
ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 541.126

ДЕТАЛЬНЫЙ КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ
МНОГОСТАДИЙНОГО ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ИЗОБУТАНА

© 2015 г. В. Я. Басевич, А. А. Беляев*, С. Н. Медведев, В. С. Посвянский, С. М. Фролов

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва

**E-mail: belyaev@center.chph.ras.ru*

Поступила в редакцию 02.04.2014

Цель работы – построение детального кинетического механизма окисления и горения изобутана, описывающего как высокотемпературные реакции, так и многостадийный процесс в области низких температур. Изобутан выбран потому, что он – первый член гомологического ряда изомеризованных алканов, причем для более высокого члена ряда – изооктана – в экспериментах наблюдалось многостадийное самовоспламенение. Показано, что при определенных условиях самовоспламенение изобутана происходит в три стадии, характерные для нормальных алканов и изооктана: холодное и голубое пламена, а также горячий взрыв. По предложенному детальному кинетическому механизму выполнены расчеты самовоспламенения и распространения пламени и проведено сравнение результатов расчетов с известными экспериментальными данными. Получено удовлетворительное качественное и количественное согласие результатов. Рассмотрены процесс самовоспламенения от сжатия и повышенная антидетонационная стойкость изобутана при самовоспламенении в поршневых двигателях внутреннего сгорания. Оказалось, что антидетонационные свойства у изобутана выше, чем у нормального бутана.

Ключевые слова: алканы, кинетические механизмы, изомеры, самовоспламенение, многостадийность, распространение пламени.

DOI: 10.7868/S0207401X15040044

ВВЕДЕНИЕ

В монографии [1] на основе обзора большого экспериментального материала сделаны важные обобщения и введено понятие многостадийного самовоспламенения углеводородов с разделенными стадиями “холодного”, “голубого” и “горячего” пламени. Многостадийность обнаруживается в экспериментах при окислении многих углеводородов [1, 2]. В литературе предлагаются детальные кинетические механизмы (ДКМ) окисления и горения различных углеводородов, в том числе изомеризованных (см., например, работу [3]), однако ни в одной из известных работ не показано, что эти механизмы адекватно описывают многостадийность с тремя указанными стадиями. Исключение составляет лишь работа [4]. Авторы этой работы, рассматривая феноменологию самовоспламенения эталонных топлив – н-гептана и изооктана, дают голубому пламени новое название – “предвоспламенение” (preignition) и предлагают для него сложное кинетическое объяснение (через реакции с ароматическими структурами), которое не может быть применено к индивидуальным углеводородам нормального строения и их изомерам.

Ранее [5–12] нами предложено и обосновано кинетическое объяснение возникновения голубого пламени, которое применимо к алканам нормального строения вплоть до н-гексадекана. Основная цель данной работы – разработать ДКМ изобутана, который адекватно, насколько это возможно, описывал бы не только высокотемпературные реакции, но и реакции многостадийного окисления и горения в области низких температур. Изобутан выбран потому, что он – первый изомеризованный алкан, поэтому именно с него надо начинать построение ДКМ для таких соединений. Кроме того, цель работы состояла в исследовании (на основе разработанного ДКМ) самовоспламенения изомеризованных углеводородов при сжатии в условиях двигателя внутреннего сгорания (ДВС). Дело в том, что именно в условиях ДВС еще в начале 1950-х годов у ряда углеводородов были обнаружены голубые пламена. В опытах голубое пламя регистрируется как предпламенное голубое свечение [2, 13, 14], а на параметрической плоскости “состав смеси – температура сжатия” голубые пламена обнаруживаются в области, примыкающей к области самовоспламенения. В голубых пламенах происходит частичное реагирование: убывают концентрации топли-

ва и кислорода и появляются в некотором количестве промежуточные и конечные продукты реакции.

Еще одно важное свойство изомеризованных углеводородов — их известная причастность к антидетонационной стойкости моторных топлив: в бензинах, используемых в ДВС, может содержаться до трети изопарафинов. Это свойство изобутана также рассмотрено в данной работе.

ПОСТРОЕНИЕ МЕХАНИЗМА

Для построения многостадийного ДКМ окисления и горения изобутана применили методику аналогий в избрании важных для многостадийности реакций, оправдавшую себя при разработке ДКМ нормальных алканов от пропана до н-гексдекана [5–12]. За основу взяли ДКМ н-бутана. В его алгоритм [6] заложен принцип неэкстенсивного построения механизма, характеризующегося двумя особенностями: предполагается, что, во-первых, низкотемпературное разветвление обязательно группе реакций с одним присоединением кислорода, и, во-вторых, путь окисления нормального углеводорода через изомерные формы может быть исключен, так как он медленнее, чем путь окисления через неизомеризованные компоненты. Поэтому в ДКМ многостадийного окисления и горения н-бутана $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ [6], содержащем блоки реакций углеводородов $\text{C}_1\text{--C}_4$, для получения ДКМ изобутана $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ нами введено ограниченное число новых компонентов — по одному изомеризованному для каждого компонента нормального строения, а также вероятные реакции, аналогичные реакциям для н-бутана, которые ответственны за окисление изобутана. Новые изомеризованные компоненты ДКМ — это $i\text{-C}_3\text{H}_7$, $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{O}_2$, $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{O}_2\text{H}$, $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{O}$, $i\text{-C}_3\text{H}_5$, $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$, $i\text{-C}_4\text{H}_9$, $i\text{-C}_4\text{H}_9\text{O}_2$, $i\text{-C}_4\text{H}_9\text{O}_2\text{H}$ ($i\text{-C}_4\text{H}_{10}\text{O}_2$), $i\text{-C}_4\text{H}_9\text{O}$, $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{CHO}$ ($i\text{-C}_4\text{H}_8\text{O}$), $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{CO}$ ($i\text{-C}_4\text{H}_7\text{O}$), $i\text{-C}_4\text{H}_8$ и $i\text{-C}_4\text{H}_7$ (в скобках указана краткая запись того или иного компонента в ДКМ). Термохимические параметры изомеризованных компонентов — энтальпию образования ΔH_{298}° , энтропию S_{298}° и коэффициенты c_0 , c_1 , c_2 , c_3 и c_4 в формуле теплоемкости при постоянном давлении: $c_p = c_0 + c_1 T/10^3 + c_2 T^2/10^6 + c_3 T^3/10^9 + c_4 T^4/10^{12}$, вычисляли на основе известных рекомендаций и правил аддитивности для двух интервалов температуры — низкотемпературного и высокотемпературного [5].

Таким образом, к механизму окисления и горения $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ [6] добавлены 118 новых реакций с участием 14 указанных выше изомеризованных компонентов. Всего новый ДКМ окисления и горения $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ – $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ включает 68 компонентов и 409 пар прямых и обратных реакций.

Следует отметить, что вследствие недостаточности экспериментальных данных существует проблема выбора аррениусовских параметров констант скоростей многих реакций. Поэтому для построения массива констант реакций в ДКМ окисления и горения $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ использовались параметры аналогичных реакций для $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ на основе принципов алгоритма [5, 6]. При этом для константы скорости i -той элементарной реакции, как и в [5–12], принята двухпараметрическая форма с предэкспоненциальным множителем A_i и энергией активации E_i , причем параметры для изомеризованных компонентов связаны с параметрами для компонентов с нормальным строением формулами

$$A_{i(i)} = A_{i(n)} \exp[(\Delta S_{i(i)} - \Delta S_{i(n)})/R], \quad (1)$$

$$E_{i(i)} = E_{i(n)} - 0.25[\Delta H_{i(i)} - \Delta H_{i(n)}] \quad \text{для} \\ \text{экзотермических реакций}, \quad (2)$$

$$E_{i(i)} = E_{i(n)} + 0.75[\Delta H_{i(i)} - \Delta H_{i(n)}] \quad \text{для} \\ \text{эндотермических реакций},$$

где $A_{i(i)}$ и $A_{i(n)}$ — предэкспоненциальные множители скорости i -той элементарной реакции с участием изомеризованных компонентов (i) и компонентов нормального строения (n), $E_{i(i)}$ и $E_{i(n)}$ — энергии активации i -той элементарной реакции с участием изомеризованных компонентов (i) и компонентов нормального строения (n), R — газовая постоянная, $\Delta S_{i(i)}$ и $\Delta S_{i(n)}$ — соответствующие изменения энтропии реакций и $\Delta H_{i(i)}$ и $\Delta H_{i(n)}$ — соответствующие изменения энтальпии реакций.

Никакая дальнейшая корректировка полученных таким образом аррениусовских параметров $A_{i(i)}$ и $E_{i(i)}$ не проводилась.

ПРОВЕРКА МЕХАНИЗМА

Самовоспламенение

Полученный ДКМ проверили, сравнив расчеты самовоспламенения изобутана с известными опытными данными, полученными на машинах быстрого сжатия и в ударных трубах. Расчеты проводились с помощью кинетической программы, алгоритм которой детально описан в работе [15].

На рис. 1 представлены типичные расчетные зависимости температуры от времени при самовоспламенении стехиометрической изобутановоздушной смеси при высокой (1250 К), средней (714 К) и низкой (550 К) начальной температуре T_0 и давлении $P = 19$ ата. Видно, что при высокой температуре самовоспламенение протекает как одностадийное, при средней — как двухстадийное, а при низкой — опять как одностадийное, хотя фактически при средних и низких температурах самовоспламенение *многостадийное* (рис. 2). Первый

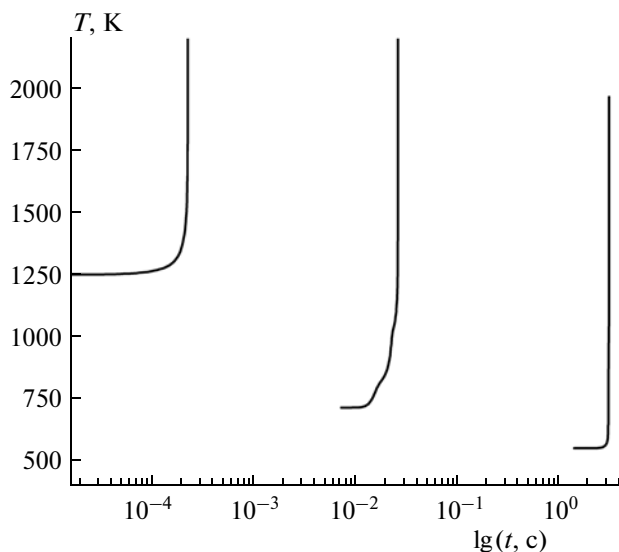


Рис. 1. Расчетные зависимости температуры от времени при самовоспламенении стехиометрической изобутановоздушной смеси при давлении $P = 19$ ата и разных начальных температурах: $T_0 = 1250, 714$ и 550 К.

ступенчатый подъем при начальной температуре $T_0 = 714$ К возникает при $t \sim 0.014$ с и связан с возникновением холодного пламени. По истечении ~ 0.020 с возникает голубое пламя, а затем, при $t \sim 0.026$ с, происходит горячий взрыв. При начальной температуре $T_0 = 550$ К холодное пламя возникает в момент времени $t \sim 3.01$ с, а голубое – в момент времени $t \sim 3.04$ с. Так проявляется многостадийность самовоспламенения – последовательное появление холодного и голубого пламен, а затем и горячего взрыва. Ускорение реакции в холодном пламени происходит благодаря разветвлению процесса при распаде алкилгидроперекиси $i\text{-C}_4\text{H}_9\text{O}_2\text{H}$ с образованием гидроксила и оксирадикала. Возникновение голубого пламени связано с разветвлением, вызванным распадом перекиси водорода H_2O_2 на два гидроксила. Это подтверждается поведением расчетных кривых для перекисей и двумя пиками на временной зависимости концентрации гидроксила на рис. 2. В экспериментах такое четкое разделение стадий на измеряемых зависимостях температуры (или давления) от времени проявляется не всегда вследствие пространственной неоднородности температуры, однако локально оно всегда реализуется. К сожалению, нет экспериментальных данных по концентрации гидроксила при низкотемпературном самовоспламенении.

На рис. 3 проведено сравнение результатов расчетов (кривые) с экспериментальными данными [3] (точки) по самовоспламенению воздушных смесей $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ разного состава, определяемого коэффициентом избытка горючего $\Phi = 0.5, 1$ и 2 (соответственно для бедной, стехиометрической и богатой смесей), при разных начальных температурах и давлениях от 18 до 20 ата. Видно, что многостадийное самовоспламенение при средних и низких температурах приводит к явлению отрицательного (при $\Phi = 2$), нулевого (при $\Phi = 1$) или слабоположительного (при $\Phi = 0.5$) коэффициента скорости реакции. При этом с ростом начальной температуры суммарные задержки самовоспламенения возрастают (при $\Phi = 2$), остаются неизменными (при $\Phi = 1$), или немного сокращаются (при $\Phi = 0.5$). Кривые при разных составах

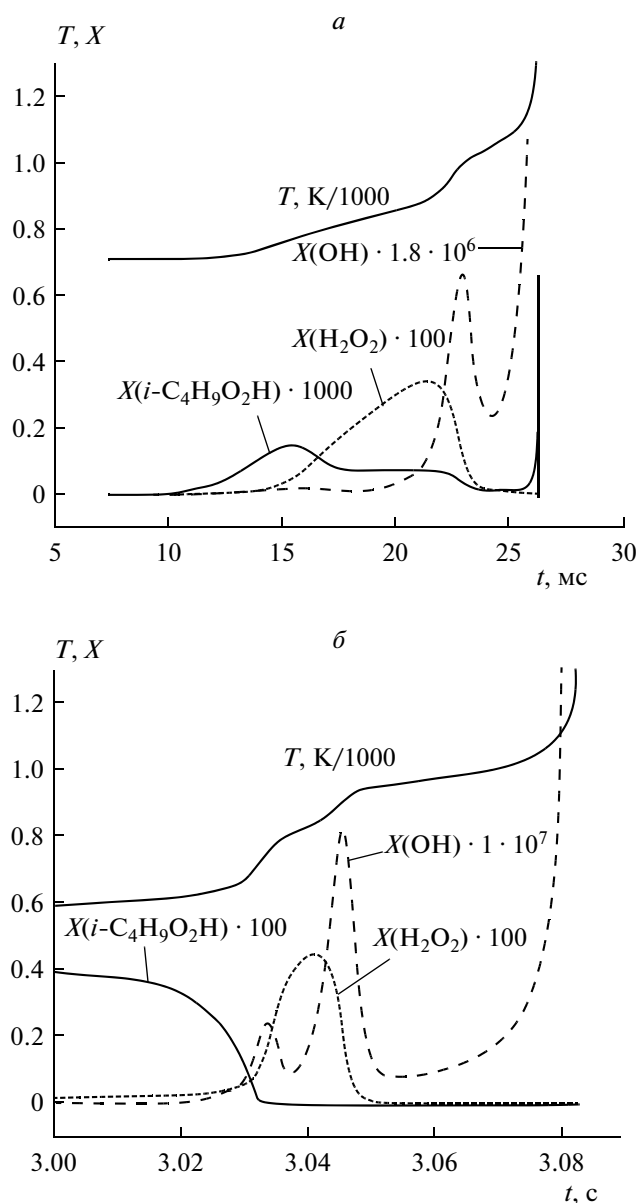


Рис. 2. Расчетные зависимости температуры, а также концентраций гидроксила, алкилгидроперекиси и перекиси водорода от времени при самовоспламенении стехиометрической изобутановоздушной смеси. Давление $P = 19$ ата, начальные температуры $T_0 = 714$ (а) и 550 К (б).

своей и богатой смесей), при разных начальных температурах и давлениях от 18 до 20 ата. Видно, что многостадийное самовоспламенение при средних и низких температурах приводит к явлению отрицательного (при $\Phi = 2$), нулевого (при $\Phi = 1$) или слабоположительного (при $\Phi = 0.5$) коэффициента скорости реакции. При этом с ростом начальной температуры суммарные задержки самовоспламенения возрастают (при $\Phi = 2$), остаются неизменными (при $\Phi = 1$), или немного сокращаются (при $\Phi = 0.5$). Кривые при разных составах

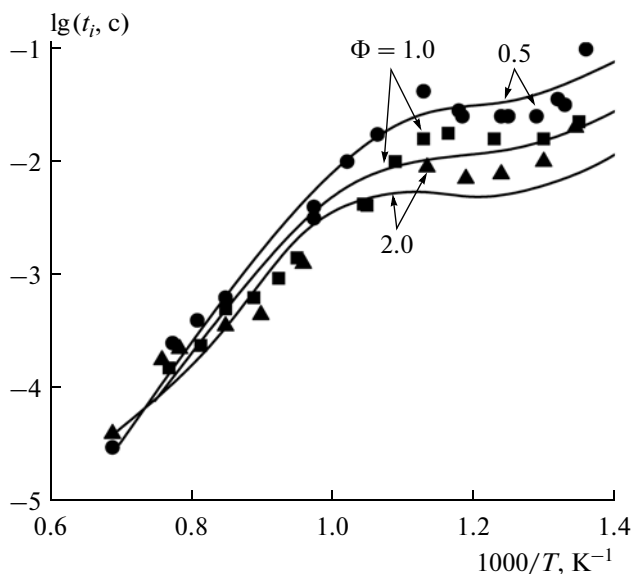


Рис. 3. Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (точки [3]) задержек самовоспламенения воздушных смесей $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при разных температурах и значениях коэффициента избытка горючего; давление $P = 18\text{--}20$ ата.

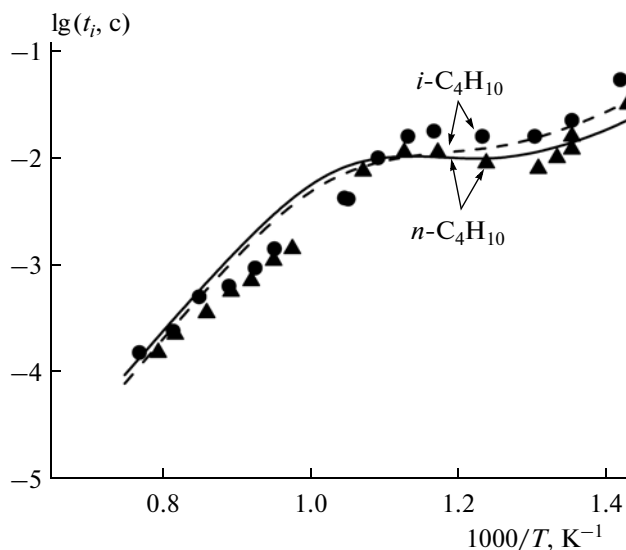


Рис. 4. Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (точки [3]) задержек самовоспламенения стехиометрических воздушных смесей $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при разных начальных температурах; давление $P = 18\text{--}20$ ата.

смеси отражают тенденцию, но не во всех деталях точно отражают экспериментальные данные.

На рис. 4 проведено сравнение результатов расчетов (кривые) и опытов [3] (точки), относящихся к стехиометрическим воздушным смесям $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$, содержащим 3.11% горючего при относительно высоких давлениях $P = 18\text{--}20$ ата, а на рис. 5 проведено аналогичное сравнение с экспериментами [3] в высокотемпературной области при низких давлениях $P = 1$ и 2 ата. Видно удовлетворительное согласие результатов.

В более ранней работе [16] представлены опытные данные по задержкам самовоспламенения $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$, приведенные к атмосферному давлению. Они практически совпадают с данными из [3]. Однако в работе [16] дополнительно приводятся результаты измерений концентрации гидроксила, которые воспроизведены на рис. 6а. На рис. 6б представлены расчетные концентрации гидроксила, полученные для условий опыта [16]. Полученное соответствие между опытными данными и расчетами представляется удовлетворительным.

Распространение ламинарного пламени

Разработанный ДКМ проверяли не только на задаче о самовоспламенении воздушных смесей $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$, но и на задаче о распространении плоского ламинарного пламени в таких смесях. Для расчета структуры и скорости распространения пламени использовали методику, разработанную в работе [17].

На рис. 7 проведено сравнение расчетных и измеренных в [18, 19] значений нормальной скорости пламени u_n в воздушных смесях $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ разного состава при $P = 1$ ата и $T_0 = 293$ К. Разброс экспериментальных данных достаточно велик и сопоставим с разницей скоростей у n -бутана и изобутана, однако видно общее удовлетворительное согласие результатов.

Самовоспламенение от сжатия в условиях ДВС

Важное свойство изобутана, которое проявляется на практике при самовоспламенении изобутановоздушных смесей в условиях ДВС – его антитетонационная стойкость. В данной работе это свойство изобутана исследовалось с помощью вычислительной программы [20], позволяющей рассчитывать самовоспламенение топливно-воздушной смеси при изменении ее объема в ДВС при разных степенях сжатия ε (отношение первоначального максимального объема смеси к минимальному при верхнем положении поршня). Для анализа склонности смеси к самовоспламенению строится так называемая индикаторная диаграмма, представляющая собой зависимость давления в цилиндре двигателя от угла поворота коленчатого вала (ПКВ) при перемещении поршня.

На рис. 8 приведен пример расчетной индикаторной диаграммы с самовоспламенением стехиометрической изобутановоздушной смеси при $P_0 = 1$ ата, $T_0 = 340$ К, $\varepsilon = 11$ и числе оборотов двигателя $n = 600$ мин⁻¹, причем расчет сделан для адиабатических условий, т.е. без учета теплообмена газов со стенками цилиндра ДВС. Сжатие на-

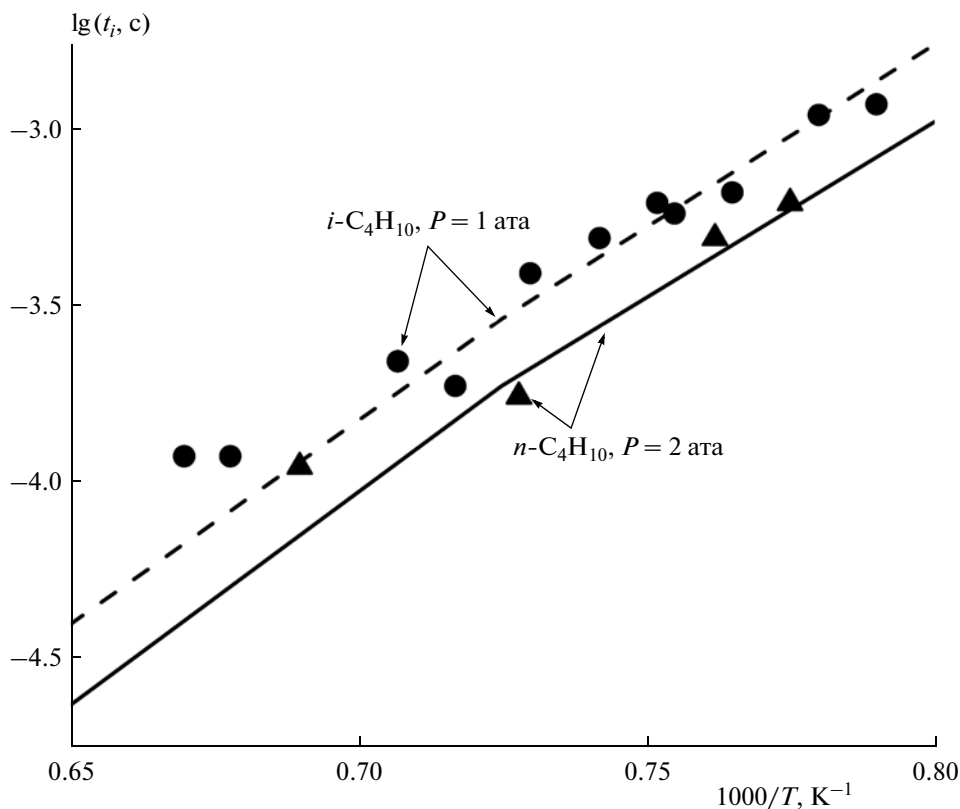


Рис. 5. Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (точки [3]) задержек самовоспламенения стехиометрических воздушных смесей $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при разных температурах; давление $P = 1$ и 2 ата.

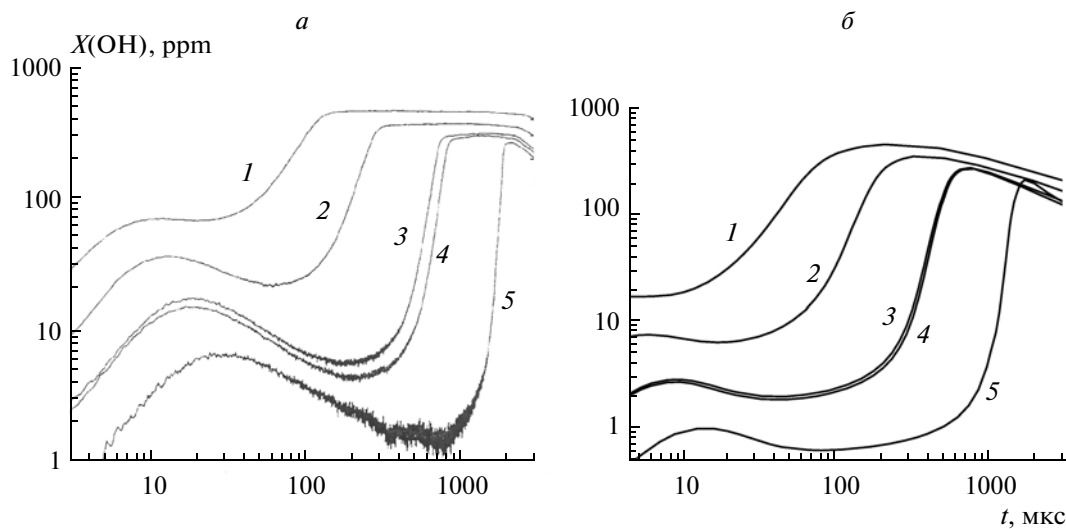


Рис. 6. Измеренные [16] (а) и расчетные (б) зависимости концентрации гидроксила ОН от времени при самовоспламенении смеси $0.1\% i\text{-C}_4\text{H}_{10} + 0.65\% \text{O}_2 + \text{Ar}$ при $T_0 = 1720$ К и $P = 1.41$ ата (1), 1593 К и 1.46 ата (2), 1491 К и 150 ата (3), 1488 К и 1.57 ата (4), 1411 К и 1.55 ата (5).

чинается при положении поршня в нижней мертвой точке (НМТ, 0° ПКВ) при максимальном объеме смеси и заканчивается в верхней мертвой точке (ВМТ, 180° ПКВ). В данном примере время

сжатия составляет $t = 0.05$ с (1° ПКВ соответствует времени ~ 0.278 мс). Видно, что самовоспламенение смеси (с проявлением многостадийности) начинается в ВМТ, а сгорание заряда происходит

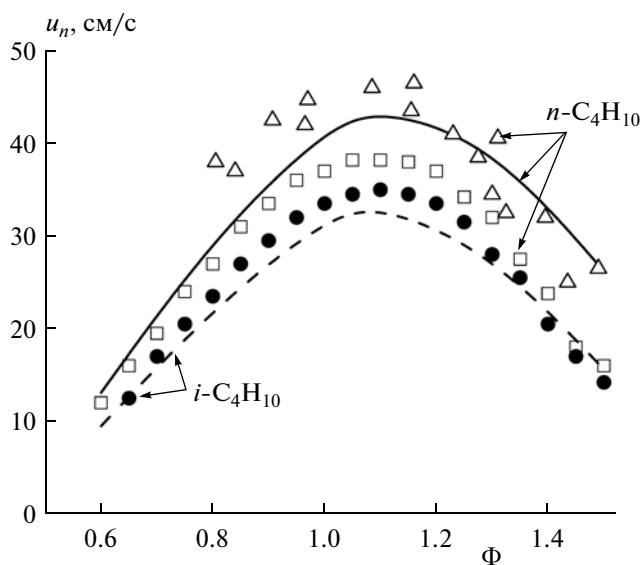


Рис. 7. Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (точки) зависимостей нормальной скорости ламинарного пламени u_n от коэффициента избытка горючего Φ для воздушных смесей $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при давлении $P = 1$ ата и температуре $T_0 = 293$ К; Δ – экспериментальные данные из [18], \square и \bullet – из [19].

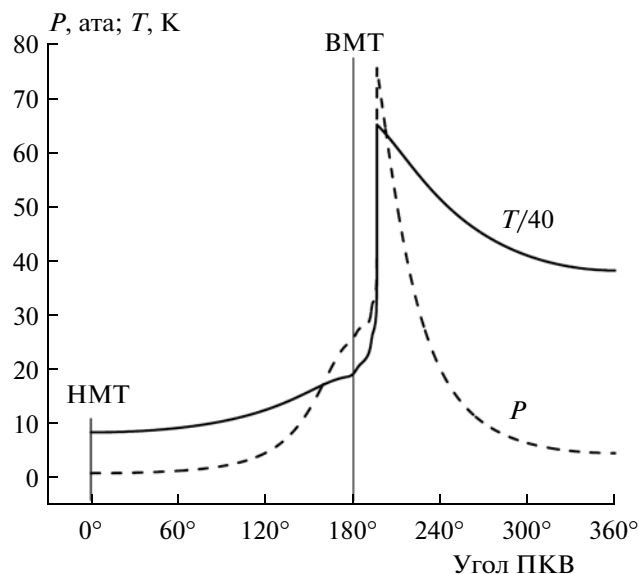


Рис. 8. Расчетные индикаторные диаграммы $P(t)$ и $T(t)$ для стехиометрической воздушной смеси $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при сжатии, самовоспламенении, горении и расширении в ДВС; начальное давление $P_0 = 1$ ата, начальная температура $T_0 = 340$ К, степень сжатия $\varepsilon = 11$, $n = 600$ мин $^{-1}$.

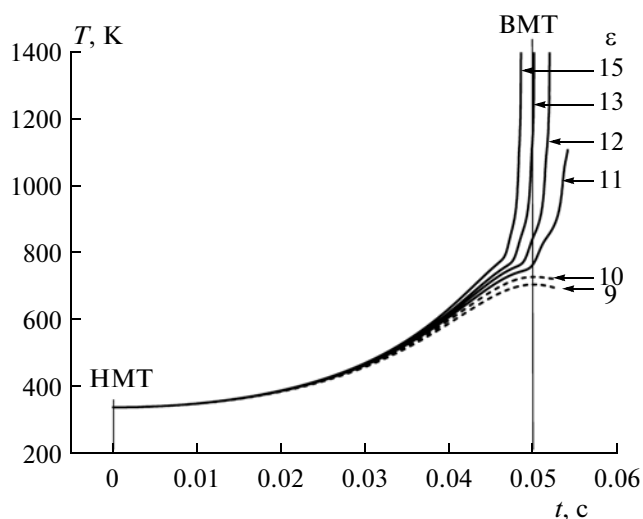


Рис. 9. Расчетные зависимости температуры T от времени при разной степени сжатия стехиометрической воздушной смеси $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$; $P_0 = 1$ ата, $T_0 = 340$ К, $n = 600$ мин $^{-1}$.

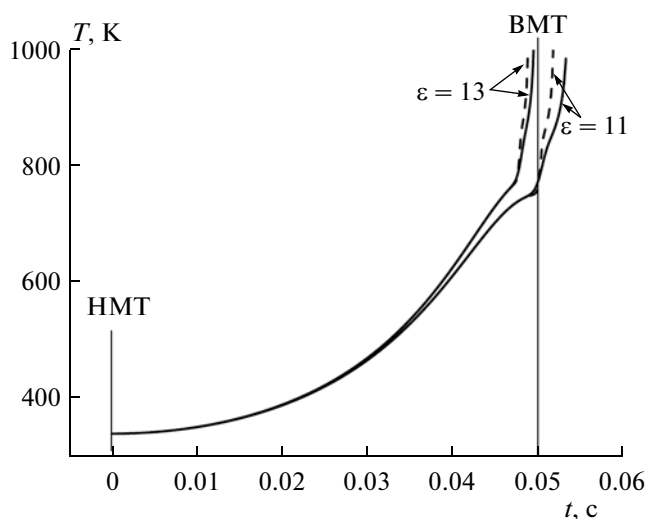


Рис. 10. Расчетные зависимости температуры T от времени при разной степени сжатия стехиометрических воздушных смесей $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ (штриховая линия) и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ (сплошная); $P_0 = 1$ ата, $T_0 = 340$ К, $n = 600$ мин $^{-1}$.

в процессе расширения объема (максимум давления и температуры достигается при $\sim 195^\circ$ ПКВ).

На рис. 9 представлены расчетные зависимости температуры в цилиндре ДВС от времени при разных значениях степени сжатия. При $\varepsilon \sim 11$ наблюдается частичное реагирование смеси в голубом пламени без наступления горячего взрыва, а при более высоких степенях сжатия смесь самовоспламеняется с горячим взрывом.

На рис. 10 и 11 представлено сравнение расчетных зависимостей температуры от времени (рис. 10) и момента самовоспламенения t_i от степени сжатия (рис. 11) для стехиометрических воздушных смесей $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ при прочих равных условиях. Видно, что антидетонационные свойства у изобутана выше, чем у n -бутана. На практике антидетонационную стойкость топлива описывают значением так называемого октанового числа (ОЧ),

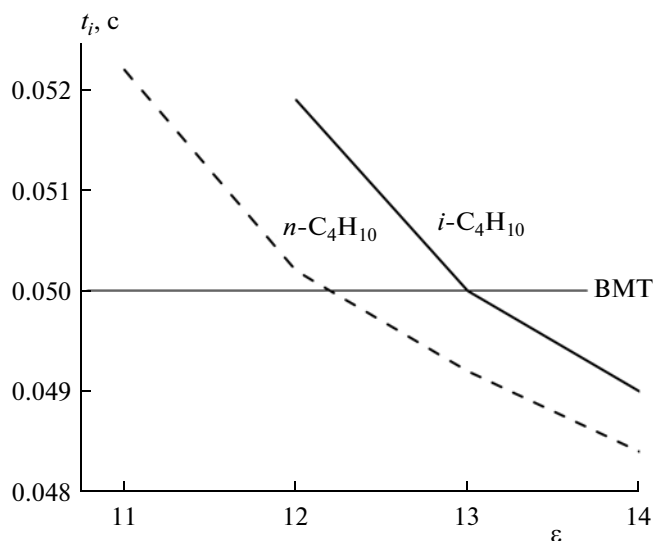


Рис. 11. Расчетные зависимости момента самовоспламенения t_i от степени сжатия ϵ для стехиометрических воздушных смесей $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$; $P_0 = 1$ ата, $T_0 = 340$ К, $n = 600$ мин⁻¹.

определяемого по специальной методике. По справочным данным ОЧ у $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ приблизительно равно 91, а у $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ — 99. Таким образом, разработанный ДКМ правильно предсказывает и такое свойство изобутана, как антидетонационная стойкость. Относительно небольшое различие в ОЧ у $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ и $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ объясняет ту небольшую разницу, которая обнаруживается в экспериментах и расчетах в ходе самовоспламенения n -бутана и изобутана. Но это соответствует известному положению, что изомеризованные алканы окисляются труднее, чем нормальные, так как метильные группы изомеров экранируют от окисления “линейную” часть изомеризованного углеводорода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные проверки ДКМ окисления и горения изобутана позволяют сделать вывод о том, что и неэкстенсивный принцип построения ДКМ с целевым ограничением многообразия продуктов и реакций, но с сохранением основных каналов процесса и принципиально важных типов элементарных актов, и полученная на его основе кинетика реакций в общем правильны и непротиворечивы. Важнейшая особенность нового ДКМ — описание многостадийности в виде холодных и голубых пламен с последующим горячим взрывом при низкотемпературном самовоспламенении.

Выполненные расчеты процессов самовоспламенения и горения воздушных смесей изобутана оказались в удовлетворительном качественном и количественном согласии с известными экспериментальными данными в широком диапазоне изменений коэффициента избытка горючего, начальных температур и давлений. Применение

ДКМ в расчетах, моделирующих работу ДВС, показало, что при определенных условиях в ДВС перед самовоспламенением могут возникать голубые пламена, приводящие к частичному реагированию смеси. Такие явления многократно наблюдались в эксперименте. Построенный ДКМ удовлетворительно описывает антидетонационные свойства изобутана и n -бутана: как и в эксперименте, у изобутана они выше, чем у нормального бутана.

Файл с данными кинетического механизма будет размещен на сайте www.combex.ru.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по государственному контракту № 14.609.21.0001 (идентификатор контракта RFMEFI57914X0038) “Разработка технологии создания гидрореактивной тяги в водометных двигателях высокоскоростных водных транспортных средств и создание стендового демонстрационного образца гидрореактивного импульсно-детонационного двигателя” в рамках федеральной целевой программы “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 гг.”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколик А.С. // Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. М.: Изд-во. АН СССР, 1960.
2. Egerton A.C., Moore N.P.W., Lyn W.T. // Nature. 1951. V. 167. P. 191.
3. Healy D., Donato N.S., Aul C.J. et al. // Combust. and Flame. 2010. V. 157. P. 1540.
4. Machrafi H., Cavadias S. // Ibid. 2008. V. 155. P. 557.
5. Басевич В.Я., Веденев В.И., Фролов С.М., Романович Л.Б. // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 11. С. 87.

6. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Там же. 2007. Т. 26. № 7. С. 37.
7. Басевич В.Я., Фролов С.М. // Успехи химии. 2007. Т. 76. № 9. С. 927.
8. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 8. С. 59.
9. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Там же. 2010. Т. 29. № 7. С. 71.
10. Басевич В.Я., Беляев А.А., Посвянский В.С., Фролов С.М. // Там же. № 12. С. 40.
11. Басевич В.Я., Беляев А.А., Медведев С.Н., Посвянский В.С., Фролов С.М. // Там же. 2011. Т. 30. № 12. С. 9.
12. Басевич В.Я., Беляев А.А., Посвянский В.С., Фролов С.М. // Там же. 2013. Т. 32. № 4. С. 87.
13. Downs D., Street J.S., Wheeler R.W. // Fuel. 1953. V. 32. P. 270.
14. Gaydon A.G., Moore N.P.W., Simonson J.P. // Proc. Roy. Soc. 1955. V. A230. P. 1.
15. Лидский Б.В., Нейгауз М.Г., Басевич В.Я., Фролов С.М. // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 3. С. 51.
16. Oehlschlaeger M.A., Davidson D.F., Herbon J.T., Hanson R.K. // Intern. J. Chem. Kinet. 2004. V. 36. № 2. P. 67.
17. Беляев А.А., Посвянский В.С. // Алгоритмы и программы. Информ. бюлл. гос. фонда алгоритмов и программ СССР. 1985. № 3. С. 35.
18. Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion. Springer-Verlag, 1996.
19. Bosschaart K.J., de Goeij L.P.H. // Combust. and Flame. 2004. V. 136. P. 261.
20. Басевич В.Я., Беляев А.А., Гоц А.Н. и др. // Горение и взрыв / Под. ред. Фролова С.М. М.: Торус Пресс, 2012. Вып. 5. С. 167.