■原著論文/ORIGINAL PAPER■

プロパンー空気予混合火炎の燃焼速度および構造に及ぼすウォーターミストの 影響に関する数値解析

Numerical Simulation of the Effect of Water Mist on the Flame Speed and Structure of Propane-Air Premixed Flame

吉田 亮*・湯川 明子

YOSHIDA, Akira* and YUKAWA, Akiko

東京電機大学工学部 〒120-8551 東京都足立区千住旭町 5 Tokyo Denki University, 5 Senju-Asahicho, Adachi-ku, Tokyo 120-8551, Japan

2013 年 3 月 30 日受付; 2013 年 6 月 25 日受理/Received 30 March, 2013; Accepted 25 June, 2013

Abstract : Water mist is expected to have physical and chemical effects on the laminar flame speeds. In the present study, the effect of water mist on the flame speed and structure of propane-air premixed flames is numerically simulated by using PREMIX code of CHEMKIN package, modified to include the evaporation process of water mist. Evaporation process was assumed to follow the Arrhenius law. Chemical kinetic models for propane oxidation were evaluated by comparison of simulated flame speeds with experimental data for the case without water mist. The effects of water mist on flame speeds are separated into the dilution and chemical effects of water vapor, and the thermal effect which includes the heat of evaporation of water mist. The most effective is the sensible heat of water vapor, which is followed by the heat of evaporation. The chemical effect is relatively small but cannot be neglected. When the water mist is added, the flame temperature decreases due to thermal effect which reduces the rates of chemical reactions involving the radicals such as O and H, which have the positive sensitivity of flame speed. Furthermore, three-body reactions involving H_2O are enhanced. These reactions have high negative sensitivity of flame speed due to high chaperon efficiency of H_2O .

Key Words : Fire suppression, Water mist, CHEMKIN, Laminar flame speed

1. 緒言

近年オゾン層保護を目的としてハロン消火剤の生産の廃 止が決定され、種々のハロン代替消火剤の開発が進められ ている[1]. 中でもウォーターミストは環境負荷が低く、入 手が容易であるため、ハロン消火剤の代替消火剤として注 目されている[2,3]. ウォーターミストの消炎効果は、冷却 効果,窒息効果および化学反応抑制効果に大別されており、 ウォーターミストは、冷却効果の大きい気体消火剤である N₂、CF4 や化学的な抑制剤である CF₃Br よりも消炎効果が 大きいことが明らかにされている[4]. ここで、燃焼現象は 化学反応が温度に依存することからも明らかなように実際 にはこれらが同時に起こり相互に密接に関連している. そ のため、実験的にそれぞれの効果を分離してその影響の度 合いを解明することはできない. 燃焼速度は燃料の持つ基本的な物理化学的特性値であ り,拡散火炎の消炎を Damköhler 数で議論する際に化学反 応の特性時間を評価するために用いられ、また拡散火炎の 安定性が火炎基部に形成される予混合火炎の燃焼速度に よって支配されること[5]を考慮すれば、火炎の消炎を議論 するうえで極めて重要なパラメータである.そのためこれ までに水素およびメタンに関しては、燃焼速度に及ぼす消 火剤の影響が広く研究されているが[6,7]、プロパンに関し てはほとんど解明されていない.そこで本研究では CHEMKIN の PREMIX コードを用いて数値解析を行い、プ ロパン-空気層流予混合火炎の燃焼速度および火炎構造に 及ぼすウォーターミストの冷却効果および化学反応抑制効 果を数値解析により明らかにした.

^{*} Corresponding author. E-mail: yoshida@cck.dendai.ac.jp

2. 解析手法およびモデル

2.1. 化学反応機構および計算条件

燃焼現象の諸特性を数値解析するために,これまでに多 くの詳細化学反応機構が提案されており,水素あるいはメ タンなどの構造の簡単な燃料についてはその反応機構はほ ぼ解明されたといえる[8].しかし,C3以上の高級な炭化 水素燃料に関しては使用する反応機構によって計算される 燃焼特性に差異が生じる.そこで本研究では、プロパンの 酸化反応として提案されている代表的な四つの反応機構を 用いて燃焼速度を計算し,実験結果とよく一致する反応機 構を採用することにした.用いた四つの反応機構はそれぞ れ,DLW 機構[9](71化学種,469素反応),San Diego Mech 機構[10](46化学種,235素反応),USC Mech II 機構[11](111 化学種,784素反応),および AramcoMech 1.3 機構[12](171 化学種,1140素反応)である.

火炎はプロパン-空気予混合火炎で一次元,定常,層流 平面自由伝播火炎を考え,当量比を変化させて燃焼速度を 計算した.未燃混合気温度は T₀ = 298 K,圧力は P₀ = 1 atm である.また空気の組成は標準乾き空気の組成に準じ N₂: O₂:Ar:CO₂ = 78.084:20.948:0.934:0.034 とした.

常温での飽和蒸気圧は極めて低いが、火炎近傍では温度 が上昇し、ほとんどすべてのミストは蒸発していることが 明らかなため[13]、添加したミスト量は完全蒸発をした時 の水蒸気希釈率で表した.ここで水蒸気希釈率 X_{H2O} の定 義は $X_{H2O} = N_{H2O} / (N_{C3H8} + N_{O2} + N_{N2} + N_{Ar} + N_{H2O})$ であり、 N は各化学種のモル数である、本研究では $X_{H2O} =$ 0~0.20の範囲で変化させた.

2.2. ウォーターミストのモデル化

ウォーターミストの消炎効果には,前述した通り三つの 効果が考えられるが,本研究では窒息効果は反応抑制効果 に含めて考える。冷却効果は,ミストの蒸発過程で生じる 蒸発潜熱と,蒸発した水蒸気の温度上昇に消費される顕熱 が考えられる。一方,化学反応抑制効果はH2Oの分解反応 および三体反応の第三体としての chaperon 効果がある。こ れらの効果が層流燃焼速度に及ぼす影響の程度を明らかに するために以下の四つのモデルを考える。

(1) 水蒸気無添加モデル〈O〉

このモデルは、ミストを添加しない場合で、プロパン-空気だけの予混合気を考える.なおこのモデルは、以下に 示す三つのモデルにおいて計算された燃焼速度に基づき、 ウォーターミストの影響を議論する基準となる.

(2) 水蒸気非反応モデル〈V〉

このモデルでは蒸発過程を無視し,添加されたミストを 同量の水蒸気とみなす.また添加された水蒸気は反応には 関与しない不活性物質として取り扱う.従って,このモデ ルでは蒸発した水蒸気の顕熱の影響のみを知ることができ る.解析では添加した水蒸気をプロパンの酸化反応で生じ る H₂O と区別し,完全に不活性な水蒸気 Virtual-H₂O と定 義した. この仮想的な気体 Virtual-H₂O は, H₂O と同じ分 子構造を持ち,同じ熱力学特性および輸送特性を持つ.ま た化学反応に関与させないように素反応式に含めていない [14].

(3) 水蒸気反応モデル 〈R〉

このモデルでは水蒸気非反応モデルと同様,蒸発過程は 考慮していないが,添加した水蒸気の顕熱と化学反応に及 ぼす影響を含めたモデルである.このモデルでは添加した 水蒸気は,プロパンの燃焼反応で生じた H₂O と同様に分解 や三体反応に関与する.従って,水蒸気非反応モデルと比 較することで,水蒸気の化学反応抑制効果を抽出すること ができる.

(4) ミスト蒸発モデル〈WMG〉

ミストの蒸発潜熱,蒸発した水蒸気の顕熱および化学反応に及ぼす影響のすべてを考えたモデルである. CHEMKINでは気相反応しか取扱えない.そのためウォーターミストおよびその蒸発過程をCHEMKINで取り扱うためにはモデル化が必要である.ここではウォーターミストを水と同じ物性値を持つ仮想的な理想気体と仮定し,ウォーターミストガス (WMG)と呼ぶ[15].すなわち,圧力 $P_0 = 1$ [atm] = 101.325 [kPa],温度 $T_0 = 298$ [K]の下で,密度 $\rho_0 = 997.047$ [kg/m³]となる理想気体であると考える. 一般ガス定数は $R_0 = 8.3143$ [kJ/kmol-K] であるから,理想気体の状態方程式

$$P_0 = \rho_0 \frac{R_0}{M_{WMG}} T_0$$

よりウォーターミストガス (WMG)の分子量は M_{WMG} = 24,380 [kg/kmol] となる.水蒸気の分子量を M_{H2O} とすると,1 [kmol]のウォーターミストガスは蒸発することにより M_{WMG}/M_{H2O} [kmol]の水蒸気になるので、24,380/18 = 1354 [kmol]の水蒸気が生成される.従って、ウォーターミストガスが水蒸気に変化する蒸発過程は反応式

 $WMG \rightarrow 1354 \; H_2O$

で表すことができる.また反応速度は

$$-\frac{d[WMG]}{dt} = k[WMG]$$

で表される.ここで[]は濃度を表す.この反応(蒸発過程) は Arrhenius 則に従うと仮定し,反応速度定数 k は

 $k = Aexp(-E/R_0T)$

で表されるものとした. ここでA [s⁻¹] は頻度因子, E [kcal/mol] は活性化エネルギーである.なお、ウォーターミストガス の分子量 M_{WMG} は水の分子量 M_{H20} の 1354 倍であるので定 圧比熱、比エンタルピーおよび比エントロピーといった熱 物性値は水の熱物性値の 1/1354 とし、その結果ミストの蒸



Fig. 1 Laminar flame speeds (Numerical calculations and experiments).

発潜熱は反応熱として自動的に反応計算に組み込まれるこ とになる.

3. 解析結果および考察

3.1. 反応機構による燃焼速度の比較

プロパンに対して前述した四つの反応機構を用いて計算 された層流燃焼速度と実験結果の比較を図1に示す.実験 結果については、Yoshida 等[13]はよどみ流中に形成される 平面火炎, Vagelopoulos 等[16]は対向流予混合火炎を用い, また Bosschaart 等[17]は平面火炎に熱流束法を適用し求め たものである。詳細にみると熱流束法による測定結果が希 薄側で多少低いが、測定された燃焼速度は、実験方法に差 異があるものの極めてよく一致している.また計算結果で は, San Diego Mech 機構[10]と USC Mech II [11]ではほぼ等 しい燃焼速度が得られ、燃焼速度に及ぼす反応機構の違い の影響はほとんど認められない。この二つの機構により得 られた燃焼速度はともに希薄側では実験値とよく一致する が、量論比から過濃側では過小評価となる。一方、DLW 機構[8]による計算結果は当量比の全領域でよく一致してい るが、詳細に見ると希薄側では多少低めの結果となり、熱 流束法により求められた燃焼速度と一致することが分か る. また, AramcoMech 1.3 機構[12]を用いた計算結果は当 量比の全領域で実験結果とよく一致しており、希薄側にお いても、よどみ流および対向流によって得られた結果と完 全に一致する.本研究では、計算時間を考慮し、比較的少 ない素反応数で実験値とよく一致する DLW 機構を用いる ことにする.

3.2. ウォーターミストガスの蒸発

ウォーターミストガス (WMG) の蒸発過程を支配してい

るのは頻度因子 A [s⁻¹] と活性化エネルギー E [kcal/mol] で ある. これらのパラメータはミスト粒径あるいは数密度と いったミスト特性によって決定されることは明らかである が,これらに関する実験データは存在しないため,物理的, 化学的に矛盾のない値を見出す必要がある.そのために蒸 発終了温度 Tev を仮定し、その温度で蒸発が終了するよう な頻度因子 A と活性化エネルギー E の組み合わせを求め る.まず,WMG が予熱帯で完全に蒸発するとして,蒸発 終了温度を Tev = 500 K と設定し[15],頻度因子 A および活 性化エネルギー *E* を求めた. その際, $E = 26 \sim 42$ [kcal/ mol] の範囲で A の値は 10¹⁸ [s⁻¹] 程度となるが, A を変化さ せても,温度分布および水蒸気,WMG,中間生成物の濃 度分布に差異が見られなかった。そこで、次に火炎帯内で 完全に蒸発するよう Tev = 1000 [K] および 1500 [K] と仮定 し、同様に Arrhenius パラメータを求めた. その際、E = 30[kcal/mol] 一定にして A の値を求めた結果, それぞれ A = $3.16 \times 10^{11}, 1.00 \times 10^9 [s^{-1}]$ となった. 図 2 に T_{ev} を変化させ た場合の温度分布および水蒸気, WMG の濃度の分布を示 し、図3に中間生成物の濃度分布を示す。WMGの消滅あ るいは水蒸気の生成は、頻度因子が大きくなるほど蒸発終 了温度が低くなり、ほとんどが予熱帯で消滅する.これは、 頻度因子が大きいほど WMG の蒸発反応が盛んに行われる ためである.また、頻度因子が大きいモデルほど蒸発によ る吸熱反応が盛んに行われ、予熱帯の温度が低下するが、 WMG の蒸発はどの場合もほとんど予熱帯のみで行われて いるので、反応帯における温度分布には差が表れず、火炎 構造に影響を及ぼすこともない。また、断熱火炎温度はへ スの法則により蒸発過程のいかんにかかわらずすべて一致 する. これらより, 蒸発終了温度を変えることにより, 粒 径などのミスト特性を考慮できると考えられる.図4は, 各モデルにおける水蒸気の生成過程を示す.水蒸気無添加



Fig. 2 Effect of T_{ev} on temperature distributions and evaporation processes for $\langle WMG \rangle$, $\phi = 1.0$ and 1354 $X_{WMG} = 0.20$.



Fig. 3 Effects of T_{ev} on the major species concentrations for <WMG>, $\phi = 1.0$ and $1354X_{WMG} = 0.20$.



Fig. 4 Concentration distributions of water vapor and water mist gas for $\phi = 1.0, X_{H2O} = 0$ and 0.2.

モデルでは、プロパンの酸化反応に伴い発生した水蒸気が 燃焼ガス中では X_{H20}=0.15 に達する.水蒸気非反応モデル および水蒸気反応モデルでは、予め水蒸気 X_{H20}=0.2 を添 加させた場合、反応後には X_{H20}=0.32 にまで増加する.こ れに対し、ミスト添加モデルでは WMG の蒸発により最終 的には X_{H20}=0.32 にまで達する.この結果、ミストをウォー ターミストガスと仮定することにより、ミストの蒸発過程 を考慮した火炎構造の解析が可能であることが明らかに なった.ただしこのモデルでは、ウォーターミストは予熱 帯あるいは火炎帯で完全に蒸発する必要があり、粒径およ び滞留時間には考慮が必要である.



Fig. 5 Laminar flame speeds of propane/air mixture with and without water mist for $\phi = 1.0$, $X_{H2O} = 0$ and 0.2.

3.3. 燃焼速度

次に各モデルを用いて計算された燃焼速度を比較し, ウォーターミストが燃焼速度に及ぼす効果を調べた.水蒸 気非反応モデルは添加した水蒸気を反応に関与させていな いので,水蒸気無添加モデルの結果と比較することにより, 水蒸気の顕熱のみによる消炎効果を抽出することができ る.また,水蒸気反応モデルは水蒸気の熱的効果に加え, 化学反応の効果も含まれているため,水蒸気非反応モデル との差から化学的効果を評価できる.さらに,ミスト蒸発 モデルでは,水蒸気の効果に加え蒸発に伴う潜熱の効果が 含まれるため,水蒸気反応モデルとの差から蒸発潜熱の効 果を求めることができる.

 ϕ = 1.0 について結果を図 5 に示す. X_{H2O} = 0 における燃 焼速度は, どのモデルでも $S_{u,O}$ = 39.8 cm/s となり, また X_{H2O} = 0.20 においてはそれぞれ $S_{u,V}$ = 18.1 cm/s, $S_{u,R}$ = 15.4 cm/s, $S_{u,WMG}$ = 4.84 cm/s となった. ここで, ミスト添 加による燃焼速度低減量の割合を求めたところ, それぞれ 水蒸気の顕熱の効果が 62.1 %, 化学的効果が 7.7 %, 蒸発 潜熱の効果が 30.2 % であった. これよりウォーターミスト による燃焼速度低減効果は, ほとんどが熱的効果であるが, 化学的効果も決して無視できない程度に存在することが分 かった.

3.4. 温度分布

次に各モデルの温度分布を比較し、ウォーターミストが 火炎帯温度に及ぼす効果を調べた.図6は水蒸気無添加モ デルおよび X_{H2O}=0.20における水蒸気非反応モデル、水蒸 気反応モデル、ミスト蒸発モデルを用いて得られた温度分 布を示す.

水蒸気無添加モデルでは、消炎効果を持つ水蒸気および ウォーターミストが添加されていないため、断熱火炎温度



Fig. 6 Temperature distributions for $\phi = 1.0$, $X_{H2O} = 0$ and 0.2.

はどのモデルよりも高い $T_{ad,O} = 2270$ K となった.また, 顕熱の影響を受けた水蒸気非反応モデルでは 320 K ほどの 温度低下が見られ, $T_{ad,V} = 1947$ K となり,水蒸気反応モデ ルでは $T_{ad,R} = 1949$ K,ミスト蒸発モデルでは潜熱の吸収が 行われるため,さらに 190 K ほど温度低下して $T_{ad,WMG} =$ 1762 K となった.

ここで、水蒸気非反応モデルと水蒸気反応モデルとの間 は、わずか2Kの差しかなかった.これは、Virtual-H₂Oは 水蒸気と同じ熱力学特性を持っており標準生成エンタル ピーには差がないため、添加された水蒸気の反応への関与 の有無によって断熱火炎温度に違いが現れないからであ る. つまり,水蒸気の化学的効果は断熱火炎温度には現れ ないが,反応途中の温度や燃焼速度には影響を与えること になる.

3.4. H₂O が関与する反応の反応速度と濃度分布

水蒸気の化学的効果を調べるため,主要な素反応の正味 反応速度を調べた.図7に,水蒸気非反応モデルと水蒸気 反応モデルにおいて,H₂Oが関与する素反応のうち,反応 速度の大きいものだけ示した.どちらも*X_{H20}*=0.20におけ る値で,水蒸気非反応モデルを実線で,水蒸気反応モデル を点線で示す.

図7 左図で表示されたOH+H2⇔H+H2O(R3), OH+OH⇔O+H₂O (R4), CH₃+OH⇔CH₂*+H₂O (R89) は, H₂O Ø 生成分解に関する反応である。水蒸気反応モデルでは添加さ れた H₂O は反応に関与するため, H₂O が分解される逆方向 の反応速度が増加する. そのため, R3, R89 については正 味反応速度が低下し、R4 は負方向に大きくなる。一方, 図7右図でH+O₂+H₂O⇔HO₂+H₂O (R14), HCO+M⇔CO+H+M (R50), C₃H₆+H(+M)⇔iC₃H₇(+M) (R388) は, 第三体を伴った 連鎖停止反応である. R14 は火炎中での支配的な反応であ り、添加された水蒸気が反応に関与することにより、正味 反応速度は増加する. また, R50 および R388 における第 三体 M の chaperon 効率は, R50 では H₂: 2.0, H₂O: 18.0, CH4: 2.0, CO: 1.5, CO2: 2.0, C2H6: 3.0 であり, また R388 ではH2:2.0, H2O:6.0, CH4:2.0, O:1.5, CO2:2.0, C₂H₆: 3.0, Ar: 0.7 である[18]. 従って, H₂Oの chaperon 効 率が極めて高い. その結果, これらの反応では, 添加され た水蒸気が化学反応に関与した場合, 安定物質が生成され る方向に反応が進行することになる.

これらの反応が起こることで、全体的には、H, O,



Fig. 7 Net reaction rates of reactions including H₂O.



Fig. 8 Species concentration distributions for $\phi = 1.0$, $X_{H2O} = 0$ and 0.2.



Fig. 9 Net reaction rates of predominant reactions.

CH₂*, O₂, C₃H₆, CO などの化学種濃度は低下すると同時 に OH, H₂, CH₃, HO₂, iC₃H₇, HCO などの化学種濃度が 増加し, 燃焼中に生成される中間生成物の組成は大きく変 化する. 図 8 に燃焼反応を持続させるために重要な活性基 である H, O, OH, CO の濃度分布を示す. これらの化学 種は, 水蒸気やウォーターミストからの熱的効果に加え, 添加した H₂O の化学反応への関与の有無によっても生成量 が大きく変化していることが分かる.

火炎構造が変わることで,他の素反応にも影響を及ぼす. 図9に火炎全体の主要素反応であるH+O₂⇔O+OH(R1), R3,CO+OH⇔CO₂+H(R31),R50,CH₃+O⇔CH₂O+H(R86), CH₃+C₂H₄⇔nC₃H₇(R465)の正味反応速度を示す.特に反応 速度の大きいR1は,H₂Oが反応に関与することで逆反応 速度が増加し,正味反応速度は低下する.R31は,化学種 の減少と増加が相殺し合い,正味反応速度はあまり変化し ない.R86やR465では,CH₂OやC₂H₄の生成量はH₂Oの 反応への関与にかかわらずほぼ等しいために,H,O,CH, CH₃の濃度に依存して反応が進行する.反応機構全体とし ては,図から分るように,H₂Oが反応に関与する場合,反 応帯で起こる主要な反応の反応速度は全体的に減少する. そのため反応帯での発熱量が減り,温度が低下する.その 結果,H₂Oが反応抑制効果を持つことになる.

3.5. 感度解析

図 10 に各モデルにおける燃焼速度に対する感度係数を 素反応ごとに示す. R1 は連鎖反応を維持する連鎖分枝反 応で,燃焼速度に極めて大きな影響を与える.水蒸気およ びウォーターミストを添加すると,感度係数はさらに大き くなるが,化学種の生成量は減少するため反応速度は低下 し,燃焼速度は減少する.また,R4 はウォーターミスト の添加に伴い反応生成物濃度が増加し,逆方向の反応速度 が増加するため燃焼速度は低下する.R14 は三体反応で, 反応に関与する H₂O の増加に伴い反応速度は増加するが, 感度係数が負であり,H₂O の反応への関与に伴いその絶対 値が増加するため燃焼速度は低下する.

3.6. 他の消火剤との比較

図 11 は、現在使用されているガス系消火剤である N₂, CO₂ および IG-541(N₂: Ar: CO₂ = 52: 40: 8) を希釈剤として 混合気に添加した際の燃焼速度を示す. X_{add} は消火剤のモ ル分率を表す. 400 K におけるモル比熱 c_p の大きさは、Ar: 20.81 [kJ/kmol-K], N₂: 29.27 [kJ/kmol-K], H₂O: 36.21 [kJ/kmol-K], CO₂: 41.44 [kJ/kmol-K] である. モル比熱が大 きいことが、水蒸気が N₂ および IG-541 よりも燃焼速度低 減効果が大きい理由になっている. 二酸化炭素のモル比熱 は水蒸気よりも大きいが、ウォーターミストは蒸発潜熱を 持ち、また高い chaperon 効率による反応抑制効果があるた めに、結果的にこれらの消火剤の中で最も高い燃焼速度低 減効果を持つ. この結果から、ウォーターミストはハロン 系消火剤だけでなく CO₂ などのガス系消火剤の代替消火剤







としても期待できる.

4. 結言

ウォーターミストがプロパンー空気予混合火炎の燃焼速 度に及ぼす影響を、CHEMKIN を用いた数値計算により明 らかにした.プロパンの酸化反応機構には DLW 機構を用 い,またウォーターミストガスを理想気体と仮定し,蒸発 過程を Arrhenius 型の化学反応としてモデル化した.その 結果、ウォーターミストの蒸発潜熱,蒸発した水蒸気の顕 熱および水蒸気が化学反応に及ぼす影響を定量的に分離す ることができた.ミスト量の増加とともに燃焼速度は著し く減少するが、その 62 % は水蒸気の持つ顕熱の影響によ るものである.また、30 % は蒸発潜熱の影響で、化学反応 抑制効果は 8 % 程度である.従って、ウォーターミストは 熱的な冷却効果だけでなく、化学反応抑制効果があり、そ の効果は比較的小さいものの無視することはできない. ウォーターミストは冷却効果と反応抑制効果を持つため に、消火性能は極めて高く、ガス系消火剤の代替消火剤と して使用できる.

References

- Linteris, G.T., Knyazev, V., and Babushok, V., Proc. Halon Options Technical Working Conference: 72-86 (2001).
- Naito, H., Uendo, T., Saso, Y., Kotani, Y., and Yoshida, A., Proc. Combust. Inst. 33: 2563-2571 (2011).
- Yoshida, A., Takasaki, R., Kashiwa, K., Naito, H., and Saso, Y., *Combust. Flame* 160:1357-1363 (2013).
- Zhu, D.L., Egolfopoulos, F.N., and Law, C.K., Proc. Combust. Inst. 22: 1537-1545 (1988).
- Sakurai, I., Suzuki, J., Kotani, Y., Naito, H., and Yoshida, A., *Proc. Combust. Inst.* 34: 2727-2734 (2013).
- Qiao, L., Gu, Y., Dahm, W.J.A., Oran, E.S., and Faeth, G.M., Proc. Combust. Inst. 31: 2701-2709 (2007).
- Osorio, C.H., Vissotski, A.J., Petersen, E.L., and Mannan, M.S., *Combust. Flame* 160: 1044-1059 (2013).
- Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A.P., and Law, C.K., *Prog. Energy Combust. Sci.* 38: 1-34 (2012).

- Davis, S.G., Law, C.K., and Wang, H., Combust. Flame 119: 375-399 (1999).
- San Diego Mechanism web page, http://web.eng.ucsd. edu/ mae/groups/combustion/mechanism.html (2005).
- Wang, H., You, X., Joshi, A.V., Davis, S.G., Laskin, A., Egolfopoulos, F., and Law, C.K., USC Mech Version II, http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm (2007).
- Metcalfe, W.K., Burke, S., and Curran, H.J., Aramco Mech 1.3, http://c3.nuigalway.ie/ (2013).
- Yoshida, A., Udagawa, T., Momomoto, Y., Naito, H., and Saso, Y., *Fire Saf. J.* 58: 84-91 (2013).
- Mazas, A.N., Fiorina, B., Lacoste, D.A., and Schuller, T., Combust. Flame 158: 2428-2440 (2011).
- Takahashi, F., and Katta, V., Proc. Combust. Inst. 32: 2615-2623 (2009).
- Vagelopoulos, C.M., Egolfopoulos, F.N., and Law, C.K., Proc. Combust. Inst. 25: 1341-1347 (1994).
- 17. Bosschaart, K.J., de Goey, L.P.H., and Burgers, J.M., *Combust. Flame* 136: 261-269 (2004).
- Seiser, R., and Seshadri, K., Proc. Combust. Inst. 30: 407-414 (2005).