

УДК 533.6.07

РОЛЬ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОУДАРЕНИЙ С ТРЕТЬИМ ТЕЛОМ В САМОВОСПЛАМЕНЕНИИ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ

© 2024 г. А. М. Тереза^{1*}, Г. Л. Агафонов¹, Э. К. Андержанов¹, А. С. Бетев¹,
С. П. Медведев¹, В. Н. Михалкин^{1,2}, С. В. Хомик¹, Т. Т. Черепанова¹¹Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия²Академия государственной противопожарной службы МЧС России, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 09.01.2024;

после доработки 07.02.2024;

принято в печать 20.02.2024

Проведено численное моделирование самовоспламенения бедных (6% H₂), стехиометрических и богатых (90% H₂) водородно-воздушных смесей с целью исследования влияния эффективности соударений с третьим телом (chaperon efficiency (CE)) на величину задержки воспламенения, τ . Диапазоны изменения начальной температуры в расчетах составили 850–1000 К для $P_0 = 1$ атм и 1000–1200 К для $P_0 = 6$ атм. С использованием детального кинетического механизма установлено, что наибольшая чувствительность τ к CE характерна для реакции $H + O_2 + M = HO_2 + M$, что может приводить к изменению τ в 2–3 раза. Рост давления или отклонение от стехиометрии уменьшает чувствительность. Иной характер и значительно меньшее влияние CE обнаружены для реакции $OH + OH + M = H_2O_2 + M$.

Ключевые слова: водородно-воздушная смесь, численное моделирование, химическая кинетика, задержка воспламенения, детальный кинетический механизм, эффективность по соударению с третьим телом.

DOI: 10.31857/S0207401X24070071

ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов численного моделирования на основе детальных кинетических механизмов (ДКМ) позволяет повысить точность расчетов самовоспламенения и горения водородно-воздушных смесей. Влияние химической кинетики необходимо учитывать при моделировании, например, структуры пламени [1, 2] или процессов перехода горения в детонацию [3–6] в водородно-воздушных смесях. Прогресс в повышении качества моделирования с использованием ДКМ достигнут в основном в расчетах таких характеристик горения, как задержка воспламенения τ и скорость ламинарного пламени [7–17], тогда как профили реагентов и продуктов часто остаются без внимания. Мотивацией для совершенствования ДКМ служат как получение новых, более надежных экспериментальных данных для валидации ДКМ, так и более точные измерения констант скорости элементарных реакций и термодинамических свойств, участвующих в них

атомов, радикалов и молекул [18, 19]. Следует отметить, что ДКМ горения смесей H₂–воздух являются важнейшими блоками реакций, включаемыми в разнообразные модели процессов с участием углеводородных топлив.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

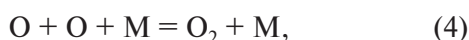
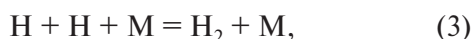
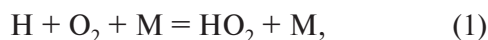
Вместе с тем в обсуждаемых кинетических механизмах остаются неясности [19], обусловленные прежде всего зависимостью химического процесса горения водорода от давления [12, 18, 20]. Описание исследуемых явлений еще более усложняется при возникновении в реагирующей среде ударных волн, где присутствуют процессы колебательной релаксации [21]. Большинство ДКМ, используемых при моделировании горения водородно-воздушных смесей, ограничивается двумя десятками обратимых реакций без рассмотрения роли электронно-возбужденных радикалов и молекул. Среди них зависящими от давления являются реакции мономолекулярного распада вместе

Таблица 1. Значения SE – эффективностей соударений с третьим телом для реакций (1)–(6)

Номер реакции	Реакция	SE							
		H_2	O_2	Ar	He	H_2O	N_2	H_2O_2	Ссылка
1	$H+O_2+M=HO_2+M$	2.5	—	0.7	0.7	16.0	—	—	[24]
		1.5	—	0.72	0.67	17.6	—	—	[16]
		1.87	0.75	0.6	0.71	15.81	0.96	—	[13]
		1.3	—	0.0	0.0	10.0	—	—	[10]
		1.5	1.0	0.72	0.57	16.6	—	—	[19]
		1.3	—	0.5	0.64	10.0	—	—	[26]
		—	0.85	0.4	0.46	11.89	—	—	[14]
2	$H+OH+M=H_2O+M$	2.5	—	0.4	0.4	12.0	—	—	[24]
		3.0	1.5	—	1.1	0.0	2.0	—	[16]
		3.77	1.5	1.23	1.33	0.0	2.46	—	[13]
		0.73	—	0.38	—	3.65	—	—	[10]
		3.0	1.5	—	1.1	0.0	2.0	—	[19]
		0.73	—	0.38	—	3.65	—	—	[26]
		—	—	—	—	—	—	—	[14]
3	$H+H+M=H_2+M$	2.5	—	0.5	0.5	12.0	—	—	[24]
		2.5	—	0.0	0.0	12.0	—	—	[16]
		2.55	—	0.0	0.0	12.02	1.01	—	[13]
		2.5	—	—	0.83	12.0	—	—	[10]
		0.0	—	—	—	14.3	0.0	—	[19]
		2.5	—	—	0.83	12.0	—	—	[26]
		—	—	—	—	—	—	—	[14]
4	$O+O+M=O_2+M$	2.5	—	0.2	0.2	12.0	—	—	[24]
		2.5	—	0.0	0.0	12.0	—	—	[16]
		2.5	—	0.0	0.0	12.0	—	—	[13]
		2.5	—	0.83	0.83	12.0	—	—	[10]
		—	8.0	—	—	5.0	2.0	—	[19]
		2.5	—	0.83	0.83	12.0	—	—	[26]
		—	—	—	—	—	—	—	[14]
5	$H+O+M=OH+M$	2.5	—	0.7	0.7	12.0	—	—	[24]
		2.5	—	0.75	0.75	12.0	—	—	[16]
		2.5	—	0.75	0.75	15.8	1.32	—	[13]
		2.5	—	0.75	0.75	12.0	—	—	[10]
		—	—	—	—	5.0	—	—	[19]
		2.5	—	0.75	0.75	12.0	—	—	[26]
		1.0	0.4	0.35	—	6.5	0.4	—	[14]
6	$OH+OH+M=H_2O_2+M$	2.5	—	0.7	0.4	6.0	—	6.0	[24]
		3.7	1.2	—	0.65	7.5	1.5	7.7	[16]
		3.27	1.2	0.85	0.65	6.63	1.33	6.61	[13]
		3.7	1.2	—	0.65	0.0	1.5	7.7	[10]
		3.7	1.2	—	0.65	7.5	1.5	7.7	[19]
		3.7	1.2	—	0.65	7.65	1.5	7.7	[26]
		2.0	—	0.7	—	6.0	—	—	[14]

Примечание: прочерк по умолчанию означает, что $SE = 1$.

с обратными к ним реакциями рекомбинации [22]. Всего в водородно-воздушной смеси шесть таких реакций:



Согласно теории Райса–Рамспергера–Каселя–Маркуса (РРКМ) [22], такие реакции протекают в переходной области (fall-off) изменения давления [22, 23]. В расчетах на основе ДКМ константы скорости k для реакций (1)–(6) определяются по формуле Линдемана–Хиншельвуда:

$$k = \frac{k_0 k_\infty [M]}{k_0 [M] + k_\infty} F, \quad (i)$$

где k_0 и k_∞ – значения констант скорости в пределах низких и высоких давлений, а концентрация третьего тела, $[M]$, зависит от давления [23]. Значение F определяется формулой

$$\log F = \frac{\log F_c}{1 + \left[\frac{\log k_0 [M] / k_\infty}{N} \right]^2},$$

где

$$N = 0.75 - 1.27 \log F_c,$$

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

Значения констант k_0 и k_∞ , а также соответствующих параметров a , T^* , T^{**} и T^{***} для реакций (1)–(6) – свои в каждой ДКМ, представленной в литературе, и, как следствие, соответствующие значения k в них разные.

Из реакций (1)–(6) наибольшее влияние на самовоспламенение оказывает реакция обрыва цепи (1), поскольку она конкурирует с реакцией разветвления [24]:



Конкуренция между ведущими реакциями (1) и (7) определяет условия смены кинетического механизма (так называемый “crossover”) [24]. По-

ложение соответствующей области “излома” кривой зависимости задержки воспламенения от температуры [25] может быть различным при варьировании коэффициентов k_1 и k_7 и использовании разных ДКМ. В этой области зависимость τ от T особенно сильна, и поэтому различие расчетных значений τ максимально. Поскольку скорости реакций зависят от концентраций водорода и кислорода в смеси, степень их влияния зависит от соотношения топливо/окислитель. Наиболее заметно это может проявляться для реакций (3) и (4).

В формуле (i) для констант скоростей реакций (1)–(6) константа k_0 часто определяется с учетом эффективности соударений с третьим телом (collision efficiency (CE)) [24]. В табл. 1 представлены значения CE для реакций (1)–(6) из различных ДКМ, наиболее часто используемых при моделировании химической кинетики. Из-за трудоемкости расчетов и измерений этих значений они оцениваются с высокой неопределенностью. По этой причине в работе [24] для реакций (2)–(5) приняты одинаковые значения CE. Влияние перекиси водорода как третьего тела учитывается в ДКМ только для реакции (6).

Если значения констант k_0 и k_∞ и параметров в формуле (i) периодически корректируются на основе теоретических расчетов, то значения CE практически не пересматриваются и часто подбираются по аналогии с экспериментальными данными, полученными для углеводородов [23, 27]. Анализ чувствительности расчетов величины τ к значениям CE в доступной литературе не представлен. В настоящей работе исследуется влияние значений CE на величины задержек воспламенения, рассчитанные для бедной, стехиометрической и богатой смесей водорода с воздухом.

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты значений τ проведены с помощью программного модуля CHEMKIN-Pro, входящего в пакет ANSYS (Academic version) [28] при начальных давлениях $P_0 = 1$ и 6 атм. Второе значение P_0 соответствует пику избыточного давления, который наблюдался в работе [29] при переходе от “медленного” к “быстрому” режиму распространения пламени, приводящему к высоким нагрузкам и повреждению конструкций. В работе [17] было показано, что в температурном диапа-

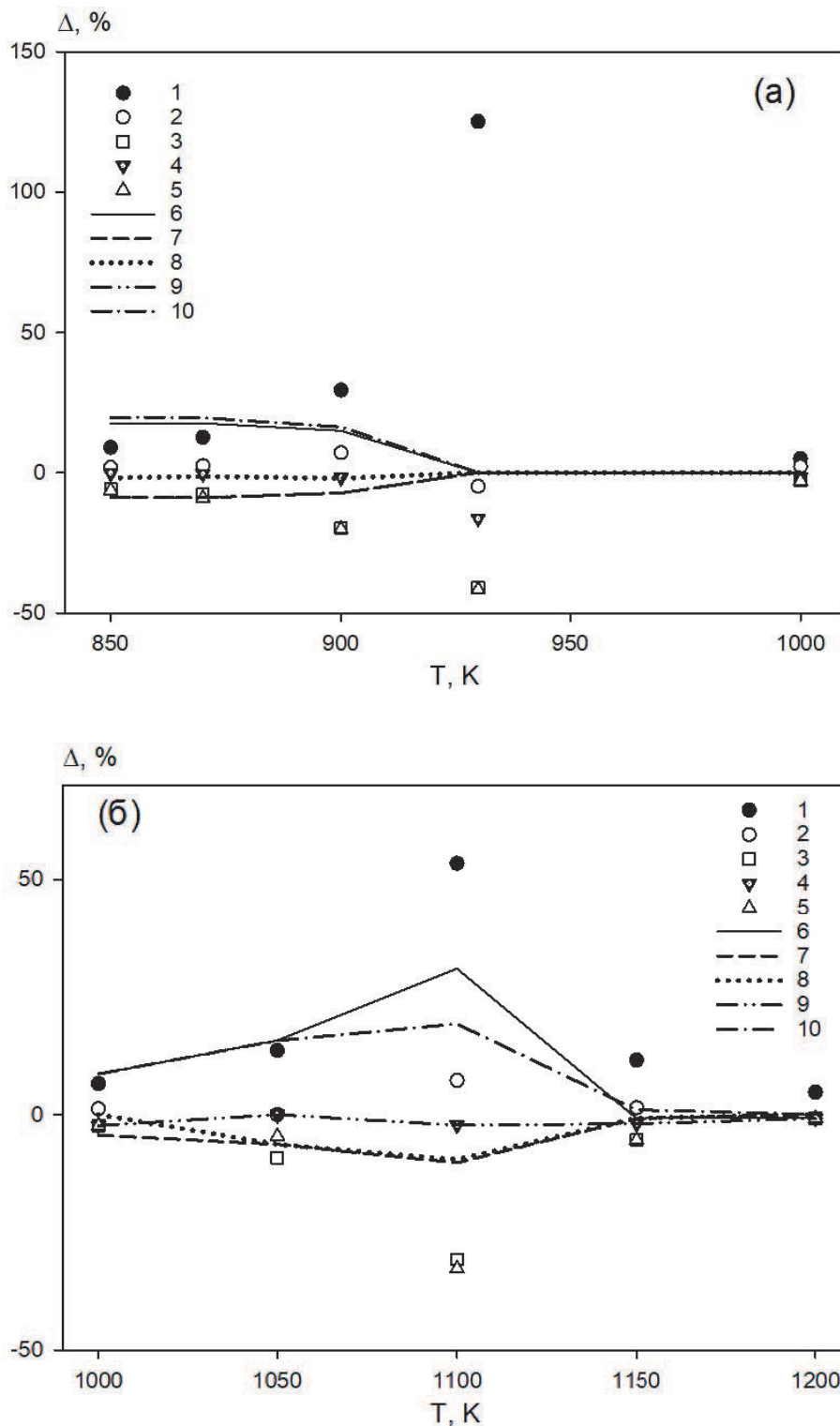


Рис. 1. Зависимость отклонения Δ при использовании разных наборов значений СЕ для реакции (1) (символы) и (6) (линии) для бедной смеси (6% H_2) при $P_0 = 1$ (а) и 6 атм (б). Символы и линии соответствуют расчетам со значениями СЕ из работ [24] (1, 6), [16] (2, 7), [13] (3, 8), [10] (4, 9), [14] (5, 10).

зоне от 800 до 1700 К для бедных водородно-воздушных смесей при давлении 1 и 6 атм численное моделирование с использованием различных ДКМ предсказывает значения задержки воспла-

менения, различающиеся не более чем в четыре раза. Максимальная разница между значениями задержек воспламенения τ , рассчитанными по разным ДКМ, наблюдается в области начальной

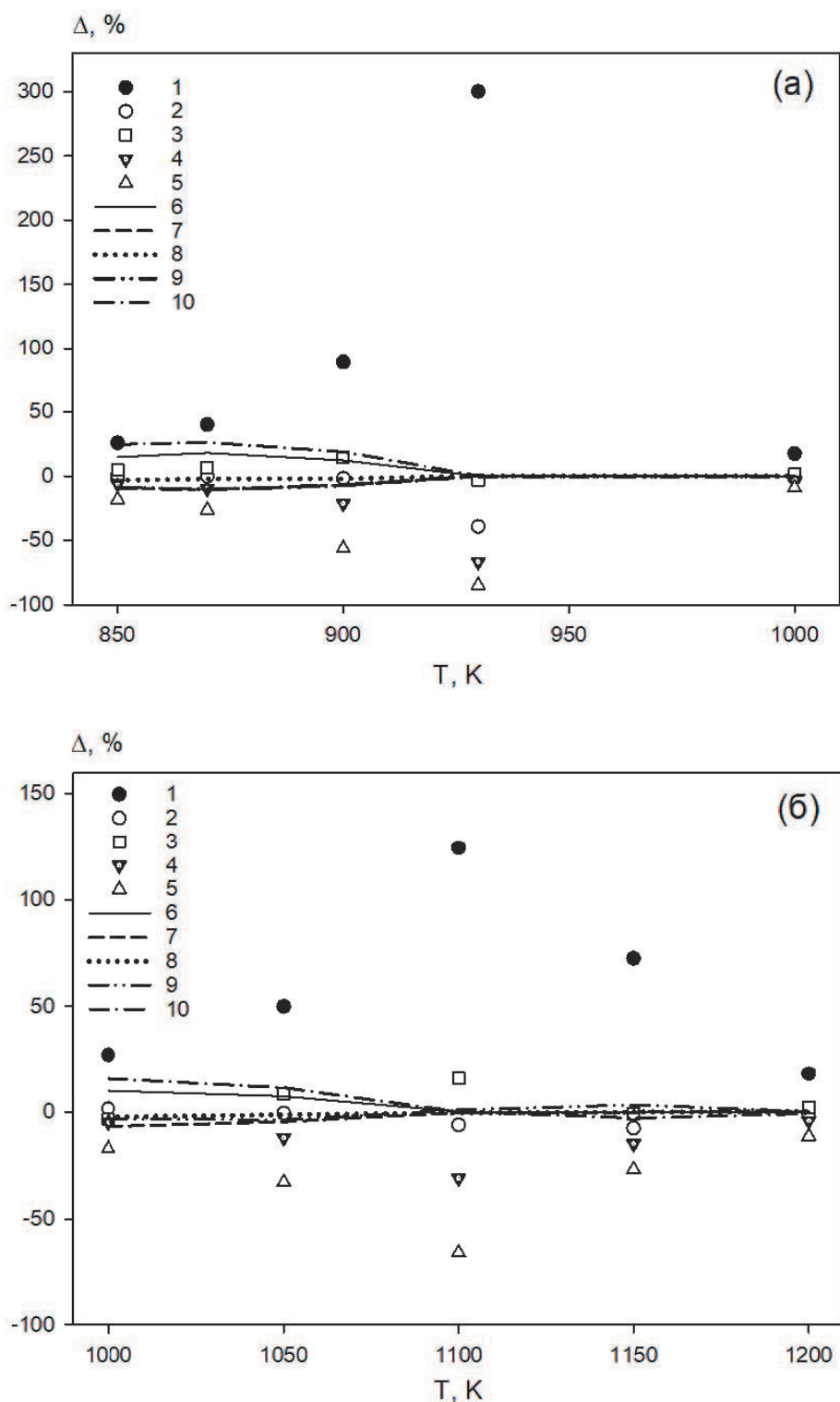


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, для стехиометрической смеси.

температуры $T_0 \approx 930$ К для $P_0 = 1$ атм и при $T_0 \approx 1100$ К для $P_0 = 6$ атм. При $T_0 < 800$ К время самовоспламенения водородно-воздушной смеси может достигать нескольких десятков минут. Поэтому в настоящей работе рассматривались диа-

пазоны начальной температуры 850–1000 К для $P_0 = 1$ атм и 1000–1250 К для $P_0 = 6$ атм с переменной дискретизацией T_0 , учитывающей резкий рост температурной зависимости значения τ для каждого из этих давлений согласно работе [17].

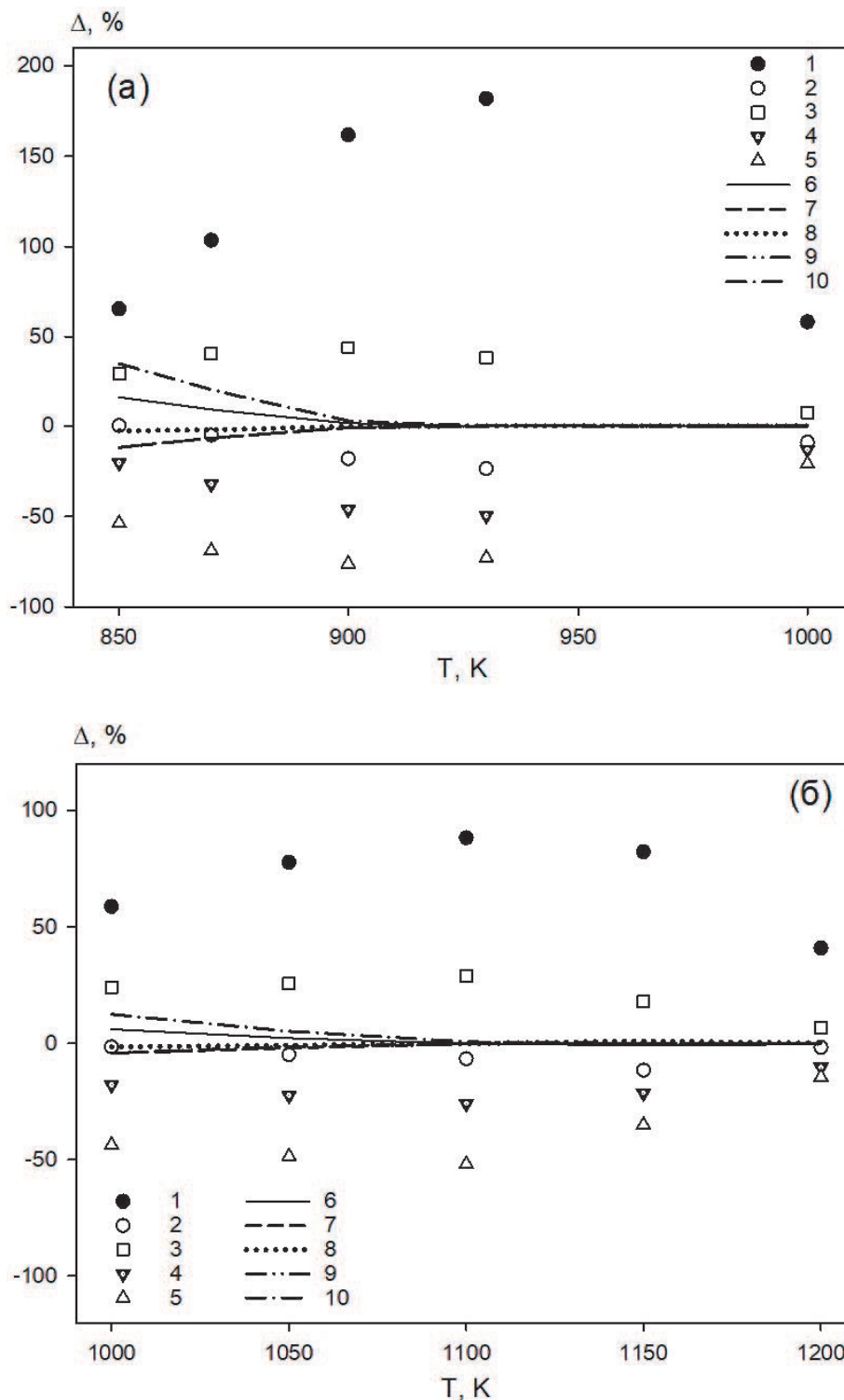


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, для богатой смеси (90% H_2).

Из табл. 1 видно, что значения СЕ в ДКМ из работ [16] и [19] весьма близки, а в работах [10] и [26] они практически совпадают. Значения СЕ для некоторых реакций в ДКМ из работ [13] и [14] также близки. В расчетах рассматривались значения СЕ, приведенные в работах [10, 13, 14, 16, 24].

Все расчеты проводились по ДКМ из работы [14] с поочередной заменой СЕ для каждой реакции в соответствии с данными из работ [10, 13, 16, 24]. Учитывались СЕ только для H_2 , O_2 , H_2O_2 и N_2 (табл. 1).

Таблица 2. Значения τ , рассчитанные по ДКМ из работы [14] для температур T_0 в интервале 850–1200 К

Тип смеси	τ , с									
	850	870	900	930	1000	1000	1050	1100	1150	1200
	$P_0 = 1$ атм					$P_0 = 6$ атм				
6% H_2	1.7	0.63	0.09	1.4E–3	2.5E–4	0.011	2.1E–3	1.3E–4	2.8E–5	1.6E–5
29.6% H_2	0.89	0.31	0.033	7.5E–4	1.6E–4	5.2E–3	8.2E–4	5.3E–5	1.4E–5	8.3E–6
90% H_2	0.29	0.069	0.01	2.5E–3	7.9E–4	2.1E–3	4.5E–4	1.2E–4	6.0E–5	4.0E–5

В дальнейшем в качестве характеристики влияния СЕ на задержку воспламенения используется выраженное в процентах относительное отклонение

$$\Delta = (\tau_i - \tau_a) / \tau_a$$

от среднего значения

$$\tau_a = \left(\sum_{i=1}^n \tau_i / n \right), \quad n = 5,$$

где τ_i ($i = 1, \dots, 5$) – значения τ , рассчитанные с использованием СЕ соответственно, из работ [10, 13, 14, 16, 24], при фиксированном T_0 . Значение τ в расчетах определялось как момент времени, соответствующий максимальной скорости роста давления.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Значения τ , рассчитанные по ДКМ из работы [14] для всех трех смесей при $P_0 = 1$ и 6 атм, представлены в табл. 2. В случае, если чувствительность к изменению СЕ в какой-либо из реакций (1)–(6) не обнаруживается, то значение в табл. 2 совпадает с τ_a . Расчеты показали, что при $P_0 = 1$ или 6 атм значения τ при варьировании СЕ для реакций (2)–(5) во всех трех смесях близки к значениям, приведенным в табл. 2. Заметное влияние СЕ обнаружено только для реакций (1) и (6).

На рис. 1 представлены значения Δ в зависимости от T_0 , рассчитанные для бедной смеси при $P_0 = 1$ атм (рис. 1а) и $P_0 = 6$ атм (рис. 1б) с использованием различных наборов СЕ для реакции (1). Видно, что на границах температурных интервалов влияние СЕ незначительно по сравнению с серединой этих интервалов. Например, использование СЕ из работы [24] при $P_0 = 1$ атм приводит к значению τ , превышающему значение на границе интервала более чем в два раза (рис. 1а), а при $P_0 = 6$ атм – в полтора раза (рис. 1б).

Для реакции (6) температурная зависимость Δ имеет иной характер, чем для реакции (1) (см.

рис. 1). При $P_0 = 1$ атм влияние СЕ заметно при $T_0 < 930$ К и не превышает 20% (рис. 1а), а при $P_0 = 6$ атм отклонение Δ существенно при $T_0 < 1150$ К и достигает максимального значения в 30% при $T_0 = 1100$ К для СЕ из работы [24] (рис. 1б). Из рис. 1 видно, что для реакции (1) значение Δ заметно больше, чем для реакции (6).

В стехиометрической смеси (29.6% H_2) влияние СЕ на $\Delta(T)$ для реакций (1) и (6) имеет такой же характер, как и в бедной, но величина $\Delta(T)$ для реакции (1) значительно больше (рис. 2). Для реакции (1) в богатой смеси величина $\Delta(T)$ в целом меньше, чем в стехиометрической, но больше вблизи границ рассматриваемых температурных интервалов (рис. 3). В отличие от бедной и стехиометрической смесей влияние СЕ на величину Δ для реакции (6) в богатой смеси монотонно возрастает с понижением температуры и при $T_0 < 900$ К для $P_0 = 1$ атм и при $T_0 < 1100$ К для $P_0 = 6$ атм.

Различие в характере влияния СЕ на величину $\Delta(T)$ в реакциях (1) и (6) можно объяснить возрастающим влиянием реакции (6) на величину τ при понижении T_0 . Так, в работе [25] показано, что искусственное добавление H_2O_2 в водородно-воздушные смеси приводит к более резкому уменьшению τ с понижением T_0 .

ВЫВОДЫ

Установлено, что во всех рассмотренных интервалах начальных температур и давлений наибольшая чувствительность рассчитанных значений τ к СЕ характерна для реакции (1). Для реакций (2)–(5) вариации СЕ не приводят к изменению τ . Для реакции (6) влияние СЕ значительно слабее и имеет иной характер по сравнению с реакцией (1). Наибольшее влияние СЕ обнаруживается для реакции (1) в стехиометрической смеси водород–воздух, что может приводить к изменению расчетного значения τ в 2–3 раза в интервалах наибольшего расхождения расчетов по разным

ДКМ. С ростом давления влияние СЕ для реакции (1) уменьшается. Влияние значений СЕ для реакции (6) на расчеты τ слабо меняется в зависимости от содержания водорода в исходной смеси и начального давления и уменьшается с ростом начальной температуры.

Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение госзадания (тема № 122040500073-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Яковенко И. С., Медведков И. С., Киверин А. Д. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 3. С. 85.
2. Yakovenko I., Kiverin A. // Fire. 2023. V. 6. P. 239.
3. Киверин А. Д., Медведков И. С., Яковенко И. С. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 11. С. 33.
4. Nikitin V.F., Mikhalechenko E.V., Stamov L.I., Tyurenkova V.V., Smirnov N.N. // Acta Astronaut. 2023. V. 213. P. 156.
5. Smirnov N.N., Azatyan V.V., Nikitin V.F. et al. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 49. Pt. B. P. 1315.
6. Smirnov N.N., Nikitin V.F., Mikhalechenko E.V., Stamov L.I., Tyurenkova V.V. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2024. V. 49. Pt. B. P. 495.
7. Saxena P., Williams F.A. // Combust. and Flame. 2006. V. 145. P. 316.
8. Konnov A.A. // Combust. and Flame. 2008. V. 152. № 4. P. 507.
9. Hong Z., Davidson D.F., Hanson R.K. // Combust. and Flame. 2011. V. 158. № 4. P. 633.
10. Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al. // Combust. and Flame. 2013. V. 160. P. 995.
11. Schonborn A., Sayad P., Konnov A.A., Klingmann J. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. № 23. P. 12166.
12. Hashemi H., Christensen J.M., Gersen S., Glarborg P. // Proc. Combust. Inst. 2015. V. 35. P. 553.
13. Smith G.P., Tao Y., Wang H. // Foundational Fuel Chemistry Model. Ver. 1.0 (FFCM-1), 2016. <https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM1/pages/FFCM1.html>
14. Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.
15. Jin S., Shu B., He X., Fernandes R., Li L. // Fuel. 2021. V. 303. № 121291.
16. Zhang Y., Fu J., Xie M., Liu J. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2021. V. 46. № 7. P. 5799.
17. Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К., Бетев А.С., Медведев С.П., Хомик С.В. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 8. С. 66.
18. Olm C., Zsely I.G., Palvolgyi R. et al. // Combust. and Flame. 2014. V. 161. № 9. P. 2219.
19. Konnov A.A. // Combust. Flame. 2019. V. 203. P. 14.
20. Weydahl T., Pouyapakkam M., Seljeskog M., Haugen N.E.L. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2011. V. 36. № 18. P. 12025.
21. Skrebkov O.V., Kostenko S.S., Smirnov A.L. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2020. V. 45. P. 3251.
22. Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
23. Baulch D.L., Bowman C.T., Cobos C.J. et al. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. № 3. P. 757.
24. Sanchez A.L., Williams F.A. // Progr. Energy Combust. Sci. 2014. V. 41. P. 1.
25. Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К. и др. // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 3. С. 70.
26. Ranzi E., Frassoldati A., Grana R. et al. // Progr. Energy Combust. Sci. 2012. V. 38. № 4. P. 468.
27. Vlasov P.A., Kusnetsov N.M., Petrov Y.P., Turetskii S.V. // Proc. 24th ICDERS (Intern.). Taiwan, Taipei, 2013. Paper 153. <http://www.icders.org/ICDERS2013/abstracts/ICDERS2013-0153.pdf>
28. CHEMKIN-Pro 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1. Reaction Design: San Diego, 2011.
29. Grune J., Sempert K., Haberstroh H., Kuznetsov M., Jordan T. // J. Loss Prevent. Proc. Industries. 2013. V. 26. P. 317.

THE ROLE OF THIRD-BODY

COLLISION EFFICIENCY IN AUTOIGNITION OF HYDROGEN–AIR MIXTURES

A. M. Tereza^{1*}, G. L. Agafonov¹, E. K. Anderzhanov¹, A. S. Betev¹,
S. P. Medvedev¹, V. N. Mikhalkin^{1,2}, S. V. Khomik¹, T. T. Cherepanova¹

¹*Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*Academy of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Moscow, Russia*

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

Numerical simulations of autoignition of lean (6% H₂), stoichiometric, and rich (90% H₂) hydrogen–air mixtures have been performed to examine the influence of third-body efficiency (chaperon efficiency, CE) on the value of ignition delay, τ . The temperature ranges explored in the computations are 850–1000 K for $P_0 = 1$ bar and 1000–1200 K for $P_0 = 6$ bar. By using a detailed kinetic mechanism, it has been found that the sensitivity of ignition delay to CE is the highest for the reaction step $H + O_2 + M = HO_2 + M$, which can lead to a variation in τ by a factor of 2 to 3. A pressure increase or deviation from stoichiometry reduces the sensitivity. The influence of CE is qualitatively different and weaker for the reaction step $OH + OH + M = H_2O_2 + M$.

Keywords: hydrogen–air mixture, numerical simulation, chemical kinetics, ignition delay, detailed kinetic mechanism, chaperon efficiency

REFERENCES

1. S. Yakovenko, I. S. Medvedkov, and A. D. Kiverin, *Russ. J. Phys. Chem. B* **16**, 294 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122020142>
2. Yakovenko, and A. Kiverin, *Fire* **6**, 239 (2023).
<https://doi.org/10.3390/fire6060239>
3. A. D. Kiverin, I. S. Medvedkov, and I. S. Yakovenko, *Russ. J. Phys. Chem. B* **16**, 1075 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122060057>
4. V. F. Nikitin, E. V. Mikhalkchenko, L. I. Stamov, V. V. Tyurenkova, and N. N. Smirnov, *Acta Astronautica* **213**, 156 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.08.036>
5. N. N. Smirnov, V. V. Azatyan, V. F. Nikitin et al., *Intern. J. Hydrogen Energy* **B 49**, 1315 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.11.085>
6. N. N. Smirnov, V. F. Nikitin, E. V. Mikhalkchenko, L. I. Stamov, V. V. Tyurenkova, *Intern. J. Hydrogen Energy* **B 49**, 495 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.08.184>
7. P. Saxena, and F. A. Williams, *Combust. Flame* **145**, 316 (2006).
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.10.004>
8. A. A. Konnov, *Combust. Flame* **152** (4), 507 (2008).
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.10.024>
9. Z. Hong, D. F. Davidson, and R. K. Hanson, *Combust. Flame* **158** (4), 633 (2011).
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.10.002>
10. A. Keromnes, W.K. Metcalfe, K.A. Heufer et al., *Combust. Flame* **160**, 995 (2013).
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.01.001>
11. A. Schönborn, P. Sayad, A.A. Konnov, and J. Klingmann J., *Intern. J. Hydrogen Energy* **39** (23), 12166 (2014).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.05.157>
12. H. Hashemi, J. M. Christensen, S. Gersen, and P. Glarborg, *Proc. Combust. Inst.* **35**, 553 (2015).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.101>
13. G. P. Smith, Y. Tao, and H. Wang, *Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1)* (2016).
<https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM1/pages/download.html>
14. P. A. Vlasov, V. N. Smirnov, and A. M. Tereza, *Russ. J. Phys. Chem. B* **10** (3), 456 (2016).
<https://doi.org/10.1134/S1990793116030283>
15. S. Jin, B. Shu, X. He, R. Fernandes, and L. Li, *Fuel* **303**, 121291 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121291>
16. Y. Zhang, J. Fu, M. Xie, and J. Liu, *Intern. J. Hydrogen Energy*, **46** (7) 5799 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.11.083>
17. A. M. Tereza, G. L. Agafonov, E. K. Anderzhanov, et al., *Russ. J. Phys. Chem. B* **16**, 686 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122040297>
18. C. Olm, I. G. Zsély, R. Pálvölgyi, et al., *Combust. Flame* **161** (9), 2219 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.03.006>
19. A.A. Konnov, *Combust. Flame* **203**, 14 (2019).
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.01.032>
20. T. Weydahl, M. Poyyapakkam, M. Seljeskog, and N.E.L. Haugen, *Intern. J. Hydrogen Energy* **36** (18), 12025 (2011).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.06.063>
21. O. V. Skrebkov, S. S. Kostenko, and A. L. Smirnov, *Intern. J. Hydrogen Energy* **45**, 3251 (2020).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.168>
22. N.M. Kuznetsov, *The Kinetics of Monomolecular Reactions* (Nauka, Moscow 1982) [in Russian]
23. D. L. Baulch, C. T. Bowman, C. J. Cobos, et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data* **34** (3), 757 (2005).
<https://doi.org/10.1063/1.1748524>
24. A. L. Sánchez, and F. A. Williams, *Progr. Energy Combust. Sci.* **41**, 1 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pecs.2013.10.002>

25. A. M. Tereza, G. L. Agafonov, E. K. Anderzhanov, et al., *Russ. J. Phys. Chem. B* **17** (2), 425 (2023).
<https://doi.org/10.1134/S1990793123020173>
26. E. Ranzi, A. Frassoldati, R. Grana, et al., *Progr. Energy Combust. Sci.* **38** (4), 468 (2012).
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.03.004>
27. P. A. Vlasov, N. M. Kusnetsov, Y. P. Petrov and S. V. Turetskii, *Proc. 24th ICDERS*, Paper 153 (2013).
<http://www.icders.org/ICDERS2013/abstracts/ICDERS2013-0153.pdf>
28. CHEMKIN-Pro, Reaction Design, San Diego, 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1, 2011.
29. J. Grune, K. Sempert, H. Haberstroh, M. Kuznetsov, and T. Jordan, *J. Loss Prevent. Proc. Industries* **26**, 317 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2013.09.008>