

А. Л. Абдуллин, В. Г. Крюков, К. А. Березовская

АЛГОРИТМ КОНВЕРСИИ И ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ МЕЖДУ БАЗАМИ ДАННЫХ ВЕЩЕСТВ

Ключевые слова: высокотемпературные процессы, индивидуальные вещества, база данных, аппроксимация.

Разработаны алгоритм и программное обеспечение для преобразования и передачи информации между разными базами данных по веществам, используемых в расчетах высокотемпературных процессов. Алгоритм включает: чтение информации о веществе из базы-источника (IBTANTHERMO, THERMO, LEEDS, BURCAT); формирование зависимостей энтальпии и энтропии от температуры в табличной форме; коррекция таблицы в соответствии с размерностями и термической шкалой рабочей базы (ТТИ); аппроксимация таблицы методом Чебышева; оценка ошибок аппроксимации и запись в архив. Выполненные расчеты показали, что: эти ошибки незначительны; для однозначного определения коэффициентов аппроксимации в программе необходимо использовать двойную точность.

Key words: high-temperature processes, individual substances, data base, approximation.

Are developed a algorithm and code to convert and transfer information between different databases of substances used in calculations of high-temperature processes. The algorithm includes: reading information of specie from the source database (IBTANTHERMO, THERMO, LEEDS, BURCAT); formation of the temperature dependencies of enthalpy and entropy in tabular form; correction table according to the dimensions and thermal scale of working base (TTI); approximation of table in polynomial form by Chebyshev method; error estimations of approximation and record store in the archive. Calculations showed that: there errors are minor; to determine punctually the approximation coefficients is necessary to use the double precision in code.

Введение

Математическое моделирование процессов горения и пиролиза широко используется для прогнозирования характеристик высокотемпературных энергоустановок (печи, газогенераторы, пиролизеры). Известно, что такие процессы описываются достаточно сложными механизмами реакций со значительным числом реагирующих веществ. Информация об этих веществах (молекулярная масса μ , параметры Леннарда-Джонса σ и ϵ/k и, главным образом, зависимости энтальпии и энтропии от температуры $H = f(T)$ и $S_o = f(T)$) собраны в базах данных индивидуальных веществ.

Но, как правило, каждая база данных имеет отличную от других: структуру информации, единицы измерения, термическую шкалу и набор индивидуальных веществ. Например, база данных THERMO [1] специализирована на определение характеристик продуктов сгорания ракетных топлив, а база [2] ориентируется на реагирующие углеводородные среды с высокой молекулярной массой. Поэтому интересными являются, в частности следующие задачи:

- о влиянии рассогласования данных о веществах (содержащихся в разных базах) на результаты расчетов высокотемпературных процессов и какие данные являются более корректными;
- о расширении рабочей базы за счет веществ, представленных в других базах, что, например, необходимо при переходе от задач расчета энергетических характеристик к задачам прогнозирования вредных выбросов.

Пример первой задачи показан в работе [3], которая специально посвящена сравнению результатов полученных по одной и той же программе, но при использовании различных баз данных. На рис. 1 показаны изменения концентраций веществ OH и NH в реагирующей среде O-N-H-Ar в ходе ее сгорания в реакторе идеального вытеснения.

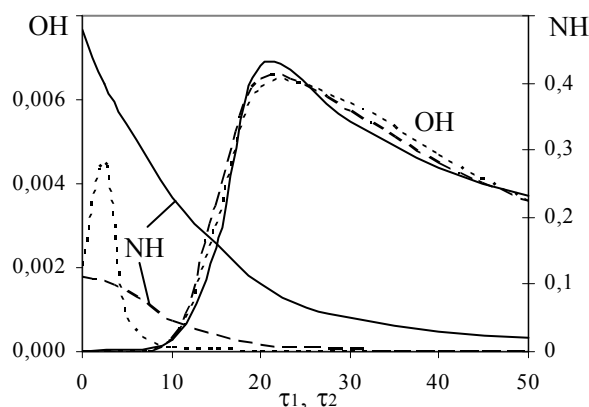


Рис. 1 - Изменение концентраций веществ OH и NH в реагирующей среде (O-N-H-Ar) при использовании различных баз данных: (—) — [5]; (---) — [6]; (- -) — [7]; [OH (мольные доли)] = $f(t_1)$; [NH (ppm)] = $f(t_2)$; размерность t_1 (мс); $t_2 = 0,1 t_1$

Расчеты были выполнены по программе CHEMKIN [4], с поочередным применением баз данных [5, 6, 7]. Как видно, на эволюцию вещества OH смена базы практически не влияет, но имеется значительное влияние этого фактора на изменение концентрации NH.

Пример второй задачи представлен в работе [8], где моделируется сложная среда «Уголь + Воздух + CaCO_3 ». Сначала реагирующая среда представлялась 46 веществами, взятыми из базы ТТИ [9]. Но затем возникла необходимость увеличить число реакций и веществ. Эти вещества (отсутствующие в базе ТТИ) содержались в базах [10,11], но чтобы включить их в рабочую базу программы расчета пришлось реаппроксимировать температурные зависимости энтальпии и энтропии, оценивать погрешности и занести «вручную» определенный набор чисел.

Для рационального решения таких задач имеет смысл разработать некоторый алгоритм и программное обеспечение реаппроксимации и сравнения температурных зависимостей энтальпии и энтропии веществ содержащихся в различных базах данных.

Краткая характеристика известных баз данных

В научных исследованиях широко используются базы данных: [1], [2], [9], [10], в которых зависимости $H = f(T)$, $S_o = f(T)$ представляются полиномами. Основные из этих баз кратко описаны ниже:

База данных THERMO [1]

Эта база содержит один архив индивидуальных веществ (газообразные, конденсированные и ионизованные). Зависимости их энтальпий и энтропий по температуре описываются формулами:

$$\frac{H}{R_0 T} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (1)$$

$$\frac{S_o}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 \quad (2)$$

где H – энтальпия; S_o – энтропия при давлении $P=1$ атм.; $a_1, a_2, \dots, a_7$ – коэффициенты аппроксимации для газообразных веществ записываемые для двух температурных интервалов 300K .. 1000K, 1000K .. 5000 (6000)K. Для конденсированных веществ количество этих интервалов может быть больше (например вещество SiO_2 представляется 4-мя температурными интервалами). Каждое вещество идентифицируется химической формулой и дополняется индексом: G (газ), L (жидкость), S (твердое вещество). В базе используются международные единицы измерения, а именно: H (дж/кмоль) и S_o (дж/(кмоль K)). Для элементов в наиболее устойчивом состоянии (при $T_0 = 298,15\text{K}$) теплота образования $(\Delta H_f^0)_{298,15} = 0$. Такую же структуру имеют другие базы по веществам (BURCAT[2], LEEDS[11], и др.) используемые за рубежом.

База данных ТТИ [9]

Эта база содержит 2 архива: газообразных (G) и конденсированных веществ (K). Зависимости $H(T)$, $S_o(T)$ для газообразных веществ представляются формулами:

$$H = a_0 + \sum_{q=1}^7 a_q x^q \quad x = 0,001 \cdot T \quad (3)$$

$$S_o = a_s + 10^{-3} a_1 \ln x + \sum_{q=2}^7 \frac{q}{q-1} a_q x^{q-1} \quad (4)$$

где значения $a_0, a_s, a_1 \dots a_7$ являются коэффициентами аппроксимации H , S_o на интервале $T=300 \dots 6000\text{K}$. Зависимости $H(T)$, $S_o(T)$ для конденсированных веществ имеют точки разрыва (фазовые переходы) и поэтому аппроксимация этих зависимостей выполняется между этими точками по формулам:

$$H = a_0 + \sum_{q=1}^3 a_q x^q \quad x = 0,001 \cdot T; \quad (5)$$

$$S_o = a_s + 10^{-3} a_1 \ln x + \sum_{q=2}^3 \frac{q}{q-1} a_q x^{q-1}; \quad (6)$$

Для каждого конденсированного вещества предусматриваются от 2-х до 4-х субинтервалов аппроксимации. В архивы G и K включены: молекулярная масса и химическая формула (а также валентность для атомарных веществ). Кроме того, в архиве G содержатся параметры Леннарда-Джонса (σ и ϵ/k). В этой базе используются единицы: (ккал/кмоль) – для энтальпии; (ккал/(кмоль K)) – для энтропии. Термическая шкала энтальпии формируется по тем же правилам, что и в базе THERMO, но при $T_0 = 293,15\text{K}$.

База данных ИВТАНТЕРМО [10]

Эта база включает только один архив, содержащий информацию о газовых, конденсированных и ионизованных веществах. Зависимости $H(T)$, $S_o(T)$ для каждого вещества представляются формулами:

$$H = A_f + 10^4 [-2a_{-2} X^{-1} + a_{-1} + a_2 X + a_1 X^2 + 2a_2 X^3 + 3a_3 X^4] \quad (7)$$

$$S_o = -a_{-2} X^{-2} + a_1 \ln X + a_0 + a_L + 2a_1 X + 3a_2 X^2 + 4a_3 X^3 \quad (8)$$

где $X = 10^{-4} T$

Для газовых веществ общий интервал аппроксимации $T=300 \dots 20000\text{K}$, а для конденсированных $T=300\text{K} \dots 6000\text{K}$, и для каждого вещества аппроксимация выполняется на двух или более температурных субинтервалах. Используется та же самая термическая шкала и система единиц, что и в базе THERMO. Приводятся также параметры Леннарда-Джонса.

Таким образом, между способами представления данных в базах: THERMO, ИВТАНТЕРМО, ТТИ существуют значительные отличия в: формулах аппроксимации энтальпий и энтропий по температуре; температурных субинтервалах; в единицах измерения и термических шкалах и т.д. В то же время часто возникает необходимость сравнения данных и их передачи из одной базы в другую. В настоящей работе для упрощения решения этих задач были разработаны алгоритм и программное обеспечение конвертирования и передачи информации из баз данных типа THERMO и ИВТАНТЕРМО (базы – источники), в базу ТТИ (рабочая база).

Алгоритм конвертирования информации

Основная задача этого алгоритма заключается в трансформации функций H , $S_o = f(T)$ из представлений базы-источника (например, ИВТАНТЕРМО) в форму, принятую в рабочей базе (в дальнейшем для описания параметров базы-источника используется индекс E , а для параметров рабочей базы – индекс R). Предлагаемый алгоритм включает следующие шаги:

1. По химическому символу вещества из базы E считать необходимую информацию: A_f , T_{in} , T_f , a_0 , a_L , a_{-2} , a_{-1} , a_1 , a_2 , a_3 для всех температурных субинтервалов (индексы: in – начало, f – конец субинтервала).
2. Сформировать таблицу температур для всего интервала T_k , $k=1 \dots (\sum_{i=1}^t k_i + 1)$, где t – число темпера-

турных субинтервалов, k_i – количество «шагов» по температуре на каждом субинтервале;

3. Произвести расчет параметра ΔE_s , характеризующего смещение в значениях энтальпий при различных началах отсчета, принятых в базах $E(T_{E,0})$ и $R(T_{R,0})$:

$$F_j = 10^4 [-2a_{-2}X_j^{-1} + a_{-1} + a_2X_j + a_1X_j^2 + 2a_2X_j^3 + 3a_3X_j^4] \quad j=1,2 \quad (9)$$

где $X_1 = 10^{-4} \cdot T_{E,0}$; $X_2 = 10^{-4} \cdot T_{R,0}$.

Тогда:

$$\Delta E_s = F_2 - F_1 \quad (10)$$

4. Произвести расчет параметров H_k^E, S_{0k}^E по соотношениям (7, 8) для определенных на шаге 2 значений T_k .

5. Произвести перерасчет значений энтальпии и энтропии в соответствии с начальным значением температуры и размерностью, принятыми в расчетной модели:

$$\frac{H_k^E + \Delta E_s}{4,184} \Rightarrow H_k^R; \quad \frac{S_{0k}^E}{4,184} \Rightarrow S_{0k}^R; \quad (11)$$

При одинаковых началах отсчета энтальпии в базах E и R шаг 3 не выполняется, а в формуле (11) производится только пересчет размерности.

6. В соответствии с полученными значениями $H_k^R = f_H(T_k); S_{0k}^R = f_S(T_k)$ найти коэффициенты $a_0, a_s, a_1, a_2 \dots a_7$ полиномов (3,4) по методу Чебышева [12].

7. Вычислить значения $H_k^R = f_H(T_k)$ и $S_{0k}^R = f_S(T_k)$ по формулам (3,4).

8. Определить погрешность реаппроксимации $\varepsilon_k^H, \varepsilon_k^S$ по формулам:

$$\varepsilon_k^H = \frac{|H_k^R - H_k^E|}{C_{pk}^E}; \quad \varepsilon_k^S = \frac{|(S_{0k}^R - S_{0k}^E)T_k|}{C_{pk}^E}; \quad (12)$$

9. Если полученная погрешность меньше допустимой (например, среднее арифметическое $\bar{\varepsilon}^H, \bar{\varepsilon}^S < 1^\circ\text{K}$), то результаты реаппроксимации корректны и могут быть использованы в базе R для применения в программах расчета процессов горения и пиролиза.

В соответствии с приведенным алгоритмом (шаги 1-9) были созданы программы конвертирования и передачи информации по направлениям: (THERMO $\Rightarrow$ ТТИ) и (ИВТАНТЕРМО $\Rightarrow$ ТТИ).

Влияние точности вычислений на коэффициенты аппроксимации

В соответствии с приведенным алгоритмом на шаге 6 методом Чебышева определяются коэффициенты аппроксимации по табличным данным температуры ($x_j = bT_j$) и энтальпии (H_j) заданных в точках j где b – масштабный коэффициент (в базе ТТИ $b = 0,001$). Из табличной зависимости $[x_j, H_j]$ необходимо получить коэффициенты a_i полинома (3), т.е.:

$$[x_j, H_j] \Rightarrow H(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i; \quad (13)$$

Полиномы Чебышева имеют вид:

$$\begin{aligned} g_0(x) &= 1; & g_1(x) &= x; \\ g_{n+1}(x) &= 2xg_n(x) - g_{n-1}(x); \end{aligned} \quad (14)$$

Традиционный символ для этих полиномов « T » мы заменили на символ « g », чтобы не путать с символом температуры. На базе полиномов Чебышева зависимость $H(x_i)$ можно записать в виде:

$$H(x, a') = \sum_{i=0}^n a'_i g_i(x) \quad (15)$$

где $a' \equiv (a'_1, a'_2, \dots, a'_n)$ и a'_i – «промежуточные» коэффициенты аппроксимации. Для их определения необходимо решить систему линейных уравнений:

$$A_{jk} a'_k = B_j \quad (16)$$

где $j = 1, \dots, m; \quad i, k = 0, \dots, n;$

$$A_{jk} \equiv (g_i, g_k) = \frac{1}{m+1} \sum_{j=0}^m g_i(x_j) g_k(x_j) \quad (17)$$

$$B_j \equiv (g_i, H) = \frac{1}{m+1} \sum_{j=0}^m g_i(x_j) H(x_j) \quad (18)$$

После решения системы (16) значения a'_i несложно пересчитать в применяемые в рабочей базе коэффициенты a_i .

Предварительные расчеты показали, что матрица A_{jk} может быть плохо обусловленной, что приводит к погрешностям при вычислении коэффициентов a_i . Поэтому необходимо определить факторы, влияющие на эти погрешности, и важнейшим из них, очевидно, является число значащих цифр, учитываемых в расчетах. Для этого были написаны 4 версии программы аппроксимации:

- с одинарной точностью (на языках Fortran (AF1) и C⁺⁺ (AC1));
- с двойной точностью (Fortran (AF2) и C⁺⁺ (AC2)).

Используя их, были выполнены численные эксперименты по реаппроксимации данных из базы THERMO в «стандарт» базы ТТИ с целью установления разницы между коэффициентами a_i , определяемыми по этим программам. Некоторые результаты представлены в таблицах 1 и 2.

Коэффициенты аппроксимации $a_0, a_1 \dots a_7$ для газообразных веществ H_2O и NO в интервале $T = 200 \dots 6000\text{K}$, вычисленные по кодам AF1 и AC1 показаны в таблице 1. Как видно, по коэффициентам a_0, a_1, a_2, a_3, a_4 разница является незначительной, но становится заметной для коэффициентов a_5, a_6 и a_7 , что является сигналом «ухудшения» обусловленности системы уравнений (16).

Для конденсированных веществ разница по коэффициентам может стать еще заметнее. В таблице 2 показаны коэффициенты реаппроксимации a_s, a_1, a_1, a_2, a_3 (определенных по четырем кодам: AF1, AC1, AF2 и AC2) для вещества SiO_2^* на интервалах: $T = 200 \dots 847\text{K}$, $T = 847 \dots 1000\text{K}$, $T = 1000 \dots 1600\text{K}$. Как видно, разница между коэффициентами, полученными по кодам AF1, AC1 значительна, особенно на интервале $T = 847 \dots 1000\text{K}$. Кроме того, по коэффициентам a_2, a_3 разница является более значительной, чем по коэффициентам a_1, a_1 . В тоже время, коэффициенты, определенные по кодам двойной точности

(AF2 и AC2) являются практически одинаковыми. Поэтому дальнейшие расчеты выполнялись по программам AF2 или AC2.

Таблица 1 – Коэффициенты реаппроксимации (THERMO $\Rightarrow$ ТТИ) веществ H_2O и NO в интервале $T=200K\div6000K$

H_2O	$a_1 \cdot 10^{-5}$	$a_1 \cdot 10^{-4}$	$a_2 \cdot 10^{-3}$	$a_3 \cdot 10^{-4}$
AC1	-.60077	.77361	-.23521	.16747
AF1	-.60078	.77413	-.24629	.16852
	$a_4 \cdot 10^{-3}$	$a_5 \cdot 10^{-3}$	$a_6 \cdot 10^{-2}$	$a_7 \cdot 10^{-1}$
AC1	-.80102	.18547	-.21921	.10569
AF1	-.80621	.18683	-.22103	.10666
NO	$a_1 \cdot 10^{-5}$	$a_1 \cdot 10^{-4}$	$a_2 \cdot 10^{-3}$	$a_3 \cdot 10^{-4}$
AC1	.19919	.60671	.15681	-.04581
AF1	.19920	.60621	.15794	-.04691
	$a_4 \cdot 10^{-3}$	$a_5 \cdot 10^{-1}$	a_6	a_7
AC1	.07327	-.49383	-.11892	.02640
AF1	.07873	-.63961	-.07863	.01573

Таблица 2 – Коэффициенты реаппроксимации (THERMO $\Rightarrow$ ТТИ) вещества SiO_2^* в 3-х интервалах температур

1	2	3	4	5
200K–847K	AF1	AC1	AF2	AC2
$a_5 \cdot 10^{-2}$	.058094	.058067	.058349	.058349
$a_1 \cdot 10^{-6}$	-.219755	-.219755	-.21976	-.21976
$a_1 \cdot 10^{-5}$	.032225	.032216	.03234	.03234
$a_2 \cdot 10^{-4}$	1.45689	1.45717	1.4546	1.4546
$a_3 \cdot 10^{-3}$	-4.78180	-4.78387	-4.7673	-4.7673
847K–1000K	AF1	AC1	AF2	AC2
$a_5 \cdot 10^{-2}$	.047670	-.031870	.25431	.25431
$a_1 \cdot 10^{-6}$	-.218093	-.216557	-.22210	-.22210
$a_1 \cdot 10^{-5}$	.010822	-.039375	.14144	.14144
$a_2 \cdot 10^{-4}$	1.52962	2.07526	.11309	.11309
$a_3 \cdot 10^{-3}$	-5.08680	-7.05929	.02449	.02449
1000K–1696K	AF1	AC1	AF2	AC2
$a_5 \cdot 10^{-2}$	.254220	.252499	.25324	.25324
$a_1 \cdot 10^{-6}$	-.222112	-.222052	-.22208	-.22208
$a_1 \cdot 10^{-5}$	.141539	.140139	.14074	.14074
$a_2 \cdot 10^{-4}$	.114314	.124890	.12035	.12035
$a_3 \cdot 10^{-3}$	.014209	-.011933	-.00077	-.00077

Результаты численных исследований

В ходе численных исследований по программе AF2 были выполнены расчеты конвертирования по более, чем 50 веществам из каждой источниковой базы. Некоторые результаты по погрешностям конвертирования информации из базы данных IVTAN-THERMO в рабочую базу приведены на рис.2-4. На рис.2 представлено распределение погрешностей ε_k^H , ε_k^S по температуре для газообразного вещества H_2O . Очевидно, что в выбранном температурном интервале (298 – 6000°K) эти погрешности не превышают 1°K, имея максимум в зоне низких температур.

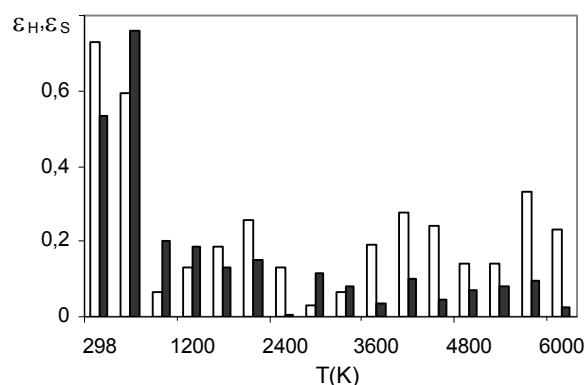


Рис. 2 – Распределение погрешностей ε_S (□) и ε_H (■) по температурному интервалу (298–6000K) для H_2O -газ

На рис. 3, 4 представлено распределение погрешностей ε_k^H , ε_k^S по температуре для конденсированного вещества $Fe_2O_3^*$ на двух температурных интервалах. Максимальная величина погрешностей ε_H , ε_S достигает 1,5°K в интервале от 300K до 400K (рис. 3) при средних значениях $\bar{\varepsilon}_H$, $\bar{\varepsilon}_S = 0,4^\circ K$.

Аналогичные результаты были получены для всех рассмотренных веществ. Средняя погрешность реаппроксимации для газов находится в допустимых пределах и не превышает 1°K. Однако, для конденсированных веществ наблюдаются погрешности $\bar{\varepsilon}_H$, $\bar{\varepsilon}_S$ более высокие, чем для газов, особенно на первом температурном интервале, соответствующем относительно низким температурам.

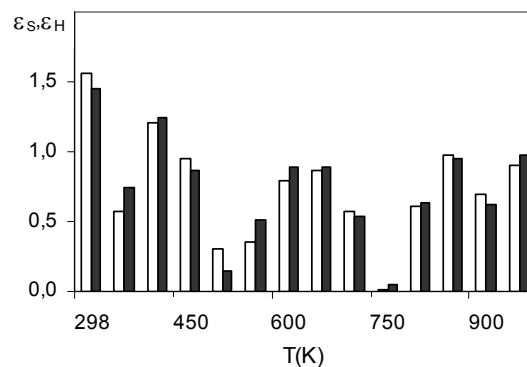


Рис. 3 – Распределение погрешностей ε_S (□) и ε_H (■) по интервалу температуры для конденсированного вещества $Fe_2O_3^*$ ($\Delta T=298\ldots955K$)

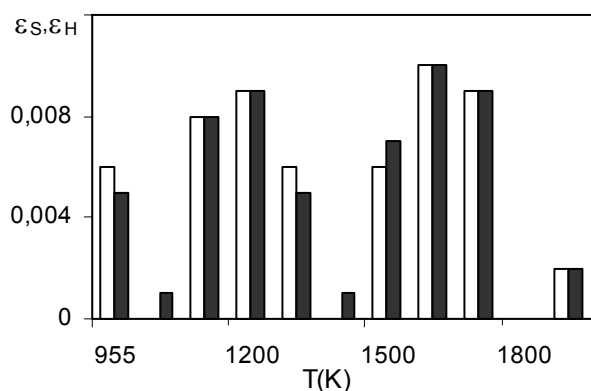


Рис. 4 - Распределение погрешностей ε_S (□) и ε_H (■) по интервалу температуры для конденсированного вещества Fe_2O_3^* ($\Delta T = 955 \dots 1812 \text{ K}$)

Заключение

1. Для обеспечения моделирования высокотемпературных процессов широко используются базы данных по веществам (THERMO, ТТИ, ИВТАНТЕРМО). Однако, эти базы имеют разные структуры, термические шкалы, формы зависимостей энтальпии и энтропии от температуры, что затрудняет обмен данными между базами.
2. В результате проведенных исследований был разработан алгоритм, реализованный в программу, обеспечивающую оперативное конвертирование информации о свойствах индивидуальных веществ из баз данных типа THERMO и ИВТАНТЕРМО в рабочую базу ТТИ с оценкой погрешностей, вызванными реаппроксимацией зависимостей $H = f(T)$, $S_0 = f(T)$.
3. Для всех «проверенных» веществ как газообразных, так и конденсированных (на назначенных температурных интервалах) эти погрешности находятся в допустимых пределах (ε_H , $\varepsilon_S \approx 1^\circ \text{K}$). Максимальная погрешность (ε_H , $\varepsilon_S \approx 3^\circ \text{K}$) отмечается для конденсированных веществ в интервале невысоких температур (от 300K до 600K).
4. В целях большей однозначности определения коэффициентов реаппроксимации рекомендуется использовать версию программного обеспечения с

переменными двойной точности (AF2), так как применение одинарной точности может привести к ошибкам при расчете этих коэффициентов из-за возможности плохой обусловленности системы уравнений (16).

Литература

1. Gordon S., McBride B.J.. *Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman – Jouguet Detonations*. NASA SP-273, Washington, USA, 1971, 245 p.
2. Burcat A. *Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion*. Technion Aerospace Engineering (TAE) Report # 867, January 2001, 127 p.
3. Martin R.J., Brown N.J. The importance of Thermodynamics to the Modeling of Nitrogen Combustion Chemistry // *Combustion and Flame*, V. 78, pp. 365-376, 1989.
4. Kee R.J., Miller J.A., Jefferson T.H. *CHEMKIN: A General-Purpose Transportable. Fortran Chemical Kinetics Code Package*. SAND80-8003, 1980. 106 p.
5. Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A. *The CHEMKIN Thermodynamic Data Base*. SAND87-8215, 1987. 67 p.
6. Westbrook C.K., Chase L.L. *Chemical Kinetics and Thermochemical Data for Combustion Applications*. UCID-17833, Rev. 3, 1983, 53 p.
7. Chase Jr.M.W., Davies C.A., Downey Jr..J.R., Frurip D.J., McDonald R.A., Syverud A.M.. *JANAF Thermochemical Tables*. 3rd Edition, V.14, №1, 1985, 1856p.
8. Costa V.J., Krioukov V.G., Maliska C. R. Pulverized Coal Combustion and its Interaction with Moisture // *Proceedings of 35-th National Heat Transfer Conference- NTHC*, California, USA, V.1, 2001, 6 p.
9. Алемасов В.Е., Дрегалин А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.И. *Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания*. Справочник, Том 1, Москва, ВИНТИ, 1971, 266 с.
10. Белов Г.В., Иориш В.С., Юнгман В.С. Моделирование равновесных состояний термодинамических систем с использованием ИВТАНТЕРМО для Windows // *Теплофизика высоких температур*, Т. 28, № 2, стр. 191-196, 2000.
11. *LEEDS Reaction Kinetics Database*. School of Chemistry, University of Leeds, 2000. 43 p.
12. Калиткин Н.Н. *Численные методы*. Москва, Изд. Наука, 1978, 512 с.