

УДК 546.36

АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В МОДЕЛЯХ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ ПРОПАНА

I. Lytras, E. P. Mitsopoulos, E. Dogkas, P. Koutmos

Университет Патр, Патры 26504, Греция, ermitsopoulos@gmail.com

Представлена упрощенная алгебраическая модель для вычисления концентраций OH^* , CN^* и CO_2^* на базе результатов численных расчетов пламен пропана с помощью редуцированного механизма его окисления. Концентрации возбужденных частиц и их предшественников вычислены путем постобработки основных результатов моделирования с использованием алгебраических выражений, полученных в предположении квазистационарности с учетом детальной кинетики образования хемилюминесцентных соединений. Обнаруженные расхождения компенсированы применением поправочных функций, полученных из сопоставления с расчетами по детальной модели химических реакций. Проведены расчеты по предложенному подходу серии модельных ламинарных пламен с целью расширения его применимости к системам с турбулентным горением.

Ключевые слова: хемилюминесцентное свечение, алгебраическая модель хемилюминесценции, редуцированная кинетическая модель горения, окисление пропана, ламинарное пламя, турбулентное горение.

DOI 10.15372/FGV20200304

ВВЕДЕНИЕ

Хемилюминесценция пламени — это невозмущающий, недорогой оптический метод диагностики реагирующих потоков, используемый как в фундаментальных исследованиях, так и для мониторинга процессов горения на практике [1–3]. Он сыграл важную роль в разработке более безопасных, в том числе с точки зрения экологии, и более эффективных устройств сжигания. Этот метод находит применение для оптимизации работы как небольших промышленных установок, так и двигателей внутреннего сгорания и газотурбинных установок [4–6].

В углеводородных пламенах источниками хемилюминесцентного свечения являются возбужденные радикалы или молекулы, такие как CN^* , OH^* , CO_2^* и C_2^* [3]. Поскольку эти соединения образуются в основном во фронте пламени, хемилюминесценция позволяет охарактеризовать зону реакций [2, 4, 7]. Измерение хемилюминесценции обычно проводится совместно с применением других методов, например таких, как PLIF (плоскостная лазерно-

индуцированная флуоресценция) [4, 6, 8]. Результаты измерения полезны также для проверки современных кинетических схем, моделирующих хемилюминесценцию [2, 6, 9, 10].

Кинетические модели, включающие в себя хемилюминесцентные частицы, были подтверждены и существенно усовершенствованы, главным образом, для ламинарных пламен [9–11]. Применение таких схем в рамках сложных численных расчетов позволяет грамотно интерпретировать измеренную интенсивность излучения [4, 5, 8, 12].

Авторы работы [6] предположили, что результаты, полученные для ламинарных пламен, могут быть использованы для описания турбулентных пламен в условиях слабой деформации. Предсказание концентраций возбужденных частиц в турбулентных реагирующих потоках могло бы существенно упростить анализ экспериментальных данных, представляющих собой огромное количество изображений. Однако точное определение концентраций хемилюминесцентных частиц и их предшественников требует трехмерных расчетов с использованием детальных кинетических механизмов, т. е. требует больших вычислительных мощностей [5, 8]. Кроме того, помимо неопределенностей, связанных с кинетикой хемилюминесценции, маловероятно, что соединения-

предшественники и тушители будут теми же самыми в общих схемах окисления (например, [6, 13]).

Из-за этих трудностей попытки численно оценить хемилюминесценцию в турбулентных реагирующих потоках довольно немногочисленны. В [13] выполнен расчет средних концентраций CH^* . Автор провел постобработку собственных результатов расчета методом переноса функции плотности вероятности и представления предшественников и возбужденных частиц как соединений, непосредственно образовавшихся по его схеме окисления топлива, в предположении квазистационарности состояния (QSS). В [14] метод постобработки для хемилюминесцентных частиц (например, CH^* и OH^*) использовался для анализа изображений, полученных методом компьютерной томографии; применялись таблицы преобразования, созданные для ламинарных пламен. В [15] разработан метод коррекции оптических искажений при диагностике горения, основанный на методе моделирования крупных вихрей (LES) с использованием значений концентрации OH^* из справочных таблиц, связывающих состав смеси и концентрацию люминесцентных частиц. В работе [8] проведены расчеты камеры сгорания методом осреднения Рейнольдса уравнений Навье — Стокса (RANS) с использованием таблиц скоростей реакций образования и тушения хемилюминесцентных частиц в зависимости от локальной степени превращения и состава смеси. В [16] выполнены расчеты ракетной камеры сгорания путем решения уравнений переноса для хемилюминесцентных частиц и исследована обоснованность предположения о квазистационарности для OH^* и CH^* .

Целью данной статьи является разработка методологии расчета концентрации возбужденных частиц на основе результатов [6, 13], которая подходила бы для применения в сложных численных расчетах турбулентных пламен. Концентрации OH^* , CH^* и CO_2^* рассчитаны исходя из предположения, что они находятся в квазистационарном состоянии и определяются скоростью их образования, посредством постобработки с использованием алгебраических выражений, полученных с применением проверенных детальных механизмов химических реакций [9, 11]. Концентрации соединений-предшественников получены из аналогичных выражений, включающих в себя концентрации тех веществ, которые были

явно рассчитаны с использованием редуцированной кинетической модели в предположении квазистационарности. Неточности, возникающие на этом этапе, компенсированы с помощью поправочных функций, определенных путем сравнения результатов расчетов по предложенной модели и расчетов с использованием детального механизма реакций. Такой подход позволил создать модель для описания хемилюминесценции, сходную по уровню сложности с редуцированным механизмом окисления топлива. С помощью программного пакета ANSYS 18 предложенная алгебраическая модель хемилюминесценции проверена на результатах доступных экспериментов и численных расчетов с использованием детальной кинетической схемы для ламинарных пламен.

1. УПРОЩЕННАЯ АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

1.1. Постановка задачи

Была поставлена цель объединить упрощенную алгебраическую модель расчета концентраций хемилюминесцентных частиц с квазиглобальной схемой окисления пропана из 12 соединений и построить комбинированную модель, подходящую для трехмерного моделирования турбулентных реагирующих потоков. Квазиглобальная схема из 12 соединений была разработана для бедных смесей C_3H_8 /воздух путем редуцирования схемы, состоящей из 27 соединений и 352 реакций, которая, в свою очередь, построена на основе механизма, включающего в себя 45 соединений. В обеих схемах (из 45 и 27 соединений) используются данные библиотеки USC Mech II C_1 – C_4 [17] путем последовательного применения анализа графа прямых связей (DRG). Входящие в квазиглобальную схему молекулы CO , H_2 , радикалы H , O , OH , а также промежуточные углеводороды C_2H_4 , C_2H_2 , которые являются предшественниками основных загрязняющих веществ, участвуют в реакциях наибольшего тепловыделения, отвечают за бедный срыв пламени, а также являются предшественниками возбужденных частиц, включенных в детальные химико-кинетические модели (см., например, [6, 9, 13]). Эта схема, представленная в табл. 1, была применена для моделирования пламени пропана в спутном потоке, а также для моделирования бедных стратифицированных пламен

Таблица 1

Базовая схема окисления пропана, включающая в себя 12 соединений

Номер	Реакция	A , $\text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	n	E , кал/моль
R1	$\text{H} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{O} + \text{OH}$	$2.644 \cdot 10^{16}$	-0.671	17 041.00
R2	$\text{O} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H} + \text{OH}$	$4.589 \cdot 10^4$	2.700	6 260.00
R3	$\text{OH} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$1.554 \cdot 10^8$	1.510	3 430.00
R4	$2\text{OH} \leftrightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$3.973 \cdot 10^4$	2.400	-2 110.00
R5	$2\text{H} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{M}$	$1.780 \cdot 10^{20}$	-1.000	0
R6	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$4.400 \cdot 10^{22}$	-2.000	0
R7	$\text{O} + \text{H} + \text{M} \leftrightarrow \text{OH} + \text{M}$	$9.428 \cdot 10^{18}$	-1.000	0
R8	$2\text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{M}$	$1.200 \cdot 10^{18}$	-1.000	0
R9	$\text{CO} + \text{O} (+ \text{M}) \leftrightarrow \text{CO}_2 (+ \text{M})$	$1.260 \cdot 10^{10}$	0	2 384.00
R10	$\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$6.046 \cdot 10^4$	2.053	-355.67
R11	$\text{CO} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{O}$	$1.119 \cdot 10^{12}$	0	47 700.00
R12	$\text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{O} \leftrightarrow 2\text{CO} + 2\text{H}$	$6.230 \cdot 10^{13}$	2.000	1 900.00
R13	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} + 2\text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H} + \text{H}_2$	$7.000 \cdot 10^{20}$	2.400	4 471.00
R14	$\text{C}_3\text{H}_8 + 3\text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 + \text{OH} + \text{O} + \text{H}$	$2.000 \cdot 10^{19}$	1.900	47 590.00

пропана на плохообтекаемом теле (см., например, [18, 19]). Расчеты проводились с помощью программного обеспечения ANSYS 18.

Алгебраическая модель хемилюминесценции реализована в виде полевых функций и проверена на ламинарных противоточных осесимметричных бунзеновских пламенах, а также на пламени в спутном потоке. Она может быть также использована при решении задач вычислительной гидродинамики или в сочетании с любым другим механизмом реакций. Комбинированная модель (СМ), т. е. квази-глобальная схема с алгебраической моделью хемилюминесценции, была проверена по результатам экспериментов и моделирования пламен с использованием вышеописанного скелетного механизма окисления C_3H_8 из 45 соединений, включающего в себя детальную подмодель хемилюминесценции [9], позднее усовершенствованную в работе [20]. Указанная расширенная кинетическая схема приведена в табл. 2, А и далее называется детальной моделью (DM).

1.2. Концентрации возбужденных частиц

В углеводородном пламени источниками видимого и ультрафиолетового излучения являются четыре основных компонента: OH^* , CH^* , CO_2^* и C_2^* [2, 6, 9]. Характеристики этих

частиц и кинетика их реакций систематично обсуждались в ряде работ (например, [2, 6, 9–11, 20–23]). Имеют место три основных процесса: образование предшественников, радикалов и молекул в возбужденном состоянии; быстрые столкновительные реакции тушения, приводящие возбужденные молекулы к их основному состоянию; радиационные переходы в основное состояние.

CH^* в основном излучает в ультрафиолетовой и видимой областях на длине волны 431 нм [21], а приведенная в табл. 2, А кинетика CH^* описана в работе [9]. Реакции C_2H с O и O_2 (см. С1, С2 в табл. 2, А) являются доминирующими путями образования CH^* при горении углеводородов. Вклад реакции $\text{C}_2 + \text{OH} \leftrightarrow \text{CH}^* + \text{CO}$ не рассматривался в алгебраической модели из-за сложности получения явного алгебраического выражения для C_2 . Хотя и ожидается, что ее вклад будет меньше, по крайней мере в бедных и стехиометрических пламенах пропана [6], этот аспект всё же требует дальнейшего изучения [20]. Максимум интенсивности ультрафиолетового излучения OH^* приходится на длину волны 309 нм [23]. В табл. 2, А представлены пути и соответствующие константы скорости, предложенные в работах [9, 20]. Основным каналом образования OH^* является ре-

Таблица 2

Реакции образования и расходования

Номер	Реакция	$A, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	n	$E, \text{кал/моль}$
А. Хемиллюминесцентные соединения [9, 20]				
CH*				
C1	$\text{C}_2\text{H} + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}^* + \text{CO}$	$1.04 \cdot 10^{12}$	0	2600.00
C2	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}^* + \text{CO}_2$	$1.8 \cdot 10^{11}$	0	0
C3	$\text{CH}^* + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CH} + \text{H}_2\text{O}$	$5.30 \cdot 10^{13}$	0	0
C4	$\text{CH}^* + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{CH} + \text{CO}_2$	$2.41 \cdot 10^{-1}$	4.300	-1696.94
C5	$\text{CH}^* + \text{CO} \leftrightarrow \text{CH} + \text{CO}$	$2.44 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C6	$\text{CH}^* + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	$1.47 \cdot 10^{14}$	0	1362.33
C7	$\text{CH}^* + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH} + \text{O}_2$	$2.48 \cdot 10^6$	2.140	-1720.84
C8	$\text{CH}^* + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{CH} + \text{N}_2$	$3.03 \cdot 10^2$	3.400	-382.41
C9	$\text{CH}^* + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH} + \text{CH}_4$	$1.73 \cdot 10^{13}$	0	167.30
OH*				
C10	$\text{H} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{OH}^* + \text{M}$	$1.500 \cdot 10^{13}$	0	5975.14
C11	$\text{CH} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{OH}^* + \text{CO}$	$8.000 \cdot 10^{10}$	0	0
C12	$\text{OH}^* + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	$5.930 \cdot 10^{12}$	0.500	-863.64
C13	$\text{OH}^* + \text{CO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{CO}_2$	$2.760 \cdot 10^{12}$	0.500	-970.36
C14	$\text{OH}^* + \text{CO} \rightarrow \text{OH} + \text{CO}$	$3.230 \cdot 10^{12}$	0.500	-789.47
C15	$\text{OH}^* + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$	$2.950 \cdot 10^{12}$	0.500	-444.55
C16	$\text{OH}^* + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	$2.100 \cdot 10^{12}$	0.500	-482.79
C17	$\text{OH}^* + \text{OH} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$3.360 \cdot 10^{12}$	0.500	-762.00
C18	$\text{OH}^* + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	$1.310 \cdot 10^{12}$	0.500	-167.30
C19	$\text{OH}^* + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	$2.890 \cdot 10^{11}$	0	461.28
C20	$\text{OH}^* + \text{N}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{N}_2$	$1.080 \cdot 10^{11}$	0.500	-1240.44
C21	$\text{OH}^* + \text{CH}_4 \leftrightarrow \text{OH} + \text{CH}_4$	$3.360 \cdot 10^{12}$	0.500	-635.76
CO ₂ *				
C22	$\text{CO} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{CO}_2^* + \text{M}$	$4.00 \cdot 10^{14}$	0	2384.00
C23	$\text{CO}_2^* + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$8.34 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C24	$\text{CO}_2^* + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{CO}_2$	$9.12 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C25	$\text{CO}_2^* + \text{CO} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{CO}$	$9.69 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C26	$\text{CO}_2^* + \text{H} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$3.07 \cdot 10^{13}$	0.500	0
C27	$\text{CO}_2^* + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$2.27 \cdot 10^{13}$	0.500	0
C28	$\text{CO}_2^* + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{O}_2$	$8.77 \cdot 10^{12}$	0.500	0

Продолжение таблицы 2

Номер	Реакция	$A, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	n	$E, \text{кал/моль}$
А. Хемилюминесцентные соединения [9, 20]				
CO_2^*				
C29	$\text{CO}_2^* + \text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{O}$	$9.82 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C30	$\text{CO}_2^* + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$	$9.87 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C31	$\text{CO}_2^* + \text{CH}_4 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{CH}_4$	$1.19 \cdot 10^{13}$	0.500	0
C32	$\text{CO}_2^* + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{N}_2$	$9.96 \cdot 10^{12}$	0.500	0
C33	$\text{CO}_2^* \leftrightarrow \text{CO}_2$	$1.00 \cdot 10^6$	0	0
В. Предшественники возбужденных частиц				
C_2H [13]				
P1	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{OH}$	$4.60 \cdot 10^{19}$	-1.400	28 950.00
P2	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$3.37 \cdot 10^7$	2.000	14 000.00
P3	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CH}^* + \text{CO}_2$	$3.20 \cdot 10^{11}$	0	1 600.00
P4	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{HCO} + \text{CO}$	$1.00 \cdot 10^{13}$	0	-755.00
P5	$\text{C}_2\text{H} + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}^* + \text{CO}$	$2.50 \cdot 10^{12}$	0	0
P6	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_2$	$5.68 \cdot 10^{10}$	0.900	1 993.00
P7	$\text{C}_2\text{H} + \text{H} + \text{M} \leftrightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{M}$	$1.00 \cdot 10^{17}$	-1.000	0
CH_2, CH [26]				
P8	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	$4.100 \cdot 10^8$	1.500	1 696.94
P9	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	$4.300 \cdot 10^{14}$	0	12 117.55
P10	$\text{CHCO} + \text{H} \leftrightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	$3.000 \cdot 10^{13}$	0	0
P11	$\text{CHCO} + \text{O} \leftrightarrow \text{CO} + \text{CO} + \text{H}$	$1.000 \cdot 10^{14}$	0	0
P12	$\text{CH}_2 + \text{H} \leftrightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	$8.400 \cdot 10^9$	1.500	334.61
P13	$\text{CH} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	$5.830 \cdot 10^9$	1.500	3 126.19
P14	$\text{CH} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CHO} + \text{O}$	$3.000 \cdot 10^{13}$	0	0
P15	$\text{CO}_2 + \text{CH} \leftrightarrow \text{CHO} + \text{CO}$	$3.400 \cdot 10^{12}$	0	693.11
P16	$\text{CH}_2 + \text{O} \leftrightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	$8.000 \cdot 10^{13}$	0	0
P17	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	$6.500 \cdot 10^{12}$	0	1 505.73
P18	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H} + \text{H}$	$6.500 \cdot 10^{12}$	0	1 505.73
P19	$\text{CH}_2 + \text{CO} \leftrightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	$2.361 \cdot 10^{12}$	0	-7 024.36

акция C11 вида $\text{CH} + \text{O}_2 \leftrightarrow \text{OH}^* + \text{CO}$, однако в модели также учитывается вклад реакции C10. В пламенах углеродсодержащих топлив интенсивный широкополосный хемилюминесцентный сигнал CO_2^* накладывается на линии CH^* и OH^* . В табл. 2, А приведена кинетическая схема для CO_2^* , предложенная авторами работы [11]. Реакция C22 между CO и O

дает основной вклад в образование CO_2^* . Излучение C_2^* в ультрафиолетовой области спектра незначительно по сравнению с вкладом остальных возбужденных компонентов в бедном и околостехиометрическом пламенах, которые здесь рассматриваются [6]. Однако в богатых пламенах и пламенах более тяжелых углеводородов вклад C_2^* может быть существенным. Способ-

Таблица 3

Алгебраические выражения для концентраций

А. Возбужденные частицы	
$\text{CH}^* = \frac{k_{C1}[\text{C}_2\text{H}][\text{O}_2] + k_{C2}[\text{C}_2\text{H}][\text{O}]}{\sum_{j=3}^9 k_{Qj}[\text{M}_j] + A_C}$	(ES1)
$\text{OH}^* = \frac{k_{C11}[\text{CH}][\text{O}_2]}{\sum_{j=12}^{21} k_{Qj}[\text{M}_j] + A_C}$	(ES2)
$\text{CO}_2^* = \frac{k_{C22}[\text{M}][\text{CO}][\text{O}]}{\sum_{j=24}^{33} k_{Qj}[\text{M}_j] + A_C}$	(ES3)
В. Предшественники возбужденных частиц	
$\text{C}_2\text{H} = \frac{k_{p1}[\text{C}_2\text{H}_2][\text{O}] + k_{p2}[\text{C}_2\text{H}_2][\text{OH}]}{(k_{p3} + k_{p4})[\text{O}_2] + k_{p5}[\text{O}] + k_{p6}[\text{H}_2] + k_{p7}[\text{M}][\text{H}]}$	(PS1)
$\text{CH} = \frac{k_{p12}[\text{CH}_2][\text{H}]}{k_{p14}[\text{O}_2] + k_{p15}[\text{CO}_2] + k_{p13}[\text{H}_2]}$	(PS2)
$\text{CH}_2 = \frac{(k_{p8} + k_{p9}z_1)[\text{C}_2\text{H}_2][\text{O}]}{k_{p12}[\text{H}](1 - z_2) + k_{p16}[\text{O}] + (k_{p17} + k_{p18})[\text{O}_2] + k_{p19}[\text{CO}](1 - z_1)}$	(PS3)
$z_1 = \frac{k_{p10}[\text{H}]}{k_{p10}[\text{H}] + k_{p11}[\text{O}]}$	
$z_2 = \frac{k_{p13}[\text{H}_2]}{k_{p13}[\text{H}_2] + k_{p14}[\text{O}_2] + k_{p15}[\text{CO}_2]}$	

ность кинетической модели точно предсказывать концентрации возбужденных молекул зависит как от соответствующих констант скоростей реакций, так и от точности определения концентраций предшественников и тушителей, например CH , C_2H , CH_2 , O , OH и, возможно, HCO .

Можно использовать три основных подхода, чтобы объединить кинетическую модель хемилюминесценции с трехмерной моделью турбулентного пламени (см., например, [24, 25]). Первый состоит в использовании полного детального кинетического механизма, включающего в себя образование хемилюминесцентных соединений [16]. Второй заключается в использовании таблиц параметров, полученных для модельных ламинарных пламен, в том числе таблиц, определяющих связи между концентрацией хемилюминесцентных частиц и каким-либо параметром пламени, например массовой долей топлива или степенью завершено-

сти процесса горения. Третий подход, который использован в настоящей работе, — обработка результатов базового моделирования на каждом временном шаге с использованием соответствующих выражений, полученных из модели хемилюминесценции, т. е. без прямого решения задачи расчета концентраций хемилюминесцентных частиц (см., например, [6, 8, 13]).

Возбужденные соединения оказывают незначительное влияние на химический состав пламени из-за их низких скоростей образования и быстрой гибели в результате столкновительного тушения. Логично считать их концентрацию квазистационарной, поскольку скорость образования ограничивает весь процесс, а их переносом можно пренебречь [6, 13]. Это предположение в некоторых случаях ставилось под сомнение. В работе [16] обнаружено, что, хотя предположение о квазистационарности является приемлемым

для CH^* , для OH^* оно не выполняется. С учетом неопределенности в используемых кинетических параметрах, а также сложности расчетов турбулентных течений, как и в ряде других исследований [6, 13, 25], в данной работе принято предположение о квазистационарности концентраций возбужденных частиц. Концентрация, например, CH^* может быть получена с помощью алгебраического выражения ES1, приведенного в табл. 3,А, где k_{C1} , k_{C2} — константы скоростей соответствующих реакций образования CH^* , k_{Qj} — константы скорости тушения CH^* при взаимодействии с компонентом j в реакциях C3–C9 (см. табл. 2,А), A_C — коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения фотонов при переходе CH^* в основное состояние. Аналогичные выражения могут быть получены для OH^* (уравнение ES2) и CO_2^* (уравнение ES3) [6, 25].

1.3. Концентрации предшественников

Частицы, являющиеся предшественниками возбужденных, такие как C_2H (для CH^*), а также CH и CH_2 (для OH^*) (см. табл. 2,В), обычно не включены в редуцированные модели горения, поэтому либо их нужно добавить в модель, либо выразить их концентрацию через явные значения локальных концентраций тех соединений, которые входят в модель. Существующая модель из 12 соединений (см. табл. 1) включает в себя CO , H_2 , радикалы H , O , OH и промежуточные соединения C_2H_4 , C_2H_2 , которые можно использовать для расчета указанных выше предшественников. Предполагая концентрацию предшественников квазистационарной, а также определив набор реакций, в которых они участвуют (см. табл. 2,В), и зная константы скоростей этих реакций (схема USC II), удалось получить алгебраические выражения для концентрации предшественников. Они представлены в табл. 3,В [13, 26]. C_2H образуется исключительно в результате реакций C_2H_2 с O и OH (см. P1 и P2 в табл. 2,В) и расходуется в реакциях с H , O , OH , O_2 , H_2 (реакции P3–P7), а его концентрация может быть вычислена явно по формуле PS1 из табл. 3,В. Аналогичным образом набор реакций, относящихся к образованию и расходованию CH и CH_2 , принимается таким, который указан в табл. 2,В: образование CH_2 по реакциям P8–P10, P13 и образование CH по P12 (см., например, [26]). Концентрации этих двух

соединений могут быть вычислены по выражениям PS2 и PS3 из табл. 3,В. Все соединения, концентрации которых присутствуют в выражениях PS1–PS3, включены в редуцированную модель.

Приведенные выше допущения в полученной упрощенной алгебраической модели представляют собой компромисс между экономией вычислительных ресурсов и точностью. Способность воспроизводить предложенной моделью концентрации как предшественников, так и самих возбужденных частиц подтверждена и проверена путем расчета тестовых пламен.

2. УТОЧНЕНИЕ И ПРОВЕРКА АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

Упрощенная алгебраическая модель хемилюминесценции (уравнения PS1–PS3 и ES1–ES3 в табл. 3) была включена в виде набора полевых функций, которые обрабатывались программным обеспечением ANSYS 18 [27]. На первом этапе проводились расчеты предварительно перемешанных [10] и частично предварительно перемешанных [28] противоточных пламен бедных смесей пропана в широком диапазоне коэффициентов растяжения, а также осесимметричных бунзеновских [29] пламен и поднятых пламен пропана в спутном потоке [30, 31]. Предварительно перемешанные противоточные пламена с коэффициентом растяжения $\alpha = 160 \text{ c}^{-1}$ стабилизировались между двумя соплами диаметром 30 мм, направленными друг на друга, расстояние между срезами которых составляло 25 мм. Частично предварительно перемешанное пламя с коэффициентом растяжения $\alpha = 140 \text{ c}^{-1}$ на встречных струях ультрабедной (и околостехиометрической) смеси $\text{C}_3\text{H}_8/\text{воздух}$ и смеси $\text{H}_2/\text{воздух}$ с коэффициентом избытка горючего $\phi = 0.28$ стабилизировалось на противоточной горелке [28], представляющей собой две прямые трубки диаметром 25 мм с расстоянием между торцами 12.6 мм.

Расчеты также проводились для осесимметричной горелки Бунзена с соплом диаметром 14 мм с коэффициентом сужения 12.75 и острой кромкой (толщиной 0.8 мм). В этой работе численно изучалось стехиометрическое ($\phi = 1$) пламя пропан/воздух, исследованное ранее в [29]. Расчеты пламен пропана в спутном потоке воздуха проводились для осесимметричных горелок, которые использовались в

работах [30, 31], их геометрия показана далее на вставке к рис. 4. Центральные сопла этих горелок имели внутренний диаметр 0.254 и 4.3 мм, а внешние трубки — 152 и 65 мм соответственно. Высота отрыва пламени варьировалась путем изменения либо скорости подачи топлива [30], либо температуры горячего и воздуха (T_0) [31]. В случае первой конфигурации через центральное сопло подавался чистый пропан со скоростью 9 м/с, а в кольцевой зазор — воздух со скоростью 4 см/с. Во втором случае через центральное сопло подавалась смесь C_3H_8/N_2 (0.12/0.88 по объему), скорость потока которой совпадала со скоростью подачи воздуха (0.4 м/с), температура газов на входе составляла 400 К.

Результаты расчетов описанного выше противоточного пламени, выполненных с помощью Chemkin II [32] с использованием детальной модели, рассматривались как целевые данные для оптимизации комбинированной алгебраической модели хемилюминесценции. Параметрические вычисления для всех горелок с использованием комбинированной модели выполнены в программном пакете ANSYS 18. Это удобно для проведения сравнения с экспериментальными данными по хемилюминесценции, поскольку этот пакет также предполагался для моделирования пламени на плохообтекаемом теле (см., например, [19]) с применением разработанной комбинированной модели. Кроме того, это программное обеспечение совместно с модулем постобработки позволяет провести прямое сравнение с результатами расчета в программе Chemkin по детальной модели и определить ошибку, которую необходимо учитывать при использовании предложенной модели в крупномасштабных вычислениях. Результаты решений, полученные с помощью детальной модели в Chemkin, были использованы для вычисления концентраций возбужденных частиц с помощью алгебраических выражений ES1–ES3.

В расчетах учитывался детальный молекулярный транспорт, среда рассматривалась как оптически тонкая, применялись схема дифференцирования третьего порядка по пространственным переменным и решатель ANSYS прямой задачи химической кинетики с жестко заданной химией. В расчетах противоточных пламен использовалась осесимметричная неоднородная сетка. Она включала в себя более 30 узлов, а радиальный размер обла-

сти расчета составлял 7 радиусов центрального сопла. Результаты двумерных расчетов ANSYS сравнивались с одномерными результатами Chemkin II вдоль центральной оси горелки.

Расчеты пламен в спутных потоках проводились как с комбинированной, так и с детальной моделью в программном обеспечении ANSYS, а их результаты сравнивались для различных условий. Растянутая неоднородная сетка использовалась для бунзеновских пламен и пламен в спутных потоках, размеры области расчета составляли до 5 и 25 высот пламени в радиальном и осевом направлениях соответственно. Адаптивное уточнение сетки проводилось последовательно на фронте пламени, определяемом путем вычисления градиента и кривизны поля концентрации радикалов H, чтобы разрешить реагирующий слой в этой области и обеспечить высокую пространственную точность расчета с использованием детальной модели. Та же самая сетка применялась для комбинированной модели, хотя такую же степень разрешения можно получить и с несколько более грубой сеткой из-за меньшей жесткости квазиглобальной модели. Граничные условия на входе в расчетах приняты такими же, как в соответствующих экспериментах. На оси и открытых границах предполагались нулевая радиальная скорость и нулевые градиенты осевой скорости, температуры и концентраций частиц, на выходе из сопел — также нулевые градиенты.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Упрощения, связанные с вычислением концентраций как предшественников (PS1–PS3 в табл. 3,В), так и возбужденных частиц (ES1–ES3 в табл. 3,А) по явным выражениям, приводят к ошибкам, поэтому необходимо их компенсировать внесением соответствующих поправок.

Сначала для компенсации расхождений в предварительно перемешанных противоточных пламенах концентраций предшественников, полученных с помощью комбинированной модели в ANSYS и детальной модели в Chemkin II, были введены поправочные функции. Затем скорректированные выражения для концентрации предшественников были проверены в расчетах пламен, изученных в работе [28], чтобы установить их универсальность для

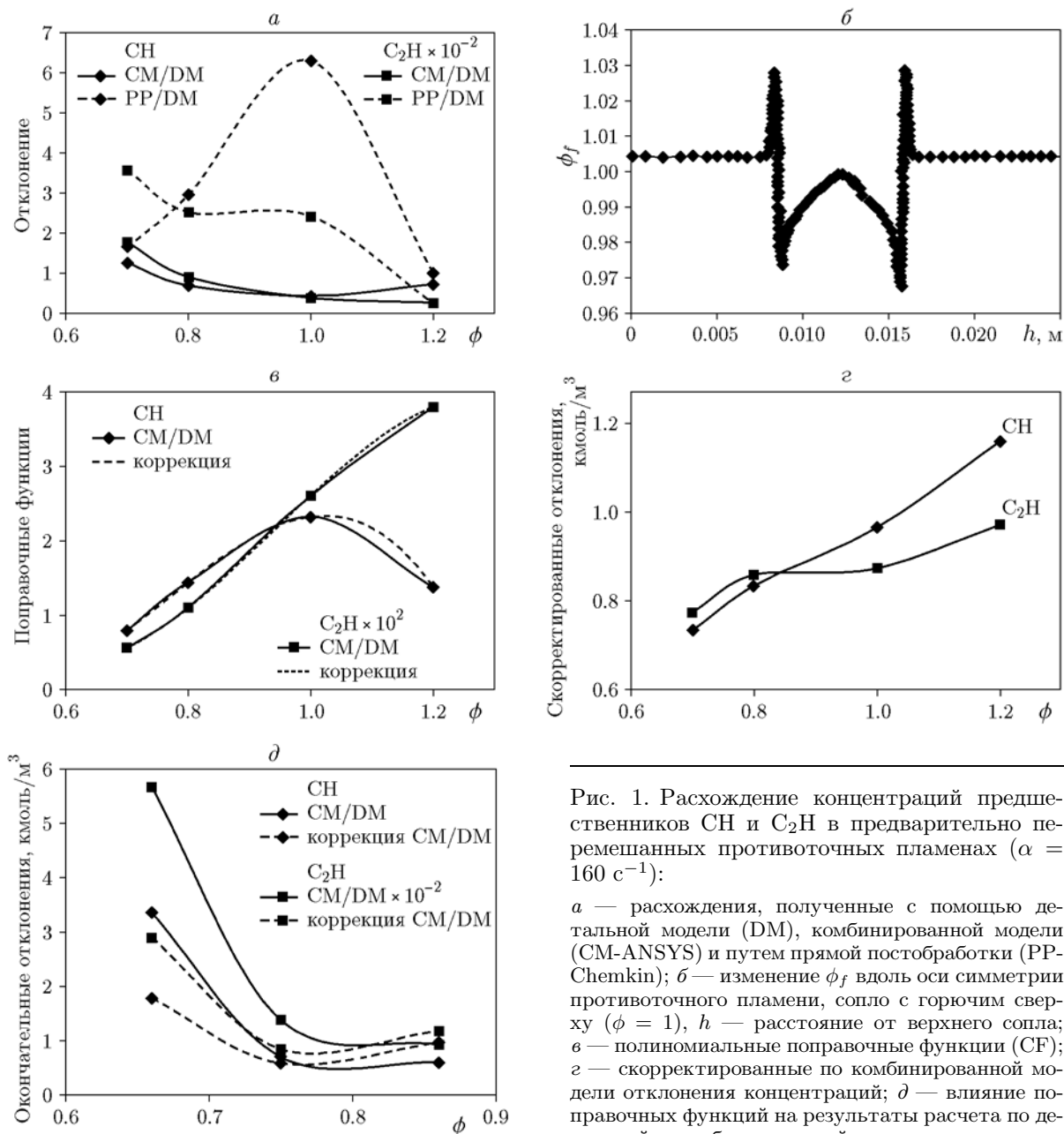


Рис. 1. Расхождение концентраций предшественников CH и C₂H в предварительно перемешанных противоточных пламенах ($\alpha = 160 \text{ c}^{-1}$):

a — расхождения, полученные с помощью детальной модели (DM), комбинированной модели (CM-ANSYS) и путем прямой постобработки (PP-Chemkin); *б* — изменение ϕ_f вдоль оси симметрии противоточного пламени, сопло с горючим сверху ($\phi = 1$), h — расстояние от верхнего сопла; *в* — полиномиальные поправочные функции (CF); *г* — скорректированные по комбинированной модели отклонения концентраций; *д* — влияние поправочных функций на результаты расчета по детальной и комбинированной моделям

стратифицированных смесей. После этого рассчитывались концентрации возбужденных частиц по выражениям ES1–ES3 (см. табл. 3,А) и скорректированным значениям концентраций предшественников и сопоставлялись с соответствующими значениями, полученными в Chemkin II с использованием детальной модели для обеих конфигураций противоточных пламен.

Расхождения в концентрациях предше-

ственников CH и C₂H в различных предварительно перемешанных противоточных пламенах, полученные с помощью детальной (DM) и комбинированной (CM) моделей, а также путем прямой обработки (PP) решений Chemkin с использованием детального механизма и выражений PS1–PS3 из табл. 3,В, показаны на рис. 1,а. Видно, что расхождения достаточно велики и алгебраическая модель требует уточнений. Прямая обработка данных, полученных

с детальной моделью, также приводит к значительным ошибкам, что дополнительно оправдывает применение поправочных функций.

Значения концентраций предшественников, полученные с помощью комбинированной модели, были умножены на полиномиальные поправочные функции, зависящие от локального коэффициента избытка горючего ϕ_f , который рассчитывался на основе элементного состава по формуле $\phi_f = (X_H + 4X_C)/2X_O$, где X_H , X_C и X_O — молярные доли H, C и O соответственно [33]. Наблюдается очень хорошее согласие между значениями ϕ_f и ϕ при использовании детальной кинетики для ряда пропановоздушных пламен. Хорошее согласие между ϕ_f и ϕ также получено в расчетах ANSYS с детальной моделью для стехиометрического противоточного пламени: максимальные отклонения составили 2.8 % во фронтах пламен вдоль оси (см. рис. 1,б).

На рис. 1,в представлены полиномиальные функции для двух соединений-предшественников в некотором интервале ϕ в вышеупомянутых противоточных пламенах предварительно перемешанных смесей. Отклонения концентраций CH и C_2H в этих пламенах, полученные с использованием комбинированной и детальной моделей, (рис. 1,г) демонстрируют максимальное расхождение 20 % вблизи области с $\phi = 1.2$.

Чтобы проверить применимость этой поправки, аналогично тому, как показано на рис. 1,а,в, были сопоставлены результаты расчета в ANSYS и Chemkin предварительно перемешанного противоточного пламени, соответствующего условиям [28] (рис. 1,д). Коэффициент избытка горючего в этом пламени изменялся с 0.65 до 0.86. Следует отметить, что модель, включающая в себя 12 соединений, дает вполне удовлетворительные результаты в изученных условиях. Представленные зависимости показывают, что предложенный подход введения поправок сохраняет свою эффективность и для этих пламен. Он позволяет значительно улучшить согласие, несмотря на остающиеся расхождения в пламенах бедных смесей, что обусловлено отклонениями от предположения квазистационарности концентраций.

Значения максимальных концентраций CH^* , OH^* , CO_2^* , полученных для предварительно перемешанных противоточных пламен с помощью детальной и комбинированной моделей с учетом поправок и после прямой пост-

обработки решений Chemkin с использованием выражений ES1–ES3 (см. табл. 3,А), показаны на рис. 2,а–в. Хотя введенные поправки позволили значительно улучшить согласие с результатами расчета по детальной модели, наблюдаемые расхождения указывают на недостатки алгебраической модели. Они в большей степени обусловлены тем, что приближение квазистационарности не вполне допустимо.

Для дальнейшего усовершенствования комбинированной модели были использованы полиномиальные поправочные функции для концентраций возбужденных частиц. Полученные отклонения, выраженные как отношение концентрации по комбинированной модели к концентрации по детальной модели, представлены на рис. 2,г. Максимальные расхождения 20 ÷ 25 % наблюдаются для бедных и богатых смесей, что обусловлено несовершенством базовой модели окисления топлива и неточностью оценки ϕ_f . На рис. 2,д показаны зависимости отношения OH^*/CH^* , рассчитанного по двум моделям, от коэффициента избытка горючего. Видно, что алгебраическая модель хорошо воспроизводит зависимость, которую демонстрирует детальная модель. Последняя была недавно проверена в работе [10] для смесей CH_4/C_3H_8 и показала способность хорошо предсказывать концентрации этих частиц.

На следующем этапе были проведены расчеты пламен на бунзеновской горелке и поднятых пламен в спутном потоке, целью которых являлось качественное и количественное воспроизведение концентраций хемиллюминесцентных частиц, а также температур и концентраций основных соединений и высоты отрыва пламени. Эти типы пламен имеют непосредственное отношение к трехмерным практическим конфигурациям.

Поля температур и концентраций OH^* , CH^* , CO_2^* в бунзеновском пламени ($\phi = 1.0$), полученные с помощью двух моделей, показаны на рис. 3. Для всех трех частиц видно отличное качественное согласие между двумя моделями: точно воспроизводятся как форма, так и положение максимумов концентраций. Количественные расхождения составляют около 12 ÷ 15 %, т. е. меньше, чем на графиках рис. 2,г. Хорошее качественное согласие получено для бедных и богатых пламен ($\phi = 0.75$ и 1.25) — максимальное отклонение около 20 %. Рассчитанные значения концентраций CH^* и OH^* находятся в хорошем качественном согла-

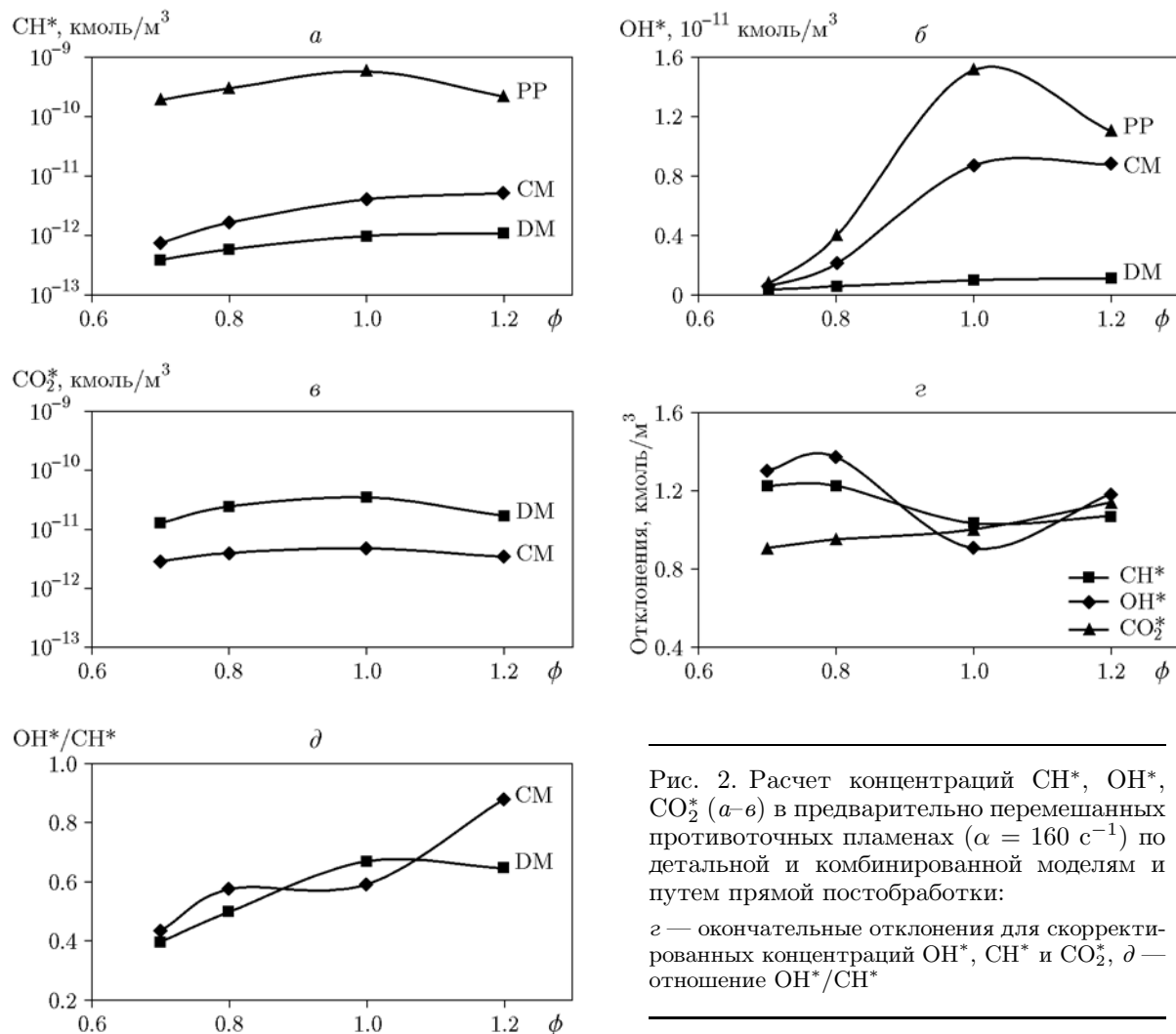


Рис. 2. Расчет концентраций CH^* , OH^* , CO_2^* (а–в) в предварительно перемешанных противоточных пламенах ($\alpha = 160 \text{ c}^{-1}$) по детальной и комбинированной моделям и путем прямой постобработки: ε — окончательные отклонения для скорректированных концентраций OH^* , CH^* и CO_2^* , δ — отношение OH^*/CH^*

сии с результатами экспериментов и моделирования, описанными в работе [29].

Расчеты поднятого пламени в спутном потоке проводились при условиях, аналогичных используемым в работе [30]: скорость потока горючего 9 м/с, высота отрыва пламени от горелки 10 мм. Поле температуры, полученное с помощью комбинированной модели, показано на рис. 4. Сопоставление с фотографиями пламени и контурами, полученными методом рэлеевского рассеяния в работе [30, рис. 3], позволяет адекватно представить положение и высоту отрыва пламени. На рис. 3 из этой работы также представлена фотография хемилюминесценции CH^* . Следует отметить, что измеренные уровни CH^* включают в себя вклад CO_2^* . Действительно, рассчитанные распре-

ления суммарной концентрации CH^* и CO_2^* на рис. 4 точно воспроизводят измеренное в работе [30] распределение CH^* , в то время как вычисленное положение фронта пламени по CH^* не совпадает с положением фронта, определенного по остальным хемилюминесцентным частицам. Это было также подтверждено вычислениями с детальной моделью в ANSYS. Способность модели определять вклады каждого из хемилюминесцентных соединений позволяет провести полезный анализ и интерпретацию соответствующих экспериментальных данных.

Расчеты поднятого пламени с частично предварительно перемешанными и подогретыми исходными компонентами проведены для условий, соответствующих работе [31]: скорость потоков 0.4 м/с, высота отрыва пламе-

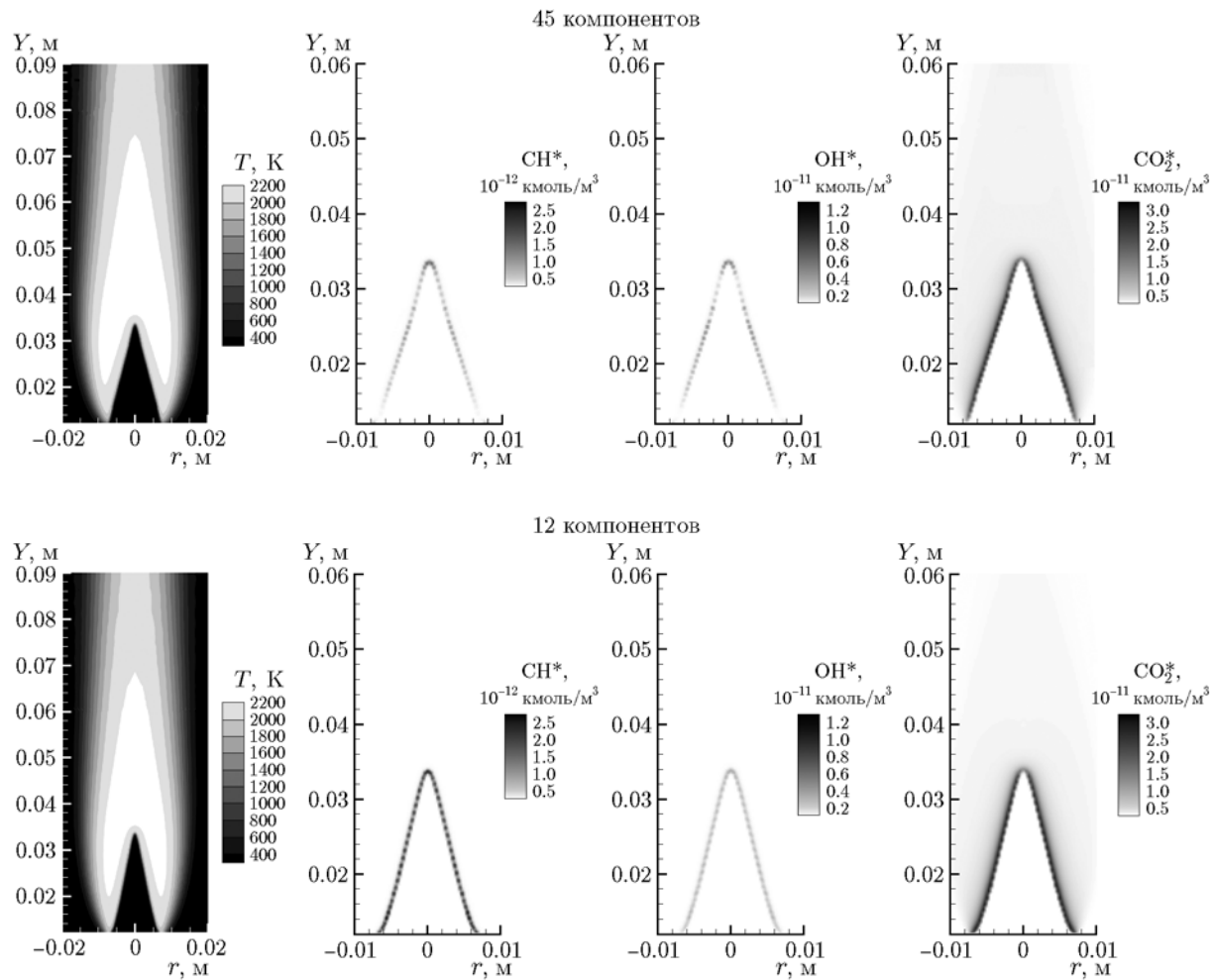


Рис. 3. Рассчитанные с помощью комбинированной и детальной моделей поля температур и концентраций CH^* , OH^* и CO_2^* в бунзеновском пламени

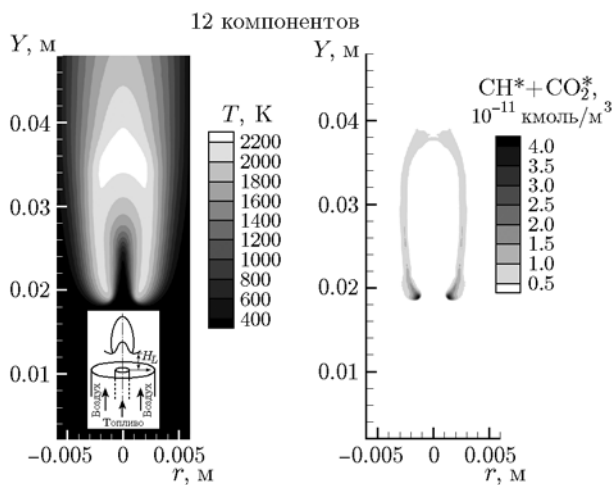


Рис. 4. Рассчитанные поля температуры и концентрации $\text{CH}^* + \text{CO}_2^*$ в пламени в спутном потоке при условиях, как в работе [30]

ни 34 мм. Результаты, полученные с детальной и комбинированной моделями, представлены на рис. 5. Как видно, высота отрыва пламени от центрального сопла, а также форма температурного профиля хорошо описываются обеими моделями. Распределения концентраций основных соединений и радикалов также адекватно предсказываются схемой из 12 соединений, что обеспечило хорошее согласие между результатами расчета концентраций трех возбужденных частиц по двум моделям.

Несмотря на то, что полученные результаты расчета для осесимметричных пламен уже позволяют предложить данный подход для моделирования трехмерных крупномасштабных систем, все же требуется дальнейшая проверка алгебраической модели в сложных конфигурациях, в том числе в тех, где изменяется коэффициент избытка горючего, например в страти-

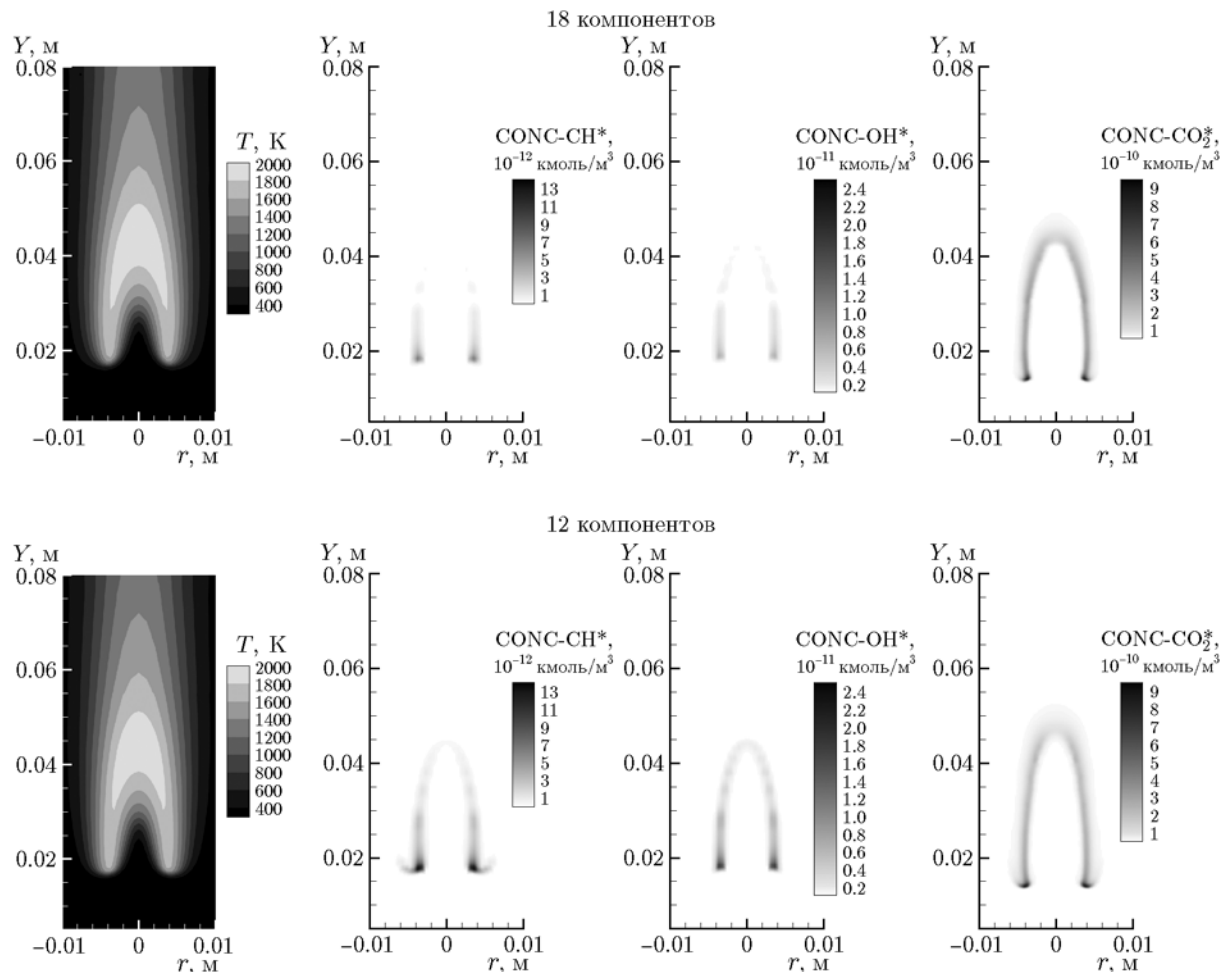


Рис. 5. Рассчитанные поля температур и концентраций CH^* , OH^* и CO_2^* в пламени в спутном потоке, соответствующем условиям работы [31]

фицированных пламенах. Следует также проверить в этом методе корректность процедур, в которых используются таблицы преобразования для люминесцентных частиц в условиях турбулентности. В целом предложенная алгебраическая модель представляет собой эффективный и экономный в плане вычислительных ресурсов подход для прямого сравнения результатов экспериментов по визуализации турбулентных пламен и расчетов с использованием редуцированных кинетических схем. Модель пригодна и для описания пламени метана, но в будущем целесообразно проверить ее применимость для пламен более тяжелых углеводородов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предпринята попытка разработать методику расчета интенсивности хемилюминес-

центного свечения в сложных моделях турбулентного пламени. Концентрации хемилюминесцентных частиц OH^* , CH^* и CO_2^* были рассчитаны с использованием алгебраических выражений, полученных на основе предположения о квазистационарности и знания соответствующих реакций и их констант скорости. Эта процедура была объединена с получением решения на основе квазиглобальной схемы окисления пропана, включающей в себя 12 соединений. Концентрации соединений-предшественников были вычислены аналогичным образом с использованием выражений, в которые входят концентрации соединений, рассчитанные по редуцированной кинетической модели. Обнаруженные расхождения удалось компенсировать с помощью полиномиальных поправочных функций, зависящих от локального состава, которые были получены из

сопоставления с результатами расчета с детальным механизмом реакций. Это позволило как количественно, так и качественно улучшить расчет концентрации хемилюминесцентных частиц, обеспечив тем самым возможность более глубокого анализа экспериментальных данных.

Алгебраическая модель реализована в коммерческом программном обеспечении в виде полевых функций постобработки и проверена на результатах детального химико-кинетического моделирования противоточных осесимметричных бунзеновских пламен, а также пламен в спутном потоке. Предложенный подход моделирования хемилюминесценции по уровню сложности сопоставим с решением задачи описания турбулентных реагирующих потоков с использованием сокращенного или квазиглобального кинетического механизма. Показана высокая эффективность предложенной процедуры расчетов. Дальнейшее ее уточнение или обобщение на более тяжелые углеводородные топлива позволит ей стать эффективным инструментом для моделирования сложных турбулентных реагирующих потоков.

Авторы выражают благодарность проф. Ф. Эгольфопулосу и сотрудникам его группы в лаборатории исследования топлив и горения Департамента аэрокосмического машиностроения Университета Южной Калифорнии (Луизиана, США) за предоставление кинетических механизмов горения и полезные обсуждения содержания работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Docquier N., Candel S.** Combustion control and sensors: a review // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2002. — V. 28, N 2. — P. 107–150.
2. **Panoutsos C. S., Hardalupas Y., Taylor A. M. K. P.** Numerical evaluation of equivalence ratio measurement using OH* and CH* chemiluminescence in premixed and non-premixed methane—air flames // *Combust. Flame.* — 2009. — V. 156, N 2. — P. 273–291.
3. **Ballester J., García-Armingol T.** Diagnostic techniques for the monitoring and control of practical flames // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2010. — V. 36, N 4. — P. 375–411.
4. **Guyot D., Güthe F., Schuermans B., Lacarelle A., Paschereit C.** CH*/OH* chemiluminescence response of an atmospheric premixed flame under varying operating conditions // *ASME Turbo Expo 2010: Power for Land, Sea, and Air.* — 2010. — P. 933–944.
5. **Lauer M., Sattelmayer T.** On the adequacy of chemiluminescence as a measure for heat release in turbulent flames with mixture gradients // *J. Eng. Gas Turbines Power.* — 2010. — V. 132, N 6.
6. **Nori V. N., Seitzman J. M.** CH* chemiluminescence modeling for combustion diagnostics // *Proc. Combust. Inst.* — 2009. — V. 32, N 1. — P. 895–903.
7. **Swaminathan N., Xu G., Dowling A. P., Balachandran R.** Heat release rate correlation and combustion noise in premixed flames // *J. Fluid Mech.* — 2011. — V. 681. — P. 80–115.
8. **Goers S., Witzel B., Heinze J., Stockhausen G., van Kampen J., Schulz C., Willert C., Fleing C.** Endoscopic chemiluminescence measurements as a robust experimental tool in high-pressure gas turbine combustion tests // *ASME Turbo Expo 2014: Turbine Technical Conference and Exposition. V. 4B: Combustion, Fuels and Emissions, V04BT04A048.* — 2014.
9. **Kathrotia T.** Reaction kinetics modeling of OH*, CH*, and C₂* chemiluminescence. — Heidelberg Univ., 2011.
10. **Liu Y., Vourliotakis G., Hardalupas Y., Taylor A. M.** Experimental and numerical study of chemiluminescence characteristics in premixed counterflow flames of methane based fuel blends // *55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2017.*
11. **Kopp M. M., Mathieu O., Petersen E. L.** Rate determination of the CO₂* chemiluminescence reaction CO + O + M CO₂* + M // *Int. J. Chem. Kinet.* — 2015. — V. 47, N 1. — P. 50–72.
12. **Hardalupas Y., Panoutsos C. S., Taylor A. M. K. P.** Spatial resolution of a chemiluminescence sensor for local heat-release rate and equivalence ratio measurements in a model gas turbine combustor // *Exp. Fluids.* — 2010. — V. 49. — P. 883–909.
13. **Dunn M. J.** Finite-rate chemistry effects in turbulent premixed combustion. — Univ. of Sydney, 2008.
14. **Floyd J.** Computed tomography of chemiluminescence: a 3D time resolved sensor for turbulent combustion. — Imperial College London, 2009.
15. **Ertem C. K., Janicka J., Dreizler A.** Ray tracing of chemiluminescence in an unconfined non-premixed turbulent jet flame using large-eddy simulation // *Appl. Phys. B: Lasers Opt.* — 2012. — V. 107. — P. 603–611.
16. **Sardeshmukh S., Bedard M., Anderson W.** The use of OH* and CH* as heat release markers in combustion dynamics // *Int. J. Spray Combust. Dyn.* — 2017. — V. 9, N 4. — P. 409–423.
17. **Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law Ch. K.** USC Mech Version II. High-temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C1–C4 Compounds. — 2007.

18. **Koutmos P., Souflas K.** A study of slender bluff-body reacting wakes formed by concurrent or countercurrent fuel injection // *Combust. Sci. Technol.* — 2012. — V. 184, N 9. — P. 1343–1365.
19. **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. — P. 264–274.
20. **Bozkurt M.** Shock-tube investigation of key reactions for chemiluminescence in various combustion systems. — Heidelberg Univ., 2013.
21. **Devriendt K., Van Look H., Ceursters B., Peeters J.** Kinetics of formation of chemiluminescent $\text{CH}(\text{A}^2\Delta)$ by the elementary reactions of $\text{C}_2\text{H}(\text{X}^2\Sigma^+)$ with $\text{O}(\text{P})$ and $\text{O}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-)$: A pulse laser photolysis study // *Chem. Phys. Lett.* — 1996. — V. 261, N 4–5. — P. 450–456.
22. **Tamura M., Berg P. A., Harrington J. E., Luque J., Jeffries J. B., Smith G. P., Crosley D. R.** Collisional quenching of $\text{CH}(\text{A})$, $\text{OH}(\text{A})$, and $\text{NO}(\text{A})$ in low pressure hydrocarbon flames // *Combust. Flame.* — 1998. — V. 114, N 3–4. — P. 502–514.
23. **Smith G. P., Luque J., Park C., Jeffries J. B., Crosley D. R.** Low pressure flame determinations of rate constants for $\text{OH}(\text{A})$ and $\text{CH}(\text{A})$ chemiluminescence // *Combust. Flame.* — 2002. — V. 131, N 1–2. — P. 59–69.
24. **Walsh K. T., Long M. B., Tanoff M. A., Smooke M. D.** Experimental and computational study of CH , CH^* , and OH^* in an axisymmetric laminar diffusion flame // *Symp. Combust.* — 1998. — V. 27, N 1. — P. 615–623.
25. **Nori V., Seitzman J.** Chemiluminescence measurements and modeling in syngas, methane and jet-A fueled combustors // 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2007.
26. **Kennel C., Mauss F., Peters N.** Reduced kinetic mechanisms for premixed propane-air flames BT // *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* / N. Peters, B. Rogg (Eds). — Berlin, Heidelberg: Springer, 1993. — P. 123–141.
27. **ANSYS® Academic Research**, Release 18. — 2017.
28. **Cheng Z., Pitz R. W., Wehrmeyer J. A.** Lean and ultralean stretched propane — air counterflow flames // *Combust. Flame.* — 2006. — V. 145, N 4. — P. 647–662.
29. **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 Combustion Symposium, 2015.
30. **Lee J., Won S. H., Jin S. H., Chung S. H.** Lifted flames in laminar jets of propane in coflow air // *Combust. Flame.* — 2003. — V. 135, N 4. — P. 449–462.
31. **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, N 1. — P. 947–954.
32. **Chemkin II** Collection, Reaction Design, Release 4.1. — 2006.
33. **Pope C. J., Shandross R. A., Howard J. B.** Variation of equivalence ratio and element ratios with distance from burner in premixed one-dimensional flames // *Combust. Flame.* — 1999. — V. 116, N 4. — P. 605–614.

Поступила в редакцию 04.07.2019.

После доработки 07.10.2019.

Принята к публикации 06.11.2019.