

УДК 519.688

Создание программного модуля для решения задач горения с учетом детальной химической кинетики

А.Е. Смыгалина

Студент, кафедра «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

*Научный руководитель: Иванов М.Ф., д.ф-м.н., профессор кафедры «Физика»
МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

МГТУ им. Н.Э. Баумана

anna.smygalina@gmail.com

1. Введение

В настоящее время достигнуто понимание того, что моделирование процессов горения требует использования детальной химической кинетики для описания реальных процессов происходящих при горении. Упрощенные модели одноступенчатой химической реакции позволяют в некоторых случаях получить качественно правильное понимание процессов, однако непригодны для количественного описания и зачастую приводят к совершенно неправильным результатам, особенно при моделировании нестационарных и переходных процессов [1-5]. Вместе с тем, использование детальных химических схем в гидродинамических расчетах связано со значительными техническими трудностями. Известно, например, что при горении водорода происходит до 137 различных видов элементарных реакций, а при горении углеводородов число элементарных реакций более 2000. Разработанные (редуцированные) кинетические схемы содержат лишь те элементарные реакции, которые имеют определяющее значение в химическом превращении. Наиболее распространенные и используемые в настоящей работе схемы горения водорода содержат около двадцати элементарных реакций, схемы горения метана – около шестидесяти. Расчет химического превращения (концентраций реагентов через определенный промежуток времени) по определенной химической модели требует решения системы дифференциальных уравнений, каждое из которых описывает

изменение во времени концентрации одного реагента и составляется согласно закону действующих масс. Понятно, что имея, к примеру, шестьдесят реакций, исследователю, занимающемуся численным моделированием горения, приходится выполнять большое число однотипных операций для формирования указанной системы уравнений, что увеличивает вероятность ошибок в программе.

В настоящей работе разработан метод автоматизации формирования систем уравнений кинетики, основанный на идее создания отдельного компьютерного модуля для выполнения данной задачи. Такой компьютерный модуль разрабатывался как дополнение к используемому в моделировании гидродинамическому коду для исследования процессов горения [2-5]. Разработанный модуль производит считывание данных о химических реакциях из текстового файла, составленного в стандартном формате ChemKin [6]. Таким образом, тестирование кода состоит в непосредственной проверке того, насколько правильно осуществляется чтение файла с указанным форматом. Эффективность использования разработанного модуля продемонстрирована на примерах расчетов времен индукции в рамках нульмерной модели для газовых смесей водорода и смесей метана. Проведенные расчеты показали хорошее согласие с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Как правило, в работах, посвященных моделированию горения сложных веществ с детальной кинетикой, используется какая-либо коммерческая программа, реализующая расчет горения с учетом детальной кинетики. Так, в [7], использовался программный пакет HOMREA, производящий расчет времен индукции, временных зависимостей температуры, давления и концентраций химических соединений, а также параметров чувствительности. При этом был взят кинетический механизм для углеводородов C_1 - C_4 , состоящий из 412 элементарных обратимых реакций и учитывающий 61 химический компонент. В [8] расчеты времен индукции смесей метана с водородом и анализ чувствительности кинетических механизмов были выполнены с помощью программных кодов CHEMKIN II и Senkin; основной кинетический механизм NUI Galway состоял из 663 элементарных реакций и включал 118 химических компонентов. В [9] для горения смеси сингаз-воздух был применен механизм из 62 элементарных двусторонних реакций. В [10] приведены расчеты времен индукции и скоростей ламинарного пламени для систем углеводородов C_1 - C_3 , использовался программный пакет CANTERA (нульмерная модель) и CHEMKIN-PRO (расчет скорости пламени), а также кинетическая схема из 779 элементарных реакций с учетом 97 компонентов. В [11] нульмерные расчеты горения смеси сингаз-воздух были проведены с использованием программного пакета CHEMKIN,

химическое превращение описывалось моделью GRI-Mech 3.0, состоящей из 325 реакций между 53 компонентами. В качестве интересного примера горения с чрезвычайно большим числом реакций приведем указанный в [12] механизм горения n-гептана (C_7H_{16}), включающий 2539 реакций и 561 компонент.

В настоящей работе проводятся расчеты времен индукции смесей водорода с воздухом и смесей метан-водород-кислород-аргон. Для кинетики водорода было использовано 6 схем: схема из 9 элементарных обратимых реакций [4], из 21 [13], из 19 [14], из 28 [15], из 23 [16], из 24 [17]; во всех механизмах учитывалось 9 химических компонентов (H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 , N_2). Для кинетики метана использовалось 3 схемы: из 74 элементарных обратимых реакций [14], из 105 [15], из 102 [16], число участвующих компонент: 21 (CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , H , H_2 , O , OH , HO_2 , CH_3 , C_2H_6 , C_2H_4 , C_2H_5 , CO , HCO , CH_2O , CH_3O , $\text{CH}_2(\text{S})$, CH_2 , CH_2OH , Ar).

2. Описание разрабатываемого программного модуля

Разработанный модуль представляет собой отдельную программную единицу, создаваемую в среде программирования Compaq Visual Fortran 6.6. Модуль проводит чтение текстового файла с кинетическим механизмом, фрагмент которого приводится на рис.1 [15]. После открытия файла запускается цикл, на каждом этапе которого прочитывается первая строка из очередной записи файла (под строкой следует понимать последовательность символов, не разделенных пробелами или слэшами; под записью – совокупность строк, находящихся на одинаковом уровне в текстовом файле на одной «строке», в привычном смысле этого слова). Далее осуществляется проверка прочитанной строки: выражает ли эта строка реакцию, например, $\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{OH}$, или совокупность коэффициентов, например, ' $\text{H}_2/2.00/ \text{H}_2\text{O}/6.00/$ ', или специальные обозначения реакции 'LOW', 'TROE'. В первом случае, то есть, если первая строка записи есть некоторое символьное выражение реакции, проводится ее обработка: распознавание знака между левой и правой частями реакции (= или $\rightleftharpoons$ или $\Rightarrow$), далее распознавание в каждой из частей подстрок, обозначающих химические соединения, разделенных знаками '+'. Предполагается, что перед работой модуля пользователем задается массив из химических соединений в виде символьных переменных, например, ' H_2 ', ' CHO ', так что внутри всей программы химическому соединению ставится в соответствие порядковый номер. При распознавании соединений, участвующих в некоторой реакции, в специально отведенный динамический целочисленный массив записываются данные: количество реагентов в левой и правой частях реакции, порядковый номер каждого входящего реагента. Если некоторая очередная считываемая реакция содержит соединение, не входящее в список, <http://sntbul.bmstu.ru/doc/564391.html>

заданный пользователем, то данная реакция не учитывается. После прочтения строки-реакции, осуществляется запись в отдельный динамический массив соответствующих данной реакции величин для расчета константы скорости прямой реакции A_f , b_f , $E_{act\ f}$. Указанные величины приведены для любой реакции и следуют за строкой-реакцией в пределах одной записи.

```

REACTIONS
2O+M<=>O2+M          1.200E+17   -1.000   .00
'H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/'
O2+CH2O<=>H2O+HCO      1.000E+14    .000  40000.00
H+O2+M<=>HO2+M         2.800E+18   -.860   .00
'O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/'
H+2O2<=>H2O2+O2        2.080E+19   -1.240   .00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O     11.26E+18   -.760   .00
H+CH3(+M)<=>CH4(+M)     13.90E+15   -.534  536.00
    LOW   2.620E+33   -4.760  2440.00
    TROE   .7830    74.00  2941.00  6964.00
'H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/3.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/'
H+CH4<=>CH3+H2         6.600E+08    1.620  10840.00

```

Рис. 1. Фрагмент кинетического механизма [15]

Модуль рассчитан на считывание реакций, в левой и правой частях которых содержится не более 3 молекул/радикалов/атомов того или иного реагента. Такой вариант, вообще говоря, исчерпывает все физически реализуемые химические реакции, поскольку известно, что вероятность реакций порядка, выше третьего, крайне мала [18].

Теперь рассмотрим другой вариант: в качестве первой строки очередной записи файла может находиться строка с коэффициентами для расчета концентрации реагента 'M'. Эта строка имеет вид последовательности формул химических соединений со следующими за ними под знаками слэшей коэффициентами (например, 'H2/2.00/H2O/6.00/'). Вся строка заключена в апострофы. Производится последовательное чтение подстрок, обозначающих химические соединения (ориентирами для их распознавания служат слэши) и запись в динамический массив стоящих за ними коэффициентов.

В случае если первая строка есть специальная строка 'LOW', проводится запись в отдельный динамический массив трех следующих за данной строкой коэффициентов, которые соответствуют расчету константы скорости при низких давлениях и необходимы для расчета итоговой константы реакции по формуле Линдемана, поскольку константы скоростей таких реакций зависят от давления. Если первая строка есть специальная строка 'TROE', проводится запись в отдельный динамический массив четырех следующих за

данной строкой коэффициентов, которые используются для расчета константы скорости реакции в рамках формализма Трое.

Таким образом, сформированные массивы содержат всю информацию о химическом механизме и позволяют записать систему дифференциальных уравнений кинетики. Такая система имеет вид [14]:

$$\frac{dc_i}{dt} = \sum_{q=1}^Q \left(v_{qi}^{(n)} - v_{qi}^{(p)} \right) \left[k_{qf} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(p)}} - k_{qb} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(n)}} \right], i = 1..S \quad (1)$$

Число уравнений в системе равно числу различных химических компонент, S . Система (1) описывает превращение, происходящее по механизму

$$\sum_{j=1}^S v_{qj}^{(p)} E_j \leftrightarrow \sum_{j=1}^S v_{qj}^{(n)} E_j, q = 1..Q, \quad (2)$$

представляющему собой совокупность из Q элементарных обратимых реакций между S компонентами E_j . В системе уравнений (1-2) введены обозначения: c_i – молярная плотность (концентрация) i -го компонента, $\frac{dc_i}{dt}$ – массовая скорость химического превращения по i -му компоненту, $v_{qj}^{(p)}, v_{qj}^{(n)}$ – стехиометрические коэффициенты j -го реагента и j -го продукта q -й реакции, k_{qf}, k_{qb} – константы скоростей прямой (f) и обратной (b) q -й реакции.

Формирование системы (1) происходит в отдельной подпрограмме, не входящей в модуль по чтению кинетического механизма. На первом этапе происходит вычисление выражений $\left[k_{qf} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(p)}} - k_{qb} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(n)}} \right]$, соответствующих каждой реакции. В

программе реализуется эквивалентный вариант $\left[k_{qf} \prod_{l=1}^{W_1} c_l^{v_{ql}^{(p)}} - k_{qb} \prod_{l=1}^{W_2} c_l^{v_{ql}^{(n)}} \right]$, где W_1, W_2 –

число реагентов в левой и продуктов в правой частях q -й реакции. Формирование правой части i -го уравнения системы (1) проводится в цикле по числу реакций Q (см. сумму по Q реакциям в уравнении (1)). На каждом этапе данного цикла, т.е. для каждой отдельной реакции, с помощью двух циклов по числу реагентов (W_1) и числу продуктов (W_2) производится проверка наличия среди реагентов (продуктов) i -го соединения: если он содержится среди реагентов (продуктов), то к общей i -ой правой части добавляется со знаком «минус» (для реагентов) («плюс» – для продуктов) предварительно вычисленная

величина $\left[k_{qf} \prod_{l=1}^{W_1} c_l^{v_{ql}^{(p)}} - k_{qb} \prod_{l=1}^{W_2} c_l^{v_{ql}^{(n)}} \right]$, соответствующая q -й рассматриваемой реакции.

Процесс значительно упрощается, если (и это реализовано в данном модуле) каждая реакция представлена так, что стехиометрические коэффициенты каждого соединения равны 1. Например, реакция $2O+M=O_2+M$ может быть представлена в виде $O+O+M=O_2+M$.

Отдельный вопрос представляет вычисление констант скоростей реакций. Описываемый модуль рассчитан на считывание данных, соответствующим нескольким различным видам реакций. Все возможные случаи, учитывающиеся в модуле, исчерпываются приведенными в таблице видами реакций. Разным видам реакций соответствуют разные способы определения констант скоростей.

	реакция	A_f , см, моль, с	b_f	$E_{act\ f}$, кал/моль
1	$O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$	3.870E+04	2.700	6260.00
2	$CH_3CO_2+M \Rightarrow CH_3+CO_2+M$	8.700E+15	0.0	14400.0
	$H_2+CH_2(+M) \rightleftharpoons CH_3(+M)$	6.000E+14	.000	.00
3	LOW	1.040E+26	-2.760	1600.00
	TROE	.5620	91.00	5836.00
	'H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/.70/'			
	$N_2O(+M) \rightleftharpoons N_2+O(+M)$	7.910E+10	.000	56020.00
4	LOW	6.370E+14	.000	56640.00
	'H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/.625/'			

Первый представленный в таблице вид реакции – обратимая реакция, как правило, бимолекулярная реакция. Реакции соответствует набор из трех величин: A_f , b_f , $E_{act\ f}$, необходимых для расчета константы скорости прямой реакции по закону Аррениуса [14]:

$$k_{qr} = A_{qr} T^{b_{qr}} \exp\left(-\frac{E_{act\ qr}}{RT}\right), \quad r = f, b. \quad (3)$$

Размерности величин A , b , E_{act} в текстовом файле должны быть следующими: $[A]=1/c$ (для реакций первого порядка), $cm^3/(mоль \cdot c)$ (для реакций второго порядка), $cm^6/(mоль^2 \cdot c)$ (для реакций третьего порядка), b – безразмерная величина, $[E_{act}]=\text{кал/моль}$. Константа скорости обратной реакции пересчитывается из константы скорости прямой реакции с применением термодимических данных об участвующих в реакции компонентах (стандартная энтальпия образования, энтропия реакции), в соответствии с термодинамическим законом действующих масс [19].

Второй вид реакции – необратимая реакция. В этом случае константу скорости обратной реакции можно формально положить равной нулю.

Возможны случаи, как среди двусторонних, так и односторонних реакций, когда одним из реагентов является элемент ‘М’ (например, реакция $2O+M \rightleftharpoons O_2+M$). Под ‘М’ следует понимать некоторую молекулу из смеси, выполняющую роль акцептора энергии, выделяющейся при реакции. Авторы кинетических схем указывают, какой можно принять концентрацию ‘М’. Стандартным способом указания концентрации, принятым в формате ChemKin, является условие, что концентрация [М] равна сумме концентраций всех химических соединений в смеси, причем если за реакцией следует строка вида ‘Н2/2.00/ Н2О/6.00/ СН4/2.00/’, то концентрации данных компонентов суммируются, будучи умноженными на соответствующие коэффициенты.

Рассмотрим последние два типа реакций. Для мономолекулярных реакций и реакций рекомбинации константы скоростей имеют зависимость от давления. В кинетических механизмах для таких реакций указываются два набора параметров (A_f , b_f , E_{actf}), соответствующих высоким и низким давлениям, а также параметры для вычисления концентрации реагента М, который считается принимающим участие в реакции в случае низких давлений [14]. Для расчета констант скоростей реакций в среднем диапазоне давлений, применяют 2 подхода: подход Линдемана (Lindemann-Hinshelwood form) и подход Трое (Troe form) [14,19].

В подходе Линдемана [14] расчет проводится по формуле:

$$k = \frac{k_0[M]}{1 + k_0[M]/k_\infty}, \quad (4)$$

где [М] - концентрация реагента М. Константа k_0 вычисляется по формуле (3) с использованием набора параметров (A , b , E_{act}) для низких давлений; аналогично вычисляется k_∞ , но с параметрами для высоких давлений.

Пример реакции, взятой из кинетического механизма, константа скорости которой определяется по методу Линдемана, - реакция 4 в таблице 1. Реакция в присутствии М соответствует низким давлениям, параметры для расчета k_0 следуют после слова ‘LOW’. Вычисление концентрации М проводится по формуле

$$[M] = \sum_{i=1}^S \varphi_i Y_i. \quad (5)$$

Здесь Y_i - концентрация i -го химического компонента, $\varphi_i = 1$ для всех компонентов, за исключением тех, для которых приведены эти значения в строке, непосредственно следующей за реакцией.

В рамках *подхода Трое* константа скорости реакции определяется следующим образом:

$$k = \frac{k_0[M]}{1 + k_0[M]/k_\infty} \cdot F, \quad (6)$$

$$\log F = \frac{\log F_{cent}}{1 + (\kappa/(N - d \cdot \kappa))^2}, \quad \kappa = \log\left(\frac{k_0[M]}{k_\infty}\right) + C,$$

$$C = -0.4 - 0.67 \log F_{cent}, \quad N = 0.75 - 1.27 \log F_{cent}, \quad d = 0.14 \quad (7)$$

$$F_{cent} = (1 - a) \exp(-T/T^{***}) + a \exp(-T/T^*) + \exp(-T^{**}/T).$$

Как показывает выражение (6), искомая константа скорости равна константе, вычисленной по способу Линдемана и умноженной на величину F , которая определяется из формул (7).

Величины a , T^* , T^{**} , T^{***} задаются в строке, обозначенной 'TROE' (см. реакцию 3 из таблицы).

3. Расчет времени индукции: нульмерная модель

Разработанный модуль был включен в программу для расчета горения по нульмерной модели. Такая модель предполагает рассмотрение процесса химического превращения (горения) в системе, в которой отсутствуют процессы переноса, такие как конвекция, диффузия. Соответствующая математическая модель включает уже рассмотренную нами систему дифференциальных уравнений химической кинетики, а также уравнение для расчета температуры смеси с учетом выделения/поглощения энергии при химических реакциях:

$$\begin{cases} \frac{dc_i}{dt} = \sum_{q=1}^Q (v_{qi}^{(\tau)} - v_{qi}^{(\delta)}) \left[k_{qf} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(\delta)}} - k_{qb} \prod_{j=1}^S c_j^{v_{qj}^{(\tau)}} \right], \quad i = 1..S, \\ \frac{dT}{dt} = - \frac{\sum_{j=1}^S h_j r_j}{\rho c_p}. \end{cases} \quad (8)$$

В системе уравнений (8) введены обозначения: $r_i = M_i dc_i/dt$ – массовая скорость химического превращения по i -му компоненту, $\rho = \sum_{j=1}^S M_j c_j$ – плотность смеси, $c_p = \sum_{j=1}^S w_j c_{p,j}$ – удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении, h_j – удельная энтальпия компонента j .

4. Сравнение с экспериментальными данными

На рисунках 2-4 представлены результаты расчетов времен индукции различных смесей, проведенных с использованием нульмерной программы, а также соответствующие экспериментальные данные, имеющиеся в литературе. Для моделирования химического превращения смесей водорода было использовано 6 редуцированных схем, для горения смесей с метаном – 3 схемы.

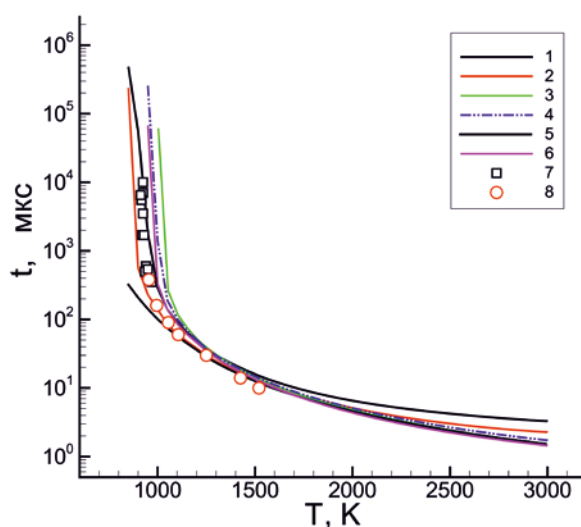


Рис. 2. Времена индукции стехиометрической смеси водорода с воздухом при атмосферном давлении. Расчеты: 1-[4], 2-[13], 3-[14], 4-[15], 5-[16], 6-[17].

Экспериментальные данные: 7-[20], 8-[21]

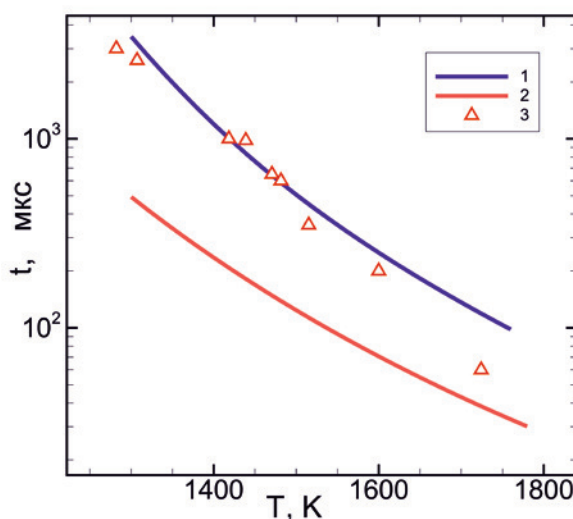


Рис. 3. Времена индукции смеси $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}=0.998/3.99/95.012$ при давлении 20 атм.

Расчеты: 1-[15], 2-[16]. Экспериментальные данные: 5-[8]

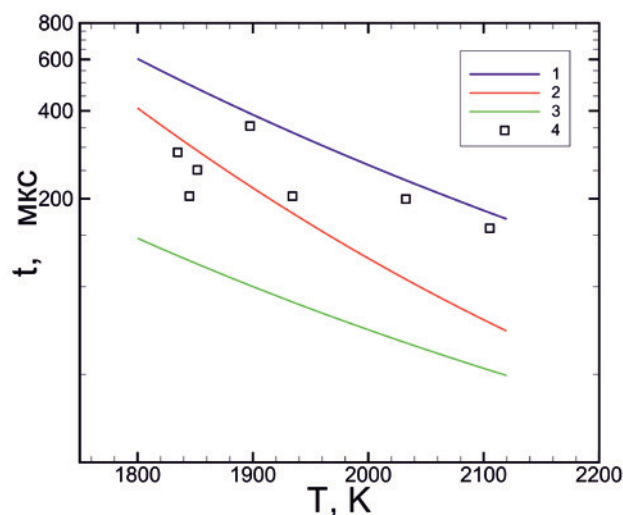


Рис. 4. Времена индукции смеси 2%CH₄+8%O₂+10%Ar при давлении 0,39 атм. Расчеты: 1-[15], 2-[16], 3-[14]. Экспериментальные данные: 4-[7]

5. Выводы

Результатом данной работы стала разработка модуля для чтения файлов, содержащих механизмы химической кинетики. Модуль показал свою работоспособность при тестировании различных схем химической кинетики в рамках нульмерной модели горения. В качестве дальнейшего использования данного модуля предполагается его внедрение в газодинамические программные коды горения с целью исследования процессов горения, описываемых сложными детальными механизмами химической кинетики.

Список литературы

1. R. Hilbert, F. Tap, H. El-Rabii, D. The'venin, Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations, *Progress in Energy and Combustion Science* 30 (2004) 61–117.
2. М. А. Либерман, М. Ф. Иванов, А. Д. Киверин, М. С. Кузнецов, Т. В. Рахимова, А. А. Чукаловский, О механизме перехода медленного горения в детонацию в водород-кислородной смеси, *ЖЭТФ* 138, No. 4, pp. 772–788 (2010).
3. М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин, М.А. Либерман, В.Е. Фортов, Механизм ускорения пламени и переход в детонацию водородно-кислородной смеси в канале, *Доклады РАН*, том 434, № 6, с. 756–759 (2010).

4. M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. A. Liberman, Hydrogen-oxygen flame acceleration and transition to detonation in channels with no-slip walls for a detailed chemical reaction model, *Phys. Rev. E* **83**, No.5, 056313 (2011).
5. M.A. Liberman, A.D. Kiverin, M.F. Ivanov, Regimes of chemical reaction waves initiated by nonuniform initial conditions for detailed chemical reaction models, *Phys. Rev. E* **85**, 056312 (2012).
6. Kee R.J., Rupley F.M., Meeks E., Miller J.A. CHEMKIN-III: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gasphase chemical and plasma kinetics. UC-405. SAND96-8216. 1996.
7. Heghes C.I. C1-C4 Hydrocarbon oxidation mechanism. Dissertation. Heidelberg, 2006.
8. Zhang Y., Huang Z., Wei L., Zhang J., Law C.K. Experimental and modeling study on ignition delay mixtures of methane, hydrogen, oxygen and argon at elevated pressures// *Combustion and Flame* 159 (2012) pp.918-931.
9. A.M. Starik, A.S. Sharipov, N.S. Titova The effect of the vibrational excitation of molecules on the shock-induced combustion in a syngas-air mixture// *Combustion science and technology* 183:1 (2010), pp.75-103.
10. O.W. Powell, P. Papas, C.B. Dreyer Hydrogen- and C1-C3 Hydrocarbon-nitrous oxide kinetics in freely propagating and burner-stabilized flames, shock tubes and flow reactors// *Combustion science and technology* 182:3 (2010), pp.252-283.
11. D.E. Cavaliere, M. De Joannon, P. Sabia, M. Sirignano, A. D'Anna A comprehensive kinetic modeling of ignition of syngas-air mixtures at low temperatures and high pressures// *Combustion science and technology* 182:4 (2010), pp.692-701.
12. T. Wada, F. Jarmolowitz, D. Abel, N. Peters An instability of diluted lean methane/air combustion: modeling and control// *Combustion science and technology* 183:1 (2010), pp.1-19.
13. Бохон Ю.А., Гальбурт В.А., Гостинцев Ю.А. и др. Развитие взрыва газовой смеси за ударными волнами. Препринт ИВТАН №2-416. Москва: 1998. 59с.
14. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. Г.Л. Агафонова. Под ред. П.А. Власова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 352 с.
15. C. Heghes, V. Karbach, J. Warnatz. Evaluation of new data for hydrocarbon kinetics. *Proc. of Europ. Combust. Meeting*, 176, Louvain-la-Neuve, Belgium. 2005.
16. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.

17. Уманский С.Я. Теория элементарных химических реакций – Долгопрудный: Издательский дом "Интеллект", 2009. – 408 с.
18. Slack M., Grillo A. Investigation of Hydrogen-air Ignition Sensitized by Nitric Oxide and Nitrogen Dioxide, NASA Report CR-2896, 1977.
19. Schultz E., Shepherd J. Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation, Cal. Inst. of Tech. Graduate Aeronautical Lab. Tech. Rep. FM 99-5 (2000) p. 230.