

УДК 544.454.3, 544.431.7

СРЫВ РАЗВИТОЙ ДЕТОНАЦИИ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ МАЛОЙ ДОБАВКОЙ УГЛЕВОДОРОДНОГО ИНГИБИТОРА

Н. Н. Смирнов^{1,2}, В. Ф. Никитин^{1,2}, Е. В. Михальченко^{1,2}, Л. И. Стамов^{1,2}¹ Научно-исследовательский институт системных исследований РАН (ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН), 117218 Москва² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, mech.math.msu@inbox.ru, vfnikster@gmail.com, mikhailchenkolena@yandex.ru, lyubens@mail.ru

Проведено численное моделирование влияния сравнительно малой добавки неопределенного газообразного углеводорода (пропилена) на динамику детонационной волны в стехиометрической водородно-воздушной смеси. Исследовалось влияние концентрации пропилена на развитие детонации в смеси, вызванной прямым инициированием с помощью притока энергии извне в малом объеме за короткое время, при различной начальной температуре смеси. В исследовании использовался детальный механизм горения водорода и ключевая реакция гидрирования пропилена. Пропилен легко вступает в реакцию гидрирования, изымая атомарный водород из реакционной цепи. Это приводит к увеличению задержки самовоспламенения смеси за лидирующей ударной волной и при достаточной концентрации ингибирующей добавки — к распаду ячеистой структуры детонационной волны и вырождению детонации.

Ключевые слова: детонация, численное моделирование, детальный кинетический механизм, ингибирование, ячеистая структура детонационной волны.

DOI 10.15372/FGV20220508

ВВЕДЕНИЕ

Случайные взрывы представляют реальную опасность для современной промышленности, техники, эксплуатации стратегических объектов и т. д. Одними из важных аспектов решения данной проблемы являются контроль и регулирование интенсивности горения и предотвращение неконтролируемых возгораний и взрывов газов, перехода горения в детонацию.

Поскольку в основе горения и взрыва лежат химические реакции, наиболее эффективно влиять на эти процессы можно, воздействуя в первую очередь на их химический механизм и скорость ключевых реакций методами химической кинетики. Большой цикл работ и монографий по управлению детонационными процессами с помощью химических реакций был опубликован В. В. Азатыном с сотрудниками; прежде всего хочется отметить монографию [1], в которой подведен итог этих исследований.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00297).

© Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Михальченко Е. В., Стамов Л. И., 2022.

Химическая реакция водорода с кислородом — классический пример разветвленной цепной реакции. В цепных реакциях важнейшую роль играют радикалы как промежуточные продукты элементарных стадий. Без посредства радикалов конечный продукт не образуется.

В реакции H_2 и O_2 наиболее подвижный и активный радикал — атомарный водород H . Если снизить его активность, реакция замедлится. Но замедление реакции совсем не означает снижение ее энергетики.

Снижения активности H можно добиться многими способами. Одним из популярных как на практике, так и в теоретических исследованиях является использование фреонов. Применяются также и относительно нейтральные газообразные разбавители. Например, в работе [2] численно исследуется детонационная способность смесей водорода, разбавленных CF_3I , H_2O , CO_2 и N_2 . С использованием детального химико-кинетического механизма окисления водорода изучено ингибирующее действие химически активных (CF_3I , H_2O , CO_2) и химически инертных (N_2) разбавителей на химическую длину и временные масштабы структуры детонации. Также в работе [2] была изучена ин-

гибирующая эффективность фреона CF_3I в отношении гашения детонации смесей водород — воздух/кислород.

В данной работе рассмотрен иной метод снижения концентрации атомарного водорода — присоединение к непредельному углеводороду с ликвидацией двойной связи между атомами углерода. Образующийся радикал алканового ряда значительно менее активен, чем атомарный водород.

В роли ингибитора в настоящем исследовании выступает пропилен C_3H_6 , или $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$; присоединение к нему атомарного водорода с наибольшей вероятностью приводит к образованию радикала пропила C_3H_7 , или $\text{CH}_2=\text{CH}_2-\text{CH}_3$.

Самоподдерживающие свойства детонации во многом определяются задержкой тепловыделения, которая зависит от времени развития цепного процесса. Энерговыведение должно произойти за ударной волной в газе до выхода его за пределы поверхности, отсекающей возмущения от ударной волны. В одномерных моделях это поверхность, на которой относительная скорость газа равна местной скорости звука. В многомерных моделях поверхность, отсекающая возмущения, определяется несколько сложнее, возможны области частичного отсечения возмущений, но суть от этого не изменяется. Увеличение времени реакции ведет к тому, что большая часть энергии выделяется в зоне, в которой скорость течения газа относительно ударной волны сверхзвуковая, поэтому возмущения не доходят до ударной волны и не могут поддерживать ее распространение. Частичное изъятие атомарного водорода H из цепного процесса замедляет реакцию и может привести к переходу первично развившейся после прямого инициирования детонации в режим горения. Количество ингибитора (по объему) при этом не превышает нескольких процентов.

Целью настоящей работы является численное исследование влияния пропилена на детонацию водородно-воздушной смеси, развившуюся в результате прямого инициирования. Поскольку в расчете требуется достаточно детально знать количество атомарного водорода, возникающего на короткое время в окрестности пика волны детонации, математическая модель должна по возможности учитывать не только энергетику горючей смеси, но и детальный механизм развития цепной реакции. В то же время известно, что образующийся при гид-

рировании пропилена свободный радикал пропила имеет малую активность по сравнению с легкими радикалами цепи горения водорода O , H , OH , так что его участие в реакции с последующим выделением энергии происходит с существенной задержкой, уже позади детонационной волны. Это означает, что дальнейшим преобразованием пропила можно пренебречь, если целью исследования является устойчивость детонации, а не такие медленные процессы, как горение. Таким образом, механизм реакции, используемый в настоящем исследовании, состоит из механизма горения водорода с нейтральным азотом и единственной необратимой реакцией гидрирования пропилена атомарным водородом.

Известно [3–5], что детонационная волна имеет ячеистую структуру, в которой давление в узлах на пересечении поперечных ударных и детонационных волн существенно, в три раза и более, превышает теоретическое давление позади детонации Чепмена — Жуге и соответствующее давление в лидирующем пике Неймана для плоской волны. Поскольку динамика реакционной цепи и соответствующего образования в ней атомарного водорода существенно зависит от локальной температуры и плотности, для подобного исследования необходима модель, позволяющая учесть ячеистую структуру, т. е., как минимум, двумерная модель.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Модель представляет собой систему уравнений баланса для многокомпонентной газовой динамики с учетом химических взаимодействий и без учета явлений переноса. Она дополняется моделью смеси совершенных газов и кинетическим механизмом реакций между компонентами смеси. Уравнения баланса:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = \dot{\omega}_k, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((E_T + p)u_j) = \dot{q}. \quad (3)$$

Уравнения баланса массы компонентов $\dot{\omega}_k$ (1), импульса (2) и энергии \dot{q} (3) дополняются определениями плотности смеси ρ как суммы парциальных плотностей компонентов ρ_k , давления p по уравнению состояния смеси совершенных газов и полной энергии E_T как суммы

тепловой, химической и кинетической энергии компонентов:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_C} \rho_k,$$

$$p = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} \frac{\rho_k}{W_k} = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k, \quad (4)$$

$$E_T = \sum_{k=1}^{N_C} X_k E_k(T) + \frac{\rho}{2} u_j u_j.$$

Здесь t — время, x_j — пространственная координата j , u_j , u_i — компонент вектора скорости вдоль координаты, p — давление, N_C — число компонентов газа, N_R — число химических реакций, R_G — универсальная газовая постоянная, T — температура, X_k — молярная плотность компонента k , $E_k(T)$ — сумма внутренней и химической энергии компонента k на 1 моль.

Интенсивность образования компонентов в процессе реакций выражается через интенсивность реакций согласно закону действующих масс:

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^{N_R} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) \times \omega_r(X_1, \dots, X_{N_C}, T), \quad (5)$$

где W_k — молярная масса компонента k , ν'_{kr} , ν''_{kr} — входящий и исходящий стехиометрические коэффициенты компонента k для реакции r . Интенсивность обратимой реакции выражается через коэффициент скорости реакции $f_r(T, M_r)$, константу равновесия K_r и молярную плотность X_k участвующих в ней компонентов:

$$\omega_r = f_r(T, M_r) \times \left[\prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu'_{rk}} - \frac{1}{K_r(T)} \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu''_{rk}} \right]. \quad (6)$$

Для необратимой реакции второй член в квадратных скобках выражения (6) равен нулю, что соответствует большому значению константы равновесия K_r по сравнению с единицей. Константа равновесия определяется термодинамическими свойствами участвующих в реакции компонентов:

$$\ln K_r(T) = - \sum_{k=1}^{N_C} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) \left(\frac{H_k(T)}{R_G T} - \frac{S_k(T)}{R_G} - 1 \right) + \left(\sum_{k=1}^{N_C} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) \right) \ln \frac{p_B}{R_G T}, \quad (7)$$

где $H_k(T)$ — сумма внутренней и химической энтальпии компонента k на 1 моль, $S_k(T)$ — энтропия компонента k на 1 моль для базового давления $p = p_B$. При использовании выражения (7) равновесие предполагается для условий постоянного объема, что при моделировании детонации более приемлемо, чем использование условия постоянного давления, обычно применяющегося при моделировании спокойного горения.

Коэффициент скорости реакции зависит от температуры и обобщенного влияния компонентов смеси. В простейшем случае коэффициент моделируется обобщенной зависимостью Аррениуса от температуры T ; при участии в реакции не изменяющихся в ней компонентов он умножается на коэффициент влияния компонентов смеси на интенсивность реакции M_r . В большинстве детальных механизмов часть реакций зависит от T и M_r сложным образом, и в этом случае применяется методика Трой [6, 7] для его вычисления.

Для исследований нами использован механизм горения водорода [8] с участием 8 компонентов, состоящий из 20 различных обратимых реакций (31 реакция с учетом дубликатов). Из них 4 реакции обмена между стабильными компонентами и легкими радикалами H_2 , O_2 , H_2O , OH , O , H , 4 реакции рекомбинации/диссоциации с этими же компонентами, 6 реакций с участием тяжелого радикала HO_2 и 6 реакций с участием перекиси H_2O_2 , которая стабильна лишь в условиях низкой температуры, а в условиях пламени играет роль радикала. Еще одна реакция — гидрирование пропилена:



коэффициент скорости этой реакции взят из монографии [1]:

$$f_{C_3H_6} = 1.13 \cdot 10^{13} \exp \left(- \frac{1640}{R_G T} \right), \quad (8)$$

где константа перед экспонентой имеет размерность $см^3/(моль \cdot с)$, а энергия активации —

кал/моль. В системе единиц СИ константа равна $1.13 \cdot 10^7 \text{ м}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$, а энергия активации 6 860 Дж/моль.

Расчет проводится в прямоугольной двумерной области длиной L и шириной H : $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq H$. На границах $y = 0$, $y = H$ задавались условия периодичности, т. е. выполнения для любых параметров течения φ тождества $\varphi(x, H) = \varphi(x, 0)$, а на границах $x = 0$ и $x = L$ — условия свободного выхода. На поверхностях свободного входа/выхода, если локальная скорость выхода была дозвуковой, на этой границе задавалось внешнее давление, равное начальному p_0 ; если же скорость истечения была сверхзвуковой, граничные условия не специфицировались. Условия периодичности выполнялись при помощи склейки между собой линий двумерной сетки $y = 0$ и $y = H$ так, чтобы рабочая область имела топологию цилиндра.

Начальное состояние определялось давлением p_0 , температурой T_0 и начальным составом, определяемым ненормированными молярными долями компонентов $[\text{H}_2] : [\text{O}_2] : [\text{N}_2] : [\text{C}_3\text{H}_6]$. Начальные молярные доли компонентов ρ_{0k} определяются через начальные ненормированные молярные доли C_k следующим образом:

$$\rho_{0k} = p_0 C_k W_k / \left(R_G T_0 \sum_{m=1}^{N_C} C_m \right). \quad (9)$$

Зажигание производится подводом внешней энергии, что моделируется членом \dot{q} в правой части уравнения энергии (3). Энергия подводится в течение времени t_q в прямоугольный участок рабочей области $[0, x_q] \times [y_{q1}, y_{q2}]$, где x_q — правая граница области зажигания, y_{q1} , y_{q2} — верхняя и нижняя границы области зажигания. Для провоцирования начальных возмущений детонационной волны мощность зажигания \dot{q} модифицировалась наложением на нее случайных возмущений так, чтобы интегрально энергия зажигания не изменилась.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Для численных расчетов использовалась равномерная сетка из квадратных элементов размером $h = 25$ мкм, что соответствует рабочей области 4000×800 ячеек. Все распределенные параметры — ρ_k , u_j , T и производные от них — рассчитывались в центре ячеек, интерполяции же параметров на грань —

в середине граней. Для расчета шага газовой динамики использовался псевдориманов метод AUSM [9] вычисления потоков, применяемый к «левой» и «правой» интерполяциям на каждую внутреннюю грань методом MUSCL [10] с ограничителем градиента переменных KOREN [11] для того, чтобы обеспечить второй порядок интерполяции вне областей высоких градиентов переменных. Потоки на внешних гранях соответствовали граничным условиям, выставляемым там. Метод AUSM напрямую позволяет реализовать как сверхзвуковой, так и дозвуковой свободный выход с заданием противодавления по одному и тому же алгоритму.

Расчет потоков массы компонентов за счет химических взаимодействий осуществлялся осреднением по интервалу времени решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), получаемых из (1) и (3) с исключением потоков через грани, т. е. в данном случае членов, имеющих производные по пространству. Результат расчета системы ОДУ независимо в каждой расчетной ячейке использовался для расчета среднего по временному интервалу потока массы компонентов. Для решения системы использовался L-стабильный метод Новикова (4,2), предназначенный для жестких систем ОДУ [12].

Шаг по времени вычислялся с помощью критерия Куранта — Фридрихса — Леви с понижающим коэффициентом 0.25.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Детонация вызывалась не переходом, а прямым инициированием так, что для численных исследований достаточно короткой рабочей области. Нами использовалась область размером 10×2 см. Другие параметры: $p_0 = 1$ бар, $T_0 = 400$ или 500 К, стехиометрическая смесь водорода с воздухом $[\text{H}_2] : [\text{O}_2] : [\text{N}_2] = 2 : 1 : 4$. Добавка пропилена в смеси варьировалась от 0 до 4 % по объему (что для совершенных газов означает и молярную долю). Энергия зажигания подводилась в течение $t_q = 10^{-6}$ с, мощность была достаточной, чтобы заведомо вызвать в смеси пересжатую детонационную волну.

На рис. 1 изображено распределение давления в моменты времени $t = 25$ и 50 мкс при начальной температуре $T_0 = 400$ К и начальной концентрации пропилена $[\text{C}_3\text{H}_6] = 0 \div 4$ % (об.). Из сравнения результатов видно, что в отсутствие пропилена по смеси идет

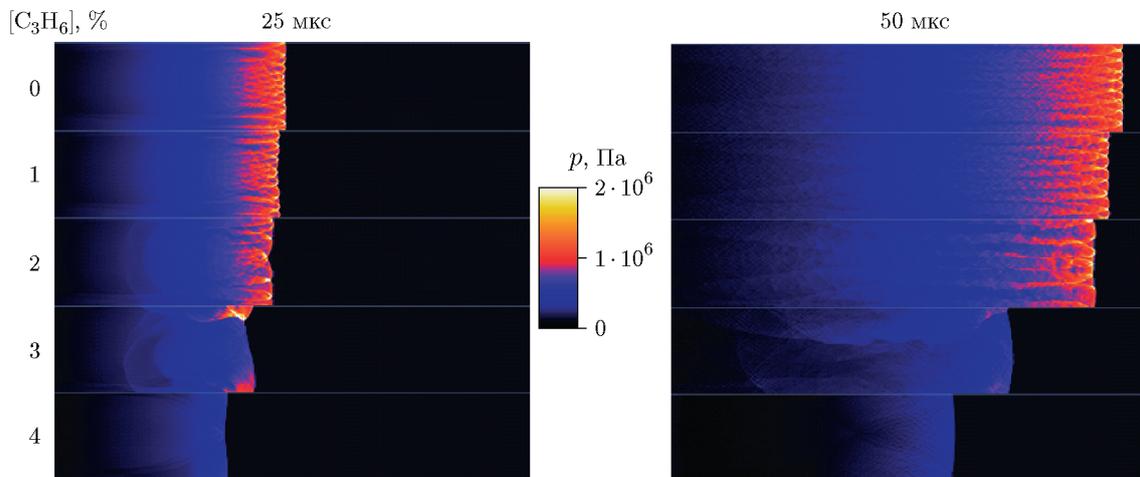


Рис. 1. Распределение давления при различной концентрации пропилена в смеси в моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре 400 К

развитая волновая структура ячейистой детонации. При $[C_3H_6] = 1\%$ скорость волны незначительно снижается. При $[C_3H_6] = 2\%$ ячейки детонационной структуры становятся значительно крупнее. При $[C_3H_6] = 3\%$ в момент времени $t = 25$ мкс область интенсивного давления на волне всего одна (на картинке она разделена на две части, но фактически верхняя и нижняя части склеены периодическим граничным условием), что свидетельствует о формировании детонации с одним спином; при $t = 50$ мкс детонация вырождается в ударную волну. В случае $[C_3H_6] = 4\%$ детонационная волна уже при $t = 25$ мкс вырождается в ударную, хотя следы ячейистой структуры на волне в виде поперечных волн еще остаются. К моменту $t = 50$ мкс интенсивность ударной волны снижается. Можно заметить, что на всех картинах распределения давления слева давление низкое — это следствие постановки граничного условия свободного выхода. Оно приводит к тому, что интенсивность ударной волны (но не детонационной), идущей вправо, быстро ослабевает за счет приходящих от левого конца рабочей области волн разрежения.

На рис. 2 приведено распределение температуры в моменты времени 25 и 50 мкс при начальных условиях $T_0 = 400$ К и $[C_3H_6] = 0 \div 4\%$ (об.).

При $[C_3H_6] = 0, 1$ и 2% (об.) на рис. 2 наблюдается картина развитой ячейистой детонации с достаточно интенсивными возмущениями температуры позади волны, но тем не менее везде температура сразу за волновой

структурой достаточно высока, чтобы соответствовать температуре сгоревшей газовой смеси. При $[C_3H_6] = 3\%$ в момент времени $t = 25$ мкс область высокой температуры примыкает к лидирующей волне лишь в одном месте (разделенном на две части из-за особенностей изображения домена), в других местах ударная волна, заметная по меньшему подъему температуры, отходит вперед. При $[C_3H_6] = 3\%$ и $t = 50$ мкс ударная волна уже везде опережает область высокой температуры, что говорит об отставании зоны реакции от лидирующей ударной волны. При $[C_3H_6] = 4\%$ видно, что на лидирующей волне подъем температуры не столь велик, как для сгоревшего газа, поскольку он вызван адиабатическим нагревом в ударной волне. Область сгоревшего газа характеризуется высоким подъемом температуры, и она в данном случае отстает от лидирующей волны, отставание это с течением времени увеличивается.

Из различных теоретических исследований ячейистой детонации [3–5] известно, что ход такого процесса можно вполне понять, рассмотрев картину давления, максимально достигнутого за все время процесса в каждой точке. Максимального значения оно в подобном процессе достигает в перемещающихся поперек движущегося потока волновой структуры тройных точках, где взаимодействуют ударные и детонационные волны. В наших расчетах максимум также достигался в области зажигания. Получающиеся на рисунке структуры соответствуют детонационным ячейкам, их регу-

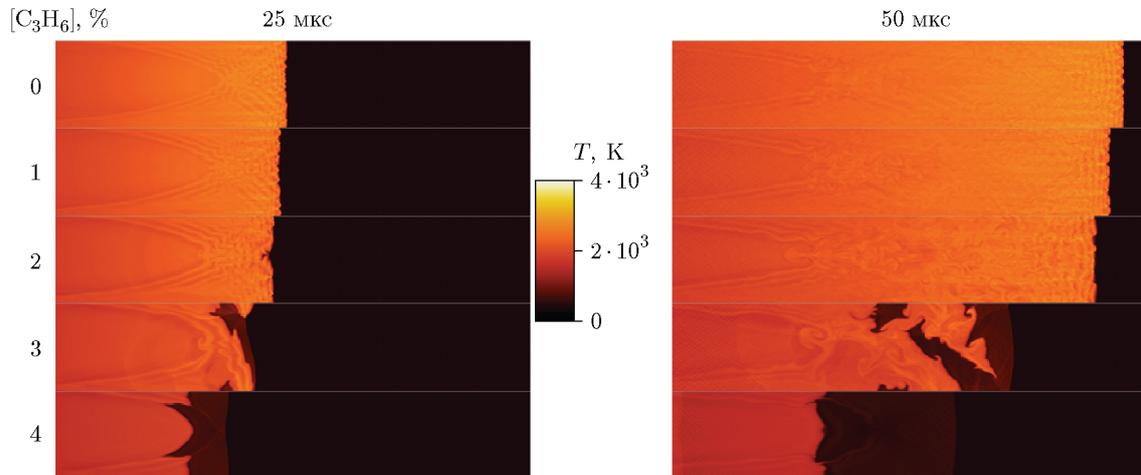


Рис. 2. Распределение температуры при различной концентрации пропилена в смеси в моменты времени 25 и 50 мкс при начальной температуре 400 К

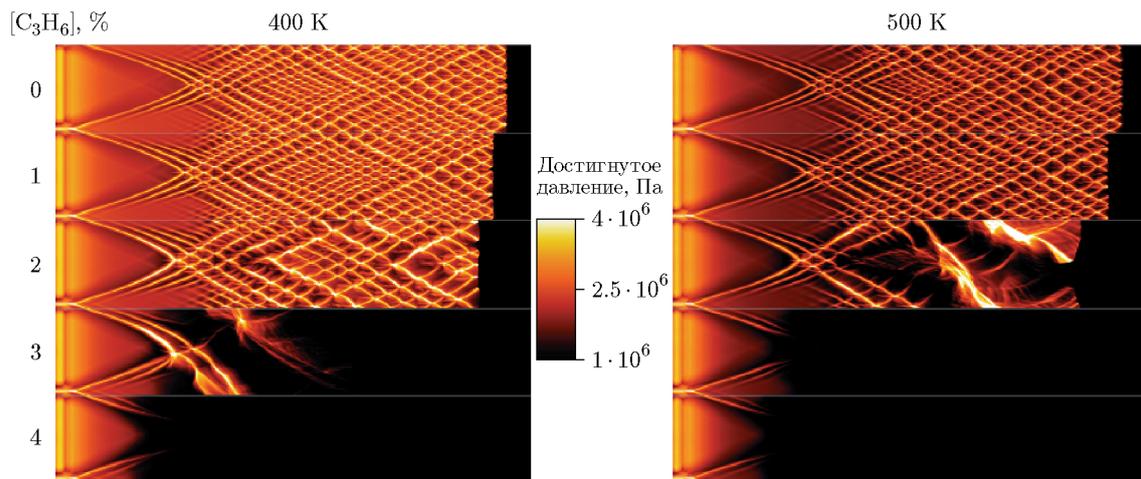


Рис. 3. Максимально достигнутое давление к моменту времени 50 мкс при различной концентрации пропилена в смеси и начальных температурах 400 и 500 К

лярное расположение соответствует развитой детонации, отсутствие регулярности — переходным процессам вырождения или образования детонационной волны.

На рис. 3 показаны волновые картины максимально достигнутого давления к моменту времени 50 мкс при $T_0 = 400$ и 500 К и концентрациях $[C_3H_6] = 0 \div 4$ % (об.) с шагом 1 %. Видно, что во всех случаях на картине слева в окрестности области зажигания имеет место высокий подъем давления. Такой подъем вызван высокой мощностью зажигания и требовался для прямого инициирования детонации. В случае $[C_3H_6] = 0$ или 1 % на некотором расстоянии от области зажигания возникает нерегулярная ячеистая структура, по-

степенно становящаяся все более регулярной. Если $[C_3H_6] = 2$ %, то при $T_0 = 400$ К ячейки детонационной структуры более крупные, а при $T_0 = 500$ К вместо регулярной структуры возникает спин. Можно заметить, что максимальное давление в едином спине существенно выше, чем в регулярной ячеистой структуре. Тем не менее спин неустойчив, хотя к моменту времени 50 мкс еще нельзя сказать, распадется или нет детонационная волна в дальнейшем. При $[C_3H_6] = 3$ % и $T_0 = 400$ К спиновая структура возникает почти сразу, но сравнительно быстро вырождается и исчезает. При $T_0 = 500$ К она уже отсутствует, заметно лишь быстрое падение максимально достигнутого давления после начального его подъема

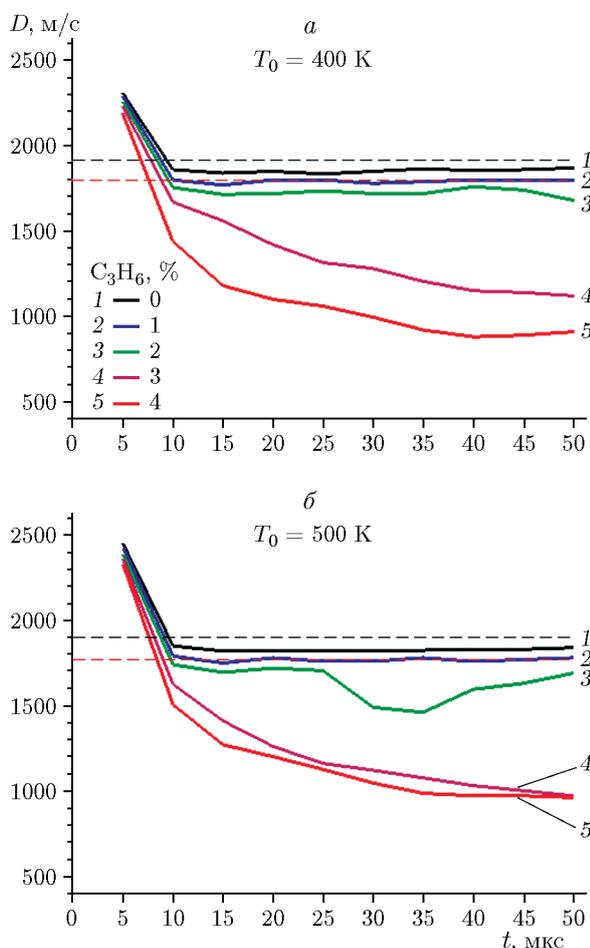


Рис. 4. Скорость лидирующей волны (детонации или ударной) в зависимости от времени при начальной температуре 400 (а) и 500 К (б)

при инициировании. При $[C_3H_6] = 4\%$ детонационная структура практически не возникает. Таким образом, видно, что влияние ингибитора на подавление детонации тем сильнее, чем выше начальная температура смеси. Это можно объяснить тем, что интенсивность изъятия атомарного водорода из реакционной цепи растет с повышением температуры согласно формуле для коэффициента интенсивности скорости реакции (8).

На рис. 4 приведена зависимость скорости ведущей волны (детонации или ударной) от времени, начиная с 5 мкс и кончая 50 мкс, когда расчет заканчивался во всех случаях. Начальная температура составляла 400 и 500 К. Видно, что скорость ведущей волны с течением времени вначале падает, затем, колеблясь, становится для концентраций 0 и 1 % несколько ниже уровня скорости Чепмена — Жуге (ин-

тервал скорости Чепмена — Жуге изображен штриховыми горизонтальными линиями). При $[C_3H_6] = 2\%$ в случае $T_0 = 400$ К скорость тоже несколько ниже скорости Чепмена — Жуге, но при $T_0 = 500$ К скорость лидирующей волны испытывает существенную осцилляцию (провал), после чего снова возвращается к уровню Чепмена — Жуге. При $[C_3H_6] = 3$ и 4 % скорость волны быстро уменьшается ниже скорости Чепмена — Жуге, хотя при $T_0 = 400$ К это уменьшение при 3 % ингибитора не столь быстрое, как при 4 %. При $T_0 = 500$ К скорость при обеих концентрациях ингибитора в смеси падает практически одинаково. Во всех случаях эта скорость еще не достигает скорости звука, находящейся для данной смеси в пределах $450 \div 550$ м/с в зависимости от температуры и концентрации ингибитора, но в интервале времени до 50 мкс она не выходит на асимптотическое значение.

Видно, что в обоих рассмотренных случаях граница концентрации ингибитора, отделяющая случаи сохранения и подавления детонации, лежит между 2 и 3 %. Следует, впрочем, заметить, что возможность перехода горения снова в детонацию проверена не была, поскольку интервал времени расчета был существенно меньше преддетонационного расстояния. Тем не менее для перехода к детонации одним из условий является ускорение лидирующей волны, здесь же при концентрациях 3 и 4 % идет монотонное уменьшение ее скорости.

В экспериментах [1] выявлено, что добавка 2.5 % (об.) пропилена подавляет развитую стационарную детонацию водородно-воздушной смеси. Таким образом, наши численные исследования соответствуют экспериментальным.

ВЫВОДЫ

На основе математической модели развития двумерной ячеистой детонации было показано, что добавка пропилена 3 и 4 % (об.) в стехиометрическую смесь водорода с воздухом надежно подавляет детонацию, вызванную мощным выделением энергии, а при концентрациях 2 % и ниже не подавляет, что согласуется с экспериментальными выводами о влиянии присадки ингибитора на основе пропилена.

В диапазоне концентрации ингибитора $2 \div 3\%$ (об.) динамика подавления детонации зависит от начальной температуры газа: чем она выше, тем подавление эффективнее.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Азатян В. В.** Цепные реакции в процессах горения, взрыва и детонации газов. Химические методы управления. — М.: Изд-во РАН, 2020.
2. **Santosh K. D., Singh A. V.** Inhibition of hydrogen-oxygen/air gaseous detonations using CF_3I , H_2O , and CO_2 // *Fire Saf. J.* — 2021. — V. 124. — 103405. — DOI: 10.1016/j.firesaf.2021.103405.
3. **Denisov Y. N., Troshin Y. K.** On the mechanism of detonative combustion // *Int. Symp. Combust.* — 1961. — V. 8, N 1. — P. 600–610.
4. **White D. R.** Turbulent structure of gaseous detonation // *Phys. Fluids.* — 1961. — V. 4, N 4. — P. 465–480. — DOI: 10.1063/1.1706350.
5. **Gamezo V. N., Vasil'ev A. A., Khokhlov A. M., Oran E. S.** Fine cellular structures produced by marginal detonations // *Proc. Combust. Inst.* — 2000. — V. 28, N 1. — P. 611–617. — DOI: 10.1016/S0082-0784(00)80261-1.
6. **Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.** Chemkin-II: a Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics // *Sandia Nat. Lab. Rep. SAND89-8009.* — 1990.
7. **Gilbert R. G., Luther K., Troe J.** Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. II. Weak collision rate constant // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* — 1983. — Bd 87, N 2. — S. 169–177. — DOI: 10.1002/bbpc.19830870218.
8. **Hong Z., Cook R. D., Davidson D. F., Hanson R. K.** A shock tube study of $\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$ and $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightarrow 2\text{OH} + \text{M}$ using laser absorption of H_2O and OH : intrinsic low dimensional manifolds in composition space // *J. Phys. Chem. A.* — 2010. — V. 114, N 18. — P. 5718–5727. — DOI: 10.1021/jp100204z.
9. **Liou M.-S.** A Sequel to AUSM: AUSM+ // *J. Comput. Phys.* — 1996. — V. 129, N 2. — P. 364–382. — DOI: 10.1006/jcph.1996.0256.
10. **Van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // *J. Comput. Phys.* — 1979. — V. 32, N 1. — P. 101–136. — DOI: 10.1016/0021-9991(79)90145-1.
11. **Koren B.** A robust upwind discretization method for advection, diffusion and source terms // *Numerical Methods for Advection-Diffusion Problems.* — Braunschweig: Vieweg, 1993. — P. 117–138. — (Notes on Numerical Mechanics; V. 45).
12. **Новиков Е. А.** L-устойчивый (4,2)-метод четвертого порядка для решения жестких задач // *Вестн. Самар. гос. ун-та. Естественнонауч. сер.* — 2011. — № 8 (89). — С. 59–68.

Поступила в редакцию 03.02.2022.

После доработки 04.04.2022.

Принята к публикации 25.05.2022.