

Разработка алгоритма анализа детальной кинетики горения газообразных топлив с использованием гиперграфа химических реакций

Мария Александровна Козлова 

Институт систем энергетики Л. А. Мелентьева СО РАН, Иркутск, Россия
Контакт для переписки: kma95@isem.irk.ru 

Аннотация. В данной работе был разработан и протестирован алгоритм анализа поэтапного гиперграфа химических реакций на примере горения метана в чистом кислороде. Гиперграф визуализирует механизм химической реакции. Исходными данными для алгоритма являются данные детального механизма в виде списка компонентов и реакций. На каждом этапе гиперграфа проводится расчет скоростей реакций и равновесных количеств веществ, присутствующих в системе на данном этапе. Такой подход позволит отбросить компоненты, которые не могут образоваться в результате цепочки взаимопревращений.

Результатами расчета является зависимость количеств компонентов от этапа гиперграфа. Также были получены зависимости значимых веществ от температуры. Расчеты показали, что с ростом температуры расчет число значимых компонентов, при этом на конечный результат влияет выбор последовательности реакций.

Ключевые слова: детальная кинетика, горение метана, граф химических реакций, математическое моделирование, разработка алгоритма, поиск равновесных количеств компонентов, сокращение детального механизма.

Благодарности: Исследование выполнено в рамках проекта государственного задания (№FWEU-2026-0010) программы фундаментальных исследований РФ на 2021–2030 гг. с использованием ресурсов ЦКП «Высокотемпературный контур» и за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 23-29-00406).

Цитирование: Козлова М. А. 2026. Разработка алгоритма анализа детальной кинетики горения газообразных топлив с использованием гиперграфа химических реакций // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-мате-

математическое моделирование. нефть, газ, энергетика. Том 12. № 1 (45). С. 117–130.
<https://doi.org/10.21684/2411-7978-2026-12-1-117-130>

Поступила 30.10.2025; одобрена 01.12.2025.; принята 02.12.2025

Development of an algorithm for analyzing the detailed kinetics of combustion of gaseous fuels using the hypergraph of chemical reactions

Mariia A. Kozlova 

Melentiev Energy Systems Institute SB RAS, Irkutsk, Russia
kma95@isem.irk.ru 

Abstract. In this paper, we developed and tested an algorithm for analyzing a stage-by-stage hypergraph of chemical reactions using the example of methane combustion in pure oxygen. The hypergraph visualizes the chemical reaction mechanism. The algorithm's input data is a detailed mechanism listing components and reactions. At each stage of the hypergraph, the reaction rates and equilibrium amounts of substances present in the system at that stage are calculated. This approach allows us to discard components that cannot form as a result of a chain of interconversions. The calculation results show the dependence of component quantities on the hypergraph stage. Temperature dependences of significant substances were also obtained. The calculations showed that as temperature increases, the number of significant components decreases, and the final result is influenced by the choice of reaction sequence

Keywords: detailed kinetics, methane combustion, chemical reaction graph, mathematical modeling, algorithm development, finding equilibrium quantities of components, reduction of detailed mechanism.

Acknowledgements: The research was carried out under State Assignment Project (no. FWEU-2026-0010) of the Fundamental Research Program of Russian Federation 2021-2030 using the resources of the High-Temperature Circuit Multi-Access Research Center and partly supported by the Russian Foundation of Basic Research, Grant No. 23-29-00406.

Citation: Kozlova, M. A. 2026. Investigation of methane combustion using chemical reaction hypergraph. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 12(1), 117–130. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2026-12-1-117-130>

Received Oct. 30, 2025; Reviewed Dec. 1, 2025; Accepted Dec. 2, 2025

Введение

Основную сложность в модель реагирующей системы вносят химические реакции, которые развиваются в пространстве и во времени с выделением или поглощением тепла и изменением состава системы. Как правило, в рамках существующих моделей вычислительной гидродинамики используются упрощенные представления о механизме химической кинетики. Например, брутто-форма горения метана выглядит следующим образом:



В действительности, химическая реакция представляет собой множество последовательных и параллельных элементарных реакций с образованием промежуточных компонентов [Романовский, 2006]. Такая совокупность компонентов и реакций называется детальным механизмом. Например, при горении того же метана кроме воды и углекислого газа образуются другие вещества, в том числе и экологически опасные: формальдегид НСОН , угарный газ СО , полиароматические углеводороды, сажа. При этом на механизм реакции влияют поверхность реактора, состав атмосферы, примеси [Арутюнов, 2011].

На сайте [Faravelli, 2018] в свободном доступе представлены детальные механизмы горения различных видов топлив, в том числе и метана. Самый крупный механизм горения метана — «NUIGMech-1.1-2020» — включает более 2700 компонентов и более 11 тысяч реакций. Другой наиболее популярный механизм «GRI-MECH 3.0» включает 53 вещества и 325 реакций [Smith, 1999]. Этот механизм был использован в работах [Сивкова, 2009; Слостная, 2023] для изучения влияния различных условий горения на характеристики пламени метановоздушной смеси. Также проводятся работы по сравнению механизмов. Например, в работе [Li, Williams, 2002] были сравнены 24-этапный и 9-этапный механизмы горения метана. Показано, что расчеты по детальному механизму лучше согласуются с экспериментальными данными. В расчетах участвовали только реакции с образованием/взаимодействием максимум двух частиц, при этом наиболее существенными компонентами отмечены следующие: CH_3 , OH , HO_2 , H_2O_2 , CH_2O , CHO , CH_3O , H , O .

Существуют программные комплексы, которые предназначены для моделирования реагирующих систем с учетом детальной химической кинетики, например, расчетные пакеты «laminarSMOKE» и «OpenSMOKE++» [Faravelli, 2018]. Эти пакеты позволяют включать детальные механизмы в виде внешнего файла, как это было сделано, например, в работах [Суоци, 2013, 2015; Слостная, 2023]. Встроенные решатели жестких систем дифференциальных уравнений не универсальны, и разработчики данного программного комплекса сосредоточены на совершенствовании и дополнении этих решателей [Суоци, 2015].

Поскольку число реакций велико, это замедляет численный расчет состава газовой смеси. При этом численное решение жесткой системы практически невозможно для высокой размерности системы (сотни и тысячи реакций). В связи с этим в литературе часто ставится задача поиска наиболее существенных реакций и компонентов. Методики

отбора существенных компонентов и реакций варьируется от автора к автору. Например, в работах [Lu, Law, 2005; Xia, 2009; Chen, Chen, 2018; Wu, 2020] строят скелетный механизм путем отбора существенных компонентов и реакций по каким-либо критериям. При этом механизм реакции часто визуализируется в виде реакционной сети, которые удобно исследовать математическими методами [Feinberg, 2019]. Отмечается, что ошибки в предсказанных характеристиках горения накапливаются из-за удаления компонентов из подробных механизмов.

Этап решения системы жестких уравнений иногда заменяют этапом поиска равновесных количеств на основе нахождения минимума энергии Гиббса системы, как это было сделано в работах [Горбань, 2001; Graciun, Feinberg, 2005]. Такие расчеты позволяют получить качественное представление о детальном механизме протекания химической реакции. При этом равновесный способ не учитывает время, необходимое для протекания химических реакций [Корепанов, 2008].

В данной работе предложен и протестирован алгоритм отбора веществ и реакций на основе представления химической реакции как последовательности элементарных превращений компонентов, что можно визуализировать в виде гиперграфа. Такое представление позволит отбросить вещества, которые не могут образоваться в цепочке взаимодействий. На каждом этапе механизма проводится оценка скоростей элементарных реакций и равновесный расчет количеств компонентов. Алгоритм протестирован на механизме горения метана «CRECK_2003_C1_C3_HT», который содержит 114 веществ и 1999 реакций.

Методика

В данной работе нас интересует только развитие химической реакции при заданных температуре, давлении и количеств начальных компонентов. Расчет проводится в одной расчетной ячейки, для которой приняты следующие упрощения:

1. Давление и температура постоянны, то есть при расчете равновесных количеств применимо условие минимума энергии Гиббса.
2. Нет стоков/истоков тепла и массы.
3. Компоненты перемешиваются мгновенно.

Допущения при построении и анализе поэтапного механизма детальной кинетики химической реакции следующие:

4. Взаимодействия происходят максимум между двумя частицами, поскольку программный комплекс на данном этапе разработки позволяет расчет только с такими взаимодействиями. В дальнейшем автор планирует дополнить комплекс возможностью включения трехчастичных взаимодействий.
5. Применимо термическое уравнение состояния идеального газа: $pV = \sigma RT$, где p — давление, Па; V — объем, м³; R — универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); T — температура, К.
6. Все элементарные реакции полагаются обратимыми [Rao, Esposito, 2016], при этом брутто-реакция горения метана трактуется как необратимая.

Алгоритм анализа представлен на рис. 1.



Рис. 1. Алгоритм анализа детального механизма химической реакции
Fig. 1. Algorithm for analyzing the detailed mechanism of a chemical reaction

Для построения и анализа гиперграфа химических реакций авторами был написан комплекс программ [Козлова, 2023].

Построение механизма химической реакции

На рис. 2 в соответствии с методикой из [Козлова, Шаманский, 2022] представлен избыточный механизм, построенный на основе «CRECK_2003_C1_C3_HT».

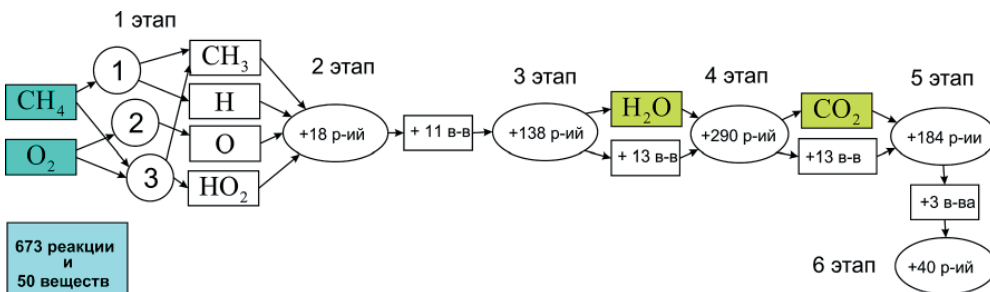
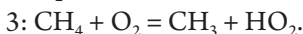
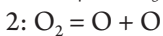
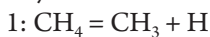


Рис. 2. Гиперграф на основе «CRECK_2003_C1_C3_HT»
Fig. 2. Hypergraph on based «CRECK_2003_C1_C3_HT»

Кругами на рис. 2 обозначены реакции, прямоугольниками — компоненты. Зеленым выделены исходные компоненты, желтым выделены основные продукты реакции. Каждый этап гиперграфа представляет собой совокупность элементарных реакций между компонентами, появившимися на предыдущем этапе. При этом были удалены азотсодержащие компоненты для сокращения времени расчетов, а исходный список реакций был дополнен обратными. Таким образом получилось 50 компонентов и 774 реакции. Полученному механизму в таком виде было присвоено рабочее название «CRECK».

Например, этап 1 представляет собой совокупность 6 реакций, которые возможны между исходными CH_4 и O_2 :



Эти реакции генерируют 4 новых вещества: CH_3 , H , O , HO_2 , которые дополняют исходный список. На втором этапе между этими компонентами возможны 49 реакций, и одна из них $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$ приводит к образованию воды. Развитие графа происходит до тех пор, пока список веществ не будет пополняться и пока не будут появляться новые реакции.

Возникает вопрос: какие реакции и вещества могут присутствовать в реальности при горении метана? Для ответа на этот вопрос в данной работе предложено на каждом этапе графа анализировать веса дуг-реакций и вершин-веществ и находить равновесные количества веществ.

Веса дуг поэтапного гиперграфа химических реакций

Для скоростей реакций (они же веса дуг гиперграфа) воспользуемся формулой, приведенной в [Шаманский, Козлова, 2023]:

$$\omega_x = \tilde{\varphi}(T) \left(\frac{p}{\sigma} \right)^{m^\pm} \left[\exp \left(\sum_{i=1}^{m^+} \frac{\mu^+}{RT} \right) - \exp \left(\sum_{i=1}^{m^-} \frac{\mu^-}{RT} \right) \right], \quad (2)$$

где $\tilde{\varphi}(T) = k_C^\pm (RT)^{-m^\pm} \exp \left(- \sum_{i=1}^{m^\pm} \mu_i^{\pm,0} / RT \right)$ — кинетический коэффициент, который может быть определен по концентрационным константам скоростей как прямой, так и обратной реакции; μ_i^0 — стандартный химический потенциал i -го вещества, Дж/моль; R — универсальная газовая постоянная; T — температура, К; p — давление в системе, атм; k_N^\pm — кинетические коэффициенты химических реакций, которые в базах данных записываются для молярных концентраций реагентов; m^\pm — число реагентов/продуктов реакции; σ — число всех молей в системе. Вес дуги реакции соответствует проводимости данной реакции при перераспределении элементов между реагирующими веществами.

Константа реакции рассчитывается следующим образом:

$$k_C^\pm = k_C^\pm(T) = A \cdot \left(\frac{T}{298} \right)^n e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad (3)$$

где A , E_a и n — коэффициенты из базы данных. Константы k_C^+ и k_C^- — константы прямой и обратной реакций соответственно. Размерность константы скорости реакции зависит от порядка реакции. Например, для реакции 2-го порядка константа скорости реакции имеет размерность $\text{м}^3/(\text{моль}\cdot\text{с})$.

Расчет равновесного количества вещества

На данном же этапе работы предполагаем, что количества веществ являются равновесными.

На каждом этапе графа производим сортировку реакций по скоростям. Скорости вычислены по формуле (2). Затем последовательно, начиная с самой быстрой реакции, производим расчет равновесного количества веществ, участвующих в данной реакции. Например, для реакции $\text{CH}_4 + \text{O}_2 = \text{CH}_3 + \text{HO}_2$ рассчитываем равновесное количество для веществ CH_4 , O_2 , CH_3 и HO_2 .

Для расчета количеств веществ, участвующих в элементарной реакции, решаем задачу выпуклого программирования на поиск минимума энергии Гиббса: найти $\min(G(\mathbf{x}, P, T))$ при условиях $\mathbf{Ax}^0 = \mathbf{Ax}$, $\mathbf{x} > 0$, где \mathbf{x} — равновесные количества веществ, моль; \mathbf{x}^0 — их начальные количества, моль; \mathbf{A} — матрица стехиометрических коэффициентов. Температуру и давление полагаем постоянными. Разумеется, продуктов не может образоваться больше, чем это позволяют количества реагентов, поэтому в расчетах необходимо ввести дополнительное ограничение: $\mathbf{x}_{p,r} \leq \mathbf{x}_{p,r}^0 + \min(\mathbf{x}_{r,p}^0)$, где индексы p и r указывают на продукты и реагенты соответственно

Расчет констант обратных реакций

В теории $\frac{k^+}{k^-} = K$, где K — термодинамическая константа равновесия. В реальности кинетические константы реакций могут быть не согласованы с термодинамическими, то есть $\frac{k^+}{k^-} \neq K$, на что обращено внимание в [Горбань, 1989]. Основная причина заключается в том, что методы измерения в экспериментах у разных авторов разные. Для расчета кинетического коэффициента необходимо выбрать либо k^+ , либо k^- . В той же работе [Горбань, 1989] предложен способ согласования констант на основе многогранника согласованности.

В данной работе был применен следующий способ. Предположим, что для расчетов мы выбрали k^+ . Поскольку $k_C^\pm = k_C^\pm(T) = A \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^n e^{-\frac{E_a}{RT}}$, то для каждой реакции появляются три неизвестные — A^- , E_a^- и n^- . Чтобы их найти, необходимо составить систему из N уравнений (N разных температур). Из условия $K = \exp\left(\frac{\Delta G}{RT}\right) = \frac{k^+}{k^-}$ следует, что:

$$\ln(k^+) = \ln\left(\frac{\Delta G}{RT_i}\right) + \ln(k^-), i = 1 \dots N. \quad (4)$$

Подставляя $k^\pm = A^\pm \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n^\pm} e^{-\frac{E_a^\pm}{RT}}$ в (4) получаем систему из N уравнений относительно $\ln(A^-)$, E_a^- и n^- :

$$\ln(A^-) + \left[\ln \frac{T_i}{298} \right] n^- + \left[-\frac{1}{RT_i} \right] E_a^- = \ln(k^+) + \frac{\Delta G}{RT_i}, i = 1, 2, 3. \quad (5)$$

В данной работе для упрощения и для получения квадратной матрицы 3×3 были применены 3 значения температур: $T_1 = 1000$ К, $T_2 = 1500$ К и $T_3 = 2000$ К.

Результаты

На рис. 3 представлены расчеты количеств компонентов с относительным содержанием более 25% в зависимости от номера этапа в графе. Пороговое значение 25% было выбрано произвольным образом в иллюстративных целях. При меньшем пороговом значении количество отображаемых веществ увеличится. Начальные количества веществ для равновесного расчета: CH_4 — 2 моль, O_2 — 1 моль, остальные вещества — 0 моль.

При $T = 1500$ К наблюдаются незначительные изменения количеств компонентов. Максимальное количество у воды — 3,8 ммоль. При $T = 2000$ К основные продукты это H_2O и CO_2 (рис. 3, а). Содержание других продуктов незначительно.

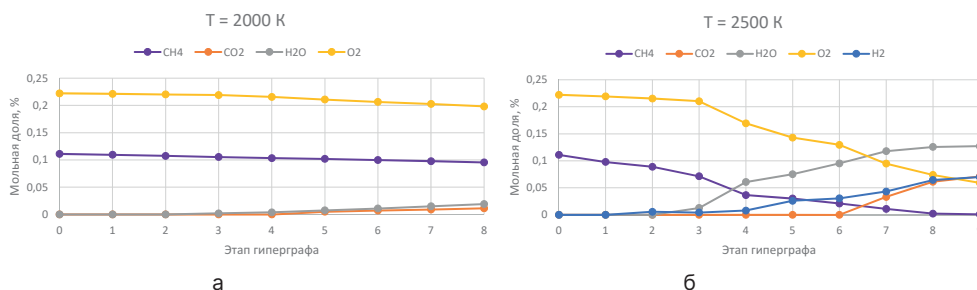


Рис. 3. Зависимость количеств компонентов с мольной долей более 25% от этапа гиперграфа при: а) $T = 2000$ К; б) $T = 2500$ К

Fig. 3. Dependence of the amounts of components with a mole fraction of more than 25% on the hypergraph stage at: а) $T = 2000$ К; б) $T = 2500$ К

Число этапов для разных температур разное из-за оценки весов реакций на каждом этапе. При $T = 2500$ К наблюдается большее разнообразие значимых компонентов (рис. 3, б). Значимыми компонентами с мольной долей более 5% кроме представленных на рис. 3, б оказываются CO , H_2 , OH , HCHO , CHO , $\text{O}(\text{CH})_2\text{O}$, H . Количество образовавшегося водорода H_2 сопоставимо с количеством CH_2 — 0,51 моль (17%), что довольно много. Самый близкий к этому результат, найденный в литературе, составляет 13% [Li, 2020] и получен на основе механизма «GRI-MECH 3.0». Такие результаты получаются вследствие того, что с повышением температуры возрастает вклад некоторых реакций с участием водорода, при этом расчет проводился без учета тепло- и массопереноса.

Из рис. 3 можно наблюдать явную зависимость количеств компонентов не только от исходного списка реакций, но и от температуры. Были проведены расчеты для диапа-

зона от 1500 до 3000 К с шагом 100 К для более явной демонстрации этой зависимости (рис. 4).

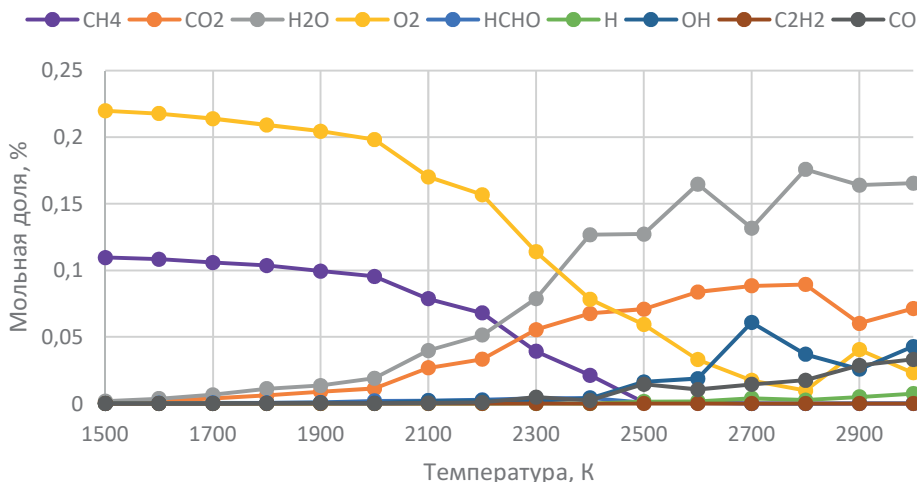


Рис. 4. Зависимость некоторых компонентов от температуры

Fig. 4. Temperature dependence of components

Значения компонентов приведены для последнего этапа гиперграфа. Кроме указанных на рис. 4 компонентами с мольной долей более 5 % оказались CH_2 , CH_3 , CH_3O , CO , $\text{O}(\text{CH})_2\text{O}$, HCO , H_2 , O . В этот список не вошли такие значимые компоненты, как H_2O_2 , HO_2 , CH_2O , указанные в [Li, Williams, 2002].

Расчет для одной температуры около 25 минут. Расчеты были произведены на процессоре Intel Core i5-10600KF CPU.

Устойчивость алгоритма

В данном алгоритме различные подходы к выбору последовательности на каждом этапе гиперграфа приводят к значительным расхождениям в значениях количеств компонентов. На рис. 5 показана зависимость от выбора последовательности реакций для расчета равновесных количеств для смеси $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$. Результаты были сравнены с данными из [Gerasimov, 2023].

На рис. 5 «to min» означает расчет от самой быстрой к самой медленной реакции; «to max» — от самой медленной к самой быстрой; «by 2» означает смену местами четных и нечетных по номеру реакций. Максимальное расхождение наблюдается при расчете от самой медленной к самой быстрой реакции, при этом для некоторых компонентов (OH) способ расчета оказывает значительное влияние. Таким образом, алгоритм с приведенными способами выбора очередности реакций оказывается неустойчивым, в связи с чем появляется необходимость разработки методики ранжирования элементарных реакций на каждом этапе механизма.

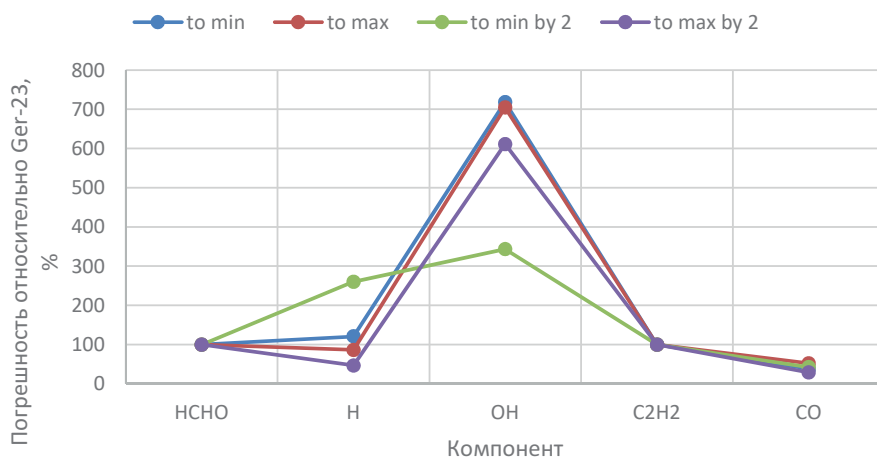


Рис. 5. Влияние выбора последовательности реакций на результат расчета для смеси $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$

Fig. 5. The influence of the choice of reaction sequence on the calculation result for a mixture $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$

Обсуждение

Тестирование методики в данной работе показало, что при относительно низких температурах ($T = 1500 \text{ K}$) количества веществ практически не меняются, конверсия реагентов в продукты, хотя и термодинамически выгодна, кинетически ограничена. При температурах порядка 2000 K происходит существенная конверсия реагентов, при температурах выше 2500 K наблюдается диссоциация продуктов сгорания. Это объясняется тем, что были выбраны реакции с образованием/взаимодействием максимум двух частиц (по [Li, Williams, 2002]) и без участия азотсодержащих компонентов, и более короткие пути образования компонентов в самом гиперграфе оказались не учтены.

На устойчивость алгоритма на этапе расчета равновесных компонентов сильно влияет выбор последовательности реакций: самая последняя реакция в последовательности оказывается решающей, в связи с чем появляется задача оптимального ранжирования реакций.

Заключение

Разработан и реализован алгоритм построения и анализа детального механизма химической реакции. Все расчеты были проведены с использованием ресурсов ЦКП «Высокотемпературный контур». Подход был применен к горению метана в кислороде. Было выявлено, что с ростом температуры расчет число значимых компонентов. Преимуществом методики является возможность проследить развитие механизма химической реакции с повторением веществ и компонентов. Недостатки же, однако, связаны с несовершенством численного расчета количеств компонентов на каждом

этапе развития механизма, и в дальнейшем планируется работа над заменой данного этапа другим методом.

Представленный в данной работе подход на основе оценки весов и дуг гиперграфа позволит отбросить несущественные компоненты и реакции по заданному пороговому значению. Результаты оценки дополняют решение прямой задачи на основе кинетической модели с учетом детального механизма химических процессов. В частности, при исследовании детальной кинетики горения метана возможна количественная оценка образования тех или иных компонентов в зависимости от температуры и давления.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- Арутюнов В. С. Окислительная конверсия природного газа. М.: Красанд, 2011. 590 с.
- Горбань А. Н., Каганович Б. М., Филиппов С. П. Термодинамические равновесия и экстремумы: Анализ областей достижимости и частичных равновесий в физико-химических и технических системах. Новосибирск: Наука, 2001. 296 с.
- Горбань А. Н., Миркес Е. М., Бочаров А. Н., Быков В. И. Термодинамическое согласование кинетических данных // Физика горения и взрыва. 1989. Том 5. С. 81–88.
- Козлова, М. А. (2023). Кинетический анализ поэтапного гиперграфа химических реакций. Св. О рег № 2023683002 [MATLAB].
- Козлова М. А., Шаманский В. А. Построение графа химических реакций для анализа реагирующих систем // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2022. Том 4. С. 108–118. <https://doi.org/10.38028/ESI.2022.28.4.008>
- Корепанов М. А. Математическое моделирование химически реагирующих течений // Химическая физика и мезоскопия. 2008. Том 10(3). С. 268–279.
- Романовский Б. В. Основы химической кинетики. М.: Экзамен, 2006. 415 с.
- Сивкова Е. Э. Стабилизация ламинарного метано-воздушного пламени наносекундным разрядом // Труды МФТИ. 2009. Том 1(3). С. 151–159.
- Сластная Д. А., Хребтов М. Ю., Мулладжанов Р. И., Дулин В. М. Прямое численное моделирование взаимодействия пламени метановоздушной смеси с плоской охлажденной преградой с учетом детальной кинетики // Всероссийская Конференция «XXXIX Сибирский Теплофизический Семинар»: Тезисы Докладов. 2023. С. 249.
- Шаманский В. А., Козлова М. А. Поиск экстремального содержания компонента в реагирующей системе с помощью графа химических реакций // Вестник Кибернетики. 2023. Том 21(1). С. 21–28. <https://doi.org/10.35266/1999-7604-2023-1->
- Chen Y., Chen J.-Y. Towards improved automatic chemical kinetic model reduction regarding ignition delays and flame speeds // Combustion and Flame. 2018. Vol. 190. Pp. 293–301. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.11.024>
- Craciun G., Feinberg M. Multiple Equilibria in Complex Chemical Reaction Networks: I. The Injectivity Property // SIAM Journal on Applied Mathematics. 2005. Vol. 65, No. 5. Pp. 1526–1546. <https://doi.org/10.1137/S0036139904440278>
- Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. Numerical modeling of laminar flames with detailed kinetics based on the operator-splitting method // Energy Fuels. 2013. Vol. 27. Pp. 7730–7753. <https://doi.org/10.1021/ef4016334>

- Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms // *Computer Physics Communications*. 2015. Vol. 192. Pp. 237–264. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.02.014>
- Faravelli T., Frassoldati A., Cuoci A., Mehl M., Stagni A., Pelucchi M., Maffei L. P., Ranzi E. 2018. The CRECK Modeling Group. <https://www.creckmodeling.polimi.it/> (дата обращения: 02.10.2024)
- Feinberg M. *Foundations of Chemical Reaction Network Theory*. Springer. 2019. 473 p.
- Gerasimov I. E., Bolshova T. A., Osipova K. N., Dmitriev A. M., Knyazkov D. A., Shmakov A. G. Flame Structure at Elevated Pressure Values and Reduced Reaction Mechanisms for the Combustion of CH₄/H₂ Mixtures // *Energies*. 2023. Vol. 16(22). Pp. 7489. <https://doi.org/10.3390/en16227489>
- Li S. C., Williams F. A. Reaction Mechanisms for Methane Ignition // *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 2002. Vol. 124. Pp. 471–480. <https://doi.org/10.1115/1.2000-GT-0145>
- Li Z., Li Y., Lou C. 2020. Kinetic simulation of methane combustion reaction: From mechanism to application // APEN-MIT-2019. Applied Energy Symposium: MIT A+B (May 22–24, 2019, Boston, USA) // <https://doi.org/10.46855/energy-proceedings-428>
- Lu T., Law C. K. A directed relation graph method for mechanism reduction // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005. Vol. 30 No. 1. Pp. 1333–1341. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.145>
- Manion A., Huie R. E., Levin R. D., Burgess Jr. D. R., Orkin V. L., Tsang W., McGivern W. S., Hudgens J. W., Knyazev V. D., Atkinson D. B., Chai E., Tereza A. M., Lin C.-Y., Allison T. C., Mallard W. G., Westley F., Herron J. T., Hampson R. F., Frizzell D. H. 2023. NIST Chemical Kinetics Database. <https://kinetics.nist.gov/kinetics/> (дата обращения: 10.05.2023)
- Rao R., Esposito, M. Nonequilibrium Thermodynamics of Chemical Reaction Networks: Wisdom from Stochastic Thermodynamics // *Physical Review X*. 2016. Vol. 6, No. 4. Pp. 041064. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.041064>
- Smith G. P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R., Song S., Gardine W. C., Lissianski Jr. V., Qin Z. 1999. GRI-mech. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>
- Wu Y., Liu Y., Lu T. 2020. A linearized error propagation method for skeletal mechanism reduction // *Combustion and Flame*. Vol. 211. Pp. 303–311. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.10.003>
- Xia A. G., Michelangeli D. V., Makar P. A. Mechanism reduction for the formation of secondary organic aerosol for integration into a 3-dimensional regional air quality model: α -pinene oxidation system // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2009. Pp. 4341–4362. <https://doi.org/10.5194/acp-9-4341-2009>

References

- Arutyunov, V. S. (2011). *Okislitel'naya konversiya prirodnogo gaza*. Krasand. [In Russian]
- Gorban', A. N., Kaganovich, B. M., & Filippov, S. P. (2001). *Termodinamicheskie ravnovesiya i ekstremumy: Analiz oblastey dostizhimosti i chastichnykh ravnovesiy v fiziko-khimicheskikh i tekhnicheskikh sistemakh*. Nauka. [In Russian]

- Gorban, A. N., Mirkes, E. M., Bocharov, A. N., & Bykov, V. I. (1989). Termodinamicheskoe soglasovanie kineticheskikh dannyykh. *Fizika goreniya i vzryva*, 5, 81–88. [In Russian]
- Kozlova, M. A. (2023). Kineticheskiy analiz poetapnogo gipergrafa khimicheskikh reaktsiy. *Sv. O reg № 2023683002 [MATLAB]*. [In Russian]
- Kozlova, M. A., & Shamanskiy, V. A. (2022). Postroenie grafa khimicheskikh reaktsiy dlya analiza reagiruyushchikh sistem. *Informatsionnye i matematicheskie tekhnologii v nauke i upravlenii*, 4, 108–118. <https://doi.org/10.38028/ESI.2022.28.4.008> [In Russian]
- Korepanov, M. A. (2008). Matematicheskoye modelirovaniye khimicheskoy reagiruyushchikh techeniy. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. [In Russian]
- Romanovskiy, B. V. (2006). *Osnovy khimicheskoy kinetiki*. Ekzamen. [In Russian]
- Sivkova, E. E. (2009). Stabilizatsiya laminarnogo metano-vozdushnogo plameni nano-sekundnym razryadom. *Trudy MFTI*, 1(3), 151–159. [In Russian]
- Slastnaya, D. A., Khrebtov, M. Yu., Mullyadzhyanov, R. I., & Dulin, V. M. (2023). Pryamoye chislennoye modelirovaniye vzaimodeystviya plameni metanovo-vozdushnoy smesi s ploskoy okhlazhdennoy pregradoy s uchedom detal'noy kinetiki. *Vserossiyskaya Konferentsiya "XXXIX Sibirskiy Teplofizicheskiiy Seminar": Tezisy Dokladov*, 249. [In Russian]
- Shamanskiy, V. A., & Kozlova, M. A. (2023). Poisk ekstremal'nogo sodержaniya komponenta v reagiruyushchey sisteme s pomoshch'yu grafa khimicheskikh reaktsiy. *Vestnik Kibernetiki*. 21(1), 21–28. <https://doi.org/10.35266/1999-7604-2023-1>
- Chen, Y., & Chen, J.-Y. (2018). Towards improved automatic chemical kinetic model reduction regarding ignition delays and flame speeds. *Combustion and Flame*, 190, 293–301. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.11.024>
- Craciun, G., & Feinberg, M. (2005). Multiple Equilibria in Complex Chemical Reaction Networks: I. The Injectivity Property. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 65(5), 1526–1546. <https://doi.org/10.1137/S0036139904440278>
- Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., & Ranzi, E. (2013). Numerical modeling of laminar flames with detailed kinetics based on the operator-splitting method. *Energy Fuels*, 27, 7730–7753. <https://doi.org/10.1021/ef4016334>
- Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., & Ranzi, E. (2015). OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms. *Computer Physics Communications*, 192, 237–264. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.02.014>
- Faravelli, T., Frassoldati, A., Cuoci, A., Mehl, M., Stagni, A., Pelucchi, M., Maffei, L. P., & Ranzi, E. (2024, October 2). *The CRECK Modeling Group*. Retrieved October 2, 2024, from <https://www.creckmodeling.polimi.it/>.
- Feinberg, M. (2019). *Foundations of Chemical Reaction Network Theory*. Springer.
- Gerasimov, I. E., Bolshova, T. A., Osipova, K. N., Dmitriev, A. M., Knyazkov, D. A., & Shmakov, A. G. (2023). Flame Structure at Elevated Pressure Values and Reduced Reaction Mechanisms for the Combustion of CH₄/H₂ Mixtures. *Energies*, 16(22), 7489. <https://doi.org/10.3390/en16227489>
- Li, S. C., & Williams, F. A. (2002). Reaction Mechanisms for Methane Ignition. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 124, 471–480. <https://doi.org/10.1115/2000-GT-0145>

- Li, Z., Li, Y., & Lou, C. (2020). Kinetic simulation of methane combustion reaction: From mechanism to application. *APEN-MIT-2019. Applied Energy Symposium: MIT A+B* (May 22-24, 2019, Boston, USA). <https://doi.org/10.46855/energy-proceedings-428>
- Lu, T., & Law, C. K. (2005). A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1), 1333–1341. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.145>
- Manion, A., Huie, R. E., Levin, R. D., Burgess Jr., D. R., Orkin, V. L., Tsang, W., McGivern, W. S., Hudgens, J. W., Knyazev, V. D., Atkinson, D. B., Chai, E., Tereza, A. M., Lin, C.-Y., Allison, T. C., Mallard, W. G., Westley, F., Herron, J. T., Hampson, R. F., & Frizzell, D. H. (2023, May 10). *NIST Chemical Kinetics Database*. Retrieved May 10, 2023, from <https://kinetics.nist.gov/kinetics/>
- Rao, R., & Esposito, M. (2016). Nonequilibrium Thermodynamics of Chemical Reaction Networks: Wisdom from Stochastic Thermodynamics. *Physical Review X*, 6(4), 041064. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.041064>
- Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R., Song, S., Gardine, W. C., Lissianski, Jr. V., & Qin, Z. (1999). *GRI-mech*. Retrieved June 10, 2023, from <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>
- Wu, Y., Liu, Y., & Lu, T. (2020). A linearized error propagation method for skeletal mechanism reduction. *Combustion and Flame*, 211, 303–311. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.10.003>
- Xia, A. G., Michelangeli, D. V., & Makar, P. A. (2009). Mechanism reduction for the formation of secondary organic aerosol for integration into a 3-dimensional regional air quality model: α -pinene oxidation system. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4341–4362. <https://doi.org/10.5194/acp-9-4341-2009>

Информация об авторах

Мария Александровна Козлова, младший научный сотрудник, лаборатория термодинамики № 72, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук, Иркутск, Россия.
kma95@isem.irk.ru,
<https://orcid.org/0000-0001-8860-6768>,
https://elibrary.ru/author_profile.asp?authorid=1157720

Information about the authors

Mariia A. Kozlova, junior researcher in the laboratory “Thermodynamics” No. 72, the Melentiev Energy Systems Institute of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.
kma95@isem.irk.ru,
<https://orcid.org/0000-0001-8860-6768>
https://elibrary.ru/author_profile.asp?authorid=1157720