

Combustión de mezclas ricas de etano-aire en medios porosos inertes

Combustion of rich ethane-air mixtures in inert porous media

Khriscia Utria S.¹ Freddy González B.¹ Mario Toledo T.¹

Recibido 9 de mayo de 2011, aceptado 9 de noviembre de 2012

Received: May 9, 2011 Accepted: November 9, 2012

RESUMEN

El presente trabajo tiene por objetivo analizar teórica-experimentalmente la combustión de mezclas ricas de etano-aire en medios porosos inertes (MPI) para evaluar la producción de hidrógeno y gas de síntesis. Se analizan los perfiles de temperatura, las velocidades de propagación de llama y los productos principales de la combustión, como son el hidrógeno (H_2) y el monóxido de carbono (CO), mediante el uso de cromatografía gaseosa, para relaciones de equivalencia en el rango de 1,0 a 2,5 y dos diámetros de esferas de alúmina que componen el medio poroso. Se simula numéricamente el proceso de combustión mediante el uso del programa PREMIX utilizando dos mecanismos de reacción, como son el GRI-MECH 1.2 y GRI-MECH 3.0. Con GRI-MECH 3.0 se obtienen resultados numéricos que predicen correctamente los resultados experimentales para todo el rango de relaciones de equivalencia con un medio poroso compuesto por esferas de alúmina de 3,5 mm. La máxima generación de hidrógeno H_2 y CO presentes en los productos de combustión son de 14,3% y 18,0%, respectivamente. El porcentaje de conversión de etano en H_2 (61,3%) y en CO (81%) muestra el potencial de este combustible como generador de gas de síntesis.

Palabras clave: Combustión, etano, medios porosos inertes, mecanismos de reacción, simulación numérica, hidrógeno.

ABSTRACT

This research develops the theoretical and experimental analysis of ethane-air combustion in inert porous media (IPM) to evaluate hydrogen and syngas production. Temperature profiles, flame propagation rates and major combustion products such as hydrogen (H_2) and carbon monoxide (CO), through gas chromatography, are analysed at a range of equivalence ratios between 1.0 and 2.5, with two different alumina sphere diameters composing the porous media. Combustion of ethane-air mixture in IPM is simulated numerically using the PREMIX program with two reaction mechanisms, such as GRI-MECH 1.2 and GRI-MECH 3.0. GRI-MECH 3.0 numerical results predict correctly experimental results for a porous media with 3.5 mm alumina spheres along the range of equivalence ratio. The maximum generation of hydrogen H_2 and CO, are 14.3% and 18%, respectively. The conversion rate of ethane in H_2 (61.3%) and CO (81%) shows the potential of this fuel as a synthesis gas generator.

Keywords: Combustion, ethane, inert porous media, reaction mechanism, numerical simulation, hydrogen.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad se buscan constantemente fuentes de energías más limpias y económicas como el gas natural. El etano es un componente significativo en muchos

gases naturales y juega un papel muy importante para determinar sus propiedades de ignición. Además, se sabe que la comprensión cuantitativa de la oxidación química de éste ayudaría a modelar correctamente la pirólisis y oxidación del gas natural.

¹ Departamento de Ingeniería Mecánica. Universidad Técnica Federico Santa María. Av. España 1680. Valparaíso, Chile. E-mail: mario.toledo@usm.cl; khriscia.utria@usm.cl; freddy.gonzalez@gmail.com

La combustión en MPI consiste en el proceso de propagación de la zona reacción exotérmica química de un gas a lo largo de un sólido químicamente inerte. Existe una participación tanto del medio poroso como del gas reactante en este proceso, en donde tres zonas características se pueden identificar dentro del medio poroso. Una zona que se encuentra delante del frente donde los gases reactantes se mezclan en forma natural y se precalientan aprovechando el calor desprendido por el medio poroso. La segunda zona es muy estrecha y representa la zona de reacción química, la que se mueve en la misma dirección o en contra del flujo de gas y donde se libera una gran cantidad de la entalpía, la que es absorbida por el medio poroso y conducida hacia la primera zona, es decir, la zona de entrada del gas fresco. En esta última zona, gracias a la inmensa superficie específica que tiene el medio poroso, la energía es cedida por ella al gas entrante y trasladada por convección hacia la zona de la reacción. De esta forma se realiza una regeneración del calor en el sistema, lo que lleva al exceso de la entalpía en la zona de reacción química y un lento aumento de la temperatura en el frente, la que puede superar a la temperatura adiabática. La tercera zona, la que se encuentra detrás del frente, contiene los productos de combustión, los que intercambian activamente el calor por convección con el medio poroso. Estos sistemas se caracterizan por la presencia en ellos de dos frentes dinámicos, el de generación del calor y el de altas temperaturas. Producto de la adecuada selección de los parámetros geométricos, fluido-dinámicos y térmicos, ambas fuentes pueden superponerse intensificándose mutuamente.

Una aplicación de estos procesos de combustión en medios porosos es el uso de mezclas ricas de combustible-aire con el fin de obtener hidrógeno (o gas de síntesis) [1]. El hidrógeno es considerado como un combustible limpio, dado que genera el mínimo de emisiones cuando se quema y, esencialmente, sin emisiones cuando es convertido en electricidad en una celda de combustible. Además este combustible contiene más energía por unidad de masa que cualquier otro combustible, sin embargo su energía por unidad de volumen es baja.

Por su parte, la combustión de etano se ha investigado en variados trabajos con el objetivo de: (1) examinar el efecto de presiones elevadas en la oxidación del etano, (2) expandir la base de datos actual de la oxidación del etano, (3) estudiar el efecto

de la presión en la producción y destrucción de aldehídos y epóxidos intermedios, y (4) desarrollar un mecanismo de reacción detallado de la oxidación de etano a las diferentes presiones y temperaturas. En [2] se expandió un mecanismo optimizado de reacción, desarrollado para modelar la combustión de gas natural. Esto se realizó con el fin de incluir reacciones que se originan en condiciones de bajas temperaturas y presiones elevadas en el flujo de un reactante. Para ello se evaluó experimentalmente una relación de equivalencia de 0,2 en el aire y presiones de 36 y 10 atm. Un detallado modelo de la cinética química fue utilizado para simular y analizar los datos experimentales. Este modelo incluye GRI-MECH 1.1 y un set completo de especies de reacciones de C₂.

Un modelo detallado de la cinética química fue desarrollado para la oxidación del etano en [3], la cual es aplicable sobre un amplio rango de temperaturas y presiones. Este modelo incluye los resultados de otras investigaciones y de la importancia de las bajas temperaturas de las vías de la reacción C₂H₅+O₂, así como también muchas reacciones de abstracción C₂H₆+RO₂. Se desarrolló la modelación numérica de la oxidación del etano con etapas separadas de autoignición en [4]: *llama fría* (con cadenas ramificadas de vía hidroperóxido etilo (C₂H₅O₂H), hidroperóxido metil (CH₃O₂H), y descomposición parcial de peróxido de hidrógeno (H₂O₂), la etapa anterior a *llama caliente* (con cadenas ramificadas de peróxido de hidrógeno) y la ignición de *llama caliente*. El trabajo se inició bajo la consideración que el fenómeno de *llama fría* puede estar asociado con su oxidación y con la oxidación de sus productos estables y radicales formados en las últimas etapas y que también aparecen en la oxidación del metano. Con el desarrollo de una prueba experimental escogieron el modelo que describía las características de la oxidación y combustión del etano a altas temperaturas. Luego se simuló la oxidación a bajas temperaturas y la autoignición de mezclas de etano-oxígeno para comparar los resultados con los datos de estudios previos. Las simulaciones se llevaron a cabo bajo ciertas condiciones con un amplio rango de composición, temperatura y presión de la mezcla estudiadas en [5].

Los estudios previos muestran la tendencia a la investigación del etano como combustible y a una correcta modelación de su proceso de combustión bajo diferentes condiciones de presión y temperatura.

El presente trabajo tiene como objetivo principal analizar teórica y experimentalmente el proceso de oxidación parcial de la mezcla etano-aire en MPI para evaluar la producción de hidrógeno y gas de síntesis. Se utilizan dos mecanismos de reacción para la modelación numérica del proceso de combustión como son GRI-MECH 1.2 y GRI-MECH 3.0, y se contrastan los resultados con los experimentos realizados.

MODELO MATEMÁTICO Y MECANISMOS DE REACCIÓN

En esta investigación se utiliza el modelo matemático propuesto por [1] para describir la interacción fluido-dinámica y de transferencia de calor entre la fase sólida y gaseosa, mediante el uso del código PREMIX modificado.

Se analizan dos mecanismos de reacción, simulando el proceso de combustión de etano en un rango de relación de equivalencia entre 1,0 y 2,5. En primer lugar se utiliza el mecanismo de reacción GRI-MECH 1.1 Expanded [2], el cual consta de 277 reacciones elementales y 47 especies. No se logra simular adecuadamente el proceso con este mecanismo, por lo que se continúa con el mecanismo de reacción GRI-MECH 1.2, el cual es básicamente el GRI-MECH 1.1 con las siguientes mejoras: la tasa de coeficientes nominal para dos reacciones $H+O_2 \rightarrow OH+O$ y $CH_3+H(+M) \rightarrow CH_4(+M)$ es actualizada; y la variable de optimización para la reacción $CH_3+H(+M) \rightarrow CH_4(+M)$ se cambia de un multiplicador global a un multiplicador solo para el límite de bajas presiones. Para este mecanismo se presentan los resultados en este trabajo.

El otro mecanismo de reacción es el GRI-MECH 3.0 [6], el cual está diseñado para optimizar el modelo de combustión de gas natural, incluida la formación de NO y la química del quemado de gases. Es el mecanismo sucesor a la versión 2.11. Algunas optimizaciones son consideradas como nuevas expresiones para las reacciones $H+O_2$, O_2+CH_3 , CH_2O+H y la descomposición CH_2O . Dado que el gas natural contiene propano (y algunos hidrocarburos superiores que pueden ser representados por unos propanos), un conjunto mínimo de la cinética del propano se incluye en el modelo de esta especie, como componente de baja importancia. Este nuevo mecanismo contiene

325 reacciones (3 son duplicados porque la suma de dos expresiones de parámetros de la velocidad son necesarias) y 53 especies (incluido el argón).

Los dos mecanismos utilizados en este trabajo están diseñados para trabajar en regímenes de altas temperaturas; sin embargo, el etano trabaja en regímenes de bajas temperaturas en procesos de combustión en MPI para ciertos parámetros específicos [1]. Estas bajas temperaturas características se elevan con el uso de un medio poroso compuesto por esferas de alúmina de diámetro menor, aumentando el área de transferencia de calor.

DISEÑO DEL REACTOR POROSO Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

El reactor poroso consiste en un tubo de cuarzo relleno con esferas de alúmina en su interior, contiene un sistema de inyección de combustible y suministro de aire, un sistema de medición de temperatura y un cromatógrafo de gases (CG). El tubo tiene un diámetro interno de 41 mm, un espesor de pared de 2 mm y una longitud de 42 cm. La superficie interna del tubo es cubierta con una capa de 2 mm de aislamiento Fiberfrax. Para evitar pérdidas de calor y lograr perfiles casi uniformes de temperatura, 30 mm de espesor adicional de aislamiento para altas temperaturas se aplica en el diámetro exterior del reactor. Se trabaja con dos diámetros de esferas de alúmina de 5,5 mm y 3,5 mm, dando una porosidad de ~40%.

El procedimiento experimental considera un encendido en la parte superior del reactor con una relación de equivalencia entre 1,0 (mezcla combustible-aire estequiométrica, combustión completa) y 1,8 (mezcla rica en combustible). Luego, el frente de combustión se propaga aguas arriba y se comienza con la recolección de datos como son: temperatura de combustión, cálculo de la velocidad de propagación y análisis de los principales productos de combustión. Una vez que el frente de combustión llega a la parte inferior del reactor se modifica la relación de equivalencia, por un valor elevado de mezcla rica mayor a 2,0, de manera que la llama se propaga aguas abajo, y se realizan los mismos procedimientos de medición. El rango de relación de equivalencia estudiado está entre 1,0 y 2,5. Esta medición de datos experimentales se divide en dos partes: la primera trabaja con diámetros de esferas de alúmina de 5,5 mm y en la segunda con diámetros de esfera de 3,5 mm.

Los valores de la temperatura de combustión (K) de la mezcla gaseosa (aire-etano) son promedios de las temperaturas máximas indicadas en cada punto de medición (ver Figura 1: T1, T2, T3, T4 y T5), y las velocidades de propagación de llama se calculan a través del tiempo (t) que toma en avanzar la temperatura máxima entre termocuplas, que se encuentran a 4 cm (d), es decir, $v = d/t$.

Como referencia se presenta la temperatura adiabática de la mezcla combustible-aire, la cual considera un proceso de combustión sin pérdidas de energía.

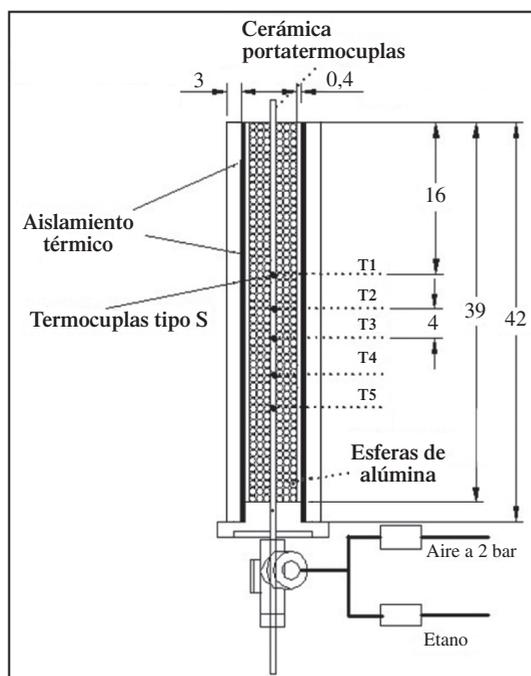


Figura 1. Esquema del reactor poroso (dimensiones en cm).

PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Para un caudal de mezcla etano-aire de 6 l/min, y por lo tanto una velocidad de filtración de 12 cm/s, se presentan y analizan los resultados de este trabajo.

Temperatura de combustión

Las Figuras 2 y 3 muestran las temperaturas de combustión (fase sólida) obtenidas experimentalmente y con los mecanismos GRI-MECH 1.2 y GRI-MECH 3.0 para un medio poroso compuesto por esferas de 5,5 mm y 3,5 mm, respectivamente. La temperatura adiabática se presenta como referencia.

Para un diámetro de esferas de alúmina de 5,5 mm los resultados numéricos y experimentales no se contrastan correctamente, siendo más aproximados los del mecanismo GRI-MECH 3.0 para relaciones de equivalencia superiores a $\phi = 1,5$. El mecanismo GRI-MECH 1.2 obtiene temperaturas superiores a las experimentales pero mostrando una tendencia similar. Los resultados experimentales muestran un aumento de la temperatura a medida que aumenta la relación de equivalencia, desde 989 K para $\phi = 1,0$ hasta 1.364 K para $\phi = 2,5$, siendo más importante este aumento para $\phi < 1,5$. Se obtienen temperaturas superadiabáticas para $\phi > 2,4$.

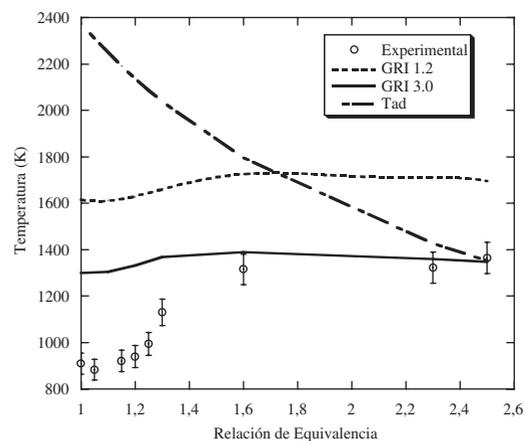


Figura 2. Temperatura de combustión para un medio poroso con esferas de 5,5 mm de diámetro.

Para un diámetro de esferas de alúmina de 3,5 mm y debido al aumento del área de transferencia de calor, las temperaturas de combustión para $\phi < 1,5$ se presentan en el rango de ~1300 K, es decir, una diferencia de 300 K en comparación con el diámetro de 5,5 mm. Para un $\phi = 2,5$ la temperatura de combustión es de 1381 K, muy similar que para 5,5 mm. El mecanismo GRI-MECH 3.0 predice correctamente los resultados experimentales y el GRI-MECH 1.2 obtiene temperaturas superiores a las experimentales pero mostrando una tendencia similar. Se obtienen temperaturas superadiabáticas para $\phi > 2,3$.

La modelación numérica de la temperatura de combustión basada en la cinética de la combustión del etano no es correcta debido a que los mecanismos GRI-MECH utilizados están diseñados originalmente para trabajar con metano y para altas temperaturas. La ignición del etano podría ocurrir a bajas temperaturas

[2, 7-9], siendo ésta omitida en los mecanismos GRI-MECH.

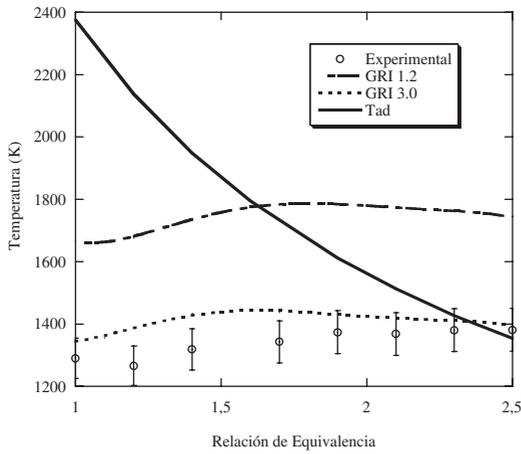


Figura 3. Temperatura de combustión para un medio poroso con esferas de 3,5 mm de diámetro.

Velocidad de propagación de llama

Las Figuras 4 y 5 muestran las velocidades de propagación de llama obtenidas experimentalmente y con los mecanismos de reacción para un medio poroso compuesto por esferas de 5,5 mm y 3,5 mm de diámetro, respectivamente. En la Figura 4 se observa que los resultados numéricos y experimentales no se contrastan correctamente con ambos mecanismos en el rango de relación de equivalencia estudiado. El mecanismo GRI-MECH 3.0 predice correctamente para un rango de $1,2 < \phi < 1,6$ para un diámetro de esferas de 5,5 mm.

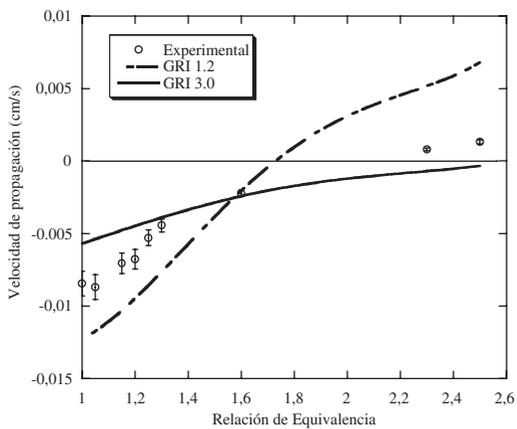


Figura 4. Velocidad de propagación de llama numérica y experimental para esferas de 5,5 mm de diámetro.

En la Figura 5, para 3,5 mm de diámetro de esferas, se muestra que el mecanismo GRI-MECH 3.0 predice correctamente los resultados experimentales. Los resultados numéricos que se obtienen con el mecanismo GRI-MECH 1.2 no describen correctamente los resultados experimentales.

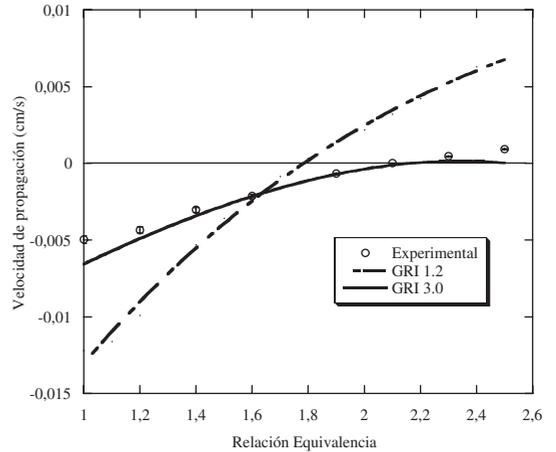


Figura 5. Velocidad de propagación de llama numérica y experimental para esferas de 3,5 mm de diámetro.

La Figura 6 presenta los resultados experimentales de velocidades de propagación de manera de analizarlos comparativamente. Los máximos valores absolutos se presentan para $\phi = 1,0$ con un valor 0,00844 cm/s y 0,00497 cm/s para 5,5 mm y 3,5 mm de diámetro de esferas, respectivamente. Desde este valor máximo las velocidades disminuyen hasta su estabilización en $\phi = 2,1$ y $\phi = 1,9$ para un medio

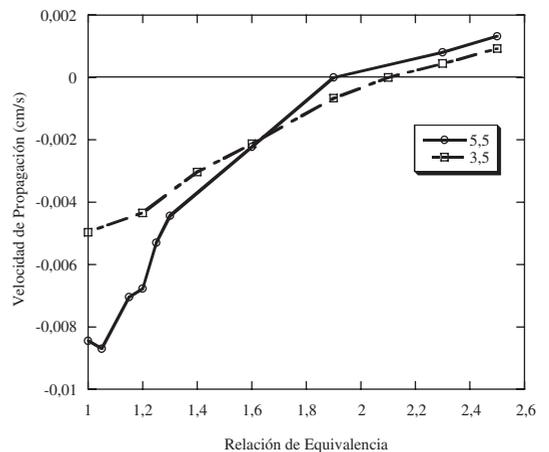


Figura 6. Velocidad de propagación de llama experimental para dos diámetros de esferas de alúmina.

poroso de 5,5 mm y 3,5 mm, respectivamente, para luego propagarse en contracorriente desde ese valor hasta $\phi = 2,5$. Para el rango de $1,0 < \phi < 1,4$ se presentan velocidades mayores para diámetro de esferas de 5,5 mm debido principalmente a las bajas temperaturas de combustión de etano registradas.

Productos de la combustión

Para relaciones de equivalencia mayores a 1,0 la combustión completa no puede ser alcanzada debido a la falta de oxígeno en las mezclas de combustible + aire. Los principales productos de combustión para estos casos son CO, H₂, CO₂ y CH₄ [1].

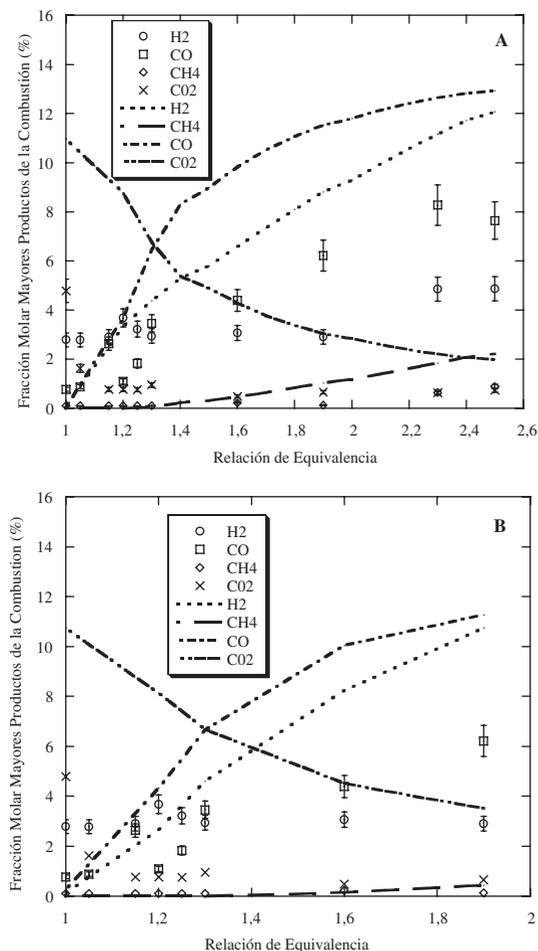


Figura 7. Principales productos de la combustión de etano para un medio poroso compuesto por un diámetro de esferas de 5,5 mm. Resultados experimentales (puntos discretos) y numéricos (líneas continuas). A. Utilizando GRI-MECH 3.0. B. Utilizando GRI-MECH 1.2.

Las Figuras 7 y 8 presentan los resultados de los principales productos de la combustión obtenidos experimentalmente y de la modelación matemática con los mecanismos GRI-MECH 1.2 y GRI-MECH 3.0 para un medio poroso de 5,5 mm y 3,5 mm de diámetro de esferas de alúmina, respectivamente. En la Figura 7 se muestra que al aumentar la relación de equivalencia el H₂, CO y CH₄ se incrementan y el CO₂ disminuye para los resultados experimentales y numéricos. La predicción numérica es sobreestimada para H₂, CO y CO₂ con ambos mecanismos, especialmente para relaciones de equivalencia mayores a 1,5. Las predicciones de CH₄ se presentan correctas respecto de los resultados experimentales con ambos mecanismos, cuyos resultados son similares entre sí.

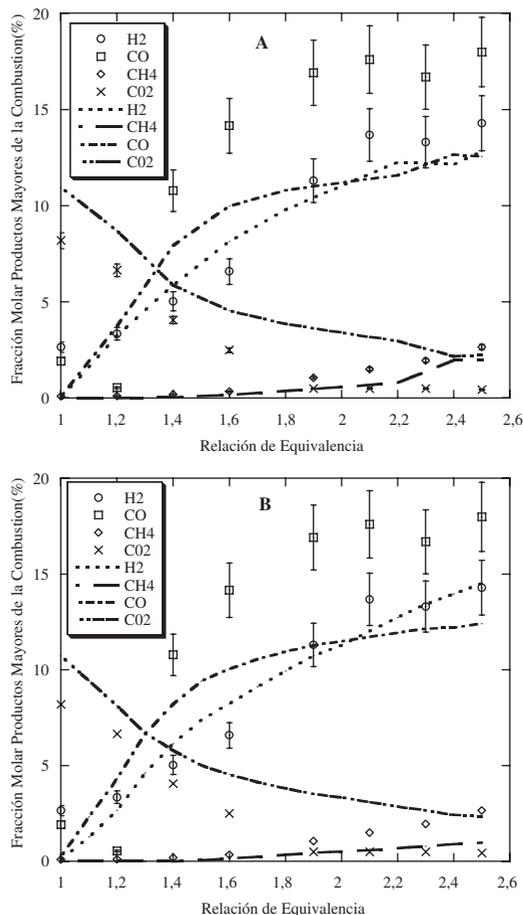


Figura 8. Principales productos de la combustión de etano para un medio poroso compuesto por un diámetro de esferas de 3,5 mm. Resultados experimentales (puntos discretos) y numéricos (líneas continuas). A. Utilizando GRI-MECH 3.0. B. Utilizando GRI-MECH 1.2.

En la Figura 8 se muestra que al aumentar la relación de equivalencia el H_2 , CO y CH_4 se incrementan y el CO_2 disminuye para los resultados experimentales y numéricos. En general las predicciones numéricas con ambos mecanismos de reacción, GRI-MECH 1.2 y GRI-MECH 3.0, contrastan correctamente los resultados experimentales.

Comparando los resultados experimentales, la Figura 9 muestra que la generación de H_2 es significativamente mayor para un diámetro de esferas de 3,5 mm, siendo la máxima generada con 5,5 mm de 4,87% y la de 3,5 mm de 14,29% para una $\phi = 2,5$, es decir, la generación se incrementa en un 10%. Para la generación de CO se tiene que para un diámetro de 5,5 mm se alcanza un 8,27% en $\phi = 2,3$ y para 3,5 mm un 17,99% en $\phi = 2,5$, es decir, un 9% mayor para el diámetro menor. Estos mejores resultados con un diámetro de 3,5 mm se deben principalmente a la mayor temperatura de combustión obtenida.

Conversión de hidrógeno (H_2) y monóxido de carbono (CO)

Los porcentajes de conversión de H_2 y CO respecto de la composición elemental de etano se presentan mayores para un medio poroso compuesto por esferas de alúmina de 3,5 mm de diámetro (Figura 10). Los porcentajes más altos de conversión de H_2 son de 19% y 61,3% en $\phi = 2,1$ para un diámetro de 5,5 mm y 3,5 mm, respectivamente. Por su parte el máximo porcentaje de conversión de CO

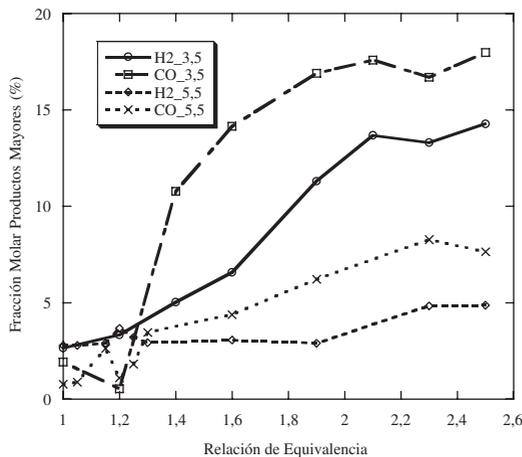


Figura 9. Resultados experimentales de productos de la combustión de etano para un medio poroso compuesto por un diámetro de esferas de 3,5 y 5,5 mm.

se encuentra en la misma equivalencia de 2,1 con un valor de 29,39% y 69,2%, respectivamente. La solución numérica no predice correctamente los porcentajes de conversión.

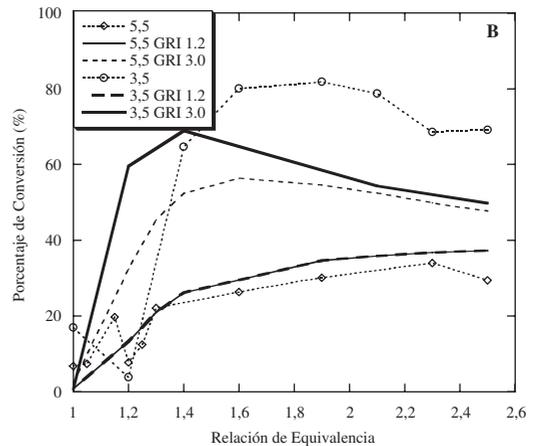
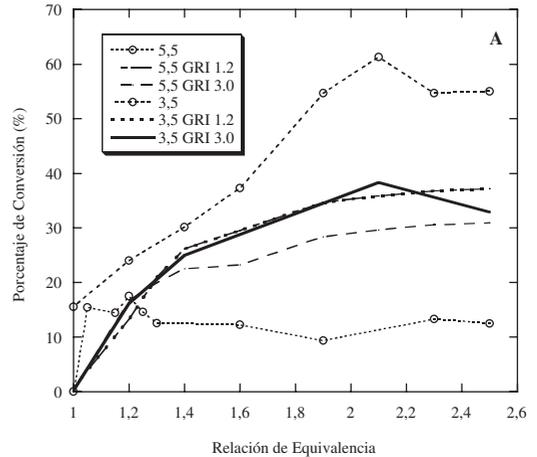


Figura 10. Conversión H_2 y CO para un medio poroso compuesto por esferas de diámetro de 3,5 mm y 5,5 mm. A. H_2 . B. CO.

CONCLUSIONES

Se analiza numérica y experimentalmente la combustión rica de la mezcla de etano-aire en medios porosos inertes (MPI) y su aplicación en la obtención de hidrógeno y gas de síntesis. Se diseñó y construyó un quemador de MPI para trabajar en un rango de relaciones de equivalencia desde la estequiometría ($\phi = 1,0$) hasta $\phi = 2,5$, con dos diámetros de esferas de alúmina (3,5 mm y 5,5 mm). Se simuló el proceso de combustión con los mecanismos de reacción GRI MECH 1.2 y GRI MECH 3.0 mediante el uso del programa PREMIX modificado.

Las predicciones numéricas con el mecanismo GRI-MECH 3.0 son correctas para las temperaturas de combustión en un medio poroso compuesto de esferas de alúmina de 3,5 mm, para relaciones de equivalencia mayores a 1,5. Las velocidades del frente de combustión, así como también los productos de combustión para este caso resultan similares, conservando las mismas tendencias, al igual que los productos de combustión.

Las temperaturas de combustión para un diámetro de esferas de 5,5 mm presentan valores menores a 1300 K para relaciones de equivalencia entre $\phi = 1,0$ y $\phi = 1,6$, lo cual se confirma con los resultados obtenidos por Toledo, Bubnovich, Saveliev y Kennedy [1]. Al modificar el diámetro de las esferas a 3,5 mm, las temperaturas de combustión bajo este rango de relación de equivalencia aumentan a valores mayores a 1300 K, debido a la mayor área de transferencia de calor entre la llama y el sólido. Para relaciones de equivalencia mayor a 1,6 las temperaturas se mantienen altas (~1300 K) independiente del diámetro de esferas de alúmina utilizado.

Para un medio poroso compuesto por esferas de alúmina de 5,5 mm las velocidades de propagación del frente de combustión aguas abajo (superadiabáticas) se encuentran para relaciones de equivalencia mayores a $\phi = 1,9$ y las velocidades aguas arriba (subadiabáticas) se observan para un rango de relación de equivalencia de 1,0 a 1,9. Para un diámetro de esfera de 3,5 mm las velocidades de propagación aguas abajo se encuentran para $\phi > 2,1$ y las velocidades aguas arriba entre $\phi = 1,0$ y $\phi = 2,1$. La mayor velocidad absoluta tiene un valor de 0,0084421 cm/s en $\phi = 1,0$ para un diámetro de esferas de 5,5 mm.

Para mezclas ricas la combustión completa no puede ser alcanzada debido al bajo contenido de oxígeno en la mezcla. Como resultado se forman los productos de oxidación parcial tales como H_2 , CO e hidrocarburos. Para diámetros de esferas de alúmina que componen el medio poroso de 5,5 mm y 3,5 mm la máxima concentración de hidrógeno

generada es de 4,9% y 14,3%, respectivamente. El máximo porcentaje de conversión de etano en H_2 (61,3%) y en CO (81%) se obtiene para 3,5 mm, lo cual muestra el potencial de este combustible como generador de hidrógeno y gas de síntesis.

AGRADECIMIENTOS

Los resultados presentados en este trabajo fueron obtenidos durante una investigación apoyada por la Dirección General de Investigación y Postgrado (DGIP) de la Universidad Técnica Federico Santa María y por el proyecto FONDECYT 11080106.

REFERENCIAS

- [1] M. Toledo, V. Bubnovich, A. Saveliev and L. Kennedy. "Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media". *International Journal of Hydrogen Energy*. Vol. 34, pp. 1818-1827. 2009.
- [2] T.B. Hunters, T.A. Litzinger, H. Wang and M. Frenklach. "Ethane oxidation at elevated pressures in the intermediate temperature regime: experiments and modeling". *Combust Flame*. Vol. 104, pp. 505-23. 1996.
- [3] C.V. Naik, A.M. Dean. "Detailed kinetic modeling of ethane oxidation". *Combust Flame*. Vol. 145, pp. 16-37. 2006.
- [4] C.G. Fotache, H. Wang, C.K. Law. "Ignition of ethane, propane, and butane in counterflow jets of cold fuel versus hot air under variable pressures". *Combust Flame*. Vol. 117, pp. 777-94. 1999.
- [5] V.Y. Basevich, V.I. Vedeneev and V.S. Arutyunov. "Kinetic interpretation of multi-stage self-ignition of paraffin hydrocarbons". *Chem Phys Rep*. Vol. 17, pp. 917-26. 1998.
- [6] M. Frenklach, H. Wang, M. Goldenberg, G.P. Smith, D.M. Golden, C.T. Bowman, R.K. Hanson, W.C. Gardiner and V. Lissianski. "GRI-Mech—An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion". *Gas Research Institute Report N° GRI-95/0058*. URL: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/