

УДК 536.461.536.462

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ КИСЛОРОДА В ПРОДУКТАХ СГОРАНИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА

В. М. Шварцберг, В. А. Бунев, **В. С. Бабкин**Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, 630090 Новосибирск
vshvarts@kinetics.nsc.ru

Методом меченых атомов в численном моделировании исследован вопрос о распределении атомов кислорода воздуха в продуктах окисления богатых смесей синтез-газа с воздухом в пламени и в условиях самовоспламенения при постоянном объеме. Установлено, что в богатых смесях имеет место стадийность в окислении водорода и оксида углерода, которая отчетливо видна на профилях скорости образования H_2O и CO_2 . Наблюдаемая стадийность неизбежно приводит к появлению стадийности в скорости выделения тепла. Изучены пути превращения и роль атома кислорода молекулы CO в тепловыделении в данных пламенах.

Ключевые слова: численное моделирование, метод меченых атомов, синтез-газ, сверхадиабатическая температура.

DOI 10.15372/FGV20170601

ВВЕДЕНИЕ

Использование альтернативных, экологически безвредных источников энергии в последнее время вызывает большой интерес. Прежде всего, это связано с принятием во всем мире мер по сокращению выбросов углекислого газа и загрязнителей в атмосферу при сжигании различных видов топлива. Молекулярный водород, например, является идеальным источником энергии, однако ввиду высокой взрывоопасности его массовое использование в качестве топлива в настоящее время невозможно, поскольку до сих пор не разработаны надежные средства пожаро- и взрывобезопасности при его применении. Одной из приемлемых альтернатив водороду являются его смеси с другими углеводородными топливами.

Синтез-газ может эффективно использоваться в энергетике для получения тепла и электроэнергии в газотурбинных и парогазовых установках [1, 2]. Применение синтез-газа в качестве непосредственного топлива для тепловых электростанций комбинированного цикла с интегрированной газификацией считается одним из наиболее перспективных направлений. Такие электростанции могут использовать различные исходные топлива, включая уголь, биомассу, органические отходы и

др., и получать при этом энергию практически при полном отсутствии загрязняющих веществ. Кроме того, цикл с интегрированной газификацией позволяет не только сильно снизить экологическое воздействие на окружающую среду по сравнению с традиционными электростанциями, но и повысить тепловую эффективность электростанции и вырабатывать электричество по конкурентоспособным ценам. Повышение эффективности газификации на угольных электростанциях оказалось достаточно существенным (больше чем на 40 %), чтобы сделать процесс с интегрированной газификацией привлекательной альтернативой сжиганию природного газа [1].

В последнее время наблюдается повышение интереса к исследованию химии и механизма горения смесей, содержащих монооксид углерода и водород. По данным работы [3] к 2015 г. было опубликовано 52 работы с результатами измерения разнообразных характеристик горения смесей синтез-газа, всего получено 408 наборов экспериментальных данных. В частности, были измерены задержки самовоспламенения, скорости распространения пламени и концентрации продуктов окисления в реакторах различного типа при разных давлениях, начальных температурах и коэффициентах избытка горючего. Проведено сопоставление экспериментов с результатами моделирования на основе двадцати современных кинетических механизмов горения синтез-газа и уг-

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-03-01027-а).

© Шварцберг В. М., Бунев В. А., Бабкин В. С., 2017.

леводородов. Таким образом, была проанализирована предсказательная способность этих механизмов и сопоставлены отклонения результатов моделирования для каждой характеристики горения. При этом для части экспериментальных данных не получено приемлемого согласия с расчетами, и последние признаны ошибочными.

Синтез-газ представляет собой двухтопливную смесь, горение которой изучено наиболее полно. В качестве примера можно привести пять новейших механизмов, описывающих горение смесей CO и H₂ [4–8], разработанные после 2010 г. Несмотря на большое количество опубликованных работ по химии и механизму горения CO в смеси с H₂, остается ряд неясных вопросов, представляющих определенный интерес. В первую очередь, это касается роли атома кислорода в молекуле монооксида углерода в процессе горения и при тепловыделении. Неясен также вопрос о возможности селективного окисления водорода в условиях самовоспламенения и в пламени синтез-газа при недостатке кислорода.

Целью настоящей работы является численное исследование методом меченых атомов некоторых закономерностей химического превращения кислорода воздуха при самовоспламенении и в пламени смесей CO/H₂/воздух. В смесях монооксида углерода и водорода, по-видимому, возможен процесс селективного окисления водорода в богатых смесях при дефиците кислорода для полного окисления многокомпонентного топлива.

Известно, что метод меченых атомов [9] оказался достаточно эффективным в экспериментах по изучению многостадийного механизма химических превращений, тогда как в численном моделировании процессов горения он применяется крайне редко, хотя его возможности трудно переоценить. Примерами плодотворного использования этого метода являются работы [10–12].

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Скорость распространения и структура пламени рассчитывались с помощью программы PREMIX [13] из программного пакета CHEMKIN II [14] для смесей CO/H₂/N₂/O*O*, где O* — меченый атом кислорода. Самовоспламенение моделировалось с использованием программы SENKIN, также входящей в пакет CHEMKIN II.

Механизм [15], состоящий из 93 элементарных реакций с участием 21 соединения, хорошо предсказывает скорость распространения пламени синтез-газа с различным соотношением компонентов CO/H₂ при различном соотношении топливо/воздух в условиях атмосферного и повышенного давления. В настоящей работе при моделировании горения и самовоспламенения использовался данный механизм. Расчетная область составляла 38 см. Следует отметить, что все полученные результаты справедливы в рамках используемого кинетического механизма.

Появление метки на атомах кислорода в молекулах кислорода воздуха приводит к необходимости модификации этой схемы. В нее были добавлены новые компоненты, которые появляются в результате наличия метки на атомах кислорода воздуха, и добавлены новые реакции с их участием. Модификация кинетической схемы [15] проводилась в соответствии с предложенным в [10] методом. Она привела к увеличению реакций с 93 с участием 21 компонента до 421 с участием 37 компонентов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлена зависимость концентрации H₂O в продуктах самовоспламенения богатой смеси 25 % CO + 25 % H₂ + воздух ($\phi = 2.38$) (кислород воздуха без метки) и околостехиометрической смеси 15 % CO + 15 % H₂ + воздух (кислород воздуха без метки) от текущей температуры при начальной

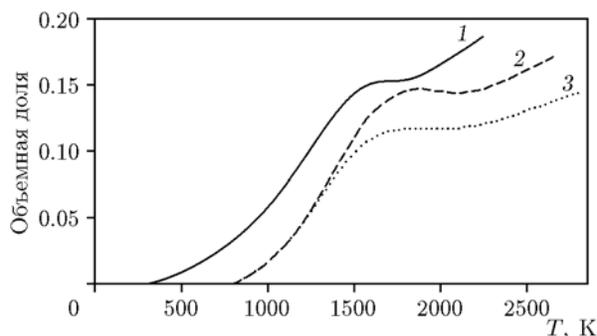


Рис. 1. Зависимость концентрации H₂O от температуры во фронте пламени смеси CO/H₂/воздух состава 0.2/0.2/0.6 (линия 1, T₀ = 298 K, p₀ = 0.1 МПа) и при самовоспламенении синтез-газа при постоянном объеме (линия 2 — состав 0.25/0.25/0.5, линия 3 — 0.15/0.15/0.7; T₀ = 800 K, p₀ = 0.1 МПа)

температуре $T_0 = 800$ К, начальном давлении $p_0 = 0.1$ МПа и при постоянном объеме. Видно, что и в околостехиометрической смеси и в смеси, по составу близкой к богатому пределу распространения, образование воды происходит в две стадии. При самовоспламенении в периоде индукции имеется промежуток времени (соответствует диапазону температур $T = 1800 \div 2200$ К на рис. 1), когда концентрация воды при росте температуры практически не меняется. Аналогичная зависимость наблюдается и в ламинарном пламени предварительно перемешанной эквимольной смеси 20 % CO + 20 % H₂ + воздух ($\phi = 1.59$) (кислород воздуха без метки, $T_0 = 300$ К, $p_0 = 0.1$ МПа).

Возможной причиной такого поведения процесса образования воды является окисление водорода атомом кислорода из оксида углерода CO при высокой температуре. Для того чтобы выяснить причину такого двухстадийного процесса, была использована кинетическая схема с помещением метки на атом кислорода воздуха. В этом случае в продуктах возможно образование двух типов молекул воды — H₂O* и H₂O.

На рис. 2 показаны профили результирующих скоростей образования (ROP) двух основных экзотермических продуктов горения H₂O и CO₂ в пламени H₂/CO/воздух (0.2/0.2/0.6) (расчеты проведены с механизмом без меток). Скорость образования воды в пламени быстро нарастает, достигая максимума, затем снижается до отрицательного значения (т. е. в определенной зоне пламени вода расходуется), а да-

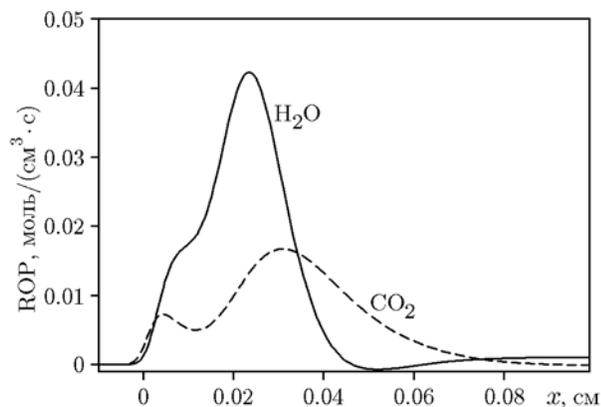


Рис. 2. Профили скоростей образования воды и углекислого газа в ламинарном пламени предварительно перемешанной смеси CO/H₂/воздух (0.2/0.2/0.6) при $T_0 = 298$ К и $p_0 = 0.1$ МПа

лее немного увеличивается. Следует отметить, что рост скорости образования воды в низкотемпературной области фронта пламени не является монотонным. Как видно на рис. 2, на профиле этой скорости есть плечо на расстоянии $x \approx 0.01$ см во фронте пламени.

На профиле скорости образования CO₂ наблюдаются два максимума. Следует отметить, что образование углекислого газа смещено в более высокотемпературную область по сравнению с водой. Из сказанного выше понятно, что в пламени, по-видимому, имеются две зоны выделения тепла: первая связана с образованием H₂O, вторая — с образованием CO₂. Эти зоны несколько смещены друг относительно друга, что должно найти отражение на профиле скорости тепловыделения.

Следует отметить, что появление максимумов на профилях скоростей образования H₂O и CO₂ связано с особенностями концентрационного профиля гидроксила в данном пламени. Профиль молярной доли OH имеет «полочку» в низкотемпературной области пламени, а поскольку основными путями образования воды и углекислого газа являются реакции H₂ + OH = H₂O + H и CO + OH = CO₂ + H, то профили скорости образования этих продуктов также имеют соответствующие особенности.

На рис. 3 показаны профили скорости выделения тепла (HRR) и температуры в пламени H₂/CO/воздух (0.2/0.2/0.6). На профиле температуры не видно каких-либо особенностей, свидетельствующих о двухзонной структуре пламени, в то время как профиль скорости тепловыделения явно представляет со-

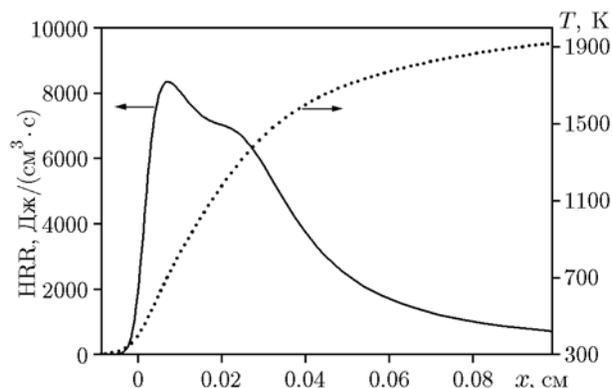


Рис. 3. Профили скорости тепловыделения и температуры в ламинарном пламени предварительно перемешанной смеси CO/H₂/воздух (0.2/0.2/0.6) при $T_0 = 298$ К и $p_0 = 0.1$ МПа

бой два частично перекрывающихся максимума, что свидетельствует о протекании тепловыделения в двух зонах.

На рис. 4 представлена зависимость концентраций H_2O^* , CO^* , COO^* и H_2O от текущей температуры во время самовоспламенения богатой смеси 25 % H_2 —25 % CO — O^*O^* — N_2 при $T_0 = 800$ К и $p_0 = 0.1$ МПа в условиях постоянного объема. Видно, что в данном процессе образуется и H_2O^* , и H_2O . Меченый атом кислорода воздуха при низкой температуре (почти до 2000 К) идет на образование преимущественно H_2O^* и COO^* . Вода без метки на атоме кислорода H_2O в этом промежутке температуры ($800 \div 1750$ К) не образуется. Она начинает образовываться вместе с оксидом CO^* с некоторым запаздыванием. Из рисунка видно, что меченый атом кислорода появляется в молекуле CO^* , а немеченый атом кислорода из молекулы CO появляется в молекуле H_2O . Следовательно, в кинетической схеме окисления синтез-газа имеется блок реакций, отвечающих за такой переход.

На рис. 5 приведены профили концентраций исходных компонентов CO , H_2 , O^*O^* и продуктов реакции H_2O^* , COO^* , CO^* , CO^*O^* , H_2O в богатом пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ ($0.2/0.2/0.126/0.474$) ($\phi = 1.59$) при $T_0 = 300$ К и $p_0 = 0.1$ МПа. Для данной смеси численное значение нормальной скорости распространения пламени хорошо согласуется с экспериментальными данными, представленными в [16] (165 и 168 см/с соответ-

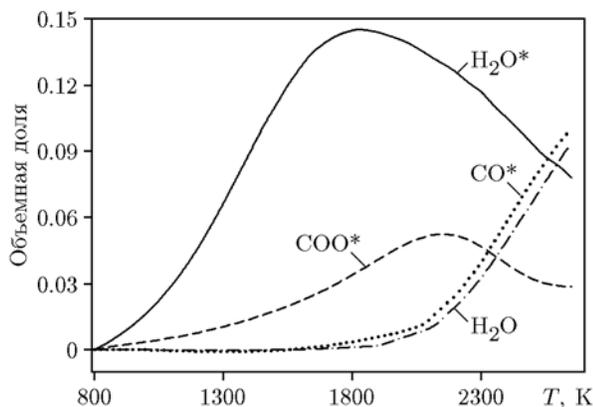


Рис. 4. Зависимость концентраций H_2O^* , COO^* , CO^* , H_2O от температуры при самовоспламенении синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ ($0.2/0.2/0.126/0.474$) при $T_0 = 800$ К и $p_0 = 0.1$ МПа

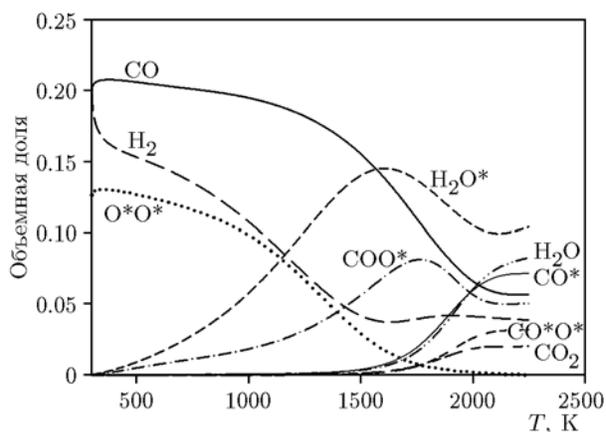
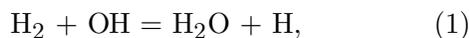


Рис. 5. Зависимость концентраций CO , H_2 , O^*O^* , H_2O^* , COO^* , CO^* , CO^*O^* , CO_2 , H_2O от температуры во фронте пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ ($0.2/0.2/0.126/0.474$) при $T_0 = 300$ К и $p_0 = 0.1$ МПа

ственно). Наличие метки на атомах кислорода воздуха (O^*O^*) позволяет решить вопрос о том, каким образом меченый атом кислорода появляется в продуктах реакции. Видно, что в данном богатом пламени ($\phi = 1.58$) в диапазоне $T \lesssim 1600 \div 1800$ К атом кислорода O^* появляется только в молекулах воды H_2O^* и диоксида углерода COO^* . При этом концентрация исходных молекул O^*O^* при $T = 1600$ К практически близка к нулю. С дальнейшим ростом температуры в пламени происходит перераспределение меченых атомов из молекул воды H_2O^* и диоксида углерода COO^* в молекулы CO^*O^* и CO^* . Появление меченого атома O^* в молекуле CO^* указывает на то, что атомы O в молекулах CO заменяются мечеными атомами кислорода O^* , что в конечном итоге приводит к образованию воды H_2O с немеченым атомом кислорода. То, что исходный кислород воздуха первоначально полностью перешел в продукты окисления воду H_2O^* и диоксид углерода COO^* , позволяет утверждать, что дальнейший подъем температуры связан только с перераспределением немеченого кислорода из CO в другие продукты — CO_2 , H_2O с выделением дополнительного количества тепла.

С помощью метода меченых атомов можно установить различие скоростей тепловыделения в реакциях с участием меченых и немеченых атомов O . Например, рассмотрим реакции



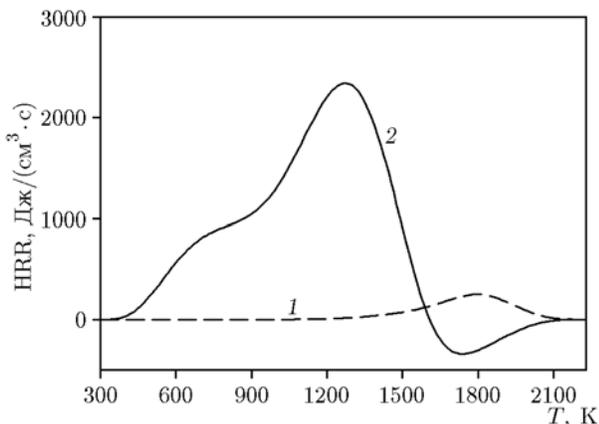


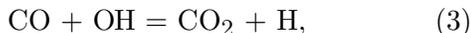
Рис. 6. Зависимость скорости тепловыделения в реакциях $\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$ (кривая 1) и $\text{H}_2 + \text{O}^*\text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^* + \text{H}$ (кривая 2) от температуры во фронте пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ (0.2/0.2/0.126/0.474) при $T_0 = 300$ К и $p_0 = 0.1$ МПа



На рис. 6 представлены профили скорости тепловыделения в этих реакциях. Видно, что в реакции (2) скорость тепловыделения положительна только при $T < 1300 \div 1500$ К. Это соответствует области пламени, в которой концентрация H_2O^* растет и достигает максимума. После достижения максимума концентрация H_2O^* падает (см. рис. 4), а скорость тепловыделения становится отрицательной, что указывает на отрицательное значение скорости реакции (2) в этой зоне пламени.

Скорость тепловыделения в реакции (1) очень мала и отличается от нулевого значения в диапазоне $T = 1500 \div 2100$ К. Следовательно, реакция с участием O^*H вносит основной вклад в тепловыделение.

На рис. 7 представлены профили скорости тепловыделения в реакциях



Видно, что в реакции (5) компоненты реагируют с поглощением тепла. Следовательно, скорость этой реакции отрицательна, т. е. из

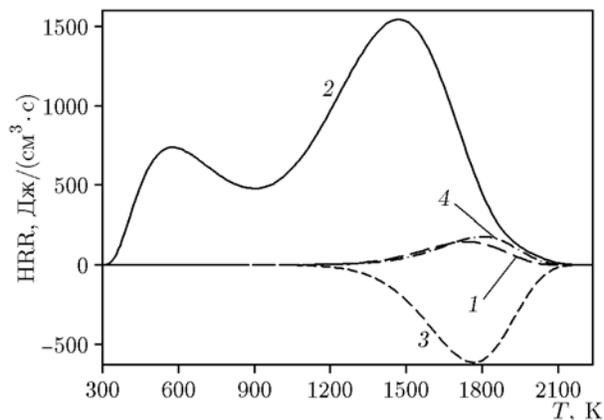


Рис. 7. Зависимость скорости тепловыделения в реакциях $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ (кривая 1), $\text{CO} + \text{O}^*\text{H} \rightarrow \text{COO}^* + \text{H}$ (2), $\text{CO}^* + \text{OH} \rightarrow \text{COO}^* + \text{H}$ (3), $\text{CO}^* + \text{O}^*\text{H} \rightarrow \text{CO}^*\text{O}^* + \text{H}$ (4) от температуры во фронте пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ (0.2/0.2/0.126/0.474) при $T_0 = 300$ К и $p_0 = 0.1$ МПа

COO^* и H образуются CO^* и OH . Из вышесказанного понятно, как происходит обмен меченым атомом O^* и атомом O , т. е. как CO превращается в CO^* . Отметим, что эта реакция протекает при $T > 1200$ К. Аналогичная ситуация имеет место и в условиях самовоспламенения при тех же температурах. Далее часть CO^* реагирует с O^*H с образованием CO^*O^* и выделением тепла. Реакция (5) протекает с поглощением тепла (см. рис. 5), т. е. ее скорость в диапазоне $T = 1300 \div 2000$ К отрицательна. Следовательно, именно так образуются монооксид углерода с меткой CO^* и гидроксил без метки. Следует отметить, что тепло выделяется при взаимодействии CO и O^*H (реакция (4)). Вклад в тепловыделение стадий (5) и (6) пренебрежимо мал. Неизбежно возникает вопрос, как соотносятся скорости тепловыделения реакций (3)–(6) и скорость тепловыделения в реакции $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ при расчете с механизмом без меченых атомов. Установлено, что скорость тепловыделения в системе без меток равна сумме скоростей тепловыделения в стадиях (3)–(6).

Численное моделирование показало, что скорость тепловыделения в реакции (4) на начальном участке фронта превышает скорость тепловыделения в реакции (2). Тепловыделение в реакциях $\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$, $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ и $\text{CO}^* + \text{OH} \rightarrow \text{COO}^* + \text{H}$ начинается при $T > 1200 \div 1500$ К. Это связа-

но с тем, что концентрация гидроксила с немеченым атомом кислорода OH начинает расти именно в этой области температур и достигает максимума при $T = 2017 \text{ K}$ (рис. 8).

На рис. 8 приведены зависимости концентраций O^*H и OH от температуры во фронте пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ (0.2/0.2/0.126/0.474). Максимальная концентрация гидроксила, образовавшегося из кислорода воздуха (O^*H), в 2.5 раза выше максимальной концентрации OH . При этом максимум концентрации OH смещен в более высокотемпературную область пламени.

На рис. 9 показано, как меняется отноше-

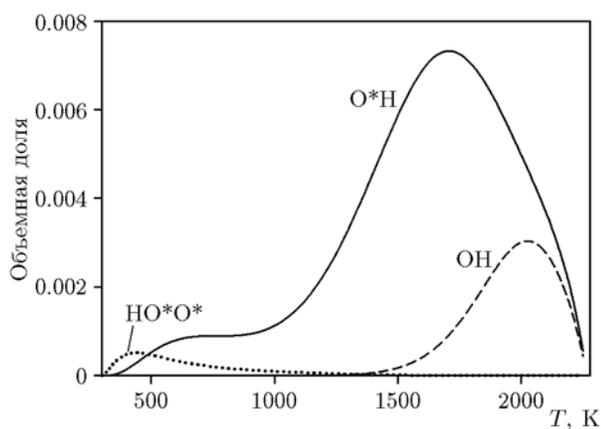


Рис. 8. Зависимость концентраций O^*H , OH и HO^*O^* от температуры во фронте пламени синтез-газа $\text{CO}/\text{H}_2/\text{O}^*\text{O}^*/\text{N}_2$ (0.2/0.2/0.126/0.474) при $T_0 = 300 \text{ K}$ и $p_0 = 0.1 \text{ МПа}$

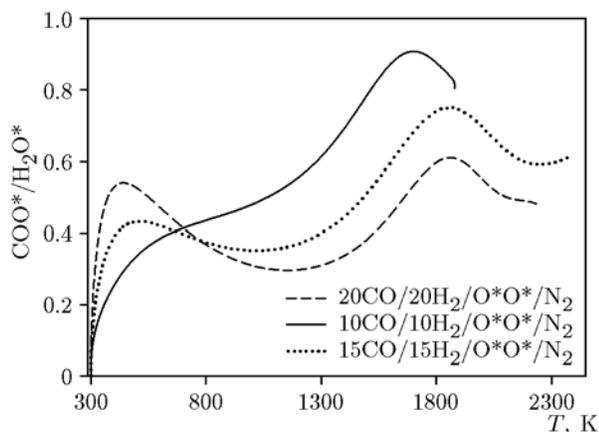


Рис. 9. Зависимость отношения объемных долей $\text{COO}^*/\text{H}_2\text{O}^*$ от температуры во фронте пламени синтез-газ/воздух различного состава, $T_0 = 300 \text{ K}$ и $p_0 = 0.1 \text{ МПа}$

ние концентраций $\text{COO}^*/\text{H}_2\text{O}^*$, главных продуктов сгорания в условиях пламени, содержащих меченый атом кислорода воздуха. Видно, что это соотношение, во-первых, всегда меньше единицы для эквимольной смеси водорода и монооксида углерода и, во-вторых, справедливо для бедных, богатых и стехиометрических эквимольных смесей, в том числе и при равновесных условиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты позволяют утверждать, что в условиях самовоспламенения и в условиях ламинарного распространения пламени в богатых смесях синтез-газа с воздухом имеет место стадийность в окислении водорода и монооксида углерода, которая отчетливо видна на профилях скорости образования воды и CO_2 .

Наблюдаемая стадийность в окислении компонентов горючего неизбежно приводит к появлению стадийности в скорости выделения тепла, что проявляется в виде двух максимумов на профиле скорости тепловыделения на расстояниях 0.1 и 0.3 см.

Применение метода меченых атомов в численном моделировании позволило установить, что стадийность в пламенах $\text{H}_2/\text{CO}/\text{воздух}$ также связана с образованием воды и CO_2 не только за счет кислорода воздуха, но и за счет атома кислорода, содержащегося в молекуле монооксида углерода. Об этом свидетельствует разнообразие продуктов горения H_2O , H_2O^* , COO , COO^* , CO^*O^* и распределение их концентраций во фронте пламени.

Установлено, что образование продуктов горения с кислородом воздуха и с кислородом, содержащимся в молекуле монооксида углерода, во фронте пламени и в период индукции самовоспламенения происходит неодновременно. Сначала наблюдается расходование кислорода O^*O^* и образование продуктов COO^* и H_2O^* , затем — рост температуры и одновременное образование продуктов H_2O и COO . Образуется также монооксид углерода, содержащий атом кислорода с меткой (т. е. из кислорода воздуха). Следует отметить, что подъем температуры после полного расходования кислорода воздуха связан только с перераспределением немеченого кислорода из CO в другие продукты — CO_2 , H_2O с выделением дополнительного количества тепла. Из этого следует, что в кине-

тической схеме окисления синтез-газа имеются реакции, отвечающие за такие превращения.

Показано, что в пламенах синтез-газа тепло преимущественно выделяется в реакциях $H_2 + OH = H_2O + H$ и $CO + OH = CO_2 + H$, т. е. радикал OH играет ключевую роль в процессе выделения тепла. В первой из этих двух реакций основное тепло выделяется при взаимодействии молекулярного водорода с гидроксидом, содержащим атом кислорода воздуха (O^*H). Аналогично при взаимодействии монооксида углерода с гидроксидом основное тепло выделяется в реакции $CO + O^*H = COO^* + H$. Вклад реакций $CO + OH = CO_2 + H$ и $CO^* + O^*H = CO^*O^* + H$ в тепловыделение пренебрежимо мал. Интересно, что реакция $CO^* + OH = CO^*O + H$ протекает с поглощением тепла, т. е. справа налево, фактически представляя собой путь переноса меченого атома кислорода в молекулу монооксида углерода.

Результаты моделирования показали, что максимум концентрации OH по сравнению с O^*H наблюдается при более высокой температуре. При этом вклад OH в тепловыделение мал по сравнению с вкладом радикала O^*H .

Установлено, что в бедных, богатых и стехиометрических пламенах синтез-газ/воздух, в которых концентрации CO и H_2 одинаковы, соотношение концентраций продуктов горения COO^*/H_2O^* всегда меньше единицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Synthesis** Gas Combustion. Fundamentals and Applications / T. Liewen, V. Yang, R. Yetter (Eds). — Boca Raton: CRC Press, 2010.
2. **Whitty K. J., Zhang H. R., Eddings E. G.** Emissions from syngas combustion // Combust. Sci. Technol. — 2008. — V. 180. — P. 1117–1136.
3. **Olm C., Zsély I. G., Varga T., Curran H. J., Turányi T.** Comparison of the performance of several recent syngas combustion mechanisms // Combust. Flame. — 2015. — V. 162. — P. 1793–1812.
4. **CRECK** modeling group Hydrogen/CO mechanism version 1212. — <http://creckmodeling.chem.polimi.it/kinetic.html>.
5. **Kéromnès A., Metcalfe W. K., Heufer K. A., Donohoe N., Das A. K., Sung C.-J., Herzler J., Naumann C., Griebel P., Mathieu O., Krejci M. C., Petersen E. L., Pitz W. J., Curran H. J.** An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // Combust. Flame. — 2013. — V. 160. — P. 995–1011.
6. **Li X., You X., Wu F., Law C. K.** Uncertainty analysis of the kinetic model prediction for high-pressure H_2/CO combustion // Proc. Combust. Inst. — 2015. — V. 35. — P. 617–624.
7. **Healy D., Kalitan D. M., Aul C. J., Petersen E. L., Bourque G., Curran H. J.** Oxidation of C1–C5 alkane quinary natural gas mixtures at high pressures // Energy Fuel. — 2010. — V. 24. — P. 1521–1528.
8. **Mechanical and Aerospace Engineering** (Combustion Research), University of California at San Diego: Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, San Diego Mechanism, version 2014-02-17. — <http://combustion.ucsd.edu>.
9. **Кондратьев В. Н.** Кинетика химических газовых реакций. — М.: Изд-во АН СССР, 1958.
10. **Бунев В. А., Бабкин В. С., Бакланов А. В., Замашиков В. В., Намятов И. Г.** Селективное окисление водорода в пламени богатых смесей водород — метан — воздух // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 5. — С. 3–11.
11. **Бунев В. А., Бакланов А. В., Замашиков В. В., Бабкин В. С.** Метод меченых атомов в численном моделировании процессов горения // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 6. — С. 3–12.
12. **Bunев V. A., Shvartsberg V. M., Babkin V. S.** Distribution of O atoms from CH_2O molecules in the combustion products of formaldehyde // Mendeleev Commun. — 2015. — V. 25, N 2. — P. 157–158.
13. **Kee R. J., Grcar J. F., Smooke M. D., Miller J. A.** A program for modeling steady, laminar, one-dimensional premixed flames // Rep. SAND85-8240. — Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1985.
14. **Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.** Chemkin II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics // Rep. SAND89-8009. — Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1989.
15. **Li J., Zhao Z., Kazakov A., Chaos M., Dryer F. L., Scire J. J., Jr.** A comprehensive kinetic mechanism for CO , CH_2O , and CH_3OH combustion // Intern. J. Chem. Kinet. — 2007. — V. 39. — P. 109–136.
16. **Prathap C., Ray A., Ravi M. R.** Investigation of nitrogen dilution effects on the laminar burning velocity and flame stability of syngas fuel at atmospheric condition // Combust. Flame. — 2008. — V. 155. — P. 145–160.

Поступила в редакцию 26/XII 2016 г.