

Abschlußbericht

zum Forschungsvorhaben Pe 241/9-2

“Turbulente Brenngeschwindigkeit”

von

Prof. Dr.-Ing. N. Peters

Aachen, im August 1994

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Asymptotische Analyse von H ₂ -Flammen	9
2.1	Reduzierter Reaktionsmechanismus	9
2.2	Flammenstruktur	12
2.3	Brenngeschwindigkeit	14
2.4	Ergebnisse	15
3	Markstein-Zahlen	21
3.1	Asymptotische Formulierung	22
3.2	Ergebnisse	23
3.3	Vergleich mit Experimenten	45
4	Simulation einer Bunsen-Flamme	49
4.1	Mathematische Formulierung	50
4.2	Ergebnisse	51
4.3	Vergleich mit Experimenten	53
5	Zusammenfassung	54
	Literaturverzeichnis	56
	Anhang	59

1 Einleitung

Der vorgemischten Verbrennung, sei sie laminar oder turbulent, kommt aufgrund des schnellen Reaktionsumsatzes eine besondere Bedeutung zu. Sie findet Anwendung in technischen Verbrennungsprozessen wie zum Beispiel im Ottomotor, kann aber auch bei der unkontrollierten Verbrennung während einer Gasexplosion zu beträchtlichen Schäden führen. Um nun einerseits die turbulente vorgemischte Verbrennung in technischen Anwendungen optimieren zu können und auf der anderen Seite die Entstehung und Auswirkungen von Explosionen in Gaswolken zu verstehen und dann auch zu vermeiden, ist daher die Untersuchung des dynamischen Verhaltens vorgemischter Flammen in laminaren und turbulenten Strömungen unumgänglich.

Die Verbrennung ist ein äußerst komplexer Prozeß, der sich aus einer Vielzahl physikalischer und chemischer Vorgänge zusammensetzt. Im allgemeinen ist die Modellierung mathematisch sehr aufwendig. Dabei wird die Massen- und Impulserhaltung durch die Navier-Stokes-Gleichungen für viskose kompressible Strömungen beschrieben. Die Erhaltung von Energie und Spezies wird durch Transportgleichungen erfaßt, die Wärmeleitungs- und Diffusionsvorgänge der beteiligten Spezies darstellen. Die Kopplung von Navier-Stokes-Gleichungen und Transportgleichungen erfolgt einerseits durch die thermische Expansion des Gases, andererseits durch die Konvektion. Neben den gewöhnlichen strömungsmechanischen Nichtlinearitäten beinhalten die Erhaltungsgleichungen auch exponentielle Nichtlinearitäten, die im Arrhenius-Ansatz zur Darstellung der chemischen Reaktionsgeschwindigkeiten auftreten. Zur Vereinfachung des Problems erscheint daher die Einführung phänomenologischer Modelle oder die Betrachtung verschiedener Grenzfälle zunächst sinnvoll.

Die turbulente Brenngeschwindigkeit s_T ist die zentrale Größe zur Beschreibung turbulenter Vormischflammen. Seit der wegweisenden Arbeit von Damköhler [1] im Jahre 1940 ist immer wieder versucht worden, die Abhängigkeit der turbulenten Brenngeschwindigkeit von den Parametern wie der Turbulenzintensität v' , der laminaren Brenngeschwindigkeit s_L und von Längenskalen eindeutig zu bestimmen. In [2] wird ein diffusives-thermisches Modell vorgestellt, welches auch häufig als Modell konstanter Dichte bezeichnet wird. In dem Modell wird der Einfluß der thermischen Expansion als gering eingestuft, so daß die Strömungs-

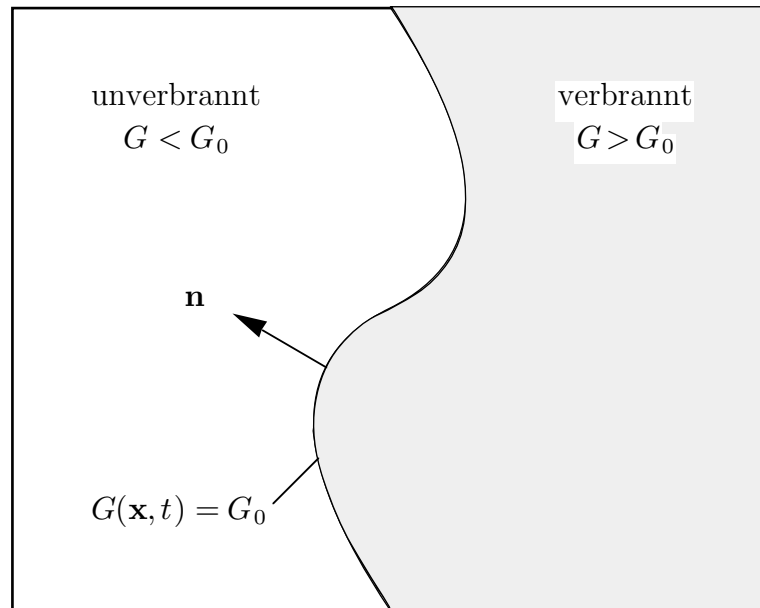


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung einer Flamme als gasdynamische Diskontinuität

gleichungen von den Transportgleichungen entkoppelt werden. Nach Lösung der Strömungsgleichungen für den Fall vernachlässigbarer thermischer Expansion sind das Dichte- und Geschwindigkeitsfeld bekannt und können in die Transportgleichungen eingesetzt werden. Damit wird der Effekt des Strömungsfeldes auf die Flamme berücksichtigt. Der Einfluß der thermischen Expansion auf die Strömung wird allerdings vernachlässigt. Eine konsistente mathematische Herleitung eines solchen Modells auf der Grundlage asymptotischer Methoden findet man in [3]. Das Modell konstanter Dichte ist erfolgreich zur qualitativen Beschreibung verschiedener Flammenphänomene eingesetzt worden, zu denen z.B. auch die zellularen Flammen gehören.

Andere Modelle berücksichtigen die thermische Expansion vollständig, wobei Transportprozesse aber unberücksichtigt bleiben. Eine allgemeine Beschreibung dieser Modelle wird in [4] gegeben. Dabei wird eine sich bewegende Oberfläche als Flammenfront identifiziert, welche das unverbrannte Gemisch vom verbrannten Gas trennt (s. Abb. 1.1). Normal zur Flammenfront liegt also ein Dichtesprung vor. Gemäß Massen- und Impulserhaltung haben die Strömungsvariablen Sprungbedingungen an der Flammenfront zu erfüllen. Auf beiden Seiten der Flammenfront betrachtet man das Strömungsfeld als inkompressibel und nicht viskos.

Komplexe Wechselbeziehungen bei chemischen Reaktionen, Wärmeleitung und Spezies-Diffusion werden in diesen Modellen nicht beachtet, so daß der Einfluß der Flammenstruktur nicht berücksichtigt wird. Stattdessen definiert man einen Ausdruck für die Brenngeschwindigkeit, mit der sich die Flamme normal zur Front relativ zur Strömung ausbreitet.

Zwischen der Brenngeschwindigkeit s_L , der Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{v} und der Flammenfrontgeschwindigkeit $d\mathbf{x}/dt|_F$ besteht folgende Beziehung

$$\mathbf{n} \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Big|_F = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + s_L, \quad (1.1)$$

wobei \mathbf{x}_F den Ort der Flamme beschreibt und \mathbf{n} den ins unverbrannte Gemisch zeigende Normalenvektor bezeichnet. Der Normalenvektor ist wie folgt definiert

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla G}{|\nabla G|}, \quad (1.2)$$

wobei $G(\mathbf{x}, t)$ als ein skalares Feld identifiziert wird, dessen Oberfläche

$$G(\mathbf{x}, t) = G_0 = \text{const} \quad (1.3)$$

die Flammenfläche darstellt. Die Flammenkontur $G(\mathbf{x}, t) = G_0$ trennt das Strömungsfeld in den Bereich des unverbrannten Gemisches, wo $G < G_0$ ist, und in den Bereich des verbrannten Gases, wo $G > G_0$ gilt. Differenziert man Gl. (1.3) nach der Zeit bei $G = G_0$, erhält man

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \nabla G \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \Big|_{G=G_0} = 0 \quad (1.4)$$

und mit Gl. (1.2) ergibt sich

$$\frac{\partial G}{\partial t} = |\nabla G| \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \Big|_{G=G_0}. \quad (1.5)$$

Identifiziert man $\partial \mathbf{x} / \partial t|_{G=G_0}$ als $\partial \mathbf{x} / \partial t|_F$ erhält man mit Gl. (1.1)

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_L |\nabla G|. \quad (1.6)$$

Umschreiben der letzten Gleichung, die in [5] hergeleitet wird, führt auf

$$s_L = \frac{1}{|\nabla G|} \left(\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G \right). \quad (1.7)$$

Erste Untersuchungen im Rahmen des eben beschriebenen Modells sind von Landau [6] und Darrieus [7] durchgeführt worden. Bei Stabilitätsuntersuchungen ebener Flammen sind sie davon ausgegangen, daß die Brenngeschwindigkeit eine vorgeschriebene Konstante ist. Bezieht man die Geschwindigkeiten auf die Brenngeschwindigkeit einer ebenen adiabaten Flamme, so besteht das Landau-Darrieus Modell neben den Sprungbedingungen aus

$$s_L = 1. \quad (1.8)$$

Das Landau-Darrieus Modell zeigt, daß ebene Flammen bedingungslos instabil sind. Allerdings stimmt dieses Ergebnis nicht mit Laborversuchen überein, in denen ebene Flammen beobachtet werden. Spätere Arbeiten versuchten das Landau-Darrieus Modell durch die Annahme unterschiedlicher Ausdrücke für die Brenngeschwindigkeit zu verbessern. Markstein führte einen phänomenologischen Parameter ein, der den Einfluß der Flammenkrümmung auf die Brenngeschwindigkeit berücksichtigte [4].

In diesen Untersuchungen wird die Flamme als eine Grenzschicht aufgefaßt, in der Transportprozesse dominieren. Innerhalb dieser Grenzschicht befindet sich eine weitere Grenzschicht, welche durch chemische Reaktionen gekennzeichnet ist (s. Abb. 1.2). Bildet man das Verhältnis zwischen der charakteristischen Länge der Flamme l_F und der charakteristischen Größe für den Krümmungsradius der Flammenfront l_Λ , erhält man den dimensionslosen Parameter $\Lambda = l_\Lambda/l_F$. Aufgrund chemischer Reaktionen ist die Einführung einer dimensionslosen Aktivierungsenergie β zweckmäßig. Die Länge der Flammenzone ist somit von der Größenordnung $O(1/\Lambda)$; die Länge der Reaktionszone ist von der Ordnung $O(1/(\Lambda\beta))$. In Verbrennungsprozessen ist die Aktivierungsenergie häufig sehr groß, so daß die reaktionskinetischen Vorgänge in einer sehr dünnen Schicht, der Reaktionszone, ablaufen. Um die Wechselbeziehung zwischen reaktionskinetischen Vorgängen und Transportprozessen beschreiben zu können, wird die Flammenstruktur in jeder der Grenzschichten aufgelöst. Dabei sind die Lösungen der verschiedenen Bereiche einander anzupassen. Anschließend ist es möglich, Sprungbedingungen an der Flammenfront anstatt vorzuschreiben, aus den Lösungen abzuleiten. Ferner erhält man eine Gleichung zur Beschreibung der Flammenausbreitung. Die Lösung des Problems wird als asymptotische Entwicklung in Potenzen von $1/\Lambda$ dargestellt. Die führenden Terme in der Entwicklung korrespondieren mit dem

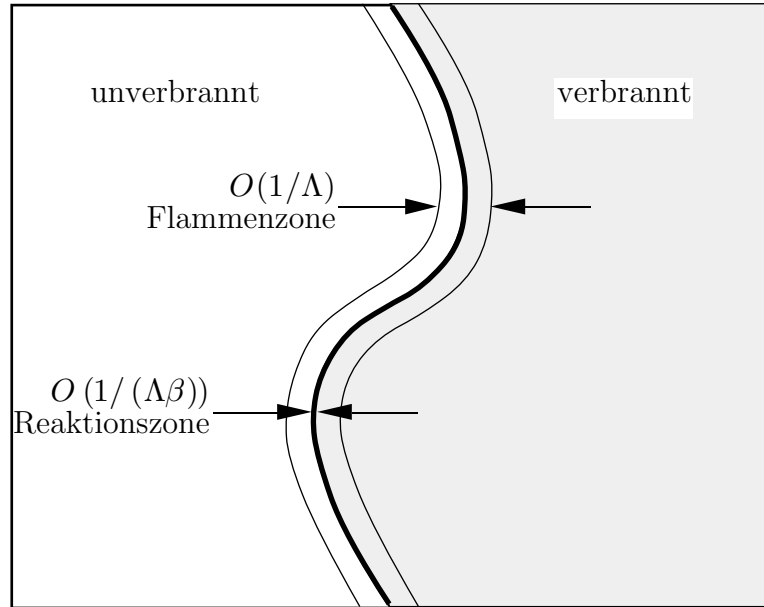


Abbildung 1.2: Unterschiedliche Skalen einer gekrümmten Flamme in einer beliebigen Strömung

Landau-Darrieus Modell. Terme höherer Ordnung erfassen die Flammenstruktur und stellen eine Korrektur deren Modells dar.

Die im Rahmen dieses Forschungsprojektes hergeleitete Gleichung zur Beschreibung der Flammenausbreitung (Gl.(84) im Zwischenbericht)

$$\rho_u \frac{D_u G}{Dt} = (\rho s_H)_{u,0} |\nabla G| \left[\varphi \left(1 + \mathcal{P} \frac{dp}{dt} \frac{l_F}{s_{H_u,0} p_r} \right) - \mathcal{L}_u \kappa - (\mathcal{L}_u + l_F \mathcal{H}) \frac{\rho_u / \varphi}{(\rho s_H)_{u,0}} (-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_u \cdot \mathbf{n}) \right] \quad (1.9)$$

kann als Grundlage bei der Modellierung turbulenter Vormischflammen eingesetzt werden [8].

Auf dem Gebiet turbulenter Vormischflammen sind hervorragende Arbeiten von Clavin und Williams [9], Pelce and Clavin [10] und Matalon und Matkowsky [11] erschienen. In den letzten beiden Arbeiten wird eine Gleichung zur Beschreibung der Ausbreitung leicht gewellter Flammen hergeleitet, wobei die Front in expliziter Form gegeben ist. Diese Art der Darstellung schließt allerdings Zustände aus, wo die Flamme stark gefaltet ist. Für die Analyse turbulenter Flammen im Bereich gefalteter Flammen ist daher eine Verallgemeinerung dieser Formulierung notwendig. In der bereits abgelaufenen 1. Förderungsperiode erfolgte

die Herleitung einer Gleichung zur Beschreibung der Flammenausbreitung, wobei die Oberfläche der Flamme in impliziter Form dargestellt wurde. Ferner wurde der Einfluß von Wärmeverlusten, nicht konstanten Transportgrößen und Druckschwankungen untersucht. Grundlage dieser Arbeit waren die Veröffentlichungen von Pelce und Clavin [10] und von Matalon und Matkowsky [11]. Bei der Untersuchung der Wärmeverluste wurden die Arbeiten von Clavin und Nicoli [12], [13] und Joulin und Clavin [14] berücksichtigt. Die Temperaturabhängigkeit der Transportkoeffizienten wurde in [15] analysiert. Der Einfluß von Druckschwankungen ist in [16], [17], [18] untersucht worden.

In der Verlängerung der Förderungsperiode wird nun im besonderen der Einfluß der chemischen Kinetik auf die Markstein-Länge untersucht. Die Markstein-Länge ist ein Maß des Krümmungs- und Streckungs-Einflusses auf die turbulente Brenngeschwindigkeit der Flamme. Hierzu werden für die Kohlenwasserstoffe Methan (CH_4), Methanol (CH_3OH), Acetylen (C_2H_2), Ethen (C_2H_4), Ethan (C_2H_6), *n*-Heptan (*n*- C_7H_{16}) und *iso*-Oktan (*iso*- C_8H_{18}) sowie für Wasserstoff (H_2) Markstein-Zahlen mit Hilfe einer asymptotischen Formulierung ermittelt und mit experimentellen Daten verglichen. Um sicherzustellen, daß die aus einer asymptotischen Betrachtung von CH_4 -Flammen [19] gewonnene Beziehung auf alle Brennstoffe anzuwenden ist, wird eine asymptotische Untersuchung der Struktur von H_2 -Flammen notwendig, welche sich grundsätzlich von der Struktur einer Methan-Flamme unterscheidet. Abschließend wird zur Validierung der gewonnenen Feldgleichung eine numerische Simulation einer zwei-dimensionalen turbulenten Vormischflamme (Bunsen-Flamme) durchgeführt. Die errechneten Flammenkonturen werden mit experimentellen Daten verglichen.

Auf eine ausführliche Herleitung der Feldgleichung wurde hier im Bericht verzichtet. Hierzu sei auf den Zwischenbericht verwiesen [20]. Eine detaillierte Übersicht über das dynamische Verhalten vorgemischter Flammen in laminaren und turbulenten Strömungen findet man in einer Arbeit von Clavin [21].

2 Asymptotische Analyse von H_2 -Flammen

Aus einer asymptotischen Analyse schwach gestreckter, stöchiometrischer Methan-Luft Flammen von Rogg und Peters [19] konnte eine algebraische Formulierung für die Markstein-Länge bzw. die Markstein-Zahl hergeleitet werden. Göttgens, Mauß und Peters [22] fanden eine ähnliche Flammen-Struktur von Methan und mehreren anderen Kohlenwasserstoffen, so daß die Anwendung der asymptotisch gewonnenen Formulierung der Markstein-Zahl auch auf andere Kohlenwasserstoffe berechtigt scheint. Es wurde aber auch deutlich, daß sich die Struktur von Wasserstoff-Flammen grundsätzlich von der einer Methan-Flamme unterscheidet. Dies hängt damit zusammen, daß H-Radikale aus der Reaktionszone in die Vorwärmzone diffundieren und dort untereinander mit starker Wärmeentwicklung rekombinieren. Bei CH_4 -Flammen ist dies nicht möglich, da die Anwesenheit von CH_4 sofort zu einem Verbrauch der Radikale durch die vergleichsweise schnelle Reaktion $CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$ führt. Aus diesem Grund wird eine asymptotische Analyse von H_2 -Flammen durchgeführt, um zu prüfen ob eine separate algebraische Formulierung der Markstein-Zahlen für Wasserstoff-Flammen notwendig wird.

Die asymptotische Untersuchung von Wasserstoff-Flammen ist am Institut für Technische Mechanik in Zusammenarbeit mit Prof. Seshardri und Prof. Williams durchgeführt worden [24]. Sie beginnt mit der Formulierung eines reduzierten Reaktionsmechanismus anhand dessen sich die kinetische Struktur basierend auf einem detaillierten Mechanismus überschaubar beschreiben läßt. Zugrunde liegt ein reduzierter Reaktionsmechanismus von Mauß [23]. Anschließend ist die Flamme, gemäß der üblichen Vorgehensweise einer asymptotischen Untersuchung, in verschiedene Zonen aufgeteilt worden, welche sich separat analysieren lassen.

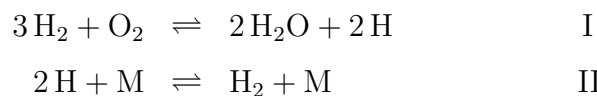
2.1 Reduzierter Reaktionsmechanismus

Ein detailliertes Reaktionsschema zur Beschreibung der Chemie von Wasserstoff-Luft Vormischflammen ist in [23] gegeben. Der Mechanismus umfaßt 24 Reaktionen mit 8 chemischen Spezies (Vorwärts- und Rückwärts-Reaktion werden dabei als zwei Schritte gezählt). Dieses Reaktionsschema ist zwar nicht sehr umfangreich verglichen zu detaillierten Mechanismen für Kohlenwasserstoffe, aber den-

Nummer	Reaktion	A	n	E
	physikalische Einheit	$[mol, cm^{-3}, s]$	$[]$	$[kJ/mol]$
1.1 H ₂ -O ₂ Reaktionen				
1f	$O_2 + H \rightarrow OH + O$	2.000E+14	0.00	70.3
1b	$O + OH \rightarrow H + O_2$	1.133E+13	0.00	0.551
2f	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	5.060E+04	2.67	26.3
2b	$H + OH \rightarrow O + H_2$	2.279E+04	2.67	18.5
3f	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	1.000E+08	1.60	13.8
3b	$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	4.686E+08	1.60	77.3
4f	$2OH \rightarrow H_2O + O$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$O + H_2O \rightarrow 2OH$	1.561E+10	1.14	71.7
1.2 HO ₂ Reaktionen				
5f	$H + O_2 + M' \rightarrow HO_2 + M'$	2.300E+18	-0.80	0
5b	$HO_2 + M' \rightarrow O_2 + H + M'$	3.301E+18	-0.80	196
6	$HO_2 + H \rightarrow 2OH$	1.500E+14	0.00	4.2
7	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	2.500E+13	0.00	2.9
8	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	6.000E+13	0.00	0
9	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	3.000E+13	0.00	7.2

Tabelle 1: Reaktionsmechanismus für Wasserstoff

noch ist es für eine asymptotische Untersuchung zu groß. Aus diesem Grund wird ein verkürzter Mechanismus erzeugt, indem alle weniger wichtigen Reaktionen und Spezies eliminiert werden. Der resultierende Mechanismus ist in Tabelle 1 dargestellt. Er umfaßt 14 Reaktionen mit 7 beteiligten chemischen Spezies. Wie von Mauß [23] gezeigt, lassen sich die Konzentrationen der Radikale O, OH, HO₂ aus algebraischen Beziehungen berechnen, da sie als stationär zu betrachten sind (steady state). Damit läßt sich ein globaler 2-Schritt Mechanismus formulieren, der die prinzipielle kinetische Information des H₂-Mechanismusses in Tabelle 1 wiedergibt. Die zwei globalen Reaktionschritte ergeben sich zu



Hierbei ist M ein inerte Stoßpartner. Die Reaktionsgeschwindigkeiten der zwei

globalen Schritte lassen sich wie folgt darstellen

$$w_{\text{I}} = w_{1f} - w_{1b} + w_6 + w_9 \quad (2.1)$$

$$w_{\text{II}} = w_5 \quad (2.2)$$

Zur Vereinfachung der algebraischen Steady State Beziehungen werden weitere Simplifikationen die sogenannten "Truncations" vorgenommen. Dabei werden solche Reaktionsraten in den algebraischen Gleichungen vernachlässigt, die nur geringen Einfluß haben. Daraus ergeben sich für die Radikale HO_2 , O und OH folgendende Beziehungen

$$C_{HO_2} = \frac{k_5 C_M C_H C_{O_2}}{(k_6 + k_7 + k_9) C_H + k_8 C_{OH}} \quad (2.3)$$

$$C_O = \frac{k_{1f} C_H C_{O_2} + k_{2b} C_{OH} C_H}{k_{1b} C_{OH} + k_{2f} C_{H_2}} \quad (2.4)$$

und

$$C_{OH} = \frac{2 k_{1f} C_H C_{O_2} + k_{3b} C_H C_{H_2O} + 2 k_6 C_H C_{HO_2}}{2 k_{1b} C_O + k_{3f} C_{H_2}} \quad (2.5)$$

Aus den Gleichungen wird offensichtlich, daß bedingt durch die Kopplung eine kubische Beziehung für OH resultiert. Weitere Truncations bei der Lösung des gekoppelten Gleichungssystems liefern eine lineare Beziehung für OH, die nicht mehr von den Konzentrationen der anderen Steady States O und HO_2 abhängt.

$$C_{OH} = \frac{[2k_{1f}C_{O_2} + k_{3b}C_{H_2O}(1 + \kappa)][\gamma k_{1b}(1 + \kappa)C_H + k_{2f}C_{H_2}]C_H}{k_{2f}k_{3f}C_{H_2}^2 + [2k_{1f}k_{1b}C_{O_2} + \gamma k_{1b}k_{3f}(1 + \kappa)C_{H_2}]C_H + 2\gamma k_{1b}k_{2b}(1 + \kappa)C_H^2} \quad (2.6)$$

mit

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{C_{H_2O}}{K_3 C_{H_2}} \\ \kappa &= \frac{2 k_5 C_M k_6 C_{O_2}}{k_{3b} (k_6 + k_7 + k_9) C_{H_2O}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

und der Gleichgewichtskonstanten der 3.Reaktion $K_3 = k_{3f}/k_{3b}$. Damit lassen sich die globalen Reaktionsgeschwindigkeiten (2.1) und (2.2) wie folgt errechnen

$$\begin{aligned} w_{\text{I}} = & \frac{[k_{1f} C_H C_{O_2} [1 - (1 + \kappa)^2 C_{H_2O}^2 C_H^2 / (K_I C_{H_2}^3 C_{O_2})]]}{1 + [\mathcal{A} C_{O_2} + \mathcal{C}(1 + \kappa) C_{H_2O}] C_H / C_{H_2}^2 + \mathcal{B}(1 + \kappa) C_{H_2O} C_H^2 / C_{H_2}^3} \\ & + \frac{k_5 C_M k_6 C_{O_2} C_H}{k_6 + k_7 + \gamma k_8 + k_9} \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$w_{\text{II}} = k_5 C_{\text{M}} C_{\text{O}_2} C_{\text{H}}. \quad (2.9)$$

Die Variablen \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} sowie die Größe K_I sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{2 k_{1f} k_{1b}}{k_{2f} k_{3f}}, & \mathcal{B} &= \frac{2 k_{1b}}{k_{3f} K_2 K_3} \\ \mathcal{C} &= \frac{k_{1b}}{k_{2f} K_3}, & K_I &= K_1 K_2 K_3^2. \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.2 Flammenstruktur

Eine schematische Darstellung der Flammenstruktur einer vorgemischten Wasserstoff-Luft-Flamme zeigt Abb. 2.1 Hier wird deutlich, daß sich die Flamme

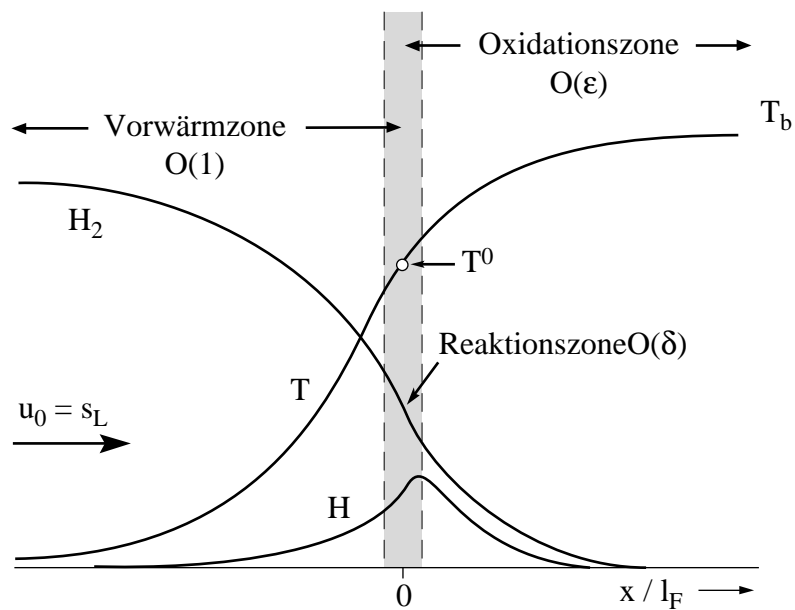


Abbildung 2.1: Schematische Struktur einer H_2 -Vormischflamme

in mehrere Zonen aufteilen läßt. Bei einer Anströmgeschwindigkeit von $u_0 = s_L$ brennt die Flamme stationär. Es entsteht eine Vorwärmzone, wo das Gemisch aufgeheizt wird, eine Reaktionszone und eine Oxidationszone. Die Zonen sind von unterschiedlicher Dicke. Wird die Größenordnung der Vorwärmzone zu eins angenommen ist Reaktionszone von der Ordnung δ und die Oxidationszone von der Ordnung ϵ . Es gilt $\delta \ll \epsilon \ll 1$. An die Oxidationszone schließt eine hier nicht mehr dargestellte Wärmeverlustzone an, in der aufgrund von Strahlungsverlusten

die Maximal-Temperatur abgesenkt wird. Sie ist allerdings für eine asymptotische Betrachtung nur von untergeordnetem Interesse, da sie keinen Einfluß auf die Reaktionszone hat, welche im wesentlichen analysiert wird. Die Vorwärmzone ist durch eine noch eingefrorene Chemie gekennzeichnet. Die Profile der chemischen Spezies sind durch ihr jeweiliges Diffusionsverhalten bestimmt, welches durch ihre Lewis-Zahl charakterisiert wird. Erst wenn die Temperatur des Gemisches eine gewisse Temperatur erreicht hat beginnt ein Reaktionsumsatz in der Reaktionszone.

Reaktionszone

Die Temperatur, welche die Reaktionszone charakterisiert ist die Inner-Layer-Temperatur T^0 . Sie kann vereinfachend gleichgesetzt werden mit der Crossover-Temperatur T_c [25] [26], die durch die Beziehung

$$\alpha \theta = \frac{k_5^0 C_M^0}{k_{1f}^0} = 1 \quad (2.11)$$

gegeben ist. Durch die obige Gleichung wird die Temperatur des Überganges von einem kettenabrechenden Verhalten, welches durch die Reaktion 5 representiert wird, zu einem kettenverzweigenden Verhalten, was durch die Reaktion 1f ausgedrückt wird, dargestellt. Die hochgestellte 0 besagt, daß die Auswertung der Reaktionsraten bei der Temperatur $T_c = T^0$ erfolgt. Der Faktor α in Glg. (2.11) ist gegeben durch

$$\alpha = \frac{k_7^0 + k_9^0 + k_8^0 \gamma^0 \kappa^0}{k_6^0 + k_7^0 + k_9^0 + k_8^0 \gamma^0 \kappa^0}, \quad (2.12)$$

der durch Vernachlässigung der Rate k_6 zu 1 gesetzt werden kann [25] [26]. Hier allerdings hat sich gezeigt, daß α im allgemeinen ungefähr 0.4 ist.

Um die dünne Reaktionszone der Ordnung δ genauer auflösen zu können wird eine gestreckte Koordinate ξ eingeführt. Die Lösung der Gleichungen für die dimensionslose Temperatur $y_T = T/T^0$, sowie wie den Massenbruch y_H des H-Radikals als Funktion von ξ , ist in Abb. 2.2 dargestellt. Es zeigt sich, daß die Reaktionszone wiederum in zwei einzelne Layer aufzuteilen ist. Jedes der Layer wird durch jeweils eine der globalen Reaktionen charakterisiert. Layer II wird durch die Reaktion II beschrieben. Dort werden bei der Temperatur T^0 die Radikale verbraucht. Es wird daher als Radikal-Verbrauchszone bezeichnet. Analog wird

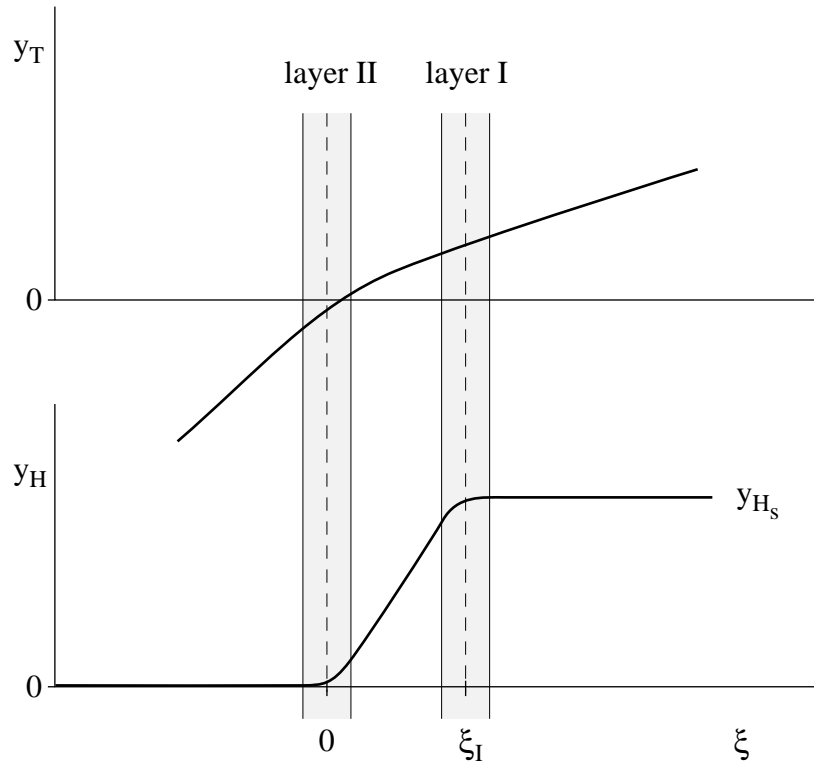


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der asymptotischen Struktur der Reaktionszone (Inner-Layer) einer H_2 -Vormischflamme

Layer I durch die globale Reaktion I charakterisiert, welche beim Übergang zu höheren Temperaturen aus dem eingefrorenen Zustand in ein Gleichgewichtszustand wechselt. Dieses Regime wird als Radikal-Ungleichgewichtszone bezeichnet. Zwischen beiden Regimen ist die Chemie näherungsweise eingefroren.

2.3 Brenngeschwindigkeit

Die Damköhler-Zahl des zweiten globalen Reaktionsschritt ist gegeben durch

$$D_{II} = \frac{Y_{H_2,u}}{W_{H_2}} \left(\frac{\lambda^0}{c_p^0} \right) \left(\frac{\rho^0}{\rho_u v_u} \right)^2 \times \frac{2^{7/2} k_5^0 C_M^0 K_I^{1/2} L_{H_2}^{3/2} L_{O_2}^{3/2}}{X_{H_2O}^0 (1 + \kappa^0)} \quad (2.13)$$

Hierbei sind Y_{H_2} ein Massenbruch, X_{H_2O} ein Molenbruch sowie L_i Lewis-Zahlen verschiedener Komponenten. Wählt man die Dicke der Oxidationsschicht ϵ so, daß

$$D_{II} \epsilon^4 = 1 \quad (2.14)$$

und berücksichtigt, daß

$$\epsilon = \frac{T_b - T^0}{2 z^0 (T_b - T_u)} \quad (2.15)$$

läßt sich mit $s_L = v_u$ eine Beziehung für die Brenngeschwindigkeit ableiten.

$$s_L^2 = \frac{Y_{H_2,u}}{W_{H_2}} \left(\frac{\lambda^0}{c_p^0} \right) \left(\frac{\rho^0}{\rho_u} \right)^2 \times \frac{k_5^0 C_M^0 (K_I^0)^{1/2} L_{H_2}^{3/2} L_{O_2}^{3/2} (T_b - T^0)^4}{2^{1/2} X_{H_2O}^0 (1 + \kappa^0) (z^0)^4 (T_b - T_u)^4} \quad (2.16)$$

Zur Auswertung der Glg. (2.16) werden die Größen T^0 und z^0 benötigt. Weiterhin ist $\lambda/c_p = 2.58 \times 10^{-4} (T/298)^{0.7}$ g/(cm s) [29] und die Lewis-Zahlen der Spezies werden als konstant angenommen, $L_{H_2} = 0.3$, $L_{O_2} = 1.1$, $L_{H_2O} = 0.83$ und $L_H = 0.18$.

Abschließend ist zu erwähnen, daß in der Glg. (2.16) das Quadrat der Brenngeschwindigkeit proportional zu $(T_b - T_u)^4$ ist, was wiederum ähnlich zu früheren asymptotischen Lösungen der Brenngeschwindigkeit für Methan [29] und Methanol [30] ist.

2.4 Ergebnisse

Im folgenden sind die Ergebnisse für die Brenngeschwindigkeit als Funktion der Vorheiztemperatur T_u , des Mischungsverhältnisses ϕ sowie des Druckes p dargestellt. Darüber hinaus werden die Ergebnisse einer Auswertung der Temperaturen T^0 und T_c als Funktion des Druckes und des Mischungsverhältnisses diskutiert.

Die Brenngeschwindigkeit wurde aus Glg. (2.16) errechnet. Die benötigten Werte von T^0 und z^0 sind aus einer numerischen Integration der Erhaltungsgleichungen, welche asymptotisch auf die Terme 1.Ordnung vereinfacht wurden, bestimmt worden. Die daraus resultierenden Lösungen für die Brenngeschwindigkeit sind in den folgenden Abbildungen mit dem Anhang *asym* gekennzeichnet. Neben dieser asymptotischen Lösung ist die Brenngeschwindigkeit auch mit Hilfe einer analytischen Approximation der Größen T^0 und z^0 in Glg. (2.16) errechnet worden. Diese Lösungen sind mit dem Anhang *analytic* gekennzeichnet. Dabei wurde T^0 aus Glg. (2.11) ermittelt, wobei α zu 0.4 gesetzt wurde. Für z^0 läßt sich folgende vereinfachte Beziehung herleiten

$$a^2 = 2 \frac{(z^0)^3}{m}, \quad (2.17)$$

hier ist a durch

$$a = \frac{\tau^0}{c} = \frac{T^0 - T_u}{c(T_b - T_u)} \quad (2.18)$$

gegeben. Die Variabel c kann näherungsweise zu 3.5 gesetzt werden und mit $m \approx m_{II}$ folgt m dann aus der Beziehung

$$\frac{\theta \alpha}{m_{II}^2} = f(c) = 0.43685 - 0.1457 c + 0.02385 c^2. \quad (2.19)$$

In Abb. 2.3 sind die errechneten Brenngeschwindigkeiten für variable Brennstoff-/Luft-Verhältnisse aufgetragen. Die Gemisch-Temperatur beträgt 300 K und das Mischungsverhältnis ist stöchiometrisch. Zum Vergleich sind die Lösungen einer numerischen Simulation vom Mauß [23] gezeigt. Es wird deutlich, daß tendenziell die numerische Lösung gut wiedergegeben wird sowohl von der asymptotischen Lösung, als auch von der analytischen Lösung. Allerdings sind die Absolutwerte für Drücke zwischen 1 und 30 bar deutlich zu hoch.

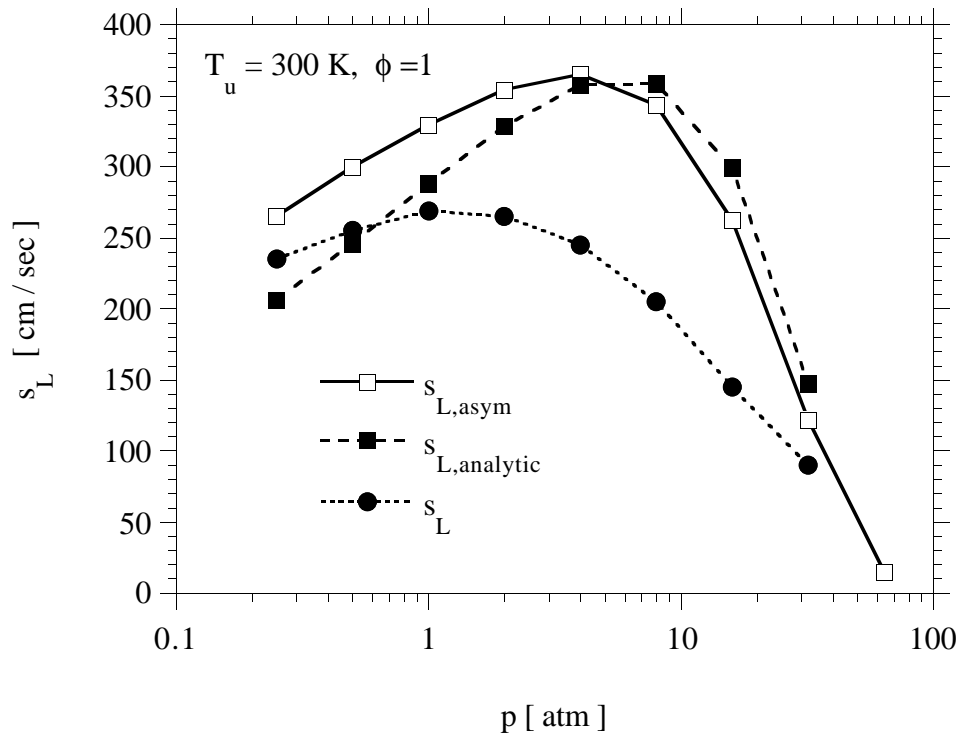


Abbildung 2.3: Vergleich verschiedener Lösungen für die Brenngeschwindigkeit als Funktion des Druckes

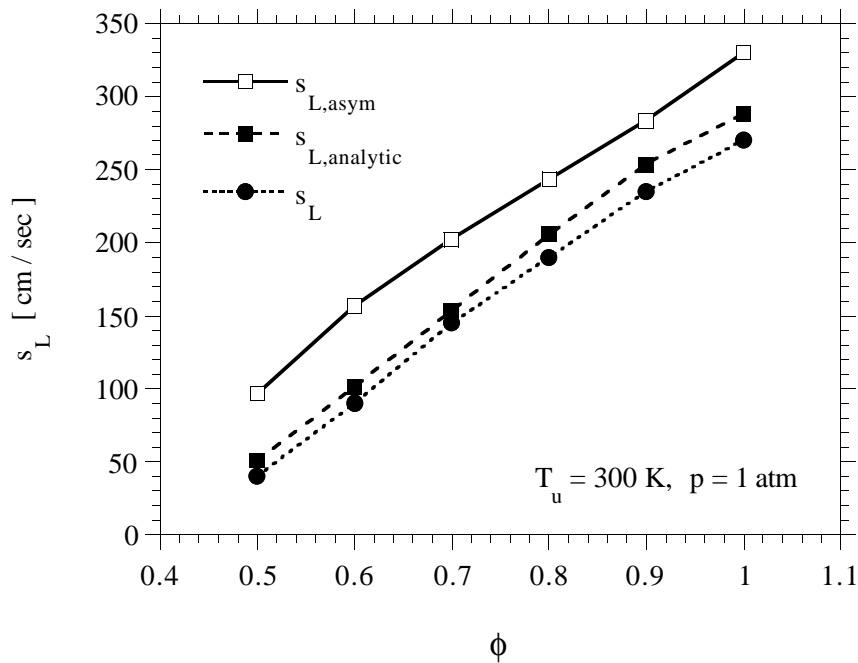


Abbildung 2.4: Vergleich verschiedener Lösungen für die Brenngeschwindigkeit als Funktion des Mischungsverhältnisses

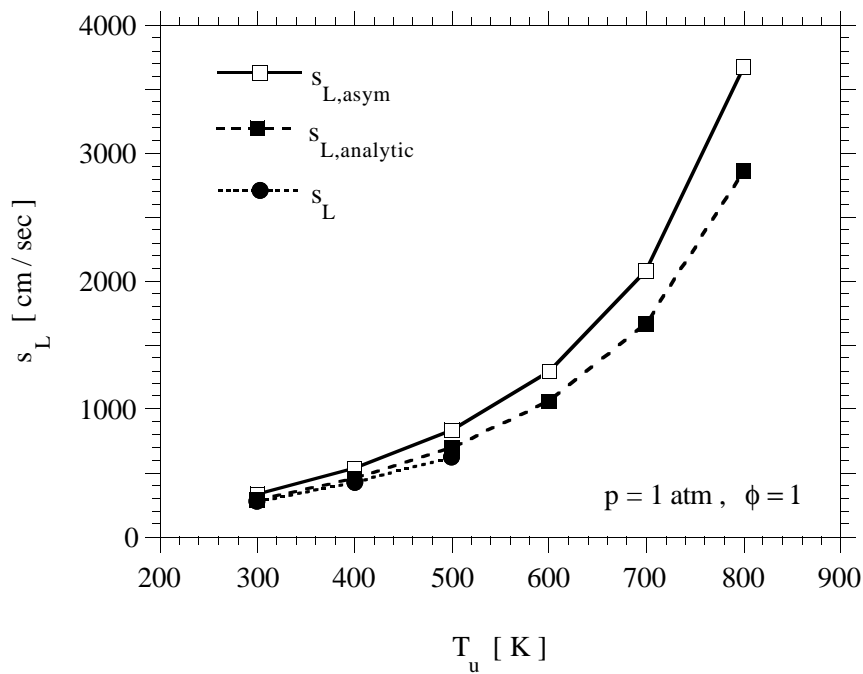


Abbildung 2.5: Vergleich verschiedener Lösungen für die Brenngeschwindigkeit als Funktion der Vorheiztemperatur

Ein prinzipiell ähnliches Verhalten zwischen den verschiedenen Lösungen zeigt sich für eine Variation des Mischungsverhältnisses bei 1 bar und Umgebungstemperatur in Abb. 2.5. Doch liefert die analytische Lösung Ergebnisse, die näher an denen der numerischen Simulation liegen.

Auch für eine Variation der Vorheiztemperatur T_u ist die Übereinstimmung der analytischen Lösung und der numerischen Lösung besser wie in Abb. 2.6 zu erkennen ist. Die Auswertung erfolgte hier für 1 bar und ein stöchiometrisches Gemisch. Für ein Ansteigen der Vorwärmtemperatur in die Nähe der Inner-Layer-Temperatur T^0 erreichen die asymptotisch und analytisch errechneten Brenngeschwindigkeiten sehr große Werte und werden im Limit $T_u = T^0$ unendlich. Die Ursache ist, daß für $T_u \rightarrow T^0$ die Größe a gegen 0 geht nach Glg. (2.18) und somit auch z^0 gegen 0 nach Glg. (2.17). Für $z^0 \rightarrow 0$ gilt $s_L \rightarrow \infty$ nach Glg. (2.16). Die Gültigkeit der asymptotischen Entwicklung muß für solch hohe Vorheiztemperaturen allerdings in Frage gestellt werden, da die Voraussetzung $\delta \ll \epsilon \ll 1$ dort nicht mehr erfüllt ist. Leider stehen keine numerischen Simulationen für hohe Vorwärmtemperaturen zur Verfügung.

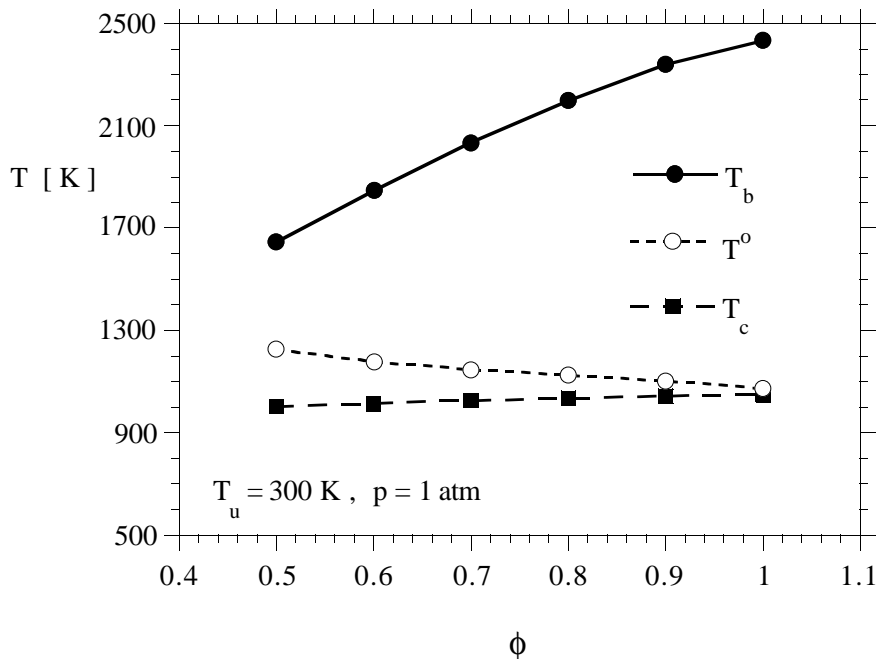


Abbildung 2.6: Vergleich verschiedener Lösungen für die Temperaturen T_c , T^0 und T_b als Funktion des Mischungsverhältnisses

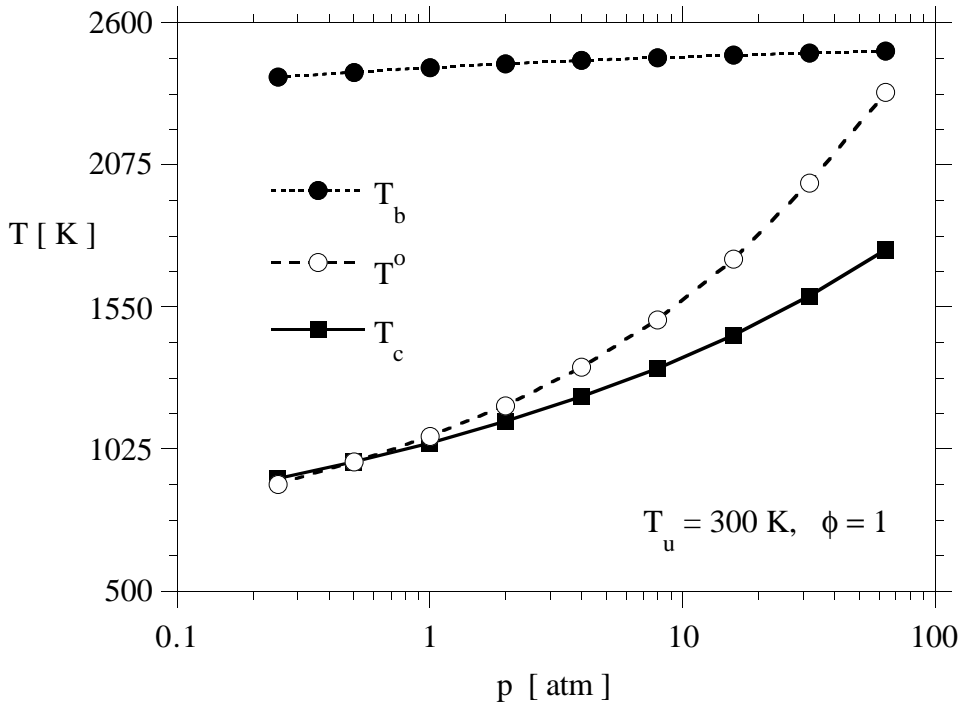


Abbildung 2.7: Vergleich verschiedener Lösungen für die Temperaturen T_c , T^0 und T_b als Funktion des Druckes

Zur Bewertung der oft getroffenen Annahme, daß $T^0 = T_c$ ist, sind in den Abb. 2.6 und 2.7 die Temperaturen T_c , T^0 und T_b als Funktion des Mischungsverhältnisses und des Druckes aufgetragen. Es zeigt sich, daß die Annahme $T^0 = T_c$ für kleine Drücke und in der Nähe stöchiometrischer Mischung recht gut ist. Für magere Gemische und vor allem für hohe Drücke sind die Abweichungen jedoch beträchtlich.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß im gegensatz zu Kohlenwasserstoffflammen die Reaktionszone einer vorgemischten H_2 -Flamme in 2 Layer aufgeteilt werden muß. Diese besitzen jeweils eine charakteristische Temperatur. Die Temperaturen können erheblich voneinander abweichen, so daß hier ein Grund dafür gefunden zu sein scheint, warum eine Ermittlung der Flammgeschwindigkeit für Wasserstoff mit Hilfe einer asymptotischen Formulierung für Kohlenwasserstoffe oftmals zu großen Fehlern führte [22].

Trotzdem ergaben sich durch die Asymptotik auch viele Gemeinsamkeiten zwi-

schen Wasserstoff und Kohlenwasserstoffen. Dies gilt vor allem für das Layer II (Radikal-Verbrauchszone) in der Reaktionszone einer Wasserstoffflamme und für die Oxidationszone. Aus diesem Grund ist es berechtigt auch zur Berechnung der Markstein-Längen für H_2 -Flammen eine für Methan-Flammen asymptotisch gewonnene Formulierung [19] zu verwenden.

3 Markstein-Zahlen

Der Einfluß von Flammenstreckung auf die laminare Brenngeschwindigkeit wird durch die Markstein-Länge wiedergegeben [4]. Dabei ist zu berücksichtigen, daß auch die Krümmung der Flammenoberfläche eine Streckung in der Flamme induziert, so daß durch die Markstein-Länge Streckungs- und Krümmungs-Einflüsse auf die Brenngeschwindigkeit representiert werden. Clavin [21] hat gefunden, daß sich die Markstein-Längen für Krümmung und Streckung unterscheiden.

Markstein [4] hat in einer grundlegenden Arbeit die Beziehung

$$s_L = s_{L,\infty} - \mathcal{L} \gamma \quad (3.1)$$

postuliert. Hierbei ist s_L die Brenngeschwindigkeit der gestreckten Flamme, \mathcal{L} die Markstein-Länge [21], γ die charakteristische Flammenstreckung und $s_{L,\infty}$ die Brenngeschwindigkeit der ungestreckten Flamme. Die dimensionslose Kennzahl, welche die Flammenstreckung charakterisiert ist die Karlovitz-Zahl. Sie wird gebildet aus dem Verhältnis einer charakteristischen Verweilzeit der Flamme l_F/s_L und der charakteristischen Flammenstreckung [28].

$$\text{Ka} = \gamma \frac{l_F}{s_L} \quad (3.2)$$

Die Größe l_F in Glg. (3.2) ist die laminare Flammendicke. Die Markstein-Zahl ist definiert als Quotient der Markstein-Länge und der laminaren Flammendicke

$$\text{Ma} = \frac{\mathcal{L}}{l_F}. \quad (3.3)$$

Setzt man die Definitionen der Markstein- und Karlovitz-Zahl in Glg (3.1) ein ergibt sich die Beziehung

$$\frac{s_{L,\infty}}{s_L} = 1 + \text{Ma Ka}. \quad (3.4)$$

Dies bedeutet, daß durch die Proportionalität der Markstein-Zahl zur Flammendicke die Markstein-Zahl keine Funktion der Karlovitz-Zahl ist.

Im folgenden Kapitel wird zunächst kurz die Herleitung einer asymptotischen Formulierung zur Berechnung der Markstein-Zahl dargestellt [19]. Mit Hilfe dieser Beziehung werden die Markstein-Zahlen für eine Reihe von Brennstoffen als Funktion des Druckes, des Mischungsverhältnisses und der Vorheiztemperatur ermittelt. Abschließend erfolgt ein Vergleich mit den in der Literatur zur Verfügung stehenden experimentellen Daten [32] [33] [34] [36] [37] [38] [39].

3.1 Asymptotische Formulierung

Als Teil einer asymptotischen Analyse schwach gestreckter, stöchiometrischer Methan-Luft-Vormischflammen [19] ist eine Beziehung für die Markstein-Zahl hergeleitet worden.

$$\text{Ma} = \frac{\mathcal{L}}{l_F} = -\frac{1}{C_0^{(0)}} \left[\frac{2(L_f - 1)}{\epsilon z_0^{(0)}} \times \int_0^1 C^{(0)} \ln u \, du - \int_0^1 C^{(0)} \, du \right] \quad (3.5)$$

Diese Formulierung beinhaltet die Annahme, daß die Lewis-Zahl des Brennstoffes sich nicht deutlich von 1 unterscheidet. Eine allgemeinere Gültigkeit ergibt sich, wenn in obiger Gleichung der Term $(L_f - 1)$ durch den Term $(L_f - 1)/L_f$ ersetzt wird. In Glg. (3.5) ist $C_0^{(0)}$ der auf die Terme führender Ordnung vereinfachte Chapman Rubensin Parameter $C = \rho\mu/(\rho\mu)_u$, ausgewertet an der Stelle $T = T_0$. Die Größe L_f bezeichnet die Lewis-Zahl des Brennstoffes, $z_0^{(0)}$ ist eine Streckungsvariable, die mit $2^{1/4}$ gegeben ist und ϵ ist Dicke der Oxidationszone, welche sich durch

$$\epsilon = 1/(\text{Da}_{III})^{1/4} = \frac{1}{z_0^{(0)}} \frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} \quad (3.6)$$

berechnen läßt. In obiger Gleichung ist Da_{III} die Damköhler-Zahl der kettenabbrechenden Globalreaktion. Weiterhin beschreibt u das Verhältnis der dimensionslosen Temperaturen $\tau^{(0)}/\tau_0^{(0)}$.

Das erste Integral in Glg. (3.5) läßt sich näherungsweise beschreiben durch

$$\int_0^1 C^{(0)} \ln u \, du \approx \int_0^{\Delta'} \frac{\ln(1+x)}{x} \, dx \quad (3.7)$$

Ersetzt man das 1. Integral und löst das 2. Integral folgt aus Glg. (3.5)

$$\text{Ma} = \frac{1 + \Delta'}{\Delta'} \left[\ln(1 + \Delta') + \frac{2(L_f - 1)}{\epsilon z_0^{(0)}} \times \int_0^{\Delta'} \frac{\ln(1+x)}{x} \, dx \right]. \quad (3.8)$$

Dabei ist Δ' die dimensionslose Temperaturdifferenz aus Inner-Layer Temperatur und Vorheiz-Temperatur

$$\Delta' = \frac{T^0 - T_u}{T_u}. \quad (3.9)$$

Aus Glg. (3.8) lassen sich nun die Markstein-Zahlen für verschiedene Brennstoffe und Randbedingungen errechnen. Als Eingabe werden neben der Lewis-Zahl des Brennstoffes lediglich die Inner-Layer Temperatur T^0 sowie die Dicke der Oxidationszone ϵ , die sich wiederum aus T^0 , T_b und T_u berechnen läßt, benötigt (siehe Glg. (3.6)).

Die in [22] verwendete Näherungsformel für die Brenngeschwindigkeit der ungestreckten Vormischflamme lautet

$$s_L = F Y_{f,u}^m \exp(-G/T^0) \frac{T_u}{T^0} \left(\frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} \right)^n. \quad (3.10)$$

Mit der Annahme, daß die Temperatur T^0 keine Funktion des Mischungsverhältnisses ist, ergibt sich T^0 aus

$$p = B \exp(-E/T^0). \quad (3.11)$$

Die dafür benötigten Koeffizienten B [bar], E [K], F [cm/s], G [K], m und n sind kraftstoffabhängig und werden für jeden Kraftstoff im folgenden angegeben.

Zur Vereinfachung der Näherungsformel für die adiabate Flammentemperatur ist angenommen worden, daß T_b in erster Näherung keine Funktion von p ist. Die Formel für T_b lautet dann

$$T_b = a T_u + b + c \phi + d \phi^2 + e \phi^3. \quad (3.12)$$

Auch die Koeffizienten $a - e$ sind kraftstoffabhängig und werden im folgenden jeweils angegeben. Hierbei sind ausser a alle Koeffizienten mit der physikalischen Dimension [K] versehen.

3.2 Ergebnisse

Unter Verwendung von Glg. (3.8) werden für verschiedene Brennstoffe die Markstein-Zahlen als Funktion des Druckes p , der Vorheiztemperatur T_u sowie des Mischungsverhältnisses ϕ errechnet. Dazu werden die Inner-Layer Temperatur T^0 und ihre adiabate Verbrennungstemperatur T_b für die entsprechenden Werte von p , T_u und ϕ benötigt.

Basierend auf den Ergebnissen von numerisch berechneten Flamelet-Libraries für die verschiedenen Brennstoffe, sind Näherungsformeln für s_L und T^0 [22], sowie für T_b , die durch ein polynom höherer Ordnung gegeben ist, erzeugt worden. In [22] ist dies für die Brennstoffe CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_8 und für H_2 bereits durchgeführt worden. Für die übrigen Brennstoffe CH_3OH , n -Heptan und *iso*-Oktan sind zunächst, basierend auf detaillierten Reaktionsmechanismen, Flamelet-Libraries errechnet worden und anschließend entsprechend

zu [22] Naherungsformeln fur s_L und T^0 approximiert worden. Dabei beinhaltet eine Flamelet-Library etwa 200 Flamelets. Die verwendeten Mechanismen fur Methanol, n -Heptan und iso -Oktan sind im Anhang aufgelistet.

Neben den Markstein-Zahlen sind im folgenden fur Methanol, n -Heptan und iso -Oktan auch die Ergebnisse, der mit Hilfe der Naherungsformeln erzeugten Brenngeschwindigkeiten s_L , sowie ihre Inner Layer Temperatur T^0 , dargestellt.

Wasserstoff

Die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11) fur Wasserstoff sind:

$$\begin{aligned} B &= 30044.1 \text{ [bar]} ; E &= 10200.9 \text{ [K]} ; m &= 1.08721 \text{ []} \\ F &= 1.29288 \times 10^6 \text{ [cm/s]} ; G &= 2057.56 \text{ [K]} ; n &= 3.535 \text{ []} \end{aligned}$$

und fur Glg. (3.12)

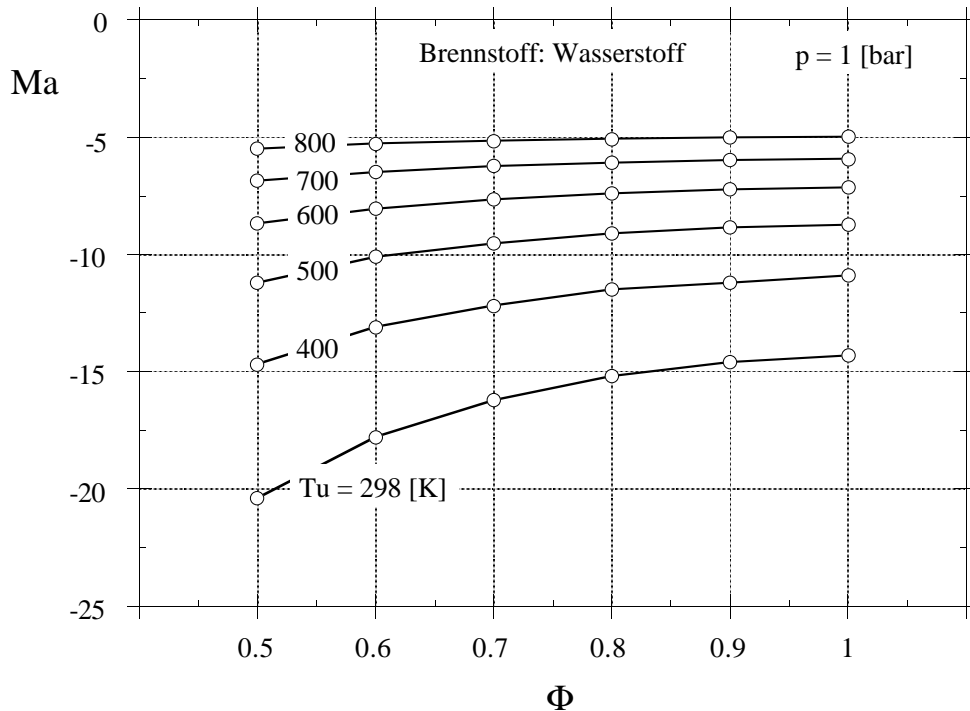


Abbildung 3.1: Markstein-Zahlen von Wasserstoff bei $p = 1$ bar.

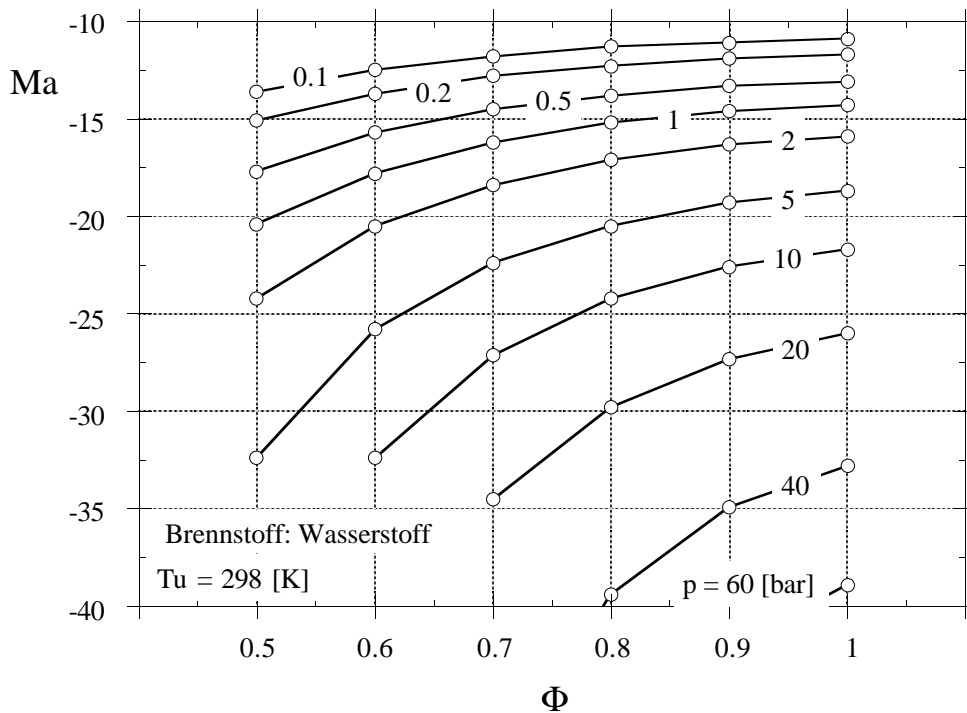


Abbildung 3.2: Markstein-Zahlen von Wasserstoff bei $T_u = 298$ [K].

$$\begin{aligned}
 a &= 0.522 \quad [\quad] ; \quad b = 673.8 \quad [K] ; \quad c = 807.9 \quad [K] \\
 d &= 2515.6 \quad [K] ; \quad e = -1765.9 \quad [K] .
 \end{aligned}$$

Die Lewis-Zahl von H_2 ist 0.3. In Abb. 3.1 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Es zeigt sich, daß die Markstein-Zahlen negativ sind und für größere Vorwärmtemperaturen abnehmen. Weiterhin nehmen die Markstein-Zahlen für magere Gemische ab. Dieses Verhalten stimmt mit Experimenten überein. Eine negative Markstein-Zahl bedeutet, daß die Flammengeschwindigkeit unter Streckungseinfluß zunimmt, was zu einer instabilen Flamme führt. Die Ursache für negative Markstein-Zahlen ist vornehmlich darin zu sehen, daß die Lewis Zahl von Wasserstoff deutlich kleiner als 1 ist. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von -14.5.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.2. Hier wird deutlich, daß die negativen Markstein-Zahlen für steigenden Druck stark anwachsen. Die Herleitung der Beziehungen für die Markstein-Zahl sowie für die Brenngeschwindigkeit s_L , die

Temperatur in der Reaktionszone T^0 und die adiabate Verbrennungstemperatur T_b erfolgte für Mischungen in der Nähe der Stöchiometrie bzw. leicht magere Mischungen. Aus diesem Grund können für hohe Drücke die Markstein-Zahlen nur um die Stöchiometrie ausgewertet werden, da dort für sehr magere Mischungen die Annahme, daß T^0 keine Funktion von ϕ ist zu nennenswerten Fehlern führt. Im besonderen kann dadurch die Inner-Layer Temperatur größer als die adiabate Verbrennungstemperatur werden, was unphysikalisch ist.

Methan

Für Methan lauten die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11):

$$B = 3.1557 \times 10^8 \text{ [bar]}; E = 23873 \text{ [K]}; m = 0.565 \text{ []}$$

$$F = 22.176 \text{ [cm/s]}; G = -6444.27 \text{ [K]}; n = 2.516 \text{ []}$$

und für Glg. (3.12)

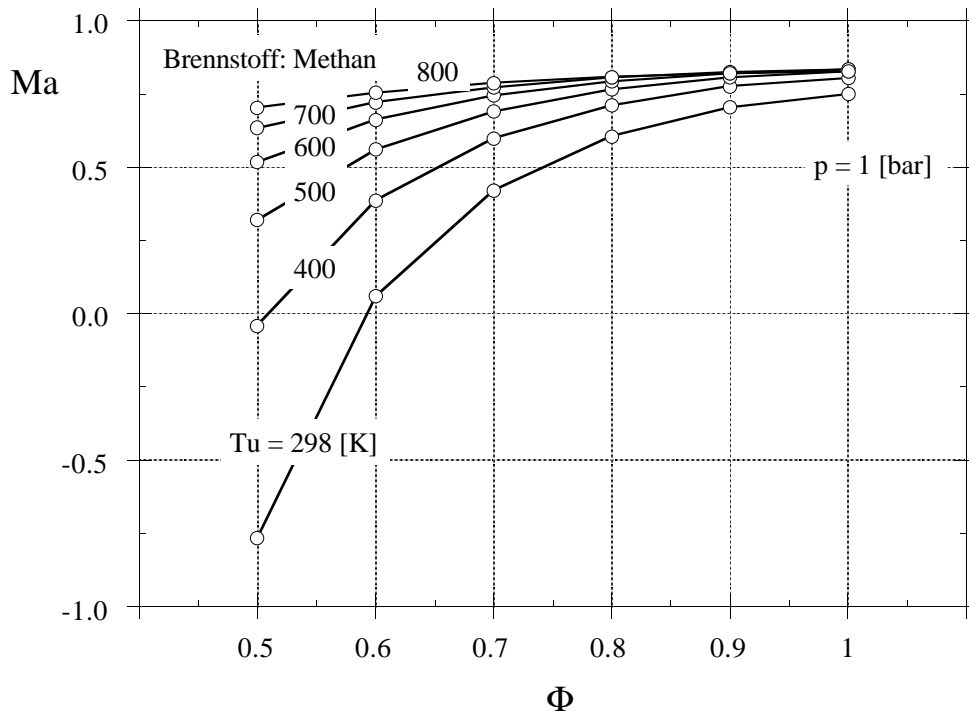


Abbildung 3.3: Markstein-Zahlen von Methan bei $p = 1$ bar.

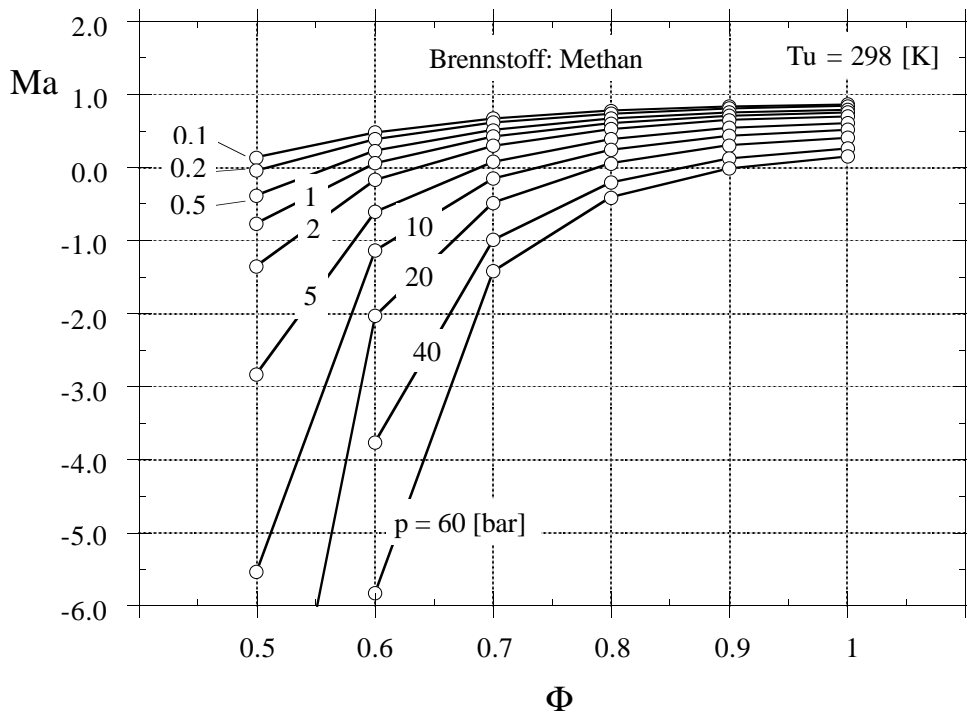


Abbildung 3.4: Markstein-Zahlen von Methan bei $T_u = 298$ [K].

$$a = 0.627 \quad [\quad] ; \quad b = 1270.15 \quad [K] ; \quad c = -2449 \quad [K]$$

$$d = 6776 \quad [K] ; \quad e = -3556 \quad [K] .$$

Die Lewis-Zahl von Methan ist 0.91. In Abb. 3.3 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Ähnlich zu Wasserstoff nehmen die Markstein-Zahlen mit steigender Vorwärmtemperatur und fallenden ϕ ab. Der starke Abfall für kleine ϕ bei 298 K läßt vermuten, daß für noch kleinere Brennstoff/Luft Verhältnisse die Markstein-Zahl negativ wird, was experimentell beobachtet wurde. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 0.75.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.4. Hier wird nun ein besonderes Verhalten von Methan deutlich. Es zeigt sich, daß die Markstein-Zahlen für steigenden Druck kleiner werden und schließlich auch negativ. Die Tendenz für magere Mischungen kleinere Markstein-Zahlen ist ähnlich zu Wasserstoff. Die Ursache für die negativen Markstein-Zahlen ist wiederum in der Lewis Zahl zu sehen, die mit 0.91 leicht kleiner 1 ist.

Methanol

Für Methanol lauten die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11):

$$B = 2.11 \times 10^6 \text{ [bar]}; E = 17657.5 \text{ [K]}; m = 0.91 \text{ []}$$

$$F = 9995.57 \text{ [cm/s]}; G = 1088.85 \text{ [K]}; n = 2.263 \text{ []}$$

und für Glg. (3.12)

$$a = 0.77 \text{ []}; b = 1260 \text{ [K]}; c = -2449 \text{ [K]}$$

$$d = 6797 \text{ [K]}; e = -3594 \text{ [K]}.$$

Die Lewis-Zahl ist zu 1.68 bestimmt worden. In Abb. 3.5 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Es ergeben sich ausschließlich positive Markstein-Zahlen. Weiterhin zeigt sich, daß für größere Vorwärmtemperaturen die Markstein-Zahl abnimmt. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 7.1, die relativ groß ist.

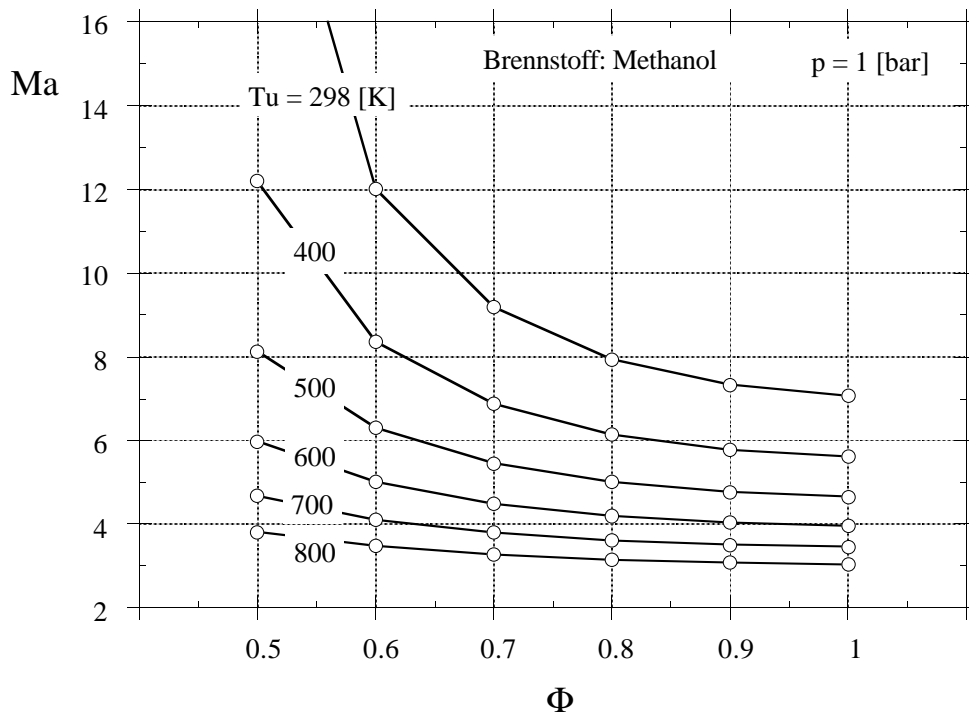


Abbildung 3.5: Markstein-Zahlen von Methanol bei $p = 1$ bar.

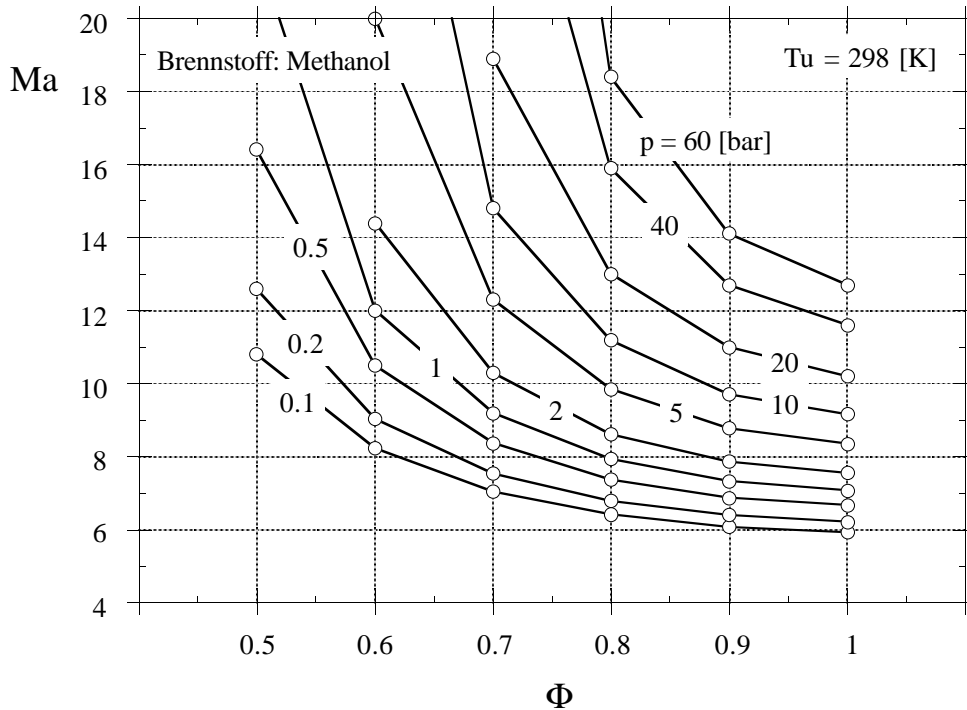


Abbildung 3.6: Markstein-Zahlen von Methanol bei $T_u = 298$ [K].

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.6. Auch hier wird das schon bekannte Verhalten deutlich, daß die Markstein-Zahlen für steigenden Druck stark anwachsen.

Die Brenngeschwindigkeiten von Methanol sind in den Abb. 3.7 und Abb. 3.8 dargestellt. Die durchgezogenen Linien sind die aus Glg. (3.10) errechneten Werte und die Symbole geben die Lösung aus den numerisch berechneten Flamelet Libraries. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung im gesamten Parameterbereich, was die Güte der angepaßten Parameter in Glg. (3.10) unterstreicht.

Weiterhin sind in Abb. 3.9 die aus Glg. (3.10) errechneten Inner Layer Temperaturen als Funktion des Druckes aufgetragen. Dargestellt sind die Lösungen für die Brennstoffe Methanol, *n*-Heptan und *iso*-Oktan, da für diese Brennstoffe neue Flamelet Libraries errechnet wurden. Es wird deutlich, daß die Inner Layer Temperatur von Methanol signifikant höher ist, als die von *n*-Heptan und *iso*-Oktan. Dies ist ähnlich zu dem Verhalten von Methan [22].

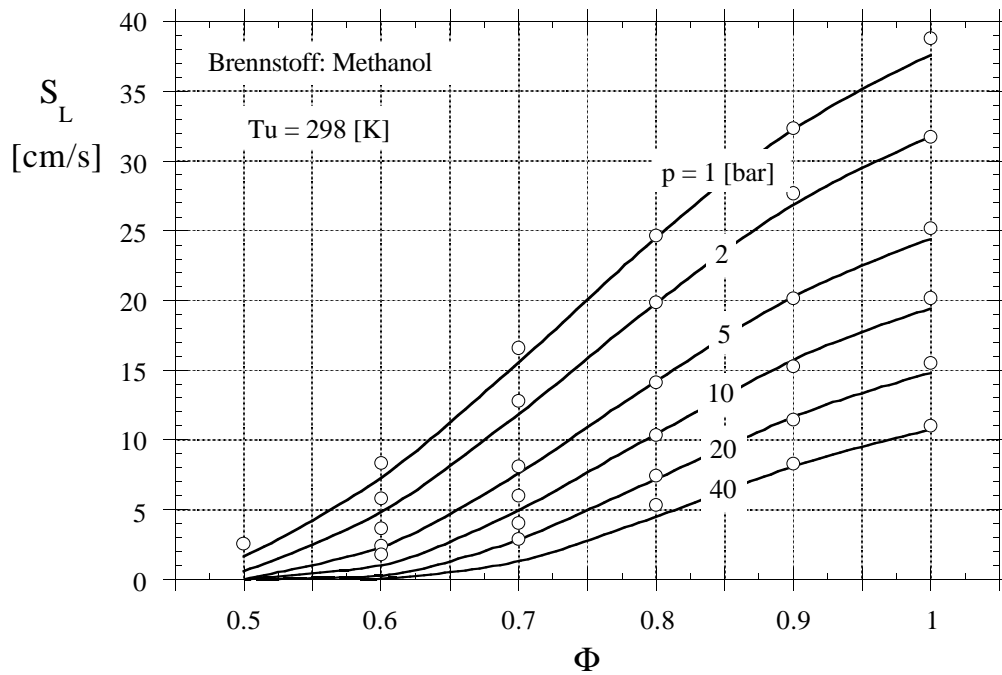


Abbildung 3.7: Brenngeschwindigkeiten von Methanol bei $p = 1$ bar.

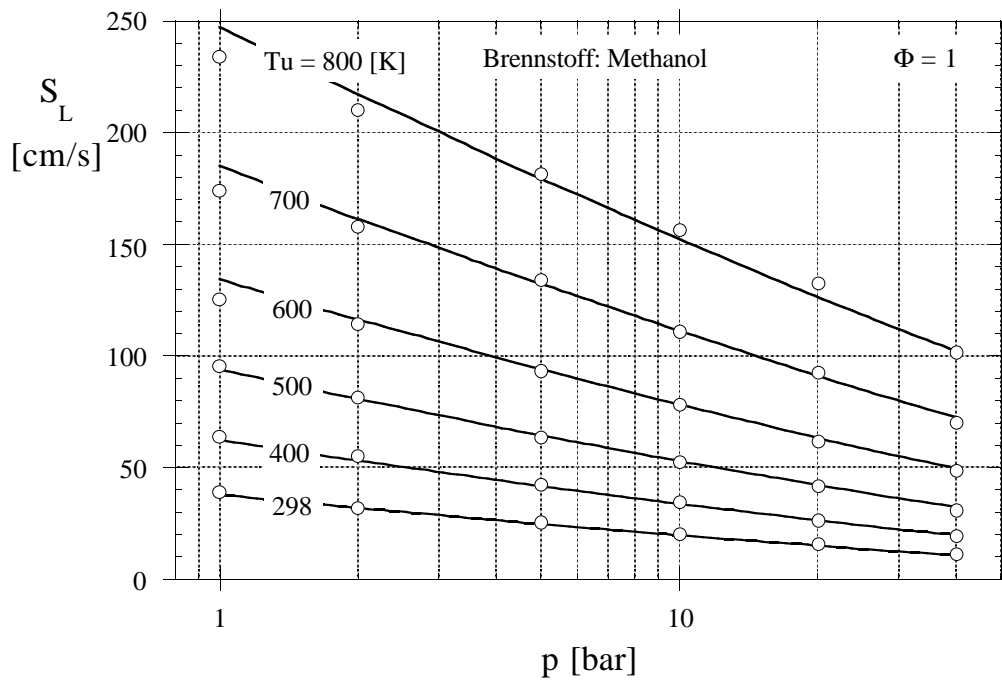


Abbildung 3.8: Brenngeschwindigkeiten von Methanol bei $\phi = 1$.

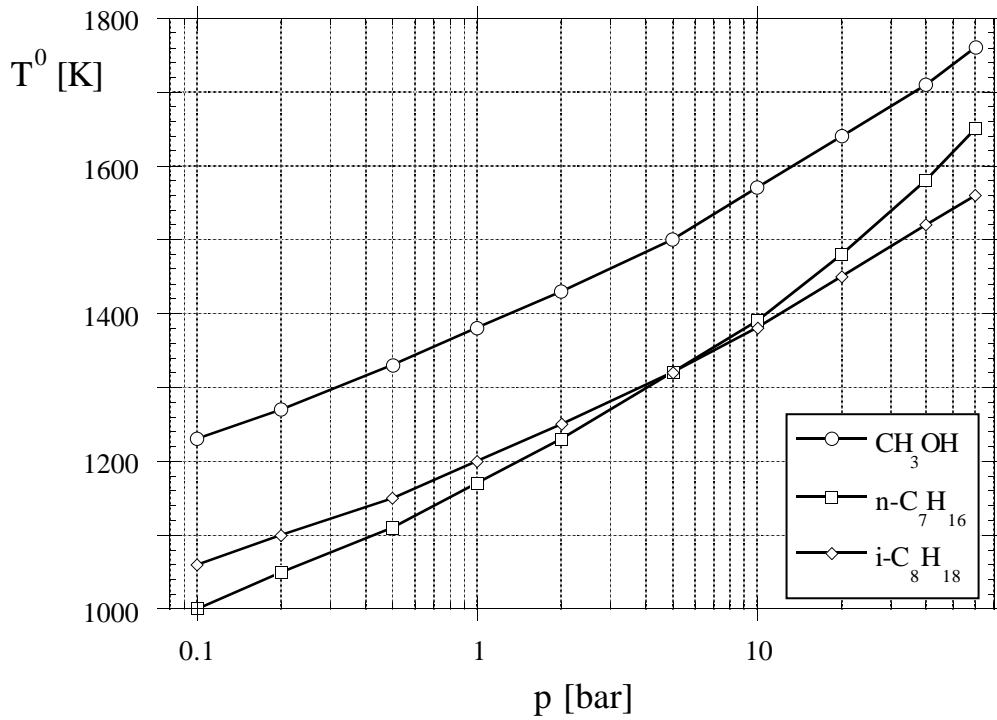


Abbildung 3.9: Inner Layer Temperaturen von Methanol, *n*-Heptan und *iso*-Oktan bei $p = 1$ bar.

Acetylen

Die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11) für Acetylen lauten:

$$B = 56834 \text{ [bar]} ; E = 11344.4 \text{ [K]} ; m = 0.907 \text{ []}$$

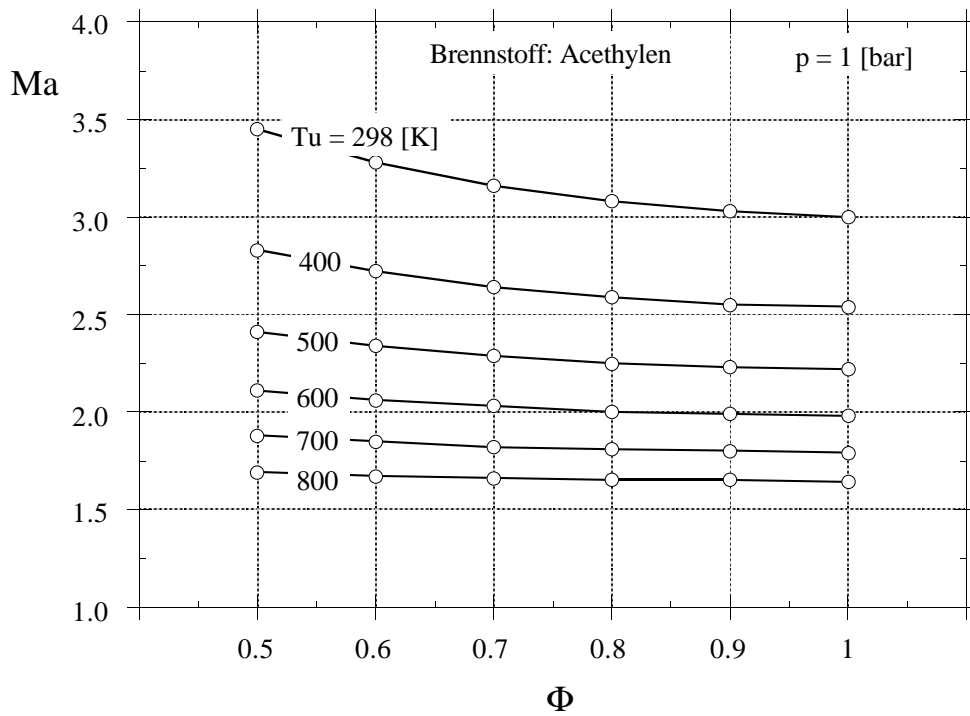
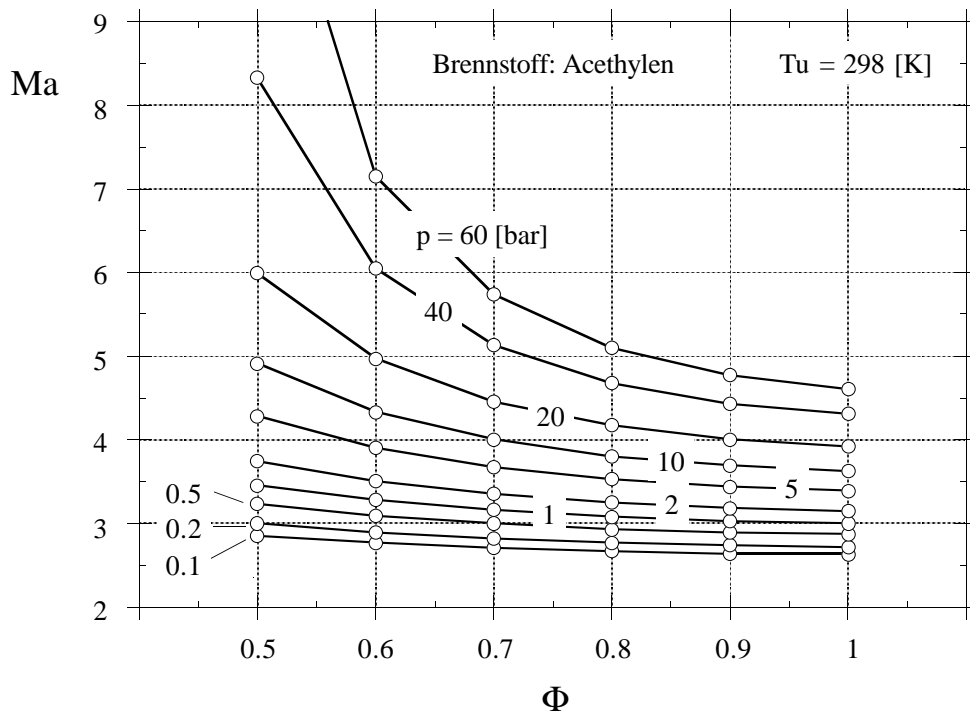
$$F = 37746.6 \text{ [cm/s]} ; G = 1032.36 \text{ [K]} ; n = 2.587 \text{ []}$$

und für Glg. (3.12)

$$a = 0.52 \text{ []} ; b = 1646 \text{ [K]} ; c = -2965 \text{ [K]}$$

$$d = 8187 \text{ [K]} ; e = -4160 \text{ [K]} .$$

Die Lewis-Zahl von Acetylen ist 1.68. In Abb. 3.10 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Wiederum ergeben sich ausschließlich positive Markstein-Zahlen. Weiterhin zeigt sich, daß für größere

Abbildung 3.10: Markstein-Zahlen von Acetylen bei $p = 1$ bar.Abbildung 3.11: Markstein-Zahlen von Acetylen bei $T_u = 298$ [K].

Vorwärmtemperaturen die Markstein-Zahl abnimmt. Die Abhängigkeit der Markstein-Zahl vom Mischungsverhältnis ist schwach. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 2.95.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.11. Auch hier wird das schon bekannte Verhalten deutlich, daß die Markstein-Zahlen für steigenden Druck anwachsen. Das Niveau der Markstein-Zahlen ist allerdings relativ gering.

Ethen

Für Ethen lauten die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11):

$$B = 3.7 \times 10^5 \text{ [bar]}; E = 14368.7 \text{ [K]}; m = 0.7713 \text{ []}$$

$$F = 9978.9 \text{ [cm/s]}; G = 263.23 \text{ [K]}; n = 2.4 \text{ []}$$

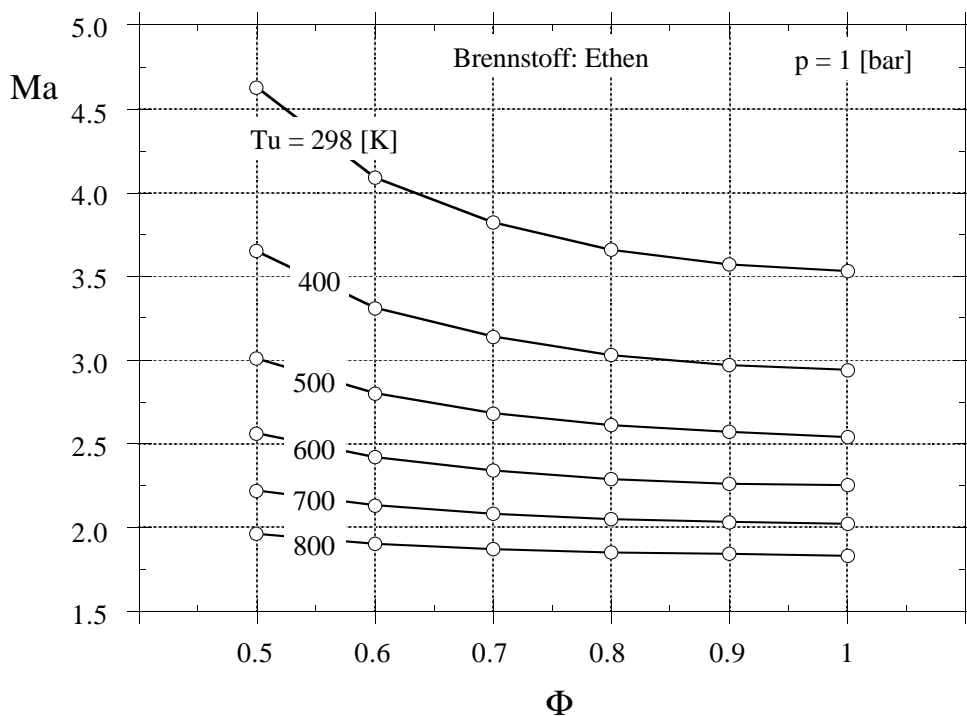


Abbildung 3.12: Markstein-Zahlen von Ethen bei $p = 1$ bar.

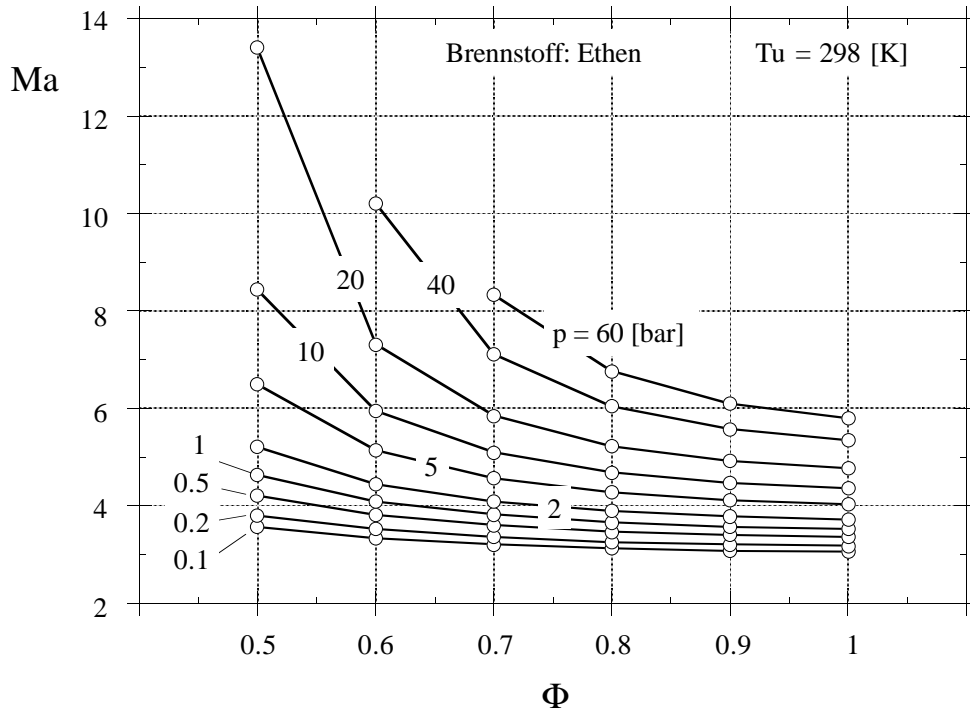


Abbildung 3.13: Markstein-Zahlen von Ethen bei $T_u = 298$ [K].

und für Glg. (3.12)

$$\begin{aligned}
 a &= 0.44 \text{ []} ; b = 602 \text{ [K]} ; c = 880 \text{ [K]} \\
 d &= 2686 \text{ [K]} ; e = -1891 \text{ [K]} .
 \end{aligned}$$

Die Lewis-Zahl von Ethen ist 1.21. In Abb. 3.12 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Wiederum ergeben sich ausschließlich positive Markstein-Zahlen und es zeigt sich, daß für größere Vorwärmtemperaturen die Markstein-Zahl abnimmt. Die Abhängigkeit der Markstein-Zahl vom Mischungsverhältnis ist wieder etwas stärker als bei Acetylen. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 3.45, die aber immer noch relativ klein ist.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.13. Auch hier ist das Verhalten sehr ähnlich zu Acetylen. Das Niveau der Markstein-Zahlen ist etwas höher als das für Acetylen.

Ethan

Für Ethan lauten die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11):

$$B = 4.32 \times 10^6 \text{ [bar]}; E = 18859 \text{ [K]}; m = 0.431 \text{ []}$$

$$F = 1900.41 \text{ [cm/s]}; G = -506.97 \text{ [K]}; n = 2.18 \text{ []}$$

und für Glg. (3.12)

$$a = 0.526 \text{ []}; b = 1437 \text{ [K]}; c = -2967 \text{ [K]}$$

$$d = 7538 \text{ [K]}; e = -3873 \text{ [K]}.$$

Die Lewis-Zahl von Ethan ergibt sich zu 1.32. In Abb. 3.14 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Allgemein ist das Verhalten der Markstein-Zahlen sehr ähnlich zu dem von Ethen. Lediglich das Niveau ist etwas höher. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 4.3.

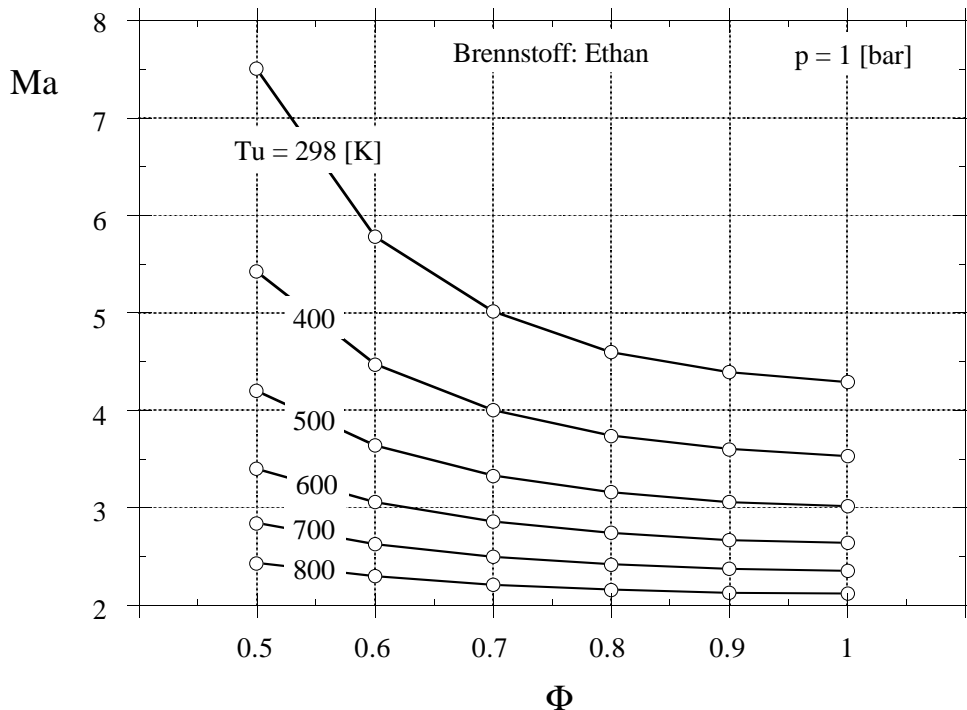


Abbildung 3.14: Markstein-Zahlen von Ethan bei $p = 1$ bar.

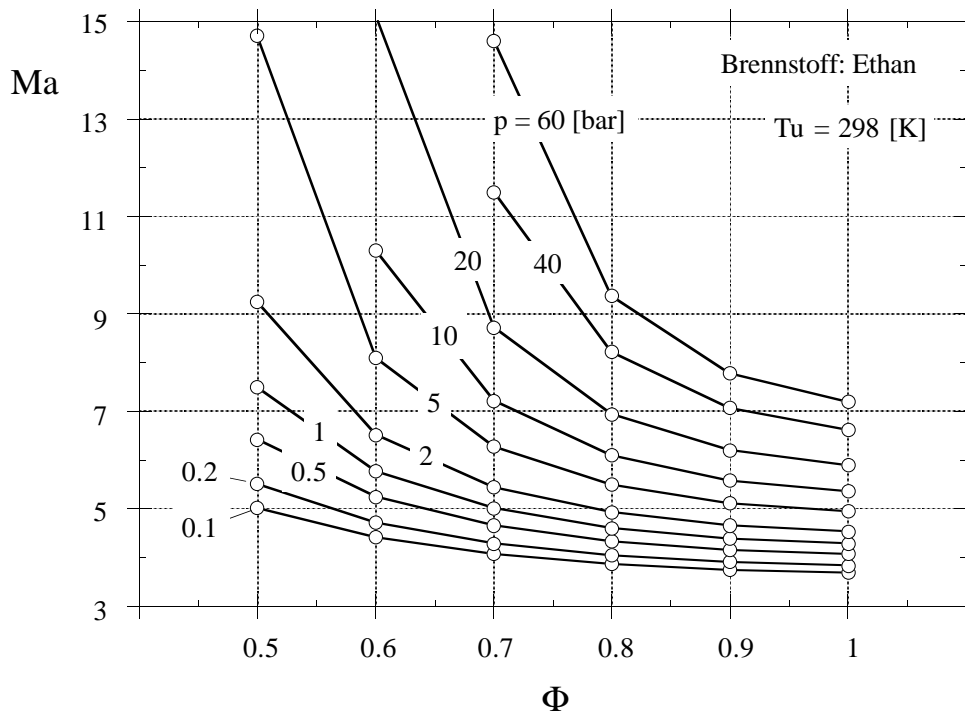


Abbildung 3.15: Markstein-Zahlen von Ethan bei $T_u = 298$ [K].

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.15. Auch hier ist das Verhalten sehr ähnlich zu Ethen. Erneut ist das Niveau der Markstein-Zahlen ist etwas höher als das für Ethen.

Propan

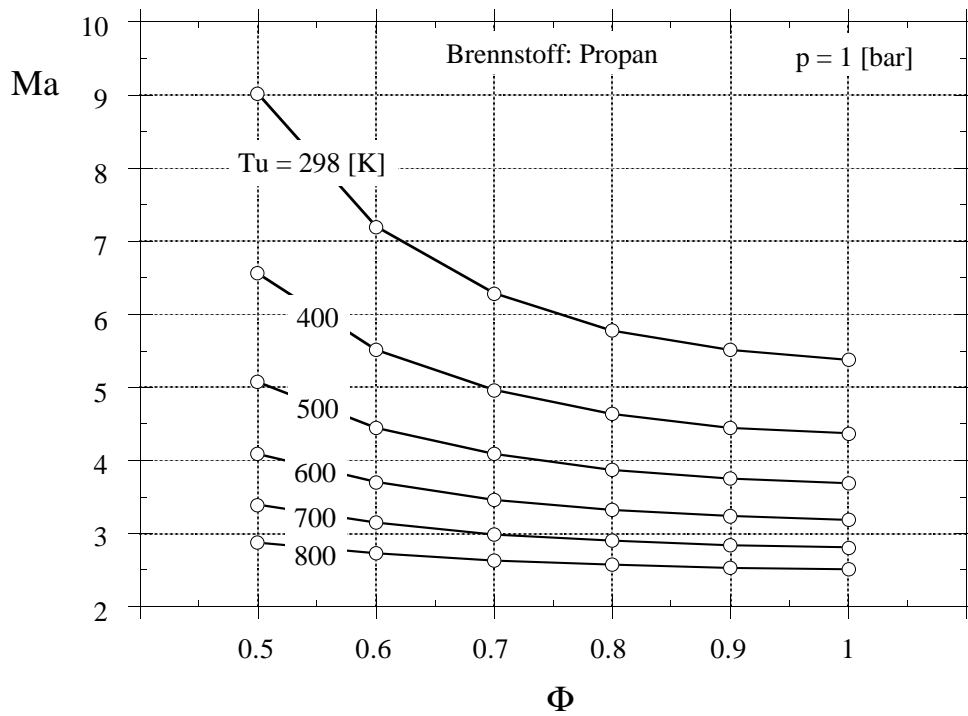
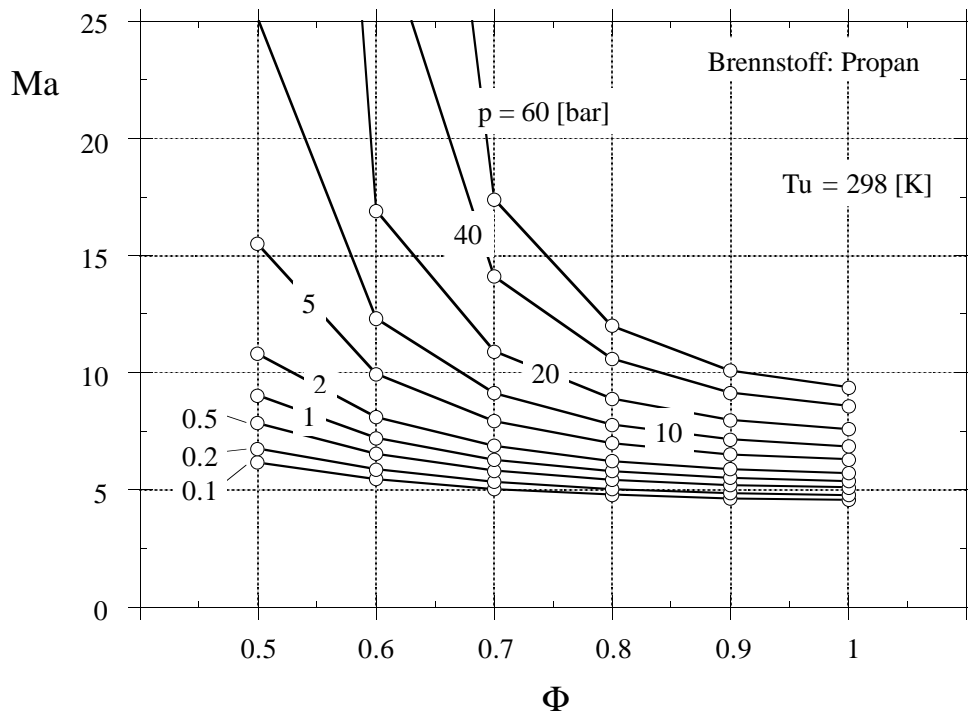
Die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11) für Propan lauten:

$$\begin{aligned}
 B &= 2.25 \times 10^6 \text{ [bar]}; & E &= 17223.5 \text{ [K]}; & m &= 0.582 \text{ []} \\
 F &= 1274.89 \text{ [cm/s]}; & G &= -1324.78 \text{ [K]}; & n &= 2.397 \text{ []}
 \end{aligned}$$

und für Glg. (3.12)

$$\begin{aligned}
 a &= 0.53 \text{ []}; & b &= 1434 \text{ [K]}; & c &= -2952 \text{ [K]} \\
 d &= 7518 \text{ [K]}; & e &= -3856 \text{ [K]}.
 \end{aligned}$$

Die Lewis-Zahl von Propan ist 1.63.

Abbildung 3.16: Markstein-Zahlen von Propan bei $p = 1$ bar.Abbildung 3.17: Markstein-Zahlen von Propan bei $T_u = 298$ [K].

In Abb. 3.16 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Allgemein ist das Verhalten der Markstein-Zahlen sehr ähnlich zu dem von Ethan und Ethen. Lediglich das Niveau ist wiederum etwas höher. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 5.4.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.17. Erneut ist das Niveau der Markstein-Zahlen ist etwas höher als das für Ethan aber ansonsten sehr ähnlich.

n-Heptan

Die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11) lauten:

$$B = 1.7 \times 10^6 \text{ [bar]} ; E = 17508 \text{ [K]} ; m = 0.52 \text{ []}$$

$$F = 7956 \text{ [cm/s]} ; G = 912 \text{ [K]} ; n = 2.3 \text{ []}$$

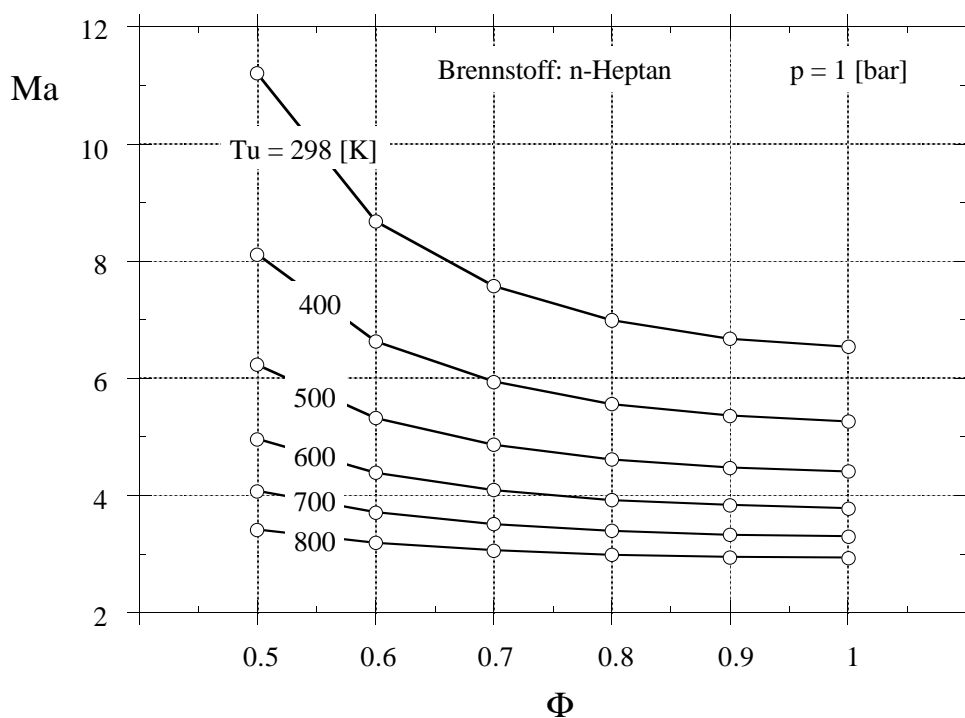


Abbildung 3.18: Markstein-Zahlen von *n*-Heptan bei $p = 1$ bar.

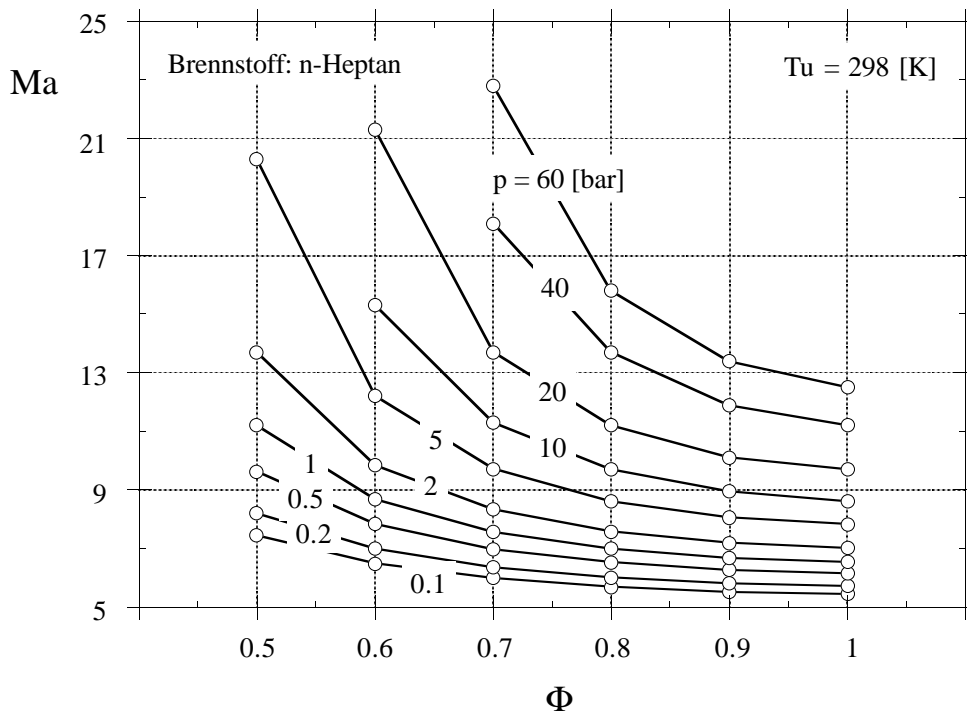


Abbildung 3.19: Markstein-Zahlen von n -Heptan bei $T_u = 298$ [K].

und für Glg. (3.12)

$$a = 0.49 \text{ []} ; b = 758.7 \text{ [K]} ; c = -277.8 \text{ [K]}$$

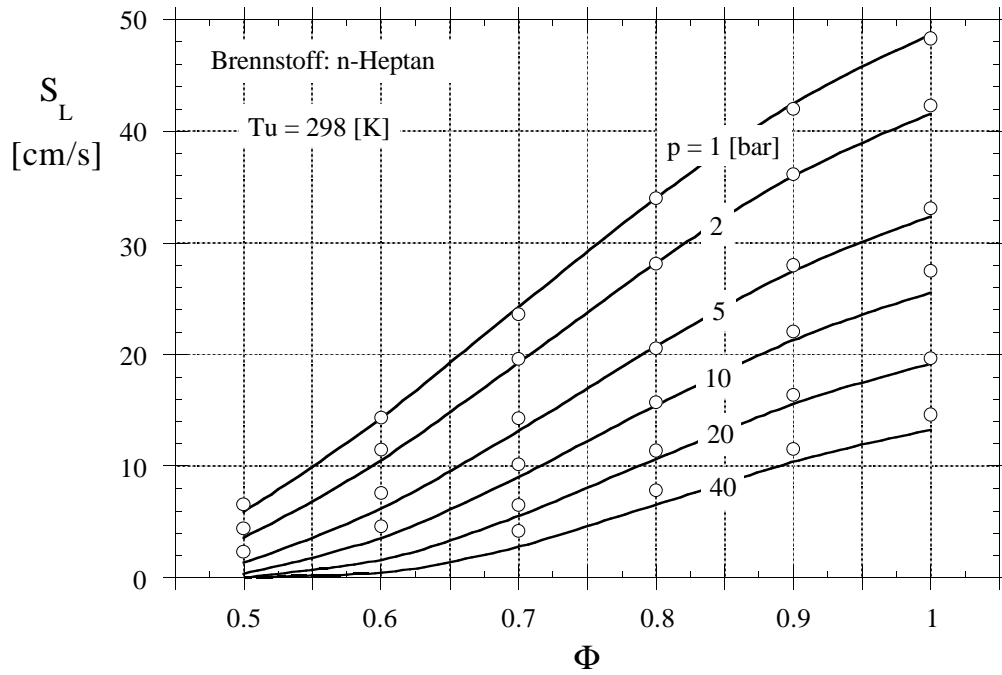
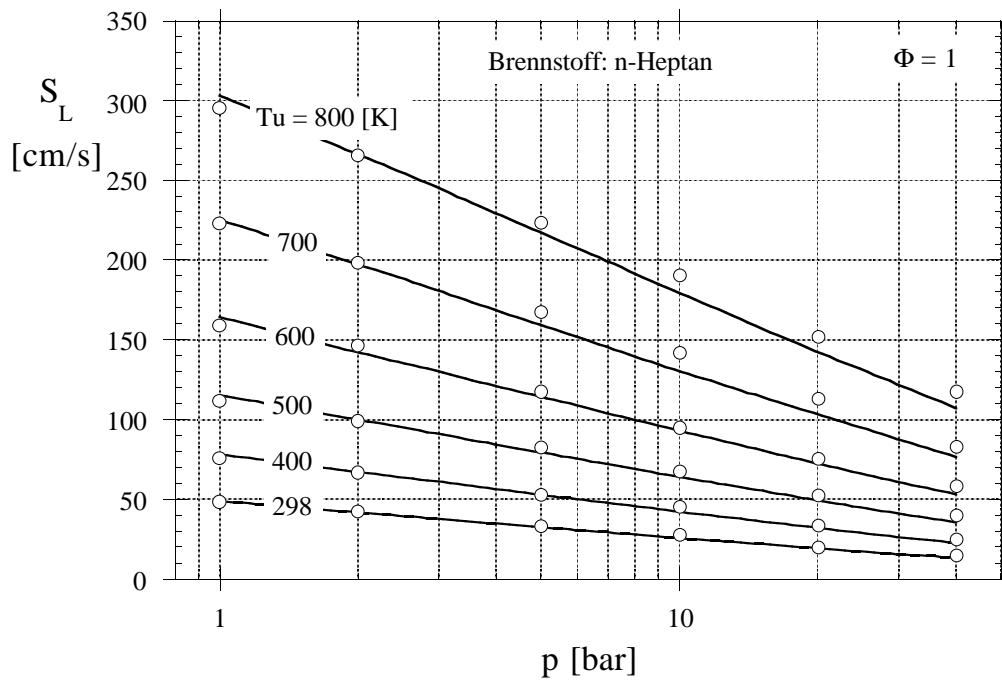
$$d = 4269 \text{ [K]} ; e = -2642 \text{ [K]} .$$

Die Lewis-Zahl ist zu 2.056 errechnet worden.

In Abb. 3.18 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen. Wiederum ist das allgemeine Verhalten der Markstein-Zahlen sehr ähnlich zu dem von Propan, Ethan und Ethen. Das Niveau ist nochmals etwas höher. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 6.8.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.19. Erneut ist das Niveau der Markstein-Zahlen ist etwas höher als das für Propan aber ansonsten sehr ähnlich.

Die Brenngeschwindigkeiten von n -Heptan sind in den Abb. 3.20 und Abb. 3.21 dargestellt. Wiederun zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung.

Abbildung 3.20: Brenngeschwindigkeiten von *n*-Heptan bei $p = 1$ bar.Abbildung 3.21: Brenngeschwindigkeiten von *n*-Heptan bei $\phi = 1$.

iso-Oktan

Für *iso*-Oktan lauten die Koeffizienten zur Auswertung der Glg. (3.10) und (3.11):

$$B = 3.8 \times 10^7 \text{ [bar]}; E = 20906 \text{ [K]}; m = 0.5578 \text{ []}$$

$$F = 2926 \text{ [cm/s]}; G = -25.6 \text{ [K]}; n = 2.5214 \text{ []}$$

und für Glg. (3.12)

$$a = 0.61 \text{ []}; b = 936 \text{ [K]}; c = -1127 \text{ [K]}$$

$$d = 5326 \text{ [K]}; e = -3044 \text{ [K]} .$$

Die Lewis-Zahl ist mit 2.55 gegeben. In Abb. 3.22 sind die Markstein-Zahlen für $p = 1$ bar als Funktion von ϕ und T_u aufgetragen.

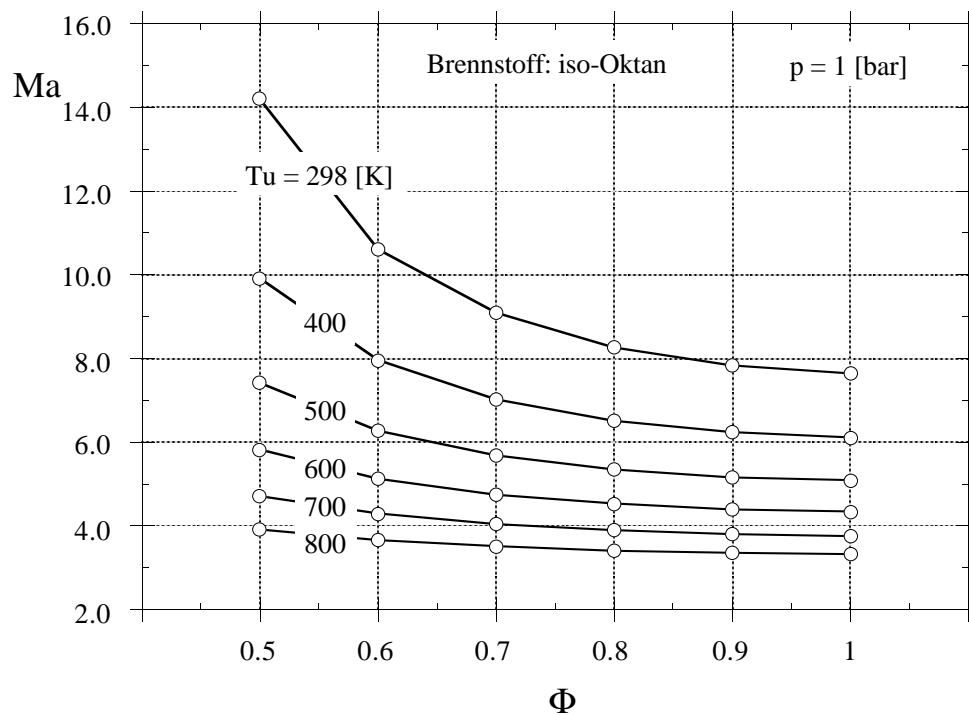


Abbildung 3.22: Markstein-Zahlen von *iso*-Oktan bei $p = 1$ bar.

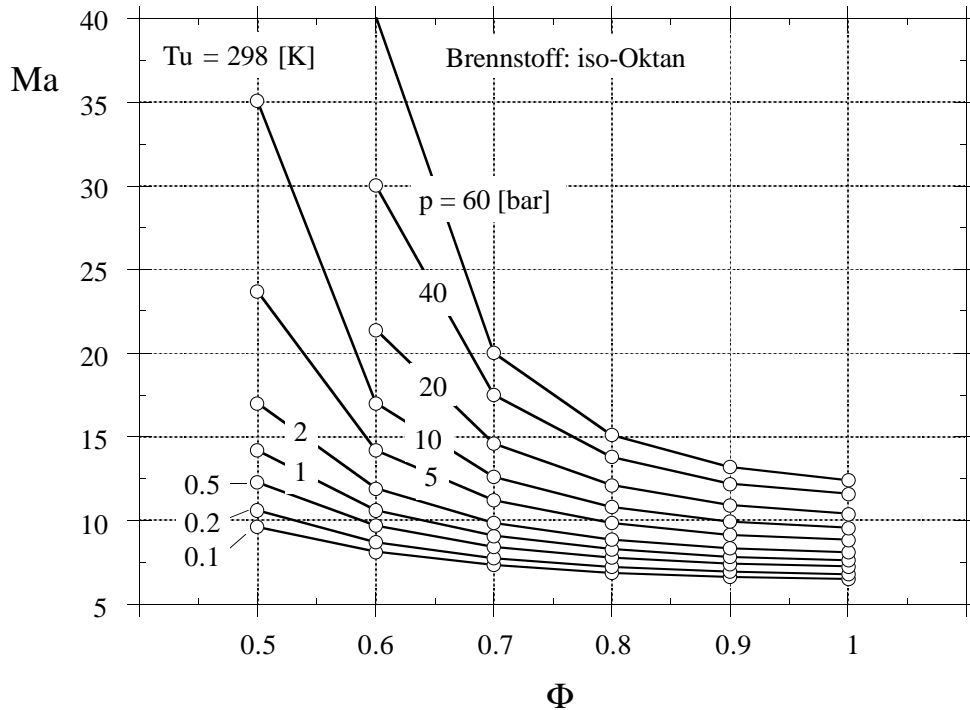


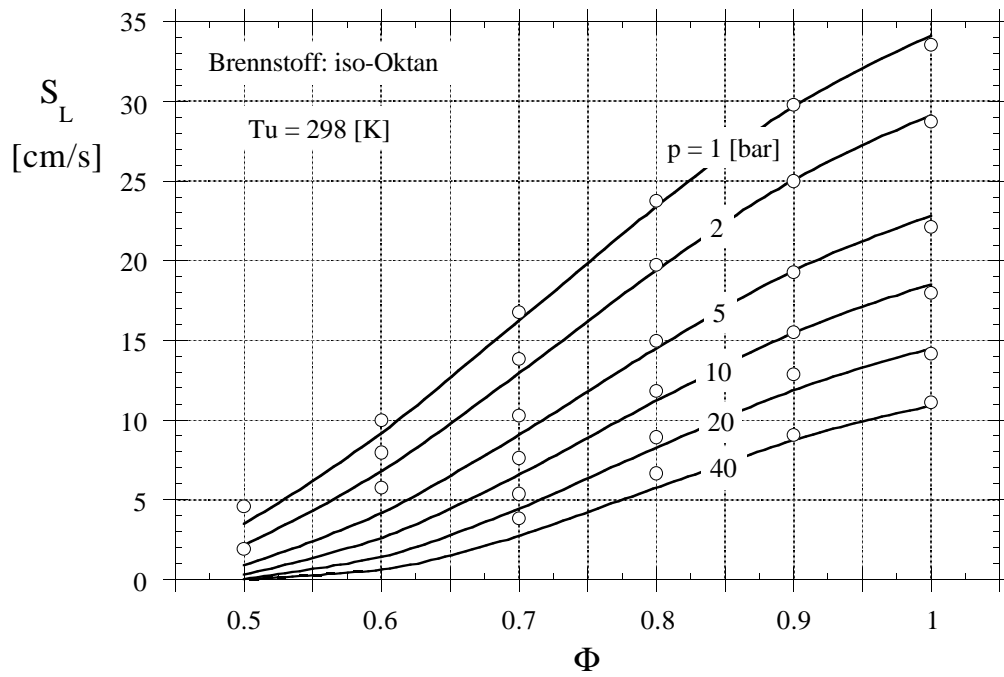
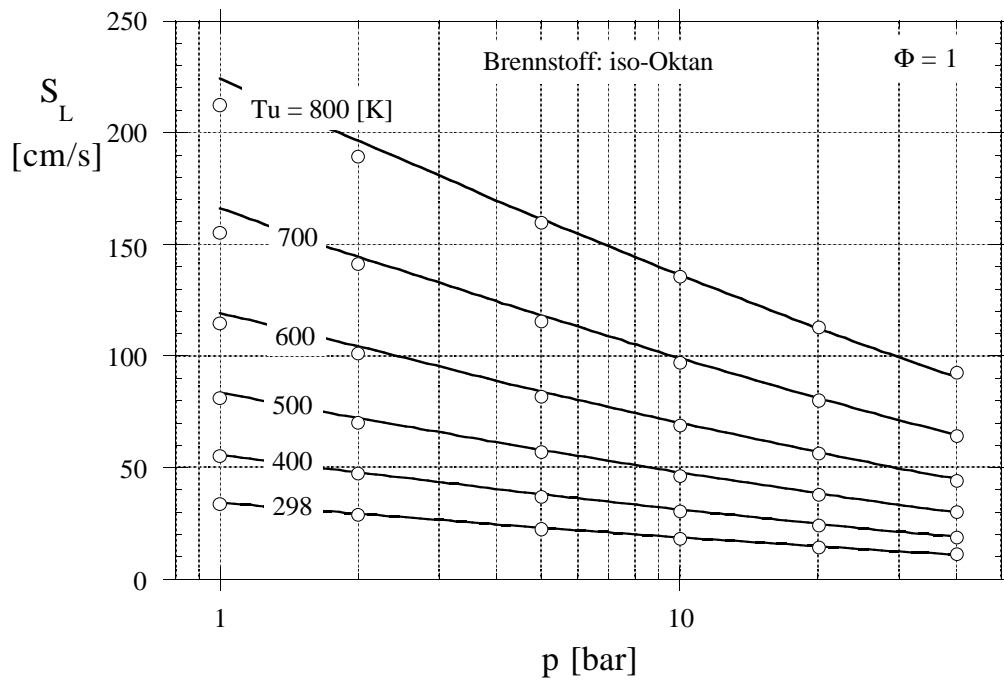
Abbildung 3.23: Markstein-Zahlen von *iso*-Oktan bei $T_u = 298$ [K].

Das allgemeine Verhalten der Markstein-Zahlen sehr ähnlich zu dem von *n*-Heptan. Das Niveau ist nochmals etwas höher. Für den Standard-Zustand 298 K, 1 bar und $\phi = 1$ ergibt sich eine Markstein-Zahl von 7.7.

Die Abhängigkeit vom Druck zeigt Abb. 3.23. Hier zeigt sich, daß für hohe Drücke die Markstein-Zahlen sehr viel stärker ansteigen als für die übrigen Brennstoffe.

Analog zu Methanol und *n*-Heptan sind in Abb. 3.24 und Abb. 3.25 auch für *iso*-Oktan die Brenngeschwindigkeiten aufgetragen. Wie für die anderen Brennstoffe zeigt sich eine exzellente Übereinstimmung zwischen den Werten errechnet aus Glg. (3.10) und den numerisch errechneten Werten.

Zur Validierung des verwendeten Reaktionsschemas, sind in Abb. 3.26 numerisch errechnete Brenngeschwindigkeiten mit neuen experimentellen Daten von Bradley et al. [45] verglichen. Aufgetragen sind die Brenngeschwindigkeiten als Funktion des Mischungsverhältnisses. Die Übereinstimmung ist für die hier vorliegenden Randbedingungen $p = 1$ bar und $T_u = 328$ K sehr gut.

Abbildung 3.24: Brenngeschwindigkeiten von *iso*-Oktan bei $p = 1$ bar.Abbildung 3.25: Brenngeschwindigkeiten von *iso*-Oktan bei $\phi = 1$.

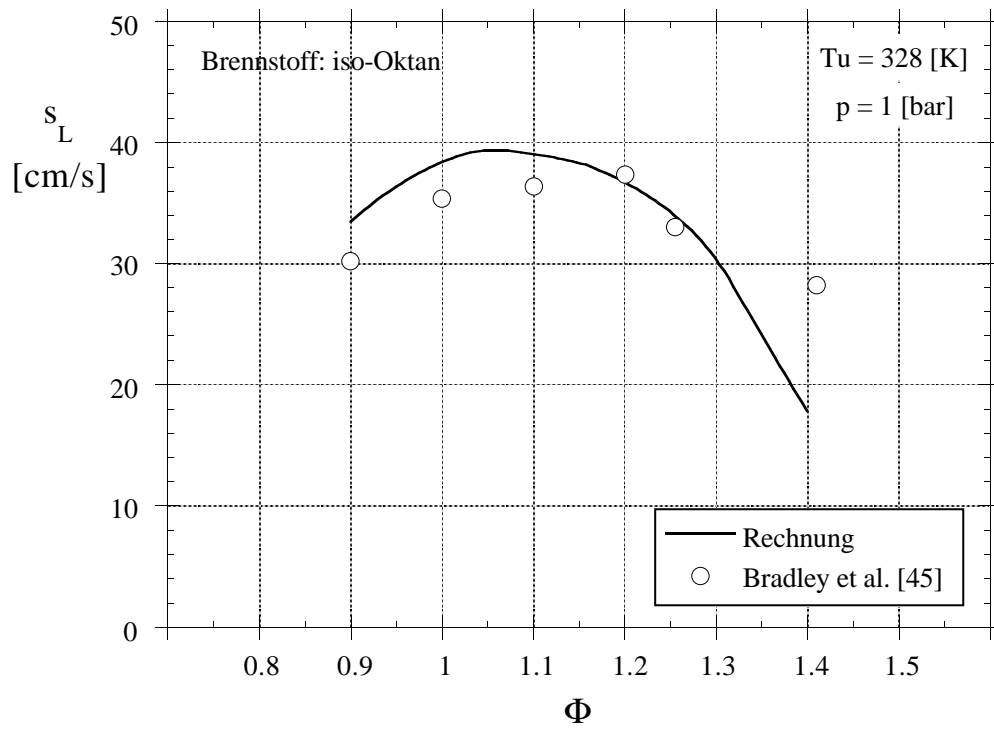


Abbildung 3.26: Brenngeschwindigkeiten von *iso*-Oktan bei $p = 1$ bar und $T_u = 328$ [K].

3.3 Vergleich mit Experimenten

Die experimentelle Ermittlung von Markstein-Zahlen ist äußerst schwierig [32]. Die Folge ist, daß für die ermittelten Werte oftmals eine Fehlertoleranz von 100% angegeben wird. In der Literatur zeigte sich auch, daß die experimentell bestimmten Werte der Markstein-Zahlen von der jeweiligen Konfiguration des Experimentes und des Meßverfahrens abhängig sind [32] [36].

Für die Brennstoffe Methan, Acetylen, Ethan, Propan und Wasserstoff sind in der Literatur Daten verfügbar [32] [33] [34] [36] [37] [38] [39]. Sie werden im folgenden mit den hier errechneten Markstein-Zahlen verglichen.

In Abb. 3.27 sind die Ergebnisse für Wasserstoff bei $T_u = 298$ K zusammengestellt. Leider stehen nur wenig experimentellen Daten für stöchiometrische und magere Gemische zur Verfügung. Der experimentelle Wert [33] gibt für ein stöchiometrisches Gemisch eine Markstein-Zahl von -3.6 an, was in mäßiger Übereinstimmung mit dem errechneten Wert von -14.5 ist.

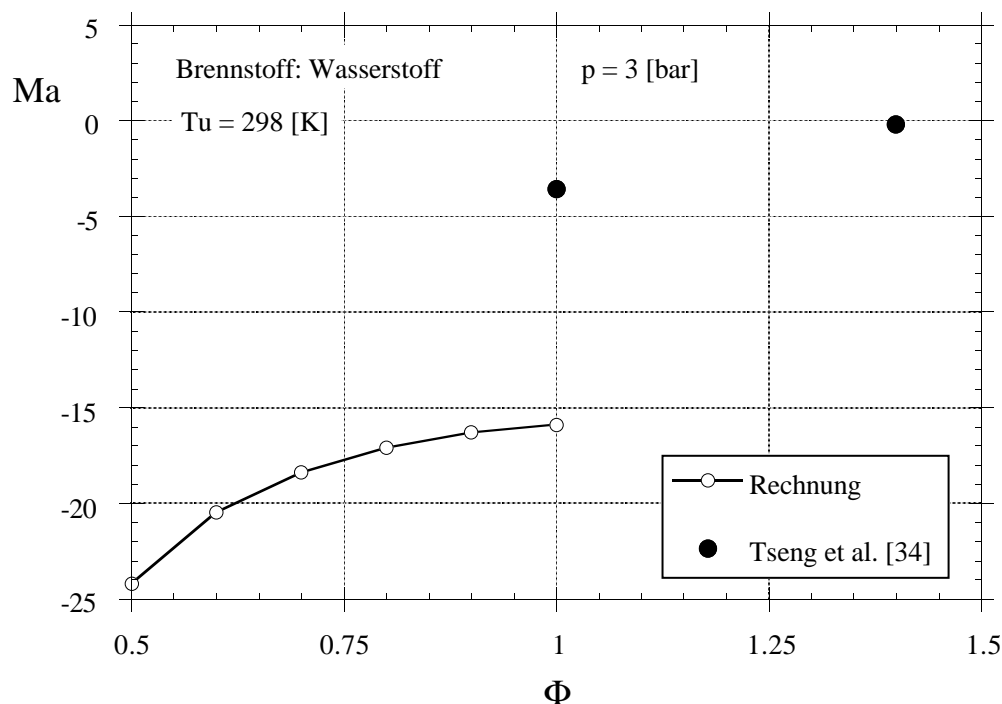


Abbildung 3.27: Markstein-Zahlen von Wasserstoff bei $p = 3$ bar.

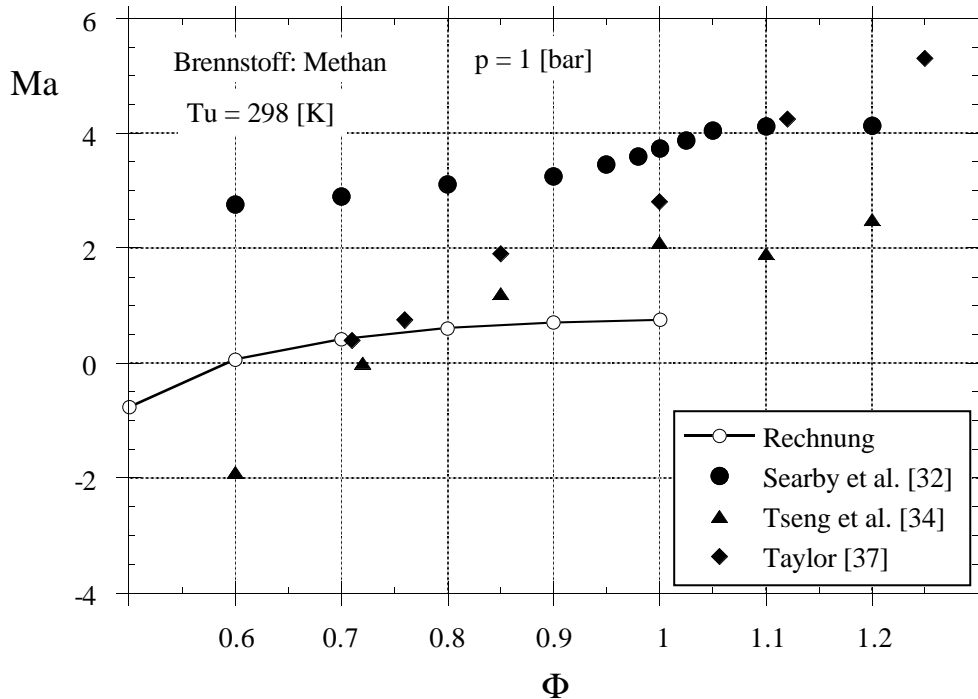


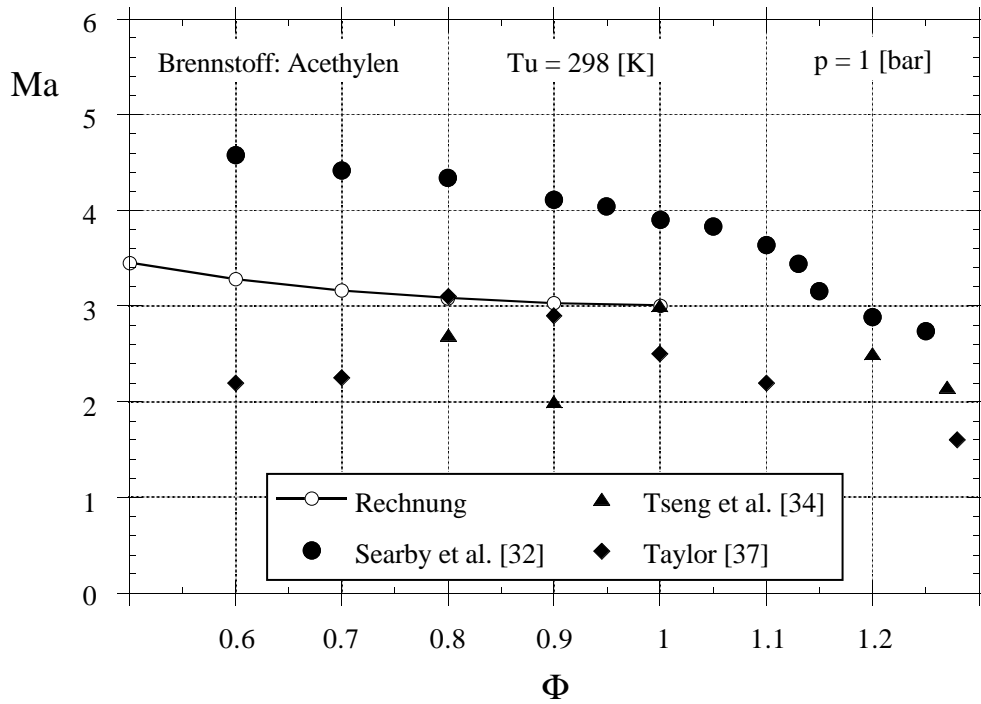
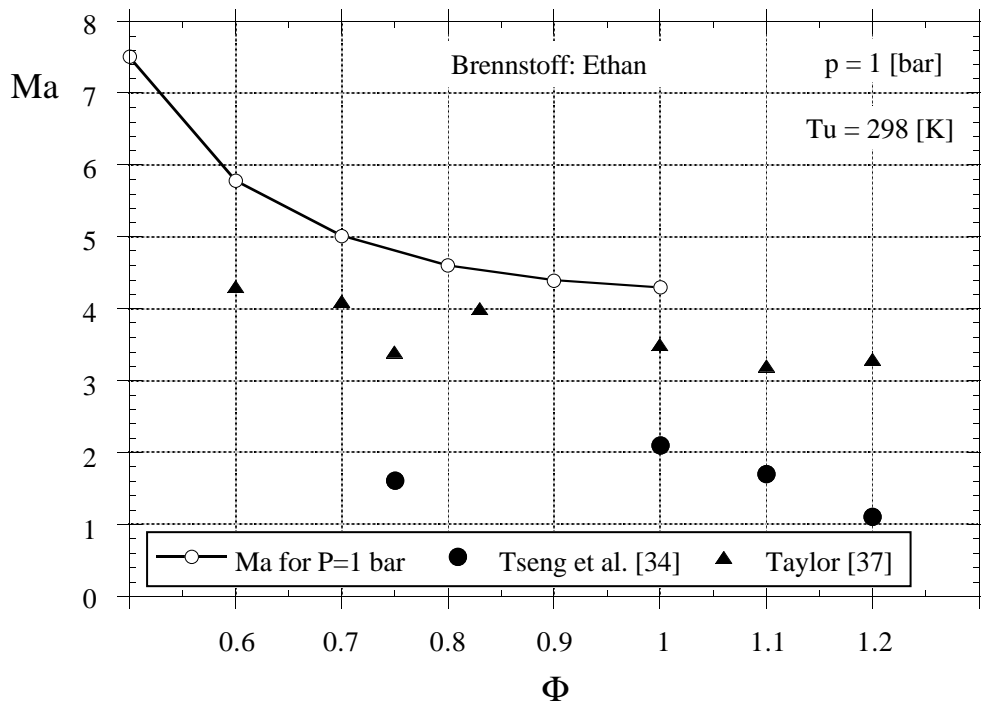
Abbildung 3.28: Markstein-Zahlen von Methan bei $p = 1$ bar.

In Abb. 3.28 sind die Ergebnisse für Methan bei $T_u = 298$ K und $p = 1$ bar zusammengestellt. In anbetracht der Streuung der experimentellen Daten ist die Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten und den errechneten Werten der Markstein-Zahl sehr gut. Auch die Tendenz einer fallenden Markstein-Zahl für magerere Gemische wird durch die Rechnung richtig wiedergegeben.

Ähnlich gut ist die Übereinstimmung im Falle von Acetylen. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.29 dargestellt. Hier wird die Tendenz einer steigenden Markstein-Zahl für magerere Gemische richtig wiedergegeben.

Die Markstein-Zahlen von Ethan sind in Abb. 3.30 aufgetragen. Es zeigt sich, daß die errechneten Markstein-Zahlen etwas höher sind als die experimentell bestimmten. Dennoch ist die Übereinstimmung recht gut.

Abschließend sind die Ergebnisse für Propan bei $p = 1$ bar in Abb. 3.31 zusammengestellt. Es stehen eine Reihe von Meßwerten zur Verfügung, die bis auf einen Wert von Deshaies et al. [36] durchaus ähnlich sind. Die errechneten Markstein-Zahlen liegen zwischen den experimentellen Daten. Weiterhin wird deutlich, daß

Abbildung 3.29: Markstein-Zahlen von Acetylen bei $p = 1$ bar.Abbildung 3.30: Markstein-Zahlen von Ethan bei $p = 1$ bar.

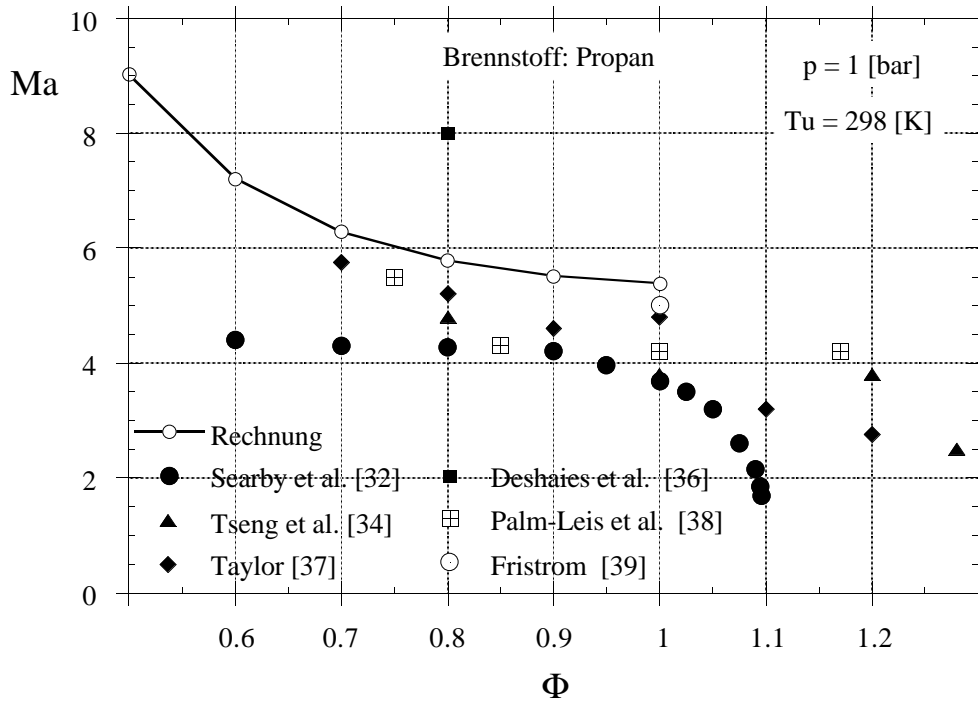


Abbildung 3.31: Markstein-Zahlen von Propan bei $p = 1$ bar.

für fette Gemische die errechneten Markstein-Zahlen wieder leicht ansteigen, was experimentell nicht beobachtet wurde. Dieser Effekt ist auch bei den anderen Brennstoffen zu beobachten. Die Ursache scheint hier zu sein, daß die hergeleitete asymptotische Formulierung zur Errechnung der Markstein-Zahlen für fette Gemische deutlich an Genauigkeit verliert.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß der Vergleich der mit Hilfe von Glg (3.8) errechneten und der experimentell bestimmten Markstein-Zahlen eine gute Übereinstimmung für verschiedenste Brennstoffe zeigt. Damit scheint Glg (3.8) zur Ermittlung von Markstein-Zahlen für alle hier benutzten Brennstoffe im validierten Parameterbereich anwendbar zu sein.

Somit wurde eine Daten-Basis geschaffen, die einen Eindruck gibt über die zu erwartenden Markstein-Zahlen für technisch relevante Kraftstoffe bzw. ihre Modellkraftstoffe.

4 Simulation einer Bunsen-Flamme

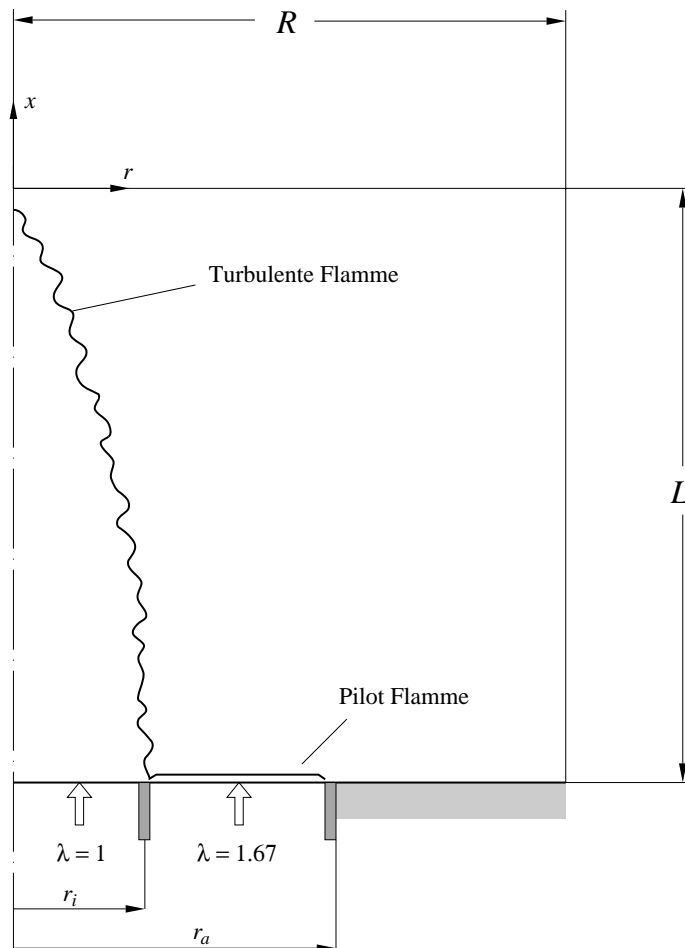


Abbildung 4.1: Skizze einer Turbulenten Bunsen-Flamme

Am Beispiel einer turbulenten runden Freistrahlfamme soll die Voraussagekraft des G -Gleichungskonzepts überprüft werden. Dazu wird ein Parallelstrombrenner verwendet (siehe Abb. 4.1). Aus der inneren Düse tritt ein stöchiometrisches Methan-Luft-Gemisch mit hoher Geschwindigkeit in ruhende Luft aus. Der Freistrahler wird an der mageren Pilotflamme, die an der äußeren Düse anliegt, entzündet und es bildet sich eine turbulente Freistrahlfamme aus.

4.1 Mathematische Formulierung

Zur Beschreibung der turbulenten Flammenausbreitung verwenden wir die turbulente G -Gleichung

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial t} + \bar{v}^c \cdot \nabla \bar{G} = s_T |\nabla \bar{G}|. \quad (4.1)$$

Die turbulente Brenngeschwindigkeit wird durch folgenden Ausdruck modelliert

$$s_T = (s_L + b_2 \sqrt{v' s_L} + b_1 v') \left(1 - b_3 \frac{\mathcal{L}}{\ell_t} \frac{v'}{s_L} \right). \quad (4.2)$$

Die Konstanten wurden von Ashurst [42] mit Hilfe einer direkten numerischen Simulation zu $b_1 = 1,5$, $b_2 = 0,8$ und $b_3 = 1,4$ bestimmt.

Das turbulente Geschwindigkeitsfeld wird durch die Favre-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben und ein k - ε -Modell beschrieben. Da die Flamme bei Verwendung des G -Gleichungsmodells als Diskontinuität angesehen wird, muß das verwendete numerische Verfahren in der Lage sein, die auftretenden Sprünge in Temperatur, Dichte, Geschwindigkeit und Druck richtig wiederzugeben.

Das Geschwindigkeitsfeld wird in zwei Anteile aufgespalten [43]

$$\vec{v} = \vec{u} + \nabla \phi, \quad (4.3)$$

einen divergenzfreien Anteil \vec{u} und einen rotationsfreien Anteil $\nabla \phi$, der als Gradient eines Skalars dargestellt werden kann. Der Skalar ϕ kann aus einer Poisson-Gleichung bestimmt werden

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{v} &= \underbrace{\nabla \cdot \vec{u}}_{\equiv 0} + \nabla^2 \phi \\ \nabla^2 \phi &= s_T |\nabla G| \delta(G - G_0) \left(\frac{T_b}{T_u} - 1 \right) + \frac{1}{\rho T} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla T \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Die divergenzfreie Geschwindigkeit \vec{u} läßt sich dann aus den Navier-Stokes-Gleichungen bestimmen.

4.2 Ergebnisse

Im folgenden sind beispielhaft die Ergebnisse numerischer Rechnungen für eine mittlere Düsenaustrittsgeschwindigkeit von 30 m/s aufgezeigt.

In Abb. 4.2 ist das mittlere Temperaturfeld dargestellt. Das aus der Düse strömende kalte Gemisch wird in der dünnen Flamme verbrannt. Die Flammenkontur ist deutlich sichtbar. Durch Wärmeverluste nimmt die Temperatur stromab der Flamme in radialer und axialer Richtung ab.

Ein Ausschnitt des Geschwindigkeitsfeldes im Bereich der inneren Düse ist in Abb. 4.3 zu sehen. Das zugehörige Temperaturfeld ist farbig unterlegt. Entlang der Flammenfront ändert sich die Geschwindigkeit sprunghaft aufgrund der thermische Expansion in der Flamme.

Abschließend zeigt Abb. 4.4 das skalare Feld G . Die Flamme wird durch die Isolinie $G_0 = 1$ beschrieben. Obwohl Temperatur, Dichte und Geschwindigkeiten an der Flammenfront unstetig sind, bleibt der Verlauf von G durch die Flamme kontinuierlich.

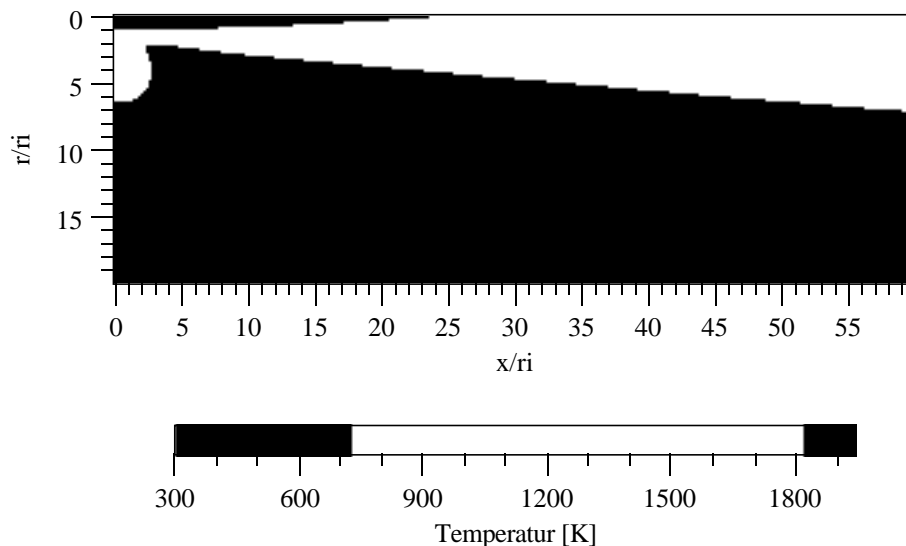


Abbildung 4.2: Temperaturverteilung

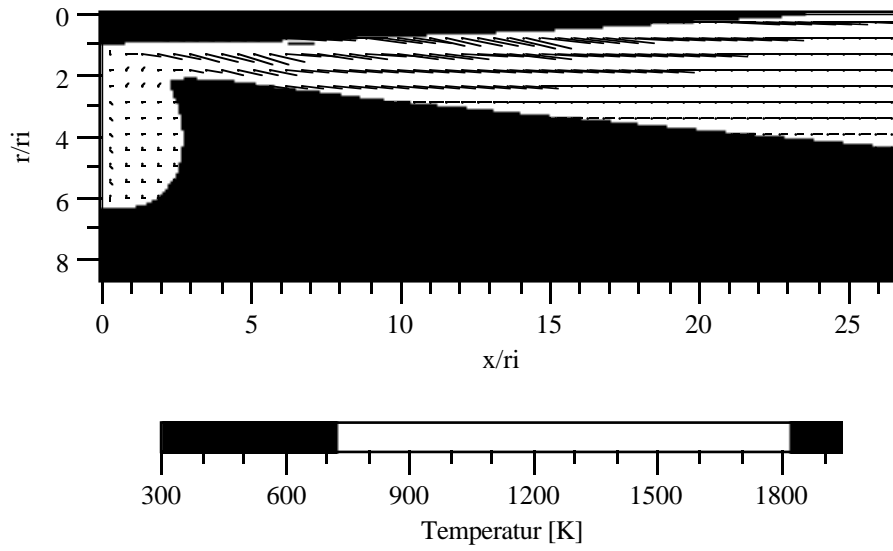


Abbildung 4.3: Geschwindigkeitsverteilung mit unterlegter Temperaturverteilung

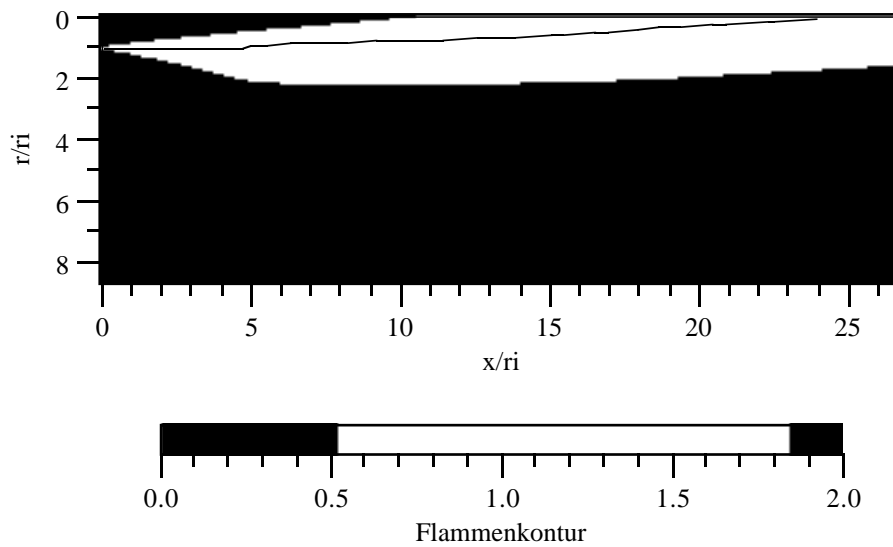


Abbildung 4.4: Verteilung des G-Feldes

4.3 Vergleich mit Experimenten

Eine Validierung der numerischen Simulation der turbulenten Vormischflamme erfolgte durch einen Vergleich der mittleren Flammenkonturen mit experimentellen Daten [44].

In Abb. 4.5 sind Flammenlängen für drei verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten dargestellt.

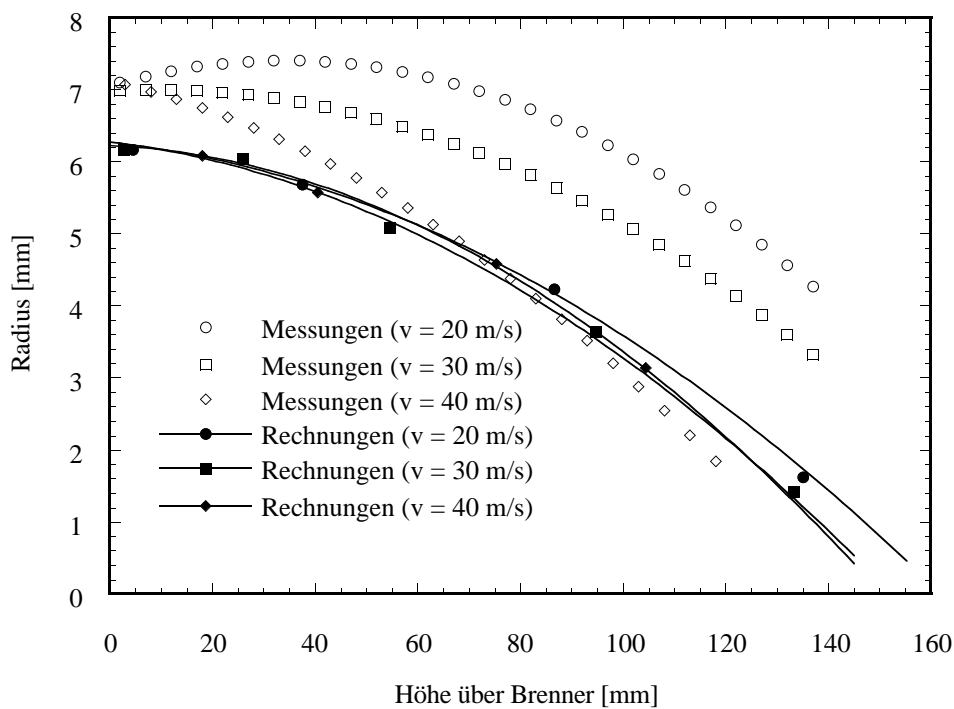


Abbildung 4.5: Mittlere Flammenkonturen für verschiedene Düsenaustrittsgeschwindigkeiten

Generell wird die Flammenkontur richtig wiedergegeben. Allerdings wird die Lage der Flammenkontur in den experimentellen Daten durch die Variation der Austrittsgeschwindigkeit stärker beeinflusst. Dies ist zurückzuführen auf die unzureichende Sensitivität des Turbulenzmodells in Bezug auf die thermische Expansion. Die Diskrepanz zwischen Rechnung und Experiment bei der Beschreibung des Verankerungspunktes der Flamme am Brenner läßt sich dadurch erklären, daß in der Simulation die Position des Verankerungspunktes fest vorgegeben wurde.

5 Zusammenfassung

Der Einfluß der chemischen Kinetik auf die Markstein-Länge ist untersucht worden. Die Markstein-Länge ist ein Maß des Krümmungs- und Streckungs-Einflusses auf die turbulente Brenngeschwindigkeit der Flamme. Hierzu wurden für die Kohlenwasserstoffe Methan (CH_4), Methanol (CH_3OH), Acetylen (C_2H_2), Ethen (C_2H_4), Ethan (C_2H_6), *n*-Heptan (*n*- C_7H_{16}) und *iso*-Oktan (*iso*- C_8H_{18}) sowie für Wasserstoff (H_2) Markstein-Zahlen mit Hilfe einer asymptotischen Formulierung ermittelt und mit den in der Literatur verfügbaren experimentellen Daten verglichen.

Um sicherzustellen, daß die aus einer asymptotischen Betrachtung von CH_4 -Flammen [19] gewonnene Beziehung für die Markstein-Zahl auf alle Brennstoffe angewendet werden kann, ist eine asymptotische Untersuchung der Struktur von H_2 -Flammen durchgeführt worden, da erwartet wurde, daß sich die Struktur einer Wasserstoff- und einer Methan-Flamme deutlich voneinander unterscheiden.

Aus der asymptotischen Untersuchung der Struktur von H_2 -Flammen ergab sich, daß die Reaktionszone im gegensatz zu Kohlenwasserstoffflammen in zwei einzelne Zonen aufzuteilen ist. Jede Zone wird durch jeweils eine der globalen Reaktionen charakterisiert. In der ersten Zone werden die Radikale verbraucht. Sie wird daher als Radikal-Verbrauchszone bezeichnet. Die zweite Zone wird durch die kettenverzweigende global Reaktion charakterisiert, welche beim Übergang zu höheren Temperaturen aus dem eingefrorenen Zustand in ein Gleichgewichtszustand wechselt. Dieses Regime wird als Radikal-Ungleichgewichtszone bezeichnet. Zwischen beiden Regimen ist die Chemie näherungsweise eingefroren. Trotzdem ergaben sich durch die Asymptotik für Wasserstoffflammen auch viele Gemeinsamkeiten zwischen Wasserstoff und Kohlenwasserstoffen. Dies gilt vor allem für die Radikal-Verbrauchszone in der Reaktionszone einer Wasserstoffflamme sowie für die Oxidationszone. Aus diesem Grund ist es berechtigt zur Berechnung der Markstein-Längen von H_2 -Flammen die für Methan-Flammen asymptotisch gewonnene Formulierung zu verwenden.

Da die experimentelle Ermittlung der Markstein-Zahl äußerst schwierig ist, sollte eine Daten-Basis geschaffen werden, die den Einfluß der chemischen Kinetik auf die Markstein-Zahl widerspiegelt und einen Eindruck gibt über die zu erwartenden Werte der Markstein-Zahl für technisch relevante Kraftstoffe bzw. ihre

Modellkraftstoffe.

Ein Vergleich der mit Hilfe von Glg (3.8) errechneten und der experimentell bestimmten Markstein-Zahlen zeigt eine gute Übereinstimmung für verschiedenste Brennstoffe. Es wurden für alle Kraftstoffe die Abhängigkeit der Markstein-Zahl vom Mischungsverhältnis richtig wiedergegeben. Für die Brennstoffe Wasserstoff und Methan, welche eine Lewis-Zahl kleiner als 1 besitzen, fällt die Markstein-Zahl mit fallendem Brennstoff/Luft-Verhältnis. Alle anderen hier untersuchten Kohlenwasserstoffe besitzen eine Lewis-Zahl größer als 1 und zeigen ein umgekehrtes Verhalten in bezug auf das Brennstoff/Luft-Verhältnis. Damit wurde gezeigt, daß die verwendete asymptotische Formulierung zur Ermittlung der Markstein-Zahl für alle hier untersuchten Brennstoffe im validierten Parameterbereich anwendbar ist.

Abschließend wurde zur Validierung der gewonnenen Feldgleichung eine numerische Simulation einer zwei-dimensionalen turbulenten Vormischflamme (Bunsen-Flamme) durchgeführt. Die errechneten Flammenkonturen wurden mit experimentellen Daten verglichen und lieferten eine zufriedenstellende Übereinstimmung.

Literaturverzeichnis

- [1] Damköhler, G.: *Der Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen*, Z. f. Elektroch. **46**, No. 11, 601-652, (1940)
- [2] Barenblatt, G.I., Zeldovich, Y.B., Istratov, A.G.: *On Diffusional Thermal Instability of Laminar Flame*, Prikl. Mekh. Tekh. Fiz., **2**, pp. 21, (1962)
- [3] Matkowsky, B.J., Sivashinsky, G.I.: *An Asymptotic Derivation of Two Models in Flame Theory Associated with the Constant Density Approximation*, SIAM J. Appl. Math., **37**, pp. 686-699, (1979)
- [4] Markstein, G.H.: *Nonsteady Flame Propagation*, Pergamon Press, Oxford, (1964)
- [5] Williams, F.A.: *The Mathematics of Combustion* (J.D. Buckmaster, Ed.), SIAM, Philadelphia, pp. 97-131, (1985)
- [6] Landau, L.D.: *On the Theory of Slow Combustion*, Acta Physicochimica URSS, **19**, pp. 77, (1944)
- [7] Darrieus, G.: *Propagation d'un front de flamme*, vorgestellt auf Le Congres de Mécanique Appliquée, unveröffentlicht, (1945)
- [8] Peters, N.: *A Spectral Closure for Premixed Turbulent Combustion in the Flamelet Regime*, erscheint in J. Fluid. Mech., (1993)
- [9] Clavin, P., Williams, F.A.: *Effects of Molecular Diffusion and of Thermal Expansion on the Structure and Dynamics of Premixed Flames in Turbulent Flows of Large Scales and Low Intensity*, J. Fluid Mech., **116**, pp. 251, (1982)
- [10] Pelce, P., Clavin, P.: *Influence of Hydrodynamics and Diffusion upon the Stability Limits of Laminar Premixed Flames*, J. Fluid Mech., **124**, pp. 219-237, (1982)
- [11] Matalon, M., Matkowsky, B.J.: *Flames as Gasdynamic Discontinuities*, J. Fluid Mech., **124**, pp. 239-259, (1982)

- [12] Clavin, P., Nicoli, C.: *Effect of Heat Losses on the Limits of Stability of Premixed Flames Propagating Downwards*, Combustion and Flame, **60**, pp. 1-14, (1985)
- [13] Nicoli, C.: *Dynamique des Flammes Prémélangées en Présence des Mécanismes Controlant les Limites D'Inflammabilité*, Dissertation, L'Université de Provence, (1985)
- [14] Joulin, G., Clavin, P.: *Linear Stability Analysis of Nonadiabatic Flames: Diffusional-Thermal Model*, Combustion and Flame, **35**, pp. 139-153, (1979)
- [15] Clavin, P., Garcia, P.: *The Influence of the Temperature Dependence of Diffusivities on the Dynamics of Flame Fronts*, Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, **2**, pp. 245-263, (1983)
- [16] Peters, N., Ludford, G.S.S.: *The Effect of Pressure Variations on Premixed Flames*, Combustion Science and Technology, **34**, pp. 331-344, (1983)
- [17] Levin, J., Matalon, M.: *Lewis Number Effect on the Propagation of Premixed Flames in Closed Tubes*, to appear in Combustion and Flame, (1993)
- [18] Ledder, G., Kapila, A.K.: *The Response of Premixed Flames to Pressure Perturbations*, Combust. Sci. and Tech., **76**, pp. 21-44, (1991)
- [19] Rogg, B., Peters, N.: *The Asymptotic Structure of Weakly Strained Stoichiometric Methane-Air Flames*, Combustion and Flame **79**, pp. 402-420, (1990)
- [20] Peters, N.: *Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben Pe 241/9 "Turbulente Brenngeschwindigkeit"*, (1993)
- [21] Clavin, P.: *Dynamic Behavior of Premixed Flame Fronts in Laminar and Turbulent Flows*, Prog. Energy Combust. Sci., **11**, pp. 1-59, (1985)
- [22] Göttgens, J., Mauß, F., Peters, N.: *Approximation of Burning Velocities and Flame Thicknesses*, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 129-135, (1992)

- [23] Mauß, F., Peters, N., Rogg, B., Williams, F.A.: *Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Hydrogen Flames in Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (N. Peters and B. Rogg Eds.), Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag Heidelberg, **m15**, p. 29 ff, (1992)
- [24] Seshadri, K., Peters, N., Williams, F.A.: *Asymptotic Analysis of Stoichiometric and Lean Hydrogen-Air Flames*, Combustion and Flame, **96**, pp. 407-427, (1994)
- [25] Treviño, C., Williams, F.A.: *Progr. Astronaut. Aeronaut.*, **113**, pp. 129-165, (1988)
- [26] Tangirala, V., Seshadri, K., Treviño, C., Smooke, M.D.: *Progr. Astronaut. Aeronaut.*, **131**, pp. 89, (1991)
- [27] Cant, R.S., Bray, K.N.C.: *Strained Laminar Flamelet Calculations of Premixed Turbulent Combustion*
- [28] Peters, N.: *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*, Twenty-First Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1231-1250, (1986)
- [29] Peters, N., Williams, F.A.: *The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames*, Combustion and Flame, **68**, pp. 185-207, (1987)
- [30] Yang, B., Seshadri, K., Peters, N.: Combustion and Flame, **91**, pp. 382-398, (1992)
- [31] Liñán, A.: *Acta Astronaut.* **1**, pp. 1007-1039, (1974)
- [32] Searby, G., Quinard, J.: *Direct and Indirect Measurements of Markstein Numbers of Premixed Flames*, Combustion and Flame, **82**, pp. 298-311, (1990)
- [33] Known, S., Tseng, L.-K., Faeth, G.M.: *Laminar Burning Velocities and Transition to Unstable Flames of Hydrogen-Air and Propane-Air Mixtures*, Combustion and Flame, **90**, pp. 230-246, (1992)
- [34] Tseng, L.-K., Ismail, M.A., Faeth, G.M.: *Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers of Hydrocarbon-Air Flames*, Combustion and Flame, **95**, pp. 410-426, (1993)

- [35] Law, C.K., Zhu, D.L., Yu, G.: *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1419-1426, (1986)
- [36] Deshaies, B., Cambray, P.: *Combustion and Flame*, **82**, pp. 361-375, (1990)
- [37] Taylor, S.C.: *Ph. D. thesis*, University of Leeds, (1991)
- [38] Palm-Leis, A., Strehlow, R.A.: *Combustion and Flame*, **13**, pp. 111-129, (1969)
- [39] Fristrom, R.M.: *Phys. Fluids*, **8**, pp. 273-280, (1965)
- [40] Wirth, M., Peters, N.: *A Flamelet Formulation and Spectral Analysis in Theory and IC-Engine Experiments*, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 493-501, (1992)
- [41] Kerstein, A.R., Ashurst, W.T., Williams, F.A.: *Field Equation for Interface Propagation in an Unsteady Homogeneous Flow Field*, *Phys. Rev. A* **37**, pp. 2728-2731, (1988)
- [42] Ashurst, W.T.: Personal Communication, calculations as in *Geometry of Premixed Flames in Three-Dimensional Turbulence*, Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program 1990
- [43] Majda, A., Sethian, J.: *The Derivation and Numerical Solution of the Equations for Zero Mach Number Combustion*, *CST*, **42**, p. 185, (1985)
- [44] Chen, Y.C.: *Unveröffentlichte Messungen*, Institut für Technische Mechanik, (1994)
- [45] Bradley, D., Lawes, M., Sheppard, C.G.W.: *JOULE II Programme*, Internal Report, (1994)

Mechanismus: Methanol

Number	Reaction	A	n	E
1f	$O_2 + H \rightarrow OH + O$	2.000E+14	0.00	70.3
1b	$OH + O \rightarrow O_2 + H$	1.568E+13	0.00	3.52
2f	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	5.060E+04	2.67	26.3
2b	$OH + H \rightarrow H_2 + O$	2.222E+04	2.67	18.3
3f	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	1.000E+08	1.60	13.8
3b	$H_2O + H \rightarrow H_2 + OH$	4.312E+08	1.60	76.5
4f	$2OH \rightarrow H_2O + O$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$H_2O + O \rightarrow 2OH$	1.473E+10	1.14	71.1
5f	$O_2 + H + M' \rightarrow HO_2 + M'$	2.300E+18	-0.80	0
5b	$HO_2 + M' \rightarrow O_2 + H + M'$	3.190E+18	-0.80	195
6	$HO_2 + H \rightarrow 2OH$	1.500E+14	0.00	4.2
7	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	2.500E+13	0.00	2.9
8	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	6.000E+13	0.00	0
9	$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	3.000E+13	0.00	7.2
10	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	1.800E+13	0.00	-1.7
11	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	2.500E+11	0.00	-5.2
12f	$2OH + M' \rightarrow H_2O_2 + M'$	3.250E+22	-2.00	0
12b	$H_2O_2 + M' \rightarrow 2OH + M'$	1.692E+24	-2.00	202
13	$H_2O_2 + H \rightarrow H_2O + OH$	1.000E+13	0.00	15
14f	$H_2O_2 + OH \rightarrow H_2O + HO_2$	5.400E+12	0.00	4.2
14b	$H_2O + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + OH$	1.802E+13	0.00	135
15	$2H + M' \rightarrow H_2 + M'$	1.800E+18	-1.00	0
16	$OH + H + M' \rightarrow H_2O + M'$	2.200E+22	-2.00	0
17	$2O + M' \rightarrow O_2 + M'$	2.900E+17	-1.00	0
18f	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	4.400E+06	1.50	-3.1
18b	$CO_2 + H \rightarrow CO + OH$	4.956E+08	1.50	89.8
19	$CH + O_2 \rightarrow CHO + O$	3.000E+13	0.00	0
20	$CO_2 + CH \rightarrow CHO + CO$	3.400E+12	0.00	2.9
21	$CHO + H \rightarrow CO + H_2$	2.000E+14	0.00	0
22	$CHO + OH \rightarrow CO + H_2O$	1.000E+14	0.00	0
23	$CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$	3.000E+12	0.00	0
24f	$CHO + M' \rightarrow CO + H + M'$	7.100E+14	0.00	70.3
24b	$CO + H + M' \rightarrow CHO + M'$	1.136E+15	0.00	9.97

Number	Reaction	A	n	E	
25f	$\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	8.400E+09	1.50	1.4	
25b	$\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	5.830E+09	1.50	13.1	
26	$\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + 2\text{H}$	8.000E+13	0.00	0	
27	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	6.500E+12	0.00	6.3	
28	$\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}$	6.500E+12	0.00	6.3	
29	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	2.500E+13	0.00	16.7	
30	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$	3.500E+13	0.00	14.6	
31	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	3.000E+13	0.00	5	
32	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{M}'$	1.400E+17	0.00	320	
33f	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$	1.800E+14	0.00	63	
33b	$\text{CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	3.680E+13	0.00	44.3	
34	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	k_0	6.257E+23	-1.80	0
		k_∞	2.108E+14	0.00	0
35	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	7.000E+13	0.00	0	
36	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	k_0	1.270E+41	-7.00	11.6
		k_∞	3.613E+13	0.00	0
37	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	3.400E+11	0.00	37.4	
38f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	2.200E+04	3.00	36.6	
38b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	8.391E+02	3.00	34.6	
39	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	1.200E+07	2.10	31.9	
40f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.600E+06	2.10	10.3	
40b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{OH}$	2.631E+05	2.10	70.9	
41f	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	1.100E+13	0.00	12	
41b	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	5.270E+13	0.00	120	
42	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHCO} + \text{O}$	5.000E+13	0.00	6.3	
43f	$\text{CHCO} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	3.000E+13	0.00	0	
43b	$\text{CH}_2 + \text{CO} \rightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	2.361E+12	0.00	-29.4	
44	$\text{CHCO} + \text{O} \rightarrow 2\text{CO} + \text{H}$	1.000E+14	0.00	0	
45	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	4.100E+08	1.50	7.1	
46	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CHCO} + \text{H}$	4.300E+14	0.00	50.7	
47f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+13	0.00	29.3	
47b	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH}$	9.000E+12	0.00	-16	
48	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_3$	3.000E+13	0.00	0	
49	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	3.000E+13	0.00	0	
50	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HO}_2$	5.400E+11	0.00	0	

Number	Reaction	A	n	E	
51f	$C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H$	k_0	1.187E+42	-7.50	190
		k_∞	2.000E+14	0.00	166
51b	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H_3$	k_0	6.245E+41	-7.50	27.5
		k_∞	1.053E+14	0.00	3.39
52f	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	1.500E+14	0.00	42.7	
52b	$C_2H_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4 + H$	9.605E+12	0.00	32.6	
53	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + CO + H$	1.600E+09	1.20	3.1	
54f	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	3.000E+13	0.00	12.6	
54b	$C_2H_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4 + OH$	8.283E+12	0.00	65.2	
55	$C_2H_4 + M' \rightarrow C_2H_2 + H_2 + M'$	2.500E+17	0.00	320	
56f	$C_2H_5 + H \rightarrow 2CH_3$	3.000E+13	0.00	0	
56b	$2CH_3 \rightarrow C_2H_5 + H$	3.457E+12	0.00	49.7	
57	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$	2.000E+12	0.00	20.9	
58f	$C_2H_5 \rightarrow C_2H_4 + H$	k_0	1.000E+16	0.00	126
		k_∞	1.300E+13	0.00	167
58b	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_5$	k_0	1.595E+16	0.00	-27.4
		k_∞	2.073E+13	0.00	13.6
59	$C_2H_6 + H \rightarrow C_2H_5 + H_2$	5.400E+02	3.50	21.8	
60	$C_2H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + OH$	3.000E+07	2.00	21.4	
61	$C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$	6.300E+06	2.00	2.7	
62	$C_3H_3 + O_2 \rightarrow CHCO + CH_2O$	6.000E+12	0.00	0	
63	$C_3H_3 + O \rightarrow C_2H_3 + CO$	3.800E+13	0.00	0	
64f	$C_3H_4 \rightarrow C_3H_3 + H$	5.000E+14	0.00	370	
64b	$C_3H_3 + H \rightarrow C_3H_4$	1.700E+13	0.00	19.9	
65	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_2 + CH_2O$	1.000E+12	0.00	0	
66	$C_3H_4 + O \rightarrow C_2H_3 + CHO$	1.000E+12	0.00	0	
67	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + CH_2O$	1.000E+12	0.00	0	
68	$C_3H_4 + OH \rightarrow C_2H_4 + CHO$	1.000E+12	0.00	0	
69f	$C_3H_5 \rightarrow C_3H_4 + H$	3.980E+13	0.00	293	
69b	$C_3H_4 + H \rightarrow C_3H_5$	1.267E+13	0.00	32.5	
70	$C_3H_5 + H \rightarrow C_3H_4 + H_2$	1.000E+13	0.00	0	
71f	$C_3H_6 \rightarrow C_2H_3 + CH_3$	3.150E+15	0.00	359	
71b	$C_2H_3 + CH_3 \rightarrow C_3H_6$	2.511E+12	0.00	-34.7	
72	$C_3H_6 + H \rightarrow C_3H_5 + H_2$	5.000E+12	0.00	6.3	
73	$N-C_3H_7 \rightarrow C_2H_4 + CH_3$	9.600E+13	0.00	130	
74f	$N-C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + H$	1.250E+14	0.00	155	
74b	$C_3H_6 + H \rightarrow N-C_3H_7$	4.609E+14	0.00	21.5	

Number	Reaction	A	n	E
75	$\text{I-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3$	6.300E+13	0.00	154
76	$\text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HO}_2$	1.000E+12	0.00	20.9
77	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	1.300E+14	0.00	40.6
78	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	1.000E+14	0.00	34.9
79	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$	3.000E+13	0.00	24.1
80	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$	2.600E+13	0.00	18.7
81	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	3.700E+12	0.00	6.9
82	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	2.800E+12	0.00	3.6
83	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	3.000E+13	0.00	0
84	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.000E+13	0.00	30.1
85	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+13	0.00	105
86	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH} + \text{M}'$	3.160E+18	0.00	336
87	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2$	4.000E+13	0.00	25.5
88	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	19.6
89	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+13	0.00	7.1
90f	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	6.200E+12	0.00	81.1
90b	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{HO}_2$	1.000E+07	1.70	47.9

Mechanismus: *n*-Heptan

Number	Reaction	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
01. H2-O2 React. (no HO2, H2O2)				
1f	$\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2.000E+14	0.00	70.3
1b	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	1.157E+13	0.00	0.622
2f	$\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	5.060E+04	2.67	26.3
2b	$\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	2.275E+04	2.67	18.5
3f	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.000E+08	1.60	13.8
3b	$\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$	4.652E+08	1.60	77.3
4f	$2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}$	1.552E+10	1.14	71.7
02. Recombination Reactions				
5f	$2\text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}'$	1.800E+18	-1.00	0
5b	$\text{H}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{H} + \text{M}'$	5.862E+18	-1.00	435
6f	$2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}'$	2.900E+17	-1.00	0
6b	$\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{O} + \text{M}'$	7.341E+18	-1.00	497
7f	$\text{H} + \text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}'$	2.200E+22	-2.00	0
7b	$\text{H}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{M}'$	3.333E+23	-2.00	498
03. HO2 Formation/Consumption				
8f	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}'$	2.300E+18	-0.80	0
8b	$\text{HO}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{H} + \text{M}'$	3.287E+18	-0.80	196
9	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2\text{OH}$	1.500E+14	0.00	4.2
10	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.500E+13	0.00	2.9
11	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	3.000E+13	0.00	7.2
12	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	1.800E+13	0.00	-1.7
13f	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	6.000E+13	0.00	0
13b	$\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	6.361E+14	0.00	303
04. H2O2 Formation/Consumption				
14	$2\text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.500E+11	0.00	-5.2
15f	$2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}'$	3.250E+22	-2.00	0
15b	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}'$	4.145E+24	-2.00	211
17	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	15
18f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	2.803E+13	0.00	26.8
18b	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}_2$	5.429E+12	0.00	81.4
19f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	5.400E+12	0.00	4.2
19b	$\text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.082E+13	0.00	130
05. CO REACTIONS				
20f	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	6.000E+06	1.50	-3.1
20b	$\text{H} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{CO}$	1.739E+09	1.50	98.7
21	$\text{CO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$	1.500E+14	0.00	98.7

Number	Reaction	A	n	E	
22	$\text{CO} + \text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CO}_2 + \text{M}'$	7.100E+13	0.00	-19	
10. CH Reactions					
24	$\text{CH} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	4.000E+13	0.00	0	
25	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$	6.000E+13	0.00	0	
26	$\text{CH} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{CO}$	3.400E+12	0.00	2.9	
27f	$\text{CH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH}$	5.700E+12	0.00	-3.2	
27b	$\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}$	4.449E+14	0.00	363	
11. CHO REACTIONS					
28f	$\text{CHO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$	7.100E+14	0.00	70.3	
28b	$\text{H} + \text{CO} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{M}'$	9.294E+14	0.00	8.03	
29	$\text{CHO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	9.000E+13	0.00	0	
32	$\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+14	0.00	0	
33	$\text{CHO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$	3.000E+12	0.00	0	
12. CH2 Reactions					
35f	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	6.000E+12	0.00	-7.5	
35b	$\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{H} + \text{}_3\text{-CH}_2$	3.763E+12	0.00	3.16	
38	$\text{}_2\text{-CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{H}$	1.100E+14	0.00	3.4	
39	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	4.200E+13	0.00	0	
40	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	1.300E+13	0.00	6.2	
41	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	1.200E+13	0.00	6.2	
42f	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{M}'$	1.200E+13	0.00	0	
42b	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{}_1\text{-CH}_2 + \text{M}'$	4.892E+12	0.00	37.5	
43	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	3.100E+13	0.00	0	
44f	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	7.200E+13	0.00	0	
44b	$\text{H} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2 + \text{}_1\text{-CH}_2$	2.246E+14	0.00	60.5	
13. CH2O Reactions					
45	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+16	0.00	320	
46	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	2.300E+10	1.05	13.7	
47	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$	4.150E+11	0.57	11.6	
48	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	3.400E+09	1.20	-1.9	
49	$\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.000E+12	0.00	54.7	
14. CH3 Reactions					
53	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	8.430E+13	0.00	0	
34f	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	k_0	6.257E+23	-1.80	0
		k_∞	2.108E+14	0.00	0
34b	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_3$	k_0	6.561E+25	-1.80	439
		k_∞	2.211E+16	0.00	439
55	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$	2.260E+14	0.00	64.8	
57	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	3.300E+11	0.00	37.4	
145	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{OH}$	1.800E+13	0.00	0	

Number	Reaction	A	n	E	
59	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{O}_2$	3.600E+12	0.00	0	
36f	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	k_0	1.272E+41	-7.00	11.6
		k_∞	1.813E+13	0.00	0
36b	$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow 2\text{CH}_3$	k_0	5.014E+44	-7.00	385
		k_∞	7.146E+16	0.00	373
15a. CH3O Reactions					
62	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+13	0.00	105	
63	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	1.800E+13	0.00	0	
64	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	4.000E+10	0.00	8.9	
67	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{CH}_3$	1.100E+13	0.00	0	
15b. CH2OH Reactions					
69	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+13	0.00	105	
70	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	3.000E+13	0.00	0	
71	$\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.000E+13	0.00	30	
17. CH4 Reactions					
84f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$	1.300E+04	3.00	33.6	
84b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_4$	4.038E+02	3.00	29.3	
85	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$	6.923E+08	1.56	35.5	
86f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$	1.600E+07	1.83	11.6	
86b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_4$	2.312E+06	1.83	70.8	
18. CH3OH Reactions					
90f	$\text{OH} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	k_0	1.596E+44	-8.20	0
		k_∞	6.022E+13	0.00	0
90b	$\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	k_0	6.633E+46	-8.20	385
		k_∞	2.503E+16	0.00	385
91	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2$	4.000E+13	0.00	25.5	
92	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	19.6	
93	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+13	0.00	7.1	
96	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CH}_2\text{OH}$	9.000E+12	0.00	41.1	
97	$+ \text{M} \rightarrow + \text{M}$	2.000E+11	0.00	29.3	
20. C2H REACTIONS					
103	$\text{C}_2\text{H} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{CH}$	1.000E+13	0.00	0	
104	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCCO} + \text{O}$	3.000E+12	0.00	0	
20A. HCCO REACTIONS					
105f	$\text{HCCO} + \text{H} \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CO}$	1.500E+14	0.00	0	
105b	$\text{CO} + \text{}_3\text{-CH}_2 \rightarrow \text{H} + \text{HCCO}$	3.483E+13	0.00	124	
106	$\text{HCCO} + \text{O} \rightarrow 2\text{CO} + \text{H}$	9.600E+13	0.00	0	
21. C2H2 REACTIONS					
109	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCCO} + \text{OH}$	2.000E+08	1.50	126	
110f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	1.500E+14	0.00	79.6	
110b	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_2$	1.563E+13	0.00	-34.9	
111	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CO}$	1.720E+04	2.80	2.1	
112	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{HCCO} + \text{H}$	1.720E+04	2.80	2.1	
113f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}$	6.000E+13	0.00	54.2	

Number	Reaction	A	n	E	
113b	$C_2H + H_2O \rightarrow OH + C_2H_2$	2.908E+13	0.00	3.16	
25. C2H3 REACTIONS					
51f	$C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H$	k_0	1.187E+42	-7.50	190
		k_∞	2.000E+14	0.00	166
51b	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H_3$	k_0	6.245E+41	-7.50	27.5
		k_∞	1.053E+14	0.00	3.39
120	$C_2H_3 + OH \rightarrow C_2H_2 + H_2O$	5.000E+13	0.00	0	
121	$C_2H_3 + H \rightarrow C_2H_2 + H_2$	1.200E+13	0.00	0	
125	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$	1.210E+11	0.00	0	
a125	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + CHO$	5.420E+12	0.00	0	
23. C2H4 REACTIONS					
129f	$C_2H_4 + M' \rightarrow C_2H_2 + H_2 + M'$	2.500E+17	0.00	320	
129b	$H_2 + C_2H_2 + M' \rightarrow C_2H_4 + M'$	6.928E+15	0.00	145	
131f	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	1.700E+15	0.00	62.9	
131b	$H_2 + C_2H_3 \rightarrow H + C_2H_4$	6.285E+13	0.00	47.5	
133	$C_2H_4 + O \rightarrow CHO + CH_3$	1.210E+06	2.08	0	
134f	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	6.500E+13	0.00	24.9	
134b	$H_2O + C_2H_3 \rightarrow OH + C_2H_4$	1.118E+13	0.00	73	
24. C2H5 REACTIONS					
58f	$C_2H_5 \rightarrow C_2H_4 + H$	k_0	1.000E+16	0.00	126
		k_∞	1.300E+13	0.00	167
58b	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_5$	k_0	1.595E+16	0.00	-27.4
		k_∞	2.073E+13	0.00	13.6
146	$C_2H_5 + H \rightarrow 2CH_3$	3.000E+13	0.00	0	
149	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$	1.100E+10	0.00	-6.3	
150	$C_2H_5 + CH_3 \rightarrow C_2H_4 + CH_4$	1.140E+12	0.00	0	
25. C2H6 REACTIONS					
164f	$C_2H_6 + H \rightarrow C_2H_5 + H_2$	1.400E+09	1.50	31.1	
164b	$H_2 + C_2H_5 \rightarrow H + C_2H_6$	1.812E+07	1.50	49	
165	$C_2H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + OH$	1.000E+09	1.50	24.4	
166	$C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$	7.200E+06	2.00	3.6	
168f	$C_2H_6 + O_2 \rightarrow C_2H_5 + HO_2$	6.000E+13	0.00	217	
168b	$HO_2 + C_2H_5 \rightarrow O_2 + C_2H_6$	3.407E+11	0.00	-4.16	
170f	$C_2H_6 + CH_3 \rightarrow C_2H_5 + CH_4$	1.500E-07	6.00	25.4	
170b	$CH_4 + C_2H_5 \rightarrow CH_3 + C_2H_6$	6.250E-08	6.00	47.6	
32. C3H4 Reactions					
187	$C_3H_4 + O \rightarrow CH_2O + C_2H_2$	1.000E+12	0.00	0	
188	$C_3H_4 + O \rightarrow CHO + C_2H_3$	1.000E+12	0.00	0	
189	$C_3H_4 + OH \rightarrow CH_2O + C_2H_3$	1.000E+12	0.00	0	
190	$C_3H_4 + OH \rightarrow CHO + C_2H_4$	1.000E+12	0.00	0	
33. C3H5 Reactions					
191f	$C_3H_5 \rightarrow C_3H_4 + H$	3.980E+13	0.00	293	
191b	$H + C_3H_4 \rightarrow C_3H_5$	6.394E+12	0.00	25.9	

Number	Reaction	A	n	E
192	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.000E+13	0.00	0
193	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{HO}_2$	6.000E+11	0.00	41.9
34. C3H6 Reactions				
195f	$\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3$	3.150E+15	0.00	359
195b	$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6$	6.426E+11	0.00	-47.9
196f	$\text{H} + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$	5.000E+12	0.00	6.3
196b	$\text{H}_2 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}$	4.818E+11	0.00	109
197	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_2\text{O}$	5.900E+13	0.00	21
198	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CHO}$	3.600E+12	0.00	0
200	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{O}$	7.900E+12	0.00	0
202	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	4.000E+12	0.00	0
203	$\text{CH}_3 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_3\text{H}_5$	8.960E+12	0.00	35.6
35a. n-C3H7 Reactions				
205f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	9.600E+13	0.00	130
205b	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7$	5.125E+11	0.00	32.2
206f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$	1.250E+14	0.00	155
206b	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7$	3.713E+13	0.00	14
207	$\text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{HO}_2$	1.000E+12	0.00	20.9
40. C4H6 Reactions				
234	$\text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow 2\text{C}_2\text{H}_3$	4.030E+19	-1.00	411
235f	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}$	1.000E+11	0.00	30.5
235b	$\text{H} + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_3$	8.397E+12	0.00	-0.244
239	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_3\text{H}_5$	2.000E+12	0.00	0
41. C4H7 Reactions				
241f	$\text{C}_4\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}$	1.200E+14	0.00	206
241b	$\text{H} + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7$	1.343E+14	0.00	30.3
242	$\text{C}_4\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_3$	1.000E+11	0.00	155
257	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{H} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8$	4.397E+17	-1.00	4.52
244	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{HO}_2$	1.000E+11	0.00	0
246	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{CH}_4$	1.000E+13	0.00	0
252f	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6$	4.000E+13	0.00	0
252b	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_4\text{H}_7$	1.513E+15	0.00	156
42. 1-C4H8 Reactions				
255f	$\text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3$	8.000E+16	0.00	307
255b	$\text{CH}_3 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8$	2.070E+14	0.00	30.2
258	$\text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2$	5.000E+13	0.00	16.3
265	$\text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{CH}_2\text{O}$	6.500E+12	0.00	0
279	$\text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	2.265E+14	0.00	12.8

Number	Reaction	A	n	E
43. P-C4H9 REACTIONS				
292	$\text{P-C}_4\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$	2.500E+13	0.00	121
294	$\text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{O}_2 \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{HO}_2$	1.000E+12	0.00	8.4
50. 1-C5H9 Reactions				
a327	$\text{C}_5\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$	2.500E+13	0.00	126
a328	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9$	1.500E+10	0.00	31
a329	$\text{C}_5\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_3\text{H}_6$	2.500E+13	0.00	126
51. 1-C5H10 Reactions				
a331f	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_5$	1.000E+16	0.00	299
a331b	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10}$	8.947E+12	0.00	33.4
333	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{H} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{H}_2$	2.800E+13	0.00	16.8
335	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{O} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{OH}$	2.540E+05	2.60	-4.7
341	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{H}_2\text{O}$	6.800E+13	0.00	12.8
347	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{CH}_4$	1.000E+11	0.00	30.6
52. 1-C5H11 Reactions				
349	$\text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{11} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{N-C}_3\text{H}_7$	3.200E+13	0.00	119
352	$\text{H} + \text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{11}$	7.900E+12	0.00	12.1
61. 1-C6H12 Reactions				
355	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_5$	2.500E+16	0.00	298
356	$\text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12}$	1.000E+13	0.00	0
359	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	2.800E+07	2.00	32.2
361	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	8.000E+06	2.00	20.9
363	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{H} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	8.000E+06	2.00	20.9
369	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{O} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH}$	5.000E+13	0.00	32.9
371	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{O} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH}$	2.800E+13	0.00	21.8
373	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{O} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{C}_2\text{H}_3 + \text{OH}$	2.800E+13	0.00	21.8
379	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}$	4.300E+09	1.10	7.6
381	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2\text{O}$	1.300E+09	1.30	2.9
383	$\text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{OH} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.300E+09	1.30	2.9
71. 1-C7H14 Reactions				
395	$\text{}_1\text{-C}_7\text{H}_{14} \rightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_5$	2.500E+16	0.00	298
396	$\text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{}_1\text{-C}_7\text{H}_{14}$	1.000E+13	0.00	0
16. C7H15 REACTIONS				
441	$\text{}_1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{11} + \text{C}_2\text{H}_4$	2.500E+13	0.00	121
443	$\text{}_2\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_7\text{H}_{14} + \text{H}$	2.000E+13	0.00	169
445	$\text{}_2\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_6$	1.600E+13	0.00	118
447	$\text{}_3\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_6\text{H}_{12} + \text{CH}_3$	8.000E+13	0.00	138
449	$\text{}_3\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{N-C}_3\text{H}_7$	5.000E+12	0.00	122
451	$\text{}_4\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{}_1\text{-C}_5\text{H}_{10}$	1.000E+13	0.00	117
453	$\text{}_4\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow \text{}_1\text{-C}_7\text{H}_{14} + \text{H}$	1.000E+13	0.00	159

Number	Reaction	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
471	1-C ₇ H ₁₅ → 3-C ₇ H ₁₅	2.000E+11	0.00	46.5
472	3-C ₇ H ₁₅ → 1-C ₇ H ₁₅	3.000E+11	0.00	59
473	1-C ₇ H ₁₅ → 4-C ₇ H ₁₅	2.000E+11	0.00	75.8
474	4-C ₇ H ₁₅ → 1-C ₇ H ₁₅	6.000E+11	0.00	88.4
475	2-C ₇ H ₁₅ → 3-C ₇ H ₁₅	2.000E+11	0.00	75.8
476	3-C ₇ H ₁₅ → 2-C ₇ H ₁₅	2.000E+11	0.00	75.8
477	1-C ₇ H ₁₅ → 2-C ₇ H ₁₅	2.000E+11	0.00	75.8
478	2-C ₇ H ₁₅ → 1-C ₇ H ₁₅	3.000E+11	0.00	88.4
455	1-C ₇ H ₁₅ + O ₂ → 1-C ₇ H ₁₄ + HO ₂	1.000E+10	0.00	8.4
457	2-C ₇ H ₁₅ + O ₂ → 1-C ₇ H ₁₄ + HO ₂	1.000E+10	0.00	8.4
459	3-C ₇ H ₁₅ + O ₂ → 1-C ₇ H ₁₄ + HO ₂	1.000E+10	0.00	8.4
461	4-C ₇ H ₁₅ + O ₂ → 1-C ₇ H ₁₄ + HO ₂	1.000E+10	0.00	8.4
78. N-C ₇ H ₁₆ REACTIONS				
659	N-C ₇ H ₁₆ → P-C ₄ H ₉ + N-C ₃ H ₇	3.160E+16	0.00	339
669	N-C ₇ H ₁₆ + H → 1-C ₇ H ₁₅ + H ₂	5.600E+07	2.00	32.2
671	N-C ₇ H ₁₆ + H → 2-C ₇ H ₁₅ + H ₂	1.750E+07	2.00	20.9
673	N-C ₇ H ₁₆ + H → 3-C ₇ H ₁₅ + H ₂	1.750E+07	2.00	20.9
675	N-C ₇ H ₁₆ + H → 4-C ₇ H ₁₅ + H ₂	8.780E+06	2.00	20.9
677	N-C ₇ H ₁₆ + O → 1-C ₇ H ₁₅ + OH	1.000E+14	0.00	32.9
679	N-C ₇ H ₁₆ + O → 2-C ₇ H ₁₅ + OH	5.600E+13	0.00	21.8
681	N-C ₇ H ₁₆ + O → 3-C ₇ H ₁₅ + OH	5.600E+13	0.00	21.8
683	N-C ₇ H ₁₆ + O → 4-C ₇ H ₁₅ + OH	2.800E+13	0.00	21.8
685	N-C ₇ H ₁₆ + OH → 1-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O	8.610E+09	1.10	7.6
687	N-C ₇ H ₁₆ + OH → 2-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O	2.600E+09	1.30	2.9
689	N-C ₇ H ₁₆ + OH → 3-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O	2.600E+09	1.30	2.9
691	N-C ₇ H ₁₆ + OH → 4-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O	1.300E+09	1.30	2.9
693	N-C ₇ H ₁₆ + HO ₂ → 1-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O ₂	1.120E+13	0.00	81.2
695	N-C ₇ H ₁₆ + HO ₂ → 2-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O ₂	6.700E+12	0.00	71.2
697	N-C ₇ H ₁₆ + HO ₂ → 3-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O ₂	6.700E+12	0.00	71.2
699	N-C ₇ H ₁₆ + HO ₂ → 4-C ₇ H ₁₅ + H ₂ O ₂	3.350E+12	0.00	71.2
701	N-C ₇ H ₁₆ + CH ₃ → 1-C ₇ H ₁₅ + CH ₄	1.300E+12	0.00	48.6
703	N-C ₇ H ₁₆ + CH ₃ → 2-C ₇ H ₁₅ + CH ₄	8.000E+11	0.00	39.8
705	N-C ₇ H ₁₆ + CH ₃ → 3-C ₇ H ₁₅ + CH ₄	8.000E+11	0.00	39.8
707	N-C ₇ H ₁₆ + CH ₃ → 4-C ₇ H ₁₅ + CH ₄	4.000E+11	0.00	39.8

Number	Reaction	A	n	E
709	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow \text{1-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$	2.500E+13	0.00	205
711	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow \text{2-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$	4.000E+13	0.00	199
713	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow \text{3-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$	4.000E+13	0.00	199
715	$\text{N-C}_7\text{H}_{16} + \text{O}_2 \rightarrow \text{4-C}_7\text{H}_{15} + \text{HO}_2$	2.000E+13	0.00	199
8. Low Temperature branch				
121f	$\text{1-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
121b	$\text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{1-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$	3.000E+14	0.00	117
122f	$\text{2-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
122b	$\text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{2-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$	6.600E+14	0.00	117
123f	$\text{3-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
123b	$\text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{3-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$	6.900E+14	0.00	117
124f	$\text{4-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2 \rightarrow \text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
124b	$\text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{4-C}_7\text{H}_{15} + \text{O}_2$	3.500E+14	0.00	117
125f	$\text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{1HEOOH-2-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	2.000E+11	0.00	71.2
125b	$\text{1HEOOH-2-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 \rightarrow \text{1C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2$	1.000E+11	0.00	52.3
129	$\text{1HEOOH-2-C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{OOC}_7\text{OOH-O}_2\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}$	5.000E+11	0.00	0
133	$\text{OOC}_7\text{OOH-O}_2\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH} \rightarrow \text{HOOC}_7\text{OOH-HOOC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$	2.000E+11	0.00	71.2
134	$\text{HOOC}_7\text{OOH-HOOC}_7\text{H}_{13}\text{OOH} \rightarrow \text{OC}_7\text{OOH-OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH} + \text{OH}$	1.000E+09	0.00	31.4
135	$\text{OC}_7\text{OOH-OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH} \rightarrow \text{OC}_7\text{H}_{13}\text{O} + \text{OH}$	8.400E+14	0.00	180
136	$\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{1-C}_5\text{H}_{11} + \text{CO}$	2.000E+13	0.00	62.8

Mechanismus: *i*-Oktan

Number	Reaction	A	n	E
1f	$\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2.000E+14	0.00	70.3
1b	$\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	1.157E+13	0.00	0.622
2f	$\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	5.060E+04	2.67	26.3
2b	$\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	2.275E+04	2.67	18.5
3f	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.000E+08	1.60	13.8
3b	$\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$	4.652E+08	1.60	77.3
4f	$2\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.500E+09	1.14	0.42
4b	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}$	1.552E+10	1.14	71.7
5f	$2\text{H} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}'$	1.800E+18	-1.00	0
5b	$\text{H}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{H} + \text{M}'$	5.862E+18	-1.00	435
6f	$2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{M}'$	2.900E+17	-1.00	0
6b	$\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{O} + \text{M}'$	7.341E+18	-1.00	497
7f	$\text{H} + \text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}'$	2.200E+22	-2.00	0
7b	$\text{H}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{M}'$	3.333E+23	-2.00	498
8f	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}'$	2.300E+18	-0.80	0
8b	$\text{HO}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{O}_2 + \text{H} + \text{M}'$	3.287E+18	-0.80	196
9f	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow 2\text{OH}$	1.500E+14	0.00	4.2
9b	$2\text{OH} \rightarrow \text{H} + \text{HO}_2$	8.891E+12	0.00	166
10f	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.500E+13	0.00	2.9
10b	$\text{O}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{HO}_2$	5.698E+13	0.00	242
11f	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	3.000E+13	0.00	7.2
11b	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H} + \text{HO}_2$	1.840E+13	0.00	240
12f	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{O}_2$	1.800E+13	0.00	-1.7
12b	$\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{HO}_2$	1.844E+13	0.00	230
13f	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	6.000E+13	0.00	0
13b	$\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	6.361E+14	0.00	303
14	$2\text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.500E+11	0.00	-5.2
15f	$2\text{OH} + \text{M}' \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}'$	3.250E+22	-2.00	0
15b	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}'$	4.145E+24	-2.00	211
17	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	15
18f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	2.803E+13	0.00	26.8
18b	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}_2$	5.429E+12	0.00	81.4
19f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	5.400E+12	0.00	4.2

Number	Reaction	A	n	E
19b	$\text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.082E+13	0.00	130
20f	$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	6.000E+06	1.50	-3.1
20b	$\text{H} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{CO}$	1.739E+09	1.50	98.7
21	$\text{CO} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{OH}$	1.500E+14	0.00	98.7
25	$\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$	6.000E+13	0.00	0
26	$\text{CH} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{CO}$	3.400E+12	0.00	2.9
27	$\text{CH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{OH}$	5.700E+12	0.00	-3.2
28f	$\text{CHO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$	1.566E+14	0.00	65.9
28b	$\text{H} + \text{CO} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{M}'$	2.050E+14	0.00	3.66
29	$\text{CHO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	1.800E+14	0.00	0
32	$\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+14	0.00	0
35f	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	6.000E+12	0.00	-7.5
35b	$\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{H} + \text{}_3\text{-CH}_2$	3.763E+12	0.00	3.16
38	$\text{}_2\text{}_3\text{-CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{H}$	1.100E+14	0.00	3.4
39	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	4.200E+13	0.00	0
40	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	1.300E+13	0.00	6.2
41	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	1.200E+13	0.00	6.2
42f	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{M}'$	1.200E+13	0.00	0
42b	$\text{}_3\text{-CH}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{}_1\text{-CH}_2 + \text{M}'$	4.892E+12	0.00	37.5
43	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	3.100E+13	0.00	0
44f	$\text{}_1\text{-CH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	7.200E+13	0.00	0
44b	$\text{H} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2 + \text{}_1\text{-CH}_2$	2.246E+14	0.00	60.5
45	$\text{CH}_2\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+16	0.00	320
46	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	2.300E+10	1.05	13.7
47	$\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$	4.150E+11	0.57	11.6
48	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	3.400E+09	1.20	-1.9
49	$\text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.000E+12	0.00	54.7
53	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	5.319E+13	0.00	0
34f	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_4$	k_0 1.251E+24	-1.80	0
		k_∞ 2.108E+14	0.00	0
34b	$\text{CH}_4 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_3$	k_0 1.312E+26	-1.80	439
		k_∞ 2.211E+16	0.00	439
55	$\text{CH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}$	2.260E+14	0.00	64.8
56	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	4.750E+16	-0.13	88
57	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	3.300E+11	0.00	37.4

Number	Reaction	A	n	E	
145	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$	9.000E+13	0.00	0	
59	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{O}_2$	3.600E+12	0.00	0	
36f	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	k_0	1.272E+41	-7.00	11.6
		k_∞	1.813E+13	0.00	0
36b	$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow 2\text{CH}_3$	k_0	5.014E+44	-7.00	385
		k_∞	7.146E+16	0.00	373
62	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+13	0.00	105	
63	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	1.800E+13	0.00	0	
64	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	4.000E+10	0.00	8.9	
69	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}'$	5.000E+13	0.00	105	
70	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	3.000E+13	0.00	0	
71	$\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.000E+13	0.00	30	
72	$\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_3 + \text{O}_2 + \text{M}'$	7.240E+16	0.00	111	
73	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{M}'$	1.410E+16	0.00	-4.6	
84f	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$	1.300E+04	3.00	33.6	
84b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{CH}_4$	4.038E+02	3.00	29.3	
85	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$	6.923E+08	1.56	35.5	
86f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$	1.600E+07	1.83	11.6	
86b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_4$	2.312E+06	1.83	70.8	
90f	$\text{OH} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$	k_0	1.596E+44	-8.20	0
		k_∞	6.022E+13	0.00	0
90b	$\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$	k_0	6.633E+46	-8.20	385
		k_∞	2.503E+16	0.00	385
91	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$	4.000E+13	0.00	25.5	
92	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$	1.000E+13	0.00	19.6	
93	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	1.000E+13	0.00	7.1	
96	$\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{CH}_3\text{O}$	9.000E+12	0.00	41.1	
100	$2\text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$	3.000E+13	0.00	0	
105f	$\text{HCCO} + \text{H} \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CO}$	1.500E+14	0.00	0	
105b	$\text{CO} + \text{}_3\text{-CH}_2 \rightarrow \text{H} + \text{HCCO}$	3.483E+13	0.00	124	
106	$\text{HCCO} + \text{O} \rightarrow 2\text{CO} + \text{H}$	9.600E+13	0.00	0	
109	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCCO} + \text{OH}$	2.000E+08	1.50	126	
110f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	1.500E+14	0.00	79.6	
110b	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H} \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_2$	1.563E+13	0.00	-34.9	
111	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{}_3\text{-CH}_2 + \text{CO}$	1.720E+04	2.80	2.1	
112	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{HCCO} + \text{H}$	1.720E+04	2.80	2.1	
113f	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}$	6.000E+13	0.00	54.2	

Number	Reaction	A	n	E
113b	$\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_2$	2.908E+13	0.00	3.16
51f	$\text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$	k_0	1.187E+42	-7.50
		k_∞	2.000E+14	0.00
51b	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3$	k_0	6.245E+41	-7.50
		k_∞	1.053E+14	0.00
120	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$	5.000E+13	0.00	0
125	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HO}_2$	1.210E+11	0.00	0
a125	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{CHO}$	5.420E+12	0.00	0
129	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{M}'$	2.500E+17	0.00	320
131f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	1.700E+15	0.00	62.9
131b	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_4$	6.285E+13	0.00	47.5
133	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{CH}_3$	1.210E+06	2.08	0
134f	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	6.500E+13	0.00	24.9
134b	$\text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_4$	1.118E+13	0.00	73
58f	$\text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	k_0	1.000E+16	0.00
		k_∞	1.300E+13	0.00
58b	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5$	k_0	1.595E+16	0.00
		k_∞	2.073E+13	0.00
146f	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow 2\text{CH}_3$	3.000E+13	0.00	0
146b	$2\text{CH}_3 \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_5$	1.916E+12	0.00	43.6
149	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$	1.100E+10	0.00	-6.3
164f	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	1.400E+09	1.50	31.1
164b	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{H} + \text{C}_2\text{H}_6$	1.812E+07	1.50	49
165	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{OH}$	1.000E+09	1.50	24.4
166	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	7.200E+06	2.00	3.6
170	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_4$	1.500E-07	6.00	25.4
187	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_2$	1.000E+12	0.00	0
188	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{C}_2\text{H}_3$	1.000E+12	0.00	0
189	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_3$	1.000E+12	0.00	0
190	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{C}_2\text{H}_4$	1.000E+12	0.00	0
191f	$\text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}$	3.000E+11	0.84	250
191b	$\text{H} + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5$	4.820E+10	0.84	-17.2
a192f	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}$	6.000E+12	0.00	0
a192b	$\text{H}_2\text{O} + \text{C}_3\text{H}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{C}_3\text{H}_5$	1.460E+13	0.00	231
192	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.000E+13	0.00	0
193	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{HO}_2$	6.000E+11	0.00	41.9
195	$\text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3$	3.150E+15	0.00	359

Number	Reaction	A	n	E
196	$\text{H} + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$	5.000E+12	0.00	6.3
197	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_2\text{O}$	5.900E+13	0.00	21
198	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CHO}$	3.600E+12	0.00	0
200	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{O}$	7.900E+12	0.00	0
202	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	4.000E+12	0.00	0
203	$\text{CH}_3 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_3\text{H}_5$	8.960E+12	0.00	35.6
205f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	9.600E+13	0.00	130
205b	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7$	5.125E+11	0.00	32.2
206f	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$	1.250E+14	0.00	155
206b	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7$	3.713E+13	0.00	14
208f	$\text{I-C}_3\text{H}_7 \rightarrow \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$	6.300E+13	0.00	154
208b	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{I-C}_3\text{H}_7$	2.499E+12	0.00	-4.74
234	$\text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow 2\text{C}_2\text{H}_3$	4.030E+19	-1.00	411
235f	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}$	1.000E+11	0.00	30.5
235b	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	9.111E+12	0.00	0.0225
239	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_3\text{H}_5$	2.000E+12	0.00	0
241f	$\text{C}_4\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}$	1.200E+14	0.00	206
241b	$\text{H} + \text{C}_4\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7$	1.343E+14	0.00	30.3
244	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6 + \text{HO}_2$	1.000E+11	0.00	0
255f	$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3$	8.000E+16	0.00	307
255b	$\text{CH}_3 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8$	2.070E+14	0.00	30.2
257f	$1\text{-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{H} + \text{C}_4\text{H}_7$	4.110E+18	-1.00	408
257b	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{H} \rightarrow 1\text{-C}_4\text{H}_8$	1.494E+17	-1.00	4.53
258	$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2$	5.000E+13	0.00	16.3
265	$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{CH}_2\text{O}$	6.500E+12	0.00	0
266	$1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$	1.750E+13	0.00	29.1
353	$\text{C}_6\text{H}_{11} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_6$	2.500E+13	0.00	126
393	$\text{C}_7\text{H}_{13} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + 1\text{-C}_4\text{H}_8$	2.500E+13	0.00	126
751	$\text{I-C}_4\text{H}_7 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{CH}_3$	1.000E+13	0.00	214
752	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{I-C}_4\text{H}_7$	2.000E+11	0.00	31.4
753	$\text{I-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3$	5.000E+18	-1.00	307
754	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{I-C}_4\text{H}_8$	2.000E+13	0.00	0
755	$\text{I-C}_4\text{H}_8 \rightarrow \text{I-C}_4\text{H}_7 + \text{H}$	1.000E+17	0.00	368

Number	Reaction	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
756	I-C ₄ H ₇ + H → I-C ₄ H ₈	2.000E+13	0.00	0
757	I-C ₄ H ₈ + H → I-C ₄ H ₇ + H ₂	1.000E+13	0.00	15.9
758	I-C ₄ H ₇ + H ₂ → I-C ₄ H ₈ + H	3.000E+13	0.00	105
759	I-C ₄ H ₈ + O → I-C ₄ H ₇ + OH	2.500E+05	2.60	-4.7
761	I-C ₄ H ₈ + O → I-C ₃ H ₇ + CHO	7.230E+05	2.30	-4.4
763	I-C ₄ H ₈ + OH → I-C ₄ H ₇ + H ₂ O	9.600E+12	0.00	5.2
765	I-C ₄ H ₈ + OH → I-C ₃ H ₇ + CH ₂ O	1.500E+12	0.00	0
769	I-C ₄ H ₉ → C ₃ H ₆ + CH ₃	1.000E+14	0.00	137
771	I-C ₄ H ₉ → I-C ₄ H ₈ + H	2.000E+13	0.00	151
772	I-C ₄ H ₈ + H → I-C ₄ H ₉	1.000E+13	0.00	5
773	I-C ₄ H ₉ + O ₂ → I-C ₄ H ₈ + HO ₂	2.340E+10	0.00	0
775	T-C ₄ H ₉ → H + I-C ₄ H ₈	3.160E+15	0.00	183
776	H + I-C ₄ H ₈ → T-C ₄ H ₉	3.100E+13	0.00	6.3
777	T-C ₄ H ₉ → C ₃ H ₆ + CH ₃	1.585E+15	0.00	194
779	T-C ₄ H ₉ + O ₂ → I-C ₄ H ₈ + HO ₂	1.170E+11	0.00	0
811	NEOC ₅ H ₁₁ -C ₅ H ₁₁ → I-C ₄ H ₈ + CH ₃	1.000E+11	0.00	109
815	C ₆ H ₁₀ → 2C ₃ H ₅	2.512E+14	0.00	249
816	2C ₃ H ₅ → C ₆ H ₁₀	1.020E+13	0.00	-1.1
817	I-C ₆ H ₁₃ → I-C ₃ H ₇ + C ₃ H ₆	2.512E+13	0.00	118
819	I-C ₆ H ₁₃ → T-C ₄ H ₉ + C ₂ H ₄	2.512E+13	0.00	121
821	I-C ₆ H ₁₃ → I-C ₄ H ₉ + C ₂ H ₄	2.512E+13	0.00	121
823	I-C ₇ H ₁₃ → I-C ₄ H ₈ + C ₃ H ₅	2.500E+13	0.00	25.6
825	I-C ₇ H ₁₃ → C ₃ H ₆ + I-C ₄ H ₇	2.500E+13	0.00	25.6
827	I-C ₇ H ₁₃ → C ₆ H ₁₀ + CH ₃	1.000E+14	0.00	37.4
828	C ₆ H ₁₀ + CH ₃ → I-C ₇ H ₁₃	3.200E+11	0.00	38.1
829	A-C ₇ H ₁₄ → I-C ₄ H ₇ + I-C ₃ H ₇	2.500E+16	0.00	297
831	A-C ₇ H ₁₄ → C ₃ H ₅ + T-C ₄ H ₉	2.500E+16	0.00	297
835	A-C ₇ H ₁₄ + O → I-C ₇ H ₁₃ + OH	2.540E+05	2.60	-4.6
839	A-C ₇ H ₁₄ + OH → I-C ₇ H ₁₃ + H ₂ O	6.800E+13	0.00	13
843	C-C ₇ H ₁₄ → C ₆ H ₁₁ + CH ₃	2.500E+16	0.00	297
845	C-C ₇ H ₁₄ + H → I-C ₇ H ₁₃ + H ₂	2.800E+13	0.00	16.8
847	C-C ₇ H ₁₄ + O → I-C ₇ H ₁₃ + OH	2.540E+05	2.60	-4.6
851	C-C ₇ H ₁₄ + OH → I-C ₇ H ₁₃ + H ₂ O	6.800E+13	0.00	13

Number	Reaction	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
855	I-C ₇ H ₁₅ → I-C ₄ H ₈ + I-C ₃ H ₇	2.500E+13	0.00	117
858	A-C ₇ H ₁₄ + H → I-C ₇ H ₁₅	8.000E+12	0.00	5
860	C-C ₇ H ₁₄ + H → I-C ₇ H ₁₅	8.000E+12	0.00	5
861	I-C ₇ H ₁₅ → C ₃ H ₆ + T-C ₄ H ₉	2.512E+13	0.00	118
863	I-C ₈ H ₁₆ → I-C ₄ H ₇ + T-C ₄ H ₉	2.500E+16	0.00	297
865	I-C ₈ H ₁₆ → C ₇ H ₁₃ + CH ₃	2.500E+16	0.00	297
873	I-C ₈ H ₁₆ + OH → I-C ₄ H ₈ + I-C ₄ H ₇ + H ₂ O	1.300E+09	1.30	2.9
886	A-C ₈ H ₁₇ → D-C ₈ H ₁₇	6.000E+11	0.00	59
887	D-C ₈ H ₁₇ → A-C ₈ H ₁₇	9.000E+11	0.00	59
888	A-C ₈ H ₁₇ → C-C ₈ H ₁₇	1.000E+11	0.00	67.4
889	C-C ₈ H ₁₇ → A-C ₈ H ₁₇	9.000E+11	0.00	88.4
882	A-C ₈ H ₁₇ → A-C ₇ H ₁₄ + CH ₃	1.000E+11	0.00	109
884	A-C ₈ H ₁₇ → I-C ₄ H ₈ + I-C ₄ H ₉	1.300E+13	0.00	124
890	B-C ₈ H ₁₇ → C-C ₇ H ₁₄ + CH ₃	1.000E+13	0.00	109
894	C-C ₈ H ₁₇ → I-C ₄ H ₈ + T-C ₄ H ₉	5.000E+12	0.00	121
900	D-C ₈ H ₁₇ → A-C ₇ H ₁₄ + CH ₃	1.250E+13	0.00	137
902	D-C ₈ H ₁₇ → C ₃ H ₆ + NEOC ₅ H ₁₁ -C ₅ H ₁₁	1.300E+13	0.00	124
904	D-C ₈ H ₁₇ → I-C ₈ H ₁₆ + H	3.300E+14	0.00	151
1064	I-C ₈ H ₁₈ → T-C ₄ H ₉ + I-C ₄ H ₉	2.000E+16	0.00	327
1066	I-C ₈ H ₁₈ → NEOC ₅ H ₁₁ -C ₅ H ₁₁ + I-C ₃ H ₇	2.000E+16	0.00	327
1068	I-C ₈ H ₁₈ + H → A-C ₈ H ₁₇ + H ₂	8.440E+07	2.00	32.2
1070	I-C ₈ H ₁₈ + H → B-C ₈ H ₁₇ + H ₂	9.000E+06	2.00	20.9
1072	I-C ₈ H ₁₈ + H → C-C ₈ H ₁₇ + H ₂	1.260E+14	0.00	30.6
1074	I-C ₈ H ₁₈ + H → D-C ₈ H ₁₇ + H ₂	5.628E+07	2.00	32.2
1076	I-C ₈ H ₁₈ + O → A-C ₈ H ₁₇ + OH	1.500E+14	0.00	32.9
1078	I-C ₈ H ₁₈ + O → B-C ₈ H ₁₇ + OH	2.800E+13	0.00	21.8
1080	I-C ₈ H ₁₈ + O → C-C ₈ H ₁₇ + OH	1.000E+13	0.00	13.7
1082	I-C ₈ H ₁₈ + O → D-C ₈ H ₁₇ + OH	1.000E+14	0.00	32.9
1084	I-C ₈ H ₁₈ + OH → A-C ₈ H ₁₇ + H ₂ O	1.290E+10	1.10	7.6
1086	I-C ₈ H ₁₈ + OH → B-C ₈ H ₁₇ + H ₂ O	1.300E+09	1.30	2.9
1088	I-C ₈ H ₁₈ + OH → C-C ₈ H ₁₇ + H ₂ O	1.960E+12	0.00	1.9
1090	I-C ₈ H ₁₈ + OH → D-C ₈ H ₁₇ + H ₂ O	8.610E+09	1.10	7.6
1092	I-C ₈ H ₁₈ + HO ₂ → A-C ₈ H ₁₇ + H ₂ O ₂	1.680E+13	0.00	81.2

Number	Reaction	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i>
1094	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{B-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.350E+12	0.00	71.2
1096	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2\text{O}_2$	3.000E+12	0.00	60.3
1098	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{D-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2\text{O}_2$	1.120E+13	0.00	81.2
1100	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{CH}_4$	5.850E+12	0.00	48.6
1102	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{B-C}_8\text{H}_{17} + \text{CH}_4$	1.200E+12	0.00	39.8
1104	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{CH}_4$	1.000E+11	0.00	33.1
1106	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{D-C}_8\text{H}_{17} + \text{CH}_4$	3.900E+12	0.00	48.6
1116	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{O}_2 \rightarrow \text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{HO}_2$	3.750E+13	0.00	205
1118	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{O}_2 \rightarrow \text{B-C}_8\text{H}_{17} + \text{HO}_2$	2.000E+13	0.00	201
1120	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{O}_2 \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{HO}_2$	2.000E+12	0.00	193
1122	$\text{I-C}_8\text{H}_{18} + \text{O}_2 \rightarrow \text{D-C}_8\text{H}_{17} + \text{HO}_2$	2.500E+13	0.00	205
11f	$\text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2 \rightarrow \text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
11b	$\text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2 \rightarrow \text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2$	5.850E+14	0.00	100
127f	$\text{B-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2 \rightarrow \text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
127b	$\text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2 \rightarrow \text{B-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2$	1.850E+14	0.00	100
153f	$\text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2 \rightarrow \text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
153b	$\text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2 \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2$	8.450E+14	0.00	100
179f	$\text{D-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2 \rightarrow \text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2$	2.000E+12	0.00	0
179b	$\text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2 \rightarrow \text{D-C}_8\text{H}_{17} + \text{O}_2$	3.850E+14	0.00	100
123f	$\text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2 \rightarrow \text{AOE}\text{OOH-2-C}_8\text{H}_{16}\text{OOH}$	3.000E+12	0.00	61.1
123b	$\text{AOE}\text{OOH-2-C}_8\text{H}_{16}\text{OOH} \rightarrow \text{AC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2\text{-C}_8\text{H}_{17}\text{O}_2$	1.000E+11	0.00	27.6
1112	$\text{AOE}\text{OOH-2-C}_8\text{H}_{16}\text{OOH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OCTO}_4\text{H-O}_2\text{C}_8\text{H}_{16}\text{OOH}$	5.000E+11	0.00	0
1247	$\text{OCTO}_4\text{H-O}_2\text{C}_8\text{H}_{16}\text{OOH} \rightarrow \text{HOCTO}_4\text{H-HOOC}_8\text{H}_{15}\text{OOH}$	6.000E+11	0.00	61.1
1248	$\text{HOCTO}_4\text{H-HOOC}_8\text{H}_{15}\text{OOH} \rightarrow \text{OCTO}_3\text{H-OC}_8\text{H}_{15}\text{OOH} + \text{OH}$	1.000E+09	0.00	31.2
1249	$\text{OCTO}_3\text{H-OC}_8\text{H}_{15}\text{OOH} \rightarrow \text{OC}_8\text{H}_{15}\text{O} + \text{OH}$	2.000E+14	0.00	180
1250	$\text{OC}_8\text{H}_{15}\text{O} \rightarrow \text{I-C}_6\text{H}_{13} + \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$	2.000E+13	0.00	62.8