

УДК 519.6
PACS 02.60.Cb**АПРОБАЦИЯ CFD-КОДА CABARET-COMBUSTION НА ДАННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
ПО УСКОРЕННОМУ ГОРЕНИЮ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ
НА УСТАНОВКЕ «БОЛЬШОЙ МАКЕТ-ТРУБА»****Гавриков А.И., Данилин А.В.**

(ФГБУН «Институт проблем безопасного развития атомной энергетики» РАН, г. Москва),

Безгодов Е.В., Пасюков С.Д., Симоненко В.А.

(ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», г. Снежинск)

Контакты: Андрей Игоревич Гавриков; gavrikovandrey@yandex.ru

Вопросы водородной взрывобезопасности крайне актуальны. В поиске решений требуются не только экспериментальные, но и вычислительные методы.

Цель работы – исследование турбулентного горения водородно-воздушных смесей в экспериментах и апробация расчетного CFD-кода CABARET-COMBUSTION на этих новых данных.

Материал и методы. Исследование проводилось в экспериментальной установке – трубе большого диаметра, а также при помощи численного моделирования дефлаграционного горения.

Результаты. Выявлено хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными данными по скорости распространения фронта пламени и динамике давления на фронте ударной волны.

Заключение. Полученные результаты говорят о перспективности применения CFD-кода CABARET-COMBUSTION в численном решении задач горения водородно-воздушных смесей. Данный код и проверка его работы на данных, полученных с качественной диагностикой, позволит увеличить прогнозные возможности суперкомпьютерного моделирования и проводить анализ гипотетических аварий на качественно новом уровне.

Ключевые слова: водородная взрывобезопасность, CFD-код, схема CABARET, горение водородно-воздушных смесей, турбулентное горение, дефлаграционное горение, суперкомпьютерное моделирование, вычислительные методы высокого разрешения, водородная энергетика, БМТ, труба большого диаметра

Для цитирования: Гавриков А.И., Данилин А.В., Безгодов Е.В., Пасюков С.Д., Симоненко В.А. Апробация CFD-кода CABARET-COMBUSTION на данных экспериментов по ускоренному горению водородно-воздушных смесей на установке «Большой макет-труба». – Атомная энергия, 2024, т. 137, вып. 3–4, с. 206–211.

Финансирование. Работы выполнялись без внешнего финансирования.

Потенциальный конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Развитие энерготехнологических комплексов в России на сегодняшний день связывают с новым стратегическим направлением – водородной энергетикой. Перспективность использования водорода (H_2) обусловлена его хорошей экологичностью, высокой удельной теплотой сгорания, широкой сферой применения и относительной простотой получения. Постановление Правительства Российской Федерации [1] определяет курс на развитие водородной энергетики на среднесрочный (2024), долгосрочный (2035) периоды и в перспективе (до 2050 г.), а также на расширение экспорта энерготехнологических водородных ресурсов. Ставятся задачи по расширению тем исследований, области применения H_2 в качестве технологического энергоносителя и увеличения его производства. Несмотря на перспективность водородной энергетики, необходимо учитывать риски при обращении с H_2 . Легкая воспламеняемость газа, низкая минимальная энергия зажигания и большая удельная теплота сгорания обуславливают крайне высокую степень риска детонации при возможных аварийных утечках H_2 в атмосферу. Особенности пожаро- и взрывоопасности этого газа требуют как экспериментальных исследований, так и программно-вычислительных инструментов вычислительной гидродинамики (англ. Computational fluid dynamics, CFD) для точных прогно-

зов и оценки последствий аварий, обусловленных горением и детонацией H_2 .

Один из наиболее сложных и важных аспектов водородной безопасности – проблема масштабирования при переходе от экспериментальных установок к промышленным объектам [2], таким как химико-технологическая площадка конверсии метана или помещения герметичного ограждения атомной станции, для которых полномасштабные эксперименты практически невозможны из-за технической сложности и высокой стоимости. Ввиду большого числа безразмерных параметров, характеризующих тепло-гидравлические процессы в помещениях герметичного ограждения, полного подобия в экспериментах достичь не удастся. В связи с этим актуальной задачей становится создание надежных расчетно-теоретических инструментов, при использовании которых число свободных параметров минимизируется.

Цель работы – исследование турбулентного горения водородно-воздушных смесей в экспериментах и апробация расчетного CFD-кода CABARET-COMBUSTION на этих новых данных.

В ходе работы решались следующие задачи:

- получение новых опытных данных по ускоренному горению перемешанных водородно-воздушных

смесей (ВВС) с использованием экспериментальной установки;

- моделирование быстрого турбулентного горения этих перемешанных смесей при помощи кода CABARET-COMBUSTION.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ ИССЛЕДОВАНИЯ

Материал. Состав исследуемых ВВС в разных экспериментах отличался по концентрации H_2 . Для приготовления необходимого состава горючей смеси методом парциальных давлений измеряли статическое давление при помощи манометра ЭЛЕМЕР АИР-30М (ООО «НПП «ЭЛЕМЕР»», Россия). Его измерительный диапазон — до 250 кПа, погрешность $\pm 0,15$ кПа. В вакуумированные перед воспламенением баллоны отбирали пробы смеси для анализа состава. Абсолютная погрешность измерения объемной концентрации H_2 находилась в пределах $\pm 0,3\%$.

Оборудование. Опыты проводили на базе ФГУП «Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина» (г. Снежинск, Россия) на разработанной в этом же институте установке «Большой макет-труба» (БМТ) [3]. Стальная труба большого диаметра предназначена для исследования процессов ускорения пламени, приводящих к значительному повышению давления, что служит определяющим фактором разрушений объектов при взрывах. Диаметр трубы круглого сечения — 0,325 м, длина — 6 м. Она соединяется со смесителем (объем — 1 м³), который служит для подготовки горючих смесей.

Положение трубы может быть как горизонтальным, так и вертикальным, что позволяет проводить уникальные эксперименты. После поджига горючей смеси положение БМТ меняют при помощи поворотного шарнира. Вертикальная пространственная ориентация трубы позволяет изучать влияние эффекта плавучести легкого горючего газа. Для исследования горения ВВС это очень важно, так как H_2 самый легкий газ и его свойства в нижнем концентрационном пределе горения в воздухе таковы, что процессы горения сильно различаются в зависимости от направления горения — вверх или вниз — за счет существенного влияния плавучести.

На равном удалении друг от друга в трубе можно установить 13 кольцевых перегородок (две из них — вплотную к торцам трубы) для создания определенной степени загромождения (англ. blockage ratio, BR). Коэффициент перекрытия сечения канала BR — характеристика экспериментальной установки, отражающая соотношение перекрытой перегородкой площади поперечного сечения трубы к общей площади ее сечения:

$$BR = 1 - (d/D)^2,$$

где d — диаметр созданного перегородкой отверстия, м;
 D — диаметр трубы, м.

Перегородки разделяют трубу на 12 секций, по центру каждой из которых в стенке трубы сделаны входные порты, в них устанавливают измерительное оборудование — датчики давления, термопары и датчики-отметчики фронта пламени.

В экспериментах для инициирования горения ВВС в торце трубы размещали искровую свечу зажигания (энергия искры — 20 мДж, искровой зазор — 1 мм). Время прохождения фронта горения газовой смеси, излучающего в ультрафиолетовом диапазоне (длина волны — 300–320 нм), оценивали при помощи датчиков-отметчиков — кремниевых фотоумножителей SiPM (англ. silicon photomultiplier), или датчиков положения фронта пламени, — MicroFJ-SMTPA-30035 (ONSEMI, США). В узких каналах, выполняющих роль коллиматоров и направленных перпендикулярно направлению движения фронта пламени, размещали чувствительные элементы датчиков.

Динамическое давление в газовой смеси измеряли тензометрическими датчиками МИДА-ДИ-12П-082-Ех-В (ГК «Теплоприбор», Россия) с диапазоном измерений до 2,5 МПа и относительной погрешностью $\pm 6\%$, а также пьезоэлектрическими датчиками пульсации динамического давления PS01-02 (ООО «ГлобалТест», Россия) с диапазоном измерений до 25 МПа и относительной погрешностью $\pm 11\%$.

Регламент и условия экспериментов. Все опыты проводили по единому неизменному регламенту:

- подача газов в смеситель в заданных пропорциях (методом парциальных давлений) для создания ВВС;
- перемешивание смеси до однородного состояния при помощи вентилятора, находящегося внутри смесителя;
- вакуумирование трубы БМТ и наполнение ее ВВС из смесителя до заданной величины давления;
- отбор пробы газов из трубы;
- поджиг смеси;
- замеры параметров горения при помощи датчиков;
- удаление оставшихся продуктов реакции (продукта трубы) после завершения опыта.

Условия экспериментов: коэффициент загромождения трубы BR — 0,6; начальное давление в трубе перед воспламенением смеси — 0,1 МПа; температура — 20 °С; пространственная ориентация установки — горизонтальная или вертикальная.

В сериях экспериментов БМТ-3 и БМТ-4, которые отличались пространственным положением трубы, исследовали влияние плавучести на процесс ускорения пламени в зависимости от точки поджига ВВС — сверху или снизу. Известно, что граница перехода горения от медленной дефлаграции к быстрой определяется значением объемной концентрации H_2 в смеси. В опытах при смене положения трубы с горизонтального на вертикальное выявляли смещение этой границы — с 10 до 9,5 об.% водорода соответственно [4].

Таблица 1. Параметры значимых экспериментов с горением водородно-воздушных смесей

Серия, номер опыта	C_{H_2} , об. %	Пространственное положение БМТ	ΔP , 10^5 Па
БМТ-4: № 8 № 2	13,7 11,7	Вертикальное	4,365 3,806
БМТ-3: № 2	11,7	Горизонтальное	3,806

Авторы составили таблицу на основе собственных данных

Примечание. БМТ – экспериментальная установка «Большой макет-труба»; C_{H_2} – объемная концентрация водорода в смеси; ΔP – избыточное давление полного адиабатического сгорания смеси в БМТ.

Для последующего этапа – численного моделирования, были отобраны наиболее значимые эксперименты (табл. 1).

РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе применяли CFD-код **SABARET-COMBUSTION** [5], разрабатываемый в ФГБУН «Институт проблем безопасного развития атомной энергетики» РАН (Москва, Россия). Данный код основан на явной численной вихреразрешающей методике КАБАРЕ [6, 7], к основным свойствам которой относятся консервативность, второй порядок аппроксимации по времени и пространству, компактность вычислительного шаблона, высокое разрешение разрывных гидродинамических течений и сравнительно низкая численная диссипация в классе схем аналогичного порядка точности. Назначение кода **SABARET-COMBUSTION** – расчет турбулентного горения и детонации перемешанных ВВС.

Математическая модель. Движение газовой смеси можно выразить при помощи следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0; \\ \partial_t(\rho u_i) + \operatorname{div}(\rho u_i \mathbf{u}) = -\nabla_i p + \nabla_j \tau_{ij} + \rho g_i, \quad i, j = 1, 2, 3; \\ \partial_t(\rho E) + \operatorname{div}((\rho E + p)\mathbf{u}) = \nabla \mathbf{q} + \nabla_j (u_j \tau_{ij}); \\ \partial_t(\rho \xi_k) + \operatorname{div}(\rho \xi_k \mathbf{u}) = \rho \dot{\xi}_k, \quad k = 1, N; \end{cases} \quad (1)$$

где ρ – плотность, кг/м³; $\mathbf{u}$ – скорость, м/с; p – давление, Па; E – полная внутренняя энергия, Дж/кг; $\xi_k, \dot{\xi}_k$ – массовая доля и скорость химических превращений (с⁻¹) k -го компонента газовой смеси соответственно; $\mathbf{q}$ – плотность теплового потока, Дж/(м² с), τ_{ij} – тензор вязких напряжений (ij), Па; g – ускорение свободного падения, м/с².

Коэффициенты диффузионного переноса вычисляются в соответствии с зависимостями, данными в [8]. Система уравнений (1) дополняется уравнением состояния идеальных газов:

$$p = \rho R T \sum_{k=1}^N \frac{\xi_k}{M_k}$$

где R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль К); T – температура, К; M_k – молярная масса k -го компонента газовой смеси (воздух, водород и водяной пар), кг/моль.

Термодинамические параметры газов определяются полиномами формата NASA 7 [9], приближающими табличные термодинамические данные [10].

Для расчета крупномасштабного горения используется модель, предложенная в работе [11]:

$$\partial_t(\rho C) + \operatorname{div}(\rho C \mathbf{u}) = -\rho_u S_t |\nabla C|, \quad (2)$$

где $C(\xi_{H_2}/\xi_{H_2,u})$ – глубина сгорания топлива; ξ_{H_2} и $\xi_{H_2,u}$ – текущая и начальная массовые доли топлива (H_2) соответственно; ρ_u – плотность начальной горючей смеси, кг/м³; S_t – скорость турбулентного горения, м/с.

Левая часть уравнения (2) отражает конвективный перенос фронта пламени вместе с потоком газа, правая часть – движение фронта пламени по свежей смеси со скоростью турбулентного горения.

Одностадийная необратимая реакция описывает химические превращения (окисление водорода) в эксперименте:



Исходя из уравнения (2) и определения глубины сгорания смеси, получаем выражения для химической кинетики всех компонентов смеси:

$$\begin{cases} \dot{\xi}_{H_2} = -\xi_u \frac{\rho_u}{\rho} S_t |\nabla C| \\ \dot{\xi}_{O_2} = S \dot{\xi}_{H_2} \\ \dot{\xi}_{H_2O} = -(1+s) \dot{\xi}_{H_2} \\ \dot{\xi}_{N_2} = 0 \end{cases}$$

где $\dot{\xi}_{H_2}$ – скорость химических превращений водорода, с⁻¹; $\dot{\xi}_{O_2}$ – скорость химических превращений кислорода, с⁻¹; $\dot{\xi}_{H_2O}$ – скорость химических превращений водяного пара, с⁻¹; $\dot{\xi}_{N_2}$ – скорость химических превращений азота, с⁻¹; s – массовый стехиометрический коэффициент окислителя; для реакции окисления водорода $s = 8$.

Для вычисления скорости ламинарного горения ВВС используется выражение, полученное в работе [12] обобщением массива экспериментальных данных. Скорость турбулентного горения вычисляется в соответствии с выражением, предложенным в [13].

Для учета лучистого теплообмена в объеме и на стенках трубы используется модель дискретных ординат [14].

Расчеты выполняли на гексаэдральной сетке: число ячеек — 1,5 млн, превалирующий размер ячеек — 5 мм. Учитывали как конвективные, так и лучистые теплотери на стенках установки. Данные по экспериментальному избыточному давлению снимали с тензо- и пьезодатчиков, расположенных на расстоянии 750 мм от конца установки. Данные по расчетному избыточному давлению представили в необработанном виде. Расчетные работы выполняли с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова (Суперкомпьютерного комплекса) [15].

Результаты моделирования. Представлены результаты моделирования экспериментов (8 и 2, серия БМТ-4) с горизонтальным положением трубы и с вертикальным положением (2, серия БМТ-3).

1. Расчет эксперимента 8 серии БМТ-4. На рис. 1 наблюдается хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных по динамике положения и скорости фронта пламени вдоль трубы БМТ. Можно сопоставить динамику избыточного давления, полученную на основе экспериментальных и расчетных данных (рис. 2).

2. Расчет эксперимента 2 из серии БМТ-4. На рис. 3 видно, что расчетные значения скорости фронта пламени на участке трубы с ускоренным горением оказались несколько ниже экспериментальных. Сопоставление динамики избыточного давления в экспериментах (по данным датчиков) и в расчетной модели представлено на рис. 4.

3. Расчет эксперимента 2 из серии БМТ-3. Расчетные значения скорости фронта пламени на участке трубы с ускоренным горением оказались заметно ниже экспериментальных (рис. 5). Сопоставить

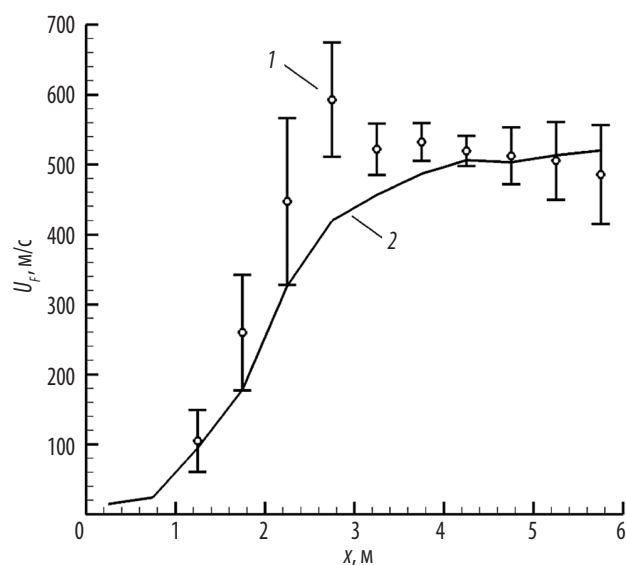


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 1. Динамика положения фронта пламени вдоль длины (x) установки «Большой макет-труба» (БМТ) в зависимости от скорости фронта пламени (U_f): в опыте 8 серии БМТ-4 (1), в расчете по вихреразрешающей методике КАБАРЕ (2)

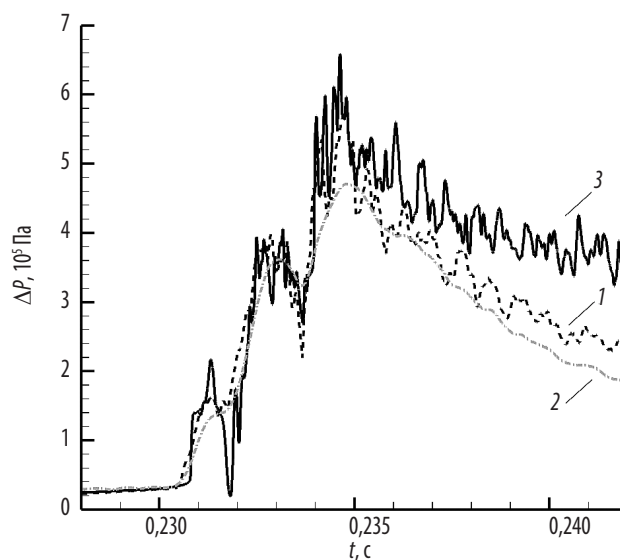


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 2. Динамика избыточного давления (ΔP) в зависимости от времени (t) в опыте 8 серии БМТ-4 по данным пьезодатчика (1) и тензодатчика (2) в установке БМТ и в расчете по методике КАБАРЕ (3). Расчетная кривая сдвинута по оси ОХ на $-0,034$ с для синхронизации с экспериментальными данными

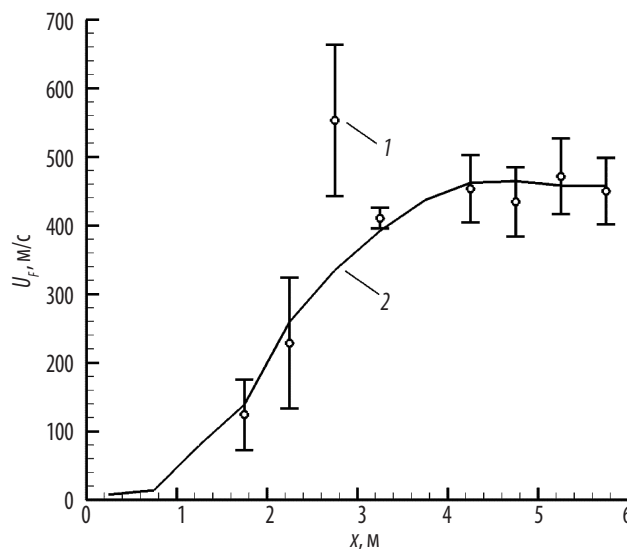


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 3. Динамика положения (x) фронта пламени вдоль длины установки БМТ в зависимости от скорости фронта пламени (U_f) в опыте 2 серии БМТ-4 (1) и в расчете по методике КАБАРЕ (2)

кривые, построенные по экспериментальным данным с датчиков давления и по расчетным данным, можно на рис. 6.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для рассмотренного набора экспериментальных данных наблюдается хорошее соответствие результатов, полученных в опытах и расчетным способом. Однако следует отметить некоторые неопределенности, связанные как с экспериментальной, так и с расчетной методикой.

Во всех случаях расчетная методика воспроизводила скорость распространения фронта пламени

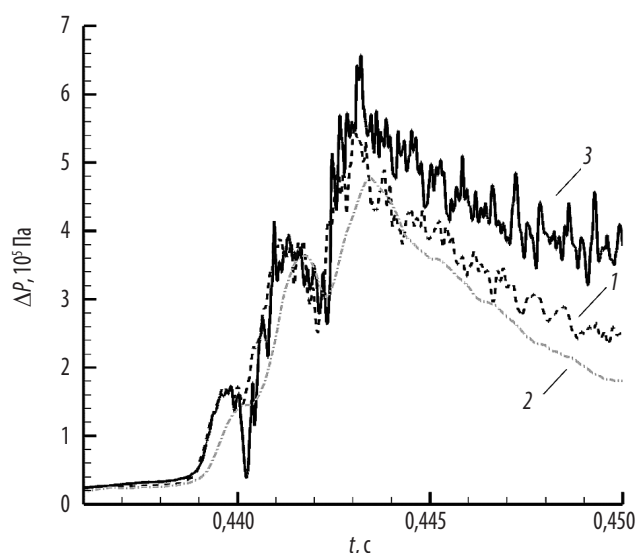


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 4. Динамика избыточного давления (ΔP) в зависимости от времени (t) в опыте 2 серии БМТ-4 по данным пьезодатчика (1) и тензодатчика (2) в установке БМТ и в расчете по методике КАБАРЕ (3). Расчетная кривая сдвинута по оси ОХ на 0,207 с для синхронизации с экспериментальными данными

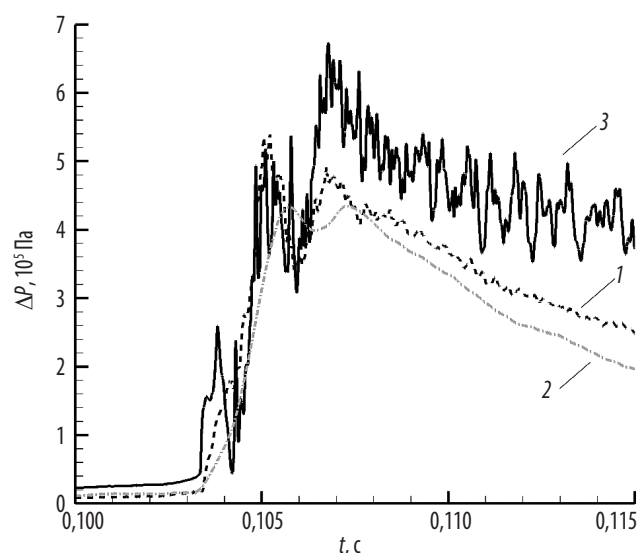


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 6. Динамика избыточного давления (ΔP) в зависимости от времени (t) в опыте 2 серии БМТ-3 по данным пьезодатчика (1) и тензодатчика (2) в установке БМТ и в расчете по методике КАБАРЕ (3). Расчетная кривая сдвинута по оси ОХ на 0,0145 с для синхронизации с экспериментальными данными

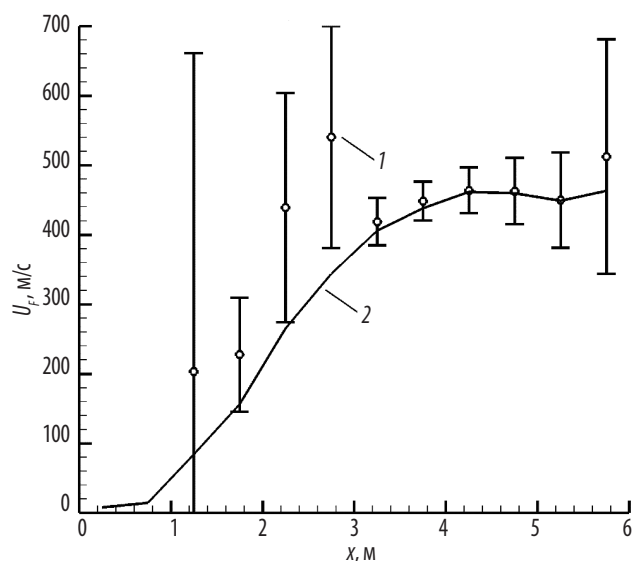


Рисунок составлен авторами на основе собственных данных

Рис. 5. Динамика положения (x) фронта пламени вдоль длины установки БМТ в зависимости от скорости фронта пламени (U_f) в опыте 2 серии БМТ-3 (1) и в расчете по методике КАБАРЕ (2)

во второй половине экспериментальной установки в рамках экспериментальной погрешности, что видно на рис. 1, 3, 5, однако не воспроизводила локальный пик скорости, наблюдаемый во всех экспериментах в области, близкой к центру установки, что может быть объяснено несовершенством используемой зависимости турбулентной скорости горения от масштабов ее турбулентных пульсаций.

Наблюдается расхождение по времени формирования ударного скачка в расчетах и экспериментах. С одной стороны, данный факт можно объяснить несовершенством численной методики, в частности отсутствием специальной модели развития пламени в начальные моменты после поджига, поскольку

данный этап горения не разрешается пространственной сеткой, используемой в расчетах. С другой стороны, может существовать некоторая неоднородность перемешивания горючей смеси в экспериментах. Например, разница во времени формирования ударного скачка в эксперименте 2 из серии БМТ-4 (вертикальная труба) и в расчете объясняется особенностями заполнения установки горючей смесью. После закачки и выдержки смеси устанавливается более низкая концентрация водорода в нижней части трубы, что приводит к меньшей скорости распространения пламени на начальном этапе горения, а это, в свою очередь, приводит к значительной итоговой задержке распространения фронта пламени и формирования ударной волны.

Во всех экспериментах можно выделить три последовательно возникающих скачка давления (см. рис. 2, 4, 6): предварительный, основной и вызванный прохождением отраженной ударной волны. На указанных рисунках отражаются следующие выявленные закономерности:

- 1) расчеты с хорошим соответствием качественно и количественно воспроизводят экспериментально наблюдаемую структуру скачков давления;
- 2) расчетные данные по предварительному скачку давления оказались несколько завышены относительно экспериментальных;
- 3) расчеты по основному скачку давления оказались в пределах погрешности датчиков;
- 4) значения давления в отраженной ударной волне, полученные в экспериментах, были ниже расчетных данных, что можно объяснить температурным воздействием на датчики, поскольку к моменту прохождения отраженной ударной волны горячие продукты реакции уже успевают достичь расположения датчиков. Особенно заметно этот

эффект проявляется в эксперименте № 8 из серии БМТ-4 (см. рис. 6), в котором магнитуа отраженной ударной волны ниже магнитуды основного скачка по показаниям пьезодатчика;

5) данные, полученные при помощи тензодатчиков, имеют меньшее временное разрешение и на кривой располагаются ниже, чем показания пьезодатчиков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены данные новых экспериментов, проведенных на установке «Большой макет-труба», а также расчеты с применением численной модели горения перемешанных водородно-воздушных смесей

при помощи CFD-кода CABARET-COMBUSTION, основанного на явной численной вихреразрешающей методике КАБАРЕ. Расчетные данные по времени и амплитуде с достаточно высокой точностью воспроизводят экспериментальные на начальной волновой стадии процесса. Однако на стадии догорания отмечены расхождения, что, вероятно, может быть связано с температурным воздействием на измерительное оборудование, в связи с чем требуются дополнительные исследования с анализом возможных причин. В целом вихреразрешающий подход к моделированию турбулентности может быть очень перспективным для обоснования аспектов водородной безопасности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Распоряжение** Правительства Российской Федерации № 2162-р от 5 августа 2021 г. «Концепция развития водородной энергетики в Российской Федерации». Режим доступа: <http://publication.pravo.gov.ru/Document/View/0001202108100014?index=1> (дата обращения: 10.04.2024).
2. Drubetskoi E., Eckart S., Krause H. Short overview on combustion systems scale-up with emphasis on NOx emissions of gas-fired furnaces. — *Energy. Sci. Eng.*, 2022, v. 10, p. 621–629. DOI: 10.1002/ese3.1028
3. **Технологии** водородной энергетики: экспериментальные и расчетно-теоретические исследования безопасности. [Электронный ресурс]. Режим доступа: в открытом доступе. URL: <https://vniitf.ru/data/broshyura%20eksperimentalnaya%20baza%20rfyats-vniitf%20vodorodnoy%20energetiki%20pravka%2012.09.23.pdf> (дата обращения 10.04.2024).
4. Bezgodov E.V., Pasyukov S.D., Tarakanov A.A. et al. The effect of buoyancy on flame acceleration in hydrogen-air mixtures: Experiments in horizontal and vertical tubes. — In: *Proc. 28th ICDEERS*. Napoli, June 19–24, 2022, No. 194.
5. Гавриков А.И., Данилин А.В., Канаев А.А., Киселев А.Е. Моделирование детонации в установках крупного масштаба с помощью прецизионного вихреразрешающего кода CABARET-COMBUSTION. — *Изв. РАН. Энергетика*, 2022, т. 4, с. 11–24. DOI: 10.31857/S0002331022040057
6. Головинин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Издательство Московского университета, 2013, 472 с.
7. Большов Л.А., Глотов В.Ю., Головинин В.М. и др. Валидация кода CABARET-SC1 на экспериментах по водородной взрывобезопасности на АЭС. — *Атомная энергия*, 2019, т. 127, вып. 4, с. 18–23. EDN: RNBDJY
8. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. Пер. с англ. Г.Л. Агафонова. Под ред. П.А. Власова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006, 351 с.
9. McBride B.J., Gordon S., Reno M.A.; NASA. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. NASA Technical Memorandum 4513. National Aeronautics and Space Administration, 1993, 90 p.
10. Chase M.W. Jr, Davies C.A., Downey J.R. et al. JANAF Thermochemical Tables, 3rd Ed. — *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1985, v. 14, suppl. 1.
11. Zimont V.L., Lipatnikov A.N. A numerical model of premixed turbulent combustion of gases. — *Chem. Phys. Rep.*, 1995, v. 14, № 7, p. 993–1025.
12. Eitner F.A. Effiziente numerische simulation des deflagrationsdetonations-übergangs. Doktor – ingenieurs dissertation. Munich: Technische Universität München Institut für Energietechnik, 2013, p. 158. (In Germ.).
13. Peters N. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. — *J. Fluid. Mech.*, 1999, v. 384, p. 107–132. DOI: 10.1017/S0022112098004212
14. Снегирёв А.Ю. Тепловое излучение. Основы теории и методы расчета: учеб. пособие. СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2021, 177 с.
15. Воеводин В.В., Жуматий С.А., Соболев С.И. и др. Практика суперкомпьютера «Ломоносов». — *Открытые системы. СУБД*, 2012, № 7, с. 36–39.

Благодарности

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова (Суперкомпьютерного комплекса).

Вклад авторов

Все авторы подтверждают соответствие своего авторства критериям ICMJE. Все авторы участвовали в разработке концепции исследования, написании текста рукописи, формулировке выводов. Окончательный вариант рукописи прочтен и одобрен всеми авторами.

Идентификаторы авторов

Гавриков Андрей Игоревич: ORCID 0000-0001-7307-0024
Данилин Александр Вадимович: ORCID 0009-0005-9652-0653
Безгодов Евгений Витальевич: ORCID 0000-0001-8283-3329
Пасюков Сергей Дмитриевич: ORCID 0009-0000-5281-0169