

УДК 536.46+662.12

РЕДУЦИРОВАННЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ СМЕСЕЙ ПРОПАН — ВОЗДУХ

E. Dogkas, I. Lytras, P. Koutmos, G. Kontogouris

Университет Патр, Патры 26504, Греция, koutmos@mech.upatras.gr

Предложены две упрощенные кинетические схемы высокотемпературного окисления пропана, которые подходят для применения в комплексных моделях турбулентного горения. Итеративный процесс оптимизации схем осуществлялся на основе расчетов равновесного состава и температуры, времени задержки самовоспламенения одномерного, свободно распространяющегося пламени и двумерного пламени ламинарной струи топлива в спутном потоке воздуха. Для проверки редуцированных моделей проводилось сравнение расчетов на их основе с результатами расчета по детальному механизму USC Mech II, а также с экспериментальными данными. Показано, что предложенные редуцированные модели удовлетворительно описывают набор исследованных параметров.

Ключевые слова: редуцированная химия пропана, окисление пропана, ламинарное пламя, редуцирование химико-кинетических схем.

DOI 10.15372/FGV20200103

ВВЕДЕНИЕ

Гибкость в эксплуатации топлив, высокая эффективность работы, длительный срок службы компонентов и низкие выбросы загрязняющих веществ — все это целевые характеристики, которыми должны обладать разрабатываемые горелочные устройства. Метод моделирования крупных вихрей (LES) позволяет значительно углубить понимание процессов горения и снизить затраты на их оптимизацию, дополнив лабораторные [1] и промышленные [2–5] крупномасштабные эксперименты.

Потенциал метода LES наилучшим образом может быть реализован только в том случае, если он будет надежно предсказывать такие характеристики, как концентрация загрязняющих веществ, время задержки самовоспламенения, скорость распространения пламени, а также условия проскока и срыва пламени [2, 3, 5, 6]. Вычислительная нагрузка в значительной степени может быть снижена за счет использования упрощенных кинетических схем [1, 3, 7] вместо детальных химико-кинетических и транспортных моделей.

Для сокращения детальных механизмов

использовалось несколько методов [5]. Первый этап упрощения заключается, как правило, в комплексном анализе чувствительности механизма [7–9] или в применении метода ориентированных графов (DRG [5]), что позволяет выявить и устранить некоторые элементарные реакции и промежуточные соединения. Полученный скелетный механизм может быть дополнительно в большей или меньшей степени редуцирован с помощью, например, метода квазистационарности концентраций соединений и частичного равновесия реакций (QSSA) [5, 7], метода сингулярных возмущений (CSP) [5] или процедуры построения собственных низкоразмерных множеств (ILDLM [10]). Эти подходы позволяют найти компромисс между точностью расчета и временными затратами на вычисления. Для пропана разработаны умеренно редуцированные механизмы, состоящие из $30 \div 40$ соединений и $60 \div 100$ реакций (см., например, [6, 11]). В работах [12–14] проведено глубокое редуцирование механизма окисления пропана — до $9 \div 11$ соединений и $5 \div 6$ реакций. В этих механизмах скорости результирующих реакций явно выражены в виде алгебраических комбинаций скоростей элементарных реакций, которые из механизмов исключены. Значения концентраций исключенных соединений, требуемые в этих выражениях, получены из исходной схемы реакций в предположении

квазистационарности их концентраций. Нелинейные алгебраические уравнения, возникающие в результате дополнительного сокращения, решаются итерационным способом, что создает дополнительные трудности при численной реализации и увеличивает время счета. Квазиглобальные схемы [2, 3] включают в себя одну или несколько глобальных стадий разложения топлива с константами скорости, подобранными для требуемого диапазона условий, и наборы элементарных реакций для составляющих подсистем, например для $H_2/CO/O_2$. Такие схемы особенно популярны из-за простоты их реализации при численном моделировании. Дальнейшее упрощение обеспечивается глобальными моделями окисления, содержащими лишь очень ограниченное число рационально выбранных частиц, а константы скорости реакций подбираются так, чтобы описывать заранее определенные параметры горения [1, 15].

В данной работе представлены две упрощенные кинетические модели высокотемпературного окисления пропана, одна из которых включает в себя 18 соединений, а другая, квазиглобальная, — 12 соединений. Цель состояла в том, чтобы устранить имеющийся разрыв между редуцированными механизмами с большим количеством соединений и реакций [6, 11] и глобальными моделями с $6 \div 8$ соединениями и $4 \div 5$ реакциями [1, 15]. Кроме того, требовалось, чтобы при использовании моделей не было необходимости решать сложные нелинейные алгебраические уравнения, включающие в себя значения скоростей исключенных элементарных стадий и квазистационарных концентраций частиц, как это было предложено ранее, например, в работах [12–14]. Такой подход влечет за собой увеличение объема вычислений, усложнение реализации и снижение точности расчета концентраций некоторых соединений, которые важны для описания ключевых параметров горения. В случае исключения или объединения реакций использовались аррениусовские выражения для констант скорости с «оптимизированными» предэкспоненциальными множителями, как это делалось при создании квазиглобальных моделей. Общая методология редуцирования, принятая в настоящей работе, аналогична той, что применялась для получения универсальных редуцированных механизмов горения метана [16].

Пропан является широко распространенным модельным топливом, характеристики ко-

торого (химические свойства, ламинарная скорость распространения пламени, характеристики гашения пламени) близки к характеристикам используемых на практике более тяжелых парафинов. Высокотемпературное окисление пропана отличается быстрым разложением на более легкие промежуточные соединения $C1-C3$, аналогично тому, как это происходит с более сложными углеводородами, и, таким образом, может дать информацию о процессах горения жидких топлив [6]. Дальнейшей целью является включение разработанных механизмов в LES-модель для описания пламени пропана, стабилизированного плохообтекаемым телом [1].

РАЗРАБОТКА УПРОЩЕННЫХ РЕДУЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ

Ставилась задача создания двух универсальных редуцированных кинетических моделей, каждая из которых имела бы разную степень детализации, но при этом включала в себя некоторые радикалы и промежуточные углеводороды, чтобы описывать наиболее важные параметры горения в сложных расчетах, в частности для пламен, стабилизированных плохообтекаемым телом [1–3]. Кроме того, в моделях требовалось сохранить такие, например, частицы, как C_2H_2 , H, OH, O, чтобы иметь возможность использовать разработанные схемы для описания результатов оптических измерений пламен (данные по хемиллюминесценции и тепловые карты) [17].

Ранее из исходного кинетического механизма USC Mech II для углеводородов $C1-C4$ [8] методом DRG для смесей C_3H_8 — воздух в широком интервале коэффициентов избытка горючего $0.55 \div 1.45$ была получена скелетная схема, состоящая из 151 реакции и 27 соединений. Эта схема представлена в работе [18]. Она позволила описать различные пламена, включая ламинарные бунзеновские, не хуже, чем исходный механизм USC Mech II [19]. Из этой схемы при том же наборе целевых параметров были разработаны два сокращенных механизма — с 18 и 12 соединениями, которые приведены в приложении в формате Chemkin.

Согласно механизму, включающему в себя 27 соединений, большая часть пропана реагирует с радикалами H, O, OH и HO_2 , а при более низких температурах — с молекулярным кислородом с образованием линейных пропильных

и изопропильных радикалов (n -, i -C₃H₇), которые быстро расходуются с образованием вторичных продуктов. Некоторые из них (например, C₂H₄, C₂H₂, CH₃) остаются не израсходованными к тому моменту, когда уже весь пропан прореагировал, другие (например, C₃H₆, C₃H₄) расходуются полностью. Пропен вступает в реакцию с радикалами H, OH, HO₂ с образованием пропенильного радикала и C₂H₄. Этилен, в основном через реакции с H и OH, расходуеться с образованием C₂H₃, CH₃ и C₂H₂.

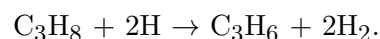
Дальнейшее формальное сокращение 27-компонентной схемы посредством, например, метода DRG приводит к тому, что получаемая модель начинает давать существенную погрешность при описании ключевых параметров горения (скорости распространения пламени и времени задержки зажигания). Поэтому разработка еще более сокращенной схемы, с меньшим количеством соединений и меньшей жесткостью системы, непременно влечет за собой необходимость разумного компромисса между вычислительными затратами и точностью.

В настоящей работе после исключения реакций или объединения нескольких в одну глобальную для констант скоростей оставшихся реакций использовались аррениусовские выражения. Это позволило избежать двух проблем: во-первых, необходимости выражать их скорости (глобальные) через комбинации скоростей исключенных элементарных стадий; во-вторых, необходимости выделять соединения, имеющие квазистационарные концентрации, и впоследствии определять их из решения системы нелинейных алгебраических уравнений, как это предложено в [12–14]. Итерационный способ решения этих уравнений значительно увеличивает процессорное время, а досрочное завершение вычислений, обычно применяемое для ускорения расчета, приводит к дополнительным неточностям [3, 10]. Предложенная в этой работе процедура имеет явное преимущество с точки зрения уменьшения жесткости системы и вычислительных затрат при использовании разработанных редуцированных механизмов в моделировании сложных систем.

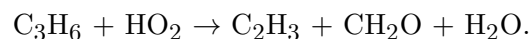
Оптимизация проводилась путем подбора только значений предэкспонентов констант скоростей используемых в механизме глобальных реакций и нескольких элементарных реакций, которые были сохранены в процессе редуцирования, путем вычисления характеристик

горения в нескольких выбранных для анализа типах пламен [2, 3, 6, 9, 11]. Исключение соединений из исходного 27-компонентного механизма осуществлялось аналогично работе [20]. Ее авторы предложили определять для каждого соединения так называемый уровень важности (LOI), значение которого вычислялось на основе комбинированного коэффициента чувствительности горения и параметра, характеризующего временной масштаб химических взаимодействий с участием этого компонента (время жизни соединения от его образования до расхода). В настоящей работе решение оставлять соединение или удалять принималось в зависимости от того, ставилась ли цель воспроизводить экспериментальные данные по оптической визуализации или нет. Например, радикалы и хемиллюминесцирующие соединения, такие как H, OH, O, C₂H₂ и CH₂O, были сохранены полностью в 18-компонентной схеме и лишь частично — в модели из 14 соединений.

В частности, CH₂, CH₂^{*}, HCCO, CH₂CO, CH₂CHO, a -C₃H₅, C₃H₅, n -C₃H₇, i -C₃H₇ и реакции с их участием были исключены из 27-компонентного механизма. Реакции горючего с радикалами H, O и OH, в результате которых образуются нормальные и изопропильные радикалы, а также последующие реакции с участием этих радикалов были сведены в реакции 47, 48, 49 (схема из 18 соединений, см. приложение). То есть реакции C₃H₈ + H ↔ i -C₃H₇ + H₂ и i -C₃H₇N + H ↔ C₃H₆ + H₂ были объединены в одну глобальную реакцию

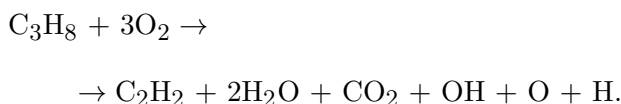


В схеме из 18 соединений пропен вступает в реакцию с H (реакция 45) с образованием C₂H₄ и CH₃. Реакция C₃H₆ с OH из схемы с 27 соединениями, протекающая с образованием пропенильного радикала: C₃H₆ + OH ↔ a -C₃H₅ + H₂O, и следующая реакция a -C₃H₅ + HO₂ ↔ OH + C₂H₃ + CH₂O были объединены в 18-компонентном механизме в единую реакцию 46:



C₂H₄ реагирует с радикалами H, O и OH с образованием C₂H₃, CH₃ и HCO. В результате взаимодействия C₂H₃ с теми же радикалами образуются CH₂O и HCO. C₂H₂ образуется в результате быстрой реакции C₂H₃ ↔ C₂H₂ + H, а также в результате реакций C₂H₃

с Н и ОН. Окисление C_2H_2 происходит главным образом посредством реакции $C_2H_2 + O \leftrightarrow HCCO + H$ (в базовой схеме из 27 соединений). Эта реакция в сокращенных моделях объединена с реакцией $HCCO + O \leftrightarrow H + 2CO$, а ее константа скорости подобрана так, чтобы получить такое же общее расхождение C_2H_2 в реакции 31 в механизме из 18 соединений. Реакции CH_3 , CH_2O и HCO с основными радикалами оставлены такими же, как в исходном механизме для системы $CO/H_2/O_2$. Для моделирования разложения топлива, инициируемого O_2 , и более адекватного описания процесса самовоспламенения (аналогичного описанию по схеме USC II) реакции $C_3H_8 + O_2 \leftrightarrow i-C_3H_7 + HO_2$, $n-C_3H_7 + O_2 \leftrightarrow C_3H_6 + HO_2$, $C_3H_6 + OH \leftrightarrow a-C_3H_5 + H_2O$, $C_3H_5 + HO_2 \leftrightarrow OH + C_2H_3 + CH_2O$, $C_2H_3 + O_2 \leftrightarrow C_2H_2 + HO_2$, $CH_2O + O_2 \leftrightarrow HCO + HO_2$, $HCO + H_2O \leftrightarrow CO + H + H_2O$ и $CO + HO_2 \leftrightarrow CO_2 + OH$ были объединены в одну глобальную реакцию:

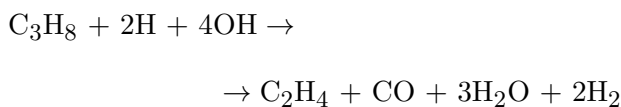


Ее константа скорости взята такой же, как в приведенной выше элементарной реакции топлива с кислородом, изменен только предэкспонент, так чтобы описать задержку воспламенения смесей C_3H_8 — воздух.

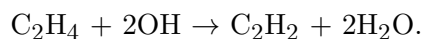
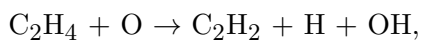
Посредством дальнейших упрощений была создана квазиглобальная схема из 12 соединений. Реакции топлива, его первичных стабильных продуктов, таких как C_3H_6 , C_2H_4 , а также промежуточных соединений CH_3 , CH_2O , HCO с основными радикалами пламени, которые входили в схему из 18 соединений, здесь были объединены и описаны четырьмя глобальными реакциями расщепления. Из них в реакции



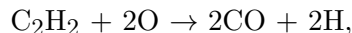
использовалась константа скорости из реакции 48, а в



— из реакции 47. Две другие реакции обеспечивают расщепление этилена:



Окисление C_2H_2 представлено следующим образом:

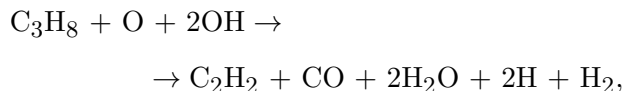


В этой версии механизма оставлена базовая кинетика для системы $CO/H_2/O_2$, которая описывается 11 элементарными реакциями. Глобальная реакция



также была включена для моделирования разложения топлива, инициируемого реакцией с O_2 .

Была предпринята попытка еще больше упростить набор реакций, сохранив, например, только реакцию



чтобы описать полную конверсию исходного топлива, а также образующихся из него более легких углеводородов и промежуточных соединений, как это предложено в работе [13]. Однако это привело к существенному завышению скорости распространения пламени богатых смесей.

ТЕСТИРОВАНИЕ РЕДУЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для тестирования разработанных сокращенных моделей были проведены расчеты противоточных пламен предварительно перемешанных и частично перемешанных бедных смесей при больших коэффициентах растяжения, а также расчеты кинетики превращения смесей в реакторе идеального перемешивания. Кроме того, проведены расчеты осесимметричного двумерного поднятого ламинарного пламени в спутных потоках с предварительным подогревом и без него. Подбор предэкспонентов констант скоростей реакций выполнен путем сравнения значений адиабатической температуры, скорости распространения пламени, концентрации частиц и времени задержки самовоспламенения, полученных с помощью редуцированных механизмов и механизма USC II,

а также сравнения с известными из литературы экспериментальными данными и результатами расчета для набора выбранных для анализа пламен.

Итерационный процесс ручного подбора значений предэкспонентов констант скорости реакций стал возможным благодаря относительно узкому диапазону параметров (коэффициент избытка топлива $\phi = 0.7 \div 1.45$, давление $p = 1$ атм, температура исходных газов $T_0 = 300 \div 650$ К). Эта процедура состояла из четырех этапов. Сначала (1) подбирались значения предэкспонентов констант скорости расщепления C_3H_8 и C_3H_6 в реакциях с радикалами H, OH, O. Затем (2) осуществлялся подбор констант скорости окисления вторичных углеводородов, т. е. реакций C_2H_4 с O и OH и C_2H_2 с O. На следующем этапе (3) подбирались константы скоростей расщепления C_2H_3 и CH_3 , причем потребовалось лишь незначительное их изменение. На заключительном этапе (4) не потребовалось никаких изменений значений констант скорости реакций для системы CO/H₂/O₂.

Моделирование, нульмерное и одномерное, проводилось с использованием программного пакета Chemkin II [21]. Расчет осесимметричного пламени струи топлива выполнялся с помощью программного обеспечения ANSYS 18 [22]. Выбор именно этого программного продукта обусловлен тем, что одной из целей работы было внедрение разработанных механизмов в трехмерные модели турбулентных реагирующих потоков, реализованные в этом программном обеспечении [1]. Использовалась детальная модель молекулярного транспорта, в модели излучения предполагалась оптически тонкая среда, применялась схема MUSCL третьего порядка для пространственного дифференцирования, использовался прямой решатель для химической кинетики. Для осесимметричной области использовалась равномерная сетка с 375 000 ячеек. Расчетная область начиналась со среза сопла подачи топлива и распространялась вдоль потока на 25 диаметров сопла. Радиальный размер области составлял 8 диаметров топливного сопла. Граничные условия у среза сопла задавались такими же, как в эксперименте. На оси, на выходе из сопла и на открытых границах радиальная скорость и градиент аксиальной составляющей скорости, температуры и концентрации частиц были приняты равными нулю. При обнаружении лю-

бых существенных расхождений, выявленных в этих двумерных тестовых расчетах, значения предэкспонентов констант скорости варьировались так, чтобы добиться соответствия. Модифицированный таким образом редуцированный механизм использовался для одномерных расчетов, где снова проводилась его подстройка путем вариации констант скорости. В результате нескольких таких итерационных циклов были подобраны кинетические параметры (см. приложение).

Вначале были выполнены расчеты равновесного состава и температуры (эти результаты не приведены для краткости) с использованием детальной схемы USC II и сокращенных механизмов с 18 и 12 соединениями. Расчеты подтвердили способность редуцированных моделей правильно предсказывать адиабатическую температуру и состав смеси в нульмерном реакторе при $T_0 = 298$ К и $p = 1$ атм, в то время как упрощенные схемы зачастую не дают адекватных предсказаний [2, 23]. Таким образом, подход, использованный при создании редуцированных моделей в этой работе, оказался вполне состоятельным.

Расчеты времени задержки самовоспламенения t_{ign} были выполнены для смесей пропан — воздух при $p = 1$ атм, $\phi = 0.7 \div 1.3$ и $T_0 = 1000 \div 2200$ К. На рис. 1 сопоставлены результаты вычислений с использованием схем USC II, редуцированных моделей с 18 и 12 соединениями с данными экспериментов [9] и с результатами расчетов по схеме [24], включающей в себя 12 соединений и 15 реакций, разработанной для самовоспламенения пропана на основе детальной модели [11]. Адекватное предсказание задержки воспламенения подтверждает способность разработанных схем описывать переходные процессы горения, такие как воспламенение и гашение. Повидимому, это обусловлено тем, что разработанные модели содержат реакции с участием основных радикалов, таких как O, H, OH, HO₂. Редуцированные схемы, как видно, хорошо воспроизводят данные как качественно, так и количественно.

Редуцированные схемы были также протестированы путем расчета скорости ламинарного нерастяженного пламени, а также расчета распределения концентраций и температуры в одномерных пламенах с предварительным подогревом горючей смеси и без него ($T_0 = 300$ и 500 К) при различных коэффициентах ϕ . На

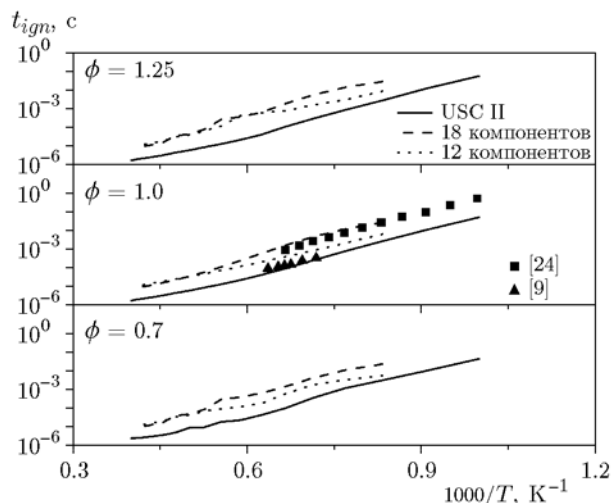


Рис. 1. Время задержки самовоспламенения, предсказанное различными кинетическими моделями

рис. 2 результаты расчета сопоставлены с экспериментальными данными [25, 26] и расчетами с использованием механизма USC II. Поскольку диффузия, экзотермичность и реакционная способность смеси определяют скорость распространения пламени, ее точное предсказание представляет собой серьезный тест для любого кинетического механизма. Видно, что обе схемы в этом смысле дают вполне удовле-

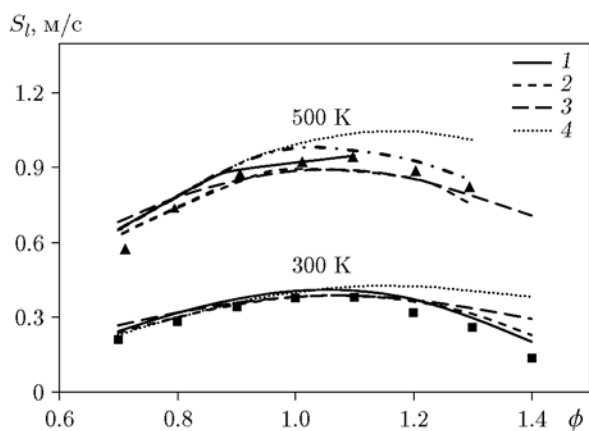


Рис. 2. Зависимость ламинарной скорости свободно распространяющегося пламени предварительно перемешанной смеси пропан — воздух от коэффициента избытка горючего при $p = 1$ атм и $T_0 = 300$ и 500 К:

линии: 1 — USC II, 2 — схема, содержащая 18 компонентов, 3 — 12 компонентов, 4 — 11 компонентов; эксперимент: ■ — [25], ▲ — [26]

творительный результат. В случае бедных и околостехиометрических смесей модели хорошо предсказывают скорость ламинарного пламени S_L . Максимальные значения S_L , согласно расчетам, лежат в диапазоне $0.386 \div 0.397$ м/с, тогда как по экспериментальным данным они составляют $0.38 \div 0.39$ м/с [25]. В случае, когда горючая смесь предварительно подогрета, расхождения между расчетом и экспериментом немного больше. Для схемы с 12 соединениями отклонения увеличиваются при переходе к более бедным (например, $\phi = 0.7$) или более богатым (например, $\phi = 1.4$) смесям. Это, вероятно, связано с отсутствием важных промежуточных соединений на начальных стадиях разложения топлива. Как видно из рис. 2, расчет по схеме с 11 соединениями завышает значение скорости распространения пламени более чем на 80 %. Это несоответствие может быть исправлено путем параметризации предэкспонентов ведущих реакций, если взять коэффициент избытка горючего ϕ в качестве параметра, как это реализовано в [2, 3], однако при этом будет потеряна общность.

Рассчитанные профили температуры, а также молярных концентраций CO и OH для одномерного, свободно распространяющегося, предварительно перемешанного пламени сопоставлены на рис. 3. Видно, что квазиглобальная схема дает несколько заниженное значение

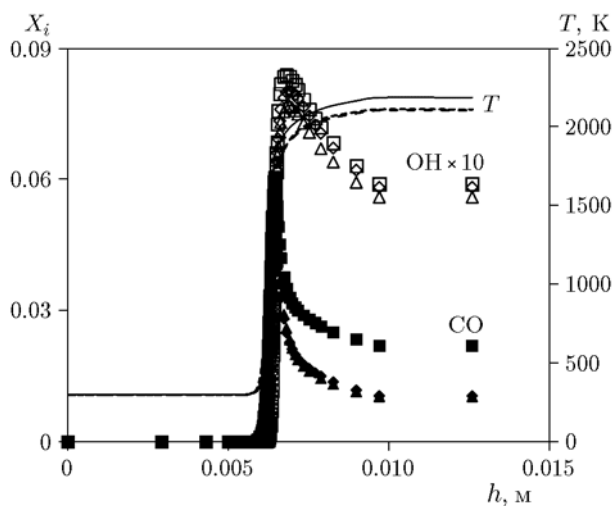


Рис. 3. Распределение температуры и молярных концентраций соединений CO, OH во фронте (h) одномерного, свободно распространяющегося пламени ($\phi = 1$):

■, □ — USC II, ◆, ◇ — 18 компонентов, ▲, △ — 12 компонентов

CO (и, соответственно, неточно предсказывает CO₂). Ранее было показано [2, 3, 7], что удовлетворительное согласие обычно не может быть достигнуто, если схема включает менее $7 \div 8$ соединений.

В работе [27] экспериментально и численно исследовались два растяженных, одномерных, предварительно частично перемешанных пропановых пламени, стабилизированные на противотоках струй C₃H₈ — воздух и H₂ — воздух. Пропановая смесь была околостехиометрической ($\phi = 0.86$) либо бедной ($\phi = 0.55$), а водородная — очень бедной ($\phi = 0.28$). Коэффициент растяжения составлял 140 c^{-1} . Эти сложные пламена являются моделью процессов, происходящих в камерах сгорания двигателей с прямым впрыском с искровым зажиганием [6] или в вихревых горелках со стабилизацией плохообтекаемым телом [1], поэтому их описание представляет собой серьезный тест для кинетических схем. Сравнение результатов расчета температуры, концентраций основных и промежуточных соединений, включая радикалы, с использованием редуцированных схем и детального механизма USC II, а также с экспериментальными данными показано на рис. 4 и 5 для $\phi = 0.86$ и 0.55 соответственно.

Как видно из рис. 4, сокращенные схемы хорошо воспроизводят измеренные профили температуры, профили молярной доли CO₂ и H₂O, за исключением того, что предсказывают меньшую их ширину. Однако это не может быть объяснено тем, что в модели реакционная способность пропана занижена, поскольку в аналогичном интервале коэффициентов избытка горючего скорость свободного распространения пропановоздушных смесей воспроизводится моделями довольно хорошо (см. рис. 2). Подобные расхождения со стороны подачи пропана наблюдались также в [27], где расчеты проведены с механизмом, предложенным в [6], и с оптимизированным механизмом для углеводородов C1–C3, предложенным в [9]. Тем не менее, все основные тенденции, наблюдаемые экспериментально, в частности форма профилей и величина концентраций H₂O, CO₂ (в области плато) и H₂ (см. рис. 4), описываются моделью хорошо. Модель, состоящая из 12 соединений, удовлетворительно описывает как профили температуры, так и профили концентраций соединений. Из рис. 4, б видно, что профили концентраций H₂, OH и промежуточных углеводородов, в частности C₂H₂, также хоро-

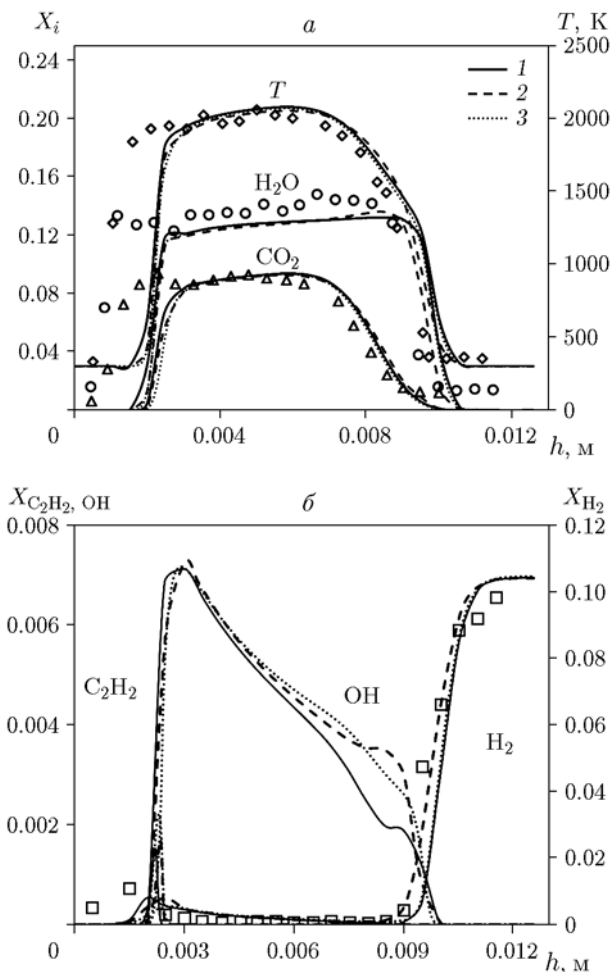


Рис. 4. Сравнение экспериментальных и рассчитанных профилей температуры и концентраций соединений в пламени на противотоках смесей C₃H₈ — воздух, $\phi = 0.86$ (а) и H₂ — воздух, $\phi = 0.28$ (б) (коэффициент растяжения 140 c^{-1} [27]):

1 — USC II, 2 — 18 компонентов, 3 — 12 компонентов; точки — эксперимент

шо описываются моделью.

Результаты расчета для пламени с $\phi = 0.55$ приведены на рис. 5. Примечательно, что схемы как с 18, так и с 12 соединениями воспроизвели качественно и количественно профили температуры и концентраций соединений в пламени очень бедной пропановоздушной смеси, горение которой поддерживалось только за счет встречного потока смеси водорода с воздухом. Способность моделей описывать это сложное пламя позволяет предположить, что их можно использовать для описания процессов самовоспламенения, гашения и проскока пламен, имеющих практическое значение [1, 3, 6].

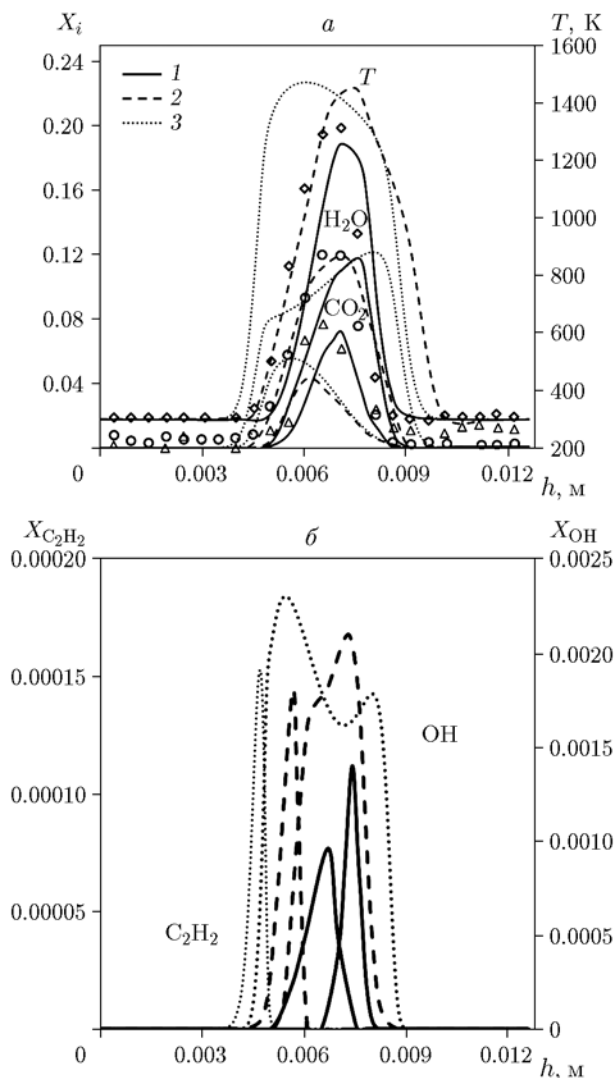


Рис. 5. Сравнение экспериментальных и рассчитанных профилей температуры и концентраций соединений в пламени на противотоках смесей C_3H_8 — воздух, $\phi = 0.55$ (а) и H_2 — воздух, $\phi = 0.28$ (б) (коэффициент растяжения 140 c^{-1}):

1 — USC II, 2 — 18 компонентов, 3 — 12 компонентов; точки — эксперимент [27]

Кроме того, способность схем хорошо предсказывать распределение основных радикалов и C_2H_2 позволяет использовать их в сложных моделях для описания распределений хемилюминесцентных частиц и проводить прямое сравнение с результатами оптических измерений [1, 17].

Способность редуцированных моделей описывать условия гашения в реакторе идеального смешения была проверена на смесях в

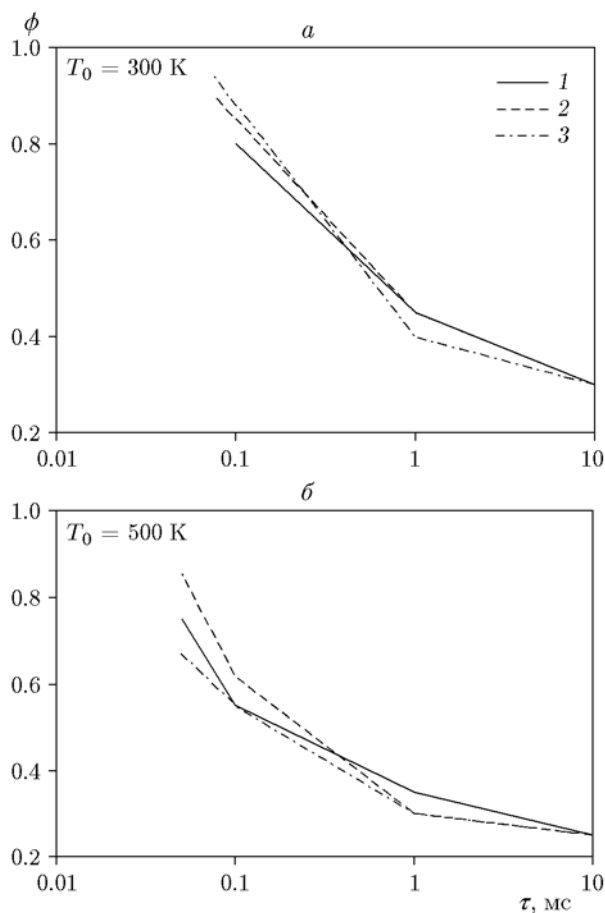


Рис. 6. Кривая «бедного» срыва пламени смеси C_3H_8 — воздух при $p = 1$ атм и различных начальных температурах смеси

диапазонах $\phi = 0.25 \div 1.2$ и $T_0 = 300 \div 600 \text{ K}$ [24, 26]. Время пребывания в реакторе идеального смешения τ , при котором происходит «бедный» срыв (вследствие уменьшения расхода топлива в зоне горения) при заданном коэффициенте избытка горючего, рассчитано с помощью пакета Chemkin II [21]. На рис. 6 показаны результаты расчета зависимости $\phi(\tau)$ для смеси C_3H_8 — воздух при $p = 1$ атм и $T_0 = 300$ и 500 K соответственно. В целом, все три механизма дают близкие результаты расчета, хотя сокращенные модели демонстрируют тенденцию к увеличению времени пребывания по сравнению с механизмом USC. Зависимость $\phi(\tau)$ оказалась чувствительной к набору реакций для системы $CO/H_2/O_2$, что позволило создать адекватную схему из 12 соединений.

При расчете осесимметричных поднятых

пламен в спутных потоках ставилась цель качественно и количественно воспроизвести поля температуры и концентраций основных компонентов, а также высоту отрыва пламени. Это позволило проверить способность упрощенных схем описывать особенности пламен со сложной структурой, каковыми являются пламена на практике. На рис. 7 показаны результаты расчета для осесимметричного пламени, стабилизированного на горелке, которая использовалась в работе [28]. Горелка состоит из центрального сопла внутреннего диаметра 4.3 мм для подачи топлива и коаксиального сопла внутреннего диаметра 65 мм для подачи спутного потока воздуха. Высота отрыва пламени задавалась путем изменения температуры топлива и воздуха T_0 от 300 до 500 К. Выбраны следующие условия тестирования механизмов: через центральное сопло подавалась смесь $C_3H_8/N_2 = 0.12/0.88$ (по объему), а через коаксиальный зазор — воздух, скорость истечения которых составляла 0.4 м/с. При таких условиях имелась возможность стабилизировать пламена, как присоединенные к кромке сопла, так и поднятые.

Двумерные поля температур, рассчитанные с помощью ANSYS 18 [22] с использова-

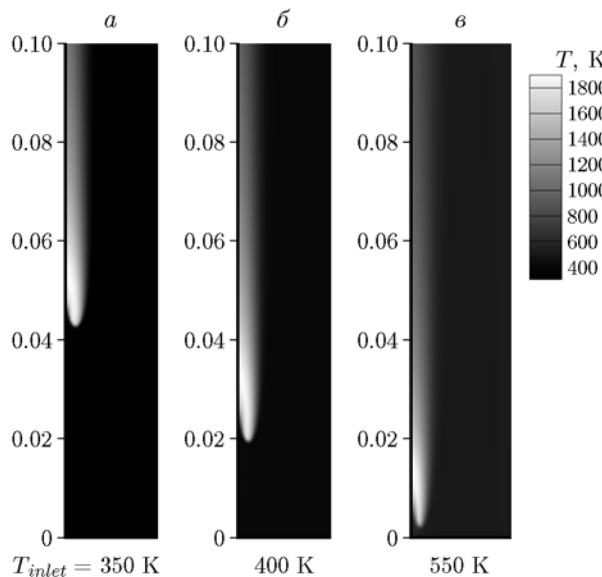


Рис. 7. Рассчитанное по схеме из 18 соединений распределение температуры в пламени струи топлива в спутном потоке воздуха [28]: *a* — сильно оторванное пламя, *б* — умеренно оторванное пламя, *в* — пламя, практически присоединенное к кромке сопла

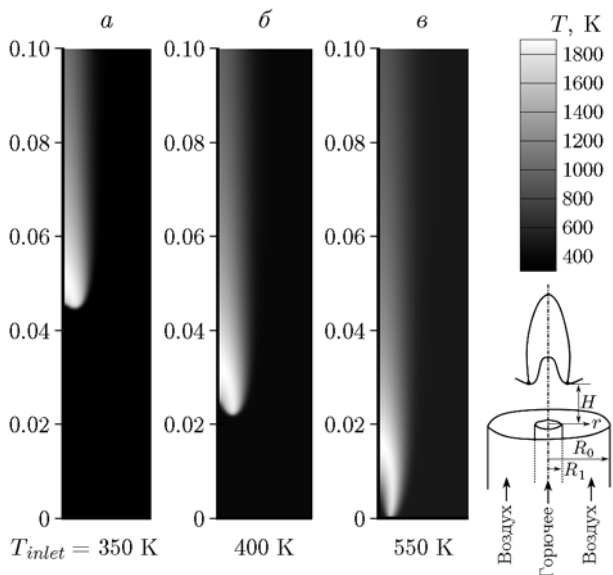


Рис. 8. Рассчитанное по схеме из 12 соединений распределение температуры в пламени струи топлива в спутном потоке воздуха [28]: *a* — сильно оторванное пламя, *б* — умеренно оторванное пламя, *в* — пламя, практически присоединенное к кромке сопла; на врезке — схема горелки

нием 18- и 12-компонентных схем, показаны на рис. 7 и 8. Каждый из них отражает три случая, соответствующие различной температуре газов на выходе из сопел, что приводит к сильному, умеренному и незначительному отрыву пламени. В случае слабого отрыва пламени распределение температуры имеет форму рыбьей кости, а при увеличении высоты отрыва температурное поле становится более похожим по форме на зуб. Аналогичные изменения наблюдались как при экспериментальной визуализации [28], так и при проведении аналогичных расчетов струйных пламен [4]. В настоящей работе обе модели хорошо отражают наблюдаемые тенденции.

На рис. 9 сопоставлены расчетные и экспериментальные зависимости высоты отрыва пламени H от начальной температуры газов на выходе из сопел. Как видно, используемые модели удовлетворительно предсказывают высоту отрыва пламени. Механизм из 18 соединений несколько лучше описывает экспериментальные данные, в то время как схема из 12 соединений немного занижает значения высоты отрыва, особенно при высоких значениях ϕ и T_0 . Это означает, что модель с 12 компонентами завышает реакционную способность топлив-

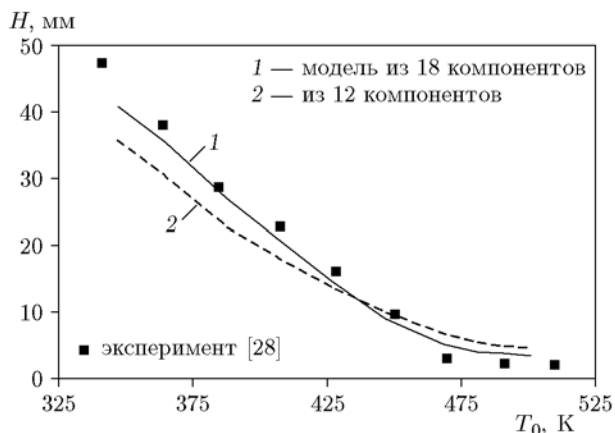


Рис. 9. Зависимость высоты отрыва пламени от начальной температуры газов

ва. Подтверждением тому являются также завышенные при расчете по данной модели значения скорости свободного распространения пламен богатых смесей, о чем упоминалось выше.

Приведенные выше результаты расчетов и их сопоставление с расчетами по детальному механизму и с экспериментальными данными показывают, что предложенные упрощенные схемы хорошо описывают наблюдаемые тенденции в исследуемых пламенах. Погрешности, возникающие при использовании квазиглобальной схемы, выше для смесей с коэффициентом избытка горючего $\phi > 1.45$. Это можно объяснить недостаточным количеством промежуточных углеводородов, включенных в схему разложения топлива. Способность предложенных кинетических схем описывать сложную тепловую структуру поднятого пламени струи топлива в спутном потоке воздуха указывает на то, что любая из этих схем, в зависимости от выделенных вычислительных мощностей, может быть включена в модель для крупномасштабных трехмерных расчетов турбулентного горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны две редуцированные кинетические схемы высокотемпературного окисления пропана. Одна из них состоит из 50 реакций и 18 соединений, в число которых входят

наиболее важные промежуточные соединения и углеводороды. Кроме того, в схему входит полный набор реакций для системы $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}_2$. Другая схема представляет собой компактный квазиглобальный механизм, содержащий 12 соединений. Разложение топлива до C_2H_4 , C_2H_2 и CO описывается в ней четырьмя глобальными реакциями. Эта схема, как и предыдущая, включает в себя реакции для системы $\text{CO}/\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{O}_2$.

Константы скоростей как глобальных, так и элементарных реакций представлены в аррениусовском виде. Предэкспоненциальные множители систематически оптимизированы путем расчета параметров ранее хорошо изученных пламен, таких как одномерное, предварительно перемешанное, свободно распространяющееся пламя, противоточное пламя, двумерное поднятое пламя струи топлива в спутном потоке воздуха. Кроме того, проведены расчеты задержки воспламенения горючей смеси в реакторе идеального смешения.

Предложенные схемы продемонстрировали хорошую предсказательную способность. Если эти механизмы дополнить, например, реакциями, описывающими образование NO_x , и реакциями хемилюминесцентных соединений, то можно будет использовать их для расчета многомерных турбулентных потоков. Хотя использование упрощенной кинетики, как известно, не позволяет достоверно описать химические превращения, тем не менее такой подход отражает вполне адекватно некоторые существенные свойства пламен. Процедура, применяемая в данной работе при разработке упрощенных моделей, может быть также применена к более сложным углеводородам или альтернативным видам топлива, представляющим практический интерес.

Авторы выражают благодарность проф. Ф. Эголфопулосу и сотрудникам лаборатории исследования горения и топлив факультета аэрокосмической техники и машиностроения Университета Южной Калифорнии (США, штат Лос-Анджелес) за предоставление редуцированной схемы реакций (27 соединений), а также за полезные обсуждения результатов этой работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ
18-компонентная модель

ELEMENTS

O H C N

SPECIES

H O OH HO₂ H₂ H₂O O₂ CH₃ HCO CH₂OCO CO₂ C₂H₂ C₂H₃ C₂H₄ C₃H₆ C₃H₈ N₂

| № п/п | Реакция | A, см ³ , моль, с | n | E, Дж/моль |
|---|--|------------------------------|--------|------------|
| 1 | H + O ₂ ↔ O + OH | 2.644 · 10 ¹⁶ | -0.671 | 17 041.00 |
| 2 | O + H ₂ ↔ H + OH | 4.589 · 10 ⁴ | 2.700 | 6 260.00 |
| 3 | OH + H ₂ ↔ H + H ₂ O | 0.073 · 10 ⁸ | 1.510 | 3 430.00 |
| 4 | 2OH ↔ O + H ₂ O | 3.973 · 10 ⁴ | 2.400 | -2 110.00 |
| 5 | 2H + M ↔ H ₂ + M | 1.780 · 10 ¹⁸ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /0/H ₂ O/0/CO ₂ /0/ | | | | |
| 6 | H + OH + M ↔ H ₂ O + M | 4.400 · 10 ²² | -2.000 | 0 |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.30/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 7 | O + H + M ↔ OH + M | 9.428 · 10 ¹⁸ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/12.00/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 8 | 2O + M ↔ O ₂ + M | 1.200 · 10 ¹⁷ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /2.40/H ₂ O/15.40/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 9 | H + O ₂ (+ M) ↔ HO ₂ (+ M) | 1.116 · 10 ¹¹ | 0.440 | 0 |
| LOW / 0.63280 · 10 ²⁰ -0.14000 · 10 ¹ 0 · 10 ⁰ | | | | |
| TROE / 0.50000 · 10 ⁰ 0.10000 · 10 ⁻²⁹ 0.10000 · 10 ³¹ | | | | |
| H ₂ O/11.89/O ₂ /0.85/CO/1.09/CO ₂ /2.18/ | | | | |
| 10 | HO ₂ + H ↔ O + H ₂ O | 3.970 · 10 ¹² | 0 | 671.00 |
| 11 | HO ₂ + H ↔ 2OH | 7.485 · 10 ¹³ | 0 | 295.00 |
| 12 | HO ₂ + O ↔ OH + O ₂ | 4.000 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 13 | CO + O(+ M) ↔ CO ₂ (+ M) | 1.362 · 10 ¹⁰ | 0 | 2 384.00 |
| LOW / 0.11730 · 10 ²⁵ -0.27900 · 10 ¹ 0.41910 · 10 ⁴ | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/12.00/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 14 | CO + OH ↔ CO ₂ + H | 7.046 · 10 ⁴ | 2.053 | -355.67 |
| 15 | CO + O ₂ ↔ CO ₂ + O | 1.119 · 10 ¹² | 0 | 47 700.00 |
| 16 | CO + HO ₂ ↔ CO ₂ + OH | 1.570 · 10 ⁵ | 2.180 | 17 942.61 |
| 17 | HCO + H ↔ CO + H ₂ | 0.830 · 10 ¹⁴ | 0 | 0 |
| 18 | HCO + O ↔ CO + OH | 2.083 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 19 | HCO + O ↔ CO ₂ + H | 3.000 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 20 | HCO + OH ↔ CO + H ₂ O | 3.500 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 21 | HCO + M ↔ CO + H + M | 6.000 · 10 ¹⁷ | -1.000 | 17 000.00 |

| № п/п | Реакция | A , см ³ , моль, с | n | E , Дж/моль |
|---|--|---------------------------------|--------|---------------|
| H ₂ /2.00/H ₂ O/0/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 22 | HCO + O ₂ ↔ CO + HO ₂ | 5.000 · 10 ⁸ | 0.807 | -727.00 |
| 23 | CO + H ₂ (+ M) ↔ CH ₂ O(+ M) | 4.300 · 10 ⁷ | 1.500 | 79 600.00 |
| LOW / 0.50700 · 10 ²⁸ -0.34200 · 10 ¹ 0.84350 · 10 ⁵ / | | | | |
| TROE / 0.93200 · 10 ⁰ 0.19700 · 10 ³ 0.15400 · 10 ⁴ 0.10300 · 10 ⁵ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.00/CO/1.50/CO ₂ /2.00/ | | | | |
| 24 | HCO + H(+ M) ↔ CH ₂ O(+ M) | 1.090 · 10 ¹² | 0.480 | -260.00 |
| LOW / 0.13500 · 10 ²⁵ -0.25700 · 10 ¹ 0.14250 · 10 ⁴ / | | | | |
| TROE / 0.78240 · 10 ⁰ 0.27100 · 10 ³ 0.27550 · 10 ⁴ 0.65700 · 10 ⁴ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.00/CO/1.50/CO ₂ /2.00/ | | | | |
| 25 | CH ₂ O + H ↔ HCO + H ₂ | 5.000 · 10 ¹⁰ | 1.050 | 3 275.00 |
| 26 | CH ₂ O + O ↔ HCO + OH | 3.900 · 10 ¹³ | 0 | 3 540.00 |
| 27 | CH ₂ O + OH ↔ HCO + H ₂ O | 3.430 · 10 ⁹ | 1.180 | -447.00 |
| 28 | CH ₃ + O ↔ CH ₂ O + H | 9.600 · 10 ¹⁵ | 0 | 0 |
| 29 | CH ₃ + O ₂ ↔ OH + CH ₂ O | 4.000 · 10 ¹² | 0 | 8 940.00 |
| 30 | C ₂ H ₃ (+ M) ↔ C ₂ H ₂ + H(+ M) | 2.693 · 10 ⁹ | 1.620 | 37 048.20 |
| LOW / 0.25650 · 10 ²⁸ -0.34000 · 10 ¹ 0.35799 · 10 ⁵ / | | | | |
| TROE / 0.19816 · 10 ¹ 0.53837 · 10 ⁴ 0.42932 · 10 ¹ -0.79500 · 10 ⁻¹ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.00/CO/1.50/CO ₂ /2.00/C ₂ H ₂ /3.00/C ₂ H ₄ /3.00/ | | | | |
| 31 | C ₂ H ₂ + 2O ↔ 2CO + 2H | 4.832 · 10 ¹⁵ | 2.000 | 1 900.00 |
| 32 | C ₂ H ₂ + OH ↔ CH ₃ + CO | 4.830 · 10 ⁻² | 4.000 | -2 000.00 |
| 33 | C ₂ H ₂ + HCO ↔ C ₂ H ₃ + CO | 2.500 · 10 ⁷ | 2.000 | 6 000.00 |
| 34 | C ₂ H ₃ + H(+ M) ↔ C ₂ H ₄ (+ M) | 6.080 · 10 ¹² | 0.270 | 280.00 |
| LOW / 0.14000 · 10 ³¹ -0.38600 · 10 ¹ 0.33200 · 10 ⁴ / | | | | |
| TROE / 0.78200 · 10 ⁰ 0.20750 · 10 ³ 0.26630 · 10 ⁴ 0.60950 · 10 ⁴ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.00/CO/1.50/CO ₂ /2.00/C ₂ H ₂ /3.00/C ₂ H ₄ /3.00/ | | | | |
| 35 | C ₂ H ₃ + H ↔ C ₂ H ₂ + H ₂ | 4.860 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 36 | C ₂ H ₃ + O ↔ CH ₃ + CO | 8.775 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 37 | C ₂ H ₃ + OH ↔ C ₂ H ₂ + H ₂ O | 3.863 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| 38 | C ₂ H ₃ + O ₂ ↔ HCO + CH ₂ O | 8.438 · 10 ¹⁶ | -1.390 | 1 010.00 |
| 39 | C ₂ H ₃ + HCO ↔ C ₂ H ₄ + CO | 1.680 · 10 ¹⁵ | 0 | 0 |
| 40 | C ₂ H ₃ + CH ₃ (+ M) ↔ C ₃ H ₆ (+ M) | 2.500 · 10 ¹³ | 0 | 0 |
| LOW / 0.42700 · 10 ⁵⁹ -0.11940 · 10 ² 0.97698 · 10 ⁴ / | | | | |
| TROE / 0.17500 · 10 ⁰ 0.13406 · 10 ⁴ 0.60000 · 10 ⁵ 0.10140 · 10 ⁵ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.00/CO/1.50/CO ₂ /2.00/C ₂ H ₄ /3.00/ | | | | |
| 41 | 2C ₂ H ₃ ↔ C ₂ H ₂ + C ₂ H ₄ | 9.600 · 10 ¹¹ | 0 | 0 |
| 42 | C ₂ H ₄ + O ↔ C ₂ H ₃ + OH | 1.250 · 10 ⁷ | 1.900 | 3 740.00 |

| № п/п | Реакция | A , см ³ , моль, с | n | E , Дж/моль |
|-------|--|---------------------------------|--------|---------------|
| 43 | $C_2H_4 + O \leftrightarrow CH_3 + HCO$ | $2.500 \cdot 10^7$ | 1.830 | 220.00 |
| 44 | $C_2H_4 + OH \leftrightarrow C_2H_3 + H_2O$ | $2.450 \cdot 10^6$ | 2.000 | 2 500.00 |
| 45 | $C_3H_6 + H \leftrightarrow C_2H_4 + CH_3$ | $3.500 \cdot 10^{22}$ | -2.390 | 11 180.00 |
| 46 | $C_3H_6 + HO_2 \leftrightarrow C_2H_3 + CH_2O + H_2O$ | $1.473 \cdot 10^7$ | 2.00 | -298.00 |
| 47 | $C_3H_8 + 2H \leftrightarrow C_3H_6 + 2H_2$ | $1.300 \cdot 10^7$ | 2.400 | 4 471.00 |
| 48 | $C_3H_8 + O \leftrightarrow C_3H_6 + H_2O$ | $4.760 \cdot 10^5$ | 2.710 | 2 106.00 |
| 49 | $C_3H_8 + 2OH \leftrightarrow C_3H_6 + 2H_2O$ | $2.400 \cdot 10^5$ | 2.390 | 393.00 |
| 50 | $C_3H_8 + 3O_2 \rightarrow C_2H_2 + 2H_2O + CO_2 + OH + O + H$ | $2.000 \cdot 10^{19}$ | 1.900 | 47 590.00 |

12-компонентная модель

ELEMENTS

O H C N

SPECIES

H O OH H₂ H₂O O₂ CO CO₂C₂H₂ C₂H₄ C₃H₈ N₂

| № п/п | Реакция | A , см ³ , моль, с | n | E , Дж/моль |
|--|--|---------------------------------|--------|---------------|
| 1 | $H + O_2 \leftrightarrow O + OH$ | $2.244 \cdot 10^{16}$ | -0.671 | 17 041.00 |
| 2 | $O + H_2 \leftrightarrow H + OH$ | $4.589 \cdot 10^4$ | 2.700 | 6 260.00 |
| 3 | $OH + H_2 \leftrightarrow H + H_2O$ | $1.554 \cdot 10^8$ | 1.510 | 3 430.00 |
| 4 | $2OH \leftrightarrow O + H_2O$ | $3.973 \cdot 10^4$ | 2.400 | -2 110.00 |
| 5 | $2H + M \leftrightarrow H_2 + M$ | $1.780 \cdot 10^{20}$ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /0/H ₂ O/0/CO ₂ /0/ | | | | |
| 6 | $H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$ | $4.400 \cdot 10^{22}$ | -2.000 | 0 |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/6.30/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 7 | $O + H + M \leftrightarrow OH + M$ | $9.428 \cdot 10^{18}$ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/12.00/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 8 | $2O + M \leftrightarrow O_2 + M$ | $1.200 \cdot 10^{18}$ | -1.000 | 0 |
| H ₂ /2.40/H ₂ O/15.40/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 9 | $CO + O(+M) \leftrightarrow CO_2(+M)$ | $1.260 \cdot 10^{10}$ | 0 | 2 384.00 |
| LOW / $0.11730 \cdot 10^{25}$ $-0.27900 \cdot 10^1$ $0.41910 \cdot 10^4$ / | | | | |
| H ₂ /2.00/H ₂ O/12.00/CO/1.75/CO ₂ /3.60/ | | | | |
| 10 | $CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$ | $6.046 \cdot 10^4$ | 2.053 | -355.67 |
| 11 | $CO + O_2 \leftrightarrow CO_2 + O$ | $1.119 \cdot 10^{12}$ | 0 | 47 700.00 |
| 12 | $C_2H_2 + 5OH \rightarrow 2CO + 3H_2O + H$ | $4.830 \cdot 10^{-2}$ | 4.000 | -2 000.00 |
| 13 | $C_2H_2 + 2O \rightarrow 2CO + 2H$ | $2.200 \cdot 10^{15}$ | 2.000 | 1 900.00 |
| 14 | $C_2H_4 + O \rightarrow C_2H_2 + H + OH$ | $3.100 \cdot 10^{12}$ | 0 | 0 |

| № п/п | Реакция | A , см ³ , моль, с | n | E , Дж/моль |
|-------|---|---------------------------------|-------|---------------|
| 15 | $C_2H_4 + 2OH \leftrightarrow C_2H_2 + 2H_2O$ | $3.863 \cdot 10^{13}$ | 0 | 0 |
| 16 | $C_3H_8 + 2H + 4OH \rightarrow C_2H_4 + CO + 3H_2O + 2H_2$ | $2.760 \cdot 10^{22}$ | 2.710 | 4 471.00 |
| 17 | $C_3H_8 + OH + 2O \rightarrow C_2H_4 + CO + H + 2H_2O$ | $2.760 \cdot 10^{22}$ | 2.710 | 2 106.00 |
| 18 | $C_3H_8 + 3O_2 \leftrightarrow C_2H_4 + CO_2 + 3OH + O + H$ | $1.000 \cdot 10^{19}$ | 2.500 | 47 590.00 |

ЛИТЕРАТУРА

1. Karagiannaki C., Dogkas E., Paterakis G., Souflas K., Psarakis E. Z., Vasiliou P., Koutmos P. A comparison of the characteristics of disk stabilized lean propane flames operated under premixed or stratified inlet mixture conditions // *Exp. Therm. Fluid Sci.* — 2014. — V. 59. — DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2014.04.002.
2. Briones A. M., Sekar B., Kundu K., Stouffer S., Zelina J. Reduced propane-air and vitiated-air chemical schemes for gas turbine combustion applications // 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 2009.
3. Gokulakrishnan P., Bikkani R., Klassen M., Roby R., Kiel B. Influence of turbulence-chemistry interaction in blow-out predictions of bluff-body stabilized flames // 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 2009.
4. Lou H. H., Chen D., Martin C. B., Li X., Li K., Vaid H., Kumar A. T., Singh K. D. Validation of a reduced combustion mechanism for light hydrocarbons // *Clean Technol. Environ. Policy.* — 2012. — V. 14. — P. 737–748. — DOI: 10.1007/s10098-011-0441-6.
5. Lu T., Law C. K. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2009. — V. 35. — P. 192–215.
6. Haworth D. C., Blint R. J., Cuenot B., Poinot T. J. Numerical simulation of turbulent propane-air combustion with nonhomogeneous reactants // *Combust. Flame.* — 2000. — V. 121. — P. 395–417.
7. Law C. K., Sung C. J., Wang H., Lu T. F. Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanisms for combustion modeling // *AIAA J.* — 2003. — V. 41. — P. 1629–1646. — DOI: 10.2514/2.7289.
8. Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F. N., Law C. K. USC Mech Version II. High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C1–C4 Compounds. — 2007. — http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm.
9. Qin Z., Lissianski V. V., Yang H., Gardiner W. C., Davis S. G., Wang H. Combustion chemistry of propane: A case study of detailed reaction mechanism optimization // *Proc. Combust. Inst.* — 2000. — V. 28. — P. 1663–1669. — DOI: 10.1016/S0082-0784(00)80565-2.
10. Maas U., Pope S. B. Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space // *Combust. Flame.* — 1992. — V. 88. — P. 239–264. — DOI: 10.1016/0010-2180(92)90034-M.
11. Petrova M. V., Williams F. A. A small detailed chemical-kinetic mechanism for hydrocarbon combustion // *Combust. Flame.* — 2006. — V. 144. — P. 526–544. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.07.016.
12. Djavdan E., Darabiha N., Giovangigli V., Candel S. M. Strained propane-air flames with detailed and reduced kinetic schemes // *Combust. Sci. Technol.* — 1991. — V. 76. — P. 287–309. — DOI: 10.1080/00102209108951714.
13. Leung K. M., Lindstedt R. P., Jones W. P. Reduced kinetic mechanisms for propane diffusion flames BT // *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* /N. Peters, B. Rogg (Eds). — Berlin; Heidelberg: Springer, 1993.
14. Paczko G., Lefdal P. M., Peters N. Reduced reaction schemes for methane, methanol and propane flames // *Symp. Combust.* — 1988. — V. 21. — P. 739–748. — DOI: 10.1016/S0082-0784(88)80306-0.
15. Westbrook C. K., Dryer F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 1984. — V. 10. — P. 1–57. — DOI: 10.1016/0360-1285(84)90118-7.
16. Lytras I., Koutmos P., Dogkas E. Сокращенная кинетическая модель для моделирования сложных турбулентных пламен метана // *Физика горения и взрыва.* — 2019. — Т. 55, № 2. — С. 11–28.
17. Nori V. N., Scitzman J. M. CH* chemiluminescence modeling for combustion diagnostics // *Proc. Combust. Inst.* — 2009. — V. 32. — P. 895–903. — DOI: 10.1016/j.proci.2008.05.050.
18. Egolfopoulos F. N., Zhao R. // Private Communication. Dep. Aerosp. Mech. Eng. Univ. South California, 2015, Los Angeles, Calif 90089-1453, USA.
19. Souflas K., Menon S., Paterakis G., Dogkas E., Koutmos P., Gururajan V., Egolfopoulos F. N. Determination of laminar flame speeds

- using axisymmetric bunsen flames: Intricacies and accuracy // 9th Mediterranean Combust. Symp., 2015.
20. **Arvidsson A.** Development of an Automatic Reduction Tool for Chemical Mechanisms and an Optimized Sparse Matrix Solver for Systems of Differential and Algebraic Equations. — Lund University, 2010.
 21. **Chemkin II** Collection, Release 4.1. — 2006.
 22. **ANSYS®** Academic Research, Release 18. — 2017.
 23. **Bibrycki J., Poinso T., Zajdel A.** Investigation of laminar flame speed of $\text{CH}_4/\text{N}_2/\text{O}_2$ and $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{O}_2$ mixtures using reduced chemical kinetic mechanisms // Arch. Combust. — 2010. — P. 287–296.
 24. **Prince J. C., Treviño C., Williams F. A.** Reduced kinetic mechanism for high-temperature propane ignition // Int. J. Chem. Kinet. — 2008. — V. 40. — P. 721–729. — DOI: 10.1002/KIN.20365.
 25. **Park O., Veloo P. S., Liu N., Egolfopoulos F. N.** Combustion characteristics of alternative gaseous fuels // Proc. Combust. Inst. — 2011. — V. 33. — P. 887–894. — DOI: 10.1016/j.proci.2010.06.116.
 26. **Zhao Z., Kazakov A., Li J., Dryer F. L.** The initial temperature and N_2 dilution effect on the laminar flame speed of propane/air // Combust. Sci. Technol. — 2004. — V. 176. — P. 1705–1723. — DOI: 10.1080/00102200490487553.
 27. **Cheng Z., Pitz R. W., Wehrmeyer J. A.** Lean and ultralean stretched propane-air counterflow flames // Combust. Flame. — 2006. — V. 145. — P. 647–662. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2006.02.006.
 28. **Kim K. N., Won S. H., Chung S. H.** Characteristics of laminar lifted flames in coflow jets with initial temperature variation // Proc. Combust. Inst. — 2007. — V. 31. — P. 947–954. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.08.012>.

Поступила в редакцию 04.09.2018.

После доработки 29.04.2019.

Принята к публикации 28.08.2019.
