



UNIVERSITE D'ORLEANS



Région Centre

# THESE

*présentée à*

L'UNIVERSITE D'ORLEANS

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

Discipline : Chimie - Physique  
Spécialité : Cinétique Chimique

par

Jocelyn LUCHE

*Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion*

*Application à un mécanisme du kérosène*

*Soutenue le 5 Novembre 2003*

**MEMBRES DU JURY :**

- **J. P. Sawerysyn** *Professeur à l'Université de Lille I (Rapporteur)*
- **G. Scacchi** *Professeur à l'E.N.S.I.C. – I.N.P.L. (Rapporteur)*
- **B. Izrar** *Professeur à l'Université d'Orléans (Président)*
- **M. Cazalens** *Ingénieur à la SNECMA (Examineur)*
- **J.-C. Boettner** *Chargé de Recherche au CNRS (Directeur de thèse)*
- **M. Reuillon** *Chargée de Recherche au CNRS (Examineur)*

*Cette étude a été réalisée avec le concours du Conseil Régional du Centre*



# Sommaire

---

## Remerciements

## Symboles et abréviations

## Chapitre I : Intérêt et contexte de l'étude

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I-1. Réduction selon une démarche « purement chimique »</b>	<b>5</b>
<b>I-1.1. Calcul des flux atomiques et analyse des chemins réactionnels</b>	<b>5</b>
<i>I-1.1.1. Principe de la méthode</i>	6
<i>I-1.1.2. Détection des espèces inutiles</i>	8
<i>I-1.1.3. Conclusion</i>	8
<b>I-1.2. L'analyse de sensibilité</b>	<b>9</b>
<b>I-1.3. L'analyse des Composantes Principales (ACP)</b>	<b>10</b>
<i>I-1.3.1. Avec les coefficients de sensibilité des concentrations</i>	10
<i>I-1.3.2. Avec les coefficients de sensibilité des vitesses</i>	12
<i>I-1.3.3. Conclusion</i>	15
<b>I-2. Réduction selon une démarche « chimico-mathématique »</b>	<b>16</b>
<b>I-2.1. L'Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire et l'Equilibre Partiel</b>	<b>17</b>
<i>I-2.1.1. Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire : AEQS</i>	17
<i>I-2.1.2. Approximation de l'Equilibre Partiel : AEP</i>	19
<b>I-2.2. Le critère de sélection <math>K'</math></b>	<b>20</b>
<b>I-2.3. La méthode liée aux temps caractéristiques des espèces</b>	<b>21</b>
<b>I-2.4. La méthode CSP (Computational Singular Perturbation)</b>	<b>22</b>
<i>I-2.4.1. Principe de la méthode</i>	22
<i>I-2.4.2. Utilisation de la méthode</i>	23
• <i>Théorie du « CSP pointer »</i>	
• <i>Théorie du « CSP pointer » intégré</i>	
<i>I-2.4.3. Résultats</i>	24
<b>I-2.5. L'erreur induite par l'AEQS</b>	<b>26</b>
<b>I-3. Réduction selon une démarche « purement mathématique »</b>	<b>27</b>
<b>I-3.1. Le Repro-Modelling</b>	<b>27</b>
<i>I-3.1.1. Principe de la méthode</i>	27
<i>I-3.1.2. Conclusion</i>	28

---

<b>I-3.2.</b>	<b>La méthode Intrinsic Low-Dimensional Manifold (ILDm)</b>	<b>29</b>
I-3.2.1.	<i>Principe de la méthode</i>	29
I-3.2.2.	<i>Résultats</i>	30
I-3.2.3.	<i>Conclusion</i>	31
<b>I-4.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>31</b>
 <b>Chapitre II : Codes de calcul</b>		
<b>II-1.</b>	<b>Le mécanisme cinétique détaillé : Chem.inp</b>	<b>33</b>
II-1.1.	<b>Généralités sur le mécanisme réactionnel</b>	<b>33</b>
II-1.2.	<b>Les réactions de « <i>fall-off</i> » dépendantes de la pression</b>	<b>36</b>
II-1.2.1.	<i>La méthode de Lindemann</i>	36
•	<i>Cas d'une réaction tri-moléculaire</i>	
•	<i>Cas d'une réaction unimoléculaire</i>	
II-1.2.2.	<i>La méthode de Troe</i>	39
<b>II-2.</b>	<b>Fichier de données thermodynamiques : Therm.dat</b>	<b>40</b>
<b>II-3.</b>	<b>L'interpréteur chimique : CKINTERP.F</b>	<b>41</b>
<b>II-4.</b>	<b>Le réacteur parfaitement agité : Perfectly Stirred Reactor, PSR</b>	<b>42</b>
II-4.1.	<b>Présentation générale du réacteur</b>	<b>42</b>
II-4.2.	<b>Equations du réacteur parfaitement agité</b>	<b>45</b>
II-4.3.	<b>Méthode de résolution numérique</b>	<b>47</b>
<b>II-5.</b>	<b>KINALC : Programme d'analyse et de réduction des mécanismes</b>	<b>47</b>
II-5.1.	<b>Description générale du programme originel de <i>Pilling et al. (1995)</i></b>	<b>49</b>
II-5.1.1.	<i>Analyse des vitesses et chemins réactionnels</i>	49
II-5.1.2.	<i>Analyse locale de sensibilité des concentrations</i>	49
II-5.1.3.	<i>Analyse de la matrice Jacobienne et analyse des échelles de temps</i>	50
II-5.2.	<b>Les trois options de la méthode mise en œuvre par <i>Lepage (2000)</i></b>	<b>50</b>
II-5.2.1.	<i>Elimination des espèces inutiles (Méthode des Flux Atomiques)</i>	50
II-5.2.2.	<i>Elimination des réactions inutiles (Analyse des Composantes Principales)</i>	52
II-5.2.3.	<i>Construction du schéma réduit (Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire)</i>	53

---

## Chapitre III : Validation et expertise de la méthode de réduction

<b>III-1.</b>	<b>Description du mécanisme détaillé et des objectifs de la réduction</b>	<b>55</b>
<b>III-1.1.</b>	<b>Sélection des espèces à reproduire</b>	<b>56</b>
<i>III-1.1.1.</i>	<i>Le n-décane</i>	<i>56</i>
<i>III-1.1.2.</i>	<i>Le n-propylbenzène</i>	<i>57</i>
<i>III-1.1.3.</i>	<i>Le n-propylcyclohexane</i>	<i>58</i>
<i>III-1.1.4.</i>	<i>Le kérosène reconstitué</i>	<i>58</i>
<b>III-1.2.</b>	<b>Sélection de la déviation relative maximale tolérée</b>	<b>59</b>
<b>III-1.3.</b>	<b>Taux de réduction et gain en temps de calcul</b>	<b>59</b>
<b>III-1.4.</b>	<b>Domaine paramétrique de l'étude</b>	<b>60</b>
<b>III-2.</b>	<b>Construction des mécanismes squelettiques</b>	<b>63</b>
<b>III-2.1.</b>	<b>Paramètres de la méthode : seuils sur les flux atomiques et PCAF</b>	<b>63</b>
<b>III-2.2.</b>	<b>Description des résultats</b>	<b>64</b>
<b>III-2.3.</b>	<b>Discussion</b>	<b>68</b>
<b>III-3.</b>	<b>Construction et sélection du schéma réduit final</b>	<b>71</b>
<b>III-3.1.</b>	<b>Construction des mécanismes réduits</b>	<b>72</b>
<b>III-3.2.</b>	<b>Méthode de sélection du mécanisme réduit</b>	<b>73</b>
<i>III-3.2.1.</i>	<i>Critère basé sur le gain en temps de calcul</i>	<i>77</i>
<i>III-3.2.2.</i>	<i>Critère basé sur la prédictivité</i>	<i>78</i>
<i>III-3.2.3.</i>	<i>Conjugaison des deux critères</i>	<i>80</i>
<b>III-3.3.</b>	<b>Validation des schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles</b>	<b>83</b>
<b>III-4.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>87</b>

## Chapitre IV : Etude de l'élimination des espèces et des réactions

<b>IV-1.</b>	<b>Avantages et inconvénients de la méthode en vue de son automatisation</b>	<b>89</b>
<b>IV-1.1</b>	<b>Avantages et inconvénients de la procédure de réduction</b>	<b>90</b>
<b>IV-1.2</b>	<b>Amélioration de l'automatisation du processus de réduction</b>	<b>90</b>
<b>IV-2.</b>	<b>Phase 1 : Analyse des flux atomiques</b>	<b>93</b>
<b>IV-2.1.</b>	<b>Principales voies réactionnelles impliquées : mécanisme local</b>	<b>93</b>

---

IV-2.1.1.	<i>Le n-décane</i>	93
IV-2.1.2.	<i>Le n-propylbenzène</i>	97
IV-2.1.3.	<i>Le n-propylcyclohexane</i>	103
<b>IV-2.2.</b>	<b>Espèces conservées : mécanisme spécifique</b>	<b>104</b>
<b>IV-2.3.</b>	<b>Elaboration du mécanisme général</b>	<b>106</b>
IV-2.3.1.	<i>Influence des seuils choisis pour les flux atomiques</i>	107
IV-2.3.2.	<i>Résultats</i>	109
IV-2.3.3.	<i>Discussion</i>	114
<b>IV-3.</b>	<b>Phase 2 : Analyse des composantes principales, méthode PCAF</b>	<b>117</b>
<b>IV-3.1.</b>	<b>Elimination des réactions inutiles</b>	<b>118</b>
IV-3.1.1.	<i>Influence de la pression</i>	118
IV-3.1.2.	<i>Influence de la richesse et de la température</i>	120
IV-3.1.3.	<i>Synthèse</i>	125
<b>IV-3.2.</b>	<b>Résultats</b>	<b>126</b>
<b>IV-4.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>136</b>

## Chapitre V : Obtention et optimisation du schéma réduit

<b>V-1.</b>	<b>Validation d'un schéma réduit obtenu avec le critère <math>K'</math></b>	<b>139</b>
V-1.1.	<b>Influence du nombre d'itérations sur les résultats</b>	<b>140</b>
V-1.2.	<b>Utilisation d'un accélérateur de convergence</b>	<b>141</b>
V-1.2.1.	<i>Conséquences sur le temps de calcul</i>	142
V-1.2.2.	<i>Conséquences sur la prédictivité</i>	143
V-1.3.	<b>Synthèse</b>	<b>145</b>
<b>V-2.</b>	<b>Recherche d'une meilleure sélection des espèces différentielles/stationnaires</b>	<b>146</b>
V-2.1.	<b>Sélection grâce à l'analyse de la matrice Jacobienne (critère <math>\lambda_k</math>)</b>	<b>146</b>
V-2.2.	<b>Sélection grâce aux pointeurs CSP (critères <math>Qp_k</math> et <math>I_k</math>)</b>	<b>149</b>
V-2.3.	<b>Sélection par le biais de l'erreur induite (critère <math>QSSAS</math>)</b>	<b>154</b>
<b>V-3.</b>	<b>Automatisation de la construction du schéma réduit final</b>	<b>162</b>
<b>V-4.</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>163</b>
<b>V-5.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>168</b>

---

<b>Conclusion</b>	<b>169</b>
<b>Référence bibliographiques</b>	<b>171</b>
<b>Annexe I : Le mécanisme détaillé réversible du kérosène</b>	<b>185</b>
<b>Annexe II : Nomenclature des espèces considérées</b>	<b>211</b>
<b>Annexe III : Les mécanismes squelettiques après l'élimination des espèces inutiles</b>	<b>215</b>
<b>Annexe IV : Les mécanismes squelettiques obtenus après l'élimination des réactions inutiles</b>	<b>235</b>
<b>Annexe V : L'accélérateur de convergence et extrapolation</b>	<b>259</b>
<b>Annexe VI : Schéma réduit KDIF52</b>	<b>263</b>





# *Remerciements*

---

Ce travail, financé par la Région Centre, a été réalisé au Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs (L.C.S.R.) à Orléans, laboratoire propre du Centre National de la Recherche Scientifique (C.N.R.S.).

Je tiens, tout d'abord, à remercier vivement Monsieur M. Cathonnet, Directeur du L.C.S.R., pendant la majeure partie de ces travaux. Qu'il trouve, ici, l'expression de ma gratitude pour sa grande humanité, sa disponibilité et enfin, ce qui paraît le plus important à mes yeux, pour sa considération et son sens de l'écoute. Je tiens, également, à le remercier de m'avoir fait profiter de ses connaissances et de ses compétences sur des sujets aussi divers que variés au cours des nombreuses discussions que nous avons eues ensemble.

Ensuite, je tiens à remercier Monsieur S. Gokalp, Directeur du L.C.S.R., de m'avoir permis de terminer mes travaux en toute quiétude et sans difficulté au sein de son laboratoire.

J'adresse également mes remerciements à Monsieur J. P. Sawerysin, Professeur à l'Université de Lille, ainsi que Monsieur S. Scacchi, Professeur à l'E.N.S.I.C.-I.N.P.L., pour avoir consacré, en tant que rapporteurs, une partie de leur temps à l'examen critique de ce mémoire de thèse ainsi qu'à Monsieur B. Izrar, Professeur à l'Université d'Orléans, pour avoir bien voulu me faire l'honneur de présider mon jury de thèse.

Mes remerciements vont également à Monsieur M. Cazalens, Ingénieur à la S.N.E.C.M.A., pour ses remarques tant techniques que pratiques.

J'adresse toute ma reconnaissance à Monsieur J. C. Boettner, Chargé de Recherche au L.C.S.R., pour la grande autonomie, la liberté d'organisation dans mon travail et la confiance « aveugle » qu'il m'a accordées pour mener à bien des travaux aussi complexes (pour quelqu'un de novice dans le domaine) que passionnants, tout en apportant, au moment opportun, un regard critique. Je tiens à dire que j'ai été impressionné (et peut-être un peu intimidé) par autant de connaissances et de compétences en informatique qui vont malheureusement faire défaut au laboratoire dans l'avenir. De plus, derrière cette façade impressionnante, au premier abord, se cache une personne avec laquelle j'ai pris plaisir à discuter, pourvue d'une énorme gentillesse, de grandes générosité et sympathie.

Que dire pour remercier Madame M. Reuillon, Chargée de Recherche au L.C.S.R., qui a grandement contribué au succès de ces travaux. Qu'elle soit remerciée pour toute l'aide scientifique, technique et parfois morale qu'elle m'a apportée durant ces années de thèse. Je tiens à lui exprimer ma profonde gratitude pour sa bienveillante gentillesse et son amitié sincère permanente. Malgré sa discrétion, elle constitue un élément essentiel et même indispensable aux recherches menées au sein du

---

laboratoire dans le domaine de la combustion en général et la réduction de mécanismes en particulier : son professionnalisme, son sens critique, ses compétences et connaissances en cinétique chimique ont de nombreuses fois permis d'éviter les « fausses routes » et les erreurs potentielles. J'espère que le Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs saura reconnaître et tirer profit de toutes ses qualités pour faire prospérer l'activité « Réduction de Mécanismes » et faire en sorte qu'elle soit reconnue de tous dans le monde entier.

Je tiens également à remercier certains membres du laboratoire (Ingénieurs – Techniciens et Chercheurs) pour leur accueil chaleureux et leur sympathie : Jacques, Fabrice, Michel, Alain, Bernadette, Denise, Claude, Pâquerette, Murielle, Gérard, Nabiha, Nathalie, Laurent, Wahid, Jean-Louis, Christian, Lionel, Stéphanie, Yuri, Brahim, Sandra.

Avant de terminer, je souhaite saluer l'ensemble des Doctorants (ou Docteurs) du laboratoire avec qui j'ai partagé les vicissitudes de la vie de thésards durant ces années : Françoise, Alain, Valérie, Simon, Abdou, Stéphane, Nicolas, Sandro, Mohammed, Danielle, André, Karim, Géraldine, Annaïk, Stéphanie, Philippe, Thierry, Pablo, Fabien, Delphine...

Un proverbe chinois dit qu'il est plus facile de devenir ami au hasard d'une rencontre que de le rester dans la vie. J'ai la chance d'en avoir rencontré qui vont le rester, parmi les membres de la confrérie fromagère : Geoffrey, Christophe et sa femme Virginie, Olivier, Nadine, Jean-François, Véronique, Nicolas, Xavier. Merci à eux pour les bons repas entre amis et pour les nombreux moments de bonne humeur, de fou rire et de rigolade que nous avons partagés et qui vont se poursuivre dans l'avenir.

---

# Symboles

Symbole	Description	Unité
$A_j$	Facteur pré-exponentiel de la constante de vitesse de la réaction $j$	Variable
$\alpha_{k_j}$	Coefficient d'efficacité de collision de l'espèce $k$ dans la réaction $j$	-
$B_k$	Sensibilité globale de l'espèce $k$	-
$\chi_k$	Symbole chimique de l'espèce $k$	-
$[\chi_k]$	Concentration molaire de $\chi_k$ , notée aussi $C_k$	$\text{mole.cm}^{-3}$
$c_k$	Concentration molaire de l'espèce $k$	$\text{mol.cm}^{-3}$
$\mathbf{c}$	Vecteur concentration	-
$C_{p_k}^0$	Chaleur spécifique à pression constante de l'espèce $k$ à l'état standard	$\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$
$\Delta C_k^s$	Erreur (absolue) sur la concentration d'une simple espèce $k$	$\text{mole.cm}^{-3}$
$\Delta C_k^g$	Erreur (absolue) sur la concentration d'un groupe de $k$ espèces	$\text{mole.cm}^{-3}$
$\Delta G_j^\circ$	Variation de l'enthalpie libre standard de Gibbs de la réaction $j$	$\text{J.mol}^{-1}$
$\Delta H_j$	Variation d'enthalpie de la réaction $j$	$\text{J.mol}^{-1}$
$\Delta H_j^\circ$	Variation de l'enthalpie standard de la réaction $j$	$\text{J.mol}^{-1}$
$\Delta k$	Variation du vecteur constante de vitesse	-
$\Delta k_j$	Variation de la constante de vitesse de la réaction $j$ d'ordre $m$	$(\text{mole.cm}^{-3})^{1-m}.\text{s}^{-1}$
$\Delta S_j^\circ$	Variation de l'entropie standard de la réaction $j$	$\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$
$\nu_{k_j}$	Coefficient stœchiométrique net de l'espèce $k$ dans la réaction $j$	-
$E_a$	Energie d'activation	$\text{J.mol}^{-1}$
$Er$	Critère de sélection des mécanismes	-

Symbole	Description	Unité
$\Phi_{k,tot}^+$	Flux total entrant de l'espèce $k$ sur l'ensemble de la combustion	$mol.cm^{-3}$
$\Phi_{k,tot}^-$	Flux total sortant de l'espèce $k$ sur l'ensemble de la combustion	$mol.cm^{-3}$
$\phi$	Richesse du mélange	-
$\phi_{jkk'}$	Flux atomique circulant de l'espèce $k$ vers l'espèce $k'$ dans la réaction $j$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$\phi_{kk',\tau}^{net}$	Flux atomique net circulant entre les espèces $k$ et $k'$ au temps de séjour $\tau$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$\phi_{k,tot}^+$	Flux atomique total entrant de l'espèce $k$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$\phi_{k,tot}^-$	Flux atomique total sortant de l'espèce $k$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$\tilde{F}$	Matrice des vitesses normalisées	-
$f_k^d$	Vitesse de disparition de l'espèce $k$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$f_k^f$	Vitesse de formation de l'espèce $k$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$f_k$	Vitesse de réaction de l'espèce $k$ , appelée aussi vitesse molaire de production chimique de l'espèce $k$	$mol.cm^{-3}.s^{-1}$
$GC_{moy}$	Gain en temps de calcul moyen ( $GC_{moy} = \frac{t_{det.}}{t_{red.}}$ )	
$h_k$	Enthalpie spécifique de l'espèce $k$	$J.g^{-1}$
$H_k^\circ$	Enthalpie de $k$ à l'état standard	$J.mol^{-1}$
$i$	Indice parcourant les espèces	-
$j$	Indice parcourant les réactions	-
$J$	Matrice jacobienne	-
$k$	Indice parcourant les espèces	-
$\mathbf{k}$	Vecteur constante de vitesse	-
$k_{d j}$	Constante de vitesse de la réaction $j$ d'ordre $m$	$(mole.cm^{-3})^{1-m}.s^{-1}$

Symbole	Description	Unité
$k_{r_j}$	Constante de vitesse inverse de la réaction $j$ d'ordre $m$	$(\text{mole.cm}^{-3})^{1-m}.\text{s}^{-1}$
$K_{c_j}$	Constante d'équilibre de la réaction $j$ en unité de concentration	variable
$K_{p_j}$	Constante d'équilibre de la réaction $j$ en unité de pression	variable
$\lambda_k$	Valeur propre de l'espèce $k$	$\text{s}^{-1}$
$M$	Partenaire de collision	-
$\dot{m}$	Débit massique	$\text{g.s}^{-1}$
$n_{A,k}$	Nombre d'atomes $A$ dans l'espèce $k$	-
$N_{A,j}$	Nombre d'atomes $A$ dans le membre de gauche de la réaction $j$	-
$N_k$	Nombre total d'espèces	-
$N_r$	Nombre total de réactions	-
$N_t$	Nombre total de temps de séjour	-
$\nu'_{k_j}$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce $k'$ dans la réaction $j$	-
$\nu''_{k_j}$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce $k''$ dans la réaction $j$	-
$P$	Pression	$\text{Pa}$
$\%P$	Pourcentage de prédictivité (= pourcentage d'espèces avec une fraction molaire supérieure ou égale à 10ppm reproduites avec moins de 10% d'erreur)	-
$\Theta_{kk'}^-$	Proportion du flux sortant de l'espèce $k$ entrant dans l'espèce $k'$	-
$\Theta_{k'k}^+$	Proportion du flux entrant dans l'espèce $k'$ provenant l'espèce $k$	-
$q_j$	Vitesse de la réaction $j$	$\text{mol.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$
$Q$	Perte de chaleur du réacteur	$\text{J.s}^{-1}$
$R$	Constante des gaz parfaits	$\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$
$\rho$	densité massique (ou masse volumique)	$\text{g.cm}^{-3}$
$S$	Matrice de sensibilité	variable

<b>Symbole</b>	<b>Description</b>	<b>Unité</b>
$\tilde{S}$	<i>Matrice de sensibilité normalisée</i>	-
$\tilde{S}^T$	<i>Transposée de la matrice de sensibilité normalisée</i>	-
$S_k^\circ$	<i>Entropie de l'espèce k à l'état standard</i>	$J.K^{-1}.mol^{-1}$
$\tau$	<i>Temps de séjour</i>	s
$\tau_{eq}$	<i>Temps de séjour pour lequel l'équilibre est considéré comme atteint</i>	s
$\tau_{ext}$	<i>Temps de séjour correspondant à la limite d'extinction</i>	s
$\tau_k$	<i>Temps caractéristique de l'espèce k</i>	S
$t$	<i>Temps</i>	S
$T$	<i>Température</i>	K
$U$	<i>Matrice des vecteurs propres</i>	-
$V$	<i>Volume du réacteur</i>	$cm^3$
$W_k$	<i>Masse molaire de l'espèce k</i>	$g.mol^{-1}$
$\bar{W}$	<i>Masse molaire moyenne</i>	$g.mol^{-1}$
$X_k$	<i>Fraction molaire de l'espèce k</i>	-
$\mathbf{y}$	<i>Vecteur concentration</i>	-
$y_k$	<i>Concentration de l'espèce k</i>	$mol.cm^{-3}$
$Y_k$	<i>Fraction massique de l'espèce k</i>	-
$\Psi$	<i>Composantes principales de vecteurs propres</i>	-

## **Abréviations**

<b>Abréviations</b>	<b>Description</b>
<i>ACP</i>	<i>Analyse des composantes principales</i>
<i>AEP</i>	<i>Approximation de l'équilibre partiel</i>

<i>AEQS</i>	<i>Approximation de l'état quasi-stationnaire</i>
<i>EP</i>	<i>Equilibre partiel</i>
<i>EQS</i>	<i>Etat quasi-stationnaire</i>
<i>ODE</i>	<i>Ordinary Differential Equations (équations différentielles du premier ordre)</i>
<i>Package</i>	<i>Ensemble de programmes</i>
<i>PSR</i>	<i>Perfectly stirred Reactor</i>







# Chapitre I

---

## Intérêt et contexte de l'étude

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I-1. Réduction selon une démarche « purement chimique »</b>	<b>5</b>
<b>I-1.1. Calcul des flux atomiques et analyse des chemins réactionnels</b>	<b>5</b>
<i>I-1.1.1. Principe de la méthode</i>	6
<i>I-1.1.2. Détection des espèces inutiles</i>	8
<i>I-1.1.3. Conclusion</i>	8
<b>I-1.2. L'analyse de sensibilité</b>	<b>9</b>
<b>I-1.3. L'analyse des Composantes Principales (ACP)</b>	<b>10</b>
<i>I-1.3.1. Avec les coefficients de sensibilité des concentrations</i>	10
<i>I-1.3.2. Avec les coefficients de sensibilité des vitesses</i>	12
<i>I-1.3.3. Conclusion</i>	15
<b>I-2. Réduction selon une démarche « chimico-mathématique »</b>	<b>16</b>
<b>I-2.1. L'Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire et de l'Equilibre Partiel</b>	<b>17</b>
<i>I-2.1.1. Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire : AEQS</i>	17
<i>I-2.1.2. Approximation de l'Equilibre Partiel : AEP</i>	19
<b>I-2.2. Le critère de sélection <math>K'</math></b>	<b>20</b>
<b>I-2.3. La méthode liée au temps caractéristiques des espèces</b>	<b>21</b>
<b>I-2.4. La méthode CSP (Computational Singular Perturbation)</b>	<b>22</b>
<i>I-2.4.1. Principe de la méthode</i>	22
<i>I-2.4.2. Utilisation de la méthode</i>	23
• <i>Théorie du « CSP pointer »</i>	
• <i>Théorie du « CSP pointer » intégré</i>	
<i>I-2.4.3. Résultats</i>	24
<b>I-2.5. L'erreur induite par l'AEQS</b>	<b>26</b>
<b>I-3. Réduction selon une démarche « purement mathématique »</b>	<b>27</b>
<b>I-3.1. Le Repro-Modelling</b>	<b>27</b>
<i>I-3.1.1. Principe de la méthode</i>	27
<i>I-3.1.2. Conclusion</i>	28
<b>I-3.2. La méthode Intrinsic Low-Dimensional Manifold (ILDm)</b>	<b>29</b>
<i>I-3.2.1. Principe de la méthode</i>	29
<i>I-3.2.2. Résultats</i>	30
<i>I-3.2.3. Conclusion</i>	31
<b>I-4. Synthèse</b>	<b>31</b>

---

---

---

## Introduction

Parallèlement à la montée en puissance des ordinateurs, de nombreuses équipes de recherche à travers le monde tentent de pousser plus loin la compréhension et la connaissance des processus physico-chimiques survenant lors de la combustion d'hydrocarbures. Elles développent des mécanismes cinétiques détaillés pour décrire la formation et l'oxydation des suies (*Kennedy, 1997*), pour représenter l'auto-inflammation dans les moteurs diesel (*Chang et al., 1996 - Sazhina et al., 1999*), pour rendre compte du cliquetis dans les moteurs (*Natarajan et al., 1984 - Cowart et al., 1990 - Chevalier et al., 1992 - Nehse et al., 1996 - Lee et al., 2000*), pour simuler la combustion supersonique dans les turbines d'avions (*Guerra et al., 1991 - Gerlinger et al., 1994 - Tabejamaat et al., 1997 - Kundu et al., 1999 - Oevermann, 2000 - Beck et al., 2001 - Gaffié et al., 2001 - Ogoronikov et al., 2001 - Tomioka et al., 2001 - Davidenko et al., 2002*) ou bien encore la propagation de flammes 2D ou 3D (références dans le tableau I-1 ci-après).

Les modèles détaillés nécessaires à la bonne représentation de ces phénomènes sont de plus en plus précis, et donc inévitablement, contiennent de plus en plus d'espèces et de réactions. Ces mécanismes peuvent comporter quelques dizaines d'espèces et plusieurs centaines de réactions élémentaires dans le cas des hydrocarbures les plus simples : le mécanisme du « *Gas Research Institute* », GRI-Mech 3.0 pour le méthane, souvent cité dans la littérature, contient 52 espèces et 325 réactions. Cette croissance du nombre d'espèces est constatée dans la construction de mécanismes représentatifs d'hydrocarbures purs de plus en plus lourds comme le n-heptane (*Müller et al., 1992 - Curran et al., 1998*), l'iso-octane (*Côme et al., 1996*), le n-décane (*Glaude et al., 1998*), des composés aromatiques tels le benzène, le styrène ... (*Pengloan, 2001 - Dagaut et al., 2002*), des composés naphthéniques comme le cyclohexane, le n-propylcyclohexane ... (*El Bakali et al., 2000 - Ristori et al., 2001*), voire même dans des modèles détaillés de mélanges d'hydrocarbures, comme le gaz naturel proposé par le GRI (*Smith et al., 1998*), un kérosène (*Balés-Guéret et al., 1990 - Dagaut et al., 1994a et 1995 - Voisin, 1997 - El Bakali, 1999 - Linsdstedt et al., 2000 - Patterson et al., 2000*), un gazole (*Ristori, 2000*). Parmi ces différents mécanismes, il n'est pas rare de rencontrer plusieurs centaines d'espèces et milliers de réactions : 298 espèces et 2352 réactions pour le modèle du gazole, 473 espèces et 2411 réactions pour le modèle de l'iso-octane, 1216 espèces et 7920 réactions pour le modèle du n-décane. Classiquement, ces mécanismes sont construits par un empilement successif des différents sous-

mécanismes représentant les réactions des nouveaux composés et intermédiaires mis en jeu, et validés par l'expérience.

Une autre méthode d'élaboration de mécanisme cinétique plus récente fait appel à la génération automatique. Un système expert élabore à partir d'une base de réactions connues et validées (réactions des espèces en C<sub>0</sub> à C<sub>2</sub>), l'ensemble des réactions des hydrocarbures supérieurs ainsi que leurs paramètres cinétiques et données thermodynamiques. Une description détaillée de la méthode peut être consultée dans l'article de *Côme et al. (1979)* ou au sein des validations de la cinétique de divers hydrocarbures : le n-butane (*Warth et al., 1998*), l'iso-octane et le n-décane (cités plus haut). Ces mécanismes générés automatiquement, de grande taille, sont le plus souvent préalablement simplifiés pour permettre leur intégration dans des modélisations industrielles. Celle-ci est effectuée par une technique de « lumping » chimique ou regroupement des espèces ayant des propriétés et des formules chimiques similaires, sous une même entité (isomères). Cette technique de réduction, plutôt spécifique à ce type d'élaboration de mécanismes, ne sera pas développée ici.

La mise en œuvre d'une chimie de plus en plus complexe, à la fois représentative et prédictive, se heurte cependant très rapidement aux contraintes des codes de calcul industriels et interdit, pratiquement, de pouvoir coupler ces phénomènes avec une cinétique détaillée (*Turányi, 1994a*). Pour illustrer notre propos sur ces difficultés de couplage, nous avons choisi dans la littérature quelques exemples de temps de calcul obtenus avec différents types de calculateurs, pour différents cas de combustion turbulente (2D et 3D) où une chimie détaillée a été introduite. Dans le tableau I-1, selon le type d'études, en 2 dimensions (calcul réalisé à l'aide d'un seul processeur, symbole : NPE), ou en 3 dimensions (calcul effectué grâce à des « simulations parallèles », c'est à dire simultanément sur plusieurs processeurs, symbole : PE), sont répertoriés les temps de calcul nécessaires à la simulation (dernière colonne).

En nous appuyant sur des travaux de *Lange et Warnatz (2002)* (64 processeurs = accélération du calcul d'un facteur 60 – 256 processeurs = accélération de 200, configuration = 450 MHz/512 Mo RAM), nous avons estimé les temps de calcul de la combustion turbulente 3D qui correspondraient à l'utilisation d'un processeur unique, configuration la plus répandue à l'heure actuelle compte tenu du coût financier d'une installation multi-processeurs. Les résultats obtenus (après le symbole ⇔) avec mono-processeur, montrent bien que le couplage entre la « *physique* » et la « *chimie détaillée* » même simple, entraîne des temps de calcul estimés

tellement élevés (jusqu'à 25 ans) qu'il ne peut être envisagé actuellement pour des mécanismes de taille supérieure.

Espèces	Modèles détaillés	Type de simulation	Système de calcul	Temps de calcul
H <sub>2</sub> /Air ( <i>Baum et al., 1994</i> )	9 espèces 19 réactions	Flammes turbulentes (2D)	CRAY-C98	~ 100 h (1*/NPE <sup>#</sup> )
Gri Mech 3.0 ( <i>Hermann, 2001</i> )	52 espèces 325 réactions	Flammes turbulentes prémélangées (2D)	AMD Athlon 700	qq j à qq sem. (1*/NPE <sup>#</sup> )
Propane/Air ( <i>Haworth et al., 2000</i> ) ( <i>Jimenez et al., 2000</i> )	29 espèces 73 réactions	Propagation de flammes turbulentes (2D)	CRAY C-90 NEC SX5	(1*/NPE <sup>#</sup> ) > 25 h 2 à 3 j
H <sub>2</sub> /Air  CH <sub>4</sub> /Air ( <i>Lange et Warnatz, 2002</i> )	9 espèces 27 réactions 15 espèces 84 réactions	- Auto-inflammation dans une couche de mélange turbulente - Combustion turbulente (3D)	CRAY T3E	~23 h (256*/PE <sup>#</sup> ) ⇔ 180 j (1*/NPE <sup>#</sup> )
CH <sub>4</sub> /Air ( <i>Bell et al., 2002</i> )	20 espèces 84 réactions	Comportement d'une flamme prémélangée turbulente de méthane en 3D	IBM SP3	~750 h (64-96*/PE <sup>#</sup> ) ⇔ 5 à 8 ans (1*/NPE <sup>#</sup> )
H <sub>2</sub> /Air ( <i>Tanahashi et al., 2000</i> )	12 espèces 27 réactions	Propagation de flammes turbulentes en 3D	SR2201	~ 3600 h (64*/PE <sup>#</sup> ) ⇔ ~26 ans (1*/NPE <sup>#</sup> )

**Tableau I-1 :** Simulation de la combustion turbulente de différents hydrocarbures. \* nombre de processeurs utilisés - # PE = simulation parallèle, NPE = simulation non-parallèle.

Le facteur pénalisant au niveau du temps de calcul est la résolution du système d'équations différentielles (ou ODE) de conservation de la masse : 80% à 95% du temps total pour la combustion turbulente d'un système simple tel l'hydrogène (*Clifford et al., 1998 - Lowe et al., 1998*). Ce handicap a donc conduit les cinéticiens à mettre en place des techniques de réduction de mécanisme dans le but de minimiser le nombre d'espèces cinétiques, tout en assurant à une représentation correcte du système chimique.

L'opération initiale indispensable avant toute simplification d'un schéma cinétique détaillé, passe par une sélection méticuleuse des comportements que ce dernier doit reproduire, en conservant à l'esprit que **le schéma réduit obtenu ne peut être meilleur que l'original**. Le choix des phénomènes à représenter influe fortement sur la taille du schéma final par le biais des espèces et des réactions associées, mais aussi sur le temps d'exécution de la simulation par rapport au modèle initial. Il est évident que plus on s'imposera de contraintes à respecter, plus la taille du schéma réduit se rapprochera de celle du détaillé et moins le gain en temps de calcul sera intéressant. Selon ce principe, où l'amélioration des performances de vitesse des calculs est

liée à une perte progressive des informations cinétiques, trois types de démarche de réduction se distinguent.

La première, que nous qualifierons de démarche « *purement chimique* » (terme se rapportant à la nature ou formalisme du schéma réduit) est basée sur un principe de réduction mis en avant par *Peters (1991)*. Elle utilise des outils tels que : *l'Etude des Flux Atomiques*, *l'Analyse de Sensibilité* et *l'Analyse des Composantes Principales*. Le modèle pseudo-détaillé (ou squelettique) est obtenu par l'élimination des espèces et/ou des réactions non primordiales à une approximation correcte de la combustion. La représentation « explicite » du système réactif chimique, sous la forme d'un mécanisme composé de réactions élémentaires, a l'avantage d'être directement exploitable par le cinéticien. Dans cette approche, le modèle réduit conserve sensiblement les mêmes qualités de prédiction, cependant la rapidité d'exécution des calculs n'est qu'insuffisamment améliorée.

Pour pallier cet inconvénient, une deuxième approche, qui laisse encore une place importante à la cinétique, va tenter de réduire la raideur du système d'équations différentielles. Il s'agit d'une démarche mixte que nous qualifierons de « *chimico-mathématique* » avec l'utilisation de méthodes comme : *l'Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire (AEQS)*, *l'Approximation des Equilibres Partiels (AEP)*, la technique « *Computational Singular Perturbation* » (CSP) ou le *Temps de Vie Caractéristique des Espèces*. Le mécanisme obtenu est qualifié de « pseudo-global », car il n'est pas représenté sous sa forme classique (avec ses réactions élémentaires), mais plutôt sous la forme d'un système algèbro-différentiel permettant néanmoins le calcul de la concentration des espèces impliquées.

Quand les ambitions de représentativité du système chimique sont plus globales ou limitées à quelques caractéristiques (par exemple, suivi de la formation d'un polluant particulièrement ciblé, température, délais d'auto-inflammation...), la réduction peut être abordée selon une troisième approche. C'est ce que nous appellerons la démarche « *purement mathématique* », dans le sens où la chimie détaillée se trouve réduite à un ensemble de paramètres fonction des objectifs à atteindre avec perte d'informations cinétiques. Cette démarche permet l'élaboration de schémas de type global pour lesquels les caractéristiques à reproduire sont représentées (« fitted » en anglais) grâce à des équations polynomiales (méthode du « *Repro-Modelling* »), ou des tableaux multi-entrées (méthode *ILDM* ou « *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* »).

La synthèse des trois démarches précédentes, nous permettra de présenter et de justifier la stratégie qui nous semble la plus appropriée.

## I-1. Réduction selon une démarche « purement chimique »

Les trois outils permettant cette réduction : l'Analyse des Flux Atomiques, l'Analyse de Sensibilité et l'Analyse des Composantes Principales, sont successivement présentés.

### I-1.1. Calcul des flux atomiques et analyse des chemins réactionnels

L'analyse des flux atomiques, circulant entre les différentes espèces du schéma cinétique détaillé, permet d'apprécier l'importance des réactions élémentaires correspondantes. Lorsque celles-ci ont une influence mineure sur le processus de combustion, elles sont écartées du système, et par là même les espèces y participant (*Warnatz, 1992*).

*Revel (1991)* et *Revel et al (1994)* ont initialement développé cette méthode pour simplifier un mécanisme détaillé de combustion du méthane. Elle consiste à calculer les flux atomiques des 4 éléments C, H, O et N transitant entre toutes les espèces du système réactionnel selon les chemins réactionnels empruntés.

La comparaison des diagrammes de flux inter-espèces (molécules stables et radicaux) permet de déduire les voies réactionnelles importantes pour une espèce et pour des conditions paramétriques données (temps de séjour, pression, température d'entrée et richesse du mélange). Les espèces non-indispensables, pour simuler correctement le processus de combustion, sont identifiées avant de construire un schéma simplifié. Les auteurs précisent que cette opération doit être répétée pour un grand nombre de temps de séjour : en effet, une espèce peut être négligeable à un temps de réaction  $t_1$ , puis devenir importante à un autre temps  $t_2$ . Il faut donc regarder l'influence de cette espèce pour l'ensemble des conditions paramétriques avant de l'écartier définitivement du mécanisme.

Avant de décrire la méthode, quelques définitions s'imposent. On appelle « **espèce redondante** », selon la terminologie utilisée par *Turányi (1990a)*, toute espèce qui peut être supprimée du mécanisme initial sans bouleverser les prédictions de celui-ci. A l'inverse, les « **espèces importantes** » sont celles dont on cherche à reproduire les profils avec le minimum d'erreur. Ce groupe est constitué des réactifs, des produits et de certains intermédiaires (stables ou radicalaires) jouant, *a priori*, un rôle important dans la combustion. On distingue enfin « **les espèces nécessaires** » dont la présence est indispensable pour reproduire correctement, à la fois, l'évolution des espèces importantes et certaines caractéristiques du modèle (limite et température



d'extinction, dans le cas d'un réacteur parfaitement agité par exemple). Espèces nécessaires et importantes sont liées entre elles par un ensemble de réactions importantes.

### I-1.1.1. Principe de la méthode

Le flux atomique  $\phi(A)_{jkk'}$  symbolise le flux d'atome  $A$  (C, H, O ou N) circulant entre deux espèces (depuis l'espèce  $k$  vers l'espèce  $k'$ ) à un temps de séjour donné  $\tau$ , pour une réaction  $j$  donnée ( $k + m \rightleftharpoons k' + m'$ ). Ce flux est exprimable selon la formule :

$$\phi(A)_{j,kk'} = \frac{q_j \cdot n_{A,k} \cdot n_{A,k'}}{N_{A,j}} \quad (1.)$$

avec  $q_j$  = vitesse nette de la réaction  $j$  -  $n_{A,k}$  = nombre d'atomes  $A$  dans l'espèce  $k$  -  $n_{A,k'}$  = nombre d'atomes  $A$  dans l'espèce  $k'$  -  $N_{A,j}$  = nombre total d'atomes  $A$  dans le membre de gauche de la réaction  $j$  (dans les espèces  $k$  et  $m$ ).

En étudiant les flux entrants et sortants de l'élément  $A$  pour chaque espèce  $k$ , respectivement  $\phi^+$  et  $\phi^-$ , les autres contributions de l'espèce  $k'$  (dans la formation ou la destruction de l'espèce  $k$ ) peuvent être connues quantitativement :

$$\phi_{k,tot}^+(A) = \sum_{i=1}^{N_k} \phi_{k'k,\tau}^{net} \quad \text{avec} \quad \phi_{k'k,\tau}^{net} = \phi_{k'k} - \phi_{kk'} \quad (\text{de } k' \text{ vers } k) \quad (2.)$$

$$\phi_{k,tot}^-(A) = \sum_{i=1}^{N_k} \phi_{kk',\tau}^{net} \quad \text{avec} \quad \phi_{kk',\tau}^{net} = \phi_{kk'} - \phi_{k'k} \quad (\text{de } k \text{ vers } k') \quad (3.)$$

$\phi_{\tau}^{net}$  est le flux atomique net de l'élément  $A$  échangé entre deux espèces à un temps de séjour  $\tau$  donné, pour un ensemble de réactions, corrigé du flux atomique, dans les mêmes conditions, de la réaction inverse. Le symbole  $i$  représente l'indice des espèces contenant l'élément  $A$ .

Pour un atome  $A$ , le flux total entrant  $\phi_{k,tot}^+$  dans l'espèce  $k$  est défini comme étant la somme des flux atomiques nets de l'ensemble des espèces  $k'$  vers l'espèce  $k$ . Inversement, le flux total sortant  $\phi_{k,tot}^-$  est calculé en additionnant les flux atomiques nets de l'espèce  $k$  vers toutes les autres espèces  $k'$  du système. En fait, dans le cas d'un réacteur parfaitement agité, ces valeurs correspondent à un temps de séjour  $\tau$  donné. Au cours de la combustion, c'est à dire depuis la

limite d'extinction  $\tau_{ext}$  jusqu'au point d'équilibre  $\tau_{eq}$ , le flux atomique entre deux espèces peut être estimé en intégrant le flux total sur l'ensemble du domaine  $[\tau_{ext} - \tau_{eq}]$  du temps de séjour. En réalité,  $\tau_{eq}$  représente un temps de séjour suffisamment proche des conditions à l'équilibre. Empiriquement, il est choisi égal à 20 fois  $\tau_{ext}$ . Le flux total intégré (ou la concentration totale) sortant ou entrant d'une espèce  $k$  s'exprime alors par :

$$\Phi_{k,tot}^+(A) = \int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_{k,tot}^+(A).d\tau \quad (4.)$$

$$\Phi_{k,tot}^-(A) = \int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_{k,tot}^-(A).d\tau \quad (5.)$$

Les diagrammes des flux atomiques inter-espèces sont construits à partir des flux intégrés entre deux espèces  $k$  et  $k'$  normalisés par rapport aux flux totaux intégrés entrants ou sortants de ces deux espèces des équations 2 et 3. Ces flux inter-espèces sont définis par les expressions :

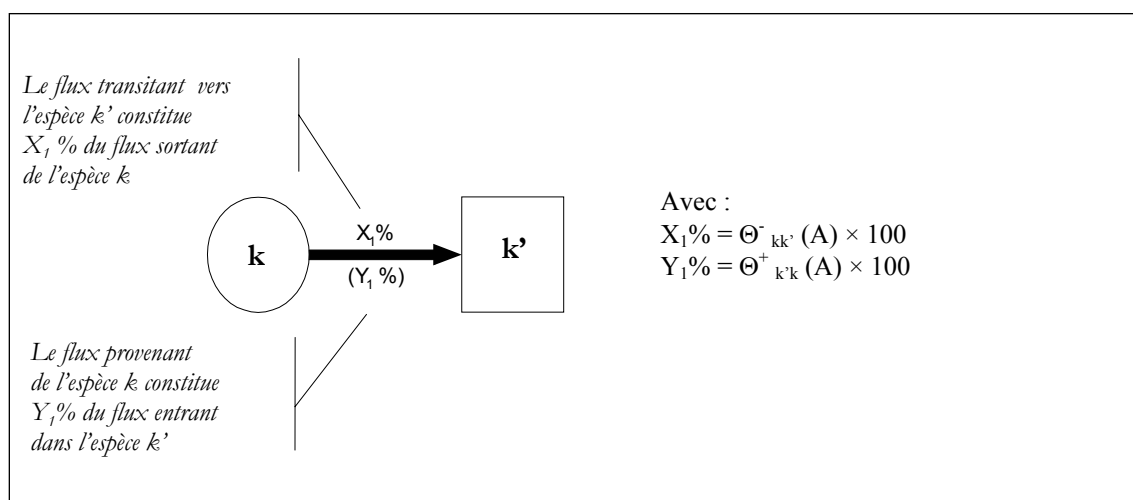
$$\Theta_{kk'}^-(A) = \frac{\int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_{kk',\tau}^{net}(A).d\tau}{\int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_k^-(A).d\tau} \quad (6.)$$

$\Theta_{kk'}^-(A)$  représente la proportion, pour l'atome  $A$ , du flux sortant de l'espèce  $k$  qui aboutit à l'espèce  $k'$ .

$$\Theta_{k'k}^+(A) = \frac{\int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_{k'k,\tau}^{net}(A).d\tau}{\int_{\tau_{ext}}^{\tau_{eq}} \phi_{k'}^+(A).d\tau} \quad (7.)$$

$\Theta_{k'k}^+(A)$  représente la proportion, pour l'atome  $A$ , du flux entrant dans l'espèce  $k'$  qui provient de l'espèce  $k$ .

Comme illustration, un schéma de principe correspondant au diagramme de flux entre 2 espèces  $X$  et  $Y$  est présenté sur la figure I-1.



**Figure I-1 :** Schéma de synthèse d'un diagramme de flux atomiques entre les espèces  $k$  et  $k'$ .

### I-1.1.2. Détection des espèces inutiles

Les espèces par lesquelles circulent des flux négligeables de C, H, O, N seront considérées comme éliminables. L'identification de ces espèces est réalisée en comparant le flux total entrant de l'élément  $A$  ( $\Phi_{k,tot}^+$ ) pour chaque espèce  $k$  (incluant l'élément  $A$ ) et le flux sortant ( $\Phi_{XA,tot}^-$ ) du réactif  $XA$  ( $XA$  « fournisseur » de l'élément  $A$ ). A ce stade, des niveaux de seuil (en %) sur le flux total sortant doivent être définis par l'utilisateur, selon le degré de précision recherché. L'espèce  $k$  sera supposée inutile pour l'élément  $A$ , si la condition suivante est satisfaite :  $\Phi_k^+(A) < (seuil) \cdot \Phi_{XA}^-(A)$ , et éliminée, avec ses réactions correspondantes, sans risques pour le modèle.

### I-1.1.3. Conclusion

L'analyse des flux atomiques a été mise en place sur un ensemble de conditions paramétriques initiales afin d'aboutir à un mécanisme squelettique ou pseudo-détaillé. *Frouzakis et Boulochos (2000)* ont utilisé cette méthode pour réduire un mécanisme détaillé  $CH_4$ /air comportant 488 réactions irréversibles et 53 espèces à 188 réactions et 27 espèces. Les erreurs relatives obtenues sur l'évolution de la composition du système réactif sont inférieures à 2% par rapport au schéma initial, et le gain en temps de calcul est voisin de 2.

Récemment, *Lepage (2000)*, s'appuyant sur le même principe, a lancé les bases d'une automatisation de la simplification des mécanismes selon cette méthode en l'appliquant à la

combustion du gaz naturel et du n-décane. Pour ces deux exemples, un mécanisme squelettique, dans lequel environ 30% des espèces et 65% des réactions ont été éliminées, a pu être obtenu. Les écarts relatifs rencontrés, par rapport au modèle initial, sur les différents profils d'espèces sont inférieurs à 5% et le temps de calcul nécessaire est 2 à 4 fois plus faible.

Bien qu'intéressante, cette technique nous semble insuffisamment performante au niveau de la rapidité des calculs. Dans chacun des exemples cités, les différents auteurs ont utilisé cette méthode comme l'étape initiale de simplification. *Revel (1991)* et *Revel et al. (1994)* se sont appuyés sur ce type de modèle simplifié, pour établir un mécanisme global du méthane à 6 étapes (calcul environ 10 fois plus rapide). L'utilisation de techniques de réduction complémentaires s'avère nécessaire pour accroître le taux de réduction ainsi que le gain en temps de calcul, sans faire chuter les capacités prédictives du mécanisme : l'analyse de sensibilité en est une.

### I-1.2. L'analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité est l'outil mathématique utilisé pour quantifier l'importance des réactions ou des espèces les unes par rapport aux autres (*Tomlin et al., 1997*). Elle permet d'apprécier la réponse d'un mécanisme suite à une perturbation provoquée sur l'un des paramètres du système (variation sur la constante de vitesse  $k$ , par exemple). La quantification de cette réponse permet de déterminer les réactions « sensibles » ayant une influence sur les profils d'espèces ou la vitesse nette des espèces. Le système d'équations différentielles ordinaires (ODE) de conservation de la masse pour les espèces est défini par la relation :

$$\frac{dy_i}{dk_j} = f_i(k, y) = \sum_j \nu_{ij} q_j \quad (8.)$$

où  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{y}$  sont les vecteurs constante de vitesse et concentration,  $y_i$  est la concentration de l'espèce  $i$ ,  $\nu_{ij}$  est le coefficient stœchiométrique de l'espèce  $i$  dans la réaction  $j$ ,  $q_j$  est la vitesse nette de la réaction  $j$ ,  $k_j$  est la constante de vitesse de la réaction  $j$ .

Le coefficient de sensibilité du premier ordre de l'espèce  $i$  par rapport au paramètre  $k_j$  peut s'écrire comme suit (*Griffiths, 1995*) :

$$S_{ij} = \frac{\delta y_i}{\delta k_j}(k, t) \approx \frac{y_i(k_j + \Delta k_j, t) - y_i(k_j, t)}{\Delta k_j} \quad (9.)$$

Il mesure la variation de la concentration de l'espèce  $i$  au temps  $t$ , en réponse à une variation de la constante de vitesse  $k_j$  (réaction  $j$ ).

Les coefficients de sensibilité directs  $S_{ij}$  sont peu utilisés, car constantes de vitesse et concentrations d'espèces ont des ordres de grandeur très différents (*Turányi, 1997*) : dans la pratique, les coefficients de sensibilité sont normalisés en utilisant la transformation suivante :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{k_j}{y_i(t)} \left( \frac{\delta y_i}{\delta k_j} \right) = \frac{\delta \ln y_i(t)}{\delta \ln k_j} \quad (10.)$$

L'analyse de sensibilité permet de diminuer la taille d'un mécanisme par élimination des réactions dont le coefficient de sensibilité normalisé est faible. Le modèle réduit devant être applicable sur un domaine paramétrique étendu, il faudra donc évaluer la matrice de sensibilité pour diverses conditions paramétriques de pression, température, richesse, temps de séjour, ... (*Griffiths, 1995*). Ces mêmes auteurs s'accordent à dire que ce procédé est lent et inefficace (peu de réactions sont éliminées). Il faut recourir à d'autres méthodes pour obtenir une réduction plus substantielle.

### **I-1.3. L'analyse des Composantes Principales (ACP)**

L'analyse des composantes principales vient compléter, en l'améliorant, l'analyse de sensibilité. Depuis une quinzaine d'années, cette technique est utilisée dans différents domaines : les réactions oscillantes (*Vajda et Turányi, 1986 - Ibison, 1992*), la chimie troposphérique (*Turányi et Bércecs, 1990 - Zeng et al., 1997*) et la combustion (*Turányi, 1990a - Tomlin et al., 1992, 1995 - Vlachos, 1996 - Brown et al., 1997 - Frouzakis et Boulochos, 2000 - Lepage, 2000*). L'objectif de cette méthode est d'étudier, en détail et de façon simultanée, les coefficients de sensibilité normalisés, afin d'extraire en une seule opération les informations sur les réactions importantes du modèle cinétique. Avec cette méthode, il devient possible d'obtenir un lot minimum de réactions élémentaires importantes assurant une prédiction correcte de l'évolution des espèces du système.

#### *I-1.3.1. Avec les coefficients de sensibilité des concentrations*

L'analyse des composantes principales sur les coefficients de sensibilité normalisés des concentrations des espèces, développée dès 1985, par *Vajda et Turányi*, est basée sur l'étude des

valeurs et vecteurs propres de la matrice  $\tilde{S}^T \tilde{S}$ .  $\tilde{S}$  est la matrice des coefficients de sensibilité normalisés, et  $\tilde{S}^T$  représente sa transposée. Selon ces auteurs, la variation de concentration provoquée par une variation du jeu de constantes de vitesse est quantifiée par une fonction de réponse  $Q(k)$  permettant d'isoler les réactions influentes. La fonction  $Q(k)$  est définie par la relation :

$$Q(k) = \sum_{l=1}^{N_t} \sum_{k=1}^{N_k} \left( \frac{y_k(t_l, k) - y_k(t_l, k^0)}{y_k(t_l, k^0)} \right)^2 \quad (11.)$$

Après un développement en série de Taylor autour du point  $\alpha^0$  (le symbole  $^0$  représentant le système avant la perturbation) cette fonction devient :

$$Q(k) \approx (\Delta\alpha)^T \tilde{S}^T \cdot \tilde{S}(\Delta\alpha) \quad (12.)$$

avec  $\alpha_j = \ln k_j$ ,  $\Delta\alpha_j = \alpha_j - \alpha_j^0$ . Si l'on pose  $U$  la matrice des vecteurs propres normalisés  $u_j$  de  $\tilde{S}^T \tilde{S}$ , avec  $\tilde{S}^T \tilde{S} = U\Lambda U^T$  tel que  $U^T U = I$ , et  $\Lambda$  est la matrice diagonale des valeurs propres  $\lambda_k$  de la matrice  $\tilde{S}^T \tilde{S}$ , on définit ainsi un nouveau jeu de paramètres  $\psi$ , où  $\psi = U^T \alpha$  et  $\Delta\psi = U^T \Delta\alpha$ , qui sont appelés les *composantes principales de vecteurs propres*. On obtient finalement :

$$Q(\alpha) = (\Delta\alpha)^T \tilde{S}^T \cdot \tilde{S}(\Delta\alpha) = \sum_{k=1}^{N_k} \lambda_k \|\Delta\psi_k\|^2 \quad (13.)$$

Les valeurs propres ( $\lambda_k$ ) mesurent l'importance de leurs vecteurs propres respectifs dans le mécanisme réactionnel (Tomlin et al., 1995). Elles mesurent également l'importance des réactions présentes dans les composantes principales ( $\psi_k$ ) de leurs vecteurs propres (Vajda et al., 1990). Ainsi, les composantes principales de vecteurs propres, correspondant aux grandes valeurs propres, définissent la partie du mécanisme nécessaire à la prévision des différentes étapes de combustion d'une espèce. Chaque vecteur propre représente un ensemble de réactions couplées dont les contributions relatives sont définies par la taille des composantes de vecteur propre. L'inconvénient majeur de cette méthode est lié au temps de calcul important de la matrice  $S$ .

Par contre, si l'on considère la matrice  $F$ , qui dépend directement des vitesses de réaction, le temps requis pour évaluer cette matrice devient presque négligeable (tous les éléments sont des sous-produits du calcul). C'est la méthode PCAF.

## I-1.3.2. Avec les coefficients de sensibilité des vitesses

L'analyse des composantes principales de la matrice  $(\tilde{F})$  des coefficients de sensibilité normalisés des vitesses a été utilisée avec succès pour identifier les réactions éliminables et construire des mécanismes réduits : réduction d'un mécanisme d'oxydation de l'hydrogène (Tomlin et al., 1992), d'un mécanisme d'oxydation du formaldéhyde à haute température (Turányi et al., 1989), et d'un mécanisme de pyrolyse du propane (Tomlin et al., 1995). Cette analyse de sensibilité mesure l'effet d'une variation de la constante de vitesse  $k$  de la réaction  $j$  sur la vitesse nette de l'espèce  $i$ . Les coefficients de sensibilité normalisés des vitesses de réaction,  $\tilde{F}_{ij}$ , s'expriment suivant la formule :

$$\tilde{F}_{ij} = \frac{\partial \ln f_i}{\partial \ln k_j} = \frac{\nu_{ij} q_j}{f_i} \quad (14.)$$

avec  $\nu_{ij}$  coefficient stœchiométrique de l'espèce  $i$  dans la réaction  $j$ ,  $q_j$  vitesse nette de la réaction  $j$ ,  $f_i$  vitesse de production de l'espèce  $i$ ,  $k_j$  constante de vitesse de la réaction  $j$ .

Selon Turányi (1990a), la méthode PCAF présente la caractéristique de considérer chacune des espèces du système avec le même poids et la même importance au cours du processus d'élimination de réactions. Il est donc indispensable, au préalable, d'identifier et de supprimer les espèces inutiles (et leur réactions) avant de tenter l'élimination des réactions les moins sensibles, par la méthode PCAF.

Tomlin et al. (1992, 1995) et Turányi et al. (1989) proposent une sélection des espèces non-importantes suivant une relation dans laquelle intervient la matrice jacobienne  $\partial f / \partial c$  sous sa forme normalisée :

$$B_i = \sum_{n=1}^N \left( \frac{\partial \ln f_n}{\partial \ln c_i} \right)^2 \quad N = \text{nombre d'espèces importantes} \quad (15.)$$

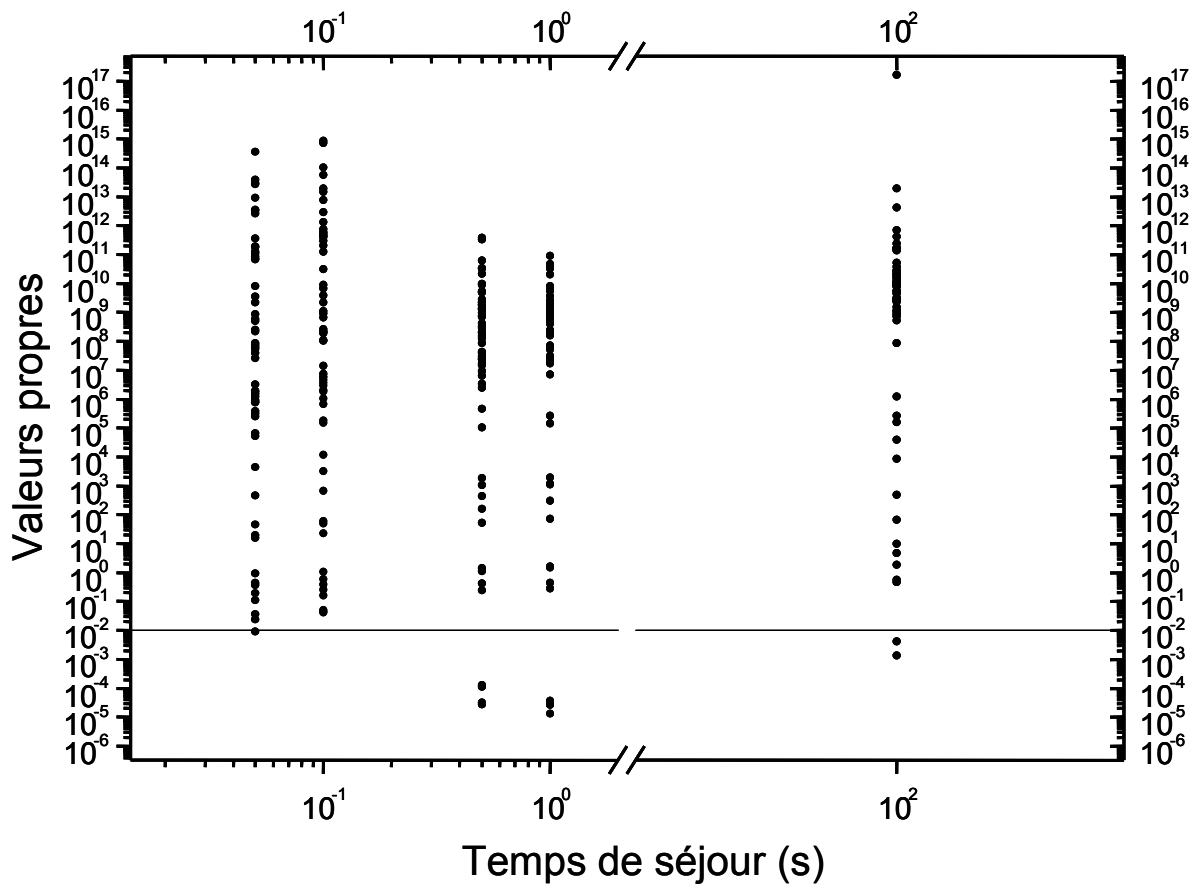
Une espèce  $i$  dont la variation de concentration n'affecte pas la vitesse de production des espèces importantes et nécessaires, est considérée comme non importante, et la valeur de  $B_i$  pour cette espèce sera inférieure au seuil  $B_{seuil}$  défini par l'utilisateur (valable pour un mécanisme donné).

Pour sélectionner les espèces à écarter, la méthode utilise un processus itératif. En premier lieu, il faut définir un jeu initial d'espèces importantes et calculer  $B_i$  pour chaque espèce du système. La plus forte des valeurs de  $B_i$  (associée initialement à une espèce non importante) indique l'espèce potentiellement nécessaire puisqu'elle a une influence sur les espèces importantes. Cette espèce devenue nécessaire entre dans le groupe des espèces importantes. On reprend ce processus itératif jusqu'à ce que l'on ne trouve plus d'autre espèce candidate. Les espèces inutiles seront par conséquent celles qui n'auront jamais été sélectionnées. Pour éliminer efficacement un grand nombre d'espèces inutiles, *Tomlin et al. (1995)* suggèrent d'introduire les espèces nécessaires par paquets. A chaque itération, le classement des valeurs de  $B_i$  par ordre croissant va laisser apparaître un saut qui va permettre de définir une nouvelle valeur de coupure. Les espèces, dont la valeur de  $B_i$  est supérieure à la valeur de coupure et qui n'ont pas été sélectionnées, sont ajoutées au lot d'espèces importantes. On recalcule les valeurs de  $B_i$  pour le nouveau lot d'espèces importantes. La procédure s'arrête lorsque les espèces  $i$  ont déjà été retenues comme espèces importantes.

Les espèces inutiles étant identifiées et éliminées, il est possible d'appliquer maintenant la méthode de l'analyse des composantes principales de la matrice des vitesses (PCAF) suivant le principe décrit précédemment. En effet, le calcul de la matrice  $\tilde{F}^T \tilde{F}$  permet d'obtenir les valeurs propres ( $\lambda_k$ ) et les composantes de vecteurs propres ( $\psi_k$ ), et donc d'identifier les réactions indispensables.

Le choix des seuils sur les valeurs et les vecteurs propres, est le point clé pour déterminer précisément les groupes de réactions à éliminer. En effet, les éléments de composantes principales de vecteurs propres correspondant à de petites valeurs propres auront une influence mineure sur le comportement du système (*Vajda et al., 1990*). *Brown et al. (1997)* présentent ce choix sur  $\lambda$  comme un moyen de séparer les réactions en deux domaines. L'un contient les réactions influentes du modèle ( $\Psi \geq \text{seuil}$ ) et l'autre les réactions non influentes ( $\Psi \leq \text{seuil}$ ). *Tomlin et al. (1992)*, *Turányi et al. (1989)* choisissent, pour leur part, des limites arbitraires pour les valeurs propres ( $> 10^{-4}$ ) et les composantes des vecteurs propres ( $> 0.1 - 0.2$ ). Dans le cadre de la chimie troposphérique, ces limites sont nettement supérieures à celles utilisées pour la combustion. Par exemple, *Zeng et al. (1997)* annoncent des limites pour les valeurs propres comprises entre 50 et 200. Selon le type d'étude menée, les seuils seront donc choisis pour obtenir un bon compromis entre le nombre d'espèces (et/ou de réactions) conservées dans le mécanisme réduit et la précision du modèle.





**Figure I-2 :** Répartition des valeurs propres en fonction du temps de séjour (*Lepage, 2000*).

Un exemple de répartition des valeurs propres en fonction du temps de séjour est représenté sur la figure I-2. On observe un saut dans les valeurs propres aux alentours de  $10^{-2}$  et  $10^{-3}$ , mais ce domaine de coupure varie en fonction des conditions initiales et des temps de séjour. De ce fait, le choix d'un seuil fixe n'apparaît pas le plus judicieux sur l'ensemble du domaine. En conséquence, l'utilisation d'une méthode de sélection dynamique des seuils sur les valeurs propres, comme celle imaginée par *Lepage (2000)*, nous a semblé préférable. La détection automatique des valeurs de coupure est obtenue en calculant la dérivée première (représentée par une différence première) des logarithmes des valeurs propres en fonction du rang de celle-ci :  $\delta_1 = \lambda_1 - \lambda_2$ ,  $\delta_2 = \lambda_2 - \lambda_3$ , .... Les  $I$  plus fortes valeurs peuvent être retenues après avoir déterminé la valeur maximale  $\delta_I$  sur un large domaine de valeurs propres  $[10^{-5} - 10^{+5}]$ .

Une fois les valeurs propres les plus significatives sélectionnées, un seuil sur les composantes de vecteurs propres (des  $I$  plus fortes valeurs propres) doit également être choisi. Les vecteurs propres étant normalisés, la somme des carrés de leurs composantes est égale à

l'unité. Les composantes de vecteurs propres sont classées en ordre décroissant, puis les valeurs du carré des composantes sont sommées en commençant par les plus fortes valeurs (correspondant aux réactions les plus importantes du lot de toutes les composantes). La sélection

des réactions à conserver est effectuée sur la base de l'inégalité suivante : 
$$\sum_{I=1}^{I_j} (u_I)^2 \leq \text{seuil},$$

où  $I$  est le rang qu'occupe la composante de vecteur propre pour la réaction  $j$ . Le seuil varie entre 0,95 et 0,999. L'utilisation de ce seuil variable est justifiée *a posteriori* par une meilleure sélection des réactions à éliminer.

### I-1.3.3. Conclusion

Grâce à la méthode de l'analyse de la composante principale, simple à mettre en place et d'utilisation facile, de nombreuses équipes de recherche sont parvenues à réduire divers mécanismes (différents en taille, en type de combustibles étudiés, en domaine cinétique abordé : tableau I-2).

Des taux de réduction allant jusqu'à 75% de la taille initiale du mécanisme ont été obtenus. Les mécanismes réduits obtenus reproduisent avec une bonne précision (erreur souvent inférieure à 5%) les profils de concentration des espèces choisies. Un gain en temps de calcul accompagne cette réduction. Ainsi *Turányi (1990)*, dans son étude sur le mécanisme de pyrolyse du butane, obtient un temps de calcul, avec le modèle réduit, qui ne représente plus que 12% de celui obtenu avec le modèle détaillé.

Cependant, la réduction d'un modèle détaillé, validé, sur un *large* domaine de conditions paramétriques conduit le plus souvent à des gains modestes sur le temps de calcul ainsi que sur le taux de réduction (*Brown et al., 1997*). Pour aller plus loin, il est nécessaire d'envisager la diminution du nombre de variables dans le système différentiel, en faisant appel à la distinction entre variables lentes et rapides et en identifiant les espèces candidates à l'approximation de l'état quasi-stationnaire. Certaines techniques facilitent cette identification et sont présentées dans le paragraphe suivant.

Auteurs	Schéma initial	Schéma final ( $r^{\circ}$ = réactions)	Précision $\Delta C / C$
<i>Vajda et al. (1985)</i>	HCHO + CO 25 réactions 12 espèces	13 réactions 12 espèces	<b>1%</b>
<i>Turányi et al. (1989)</i>	Propane (pyrolyse) 66 réactions 14 espèces	23 réactions 14 espèces	~ <b>1%</b> (à 3% de conversion de $C_3H_8$ )
<i>Turányi (1990)</i>	Butane (pyrolyse) 60 réactions 22 espèces	49 réactions 22 espèces	de <b>1 à 7 %</b> (suivant l'espèce considérée)
<i>Vajda et al. (1990)</i>	$H_2 / O_2$ 38 réactions 9 espèces (+ T)	21 / 15 réactions 9 espèces	~ <b>5%</b>
<i>Tomlin et al. (1992)</i>	$H_2/O_2$ 47 réactions 9 espèces	14 / 17 réactions 9 espèces	<b>1%</b>
<i>Tomlin et al. (1995)</i>	Propane (pyrolyse) 422 réactions 48 espèces	122 / 50 réactions 19 espèces	<b>1 à 5 %</b>
<i>Vlachos (1996)</i>	$H_2$ /Air 40 réactions 8 espèces	de 6 à 26 réactions de 7 à 8 espèces	<b>0,3 à 3 %</b>
<i>Brown et al. (1997)</i>	$CH_4$ 235 / 177 réactions 52 / 31 espèces	200 / 158 réactions 48 / 30 espèces	~ <b>5 %</b>
<i>Zeng et al. (1997)</i>	Chimie troposphérique (Butane) 512 réactions 185 espèces	Suivant scénario 62 $r^{\circ}$ / 22 espèces 73 $r^{\circ}$ / 33 espèces 54 $r^{\circ}$ / 16 espèces	<b>3 à 27 %</b> <b>1 à 11 %</b> <b>&lt; 1 %</b>
<i>Frouzakis et Boulochos (2000)</i>	$CH_4$ /Air 488 réactions 53 espèces	95 / 109 réactions 27 espèces	<b>3 à 5 %</b>
<i>Lepage (2000)</i>	n-décane 1293 réactions 113 espèces	463 réactions 82 espèces	<b>3 à 5 %</b>

**Tableau I-2 :** Résultats de réduction de mécanismes par l'analyse des composantes principales.

## I-2. Réduction selon une démarche « chimico-mathématique »

La plupart des systèmes réactifs (et la combustion en particulier) font intervenir des phénomènes rapides, avec des variables ayant un temps caractéristique court, mais aussi des phénomènes lents, avec un temps caractéristique élevé. La disparité de ces temps ( $\tau_k$ ) est responsable de la raideur du système différentiel associé (exprimée grossièrement par le rapport entre le temps du processus le plus rapide, et celui le plus lent). La démarche chimique de la réduction permet d'identifier et d'éliminer du système les espèces dites rapides (valeurs propres élevées), et de ce fait contribue à une diminution de la raideur.

Un autre moyen de réduire la raideur du système est l'emploi de méthodes telles que « *l'Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire* » et de « *l'Approximation des Equilibres Partiels* ». Des espèces rapides sont déplacées vers le sous-système algébrique, avec l'avantage de ne plus participer à la limitation du pas de temps nécessaire à la résolution du système différentiel. Par contre, la validité de ces méthodes dépend fortement de l'identification des espèces candidates à l'état stationnaire. Différents modes de sélection existent. Parmi ceux que nous avons testés, citons : le critère  $K'$  de *Chang (1995)* et ses variantes, la méthode « *Computational Singular Perturbation* » de *Lam et Goussis (1988)*, ou la méthode liée aux temps caractéristiques des espèces de *Turányi et al. (1993)*.

Pour ces différentes techniques, la composante chimie est encore importante, et se traduit par un modèle encore plus réduit dit « pseudo-global ». Contrairement à ces dernières, la méthode « *Intrinsic Low-Dimensional Manifold* » de *Maas et Pope (1992a et b)*, bien que basée sur le découplage des temps caractéristiques, ne permet pas d'obtenir ce type de modèle réduit pseudo-global, d'où son classement dans l'approche de réduction purement mathématique. L'application de l'AEQS entraîne cependant des imprécisions plus ou moins importantes sur la reproduction des profils d'espèces. L'évaluation de ces erreurs, que nous avons aussi étudiée, constitue un autre moyen de déterminer les espèces stationnaires.

## **I-2.1. L'Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire et de l'Equilibre Partiel**

### *I-2.1.1. Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire : AEQS*

La méthode de l'approximation de l'état stationnaire (*Bodenstein et Lutkemeyer, 1924* - expliquée en détail dans *Peters et Kee, 1987*) a permis d'obtenir, avant même l'apparition des ordinateurs, des solutions analytiques approchées des systèmes d'équations différentielles. Cette technique évalue la dispersion des temps caractéristiques des espèces du système. Pour cela, elle détermine les espèces (intermédiaires réactionnels) qui réagissent sur une très courte échelle de temps, donc celles qui sont les plus réactives, et dont la fraction molaire ( $X_k$ ) est très faible. On dit alors que la concentration de ces intermédiaires a atteint un état stationnaire par rapport aux autres composés du système. Autrement dit, l'accumulation d'une espèce stationnaire  $k$ , étant *a priori* une espèce rapidement consommée, est très faible dans le milieu réactionnel. *De facto*, la

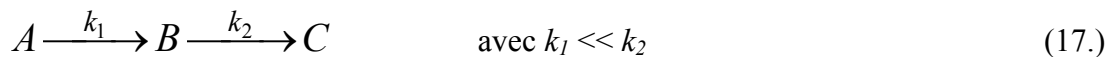
vitesse de formation ( $f_k^f$ ) de cette espèce est équivalente à sa vitesse de destruction ( $f_k^d$ ), conduisant à une vitesse nette ( $f_k^{net}$ ) négligeable devant ces deux vitesses.

L'intérêt de l'AEQS est de réduire la raideur inhérente à la multiplicité d'échelles de temps caractéristiques. Ainsi, le système différentiel initial est remplacé par une combinaison d'équations différentielles, pour le calcul des concentrations des espèces ayant un temps caractéristique plutôt long (espèces différentielles), et d'expressions algébriques implicites pour celles réagissant sur une échelle de temps plutôt courte (espèces en état quasi stationnaires).

L'application de l'AEQS se traduit par l'expression générale :

$$\frac{dy_{EQS}}{dt} = f(y_{EQS}, y_i, k_j) \approx 0 \quad (16.)$$

c'est à dire une vitesse nette de formation des espèces en EQS quasi-nulle (le symbole  $i$  se rapporte aux espèces non-AEQS), ou sur l'exemple simple de *Ferrendier (1998)* :



avec la première réaction cinétiquement limitante et  $B$  en état quasi-stationnaire, par :

$$\frac{d[B]_{EQS}}{dt} = k_1[A] - k_2[B]_{EQS} \approx 0 \quad (18.)$$

Ainsi, le système de réactions successives évolue vers un système équivalent du type pseudo-global :  $A \xrightarrow{k} C$ . La concentration de l'espèce  $B$  pouvant être déduite algébriquement de celle de l'espèce  $A$  à l'aide de la relation :

$$[B]_{EQS} \approx \frac{k_1}{k_2} [A] \quad (19.)$$

De nombreuses études théoriques sur des systèmes simples (*Volk, 1977 - Viossat et Ben-Aïm, 1998*), ou sur des systèmes réels (*Turányi et al., 1993*) ont été menées. Cette méthode de réduction a permis à de nombreux auteurs : *Packzo et al. (1986) - Rogg et Williams (1988) - Glarborg et al. (1992) - Trevino et Méndez (1992) - Peters et Rogg (1993) - Sunj et al. (1998)*, d'élaborer des schémas réduits performants et précis.

L'écriture manuelle des équations algébriques est longue, fastidieuse et conduit régulièrement à des erreurs. Il est donc souhaitable d'utiliser une technique automatisée

d'écriture des expressions algébriques pour la concentration des espèces stationnaires en fonction de celle des autres (programme CARM de *Chen, 1987 et 1988 - Chang, 1995*). La sélection de ces espèces devient donc le point clé de la méthode. Quatre possibilités, selon différents critères, seront présentées dans les paragraphes suivants. Notons que le choix doit s'effectuer de manière objective, sans l'intervention de l'utilisateur. Cependant, certaines conditions sont à respecter. Ainsi, *Tomlin et al. (1992)* montrent que si l'on assimile systématiquement tous les radicaux aux intermédiaires en EQS, cette procédure peut conduire à des problèmes de sélection (cas du radical Br dans le système H<sub>2</sub>-Br<sub>2</sub>, des radicaux peroxydes dans la chimie atmosphérique, du radical H très réactif en combustion). Ils ajoutent que l'AEQS peut également s'appliquer à des espèces moléculaires sous certaines conditions (la molécule diallyle dans la pyrolyse du propane).

### I-2.1.2. Approximation de l'Equilibre Partiel : AEP

Cette méthode, complémentaire de la technique précédente, est surtout utilisée pour simplifier des expressions algébriques issues de l'AEQS. Elle est basée sur l'existence d'un équilibre entre les vitesses de réaction dans les sens direct et inverse de certaines réactions réversibles très rapides, dites en équilibre partiel. Exemple tiré de *Ferrendier (1998)* pour deux réactions (dont une réversible) et trois espèces :



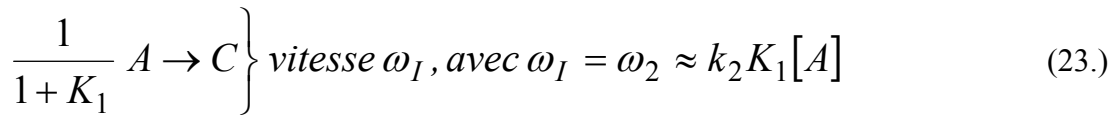
On suppose que les espèces *A* et *B* sont en équilibre et que  $k_{1,r} \gg k_2$  et  $k_{1,d}$ . On peut écrire :  $K_1 = \frac{[B]}{[A]} = \frac{k_{1,d}}{k_{1,r}}$ . Ainsi, les vitesses de formation et destruction de l'intermédiaire *B* vers le réactif *A* sont beaucoup plus élevées que la vitesse de formation du produit *C* à partir de *B*. L'hypothèse d'un équilibre sens direct / sens inverse dans la première réaction permet d'éliminer la variable  $[B]$  et la vitesse  $\omega_1$  :

$$\begin{aligned}
 0 &\approx k_{1,d}[A] - k_{1,r}[B] \\
 \frac{d[B]}{dt} &= -\frac{d[A]}{dt} - \omega_2 \\
 \frac{d[C]}{dt} &= \omega_2
 \end{aligned}
 \tag{21.}$$

On peut écrire cette série de trois équations sous la forme :

$$\begin{aligned}
 [B] &\approx K_1[A] \\
 (1 + K_1) \frac{d[A]}{dt} &\approx -\omega_2 \\
 \frac{d[C]}{dt} &= \omega_2
 \end{aligned}
 \tag{22.}$$

Ceci correspond à la loi d'évolution d'un schéma cinétique réduit à deux espèces et une réaction, soit :



L'utilisation de l'AEP est moins fréquente car elle entraîne une perte de précision plus importante que dans le cas de l'AEQS. Toutefois, pour certaines estimations de concentration en entrée (méthode d'itération interne), elle est souvent suffisante (*Wang et al., 1993 ; Wang et Rogg, 1993*).

### I-2.2. Le critère de sélection $K'$

Selon *Chang (1995)* et *Chen (1997)*, une espèce  $k$  est candidate à l'état stationnaire si elle répond aux conditions suivantes :

$$\tau_k \rightarrow 0 ; X_k \approx 0 ; \left| f_k^f \right| \approx \left| f_k^d \right| \text{ et } \left| f_k^{net} \right| = \left| f_k^f - f_k^d \right| \ll \left| f_k^f \right|, \left| f_k^d \right|.$$

A partir de ces remarques, le critère de sélection se met sous la forme suivante :

$$K_k = X_k \cdot \frac{\left| f_k^f - f_k^d \right|}{\max(\left| f_k^f \right|, \left| f_k^d \right|)}
 \tag{24.}$$

Les espèces ayant les valeurs de  $K_k$  les plus faibles peuvent être raisonnablement estimées comme candidates à l'état quasi-stationnaire.

Un autre critère de sélection a été défini par *Vioosat et Ben-Aim (1998)* dans leur étude sur la fonction DEQS (Déviation Equilibre Quasi-Stationnaire) :

$$deqs(k) = \frac{f_k^f}{f_k^d} \quad (25.)$$

Cette grandeur étant voisine de 1 lorsque l'espèce est en état quasi-stationnaire.

Pour améliorer la qualité de sélection, *Lepage (2000)* a établi un nouveau critère  $K'$  en fusionnant les deux précédents selon :

$$K'_k = (deqs(k) - 1) \cdot X_k \quad (26.)$$

En intégrant ce critère  $K'_k$  sur toute la zone de combustion, et pour différentes conditions paramétriques, on obtient un classement des espèces en fonction de leur probabilité de stationnarité (plus  $K'_k$  est faible, plus l'espèce peut être considérée en état-stationnaire). Celles qui présentent les valeurs intégrales de  $K'$  les plus faibles sont considérées comme stationnaires. Ce nouveau critère donne généralement des résultats meilleurs que ceux obtenus avec le critère  $K_k$ .

### I-2.3. La méthode de sélection liée aux temps caractéristiques des espèces

Une autre technique (*Turányi et Toth, 1992 - Turányi et al., 1993 - Tomlin et al., 1995 - Jaubertie et al., 1998 - Løvås et al., 2000 - 2002a et b - Soyhan et al., 2002*) permettant de déterminer ce nombre d'espèces stationnaires, est l'analyse de la matrice Jacobienne et l'utilisation des temps caractéristiques de chacune des espèces  $\tau_k$ . Le temps caractéristique d'une espèce  $k$ , grossièrement égal à l'inverse de l'élément diagonal  $\lambda_k$  de la matrice Jacobienne pour

cette espèce, peut s'écrire selon :  $\tau_k \equiv \left| -\frac{1}{\lambda_k} \right|$ .

Cette méthode de sélection apparaît dans les programmes KINALC (*Pilling et al., 1995*) ou CSP91 (*Goussis et Lam, 1991*). Si  $\tau_k < \tau_{cut}$  ( $\tau_{cut}$ , temps caractéristique de coupure spécifié par l'utilisateur), la  $k^{ième}$  espèce peut être considérée comme étant stationnaire. D'après *Massias et al. (1999a et b)*, cette procédure est peu précise et dépend fortement du choix arbitraire de la valeur de coupure.



#### I-2.4. La méthode CSP (Computational Singular Perturbation)

Dès 1985, *S. H. Lam* a proposé, en collaboration avec *D. A. Goussis*, une nouvelle méthode de réduction de mécanisme : Computational Singular Perturbation ou *CSP* (*Lam et Goussis, 1991, 1994 - Lam 1993, 1995*). Conçue à l'origine pour diminuer la raideur des systèmes à résoudre, son utilisation ne nécessite pas de compétences particulières en cinétique. L'algorithme identifie numériquement les espèces en état stationnaire (ou « radicaux » selon la terminologie des auteurs) et les réactions rapides.

Les réactions chimiques sont rassemblées en groupes de réactions associées par ordre de grandeur de leur échelle de temps caractéristique. Ces groupes de réactions peuvent être *éteints*, *dormants* ou *actifs*. Les *groupes éteints* (ou épuisés) contiennent les réactions chimiques dites rapides à partir desquelles les suppositions de l'AEQS et de l'AEP peuvent être appliquées pour les éliminer du schéma réactionnel. Les *groupes dormants* contiennent les réactions chimiques lentes qui ne jouent aucun rôle à un temps  $t$  donné dans le processus étudié. Les *groupes actifs* sont lents et contiennent les réactions contrôlant la vitesse.

##### I-2.4.1. Principe de la méthode

Dans son mémoire, *Lepage* résume simplement le principe utilisé dans la méthode. Si l'on reprend ses conclusions, le système d'équations d'évolution des concentrations au cours du temps, qui s'appuie sur une nouvelle formulation, s'exprime par :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c) = \sum_{m=1}^N a_m \cdot g^m(c) \tag{27.}$$
$$g^m(c) = b^m \cdot f(c) = b^m \cdot \sum_{j=1}^{N_r} \nu_j q_j$$

avec :  $c$  = vecteur concentration de dimension  $N$ ,  $A = (a_1, \dots, a_N)$  base de vecteurs propres colonnes,  $B = (b^1, \dots, b^N)$  base de vecteurs propres lignes telle que  $B = (A)^{-1}$ ,  $g^m$  = modes propres du système.

A chaque terme est associé un temps caractéristique du système. Le découplage des modes lents/rapides s'effectue par analyse des valeurs propres. Les valeurs propres élevées

correspondent aux modes rapides, qui pourront être écartés, facilitant *a priori* l'intégration d'un système devenu moins raide. Une espèce sera ainsi considérée en EQS si aucun mode lent ne l'affecte. A chaque pas de temps, la décomposition du système peut être représentée par :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c) = \sum_{m=1}^M \underbrace{a_m \cdot g^m}_{\text{modes rapides}} + \sum_{m=M+1}^N \underbrace{a_m \cdot g^m}_{\text{modes lents}} \quad (28.)$$

avec  $M$  = nombre de modes rapides négligeables au temps  $t$

#### I-2.4.2. Utilisation de la méthode

Pour obtenir le mécanisme cinétique réduit, *Lam* propose d'identifier les espèces candidates à l'état stationnaire grâce au « **CSP pointer** » (pointeur CSP). Bien qu'« éliminées » du mécanisme, ils restent présents sous la forme d'expressions algébriques permettant le calcul de leurs concentrations.

- **Théorie du « CSP pointer »**

L'analyse CSP réalisée en chaque point  $x$  du domaine paramétrique permet d'obtenir un pointeur CSP,  $D_k(x)$ , pour chacune des espèces  $k$  du système. Chaque pointeur, associé au  $m^{\text{ième}}$  mode rapide, est défini par les  $N$  éléments diagonaux du produit des matrices  $a_m$  et  $b^m$  tel que :

$$a_m \cdot b^m = \begin{bmatrix} \alpha_{m,1} \\ \vdots \\ \alpha_{m,N} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta^{m,1} & \dots & \beta^{m,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_m(1) & \dots & \alpha_{m,1} \cdot \beta^{m,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{m,N} \cdot \beta^{m,1} & \dots & D_m(N) \end{bmatrix} \quad (29.)$$

soit :

$$D = \text{diag} \left[ \sum_{m=1}^M a_m \cdot b^m \right] = \text{diag} \begin{bmatrix} D_1 & & \\ & \ddots & \\ & & D_N \end{bmatrix} \quad (30.)$$

Lorsque  $D_i(x)$  est égal à 1, le statut de la  $i^{\text{ième}}$  espèce est régi par les échelles de temps rapides. Cette dernière peut être considérée comme une espèce stationnaire en  $x$ . A l'inverse, l'espèce n'est pas stationnaire si  $D_k(x) = 0$ . Cependant, *Massias et al. (1999a et b)* montrent que l'utilisation de ce pointeur CSP, seul, a des limites et peut même conduire à des inexactitudes dans le choix des espèces stationnaires. Ainsi, selon le domaine réactionnel étudié (gaz brûlés pour une flamme, par exemple), un réactif pourra être désigné par le pointeur comme une espèce stationnaire, alors qu'il n'y a pas lieu.

- ***Théorie du « CSP pointer » intégré***

Pour minimiser ces défauts de sélection, *Massias et al. (1999a et b)* proposent un pointeur CSP pondéré par la vitesse nette de réaction ( $f_k$ ) de l'espèce  $k$  et sa fraction molaire ( $X_k$ ). Celui-ci est ensuite intégré sur l'ensemble de la zone réactionnel  $L$ . Ce critère de sélection  $I_k$ , ou pointeur CSP intégré, permet une identification semble t'il plus correcte des espèces stationnaires. Les fortes valeurs de  $I_k$  désignent la stationnarité, inversement  $I_k = 0$  pour les espèces majeures (espèces différentielles).

$$I_k = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{D_k(x) \cdot |f_k(x)|}{|f_k(x)_{max}| \cdot X_k(x)} dx \quad (31.)$$

#### I-2.4.3. Résultats

Le pointeur CSP (intégré ou non) permet donc de sélectionner un lot d'espèces stationnaires pour établir un mécanisme réduit pseudo-global. Cependant, cette méthode itérative (*Lam et Goussis, 1991*) entraîne parfois des développements longs et fastidieux lors de la résolution du système d'équations différentielles (*Jaubertie, 1999*). De plus, elle présente l'inconvénient de ne pas distinguer de façon nette et précise, grâce à une coupure significative dans les valeurs de  $I_k$  par exemple, le lot des espèces stationnaires de celui des différentielles (*Massias et al., 1999a et b - Diamantis et al., 2002*).

C'est pourquoi dans le programme CSP-STEP *Massias et al. (1997)* ont utilisé une formule empirique :  $M = N - E - S$ , reliant les  $N$  espèces totales, les  $E$  éléments du mécanisme et les  $S$  étapes du schéma réduit pseudo-global final, afin de déterminer les  $M$  espèces stationnaires à sélectionner. Moins il y a d'étapes ( $S$  faible), plus les calculs sont rapides, mais cette rapidité se fait au détriment de la précision.

Une autre possibilité, le choix arbitraire de la limite où les espèces peuvent être mises en état stationnaire, existe dans les programmes CSP91 (*Goussis et Lam, 1991*) ou KINALC (*Pilling et al., 1995*). Mais, elle peut entraîner des imprécisions sur la sélection des espèces en certains points du domaine paramétrique qui ne requièrent que la prise en compte d'un nombre limité d'espèces EQS (par exemple, les points proches de la limite d'extinction dans l'étude de *Goussis et Lam, 1992*), et par conséquent sur les profils des fractions molaires des espèces concernées.

Parmi, les études menées sur différents mécanismes, les plus significatives récapitulées dans le tableau I-3, permettent d'évaluer les capacités de réduction de la méthode CSP (quand les

informations sont fournies). D'un point de vue général, les résultats semblent satisfaisants : taux de réduction élevés, gains en temps améliorés et bonne précision sur les concentrations calculées (< 5%).

Auteurs	Schéma initial	Schéma final (M = mécanisme)	Schéma pseudo-global	Précision $\Delta C/C^a$	Gain en temps de calcul
<i>Lam et al. (1988)</i> Avec schéma de <i>Peters et Williams</i> (1987)	H <sub>2</sub> / O <sub>2</sub> / (CH <sub>4</sub> ) 38 réactions (irrev) ~ 15 espèces	H <sub>2</sub> / O <sub>2</sub> <sup>b</sup> 10 réactions (irrev) 7 espèces	7 réactions 7 espèces	?	?
<i>Treviño et Solorio</i> (1991)	H <sub>2</sub> / O <sub>2</sub> / CO 58 réactions ~ 11 espèces	2 régimes 10 / 8 réactions 10 / 9 espèces	2 régimes 5 / 4 réactions 8 / 7 espèces	?	?
<i>Treviño et Mendéz</i> (1992)	CH <sub>4</sub> / O <sub>2</sub> 231 réactions ?		6 réactions 9 espèces	Jusqu'à ~ 50 %	?
<i>Fotache et al. (1997)</i>	CH <sub>4</sub> 177 réactions (rev) 32 espèces	M <sub>1</sub> , M <sub>2</sub> , M <sub>3</sub> , M <sub>4</sub> 29/34/51/64 réactions 17/18/20/22 espèces		Jusqu'à ~ 10 %	2 à 3
<i>Massias et al.</i> (1999a et b)	CH <sub>4</sub> / H <sub>2</sub> 279 / 71 réactions 49 / 18 espèces		10 (ou 7) / 5 réactions 15 / 8 espèces	~ 5 %	0
<i>Frouzakis et</i> <i>Boulochos</i> (2000)	CH <sub>4</sub> / Air 488 réactions 53 espèces	CH <sub>4</sub> / Air 95 réactions 27 espèces	7 réactions 11 espèces	~ 2 %	< 2
<i>Diamantis et al.</i> (2002)	CH <sub>4</sub> / Air 249 réactions 49 espèces	CH <sub>4</sub> / Air 52 réactions 17 espèces	10 réactions 15 espèces	~ 5 %	?
<i>Lu et al.</i> (2002)	CH <sub>4</sub> / O <sub>2</sub> GRI Mech 1.2 H <sub>2</sub> / O <sub>2</sub> 9 espèces ? réactions		10 réactions 14 espèces  4 réactions 6 espèces	~ 2 %	?

**Tableau I-3 :** Résultats de la réduction de mécanisme par la méthode CSP.

Note a : la comparaison C (C = concentration) détaillé / C réduit pour calculer la précision sur C est soit estimée par les courbes des articles, soit donnée par les auteurs.

Note b : les auteurs de cet article n'utilisent qu'une partie du mécanisme de *Peters et Williams (1987)* pour tester leur méthode de réduction.

Néanmoins, la difficulté majeure de cette procédure de réduction, soulignée par différents auteurs, reste malgré tout le « bon » choix des espèces EQS. Cette sélection peut effectivement changer au cours de l'évolution du système réactif, pour un même mécanisme, si les conditions paramétriques couvrent un domaine très étendu. Dans la plupart des cas, les solutions possibles ne peuvent s'appuyer que sur des notions d'intuition « éclairée » ou sur les connaissances

cinétiques de l'utilisateur. Cet aspect sera discuté en détail dans la partie résultats concernant nos essais d'application de la méthode CSP.

### I-2.5. L'erreur induite par l'AEQS

L'utilisation de l'approximation de l'état quasi-stationnaire entraîne une erreur sur les concentrations des espèces stationnaires. Mais les espèces non-stationnaires ou différentielles sont de manière indirecte également affectées. Pour quantifier cette erreur sur la concentration

d'une simple (*s*) espèce *k* ( $\Delta c_k^s$ ), *Turányi et al. (1993)* utilisent la relation :  $\Delta c_k^s = \frac{1}{\lambda_k} \cdot \frac{dc_k}{dt}$ .

Autrement dit, plus une espèce engendre une erreur faible pour l'ensemble du système, plus sa probabilité d'être effectivement stationnaire est forte. Selon ce principe, il est alors possible d'identifier la majorité des espèces stationnaires sur la base de leur erreur instantanée (erreurs les plus faibles).

En réalité, cette sélection doit tenir compte des couplages éventuels entre les différentes espèces du système. C'est pourquoi les effets de l'application de l'AEQS sont préférentiellement évalués pour un groupe (*g*) d'espèces, qui peut être identifié grâce à la relation :

$$\Delta c_k^g = \frac{1}{\lambda_k} \cdot \frac{dc_k}{dt} - \frac{1}{\lambda_k} \sum_{i \neq k} J_{ki} \Delta c_i^g.$$

Avec  $J_{ki}$  élément de la matrice Jacobienne.

Le terme  $\frac{1}{\lambda_k} \sum_{i \neq k} J_{ki} \Delta c_i^g$  représente les interactions entre les erreurs instantanées de

l'espèce *i* sur l'espèce *k* dans le groupe *g*. Si l'erreur  $\Delta c_k^g$  de ce groupe reste faible, alors les espèces le constituant sont de bonnes candidates à l'état stationnaire. Dans le cas contraire, il est nécessaire de constituer un nouveau groupe et d'en calculer les nouvelles erreurs.

L'évaluation de ce type d'erreur et la constitution des différents groupes nécessitent de nombreux calculs avant l'identification finale des espèces stationnaires. En outre, l'étude de *Tomlin et al. (1995)* montre que ces deux types d'erreur entraînent la sélection des mêmes espèces stationnaires.  $\Delta c_k^s$  constitue donc une estimation correcte et simple de l'erreur engendrée par l'AEQS sur une espèce pour sélectionner, sans prendre trop de risques, les espèces candidates à l'état stationnaire.

### I-3. Réduction selon une démarche « purement mathématique »

Dans cette démarche, l'aspect cinétique chimique est minimisé pour privilégier, avant tout, le gain en temps de calcul. Deux méthodes : *Repro-modelling* ou *ILDM* (Intrinsic Low-Dimensional Manifold) sont principalement utilisées pour ce type de réduction.

#### I-3.1. La méthode du *Repro-Modelling*

*Turányi (1994a et b)* présente la méthode du *repro-modelling* comme une paramétrisation du processus chimique sous la forme d'équations polynomiales multi-variables explicites. Elle a surtout été mise en œuvre dans le domaine de la pollution atmosphérique, mais peu en revanche dans celui de la combustion.

##### I-3.1.1. Principe de la méthode

A partir de nombreuses simulations avec le modèle cinétique détaillé, une base d'informations sur la concentration des espèces et sur les vitesses de réactions est construite. Ces données peuvent ensuite être représentées (« *fitted* » en anglais) par un polynôme multivariés d'ordre supérieur. Les coefficients de ce polynôme permettent ainsi une évaluation beaucoup plus rapide des grandeurs à reproduire qu'avec le modèle détaillé. Par contre, une condition doit être respectée. *Turányi (1994b)* souligne, en effet, que la mise en place d'un *repro-modèle* ne peut s'effectuer sans une sélection préalable des espèces importantes dans les mécanismes. En général, la technique du *repro-modelling* permet une représentation cinétique correcte du système.

Les simulations sont parfois jusqu'à  $10^4$  fois plus rapides que celles effectuées avec le modèle complet (*Griffiths, 1995*). De plus, les polynômes utilisés peuvent évaluer les variables avec une précision de l'ordre de 1 % (*Tomlin et al., 1997*). Cependant, les informations paramétrées sont relatives à un domaine de conditions bien limité (température, pression, temps de réaction...), alors que dans la plupart des cas, celui-ci est beaucoup plus vaste. La prise en compte d'un domaine beaucoup plus vaste supposerait l'accumulation d'une quantité de résultats nettement plus importante avec le mécanisme détaillé (données à introduire dans le polynôme). L'opération de « *fittage* » de plus en plus complexe devient alors très pénalisante en temps et la robustesse de l'algorithme diminue. Une autre solution consisterait à utiliser autant de

polynômes qu'il y a de domaines expérimentaux à représenter ou de sous-modèles dans le mécanisme détaillé initial. Dans les deux cas, le nombre des données à stocker devient très rapidement gigantesque faisant « exploser » la taille du fichier de stockage.

### I-3.1.2. Conclusion

L'utilisation de la méthode du repro-modelling pour différentes études, rassemblées dans le tableau I-4, laisse apparaître une bonne précision sur les profils de concentration calculée. Le gain en temps de calcul peut même être très important : 25 à 25000. Cependant, il faut souligner que le nombre de variables et le domaine paramétrique sont limités. De plus, la plupart des auteurs dont *Lowe et al. (1998)*, précisent bien que cette technique du repro-modelling ne devient intéressante que si elle est utilisée en aval sur un système simplifié au préalable par d'autres méthodes.

Auteurs	Schéma initial	Nombre de variables	Gain en temps de calcul	Précision $\Delta C/C^a$
<i>Turányi (1994a)</i>	H <sub>2</sub> / O <sub>2</sub> / CO ? réactions ? espèces	2 3	24000 12000	<b>0.26%</b>
<i>Turányi (1994b)</i>	Chimie oscillante 80 (ou 42) réactions 25 (ou 22) espèces	4 à 10 8	? 60	<b>0.3 à 2%</b> ?
<i>Lowe et al. (1998)</i>	Chimie troposphérique 159 réactions 29 espèces	10	25	<b>1%</b>
<i>Clifford et al. (1998)</i>	H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> ? réactions ? espèces	2	de 3 à 1500	<b>5%</b>

**Tableau I-4 :** Résultats de la réduction de mécanismes par la méthode du Repro-modelling.

Note a : la comparaison C (C = concentration) détaillé / C réduit pour calculer la précision sur C est soit estimée par les courbes des articles, soit donnée par les auteurs.

Selon *Turányi (1994a)*, 13 à 15 variables semblent constituer une limite acceptable sur les mécanismes essayés, mais des études complémentaires seront nécessaires pour évaluer le potentiel réel de cette méthode dans le domaine de la combustion et sur des mécanismes plus complexes.

### I-3.2. La méthode ILDM

La cinétique associée à un mécanisme détaillé comportant  $N$  espèces est représentée par  $N$  équations différentielles qui peuvent être couplées à d'autres équations (celles de la dynamique des fluides dans la combustion turbulente). La résolution de ces équations entraîne des temps de calcul prohibitifs. Il semble donc intéressant de développer une méthode conduisant à des simplifications mathématiques du système pour permettre de diminuer ostensiblement le temps de calcul de la cinétique chimique. *Maas et Pope (1992a et b)* et *Maas (1998)* proposent la méthode ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifold).

#### I-3.2.1. Principe de la méthode

L'objectif est de créer un modèle global (ou pseudo-global) permettant d'effectuer les calculs multidimensionnels de la dynamique des fluides, mais en ne conservant qu'une représentation très simplifiée de la chimie. Les seules informations requises sont : le mécanisme détaillé et le nombre de degrés de liberté  $n$  (nombre d'étapes ou dimension) du schéma réduit final.

A l'instar de CSP, la méthode ILDM cherche également à simplifier la multiplicité d'échelles de temps en s'appuyant sur une analyse valeurs propres/vecteurs propres de la matrice Jacobienne, qui permet l'identification des temps caractéristiques et des processus chimiques lents ou rapides. Dans l'espace des phases, l'évolution de la cinétique chimique (analyse des vecteurs propres) tend rapidement vers une limite nommée variété lente ou manifold, qui définit donc un sous-ensemble pouvant être utilisé pour construire un schéma réduit. Seuls sont considérés les temps caractéristiques les moins rapides, puisque les perturbations associées aux temps caractéristiques rapides sont relaxées rapidement par la chimie vers le manifold correspondant à l'évolution lente du système vers le point d'équilibre. L'identification de ce manifold, attracteur des différentes trajectoires du modèle détaillé, est nécessaire. Le travail consiste donc à reproduire les mouvements du système le long du manifold à partir des différentes caractéristiques de ce dernier (vitesse de formation des espèces, composition chimique, température,...). Ces caractéristiques qui paramétrisent les variables sont conservées dans une table représentative du schéma réduit final. Ainsi, les autres variables correspondant aux échelles de temps rapides, sont « éliminées » du schéma réactionnel. Le schéma réduit qui en résulte comporte  $n$  étapes, fonction des coordonnées associées avec les  $n$  degrés de liberté (*Ferrendier, 1998*).



## I-3.2.2. Résultats

Les études de réduction ILDM en combustion ont toutes été réalisées sur des mécanismes cinétiques relativement simples (tableau I-5).

Mécanismes	Auteurs
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	<i>Maas et Pope, 1994</i> <i>Eggels et de Goey, 1995</i> <i>Niemman et al., 1997</i> <i>Buki et al., 2002</i>
H <sub>2</sub> /CO/O <sub>2</sub>	<i>Maas et Pope, 1992a , 1992b et 1994</i> <i>Eggels et al., 1997</i>
H <sub>2</sub> /CO/Air	<i>Maas et Pope, 1994</i>
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	<i>Schmidt et al., 1996 et 1998</i> <i>Ferrendier, 1998</i> <i>Gicquel et al., 1999</i> <i>Zurbach et al., 1999</i>

**Tableau I-5 :** Exemples de mécanismes réduits par la méthode ILDM.

Le point commun à ces modèles est le nombre limité d'espèces (8 à 34) et de réactions (8 à 288). Les gains en temps de calcul mesurés ne sont guère élevés, et le plus souvent comparables à ceux obtenus avec l'approche de réduction dite purement chimique : 3 pour un modèle CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> (*Gicquel et al., 1999*) - 10 pour un système H<sub>2</sub>/CO/O<sub>2</sub> (*Maas et Pope, 1994*) et 17 pour un système H<sub>2</sub>/CO/Air (*Maas et Pope, 1994*). Par contre, la précision des calculs est tout à fait correcte : l'erreur relative schéma réduit/modèle détaillé est inférieure à 5%, voire 3% dans la majorité des cas.

Avec un mécanisme H<sub>2</sub>/CO/O<sub>2</sub>, *Eggels et al. (1997)* arrivent à la conclusion suivante : un schéma réduit à 2 étapes donne de meilleurs résultats (en terme de précision et de temps de calcul) s'il est obtenu par la méthode de réduction conventionnelle (AEQS) et non par la méthode ILDM. Un autre inconvénient inhérent à cette technique est la nécessité d'augmenter, même pour des systèmes simples, la quantité de données stockées pour reproduire correctement certains comportements de la combustion (*Zurbach et al., 1999*). En effet, plus le système et les conditions paramétriques sont « complexes » (simulation avec un modèle de grande taille dans la zone où la réactivité est maximale et dans des conditions paramétriques autres que la stœchiométrie par exemple), plus il est nécessaire d'augmenter la taille du manifold, et donc le nombre d'informations dans les tableaux paramétrant les variables étudiées, et donc le temps de calcul. *Niemman et al. (1997)* estiment qu'il faudrait stocker *un milliard* de données pour simuler correctement la combustion dans un moteur diesel. Cette inflation d'informations à tabuler, à laquelle s'ajoute le temps d'accès croissant à ces données, constitue le handicap majeur de cette méthode.

### I-3.2.3. Conclusion

Dans l'état actuel des connaissances, il semble qu'un manifold de dimension 5 soit une limite raisonnable à ne pas dépasser (*Turányi, 1994a*). Cet auteur propose l'utilisation de polynômes (même démarche que dans le repro-modelling), au lieu des tables, pour résoudre les problèmes liés au stockage de données. Ainsi, *Niemman et al. (1997)* et *Buki et al. (2002)* ont suivi cette procédure en utilisant des polynômes orthogonaux multivariés pour paramétrer les résultats. Ce mode de paramétrage leur a permis de diminuer le besoin de stockage par 200, tout en conservant une bonne prédictivité sur les variables suivies. Par contre, la détermination des coefficients des polynômes orthogonaux n'est pas une opération aisée et dépend fortement des informations stockées initialement et de leurs qualités.

Il est difficile d'apprécier la robustesse et l'efficacité de la technique ILDM sur des modèles de la combustion beaucoup plus complexes, les études n'existant pas. Par ailleurs, la chimie basse température, importante dans les phénomènes de cliquetis ou d'auto-inflammation dans les moteurs, semble être d'une complexité (en nombre de variables supplémentaires) la mettant hors de portée du domaine d'application de la méthode ILDM.

## I-4. Synthèse

L'« inflation » de la taille des mécanismes qui accompagne la compréhension de la cinétique rend les simulations gourmandes en temps de calcul (de quelques heures à plusieurs semaines). L'intérêt de la réduction est d'essayer de contourner ce problème, en diminuant la taille du mécanisme, tout en préservant les qualités prédictives du modèle initial.

Ainsi que nous l'avons vu, la démarche de réduction dépend fortement des objectifs de précision et de rapidité souhaités. Si l'on vise un mécanisme réduit rapide, ne reproduisant que quelques unes des caractéristiques du modèle initial, la démarche mathématique (Repro-modelling ou ILDM) qui conduit à un mécanisme réduit global, semble bien adaptée. Les temps de calcul observés sont effectivement de 15 (systèmes relativement simples) à 20000 (systèmes très simples) fois plus faibles. Cependant, l'inconvénient majeur de cette approche est le faible nombre de variables représentées : de 2 à moins d'une dizaine (sur un maximum de 40 espèces), si l'on veut garantir l'efficacité de ces méthodes.

Un modèle pseudo-détaillé, obtenu après l'élimination des espèces et des réactions inutiles (méthode des flux atomiques, de l'analyse de sensibilité ou ACP), sera plus apte à rendre compte

de l'évolution de la majeure partie des espèces (50% à 75%). Les gains en temps de calcul avec ces mécanismes allégés, qui peuvent atteindre un facteur 10, sont généralement compris entre 3 et 5. Cette amélioration, honorable, est insuffisante pour espérer intégrer cette description de la chimie dans les codes de calculs industriels déjà fort complexes.

Pour un cinéticien, la réduction d'un mécanisme n'offre d'intérêt que si le schéma réduit obtenu conserve des capacités prédictives. Pour ces raisons, le développement d'un schéma pseudo-global, selon la démarche « chimico-mathématique », semble être un compromis honnête entre représentativité de la chimie et rapidité des calculs. Cependant, cette opération n'est efficace que sur un mécanisme débarrassé au préalable de toutes ses réactions et espèces inutiles (*Montgomery et al., 2002a et b*).

La stratégie adoptée dans cette étude est la suivante : élimination des espèces inutiles par la méthode des flux atomiques puis élimination des réactions inutiles par la méthode PCAF. A l'issue de cette simplification, un mécanisme squelettique est obtenu. L'application de l'AEQS sur ce dernier conduit vers le schéma réduit final. Cette approche qui s'appuie sur deux démarches, chimique et chimico-mathématique, présente l'avantage de représenter correctement la composition de plus de 70% des espèces majoritaires, avec des temps de calcul très réduits (jusqu'à 24 fois par rapport au modèle initial : *Lepage, 2000 - Frouzakis et Boulochos, 2000*).

La présente étude se propose, après expertise, d'améliorer la méthodologie de réduction mise en place au *Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs* et d'en simplifier l'utilisation en développant des programmes automatisés pour chacune des 3 étapes qui la constitue.

Après avoir présenté les codes de calcul utilisés, nous validerons, sur un **large domaine** de conditions paramétriques, le processus de réduction en l'état, afin de définir les conditions optimales d'application et les améliorations possibles de cette technique sur un modèle détaillé de **grande taille** : celui d'un kérosène reconstitué (225 espèces / 3493 réactions irréversibles).

Ces conditions serviront de base d'une part, à l'étude approfondie de l'influence des paramètres initiaux de la combustion (pression, température et richesse) sur l'élimination des espèces et des réactions au cours des deux premières opérations de réduction chimique (en mécanismes simplifiés) et d'autre part, à la mise en place d'une automatisation complète de la procédure de calcul.

Enfin, dans la dernière partie de notre travail qui vise à obtenir « le meilleur » schéma réduit conciliant à la fois rapidité et précision (application de l'AEQS), nous présenterons des solutions pour atteindre cet objectif avec la mise en œuvre d'un autre critère de sélection des espèces en EQS fiable et facile d'utilisation. Les nouveaux développements apportés au code de calcul, pour rendre cette étape totalement automatique, seront également décrits.



# Chapitre II

---

## Les codes de calcul

<b>II-1.</b>	<b>Le mécanisme cinétique détaillé : Chem.inp</b>	<b>33</b>
II-1.1.	Généralités sur le mécanisme réactionnel	33
II-1.2.	Les réactions de « <i>fall-off</i> » dépendantes de la pression	36
II-1.2.1.	<i>La méthode de Lindemann</i>	36
•	<i>Cas d'une réaction tri-moléculaire</i>	
•	<i>Cas d'une réaction unimoléculaire</i>	
II-1.2.2.	<i>La méthode de Troe</i>	39
<b>II-2.</b>	<b>Fichier de données thermodynamiques : Therm.dat</b>	<b>40</b>
<b>II-3.</b>	<b>L'interpréteur chimique : CKINTERP.F</b>	<b>41</b>
<b>II-4.</b>	<b>Le réacteur parfaitement agité : Perfectly Stirred Reactor, PSR</b>	<b>42</b>
II-4.1.	Présentation générale du réacteur	42
II-4.2.	Equations du réacteur parfaitement agité	45
II-4.3.	Méthode de résolution numérique	47
<b>II-5.</b>	<b>KINALC : Programme d'analyse et de réduction des mécanismes</b>	<b>47</b>
II-5.1.	Description générale du programme originel de <i>Pilling et al. (1995)</i>	49
II-5.1.1.	<i>Analyse des vitesses et chemins réactionnels</i>	49
II-5.1.2.	<i>Analyse locale de sensibilité des concentrations</i>	49
II-5.1.3.	<i>Analyse de la matrice Jacobienne et analyse des échelles de temps</i>	50
II-5.2.	Les trois options de la méthode mise en œuvre par <i>Lepage (2000)</i>	50
II-5.2.1.	<i>Elimination des espèces inutiles (Méthode des Flux Atomiques)</i>	50
II-5.2.2.	<i>Elimination des réactions inutiles (Analyse des Composantes Principales)</i>	52
II-5.2.3.	<i>Construction du schéma réduit (Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire)</i>	53

---

---

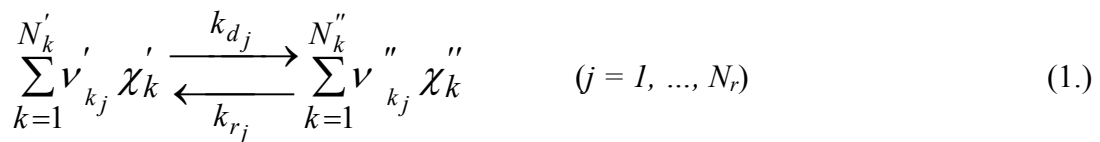
---

Les programmes utilisés au cours de ce travail pour simuler le processus de combustion d'un hydrocarbure et effectuer divers calculs cinétiques, font partie du package CHEMKIN-II développé par *Kee et al. (1989)*. Les différents modules écrits en Fortran 77 permettent la modélisation de phénomènes de cinétiques chimiques plus ou moins complexes telles la combustion en phase gazeuse, les réactions gaz-surface ou celles des plasmas. Ces programmes requièrent en entrée : un mécanisme cinétique (**Chem.inp**), une base de données thermodynamiques (**Therm.dat**). Nous avons effectué les simulations dans les conditions du réacteur parfaitement agité grâce au programme **PSR** mis au point par *Glarborg et al. (1986)*.

## II-1. Le mécanisme cinétique détaillé : Chem.inp

### II-1.1. Généralités sur le mécanisme réactionnel

Un mécanisme cinétique peut être représenté par un ensemble de  $N_r$  réactions élémentaires réversibles ou non contenant au total  $N_k$  espèces chimiques ( $N'_k$  dans le membre de gauche et  $N''_k$  dans le membre de droite). Il est possible de représenter ces réactions sous la forme suivante :



Avec  $\nu'_{kj}$  (ou  $\nu''_{kj}$ ) le coefficient stœchiométrique de la  $k^{\text{ième}}$  espèce dans la réaction  $j$  et  $\chi'_k$  (ou  $\chi''_k$ ) symbole d'une espèce chimique  $k$ . La vitesse nette de la réaction  $j$  ( $q_j$ ) est définie par la relation 2 :

$$q_j = \left[ k_{d_j} \cdot \prod_{k=1}^{N'_k} [\chi'_k]^{\nu'_{kj}} - k_{r_j} \cdot \prod_{k=1}^{N''_k} [\chi''_k]^{\nu''_{kj}} \right] \quad (2)$$

où  $[\chi_k]$  est la concentration molaire de la  $k^{\text{ième}}$  espèce,  $k_{d_j}$  et  $k_{r_j}$  sont respectivement les constantes de vitesse directe et inverse de la  $j^{\text{ième}}$  réaction.

Pour les réactions de dissociation ou de recombinaison (ex :  $R + X + M = RX + M$ ) nécessitant l'intervention d'un partenaire de collision ou « troisième corps » (M), la relation (2) devient :

$$q_j = \left( \sum_{k=1}^{N_k} (\alpha_{k_j}) \cdot [\chi_k] \right) \cdot \left[ k_{d_j} \cdot \prod_{k=1}^{N'_k} [\chi'_k]^{v'_{kj}} - k_{r_j} \cdot \prod_{k=1}^{N''_k} [\chi''_k]^{v''_{kj}} \right] \quad (3.)$$

Les coefficients  $\alpha_{k_j}$  sont utilisés pour spécifier l'efficacité de collision de la  $k^{\text{ième}}$  espèce dans la réaction  $j$ . La constante de vitesse directe  $k_{d_j}$  d'une réaction  $j$  est calculée par la loi d'Arrhenius généralisée :

$$k_{d_j} = A_j T^n \exp \left( \frac{-Ea_j}{RT} \right) \quad (4.)$$

avec :  $A_j$  le facteur pré-exponentiel de la réaction  $j$ ,  $n$  l'exposant sur la température,  $Ea_j$  l'énergie d'activation de la réaction  $j$  et  $R$  constante des gaz parfaits (dont les unités dépendent de celles des grandeurs thermodynamiques utilisées).

La constante de vitesse inverse  $k_{r_j}$  peut être déduite de la relation entre la constante d'équilibre des processus directs et inverses dans l'échelle des concentrations  $K_{c_j}$  et  $k_{d_j}$  pour la réaction élémentaire réversible selon :

$$k_{r_j} = \frac{k_{d_j}}{K_{c_j} \times (c_0)^{v_{kj}}} \quad (\text{avec } c_0 \text{ concentration unitaire}) \quad (5.)$$

$v_{k_j} = v''_{k_j} - v'_{k_j}$  est le coefficient stœchiométrique net dans la réaction  $j$ .

$$\text{avec } K_{c_j} = \frac{\prod_{k=1}^{N''_k} \left( \frac{[\chi''_k]}{c_0} \right)^{v''_{kj}}}{\prod_{k=1}^{N'_k} \left( \frac{[\chi'_k]}{c_0} \right)^{v'_{kj}}}$$

Le calcul de la constante d'équilibre  $K_{c_j}$  de la  $j^{\text{ième}}$  réaction s'effectue à partir de :



$$\Delta_r G_j^\circ = -RT \cdot \ln(K_{p_j}) \quad (6.)$$

où  $\Delta_r G_j^\circ$  correspond à la variation d'enthalpie libre standard de réaction entre les produits et les réactifs. La constante d'équilibre  $K_{p_j}$  exprimée en fonction des pressions partielles ( $p_k$ , en bar) est définie par la relation :

$$K_{p_j} = \frac{\prod_{k=1}^{N_k''} \left( \frac{p_k}{p_0} \right)^{v_k''}}{\prod_{k=1}^{N_k'} \left( \frac{p_k}{p_0} \right)^{v_k'}} \quad (\text{avec } p_0 \text{ pression standard} = 100 \text{ kPa ou 1 bar}) \quad (7.)$$

Les gaz étant supposés parfaits, on a  $p_k = [\chi_k] \cdot R_1 T$  (avec  $R_1$  constante des gaz parfaits lorsque  $p_k$  est en bar et  $[\chi_k]$  en mol.l<sup>-1</sup>, soit  $R_1 = 0.08314 \text{ bar.l.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).

$K_{p_j}$  est liée à la constante d'équilibre  $K_{c_j}$  et peut se réécrire suivant la relation :

$$K_{p_j} = \frac{\prod_{k=1}^{N_k''} \left( \frac{[\chi_k''] R_1 T}{p_0} \right)^{v_k''}}{\prod_{k=1}^{N_k'} \left( \frac{[\chi_k'] R_1 T}{p_0} \right)^{v_k'}} = K_{c_j} \cdot \left( \frac{R_1 T c_0}{p_0} \right)^{v_{kj}} \quad (8.)$$

A partir de la relation (6),  $K_{p_j}$  devient :

$$K_{p_j} = \exp \left( -\frac{\Delta_r G_j^\circ}{RT} \right) = \exp \left( \frac{\Delta_r S_j^\circ}{R} - \frac{\Delta_r H_j^\circ}{RT} \right) \quad (9.)$$

$\Delta_r$  représente une variation entre les produits et les réactifs dans la réaction  $j$ . On a :

$$\frac{\Delta_r S_j^\circ}{R} = \sum_{k=1}^{N_k} v_{kj} \frac{S_k^\circ}{R} \quad (10.)$$

$$\frac{\Delta_r H_j^\circ}{RT} = \sum_{k=1}^{N_k} \nu_{k_j} \frac{H_k^\circ}{RT} \quad (11.)$$

Les grandeurs thermodynamiques (enthalpie et entropie standard) permettant de calculer la constante d'équilibre  $K_{c_j}$ , sont évaluées en fonction de la température à l'aide de polynômes décrits plus loin dans le paragraphe II-2.

### II-1.2. Les réactions de « *fall-off* » dépendantes de la pression

Les constantes de vitesse des réactions élémentaires ne dépendent en principe que de la température. Cependant, certaines d'entre elles peuvent dépendre également de la pression. La réaction de recombinaison du radical méthyle ( $\text{CH}_3$ ) pour former l'éthane ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) en est un exemple. Dans le domaine de haute pression, la réaction s'écrit :  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ , alors que dans celui de basse pression la réaction s'écrit  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 + \text{M} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{M}$ . Dans la zone de pression intermédiaire, on dit que la réaction est dans la zone de *fall-off*. Dans ce cas, elle s'écrit :  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 + (\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + (\text{M})$ , avec le troisième corps réactionnel M entre parenthèses.

Pour représenter les expressions de vitesse des réactions de décomposition ou de recombinaison tri-moléculaire dans cette « partie *fall-off* », plusieurs méthodes existent : la théorie de *Lindemann* (1922) et la théorie de *Troe* (1979) s'appuyant sur la théorie élémentaire des collisions ou la méthode RRKM (*Rice et Ramsperger, 1927 - Kassel, 1928 - Marcus, 1952*) s'appuyant sur la théorie du complexe activé.

#### II-1.2.1. La théorie de Lindemann

C'est la formulation la plus simple. L'expression des constantes de vitesse, sous la forme d'*Arrhenius* modifiée, est donnée pour les limites haute pression ( $k_\infty$ ) et pour les limites basse pression ( $k_0$ ) selon les expressions :

$$\begin{aligned} k_0 &= A_0 T^{\beta_0} \exp(-E_0 / RT) \\ k_\infty &= A_\infty T^{\beta_\infty} \exp(-E_\infty / RT) \end{aligned} \quad (12.)$$

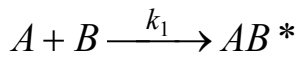
La constante de vitesse, valide sur tout le domaine de pression et de température, est exprimée par la formule suivante :

$$k = k_{\infty} \left( \frac{P_r}{1 + P_r} \right) \quad (13.)$$

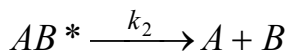
$P_r$  pression réduite donnée par la relation :  $P_r = \frac{k_0 [M]}{k_{\infty}}$ ,  $[M]$  étant la concentration du mélange.

• **Cas d'une réaction tri-moléculaire**

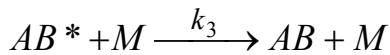
En considérant une réaction de recombinaison  $A + B + M \Leftrightarrow Produits + M$ , la théorie de *Lindemann* décompose cette réaction de la façon suivante :



➤ Collision de A et B conduisant à une molécule  $AB^*$  activée,



➤ Décomposition unimoléculaire de la molécule activée  $AB^*$ ,



➤ Désactivation de la molécule  $AB^*$  par choc avec une molécule M.

$AB^*$  : molécule activée,  $M$  : partenaire de collision représentant une molécule quelconque du milieu réactionnel (réactif, produit, ...).

Si on applique l'approximation de l'état quasi-stationnaire à la molécule activée  $AB^*$ , on obtient l'expression :

$$\frac{d[AB^*]}{dt} = k_1 [A] \cdot [B] - k_2 [AB^*] - k_3 [AB^*] \cdot [M] \approx 0 \quad (14.)$$

soit 
$$[AB^*] = \frac{k_1 [A] \cdot [B]}{k_2 + k_3 [M]} \quad (15.)$$

La vitesse du processus (vitesse de formation de la molécule AB) s'écrit :

$$\frac{d[AB]}{dt} = k_3 [AB^*] \cdot [M] = \frac{k_1 k_3 [M]}{k_2 + k_3 [M]} [A] \cdot [B] = k_{Lindemann} [A] \cdot [B] \quad (16.)$$

Dans le domaine de basse pression, la concentration du troisième corps étant très basse, le terme  $k_3 [M]$  devient très faible par rapport à  $k_2$  et la réaction est alors d'ordre 3. Par contre,

dans le domaine de haute pression, c'est le terme  $k_2$  qui devient négligeable devant le terme  $k_3[M]$ , et la réaction est d'ordre 2. Dans la zone de pression intermédiaire (*fall-off*), l'ordre de la réaction est aussi intermédiaire, compris entre 3 et 2.

L'expression devient suivant le domaine de pression considéré :

✓ *Basse pression* :  $k_3[M] \ll k_2$ , ordre 3  $k_{\text{Lindemann}} \rightarrow \frac{k_1 k_3 [M]}{k_2} = k_0[M]$  (17.)

✓ *Haute pression* :  $k_3[M] \gg k_2$ , ordre 2  $k_{\text{Lindemann}} \rightarrow k_1 = k_\infty$  (18.)

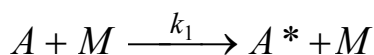
Dans la zone de *fall-off*, la constante de vitesse de la réaction s'écrit alors selon la relation :

$$k_{\text{Lindemann}} = \frac{k_1 k_3 [M]}{k_2 + k_3 [M]} = \frac{k_1}{\frac{k_2}{k_3 [M]} + 1} = \frac{k_\infty}{1 + \frac{k_\infty}{k_0 [M]}} \quad (19.)$$

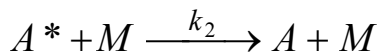
avec  $[M] = \sum_i f_i [M]_i$  ( $f_i$  : facteur d'efficacité pour le partenaire de collision)

• **Cas d'une réaction unimoléculaire**

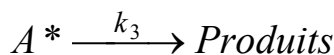
La théorie de *Lindemann* peut également s'appliquer aux réactions unimoléculaires (réactions de décomposition thermique ou réactions d'isomérisation) décrites selon les trois étapes suivantes :



➤ *activation de A par collision avec M (molécule quelconque du milieu),*



➤ *désactivation de la particule A\* activée par choc également,*



➤ *décomposition unimoléculaire de la particule activée A\*.*

Si on suit la même démarche que précédemment, application de l'approximation de l'état quasi-stationnaire et hypothèses suivant le domaine de pression considéré, on aboutit aux relations suivantes :

$$\frac{d[A^*]}{dt} = k_1[A] \cdot [M] - k_2[A^*] \cdot [M] - k_3[A^*] \approx 0 \quad (20.)$$

$$\text{d'où } [A^*] = \frac{k_1[A] \cdot [M]}{k_2[M] + k_3} \quad (21.)$$

$$\frac{d[\text{Produits}]}{dt} = k_3[A^*] = \frac{k_1 k_3[M]}{k_2[M] + k_3} [A] = k_{Lindemann} [A] \quad (22.)$$

L'expression devient suivant le domaine de pression considéré :

$$\checkmark \text{ Basse pression : } k_2[M] \ll k_3, \text{ ordre 2 } \quad k_{Lindemann} \rightarrow k_1[M] = k_0[M] \quad (23.)$$

$$\checkmark \text{ Haute pression : } k_2[M] \gg k_3, \text{ ordre 1 } \quad k_{Lindemann} \rightarrow \frac{k_1 k_3}{k_2} = k_\infty \quad (24.)$$

Dans la zone de *fall-off*, où l'ordre de la réaction est compris entre 2 et 1, la constante de vitesse se met sous la forme :

$$k_{Lindemann} = \frac{k_1 k_3[M]}{k_3 + k_2[M]} = \frac{k_\infty}{1 + \frac{k_\infty}{k_0[M]}} \quad (25.)$$

### II-1.2.2. La méthode de Troe

Le formalisme de *Troe* généralise la méthode de *Lindemann*, permettant de mieux décrire l'effet de pression sur les constantes de vitesse. Il vise à réduire les écarts entre la détermination expérimentale et les valeurs calculées selon la formule de *Lindemann*. La constante de vitesse est alors corrigée par un facteur « d'élargissement »  $F$  (avec  $k_{Troe} = k_{Lindemann} \times F$ ), qui lui-même est calculé à partir du paramètre de centrage  $F_{cent}$ . Ce facteur de centrage est estimé à partir des paramètres  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  ( $d$  étant facultatif) de la formule de *Troe* qui exprime la dépendance de ce dernier vis à vis de la température :

$$F_{cent} = (1 - a) \exp\left(\frac{-T}{b}\right) + a \cdot \exp\left(\frac{-T}{c}\right) + \exp\left(\frac{-d}{T}\right)$$

$$\log F = \left[ 1 + \left[ \frac{\log P_r + c}{n - 0,14 (\log P_r + c)} \right]^2 \right]^{-1} \cdot \log F_{cent}$$

$$\text{avec } P_r = \frac{k_0 [M]}{k_\infty} \quad (\text{pression réduite})$$

$$n = 0,75 - 1,27 \log F_{cent}$$

$$c = -0,4 - 0,67 \log F_{cent}$$

La méthode de calcul des différents paramètres de *Troe* est expliquée en détail dans le livre de *Gardiner et Troe (1984)*.

## II-2. Fichier de données thermodynamiques : Therm.dat

CHEMKIN-II possède sa propre base de données thermodynamiques (*Kee et al, 1987*) provenant majoritairement des tables de *JANAF (1971)*, des compilations de *Burcat (2001)* et de calculs ab-initio. Ces données thermodynamiques sont exprimées dans le formalisme du « NASA Chemical Equilibrium Program » (*Gordon et McBride, 1971*). Elles permettent le calcul des constantes de vitesse des réactions inverses qui sont liées aux constantes de vitesse directe et aux constantes d'équilibre, soit en unité de concentrations ( $K_c$ ), soit en unité de pression ( $K_p$ ), comme exprimées par les relations 6 et 8.

Les propriétés thermodynamiques, chaleur spécifique ( $C_p$ ), enthalpie standard ( $H^\circ$ ) et entropie standard ( $S^\circ$ ), d'une espèce  $i$  sont représentées à l'aide d'un ensemble de 14 coefficients polynomiaux ( $a_i$ ) pour un grand domaine de température. Les sept premiers coefficients permettent le calcul des grandeurs thermodynamiques entre 1000K et 3000K (ou 5000K). Les sept autres sont utilisés dans le domaine de température 300 – 1000K. La base de données contient également le nom des espèces, la nature des atomes constitutifs et le domaine de température sur lequel le polynôme a été validé.

La capacité calorifique standard à pression constante pour l'espèce  $k$  est représentée :

$$\frac{C_{p_k}^\circ}{R} = \sum_{n=1}^5 a_{n,k} T^{(n-1)} \quad n = \text{rang du coefficient du polynôme} \quad (26.)$$

De cette expression, on déduit l'enthalpie standard de formation apparente de  $k$  à pression constante :

$$H_k^\circ = \int_{T_0}^T C_{p_k}^\circ \cdot dT \quad \text{ou} \quad \frac{H_k^\circ}{RT} = \int_{T_0}^T \frac{C_{p_k}^\circ}{RT} \cdot dT \quad (27.)$$

$$\text{soit} \quad \frac{H_k^\circ}{RT} = \sum_{n=1}^5 \frac{a_{n,k} T^{(n-1)}}{n} + \frac{a_{6,k}}{T} \quad (28.)$$

L'entropie est définie de façon semblable selon :

$$S_k^\circ = \int_{T_0}^T \frac{C_{p_k}^\circ}{T} dT \quad (29.)$$

$$\text{soit} \quad \frac{S_k^\circ}{R} = a_{1,k} \ln T + \sum_{n=2}^5 \frac{a_{n,k} T^{(n-1)}}{(n-1)} + a_{7,k} \quad (30.)$$

A partir de ces trois grandeurs ( $C_p^\circ$ ,  $H^\circ$ ,  $S^\circ$ ), il est possible de calculer :

$$\times \text{ La capacité calorifique standard à volume constant : } C_v^\circ = C_p^\circ - R \quad (31.)$$

$$\times \text{ L'énergie interne standard : } U_k^\circ = H_k^\circ - \nu_{k_j} RT \quad (32.)$$

$$\times \text{ L'énergie libre standard : } A_k^\circ = U_k^\circ - TS_k^\circ \quad (33.)$$

$$\times \text{ L'enthalpie libre standard : } G_k^\circ = H_k^\circ - TS_k^\circ \quad (34.)$$

La variation d'enthalpie libre standard  $\Delta G^\circ$  de Gibbs d'une réaction :  $\Delta G_r^0 = G_{\text{produits}}^0 - G_{\text{réactifs}}^0 = -RT \ln(K_{p_j})$  permet le calcul de la constante d'équilibre  $K_p$ , et donc d'accéder à la valeur de la constante inverse ( $k_{r_j}$ ).

### II-3. L'interpréteur chimique : CKINTERP.F

L'interpréteur de CHEMKIN (CKINTERP.F, figure II-1) lit le fichier d'entrée **Chem.inp**, qui contient le mécanisme et les paramètres cinétiques de chaque réaction, puis vérifie la balance atomique de chacune d'entre elles, et ouvre la base de données

thermodynamiques (**Therm.dat**). Après vérification, le programme **CKINTERP.F** crée un fichier binaire, **Chem.bin**, (et son équivalent en format ASCII, **Chem.out**), contenant toutes les informations nécessaires pour les codes de calcul **PSR** ou **KINALC**.

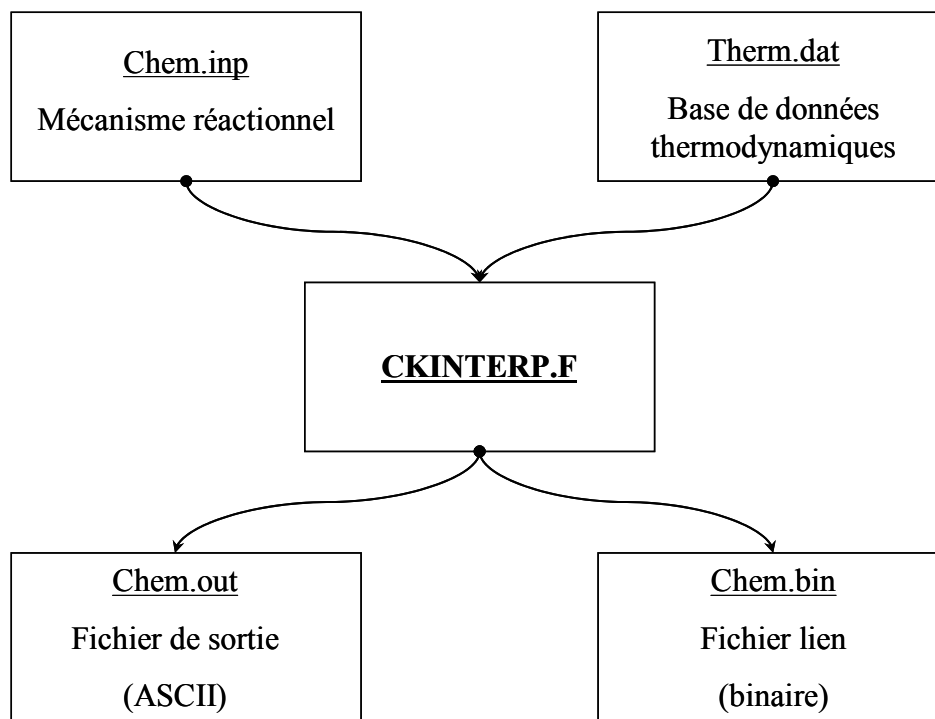


Figure II-1 : Interpréteur chimique.

## II-4. Le réacteur parfaitement agité : Perfectly Stirred Reactor, PSR

### II-4.1. Présentation générale du réacteur

Le réacteur parfaitement agité peut être schématiquement représenté par un volume thermiquement isolé ou non, dans lequel un flux massique constant de combustible et d'oxydant est introduit. L'écoulement au sein de la chambre (figure II-2) est fortement turbulent, ce qui permet d'admettre l'uniformité de la température et de la composition à l'intérieur du réacteur. Dans ces conditions idéales, la vitesse de conversion des réactifs en produits est contrôlée uniquement par les processus chimiques, et non par les phénomènes de diffusion (transfert de masse ou de chaleur). Les vitesses de mélange sont également considérées comme infiniment rapides. De plus, pour remplir les conditions d'un réacteur parfaitement agité, on supposera qu'aucune réaction catalytique n'intervient au niveau des parois.



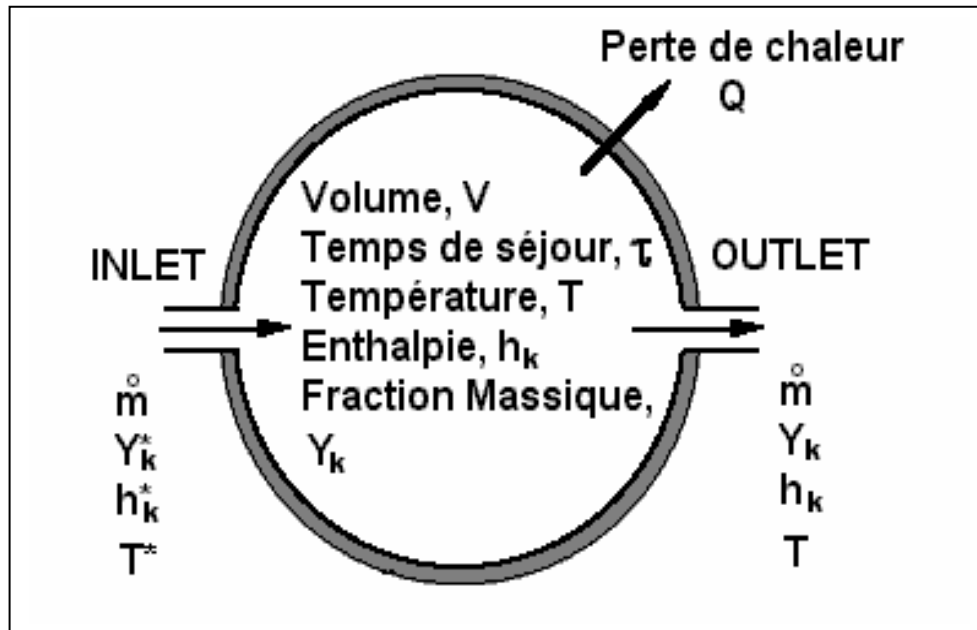


Figure II-2 : Représentation schématique du réacteur PSR.

Le réacteur est caractérisé par son volume ( $V$ ), son temps de passage (appelé « *temps de séjour* ») moyen ( $\tau$ ), la température ( $T$ ), une perte thermique éventuelle ( $Q$ ) et les fractions massiques des espèces ( $Y_k$ ). Le débit massique de gaz ( $\dot{m}$ ) dans le réacteur est constant. L'astérisque correspond aux conditions d'entrée (INLET sur la figure II-2).

La modélisation d'un réacteur parfaitement agité est assurée par le programme PSR contenu dans le package CHEMKIN-II. Le code de calcul Fortran **DRVPSR.F** (figure II-3) utilise le fichier de sortie de l'interpréteur (**Chem.bin**) par l'intermédiaire de la librairie de sous-programmes (**Chemlib**). Il fait également appel à un fichier de conditions initiales du modèle (**Psr.inp**), où sont définies les concentrations de départ en combustible et comburant, voire d'autres composés ( $H_2O$ ,  $NO$ ,  $N_2$ ...). Ce fichier d'entrée comprend aussi des informations sur le temps de séjour ( $\tau$ ) auquel est effectué le calcul, la température d'entrée du réacteur ( $T_e$ ), la pression ( $P$ ), la richesse du milieu ( $\phi$ )...

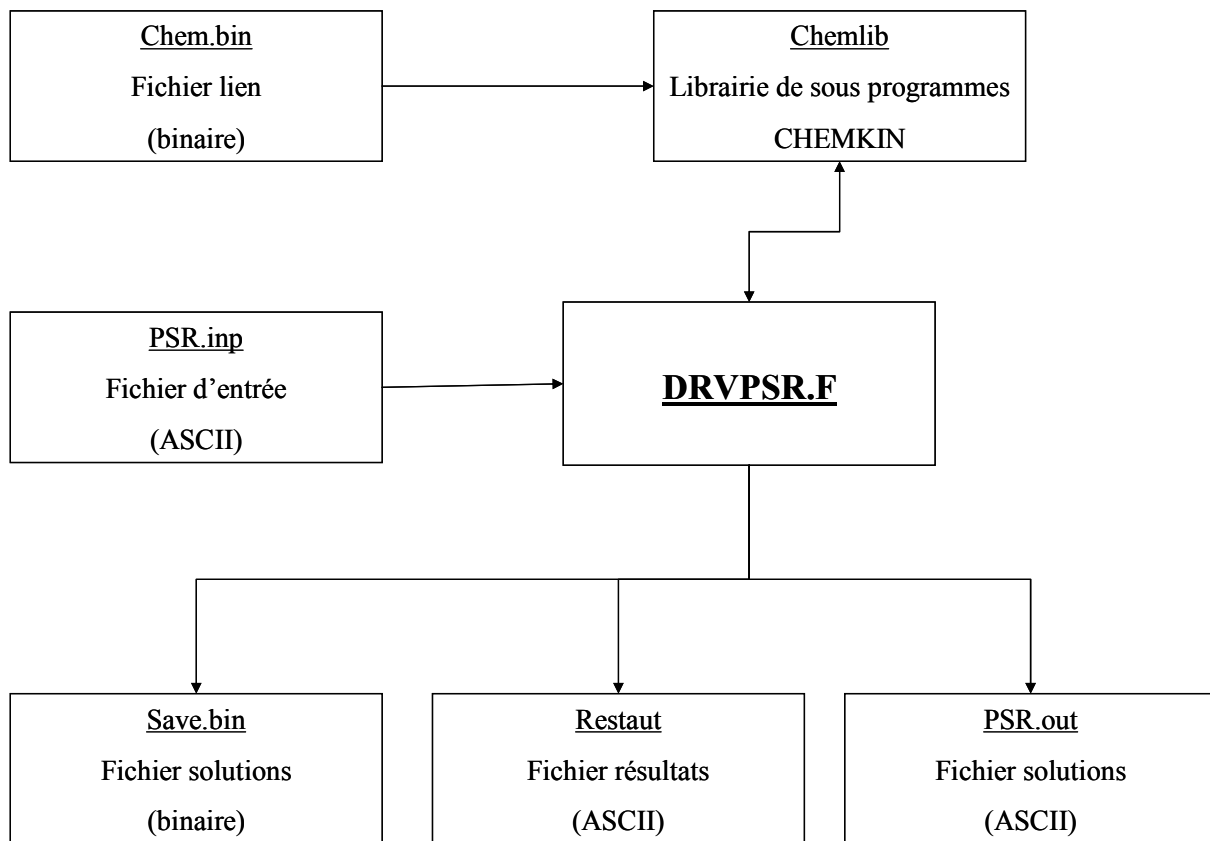


Figure II-3 : Fonctionnement de PSR au sein de CHEMKIN-II.

A l'issue du calcul, le programme PSR fournit deux fichiers de solutions : un fichier binaire (**Save.bin**) et son homologue en format texte (**Psr.out**), qui contiennent toutes les solutions des calculs (*fractions molaires* des différentes espèces du milieu en fonction de  $T$ ,  $P$ ,  $\phi$ ,  $\tau$ , ...). Le fichier de sortie peut contenir (si l'option est choisie) les résultats d'analyse de sensibilité des voies réactionnelles, permettant de mieux comprendre l'importance de certaines espèces ou réactions. En fonction de ces résultats, l'utilisateur peut alors décider de modifier le mécanisme cinétique pour ajuster les prévisions de son modèle à l'expérience. Le fichier **Save.bin**, quant à lui, servira d'interface en tant que fichier d'entrée pour faire une analyse ultérieure plus fine des résultats avec des programmes spécifiques de post-traitement, tel que KINALC. Un troisième fichier de solutions **Restaut** (en format texte) résume sous forme de tableau les différentes informations sur le temps de séjour, la température et les fractions molaires de toutes espèces impliquées dans le mécanisme réactionnel. Ce dernier est présenté de manière conviviale pour vérifier rapidement le bon déroulement des calculs.

## II-4.2. Equations du réacteur parfaitement agité

Pour décrire le modèle PSR, on applique les lois de conservation des espèces et de l'énergie pour le système dans des conditions stationnaires. Les équations caractéristiques sont les suivantes (l'étoile \* se réfère aux conditions d'entrée) :

$$\text{Conservation des espèces :} \quad \dot{m} \cdot (Y_k - Y_k^*) - f_k \cdot W_k \cdot V = 0 \quad (35.)$$

$$\text{Conservation de l'énergie :} \quad \dot{m} \cdot \sum_{k=1}^{N_k} (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) + Q = 0 \quad (36.)$$

Dans ce système d'équations,  $Y_k$  est la fraction massique de l'espèce  $k$  (avec  $k = 1, \dots, N_k$ ),  $W_k$  sa masse molaire,  $V$  le volume du réacteur,  $f_k$  la vitesse molaire de production de la  $k^{\text{ième}}$  espèce par unité de volume,  $h_k$  l'enthalpie spécifique de  $k$  et  $Q$  la perte de chaleur du réacteur.

Le temps de séjour moyen ( $\tau$ ) est souvent utilisé pour caractériser le réacteur plutôt que le flux massique ( $\dot{m}$ ). Le temps de séjour moyen, donné par la relation 37, est fonction du volume du réacteur ( $V$ ) et du flux massique ( $\dot{m}$ ) :

$$\tau = \frac{\rho \cdot V}{\dot{m}} \quad (37.)$$

La densité massique ( $\rho$ ) est calculée à partir de l'équation d'état pour les gaz parfaits :

$$\rho = \frac{P \cdot \bar{W}}{R \cdot T} \quad (38.)$$

$$\bar{W} = \left( \sum_k \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (39.)$$

$\bar{W}$  : masse molaire moyenne,  $P$  : Pression,  $T$  : Température,  $R$  : Constante universelle des gaz.

La vitesse nette de production de chaque espèce  $k$ , ( $f_k$ ), est le résultat d'une compétition entre les réactions chimiques contenant cette espèce. On suppose que chaque réaction se déroule en accord avec la loi d'action de masses et que la constante de vitesse de réaction s'écrit sous la forme de l'équation d'Arrhenius modifiée (équation 5).

Les équations 35 et 36 forment un ensemble de  $N_k + 1$  équations algébriques non-linéaires qui permettent d'obtenir la température et les fractions molaires des espèces. Cependant dans certains cas (défaut de convergence de la méthode de résolution du système

algébrique), il devient nécessaire d'intégrer le systèmes d'équations différentielles lié au régime transitoire du réacteur. Les équations caractéristiques (équations 35 et 36) s'écrivent, dans ce cas :

$$\text{Conservation des espèces :} \quad -\dot{m} \cdot (Y_k - Y_k^*) + f_k \cdot W_k \cdot V = \rho \cdot V \cdot \frac{dY_k}{dt} \quad (40.)$$

$$\text{ou encore :} \quad \frac{dY_k}{dt} = -\frac{1}{\tau} \cdot (Y_k - Y_k^*) + \frac{f_k \cdot W_k}{\rho} \quad (41.)$$

$$\text{Conservation de l'énergie :} \quad -\dot{m} \cdot \sum_{k=1}^{N_k} (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) - Q = \rho \cdot V \cdot \frac{dh}{dt} \quad (42.)$$

$$\text{ou encore :} \quad \frac{dh}{dt} = -\frac{1}{\tau} \cdot \sum_{k=1}^{N_k} (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) - \frac{Q}{\rho V} \quad (43.)$$

où  $h$  est l'enthalpie spécifique moyenne définie par la relation :

$$h = \sum_{k=1}^{N_k} Y_k \cdot h_k \quad (44.)$$

L'équation de conservation de l'énergie est souvent exprimée en fonction de la température ( $T$ ) plutôt que de l'enthalpie ( $h$ ).

La chaleur spécifique moyenne est définie par la relation :

$$C_p = \sum_{k=1}^{N_k} Y_k \cdot C_{p_k} \quad (45.)$$

A partir des équations (44) et (45), on peut écrire :

$$\frac{dh}{dt} = C_p \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^{N_k} h_k \cdot \frac{dY_k}{dt} \quad (46.)$$

La combinaison des équations (38), (41) et (43) permet de rendre compte de l'évolution de la température au sein du réacteur :

$$C_p \frac{dT}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot \sum_{k=1}^{N_k} Y_k^* (h_k^* - h_k) - \sum_{k=1}^{N_k} \left( \frac{h_k \cdot f_k \cdot W_k}{\rho} \right) - \frac{Q}{\rho \cdot V} \quad (47.)$$

Nous allons aborder maintenant les techniques de résolution de ces équations caractéristiques.

### II-4.3. Méthode de résolution numérique

Le système d'équations algébriques régissant le fonctionnement du réacteur agité en régime stationnaire (équations 35 et 36) est résolu par une méthode de *Newton* modifiée. Au départ, le programme PSR nécessite une estimation correcte de la solution (composition et température) à l'équilibre ( $\tau = \infty$ ). PSR utilise le programme STANJAN de *Reynolds (1986)* qui calcule la composition à l'équilibre par minimisation de la fonction énergie libre de *Gibbs*. A partir de cette estimation de la solution, le calcul s'effectue en deux temps. Tout d'abord, PSR tente de résoudre les équations de conservation de la masse (éq. 35), à la température d'équilibre calculée, pour obtenir une composition du mélange qui correspond à cette température et au temps de séjour spécifié. Puis l'équation de conservation de l'énergie (éq. 36) est prise en compte (soit maintenant un système à  $N_k + 1$  équations). En cas de défauts de convergence, le programme tente d'estimer la solution en résolvant les équations du régime instationnaire (équations 41 et 47) par l'utilisation d'un intégrateur implicite (*Euler*). Ce résultat permet d'initialiser une nouvelle séquence d'itérations par la méthode de *Newton* sur les équations (35) et (36). Le processus se poursuit jusqu'à l'obtention d'une solution. Dans le cas d'un défaut répété de convergence, le programme de calcul produit un message d'erreur.

### II-5. KINALC : Programme d'analyse et de réduction des mécanismes

La réduction de mécanisme cinétique par les méthodes les plus courantes est réalisée grâce au code de calcul KINALC (*Pilling et al., 1995*). Ce programme qui fonctionne en post-traitement du package CHEMKIN, est compatible avec les fichiers de ce dernier, sauf pour le format des réactions (qui ne peuvent être utilisées sous la forme classique réversible). En conséquence, il faut réécrire ce mécanisme sous forme irréversible et donc d'évaluer les paramètres d'*Arrhenius* des réactions inverses.

Cette étape de transformation est effectuée par l'intermédiaire du programme **MECHMOD**, dans lequel trois options de calcul selon les conditions retenues sont disponibles :

- Les paramètres  $A$ ,  $n$  et  $E$  des réactions inverses sont calculés par ajustement à trois températures ( $T_{low}$ ,  $T_{mid}$  et  $T_{high}$ ) judicieusement choisies (3 équations à 3 inconnues).

- Le paramètre  $n$  est conservé et seuls les paramètres  $A$  et  $E$  des réactions inverses sont calculés pour deux températures ( $T_{low}$  et  $T_{high}$ ).
- Le paramètre  $A$  est conservé et seuls les paramètres  $n$  et  $E$  des réactions inverses sont calculés pour deux températures ( $T_{low}$  et  $T_{high}$ ).

Nous avons choisi la première de ces options avec  $T_{low} = 500K$ ,  $T_{mid} = 1200K$  et  $T_{high} = 2500K$ . Les estimations de  $A$ ,  $n$ ,  $E$  sont voisines (au moins avec les valeurs choisies  $T_{low}$ ,  $T_{mid}$ ,  $T_{high}$ ) de celles que l'on peut calculer par tabulation de la constante inverse en fonction de la température et ajustement des 3 paramètres par une méthode des moindres carrés. Le programme KINALC fonctionne ainsi qu'avec les codes de calcul SENKIN, PREMIX, OPPDIF, SHOCK et EQLIB de l'environnement CHEMKIN et avec le code de simulation RUN1DL de Rogg (1991).

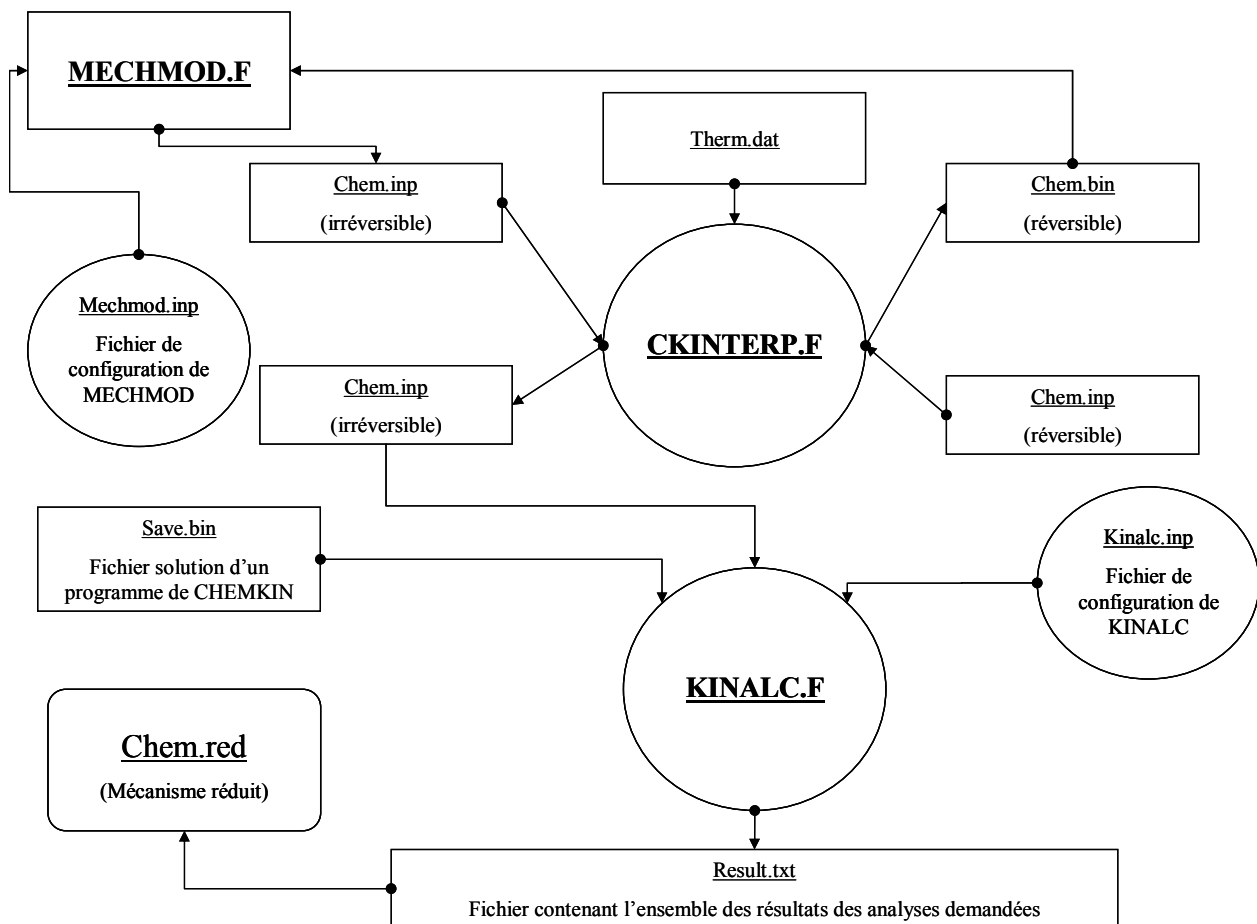


Figure II-4 : Fonctionnement des programmes MECHMOD et KINALC.

### II-5.1. Description générale du programme originel de *Pilling et al. (1995)*

Le programme **KINALC** utilise le fichier binaire (**Chem.bin**) du mécanisme irréversible, obtenu en sortie de l'interpréteur, ainsi que le fichier binaire (**Save.bin**) d'un des codes de calcul cités précédemment. Un troisième fichier (en format texte : **Kinalc.inp**) est requis pour initialiser l'environnement de travail de KINALC et décrire les analyses à effectuer. Nous avons schématisé le principe de fonctionnement de KINALC sur la figure II-4.

Les différentes méthodes d'analyse de mécanismes réactionnels disponibles dans ce programme sont les suivantes :

#### II-5.1.1. *Analyse des vitesses et chemins réactionnels*

- Analyse des vitesses de production (ROPAD - *Warnatz, 1983*) : calcul la contribution de chaque réaction à la formation et à la destruction de chaque espèce,
- Analyse des flux atomiques (ATOMFLOW – *Revel et al., 1994*),
- Analyse de la sensibilité globale des vitesses (RIMP – *Turányi et al., 1989*),
- Analyse de l'importance des réactions par analyse des composantes principales de la matrice normalisée des vitesses  $F$  (PCAF – *Turányi et al., 1989*).

#### II-5.1.2. *Analyse locale de sensibilité des concentrations*

- Sensibilité des vitesses de flamme et recherche des espèces dont la chaleur de formation influence une liste d'espèces définie par l'utilisateur (HSENS),
- Recherche des réactions ayant une influence sur la concentration d'une espèce donnée (SENS), ou sur un groupe d'espèces (SENG – *Vajda et al., 1985*),
- Analyse de l'importance des réactions par analyse des composantes principales de la matrice de sensibilité normalisée  $S^*$  (PCAS – *Vajda et al., 1985*),
- Recherche des réactions entraînant une forte incertitude sur la concentration des espèces désignées par l'utilisateur (UNC\_ANAL – *Warnatz, 1992*),
- Recherche des étapes limitantes de la vitesse de formation d'espèces définies par l'utilisateur (RALI).

### II-5.1.3. Analyse de la matrice Jacobienne et analyse des échelles de temps

- Calcul de la sensibilité globale des concentrations, recherche des dépendances directes et indirectes entre espèces (CONNECT – Turányi, 1990),
- Calcul des espérances de vie des espèces (LIFETIME - Turányi et al., 1993),
- Calcul de l'erreur induite par la mise en état quasi-stationnaire d'une espèce (QSSAS) ou d'un groupe d'espèces (QSSAG – Turányi et al., 1993),
- Analyse CSP : Computational Singular Perturbation (CSP - Lam et Goussis, 1988),
- Analyse ILDM : Intrinsic Low Dimensional Manifold (ILDM – Maas et Pope, 1992a et b).

## II-5.2. Les trois options de la méthode mise en œuvre par Lepage (2000)

Dans cette étude, le processus de réduction de mécanisme se divise en trois étapes utilisant chacune une option différente du code de calcul KINALC. A chaque étape, le calcul est effectué sur un large domaine de temps de séjour, pour une condition paramétrique donnée de pression, de richesse et de température d'entrée (fichiers d'entrée  $\mathbf{p}(P, \phi, T_e, \tau)$ ).

### II.5.2.1. Elimination des espèces inutiles (Méthode des Flux Atomiques)

La première étape utilise l'option ATOMFLOW du sous-programme ATOMPSR (figure II-5) pour calculer les flux atomiques entre chacune des espèces du système.

Les résultats obtenus (contenus dans les fichiers  $\mathbf{F}(P, \phi, T_e, \tau)$ ) sont repris en post-traitement par le programme POSTFLOW. Ce dernier permet l'intégration des flux atomiques sur l'ensemble du domaine des temps de séjour, quantifiant ainsi la matière (concentration atomique) qui transite entre deux espèces au cours du processus de combustion. Il devient alors possible d'évaluer les différentes contributions des flux de chaque espèce (contenus dans le fichier **Rapport.txt**) et de faire ressortir les voies réactionnelles importantes pour cette condition paramétrique.



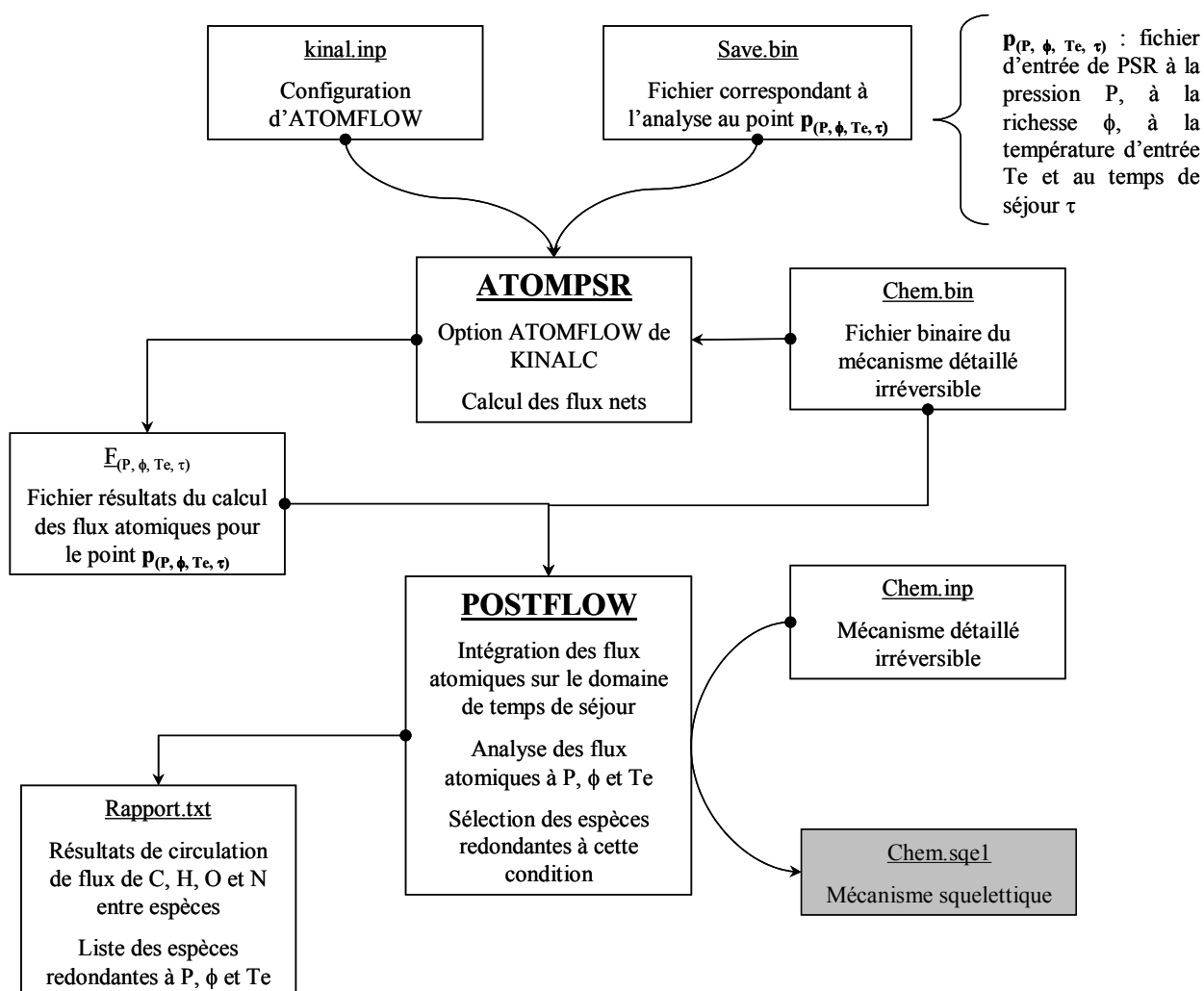


Figure II-5 : Fonctionnement des programmes de la première étape du processus de réduction.

En prenant en compte toutes les espèces (et leurs réactions) conservées pour l'ensemble des conditions paramétriques, **POSTFLOW** conduit à un mécanisme détaillé squelettique (**Chem.sqe1**) contenant les espèces importantes et nécessaires à la représentation correcte de la chimie. L'enchaînement des diverses opérations de cette première étape nécessaires à l'élimination des espèces inutiles est décrit en dans l'organigramme de la figure II-5. Cette phase de réduction (évaluation des flux atomiques et analyse des résultats), quasi-automatique dans sa version initiale, conduit à l'élaboration du modèle squelettique.

### II.5.2.2. Elimination des réactions inutiles (Analyse des Composantes Principales)

La deuxième étape utilise l'option PCAF qui permet au programme **PCAFW** (figure II-6) de calculer automatiquement les valeurs propres et les composantes de vecteurs propres de la matrice des vitesses pour chacune des réactions du système. Les résultats (contenus dans les fichiers  $\mathbf{R}_{(P, \phi, T_e, \tau)}$ ) sont post-traités par le programme **POSTPCAF**. Il permet, grâce à l'utilisation d'un seuil de coupure sur les composantes de vecteurs propres initialement fourni par l'utilisateur, de construire aisément un second mécanisme squelettique (**Chem.sqe2**), débarrassé de ses réactions inutiles, tout en conservant la reproductibilité des résultats obtenus par le premier mécanisme squelettique. Le déroulement du processus d'élimination des réactions inutiles est détaillé sur la figure II-6.

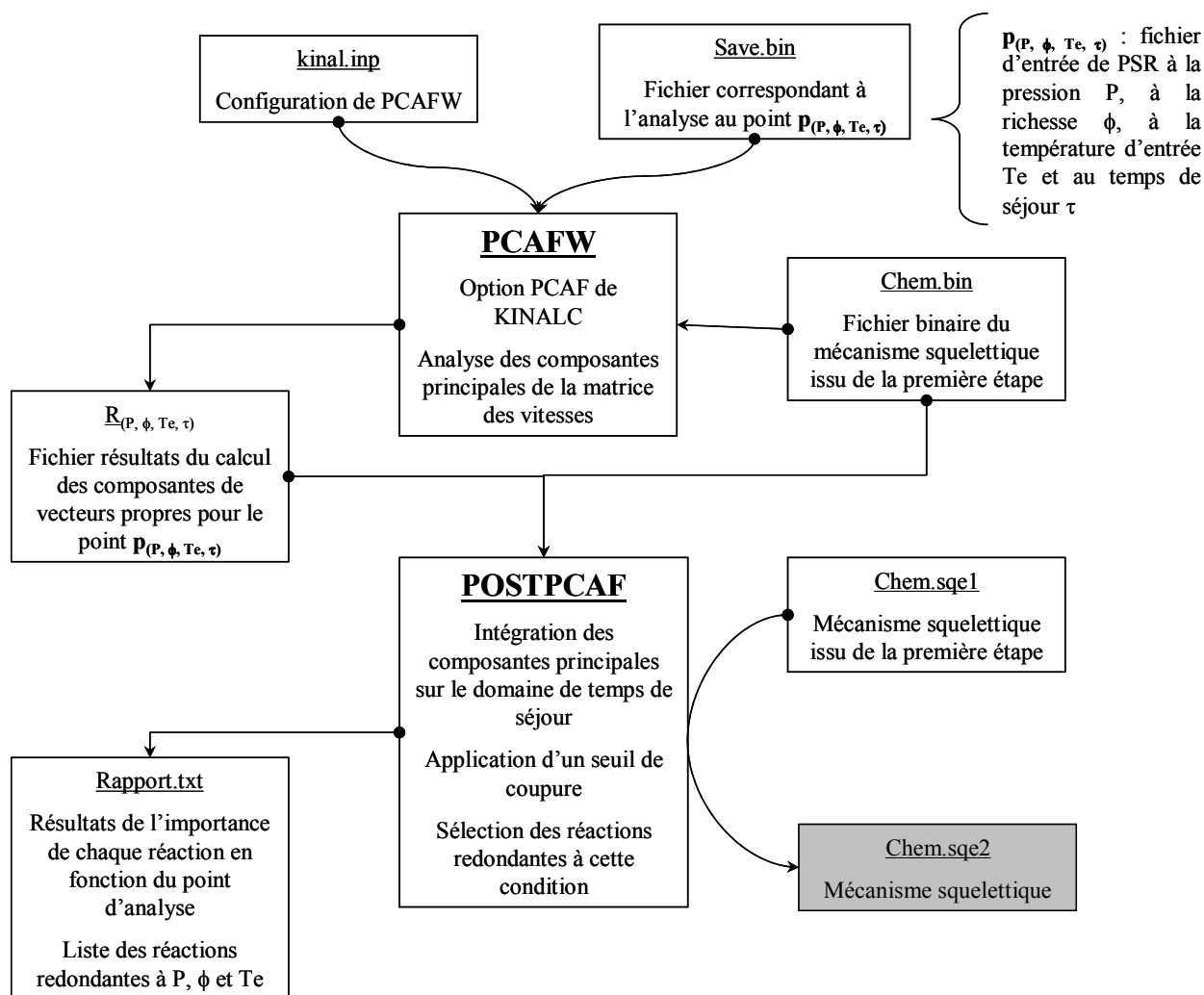


Figure II-6 : Fonctionnement des programmes de la seconde étape du processus de réduction.

### II.5.2.3. Construction du schéma réduit (Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire)

Le classement et la sélection des espèces stationnaires sont réalisés par le programme **PREMCARM**. Au cours de cette troisième étape, les vitesses de formation et de consommation des espèces étudiées sont calculées par l'intermédiaire de l'option **ROPAD** de **KINALC**. Cette dernière renvoie en sortie la valeur du *DEQS*,  $K'$ , et la fraction molaire de chacune des espèces du système sous forme d'un fichier ASCII, **DEQS.OUT**<sub>(p, φ, T<sub>e</sub>, τ)</sub>. Le post-traitement de la totalité de ces fichiers est assuré par le programme **AEQS.F** qui intègre la valeur du critère de sélection  $K'$ , sur l'ensemble de la zone de combustion, et propose en sortie une liste d'espèces chimiques candidates à l'approximation de l'état quasi-stationnaire.

L'utilisateur doit ensuite intervenir pour choisir dans le lot proposé, les espèces candidates à l'Etat Quasi-Stationnaire les plus probables. En effet, ces données sont nécessaires pour que le programme **SUBCREAT** puisse générer automatiquement les routines et les fonctions nécessaires aux calculs des vitesses de production molaire de ces espèces, opérations effectuées au sein de la routine **CKWYP** :

- **WT** : évaluation de la masse molaire des espèces différentielles et stationnaires,
- **WDOT** : évaluation des vitesses de production molaire des espèces différentielles,
- **TROE** : évaluation du facteur de *Troe* et des paramètres d'*Arrhenius* pour  $k_0$  dans les réactions de *fall-off*,
- **ELEM RATE** : évaluation des vitesses des réactions élémentaires,
- **THIRDB** : évaluation de la concentration d'un partenaire de collision,
- **STEADYE** : évaluation des fractions molaires des espèces en EQS,
- **RATECONS** : évaluation des constantes de vitesse.

Tous les détails de cette dernière phase de réduction, sélection des espèces en EQS, écriture des différents éléments permettant la résolution du système algébrique (**SUBCREAT**), sont représentés sur la figure II-7. Le mécanisme réduit obtenu (**Chem.red**) ne contient plus qu'un nombre limité d'espèces, dites différentielles, qui sont les seules variables visibles de l'extérieur.

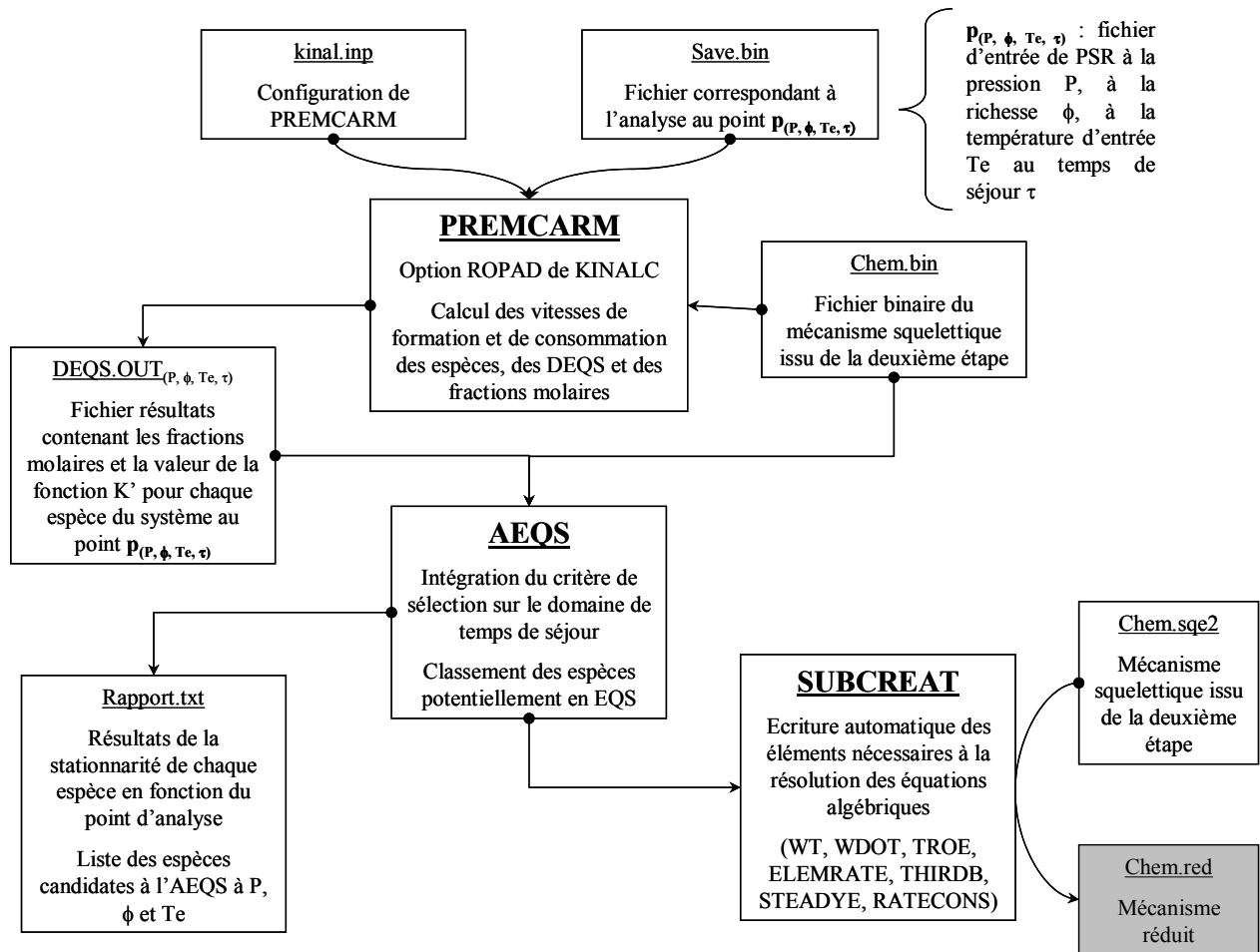


Figure II-7 : Fonctionnement des programmes de la troisième étape du processus de réduction.



# ***Chapitre III***

---

## ***Validation de la méthode de réduction avec le mécanisme détaillé d'un kérosène reconstitué***

<b>III-1.</b>	<b>Description du mécanisme détaillé et des objectifs de la réduction</b>	<b>55</b>
<b>III-1.1.</b>	<b>Sélection des espèces à reproduire</b>	<b>56</b>
<i>III-1.1.1.</i>	<i>Le n-décane</i>	<i>56</i>
<i>III-1.1.2.</i>	<i>Le n-propylbenzène</i>	<i>57</i>
<i>III-1.1.3.</i>	<i>Le n-propylcyclohexane</i>	<i>58</i>
<i>III-1.1.4.</i>	<i>Le kérosène reconstitué</i>	<i>58</i>
<b>III-1.2.</b>	<b>Sélection de la déviation relative maximale tolérée</b>	<b>59</b>
<b>III-1.3.</b>	<b>Taux de réduction et gain en temps de calcul</b>	<b>59</b>
<b>III-1.4.</b>	<b>Domaine paramétrique de l'étude</b>	<b>60</b>
<b>III-2.</b>	<b>Construction des mécanismes squelettiques</b>	<b>63</b>
<b>III-2.1.</b>	<b>Paramètres de la méthode : seuils sur les flux atomiques et PCAF</b>	<b>63</b>
<b>III-2.2.</b>	<b>Description des résultats</b>	<b>64</b>
<b>III-2.3.</b>	<b>Discussion</b>	<b>68</b>
<b>III-3.</b>	<b>Construction et sélection du schéma réduit final</b>	<b>71</b>
<b>III-3.1.</b>	<b>Construction des mécanismes réduits</b>	<b>72</b>
<b>III-3.2.</b>	<b>Méthode de sélection du mécanisme réduit</b>	<b>73</b>
<i>III-3.2.1.</i>	<i>Critère basé sur le gain en temps de calcul</i>	<i>77</i>
<i>III-3.2.2.</i>	<i>Critère basé sur la prédictivité</i>	<i>78</i>
<i>III-3.2.3.</i>	<i>Conjugaison des deux critères</i>	<i>80</i>
<b>III-3.3.</b>	<b>Validation des schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles</b>	<b>83</b>
<b>III-4.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>87</b>

---

---

---

Les méthodes de réduction utilisées, présentées dans les chapitres précédents, ont été en partie développées et validées lors d'une étude antérieure réalisée au LCSR dans les conditions du réacteur parfaitement agité, à pression atmosphérique, sur un mécanisme du gaz naturel (méthane + éthane + propane) comportant 100 espèces et 1202 réactions irréversibles, sur un large domaine de richesse (0,2 – 2,0) et de températures d'entrée (300 – 1800K). Cette stratégie de réduction a partiellement été mise en œuvre sur un mécanisme du n-décane (113 espèces et 1293 réactions irréversibles) dans un domaine paramétrique plus restreint (300K, 1 bar et 4 richesses : 0,4 – 1,0 – 1,5 – 2,0). Suite à ce travail, il est apparu nécessaire de tester plus avant la méthodologie, sur des mécanismes détaillés de taille importante et surtout dans un domaine paramétrique plus large. A cet effet, et après validation, un modèle détaillé représentatif de la combustion d'un kérosène reconstitué a été utilisé comme référence à 4 pressions, à 6 richesses et 6 températures d'entrée.

Dans ce chapitre, nous présenterons une description du mécanisme détaillé initial et des nouveaux objectifs de la réduction, pour en arriver aux résultats obtenus successivement à chacune des étapes de la méthode de réduction. Cette phase du travail est destinée à détecter et tester les points clés de la méthodologie, afin de trouver les conditions optimales d'application de la technique (au cas du kérosène).

### III-1. Description du mécanisme détaillé et des objectifs de la réduction

Le kérosène « reconstitué » utilisé est un mélange de chacun des représentants des trois familles chimiques majoritairement présentes dans un kérosène industriel de type TR0. De précédents travaux (*Guéret, 1989*), sur l'analyse de la composition d'un kérosène, ont conduit aux proportions molaires suivantes (les composés représentatifs de la famille choisie pour cette étude sont indiqués entre parenthèses) : 74 % d'alcane linéaires (n-décane), 15 % d'aromatiques (n-propylbenzène) et 11 % de naphthéniques (n-propylcyclohexane). Le mécanisme du kérosène « reconstitué » a été mis au point au laboratoire par *Dagaut et al. (1994a et 1995)* et réactualisé par *Voisin (1997)* et *El Bakali (1999)* : il comprend 225 espèces et 1800 réactions élémentaires réversibles (ou 3493 réactions irréversibles). Ce mécanisme détaillé réversible (annexe 1) prend également en compte la formation des oxydes d'azote (25 espèces azotées) et la chimie de certains précurseurs des suies (radicaux propargyles, naphthalène, biphenyle, ...). La nomenclature complète des espèces du mécanisme détaillé est donnée en annexe 2.



Des 3493 réactions élémentaires irréversibles en présence, 36 dépendent de la pression (réactions de « *fall-off* »). Pour permettre l'obtention d'un schéma réduit général utilisable sur un vaste domaine de pression, il est apparu indispensable de reformuler et de recalculer les constantes de vitesse de ces réactions (*Voisin, 1997*) en utilisant le formalisme de *Lindemann*. L'ajustement des constantes a été effectué par une méthode de régression de distances orthogonales (*Boggs et al., 1987 et 1989*). L'algorithme utilisé, développé au NIST, est beaucoup mieux adapté que celui de la méthode classique des moindres carrés. Il permet d'estimer les paramètres de l'équation d'*Arrhenius* modifiée ( $A$ ,  $n$  et  $E_a$ ) pour les constantes de vitesses  $k_\infty$  et  $k_0$  à partir de celles correspondant aux différentes pressions étudiées. Ces résultats ont été validés sur un vaste domaine de température allant de 500K à 2500K et de pression : 0,5 bar (*El Bakali, 1999 ; Ristori, 2000*), et de 1 bar à 40 bars (*Voisin, 1997*). L'ajustement de ces constantes de vitesse (annexe 1) induit une déviation relative inférieure à 3% sur les fractions molaires des espèces.

### III-1.1. Sélection des espèces à reproduire

Le modèle détaillé réversible nous servira de référence pour une comparaison avec les schémas cinétiques réduits obtenus à chaque étape du processus de réduction. Il est important de définir, au préalable, les phénomènes les plus représentatifs de la combustion dont il faudra tenir compte. Comme nous l'avons indiqué précédemment, le schéma cinétique détaillé du kérosène est constitué entre autres de sous-mécanismes pour le n-décane, le n-propylbenzène et le n-propylcyclohexane. Grâce à des études antérieures sur ces composés, nous avons choisi parmi les espèces chimiques, celles qui nous semblent quantitativement importantes pour ce mélange d'hydrocarbures sur tout le domaine paramétrique.

#### III-1.1.1. Le n-décane

Les travaux expérimentaux concernant l'oxydation des hydrocarbures linéaires paraffiniques supérieurs sont peu nombreux. L'oxydation du n-décane a été étudiée par *Guéret (1989)* et *Balés-Guéret et al. (1992)*, en réacteur piston et en réacteur parfaitement agité PSR, à pression atmosphérique entre 900K et 1050K. Dans le domaine de richesse (0,2 - 1,5), n-C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> conduit à la formation de composés majoritaires tels que CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, 1-C<sub>4</sub>H<sub>8</sub> et 1,3-C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>. D'autres composés sont formés minoritairement : les 1-alcènes allant du 1-pentène (1-C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>) au 1-nonène (1-C<sub>9</sub>H<sub>18</sub>), voire à l'état de traces : les 2-

pentènes (cis et trans), les 2-butènes (cis et trans), le propadiène, le 1,3-pentadiène, le cyclopentadiène. Plus récemment, une étude a été réalisée par *Ristori (2000)* dans les mêmes conditions de pression et de richesse (0,5 – 2,0) sur un domaine de température compris entre 900K et 1400K. Elle permet de confirmer, outre la présence d'espèces telles  $H_2$ ,  $CH_2O$ ,  $C_2H_6$  et  $C_2H_2$  parmi les majoritaires, celle de l'allène ( $AC_3H_4$ ), du propyne ( $PC_3H_4$ ) et de l'acroléine (ACROL) détectés comme composés minoritaires. Dans cette dernière étude, la distinction entre les espèces majoritaires, minoritaires et à l'état de traces est établie sur les valeurs des fractions molaires comme suit : supérieures à 100ppm, comprises entre 10 et 100ppm et inférieures à 10ppm. Cette précision est utile pour identifier les espèces majoritaires dans d'autres études effectuées sur les 3 hydrocarbures utilisés. Par exemple, l'oxydation du n-décane à 10 atmosphères (*Dagaut et al., 1994b et 1995 ; Voisin, 1997*) et à 40 atmosphères (*Dagaut et al., 1995*) met en avant la formation des composés majoritaires suivants :  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_2O$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_3H_6$ ,  $C_2H_6$ ,  $CH_4$ , 1- $C_5H_{10}$ , 1- $C_6H_{12}$ , 1- $C_4H_8$ ,  $H_2$ .

### III-1.1.2. Le n-propylbenzène

De même, peu d'études sont disponibles en ce qui concerne l'oxydation des espèces mono-aromatiques. Récemment, des travaux ont été menés sur le n-propylbenzène (PSR, mêmes conditions que celles du n-décane, *El Bakali, 1999 ; Ristori, 2000 ; Dagaut et al., 2002*). En utilisant le critère précédent, ces études conduisent à distinguer la formation des espèces majoritaires suivantes :  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CH_2O$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_6H_6$ , toluène (TOLUEN), benzaldéhyde (PHHCO), éthylbenzène ( $PHC_2H_5$ ), styrène (STYREN), puis les minoritaires :  $C_2H_6$ ,  $C_3H_6$ ,  $C_4H_4$ , cyclopentadiène (CPD), dibenzyle ( $C_{14}H_{14}$ ), et enfin celles présentes à l'état de traces :  $AC_3H_4$ ,  $PC_3H_4$ , acroléine, 1,3- $C_4H_6$ .

Dans une étude en réacteur à écoulement (*Litzinger et al., 1986*), on retrouve la même répartition, mais de nouveaux composés, phénol ( $C_6H_6O$ ) et benzaldéhyde (PHHCO), apparaissent parmi le lot d'espèces minoritaires. A plus haute pression (10 atm), la seule étude dans ce domaine (*Marchal, 1997*) sur l'oxydation de ce mono-aromatique en réacteur agité, au voisinage de la stœchiométrie, aboutit à des résultats similaires concernant le classement des espèces.

### III-1.1.3. Le n-propylcyclohexane

Les travaux sur l'oxydation du n-propylcyclohexane (*Guéret, 1989*) montrent la présence d'hydrocarbures légers ( $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_3H_6$ , 1,3- $C_4H_6$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_6$ ) et d'oxydes de carbone comme composés majoritaires. Les hydrocarbures plus lourds sont présents minoritairement ou à l'état de traces dans le milieu réactionnel (hydrocarbures insaturés de  $C_4$  à  $C_7$ ). Des études récentes sur l'oxydation de ce naphénique mono-cyclique (*El Bakali, 1999 ; Ristori, 2000 ; Ristori et al., 2001*) conduisent aux mêmes conclusions sur les alcanes linéaires majoritaires analysés, auxquels s'ajoutent le cyclohexène ( $CyC_6H_{10}$ ) et le benzène ( $C_6H_6$ ). D'autres composés cycliques insaturés, le méthylèncyclohexane ( $CyC_7H_{12}$ ), le vinylcyclohexane ( $CyC_8H_{14}$ ) sont détectés comme espèces minoritaires, et le cyclopentène ( $CyC_5H_8$ ) à l'état de traces. A 10 atmosphères, un classement similaire de l'importance des espèces est retrouvé par *Marchal (1997)*.

### III-1.1.4. Le kérosène reconstitué

Les différents résultats obtenus sur les 3 hydrocarbures, confirmés par les études sur l'oxydation d'un kérosène (*Dagaut et al., 1994a et 1995 ; Voisin, 1997 ; El Bakali, 1999*), mettent en exergue le lot d'espèces suivant :  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_2O$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_6$ , 1- $C_4H_8$ , 1,3- $C_4H_6$ , 1- $C_5H_{10}$ , 1- $C_6H_{12}$ , benzène, toluène, éthylbenzène (PHC2H5), styrène et cyclohexène ( $CyC_6H_{10}$ ). Pour notre part, nous avons choisi de tenir compte de cette sélection pour le suivi des espèces importantes, avec toutefois, quelques modifications concernant : 1- $C_4H_8$ , 1- $C_5H_{10}$ , 1- $C_6H_{12}$ , (PHC2H5), styrène et ( $CYC6H10$ ) qui n'ont pas été retenues. En effet, *El Bakali (1999)* attribue à ces composés des fractions molaires inférieures à 10 ppm et/ou des erreurs relatives très élevées (> à 90%) par rapport aux résultats expérimentaux. Certains radicaux ( $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $HCO$  et  $CH_3$ ) incontestablement actifs et primordiaux lors de la combustion d'un hydrocarbure ont aussi fait l'objet de toute notre attention. Bien entendu, l'oxygène moléculaire, le n-décane, le n-propylbenzène et le n-propylcyclohexane, se rajoutent à ce lot. En fait, les 25 composés choisis représentent plus de 90% du bilan atomique total en carbone, en hydrogène ou en oxygène du système réactionnel considéré.

Enfin, pour prendre en compte la chimie des oxydes d'azote, deux espèces supplémentaires,  $NO$  et  $HCN$ , ont été considérées.

### III-1.2. Sélection de la déviation relative maximale tolérée

Après avoir identifié et sélectionné les grandeurs qui devront être reproduites en priorité par le mécanisme réduit, il est nécessaire de définir l'erreur relative maximale qui sera tolérée, entre les profils d'espèces obtenus au cours de la réduction et ceux du modèle détaillé réversible initial. Cependant, il faut bien garder à l'esprit que ***le schéma réduit ne sera jamais meilleur que l'original***. En conséquence, la déviation (relative) autorisée, doit être fixée judicieusement, pour permettre la validation des modèles squelettiques et du modèle réduit final. Les schémas cinétiques réduits trouvés dans la littérature pour différents hydrocarbures (Chapitre I) conduisent à des écarts allant de quelques pour cents à plusieurs dizaines de pour cents. L'étude développée sur le gaz naturel et le n-décane, sur laquelle nous nous sommes appuyés, a montré qu'une déviation de 10% sur les variables du système est souvent atteinte lorsque le critère de réduction du temps de calcul est pris en compte. Etant donnée la similitude entre le mécanisme du n-décane et celui du kérosène (contenant 74% de n-décane), nous avons opté pour une erreur relative maximale de 10% sur les limites d'extinction et les fractions molaires des espèces.

### III-1.3. Taux de réduction et gain en temps de calcul

L'un des objectifs de la réduction étant de reproduire correctement les profils des espèces choisies (erreur relative  $\leq 10\%$ ), nous rechercherons des mécanismes réduits présentant à la fois, un taux de réduction (élimination d'espèces et de réactions) élevé, ***mais aussi*** une durée des calculs nettement inférieure à celle du schéma détaillé. Comme nous l'avons vu, certains auteurs annoncent des taux de réduction, sur un domaine de conditions paramétriques limité (le plus souvent une condition locale à une pression - une richesse et une température), pouvant aller jusqu'à 50 % pour les espèces et 90 % pour les réactions. Un tel résultat est associé à des gains en temps de calcul compris entre 2 et 5 et une précision de l'ordre de 1 ou 2% sur les fractions molaires. Cependant, des travaux comme ceux de *Lepage (2000)* sur le n-décane, ainsi que ceux de *Frouzakis et Boulochos (2000)* sur le méthane montrent bien que corrélativement au taux de réduction qui augmente (et donc le gain en temps de calcul), la précision du schéma réduit diminue : il est donc indispensable de prendre en compte la balance entre précision et rapidité de calcul.

Ainsi que nous l'avons fait dans le cas de la déviation relative maximum tolérée, nous devons également définir un gain en temps de calcul maximum. Là encore, si l'on se réfère à

la réduction pratiquée sur le mécanisme du n-décane, on peut espérer que ce gain soit égal, voire supérieur, à celui mentionné dans cette étude. Rappelons que pour cet hydrocarbure, et un domaine de conditions paramétriques beaucoup plus restreint que le nôtre, une diminution du temps de calcul d'un facteur 10 (en moyenne) avait pu être atteinte.

#### **III-1.4. Domaine paramétrique de l'étude**

Après avoir établi les objectifs du processus de réduction en termes de grandeurs à reproduire, de précision et de gain en temps de calcul, nous allons maintenant définir le domaine des conditions paramétriques de l'étude. Les simulations numériques (programme PSR) ont été effectuées en faisant varier le temps de séjour depuis une valeur proche de l'équilibre (de 1 à 100 s) jusqu'à une valeur faible (de quelques millisecondes à quelques microsecondes, suivant les cas) proche de la limite d'extinction.

L'évolution, en fonction du temps de séjour, de la température et des fractions molaires des espèces a été calculée pour différentes températures d'entrée du réacteur, différentes pressions et différentes richesses du mélange réactionnel initial. Les conditions initiales utilisées sont récapitulées ci-dessous :

- Température d'entrée du réacteur : 300 – 600 – 900 – 1200 – 1500 et 1800K,
- Pression à l'intérieur du réacteur : 0,5 - 1 - 3 et 10 bars,
- Richesse de 0,5 à 2,0 pour toutes les températures d'entrée et en dehors de ce domaine quand le programme PSR le permet (0,1 au minimum et 15 au maximum).

Le calcul des limites (figure III-1) et températures d'extinction (figure III-2), en fonction de la richesse, a été effectué pour toutes les températures du réacteur et chacune des 4 pressions choisies.

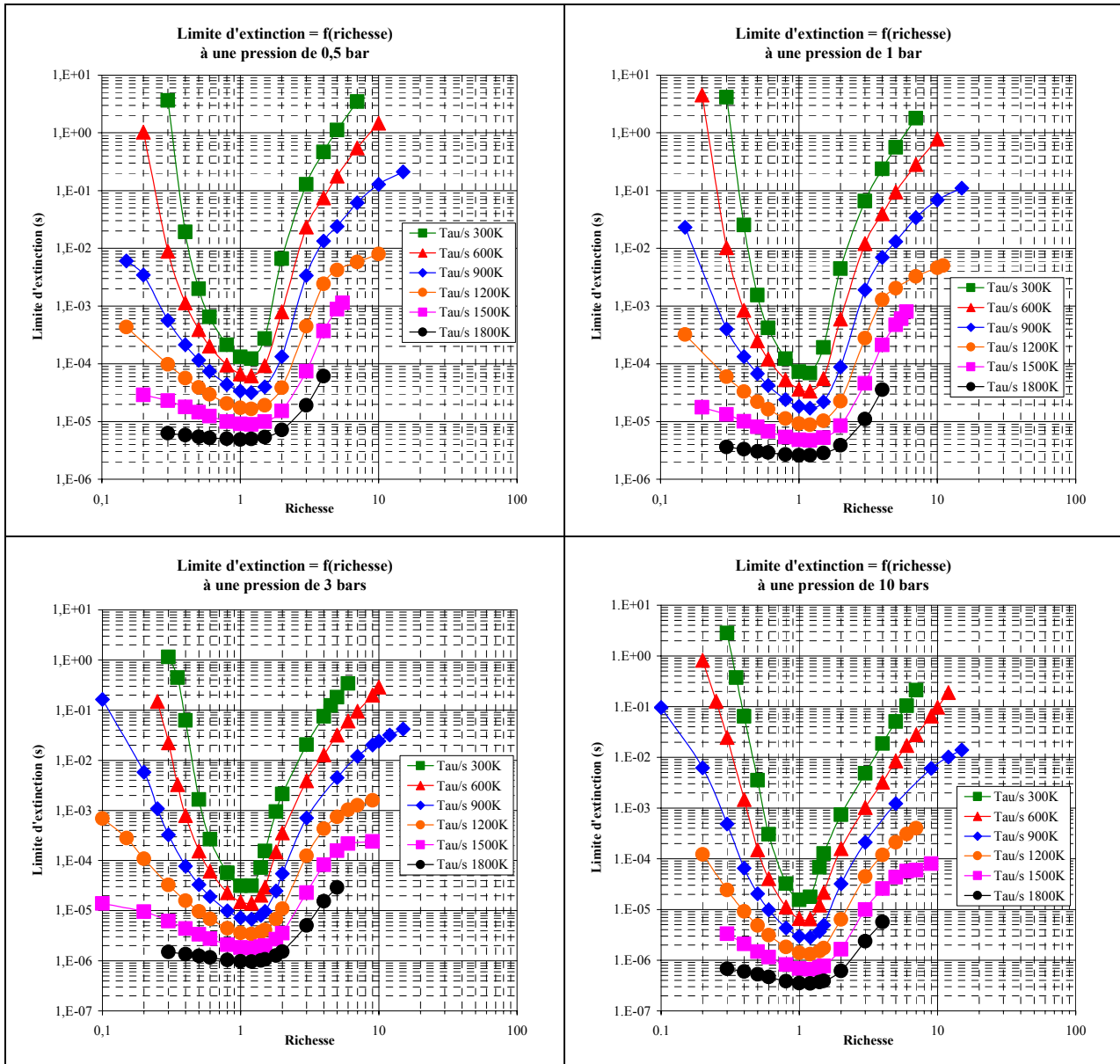
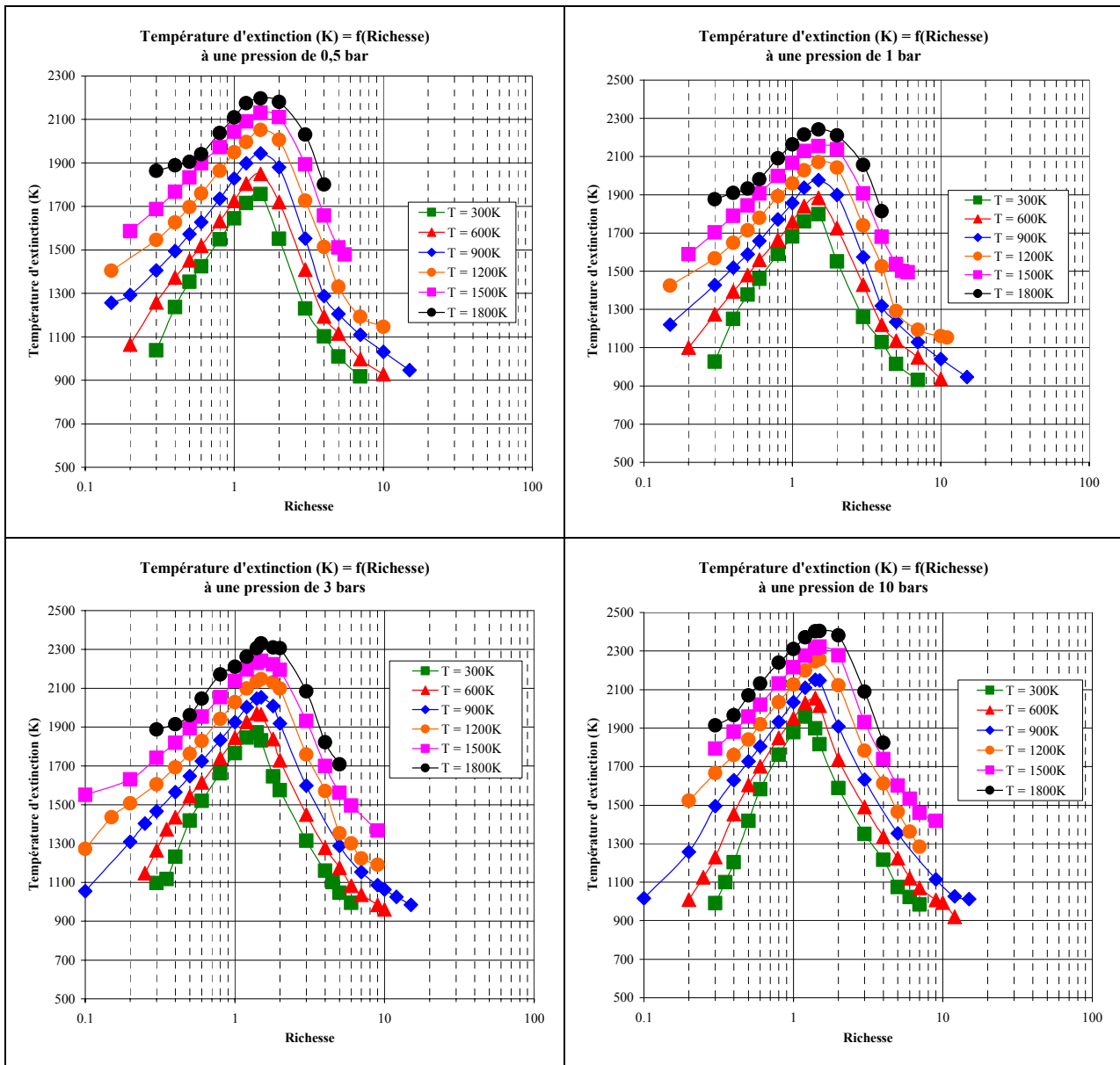


Figure III-1 : Comparaison des limites d'extinction à différentes températures d'entrée du réacteur en fonction de la richesse aux 4 pressions étudiées.



**Figure III-2 :** Comparaison des températures d'extinction à différentes températures d'entrée du réacteur en fonction de la richesse aux 4 pressions étudiées.

Cet ensemble de résultats préliminaires, nous permet de disposer de la référence indispensable pour tester la simplification. En effet, cette cartographie, représentative du schéma détaillé, nous servira à comparer et contrôler de manière rapide et robuste les résultats obtenus à chacune des étapes de la réduction. En premier lieu, ceci permet d'évaluer le niveau d'erreur du mécanisme irréversible par rapport au modèle cinétique détaillé initial, puis celui de chacun des mécanismes squelettiques (après les flux atomiques et PCAF) et enfin celui du schéma réduit final. En second lieu, nous confirmerons, s'il y a lieu, le niveau d'erreur atteint, en contrôlant celui obtenu sur les profils d'espèces sélectionnées, ce qui nous permettra de décider si le mécanisme testé doit être conservé.

Ce mode de comparaison a été appliqué pour valider le modèle irréversible, seul format de mécanisme accepté par les programmes utilisés pour la réduction. La multiplication par un facteur d'environ deux du nombre de réactions dans le modèle détaillé irréversible entraîne un temps de calcul deux fois supérieur à celui du réversible. Un écart (relatif) maximum d'environ 1% est rencontré sur les profils des températures d'extinction et limites d'extinction. De plus, les erreurs relatives faibles (3% au maximum) sur les profils d'espèces sont dues aux estimations calculées des paramètres d'*Arrhenius* des réactions inverses par le programme MECHMOD. Ces déviations nous permettent néanmoins de retenir ce modèle cinétique comme base fiable pour entamer le processus de réduction. Cependant, le mécanisme détaillé réversible initial servira, rappelons-le, de référence pour toutes les comparaisons ultérieures avec les schémas réduits.

## III-2. Construction des mécanismes squelettiques

Les deux objectifs principaux à atteindre sont :

- la reproduction des profils de fractions molaires des 25 espèces suivies et ceux de la température sur un large domaine paramétrique, avec une erreur relative inférieure à 10%,
- l'obtention d'un gain appréciable en temps de calcul entre mécanisme initial et réduit final.

Nous avons entamé le processus de réduction en commençant par l'élimination des espèces inutiles, grâce à la méthode des flux atomiques, puis celle des réactions inutiles par l'analyse des composantes principales sur la matrice des vitesses (PCAF). Ces deux opérations permettent de construire le mécanisme squelettique « général », valide dans les conditions prédéfinies de pression, température d'entrée et richesse.

### III-2.1. Paramètres de la méthode : seuils sur les flux atomiques et PCAF

Avant de commencer la réduction, il est nécessaire de définir des seuils sur les flux atomiques (C, H, O et N) inter-espèces, afin d'éliminer celles pour lesquelles ces flux sont négligeables. Nous avons choisi les seuils sur les atomes de carbone, d'oxygène et d'hydrogène égaux à 10 %. Le seuil pour l'azote atomique est fixé à 20 %. Ces choix sont le fruit d'essais entrepris avec différentes valeurs de seuils. Avec les seuils indiqués, le mécanisme squelettique issu de cette première étape ne contient plus que 134 espèces et 2132



réactions (soit un taux de réduction d'environ 40 % pour les espèces et les réactions). A partir de ce premier modèle squelettique, une analyse de sensibilité est effectuée sur les vitesses de chaque réaction, par l'intermédiaire de la méthode PCAF. Cette technique issue des statistiques et appliquée à la cinétique chimique quantifie l'influence d'une réaction sur l'ensemble des espèces : seules les réactions correspondant à des composantes fortes de vecteurs propres (variant de 0 à 1), *et* associées à des valeurs propres fortes, seront conservées.

A ce stade de la réduction, il s'agit encore une fois de définir un seuil de coupure sur les composantes de vecteurs propres. Plus il est voisin de 1, moins on élimine de réactions. Nos premiers essais ont été menés avec un seuil strictement inférieur à l'unité. Le mécanisme ainsi débarrassé de ses réactions inutiles ne comprend plus que 134 espèces et 1676 réactions (soit une diminution totale de 52% du nombre de réactions). Pour tenter d'améliorer encore ce résultat, différentes valeurs de seuil ont été testées. La valeur minimale, compatible avec nos critères de reproductibilité, est voisine de 0,985 (toutes les réactions ayant des composantes principales supérieures ou égales à cette valeur sont éliminées). Dans les conditions ainsi retenues, le modèle squelettique ne contient plus que 1220 réactions (456 de moins). Le taux de réduction final, est de 40% pour les espèces, et de 65% pour les réactions.

### **III-2.2. Description des résultats**

Pour juger de la prédictivité des modèles squelettiques, compte tenu du volume très important de résultats obtenus pour chacune des variables (près de 50000 profils d'espèces et de température à chaque étape de la réduction), nous nous limiterons aux exemples les plus significatifs.

Le tableau III-1 montre la comparaison des limites ( $\tau_{ext}$ /seconde) et températures d'extinction ( $T_{ext}/K$ ), pour 2 températures d'entrée, 2 pressions (1200K/1 bar et 300K/10 bars) pour 4 richesses (0,5 – 1,0 – 2,0 – 4,0), entre le mécanisme détaillé réversible d'une part et les deux mécanismes squelettiques d'autre part : après élimination des espèces inutiles (mécanisme squelettique flux), puis après élimination des réactions inutiles supplémentaires (mécanisme squelettique PCAF).

Richesse	0,5		1,0		2,0		4,0	
Te = 1200K / P = 1 bar	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>
Mécanisme détaillé réversible	1714	2,19.10 <sup>-5</sup>	1959	9,23.10 <sup>-6</sup>	2042	2,24.10 <sup>-5</sup>	1528	1,27.10 <sup>-3</sup>
Mécanisme squelettique flux	1717	2,14.10 <sup>-5</sup>	1960	9,15.10 <sup>-6</sup>	2033	2,18.10 <sup>-5</sup>	1341 (1533)	1,19.10 <sup>-3</sup> (1,28.10 <sup>-3</sup> )
<b>Erreur relative</b>	<b>0,17%</b>	<b>-2,34%</b>	<b>0,05%</b>	<b>-0,87%</b>	<b>-0,44%</b>	<b>-2,75%</b>	<b>-14% (0,33%)</b>	<b>-6,72% (0,78%)</b>
Mécanisme squelettique PCAF	1719	2,15.10 <sup>-5</sup>	1961	9,20.10 <sup>-6</sup>	2023	2,18.10 <sup>-5</sup>	1341 (1533)	1,19.10 <sup>-3</sup> (1,28.10 <sup>-3</sup> )
<b>Erreur relative</b>	<b>0,29%</b>	<b>-1,86%</b>	<b>0,10%</b>	<b>-0,33%</b>	<b>-0,94%</b>	<b>-2,75%</b>	<b>-14% (0,33%)</b>	<b>-6,72% (0,78%)</b>
Richesse	0,5		1,0		2,0		4,0	
Te = 300K / P = 10 bars	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	T <sub>ext</sub>	τ <sub>ext</sub>
Mécanisme détaillé réversible	1418	3,54.10 <sup>-3</sup>	1878	1,54.10 <sup>-5</sup>	1589	7,44.10 <sup>-4</sup>	1216	1,86.10 <sup>-2</sup>
Mécanisme squelettique flux	1423	3,59.10 <sup>-3</sup>	1878	1,53.10 <sup>-5</sup>	1594	7,48.10 <sup>-4</sup>	1216	1,80.10 <sup>-2</sup>
<b>Erreur relative</b>	<b>0,35%</b>	<b>1,39%</b>	<b>0,0%</b>	<b>-0,65%</b>	<b>0,31%</b>	<b>0,53%</b>	<b>0,0%</b>	<b>-3,33%</b>
Mécanisme squelettique PCAF	1417	3,59.10 <sup>-3</sup>	1887	1,53.10 <sup>-5</sup>	1597	7,52.10 <sup>-4</sup>	1216	1,67.10 <sup>-2</sup>
<b>Erreur relative</b>	<b>-0,07%</b>	<b>1,39%</b>	<b>0,48%</b>	<b>-0,65 %</b>	<b>0,50%</b>	<b>1,06%</b>	<b>0,0%</b>	<b>-11,38%</b>

**Tableau III-1 :** Comparaison des limites et températures d'extinction pour différentes conditions initiales.

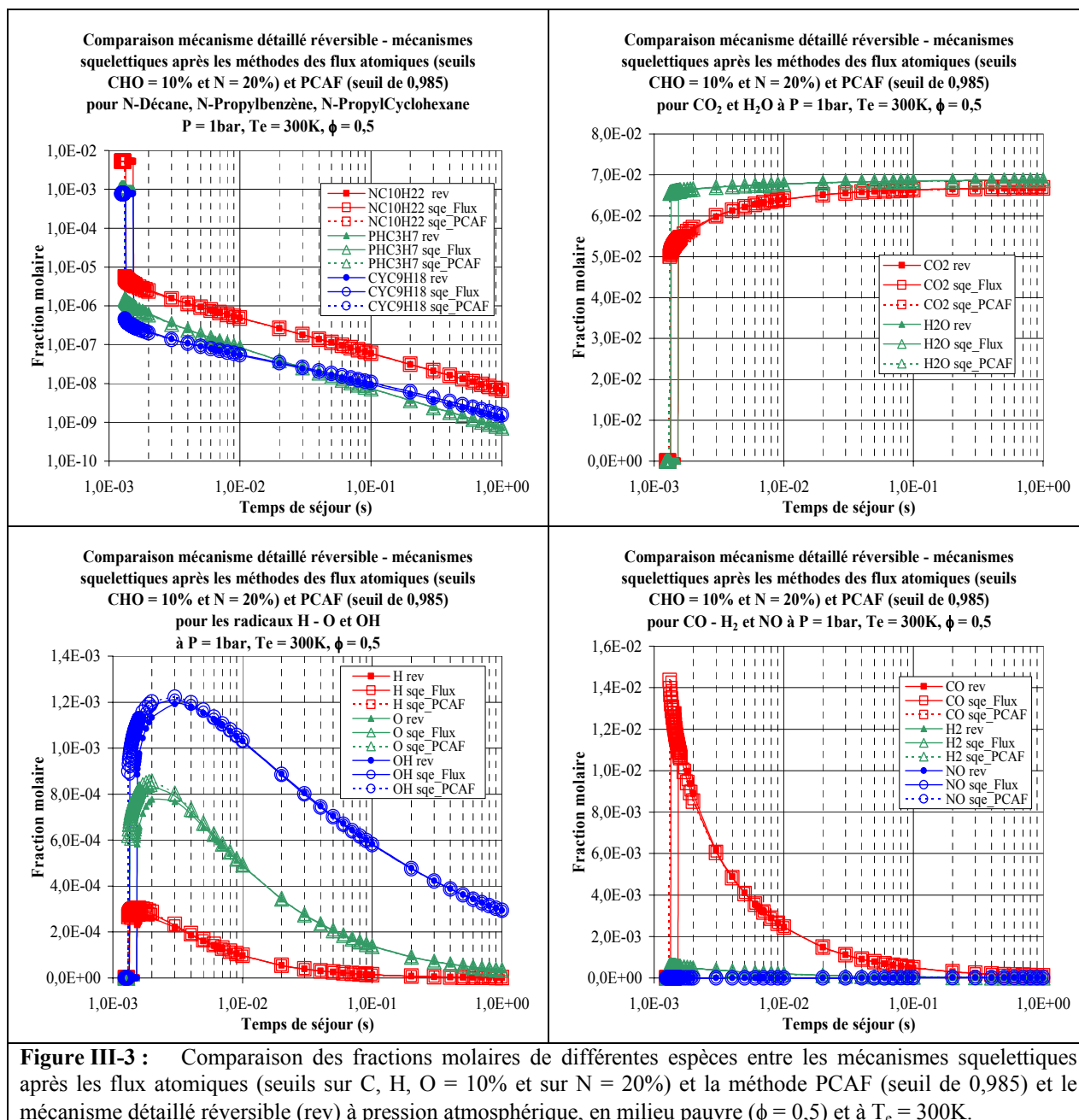
L'examen de ces résultats indique clairement que les deux étapes de réduction conduisent à des mécanismes squelettiques reproduisant ces deux variables, avec une faible déviation par rapport au référentiel. En effet, l'erreur relative sur la température d'extinction est inférieure à 1% pour les conditions présentées. Celle sur la limite d'extinction est généralement inférieure à 3%. Des marges d'erreur identiques sont obtenues pour toutes les autres conditions expérimentales.

En milieu riche, l'élimination de certaines espèces et réactions entraîne parfois l'apparition de perturbations sur les profils. En effet, il n'est pas rare d'observer « deux sauts de température » en milieu très riche, mais parfois également en milieu très pauvre. La difficulté est de choisir parmi les couples de valeurs obtenues, ceux qui permettront de représenter le plus correctement à la fois la limite et la température d'extinction. Il apparaît que le second saut (température plus forte : résultats indiqués entre parenthèses dans le tableau III-1) permet d'obtenir une continuité « naturelle » sur les courbes d'évolution des profils en fonction de la richesse. Nous développerons ce point particulier lors de la discussion dans le paragraphe suivant.

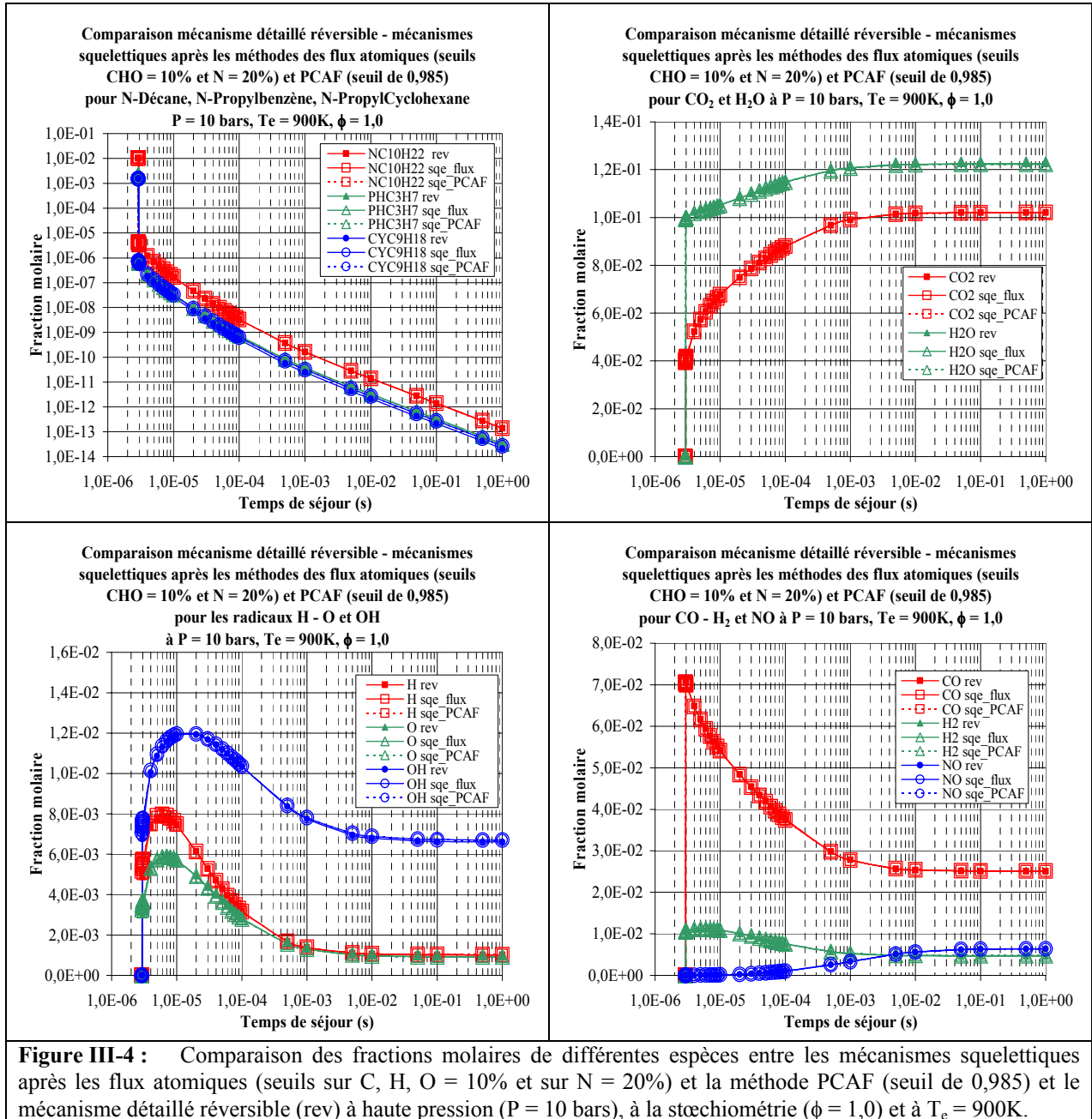
Nous avons présenté sur les figures III-3 (P = 1 bar, T<sub>e</sub> = 300K, φ = 0,5) et III-4 (P = 10 bars, T<sub>e</sub> = 900K, φ = 1,0) une comparaison des fractions molaires de réactifs, de produits, de radicaux (H, O et OH) et d'espèces intermédiaires (H<sub>2</sub>, CO et NO).

A 1 bar (figure III-3), les profils des différentes espèces montrent un bon accord entre les différents mécanismes. L'erreur relative de prédiction observée avec les mécanismes

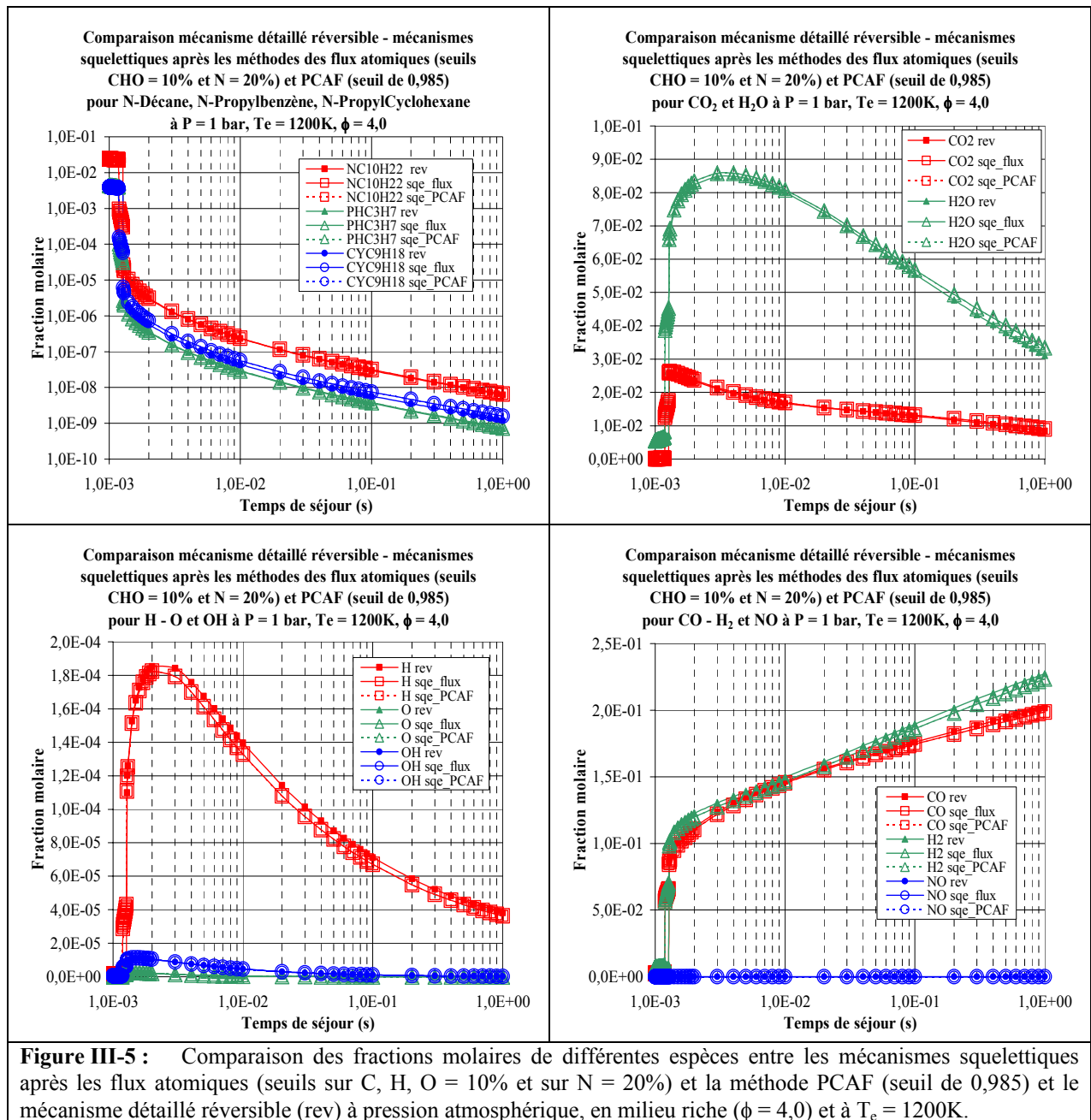
squelettiques est de l'ordre de 2% à 5%. Pour les espèces intermédiaires et NO, la qualité de prédiction des mécanismes squelettiques est un peu moins bonne, avec une surestimation de la concentration maximale des espèces de l'ordre de 10% à 15%. Cependant, ce dépassement de la marge d'erreur n'apparaît que pour les températures extrêmes à  $T_e = 300K$  (et parfois à 1800K), et uniquement en milieu pauvre. En milieu stœchiométrique ou riche, l'erreur reste voisine, et le plus souvent inférieure au seuil maximum autorisé (10%).



A 10 bars (figure III-4), une bonne adéquation est aussi observée entre les différents profils d'espèces représentés. L'erreur relative maximale rencontrée est égale à 5% sur ceux des radicaux.



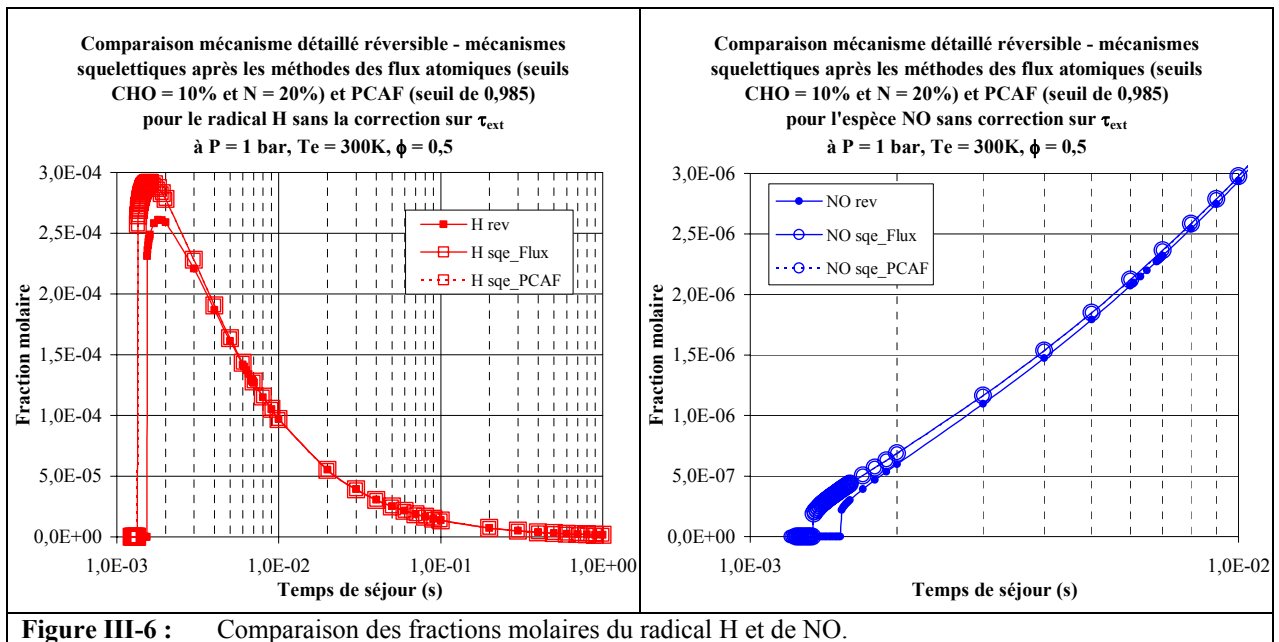
Une bonne prédictivité pour les 11 espèces choisies, dans des conditions de richesse élevée ( $\phi = 4,0$ ,  $P = 1$  bar,  $T_e = 1200K$ ) est observée sur la figure III-5.



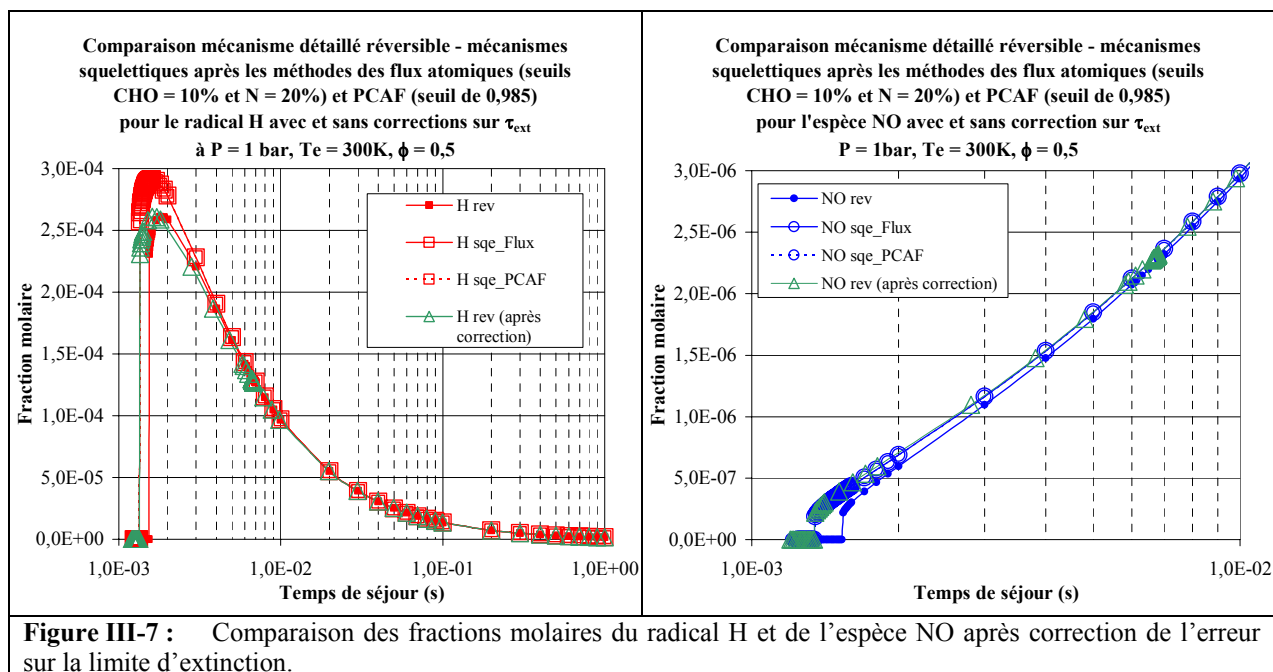
### III-2.3. Discussion

Il est intéressant de noter que l'erreur relative supérieure à 10% rencontrée pour certaines espèces (conditions de la figure III-3 avec un seuil PCAF = 0,985) ne traduit pas nécessairement une mauvaise qualité de prédiction de la part du mécanisme squelettique. Dans la majorité des cas, le profil de fraction molaire des autres espèces, pour une condition

donnée, est correctement estimé. Il faut souligner que les espèces, dont le profil est médiocrement reproduit, ne sont généralement présentes qu'à l'état de traces (fraction molaire inférieure à une dizaine de ppm, voire même à la ppm) et l'erreur sur ces espèces n'influence pas ou peu la précision globale qui reste bonne avec les différents mécanismes squelettiques considérés.

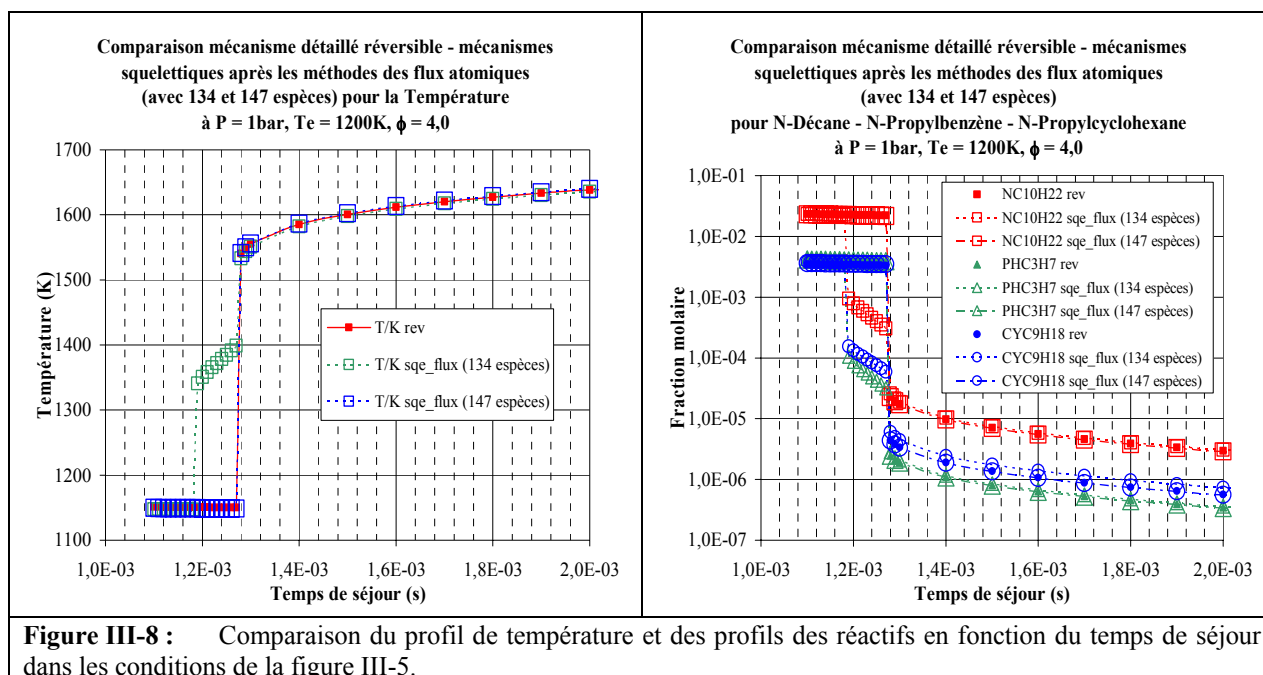


Ainsi, en reprenant le profil de NO (figure III-6), on s'aperçoit qu'il présente une erreur relative d'environ 30% au voisinage de la limite d'extinction (fraction molaire inférieure à la ppm), mais que cette erreur importante est due au déplacement de la limite d'extinction vers des temps de séjour plus faibles. Il apparaît donc indispensable de comparer les courbes en prenant en compte cet écart, c'est à dire en faisant coïncider les deux limites. Cette correction appliquée aux profils de H et NO, issus du mécanisme détaillé réversible, est représentée sur la figure III-7. L'erreur sur NO devient alors négligeable (< 2%). Pour le radical H, l'erreur reste acceptable en atteignant au plus 10% dans la zone où la concentration est maximale. Néanmoins, pour bon nombre d'espèces, l'erreur ne dépasse que de quelques pour cents (1 à 3%) le seuil fixé. Pour les conditions paramétriques de la figure III-6, les espèces les plus déviantes sont le radical méthyle (11,6%), le formaldéhyde (12,8%) ainsi que le toluène (13,8%).



La validation d'un modèle réduit, sur un domaine très étendu de richesse (0,1 à 15,0), nécessite donc de prendre certaines précautions. Comme nous l'avons évoqué précédemment, la simplification d'un mécanisme peut provoquer des perturbations notables sur les profils.

Sur la figure III-8, deux exemples (en milieu très riche) de mécanismes squelettiques (conditions identiques à celles de la figure III-5), obtenus après l'analyse des flux, sont traités. Dans le premier, plus d'espèces ont été retirées, soit 134 restantes au lieu de 147. Cette élimination plus poussée fait apparaître, sur la courbe d'évolution de la température, un « double saut » qui n'est pas un artefact numérique.



On peut tenter d'interpréter ce phénomène de la manière suivante : un chemin réactionnel relativement prépondérant dans ces conditions particulières de richesse et dans ce domaine de temps de séjour a pu être « coupé », accompagné d'une perte de réactivité du système.

Pour éliminer ce problème, nous avons apporté les modifications suivantes au mécanisme squelettique général contenant 134 espèces : les valeurs des seuils choisis (10% sur C, H et O et 20% sur N), inchangées de  $\phi = 0,1$  jusqu'à  $\phi = 2,0$  inclus, ont été diminuées (5% et 10%) en milieu très riche ( $\phi > 2,0$ ). Le mécanisme squelettique ainsi modifié (exemple de la figure III-8) comprend maintenant 147 espèces et 2427 réactions. La prise en compte de 13 espèces supplémentaires (C5H8I3, AC8H16, SC3H5, TC3H5, SC4H9, IC4H5, C4H6O2H, CC7H15, C8H15I3, C8H15I7, BPHC2H4, AC8H15C, AC7H13C : nomenclature en annexe) et des 295 réactions correspondantes, permet de faire disparaître l'anomalie, et améliore ainsi la qualité des profils obtenus.

A la lumière de ces résultats, il semble donc souhaitable de subdiviser le domaine de richesse : un sous-domaine recouvrant les très faibles richesses (de 0,1 à 0,5), un autre sous-domaine autour de la stœchiométrie (0,5 à 2,0) et enfin un sous-domaine à richesse forte (2,0 et plus). Cette division est en partie justifiée par la répartition spécifique de certaines espèces (et/ou réactions) en fonction du domaine de richesse. Cette alternative aux seuils monolithiques mis en œuvre dans ce travail permettrait, selon nous, d'éliminer un nombre plus important d'espèces (environ 20 à 30) et de réactions (environ 300 à 600) dans chacun des 3 sous-domaines, tout en conservant le même caractère prédictif du modèle initial (mais probablement en entraînant d'autres problèmes techniques tels que celui de la « continuité » des espèces en passant d'un domaine à l'autre). Pour ces diverses raisons et dans un souci de cohérence, nous nous sommes limités au seul sous-domaine intermédiaire (0,5 à 2,0).

### III-3. Construction et sélection du schéma réduit final

Les méthodes précédentes ont permis de débarrasser le mécanisme détaillé initial de ses espèces et réactions inutiles. A ce stade, un gain supplémentaire de temps de calcul est envisageable en essayant de diminuer le nombre d'espèces chimiques présentes dans le système différentiel. L'utilisation de l'approximation de l'état quasi-stationnaire (AEQS) permet de déplacer artificiellement certaines espèces, dites « rapides » (espèces en EQS), vers un sous-système d'équations algébriques, mais il convient d'identifier correctement ces



espèces stationnaires. Nous nous sommes appuyés sur le nouveau critère d'identification des espèces EQS de *Lepage, K'*, afin d'en vérifier la fiabilité et la précision. Nous présentons dans ce paragraphe les différentes étapes de construction, de sélection et de validation des mécanismes conduisant au « meilleur » schéma cinétique réduit (une bonne qualité de prédiction associée à une bonne rapidité de calcul).

### III-3.1. Construction des mécanismes réduits

Le classement des espèces selon ce critère est indiqué dans le tableau III-2 ci-dessous. Partant du haut vers le bas : la première case (Kdiff33) correspond aux 33 espèces différentielles (non mises en EQS) conservées. La deuxième (Kdiff37), avec les radicaux propargyles  $C_3H_2$  et  $C_3H_3$ , le 1,3-butadiène  $C_4H_6$ , le radical méthylène  $CH_2$  tient compte des 33 espèces précédentes, plus ces quatre espèces différentielles supplémentaires, et ainsi de suite pour les mécanismes réduits suivants. Le nombre total d'espèces correspondant à Kdiff134 (mécanisme squelettique) s'obtient en additionnant les 63 espèces de ce niveau à toutes celles contenues dans les 10 cases supérieures (soit  $33+4+3 \dots = 71$ ). Le lot mentionné dans Kdiff225 correspond donc aux espèces éliminées par la méthode des flux atomiques.

Mécanismes	Espèces différentielles
Kdiff33	O <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> O, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , NC <sub>10</sub> H <sub>22</sub> , H <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> O, NO, O, N <sub>2</sub> , HCN, OH, CH <sub>3</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , PHC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , CYC <sub>9</sub> H <sub>18</sub> , H, CH <sub>4</sub> , PHCH <sub>2</sub> , TOLUEN, AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , HO <sub>2</sub> , HCCO, HCO, C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> , (33 espèces)
Kdiff37	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> , CH <sub>2</sub> , (4 espèces)
Kdiff40	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> , CPD, STYREN, (3 espèces)
Kdiff43	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O, PHHCO, (3 espèces)
Kdiff45	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> , PHCH <sub>2</sub> OH, (2 espèces)
Kdiff48	CH <sub>2</sub> CO, CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>2</sub> OH, (3 espèces)
Kdiff51	AC <sub>5</sub> H <sub>10</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> , PHC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , (3 espèces)
Kdiff54	AC <sub>6</sub> H <sub>12</sub> , AC <sub>7</sub> H <sub>14</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> 13, (3 espèces)
Kdiff63	NC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , SCH <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> O, CYC <sub>6</sub> H <sub>10</sub> , IC <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , NC <sub>4</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> 13, ACROL, CH, (9 espèces)
Kdiff71	NO <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> H, C, N, NH, CN, C <sub>4</sub> H, HNCO, (8 espèces)
Kdiff134 (mécanismes squelettiques)	CHD <sub>13</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O, C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> 13, OC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> , CH <sub>3</sub> O, PC <sub>4</sub> H <sub>9</sub> , MEALL, C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> OH, H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> 16, CH <sub>2</sub> HCO, C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O, N <sub>2</sub> O, NH <sub>3</sub> , NH <sub>2</sub> , NCO, CH <sub>2</sub> CN, FC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, EC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, CC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, BC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, AC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, DC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, GC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> C, C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O <sub>13</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> CY <sub>2</sub> , C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> , NC <sub>4</sub> H <sub>5</sub> , AC <sub>7</sub> H <sub>15</sub> , AC <sub>8</sub> H <sub>17</sub> , CYC <sub>6</sub> H <sub>11</sub> , AC <sub>5</sub> H <sub>11</sub> , BC <sub>6</sub> H <sub>13</sub> , APHC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , AC <sub>6</sub> H <sub>13</sub> , AC <sub>9</sub> H <sub>19</sub> , DC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> , CC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> , EC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> , BC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> , CC <sub>8</sub> H <sub>17</sub> , BC <sub>8</sub> H <sub>17</sub> , DC <sub>8</sub> H <sub>17</sub> , AC <sub>10</sub> H <sub>21</sub> , CPHC <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , BPHC <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> CO, NNH, C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> C, C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH, PHCO, BPHPROPY, APHC <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , HOC <sub>4</sub> H <sub>6</sub> , PHCH <sub>2</sub> O, C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O, H <sub>2</sub> NO, HONO, CH <sub>3</sub> CN, HNO, HCNO, H <sub>2</sub> CN, HOCN, (63 espèces)
Kdiff225 (mécanisme détaillé)  <i>lot d'espèces éliminé à la suite des flux atomiques</i>	CH <sub>3</sub> HCO, C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , BUTYNE, C <sub>2</sub> C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> , T <sub>2</sub> C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> , T <sub>2</sub> C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> , C <sub>2</sub> C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> 13, CC <sub>7</sub> H <sub>14</sub> , BC <sub>7</sub> H <sub>14</sub> , AC <sub>8</sub> H <sub>16</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> , AC <sub>9</sub> H <sub>18</sub> , AC <sub>10</sub> H <sub>20</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH, PHC <sub>2</sub> H, C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> , NAPHT, C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> 12, BUTYN <sub>2</sub> , MHD, CYC <sub>6</sub> H <sub>12</sub> , CYC <sub>5</sub> H <sub>8</sub> , CYC <sub>8</sub> H <sub>14</sub> , CYC <sub>7</sub> H <sub>12</sub> , C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> 13, C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> 16, HEX1245, MC <sub>6</sub> H <sub>6</sub> , FULVENE, C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> 15, NC <sub>4</sub> H <sub>10</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> H, C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O, HCCOH, C <sub>2</sub> , CHOCHO, CHOCO, C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O, CH <sub>3</sub> CO, SC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O, IC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , TC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O, C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> H, C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O, IC <sub>4</sub> H <sub>7</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> OH, SC <sub>4</sub> H <sub>9</sub> , IC <sub>4</sub> H <sub>5</sub> , H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> O, C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> H, BC <sub>5</sub> H <sub>11</sub> , CC <sub>5</sub> H <sub>11</sub> , ETHCO, C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> 24, BC <sub>7</sub> H <sub>15</sub> , CC <sub>7</sub> H <sub>15</sub> , DC <sub>7</sub> H <sub>15</sub> , C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> 24, C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> 35, C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 13, BC <sub>9</sub> H <sub>19</sub> , CC <sub>9</sub> H <sub>19</sub> , DC <sub>9</sub> H <sub>19</sub> , EC <sub>9</sub> H <sub>19</sub> , AC <sub>9</sub> H <sub>17</sub> , AC <sub>10</sub> H <sub>19</sub> , C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 14, C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 15, C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 16, C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 17, C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> 18, C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> 15, BPHC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> , C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> , CYC <sub>5</sub> H <sub>7</sub> , C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> 14, C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> 31, C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> 11, AC <sub>8</sub> H <sub>15</sub> C, AC <sub>7</sub> H <sub>13</sub> C, CC <sub>6</sub> H <sub>13</sub> , C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> 12, C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> 15, NO <sub>3</sub> , N <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , NCN (91 espèces)

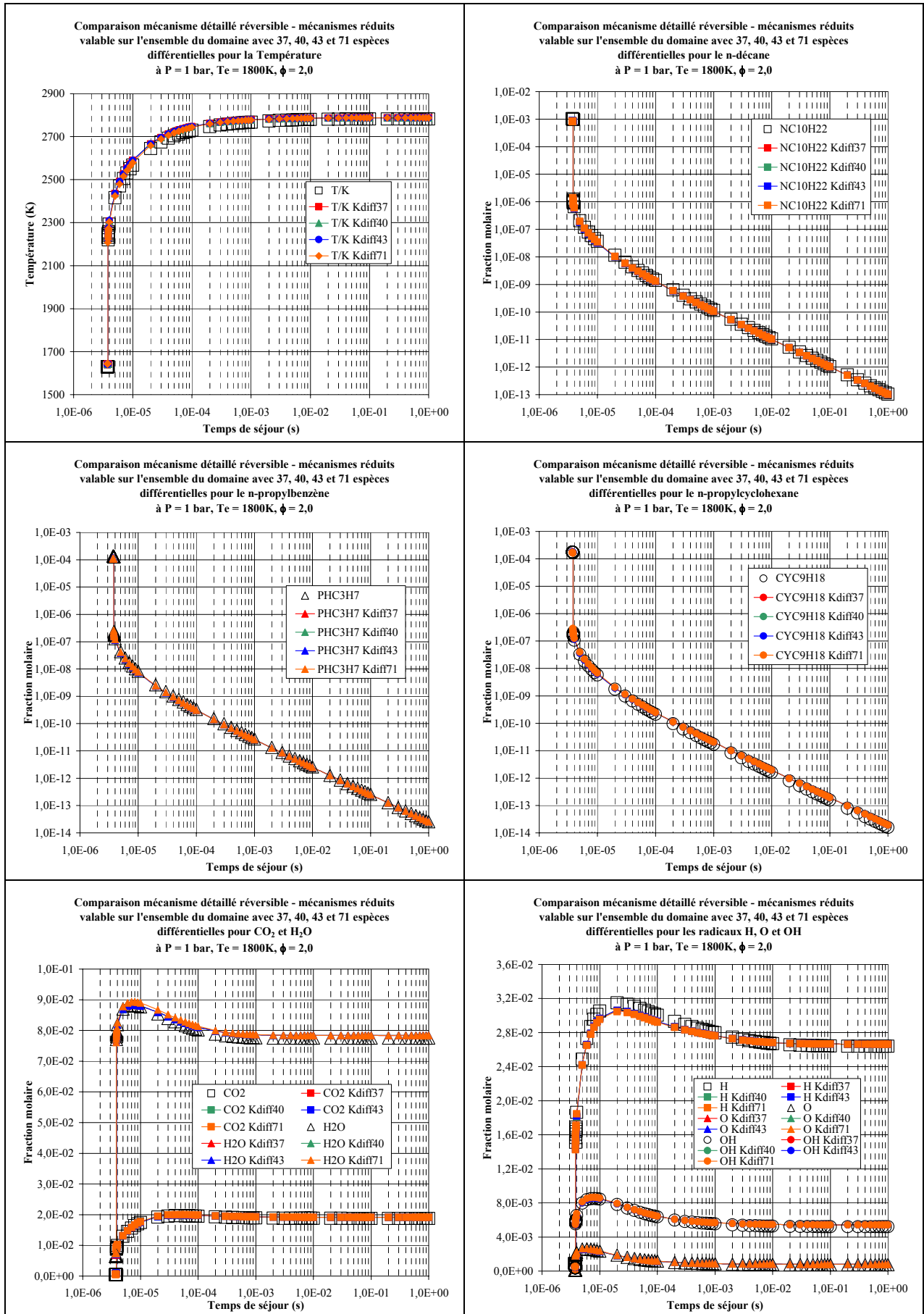
Tableau III-2 : Classement des espèces utilisé dans les mécanismes réduits (nomenclature en annexe).

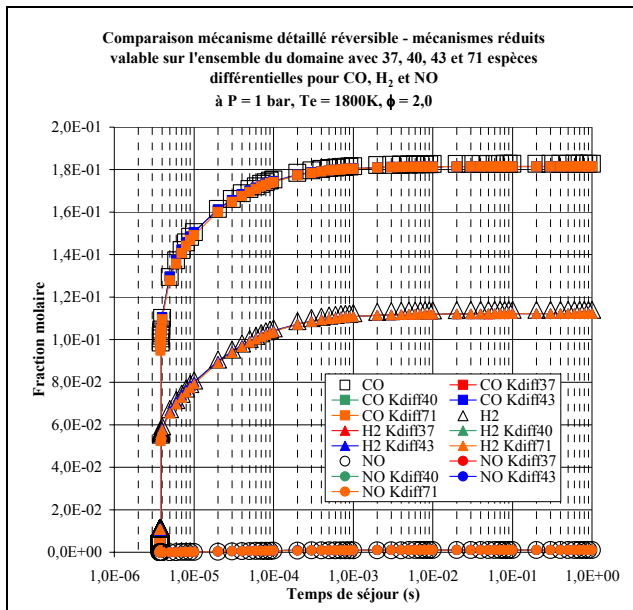
Ainsi, différents mécanismes réduits comprenant de 33 espèces différentielles (soit 101 espèces en EQS) jusqu'à 71 espèces différentielles (soit 63 espèces en EQS) ont été étudiés afin de déterminer celui qui répond le mieux aux exigences souhaitées (précision et rapidité).

Pour la résolution du système d'équations algébriques, le nombre maximal d'itérations utilisé a été fixé entre 30 et 50. Cette limite supérieure (50) a été choisie en fonction des précédents résultats sur le n-décane, qui montrent que cette valeur conduit à une évaluation correcte de la solution. Après plusieurs essais, il s'avère que pour conserver une précision correcte sur l'ensemble des profils de fractions molaires d'espèces (au maximum 10% d'erreur relative), le nombre minimum d'itérations à appliquer est de l'ordre de 30.

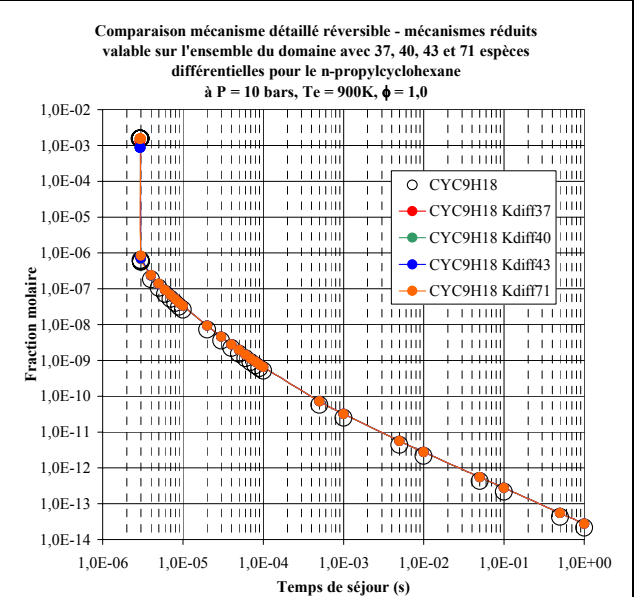
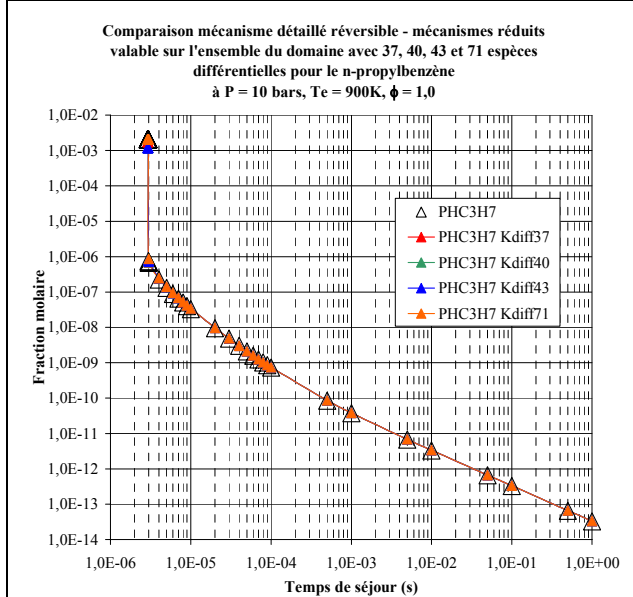
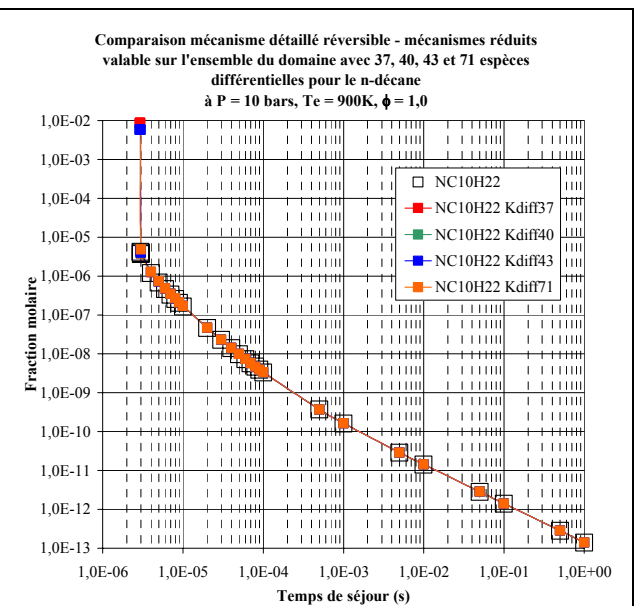
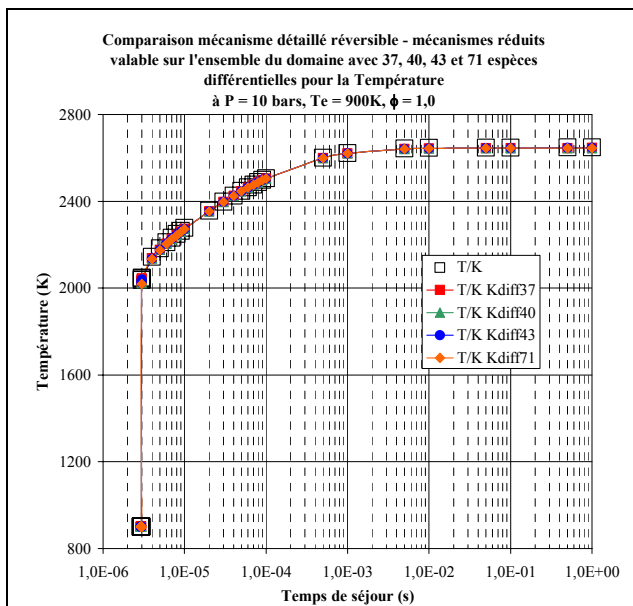
### III-3.2. Méthode de sélection du mécanisme réduit

A ce stade de l'étude, nous devons sélectionner parmi les différents mécanismes réduits, celui qui présente à la fois une bonne qualité prédictive et assure une mise en œuvre rapide. Nous avons testé plusieurs mécanismes en différents points du domaine paramétrique initialement choisi :  $P = 1$  et 10 bars,  $\phi = 0,5 - 1,0$  et 2,0 et  $T_e = 300$  à 1800K. Un grand nombre de résultats ont été accumulés pour les 26 variables suivies (25 espèces et la température) parmi 36 conditions (de richesse, température d'entrée et pression), 8 choix d'itérations (50, 45, 42, 40, 37, 35, 32 et 30) et 10 mécanismes réduits en compétition. Une comparaison des résultats, en considérant alternativement chacune des variables, a été tentée sans grand succès. Deux séries de résultats pour des conditions locales :  $P = 1$  bar –  $\phi = 2,0$  –  $T_e = 1800$ K (figure III-9) puis  $P = 10$  bars –  $\phi = 1,0$  –  $T_e = 900$ K (figure III-10), vont nous permettre d'illustrer notre propos. Sur ces différentes figures, les profils de fractions molaires de certaines espèces (réactifs, produits, radicaux H, O, OH et certains intermédiaires réactionnels  $H_2$  et CO, et NO) sont correctement reproduits pour les mécanismes réduits choisis (avec 37, 40, 43 et 71 espèces différentielles). Cependant, le choix d'un mécanisme réduit plutôt qu'un autre est impossible sans une étude comparative (longue et fastidieuse) de chacun des profils pour chacune des conditions. Du fait de la quantité très importante de résultats à traiter, liée au large domaine paramétrique considéré, il n'est pas réellement aisé d'apprécier les différences entre les profils d'espèce pour l'ensemble des modèles réduits choisis.





**Figure III-9 :** Comparaison des profils de température et de fractions molaires de différentes espèces entre les mécanismes réduits comprenant 37, 40, 43 et 71 espèces différentielles issus d'un mécanisme squelettique valable sur l'ensemble du domaine paramétrique (seuils sur C, H, O = 10% et sur N = 20% - seuil sur PCAF = 0,985) et le mécanisme détaillé réversible à pression atmosphérique, en milieu riche ( $\phi = 2,0$ ) et à une température d'entrée du réacteur de 1800K.



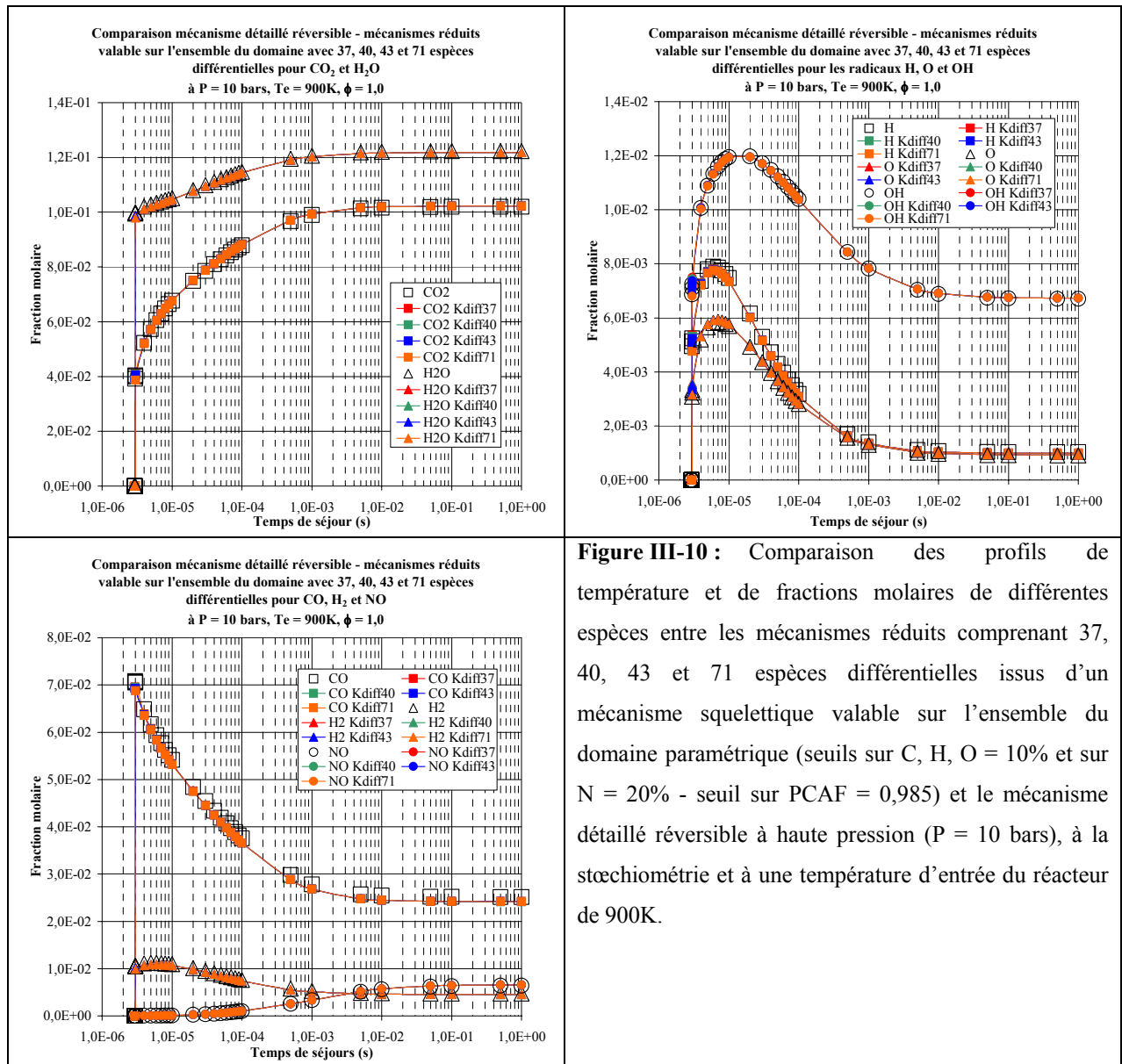


Figure III-10 : Comparaison des profils de température et de fractions molaires de différentes espèces entre les mécanismes réduits comprenant 37, 40, 43 et 71 espèces différentielles issus d'un mécanisme squelettique valable sur l'ensemble du domaine paramétrique (seuils sur C, H, O = 10% et sur N = 20% - seuil sur PCAF = 0,985) et le mécanisme détaillé réversible à haute pression ( $P = 10$  bars), à la stœchiométrie et à une température d'entrée du réacteur de 900K.

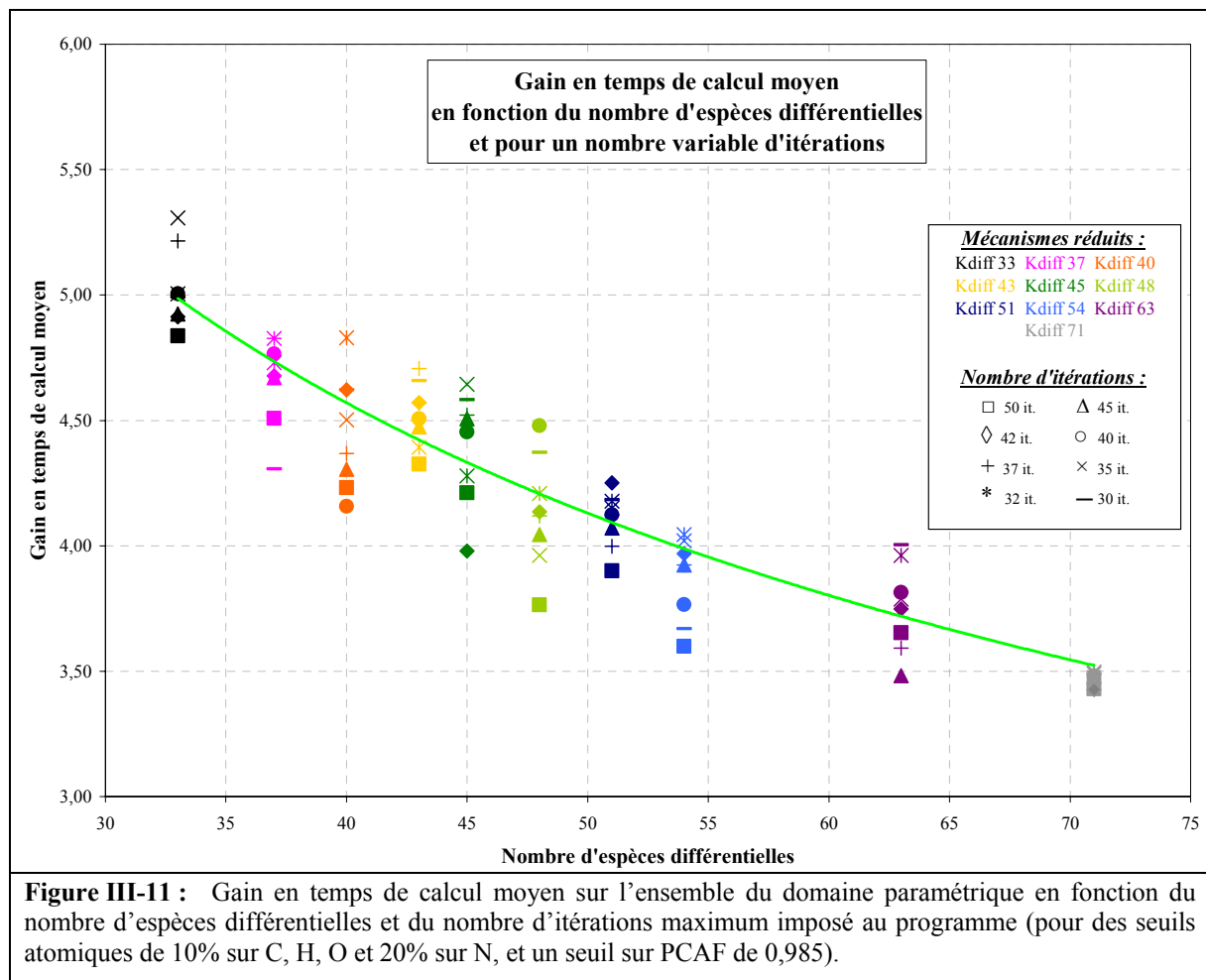
Pour cette raison, la mise en oeuvre d'une comparaison *globale* de chacun des mécanismes réduits sur l'ensemble du domaine paramétrique a été retenue. La sélection finale du « bon » mécanisme sera confirmée ultérieurement par une étude plus approfondie, mais plus simple, de l'évolution de chacune des 26 variables mises en jeu. L'approche initiale choisie nous a conduit à sélectionner, parmi les mécanismes réduits, ceux qui offraient un gain en temps de calcul élevé.

III-3.2.1. Critère basé sur le gain en temps de calcul

Ce gain  $GC$  est défini par le rapport du temps de calcul nécessaire pour réaliser la simulation numérique à une condition paramétrique donnée avec le mécanisme détaillé réversible ( $t_{DET}$ ), à celui obtenu dans les mêmes conditions avec le mécanisme réduit ( $t_{RED}$ ). On écrit donc pour une condition paramétrique donnée :  $GC = \frac{t_{DET}}{t_{RED}}$ . Le gain en

temps de calcul d'un mécanisme réduit sur l'ensemble d'un domaine peut être quantifié en considérant, par exemple, la moyenne arithmétique des  $GC$  pour l'ensemble des conditions

paramétriques. On définit ainsi le gain en temps de calcul moyen :  $GC_{moy} = \frac{\sum_{i=1}^N GC}{N}$  ( $N$  étant le nombre de conditions).



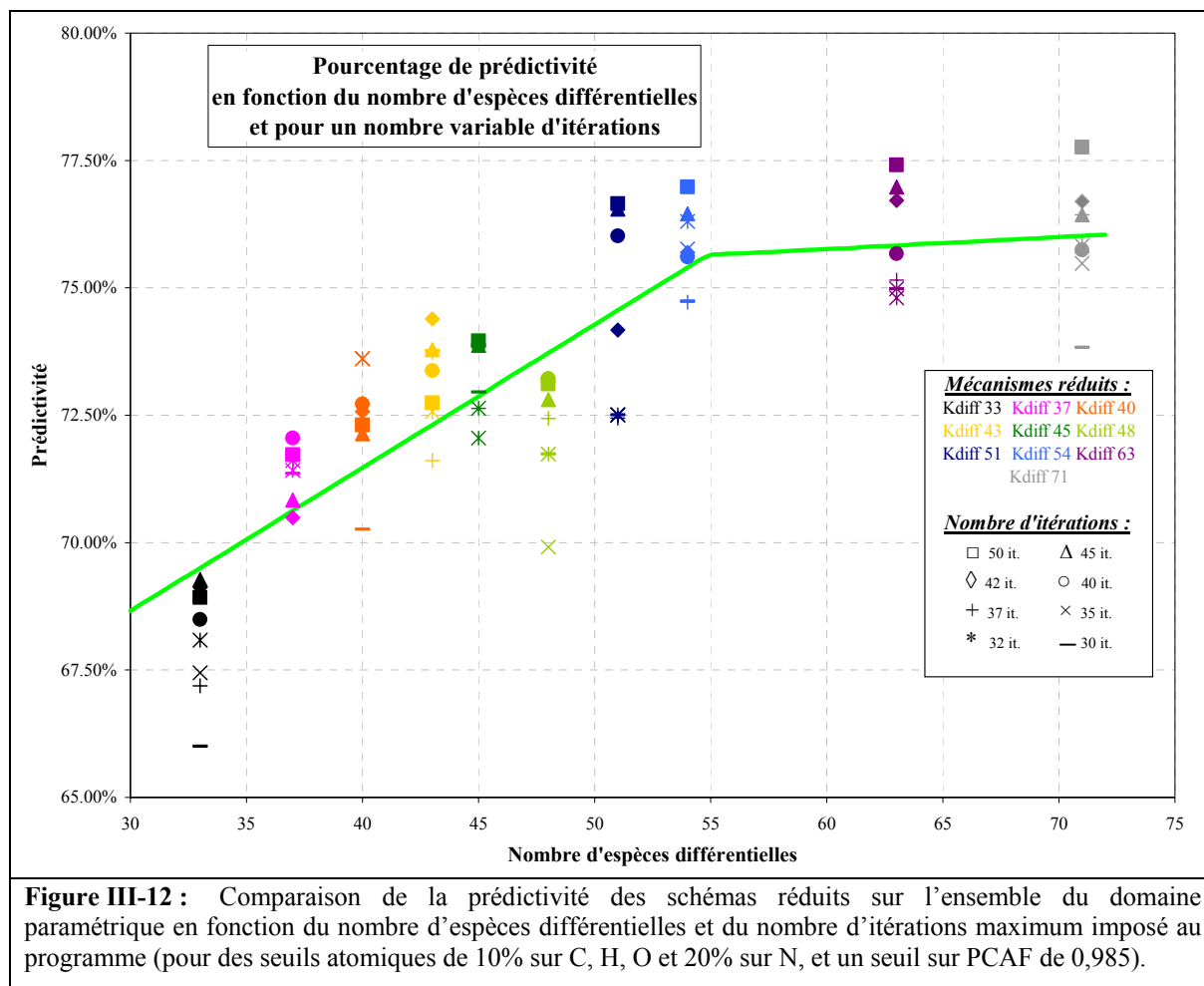
Sur la figure III-11 est représentée l'évolution du gain moyen en temps de calcul,  $GC_{moy}$ , en fonction du nombre d'espèces différentielles restantes et pour différentes valeurs du nombre maximal d'itérations (symbole). La courbe de tendance indique clairement que les gains les plus intéressants se situent en haut à gauche avec un effet très net de la taille des mécanismes et un effet un peu moins marqué du nombre d'itérations internes. Les valeurs de ces  $GC_{moy}$  se situent entre 4,0 et 5,5 et sont associés à des mécanismes réduits comprenant de 33 à 45 espèces différentielles. La diminution conjointe du nombre d'espèces différentielles et du nombre maximal d'itérations conduit donc à une augmentation de  $GC_{moy}$ , mais également, et ce n'est pas le but recherché, à une diminution de la prédictivité du modèle réduit.

### III-3.2.2. Critère basé sur la prédictivité

Afin de mieux évaluer la précision globale d'un mécanisme réduit sur l'ensemble des  $i$  conditions ( $i = 1, \dots, N$ ) du domaine paramétrique considéré, un nouveau critère a été mis en oeuvre, pour les  $j$  espèces ( $j = 1, \dots, k$ ) : le pourcentage de prédictivité d'un mécanisme,  $\%P$ . Il représente le pourcentage d'espèces dont la fraction molaire est supérieure à 10 ppm et qui sont représentées avec une erreur relative inférieure ou égale à 10%. Il est défini par la formule suivante :

$$\%P = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k n'_{i,j} \left\{ X_{i,j} \geq 10 \text{ ppm}, \frac{\Delta X_{i,j}}{X_{i,j}} \leq 10\% \right\}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^k n^{\circ}_{i,j} \{ X_{i,j} \geq 10 \text{ ppm} \}}$$

Le numérateur représente le nombre d'espèces ( $n'_{i,j}$ ) dont la fraction molaire  $X_{i,j}$  est supérieure ou égale à 10 ppm, et qui sont reproduites avec une erreur relative  $\left( \frac{\Delta X_{i,j}}{X_{i,j}} \right)$  inférieure ou égale à 10% et le dénominateur le nombre total d'espèces du mécanisme détaillé initial ( $n^{\circ}_{i,j}$ ) impliquées dans le mécanisme et dont la concentration est supérieure ou égale à 10 ppm.



En appliquant ce critère, l'ensemble des profils correctement reproduits (erreur relative inférieure ou égale à 10% pour des concentrations supérieures ou égales à 10 ppm) pour chacun des mécanismes réduits étudiés (figure III-12). On s'aperçoit que la prédictivité d'un modèle réduit peut varier d'environ 10 points (soit une centaine de profils d'espèces convenablement reproduites) d'un schéma réduit à un autre. En effet pour un calcul mené avec 30 itérations, le mécanisme réduit Kdiff33 reproduit bien 66% des fractions molaires des espèces suivies contre 74% pour le mécanisme Kdiff71. On constate une différence du même ordre de grandeur avec 50 itérations : pour ces mêmes schémas réduits, %P passe respectivement de 69% à 78%. Pour le mécanisme réduit contenant 134 espèces différentielles (correspondant au mécanisme squelettique obtenu à la sortie de PCAF) la prédictivité est voisine de 80%. Par définition, la valeur maximale 100 est attribuée au modèle détaillé initial qui sert de référence.



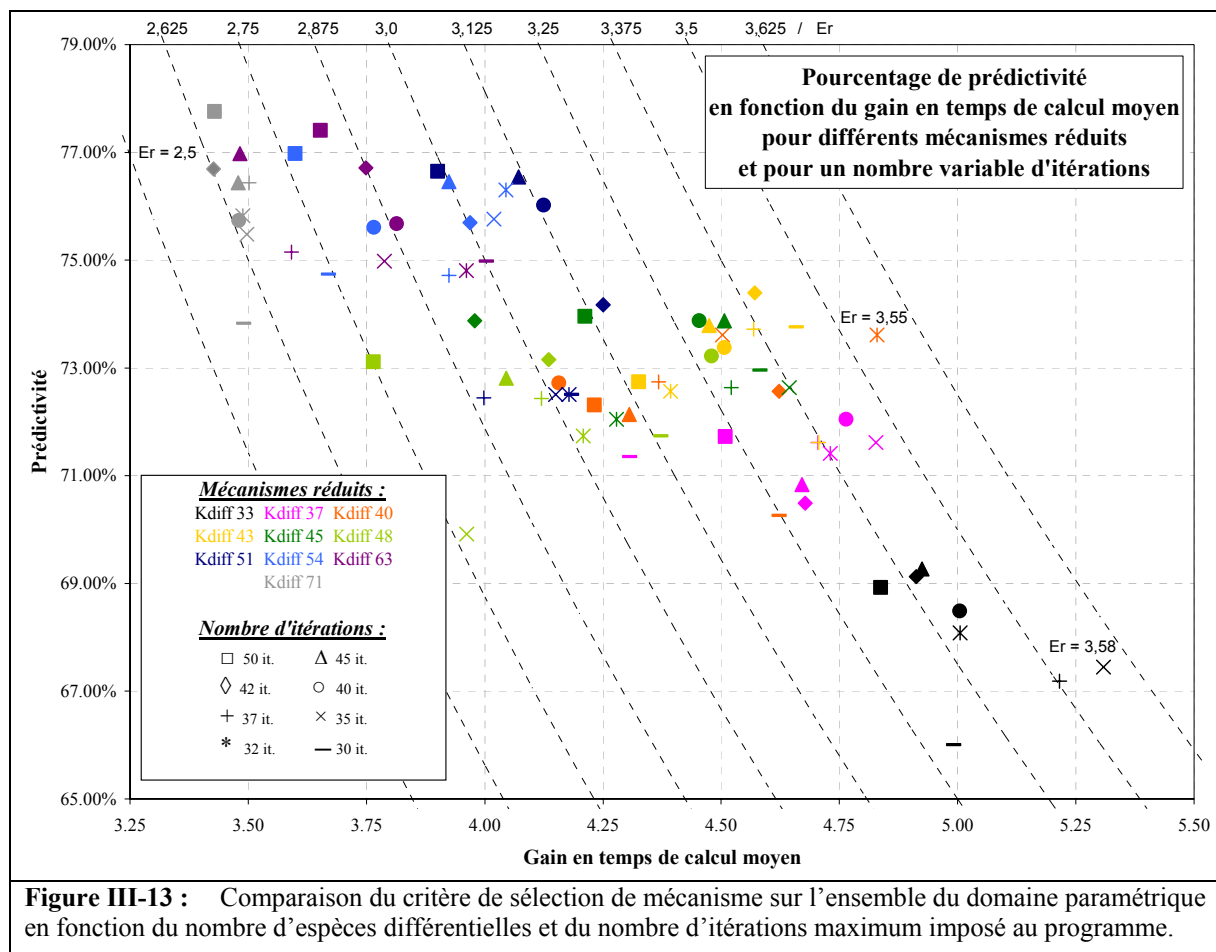
L'analyse de l'évolution des différentes valeurs de %P sur le graphe ainsi que sa courbe de tendance permet d'identifier deux domaines pour lesquels le rôle du nombre total d'espèces différentielles n'est pas le même, ainsi :

- choisir entre 33 et 51 espèces différentielles, où l'influence de ces dernières est plus marquée, est soit très favorable (%P ~ 75% en moyenne, de 30 à 50 itérations, pour Kdiff51), soit moins (%P ~ 68% pour Kdiff33) à la qualité prédictive du schéma réduit correspondant (sur ce domaine, la perte de précision peut atteindre jusqu'à 10 points),
- à l'inverse, choisir entre 54, 63 ou 71 espèces différentielles n'a quasiment pas d'impact sur la prédictivité, qui reste voisine de 75% pour 30 itérations (78% pour 50 itérations), alors que le gain en temps de calcul décroît.

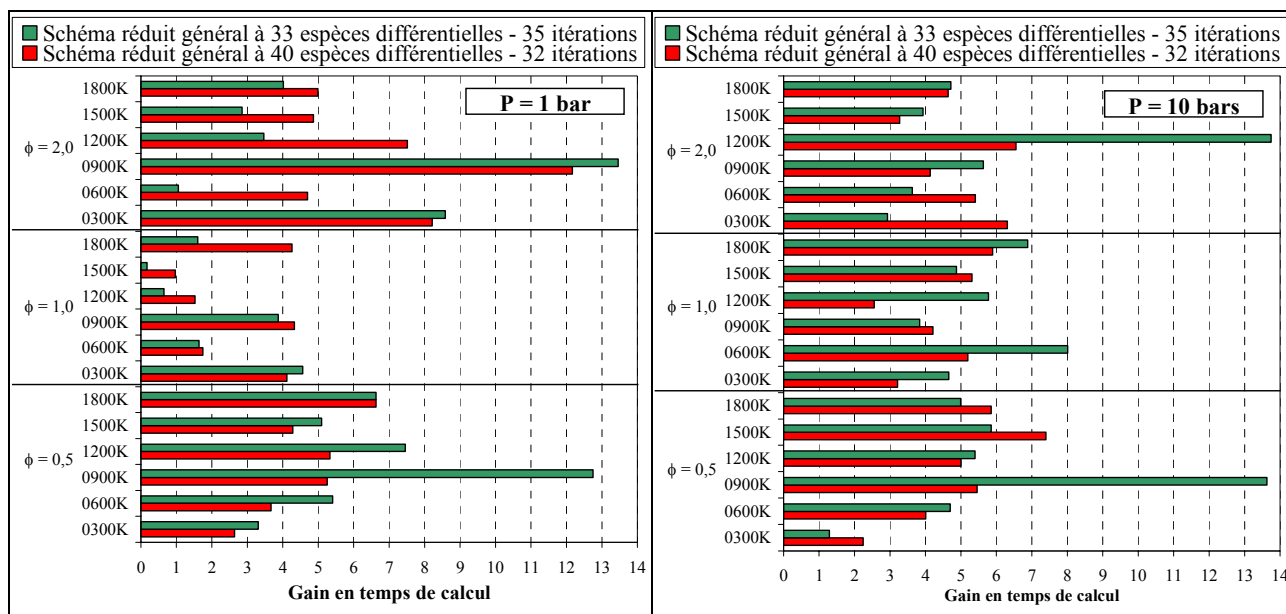
Ainsi comme on pouvait s'y attendre, la prédictivité d'un mécanisme réduit sera maximale pour un nombre élevé d'espèces différentielles, mais aussi pour un nombre élevé d'itérations. Cependant, on le sait, ces deux conditions conduisent à un gain en temps de calcul moyen médiocre. En conséquence, le gain en temps de calcul moyen ne doit pas être utilisé comme critère unique pour le choix d'un mécanisme réduit, car il ne prend pas en compte la précision des résultats.

### III-3.2.3. Conjugaison des deux critères

C'est pourquoi, nous avons été amenés à considérer un nouveau critère de sélection de mécanisme ( $Er$ ), basé sur le produit du gain en temps de calcul ( $GC_{moy}$ ) par le pourcentage de prédictivité du modèle réduit (%P). Plus la valeur de  $Er$  sera importante, plus le mécanisme réduit présentera à la fois une prédictivité intéressante et un gain en temps favorable. La figure III-13 établit la cartographie des variations du gain en temps de calcul et de la prédictivité en fonction des conditions : nombre d'espèces différentielles symbolisé par différentes couleurs et le nombre d'itérations représenté par différents symboles. La classification des mécanismes réduits « optimums » est liée à l'importance du critère  $Er$  représenté par des courbes isovaleurs en pointillés sur la figure. Ainsi, les mécanismes Kdiff40 associé à 32 itérations et Kdiff33 associé à 35 itérations possèdent, selon les critères choisis, le meilleur compromis entre qualité et rapidité de simulation avec comme valeurs respectives pour  $Er$  à 3,55 et 3,58.

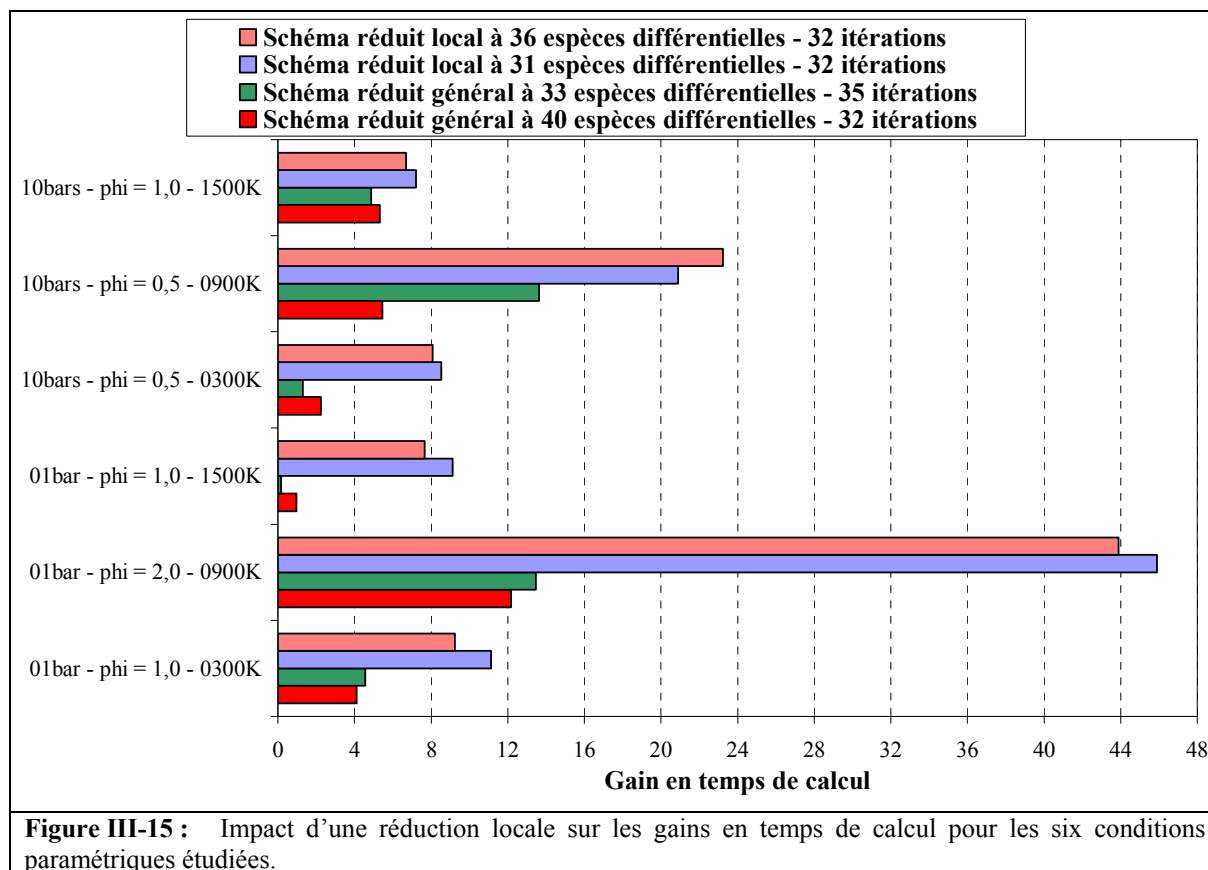


Comme nous l'avons vu, la valeur maximale du gain en temps de calcul moyen est d'environ 5,3. Toutefois, elle peut être supérieure et atteindre localement 14 sous certaines conditions paramétriques : à  $P = 1 \text{ bar} - \phi = 2,0 - T_e = 900\text{K}$  ou  $P = 10 \text{ bars} - \phi = 0,5 - T_e = 900\text{K}$  (figures III-14) par exemple. En outre, quelques conditions paramétriques présentent des gains en temps de calcul inférieurs à la valeur moyenne de 4,85 pour le mécanisme Kdiff40 et 5,3 pour le mécanisme Kdiff33. On peut citer les conditions :  $P = 1 \text{ bar} - \phi = 1,0 - T_e = 1500\text{K}$  ou  $P = 10 \text{ bars} - \phi = 0,5 - T_e = 300\text{K}$ . Enfin, dans la majorité des conditions paramétriques étudiées, le gain en temps de calcul est proche des valeurs moyennes (par exemple :  $P = 1 \text{ bar} - \phi = 1,0 - T_e = 300\text{K}$  ou  $P = 10 \text{ bars} - \phi = 1,0 - T_e = 1500\text{K}$ ).



**Figure III-14 :** Comparaison des gains en temps de calcul pour les schémas réduits généraux Kdiff33 et Kdiff40 pour les différentes conditions paramétriques.

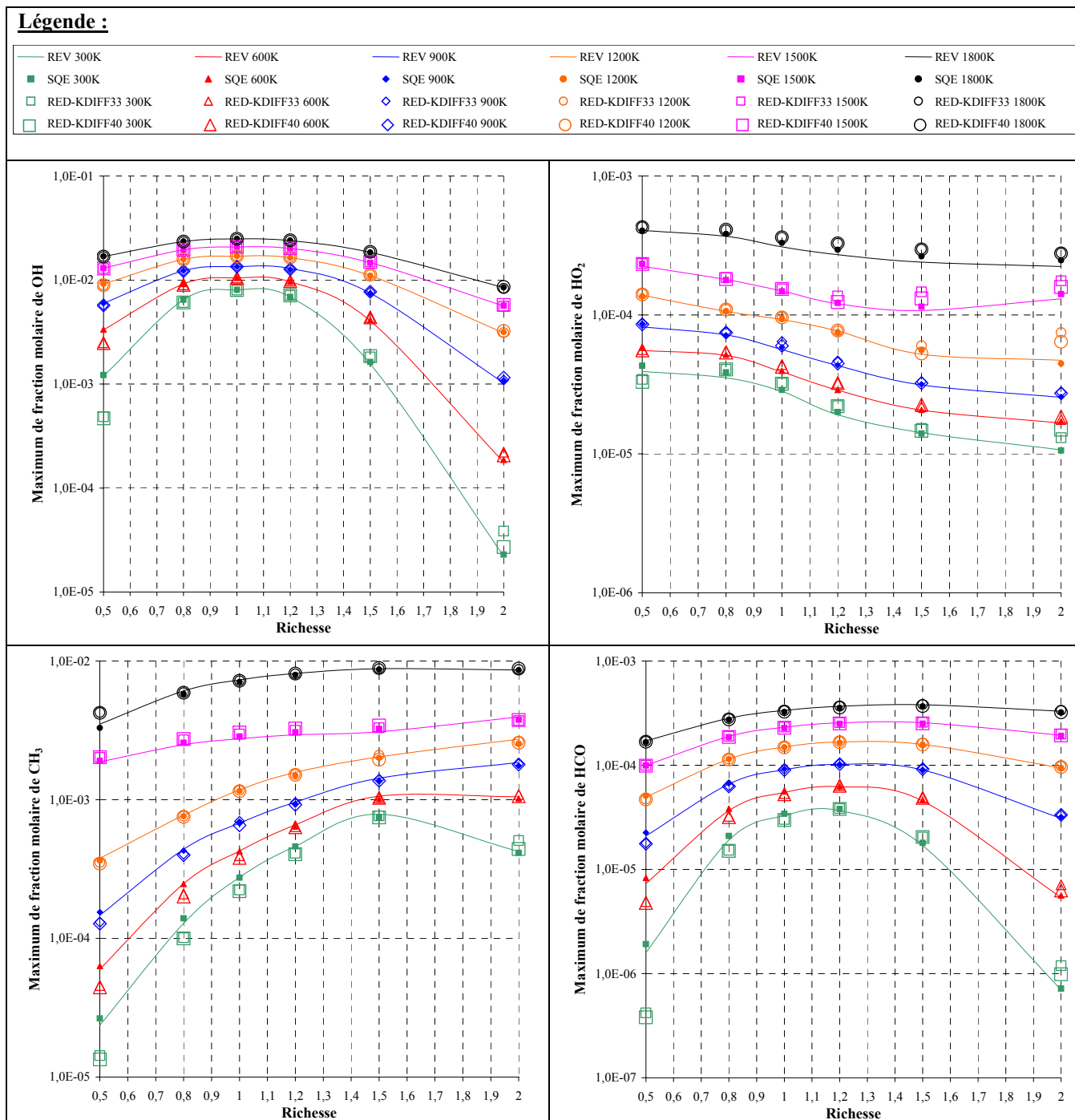
Rappelons que l'un des objectifs de cette étude était la mise au point d'un schéma réduit final validé sur un *large domaine* paramétrique. Cependant, il apparaît sur les histogrammes que lorsque le domaine paramétrique est plus restreint (une pression, une richesse et une température d'entrée par exemple), il est possible d'améliorer les gains en temps de calcul grâce à l'élaboration de schémas réduits « locaux ». Pour les conditions paramétriques précitées, ils contiennent un nombre compris entre 97 et 139 pour les espèces, et entre 407 et 614 pour les réactions. Ces chiffres représentent une simplification de 40% à 60% en nombre d'espèces et 80% à 90% en nombre de réactions. Ce surcroît de réduction entraîne une amélioration des gains en temps de calcul (figure III-15) dont les valeurs sont désormais comprises entre 7,5 et 46. Ces bons résultats ne doivent pas masquer le fait que l'on sera amené, dans ces conditions, à développer autant de schémas réduits que de conditions initiales de pression, température et richesse aboutissant à un processus de réduction long et fastidieux pouvant être, par ailleurs, source de nombreuses erreurs. Le traitement ultérieur n'est pas évident notamment au niveau de la continuité des espèces à la frontière de validité de deux schémas.



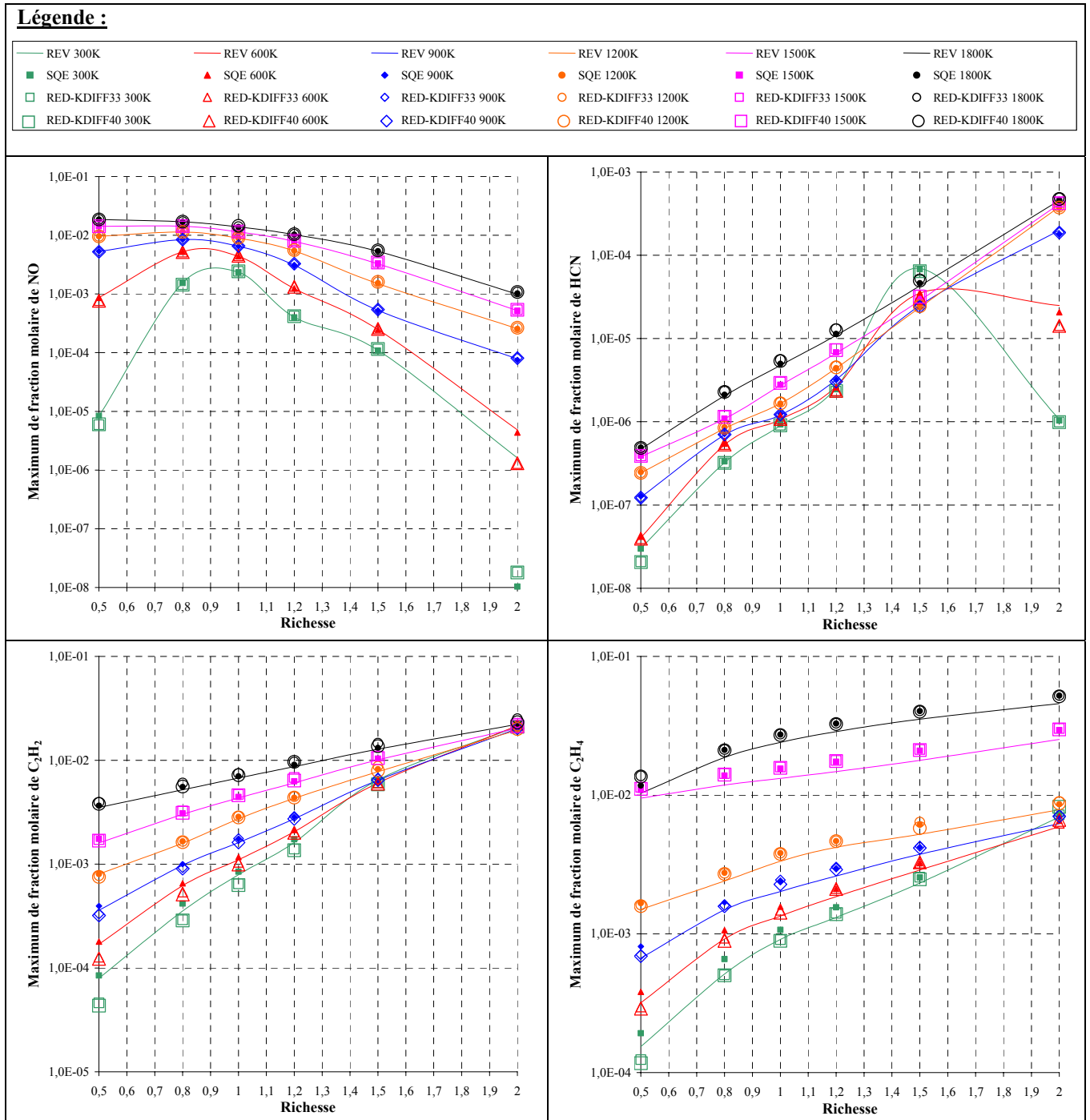
### III-3.3. Validation des schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles

Les mécanismes réduits sélectionnés subissent une validation finale par comparaison des déviations relatives sur les maxima des fractions molaires des espèces à différentes richesses. Nous avons tracé sur la figure III-16 les résultats obtenus à pression atmosphérique et pour différentes températures d'entrée (rappel pour la comparaison : détaillé réversible = REV, trait plein épais / squelettique après PCAF = SQE, symbole plein / réduit avec 33 espèces différentielles = RED-KDIFF33, « petit » symbole vide / réduit avec 40 espèces différentielles = RED-KDIFF40, « grand » symbole vide). Une bonne représentativité générale (l'erreur relative est inférieure à 10%) est constatée, pour la majorité des profils des espèces. Comme nous l'avons dit précédemment, des résultats présentant une erreur relative supérieure au seuil imposé ne sont pas la preuve d'une mauvaise qualité de prédiction de la part du mécanisme réduit : en effet, les fractions molaires des espèces concernées (intermédiaires réactionnels, radicaux, réactifs ou NO) ne dépassent que légèrement le seuil imposé. On peut citer en exemple les radicaux H et OH en milieu riche à 300K et 600K, ainsi que CO en milieu pauvre à 600K, dont les erreurs relatives sont comprises entre 10% et 20%.

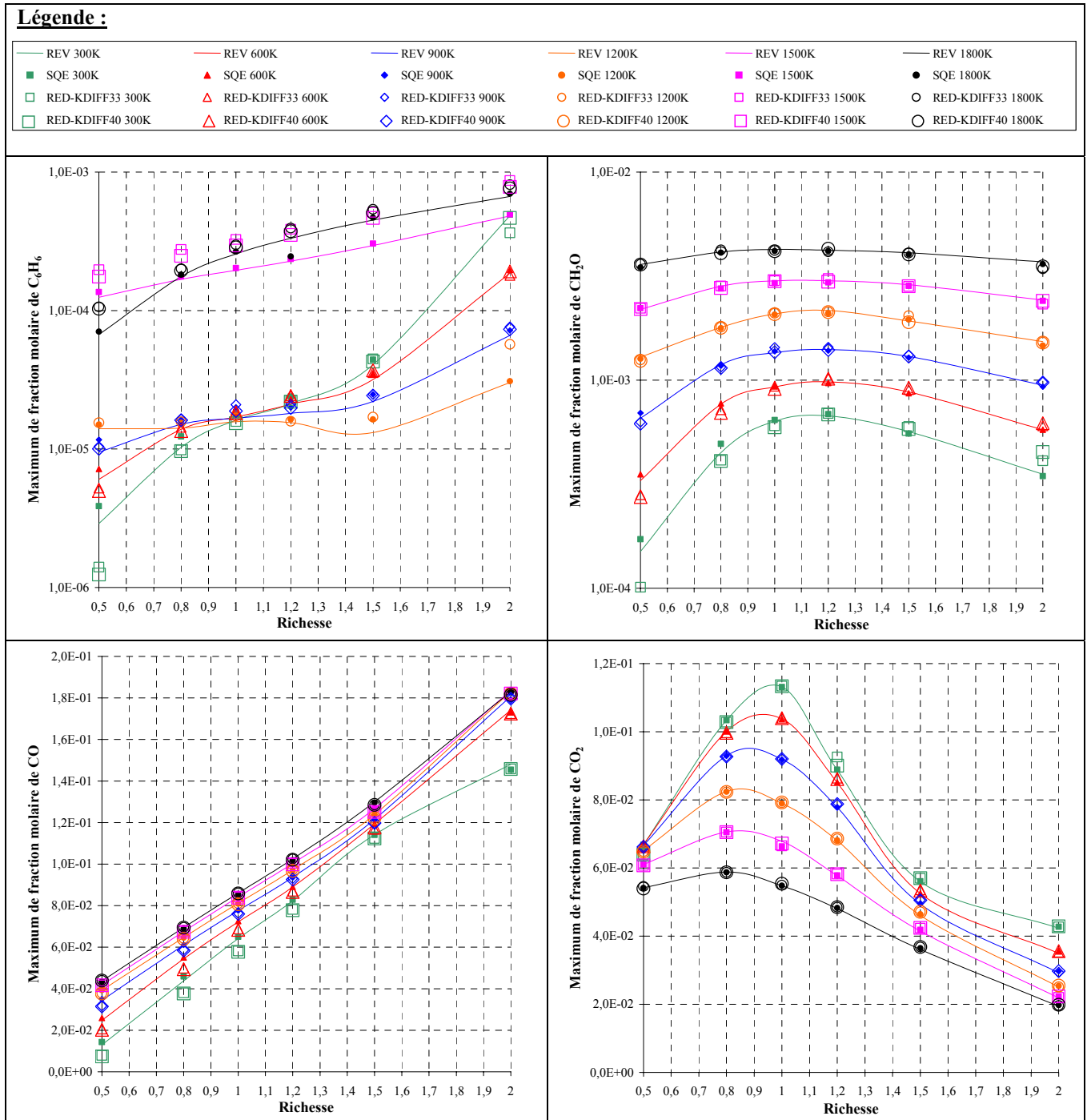
Dans d'autres cas, les erreurs importantes concernent des espèces dont la fraction molaire est inférieure à une dizaine de ppm. Ainsi, l'intermédiaire NO ou le radical OH à  $\phi = 2,0$  et  $T_e = 300K$  ou  $600K$ , présentent une erreur relative légèrement supérieure à 20% au voisinage de la limite d'extinction.



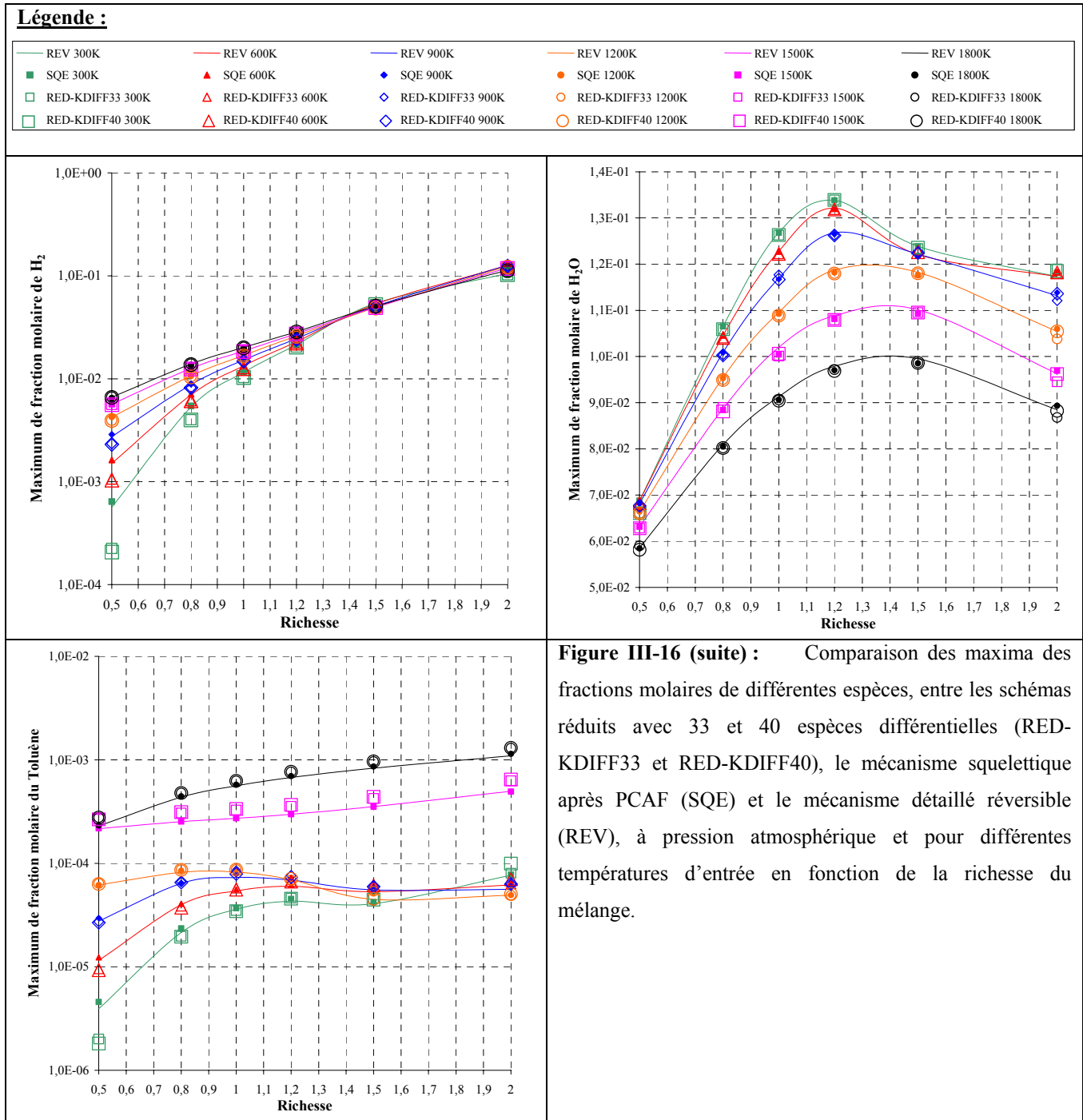
**Figure III-16 :** Comparaison des maxima des fractions molaires de différentes espèces, entre les schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles (RED-KDIFF33 et RED-KDIFF40), le mécanisme squelettique après PCAF (SQE) et le mécanisme détaillé réversible (REV), à pression atmosphérique et pour différentes températures d'entrée en fonction de la richesse du mélange.



**Figure III-16 (suite) :** Comparaison des maxima des fractions molaires de différentes espèces, entre les schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles (RED-KDIFF33 et RED-KDIFF40), le mécanisme squelettique après PCAF (SQE) et le mécanisme détaillé réversible (REV), à pression atmosphérique et pour différentes températures d'entrée en fonction de la richesse du mélange.



**Figure III-16 (suite) :** Comparaison des maxima des fractions molaires de différentes espèces, entre les schémas réduits avec 33 et 40 espèces différentielles (RED-KDIFF33 et RED-KDIFF40), le mécanisme squelettique après PCAF (SQE) et le mécanisme détaillé réversible (REV), à pression atmosphérique et pour différentes températures d'entrée en fonction de la richesse du mélange.



### III-4. Synthèse

Cette « prise en main » initiale de la méthodologie de réduction, nous a permis d'élaborer un mécanisme simplifié d'un kérosène reconstitué sur un large domaine de conditions paramétriques. Ce mécanisme squelettique, constitué de 134 espèces, a vu son nombre de réactions passer de 2132, après l'analyse des flux atomiques, à 1220 après l'analyse de sensibilité.



Les résultats de cette première partie du travail de réduction nous semblent en bon accord avec nos objectifs initiaux puisque l'erreur relative est majoritairement inférieure à 10%. Après l'application de l'AEQS, les mécanismes réduits obtenus, mettant en jeu 33 et 40 espèces différentielles avec respectivement 35 et 32 itérations, semblent répondre au double critère précision/rapidité. Le gain moyen en temps de calcul par rapport au mécanisme réversible initial est voisin de 5,5 pour le plus rapide (Kdiff33) et la prédictivité avoisine 75% pour le plus précis (Kdiff40). Néanmoins, ces résultats préliminaires satisfaisants par rapport à ceux de la littérature en regard du vaste domaine paramétrique utilisé, nous semblent cependant perfectibles.

Nous avons donc envisagé d'apporter des modifications, en recherchant tout d'abord une élimination plus sévère des espèces et des réactions, puis en modifiant la résolution mathématique du système algébrique afin de réduire très sensiblement le temps de calcul.

Dans les chapitres suivants, nous allons présenter les résultats de ces nouvelles modifications du processus de réduction en essayant de dégager les avantages et inconvénients de chacun des programmes (méthodes des flux atomiques, PCAF et de l'AEQS). Cette phase d'amélioration nous a semblé indispensable avant de tenter toute automatisation du processus de réduction.



# ***Chapitre IV***

---

## ***Etude de l'élimination des espèces et des réactions inutiles***

<b>IV-1.</b>	<b>Avantages et inconvénients de la méthode en vue de son automatisation</b>	<b>89</b>
IV-1.1.	Avantages et inconvénients de la procédure de réduction	90
IV-1.2.	Amélioration de l'automatisation du processus de réduction	90
<b>IV-2.</b>	<b>Phase 1 : Analyse des flux atomiques</b>	<b>93</b>
IV-2.1.	Principales voies réactionnelles impliquées : mécanisme local	93
IV-2.1.1.	<i>Le n-décane</i>	93
IV-2.1.2.	<i>Le n-propylbenzène</i>	97
IV-2.1.3.	<i>Le n-propylcyclohexane</i>	103
IV-2.2.	Espèces conservées : mécanisme spécifique	104
IV-2.3.	Elaboration du mécanisme général	106
IV-2.3.1.	<i>Influence des seuils choisis pour les flux atomiques</i>	107
IV-2.3.2.	<i>Résultats</i>	109
IV-2.3.3.	<i>Discussion</i>	114
<b>IV-3.</b>	<b>Phase 2 : Analyse des composantes principales, méthode PCAF</b>	<b>117</b>
IV-3.1.	Elimination des réactions inutiles	118
IV-3.1.1.	<i>Influence de la pression</i>	118
IV-3.1.2.	<i>Influence de la richesse et de la température</i>	120
IV-3.1.3.	<i>Synthèse</i>	125
IV-3.2.	Résultats	126
<b>IV-4.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>136</b>

---

---

---

Le premier essai de réduction sur un mécanisme détaillé de grande taille, celui d'un kérosène, a permis de valider la méthode dans un domaine d'application paramétrique beaucoup plus large. Cependant, la nécessité d'affiner notre méthodologie s'est dégagée rapidement. Dans cette nouvelle phase de travail, l'interfaçage des différents programmes utilisés (calculs, post-traitements, validations...) au cours des analyses de flux atomiques ou des composantes principales, a pu être finalisé et ensuite validé pour le même mécanisme initial mais sur un domaine de richesse allant de 0,5 à 2,0 (pour les raisons développées dans le chapitre précédent).

L'automatisation de cet outil va faciliter grandement l'analyse détaillée de la cinétique de combustion du kérosène au niveau de l'influence de la pression, la richesse et la température d'entrée. L'étude a porté sur :

- les chemins réactionnels empruntés lors de la combustion du mélange ternaire constituant le kérosène (Flux Atomiques) ainsi que leur importance (PCAF),
- le pourcentage d'espèces éliminées (Flux Atomiques),
- la répartition des espèces selon les conditions étudiées (Flux Atomiques).

Afin de pouvoir sélectionner le meilleur mécanisme squelettique général validé sur l'ensemble du domaine paramétrique choisi, à chacune des étapes, on a étudié l'influence des seuils sur le taux de réduction (et donc sur le gain en temps de calcul) ainsi que sur la précision.

L'élimination successive des espèces et réactions inutiles permet d'aboutir, après validation, au « meilleur mécanisme » squelettique général. Ce modèle, qui répond aux objectifs que nous nous sommes fixés, servira de point de départ pour la dernière étape du processus de réduction.

#### **IV-1. Avantages et inconvénients de la méthode en vue de son automatisation**

L'analyse critique de la première phase de réduction sur un mécanisme détaillé du kérosène, nous a permis de dégager les avantages et inconvénients des différents programmes utilisés. La prise en compte de ceux-ci a simplifié l'automatisation du processus de réduction à chaque étape.

#### IV-1.1. Avantages et inconvénients de la procédure de réduction

Rappelons que, l'enchaînement général des deux premières étapes de réduction, présentées individuellement dans le chapitre II, s'articule comme suit (figure IV-1) :

⇒ Calculs des flux atomiques par le programme **ATOMPSR** (option **ATOMFLOW**) et des composantes principales par le programme **PCAFW** (option **PCAF**) à partir du fichier binaire (**Chem.bin**) obtenu après l'interprétation du mécanisme détaillé (**Chem.irv**) pour la première étape, et squelettique (après les flux : **Chem.sqe1**) pour la seconde. Ce fichier binaire est utilisé conjointement à celui issu du code de calcul PSR (**Save.bin**) pour un temps de séjour à une condition donnée (fichiers d'entrée **p???????.XX**).

⇒ Post-traitement des fichiers de flux (**F???????.XX**) par le programme **POSTFLOW** ou de ceux de **PCAF** (**R???????.XX**) par le programme **POSTPCAF**. Les fichiers de résultats respectifs (fichiers **Aelim.XX** ou **Res-cond.XX**) servent alors de base à l'élaboration des mécanismes squelettiques (**Chem.sqe1** et **Chem.sqe2**) au sein de chacune des étapes.

⇒ Validation de ce mécanisme par la comparaison (programme **COMPAR**) des résultats, obtenus avec PSR à une condition paramétrique (de pression – de richesse et de température d'entrée) donnée (**P???????**), du mécanisme squelettique (**RESTAUT.SQE**) et du modèle détaillé initial (**RESTAUT.REV**).

Cette phase de l'étude a pour objectif de faciliter l'élimination des espèces et réactions inutiles. Le regroupement de l'ensemble du processus dans un programme unique réduit l'intervention humaine, et donc les fausses manœuvres. Le paramétrage des variables (nombres d'espèces et de réactions - nombre de fichiers d'entrée utilisés par les différents programmes – seuils de coupure), le dimensionnement des tableaux, l'intervention sur la nature des fichiers d'entrée ou de sortie (déplacement, changement de nom, ou création de fichiers) étaient des opérations manuelles fastidieuses et répétitives que nous avons cherchées à minimiser.

#### IV-1.2. Amélioration de l'automatisation du processus de réduction

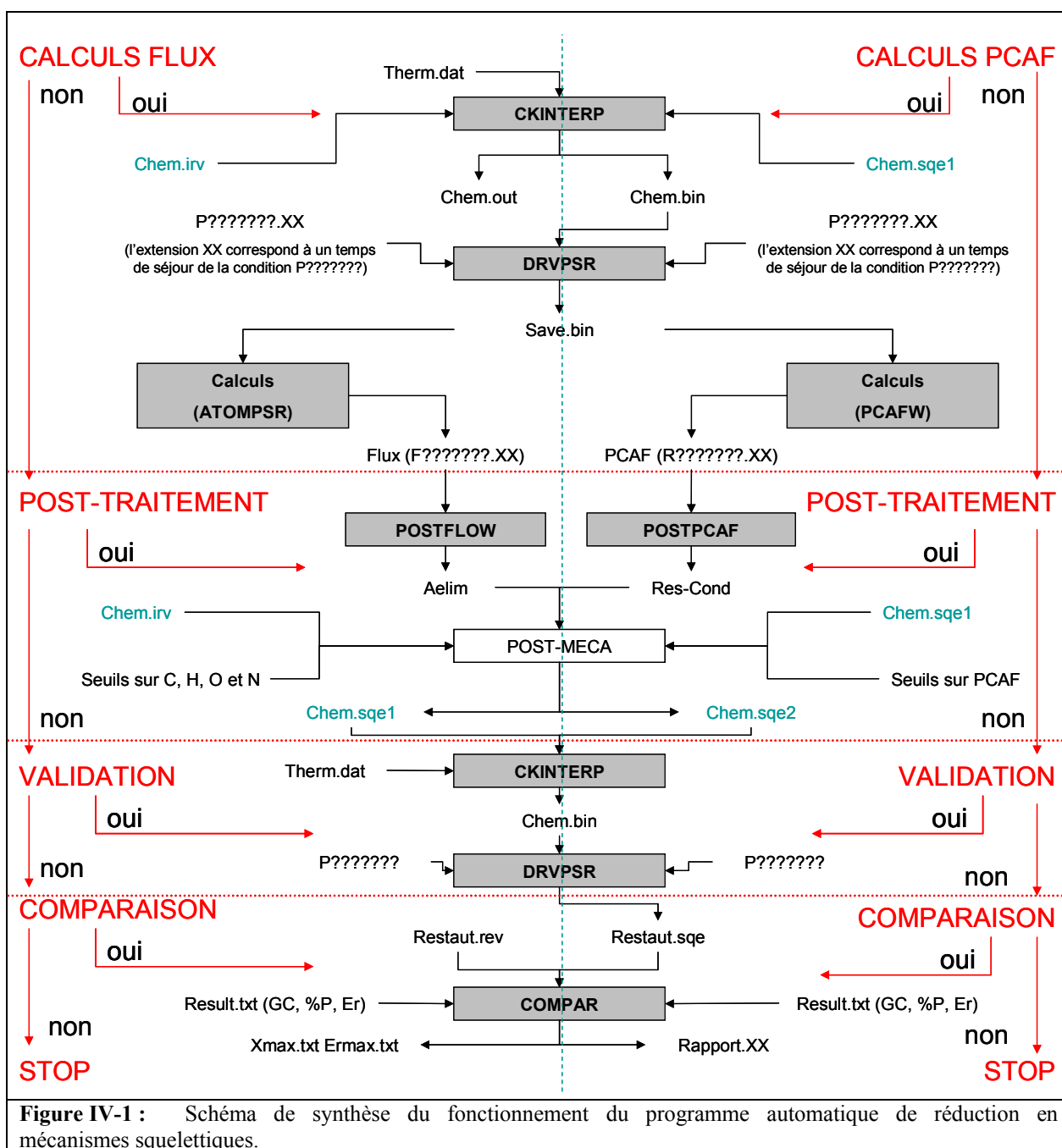
Après avoir calculé successivement les flux atomiques d'espèces ainsi que les composantes principales des réactions pour l'ensemble des conditions paramétriques, le programme post-traite les fichiers de résultats (**F???????.XX** ou **R???????.XX**). La détection du nombre de ces fichiers issus des flux ou de PCAF s'effectue automatiquement et

le calcul s'enchaîne sans interruptions pour chacune des conditions paramétriques considérées (144 dans notre étude), sans aucune intervention humaine sur les fichiers. Les délais de préparation et de mise en route des calculs sont alors minimisés. En effet, quelques minutes de gagnées sur une condition signifient une durée de calcul de 2 jours au lieu de 10 auparavant sur l'ensemble des 144 cas envisagés.

Qui plus est, ce gain en temps est mis à profit pour balayer un plus grand domaine de seuils choisis par l'utilisateur (au lieu d'un seul auparavant) : seuils sur les flux atomiques de 1% à 40%, et seuils sur PCAF de 0,950 à 1. Les fichiers de résultats après post-traitement (**AELIM.XX** et **RES-COND.XX**) contiennent sous forme condensée toutes les valeurs des flux d'une espèce ou des composantes principales d'une réaction pour une condition paramétrique donnée, ainsi que leurs situations par rapport aux divers seuils pris en compte. Cette manière de procéder évite ainsi de recommencer le post-traitement des fichiers **F???????XX** ou **R???????XX** si le mécanisme squelettique obtenu (correspondant à un couple de seuils Flux/PCAF) ne correspond pas aux objectifs de rapidité et de précision souhaités. Cette dernière étape, moins coûteuse en temps de calcul, conduit aisément à l'obtention de différents modèles squelettiques en fonction des différents seuils de coupure envisagés.

Une amélioration similaire a été apportée dans l'étape de validation du mécanisme squelettique. L'obtention du critère de sélection ( $Er$ ) dépend du calcul des  $GC$  (comparaison des temps de calculs) et des pourcentages de prédictivité (valeurs relevées manuellement après le calcul effectué avec PSR). Maintenant, le programme détermine automatiquement ces différents critères pour l'ensemble des couples de seuils sur les Flux Atomiques ou la méthode PCAF pour chacune des conditions paramétriques. Des règles d'expertise ont donc été introduites dans la programmation afin d'assister l'utilisateur dans l'identification du « meilleur » mécanisme squelettique (valeur de  $Er$  la plus élevée). Grâce à cette automatisation, l'utilisateur doit simplement vérifier le bon déroulement des différentes opérations effectuées au sein des nouveaux programmes.

Afin de minimiser la quantité des calculs, en cas d'erreur, des points de repère interactifs (symbolisés en rouge sur la figure IV-1) sont disponibles à chaque sous-étape importante au cours du processus d'élimination des espèces ou des réactions. Ces balises permettent de relancer les calculs à l'endroit précis où on le désire.



Différents calculs menés initialement sans passer par la procédure automatique ont mis en évidence deux points importants :

⇒ Avant d'effectuer les calculs, il est important de disposer d'une répartition précise et suffisamment détaillée des temps de séjour, dans le fichier d'entrée de PSR, afin de prendre en compte le déplacement de la limite d'extinction entre les différents mécanismes squelettiques. Une répartition incorrecte ou trop éparse entraîne des arrêts prématurés du calcul dans le pire des cas, mais également des évaluations biaisées du pourcentage de



prédictivité, donc du critère de sélection, *Er*. Ce type d'erreur entraînait un réel doute sur la validité du mécanisme squelettique testé.

⇒ La seconde difficulté est relative à la robustesse des calculs de PSR. Pour que le programme détecte correctement la limite d'extinction, il est indispensable que les derniers temps de séjour calculés se situent sur la branche froide (correspondant à la température d'entrée du réacteur). En effet, le premier point sur la branche froide sert à la comparaison de la limite d'extinction avec celle du modèle initial.

Nous disposons maintenant d'un programme complètement automatique pour chacune des deux premières étapes de réduction, tout en restant simple et d'une mise en œuvre facile. Grâce à ces améliorations, nous avons pu mieux appréhender, au plan cinétique, l'évolution de la combustion du kérosène, sous diverses conditions expérimentales. Cet aspect est développé dans les parties suivantes : l'analyse des flux atomiques et l'analyse des composantes principales.

## IV-2. Phase 1 : Analyse des flux atomiques

### IV-2.1. Principales voies réactionnelles impliquées : mécanisme local

L'étude des flux atomiques a été réalisée pour chacun des trois réactifs initiaux, afin de déterminer les chemins réactionnels préférentiels conduisant à la consommation du n-décane, du n-propylbenzène et du n-propylcyclohexane, en fonction des conditions de pression, de richesse et de température d'entrée.

#### IV-2.1.1. Le n-décane

Le diagramme des flux atomiques de carbone pour le n-décane est représenté, d'un point de vue général, sur la figure IV-2. Cette dernière synthétise, indépendamment des conditions initiales, les principales voies réactionnelles rencontrées, possédant un flux atomique inter-espèces au moins égal à 10% du flux (sortant) de référence de n-C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> : voies de décomposition supérieures jusqu'aux C<sub>6</sub> et inférieures jusqu'aux C<sub>2</sub>.

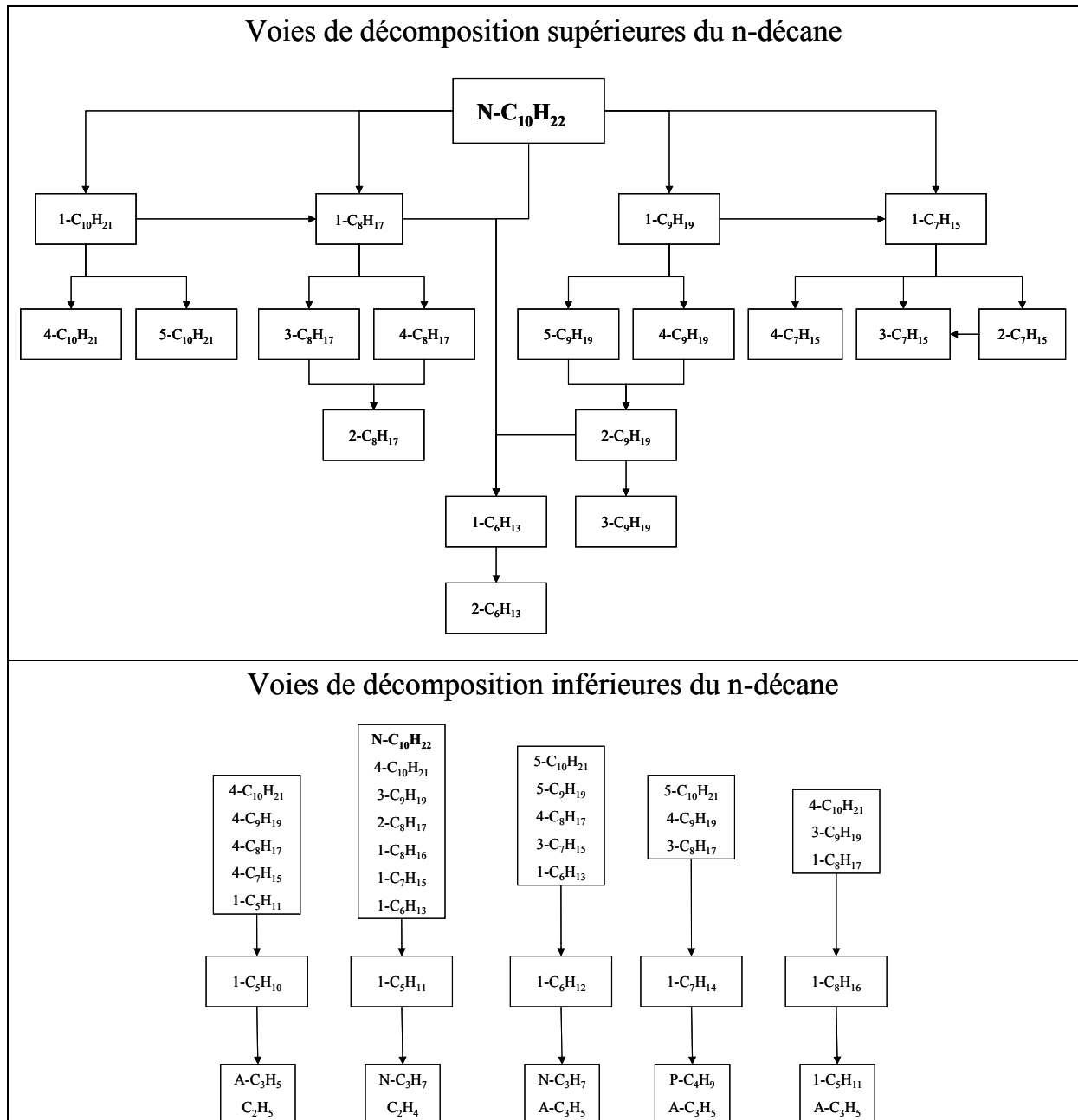
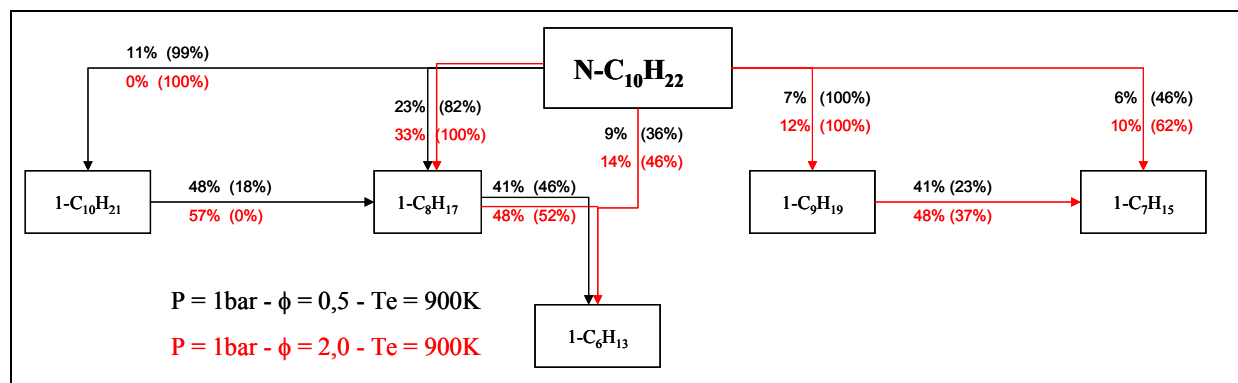


Figure IV-2 : Diagramme général des flux atomiques de carbone pour le n-décane.

Selon le domaine paramétrique considéré, l'importance relative des réactions varie. Ainsi, à pression atmosphérique, en milieu pauvre et basse température, le n-décane sera quasi exclusivement consommé pour former les cinq radicaux décyles qui représentent environ 94% des voies de décomposition du n-décane. A une augmentation d'un de ces trois paramètres (P,  $\phi$  et  $T_e$ ) sera associée une diminution progressive de l'importance de ces voies incluant les principaux radicaux de la combustion (H, O, OH, HO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>), au profit des réactions d'amorçage par scission du n-décane en radicaux nonyles, octyles, heptyles, hexyles et pentyles.



**Figure IV-3 :** Diagramme des flux atomiques pour le n-décane à  $\phi = 0,5$  et  $2,0$  pour  $P$  et  $T_e$  fixées.

Sur la figure IV-3, un exemple est présenté pour deux richesses ( $0,5$  et  $2,0$  pour  $P$  et  $T_e$  fixées). La formation du radical  $1\text{-C}_{10}\text{H}_{21}$  devient négligeable en milieu riche avec un flux de carbone inférieur à  $1\%$  ( $11\%$  en milieu pauvre). Ainsi, les radicaux décyles, et par conséquent les réactions les formant et les consommant, tendent à disparaître (voies symbolisées par un trait rouge sur le diagramme) au fur et à mesure que la richesse augmente. Par contre, d'autres voies réactionnelles, déjà présentes mais non considérées (flux faibles) en milieu pauvre, voient leur importance croître : celles des radicaux 1-nonyle et 1-heptyle par exemple. La prépondérance de cette voie conduisant au radical 1-octyle, déjà constatée en milieu pauvre, s'accroît encore : flux d'environ  $20\%$  à  $\phi = 0,5$ , contre environ  $30\%$  à  $\phi = 2,0$ .

Une augmentation de la température (ou de la richesse) s'accompagne du renforcement des voies de dégradation thermique des réactifs (rupture de la molécule en plusieurs fragments) aux dépens des voies d'oxydation (arrachement d'un atome d'hydrogène et attaque radicalaire). Le diagramme de la figure IV-4 illustre ces effets de variation de la température ( $900\text{K}$  et  $1800\text{K}$ ,  $P$  et  $\phi$  étant fixées) : on voit bien que lorsque celle-ci augmente, les réactions de scission des radicaux de  $\text{C}_9$  à  $\text{C}_5$  deviennent majoritaires par rapport aux réactions d'isomérisation. De  $900\text{K}$  à  $1800\text{K}$  ( $P = 1 \text{ bar}$ ,  $\phi = 2,0$ ), on peut constater que le flux de la réaction d'isomérisation du radical  $1\text{-C}_8\text{H}_{17} \rightarrow 4\text{-C}_8\text{H}_{17}$  perd environ  $8$  points (de  $26\%$  à  $18\%$ ). Cette perte est compensée par la réaction de  $\beta$ -scission  $1\text{-C}_8\text{H}_{17} \rightarrow 1\text{-C}_6\text{H}_{13}$  qui voit sa valeur progresser de  $48\%$  à  $56\%$ . Le même constat est fait pour le radical  $1\text{-C}_7\text{H}_{15}$  pour lequel la réaction de pyrolyse en  $1\text{-C}_5\text{H}_{11}$  devient plus importante avec la température :  $37\%$  à  $48\%$ . Parallèlement, la tendance s'inverse avec la voie réactionnelle permettant l'isomérisation du  $1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow 3\text{-C}_7\text{H}_{15}$ . Le flux décroît de  $36\%$  à  $22\%$ .

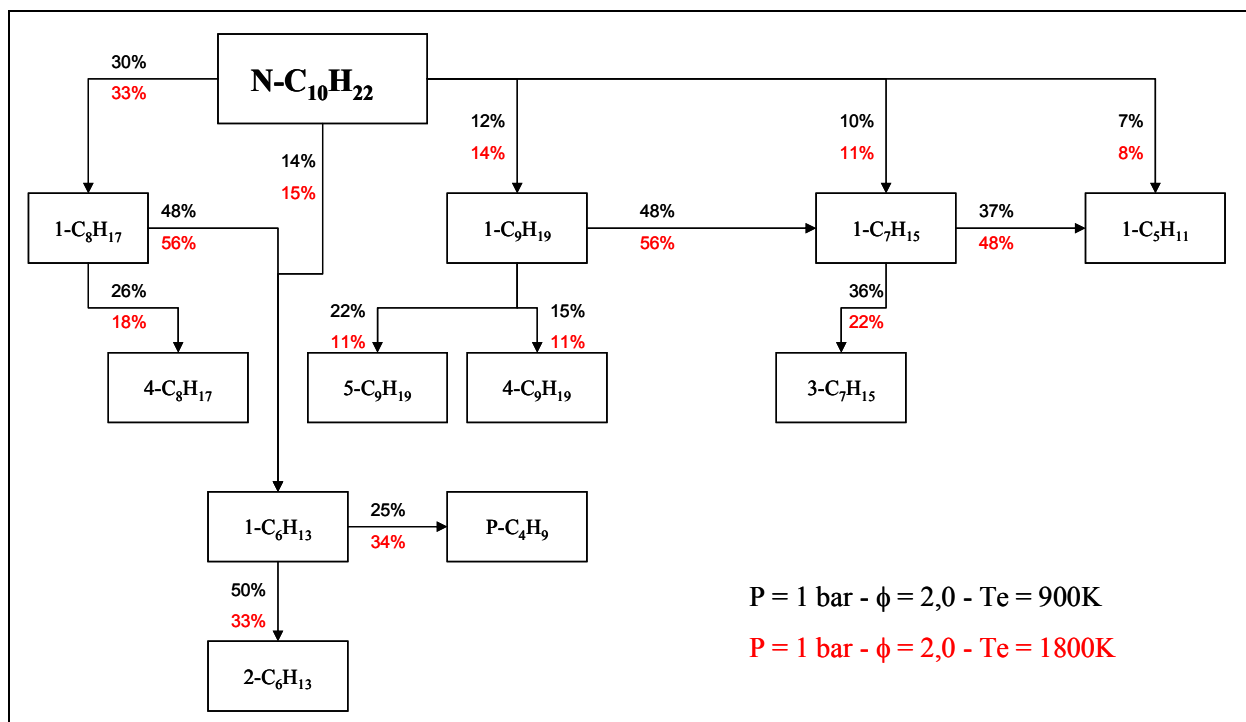


Figure IV-4 : Diagramme des flux atomiques pour le n-décane à 900K et 1800K pour P et  $\phi$  fixés.

La pression semble n'avoir, pour sa part, et sur l'ensemble du domaine de richesse et de température, qu'un effet modéré sur l'évolution des flux : l'augmentation de celle-ci (de 1 à 10 bars) aboutit à un léger renforcement des voies de  $\beta$ -scission, avec une augmentation d'environ 2 points de la valeur du flux vers  $1-C_8H_{17}$  et  $1-C_6H_{13}$ . En même temps, une faible perte d'influence des réactions conduisant aux radicaux décyles (faisant intervenir les radicaux H, O, OH, ...) est constatée : diminution de 5 points pour la voie formant  $1-C_{10}H_{21}$  à haute pression.

Deux grandes tendances se dessinent ainsi pour la décomposition du n-décane (figure IV-5). A basse température et en milieu pauvre, c'est la formation des radicaux décyles qui domine. Par contre, lorsque la température et/ou la richesse augmentent, ce sont les réactions de  $\beta$ -scission qui deviennent progressivement plus significatives. Ces dernières conduisent exclusivement à la formation des radicaux  $C_9$  à  $C_5$ , directement à partir du réactif initial et non plus en passant par l'intermédiaire des radicaux décyles. Les radicaux (nombre de C < 10) ainsi formés vont ensuite, se décomposer en espèces à nombre inférieur de carbone (dégradation thermique) à haute température et milieu riche, ou suivre des voies correspondant aux réactions d'isomérisation conservées à basse température et milieu pauvre. Quel que soit le chemin emprunté pour ces premières étapes de décomposition, le processus conduit à la formation d'alcènes, de nature et de concentration différentes, selon les conditions expérimentales considérées (du nonène jusqu'à l'éthylène).

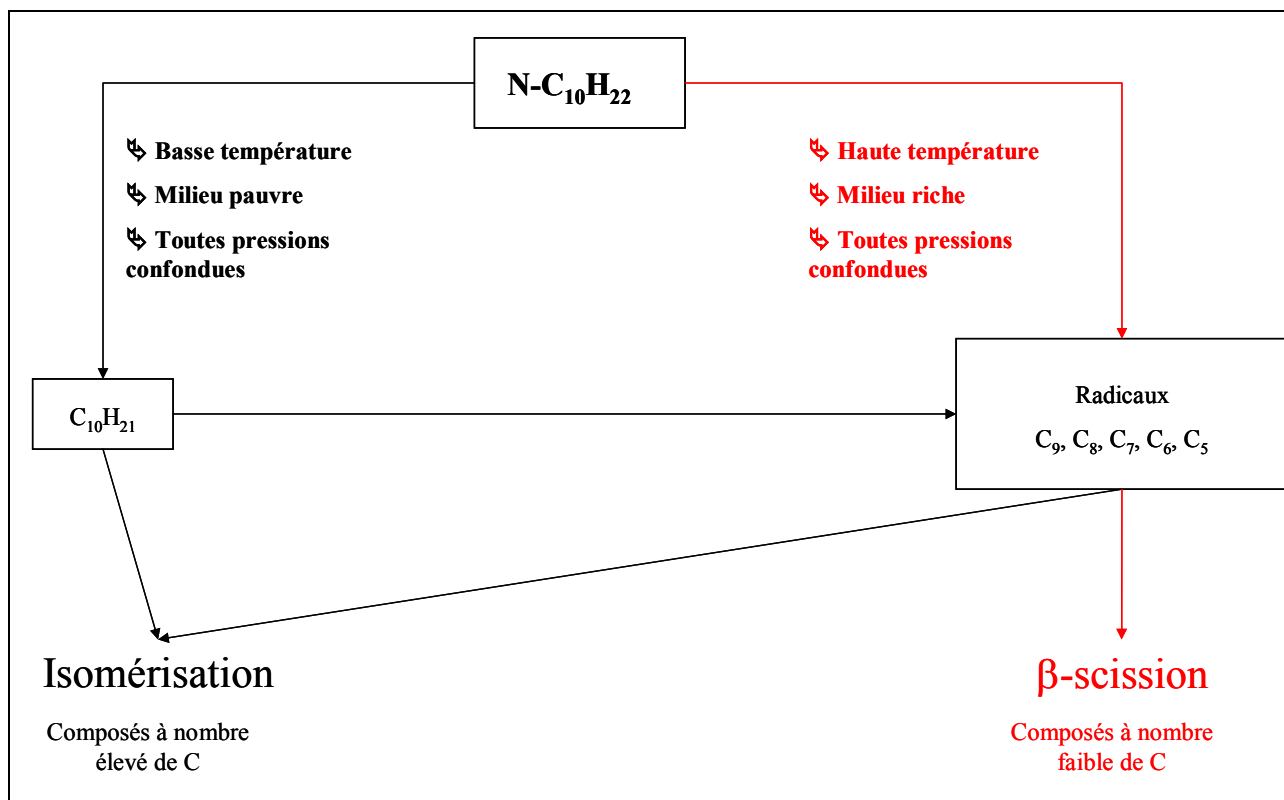


Figure IV-5 : Diagramme des flux atomiques pour le n-décane selon les conditions de  $\phi$  et  $T_e$ .

#### IV-2.1.2. Le n-propylbenzène

Les noms des composés, hors nomenclature classique (et entre parenthèses), sont conservés identiques à ceux utilisés dans le mécanisme. Leur explication est donnée en annexe 2.

L'influence de la variation des 3 paramètres ( $P$ ,  $\phi$  et  $T_e$ ) sur le type des réactions consommant cette espèce mono-aromatique a été étudiée. Les voies les plus significatives apparaissent sur la figure IV-6.

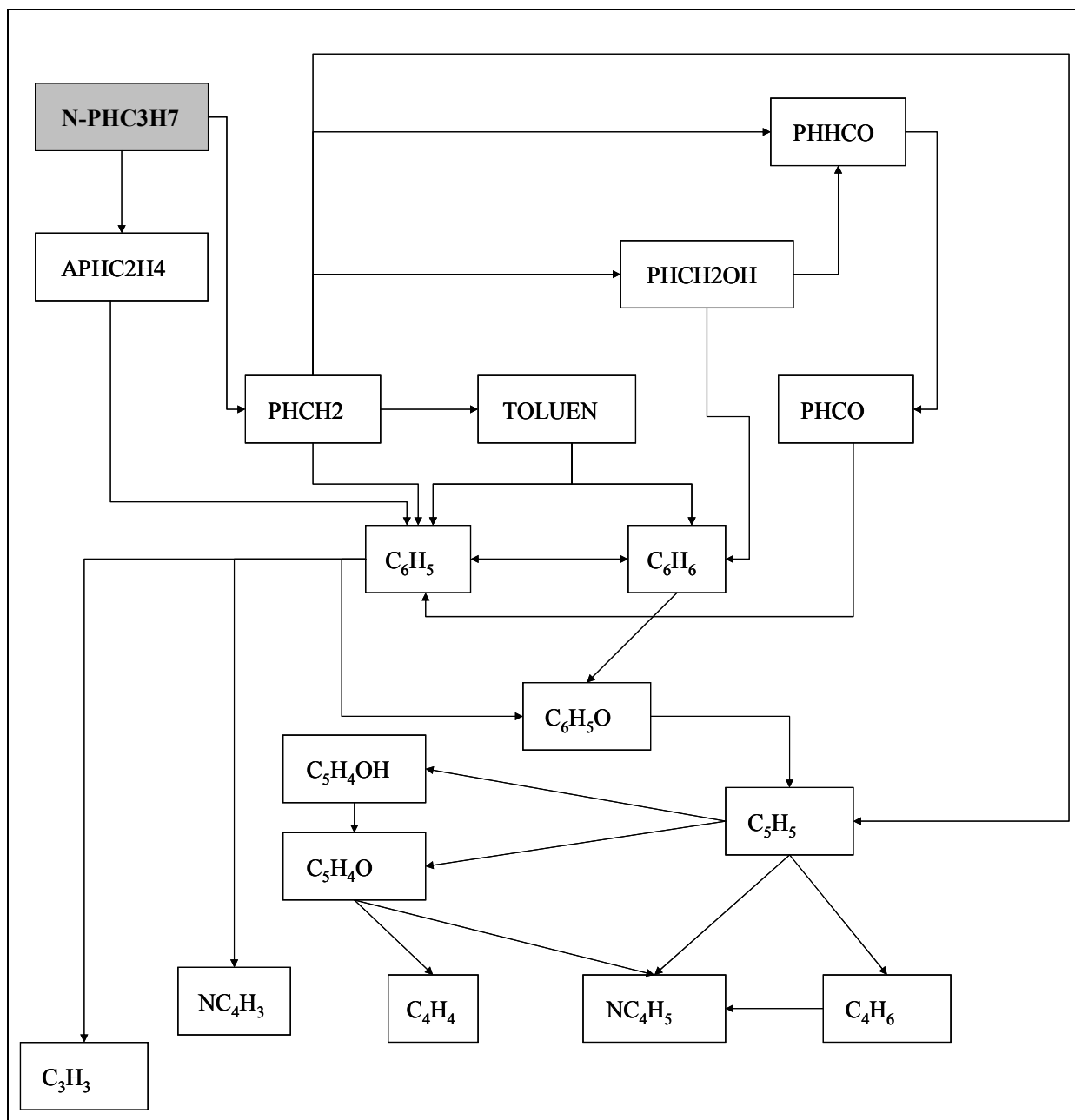
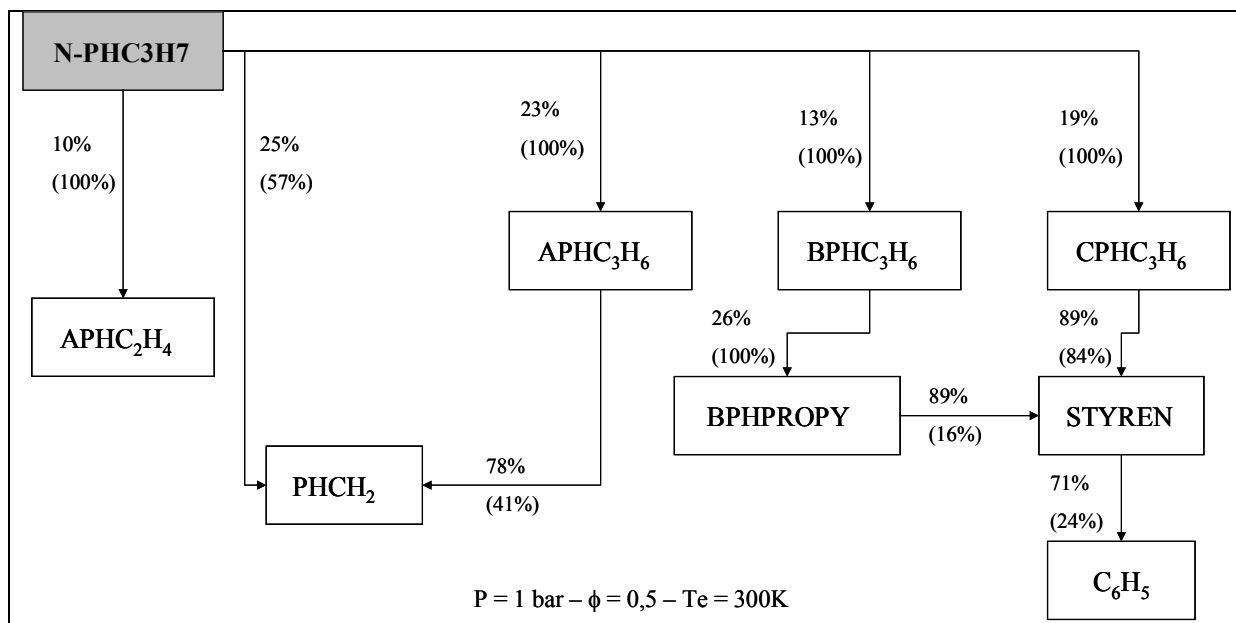


Figure IV-6 : Diagramme des flux atomiques de carbone pour le n-propylbenzène.

Dans la première étape de décomposition, les radicaux benzyle (PHCH2) et éthylène-benzène (APHC2H4) sont toujours présents, à des taux divers, pour l'ensemble des conditions locales. Ces deux chemins représentent jusqu'à 90% de la consommation du réactif initial. Cependant, en milieu pauvre et à basse température (exclusivement), une troisième voie devient prépondérante (elle peut représenter environ 60% de la consommation du réactif). Elle correspond à une attaque radicalaire sur le groupement alkyle du n-propylbenzène pour former les radicaux propénylbenzènes (PHC3H6). Ces derniers sont eux-mêmes à l'origine de la formation d'espèces aromatiques telles que l'isopropénylbenzène (BPHPROPY) et le styrène (STYREN) pour aboutir au radical phényle (figure IV-7).



**Figure IV-7 :** Diagramme des flux atomiques pour le n-propylbenzène à P = 1 bar,  $\phi = 0,5$  et  $T_e = 300K$ .

Hormis cette condition spécifique, le processus de dégradation sur les deux premiers radicaux se poursuit comme suit. (APHC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) est la principale source du radical phényle en milieu riche (~80% de C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> sont formés à partir de ce radical), toutes températures d'entrée confondues. L'autre voie de formation de C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> provient du toluène (figure IV-8). En milieu pauvre, la voie réactionnelle issue de (APHC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) perd de son importance (de 28% à 21%), en même temps que celle provenant du toluène disparaît (de 49% à 4%), au profit des réactions issues de (PHCH<sub>2</sub>) qui passent de 0% à 19%. Ainsi, à pression atmosphérique pour les conditions de l'exemple choisi :  $\phi = 0,5$  –  $T_e = 900K$ , C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> est formé à hauteur de 30% à partir de (APHC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), contre 60% à partir des composés issus de la dégradation de (PHCH<sub>2</sub>). Le radical phényle est formé, à la fois directement ( $PHCH_2 \rightarrow C_6H_5$ ), et via le benzène ou des « composés aromatiques oxygénés » tels que l'alcool benzylique, le benzaldéhyde et le radical benzoyle (respectivement PHCH<sub>2</sub>OH, PHHCO et PHCO).

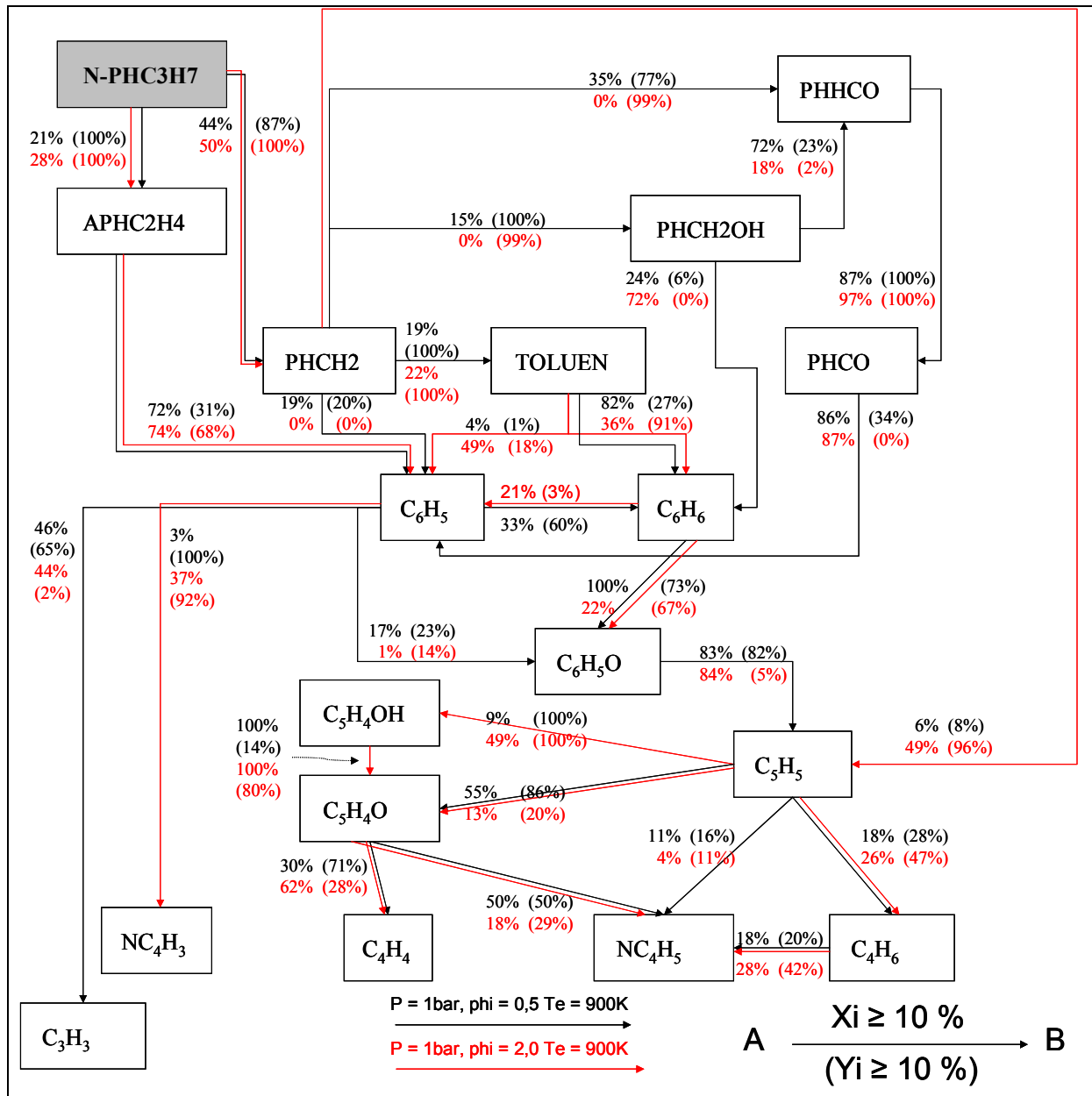


Figure IV-8 : Diagramme des flux atomiques du n-propylbenzène à  $\phi = 0,5$  et  $2,0$  pour  $P$  et  $T_e$  fixées.

Lorsque la température augmente (de 900K à 1800K,  $P$  et  $\phi$  étant fixées : figure IV-9) les voies empruntées passant par les composés oxygénés (PHCH2OH et PHHCO) deviennent moins importantes : perte d'environ 15 points en milieu pauvre. Cette tendance s'accroît, jusqu'à disparition de ces chemins à richesse plus élevée.

Dans les étapes de décomposition consécutives, les réactions dominantes de formation du 1,3-cyclopentadiényle ( $C_5H_5$ ) à partir, soit du radical phenoxy ( $C_6H_5O$ ) issu lui-même du benzène ou du radical phényle, soit du radical benzyle (PHCH2) s'invertissent : à basse température,  $C_5H_5$  provient majoritairement (82%) du radical phenoxy ( $C_6H_5O$ ), tandis qu'à haute température, cette voie devenue négligeable est remplacée par celle (87%) venant



directement de (PHCH<sub>2</sub>). L'augmentation de la richesse provoque, elle aussi, ce même type de permutation des chemins empruntés pour former C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>. Sur le diagramme de la figure IV-8, on voit effectivement que le taux de passage du flux entrant dans C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>, à partir du benzyle, représente 8% du flux total en milieu pauvre, alors qu'avec 96% en milieu riche, on peut considérer que cette voie de formation est la seule qui reste.

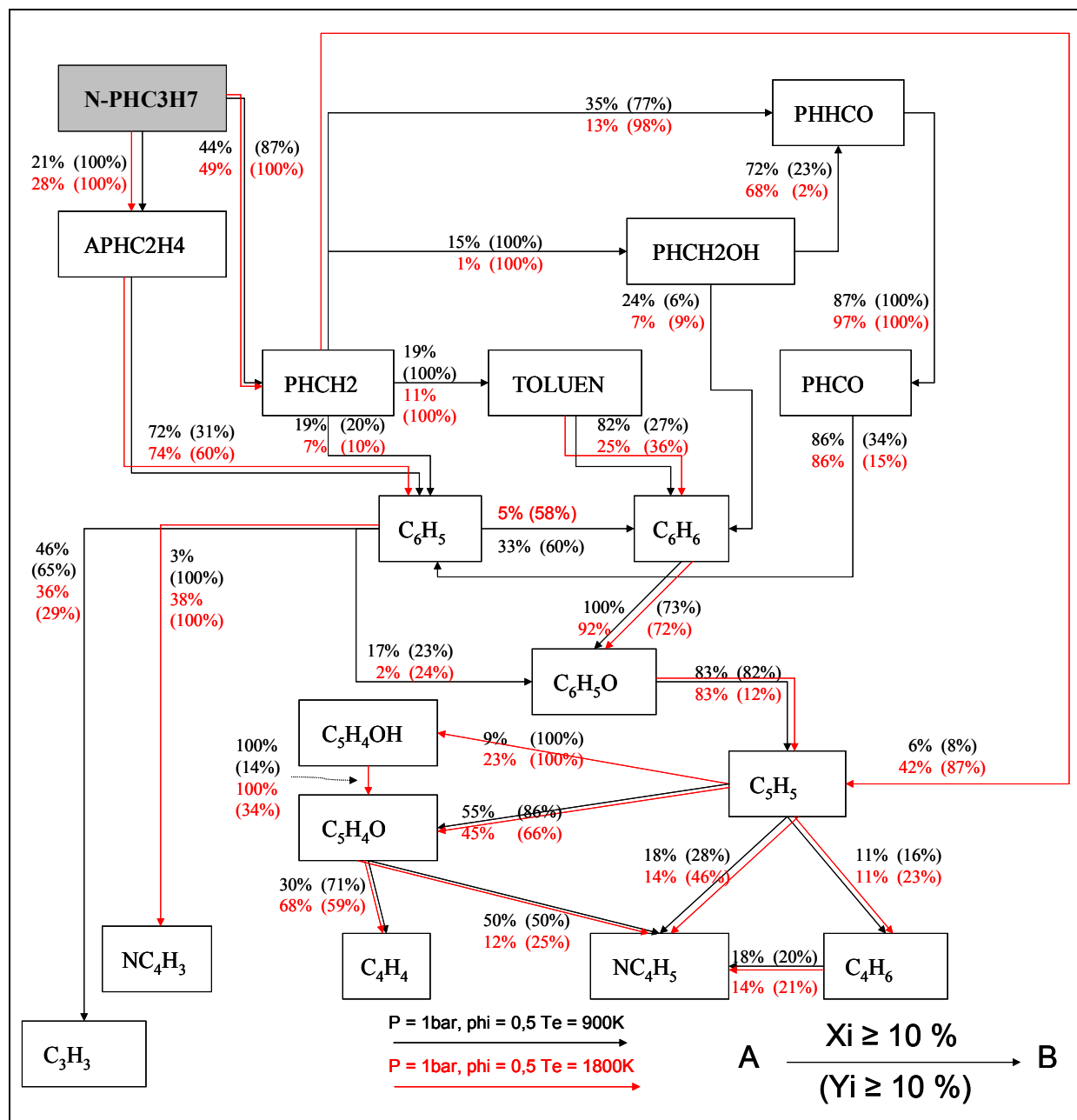


Figure IV-9 : Diagramme des flux atomiques du n-propylbenzène à Te = 900K et 1800K, pour P et φ fixées.

La décomposition du n-propylbenzène se résume globalement selon le schéma de la figure IV-10. A température et richesse faibles, le radical phényle est le composé clé de la dégradation du n-propylbenzène. Il est formé à partir des principaux acteurs (« second rôles »)

de la chimie de cet hydrocarbure ( $\text{PHC}_3\text{H}_6$ ,  $\text{PHC}_2\text{H}_4$  et  $\text{PHCH}_2$ ). Une augmentation de température et/ou de richesse provoque une disparition progressive des réactions assurant la jonction entre les chemins réactionnels de formation des radicaux  $\text{C}_6\text{H}_5$  et  $\text{C}_5\text{H}_5$  (voies surlignées en bleu sur le diagramme). De ce fait, deux possibilités de chemins réactionnels distincts et indépendants l'un de l'autre sont observées : le premier est issu de ( $\text{APHC}_2\text{H}_4$ ) et ( $\text{PHC}_3\text{H}_6$ ) et le second de ( $\text{PHCH}_2$ ). Au fur et à mesure que la richesse et/ou la température augmente le passage du flux de carbone par l'espèce ( $\text{PHC}_3\text{H}_6$ ) diminue jusqu'à disparaître. A un stade plus avancé de la décomposition, ces radicaux sont les promoteurs de composés en  $\text{C}_4$  :  $\text{C}_4\text{H}_4$ ,  $\text{NC}_4\text{H}_5$  et  $\text{C}_4\text{H}_6$  pour  $\text{C}_5\text{H}_5$  et  $\text{NC}_4\text{H}_3$  pour  $\text{C}_6\text{H}_5$  (remplacé par  $\text{C}_3\text{H}_3$  à basse température et milieu pauvre). Ces derniers se décomposent successivement en espèces telles que  $\text{AC}_3\text{H}_5$ ,  $\text{AC}_3\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_3$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ , ...

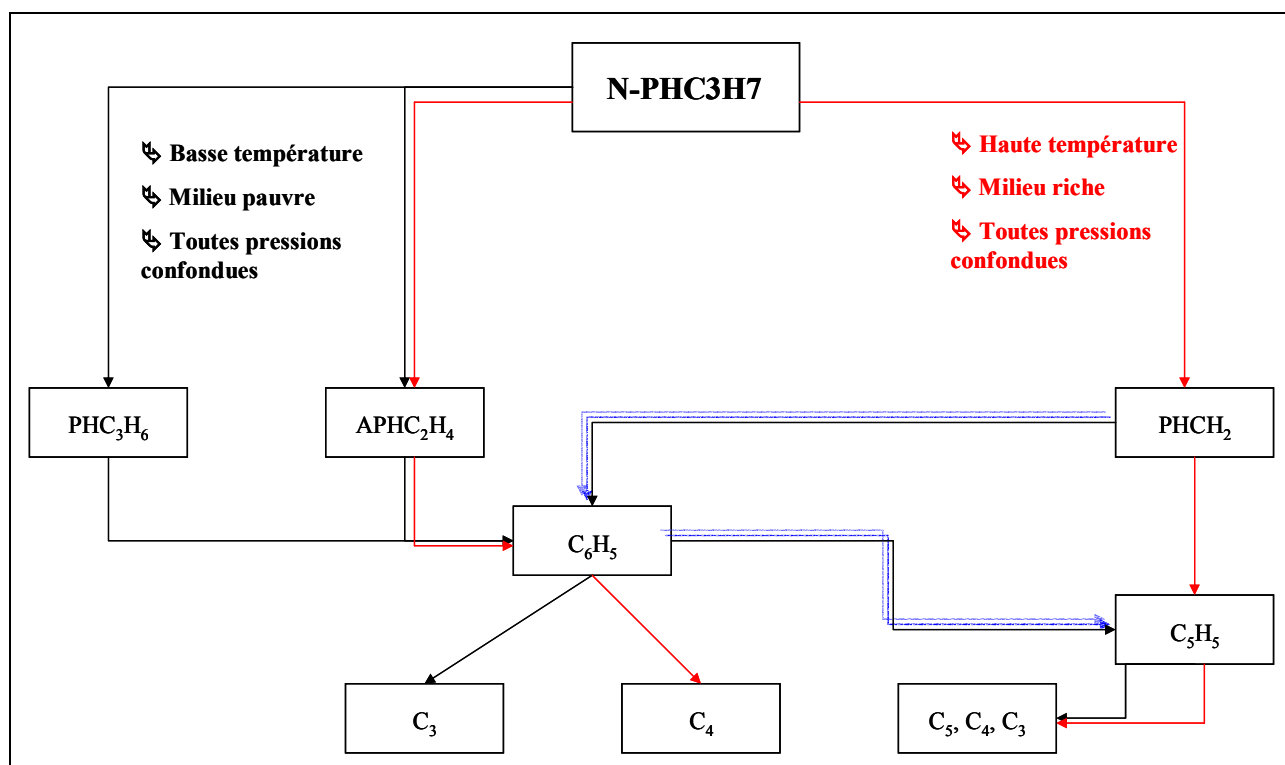


Figure IV-10 : Diagramme de synthèse des flux atomiques pour le n-propylbenzène.

Ainsi que pour le n-décane, l'influence de la variation de pression est peu marquée, notamment pour les réactions correspondant à un fort flux de carbone (> à environ 30%). Mais, pour certaines autres caractérisées par un très faible flux (< à environ 5%), l'augmentation de ce paramètre tend à accentuer leur importance. Ainsi, en milieu pauvre et à 900K, citons la réaction *toluène* → *phényle*, dont le flux passe de 4% à 14% lorsque la pression varie de 1 à 10 bars. La réaction (*PHCH<sub>2</sub>*) → *C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>* voit, elle aussi, sa valeur croître

de 5% à 10%. A l'inverse, certaines autres réactions caractérisées par un flux intermédiaire (entre 5 et 20%), telles *benzyle* → (*PHCH2OH*, *PHHCO*), voient leurs valeurs de flux diminuer de moitié ou plus.

#### IV-2.1.3. Le n-propylcyclohexane

Des 3 réactifs initiaux, le n-propylcyclohexane est le seul composé qui ne possède pas de voies réactionnelles majoritaires dominantes. En effet, seules les réactions avec les radicaux H, O, OH, HO<sub>2</sub>, ..., formant les composés cyclohexyl-propyles (EC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) et (FC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) ont des flux supérieurs à 10%. Les valeurs de ces flux restent, malgré tout, très proches de celles relevées pour les autres chemins de décomposition du réactif initial (figure IV-11). Nous avons dû diminuer le seuil sur C, H et O à 5% pour mettre en évidence l'effet de variations de pression, richesse et température d'entrée.

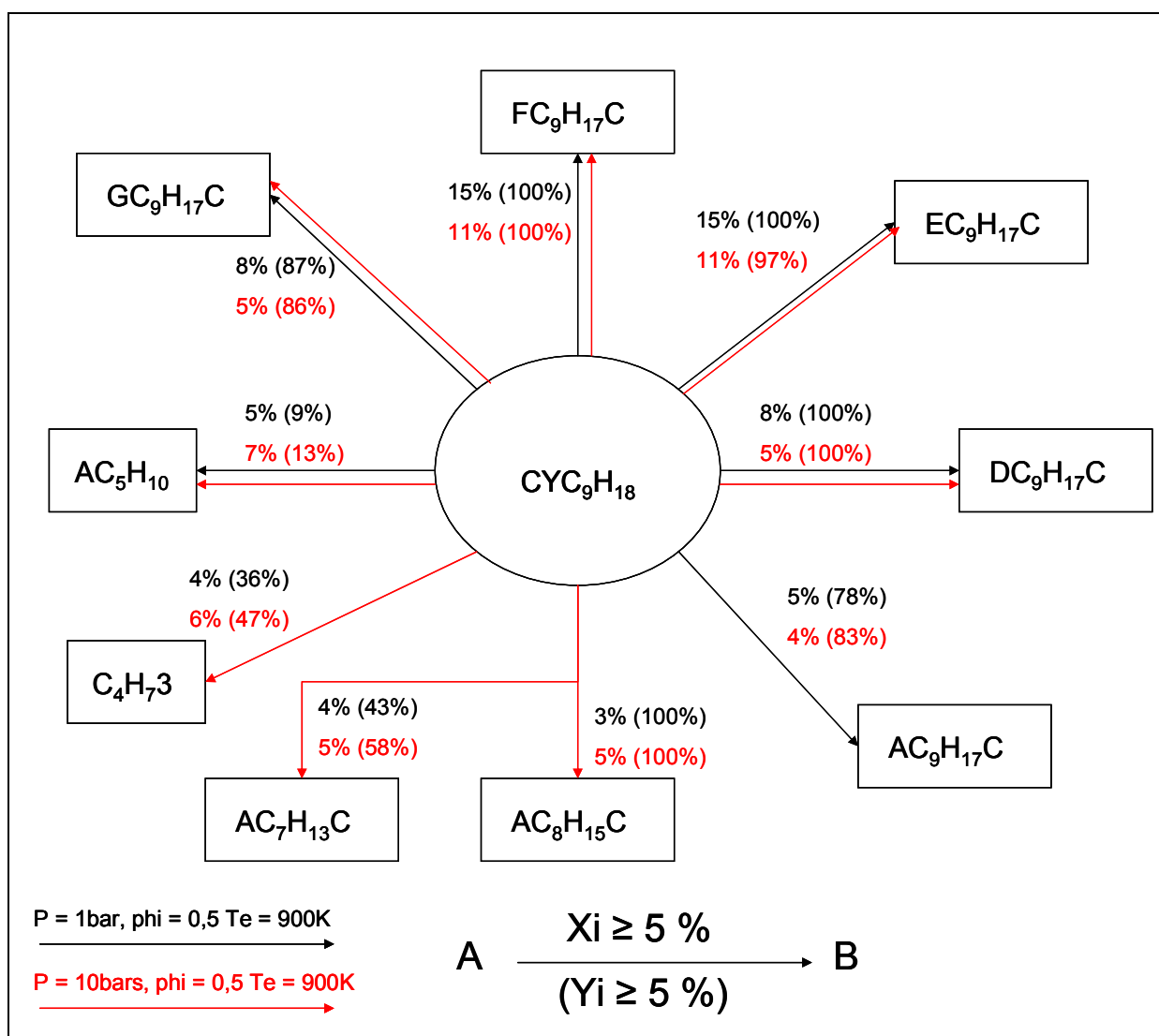


Figure IV-11 : Diagramme de synthèse des flux atomiques pour le n-propylcyclohexane.

En milieu pauvre, ce composé forme principalement les radicaux cyclohexyl-propyles ( $C_9H_{17}C$ ) (avec un flux de 5% à 15% pour chacun des 7 radicaux formés), alors qu'en milieu riche ce dernier se décompose essentiellement, en cyclohexyl-méthyle ( $AC_7H_{13}C$ ) et cyclohexyl-éthyle ( $AC_8H_{15}C$ ) (flux voisin de 10%, contre moins de 1% pour les ( $C_9H_{17}C$ )). Ces composés seront ultérieurement dégradés en espèces naphthéniques à petits nombres de carbone : cyclohexyle ( $CyC_6H_{11}$ ), cyclopentène ( $CyC_5H_8$ ), cyclopentyle ( $CyC_5H_7$ ), cyclopentadiène (CPD), ... A basse température et faible richesse, le cyclopentadiène (formule brute  $C_5H_6$ ) peut se révéler important lors de la formation du cyclopentadiényle,  $C_5H_5$  (espèce clé de la décomposition du n-propylbenzène). En effet, dans ces conditions, la réaction  $C_5H_6 \rightarrow C_5H_5$  possède un flux de C de l'ordre de 10%.

Globalement, on constate qu'une augmentation de la richesse provoque l'arrachement d'un H ou du groupement alkyle de la molécule initiale ( $CyC_9H_{18}$ ). En revanche, l'augmentation de la température semble favoriser préférentiellement l'ouverture du cycle pour former des fragments, tels que  $C_2H_4$ ,  $C_3H_6$ ,  $NC_3H_7$ ,  $C_4H_7$  (1-butyl-3ène) et  $1-C_5H_{10}$ .

#### IV-2.2. Espèces conservées : mécanisme spécifique

Grâce aux études précédentes, nous pouvons décrire l'influence de la pression, de la richesse et de la température d'entrée sur la chimie de la combustion de chacun des 3 réactifs, c'est-à-dire sur la nature des espèces et des voies majoritaires. L'utilisation de conditions spécifiques, où l'un des paramètres est fixé tandis que les 2 autres varient, va nous permettre de préciser la répartition des espèces à conserver, lorsqu'on étend le domaine paramétrique. Nous avons choisi de découper celui-ci en plusieurs zones correspondant à la sélection de six points de fonctionnement :  $P = 1$  et  $10$  bars –  $\phi = 0,5$  et  $2,0$  –  $T_e = 300K$  et  $1800K$ , situés aux extrémités du domaine. Le seuil sur les flux atomiques est égal à 10% pour C, H et O et 20% pour N.

Dans le tableau IV-1 est présenté un récapitulatif de la répartition des espèces présentes dans le mécanisme détaillé, 225 au total, selon les conditions retenues pour P ou  $T_e$  ou  $\phi$ . Un premier lot contient 58 espèces communes toujours conservées, quelles que soient les conditions. Chaque ligne qui suit (51) correspond aux composés dits « spécifiques » aux 6 conditions. Leur présence est signalée par le symbole « × » (« commun » signifiant que l'espèce existe dans les 2 cas de pression, de richesse, ...). Enfin, le dernier lot rassemble les 116 espèces qui sont définitivement écartées du mécanisme.

<b>Espèces communes conservées à chacune des conditions paramétriques considérées</b>									
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> CO CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> O C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> NC <sub>10</sub> H <sub>22</sub> PHC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> CyC <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> H O OH H <sub>2</sub> O HCO CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CO C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> HCCO IC <sub>4</sub> H <sub>3</sub> NC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> PC <sub>4</sub> H <sub>9</sub> AC5H11 AC6H13 BC6H13 AC7H15 AC8H17 AC9H19 PHCH2 C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> APHC2H4 C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> C4H73 C6H1116 CyC <sub>6</sub> H <sub>11</sub> C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> OH NO HCN HNO NH <sub>2</sub> NH N CN NCO HOCN HNCO HO <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> C <sub>4</sub> H <sub>4</sub>									
<b>Espèces spécifiques à chacune des conditions paramétriques considérées</b>									
	Pression			Richesse			Température		
	Commun	1 bar	10 bars	Commun	0,5	2,0	Commun	300K	1800K
CH4	x	x	x	-	-	x	-	x	-
C2H6	x	x	x	-	-	x	-	x	-
CH3OH	x	x	x	-	x	-	-	x	-
C4H6	x	x	x	x	x	x	-	x	-
C6H6	x	x	x	x	x	x	-	x	-
TOLUEN	x	x	x	x	x	x	-	x	-
PHHCO	x	x	x	-	x	-	x	x	x
PHCH2OH	x	x	x	-	x	-	-	x	-
SCH2	x	x	x	-	-	x	x	x	x
CH	x	x	x	-	-	x	x	x	x
CH2OH	x	x	x	-	x	-	-	x	-
CH2HCO	x	x	x	-	x	-	x	x	x
C3H2	x	x	x	-	-	x	x	x	x
NC4H3	x	x	x	x	x	x	-	-	x
EC10H21	x	x	x	-	x	-	-	x	-
C6H5O	x	x	x	x	x	x	-	x	-
PHCO	x	x	x	-	x	-	x	x	x
EC9H17C	x	x	x	-	x	-	-	x	-
FC9H17C	x	x	x	-	x	-	-	x	-
NH3	x	x	x	-	-	x	-	x	-
N2O	x	x	x	-	x	-	-	x	-
H2CN	x	x	x	-	-	x	x	x	x
AC3H4	x	x	x	x	x	x	-	x	-
STYREN	x	x	x	-	x	-	-	x	-
NC4H5	x	x	x	x	x	x	-	x	-
AC10H21	-	x	-	-	x	-	-	x	-
CC10H21	x	x	x	-	x	-	-	x	-
DC10H21	x	x	x	-	x	-	-	x	-
CC9H17C	x	x	x	-	x	-	-	x	-
NNH	-	x	-	-	x	-	-	x	-
CH3CN	x	x	x	-	-	-	-	x	-
CH3O	-	-	x	-	x	-	-	x	-
APHC3H6	x	x	x	-	x	-	-	x	-
CPHC3H6	x	x	x	-	x	-	-	x	-
NO2	-	-	-	-	x	-	-	x	-
HONO	-	-	-	-	x	-	-	x	-
C2H	x	x	x	-	-	x	x	x	x
C2H2OH	-	-	x	-	-	x	-	x	-
C	x	x	x	-	-	x	-	-	x
C2O	-	-	x	-	-	-	-	x	-
OC4H6	-	x	-	-	x	-	-	x	-
DC8H17	x	x	x	x	x	x	-	x	-
BC10H21	-	x	-	-	-	-	-	x	-
BPHC3H6	-	x	-	-	x	-	-	x	-
AC9H17C	x	x	x	-	x	-	-	x	-

BC9H17C	-	x	-	-	x	-	-	x	-
DC9H17C	-	x	-	-	x	-	-	x	-
GC9H17C	-	x	-	-	x	-	-	x	-
HCNO	-	x	-	-	-	-	-	x	-
CH2CN	-	x	-	-	-	-	-	x	-
AC6H12	-	x	-	-	x	-	-	x	-
<b>Espèces communes éliminées à chacune des conditions paramétriques considérées</b>									
CH3HCO C3H8 BUTYNE C2C4H8 ACROL T2C4H8 AC5H10 T2C5H10 C2C5H10 CC7H14 AC7H14 BC7H14 AC8H16 C6H10 AC9H18 AC10H20 PHC2H5 CPD C6H5OH C14H14 NAPHT CHD13 C4H612 BUTYN2 HOC4H6 MHD CYC6H12 CYC5H8 CYC7H12 C7H1213 C7H1216 HEX1245 MC6H6 FULVENE C6H615 NC4H10 H2O2 HCCOH C2 CHOCHO CHOCO C2H3O CH3CO SC3H5 C3H3O IC3H7 TC3H5 C3H6O C3H5O C3H4O2H C3H4O C2H3CO IC4H7 C3H4OH MEALL SC4H9 IC4H5 H2C4O C4H6O2H BC5H11 CC5H11 ETHCO C5H913 C5H924 C6H1113 BC7H15 CC7H15 C7H1313 C7H1324 C7H1335 BC8H17 CC8H17 C8H1513 BC9H19 CC9H19 DC9H19 AC9H17 AC10H19 C8H1514 C8H1515 C8H1516 C8H1517 C8H1518 C5H915 BPHC2H4 C6H9 C6H9CY2 C6H7C C5H7 CYC5H7 C7H1314 C7H1331 C5H911 AC8H15C AC7H13C CC6H13 C6H1112 C6H1115 PHCH2O BPHPROPY NO3 H2NO N2H2 C2N2 NCN C5H813 PHC2H CYC6H10 CYC8H14 C2H4O C2H4O2H C4H C4H5O DC7H15 C5H5O13 EC9H19									

**Tableau IV-1 :** Répartition de toutes les espèces dans le mécanisme selon les conditions retenues.

L'examen de ce tableau confirme les grandes tendances du paragraphe précédent. En effet, les radicaux paraffiniques (de 1-C<sub>9</sub>H<sub>19</sub> à 1-C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>) provenant des réactions d'amorçage du n-décane, ainsi que les composés radicalaires aromatiques (APHC2H4, PHCH2, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> et C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>) issus de la décomposition du n-propylbenzène, sont conservés quelles que soient les conditions paramétriques. Pour la partie naphtéinique, les espèces 1-butyl-3ène (C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>3), 1-hexèn-6yle (C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>16) et cyclohexyle (CyC<sub>6</sub>H<sub>11</sub>) sont communes aux 6 conditions. Les tous premiers radicaux formés par un arrachement de H sur la molécule : (PHC3H6) pour le n-propylbenzène, (C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>) pour le n-décane et (C<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) pour le n-propylcyclohexane sont spécifiquement conservés à basse température et en milieu pauvre. Les composés aromatiques oxygénés (PHHCO, ...), le benzène et le toluène sont, pour leur part, présents à richesse faible quelle que soit la température d'entrée. De plus, l'étude des mécanismes spécifiques permet, de mieux apprécier le cheminement parfois complexe qui mène à la formation d'espèces à petit nombre de carbone. Parmi celles-ci, on peut citer les CH<sub>i</sub>, comme CH<sub>4</sub> qui est conservé en milieu riche et basse température (idem pour C), ou comme SCH<sub>2</sub> et CH qui n'existent qu'en milieu riche sur tout le domaine de température.

### IV-2.3. Elaboration du mécanisme général

Ainsi, l'utilisation des mécanismes spécifiques apportent un complément d'informations (répartition des espèces suivant les conditions) par rapport aux modèles locaux (importance des voies réactionnelles empruntées pour les espèces conservées), et permet de mieux appréhender les phénomènes pris en compte pour simuler la combustion des réactifs à l'aide

du mécanisme général. Ce dernier va regrouper l'ensemble des résultats fournis par les mécanismes locaux et/ou spécifiques.

#### IV-2.3.1. Influence des seuils choisis pour les flux atomiques

L'étude de différents seuils, en dessous desquels les flux atomiques de C, H, O et N sont considérés comme négligeables, nous a permis d'élaborer un mécanisme squelettique présentant à la fois un taux de réduction, un gain en temps de calcul et des qualités de prédiction intéressantes. Les seuils choisis varient de 10% à 30% pour C, H, O et de 20% à 40% pour N avec un pas de 5 points. Le tableau IV-2 présente  $GC_{moy}$ , le gain en temps de calcul moyen, %P, le pourcentage de prédictivité,  $Er$ , le critère de sélection de mécanisme, et le nombre d'espèces et de réactions conservées pour chacun des couples de seuils choisis. Les résultats obtenus avec les seuils 25% et 30% sur les atomes C, H et O ont été écartés en raison de leur médiocre qualité de prédiction (les profils de plus de la moitié des espèces sont mal reproduits).

Seuils (%) sur les		Mécanisme après les flux			Nombre	
flux CHO	flux N	$GC_{moy}$	%P	$Er$	espèces	Réactions
10	20	2,9	84,5	2,40	109	1644
10	25	3,0	84,2	2,50	107	1622
10	30	2,9	84,2	2,48	106	1616
<b>10</b>	<b>35</b>	<b>3,1</b>	<b>84,1</b>	<b>2,59</b>	105	1598
10	40	3,0	84,2	2,55	105	1598
15	20	3,7	79,6	2,97	93	1350
15	25	3,8	79,5	3,05	91	1328
15	30	4,0	79,5	3,15	89	1304
<b>15</b>	<b>35</b>	<b>4,0</b>	<b>79,5</b>	<b>3,15</b>	89	1304
15	40	4,0	79,5	3,15	89	1304
20	20	4,2	63,2	2,63	80	1060
20	25	4,2	63,8	2,66	78	1038
<b>20</b>	<b>30</b>	<b>4,5</b>	<b>63,8</b>	<b>2,88</b>	77	1032
20	35	4,3	63,8	2,74	76	1014
20	40	4,4	63,8	2,80	76	1014
Mécanisme détaillé initial					225	3493

**Tableau IV-2 :** Influence de la variation des seuils des flux atomiques sur la rapidité, la précision et le taux de réduction du mécanisme.

L'examen de ce tableau montre que la valeur du seuil sur l'azote atomique a une influence modeste sur le taux de réduction (pour un seuil sur C, H, O identique) : 4 espèces azotées seulement sont écartées lorsque le seuil passe de 20% à 40%. De même, le  $GC_{moy}$  et le

%P subissent de faibles variations : respectivement une augmentation de 6% et une diminution de moins de 1%.

Par contre, pour un même seuil sur N, l'influence du seuil sur les atomes C, H et O est beaucoup plus significative. Ainsi, en passant de 10% à 20% (seuil sur N = 20%, par exemple) le gain en temps de calcul croît de 2,9 à 4,2, tandis que la prédictivité décroît de 84,5% à 63,2%. Dans ce cas, cela correspond à l'élimination de 29 espèces hydrocarbonées (répertoriées dans la première colonne du tableau IV-3 (16 + 13 espèces)).

<b>Espèces conservées pour les seuils 10/20</b>						
H2 O2 CO CO2 CH4 C2H6 CH2O C2H2 C2H4 C3H6 CH3OH AC3H4 C4H4 C4H6 C4H2 PC3H4 C4H8 C6H6 C AC6H12 NC10H22 PHC3H7 TOLUEN STYREN PHHCO PHCH2OH CYC9H18 N2 H O OH HO2 H2O HCO CH3 SCH2 C2H5 CH2 CH CH3O CH2OH C3H3 CH2CO C2H3 CH2HCO C2H HCCO IC4H3 C2H2OH C2O NC3H7 AC3H5 C3H2 NC4H3 PC4H9 NC4H5 OC4H6 AC5H11 AC6H13 BC6H13 AC7H15 AC8H17 DC8H17 AC9H19 AC10H21 BC10H21 CC10H21 DC10H21 EC10H21 C4H73 C6H1116 APHC3H6 BPHC3H6 CPHC3H6 PHCH2 C6H5 APHC2H4 C6H5O C5H5 C5H4OH C5H4O PHCO CYC6H11 AC9H17C BC9H17C CC9H17C DC9H17C EC9H17C FC9H17C GC9H17C NO HCN NH3 N2O NO2 HNO HONO H2CN NNH NH2 NH N CN NCO HOCN HCNO HNCO CH3CN CH2CN ( <b>109 espèces</b> )						
<b>Espèces éliminées</b>						
<b>Seuil Sur C, H et O</b>	<b>Seuil sur N</b>					
		<b>20</b>	<b>25</b>	<b>30</b>	<b>35</b>	<b>40</b>
<b>10</b>		-	CH2CN HCNO (2 espèces) = 10/25	CH2CN HCNO CH3CN (3 espèces) = 10/30	CH2CN HCNO CH3CN NH3 (4 espèces) = 10/35	CH2CN HCNO CH3CN NH3 (4 espèces) = 10/40
<b>15</b>		C4H8 C AC6H12 C2O OC4H6 DC8H17 AC9H19 BC10H21 C4H73 C6H1116 BPHC3H6 CYC6H11 AC9H17C BC9H17C DC9H17C GC9H17C (16 espèces) = 15/20	10/25 + 15/20 (18 espèces) = 15/25	NH3 + 10/30 + 15/20 (20 espèces) = 15/30	10/35 + 15/20 (20 espèces) = 15/35	10/40 + 15/20 (20 espèces) = 15/40
<b>20</b>		AC3H4 STYREN CH CH3O C2H2OH NC4H3 AC5H11 BC6H13 AC7H15 CC10H21 DC10H21 CPHC3H6 CC9H17C + 15/20 (29 espèces) = 20/20	15/25 + 20/20 (31 espèces) = 20/25	10/30 + 15/20 + 20/20 (32 espèces) = 20/30	15/35 + 20/20 (33 espèces) = 20/35	15/40 + 20/20 (33 espèces) = 20/40
<b>25</b>	<b>Résultats écartés en raison des mauvaises qualités de prédiction de ces modèles</b>					
<b>30</b>						

**Tableau IV-3 :** Espèces éliminées en fonction des seuils sur les flux atomiques par rapport au mécanisme correspondant aux seuils 10/20.

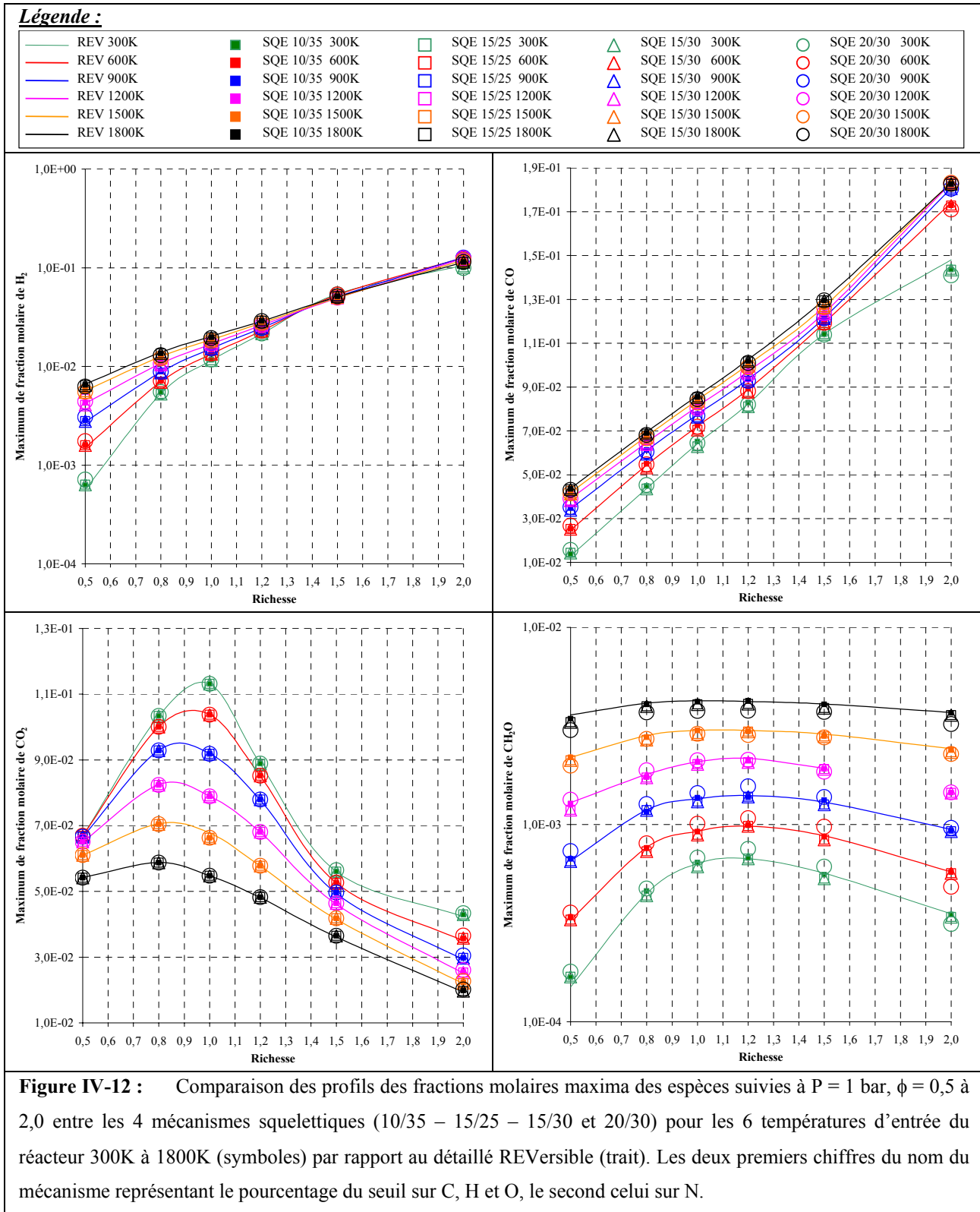
La valeur maximale du critère de sélection *Er* permet d'identifier les mécanismes squelettiques potentiellement meilleurs en fonction des seuils. L'évolution de ce critère présente un optimum pour un seuil de coupure (sur C, H, O) voisin de 15%. Pour cette valeur, les mécanismes (appelés 15/25 ou 15/30 ...), correspondant à des seuils sur N égaux

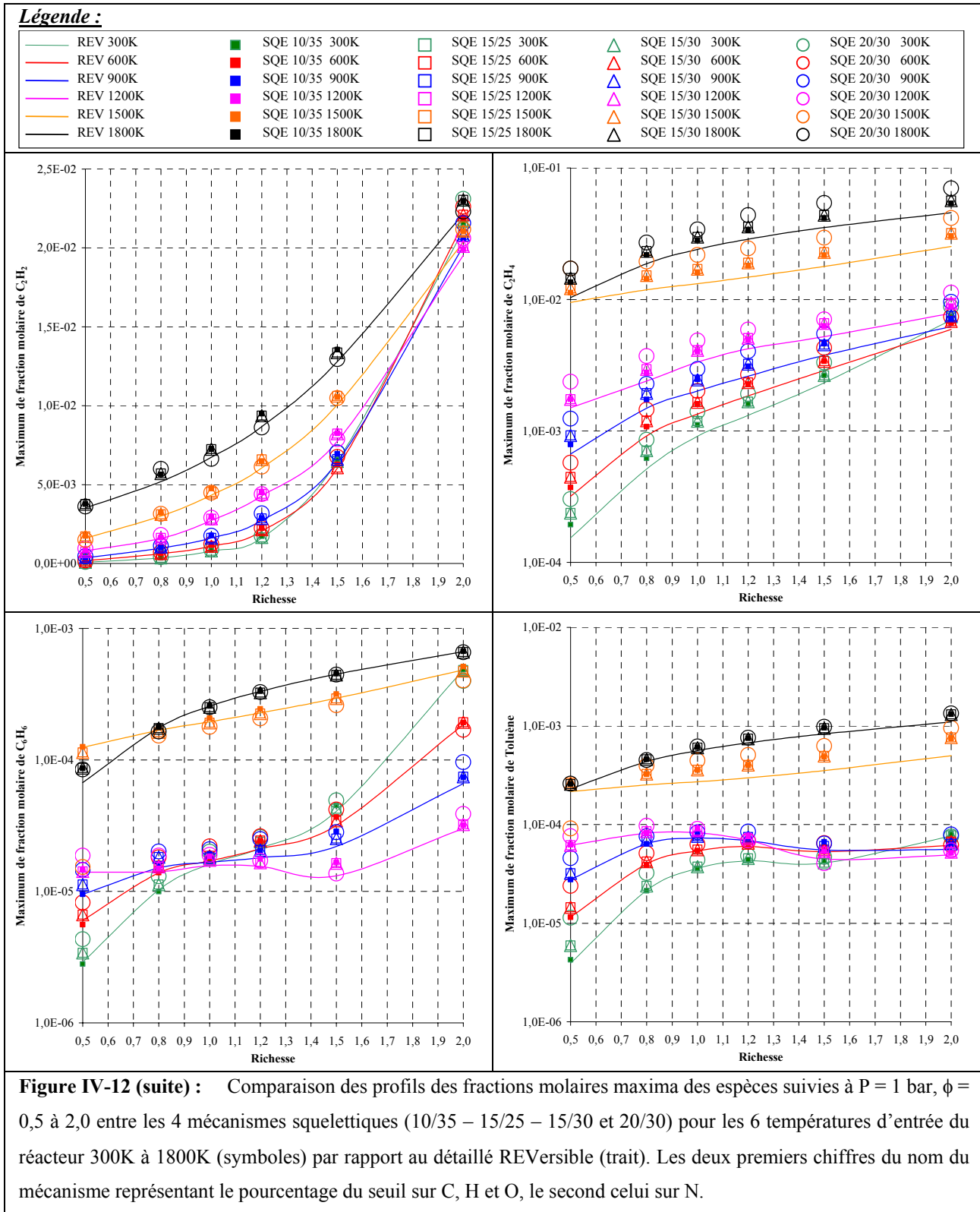


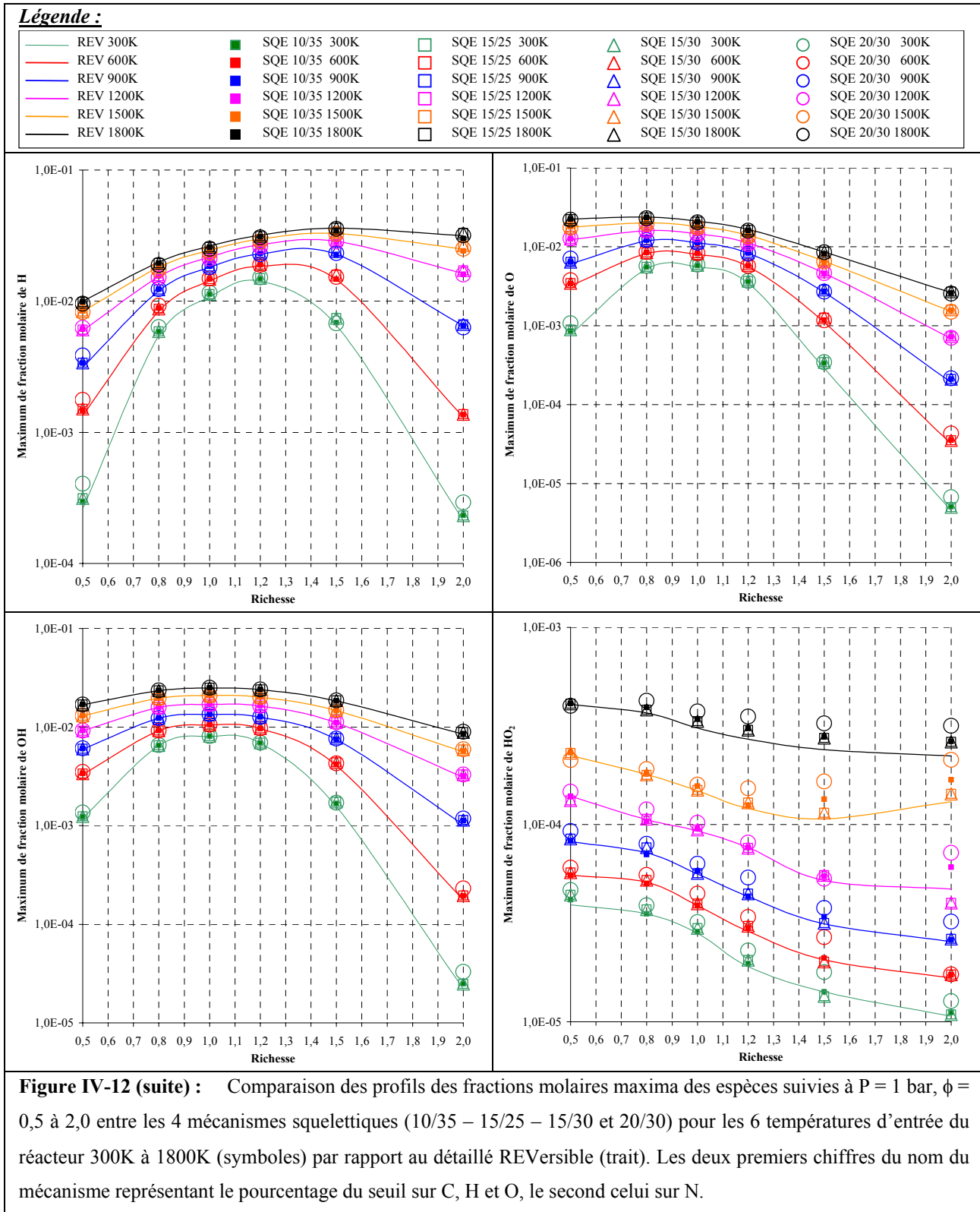
respectivement à 25%, 30% et à 35%, semblent donner des résultats intéressants sur le gain en temps de calcul et la prédictivité.

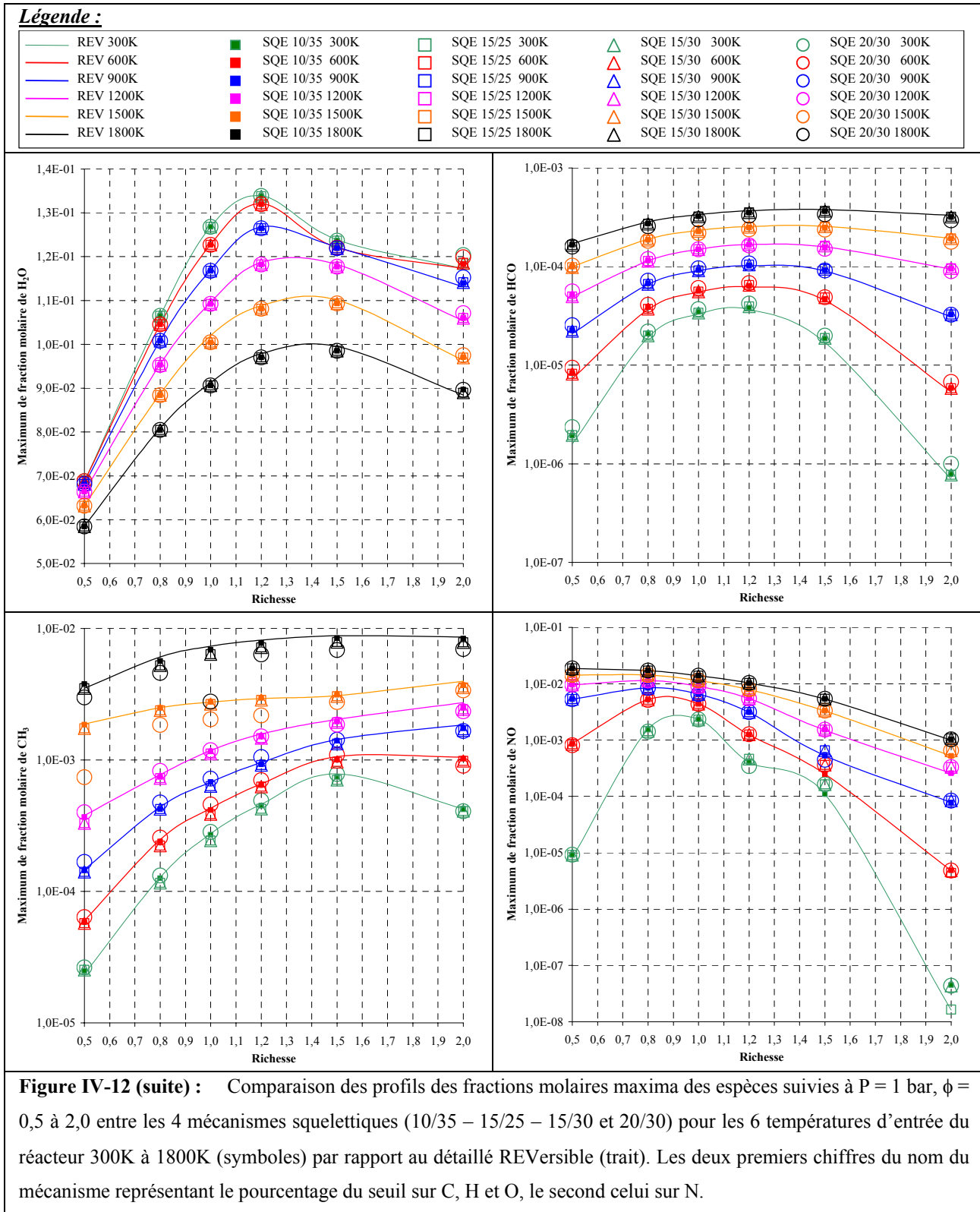
#### IV-2.3.2. Résultats

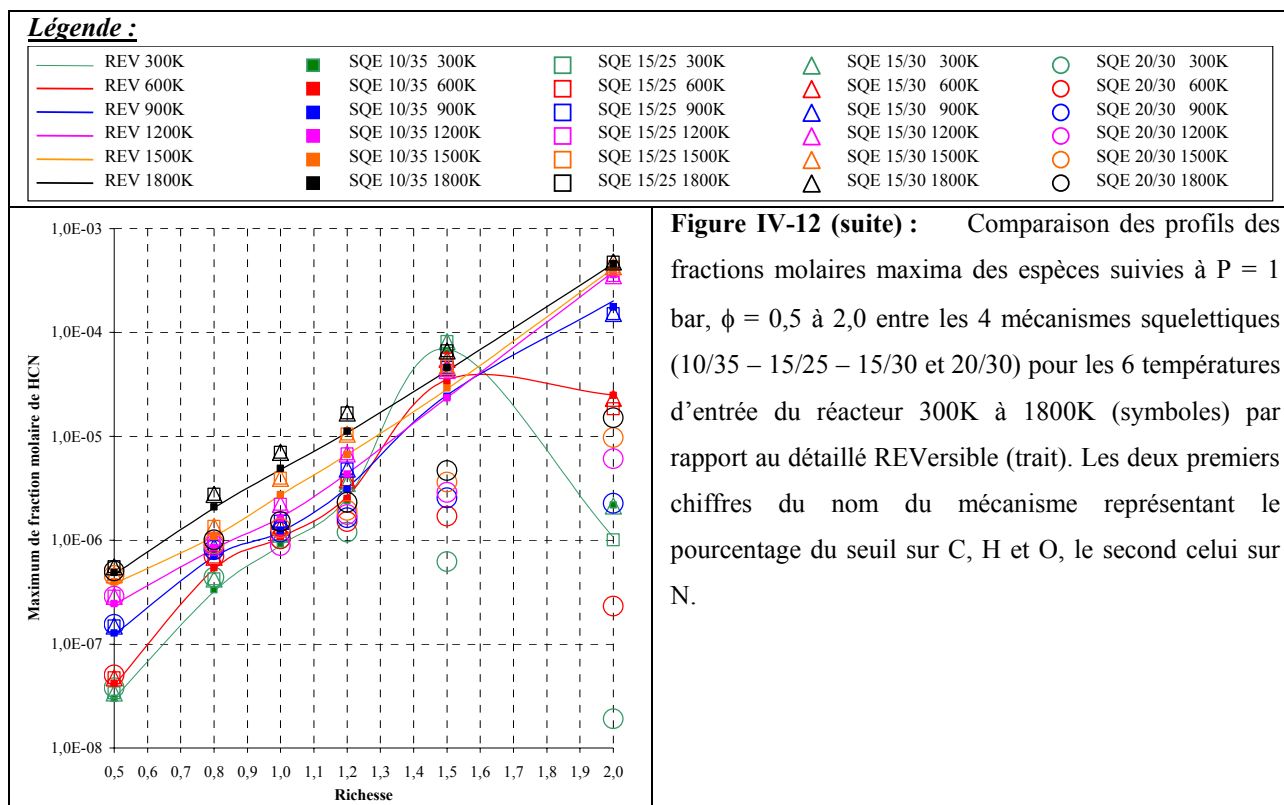
Une bonne adéquation entre les profils d'espèces est observée pour 4 mécanismes squelettiques parmi les 15 : 10/35 – 15/25 – 15/30 – 20/20, pour lesquels l'un des 3 critères [ $GC_{moy}$  / %P /  $Er$ ] est fort (figure IV-12). Le mécanisme 10/35 (3 critères : 3,1 / 84,1% / 2,59) présentant une prédictivité élevée, reproduit bien sans dépasser la marge d'erreur imposée (10%) sur l'ensemble des espèces (hormis  $C_2H_4$ ). Les deux mécanismes suivants, 15/25 et 15/30 (3 critères :  $\sim 4$  /  $\sim 80\%$  /  $\sim 3,1$ ), pour lesquels  $GC_{moy}$  et  $Er$  augmentent tandis que la prédictivité décroît légèrement, conduisent à des écarts plus marqués sur certains profils, comme  $CH_2O$ ,  $HO_2$ ,  $C_6H_6$ , toluène, NO et  $CH_3$ . Cependant, ces écarts n'excèdent pas, dans la majorité des cas, les objectifs de précision visés. Enfin, avec le mécanisme 20/30 (3 critères : 4,5 / 63,8% / 2,88, donc plus faible prédictivité), l'ensemble des profils d'espèces étudiés montrent bien évidemment une déviation plus importante. Les espèces concernées, en plus de  $C_2H_4$ , HCN et du toluène, sont le benzène, NO,  $HO_2$  et  $CH_3$ . Rappelons que généralement, les espèces les moins bien reproduites ont des fractions molaires inférieures à 10 ppm et que l'erreur observée diminue lorsque la concentration augmente. Cette remarque n'est cependant pas justifiée pour des espèces comme  $C_2H_4$  et HCN, espèces non négligeables mais dont les profils présentent souvent une erreur supérieure à 15%. Dans le paragraphe suivant, nous tenterons d'expliquer le rôle et l'importance de ces composés dans le processus de combustion.











#### IV-2.3.3. Discussion

L'analyse des diagrammes de flux de  $C_2H_4$  et HCN, pour lesquels des écarts plus importants sur les évolutions des concentrations sont observés, a été particulièrement détaillée. Un autre composé important de la combustion,  $CH_2O$ , impliqué dans les chemins réactionnels de ces deux composés, et généralement bien reproduit, a aussi été pris en compte. L'étude des voies réactionnelles conduisant au formaldéhyde nous permettra de comprendre les écarts rencontrés sur les fractions molaires d'éthylène et d'acide cyanhydrique.

Dans le mécanisme du kérosène reconstitué, nous avons dénombré environ une quarantaine de composés susceptibles de conduire à l'éthylène (les principaux sont présentés sur la figure IV-13). Parmi eux, seulement deux ou trois espèces,  $AC_3H_4$ ,  $C_2H_5$  et  $NC_3H_7$ , (repérées en rouge sur la figure), selon les conditions, correspondent à des voies réactionnelles significatives (flux de carbone supérieur à 10%). Environ 50% du flux total menant à la formation de  $C_2H_4$  est produit grâce aux réactions consommant ces 3 composés. D'autres espèces,  $C_3H_6$ ,  $PC_4H_9$ ,  $1-C_5H_{11}$ ,  $1-C_6H_{13}$ ,  $1-C_7H_{15}$  et  $1-C_8H_{17}$ , ont un flux compris entre 5% et 10% : elles représentent, à elles seules, de 30% à 50% du flux total entrant dans l'éthylène. Le reliquat du flux « producteur » de  $C_2H_4$  (soit 15% à 20%) provient d'environ 25 espèces (dont  $1,3-C_4H_6$ ,  $C_4H_8$ ,  $PC_3H_4$ ..., avec un flux strictement inférieur à 5%). Ainsi, il

apparaît clairement que l'origine de l'éthylène est très diversifiée. Environ la moitié des chemins réactionnels participant à sa production, ont des flux inférieurs à 10%, et donc ne sont pas conservés. La disparition de ces voies, bien qu'elles soient peu importantes individuellement, provoque globalement une perte de précision sur la concentration de cette espèce. Pour s'affranchir de ce problème, il est indispensable de diminuer le seuil sur C, H, O en le passant à 5% par exemple. Cette démarche va à l'encontre de nos objectifs de réduction.

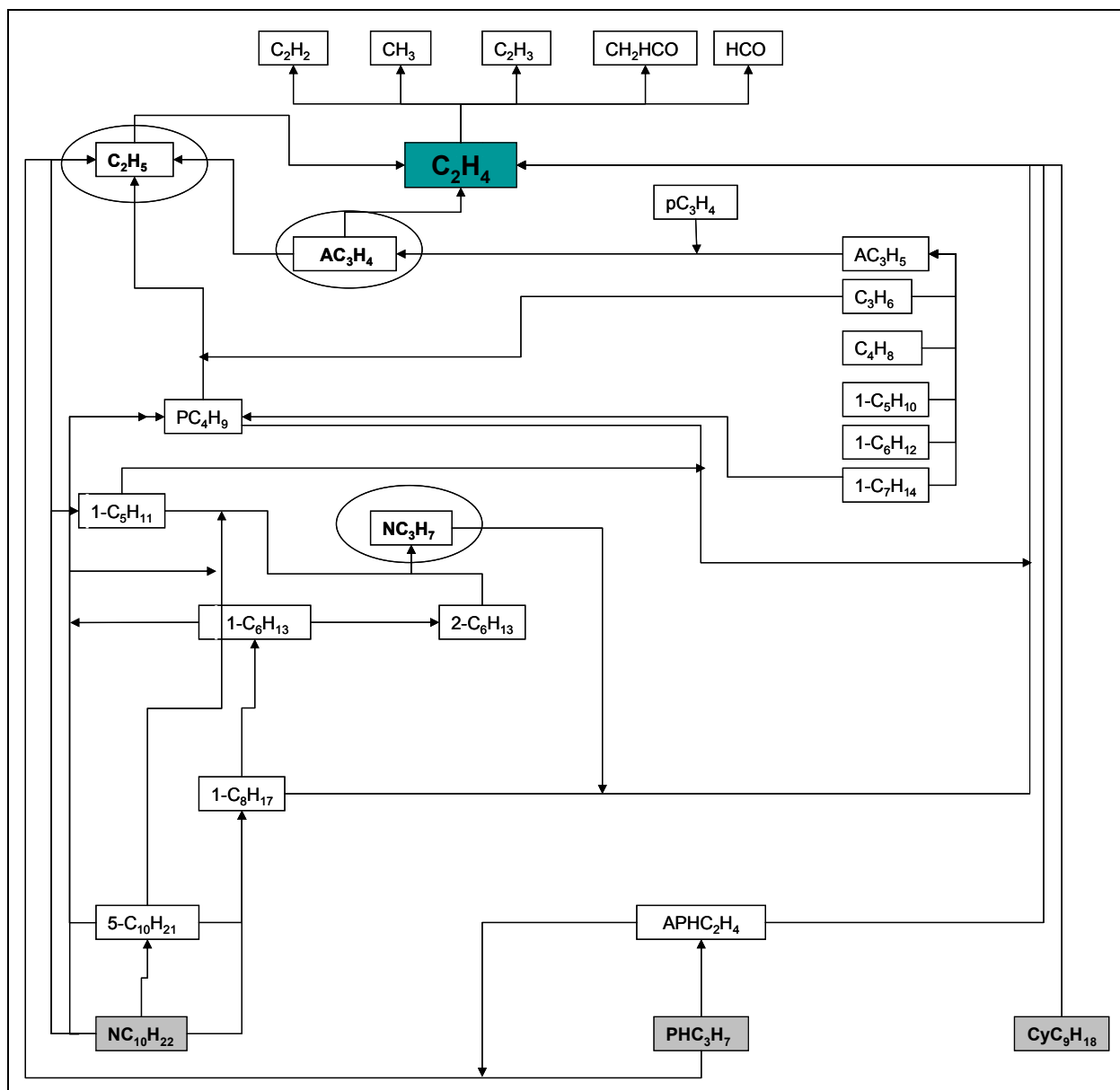


Figure IV-13 : Diagramme simplifié des flux atomiques de carbone pour l'éthylène.

Par ailleurs, il faut souligner que la représentativité des modèles détaillés, en ce qui concerne l'éthylène (du fait aussi de son rôle « carrefour » de nombreuses autres voies), est loin d'être parfaite. Différents travaux antérieurs menés au laboratoire sur le n-décane, le

n-propylbenzène ou le n-propylcyclohexane tendent à le prouver. Nous nous appuyons donc sur un mécanisme initial (notre référence) pour lequel les prévisions sur la fraction molaire sont parfois entachées d'une erreur déjà importante (jusqu'à  $\pm 100\%$  par rapport à l'expérience). Dans ces conditions, l'erreur relative de 15% à 20% apportée par notre mécanisme réduit semble tout à fait raisonnable, et même si elle provoque quelques perturbations, ne devrait pas être préjudiciable à la prédiction globale.

L'imprécision issue de la suppression de nombreuses « petites » voies, impliquées dans la formation de l'éthylène, peut se répercuter sur d'autres espèces, comme c'est le cas notamment pour HCN. L'analyse des flux atomiques de carbone transitant révèle bien le rôle important joué par  $C_2H_4$  dans la formation de HCN (figure IV-14). Le carbone constitutif de HCN provient majoritairement des radicaux hydrocarbonés HCCO et  $CH_i$  ( $i = 1$  à  $3$ ) issus des voies de décomposition de  $C_2H_4$  via  $C_2H_3$ ,  $C_2H_2$  ou  $CH_2HCO$ ,  $CH_2CO$ .

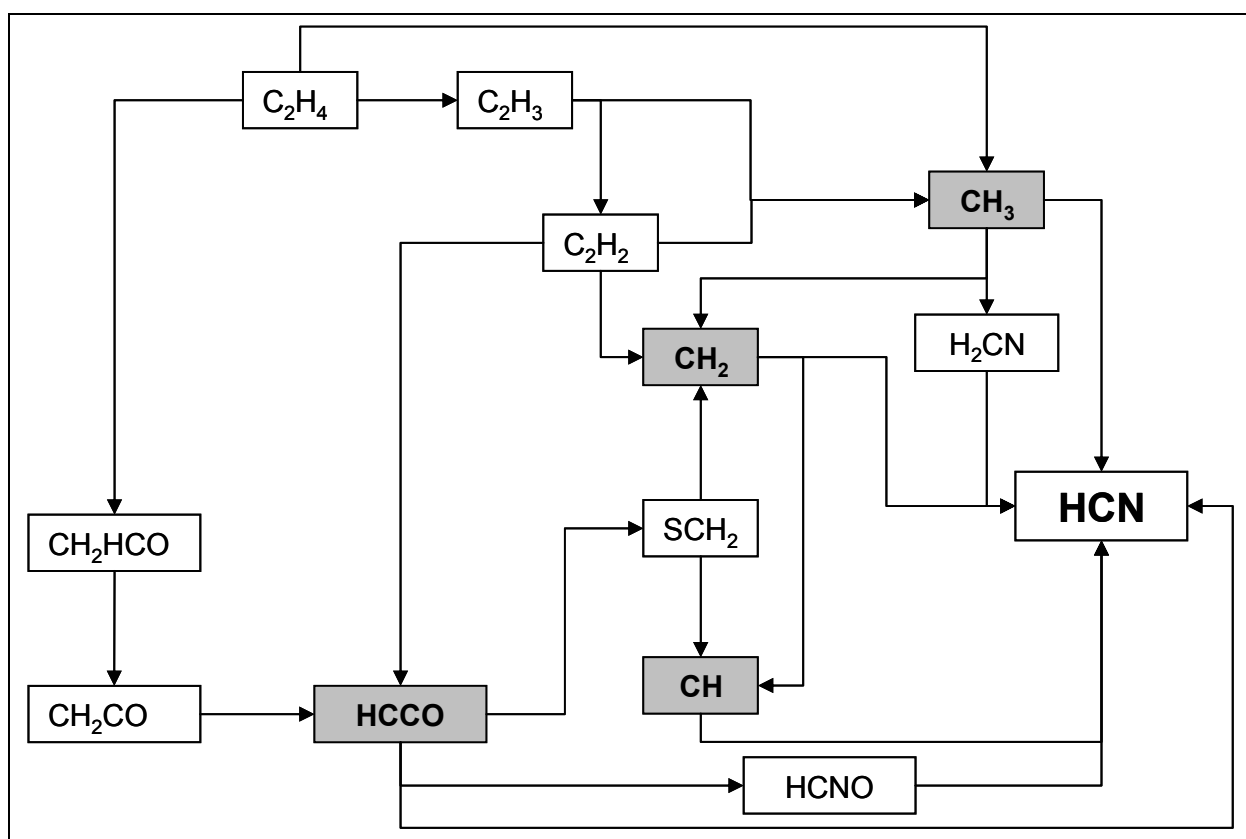


Figure IV-14 : Diagramme des flux atomiques de carbone pour HCN.

Ainsi, lorsque la somme des « petites » voies réactionnelles minoritaires écartées représente une forte proportion du flux total nécessaire à la production d'une espèce, celle-ci est moins bien prédite. A l'inverse, on constate que les espèces globalement bien reproduites ne dépendent pas d'une multitude de chemins faiblement importants. Pour corroborer notre



interprétation, l'exemple du formaldéhyde est présenté sur la figure IV-15. Cette espèce possède des voies réactionnelles qui utilisent les composés rencontrés lors de la décomposition de  $C_2H_4$  ( $CH_3$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_3$ ,  $CH_2HCO$ ) ou la formation de HCN ( $CH_2$ ,  $SCH_2$ ,  $CH_3$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_3$ ,  $CH_2HCO$ ...). Quatre espèces,  $CH_2$ ,  $CH_3$ ,  $CH_3O$  et  $CH_2OH$ , dont le flux de carbone est supérieur à 10%, contribuent essentiellement à la production de  $CH_2O$  en fournissant, à elles seules, 75% à 90% du flux total nécessaire. Le complément est fourni par une douzaine d'espèces (dont  $SCH_2$ ,  $C_2H_3$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_5$ ,  $AC_3H_4$ ,  $PC_3H_4$ ,  $C_3H_6$ ,  $C_4H_8$  ... avec un flux  $<$  à 10%). Dans ce cas, la somme des voies minoritaires écartées du mécanisme représente une faible proportion, en terme de flux nécessaire à la formation du formaldéhyde, d'où peu ou pas de perturbation sur ses profils de fractions molaires.

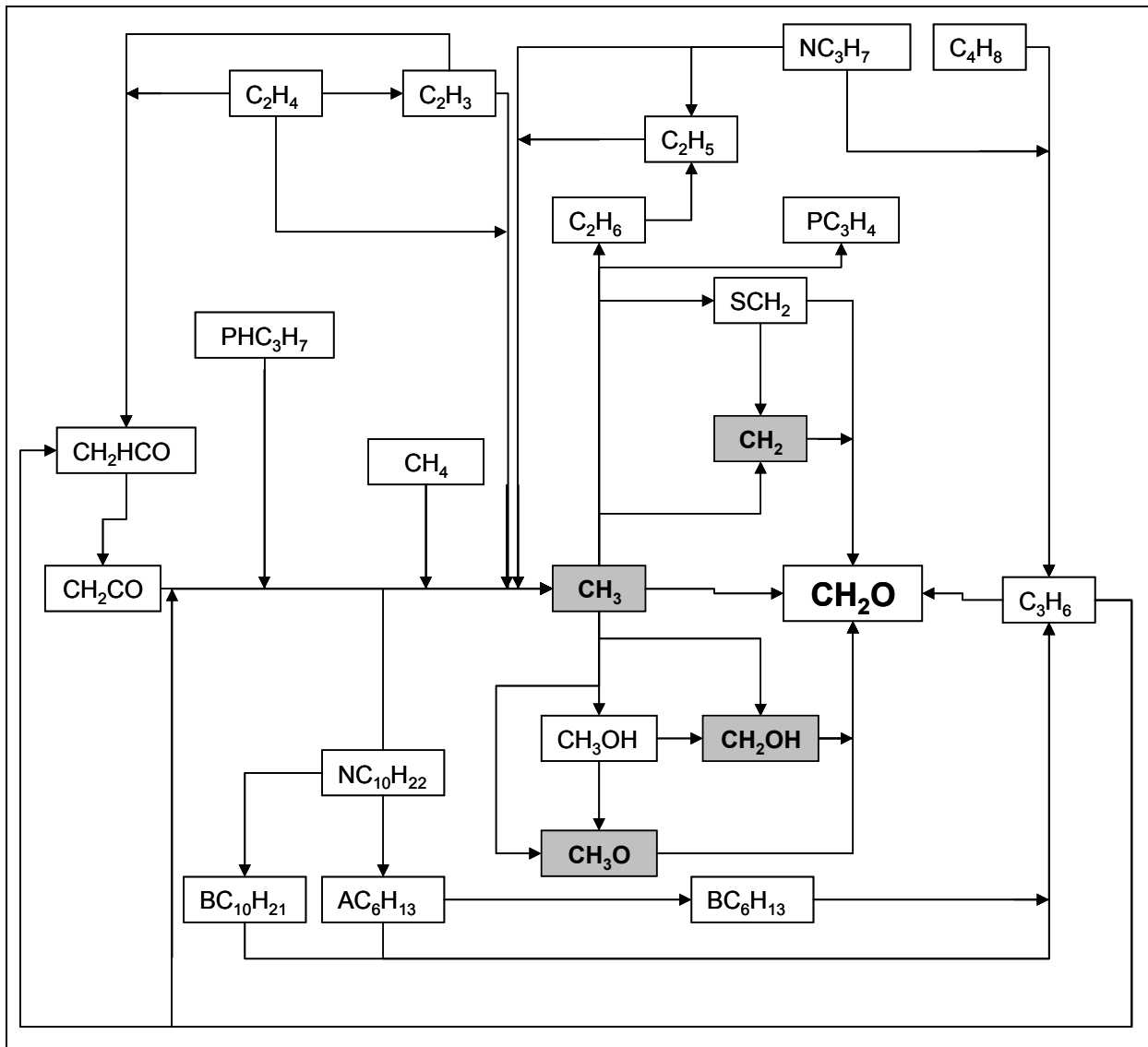


Figure IV-15 : Diagramme des flux atomiques de carbone pour le formaldéhyde.

## IV-3. Phase 2 : Analyse des composantes principales, méthode PCAF

### IV-3.1. Elimination des réactions inutiles

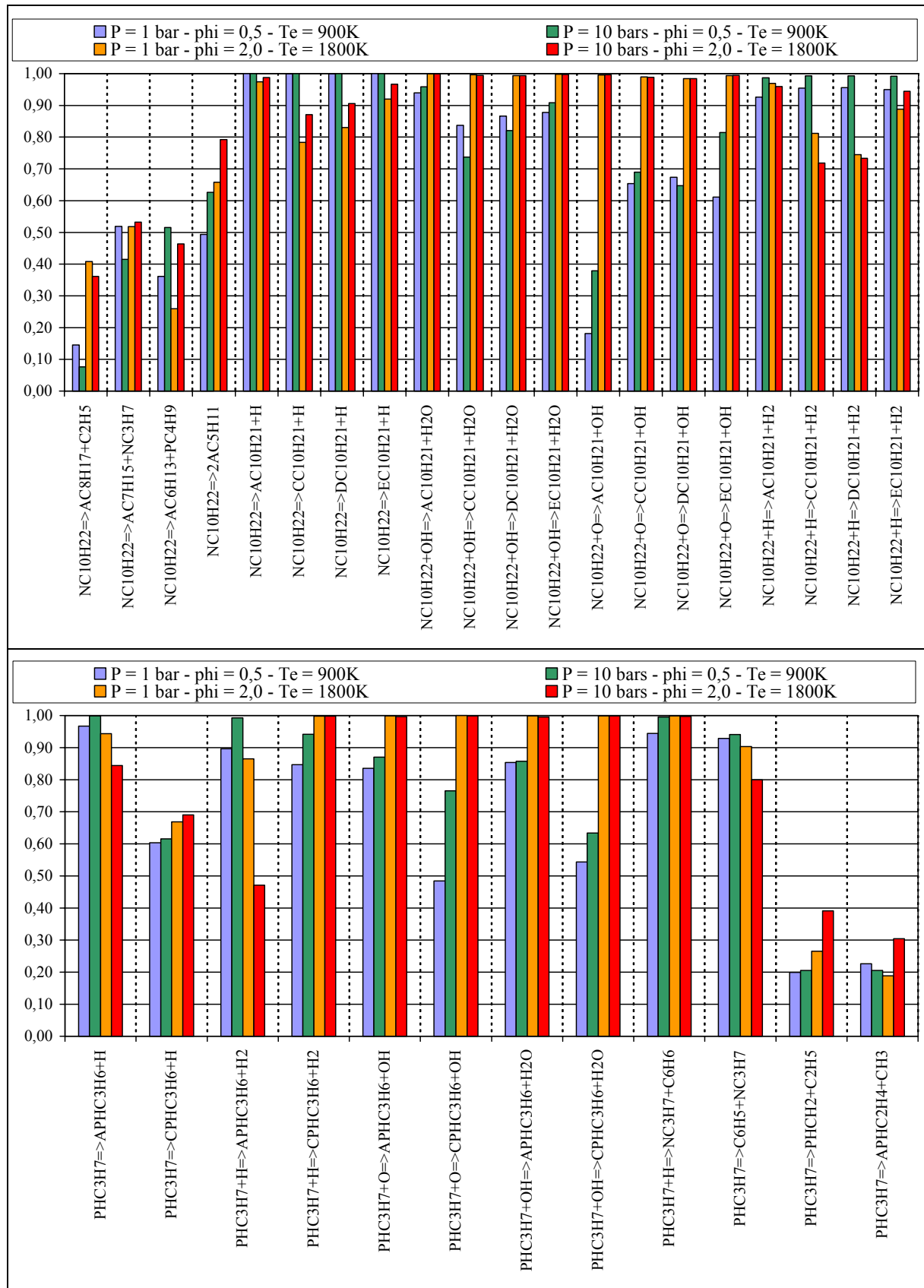
Après l'étape de simplification des espèces (obtention du premier mécanisme squelettique), la seconde étape consiste à supprimer les réactions inutiles d'une manière directe en étudiant leur sensibilité sur l'ensemble du domaine paramétrique. Cette étape s'effectue par l'Analyse des Composantes Principales de la matrice des Vitesses (PCAF). Ainsi, plus la valeur des composantes principales est proche de l'unité, moins la réaction est sensible et on peut *a priori* l'écartier sans provoquer de perturbations notables sur les résultats.

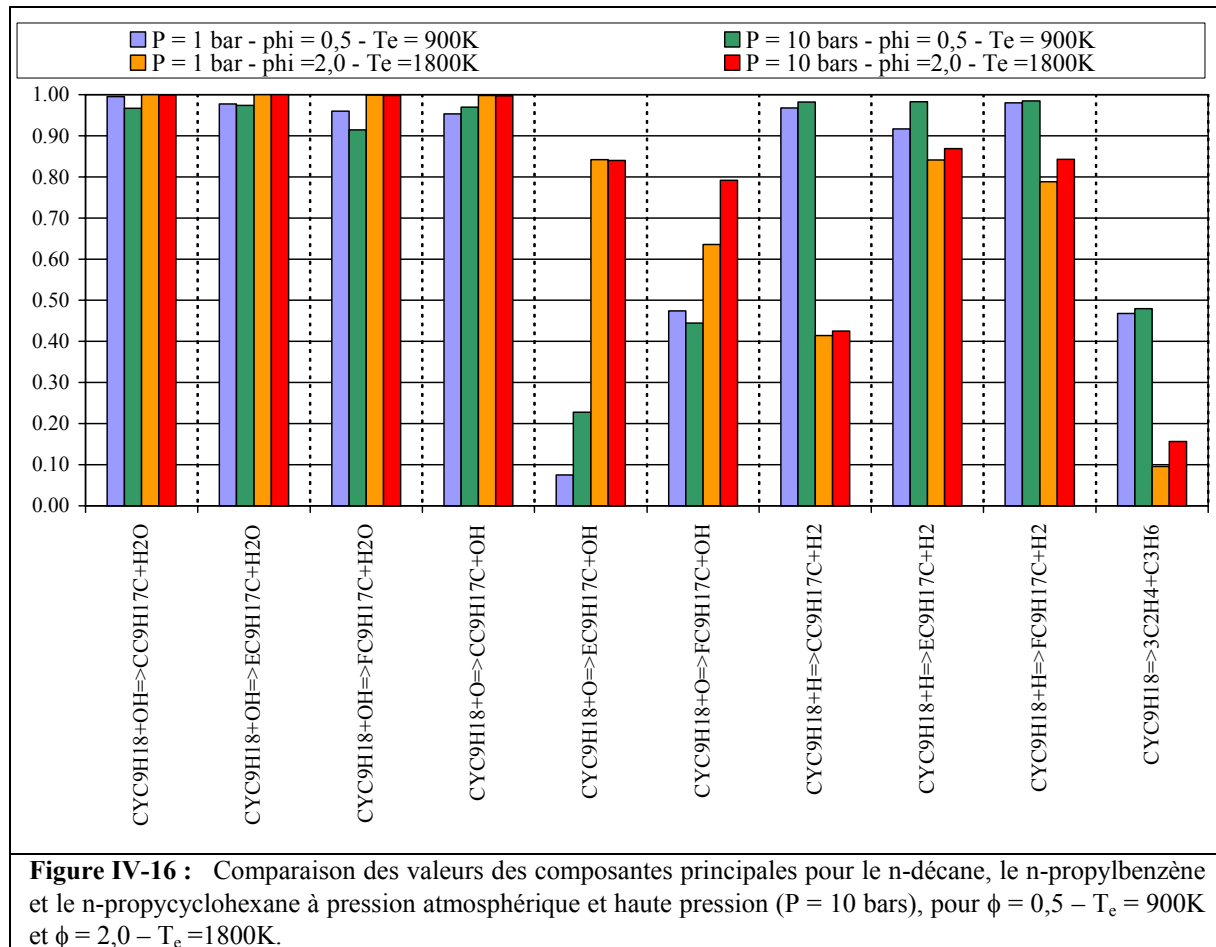
Compte tenu du nombre important de réactions en présence, il n'est pas simple d'étudier en détail l'importance de chacune d'entre elles, pour un seuil sur PCAF fixé, en fonction des conditions paramétriques. Au cours de l'établissement des différents mécanismes locaux, nous avons tenté de dégager quelques grandes tendances sur le comportement de certaines espèces (les réactifs et les tout premiers radicaux issus de leur décomposition) et les chemins réactionnels dans lesquels ces dernières interviennent.

Comme illustration, les conditions initiales suivantes :  $P = 1$  et  $10$  bars –  $\phi = 0,5$  et  $2,0$  –  $T_e = 600K$ ,  $900K$  et  $1800K$ , ont été étudiées avec un seuil sur PCAF égal à  $1$ . Toutes les réactions correspondant à des composantes principales de vecteurs propres égales à  $1$  sont donc éliminées du mécanisme réactionnel.

#### IV-3.1.1. Influence de la pression

Dans tous les cas, la pression n'apparaît pas jouer un rôle marquant sur la sensibilité des réactions (figure IV-16). Par contre, l'augmentation de richesse ou de température provoque une diminution de la sensibilité (augmentation de la valeur des composantes principales des réactions concernées). Par conséquent, seuls les effets de la variation de richesse et de température d'entrée ont été suivis dans leur intégralité.





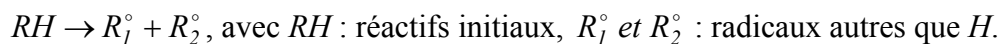
IV-3.1.2. Influence de la richesse et de la température

L'utilisation de la méthode PCAF sur le mécanisme squelettique 1 (annexe 3) permet également de classer l'importance des types principaux de réactions suivant leur niveau de sensibilité (tableau IV-4).

Type de réactions	Niveau de sensibilité
Réactions d'amorçage	<p>Sensibilité forte (Composantes principales → 0)</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p>Sensibilité faible (Composantes principales → 1)</p>
Réactions de branchement	
Réactions de métathèse	
Réactions de « terminaison »	

Tableau IV-4 : Importance des différents types de réactions de combustion

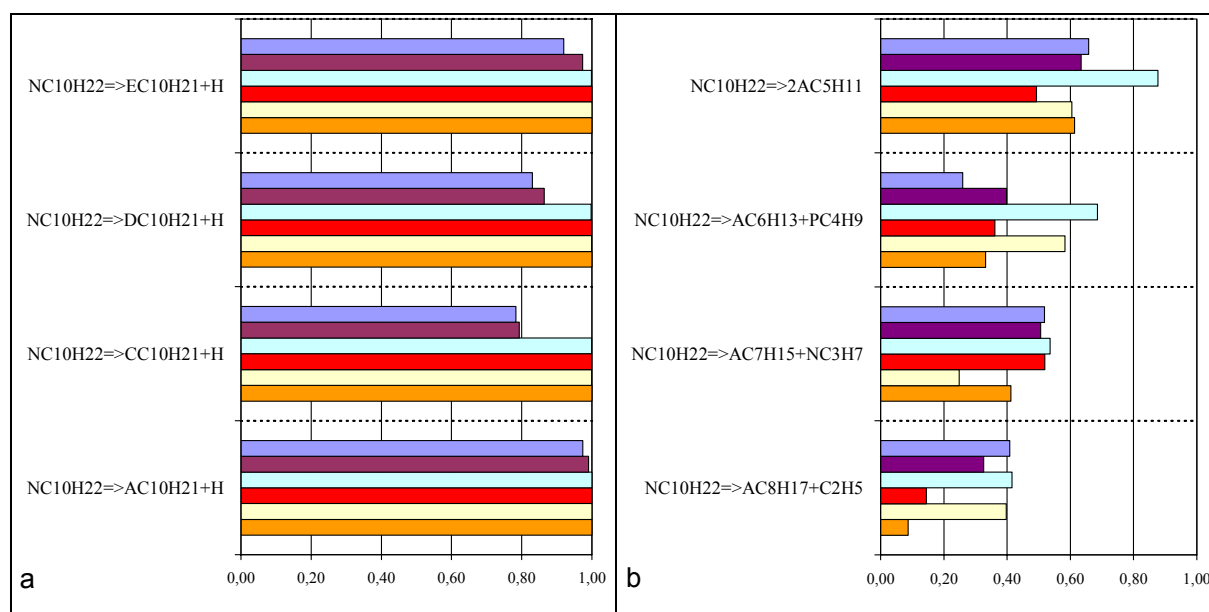
L'analyse des résultats de sensibilité indique que les réactions d'amorçage unimoléculaires sont toujours conservées sur l'ensemble du domaine paramétrique. Ce sont des réactions du type :

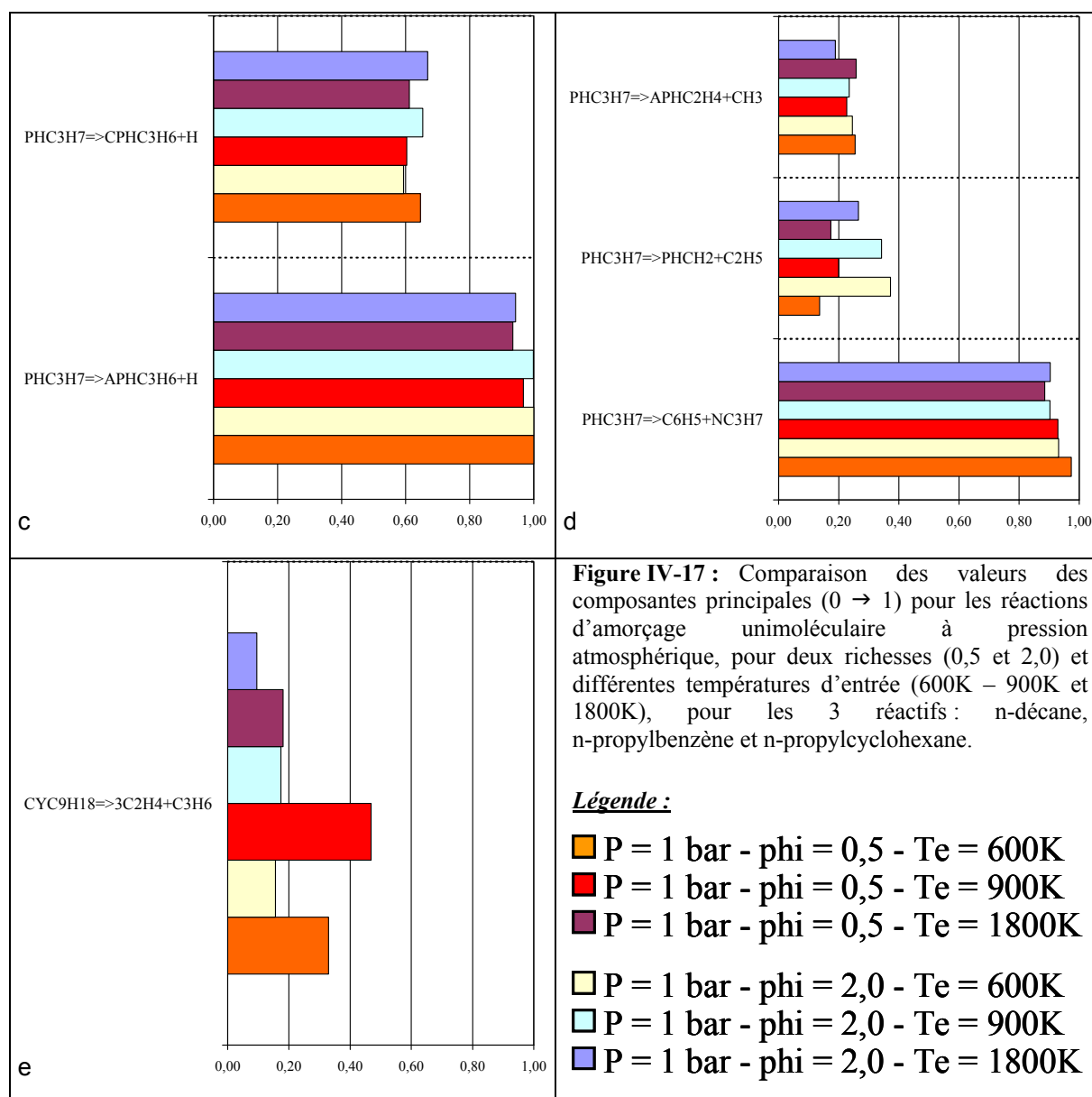


On peut citer en exemple les réactions suivantes (nomenclature non classique, correspondance en annexe 2) :

- pour le n-décane :  $NC_{10}H_{22} \rightarrow (AC8H_{17}) + C_2H_5^\circ$ ,
- pour le n-propylbenzène :  $(PHC3H7) \rightarrow (APH2H4) + CH_3^\circ$ .

Elles présentent effectivement les valeurs de composantes principales les plus faibles, valeurs généralement inférieures à 0,6 (figure IV-17, graphes b, d, e). Ce résultat confirme la prépondérance de ces réactions, dans la combustion du kérosène reconstitué, déjà soulignée au cours de l'analyse des flux atomiques.



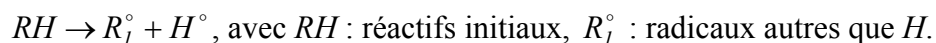


**Figure IV-17 :** Comparaison des valeurs des composantes principales (0 → 1) pour les réactions d'amorçage unimoléculaire à pression atmosphérique, pour deux richesses (0,5 et 2,0) et différentes températures d'entrée (600K – 900K et 1800K), pour les 3 réactifs : n-décane, n-propylbenzène et n-propylcyclohexane.

**Légende :**

- P = 1 bar - phi = 0,5 - Te = 600K
- P = 1 bar - phi = 0,5 - Te = 900K
- P = 1 bar - phi = 0,5 - Te = 1800K
- P = 1 bar - phi = 2,0 - Te = 600K
- P = 1 bar - phi = 2,0 - Te = 900K
- P = 1 bar - phi = 2,0 - Te = 1800K

Les réactions d'amorçage unimoléculaires, où un atome d'hydrogène est arraché de la molécule initiale, sont des réactions moins sensibles que les précédentes (valeurs des composantes principales quasiment égales à 1). Ce sont des réactions du type :



Parmi elles, citons :

- pour le n-décane :  $NC_{10}H_{22} \rightarrow (AC_{10}H_{21}) + H^\circ$ ,
- pour le n-propylbenzène :  $(PHC3H7) \rightarrow (APHC3H6) + H^\circ$

Elles sont éliminables à basse température et en milieu pauvre (figure IV-17, graphes a, c). Une réaction fait exception à cette règle générale :  $(PHC3H7) \rightarrow (CPHC3H6) + H^\circ$ , qui

demeure sensible à la température et à la richesse. Le radical propénylbenzène (CPHC3H6) est un précurseur important de formation du styrène.

Les réactions d'amorçage, faisant intervenir deux molécules pour former deux radicaux libres par transfert d'atomes (réactions du type :  $RH + O_2 \rightarrow R_1^\circ + HO_2^\circ$ ) sont globalement peu sensibles (les valeurs du niveau de sensibilité PCAF généralement supérieures au seuil de coupure choisi (0.985)), et par conséquent elles sont éliminées du mécanisme réactionnel.

Le second type de réactions, détectées comme sensibles comprend :

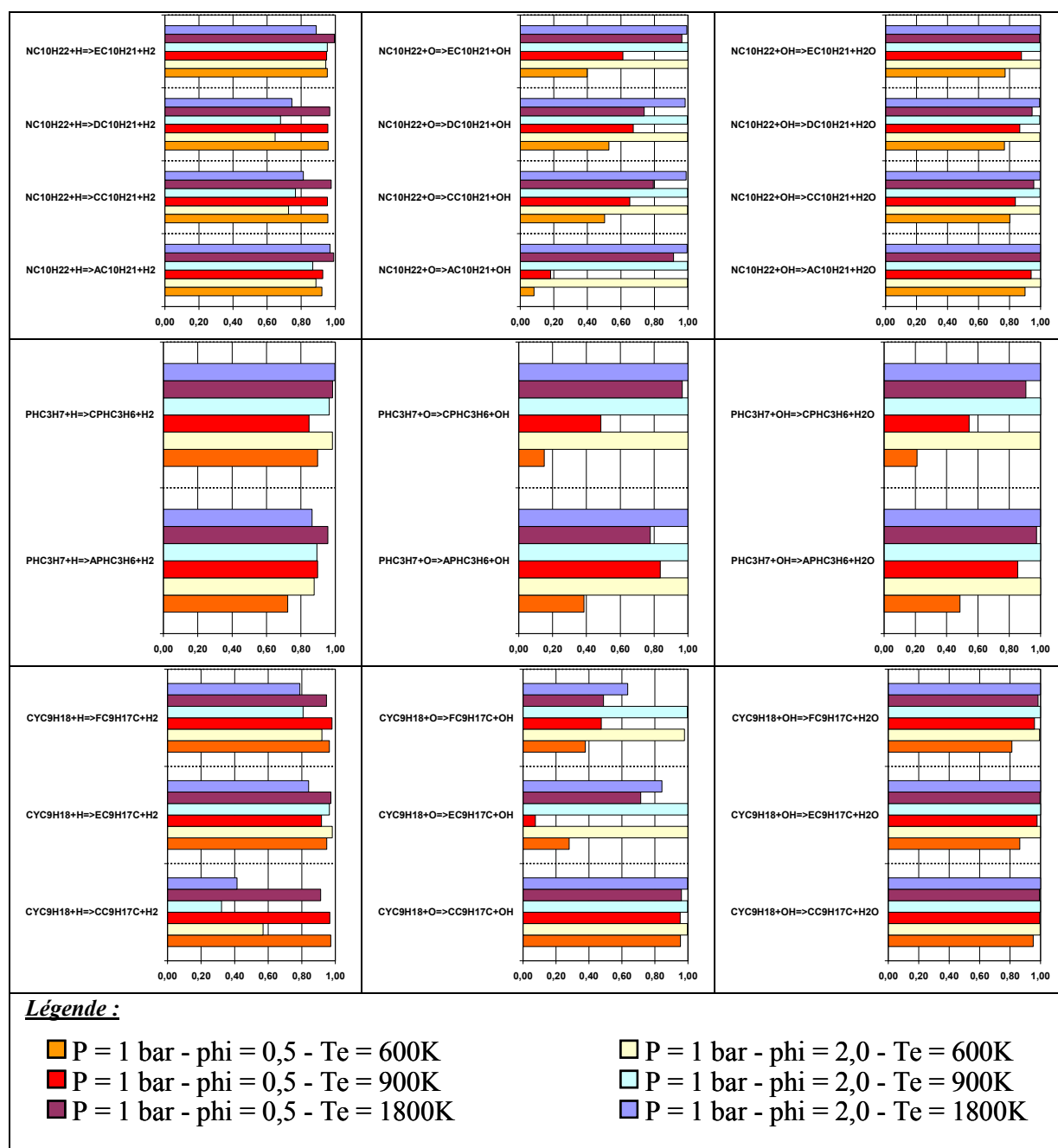
✓ des réactions de métathèse du type  $RH + X^\circ \rightarrow R_1^\circ + HX$ , avec  $HX$  : molécule stable. Par exemple :

- $NC_{10}H_{22} + OH^\circ \rightarrow (AC10H21) + H_2O$  pour le n-décane,
- $(PHC3H7) + OH^\circ \rightarrow (APHC3H6) + H_2O$  pour le n-propylbenzène.

✓ des réactions de branchements du type  $RH + X^\circ \rightarrow R_1^\circ + HX^\circ$ , avec  $HX$  : radical. Comme :

- $NC_{10}H_{22} + O^\circ \rightarrow (AC10H21) + OH^\circ$  pour le n-décane,
- $(PHC3H7) + O^\circ \rightarrow (APHC3H6) + OH^\circ$  pour le n-propylbenzène.

Dans les deux cas, ces réactions font intervenir H, O, OH, CH<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> ..., radicaux jouant un rôle primordial dans la combustion. Seules les réactions avec les radicaux H, O et OH dominent pour arracher un H de la chaîne alkyle des trois réactifs. Elles sont donc conservées, avec toutefois un niveau de sensibilité inférieur à celui des réactions d'amorçage. Dans la majorité des cas, les valeurs des composantes principales de ces réactions de métathèse ou de branchement sont comprises entre 0,5 et 0,9, et leur importance dépend des conditions paramétriques initiales (figure IV-18). En milieu pauvre et pour toutes les températures considérées, les réactions faisant intervenir le radical O sont les plus sensibles, suivies par celles avec OH et enfin celles avec H. En milieu riche, la sensibilité de ces réactions croît selon l'ordre : H, O, OH.



**Figure IV-18 :** Comparaison des valeurs des composantes principales pour les réactions de métathèse et de branchement à pression atmosphérique, pour deux richesses (0,5 et 2,0) et différentes températures d'entrée (600K – 900K et 1800K) pour les 3 réactifs : n-décane, n-propylbenzène et n-propylcyclohexane.

Les réactions « re »formant le réactif initial sont, pour leur part, écartées du mécanisme réactionnel. Ces réactions, du type  $R_1^\circ + M_1 \rightarrow R_2^\circ + RH$  (avec  $M_1$  une molécule ou un radical,  $RH$  le réactif initial et  $R_1^\circ$  et  $R_2^\circ$  des radicaux), ont des valeurs de composantes principales voisines de 1. Quelques exceptions sont cependant rencontrées, notamment en ce qui concerne les réactions avec le n-propylcyclohexane suivantes :  $(CC9H17C \text{ ou } FC9H17C)^\circ + M_1 \rightarrow (CyC9H18) + R_2^\circ$  avec respectivement  $M_1 = H_2O$ ,



OH, H<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, CH<sub>2</sub>O correspondant à R<sub>2</sub><sup>o</sup> = OH, O, H, AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>, HCO, qui peuvent devenir sensibles dans des conditions de richesse ou de température élevées. Les valeurs observées, pour les 3 températures étudiées, sont comprises entre 0,3 et 0,6. De la même manière, les réactions de terminaison (réactions du type R<sub>1</sub><sup>o</sup> + R<sub>2</sub><sup>o</sup> → RH) par recombinaison de radicaux pour « re »former le réactif initial, sont elles aussi écartées du mécanisme réactionnel sauf pour les réactions pour le n-propylbenzène : (PHCH<sub>2</sub>) + C<sub>2</sub>H<sub>5</sub><sup>o</sup> → (PHC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>) et (APHC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) + CH<sub>3</sub><sup>o</sup> → (PHC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>) et (CC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C ou FC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) + HO<sub>2</sub><sup>o</sup> → (CyC<sub>9</sub>H<sub>18</sub>) + O<sub>2</sub> pour le n-propylcyclohexane.

Les tout premiers radicaux, formés lors de la décomposition du réactif initial, sont ensuite consommés uniquement par trois types de réactions :

- *Terminaison* : (PHCH<sub>2</sub>) + H<sup>o</sup> → (TOLUEN) pour les composés aromatiques,
- *β-scission* : (PHCH<sub>2</sub>) → C<sub>4</sub>H<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>o</sup> pour les composés aromatiques ou (BC<sub>6</sub>H<sub>13</sub>) → C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> + NC<sub>3</sub>H<sub>7</sub><sup>o</sup> pour les composés aliphatiques,
- *Isomérisation* : (AC<sub>6</sub>H<sub>13</sub>) → (BC<sub>6</sub>H<sub>13</sub>) pour les composés aliphatiques ou (FC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) → (CC<sub>9</sub>H<sub>17</sub>C) pour les composés naphthéniques.

Les composés issus de ces étapes de décomposition vont, à leur tour, réagir soit avec les radicaux H, O et OH (comme c'est le cas pour (PHCH<sub>2</sub>) et les radicaux du n-propylcyclohexane), soit avec HO<sub>2</sub> (pour le radical benzyle (PHCH<sub>2</sub>) uniquement). Ces réactions sont toutes sensibles sur l'ensemble du domaine paramétrique, exception faite de (PHCH<sub>2</sub>) + HO<sub>2</sub><sup>o</sup> → toluène + O<sub>2</sub> qui est éliminée à haute température et en milieu riche. De plus dans la majorité des cas, à un stade de décomposition plus avancée des réactifs, les réactions inverses sont conservées.

#### IV-3.1.3. Synthèse

La méthode PCAF a permis d'effectuer le classement des différentes réactions selon leur sensibilité : tout d'abord les réactions d'amorçage unimoléculaire, puis les réactions de métathèse ou de branchement (avec dans l'ordre les radicaux O, OH, H en milieu pauvre, et H, O, OH en milieu riche), et enfin les réactions de terminaison. Les autres types de réactions caractérisées par une faible sensibilité sont écartés du mécanisme réactionnel.

Des résultats identiques retrouvés dans la littérature corroborent bien nos conclusions : *Ristori (2000)* pour le n-décane, *Dagaut et al. (2002)* pour le n-propylbenzène, *Ristori et al. (2001)* pour le n-propylcyclohexane. En effet, ces auteurs observent aussi une prédominance des réactions d'amorçage et une diminution de l'importance des réactions de métathèse ou de branchement du radical H, au profit de O et OH, quand la richesse et/ou la température augmentent.

### IV-3.2. Résultats

Les effets de la variation du seuil de PCAF sur le nombre de réactions conservées et le taux de réduction correspondant, pour deux mécanismes squelettiques issus de la phase 1, sont quantifiés dans le tableau IV-5.

	Mécanisme squelettique 1 : 15/25 (91 espèces)					Mécanisme squelettique 1 : 15/30 (89 espèces)				
	GC <sub>mov</sub>	%P	Er	Réactions	Tx de réd.	GC <sub>mov</sub>	%P	Er	Réactions	Tx de réd.
	mécanisme détaillé			3493	-	mécanisme détaillé			3493	-
Flux	3,8	79,5	3,05	1328	62,0%	4,0	79,5	3,15	1304	62,7%
1,000	4,92	79,3	3,90	991	71,6%	5,12	79,2	4,06	982	71,9%
0,995	6,55	78,8	5,16	748	78,6%	6,61	78,4	5,19	738	78,9%
0,990	6,66	78,6	5,23	713	79,6%	7,12	78,9	5,62	703	79,9%
<b>0,985</b>	<b>7,20</b>	<b>78,5</b>	<b>5,65</b>	<b>694</b>	<b>80,1%</b>	<b>7,32</b>	<b>78,8</b>	<b>5,76</b>	<b>680</b>	<b>80,5%</b>
0,980	7,05	78,8	5,56	680	80,5%	7,11	77,6	5,52	664	81,0%
0,975	7,19	77,6	5,58	670	80,8%	7,32	77,5	5,67	654	81,3%
0,970	7,29	75,8	5,53	657	81,2%	7,46	76,9	5,74	645	81,5%
0,965	7,29	76,5	5,57	650	81,4%	7,33	76,8	5,63	637	81,8%
0,960	7,31	76,0	5,56	642	81,6%	<b>7,74</b>	<b>76,7</b>	<b>5,93</b>	<b>632</b>	<b>81,9%</b>
0,955	7,31	76,3	5,58	634	81,8%	7,15	77,4	5,53	623	82,2%
<b>0,950</b>	<b>7,53</b>	<b>78,5</b>	<b>5,91</b>	<b>625</b>	<b>82,1%</b>	7,38	77,8	5,74	613	82,5%

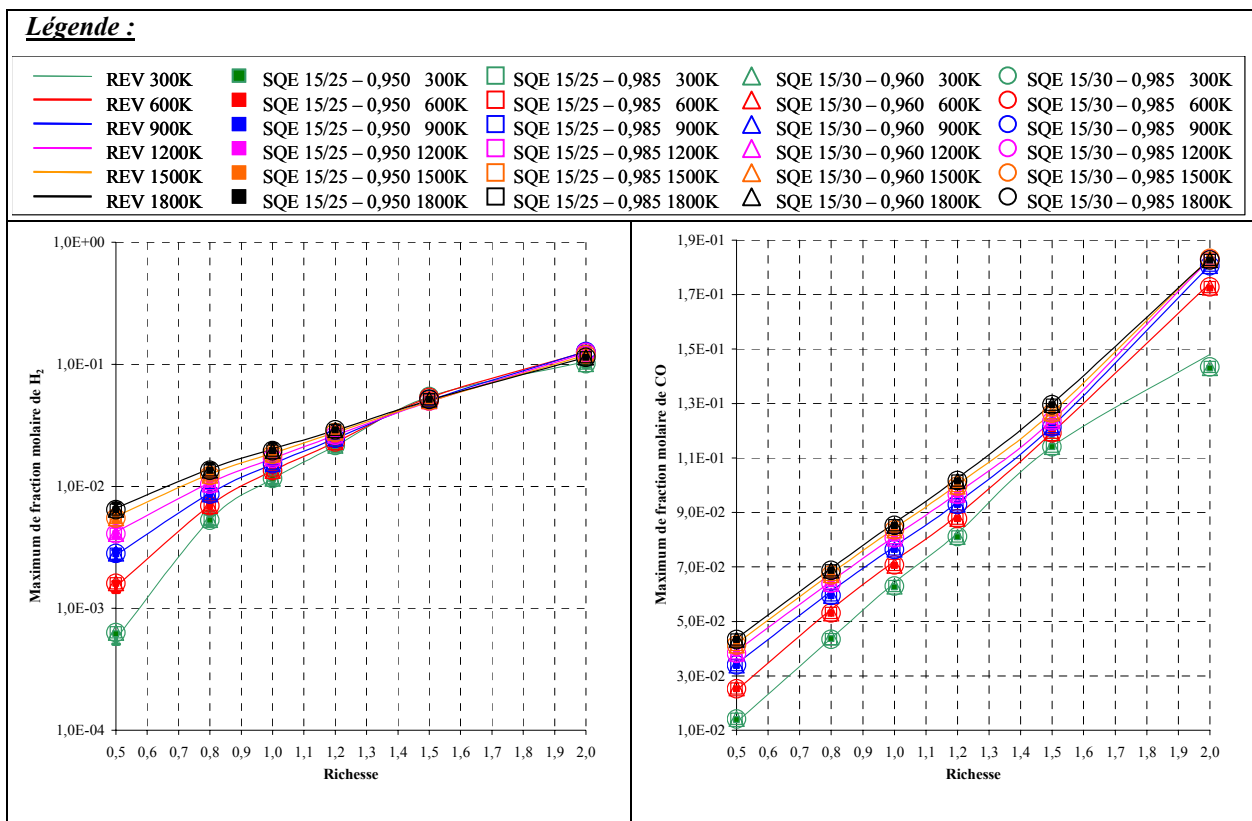
Tableau IV-5 : Comparaison de la variation des seuils de PCAF pour les mécanismes 15/25 et 15/30.

Contrairement à la méthode des flux atomiques, le choix des seuils de coupure dans PCAF a une influence modérée sur le gain en temps de calcul et sur le pourcentage de prédictivité. Une diminution du seuil de 0,995 à 0,950 n'entraîne qu'une augmentation de  $GC_{mov}$  de 1 point au maximum (de 6,5 à 7,5) et peu d'effet sur le paramètre %P (77,8% à 78,5%). On peut logiquement en conclure qu'une modification du seuil de coupure sur les composantes de vecteurs propres n'entraîne pas de bouleversements majeurs sur le taux de réduction. Ainsi dans l'exemple choisi, les 123 à 125 réactions supplémentaires éliminées

conduisent à une augmentation modérée du taux de réduction (moins de 4 points : ~78% à ~82%) par rapport au modèle détaillé initial.

L'évolution du critère de sélection  $Er$  montre que les mécanismes (annexe 4) correspondant aux seuils (respectivement Flux C, H, O/Flux N – PCAF) : 15/25 – 0,985 ; 15/25 – 0,950, d'une part et les mécanismes 15/30 - 0,985 et 15/30 - 0,960 d'autre part, sont des candidats pour la sélection finale. En effet, ils allient à la fois rapidité d'exécution de calcul (gain moyen variant de 7,2 à 7,7) et précision sur les profils de fractions molaires (pourcentage de prédictivité variant de 76,7 à 78,8).

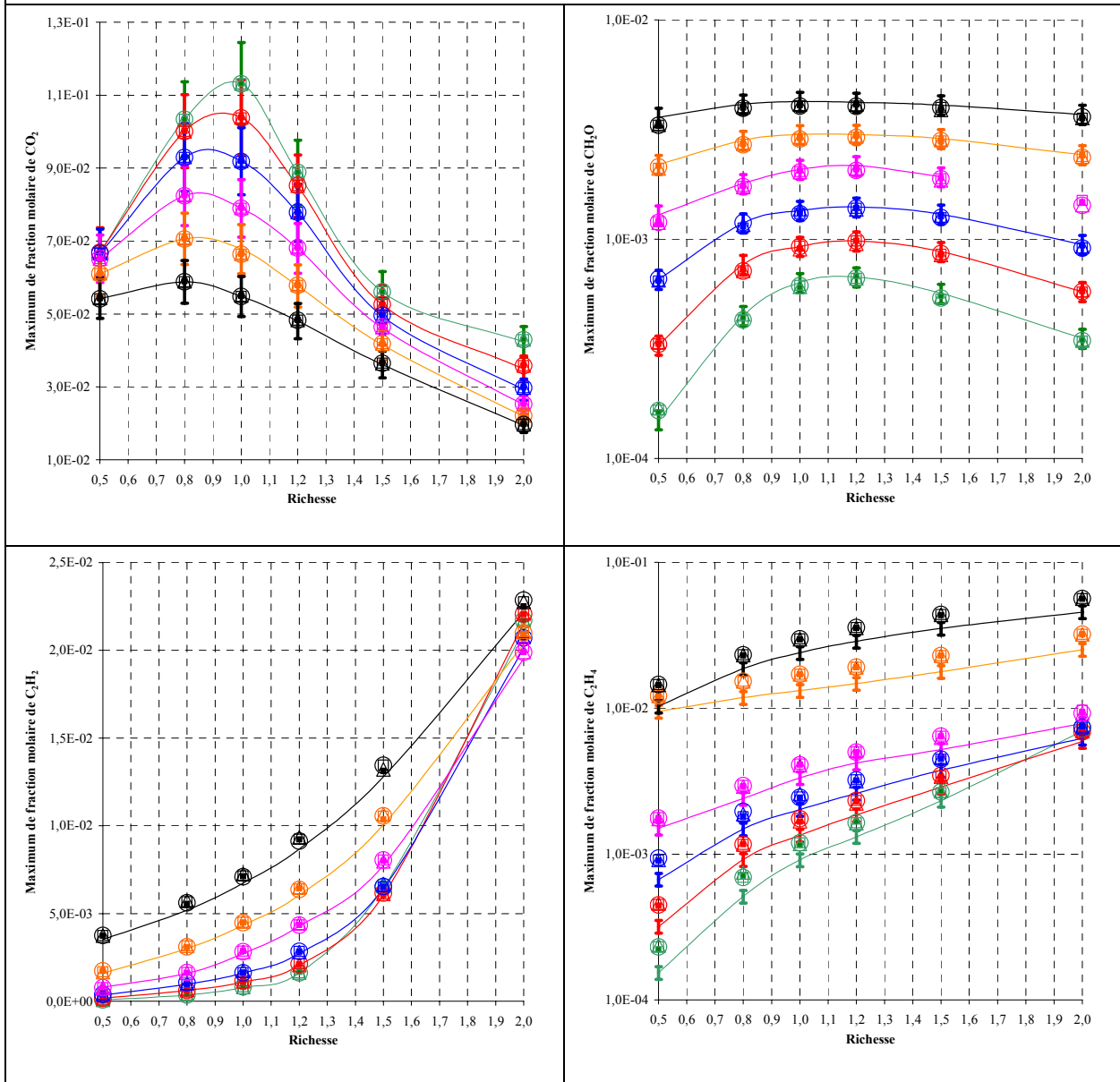
L'évolution des profils de plusieurs espèces calculés selon ces quatre mécanismes, en fonction de la richesse et pour différentes températures d'entrée est représentée, à pression atmosphérique (figure IV-19) et à 10 bars (figure IV-20). Un intervalle d'erreur sur la fraction molaire (symbolisé par un I) a été calculé afin d'apprécier la conformité des résultats par rapport aux 10% fixés. Ces résultats sont satisfaisants pour l'ensemble des cas étudiés et la majorité des profils reste dans la marge d'erreur imposée. Ainsi que nous l'avons signalé précédemment, les espèces marginales présentant une erreur comprise entre 15% et 20% sont  $C_2H_4$  et  $HCN$ . D'autres composés, mais en concentration très faible, comme  $C_6H_6$ , le toluène,  $HO_2$ ,  $CH_3$  ou  $NO$ , font partie de ce lot.



**Légende :**

— REV 300K	■ SQE 15/25-0,950 300K	□ SQE 15/25-0,985 300K	△ SQE 15/30-0,960 300K	○ SQE 15/30-0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25-0,950 600K	□ SQE 15/25-0,985 600K	△ SQE 15/30-0,960 600K	○ SQE 15/30-0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25-0,950 900K	□ SQE 15/25-0,985 900K	△ SQE 15/30-0,960 900K	○ SQE 15/30-0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25-0,950 1200K	□ SQE 15/25-0,985 1200K	△ SQE 15/30-0,960 1200K	○ SQE 15/30-0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25-0,950 1500K	□ SQE 15/25-0,985 1500K	△ SQE 15/30-0,960 1500K	○ SQE 15/30-0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25-0,950 1800K	□ SQE 15/25-0,985 1800K	△ SQE 15/30-0,960 1800K	○ SQE 15/30-0,985 1800K

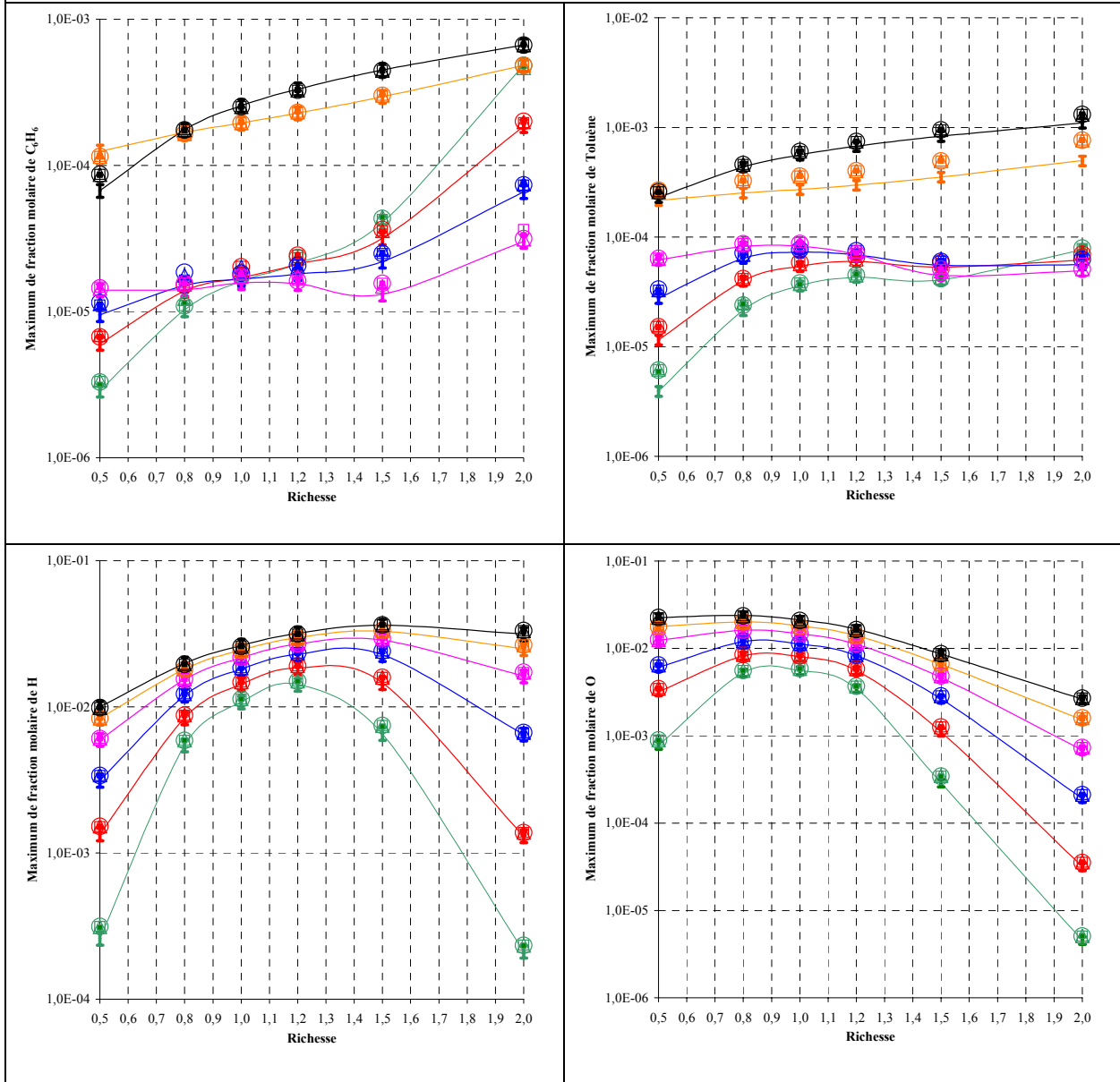
**Figure IV-19 :** Comparaison des profils des fractions molaires maxima des espèces suivies, à pression atmosphérique, sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0) entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).



**Figure IV-19 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maxima des espèces suivies, à pression atmosphérique, sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0) entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

**Légende :**

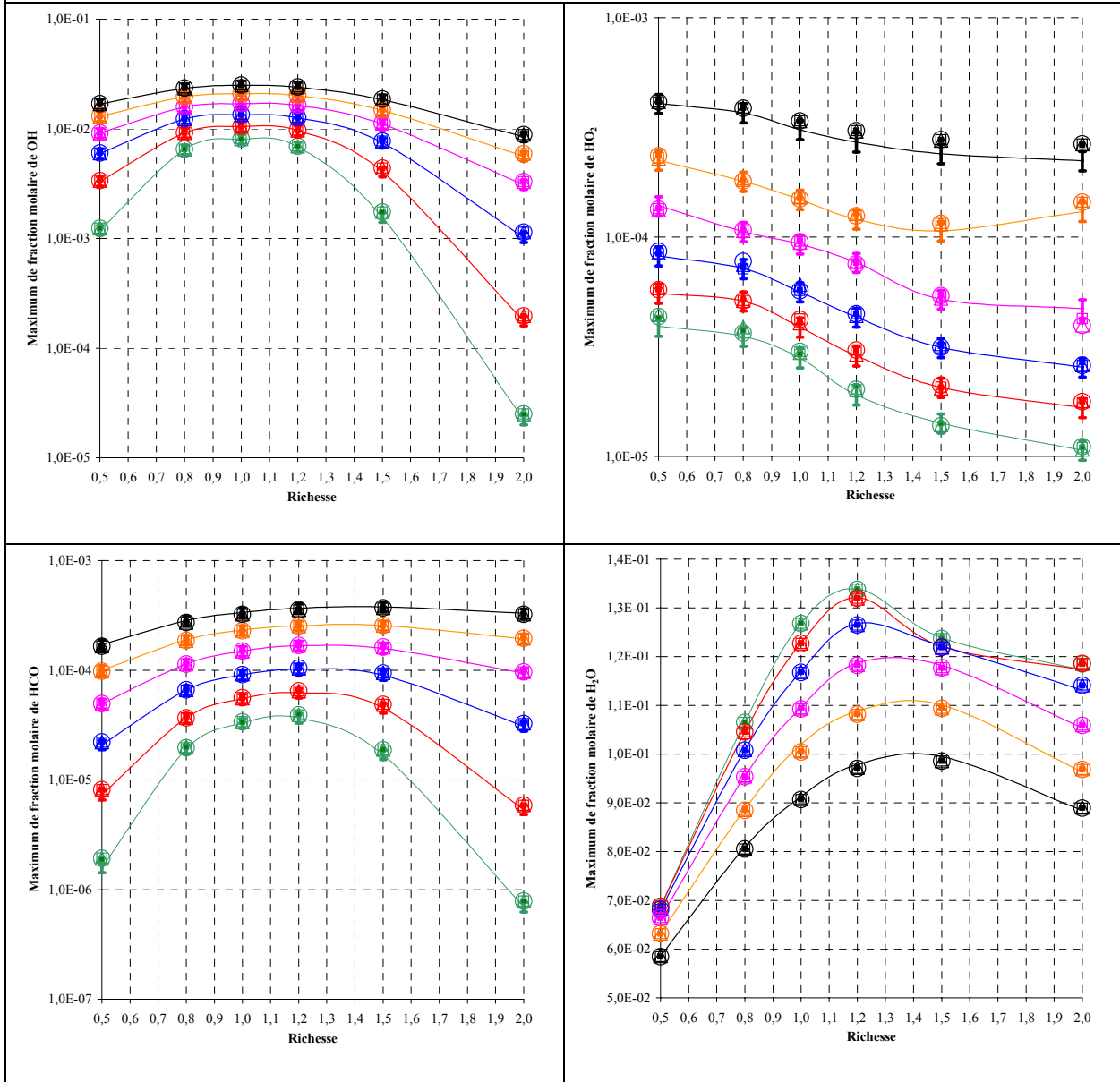
— REV 300K	■ SQE 15/25-0,950 300K	□ SQE 15/25-0,985 300K	△ SQE 15/30-0,960 300K	○ SQE 15/30-0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25-0,950 600K	□ SQE 15/25-0,985 600K	△ SQE 15/30-0,960 600K	○ SQE 15/30-0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25-0,950 900K	□ SQE 15/25-0,985 900K	△ SQE 15/30-0,960 900K	○ SQE 15/30-0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25-0,950 1200K	□ SQE 15/25-0,985 1200K	△ SQE 15/30-0,960 1200K	○ SQE 15/30-0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25-0,950 1500K	□ SQE 15/25-0,985 1500K	△ SQE 15/30-0,960 1500K	○ SQE 15/30-0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25-0,950 1800K	□ SQE 15/25-0,985 1800K	△ SQE 15/30-0,960 1800K	○ SQE 15/30-0,985 1800K



**Figure IV-19 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maximales des espèces suivies, à pression atmosphérique, sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0) entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

**Légende :**

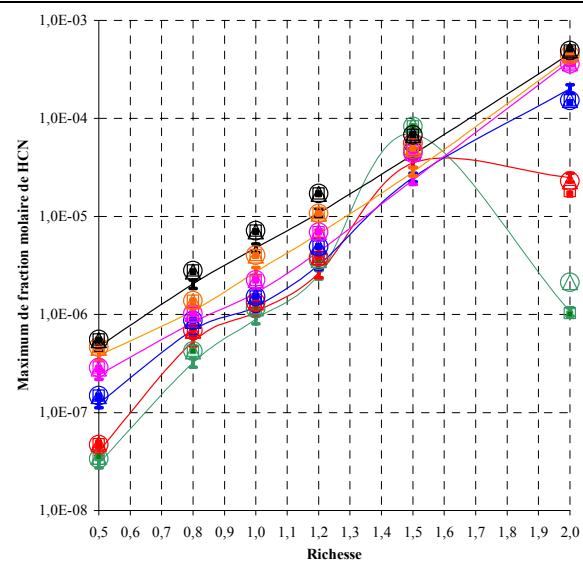
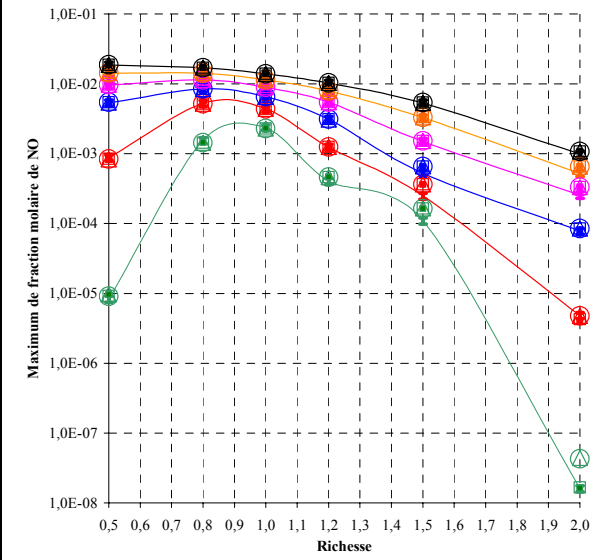
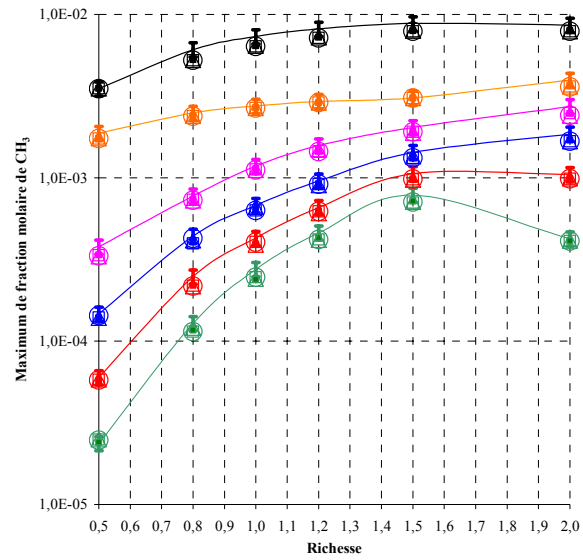
— REV 300K	■ SQE 15/25 - 0,950 300K	□ SQE 15/25 - 0,985 300K	△ SQE 15/30 - 0,960 300K	○ SQE 15/30 - 0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25 - 0,950 600K	□ SQE 15/25 - 0,985 600K	△ SQE 15/30 - 0,960 600K	○ SQE 15/30 - 0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25 - 0,950 900K	□ SQE 15/25 - 0,985 900K	△ SQE 15/30 - 0,960 900K	○ SQE 15/30 - 0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25 - 0,950 1200K	□ SQE 15/25 - 0,985 1200K	△ SQE 15/30 - 0,960 1200K	○ SQE 15/30 - 0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25 - 0,950 1500K	□ SQE 15/25 - 0,985 1500K	△ SQE 15/30 - 0,960 1500K	○ SQE 15/30 - 0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25 - 0,950 1800K	□ SQE 15/25 - 0,985 1800K	△ SQE 15/30 - 0,960 1800K	○ SQE 15/30 - 0,985 1800K



**Figure IV-19 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maxima des espèces suivies, à pression atmosphérique, sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0) entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

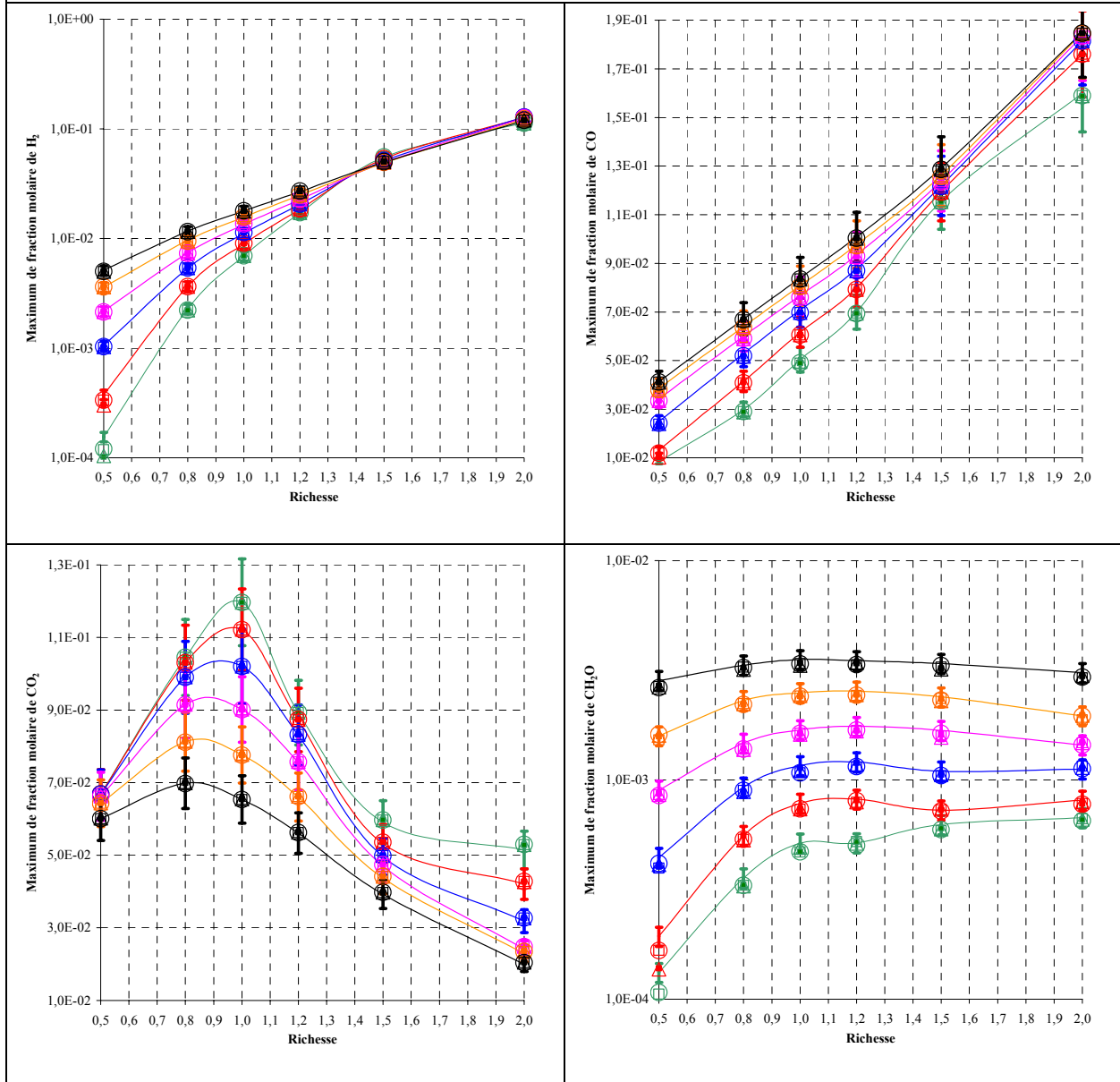
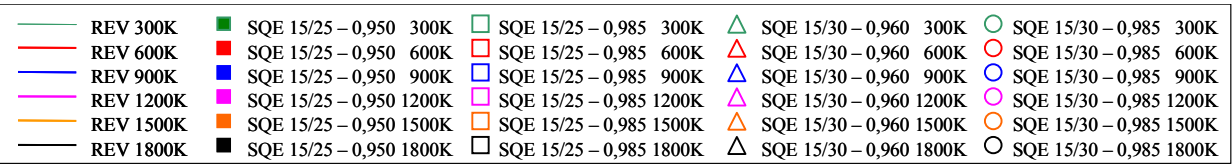
**Légende :**

— REV 300K	■ SQE 15/25 - 0,950 300K	□ SQE 15/25 - 0,985 300K	△ SQE 15/30 - 0,960 300K	○ SQE 15/30 - 0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25 - 0,950 600K	□ SQE 15/25 - 0,985 600K	△ SQE 15/30 - 0,960 600K	○ SQE 15/30 - 0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25 - 0,950 900K	□ SQE 15/25 - 0,985 900K	△ SQE 15/30 - 0,960 900K	○ SQE 15/30 - 0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25 - 0,950 1200K	□ SQE 15/25 - 0,985 1200K	△ SQE 15/30 - 0,960 1200K	○ SQE 15/30 - 0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25 - 0,950 1500K	□ SQE 15/25 - 0,985 1500K	△ SQE 15/30 - 0,960 1500K	○ SQE 15/30 - 0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25 - 0,950 1800K	□ SQE 15/25 - 0,985 1800K	△ SQE 15/30 - 0,960 1800K	○ SQE 15/30 - 0,985 1800K



**Figure IV-19 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maxima des espèces suivies, à pression atmosphérique, sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0) entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

**Légende :**

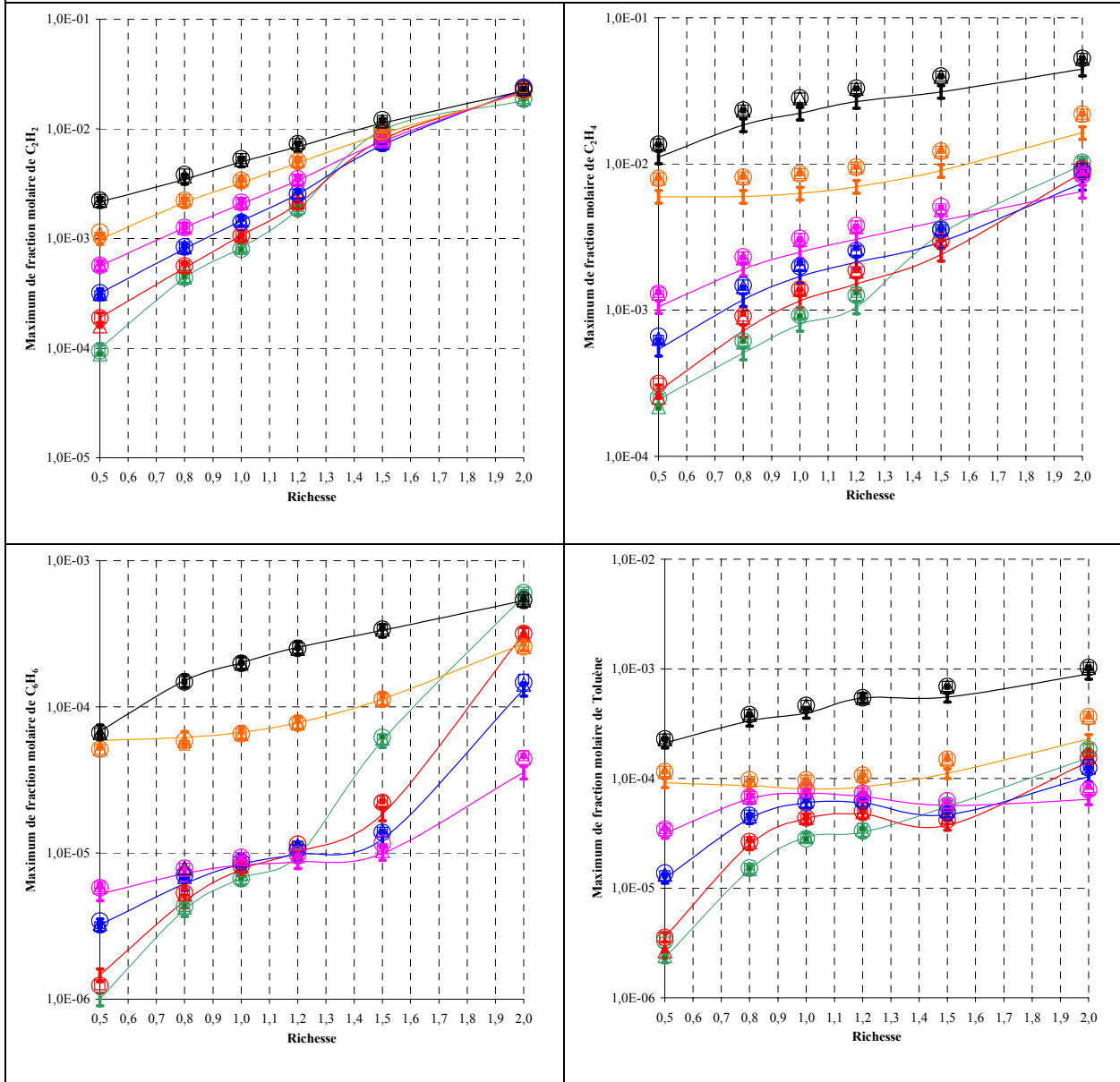


**Figure IV-20 :** Comparaison des profils des fractions molaires maxima des espèces suivies à haute pression ( $P = 10$  bars), sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0), entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).



**Légende :**

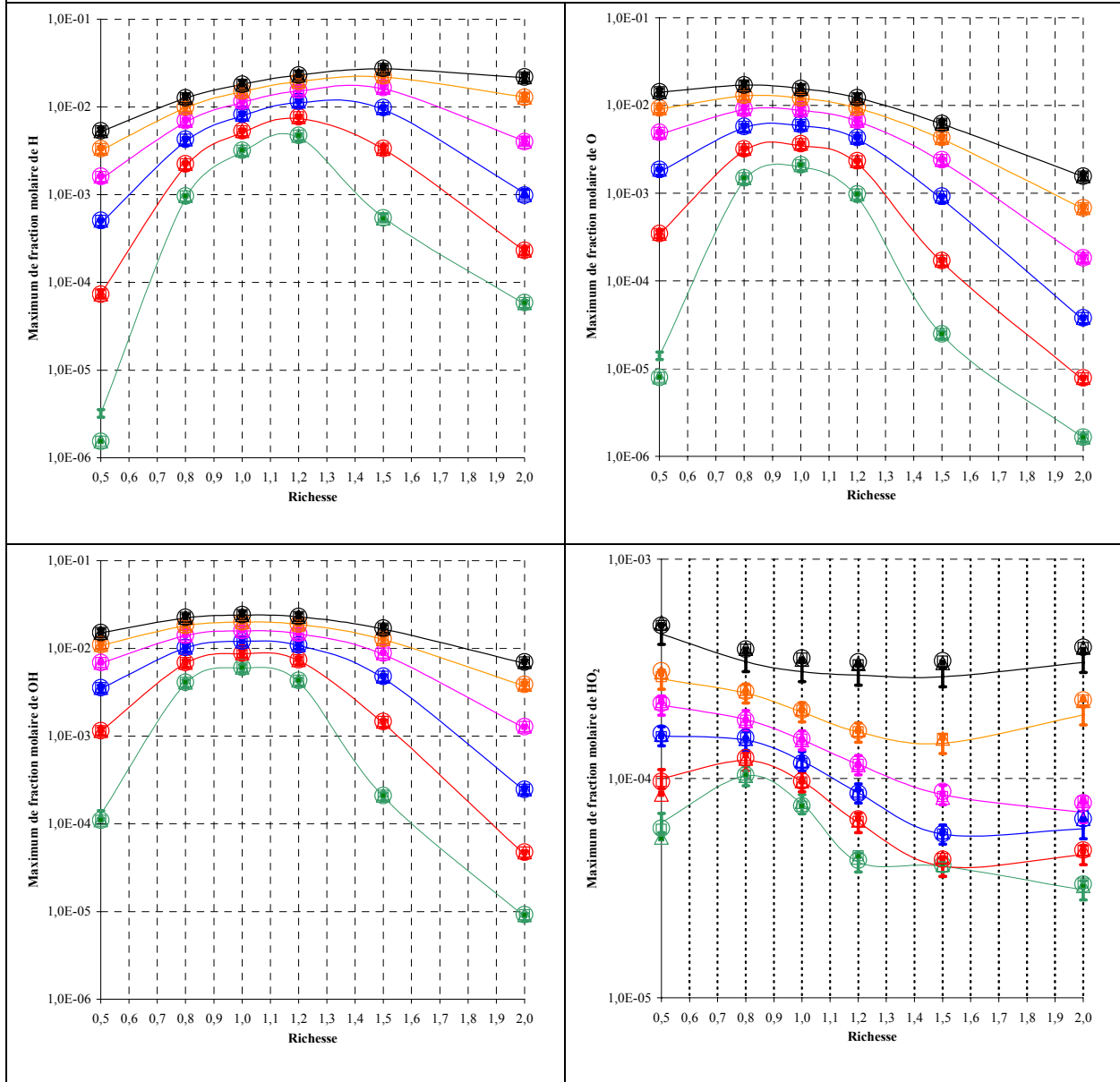
— REV 300K	■ SQE 15/25 - 0,950 300K	□ SQE 15/25 - 0,985 300K	△ SQE 15/30 - 0,960 300K	○ SQE 15/30 - 0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25 - 0,950 600K	□ SQE 15/25 - 0,985 600K	△ SQE 15/30 - 0,960 600K	○ SQE 15/30 - 0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25 - 0,950 900K	□ SQE 15/25 - 0,985 900K	△ SQE 15/30 - 0,960 900K	○ SQE 15/30 - 0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25 - 0,950 1200K	□ SQE 15/25 - 0,985 1200K	△ SQE 15/30 - 0,960 1200K	○ SQE 15/30 - 0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25 - 0,950 1500K	□ SQE 15/25 - 0,985 1500K	△ SQE 15/30 - 0,960 1500K	○ SQE 15/30 - 0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25 - 0,950 1800K	□ SQE 15/25 - 0,985 1800K	△ SQE 15/30 - 0,960 1800K	○ SQE 15/30 - 0,985 1800K



**Figure IV-20 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maximales des espèces suivies à haute pression ( $P = 10$  bars), sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0), entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

**Légende :**

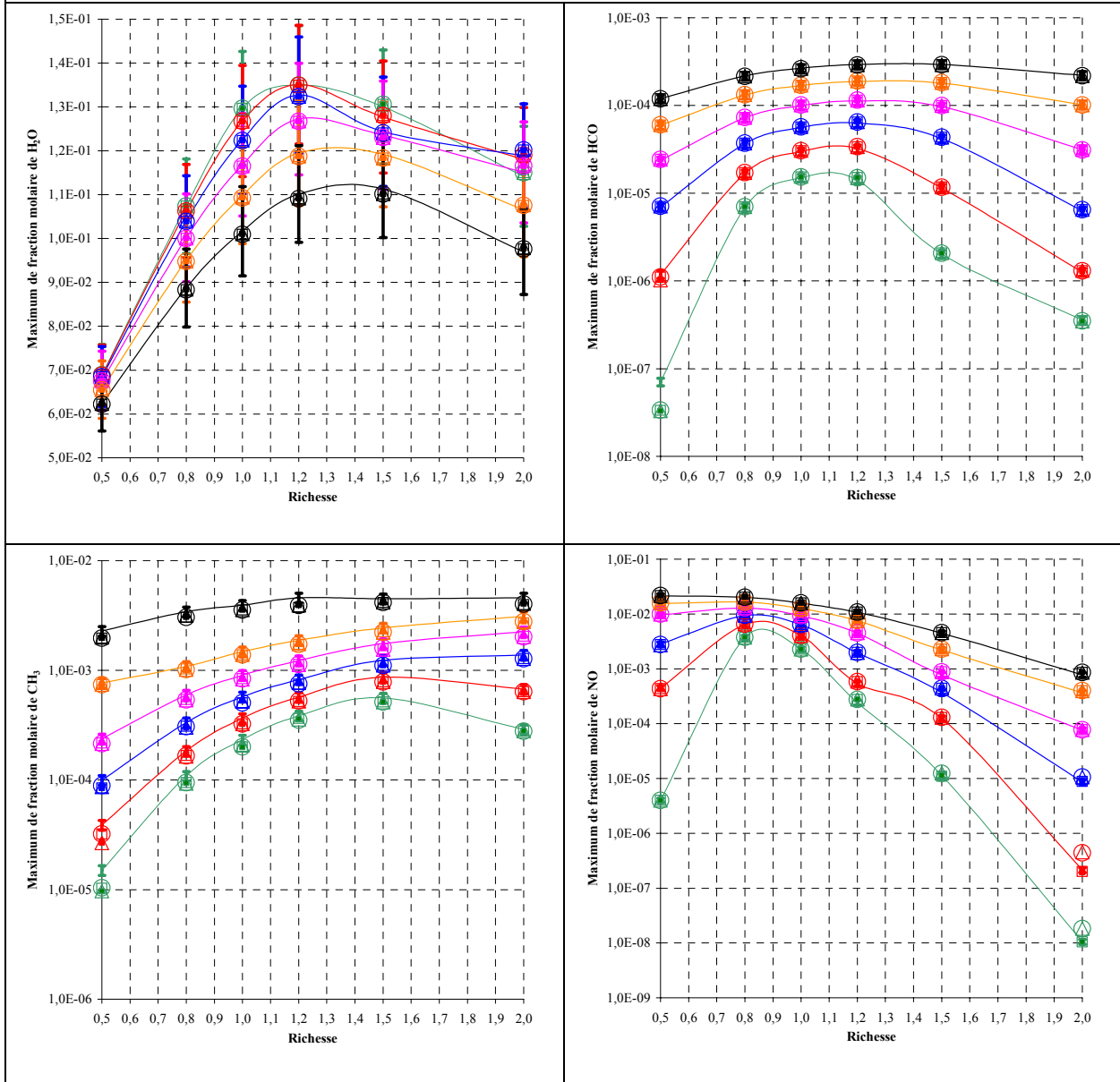
— REV 300K	■ SQE 15/25 - 0,950 300K	□ SQE 15/25 - 0,985 300K	△ SQE 15/30 - 0,960 300K	○ SQE 15/30 - 0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25 - 0,950 600K	□ SQE 15/25 - 0,985 600K	△ SQE 15/30 - 0,960 600K	○ SQE 15/30 - 0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25 - 0,950 900K	□ SQE 15/25 - 0,985 900K	△ SQE 15/30 - 0,960 900K	○ SQE 15/30 - 0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25 - 0,950 1200K	□ SQE 15/25 - 0,985 1200K	△ SQE 15/30 - 0,960 1200K	○ SQE 15/30 - 0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25 - 0,950 1500K	□ SQE 15/25 - 0,985 1500K	△ SQE 15/30 - 0,960 1500K	○ SQE 15/30 - 0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25 - 0,950 1800K	□ SQE 15/25 - 0,985 1800K	△ SQE 15/30 - 0,960 1800K	○ SQE 15/30 - 0,985 1800K



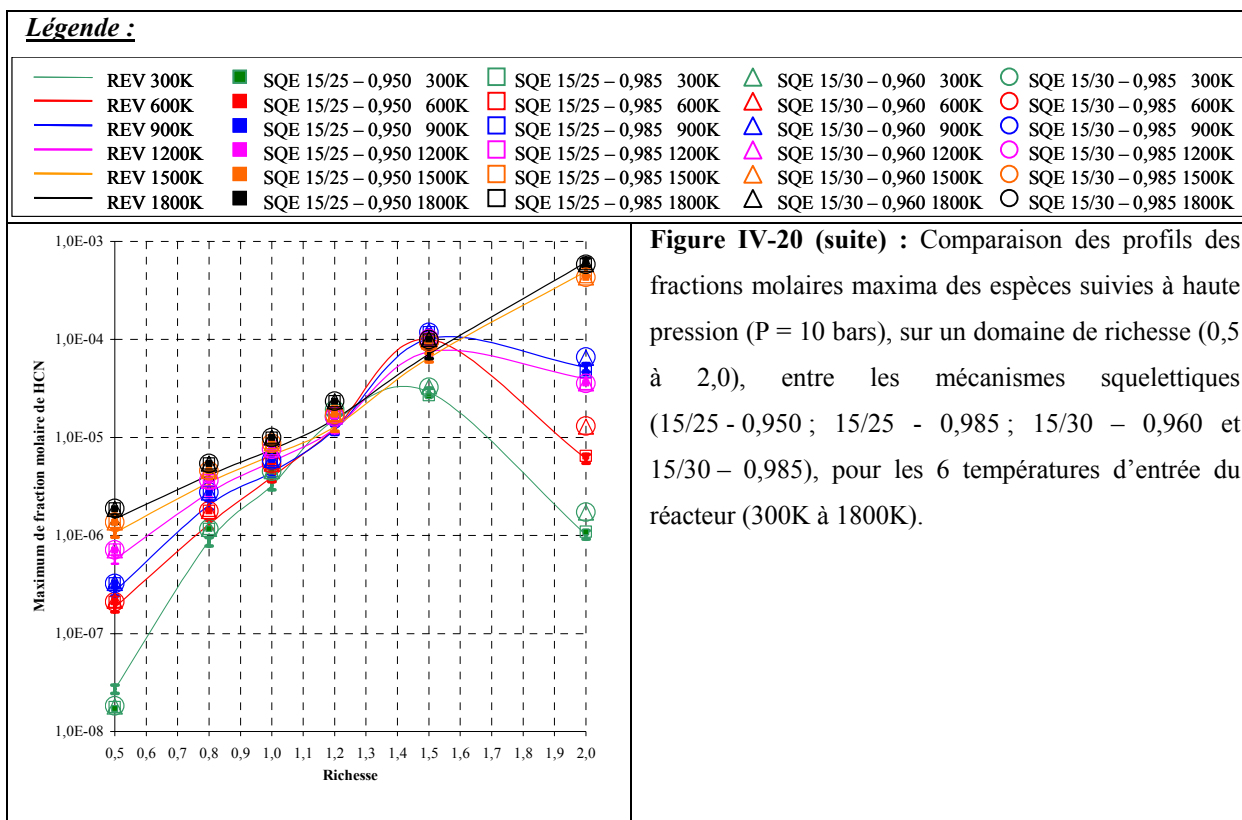
**Figure IV-20 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maximales des espèces suivies à haute pression ( $P = 10$  bars), sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0), entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).

**Légende :**

— REV 300K	■ SQE 15/25 – 0,950 300K	□ SQE 15/25 – 0,985 300K	△ SQE 15/30 – 0,960 300K	○ SQE 15/30 – 0,985 300K
— REV 600K	■ SQE 15/25 – 0,950 600K	□ SQE 15/25 – 0,985 600K	△ SQE 15/30 – 0,960 600K	○ SQE 15/30 – 0,985 600K
— REV 900K	■ SQE 15/25 – 0,950 900K	□ SQE 15/25 – 0,985 900K	△ SQE 15/30 – 0,960 900K	○ SQE 15/30 – 0,985 900K
— REV 1200K	■ SQE 15/25 – 0,950 1200K	□ SQE 15/25 – 0,985 1200K	△ SQE 15/30 – 0,960 1200K	○ SQE 15/30 – 0,985 1200K
— REV 1500K	■ SQE 15/25 – 0,950 1500K	□ SQE 15/25 – 0,985 1500K	△ SQE 15/30 – 0,960 1500K	○ SQE 15/30 – 0,985 1500K
— REV 1800K	■ SQE 15/25 – 0,950 1800K	□ SQE 15/25 – 0,985 1800K	△ SQE 15/30 – 0,960 1800K	○ SQE 15/30 – 0,985 1800K



**Figure IV-20 (suite) :** Comparaison des profils des fractions molaires maximales des espèces suivies à haute pression (P = 10 bars), sur un domaine de richesse (0,5 à 2,0), entre les mécanismes squelettiques (15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 – 0,960 et 15/30 – 0,985), pour les 6 températures d'entrée du réacteur (300K à 1800K).



#### IV-4. Synthèse

La principale amélioration apportée à cette partie de la procédure de réduction a consisté à s'affranchir au maximum de toute intervention humaine et ces nouveaux programmes permettent d'obtenir rapidement des mécanismes simplifiés d'une manière automatique. Ces mécanismes, sous une forme encore détaillée, sont de taille plus faible (*espèces/réactions* :  $\sim 90 / < 700$ ) que ceux obtenus au cours de la première approche (chapitre III :  $134 / 1220$ ) tout en restant valides sur tout le domaine expérimental choisi. La mise au point s'est effectuée en deux temps.

Tout d'abord, l'application de la méthode des flux atomiques nous a apporté les informations nécessaires sur les « propriétés » du modèle, c'est-à-dire sur les voies réactionnelles principales (mécanismes locaux) et sur la répartition des espèces conservées sur un large domaine paramétrique (mécanismes spécifiques). Ensuite, à partir de la synthèse de ces résultats obtenus au niveau local et/ou spécifique, un mécanisme squelettique général (valable pour toutes les conditions étudiées) peut être élaboré en fixant les seuils de coupure sur les flux atomiques C, H, O et N. Une augmentation des valeurs de ces seuils de sélection se traduit par une augmentation du taux de réduction et du  $GC_{moy}$ , accompagnée d'une diminution du %P. Le critère de sélection  $Er$  fait ressortir du lot les mécanismes généraux

15/25 et 15/30 (seuils : C, H, O/N). Ces derniers ont un gain en temps de calcul moyen d'environ 4 et conduisent à des profils d'espèces entachés d'une erreur relative inférieure à 10%.

La seconde étape de la réduction chimique permet l'élimination directe des réactions les moins sensibles du mécanisme. A l'aide de cette méthode, nous avons pu dégager des tendances générales relatives au type de réactions prédominantes dans le processus de décomposition d'un kérosène, avec dans l'ordre : réactions d'amorçage unimoléculaire, réactions de branchement, réactions de métathèse avec H, O, OH, réactions d'isomérisation et réactions avec l'oxygène moléculaire. L'influence des seuils pour les composantes de vecteurs propres sur l'évolution des résultats (*GC - %P - Er*) est moins significative que dans le cas des flux atomiques. L'application de cette technique nous a conduit à la sélection des meilleurs mécanismes squelettiques suivants : 15/25 - 0,950 ; 15/25 - 0,985 ; 15/30 - 0,960 et 15/30 - 0,985.

Ces modèles, pour lesquels le gain en temps de calcul moyen est d'environ 7, et la précision d'environ 80%, serviront de base, dans la suite du processus de réduction, au cours de l'optimisation mathématique afin d'obtenir les schémas réduits définitifs.





# *Chapitre V*

---

## *Obtention et optimisation du schéma réduit*

<b>V-1.</b>	<b>Validation d'un schéma réduit obtenu avec le critère <math>K'</math></b>	<b>139</b>
V-1.1.	Influence du nombre d'itérations sur les résultats	140
V-1.2.	Utilisation d'un accélérateur de convergence	141
V-1.2.1.	<i>Conséquences sur le temps de calcul</i>	<i>142</i>
V-1.2.2.	<i>Conséquences sur la prédictivité</i>	<i>143</i>
V-1.3.	Synthèse	145
<b>V-2.</b>	<b>Recherche d'une meilleure sélection des espèces différentielles/stationnaires</b>	<b>146</b>
V-2.1.	Sélection grâce à l'analyse de la matrice Jacobienne (critère $\lambda_k$ )	146
V-2.2.	Sélection grâce aux deux pointeurs CSP (critères $Qp_k$ et $I_k$ )	149
V-2.3.	Sélection par le biais de l'erreur induite (critère $QSSAS$ )	154
<b>V-3.</b>	<b>Automatisation de la construction du schéma réduit final</b>	<b>162</b>
<b>V-4.</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>163</b>
<b>V-5.</b>	<b>Synthèse</b>	<b>168</b>

---



---

---

L'étape des flux atomiques et celle de l'analyse des composantes principales proposent, après élimination des espèces et des réactions inutiles, quatre mécanismes squelettiques généraux optima. Ces modèles sont relatifs à des seuils de coupure différents au niveau de ces 2 étapes : mécanismes 15/25 – 0,985 ; 15/25 - 0,950 ; 15/30 – 0,985 et 15/30 – 0,960. Après identification des espèces stationnaires, l'étape finale du processus de réduction va permettre l'élaboration de schémas réduits à partir de ces 4 mécanismes squelettiques. Au préalable, nous avons procédé à une optimisation du code de calcul, décrite dans le chapitre III. Ce perfectionnement de la méthode concerne :

- la diminution de la quantité de calculs,
- l'amélioration de la sélection des espèces en EQS,
- l'automatisation intégrale de cette dernière étape depuis l'identification des espèces EQS jusqu'à l'élaboration du schéma réduit final.

Le nombre d'espèces et de réactions pour chacun des modèles squelettiques (conclusion du chapitre précédent) étant relativement proches, *de facto* les gains en temps de calcul moyen et les pourcentages de prédictivité sont peu différents d'un mécanisme à l'autre, et il apparaît superflu d'examiner dans le détail chacun d'entre eux. L'étude approfondie, visant à améliorer les performances du schéma réduit final, sera donc effectuée sur un mécanisme squelettique : le 15/25 – 0,985 (avec 91 espèces et 694 réactions). Puis, le code de calcul ainsi optimisé sera mis en œuvre sur les 3 autres modèles squelettiques pour élaborer leurs schémas réduits correspondants. La comparaison des différentes améliorations apportées par ces schémas réduits nous permettra de sélectionner, parmi les 4, le plus satisfaisant.

## V-1. Validation d'un schéma réduit obtenu avec le critère $K'$

Ce troisième volet du processus de réduction consiste donc à développer et à construire un schéma réduit dit « optimal » : selon l'approche chimico-mathématique (AEQS). Cette démarche suppose la détection pertinente des espèces en état quasi-stationnaire par l'intermédiaire d'un critère.  $K'$ , déjà utilisé dans la phase initiale de validation de la méthodologie, et repris ici. Les premières solutions envisagées pour restreindre la quantité de calculs, tout en conservant nos objectifs (rapidité et précision) la diminution :

- du nombre d'espèces différentielles (espèces transportées),
- du nombre d'itérations imposées aux calculs.

Ces points cruciaux de la méthode sont analysés dans cette partie et nous avons tout d'abord étudié les répercussions de la variation du nombre d'itérations sur la précision (%P) et sur la rapidité du calcul ( $GC_{\text{moy}}$ ). L'introduction ultérieure d'un accélérateur de convergence dans la procédure de calcul a été testée et verrons que les améliorations apportées justifient l'intérêt de telles modifications.

### V-1.1. Influence du nombre d'itérations sur les résultats

Une fois les 91 espèces classées selon le critère  $K'$  (tableau V-1), sur l'ensemble du domaine paramétrique, le but est de minimiser le nombre d'espèces différentielles sans pénaliser les qualités de prédiction du modèle.

1	PHC3H7	2,96E+02	32	AC3H4	1,46E-03	63	HNO	2,83E-05
2	O2	1,54E+01	33	PHCH2OH	1,05E-03	64	NC3H7	2,66E-05
3	CO2	1,39E+01	34	HCCO	9,42E-04	65	NCO	2,42E-05
4	N2	8,47E+00	35	PHCH2	9,19E-04	66	C6H5O	1,85E-05
5	CO	4,43E+00	36	FC9H17C	8,71E-04	67	EC9H17C	9,99E-06
6	H2O	1,08E+00	37	CC9H17C	7,32E-04	68	HOCN	9,22E-06
7	STYREN	2,75E-01	38	HO2	6,74E-04	69	HONO	5,29E-06
8	NO	1,88E-01	39	HCO	5,90E-04	70	NNH	4,60E-06
9	OH	1,87E-01	40	CYC9H18	5,84E-04	71	PC4H9	4,11E-06
10	H2	1,27E-01	41	IC4H3	5,76E-04	72	C5H4OH	2,53E-06
11	O	1,24E-01	42	C4H4	4,02E-04	73	CH3O	2,05E-06
12	C2H2	1,10E-01	43	C2H	3,52E-04	74	H2CN	1,99E-06
13	C2H4	1,03E-01	44	NO2	3,38E-04	75	CH2HCO	1,97E-06
14	CH4	4,48E-02	45	CH3OH	3,19E-04	76	DC10H21	1,55E-06
15	C3H6	1,93E-02	46	CH	3,11E-04	77	CC10H21	1,54E-06
16	H	1,60E-02	47	NH3	2,03E-04	78	AC8H17	1,32E-06
17	C2H6	7,16E-03	48	C2H5	1,86E-04	79	CH3CN	1,28E-06
18	C6H6	6,01E-03	49	HNCO	1,76E-04	80	EC10H21	1,10E-06
19	NC10H22	5,41E-03	50	C5H4O	1,35E-04	81	AC6H13	9,85E-07
20	TOLUEN	4,84E-03	51	SCH2	1,32E-04	82	NC4H5	7,64E-07
21	CH2O	4,55E-03	52	N	9,75E-05	83	AC10H21	7,11E-07
22	PC3H4	4,41E-03	53	CH2OH	7,91E-05	84	BC6H13	4,09E-07
23	CH3	4,28E-03	54	N2O	6,80E-05	85	AC7H15	2,35E-07
24	C3H2	3,45E-03	55	C5H5	6,68E-05	86	APHC2H4	2,06E-07
25	HCN	2,53E-03	56	C6H5	4,87E-05	87	AC5H11	1,48E-07
26	C4H2	2,36E-03	57	CN	4,73E-05	88	C3PHC3H6	4,51E-08
27	C4H6	2,00E-03	58	NH	4,58E-05	89	PHCO	9,09E-09
28	C3H3	1,88E-03	59	C2H3	4,19E-05	90	C2H2OH	2,07E-09
29	CH2CO	1,68E-03	60	PHHCO	4,17E-05	91	APHC3H6	1,29E-10
30	AC3H5	1,67E-03	61	NC4H3	3,75E-05			
31	CH2	1,47E-03	62	NH2	3,73E-05			

Tableau V-1 : Classement des espèces suivant le critère  $K'$ .

Selon ce classement « immuable » (dans le sens où l'on s'interdit toute modification), le nombre minimum d'espèces différentielles qu'il est possible de conserver, sur les 91 initiales, sans recourt à des connaissances particulières en cinétique et sans écarter les réactifs initiaux

du lot, est symbolisé par un trait épais. Il s'élève à 40 (schéma Kdiff40). Le modèle correspondant a été validé avec un nombre fixe d'itérations variant de 15 à 99 (tableau V-2).

Nombre d'itérations	Gain en temps de calcul moyen	Pourcentage de prédictivité	Er
99	6,8	65,7	4,47
75	7,5	64,9	4,87
50	9,2	65,9	6,06
45	9,8	65,8	6,45
42	9,8	65,0	6,37
40	10,5	65,8	6,91
37	11,2	64,5	7,22
35	11,0	63,0	6,93
32	10,7	63,3	6,77
30	11,1	63,5	7,05
25	11,8	64,1	7,56
<b>20</b>	<b>12,4</b>	<b>62,2</b>	<b>7,71</b>
15	12,8	58,5	7,49

**Tableau V-2 :** Prédictivité et Gain en temps de calcul du schéma réduit Kdiff40 pour 15 à 99 itérations.

Les résultats consignés dans ce tableau sont révélateurs des qualités de ce schéma réduit. On constate, comme on s'y attendait, à ce que la rapidité d'exécution des calculs augmente lorsque le nombre d'itérations diminue. Par rapport au modèle détaillé initial, elle est voisine d'un facteur 7 avec 99 itérations pour atteindre environ 12 avec 15 ou 20 itérations. Si l'on compare ces résultats avec ceux de notre première approche de réduction (chapitre III), une amélioration d'un facteur compris entre 2 et 2,5 sur le gain en temps de calcul est obtenue.

Du point de vue de la précision, on remarque qu'environ 63% à 66% des profils des espèces suivies sont reproduits correctement sans dépasser les 10% de marge d'erreur imposée. On constate qu'il existe un nombre minimum d'itérations (15) en dessous duquel on dégrade la prédictivité, qui passe alors en dessous de 50%.

### V-1.2. Utilisation d'un accélérateur de convergence

A ce stade, l'intérêt d'une amélioration numérique des calculs est apparu. Ainsi, un accélérateur de convergence, appelé epsilon-algorithme (*Wynn, 1966*), a été inséré dans le code de calcul au niveau de la résolution itérative des équations algébriques (méthode des itérations internes). Ce programme, présenté en annexe VI, permet de calculer avec précision la limite d'une série (les concentrations des espèces en EQS estimées par inner-iteration). Le principe de la méthode est explicité dans l'article de *Brezinsky (1971)*.

Différents calculs ont été repris avec ce « code optimisé » sur le même schéma réduit (Kdiff40), pour un nombre imposé d'itérations variant de 10 à 75, et dans les mêmes conditions paramétriques (pression, température, richesse et répartition des temps de séjour au sein des fichiers d'entrée de PSR) que la configuration sans accélérateur.

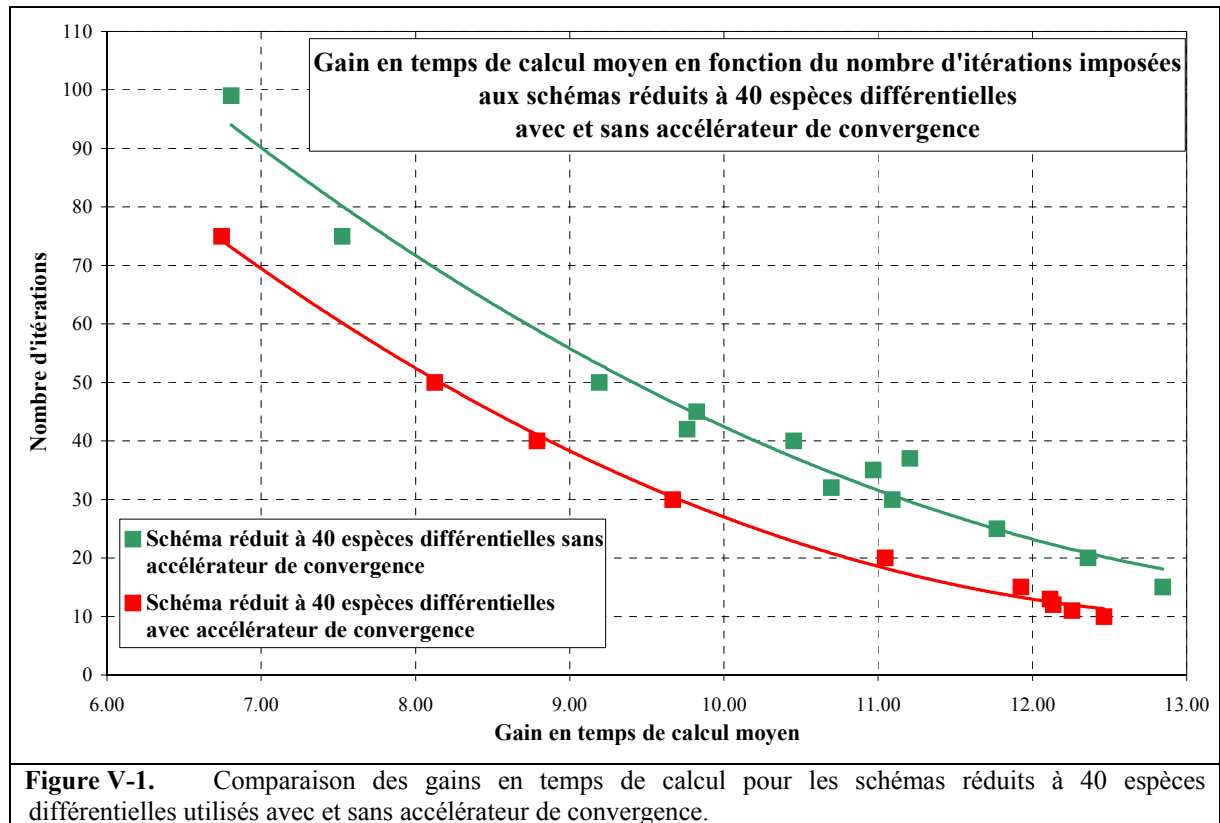
*V-1.2.1. Conséquences sur le temps de calcul*

Le tableau V-3 récapitule l'ensemble des nouveaux résultats obtenus avec accélérateur.

Nombre d'itérations	Gain en temps de calcul moyen	Pourcentage de prédictivité	Er
75	6,7	65,2	4,37
50	8,1	65,2	5,28
40	8,8	65,2	5,74
30	9,7	65,2	6,32
20	11,0	65,6	7,22
15	11,9	65,5	7,79
13	12,1	64,4	7,79
12	12,1	64,2	7,77
<b>11</b>	<b>12,3</b>	<b>64,2</b>	<b>7,90</b>
10	12,5	56,5	7,06

**Tableau V-3 :** Prédictivité et Gain en temps de calcul du schéma réduit Kdiff40 utilisé avec un accélérateur de convergence et un nombre d'itérations variables (10 à 75 itérations).

Si l'on compare les deux configurations de calcul utilisées avec et sans accélérateur (figure V-1), on constate que l'épsilon algorithm « accélère » effectivement les calculs. Autrement dit, pour obtenir un gain en temps de calcul moyen identique, moins d'itérations sont nécessaires lorsque l'accélérateur est pris en compte (courbe rouge). Ainsi, dans le domaine des gains les plus faibles (6,8 par exemple), l'ancienne configuration va utiliser 100 itérations alors que la nouvelle n'en nécessitera que 75 (soit une économie en calcul de 25%). Une tendance similaire est relevée dans le domaine des gains plus élevés. Pour  $GC_{\text{moy}} = 12,5$ , l'économie réalisée est voisine d'un facteur 2 (avec 10 itérations au lieu de 20).



#### V-1.2.2. Conséquences sur la prédictivité

L'examen de l'évolution des prédictivités montre que ce critère est moins affecté par l'utilisation de l'accélérateur de convergence. En effet, sa précision maximale est sensiblement la même, environ 65%, dans les deux cas. Le calcul avec accélérateur présente l'avantage d'atteindre cette valeur rapidement (11 itérations), alors que l'ancienne configuration en demandait au moins 37.

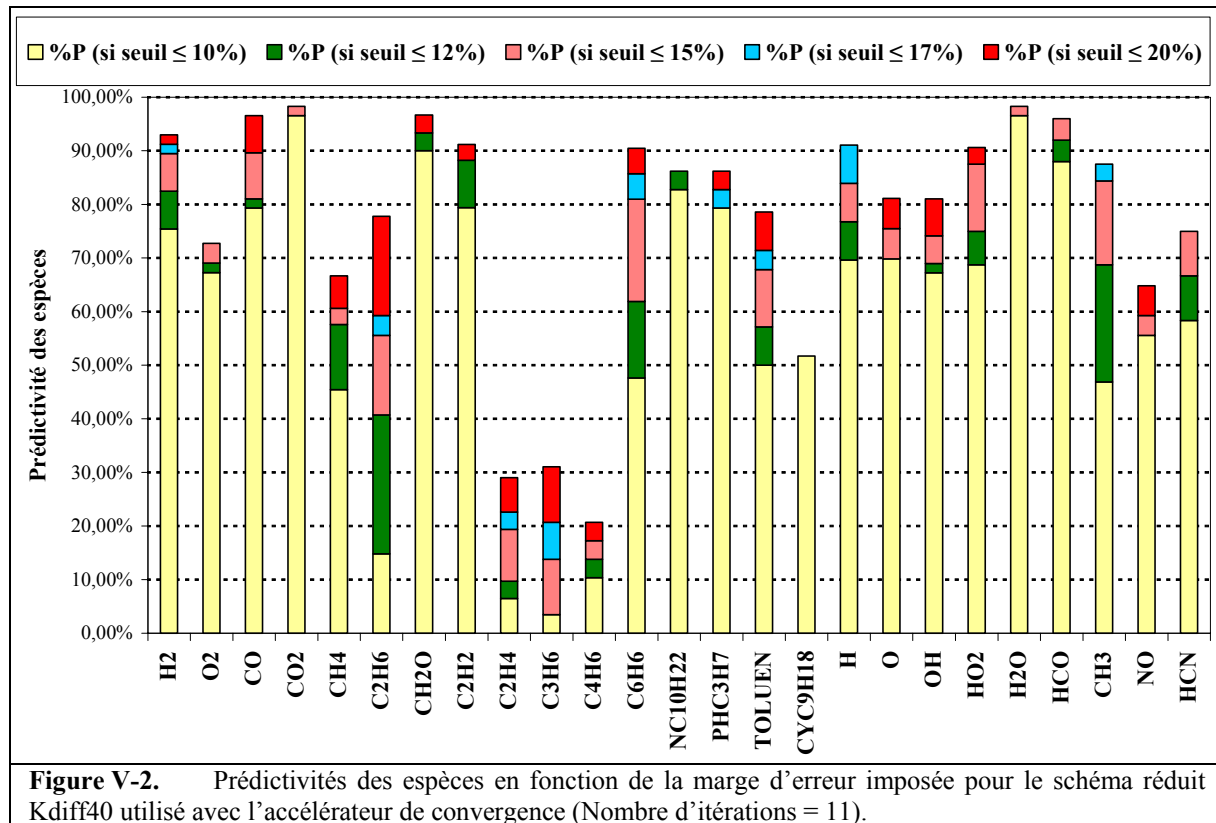
Nous avons aussi comparé, sur un domaine de seuils d'erreur tolérée plus grand, les prédictivités des « meilleurs » mécanismes réduits issus des calculs menés avec ou sans l'accélérateur (tableau V-4). Ces schémas correspondent à la valeur du facteur  $Er$  la plus élevée, représentative de la meilleure conjugaison entre  $GC$  et  $\%P$ , soit respectivement 7,90 et 7,71 pour 11 et 20 itérations.

Erreur maximum tolérée sur les fractions molaires des espèces	Kdiff40 / 11 itérations (avec $\varepsilon$ -algorithme)	Kdiff40 / 20 itérations (sans $\varepsilon$ -algorithme)
Si $\Delta C/C \leq 10\%$	64,2% (-%)	62,2% (-%)
Si $\Delta C/C \leq 12\%$	68,9% (+4,7%)	65,7% (+3,5%)
Si $\Delta C/C \leq 15\%$	74,6 % (+10,4%)	72,0 % (+9,8%)
Si $\Delta C/C \leq 17\%$	76,0% (+11,8%)	74,6% (+12,4%)
Si $\Delta C/C \leq 20\%$	79,7 % (+15,5%)	78,3 % (+16,1%)

**Tableau V-4 :** Prédictivités observées selon l'erreur maximum tolérée. Le pourcentage entre parenthèses (%) représente la différence par rapport à la première ligne pour chacun des mécanismes considérés.

Une meilleure représentation (d'environ 2 points) des profils d'espèces est observée pour le modèle utilisant l'accélérateur de convergence. Ces résultats mettent en évidence une bonne reproduction des profils (jusqu'à 80%) sur l'ensemble du domaine paramétrique, en particulier si on autorise un  $\Delta C/C$  légèrement plus élevé. Par exemple, si  $\Delta C/C = 20\%$  au lieu de 10%, le taux de prédictivité est d'autant meilleur que le calcul est effectué avec l' $\varepsilon$ -algorithme : 79,7% (contre 64,2%), qui correspondent à un total de 15,5% de profils d'espèces supplémentaires mieux représentés. Rappelons que ce niveau d'erreur reste malgré tout très acceptable, d'après les comparaisons expérience/simulation, jusqu'à  $\pm 100\%$  d'erreur, relevées dans la littérature pour certaines espèces intermédiaires comme  $C_2H_4$  (chapitre IV).

Le pourcentage de prédictivité, dont les valeurs sont répertoriées dans le tableau V-4, évalue la précision dans sa globalité, c'est-à-dire pour un ensemble d'espèces préalablement ciblées en fonction de leur importance (les 25 espèces du chapitre III), sans distinction du rôle de chacune sur les variations de ce paramètre. Pour rendre compte de l'erreur spécifique relative à une espèce bien définie, une autre approche est nécessaire. Pour chacune des espèces retenues, il s'agit de suivre l'évolution de la précision des profils de fraction molaire en fonction de la marge d'erreur que l'on s'impose (histogramme de la figure V-2).



Ainsi, dans ce diagramme, il apparaît que si l'erreur est fixée à 10% (zone de couleur jaune), le schéma réduit reproduit correctement les principales espèces intervenant dans la combustion du kérosène telles que : les réactifs, les produits ( $H_2O$  et  $CO_2$ ), certains intermédiaires ( $H_2$ ,  $CO$ ,  $CH_2O$ ,  $C_2H_2$ ) et les principaux radicaux ( $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $HCO$ ) avec une prédictivité supérieure à 60%. Par contre,  $CH_3$  n'est correctement reproduit que si le seuil atteint 12%. Dans ce cas, la prise en compte du domaine d'erreur 10% - 12% (symbolisé par la zone de couleur verte) permet d'atteindre et de dépasser les 60% de prédictivité visés. Il en va de même pour  $NO$ ,  $C_2H_6$  et  $HCN$  mais seulement à partir d'un seuil d'erreur de 15% (zone de couleur rose saumon). A 20% d'erreur acceptée (zone de couleur rouge), la majorité des espèces (60 à 70%) est bien représentée. Seules 3 espèces intermédiaires, déjà mentionnées comme marginales au cours des 2 premières étapes (FLUX/PCAF)  $C_2H_4$ ,  $C_3H_6$  et  $C_4H_6$  sont moins bien reproduites (au maximum 30% des profils pour la marge d'erreur maximale inférieure ou égale à 20%).

### V-1.3. Synthèse

L'introduction d'un accélérateur de convergence dans la méthode AEQS utilisant le critère  $K'$ , nous a donc permis de diminuer le nombre d'itérations pour la résolution des



équations algébriques et d'améliorer notablement la précision du schéma réduit. *De facto*, la rapidité des calculs s'en est trouvée accrue. Ainsi, le « meilleur » schéma réduit contenant 40 espèces différentielles, permet désormais de reproduire avec une déviation relative inférieure à 10%, environ 64% des profils des espèces suivies, avec seulement 11 itérations et pour un temps de calcul moyen 12,5 fois inférieur à celui du modèle détaillé initial.

## V-2. Recherche d'une meilleure sélection des espèces différentielles/stationnaires

Le classement des espèces selon la « probabilité de stationnarité », déduit du critère  $K'$ , nous a conduit à un schéma réduit final contenant 40 espèces différentielles. La limite espèces différentielles/espèces stationnaires, caractérisée par une valeur de coupure  $K'_c$ , n'a pas pu être déterminée de façon patente à partir des seules variations de ce critère. En effet, l'évolution est monotone et aucun saut caractéristique n'apparaît. En conséquence, le choix de cette valeur s'appuie sur le bon sens de l'utilisateur. La condition retenue est de conserver au moins tous les réactifs dans le lot des espèces différentielles (classement du tableau V-1). Cette séparation intuitive est évidemment peu propice à une automatisation de cette phase de réduction.

Il apparaît donc important de disposer d'un outil précis, capable d'identifier et d'isoler correctement espèces différentielles et espèces stationnaires en l'absence d'intervention humaine.

### V-2.1. Sélection grâce à l'analyse de la matrice Jacobienne (critère $\lambda_k$ )

Parmi les méthodes envisagées, l'analyse des valeurs propres de la matrice jacobienne ( $\frac{df}{dc}$ , avec  $f$  la vitesse nette et  $c$  la concentration molaire) nous a semblé intéressante en cas d'existence d'un « saut » dans la distribution de ces valeurs. Les espèces stationnaires correspondraient alors aux valeurs de  $\lambda$  les plus grandes et négatives.

Un exemple d'évolution des valeurs propres pour le mécanisme squelettique du kérosène, comprenant 91 espèces et 694 réactions (à  $P=0,5$  bar,  $\phi=0,5$  et  $T_e=300K$ ) est présenté pour 3 temps de séjour différents dans le tableau V-5 :

- $1,66 \cdot 10^{-3}$  s (point proche de la limite d'extinction),
- $10^{-2}$  s (point intermédiaire),
- 1,0 s (point proche de l'équilibre).

$\tau(s)$	extinction		intermédiaire		Equilibre
	1,66E-03		1,00E-02		1,00E+00
<i>O2</i>	1,36E-02	<i>H2O</i>	5,85E-04	<i>H2O</i>	1,31E-06
<i>CH3OH</i>	0,00E+00	<i>C2H6</i>	0,00E+00	<i>N2</i>	5,56E-13
<i>PHCH2OH</i>	0,00E+00	<i>CH3OH</i>	0,00E+00	<i>CH2O</i>	0,00E+00
<i>HO2</i>	0,00E+00	<i>PHHCO</i>	0,00E+00	<i>CC9H17C</i>	0,00E+00
<i>CH3</i>	0,00E+00	<i>OH</i>	0,00E+00	<i>HCN</i>	0,00E+00
<i>AC3H5</i>	0,00E+00	<i>HO2</i>	0,00E+00	<i>CO2</i>	-4,55E-09
<i>C6H5</i>	0,00E+00	<i>CH3</i>	0,00E+00	<i>O2</i>	-1,40E-06
<i>N2</i>	-2,57E-11	<i>CH2CO</i>	0,00E+00	<i>NO</i>	-2,66E-02
<i>CO2</i>	-4,02E-07	<i>HOCN</i>	0,00E+00	<i>N2O</i>	-5,54E+01
<i>H2O</i>	-1,75E-04	<i>N2</i>	-7,83E-10	<i>CO</i>	-4,91E+02
<i>NO</i>	-3,23E-02	<i>CO2</i>	-9,16E-09	<i>C4H2</i>	-4,99E+02
<i>N2O</i>	-4,15E+02	<i>O2</i>	-4,37E-04	<i>CH3CN</i>	-4,99E+02
<i>H2</i>	-6,31E+02	<i>NO</i>	-5,29E-02	<i>HNCO</i>	-5,50E+02
<i>CO</i>	-6,31E+02	<i>N2O</i>	-7,63E+02	<i>FC9H17C</i>	-5,69E+02
<i>FC9H17C</i>	-6,50E+02	<i>FC9H17C</i>	-8,63E+02	<i>OH</i>	-8,12E+02
<i>HCN</i>	-1,79E+03	<i>H2</i>	-2,59E+03	<i>STYREN</i>	-9,05E+02
<i>HNCO</i>	-4,23E+03	<i>CO</i>	-2,59E+03	<i>AC3H5</i>	-1,98E+03
<i>C4H2</i>	-9,83E+03	<i>HCN</i>	-4,34E+03	<i>C2H2</i>	-4,02E+03
<i>STYREN</i>	-1,52E+04	<i>HNCO</i>	-6,98E+03	<i>NH3</i>	-4,61E+03
<i>NH3</i>	-1,66E+04	<i>C4H2</i>	-1,03E+04	<i>NO2</i>	-6,53E+03
<i>CH4</i>	-1,70E+04	<i>AC3H5</i>	-1,25E+04	<i>PHCH2OH</i>	-7,18E+03
<i>TOLUEN</i>	-1,78E+04	<i>STYREN</i>	-1,51E+04	<i>CH4</i>	-7,38E+03
<i>PHHCO</i>	-1,78E+04	<i>TOLUEN</i>	-2,42E+04	<i>PC3H4</i>	-8,09E+03
<i>C2H2</i>	-2,10E+04	<i>NH3</i>	-3,34E+04	<i>H2</i>	-8,66E+03
<i>C4H6</i>	-2,74E+04	<i>PHCH2OH</i>	-3,40E+04	<i>C2H4</i>	-9,31E+03
<i>PC3H4</i>	-3,54E+04	<i>CH3CN</i>	-3,40E+04	<i>C4H6</i>	-9,57E+03
<i>C2H6</i>	-4,24E+04	<i>CH4</i>	-3,77E+04	<i>TOLUEN</i>	-1,14E+04
<i>C6H5O</i>	-4,24E+04	<i>C5H4O</i>	-3,79E+04	<i>HOCN</i>	-1,23E+04
<i>HOCN</i>	-4,45E+04	<i>C2H2</i>	-4,46E+04	<i>AC3H4</i>	-1,80E+04
<i>C2H4</i>	-4,90E+04	<i>C4H6</i>	-5,11E+04	<i>C6H6</i>	-1,95E+04
<i>C5H4O</i>	-5,19E+04	<i>PC3H4</i>	-5,99E+04	<i>CH2CO</i>	-2,06E+04
<i>CH2CO</i>	-6,13E+04	<i>C2H4</i>	-6,77E+04	<i>C3H6</i>	-2,35E+04
<i>CH3CN</i>	-6,42E+04	<i>CH2O</i>	-9,96E+04	<i>C2H6</i>	-2,37E+04
<i>AC3H4</i>	-7,38E+04	<i>AC3H4</i>	-1,49E+05	<i>PHHCO</i>	-2,37E+04
<i>CH2O</i>	-8,84E+04	<i>C6H6</i>	-1,51E+05	<i>C5H4O</i>	-2,51E+04
<i>C3H6</i>	-9,49E+04	<i>NO2</i>	-1,54E+05	<i>CH3OH</i>	-2,58E+04
<i>HONO</i>	-1,03E+05	<i>C3H6</i>	-1,61E+05	<i>CH3</i>	-4,62E+04
<i>C4H4</i>	-1,25E+05	<i>O</i>	-1,94E+05	<i>NH2</i>	-4,80E+04
<i>NH2</i>	-1,47E+05	<i>NH2</i>	-2,01E+05	<i>C4H4</i>	-5,44E+04
<i>OH</i>	-1,54E+05	<i>C4H4</i>	-2,29E+05	<i>PHCH2</i>	-6,43E+04
<b>PHC3H7</b>	-1,86E+05	<i>C3H2</i>	-3,27E+05	<i>NCO</i>	-6,75E+04
<i>NO2</i>	-2,08E+05	<i>NCO</i>	-3,57E+05	<i>HO2</i>	-7,87E+04
<i>C3H2</i>	-2,22E+05	<i>HNO</i>	-3,88E+05	<i>HNO</i>	-8,22E+04
<i>H2CN</i>	-2,57E+05	<i>PHCH2</i>	-4,36E+05	<i>C3H2</i>	-9,99E+04
<b>NC10H22</b>	-2,68E+05	<i>H</i>	-4,84E+05	<i>O</i>	-1,01E+05
<i>NCO</i>	-3,15E+05	<i>HONO</i>	-6,04E+05	<i>NC4H3</i>	-1,12E+05
<i>HNO</i>	-3,27E+05	<i>H2CN</i>	-6,46E+05	<i>C3H3</i>	-1,24E+05
<i>O</i>	-3,79E+05	<i>N</i>	-7,25E+05	<i>NH</i>	-1,73E+05
<b>CYC9H18</b>	-3,79E+05	<i>NH</i>	-7,68E+05	<b>CYC9H18</b>	-1,77E+05
<i>PHCH2</i>	-4,80E+05	<b>NC10H22</b>	-7,72E+05	<i>C6H5</i>	-1,79E+05

<i>N</i>	-5,72E+05	<b>CYC9H18</b>	-7,99E+05	<i>H</i>	-3,66E+05
<i>NH</i>	-5,79E+05	<i>C6H5</i>	-8,00E+05	<i>IC4H3</i>	-4,78E+05
<i>H</i>	-6,11E+05	<b>PHC3H7</b>	-8,33E+05	<i>N</i>	-5,83E+05
EC9H17C	-6,51E+05	<i>IC4H3</i>	-1,09E+06	<b>NC10H22</b>	-6,46E+05
<i>C6H6</i>	-8,12E+05	<i>NC4H3</i>	-1,12E+06	<i>H2CN</i>	-8,16E+05
C5H4OH	-8,81E+05	<i>C6H5O</i>	-1,37E+06	<i>HONO</i>	-9,39E+05
<i>C3H3</i>	-1,13E+06	<i>C3H3</i>	-1,49E+06	<i>HCCO</i>	-9,45E+05
C2H5	-1,73E+06	<i>HCCO</i>	-1,95E+06	<i>C5H5</i>	-1,10E+06
<i>IC4H3</i>	-1,86E+06	C5H4OH	-2,00E+06	<b>PHC3H7</b>	-1,35E+06
<i>HCCO</i>	-1,91E+06	C2H5	-2,29E+06	C2H5	-1,50E+06
NC4H5	-2,14E+06	CH2	-2,71E+06	CH2	-2,09E+06
C2H3	-2,41E+06	CN	-4,46E+06	C5H4OH	-2,58E+06
CH2	-2,45E+06	C2H3	-4,76E+06	<i>C6H5O</i>	-3,02E+06
<i>NC4H3</i>	-2,72E+06	EC9H17C	-5,34E+06	CN	-3,69E+06
<i>C5H5</i>	-4,85E+06	C5H5	-6,82E+06	C2H3	-6,18E+06
CN	-5,53E+06	HCO	-8,32E+06	C2H	-7,40E+06
HCO	-7,14E+06	C2H	-9,40E+06	HCO	-7,95E+06
NC3H7	-8,54E+06	NC4H5	-1,38E+07	EC9H17C	-9,17E+06
CH3O	-1,31E+07	CH2OH	-1,88E+07	CH2OH	-1,88E+07
CH2OH	-1,91E+07	NC3H7	-2,17E+07	CH	-2,24E+07
CH2HCO	-2,86E+07	CH3O	-2,28E+07	NC4H5	-2,30E+07
CH	-3,02E+07	CH	-2,42E+07	CH3O	-2,31E+07
PC4H9	-3,53E+07	NNH	-1,19E+08	NC3H7	-2,74E+07
DC10H21	-3,83E+07	SCH2	-1,21E+08	NNH	-1,12E+08
C2H	-7,35E+07	DC10H21	-1,37E+08	SCH2	-1,18E+08
APHC2H4	-1,11E+08	PC4H9	-1,38E+08	DC10H21	-1,88E+08
CPHC3H6	-1,17E+08	CH2HCO	-1,78E+08	PC4H9	-1,96E+08
SCH2	-1,33E+08	APHC2H4	-5,91E+08	CH2HCO	-2,84E+08
NNH	-1,49E+08	CPHC3H6	-6,22E+08	APHC2H4	-9,09E+08
AC7H15	-2,61E+08	EC10H21	-9,99E+08	CPHC3H6	-9,54E+08
AC8H17	-2,61E+08	AC7H15	-1,03E+09	EC10H21	-1,30E+09
EC10H21	-3,68E+08	AC8H17	-1,03E+09	AC7H15	-1,47E+09
BC6H13	-5,33E+08	<i>CC9H17C</i>	-1,69E+09	AC8H17	-1,47E+09
AC5H11	-5,89E+08	BC6H13	-1,99E+09	BC6H13	-2,75E+09
<i>CC9H17C</i>	-6,95E+08	AC5H11	-2,32E+09	AC5H11	-3,30E+09
AC6H13	-3,48E+09	AC6H13	-6,68E+09	AC6H13	-8,06E+09
PHCO	-3,95E+09	AC10H21	-8,43E+09	AC10H21	-9,85E+09
AC10H21	-4,61E+09	CC10H21	-9,31E+09	CC10H21	-1,08E+10
CC10H21	-5,34E+09	PHCO	-1,61E+10	PHCO	-2,31E+10
C2H2OH	-8,59E+10	C2H2OH	-3,28E+11	C2H2OH	-4,63E+11
APHC3H6	-6,13E+11	APHC3H6	-1,14E+12	APHC3H6	-1,34E+12

**Tableau V-5 :** Répartition des valeurs propres d'un mécanisme squelettique du kérosène (91 espèces, 694 réactions) pour 3 temps de séjour ( $1,66 \cdot 10^{-3}$ ,  $10^{-2}$  et 1,0 s) à  $P = 0,5$  bar,  $\phi = 0,5$  et  $T_e = 300K$ .

Le classement par ordre décroissant des valeurs propres ne montre aucune variation brutale permettant l'identification du lot des espèces différentielles et celui des stationnaires. Effectivement, en ce qui concerne les modèles cinétiques de taille importante, comme le nôtre, une variation « régulière » de  $10^{-2}$  à  $10^{12} \text{ s}^{-1}$  (en valeur absolue) des  $\lambda_k$  est observée. En conséquence, tout comme pour le critère  $K'$ , la construction d'un schéma réduit basé sur la détection automatique d'une zone de coupure est exclue. Une solution reste le choix arbitraire de la limite. Pour ce faire, en nous appuyant sur l'analyse des temps caractéristiques  $\tau_i$  (en gros l'inverse des valeurs propres), nous avons utilisé l'inverse de la valeur de coupure du

temps, soit  $\lambda_{cut} = 10^5 \text{ s}^{-1}$ , proposée par ces derniers (c'est la valeur utilisée par défaut dans KINALC).

La limite correspondant à cette valeur est représentée par un trait plein épais dans le tableau V-5 pour les trois temps de séjour. On y remarque que des espèces importantes, comme les 3 réactifs (n-décane, n-propylbenzène et n-propylcyclohexane), des radicaux (H, O, OH) se trouvent exclues du lot des espèces différentielles. Il est alors nécessaire d'appliquer une nouvelle règle de sélection empirique, fixant la coupure après la dernière espèce devant impérativement appartenir au lot des espèces différentielles. Cette sélection conduit à des valeurs de  $\lambda_{cut}$  différentes selon le temps de séjour considéré. Dans l'exemple choisi les séparations sont symbolisées par un trait rouge, on trouve ainsi pour  $\lambda_{cut}$  :

- $-3,80 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$  (ou  $\sim 2,63 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ ) au voisinage de la limite d'extinction,
- $-8,34 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$  (ou  $\sim 1,20 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ ) pour le temps de séjour intermédiaire,
- $-1,36 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  (ou  $\sim 7,35 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ ) au voisinage de l'équilibre.

Cette variation de la valeur propre de coupure (ou du temps caractéristique correspondant) met bien en évidence la difficulté d'un choix unique sur tout le domaine, donc du nombre total d'espèces différentielles à prendre en compte (49, 53 ou 59). L'utilisation d'une telle règle empirique, conduisant à sélectionner un nombre d'espèces différentielles trop important (il suffit que l'espèce soit considérée une seule fois comme différentielle, sur tout le domaine, pour faire partie du lot), ne permet pas dans la pratique l'élaboration rapide d'un schéma réduit final.

### V-2.2. Sélection grâce aux deux pointeurs CSP (critères $Qp_k$ et $I_k$ )

Nous avons poursuivi nos objectifs d'automatisation en testant la méthode de sélection basée sur le pointeur de radicaux intégré  $I_k$ . Ce critère permet lui aussi d'effectuer le classement des espèces suivant leur probabilité de stationnarité. Mais là encore, la détection d'une limite entre les espèces stationnaires et différentielles n'est toujours pas automatisable. En effet, comme on peut le constater dans le tableau V-6, il est de nouveau nécessaire de recourir à une valeur de coupure choisie arbitrairement. Ainsi selon cette procédure, le nombre minimum d'espèces différentielles requises est de 57. Il correspond à toutes les

espèces classées jusqu'au n-propylbenzène, réactif indispensable au système (mécanisme Kdiff57).

Si l'on compare avec le mécanisme réduit Kdiff40, précédemment élaboré à partir du critère  $K'$ , les résultats relatifs à Kdiff57 sont paradoxalement moins bons. Dans cette configuration, où le nombre d'espèces différentielles considérées est le plus grand (17 supplémentaires), une perte de 1,5 point sur le gain en temps de calcul moyen (10,8 au lieu de 12,3) est constatée.

Par ailleurs, on aurait pu s'attendre à une amélioration de la prédictivité. En effet, parmi les 57 espèces différentielles retenues sont incluses les 40 correspondant au schéma Kdiff40 (espèces repérées en italique dans le tableau V-6). Or, ce n'est pas le cas. Bien au contraire, on observe une diminution d'environ 2 points de la prédictivité pour le schéma Kdiff57 (62,0% au lieu de 64,2%). Cette légère dégradation du potentiel prédictif pourrait s'expliquer par une mauvaise évaluation de la probabilité de stationnarité de certaines espèces, dont la sélection rend plus difficile la résolution numérique du système d'équations différentielles.

1	<i>N2</i>	3,95E-05	32	<i>HNCO</i>	6,94E+07	63	<i>CC10H21</i>	1,07E+10
2	<i>CO2</i>	7,54E-02	33	<i>C5H5</i>	7,51E+07	64	<i>DC10H21</i>	1,08E+10
3	<i>H2O</i>	3,36E-01	34	<i>C3H2</i>	1,14E+08	65	<i>AC8H17</i>	1,15E+10
4	<i>CO</i>	9,12E+01	35	<i>C3H3</i>	1,42E+08	66	<i>CH3O</i>	1,31E+10
5	<i>O2</i>	1,67E+02	36	<i>TOLUEN</i>	1,85E+08	67	<i>EC10H21</i>	1,84E+10
6	<i>OH</i>	5,57E+03	37	<i>C2H5</i>	2,39E+08	68	<i>C6H5O</i>	2,13E+10
7	<i>C2H2</i>	5,56E+04	38	<i>HCO</i>	2,42E+08	69	<i>BC6H13</i>	2,15E+10
8	<i>C2H4</i>	9,28E+04	39	<i>PC3H4</i>	2,46E+08	70	<i>AC6H13</i>	2,18E+10
9	<i>CH2O</i>	1,72E+05	40	<i>C2H3</i>	2,59E+08	71	<i>AC5H11</i>	2,21E+10
10	<i>NO</i>	1,75E+05	41	<i>N2O</i>	4,11E+08	72	<i>AC10H21</i>	3,53E+10
11	<i>CH2CO</i>	2,08E+05	42	<i>CH3OH</i>	5,18E+08	73	<i>NO2</i>	3,77E+10
12	<i>FC9H17C</i>	4,59E+05	43	<i>NC10H22</i>	7,28E+08	74	<i>AC7H15</i>	7,19E+10
13	<i>CC9H17C</i>	6,28E+05	44	<i>PHCH2OH</i>	8,16E+08	75	<i>NH3</i>	1,43E+11
14	<i>HCN</i>	1,71E+06	45	<i>C4H6</i>	1,18E+09	76	<i>CPHC3H6</i>	1,73E+11
15	<i>HO2</i>	1,90E+06	46	<i>PHHCO</i>	1,42E+09	77	<i>NCO</i>	1,86E+11
16	<i>PHCH2</i>	2,53E+06	47	<i>NC3H7</i>	1,52E+09	78	<i>HNO</i>	2,17E+11
17	<i>CH3</i>	3,03E+06	48	<i>PC4H9</i>	1,71E+09	79	<i>CH3CN</i>	2,30E+11
18	<i>H2</i>	3,20E+06	49	<i>NC4H3</i>	1,72E+09	80	<i>NH2</i>	2,34E+11
19	<i>O</i>	3,57E+06	50	<i>CYC9H18</i>	2,00E+09	81	<i>NH</i>	5,94E+11
20	<i>STYREN</i>	8,35E+06	51	<i>CH2OH</i>	2,21E+09	82	<i>SCH2</i>	5,98E+11
21	<i>AC3H5</i>	1,42E+07	52	<i>CH2HCO</i>	2,49E+09	83	<i>NNH</i>	8,10E+11
22	<i>C4H2</i>	1,69E+07	53	<i>CH2</i>	2,69E+09	84	<i>PHCO</i>	1,26E+12
23	<i>CH4</i>	2,37E+07	54	<i>C6H6</i>	2,98E+09	85	<i>C2H2OH</i>	1,85E+13
24	<i>HCCO</i>	2,52E+07	55	<i>C5H4OH</i>	3,30E+09	86	<i>CH</i>	3,12E+13
25	<i>H</i>	3,46E+07	56	<i>IC4H3</i>	3,34E+09	87	<i>CN</i>	3,94E+13
26	<i>C5H4O</i>	3,87E+07	57	<i>PHC3H7</i>	4,04E+09	88	<i>HONO</i>	6,05E+13
27	<i>C4H4</i>	4,20E+07	58	<i>C2H</i>	4,20E+09	89	<i>N</i>	6,71E+13
28	<i>C3H6</i>	4,35E+07	59	<i>APHC2H4</i>	6,11E+09	90	<i>APHC3H6</i>	7,61E+13
29	<i>AC3H4</i>	5,23E+07	60	<i>HOCN</i>	6,32E+09	91	<i>H2CN</i>	9,32E+13
30	<i>C2H6</i>	5,49E+07	61	<i>NC4H5</i>	8,17E+09			
31	<i>C6H5</i>	6,88E+07	62	<i>EC9H17C</i>	1,03E+10			

**Tableau V-6 :** Classement des espèces donné par le pointeur CSP intégré.

Le pointeur de radicaux intégré ne semble donc pas constituer non plus un bon critère pour la sélection automatique des espèces :

- nombre d'espèces différentielles trop important pénalisant le  $GC_{moy}$ ,
- classement différent (moins favorable) des espèces stationnaires pénalisant le  $\%P$ .

En fait, on retrouve pour le critère  $I_k$ , les mêmes reproches que ceux formulés pour  $K'$  :

- choix de la limite différentielles/stationnaires par la localisation du dernier réactif,
- absence de sauts caractéristiques dans les valeurs de ce critère,
- donc, automatisation de la méthode de sélection délicate voire impossible.

Dans la méthode CSP, il existe une autre variante de sélection. Elle utilise le critère  $Qp_k$ , borné de 0 à 1 qui constitue un indicateur de la probabilité de stationnarité d'une espèce pour un temps de séjour donné. Lorsqu'une espèce est stationnaire,  $Qp_k$  sera voisin de 1, alors que pour une espèce différentielle,  $Qp_k$  tendra vers 0. Sur l'ensemble du domaine paramétrique, si la somme des  $Qp_k$  de cette espèce sur la totalité des  $N$  points de temps de séjour, symbolisé

par la formule  $\Omega = \left( \frac{\sum_{k=1}^N Qp_{k,i}}{N} \approx 1 \right)$ , est proche de 1, alors l'espèce  $i$  présentera une forte

probabilité d'être en état stationnaire.

Un premier essai, effectué à  $P = 1\text{bar}$ ,  $\phi = 1,0$  et  $T_e = 900\text{K}$ , a souligné un défaut important de ce critère : les trois réactifs sont identifiés comme stationnaires, alors que ces espèces doivent absolument être incluses dans le lot différentiel. Pour remédier à ce problème de sélection, nous avons été contraints d'imposer au code de calcul la non-stationnarité des réactifs, quelle que soit la valeur de  $Qp_k$ . En tenant compte de cet aménagement, pour l'ensemble des conditions paramétriques, nous avons classé par ordre croissant les valeurs de  $\Omega$  obtenus pour les 91 espèces (tableau V-7). Les 5 premières espèces (en rouge) correspondent à la condition de non-stationnarité imposée.

1	O2	0,00%	32	NO2	99,09%	63	AC7H15	99,70%
2	NC10H22	0,00%	33	CH2	99,16%	64	AC8H17	99,70%
3	PHC3H7	0,00%	34	C2H6	99,17%	65	CPHC3H6	99,70%
4	CYC9H18	0,00%	35	N	99,21%	66	C5H4OH	99,70%
5	N2	0,00%	36	CN	99,32%	67	EC9H17C	99,70%
6	CO2	0,07%	37	HO2	99,41%	68	BC6H13	99,71%
7	NO	0,67%	38	NH	99,43%	69	IC4H3	99,77%
8	CO	1,25%	39	HNO	99,45%	70	C2H5	99,77%
9	H2O	3,02%	40	PC3H4	99,46%	71	C2H	99,78%
10	HCN	4,00%	41	C6H6	99,46%	72	EC10H21	99,79%
11	HNCO	33,38%	42	AC3H4	99,47%	73	C6H5	99,80%
12	H2	42,91%	43	C5H5	99,47%	74	CH	99,80%
13	N2O	48,51%	44	TOLUEN	99,48%	75	NC3H7	99,83%
14	FC9H17C	54,18%	45	CH3OH	99,48%	76	PHCO	99,83%
15	H	56,90%	46	C4H4	99,48%	77	CC10H21	99,84%
16	C2H2	62,23%	47	C4H6	99,48%	78	DC10H21	99,84%
17	CC9H17C	64,89%	48	PHHCO	99,48%	79	APHC2H4	99,85%
18	O	75,41%	49	PHCH2OH	99,48%	80	CH3O	99,86%
19	NH3	81,93%	50	STYREN	99,48%	81	HCCO	99,88%
20	C4H2	82,28%	51	C3H3	99,50%	82	SCH2	99,89%
21	OH	82,33%	52	C3H6	99,52%	83	HCO	99,90%
22	CH4	89,55%	53	HONO	99,53%	84	AC10H21	99,92%
23	C2H4	90,80%	54	AC3H5	99,54%	85	C2H3	99,93%
24	CH3	93,81%	55	PHCH2	99,54%	86	CH2OH	99,93%
25	NH2	97,60%	56	NC4H3	99,62%	87	AC6H13	99,93%
26	CH2O	98,22%	57	C6H5O	99,68%	88	CH2HCO	99,93%
27	HOCN	98,35%	58	C5H4O	99,68%	89	C2H2OH	99,93%
28	CH2CO	98,55%	59	H2CN	99,68%	90	APHC3H6	99,96%
29	NCO	98,57%	60	PC4H9	99,70%	91	NNH	100,00%
30	CH3CN	98,74%	61	NC4H5	99,70%			
31	C3H2	98,78%	62	AC5H11	99,70%			

Tableau V-7 : Classement des espèces donné par le pointeur CSP (non intégré).

Ainsi que dans les cas précédents, l'évolution de ce critère ne laisse apparaître aucun saut caractéristique suggérant une sélection possible. A nouveau, il faut recourir à l'étude pas à pas de la meilleure configuration en fonction du pourcentage de coupure choisi ( $\Omega_c$ ). Les valeurs choisies, relatives à 9 mécanismes (utilisés avec 11 itérations), ainsi que les résultats correspondants, sont récapitulés dans le tableau V-8.

Schéma Réduit	$\Omega_c$	Nombre d'itérations	Gain en temps de calcul moyen	Prédictivité	Critère $Er$
22	90,0%	11	-	35,6%	-
24	97,5%	11	-	39,9%	-
31	99,0%	11	-	42,4%	-
36	99,4%	11	12,3	43,3%	5,33
50	99,5%	11	11,8	54,8%	6,47
<b>55</b>	<b>99,6%</b>	<b>11</b>	<b>11,3</b>	<b>62,5%</b>	<b>7,06</b>
67	99,7%	11	8,9	64,3%	5,72
73	99,8%	11	8,8	63,2%	5,56
83	99,9%	11	7,1	63,8%	4,53

 Tableau V-8 : Résultats pour différents mécanismes réduits obtenus avec le pointeur de radicaux  $\Omega$ .

Si l'on suit l'évolution du paramètre prédictivité, il apparaît clairement que le nombre d'espèces différentielles (ou la valeur de  $\Omega_c$ ) doit être supérieur à 50 ( $\Omega_c > 99,5\%$ ) pour atteindre une précision convenable (voisine de 60%) sur les concentrations des espèces. Le mécanisme sélectionné contient donc 55 espèces différentielles avec  $GC_{moy} = 11,3$  et  $\%P = 62,5\%$ . Pour cette configuration, la prédictivité reste comparable à celle obtenue avec les techniques précédentes (critère  $K'$  ou pointeur de radicaux intégré  $I_k$ ). La baisse observée sur  $GC_{moy}$  (comme avec  $I_k$ ) provient du nombre plus élevé d'espèces différentielles prises en compte dans le système différentiel.

Les valeurs médiocres obtenues pour les 4 premiers mécanismes Kdiff22 – 24 – 31 et 36 peuvent s'expliquer par l'absence de certaines espèces *indispensables* parmi le lot des différentielles (espèces décalées vers la droite dans le tableau V-7), telles :  $C_2H_4$ ,  $CH_3$ ,  $CH_2O$ ,  $C_2H_6$ ,  $HO_2$ ,  $C_6H_6$ , le toluène,  $C_4H_6$ ,  $C_3H_6$  et HCO (reconnues comme importantes dans la combustion et servant de référence à la validation finale des schémas réduits). En effet, le meilleur des schémas réduits de la série, Kdiff55, dans lequel on retrouve toutes les espèces (hormis HCCO et HCO) du modèle Kdiff40 (critère  $K'$ ) conduit à une prédictivité équivalente. Dans ce cas de figure, on peut donc supposer que pour améliorer la précision avec de nouveaux schémas, il faudrait au moins prendre en compte les 40 espèces différentielles du mécanisme Kdiff40. Un test effectué sur Kdiff55, auquel on a rajouté les 2 espèces, HCCO et HCO (soit 57 espèces), conduisant à une meilleure prédictivité (1 point de plus : 63,5%, qui se rapproche des 64,2% de Kdiff40), tend à renforcer notre supposition.

Bien que l'obtention du schéma réduit ait été simplifiée (diminution du nombre de tests du fait de l'évolution des valeurs de  $\Omega$  sur un domaine restreint  $[0 ; 1]$ , au lieu de  $]-\infty ; +\infty[$ ), et que des résultats équivalents à ceux de Kdiff40 (critère  $K'$ ) aient pu être acquis, cette technique ne satisfait pas non plus nos objectifs de séparation automatique des deux types d'espèces (différentielles/stationnaires). En résumé, les principaux reproches de la méthode de sélection selon  $Qp_k$  sont les suivants :

- absence de saut caractéristique dans l'évolution des valeurs de ce critère,
- condition supplémentaire à appliquer dans le programme de calcul : la non-stationnarité des réactifs,
- nombre trop important d'espèces différentielles entraînant une diminution du gain en temps de calcul.



### V-2.3. Sélection par le biais de l'erreur induite (critère QSSAS)

Pour cette troisième approche d'automatisation de la sélection, nous avons été amenés à considérer la technique des erreurs induites par les espèces choisies comme stationnaires (option QSSAS de KINALC). Comme nous l'avons décrit de façon détaillée dans le chapitre I, la mise en état-stationnaire d'une espèce peut induire une erreur importante sur l'ensemble des autres espèces du système (*Turányi et al., 1993*). Autrement dit, plus l'erreur associée à une espèce considérée *a priori* comme stationnaire sera faible, plus sa probabilité d'être réellement stationnaire sera grande.

Dans le tableau V-9, sont présentées les valeurs des erreurs induites obtenues suite à la mise en EQS des 91 espèces considérées, pour un cas particulier ( $P = 1\text{bar}$ ,  $\phi = 1,0$  et  $T_e = 900\text{K}$ ), à 3 temps de séjour :

- $1,83 \cdot 10^{-5}$  s (point proche de l'extinction),
- $10^{-3}$  s (point proche de l'équilibre),
- $2 \cdot 10^{-5}$  s (point intermédiaire entre ces deux derniers).

Un classement par ordre décroissant montre que le choix des réactifs, des produits et mêmes de certains intermédiaires, comme espèces stationnaires, introduit une erreur bien supérieure à 100%. Cependant, là encore, la détermination d'une limite sur l'erreur autorisée dépend de l'utilisateur. Lorsque cette limite, symbolisée par un trait dans chaque colonne, est fixée à 1%, des espèces seront exclues du système différentiel (ainsi à  $\tau = 10^{-3}$  s :  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$  et  $\text{OH}$ , repérés en gras). Le même problème se pose pour certains autres composés comme le radical phenoxy  $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}$ , se comportant soit comme stationnaire (à  $\tau = 1,83 \cdot 10^{-5}$  s et  $2,0 \cdot 10^{-5}$  s), soit comme différentiel ( $\tau = 10^{-3}$  s). Inversement, le benzène, le formaldéhyde, ... présents en tant qu'espèces différentielles pour les deux premiers temps de séjour disparaissent du lot pour le troisième temps.

1,83E-05 s		2,00E-05 s		1,00E-03 s		Erreur max	
CO2	-6,22E+02	CO2	-4,10E+02	NC10H22	1,00E+02	CO2	6,22E+02
CO	-2,55E+02	NO	-2,01E+02	PHC3H7	1,00E+02	CO	2,55E+02
NO	-2,01E+02	CO	-1,96E+02	CYC9H18	9,87E+01	NO	2,01E+02
NC10H22	1,00E+02	NC10H22	1,00E+02	N2	3,41E+01	NC10H22	1,00E+02
PHC3H7	1,00E+02	PHC3H7	1,00E+02	NO	-2,39E+01	PHC3H7	1,00E+02
<b>H2O</b>	<b>-8,61E+01</b>	CYC9H18	8,56E+01	CO2	-3,77E+00	CYC9H18	9,87E+01
CYC9H18	8,54E+01	O2	5,90E+01	O2	2,53E+00	H2O	8,61E+01
O2	6,91E+01	<b>H2O</b>	<b>-5,64E+01</b>	CO	-2,45E+00	O2	6,91E+01
HCN	-4,87E+01	HCN	-3,21E+01	<b>C6H5O</b>	<b>1,71E+00</b>	HCN	4,87E+01
N2O	-3,06E+01	N2	2,12E+01	C6H6	-5,36E-01	N2	3,41E+01

N2	1,89E+01	N2O	-1,99E+01	<b>H2O</b>	<b>-5,24E-01</b>	N2O	3,06E+01
HNCO	-1,82E+01	HNCO	-1,28E+01	HCN	-2,78E-01	HNCO	1,82E+01
H2	-1,05E+01	H2	-7,48E+00	EC9H17C	2,30E-01	H2	1,05E+01
NH3	-8,06E+00	AC3H5	-5,87E+00	HNCO	-1,69E-01	NH3	8,06E+00
C4H2	-7,88E+00	NH3	-5,75E+00	STYREN	-1,60E-01	C4H2	7,88E+00
AC3H5	-7,73E+00	C4H2	-5,50E+00	N2O	-1,49E-01	AC3H5	7,73E+00
C2H4	-6,99E+00	C2H4	-4,92E+00	C3H3	1,30E-01	C2H4	6,99E+00
C2H2	-6,98E+00	C2H2	-4,74E+00	AC3H4	-1,16E-01	C2H2	6,98E+00
PC3H4	-5,67E+00	PC3H4	-3,86E+00	C6H5	-9,82E-02	PC3H4	5,67E+00
STYREN	-4,42E+00	STYREN	-3,18E+00	NC4H5	8,04E-02	STYREN	4,42E+00
CH4	-3,86E+00	CH4	-2,64E+00	H2	-7,62E-02	CH4	3,86E+00
CH3OH	-3,39E+00	<b>H</b>	<b>-2,54E+00</b>	AC3H5	7,54E-02	CH3OH	3,39E+00
TOLUEN	-3,31E+00	CH3OH	-2,47E+00	APHC3H6	7,47E-02	TOLUEN	3,31E+00
CH2O	-2,99E+00	TOLUEN	-2,37E+00	C2H4	-6,96E-02	CH2O	2,99E+00
C4H6	-2,87E+00	CH2O	-2,20E+00	NH3	-6,32E-02	C4H6	2,87E+00
C5H4O	-2,79E+00	<b>O</b>	<b>-2,05E+00</b>	PHCH2OH	6,02E-02	C5H4O	2,79E+00
PHCH2OH	-2,72E+00	C5H4O	-2,03E+00	C2H2	-5,15E-02	PHCH2OH	2,72E+00
<b>H</b>	<b>-2,64E+00</b>	C4H6	-1,89E+00	C4H2	-4,47E-02	<b>H</b>	2,64E+00
AC3H4	-2,52E+00	<b>OH</b>	<b>-1,75E+00</b>	<b>H</b>	<b>-4,02E-02</b>	AC3H4	2,52E+00
PHHCO	-2,26E+00	C3H2	-1,73E+00	AC10H21	3,95E-02	PHHCO	2,26E+00
C3H2	-2,20E+00	AC3H4	-1,67E+00	CH2O	-3,62E-02	C3H2	2,20E+00
NH2	-2,20E+00	NH2	-1,63E+00	PHHCO	3,55E-02	NH2	2,20E+00
<b>O</b>	<b>-2,14E+00</b>	PHCH2OH	-1,62E+00	NC4H3	3,54E-02	<b>O</b>	2,14E+00
OH	-2,09E+00	PHHCO	-1,57E+00	<b>O</b>	<b>-3,48E-02</b>	OH	2,09E+00
C2H6	-2,03E+00	N	-1,51E+00	<b>OH</b>	<b>-3,15E-02</b>	C2H6	2,03E+00
C3H6	-1,89E+00	C2H6	-1,42E+00	EC10H21	3,15E-02	C3H6	1,89E+00
C6H6	-1,89E+00	C3H6	-1,27E+00	CH4	-3,14E-02	C6H6	1,89E+00
N	-1,73E+00	C6H6	-1,24E+00	TOLUEN	-2,95E-02	N	1,73E+00
HOCN	-1,52E+00	HOCN	-1,09E+00	C3H2	2,94E-02	C6H5O	1,71E+00
C4H4	-1,50E+00	C4H4	-1,09E+00	N	-2,89E-02	HOCN	1,52E+00
CH3	-1,34E+00	CH3	-9,82E-01	NH2	-2,80E-02	C4H4	1,50E+00
H2CN	-1,08E+00	H2CN	-8,85E-01	CH3	-2,04E-02	CH3	1,34E+00
CH3CN	-9,95E-01	NO2	-7,35E-01	C5H5	-2,02E-02	H2CN	1,08E+00
NCO	-9,76E-01	NCO	-7,32E-01	NO2	-2,01E-02	CH3CN	9,95E-01
NO2	-9,68E-01	CH3CN	-7,22E-01	HOCN	-1,88E-02	NCO	9,76E-01
NH	-8,15E-01	NH	-6,06E-01	C4H4	-1,86E-02	NO2	9,68E-01
PHCH2	-7,24E-01	PHCH2	-5,48E-01	IC4H3	-1,76E-02	NH	8,15E-01
CH2CO	-7,05E-01	CH2CO	-5,13E-01	DC10H21	1,61E-02	PHCH2	7,24E-01
HNO	-6,77E-01	HNO	-5,08E-01	NCO	-1,60E-02	CH2CO	7,05E-01
IC4H3	-5,82E-01	IC4H3	-4,67E-01	CC10H21	1,55E-02	HNO	6,77E-01
C3H3	-4,63E-01	CN	-3,99E-01	PC3H4	-1,37E-02	IC4H3	5,82E-01
CN	-4,42E-01	C3H3	-3,31E-01	CH3CN	-1,31E-02	C3H3	4,63E-01
HO2	-3,86E-01	HO2	-2,95E-01	NH	-1,26E-02	CN	4,42E-01
HONO	-3,54E-01	CH2	-2,80E-01	CH2CO	-1,23E-02	HO2	3,86E-01
CH2	-3,37E-01	HONO	-2,69E-01	PHCH2	-1,17E-02	HONO	3,54E-01
HCCO	-3,28E-01	HCCO	-2,47E-01	CH3OH	-1,09E-02	CH2	3,37E-01
NC4H3	-1,98E-01	CH	-1,80E-01	CN	-9,53E-03	HCCO	3,28E-01
CH	-1,84E-01	CH2OH	-1,68E-01	C3H6	-9,52E-03	EC9H17C	2,30E-01
CH2OH	-1,74E-01	NC4H3	-1,56E-01	C4H6	-9,09E-03	NC4H3	1,98E-01
HCO	-1,64E-01	HCO	-1,37E-01	AC7H15	-8,46E-03	CH	1,84E-01
C2H5	-1,29E-01	C2H5	-9,81E-02	HNO	-8,45E-03	CH2OH	1,74E-01
C5H5	-1,22E-01	C5H5	-8,87E-02	H2CN	-8,04E-03	HCO	1,64E-01
C6H5	-1,09E-01	C6H5	-7,45E-02	C5H4OH	7,95E-03	C2H5	1,29E-01
C2H3	-6,83E-02	C2H3	-5,03E-02	AC8H17	-7,75E-03	C5H5	1,22E-01

C5H4OH	-4,74E-02	C2H	-4,21E-02	C2H	-7,69E-03	C6H5	1,09E-01
NNH	-4,09E-02	NNH	-4,04E-02	C2H6	-7,55E-03	NC4H5	8,04E-02
EC9H17C	-4,08E-02	C5H4OH	-3,51E-02	HO2	-7,20E-03	APHC3H6	7,47E-02
<b>C6H5O</b>	<b>-3,69E-02</b>	NC3H7	-2,76E-02	HCCO	-6,61E-03	C2H3	6,83E-02
NC3H7	-3,48E-02	EC9H17C	-2,71E-02	CH	-6,43E-03	C5H4OH	4,74E-02
C2H	-3,33E-02	<b>C6H5O</b>	<b>-2,33E-02</b>	C5H4O	-5,36E-03	C2H	4,21E-02
SCH2	-2,34E-02	SCH2	-2,10E-02	C2H5	-5,32E-03	NNH	4,09E-02
NC4H5	-1,57E-02	CH3O	-1,12E-02	CH2	-4,83E-03	AC10H21	3,95E-02
CH3O	-1,45E-02	NC4H5	-1,02E-02	CH2OH	-4,79E-03	NC3H7	3,48E-02
PC4H9	-4,66E-03	AC7H15	4,97E-03	AC5H11	-4,19E-03	EC10H21	3,15E-02
FC9H17C	-1,83E-03	APHC2H4	3,73E-03	APHC2H4	-4,07E-03	SCH2	2,34E-02
CH2HCO	-1,80E-03	APHC3H6	3,50E-03	CPHC3H6	3,80E-03	DC10H21	1,61E-02
CC9H17C	-1,49E-03	AC8H17	3,44E-03	PC4H9	-3,41E-03	CC10H21	1,55E-02
EC10H21	-5,23E-04	AC5H11	2,48E-03	CH2HCO	3,11E-03	CH3O	1,45E-02
DC10H21	-4,70E-04	CPHC3H6	2,25E-03	C2H2OH	3,03E-03	AC7H15	8,46E-03
CC10H21	-4,58E-04	PHCO	2,00E-03	AC6H13	-2,98E-03	AC8H17	7,75E-03
CPHC3H6	-4,40E-04	AC6H13	1,47E-03	PHCO	2,92E-03	PC4H9	4,66E-03
APHC3H6	3,21E-04	FC9H17C	-1,44E-03	NC3H7	-1,96E-03	AC5H11	4,19E-03
BC6H13	-2,89E-04	PC4H9	-1,38E-03	C2H3	-1,78E-03	APHC2H4	4,07E-03
APHC2H4	-2,59E-04	C2H2OH	1,36E-03	HONO	-1,48E-03	CPHC3H6	3,80E-03
AC10H21	-2,45E-04	CC9H17C	-1,28E-03	NNH	-1,44E-03	CH2HCO	3,11E-03
AC8H17	-2,41E-04	CH2HCO	-8,69E-04	SCH2	-9,35E-04	C2H2OH	3,03E-03
AC6H13	-1,98E-04	BC6H13	-6,73E-04	HCO	-8,40E-04	AC6H13	2,98E-03
C2H2OH	1,49E-04	DC10H21	-1,93E-04	FC9H17C	-3,17E-04	PHCO	2,92E-03
AC7H15	-7,97E-05	CC10H21	-1,74E-04	CC9H17C	2,99E-04	FC9H17C	1,83E-03
PHCO	6,34E-05	AC10H21	1,33E-04	CH3O	-3,62E-05	CC9H17C	1,49E-03
AC5H11	-7,10E-06	EC10H21	-5,52E-06	BC6H13	3,58E-05	BC6H13	6,73E-04

**Tableau V-9 :** Erreurs relatives induites (en %) par la mise en EQS d'espèces à  $P = 1\text{ bar}$ ,  $\phi = 1,0$ ,  $T_e = 900\text{ K}$  et à 3 temps de séjour ( $1,83 \cdot 10^{-5}\text{ s}$  –  $2 \cdot 10^{-5}\text{ s}$  et  $10^{-3}\text{ s}$ ).

Un moyen de contourner cette difficulté est de ne retenir que l'erreur induite la plus forte (en valeur absolue) pour chaque espèce sur l'ensemble du domaine de temps de séjour, c'est-à-dire dans l'exemple présenté le maximum sur les 3 colonnes. Ce classement, lui aussi par ordre décroissant, correspond à la quatrième colonne du tableau V-9. Ainsi, lorsqu'on accepte une erreur maximum de 1% sur ces valeurs, 43 espèces différentielles sont sélectionnées. Ces mêmes opérations doivent être appliquées sur l'ensemble du domaine paramétrique (pression, richesse et température) pour aboutir au schéma réduit final général. Le résultat de ce classement est donné dans le tableau V-10. Si un seuil de 1% est retenu, le schéma réduit correspondant comprend 74 espèces différentielles (coupure après le radical  $C_2H_3$ , symbolisé en rouge). Ce nombre élevé peut être réduit à 59 (coupure au niveau du trait) si l'on augmente le seuil d'erreur à 7%. Le radical H, primordial dans les systèmes en combustion, doit impérativement faire partie du lot d'espèces différentielles. Ce radical semble en fait marquer la limite entre les deux lots d'espèces.

1	CO2	5,83E+05	32	<b>HOCN</b>	<b>2,18E+02</b>	63	AC7H15	3,84E+00
2	H2O	5,87E+04	33	CH2CO	1,53E+02	64	AC8H17	3,48E+00
3	<b>N2O</b>	<b>2,48E+04</b>	34	<b>NO2</b>	<b>1,47E+02</b>	65	CH2	2,50E+00
4	CO	1,68E+04	35	C3H2	1,40E+02	66	PC4H9	2,03E+00
5	HCN	6,84E+03	36	<b>HNO</b>	<b>1,00E+02</b>	67	NC4H5	2,00E+00
6	<b>HNCO</b>	<b>5,25E+03</b>	37	NC10H22	1,00E+02	68	CN	1,93E+00
7	NO	3,14E+03	38	PHC3H7	1,00E+02	69	AC5H11	1,89E+00
8	C2H2	2,00E+03	39	CYC9H18	1,00E+02	70	APHC2H4	1,45E+00
9	<b>NH3</b>	<b>1,68E+03</b>	40	O2	9,96E+01	71	HCO	1,22E+00
10	H2	1,60E+03	41	N2	9,09E+01	72	CH	1,16E+00
11	C4H2	1,52E+03	42	C3H3	5,75E+01	73	AC6H13	1,12E+00
12	PC3H4	1,50E+03	43	PHCH2	5,02E+01	74	<b>C2H3</b>	<b>1,07E+00</b>
13	CH4	1,48E+03	44	CH3	4,68E+01	75	APHC3H6	9,72E-01
14	PHCH2OH	1,43E+03	45	HO2	4,24E+01	76	CPHC3H6	9,66E-01
15	C4H6	1,23E+03	46	<b>NCO</b>	<b>3,25E+01</b>	77	CH2OH	9,25E-01
16	C2H4	1,06E+03	47	<b>NH</b>	<b>2,84E+01</b>	78	CH3O	5,69E-01
17	STYREN	9,03E+02	48	<b>NC4H3</b>	<b>2,39E+01</b>	79	NC3H7	5,48E-01
18	C6H6	8,31E+02	49	<b>C6H5</b>	<b>1,96E+01</b>	80	NNH	5,14E-01
19	AC3H4	8,09E+02	50	<b>PHCO</b>	<b>1,80E+01</b>	81	SCH2	2,62E-01
20	TOLUEN	7,15E+02	51	OH	1,58E+01	82	C2H	2,60E-01
21	AC3H5	6,08E+02	52	<b>C5H5</b>	<b>1,57E+01</b>	83	EC10H21	2,45E-01
22	<b>CH3OH</b>	<b>5,55E+02</b>	53	<b>HONO</b>	<b>1,26E+01</b>	84	CH2HCO	1,58E-01
23	<b>C5H4O</b>	<b>5,17E+02</b>	54	<b>H2CN</b>	<b>9,51E+00</b>	85	CC10H21	1,18E-01
24	C2H6	5,03E+02	55	<b>C5H4OH</b>	<b>9,35E+00</b>	86	DC10H21	1,16E-01
25	C3H6	4,79E+02	56	O	9,15E+00	87	AC10H21	7,66E-02
26	CH2O	4,55E+02	57	<b>IC4H3</b>	<b>7,74E+00</b>	88	FC9H17C	6,57E-02
27	<b>PHHCO</b>	<b>4,09E+02</b>	58	N	<b>7,41E+00</b>	89	CC9H17C	6,56E-02
28	<b>C4H4</b>	<b>2,71E+02</b>	59	H	7,30E+00	90	C2H2OH	4,57E-02
29	<b>NH2</b>	<b>2,58E+02</b>	60	EC9H17C	5,20E+00	91	BC6H13	2,39E-02
30	<b>C6H5O</b>	<b>2,50E+02</b>	61	C2H5	4,60E+00			
31	<b>CH3CN</b>	<b>2,49E+02</b>	62	HCCO	3,94E+00			

Tableau V-10 : Classement des espèces d'après le critère *QSSAS*.

La comparaison avec les résultats obtenus selon le critère *K'* montre que certaines espèces, considérées comme stationnaires, deviennent différentielles avec ce nouveau critère *QSSAS*. Parmi celles-ci, citons des composés comme : N<sub>2</sub>O, HNCO, NH<sub>3</sub> ..., des espèces (stables ou radicalaires) hydrocarbonées : CH<sub>3</sub>OH, C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>O, PHHCO ... (repérés en gras dans le tableau V-10). Le point commun entre toutes ces espèces est leur fraction molaire extrêmement faible (le plus souvent inférieure à 10<sup>-8</sup>) accompagnée d'une erreur induite importante (≥ 100%). Comme nous l'avons précédemment souligné, une plus forte erreur constatée sur une espèce, dont la fraction molaire est inférieure à la ppm, n'a pas de répercussion significative sur les prévisions obtenues pour les autres composés. Suite à ces observations, nous avons donc entrepris d'affiner la méthode de sélection *QSSAS*.

Dans un premier temps, seules les erreurs sur les espèces dont les fractions molaires sont supérieures ou égales à 10 ppm sont considérées (les autres étant fixées arbitrairement à une valeur de  $-1.10^{+10}$ ). Selon ce principe le classement précédent (tableau V-10) devient (tableau V-11) :

1	CO2	5,83E+05	32	CH3	4,68E+01	63	NO2	2,83E-03
2	H2O	5,87E+04	33	HO2	4,24E+01	64	CH3O	-1,00E+10
3	CO	1,68E+04	34	C3H2	2,19E+01	65	CH2HCO	-1,00E+10
4	C2H2	2,00E+03	35	C6H5O	1,94E+01	66	C2H2OH	-1,00E+10
5	H2	1,60E+03	36	OH	1,58E+01	67	PC4H9	-1,00E+10
6	CH4	1,48E+03	37	C5H5	1,57E+01	68	NC4H5	-1,00E+10
7	PHCH2OH	1,43E+03	38	C4H4	1,56E+01	69	AC5H11	-1,00E+10
8	C4H6	1,23E+03	39	C6H5	1,10E+01	70	AC6H13	-1,00E+10
9	C2H4	1,06E+03	40	O	9,15E+00	71	BC6H13	-1,00E+10
10	STYREN	9,03E+02	41	IC4H3	7,74E+00	72	AC7H15	-1,00E+10
11	C6H6	8,31E+02	42	H	7,30E+00	73	AC8H17	-1,00E+10
12	AC3H4	8,09E+02	43	C3H3	6,93E+00	74	AC10H21	-1,00E+10
13	TOLUEN	7,15E+02	44	C2H5	4,60E+00	75	CC10H21	-1,00E+10
14	NO	6,14E+02	45	HCCO	3,94E+00	76	DC10H21	-1,00E+10
15	AC3H5	6,08E+02	46	NC4H3	3,13E+00	77	EC10H21	-1,00E+10
16	CH3OH	5,55E+02	47	N	3,00E+00	78	APHC3H6	-1,00E+10
17	C5H4O	5,17E+02	48	CH2	2,50E+00	79	CPHC3H6	-1,00E+10
18	C2H6	5,03E+02	49	HNCO	2,04E+00	80	APHC2H4	-1,00E+10
19	C3H6	4,79E+02	50	HCO	1,22E+00	81	C5H4OH	-1,00E+10
20	CH2O	4,55E+02	51	CH	1,16E+00	82	PHCO	-1,00E+10
21	PHHCO	2,78E+02	52	NH3	1,00E+00	83	EC9H17C	-1,00E+10
22	CH2CO	1,53E+02	53	CH2OH	9,25E-01	84	N2O	-1,00E+10
23	C4H2	1,45E+02	54	NH	4,98E-01	85	HNO	-1,00E+10
24	HCN	1,23E+02	55	C2H3	3,47E-01	86	HONO	-1,00E+10
25	NC10H22	1,00E+02	56	NC3H7	3,33E-01	87	H2CN	-1,00E+10
26	O2	9,96E+01	57	C2H	2,60E-01	88	NNH	-1,00E+10
27	PHC3H7	9,64E+01	58	SCH2	2,47E-01	89	NCO	-1,00E+10
28	N2	9,09E+01	59	NH2	1,77E-01	90	HOCN	-1,00E+10
29	CYC9H18	8,81E+01	60	CN	1,27E-01	91	CH3CN	-1,00E+10
30	PC3H4	5,24E+01	61	FC9H17C	3,98E-02			
31	PHCH2	5,02E+01	62	CC9H17C	3,24E-02			

**Tableau V-11 :** Classement des espèces selon le critère *QSSAS* : erreur induite pour des fractions molaires supérieures à 10ppm.

Cette première classification conduit à un domaine d'analyse moins étendu par rapport aux autres méthodes, facilitant par conséquent le choix du seuil de coupure : domaine d'erreur « borné » entre 0 et une valeur obligatoirement inférieure à celles correspondants aux réactifs (50% par exemple). Ce choix évite donc de sélectionner le n-propylcyclohexane (88,1%), l'azote moléculaire (90,9%), le n-propylbenzène (96,4%) ou l'oxygène moléculaire (99,6%), parmi les espèces en état stationnaire. Ainsi, cette option permet d'identifier clairement 3 lots d'espèces (délimités par un trait dans le tableau V-11) :

- un premier lot contenant les *espèces différentielles* (31 au total) dont l'erreur associée est supérieure à 50%,
- un deuxième lot contenant les *espèces « mixtes »* (32 au total), pouvant être identifiées tantôt comme différentielles à une condition paramétrique, puis stationnaires à une autre, et dont l'erreur associée est inférieure à 50%,
- un troisième lot contenant les *espèces stationnaires* (28 au total) dont la fraction molaire correspondante reste faible, quelle que soit la condition paramétrique considérée (valeur d'erreur arbitrairement fixée à  $-1.10^{+10}$ ).

L'analyse de l'erreur induite par ces espèces dites mixtes permet de sélectionner un lot supplémentaire d'espèces stationnaires dont l'erreur correspondante est inférieure à un seuil de coupure que l'on choisit. Ces espèces sont aussi classées dans l'ordre de leur probabilité de stationnarité : forte quand l'erreur tend vers 0%, faible quand cette dernière est supérieure ou égale à 50%.

L'adaptation du code de calcul à ces nouvelles conditions de sélection nous a permis d'établir un schéma réduit spécifique à la valeur du seuil de coupure (*SC*) retenu. Par exemple, pour le mécanisme squelettique de référence étudié (15/25 - 0,985) :

<i>SC</i> = 0%	correspond au schéma Kdiff63,
= 1%	Kdiff52,
= 2,5%	Kdiff47,
= 5%	Kdiff43.

Les précédentes réductions ayant souligné la présence nécessaire du radical H dans le schéma réduit, toute étude utilisant le critère *QSSAS* pour des seuils de coupure supérieurs à 5% devient dans ce cas inutile.

Les résultats relatifs à ces 4 seuils sont donnés en ordre décroissant dans le tableau V-12. Dans la partie supérieure se trouvent les 31 espèces différentielles (erreur correspondante > 50%) communes aux quatre schémas réduits. L'analyse du lot intermédiaire (ou « mixte ») permet d'identifier de 12 à 32 espèces différentielles supplémentaires, espèces induisant une erreur supérieure aux seuils fixés. Les 28 à 48 espèces restantes de la troisième partie du tableau sont celles considérées comme étant en état-stationnaire. Ces dernières présentent une fraction molaire inférieure à 10ppm et/ou induisent une erreur inférieure au seuil de coupure : depuis le protoxyde d'azote, N<sub>2</sub>O jusqu'au radical BC6H13. Parmi celles-ci, des composés (HNCO, NH<sub>3</sub>, NH<sub>2</sub> ...) dont les fractions molaires n'excèdent jamais

10 ppm, se retrouvent intégrés au lot des stationnaires malgré une erreur importante (strictement supérieur à 100%).

Espèces différentielles (Erreurs > 50%)							
CO2	H2O	CO	C2H2	H2	CH4	PHCH2OH	C4H6
C2H4	STYREN	C6H6	AC3H4	TOLUEN	NO	AC3H5	CH3OH
C5H4O	C2H6	C3H6	CH2O	PHHCO	CH2CO	C4H2	HCN
NC10H22	O2	PHC3H7	N2	CYC9H18	PC3H4	PHCH2	
Espèces différentielles (0% < Erreurs < 50%)							
SC = 5%		SC = 2,5%		SC = 1%		SC = 0%	
Kdiff43		Kdiff47		Kdiff52		Kdiff63	
CH3	4,68E+01	CH3	4,68E+01	CH3	4,68E+01	CH3	4,68E+01
HO2	4,24E+01	HO2	4,24E+01	HO2	4,24E+01	HO2	4,24E+01
C3H2	2,19E+01	C3H2	2,19E+01	C3H2	2,19E+01	C3H2	2,19E+01
C6H5O	1,94E+01	C6H5O	1,94E+01	C6H5O	1,94E+01	C6H5O	1,94E+01
OH	1,58E+01	OH	1,58E+01	OH	1,58E+01	OH	1,58E+01
C5H5	1,57E+01	C5H5	1,57E+01	C5H5	1,57E+01	C5H5	1,57E+01
C4H4	1,56E+01	C4H4	1,56E+01	C4H4	1,56E+01	C4H4	1,56E+01
C6H5	1,10E+01	C6H5	1,10E+01	C6H5	1,10E+01	C6H5	1,10E+01
O	9,15E+00	O	9,15E+00	O	9,15E+00	O	9,15E+00
IC4H3	7,74E+00	IC4H3	7,74E+00	IC4H3	7,74E+00	IC4H3	7,74E+00
H	7,30E+00	H	7,30E+00	H	7,30E+00	H	7,30E+00
C3H3	6,93E+00	C3H3	6,93E+00	C3H3	6,93E+00	C3H3	6,93E+00
		C2H5	4,60E+00	C2H5	4,60E+00	C2H5	4,60E+00
		HCCO	3,94E+00	HCCO	3,94E+00	HCCO	3,94E+00
		NC4H3	3,13E+00	NC4H3	3,13E+00	NC4H3	3,13E+00
		N	3,00E+00	N	3,00E+00	N	3,00E+00
				CH2	2,50E+00	CH2	2,50E+00
				HNCO	2,04E+00	HNCO	2,04E+00
				HCO	1,22E+00	HCO	1,22E+00
				CH	1,16E+00	CH	1,16E+00
				NH3	1,00E+00	NH3	1,00E+00
						CH2OH	9,25E-01
						NH	4,98E-01
						C2H3	3,47E-01
						NC3H7	3,33E-01
						C2H	2,60E-01
						SCH2	2,47E-01
						NH2	1,77E-01
						CN	1,27E-01
						FC9H17C	3,98E-02
						CC9H17C	3,24E-02
						NO2	2,83E-03
Espèces stationnaires							
N2O	2,48E+04	N2O	2,48E+04	N2O	2,48E+04	N2O	2,48E+04
HNCO	5,25E+03	HNCO	5,25E+03	NH2	2,58E+02	CH3CN	2,49E+02
NH3	1,68E+03	NH3	1,68E+03	CH3CN	2,49E+02	HOCN	2,18E+02
NH2	2,58E+02	NH2	2,58E+02	HOCN	2,18E+02	HNO	1,00E+02
CH3CN	2,49E+02	CH3CN	2,49E+02	NO2	1,47E+02	NCO	3,25E+01
HOCN	2,18E+02	HOCN	2,18E+02	HNO	1,00E+02	PHCO	1,80E+01
NO2	1,47E+02	NO2	1,47E+02	NCO	3,25E+01	HONO	1,26E+01

HNO	1,00E+02	HNO	1,00E+02	NH	2,84E+01	H2CN	9,51E+00
NCO	3,25E+01	NCO	3,25E+01	PHCO	1,80E+01	C5H4OH	9,35E+00
NH	2,84E+01	NH	2,84E+01	HONO	1,26E+01	EC9H17C	5,20E+00
NC4H3	2,39E+01	PHCO	1,80E+01	H2CN	9,51E+00	AC7H15	3,84E+00
PHCO	1,80E+01	HONO	1,26E+01	C5H4OH	9,35E+00	AC8H17	3,48E+00
HONO	1,26E+01	H2CN	9,51E+00	EC9H17C	5,20E+00	PC4H9	2,03E+00
H2CN	9,51E+00	C5H4OH	9,35E+00	AC7H15	3,84E+00	NC4H5	2,00E+00
C5H4OH	9,35E+00	EC9H17C	5,20E+00	AC8H17	3,48E+00	AC5H11	1,89E+00
N	7,41E+00	AC7H15	3,84E+00	PC4H9	2,03E+00	APHC2H4	1,45E+00
EC9H17C	5,20E+00	AC8H17	3,48E+00	NC4H5	2,00E+00	AC6H13	1,12E+00
C2H5	4,60E+00	CH2	2,50E+00	CN	1,93E+00	APHC3H6	9,72E-01
HCCO	3,94E+00	PC4H9	2,03E+00	AC5H11	1,89E+00	CPHC3H6	9,66E-01
AC7H15	3,84E+00	NC4H5	2,00E+00	APHC2H4	1,45E+00	CH3O	5,69E-01
AC8H17	3,48E+00	CN	1,93E+00	AC6H13	1,12E+00	NNH	5,14E-01
CH2	2,50E+00	AC5H11	1,89E+00	C2H3	1,07E+00	EC10H21	2,45E-01
PC4H9	2,03E+00	APHC2H4	1,45E+00	APHC3H6	9,72E-01	CH2HCO	1,58E-01
NC4H5	2,00E+00	HCO	1,22E+00	CPHC3H6	9,66E-01	CC10H21	1,18E-01
CN	1,93E+00	CH	1,16E+00	CH2OH	9,25E-01	DC10H21	1,16E-01
AC5H11	1,89E+00	AC6H13	1,12E+00	CH3O	5,69E-01	AC10H21	7,66E-02
APHC2H4	1,45E+00	C2H3	1,07E+00	NC3H7	5,48E-01	C2H2OH	4,57E-02
HCO	1,22E+00	APHC3H6	9,72E-01	NNH	5,14E-01	BC6H13	2,39E-02
CH	1,16E+00	CPHC3H6	9,66E-01	SCH2	2,62E-01		
AC6H13	1,12E+00	CH2OH	9,25E-01	C2H	2,60E-01		
C2H3	1,07E+00	CH3O	5,69E-01	EC10H21	2,45E-01		
APHC3H6	9,72E-01	NC3H7	5,48E-01	CH2HCO	1,58E-01		
CPHC3H6	9,66E-01	NNH	5,14E-01	CC10H21	1,18E-01		
CH2OH	9,25E-01	SCH2	2,62E-01	DC10H21	1,16E-01		
CH3O	5,69E-01	C2H	2,60E-01	AC10H21	7,66E-02		
NC3H7	5,48E-01	EC10H21	2,45E-01	FC9H17C	6,57E-02		
NNH	5,14E-01	CH2HCO	1,58E-01	CC9H17C	6,56E-02		
SCH2	2,62E-01	CC10H21	1,18E-01	C2H2OH	4,57E-02		
C2H	2,60E-01	DC10H21	1,16E-01	BC6H13	2,39E-02		
EC10H21	2,45E-01	AC10H21	7,66E-02				
CH2HCO	1,58E-01	FC9H17C	6,57E-02				
CC10H21	1,18E-01	CC9H17C	6,56E-02				
DC10H21	1,16E-01	C2H2OH	4,57E-02				
AC10H21	7,66E-02	BC6H13	2,39E-02				
FC9H17C	6,57E-02						
CC9H17C	6,56E-02						
C2H2OH	4,57E-02						
BC6H13	2,39E-02						

Tableau V-12 : Classement des espèces selon le critère QSSAS.

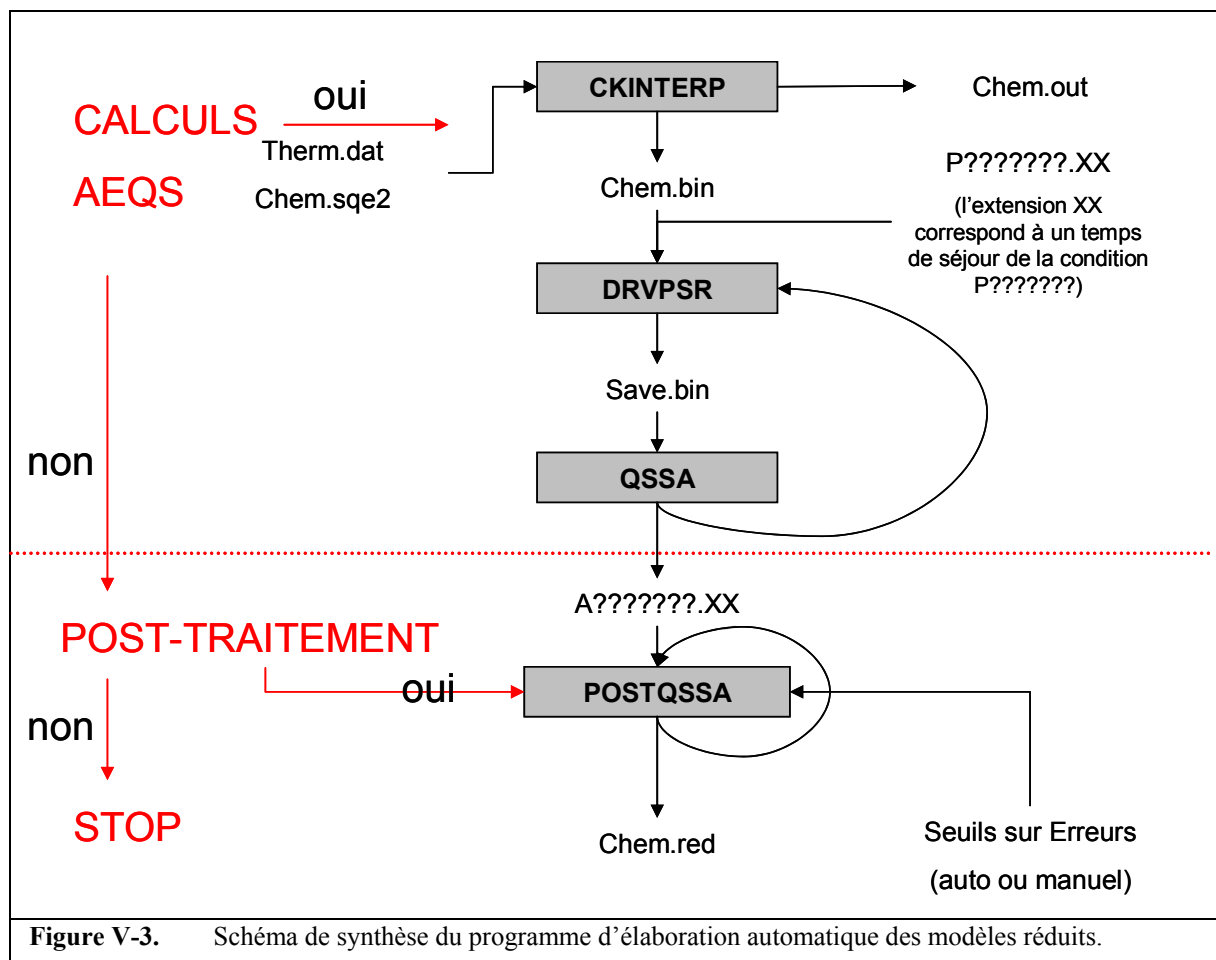
Le critère de sélection QSSAS répond plus efficacement à notre objectif de sélection automatique des espèces en EQS. La seule intervention de l'utilisateur est le choix d'un seuil d'erreur, intervention facilitée par un domaine de valeurs beaucoup plus restreint ( $[0\%; 50\%]$ ) que ceux rencontrés dans les autres méthodes précédemment étudiées ( $]-\infty; +\infty[$  ou  $[0; +\infty[$ ). La même procédure a été répétée sur les trois autres mécanismes



squelettiques sélectionnés pour leur qualité de prédiction : 15/25 - 0,950 ; 15/30 - 0,985 ; 15/30 - 0,960.

### V-3. Automatisation de la construction du schéma réduit final

La mise en place d'une option automatique pour le choix des espèces stationnaires, à partir de la méthode des erreurs induites, supposait le développement de plusieurs aménagements du code de calcul.



Le principe général de l'organigramme (figure V-3) décrit au chapitre IV reste le même :

- interprétation du mécanisme squelettique de PCAF (**Chem.sqe2**),
- calcul des erreurs induites pour chacune des espèces et à chaque condition paramétrique ( $\tau$ ,  $P$ ,  $\phi$  et  $T_e$ ),
- utilisation des fichiers de résultats correspondant à ce mécanisme squelettique (**A???????.XX**) pour constituer une base de données nécessaire à l'élaboration du

schéma réduit final (**Chem.red**). Celle-ci a été conçue de sorte que plusieurs seuils d'erreur (ou coupure entre les deux lots d'espèces) soient testés successivement. Ainsi, plusieurs mécanismes avec des niveaux de réduction différents sont alors disponibles pour être interprétés et validés.

Le principal avantage de la méthode *QSSAS* est sa rapidité d'obtention des résultats pour chacune des espèces, à toutes les conditions étudiées (fichiers appelés P???????).XX). L'ensemble des calculs sur les erreurs induites est effectué 200 fois plus vite qu'avec la méthode utilisant le critère *K'*. Ce gain de temps permet donc un développement et une validation plus rapide du « meilleur » schéma réduit (mécanisme le plus performant par rapport aux conditions de précision et de rapidité à respecter). De plus, la fin de la procédure de calcul qui consiste à écrire les équations algébriques (**SUBCREAT**) afin de les mettre à la place du système différentiel correspondant (subroutine **CKWYP**) a été complètement automatisée. Ces améliorations écartent définitivement toutes possibilités de fausses manœuvres dans la manipulation des fichiers : copie des éléments de la routine CKWYP (WT, WDOT, THIRDB, ELEM RATE, STEADYE, TROE et RATECONS) au sein du code de calcul, paramétrage de variables à l'intérieur de ces routines ou de fichiers utilisés par ces routines, ... Le schéma réduit ainsi élaboré, sans erreur interne, est fiable et immédiatement utilisable.

#### V-4. Résultats et discussion

A partir du classement des probabilités de stationnarité des différentes espèces selon le critère *QSSAS* du tableau V-12, quatre schémas réduits (Kdiff43 – 47 - 52 et 63) issus du mécanisme squelettique 15/25 - 0,985, correspondant à 4 seuils de coupure (respectivement 5% - 2,5% - 1% et 0%), ont été sélectionnés et validés. Les gains en temps de calcul et les pourcentages de prédictivités sont donnés pour chacun d'entre eux dans le tableau V-13.

Seuil erreur	Schéma réduit (Kdiff)	Nombre d'itérations	Gain en temps de calcul moyen	Prédictivité	Critère de sélection ( <i>Er</i> )
5%	43	11	12,8	58,4%	7,48
2,5%	47	11	12,7	61,3%	7,79
<b>1,0%</b>	<b>52</b>	<b>11</b>	<b>12,8</b>	<b>62,3%</b>	<b>7,97</b>
0%	63	11	10,8	62,0%	6,70

**Tableau V-13 :** Gain en temps de calcul et prédictivité pour différents seuils d'erreur.

Les résultats donnent un léger avantage au modèle réduit correspondant à un seuil d'erreur pour QSSAS égal à 1%. Ce schéma réduit, avec 52 espèces différentielles et 11 itérations (annexe VII), conduit à un gain en temps de calcul moyen de 12,8 et une prédictivité de 62,3%. Ces valeurs sont comparables à celles obtenues avec le critère de sélection  $K'$  pour le mécanisme Kdiff40 ( $GC_{moy} = 12,3 - \%P = 64,2\%$ ), pour un même nombre d'itérations (11). Cette similitude dans la prédictivité et le gain en temps de calcul n'est pas due au nombre ni à la nature des espèces présentes parmi les différentielles, mais plus probablement au classement plus judicieux des espèces stationnaires les unes par rapport aux autres qui, dans le cas du critère QSSAS, semble favoriser la résolution numérique du système algébro-différentiel. De nombreux essais, où les résultats sont en général moins bons pour  $\%P$  et  $GC_{moy}$  lorsqu'on décline les espèces stationnaires, tendent à confirmer cette hypothèse.

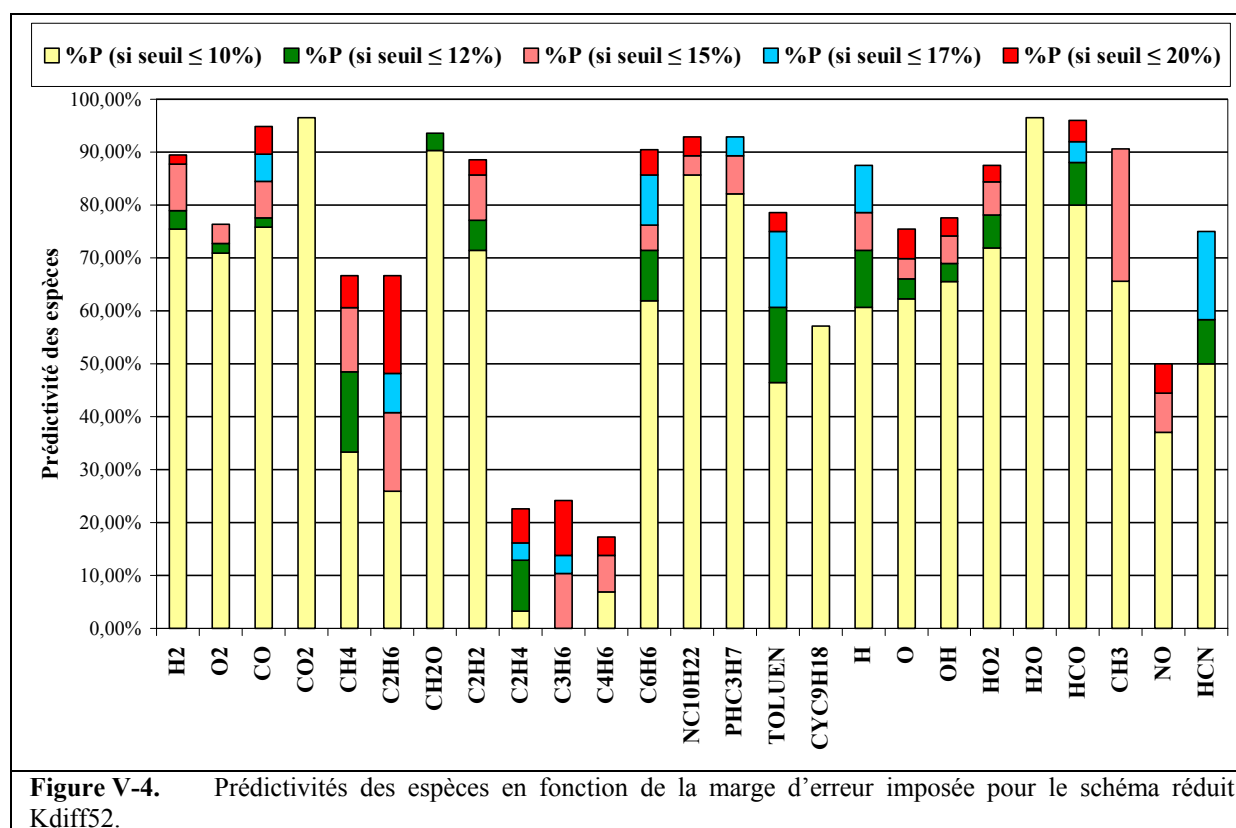
Par exemple, un classement inverse (la dernière espèce devient la première et ainsi de suite) avec Kdiff52, a même révélé un temps de calcul supérieur à celui nécessaire pour le mécanisme détaillé.

Cette difficulté du tri des espèces stationnaires a déjà été abordé au laboratoire dans une étude sur un mécanisme du n-décane (*Sferdean, 1993 ; Lepage, 2000*). Une hiérarchisation des espèces selon leur niveau de dépendance les unes par rapport aux autres (avec couplages le plus souvent non linéaires) a pu être établi. Ces auteurs ont montré que le processus d'explicitation des concentrations des espèces algébriques en fonction des différentielles, bien qu'effectué avec attention, peut parfois être sujet à caution (erreur d'écriture ou mauvais choix).

La similitude dans la prédictivité de Kdiff40 ( $K'$ ) et Kdiff52 (QSSAS) se retrouve au niveau des erreurs maximums autorisées (12%, 15%, 17% ou 20%) sur les fractions molaires des espèces importantes (tableau V-14). En effet, si une erreur de 20% est constatée, la prédictivité rencontrée est du même ordre de grandeur : environ 78% pour les deux schémas réduits.

Erreur maximum tolérée sur les fractions molaires des espèces	Kdiff40 / 11 itérations (avec $\varepsilon$ -algorithme)	Kdiff52 / 11 itérations (avec $\varepsilon$ -algorithme)
Si $\Delta C/C \leq 10\%$	64,2% (-%)	62,3% (-%)
Si $\Delta C/C \leq 12\%$	68,9% (+4,7%)	66,1% (+3,8%)
Si $\Delta C/C \leq 15\%$	74,6 % (+10,4%)	71,8% (+9,4%)
Si $\Delta C/C \leq 17\%$	76,0% (+11,8%)	74,1% (+11,7%)
Si $\Delta C/C \leq 20\%$	79,7% (+15,5%)	77,3% (+15,0%)

**Tableau V-14 :** Prédictivités observées suivant l'erreur maximum tolérée. Les pourcentages entre parenthèses représentent la différence de pourcentage par rapport à la première ligne pour chacun des mécanismes considérés.



**Figure V-4.** Prédictivités des espèces en fonction de la marge d'erreur imposée pour le schéma réduit Kdiff52.

L'histogramme de la figure V-4 représente l'évolution de cette prédictivité pour plusieurs espèces en fonction de la marge d'erreur acceptée. L'observation de ce diagramme permet d'aboutir aux mêmes conclusions que celles obtenues avec le modèle Kdiff40. Là encore, les performances de Kdiff52 sont équivalentes à celles de Kdiff40 :

- réactifs, produits ( $H_2O$  et  $CO_2$ ), intermédiaires ( $H_2$ ,  $CO$ ,  $CH_2O$ ,  $C_2H_2$ ) et principaux radicaux ( $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $HCO$ ) sont correctement reproduits : prédictivité globale le plus souvent supérieure à 70%. Même  $HCN$  et  $CH_3$  font partie du lot (prédictivité de 60%), alors que ce n'était pas le cas auparavant (pour Kdiff40),
- $C_2H_6$  et  $NO$  sont bien estimés si la marge d'erreur acceptée est de 20%,
- Plus de 60% à 70% des profils d'espèces possèdent une erreur relative inférieure à 20% par rapport au modèle détaillé,
- $C_2H_4$ ,  $C_3H_6$  et  $C_4H_6$  sont aussi les seules espèces moins bien simulées : moins de 30% des profils lorsque la marge d'erreur tolérée atteint 20%.

Cette technique de classement et de sélection des espèces différentielles et stationnaires, simple et rapide à mettre en œuvre, nous a permis de compléter notre étude sur les 3 autres mécanismes squelettiques (15/25 – 0,950 ; 15/30 – 0,985 et 15/30 - 0,960) sélectionnés dans

le précédent chapitre. Les résultats relatifs à  $GC$ ,  $\%P$  et  $Er$  sont répertoriés dans le tableau V-15.

Mécanisme	Schéma réduit (Kdiff)	Nombre d'itérations	Gain en temps de calcul moyen	Prédictivité	Critère de sélection ( $Er$ )
15/25-0,950	50	11	13,8	55,4%	7,63
15/25-0,985	52	11	12,8	62,3%	7,96
<b>15/30-0,960</b>	<b>49</b>	<b>11</b>	<b>14,6</b>	<b>63,3%</b>	<b>9,23</b>
15/30-0,985	51	11	13,5	62,4%	8,44

Tableau V-15 : Comparaison des résultats pour les quatre meilleurs mécanismes squelettiques du chapitre IV.

Le schéma réduit 15/30 – 0,960 apparaît comme celui présentant un bon compromis, sensiblement meilleur que les autres mécanismes, entre rapidité et précision. Il apporte un gain en temps de calcul d'environ 14,6 et une prédictivité de 63,3%. La prédictivité spécifique à chacune des espèces pour ce schéma réduit donne des résultats analogues à ceux obtenus pour le 15/25 – 0,985 (figure V-5).

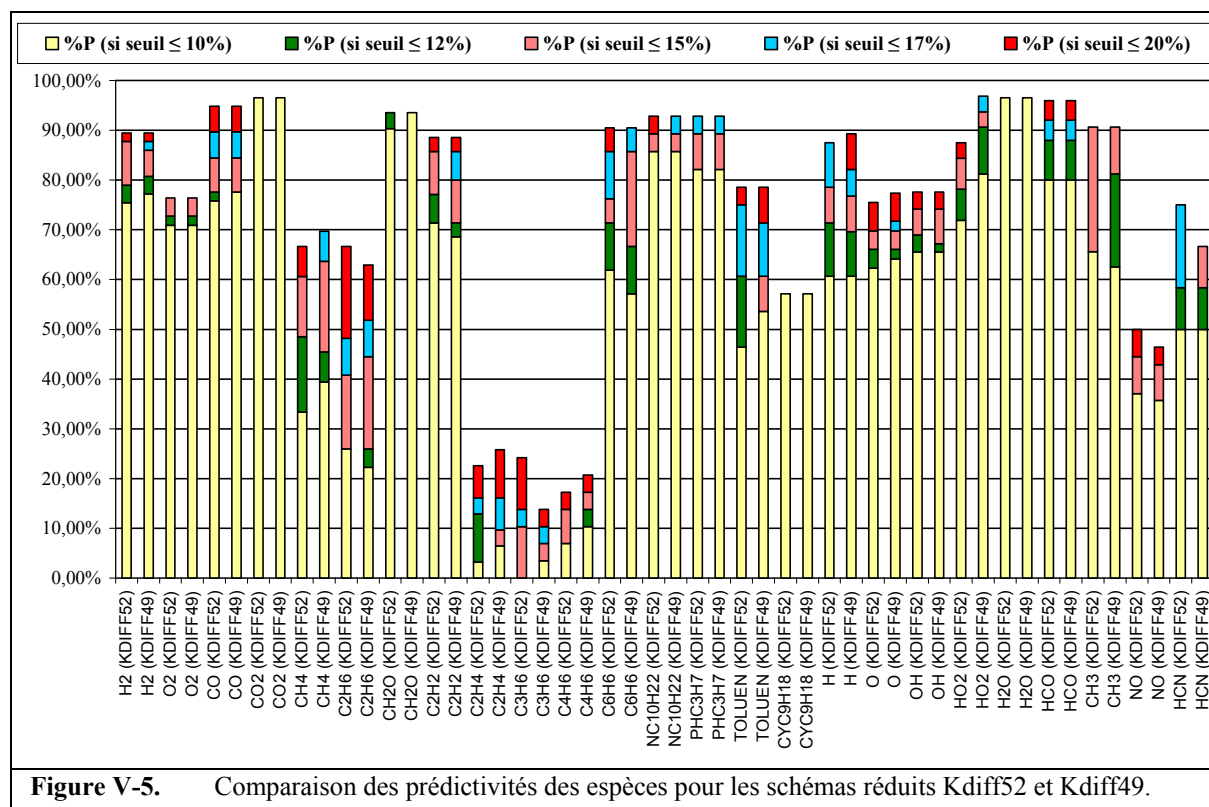
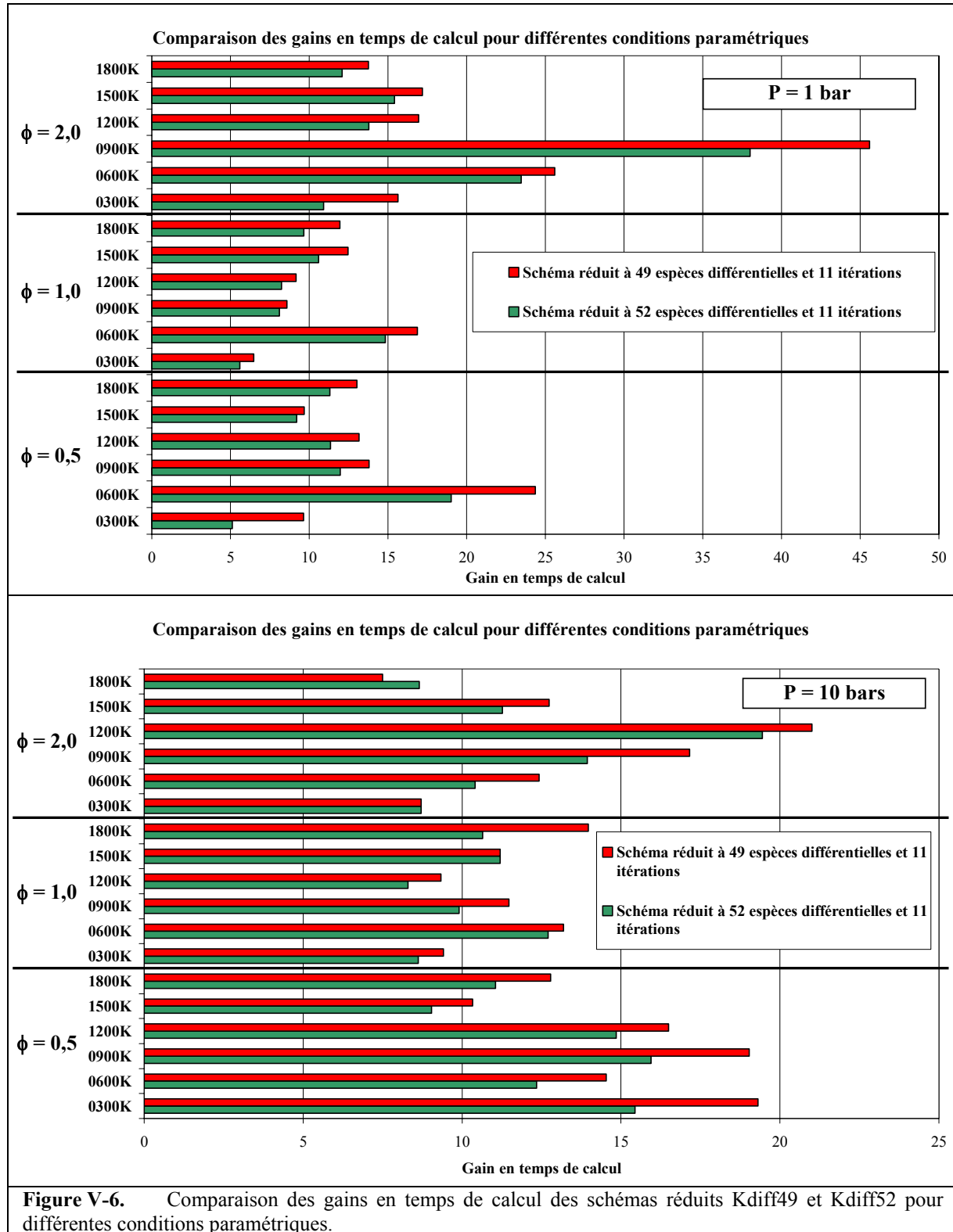


Figure V-5. Comparaison des prédictivités des espèces pour les schémas réduits Kdiff52 et Kdiff49.

Une autre comparaison sur les gains en temps de calcul, spécifiques à différentes conditions paramétriques données ( $P$ ,  $\phi$ ,  $Te$ ), permet d'évaluer les qualités du mécanisme réduit Kdiff49 par rapport à Kdiff52. Les résultats présentés sur la figure V-6, montrent en

effet l'amélioration de ce paramètre, qui gagne de 1 à 5 points (soit un *GC* variant de 6 à 46). Une des raisons de cette progression pourrait être la diminution du nombre d'espèces (2 en moins sur la totalité, 3 en moins dans les différentielles).



## V-5. Synthèse

L'optimisation de l'obtention d'un modèle réduit nous a conduit à un premier schéma contenant 40 espèces différentielles, utilisant 20 itérations, selon le critère de sélection  $K'$ . L'introduction dans le code de calcul d'un accélérateur de convergence (epsilon-algorithme) a permis de diminuer les temps de calcul d'un facteur 2 à 3, tout en aboutissant à de meilleurs résultats (accroissement de la prédictivité d'environ 10 points par rapport à l'ancienne configuration). La séparation plus ou moins intuitive des espèces différentielles et stationnaires a confirmé la nécessité de disposer d'une technique susceptible d'effectuer cette opération de manière plus automatique.

Les différents critères de sélection  $K'$ ,  $\lambda_i$  (ou  $\tau_i$ ), pointeur de radicaux intégré ( $I_i$ ), ont montré qu'en l'absence d'une variation brutale (saut) dans l'évolution de ces derniers, il est très difficile de choisir une valeur de coupure sur un large domaine sans faire appel à des règles empiriques ou des connaissances en cinétique chimique. Par contre, nous avons pu vérifier que le critère de sélection QSSAS présente l'avantage d'identifier beaucoup plus facilement ce seuil de coupure sans les interventions précédentes. Ainsi, l'automatisation complète de cette phase de réduction (un pourcentage est choisi au démarrage de l'étude), nous a permis le développement d'un schéma réduit final dans un délai beaucoup plus court que le critère  $K'$ , autorisant ainsi l'étude approfondie et détaillée de plusieurs schémas réduits.

Le mécanisme squelettique de référence choisi (15/25 - 0,985) a été transformé en un schéma réduit ne comportant plus que 52 espèces différentielles au lieu des 91. Parmi les performances de ce dernier par rapport au mécanisme détaillé, on peut citer une reproduction correcte de 62% des profils d'espèces lorsque l'erreur consentie sur les fractions molaires est de 10% (75% pour une erreur de 20%) et un gain de 13 en temps de calcul. Des 4 modèles étudiés, celui correspondant à 49 espèces différentielles conservées, issu de mécanisme squelettique 15/30 - 0,960, a pu être identifié comme vraisemblablement « le meilleur » : gain en temps de calcul moyen d'environ 15 et prédictivité voisine de 63%.





# *Conclusion*

---

Cette étude portait sur la réduction automatique de schémas cinétiques détaillés complexes (tels ceux représentatifs de la combustion de carburateurs), sur un domaine de conditions expérimentales le plus étendu possible, selon une méthodologie simple à mettre en œuvre. Le protocole est basé sur la démarche du cinéticien qui cherche à préserver au mieux les informations cinétiques. Deux objectifs à atteindre, souvent antagonistes, ont donc guidé notre travail : une diminution maximale du temps de calcul ainsi que le maintien de la prédictivité du modèle.

Pour mener à bien cette démarche, une stratégie en trois étapes successives a été suivie. Les deux premières, abordées selon une approche qualifiée de « chimique » avec la méthode des flux atomiques et l'analyse des composantes principales, permettent l'élimination des espèces et réactions *a priori* inutiles pour une description correcte des principales phases de la combustion. Le mécanisme squelettique (ou semi-détaillé) obtenu est alors traité dans une troisième étape de réduction selon une approche « chimico-mathématique », où l'on cherche à accélérer la résolution des équations différentielles de conservation de la masse pour conduire au schéma réduit final. Cette étape est réalisée grâce à l'application de l'état quasi-stationnaire sur certaines espèces rapides pour substituer au système différentiel un système algèbro-différentiel qui est globalement plus rapide à résoudre.

Ce processus de réduction de mécanisme cinétique a été appliqué à un modèle détaillé de grande taille : celui d'un kérosène reconstitué (représenté par un mélange contenant 74% de n-décane, 15% de n-propylbenzène et de 11% de n-propylcyclohexane) comprenant 225 espèces et 1800 réactions élémentaires réversibles (ou 3493 irréversibles). La réduction et la validation des schémas squelettiques et réduits ont été menées en réacteur parfaitement agité (PSR) sur un large domaine de pression (0,5 - 10 bars), de richesse (0,5 - 2) et de température d'entrée (300K – 1800K).

Tout d'abord, l'étape préalable a consisté à utiliser la méthodologie dans sa version initiale. Ce diagnostic préliminaire de validation, très prometteur au regard du domaine paramétrique étendu pris en compte, a surtout joué un rôle de révélateur des points faibles, voire de certaines lacunes, des différentes séquences de programmation. Il a servi de référence pour tester l'efficacité des nouveaux développements apportés.

Une fois ce bilan établi, nous avons ensuite tout particulièrement ciblé l'amélioration des performances de chacun des niveaux de la réduction. Toute la procédure de calcul a été ***totale*** ***ment automatisée*** pour s'affranchir de l'intervention humaine (donc des sources

d'erreurs possibles) et pour construire *rapidement et en toute fiabilité* les différents mécanismes réduits. Parallèlement, la conception d'un nouveau critère de sélection ( $Er$ ), produit du gain en temps de calcul moyen ( $GC_{moy}$ ) et du pourcentage de prédictivité d'un mécanisme ( $\%P$ ), a grandement facilité le choix du « meilleur » mécanisme, sur l'ensemble du domaine paramétrique, à chacune des 3 étapes.

Pour le kérosène, les deux premières simplifications : modèle détaillé → modèle squelettique se sont traduites par une élimination d'environ 60% des espèces et 80% des réactions. Quatre mécanismes squelettiques ont été identifiés comme étant les plus compétitifs parmi les candidats. Ce choix correspond aux valeurs élevées de  $Er$ , soit un gain en temps de calcul qui atteint un facteur voisin de 7 et une prédictivité pour l'ensemble des variables choisies proche de 80%. Simultanément, l'étude approfondie des diagrammes de flux et des résultats issus de PCAF a permis de mieux comprendre, pour un mélange aussi complexe, le rôle et l'importance des différentes voies réactionnelles sur la consommation des trois réactifs du kérosène.

Dans la dernière phase de réduction, nous avons élaboré les 4 schémas réduits correspondants en respectant une limite de 10% sur la précision des variables (température et fraction molaire). L'introduction d'un accélérateur de convergence, conjointement à la méthode des itérations internes dans la procédure de calcul, a accru les performances de ces différents schémas réduits (par diminution d'un facteur 2 à 3 du nombre d'itérations nécessaires au calcul). Ainsi, selon le critère de sélection ( $K'$ ) des espèces en EQS, l'un des mécanismes réduits testé, ne comprend plus que 40 espèces différentielles et utilise seulement 11 itérations. Il conduit à un gain en temps de calcul d'environ 12 et une prédictivité de 65%.

L'utilisation d'un autre critère ( $QSSAS$ ) s'appuyant sur la méthode des erreurs induites a amélioré la pertinence dans la sélection des espèces stationnaires, et de plus a permis l'automatisation totale de cette dernière phase de la réduction. Le schéma réduit le plus performant obtenu selon ce critère, avec 49 espèces différentielles, conduit à un gain en temps de calcul moyen d'environ 15, et une prédictivité avoisinant les 65%.

La stratégie de réduction, que nous avons perfectionnée et automatisée, permet *in fine* de faciliter la construction et la validation d'un schéma réduit final tout en respectant la précision initialement fixée.



# ***Références bibliographiques***

---

- Balès-Guéret, C. - Cathonnet, M. - Boettner, J.-C. - Gaillard, F.,**  
Experimental Study and Modeling of Kerosene Oxidation in a Jet-Stirred Flow Reactor, *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1990, pp. 211-216
- Balès-Guéret, C. - Cathonnet, M. - Boettner, J.-C. - Gaillard, F.,**  
Experimental Study and Kinetic Modeling of Higher Hydrocarbons Oxidation in a Jet-Stirred Flow Reactor, *Energy and Fuels*, **6**, 1992, pp. 189-194
- Baum, M. - Poinso, T. J. - Haworth, D. C. - Darabiha, N.,**  
Direct Numerical Simulation of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Flames with Complex Chemistry in Two-Dimensional Turbulent Flows, *J. Fluid. Mech.*, **281**, 1994, pp. 1-32
- Beck, H. - Hannemann, W. H. - Weiland, M.,**  
Modifications to the DLR High Enthalpy Shock Tunnel HEG for Measurements on Supersonic Combustion, *10<sup>th</sup> AIAA/NAL/NSDA/ISAS, Int. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf.*, Kyoto (JAPAN), April 24-27, 2001, AIAA paper 2001-1860
- Bell, J. B. - Day, M. S. - Grcar, J. F.,**  
Numerical Simulation of Premixed Turbulent Methane Combustion, *Proc. Combust. Inst.*, **29**, 2002, pp. 1987-1993
- Boggs, P. T. - Byrd, R. H. - Schnabel, R. B.,**  
A Stable and Efficient Algorithm for Nonlinear Orthogonal Distance Regression, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **8**, 1987, pp. 1052-1078
- Boggs, P. T. - Byrd, R. H. - Donaldson, J. R. - Schnabel, R. B.,**  
Algorithm 676 – Odrpack: Software for Weighted Orthogonal Distance Regression, *ACM Trans. Math. Software*, **15**, 1989, pp. 348-364
- Bodenstein, M. - Lutkemeyer, H.,**  
Quasi-Steady State Assumption, *Z. Phys. Chem.*, 1924, **114**
- Brezinski, C.,**  
Etudes sur les  $\epsilon$ - et  $\rho$ -algorithmes, *Numer. Math.*, **17**, 1971, pp. 153-162
- Brown, N. J. - Li, G. - Koszykowi, M. L.,**  
Mechanism Reduction via Principal Component Analysis, *Int. J. Chem. Kinet.*, **29**, 1997, pp. 393-414
- Buki, A. - Perger, T. - Turányi, T. - Maas, U.,**  
Repro-Modelling based generation of Intrinsic Low-Dimensional Manifolds, *J. Math. Chem.*, **31**, 2002, pp. 345-362
- Burcat, A.,**  
Third Millenium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion, *Technion Aerospace Engineering (TAE) Report # 867*, January 2001

**Chang, W.-C.,**

Modelling of Nitrogen Oxide Formation in Turbulent Flames: Development of Reduced Mechanisms and Mixing Models, *Ph.D Thesis*, University of California at Berkeley, 1995

**Chang, C.-S. - Zhang, Y. - Bray, K. N. C. - Rogg, B.,**

Modelling and Simulation of Autoignition under Simulated Diesel-Engine Conditions, *Combust. Sci. Tech.*, **113-114**, 1996, pp. 205-219

**Chen, J.-Y.,**

A General Procedure for Constructing Reduced Mechanisms with given Independent Relations, Sandia National Laboratories Report, SAND87-8782, 1987

**Chen, J.-Y.,**

Short Communication: A General Procedure for Constructing Reduced Mechanisms with given Independent Relations, *Combust. Sci. Tech.*, **57**, 1988, pp. 89-94

**Chen, J.-Y.,**

Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modelling of Turbulent Combustion, Workshop on "Numerical Aspect of Reduction in Chemical Kinetics", CERMICS-ENPC Cité Descartes, Champs sur Marne (FRANCE), September 2, 1997

**Chevalier, C. - Pitz, W. J. - Warnatz, J. - Westbrook, C. K. - Melenk, H.,**

Hydrocarbon Ignition: Automatic Generation of Reaction Mechanisms and Applications to Modelling of Engine Knock, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 93-101

**Clifford, L. J. - Milne, A. M. - Turányi, T. - Boulton, D.,**

An Induction Parameter Model for Shock-Induced Hydrogen Combustion Simulations, *Combustion and Flame*, **113**, 1998, pp. 106-118

**Côme, G. M. - Azay, P. - Alran, D. - Niclause, M.,**

*AIChE 72<sup>nd</sup> Annual Meeting (San Francisco)*, 1979

**Côme, G. M. - Warth, V. - Glaude, P. A. - Fournet, R. - Battin-Leclerc, F. - Scacchi, G.,**

Computer-Aided Design of Gas-Phase Oxidation Mechanisms – Application to the Modeling of n-Heptane and Iso-octane Oxidation, *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1996, pp. 755-762

**Cowart, J. S. - Keck, J. C. - Heywood, J. B. - Westbrook, C. K. - Pitz, W. J.,**

Engine Knock Predictions Using a Fully-Detailed and a Reduced Chemical Kinetic Mechanism, *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1990, pp. 1055-1062

**Curran, H. J. - Gaffuri, P. - Pitz, W. J. - Westbrook, C. K.,**

A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation, *Combustion and Flame*, **114**, 1998, pp. 149-177

- Dagaut, P. - Reuillon, M. - Boettner, J.-C. - Cathonnet, M.,**  
Kerosene Combustion at Pressures up to 40 atm.: Experimental Study and Detailed Chemical Kinetic Modeling, *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1994, pp. 919-926
- Dagaut, P. - Reuillon, M. - Cathonnet, M.,**  
High Pressure Oxidation of Liquid Fuels from Low to High Temperature. 3. N-Decane, *Combust. Sci. Tech.*, **103**, 1994, pp. 349-359
- Dagaut, P. - Reuillon, M. - Cathonnet, M. - Voisin, D.,**  
High Pressure Oxidation of Normal Decane and Kerosene in Dilute Conditions from Low to High Temperature, *J. Chim. Phys.*, **92**, 1995, pp. 47-76
- Dagaut, P. - Ristori, A. – El Bakali, A. - Cathonnet, M.,**  
Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of nPropylbenzene, *Fuel*, **81**, 2002, pp. 173-184
- Davidenko, D. - Gökalp, I. - Dufour, E. - Gaffié, D.,**  
Kinetic Mechanism Validation and Numerical Simulation of Supersonic Combustion of Methane-Hydrogen Fuel, *11<sup>th</sup> AIAA/AAAF Int. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf.*, Orléans (FRANCE), September 29 – October 4, 2002, AIAA paper 2002-5207
- Diamantis, D. - Mastorakos, E. - Goussis, D. A.,**  
Simulations of Premixed Combustion in Porous Media, *Combust. Theory Modelling*, **6**, 2002, pp. 383-411
- Eggels, R. L. G. M. - de Goey, L. P. H.,**  
Mathematically Reduced Reaction Mechanisms Applied to Adiabatic Flat Hydrogen / Air Flames, *Combustion and Flame*, **100**, 1995, pp. 559-570
- Eggels, R. L. G. M. - Louis, J. J. J. - Kok, W. - de Goey, L. P. H.,**  
Comparison of Conventional and Low-Dimensional Manifold Methods to Reduce Reaction Mechanisms, *Combust. Sci. Tech.*, **123**, 1997, pp. 347-362
- El Bakali, A., - Dagaut, P. - Cathonnet, M.,**  
Cinétique de Combustion du Kérosène à Pression Atmosphérique, *Rapport interne CNRS*, 1999
- El Bakali, A., - Braun-Unkhoff, M. - Dagaut, P. – Frank, P. - Cathonnet, M.,**  
Detailed Kinetic Reaction Mechanism for Cyclohexane Oxidation at Pressure up to ten Atmospheres, *Proc. Comb. Inst.*, **28**, 2000, sous presse
- Ferrendier, M.,**  
Mise au Point de Schémas Cinétiques Réduits pour Décrire la Formation des Polluants NOx dans la Combustion, *Thèse*, Université d'Orléans, 1998
- Fotache, C. G. - Kreutz, T. G. - Law, C. K.,**  
Ignition of Counterflowing Methane versus Heated Air under Reduced and Elevated Pressures, *Combustion and Flame*, **108**, 1997, pp. 442-470

**Frouzakis, C. E. - Boulouchos, K.,**

Analysis and Reduction of the CH<sub>4</sub> – Air Mechanism at Leans Conditions, *Combust. Sci. Tech.*, **159**, 2000, pp. 281-303

**Gaffié, D. - Wepler, U. - Magre, P. - Koschel, W. - Novelli, P.,**

Numerical Investigation of Supersonic Reacting Hydrogen Jets in a Hot Air Coflow, *10<sup>th</sup> AIAA/NAL/NSDA/ISAS, Int. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf.*, Kyoto (JAPAN), April 24-27, 2001, AIAA paper 2001-1864

**Gardiner, W. C. - Troe, J.,**

Rate Coefficients of Thermal Dissociation, Isomerization, and Recombinaison Reactions » dans le livre “*Combustion Chemistry*”, de Gardiner, W. C., Ed., Sringer-Verlag, New-York, 1984, p. 455

**Gerlinger, P. - Bruggemann, D. - Algermissen, J.,**

Numerical Simulation of Supersonic Mixing and Combustion, *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1994, pp. 21-27

**Gicquel, O. - Thevenin, D. - Hilka, M. - Darabiha, N.,**

Direct Numerical Simulation of Turbulent Premixed Flames Using Intrinsic Low-Dimensional Manifolds, *Combust. Theory Modelling*, **3**, 1999, pp. 479-502

**Glarborg, P.- Kee, R.J.- Grcar, J. F.- Miller, J.A.,**

PSR : A Fortran Program Modeling Well-Stirred Reactors, Sandia National Laboratories Report, SAND86-8209, UC-4, 1986

**Glarborg, P. - Lilleheie, N. I. - Byggstoyl, S. - Magnussen, B. F., Kilpinen, P. - Hupa, M.,**

A Reduced Mechanism for Nitrogen Chemistry in Methane Combustion, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 889-898

**Glaude, P. A. - Warth, V. - Fournet, R. - Battin-Leclerc, F. - Scacchi, G. - Côme, G. M.,**

Modeling of the Oxidation of n-Octane and n-Decane Using an Automatic Generation of Mechanisms, *Int. J. Chem. Kinet.*, **30**, 1998, pp. 949-959

**Gordon, S. - McBride, B. J.,**

Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations, NASA SP-273, 1971

**Goussis, D. A. - Lam, S. H.,**

CSP91, <http://www.princeton.edu/ftp.awtron/>, 1991

**Goussis, D. A. - Lam, S. H.,**

A Study of Homogeneous Methanol Oxidation Kinetics Using CSP, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 113-120

**Griffiths, J. F.,**

Reduced Kinetic Models and their Application to Practical Combustion Systems, *Prog. Energy Combust. Sci.*, **21**, 1995, pp. 25-107

**Guéret, C.,**

Elaboration d'un Modèle Cinétique pour l'Oxydation du Kérosène et d'Hydrocarbures représentatifs, *Thèse de l'Université d'Orléans*, 1989

**Guerra, R. - Waidmann, W. - Laible, C.,**

An Experimental Investigation of the Combustion of a Hydrogen Jet Injected Parallel in a Supersonic Air Stream, *3<sup>rd</sup> AIAA Int. Aerospace Planes Conf.*, Lampoldshausen (GERMANY), December 3-5, 1991, AIAA paper 91-5102

**Haworth, D. C. - Blint, R. J. - Cuenot, B. - Poinso, T. J.,**

Numerical Simulation of Turbulent Propane-Air Combustion with Nonhomogeneous Reactants, *Combustion and Flame*, **121**, 2000, pp. 395-417

**Herrmann, M. G.,**

Numerical Simulation of Premixed Turbulent Combustion Based on a Level Set Flamelet Model, *Ph.D Thesis*, RWTH Aachen, 2001

**Ibison, P.**

Reduction and Analysis of Oscillatory Landolt Mechanisms, *J. Phys. Chem.*, 1992, **96**, pp. 6321-6325

**JANAF,**

Thermochemical Tables, National Standard Ref. Data Service, NSRDS-NBS 37, 1971

**Jaubertie, A. - Plion, P. - Sportisse, B. - Aumont, B. - Toupan, G.,**

Reduction of Kinetic Schemes for Atmospheric Chemistry, *International Conference on Air Pollution Modelling and Simulation*, Champs sur Marne (France), *Proceedings*, **2**, 1998, 445-458

**Jaubertie, A.**

Optimisation en Taille et en Raideur des Schémas Cinétiques Utilisés en Chimie Atmosphérique, *Thèse de l'Université de Paris XII*, 1999

**Jiménez, C. - Haworth, D. C. - Poinso, T. J. - Cuenot, B. - Blint, R. J.,**

Numerical Simulation of Combustion in a Lean Stratified Propane-Air Mixture, *Proceedings of Summer Program, Center for Turbulence Research*, 2000, pp. 133-144

**Kassel, L. S.,**

*J. Chem. Phys.*, **32**, 1928, p. 225 et p. 1065

**Kee, R.J. - Rupley, F.M. - Miller, J.A.,**

The CHEMKIN II Thermodynamical Data Bases, Sandia National Laboratories Report, SAND85-8240, 1987 (Réédition janvier 1993)

**Kee, R.J. - Rupley, F.M. - Miller, J.A.,**

CHEMKIN II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics, Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B, UC-706, 1989

**Kennedy, I. M.,**

Models of Soot Formation and Oxidation, *Prog. Energy Combust. Sci.*, **23**, 1997, pp. 95-132



**Kundu, K. P. - Penko, P. F. - VanOverbeke, T. J.,**

A Practical Kinetic Mechanism for Computing Combustion in Gas Turbine Engines, *35<sup>th</sup> AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Los Angeles, June 20-24 1999

**Lam, S. H. - Goussis, D. A.,**

Understanding Complex Chemical Kinetics with Computational Singular Perturbation, *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1988, pp. 931-941

**Lam, S. H. - Goussis, D. A.,**

Conventional Asymptotics and Computational Singular Perturbation for Simplified Kinetics Modelling, in *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Lecture Notes in Physics 384, M. Smooke, Ed., Springer Verlag, Chapter 10, 1991

**Lam, S. H.,**

Using CSP to Understand Complex Chemical Kinetics, *Combust. Sci. and Tech.*, 1993, **89**, pp. 375-404

**Lam, S. H. - Goussis, D. A.,**

The CSP Method for Simplifying Kinetics, *Int. J. Chem. Kinet.*, **26**, 1994, pp. 461-486

**Lam, S. H.,**

Reduced Chemistry Modelling and Sensitivity Analysis, in Lecture notes for *Aerothermochemistry for Hypersonic Technology 1994-1995*, Lecture Series Programme, at the Von Karman Institute for Fluid Dynamics, April 24-28 1995, WWW: <http://www.princeton.edu/~lam/vki.html>

**Lange, M. - and Warnatz, J.,**

Massively Parallel Direct Numerical Simulation of Turbulent Combustion, *NIC Symposium 2001, Proceedings, Horst Rollnik, Dietrich Wolf (Ed.), John Von Neumann Institute for Computings, Julech, NIC Series, 9*, 2002, pp. 419-429

**Lee, Y. - Pae, S. - Min, K. - Kim, E. S.,**

Prediction of Knock Onset and the Autoignition Site in Spark-Ignition Engines, *Proc. Inst. Mech. Eng., D J. Automob. Eng.*, **214**, 2000, pp. 751-763

**Lepage, V.,**

Elaboration d'une Méthode de Réduction de Schémas Cinétiques Détaillés. Application aux Mécanismes de Combustion du Gaz Naturel et du N-décane, *Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)*, 2000

**Lindemann, F. A.,**

Trans. Faraday Soc., 17, 1922, p. 598

**Lindstedt, R. P. - Maurice, L. Q.,**

A Detailed Chemical Kinetic Model for Aviation Fuels, *J. Propuls. Power*, **16**, 2000, p. 187-195

**Litzinger, T. A. - Brezinsky, K. - Glassman, I.,**

Reactions of N-Propylbenzene During Gas Phase Oxidation, *Combust. Sci. Tech.*, **50**, 1986, pp. 117-133

**Løvås, T. - Nilsson, D. - Mauss, F.,**

Automatic Reduction Procedure for Chemical Mechanisms Applied to Premixed Methane/Air Flames, *Proc. Comb. Inst.*, **28**, 2000, pp. 1809-1815

**Løvås, T. - Amneus, P. - Mauss, F. - Mastorakos, E.,**

Comparison of Automatic Reduction Procedures for Ignition Chemistry, *Proc. Comb. Inst.*, **29**, 2002a, pp. 1387-1393

**Løvås, T. - Mauss, F. - Hasse, F. - Peters, N.,**

Development of Adaptive Kinetics for Application in Combustion Systems, *Proc. Comb. Inst.*, **29**, 2002b, pp. 1403-1410

**Lowe, R. M - Tomlin, A. S.,**

The Application of Repro-Modelling to a Tropospheric Chemical Model, *Conférence Internationale sur la Modélisation et la Simulation de la Pollution Atmosphérique*, Oct 1998, pp. 423-433

**Lu, T. - Ju, Y. - Law, C. K.,**

Complex CSP for Chemistry Reduction and Analysis, *Combustion and Flame*, **126**, 2001, pp. 1445-1455

**Maas, U. - Pope, S. B.,**

Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space, *Combustion and Flame*, **88**, 1992a, pp. 239-264

**Maas, U. - Pope, S. B.,**

Implementation of Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992b, pp. 103-112

**Maas, U. - Pope, S. B.,**

Laminar Flame Calculations Using Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds, *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1994, pp. 1349-1356

**Maas, U.,**

Efficient Calculation of Intrinsic Low-Dimensional Manifolds for the Simplification of Chemical Kinetics, *Computing and Visualization in Science*, **1**, 1998, (No 2), pp. 69-81

**Marchal, A.,**

Etude de la Contribution des Familles Chimiques Constitutives des Gazoles à la Formation de Polluants non Réglementés, *Thèse de l'Université d'Orléans*, 1997

**Marcus, R. A.,**

*J. Chem. Phys.*, **20**, 1952, p. 359

- Massias, A. - Diamantis, D. - Mastorakos, E. - Goussis, D. A.,**  
Reduced Mechanisms for Methane Combustion and NO<sub>x</sub> Formation using the CSP Method, *Combustion Institute (Greek Section)*, Athens, 1997, pp. 43-47
- Massias, A. - Diamantis, D. - Mastorakos, E. - Goussis, D. A.,**  
An Algorithm for the Construction of Global Reduced Mechanisms with CSP Data, *Combustion and Flame*, **117**, 1999a, pp. 685-708
- Massias, A. - Diamantis, D. - Mastorakos, E. - Goussis, D. A.,**  
Global Reduced Mechanisms for Methane and Hydrogen Combustion with Nitric Oxide Formation Constructed with CSP, *Combust. Theory Modelling*, **3**, 1999b, pp. 233-257
- Montgomery, C. J. - Cremer, M. A. - Chen, J.-Y. - Westbrook, C. K. - Maurice, L. Q.,**  
Reduced Chemical Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon Fuels, *J. Propuls. Power*, **18**, 2002a, p. 192-198
- Montgomery, C. J. - Swensen, D. A. - Harding, T. V. - Cremer, M. A. - Bockelie, M. J.,**  
A Computational Problem Solving Environment for Creating and Testing Reduced Chemical Kinetic Mechanisms, *Advances in Engineering Software*, **33**, 2002b, p. 59-70
- Müller, U. C. - Peters, N. - Liñan, A.,**  
Global Kinetics for n-Heptane Ignition at High Pressures, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 777-784
- Natarajan, B. - Bracco, F. V.,**  
On Multidimensional Modeling of Auto-Ignition in Spark-Ignitions Engines, *Combustion and Flame*, **57**, 1984, pp. 179-197
- Nehse, M. - Warnatz, J. - Chevalier, C.,**  
Kinetic Modeling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons, *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1996, pp. 773-780
- Niemann, H. - Schmidt, D. - Maas, U.,**  
An Efficient Storage Scheme for Reduced Chemical Kinetics Based on Orthogonal Polynomials, *J. Eng. Math.*, **31**, 1997, pp. 131-142
- Oevermann, M.,**  
Numerical Investigation of Turbulent Hydrogen Combustion in a Scramjet Using Flamelet Modeling, *Aerosp. Sci. Technol*, **4**, 2000, pp. 463-480
- Ogorodnikov, D. A. - Vinogradov, V. A. - Shikhman, Y. M. - Stroking, V. T.,**  
Russian Research on Experimental Hydrogen-Fueled Dual-Mode Scramjet: Conception and Preflight Tests, *J. Propuls. Power*, **17**, 2001, p. 1041
- Paczko, G. - Lefdal, P.M. - Peters, N.,**  
Reduced Reactions Schemes for Methane, Methanol and Propane Flames, *Twenty-First Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1986, pp. 748-779

- Patterson, P. M. – Kyne, A. G. – Pourkashanian, M. – Williams, A. – Wilson, C. W.,**  
Combustion of Kerosene in Counterflow Diffusion Flames, *J. Propuls. Power*, **16**, 2000, pp. 453-460
- Pengloan, G.,**  
Etude Cinétique de l'Oxydation de Composés Aromatiques : Application à la Formation de Polluants dans les Moteurs Automobiles, *Thèse de l'Université d'Orléans*, 2001
- Peters, N. - Kee, R. J.,**  
The Computation of Stretched Laminar Methane-Air Diffusion Flames Using a Reduced Four-Step, *Combustion and Flame*, **68**, 1987, pp. 17-29
- Peters, N.,**  
Reducing Mechanisms in *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Lecture Notes in Physics 384, M. Smooke (Ed.), 1991, Springer Verlag
- Peters, N. - Rogg, B.,**  
Reducing Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, *Lecture Notes in Physics M.15*, 1993, Springer Verlag
- Peters, N. - Williams, F. A.,**  
The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames, *Combustion and Flame*, **68**, 1987, pp. 185-207
- Pilling, M. - Turányi, T. - Hughes, K. - Clague, K.,**  
KINALC, <http://chem.leeds.ac.uk/Combustion/Combustion.html>, version 1.0, 1995
- Revel, J.,**  
Modélisation de la Combustion de Mélanges Méthane-Air : Validation d'un Mécanisme Détaillé, Construction d'un Modèle Cinétique Global Equivalent, *Thèse de l'Université de Pierre et Marie Curie (Paris VI)*, 1991
- Revel, J. - Boettner, J.-C. - Cathonnet, M. - Bachman, J. S.,**  
Derivation of a Global Chemical Kinetic Mechanism for Methane Ignition and Combustion, *J. Chim. Phys.*, **91**, 1994, pp. 365-382
- Reynolds, W. C.,**  
The Element Potential for Chemical Equilibrium Analysis: Implementation in the Interactive Program STANJAN, Dept. of mechanical engineering, Stanford University, 1986
- Rice, O. K. - Ramsperger, H. C.,**  
Theories of Unimolecular Gas Reactions at Low Pressures, *J. Am. Chem. Soc.*, **49**, 1927, p. 1617-1629
- Ristori, A.,**  
Modélisation de la Combustion du Gazole - Etude des Aspects Chimiques, *Thèse de l'Université d'Orléans*, 2000

- Ristori, A. - El Bakali, A. - Dagaut, P. - Cathonnet, M.,**  
The Oxidation of N-Propylcyclohexane: Experimental Results and Kinetic Modeling, *Combust. Sci. Tech.*, **165**, 2001, pp. 197-228
- Rogg, B. - Williams, F. A.,**  
Structure of Wet CO Flames with Full and Reduced Kinetic Mechanisms, *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1988, pp. 1441-1451
- Rogg, B.,**  
A Computer Program for the Simulation of One-Dimensional Chemically Reacting Flows, Report CUED/A-THERMO/TR39, Cambridge University Engineering Department, 1991
- Sazhina, E. M. - Sazhinj, S. S. - Heikal, M. R. - Marooney, C. J.,**  
The Shell Autoignition Model: Application to Gasoline and Diesel Fuels, *Fuel (Guilford)*, **78**, 1999, pp. 389-401
- Schmidt, D. - Segatz, J. - Riedel, U. - Warnatz, J.,**  
Simulation of Laminar Methane-Air Flames Using Automatically Simplified Chemical Kinetics, *Combust. Sci. Tech.*, **113-114**, 1996, pp. 3-16
- Schmidt, D. - Blasenbrey, T. - Mass, U.,**  
Intrinsic Low-Dimensional Manifolds of Strained and Unstrained Flames, *Combust. Theory Modelling*, **2**, 1998, pp. 135-152
- Sferdean, C.,**  
Etablissement d'un Schéma Cinétique Réduit pour la Globalisation de la Combustion du N-décane, *Rapport interne CNRS*, 1993
- Smith, G. P. - Golden, D. M. - Frenklach, M. - Moriarty, N. W. - Eiteneer, B. - Goldenberg, M. - Bowman, C. T. - Hanson, R. K. - Song, S. - Gardinaer, W. C. - Lissianski, V. V.,**  
GRI-Mech version 3.0, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/), 1998
- Soyhan, H. K. - Mauss, F. - Sorousbay, C.,**  
Chemical Kinetic Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines Using Reduced Chemistry, *Combust. Sci. Tech.*, **174**, 2002, pp. 73-91
- Sunj, C. J. Law, C. K - Chen, J.-Y.,**  
An Augmented Reduced Mechanism for Methane Oxidation with Comprehensive Global Parametric Validation, *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1998, pp. 295-304
- Tabejamaat, S. - Ju, Y. - Niioka, T.,**  
Numerical Simulation of Secondary Combustion of Hydrogen Injected from Preburner into Supersonic Airflow, *AIAA Journal*, **9**, 1997, p. 1441
- Tamioka, S. - Murakami, A. - Kudo, K. - Mitani, T.,**  
Combustion Tests of a Staged Supersonic Combustor with a Strut, *J. Propuls. Power*, **17**, 2001, p. 293

- Tanahashi, M. - Fujimura, M. - Miyauchi, T.,**  
Coherent Fine-Scale Eddies in Turbulent Premixed Flames, *Proceedings of the Combustion Institute*, **28**, 2000, pp. 529-535
- Tomlin, A. S. - Pilling, M. J. - Turányi, T. - Merkin, J. H. - Brindley, J.,**  
Mechanism Reduction for the Oscillatory Oxidation of Hydrogen: Sensitivity and Quasi-Steady-State Analyses, *Combustion and Flame*, **91**, 1992, pp. 107-130
- Tomlin, A. S. - Pilling, M. J. - Merkin, J. H. - Brindley, J. - Burgess, N. - Gough, A.,**  
Reduced Mechanisms for Propane Pyrolysis, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34**, 1995, pp. 3749-3760
- Tomlin, A. S. - Turányi, T. - and, Pilling, M. J.,**  
Chap. 4: Mathematical Tools for the Construction, Investigation and Reduction of Combustion Mechanisms, in *Low-Temperature Combustion and Autoignition*, coll. *Comprehensive Chemical Kinetics*, **35**, 1997, Elsevier, Amsterdam
- Treviño, C. - Solorio, F.,**  
Asymptotic Analysis of the High-Temperature Ignition of CO/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Mixtures, *Combustion and Flame*, **86**, 1991, pp. 285-295
- Treviño, C. - Mendez, F.,**  
Reduced Kinetic Mechanism for Methane Ignition, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 121-127
- Troe, J.,**  
Predictive Possibilities of Unimolecular Rate Theory, *J. Phys. Chem.*, **83**, 1979, pp. 114-126
- Turányi, T. - Bèrces, T. - Vajda, S.,**  
Reaction Rate Analysis of Complex Kinetic Systems, *Int. J. Chem. Kinet.*, **21**, 1989, pp. 83-99
- Turányi, T.,**  
Reduction of Large Reaction Mechanisms, *New. J. Chem.*, 1990, **14**, pp. 795-803
- Turányi, T. - Bèrces, T.,**  
Kinetics of Reactions Occurring in the Unpolluted Troposphere, II. Sensitivity Analysis, *React. Kinet. Catal. Lett.*, **41**, 1990, pp. 103-108
- Turányi, T. - Toth, J.,**  
Comments to an Article of Frank-Kamenetskii on the Quasi-Steady-State Approximation, *Acta Chim. Hung.*, **129**, 1992, pp. 163-172
- Turányi, T. - Tomlin, A. S. - and Pilling, M. J.,**  
On the Error of the Quasi-Steady-State Approximation, *J. Phys. Chem.*, 1993, **97**, pp. 163-172
- Turányi, T.,**  
Application of Repro-Modeling for the Reduction of Combustion Mechanisms, *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1994a, pp. 949-955

**Turányi, T.,**

Parameterization of Reaction Mechanisms Using Orthonormal Polynomials, *Computers Chem.*, 1994b, **18**, pp. 45-54

**Turányi, T.,**

Applications of Sensitivity Analysis to Combustion Chemistry, *Reliability Engineering and System Safety*, **57**, 1997, pp. 41-48

**Vajda, S. - Valko, P. - Turányi, T.,**

Principal Component Analysis of Kinetic Models, *Int. J. Chem. Kinet.*, **17**, 1985, pp. 55-81

**Vajda, S. - Turányi, T.,**

Principal Component Analysis for Reducing the Edelson-Fields-Noyes Model of the Belousov-Zhabotinsky Reaction, *J. Phys. Chem.*, **90**, 1986, pp. 1664-1670

**Vajda, S. - Rabitz, H. - Yetter, R. A.,**

Effects of Thermal Coupling and Diffusion on the Mechanism of H<sub>2</sub> Oxidation in Steady Premixed Laminar Flames, *Combustion and Flame*, **82**, 1990, pp. 270-297

**Viossat, V. - Ben-Aïm, R. I.,**

Validity of the Quasi-Stationary-State Approximation in the Case of Two Successive Reversible First-Order Reactions, *J. Chem. Educ.*, **75**, 1998, pp. 1165-1169

**Vlachos, D. G.,**

Reduction of Detailed Kinetic Mechanisms for Ignition and Extinction of Premixed Hydrogen/Air Flames, *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 1996, pp. 3979-3993

**Voisin, D.,**

Cinétique Chimique d'Oxydation d'Hydrocarbures et Obtention d'un Modèle pour la Combustion du Kérosène, *Thèse de l'Université d'Orléans*, 1997

**Volk, L.,**

Steady-State and Equilibrium Approximations in Reaction Kinetics, *J. Chem. Educ.*, **54**, 1977, pp. 95-97

**Wang, W. - Rogg, B. - Williams, F. A.,**

Reduced Kinetic Mechanisms for Wet CO Flames, in "Reducing Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems" de N. Peters et B. Rogg, Lecture Notes in Physics M.15, 1993a, Springer Verlag

**Wang, W. - Rogg, B.,**

Premixed Ethylen/Air and Ethane/Air Flames: Reduced Mechanisms Based on Inner Iteration, in "Reducing Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems" de N. Peters et B. Rogg, Lecture Notes in Physics M.15, 1993b, Springer Verlag

**Warnatz, J.,**

Hydrocarbon Oxidation at High-Temperatures, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **87**, 1983, pp. 1008-1022

**Warnatz, J.,**

Resolution of Gas Phase and Surface Combustion Chemistry into Elementary Reactions, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*, 1992, pp. 553-579

**Warth, V. - Stef, N. Glaude, P. A. - Battin-Leclerc, F. - Scacchi, G. - Côme, G. M.,**

Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modeling of the Oxidation of *n*-Butane, *Combustion and Flame*, **114**, 1998, pp. 81-102

**Wynn, P.,**

On the Convergence and Stability of the Epsilon Algorithm, *J. SIAM Numer. Anal.*, **3**, 1966, pp. 91-122

**Zeng, G. - Pilling, M. J. - Saunders, S. M.,**

Mechanism Reduction for Tropospheric Chemistry (Butane Oxidation), *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, **93** (16), 1997, pp. 2937-2946

**Zurbach, S. - Garreton, D. - Kannyche, M. - Candel, S.,**

Calcul de Flamme Turbulentes non Prémélangées à l'Aide d'une Approche Probabiliste et d'une Cinétique Chimique Réduite, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **327** (série II b), 1999, pp. 997-1004







# Annexe I

## Le mécanisme détaillé réversible du kérosène

### ELEMENTS

C H O N  
END

### SPECIES

H2	O2	CO	CO2	CH4	C2H6	CH2O	C2H2	C2H4	C3H6
CH3OH	CH3HCO	AC3H4	C4H4	C4H6	C4H2	C3H8	BUTYNE	C2C4H8	ACROL
PC3H4	C4H8	T2C4H8	C6H6	AC5H10	T2C5H10	C2C5H10	C5H813	C	AC6H12
CC7H14	AC7H14	BC7H14	AC8H16	C6H10	AC9H18	AC10H20	NC10H22	PHC3H7	TOLUEN
PHC2H5	STYREN	PHHCO	CPD	C6H5OH	PHC2H	PHCH2OH	C14H14	NAPHT	CHD13
C4H612	BUTYN2	HOC4H6	MHD	CYC6H12	CYC5H8	CYC6H10	CYC9H18	CYC8H14	CYC7H12
C7H1213	C7H1216	HEX1245	MC6H6	FULVENE	C6H615	NC4H10	N2	H	O
OH	HO2	H2O	H2O2	HCO	CH3	SCH2	C2H5	CH2	CH
CH3O	CH2OH	C3H3	CH2CO	C2H3	C2H4O2H	CH2HCO	C2H	C2H4O	HCCO
HCCOH	IC4H3	C2	CHOCCHO	CHOCO	C2H3O	CH3CO	C2H2OH	C2O	SC3H5
C3H3O	IC3H7	NC3H7	AC3H5	TC3H5	C3H6O	C3H5O	C3H4O2H	C3H4O	C2H3CO
IC4H7	C3H4OH	C3H2	NC4H3	MEALL	SC4H9	PC4H9	NC4H5	IC4H5	H2C4O
C4H	OC4H6	C4H5O	C4H6O2H	AC5H11	BC5H11	CC5H11	ETHCO	C5H913	C5H924
AC6H13	BC6H13	C6H1113	AC7H15	BC7H15	CC7H15	DC7H15	C7H1313	C7H1324	C7H1335
AC8H17	BC8H17	CC8H17	DC8H17	C8H1513	AC9H19	BC9H19	CC9H19	DC9H19	EC9H19
AC9H17	AC10H21	BC10H21	CC10H21	DC10H21	EC10H21	AC10H19	C8H1514	C8H1515	C8H1516
C8H1517	C8H1518	C4H73	C5H915	C6H1116	APHC3H6	BPHC3H6	CPHC3H6	PHCH2	BPHC2H4
C6H5	APHC2H4	C6H5O	C5H5	C5H4OH	C5H4O	PHCO	C5H5O13	C6H9	C6H9CY2
C6H7C	C5H7	CYC5H7	CYC6H11	AC9H17C	BC9H17C	CC9H17C	DC9H17C	EC9H17C	FC9H17C
GC9H17C	C7H1314	C7H1331	C5H911	AC8H15C	AC7H13C	CC6H13	C6H1112	C6H1115	PHCH2O
BPHPROPY	NO	HCN	NH3	NO3	N2O	NO2	HNO	HONO	H2NO
N2H2	H2CN	NNH	NH2	NH	N	CN	NCO	C2N2	HOCN
HCNO	HNCO	CH3CN	CH2CN	NCN					

### REACTIONS MOLES CAL/MOLE

1. H+H+M=H2+M	7.31E+17	-1.0	0.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
2. O+O+M=O2+M	1.14E+17	-1.0	0.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
3. O+H+M=OH+M	6.20E+16	-0.6	0.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
4. H2+O2=OH+OH	1.70E+13	0.0	47780.0
5. O+H2=OH+H	3.87E+04	2.7	6260.0
6. H+O2=OH+O	1.85E+14	0.0	16812.0
7. H+O2+M=HO2+M	8.00E+17	-0.8	0.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
8. H+OH+M=H2O+M	8.62E+21	-2.0	0.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
9. H2+OH=H2O+H	2.16E+08	1.5	3430.0
10. H2O+O=OH+OH	1.50E+10	1.1	17260.0
11. HO2+OH=H2O+O2	2.89E+13	0.0	-497.0
12. HO2+O=OH+O2	1.81E+13	0.0	-400.0
13. H+HO2=H2+O2	4.28E+13	0.0	1411.0
14. H+HO2=OH+OH	1.69E+14	0.0	874.0
15. H+HO2=H2O+O	3.01E+13	0.0	1721.0
16. HO2+HO2=H2O2+O2	4.08E+02	3.3	1979.0
17. H2O2+OH=HO2+H2O	5.80E+14	0.0	9557.0
18. H2O2+H=HO2+H2	1.70E+12	0.0	3750.0
19. H2O2+H=H2O+OH	1.00E+13	0.0	3590.0
20. H2O2+O=HO2+OH	2.80E+13	0.0	6400.0
21. CO+HO2=CO2+OH	1.50E+14	0.0	23650.0
22. CO+OH=CO2+H	4.40E+06	1.5	-740.0
23. CO+O+M=CO2+M	2.83E+13	0.0	-4540.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
24. CO+O2=CO2+O	2.53E+12	0.0	47700.0
25. HCO+M=H+CO+M	1.85E+17	-1.0	17000.0
H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
26. HCO+OH=CO+H2O	1.00E+14	0.0	0.0
27. HCO+O=CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0
28. HCO+O=CO2+H	3.00E+13	0.0	0.0
29. HCO+H=CO+H2	7.22E+13	0.0	0.0
30. HCO+O2=CO+HO2	2.11E+09	1.1	-620.0
31. HCO+CH3=CO+CH4	1.20E+14	0.0	0.0
32. HCO+HO2=CO2+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0

33.	HCO+C2H6=CH2O+C2H5	4.70E+04	2.7	18235.0
34.	HCO+HCO=CH2O+CO	1.80E+13	0.0	0.0
35.	HCO+HCO=H2+CO+CO	3.00E+12	0.0	0.0
36.	CH4+HO2=CH3+H2O2	1.12E+13	0.0	24641.0
37.	CH4+OH=CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2462.0
38.	CH4+O=CH3+OH	1.62E+06	2.3	7094.0
39.	CH4+H=CH3+H2	2.25E+04	3.0	8756.6
40.	CH4+CH2=CH3+CH3	4.30E+12	0.0	10038.0
41.	CH4+O2=CH3+HO2	4.04E+13	0.0	56913.0
42.	CH3+M=CH2+H+M	1.90E+16	0.0	91600.0
43.	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/ CH3+M=CH+H2+M	6.90E+14	0.0	82460.0
44.	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/ CH3+HO2=CH3O+OH	5.00E+12	0.0	0.0
45.	CH3+O=CH2O+H	8.43E+13	0.0	0.0
46.	CH3+H=CH2+H2	7.00E+13	0.0	15100.0
47.	CH3+O2=CH3O+O	1.32E+14	0.0	31398.0
48.	CH3+O2=CH2O+OH	4.38E+11	0.0	14656.0
49.	CH3+CH3=C2H5+H	3.01E+13	0.0	13513.0
50.	CH3+CH3O=CH4+CH2O	2.41E+13	0.0	0.0
51.	CH3+CH2OH=CH4+CH2O	2.41E+12	0.0	0.0
52.	CH2+OH=CH+H2O	1.13E+07	2.0	3000.0
53.	CH2+OH=CH2O+H	2.50E+13	0.0	0.0
54.	CH2+O=CO+H+H	5.00E+13	0.0	0.0
55.	CH2+O=CO+H2	6.00E+13	0.0	0.0
56.	CH2+H=CH+H2	1.00E+18	-1.6	0.0
57.	CH2+O2=HCO+OH	4.30E+10	0.0	-500.0
58.	CH2+O2=CO2+H2	3.45E+11	0.0	1000.0
59.	CH2+O2=CO2+H+H	1.60E+12	0.0	1000.0
60.	CH2+O2=CO+H2O	1.87E+10	0.0	-1000.0
61.	CH2+O2=CO+OH+H	8.64E+10	0.0	-500.0
62.	CH2+O2=CH2O+O	5.00E+13	0.0	9000.0
63.	CH2+CO2=CH2O+CO	1.10E+11	0.0	1000.0
64.	CH2+CH2=C2H2+H2	3.20E+13	0.0	0.0
65.	CH2+CH2=C2H2+H+H	4.00E+13	0.0	0.0
66.	CH2+CH3=C2H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
67.	CH2+CH=C2H2+H	4.00E+13	0.0	0.0
68.	CH2+C2H2=H+C3H3	1.20E+13	0.0	6620.0
69.	CH2+C2H4=C3H6	4.30E+12	0.0	10038.0
70.	CH2+C2H6=CH3+C2H5	6.50E+12	0.0	7911.0
71.	SCH2+M=CH2+M	1.00E+13	0.0	0.0
72.	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/ SCH2+O2=CO+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0
73.	SCH2+H2=CH3+H	7.00E+13	0.0	0.0
74.	SCH2+H=CH2+H	2.00E+14	0.0	0.0
75.	SCH2+H=CH+H2	3.00E+13	0.0	0.0
76.	SCH2+O=CO+H+H	1.50E+13	0.0	0.0
77.	SCH2+O=CO+H2	1.50E+13	0.0	0.0
78.	SCH2+OH=CH2O+H	3.00E+13	0.0	0.0
79.	SCH2+HO2=CH2O+OH	3.00E+13	0.0	0.0
80.	SCH2+H2O2=CH3O+OH	3.00E+13	0.0	0.0
81.	SCH2+H2O=CH3OH	1.80E+13	0.0	0.0
82.	SCH2+CH2O=CH3+HCO	1.20E+12	0.0	0.0
83.	SCH2+HCO=CH3+CO	1.80E+13	0.0	0.0
84.	SCH2+CH3=C2H4+H	1.80E+13	0.0	0.0
85.	SCH2+CH4=CH3+CH3	4.00E+13	0.0	0.0
86.	SCH2+C2H6=CH3+C2H5	1.20E+14	0.0	0.0
87.	SCH2+C2H2=C3H3+H	1.80E+14	0.0	0.0
88.	SCH2+H2O=CH2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
89.	SCH2+CO2=CH2O+CO	3.00E+12	0.0	0.0
90.	SCH2+CH2CO=C2H4+CO	1.60E+14	0.0	0.0
91.	CH+OH=HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0
92.	CH+O=CO+H	1.00E+14	0.0	0.0
93.	CH+O2=HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0
94.	CH+O2=CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
95.	CH+CO2=HCO+CO	3.40E+12	0.0	690.0
96.	CH+CH4=C2H4+H	6.00E+13	0.0	0.0
97.	CH+CH3=C2H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
98.	CH+H=C+H2	1.50E+14	0.0	0.0
99.	CH+OH=C+H2O	4.00E+07	2.0	3000.0
100.	C+OH=CO+H	5.00E+13	0.0	0.0
101.	C+O2=CO+O	2.00E+13	0.0	0.0
102.	C+CH3=C2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0
103.	C+CH2=C2H+H	5.00E+13	0.0	0.0
104.	CH3O+M=CH2O+H+M	4.88E+15	0.0	22773.0
105.	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/ CH3O+HO2=CH2O+H2O2	3.00E+11	0.0	0.0

106.	CH3O+OH=CH2O+H2O	1.00E+13	0.0	0.0
107.	CH3O+O=CH2O+OH	1.30E+13	0.0	0.0
108.	CH3O+H=CH2O+H2	2.00E+13	0.0	0.0
109.	CH3O+O2=CH2O+HO2	2.35E+10	0.0	1788.0
110.	CH3O+CH2O=CH3OH+HCO	1.15E+11	0.0	1280.0
111.	CH3O+CO=CH3+CO2	1.57E+13	0.0	11804.0
112.	CH3O+HCO=CH3OH+CO	9.00E+13	0.0	0.0
113.	CH3O+C2H5=CH2O+C2H6	2.41E+13	0.0	0.0
114.	CH3O+C2H3=CH2O+C2H4	2.41E+13	0.0	0.0
115.	CH3O+C2H4=CH2O+C2H5	1.20E+11	0.0	7000.0
116.	CH2O+M=HCO+H+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	1.26E+16	0.0	77898.0
117.	CH2O+HO2=HCO+H2O2	4.00E+12	0.0	11665.0
118.	CH2O+OH=HCO+H2O	1.72E+09	1.2	-447.0
119.	CH2O+O=HCO+OH	1.81E+13	0.0	3088.0
120.	CH2O+H=HCO+H2	1.26E+08	1.6	2170.0
121.	CH2O+O2=HCO+HO2	2.04E+13	0.0	39000.0
122.	CH2O+CH3=HCO+CH4	4.09E+12	0.0	8843.0
123.	C2H6+HO2=C2H5+H2O2	1.21E+12	0.0	17600.0
124.	C2H6+OH=C2H5+H2O	4.10E+06	2.1	860.0
125.	C2H6+O=C2H5+OH	9.99E+08	1.5	5803.0
126.	C2H6+H=C2H5+H2	5.25E+14	0.0	12800.0
127.	C2H6+O2=C2H5+HO2	1.00E+13	0.0	51000.0
128.	C2H6+CH3O=C2H5+CH3OH	3.02E+11	0.0	7000.0
129.	C2H6+CH3=C2H5+CH4	7.54E+00	3.7	9883.0
130.	C2H5+HO2=C2H4+H2O2	3.00E+11	0.0	0.0
131.	C2H5+OH=C2H4+H2O	2.41E+13	0.0	0.0
132.	C2H5+OH=>CH3+CH2O+H	2.41E+13	0.0	0.0
133.	C2H5+O=CH2O+CH3	4.24E+13	0.0	0.0
134.	C2H5+O=CH3HCO+H	5.30E+13	0.0	0.0
135.	C2H5+O=C2H4+OH	3.05E+13	0.0	0.0
136.	C2H5+H=C2H4+H2	1.25E+14	0.0	8000.0
137.	C2H5+CH3=C2H4+CH4	1.14E+12	0.0	0.0
138.	C2H5+C2H5=C2H4+C2H6	1.40E+12	0.0	0.0
139.	C2H4+M=C2H2+H2+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	3.00E+17	0.0	79350.0
140.	C2H4+M=C2H3+H+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	2.97E+17	0.0	96560.0
141.	C2H4+HO2=C2H4O2H	2.00E+11	0.0	8000.0
142.	C2H4+OH=C2H3+H2O	2.02E+13	0.0	5936.0
143.	C2H4+O=CH3+HCO	1.20E+08	1.4	530.0
144.	C2H4+O=CH2HCO+H	2.00E+08	1.4	530.0
145.	C2H4+H=C2H3+H2	1.00E+14	0.0	15009.0
146.	C2H4+O2=C2H3+HO2	4.00E+13	0.0	61500.0
147.	C2H4+C2H4=C2H5+C2H3	5.00E+14	0.0	64700.0
148.	C2H4+CH3=C2H3+CH4	6.63E+00	3.7	9499.0
149.	C2H3+HO2=>CH3+CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0
150.	C2H3+OH=C2H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
151.	C2H3+H=C2H2+H2	3.00E+13	0.0	0.0
152.	C2H3+O=CH3+CO	1.50E+13	0.0	0.0
153.	C2H3+O=CH2CO+H	1.50E+13	0.0	0.0
154.	C2H3+O2=C2H2+HO2	1.98E+12	0.0	10000.0
155.	C2H3+CH=CH2+C2H2	5.00E+13	0.0	0.0
156.	C2H3+CH2=AC3H4+H	3.00E+13	0.0	0.0
157.	C2H3+CH3=C2H2+CH4	3.91E+11	0.0	0.0
158.	C2H3+C2H6=C2H4+C2H5	1.50E+13	0.0	10000.0
159.	C2H3+C2H=C2H2+C2H2	9.64E+11	0.0	0.0
160.	C2H3+C2H2=C4H4+H	2.00E+12	0.0	5000.0
161.	C2H3+HCO=C2H4+CO	9.03E+13	0.0	0.0
162.	C2H3+CH2O=C2H4+HCO	5.42E+03	2.8	5862.0
163.	C2H3+C2H3=C2H2+C2H4	1.08E+13	0.0	0.0
164.	C2H3+C2H3=C4H6	5.00E+13	0.0	0.0
165.	C2H3+C2H4=C4H6+H	1.20E+12	0.0	4683.0
166.	C2H2+O2=HCCO+OH	2.00E+08	1.5	30100.0
167.	C2H2+O2=C2H+HO2	1.21E+13	0.0	74520.0
168.	C2H2+HO2=CH2CO+OH	6.09E+09	0.0	7948.0
169.	C2H2+OH=C2H+H2O	3.40E+07	2.0	14000.0
170.	C2H2+OH=CH3+CO	4.84E-04	4.0	-2000.0
171.	C2H2+OH=CH2CO+H	2.19E-04	4.5	-1000.0
172.	C2H2+OH=HCCOH+H	5.06E+05	2.3	13500.0
173.	C2H2+O=CH2+CO	1.98E+04	2.6	656.0
174.	C2H2+O=HCCO+H	4.62E+04	2.6	656.0
175.	C2H2+CH3=C2H+CH4	1.80E+11	0.0	17290.0
176.	C2H+H2=C2H2+H	1.51E+13	0.0	3100.0
177.	C2H+OH=HCCO+H	2.00E+13	0.0	0.0
178.	C2H+OH=C2+H2O	4.00E+07	2.0	8000.0
179.	C2H+O=CO+CH	1.00E+13	0.0	0.0

Annexe I

180.	C2H+O2=CO+HCO	2.41E+12	0.0	0.0
181.	CH2CO+H=CH2HCO	1.00E+14	0.0	2500.0
182.	CH2HCO+O2=CH2CO+HO2	1.58E+10	0.0	0.0
183.	CH2HCO+O2=CH2O+CO+OH	2.51E+10	0.0	0.0
184.	CH2HCO+O2=OH+CHOCHO	2.51E+11	0.0	14640.0
185.	CH2HCO+O=CH2O+HCO	3.98E+13	0.0	0.0
186.	CH2HCO+HO2=CH2O+HCO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
187.	CHOCHO+OH=CHOCO+H2O	1.00E+13	0.0	0.0
188.	CHOCHO+O=CHOCO+OH	7.24E+12	0.0	1970.0
189.	CHOCHO+H=CH2O+HCO	1.00E+12	0.0	0.0
190.	CHOCHO+HO2=CHOCO+H2O2	1.70E+12	0.0	10700.0
191.	CHOCHO+CH3=CHOCO+CH4	1.74E+12	0.0	8440.0
192.	CHOCHO+O2=HCO+CO+HO2	6.30E+13	0.0	30000.0
193.	CHOCO=HCO+CO	2.00E+07	0.0	0.0
194.	CHOCO+O2=CO+CO+HO2	3.98E+12	0.0	30000.0
195.	C2H4O2H=C2H4O+OH	3.16E+11	0.0	19500.0
196.	C2H4O=CH4+CO	1.21E+13	0.0	57200.0
197.	C2H4O=CH3HCO	6.00E+13	0.0	57200.0
198.	C2H4O=CH3+HCO	4.90E+13	0.0	57200.0
199.	C2H4O+O2=C2H3O+HO2	4.00E+13	0.0	61500.0
200.	C2H4O+H=C2H3O+H2	2.00E+13	0.0	8300.0
201.	C2H4O+H=C2H3+H2O	5.00E+09	0.0	5000.0
202.	C2H4O+H=C2H4+OH	9.51E+10	0.0	5000.0
203.	C2H4O+O=C2H3O+OH	1.91E+12	0.0	5250.0
204.	C2H4O+OH=C2H3O+H2O	4.79E+13	0.0	5955.0
205.	C2H4O+HO2=C2H3O+H2O2	4.00E+12	0.0	17000.0
206.	C2H4O+CH3=CH4+C2H3O	1.07E+12	0.0	11830.0
207.	C2H3O=CH2CO+H	1.60E+13	0.0	35000.0
208.	C2H3O=CH3CO	8.51E+14	0.0	14000.0
209.	C2H2OH=CH2CO+H	5.00E+15	0.0	28000.0
210.	C2H2OH+H=CH2CO+H2	2.00E+13	0.0	4000.0
211.	C2H2OH+O=CH2CO+OH	2.00E+13	0.0	4000.0
212.	C2H2OH+OH=CH2CO+H2O	1.00E+13	0.0	2000.0
213.	C2H2OH+O2=>HCO+CO2+H2	4.00E+12	0.0	-250.0
214.	HCCOH+H=CH2CO+H	1.00E+13	0.0	0.0
215.	CH2CO+M=CH2+CO+M	3.60E+15	0.0	59270.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
216.	CH2CO+O2=CH2O+CO2	2.00E+13	0.0	61500.0
217.	CH2CO+HO2=>CH2O+CO+OH	6.00E+11	0.0	12738.0
218.	CH2CO+O=CH2+CO2	1.76E+12	0.0	1349.0
219.	CH2CO+O=HCCO+OH	1.00E+13	0.0	8000.0
220.	CH2CO+OH=CH2OH+CO	6.93E+12	0.0	0.0
221.	CH2CO+OH=HCO+CH2O	2.04E+11	0.0	0.0
222.	CH2CO+OH=HCCO+H2O	1.02E+11	0.0	0.0
223.	CH2CO+OH=CH3+CO2	3.10E+12	0.0	0.0
224.	CH2CO+H=CH3+CO	1.50E+04	2.8	673.0
225.	CH2CO+H=HCCO+H2	1.80E+14	0.0	8600.0
226.	CH2CO+CH3=C2H5+CO	6.00E+10	0.0	0.0
227.	CH2CO+CH3=HCCO+CH4	7.50E+12	0.0	13000.0
228.	CH2CO+CH2=HCCO+CH3	1.00E+12	0.0	0.0
229.	CH2CO+CH2=C2H4+CO	3.60E+13	0.0	11000.0
230.	HCCO+M=CH+CO+M	6.00E+15	0.0	58821.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
231.	HCCO+OH=HCO+CO+H	1.00E+13	0.0	0.0
232.	HCCO+OH=C2O+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
233.	HCCO+O=CO+CO+H	1.93E+14	0.0	590.0
234.	HCCO+H=SCH2+CO	1.50E+14	0.0	0.0
235.	HCCO+O2=CO2+CO+H	1.40E+09	1.0	0.0
236.	HCCO+CH2=C2H+CH2O	1.00E+13	0.0	2000.0
237.	HCCO+CH2=C2H3+CO	3.00E+13	0.0	0.0
238.	HCCO+C2H2=C3H3+CO	1.00E+11	0.0	3000.0
239.	HCCO+CH=C2H2+CO	5.00E+13	0.0	0.0
240.	HCCO+HCCO=C2H2+CO+CO	1.00E+13	0.0	0.0
241.	CH3OH+HO2=CH2OH+H2O2	6.30E+12	0.0	19360.0
242.	CH3OH+OH=CH2OH+H2O	4.53E+11	0.3	1160.0
243.	CH3OH+OH=CH3O+H2O	3.63E+11	0.7	5868.0
244.	CH3OH+O=CH2OH+OH	1.63E+13	0.0	5030.0
245.	CH3OH+H=CH2OH+H2	4.00E+13	0.0	6100.0
246.	CH3OH+CH2O=CH3O+CH3O	1.55E+12	0.0	79570.0
247.	CH3OH+CH3=CH2OH+CH4	3.57E+11	0.0	8663.0
248.	CH3OH+CH3=CH3O+CH4	4.68E+05	2.3	12764.0
249.	CH2OH+M=CH2O+H+M	1.00E+14	0.0	25100.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
250.	CH2OH+H=CH2O+H2	3.00E+13	0.0	0.0
251.	CH2OH+O2=CH2O+HO2	2.17E+14	0.0	4690.0
252.	CH3HCO=CH3+HCO	9.59E+14	0.0	74180.0
253.	CH3HCO+HO2=CH3CO+H2O2	1.70E+12	0.0	10700.0

254.	CH3HCO+OH=CH3CO+H2O	2.35E+10	0.7	-1113.0
255.	CH3HCO+O=CH3CO+OH	5.85E+12	0.0	1808.0
256.	CH3HCO+H=CH3CO+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
257.	CH3HCO+O2=CH3CO+HO2	2.00E+13	0.5	42200.0
258.	CH3HCO+CH3=CH3CO+CH4	1.70E+12	0.0	8440.0
259.	CH3HCO+HCO=CH3CO+CH2O	7.80E+13	0.0	8440.0
260.	CH3CO+M=CH3+CO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	8.64E+15	0.0	14400.0
261.	C2O+O2=CO+CO+O	2.00E+13	0.0	0.0
262.	C2O+OH=CO+CO+H	2.00E+13	0.0	0.0
263.	C2O+O=CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0
264.	C2O+H=CH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
265.	C2+O2=CO+CO	5.00E+13	0.0	0.0
266.	C2+OH=C2O+H	5.00E+13	0.0	0.0
267.	C2+H2=C2H+H	4.00E+05	2.4	1000.0
268.	CH2+C3H8=CH3+IC3H7	2.19E+12	0.0	6405.0
269.	CH2+C3H8=CH3+NC3H7	1.79E+12	0.0	6405.0
270.	CH3+C2H5(+M)=C3H8(+M) Low pressure limit: 0.68000E+62 -0.13420E+02 0.60000E+04 TROE centering: 0.10000E+01 0.10000E+04 0.14340E+04 0.53290E+04	4.90E+14	-0.5	0.0
271.	C3H8+O2=NC3H7+HO2	4.00E+13	0.0	50872.0
272.	C3H8+O2=IC3H7+HO2	4.00E+13	0.0	47500.0
273.	C3H8+HO2=NC3H7+H2O2	4.76E+04	2.5	16494.0
274.	C3H8+HO2=IC3H7+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
275.	C3H8+OH=NC3H7+H2O	3.16E+07	1.8	934.0
276.	C3H8+OH=IC3H7+H2O	7.08E+06	1.9	-159.0
277.	C3H8+O=NC3H7+OH	3.72E+06	2.4	5505.0
278.	C3H8+O=IC3H7+OH	5.50E+05	2.5	3140.0
279.	C3H8+H=NC3H7+H2	1.34E+06	2.5	6756.0
280.	C3H8+H=IC3H7+H2	1.01E+04	2.9	2931.0
281.	C3H8+CH3=NC3H7+CH4	3.00E+12	0.0	11710.0
282.	C3H8+CH3=IC3H7+CH4	8.07E+11	0.0	10110.0
283.	C3H8+C2H5=NC3H7+C2H6	3.16E+11	0.0	12300.0
284.	C3H8+C2H5=IC3H7+C2H6	5.01E+10	0.0	10400.0
285.	C3H8+C2H3=NC3H7+C2H4	6.00E+02	3.3	10502.0
286.	C3H8+C2H3=IC3H7+C2H4	1.00E+03	3.1	8829.0
287.	C3H8+IC3H7=NC3H7+C3H8	1.00E+11	0.0	12900.0
288.	C3H8+AC3H5=NC3H7+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
289.	C3H8+AC3H5=IC3H7+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
290.	C3H8+CH3O=NC3H7+CH3OH	3.18E+11	0.0	7050.0
291.	C3H8+CH3O=IC3H7+CH3OH	7.20E+10	0.0	4470.0
292.	NC3H7+O2=C3H6+HO2	1.00E+12	0.0	5020.0
293.	IC3H7=C2H4+CH3	1.14E+11	0.0	31110.0
294.	IC3H7+O2=C3H6+HO2	2.75E+10	0.0	-2151.0
295.	C3H6=SC3H5+H	7.59E+14	0.0	101300.0
296.	C3H6=TC3H5+H	1.45E+15	0.0	98060.0
297.	C3H6=C2H3+CH3	1.10E+21	-1.2	97720.0
298.	C3H6=CH4+C2H2	3.50E+12	0.0	70000.0
299.	C3H6+O2=AC3H5+HO2	1.95E+12	0.0	39000.0
300.	C3H6+O2=SC3H5+HO2	1.40E+13	0.0	60200.0
301.	C3H6+O2=TC3H5+HO2	7.00E+12	0.0	60200.0
302.	C3H6+HO2=C3H6O+OH	1.02E+12	0.0	14964.0
303.	C3H6+HO2=AC3H5+H2O2	1.50E+11	0.0	14190.0
304.	C3H6+HO2=SC3H5+H2O2	7.50E+09	0.0	12570.0
305.	C3H6+HO2=TC3H5+H2O2	3.00E+09	0.0	9930.0
306.	C3H6+OH=AC3H5+H2O	7.70E+05	2.2	622.0
307.	C3H6+OH=SC3H5+H2O	1.01E+13	0.0	5960.0
308.	C3H6+OH=TC3H5+H2O	1.11E+06	2.0	1450.0
309.	C3H6+O=C2H5+HCO	4.69E+07	1.6	-628.0
310.	C3H6+O=CH3+CH2HCO	3.90E+07	1.6	-628.0
311.	C3H6+O=C2H4+CH2O	7.02E+07	1.6	-628.0
312.	C3H6+O=AC3H5+OH	1.75E+11	0.7	5884.0
313.	C3H6+O=SC3H5+OH	1.20E+11	0.7	8960.0
314.	C3H6+O=TC3H5+OH	6.00E+10	0.7	7633.0
315.	C3H6+H=IC3H7	5.70E+09	1.2	874.0
316.	C3H6+H=AC3H5+H2	1.70E+05	2.5	2492.0
317.	C3H6+H=SC3H5+H2	3.46E+14	0.0	17422.0
318.	C3H6+H=TC3H5+H2	1.67E+14	0.0	14818.0
319.	C3H6+CH3=AC3H5+CH4	1.60E+11	0.0	8800.0
320.	C3H6+CH3=SC3H5+CH4	3.30E+11	0.0	10110.0
321.	C3H6+CH3=TC3H5+CH4	5.00E+10	0.0	8030.0
322.	C3H6+C2H5=AC3H5+C2H6	1.00E+11	0.0	9800.0
323.	C3H6+C2H3=C4H6+CH3	7.20E+11	0.0	5008.0
324.	C3H6O=>C2H5+HCO	1.26E+14	0.0	58000.0
325.	AC3H5+HO2=C3H5O+OH	7.50E+11	0.0	0.0
326.	AC3H5+H=AC3H4+H2	6.03E+12	0.0	0.0
327.	AC3H5+CH3=AC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0

Annexe I

328.	AC3H5+CH2=C4H6+H	3.00E+13	0.0	0.0
329.	AC3H5+C2H5=AC3H4+C2H6	4.00E+11	0.0	0.0
330.	AC3H5+C2H3=AC3H4+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
331.	SC3H5=PC3H4+H	5.62E+12	0.0	43500.0
332.	SC3H5+O2=CH3CO+HCO	4.34E+12	0.0	0.0
333.	SC3H5+HO2=>CH2CO+CH3+OH	4.50E+12	0.0	0.0
334.	SC3H5+H=AC3H4+H2	3.33E+12	0.0	0.0
335.	SC3H5+H=PC3H4+H2	3.33E+12	0.0	0.0
336.	SC3H5+O=>CH2CO+CH3	1.81E+14	0.0	0.0
337.	SC3H5+CH3=AC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
338.	SC3H5+C2H5=AC3H4+C2H6	1.00E+11	0.0	0.0
339.	SC3H5+C2H3=AC3H4+C2H4	1.00E+11	0.0	0.0
340.	TC3H5=AC3H5	2.50E+12	0.0	47000.0
341.	TC3H5+O2=CH3CO+CH2O	5.01E+12	0.0	19000.0
342.	TC3H5+O=>CH2CO+CH3	1.81E+14	0.0	0.0
343.	TC3H5+H=PC3H4+H2	1.00E+13	0.0	0.0
344.	TC3H5+CH3=AC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
345.	TC3H5+C2H5=AC3H4+C2H6	1.00E+11	0.0	0.0
346.	TC3H5+C2H3=AC3H4+C2H4	1.00E+11	0.0	0.0
347.	AC3H4+M=C3H3+H+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	2.00E+18	0.0	80000.0
348.	AC3H4=PC3H4	1.20E+15	0.0	92400.0
349.	AC3H4+O2=C3H3+HO2	4.00E+13	0.0	61500.0
350.	AC3H4+HO2=>C3H4O2H	1.50E+11	0.0	8000.0
351.	AC3H4+HO2=C3H3+H2O2	1.80E+13	0.0	19000.0
352.	AC3H4+HO2=>CH2CO+CH2+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
353.	AC3H4+HO2=>ACROL+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
354.	AC3H4+HO2=>C2H2+CH2O+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
355.	AC3H4+OH=C3H3+H2O	2.15E+12	0.0	-200.0
356.	AC3H4+OH=CH2CO+CH3	1.00E+12	0.0	-393.0
357.	AC3H4+OH=HCO+C2H4	1.25E+11	0.0	-393.0
358.	AC3H4+OH=C2H5+CO	1.88E+11	0.0	-393.0
359.	AC3H4+OH=ACROL+H	3.75E+11	0.0	-393.0
360.	AC3H4+O=C2H4+CO	1.12E-02	4.6	-4243.0
361.	AC3H4+O=C2H3+HCO	5.00E-04	4.6	-4243.0
362.	AC3H4+O=CH2CO+CH2	1.00E-03	4.6	-4243.0
363.	AC3H4+O=C2H2+CH2O	2.50E-03	4.6	-4243.0
364.	AC3H4+H=AC3H5	1.20E+12	0.0	2700.0
365.	AC3H4+H=SC3H5	8.00E+11	0.0	2000.0
366.	AC3H4+H=TC3H5	8.50E+12	0.0	2000.0
367.	AC3H4+H=C3H3+H2	1.00E+14	0.0	15009.0
368.	IC4H7=AC3H4+CH3	2.00E+13	0.0	51460.0
369.	AC3H4+CH3=C3H3+CH4	1.33E+12	0.0	7700.0
370.	AC3H4+AC3H5=C3H3+C3H6	9.00E+11	0.0	7700.0
371.	C3H4O2H=>AC3H4+HO2	3.16E+11	0.0	19500.0
372.	C3H4O2H=>C3H4O+OH	3.16E+11	0.0	19500.0
373.	C3H4O=>ACROL	2.45E+14	0.0	58485.0
374.	C3H4O+O2=>C3H3O+HO2	4.00E+13	0.0	61500.0
375.	C3H4O+HO2=>CH2CO+CH2O+OH	1.00E+12	0.0	14340.0
376.	C3H4O+HO2=>C3H3O+H2O2	4.00E+12	0.0	17000.0
377.	C3H4O+OH=>C3H3O+H2O	4.79E+13	0.0	5955.0
378.	C3H3O=>C2H3CO	8.51E+14	0.0	14000.0
379.	C3H3O+O2=>HCCO+HCO+OH	5.01E+12	0.0	19192.0
380.	PC3H4+M=C3H3+H+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	4.70E+18	0.0	80000.0
381.	PC3H4=C2H+CH3	4.20E+16	0.0	100000.0
382.	PC3H4+O2=C3H3+HO2	2.50E+12	0.0	51000.0
383.	PC3H4+O2=>HCCO+OH+CH2	1.00E+07	1.5	30100.0
384.	PC3H4+HO2=>C2H4+CO+OH	6.09E+09	0.0	7948.0
385.	PC3H4+HO2=CH3CO+CH2O	3.00E+12	0.0	16000.0
386.	PC3H4+HO2=CH3HCO+HCO	4.50E+12	0.0	16000.0
387.	PC3H4+HO2=C3H3+H2O2	5.00E+11	0.0	19000.0
388.	PC3H4+OH=C3H3+H2O	6.50E+02	3.0	200.0
389.	PC3H4+OH=CH2CO+CH3	2.00E-04	4.5	-1000.0
390.	PC3H4+OH=HCO+C2H4	1.00E-04	4.5	-1000.0
391.	PC3H4+OH=CH2O+C2H3	1.00E-04	4.5	-1000.0
392.	PC3H4+OH=ACROL+H	1.00E-04	4.5	-1000.0
393.	PC3H4+O=CH2CO+CH2	6.40E+12	0.0	2100.0
394.	PC3H4+O=C2H3+HCO	3.20E+12	0.0	2100.0
395.	PC3H4+O=HCCO+CH3	9.18E+12	0.0	2100.0
396.	PC3H4+O=CH2O+C2H2	3.20E+11	0.0	2100.0
397.	PC3H4+O=>HCCO+CH2+H	3.20E+11	0.0	2010.0
398.	PC3H4+H=TC3H5	1.30E+13	0.0	1999.0
399.	PC3H4+H=C3H3+H2	2.00E+14	0.0	15000.0
400.	PC3H4+CH3=C3H3+CH4	4.00E+11	0.0	7700.0
401.	PC3H4+C2H3=C3H3+C2H4	1.00E+11	0.0	7700.0
402.	PC3H4+C2H=C3H3+C2H2	4.20E+16	0.0	100000.0



403.	C3H4OH=>CH2CO+CH3	3.00E+15	0.0	28000.0
404.	C3H4OH=>HCO+C2H4	5.00E+14	0.0	28000.0
405.	C3H4OH=>CH2O+C2H3	1.00E+15	0.0	28000.0
406.	C3H4OH=>ACROL+H	5.00E+14	0.0	28000.0
407.	C3H3+O2=CH2CO+HCO	3.01E+10	0.0	2870.0
408.	C3H3+HO2=C3H2+H2O2	2.00E+12	0.0	0.0
409.	C3H3+OH=C3H2+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
410.	C3H3+OH=HCCO+CH3	5.00E+12	0.0	0.0
411.	C3H3+O=>C2H2+HCO	1.39E+14	0.0	0.0
412.	C3H3+O=C2H3+CO	4.62E+13	0.0	0.0
413.	C3H3+O=C2H+CH2O	4.62E+13	0.0	0.0
414.	C3H3+O=>C2H2+CO+H	4.62E+13	0.0	0.0
415.	C3H3+H=C3H2+H2	5.00E+13	0.0	3000.0
416.	C3H3+CH=IC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
417.	C3H3+CH=NC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
418.	C3H3+CH2=C4H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
419.	C3H3+CH3=C4H6	3.33E+12	0.0	0.0
420.	CH+C2H2=C3H2+H	1.00E+14	0.0	0.0
421.	C3H2+O2=HCCO+HCO	3.00E+10	0.0	2870.0
422.	C3H2+OH=C2H2+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
423.	C3H2+CH2=IC4H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
424.	C3H5O=ACROL+H	1.00E+14	0.0	19000.0
425.	ACROL=C2H3+HCO	2.45E+16	0.0	84128.0
426.	ACROL+O=>C2H3CO+OH	5.01E+12	0.0	1790.0
427.	ACROL+H=>C2H3CO+H2	3.38E+13	0.0	4200.0
428.	ACROL+OH=>C2H3CO+H2O	1.00E+13	0.0	0.0
429.	ACROL+HO2=>C2H3CO+H2O2	1.70E+12	0.0	10700.0
430.	ACROL+CH3=>C2H3CO+CH4	1.74E+12	0.0	8440.0
431.	ACROL+C2H3=>C2H3CO+C2H4	1.74E+12	0.0	8440.0
432.	ACROL+AC3H5=>C2H3CO+C3H6	1.00E+12	0.0	8000.0
433.	ACROL+C2H5=C2H3CO+C2H6	1.74E+12	0.0	8440.0
434.	C2H3CO+M=>C2H3+CO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	8.60E+15	0.0	23000.0
435.	C2H3CO+OH=>ACROL+O	1.00E+12	0.0	19160.0
436.	NC4H10=C2H5+C2H5	2.00E+16	0.0	81300.0
437.	NC4H10=NC3H7+CH3	1.00E+17	0.0	85400.0
438.	NC4H10=PC4H9+H	1.58E+16	0.0	98000.0
439.	NC4H10=SC4H9+H	1.00E+16	0.0	95000.0
440.	NC4H10+O2=PC4H9+HO2	2.51E+13	0.0	49000.0
441.	NC4H10+O2=SC4H9+HO2	3.98E+13	0.0	47600.0
442.	NC4H10+H=PC4H9+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
443.	NC4H10+H=SC4H9+H2	4.78E+06	2.5	7369.0
444.	NC4H10+O=PC4H9+OH	4.89E+06	2.4	5505.0
445.	NC4H10+O=SC4H9+OH	4.28E+05	2.6	2583.0
446.	NC4H10+OH=PC4H9+H2O	4.14E+07	1.7	753.0
447.	NC4H10+OH=SC4H9+H2O	7.23E+07	1.6	-246.0
448.	NC4H10+HO2=PC4H9+H2O2	1.70E+13	0.0	20460.0
449.	NC4H10+HO2=SC4H9+H2O2	4.00E+12	0.0	18150.0
450.	NC4H10+CH3=PC4H9+CH4	2.19E+11	0.0	11400.0
451.	NC4H10+CH3=SC4H9+CH4	2.19E+11	0.0	9600.0
452.	NC4H10+C2H3=PC4H9+C2H4	1.00E+12	0.0	18000.0
453.	NC4H10+C2H3=SC4H9+C2H4	7.94E+11	0.0	16800.0
454.	NC4H10+C2H5=PC4H9+C2H6	1.00E+11	0.0	13400.0
455.	NC4H10+C2H5=SC4H9+C2H6	1.00E+11	0.0	10400.0
456.	NC4H10+AC3H5=PC4H9+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
457.	NC4H10+AC3H5=SC4H9+C3H6	3.16E+11	0.0	16400.0
458.	NC4H10+CH3O=PC4H9+CH3OH	3.00E+11	0.0	7000.0
459.	NC4H10+CH3O=SC4H9+CH3OH	6.00E+11	0.0	7000.0
460.	PC4H9=C2H5+C2H4	2.50E+12	0.0	28500.0
461.	PC4H9=C4H8+H	1.26E+13	0.0	38600.0
462.	PC4H9=SC4H9	1.39E+09	1.0	33760.0
463.	PC4H9+O2=C4H8+HO2	3.80E+10	0.0	-2000.0
464.	PC4H9+HO2=C4H8+H2O2	2.41E+13	0.0	0.0
465.	PC4H9+OH=C4H8+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
466.	PC4H9+H=C4H8+H2	1.25E+13	0.0	0.0
467.	PC4H9+CH3=C4H8+CH4	2.00E+12	0.0	0.0
468.	PC4H9+C2H5=C4H8+C2H6	1.60E+12	0.0	0.0
469.	PC4H9+AC3H5=C4H8+C3H6	1.00E+12	0.0	0.0
470.	SC4H9=T2C4H8+H	4.57E+12	0.0	34000.0
471.	SC4H9=C2C4H8+H	4.17E+12	0.0	34780.0
472.	SC4H9+O2=C4H8+HO2	7.59E+09	0.0	-2000.0
473.	SC4H9+O2=T2C4H8+HO2	9.00E+09	0.0	-2000.0
474.	SC4H9+O2=C2C4H8+HO2	9.00E+09	0.0	-2000.0
475.	SC4H9+HO2=C4H8+H2O2	2.40E+13	0.0	0.0
476.	SC4H9+HO2=T2C4H8+H2O2	2.40E+13	0.0	0.0
477.	SC4H9+HO2=C2C4H8+H2O2	2.40E+13	0.0	0.0
478.	SC4H9+OH=C4H8+H2O	2.40E+13	0.0	0.0

479.	SC4H9+OH=T2C4H8+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
480.	SC4H9+OH=C2C4H8+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
481.	SC4H9+H=C4H8+H2	3.33E+13	0.0	0.0
482.	SC4H9+H=T2C4H8+H2	5.00E+13	0.0	0.0
483.	SC4H9+H=C2C4H8+H2	5.00E+13	0.0	0.0
484.	SC4H9+CH3=C4H8+CH4	8.00E+11	0.0	0.0
485.	SC4H9+CH3=T2C4H8+CH4	1.00E+12	0.0	0.0
486.	SC4H9+CH3=C2C4H8+CH4	1.00E+12	0.0	0.0
487.	C4H8=MEALL+H	4.08E+18	-1.0	97350.0
488.	C4H8=C2C4H8	4.00E+11	0.0	60000.0
489.	C4H8=T2C4H8	4.00E+11	0.0	60000.0
490.	C4H8=AC3H5+CH3	1.50E+19	-1.0	73400.0
491.	C4H8=C2H3+C2H5	1.00E+19	-1.0	96770.0
492.	C4H8+O2=MEALL+HO2	4.00E+12	0.0	40000.0
493.	C4H8+HO2=MEALL+H2O2	1.00E+11	0.0	17060.0
494.	C4H8+HO2=>CH2O+C3H6+OH	2.50E+12	0.0	14340.0
495.	C4H8+OH=MEALL+H2O	4.19E+06	2.0	-543.0
496.	C4H8+OH=CH2O+NC3H7	3.44E+12	0.0	-928.0
497.	C4H8+OH=CH3HCO+C2H5	4.00E+11	0.0	-928.0
498.	C4H8+O=C3H6+CH2O	7.23E+05	2.3	-1050.0
499.	C4H8+O=CH3HCO+C2H4	1.30E+13	0.0	850.0
500.	C4H8+O=C2H5+CH3CO	1.63E+13	0.0	850.0
501.	C4H8+O=MEALL+OH	2.60E+12	0.0	4500.0
502.	C4H8+H=SC4H9	8.00E+12	0.0	1500.0
503.	C4H8+H=MEALL+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
504.	C4H8+CH3=C4H73+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
505.	C4H8+CH3=MEALL+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
506.	C4H8+C2H5=MEALL+C2H6	1.00E+11	0.0	8300.0
507.	C4H8+AC3H5=MEALL+C3H6	8.00E+10	0.0	12400.0
508.	C4H8+SC3H5=MEALL+C3H6	8.00E+10	0.0	12400.0
509.	C4H8+TC3H5=MEALL+C3H6	8.00E+10	0.0	12400.0
510.	C2C4H8=T2C4H8	3.62E+13	0.0	61330.0
511.	C2C4H8=C4H6+H2	1.00E+13	0.0	65500.0
512.	C2C4H8=MEALL+H	4.07E+18	-1.0	97350.0
513.	C2C4H8=SC3H5+CH3	2.00E+16	0.0	71300.0
514.	C2C4H8+OH=MEALL+H2O	9.00E+06	2.0	-60.0
515.	C2C4H8+O=IC3H7+HCO	6.03E+12	0.0	0.0
516.	C2C4H8+O=CH3HCO+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
517.	C2C4H8+H=MEALL+H2	1.00E+13	0.0	3500.0
518.	C2C4H8+CH3=MEALL+CH4	1.00E+11	0.0	8200.0
519.	T2C4H8=MEALL+H	4.07E+18	-1.0	97350.0
520.	T2C4H8=SC3H5+CH3	2.00E+16	0.0	71300.0
521.	T2C4H8+OH=MEALL+H2O	9.00E+06	2.0	-60.0
522.	T2C4H8+O=IC3H7+HCO	6.03E+12	0.0	0.0
523.	T2C4H8+O=CH3HCO+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
524.	T2C4H8+H=MEALL+H2	5.00E+12	0.0	3500.0
525.	T2C4H8+CH3=MEALL+CH4	1.00E+11	0.0	8200.0
526.	C4H73=C2H4+C2H3	5.00E+13	0.0	38000.0
527.	C4H73=C4H6+H	1.00E+14	0.0	44000.0
528.	C4H73+O2=C4H6+HO2	1.02E+12	0.0	22654.0
529.	C4H73+HO2=C4H6+H2O2	1.80E+12	0.0	0.0
530.	C4H73+HO2=>ACROL+CH3+OH	1.00E+12	0.0	0.0
531.	C4H73+OH=C4H6+H2O	4.00E+13	0.0	0.0
532.	C4H73+O=C4H6+OH	4.00E+13	0.0	0.0
533.	C4H73+H=C4H6+H2	3.16E+13	0.0	0.0
534.	C4H73+CH3=C4H6+CH4	7.94E+12	0.0	0.0
535.	C4H73+C2H3=C4H6+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
536.	C4H73+C2H5=C4H6+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
537.	C4H73+C2H5=C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
538.	C4H73+C2H5=T2C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
539.	C4H73+C2H5=C2C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
540.	C4H73+C3H3=C4H6+PC3H4	4.00E+12	0.0	0.0
541.	C4H73+C3H3=C4H6+AC3H4	4.00E+12	0.0	0.0
542.	C4H73+AC3H5=C4H6+C3H6	6.30E+12	0.0	0.0
543.	C4H73+C4H73=C4H6+C4H8	3.16E+12	0.0	0.0
544.	C4H73+H2=C4H8+H	3.00E+12	0.0	15700.0
545.	C4H73+C2H6=C4H8+C2H5	3.00E+13	0.0	12300.0
546.	C4H73+C2H4=C4H8+C2H3	1.00E+11	0.0	15000.0
547.	C4H73+C3H6=C4H8+AC3H5	1.00E+11	0.0	9800.0
548.	C4H73+C4H8=C4H8+MEALL	1.00E+11	0.0	8300.0
549.	C4H73+T2C4H8=C4H8+MEALL	2.00E+11	0.0	9800.0
550.	C4H73+C2C4H8=C4H8+MEALL	2.00E+11	0.0	9800.0
551.	C4H6+C4H73=NC4H5+C4H8	6.32E+02	3.1	20010.0
552.	C4H6+C4H73=IC4H5+C4H8	6.32E+02	3.1	18010.0
553.	MEALL=C4H6+H	6.30E+14	0.0	49300.0
554.	MEALL+O2=C4H6+HO2	2.00E+09	0.0	-1506.0
555.	MEALL+HO2=C4H6+H2O2	1.00E+12	0.0	0.0

556.	MEALL+OH=C4H6+H2O	4.00E+13	0.0	0.0
557.	MEALL+O=C4H6+OH	4.00E+13	0.0	0.0
558.	MEALL+H=C4H6+H2	3.16E+12	0.0	0.0
559.	MEALL+CH3=C4H6+CH4	1.00E+13	0.0	0.0
560.	MEALL+C2H3=C4H6+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
561.	MEALL+C2H5=C4H6+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
562.	MEALL+C2H5=C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
563.	MEALL+C2H5=T2C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
564.	MEALL+C2H5=C2C4H8+C2H4	5.00E+11	0.0	0.0
565.	MEALL+C3H3=C4H6+PC3H4	4.00E+12	0.0	0.0
566.	MEALL+C3H3=C4H6+AC3H4	4.00E+12	0.0	0.0
567.	MEALL+AC3H5=C4H6+C3H6	6.30E+12	0.0	0.0
568.	MEALL+AC3H5=C4H8+AC3H4	1.00E+12	0.0	0.0
569.	MEALL+AC3H5=>MHD	3.20E+11	0.0	0.0
570.	MHD=>MEALL+AC3H5	5.00E+15	0.0	72800.0
571.	MHD=>CH3+C6H9	5.00E+16	0.0	73000.0
572.	MEALL+MEALL=C4H6+C4H8	3.00E+12	0.0	0.0
573.	C3H3+CH3=BUTYNE	5.00E+12	0.0	0.0
574.	BUTYNE+HO2=NC4H5+H2O2	5.00E+11	0.0	17000.0
575.	BUTYNE+HO2=IC4H5+H2O2	5.00E+11	0.0	17000.0
576.	BUTYNE+OH=NC4H5+H2O	2.60E+02	3.0	200.0
577.	BUTYNE+OH=IC4H5+H2O	2.60E+02	3.0	200.0
578.	BUTYNE+OH=CH2CO+C2H5	4.00E-04	4.5	-1000.0
579.	BUTYNE+O=C3H6+CO	2.00E+13	0.0	1660.0
580.	BUTYNE+H=AC3H4+CH3	1.30E+05	2.5	1000.0
581.	BUTYNE+H=C2H5+C2H2	6.50E+04	2.5	1000.0
582.	BUTYNE+H=IC4H5+H2	6.50E+13	0.0	9400.0
583.	BUTYNE+H=NC4H5+H2	6.50E+13	0.0	9400.0
584.	BUTYNE+CH3=IC4H5+CH4	1.00E+14	0.0	19500.0
585.	BUTYNE+CH3=NC4H5+CH4	1.00E+14	0.0	19500.0
586.	BUTYN2=C4H6	3.00E+13	0.0	65000.0
587.	BUTYN2=C4H612	3.00E+13	0.0	67000.0
588.	BUTYN2+H=PC3H4+CH3	2.60E+05	2.5	1000.0
589.	BUTYNE=C4H612	2.50E+13	0.0	65000.0
590.	C4H612=C4H6	2.50E+13	0.0	63000.0
591.	C4H612=C3H3+CH3	2.00E+15	0.0	75000.0
592.	C4H612+H=AC3H4+CH3	6.00E+12	0.0	2100.0
593.	C4H612+H=PC3H4+CH3	6.00E+12	0.0	2100.0
594.	IC3H7+C2H2=C4H6+CH3	2.77E+10	0.0	6504.0
595.	C4H6=C2H4+C2H2	1.00E+14	0.0	75000.0
596.	C4H6=NC4H5+H	1.58E+16	0.0	110000.0
597.	C4H6+O2=NC4H5+HO2	2.80E+13	0.0	62500.0
598.	C4H6+O2=IC4H5+HO2	1.40E+12	0.0	50600.0
599.	C4H6+HO2=NC4H5+H2O2	2.00E+11	0.0	12600.0
600.	C4H6+HO2=IC4H5+H2O2	1.00E+11	0.0	9920.0
601.	C4H6+OH=NC4H5+H2O	1.00E+07	2.0	7253.0
602.	C4H6+OH=IC4H5+H2O	8.00E+06	2.0	3744.0
603.	C4H6+O=IC4H5+OH	4.53E+15	-0.5	7028.0
604.	C4H6+O=NC4H5+OH	2.27E+15	-0.5	7028.0
605.	C4H6+H=PC3H4+CH3	1.30E+03	2.5	1000.0
606.	C4H6+H=AC3H4+CH3	1.00E+13	0.0	15000.0
607.	C4H6+H=NC4H5+H2	5.00E+15	0.0	22800.0
608.	C4H6+H=IC4H5+H2	2.50E+15	0.0	22800.0
609.	C4H6+CH3=NC4H5+CH4	2.00E+14	0.0	24800.0
610.	C4H6+CH3=IC4H5+CH4	4.00E+14	0.0	22800.0
611.	C4H6+C2H3=NC4H5+C2H4	6.32E+02	3.1	20010.0
612.	C4H6+C2H3=IC4H5+C2H4	6.32E+02	3.1	18010.0
613.	C4H6+MEALL=NC4H5+C4H8	6.32E+02	3.1	20010.0
614.	C4H6+MEALL=IC4H5+C4H8	6.32E+02	3.1	18010.0
615.	C4H6+OH=HOC4H6	3.50E+12	0.0	-994.0
616.	HOC4H6=>OC4H6+H	5.00E+14	0.0	28000.0
617.	C4H6+O=>OC4H6	3.00E+13	0.0	80.0
618.	OC4H6=>C3H6+CO	2.00E+13	0.0	57000.0
619.	OC4H6=>C2H4+CH2CO	5.00E+14	1.0	78000.0
620.	OC4H6+O=>C2H3O+C2H3O	1.20E+08	1.4	530.0
621.	OC4H6+OH=>CH2CO+C2H3+H2O	2.02E+13	0.0	5955.0
622.	OC4H6+HO2=>C2H3O+C2H3O+OH	5.00E+12	0.0	14964.0
623.	OC4H6+H=>C4H5O+H2	4.10E+09	1.2	2405.0
624.	OC4H6+OH=>C4H5O+H2O	2.35E+10	0.7	-1113.0
625.	OC4H6+HO2=>C4H5O+H2O2	1.70E+12	0.0	10700.0
626.	OC4H6+O=>C4H5O+OH	5.85E+12	0.0	1808.0
627.	OC4H6+CH3=>C4H5O+CH4	1.70E+12	0.0	8440.0
628.	OC4H6+C2H3=>C4H5O+C2H4	1.70E+12	0.0	8440.0
629.	OC4H6+AC3H5=>C4H5O+C3H6	1.70E+12	0.0	8440.0
630.	C4H6+HO2=>C4H6O2H	2.00E+11	0.0	8000.0
631.	C4H6O2H=>ACROL+OH+CH2	1.00E+10	0.0	19500.0
632.	C4H6O2H=>OC4H6+OH	2.00E+11	0.0	19500.0

633.	C4H5O+H=>OC4H6	5.00E+12	0.0	0.0
634.	C4H5O+O2=>ACROL+CO+OH	1.00E+12	0.0	25000.0
635.	C4H5O=>CH2CO+C2H3	1.00E+15	0.0	65000.0
636.	C4H5O=>CO+C2H2+CH3	5.00E+14	0.0	65000.0
637.	C4H5O=>CO+AC3H5	5.00E+14	0.0	60000.0
638.	IC4H5+O2=C2H3CO+CH2O	2.00E+11	0.0	14000.0
639.	IC4H5+O=>CH2CO+C2H3	1.00E+13	0.0	2000.0
640.	IC4H5+HO2=CH2CO+C2H3+OH	1.00E+12	0.0	2000.0
641.	IC4H5+HO2=>C4H5O+OH	1.00E+13	0.0	2000.0
642.	C3H6+IC4H5=AC3H5+C4H6	1.00E+11	0.0	9800.0
643.	NC4H5=C2H3+C2H2	5.00E+13	0.0	44000.0
644.	NC4H5+O2=ACROL+HCO	2.00E+11	0.0	14000.0
645.	NC4H5+O=>AC3H5+CO	1.00E+13	0.0	2000.0
646.	NC4H5+OH=C4H4+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
647.	NC4H5+HO2=>AC3H5+CO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
648.	NC4H5+H=C4H4+H2	1.00E+14	0.0	0.0
649.	NC4H5+H=IC4H5+H	1.00E+14	0.0	0.0
650.	NC4H5+C2H2=C4H6+C2H	1.80E+11	0.0	17300.0
651.	NC4H5+CH2O=C4H6+HCO	4.00E+12	0.0	8840.0
652.	C3H6+NC4H5=AC3H5+C4H6	1.00E+11	0.0	9800.0
653.	IC4H5+C2H2=C4H6+C2H	1.80E+11	0.0	17300.0
654.	IC4H5+CH2O=C4H6+HCO	4.00E+12	0.0	8840.0
655.	C4H4=C2H2+C2H2	3.20E+13	0.0	77100.0
656.	C4H4+M=NC4H3+H+M	1.00E+20	0.0	99300.0
657.	C4H4=IC4H3+H	6.30E+13	0.0	87100.0
658.	C4H4=C4H2+H2	1.26E+15	0.0	94700.0
659.	C4H4+O2=NC4H3+HO2	1.00E+13	0.0	63200.0
660.	C4H4+O2=IC4H3+HO2	1.00E+13	0.0	44640.0
661.	C4H4+HO2=NC4H3+H2O2	2.00E+11	0.0	12600.0
662.	C4H4+HO2=IC4H3+H2O2	1.00E+11	0.0	9920.0
663.	C4H4+HO2=C3H3+HCO+OH	4.00E+11	0.0	8000.0
664.	C4H4+OH=IC4H3+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
665.	C4H4+OH=NC4H3+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0
666.	C4H4+O=AC3H4+CO	3.00E+13	0.0	1810.0
667.	C4H4+H=IC4H3+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
668.	C4H4+H=NC4H3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
669.	C4H4+C2H=IC4H3+C2H2	3.98E+13	0.0	0.0
670.	C4H4+CH3=IC4H3+CH4	1.66E+01	3.7	9499.0
671.	C4H4+NC4H5=IC4H3+C4H6	4.00E+11	0.0	5000.0
672.	C4H4+IC4H5=IC4H3+C4H6	4.00E+11	0.0	5000.0
673.	C2H2+C2H2=IC4H3+H	6.31E+13	0.0	41600.0
674.	IC4H3+O2=CH2CO+HCCO	1.00E+12	0.0	0.0
675.	IC4H3+OH=C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
676.	IC4H3+O=CH2CO+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
677.	IC4H3+O=H2C4O+H	2.00E+13	0.0	0.0
678.	IC4H3+H=C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
679.	IC4H3+CH2=AC3H4+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
680.	NC4H3+OH=C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
681.	NC4H3+H=C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
682.	NC4H3+H=IC4H3+H	1.00E+14	0.0	0.0
683.	H2C4O+OH=CH2CO+HCCO	1.00E+07	2.0	2000.0
684.	H2C4O+H=C2H2+HCCO	5.00E+13	0.0	3000.0
685.	C2H2+C2H=C4H2+H	1.82E+14	0.0	467.0
686.	C4H2+M=C4H+H+M	3.50E+17	0.0	80065.0
687.	C4H2+OH=H2C4O+H	6.66E+12	0.0	-410.0
688.	C4H2+O=C3H2+CO	1.20E+12	0.0	0.0
689.	C4H+O2=C2H+CO+CO	1.00E+14	0.0	0.0
690.	C3H3+C3H3=C6H615	4.00E+12	0.0	0.0
691.	C6H615=HEX1245	1.80E+11	0.0	35804.0
692.	HEX1245=MC6H6	5.00E+11	0.0	22081.0
693.	MC6H6=FULVENE	4.26E+13	0.0	49282.0
694.	MC6H6=C6H6	3.79E+13	0.0	22000.0
695.	FULVENE=C6H6	5.50E+13	0.0	66080.0
696.	C3H3+AC3H4=C6H6+H	1.40E+12	0.0	12800.0
697.	C3H3+PC3H4=C6H6+H	1.40E+12	0.0	12800.0
698.	C3H3+C3H3=C6H6	3.00E+11	0.0	0.0
699.	C4H4+C2H3=C6H6+H	1.90E+12	0.0	3510.0
700.	NC4H5+C2H2=C6H6+H	2.80E+03	2.9	1400.0
701.	NC4H3+C2H3=C6H6	2.87E+14	0.0	817.0
702.	C6H6=C4H4+C2H2	9.00E+15	0.0	107430.0
703.	C3H3+C3H3=C6H5+H	1.00E+13	0.0	0.0
704.	NC4H3+C2H2=C6H5	2.80E+03	2.9	1400.0
705.	C5H5+HO2=C5H5O13+OH	2.00E+13	0.0	0.0
706.	C5H5+OH=C5H4OH+H	3.00E+14	0.0	0.0
707.	C5H5+OH=C4H6+CO	1.50E+14	0.0	0.0
708.	C5H5+H=CPD	2.00E+14	0.0	0.0
709.	C5H4O+H=NC4H5+CO	1.71E+13	0.0	0.0

710.	C5H5+O=C5H4O+H	5.00E+14	0.0	0.0
711.	C5H5+O=NC4H5+CO	2.00E+14	0.0	0.0
712.	C5H5O13=NC4H5+CO	2.51E+11	0.0	43900.0
713.	C5H4OH=C5H4O+H	2.10E+13	0.0	48000.0
714.	C5H4O=>CO+C4H4	1.00E+12	0.0	53000.0
715.	CPD+O2=C5H5+HO2	2.00E+13	0.0	25000.0
716.	CPD+HO2=C5H5+H2O2	2.00E+12	0.0	11660.0
717.	CPD+OH=C5H5+H2O	3.43E+09	1.2	-447.0
718.	CPD+H=C5H5+H2	2.19E+08	1.8	3000.0
719.	CPD+H=C3H3+C2H4	3.00E+12	0.0	0.0
720.	CPD+O=C5H5+OH	1.81E+13	0.0	3080.0
721.	CPD+CH3=C5H5+CH4	3.11E+11	0.0	5500.0
722.	CPD+C2H3=C5H5+C2H4	3.11E+11	0.0	5500.0
723.	CPD+C2H5=C5H5+C2H6	3.11E+11	0.0	5500.0
724.	CPD+NC4H5=C5H5+C4H6	3.11E+11	0.0	5500.0
725.	CPD+IC4H5=C5H5+C4H6	3.11E+11	0.0	5500.0
726.	CPD+C6H5=C5H5+C6H6	3.11E+11	0.0	5500.0
727.	CPD+O2=C3H4O+CH2CO	3.00E+08	0.0	3000.0
728.	C6H5+H=C6H6	2.20E+14	0.0	0.0
729.	C6H6+O2=C6H5+HO2	6.30E+13	0.0	60000.0
730.	C6H6+HO2=C6H5+H2O2	1.52E+11	0.0	17000.0
731.	C6H6+OH=C6H5+H2O	2.11E+13	0.0	4570.0
732.	C6H6+H=C6H5+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
733.	C6H6+O=C6H5OH	3.56E+01	3.8	940.0
734.	C6H6+CH3=C6H5+CH4	2.00E+12	0.0	15000.0
735.	C6H6+C2H5=C6H5+C2H6	2.00E+12	0.0	15000.0
736.	C6H6+C2H3=C6H5+C2H4	2.00E+12	0.0	15000.0
737.	C6H6+AC3H5=C6H5+C3H6	2.00E+12	0.0	15000.0
738.	C6H6+MEALL=C6H5+C4H8	2.00E+12	0.0	15000.0
739.	C6H6+NC4H5=C6H5+C4H6	2.00E+12	0.0	15000.0
740.	C6H6+IC4H5=C6H5+C4H6	2.00E+12	0.0	15000.0
741.	C6H5+O2=C6H5O+O	2.09E+12	0.0	7470.0
742.	C6H5+HO2=C6H5O+OH	5.00E+13	0.0	1000.0
743.	C6H5+OH=C6H5O+H	5.00E+13	0.0	0.0
744.	C6H5+C2H=PHC2H	3.00E+08	0.0	1391.0
745.	C6H5+C2H4=STYREN+H	1.43E+08	1.2	3540.0
746.	C6H5+C2H2=PHC2H+H	1.00E+13	0.0	7647.0
747.	C6H5+C4H2=PHC2H+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
748.	C6H5+C4H4=PHC2H+C2H3	1.00E+13	0.0	7647.0
749.	C6H5O=C5H5+CO	5.00E+15	0.0	64000.0
750.	C6H5O+H=C6H5OH	2.50E+14	0.0	0.0
751.	C6H5OH+OH=C6H5O+H2O	6.00E+12	0.0	0.0
752.	C6H5OH+H=C6H6+OH	2.21E+13	0.0	7910.0
753.	C6H5OH+H=C6H5O+H2	1.15E+14	0.0	12400.0
754.	C6H5OH+O=C6H5O+OH	2.81E+13	0.0	7352.0
755.	C6H5OH+CH3=C6H5O+CH4	3.00E+02	3.0	7650.0
756.	C6H5OH+C2H5=C6H5O+C2H6	3.00E+02	3.0	7650.0
757.	C6H5OH+C2H3=C6H5O+C2H4	3.00E+02	3.0	7650.0
758.	C6H5OH+NC4H5=C6H5O+C4H6	3.00E+02	3.0	7650.0
759.	C6H5OH+IC4H5=C6H5O+C4H6	3.00E+02	3.0	7650.0
760.	C6H5OH+C5H5=C6H5O+CPD	3.00E+02	3.0	7650.0
761.	C6H5OH+C6H5=C6H5O+C6H6	3.00E+02	3.0	7650.0
762.	TOLUEN=C6H5+CH3	1.40E+16	0.0	99800.0
763.	TOLUEN=PHCH2+H	3.00E+15	0.0	88194.0
764.	TOLUEN+O2=PHCH2+HO2	3.00E+14	0.0	43062.0
765.	TOLUEN+HO2=PHCH2+H2O2	3.00E+14	0.0	22010.0
766.	TOLUEN+OH=PHCH2+H2O	1.00E+13	0.0	2180.0
767.	TOLUEN+O=PHCH2+OH	6.30E+11	0.0	0.0
768.	TOLUEN+H=PHCH2+H2	1.26E+14	0.0	8364.0
769.	TOLUEN+H=C6H6+CH3	2.40E+13	0.0	5123.0
770.	TOLUEN+CH3=PHCH2+CH4	8.88E+10	0.0	8754.0
771.	TOLUEN+C2H5=PHCH2+C2H6	1.01E+11	0.0	9514.0
772.	TOLUEN+C6H5=PHCH2+C6H6	2.10E+12	0.0	4400.0
773.	TOLUEN+NC4H5=PHCH2+C4H6	4.00E+12	0.0	7500.0
774.	TOLUEN+C2H3=PHCH2+C2H4	4.00E+12	0.0	7500.0
775.	NC4H5+AC3H4=TOLUEN+H	2.00E+11	0.0	3700.0
776.	NC4H5+PC3H4=TOLUEN+H	6.32E+11	0.0	3700.0
777.	PHCH2=C4H4+C3H3	2.00E+14	0.0	83600.0
778.	PHCH2=C5H5+C2H2	6.03E+13	0.0	70000.0
779.	PHCH2+O2=PHCO+OH	6.31E+12	0.0	43000.0
780.	PHCH2+HO2=PHCH2O+OH	3.16E+12	0.0	0.0
781.	PHCH2O=PHCO+H	1.30E+14	0.0	1100.0
782.	PHCH2+OH=PHCH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
783.	PHCH2+O=PHCO+H	1.58E+13	0.0	0.0
784.	PHCH2+O=C6H5+CH2O	1.00E+13	0.0	0.0
785.	PHCH2+C3H3=TOLUEN+C3H2	1.00E+12	0.0	0.0
786.	PHCH2+C6H5OH=TOLUEN+C6H5O	1.05E+11	0.0	9500.0

787.	PHCH2OH+O2=>PHHCO+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
788.	PHCH2OH+OH=>PHHCO+H2O+H	8.43E+12	0.0	2583.0
789.	PHCH2OH+H=C6H6+CH2OH	1.20E+13	0.0	5148.0
790.	PHCH2OH+PHCH2=>PHHCO+TOLUEN+H	2.11E+11	0.0	9500.0
791.	PHCH2OH+C6H5=>PHHCO+C6H6+H	1.40E+12	0.0	4400.0
792.	PHHCO=PHCO+H	3.98E+15	0.0	83701.0
793.	PHHCO+O2=PHCO+HO2	1.02E+13	0.0	39000.0
794.	PHHCO+HO2=PHCO+H2O2	2.00E+12	0.0	11665.0
795.	PHHCO+OH=PHCO+H2O	1.71E+09	1.2	-447.0
796.	PHHCO+OH=C6H5OH+HCO	1.20E+13	0.0	5123.0
797.	PHHCO+O=PHCO+OH	9.04E+12	0.0	3080.0
798.	PHHCO+H=PHCO+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
799.	PHHCO+H=C6H6+HCO	1.20E+13	0.0	5148.0
800.	PHHCO+CH3=PHCO+CH4	2.77E+03	2.8	5773.0
801.	PHHCO+C6H5=PHCO+C6H6	7.01E+11	0.0	4400.0
802.	PHCO=C6H5+CO	3.98E+14	0.0	29401.0
803.	PHCO+O2=C6H5O+CO2	3.00E+10	0.0	2870.0
804.	PHCO+HO2=>C6H5+CO2+OH	2.00E+13	0.0	0.0
805.	PHC2H5+H=C2H5+C6H6	2.40E+13	0.0	5123.0
806.	PHC2H5=PHCH2+CH3	1.00E+15	0.0	70000.0
807.	PHC2H5=C6H6+C2H4	1.15E+09	0.0	51699.0
808.	PHC2H5=BPHC2H4+H	2.51E+15	0.0	81260.0
809.	PHC2H5=APHC2H4+H	2.51E+15	0.0	83260.0
810.	PHC2H5+HO2=BPHC2H4+H2O2	9.80E+10	0.0	12584.0
811.	PHC2H5+OH=BPHC2H4+H2O	5.20E+12	0.0	0.0
812.	PHC2H5+H=BPHC2H4+H2	8.00E-05	5.5	335.0
813.	PHC2H5+CH3=BPHC2H4+CH4	1.00E+12	0.0	10000.0
814.	C6H5+C2H5=PHC2H5	1.00E+13	0.0	0.0
815.	BPHC2H4=STYREN+H	3.16E+13	0.0	50670.0
816.	APHC2H4=STYREN+H	3.16E+13	0.0	50670.0
817.	APHC2H4=C6H5+C2H4	1.00E+14	0.0	35000.0
818.	STYREN=C6H6+C2H2	1.60E+11	0.0	58438.0
819.	NC4H5+C4H4=STYREN+H	3.16E+11	0.0	3700.0
820.	C4H4+C4H4=STYREN	1.48E+14	0.0	38003.0
821.	PHC3H7=APHC3H6+H	8.00E+15	0.0	100210.0
822.	PHC3H7+H=APHC3H6+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
823.	PHC3H7+O=APHC3H6+OH	1.93E+05	2.7	3716.0
824.	PHC3H7+OH=APHC3H6+H2O	3.16E+07	1.8	934.0
825.	PHC3H7+HO2=APHC3H6+H2O2	4.76E+04	2.5	16494.0
826.	PHC3H7+O2=APHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	50600.0
827.	PHC3H7+CH3=APHC3H6+CH4	5.00E+12	0.0	11710.0
828.	PHC3H7+C2H3=APHC3H6+C2H4	6.00E+02	3.3	10502.0
829.	PHC3H7+C2H5=APHC3H6+C2H6	3.16E+11	0.0	12300.0
830.	PHC3H7+AC3H5=APHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
831.	PHC3H7+TC3H5=APHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
832.	PHC3H7+SC3H5=APHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
833.	PHC3H7+C6H5=APHC3H6+C6H6	7.94E+11	0.0	20500.0
834.	PHC3H7+PHCH2=APHC3H6+TOLUEN	7.94E+11	0.0	20500.0
835.	PHC3H7+BPHC2H4=APHC3H6+PHC2H5	7.94E+11	0.0	20500.0
836.	PHC3H7+CH3O=APHC3H6+CH3OH	3.18E+11	0.0	7050.0
837.	APHC3H6=PHCH2+C2H4	1.00E+14	0.0	13000.0
838.	PHC3H7=BPHC3H6+H	8.00E+15	0.0	99110.0
839.	PHC3H7+H=BPHC3H6+H2	1.01E+04	2.9	2931.0
840.	PHC3H7+O=BPHC3H6+OH	4.77E+04	2.7	2106.0
841.	PHC3H7+OH=BPHC3H6+H2O	7.08E+06	1.9	-159.0
842.	PHC3H7+HO2=BPHC3H6+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
843.	PHC3H7+O2=BPHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	49500.0
844.	PHC3H7+CH3=BPHC3H6+CH4	6.00E+11	0.0	10120.0
845.	PHC3H7+C2H3=BPHC3H6+C2H4	1.00E+03	3.1	8829.0
846.	PHC3H7+C2H5=BPHC3H6+C2H6	5.01E+10	0.0	10400.0
847.	PHC3H7+AC3H5=BPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
848.	PHC3H7+TC3H5=BPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
849.	PHC3H7+SC3H5=BPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
850.	PHC3H7+C6H5=BPHC3H6+C6H6	7.94E+11	0.0	16200.0
851.	PHC3H7+PHCH2=BPHC3H6+TOLUEN	7.94E+11	0.0	16200.0
852.	PHC3H7+BPHC2H4=BPHC3H6+PHC2H5	7.94E+11	0.0	16200.0
853.	PHC3H7+CH3O=BPHC3H6+CH3OH	7.20E+10	0.0	4470.0
854.	BPHC3H6=C6H5+C3H6	1.00E+14	0.0	34800.0
855.	BPHC3H6=BPHPROPY	2.00E+11	0.0	20000.0
856.	BPHPROPY=STYREN+CH3	1.00E+14	0.0	24000.0
857.	BPHC3H6+O=PHCH2+CH3HCO	2.00E+13	0.0	4000.0
858.	BPHC3H6+OH=TOLUEN+CH3HCO	2.00E+13	0.0	4000.0
859.	BPHC3H6+HO2=>PHCH2+CH3HCO+OH	2.00E+13	0.0	4000.0
860.	PHC3H7=CPHC3H6+H	8.00E+15	0.0	86210.0
861.	PHC3H7+H=CPHC3H6+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
862.	PHC3H7+O=CPHC3H6+OH	4.77E+04	2.7	1106.0
863.	PHC3H7+OH=CPHC3H6+H2O	7.08E+06	1.9	-1159.0

Annexe I

864.	PHC3H7+HO2=CPHC3H6+H2O2	9.64E+03	2.6	12910.0
865.	PHC3H7+O2=CPHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	35800.0
866.	PHC3H7+CH3=CPHC3H6+CH4	6.00E+11	0.0	10120.0
867.	PHC3H7+C2H3=CPHC3H6+C2H4	1.00E+03	3.1	8829.0
868.	PHC3H7+C2H5=CPHC3H6+C2H6	5.01E+10	0.0	10400.0
869.	PHC3H7+AC3H5=CPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
870.	PHC3H7+TC3H5=CPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
871.	PHC3H7+SC3H5=CPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
872.	PHC3H7+C6H5=CPHC3H6+C6H6	7.94E+11	0.0	16200.0
873.	PHC3H7+PHCH2=CPHC3H6+TOLUEN	7.94E+11	0.0	16200.0
874.	PHC3H7+BPHC2H4=CPHC3H6+PHC2H5	7.94E+11	0.0	16200.0
875.	PHC3H7+CH3O=CPHC3H6+CH3OH	7.20E+10	0.0	4470.0
876.	CPHC3H6=STYREN+CH3	1.00E+14	0.0	34850.0
877.	CPHC3H6+O=PHHCO+C2H5	1.60E+13	0.0	0.0
878.	CPHC3H6+OH=PHHCO+C2H6	1.60E+13	0.0	0.0
879.	CPHC3H6+HO2=>PHHCO+C2H5+OH	5.00E+12	0.0	0.0
880.	PHC3H7+H=NC3H7+C6H6	2.40E+13	0.0	5123.0
881.	PHC3H7=C6H5+NC3H7	5.00E+16	0.0	86500.0
882.	PHC3H7=PHCH2+C2H5	5.00E+16	0.0	74500.0
883.	PHC3H7=APHC2H4+CH3	5.00E+16	0.0	77500.0
884.	PHCH2+PHCH2=C14H14	2.51E+11	0.4	0.0
885.	C5H5+C5H5=NAPHT+H2	1.00E+13	0.0	7000.0
886.	AC5H11=BC5H11	9.84E+10	0.0	19660.0
887.	AC5H11=C2H4+NC3H7	4.50E+13	0.0	28700.0
888.	AC5H11=AC5H10+H	4.26E+13	0.0	38600.0
889.	AC5H11+O2=AC5H10+HO2	2.76E+10	0.0	-2000.0
890.	AC5H11+OH=AC5H10+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
891.	AC5H11+O=CH2O+PC4H9	5.00E+14	0.0	0.0
892.	AC5H11+H=AC5H10+H2	1.25E+13	0.0	0.0
893.	BC5H11=C3H6+C2H5	4.50E+13	0.0	29700.0
894.	BC5H11=AC5H10+H	6.30E+12	0.0	40400.0
895.	BC5H11=C2C5H10+H	5.00E+12	0.0	37900.0
896.	BC5H11=T2C5H10+H	5.00E+12	0.0	37900.0
897.	BC5H11+O2=AC5H10+HO2	2.00E+11	0.0	5020.0
898.	BC5H11+O2=T2C5H10+HO2	2.00E+11	0.0	5020.0
899.	BC5H11+O2=C2C5H10+HO2	1.00E+11	0.0	5020.0
900.	BC5H11+HO2=C2C5H10+H2O2	2.40E+13	0.0	0.0
901.	BC5H11+HO2=T2C5H10+H2O2	2.40E+13	0.0	0.0
902.	BC5H11+HO2=>NC3H7+CH3HCO+OH	2.43E+13	0.0	0.0
903.	BC5H11+OH=AC5H10+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
904.	BC5H11+OH=C2C5H10+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
905.	BC5H11+OH=T2C5H10+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
906.	BC5H11+O=NC3H7+CH3HCO	5.00E+14	0.0	0.0
907.	BC5H11+H=C2C5H10+H2	5.00E+13	0.0	0.0
908.	BC5H11+H=T2C5H10+H2	5.00E+13	0.0	0.0
909.	CC5H11=C4H8+CH3	4.20E+13	0.0	31000.0
910.	CC5H11=C2C5H10+H	1.00E+13	0.0	37900.0
911.	CC5H11=T2C5H10+H	1.00E+13	0.0	37900.0
912.	CC5H11+O2=C2C5H10+HO2	3.58E+09	0.0	-3532.0
913.	CC5H11+O2=T2C5H10+HO2	3.58E+09	0.0	-3532.0
914.	CC5H11+O2=>ETHCO+C2H4+OH	1.20E+11	0.0	6856.0
915.	CC5H11+HO2=>ETHCO+C2H5+OH	2.43E+13	0.0	0.0
916.	CC5H11+HO2=C2C5H10+H2O2	1.00E+12	0.0	2000.0
917.	CC5H11+HO2=T2C5H10+H2O2	1.00E+12	0.0	2000.0
918.	CC5H11+OH=C2C5H10+H2O	4.80E+12	0.0	2000.0
919.	CC5H11+OH=T2C5H10+H2O	4.80E+12	0.0	2000.0
920.	CC5H11+O=C2H5+ETHCO	5.00E+14	0.0	0.0
921.	CC5H11+H=C2C5H10+H2	5.00E+13	0.0	0.0
922.	CC5H11+H=T2C5H10+H2	5.00E+13	0.0	0.0
923.	AC5H10=C2H5+AC3H5	1.00E+16	0.0	70746.0
924.	AC5H10=C2H3+NC3H7	1.38E+16	0.0	93720.0
925.	AC5H10+O2=C5H913+HO2	2.70E+13	0.0	37000.0
926.	AC5H10+OH=C5H913+H2O	2.25E+13	0.0	2217.0
927.	AC5H10+HO2=C5H913+H2O2	1.00E+11	0.0	17060.0
928.	AC5H10+O=C5H913+OH	9.62E+12	0.0	1968.0
929.	AC5H10+H=C5H913+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
930.	AC5H10+CH3=C5H913+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
931.	AC5H10+C2H5=C5H913+C2H6	1.00E+11	0.0	7300.0
932.	C2C5H10=T2C5H10	1.86E+14	0.0	63501.0
933.	C2C5H10=MEALL+CH3	1.00E+16	0.0	81000.0
934.	C2C5H10+O2=C5H913+HO2	6.00E+13	0.0	40000.0
935.	C2C5H10+O2=C5H924+HO2	2.70E+13	0.0	37000.0
936.	C2C5H10+HO2=C5H913+H2O2	1.47E+11	0.0	14962.0
937.	C2C5H10+HO2=C5H924+H2O2	9.80E+10	0.0	12583.0
938.	C2C5H10+HO2=>CH3HCO+C3H6+OH	5.01E+11	0.0	12068.0
939.	C2C5H10+OH=C5H913+H2O	3.38E+13	0.0	3060.0
940.	C2C5H10+OH=C5H924+H2O	2.25E+13	0.0	2217.0

## Annexe I

941.	C2C5H10+O=C5H913+OH	1.44E+13	0.0	2968.0
942.	C2C5H10+O=C5H924+OH	9.62E+12	0.0	1968.0
943.	C2C5H10+O=CH3HCO+C3H6	1.00E+12	0.0	0.0
944.	C2C5H10+H=C5H913+H2	2.93E+13	0.0	5445.0
945.	C2C5H10+H=C5H924+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
946.	C2C5H10+CH3=C5H913+CH4	1.50E+11	0.0	9800.0
947.	C2C5H10+CH3=C5H924+CH4	1.00E+11	0.0	8200.0
948.	C2C5H10+C2H5=C5H913+C2H6	1.50E+11	0.0	9000.0
949.	C2C5H10+C2H5=C5H924+C2H6	1.00E+11	0.0	8000.0
950.	T2C5H10=MEALL+CH3	1.00E+16	0.0	81000.0
951.	T2C5H10+O2=C5H913+HO2	2.70E+13	0.0	37000.0
952.	T2C5H10+O2=C5H924+HO2	2.70E+13	0.0	37000.0
953.	T2C5H10+HO2=C5H913+H2O2	1.47E+11	0.0	14962.0
954.	T2C5H10+HO2=C5H924+H2O2	9.80E+10	0.0	12583.0
955.	T2C5H10+HO2=>CH3HCO+C3H6+OH	5.01E+11	0.0	12068.0
956.	T2C5H10+OH=C5H913+H2O	3.38E+13	0.0	3060.0
957.	T2C5H10+OH=C5H924+H2O	2.25E+13	0.0	2217.0
958.	T2C5H10+O=C5H913+OH	1.44E+13	0.0	2968.0
959.	T2C5H10+O=C5H924+OH	9.62E+12	0.0	1968.0
960.	T2C5H10+O=CH3HCO+C3H6	1.00E+12	0.0	0.0
961.	T2C5H10+H=C5H913+H2	2.93E+13	0.0	5445.0
962.	T2C5H10+H=C5H924+H2	1.95E+13	0.0	4445.0
963.	T2C5H10+CH3=C5H913+CH4	1.50E+11	0.0	8200.0
964.	T2C5H10+CH3=C5H924+CH4	1.00E+11	0.0	7300.0
965.	T2C5H10+C2H5=C5H913+C2H6	1.50E+11	0.0	9000.0
966.	T2C5H10+C2H5=C5H924+C2H6	1.00E+11	0.0	8000.0
967.	C5H913+H=AC5H10	1.00E+13	0.0	0.0
968.	C5H913+H=C2C5H10	1.00E+13	0.0	0.0
969.	C5H913+H=T2C5H10	1.00E+13	0.0	0.0
970.	C5H924+H=C2C5H10	1.00E+13	0.0	0.0
971.	C5H924+H=T2C5H10	1.00E+13	0.0	0.0
972.	C5H913=C4H6+CH3	2.50E+13	0.0	45000.0
973.	C5H913=C5H813+H	8.00E+13	0.0	47000.0
974.	C5H913+O2=C5H813+HO2	2.10E+09	0.0	0.0
975.	C5H913+HO2=>ACROL+C2H5+OH	1.00E+13	0.0	0.0
976.	C5H913+H=C5H813+H2	3.16E+13	0.0	0.0
977.	C5H913+CH3=C5H813+CH4	1.00E+13	0.0	0.0
978.	C5H913+C2H3=C5H813+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
979.	C5H913+C2H5=C5H813+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
980.	C5H913+AC3H5=C5H813+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
981.	C5H913+MEALL=C5H813+C4H8	3.16E+12	0.0	0.0
982.	C5H924=C5H813+H	1.20E+14	0.0	49300.0
983.	C5H924+O2=C5H813+HO2	1.00E+11	0.0	0.0
984.	C5H924+O2=>CH3CO+TC3H5+OH	3.97E+12	0.0	-250.0
985.	C5H924+HO2=>CH3HCO+SC3H5+OH	1.00E+13	0.0	0.0
986.	C5H924+H=C5H813+H2	3.16E+12	0.0	0.0
987.	C5H924+CH3=C5H813+CH4	1.00E+13	0.0	0.0
988.	C5H924+C2H3=C5H813+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
989.	C5H924+C2H5=C5H813+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
990.	C5H924+AC3H5=C5H813+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
991.	C5H924+MEALL=C5H813+C4H8	3.16E+12	0.0	0.0
992.	NC4H5+CH3=C5H813	2.00E+13	0.0	0.0
993.	SC3H5+C2H3=C5H813	1.00E+13	0.0	0.0
994.	AC3H5+C2H3=C5H813	1.00E+13	0.0	0.0
995.	IC4H5+CH3=C5H813	4.80E+37	-7.6	11359.0
996.	C5H813+O2=ACROL+CH3HCO	2.00E+08	1.5	30200.0
997.	C5H813+HO2=>ACROL+C2H4+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
998.	C5H813+HO2=>C4H6+CH2O+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
999.	C5H813+OH=CH3HCO+AC3H5	6.00E+12	0.0	-393.0
1000.	C5H813+OH=CH2O+MEALL	6.00E+12	0.0	-393.0
1001.	C5H813+O=ACROL+C2H4	4.50E+08	1.4	-858.0
1002.	C5H813+O=CH2O+C4H6	4.50E+08	1.4	-858.0
1003.	C5H813+H=C5H7+H2	7.00E+06	2.0	0.0
1004.	C5H813+H=AC3H5+C2H4	3.35E+08	1.5	2000.0
1005.	C5H813+OH=C5H7+H2O	7.00E+06	2.0	0.0
1006.	C5H813+HO2=C5H7+H2O2	2.00E+11	0.0	12600.0
1007.	C5H813+CH3=C5H7+CH4	2.00E+14	0.0	22800.0
1008.	CYC5H8=C3H6+C2H2	2.50E+13	0.0	62970.0
1009.	CYC5H8=CPD+H2	1.58E+13	0.0	59780.0
1010.	CYC5H8+O2=CYC5H7+HO2	1.28E+10	0.0	25000.0
1011.	CYC5H8+HO2=CYC5H7+H2O2	1.60E+11	0.0	17060.0
1012.	CYC5H8+OH=CYC5H7+H2O	4.80E+13	0.0	300.0
1013.	CYC5H8+O=CYC5H7+OH	2.78E+11	0.0	2508.0
1014.	CYC5H7=AC3H4+C2H3	3.16E+14	0.0	37000.0
1015.	CYC5H7=CPD+H	3.16E+15	0.0	36000.0
1016.	CYC5H7=C5H7	2.00E+13	0.0	30000.0
1017.	CYC5H7+O2=ACROL+CH2HCO	4.00E+10	0.0	5000.0



Annexe I

1018.	CYC5H7+O2=CPD+HO2	1.01E+12	0.0	13353.0
1019.	CYC5H7+HO2=CPD+H2O2	2.65E+12	0.0	0.0
1020.	CYC5H7+OH=CPD+H2O	6.02E+12	0.0	0.0
1021.	CYC5H7+O=CPD+OH	1.80E+13	0.0	0.0
1022.	CYC5H7+H=CPD+H2	3.16E+13	0.0	0.0
1023.	C5H7+O=ACROL+C2H3	2.00E+14	0.0	0.0
1024.	C5H7+H=C5H813	1.00E+14	0.0	0.0
1025.	C5H7=CPD+H	2.00E+11	0.0	18000.0
1026.	C5H7+CYC6H12=C5H813+CYC6H11	1.00E+12	0.0	10000.0
1027.	AC6H13+CH3=AC6H12+CH4	1.00E+12	0.0	0.0
1028.	AC6H13+C2H5=AC6H12+C2H6	1.00E+12	0.0	0.0
1029.	AC6H13+C2H3=AC6H12+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
1030.	AC6H13+AC3H5=AC6H12+C3H6	1.00E+12	0.0	0.0
1031.	BC6H13+CH3=AC6H12+CH4	1.00E+12	0.0	0.0
1032.	BC6H13+C2H5=AC6H12+C2H6	1.00E+12	0.0	0.0
1033.	BC6H13+C2H3=AC6H12+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
1034.	BC6H13+AC3H5=AC6H12+C3H6	1.00E+12	0.0	0.0
1035.	AC6H13=BC6H13	2.00E+11	0.0	11100.0
1036.	AC6H13=CC6H13	2.00E+11	0.0	18100.0
1037.	AC6H13=AC6H12+H	1.30E+13	0.0	39000.0
1038.	AC6H13+O2=AC6H12+HO2	2.00E+12	0.0	2000.0
1039.	AC6H13+OH=AC6H12+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1040.	AC6H13+O=AC5H11+CH2O	1.61E+13	0.0	0.0
1041.	AC6H13+H=AC6H12+H2	1.81E+12	0.0	0.0
1042.	BC6H13=AC6H12+H	2.00E+13	0.0	40400.0
1043.	BC6H13+O2=AC6H12+HO2	3.00E+12	0.0	4500.0
1044.	BC6H13+O2=>CH3HCO+C4H8+OH	2.10E+11	0.0	6858.0
1045.	BC6H13+HO2=>CH3HCO+PC4H9+OH	1.00E+13	0.0	0.0
1046.	BC6H13+OH=AC6H12+H2O	3.65E+13	0.0	0.0
1047.	BC6H13+O=CH3HCO+PC4H9	1.61E+13	0.0	0.0
1048.	CC6H13=AC5H10+CH3	2.00E+13	0.0	31000.0
1049.	CC6H13=C4H8+C2H5	2.00E+13	0.0	29700.0
1050.	BC6H13=C3H6+NC3H7	5.00E+13	0.0	28700.0
1051.	AC6H13=C2H4+PC4H9	1.00E+13	0.0	28700.0
1052.	AC6H12=NC3H7+AC3H5	8.16E+15	0.0	70830.0
1053.	C2H3+PC4H9=AC6H12	1.00E+13	0.0	0.0
1054.	AC6H12=C3H6+C3H6	3.98E+12	0.0	57700.0
1055.	AC6H12+O2=C6H1113+HO2	4.00E+12	0.0	40000.0
1056.	AC6H12+HO2=C6H1113+H2O2	1.00E+11	0.0	17060.0
1057.	AC6H12+OH=C6H1113+H2O	2.00E+13	0.0	2600.0
1058.	AC6H12+O=C6H1113+OH	4.00E+13	0.0	4000.0
1059.	AC6H12+H=C6H1113+H2	6.55E+12	0.0	4445.0
1060.	AC6H12+CH3=C6H1113+CH4	2.00E+11	0.0	6800.0
1061.	AC6H12+C2H3=C6H1113+C2H4	2.00E+11	0.0	6800.0
1062.	C6H1113+H=AC6H12	1.00E+13	0.0	0.0
1063.	AC7H15=BC7H15	2.00E+11	0.0	18100.0
1064.	AC7H15=CC7H15	2.00E+11	0.0	11100.0
1065.	AC7H15=DC7H15	2.00E+11	0.0	18100.0
1066.	AC7H15=AC7H14+H	5.00E+11	0.0	40000.0
1067.	AC7H15+O2=AC7H14+HO2	2.76E+10	0.0	-2000.0
1068.	AC7H15+HO2=AC7H14+H2O2	1.00E+13	0.0	0.0
1069.	AC7H15+OH=AC7H14+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1070.	BC7H15=CC7H15	2.00E+11	0.0	18100.0
1071.	BC7H15=AC7H14+H	6.30E+12	0.0	40400.0
1072.	BC7H15=BC7H14+H	5.00E+12	0.0	37900.0
1073.	BC7H15+O2=AC7H14+HO2	7.59E+09	0.0	-2000.0
1074.	BC7H15+O2=BC7H14+HO2	9.00E+09	0.0	-2000.0
1075.	BC7H15+HO2=AC7H14+H2O2	3.30E+12	0.0	0.0
1076.	BC7H15+HO2=BC7H14+H2O2	3.30E+12	0.0	0.0
1077.	BC7H15+OH=AC7H14+H2O	3.65E+13	0.0	0.0
1078.	BC7H15+OH=BC7H14+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1079.	CC7H15=BC7H14+H	1.00E+13	0.0	37900.0
1080.	CC7H15=CC7H14+H	1.00E+13	0.0	37900.0
1081.	CC7H15+O2=BC7H14+HO2	3.58E+09	0.0	-3532.0
1082.	CC7H15+HO2=BC7H14+H2O2	3.30E+12	0.0	0.0
1083.	CC7H15+HO2=CC7H14+H2O2	3.30E+12	0.0	0.0
1084.	CC7H15+OH=BC7H14+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1085.	CC7H15+OH=CC7H14+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1086.	DC7H15=CC7H14+H	1.00E+13	0.0	37900.0
1087.	DC7H15+O2=CC7H14+HO2	3.58E+09	0.0	-3532.0
1088.	DC7H15+OH=CC7H14+H2O	2.43E+13	0.0	0.0
1089.	CC7H15=AC6H12+CH3	2.00E+13	0.0	31000.0
1090.	DC7H15=AC5H10+C2H5	2.00E+13	0.0	29700.0
1091.	CC7H15=C4H8+NC3H7	2.00E+13	0.0	28700.0
1092.	BC7H15=C3H6+PC4H9	2.00E+13	0.0	28700.0
1093.	AC7H15=C2H4+AC5H11	2.00E+13	0.0	28700.0
1094.	AC7H14=BC7H14	4.01E+11	0.0	60000.0

---

1095.	AC7H14=CC7H14	4.01E+11	0.0	60000.0
1096.	AC7H14=C2H3+AC5H11	1.00E+19	-1.0	96770.0
1097.	AC7H14=PC4H9+AC3H5	1.55E+19	-1.0	73400.0
1098.	AC7H14+O2=C7H1313+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1099.	AC7H14+HO2=C7H1313+H2O2	1.00E+11	0.0	17060.0
1100.	AC7H14+OH=C7H1313+H2O	6.30E+06	2.0	-543.0
1101.	AC7H14+H=C7H1313+H2	1.00E+13	0.0	4000.0
1102.	AC7H14+CH3=C7H1313+CH4	2.00E+11	0.0	6800.0
1103.	AC7H14+C2H3=C7H1313+C2H4	2.00E+11	0.0	6800.0
1104.	BC7H14=NC3H7+MEALL	1.00E+16	0.0	73000.0
1105.	BC7H14=SC3H5+PC4H9	1.00E+19	-1.0	96770.0
1106.	BC7H14+O2=C7H1324+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1107.	BC7H14+O2=C7H1313+HO2	2.10E+13	0.0	34900.0
1108.	BC7H14+OH=C7H1313+H2O	9.00E+06	2.0	-60.0
1109.	BC7H14+OH=C7H1324+H2O	6.30E+06	2.0	-543.0
1110.	BC7H14+O=C7H1313+OH	8.00E+13	0.0	4000.0
1111.	BC7H14+O=C7H1324+OH	8.00E+13	0.0	4000.0
1112.	BC7H14+H=C7H1313+H2	1.60E+14	0.0	3400.0
1113.	BC7H14+H=C7H1324+H2	1.60E+14	0.0	3400.0
1114.	BC7H14+CH3=C7H1313+CH4	4.00E+11	0.0	6800.0
1115.	BC7H14+CH3=C7H1324+CH4	4.00E+11	0.0	6800.0
1116.	BC7H14+C2H3=C7H1313+C2H4	4.00E+11	0.0	6800.0
1117.	BC7H14+C2H3=C7H1324+C2H4	4.00E+11	0.0	6800.0
1118.	CC7H14=C5H913+C2H5	1.55E+19	-1.0	73400.0
1119.	CC7H14=CH3+C6H1113	1.00E+19	-1.0	96770.0
1120.	CC7H14+O2=C7H1335+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1121.	CC7H14+O2=C7H1324+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1122.	CC7H14+HO2=C7H1335+H2O2	1.00E+11	0.0	12583.0
1123.	CC7H14+HO2=C7H1324+H2O2	1.00E+11	0.0	12583.0
1124.	CC7H14+OH=C7H1324+H2O	9.00E+06	2.0	-60.0
1125.	CC7H14+OH=C7H1335+H2O	9.00E+06	2.0	-60.0
1126.	CC7H14+O=C7H1335+OH	8.00E+13	0.0	4000.0
1127.	CC7H14+O=C7H1324+OH	8.00E+13	0.0	4000.0
1128.	CC7H14+H=C7H1335+H2	1.60E+14	0.0	3400.0
1129.	CC7H14+H=C7H1324+H2	1.60E+14	0.0	3400.0
1130.	CC7H14+CH3=C7H1335+CH4	4.00E+11	0.0	6800.0
1131.	CC7H14+CH3=C7H1324+CH4	4.00E+11	0.0	6800.0
1132.	CC7H14+C2H3=C7H1335+C2H4	4.00E+11	0.0	6800.0
1133.	CC7H14+C2H3=C7H1324+C2H4	4.00E+11	0.0	6800.0
1134.	C7H1313=C4H6+NC3H7	1.00E+11	0.0	37000.0
1135.	C7H1324=C5H813+C2H5	1.00E+11	0.0	37000.0
1136.	C7H1335=C3H6+MEALL	1.00E+11	0.0	37000.0
1137.	C7H1313+H=AC7H14	1.00E+13	0.0	0.0
1138.	C7H1313+H=BC7H14	1.00E+13	0.0	0.0
1139.	C7H1324+H=BC7H14	1.00E+13	0.0	0.0
1140.	C7H1324+H=CC7H14	1.00E+13	0.0	0.0
1141.	C7H1335+H=CC7H14	1.00E+13	0.0	0.0
1142.	CC8H17=CH3+AC7H14	2.00E+13	0.0	31000.0
1143.	DC8H17=C2H5+AC6H12	2.00E+13	0.0	29700.0
1144.	DC8H17=NC3H7+AC5H10	2.00E+13	0.0	28700.0
1145.	CC8H17=PC4H9+C4H8	2.00E+13	0.0	28700.0
1146.	BC8H17=AC5H11+C3H6	2.00E+13	0.0	28700.0
1147.	AC8H17=AC6H13+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
1148.	AC8H17=AC8H16+H	5.00E+12	0.0	40000.0
1149.	BC8H17=DC8H17	2.00E+11	0.0	18100.0
1150.	AC8H17=DC8H17	2.00E+11	0.0	11100.0
1151.	BC8H17=CC8H17	2.00E+11	0.0	11100.0
1152.	AC8H17=CC8H17	2.00E+11	0.0	18100.0
1153.	AC8H16=AC5H11+AC3H5	1.00E+16	0.0	71000.0
1154.	AC8H16+O2=C8H1513+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1155.	AC8H16+HO2=C8H1513+H2O2	1.00E+11	0.0	17000.0
1156.	AC8H16+OH=C8H1513+H2O	1.00E+12	0.0	1230.0
1157.	AC8H16+O=C8H1513+OH	1.00E+12	0.0	4000.0
1158.	AC8H16+H=C8H1513+H2	1.00E+12	0.0	3900.0
1159.	AC8H16+CH3=C8H1513+CH4	2.00E+11	0.0	7300.0
1160.	AC8H16+C2H3=C8H1513+C2H4	2.00E+11	0.0	7300.0
1161.	C8H1513=C4H6+PC4H9	2.50E+13	0.0	45000.0
1162.	C8H1513+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0
1163.	AC8H16+O2=C8H1514+HO2	2.00E+13	0.0	47600.0
1164.	AC8H16+HO2=C8H1514+H2O2	2.44E+12	0.0	18500.0
1165.	AC8H16+OH=C8H1514+H2O	5.60E+05	2.0	-1391.0
1166.	AC8H16+O=C8H1514+OH	6.00E+02	3.3	1653.0
1167.	AC8H16+H=C8H1514+H2	6.00E+06	2.0	5000.0
1168.	AC8H16+CH3=C8H1514+CH4	4.00E+11	0.0	9500.0
1169.	AC8H16+C2H3=C8H1514+C2H4	4.00E+11	0.0	9500.0
1170.	C8H1514=C2H3+AC6H12	2.50E+13	0.0	45000.0
1171.	C8H1514+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0

---

Annexe I

1172.	AC8H16+O2=C8H1515+HO2	2.00E+13	0.0	47600.0
1173.	AC8H16+HO2=C8H1515+H2O2	2.44E+12	0.0	18500.0
1174.	AC8H16+OH=C8H1515+H2O	5.60E+05	2.0	-1391.0
1175.	AC8H16+O=C8H1515+OH	6.00E+02	3.3	1653.0
1176.	AC8H16+H=C8H1515+H2	6.00E+06	2.0	5000.0
1177.	AC8H16+CH3=C8H1515+CH4	4.00E+11	0.0	9500.0
1178.	AC8H16+C2H3=C8H1515+C2H4	4.00E+11	0.0	9500.0
1179.	C8H1515=AC3H5+AC5H10	1.00E+13	0.0	40000.0
1180.	C8H1515+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0
1181.	AC8H16+O2=C8H1516+HO2	2.00E+13	0.0	47600.0
1182.	AC8H16+HO2=C8H1516+H2O2	2.44E+12	0.0	18500.0
1183.	AC8H16+OH=C8H1516+H2O	5.60E+05	2.0	-1391.0
1184.	AC8H16+O=C8H1516+OH	6.00E+02	3.3	1653.0
1185.	AC8H16+H=C8H1516+H2	6.00E+06	2.0	5000.0
1186.	AC8H16+CH3=C8H1516+CH4	4.00E+11	0.0	9500.0
1187.	AC8H16+C2H3=C8H1516+C2H4	4.00E+11	0.0	9500.0
1188.	C8H1516=C4H73+C4H8	1.00E+13	0.0	35000.0
1189.	C8H1516+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0
1190.	AC8H16+O2=C8H1517+HO2	2.00E+13	0.0	47600.0
1191.	AC8H16+HO2=C8H1517+H2O2	2.44E+12	0.0	18500.0
1192.	AC8H16+OH=C8H1517+H2O	1.00E+06	2.0	-596.0
1193.	AC8H16+O=C8H1517+OH	6.00E+02	3.3	1653.0
1194.	AC8H16+H=C8H1517+H2	6.00E+06	2.0	5000.0
1195.	AC8H16+CH3=C8H1517+CH4	4.00E+11	0.0	9500.0
1196.	AC8H16+C2H3=C8H1517+C2H4	4.00E+11	0.0	9500.0
1197.	C8H1517=C5H915+C3H6	1.00E+13	0.0	32500.0
1198.	C8H1517+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0
1199.	C5H915=AC3H5+C2H4	1.00E+13	0.0	30000.0
1200.	AC8H16+O2=C8H1518+HO2	1.25E+13	0.0	49000.0
1201.	AC8H16+HO2=C8H1518+H2O2	4.00E+12	0.0	19400.0
1202.	AC8H16+OH=C8H1518+H2O	7.00E+06	1.8	974.0
1203.	AC8H16+O=C8H1518+OH	2.20E+06	2.4	5500.0
1204.	AC8H16+H=C8H1518+H2	2.80E+07	2.0	7700.0
1205.	AC8H16+CH3=C8H1518+CH4	6.50E+11	0.0	11600.0
1206.	AC8H16+C2H3=C8H1518+C2H4	6.50E+11	0.0	11600.0
1207.	C8H1518=C6H1116+C2H4	1.00E+13	0.0	30000.0
1208.	C8H1518+H=AC8H16	1.00E+13	0.0	0.0
1209.	C8H1515=C8H1518	2.00E+11	0.0	18100.0
1210.	C8H1513=C8H1516	2.00E+11	0.0	18100.0
1211.	C8H1514=C8H1517	2.00E+11	0.0	18100.0
1212.	C8H1518=C8H1513	2.00E+11	0.0	18100.0
1213.	C8H1513=C8H1517	2.00E+11	0.0	11100.0
1214.	C8H1518=C8H1514	2.00E+11	0.0	11100.0
1215.	CC9H19=CH3+AC8H16	2.00E+13	0.0	31000.0
1216.	DC9H19=C2H5+AC7H14	2.00E+13	0.0	29700.0
1217.	EC9H19=AC6H12+NC3H7	2.00E+13	0.0	28700.0
1218.	DC9H19=AC5H10+PC4H9	2.00E+13	0.0	28700.0
1219.	CC9H19=C4H8+AC5H11	2.00E+13	0.0	28700.0
1220.	BC9H19=C3H6+AC6H13	2.00E+13	0.0	28700.0
1221.	AC9H19=C2H4+AC7H15	2.00E+13	0.0	28700.0
1222.	AC9H19=H+AC9H18	5.00E+12	0.0	40000.0
1223.	AC9H19=DC9H19	4.00E+11	0.0	18100.0
1224.	BC9H19=EC9H19	2.00E+11	0.0	18100.0
1225.	AC9H19=EC9H19	2.00E+11	0.0	11100.0
1226.	BC9H19=DC9H19	2.00E+11	0.0	11100.0
1227.	BC9H19=CC9H19	2.00E+11	0.0	18100.0
1228.	AC9H18=AC6H13+AC3H5	1.00E+16	0.0	71000.0
1229.	AC9H18+O2=AC9H17+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1230.	AC9H18+HO2=AC9H17+H2O2	1.00E+11	0.0	17000.0
1231.	AC9H18+OH=AC9H17+H2O	1.00E+12	0.0	1230.0
1232.	AC9H18+H=AC9H17+H2	1.00E+12	0.0	3900.0
1233.	AC9H18+O=AC9H17+OH	1.00E+12	0.0	4000.0
1234.	AC9H18+CH3=AC9H17+CH4	2.00E+11	0.0	7300.0
1235.	AC9H18+C2H3=AC9H17+C2H4	2.00E+11	0.0	7300.0
1236.	AC9H17=C4H6+AC5H11	2.50E+13	0.0	35000.0
1237.	AC9H17+H=AC9H18	1.00E+13	0.0	0.0
1238.	NC10H22=AC9H19+CH3	1.00E+17	0.0	84400.0
1239.	NC10H22=AC8H17+C2H5	1.00E+17	0.0	79900.0
1240.	NC10H22=AC7H15+NC3H7	1.00E+17	0.0	84300.0
1241.	NC10H22=AC6H13+PC4H9	1.00E+17	0.0	82200.0
1242.	NC10H22=AC5H11+AC5H11	5.00E+16	0.0	84400.0
1243.	NC10H22=AC10H21+H	1.00E+15	0.0	100000.0
1244.	NC10H22=BC10H21+H	1.00E+15	0.0	100000.0
1245.	NC10H22=CC10H21+H	1.00E+15	0.0	100000.0
1246.	NC10H22=DC10H21+H	1.00E+15	0.0	100000.0
1247.	NC10H22=EC10H21+H	1.00E+15	0.0	100000.0
1248.	NC10H22+O2=AC10H21+HO2	4.20E+13	0.0	51800.0

Annexe I

1249.	NC10H22+O2=BC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
1250.	NC10H22+O2=CC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
1251.	NC10H22+O2=DC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
1252.	NC10H22+O2=EC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
1253.	NC10H22+HO2=AC10H21+H2O2	1.12E+13	0.0	19400.0
1254.	NC10H22+HO2=BC10H21+H2O2	6.72E+12	0.0	18500.0
1255.	NC10H22+HO2=CC10H21+H2O2	6.72E+12	0.0	18500.0
1256.	NC10H22+HO2=DC10H21+H2O2	6.72E+12	0.0	18500.0
1257.	NC10H22+HO2=EC10H21+H2O2	6.72E+12	0.0	18500.0
1258.	NC10H22+OH=AC10H21+H2O	1.41E+07	1.8	973.7
1259.	NC10H22+OH=BC10H21+H2O	2.00E+06	2.0	-596.2
1260.	NC10H22+OH=CC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
1261.	NC10H22+OH=DC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
1262.	NC10H22+OH=EC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
1263.	NC10H22+O=AC10H21+OH	4.36E+06	2.4	5500.0
1264.	NC10H22+O=BC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
1265.	NC10H22+O=CC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
1266.	NC10H22+O=DC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
1267.	NC10H22+O=EC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
1268.	NC10H22+H=AC10H21+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
1269.	NC10H22+H=BC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
1270.	NC10H22+H=CC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
1271.	NC10H22+H=DC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
1272.	NC10H22+H=EC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
1273.	NC10H22+CH3=AC10H21+CH4	1.30E+12	0.0	11600.0
1274.	NC10H22+CH3=BC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
1275.	NC10H22+CH3=CC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
1276.	NC10H22+CH3=DC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
1277.	NC10H22+CH3=EC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
1278.	CC10H21=CH3+AC9H18	2.00E+13	0.0	31000.0
1279.	DC10H21=C2H5+AC8H16	2.00E+13	0.0	29700.0
1280.	EC10H21=NC3H7+AC7H14	2.00E+13	0.0	28700.0
1281.	EC10H21=PC4H9+AC6H12	2.00E+13	0.0	28700.0
1282.	DC10H21=AC5H11+AC5H10	2.00E+13	0.0	28700.0
1283.	CC10H21=AC6H13+C4H8	2.00E+13	0.0	28700.0
1284.	BC10H21=AC7H15+C3H6	2.00E+13	0.0	28700.0
1285.	AC10H21=AC8H17+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
1286.	AC10H21=AC10H20+H	5.00E+12	0.0	40000.0
1287.	AC10H21=DC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
1288.	DC10H21=BC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
1289.	AC10H21=EC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
1290.	EC10H21=BC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
1291.	DC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
1292.	CC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
1293.	EC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
1294.	CC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
1295.	AC10H20=AC7H15+AC3H5	1.00E+16	0.0	71000.0
1296.	AC10H20+O2=AC10H19+HO2	1.40E+13	0.0	31900.0
1297.	AC10H20+HO2=AC10H19+H2O2	1.00E+11	0.0	17000.0
1298.	AC10H20+OH=AC10H19+H2O	1.00E+12	0.0	1230.0
1299.	AC10H20+H=AC10H19+H2	1.00E+12	0.0	3900.0
1300.	AC10H20+O=AC10H19+OH	1.00E+12	0.0	4000.0
1301.	AC10H20+CH3=AC10H19+CH4	2.00E+11	0.0	7300.0
1302.	AC10H20+C2H3=AC10H19+C2H4	2.00E+11	0.0	7300.0
1303.	AC10H19=AC6H13+C4H6	2.50E+13	0.0	35000.0
1304.	AC10H19+H=AC10H20	1.00E+13	0.0	0.0
1305.	AC3H5+AC3H5=C6H10	1.02E+13	0.0	-263.0
1306.	MEALL+C2H3=C6H10	1.00E+12	0.0	0.0
1307.	C6H10+O2=C6H9+HO2	1.00E+11	0.0	25050.0
1308.	C6H10+HO2=C6H9+H2O2	1.64E+11	0.0	12583.0
1309.	C6H10+OH=C6H9+H2O	5.60E+12	0.0	861.0
1310.	C6H10+H=C6H9+H2	1.00E+14	0.0	3900.0
1311.	C6H10+CH3=C6H9+CH4	2.50E+11	0.0	8300.0
1312.	C6H10+C2H5=C6H9+C2H6	1.00E+11	0.0	8300.0
1313.	C6H10+C2H3=C6H9+C2H4	6.30E+12	0.0	13000.0
1314.	C6H10+AC3H5=C6H9+C3H6	1.00E+12	0.0	10500.0
1315.	C4H6+C2H3=C6H9	2.00E+11	0.0	5000.0
1316.	C6H9=C6H9CY2	1.00E+12	0.0	18000.0
1317.	C6H9CY2=CHD13+H	1.20E+14	0.0	49300.0
1318.	C6H9CY2+O2=CHD13+HO2	1.00E+09	0.0	0.0
1319.	C6H9CY2+O2=>ACROL+C2H4+HCO	3.01E+10	0.0	2870.0
1320.	C6H9CY2+HO2=CHD13+H2O2	1.00E+12	0.0	0.0
1321.	C6H9CY2+HO2=>CYC5H8+HCO+OH	4.50E+12	0.0	0.0
1322.	C6H9CY2+OH=CHD13+H2O	1.80E+13	0.0	0.0
1323.	C6H9CY2+O=CYC5H8+HCO	8.26E+13	0.0	0.0
1324.	C6H9CY2+O=CHD13+OH	1.80E+13	0.0	0.0
1325.	C6H9CY2+H=CHD13+H2	3.16E+13	0.0	0.0

Annexe I

1326.	C6H9CY2+CH3=CHD13+CH4	8.00E+12	0.0	0.0
1327.	C6H9CY2+C2H3=CHD13+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
1328.	C6H9CY2+C2H5=CHD13+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
1329.	C6H9CY2+AC3H5=CHD13+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1330.	C6H9CY2+SC3H5=CHD13+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1331.	C6H9CY2+TC3H5=CHD13+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1332.	C6H9CY2+HCO=CHD13+CH2O	4.00E+12	0.0	0.0
1333.	C6H9CY2+CH3O=CHD13+CH3OH	4.00E+12	0.0	0.0
1334.	C4H6+C2H3=CHD13+H	7.00E+11	0.0	1650.0
1335.	CHD13=C6H6+H2	5.00E+14	0.0	65140.0
1336.	CHD13=C6H7C+H	5.01E+15	0.0	72598.0
1337.	CHD13+O2=C6H7C+HO2	8.31E+11	0.0	24858.0
1338.	CHD13+HO2=C6H7C+H2O2	4.00E+12	0.0	17057.0
1339.	CHD13+OH=C6H7C+H2O	5.60E+12	0.0	861.0
1340.	CHD13+O=C6H7C+OH	1.40E+13	0.0	-795.0
1341.	CHD13+H=C6H7C+H2	1.30E+13	0.0	4445.0
1342.	CHD13+CH3=C6H7C+CH4	1.23E+11	0.0	5201.0
1343.	CHD13+C2H5=C6H7C+C2H6	1.23E+11	0.0	5201.0
1344.	CHD13+C2H2=C6H6+C2H4	3.09E+10	0.0	27151.0
1345.	CHD13+C2H3=C6H7C+C2H4	1.23E+11	0.0	5201.0
1346.	CHD13+AC3H5=C6H7C+C3H6	1.23E+11	0.0	5201.0
1347.	CHD13+HCO=C6H7C+CH2O	1.23E+11	0.0	5201.0
1348.	CHD13+CH3O=C6H7C+CH3OH	1.23E+11	0.0	5201.0
1349.	CHD13+NC4H5=C6H7C+C4H6	1.00E+11	0.0	13500.0
1350.	CHD13+IC4H5=C6H7C+C4H6	1.00E+11	0.0	13500.0
1351.	C6H7C=C6H6+H	3.16E+13	0.0	28500.0
1352.	C6H7C+O2=C6H6+HO2	1.00E+12	0.0	0.0
1353.	C6H7C+HO2=C6H6+H2O2	1.00E+12	0.0	0.0
1354.	C6H7C+HO2=>CPD+HCO+OH	4.50E+12	0.0	0.0
1355.	C6H7C+OH=C6H6+H2O	6.02E+12	0.0	0.0
1356.	C6H7C+O=C6H6+OH	1.80E+13	0.0	0.0
1357.	C6H7C+O=CPD+HCO	8.26E+13	0.0	0.0
1358.	C6H7C+H=C6H6+H2	3.16E+12	0.0	0.0
1359.	C6H7C+CH3=C6H6+CH4	1.00E+13	0.0	0.0
1360.	C6H7C+C2H3=C6H6+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
1361.	C6H7C+C2H5=C6H6+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
1362.	C6H7C+AC3H5=C6H6+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1363.	C6H7C+SC3H5=C6H6+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1364.	C6H7C+TC3H5=C6H6+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1365.	C6H7C+HCO=C6H6+CH2O	4.00E+12	0.0	0.0
1366.	CYC6H12=>C2H4+C2H4+C2H4	8.22E+17	0.0	87225.0
1367.	CYC6H12=CYC6H11+H	3.00E+16	0.0	95000.0
1368.	CYC6H12+O2=CYC6H11+HO2	7.50E+13	0.0	49000.0
1369.	CYC6H12+HO2=CYC6H11+H2O2	1.20E+13	0.0	17057.0
1370.	CYC6H12+OH=CYC6H11+H2O	1.60E+07	2.0	-681.0
1371.	CYC6H12+O=CYC6H11+OH	1.54E+14	0.0	4497.0
1372.	CYC6H12+H=CYC6H11+H2	6.00E+14	0.0	8373.0
1373.	CYC6H12+CH3=CYC6H11+CH4	1.35E+12	0.0	9540.0
1374.	CYC6H12+C2H3=CYC6H11+C2H4	1.35E+12	0.0	9540.0
1375.	CYC6H12+C2H5=CYC6H11+C2H6	1.35E+12	0.0	9540.0
1376.	CYC6H12+AC3H5=CYC6H11+C3H6	1.35E+12	0.0	9540.0
1377.	CYC6H12+SC3H5=CYC6H11+C3H6	1.35E+12	0.0	9540.0
1378.	CYC6H12+TC3H5=CYC6H11+C3H6	1.35E+12	0.0	9540.0
1379.	CYC6H12+C4H73=CYC6H11+C4H8	7.00E+11	0.0	9540.0
1380.	CYC6H12+HCO=CYC6H11+CH2O	1.35E+12	0.0	9540.0
1381.	CYC6H12+CH3O=CYC6H11+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1382.	CYC6H11=C6H1116	2.00E+13	0.0	30000.0
1383.	C6H1116=C6H1113	2.00E+11	0.0	18100.0
1384.	C6H1116=C6H1112	1.00E+11	0.0	11100.0
1385.	C6H1112=C6H1115	2.00E+11	0.0	18100.0
1386.	C6H1116=C4H73+C2H4	1.00E+12	0.0	35000.0
1387.	C6H1112=NC3H7+AC3H4	1.00E+12	0.0	33000.0
1388.	C6H1115=AC3H5+C3H6	1.00E+12	0.0	36000.0
1389.	C6H1113=C2H5+C4H6	1.00E+12	0.0	45500.0
1390.	C6H1113=C5H813+CH3	1.00E+12	0.0	50000.0
1391.	C6H1113+HO2=>NC3H7+ACROL+OH	1.00E+12	0.0	8000.0
1392.	CYC6H11=CYC6H10+H	5.00E+12	0.0	40000.0
1393.	CYC6H11+O2=CYC6H10+HO2	8.00E+12	0.0	10000.0
1394.	CYC6H11+O=CYC6H10+OH	9.64E+13	0.0	0.0
1395.	CYC6H11+HO2=CYC6H10+H2O2	2.00E+12	0.0	2000.0
1396.	CYC6H11+OH=CYC6H10+H2O	4.80E+13	0.0	0.0
1397.	CYC6H11+H=CYC6H10+H2	2.00E+11	0.0	0.0
1398.	CYC6H11+CH3=CYC6H10+CH4	4.00E+12	0.0	0.0
1399.	CYC6H11+C2H3=CYC6H10+C2H4	4.00E+12	0.0	0.0
1400.	CYC6H11+C2H5=CYC6H10+C2H6	4.00E+12	0.0	0.0
1401.	CYC6H11+AC3H5=CYC6H10+C3H6	4.00E+11	0.0	0.0
1402.	CYC6H11+SC3H5=CYC6H10+C3H6	4.00E+11	0.0	0.0

Annexe I

1403.	CYC6H11+TC3H5=CYC6H10+C3H6	4.00E+12	0.0	0.0
1404.	CYC6H11+HCO=CYC6H10+CH2O	4.00E+12	0.0	0.0
1405.	CYC6H10=C4H6+C2H4	1.00E+17	0.0	82000.0
1406.	CYC6H10=C6H9CY2+H	5.01E+15	0.0	81700.0
1407.	CYC6H10+O2=C6H9CY2+HO2	1.58E+10	0.0	25000.0
1408.	CYC6H10+HO2=C6H9CY2+H2O2	2.00E+11	0.0	17060.0
1409.	CYC6H10+OH=C6H9CY2+H2O	6.00E+13	0.0	300.0
1410.	CYC6H10+O=C6H9CY2+OH	3.23E+13	0.0	2508.0
1411.	CYC6H10+H=C6H9CY2+H2	3.20E+13	0.0	2508.0
1412.	CYC6H10+CH3=C6H9CY2+CH4	1.65E+11	0.0	4118.0
1413.	CYC6H10+C2H3=C6H9CY2+C2H4	1.65E+11	0.0	4118.0
1414.	CYC6H10+C2H5=C6H9CY2+C2H6	1.65E+11	0.0	4118.0
1415.	CYC6H10+AC3H5=C6H9CY2+C3H6	1.65E+11	0.0	4118.0
1416.	CYC6H10+SC3H5=C6H9CY2+C3H6	1.65E+11	0.0	4118.0
1417.	CYC6H10+TC3H5=C6H9CY2+C3H6	1.65E+11	0.0	4118.0
1418.	CYC6H10+HCO=C6H9CY2+CH2O	1.65E+11	0.0	4118.0
1419.	CYC6H10+CH3O=C6H9CY2+CH3OH	1.65E+11	0.0	4118.0
1420.	CYC9H18+O2=AC9H17C+HO2	2.00E+13	0.0	50610.0
1421.	CYC9H18+O2=BC9H17C+HO2	4.00E+13	0.0	49510.0
1422.	CYC9H18+O2=CC9H17C+HO2	4.00E+13	0.0	49510.0
1423.	CYC9H18+O2=DC9H17C+HO2	4.00E+13	0.0	49910.0
1424.	CYC9H18+O2=EC9H17C+HO2	8.00E+13	0.0	49910.0
1425.	CYC9H18+O2=FC9H17C+HO2	8.00E+13	0.0	49910.0
1426.	CYC9H18+O2=GC9H17C+HO2	4.00E+13	0.0	49910.0
1427.	CYC9H18+HO2=AC9H17C+H2O2	2.38E+04	2.5	16494.0
1428.	CYC9H18+HO2=BC9H17C+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
1429.	CYC9H18+HO2=CC9H17C+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
1430.	CYC9H18+HO2=DC9H17C+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
1431.	CYC9H18+HO2=EC9H17C+H2O2	1.93E+04	2.6	13910.0
1432.	CYC9H18+HO2=FC9H17C+H2O2	1.93E+04	2.6	13910.0
1433.	CYC9H18+HO2=GC9H17C+H2O2	9.64E+03	2.6	13910.0
1434.	CYC9H18+OH=AC9H17C+H2O	1.58E+07	1.8	934.0
1435.	CYC9H18+OH=BC9H17C+H2O	1.50E+09	1.0	260.0
1436.	CYC9H18+OH=CC9H17C+H2O	1.50E+09	1.0	260.0
1437.	CYC9H18+OH=DC9H17C+H2O	2.75E+12	0.0	790.0
1438.	CYC9H18+OH=EC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
1439.	CYC9H18+OH=FC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
1440.	CYC9H18+OH=GC9H17C+H2O	2.75E+12	0.0	790.0
1441.	CYC9H18+O=AC9H17C+OH	9.50E+04	2.7	1870.0
1442.	CYC9H18+O=BC9H17C+OH	4.77E+04	2.7	2106.0
1443.	CYC9H18+O=CC9H17C+OH	4.77E+04	2.7	2106.0
1444.	CYC9H18+O=DC9H17C+OH	4.33E+05	2.6	2563.0
1445.	CYC9H18+O=EC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
1446.	CYC9H18+O=FC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
1447.	CYC9H18+O=GC9H17C+OH	4.33E+05	2.6	2563.0
1448.	CYC9H18+H=AC9H17C+H2	6.65E+05	2.5	6756.0
1449.	CYC9H18+H=BC9H17C+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
1450.	CYC9H18+H=CC9H17C+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
1451.	CYC9H18+H=DC9H17C+H2	1.00E+14	0.0	8373.0
1452.	CYC9H18+H=EC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
1453.	CYC9H18+H=FC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
1454.	CYC9H18+H=GC9H17C+H2	1.00E+14	0.0	8373.0
1455.	CYC9H18+CH3=AC9H17C+CH4	4.52E-01	3.6	7154.0
1456.	CYC9H18+CH3=BC9H17C+CH4	1.51E+00	3.5	5481.0
1457.	CYC9H18+CH3=CC9H17C+CH4	1.51E+00	3.5	5481.0
1458.	CYC9H18+CH3=DC9H17C+CH4	2.25E+11	0.0	9540.0
1459.	CYC9H18+CH3=EC9H17C+CH4	4.50E+11	0.0	9540.0
1460.	CYC9H18+CH3=FC9H17C+CH4	4.50E+11	0.0	9540.0
1461.	CYC9H18+CH3=GC9H17C+CH4	2.25E+11	0.0	9540.0
1462.	CYC9H18+C2H3=AC9H17C+C2H4	4.52E-01	3.6	7154.0
1463.	CYC9H18+C2H3=BC9H17C+C2H4	1.51E+00	3.5	5481.0
1464.	CYC9H18+C2H3=CC9H17C+C2H4	1.51E+00	3.5	5481.0
1465.	CYC9H18+C2H3=DC9H17C+C2H4	2.25E+11	0.0	9540.0
1466.	CYC9H18+C2H3=EC9H17C+C2H4	4.50E+11	0.0	9540.0
1467.	CYC9H18+C2H3=FC9H17C+C2H4	4.50E+11	0.0	9540.0
1468.	CYC9H18+C2H3=GC9H17C+C2H4	2.25E+11	0.0	9540.0
1469.	CYC9H18+C2H5=AC9H17C+C2H6	4.52E-01	3.6	7154.0
1470.	CYC9H18+C2H5=BC9H17C+C2H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1471.	CYC9H18+C2H5=CC9H17C+C2H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1472.	CYC9H18+C2H5=DC9H17C+C2H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1473.	CYC9H18+C2H5=EC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1474.	CYC9H18+C2H5=FC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1475.	CYC9H18+C2H5=GC9H17C+C2H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1476.	CYC9H18+AC3H5=AC9H17C+C3H6	4.52E-01	3.6	7154.0
1477.	CYC9H18+AC3H5=BC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1478.	CYC9H18+AC3H5=CC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1479.	CYC9H18+AC3H5=DC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0

Annexe I

1480.	CYC9H18+AC3H5=EC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1481.	CYC9H18+AC3H5=FC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1482.	CYC9H18+AC3H5=GC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1483.	CYC9H18+SC3H5=AC9H17C+C3H6	4.52E-01	3.6	7154.0
1484.	CYC9H18+SC3H5=BC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1485.	CYC9H18+SC3H5=CC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1486.	CYC9H18+SC3H5=DC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1487.	CYC9H18+SC3H5=EC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1488.	CYC9H18+SC3H5=FC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1489.	CYC9H18+SC3H5=GC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1490.	CYC9H18+TC3H5=AC9H17C+C3H6	4.52E-01	3.6	7154.0
1491.	CYC9H18+TC3H5=BC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1492.	CYC9H18+TC3H5=CC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
1493.	CYC9H18+TC3H5=DC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1494.	CYC9H18+TC3H5=EC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1495.	CYC9H18+TC3H5=FC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
1496.	CYC9H18+TC3H5=GC9H17C+C3H6	2.25E+11	0.0	9540.0
1497.	CYC9H18+HCO=AC9H17C+CH2O	4.52E-01	3.6	7154.0
1498.	CYC9H18+HCO=BC9H17C+CH2O	1.51E+00	3.5	5481.0
1499.	CYC9H18+HCO=CC9H17C+CH2O	1.51E+00	3.5	5481.0
1500.	CYC9H18+HCO=DC9H17C+CH2O	2.25E+11	0.0	9540.0
1501.	CYC9H18+HCO=EC9H17C+CH2O	4.50E+11	0.0	9540.0
1502.	CYC9H18+HCO=FC9H17C+CH2O	4.50E+11	0.0	9540.0
1503.	CYC9H18+HCO=GC9H17C+CH2O	2.25E+11	0.0	9540.0
1504.	CYC9H18+CH3O=AC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1505.	CYC9H18+CH3O=BC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1506.	CYC9H18+CH3O=CC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1507.	CYC9H18+CH3O=DC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1508.	CYC9H18+CH3O=EC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1509.	CYC9H18+CH3O=FC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1510.	CYC9H18+CH3O=GC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
1511.	CYC9H18=AC8H15C+CH3	6.50E+16	0.0	85000.0
1512.	CYC9H18=AC7H13C+C2H5	6.50E+16	0.0	84000.0
1513.	CYC9H18=CYC6H11+NC3H7	6.50E+16	0.0	84000.0
1514.	CYC9H18=>3C2H4+C3H6	1.30E+17	0.0	84000.0
1515.	CYC9H18=>2C2H4+AC5H10	1.30E+17	0.0	84000.0
1516.	CYC9H18=>C2H4+NC3H7+C4H73	1.30E+17	0.0	84000.0
1517.	EC9H17C=BC9H17C	4.00E+11	0.0	16100.0
1518.	FC9H17C=BC9H17C	4.00E+11	0.0	11100.0
1519.	GC9H17C=BC9H17C	2.00E+11	0.0	18100.0
1520.	DC9H17C=AC9H17C	1.00E+11	0.0	16100.0
1521.	EC9H17C=AC9H17C	4.00E+11	0.0	11100.0
1522.	FC9H17C=AC9H17C	4.00E+11	0.0	18100.0
1523.	FC9H17C=CC9H17C	4.00E+11	0.0	18100.0
1524.	GC9H17C=CC9H17C	4.00E+11	0.0	11100.0
1525.	GC9H17C=DC9H17C	2.00E+11	0.0	18100.0
1526.	AC9H17C=AC7H13C+C2H4	2.00E+13	0.0	42000.0
1527.	BC9H17C=CYC6H11+C3H6	2.00E+13	0.0	42000.0
1528.	CC9H17C=>2C2H4+C5H913	2.00E+13	0.0	42000.0
1529.	CC9H17C=CYC8H14+CH3	2.00E+13	0.0	45000.0
1530.	DC9H17C=CYC7H12+C2H5	2.00E+13	0.0	42000.0
1531.	EC9H17C=CYC6H10+NC3H7	5.00E+12	0.0	39500.0
1532.	EC9H17C=>C4H6+C2H4+NC3H7	2.00E+13	0.0	44000.0
1533.	EC9H17C=C7H1331+C2H4	2.00E+13	0.0	45000.0
1534.	FC9H17C=C4H73+AC5H10	1.00E+13	0.0	50000.0
1535.	FC9H17C=C7H1216+C2H5	2.00E+13	0.0	45000.0
1536.	FC9H17C=C7H1314+C2H4	2.00E+13	0.0	45000.0
1537.	GC9H17C=C4H73+AC5H10	2.00E+13	0.0	50000.0
1538.	GC9H17C=C6H10+NC3H7	2.00E+13	0.0	45000.0
1539.	AC8H15C+O2=CYC8H14+HO2	8.00E+12	0.0	10000.0
1540.	AC8H15C+H=CYC8H14+H2	2.00E+11	0.0	0.0
1541.	AC8H15C+OH=CYC8H14+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
1542.	AC8H15C+O=CYC8H14+OH	1.00E+14	0.0	0.0
1543.	AC8H15C+CH3=CYC8H14+CH4	4.00E+12	0.0	0.0
1544.	AC8H15C=CYC6H11+C2H4	2.00E+13	0.0	29000.0
1545.	CYC8H14=2C2H4+C4H6	1.00E+16	0.0	71000.0
1546.	AC7H13C+O2=CYC7H12+HO2	8.00E+12	0.0	10000.0
1547.	AC7H13C+H=CYC7H12+H2	2.00E+11	0.0	0.0
1548.	AC7H13C+OH=CYC7H12+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
1549.	AC7H13C+O=CYC7H12+OH	1.00E+14	0.0	0.0
1550.	AC7H13C+CH3=CYC7H12+CH4	4.00E+12	0.0	0.0
1551.	AC7H13C=>2C2H4+AC3H5	2.00E+13	0.0	29000.0
1552.	CYC7H12=>C4H6+C3H6	1.00E+16	0.0	71000.0
1553.	C7H1213=C5H7+C2H5	1.00E+16	0.0	71000.0
1554.	C7H1216=AC3H5+C4H73	1.00E+16	0.0	71000.0
1555.	C7H1314=C7H1213+H	4.26E+13	0.0	38600.0
1556.	C7H1331=C2H4+C5H911	1.00E+11	0.0	37000.0

Annexe I

1557.	C5H911=CYC5H8+H	2.28E+11	0.0	18277.0
1558.	NO+H+M=HNO+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	2.70E+15	0.0	-600.0
1559.	NO+H+N2=HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
1560.	NO+O+M=NO2+M H2O/10.0/ O2/1.5/ N2/1.7/	7.50E+19	-1.4	0.0
	nced by 1.000E+01			
1561.	NO+OH+M=HONO+M H2O/5.0/	5.10E+23	-2.5	-68.0
1562.	NO+HO2=NO2+OH	2.10E+12	0.0	-479.0
1563.	NO+HCO=HNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
1564.	NO+C2H3=C2H2+HNO	1.00E+12	0.0	1000.0
1565.	NO2+H=NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
1566.	NO2+O=NO+O2	3.90E+12	0.0	-238.0
1567.	NO2+O(+M)=NO3(+M) Low pressure limit: 0.10000E+29 -0.40800E+01 0.24700E+04 H2O/18.6/ O2/1.5/ N2/1.5/	1.30E+13	0.0	0.0
1568.	NO2+NO2=NO+NO+O2	1.60E+12	0.0	26123.0
1569.	NO2+NO2=NO3+NO	9.60E+09	0.7	20900.0
1570.	NO2+HCO=CO+HONO	1.20E+23	-3.3	2355.0
1571.	NO2+HCO=H+CO2+NO	8.40E+15	-0.8	1930.0
1572.	NO2+CO=CO2+NO	9.00E+13	0.0	33779.0
1573.	NO2+CH2O=HCO+HONO	8.00E+02	2.8	13730.0
1574.	NO2+CH2=CH2O+NO	5.90E+13	0.0	0.0
1575.	NO2+CH=HCO+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1576.	NO2+HCCO=HCNO+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
1577.	NO3+H=NO2+OH	6.00E+13	0.0	0.0
1578.	NO3+O=NO2+O2	1.00E+13	0.0	0.0
1579.	NO3+OH=NO2+HO2	1.40E+13	0.0	0.0
1580.	NO3+HO2=NO2+O2+OH	1.50E+12	0.0	0.0
1581.	NO3+NO2=NO+NO2+O2	5.00E+10	0.0	2940.0
1582.	HNO+H=H2+NO	4.50E+11	0.7	655.0
1583.	HNO+O=NO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
1584.	HNO+OH=NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
1585.	HNO+O2=HO2+NO	1.00E+13	0.0	25000.0
1586.	HNO+NO2=HONO+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1587.	HNO+HNO=N2O+H2O	9.00E+08	0.0	3100.0
1588.	HNO+NH2=NH3+NO	3.63E+06	1.6	-1252.0
1589.	HNO+HCO=CH2O+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1590.	H2NO+M=HNO+H+M H2O/5.0/ N2/2.0/	2.50E+15	0.0	50000.0
1591.	H2NO+H=HNO+H2	3.00E+07	2.0	2000.0
1592.	H2NO+H=NH2+OH	5.00E+13	0.0	0.0
1593.	H2NO+O=HNO+OH	3.00E+07	2.0	2000.0
1594.	H2NO+O=NH2+O2	2.00E+14	0.0	0.0
1595.	H2NO+OH=HNO+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
1596.	H2NO+NO=HNO+HNO	2.00E+04	2.0	13000.0
1597.	H2NO+NO2=HNO+HONO	6.00E+11	0.0	2000.0
1598.	HONO+H=H2+NO2	1.20E+13	0.0	7352.0
1599.	HONO+O=OH+NO2	1.20E+13	0.0	5961.0
1600.	HONO+OH=H2O+NO2	4.00E+12	0.0	0.0
1601.	NH3+M=NH2+H+M N2/1.0/	2.20E+16	0.0	93470.0
1602.	NH3+H=NH2+H2	6.40E+05	2.4	10171.0
1603.	NH3+O=NH2+OH	9.40E+06	1.9	6460.0
1604.	NH3+OH=NH2+H2O	2.00E+06	2.0	566.0
1605.	NH3+HO2=NH2+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
1606.	NH2+H=NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
1607.	NH2+O=HNO+H	6.60E+14	-0.5	0.0
1608.	NH2+O=NH+OH	6.80E+12	0.0	0.0
1609.	NH2+OH=NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
1610.	NH2+HO2=H2NO+OH	5.00E+13	0.0	0.0
1611.	NH2+HO2=NH3+O2	1.00E+13	0.0	0.0
1612.	NH2+NO=NNH+OH	8.90E+12	-0.3	0.0
1613.	NH2+NO=N2+H2O	2.90E+15	-1.0	0.0
1614.	NH2+NO2=N2O+H2O	3.20E+18	-2.2	0.0
1615.	NH2+NO2=H2NO+NO	3.50E+12	0.0	0.0
1616.	NH2+H2NO=NH3+HNO	3.00E+12	0.0	1000.0
1617.	NH2+HONO=NO2+NH3	7.10E+02	3.0	-4941.0
1618.	NH2+NH2=N2H2+H2	8.50E+11	0.0	0.0
1619.	NH2+NH=N2H2+H	5.00E+13	0.0	0.0
1620.	NH2+N=N2+H+H	7.20E+13	0.0	0.0
1621.	NH+H=N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
1622.	NH+O=NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
1623.	NH+OH=HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
1624.	NH+OH=N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
1625.	NH+O2=HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0



Annexe I

1626.	NH+O2=NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0
1627.	NH+NO=N2O+H	2.85E+14	-0.4	0.0
1628.	NH+NO=N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0
1629.	NH+NO2=N2O+OH	1.00E+13	0.0	0.0
1630.	NH+NH=N2+H+H	2.50E+13	0.0	0.0
1631.	NH+N=N2+H	3.00E+13	0.0	0.0
1632.	N+OH=NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
1633.	N+O2=NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
1634.	N+NO=N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
1635.	N+CO2=NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
1636.	N+HCCO=HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1637.	N+CH3=H2CN+H	7.10E+13	0.0	0.0
1638.	N+CH2=HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0
1639.	N+H2CN=N2+CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1640.	N+CH=CN+H	1.30E+13	0.0	0.0
1641.	N+C2H3=HCN+CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1642.	N2H2+M=NNH+H+M H20/15.0/ O2/2.0/ N2/2.0/ H2/2.0/	5.00E+16	0.0	50000.0
1643.	N2H2+H=NNH+H2	5.00E+13	0.0	1000.0
1644.	N2H2+O=NH2+NO	1.00E+13	0.0	0.0
1645.	N2H2+O=NNH+OH	2.00E+13	0.0	1000.0
1646.	N2H2+OH=NNH+H2O	1.00E+13	0.0	1000.0
1647.	N2H2+NO=N2O+NH2	3.00E+12	0.0	0.0
1648.	N2H2+NH2=NH3+NNH	1.00E+13	0.0	1000.0
1649.	N2H2+NH=NNH+NH2	1.00E+13	0.0	1000.0
1650.	NNH=N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
1651.	NNH+H=N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
1652.	NNH+O=N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
1653.	NNH+O=N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
1654.	NNH+O=NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
1655.	NNH+OH=N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
1656.	NNH+O2=N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
1657.	NNH+O2=N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
1658.	NNH+NO=N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
1659.	NNH+NH2=N2+NH3	5.00E+13	0.0	0.0
1660.	NNH+NH=N2+NH2	5.00E+13	0.0	0.0
1661.	N2O+M=N2+O+M H20/12.0/ O2/1.4/ N2/1.7/ CO/1.5/ CO2/3.0/	4.00E+14	0.0	56100.0
1662.	N2O+H=N2+OH	2.36E-11	7.0	-441.0
1663.	N2O+O=NO+NO	6.60E+13	0.0	26630.0
1664.	N2O+O=N2+O2	1.00E+14	0.0	28000.0
1665.	N2O+OH=N2+HO2	1.30E-02	4.7	36561.0
1666.	N2O+OH=HNO+NO	1.20E-04	4.3	25081.0
1667.	N2O+NO=NO2+N2	5.30E+05	2.2	46281.0
1668.	N2O+CO=N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
1669.	N2O+CH=HCN+NO	1.90E+13	0.0	-511.0
1670.	N2O+C=CN+NO	5.10E+12	0.0	0.0
1671.	HCN+O=NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
1672.	HCN+O=NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0
1673.	HCN+O=CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
1674.	HCN+OH=CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
1675.	HCN+OH=HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
1676.	HCN+OH=HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
1677.	HCN+OH=NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0
1678.	HCN+CN=C2N2+H	1.50E+07	1.7	1530.0
1679.	HCN+SCH2=CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0
1680.	CN+O=CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
1681.	CN+OH=NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
1682.	CN+O2=NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
1683.	CN+CO2=NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0
1684.	CN+NO2=NCO+NO	5.30E+15	-0.8	344.0
1685.	CN+NO2=CO+N2O	4.90E+14	-0.8	344.0
1686.	CN+NO2=N2+CO2	3.70E+14	-0.8	344.0
1687.	CN+N2O=NCN+NO	3.90E+03	2.6	3696.0
1688.	CN+NCO=NCN+CO	1.80E+13	0.0	0.0
1689.	CN+H2=HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
1690.	CN+CH4=CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0
1691.	CN+HNO=HCN+NO	1.80E+13	0.0	0.0
1692.	CN+HONO=HCN+NO2	1.20E+13	0.0	0.0
1693.	CN+CH2CO=HCCO+HCN	2.00E+13	0.0	0.0
1694.	CN+C2H6=C2H5+HCN	1.20E+05	2.8	-1788.0
1695.	CN+C2H4=C2H3+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
1696.	HNCO+M=NH+CO N2/1.0/	1.10E+16	0.0	86000.0
1697.	HNCO+H=NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
1698.	HNCO+O=HNO+CO	1.50E+08	1.6	44012.0
1699.	HNCO+O=NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0

## Annexe I

1700.	HNCO+O=NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0
1701.	HNCO+OH=NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
1702.	HNCO+HO2=NCO+H2O2	3.00E+11	0.0	22000.0
1703.	HNCO+O2=HNO+CO2	1.00E+12	0.0	35000.0
1704.	HNCO+NH2=NH3+NCO	5.00E+12	0.0	6200.0
1705.	HNCO+NH=NH2+NCO	3.00E+13	0.0	23700.0
1706.	HOCN+H=HNCO+H	2.00E+07	2.0	2000.0
1707.	HOCN+O=NCO+OH	1.50E+04	2.6	4000.0
1708.	HOCN+OH=NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
1709.	HCNO+H=HCN+OH	1.00E+14	0.0	12000.0
1710.	HCNO+O=HCO+NO	2.00E+14	0.0	0.0
1711.	HCNO+OH=CH2O+NO	4.00E+13	0.0	0.0
1712.	NCO+NO=N2O+CO	8.40E+17	-1.7	763.0
1713.	NCO+NO=N2+CO2	5.60E+17	-1.7	763.0
1714.	NCO+HO2=HNCO+O2	2.00E+13	0.0	0.0
1715.	NCO+M=N+CO+M N2/1.0/	3.10E+16	-0.5	48000.0
1716.	NCO+H=NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1717.	NCO+O=NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0
1718.	NCO+OH=NO+HCO	5.00E+12	0.0	15000.0
1719.	NCO+O2=NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0
1720.	NCO+H2=HNCO+H	7.60E+02	3.0	4000.0
1721.	NCO+HCO=HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0
1722.	NCO+NO2=CO+NO+NO	2.50E+11	0.0	-707.0
1723.	NCO+NO2=CO2+N2O	3.00E+12	0.0	-707.0
1724.	NCO+HNO=HNCO+NO	1.80E+13	0.0	0.0
1725.	NCO+HONO=HNCO+NO2	3.60E+12	0.0	0.0
1726.	NCO+N=N2+CO	2.00E+13	0.0	0.0
1727.	NCO+NCO=N2+CO+CO	1.80E+13	0.0	0.0
1728.	NCO+CH4=CH3+HNCO	9.80E+12	0.0	8120.0
1729.	NCO+CH2O=HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0
1730.	NCO+C2H6=C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0
1731.	NCO+C2H2=HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0
1732.	C2N2+O=NCO+CN	4.60E+12	0.0	8880.0
1733.	C2N2+OH=HOCN+CN	1.90E+11	0.0	2900.0
1734.	NCN+O=CN+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1735.	NCN+OH=HCN+NO	5.00E+13	0.0	0.0
1736.	NCN+H=HCN+N	1.00E+14	0.0	0.0
1737.	NCN+O2=NO+NCO	1.00E+13	0.0	0.0
1738.	CH3CN+H=HCN+CH3	4.00E+07	2.0	2000.0
1739.	CH3CN+H=CH2CN+H2	3.00E+07	2.0	1000.0
1740.	CH3CN+O=NCO+CH3	1.50E+04	2.6	4980.0
1741.	CH3CN+OH=CH2CN+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
1742.	CH2CN+O=CH2O+CN	1.00E+14	0.0	0.0
1743.	CN+CH2OH=CH2CN+OH	5.00E+13	0.0	0.0
1744.	CH3+CN=CH2CN+H	1.00E+14	0.0	0.0
1745.	CH3+HOCN=CH3CN+OH	5.00E+12	0.0	2000.0
1746.	H2CN+M=HCN+H+M N2/1.0/	3.00E+14	0.0	22000.0
1747.	N2+CH2=HCN+NH	1.00E+13	0.0	74000.0
1748.	N2+CH=HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0
1749.	N2+C=CN+N	6.30E+13	0.0	46019.0
1750.	HCCO+NO=HCNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
1751.	HCCO+NO=HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
1752.	C2H+NO=CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
1753.	CH3+NO=HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0
1754.	CH3+NO=H2CN+OH	1.50E-01	3.5	3950.0
1755.	SCH2+NO=HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0
1756.	SCH2+NO=CH2+N	1.00E+14	0.0	0.0
1757.	CH2+NO=HCN+OH	2.20E+12	0.0	-378.0
1758.	CH2+NO=HCNO+H	1.30E+12	0.0	-378.0
1759.	CH+NO=HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0
1760.	CH+NO=HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0
1761.	CH+NO=NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0
1762.	C+NO=CN+O	2.00E+13	0.0	0.0
1763.	C+NO=CO+N	2.80E+13	0.0	0.0
1764.	C2H2+NO=HCO+HCN	6.00E+07	0.0	0.0
1765.	CH3+CH3(+M)=C2H6(+M) Low pressure limit: 0.34890E+43 -0.72135E+01 0.11166E+05	1.48E+20	-2.1	2301.0
1766.	OH+OH(+M)=H2O2(+M) Low pressure limit: 0.45280E+19 -0.63100E+00 0.30000E+01	4.90E+15	-1.1	86.0
1767.	CH4(+M)=CH3+H(+M) Low pressure limit: 0.19920E+28 -0.26780E+01 0.99517E+05	1.26E+24	-2.6	105623.0
1768.	CH3+OH(+M)=CH2OH+H(+M) Low pressure limit: 0.10000E+23 0.00000E+00 0.57000E+04	1.52E+13	0.0	5477.0
1769.	CH3+OH(+M)=CH3O+H(+M) Low pressure limit: 0.10000E+21 0.00000E+00 0.12000E+05	1.14E+14	0.0	14469.0

Annexe I

1770.	CH3+OH(+M)=SCH2+H2O(+M)			8.29E+12	0.0	6149.0
	Low pressure limit:	0.24630E+31	0.00000E+00	0.91000E+02		
1771.	CH3+OH(+M)=CH2O+H2(+M)			6.30E+10	0.0	11069.0
	Low pressure limit:	0.20000E+19	0.00000E+00	0.11000E+05		
1772.	C2H6(+M)=C2H5+H(+M)			6.79E+16	0.0	100462.0
	Low pressure limit:	0.34530E+20	0.00000E+00	0.87960E+05		
1773.	C2H5(+M)=C2H4+H(+M)			4.88E+28	-4.7	44423.0
	Low pressure limit:	0.53110E+29	-0.36470E+01	0.38653E+05		
1774.	C2H5+O2(+M)=C2H4+HO2(+M)			2.55E+30	-5.7	13757.0
	Low pressure limit:	0.10000E+31	0.14850E+01	0.14000E+05		
1775.	C2H5+O2(+M)=C2H4O2H(+M)			5.86E+35	-7.7	12820.0
	Low pressure limit:	0.20750E+38	-0.72590E+01	0.35080E+04		
1776.	C2H5+O2(+M)=CH3HCO+OH(+M)			4.72E+15	-1.6	12168.0
	Low pressure limit:	0.10000E+38	-0.59100E+01	0.12000E+05		
1777.	C2H2+H(+M)=C2H3(+M)			2.67E+13	-0.2	2721.0
	Low pressure limit:	0.25170E+17	0.34100E+00	0.14160E+04		
1778.	C2H2(+M)=C2H+H(+M)			1.65E+25	-3.0	128452.0
	Low pressure limit:	0.22360E+31	-0.32610E+01	0.12587E+06		
1779.	C2H3+O2(+M)=CH2HCO+O(+M)			1.28E+16	-1.1	4329.0
	Low pressure limit:	0.20020E+27	0.11160E+01	0.22120E+04		
1780.	C2H3+O2(+M)=CH2O+HCO(+M)			1.06E+24	-3.5	5030.0
	Low pressure limit:	0.90890E+51	-0.15630E+01	0.48190E+04		
1781.	C2H3+O2(+M)=CHOCHO+H(+M)			1.44E+20	-2.7	4758.0
	Low pressure limit:	0.10000E+21	0.26580E+01	0.50000E+04		
1782.	C2H2+OH(+M)=C2H2OH(+M)			1.68E+07	1.5	-2713.0
	Low pressure limit:	0.11470E+25	-0.22950E+01	0.63700E+04		
1783.	C2H2+CH3(+M)=PC3H4+H(+M)			5.76E+17	-1.4	20550.0
	Low pressure limit:	0.33570E+03	0.42330E+01	0.11293E+05		
1784.	C2H2+CH3(+M)=AC3H5(+M)			1.98E+05	1.9	16456.0
	Low pressure limit:	0.29280E-01	0.57410E+01	0.13823E+05		
1785.	C2H2+CH3(+M)=SC3H5(+M)			1.46E+23	-3.3	10475.0
	Low pressure limit:	0.22370E+45	-0.86645E+01	0.18949E+05		
1786.	CHOCHO(+M)=CH2O+CO(+M)			8.14E+12	-0.1	50761.0
	Low pressure limit:	0.21080E+18	-0.99000E-01	0.49698E+05		
1787.	CHOCHO(+M)=CO+CO+H2(+M)			6.05E+16	-0.8	56806.0
	Low pressure limit:	0.29120E+39	-0.57720E+01	0.64404E+05		
1788.	CH3+OH(+M)=CH3OH(+M)			3.88E+25	-3.6	6347.0
	Low pressure limit:	0.15720E+32	-0.42600E+01	0.50200E+03		
1789.	NC3H7(+M)=C3H6+H(+M)			7.47E+15	-1.1	34913.0
	Low pressure limit:	0.23830E+16	-0.81000E-01	0.22861E+05		
1790.	NC3H7(+M)=C2H4+CH3(+M)			2.10E+14	-0.5	29732.0
	Low pressure limit:	0.88340E+18	-0.59100E+00	0.22448E+05		
1791.	C3H6(+M)=AC3H5+H(+M)			9.64E+05	2.8	81758.0
	Low pressure limit:	0.18910E+46	-0.72030E+01	0.10306E+06		
1792.	AC3H4(+M)=PC3H4(+M)			9.16E+63	-14.6	93372.0
	Low pressure limit:	0.69320E+71	-0.15363E+02	0.93666E+05		
1793.	PC3H4+OH(+M)=>C3H4OH(+M)			2.92E+22	-3.4	6596.0
	Low pressure limit:	0.29680E+25	-0.23500E+01	0.65960E+04		
1794.	SC4H9(+M)=C3H6+CH3(+M)			3.57E+37	-7.0	44119.0
	Low pressure limit:	0.29140E+41	-0.69320E+01	0.38091E+05		
1795.	C2H3+C2H2(+M)=IC4H5(+M)			4.02E+22	-3.5	11311.0
	Low pressure limit:	0.29050E+34	-0.60440E+01	0.36600E+04		
1796.	IC4H5(+M)=C4H4+H(+M)			1.00E+14	0.0	50000.0
	Low pressure limit:	0.20000E+16	0.00000E+00	0.42000E+05		
1797.	NC4H5(+M)=C4H4+H(+M)			4.23E+08	0.0	28099.0
	Low pressure limit:	0.43320E+13	0.00000E+00	0.87760E+04		
1798.	C2H2+NC4H5(+M)=C6H7C(+M)			1.78E+20	-3.5	4164.0
	Low pressure limit:	0.25870E+27	-0.44050E+01	0.43770E+04		
1799.	IC4H3(+M)=C4H2+H(+M)			1.00E+14	0.0	55000.0
	Low pressure limit:	0.20000E+16	0.00000E+00	0.48000E+05		
1800.	NC4H3(+M)=C4H2+H(+M)			1.00E+14	0.0	36000.0
	Low pressure limit:	0.10000E+15	0.00000E+00	0.30000E+05		

END



## ***Annexe II***

---

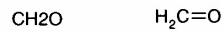
### ***Nomenclature des espèces considérées***

Espèces ne comportant pas d'atome de Carbone

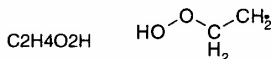
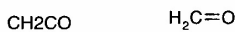
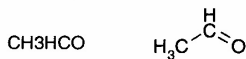
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H, O, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, NO, NH<sub>3</sub>, NO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub>, HNO, HONO, H<sub>2</sub>NO, N<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, NNH, NH<sub>2</sub>, NH, N

Espèces comportant 1 atome de Carbone

CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, SCH<sub>2</sub>, CH, C, HCN, H<sub>2</sub>CN, CN, NCO, HOCN, HCNO, HNCO, NCN

Espèces comportant 2 atomes de Carbone

C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>CN, CH<sub>2</sub>CN

Espèces comportant 3 atomes de Carbone

C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>



C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>

C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>O

C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O

C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>O

C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>H

C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>O

C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>CO

C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>OH

ETHCO

ACROL

Espèces comportant 4 atomes de Carbone

C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>

BUTYNE

C<sub>2</sub>C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>

T<sub>2</sub>C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>12

BUTYN2

HOC<sub>4</sub>H<sub>6</sub>

IC<sub>4</sub>H<sub>3</sub>

IC<sub>4</sub>H<sub>7</sub>

NC<sub>4</sub>H<sub>3</sub>

MEALL

SC<sub>4</sub>H<sub>9</sub>

PC<sub>4</sub>H<sub>9</sub>

NC<sub>4</sub>H<sub>5</sub>

IC<sub>4</sub>H<sub>5</sub>

H<sub>2</sub>C<sub>4</sub>O

C<sub>4</sub>H

OC<sub>4</sub>H<sub>6</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>5</sub>O

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>H

C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>

C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>

NC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>

Espèces comportant 5 atomes de Carbone

AC<sub>5</sub>H<sub>10</sub>

T<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>

C<sub>2</sub>C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>13

CPD

CYC<sub>5</sub>H<sub>8</sub>

AC<sub>5</sub>H<sub>11</sub>

BC<sub>5</sub>H<sub>11</sub>

CC<sub>5</sub>H<sub>11</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>13

C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>24

C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>OH

C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>O

C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>O<sub>13</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>

CYC<sub>5</sub>H<sub>7</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>15

C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>11

Espèces comportant 6 atomes de Carbone

C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>

AC<sub>6</sub>H<sub>12</sub>

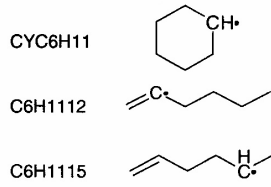
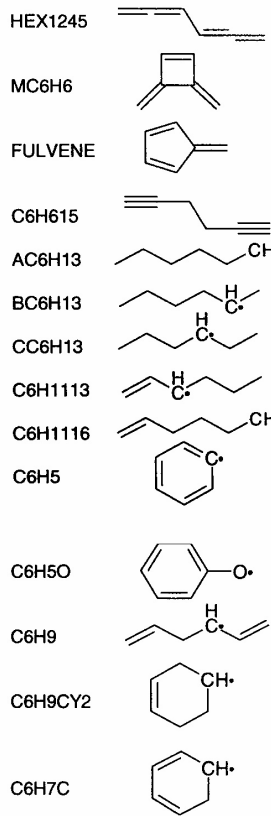
C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>

C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH

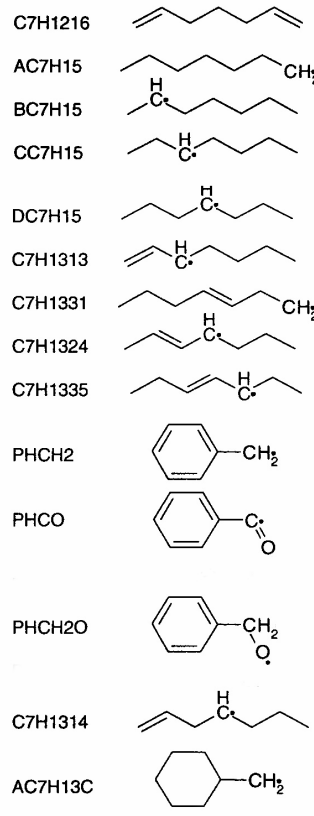
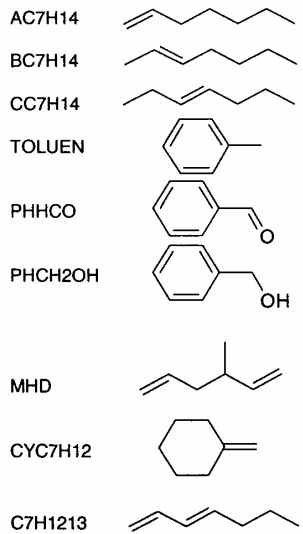
CHD<sub>13</sub>

CYC<sub>6</sub>H<sub>12</sub>

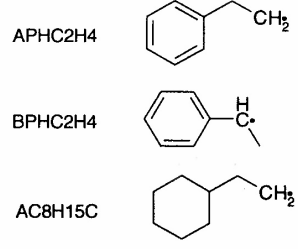
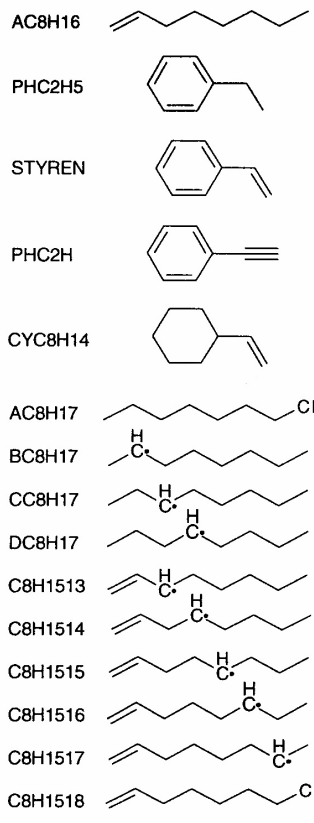
CYC<sub>6</sub>H<sub>10</sub>



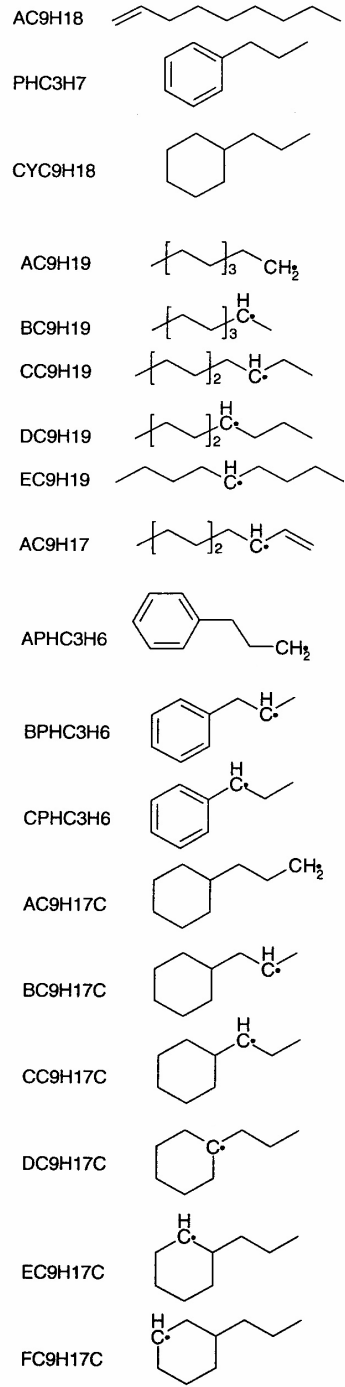
Espèces comportant 7 atomes de Carbone

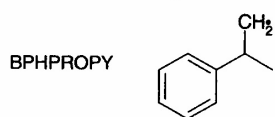
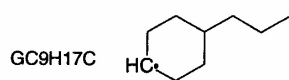


Espèces comportant 8 atomes de Carbone

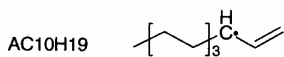
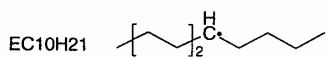
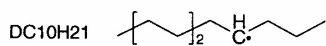
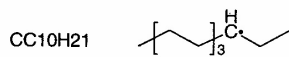
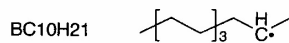
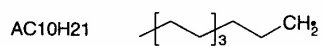
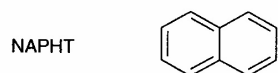
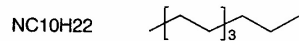
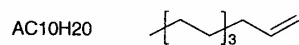


Espèces comportant 9 atomes de Carbone

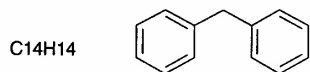




Espèces comportant 10 atomes de Carbone



Espèces comportant 14 atomes de Carbone





# Annexe III

## Mécanismes squelettiques après élimination des espèces inutiles (seuils sur C, H, O = 15% ; seuil sur N = 25% et 30%)

ELEMENTS

C H O N  
END

SPECIES

H2	O2	CO	CO2	CH4	C2H6	CH2O	C2H2	C2H4	C3H6	CH3OH	AC3H4
C4H4	C4H6	C4H2	PC3H4	C6H6	NC10H22	PHC3H7	TOLUEN	STYREN	PHHCO	PHCH2OH	CYC9H18
N2	H	O	OH	HO2	H2O	HCO	CH3	SCH2	C2H5	CH2	CH
CH3O	CH2OH	C3H3	CH2CO	C2H3	CH2HCO	C2H	HCCO	IC4H3	C2H2OH	NC3H7	AC3H5
C3H2	NC4H3	PC4H9	NC4H5	AC5H11	AC6H13	BC6H13	AC7H15	AC8H17	AC10H21	CC10H21	DC10H21
EC10H21	APHC3H6	CPHC3H6	PHCH2	C6H5	APHC2H4	C6H5O	C5H5	C5H4OH	C5H4O	PHCO	CC9H17C
EC9H17C	FC9H17C	NO	HCN	<b>NH3</b>	N2O	NO2	HNO	HONO	H2CN	NNH	NH2
NH	N	CN	NCO	HOCN	HNCO	<b>CH3CN</b>					

END

REACTIONS MOLES CAL/MOLE

1.	2H+M=>H2+M					7.31E+17	-1.0	0.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
2.	H2+M=>2H+M					2.76E+17	-0.7	103608.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
3.	2O+M=>O2+M					1.14E+17	-1.0	0.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
4.	O2+M=>2O+M					1.33E+19	-1.2	119101.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
5.	O+H+M=>OH+M					6.20E+16	-0.6	0.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
6.	OH+M=>O+H+M					1.43E+16	-0.4	101819.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
7.	H2+O2=>2OH					1.70E+13	0.0	47780.0
8.	2OH=>H2+O2					2.06E+10	0.4	28709.0
9.	O+H2=>OH+H					3.87E+04	2.7	6260.0
10.	OH+H=>O+H2					2.37E+04	2.7	4471.0
11.	H+O2=>OH+O					1.85E+14	0.0	16812.0
12.	OH+O=>H+O2					3.67E+11	0.4	-470.0
13.	H+O2+M=>HO2+M					8.00E+17	-0.8	0.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
14.	HO2+M=>H+O2+M					2.36E+18	-0.9	49560.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
15.	H+OH+M=>H2O+M					8.62E+21	-2.0	0.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
16.	H2O+M=>H+OH+M					5.22E+22	-1.9	119105.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
17.	H2+OH=>H2O+H					2.16E+08	1.5	3430.0
18.	H2O+H=>H2+OH					3.47E+09	1.4	18927.0
19.	H2O+O=>2OH					1.50E+10	1.1	17260.0
20.	2OH=>H2O+O					5.71E+08	1.3	-25.0
21.	HO2+OH=>H2O+O2					2.89E+13	0.0	-497.0
22.	H2O+O2=>HO2+OH					5.94E+13	0.2	69048.0
23.	HO2+O=>OH+O2					1.81E+13	0.0	-400.0
24.	OH+O2=>HO2+O					1.42E+12	0.4	51859.0
25.	H+HO2=>H2+O2					4.28E+13	0.0	1411.0
26.	H2+O2=>H+HO2					5.47E+12	0.4	55459.0
27.	H+HO2=>2OH					1.69E+14	0.0	874.0
28.	2OH=>H+HO2					2.62E+10	0.8	35852.0
29.	H+HO2=>H2O+O					3.01E+13	0.0	1721.0
30.	H2O+O=>H+HO2					1.23E+11	0.7	53984.0
31.	CO+HO2=>CO2+OH					1.50E+14	0.0	23650.0
32.	CO2+OH=>CO+HO2					1.43E+17	-0.5	84747.0
33.	CO+OH=>CO2+H					4.40E+06	1.5	-740.0
34.	CO2+H=>CO+OH					2.70E+13	0.2	25379.0
35.	CO+O+M=>CO2+M					2.83E+13	0.0	-4540.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
36.	CO2+M=>CO+O+M					4.01E+19	-1.0	123398.0
	H2O/16.25/	CO/1.875/	CO2/3.75/	CH4/16.25/	C2H6/16.25/			
37.	CO+O2=>CO2+O					2.53E+12	0.0	47700.0

38.	CO2+O=>CO+O2	3.08E+16	-0.9	56537.0
39.	HCO+M=>H+CO+M	1.85E+17	-1.0	17000.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
40.	H+CO+M=>HCO+M	1.82E+16	-0.7	1510.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
41.	HCO+OH=>CO+H2O	1.00E+14	0.0	0.0
42.	CO+H2O=>HCO+OH	5.95E+13	0.5	103615.0
43.	HCO+O=>CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0
44.	CO+OH=>HCO+O	6.79E+11	0.6	86330.0
45.	HCO+O=>CO2+H	3.00E+13	0.0	0.0
46.	CO2+H=>HCO+O	4.17E+18	-0.7	112449.0
47.	HCO+H=>CO+H2	7.22E+13	0.0	0.0
48.	CO+H2=>HCO+H	2.67E+12	0.6	88118.0
49.	HCO+O2=>CO+HO2	2.11E+09	1.1	-620.0
50.	CO+HO2=>HCO+O2	6.11E+08	1.3	33450.0
51.	HCO+CH3=>CO+CH4	1.20E+14	0.0	0.0
52.	CO+CH4=>HCO+CH3	4.14E+15	0.2	90000.0
53.	HCO+HO2=>CO2+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0
54.	CO2+OH+H=>HCO+HO2	2.80E+15	-0.2	45607.0
55.	HCO+C2H6=>CH2O+C2H5	4.70E+04	2.7	18235.0
56.	CH2O+C2H5=>HCO+C2H6	1.60E+04	2.8	8350.0
57.	2HCO=>CH2O+CO	1.80E+13	0.0	0.0
58.	CH2O+CO=>2HCO	8.79E+14	0.1	75209.0
59.	2HCO=>H2+2CO	3.00E+12	0.0	0.0
60.	H2+2CO=>2HCO	1.09E+10	0.9	72629.0
61.	CH4+OH=>CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2462.0
62.	CH3+H2O=>CH4+OH	2.76E+04	2.4	16077.0
63.	CH4+O=>CH3+OH	1.62E+06	2.3	7094.0
64.	CH3+OH=>CH4+O	1.06E+03	2.7	3424.0
65.	CH4+H=>CH3+H2	2.25E+04	3.0	8757.0
66.	CH3+H2=>CH4+H	2.41E+01	3.4	6875.0
67.	CH4+CH2=>2CH3	4.30E+12	0.0	10038.0
68.	2CH3=>CH4+CH2	5.98E+12	-0.2	14691.0
69.	CH4+O2=>CH3+HO2	4.04E+13	0.0	56913.0
70.	CH3+HO2=>CH4+O2	3.39E+11	0.0	983.0
71.	CH3+M=>CH2+H+M	1.90E+16	0.0	91599.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
72.	CH2+H+M=>CH3+M	3.89E+13	0.4	-18543.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
73.	CH3+M=>CH+H2+M	6.90E+14	0.0	82459.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
74.	CH+H2+M=>CH3+M	2.17E+11	0.6	-25409.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
75.	CH3+HO2=>CH3O+OH	5.00E+12	0.0	0.0
76.	CH3O+OH=>CH3+HO2	1.17E+14	-0.2	24688.0
77.	CH3+O=>CH2O+H	8.43E+13	0.0	0.0
78.	CH2O+H=>CH3+O	1.33E+16	-0.3	70561.0
79.	CH3+H=>CH2+H2	7.00E+13	0.0	15100.0
80.	CH2+H2=>CH3+H	5.40E+10	0.7	8566.0
81.	CH3+O2=>CH3O+O	1.32E+14	0.0	31398.0
82.	CH3O+O=>CH3+O2	3.96E+16	-0.5	3826.0
83.	CH3+O2=>CH2O+OH	4.38E+11	0.0	14656.0
84.	CH2O+OH=>CH3+O2	1.37E+11	0.1	67935.0
85.	2CH3=>C2H5+H	3.01E+13	0.0	13513.0
86.	C2H5+H=>2CH3	1.26E+19	-1.2	4601.0
87.	CH3+CH3O=>CH4+CH2O	2.41E+13	0.0	0.0
88.	CH4+CH2O=>CH3+CH3O	3.83E+13	0.3	84521.0
89.	CH3+CH2OH=>CH4+CH2O	2.41E+12	0.0	0.0
90.	CH4+CH2O=>CH3+CH2OH	2.84E+14	0.3	79327.0
91.	CH2+OH=>CH+H2O	1.13E+07	2.0	3000.0
92.	CH+H2O=>CH2+OH	2.79E+07	2.0	20770.0
93.	CH2+OH=>CH2O+H	2.50E+13	0.0	0.0
94.	CH2O+H=>CH2+OH	8.36E+18	-0.9	78884.0
95.	CH2+O=>CO+2H	5.00E+13	0.0	0.0
96.	CO+2H=>CH2+O	7.61E+14	-0.1	74515.0
97.	CH2+O=>CO+H2	6.00E+13	0.0	0.0
98.	CO+H2=>CH2+O	3.44E+14	0.2	178123.0
99.	CH2+H=>CH+H2	1.00E+18	-1.6	0.0
100.	CH+H2=>CH2+H	1.54E+17	-1.4	2274.0
101.	CH2+O2=>HCO+OH	4.30E+10	0.0	-500.0
102.	HCO+OH=>CH2+O2	1.32E+10	0.0	72223.0
103.	CH2+O2=>CO2+H2	3.45E+11	0.0	1000.0
104.	CO2+H2=>CH2+O2	2.41E+16	-0.6	187961.0
105.	CH2+O2=>CO2+2H	1.60E+12	0.0	1000.0
106.	CO2+2H=>CH2+O2	2.96E+17	-0.9	84353.0
107.	CH2+O2=>CO+H2O	1.87E+10	0.0	-1000.0

108.	CO+H2O=>CH2+O2	3.42E+09	0.5	175338.0
109.	CH2+O2=>CO+OH+H	8.64E+10	0.0	-500.0
110.	CO+OH+H=>CH2+O2	2.61E+09	0.4	56734.0
111.	CH2+O2=>CH2O+O	5.00E+13	0.0	9000.0
112.	CH2O+O=>CH2+O2	3.32E+16	-0.5	70602.0
113.	CH2+CO2=>CH2O+CO	1.10E+11	0.0	1000.0
114.	CH2O+CO=>CH2+CO2	5.99E+09	0.4	53765.0
115.	2CH2=>C2H2+H2	3.20E+13	0.0	0.0
116.	C2H2+H2=>2CH2	2.11E+20	-1.2	131668.0
117.	2CH2=>C2H2+2H	4.00E+13	0.0	0.0
118.	C2H2+2H=>2CH2	7.00E+20	-1.5	28060.0
119.	CH2+CH3=>C2H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
120.	C2H4+H=>CH2+CH3	1.01E+21	-1.4	64531.0
121.	CH2+CH=>C2H2+H	4.00E+13	0.0	0.0
122.	C2H2+H=>CH2+CH	1.72E+21	-1.4	129394.0
123.	CH2+C2H2=>H+C3H3	1.20E+13	0.0	6620.0
124.	H+C3H3=>CH2+C2H2	5.48E+18	-1.5	19215.0
125.	CH2+C2H4=>C3H6	4.30E+12	0.0	10038.0
126.	C3H6=>CH2+C2H4	1.42E+21	-1.7	111693.0
127.	CH2+C2H6=>CH3+C2H5	6.50E+12	0.0	7911.0
128.	CH3+C2H5=>CH2+C2H6	2.18E+12	-0.1	17470.0
129.	SCH2+M=>CH2+M	1.00E+13	0.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
130.	CH2+M=>SCH2+M	3.84E+12	0.0	8917.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
131.	SCH2+O2=>CO+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0
132.	CO+OH+H=>SCH2+O2	3.48E+11	0.4	66151.0
133.	SCH2+H2=>CH3+H	7.00E+13	0.0	0.0
134.	CH3+H=>SCH2+H2	3.49E+16	-0.7	15452.0
135.	SCH2+H=>CH2+H	2.00E+14	0.0	0.0
136.	CH2+H=>SCH2+H	7.69E+13	0.0	8917.0
137.	SCH2+H=>CH+H2	3.00E+13	0.0	0.0
138.	CH+H2=>SCH2+H	1.77E+12	0.2	11191.0
139.	SCH2+O=>CO+2H	1.50E+13	0.0	0.0
140.	CO+2H=>SCH2+O	8.77E+13	-0.1	83433.0
141.	SCH2+O=>CO+H2	1.50E+13	0.0	0.0
142.	CO+H2=>SCH2+O	3.31E+13	0.2	187041.0
143.	SCH2+OH=>CH2O+H	3.00E+13	0.0	0.0
144.	CH2O+H=>SCH2+OH	3.86E+18	-0.9	87802.0
145.	SCH2+HO2=>CH2O+OH	3.00E+13	0.0	0.0
146.	CH2O+OH=>SCH2+HO2	5.98E+14	-0.1	122779.0
147.	SCH2+H2O=>CH3OH	1.80E+13	0.0	0.0
148.	CH3OH=>SCH2+H2O	4.92E+20	-1.5	93590.0
149.	SCH2+CH2O=>CH3+HCO	1.20E+12	0.0	0.0
150.	CH3+HCO=>SCH2+CH2O	4.53E+11	-0.1	28361.0
151.	SCH2+HCO=>CH3+CO	1.80E+13	0.0	0.0
152.	CH3+CO=>SCH2+HCO	3.32E+14	0.0	103570.0
153.	SCH2+CH3=>C2H4+H	1.80E+13	0.0	0.0
154.	C2H4+H=>SCH2+CH3	1.74E+20	-1.3	73449.0
155.	SCH2+CH4=>2CH3	4.00E+13	0.0	0.0
156.	2CH3=>SCH2+CH4	2.14E+13	-0.2	13570.0
157.	SCH2+C2H6=>CH3+C2H5	1.20E+14	0.0	0.0
158.	CH3+C2H5=>SCH2+C2H6	1.54E+13	-0.1	18476.0
159.	SCH2+C2H2=>C3H3+H	1.80E+14	0.0	0.0
160.	C3H3+H=>SCH2+C2H2	3.16E+19	-1.5	21513.0
161.	SCH2+H2O=>CH2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
162.	CH2+H2O=>SCH2+H2O	1.15E+13	0.0	8917.0
163.	SCH2+CO2=>CH2O+CO	3.00E+12	0.0	0.0
164.	CH2O+CO=>SCH2+CO2	6.28E+10	0.4	61682.0
165.	SCH2+CH2CO=>C2H4+CO	1.60E+14	0.0	0.0
166.	C2H4+CO=>SCH2+CH2CO	7.13E+14	0.2	103677.0
167.	CH+OH=>HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0
168.	HCO+H=>CH+OH	4.94E+16	-0.5	89520.0
169.	CH+O=>CO+H	1.00E+14	0.0	0.0
170.	CO+H=>CH+O	3.73E+15	0.0	175849.0
171.	CH+O2=>HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0
172.	HCO+O=>CH+O2	1.08E+14	-0.1	72238.0
173.	CH+O2=>CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
174.	CO+OH=>CH+O2	1.48E+12	0.5	158568.0
175.	CH+CO2=>HCO+CO	3.40E+12	0.0	690.0
176.	HCO+CO=>CH+CO2	9.12E+08	0.7	64091.0
177.	CH+CH4=>C2H4+H	6.00E+13	0.0	0.0
178.	C2H4+H=>CH+CH4	1.06E+19	-1.1	60376.0
179.	CH+CH3=>C2H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
180.	C2H3+H=>CH+CH3	3.09E+17	-0.8	54024.0
181.	CH3O+M=>CH2O+H+M	4.88E+15	0.0	22773.0

	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
182.	CH2O+H+M=>CH3O+M	2.21E+13	0.4	1805.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
183.	CH3O+OH=>CH2O+H2O	1.00E+13	0.0	0.0
184.	CH2O+H2O=>CH3O+OH	2.74E+11	0.6	98136.0
185.	CH3O+O=>CH2O+OH	1.30E+13	0.0	0.0
186.	CH2O+OH=>CH3O+O	1.36E+10	0.7	80851.0
187.	CH3O+H=>CH2O+H2	2.00E+13	0.0	0.0
188.	CH2O+H2=>CH3O+H	3.41E+10	0.7	82640.0
189.	CH3O+O2=>CH2O+HO2	2.35E+10	0.0	1788.0
190.	CH2O+HO2=>CH3O+O2	3.13E+08	0.3	30379.0
191.	CH3O+CH2O=>CH3OH+HCO	1.15E+11	0.0	1280.0
192.	CH3OH+HCO=>CH3O+CH2O	1.35E+09	0.3	14506.0
193.	CH3O+CO=>CH3+CO2	1.57E+13	0.0	11804.0
194.	CH3+CO2=>CH3O+CO	6.35E+14	-0.3	48213.0
195.	CH3O+HCO=>CH3OH+CO	9.00E+13	0.0	0.0
196.	CH3OH+CO=>CH3O+HCO	5.14E+13	0.3	88435.0
197.	CH3O+C2H5=>CH2O+C2H6	2.41E+13	0.0	0.0
198.	CH2O+C2H6=>CH3O+C2H5	1.59E+14	0.1	79615.0
199.	CH3O+C2H3=>CH2O+C2H4	2.41E+13	0.0	0.0
200.	CH2O+C2H4=>CH3O+C2H3	6.55E+14	0.0	90874.0
201.	CH3O+C2H4=>CH2O+C2H5	1.20E+11	0.0	7000.0
202.	CH2O+C2H5=>CH3O+C2H4	4.39E+09	0.2	22730.0
203.	CH2O+M=>HCO+H+M	1.26E+16	0.0	77897.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
204.	HCO+H+M=>CH2O+M	2.53E+13	0.3	-12801.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
205.	CH2O+OH=>HCO+H2O	1.72E+09	1.2	-447.0
206.	HCO+H2O=>CH2O+OH	2.09E+07	1.6	27959.0
207.	CH2O+O=>HCO+OH	1.81E+13	0.0	3088.0
208.	HCO+OH=>CH2O+O	8.37E+09	0.5	14209.0
209.	CH2O+H=>HCO+H2	1.26E+08	1.6	2170.0
210.	HCO+H2=>CH2O+H	9.54E+04	2.2	15079.0
211.	CH2O+O2=>HCO+HO2	2.04E+13	0.0	39000.0
212.	HCO+HO2=>CH2O+O2	1.21E+11	0.2	-2139.0
213.	CH2O+CH3=>HCO+CH4	4.09E+12	0.0	8843.0
214.	HCO+CH4=>CH2O+CH3	2.89E+12	0.1	23634.0
215.	C2H6+OH=>C2H5+H2O	4.10E+06	2.1	860.0
216.	C2H5+H2O=>C2H6+OH	1.70E+04	2.5	19381.0
217.	C2H6+O=>C2H5+OH	9.99E+08	1.5	5803.0
218.	C2H5+OH=>C2H6+O	1.58E+05	2.0	7039.0
219.	C2H6+H=>C2H5+H2	5.25E+14	0.0	12800.0
220.	C2H5+H2=>C2H6+H	1.36E+11	0.6	15825.0
221.	C2H6+O2=>C2H5+HO2	1.00E+13	0.0	51000.0
222.	C2H5+HO2=>C2H6+O2	2.02E+10	0.2	-24.0
223.	C2H6+CH3O=>C2H5+CH3OH	3.02E+11	0.0	7000.0
224.	C2H5+CH3OH=>C2H6+CH3O	1.20E+09	0.3	10341.0
225.	C2H6+CH3=>C2H5+CH4	7.54E+00	3.7	9883.0
226.	C2H5+CH4=>C2H6+CH3	1.81E+00	3.9	14789.0
227.	C2H5+OH=>C2H4+H2O	2.41E+13	0.0	0.0
228.	C2H4+H2O=>C2H5+OH	1.81E+13	0.4	82406.0
229.	C2H5+OH=>CH3+CH2O+H	2.41E+13	0.0	0.0
230.	C2H5+O=>CH2O+CH3	4.24E+13	0.0	0.0
231.	CH2O+CH3=>C2H5+O	1.60E+10	0.9	79473.0
232.	C2H5+O=>C2H4+OH	3.05E+13	0.0	0.0
233.	C2H4+OH=>C2H5+O	8.69E+11	0.5	65121.0
234.	C2H5+H=>C2H4+H2	1.25E+14	0.0	8000.0
235.	C2H4+H2=>C2H5+H	5.83E+12	0.5	74909.0
236.	C2H5+CH3=>C2H4+CH4	1.14E+12	0.0	0.0
237.	C2H4+CH4=>C2H5+CH3	4.97E+13	0.1	68791.0
238.	2C2H5=>C2H4+C2H6	1.40E+12	0.0	0.0
239.	C2H4+C2H6=>2C2H5	2.53E+14	-0.1	63885.0
240.	C2H4+M=>C2H2+H2+M	3.00E+17	0.0	79349.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
241.	C2H2+H2+M=>C2H4+M	1.61E+14	0.5	36344.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
242.	C2H4+M=>C2H3+H+M	2.97E+17	0.0	96559.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
243.	C2H3+H+M=>C2H4+M	4.94E+13	0.5	-15283.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
244.	C2H4+OH=>C2H3+H2O	2.02E+13	0.0	5936.0
245.	C2H3+H2O=>C2H4+OH	2.04E+10	0.6	13199.0
246.	C2H4+O=>CH3+HCO	1.20E+08	1.4	530.0
247.	CH3+HCO=>C2H4+O	7.38E+02	2.4	26004.0
248.	C2H4+O=>CH2HCO+H	2.00E+08	1.4	530.0
249.	CH2HCO+H=>C2H4+O	6.67E+09	0.8	17143.0

250.	$C2H4+H=>C2H3+H2$	1.00E+14	0.0	15009.0
251.	$C2H3+H2=>C2H4+H$	6.28E+09	0.8	6775.0
252.	$C2H4+O2=>C2H3+HO2$	4.00E+13	0.0	61500.0
253.	$C2H3+HO2=>C2H4+O2$	1.97E+10	0.4	-782.0
254.	$2C2H4=>C2H5+C2H3$	5.00E+14	0.0	64699.0
255.	$C2H5+C2H3=>2C2H4$	6.73E+11	0.2	-10444.0
256.	$C2H4+CH3=>C2H3+CH4$	6.63E+00	3.7	9499.0
257.	$C2H3+CH4=>C2H4+CH3$	3.88E-01	4.0	3146.0
258.	$C2H3+HO2=>CH3+CO+OH$	3.00E+13	0.0	0.0
259.	$C2H3+OH=>C2H2+H2O$	3.00E+13	0.0	0.0
260.	$C2H2+H2O=>C2H3+OH$	1.55E+15	-0.1	84333.0
261.	$C2H3+H=>C2H2+H2$	3.00E+13	0.0	0.0
262.	$C2H2+H2=>C2H3+H$	9.64E+13	0.0	68836.0
263.	$C2H3+O=>CH3+CO$	1.50E+13	0.0	0.0
264.	$CH3+CO=>C2H3+O$	5.44E+10	0.8	121826.0
265.	$C2H3+O=>CH2CO+H$	1.50E+13	0.0	0.0
266.	$CH2CO+H=>C2H3+O$	1.18E+17	-0.7	91597.0
267.	$C2H3+O2=>C2H2+HO2$	1.98E+12	0.0	10000.0
268.	$C2H2+HO2=>C2H3+O2$	4.97E+13	-0.4	24788.0
269.	$C2H3+CH=>CH2+C2H2$	5.00E+13	0.0	0.0
270.	$CH2+C2H2=>C2H3+CH$	1.05E+15	-0.2	66562.0
271.	$C2H3+CH2=>AC3H4+H$	3.00E+13	0.0	0.0
272.	$AC3H4+H=>C2H3+CH2$	9.24E+22	-1.9	68086.0
273.	$C2H3+CH3=>C2H2+CH4$	3.91E+11	0.0	0.0
274.	$C2H2+CH4=>C2H3+CH3$	1.17E+15	-0.4	70718.0
275.	$C2H3+C2H6=>C2H4+C2H5$	1.50E+13	0.0	10000.0
276.	$C2H4+C2H5=>C2H3+C2H6$	6.17E+13	-0.2	21258.0
277.	$C2H3+C2H=>2C2H2$	9.64E+11	0.0	0.0
278.	$2C2H2=>C2H3+C2H$	4.87E+16	-0.9	97582.0
279.	$C2H3+C2H2=>C4H4+H$	2.00E+12	0.0	5000.0
280.	$C4H4+H=>C2H3+C2H2$	4.28E+18	-1.4	10662.0
281.	$C2H3+HCO=>C2H4+CO$	9.03E+13	0.0	0.0
282.	$C2H4+CO=>C2H3+HCO$	5.33E+16	-0.1	96352.0
283.	$C2H3+CH2O=>C2H4+HCO$	5.42E+03	2.8	5862.0
284.	$C2H4+HCO=>C2H3+CH2O$	6.54E+04	2.6	27005.0
285.	$2C2H3=>C2H2+C2H4$	1.08E+13	0.0	0.0
286.	$C2H2+C2H4=>2C2H3$	5.55E+17	-0.7	77070.0
287.	$2C2H3=>C4H6$	5.00E+13	0.0	0.0
288.	$C4H6=>2C2H3$	3.08E+26	-2.7	118048.0
289.	$C2H3+C2H4=>C4H6+H$	1.20E+12	0.0	4683.0
290.	$C4H6+H=>C2H3+C2H4$	1.23E+21	-2.2	10889.0
291.	$C2H2+O2=>HCCO+OH$	2.00E+08	1.5	30100.0
292.	$HCCO+OH=>C2H2+O2$	2.67E+05	1.8	31734.0
293.	$C2H2+O2=>C2H+HO2$	1.21E+13	0.0	74519.0
294.	$C2H+HO2=>C2H2+O2$	6.02E+09	0.6	-8274.0
295.	$C2H2+HO2=>CH2CO+OH$	6.09E+09	0.0	7948.0
296.	$CH2CO+OH=>C2H2+HO2$	3.79E+09	0.1	67475.0
297.	$C2H2+OH=>C2H+H2O$	3.40E+07	2.0	14000.0
298.	$C2H+H2O=>C2H2+OH$	3.48E+04	2.8	751.0
299.	$C2H2+OH=>CH3+CO$	4.84E-04	4.0	-2000.0
300.	$CH3+CO=>C2H2+OH$	8.92E-07	4.8	52778.0
301.	$C2H2+OH=>CH2CO+H$	2.19E-04	4.5	-1000.0
302.	$CH2CO+H=>C2H2+OH$	8.79E-01	3.8	23550.0
303.	$C2H2+O=>CH2+CO$	1.98E+04	2.6	656.0
304.	$CH2+CO=>C2H2+O$	1.72E-02	4.1	47111.0
305.	$C2H2+O=>HCCO+H$	4.62E+04	2.6	656.0
306.	$HCCO+H=>C2H2+O$	3.10E+04	2.5	19572.0
307.	$C2H2+CH3=>C2H+CH4$	1.80E+11	0.0	17290.0
308.	$C2H+CH4=>C2H2+CH3$	1.07E+10	0.5	-9574.0
309.	$C2H+H2=>C2H2+H$	1.51E+13	0.0	3100.0
310.	$C2H2+H=>C2H+H2$	2.37E+17	-1.0	31846.0
311.	$C2H+OH=>HCCO+H$	2.00E+13	0.0	0.0
312.	$HCCO+H=>C2H+OH$	3.45E+17	-1.0	49451.0
313.	$C2H+O=>CO+CH$	1.00E+13	0.0	0.0
314.	$CO+CH=>C2H+O$	2.10E+10	0.7	77475.0
315.	$C2H+O2=>CO+HCO$	2.41E+12	0.0	0.0
316.	$CO+HCO=>C2H+O2$	1.66E+10	0.6	149713.0
317.	$CH2CO+H=>CH2HCO$	1.00E+14	0.0	2500.0
318.	$CH2HCO=>CH2CO+H$	2.54E+15	-0.4	39358.0
319.	$CH2HCO+O2=>CH2CO+HO2$	1.58E+10	0.0	0.0
320.	$CH2CO+HO2=>CH2HCO+O2$	1.84E+09	0.3	12702.0
321.	$CH2HCO+O2=>CH2O+CO+OH$	2.51E+10	0.0	0.0
322.	$CH2O+CO+OH=>CH2HCO+O2$	1.42E+02	2.1	46650.0
323.	$CH2HCO+O=>CH2O+HCO$	3.98E+13	0.0	0.0
324.	$CH2O+HCO=>CH2HCO+O$	1.16E+09	1.3	79421.0
325.	$CH2HCO+HO2=>CH2O+HCO+OH$	1.00E+13	0.0	0.0

326.	CH2O+HCO+OH=>CH2HCO+HO2	1.96E+05	1.8	12580.0
327.	C2H2OH=>CH2CO+H	5.00E+15	0.0	28000.0
328.	CH2CO+H=>C2H2OH	4.87E+16	-0.3	21191.0
329.	C2H2OH+H=>CH2CO+H2	2.00E+13	0.0	4000.0
330.	CH2CO+H2=>C2H2OH+H	7.34E+13	0.0	100799.0
331.	C2H2OH+O=>CH2CO+OH	2.00E+13	0.0	4000.0
332.	CH2CO+OH=>C2H2OH+O	4.49E+13	0.0	99010.0
333.	C2H2OH+OH=>CH2CO+H2O	1.00E+13	0.0	2000.0
334.	CH2CO+H2O=>C2H2OH+OH	5.90E+14	-0.1	114296.0
335.	C2H2OH+O2=>HCO+CO2+H2	4.00E+12	0.0	-250.0
336.	CH2CO+M=>CH2+CO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	3.60E+15	0.0	59270.0
337.	CH2+CO+M=>CH2CO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	3.39E+06	1.9	-20644.0
338.	CH2CO+O2=>CH2O+CO2	2.00E+13	0.0	61500.0
339.	CH2O+CO2=>CH2CO+O2	1.77E+13	0.4	171126.0
340.	CH2CO+HO2=>CH2O+CO+OH	6.00E+11	0.0	12738.0
341.	CH2CO+O=>CH2+CO2	1.76E+12	0.0	1349.0
342.	CH2+CO2=>CH2CO+O	2.35E+09	0.8	49373.0
343.	CH2CO+O=>HCCO+OH	1.00E+13	0.0	8000.0
344.	HCCO+OH=>CH2CO+O	1.68E+09	0.5	2366.0
345.	CH2CO+OH=>CH2OH+CO	6.93E+12	0.0	0.0
346.	CH2OH+CO=>CH2CO+OH	6.50E+09	0.6	25132.0
347.	CH2CO+OH=>HCO+CH2O	2.04E+11	0.0	0.0
348.	HCO+CH2O=>CH2CO+OH	6.54E+08	0.6	14460.0
349.	CH2CO+OH=>HCCO+H2O	1.02E+11	0.0	0.0
350.	HCCO+H2O=>CH2CO+OH	4.49E+08	0.4	11652.0
351.	CH2CO+OH=>CH3+CO2	3.10E+12	0.0	0.0
352.	CH3+CO2=>CH2CO+OH	8.75E+12	0.2	56347.0
353.	CH2CO+H=>CH3+CO	1.50E+04	2.8	673.0
354.	CH3+CO=>CH2CO+H	6.90E-03	4.3	30901.0
355.	CH2CO+H=>HCCO+H2	1.80E+14	0.0	8600.0
356.	HCCO+H2=>CH2CO+H	4.93E+10	0.6	4755.0
357.	CH2CO+CH3=>C2H5+CO	6.00E+10	0.0	0.0
358.	C2H5+CO=>CH2CO+CH3	1.15E+10	0.3	21316.0
359.	CH2CO+CH3=>HCCO+CH4	7.50E+12	0.0	13000.0
360.	HCCO+CH4=>CH2CO+CH3	1.92E+12	0.2	11036.0
361.	CH2CO+CH2=>HCCO+CH3	1.00E+12	0.0	0.0
362.	HCCO+CH3=>CH2CO+CH2	3.55E+11	-0.1	2690.0
363.	CH2CO+CH2=>C2H4+CO	3.60E+13	0.0	11000.0
364.	C2H4+CO=>CH2CO+CH2	4.17E+14	0.2	105760.0
365.	HCCO+M=>CH+CO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	6.00E+15	0.0	58821.0
366.	CH+CO+M=>HCCO+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	3.17E+09	1.5	-14975.0
367.	HCCO+OH=>HCO+CO+H	1.00E+13	0.0	0.0
368.	HCO+CO+H=>HCCO+OH	8.70E+09	0.9	15725.0
369.	HCCO+O=>2CO+H	1.93E+14	0.0	590.0
370.	2CO+H=>HCCO+O	3.80E+09	1.5	102644.0
371.	HCCO+H=>SCH2+CO	1.50E+14	0.0	0.0
372.	SCH2+CO=>HCCO+H	5.05E+08	1.6	18621.0
373.	HCCO+O2=>CO2+CO+H	1.40E+09	1.0	0.0
374.	CO2+CO+H=>HCCO+O2	3.36E+08	1.6	110892.0
375.	HCCO+CH2=>C2H+CH2O	1.00E+13	0.0	2000.0
376.	C2H+CH2O=>HCCO+CH2	1.94E+14	0.1	31433.0
377.	HCCO+CH2=>C2H3+CO	3.00E+13	0.0	0.0
378.	C2H3+CO=>HCCO+CH2	7.97E+13	0.3	90371.0
379.	HCCO+C2H2=>C3H3+CO	1.00E+11	0.0	3000.0
380.	C3H3+CO=>HCCO+C2H2	5.91E+10	0.1	43134.0
381.	HCCO+CH=>C2H2+CO	5.00E+13	0.0	0.0
382.	C2H2+CO=>HCCO+CH	2.78E+15	0.2	156933.0
383.	2HCCO=>C2H2+2CO	1.00E+13	0.0	0.0
384.	C2H2+2CO=>2HCCO	2.93E+08	1.6	83138.0
385.	CH3OH+OH=>CH2OH+H2O	4.53E+11	0.3	1160.0
386.	CH2OH+H2O=>CH3OH+OH	6.36E+09	0.5	21533.0
387.	CH3OH+OH=>CH3O+H2O	3.63E+11	0.7	5868.0
388.	CH3O+H2O=>CH3OH+OH	3.78E+11	0.8	21048.0
389.	CH3OH+O=>CH2OH+OH	1.63E+13	0.0	5030.0
390.	CH2OH+OH=>CH3OH+O	8.71E+09	0.3	8118.0
391.	CH3OH+H=>CH2OH+H2	4.00E+13	0.0	6100.0
392.	CH2OH+H2=>CH3OH+H	3.49E+10	0.3	10977.0
393.	CH3OH+CH2O=>2CH3O	1.55E+12	0.0	79569.0
394.	2CH3O=>CH3OH+CH2O	5.89E+13	-0.5	-3387.0
395.	CH3OH+CH3=>CH2OH+CH4	3.57E+11	0.0	8663.0
396.	CH2OH+CH4=>CH3OH+CH3	2.90E+11	-0.1	15421.0
397.	CH3OH+CH3=>CH3O+CH4	4.68E+05	2.3	12764.0

398.	CH3O+CH4=>CH3OH+CH3	2.82E+07	2.2	14328.0
399.	CH2OH+M=>CH2O+H+M	1.00E+14	0.0	25100.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
400.	CH2O+H+M=>CH2OH+M	3.35E+13	0.4	-1062.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
401.	CH2OH+H=>CH2O+H2	3.00E+13	0.0	0.0
402.	CH2O+H2=>CH2OH+H	3.79E+12	0.7	77446.0
403.	CH2OH+O2=>CH2O+HO2	2.17E+14	0.0	4690.0
404.	CH2O+HO2=>CH2OH+O2	2.15E+14	0.3	28088.0
405.	NC3H7+O2=>C3H6+HO2	1.00E+12	0.0	5020.0
406.	C3H6+HO2=>NC3H7+O2	1.72E+11	0.2	21548.0
407.	C3H6=>C2H3+CH3	1.10E+21	-1.2	97719.0
408.	C2H3+CH3=>C3H6	2.70E+11	0.6	-5635.0
409.	C3H6=>CH4+C2H2	3.50E+12	0.0	69999.0
410.	CH4+C2H2=>C3H6	2.58E+06	1.4	37363.0
411.	C3H6+O2=>AC3H5+HO2	1.95E+12	0.0	39000.0
412.	AC3H5+HO2=>C3H6+O2	5.84E+12	-0.7	2900.0
413.	C3H6+OH=>AC3H5+H2O	7.70E+05	2.2	622.0
414.	AC3H5+H2O=>C3H6+OH	4.73E+06	1.7	34067.0
415.	C3H6+O=>C2H5+HCO	4.69E+07	1.6	-628.0
416.	C2H5+HCO=>C3H6+O	1.78E+02	2.7	24421.0
417.	C3H6+O=>CH3+CH2HCO	3.90E+07	1.6	-628.0
418.	CH3+CH2HCO=>C3H6+O	1.92E+03	2.3	24473.0
419.	C3H6+O=>C2H4+CH2O	7.02E+07	1.6	-628.0
420.	C2H4+CH2O=>C3H6+O	1.64E+04	2.6	78420.0
421.	C3H6+O=>AC3H5+OH	1.75E+11	0.7	5884.0
422.	AC3H5+OH=>C3H6+O	4.09E+10	0.3	22043.0
423.	C3H6+H=>AC3H5+H2	1.70E+05	2.5	2492.0
424.	AC3H5+H2=>C3H6+H	6.50E+04	2.2	20440.0
425.	C3H6+CH3=>AC3H5+CH4	1.60E+11	0.0	8800.0
426.	AC3H5+CH4=>C3H6+CH3	5.70E+13	-0.7	28629.0
427.	C3H6+C2H5=>AC3H5+C2H6	1.00E+11	0.0	9800.0
428.	AC3H5+C2H6=>C3H6+C2H5	1.48E+14	-0.9	24724.0
429.	C3H6+C2H3=>C4H6+CH3	7.20E+11	0.0	5008.0
430.	C4H6+CH3=>C3H6+C2H3	1.09E+15	-0.8	19702.0
431.	AC3H5+H=>AC3H4+H2	6.03E+12	0.0	0.0
432.	AC3H4+H2=>AC3H5+H	3.47E+09	1.2	43856.0
433.	AC3H5+CH3=>AC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
434.	AC3H4+CH4=>AC3H5+CH3	5.37E+10	0.8	45738.0
435.	AC3H5+CH2=>C4H6+H	3.00E+13	0.0	0.0
436.	C4H6+H=>AC3H5+CH2	1.88E+20	-1.1	53043.0
437.	AC3H5+C2H5=>AC3H4+C2H6	4.00E+11	0.0	0.0
438.	AC3H4+C2H6=>AC3H5+C2H5	8.93E+11	0.6	40832.0
439.	AC3H5+C2H3=>AC3H4+C2H4	1.00E+12	0.0	0.0
440.	AC3H4+C2H4=>AC3H5+C2H3	9.18E+12	0.5	52090.0
441.	AC3H4+M=>C3H3+H+M	2.00E+18	0.0	79999.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
442.	C3H3+H+M=>AC3H4+M	2.53E+15	0.1	-10262.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
443.	AC3H4=>PC3H4	1.20E+15	0.0	92399.0
444.	PC3H4=>AC3H4	2.70E+14	0.1	93558.0
445.	AC3H4+O2=>C3H3+HO2	4.00E+13	0.0	61500.0
446.	C3H3+HO2=>AC3H4+O2	1.49E+11	0.0	20798.0
447.	AC3H4+HO2=>CH2CO+CH2+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
448.	AC3H4+HO2=>C2H2+CH2O+OH	5.00E+11	0.0	19000.0
449.	AC3H4+OH=>C3H3+H2O	2.15E+12	0.0	-200.0
450.	C3H3+H2O=>AC3H4+OH	1.65E+10	0.3	28643.0
451.	AC3H4+OH=>CH2CO+CH3	1.00E+12	0.0	-393.0
452.	CH2CO+CH3=>AC3H4+OH	5.42E+09	0.6	31442.0
453.	AC3H4+OH=>HCO+C2H4	1.25E+11	0.0	-393.0
454.	HCO+C2H4=>AC3H4+OH	1.64E+08	0.8	31549.0
455.	AC3H4+OH=>C2H5+CO	1.88E+11	0.0	-393.0
456.	C2H5+CO=>AC3H4+OH	1.95E+08	0.8	52758.0
457.	AC3H4+O=>C2H4+CO	1.12E-02	4.6	-4243.0
458.	C2H4+CO=>AC3H4+O	3.34E-07	5.9	114029.0
459.	AC3H4+O=>C2H3+HCO	5.00E-04	4.6	-4243.0
460.	C2H3+HCO=>AC3H4+O	2.52E-11	6.1	17676.0
461.	AC3H4+O=>CH2CO+CH2	1.00E-03	4.6	-4243.0
462.	CH2CO+CH2=>AC3H4+O	2.56E-09	5.8	19269.0
463.	AC3H4+O=>C2H2+CH2O	2.50E-03	4.6	-4243.0
464.	C2H2+CH2O=>AC3H4+O	5.34E-07	5.5	73603.0
465.	AC3H4+H=>AC3H5	1.20E+12	0.0	2700.0
466.	AC3H5=>AC3H4+H	7.86E+14	-0.9	62451.0
467.	AC3H4+H=>C3H3+H2	1.00E+14	0.0	15009.0
468.	C3H3+H2=>AC3H4+H	4.76E+10	0.4	28355.0
469.	AC3H4+CH3=>C3H3+CH4	1.33E+12	0.0	7700.0

470.	C3H3+CH4=>AC3H4+CH3	5.92E+11	0.0	22927.0
471.	AC3H4+AC3H5=>C3H3+C3H6	9.00E+11	0.0	7700.0
472.	C3H3+C3H6=>AC3H4+AC3H5	1.12E+09	0.7	3098.0
473.	PC3H4+M=>C3H3+H+M	4.70E+18	0.0	79999.0
474.	C3H3+H+M=>PC3H4+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/ H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	2.64E+16	0.0	-11421.0
475.	PC3H4=>C2H+CH3	4.20E+16	0.0	99999.0
476.	C2H+CH3=>PC3H4	4.26E+07	1.8	-26228.0
477.	PC3H4+O2=>C3H3+HO2	2.50E+12	0.0	51000.0
478.	C3H3+HO2=>PC3H4+O2	4.15E+10	-0.1	9139.0
479.	PC3H4+O2=>HCCO+OH+CH2	1.00E+07	1.5	30100.0
480.	PC3H4+HO2=>C2H4+CO+OH	6.09E+09	0.0	7948.0
481.	PC3H4+OH=>C3H3+H2O	6.50E+02	3.0	200.0
482.	C3H3+H2O=>PC3H4+OH	2.21E+01	3.1	27884.0
483.	PC3H4+OH=>CH2CO+CH3	2.00E-04	4.5	-1000.0
484.	CH2CO+CH3=>PC3H4+OH	4.82E-06	4.9	29676.0
485.	PC3H4+OH=>HCO+C2H4	1.00E-04	4.5	-1000.0
486.	HCO+C2H4=>PC3H4+OH	5.83E-07	5.1	29783.0
487.	PC3H4+OH=>CH2O+C2H3	1.00E-04	4.5	-1000.0
488.	CH2O+C2H3=>PC3H4+OH	4.83E-08	5.3	8640.0
489.	PC3H4+O=>CH2CO+CH2	6.40E+12	0.0	2100.0
490.	CH2CO+CH2=>PC3H4+O	7.28E+07	1.1	24453.0
491.	PC3H4+O=>C2H3+HCO	3.20E+12	0.0	2100.0
492.	C2H3+HCO=>PC3H4+O	7.16E+05	1.3	22860.0
493.	PC3H4+O=>HCCO+CH3	9.18E+12	0.0	2100.0
494.	HCCO+CH3=>PC3H4+O	3.71E+07	1.0	27142.0
495.	PC3H4+O=>CH2O+C2H2	3.20E+11	0.0	2100.0
496.	CH2O+C2H2=>PC3H4+O	3.04E+08	0.8	78787.0
497.	PC3H4+O=>HCCO+CH2+H	3.20E+11	0.0	2010.0
498.	PC3H4+H=>C3H3+H2	2.00E+14	0.0	15000.0
499.	C3H3+H2=>PC3H4+H	4.24E+11	0.3	27187.0
500.	PC3H4+CH3=>C3H3+CH4	4.00E+11	0.0	7700.0
501.	C3H3+CH4=>PC3H4+CH3	7.90E+11	-0.1	21768.0
502.	PC3H4+C2H3=>C3H3+C2H4	1.00E+11	0.0	7700.0
503.	C3H3+C2H4=>PC3H4+C2H3	3.38E+12	-0.5	28121.0
504.	PC3H4+C2H=>C3H3+C2H2	4.20E+16	0.0	99999.0
505.	C3H3+C2H2=>PC3H4+C2H	1.40E+18	-0.7	140932.0
506.	C3H3+O2=>CH2CO+HCO	3.01E+10	0.0	2870.0
507.	CH2CO+HCO=>C3H3+O2	8.12E+07	0.8	87547.0
508.	C3H3+OH=>C3H2+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
509.	C3H2+H2O=>C3H3+OH	5.49E+12	0.3	43676.0
510.	C3H3+OH=>HCCO+CH3	5.00E+12	0.0	0.0
511.	HCCO+CH3=>C3H3+OH	1.56E+10	0.7	14644.0
512.	C3H3+O=>C2H2+HCO	1.39E+14	0.0	0.0
513.	C3H3+O=>C2H3+CO	4.62E+13	0.0	0.0
514.	C2H3+CO=>C3H3+O	1.80E+08	1.7	96691.0
515.	C3H3+O=>C2H+CH2O	4.62E+13	0.0	0.0
516.	C2H+CH2O=>C3H3+O	1.32E+09	1.5	35754.0
517.	C3H3+O=>C2H2+CO+H	4.62E+13	0.0	0.0
518.	C3H3+H=>C3H2+H2	5.00E+13	0.0	3000.0
519.	C3H2+H2=>C3H3+H	3.42E+12	0.5	31179.0
520.	C3H3+CH=>IC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
521.	IC4H3+H=>C3H3+CH	1.21E+19	-1.4	62455.0
522.	C3H3+CH=>NC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
523.	NC4H3+H=>C3H3+CH	3.48E+19	-1.2	44119.0
524.	C3H3+CH2=>C4H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
525.	C4H4+H=>C3H3+CH2	3.84E+20	-1.2	55898.0
526.	C3H3+CH3=>C4H6	3.33E+12	0.0	0.0
527.	C4H6=>C3H3+CH3	2.21E+22	-1.8	92914.0
528.	CH+C2H2=>C3H2+H	1.00E+14	0.0	0.0
529.	C3H2+H=>CH+C2H2	2.03E+19	-1.2	38501.0
530.	C3H2+O2=>HCCO+HCO	3.00E+10	0.0	2870.0
531.	HCCO+HCO=>C3H2+O2	3.25E+05	0.9	55523.0
532.	C3H2+OH=>C2H2+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
533.	C2H2+HCO=>C3H2+OH	4.06E+11	0.6	51019.0
534.	C3H2+CH2=>IC4H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
535.	IC4H3+H=>C3H2+CH2	1.17E+19	-1.7	36550.0
536.	PC4H9=>C2H5+C2H4	2.50E+12	0.0	28500.0
537.	C2H5+C2H4=>PC4H9	7.20E+03	2.1	5072.0
538.	C4H6=>C2H4+C2H2	1.00E+14	0.0	74999.0
539.	C2H4+C2H2=>C4H6	8.31E+05	1.9	34021.0
540.	C4H6=>NC4H5+H	1.58E+16	0.0	109999.0
541.	NC4H5+H=>C4H6	9.85E+14	-0.4	-911.0
542.	C4H6+O2=>NC4H5+HO2	2.80E+13	0.0	62500.0
543.	NC4H5+HO2=>C4H6+O2	5.15E+12	-0.5	1149.0



544.	C4H6+OH=>NC4H5+H2O	1.00E+07	2.0	7253.0
545.	NC4H5+H2O=>C4H6+OH	3.78E+06	1.7	15447.0
546.	C4H6+O=>NC4H5+OH	2.27E+15	-0.5	7028.0
547.	NC4H5+OH=>C4H6+O	3.27E+13	-0.6	-2063.0
548.	C4H6+H=>PC3H4+CH3	1.30E+03	2.5	1000.0
549.	PC3H4+CH3=>C4H6+H	3.48E-05	4.3	-493.0
550.	C4H6+H=>AC3H4+CH3	1.00E+13	0.0	15000.0
551.	AC3H4+CH3=>C4H6+H	1.19E+06	1.7	12348.0
552.	C4H6+H=>NC4H5+H2	5.00E+15	0.0	22800.0
553.	NC4H5+H2=>C4H6+H	1.18E+14	-0.1	15498.0
554.	C4H6+CH3=>NC4H5+CH4	2.00E+14	0.0	24800.0
555.	NC4H5+CH4=>C4H6+CH3	4.38E+15	-0.5	19379.0
556.	C4H6+C2H3=>NC4H5+C2H4	6.32E+02	3.1	20010.0
557.	NC4H5+C2H4=>C4H6+C2H3	2.37E+05	2.3	20941.0
558.	NC4H5=>C2H3+C2H2	5.00E+13	0.0	44000.0
559.	C2H3+C2H2=>NC4H5	1.11E+03	2.8	2090.0
560.	NC4H5+O=>AC3H5+CO	1.00E+13	0.0	2000.0
561.	NC4H5+OH=>C4H4+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
562.	C4H4+H2O=>NC4H5+OH	5.75E+03	3.5	83857.0
563.	NC4H5+HO2=>AC3H5+CO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
564.	NC4H5+H=>C4H4+H2	1.00E+14	0.0	0.0
565.	C4H4+H2=>NC4H5+H	1.79E+09	1.6	67360.0
566.	NC4H5+C2H2=>C4H6+C2H	1.80E+11	0.0	17300.0
567.	C4H6+C2H=>NC4H5+C2H2	4.87E+08	1.1	-4144.0
568.	NC4H5+CH2O=>C4H6+HCO	4.00E+12	0.0	8840.0
569.	C4H6+HCO=>NC4H5+CH2O	1.29E+11	0.7	29052.0
570.	C3H6+NC4H5=>AC3H5+C4H6	1.00E+11	0.0	9800.0
571.	AC3H5+C4H6=>C3H6+NC4H5	1.63E+12	-0.2	35050.0
572.	C4H4=>2C2H2	3.20E+13	0.0	77099.0
573.	2C2H2=>C4H4	1.28E+08	1.2	36666.0
574.	C4H4+M=>NC4H3+H+M	1.00E+20	0.0	99299.0
575.	NC4H3+H+M=>C4H4+M	2.11E+18	-0.1	-13814.0
576.	C4H4=>IC4H3+H	6.30E+13	0.0	87099.0
577.	IC4H3+H=>C4H4	4.62E+11	-0.3	-7678.0
578.	C4H4=>C4H2+H2	1.26E+15	0.0	94699.0
579.	C4H2+H2=>C4H4	6.74E+11	0.7	50518.0
580.	C4H4+O2=>NC4H3+HO2	1.00E+13	0.0	63200.0
581.	NC4H3+HO2=>C4H4+O2	6.22E+11	-0.2	-354.0
582.	C4H4+O2=>IC4H3+HO2	1.00E+13	0.0	44640.0
583.	IC4H3+HO2=>C4H4+O2	2.17E+11	-0.4	-578.0
584.	C4H4+HO2=>C3H3+HCO+OH	4.00E+11	0.0	8000.0
585.	C3H3+HCO+OH=>C4H4+HO2	4.34E+03	1.4	-24735.0
586.	C4H4+OH=>IC4H3+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
587.	IC4H3+H2O=>C4H4+OH	8.89E+05	1.8	26327.0
588.	C4H4+OH=>NC4H3+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0
589.	NC4H3+H2O=>C4H4+OH	9.58E+05	2.0	10991.0
590.	C4H4+O=>AC3H4+CO	3.00E+13	0.0	1810.0
591.	AC3H4+CO=>C4H4+O	3.76E+10	1.0	110689.0
592.	C4H4+H=>IC4H3+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
593.	IC4H3+H2=>C4H4+H	9.21E+02	2.5	18071.0
594.	C4H4+H=>NC4H3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
595.	NC4H3+H2=>C4H4+H	1.59E+05	2.2	5495.0
596.	C4H4+C2H=>IC4H3+C2H2	3.98E+13	0.0	0.0
597.	IC4H3+C2H2=>C4H4+C2H	1.73E+15	-1.0	37576.0
598.	C4H4+CH3=>IC4H3+CH4	1.66E+01	3.7	9499.0
599.	IC4H3+CH4=>C4H4+CH3	4.28E+01	3.3	20211.0
600.	C4H4+NC4H5=>IC4H3+C4H6	4.00E+11	0.0	5000.0
601.	IC4H3+C4H6=>C4H4+NC4H5	4.71E+10	0.1	21133.0
602.	2C2H2=>IC4H3+H	6.31E+13	0.0	41600.0
603.	IC4H3+H=>2C2H2	1.16E+17	-1.5	-12744.0
604.	IC4H3+O2=>CH2CO+HCCO	1.00E+12	0.0	0.0
605.	CH2CO+HCCO=>IC4H3+O2	2.90E+09	1.1	80528.0
606.	IC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
607.	C4H2+H2O=>IC4H3+OH	3.52E+13	0.8	66093.0
608.	IC4H3+O=>CH2CO+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
609.	CH2CO+C2H=>IC4H3+O	1.70E+09	1.7	48359.0
610.	IC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
611.	C4H2+H2=>IC4H3+H	3.64E+12	1.0	50596.0
612.	IC4H3+CH2=>AC3H4+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
613.	AC3H4+C2H=>IC4H3+CH2	6.63E+14	0.5	24847.0
614.	NC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
615.	C4H2+H2O=>NC4H3+OH	1.22E+13	0.6	84429.0
616.	NC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
617.	C4H2+H2=>NC4H3+H	1.27E+12	0.8	68932.0
618.	NC4H3+H=>IC4H3+H	1.00E+14	0.0	0.0
619.	IC4H3+H=>NC4H3+H	3.48E+13	-0.2	18336.0

620.	C2H2+C2H=>C4H2+H	1.82E+14	0.0	467.0
621.	C4H2+H=>C2H2+C2H	3.84E+20	-1.4	25465.0
622.	C4H2+O=>C3H2+CO	1.20E+12	0.0	0.0
623.	C3H2+CO=>C4H2+O	2.43E+08	0.9	90978.0
624.	C3H3+AC3H4=>C6H6+H	1.40E+12	0.0	12800.0
625.	C6H6+H=>C3H3+AC3H4	1.02E+23	-1.4	71909.0
626.	C3H3+PC3H4=>C6H6+H	1.40E+12	0.0	12800.0
627.	C6H6+H=>C3H3+PC3H4	4.52E+23	-1.5	70750.0
628.	2C3H3=>C6H6	3.00E+11	0.0	0.0
629.	C6H6=>2C3H3	4.11E+25	-1.6	149552.0
630.	C4H4+C2H3=>C6H6+H	1.90E+12	0.0	3510.0
631.	C6H6+H=>C4H4+C2H3	4.42E+25	-2.0	74806.0
632.	NC4H5+C2H2=>C6H6+H	2.80E+03	2.9	1400.0
633.	C6H6+H=>NC4H5+C2H2	3.63E+11	2.5	71220.0
634.	NC4H3+C2H3=>C6H6	2.87E+14	0.0	817.0
635.	C6H6=>NC4H3+C2H3	3.17E+29	-1.9	185226.0
636.	C6H6=>C4H4+C2H2	9.00E+15	0.0	107429.0
637.	C4H4+C2H2=>C6H6	3.30E+03	1.7	1361.0
638.	2C3H3=>C6H5+H	1.00E+13	0.0	0.0
639.	C6H5+H=>2C3H3	9.21E+22	-1.2	36840.0
640.	NC4H3+C2H2=>C6H5	2.80E+03	2.9	1400.0
641.	C6H5=>NC4H3+C2H2	5.82E+13	1.6	108051.0
642.	C5H5+OH=>C5H4OH+H	3.00E+14	0.0	0.0
643.	C5H4OH+H=>C5H5+OH	4.10E+19	-1.1	9150.0
644.	C5H5+OH=>C4H6+CO	1.50E+14	0.0	0.0
645.	C4H6+CO=>C5H5+OH	1.37E+11	0.6	71878.0
646.	C5H4O+H=>NC4H5+CO	1.71E+13	0.0	0.0
647.	NC4H5+CO=>C5H4O+H	1.82E+04	1.0	-10196.0
648.	C5H5+O=>C5H4O+H	5.00E+14	0.0	0.0
649.	C5H4O+H=>C5H5+O	6.16E+18	-0.6	72983.0
650.	C5H5+O=>NC4H5+CO	2.00E+14	0.0	0.0
651.	NC4H5+CO=>C5H5+O	2.62E+09	0.5	62787.0
652.	C5H4OH=>C5H4O+H	2.10E+13	0.0	48000.0
653.	C5H4O+H=>C5H4OH	8.20E+12	0.3	10014.0
654.	C5H4O=>CO+C4H4	1.00E+12	0.0	53000.0
655.	C6H5+H=>C6H6	2.20E+14	0.0	0.0
656.	C6H6=>C6H5+H	1.37E+18	-0.3	112531.0
657.	C6H6+O2=>C6H5+HO2	6.30E+13	0.0	60000.0
658.	C6H5+HO2=>C6H6+O2	2.98E+10	0.2	-2971.0
659.	C6H6+OH=>C6H5+H2O	2.11E+13	0.0	4570.0
660.	C6H5+H2O=>C6H6+OH	2.05E+10	0.4	11144.0
661.	C6H6+H=>C6H5+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
662.	C6H5+H2=>C6H6+H	1.51E+10	0.6	7077.0
663.	C6H6+O=>C6H5O+H	3.56E+01	3.8	940.0
664.	C6H5O+H=>C6H6+O	1.32E+04	2.8	17617.0
665.	C6H6+CH3=>C6H5+CH4	2.00E+12	0.0	15000.0
666.	C6H5+CH4=>C6H6+CH3	1.13E+11	0.2	7959.0
667.	C6H6+C2H5=>C6H5+C2H6	2.00E+12	0.0	15000.0
668.	C6H5+C2H6=>C6H6+C2H5	4.68E+11	0.0	3053.0
669.	C6H6+C2H3=>C6H5+C2H4	2.00E+12	0.0	15000.0
670.	C6H5+C2H4=>C6H6+C2H3	1.93E+12	-0.2	14311.0
671.	C6H6+AC3H5=>C6H5+C3H6	2.00E+12	0.0	15000.0
672.	C6H5+C3H6=>C6H6+AC3H5	3.16E+08	0.9	-11871.0
673.	C6H6+NC4H5=>C6H5+C4H6	2.00E+12	0.0	15000.0
674.	C6H5+C4H6=>C6H6+NC4H5	5.14E+09	0.7	13379.0
675.	C6H5+O2=>C6H5O+O	2.09E+12	0.0	7470.0
676.	C6H5O+O=>C6H5+O2	4.14E+16	-1.1	17576.0
677.	C6H5+HO2=>C6H5O+OH	5.00E+13	0.0	1000.0
678.	C6H5O+OH=>C6H5+HO2	7.75E+16	-0.7	63366.0
679.	C6H5+OH=>C6H5O+H	5.00E+13	0.0	0.0
680.	C6H5O+H=>C6H5+OH	5.00E+20	-1.5	27388.0
681.	C6H5+C2H4=>STYREN+H	1.43E+08	1.2	3540.0
682.	STYREN+H=>C6H5+C2H4	2.84E+14	0.0	8684.0
683.	C6H5O=>C5H5+CO	5.00E+15	0.0	63999.0
684.	C5H5+CO=>C6H5O	1.05E+05	2.3	35686.0
685.	TOLUEN=>C6H5+CH3	1.40E+16	0.0	99799.0
686.	C6H5+CH3=>TOLUEN	4.88E+07	1.3	-4178.0
687.	TOLUEN=>PHCH2+H	3.00E+15	0.0	88193.0
688.	PHCH2+H=>TOLUEN	4.31E+14	-0.3	-2545.0
689.	TOLUEN+O2=>PHCH2+HO2	3.00E+14	0.0	43062.0
690.	PHCH2+HO2=>TOLUEN+O2	1.27E+14	-0.4	1884.0
691.	TOLUEN+OH=>PHCH2+H2O	1.00E+13	0.0	2180.0
692.	PHCH2+H2O=>TOLUEN+OH	8.71E+12	-0.2	30547.0
693.	TOLUEN+O=>PHCH2+OH	6.30E+11	0.0	0.0
694.	PHCH2+OH=>TOLUEN+O	2.09E+10	-0.1	11081.0
695.	TOLUEN+H=>PHCH2+H2	1.26E+14	0.0	8364.0

696.	PHCH2+H2=>TOLUEN+H	6.83E+12	0.0	21234.0
697.	TOLUEN+H=>C6H6+CH3	2.40E+13	0.0	5123.0
698.	C6H6+CH3=>TOLUEN+H	5.22E+08	1.0	13676.0
699.	TOLUEN+CH3=>PHCH2+CH4	8.88E+10	0.0	8754.0
700.	PHCH2+CH4=>TOLUEN+CH3	4.49E+12	-0.4	23505.0
701.	TOLUEN+C2H5=>PHCH2+C2H6	1.01E+11	0.0	9514.0
702.	PHCH2+C2H6=>TOLUEN+C2H5	2.12E+13	-0.6	19359.0
703.	TOLUEN+C6H5=>PHCH2+C6H6	2.10E+12	0.0	4400.0
704.	PHCH2+C6H6=>TOLUEN+C6H5	1.88E+15	-0.6	26193.0
705.	TOLUEN+NC4H5=>PHCH2+C4H6	4.00E+12	0.0	7500.0
706.	PHCH2+C4H6=>TOLUEN+NC4H5	9.22E+12	0.1	27672.0
707.	TOLUEN+C2H3=>PHCH2+C2H4	4.00E+12	0.0	7500.0
708.	PHCH2+C2H4=>TOLUEN+C2H3	3.45E+15	-0.8	28604.0
709.	NC4H5+AC3H4=>TOLUEN+H	2.00E+11	0.0	3700.0
710.	TOLUEN+H=>NC4H5+AC3H4	1.61E+18	-0.2	72252.0
711.	NC4H5+PC3H4=>TOLUEN+H	6.32E+11	0.0	3700.0
712.	TOLUEN+H=>NC4H5+PC3H4	2.27E+19	-0.3	71093.0
713.	PHCH2=>C4H4+C3H3	2.00E+14	0.0	83599.0
714.	C4H4+C3H3=>PHCH2	1.03E+01	2.0	-20724.0
715.	PHCH2=>C5H5+C2H2	6.03E+13	0.0	69999.0
716.	C5H5+C2H2=>PHCH2	1.67E+05	1.5	1056.0
717.	PHCH2+O2=>PHHCO+OH	6.31E+12	0.0	43000.0
718.	PHHCO+OH=>PHCH2+O2	2.46E+10	0.7	92260.0
719.	PHCH2+OH=>PHCH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
720.	PHCH2OH=>PHCH2+OH	1.41E+18	-0.6	84716.0
721.	PHCH2+O=>PHHCO+H	1.58E+13	0.0	0.0
722.	PHHCO+H=>PHCH2+O	3.11E+13	0.3	66542.0
723.	PHCH2+O=>C6H5+CH2O	1.00E+13	0.0	0.0
724.	C6H5+CH2O=>PHCH2+O	3.83E+07	1.3	57322.0
725.	PHCH2+C3H3=>TOLUEN+C3H2	1.00E+12	0.0	0.0
726.	TOLUEN+C3H2=>PHCH2+C3H3	1.26E+12	0.5	15309.0
727.	PHCH2OH+O2=>PHHCO+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
728.	PHCH2OH+OH=>PHHCO+H2O+H	8.43E+12	0.0	2583.0
729.	PHCH2OH+H=>C6H6+CH2OH	1.20E+13	0.0	5148.0
730.	C6H6+CH2OH=>PHCH2OH+H	5.27E+07	1.0	14627.0
731.	PHCH2OH+PHCH2=>PHHCO+TOLUEN+H	2.11E+11	0.0	9500.0
732.	PHCH2OH+C6H5=>PHHCO+C6H6+H	1.40E+12	0.0	4400.0
733.	PHHCO=>PHCO+H	3.98E+15	0.0	83700.0
734.	PHCO+H=>PHHCO	6.88E+12	0.3	-3725.0
735.	PHHCO+O2=>PHCO+HO2	1.02E+13	0.0	39000.0
736.	PHCO+HO2=>PHHCO+O2	5.21E+10	0.2	1134.0
737.	PHHCO+OH=>PHCO+H2O	1.71E+09	1.2	-447.0
738.	PHCO+H2O=>PHHCO+OH	1.79E+07	1.6	31232.0
739.	PHHCO+O=>PHCO+OH	9.04E+12	0.0	3080.0
740.	PHCO+OH=>PHHCO+O	3.61E+09	0.5	17473.0
741.	PHHCO+H=>PHCO+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
742.	PHCO+H2=>PHHCO+H	3.26E+10	0.6	21110.0
743.	PHHCO+H=>C6H6+HCO	1.20E+13	0.0	5148.0
744.	C6H6+HCO=>PHHCO+H	2.93E+08	1.1	17760.0
745.	PHHCO+CH3=>PHCO+CH4	2.77E+03	2.8	5773.0
746.	PHCO+CH4=>PHHCO+CH3	1.68E+03	3.0	23836.0
747.	PHHCO+C6H5=>PHCO+C6H6	7.01E+11	0.0	4400.0
748.	PHCO+C6H6=>PHHCO+C6H5	7.57E+12	0.0	29505.0
749.	PHCO=>C6H5+CO	3.98E+14	0.0	29401.0
750.	C6H5+CO=>PHCO	8.82E+07	1.4	1418.0
751.	PHCO+O2=>C6H5O+CO2	3.00E+10	0.0	2870.0
752.	C6H5O+CO2=>PHCO+O2	1.87E+14	-0.7	112932.0
753.	PHCO+HO2=>C6H5+CO2+OH	2.00E+13	0.0	0.0
754.	APHC2H4=>STYREN+H	3.16E+13	0.0	50670.0
755.	STYREN+H=>APHC2H4	1.11E+12	0.3	18261.0
756.	APHC2H4=>C6H5+C2H4	1.00E+14	0.0	35000.0
757.	C6H5+C2H4=>APHC2H4	1.77E+06	1.6	-2553.0
758.	STYREN=>C6H6+C2H2	1.60E+11	0.0	58438.0
759.	C6H6+C2H2=>STYREN	7.13E+05	1.2	19210.0
760.	NC4H5+C4H4=>STYREN+H	3.16E+11	0.0	3700.0
761.	STYREN+H=>NC4H5+C4H4	3.67E+19	-0.4	72314.0
762.	2C4H4=>STYREN	1.48E+14	0.0	38003.0
763.	STYREN=>2C4H4	3.62E+26	-1.7	142864.0
764.	PHC3H7=>APHC3H6+H	8.00E+15	0.0	100209.0
765.	APHC3H6+H=>PHC3H7	3.75E+12	0.4	-698.0
766.	PHC3H7+H=>APHC3H6+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
767.	APHC3H6+H2=>PHC3H7+H	2.35E+02	3.2	9456.0
768.	PHC3H7+O=>APHC3H6+OH	1.93E+05	2.7	3716.0
769.	APHC3H6+OH=>PHC3H7+O	2.09E+01	3.3	4628.0
770.	PHC3H7+OH=>APHC3H6+H2O	3.16E+07	1.8	934.0
771.	APHC3H6+H2O=>PHC3H7+OH	8.98E+04	2.3	19131.0

772.	PHC3H7+O2=>APHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	50600.0
773.	APHC3H6+HO2=>PHC3H7+O2	5.54E+10	0.3	-748.0
774.	PHC3H7+CH3=>APHC3H6+CH4	5.00E+12	0.0	11710.0
775.	APHC3H6+CH4=>PHC3H7+CH3	8.24E+11	0.3	16292.0
776.	PHC3H7+C2H3=>APHC3H6+C2H4	6.00E+02	3.3	10502.0
777.	APHC3H6+C2H4=>PHC3H7+C2H3	1.69E+03	3.2	21436.0
778.	PHC3H7+C2H5=>APHC3H6+C2H6	3.16E+11	0.0	12300.0
779.	APHC3H6+C2H6=>PHC3H7+C2H5	2.17E+11	0.1	11976.0
780.	PHC3H7+AC3H5=>APHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	20500.0
781.	APHC3H6+C3H6=>PHC3H7+AC3H5	3.67E+08	1.0	5252.0
782.	PHC3H7+C6H5=>APHC3H6+C6H6	7.94E+11	0.0	20500.0
783.	APHC3H6+C6H6=>PHC3H7+C6H5	2.32E+12	0.1	32123.0
784.	PHC3H7+PHCH2=>APHC3H6+TOLUEN	7.94E+11	0.0	20500.0
785.	APHC3H6+TOLUEN=>PHC3H7+PHCH2	2.59E+09	0.7	10330.0
786.	PHC3H7+CH3O=>APHC3H6+CH3OH	3.18E+11	0.0	7050.0
787.	APHC3H6+CH3OH=>PHC3H7+CH3O	8.68E+08	0.4	10067.0
788.	APHC3H6=>PHCH2+C2H4	1.00E+14	0.0	13000.0
789.	PHCH2+C2H4=>APHC3H6	7.58E+07	1.3	-125.0
790.	PHC3H7=>CPHC3H6+H	8.00E+15	0.0	86209.0
791.	CPHC3H6+H=>PHC3H7	4.21E+12	0.5	287.0
792.	PHC3H7+H=>CPHC3H6+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
793.	CPHC3H6+H2=>PHC3H7+H	2.01E+00	3.7	19616.0
794.	PHC3H7+O=>CPHC3H6+OH	4.77E+04	2.7	1106.0
795.	CPHC3H6+OH=>PHC3H7+O	5.79E+00	3.5	17003.0
796.	PHC3H7+OH=>CPHC3H6+H2O	7.08E+06	1.9	-1159.0
797.	CPHC3H6+H2O=>PHC3H7+OH	2.26E+04	2.6	32023.0
798.	PHC3H7+O2=>CPHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	35800.0
799.	CPHC3H6+HO2=>PHC3H7+O2	6.21E+10	0.4	-563.0
800.	PHC3H7+CH3=>CPHC3H6+CH4	6.00E+11	0.0	10120.0
801.	CPHC3H6+CH4=>PHC3H7+CH3	1.11E+11	0.4	29687.0
802.	PHC3H7+C2H3=>CPHC3H6+C2H4	1.00E+03	3.1	8829.0
803.	CPHC3H6+C2H4=>PHC3H7+C2H3	3.16E+03	3.2	34748.0
804.	PHC3H7+C2H5=>CPHC3H6+C2H6	5.01E+10	0.0	10400.0
805.	CPHC3H6+C2H6=>PHC3H7+C2H5	3.85E+10	0.2	25061.0
806.	PHC3H7+AC3H5=>CPHC3H6+C3H6	7.94E+11	0.0	16200.0
807.	CPHC3H6+C3H6=>PHC3H7+AC3H5	4.12E+08	1.1	15937.0
808.	PHC3H7+C6H5=>CPHC3H6+C6H6	7.94E+11	0.0	16200.0
809.	CPHC3H6+C6H6=>PHC3H7+C6H5	2.61E+12	0.2	42808.0
810.	PHC3H7+PHCH2=>CPHC3H6+TOLUEN	7.94E+11	0.0	16200.0
811.	CPHC3H6+TOLUEN=>PHC3H7+PHCH2	2.91E+09	0.8	21015.0
812.	PHC3H7+CH3O=>CPHC3H6+CH3OH	7.20E+10	0.0	4470.0
813.	CPHC3H6+CH3OH=>PHC3H7+CH3O	2.21E+08	0.5	22472.0
814.	CPHC3H6=>STYREN+CH3	1.00E+14	0.0	34850.0
815.	STYREN+CH3=>CPHC3H6	3.26E+06	1.5	-1355.0
816.	CPHC3H6+O=>PHHCO+C2H5	1.60E+13	0.0	0.0
817.	PHHCO+C2H5=>CPHC3H6+O	1.72E+08	1.2	75131.0
818.	CPHC3H6+OH=>PHHCO+C2H6	1.60E+13	0.0	0.0
819.	PHHCO+C2H6=>CPHC3H6+OH	1.09E+12	0.6	73895.0
820.	CPHC3H6+HO2=>PHHCO+C2H5+OH	5.00E+12	0.0	0.0
821.	PHC3H7+H=>NC3H7+C6H6	2.40E+13	0.0	5123.0
822.	NC3H7+C6H6=>PHC3H7+H	1.50E+07	1.3	14926.0
823.	PHC3H7=>C6H5+NC3H7	5.00E+16	0.0	86499.0
824.	C6H5+NC3H7=>PHC3H7	5.01E+06	1.6	-16228.0
825.	PHC3H7=>PHCH2+C2H5	5.00E+16	0.0	74499.0
826.	PHCH2+C2H5=>PHC3H7	1.44E+08	1.4	-2834.0
827.	PHC3H7=>APHC2H4+CH3	5.00E+16	0.0	77499.0
828.	APHC2H4+CH3=>PHC3H7	2.44E+07	1.7	-12219.0
829.	AC5H11=>C2H4+NC3H7	4.50E+13	0.0	28700.0
830.	C2H4+NC3H7=>AC5H11	9.79E+04	2.0	5388.0
831.	AC5H11+O=>CH2O+PC4H9	5.00E+14	0.0	0.0
832.	CH2O+PC4H9=>AC5H11+O	4.14E+10	1.1	82832.0
833.	AC6H13=>BC6H13	2.00E+11	0.0	11100.0
834.	BC6H13=>AC6H13	3.47E+10	0.1	12180.0
835.	AC6H13+O=>AC5H11+CH2O	1.61E+13	0.0	0.0
836.	AC5H11+CH2O=>AC6H13+O	6.79E+08	1.2	80594.0
837.	BC6H13=>C3H6+NC3H7	5.00E+13	0.0	28700.0
838.	C3H6+NC3H7=>BC6H13	1.14E+05	2.0	5853.0
839.	AC6H13=>C2H4+PC4H9	1.00E+13	0.0	28700.0
840.	C2H4+PC4H9=>AC6H13	7.23E+04	1.9	5393.0
841.	AC7H15=>C2H4+AC5H11	2.00E+13	0.0	28700.0
842.	C2H4+AC5H11=>AC7H15	6.80E+04	2.0	5243.0
843.	AC8H17=>AC6H13+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
844.	AC6H13+C2H4=>AC8H17	2.44E-01	3.0	1977.0
845.	NC10H22=>AC8H17+C2H5	1.00E+17	0.0	79899.0
846.	AC8H17+C2H5=>NC10H22	2.23E+10	1.4	-4112.0
847.	NC10H22=>AC7H15+NC3H7	1.00E+17	0.0	84299.0

848.	AC7H15+NC3H7=>NC10H22	3.08E+04	2.5	-5100.0
849.	NC10H22=>AC6H13+PC4H9	1.00E+17	0.0	82199.0
850.	AC6H13+PC4H9=>NC10H22	9.46E+04	2.3	-5107.0
851.	NC10H22=>2AC5H11	5.00E+16	0.0	84399.0
852.	2AC5H11=>NC10H22	2.41E+04	2.4	-5146.0
853.	NC10H22=>AC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
854.	AC10H21+H=>NC10H22	8.63E+11	0.3	-664.0
855.	NC10H22=>CC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
856.	CC10H21+H=>NC10H22	1.13E+11	0.6	187.0
857.	NC10H22=>DC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
858.	DC10H21+H=>NC10H22	1.13E+11	0.6	187.0
859.	NC10H22=>EC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
860.	EC10H21+H=>NC10H22	1.13E+11	0.6	187.0
861.	NC10H22+O2=>AC10H21+HO2	4.20E+13	0.0	51800.0
862.	AC10H21+HO2=>NC10H22+O2	1.07E+11	0.2	696.0
863.	NC10H22+O2=>CC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
864.	CC10H21+HO2=>NC10H22+O2	4.67E+09	0.4	-2252.0
865.	NC10H22+O2=>DC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
866.	DC10H21+HO2=>NC10H22+O2	4.67E+09	0.4	-2252.0
867.	NC10H22+O2=>EC10H21+HO2	1.40E+13	0.0	48000.0
868.	EC10H21+HO2=>NC10H22+O2	4.67E+09	0.4	-2252.0
869.	NC10H22+OH=>AC10H21+H2O	1.41E+07	1.8	974.0
870.	AC10H21+H2O=>NC10H22+OH	7.39E+04	2.2	19415.0
871.	NC10H22+OH=>CC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
872.	CC10H21+H2O=>NC10H22+OH	1.55E+03	2.7	17902.0
873.	NC10H22+OH=>DC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
874.	DC10H21+H2O=>NC10H22+OH	1.55E+03	2.7	17902.0
875.	NC10H22+OH=>EC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
876.	EC10H21+H2O=>NC10H22+OH	1.55E+03	2.7	17902.0
877.	NC10H22+O=>AC10H21+OH	4.36E+06	2.4	5500.0
878.	AC10H21+OH=>NC10H22+O	8.68E+02	2.9	6656.0
879.	NC10H22+O=>CC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
880.	CC10H21+OH=>NC10H22+O	2.94E-02	4.1	3660.0
881.	NC10H22+O=>DC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
882.	DC10H21+OH=>NC10H22+O	2.94E-02	4.1	3660.0
883.	NC10H22+O=>EC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
884.	EC10H21+OH=>NC10H22+O	2.94E-02	4.1	3660.0
885.	NC10H22+H=>AC10H21+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
886.	AC10H21+H2=>NC10H22+H	1.83E+04	2.6	10645.0
887.	NC10H22+H=>CC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
888.	CC10H21+H2=>NC10H22+H	7.68E+02	2.8	8796.0
889.	NC10H22+H=>DC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
890.	DC10H21+H2=>NC10H22+H	7.68E+02	2.8	8796.0
891.	NC10H22+H=>EC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
892.	EC10H21+H2=>NC10H22+H	7.68E+02	2.8	8796.0
893.	NC10H22+CH3=>AC10H21+CH4	1.30E+12	0.0	11600.0
894.	AC10H21+CH4=>NC10H22+CH3	3.94E+11	0.2	16426.0
895.	NC10H22+CH3=>CC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
896.	CC10H21+CH4=>NC10H22+CH3	3.18E+10	0.4	15177.0
897.	NC10H22+CH3=>DC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
898.	DC10H21+CH4=>NC10H22+CH3	3.18E+10	0.4	15177.0
899.	NC10H22+CH3=>EC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
900.	EC10H21+CH4=>NC10H22+CH3	3.18E+10	0.4	15177.0
901.	AC10H21=>AC8H17+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
902.	AC8H17+C2H4=>AC10H21	3.00E+08	1.5	8494.0
903.	AC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
904.	DC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	18951.0
905.	AC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
906.	EC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	11951.0
907.	DC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
908.	CC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
909.	EC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
910.	CC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
911.	CYC9H18+O2=>CC9H17C+HO2	4.00E+13	0.0	49510.0
912.	CC9H17C+HO2=>C9H18+O2	7.61E+09	0.6	-976.0
913.	CYC9H18+O2=>EC9H17C+HO2	8.00E+13	0.0	49910.0
914.	EC9H17C+HO2=>C9H18+O2	2.06E+11	0.2	-502.0
915.	CYC9H18+O2=>FC9H17C+HO2	8.00E+13	0.0	49910.0
916.	FC9H17C+HO2=>C9H18+O2	2.06E+11	0.2	-502.0
917.	CYC9H18+OH=>CC9H17C+H2O	1.50E+09	1.0	260.0
918.	CC9H17C+H2O=>C9H18+OH	5.86E+05	1.8	19319.0
919.	CYC9H18+OH=>EC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
920.	EC9H17C+H2O=>C9H18+OH	2.91E+10	0.4	19923.0
921.	CYC9H18+OH=>FC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
922.	FC9H17C+H2O=>C9H18+OH	2.91E+10	0.4	19923.0
923.	CYC9H18+O=>CC9H17C+OH	4.77E+04	2.7	2106.0

924.	CC9H17C+OH=>C9H18+O	7.09E-01	3.6	3880.0
925.	C9H18+O=>EC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
926.	EC9H17C+OH=>C9H18+O	1.75E+02	3.1	4410.0
927.	C9H18+O=>FC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
928.	FC9H17C+OH=>C9H18+O	1.75E+02	3.1	4410.0
929.	C9H18+H=>CC9H17C+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
930.	CC9H17C+H2=>C9H18+H	3.16E+01	3.4	8034.0
931.	C9H18+H=>EC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
932.	EC9H17C+H2=>C9H18+H	6.59E+10	0.6	12009.0
933.	C9H18+H=>FC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
934.	FC9H17C+H2=>C9H18+H	6.59E+10	0.6	12009.0
935.	C9H18+CH3=>CC9H17C+CH4	1.51E+00	3.5	5481.0
936.	CC9H17C+CH4=>C9H18+CH3	3.42E-02	4.0	10925.0
937.	C9H18+CH3=>EC9H17C+CH4	4.50E+11	0.0	9540.0
938.	EC9H17C+CH4=>C9H18+CH3	1.38E+11	0.2	15057.0
939.	C9H18+CH3=>FC9H17C+CH4	4.50E+11	0.0	9540.0
940.	FC9H17C+CH4=>C9H18+CH3	1.38E+11	0.2	15057.0
941.	C9H18+C2H3=>CC9H17C+C2H4	1.51E+00	3.5	5481.0
942.	CC9H17C+C2H4=>C9H18+C2H3	5.85E-01	3.7	17278.0
943.	C9H18+C2H3=>EC9H17C+C2H4	4.50E+11	0.0	9540.0
944.	EC9H17C+C2H4=>C9H18+C2H3	2.36E+12	-0.2	21410.0
945.	C9H18+C2H3=>FC9H17C+C2H4	4.50E+11	0.0	9540.0
946.	FC9H17C+C2H4=>C9H18+C2H3	2.36E+12	-0.2	21410.0
947.	C9H18+C2H5=>CC9H17C+C2H6	1.51E+00	3.5	5481.0
948.	CC9H17C+C2H6=>C9H18+C2H5	1.42E-01	3.8	6019.0
949.	C9H18+C2H5=>EC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
950.	EC9H17C+C2H6=>C9H18+C2H5	5.75E+11	0.0	10151.0
951.	C9H18+C2H5=>FC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
952.	FC9H17C+C2H6=>C9H18+C2H5	5.75E+11	0.0	10151.0
953.	C9H18+AC3H5=>CC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
954.	CC9H17C+C3H6=>C9H18+AC3H5	9.60E-05	4.7	-8904.0
955.	C9H18+AC3H5=>EC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
956.	EC9H17C+C3H6=>C9H18+AC3H5	3.88E+08	0.9	-4772.0
957.	C9H18+AC3H5=>FC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
958.	FC9H17C+C3H6=>C9H18+AC3H5	3.88E+08	0.9	-4772.0
959.	C9H18+HCO=>CC9H17C+CH2O	1.51E+00	3.5	5481.0
960.	CC9H17C+CH2O=>C9H18+HCO	4.85E-02	3.9	-3866.0
961.	C9H18+HCO=>EC9H17C+CH2O	4.50E+11	0.0	9540.0
962.	EC9H17C+CH2O=>C9H18+HCO	1.96E+11	0.0	267.0
963.	C9H18+HCO=>FC9H17C+CH2O	4.50E+11	0.0	9540.0
964.	FC9H17C+CH2O=>C9H18+HCO	1.96E+11	0.0	267.0
965.	C9H18+CH3O=>CC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
966.	CC9H17C+CH3OH=>C9H18+CH3O	1.62E+08	0.7	8353.0
967.	C9H18+CH3O=>EC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
968.	EC9H17C+CH3OH=>C9H18+CH3O	2.20E+09	0.3	8426.0
969.	C9H18+CH3O=>FC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
970.	FC9H17C+CH3OH=>C9H18+CH3O	2.20E+09	0.3	8426.0
971.	C9H18=>3C2H4+C3H6	1.30E+17	0.0	83999.0
972.	FC9H17C=>CC9H17C	4.00E+11	0.0	18100.0
973.	CC9H17C=>FC9H17C	2.95E+10	0.4	18027.0
974.	EC9H17C=>C4H6+C2H4+NC3H7	2.00E+13	0.0	44000.0
975.	NO+H+M=>HNO+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	2.70E+15	0.0	-600.0
976.	HNO+M=>NO+H+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	1.05E+17	-0.2	49397.0
977.	NO+H+N2=>HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
978.	HNO+N2=>NO+H+N2	2.72E+21	-1.7	49996.0
979.	NO+O+M=>NO2+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	7.50E+19	-1.4	0.0
980.	NO2+M=>NO+O+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	1.51E+24	-2.1	73627.0
981.	NO+OH+M=>HONO+M H2O/5.0/	5.10E+23	-2.5	-68.0
982.	HONO+M=>NO+OH+M H2O/5.0/	2.45E+31	-4.0	50372.0
983.	NO+HO2=>NO2+OH	2.10E+12	0.0	-479.0
984.	NO2+OH=>NO+HO2	2.85E+13	-0.1	6306.0
985.	NO+HCO=>HNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
986.	HNO+CO=>NO+HCO	2.74E+13	0.1	34507.0
987.	NO+C2H3=>C2H2+HNO	1.00E+12	0.0	1000.0
988.	C2H2+HNO=>NO+C2H3	3.31E+14	-0.5	16225.0
989.	NO2+H=>NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
990.	NO+OH=>NO2+H	9.60E+08	0.9	28193.0
991.	NO2+O=>NO+O2	3.90E+12	0.0	-238.0
992.	NO+O2=>NO2+O	2.25E+10	0.5	45236.0
993.	2NO2=>2NO+O2	1.60E+12	0.0	26123.0

994.	2NO+O2=>2NO2	4.57E+05	1.1	-2029.0
995.	NO2+HCO=>CO+HONO	1.20E+23	-3.3	2355.0
996.	CO+HONO=>NO2+HCO	6.47E+24	-3.6	65498.0
997.	NO2+HCO=>H+CO2+NO	8.40E+15	-0.8	1930.0
998.	H+CO2+NO=>NO2+HCO	5.79E+16	-0.8	40752.0
999.	NO2+CO=>CO2+NO	9.00E+13	0.0	33779.0
1000.	CO2+NO=>NO2+CO	6.32E+15	-0.4	88090.0
1001.	NO2+CH2O=>HCO+HONO	8.00E+02	2.8	13730.0
1002.	HCO+HONO=>NO2+CH2O	8.83E+02	2.4	1665.0
1003.	NO2+CH2=>CH2O+NO	5.90E+13	0.0	0.0
1004.	CH2O+NO=>NO2+CH2	2.26E+14	0.0	107077.0
1005.	NO2+CH=>HCO+NO	1.00E+14	0.0	0.0
1006.	HCO+NO=>NO2+CH	1.88E+12	0.4	117712.0
1007.	HNO+H=>H2+NO	4.50E+11	0.7	655.0
1008.	H2+NO=>HNO+H	4.37E+09	1.2	54266.0
1009.	HNO+O=>NO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
1010.	NO+OH=>HNO+O	5.94E+10	0.5	51823.0
1011.	HNO+OH=>NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
1012.	NO+H2O=>HNO+OH	5.62E+12	0.4	69108.0
1013.	HNO+O2=>HO2+NO	1.00E+13	0.0	25000.0
1014.	HO2+NO=>HNO+O2	7.60E+11	0.1	24563.0
1015.	HNO+NO2=>HONO+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1016.	HONO+NO=>HNO+NO2	8.49E+12	-0.4	30637.0
1017.	2HNO=>N2O+H2O	9.00E+08	0.0	3100.0
1018.	N2O+H2O=>2HNO	7.09E+10	-0.1	88784.0
<b>1019.</b>	<b>HNO+NH2=&gt;NH3+NO</b>	<b>3.63E+06</b>	<b>1.6</b>	<b>-1252.0</b>
<b>1020.</b>	<b>NH3+NO=&gt;HNO+NH2</b>	<b>2.63E+07</b>	<b>1.6</b>	<b>57707.0</b>
1021.	HNO+HCO=>CH2O+NO	6.00E+11	0.0	2000.0
1022.	CH2O+NO=>HNO+HCO	7.69E+12	0.0	42702.0
1023.	HONO+H=>H2+NO2	1.20E+13	0.0	7352.0
1024.	H2+NO2=>HONO+H	8.23E+09	0.9	32327.0
1025.	HONO+O=>OH+NO2	1.20E+13	0.0	5961.0
1026.	OH+NO2=>HONO+O	5.04E+09	0.9	29147.0
1027.	HONO+OH=>H2O+NO2	4.00E+12	0.0	0.0
1028.	H2O+NO2=>HONO+OH	4.41E+10	0.8	40471.0
<b>1029.</b>	<b>NH3+M=&gt;NH2+H+M</b>	<b>2.20E+16</b>	<b>0.0</b>	<b>93469.0</b>
	N2/1.0/			
<b>1030.</b>	<b>NH2+H+M=&gt;NH3+M</b>	<b>7.84E+13</b>	<b>0.3</b>	<b>-15486.0</b>
	N2/1.0/			
<b>1031.</b>	<b>NH3+H=&gt;NH2+H2</b>	<b>6.40E+05</b>	<b>2.4</b>	<b>10171.0</b>
<b>1032.</b>	<b>NH2+H2=&gt;NH3+H</b>	<b>8.60E+02</b>	<b>2.9</b>	<b>4824.0</b>
<b>1033.</b>	<b>NH3+O=&gt;NH2+OH</b>	<b>9.40E+06</b>	<b>1.9</b>	<b>6460.0</b>
<b>1034.</b>	<b>NH2+OH=&gt;NH3+O</b>	<b>7.73E+03</b>	<b>2.5</b>	<b>-676.0</b>
<b>1035.</b>	<b>NH3+OH=&gt;NH2+H2O</b>	<b>2.00E+06</b>	<b>2.0</b>	<b>566.0</b>
<b>1036.</b>	<b>NH2+H2O=&gt;NH3+OH</b>	<b>4.32E+04</b>	<b>2.4</b>	<b>10715.0</b>
1037.	NH2+H=>NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
1038.	NH+H2=>NH2+H	4.14E+12	0.2	15529.0
1039.	NH2+O=>HNO+H	6.60E+14	-0.5	0.0
1040.	HNO+H=>NH2+O	3.68E+17	-1.0	29637.0
1041.	NH2+O=>NH+OH	6.80E+12	0.0	0.0
1042.	NH+OH=>NH2+O	4.31E+11	0.2	10090.0
1043.	NH2+OH=>NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
1044.	NH+H2O=>NH2+OH	6.65E+06	2.1	28375.0
<b>1045.</b>	<b>NH2+HO2=&gt;NH3+O2</b>	<b>1.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>1046.</b>	<b>NH3+O2=&gt;NH2+HO2</b>	<b>9.51E+14</b>	<b>-0.2</b>	<b>59395.0</b>
1047.	NH2+NO=>NNH+OH	8.90E+12	-0.3	0.0
1048.	NNH+OH=>NH2+NO	2.70E+13	-0.6	-739.0
1049.	NH2+NO=>N2+H2O	2.90E+15	-1.0	0.0
1050.	N2+H2O=>NH2+NO	8.08E+15	-0.7	124628.0
1051.	NH2+NO2=>N2O+H2O	3.20E+18	-2.2	0.0
1052.	N2O+H2O=>NH2+NO2	2.70E+20	-2.4	91691.0
<b>1053.</b>	<b>NH2+HONO=&gt;NO2+NH3</b>	<b>7.10E+02</b>	<b>3.0</b>	<b>-4941.0</b>
<b>1054.</b>	<b>NO2+NH3=&gt;NH2+HONO</b>	<b>3.63E+02</b>	<b>3.4</b>	<b>25381.0</b>
1055.	NH2+N=>N2+2H	7.20E+13	0.0	0.0
1056.	N2+2H=>NH2+N	1.68E+15	-0.2	54497.0
1057.	NH+H=>N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
1058.	N+H2=>NH+H	5.07E+13	0.1	24185.0
1059.	NH+O=>NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
1060.	NO+H=>NH+O	4.81E+15	-0.3	71370.0
1061.	NH+OH=>HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
1062.	HNO+H=>NH+OH	1.76E+17	-0.7	19547.0
1063.	NH+OH=>N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
1064.	N+H2O=>NH+OH	1.36E+13	0.5	41682.0
1065.	NH+O2=>HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0
1066.	HNO+O=>NH+O2	8.03E+06	1.7	8766.0
1067.	NH+O2=>NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0

1068.	NO+OH=>NH+O2	1.35E+05	1.7	54188.0
1069.	NH+NO=>N2O+H	2.85E+14	-0.4	0.0
1070.	N2O+H=>NH+NO	1.27E+21	-1.6	36123.0
1071.	NH+NO=>N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0
1072.	N2+OH=>NH+NO	3.69E+13	0.0	97253.0
1073.	NH+NO2=>N2O+OH	1.00E+13	0.0	0.0
1074.	N2O+OH=>NH+NO2	5.08E+14	-0.3	64316.0
1075.	2NH=>N2+2H	2.50E+13	0.0	0.0
1076.	N2+2H=>2NH	9.50E+15	-0.3	66804.0
1077.	NH+N=>N2+H	3.00E+13	0.0	0.0
1078.	N2+H=>NH+N	2.54E+15	-0.1	146226.0
1079.	N+OH=>NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
1080.	NO+H=>N+OH	1.92E+15	-0.3	48974.0
1081.	N+O2=>NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
1082.	NO+O=>N+O2	6.42E+08	1.1	37972.0
1083.	N+NO=>N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
1084.	N2+O=>N+NO	5.35E+12	0.4	74856.0
1085.	N+CO2=>NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
1086.	NO+CO=>N+CO2	1.57E+06	0.9	26254.0
1087.	N+HCCO=>HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
1088.	HCN+CO=>N+HCCO	4.82E+11	0.9	149596.0
1089.	N+CH3=>H2CN+H	7.10E+13	0.0	0.0
1090.	H2CN+H=>N+CH3	1.06E+16	-0.6	37091.0
1091.	N+CH2=>HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0
1092.	HCN+H=>N+CH2	3.73E+17	-0.7	122057.0
1093.	N+H2CN=>N2+CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1094.	N2+CH2=>N+H2CN	5.17E+09	1.0	78416.0
1095.	N+CH=>CN+H	1.30E+13	0.0	0.0
1096.	CN+H=>N+CH	1.51E+14	0.0	98838.0
1097.	N+C2H3=>HCN+CH2	2.00E+13	0.0	0.0
1098.	HCN+CH2=>N+C2H3	7.26E+10	0.5	59225.0
1099.	NNH=>N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
1100.	N2+H=>NNH	1.51E+06	0.4	6262.0
1101.	NNH+H=>N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
1102.	N2+H2=>NNH+H	5.71E+12	0.7	109870.0
1103.	NNH+O=>N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
1104.	N2+OH=>NNH+O	2.80E+12	0.6	108081.0
1105.	NNH+O=>N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
1106.	N2O+H=>NNH+O	9.26E+18	-0.8	46952.0
1107.	NNH+O=>NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
1108.	NH+NO=>NNH+O	1.04E+12	0.4	10829.0
1109.	NNH+OH=>N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
1110.	N2+H2O=>NNH+OH	4.59E+13	0.5	125367.0
1111.	NNH+O2=>N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
1112.	N2+HO2=>NNH+O2	8.94E+13	0.3	55822.0
1113.	NNH+O2=>N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
1114.	N2+O2+H=>NNH+O2	7.57E+12	0.4	6262.0
1115.	NNH+NO=>N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
1116.	N2+HNO=>NNH+NO	2.94E+14	0.1	56259.0
1117.	<b>NNH+NH2=&gt;N2+NH3</b>	<b>5.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
1118.	<b>N2+NH3=&gt;NNH+NH2</b>	<b>2.13E+15</b>	<b>0.1</b>	<b>115217.0</b>
1119.	NNH+NH=>N2+NH2	5.00E+13	0.0	0.0
1120.	N2+NH2=>NNH+NH	2.76E+13	0.4	97991.0
1121.	N2O+M=>N2+O+M	4.00E+14	0.0	56100.0
1122.	N2+O+M=>N2O+M N2/1.699/ O2/1.399/ H2O/12.0/ CO/1.5/ CO2/3.0/	6.54E+08	1.1	15410.0
1123.	N2O+H=>N2+OH	2.36E-11	7.0	-441.0
1124.	N2+OH=>N2O+H	8.90E-18	8.4	60689.0
1125.	N2O+O=>2NO	6.60E+13	0.0	26630.0
1126.	2NO=>N2O+O	7.77E+08	0.9	61877.0
1127.	N2O+O=>N2+O2	1.00E+14	0.0	28000.0
1128.	N2+O2=>N2O+O	1.90E+10	1.0	106411.0
1129.	N2O+OH=>N2+HO2	1.30E-02	4.7	36561.0
1130.	N2+HO2=>N2O+OH	3.16E-05	5.3	62713.0
1131.	N2O+OH=>HNO+NO	1.20E-04	4.3	25081.0
1132.	HNO+NO=>N2O+OH	2.38E-07	4.8	8505.0
1133.	N2O+NO=>NO2+N2	5.30E+05	2.2	46281.0
1134.	NO2+N2=>N2O+NO	1.75E+04	2.7	79218.0
1135.	N2O+CO=>N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
1136.	N2+CO2=>N2O+CO	7.41E+11	0.1	107486.0
1137.	N2O+CH=>HCN+NO	1.90E+13	0.0	-511.0
1138.	HCN+NO=>N2O+CH	3.50E+11	0.4	107334.0
1139.	HCN+O=>NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
1140.	NCO+H=>HCN+O	1.41E+07	2.0	13218.0
1141.	HCN+O=>NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0



1142.	NH+CO=>HCN+O	1.59E+00	3.4	36861.0
1143.	HCN+O=>CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
1144.	CN+OH=>HCN+O	3.97E+05	2.4	6466.0
1145.	HCN+OH=>CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
1146.	CN+H2O=>HCN+OH	1.51E+04	2.5	4852.0
1147.	HCN+OH=>HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
1148.	HOCN+H=>HCN+OH	9.21E+06	2.1	5474.0
1149.	HCN+OH=>HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
1150.	HNCO+H=>HCN+OH	4.27E+01	3.1	19072.0
1151.	HCN+OH=>NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0
1152.	NH2+CO=>HCN+OH	5.61E-06	4.6	25791.0
1153.	HCN+SCH2=>CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0
1154.	CH3+CN=>HCN+SCH2	5.98E+12	0.2	-5493.0
1155.	CN+O=>CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
1156.	CO+N=>CN+O	2.47E+14	0.1	77011.0
1157.	CN+OH=>NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
1158.	NCO+H=>CN+OH	2.74E+20	-1.5	30972.0
1159.	CN+O2=>NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
1160.	NCO+O=>CN+O2	1.02E+17	-1.0	13301.0
1161.	CN+CO2=>NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0
1162.	NCO+CO=>CN+CO2	4.12E+06	2.0	31736.0
1163.	CN+NO2=>NCO+NO	5.30E+15	-0.8	344.0
1164.	NCO+NO=>CN+NO2	4.15E+17	-1.3	59508.0
1165.	CN+NO2=>CO+N2O	4.90E+14	-0.8	344.0
1166.	CO+N2O=>CN+NO2	7.72E+16	-1.1	119274.0
1167.	CN+NO2=>N2+CO2	3.70E+14	-0.8	344.0
1168.	N2+CO2=>CN+NO2	1.99E+06	2.1	200000.0
1169.	CN+H2=>HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
1170.	HCN+H=>CN+H2	1.25E+09	1.6	23182.0
1171.	CN+CH4=>CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0
1172.	CH3+HCN=>CN+CH4	2.77E+05	2.2	18626.0
1173.	CN+HNO=>HCN+NO	1.80E+13	0.0	0.0
1174.	HCN+NO=>CN+HNO	7.28E+14	-0.4	74556.0
1175.	CN+HONO=>HCN+NO2	1.20E+13	0.0	0.0
1176.	HCN+NO2=>CN+HONO	3.43E+13	0.0	45920.0
1177.	CN+CH2CO=>HCCO+HCN	2.00E+13	0.0	0.0
1178.	HCCO+HCN=>CN+CH2CO	2.28E+13	-0.3	17100.0
1179.	CN+C2H6=>C2H5+HCN	1.20E+05	2.8	-1788.0
1180.	C2H5+HCN=>CN+C2H6	1.29E+05	2.5	22181.0
1181.	CN+C2H4=>C2H3+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
1182.	C2H3+HCN=>CN+C2H4	1.54E+14	-0.4	12711.0
1183.	HNCO+M=>NH+CO+M N2/1.0/	1.10E+16	0.0	85999.0
1184.	NH+CO+M=>HNCO+M N2/1.0/	1.02E+09	1.4	-2011.0
1185.	HNCO+H=>NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
1186.	NH2+CO=>HNCO+H	7.41E+00	3.2	7519.0
1187.	HNCO+O=>HNO+CO	1.50E+08	1.6	44012.0
1188.	HNO+CO=>HNCO+O	2.82E+04	2.5	77368.0
1189.	HNCO+O=>NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0
1190.	NH+CO2=>HNCO+O	1.28E+07	1.8	48452.0
1191.	HNCO+O=>NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0
1192.	NCO+OH=>HNCO+O	1.04E+05	2.3	1591.0
1193.	HNCO+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
1194.	NCO+H2O=>HNCO+OH	7.92E+05	2.1	10014.0
1195.	HNCO+O2=>HNO+CO2	1.00E+12	0.0	35000.0
1196.	HNO+CO2=>HNCO+O2	2.29E+12	0.1	77193.0
<b>1197.</b>	<b>HNCO+NH2=&gt;NH3+NCO</b>	<b>5.00E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>6200.0</b>
<b>1198.</b>	<b>NH3+NCO=&gt;HNCO+NH2</b>	<b>2.86E+14</b>	<b>-0.3</b>	<b>3502.0</b>
1199.	HNCO+NH=>NH2+NCO	3.00E+13	0.0	23700.0
1200.	NH2+NCO=>HNCO+NH	2.23E+13	0.0	3776.0
1201.	HOCN+H=>HNCO+H	2.00E+07	2.0	2000.0
1202.	HNCO+H=>HOCN+H	2.74E+09	1.4	27098.0
1203.	HOCN+O=>NCO+OH	1.50E+04	2.6	4000.0
1204.	NCO+OH=>HOCN+O	9.67E+04	2.3	19264.0
1205.	HOCN+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
1206.	NCO+H2O=>HOCN+OH	1.08E+08	1.6	35112.0
1207.	NCO+NO=>N2+CO	8.40E+17	-1.7	763.0
1208.	N2O+CO=>NCO+NO	1.69E+18	-1.5	60529.0
1209.	NCO+NO=>N2+CO2	5.60E+17	-1.7	763.0
1210.	N2+CO2=>NCO+NO	2.61E+18	-1.4	147777.0
1211.	NCO+HO2=>HNCO+O2	2.00E+13	0.0	0.0
1212.	HNCO+O2=>NCO+HO2	3.32E+13	0.1	62094.0
1213.	NCO+M=>N+CO+M N2/1.0/	3.10E+16	-0.5	48000.0
1214.	N+CO+M=>NCO+M	6.29E+10	0.8	-7780.0

N2/1.0/					
1215.	NCO+H=>NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0	
1216.	NH+CO=>NCO+H	2.27E+07	1.4	23643.0	
1217.	NCO+O=>NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0	
1218.	NO+CO=>NCO+O	1.11E+09	1.2	95013.0	
1219.	NCO+OH=>NO+HCO	5.00E+12	0.0	15000.0	
1220.	NO+HCO=>NCO+OH	5.24E+09	0.6	23683.0	
1221.	NCO+O2=>NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0	
1222.	NO+CO2=>NCO+O2	5.77E+11	0.3	123850.0	
1223.	NCO+H2=>HNCO+H	7.60E+02	3.0	4000.0	
1224.	HNCO+H=>NCO+H2	9.88E+03	2.7	12045.0	
1225.	NCO+HCO=>HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0	
1226.	HNCO+CO=>NCO+HCO	1.73E+13	0.3	96164.0	
1227.	NCO+NO2=>CO+2NO	2.50E+11	0.0	-707.0	
1228.	CO+2NO=>NCO+NO2	2.94E+02	1.8	20679.0	
1229.	NCO+NO2=>CO2+N2O	3.00E+12	0.0	-707.0	
1230.	CO2+N2O=>NCO+NO2	4.24E+14	-0.1	113370.0	
1231.	NCO+HNO=>HNCO+NO	1.80E+13	0.0	0.0	
1232.	HNCO+NO=>NCO+HNO	2.27E+12	0.2	61657.0	
1233.	NCO+HONO=>HNCO+NO2	3.60E+12	0.0	0.0	
1234.	HNCO+NO2=>NCO+HONO	3.21E+10	0.6	33020.0	
1235.	NCO+N=>N2+CO	2.00E+13	0.0	0.0	
1236.	N2+CO=>NCO+N	7.68E+08	1.3	169869.0	
1237.	2NCO=>N2+2CO	1.80E+13	0.0	0.0	
1238.	N2+2CO=>2NCO	1.40E+03	2.6	114089.0	
1239.	NCO+CH4=>CH3+HNCO	9.80E+12	0.0	8120.0	
1240.	CH3+HNCO=>NCO+CH4	1.37E+11	0.1	14284.0	
1241.	NCO+CH2O=>HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0	
1242.	HNCO+HCO=>NCO+CH2O	5.91E+10	0.3	20955.0	
1243.	NCO+C2H6=>C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0	
1244.	C2H5+HNCO=>NCO+C2H6	5.03E-12	7.2	8160.0	
1245.	NCO+C2H2=>HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0	
1246.	HCCO+HCN=>NCO+C2H2	9.35E+08	0.5	12493.0	
1247.	CH3CN+H=>HCN+CH3	4.00E+07	2.0	2000.0	
1248.	HCN+CH3=>CH3CN+H	7.83E+01	3.2	5719.0	
1249.	CH3CN+O=>NCO+CH3	1.50E+04	2.6	4980.0	
1250.	NCO+CH3=>CH3CN+O	2.95E+01	3.2	16937.0	
1251.	CH3+HOCN=>CH3CN+OH	5.00E+12	0.0	2000.0	
1252.	CH3CN+OH=>CH3+HOCN	1.64E+16	-0.8	5307.0	
1253.	H2CN+M=>HCN+H+M	3.00E+14	0.0	22000.0	
N2/1.0/					
1254.	HCN+H+M=>H2CN+M	3.05E+13	0.2	-3176.0	
N2/1.0/					
1255.	N2+CH2=>HCN+NH	1.00E+13	0.0	73999.0	
1256.	HCN+NH=>N2+CH2	8.79E+14	-0.6	49830.0	
1257.	N2+CH=>HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0	
1258.	HCN+N=>N2+CH	3.57E+10	0.8	18465.0	
1259.	HCCO+NO=>HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0	
1260.	HCN+CO2=>HCCO+NO	1.87E+16	-0.1	126741.0	
1261.	C2H+NO=>CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0	
1262.	CN+HCO=>C2H+NO	4.48E+11	0.4	41010.0	
1263.	CH3+NO=>HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0	
1264.	HCN+H2O=>CH3+NO	2.74E-01	3.7	85996.0	
1265.	CH3+NO=>H2CN+OH	1.50E-01	3.5	3950.0	
1266.	H2CN+OH=>CH3+NO	4.44E-01	3.3	-7933.0	
1267.	SCH2+NO=>HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0	
1268.	HCN+OH=>SCH2+NO	1.13E+15	-0.4	82001.0	
1269.	SCH2+NO=>CH2+NO	1.00E+14	0.0	0.0	
1270.	CH2+NO=>SCH2+NO	3.84E+13	0.0	8917.0	
1271.	CH2+NO=>HCN+OH	2.20E+12	0.0	-378.0	
1272.	HCN+OH=>CH2+NO	3.24E+14	-0.4	72705.0	
1273.	CH+NO=>HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0	
1274.	HCN+O=>CH+NO	7.51E+16	-0.5	72598.0	
1275.	CH+NO=>HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0	
1276.	HCO+N=>CH+NO	1.11E+15	-0.2	40546.0	
1277.	CH+NO=>NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0	
1278.	NCO+H=>CH+NO	2.99E+19	-1.2	80837.0	
1279.	C2H2+NO=>HCO+HCN	6.00E+07	0.0	0.0	
1280.	HCO+HCN=>C2H2+NO	3.39E+05	0.5	33209.0	
1281.	2CH3(+M)=>C2H6(+M)	1.48E+20	-2.1	2301.0	
1282.	Low pressure limit: C2H6(+M)=>2CH3(+M)	0.34890E+43 -0.72135E+01	0.11166E+05	9.00E+28 -3.7	93972.0
1283.	Low pressure limit: CH4(+M)=>CH3+H(+M)	0.21260E+52 -0.87374E+01	0.10284E+06	1.26E+24 -2.6	105622.0
1284.	Low pressure limit: CH3+H(+M)=>CH4(+M)	0.19920E+28 -0.26780E+01	0.99516E+05	3.59E+21 -2.5	133.0

	Low pressure limit:	0.56660E+25	-0.25497E+01	-0.59730E+04		
1285.	CH3+OH(+M)=>CH2OH+H(+M)			1.52E+13	0.0	5477.0
	Low pressure limit:	0.10000E+23	0.00000E+00	0.57000E+04		
1286.	CH2OH+H(+M)=>CH3+OH(+M)			3.10E+16	-0.9	381.0
	Low pressure limit:	0.20410E+26	-0.93340E+00	0.60400E+03		
1287.	CH3+OH(+M)=>CH3O+H(+M)			1.14E+14	0.0	14469.0
	Low pressure limit:	0.10000E+21	0.00000E+00	0.12000E+05		
1288.	CH3O+H(+M)=>CH3+OH(+M)			1.73E+19	-1.0	4179.0
	Low pressure limit:	0.15140E+26	-0.98360E+00	0.17100E+04		
1289.	CH3+OH(+M)=>SCH2+H2O(+M)			8.29E+12	0.0	6149.0
	Low pressure limit:	0.24630E+31	0.00000E+00	0.91000E+02		
1290.	SCH2+H2O(+M)=>CH3+OH(+M)			2.67E+11	0.5	6194.0
	Low pressure limit:	0.79470E+29	0.49950E+00	0.13600E+03		
1291.	CH3+OH(+M)=>CH2O+H2(+M)			6.30E+10	0.0	11069.0
	Low pressure limit:	0.20000E+19	0.00000E+00	0.11000E+05		
1292.	CH2O+H2(+M)=>CH3+OH(+M)			1.63E+13	-0.3	83419.0
	Low pressure limit:	0.51600E+21	-0.25410E+00	0.83350E+05		
1293.	C2H6(+M)=>C2H5+H(+M)			6.79E+16	0.0	100461.0
	Low pressure limit:	0.34530E+20	0.00000E+00	0.87959E+05		
1294.	C2H5+H(+M)=>C2H6(+M)			4.65E+13	0.3	-122.0
	Low pressure limit:	0.23630E+17	0.29910E+00	-0.12624E+05		
1295.	C2H5(+M)=>C2H4+H(+M)			4.88E+28	-4.7	44423.0
	Low pressure limit:	0.53110E+29	-0.36470E+01	0.38653E+05		
1296.	C2H4+H(+M)=>C2H5(+M)			6.04E+27	-4.4	7724.0
	Low pressure limit:	0.65670E+28	-0.34056E+01	0.19540E+04		
1297.	C2H5+O2(+M)=>C2H4+HO2(+M)			2.55E+30	-5.7	13757.0
	Low pressure limit:	0.10000E+31	0.14850E+01	0.14000E+05		
1298.	C2H4+HO2(+M)=>C2H5+O2(+M)			9.31E+29	-5.6	26618.0
	Low pressure limit:	0.36490E+30	0.16197E+01	0.26861E+05		
1299.	C2H2+H(+M)=>C2H3(+M)			2.67E+13	-0.2	2721.0
	Low pressure limit:	0.25170E+17	0.34100E+00	0.14160E+04		
1300.	C2H3(+M)=>C2H2+H(+M)			3.13E+12	0.1	37493.0
	Low pressure limit:	0.29530E+16	0.61700E+00	0.36188E+05		
1301.	C2H2(+M)=>C2H+H(+M)			1.65E+25	-3.0	128451.0
	Low pressure limit:	0.22360E+31	-0.32610E+01	0.12587E+06		
1302.	C2H+H(+M)=>C2H2(+M)			2.78E+21	-2.3	-3903.0
	Low pressure limit:	0.37720E+27	-0.25908E+01	-0.64860E+04		
1303.	C2H3+O2(+M)=>CH2HCO+O(+M)			1.28E+16	-1.1	4329.0
	Low pressure limit:	0.20020E+27	0.11160E+01	0.22120E+04		
1304.	CH2HCO+O(+M)=>C2H3+O2(+M)			2.20E+19	-2.0	13683.0
	Low pressure limit:	0.34470E+30	0.20230E+00	0.11566E+05		
1305.	C2H3+O2(+M)=>CH2O+HCO(+M)			1.06E+24	-3.5	5030.0
	Low pressure limit:	0.90890E+51	-0.15630E+01	0.48190E+04		
1306.	CH2O+HCO(+M)=>C2H3+O2(+M)			5.32E+22	-3.2	93805.0
	Low pressure limit:	0.45570E+50	-0.11832E+01	0.93594E+05		
1307.	C2H2+OH(+M)=>C2H2OH(+M)			1.68E+07	1.5	-2713.0
	Low pressure limit:	0.11470E+25	-0.22950E+01	0.63700E+04		
1308.	C2H2OH(+M)=>C2H2+OH(+M)			6.91E+09	1.1	28646.0
	Low pressure limit:	0.47240E+27	-0.27004E+01	0.37729E+05		
1309.	C2H2+CH3(+M)=>PC3H4+H(+M)			5.76E+17	-1.4	20550.0
	Low pressure limit:	0.33570E+03	0.42330E+01	0.11293E+05		
1310.	PC3H4+H(+M)=>C2H2+CH3(+M)			9.57E+22	-2.5	14424.0
	Low pressure limit:	0.55820E+08	0.31277E+01	0.51670E+04		
1311.	C2H2+CH3(+M)=>AC3H5(+M)			1.98E+05	1.9	16456.0
	Low pressure limit:	0.29280E-01	0.57410E+01	0.13823E+05		
1312.	AC3H5(+M)=>C2H2+CH3(+M)			9.58E+13	-0.3	68922.0
	Low pressure limit:	0.14180E+08	0.35767E+01	0.66289E+05		
1313.	CH3+OH(+M)=>CH3OH(+M)			3.88E+25	-3.6	6347.0
	Low pressure limit:	0.15720E+32	-0.42600E+01	0.50200E+03		
1314.	CH3OH(+M)=>CH3+OH(+M)			3.42E+31	-4.6	99982.0
	Low pressure limit:	0.13850E+38	-0.52278E+01	0.94137E+05		
1315.	NC3H7(+M)=>C3H6+H(+M)			7.47E+15	-1.1	34913.0
	Low pressure limit:	0.23830E+16	-0.81000E-01	0.22861E+05		
1316.	C3H6+H(+M)=>NC3H7(+M)			4.35E+14	-0.8	1881.0
	Low pressure limit:	0.13880E+15	0.27420E+00	-0.10170E+05		
1317.	NC3H7(+M)=>C2H4+CH3(+M)			2.10E+14	-0.5	29732.0
	Low pressure limit:	0.88340E+18	-0.59100E+00	0.22448E+05		
1318.	C2H4+CH3(+M)=>NC3H7(+M)			1.81E+07	1.2	5188.0
	Low pressure limit:	0.75940E+11	0.11322E+01	-0.20960E+04		
1319.	C3H6(+M)=>AC3H5+H(+M)			9.64E+05	2.8	81757.0
	Low pressure limit:	0.18910E+46	-0.72030E+01	0.10305E+06		
1320.	AC3H5+H(+M)=>C3H6(+M)			9.78E+05	2.2	-3902.0
	Low pressure limit:	0.19170E+46	-0.78097E+01	0.17395E+05		
1321.	AC3H4(+M)=>PC3H4(+M)			9.16E+63	-14.6	93371.0
	Low pressure limit:	0.69320E+71	-0.15363E+02	0.93665E+05		
1322.	PC3H4(+M)=>AC3H4(+M)			2.06E+63	-14.5	94530.0

```
Low pressure limit: 0.15590E+71 -0.15244E+02 0.94824E+05
1323. NC4H5(+M)=>C4H4+H(+M) 4.23E+08 0.0 28099.0
Low pressure limit: 0.43320E+13 0.00000E+00 0.87760E+04
1324. C4H4+H(+M)=>NC4H5(+M) 2.01E+04 1.4 -8149.0
Low pressure limit: 0.20550E+09 0.13557E+01 -0.27472E+05
1325. IC4H3(+M)=>C4H2+H(+M) 1.00E+14 0.0 55000.0
Low pressure limit: 0.20000E+16 0.00000E+00 0.48000E+05
1326. C4H2+H(+M)=>IC4H3(+M) 1.93E+13 0.7 1988.0
Low pressure limit: 0.38660E+15 0.71220E+00 -0.50120E+04
1327. NC4H3(+M)=>C4H2+H(+M) 1.00E+14 0.0 36000.0
Low pressure limit: 0.10000E+15 0.00000E+00 0.30000E+05
1328. C4H2+H(+M)=>NC4H3(+M) 6.73E+12 0.5 1324.0
Low pressure limit: 0.67320E+13 0.51550E+00 -0.46760E+04
END
```

# Annexe IV

## Les mécanismes squelettiques 15/25 – 0,985 et 15/25 – 0,950 obtenus après l'élimination des réactions inutiles

ELEMENTS

C H O N  
END

SPECIES

H2	O2	CO	CO2	CH4	C2H6	CH2O	C2H2	C2H4	C3H6	CH3OH	AC3H4
C4H4	C4H6	C4H2	PC3H4	C6H6	NC10H22	PHC3H7	TOLUEN	STYREN	PHHCO	PHCH2OH	CYC9H18
N2	H	O	OH	HO2	H2O	HCO	CH3	SCH2	C2H5	CH2	CH
CH3O	CH2OH	C3H3	CH2CO	C2H3	CH2HCO	C2H	HCCO	IC4H3	C2H2OH	NC3H7	AC3H5
C3H2	NC4H3	PC4H9	NC4H5	AC5H11	AC6H13	BC6H13	AC7H15	AC8H17	AC10H21	CC10H21	DC10H21
EC10H21	APHC3H6	CPHC3H6	PHCH2	C6H5	APHC2H4	C6H5O	C5H5	C5H4OH	C5H4O	PHCO	CC9H17C
EC9H17C	FC9H17C	NO	HCN	NH3	N2O	NO2	HNO	HONO	H2CN	NNH	NH2
NH	N	CN	NCO	HOCN	HNCO	CH3CN					

END

REACTIONS MOLES CAL/MOLE (MECANISME SQUELETTIQUE 15/25 – 0.985)

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

1.	2H+M=>H2+M	7.31E+17	-1.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
2.	H2+M=>2H+M	2.76E+17	-0.7	103608.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
3.	O+H+M=>OH+M	6.20E+16	-0.6	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
4.	OH+M=>O+H+M	1.43E+16	-0.4	101819.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
5.	H2+O2=>2OH	1.70E+13	0.0	47780.0
6.	O+H2=>OH+H	3.87E+04	2.7	6260.0
7.	OH+H=>O+H2	2.37E+04	2.7	4471.0
8.	H+O2=>OH+O	1.85E+14	0.0	16812.0
9.	OH+O=>H+O2	3.67E+11	0.4	-470.0
10.	H+O2+M=>HO2+M	8.00E+17	-0.8	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
11.	HO2+M=>H+O2+M	2.36E+18	-0.9	49560.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
12.	H+OH+M=>H2O+M	8.62E+21	-2.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
13.	H2O+M=>H+OH+M	5.22E+22	-1.9	119105.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
14.	H2+OH=>H2O+H	2.16E+08	1.5	3430.0
15.	H2O+H=>H2+OH	3.47E+09	1.4	18927.0
16.	H2O+O=>2OH	1.50E+10	1.1	17260.0
17.	2OH=>H2O+O	5.71E+08	1.3	-25.0
18.	HO2+OH=>H2O+O2	2.89E+13	0.0	-497.0
19.	H2O+O2=>HO2+OH	5.94E+13	0.2	69048.0
20.	HO2+O=>OH+O2	1.81E+13	0.0	-400.0
21.	OH+O2=>HO2+O	1.42E+12	0.4	51859.0
22.	H+HO2=>H2+O2	4.28E+13	0.0	1411.0
23.	H2+O2=>H+HO2	5.47E+12	0.4	55459.0
24.	H+HO2=>2OH	1.69E+14	0.0	874.0
25.	2OH=>H+HO2	2.62E+10	0.8	35852.0
26.	H+HO2=>H2O+O	3.01E+13	0.0	1721.0
27.	<b>H2O+O=&gt;H+HO2</b>	<b>1.23E+11</b>	<b>0.7</b>	<b>53984.0</b>
28.	CO+HO2=>CO2+OH	1.50E+14	0.0	23650.0
29.	CO2+OH=>CO+HO2	1.43E+17	-0.5	84747.0
30.	CO+OH=>CO2+H	4.40E+06	1.5	-740.0
31.	CO2+H=>CO+OH	2.70E+13	0.2	25379.0
32.	CO+O+M=>CO2+M	2.83E+13	0.0	-4540.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
33.	CO2+M=>CO+O+M	4.01E+19	-1.0	123398.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
34.	HCO+M=>H+CO+M	1.85E+17	-1.0	17000.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

35.	H+CO+M=>HCO+M	1.82E+16	-0.7	1510.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
36.	HCO+OH=>CO+H2O	1.00E+14	0.0	0.0
37.	CO+H2O=>HCO+OH	5.95E+13	0.5	103615.0
38.	HCO+O=>CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0
39.	HCO+O=>CO2+H	3.00E+13	0.0	0.0
40.	HCO+H=>CO+H2	7.22E+13	0.0	0.0
41.	CO+H2=>HCO+H	2.67E+12	0.6	88118.0
42.	HCO+O2=>CO+HO2	2.11E+09	1.1	-620.0
<b>43.</b>	<b>CO+HO2=&gt;HCO+O2</b>	<b>6.11E+08</b>	<b>1.3</b>	<b>33450.0</b>
44.	HCO+CH3=>CO+CH4	1.20E+14	0.0	0.0
<b>45.</b>	<b>CH2O+C2H5=&gt;HCO+C2H6</b>	<b>1.60E+04</b>	<b>2.8</b>	<b>8350.0</b>
46.	CH4+OH=>CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2462.0
47.	CH3+H2O=>CH4+OH	2.76E+04	2.4	16077.0
48.	CH4+O=>CH3+OH	1.62E+06	2.3	7094.0
49.	CH3+OH=>CH4+O	1.06E+03	2.7	3424.0
50.	CH4+H=>CH3+H2	2.25E+04	3.0	8757.0
51.	CH3+H2=>CH4+H	2.41E+01	3.4	6875.0
<b>52.</b>	<b>CH3+HO2=&gt;CH4+O2</b>	<b>3.39E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>983.0</b>
<b>53.</b>	<b>CH3+M=&gt;CH2+H+M</b>	<b>1.90E+16</b>	<b>0.0</b>	<b>91599.0</b>
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
54.	CH2+H+M=>CH3+M	3.89E+13	0.4	-18543.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
55.	CH3+M=>CH+H2+M	6.90E+14	0.0	82459.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
56.	CH+H2+M=>CH3+M	2.17E+11	0.6	-25409.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
57.	CH3+HO2=>CH3O+OH	5.00E+12	0.0	0.0
58.	CH3+O=>CH2O+H	8.43E+13	0.0	0.0
59.	CH3+H=>CH2+H2	7.00E+13	0.0	15100.0
60.	CH2+H2=>CH3+H	5.40E+10	0.7	8566.0
61.	CH3+O2=>CH3O+O	1.32E+14	0.0	31398.0
<b>62.</b>	<b>CH3O+O=&gt;CH3+O2</b>	<b>3.96E+16</b>	<b>-0.5</b>	<b>3826.0</b>
63.	CH3+O2=>CH2O+OH	4.38E+11	0.0	14656.0
64.	2CH3=>C2H5+H	3.01E+13	0.0	13513.0
65.	C2H5+H=>2CH3	1.26E+19	-1.2	4601.0
66.	CH2+OH=>CH+H2O	1.13E+07	2.0	3000.0
67.	CH+H2O=>CH2+OH	2.79E+07	2.0	20770.0
68.	CH2+OH=>CH2O+H	2.50E+13	0.0	0.0
69.	CH2+O=>CO+2H	5.00E+13	0.0	0.0
70.	CH2+O=>CO+H2	6.00E+13	0.0	0.0
71.	CH2+H=>CH+H2	1.00E+18	-1.6	0.0
72.	CH+H2=>CH2+H	1.54E+17	-1.4	2274.0
<b>73.</b>	<b>CH2+O2=&gt;HCO+OH</b>	<b>4.30E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>-500.0</b>
74.	CH2+O2=>CO2+H2	3.45E+11	0.0	1000.0
75.	CH2+O2=>CO2+2H	1.60E+12	0.0	1000.0
<b>76.</b>	<b>CH2+O2=&gt;CO+H2O</b>	<b>1.87E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>-1000.0</b>
77.	CH2+O2=>CO+OH+H	8.64E+10	0.0	-500.0
78.	CH2+O2=>CH2O+O	5.00E+13	0.0	9000.0
79.	CH2+CO2=>CH2O+CO	1.10E+11	0.0	1000.0
80.	2CH2=>C2H2+H2	3.20E+13	0.0	0.0
<b>81.</b>	<b>2CH2=&gt;C2H2+2H</b>	<b>4.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
82.	CH2+CH3=>C2H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
83.	CH2+C2H2=>H+C3H3	1.20E+13	0.0	6620.0
<b>84.</b>	<b>H+C3H3=&gt;CH2+C2H2</b>	<b>5.48E+18</b>	<b>-1.5</b>	<b>19215.0</b>
85.	SCH2+M=>CH2+M	1.00E+13	0.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
86.	CH2+M=>SCH2+M	3.84E+12	0.0	8917.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
87.	SCH2+O2=>CO+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0
88.	SCH2+H2=>CH3+H	7.00E+13	0.0	0.0
89.	CH3+H=>SCH2+H2	3.49E+16	-0.7	15452.0
90.	SCH2+H=>CH2+H	2.00E+14	0.0	0.0
91.	CH2+H=>SCH2+H	7.69E+13	0.0	8917.0
92.	SCH2+H=>CH+H2	3.00E+13	0.0	0.0
93.	CH+H2=>SCH2+H	1.77E+12	0.2	11191.0
<b>94.</b>	<b>SCH2+OH=&gt;CH2O+H</b>	<b>3.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
95.	SCH2+H2O=>CH3OH	1.80E+13	0.0	0.0
96.	CH3OH=>SCH2+H2O	4.92E+20	-1.5	93590.0
97.	2CH3=>SCH2+CH4	2.14E+13	-0.2	13570.0
98.	SCH2+C2H2=>C3H3+H	1.80E+14	0.0	0.0
99.	C3H3+H=>SCH2+C2H2	3.16E+19	-1.5	21513.0
<b>100.</b>	<b>SCH2+H2O=&gt;CH2+H2O</b>	<b>3.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

101. CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O=>SCH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	<b>1.15E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>8917.0</b>
102. SCH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+CO	3.00E+12	0.0	0.0
103. CH+OH=>HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0
104. CH+O=>CO+H	1.00E+14	0.0	0.0
105. CH+O <sub>2</sub> =>HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0
106. CH+O <sub>2</sub> =>CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
107. CH+CO <sub>2</sub> =>HCO+CO	3.40E+12	0.0	690.0
108. CH+CH <sub>4</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H	6.00E+13	0.0	0.0
109. CH <sub>3</sub> O+M=>CH <sub>2</sub> O+H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	4.88E+15	0.0	22773.0
110. CH <sub>3</sub> O+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	2.35E+10	0.0	1788.0
111. CH <sub>3</sub> +CO <sub>2</sub> =>CH <sub>3</sub> O+CO	6.35E+14	-0.3	48213.0
112. CH <sub>2</sub> O+M=>HCO+H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	1.26E+16	0.0	77897.0
113. HCO+H+M=>CH <sub>2</sub> O+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	<b>2.53E+13</b>	<b>0.3</b>	<b>-12801.0</b>
114. CH <sub>2</sub> O+OH=>HCO+H <sub>2</sub> O	1.72E+09	1.2	-447.0
115. HCO+H <sub>2</sub> O=>CH <sub>2</sub> O+OH	2.09E+07	1.6	27959.0
116. CH <sub>2</sub> O+O=>HCO+OH	1.81E+13	0.0	3088.0
117. CH <sub>2</sub> O+H=>HCO+H <sub>2</sub>	1.26E+08	1.6	2170.0
118. HCO+H <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+H	9.54E+04	2.2	15079.0
119. CH <sub>2</sub> O+CH <sub>3</sub> =>HCO+CH <sub>4</sub>	4.09E+12	0.0	8843.0
120. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O	4.10E+06	2.1	860.0
121. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O=>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +OH	1.70E+04	2.5	19381.0
122. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH	9.99E+08	1.5	5803.0
123. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +O	<b>1.58E+05</b>	<b>2.0</b>	<b>7039.0</b>
124. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub>	5.25E+14	0.0	12800.0
125. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +H	1.36E+11	0.6	15825.0
126. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>4</sub>	7.54E+00	3.7	9883.0
127. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub> O	2.41E+13	0.0	0.0
128. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>CH <sub>3</sub> +CH <sub>2</sub> O+H	2.41E+13	0.0	0.0
129. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +O=>CH <sub>2</sub> O+CH <sub>3</sub>	4.24E+13	0.0	0.0
130. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH	<b>3.05E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
131. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub>	<b>1.25E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>8000.0</b>
132. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>4</sub>	1.14E+12	0.0	0.0
133. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> +M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.00E+17	0.0	79349.0
134. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	1.61E+14	0.5	36344.0
135. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	2.97E+17	0.0	96559.0
136. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O	2.02E+13	0.0	5936.0
137. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +HCO	1.20E+08	1.4	530.0
138. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +O=>CH <sub>2</sub> HCO+H	2.00E+08	1.4	530.0
139. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	1.00E+14	0.0	15009.0
140. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H	6.28E+09	0.8	6775.0
141. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	<b>6.73E+11</b>	<b>0.2</b>	<b>-10444.0</b>
142. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub>	6.63E+00	3.7	9499.0
143. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub>	3.88E-01	4.0	3146.0
144. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	3.00E+13	0.0	0.0
145. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	3.00E+13	0.0	0.0
146. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +CO	<b>1.50E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
147. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O=>CH <sub>2</sub> CO+H	<b>1.50E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
148. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	<b>1.98E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>10000.0</b>
149. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> +H	2.00E+12	0.0	5000.0
150. C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	4.28E+18	-1.4	10662.0
151. C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> =>2C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	3.08E+26	-2.7	118048.0
152. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H	1.20E+12	0.0	4683.0
153. C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1.23E+21	-2.2	10889.0
154. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =>HCCO+OH	2.00E+08	1.5	30100.0
155. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> O	3.40E+07	2.0	14000.0
156. C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> O=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH	3.48E+04	2.8	751.0
157. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>CH <sub>3</sub> +CO	<b>4.84E-04</b>	<b>4.0</b>	<b>-2000.0</b>
158. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>CH <sub>2</sub> CO+H	2.19E-04	4.5	-1000.0
159. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O=>CH <sub>2</sub> +CO	1.98E+04	2.6	656.0
160. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O=>HCCO+H	4.62E+04	2.6	656.0
161. C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H	<b>1.51E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>3100.0</b>
162. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H=>C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub>	2.37E+17	-1.0	31846.0
163. C <sub>2</sub> H+OH=>HCCO+H	<b>2.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
164. C <sub>2</sub> H+O=>CO+CH	<b>1.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
165. C <sub>2</sub> H+O <sub>2</sub> =>CO+HCO	2.41E+12	0.0	0.0
166. CH <sub>2</sub> CO+H=>CH <sub>2</sub> HCO	1.00E+14	0.0	2500.0
167. CH <sub>2</sub> HCO=>CH <sub>2</sub> CO+H	2.54E+15	-0.4	39358.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

168.	CH <sub>2</sub> HCO+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> CO+HO <sub>2</sub>	1.58E+10	0.0	0.0
169.	CH <sub>2</sub> HCO+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+CO+OH	2.51E+10	0.0	0.0
170.	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH=>CH <sub>2</sub> CO+H	5.00E+15	0.0	28000.0
171.	CH <sub>2</sub> CO+H=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	4.87E+16	-0.3	21191.0
<b>172.</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH+O<sub>2</sub>=&gt;HCO+CO<sub>2</sub>+H<sub>2</sub></b>	<b>4.00E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>-250.0</b>
173.	CH <sub>2</sub> CO+M=>CH <sub>2</sub> +CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.60E+15	0.0	59270.0
174.	CH <sub>2</sub> +CO+M=>CH <sub>2</sub> CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.39E+06	1.9	-20644.0
175.	CH <sub>2</sub> CO+O=>CH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub>	1.76E+12	0.0	1349.0
<b>176.</b>	<b>CH<sub>2</sub>CO+O=&gt;HCCO+OH</b>	<b>1.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>8000.0</b>
177.	CH <sub>2</sub> CO+OH=>CH <sub>2</sub> OH+CO	6.93E+12	0.0	0.0
178.	CH <sub>2</sub> CO+OH=>CH <sub>3</sub> +CO <sub>2</sub>	3.10E+12	0.0	0.0
179.	CH <sub>2</sub> CO+H=>CH <sub>3</sub> +CO	1.50E+04	2.8	673.0
180.	CH <sub>3</sub> +CO=>CH <sub>2</sub> CO+H	6.90E-03	4.3	30901.0
181.	CH <sub>2</sub> CO+H=>HCCO+H <sub>2</sub>	1.80E+14	0.0	8600.0
182.	HCCO+H <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> CO+H	4.93E+10	0.6	4755.0
<b>183.</b>	<b>CH<sub>2</sub>CO+CH<sub>3</sub>=&gt;C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>+CO</b>	<b>6.00E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>184.</b>	<b>CH<sub>2</sub>CO+CH<sub>3</sub>=&gt;HCCO+CH<sub>4</sub></b>	<b>7.50E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>13000.0</b>
185.	HCCO+M=>CH+CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	6.00E+15	0.0	58821.0
186.	CH+CO+M=>HCCO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.17E+09	1.5	-14975.0
187.	HCCO+OH=>HCO+CO+H	1.00E+13	0.0	0.0
188.	HCCO+O=>2CO+H	1.93E+14	0.0	590.0
189.	HCCO+H=>SCH <sub>2</sub> +CO	1.50E+14	0.0	0.0
190.	SCH <sub>2</sub> +CO=>HCCO+H	5.05E+08	1.6	18621.0
191.	HCCO+O <sub>2</sub> =>CO <sub>2</sub> +CO+H	1.40E+09	1.0	0.0
192.	CH <sub>3</sub> OH+OH=>CH <sub>2</sub> OH+H <sub>2</sub> O	4.53E+11	0.3	1160.0
193.	CH <sub>3</sub> OH+OH=>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +H <sub>2</sub> O	3.63E+11	0.7	5868.0
194.	CH <sub>3</sub> OH+O=>CH <sub>2</sub> OH+OH	1.63E+13	0.0	5030.0
195.	CH <sub>3</sub> OH+H=>CH <sub>2</sub> OH+H <sub>2</sub>	4.00E+13	0.0	6100.0
196.	CH <sub>3</sub> OH+CH <sub>3</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> +H <sub>2</sub> O	4.68E+05	2.3	12764.0
197.	CH <sub>2</sub> OH+M=>CH <sub>2</sub> O+H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	1.00E+14	0.0	25100.0
198.	CH <sub>2</sub> OH+H=>CH <sub>2</sub> O+H <sub>2</sub>	3.00E+13	0.0	0.0
199.	CH <sub>2</sub> OH+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	2.17E+14	0.0	4690.0
200.	NC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> +O <sub>2</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +HO <sub>2</sub>	1.00E+12	0.0	5020.0
201.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub>	1.10E+21	-1.2	97719.0
202.	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	2.70E+11	0.6	-5635.0
203.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> =>CH <sub>4</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	3.50E+12	0.0	69999.0
204.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +OH=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O	7.70E+05	2.2	622.0
<b>205.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>+H<sub>2</sub>O=&gt;C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+OH</b>	<b>4.73E+06</b>	<b>1.7</b>	<b>34067.0</b>
206.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +HCO	4.69E+07	1.6	-628.0
207.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +CH <sub>2</sub> HCO	3.90E+07	1.6	-628.0
208.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>2</sub> O	7.02E+07	1.6	-628.0
209.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +OH	1.75E+11	0.7	5884.0
210.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub>	1.70E+05	2.5	2492.0
211.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +H	6.50E+04	2.2	20440.0
212.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub>	6.03E+12	0.0	0.0
<b>213.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>+H<sub>2</sub>=&gt;AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>+H</b>	<b>3.47E+09</b>	<b>1.2</b>	<b>43856.0</b>
214.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>3</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>4</sub>	1.00E+11	0.0	0.0
215.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>2</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H	3.00E+13	0.0	0.0
216.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4.00E+11	0.0	0.0
217.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	2.00E+18	0.0	79999.0
218.	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H+M=>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	2.53E+15	0.1	-10262.0
219.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> =>PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	1.20E+15	0.0	92399.0
220.	PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	2.70E+14	0.1	93558.0
221.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +OH=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O	2.15E+12	0.0	-200.0
222.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +OH=>CH <sub>2</sub> CO+CH <sub>3</sub>	1.00E+12	0.0	-393.0
223.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CO	1.12E-02	4.6	-4243.0
<b>224.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>+O=&gt;CH<sub>2</sub>CO+CH<sub>2</sub></b>	<b>1.00E-03</b>	<b>4.6</b>	<b>-4243.0</b>
225.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub> O	2.50E-03	4.6	-4243.0
226.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	1.20E+12	0.0	2700.0
227.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H	7.86E+14	-0.9	62451.0
228.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	1.00E+14	0.0	15009.0
229.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub>	1.33E+12	0.0	7700.0
230.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	9.00E+11	0.0	7700.0
231.	PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	4.70E+18	0.0	79999.0



REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

232.	C3H3+H+M=>PC3H4+M H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/	2.64E+16	0.0	-11421.0
233.	PC3H4=>C2H+CH3	4.20E+16	0.0	99999.0
234.	C2H+CH3=>PC3H4	4.26E+07	1.8	-26228.0
235.	PC3H4+OH=>C3H3+H2O	6.50E+02	3.0	200.0
236.	PC3H4+O=>CH2CO+CH2	6.40E+12	0.0	2100.0
237.	PC3H4+O=>C2H3+HCO	3.20E+12	0.0	2100.0
238.	PC3H4+O=>HCCO+CH3	9.18E+12	0.0	2100.0
239.	PC3H4+H=>C3H3+H2	2.00E+14	0.0	15000.0
240.	C3H3+H2=>PC3H4+H	4.24E+11	0.3	27187.0
241.	C3H3+O2=>CH2CO+HCO	3.01E+10	0.0	2870.0
242.	C3H3+OH=>C3H2+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
243.	C3H3+OH=>HCCO+CH3	5.00E+12	0.0	0.0
244.	C3H3+O=>C2H2+HCO	1.39E+14	0.0	0.0
245.	C3H3+O=>C2H3+CO	4.62E+13	0.0	0.0
246.	C3H3+O=>C2H+CH2O	4.62E+13	0.0	0.0
247.	C3H3+O=>C2H2+CO+H	4.62E+13	0.0	0.0
248.	C3H3+H=>C3H2+H2	5.00E+13	0.0	3000.0
249.	C3H2+H2=>C3H3+H	3.42E+12	0.5	31179.0
250.	C3H3+CH=>NC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
251.	C3H3+CH2=>C4H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
252.	C3H3+CH3=>C4H6	3.33E+12	0.0	0.0
253.	C4H6=>C3H3+CH3	2.21E+22	-1.8	92914.0
254.	CH+C2H2=>C3H2+H	1.00E+14	0.0	0.0
255.	C3H2+H=>CH+C2H2	2.03E+19	-1.2	38501.0
256.	C3H2+O2=>HCCO+HCO	3.00E+10	0.0	2870.0
257.	C3H2+OH=>C2H2+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
258.	C3H2+CH2=>IC4H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
259.	PC4H9=>C2H5+C2H4	2.50E+12	0.0	28500.0
260.	C4H6=>C2H4+C2H2	1.00E+14	0.0	74999.0
<b>261.</b>	<b>C2H4+C2H2=&gt;C4H6</b>	<b>8.31E+05</b>	<b>1.9</b>	<b>34021.0</b>
262.	C4H6=>NC4H5+H	1.58E+16	0.0	109999.0
263.	NC4H5+H=>C4H6	9.85E+14	-0.4	-911.0
264.	C4H6+OH=>NC4H5+H2O	1.00E+07	2.0	7253.0
265.	C4H6+O=>NC4H5+OH	2.27E+15	-0.5	7028.0
266.	C4H6+H=>NC4H5+H2	5.00E+15	0.0	22800.0
<b>267.</b>	<b>NC4H5+H2=&gt;C4H6+H</b>	<b>1.18E+14</b>	<b>-0.1</b>	<b>15498.0</b>
<b>268.</b>	<b>C4H6+CH3=&gt;NC4H5+CH4</b>	<b>2.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>24800.0</b>
269.	NC4H5=>C2H3+C2H2	5.00E+13	0.0	44000.0
270.	C2H3+C2H2=>NC4H5	1.11E+03	2.8	2090.0
271.	NC4H5+OH=>C4H4+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
272.	NC4H5+H=>C4H4+H2	1.00E+14	0.0	0.0
273.	C4H4=>2C2H2	3.20E+13	0.0	77099.0
274.	2C2H2=>C4H4	1.28E+08	1.2	36666.0
275.	C4H4+M=>NC4H3+H+M	1.00E+20	0.0	99299.0
276.	NC4H3+H+M=>C4H4+M	2.11E+18	-0.1	-13814.0
277.	C4H4=>IC4H3+H	6.30E+13	0.0	87099.0
278.	IC4H3+H=>C4H4	4.62E+11	-0.3	-7678.0
279.	C4H4=>C4H2+H2	1.26E+15	0.0	94699.0
280.	C4H2+H2=>C4H4	6.74E+11	0.7	50518.0
281.	C4H4+OH=>IC4H3+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
282.	IC4H3+H2O=>C4H4+OH	8.89E+05	1.8	26327.0
283.	C4H4+OH=>NC4H3+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0
284.	NC4H3+H2O=>C4H4+OH	9.58E+05	2.0	10991.0
285.	C4H4+O=>AC3H4+CO	3.00E+13	0.0	1810.0
286.	C4H4+H=>IC4H3+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
287.	IC4H3+H2=>C4H4+H	9.21E+02	2.5	18071.0
288.	C4H4+H=>NC4H3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
289.	NC4H3+H2=>C4H4+H	1.59E+05	2.2	5495.0
290.	C4H4+CH3=>IC4H3+CH4	1.66E+01	3.7	9499.0
291.	IC4H3+CH4=>C4H4+CH3	4.28E+01	3.3	20211.0
292.	2C2H2=>IC4H3+H	6.31E+13	0.0	41600.0
293.	IC4H3+H=>2C2H2	1.16E+17	-1.5	-12744.0
294.	IC4H3+O2=>CH2CO+HCCO	1.00E+12	0.0	0.0
295.	IC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
296.	C4H2+H2O=>IC4H3+OH	3.52E+13	0.8	66093.0
297.	IC4H3+O=>CH2CO+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
298.	IC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
299.	C4H2+H2=>IC4H3+H	3.64E+12	1.0	50596.0
<b>300.</b>	<b>AC3H4+C2H=&gt;IC4H3+CH2</b>	<b>6.63E+14</b>	<b>0.5</b>	<b>24847.0</b>
301.	NC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
302.	NC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
303.	NC4H3+H=>IC4H3+H	1.00E+14	0.0	0.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

304.	C2H2+C2H=>C4H2+H	1.82E+14	0.0	467.0
305.	C4H2+H=>C2H2+C2H	3.84E+20	-1.4	25465.0
306.	C4H2+O=>C3H2+CO	1.20E+12	0.0	0.0
<b>307.</b>	<b>C3H3+PC3H4=&gt;C6H6+H</b>	<b>1.40E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>12800.0</b>
308.	2C3H3=>C6H6	3.00E+11	0.0	0.0
309.	C6H6=>2C3H3	4.11E+25	-1.6	149552.0
310.	NC4H5+C2H2=>C6H6+H	2.80E+03	2.9	1400.0
311.	C6H6+H=>NC4H5+C2H2	3.63E+11	2.5	71220.0
<b>312.</b>	<b>NC4H3+C2H3=&gt;C6H6</b>	<b>2.87E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>817.0</b>
313.	C6H6=>NC4H3+C2H3	3.17E+29	-1.9	185226.0
314.	C6H6=>C4H4+C2H2	9.00E+15	0.0	107429.0
<b>315.</b>	<b>C4H4+C2H2=&gt;C6H6</b>	<b>3.30E+03</b>	<b>1.7</b>	<b>1361.0</b>
316.	2C3H3=>C6H5+H	1.00E+13	0.0	0.0
317.	C6H5+H=>2C3H3	9.21E+22	-1.2	36840.0
318.	NC4H3+C2H2=>C6H5	2.80E+03	2.9	1400.0
319.	C6H5=>NC4H3+C2H2	5.82E+13	1.6	108051.0
320.	C5H5+OH=>C5H4OH+H	3.00E+14	0.0	0.0
321.	C5H4OH+H=>C5H5+OH	4.10E+19	-1.1	9150.0
322.	C5H5+OH=>C4H6+CO	1.50E+14	0.0	0.0
323.	C5H4O+H=>NC4H5+CO	1.71E+13	0.0	0.0
324.	C5H5+O=>C5H4O+H	5.00E+14	0.0	0.0
325.	C5H5+O=>NC4H5+CO	2.00E+14	0.0	0.0
326.	C5H4OH=>C5H4O+H	2.10E+13	0.0	48000.0
327.	C5H4O+H=>C5H4OH	8.20E+12	0.3	10014.0
328.	C5H4O=>CO+C4H4	1.00E+12	0.0	53000.0
329.	C6H5+H=>C6H6	2.20E+14	0.0	0.0
330.	C6H6=>C6H5+H	1.37E+18	-0.3	112531.0
331.	C6H6+OH=>C6H5+H2O	2.11E+13	0.0	4570.0
332.	C6H5+H2O=>C6H6+OH	2.05E+10	0.4	11144.0
333.	C6H6+H=>C6H5+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
334.	C6H5+H2=>C6H6+H	1.51E+10	0.6	7077.0
335.	C6H6+O=>C6H5O+H	3.56E+01	3.8	940.0
336.	C6H5+C3H6=>C6H6+AC3H5	3.16E+08	0.9	-11871.0
337.	C6H5+O2=>C6H5O+O	2.09E+12	0.0	7470.0
338.	C6H5+HO2=>C6H5O+OH	5.00E+13	0.0	1000.0
339.	C6H5+OH=>C6H5O+H	5.00E+13	0.0	0.0
340.	C6H5+C2H4=>STYREN+H	1.43E+08	1.2	3540.0
341.	STYREN+H=>C6H5+C2H4	2.84E+14	0.0	8684.0
342.	C6H5O=>C5H5+CO	5.00E+15	0.0	63999.0
343.	C5H5+CO=>C6H5O	1.05E+05	2.3	35686.0
344.	TOLUEN=>C6H5+CH3	1.40E+16	0.0	99799.0
345.	C6H5+CH3=>TOLUEN	4.88E+07	1.3	-4178.0
346.	TOLUEN=>PHCH2+H	3.00E+15	0.0	88193.0
347.	PHCH2+H=>TOLUEN	4.31E+14	-0.3	-2545.0
348.	PHCH2+HO2=>TOLUEN+O2	1.27E+14	-0.4	1884.0
349.	TOLUEN+OH=>PHCH2+H2O	1.00E+13	0.0	2180.0
350.	PHCH2+H2O=>TOLUEN+OH	8.71E+12	-0.2	30547.0
351.	TOLUEN+H=>PHCH2+H2	1.26E+14	0.0	8364.0
352.	PHCH2+H2=>TOLUEN+H	6.83E+12	0.0	21234.0
353.	TOLUEN+H=>C6H6+CH3	2.40E+13	0.0	5123.0
354.	C6H6+CH3=>TOLUEN+H	5.22E+08	1.0	13676.0
355.	PHCH2=>C4H4+C3H3	2.00E+14	0.0	83599.0
356.	PHCH2=>C5H5+C2H2	6.03E+13	0.0	69999.0
357.	C5H5+C2H2=>PHCH2	1.67E+05	1.5	1056.0
358.	PHCH2+OH=>PHCH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
359.	PHCH2OH=>PHCH2+OH	1.41E+18	-0.6	84716.0
360.	PHCH2+O=>PHHCO+H	1.58E+13	0.0	0.0
361.	PHCH2+O=>C6H5+CH2O	1.00E+13	0.0	0.0
<b>362.</b>	<b>PHCH2+C3H3=&gt;TOLUEN+C3H2</b>	<b>1.00E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
363.	PHCH2OH+O2=>PHHCO+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
364.	PHCH2OH+OH=>PHHCO+H2O+H	8.43E+12	0.0	2583.0
365.	PHCH2OH+H=>C6H6+CH2OH	1.20E+13	0.0	5148.0
366.	PHHCO=>PHCO+H	3.98E+15	0.0	83700.0
367.	PHCO+H=>PHHCO	6.88E+12	0.3	-3725.0
368.	PHHCO+OH=>PHCO+H2O	1.71E+09	1.2	-447.0
369.	PHHCO+O=>PHCO+OH	9.04E+12	0.0	3080.0
370.	PHHCO+H=>PHCO+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
371.	PHHCO+H=>C6H6+HCO	1.20E+13	0.0	5148.0
<b>372.</b>	<b>PHHCO+CH3=&gt;PHCO+CH4</b>	<b>2.77E+03</b>	<b>2.8</b>	<b>5773.0</b>
373.	PHCO=>C6H5+CO	3.98E+14	0.0	29401.0
374.	C6H5+CO=>PHCO	8.82E+07	1.4	1418.0
375.	PHCO+O2=>C6H5O+CO2	3.00E+10	0.0	2870.0
376.	APHC2H4=>STYREN+H	3.16E+13	0.0	50670.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

377.	APHC2H4=>C6H5+C2H4	1.00E+14	0.0	35000.0
378.	C6H5+C2H4=>APHC2H4	1.77E+06	1.6	-2553.0
379.	STYREN=>C6H6+C2H2	1.60E+11	0.0	58438.0
380.	STYREN=>2C4H4	3.62E+26	-1.7	142864.0
381.	PHC3H7=>APHC3H6+H	8.00E+15	0.0	100209.0
382.	PHC3H7+H=>APHC3H6+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
383.	PHC3H7+O=>APHC3H6+OH	1.93E+05	2.7	3716.0
384.	PHC3H7+OH=>APHC3H6+H2O	3.16E+07	1.8	934.0
385.	PHC3H7+CH3=>APHC3H6+CH4	5.00E+12	0.0	11710.0
386.	APHC3H6=>PHCH2+C2H4	1.00E+14	0.0	13000.0
387.	PHCH2+C2H4=>APHC3H6	7.58E+07	1.3	-125.0
388.	PHC3H7=>CPHC3H6+H	8.00E+15	0.0	86209.0
389.	PHC3H7+H=>CPHC3H6+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
390.	PHC3H7+O=>CPHC3H6+OH	4.77E+04	2.7	1106.0
391.	PHC3H7+OH=>CPHC3H6+H2O	7.08E+06	1.9	-1159.0
392.	PHC3H7+O2=>CPHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	35800.0
<b>393.</b>	<b>PHC3H7+PHCH2=&gt;CPHC3H6+TOLUEN</b>	<b>7.94E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>16200.0</b>
<b>394.</b>	<b>PHC3H7+CH3O=&gt;CPHC3H6+CH3OH</b>	<b>7.20E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>4470.0</b>
395.	CPHC3H6=>STYREN+CH3	1.00E+14	0.0	34850.0
396.	STYREN+CH3=>CPHC3H6	3.26E+06	1.5	-1355.0
397.	PHC3H7+H=>NC3H7+C6H6	2.40E+13	0.0	5123.0
398.	PHC3H7=>C6H5+NC3H7	5.00E+16	0.0	86499.0
399.	PHC3H7=>PHCH2+C2H5	5.00E+16	0.0	74499.0
400.	PHCH2+C2H5=>PHC3H7	1.44E+08	1.4	-2834.0
401.	PHC3H7=>APHC2H4+CH3	5.00E+16	0.0	77499.0
<b>402.</b>	<b>APHC2H4+CH3=&gt;PHC3H7</b>	<b>2.44E+07</b>	<b>1.7</b>	<b>-12219.0</b>
403.	AC5H11=>C2H4+NC3H7	4.50E+13	0.0	28700.0
404.	AC5H11+O=>CH2O+PC4H9	5.00E+14	0.0	0.0
405.	AC6H13=>BC6H13	2.00E+11	0.0	11100.0
406.	BC6H13=>AC6H13	3.47E+10	0.1	12180.0
407.	BC6H13=>C3H6+NC3H7	5.00E+13	0.0	28700.0
408.	AC6H13=>C2H4+PC4H9	1.00E+13	0.0	28700.0
409.	AC7H15=>C2H4+AC5H11	2.00E+13	0.0	28700.0
410.	AC8H17=>AC6H13+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
411.	NC10H22=>AC8H17+C2H5	1.00E+17	0.0	79899.0
412.	NC10H22=>AC7H15+NC3H7	1.00E+17	0.0	84299.0
413.	NC10H22=>AC6H13+PC4H9	1.00E+17	0.0	82199.0
414.	NC10H22=>2AC5H11	5.00E+16	0.0	84399.0
415.	NC10H22=>AC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
416.	NC10H22=>CC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
417.	NC10H22=>DC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
418.	NC10H22=>EC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
419.	NC10H22+OH=>AC10H21+H2O	1.41E+07	1.8	974.0
420.	NC10H22+OH=>CC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
421.	NC10H22+OH=>DC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
422.	NC10H22+OH=>EC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
423.	NC10H22+O=>AC10H21+OH	4.36E+06	2.4	5500.0
424.	NC10H22+O=>CC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
425.	NC10H22+O=>DC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
426.	NC10H22+O=>EC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
427.	NC10H22+H=>AC10H21+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
428.	NC10H22+H=>CC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
429.	NC10H22+H=>DC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
430.	NC10H22+H=>EC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
431.	NC10H22+CH3=>AC10H21+CH4	1.30E+12	0.0	11600.0
432.	NC10H22+CH3=>CC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
433.	NC10H22+CH3=>DC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
434.	NC10H22+CH3=>EC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
435.	AC10H21=>AC8H17+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
436.	AC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
437.	DC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	18951.0
438.	AC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
439.	EC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	11951.0
440.	DC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
441.	CC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
442.	EC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
443.	CC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
444.	CC9H17C+HO2=>CYC9H18+O2	7.61E+09	0.6	-976.0
445.	FC9H17C+HO2=>CYC9H18+O2	2.06E+11	0.2	-502.0
446.	CYC9H18+OH=>CC9H17C+H2O	1.50E+09	1.0	260.0
447.	CC9H17C+H2O=>CYC9H18+OH	5.86E+05	1.8	19319.0
448.	CYC9H18+OH=>EC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
449.	CYC9H18+OH=>FC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

450.	FC9H17C+H2O=>C9H18+OH	2.91E+10	0.4	19923.0
451.	C9H18+O=>C9H17C+OH	4.77E+04	2.7	2106.0
<b>452.</b>	<b>C9H17C+OH=&gt;C9H18+O</b>	<b>7.09E-01</b>	<b>3.6</b>	<b>3880.0</b>
453.	C9H18+O=>C9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
454.	C9H18+O=>FC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
455.	FC9H17C+OH=>C9H18+O	1.75E+02	3.1	4410.0
456.	C9H18+H=>C9H17C+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
457.	C9H17C+H2=>C9H18+H	3.16E+01	3.4	8034.0
458.	C9H18+H=>C9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
459.	C9H18+H=>FC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
460.	FC9H17C+H2=>C9H18+H	6.59E+10	0.6	12009.0
461.	C9H18+C2H5=>C9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
462.	C9H18+C2H5=>FC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
463.	C9H18+AC3H5=>C9H17C+AC3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
464.	C9H17C+AC3H5=>C9H18+AC3H6	9.60E-05	4.7	-8904.0
465.	C9H18+AC3H5=>C9H17C+AC3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
466.	C9H18+AC3H5=>FC9H17C+AC3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
467.	FC9H17C+AC3H5=>C9H18+AC3H6	3.88E+08	0.9	-4772.0
<b>468.</b>	<b>C9H17C+CH2O=&gt;C9H18+HCO</b>	<b>4.85E-02</b>	<b>3.9</b>	<b>-3866.0</b>
<b>469.</b>	<b>FC9H17C+CH2O=&gt;C9H18+HCO</b>	<b>1.96E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>267.0</b>
470.	C9H18+CH3O=>C9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
471.	C9H18+CH3O=>FC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
472.	C9H18+CH3O=>FC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
473.	C9H18=>3C2H4+C3H6	1.30E+17	0.0	83999.0
474.	FC9H17C=>C9H17C	4.00E+11	0.0	18100.0
475.	C9H17C=>FC9H17C	2.95E+10	0.4	18027.0
476.	C9H17C=>C4H6+C2H4+NC3H7	2.00E+13	0.0	44000.0
477.	NO+H+M=>HNO+M	2.70E+15	0.0	-600.0
478.	HNO+M=>NO+H+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	1.05E+17	-0.2	49397.0
479.	NO+H+N2=>HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
<b>480.</b>	<b>HNO+N2=&gt;NO+H+N2</b>	<b>2.72E+21</b>	<b>-1.7</b>	<b>49996.0</b>
481.	NO+O+M=>NO2+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	7.50E+19	-1.4	0.0
482.	NO2+M=>NO+O+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	1.51E+24	-2.1	73627.0
483.	NO+OH+M=>HONO+M H2O/5.0/	5.10E+23	-2.5	-68.0
484.	HONO+M=>NO+OH+M H2O/5.0/	2.45E+31	-4.0	50372.0
485.	NO+HO2=>NO2+OH	2.10E+12	0.0	-479.0
486.	NO2+OH=>NO+HO2	2.85E+13	-0.1	6306.0
487.	NO+HCO=>HNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
<b>488.</b>	<b>NO+C2H3=&gt;C2H2+HNO</b>	<b>1.00E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>1000.0</b>
<b>489.</b>	<b>C2H2+HNO=&gt;NO+C2H3</b>	<b>3.31E+14</b>	<b>-0.5</b>	<b>16225.0</b>
490.	NO2+H=>NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
491.	NO+OH=>NO2+H	9.60E+08	0.9	28193.0
<b>492.</b>	<b>NO2+O=&gt;NO+O2</b>	<b>3.90E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>-238.0</b>
<b>493.</b>	<b>NO+O2=&gt;NO2+O</b>	<b>2.25E+10</b>	<b>0.5</b>	<b>45236.0</b>
<b>494.</b>	<b>NO2+CO=&gt;CO2+NO</b>	<b>9.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>33779.0</b>
495.	HNO+H=>H2+NO	4.50E+11	0.7	655.0
496.	H2+NO=>HNO+H	4.37E+09	1.2	54266.0
497.	HNO+O=>NO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
498.	HNO+OH=>NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
499.	NO+H2O=>HNO+OH	5.62E+12	0.4	69108.0
500.	NH2+H+M=>NH3+M N2/1.0/	7.84E+13	0.3	-15486.0
501.	NH3+H=>NH2+H2	6.40E+05	2.4	10171.0
502.	NH2+H2=>NH3+H	8.60E+02	2.9	4824.0
503.	NH3+O=>NH2+OH	9.40E+06	1.9	6460.0
504.	NH2+OH=>NH3+O	7.73E+03	2.5	-676.0
505.	NH3+OH=>NH2+H2O	2.00E+06	2.0	566.0
506.	NH2+H2O=>NH3+OH	4.32E+04	2.4	10715.0
507.	NH2+H=>NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
508.	NH+H2=>NH2+H	4.14E+12	0.2	15529.0
509.	NH2+O=>HNO+H	6.60E+14	-0.5	0.0
510.	HNO+H=>NH2+O	3.68E+17	-1.0	29637.0
511.	NH2+O=>NH+OH	6.80E+12	0.0	0.0
<b>512.</b>	<b>NH+OH=&gt;NH2+O</b>	<b>4.31E+11</b>	<b>0.2</b>	<b>10090.0</b>
513.	NH2+OH=>NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
514.	NH+H2O=>NH2+OH	6.65E+06	2.1	28375.0
515.	NH2+HO2=>NH3+O2	1.00E+13	0.0	0.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

516. <b>NH2+NO=&gt;NNH+OH</b>	<b>8.90E+12</b>	<b>-0.3</b>	<b>0.0</b>
517. NNH+OH=>NH2+NO	2.70E+13	-0.6	-739.0
518. NH2+NO=>N2+H2O	2.90E+15	-1.0	0.0
519. <b>N2+H2O=&gt;NH2+NO</b>	<b>8.08E+15</b>	<b>-0.7</b>	<b>124628.0</b>
520. NH+H=>N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
521. N+H2=>NH+H	5.07E+13	0.1	24185.0
522. NH+O=>NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
523. NO+H=>NH+O	4.81E+15	-0.3	71370.0
524. NH+OH=>HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
525. HNO+H=>NH+OH	1.76E+17	-0.7	19547.0
526. NH+OH=>N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
527. N+H2O=>NH+OH	1.36E+13	0.5	41682.0
528. NH+O2=>HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0
529. HNO+O=>NH+O2	8.03E+06	1.7	8766.0
530. NH+O2=>NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0
531. NH+NO=>N2O+H	2.85E+14	-0.4	0.0
532. N2O+H=>NH+NO	1.27E+21	-1.6	36123.0
533. NH+NO=>N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0
534. N2+OH=>NH+NO	3.69E+13	0.0	97253.0
535. N+OH=>NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
536. NO+H=>N+OH	1.92E+15	-0.3	48974.0
537. N+O2=>NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
538. NO+O=>N+O2	6.42E+08	1.1	37972.0
539. N+NO=>N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
540. N2+O=>N+NO	5.35E+12	0.4	74856.0
541. N+CO2=>NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
542. NO+CO=>N+CO2	1.57E+06	0.9	26254.0
543. N+HCCO=>HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
544. N+CH3=>H2CN+H	7.10E+13	0.0	0.0
545. N+CH2=>HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0
546. NNH=>N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
547. N2+H=>NNH	1.51E+06	0.4	6262.0
548. NNH+H=>N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
549. N2+H2=>NNH+H	5.71E+12	0.7	109870.0
550. NNH+O=>N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
551. N2+OH=>NNH+O	2.80E+12	0.6	108081.0
552. NNH+O=>N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
553. N2O+H=>NNH+O	9.26E+18	-0.8	46952.0
554. NNH+O=>NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
555. <b>NH+NO=&gt;NNH+O</b>	<b>1.04E+12</b>	<b>0.4</b>	<b>10829.0</b>
556. NNH+OH=>N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
557. N2+H2O=>NNH+OH	4.59E+13	0.5	125367.0
558. NNH+O2=>N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
559. N2+HO2=>NNH+O2	8.94E+13	0.3	55822.0
560. NNH+O2=>N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
561. N2+O2+H=>NNH+O2	7.57E+12	0.4	6262.0
562. NNH+NO=>N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
563. N2+HNO=>NNH+NO	2.94E+14	0.1	56259.0
564. N2O+M=>N2+O+M	4.00E+14	0.0	56100.0
	N2/1.699/ O2/1.399/ H2O/12.0/ CO/1.5/ CO2/3.0/		
565. N2+O+M=>N2O+M	6.54E+08	1.1	15410.0
	N2/1.699/ O2/1.399/ H2O/12.0/ CO/1.5/ CO2/3.0/		
566. N2O+H=>N2+OH	2.36E-11	7.0	-441.0
567. N2+OH=>N2O+H	8.90E-18	8.4	60689.0
568. N2O+O=>2NO	6.60E+13	0.0	26630.0
569. <b>N2O+O=&gt;N2+O2</b>	<b>1.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>28000.0</b>
570. <b>N2+O2=&gt;N2O+O</b>	<b>1.90E+10</b>	<b>1.0</b>	<b>106411.0</b>
571. N2+HO2=>N2O+OH	3.16E-05	5.3	62713.0
572. N2O+CO=>N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
573. <b>N2+CO2=&gt;N2O+CO</b>	<b>7.41E+11</b>	<b>0.1</b>	<b>107486.0</b>
574. HCN+O=>NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
575. NCO+H=>HCN+O	1.41E+07	2.0	13218.0
576. HCN+O=>NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0
577. NH+CO=>HCN+O	1.59E+00	3.4	36861.0
578. HCN+O=>CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
579. CN+OH=>HCN+O	3.97E+05	2.4	6466.0
580. HCN+OH=>CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
581. CN+H2O=>HCN+OH	1.51E+04	2.5	4852.0
582. HCN+OH=>HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
583. HOCN+H=>HCN+OH	9.21E+06	2.1	5474.0
584. HCN+OH=>HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
585. <b>HNCO+H=&gt;HCN+OH</b>	<b>4.27E+01</b>	<b>3.1</b>	<b>19072.0</b>
586. HCN+OH=>NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

587.	HCN+SCH2=>CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0
588.	CH3+CN=>HCN+SCH2	5.98E+12	0.2	-5493.0
589.	CN+O=>CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
590.	CO+N=>CN+O	2.47E+14	0.1	77011.0
591.	CN+OH=>NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
592.	NCO+H=>CN+OH	2.74E+20	-1.5	30972.0
593.	CN+O2=>NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
<b>594.</b>	<b>NCO+O=&gt;CN+O2</b>	<b>1.02E+17</b>	<b>-1.0</b>	<b>13301.0</b>
595.	CN+CO2=>NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0
596.	CN+H2=>HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
597.	HCN+H=>CN+H2	1.25E+09	1.6	23182.0
598.	CN+CH4=>CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0
599.	CH3+HCN=>CN+CH4	2.77E+05	2.2	18626.0
<b>600.</b>	<b>C2H5+HCN=&gt;CN+C2H6</b>	<b>1.29E+05</b>	<b>2.5</b>	<b>22181.0</b>
601.	CN+C2H4=>C2H3+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
<b>602.</b>	<b>C2H3+HCN=&gt;CN+C2H4</b>	<b>1.54E+14</b>	<b>-0.4</b>	<b>12711.0</b>
603.	HNCO+M=>NH+CO+M N2/1.0/	1.10E+16	0.0	85999.0
604.	HNCO+H=>NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
605.	NH2+CO=>HNCO+H	7.41E+00	3.2	7519.0
606.	HNCO+O=>NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0
<b>607.</b>	<b>NH+CO2=&gt;HNCO+O</b>	<b>1.28E+07</b>	<b>1.8</b>	<b>48452.0</b>
608.	HNCO+O=>NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0
609.	NCO+OH=>HNCO+O	1.04E+05	2.3	1591.0
610.	HNCO+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
611.	NCO+H2O=>HNCO+OH	7.92E+05	2.1	10014.0
612.	HNCO+O2=>HNO+CO2	1.00E+12	0.0	35000.0
613.	HOCN+H=>HNCO+H	2.00E+07	2.0	2000.0
614.	HNCO+H=>HOCN+H	2.74E+09	1.4	27098.0
615.	HOCN+O=>NCO+OH	1.50E+04	2.6	4000.0
616.	HOCN+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
617.	NCO+NO=>N2+CO	8.40E+17	-1.7	763.0
618.	NCO+NO=>N2+CO2	5.60E+17	-1.7	763.0
619.	NCO+HO2=>HNCO+O2	2.00E+13	0.0	0.0
620.	NCO+M=>N+CO+M N2/1.0/	3.10E+16	-0.5	48000.0
621.	N+CO+M=>NCO+M N2/1.0/	6.29E+10	0.8	-7780.0
622.	NCO+H=>NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
623.	NH+CO=>NCO+H	2.27E+07	1.4	23643.0
624.	NCO+O=>NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0
625.	NO+CO=>NCO+O	1.11E+09	1.2	95013.0
626.	NCO+O2=>NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0
627.	NCO+H2=>HNCO+H	7.60E+02	3.0	4000.0
628.	HNCO+H=>NCO+H2	9.88E+03	2.7	12045.0
629.	NCO+HCO=>HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0
<b>630.</b>	<b>NCO+CH4=&gt;CH3+HNCO</b>	<b>9.80E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>8120.0</b>
631.	NCO+CH2O=>HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0
632.	NCO+C2H6=>C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0
633.	NCO+C2H2=>HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0
634.	CH3CN+H=>HCN+CH3	4.00E+07	2.0	2000.0
635.	HCN+CH3=>CH3CN+H	7.83E+01	3.2	5719.0
636.	CH3+HOCN=>CH3CN+OH	5.00E+12	0.0	2000.0
637.	CH3CN+OH=>CH3+HOCN	1.64E+16	-0.8	5307.0
638.	H2CN+M=>HCN+H+M N2/1.0/	3.00E+14	0.0	22000.0
639.	HCN+H+M=>H2CN+M N2/1.0/	3.05E+13	0.2	-3176.0
640.	N2+CH=>HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0
641.	HCCO+NO=>HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
642.	C2H+NO=>CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
643.	CH3+NO=>HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0
644.	CH3+NO=>H2CN+OH	1.50E-01	3.5	3950.0
645.	SCH2+NO=>HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0
<b>646.</b>	<b>SCH2+NO=&gt;CH2+NO</b>	<b>1.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>647.</b>	<b>CH2+NO=&gt;SCH2+NO</b>	<b>3.84E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>8917.0</b>
648.	CH2+NO=>HCN+OH	2.20E+12	0.0	-378.0
649.	CH+NO=>HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0
650.	CH+NO=>HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0
651.	CH+NO=>NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0
652.	C2H2+NO=>HCO+HCN	6.00E+07	0.0	0.0
653.	2CH3(+M)=>C2H6(+M)	1.48E+20	-2.1	2301.0
Low pressure limit: 0.34890E+43 -0.72135E+01 0.11166E+05				

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950

654.	C2H6 (+M)=>2CH3 (+M)	9.00E+28	-3.7	93972.0
	Low pressure limit:	0.21260E+52	-0.87374E+01	0.10284E+06
655.	CH4 (+M)=>CH3+H (+M)	1.26E+24	-2.6	105622.0
	Low pressure limit:	0.19920E+28	-0.26780E+01	0.99516E+05
656.	CH3+H (+M)=>CH4 (+M)	3.59E+21	-2.5	133.0
	Low pressure limit:	0.56660E+25	-0.25497E+01	-0.59730E+04
657.	CH3+OH (+M)=>CH2OH+H (+M)	1.52E+13	0.0	5477.0
	Low pressure limit:	0.10000E+23	0.00000E+00	0.57000E+04
658.	CH2OH+H (+M)=>CH3+OH (+M)	3.10E+16	-0.9	381.0
	Low pressure limit:	0.20410E+26	-0.93340E+00	0.60400E+03
659.	CH3+OH (+M)=>CH3O+H (+M)	1.14E+14	0.0	14469.0
	Low pressure limit:	0.10000E+21	0.00000E+00	0.12000E+05
660.	CH3O+H (+M)=>CH3+OH (+M)	1.73E+19	-1.0	4179.0
	Low pressure limit:	0.15140E+26	-0.98360E+00	0.17100E+04
661.	CH3+OH (+M)=>SCH2+H2O (+M)	8.29E+12	0.0	6149.0
	Low pressure limit:	0.24630E+31	0.00000E+00	0.91000E+02
662.	SCH2+H2O (+M)=>CH3+OH (+M)	2.67E+11	0.5	6194.0
	Low pressure limit:	0.79470E+29	0.49950E+00	0.13600E+03
663.	C2H6 (+M)=>C2H5+H (+M)	6.79E+16	0.0	100461.0
	Low pressure limit:	0.34530E+20	0.00000E+00	0.87959E+05
664.	C2H5+H (+M)=>C2H6 (+M)	4.65E+13	0.3	-122.0
	Low pressure limit:	0.23630E+17	0.29910E+00	-0.12624E+05
665.	C2H5 (+M)=>C2H4+H (+M)	4.88E+28	-4.7	44423.0
	Low pressure limit:	0.53110E+29	-0.36470E+01	0.38653E+05
666.	C2H4+H (+M)=>C2H5 (+M)	6.04E+27	-4.4	7724.0
	Low pressure limit:	0.65670E+28	-0.34056E+01	0.19540E+04
667.	C2H5+O2 (+M)=>C2H4+HO2 (+M)	2.55E+30	-5.7	13757.0
	Low pressure limit:	0.10000E+31	0.14850E+01	0.14000E+05
668.	C2H2+H (+M)=>C2H3 (+M)	2.67E+13	-0.2	2721.0
	Low pressure limit:	0.25170E+17	0.34100E+00	0.14160E+04
669.	C2H3 (+M)=>C2H2+H (+M)	3.13E+12	0.1	37493.0
	Low pressure limit:	0.29530E+16	0.61700E+00	0.36188E+05
670.	C2H2 (+M)=>C2H+H (+M)	1.65E+25	-3.0	128451.0
	Low pressure limit:	0.22360E+31	-0.32610E+01	0.12587E+06
671.	C2H+H (+M)=>C2H2 (+M)	2.78E+21	-2.3	-3903.0
	Low pressure limit:	0.37720E+27	-0.25908E+01	-0.64860E+04
672.	C2H3+O2 (+M)=>CH2HCO+O (+M)	1.28E+16	-1.1	4329.0
	Low pressure limit:	0.20020E+27	0.11160E+01	0.22120E+04
673.	C2H3+O2 (+M)=>CH2O+HCO (+M)	1.06E+24	-3.5	5030.0
	Low pressure limit:	0.90890E+51	-0.15630E+01	0.48190E+04
674.	C2H2+OH (+M)=>C2H2OH (+M)	1.68E+07	1.5	-2713.0
	Low pressure limit:	0.11470E+25	-0.22950E+01	0.63700E+04
675.	C2H2+CH3 (+M)=>PC3H4+H (+M)	5.76E+17	-1.4	20550.0
	Low pressure limit:	0.33570E+03	0.42330E+01	0.11293E+05
676.	PC3H4+H (+M)=>C2H2+CH3 (+M)	9.57E+22	-2.5	14424.0
	Low pressure limit:	0.55820E+08	0.31277E+01	0.51670E+04
677.	C2H2+CH3 (+M)=>AC3H5 (+M)	1.98E+05	1.9	16456.0
	Low pressure limit:	0.29280E-01	0.57410E+01	0.13823E+05
678.	AC3H5 (+M)=>C2H2+CH3 (+M)	9.58E+13	-0.3	68922.0
	Low pressure limit:	0.14180E+08	0.35767E+01	0.66289E+05
679.	CH3+OH (+M)=>CH3OH (+M)	3.88E+25	-3.6	6347.0
	Low pressure limit:	0.15720E+32	-0.42600E+01	0.50200E+03
680.	CH3OH (+M)=>CH3+OH (+M)	3.42E+31	-4.6	99982.0
	Low pressure limit:	0.13850E+38	-0.52278E+01	0.94137E+05
681.	NC3H7 (+M)=>C3H6+H (+M)	7.47E+15	-1.1	34913.0
	Low pressure limit:	0.23830E+16	-0.81000E-01	0.22861E+05
682.	C3H6+H (+M)=>NC3H7 (+M)	4.35E+14	-0.8	1881.0
	Low pressure limit:	0.13880E+15	0.27420E+00	-0.10170E+05
683.	NC3H7 (+M)=>C2H4+CH3 (+M)	2.10E+14	-0.5	29732.0
	Low pressure limit:	0.88340E+18	-0.59100E+00	0.22448E+05
684.	C2H4+CH3 (+M)=>NC3H7 (+M)	1.81E+07	1.2	5188.0
	Low pressure limit:	0.75940E+11	0.11322E+01	-0.20960E+04
685.	C3H6 (+M)=>AC3H5+H (+M)	9.64E+05	2.8	81757.0
	Low pressure limit:	0.18910E+46	-0.72030E+01	0.10305E+06
686.	AC3H5+H (+M)=>C3H6 (+M)	9.78E+05	2.2	-3902.0
	Low pressure limit:	0.19170E+46	-0.78097E+01	0.17395E+05
687.	AC3H4 (+M)=>PC3H4 (+M)	9.16E+63	-14.6	93371.0
	Low pressure limit:	0.69320E+71	-0.15363E+02	0.93665E+05
688.	PC3H4 (+M)=>AC3H4 (+M)	2.06E+63	-14.5	94530.0
	Low pressure limit:	0.15590E+71	-0.15244E+02	0.94824E+05
689.	NC4H5 (+M)=>C4H4+H (+M)	4.23E+08	0.0	28099.0
	Low pressure limit:	0.43320E+13	0.00000E+00	0.87760E+04

*REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/25 – 0,985 pour former le 15/25 – 0,950*

690.	C4H4+H(+M)=>NC4H5(+M)		2.01E+04	1.4	-8149.0
	Low pressure limit:	0.20550E+09	0.13557E+01	-0.27472E+05	
691.	IC4H3(+M)=>C4H2+H(+M)		1.00E+14	0.0	55000.0
	Low pressure limit:	0.20000E+16	0.00000E+00	0.48000E+05	
692.	C4H2+H(+M)=>IC4H3(+M)		1.93E+13	0.7	1988.0
	Low pressure limit:	0.38660E+15	0.71220E+00	-0.50120E+04	
693.	NC4H3(+M)=>C4H2+H(+M)		1.00E+14	0.0	36000.0
	Low pressure limit:	0.10000E+15	0.00000E+00	0.30000E+05	
<b>694.</b>	<b>C4H2+H(+M)=&gt;NC4H3(+M)</b>		<b>6.73E+12</b>	<b>0.5</b>	<b>1324.0</b>
	<b>Low pressure limit:</b>	<b>0.67320E+13</b>	<b>0.51550E+00</b>	<b>-0.46760E+04</b>	

END



# Les mécanismes squelettiques 15/30 – 0,985 et 15/30 – 0,960 obtenus après l'élimination des réactions inutiles

## ELEMENTS

C H O N  
END

## SPECIES

H2 O2 CO CO2 CH4 C2H6 CH2O C2H2 C2H4 C3H6 CH3OH AC3H4  
C4H4 C4H6 C4H2 PC3H4 C6H6 NC10H22 PHC3H7 TOLUEN STYREN PHHCO PHCH2OH CYC9H18  
N2 H O OH HO2 H2O HCO CH3 SCH2 C2H5 CH2 CH  
CH3O CH2OH C3H3 CH2CO C2H3 CH2HCO C2H HCCO IC4H3 C2H2OH NC3H7 AC3H5  
C3H2 NC4H3 PC4H9 NC4H5 AC5H11 AC6H13 BC6H13 AC7H15 AC8H17 AC10H21 CC10H21 DC10H21  
EC10H21 APHC3H6 CPHC3H6 PHCH2 C6H5 APHC2H4 C6H5O C5H5 C5H4OH C5H4O PHCO CC9H17C  
EC9H17C FC9H17C NO HCN N2O NO2 HNO HONO H2CN NNH NH2 NH  
N CN NCO HOCN HNCO  
END

REACTIONS MOLES CAL/MOLE (MECANISME SQUELETTIQUE 15/30 – 0.985)

*REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960*

1.	2H+M=>H2+M	7.31E+17	-1.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
2.	H2+M=>2H+M	2.76E+17	-0.7	103608.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
3.	O+H+M=>OH+M	6.20E+16	-0.6	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
4.	OH+M=>O+H+M	1.43E+16	-0.4	101819.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
5.	H2+O2=>2OH	1.70E+13	0.0	47780.0
6.	O+H2=>OH+H	3.87E+04	2.7	6260.0
7.	OH+H=>O+H2	2.37E+04	2.7	4471.0
8.	H+O2=>OH+O	1.85E+14	0.0	16812.0
9.	OH+O=>H+O2	3.67E+11	0.4	-470.0
10.	H+O2+M=>HO2+M	8.00E+17	-0.8	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
11.	HO2+M=>H+O2+M	2.36E+18	-0.9	49560.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
12.	H+OH+M=>H2O+M	8.62E+21	-2.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
13.	H2O+M=>H+OH+M	5.22E+22	-1.9	119105.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
14.	H2+OH=>H2O+H	2.16E+08	1.5	3430.0
15.	H2O+H=>H2+OH	3.47E+09	1.4	18927.0
16.	H2O+O=>2OH	1.50E+10	1.1	17260.0
17.	2OH=>H2O+O	5.71E+08	1.3	-25.0
18.	HO2+OH=>H2O+O2	2.89E+13	0.0	-497.0
19.	H2O+O2=>HO2+OH	5.94E+13	0.2	69048.0
20.	HO2+O=>OH+O2	1.81E+13	0.0	-400.0
21.	OH+O2=>HO2+O	1.42E+12	0.4	51859.0
22.	H+HO2=>H2+O2	4.28E+13	0.0	1411.0
23.	H2+O2=>H+HO2	5.47E+12	0.4	55459.0
24.	H+HO2=>2OH	1.69E+14	0.0	874.0
25.	2OH=>H+HO2	2.62E+10	0.8	35852.0
26.	H+HO2=>H2O+O	3.01E+13	0.0	1721.0
27.	<b>H2O+O=&gt;H+HO2</b>	<b>1.23E+11</b>	<b>0.7</b>	<b>53984.0</b>
28.	CO+HO2=>CO2+OH	1.50E+14	0.0	23650.0
29.	CO2+OH=>CO+HO2	1.43E+17	-0.5	84747.0
30.	CO+OH=>CO2+H	4.40E+06	1.5	-740.0
31.	CO2+H=>CO+OH	2.70E+13	0.2	25379.0
32.	CO+O+M=>CO2+M	2.83E+13	0.0	-4540.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
33.	CO2+M=>CO+O+M	4.01E+19	-1.0	123398.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

34.	HCO+M=>H+CO+M	1.85E+17	-1.0	17000.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
35.	H+CO+M=>HCO+M	1.82E+16	-0.7	1510.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
36.	HCO+OH=>CO+H2O	1.00E+14	0.0	0.0
37.	CO+H2O=>HCO+OH	5.95E+13	0.5	103615.0
38.	HCO+O=>CO+OH	3.00E+13	0.0	0.0
39.	HCO+O=>CO2+H	3.00E+13	0.0	0.0
40.	HCO+H=>CO+H2	7.22E+13	0.0	0.0
41.	CO+H2=>HCO+H	2.67E+12	0.6	88118.0
42.	HCO+O2=>CO+HO2	2.11E+09	1.1	-620.0
43.	CO+HO2=>HCO+O2	6.11E+08	1.3	33450.0
44.	HCO+CH3=>CO+CH4	1.20E+14	0.0	0.0
<b>45.</b>	<b>CH2O+C2H5=&gt;HCO+C2H6</b>	<b>1.60E+04</b>	<b>2.8</b>	<b>8350.0</b>
46.	CH4+OH=>CH3+H2O	1.60E+06	2.1	2462.0
47.	CH3+H2O=>CH4+OH	2.76E+04	2.4	16077.0
48.	CH4+O=>CH3+OH	1.62E+06	2.3	7094.0
49.	CH3+OH=>CH4+O	1.06E+03	2.7	3424.0
50.	CH4+H=>CH3+H2	2.25E+04	3.0	8757.0
51.	CH3+H2=>CH4+H	2.41E+01	3.4	6875.0
<b>52.</b>	<b>CH3+HO2=&gt;CH4+O2</b>	<b>3.39E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>983.0</b>
53.	CH3+M=>CH2+H+M	1.90E+16	0.0	91599.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
<b>54.</b>	<b>CH2+H+M=&gt;CH3+M</b>	<b>3.89E+13</b>	<b>0.4</b>	<b>-18543.0</b>
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
55.	CH3+M=>CH+H2+M	6.90E+14	0.0	82459.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
56.	CH+H2+M=>CH3+M	2.17E+11	0.6	-25409.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
57.	CH3+HO2=>CH3O+OH	5.00E+12	0.0	0.0
58.	CH3+O=>CH2O+H	8.43E+13	0.0	0.0
59.	CH3+H=>CH2+H2	7.00E+13	0.0	15100.0
60.	CH2+H2=>CH3+H	5.40E+10	0.7	8566.0
61.	CH3+O2=>CH3O+O	1.32E+14	0.0	31398.0
62.	CH3+O2=>CH2O+OH	4.38E+11	0.0	14656.0
63.	2CH3=>C2H5+H	3.01E+13	0.0	13513.0
64.	C2H5+H=>2CH3	1.26E+19	-1.2	4601.0
65.	CH2+OH=>CH+H2O	1.13E+07	2.0	3000.0
66.	CH+H2O=>CH2+OH	2.79E+07	2.0	20770.0
67.	CH2+OH=>CH2O+H	2.50E+13	0.0	0.0
68.	CH2+O=>CO+2H	5.00E+13	0.0	0.0
69.	CH2+O=>CO+H2	6.00E+13	0.0	0.0
70.	CH2+H=>CH+H2	1.00E+18	-1.6	0.0
71.	CH+H2=>CH2+H	1.54E+17	-1.4	2274.0
72.	CH2+O2=>HCO+OH	4.30E+10	0.0	-500.0
73.	CH2+O2=>CO2+H2	3.45E+11	0.0	1000.0
74.	CH2+O2=>CO2+2H	1.60E+12	0.0	1000.0
<b>75.</b>	<b>CH2+O2=&gt;CO+H2O</b>	<b>1.87E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>-1000.0</b>
76.	CH2+O2=>CO+OH+H	8.64E+10	0.0	-500.0
77.	CH2+O2=>CH2O+O	5.00E+13	0.0	9000.0
78.	CH2+CO2=>CH2O+C2O	1.10E+11	0.0	1000.0
79.	2CH2=>C2H2+H2	3.20E+13	0.0	0.0
80.	2CH2=>C2H2+2H	4.00E+13	0.0	0.0
81.	CH2+CH3=>C2H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
82.	CH2+C2H2=>H+C3H3	1.20E+13	0.0	6620.0
83.	SCH2+M=>CH2+M	1.00E+13	0.0	0.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
84.	CH2+M=>SCH2+M	3.84E+12	0.0	8917.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
85.	SCH2+O2=>CO+OH+H	3.00E+13	0.0	0.0
86.	SCH2+H2=>CH3+H	7.00E+13	0.0	0.0
87.	CH3+H=>SCH2+H2	3.49E+16	-0.7	15452.0
88.	SCH2+H=>CH2+H	2.00E+14	0.0	0.0
89.	CH2+H=>SCH2+H	7.69E+13	0.0	8917.0
90.	SCH2+H=>CH+H2	3.00E+13	0.0	0.0
91.	CH+H2=>SCH2+H	1.77E+12	0.2	11191.0
<b>92.</b>	<b>SCH2+OH=&gt;CH2O+H</b>	<b>3.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
93.	SCH2+H2O=>CH3OH	1.80E+13	0.0	0.0
94.	CH3OH=>SCH2+H2O	4.92E+20	-1.5	93590.0
95.	2CH3=>SCH2+CH4	2.14E+13	-0.2	13570.0
96.	SCH2+C2H2=>C3H3+H	1.80E+14	0.0	0.0
97.	C3H3+H=>SCH2+C2H2	3.16E+19	-1.5	21513.0
98.	SCH2+H2O=>CH2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

99. CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O=>SCH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	<b>1.15E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>8917.0</b>
100. SCH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+CO	3.00E+12	0.0	0.0
101. CH+OH=>HCO+H	3.00E+13	0.0	0.0
102. CH+O=>CO+H	1.00E+14	0.0	0.0
103. CH+O <sub>2</sub> =>HCO+O	3.30E+13	0.0	0.0
104. CH+O <sub>2</sub> =>CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
105. CH+CO <sub>2</sub> =>HCO+CO	3.40E+12	0.0	690.0
106. CH+CH <sub>4</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H	6.00E+13	0.0	0.0
107. CH <sub>3</sub> O+M=>CH <sub>2</sub> O+H+M	4.88E+15	0.0	22773.0
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
108. CH <sub>3</sub> O+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	2.35E+10	0.0	1788.0
109. CH <sub>3</sub> +CO <sub>2</sub> =>CH <sub>3</sub> O+CO	6.35E+14	-0.3	48213.0
110. CH <sub>2</sub> O+M=>HCO+H+M	1.26E+16	0.0	77897.0
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
111. HCO+H+M=>CH <sub>2</sub> O+M	<b>2.53E+13</b>	<b>0.3</b>	<b>-12801.0</b>
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
112. CH <sub>2</sub> O+OH=>HCO+H <sub>2</sub> O	1.72E+09	1.2	-447.0
113. HCO+H <sub>2</sub> O=>CH <sub>2</sub> O+OH	2.09E+07	1.6	27959.0
114. CH <sub>2</sub> O+O=>HCO+OH	1.81E+13	0.0	3088.0
115. CH <sub>2</sub> O+H=>HCO+H <sub>2</sub>	1.26E+08	1.6	2170.0
116. HCO+H <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+H	9.54E+04	2.2	15079.0
117. CH <sub>2</sub> O+CH <sub>3</sub> =>HCO+CH <sub>4</sub>	4.09E+12	0.0	8843.0
118. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O	4.10E+06	2.1	860.0
119. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O=>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +OH	1.70E+04	2.5	19381.0
120. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH	9.99E+08	1.5	5803.0
121. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +O	<b>1.58E+05</b>	<b>2.0</b>	<b>7039.0</b>
122. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub>	5.25E+14	0.0	12800.0
123. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +H	1.36E+11	0.6	15825.0
124. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>4</sub>	7.54E+00	3.7	9883.0
125. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub> O	2.41E+13	0.0	0.0
126. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +OH=>CH <sub>3</sub> +CH <sub>2</sub> O+H	2.41E+13	0.0	0.0
127. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +O=>CH <sub>2</sub> O+CH <sub>3</sub>	4.24E+13	0.0	0.0
128. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH	3.05E+13	0.0	0.0
129. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub>	<b>1.25E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>8000.0</b>
130. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>4</sub>	1.14E+12	0.0	0.0
131. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> +M	3.00E+17	0.0	79349.0
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
132. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M	1.61E+14	0.5	36344.0
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
133. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H+M	2.97E+17	0.0	96559.0
H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/			
134. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O	2.02E+13	0.0	5936.0
135. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +HCO	1.20E+08	1.4	530.0
136. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +O=>CH <sub>2</sub> HCO+H	2.00E+08	1.4	530.0
137. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	1.00E+14	0.0	15009.0
138. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H	6.28E+09	0.8	6775.0
139. C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> =>2C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	6.73E+11	0.2	-10444.0
140. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub>	6.63E+00	3.7	9499.0
141. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub>	3.88E-01	4.0	3146.0
142. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	3.00E+13	0.0	0.0
143. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	3.00E+13	0.0	0.0
144. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +CO	<b>1.50E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
145. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O=>CH <sub>2</sub> CO+H	<b>1.50E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
146. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +O <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	<b>1.98E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>10000.0</b>
147. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> +H	2.00E+12	0.0	5000.0
148. C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	4.28E+18	-1.4	10662.0
149. C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> =>2C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	3.08E+26	-2.7	118048.0
150. C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H	1.20E+12	0.0	4683.0
151. C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H=>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1.23E+21	-2.2	10889.0
152. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =>HCCO+OH	2.00E+08	1.5	30100.0
153. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> O	3.40E+07	2.0	14000.0
154. C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> O=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH	3.48E+04	2.8	751.0
155. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>CH <sub>3</sub> +CO	<b>4.84E-04</b>	<b>4.0</b>	<b>-2000.0</b>
156. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +OH=>CH <sub>2</sub> CO+H	2.19E-04	4.5	-1000.0
157. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O=>CH <sub>2</sub> +CO	1.98E+04	2.6	656.0
158. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +O=>HCCO+H	4.62E+04	2.6	656.0
159. C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H	1.51E+13	0.0	3100.0
160. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +H=>C <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub>	2.37E+17	-1.0	31846.0
161. C <sub>2</sub> H+OH=>HCCO+H	<b>2.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
162. C <sub>2</sub> H+O=>CO+CH	<b>1.00E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
163. C <sub>2</sub> H+O <sub>2</sub> =>CO+HCO	2.41E+12	0.0	0.0
164. CH <sub>2</sub> CO+H=>CH <sub>2</sub> HCO	1.00E+14	0.0	2500.0
165. CH <sub>2</sub> HCO=>CH <sub>2</sub> CO+H	2.54E+15	-0.4	39358.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

166.	CH <sub>2</sub> HCO+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> CO+HO <sub>2</sub>	1.58E+10	0.0	0.0
167.	CH <sub>2</sub> HCO+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+CO+OH	2.51E+10	0.0	0.0
168.	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH=>CH <sub>2</sub> CO+H	5.00E+15	0.0	28000.0
169.	CH <sub>2</sub> CO+H=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OH	4.87E+16	-0.3	21191.0
<b>170.</b>	<b>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>OH+O<sub>2</sub>=&gt;HCO+CO<sub>2</sub>+H<sub>2</sub></b>	<b>4.00E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>-250.0</b>
171.	CH <sub>2</sub> CO+M=>CH <sub>2</sub> +CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.60E+15	0.0	59270.0
172.	CH <sub>2</sub> +CO+M=>CH <sub>2</sub> CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.39E+06	1.9	-20644.0
173.	CH <sub>2</sub> CO+O=>CH <sub>2</sub> +CO <sub>2</sub>	1.76E+12	0.0	1349.0
174.	CH <sub>2</sub> CO+O=>HCCO+OH	1.00E+13	0.0	8000.0
175.	CH <sub>2</sub> CO+OH=>CH <sub>2</sub> OH+CO	6.93E+12	0.0	0.0
176.	CH <sub>2</sub> CO+OH=>CH <sub>3</sub> +CO <sub>2</sub>	3.10E+12	0.0	0.0
177.	CH <sub>2</sub> CO+H=>CH <sub>3</sub> +CO	1.50E+04	2.8	673.0
178.	CH <sub>3</sub> +CO=>CH <sub>2</sub> CO+H	6.90E-03	4.3	30901.0
179.	CH <sub>2</sub> CO+H=>HCCO+H <sub>2</sub>	1.80E+14	0.0	8600.0
180.	HCCO+H <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> CO+H	4.93E+10	0.6	4755.0
<b>181.</b>	<b>CH<sub>2</sub>CO+CH<sub>3</sub>=&gt;C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>+CO</b>	<b>6.00E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>182.</b>	<b>CH<sub>2</sub>CO+CH<sub>3</sub>=&gt;HCCO+CH<sub>4</sub></b>	<b>7.50E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>13000.0</b>
183.	HCCO+M=>CH+CO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	6.00E+15	0.0	58821.0
184.	CH+CO+M=>HCCO+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.17E+09	1.5	-14975.0
185.	HCCO+OH=>HCO+CO+H	1.00E+13	0.0	0.0
186.	HCCO+O=>2CO+H	1.93E+14	0.0	590.0
187.	HCCO+H=>SCH <sub>2</sub> +CO	1.50E+14	0.0	0.0
188.	SCH <sub>2</sub> +CO=>HCCO+H	5.05E+08	1.6	18621.0
189.	HCCO+O <sub>2</sub> =>CO <sub>2</sub> +CO+H	1.40E+09	1.0	0.0
190.	CH <sub>3</sub> OH+OH=>CH <sub>2</sub> OH+H <sub>2</sub> O	4.53E+11	0.3	1160.0
191.	CH <sub>3</sub> OH+OH=>CH <sub>3</sub> O+H <sub>2</sub> O	3.63E+11	0.7	5868.0
192.	CH <sub>3</sub> OH+O=>CH <sub>2</sub> OH+OH	1.63E+13	0.0	5030.0
193.	CH <sub>3</sub> OH+H=>CH <sub>2</sub> OH+H <sub>2</sub>	4.00E+13	0.0	6100.0
194.	CH <sub>3</sub> OH+CH <sub>3</sub> =>CH <sub>3</sub> O+CH <sub>4</sub>	4.68E+05	2.3	12764.0
195.	CH <sub>2</sub> OH+M=>CH <sub>2</sub> O+H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	1.00E+14	0.0	25100.0
196.	CH <sub>2</sub> O+H+M=>CH <sub>2</sub> OH+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	3.35E+13	0.4	-1062.0
197.	CH <sub>2</sub> OH+H=>CH <sub>2</sub> O+H <sub>2</sub>	3.00E+13	0.0	0.0
198.	CH <sub>2</sub> OH+O <sub>2</sub> =>CH <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	2.17E+14	0.0	4690.0
199.	NC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> +O <sub>2</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +HO <sub>2</sub>	1.00E+12	0.0	5020.0
200.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> =>C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub>	1.10E+21	-1.2	97719.0
201.	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	2.70E+11	0.6	-5635.0
202.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> =>CH <sub>4</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	3.50E+12	0.0	69999.0
203.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +OH=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O	7.70E+05	2.2	622.0
<b>204.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>+H<sub>2</sub>O=&gt;C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+OH</b>	<b>4.73E+06</b>	<b>1.7</b>	<b>34067.0</b>
205.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +HCO	4.69E+07	1.6	-628.0
206.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>CH <sub>3</sub> +CH <sub>2</sub> HCO	3.90E+07	1.6	-628.0
207.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>2</sub> O	7.02E+07	1.6	-628.0
208.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +O=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +OH	1.75E+11	0.7	5884.0
209.	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub>	1.70E+05	2.5	2492.0
210.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> +H	6.50E+04	2.2	20440.0
211.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H <sub>2</sub>	6.03E+12	0.0	0.0
<b>212.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>+H<sub>2</sub>=&gt;AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>+H</b>	<b>3.47E+09</b>	<b>1.2</b>	<b>43856.0</b>
213.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>3</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>4</sub>	1.00E+11	0.0	0.0
214.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>2</sub> =>C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> +H	3.00E+13	0.0	0.0
215.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4.00E+11	0.0	0.0
216.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +M=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H+M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	2.00E+18	0.0	79999.0
217.	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H+M=>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +M H <sub>2</sub> O/16.25/ CO/1.875/ CO <sub>2</sub> /3.75/ CH <sub>4</sub> /16.25/ C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /16.25/	2.53E+15	0.1	-10262.0
218.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> =>PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	1.20E+15	0.0	92399.0
219.	PC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	2.70E+14	0.1	93558.0
220.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +OH=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O	2.15E+12	0.0	-200.0
221.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +OH=>CH <sub>2</sub> CO+CH <sub>3</sub>	1.00E+12	0.0	-393.0
222.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CO	1.12E-02	4.6	-4243.0
223.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +O=>CH <sub>2</sub> CO+CH <sub>2</sub>	1.00E-03	4.6	-4243.0
224.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +O=>C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> +CH <sub>2</sub> O	2.50E-03	4.6	-4243.0
225.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H=>AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	1.20E+12	0.0	2700.0
226.	AC <sub>3</sub> H <sub>5</sub> =>AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H	7.86E+14	-0.9	62451.0
227.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +H=>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	1.00E+14	0.0	15009.0
228.	AC <sub>3</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub> =>C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>4</sub>	1.33E+12	0.0	7700.0
<b>229.</b>	<b>AC<sub>3</sub>H<sub>4</sub>+AC<sub>3</sub>H<sub>5</sub>=&gt;C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>+C<sub>3</sub>H<sub>6</sub></b>	<b>9.00E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>7700.0</b>

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

230.	PC3H4+M=>C3H3+H+M	4.70E+18	0.0	79999.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
231.	C3H3+H+M=>PC3H4+M	2.64E+16	0.0	-11421.0
	H2O/16.25/ CO/1.875/ CO2/3.75/ CH4/16.25/ C2H6/16.25/			
232.	PC3H4=>C2H+CH3	4.20E+16	0.0	99999.0
233.	C2H+CH3=>PC3H4	4.26E+07	1.8	-26228.0
234.	PC3H4+OH=>C3H3+H2O	6.50E+02	3.0	200.0
235.	PC3H4+O=>CH2CO+CH2	6.40E+12	0.0	2100.0
236.	PC3H4+O=>C2H3+HCO	3.20E+12	0.0	2100.0
237.	PC3H4+O=>HCCO+CH3	9.18E+12	0.0	2100.0
238.	PC3H4+H=>C3H3+H2	2.00E+14	0.0	15000.0
239.	C3H3+H2=>PC3H4+H	4.24E+11	0.3	27187.0
240.	C3H3+O2=>CH2CO+HCO	3.01E+10	0.0	2870.0
241.	C3H3+OH=>C3H2+H2O	5.00E+12	0.0	0.0
242.	C3H3+OH=>HCCO+CH3	5.00E+12	0.0	0.0
243.	C3H3+O=>C2H2+HCO	1.39E+14	0.0	0.0
244.	C3H3+O=>C2H3+CO	4.62E+13	0.0	0.0
245.	C3H3+O=>C2H+CH2O	4.62E+13	0.0	0.0
246.	C3H3+O=>C2H2+CO+H	4.62E+13	0.0	0.0
247.	C3H3+H=>C3H2+H2	5.00E+13	0.0	3000.0
248.	C3H2+H2=>C3H3+H	3.42E+12	0.5	31179.0
249.	C3H3+CH=>NC4H3+H	7.00E+13	0.0	0.0
250.	C3H3+CH2=>C4H4+H	4.00E+13	0.0	0.0
251.	C3H3+CH3=>C4H6	3.33E+12	0.0	0.0
252.	C4H6=>C3H3+CH3	2.21E+22	-1.8	92914.0
253.	CH+C2H2=>C3H2+H	1.00E+14	0.0	0.0
254.	C3H2+H=>CH+C2H2	2.03E+19	-1.2	38501.0
255.	C3H2+O2=>HCCO+HCO	3.00E+10	0.0	2870.0
256.	C3H2+OH=>C2H2+HCO	5.00E+13	0.0	0.0
257.	C3H2+CH2=>IC4H3+H	3.00E+13	0.0	0.0
258.	PC4H9=>C2H5+C2H4	2.50E+12	0.0	28500.0
259.	C4H6=>C2H4+C2H2	1.00E+14	0.0	74999.0
260.	C2H4+C2H2=>C4H6	8.31E+05	1.9	34021.0
261.	C4H6=>NC4H5+H	1.58E+16	0.0	109999.0
262.	NC4H5+H=>C4H6	9.85E+14	-0.4	-911.0
263.	C4H6+OH=>NC4H5+H2O	1.00E+07	2.0	7253.0
264.	C4H6+O=>NC4H5+OH	2.27E+15	-0.5	7028.0
265.	C4H6+H=>NC4H5+H2	5.00E+15	0.0	22800.0
<b>266.</b>	<b>C4H6+CH3=&gt;NC4H5+CH4</b>	<b>2.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>24800.0</b>
267.	NC4H5=>C2H3+C2H2	5.00E+13	0.0	44000.0
268.	C2H3+C2H2=>NC4H5	1.11E+03	2.8	2090.0
269.	NC4H5+OH=>C4H4+H2O	2.00E+07	2.0	1000.0
270.	NC4H5+H=>C4H4+H2	1.00E+14	0.0	0.0
271.	C4H4=>2C2H2	3.20E+13	0.0	77099.0
272.	2C2H2=>C4H4	1.28E+08	1.2	36666.0
273.	C4H4+M=>NC4H3+H+M	1.00E+20	0.0	99299.0
274.	NC4H3+H+M=>C4H4+M	2.11E+18	-0.1	-13814.0
275.	C4H4=>IC4H3+H	6.30E+13	0.0	87099.0
276.	IC4H3+H=>C4H4	4.62E+11	-0.3	-7678.0
277.	C4H4=>C4H2+H2	1.26E+15	0.0	94699.0
278.	C4H2+H2=>C4H4	6.74E+11	0.7	50518.0
279.	C4H4+OH=>IC4H3+H2O	2.00E+07	2.0	2000.0
280.	IC4H3+H2O=>C4H4+OH	8.89E+05	1.8	26327.0
281.	C4H4+OH=>NC4H3+H2O	7.50E+06	2.0	5000.0
282.	NC4H3+H2O=>C4H4+OH	9.58E+05	2.0	10991.0
283.	C4H4+O=>AC3H4+CO	3.00E+13	0.0	1810.0
284.	C4H4+H=>IC4H3+H2	3.33E+05	2.5	9240.0
285.	IC4H3+H2=>C4H4+H	9.21E+02	2.5	18071.0
286.	C4H4+H=>NC4H3+H2	2.00E+07	2.0	15000.0
287.	NC4H3+H2=>C4H4+H	1.59E+05	2.2	5495.0
288.	C4H4+CH3=>IC4H3+CH4	1.66E+01	3.7	9499.0
289.	IC4H3+CH4=>C4H4+CH3	4.28E+01	3.3	20211.0
290.	2C2H2=>IC4H3+H	6.31E+13	0.0	41600.0
291.	IC4H3+H=>2C2H2	1.16E+17	-1.5	-12744.0
292.	IC4H3+O2=>CH2CO+HCCO	1.00E+12	0.0	0.0
293.	IC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
294.	C4H2+H2O=>IC4H3+OH	3.52E+13	0.8	66093.0
295.	IC4H3+O=>CH2CO+C2H	2.00E+13	0.0	0.0
296.	IC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0
297.	C4H2+H2=>IC4H3+H	3.64E+12	1.0	50596.0
<b>298.</b>	<b>AC3H4+C2H=&gt;IC4H3+CH2</b>	<b>6.63E+14</b>	<b>0.5</b>	<b>24847.0</b>
299.	NC4H3+OH=>C4H2+H2O	3.00E+13	0.0	0.0
300.	NC4H3+H=>C4H2+H2	5.00E+13	0.0	0.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

301.	NC4H3+H=>IC4H3+H	1.00E+14	0.0	0.0
302.	C2H2+C2H=>C4H2+H	1.82E+14	0.0	467.0
303.	C4H2+H=>C2H2+C2H	3.84E+20	-1.4	25465.0
304.	C4H2+O=>C3H2+CO	1.20E+12	0.0	0.0
<b>305.</b>	<b>C3H3+PC3H4=&gt;C6H6+H</b>	<b>1.40E+12</b>	<b>0.0</b>	<b>12800.0</b>
306.	2C3H3=>C6H6	3.00E+11	0.0	0.0
307.	C6H6=>2C3H3	4.11E+25	-1.6	149552.0
308.	NC4H5+C2H2=>C6H6+H	2.80E+03	2.9	1400.0
309.	C6H6+H=>NC4H5+C2H2	3.63E+11	2.5	71220.0
<b>310.</b>	<b>NC4H3+C2H3=&gt;C6H6</b>	<b>2.87E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>817.0</b>
311.	C6H6=>NC4H3+C2H3	3.17E+29	-1.9	185226.0
312.	C6H6=>C4H4+C2H2	9.00E+15	0.0	107429.0
<b>313.</b>	<b>C4H4+C2H2=&gt;C6H6</b>	<b>3.30E+03</b>	<b>1.7</b>	<b>1361.0</b>
314.	2C3H3=>C6H5+H	1.00E+13	0.0	0.0
315.	C6H5+H=>2C3H3	9.21E+22	-1.2	36840.0
316.	NC4H3+C2H2=>C6H5	2.80E+03	2.9	1400.0
317.	C6H5=>NC4H3+C2H2	5.82E+13	1.6	108051.0
318.	C5H5+OH=>C5H4OH+H	3.00E+14	0.0	0.0
319.	C5H4OH+H=>C5H5+OH	4.10E+19	-1.1	9150.0
320.	C5H5+OH=>C4H6+CO	1.50E+14	0.0	0.0
321.	C5H4O+H=>NC4H5+CO	1.71E+13	0.0	0.0
322.	C5H5+O=>C5H4O+H	5.00E+14	0.0	0.0
323.	C5H5+O=>NC4H5+CO	2.00E+14	0.0	0.0
324.	C5H4OH=>C5H4O+H	2.10E+13	0.0	48000.0
325.	C5H4O+H=>C5H4OH	8.20E+12	0.3	10014.0
326.	C5H4O=>CO+C4H4	1.00E+12	0.0	53000.0
327.	C6H5+H=>C6H6	2.20E+14	0.0	0.0
328.	C6H6=>C6H5+H	1.37E+18	-0.3	112531.0
329.	C6H6+OH=>C6H5+H2O	2.11E+13	0.0	4570.0
330.	C6H5+H2O=>C6H6+OH	2.05E+10	0.4	11144.0
331.	C6H6+H=>C6H5+H2	2.50E+14	0.0	16000.0
332.	C6H5+H2=>C6H6+H	1.51E+10	0.6	7077.0
333.	C6H6+O=>C6H5O+H	3.56E+01	3.8	940.0
334.	C6H5+C3H6=>C6H6+AC3H5	3.16E+08	0.9	-11871.0
335.	C6H5+O2=>C6H5O+O	2.09E+12	0.0	7470.0
336.	C6H5+HO2=>C6H5O+OH	5.00E+13	0.0	1000.0
337.	C6H5+OH=>C6H5O+H	5.00E+13	0.0	0.0
338.	C6H5+C2H4=>STYREN+H	1.43E+08	1.2	3540.0
339.	STYREN+H=>C6H5+C2H4	2.84E+14	0.0	8684.0
340.	C6H5O=>C5H5+CO	5.00E+15	0.0	63999.0
341.	C5H5+CO=>C6H5O	1.05E+05	2.3	35686.0
342.	TOLUEN=>C6H5+CH3	1.40E+16	0.0	99799.0
343.	C6H5+CH3=>TOLUEN	4.88E+07	1.3	-4178.0
344.	TOLUEN=>PHCH2+H	3.00E+15	0.0	88193.0
345.	PHCH2+H=>TOLUEN	4.31E+14	-0.3	-2545.0
346.	PHCH2+HO2=>TOLUEN+O2	1.27E+14	-0.4	1884.0
347.	TOLUEN+OH=>PHCH2+H2O	1.00E+13	0.0	2180.0
348.	PHCH2+H2O=>TOLUEN+OH	8.71E+12	-0.2	30547.0
349.	TOLUEN+H=>PHCH2+H2	1.26E+14	0.0	8364.0
350.	PHCH2+H2=>TOLUEN+H	6.83E+12	0.0	21234.0
351.	TOLUEN+H=>C6H6+CH3	2.40E+13	0.0	5123.0
352.	C6H6+CH3=>TOLUEN+H	5.22E+08	1.0	13676.0
353.	PHCH2=>C4H4+C3H3	2.00E+14	0.0	83599.0
354.	PHCH2=>C5H5+C2H2	6.03E+13	0.0	69999.0
355.	C5H5+C2H2=>PHCH2	1.67E+05	1.5	1056.0
356.	PHCH2+OH=>PHCH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
357.	PHCH2OH=>PHCH2+OH	1.41E+18	-0.6	84716.0
358.	PHCH2+O=>PHHCO+H	1.58E+13	0.0	0.0
359.	PHCH2+O=>C6H5+CH2O	1.00E+13	0.0	0.0
360.	PHCH2+C3H3=>TOLUEN+C3H2	1.00E+12	0.0	0.0
361.	PHCH2OH+O2=>PHHCO+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
362.	PHCH2OH+OH=>PHHCO+H2O+H	8.43E+12	0.0	2583.0
363.	PHCH2OH+H=>C6H6+CH2OH	1.20E+13	0.0	5148.0
364.	PHHCO=>PHCO+H	3.98E+15	0.0	83700.0
365.	PHCO+H=>PHHCO	6.88E+12	0.3	-3725.0
366.	PHHCO+OH=>PHCO+H2O	1.71E+09	1.2	-447.0
367.	PHHCO+O=>PHCO+OH	9.04E+12	0.0	3080.0
368.	PHHCO+H=>PHCO+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
369.	PHHCO+H=>C6H6+HCO	1.20E+13	0.0	5148.0
370.	PHHCO+CH3=>PHCO+CH4	2.77E+03	2.8	5773.0
371.	PHCO=>C6H5+CO	3.98E+14	0.0	29401.0
372.	C6H5+CO=>PHCO	8.82E+07	1.4	1418.0
373.	PHCO+O2=>C6H5O+CO2	3.00E+10	0.0	2870.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

374.	APHC2H4=>STYREN+H	3.16E+13	0.0	50670.0
375.	APHC2H4=>C6H5+C2H4	1.00E+14	0.0	35000.0
376.	C6H5+C2H4=>APHC2H4	1.77E+06	1.6	-2553.0
377.	STYREN=>C6H6+C2H2	1.60E+11	0.0	58438.0
378.	STYREN=>2C4H4	3.62E+26	-1.7	142864.0
379.	PHC3H7=>APHC3H6+H	8.00E+15	0.0	100209.0
380.	PHC3H7+H=>APHC3H6+H2	1.33E+06	2.5	6756.0
381.	PHC3H7+O=>APHC3H6+OH	1.93E+05	2.7	3716.0
382.	PHC3H7+OH=>APHC3H6+H2O	3.16E+07	1.8	934.0
383.	PHC3H7+CH3=>APHC3H6+CH4	5.00E+12	0.0	11710.0
384.	APHC3H6=>PHCH2+C2H4	1.00E+14	0.0	13000.0
385.	PHCH2+C2H4=>APHC3H6	7.58E+07	1.3	-125.0
386.	PHC3H7=>CPHC3H6+H	8.00E+15	0.0	86209.0
387.	PHC3H7+H=>CPHC3H6+H2	1.01E+04	2.9	1931.0
388.	PHC3H7+O=>CPHC3H6+OH	4.77E+04	2.7	1106.0
389.	PHC3H7+OH=>CPHC3H6+H2O	7.08E+06	1.9	-1159.0
390.	PHC3H7+O2=>CPHC3H6+HO2	4.00E+13	0.0	35800.0
<b>391.</b>	<b>PHC3H7+PHCH2=&gt;CPHC3H6+TOLUEN</b>	<b>7.94E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>16200.0</b>
<b>392.</b>	<b>PHC3H7+CH3O=&gt;CPHC3H6+CH3OH</b>	<b>7.20E+10</b>	<b>0.0</b>	<b>4470.0</b>
393.	CPHC3H6=>STYREN+CH3	1.00E+14	0.0	34850.0
394.	STYREN+CH3=>CPHC3H6	3.26E+06	1.5	-1355.0
395.	PHC3H7+H=>NC3H7+C6H6	2.40E+13	0.0	5123.0
396.	PHC3H7=>C6H5+NC3H7	5.00E+16	0.0	86499.0
397.	PHC3H7=>PHCH2+C2H5	5.00E+16	0.0	74499.0
398.	PHCH2+C2H5=>PHC3H7	1.44E+08	1.4	-2834.0
399.	PHC3H7=>APHC2H4+CH3	5.00E+16	0.0	77499.0
400.	APHC2H4+CH3=>PHC3H7	2.44E+07	1.7	-12219.0
401.	AC5H11=>C2H4+NC3H7	4.50E+13	0.0	28700.0
402.	AC6H13=>BC6H13	2.00E+11	0.0	11100.0
403.	BC6H13=>AC6H13	3.47E+10	0.1	12180.0
404.	BC6H13=>C3H6+NC3H7	5.00E+13	0.0	28700.0
405.	AC6H13=>C2H4+PC4H9	1.00E+13	0.0	28700.0
406.	AC7H15=>C2H4+AC5H11	2.00E+13	0.0	28700.0
407.	AC8H17=>AC6H13+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
408.	NC10H22=>AC8H17+C2H5	1.00E+17	0.0	79899.0
409.	NC10H22=>AC7H15+NC3H7	1.00E+17	0.0	84299.0
410.	NC10H22=>AC6H13+PC4H9	1.00E+17	0.0	82199.0
411.	NC10H22=>2AC5H11	5.00E+16	0.0	84399.0
412.	NC10H22=>AC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
413.	NC10H22=>CC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
414.	NC10H22=>DC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
415.	NC10H22=>EC10H21+H	1.00E+15	0.0	99999.0
416.	NC10H22+OH=>AC10H21+H2O	1.41E+07	1.8	974.0
417.	NC10H22+OH=>CC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
418.	NC10H22+OH=>DC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
419.	NC10H22+OH=>EC10H21+H2O	2.25E+06	2.0	-1391.0
420.	NC10H22+O=>AC10H21+OH	4.36E+06	2.4	5500.0
421.	NC10H22+O=>CC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
422.	NC10H22+O=>DC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
423.	NC10H22+O=>EC10H21+OH	1.13E+03	3.3	1653.0
424.	NC10H22+H=>AC10H21+H2	5.63E+07	2.0	7700.0
425.	NC10H22+H=>CC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
426.	NC10H22+H=>DC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
427.	NC10H22+H=>EC10H21+H2	1.80E+07	2.0	5000.0
428.	NC10H22+CH3=>AC10H21+CH4	1.30E+12	0.0	11600.0
429.	NC10H22+CH3=>CC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
430.	NC10H22+CH3=>DC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
431.	NC10H22+CH3=>EC10H21+CH4	8.00E+11	0.0	9500.0
432.	AC10H21=>AC8H17+C2H4	2.00E+13	0.0	28700.0
433.	AC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
434.	DC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	18951.0
435.	AC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
436.	EC10H21=>AC10H21	2.62E+10	0.3	11951.0
437.	DC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
438.	CC10H21=>DC10H21	2.00E+11	0.0	11100.0
439.	EC10H21=>CC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
440.	CC10H21=>EC10H21	2.00E+11	0.0	18100.0
441.	CC9H17C+HO2=>C9H18+O2	7.61E+09	0.6	-976.0
442.	FC9H17C+HO2=>C9H18+O2	2.06E+11	0.2	-502.0
443.	C9H18+OH=>CC9H17C+H2O	1.50E+09	1.0	260.0
444.	CC9H17C+H2O=>C9H18+OH	5.86E+05	1.8	19319.0
445.	C9H18+OH=>EC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0
446.	C9H18+OH=>FC9H17C+H2O	5.50E+12	0.0	790.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

447.	FC9H17C+H2O=>CYC9H18+OH	2.91E+10	0.4	19923.0
448.	CYC9H18+O=>CC9H17C+OH	4.77E+04	2.7	2106.0
449.	CC9H17C+OH=>CYC9H18+O	7.09E-01	3.6	3880.0
450.	CYC9H18+O=>EC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
451.	CYC9H18+O=>FC9H17C+OH	8.66E+05	2.6	2563.0
452.	FC9H17C+OH=>CYC9H18+O	1.75E+02	3.1	4410.0
453.	CYC9H18+H=>CC9H17C+H2	1.30E+06	2.4	4471.0
454.	CC9H17C+H2=>CYC9H18+H	3.16E+01	3.4	8034.0
455.	CYC9H18+H=>EC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
456.	CYC9H18+H=>FC9H17C+H2	2.00E+14	0.0	8373.0
457.	FC9H17C+H2=>CYC9H18+H	6.59E+10	0.6	12009.0
458.	CYC9H18+C2H5=>EC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
459.	CYC9H18+C2H5=>FC9H17C+C2H6	4.50E+11	0.0	9540.0
460.	CYC9H18+AC3H5=>CC9H17C+C3H6	1.51E+00	3.5	5481.0
461.	CC9H17C+C3H6=>CYC9H18+AC3H5	9.60E-05	4.7	-8904.0
462.	CYC9H18+AC3H5=>EC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
463.	CYC9H18+AC3H5=>FC9H17C+C3H6	4.50E+11	0.0	9540.0
464.	FC9H17C+C3H6=>CYC9H18+AC3H5	3.88E+08	0.9	-4772.0
<b>465.</b>	<b>CC9H17C+CH2O=&gt;CYC9H18+HCO</b>	<b>4.85E-02</b>	<b>3.9</b>	<b>-3866.0</b>
<b>466.</b>	<b>FC9H17C+CH2O=&gt;CYC9H18+HCO</b>	<b>1.96E+11</b>	<b>0.0</b>	<b>267.0</b>
467.	CYC9H18+CH3O=>CC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
468.	CYC9H18+CH3O=>EC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
469.	CYC9H18+CH3O=>FC9H17C+CH3OH	4.32E+11	0.0	4473.0
470.	CYC9H18=>3C2H4+C3H6	1.30E+17	0.0	83999.0
471.	FC9H17C=>CC9H17C	4.00E+11	0.0	18100.0
472.	CC9H17C=>FC9H17C	2.95E+10	0.4	18027.0
473.	EC9H17C=>C4H6+C2H4+NC3H7	2.00E+13	0.0	44000.0
474.	NO+H+M=>HNO+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	2.70E+15	0.0	-600.0
475.	HNO+M=>NO+H+M H2O/10.0/ O2/1.5/ H2/2.0/ CO2/3.0/ N2/0.0/	1.05E+17	-0.2	49397.0
476.	NO+H+N2=>HNO+N2	7.00E+19	-1.5	0.0
<b>477.</b>	<b>HNO+N2=&gt;NO+H+N2</b>	<b>2.72E+21</b>	<b>-1.7</b>	<b>49996.0</b>
478.	NO+O+M=>NO2+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	7.50E+19	-1.4	0.0
479.	NO2+M=>NO+O+M N2/1.699/ O2/1.5/ H2O/10.0/	1.51E+24	-2.1	73627.0
480.	NO+OH+M=>HONO+M H2O/5.0/	5.10E+23	-2.5	-68.0
481.	HONO+M=>NO+OH+M H2O/5.0/	2.45E+31	-4.0	50372.0
482.	NO+HO2=>NO2+OH	2.10E+12	0.0	-479.0
483.	NO2+OH=>NO+HO2	2.85E+13	-0.1	6306.0
484.	NO+HCO=>HNO+CO	7.20E+12	0.0	0.0
<b>485.</b>	<b>C2H2+HNO=&gt;NO+C2H3</b>	<b>3.31E+14</b>	<b>-0.5</b>	<b>16225.0</b>
486.	NO2+H=>NO+OH	8.40E+13	0.0	0.0
487.	NO+OH=>NO2+H	9.60E+08	0.9	28193.0
488.	NO2+O=>NO+O2	3.90E+12	0.0	-238.0
<b>489.</b>	<b>NO+O2=&gt;NO2+O</b>	<b>2.25E+10</b>	<b>0.5</b>	<b>45236.0</b>
490.	NO2+CO=>CO2+NO	9.00E+13	0.0	33779.0
491.	HNO+H=>H2+NO	4.50E+11	0.7	655.0
492.	H2+NO=>HNO+H	4.37E+09	1.2	54266.0
493.	HNO+O=>NO+OH	1.00E+13	0.0	0.0
494.	HNO+OH=>NO+H2O	3.60E+13	0.0	0.0
495.	NO+H2O=>HNO+OH	5.62E+12	0.4	69108.0
496.	NH2+H=>NH+H2	4.00E+13	0.0	3650.0
497.	NH+H2=>NH2+H	4.14E+12	0.2	15529.0
498.	NH2+O=>HNO+H	6.60E+14	-0.5	0.0
499.	HNO+H=>NH2+O	3.68E+17	-1.0	29637.0
500.	NH2+O=>NH+OH	6.80E+12	0.0	0.0
501.	NH+OH=>NH2+O	4.31E+11	0.2	10090.0
502.	NH2+OH=>NH+H2O	4.00E+06	2.0	1000.0
503.	NH+H2O=>NH2+OH	6.65E+06	2.1	28375.0
504.	NH2+NO=>NNH+OH	8.90E+12	-0.3	0.0
505.	NNH+OH=>NH2+NO	2.70E+13	-0.6	-739.0
506.	NH2+NO=>N2+H2O	2.90E+15	-1.0	0.0
507.	N2+H2O=>NH2+NO	8.08E+15	-0.7	124628.0
508.	NH+H=>N+H2	3.00E+13	0.0	0.0
509.	N+H2=>NH+H	5.07E+13	0.1	24185.0
510.	NH+O=>NO+H	9.20E+13	0.0	0.0
511.	NO+H=>NH+O	4.81E+15	-0.3	71370.0
512.	NH+OH=>HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
513.	HNO+H=>NH+OH	1.76E+17	-0.7	19547.0



REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

514.	NH+OH=>N+H2O	5.00E+11	0.5	2000.0
515.	N+H2O=>NH+OH	1.36E+13	0.5	41682.0
516.	NH+O2=>HNO+O	4.60E+05	2.0	6500.0
517.	HNO+O=>NH+O2	8.03E+06	1.7	8766.0
518.	NH+O2=>NO+OH	1.30E+06	1.5	100.0
519.	NH+NO=>N2O+H	2.85E+14	-0.4	0.0
520.	N2O+H=>NH+NO	1.27E+21	-1.6	36123.0
521.	NH+NO=>N2+OH	2.20E+13	-0.2	0.0
522.	N2+OH=>NH+NO	3.69E+13	0.0	97253.0
523.	N+OH=>NO+H	3.80E+13	0.0	0.0
524.	NO+H=>N+OH	1.92E+15	-0.3	48974.0
525.	N+O2=>NO+O	6.40E+09	1.0	6280.0
526.	NO+O=>N+O2	6.42E+08	1.1	37972.0
527.	N+NO=>N2+O	3.30E+12	0.3	0.0
528.	N2+O=>N+NO	5.35E+12	0.4	74856.0
529.	N+CO2=>NO+CO	1.90E+11	0.0	3400.0
530.	NO+CO=>N+CO2	1.57E+06	0.9	26254.0
531.	N+HCCO=>HCN+CO	5.00E+13	0.0	0.0
532.	N+CH3=>H2CN+H	7.10E+13	0.0	0.0
533.	N+CH2=>HCN+H	5.00E+13	0.0	0.0
534.	NNH=>N2+H	1.00E+07	0.0	0.0
535.	N2+H=>NNH	1.51E+06	0.4	6262.0
536.	NNH+H=>N2+H2	1.00E+14	0.0	0.0
537.	N2+H2=>NNH+H	5.71E+12	0.7	109870.0
538.	NNH+O=>N2+OH	8.00E+13	0.0	0.0
539.	N2+OH=>NNH+O	2.80E+12	0.6	108081.0
540.	NNH+O=>N2O+H	1.00E+14	0.0	0.0
541.	N2O+H=>NNH+O	9.26E+18	-0.8	46952.0
542.	NNH+O=>NH+NO	5.00E+13	0.0	0.0
543.	NH+NO=>NNH+O	1.04E+12	0.4	10829.0
544.	NNH+OH=>N2+H2O	5.00E+13	0.0	0.0
545.	N2+H2O=>NNH+OH	4.59E+13	0.5	125367.0
546.	NNH+O2=>N2+HO2	2.00E+14	0.0	0.0
547.	N2+HO2=>NNH+O2	8.94E+13	0.3	55822.0
548.	NNH+O2=>N2+O2+H	5.00E+13	0.0	0.0
549.	N2+O2+H=>NNH+O2	7.57E+12	0.4	6262.0
550.	NNH+NO=>N2+HNO	5.00E+13	0.0	0.0
551.	N2+HNO=>NNH+NO	2.94E+14	0.1	56259.0
552.	N2O+M=>N2+O+M	4.00E+14	0.0	56100.0
	N2/1.699/ O2/1.399/ H2O/12.0/ CO/1.5/ CO2/3.0/			
553.	N2+O+M=>N2O+M	6.54E+08	1.1	15410.0
	N2/1.699/ O2/1.399/ H2O/12.0/ CO/1.5/ CO2/3.0/			
554.	N2O+H=>N2+OH	2.36E-11	7.0	-441.0
555.	N2+OH=>N2O+H	8.90E-18	8.4	60689.0
556.	N2O+O=>2NO	6.60E+13	0.0	26630.0
<b>557.</b>	<b>N2O+O=&gt;N2+O2</b>	<b>1.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>28000.0</b>
<b>558.</b>	<b>N2+O2=&gt;N2O+O</b>	<b>1.90E+10</b>	<b>1.0</b>	<b>106411.0</b>
<b>559.</b>	<b>N2O+OH=&gt;N2+HO2</b>	<b>1.30E-02</b>	<b>4.7</b>	<b>36561.0</b>
560.	N2+HO2=>N2O+OH	3.16E-05	5.3	62713.0
561.	N2O+CO=>N2+CO2	3.20E+11	0.0	20237.0
<b>562.</b>	<b>N2+CO2=&gt;N2O+CO</b>	<b>7.41E+11</b>	<b>0.1</b>	<b>107486.0</b>
563.	HCN+O=>NCO+H	1.40E+04	2.6	4980.0
564.	NCO+H=>HCN+O	1.41E+07	2.0	13218.0
565.	HCN+O=>NH+CO	3.50E+03	2.6	4980.0
566.	NH+CO=>HCN+O	1.59E+00	3.4	36861.0
567.	HCN+O=>CN+OH	2.70E+09	1.6	29200.0
568.	CN+OH=>HCN+O	3.97E+05	2.4	6466.0
569.	HCN+OH=>CN+H2O	3.90E+06	1.8	10300.0
570.	CN+H2O=>HCN+OH	1.51E+04	2.5	4852.0
571.	HCN+OH=>HOCN+H	5.90E+04	2.4	12500.0
572.	HOCN+H=>HCN+OH	9.21E+06	2.1	5474.0
573.	HCN+OH=>HNCO+H	2.00E-03	4.0	1000.0
<b>574.</b>	<b>HNCO+H=&gt;HCN+OH</b>	<b>4.27E+01</b>	<b>3.1</b>	<b>19072.0</b>
575.	HCN+OH=>NH2+CO	7.80E-04	4.0	4000.0
576.	HCN+SCH2=>CH3+CN	5.00E+13	0.0	0.0
577.	CH3+CN=>HCN+SCH2	5.98E+12	0.2	-5493.0
578.	CN+O=>CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
579.	CO+N=>CN+O	2.47E+14	0.1	77011.0
580.	CN+OH=>NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
581.	NCO+H=>CN+OH	2.74E+20	-1.5	30972.0
582.	CN+O2=>NCO+O	7.50E+12	0.0	-389.0
<b>583.</b>	<b>NCO+O=&gt;CN+O2</b>	<b>1.02E+17</b>	<b>-1.0</b>	<b>13301.0</b>
584.	CN+CO2=>NCO+CO	3.70E+06	2.2	26884.0

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

<b>585. NCO+CO=&gt;CN+CO2</b>	<b>4.12E+06</b>	<b>2.0</b>	<b>31736.0</b>
586. CN+H2=>HCN+H	3.00E+05	2.5	2237.0
587. HCN+H=>CN+H2	1.25E+09	1.6	23182.0
588. CN+CH4=>CH3+HCN	6.20E+04	2.6	-437.0
589. CH3+HCN=>CN+CH4	2.77E+05	2.2	18626.0
<b>590. CN+C2H6=&gt;C2H5+HCN</b>	<b>1.20E+05</b>	<b>2.8</b>	<b>-1788.0</b>
591. CN+C2H4=>C2H3+HCN	5.90E+14	-0.2	0.0
592. C2H3+HCN=>CN+C2H4	1.54E+14	-0.4	12711.0
593. HNCO+M=>NH+CO+M N2/1.0/	1.10E+16	0.0	85999.0
594. HNCO+H=>NH2+CO	2.20E+07	1.7	3800.0
595. NH2+CO=>HNCO+H	7.41E+00	3.2	7519.0
596. HNCO+O=>NH+CO2	9.80E+07	1.4	8524.0
<b>597. NH+CO2=&gt;HNCO+O</b>	<b>1.28E+07</b>	<b>1.8</b>	<b>48452.0</b>
598. HNCO+O=>NCO+OH	2.20E+06	2.1	11425.0
599. NCO+OH=>HNCO+O	1.04E+05	2.3	1591.0
600. HNCO+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
601. NCO+H2O=>HNCO+OH	7.92E+05	2.1	10014.0
602. HNCO+O2=>HNO+CO2	1.00E+12	0.0	35000.0
603. HOCN+H=>HNCO+H	2.00E+07	2.0	2000.0
604. HNCO+H=>HOCN+H	2.74E+09	1.4	27098.0
605. HOCN+O=>NCO+OH	1.50E+04	2.6	4000.0
606. HOCN+OH=>NCO+H2O	6.40E+05	2.0	2563.0
<b>607. NCO+H2O=&gt;HOCN+OH</b>	<b>1.08E+08</b>	<b>1.6</b>	<b>35112.0</b>
608. NCO+NO=>N2O+CO	8.40E+17	-1.7	763.0
609. NCO+NO=>N2+CO2	5.60E+17	-1.7	763.0
610. NCO+HO2=>HNCO+O2	2.00E+13	0.0	0.0
611. NCO+M=>N+CO+M N2/1.0/	3.10E+16	-0.5	48000.0
612. N+CO+M=>NCO+M N2/1.0/	6.29E+10	0.8	-7780.0
613. NCO+H=>NH+CO	5.00E+13	0.0	0.0
614. NH+CO=>NCO+H	2.27E+07	1.4	23643.0
615. NCO+O=>NO+CO	4.70E+13	0.0	0.0
616. NO+CO=>NCO+O	1.11E+09	1.2	95013.0
617. NCO+O2=>NO+CO2	2.00E+12	0.0	20000.0
618. NCO+H2=>HNCO+H	7.60E+02	3.0	4000.0
619. HNCO+H=>NCO+H2	9.88E+03	2.7	12045.0
620. NCO+HCO=>HNCO+CO	3.60E+13	0.0	0.0
621. NCO+CH2O=>HNCO+HCO	6.00E+12	0.0	0.0
622. NCO+C2H6=>C2H5+HNCO	1.50E-09	6.9	-2910.0
623. NCO+C2H2=>HCCO+HCN	1.40E+12	0.0	1815.0
624. H2CN+M=>HCN+H+M N2/1.0/	3.00E+14	0.0	22000.0
625. HCN+H+M=>H2CN+M N2/1.0/	3.05E+13	0.2	-3176.0
626. N2+CH=>HCN+N	3.70E+07	1.4	20723.0
627. HCCO+NO=>HCN+CO2	1.60E+13	0.0	0.0
628. C2H+NO=>CN+HCO	2.10E+13	0.0	0.0
629. CH3+NO=>HCN+H2O	1.50E-01	3.5	3950.0
630. CH3+NO=>H2CN+OH	1.50E-01	3.5	3950.0
631. SCH2+NO=>HCN+OH	2.00E+13	0.0	0.0
<b>632. SCH2+NO=&gt;CH2+NO</b>	<b>1.00E+14</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>633. CH2+NO=&gt;SCH2+NO</b>	<b>3.84E+13</b>	<b>0.0</b>	<b>8917.0</b>
634. CH2+NO=>HCN+OH	2.20E+12	0.0	-378.0
635. CH+NO=>HCN+O	4.80E+13	0.0	0.0
636. CH+NO=>HCO+N	3.40E+13	0.0	0.0
637. CH+NO=>NCO+H	1.90E+13	0.0	0.0
638. C2H2+NO=>HCO+HCN	6.00E+07	0.0	0.0
639. 2CH3(+M)=>C2H6(+M) Low pressure limit: 0.34890E+43 -0.72135E+01	1.48E+20	-2.1	2301.0
640. C2H6(+M)=>2CH3(+M) Low pressure limit: 0.21260E+52 -0.87374E+01	0.11166E+05 9.00E+28	0.0 -3.7	0.0 93972.0
641. CH4(+M)=>CH3+H(+M) Low pressure limit: 0.19920E+28 -0.26780E+01	0.10284E+06 1.26E+24	0.0 -2.6	0.0 105622.0
642. CH3+H(+M)=>CH4(+M) Low pressure limit: 0.56660E+25 -0.25497E+01	0.99516E+05 3.59E+21	0.0 -2.5	0.0 133.0
643. CH3+OH(+M)=>CH2OH+H(+M) Low pressure limit: 0.10000E+23 0.00000E+00	-0.59730E+04 1.52E+13	0.0 0.0	0.0 5477.0
644. CH2OH+H(+M)=>CH3+OH(+M) Low pressure limit: 0.20410E+26 -0.93340E+00	0.57000E+04 3.10E+16	0.0 -0.9	0.0 381.0
645. CH3+OH(+M)=>CH3O+H(+M) Low pressure limit: 0.10000E+21 0.00000E+00	0.60400E+03 1.14E+14	0.0 0.0	0.0 14469.0
	0.12000E+05		

REMARQUE : Les réactions représentées en gras sont éliminées du mécanisme squelettique 15/30 – 0,985 pour former le 15/30 – 0,960

646.	CH3O+H(+M)=>CH3+OH(+M)	1.73E+19	-1.0	4179.0
	Low pressure limit: 0.15140E+26 -0.98360E+00	0.17100E+04		
647.	CH3+OH(+M)=>SCH2+H2O(+M)	8.29E+12	0.0	6149.0
	Low pressure limit: 0.24630E+31 0.00000E+00	0.91000E+02		
648.	SCH2+H2O(+M)=>CH3+OH(+M)	2.67E+11	0.5	6194.0
	Low pressure limit: 0.79470E+29 0.49950E+00	0.13600E+03		
649.	C2H6(+M)=>C2H5+H(+M)	6.79E+16	0.0	100461.0
	Low pressure limit: 0.34530E+20 0.00000E+00	0.87959E+05		
650.	C2H5+H(+M)=>C2H6(+M)	4.65E+13	0.3	-122.0
	Low pressure limit: 0.23630E+17 0.29910E+00	-0.12624E+05		
651.	C2H5(+M)=>C2H4+H(+M)	4.88E+28	-4.7	44423.0
	Low pressure limit: 0.53110E+29 -0.36470E+01	0.38653E+05		
652.	C2H4+H(+M)=>C2H5(+M)	6.04E+27	-4.4	7724.0
	Low pressure limit: 0.65670E+28 -0.34056E+01	0.19540E+04		
653.	C2H5+O2(+M)=>C2H4+HO2(+M)	2.55E+30	-5.7	13757.0
	Low pressure limit: 0.10000E+31 0.14850E+01	0.14000E+05		
654.	C2H2+H(+M)=>C2H3(+M)	2.67E+13	-0.2	2721.0
	Low pressure limit: 0.25170E+17 0.34100E+00	0.14160E+04		
655.	C2H3(+M)=>C2H2+H(+M)	3.13E+12	0.1	37493.0
	Low pressure limit: 0.29530E+16 0.61700E+00	0.36188E+05		
656.	C2H2(+M)=>C2H+H(+M)	1.65E+25	-3.0	128451.0
	Low pressure limit: 0.22360E+31 -0.32610E+01	0.12587E+06		
657.	C2H+H(+M)=>C2H2(+M)	2.78E+21	-2.3	-3903.0
	Low pressure limit: 0.37720E+27 -0.25908E+01	-0.64860E+04		
658.	C2H3+O2(+M)=>CH2HCO+O(+M)	1.28E+16	-1.1	4329.0
	Low pressure limit: 0.20020E+27 0.11160E+01	0.22120E+04		
659.	C2H3+O2(+M)=>CH2O+HCO(+M)	1.06E+24	-3.5	5030.0
	Low pressure limit: 0.90890E+51 -0.15630E+01	0.48190E+04		
660.	C2H2+OH(+M)=>C2H2OH(+M)	1.68E+07	1.5	-2713.0
	Low pressure limit: 0.11470E+25 -0.22950E+01	0.63700E+04		
661.	C2H2+CH3(+M)=>PC3H4+H(+M)	5.76E+17	-1.4	20550.0
	Low pressure limit: 0.33570E+03 0.42330E+01	0.11293E+05		
662.	PC3H4+H(+M)=>C2H2+CH3(+M)	9.57E+22	-2.5	14424.0
	Low pressure limit: 0.55820E+08 0.31277E+01	0.51670E+04		
663.	C2H2+CH3(+M)=>AC3H5(+M)	1.98E+05	1.9	16456.0
	Low pressure limit: 0.29280E-01 0.57410E+01	0.13823E+05		
664.	AC3H5(+M)=>C2H2+CH3(+M)	9.58E+13	-0.3	68922.0
	Low pressure limit: 0.14180E+08 0.35767E+01	0.66289E+05		
665.	CH3+OH(+M)=>CH3OH(+M)	3.88E+25	-3.6	6347.0
	Low pressure limit: 0.15720E+32 -0.42600E+01	0.50200E+03		
666.	CH3OH(+M)=>CH3+OH(+M)	3.42E+31	-4.6	99982.0
	Low pressure limit: 0.13850E+38 -0.52278E+01	0.94137E+05		
667.	NC3H7(+M)=>C3H6+H(+M)	7.47E+15	-1.1	34913.0
	Low pressure limit: 0.23830E+16 -0.81000E-01	0.22861E+05		
668.	C3H6+H(+M)=>NC3H7(+M)	4.35E+14	-0.8	1881.0
	Low pressure limit: 0.13880E+15 0.27420E+00	-0.10170E+05		
669.	NC3H7(+M)=>C2H4+CH3(+M)	2.10E+14	-0.5	29732.0
	Low pressure limit: 0.88340E+18 -0.59100E+00	0.22448E+05		
670.	C2H4+CH3(+M)=>NC3H7(+M)	1.81E+07	1.2	5188.0
	Low pressure limit: 0.75940E+11 0.11322E+01	-0.20960E+04		
671.	C3H6(+M)=>AC3H5+H(+M)	9.64E+05	2.8	81757.0
	Low pressure limit: 0.18910E+46 -0.72030E+01	0.10305E+06		
672.	AC3H5+H(+M)=>C3H6(+M)	9.78E+05	2.2	-3902.0
	Low pressure limit: 0.19170E+46 -0.78097E+01	0.17395E+05		
673.	AC3H4(+M)=>PC3H4(+M)	9.16E+63	-14.6	93371.0
	Low pressure limit: 0.69320E+71 -0.15363E+02	0.93665E+05		
674.	PC3H4(+M)=>AC3H4(+M)	2.06E+63	-14.5	94530.0
	Low pressure limit: 0.15590E+71 -0.15244E+02	0.94824E+05		
675.	NC4H5(+M)=>C4H4+H(+M)	4.23E+08	0.0	28099.0
	Low pressure limit: 0.43320E+13 0.00000E+00	0.87760E+04		
676.	C4H4+H(+M)=>NC4H5(+M)	2.01E+04	1.4	-8149.0
	Low pressure limit: 0.20550E+09 0.13557E+01	-0.27472E+05		
677.	IC4H3(+M)=>C4H2+H(+M)	1.00E+14	0.0	55000.0
	Low pressure limit: 0.20000E+16 0.00000E+00	0.48000E+05		
678.	C4H2+H(+M)=>IC4H3(+M)	1.93E+13	0.7	1988.0
	Low pressure limit: 0.38660E+15 0.71220E+00	-0.50120E+04		
679.	NC4H3(+M)=>C4H2+H(+M)	1.00E+14	0.0	36000.0
	Low pressure limit: 0.10000E+15 0.00000E+00	0.30000E+05		
<b>680.</b>	<b>C4H2+H(+M)=&gt;NC4H3(+M)</b>	<b>6.73E+12</b>	<b>0.5</b>	<b>1324.0</b>
	<b>Low pressure limit: 0.67320E+13 0.51550E+00</b>	<b>-0.46760E+04</b>		

END



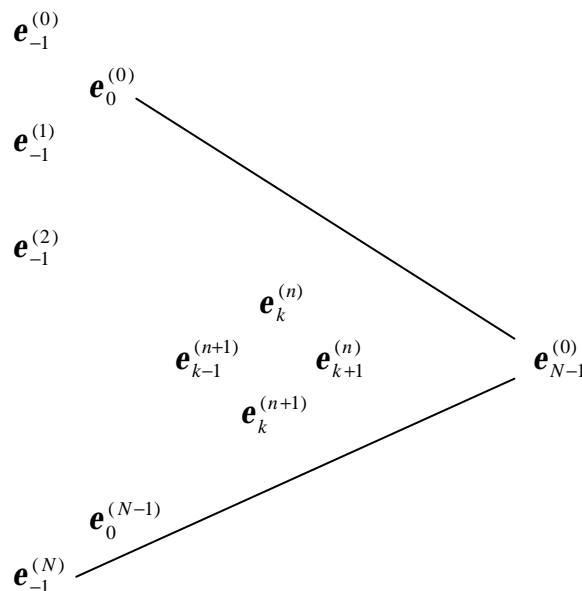
# Annexe V

## L'accélérateur de convergence et extrapolation (e-algorithme de Wynn)

Etant donnée une suite  $S_0, S_1, \dots$  du type :

$$S_n = j(n) = S + \sum_{i=1}^k a_i I_i^n$$

avec  $|I_i| < 1$ , qui converge vers  $S$  quand  $n \rightarrow \infty$ , l' $\epsilon$ -Algorithme détermine une approximation de  $S$  connaissant un certain nombre de termes de la suite. A partir de  $N$  valeurs de la suite  $S_n$ , on construit le tableau triangulaire suivant :



à l'aide des formules suivantes :

$$\begin{aligned} e_{k+1}^{(n)} &= e_{k-1}^{(n+1)} + \frac{1}{e_k^{(n+1)} - e_k^{(n)}} & n &= 0, 1, \dots, N-2 \\ & & k &= 0, 1, \dots, N-1 \\ e_{-1}^{(n)} &= 0 & n &= 0, 1, \dots, N \\ e_0^{(n)} &= S_n & n &= 0, 1, \dots, N-1 \end{aligned}$$

On montre (*Brezinsky, 1971*) que les éléments :

$$e_{2p}^{(i)} \quad \begin{aligned} i &= N-1, N-3, \dots \\ p &= 0, 1, \dots \end{aligned}$$

convergent vers  $S$  sous certaines conditions.

# L'algorithmie

```

SUBROUTINE DQ4AWO (N, EPSTAB, RESULT, ABSERR, RES3LA, NRES)
C
C          SPECIFICATIONS FOR ARGUMENTS
INTEGER    N, NRES
DOUBLE PRECISION RESULT, ABSERR, EPSTAB(52), RES3LA(3)
C
C          SPECIFICATIONS FOR LOCAL VARIABLES
INTEGER    I, IB, IB2, IE, INDX, K1, K2, K3, LIMEXP, NEWELM, NUM
DOUBLE PRECISION DELTA1, DELTA2, DELTA3, E0, E1, E1ABS, E2, E3,
&          EPMACH, EPSINF, ERR1, ERR2, ERR3, ERROR, OFLOW, RES,
&          SS, TOL1, TOL2, TOL3, UFLOW
C
C          SPECIFICATIONS FOR INTRINSICS
C
C          INTRINSIC  DABS, DMAX1
C          INTRINSIC  DABS, DMAX1
C          DOUBLE PRECISION DABS, DMAX1
C
C          SPECIFICATIONS FOR SUBROUTINES
C
epmach = 2.2d-16
uflow  = 5.4d-79
oflow  = 7.2d+75
NRES = NRES + 1
ABSERR = OFLOW
RESULT = EPSTAB(N)
IF (N .LT. 3) GO TO 100
LIMEXP = 50
EPSTAB(N+2) = EPSTAB(N)
NEWELM = (N-1)/2
EPSTAB(N) = OFLOW
NUM = N
K1 = N
DO 40 I=1, NEWELM
  K2 = K1 - 1
  K3 = K1 - 2
  RES = EPSTAB(K1+2)
  E0 = EPSTAB(K3)
  E1 = EPSTAB(K2)
  E2 = RES
  E1ABS = DABS(E1)
  DELTA2 = E2 - E1
  ERR2 = DABS(DELTA2)
  TOL2 = DMAX1(DABS(E2), E1ABS)*EPMACH
  DELTA3 = E1 - E0
  ERR3 = DABS(DELTA3)
  TOL3 = DMAX1(E1ABS, DABS(E0))*EPMACH
  IF (ERR2.GT.TOL2 .OR. ERR3.GT.TOL3) GO TO 10
C
C          IF E0, E1 AND E2 ARE EQUAL TO WITHIN
C          MACHINE ACCURACY, CONVERGENCE IS
C          ASSUMED. RESULT = E2 ABSERR =
C          ABS(E1-E0)+ABS(E2-E1)
  RESULT = RES
  ABSERR = ERR2 + ERR3
C
C          JUMP OUT OF DO-LOOP
GO TO 100
10  E3 = EPSTAB(K1)
  EPSTAB(K1) = E1
  DELTA1 = E1 - E3
  ERR1 = DABS(DELTA1)
  TOL1 = DMAX1(E1ABS, DABS(E3))*EPMACH

```

```
C                                     IF TWO ELEMENTS ARE VERY CLOSE TO
C                                     EACH OTHER, OMIT A PART OF THE
C                                     TABLE BY ADJUSTING THE VALUE OF N
C
      IF (ERR1.LE.TOL1 .OR. ERR2.LE.TOL2 .OR. ERR3.LE.TOL3) GO TO 20
      SS = 1.0D+00/DELTA1 + 1.0D+00/DELTA2 - 1.0D+00/DELTA3
      EPSINF = DABS(SS*E1)
C                                     TEST TO DETECT IRREGULAR BEHAVIOUR
C                                     IN THE TABLE, AND EVENTUALLY OMIT
C                                     A PART OF THE TABLE ADJUSTING THE
C                                     VALUE OF N.
      IF (EPSINF .GT. 1.0D-04) GO TO 30
20    N = I + I - 1
C                                     JUMP OUT OF DO-LOOP
      GO TO 50
C                                     COMPUTE A NEW ELEMENT AND EVENTUALLY
C                                     ADJUST THE VALUE OF RESULT.
30    RES = E1 + 1.0D+00/SS
      EPSTAB(K1) = RES
      K1 = K1 - 2
      ERROR = ERR2 + DABS(RES-E2) + ERR3
      IF (ERROR .GT. ABSERR) GO TO 40
      ABSERR = ERROR
      RESULT = RES
40    CONTINUE
C                                     SHIFT THE TABLE.
50    IF (N .EQ. LIMEXP) N = 2*(LIMEXP/2) - 1
      IB = 1
      IF ((NUM/2)*2 .EQ. NUM) IB = 2
      IE = NEWELM + 1
      DO 60 I=1, IE
          IB2 = IB + 2
          EPSTAB(IB) = EPSTAB(IB2)
          IB = IB2
60    CONTINUE
      IF (NUM .EQ. N) GO TO 80
      INDX = NUM - N + 1
      DO 70 I=1, N
          EPSTAB(I) = EPSTAB(INDX)
          INDX = INDX + 1
70    CONTINUE
80    IF (NRES .GE. 4) GO TO 90
      RES3LA(NRES) = RESULT
      ABSERR = OFLOW
      GO TO 100
C                                     COMPUTE ERROR ESTIMATE
C
90    ABSERR = DABS(RESULT-RES3LA(3)) + DABS(RESULT-RES3LA(2)) +
      &        DABS(RESULT-RES3LA(1))
      RES3LA(1) = RES3LA(2)
      RES3LA(2) = RES3LA(3)
      RES3LA(3) = RESULT
100   ABSERR = DMAX1(ABSERR, 5.0D+00*EPMACH*DABS(RESULT))
      RETURN
      END
```





# Annexe VI

## Sous-routine CKWYP modifiée pour le schéma réduit du kérosène en PSR. Calcul des vitesses de production molaire (Mécanisme KDIF52)

```
SUBROUTINE CKWYP (P, T, Y, ICKWRK, RCKWRK, WDOT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
PARAMETER(KK= 52, KKX= 91, KSS= 39, II= 694, NITER=11)

C
  DIMENSION ICKWRK(*), RCKWRK(*), Y(*), WDOT(*), XCON(KK), WT(KK),
&           C(KKX), RF(II), CM(II), ABV(KSS), DEN(KSS), XX(KKX),
&           WT1(KKX), V(II), AA(NITER+1, KSS), r(NITER), CTROE(3, II),
&           xlast(3, kss), epstab(niter+2, kss), nitjo(kss), sum(kss),
&           era(kss), sol(kss)
  logical   cvg(kss)
  COMMON /FRACM/ XX
  DATA SMALL/1.D-50/
  DATA RU/8.314510D7/

C
  DATA WT/
& 44.00995064, 18.01534009, 28.01055050, 26.03824067, 2.01593995, 16.04303026,
& 108.14121246, 54.09242129, 28.05418062, 104.15296268, 78.11472201, 40.06533098,
& 92.14181232, 30.00609970, 41.07330096, 32.04243040, 80.08703184, 30.07012057,
& 42.08127093, 30.02649045, 106.12527251, 42.03764081, 50.06054139, 27.02581990,
& 142.28684306, 31.99880028, 120.19599295, 28.01339912, 126.24381280, 40.06533098,
& 91.13384235, 15.03506029, 33.00677025, 38.04939103, 93.10615218, 17.00737011,
& 65.09560168, 52.07648134, 77.10675204, 15.99940014, 51.06851137, 1.00796998,
& 39.05736101, 29.06215060, 41.02967083, 51.06851137, 14.00669956, 14.02709031,
& 43.02522004, 29.01852047, 13.01912034, 17.03060949/
  DATA WT1/
& 44.00995064, 18.01534009, 28.01055050, 26.03824067, 2.01593995, 16.04303026,
& 108.14121246, 54.09242129, 28.05418062, 104.15296268, 78.11472201, 40.06533098,
& 92.14181232, 30.00609970, 41.07330096, 32.04243040, 80.08703184, 30.07012057,
& 42.08127093, 30.02649045, 106.12527251, 42.03764081, 50.06054139, 27.02581990,
& 142.28684306, 31.99880028, 120.19599295, 28.01339912, 126.24381280, 40.06533098,
& 91.13384235, 15.03506029, 33.00677025, 38.04939103, 93.10615218, 17.00737011,
& 65.09560168, 52.07648134, 77.10675204, 15.99940014, 51.06851137, 1.00796998,
& 39.05736101, 29.06215060, 41.02967083, 51.06851137, 14.00669956, 14.02709031,
& 43.02522004, 29.01852047, 13.01912034, 17.03060949, 44.01279926, 16.02263951,
& 41.05291021, 43.02522004, 46.00549984, 31.01406968, 42.01725006, 15.01466954,
& 105.11730254, 47.01346982, 28.03378987, 81.09500182, 125.23584282, 99.19760215,
& 113.22469246, 57.11633122, 53.08445132, 26.01784992, 71.14342153, 105.16093266,
& 85.17051184, 27.04621065, 119.18802297, 119.18802297, 31.03446043, 31.03446043,
& 43.08924091, 29.02136910, 14.02709031, 25.03027070, 141.27887309, 43.04561079,
& 141.27887309, 141.27887309, 141.27887309, 125.23584282, 125.23584282, 43.04561079,
& 85.17051184/

C
  SUMYOW = 0.0
  DO 10 K = 1, KK
    SUMYOW = SUMYOW + Y(K)/WT(K)
  CONTINUE
  SUMYOW = SUMYOW*T*RU

C
  BIG=0.0

C
  DO 20 K = 1, KK
    C(K)=0.0
    XCON(K) = P*Y(K) / ( SUMYOW*WT(K) )
    C(K) = MAX(XCON(K), SMALL)
    IF (XCON(K).GT.0.0) BIG = MAX(BIG, XCON(K))
    WDOT(K)=0.0
  CONTINUE

C
C   CALCUL DES CONSTANTES DE VITESSE
C
  CALL RATECONS (RF, T)

C
C   CALCUL DE LA CONCENTRATION DU PARTENAIRE DE COLLISION
C
  CALL THIRDB (C, KK, II, CM, CTROE, RF, T)

C
```

```

C      INITIALISATION DES CONCENTRATIONS
C
C      CALL UPVALUE( C, KK, KXX)
C
C      CALCUL DES CONCENTRATIONS DES ESPECES EN E.Q.S.
C
C      ADJ = 1.D0/BIG
C      CALL STEADYE (NITER,KSS,ABV,DEN,RF,CM,ADJ,SMALL,C,AA)
C
do 40 i=1,niter
do 30 j=1,kss
  if (i.gt.1) goto 15
  cvg(j)=.false.
  xlast(1,j)=0.0d+0
  xlast(2,j)=0.0d+0
  xlast(3,j)=0.0d+0
  nitjo(j)=0
15  continue
C
  if (cvg(j)) goto 30
  epstab(i,j) = aa(i,j)
C
C tester si i change
  kkjo=i
  call dq4awo(kkjo,epstab(1,j),sum(j),era(j),xlast(1,j),nitjo(j))
C
  rrr = era(j)/(sum(j)+1.0d-60)
  cvg(j) = ( abs(rrr) . lt . 1.d-2 )
C
  if (cvg(j)) then
    sol(j) = sum(j)
  endif
30  continue
40  continue
C
  do 50 j=1,kss
    C(KK+j)=sol(j)
50  continue
C
C      CALCUL DES VITESSES DES REACTIONS ELEMENTAIRES
C
C      CALL ELEMRATE (RF, C, CM, V)
C
WDOT( 1) = 0
&      +V( 28)-V( 29)+V( 30)-V( 31)+V( 32)-V( 33)+V( 39)+V( 74)+V( 75)-V( 79)
&      -V( 102)-V( 107)-V( 111)+V( 172)+V( 175)+V( 178)+V( 191)+V( 375)+V( 494)-V( 541)
&      +V( 542)+V( 572)-V( 573)-V( 595)+V( 606)-V( 607)+V( 612)+V( 618)+V( 626)+V( 641)
C
WDOT( 2) = 0
&      +V( 12)-V( 13)+V( 14)-V( 15)-V( 16)+V( 17)+V( 18)-V( 19)+V( 26)-V( 27)
&      +V( 36)-V( 37)+V( 46)-V( 47)+V( 66)-V( 67)+V( 76)-V( 95)+V( 96)-V( 100)
&      +V( 100)-V( 101)+V( 101)+V( 114)-V( 115)+V( 120)-V( 121)+V( 127)+V( 136)+V( 144)
&      +V( 155)-V( 156)+V( 192)+V( 193)+V( 204)-V( 205)+V( 221)+V( 235)+V( 242)+V( 264)
&      +V( 271)+V( 281)-V( 282)+V( 283)-V( 284)+V( 295)-V( 296)+V( 301)+V( 331)-V( 332)
&      +V( 349)-V( 350)+V( 364)+V( 368)+V( 384)+V( 391)+V( 419)+V( 420)+V( 421)+V( 422)
&      +V( 446)-V( 447)+V( 448)+V( 449)-V( 450)+V( 498)-V( 499)+V( 505)-V( 506)+V( 513)
&      -V( 514)+V( 518)-V( 519)+V( 526)-V( 527)+V( 556)-V( 557)+V( 580)-V( 581)+V( 610)
&      -V( 611)+V( 616)+V( 643)+V( 661)-V( 662)
C
WDOT( 3) = 0
&      -V( 28)+V( 29)-V( 30)+V( 31)-V( 32)+V( 33)+V( 34)-V( 35)+V( 36)-V( 37)
&      +V( 38)+V( 40)-V( 41)+V( 42)-V( 43)+V( 44)+V( 69)+V( 70)+V( 76)+V( 77)
&      +V( 79)+V( 87)+V( 102)+V( 104)+V( 106)+V( 107)+V( 111)+V( 146)+V( 157)+V( 159)
&      +V( 164)+V( 165)+V( 169)+V( 173)-V( 174)+V( 177)+V( 179)-V( 180)+V( 183)+V( 185)
&      -V( 186)+V( 187)+2*V( 188)+V( 189)-V( 190)+V( 191)+V( 223)+V( 245)+V( 247)+V( 285)
&      +V( 306)+V( 322)+V( 323)+V( 325)+V( 328)+V( 342)-V( 343)+V( 373)-V( 374)+V( 487)
&      -V( 494)+V( 541)-V( 542)+V( 543)-V( 572)+V( 573)+V( 576)-V( 577)+V( 586)+V( 589)
&      -V( 590)+V( 595)+V( 603)+V( 604)-V( 605)+V( 617)+V( 620)-V( 621)+V( 622)-V( 623)
&      +V( 624)-V( 625)+V( 629)
C
WDOT( 4) = 0
&      +V( 80)+V( 81)-V( 83)+V( 84)-V( 98)+V( 99)+V( 133)-V( 134)+V( 144)+V( 145)
&      +V( 148)-V( 149)+V( 150)-V( 154)-V( 155)+V( 156)-V( 157)-V( 158)-V( 159)-V( 160)
&      +V( 161)-V( 162)+V( 203)+V( 225)+V( 244)+V( 247)-V( 254)+V( 255)+V( 257)+V( 260)
&      -V( 261)+V( 269)-V( 270)+2*V( 273)-2*V( 274)-2*V( 292)+2*V( 293)-V( 304)+V( 305)
&      -V( 310)+V( 311)+V( 314)-V( 315)-V( 318)+V( 319)+V( 356)-V( 357)+V( 379)+V( 488)
&      -V( 489)-V( 633)-V( 652)-V( 668)+V( 669)-V( 670)+V( 671)-V( 674)-V( 675)+V( 676)

```

& -V( 677)+V( 678)

C

WDOT( 5) = 0

& +V( 1)-V( 2)-V( 5)-V( 6)+V( 7)-V( 14)+V( 15)+V( 22)-V( 23)+V( 40)

& -V( 41)+V( 50)-V( 51)+V( 55)-V( 56)+V( 59)-V( 60)+V( 70)+V( 71)-V( 72)

& +V( 74)+V( 80)-V( 88)+V( 89)+V( 92)-V( 93)+V( 117)-V( 118)+V( 124)-V( 125)

& +V( 131)+V( 133)-V( 134)+V( 139)-V( 140)+V( 145)-V( 161)+V( 162)+V( 172)+V( 181)

& -V( 182)+V( 195)+V( 198)+V( 210)-V( 211)+V( 212)-V( 213)+V( 228)+V( 239)-V( 240)

& +V( 248)-V( 249)+V( 266)-V( 267)+V( 272)+V( 279)-V( 280)+V( 286)-V( 287)+V( 288)

& -V( 289)+V( 298)-V( 299)+V( 302)+V( 333)-V( 334)+V( 351)-V( 352)+V( 370)+V( 382)

& +V( 389)+V( 427)+V( 428)+V( 429)+V( 430)+V( 456)-V( 457)+V( 458)+V( 459)-V( 460)

& +V( 495)-V( 496)+V( 501)-V( 502)+V( 507)-V( 508)+V( 520)-V( 521)+V( 548)-V( 549)

& -V( 596)+V( 597)-V( 627)+V( 628)

C

WDOT( 6) = 0

& +V( 44)-V( 46)+V( 47)-V( 48)+V( 49)-V( 50)+V( 51)+V( 52)+V( 97)-V( 108)

& +V( 119)+V( 126)+V( 132)+V( 142)-V( 143)+V( 184)+V( 196)+V( 203)+V( 214)+V( 229)

& +V( 268)+V( 290)-V( 291)+V( 372)+V( 385)+V( 431)+V( 432)+V( 433)+V( 434)-V( 598)

& +V( 599)-V( 630)-V( 655)+V( 656)

C

WDOT( 7) = 0

& +V( 358)-V( 359)-V( 363)-V( 364)-V( 365)

C

WDOT( 8) = 0

& -V( 151)+V( 152)-V( 153)+V( 215)+V( 252)-V( 253)-V( 260)+V( 261)-V( 262)+V( 263)

& -V( 264)-V( 265)-V( 266)+V( 267)-V( 268)+V( 322)+V( 476)

C

WDOT( 9) = 0

& +V( 82)+V( 108)+V( 127)+V( 130)+V( 131)+V( 132)-V( 133)+V( 134)-V( 135)-V( 136)

& -V( 137)-V( 138)-V( 139)+V( 140)+2\*V( 141)-V( 142)+V( 143)-V( 152)+V( 153)

& +V( 208)+V( 223)+V( 259)+V( 260)-V( 261)-V( 340)+V( 341)+V( 377)-V( 378)+V( 386)

& -V( 387)+V( 403)+V( 408)+V( 409)+V( 410)+V( 435)+2\*V( 473)+V( 476)-V( 601)

& +V( 602)+V( 665)-V( 666)+V( 667)+V( 683)-V( 684)

C

WDOT( 10) = 0

& +V( 340)-V( 341)+V( 376)-V( 379)-V( 380)+V( 395)-V( 396)

C

WDOT( 11) = 0

& +V( 307)+V( 308)-V( 309)+V( 310)-V( 311)+V( 312)-V( 313)-V( 314)+V( 315)+V( 329)

& -V( 330)-V( 331)+V( 332)-V( 333)+V( 334)-V( 335)+V( 336)+V( 353)-V( 354)+V( 365)

& +V( 371)+V( 379)+V( 397)

C

WDOT( 12) = 0

& +V( 212)-V( 213)+V( 214)+V( 216)-V( 217)+V( 218)-V( 219)+V( 220)-V( 221)-V( 222)

& -V( 223)-V( 224)-V( 225)-V( 226)+V( 227)-V( 228)-V( 229)-V( 230)+V( 285)-V( 300)

& -V( 687)+V( 688)

C

WDOT( 13) = 0

& -V( 344)+V( 345)-V( 346)+V( 347)+V( 348)-V( 349)+V( 350)-V( 351)+V( 352)-V( 353)

& +V( 354)+V( 362)+V( 393)

C

WDOT( 14) = 0

& -V( 477)+V( 478)-V( 479)+V( 480)-V( 481)+V( 482)-V( 483)+V( 484)-V( 485)+V( 486)

& -V( 487)-V( 488)+V( 489)+V( 490)-V( 491)+V( 492)-V( 493)+V( 494)+V( 495)-V( 496)

& +V( 497)+V( 498)-V( 499)-V( 516)+V( 517)-V( 518)+V( 519)+V( 522)-V( 523)+V( 530)

& -V( 531)+V( 532)-V( 533)+V( 534)+V( 535)-V( 536)+V( 537)-V( 538)-V( 539)+V( 540)

& +V( 541)-V( 542)+V( 554)-V( 555)-V( 562)+V( 563)+2\*V( 568)-V( 617)-V( 618)

& +V( 624)-V( 625)+V( 626)-V( 641)-V( 642)-V( 643)-V( 644)-V( 645)-V( 646)+V( 646)

& -V( 647)+V( 647)-V( 648)-V( 649)-V( 650)-V( 651)-V( 652)

C

WDOT( 15) = 0

& +V( 204)-V( 205)+V( 209)+V( 210)-V( 211)-V( 212)+V( 213)-V( 214)-V( 215)-V( 216)

& +V( 226)-V( 227)-V( 230)+V( 336)-V( 463)+V( 464)-V( 465)-V( 466)+V( 467)+V( 677)

& -V( 678)+V( 685)-V( 686)

C

WDOT( 16) = 0

& +V( 95)-V( 96)-V( 192)-V( 193)-V( 194)-V( 195)-V( 196)+V( 394)+V( 470)+V( 471)

& +V( 472)+V( 679)-V( 680)

C

WDOT( 17) = 0

& -V( 323)+V( 324)+V( 326)-V( 327)-V( 328)

C

WDOT( 18) = 0

& +V( 45)-V( 120)+V( 121)-V( 122)+V( 123)-V( 124)+V( 125)-V( 126)+V( 216)+V( 461)

& +V( 462)+V( 600)-V( 632)+V( 653)-V( 654)-V( 663)+V( 664)

C

WDOT( 19) = 0

& +V( 200)-V( 201)+V( 202)-V( 203)-V( 204)+V( 205)-V( 206)-V( 207)-V( 208)-V( 209)  
 & -V( 210)+V( 211)+V( 230)-V( 336)+V( 407)+V( 463)-V( 464)+V( 465)+V( 466)-V( 467)  
 & +V( 473)+V( 681)-V( 682)-V( 685)+V( 686)

C

WDOT( 20) = 0  
 & -V( 45)  
 & +V( 58)+V( 63)+V( 68)+V( 78)+V( 79)+V( 94)+V( 102)+V( 109)+V( 110)-V( 112)  
 & +V( 113)-V( 114)+V( 115)-V( 116)-V( 117)+V( 118)-V( 119)+V( 128)+V( 129)+V( 169)  
 & +V( 197)+V( 198)+V( 199)+V( 208)+V( 225)+V( 246)+V( 361)+V( 404)-V( 468)-V( 469)  
 & -V( 631)+V( 673)

C

WDOT( 21) = 0  
 & +V( 360)+V( 363)+V( 364)-V( 366)+V( 367)-V( 368)-V( 369)-V( 370)-V( 371)-V( 372)

C

WDOT( 22) = 0  
 & +V( 147)+V( 158)-V( 166)+V( 167)+V( 168)+V( 170)-V( 171)-V( 173)+V( 174)-V( 175)  
 & -V( 176)-V( 177)-V( 178)-V( 179)+V( 180)-V( 181)+V( 182)-V( 183)-V( 184)+V( 222)  
 & +V( 224)+V( 236)+V( 241)+V( 294)+V( 297)

C

WDOT( 23) = 0  
 & +V( 279)-V( 280)+V( 295)-V( 296)+V( 298)-V( 299)+V( 301)+V( 302)+V( 304)-V( 305)  
 & -V( 306)+V( 691)-V( 692)+V( 693)-V( 694)

C

WDOT( 24) = 0  
 & +V( 543)+V( 545)-V( 574)+V( 575)-V( 576)+V( 577)-V( 578)+V( 579)-V( 580)+V( 581)  
 & -V( 582)+V( 583)-V( 584)+V( 585)-V( 586)-V( 587)+V( 588)+V( 596)-V( 597)+V( 598)  
 & -V( 599)-V( 600)+V( 601)-V( 602)+V( 633)+V( 634)-V( 635)+V( 638)-V( 639)+V( 640)  
 & +V( 641)+V( 643)+V( 645)+V( 648)+V( 649)+V( 652)

C

WDOT( 25) = 0  
 & -V( 411)-V( 412)-V( 413)-V( 414)-V( 415)-V( 416)-V( 417)-V( 418)-V( 419)-V( 420)  
 & -V( 421)-V( 422)-V( 423)-V( 424)-V( 425)-V( 426)-V( 427)-V( 428)-V( 429)-V( 430)  
 & -V( 431)-V( 432)-V( 433)-V( 434)

C

WDOT( 26) = 0  
 & -V( 5)-V( 8)+V( 9)-V( 10)+V( 11)+V( 18)-V( 19)+V( 20)-V( 21)+V( 22)  
 & -V( 23)-V( 42)+V( 43)+V( 52)-V( 61)+V( 62)-V( 63)-V( 73)-V( 74)-V( 75)  
 & -V( 76)-V( 77)-V( 78)-V( 87)-V( 105)-V( 106)-V( 110)-V( 148)-V( 154)-V( 165)  
 & -V( 168)-V( 169)-V( 172)-V( 191)-V( 199)-V( 200)-V( 241)-V( 256)-V( 294)-V( 337)  
 & +V( 348)-V( 363)-V( 375)-V( 392)+V( 444)+V( 445)+V( 492)-V( 493)+V( 515)-V( 528)  
 & +V( 529)-V( 530)-V( 537)+V( 538)-V( 558)+V( 559)-V( 560)+V( 560)-V( 561)+V( 561)  
 & +V( 569)-V( 570)-V( 593)+V( 594)-V( 612)+V( 619)-V( 626)-V( 667)-V( 672)-V( 673)

C

WDOT( 27) = 0  
 & -V( 381)-V( 382)-V( 383)-V( 384)-V( 385)-V( 388)-V( 389)-V( 390)-V( 391)-V( 392)  
 & -V( 393)-V( 394)-V( 397)-V( 398)-V( 399)+V( 400)-V( 401)+V( 402)

C

WDOT( 28) = 0  
 & -V( 479)+V( 479)-V( 480)+V( 480)+V( 518)-V( 519)+V( 533)-V( 534)+V( 539)-V( 540)  
 & +V( 546)-V( 547)+V( 548)-V( 549)+V( 550)-V( 551)+V( 556)-V( 557)+V( 558)-V( 559)  
 & +V( 560)-V( 561)+V( 562)-V( 563)+V( 564)-V( 565)+V( 566)-V( 567)+V( 569)-V( 570)  
 & -V( 571)+V( 572)-V( 573)+V( 618)-V( 640)

C

WDOT( 29) = 0  
 & +V( 444)+V( 445)-V( 446)+V( 447)-V( 448)-V( 449)+V( 450)-V( 451)+V( 452)-V( 453)  
 & -V( 454)+V( 455)-V( 456)+V( 457)-V( 458)-V( 459)+V( 460)-V( 461)-V( 462)-V( 463)  
 & +V( 464)-V( 465)-V( 466)+V( 467)+V( 468)+V( 469)-V( 470)-V( 471)-V( 472)-V( 473)

C

WDOT( 30) = 0  
 & +V( 219)-V( 220)-V( 231)+V( 232)-V( 233)+V( 234)-V( 235)-V( 236)-V( 237)-V( 238)  
 & -V( 239)+V( 240)-V( 307)+V( 675)-V( 676)+V( 687)-V( 688)

C

WDOT( 31) = 0  
 & +V( 346)-V( 347)-V( 348)+V( 349)-V( 350)+V( 351)-V( 352)-V( 355)-V( 356)+V( 357)  
 & -V( 358)+V( 359)-V( 360)-V( 361)-V( 362)+V( 386)-V( 387)-V( 393)+V( 399)-V( 400)

C

WDOT( 32) = 0  
 & -V( 44)+V( 46)-V( 47)+V( 48)-V( 49)+V( 50)-V( 51)-V( 52)-V( 53)+V( 54)  
 & -V( 55)+V( 56)-V( 57)-V( 58)-V( 59)+V( 60)-V( 61)+V( 62)-V( 63)  
 & -2\*V( 64)+2\*V( 65)-V( 82)+V( 88)-V( 89)-2\*V( 97)-V( 111)-V( 119)-V( 126)  
 & +V( 128)+V( 129)-V( 132)+V( 137)-V( 142)+V( 143)+V( 146)+V( 157)+V( 178)+V( 179)  
 & -V( 180)-V( 183)-V( 184)-V( 196)+V( 201)-V( 202)+V( 207)-V( 214)+V( 222)-V( 229)  
 & +V( 233)-V( 234)+V( 238)+V( 243)-V( 252)+V( 253)-V( 268)-V( 290)+V( 291)+V( 344)  
 & -V( 345)+V( 353)-V( 354)-V( 372)-V( 385)+V( 395)-V( 396)+V( 401)-V( 402)-V( 431)  
 & -V( 432)-V( 433)-V( 434)-V( 544)+V( 587)-V( 588)+V( 598)-V( 599)+V( 630)+V( 634)  
 & -V( 635)-V( 636)+V( 637)-V( 643)-V( 644)-2\*V( 653)+2\*V( 654)+V( 655)-V( 656)  
 & -V( 657)+V( 658)-V( 659)+V( 660)-V( 661)+V( 662)-V( 675)+V( 676)-V( 677)+V( 678)

& -V( 679)+V( 680)+V( 683)-V( 684)

C

WDOT( 33) = 0

& +V( 10)-V( 11)-V( 18)+V( 19)-V( 20)+V( 21)-V( 22)+V( 23)-V( 24)+V( 25)

& -V( 26)+V( 27)-V( 28)+V( 29)+V( 42)-V( 43)-V( 52)-V( 57)+V( 110)+V( 148)

& +V( 168)+V( 199)+V( 200)-V( 338)-V( 348)+V( 363)+V( 392)-V( 444)-V( 445)-V( 485)

& +V( 486)-V( 515)+V( 558)-V( 559)-V( 571)-V( 619)+V( 667)

C

WDOT( 34) = 0

& +V( 242)+V( 248)-V( 249)+V( 254)-V( 255)-V( 256)-V( 257)-V( 258)+V( 306)+V( 362)

C

WDOT( 35) = 0

& +V( 335)+V( 337)+V( 338)+V( 339)-V( 342)+V( 343)+V( 375)

C

WDOT( 36) = 0

& +V( 3)-V( 4)+2\*V( 5)+V( 6)-V( 7)+V( 8)-V( 9)-V( 12)+V( 13)

& -V( 14)+V( 15)+2\*V( 16)-2\*V( 17)-V( 18)+V( 19)+V( 20)-V( 21)+2\*V( 24)

& -2\*V( 25)+V( 28)-V( 29)-V( 30)+V( 31)-V( 36)+V( 37)+V( 38)-V( 46)

& +V( 47)+V( 48)-V( 49)+V( 57)+V( 63)-V( 66)+V( 67)-V( 68)+V( 73)+V( 77)

& +V( 87)-V( 94)-V( 103)+V( 106)-V( 114)+V( 115)+V( 116)-V( 120)+V( 121)+V( 122)

& -V( 123)-V( 127)-V( 128)+V( 130)-V( 136)-V( 144)+V( 154)-V( 155)+V( 156)-V( 157)

& -V( 158)-V( 163)+V( 169)+V( 176)-V( 177)-V( 178)-V( 187)-V( 192)-V( 193)+V( 194)

& -V( 204)+V( 205)+V( 209)-V( 221)-V( 222)-V( 235)-V( 242)-V( 243)-V( 257)-V( 264)

& +V( 265)-V( 271)-V( 281)+V( 282)-V( 283)+V( 284)-V( 295)+V( 296)-V( 301)-V( 320)

& +V( 321)-V( 322)-V( 331)+V( 332)+V( 338)-V( 339)-V( 349)+V( 350)-V( 358)+V( 359)

& -V( 364)-V( 368)+V( 369)+V( 383)-V( 384)+V( 390)-V( 391)-V( 419)-V( 420)-V( 421)

& -V( 422)+V( 423)+V( 424)+V( 425)+V( 426)-V( 446)+V( 447)-V( 448)-V( 449)+V( 450)

& +V( 451)-V( 452)+V( 453)+V( 454)-V( 455)-V( 483)+V( 484)+V( 485)-V( 486)+V( 490)

& -V( 491)+V( 497)-V( 498)+V( 499)+V( 503)-V( 504)-V( 505)+V( 506)+V( 511)-V( 512)

& -V( 513)+V( 514)+V( 516)-V( 517)-V( 524)+V( 525)-V( 526)+V( 527)+V( 530)+V( 533)

& -V( 534)-V( 535)+V( 536)+V( 550)-V( 551)-V( 556)+V( 557)+V( 566)-V( 567)+V( 571)

& +V( 578)-V( 579)-V( 580)+V( 581)-V( 582)+V( 583)-V( 584)+V( 585)-V( 586)-V( 591)

& +V( 592)+V( 608)-V( 609)-V( 610)+V( 611)+V( 615)-V( 616)+V( 636)-V( 637)+V( 644)

& +V( 645)+V( 648)-V( 657)+V( 658)-V( 659)+V( 660)-V( 661)+V( 662)-V( 674)-V( 679)

& +V( 680)

C

WDOT( 37) = 0

& -V( 320)+V( 321)-V( 322)-V( 324)-V( 325)+V( 342)-V( 343)+V( 356)-V( 357)

C

WDOT( 38) = 0

& +V( 149)-V( 150)+V( 251)+V( 271)+V( 272)-V( 273)+V( 274)-V( 275)+V( 276)-V( 277)

& +V( 278)-V( 279)+V( 280)-V( 281)+V( 282)-V( 283)+V( 284)-V( 285)-V( 286)+V( 287)

& -V( 288)+V( 289)-V( 290)+V( 291)+V( 314)-V( 315)+V( 328)+V( 355)+2\*V( 380)

& +V( 689)-V( 690)

C

WDOT( 39) = 0

& +V( 316)-V( 317)+V( 318)-V( 319)-V( 329)+V( 330)+V( 331)-V( 332)+V( 333)-V( 334)

& -V( 336)-V( 337)-V( 338)-V( 339)-V( 340)+V( 341)+V( 344)-V( 345)+V( 361)+V( 373)

& -V( 374)+V( 377)-V( 378)+V( 398)

C

WDOT( 40) = 0

& -V( 3)+V( 4)-V( 6)+V( 7)+V( 8)-V( 9)-V( 16)+V( 17)-V( 20)+V( 21)

& +V( 26)-V( 27)-V( 32)+V( 33)-V( 38)-V( 39)-V( 48)+V( 49)-V( 58)+V( 61)

& -V( 62)-V( 69)-V( 70)+V( 78)-V( 104)+V( 105)-V( 116)-V( 122)+V( 123)-V( 129)

& -V( 130)-V( 137)-V( 138)-V( 146)-V( 147)-V( 159)-V( 160)-V( 164)-V( 175)-V( 176)

& -V( 188)-V( 194)-V( 206)-V( 207)-V( 208)-V( 209)-V( 223)-V( 224)-V( 225)-V( 236)

& -V( 237)-V( 238)-V( 244)-V( 245)-V( 246)-V( 247)-V( 265)-V( 285)-V( 297)-V( 306)

& -V( 324)-V( 325)-V( 335)+V( 337)-V( 360)-V( 361)-V( 369)-V( 383)-V( 390)-V( 404)

& -V( 423)-V( 424)-V( 425)-V( 426)-V( 451)+V( 452)-V( 453)-V( 454)+V( 455)-V( 481)

& +V( 482)-V( 492)+V( 493)-V( 497)-V( 503)+V( 504)-V( 509)+V( 510)-V( 511)+V( 512)

& -V( 522)+V( 523)+V( 528)-V( 529)+V( 537)-V( 538)+V( 539)-V( 540)-V( 550)+V( 551)

& -V( 552)+V( 553)-V( 554)+V( 555)+V( 564)-V( 565)-V( 568)-V( 569)+V( 570)-V( 574)

& +V( 575)-V( 576)+V( 577)-V( 578)+V( 579)-V( 589)+V( 590)+V( 593)-V( 594)-V( 606)

& +V( 607)-V( 608)+V( 609)-V( 615)-V( 624)+V( 625)+V( 649)+V( 672)

C

WDOT( 41) = 0

& +V( 258)+V( 277)-V( 278)+V( 281)-V( 282)+V( 286)-V( 287)+V( 290)-V( 291)+V( 292)

& -V( 293)-V( 294)-V( 295)+V( 296)-V( 297)-V( 298)+V( 299)+V( 300)+V( 303)-V( 691)

& +V( 692)

C

WDOT( 42) = 0

& -2\*V( 1)+2\*V( 2)-V( 3)+V( 4)+V( 6)-V( 7)-V( 8)+V( 9)-V( 10)

& +V( 11)-V( 12)+V( 13)+V( 14)-V( 15)-V( 22)+V( 23)-V( 24)+V( 25)-V( 26)

& +V( 27)+V( 30)-V( 31)+V( 34)-V( 35)+V( 39)-V( 40)+V( 41)-V( 50)+V( 51)

& +V( 53)-V( 54)+V( 58)-V( 59)+V( 60)+V( 64)-V( 65)+V( 68)+2\*V( 69)

& -V( 71)+V( 72)+2\*V( 75)+V( 77)+2\*V( 81)+V( 82)+V( 83)-V( 84)+V( 87)

& +V( 88)-V( 89)-V( 90)+V( 90)-V( 91)+V( 91)-V( 92)+V( 93)+V( 94)+V( 98)

& -V( 99)+V( 103)+V( 104)+V( 108)+V( 109)+V( 112)-V( 113)-V( 117)+V( 118)-V( 124)  
 & +V( 125)+V( 128)-V( 131)+V( 135)+V( 138)-V( 139)+V( 140)-V( 145)+V( 147)+V( 149)  
 & -V( 150)+V( 152)-V( 153)+V( 158)+V( 160)+V( 161)-V( 162)+V( 163)-V( 166)+V( 167)  
 & +V( 170)-V( 171)-V( 179)+V( 180)-V( 181)+V( 182)+V( 187)+V( 188)-V( 189)+V( 190)  
 & +V( 191)-V( 195)+V( 197)-V( 198)-V( 210)+V( 211)-V( 212)+V( 213)+V( 215)+V( 217)  
 & -V( 218)-V( 226)+V( 227)-V( 228)+V( 231)-V( 232)-V( 239)+V( 240)+V( 247)-V( 248)  
 & +V( 249)+V( 250)+V( 251)+V( 254)-V( 255)+V( 258)+V( 262)-V( 263)-V( 266)+V( 267)  
 & -V( 272)+V( 275)-V( 276)+V( 277)-V( 278)-V( 286)+V( 287)-V( 288)+V( 289)+V( 292)  
 & -V( 293)-V( 298)+V( 299)-V( 302)-V( 303)+V( 303)+V( 304)-V( 305)+V( 307)+V( 310)  
 & -V( 311)+V( 316)-V( 317)+V( 320)-V( 321)-V( 323)+V( 324)+V( 326)-V( 327)-V( 329)  
 & +V( 330)-V( 333)+V( 334)+V( 335)+V( 339)+V( 340)-V( 341)+V( 346)-V( 347)-V( 351)  
 & +V( 352)-V( 353)+V( 354)+V( 360)+V( 363)+V( 364)-V( 365)+V( 366)-V( 367)-V( 370)  
 & -V( 371)+V( 376)+V( 381)-V( 382)+V( 388)-V( 389)-V( 397)+V( 415)+V( 416)+V( 417)  
 & +V( 418)-V( 427)-V( 428)-V( 429)-V( 430)-V( 456)+V( 457)-V( 458)-V( 459)+V( 460)  
 & -V( 477)+V( 478)-V( 479)+V( 480)-V( 490)+V( 491)-V( 495)+V( 496)-V( 500)-V( 501)  
 & +V( 502)-V( 507)+V( 508)+V( 509)-V( 510)-V( 520)+V( 521)+V( 522)-V( 523)+V( 524)  
 & -V( 525)+V( 531)-V( 532)+V( 535)-V( 536)+V( 544)+V( 545)+V( 546)-V( 547)-V( 548)  
 & +V( 549)+V( 552)-V( 553)+V( 560)-V( 561)-V( 566)+V( 567)+V( 574)-V( 575)+V( 582)  
 & -V( 583)+V( 584)-V( 585)+V( 591)-V( 592)+V( 596)-V( 597)-V( 604)+V( 605)+V( 613)  
 & +V( 613)-V( 614)+V( 614)-V( 622)+V( 623)+V( 627)-V( 628)-V( 634)+V( 635)+V( 638)  
 & -V( 639)+V( 651)+V( 655)-V( 656)+V( 657)-V( 658)+V( 659)-V( 660)+V( 663)-V( 664)  
 & +V( 665)-V( 666)-V( 668)+V( 669)+V( 670)-V( 671)+V( 675)-V( 676)+V( 681)-V( 682)  
 & +V( 685)-V( 686)+V( 689)-V( 690)+V( 691)-V( 692)+V( 693)-V( 694)

C

WDOT( 43) = 0

& +V( 83)-V( 84)+V( 98)-V( 99)+V( 217)-V( 218)+V( 221)+V( 228)+V( 229)+V( 230)  
 & +V( 231)-V( 232)+V( 235)+V( 239)-V( 240)-V( 241)-V( 242)-V( 243)-V( 244)-V( 245)  
 & -V( 246)-V( 247)-V( 248)+V( 249)-V( 250)-V( 251)-V( 252)+V( 253)-V( 307)  
 & -2\*V( 308)+2\*V( 309)-2\*V( 316)+2\*V( 317)+V( 355)-V( 362)

C

WDOT( 44) = 0

& -V( 45)+V( 64)-V( 65)+V( 120)-V( 121)+V( 122)-V( 123)+V( 124)-V( 125)+V( 126)  
 & -V( 127)-V( 128)-V( 129)-V( 130)-V( 131)-V( 132)-V( 141)+V( 183)+V( 206)-V( 216)  
 & +V( 259)+V( 399)-V( 400)+V( 411)-V( 461)-V( 462)-V( 600)+V( 632)+V( 663)-V( 664)  
 & -V( 665)+V( 666)-V( 667)

C

WDOT( 45) = 0

& +V( 154)+V( 160)+V( 163)+V( 176)+V( 181)-V( 182)+V( 184)-V( 185)+V( 186)-V( 187)  
 & -V( 188)-V( 189)+V( 190)-V( 191)+V( 238)+V( 243)+V( 256)+V( 294)-V( 543)+V( 633)  
 & -V( 641)

C

WDOT( 46) = 0

& +V( 250)+V( 275)-V( 276)+V( 283)-V( 284)+V( 288)-V( 289)-V( 301)-V( 302)-V( 303)  
 & -V( 312)+V( 313)-V( 318)+V( 319)-V( 693)+V( 694)

C

WDOT( 47) = 0

& +V( 520)-V( 521)+V( 526)-V( 527)-V( 535)+V( 536)-V( 537)+V( 538)-V( 539)+V( 540)  
 & -V( 541)+V( 542)-V( 543)-V( 544)-V( 545)+V( 589)-V( 590)+V( 620)-V( 621)+V( 640)  
 & +V( 650)

C

WDOT( 48) = 0

& +V( 53)-V( 54)+V( 59)-V( 60)-V( 66)+V( 67)-V( 68)-V( 69)-V( 70)-V( 71)  
 & +V( 72)-V( 73)-V( 74)-V( 75)-V( 76)-V( 77)-V( 78)-V( 79)-2\*V( 80)  
 & -2\*V( 81)-V( 82)-V( 83)+V( 84)+V( 85)-V( 86)+V( 90)-V( 91)+V( 100)  
 & -V( 101)+V( 159)+V( 173)-V( 174)+V( 175)-V( 215)+V( 224)+V( 236)-V( 251)-V( 258)  
 & +V( 300)-V( 545)+V( 646)-V( 647)-V( 648)

C

WDOT( 49) = 0

& +V( 584)-V( 585)-V( 603)-V( 604)+V( 605)-V( 606)+V( 607)-V( 608)+V( 609)-V( 610)  
 & +V( 611)-V( 612)+V( 613)-V( 614)+V( 619)+V( 627)-V( 628)+V( 629)+V( 630)+V( 631)  
 & +V( 632)

C

WDOT( 50) = 0

& -V( 34)+V( 35)-V( 36)+V( 37)-V( 38)-V( 39)-V( 40)+V( 41)-V( 42)+V( 43)  
 & -V( 44)+V( 45)+V( 73)+V( 103)+V( 105)+V( 107)+V( 112)-V( 113)+V( 114)-V( 115)  
 & +V( 116)+V( 117)-V( 118)+V( 119)+V( 137)+V( 165)+V( 172)+V( 187)+V( 206)+V( 237)  
 & +V( 241)+V( 244)+V( 256)+V( 257)+V( 371)+V( 468)+V( 469)-V( 487)-V( 629)+V( 631)  
 & +V( 642)+V( 650)+V( 652)+V( 673)

C

WDOT( 51) = 0

& +V( 55)-V( 56)+V( 66)-V( 67)+V( 71)-V( 72)+V( 92)-V( 93)-V( 103)-V( 104)  
 & -V( 105)-V( 106)-V( 107)-V( 108)+V( 164)+V( 185)-V( 186)-V( 250)-V( 254)+V( 255)  
 & -V( 640)-V( 649)-V( 650)-V( 651)

C

WDOT( 52) = 0

& +V( 500)-V( 501)+V( 502)-V( 503)+V( 504)-V( 505)+V( 506)+V( 515)

C

Annexe VI

```

DO 124 K=1, KK
  IF (XCON(K) .LE. 0.D0 .AND. WDOT(K) .LT. 0.D0) WDOT(K)=0.D0
124 CONTINUE
C
  CTOT=0.D0
DO 329 K=1, KKX
  CTOT=CTOT+C(K)
329 CONTINUE
C
DO 339 K=1, KKX
  XX(K)=C(K)/CTOT
339 CONTINUE
C
  RETURN
  END

```

```

C-----
SUBROUTINE RATECONS (RF, T)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
DIMENSION RF(*)
RUC=8.31451D0/4.184D0
ALOGT=DLOG(T)
RTR=1.0/(RUC*T)
RF( 1) = 7.310D+17*EXP( -1.0000D+00*ALOGT)
RF( 2) = 2.756D+17*EXP( -7.1290D-01*ALOGT - 1.03608D+05*RTR)
RF( 3) = 6.200D+16*EXP( -6.0000D-01*ALOGT)
RF( 4) = 1.431D+16*EXP( -3.5220D-01*ALOGT - 1.01819D+05*RTR)
RF( 5) = 1.700D+13*EXP( - 4.77800D+04*RTR)
RF( 6) = 3.870D+04*EXP( 2.7000D+00*ALOGT - 6.26000D+03*RTR)
RF( 7) = 2.368D+04*EXP( 2.6607D+00*ALOGT - 4.47100D+03*RTR)
RF( 8) = 1.850D+14*EXP( - 1.68120D+04*RTR)
RF( 9) = 3.669D+11*EXP( 4.3670D-01*ALOGT + 4.70000D+02*RTR)
RF(10) = 8.000D+17*EXP( -8.0000D-01*ALOGT)
RF(11) = 2.361D+18*EXP( -9.0680D-01*ALOGT - 4.95600D+04*RTR)
RF(12) = 8.615D+21*EXP( -2.0000D+00*ALOGT)
RF(13) = 5.222D+22*EXP( -1.8657D+00*ALOGT - 1.19105D+05*RTR)
RF(14) = 2.161D+08*EXP( 1.5100D+00*ALOGT - 3.43000D+03*RTR)
RF(15) = 3.474D+09*EXP( 1.3573D+00*ALOGT - 1.89270D+04*RTR)
RF(16) = 1.500D+10*EXP( 1.1400D+00*ALOGT - 1.72600D+04*RTR)
RF(17) = 5.710D+08*EXP( 1.2535D+00*ALOGT + 2.50000D+01*RTR)
RF(18) = 2.890D+13*EXP( 4.97000D+02*RTR)
RF(19) = 5.936D+13*EXP( 2.4110D-01*ALOGT - 6.90480D+04*RTR)
RF(20) = 1.810D+13*EXP( 4.00000D+02*RTR)
RF(21) = 1.415D+12*EXP( 3.5450D-01*ALOGT - 5.18590D+04*RTR)
RF(22) = 4.280D+13*EXP( - 1.41100D+03*RTR)
RF(23) = 5.468D+12*EXP( 3.9380D-01*ALOGT - 5.54590D+04*RTR)
RF(24) = 1.690D+14*EXP( - 8.74000D+02*RTR)
RF(25) = 2.621D+10*EXP( 7.9130D-01*ALOGT - 3.58520D+04*RTR)
RF(26) = 3.010D+13*EXP( - 1.72100D+03*RTR)
RF(27) = 1.226D+11*EXP( 6.7780D-01*ALOGT - 5.39840D+04*RTR)
RF(28) = 1.500D+14*EXP( - 2.36500D+04*RTR)
RF(29) = 1.428D+17*EXP( -5.0160D-01*ALOGT - 8.47470D+04*RTR)
RF(30) = 4.400D+06*EXP( 1.5000D+00*ALOGT + 7.40000D+02*RTR)
RF(31) = 2.702D+13*EXP( 2.0710D-01*ALOGT - 2.53790D+04*RTR)
RF(32) = 2.830D+13*EXP( 4.54000D+03*RTR)
RF(33) = 4.010D+19*EXP( -1.0451D+00*ALOGT - 1.23398D+05*RTR)
RF(34) = 1.850D+17*EXP( -1.0000D+00*ALOGT - 1.70000D+04*RTR)
RF(35) = 1.815D+16*EXP( -6.7550D-01*ALOGT - 1.51000D+03*RTR)
RF(36) = 1.000D+14
RF(37) = 5.947D+13*EXP( 4.5890D-01*ALOGT - 1.03615D+05*RTR)
RF(38) = 3.000D+13
RF(39) = 3.000D+13
RF(40) = 7.224D+13
RF(41) = 2.673D+12*EXP( 6.1160D-01*ALOGT - 8.81180D+04*RTR)
RF(42) = 2.110D+09*EXP( 1.1200D+00*ALOGT + 6.20000D+02*RTR)
RF(43) = 6.110D+08*EXP( 1.3378D+00*ALOGT - 3.34500D+04*RTR)
RF(44) = 1.200D+14
RF(45) = 1.601D+04*EXP( 2.7593D+00*ALOGT - 8.35000D+03*RTR)
RF(46) = 1.600D+06*EXP( 2.1000D+00*ALOGT - 2.46200D+03*RTR)
RF(47) = 2.759D+04*EXP( 2.3626D+00*ALOGT - 1.60770D+04*RTR)
RF(48) = 1.620D+06*EXP( 2.3000D+00*ALOGT - 7.09400D+03*RTR)
RF(49) = 1.063D+03*EXP( 2.6761D+00*ALOGT - 3.42400D+03*RTR)
RF(50) = 2.250D+04*EXP( 3.0000D+00*ALOGT - 8.75700D+03*RTR)
RF(51) = 2.413D+01*EXP( 3.4154D+00*ALOGT - 6.87500D+03*RTR)
RF(52) = 3.391D+11*EXP( 2.1500D-02*ALOGT - 9.83000D+02*RTR)
RF(53) = 1.900D+16*EXP( - 9.15990D+04*RTR)
RF(54) = 3.886D+13*EXP( 3.7030D-01*ALOGT + 1.85430D+04*RTR)
RF(55) = 6.900D+14*EXP( - 8.24590D+04*RTR)

```

RF( 56) = 2.170D+11\*EXP( 5.5090D-01\*ALOGT + 2.54090D+04\*RTR)  
RF( 57) = 5.000D+12  
RF( 58) = 8.430D+13  
RF( 59) = 7.000D+13\*EXP( - 1.51000D+04\*RTR)  
RF( 60) = 5.399D+10\*EXP( 6.5730D-01\*ALOGT - 8.56600D+03\*RTR)  
RF( 61) = 1.320D+14\*EXP( - 3.13980D+04\*RTR)  
RF( 62) = 3.963D+16\*EXP( -5.4680D-01\*ALOGT - 3.82600D+03\*RTR)  
RF( 63) = 4.380D+11\*EXP( - 1.46560D+04\*RTR)  
RF( 64) = 3.011D+13\*EXP( - 1.35130D+04\*RTR)  
RF( 65) = 1.256D+19\*EXP( -1.2248D+00\*ALOGT - 4.60100D+03\*RTR)  
RF( 66) = 1.130D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 3.00000D+03\*RTR)  
RF( 67) = 2.793D+07\*EXP( 2.0279D+00\*ALOGT - 2.07700D+04\*RTR)  
RF( 68) = 2.500D+13  
RF( 69) = 5.000D+13  
RF( 70) = 6.000D+13  
RF( 71) = 1.000D+18\*EXP( -1.5600D+00\*ALOGT)  
RF( 72) = 1.537D+17\*EXP( -1.3794D+00\*ALOGT - 2.27400D+03\*RTR)  
RF( 73) = 4.300D+10\*EXP( 5.00000D+02\*RTR)  
RF( 74) = 3.450D+11\*EXP( - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 75) = 1.600D+12\*EXP( - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 76) = 1.870D+10\*EXP( 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 77) = 8.640D+10\*EXP( 5.00000D+02\*RTR)  
RF( 78) = 5.000D+13\*EXP( - 9.00000D+03\*RTR)  
RF( 79) = 1.100D+11\*EXP( - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 80) = 3.200D+13  
RF( 81) = 4.000D+13  
RF( 82) = 4.000D+13  
RF( 83) = 1.200D+13\*EXP( - 6.62000D+03\*RTR)  
RF( 84) = 5.480D+18\*EXP( -1.4674D+00\*ALOGT - 1.92150D+04\*RTR)  
RF( 85) = 1.000D+13  
RF( 86) = 3.843D+12\*EXP( 5.0000D-03\*ALOGT - 8.91700D+03\*RTR)  
RF( 87) = 3.000D+13  
RF( 88) = 7.000D+13  
RF( 89) = 3.488D+16\*EXP( -6.5230D-01\*ALOGT - 1.54520D+04\*RTR)  
RF( 90) = 2.000D+14  
RF( 91) = 7.685D+13\*EXP( 5.0000D-03\*ALOGT - 8.91700D+03\*RTR)  
RF( 92) = 3.000D+13  
RF( 93) = 1.772D+12\*EXP( 1.8570D-01\*ALOGT - 1.11910D+04\*RTR)  
RF( 94) = 3.000D+13  
RF( 95) = 1.800D+13  
RF( 96) = 4.917D+20\*EXP( -1.4673D+00\*ALOGT - 9.35900D+04\*RTR)  
RF( 97) = 2.138D+13\*EXP( -2.3690D-01\*ALOGT - 1.35700D+04\*RTR)  
RF( 98) = 1.800D+14  
RF( 99) = 3.159D+19\*EXP( -1.4624D+00\*ALOGT - 2.15130D+04\*RTR)  
RF( 100) = 3.000D+13  
RF( 101) = 1.153D+13\*EXP( 5.0000D-03\*ALOGT - 8.91700D+03\*RTR)  
RF( 102) = 3.000D+12  
RF( 103) = 3.000D+13  
RF( 104) = 1.000D+14  
RF( 105) = 3.300D+13  
RF( 106) = 2.000D+13  
RF( 107) = 3.400D+12\*EXP( - 6.90000D+02\*RTR)  
RF( 108) = 6.000D+13  
RF( 109) = 4.880D+15\*EXP( - 2.27730D+04\*RTR)  
RF( 110) = 2.349D+10\*EXP( - 1.78800D+03\*RTR)  
RF( 111) = 6.353D+14\*EXP( -3.0930D-01\*ALOGT - 4.82130D+04\*RTR)  
RF( 112) = 1.260D+16\*EXP( - 7.78970D+04\*RTR)  
RF( 113) = 2.531D+13\*EXP( 2.5980D-01\*ALOGT + 1.28010D+04\*RTR)  
RF( 114) = 1.716D+09\*EXP( 1.1800D+00\*ALOGT + 4.47000D+02\*RTR)  
RF( 115) = 2.089D+07\*EXP( 1.5741D+00\*ALOGT - 2.79590D+04\*RTR)  
RF( 116) = 1.807D+13\*EXP( - 3.08800D+03\*RTR)  
RF( 117) = 1.260D+08\*EXP( 1.6200D+00\*ALOGT - 2.17000D+03\*RTR)  
RF( 118) = 9.542D+04\*EXP( 2.1669D+00\*ALOGT - 1.50790D+04\*RTR)  
RF( 119) = 4.090D+12\*EXP( - 8.84300D+03\*RTR)  
RF( 120) = 4.100D+06\*EXP( 2.0600D+00\*ALOGT - 8.60000D+02\*RTR)  
RF( 121) = 1.701D+04\*EXP( 2.4934D+00\*ALOGT - 1.93810D+04\*RTR)  
RF( 122) = 9.990D+08\*EXP( 1.5000D+00\*ALOGT - 5.80300D+03\*RTR)  
RF( 123) = 1.578D+05\*EXP( 2.0469D+00\*ALOGT - 7.03900D+03\*RTR)  
RF( 124) = 5.250D+14\*EXP( - 1.28000D+04\*RTR)  
RF( 125) = 1.355D+11\*EXP( 5.8610D-01\*ALOGT - 1.58250D+04\*RTR)  
RF( 126) = 7.536D+00\*EXP( 3.7270D+00\*ALOGT - 9.88300D+03\*RTR)  
RF( 127) = 2.409D+13  
RF( 128) = 2.409D+13  
RF( 129) = 4.238D+13  
RF( 130) = 3.046D+13  
RF( 131) = 1.250D+14\*EXP( - 8.00000D+03\*RTR)  
RF( 132) = 1.144D+12



RF( 133) = 3.000D+17\*EXP( - 7.93490D+04\*RTR)  
RF( 134) = 1.605D+14\*EXP( 4.7660D-01\*ALOGT - 3.63440D+04\*RTR)  
RF( 135) = 2.970D+17\*EXP( - 9.65590D+04\*RTR)  
RF( 136) = 2.024D+13\*EXP( - 5.93600D+03\*RTR)  
RF( 137) = 1.200D+08\*EXP( 1.4400D+00\*ALOGT - 5.30000D+02\*RTR)  
RF( 138) = 2.000D+08\*EXP( 1.4400D+00\*ALOGT - 5.30000D+02\*RTR)  
RF( 139) = 1.000D+14\*EXP( - 1.50090D+04\*RTR)  
RF( 140) = 6.276D+09\*EXP( 7.5260D-01\*ALOGT - 6.77500D+03\*RTR)  
RF( 141) = 6.731D+11\*EXP( 2.2410D-01\*ALOGT + 1.04440D+04\*RTR)  
RF( 142) = 6.630D+00\*EXP( 3.7000D+00\*ALOGT - 9.49900D+03\*RTR)  
RF( 143) = 3.880D-01\*EXP( 4.0372D+00\*ALOGT - 3.14600D+03\*RTR)  
RF( 144) = 3.000D+13  
RF( 145) = 3.000D+13  
RF( 146) = 1.500D+13  
RF( 147) = 1.500D+13  
RF( 148) = 1.975D+12\*EXP( - 1.00000D+04\*RTR)  
RF( 149) = 2.000D+12\*EXP( - 5.00000D+03\*RTR)  
RF( 150) = 4.278D+18\*EXP( -1.4408D+00\*ALOGT - 1.06620D+04\*RTR)  
RF( 151) = 3.082D+26\*EXP( -2.6772D+00\*ALOGT - 1.18048D+05\*RTR)  
RF( 152) = 1.200D+12\*EXP( - 4.68300D+03\*RTR)  
RF( 153) = 1.231D+21\*EXP( -2.2116D+00\*ALOGT - 1.08890D+04\*RTR)  
RF( 154) = 2.000D+08\*EXP( 1.5000D+00\*ALOGT - 3.01000D+04\*RTR)  
RF( 155) = 3.400D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 1.40000D+04\*RTR)  
RF( 156) = 3.477D+04\*EXP( 2.8045D+00\*ALOGT - 7.51000D+02\*RTR)  
RF( 157) = 4.840D-04\*EXP( 4.0000D+00\*ALOGT + 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 158) = 2.192D-04\*EXP( 4.5000D+00\*ALOGT + 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 159) = 1.982D+04\*EXP( 2.6000D+00\*ALOGT - 6.56000D+02\*RTR)  
RF( 160) = 4.620D+04\*EXP( 2.6000D+00\*ALOGT - 6.56000D+02\*RTR)  
RF( 161) = 1.506D+13\*EXP( - 3.10000D+03\*RTR)  
RF( 162) = 2.368D+17\*EXP( -9.5720D-01\*ALOGT - 3.18460D+04\*RTR)  
RF( 163) = 2.000D+13  
RF( 164) = 1.000D+13  
RF( 165) = 2.410D+12  
RF( 166) = 1.000D+14\*EXP( - 2.50000D+03\*RTR)  
RF( 167) = 2.541D+15\*EXP( -4.0280D-01\*ALOGT - 3.93580D+04\*RTR)  
RF( 168) = 1.580D+10  
RF( 169) = 2.510D+10  
RF( 170) = 5.000D+15\*EXP( - 2.80000D+04\*RTR)  
RF( 171) = 4.866D+16\*EXP( -2.6630D-01\*ALOGT - 2.11910D+04\*RTR)  
RF( 172) = 4.000D+12\*EXP( 2.50000D+02\*RTR)  
RF( 173) = 3.600D+15\*EXP( - 5.92700D+04\*RTR)  
RF( 174) = 3.386D+06\*EXP( 1.8789D+00\*ALOGT + 2.06440D+04\*RTR)  
RF( 175) = 1.760D+12\*EXP( - 1.34900D+03\*RTR)  
RF( 176) = 1.000D+13\*EXP( - 8.00000D+03\*RTR)  
RF( 177) = 6.930D+12  
RF( 178) = 3.100D+12  
RF( 179) = 1.500D+04\*EXP( 2.8300D+00\*ALOGT - 6.73000D+02\*RTR)  
RF( 180) = 6.897D-03\*EXP( 4.3387D+00\*ALOGT - 3.09010D+04\*RTR)  
RF( 181) = 1.800D+14\*EXP( - 8.60000D+03\*RTR)  
RF( 182) = 4.929D+10\*EXP( 5.8230D-01\*ALOGT - 4.75500D+03\*RTR)  
RF( 183) = 6.000D+10  
RF( 184) = 7.500D+12\*EXP( - 1.30000D+04\*RTR)  
RF( 185) = 6.000D+15\*EXP( - 5.88210D+04\*RTR)  
RF( 186) = 3.168D+09\*EXP( 1.4773D+00\*ALOGT + 1.49750D+04\*RTR)  
RF( 187) = 1.000D+13  
RF( 188) = 1.930D+14\*EXP( - 5.90000D+02\*RTR)  
RF( 189) = 1.500D+14  
RF( 190) = 5.054D+08\*EXP( 1.5787D+00\*ALOGT - 1.86210D+04\*RTR)  
RF( 191) = 1.400D+09\*EXP( 1.0000D+00\*ALOGT)  
RF( 192) = 4.532D+11\*EXP( 3.3000D-01\*ALOGT - 1.16000D+03\*RTR)  
RF( 193) = 3.629D+11\*EXP( 7.0000D-01\*ALOGT - 5.86800D+03\*RTR)  
RF( 194) = 1.630D+13\*EXP( - 5.03000D+03\*RTR)  
RF( 195) = 4.000D+13\*EXP( - 6.10000D+03\*RTR)  
RF( 196) = 4.677D+05\*EXP( 2.3280D+00\*ALOGT - 1.27640D+04\*RTR)  
RF( 197) = 1.000D+14\*EXP( - 2.51000D+04\*RTR)  
RF( 198) = 3.000D+13  
RF( 199) = 2.168D+14\*EXP( - 4.69000D+03\*RTR)  
RF( 200) = 1.000D+12\*EXP( - 5.02000D+03\*RTR)  
RF( 201) = 1.100D+21\*EXP( -1.2000D+00\*ALOGT - 9.77190D+04\*RTR)  
RF( 202) = 2.703D+11\*EXP( 6.3360D-01\*ALOGT + 5.63500D+03\*RTR)  
RF( 203) = 3.500D+12\*EXP( - 6.99990D+04\*RTR)  
RF( 204) = 7.698D+05\*EXP( 2.2140D+00\*ALOGT - 6.22000D+02\*RTR)  
RF( 205) = 4.731D+06\*EXP( 1.7416D+00\*ALOGT - 3.40670D+04\*RTR)  
RF( 206) = 4.689D+07\*EXP( 1.5700D+00\*ALOGT + 6.28000D+02\*RTR)  
RF( 207) = 3.900D+07\*EXP( 1.5700D+00\*ALOGT + 6.28000D+02\*RTR)  
RF( 208) = 7.020D+07\*EXP( 1.5700D+00\*ALOGT + 6.28000D+02\*RTR)  
RF( 209) = 1.750D+11\*EXP( 7.0000D-01\*ALOGT - 5.88400D+03\*RTR)

RF( 210) = 1.700D+05\*EXP( 2.5000D+00\*ALOGT - 2.49200D+03\*RTR)  
RF( 211) = 6.499D+04\*EXP( 2.1804D+00\*ALOGT - 2.04400D+04\*RTR)  
RF( 212) = 6.030D+12  
RF( 213) = 3.472D+09\*EXP( 1.2267D+00\*ALOGT - 4.38560D+04\*RTR)  
RF( 214) = 1.000D+11  
RF( 215) = 3.000D+13  
RF( 216) = 4.000D+11  
RF( 217) = 2.000D+18\*EXP( - 7.99990D+04\*RTR)  
RF( 218) = 2.527D+15\*EXP( 1.2750D-01\*ALOGT + 1.02620D+04\*RTR)  
RF( 219) = 1.202D+15\*EXP( - 9.23990D+04\*RTR)  
RF( 220) = 2.703D+14\*EXP( 1.1930D-01\*ALOGT - 9.35580D+04\*RTR)  
RF( 221) = 2.150D+12\*EXP( 2.00000D+02\*RTR)  
RF( 222) = 1.000D+12\*EXP( 3.93000D+02\*RTR)  
RF( 223) = 1.125D-02\*EXP( 4.6130D+00\*ALOGT + 4.24300D+03\*RTR)  
RF( 224) = 1.000D-03\*EXP( 4.6130D+00\*ALOGT + 4.24300D+03\*RTR)  
RF( 225) = 2.500D-03\*EXP( 4.6130D+00\*ALOGT + 4.24300D+03\*RTR)  
RF( 226) = 1.200D+12\*EXP( - 2.70000D+03\*RTR)  
RF( 227) = 7.858D+14\*EXP( -9.3960D-01\*ALOGT - 6.24510D+04\*RTR)  
RF( 228) = 1.000D+14\*EXP( - 1.50090D+04\*RTR)  
RF( 229) = 1.333D+12\*EXP( - 7.70000D+03\*RTR)  
RF( 230) = 9.000D+11\*EXP( - 7.70000D+03\*RTR)  
RF( 231) = 4.700D+18\*EXP( - 7.99990D+04\*RTR)  
RF( 232) = 2.640D+16\*EXP( 8.2000D-03\*ALOGT + 1.14210D+04\*RTR)  
RF( 233) = 4.200D+16\*EXP( - 9.99990D+04\*RTR)  
RF( 234) = 4.261D+07\*EXP( 1.7755D+00\*ALOGT + 2.62280D+04\*RTR)  
RF( 235) = 6.500D+02\*EXP( 3.0000D+00\*ALOGT - 2.00000D+02\*RTR)  
RF( 236) = 6.400D+12\*EXP( - 2.10000D+03\*RTR)  
RF( 237) = 3.200D+12\*EXP( - 2.10000D+03\*RTR)  
RF( 238) = 9.180D+12\*EXP( - 2.10000D+03\*RTR)  
RF( 239) = 2.000D+14\*EXP( - 1.50000D+04\*RTR)  
RF( 240) = 4.237D+11\*EXP( 2.9520D-01\*ALOGT - 2.71870D+04\*RTR)  
RF( 241) = 3.010D+10\*EXP( - 2.87000D+03\*RTR)  
RF( 242) = 5.000D+12  
RF( 243) = 5.000D+12  
RF( 244) = 1.385D+14  
RF( 245) = 4.615D+13  
RF( 246) = 4.615D+13  
RF( 247) = 4.615D+13  
RF( 248) = 5.000D+13\*EXP( - 3.00000D+03\*RTR)  
RF( 249) = 3.416D+12\*EXP( 4.7970D-01\*ALOGT - 3.11790D+04\*RTR)  
RF( 250) = 7.000D+13  
RF( 251) = 4.000D+13  
RF( 252) = 3.330D+12  
RF( 253) = 2.212D+22\*EXP( -1.8219D+00\*ALOGT - 9.29140D+04\*RTR)  
RF( 254) = 1.000D+14  
RF( 255) = 2.030D+19\*EXP( -1.1683D+00\*ALOGT - 3.85010D+04\*RTR)  
RF( 256) = 3.000D+10\*EXP( - 2.87000D+03\*RTR)  
RF( 257) = 5.000D+13  
RF( 258) = 3.000D+13  
RF( 259) = 2.500D+12\*EXP( - 2.85000D+04\*RTR)  
RF( 260) = 1.000D+14\*EXP( - 7.49990D+04\*RTR)  
RF( 261) = 8.309D+05\*EXP( 1.9357D+00\*ALOGT - 3.40210D+04\*RTR)  
RF( 262) = 1.580D+16\*EXP( - 1.09999D+05\*RTR)  
RF( 263) = 9.852D+14\*EXP( -3.9530D-01\*ALOGT + 9.11000D+02\*RTR)  
RF( 264) = 1.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 7.25300D+03\*RTR)  
RF( 265) = 2.270D+15\*EXP( -4.7500D-01\*ALOGT - 7.02800D+03\*RTR)  
RF( 266) = 5.000D+15\*EXP( - 2.28000D+04\*RTR)  
RF( 267) = 1.176D+14\*EXP( -1.0820D-01\*ALOGT - 1.54980D+04\*RTR)  
RF( 268) = 2.000D+14\*EXP( - 2.48000D+04\*RTR)  
RF( 269) = 5.000D+13\*EXP( - 4.40000D+04\*RTR)  
RF( 270) = 1.109D+03\*EXP( 2.7965D+00\*ALOGT - 2.09000D+03\*RTR)  
RF( 271) = 2.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 272) = 1.000D+14  
RF( 273) = 3.200D+13\*EXP( - 7.70990D+04\*RTR)  
RF( 274) = 1.275D+08\*EXP( 1.1649D+00\*ALOGT - 3.66660D+04\*RTR)  
RF( 275) = 1.000D+20\*EXP( - 9.92990D+04\*RTR)  
RF( 276) = 2.107D+18\*EXP( -1.1250D-01\*ALOGT + 1.38140D+04\*RTR)  
RF( 277) = 6.300D+13\*EXP( - 8.70990D+04\*RTR)  
RF( 278) = 4.622D+11\*EXP( -3.0920D-01\*ALOGT + 7.67800D+03\*RTR)  
RF( 279) = 1.260D+15\*EXP( - 9.46990D+04\*RTR)  
RF( 280) = 6.737D+11\*EXP( 6.9010D-01\*ALOGT - 5.05180D+04\*RTR)  
RF( 281) = 2.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 282) = 8.894D+05\*EXP( 1.8251D+00\*ALOGT - 2.63270D+04\*RTR)  
RF( 283) = 7.500D+06\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 5.00000D+03\*RTR)  
RF( 284) = 9.577D+05\*EXP( 2.0218D+00\*ALOGT - 1.09910D+04\*RTR)  
RF( 285) = 3.000D+13\*EXP( - 1.81000D+03\*RTR)  
RF( 286) = 3.330D+05\*EXP( 2.5300D+00\*ALOGT - 9.24000D+03\*RTR)

RF( 287) = 9.211D+02\*EXP( 2.5078D+00\*ALOGT - 1.80710D+04\*RTR)  
RF( 288) = 2.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 1.50000D+04\*RTR)  
RF( 289) = 1.589D+05\*EXP( 2.1746D+00\*ALOGT - 5.49500D+03\*RTR)  
RF( 290) = 1.660D+01\*EXP( 3.7000D+00\*ALOGT - 9.49900D+03\*RTR)  
RF( 291) = 4.281D+01\*EXP( 3.2625D+00\*ALOGT - 2.02110D+04\*RTR)  
RF( 292) = 6.310D+13\*EXP( - 4.16000D+04\*RTR)  
RF( 293) = 1.162D+17\*EXP( -1.4741D+00\*ALOGT + 1.27440D+04\*RTR)  
RF( 294) = 1.000D+12  
RF( 295) = 3.000D+13  
RF( 296) = 3.515D+13\*EXP( 8.4650D-01\*ALOGT - 6.60930D+04\*RTR)  
RF( 297) = 2.000D+13  
RF( 298) = 5.000D+13  
RF( 299) = 3.644D+12\*EXP( 9.9930D-01\*ALOGT - 5.05960D+04\*RTR)  
RF( 300) = 6.625D+14\*EXP( 5.4940D-01\*ALOGT - 2.48470D+04\*RTR)  
RF( 301) = 3.000D+13  
RF( 302) = 5.000D+13  
RF( 303) = 1.000D+14  
RF( 304) = 1.820D+14\*EXP( - 4.67000D+02\*RTR)  
RF( 305) = 3.839D+20\*EXP( -1.4321D+00\*ALOGT - 2.54650D+04\*RTR)  
RF( 306) = 1.200D+12  
RF( 307) = 1.400D+12\*EXP( - 1.28000D+04\*RTR)  
RF( 308) = 3.000D+11  
RF( 309) = 4.110D+25\*EXP( -1.6021D+00\*ALOGT - 1.49552D+05\*RTR)  
RF( 310) = 2.800D+03\*EXP( 2.9000D+00\*ALOGT - 1.40000D+03\*RTR)  
RF( 311) = 3.629D+11\*EXP( 2.5292D+00\*ALOGT - 7.12200D+04\*RTR)  
RF( 312) = 2.870D+14\*EXP( - 8.17000D+02\*RTR)  
RF( 313) = 3.172D+29\*EXP( -1.8900D+00\*ALOGT - 1.85226D+05\*RTR)  
RF( 314) = 9.000D+15\*EXP( - 1.07429D+05\*RTR)  
RF( 315) = 3.295D+03\*EXP( 1.7265D+00\*ALOGT - 1.36100D+03\*RTR)  
RF( 316) = 1.000D+13  
RF( 317) = 9.209D+22\*EXP( -1.2078D+00\*ALOGT - 3.68400D+04\*RTR)  
RF( 318) = 2.800D+03\*EXP( 2.9000D+00\*ALOGT - 1.40000D+03\*RTR)  
RF( 319) = 5.818D+13\*EXP( 1.5691D+00\*ALOGT - 1.08051D+05\*RTR)  
RF( 320) = 3.000D+14  
RF( 321) = 4.104D+19\*EXP( -1.0742D+00\*ALOGT - 9.15000D+03\*RTR)  
RF( 322) = 1.500D+14  
RF( 323) = 1.710D+13  
RF( 324) = 5.000D+14  
RF( 325) = 2.000D+14  
RF( 326) = 2.100D+13\*EXP( - 4.80000D+04\*RTR)  
RF( 327) = 8.197D+12\*EXP( 2.7510D-01\*ALOGT - 1.00140D+04\*RTR)  
RF( 328) = 1.000D+12\*EXP( - 5.30000D+04\*RTR)  
RF( 329) = 2.200D+14  
RF( 330) = 1.373D+18\*EXP( -2.8310D-01\*ALOGT - 1.12531D+05\*RTR)  
RF( 331) = 2.110D+13\*EXP( - 4.57000D+03\*RTR)  
RF( 332) = 2.049D+10\*EXP( 4.1740D-01\*ALOGT - 1.11440D+04\*RTR)  
RF( 333) = 2.500D+14\*EXP( - 1.60000D+04\*RTR)  
RF( 334) = 1.510D+10\*EXP( 5.7010D-01\*ALOGT - 7.07700D+03\*RTR)  
RF( 335) = 3.560D+01\*EXP( 3.8000D+00\*ALOGT - 9.40000D+02\*RTR)  
RF( 336) = 3.161D+08\*EXP( 8.8970D-01\*ALOGT + 1.18710D+04\*RTR)  
RF( 337) = 2.090D+12\*EXP( - 7.47000D+03\*RTR)  
RF( 338) = 5.000D+13\*EXP( - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 339) = 5.000D+13  
RF( 340) = 1.430D+08\*EXP( 1.2200D+00\*ALOGT - 3.54000D+03\*RTR)  
RF( 341) = 2.843D+14\*EXP( -4.9000D-02\*ALOGT - 8.68400D+03\*RTR)  
RF( 342) = 5.000D+15\*EXP( - 6.39990D+04\*RTR)  
RF( 343) = 1.054D+05\*EXP( 2.2534D+00\*ALOGT - 3.56860D+04\*RTR)  
RF( 344) = 1.400D+16\*EXP( - 9.97990D+04\*RTR)  
RF( 345) = 4.877D+07\*EXP( 1.3253D+00\*ALOGT + 4.17800D+03\*RTR)  
RF( 346) = 3.000D+15\*EXP( - 8.81930D+04\*RTR)  
RF( 347) = 4.312D+14\*EXP( -3.1070D-01\*ALOGT + 2.54500D+03\*RTR)  
RF( 348) = 1.273D+14\*EXP( -4.1750D-01\*ALOGT - 1.88400D+03\*RTR)  
RF( 349) = 1.000D+13\*EXP( - 2.18000D+03\*RTR)  
RF( 350) = 8.713D+12\*EXP( -1.7640D-01\*ALOGT - 3.05470D+04\*RTR)  
RF( 351) = 1.260D+14\*EXP( - 8.36400D+03\*RTR)  
RF( 352) = 6.829D+12\*EXP( -2.3700D-02\*ALOGT - 2.12340D+04\*RTR)  
RF( 353) = 2.400D+13\*EXP( - 5.12300D+03\*RTR)  
RF( 354) = 5.218D+08\*EXP( 1.0423D+00\*ALOGT - 1.36760D+04\*RTR)  
RF( 355) = 2.000D+14\*EXP( - 8.35990D+04\*RTR)  
RF( 356) = 6.030D+13\*EXP( - 6.99990D+04\*RTR)  
RF( 357) = 1.670D+05\*EXP( 1.5436D+00\*ALOGT - 1.05600D+03\*RTR)  
RF( 358) = 2.000D+13  
RF( 359) = 1.405D+18\*EXP( -6.0370D-01\*ALOGT - 8.47160D+04\*RTR)  
RF( 360) = 1.580D+13  
RF( 361) = 1.000D+13  
RF( 362) = 1.000D+12  
RF( 363) = 2.000D+14\*EXP( - 4.14000D+04\*RTR)

RF( 364) = 8.430D+12\*EXP( - 2.58300D+03\*RTR)  
RF( 365) = 1.200D+13\*EXP( - 5.14800D+03\*RTR)  
RF( 366) = 3.980D+15\*EXP( - 8.37000D+04\*RTR)  
RF( 367) = 6.884D+12\*EXP( 2.7970D-01\*ALOGT + 3.72500D+03\*RTR)  
RF( 368) = 1.710D+09\*EXP( 1.1800D+00\*ALOGT + 4.47000D+02\*RTR)  
RF( 369) = 9.040D+12\*EXP( - 3.08000D+03\*RTR)  
RF( 370) = 5.000D+13\*EXP( - 4.92800D+03\*RTR)  
RF( 371) = 1.200D+13\*EXP( - 5.14800D+03\*RTR)  
RF( 372) = 2.770D+03\*EXP( 2.8100D+00\*ALOGT - 5.77300D+03\*RTR)  
RF( 373) = 3.980D+14\*EXP( - 2.94010D+04\*RTR)  
RF( 374) = 8.824D+07\*EXP( 1.3832D+00\*ALOGT - 1.41800D+03\*RTR)  
RF( 375) = 3.000D+10\*EXP( - 2.87000D+03\*RTR)  
RF( 376) = 3.160D+13\*EXP( - 5.06700D+04\*RTR)  
RF( 377) = 1.000D+14\*EXP( - 3.50000D+04\*RTR)  
RF( 378) = 1.765D+06\*EXP( 1.6102D+00\*ALOGT + 2.55300D+03\*RTR)  
RF( 379) = 1.600D+11\*EXP( - 5.84380D+04\*RTR)  
RF( 380) = 3.618D+26\*EXP( -1.7371D+00\*ALOGT - 1.42864D+05\*RTR)  
RF( 381) = 8.000D+15\*EXP( - 1.00209D+05\*RTR)  
RF( 382) = 1.330D+06\*EXP( 2.5400D+00\*ALOGT - 6.75600D+03\*RTR)  
RF( 383) = 1.930D+05\*EXP( 2.6800D+00\*ALOGT - 3.71600D+03\*RTR)  
RF( 384) = 3.160D+07\*EXP( 1.8000D+00\*ALOGT - 9.34000D+02\*RTR)  
RF( 385) = 5.000D+12\*EXP( - 1.17100D+04\*RTR)  
RF( 386) = 1.000D+14\*EXP( - 1.30000D+04\*RTR)  
RF( 387) = 7.580D+07\*EXP( 1.2745D+00\*ALOGT + 1.25000D+02\*RTR)  
RF( 388) = 8.000D+15\*EXP( - 8.62090D+04\*RTR)  
RF( 389) = 1.014D+04\*EXP( 2.8800D+00\*ALOGT - 1.93100D+03\*RTR)  
RF( 390) = 4.770D+04\*EXP( 2.7100D+00\*ALOGT - 1.10600D+03\*RTR)  
RF( 391) = 7.080D+06\*EXP( 1.9000D+00\*ALOGT + 1.15900D+03\*RTR)  
RF( 392) = 4.000D+13\*EXP( - 3.58000D+04\*RTR)  
RF( 393) = 7.940D+11\*EXP( - 1.62000D+04\*RTR)  
RF( 394) = 7.200D+10\*EXP( - 4.47000D+03\*RTR)  
RF( 395) = 1.000D+14\*EXP( - 3.48500D+04\*RTR)  
RF( 396) = 3.255D+06\*EXP( 1.5118D+00\*ALOGT + 1.35500D+03\*RTR)  
RF( 397) = 2.400D+13\*EXP( - 5.12300D+03\*RTR)  
RF( 398) = 5.000D+16\*EXP( - 8.64990D+04\*RTR)  
RF( 399) = 5.000D+16\*EXP( - 7.44990D+04\*RTR)  
RF( 400) = 1.438D+08\*EXP( 1.4363D+00\*ALOGT + 2.83400D+03\*RTR)  
RF( 401) = 5.000D+16\*EXP( - 7.74990D+04\*RTR)  
RF( 402) = 2.440D+07\*EXP( 1.7036D+00\*ALOGT + 1.22190D+04\*RTR)  
RF( 403) = 4.500D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 404) = 5.000D+14  
RF( 405) = 2.000D+11\*EXP( - 1.11000D+04\*RTR)  
RF( 406) = 3.465D+10\*EXP( 1.1110D-01\*ALOGT - 1.21800D+04\*RTR)  
RF( 407) = 5.000D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 408) = 1.000D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 409) = 2.000D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 410) = 2.000D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 411) = 1.000D+17\*EXP( - 7.98990D+04\*RTR)  
RF( 412) = 1.000D+17\*EXP( - 8.42990D+04\*RTR)  
RF( 413) = 1.000D+17\*EXP( - 8.21990D+04\*RTR)  
RF( 414) = 5.000D+16\*EXP( - 8.43990D+04\*RTR)  
RF( 415) = 1.000D+15\*EXP( - 9.99990D+04\*RTR)  
RF( 416) = 1.000D+15\*EXP( - 9.99990D+04\*RTR)  
RF( 417) = 1.000D+15\*EXP( - 9.99990D+04\*RTR)  
RF( 418) = 1.000D+15\*EXP( - 9.99990D+04\*RTR)  
RF( 419) = 1.412D+07\*EXP( 1.8000D+00\*ALOGT - 9.74000D+02\*RTR)  
RF( 420) = 2.253D+06\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT + 1.39100D+03\*RTR)  
RF( 421) = 2.253D+06\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT + 1.39100D+03\*RTR)  
RF( 422) = 2.253D+06\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT + 1.39100D+03\*RTR)  
RF( 423) = 4.360D+06\*EXP( 2.4000D+00\*ALOGT - 5.50000D+03\*RTR)  
RF( 424) = 1.128D+03\*EXP( 3.2700D+00\*ALOGT - 1.65300D+03\*RTR)  
RF( 425) = 1.128D+03\*EXP( 3.2700D+00\*ALOGT - 1.65300D+03\*RTR)  
RF( 426) = 1.128D+03\*EXP( 3.2700D+00\*ALOGT - 1.65300D+03\*RTR)  
RF( 427) = 5.630D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 7.70000D+03\*RTR)  
RF( 428) = 1.800D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 5.00000D+03\*RTR)  
RF( 429) = 1.800D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 5.00000D+03\*RTR)  
RF( 430) = 1.800D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 5.00000D+03\*RTR)  
RF( 431) = 1.300D+12\*EXP( - 1.16000D+04\*RTR)  
RF( 432) = 8.000D+11\*EXP( - 9.50000D+03\*RTR)  
RF( 433) = 8.000D+11\*EXP( - 9.50000D+03\*RTR)  
RF( 434) = 8.000D+11\*EXP( - 9.50000D+03\*RTR)  
RF( 435) = 2.000D+13\*EXP( - 2.87000D+04\*RTR)  
RF( 436) = 2.000D+11\*EXP( - 1.81000D+04\*RTR)  
RF( 437) = 2.622D+10\*EXP( 2.7500D-01\*ALOGT - 1.89510D+04\*RTR)  
RF( 438) = 2.000D+11\*EXP( - 1.11000D+04\*RTR)  
RF( 439) = 2.622D+10\*EXP( 2.7500D-01\*ALOGT - 1.19510D+04\*RTR)  
RF( 440) = 2.000D+11\*EXP( - 1.11000D+04\*RTR)

RF( 441) = 2.000D+11\*EXP( - 1.11000D+04\*RTR)  
RF( 442) = 2.000D+11\*EXP( - 1.81000D+04\*RTR)  
RF( 443) = 2.000D+11\*EXP( - 1.81000D+04\*RTR)  
RF( 444) = 7.607D+09\*EXP( 5.6540D-01\*ALOGT + 9.76000D+02\*RTR)  
RF( 445) = 2.063D+11\*EXP( 1.9310D-01\*ALOGT + 5.02000D+02\*RTR)  
RF( 446) = 1.500D+09\*EXP( 1.0000D+00\*ALOGT - 2.60000D+02\*RTR)  
RF( 447) = 5.859D+05\*EXP( 1.8064D+00\*ALOGT - 1.93190D+04\*RTR)  
RF( 448) = 5.500D+12\*EXP( - 7.90000D+02\*RTR)  
RF( 449) = 5.500D+12\*EXP( - 7.90000D+02\*RTR)  
RF( 450) = 2.913D+10\*EXP( 4.3410D-01\*ALOGT - 1.99230D+04\*RTR)  
RF( 451) = 4.770D+04\*EXP( 2.7100D+00\*ALOGT - 2.10600D+03\*RTR)  
RF( 452) = 7.093D-01\*EXP( 3.6299D+00\*ALOGT - 3.88000D+03\*RTR)  
RF( 453) = 8.660D+05\*EXP( 2.6000D+00\*ALOGT - 2.56300D+03\*RTR)  
RF( 454) = 8.660D+05\*EXP( 2.6000D+00\*ALOGT - 2.56300D+03\*RTR)  
RF( 455) = 1.746D+02\*EXP( 3.1476D+00\*ALOGT - 4.41000D+03\*RTR)  
RF( 456) = 1.300D+06\*EXP( 2.4000D+00\*ALOGT - 4.47100D+03\*RTR)  
RF( 457) = 3.159D+01\*EXP( 3.3592D+00\*ALOGT - 8.03400D+03\*RTR)  
RF( 458) = 2.000D+14\*EXP( - 8.37300D+03\*RTR)  
RF( 459) = 2.000D+14\*EXP( - 8.37300D+03\*RTR)  
RF( 460) = 6.588D+10\*EXP( 5.8690D-01\*ALOGT - 1.20090D+04\*RTR)  
RF( 461) = 4.500D+11\*EXP( - 9.54000D+03\*RTR)  
RF( 462) = 4.500D+11\*EXP( - 9.54000D+03\*RTR)  
RF( 463) = 1.510D+00\*EXP( 3.4600D+00\*ALOGT - 5.48100D+03\*RTR)  
RF( 464) = 9.597D-05\*EXP( 4.7388D+00\*ALOGT + 8.90400D+03\*RTR)  
RF( 465) = 4.500D+11\*EXP( - 9.54000D+03\*RTR)  
RF( 466) = 4.500D+11\*EXP( - 9.54000D+03\*RTR)  
RF( 467) = 3.877D+08\*EXP( 9.0650D-01\*ALOGT + 4.77200D+03\*RTR)  
RF( 468) = 4.845D-02\*EXP( 3.8723D+00\*ALOGT + 3.86600D+03\*RTR)  
RF( 469) = 1.957D+11\*EXP( 4.0000D-02\*ALOGT - 2.67000D+02\*RTR)  
RF( 470) = 4.320D+11\*EXP( - 4.47300D+03\*RTR)  
RF( 471) = 4.320D+11\*EXP( - 4.47300D+03\*RTR)  
RF( 472) = 4.320D+11\*EXP( - 4.47300D+03\*RTR)  
RF( 473) = 1.300D+17\*EXP( - 8.39990D+04\*RTR)  
RF( 474) = 4.000D+11\*EXP( - 1.81000D+04\*RTR)  
RF( 475) = 2.951D+10\*EXP( 3.7230D-01\*ALOGT - 1.80270D+04\*RTR)  
RF( 476) = 2.000D+13\*EXP( - 4.40000D+04\*RTR)  
RF( 477) = 2.700D+15\*EXP( 6.00000D+02\*RTR)  
RF( 478) = 1.049D+17\*EXP( -2.2420D-01\*ALOGT - 4.93970D+04\*RTR)  
RF( 479) = 7.000D+19\*EXP( -1.5000D+00\*ALOGT)  
RF( 480) = 2.718D+21\*EXP( -1.7242D+00\*ALOGT - 4.99960D+04\*RTR)  
RF( 481) = 7.500D+19\*EXP( -1.4100D+00\*ALOGT)  
RF( 482) = 1.514D+24\*EXP( -2.0762D+00\*ALOGT - 7.36270D+04\*RTR)  
RF( 483) = 5.100D+23\*EXP( -2.5100D+00\*ALOGT + 6.80000D+01\*RTR)  
RF( 484) = 2.451D+31\*EXP( -4.0457D+00\*ALOGT - 5.03720D+04\*RTR)  
RF( 485) = 2.100D+12\*EXP( 4.79000D+02\*RTR)  
RF( 486) = 2.848D+13\*EXP( -1.2270D-01\*ALOGT - 6.30600D+03\*RTR)  
RF( 487) = 7.200D+12  
RF( 488) = 1.000D+12\*EXP( - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 489) = 3.310D+14\*EXP( -5.0020D-01\*ALOGT - 1.62250D+04\*RTR)  
RF( 490) = 8.400D+13  
RF( 491) = 9.604D+08\*EXP( 9.1400D-01\*ALOGT - 2.81930D+04\*RTR)  
RF( 492) = 3.900D+12\*EXP( 2.38000D+02\*RTR)  
RF( 493) = 2.248D+10\*EXP( 4.7730D-01\*ALOGT - 4.52360D+04\*RTR)  
RF( 494) = 9.000D+13\*EXP( - 3.37790D+04\*RTR)  
RF( 495) = 4.500D+11\*EXP( 7.2000D-01\*ALOGT - 6.55000D+02\*RTR)  
RF( 496) = 4.369D+09\*EXP( 1.2312D+00\*ALOGT - 5.42660D+04\*RTR)  
RF( 497) = 1.000D+13  
RF( 498) = 3.600D+13  
RF( 499) = 5.619D+12\*EXP( 3.5850D-01\*ALOGT - 6.91080D+04\*RTR)  
RF( 500) = 7.835D+13\*EXP( 2.6550D-01\*ALOGT + 1.54860D+04\*RTR)  
RF( 501) = 6.400D+05\*EXP( 2.3900D+00\*ALOGT - 1.01710D+04\*RTR)  
RF( 502) = 8.595D+02\*EXP( 2.9426D+00\*ALOGT - 4.82400D+03\*RTR)  
RF( 503) = 9.400D+06\*EXP( 1.9400D+00\*ALOGT - 6.46000D+03\*RTR)  
RF( 504) = 7.725D+03\*EXP( 2.4533D+00\*ALOGT + 6.76000D+02\*RTR)  
RF( 505) = 2.000D+06\*EXP( 2.0400D+00\*ALOGT - 5.66000D+02\*RTR)  
RF( 506) = 4.318D+04\*EXP( 2.4398D+00\*ALOGT - 1.07150D+04\*RTR)  
RF( 507) = 4.000D+13\*EXP( - 3.65000D+03\*RTR)  
RF( 508) = 4.139D+12\*EXP( 2.2690D-01\*ALOGT - 1.55290D+04\*RTR)  
RF( 509) = 6.600D+14\*EXP( -5.0000D-01\*ALOGT)  
RF( 510) = 3.680D+17\*EXP( -1.0494D+00\*ALOGT - 2.96370D+04\*RTR)  
RF( 511) = 6.800D+12  
RF( 512) = 4.306D+11\*EXP( 1.8760D-01\*ALOGT - 1.00900D+04\*RTR)  
RF( 513) = 4.000D+06\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 514) = 6.653D+06\*EXP( 2.0742D+00\*ALOGT - 2.83750D+04\*RTR)  
RF( 515) = 1.000D+13  
RF( 516) = 8.900D+12\*EXP( -3.5000D-01\*ALOGT)  
RF( 517) = 2.703D+13\*EXP( -5.7390D-01\*ALOGT + 7.39000D+02\*RTR)

RF( 518) = 2.900D+15\*EXP( -9.8800D-01\*ALOGT)  
RF( 519) = 8.082D+15\*EXP( -7.0870D-01\*ALOGT - 1.24628D+05\*RTR)  
RF( 520) = 3.000D+13  
RF( 521) = 5.068D+13\*EXP( 1.2260D-01\*ALOGT - 2.41850D+04\*RTR)  
RF( 522) = 9.200D+13  
RF( 523) = 4.813D+15\*EXP( -2.6500D-01\*ALOGT - 7.13700D+04\*RTR)  
RF( 524) = 2.000D+13  
RF( 525) = 1.761D+17\*EXP( -7.3700D-01\*ALOGT - 1.95470D+04\*RTR)  
RF( 526) = 5.000D+11\*EXP( 5.0000D-01\*ALOGT - 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 527) = 1.358D+13\*EXP( 4.6980D-01\*ALOGT - 4.16820D+04\*RTR)  
RF( 528) = 4.600D+05\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 6.50000D+03\*RTR)  
RF( 529) = 8.033D+06\*EXP( 1.6997D+00\*ALOGT - 8.76600D+03\*RTR)  
RF( 530) = 1.300D+06\*EXP( 1.5000D+00\*ALOGT - 1.00000D+02\*RTR)  
RF( 531) = 2.850D+14\*EXP( -3.6570D-01\*ALOGT)  
RF( 532) = 1.266D+21\*EXP( -1.5565D+00\*ALOGT - 3.61230D+04\*RTR)  
RF( 533) = 2.200D+13\*EXP( -2.3000D-01\*ALOGT)  
RF( 534) = 3.686D+13\*EXP( -2.4900D-02\*ALOGT - 9.72530D+04\*RTR)  
RF( 535) = 3.800D+13  
RF( 536) = 1.923D+15\*EXP( -3.4830D-01\*ALOGT - 4.89740D+04\*RTR)  
RF( 537) = 6.400D+09\*EXP( 1.0000D+00\*ALOGT - 6.28000D+03\*RTR)  
RF( 538) = 6.424D+08\*EXP( 1.0884D+00\*ALOGT - 3.79720D+04\*RTR)  
RF( 539) = 3.300D+12\*EXP( 3.0000D-01\*ALOGT)  
RF( 540) = 5.349D+12\*EXP( 4.2180D-01\*ALOGT - 7.48560D+04\*RTR)  
RF( 541) = 1.900D+11\*EXP( - 3.40000D+03\*RTR)  
RF( 542) = 1.566D+06\*EXP( 9.4460D-01\*ALOGT - 2.62540D+04\*RTR)  
RF( 543) = 5.000D+13  
RF( 544) = 7.100D+13  
RF( 545) = 5.000D+13  
RF( 546) = 1.000D+07  
RF( 547) = 1.514D+06\*EXP( 3.6890D-01\*ALOGT - 6.26200D+03\*RTR)  
RF( 548) = 1.000D+14  
RF( 549) = 5.709D+12\*EXP( 6.5590D-01\*ALOGT - 1.09870D+05\*RTR)  
RF( 550) = 8.000D+13  
RF( 551) = 2.795D+12\*EXP( 6.1660D-01\*ALOGT - 1.08081D+05\*RTR)  
RF( 552) = 1.000D+14  
RF( 553) = 9.263D+18\*EXP( -7.7920D-01\*ALOGT - 4.69520D+04\*RTR)  
RF( 554) = 5.000D+13  
RF( 555) = 1.043D+12\*EXP( 4.1160D-01\*ALOGT - 1.08290D+04\*RTR)  
RF( 556) = 5.000D+13  
RF( 557) = 4.589D+13\*EXP( 5.0320D-01\*ALOGT - 1.25367D+05\*RTR)  
RF( 558) = 2.000D+14  
RF( 559) = 8.937D+13\*EXP( 2.6210D-01\*ALOGT - 5.58220D+04\*RTR)  
RF( 560) = 5.000D+13  
RF( 561) = 7.571D+12\*EXP( 3.6890D-01\*ALOGT - 6.26200D+03\*RTR)  
RF( 562) = 5.000D+13  
RF( 563) = 2.940D+14\*EXP( 1.4470D-01\*ALOGT - 5.62590D+04\*RTR)  
RF( 564) = 4.000D+14\*EXP( - 5.61000D+04\*RTR)  
RF( 565) = 6.538D+08\*EXP( 1.1481D+00\*ALOGT - 1.54100D+04\*RTR)  
RF( 566) = 2.360D-11\*EXP( 7.0000D+00\*ALOGT + 4.41000D+02\*RTR)  
RF( 567) = 8.901D-18\*EXP( 8.3959D+00\*ALOGT - 6.06890D+04\*RTR)  
RF( 568) = 6.600D+13\*EXP( - 2.66300D+04\*RTR)  
RF( 569) = 1.000D+14\*EXP( - 2.80000D+04\*RTR)  
RF( 570) = 1.902D+10\*EXP( 9.5910D-01\*ALOGT - 1.06411D+05\*RTR)  
RF( 571) = 3.162D-05\*EXP( 5.3246D+00\*ALOGT - 6.27130D+04\*RTR)  
RF( 572) = 3.200D+11\*EXP( - 2.02370D+04\*RTR)  
RF( 573) = 7.411D+11\*EXP( 1.0290D-01\*ALOGT - 1.07486D+05\*RTR)  
RF( 574) = 1.400D+04\*EXP( 2.6400D+00\*ALOGT - 4.98000D+03\*RTR)  
RF( 575) = 1.408D+07\*EXP( 2.0016D+00\*ALOGT - 1.32180D+04\*RTR)  
RF( 576) = 3.500D+03\*EXP( 2.6400D+00\*ALOGT - 4.98000D+03\*RTR)  
RF( 577) = 1.595D+00\*EXP( 3.4444D+00\*ALOGT - 3.68610D+04\*RTR)  
RF( 578) = 2.700D+09\*EXP( 1.5800D+00\*ALOGT - 2.92000D+04\*RTR)  
RF( 579) = 3.968D+05\*EXP( 2.4093D+00\*ALOGT - 6.46600D+03\*RTR)  
RF( 580) = 3.900D+06\*EXP( 1.8300D+00\*ALOGT - 1.03000D+04\*RTR)  
RF( 581) = 1.506D+04\*EXP( 2.5458D+00\*ALOGT - 4.85200D+03\*RTR)  
RF( 582) = 5.900D+04\*EXP( 2.4000D+00\*ALOGT - 1.25000D+04\*RTR)  
RF( 583) = 9.210D+06\*EXP( 2.0839D+00\*ALOGT - 5.47400D+03\*RTR)  
RF( 584) = 2.000D-03\*EXP( 4.0000D+00\*ALOGT - 1.00000D+03\*RTR)  
RF( 585) = 4.273D+01\*EXP( 3.1291D+00\*ALOGT - 1.90720D+04\*RTR)  
RF( 586) = 7.800D-04\*EXP( 4.0000D+00\*ALOGT - 4.00000D+03\*RTR)  
RF( 587) = 5.000D+13  
RF( 588) = 5.983D+12\*EXP( 2.1630D-01\*ALOGT + 5.49300D+03\*RTR)  
RF( 589) = 7.700D+13  
RF( 590) = 2.468D+14\*EXP( 5.8400D-02\*ALOGT - 7.70110D+04\*RTR)  
RF( 591) = 4.000D+13  
RF( 592) = 2.738D+20\*EXP( -1.4677D+00\*ALOGT - 3.09720D+04\*RTR)  
RF( 593) = 7.500D+12\*EXP( 3.89000D+02\*RTR)  
RF( 594) = 1.018D+17\*EXP( -1.0309D+00\*ALOGT - 1.33010D+04\*RTR)

RF( 595) = 3.700D+06\*EXP( 2.1600D+00\*ALOGT - 2.68840D+04\*RTR)  
RF( 596) = 3.000D+05\*EXP( 2.4500D+00\*ALOGT - 2.23700D+03\*RTR)  
RF( 597) = 1.249D+09\*EXP( 1.5814D+00\*ALOGT - 2.31820D+04\*RTR)  
RF( 598) = 6.200D+04\*EXP( 2.6400D+00\*ALOGT + 4.37000D+02\*RTR)  
RF( 599) = 2.769D+05\*EXP( 2.1868D+00\*ALOGT - 1.86260D+04\*RTR)  
RF( 600) = 1.289D+05\*EXP( 2.4876D+00\*ALOGT - 2.21810D+04\*RTR)  
RF( 601) = 5.900D+14\*EXP( -2.4000D-01\*ALOGT)  
RF( 602) = 1.542D+14\*EXP( -3.5600D-01\*ALOGT - 1.27110D+04\*RTR)  
RF( 603) = 1.100D+16\*EXP( - 8.59990D+04\*RTR)  
RF( 604) = 2.200D+07\*EXP( 1.7000D+00\*ALOGT - 3.80000D+03\*RTR)  
RF( 605) = 7.412D+00\*EXP( 3.1876D+00\*ALOGT - 7.51900D+03\*RTR)  
RF( 606) = 9.800D+07\*EXP( 1.4100D+00\*ALOGT - 8.52400D+03\*RTR)  
RF( 607) = 1.284D+07\*EXP( 1.7924D+00\*ALOGT - 4.84520D+04\*RTR)  
RF( 608) = 2.200D+06\*EXP( 2.1100D+00\*ALOGT - 1.14250D+04\*RTR)  
RF( 609) = 1.036D+05\*EXP( 2.3425D+00\*ALOGT - 1.59100D+03\*RTR)  
RF( 610) = 6.400D+05\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 2.56300D+03\*RTR)  
RF( 611) = 7.915D+05\*EXP( 2.1191D+00\*ALOGT - 1.00140D+04\*RTR)  
RF( 612) = 1.000D+12\*EXP( - 3.50000D+04\*RTR)  
RF( 613) = 2.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 614) = 2.737D+09\*EXP( 1.4452D+00\*ALOGT - 2.70980D+04\*RTR)  
RF( 615) = 1.500D+04\*EXP( 2.6400D+00\*ALOGT - 4.00000D+03\*RTR)  
RF( 616) = 6.400D+05\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 2.56300D+03\*RTR)  
RF( 617) = 8.400D+17\*EXP( -1.7300D+00\*ALOGT - 7.63000D+02\*RTR)  
RF( 618) = 5.600D+17\*EXP( -1.7300D+00\*ALOGT - 7.63000D+02\*RTR)  
RF( 619) = 2.000D+13  
RF( 620) = 3.100D+16\*EXP( -5.0000D-01\*ALOGT - 4.80000D+04\*RTR)  
RF( 621) = 6.293D+10\*EXP( 7.7830D-01\*ALOGT + 7.78000D+03\*RTR)  
RF( 622) = 5.000D+13  
RF( 623) = 2.265D+07\*EXP( 1.4428D+00\*ALOGT - 2.36430D+04\*RTR)  
RF( 624) = 4.700D+13  
RF( 625) = 1.114D+09\*EXP( 1.1777D+00\*ALOGT - 9.50130D+04\*RTR)  
RF( 626) = 2.000D+12\*EXP( - 2.00000D+04\*RTR)  
RF( 627) = 7.600D+02\*EXP( 3.0000D+00\*ALOGT - 4.00000D+03\*RTR)  
RF( 628) = 9.879D+03\*EXP( 2.7282D+00\*ALOGT - 1.20450D+04\*RTR)  
RF( 629) = 3.600D+13  
RF( 630) = 9.800D+12\*EXP( - 8.12000D+03\*RTR)  
RF( 631) = 6.000D+12  
RF( 632) = 1.500D-09\*EXP( 6.8900D+00\*ALOGT + 2.91000D+03\*RTR)  
RF( 633) = 1.400D+12\*EXP( - 1.81500D+03\*RTR)  
RF( 634) = 4.000D+07\*EXP( 2.0000D+00\*ALOGT - 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 635) = 7.833D+01\*EXP( 3.1605D+00\*ALOGT - 5.71900D+03\*RTR)  
RF( 636) = 5.000D+12\*EXP( - 2.00000D+03\*RTR)  
RF( 637) = 1.636D+16\*EXP( -8.4430D-01\*ALOGT - 5.30700D+03\*RTR)  
RF( 638) = 3.000D+14\*EXP( - 2.20000D+04\*RTR)  
RF( 639) = 3.053D+13\*EXP( 2.1130D-01\*ALOGT + 3.17600D+03\*RTR)  
RF( 640) = 3.700D+07\*EXP( 1.4200D+00\*ALOGT - 2.07230D+04\*RTR)  
RF( 641) = 1.600D+13  
RF( 642) = 2.100D+13  
RF( 643) = 1.500D-01\*EXP( 3.5230D+00\*ALOGT - 3.95000D+03\*RTR)  
RF( 644) = 1.500D-01\*EXP( 3.5230D+00\*ALOGT - 3.95000D+03\*RTR)  
RF( 645) = 2.000D+13  
RF( 646) = 1.000D+14  
RF( 647) = 3.843D+13\*EXP( 5.0000D-03\*ALOGT - 8.91700D+03\*RTR)  
RF( 648) = 2.200D+12\*EXP( 3.78000D+02\*RTR)  
RF( 649) = 4.800D+13  
RF( 650) = 3.400D+13  
RF( 651) = 1.900D+13  
RF( 652) = 6.000D+07  
RF( 653) = 1.477D+20\*EXP( -2.1380D+00\*ALOGT - 2.30100D+03\*RTR)  
RF( 654) = 9.001D+28\*EXP( -3.6619D+00\*ALOGT - 9.39720D+04\*RTR)  
RF( 655) = 1.261D+24\*EXP( -2.6060D+00\*ALOGT - 1.05622D+05\*RTR)  
RF( 656) = 3.587D+21\*EXP( -2.4777D+00\*ALOGT - 1.33000D+02\*RTR)  
RF( 657) = 1.517D+13\*EXP( - 5.47700D+03\*RTR)  
RF( 658) = 3.096D+16\*EXP( -9.3340D-01\*ALOGT - 3.81000D+02\*RTR)  
RF( 659) = 1.141D+14\*EXP( - 1.44690D+04\*RTR)  
RF( 660) = 1.727D+19\*EXP( -9.8360D-01\*ALOGT - 4.17900D+03\*RTR)  
RF( 661) = 8.286D+12\*EXP( - 6.14900D+03\*RTR)  
RF( 662) = 2.674D+11\*EXP( 4.9950D-01\*ALOGT - 6.19400D+03\*RTR)  
RF( 663) = 6.789D+16\*EXP( - 1.00461D+05\*RTR)  
RF( 664) = 4.646D+13\*EXP( 2.9910D-01\*ALOGT + 1.22000D+02\*RTR)  
RF( 665) = 4.882D+28\*EXP( -4.6890D+00\*ALOGT - 4.44230D+04\*RTR)  
RF( 666) = 6.036D+27\*EXP( -4.4476D+00\*ALOGT - 7.72400D+03\*RTR)  
RF( 667) = 2.552D+30\*EXP( -5.7040D+00\*ALOGT - 1.37570D+04\*RTR)  
RF( 668) = 2.667D+13\*EXP( -1.9700D-01\*ALOGT - 2.72100D+03\*RTR)  
RF( 669) = 3.129D+12\*EXP( 7.9000D-02\*ALOGT - 3.74930D+04\*RTR)  
RF( 670) = 1.649D+25\*EXP( -2.9640D+00\*ALOGT - 1.28451D+05\*RTR)  
RF( 671) = 2.782D+21\*EXP( -2.2938D+00\*ALOGT + 3.90300D+03\*RTR)

```

RF( 672) = 1.277D+16*EXP( -1.0650D+00*ALOGT - 4.32900D+03*RTR)
RF( 673) = 1.062D+24*EXP( -3.5370D+00*ALOGT - 5.03000D+03*RTR)
RF( 674) = 1.678D+07*EXP( 1.4800D+00*ALOGT + 2.71300D+03*RTR)
RF( 675) = 5.757D+17*EXP( -1.3880D+00*ALOGT - 2.05500D+04*RTR)
RF( 676) = 9.573D+22*EXP( -2.4933D+00*ALOGT - 1.44240D+04*RTR)
RF( 677) = 1.979D+05*EXP( 1.8720D+00*ALOGT - 1.64560D+04*RTR)
RF( 678) = 9.581D+13*EXP( -2.9230D-01*ALOGT - 6.89220D+04*RTR)
RF( 679) = 3.879D+25*EXP( -3.5890D+00*ALOGT - 6.34700D+03*RTR)
RF( 680) = 3.419D+31*EXP( -4.5568D+00*ALOGT - 9.99820D+04*RTR)
RF( 681) = 7.473D+15*EXP( -1.1240D+00*ALOGT - 3.49130D+04*RTR)
RF( 682) = 4.352D+14*EXP( -7.6880D-01*ALOGT - 1.88100D+03*RTR)
RF( 683) = 2.101D+14*EXP( -4.9700D-01*ALOGT - 2.97320D+04*RTR)
RF( 684) = 1.806D+07*EXP( 1.2262D+00*ALOGT - 5.18800D+03*RTR)
RF( 685) = 9.644D+05*EXP( 2.7780D+00*ALOGT - 8.17570D+04*RTR)
RF( 686) = 9.779D+05*EXP( 2.1713D+00*ALOGT + 3.90200D+03*RTR)
RF( 687) = 9.163D+63*EXP( -1.4612D+01*ALOGT - 9.33710D+04*RTR)
RF( 688) = 2.061D+63*EXP( -1.4493D+01*ALOGT - 9.45300D+04*RTR)
RF( 689) = 4.231D+08*EXP( - 2.80990D+04*RTR)
RF( 690) = 2.007D+04*EXP( 1.3557D+00*ALOGT + 8.14900D+03*RTR)
RF( 691) = 1.000D+14*EXP( - 5.50000D+04*RTR)
RF( 692) = 1.933D+13*EXP( 7.1220D-01*ALOGT - 1.98800D+03*RTR)
RF( 693) = 1.000D+14*EXP( - 3.60000D+04*RTR)
RF( 694) = 6.732D+12*EXP( 5.1550D-01*ALOGT - 1.32400D+03*RTR)
RETURN
END

```

C-----

```

SUBROUTINE ELEM RATE (RF, C, CM, V)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
DIMENSION RF(*), C(*), CM(*), V(*)

```

C

```

V( 1) = RF( 1)*C( 42)*C( 42)*CM( 1)
V( 2) = RF( 2)*C( 5)*CM( 2)
V( 3) = RF( 3)*C( 40)*C( 42)*CM( 3)
V( 4) = RF( 4)*C( 36)*CM( 4)
V( 5) = RF( 5)*C( 5)*C( 26)
V( 6) = RF( 6)*C( 40)*C( 5)
V( 7) = RF( 7)*C( 36)*C( 42)
V( 8) = RF( 8)*C( 42)*C( 26)
V( 9) = RF( 9)*C( 36)*C( 40)
V( 10) = RF( 10)*C( 42)*C( 26)*CM( 10)
V( 11) = RF( 11)*C( 33)*CM( 11)
V( 12) = RF( 12)*C( 42)*C( 36)*CM( 12)
V( 13) = RF( 13)*C( 2)*CM( 13)
V( 14) = RF( 14)*C( 5)*C( 36)
V( 15) = RF( 15)*C( 2)*C( 42)
V( 16) = RF( 16)*C( 2)*C( 40)
V( 17) = RF( 17)*C( 36)*C( 36)
V( 18) = RF( 18)*C( 33)*C( 36)
V( 19) = RF( 19)*C( 2)*C( 26)
V( 20) = RF( 20)*C( 33)*C( 40)
V( 21) = RF( 21)*C( 36)*C( 26)
V( 22) = RF( 22)*C( 42)*C( 33)
V( 23) = RF( 23)*C( 5)*C( 26)
V( 24) = RF( 24)*C( 42)*C( 33)
V( 25) = RF( 25)*C( 36)*C( 36)
V( 26) = RF( 26)*C( 42)*C( 33)
V( 27) = RF( 27)*C( 2)*C( 40)
V( 28) = RF( 28)*C( 3)*C( 33)
V( 29) = RF( 29)*C( 1)*C( 36)
V( 30) = RF( 30)*C( 3)*C( 36)
V( 31) = RF( 31)*C( 1)*C( 42)
V( 32) = RF( 32)*C( 3)*C( 40)*CM( 32)
V( 33) = RF( 33)*C( 1)*CM( 33)
V( 34) = RF( 34)*C( 50)*CM( 34)
V( 35) = RF( 35)*C( 42)*C( 3)*CM( 35)
V( 36) = RF( 36)*C( 50)*C( 36)
V( 37) = RF( 37)*C( 3)*C( 2)
V( 38) = RF( 38)*C( 50)*C( 40)
V( 39) = RF( 39)*C( 50)*C( 40)
V( 40) = RF( 40)*C( 50)*C( 42)
V( 41) = RF( 41)*C( 3)*C( 5)
V( 42) = RF( 42)*C( 50)*C( 26)
V( 43) = RF( 43)*C( 3)*C( 33)
V( 44) = RF( 44)*C( 50)*C( 32)
V( 45) = RF( 45)*C( 20)*C( 44)
V( 46) = RF( 46)*C( 6)*C( 36)
V( 47) = RF( 47)*C( 32)*C( 2)
V( 48) = RF( 48)*C( 6)*C( 40)
V( 49) = RF( 49)*C( 32)*C( 36)
V( 50) = RF( 50)*C( 6)*C( 42)
V( 51) = RF( 51)*C( 32)*C( 5)
V( 52) = RF( 52)*C( 32)*C( 33)
V( 53) = RF( 53)*C( 32)*CM( 53)
V( 54) = RF( 54)*C( 48)*C( 42)*CM( 54)
V( 55) = RF( 55)*C( 32)*CM( 55)
V( 56) = RF( 56)*C( 51)*C( 5)*CM( 56)
V( 57) = RF( 57)*C( 32)*C( 33)
V( 58) = RF( 58)*C( 32)*C( 40)
V( 59) = RF( 59)*C( 32)*C( 42)
V( 60) = RF( 60)*C( 48)*C( 5)
V( 61) = RF( 61)*C( 32)*C( 26)
V( 62) = RF( 62)*C( 78)*C( 40)
V( 63) = RF( 63)*C( 32)*C( 26)
V( 64) = RF( 64)*C( 32)*C( 32)
V( 65) = RF( 65)*C( 44)*C( 42)
V( 66) = RF( 66)*C( 48)*C( 36)
V( 67) = RF( 67)*C( 51)*C( 2)
V( 68) = RF( 68)*C( 48)*C( 36)
V( 69) = RF( 69)*C( 48)*C( 40)
V( 70) = RF( 70)*C( 48)*C( 40)
V( 71) = RF( 71)*C( 48)*C( 42)
V( 72) = RF( 72)*C( 51)*C( 5)
V( 73) = RF( 73)*C( 48)*C( 26)
V( 74) = RF( 74)*C( 48)*C( 26)
V( 75) = RF( 75)*C( 48)*C( 26)
V( 76) = RF( 76)*C( 48)*C( 26)
V( 77) = RF( 77)*C( 48)*C( 26)
V( 78) = RF( 78)*C( 48)*C( 26)
V( 79) = RF( 79)*C( 48)*C( 1)
V( 80) = RF( 80)*C( 48)*C( 48)
V( 81) = RF( 81)*C( 48)*C( 48)
V( 82) = RF( 82)*C( 48)*C( 32)
V( 83) = RF( 83)*C( 48)*C( 4)
V( 84) = RF( 84)*C( 42)*C( 43)
V( 85) = RF( 85)*C( 81)*CM( 85)
V( 86) = RF( 86)*C( 48)*CM( 86)
V( 87) = RF( 87)*C( 81)*C( 26)
V( 88) = RF( 88)*C( 81)*C( 5)
V( 89) = RF( 89)*C( 32)*C( 42)
V( 90) = RF( 90)*C( 81)*C( 42)
V( 91) = RF( 91)*C( 48)*C( 42)
V( 92) = RF( 92)*C( 81)*C( 42)
V( 93) = RF( 93)*C( 51)*C( 5)
V( 94) = RF( 94)*C( 81)*C( 36)

```



V( 95) = RF( 95)\*C( 81)\*C( 2)  
V( 96) = RF( 96)\*C( 16)  
V( 97) = RF( 97)\*C( 32)\*C( 32)  
V( 98) = RF( 98)\*C( 81)\*C( 4)  
V( 99) = RF( 99)\*C( 43)\*C( 42)  
V( 100) = RF(100)\*C( 81)\*C( 2)  
V( 101) = RF(101)\*C( 48)\*C( 2)  
V( 102) = RF(102)\*C( 81)\*C( 1)  
V( 103) = RF(103)\*C( 51)\*C( 36)  
V( 104) = RF(104)\*C( 51)\*C( 40)  
V( 105) = RF(105)\*C( 51)\*C( 26)  
V( 106) = RF(106)\*C( 51)\*C( 26)  
V( 107) = RF(107)\*C( 51)\*C( 1)  
V( 108) = RF(108)\*C( 51)\*C( 6)  
V( 109) = RF(109)\*C( 78)\*CM( 109)  
V( 110) = RF(110)\*C( 78)\*C( 26)  
V( 111) = RF(111)\*C( 32)\*C( 1)  
V( 112) = RF(112)\*C( 20)\*CM( 112)  
V( 113) = RF(113)\*C( 50)\*C( 42)\*CM( 113)  
V( 114) = RF(114)\*C( 20)\*C( 36)  
V( 115) = RF(115)\*C( 50)\*C( 2)  
V( 116) = RF(116)\*C( 20)\*C( 40)  
V( 117) = RF(117)\*C( 20)\*C( 42)  
V( 118) = RF(118)\*C( 50)\*C( 5)  
V( 119) = RF(119)\*C( 20)\*C( 32)  
V( 120) = RF(120)\*C( 18)\*C( 36)  
V( 121) = RF(121)\*C( 44)\*C( 2)  
V( 122) = RF(122)\*C( 18)\*C( 40)  
V( 123) = RF(123)\*C( 44)\*C( 36)  
V( 124) = RF(124)\*C( 18)\*C( 42)  
V( 125) = RF(125)\*C( 44)\*C( 5)  
V( 126) = RF(126)\*C( 18)\*C( 32)  
V( 127) = RF(127)\*C( 44)\*C( 36)  
V( 128) = RF(128)\*C( 44)\*C( 36)  
V( 129) = RF(129)\*C( 44)\*C( 40)  
V( 130) = RF(130)\*C( 44)\*C( 40)  
V( 131) = RF(131)\*C( 44)\*C( 42)  
V( 132) = RF(132)\*C( 44)\*C( 32)  
V( 133) = RF(133)\*C( 9)\*CM( 133)  
V( 134) = RF(134)\*C( 4)\*C( 5)\*CM( 134)  
V( 135) = RF(135)\*C( 9)\*CM( 135)  
V( 136) = RF(136)\*C( 9)\*C( 36)  
V( 137) = RF(137)\*C( 9)\*C( 40)  
V( 138) = RF(138)\*C( 9)\*C( 40)  
V( 139) = RF(139)\*C( 9)\*C( 42)  
V( 140) = RF(140)\*C( 74)\*C( 5)  
V( 141) = RF(141)\*C( 44)\*C( 74)  
V( 142) = RF(142)\*C( 9)\*C( 32)  
V( 143) = RF(143)\*C( 74)\*C( 6)  
V( 144) = RF(144)\*C( 74)\*C( 36)  
V( 145) = RF(145)\*C( 74)\*C( 42)  
V( 146) = RF(146)\*C( 74)\*C( 40)  
V( 147) = RF(147)\*C( 74)\*C( 40)  
V( 148) = RF(148)\*C( 74)\*C( 26)  
V( 149) = RF(149)\*C( 74)\*C( 4)  
V( 150) = RF(150)\*C( 38)\*C( 42)  
V( 151) = RF(151)\*C( 8)  
V( 152) = RF(152)\*C( 74)\*C( 9)  
V( 153) = RF(153)\*C( 8)\*C( 42)  
V( 154) = RF(154)\*C( 4)\*C( 26)  
V( 155) = RF(155)\*C( 4)\*C( 36)  
V( 156) = RF(156)\*C( 82)\*C( 2)  
V( 157) = RF(157)\*C( 4)\*C( 36)  
V( 158) = RF(158)\*C( 4)\*C( 36)  
V( 159) = RF(159)\*C( 4)\*C( 40)  
V( 160) = RF(160)\*C( 4)\*C( 40)  
V( 161) = RF(161)\*C( 82)\*C( 5)  
V( 162) = RF(162)\*C( 4)\*C( 42)  
V( 163) = RF(163)\*C( 82)\*C( 36)  
V( 164) = RF(164)\*C( 82)\*C( 40)  
V( 165) = RF(165)\*C( 82)\*C( 26)  
V( 166) = RF(166)\*C( 22)\*C( 42)  
V( 167) = RF(167)\*C( 84)  
V( 168) = RF(168)\*C( 84)\*C( 26)  
V( 169) = RF(169)\*C( 84)\*C( 26)  
V( 170) = RF(170)\*C( 90)  
V( 171) = RF(171)\*C( 22)\*C( 42)  
V( 172) = RF(172)\*C( 90)\*C( 26)  
V( 173) = RF(173)\*C( 22)\*CM( 173)  
V( 174) = RF(174)\*C( 48)\*C( 3)\*CM( 174)  
V( 175) = RF(175)\*C( 22)\*C( 40)  
V( 176) = RF(176)\*C( 22)\*C( 40)  
V( 177) = RF(177)\*C( 22)\*C( 36)  
V( 178) = RF(178)\*C( 22)\*C( 36)  
V( 179) = RF(179)\*C( 22)\*C( 42)  
V( 180) = RF(180)\*C( 32)\*C( 3)  
V( 181) = RF(181)\*C( 22)\*C( 42)  
V( 182) = RF(182)\*C( 45)\*C( 5)  
V( 183) = RF(183)\*C( 22)\*C( 32)  
V( 184) = RF(184)\*C( 22)\*C( 32)  
V( 185) = RF(185)\*C( 45)\*CM( 185)  
V( 186) = RF(186)\*C( 51)\*C( 3)\*CM( 186)  
V( 187) = RF(187)\*C( 45)\*C( 36)  
V( 188) = RF(188)\*C( 45)\*C( 40)  
V( 189) = RF(189)\*C( 45)\*C( 42)  
V( 190) = RF(190)\*C( 81)\*C( 3)  
V( 191) = RF(191)\*C( 45)\*C( 26)  
V( 192) = RF(192)\*C( 16)\*C( 36)  
V( 193) = RF(193)\*C( 16)\*C( 36)  
V( 194) = RF(194)\*C( 16)\*C( 40)  
V( 195) = RF(195)\*C( 16)\*C( 42)  
V( 196) = RF(196)\*C( 16)\*C( 32)  
V( 197) = RF(197)\*C( 77)\*CM( 197)  
V( 198) = RF(198)\*C( 77)\*C( 42)  
V( 199) = RF(199)\*C( 77)\*C( 26)  
V( 200) = RF(200)\*C( 79)\*C( 26)  
V( 201) = RF(201)\*C( 19)  
V( 202) = RF(202)\*C( 74)\*C( 32)  
V( 203) = RF(203)\*C( 19)  
V( 204) = RF(204)\*C( 19)\*C( 36)  
V( 205) = RF(205)\*C( 15)\*C( 2)  
V( 206) = RF(206)\*C( 19)\*C( 40)  
V( 207) = RF(207)\*C( 19)\*C( 40)  
V( 208) = RF(208)\*C( 19)\*C( 40)  
V( 209) = RF(209)\*C( 19)\*C( 40)  
V( 210) = RF(210)\*C( 19)\*C( 42)  
V( 211) = RF(211)\*C( 15)\*C( 5)  
V( 212) = RF(212)\*C( 15)\*C( 42)  
V( 213) = RF(213)\*C( 12)\*C( 5)  
V( 214) = RF(214)\*C( 15)\*C( 32)  
V( 215) = RF(215)\*C( 15)\*C( 48)  
V( 216) = RF(216)\*C( 15)\*C( 44)  
V( 217) = RF(217)\*C( 12)\*CM( 217)  
V( 218) = RF(218)\*C( 43)\*C( 42)\*CM( 218)  
V( 219) = RF(219)\*C( 12)  
V( 220) = RF(220)\*C( 30)  
V( 221) = RF(221)\*C( 12)\*C( 36)  
V( 222) = RF(222)\*C( 12)\*C( 36)  
V( 223) = RF(223)\*C( 12)\*C( 40)  
V( 224) = RF(224)\*C( 12)\*C( 40)  
V( 225) = RF(225)\*C( 12)\*C( 40)  
V( 226) = RF(226)\*C( 12)\*C( 42)  
V( 227) = RF(227)\*C( 15)  
V( 228) = RF(228)\*C( 12)\*C( 42)  
V( 229) = RF(229)\*C( 12)\*C( 32)  
V( 230) = RF(230)\*C( 12)\*C( 15)  
V( 231) = RF(231)\*C( 30)\*CM( 231)  
V( 232) = RF(232)\*C( 43)\*C( 42)\*CM( 232)  
V( 233) = RF(233)\*C( 30)  
V( 234) = RF(234)\*C( 82)\*C( 32)  
V( 235) = RF(235)\*C( 30)\*C( 36)  
V( 236) = RF(236)\*C( 30)\*C( 40)  
V( 237) = RF(237)\*C( 30)\*C( 40)  
V( 238) = RF(238)\*C( 30)\*C( 40)  
V( 239) = RF(239)\*C( 30)\*C( 42)  
V( 240) = RF(240)\*C( 43)\*C( 5)  
V( 241) = RF(241)\*C( 43)\*C( 26)  
V( 242) = RF(242)\*C( 43)\*C( 36)  
V( 243) = RF(243)\*C( 43)\*C( 36)  
V( 244) = RF(244)\*C( 43)\*C( 40)  
V( 245) = RF(245)\*C( 43)\*C( 40)  
V( 246) = RF(246)\*C( 43)\*C( 40)  
V( 247) = RF(247)\*C( 43)\*C( 40)  
V( 248) = RF(248)\*C( 43)\*C( 42)

V( 249) = RF(249)\*C( 34)\*C( 5)  
V( 250) = RF(250)\*C( 43)\*C( 51)  
V( 251) = RF(251)\*C( 43)\*C( 48)  
V( 252) = RF(252)\*C( 43)\*C( 32)  
V( 253) = RF(253)\*C( 8)  
V( 254) = RF(254)\*C( 51)\*C( 4)  
V( 255) = RF(255)\*C( 34)\*C( 42)  
V( 256) = RF(256)\*C( 34)\*C( 26)  
V( 257) = RF(257)\*C( 34)\*C( 36)  
V( 258) = RF(258)\*C( 34)\*C( 48)  
V( 259) = RF(259)\*C( 68)  
V( 260) = RF(260)\*C( 8)  
V( 261) = RF(261)\*C( 9)\*C( 4)  
V( 262) = RF(262)\*C( 8)  
V( 263) = RF(263)\*C( 69)\*C( 42)  
V( 264) = RF(264)\*C( 8)\*C( 36)  
V( 265) = RF(265)\*C( 8)\*C( 40)  
V( 266) = RF(266)\*C( 8)\*C( 42)  
V( 267) = RF(267)\*C( 69)\*C( 5)  
V( 268) = RF(268)\*C( 8)\*C( 32)  
V( 269) = RF(269)\*C( 69)  
V( 270) = RF(270)\*C( 74)\*C( 4)  
V( 271) = RF(271)\*C( 69)\*C( 36)  
V( 272) = RF(272)\*C( 69)\*C( 42)  
V( 273) = RF(273)\*C( 38)  
V( 274) = RF(274)\*C( 4)\*C( 4)  
V( 275) = RF(275)\*C( 38)\*CM( 275)  
V( 276) = RF(276)\*C( 46)\*C( 42)\*CM( 276)  
V( 277) = RF(277)\*C( 38)  
V( 278) = RF(278)\*C( 41)\*C( 42)  
V( 279) = RF(279)\*C( 38)  
V( 280) = RF(280)\*C( 23)\*C( 5)  
V( 281) = RF(281)\*C( 38)\*C( 36)  
V( 282) = RF(282)\*C( 41)\*C( 2)  
V( 283) = RF(283)\*C( 38)\*C( 36)  
V( 284) = RF(284)\*C( 46)\*C( 2)  
V( 285) = RF(285)\*C( 38)\*C( 40)  
V( 286) = RF(286)\*C( 38)\*C( 42)  
V( 287) = RF(287)\*C( 41)\*C( 5)  
V( 288) = RF(288)\*C( 38)\*C( 42)  
V( 289) = RF(289)\*C( 46)\*C( 5)  
V( 290) = RF(290)\*C( 38)\*C( 32)  
V( 291) = RF(291)\*C( 41)\*C( 6)  
V( 292) = RF(292)\*C( 4)\*C( 4)  
V( 293) = RF(293)\*C( 41)\*C( 42)  
V( 294) = RF(294)\*C( 41)\*C( 26)  
V( 295) = RF(295)\*C( 41)\*C( 36)  
V( 296) = RF(296)\*C( 23)\*C( 2)  
V( 297) = RF(297)\*C( 41)\*C( 40)  
V( 298) = RF(298)\*C( 41)\*C( 42)  
V( 299) = RF(299)\*C( 23)\*C( 5)  
V( 300) = RF(300)\*C( 12)\*C( 82)  
V( 301) = RF(301)\*C( 46)\*C( 36)  
V( 302) = RF(302)\*C( 46)\*C( 42)  
V( 303) = RF(303)\*C( 46)\*C( 42)  
V( 304) = RF(304)\*C( 4)\*C( 82)  
V( 305) = RF(305)\*C( 23)\*C( 42)  
V( 306) = RF(306)\*C( 23)\*C( 40)  
V( 307) = RF(307)\*C( 43)\*C( 30)  
V( 308) = RF(308)\*C( 43)\*C( 43)  
V( 309) = RF(309)\*C( 11)  
V( 310) = RF(310)\*C( 69)\*C( 4)  
V( 311) = RF(311)\*C( 11)\*C( 42)  
V( 312) = RF(312)\*C( 46)\*C( 74)  
V( 313) = RF(313)\*C( 11)  
V( 314) = RF(314)\*C( 11)  
V( 315) = RF(315)\*C( 38)\*C( 4)  
V( 316) = RF(316)\*C( 43)\*C( 43)  
V( 317) = RF(317)\*C( 39)\*C( 42)  
V( 318) = RF(318)\*C( 46)\*C( 4)  
V( 319) = RF(319)\*C( 39)  
V( 320) = RF(320)\*C( 37)\*C( 36)  
V( 321) = RF(321)\*C( 64)\*C( 42)  
V( 322) = RF(322)\*C( 37)\*C( 36)  
V( 323) = RF(323)\*C( 17)\*C( 42)  
V( 324) = RF(324)\*C( 37)\*C( 40)  
V( 325) = RF(325)\*C( 37)\*C( 40)  
V( 326) = RF(326)\*C( 64)  
V( 327) = RF(327)\*C( 17)\*C( 42)  
V( 328) = RF(328)\*C( 17)  
V( 329) = RF(329)\*C( 39)\*C( 42)  
V( 330) = RF(330)\*C( 11)  
V( 331) = RF(331)\*C( 11)\*C( 36)  
V( 332) = RF(332)\*C( 39)\*C( 2)  
V( 333) = RF(333)\*C( 11)\*C( 42)  
V( 334) = RF(334)\*C( 39)\*C( 5)  
V( 335) = RF(335)\*C( 11)\*C( 40)  
V( 336) = RF(336)\*C( 39)\*C( 19)  
V( 337) = RF(337)\*C( 39)\*C( 26)  
V( 338) = RF(338)\*C( 39)\*C( 33)  
V( 339) = RF(339)\*C( 39)\*C( 36)  
V( 340) = RF(340)\*C( 39)\*C( 9)  
V( 341) = RF(341)\*C( 10)\*C( 42)  
V( 342) = RF(342)\*C( 35)  
V( 343) = RF(343)\*C( 37)\*C( 3)  
V( 344) = RF(344)\*C( 13)  
V( 345) = RF(345)\*C( 39)\*C( 32)  
V( 346) = RF(346)\*C( 13)  
V( 347) = RF(347)\*C( 31)\*C( 42)  
V( 348) = RF(348)\*C( 31)\*C( 33)  
V( 349) = RF(349)\*C( 13)\*C( 36)  
V( 350) = RF(350)\*C( 31)\*C( 2)  
V( 351) = RF(351)\*C( 13)\*C( 42)  
V( 352) = RF(352)\*C( 31)\*C( 5)  
V( 353) = RF(353)\*C( 13)\*C( 42)  
V( 354) = RF(354)\*C( 11)\*C( 32)  
V( 355) = RF(355)\*C( 31)  
V( 356) = RF(356)\*C( 31)  
V( 357) = RF(357)\*C( 37)\*C( 4)  
V( 358) = RF(358)\*C( 31)\*C( 36)  
V( 359) = RF(359)\*C( 7)  
V( 360) = RF(360)\*C( 31)\*C( 40)  
V( 361) = RF(361)\*C( 31)\*C( 40)  
V( 362) = RF(362)\*C( 31)\*C( 43)  
V( 363) = RF(363)\*C( 7)\*C( 26)  
V( 364) = RF(364)\*C( 7)\*C( 36)  
V( 365) = RF(365)\*C( 7)\*C( 42)  
V( 366) = RF(366)\*C( 21)  
V( 367) = RF(367)\*C( 61)\*C( 42)  
V( 368) = RF(368)\*C( 21)\*C( 36)  
V( 369) = RF(369)\*C( 21)\*C( 40)  
V( 370) = RF(370)\*C( 21)\*C( 42)  
V( 371) = RF(371)\*C( 21)\*C( 42)  
V( 372) = RF(372)\*C( 21)\*C( 32)  
V( 373) = RF(373)\*C( 61)  
V( 374) = RF(374)\*C( 39)\*C( 3)  
V( 375) = RF(375)\*C( 61)\*C( 26)  
V( 376) = RF(376)\*C( 72)  
V( 377) = RF(377)\*C( 72)  
V( 378) = RF(378)\*C( 39)\*C( 9)  
V( 379) = RF(379)\*C( 10)  
V( 380) = RF(380)\*C( 10)  
V( 381) = RF(381)\*C( 27)  
V( 382) = RF(382)\*C( 27)\*C( 42)  
V( 383) = RF(383)\*C( 27)\*C( 40)  
V( 384) = RF(384)\*C( 27)\*C( 36)  
V( 385) = RF(385)\*C( 27)\*C( 32)  
V( 386) = RF(386)\*C( 75)  
V( 387) = RF(387)\*C( 31)\*C( 9)  
V( 388) = RF(388)\*C( 27)  
V( 389) = RF(389)\*C( 27)\*C( 42)  
V( 390) = RF(390)\*C( 27)\*C( 40)  
V( 391) = RF(391)\*C( 27)\*C( 36)  
V( 392) = RF(392)\*C( 27)\*C( 26)  
V( 393) = RF(393)\*C( 27)\*C( 31)  
V( 394) = RF(394)\*C( 27)\*C( 78)  
V( 395) = RF(395)\*C( 76)  
V( 396) = RF(396)\*C( 10)\*C( 32)  
V( 397) = RF(397)\*C( 27)\*C( 42)  
V( 398) = RF(398)\*C( 27)  
V( 399) = RF(399)\*C( 27)  
V( 400) = RF(400)\*C( 31)\*C( 44)  
V( 401) = RF(401)\*C( 27)  
V( 402) = RF(402)\*C( 72)\*C( 32)

V( 403) = RF(403)\*C( 71)  
V( 404) = RF(404)\*C( 71)\*C( 40)  
V( 405) = RF(405)\*C( 73)  
V( 406) = RF(406)\*C( 91)  
V( 407) = RF(407)\*C( 91)  
V( 408) = RF(408)\*C( 73)  
V( 409) = RF(409)\*C( 66)  
V( 410) = RF(410)\*C( 67)  
V( 411) = RF(411)\*C( 25)  
V( 412) = RF(412)\*C( 25)  
V( 413) = RF(413)\*C( 25)  
V( 414) = RF(414)\*C( 25)  
V( 415) = RF(415)\*C( 25)  
V( 416) = RF(416)\*C( 25)  
V( 417) = RF(417)\*C( 25)  
V( 418) = RF(418)\*C( 25)  
V( 419) = RF(419)\*C( 25)\*C( 36)  
V( 420) = RF(420)\*C( 25)\*C( 36)  
V( 421) = RF(421)\*C( 25)\*C( 36)  
V( 422) = RF(422)\*C( 25)\*C( 36)  
V( 423) = RF(423)\*C( 25)\*C( 40)  
V( 424) = RF(424)\*C( 25)\*C( 40)  
V( 425) = RF(425)\*C( 25)\*C( 40)  
V( 426) = RF(426)\*C( 25)\*C( 40)  
V( 427) = RF(427)\*C( 25)\*C( 42)  
V( 428) = RF(428)\*C( 25)\*C( 42)  
V( 429) = RF(429)\*C( 25)\*C( 42)  
V( 430) = RF(430)\*C( 25)\*C( 42)  
V( 431) = RF(431)\*C( 25)\*C( 32)  
V( 432) = RF(432)\*C( 25)\*C( 32)  
V( 433) = RF(433)\*C( 25)\*C( 32)  
V( 434) = RF(434)\*C( 25)\*C( 32)  
V( 435) = RF(435)\*C( 87)  
V( 436) = RF(436)\*C( 87)  
V( 437) = RF(437)\*C( 86)  
V( 438) = RF(438)\*C( 87)  
V( 439) = RF(439)\*C( 83)  
V( 440) = RF(440)\*C( 86)  
V( 441) = RF(441)\*C( 85)  
V( 442) = RF(442)\*C( 83)  
V( 443) = RF(443)\*C( 85)  
V( 444) = RF(444)\*C( 89)\*C( 33)  
V( 445) = RF(445)\*C( 88)\*C( 33)  
V( 446) = RF(446)\*C( 29)\*C( 36)  
V( 447) = RF(447)\*C( 89)\*C( 2)  
V( 448) = RF(448)\*C( 29)\*C( 36)  
V( 449) = RF(449)\*C( 29)\*C( 36)  
V( 450) = RF(450)\*C( 88)\*C( 2)  
V( 451) = RF(451)\*C( 29)\*C( 40)  
V( 452) = RF(452)\*C( 89)\*C( 36)  
V( 453) = RF(453)\*C( 29)\*C( 40)  
V( 454) = RF(454)\*C( 29)\*C( 40)  
V( 455) = RF(455)\*C( 88)\*C( 36)  
V( 456) = RF(456)\*C( 29)\*C( 42)  
V( 457) = RF(457)\*C( 89)\*C( 5)  
V( 458) = RF(458)\*C( 29)\*C( 42)  
V( 459) = RF(459)\*C( 29)\*C( 42)  
V( 460) = RF(460)\*C( 88)\*C( 5)  
V( 461) = RF(461)\*C( 29)\*C( 44)  
V( 462) = RF(462)\*C( 29)\*C( 44)  
V( 463) = RF(463)\*C( 29)\*C( 15)  
V( 464) = RF(464)\*C( 89)\*C( 19)  
V( 465) = RF(465)\*C( 29)\*C( 15)  
V( 466) = RF(466)\*C( 29)\*C( 15)  
V( 467) = RF(467)\*C( 88)\*C( 19)  
V( 468) = RF(468)\*C( 89)\*C( 20)  
V( 469) = RF(469)\*C( 88)\*C( 20)  
V( 470) = RF(470)\*C( 29)\*C( 78)  
V( 471) = RF(471)\*C( 29)\*C( 78)  
V( 472) = RF(472)\*C( 29)\*C( 78)  
V( 473) = RF(473)\*C( 29)  
V( 474) = RF(474)\*C( 88)  
V( 475) = RF(475)\*C( 89)  
V( 476) = RF(476)\*C( 65)  
V( 477) = RF(477)\*C( 14)\*C( 42)\*CM( 477)  
V( 478) = RF(478)\*C( 58)\*CM( 478)  
V( 479) = RF(479)\*C( 14)\*C( 42)\*C( 28)  
V( 480) = RF(480)\*C( 58)\*C( 28)  
V( 481) = RF(481)\*C( 14)\*C( 40)\*CM( 481)  
V( 482) = RF(482)\*C( 57)\*CM( 482)  
V( 483) = RF(483)\*C( 14)\*C( 36)\*CM( 483)  
V( 484) = RF(484)\*C( 62)\*CM( 484)  
V( 485) = RF(485)\*C( 14)\*C( 33)  
V( 486) = RF(486)\*C( 57)\*C( 36)  
V( 487) = RF(487)\*C( 14)\*C( 50)  
V( 488) = RF(488)\*C( 14)\*C( 74)  
V( 489) = RF(489)\*C( 4)\*C( 58)  
V( 490) = RF(490)\*C( 57)\*C( 42)  
V( 491) = RF(491)\*C( 14)\*C( 36)  
V( 492) = RF(492)\*C( 57)\*C( 40)  
V( 493) = RF(493)\*C( 14)\*C( 26)  
V( 494) = RF(494)\*C( 57)\*C( 3)  
V( 495) = RF(495)\*C( 58)\*C( 42)  
V( 496) = RF(496)\*C( 5)\*C( 14)  
V( 497) = RF(497)\*C( 58)\*C( 40)  
V( 498) = RF(498)\*C( 58)\*C( 36)  
V( 499) = RF(499)\*C( 14)\*C( 2)  
V( 500) = RF(500)\*C( 54)\*C( 42)\*CM( 500)  
V( 501) = RF(501)\*C( 52)\*C( 42)  
V( 502) = RF(502)\*C( 54)\*C( 5)  
V( 503) = RF(503)\*C( 52)\*C( 40)  
V( 504) = RF(504)\*C( 54)\*C( 36)  
V( 505) = RF(505)\*C( 52)\*C( 36)  
V( 506) = RF(506)\*C( 54)\*C( 2)  
V( 507) = RF(507)\*C( 54)\*C( 42)  
V( 508) = RF(508)\*C( 60)\*C( 5)  
V( 509) = RF(509)\*C( 54)\*C( 40)  
V( 510) = RF(510)\*C( 58)\*C( 42)  
V( 511) = RF(511)\*C( 54)\*C( 40)  
V( 512) = RF(512)\*C( 60)\*C( 36)  
V( 513) = RF(513)\*C( 54)\*C( 36)  
V( 514) = RF(514)\*C( 60)\*C( 2)  
V( 515) = RF(515)\*C( 54)\*C( 33)  
V( 516) = RF(516)\*C( 54)\*C( 14)  
V( 517) = RF(517)\*C( 80)\*C( 36)  
V( 518) = RF(518)\*C( 54)\*C( 14)  
V( 519) = RF(519)\*C( 28)\*C( 2)  
V( 520) = RF(520)\*C( 60)\*C( 42)  
V( 521) = RF(521)\*C( 47)\*C( 5)  
V( 522) = RF(522)\*C( 60)\*C( 40)  
V( 523) = RF(523)\*C( 14)\*C( 42)  
V( 524) = RF(524)\*C( 60)\*C( 36)  
V( 525) = RF(525)\*C( 58)\*C( 42)  
V( 526) = RF(526)\*C( 60)\*C( 36)  
V( 527) = RF(527)\*C( 47)\*C( 2)  
V( 528) = RF(528)\*C( 60)\*C( 26)  
V( 529) = RF(529)\*C( 58)\*C( 40)  
V( 530) = RF(530)\*C( 60)\*C( 26)  
V( 531) = RF(531)\*C( 60)\*C( 14)  
V( 532) = RF(532)\*C( 53)\*C( 42)  
V( 533) = RF(533)\*C( 60)\*C( 14)  
V( 534) = RF(534)\*C( 28)\*C( 36)  
V( 535) = RF(535)\*C( 47)\*C( 36)  
V( 536) = RF(536)\*C( 14)\*C( 42)  
V( 537) = RF(537)\*C( 47)\*C( 26)  
V( 538) = RF(538)\*C( 14)\*C( 40)  
V( 539) = RF(539)\*C( 47)\*C( 14)  
V( 540) = RF(540)\*C( 28)\*C( 40)  
V( 541) = RF(541)\*C( 47)\*C( 1)  
V( 542) = RF(542)\*C( 14)\*C( 3)  
V( 543) = RF(543)\*C( 47)\*C( 45)  
V( 544) = RF(544)\*C( 47)\*C( 32)  
V( 545) = RF(545)\*C( 47)\*C( 48)  
V( 546) = RF(546)\*C( 80)  
V( 547) = RF(547)\*C( 28)\*C( 42)  
V( 548) = RF(548)\*C( 80)\*C( 42)  
V( 549) = RF(549)\*C( 28)\*C( 5)  
V( 550) = RF(550)\*C( 80)\*C( 40)  
V( 551) = RF(551)\*C( 28)\*C( 36)  
V( 552) = RF(552)\*C( 80)\*C( 40)  
V( 553) = RF(553)\*C( 53)\*C( 42)  
V( 554) = RF(554)\*C( 80)\*C( 40)  
V( 555) = RF(555)\*C( 60)\*C( 14)  
V( 556) = RF(556)\*C( 80)\*C( 36)

```

V( 557) = RF(557)*C( 28)*C( 2)
V( 558) = RF(558)*C( 80)*C( 26)
V( 559) = RF(559)*C( 28)*C( 33)
V( 560) = RF(560)*C( 80)*C( 26)
V( 561) = RF(561)*C( 28)*C( 26)*C( 42)
V( 562) = RF(562)*C( 80)*C( 14)
V( 563) = RF(563)*C( 28)*C( 58)
V( 564) = RF(564)*C( 53)*CM( 564)
V( 565) = RF(565)*C( 28)*C( 40)*CM( 565)
V( 566) = RF(566)*C( 53)*C( 42)
V( 567) = RF(567)*C( 28)*C( 36)
V( 568) = RF(568)*C( 53)*C( 40)
V( 569) = RF(569)*C( 53)*C( 40)
V( 570) = RF(570)*C( 28)*C( 26)
V( 571) = RF(571)*C( 28)*C( 33)
V( 572) = RF(572)*C( 53)*C( 3)
V( 573) = RF(573)*C( 28)*C( 1)
V( 574) = RF(574)*C( 24)*C( 40)
V( 575) = RF(575)*C( 59)*C( 42)
V( 576) = RF(576)*C( 24)*C( 40)
V( 577) = RF(577)*C( 60)*C( 3)
V( 578) = RF(578)*C( 24)*C( 40)
V( 579) = RF(579)*C( 70)*C( 36)
V( 580) = RF(580)*C( 24)*C( 36)
V( 581) = RF(581)*C( 70)*C( 2)
V( 582) = RF(582)*C( 24)*C( 36)
V( 583) = RF(583)*C( 56)*C( 42)
V( 584) = RF(584)*C( 24)*C( 36)
V( 585) = RF(585)*C( 49)*C( 42)
V( 586) = RF(586)*C( 24)*C( 36)
V( 587) = RF(587)*C( 24)*C( 81)
V( 588) = RF(588)*C( 32)*C( 70)
V( 589) = RF(589)*C( 70)*C( 40)
V( 590) = RF(590)*C( 3)*C( 47)
V( 591) = RF(591)*C( 70)*C( 36)
V( 592) = RF(592)*C( 59)*C( 42)
V( 593) = RF(593)*C( 70)*C( 26)
V( 594) = RF(594)*C( 59)*C( 40)
V( 595) = RF(595)*C( 70)*C( 1)
V( 596) = RF(596)*C( 70)*C( 5)
V( 597) = RF(597)*C( 24)*C( 42)
V( 598) = RF(598)*C( 70)*C( 6)
V( 599) = RF(599)*C( 32)*C( 24)
V( 600) = RF(600)*C( 44)*C( 24)
V( 601) = RF(601)*C( 70)*C( 9)
V( 602) = RF(602)*C( 74)*C( 24)
V( 603) = RF(603)*C( 49)*CM( 603)
V( 604) = RF(604)*C( 49)*C( 42)
V( 605) = RF(605)*C( 54)*C( 3)
V( 606) = RF(606)*C( 49)*C( 40)
V( 607) = RF(607)*C( 60)*C( 1)
V( 608) = RF(608)*C( 49)*C( 40)
V( 609) = RF(609)*C( 59)*C( 36)
V( 610) = RF(610)*C( 49)*C( 36)
V( 611) = RF(611)*C( 59)*C( 2)
V( 612) = RF(612)*C( 49)*C( 26)
V( 613) = RF(613)*C( 56)*C( 42)
V( 614) = RF(614)*C( 49)*C( 42)
V( 615) = RF(615)*C( 56)*C( 40)
V( 616) = RF(616)*C( 56)*C( 36)
V( 617) = RF(617)*C( 59)*C( 14)
V( 618) = RF(618)*C( 59)*C( 14)
V( 619) = RF(619)*C( 59)*C( 33)
V( 620) = RF(620)*C( 59)*CM( 620)
V( 621) = RF(621)*C( 47)*C( 3)*CM( 621)
V( 622) = RF(622)*C( 59)*C( 42)
V( 623) = RF(623)*C( 60)*C( 3)
V( 624) = RF(624)*C( 59)*C( 40)
V( 625) = RF(625)*C( 14)*C( 3)

RETURN
END

```

C-----

```

SUBROUTINE THIRDB (C, KK, IDIM, CM, CTROE, RF, T)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
DIMENSION C(*), CM(*), CTROE(3,*), RF(*)

```

C

```

DO 633 k1=1,IDIM

```

```
CM(K1)=0.0D0
633 CONTINUE
C
DO 134 I=1, IDIM
DO 135 K=1, KK
IF (C(K).GT.1D-10) THEN
CM(I)=CM(I)+C(K)
ENDIF
135 CONTINUE
134 CONTINUE

CM( 1)= CM( 1)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 1)= CM( 1)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 1)= CM( 1)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 1)= CM( 1)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 1)= CM( 1)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 2)= CM( 2)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 2)= CM( 2)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 2)= CM( 2)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 2)= CM( 2)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 2)= CM( 2)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 3)= CM( 3)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 3)= CM( 3)+(1.875D+00-1)*C( 2)
CM( 3)= CM( 3)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 3)= CM( 3)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 3)= CM( 3)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 4)= CM( 4)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 4)= CM( 4)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 4)= CM( 4)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 4)= CM( 4)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 4)= CM( 4)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 10)= CM( 10)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 10)= CM( 10)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 10)= CM( 10)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 10)= CM( 10)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 10)= CM( 10)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 11)= CM( 11)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 11)= CM( 11)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 11)= CM( 11)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 11)= CM( 11)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 11)= CM( 11)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 12)= CM( 12)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 12)= CM( 12)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 12)= CM( 12)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 12)= CM( 12)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 12)= CM( 12)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 13)= CM( 13)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 13)= CM( 13)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 13)= CM( 13)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 13)= CM( 13)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 13)= CM( 13)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 32)= CM( 32)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 32)= CM( 32)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 32)= CM( 32)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 32)= CM( 32)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 32)= CM( 32)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 33)= CM( 33)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 33)= CM( 33)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 33)= CM( 33)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 33)= CM( 33)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 33)= CM( 33)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 34)= CM( 34)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 34)= CM( 34)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 34)= CM( 34)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 34)= CM( 34)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 34)= CM( 34)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 35)= CM( 35)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 35)= CM( 35)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 35)= CM( 35)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 35)= CM( 35)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 35)= CM( 35)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 53)= CM( 53)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 53)= CM( 53)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 53)= CM( 53)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 53)= CM( 53)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 53)= CM( 53)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 54)= CM( 54)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 54)= CM( 54)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 54)= CM( 54)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 54)= CM( 54)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 54)= CM( 54)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 55)= CM( 55)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 55)= CM( 55)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 55)= CM( 55)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 55)= CM( 55)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 55)= CM( 55)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 56)= CM( 56)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 56)= CM( 56)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 56)= CM( 56)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 56)= CM( 56)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 56)= CM( 56)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 85)= CM( 85)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 85)= CM( 85)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 85)= CM( 85)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 85)= CM( 85)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 86)= CM( 86)+(1.625D+01-1)*C( 1)
CM( 86)= CM( 86)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 86)= CM( 86)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 86)= CM( 86)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 86)= CM( 86)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 109)= CM( 109)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 109)= CM( 109)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 109)= CM( 109)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 109)= CM( 109)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 109)= CM( 109)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 112)= CM( 112)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 112)= CM( 112)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 112)= CM( 112)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 112)= CM( 112)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 112)= CM( 112)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 113)= CM( 113)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 113)= CM( 113)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 113)= CM( 113)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 113)= CM( 113)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 113)= CM( 113)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 133)= CM( 133)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 133)= CM( 133)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 133)= CM( 133)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 133)= CM( 133)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 133)= CM( 133)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 134)= CM( 134)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 134)= CM( 134)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 134)= CM( 134)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 134)= CM( 134)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 134)= CM( 134)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 135)= CM( 135)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 135)= CM( 135)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 135)= CM( 135)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 135)= CM( 135)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 135)= CM( 135)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 173)= CM( 173)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 173)= CM( 173)+(1.625D+01-1)*C( 2)
CM( 173)= CM( 173)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 173)= CM( 173)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 173)= CM( 173)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 174)= CM( 174)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 174)= CM( 174)+(1.875D+00-1)*C( 3)
CM( 174)= CM( 174)+(1.625D+01-1)*C( 6)
CM( 174)= CM( 174)+(1.625D+01-1)*C( 18)
CM( 185)= CM( 185)+(3.750D+00-1)*C( 1)
CM( 185)= CM( 185)+(1.625D+01-1)*C( 2)
```

CM( 185)= CM( 185)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 185)= CM( 185)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 185)= CM( 185)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 186)= CM( 186)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 186)= CM( 186)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 186)= CM( 186)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 186)= CM( 186)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 186)= CM( 186)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 197)= CM( 197)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 197)= CM( 197)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 197)= CM( 197)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 197)= CM( 197)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 197)= CM( 197)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 217)= CM( 217)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 217)= CM( 217)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 217)= CM( 217)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 217)= CM( 217)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 217)= CM( 217)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 218)= CM( 218)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 218)= CM( 218)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 218)= CM( 218)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 218)= CM( 218)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 218)= CM( 218)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 231)= CM( 231)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 231)= CM( 231)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 231)= CM( 231)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 231)= CM( 231)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 231)= CM( 231)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 232)= CM( 232)+(3.750D+00-1)\*C( 1)  
CM( 232)= CM( 232)+(1.625D+01-1)\*C( 2)  
CM( 232)= CM( 232)+(1.875D+00-1)\*C( 3)  
CM( 232)= CM( 232)+(1.625D+01-1)\*C( 6)  
CM( 232)= CM( 232)+(1.625D+01-1)\*C( 18)  
CM( 477)= CM( 477)+(3.000D+00-1)\*C( 1)  
CM( 477)= CM( 477)+(1.000D+01-1)\*C( 2)  
CM( 477)= CM( 477)+(2.000D+00-1)\*C( 5)  
CM( 477)= CM( 477)+(1.500D+00-1)\*C( 26)  
CM( 478)= CM( 478)+(3.000D+00-1)\*C( 1)  
CM( 478)= CM( 478)+(1.000D+01-1)\*C( 2)  
CM( 478)= CM( 478)+(2.000D+00-1)\*C( 5)  
CM( 478)= CM( 478)+(1.500D+00-1)\*C( 26)  
CM( 481)= CM( 481)+(1.000D+01-1)\*C( 2)  
CM( 481)= CM( 481)+(1.500D+00-1)\*C( 26)  
CM( 481)= CM( 481)+(1.699D+00-1)\*C( 28)  
CM( 482)= CM( 482)+(1.000D+01-1)\*C( 2)  
CM( 482)= CM( 482)+(1.500D+00-1)\*C( 26)  
CM( 482)= CM( 482)+(1.699D+00-1)\*C( 28)  
CM( 483)= CM( 483)+(5.000D+00-1)\*C( 2)  
CM( 484)= CM( 484)+(5.000D+00-1)\*C( 2)  
CM( 500)= CM( 500)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CM( 564)= CM( 564)+(3.000D+00-1)\*C( 1)  
CM( 564)= CM( 564)+(1.200D+01-1)\*C( 2)  
CM( 564)= CM( 564)+(1.500D+00-1)\*C( 3)  
CM( 564)= CM( 564)+(1.399D+00-1)\*C( 26)  
CM( 564)= CM( 564)+(1.699D+00-1)\*C( 28)  
CM( 565)= CM( 565)+(3.000D+00-1)\*C( 1)  
CM( 565)= CM( 565)+(1.200D+01-1)\*C( 2)  
CM( 565)= CM( 565)+(1.500D+00-1)\*C( 3)  
CM( 565)= CM( 565)+(1.399D+00-1)\*C( 26)  
CM( 565)= CM( 565)+(1.699D+00-1)\*C( 28)  
CM( 603)= CM( 603)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CM( 620)= CM( 620)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CM( 621)= CM( 621)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CM( 638)= CM( 638)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CM( 639)= CM( 639)+(1.000D+00-1)\*C( 28)  
CTROE(1, 653)= 3.4890D+42  
CTROE(2, 653)=-7.2135D+00  
CTROE(3, 653)= 5.6189D+03  
CTROE(1, 654)= 2.1260D+51  
CTROE(2, 654)=-8.7374D+00  
CTROE(3, 654)= 5.1749D+04  
CTROE(1, 655)= 1.9920D+27  
CTROE(2, 655)=-2.6780D+00  
CTROE(3, 655)= 5.0078D+04  
CTROE(1, 656)= 5.6660D+24  
CTROE(2, 656)=-2.5497D+00  
CTROE(3, 656)=-3.0057D+03  
CTROE(1, 657)= 1.0000D+22  
CTROE(2, 657)= 0.0000D+00  
CTROE(3, 657)= 2.8683D+03  
CTROE(1, 658)= 2.0410D+25  
CTROE(2, 658)=-9.3340D-01  
CTROE(3, 658)= 3.0394D+02  
CTROE(1, 659)= 1.0000D+20  
CTROE(2, 659)= 0.0000D+00  
CTROE(3, 659)= 6.0386D+03  
CTROE(1, 660)= 1.5140D+25  
CTROE(2, 660)=-9.8360D-01  
CTROE(3, 660)= 8.6050D+02  
CTROE(1, 661)= 2.4630D+30  
CTROE(2, 661)= 0.0000D+00  
CTROE(3, 661)= 4.5793D+01  
CTROE(1, 662)= 7.9470D+28  
CTROE(2, 662)= 4.9950D-01  
CTROE(3, 662)= 6.8437D+01  
CTROE(1, 663)= 3.4530D+19  
CTROE(2, 663)= 0.0000D+00  
CTROE(3, 663)= 4.4262D+04  
CTROE(1, 664)= 2.3630D+16  
CTROE(2, 664)= 2.9910D-01  
CTROE(3, 664)=-6.3526D+03  
CTROE(1, 665)= 5.3110D+28  
CTROE(2, 665)=-3.6470D+00  
CTROE(3, 665)= 1.9451D+04  
CTROE(1, 666)= 6.5670D+27  
CTROE(2, 666)=-3.4056D+00  
CTROE(3, 666)= 9.8329D+02  
CTROE(1, 667)= 1.0000D+30  
CTROE(2, 667)= 1.4850D+00  
CTROE(3, 667)= 7.0450D+03  
CTROE(1, 668)= 2.5170D+16  
CTROE(2, 668)= 3.4100D-01  
CTROE(3, 668)= 7.1255D+02  
CTROE(1, 669)= 2.9530D+15  
CTROE(2, 669)= 6.1700D-01  
CTROE(3, 669)= 1.8210D+04  
CTROE(1, 670)= 2.2360D+30  
CTROE(2, 670)=-3.2610D+00  
CTROE(3, 670)= 6.3339D+04  
CTROE(1, 671)= 3.7720D+26  
CTROE(2, 671)=-2.5908D+00  
CTROE(3, 671)=-3.2639D+03  
CTROE(1, 672)= 2.0020D+26  
CTROE(2, 672)= 1.1160D+00  
CTROE(3, 672)= 1.1131D+03  
CTROE(1, 673)= 9.0890D+50  
CTROE(2, 673)=-1.5630D+00  
CTROE(3, 673)= 2.4250D+03  
CTROE(1, 674)= 1.1470D+24  
CTROE(2, 674)=-2.2950D+00  
CTROE(3, 674)= 3.2055D+03  
CTROE(1, 675)= 3.3570D+02  
CTROE(2, 675)= 4.2330D+00  
CTROE(3, 675)= 5.6828D+03  
CTROE(1, 676)= 5.5820D+07  
CTROE(2, 676)= 3.1277D+00  
CTROE(3, 676)= 2.6001D+03  
CTROE(1, 677)= 2.9280D-02  
CTROE(2, 677)= 5.7410D+00  
CTROE(3, 677)= 6.9560D+03  
CTROE(1, 678)= 1.4180D+07  
CTROE(2, 678)= 3.5767D+00  
CTROE(3, 678)= 3.3358D+04  
CTROE(1, 679)= 1.5720D+31  
CTROE(2, 679)=-4.2600D+00  
CTROE(3, 679)= 2.5261D+02  
CTROE(1, 680)= 1.3850D+37  
CTROE(2, 680)=-5.2278D+00  
CTROE(3, 680)= 4.7371D+04  
CTROE(1, 681)= 2.3830D+15  
CTROE(2, 681)=-8.1000D-02  
CTROE(3, 681)= 1.1504D+04  
CTROE(1, 682)= 1.3880D+14  
CTROE(2, 682)= 2.7420D-01

```

CTROE(3, 682)=-5.1177D+03
CTROE(1, 683)= 8.8340D+17
CTROE(2, 683)=-5.9100D-01
CTROE(3, 683)= 1.1296D+04
CTROE(1, 684)= 7.5940D+10
CTROE(2, 684)= 1.1322D+00
CTROE(3, 684)=-1.0547D+03
CTROE(1, 685)= 1.8910D+45
CTROE(2, 685)=-7.2030D+00
CTROE(3, 685)= 5.1858D+04
CTROE(1, 686)= 1.9170D+45
CTROE(2, 686)=-7.8097D+00
CTROE(3, 686)= 8.7535D+03
CTROE(1, 687)= 6.9320D+70
CTROE(2, 687)=-1.5343D+01
CTROE(3, 687)= 4.7134D+04
CTROE(1, 688)= 1.5590D+70
CTROE(2, 688)=-1.5244D+01
CTROE(3, 688)= 4.7717D+04
CTROE(1, 689)= 4.3320D+12
CTROE(2, 689)= 0.0000D+00
CTROE(3, 689)= 4.4162D+03
CTROE(1, 690)= 2.0550D+08
CTROE(2, 690)= 1.3557D+00
CTROE(3, 690)=-1.3824D+04
CTROE(1, 691)= 2.0000D+15
CTROE(2, 691)= 0.0000D+00
CTROE(3, 691)= 2.4154D+04
CTROE(1, 692)= 3.8660D+14
CTROE(2, 692)= 7.1220D-01
CTROE(3, 692)=-2.5221D+03
CTROE(1, 693)= 1.0000D+14
CTROE(2, 693)= 0.0000D+00
CTROE(3, 693)= 1.5096D+04
CTROE(1, 694)= 6.7320D+12
CTROE(2, 694)= 5.1550D-01
CTROE(3, 694)=-2.3530D+03
CM( 653) = TROE3( 653,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 654) = TROE3( 654,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 655) = TROE3( 655,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 656) = TROE3( 656,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 657) = TROE3( 657,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 658) = TROE3( 658,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 659) = TROE3( 659,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 660) = TROE3( 660,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 661) = TROE3( 661,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 662) = TROE3( 662,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 663) = TROE3( 663,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 664) = TROE3( 664,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 665) = TROE3( 665,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 666) = TROE3( 666,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 667) = TROE3( 667,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 668) = TROE3( 668,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 669) = TROE3( 669,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 670) = TROE3( 670,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 671) = TROE3( 671,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 672) = TROE3( 672,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 673) = TROE3( 673,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 674) = TROE3( 674,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 675) = TROE3( 675,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 676) = TROE3( 676,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 677) = TROE3( 677,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 678) = TROE3( 678,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 679) = TROE3( 679,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 680) = TROE3( 680,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 681) = TROE3( 681,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 682) = TROE3( 682,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 683) = TROE3( 683,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 684) = TROE3( 684,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 685) = TROE3( 685,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 686) = TROE3( 686,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 687) = TROE3( 687,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 688) = TROE3( 688,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 689) = TROE3( 689,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 690) = TROE3( 690,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 691) = TROE3( 691,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 692) = TROE3( 692,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 693) = TROE3( 693,T, IDIM,CM,CTROE,RF)
CM( 694) = TROE3( 694,T, IDIM,CM,CTROE,RF)

```

RETURN

END

-----C

```

SUBROUTINE STEADYE (NITER,KSS,ABV,DEN,RF,CM,ADJ,SMALL,C,AA)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
DIMENSION ABV(*),DEN(*),RF(*),CM(*),C(*),AA(NITER+1,KSS)

```

C

DO 349 K=1,NITER

C

C

C

C

```

~~~~~
STEADY-STATE EXPRESSION FOR N2O ( 53)
~~~~~

```

```

DEN( 1) = 0
& +RF( 532)*C( 42)+RF( 553)*C( 42)+RF( 564)*CM( 564)+RF( 566)*C( 42)+RF( 568)*C( 40)
& +RF( 569)*C( 40)+RF( 572)*C( 3)
ABV( 1) = 0
& +RF( 531)*C( 60)*C( 14)+RF( 552)*C( 80)*C( 40)+RF( 565)*C( 28)*C( 40)*CM( 565)
& +RF( 567)*C( 28)*C( 36)+RF( 570)*C( 28)*C( 26)+RF( 571)*C( 28)*C( 33)
& +RF( 573)*C( 28)*C( 1)+RF( 617)*C( 59)*C( 14)
IF(DEN( 1).LT.1.0) DEN( 1)= MAX(ADJ*ABV( 1), DEN( 1),SMALL)
C( 53) = ABV( 1)/DEN( 1)
AA(K, 1) = C( 53)

```

C

C

C

C

```

~~~~~
STEADY-STATE EXPRESSION FOR NH2 ( 54)
~~~~~

```

```

DEN( 2) = 0
& +RF( 500)*C( 42)*CM( 500)+RF( 502)*C( 5)+RF( 504)*C( 36)+RF( 506)*C( 2)
& +RF( 507)*C( 42)+RF( 509)*C( 40)+RF( 511)*C( 40)+RF( 513)*C( 36)+RF( 515)*C( 33)
& +RF( 516)*C( 14)+RF( 518)*C( 14)+RF( 605)*C( 3)
ABV( 2) = 0
& +RF( 501)*C( 52)*C( 42)+RF( 503)*C( 52)*C( 40)+RF( 505)*C( 52)*C( 36)
& +RF( 508)*C( 60)*C( 5)+RF( 510)*C( 58)*C( 42)+RF( 512)*C( 60)*C( 36)
& +RF( 514)*C( 60)*C( 2)+RF( 517)*C( 80)*C( 36)+RF( 519)*C( 28)*C( 2)
& +RF( 586)*C( 24)*C( 36)+RF( 604)*C( 49)*C( 42)
IF(DEN( 2).LT.1.0) DEN( 2)= MAX(ADJ*ABV( 2), DEN( 2),SMALL)
C( 54) = ABV( 2)/DEN( 2)

```

```
AA(K, 2) = C( 54)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR CH3CN          ( 55)
C  ~~~~~
DEN( 3) = 0
& +RF( 634)*C( 42)+RF( 637)*C( 36)
ABV( 3) = 0
& +RF( 635)*C( 24)*C( 32)+RF( 636)*C( 32)*C( 56)
IF(DEN( 3).LT.1.0) DEN( 3)= MAX(ADJ*ABV( 3), DEN( 3) ,SMALL)
C( 55) = ABV( 3)/DEN( 3)
AA(K, 3) = C( 55)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR HOCN          ( 56)
C  ~~~~~
DEN( 4) = 0
& +RF( 583)*C( 42)+RF( 613)*C( 42)+RF( 615)*C( 40)+RF( 616)*C( 36)+RF( 636)*C( 32)
ABV( 4) = 0
& +RF( 582)*C( 24)*C( 36)+RF( 614)*C( 49)*C( 42)+RF( 637)*C( 55)*C( 36)
IF(DEN( 4).LT.1.0) DEN( 4)= MAX(ADJ*ABV( 4), DEN( 4) ,SMALL)
C( 56) = ABV( 4)/DEN( 4)
AA(K, 4) = C( 56)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR NO2          ( 57)
C  ~~~~~
DEN( 5) = 0
& +RF( 482)*CM( 482)+RF( 486)*C( 36)+RF( 490)*C( 42)+RF( 492)*C( 40)+RF( 494)*C( 3)
ABV( 5) = 0
& +RF( 481)*C( 14)*C( 40)*CM( 481)+RF( 485)*C( 14)*C( 33)+RF( 491)*C( 14)*C( 36)
& +RF( 493)*C( 14)*C( 26)
IF(DEN( 5).LT.1.0) DEN( 5)= MAX(ADJ*ABV( 5), DEN( 5) ,SMALL)
C( 57) = ABV( 5)/DEN( 5)
AA(K, 5) = C( 57)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR HNO          ( 58)
C  ~~~~~
DEN( 6) = 0
& +RF( 478)*CM( 478)+RF( 480)*C( 28)+RF( 489)*C( 4)+RF( 495)*C( 42)+RF( 497)*C( 40)
& +RF( 498)*C( 36)+RF( 510)*C( 42)+RF( 525)*C( 42)+RF( 529)*C( 40)+RF( 563)*C( 28)
ABV( 6) = 0
& +RF( 477)*C( 14)*C( 42)*CM( 477)+RF( 479)*C( 14)*C( 42)*C( 28)
& +RF( 487)*C( 14)*C( 50)+RF( 488)*C( 14)*C( 74)+RF( 496)*C( 5)*C( 14)
& +RF( 499)*C( 14)*C( 2)+RF( 509)*C( 54)*C( 40)+RF( 524)*C( 60)*C( 36)
& +RF( 528)*C( 60)*C( 26)+RF( 562)*C( 80)*C( 14)+RF( 612)*C( 49)*C( 26)
IF(DEN( 6).LT.1.0) DEN( 6)= MAX(ADJ*ABV( 6), DEN( 6) ,SMALL)
C( 58) = ABV( 6)/DEN( 6)
AA(K, 6) = C( 58)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR NCO          ( 59)
C  ~~~~~
DEN( 7) = 0
& +RF( 575)*C( 42)+RF( 592)*C( 42)+RF( 594)*C( 40)+RF( 609)*C( 36)+RF( 611)*C( 2)
& +RF( 617)*C( 14)+RF( 618)*C( 14)+RF( 619)*C( 33)+RF( 620)*CM( 620)+RF( 622)*C( 42)
& +RF( 624)*C( 40)+RF( 626)*C( 26)+RF( 627)*C( 5)+RF( 629)*C( 50)+RF( 630)*C( 6)
& +RF( 631)*C( 20)+RF( 632)*C( 18)+RF( 633)*C( 4)
ABV( 7) = 0
& +RF( 574)*C( 24)*C( 40)+RF( 591)*C( 70)*C( 36)+RF( 593)*C( 70)*C( 26)
& +RF( 595)*C( 70)*C( 1)+RF( 608)*C( 49)*C( 40)+RF( 610)*C( 49)*C( 36)
& +RF( 615)*C( 56)*C( 40)+RF( 616)*C( 56)*C( 36)+RF( 621)*C( 47)*C( 3)*CM( 621)
& +RF( 623)*C( 60)*C( 3)+RF( 625)*C( 14)*C( 3)+RF( 628)*C( 49)*C( 42)
& +RF( 651)*C( 51)*C( 14)
IF(DEN( 7).LT.1.0) DEN( 7)= MAX(ADJ*ABV( 7), DEN( 7) ,SMALL)
C( 59) = ABV( 7)/DEN( 7)
AA(K, 7) = C( 59)
C
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR NH          ( 60)
C  ~~~~~
DEN( 8) = 0
& +RF( 508)*C( 5)+RF( 512)*C( 36)+RF( 514)*C( 2)+RF( 520)*C( 42)+RF( 522)*C( 40)
& +RF( 524)*C( 36)+RF( 526)*C( 36)+RF( 528)*C( 26)+RF( 530)*C( 26)+RF( 531)*C( 14)
& +RF( 533)*C( 14)+RF( 555)*C( 14)+RF( 577)*C( 3)+RF( 607)*C( 1)+RF( 623)*C( 3)
ABV( 8) = 0
```



```

&      +RF( 507)*C( 54)*C( 42)+RF( 511)*C( 54)*C( 40)+RF( 513)*C( 54)*C( 36)
&      +RF( 521)*C( 47)*C( 5)+RF( 523)*C( 14)*C( 42)+RF( 525)*C( 58)*C( 42)
&      +RF( 527)*C( 47)*C( 2)+RF( 529)*C( 58)*C( 40)+RF( 532)*C( 53)*C( 42)
&      +RF( 534)*C( 28)*C( 36)+RF( 554)*C( 80)*C( 40)+RF( 576)*C( 24)*C( 40)
&      +RF( 603)*C( 49)*CM( 603)+RF( 606)*C( 49)*C( 40)+RF( 622)*C( 59)*C( 42)
IF(DEN( 8).LT.1.0) DEN( 8)= MAX(ADJ*ABV( 8), DEN( 8) ,SMALL)
C( 60) = ABV( 8)/DEN( 8)
AA(K, 8) = C( 60)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR PHCO          ( 61)
C      ~~~~~
DEN( 9) = 0
&      +RF( 367)*C( 42)+RF( 373)+RF( 375)*C( 26)
ABV( 9) = 0
&      +RF( 366)*C( 21)+RF( 368)*C( 21)*C( 36)+RF( 369)*C( 21)*C( 40)
&      +RF( 370)*C( 21)*C( 42)+RF( 372)*C( 21)*C( 32)+RF( 374)*C( 39)*C( 3)
IF(DEN( 9).LT.1.0) DEN( 9)= MAX(ADJ*ABV( 9), DEN( 9) ,SMALL)
C( 61) = ABV( 9)/DEN( 9)
AA(K, 9) = C( 61)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR HONO          ( 62)
C      ~~~~~
DEN( 10) = 0
&      +RF( 484)*CM( 484)
ABV( 10) = 0
&      +RF( 483)*C( 14)*C( 36)*CM( 483)
IF(DEN( 10).LT.1.0) DEN( 10)= MAX(ADJ*ABV( 10), DEN( 10) ,SMALL)
C( 62) = ABV( 10)/DEN( 10)
AA(K, 10) = C( 62)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR H2CN          ( 63)
C      ~~~~~
DEN( 11) = 0
&      +RF( 638)*CM( 638)
ABV( 11) = 0
&      +RF( 544)*C( 47)*C( 32)+RF( 639)*C( 24)*C( 42)*CM( 639)+RF( 644)*C( 32)*C( 14)
IF(DEN( 11).LT.1.0) DEN( 11)= MAX(ADJ*ABV( 11), DEN( 11) ,SMALL)
C( 63) = ABV( 11)/DEN( 11)
AA(K, 11) = C( 63)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR C5H4OH          ( 64)
C      ~~~~~
DEN( 12) = 0
&      +RF( 321)*C( 42)+RF( 326)
ABV( 12) = 0
&      +RF( 320)*C( 37)*C( 36)+RF( 327)*C( 17)*C( 42)
IF(DEN( 12).LT.1.0) DEN( 12)= MAX(ADJ*ABV( 12), DEN( 12) ,SMALL)
C( 64) = ABV( 12)/DEN( 12)
AA(K, 12) = C( 64)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR EC9H17C          ( 65)
C      ~~~~~
DEN( 13) = 0
&      +RF( 476)
ABV( 13) = 0
&      +RF( 448)*C( 29)*C( 36)+RF( 453)*C( 29)*C( 40)+RF( 458)*C( 29)*C( 42)
&      +RF( 461)*C( 29)*C( 44)+RF( 465)*C( 29)*C( 15)+RF( 471)*C( 29)*C( 78)
IF(DEN( 13).LT.1.0) DEN( 13)= MAX(ADJ*ABV( 13), DEN( 13) ,SMALL)
C( 65) = ABV( 13)/DEN( 13)
AA(K, 13) = C( 65)

C
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR AC7H15          ( 66)
C      ~~~~~
DEN( 14) = 0
&      +RF( 409)
ABV( 14) = 0
&      +RF( 412)*C( 25)
IF(DEN( 14).LT.1.0) DEN( 14)= MAX(ADJ*ABV( 14), DEN( 14) ,SMALL)
C( 66) = ABV( 14)/DEN( 14)
AA(K, 14) = C( 66)

C

```

```
C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR AC8H17      ( 67)
C  ~~~~~
DEN( 15) = 0
&    +RF( 410)
ABV( 15) = 0
&    +RF( 411)*C( 25)+RF( 435)*C( 87)
IF(DEN( 15).LT.1.0) DEN( 15)= MAX(ADJ*ABV( 15), DEN( 15) ,SMALL)
C( 67) = ABV( 15)/DEN( 15)
AA(K, 15) = C( 67)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR PC4H9      ( 68)
C  ~~~~~
DEN( 16) = 0
&    +RF( 259)
ABV( 16) = 0
&    +RF( 404)*C( 71)*C( 40)+RF( 408)*C( 73)+RF( 413)*C( 25)
IF(DEN( 16).LT.1.0) DEN( 16)= MAX(ADJ*ABV( 16), DEN( 16) ,SMALL)
C( 68) = ABV( 16)/DEN( 16)
AA(K, 16) = C( 68)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR NC4H5      ( 69)
C  ~~~~~
DEN( 17) = 0
&    +RF( 263)*C( 42)+RF( 267)*C( 5)+RF( 269)+RF( 271)*C( 36)+RF( 272)*C( 42)
&    +RF( 310)*C( 4)+RF( 689)*CM( 689)
ABV( 17) = 0
&    +RF( 262)*C( 8)+RF( 264)*C( 8)*C( 36)+RF( 265)*C( 8)*C( 40)
&    +RF( 266)*C( 8)*C( 42)+RF( 268)*C( 8)*C( 32)+RF( 270)*C( 74)*C( 4)
&    +RF( 311)*C( 11)*C( 42)+RF( 323)*C( 17)*C( 42)+RF( 325)*C( 37)*C( 40)
&    +RF( 690)*C( 38)*C( 42)*CM( 690)
IF(DEN( 17).LT.1.0) DEN( 17)= MAX(ADJ*ABV( 17), DEN( 17) ,SMALL)
C( 69) = ABV( 17)/DEN( 17)
AA(K, 17) = C( 69)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR CN        ( 70)
C  ~~~~~
DEN( 18) = 0
&    +RF( 579)*C( 36)+RF( 581)*C( 2)+RF( 588)*C( 32)+RF( 589)*C( 40)+RF( 591)*C( 36)
&    +RF( 593)*C( 26)+RF( 595)*C( 1)+RF( 596)*C( 5)+RF( 598)*C( 6)+RF( 601)*C( 9)
ABV( 18) = 0
&    +RF( 578)*C( 24)*C( 40)+RF( 580)*C( 24)*C( 36)+RF( 587)*C( 24)*C( 81)
&    +RF( 590)*C( 3)*C( 47)+RF( 592)*C( 59)*C( 42)+RF( 594)*C( 59)*C( 40)
&    +RF( 597)*C( 24)*C( 42)+RF( 599)*C( 32)*C( 24)+RF( 600)*C( 44)*C( 24)
&    +RF( 602)*C( 74)*C( 24)+RF( 642)*C( 82)*C( 14)
IF(DEN( 18).LT.1.0) DEN( 18)= MAX(ADJ*ABV( 18), DEN( 18) ,SMALL)
C( 70) = ABV( 18)/DEN( 18)
AA(K, 18) = C( 70)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR AC5H11    ( 71)
C  ~~~~~
DEN( 19) = 0
&    +RF( 403)+RF( 404)*C( 40)
ABV( 19) = 0
&    +RF( 409)*C( 66)+2*RF( 414)*C( 25)
IF(DEN( 19).LT.1.0) DEN( 19)= MAX(ADJ*ABV( 19), DEN( 19) ,SMALL)
C( 71) = ABV( 19)/DEN( 19)
AA(K, 19) = C( 71)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR APHC2H4   ( 72)
C  ~~~~~
DEN( 20) = 0
&    +RF( 376)+RF( 377)+RF( 402)*C( 32)
ABV( 20) = 0
&    +RF( 378)*C( 39)*C( 9)+RF( 401)*C( 27)
IF(DEN( 20).LT.1.0) DEN( 20)= MAX(ADJ*ABV( 20), DEN( 20) ,SMALL)
C( 72) = ABV( 20)/DEN( 20)
AA(K, 20) = C( 72)

C
C  ~~~~~
C  STEADY-STATE EXPRESSION FOR AC6H13    ( 73)
C  ~~~~~
```

```
DEN( 21) = 0
& +RF( 405)+RF( 408)
ABV( 21) = 0
& +RF( 406)*C( 91)+RF( 410)*C( 67)+RF( 413)*C( 25)
IF(DEN( 21).LT.1.0) DEN( 21)= MAX(ADJ*ABV( 21), DEN( 21) ,SMALL)
C( 73) = ABV( 21)/DEN( 21)
AA(K, 21) = C( 73)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR C2H3 ( 74)
C ~~~~~
DEN( 22) = 0
& +RF( 140)*C( 5)+RF( 141)*C( 44)+RF( 143)*C( 6)+RF( 144)*C( 36)+RF( 145)*C( 42)
& +RF( 146)*C( 40)+RF( 147)*C( 40)+RF( 148)*C( 26)+RF( 149)*C( 4)+RF( 152)*C( 9)
& +RF( 202)*C( 32)+RF( 270)*C( 4)+RF( 312)*C( 46)+RF( 488)*C( 14)+RF( 602)*C( 24)
& +RF( 669)*CM( 669)+RF( 672)*C( 26)*CM( 672)+RF( 673)*C( 26)*CM( 673)
ABV( 22) = 0
& +RF( 135)*C( 9)*CM( 135)+RF( 136)*C( 9)*C( 36)+RF( 139)*C( 9)*C( 42)
& +RF( 142)*C( 9)*C( 32)+RF( 150)*C( 38)*C( 42)+2*RF( 151)*C( 8)
& +RF( 153)*C( 8)*C( 42)+RF( 201)*C( 19)+RF( 237)*C( 30)*C( 40)
& +RF( 245)*C( 43)*C( 40)+RF( 269)*C( 69)+RF( 313)*C( 11)+RF( 489)*C( 4)*C( 58)
& +RF( 601)*C( 70)*C( 9)+RF( 668)*C( 4)*C( 42)*CM( 668)
IF(DEN( 22).LT.1.0) DEN( 22)= MAX(ADJ*ABV( 22), DEN( 22) ,SMALL)
C( 74) = ABV( 22)/DEN( 22)
AA(K, 22) = C( 74)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR APHC3H6 ( 75)
C ~~~~~
DEN( 23) = 0
& +RF( 386)
ABV( 23) = 0
& +RF( 381)*C( 27)+RF( 382)*C( 27)*C( 42)+RF( 383)*C( 27)*C( 40)
& +RF( 384)*C( 27)*C( 36)+RF( 385)*C( 27)*C( 32)+RF( 387)*C( 31)*C( 9)
IF(DEN( 23).LT.1.0) DEN( 23)= MAX(ADJ*ABV( 23), DEN( 23) ,SMALL)
C( 75) = ABV( 23)/DEN( 23)
AA(K, 23) = C( 75)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR CPHC3H6 ( 76)
C ~~~~~
DEN( 24) = 0
& +RF( 395)
ABV( 24) = 0
& +RF( 388)*C( 27)+RF( 389)*C( 27)*C( 42)+RF( 390)*C( 27)*C( 40)
& +RF( 391)*C( 27)*C( 36)+RF( 392)*C( 27)*C( 26)+RF( 393)*C( 27)*C( 31)
& +RF( 394)*C( 27)*C( 78)+RF( 396)*C( 10)*C( 32)
IF(DEN( 24).LT.1.0) DEN( 24)= MAX(ADJ*ABV( 24), DEN( 24) ,SMALL)
C( 76) = ABV( 24)/DEN( 24)
AA(K, 24) = C( 76)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR CH2OH ( 77)
C ~~~~~
DEN( 25) = 0
& +RF( 197)*CM( 197)+RF( 198)*C( 42)+RF( 199)*C( 26)+RF( 658)*C( 42)*CM( 658)
ABV( 25) = 0
& +RF( 177)*C( 22)*C( 36)+RF( 192)*C( 16)*C( 36)+RF( 194)*C( 16)*C( 40)
& +RF( 195)*C( 16)*C( 42)+RF( 365)*C( 7)*C( 42)+RF( 657)*C( 32)*C( 36)*CM( 657)
IF(DEN( 25).LT.1.0) DEN( 25)= MAX(ADJ*ABV( 25), DEN( 25) ,SMALL)
C( 77) = ABV( 25)/DEN( 25)
AA(K, 25) = C( 77)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR CH3O ( 78)
C ~~~~~
DEN( 26) = 0
& +RF( 62)*C( 40)+RF( 109)*CM( 109)+RF( 110)*C( 26)+RF( 394)*C( 27)+RF( 470)*C( 29)
& +RF( 471)*C( 29)+RF( 472)*C( 29)+RF( 660)*C( 42)*CM( 660)
ABV( 26) = 0
& +RF( 57)*C( 32)*C( 33)+RF( 61)*C( 32)*C( 26)+RF( 111)*C( 32)*C( 1)
& +RF( 193)*C( 16)*C( 36)+RF( 196)*C( 16)*C( 32)+RF( 659)*C( 32)*C( 36)*CM( 659)
IF(DEN( 26).LT.1.0) DEN( 26)= MAX(ADJ*ABV( 26), DEN( 26) ,SMALL)
C( 78) = ABV( 26)/DEN( 26)
AA(K, 26) = C( 78)

C
C
C ~~~~~
```

```

C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR NC3H7          ( 79)
C      ~~~~~
DEN( 27) = 0
&      +RF( 200)*C( 26)+RF( 681)*CM( 681)+RF( 683)*CM( 683)
ABV( 27) = 0
&      +RF( 397)*C( 27)*C( 42)+RF( 398)*C( 27)+RF( 403)*C( 71)+RF( 407)*C( 91)
&      +RF( 412)*C( 25)+RF( 476)*C( 65)+RF( 682)*C( 19)*C( 42)*CM( 682)
&      +RF( 684)*C( 9)*C( 32)*CM( 684)
IF(DEN( 27).LT.1.0) DEN( 27)= MAX(ADJ*ABV( 27), DEN( 27) ,SMALL)
C( 79) = ABV( 27)/DEN( 27)
AA(K, 27) = C( 79)

C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR NNH          ( 80)
C      ~~~~~
DEN( 28) = 0
&      +RF( 517)*C( 36)+RF( 546)+RF( 548)*C( 42)+RF( 550)*C( 40)+RF( 552)*C( 40)
&      +RF( 554)*C( 40)+RF( 556)*C( 36)+RF( 558)*C( 26)+RF( 560)*C( 26)+RF( 562)*C( 14)
ABV( 28) = 0
&      +RF( 516)*C( 54)*C( 14)+RF( 547)*C( 28)*C( 42)+RF( 549)*C( 28)*C( 5)
&      +RF( 551)*C( 28)*C( 36)+RF( 553)*C( 53)*C( 42)+RF( 555)*C( 60)*C( 14)
&      +RF( 557)*C( 28)*C( 2)+RF( 559)*C( 28)*C( 33)+RF( 561)*C( 28)*C( 26)*C( 42)
&      +RF( 563)*C( 28)*C( 58)
IF(DEN( 28).LT.1.0) DEN( 28)= MAX(ADJ*ABV( 28), DEN( 28) ,SMALL)
C( 80) = ABV( 28)/DEN( 28)
AA(K, 28) = C( 80)

C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR SCH2        ( 81)
C      ~~~~~
DEN( 29) = 0
&      +RF( 85)*CM( 85)+RF( 87)*C( 26)+RF( 88)*C( 5)+RF( 90)*C( 42)+RF( 92)*C( 42)
&      +RF( 94)*C( 36)+RF( 95)*C( 2)+RF( 98)*C( 4)+RF( 100)*C( 2)+RF( 102)*C( 1)
&      +RF( 190)*C( 3)+RF( 587)*C( 24)+RF( 645)*C( 14)+RF( 646)*C( 14)
&      +RF( 662)*C( 2)*CM( 662)
ABV( 29) = 0
&      +RF( 86)*C( 48)*CM( 86)+RF( 89)*C( 32)*C( 42)+RF( 91)*C( 48)*C( 42)
&      +RF( 93)*C( 51)*C( 5)+RF( 96)*C( 16)+RF( 97)*C( 32)*C( 32)
&      +RF( 99)*C( 43)*C( 42)+RF( 101)*C( 48)*C( 2)+RF( 189)*C( 45)*C( 42)
&      +RF( 588)*C( 32)*C( 70)+RF( 647)*C( 48)*C( 14)+RF( 661)*C( 32)*C( 36)*CM( 661)
IF(DEN( 29).LT.1.0) DEN( 29)= MAX(ADJ*ABV( 29), DEN( 29) ,SMALL)
C( 81) = ABV( 29)/DEN( 29)
AA(K, 29) = C( 81)

C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR C2H         ( 82)
C      ~~~~~
DEN( 30) = 0
&      +RF( 156)*C( 2)+RF( 161)*C( 5)+RF( 163)*C( 36)+RF( 164)*C( 40)+RF( 165)*C( 26)
&      +RF( 234)*C( 32)+RF( 300)*C( 12)+RF( 304)*C( 4)+RF( 642)*C( 14)
&      +RF( 671)*C( 42)*CM( 671)
ABV( 30) = 0
&      +RF( 155)*C( 4)*C( 36)+RF( 162)*C( 4)*C( 42)+RF( 233)*C( 30)
&      +RF( 246)*C( 43)*C( 40)+RF( 297)*C( 41)*C( 40)+RF( 305)*C( 23)*C( 42)
&      +RF( 670)*C( 4)*CM( 670)
IF(DEN( 30).LT.1.0) DEN( 30)= MAX(ADJ*ABV( 30), DEN( 30) ,SMALL)
C( 82) = ABV( 30)/DEN( 30)
AA(K, 30) = C( 82)

C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR EC10H21    ( 83)
C      ~~~~~
DEN( 31) = 0
&      +RF( 439)+RF( 442)
ABV( 31) = 0
&      +RF( 418)*C( 25)+RF( 422)*C( 25)*C( 36)+RF( 426)*C( 25)*C( 40)
&      +RF( 430)*C( 25)*C( 42)+RF( 434)*C( 25)*C( 32)+RF( 438)*C( 87)
&      +RF( 443)*C( 85)
IF(DEN( 31).LT.1.0) DEN( 31)= MAX(ADJ*ABV( 31), DEN( 31) ,SMALL)
C( 83) = ABV( 31)/DEN( 31)
AA(K, 31) = C( 83)

C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR CH2HCO     ( 84)
C      ~~~~~
DEN( 32) = 0
&      +RF( 167)+RF( 168)*C( 26)+RF( 169)*C( 26)

```

```

ABV( 32) = 0
& +RF( 138)*C( 9)*C( 40)+RF( 166)*C( 22)*C( 42)+RF( 207)*C( 19)*C( 40)
& +RF( 672)*C( 74)*C( 26)*CM( 672)
IF(DEN( 32).LT.1.0) DEN( 32)= MAX(ADJ*ABV( 32), DEN( 32), SMALL)
C( 84) = ABV( 32)/DEN( 32)
AA(K, 32) = C( 84)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR CC10H21 ( 85)
C ~~~~~
DEN( 33) = 0
& +RF( 441)+RF( 443)
ABV( 33) = 0
& +RF( 416)*C( 25)+RF( 420)*C( 25)*C( 36)+RF( 424)*C( 25)*C( 40)
& +RF( 428)*C( 25)*C( 42)+RF( 432)*C( 25)*C( 32)+RF( 440)*C( 86)
& +RF( 442)*C( 83)
IF(DEN( 33).LT.1.0) DEN( 33)= MAX(ADJ*ABV( 33), DEN( 33), SMALL)
C( 85) = ABV( 33)/DEN( 33)
AA(K, 33) = C( 85)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR DC10H21 ( 86)
C ~~~~~
DEN( 34) = 0
& +RF( 437)+RF( 440)
ABV( 34) = 0
& +RF( 417)*C( 25)+RF( 421)*C( 25)*C( 36)+RF( 425)*C( 25)*C( 40)
& +RF( 429)*C( 25)*C( 42)+RF( 433)*C( 25)*C( 32)+RF( 436)*C( 87)
& +RF( 441)*C( 85)
IF(DEN( 34).LT.1.0) DEN( 34)= MAX(ADJ*ABV( 34), DEN( 34), SMALL)
C( 86) = ABV( 34)/DEN( 34)
AA(K, 34) = C( 86)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR AC10H21 ( 87)
C ~~~~~
DEN( 35) = 0
& +RF( 435)+RF( 436)+RF( 438)
ABV( 35) = 0
& +RF( 415)*C( 25)+RF( 419)*C( 25)*C( 36)+RF( 423)*C( 25)*C( 40)
& +RF( 427)*C( 25)*C( 42)+RF( 431)*C( 25)*C( 32)+RF( 437)*C( 86)+RF( 439)*C( 83)
IF(DEN( 35).LT.1.0) DEN( 35)= MAX(ADJ*ABV( 35), DEN( 35), SMALL)
C( 87) = ABV( 35)/DEN( 35)
AA(K, 35) = C( 87)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR FC9H17C ( 88)
C ~~~~~
DEN( 36) = 0
& +RF( 445)*C( 33)+RF( 450)*C( 2)+RF( 455)*C( 36)+RF( 460)*C( 5)+RF( 467)*C( 19)
& +RF( 469)*C( 20)+RF( 474)
ABV( 36) = 0
& +RF( 449)*C( 29)*C( 36)+RF( 454)*C( 29)*C( 40)+RF( 459)*C( 29)*C( 42)
& +RF( 462)*C( 29)*C( 44)+RF( 466)*C( 29)*C( 15)+RF( 472)*C( 29)*C( 78)
& +RF( 475)*C( 89)
IF(DEN( 36).LT.1.0) DEN( 36)= MAX(ADJ*ABV( 36), DEN( 36), SMALL)
C( 88) = ABV( 36)/DEN( 36)
AA(K, 36) = C( 88)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR CC9H17C ( 89)
C ~~~~~
DEN( 37) = 0
& +RF( 444)*C( 33)+RF( 447)*C( 2)+RF( 452)*C( 36)+RF( 457)*C( 5)+RF( 464)*C( 19)
& +RF( 468)*C( 20)+RF( 475)
ABV( 37) = 0
& +RF( 446)*C( 29)*C( 36)+RF( 451)*C( 29)*C( 40)+RF( 456)*C( 29)*C( 42)
& +RF( 463)*C( 29)*C( 15)+RF( 470)*C( 29)*C( 78)+RF( 474)*C( 88)
IF(DEN( 37).LT.1.0) DEN( 37)= MAX(ADJ*ABV( 37), DEN( 37), SMALL)
C( 89) = ABV( 37)/DEN( 37)
AA(K, 37) = C( 89)

C
C
C ~~~~~
C STEADY-STATE EXPRESSION FOR C2H2OH ( 90)
C ~~~~~
DEN( 38) = 0
& +RF( 170)+RF( 172)*C( 26)

```

```
ABV( 38) = 0
&      +RF( 171)*C( 22)*C( 42)+RF( 674)*C( 4)*C( 36)*CM( 674)
IF(DEN( 38).LT.1.0) DEN( 38)= MAX(ADJ*ABV( 38), DEN( 38) ,SMALL)
C( 90) = ABV( 38)/DEN( 38)
AA(K, 38) = C( 90)
C
C      ~~~~~
C      STEADY-STATE EXPRESSION FOR BC6H13          ( 91)
C      ~~~~~
DEN( 39) = 0
&      +RF( 406)+RF( 407)
ABV( 39) = 0
&      +RF( 405)*C( 73)
IF(DEN( 39).LT.1.0) DEN( 39)= MAX(ADJ*ABV( 39), DEN( 39) ,SMALL)
C( 91) = ABV( 39)/DEN( 39)
AA(K, 39) = C( 91)
349 CONTINUE
RETURN
END
C-----C
FUNCTION TROE3 (I, T, IDIM, CM, CTROE, RF)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
DIMENSION RF(*), CTROE(3,*), CM(*)
C
ALOGT=DLOG(T)
SMALL=10.0D0**(-300)
RKLOW = CTROE(1,I)*EXP(CTROE(2,I)*ALOGT - CTROE(3,I)/T)
PR = RKLOW * CM(I) / RF(I)
PCOR = PR / (1.0d0 + PR)
TROE3 = PCOR
END
C-----C
```



## **Résumé :**

---

### **« Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion – Application à un mécanisme du kérosène »**

La modélisation de la chimie de combustion de mélanges d'hydrocarbures (alcanes, aromatiques et naphthéniques), représentatifs de combustibles industriels nécessite l'utilisation de schémas cinétiques détaillés complexes. La raideur du système différentiel associé rend impossible tout couplage avec des codes industriels en raison de son coût de calcul prohibitif. Une solution possible consiste à diminuer la taille de ces mécanismes. La présente étude se propose donc de réduire, sans dégrader son caractère prédictif initial, un mécanisme détaillé du kérosène (225 espèces et 3493 réactions irréversibles) dans les conditions du réacteur parfaitement agité (PSR) sur un vaste domaine de pression, richesse et température. La méthode utilisée se déroule en trois étapes. Les deux premières consistent à simplifier le modèle initial par élimination des espèces (méthode des flux atomiques) puis des réactions (analyse des composantes principales de la matrice des vitesses) inutiles à la description du processus de combustion. Le mécanisme squelettique obtenu est ensuite réduit par la mise en état stationnaire de certaines espèces dont les concentrations peuvent être explicitées en fonction des espèces différentielles au sein d'un système algébro-différentiel. La technique d'itérations internes, utilisée pour la résolution des expressions algébriques, est couplée à un accélérateur de convergence afin de réduire significativement le temps de calcul nécessaire aux simulations. Les programmes utilisés, au cours de cette procédure de réduction, ont été automatisés afin d'en rendre l'utilisation simple et rapide. Cette méthodologie a rendu possible l'analyse détaillée des voies réactionnelles de consommation des 3 réactifs initiaux ainsi que l'évaluation de la sensibilité des réactions impliquées. On peut ainsi, sans connaissances cinétiques particulières, élaborer des schémas réduits présentant une diminution d'un facteur 15 (globalement) à 50 (localement) du temps de calcul. Plus de 65% des profils de fractions molaires des espèces sont correctement reproduits avec une déviation relative par rapport au modèle initiale inférieure à 10%.

*Mots clés :* réduction de mécanisme, analyse des flux atomiques, analyse des composantes principales, état quasi-stationnaire, kérosène, cinétique chimique

## **Abstract:**

---

### **“Elaboration of reduced kinetic models of combustion – Application to a kerosene mechanism “**

Chemistry modelling of complex hydrocarbon mixtures (alkanes, aromatics and naphthenics) in a combustion process reconstituting industrial fuels requires hundreds species and thousands reactions. The associated system of differential equations is often too large and too stiff to be incorporated in industrial CFD (computational fluid dynamic) codes. So, a mechanism reduction must be considered. The main purpose of this work is to reduce, without damaging the initial predictive quality, a large detailed mechanism for kerosene (225 species among 3493 irreversible reactions) in perfectly stirred reactor (PSR) on a extended parametric condition range (pressure, equivalence ratio and reactor inlet temperature). The used method proceeds in a 3 steps: firstly the initial model is simplified by an elimination of useless species (with atomic flux analysis) then insignificant reactions are removed (with principal component analysis on rate matrix). Finally, the obtained skeletal mechanism is reduced by application of the quasi steady-state approximation for some species. Concentrations of those species are expressed according to the differential ones with an algebraic system. Inner-iteration technique, supplemented by a convergence accelerator, solves those algebraic expressions with a significant computational time saving. Each step of the reduction process has been automated in order to simplify and speed their use up. This methodology allows a detailed analysis of the significant pathways in the 3 reactant consumption as well as the sensitivity evaluation of implied reactions. Moreover, this reduction process leads, without particular kinetic knowledge, to the development of reduced schemes with computational time saving from a factor 15 (overall) to 50 (locally). More than 65% of species molar fractions are accurately reproduced with a relative deviation lower than 10% compared to the detailed model.

*Keywords:* mechanism reduction, atomic flux analysis, principal component analysis, quasi steady-state approximation, kerosene, chemical kinetics.

## **Discipline :**

---

CHIMIE – PHYSIQUE – Spécialité : Cinétique chimique

---