

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 533.6:621.373

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ БЕДНЫХ СМЕСЕЙ H_2 –ВОЗДУХ

© 2022 г. А. М. Тереза^{1*}, Г. Л. Агафонов¹, Э. К. Андержанов¹, А. С. Бетев¹,
С. П. Медведев¹, С. В. Хомик¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия

*E-mail: tereza@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 18.01.2022;

после доработки 15.02.2022;

принята в печать 21.02.2022

Проведено численное моделирование процессов самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей применительно к вопросам безопасности АЭС; рассчитаны величины задержек воспламенения τ и ламинарной скорости горения S_L . Сравнение расчетов, проведенных в температурном диапазоне от 800 до 1700 К при начальном давлении, равном 1 и 6 атм, показало, что величина τ , как и форма температурных зависимостей при самовоспламенении, слабо зависит от начальной концентрации водорода в воздухе. Установлено, что наибольшее различие в значениях τ , рассчитанных по разным детальным кинетическим механизмам (ДКМ), наблюдается при температуре 900 и 1100 К соответственно для давления 1 и 6 атм. Показано, что при начальной температуре выше 1250 К время достижения максимума тепловыделения существенно превышает величину τ . При расчетах S_L по всем ДКМ получены близкие между собой значения. Делается вывод, что для моделирования процессов самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей при давлении ниже 6 атм с удовлетворительной степенью точности можно использовать любой из рассмотренных ДКМ.

Ключевые слова: бедная водородно-воздушная смесь, самовоспламенение, задержка воспламенения, ламинарная скорость горения, численное моделирование, химическая кинетика, детальный кинетический механизм.

DOI: 10.31857/S0207401X2208012X

ВВЕДЕНИЕ

При разработке новых методов повышения пожаровзрывобезопасности на АЭС с водяным охлаждением и связанных с ними конструктивных решений одной из актуальных задач является прогнозирование самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей [1–5]. Решение таких задач сопряжено с необходимостью выбора условий и характеристик для определения критериев возникновения очагов самовоспламенения и распространения пламени по образующимся водородно-воздушным смесям. Существует неопределенность в том, что считать фактором, приводящим к разрушению конструкции АЭС. Тем не менее прогностические исследования процессов горения смесей H_2 –воздух при различных физико-химических условиях значительно способствуют развитию проектно-конструкторских работ, связанных с надежностью работы АЭС в аварийных ситуациях. В этой связи становится важным использование вычислительных методик режимов горения сме-

сей H_2 –воздух. Различные методы численного моделирования, используемые при таком подходе, требуют использования детальным кинетических механизмов (ДКМ), которые применительно к смесям H_2 – O_2 в настоящее время широко представлены в литературе [6–20]. В то же время остаются вопросы, связанные с различием результатов численного моделирования задержек воспламенения с использованием разных ДКМ [14, 15, 18, 19, 21].

Валидация каждого ДКМ проходит посредством сравнения результатов численного моделирования с собственными и представленными в литературе экспериментальными данными и подбора параметров констант скорости элементарных реакций. Помимо того, что разброс значений самих констант значителен [22], выбор экспериментальных данных для валидации ДКМ осложняется отсутствием единого подхода к описанию процессов воспламенения и горения. Так, задержка воспламенения τ , являющаяся одним из основных параметров, по которому проводится

разработка и тестирование ДКМ, для смесей H_2-O_2 имеет огромный разброс по своим значениям в зависимости от температуры [23]. Величина τ является брутто-характеристикой процесса воспламенения и зависит от правильности интерпретации экспериментальных результатов в рамках тех условий, для которых она определяется. В работах [15, 23, 24] перечислены основные причины, из-за которых наблюдается разброс экспериментальных значений τ . По определению Франк-Каменецкого [25] задержка воспламенения определяется как начало резкого роста давления и температуры. Вблизи концентрационных пределов воспламенения тепловыделение, а следовательно, и рост давления гораздо меньше, чем в области концентраций, близких к стехиометрическим. Кроме того, в некоторых исследованиях задержка воспламенения определялась при постоянном давлении [23], что исключает применение критерия, основанного на росте давления. В работах [26, 27] показано, что в таких случаях проводить измерения τ целесообразно по сигналу эмиссии электронно-возбужденного радикала OH^* и по выходу H_2O . Помимо этих двух соединений, для определения τ используются профили временных зависимостей концентрации исходных реагентов, а также промежуточных и конечных продуктов воспламенения смесей H_2-O_2 [10, 12, 14, 15, 17, 20, 26, 28–35].

В тех случаях, когда ДКМ разрабатывались под конкретные научно-исследовательские и конструкторские задачи, их применимость к процессам горения при других или более широких условиях воспламенения смесей H_2-O_2 может приводить к заметным расхождениям [10, 14, 15, 36, 37]. Наибольшие различия в результатах численного моделирования по разным ДКМ наблюдаются при повышенном давлении и относительно низких температурах $T_0 < 1100$ K [15, 19, 21, 33, 38–40].

Применительно к задачам по обеспечению пожаровзрывобезопасности на АЭС [41] не требуется универсальность ДКМ. Образующийся при радиолизе воды в системе охлаждения АЭС водород в смеси с воздухом способен воспламеняться вблизи нижнего концентрационного предела воспламенения, т.е. в бедных и ультрабедных составах. В этом случае процесс воспламенения характеризуется относительно малым выделением тепла, что сказывается на особенностях распространения пламени [42]. Процесс химических превращений проходит в замкнутом пространстве помещений и реакторного зала и ограничен давлением, не превышающим предельные значения, при которых конструкции АЭС могут быть разрушены.

В работе проведено численное моделирование самовоспламенения бедных водородно-воздушных смесей в ограниченном диапазоне давления и заданном температурном интервале с использо-

ванием различных ДКМ. Анализ полученных результатов позволяет оценить степень применимости рассматриваемых ДКМ к прогнозированию ситуаций, связанных с пожаровзрывобезопасностью АЭС.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДЕЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ

Рассмотрение основных путей снижения (ослабления) взрывных нагрузок при горении смесей водород–воздух подробно описано в работе [43]. Рассмотрев зависимость амплитуды нагрузок на конструкцию АЭС от скорости горения в широком диапазоне концентраций – от 11% до 34% водорода по объему, авторы [43] установили предельные условия по давлению на уровне 5.5–6 атм. До этой границы все представленные экспериментальные данные удовлетворительно описываются прямой линией. Граница соответствует скорости около 400 м/с (скорость звука в исходной горючей водородно-воздушной смеси). При увеличении давления с 6 до 12 атм амплитуда наблюдаемой нагрузки резко возрастает. Это обусловлено известной фундаментальной закономерностью ускорения пламени и перехода горения в детонацию, согласно которой при превышении пламенем скорости звука с большой вероятностью происходит инициирование детонационного или детонационно-подобного режима сгорания с уровнем нагрузок более 12 атм. Таким образом, ставится задача ослабления взрывной нагрузки путем уменьшения скорости взрывного процесса. Особую важность представляет смещение (снижение) скорости распространения фронта горения в дозвуковую область, поскольку при этом величина избыточного давления скачкообразно уменьшается с 12 до менее чем 6 атм. Одновременно требуется найти способ снизить вероятность самовоспламенения бедных водородно-воздушных смесей при давлении, не превышающем 6 атм.

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все расчеты проводились с использованием программного модуля CHEMKIN-Pro, входящего в пакет ANSYS (Academic version) [44]. При выборе ДКМ мы опирались на следующие принципы:

- используемые ДКМ разрабатывались для широкого класса исследовательских и технологических задач и представлены в литературе независимыми научными коллективами;
- валидация и апробация ДКМ проводились не только по температурным зависимостям задержек воспламенения и скорости горения ламинарного пламени, но и по форме временных профилей исходных реагентов и продуктов воспламенения смесей H_2-O_2 .

Было выбрано пять следующих ДКМ, специально разработанных для изучения горения водородно-воздушных смесей [13–16, 19]. Исследовалось самовоспламенение смесей водорода и воздуха двух концентраций: ультрабедная (6% H_2) и бедная (14% H_2). Начальное давление в расчетах полагалось равным 1 и 6 атм, температура варьировалась в диапазоне от 800 до 1700 К, что соответствовало характерному тепловыделению при сгорании бедных смесей H_2 –воздух [42]. При всех расчетах использовались термофайлы в стандарте NASA [45], прилагаемые к каждому из используемых ДКМ. Задержка воспламенения τ определялась при условии $V = \text{const}$ по моменту времени, соответствующему максимальной скорости роста давления.

Расчеты ламинарной скорости распространения пламени S_L по смеси при $T_0 = 298$ К проводились с использованием мультикомпонентных коэффициентов переноса и с учетом термодиффузии для смесей, концентрация водорода в которых превышала 12%. Для моделирования нормальной скорости горения использовался модуль PREMIX с количеством точек сетки не менее 1500, что соответствует рекомендациям из работы [13]. Транспортные коэффициенты принимались соответственно прилагаемым к каждому ДКМ файлам.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Температурные зависимости, рассчитанные по разным ДКМ для смеси с 6% и 14% H_2 в воздухе при давлениях P_0 , равных 1 и 6 атм, представлены на рис. 1. Видно, что все используемые ДКМ предсказывают S-образный характер температурной зависимости τ , но дают разные количественные результаты. Наибольшее расхождение наблюдается в области $850 < T_0 < 1000$ К для $P_0 = 1$ атм и $1000 < T_0 < 1300$ К для $P_0 = 6$ атм. Для $P_0 = 1$ атм максимальное расхождение τ для смеси с 6% H_2 в воздухе достигает 4.8 раз при $T_0 = 900$ К, а для $P_0 = 6$ атм при $T_0 = 1100$ К – 4.4 раз между ДКМ из работ [13] и [19] (табл. 1). При увеличении доли водорода в воздухе эти различия уменьшаются. Из рис. 1 видно, что интервалы максимального расхождения результатов расчета значений τ по разным ДКМ соответствуют области температурной зависимости $\tau(T)$ с наибольшим “наклоном”, где наблюдается характерный излом. Вследствие этого значение τ в области $T \sim 970$ К при $P_0 = 1$ атм меньше более чем на полтора порядка, чем при $P_0 = 6$ атм. Сравнение рис. 1а и 1б показывает незначительное сокращение задержки воспламенения при увеличении процентного содержания H_2 в воздухе. Из табл. 1 видно, что при увеличении доли водорода с 6 до 14% задержка воспламенения сокращается менее чем в 2 раза при расчетах по всем ДКМ при обоих значениях давления; при

Таблица 1. Рассчитанные по ДКМ значения τ в областях их максимального расхождения

$\tau, \text{с}$				ДКМ
6% H_2^*	14% H_2^*	6% H_2^{**}	14% H_2^{**}	
0.089	0.056	$1.34 \cdot 10^{-4}$	$7.37 \cdot 10^{-5}$	[15]
0.132	0.085	$1.59 \cdot 10^{-4}$	$1.29 \cdot 10^{-4}$	[16]
0.191	0.093	$3.63 \cdot 10^{-4}$	$2.11 \cdot 10^{-4}$	[13]
0.162	0.088	$2.56 \cdot 10^{-4}$	$1.84 \cdot 10^{-4}$	[14]
0.04	0.026	$8.26 \cdot 10^{-5}$	$5.76 \cdot 10^{-5}$	[19]

* При $T_0 = 900$ К, $P_0 = 1$ атм.

** При $T_0 = 1100$ К, $P_0 = 6$ атм.

этом в расчетах для доли водорода в 14% наблюдается лучшее согласие в результатах разных ДКМ.

Сложный характер зависимости $\tau(T, P)$ приводит к тому, что наблюдается пересечение кривых этих зависимостей в областях $T \sim 870$ и $T \sim 1100$ К (рис. 1). Такое пересечение кривых задержек воспламенения в области выше 1000 К было отмечено в работах [12–14, 19, 46]. Сложная зависимость τ от давления, характеризующая наличием трех пределов воспламенения, описанных в работе [47], обусловлена конкуренцией ведущих в индукционном периоде реакций



Реакция (1) относится к реакциям мономолекулярного распада [48] и в условиях представленного исследования протекает в переходной области (fall-off) изменения давления. Константа скорости k_1 через аппроксимационные выражения Трое [22] определяется своими предельными значениями k_0 и k_∞ в областях низких и высоких давлений соответственно. В выражении константы скорости k_0 , в свою очередь, учтена эффективность по соударениям с третьим телом (+M). Различие подходов в определении k_1 во многом влияет на разброс значений в величинах τ , предсказываемых разными ДКМ. Помимо реакции (1), с реакцией (2) конкурируют и другие реакции мономолекулярного распада [12, 30], что также усиливает влияние давления в индукционном периоде, определяющем процесс развития цепных разветвленных реакций [49]. Анализ чувствительности показал, что вблизи значений температуры $T_0 = 900$ К при $P_0 = 1$ атм и $T_0 = 1100$ К при $P_0 = 6$ атм только реакции (1) и (2) доминируют в процессе самовоспламенения исследуемых бедных и ультрабедных смесей. С повышением температуры ($T_0 > 1250$ К) начинает проявляться влияние других реакций (рис. 2). Проведенный анализ чувствительности по радикалу OH как одному из ведущих

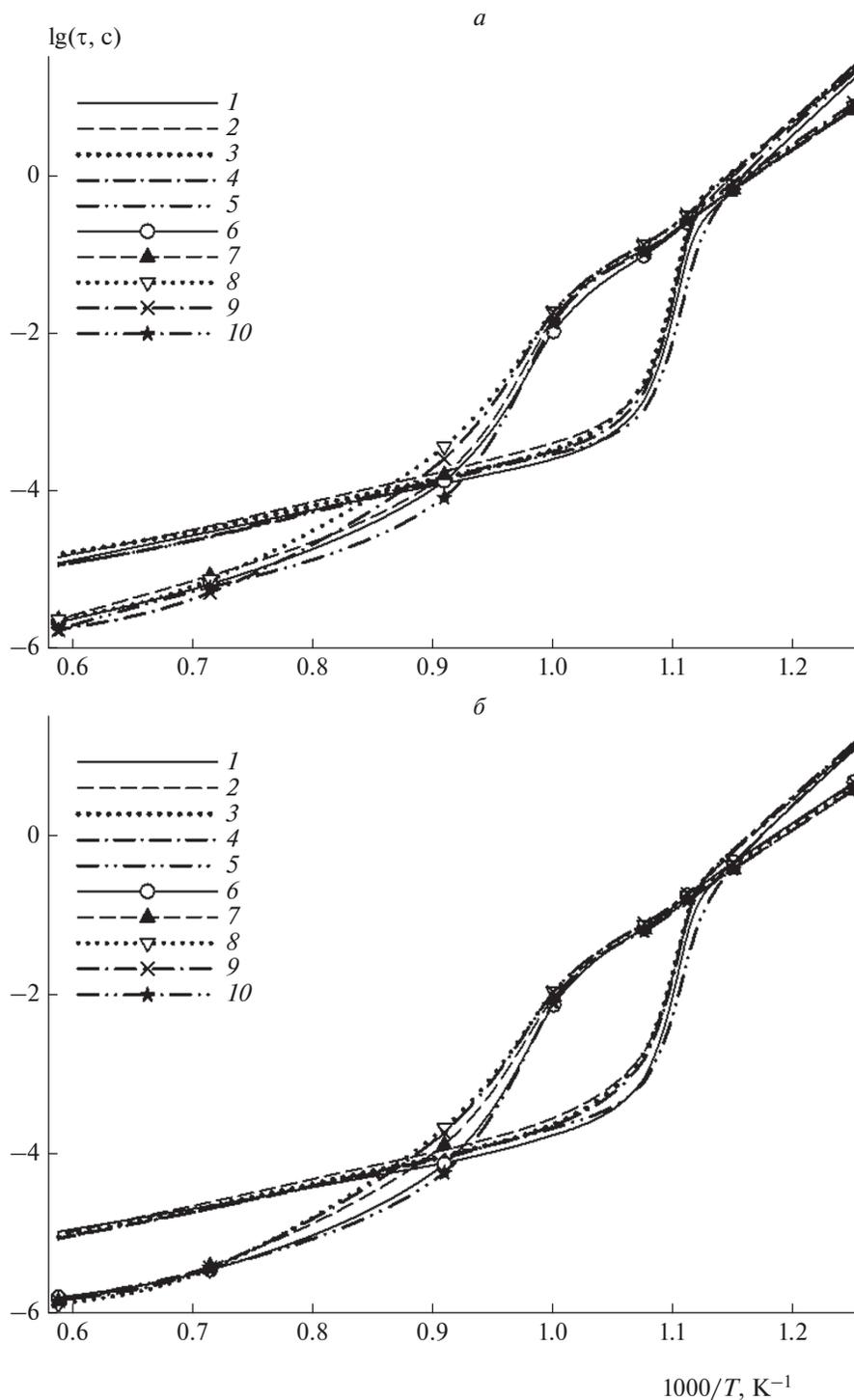


Рис. 1. Температурная зависимость задержки воспламенения смеси 6% H_2 (a) и 14% H_2 (б) с воздухом. Линии 1–5 – $P_0 = 1$ атм, линии 6–10 – $P_0 = 6$ атм. Расчеты по ДКМ из работ [15], [16], [13], [14], [19] соответственно.

промежуточных продуктов показывает влияние реакций



с одновременным понижением роли реакции (1). Роль реакции (2) остается ведущей. Влияние доминирующих реакций носит преимущественно колебательный характер во времени, что выражается в немонотонности профиля образования и

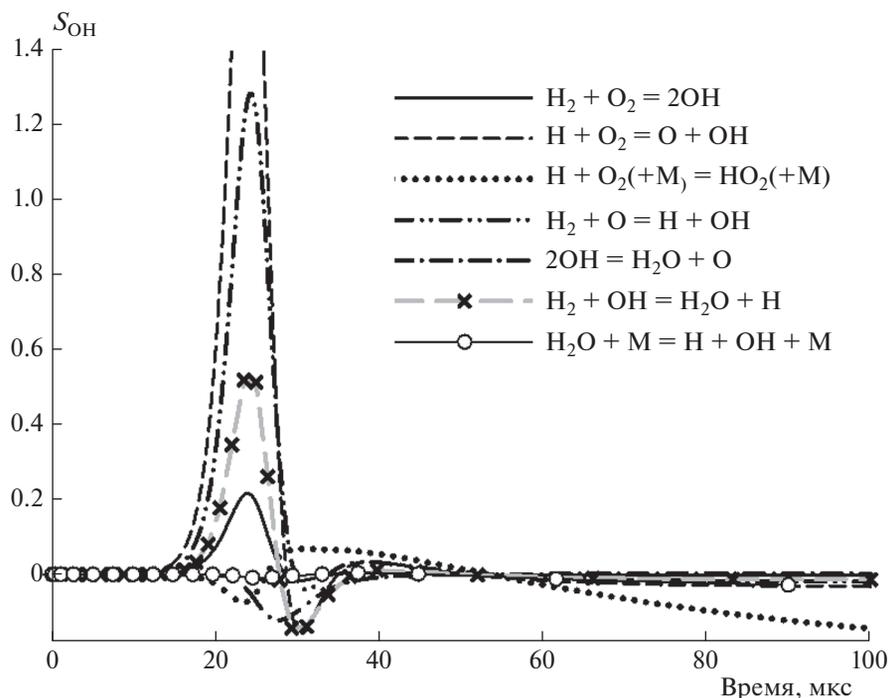
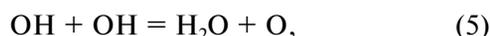


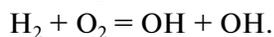
Рис. 2. Анализ чувствительности S по выходу радикала OH для смеси 6% H_2 с воздухом при $T_0 = 1400 \text{ K}$ и $P_0 = 1 \text{ атм}$, рассчитанному по ДКМ из работы [15].

расходования радикала OH (рис. 3). Сравнение рис. 2 и 3 показывает, что в момент наименьшего влияния реакции (2) роль ведущей приобретает реакция



которая и определяет характерный “провал” на графике для концентрации OH вблизи ее максимального уровня. Как соотносятся скорости реакций (1)–(5), во многом и будет определять форму профиля концентрации OH при $T_0 > 1250 \text{ K}$.

Рисунок 3 показывает, что расчеты по всем используемым ДКМ демонстрируют одинаковый характер накопления OH и роста температуры. После достижения максимальных значений концентрация OH падает, в то время как температура продолжает повышаться. Наблюдаемый второй максимум концентрации OH практически равен по величине первому при расчетах по всем ДКМ. Времена достижения максимумов по разным ДКМ также близки. Самый быстрый выход OH наблюдается по ДКМ из работы [15], где учитывается реакция инициирования



В остальных ДКМ эта реакция не рассматривается. Ее влияние, особенно в области высоких давлений и температур от 800 до 1000 K, на сегодняшний день является предметом дискуссий [50]. Самое медленное образование OH демонстрирует ДКМ, представленный в работе [16]. Этот

же ДКМ показывает и более медленный рост температуры и большую задержку воспламенения по сравнению с остальными ДКМ для условий, приведенных на рис. 3. Самый быстрый рост температуры демонстрирует ДКМ из работы [19]. Рисунок 3 показывает, что температура монотонно растет по расчетам по всем ДКМ после достижения обоих максимумов OH , характеризуя тем самым немгновенное тепловыделение. Рост температуры на стадиях самовоспламенения после достижения максимума промежуточного продукта OH определяется в области высоких температур экзотермическими реакциями рекомбинации, подобными (1) и $\text{H} + \text{OH} + \text{M}$ (рис. 2). По мере увеличения температуры свыше 1250 K основное тепловыделение наблюдается уже после достижения максимума промежуточных продуктов и, соответственно, на временах, больших значения τ . Немгновенное тепловыделение в процессе самовоспламенения смесей H_2 –воздух может сказываться при численном моделировании переходных процессов из горения в детонацию и обратно, поскольку они являются чувствительными к градиенту температуры [51]. Это еще раз подтверждает, что при проведении численного моделирования подобных процессов необходимо использовать ДКМ, а не глобальные кинетические механизмы и упрощающие расчеты мгновенное суммарное тепловыделение.

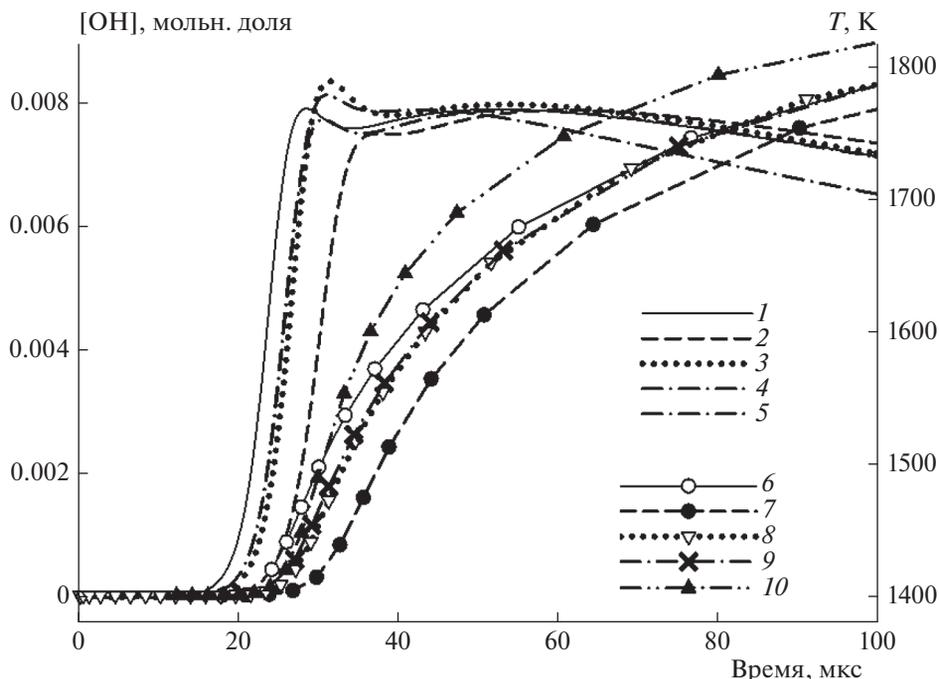


Рис. 3. Временные профили $[OH]$ (кривые без символов) и T (с символами) в процессе самовоспламенения смеси 6% H_2 с воздухом при $T_0 = 1400$ К и $P_0 = 1$ атм, рассчитанные по ДКМ из следующих работ: 1, 6 – [15]; 2, 7 – [16]; 3, 8 – [13]; 4, 9 – [14]; 5, 10 – [19].

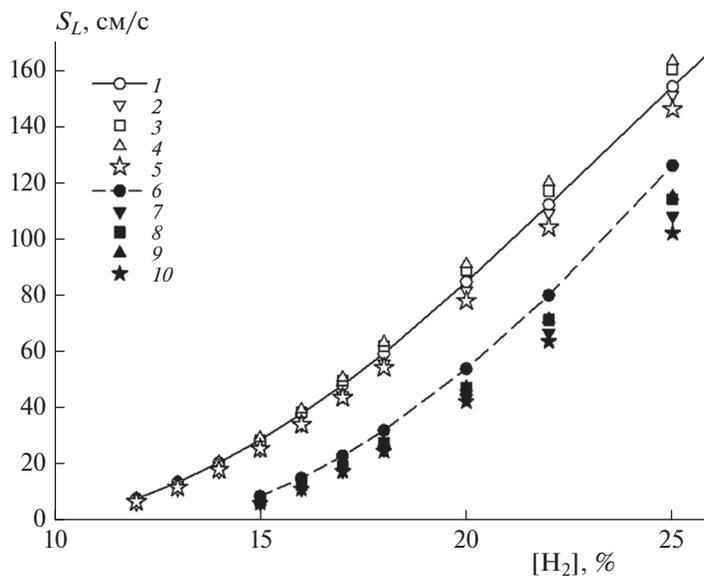


Рис. 4. Скорость ламинарного пламени S_L для бедных смесей H_2 –воздух при $T_0 = 298$ К. Светлые символы соответствуют $P_0 = 1$ атм, темные – $P_0 = 6$ атм. Расчеты по ДКМ из следующих работ: 1, 6 – [15]; 2, 7 – [16]; 3, 8 – [13]; 4, 9 – [14]; 5, 10 – [19].

РАСЧЕТ ЛАМИНАРНОЙ СКОРОСТИ ПЛАМЕНИ

Рисунок 4 демонстрирует результаты расчетов ламинарной скорости горения S_L для бедных смесей H_2 –воздух. Найти S_L для ультрабедных смесей с по-

мощью модуля PREMIX пакета CHEMKIN-Pro не представилось возможным. Поэтому расчеты велись для смесей водород–воздух в диапазонах концентраций H_2 12–25% и 15–25% при $P_0 = 1$ и 6 атм соответственно. Из рис. 4 видно, что расчеты S_L по всем ДКМ не различаются больше чем на

15% для $P_0 = 1$ атм и на 25% для $P_0 = 6$ атм. Наибольшее значение S_L для обоих давлений показывает ДКМ [19], наименьшее – ДКМ из работ [14] и [15] для $P_0 = 1$ и 6 атм соответственно. Следует учитывать, что экспериментальные измерения S_L имеют значительно больший разброс значений, чем наблюдается при расчетах по разным ДКМ [14, 19, 37, 52]. Поэтому с достаточной долей достоверности правомерно для расчетов параметра S_L использовать любой из представленных ДКМ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение задержек воспламенения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей, полученных с помощью расчетов по различным ДКМ, показало, что рассчитанные величины τ в температурном диапазоне от 800 до 1700 К при $P_0 = 1$ и 6 атм имеют в основном несущественные различия. Максимальные различия в значениях τ наблюдаются в области температур 900 и 1100 К соответственно для 1 и 6 атм. Анализ чувствительности показал, что основной вклад в определение τ вносят реакции взаимодействия атома Н с молекулой O_2 . При температурах выше 1250 К заметно отставание тепловыделения относительно достижения максимума концентрации промежуточных продуктов, что приводит к заметному росту температуры на временах, значительно больших τ . Расчеты нормальной скорости горения S_L показали близкие значения по расчетам по всем ДКМ. Учитывая, что экспериментальные данные по измерению τ и S_L , по которым проводилась апробация ДКМ, имеют разброс, больший, чем в расчетах, то при прогнозировании самовоспламенения и горения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей при давлении ниже 6 атм с удовлетворительной степенью точности можно использовать любой из рассмотренных ДКМ.

Научно-исследовательская работа выполнена в рамках ФИЦ ХФ РАН № 122040500073-4.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Abou-Rjeily Y., Cénérino G., Drozd A. et al.* IAEA-TECDOC-1661. Vienna, Austria: IAEA, 2011.
2. *Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е.* // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”. 2013. № 1. С. 89.
3. *Кириллов И.А., Харитонов Н.Л., Шарафутдинов Р.Б., Хренников Н.Н.* // Ядер. и радиац. безопасность. 2017. № 84. Т. 2. С. 26.
4. *Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2018. V. 43. P. 1894.
5. *Yakovenko I., Kiverin A. and Melnikova K.* // Fluids. 2021. V. 6. P. 21.
6. *Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M. et al.* GRI-Mech 3.0. 1999; http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
7. *Saxena P., Williams F.A.* // Combust. and Flame. 2006. V. 145. P. 316.
8. *Konnov A.* // Ibid. 2008. V. 152. № 4. P. 507.
9. *Le Cong T., Dagaut P.* // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. Issue 1. P. 427.
10. *Hong Z., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Combust. and Flame. 2011. V. 158. № 4. P. 633.
11. *Shimizu K., Hibi A., Koshi M., Morii Y., Tsuboi N.* // J. Propulsion Power. 2011. V. 27. № 2. P. 383.
12. *Burke M.P., Chaos M., Ju Y., Dryer F.L., Klippenstein S.J.* // Intern. J. Chem. Kinet. 2012. V. 44. P. 444.
13. *Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al.* // Combust. and Flame. 2013. V. 160. P. 995.
14. *Alekseev V.A., Christensen M., Konnov A.A.* // Ibid. 2015. V. 162. P. 1884.
15. *Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М.* // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.
16. *Smith G.P., Tao Y., Wang H.* Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1). 2016; <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM-1/index.html>
17. *Hedayatzadeh S.M., Soltanieh M., Fatehifar E., Heidarinassab A., Nasr M.R.J.* // J. Res. Ecology. 2016. V. 4. № 1. P. 137.
18. *Skrebkov O.V., Kostenko S.S., Smirnov A.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45. P. 3251.
19. *Zhang Y., Fu J., Xie M., Liu J.* // Ibid. 2021. V. 46. № 7. P. 5799.
20. *Hashemi H., Christensen J.M., Gersen S., Glarborg P.* // Proc. Combust. Inst. 2015. V. 35. P. 553.
21. *Hu E., Pan L., Gao Z. et al.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2016. V. 41. № 30. P. 13261.
22. *Baulch D.L., Bowman C.T., Cobos C.J. et al.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. № 3. P. 757.
23. *Schonborn A., Sayad P., Konnov A.A., Klingmann J.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. № 23. P. 12166.
24. *Павлов В.А., Герасимов Г.Я.* // Инж.-физ. журн. 2014. Т. 87. № 6. С. 1238.
25. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
26. *Petersen E.L., Kalitan D.M., Rickard M.J.A.* // Proc. 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf. and Exhibit. Rep. AIAA 2003-4493. Huntsville, AL: AIAA, 2003.
27. *Davidson D.F., Hanson R.K.* // Intern. J. Chem. Kinetics. 2004. V. 36. № 9. P. 510.
28. *Masten D.A., Hanson R.K., Bowman C.T.* // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. № 18. P. 7119.
29. *Michael J.V., Sutherland J.W., Harding L.B., Wagner A.F.* // Proc. Combust. Inst. 2000. V. 28. P. 1471.
30. *Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F.L.* // Intern. J. Chem. Kin. 2004. V. 36. № 10. P. 566.
31. *Мартыненко В.В., Пенязков О.Г., Рагомух К.А., Шабуня С.И.* // Инж.-физ. журн. 2004. Т. 77. № 4. С. 100.
32. *Pang G.A., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. P. 181.
33. *Mathieu O., Levacque A., Petersen E.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2012. V. 37. P. 15393.

34. *Mulvihill C.R., Petersen E.L.* // Proc. Combust. Inst. 2019. V. 37. P. 259.
35. *Aul C.J., Crofton M.W., Mertens J.D., Petersen E.L.* // Ibid. 2011. V. 33. P. 709.
36. *Dahoe A.E.* // J. Loss Prevention Process Industries. 2005. V. 18. P. 152.
37. *Смыгалина А.Е.* Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2018.
38. *Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V., Gelfand B.E.* // Combust. and Flame. 2010. V. 157. P. 1436.
39. *Weydahl T., Pooyarakkam M., Seljeskog M., Haugen N.E.L.* // Intern. J. Hydrogen Energy. 2011. V. 36. № 18. P. 12025.
40. *Olm C., Zsely I.G., Palvolgyi R. et al.* // Combust. and Flame. 2014. V. 161. № 9. P. 2219.
41. *Abagyan A.A., Adamov E.O., Burlakov E.V.* // Proc. IAEA Conf. (Intern.). IAEA-J4-TC972. Vienna, Austria: Springer, 1996. P. 46.
42. *Абрамов С.К., Азатян В.В., Баймуратова Г.Р. и др.* // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 11. С. 50.
43. *Grune J., Sempert K., Haberstroh H., Kuznetsov M., Jordan T.* // J. Loss Prevention Process Industries. 2013. V. 26. P. 317.
44. CHEMKIN-Pro 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1. Reaction Design: San Diego, 2011.
45. *Burcat A., Ruscic B.* Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Argonne National Laboratory: Technion-Israel Institute of Technology. Tech. Rep. ANL-05/20 and TAE-960. IL, Chicago; Tel-Aviv, 2005.
46. *Гельфанд Б.Е., Попов О.Е., Медведев С.П. и др.* // ДАН. 1993. Т. 330. С. 457.
47. *Lewis B., von Elbe G.* Combustion, flames and explosions of gases. N.Y.: Acad. Press, 1961.
48. *Кузнецов Н.М.* Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
49. *Семёнов Н.Н.* Цепные реакции. М.: Госхимтехиздат, 1934.
50. *Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V.* // Acta Astronautica. 2016. V. 126. P. 150.
51. *Киверин А.Д.* Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М.: ОИВТ РАН, 2021.
52. *Alekseev V.* Dissertation... PhD. Lund, Sweden: Lunds Univ., 2015.