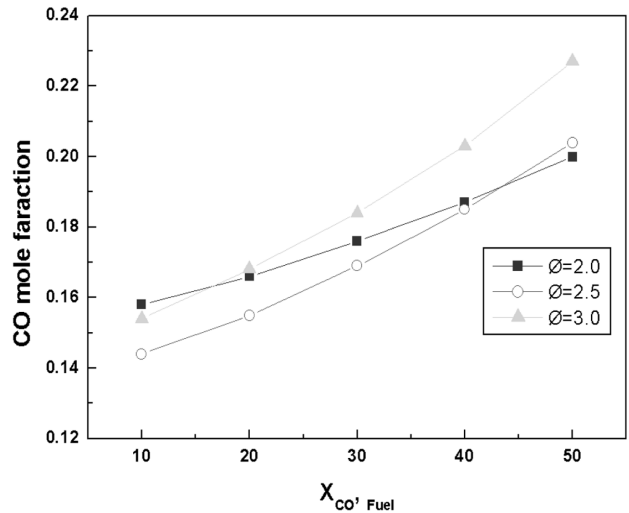


Figure 2. CO mole fraction as a function according to CO concentration in fuel stream.

Figure 2는 연료에 CO 희석량에 따른 세 가지의 당량비 조건에서 연소후 WSR에서 배출되는 CO의 물분율을 도시하였다. 연소 조건이 연료과잉 상태이므로 배출되는 CO는 WSR로 유입되는 량과 화학반응에 의해서 변화되는 양을 더한 전체 CO를 의미한다. 또한 혼합기의 당량비 계산에서 CO가 연료로 작용하고 에틸렌에 비해 이론 산소요구량도 작다. 따라서 같은 당량비에서 CO의 증가는 C_2H_4 의 감소와 함께 O_2 의 정량적인 물분율도 감소한다. $\phi=2.0$ 의 CO 물분율은 다른 과농한 경우와 비교하여 초기 유입 CO 물분율 증가에 따라 완만한 증가율을 보이고 있다.

또한, 10%의 CO 희석 경우에는 가장 작은 양의 CO를 유입하는데도 불구하고, 배출되는 CO의 물분율이 다른 당량비 경우에 비해서 최대값을 나타낸다. 이는 초기 매연이 생성되는 지점에서는 매우 적은량의 CO가 매연이나 다른

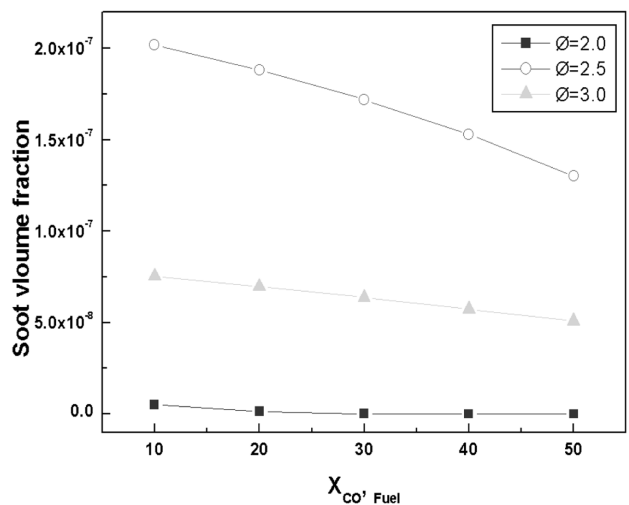


Figure 3. Soot volume fraction as a function of CO concentration in fuel stream.

탄소화합물로 변화함을 의미한다. 이러한 원인으로서는 당량비가 증가함에 따라 반응영역 내의 산소가 부족하게 되고

WSR 내부온도 또한 감소하여, 산화 반응을 하지 못한 결과로 CO가 증가하는 것으로 판단된다.

Figure 3은 CO의 첨가에 따른 매연 체적분율을 각 당량비 조건에서 나타내었다. 당량비가 2.5인 경우에 다른 두 조건의 당량비 경우보다 많은 매연이 생성됨을 확인 할 수 있다. 이러한 결과는 연료과잉조건과 연소온도의 적절한 기여로서 설명되어 질 수 있다. 즉, 매연생성을 위해서는 연료가 산화제 보다 많아 열분해되는 연료의 양이 많아져 충분한 탄화수소 반응기들이 존재하여야 한다. 또한 온도가 높아 공기역학적(aerodynamic) 매연의 성장이 이루어져야 한다. 따라서 본 연구에서는 $\phi=2.5$ 인 경우에 두 가지의 조건이 충족된다고 볼 수 있다. 매연생성에 대한 온도 효과는 일반적으로 종형(bell shape)으로 알려져 있는데⁽²⁰⁾, 본 연구에서도 CO의 첨가효과를 제외하면 당량비의 효과를 순수하게 온도의 효과로 설명할 수 있다. Figure 3에서는 CO의 첨가량이 증가함에 따라 매연체적분율의 감소율 또한 $\phi=2.5$ 에서 최대가 됨을 확인할 수 있다. 이는 매연생성에서 중요 화학종인 pyrene(A4)과 아세틸렌의 생성이 CO의 첨가로 저하되기 때문으로 판단된다.

Figure 4는 매연의 생성과 산화에 가장 중요한 화학종의 농도를 CO의 희석량에 따라 당량비 별로 도시화하였다. 매연입자를 생성하는 pyrene(A4)과 C_2H_2 반응기는 $\phi=2.5$ 일 때 가장 높게 나타나고, 이는 Figure 3에서 나타난 매연의 부피분율의 경향과 일치된다. 또한 주요 산화 화학종인 H, OH는 CO의 희석량이 증가함에 따라 증가한다. 따라서 이러한 결과는 매연생성에 대한 HACA(hydrogen abstraction and carbon addition)기구를 정당화한다고 할 수 있다. $\phi=2.0$ 경우에는 pyrene(A4)과 C_2H_2 의 농도가 매우 낮은 것을 확인할 수 있는데 이는 연료의 열분해가 매우 적게 되고, 반면에 상대적으로 산화가 크게 작용하기 때문이다.

Figure 5에는 중요 화학종에 대한 표면 성장률(surface growth rate)을 각 당량비 별로 도시하였다. 이 결과는 모든 경우에 있어서 매연 생성에 대한 HACA 기구의 중요성을 나타내고 있다. 3가지 당량비 조건 모두 pyrene(A4)에 의한 표면성장보다는 C_2H_2 에 의한 성장이 크고, 특히 당량비가 낮을 때 그 차이는 보다 커지는 것을 확인할 수 있다. 또한 매연입자의 산화측면에서는 OH가 O_2 에 비해 보다 큰 값을 가지고 있기 때문에 표면 산화는 주로 OH 반응기에 의해서 발생한다고 볼 수 있다. $\phi=2.0$ 인 경우에는 온도변화가 없음에도 불구하고 CO의 몰분율을 증가할수록 표면 성장 및 산화가 매우 급격히 감소함을 볼 수 있다. 이는 연료의 특성으로 C_2H_4 보다는 CO의 매연 전구물질 생성이 매우 저하되기 때문으로 생각된다.

반응에 의해서 생성된 입자직경과 핵생성율(nucleation rate), 응고율(coagulation rate)을 Figure 6에 나타내었다. 초기매연입자 생성 조건인 $\phi=2.0$ 일 때 CO의 희석에 따라 매연의 입자 직경은 급격히 감소하는 것을 확인할 수 있

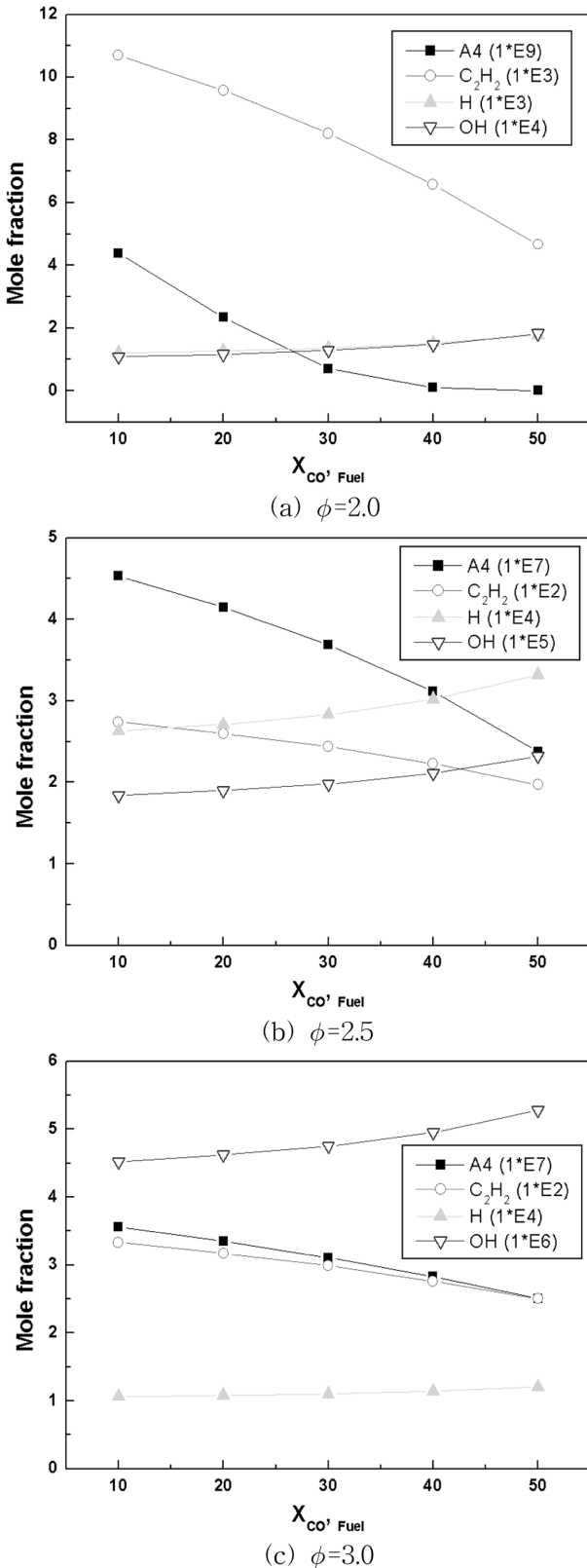
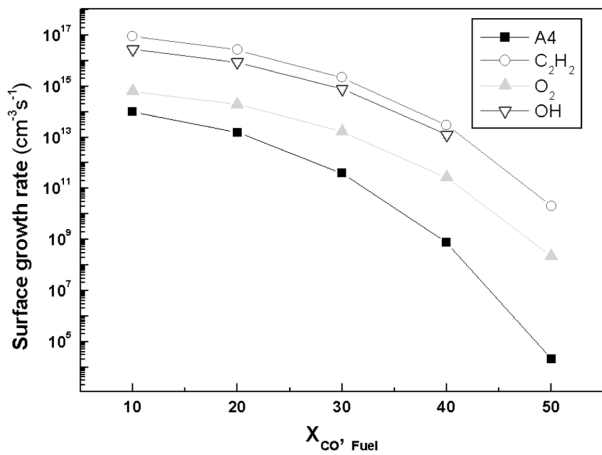
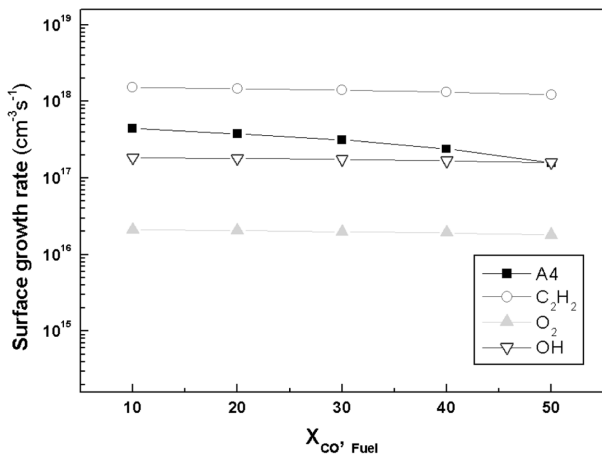


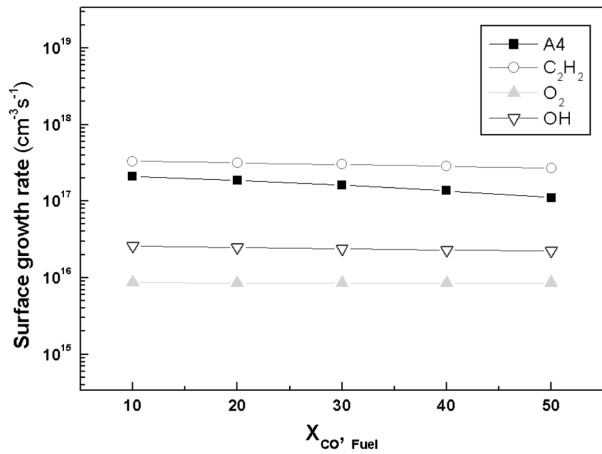
Figure 4. Concentration of aromatic species in mole fraction as a function of CO concentration for different equivalence ratio.



(a) $\phi=2.0$



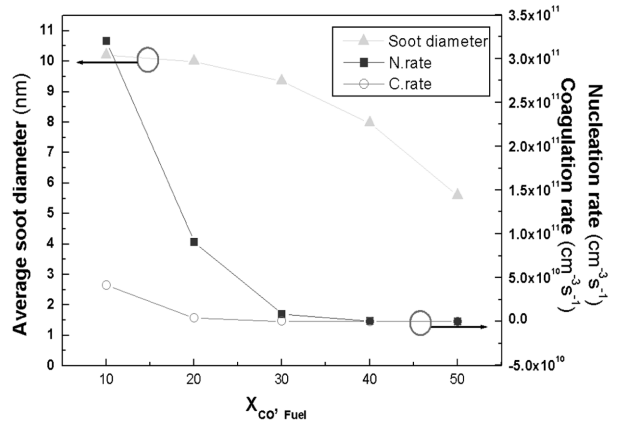
(b) $\phi=2.5$



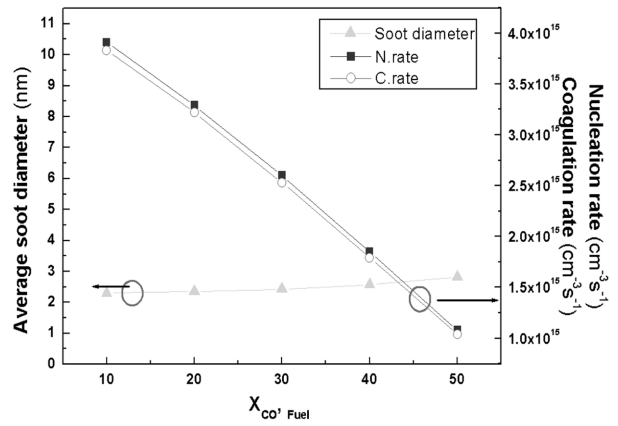
(c) $\phi=3.0$

Figure 5. Surface growth rate due to A4, C₂H₂, O₂, and OH as a function of CO concentration for different equivalence ratio.

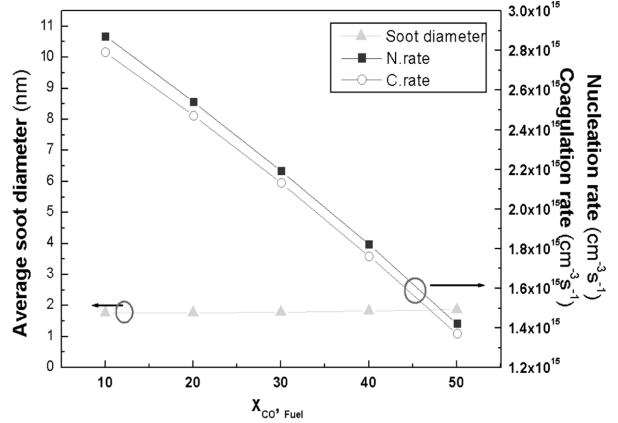
으며, 당량비가 2.5, 3.0일 조건일 때는 큰 변화가 없다. 하지만 높은 당량비에서 보다 작은 매연 주직경(primary particle diameter)을 보이고 있는데 이는 산화의 영향으로 판단할 수 있다. 또한, 핵생성율과 응고율은 CO의 첨가가 증가할수록 연료의존성에 의해 급격히 감소한다.



(a) $\phi=2.0$



(b) $\phi=2.5$



(c) $\phi=3.0$

Figure 6. Average soot diameter and Nucleation rate, Coagulation rate with respect to CO concentration for different equivalence ratio.

4. 결 론

1) 10%의 CO 희석 경우에는 가장 작은 양의 CO를 유입하는데도 불구하고, 배출되는 CO의 물분율이 다른 당량비 경우에 비해서 최대값을 나타낸다. 이는 초기 매연이 생성되는 지점에서는 매우 적은량의 CO가 매연이나 다른 탄소화합물로 변화함을 의미한다.

2) 당량비가 2.5인 경우에 매연이 생성이 최대가 되는데, 이는 연료과잉조건과 연소온도의 적절한 기여로서 설명되어 질 수 있다. 즉, 열분해되는 연료의 양이 많아져 충분한 탄화수소 반응기들이 존재하여야 하고, 온도가 높아 공기 역학적(aerodynamic) 매연의 성장이 이루어져야 함을 의미한다.

3) CO의 첨가량이 증가함에 따라 매연체적분율의 감소율이 감소하는데, 이는 매연 생성에서 중요 화학종인 pyrene 과 아세틸렌의 생성이 CO의 첨가에 의해 저하되기 때문이다.

3) 표면 성장 및 산화율과 중요 화학종의 농도는 매연 생성에 있어 HACA 기구를 입증하고 있다.

후 기

이 논문은 2012년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업 지원을 받아 수행된 것임 (2012R1A1A4A01014462).

참고문헌

1. I. M. Kennedy, "Models of Soot Formation and Oxidation", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 23, pp. 95-132 (1997).
2. H. Richter and J. B. Howard, "Formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Their Growth to Soot - A Review of Chemical Reaction Pathways", Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 26, pp. 565-608 (2000).
3. H. Guo, K. A. Thomson and G. J. Smallwood, "On the Effect of Carbon Monoxide Addition on Soot Formation in Laminar Ethylene/air Coflow Diffusion Flame", Combust. Flame, Vol. 156, pp. 1235-1142 (2009).
4. D. X. Du, R. L. Axelbaum and C. K. Law, "Soot Formation in Strained Diffusion Flames with Gaseous Additives", Combust. Flame, Vol. 102, pp. 11-20 (1995).
5. J. H. Ji and E. J. Lee, "The Effects of Carbon Dioxide as Additives on Soot Formation in Jet Diffusion Flames", Journal of Korean Institute of Fire Science & Engineering, Vol. 24, No. 6, pp. 170-175 (2010).
6. J. H. Ji and E. J. Lee, "The Characteristics of Soot at the Post-flame Region in Jet Diffusion Flames Added Carbon Dioxide", Journal of Korean Society of Safety, Vol. 25, No. 6, pp. 9-13 (2010).
7. L. G. Blevins, R. A. Fletcher, B. A. Benner, E. B. Steel and G. W. Mulholland, "The Existence of Young Soot in the Exhaust of Inverse Diffusion Flames", Proc. Comb. Inst., Vol. 29, pp. 2325-2333 (2002).
8. F. W. Lam, J. P. Longwell and J. B. Howard, "The Effect of Ethylene and Benzene Addition on the Formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Soot in a Jet-Stirred/Plug-Flow Combustor", Proc. Comb. Inst., Vol. 23, pp. 1477-1484 (1990).
9. J. P. Longwell and M. A. Weiss, "High Temperature Reaction Rates in Hydrocarbon Combustion", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 47, pp. 1634-1642 (1955).
10. J. E. Nenniger, A. Kridiotis, J. Chomiak, J. P. Longwell and A. F. Sarofim, "Characterization of a Toroidal Well Stirred Reactor", Proc. Comb. Inst., Vol. 20, pp. 473-479 (1984).
11. R. F. Reich, S. D. Stouffer, V. R. Katta, H. T. Mayfield, C. W. Frayne and J. Zelina, "Particulate Matter and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Determination Using a Well-Stirred Reactor", AIAA Paper 2003-0664 (2003).
12. S. D. Stouffer, R. C. Striebich, C. W. Frayne and J. Zelina, "Combustion Particulates Mitigations in a Well-Stirred Reactor", AIAA Paper 2002-3723.
13. J. W. Blust, D. R. Ballal and G. J. Sturgess, J. Propul. Power, Vol. 15, p. 216 (1999).
14. J. Zelina and D. R. Ballal, "Combustor Stability and Emissions Research Using a Well-Stirred Reactor", Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-Transactions of the ASME, Vol. 119, pp. 70-75 (1997).
15. N. J. Brown, K. L. Revzan and M. Frenklach, "Detailed Kinetic Modeling of Soot Formation in Ethylene/air Mixtures Reacting in a Perfectly Stirred Reactor", Proc. Comb. Inst., Vol. 27, pp. 1573-1580 (1998).
16. R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, "CHEMKIN-II, A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical Kinetics", Sandia Report SAND89-8009B (1991).
17. M. Frenklach and H. Wang, "in: H. Bockhorn (Ed.), Soot Formation in Combustion: Mechanism and Model", Springer-Verlag, Heidelberg, p. 165 (1994).
18. A. Kazakov, H. Wang and M. Frenklach, Combust. Flame, Vol. 100, pp. 111-120 (1995).
19. J. Appel and H. Bockhorn, "Kinetic Modeling of Soot Formation with Detailed Chemistry and Physics: Laminar Premixed Flames of C2 Hydrocarbons", Combust. Flame, Vol. 121, pp. 122-136 (2000).
20. M. Frenklach, D. Clary, W. Gardiner and S. Stein, "Detailed Kinetic Modeling of Soot Formation in Shock-tube Pyrolysis of Acetylene", Proc. Comb. Inst., Vol. 20, pp. 887-901 (1985).