

# Calculation of Induction Time during High-Temperature Oxidation of Methane

N.E. Afonina<sup>1</sup>, G.D. Smekhov<sup>1</sup>, A.N. Khmelevsky<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,  
Moscow, 119192, Russia,*

<sup>2</sup>*Central Aero Hydrodynamic Institute,  
Zhukovsky, 140180, Russia*

afonina@imec.msu.ru , smekhov@imec.msu.ru, khmelevsky@imec.msu.ru

## Abstract

A study of a methane-oxygen mixture ignition diluted with nitrogen by numerical simulation was carried out. Temporal sweeps of the concentrations of the components CH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, OH, and O<sub>2</sub> were obtained for three variants of the combustible mixture in a wide temperature range  $T = (700 \div 2500)$  K. The temperature regions of ignition with the mechanism of chain branching of active radicals are established. Ignition temperatures in these areas are determined. In the found temperature regions for the three variants of the mixtures, the induction time and the corresponding given induction time were calculated for the three signs of ignition. A satisfactory agreement between the values of the calculated induction time and the published measured values was established.

Keywords: methane - oxygen mixture, induction time, radicals.

Main results are:

1. A method was developed for calculating the ignition delay time (induction time) of methane-oxygen mixtures diluted with nitrogen (methane-air) mixtures.
2. In the calculations, time reversals of the concentrations of the components CH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, OH, and O<sub>2</sub> were obtained for three variants of the combustible mixture in a wide temperature range  $T = (700 \div 2500)^\circ$  K.
3. The temperature regions of ignition with the mechanism of chain branching of active radicals are established. Ignition temperatures in these areas are determined.
4. In the found temperature regions for the considered variants of the mixtures, induction times and corresponding reduced times are calculated for three ignition indications.
5. Calculated and reduced to standard values of induction times coincide with average values of reduced times of primary published experimental values.

УДК 541.126.2+539.196

# Расчет времени индукции при высоко-температурном окислении метана

Н.Е. Афонина<sup>1</sup>, Г.Д. Смехов<sup>1</sup>, А.Н. Хмелевский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Россия, Москва, 119192, Мичуринский пр-т, 1

<sup>2</sup>Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского,  
Россия, Моск. обл., Жуковский, 140180

afonina@imec.msu.ru, smekhov@imec.msu.ru, khmelevsky@imec.msu.ru

## Аннотация

Проведено исследование процесса воспламенения метано-кислородной смеси, разбавленной азотом методом численного моделирования. В расчётах получены временные развёртки концентраций компонентов  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{OH}$  и  $\text{O}_2$  для трёх вариантов горючей смеси в широком диапазоне температур  $T = (700 \div 2500)$  К. Установлены температурные области воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов. Определены температуры воспламенения в этих областях. В найденных температурных областях для трёх вариантов смесей вычислено время индукции и соответствующее ему приведённое время индукции по трём признакам воспламенения. Установлено удовлетворительное совпадение значений рассчитанного времени индукции с опубликованными измеренными значениями.

Ключевые слова: метано-кислородная смесь время индукции, радикалы

## 1. Введение

Метан является основным компонентом природного газа и широко используется во многих технических устройствах. Это обуславливает постоянный интерес к исследованию его свойств с целью повышения эффективности сгорания. Одним из основных свойств горючей смеси газа, включающей окислитель, является время задержки воспламенения (время индукции) смеси. Особый интерес представляет смесь, в которой окислителем является кислород и, в частности, стандартный воздух. В обзоре [1] приведены сведения об экспериментальных и теоретических методах исследования горючих смесей с различными горючими и окислителями, а также о полученных результатах, в том числе и для метана. Особую ценность представляет проведенное обобщение многочисленных экспериментальных величин времени индукции в метано-кислородных смесях. В настоящей работе рассматриваются метано-кислородные смеси, разбавленные азотом. Для краткости в изложении можно говорить о метано-воздушных смесях, если учесть, что стандартный воздух может быть обогащён кислородом или азотом.

## 2. Высокотемпературное воспламенение и горение метано-воздушных смесей

### 2.1. Цепные реакции разветвления

Окисление метана, как и других углеводородов, происходит в системе цепных реакций с участием активных частиц – атомов и радикалов. Цепные реакции были впервые введены в

рассмотрение и изучены Н.Н. Семёновым. [2] Описание цепных реакций и результаты их исследования приведены в монографии [3]. В водородно–кислородных смесях основной реакцией в процессе цепного разветвления активных радикалов является реакция



в которой на один исчезнувший в реакции монарадикал (атом H) образуется три монарадикала: OH и бирадикал O, эквивалентный двум монарадикалам. Эта реакция и другие происходят и в метано-кислородных средах, и поэтому должны учитываться при горении метана. Но при окислении метана происходит специфическая реакция разветвления



в которой на один исчезнувший монарадикал CH<sub>3</sub> возникает только два монарадикала, так как бирадикал O эквивалентен двум монарадикалам, а другой образующейся частицей является молекула CH<sub>3</sub>O. В результате коэффициент размножения радикалов в этой реакции оказывается меньше, чем в реакции (1) водородной схемы. Другим отличием является относительно более медленное протекание этой реакции разветвления в сравнении с реакцией (1). Эти особенности обуславливают в случае горения метана менее яркое проявление свойств цепного разветвлённого процесса окисления, чем при горении водорода.

Механизм окисления метана с реакцией (2) действует, например, при температуре 2000°K и соответствует высокотемпературному (быстрому) воспламенению в режиме цепного разветвления радикалов. При меньших температурах может происходить медленное окисление метана, при котором черты цепного разветвлённого механизма отсутствуют. Для описания такого типа процессов Н.Н. Семёновым разработана теория реакций с вырожденным цепным разветвлением.

## 2.2. Модель реагирующей среды и расчёт химической кинетики

В этом исследовании рассматривался блок реакций и соответствующая база данных о константах скорости этих реакций, приведенные в работе [4]. В блоке содержатся сведения о 196 реакциях с участием 32-х видов частиц. При этом брались константы скорости, приведенные для реакций, идущих в прямом направлении. Константы скорости обратных реакций рассчитывались с использованием термодинамического соотношения между константами скорости этих реакций.

В настоящее время в исследованиях процессов воспламенения и горения горючих смесей нашёл широкое применение метод математического моделирования [1]. В детальных схемах исследований при решении системы дифференциальных уравнений химической кинетики можно получить информацию о наблюдаемых в экспериментах величинах и делать соответствующие выводы. Организация и проведение моделирования часто приобретает черты эксперимента и вполне уместно говорить о таком моделировании, как о численном эксперименте.

При численном моделировании использовалась система кинетических уравнений для многокомпонентного реагирующего газа, предложенная и применявшаяся ранее в НИИ механики МГУ [5–14].

## 3. Методика численного моделирования

### 3.1. Начальные параметры метано-воздушных смесей

В работе использовались смеси метана и кислорода, разбавленные азотом (для краткости в изложении – метано-воздушные смеси). Начальный состав газа удобно отражать величиной содержащейся в нём относительной доли  $s$  метана и кислорода CH<sub>4</sub>–O<sub>2</sub> (в абсолютных или относительных величинах) и коэффициентом избытка горючего  $f$ , определяемом отношением двух величин – отношения концентраций горючего и окислителя в рассматриваемой смеси к отношению этих величин в стехиометрическом составе

$$f = \frac{[\text{CH}_4] \cdot [\text{O}_2]_{st}}{[\text{CH}_4]_{st} \cdot [\text{O}_2]}, \quad (3)$$

в стехиометрическом составе отношение  $\frac{[\text{CH}_4]_{st}}{[\text{O}_2]_{st}} = \frac{1}{2}$ .

Если рассматривать относительный мольный состав смеси только из метана и кислорода и учесть, что при этом сумма их мольных долей  $X_{\text{CH}_4} + X_{\text{O}_2} = 1$ , то начальный состав смеси можно описать выражением

$$s \left( \frac{f}{2+f} \text{CH}_4 + \frac{2}{2+f} \text{O}_2 \right) + (1-s) \text{N}_2, \quad (4)$$

(по определению для стехиометрической смеси  $f = 1$ ).

### 3.2. Признаки воспламенения

В экспериментальных исследованиях процесса воспламенения в водородно-кислородных смесях часто использовались эмиссионный и абсорбционный методы для регистрации в конечном счёте концентрации радикала  $\text{OH}$ , находящегося в электронно-возбуждённом или основном состояниях. Было обнаружено, что в процессе воспламенения концентрация этого радикала вначале достигает некоторого максимального значения, после которого, убывая, приходит к равновесной величине. В этом случае временем индукции считалось время достижения максимума концентрации этого компонента. В работах [10–14], выполненных в НИИ механики МГУ, отражены результаты численных экспериментов для расчёта времени индукции в водородно-кислородных смесях, удовлетворительно описывающих результаты известные и полученные в Институте. Разработанные при этом методики регистрации и расчёта времени индукции использованы при исследовании метано-воздушных смесей.

В работе [4], посвящённой исследованию механизма образования окислов азота в воздухе показывается, что при высоких температурах в начале химического процесса преобразования веществ происходит полный распад метана. При этом концентрации воды  $\text{H}_2\text{O}$ , окиси  $\text{CO}$  и двуокиси  $\text{CO}_2$  углерода приближаются к своим конечным значениям, а концентрации многих компонентов, в том числе радикалов  $\text{CH}_3$  и  $\text{OH}$ , играющих важную роль в цепном механизме воспламенения горючей смеси, достигают в этот период своей максимальной величины и затем спадают до равновесных значений. При температуре  $2000^\circ\text{K}$  эти изменения происходят в интервале  $(2 \div 4) \times 10^{-5}$  с.

Численное моделирование показало, что в метано-воздушных смесях на временных развёртках концентраций действительно обнаруживаются максимумы концентраций радикалов  $\text{CH}_3$  и  $\text{OH}$ , положения которых близки к началу быстрого распада молекул метана  $\text{CH}_4$ . При температуре  $2000\text{K}$  и других параметрах из [4] время достижения максимумов концентрации этих компонентов находится в указанном интервале. Поэтому образование отмеченных максимумов и начало резкого уменьшения концентрации метана можно считать признаками воспламенения. Возможным временем индукции следует считать время достижения максимумов и время, при котором остаётся некоторая часть начального значения концентрации метана. Для определённости в работе фиксировалось время, когда остаётся  $1/10$  часть его исходного количества.

### 3.3. Экспериментальные значения времени индукции

Горение метана интенсивно изучалось экспериментально. Как правило, измерялись времена задержки воспламенения при различных значениях начальных параметров горючей смеси. Для сравнения результатов различных работ и использования полученных величин

научной общественностью желательно было разработать метод, позволяющий представить измеренные времена индукции в виде величин, приведённых к стандартным значениям рассматриваемых параметров. Такой метод был разработан и представлен в [1]. В этом методе в качестве стандартных значений относительных мольных долей исходной смеси считается  $\text{CH}_4 - 0.1$ ,  $\text{O}_2 - 0.2$ ,  $\text{M} - 0.7$ ; инертным разбавителем  $\text{M}$  является аргон  $\text{Ar}$ ; стандартным давлением –  $P = 1$  атм.

Таким образом, в стандартном состоянии отношения концентраций метана и кислорода к концентрации инертного разбавителя равны

$$\frac{[\text{CH}_4]}{[\text{M}]} = \frac{1}{7}, \quad \frac{[\text{O}_2]}{[\text{M}]} = \frac{2}{7} \quad (5)$$

Авторы метода на основании анализа многих работ получили обобщённую формулу для времени индукции метана в кислороде в присутствии инертного разбавителя (в основном аргона), справедливую в диапазоне температур ( $700 \div 2500$ ) К,

$$\tau = \frac{\left(\frac{[\text{CH}_4]}{[\text{M}]}\right)^{0.3} \left(\frac{[\text{O}_2]}{[\text{M}]}\right)^{-1.0} P^{-0.7}}{2.5 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{25000}{T}\right) + 2.5 \times 10^4 \exp\left(-\frac{10000}{T}\right)} \quad (6)$$

(формулы веществ в квадратных скобках – их концентрации;  $P$  – давление в атмосферах;  $\tau$  – время индукции в секундах).

Средние приведённые значения всех измерений при заданных температурах получаются из формулы при подстановке в неё отношений концентраций компонентов и давления в стандартном состоянии. Приведённое время индукции для заданного измерения получается умножением измеренного времени на отношение величины выражения в числителе этой формулы для стандартного состояния на величину этого выражения в условиях заданного эксперимента. В итоге, для более чем 50 смесей в подавляющем большинстве величины приведённых значений измеренных времён индукции отличались от средних значений, вычисленных по приведённой формуле не более чем на 50 процентов.

На рис. 1, приведенном в [1], пунктирной кривой показаны средние приведённые значения всех измерений при заданных температурах, сплошные кривые определяют область, расположенную между ними, в которой оказывается большинство приведённых значений измеренных величин.

В численных экспериментах с использованием метано-кислородных смесей, разбавленных азотом (метано-воздушных смесей), применялась методика аналогичная методике в исследовании водородно – кислородных смесей. В качестве стандартных были приняты такие же значения начальных параметров:  $P_n = 1$  атм,  $s_n = 0.15$ ,  $f_n = 0.3$ . Рассчитывались зависимости концентраций различных компонентов газа от времени при фиксированных (заданных) значениях начальных параметров смеси  $P, s, f$  и  $T$ , при этом определялось по определённым признакам время индукции. В расчётах рассматривалось три варианта наборов начальных параметров смесей в области температур ( $700 \div 2500$ )°К. В варианте 1 давление  $P = 1$  атм,  $s = 0.15$ ,  $f = 0.3$ ; в варианте 2 давление  $P = 0.5$  атм,  $s = 0.1$ ,  $f = 2.0$ ; в варианте 3 давление  $P = 3$  атм,  $s = 0.3$ ,  $f = 0.3$ . Таким образом, время индукции рассчитывалось в изотермическом режиме воспламенения и горения горючей смеси при заданном давлении.

В первом варианте начальными параметрами газа являлись их значения в стандартном состоянии, во втором варианте параметры выбраны так, чтобы время индукции увеличивалось по отношению ко времени в первом варианте при изменении каждого параметра, в третьем варианте, наоборот, уменьшалось.

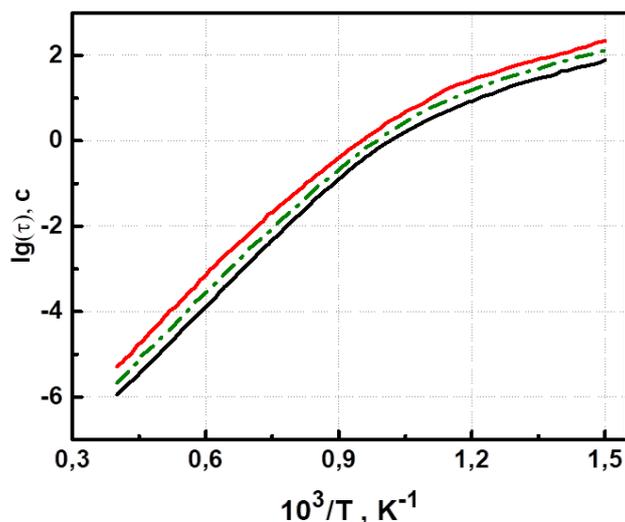


Рис. 1.

Важно отметить следующее: считалось, что разбавитель метано-кислородной смеси азот  $N_2$  является таким же инертным компонентом, как и аргон Ar. Основания для этого имеются. Азот очень прочная молекула, и в рассматриваемом диапазоне температур она практически не распадается и, как это отмечено в [4], и видно из проведенных расчётов, концентрация азота в процессе воспламенения горючей смеси изменяется совсем незначительно.

### 3.4. Временные развёртки отдельных компонентов

На рис. 2–10 приведены графики, демонстрирующие изменение концентраций компонентов  $CH_3$ ,  $CH_4$ , OH и  $O_2$  от времени (временные развёртки) в вариантах 1–3 при указанных в них температурах. По осям X – время в секундах, по осям Y – относительные мольные доли. На кривой для  $CH_4$  горизонтальным отрезком прямой показана 1/10 часть начального значения концентрации этого компонента. На оси абсцисс вертикальными отрезками прямых показаны положения максимумов концентраций  $CH_3$  и OH, а также положение фиксируемой концентрации  $CH_4$ . Эти положения являются временами индукции по соответствующим признакам для указанных компонентов.

На рис. 2–4 показаны развёртки в варианте 1. Из рисунков видно, что в диапазоне температур (2000 ÷ 1250)K времена индукции по всем трём компонентам близки друг к другу, а значение времени индукции по  $CH_4$  находится в промежутке между значениями по  $CH_3$  и OH.

Однако на интервале температуры 50 K от 1250 K до 1200 K происходит кардинальное изменение процесса воспламенения в горючей смеси. Резкого уменьшения концентрации метана вблизи времени индукции по трём компонентам не происходит. Концентрация метана медленно уменьшается от начального значения и отметки в 1/10-ю часть начального значения совсем не достигает. Можно предположить, что в рассмотренном интервале температур механизм цепного разветвления активных радикалов прекращается и, возможно, заменяется цепным вырожденным механизмом.

На рис. 5–7 показаны аналогичные временные развёртки концентраций компонентов в варианте 2, а на рис. 8–10 развёртки в варианте 3. В варианте 2 отличие заключается в изменении положения интервала температуры в 50 K, в котором происходит смена режима воспламенения. В этой смеси это происходит в диапазоне от 1450 K до 1400 K. В варианте 3 смена режима воспламенения происходит, как и в варианте 1, в диапазоне от 1250 K до 1200 K.

Таким образом, температуры 1250 K и 1450 K для соответствующих смесей являются температурами воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов. Температуры же 1200 K и 1400 K в этих смесях оказываются верхними значениями низкотемпературной области медленного воспламенения с механизмом вырожденного цепного разветвления радикалов.

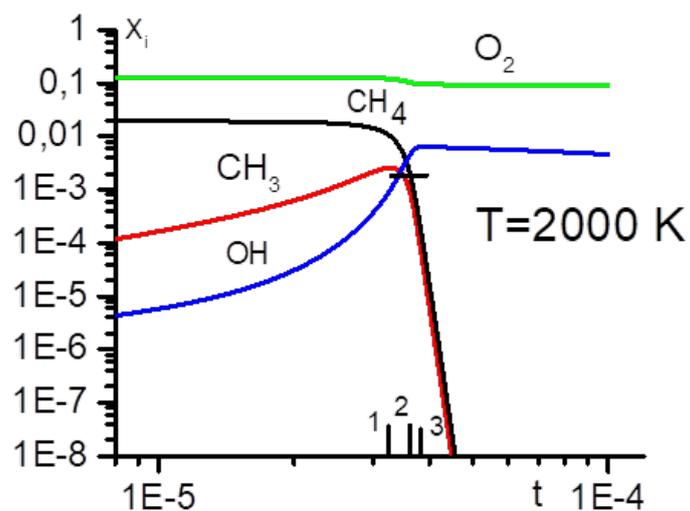


Рис. 2

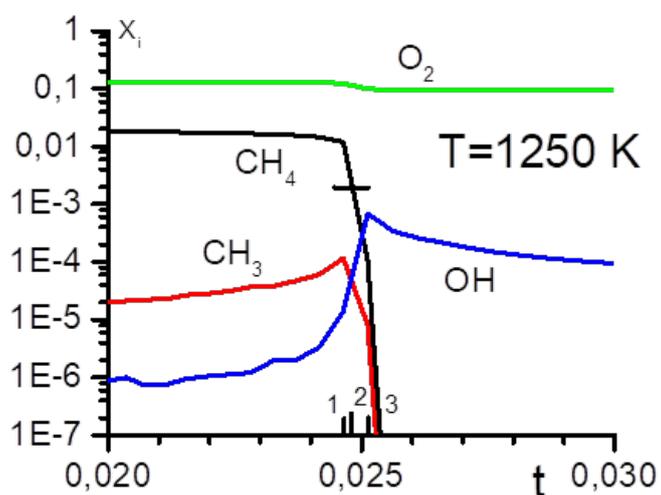


Рис. 3

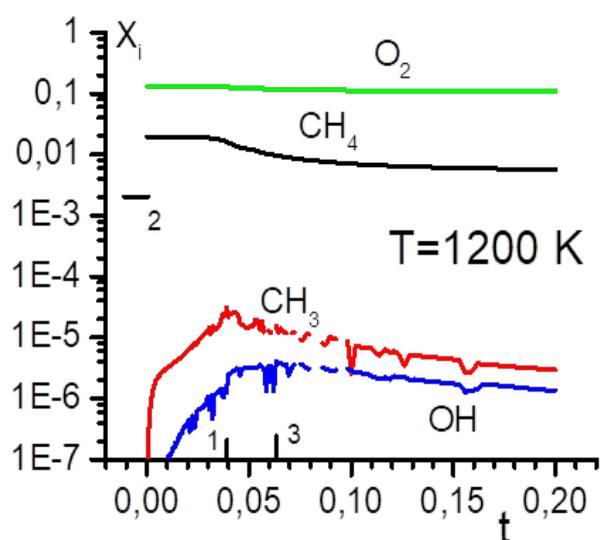


Рис.4

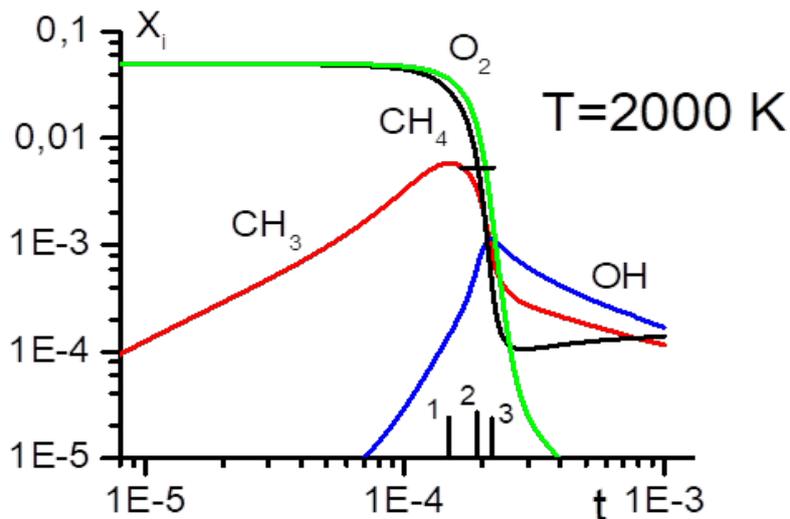


Рис.5

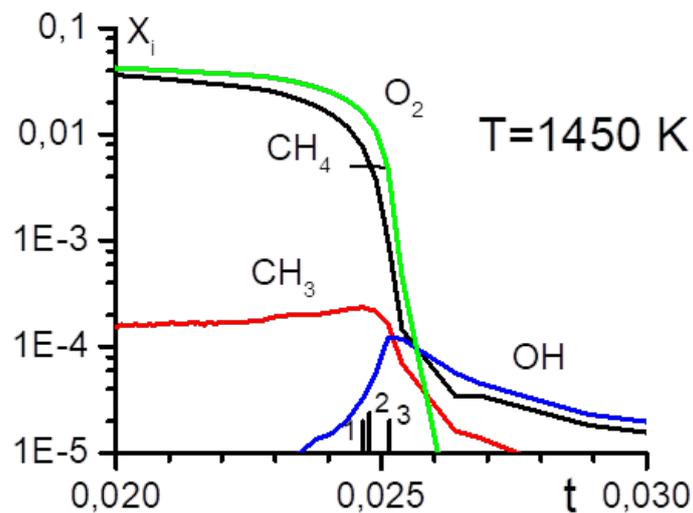


Рис.6

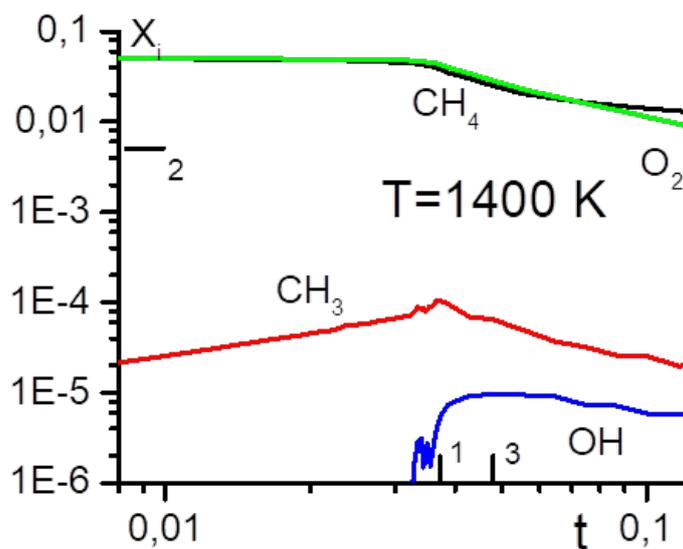


Рис. 7

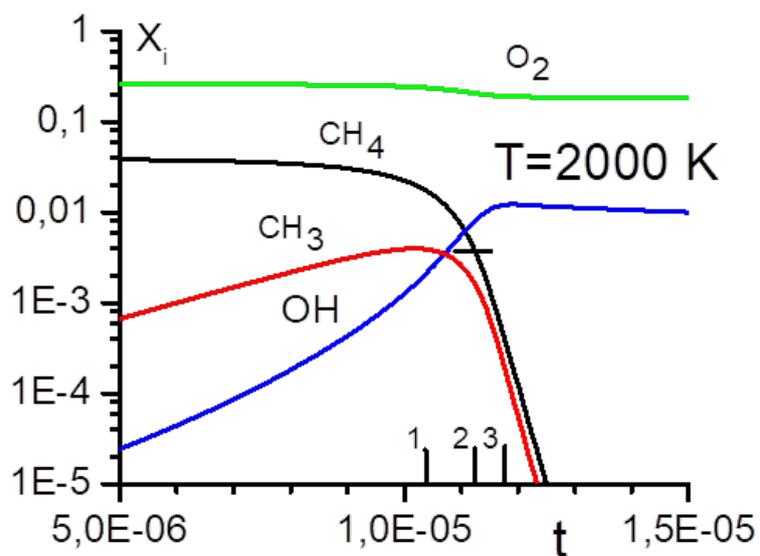


Рис 8

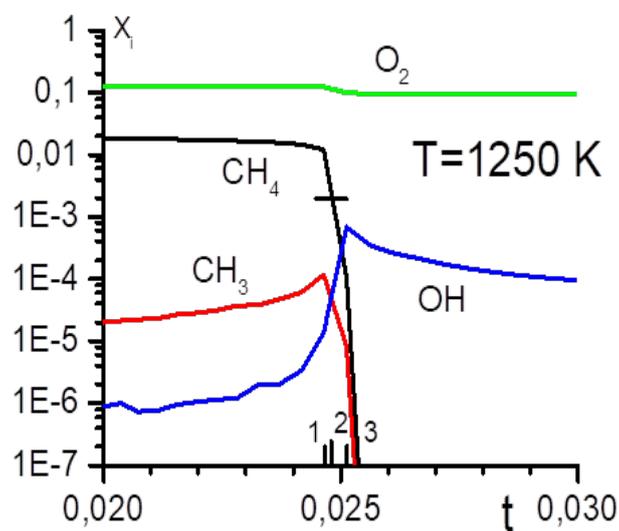


Рис. 9

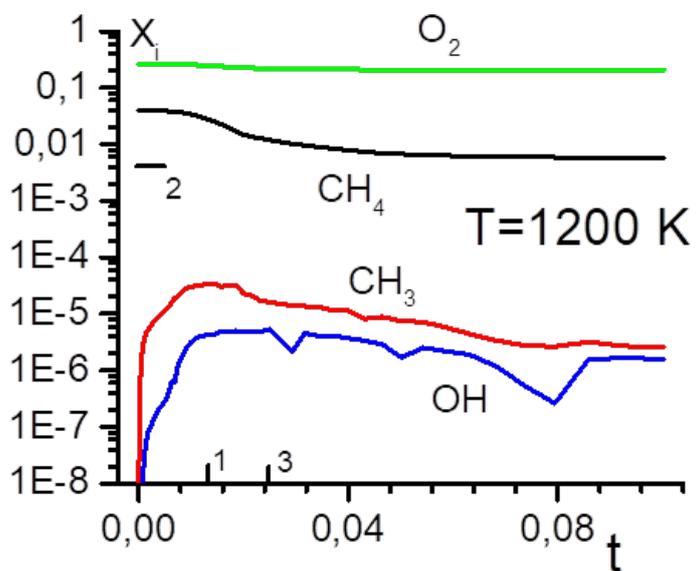


Рис. 10

Следовательно, использованные признаки воспламенения в области быстрого воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов не приемлемы для областей с медленным окислением метана. В этих областях максимумы концентрации радикалов  $\text{CH}_3$  и  $\text{OH}$  также образуются, но не могут считаться временем индукции. Расчёты показали, что в области медленного воспламенения горючая смесь продолжает расходоваться и практически прекращается при температурах меньших  $1000^\circ\text{K}$ . Определение признаков воспламенения и вычисление времени индукции в областях медленного воспламенения метана требует отдельного рассмотрения.

### 3.5. Рассчитанное и опубликованное измеренное время индукции

В численных экспериментах рассчитывалось время индукции для трёх вариантов исходных горючих смесей и для трёх признаков их воспламенения по компонентам  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$  и  $\text{OH}$ . Результаты расчётов отражены на рис. 11–19, на которых приведены зависимости времени индукции от обратного значения температуры. На рисунках представлены также сплошные и пунктирные кривые из рис. 1. На оси ординат время индукции отображено символом  $\tau$ . Рисунки демонстрируют процесс расчёта приведённых значений времени индукции от первичных рассчитанных значений. На всех рисунках сплошными символами отмечены времена индукции в высокотемпературной области окисления метана, в которой происходит процесс цепного разветвления активных радикалов. В низкотемпературной области окисления светлыми пустыми символами показаны времена достижения максимального значения концентраций радикалов  $\text{CH}_3$  и  $\text{OH}$ . Первичные времена индукции в смеси 1 отмечаются голубыми символами, в смеси 2 – зелёными, в смеси 3 – синими, приведённые времена – красными. Величина  $d_{ij}$  указывает номера признака воспламенения ( $i$ ) и смеси ( $j$ ).

На рис. 11–13 сплошными символами отмечены времена индукции по времени достижения максимального значения концентрации радикала  $\text{CH}_3$  в трёх смесях. Важно отметить, что в смеси 1 при стандартных значениях начальных компонентов в диапазоне температур ( $2000 \div 1250$ ) К первичные времена индукции в точности соответствуют пунктирной кривой рис. 11, а приведённые величины совпадают с самими величинами. Это видно на указанном рисунке, на котором символ первичного времени индукции показан на фоне несколько большего по размерам символа приведённого времени. В смеси 2 кривые первичных времен индукции проходят заметно выше области их приведённых значений, приведённые времена в диапазоне температур ( $2500 \div 1450$ ) К полностью соответствуют средним значениям величин на рис. 12. В смеси 3 кривые первичных времен индукции наоборот опускаются ниже области их приведённых значений, приведённые же времена в диапазоне температур ( $2500 \div 1250$ ) К полностью соответствуют средним значениям величин на рис. 13.

На рис. 14–16 показаны зависимости времени индукции от обратного значения температуры по признаку молекулы  $\text{CH}_4$  в смесях 1–3 (фиксация времени, когда остаётся 1/10 часть исходного количества метана). Рисунки демонстрируют важную особенность этих зависимостей. Поскольку в области медленного воспламенения признак воспламенения отсутствует, на рисунках отражены только времена индукции в области быстрого воспламенения, показанные сплошными символами. Рисунки показывают хорошее соответствие приведённого времени индукции среднему значению приведённого времени, измеренному в экспериментах [2]. В смеси 1, как и по признаку воспламенения по радикалу  $\text{CH}_3$ , приведённые величины совпадают с самими величинами. На рис. 14 символ приведённого времени индукции показан на фоне несколько большего по размерам символа первичного времени.

На рис. 17–19 сплошными символами отмечены времена индукции по времени достижения максимального значения концентрации радикала  $\text{OH}$  в трёх смесях. Показанные на них зависимости времени индукции от температуры аналогичны таким же зависимостям по признакам воспламенения радикала  $\text{CH}_3$ . В смеси 1 приведённые величины совпадают с самими величинами. На рис. 17 виден только символ приведённого времени индукции, так как он скрывает символ первичного времени, имеющего несколько меньший размер. Следует отметить, что в смеси 1 для всех признаков воспламенения при температурах ( $2500 \div 2000$ ) К первичные и приведённые времена индукции, оставаясь во внутренней области сплошных кривых, несколько выше средних значений.

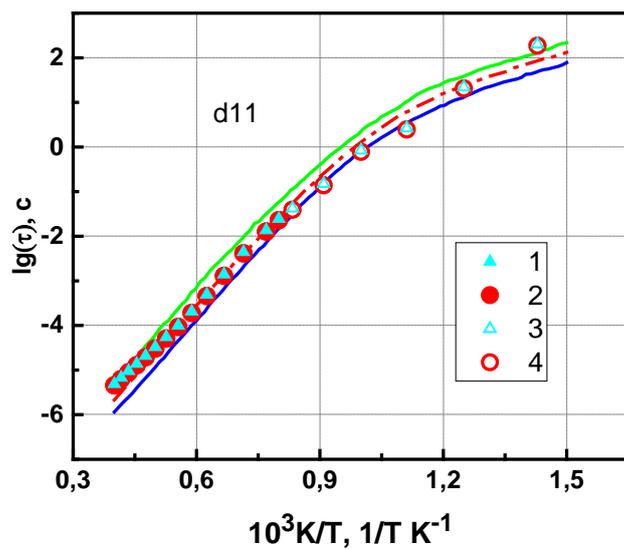


Рис.11

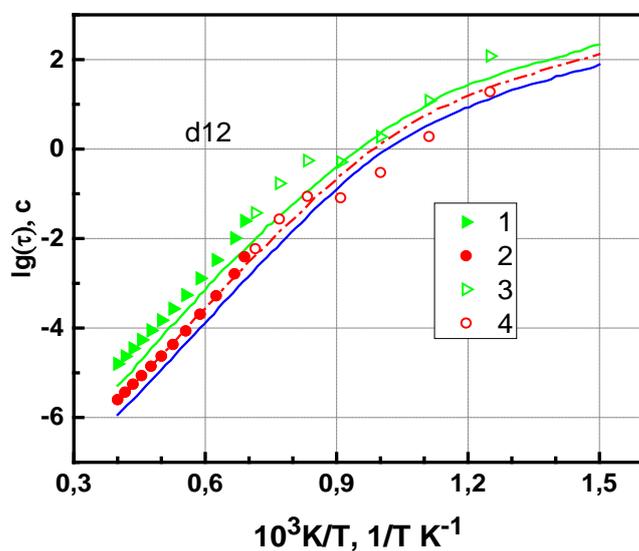


Рис 12

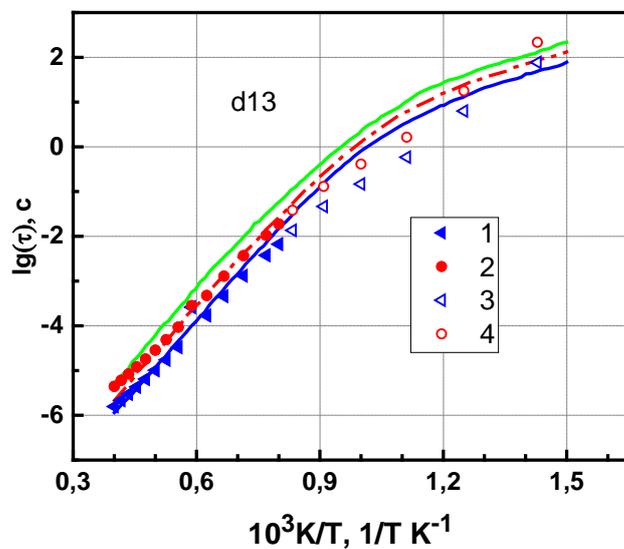


Рис 13

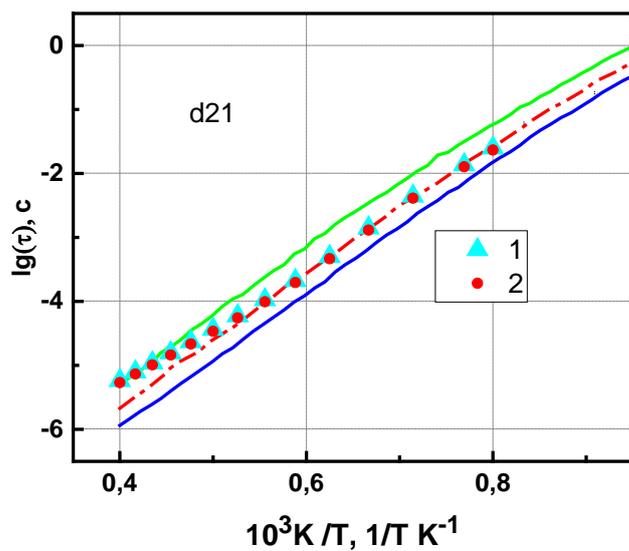


Рис. 14

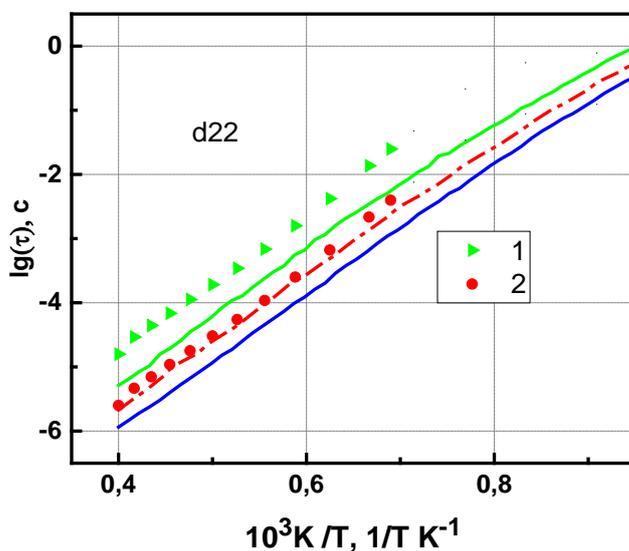


Рис. 15

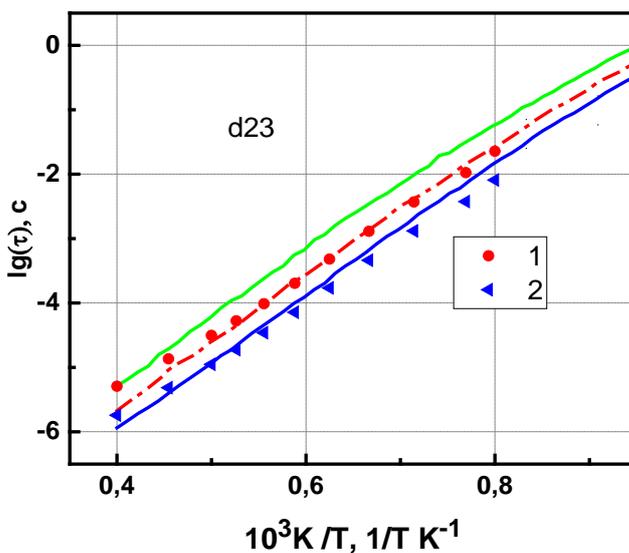


Рис. 16

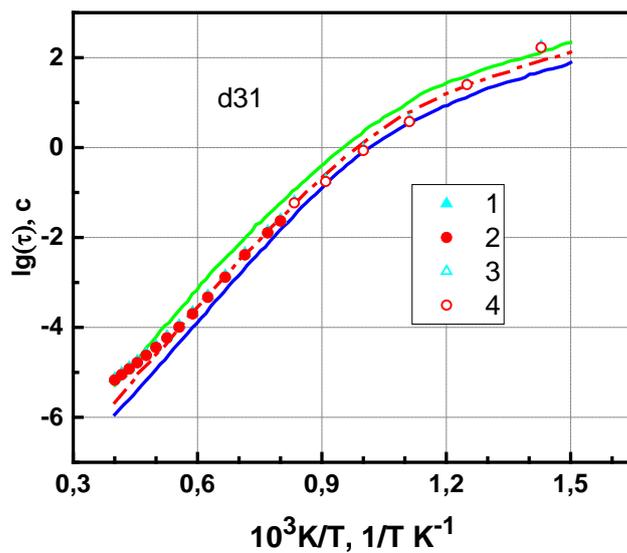


Рис. 17

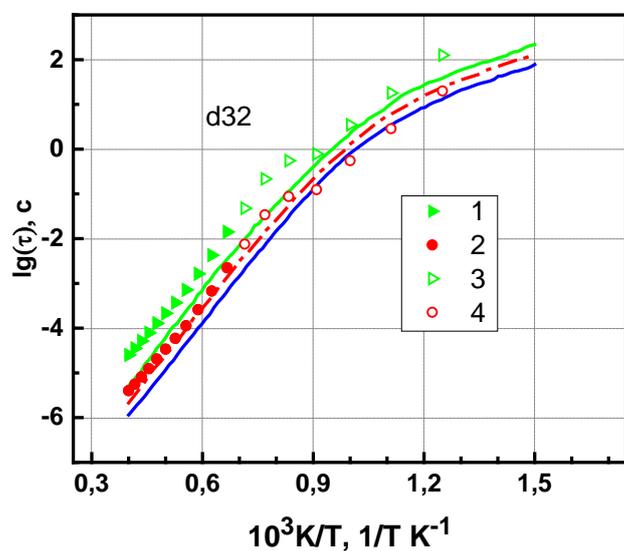


Рис. 18

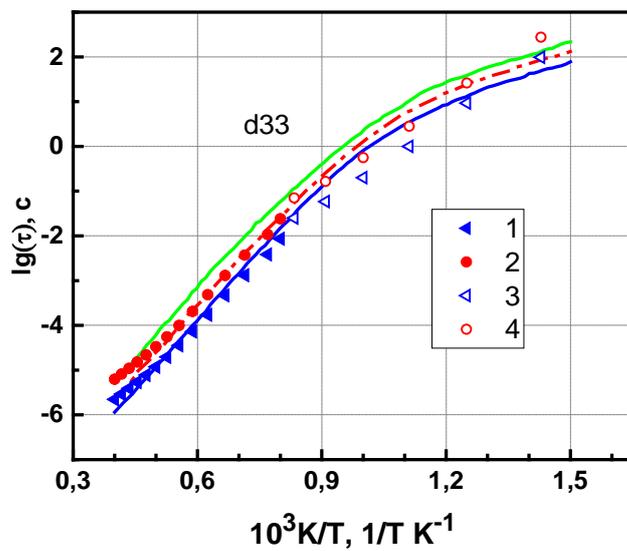


Рис. 19

Таким образом, проведенное численное моделирование метано-кислородных смесей разбавленных азотом позволило установить температурные области воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов. В этих диапазонах температуры время индукции в смеси 1 при стандартных значениях параметров принятых в [1] и [14] одинаковы. Вычисленные времена индукции в смесях 2 и 3 и приведённые к стандартным значениям по методике [1] совпадают со средними значениями приведённого времени первичных опубликованных экспериментальных величин. Это позволяет сделать более общий вывод о совпадении вычисленного времени индукции с измеренным в опытах.

Из приведенных рисунков видно, что в области медленного окисления времена индукции (первичные и приведённые), отмеченные пустыми символами, на зависимостях от температуры изменяются нерегулярно и не столь чётко, как на зависимостях в области с механизмом цепного разветвления радикалов, отмеченные сплошными символами. Приведённые времена не соответствуют на рисунках пунктирной кривой. Это подтверждает сделанный выше вывод, что использованные признаки воспламенения в области быстрого воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов не приемлемы для областей с медленным окислением метана.

#### 4. Заключение

1. Разработана методика расчёта времени задержки воспламенения (времени индукции) метано-кислородных смесей, разбавленных азотом (метано-воздушных) смесей.
2. В расчётах получены временные развёртки концентраций компонентов  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{OH}$  и  $\text{O}_2$  для трёх вариантах горючей смеси в широком диапазоне температур  $T = (700 \div 2500)^\circ\text{K}$ .
3. Установлены температурные области воспламенения с механизмом цепного разветвления активных радикалов. Определены температуры воспламенения в этих областях.
4. В найденных температурных областях для рассмотренных вариантов смесей вычислены времена индукции и соответствующие им приведённые времена по трём признакам воспламенения.
5. Вычисленные и приведённые к стандартным значениям времена индукции совпадают со средними значениями приведённого времени первичных опубликованных экспериментальных величин.

#### Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена в соответствии с планом исследований НИИ механики МГУ при частичной финансовой поддержке гранта Министерства Образования и Науки РФ (договор №14.G39.31.0001 от 13.02.2017г.) и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты: № 16-29-01092 и № 18-01-00883).

#### Литература

1. Заманский И.М., Борисов А.А. Механизмы и промотирование самовоспламенения перспективных топлив. Итоги науки и техники. Серия: Кинетика. Катализ. Т. 19. М.: ВИНТИ. 1989. 156 С.
2. Семёнов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М. Изд-во АН СССР. 1958. 686 с.
3. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука. 1974. 558 С.
4. Бочков М.В., Ловачёв Л.А., Четверушкин Б.Н. Химическая кинетика образования  $\text{NO}_x$  при горении метана в воздухе // Матем. моделирование. 1992. Т. 4. № 9. С. 3–36.
5. Смехов Г.Д. Эффективные алгоритмы расчёта состояний многокомпонентного реагирующего газа в газовой динамике // Матем. моделирование. 1993. Т. 5. № 2. С. 104.

6. Смахов Г.Д. Равновесие и кинетика в химически реагирующем много температурном газе при заданных температурах подсистем // Хим. физика. 1999. Т. 18. № 6. С. 26.
7. Левин В.А., Смахов Г.Д., Хмелевский А.Н. Численное моделирование образования окиси азота при горении метано-воздушных смесей // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 1. С. 12–23.
8. Левин В.А., Смахов Г.Д., Хмелевский А.Н. Образование окиси азота в различных группах реакций при горении метано-воздушных смесей. Тезисы докладов Всероссийской научной конференции «Физико-химические проблемы сжигания углеводородных топлив». Россия. Москва, 20–22 мая 1998 г. С. 149–150.
9. Ибрагимова Л.Б., Смахов Г.Д., Диковская Г.С. Определение константы скорости диссоциации молекул CN за фронтом сильных ударных волн // Химическая физика. 2000. Т. 19. № 8. С. 57–67.
10. Смахов Г.Д., Ибрагимова Л.Б., Каркач С.П., Скребков О.В., Шаталов О.П. Численное моделирование воспламенения водородно-кислородной смеси с учётом электронно-возбуждённых компонентов // Теплофизика высоких температур. 2007. Т. 45. № 3. С. 440.
11. Смахов Г.Д., Павлов В.А., Шаталов О.П. Исследование воспламенения водородно-кислородных смесей за фронтом падающих ударных волн: эксперимент и численное моделирование // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. <http://chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/194/>
12. Смахов Г.Д. Зависимости времени задержки воспламенения водородно-кислородных смесей от их начальных параметров // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. <http://chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/195/>
13. Smekhov G.D., Shatalov O.P., Modeling of ignition and combustion of hydrogen-oxygen mixtures behind the front of the shock wave // Book of Proceedings 27<sup>th</sup> international Symposium on Shock Waves 19-24 July 2009, St. Petersburg, Russia: Saint-Petersburg, 2009. P. 428.
14. Смахов Г.Д., Шаталов О.П. Исследование воспламенения водородно-кислородных смесей в диапазоне температур 700 ÷ 2500 К // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 1. С. 1–11.

Статья поступила в редакцию 6 мая 2019 г.