

МАКРОКИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭМИССИИ САЖИ В ДИЗЕЛЕ

В. Я. Басевич¹, С. Н. Медведев², С. М. Фролов³, Ф. С. Фролов⁴, Б. Басара⁵,
П. Пришинг⁶

Аннотация: Предложена макрокинетическая модель сажеобразования, которая может быть включена в детальные и сокращенные кинетические механизмы окисления углеводородов и их смесей, моделирующих моторные топлива. Модель включает три эффективных необратимых реакции: реакцию пиролиза ацетилена и две реакции окисления сажи — диоксидом углерода и водяным паром. Аррениусовские параметры в выражениях констант скоростей эффективных реакций определены из условия наилучшего соответствия результатов расчетов по выходу сажи, полученных на основе макрокинетического механизма и на основе многократно проверенного детального кинетического механизма (ДКМ) сажеобразования. Для ряда углеводородов (CH_4 , C_3H_8 , изо- C_8H_{18} , н- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$, н- $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$, C_6H_6 , C_7H_8 и $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) определены значения коэффициента склонности к сажеобразованию по отношению к базовому углеводороду — н-гептану. Макрокинетическую модель сажеобразования применили к многомерному расчету 14 разных режимов работы дизеля, используя ДКМ окисления и горения высших углеводородов, дополненный ДКМ образования оксидов азота. Получено удовлетворительное согласие расчетных и измеренных результатов по эмиссии сажи и оксидов азота.

Ключевые слова: сажеобразование; макрокинетическая модель; склонность углеводородов к сажеобразованию; дизель; многомерный расчет

Введение

В настоящее время в программных пакетах, решающих многомерные задачи газодинамики реагирующих течений, при расчете рабочего процесса в двигателях внутреннего сгорания (ДВС) все чаще используют ДКМ окисления и горения многокомпонентных моторных топлив. Однако для моделирования эмиссии сажи к таким ДКМ необходимо добавлять кинетические механизмы образования сажи,

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», smfrol@chph.ras.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, f.frolov@chph.ru

⁵AVL LIST GmbH, Graz, Austria, branislav.basara@avl.com

⁶AVL LIST GmbH, Graz, Austria, peter.priesching@avl.com

которые содержат сотни дополнительных химических компонентов и тысячи гомогенных и гетерогенных реакций, так что для расчетов с такими механизмами требуются очень большие вычислительные ресурсы. Поэтому для моделирования сажеобразования в ДВС нужны простейшие и проверенные макрокинетические механизмы, позволяющие, как минимум, правильно отражать тенденции изменения показателей эмиссии сажи в ответ на те или иные мероприятия (изменение характеристик распыла жидкого топлива, закрутки потока и т. д.).

В литературе имеется несколько простых макрокинетических механизмов сажеобразования [1–5], которые проверены на конкретных примерах. Общий недостаток этих моделей — невозможность их использования вместе с ДКМ окисления и горения моторных топлив.

В данной работе предложена макрокинетическая модель сажеобразования, которая может быть включена в детальные и сокращенные кинетические механизмы окисления углеводородов и их смесей, моделирующих моторные топлива.

Кинетическая модель сажеобразования

При разработке простейшей модели принимались во внимание два факта: то, что основной прекурсор сажи — ацетилен, который присутствует в ДКМ окисления и горения всех индивидуальных углеводородов, и то, что различные углеводороды имеют разную склонность к сажеобразованию.

Таблица 1 Макрокинетический механизм сажеобразования

№	Реакция	A , л, моль, с	E/R , К
1	$C_2H_2 + C_2H_2 \rightarrow C + C + C_2H_4$	$K \cdot (2 \cdot 10^{16})$	40 000
2	$C + CO_2 \rightarrow CO + CO$	A_{fp}	40 000
3	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	A_{fp}	40 000

Следуя первому факту, в макрокинетическую модель сажеобразования включили три эффективные необратимые реакции (табл. 1): реакцию пиролиза ацетилена (реакция 1) и две реакции окисления сажи — диоксидом углерода (реакция 2) и водяным паром (реакция 3). Здесь и далее сажа обозначается как С. Скорости реакций 1–3 в табл. 1 определяются по соотношениям:

$$W_1 = -A_1[C_2H_2]^2 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right); \quad (1)$$

$$W_2 = -A_2[C][CO_2] \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right); \quad (2)$$

$$W_3 = -A_3[C][H_2O] \exp\left(-\frac{E_3}{RT}\right), \quad (3)$$

где A_i и E_i — предэкспонент и энергия активации i -й реакции ($i = 1, 2, 3$); R — универсальная газовая постоянная; $[X]$ — мольная концентрация компонента X ($C_2H_2, C, C_2H_4, CO_2, CO, H_2O$ и H_2); T — температура.

Следуя второму факту, предположили, что склонность того или иного углеводорода к сажеобразованию можно характеризовать одним коэффициентом — относительным коэффициентом его склонности к сажеобразованию S . Если в качестве базового углеводорода принять n -гептан ($n-C_7H_{16}$), то коэффициент S можно определить по формуле:

$$Y_S = SY_{S,C_7H_{16}}, \quad (4)$$

где $Y_{S,C_7H_{16}}$ — выход сажи при окислении и горении n -гептана, а Y_S — выход сажи при окислении и горении того или иного углеводорода. Под выходом сажи понимается отношение массы углерода, содержащегося в саже, к начальной массе углерода, содержащегося в углеводородном горючем.

Для определения аррениусовских параметров A_i и E_i ($i = 1, 2, 3$), а также значений коэффициента S для разных углеводородов использовали многократно проверенный ДКМ сажеобразования [6], который включает в себя НАСА (Н-abstraction-acetylene-addition) механизм, механизм образования полиинов и полиароматических углеводородов, а также гетерогенные реакции и реакции образования кластеров. Параметры A_i и E_i определялись из условия наилучшего соответствия результатов расчетов по выходу сажи, полученных на основе ДКМ [6] и на основе макрокинетического механизма. Оказалось, что для всех трех реакций в табл. 1 для E_i можно принять значение 40 ккал/моль, а для A_i предположить, что $A_1 = 2 \cdot 10^{16}$ (л, моль, с) и $A_2 = A_3 = A_{fp}$. Отметим, что значение предэкспонента A_1 для лимитирующей реакции 1 может зависеть от используемого ДКМ окисления и горения горючего. Чтобы учесть это обстоятельство, в табл. 1 значение A_1 включает числовой коэффициент K , который в данном случае равен 1,0.

На рис. 1–3 показаны примеры расчетов выхода сажи при изотермическом окислении n -гептана в воздухе при разных давлениях P (от 10 до 240 атм), температурах T (от 1300 до 3000 К) и коэффициентах избытка горючего Φ (от 2 до 4) с помощью ДКМ [6] (кривые 1) и с помощью макрокинетического механизма (кривые 2) с тщательно подобранными значениями A_{fp} (приведены в табл. 2). Расчеты проводились для условий за отраженными ударными волнами с максимальным временем пребывания сильно разбавленных смесей, равным 3 мс. Из рис. 1–3 видно, что при всех P выход сажи увеличивается с ростом Φ и при всех P и Φ выход сажи имеет максимум при некоторой температуре, причем с ростом Φ этот максимум сдвигается в сторону большей температуры.

Аналогичные расчеты проведены для воздушных смесей других индивидуальных углеводородов: CH_4 , C_3H_8 , изо- C_8H_{18} , $n-C_{10}H_{22}$, $n-C_{14}H_{30}$, C_6H_6 , C_7H_8 и C_2H_5OH при разных коэффициентах избытка горючего ($\Phi = 2, 3$ и 4), давлениях ($P = 10$ –240 атм) и температурах T (от 1300 до 3000 К). Для получения

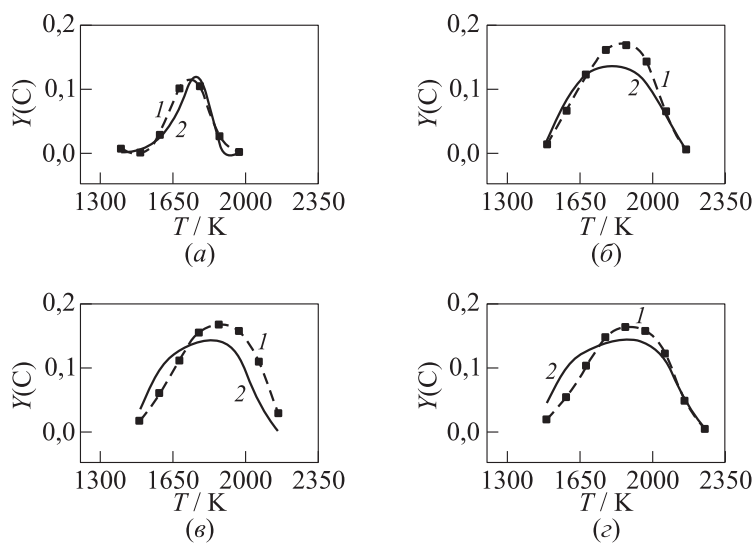


Рис. 1 Результаты расчетов выхода сажи $Y(C)$ при изотермическом окислении н-гептана в воздухе при разных давлениях P ((a) 10 атм; (б) 100; (в) 180; (г) 240 атм), температурах T и коэффициенте избытка горючего $\Phi = 2$ с помощью ДКМ [6] (1) и с помощью макрокинетического механизма (2)

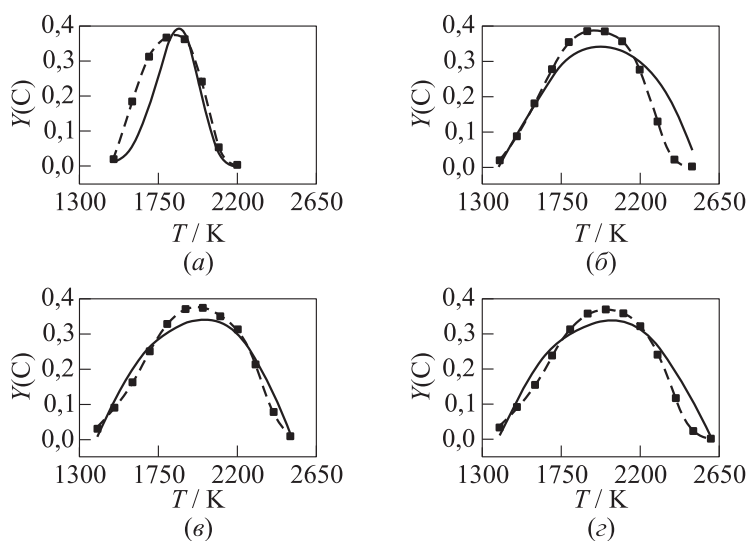


Рис. 2 Результаты расчетов выхода сажи $Y(C)$ при изотермическом окислении н-гептана в воздухе при разных давлениях P ((a) 10 атм; (б) 100; (в) 180; (г) 240 атм), температурах T и коэффициенте избытка горючего $\Phi = 3$ с помощью ДКМ [6] (1) и с помощью макрокинетического механизма (2)

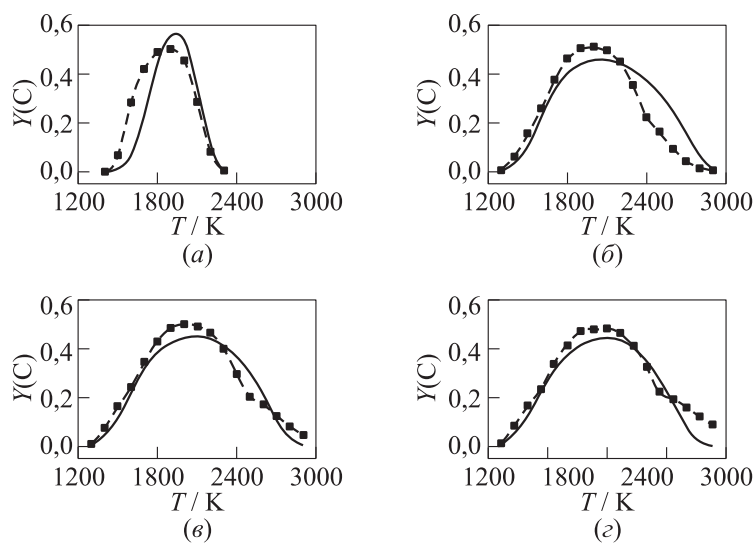


Рис. 3 Результаты расчетов выхода сажи $Y(C)$ при изотермическом окислении н-гептана в воздухе при разных давлениях P ((а) 10 атм; (б) 100; (г) 180; (з) 240 атм), температурах T и коэффициенте избытка горючего $\Phi = 4$ с помощью ДКМ [6] (1) и с помощью макрокинетического механизма (2)

Таблица 2 Предэкспонент реакций 1 и 2

P , атм	A_{fp} , л, моль, с		
	$\Phi = 2$	$\Phi = 3$	$\Phi = 4$
10	$1,30 \cdot 10^{15}$	$1,30 \cdot 10^{14}$	$1,30 \cdot 10^{14}$
20	$2,60 \cdot 10^{14}$	$8,84 \cdot 10^{13}$	$5,20 \cdot 10^{13}$
50	$6,50 \cdot 10^{13}$	$2,60 \cdot 10^{13}$	$2,34 \cdot 10^{13}$
100	$1,30 \cdot 10^{13}$	$3,90 \cdot 10^{12}$	$3,90 \cdot 10^{12}$
180	$3,90 \cdot 10^{12}$	$2,60 \cdot 10^{12}$	$6,50 \cdot 10^{11}$
240	$1,30 \cdot 10^{12}$	$1,30 \cdot 10^{12}$	$3,90 \cdot 10^{11}$

значений коэффициента S в этих расчетах определялись выходы сажи $Y(C)$ при изотермическом горении. Полученные значения относительного коэффициента склонности к сажеобразованию представлены в табл. 3. Интересно, что данные табл. 3 качественно согласуются с данными [7] по склонности разных углеводородов к сажеобразованию. Зная коэффициент S , расчет сажеобразования при окислении и горении того или иного углеводорода по макрокинетическому механизму теперь можно свести к расчету сажеобразования для базового углеводорода (н-гептана), используя формулу (4).

Таблица 3 Относительный коэффициент склонности к сажеобразованию для различных индивидуальных углеводородов

Топливо	P, атм	Φ		
		2	3	4
CH ₄	10	0,50 ± 0,30	0,49 ± 0,31	0,59 ± 0,30
	100	0,71 ± 0,37	0,44 ± 0,07	0,69 ± 0,30
	180	0,70 ± 0,34	0,87 ± 0,17	0,71 ± 0,28
	240	0,82 ± 0,30	0,73 ± 0,29	0,66 ± 0,31
C ₃ H ₈	10	0,90 ± 0,10	0,76 ± 0,22	0,75 ± 0,23
	100	0,87 ± 0,14	0,81 ± 0,19	0,81 ± 0,19
	180	0,87 ± 0,12	0,81 ± 0,19	0,77 ± 0,23
	240	0,89 ± 0,09	0,82 ± 0,17	0,80 ± 0,19
H-C ₇ H ₁₆	10	1,00	1,00	1,00
	100	1,00	1,00	1,00
	180	1,00	1,00	1,00
	240	1,00	1,00	1,00
изо-C ₈ H ₁₈	100	0,54 ± 0,30	0,56 ± 0,17	0,64 ± 0,13
	180	0,58 ± 0,38	0,64 ± 0,15	0,66 ± 0,11
	240	0,45 ± 0,16	0,59 ± 0,22	0,67 ± 0,09
H-C ₁₀ H ₂₂	10	1,04 ± 0,06	0,95 ± 0,33	1,07 ± 0,11
	100	1,06 ± 0,05	1,02 ± 0,07	1,05 ± 0,13
	180	1,00 ± 0,03	1,04 ± 0,08	1,01 ± 0,06
	240	1,04 ± 0,09	1,07 ± 0,14	1,02 ± 0,04
H-C ₁₄ H ₃₀	10	1,08 ± 0,06	1,13 ± 0,18	1,15 ± 0,20
	100	1,07 ± 0,29	1,03 ± 0,14	1,06 ± 0,11
	180	0,86 ± 0,28	0,84 ± 0,27	1,08 ± 0,14
	240	1,08 ± 0,13	1,06 ± 0,14	1,06 ± 0,10
C ₂ H ₅ OH	10	—	0,80 ± 0,80	0,40 ± 0,19
	100	0,31 ± 0,09	0,36 ± 0,14	0,33 ± 0,19
	180	0,24 ± 0,11	0,31 ± 0,13	0,31 ± 0,16
	240	0,22 ± 0,09	0,27 ± 0,14	0,26 ± 0,16
C ₆ H ₆	100	1,31 ± 0,45	1,49 ± 0,64	1,39 ± 0,43
C ₆ H ₅ CH ₃	100	1,45 ± 0,49	1,41 ± 0,49	1,71 ± 0,90

Результаты расчетов

Разработанную макрокинетическую модель сажеобразования применили к многомерному расчету 14 разных режимов работы дизеля, используя ДКМ окисления и горения [8, 9], дополненный ДКМ образования оксидов азота [10]. Основные характеристики дизеля представлены в табл. 4. Расчеты выполнены с помощью пакета AVL FIRE [11] при стандартных настройках всех моделей сопутствующих физико-химических процессов без какой-либо специальной настройки.

Таблица 4 Характеристики дизеля

Параметр	Значение
Скорость вращения, об/мин	3000
Радиус цилиндра, мм	42,5
Степень сжатия	16
Начало впрыска, град. ПКВ	713,5
Окончание впрыска, град. ПКВ	734
Угол впрыска	158°
Масса впрыскиваемого топлива, кг	$2,70 \cdot 10^{-5}$
Температура топлива, К	320
Массовая доля отработавших газов	0,1987
Стехиометрический коэффициент в отработавших газах	0,497
Закрутка потока, 1/мин	5403

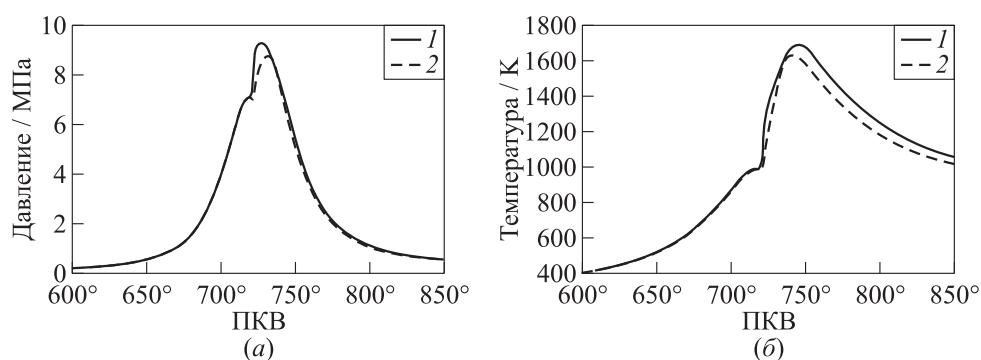


Рис. 4 Сравнение расчетных (1) и измеренных (2) зависимостей давления (а) и температуры (б) в цилиндре дизеля от угла ПКВ

На рис. 4 приведен пример сравнения расчетных и измеренных зависимостей давления и температуры в цилиндре дизеля от угла поворота коленчатого вала (ПКВ) для одного из рабочих режимов. В целом получено удовлетворительное согласие результатов.

На рис. 5 проведено сравнение расчетных и измеренных значений выхода сажи и оксидов азота NO для указанных 14 режимов работы двигателя. За исключением двух режимов (5804 и 5818), в которых прогнозируемый выход сажи оказался приблизительно вдвое выше, чем измеренный, и одного режима (5820), в котором прогнозируемый выход сажи оказался приблизительно втрое меньше, чем измеренный, согласие расчетных и измеренных результатов по выходу сажи можно в целом считать удовлетворительным. Что касается оксидов азота, результаты расчета удовлетворительно согласуются с измерениями для всех рассмотренных режимов работы дизеля.

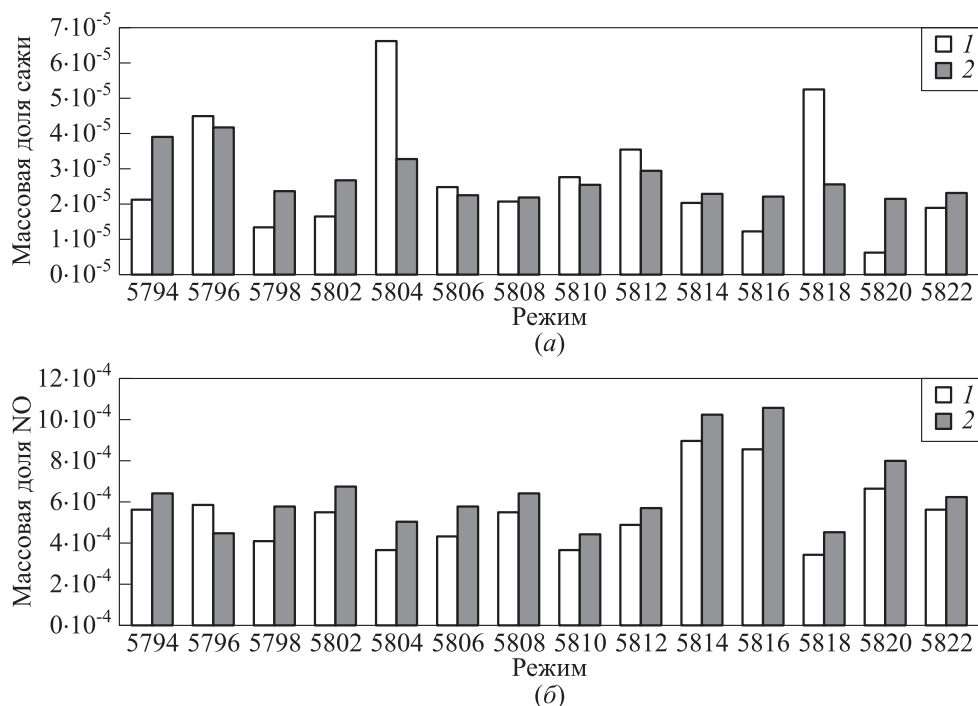


Рис. 5 Сравнение измеренных (1) и расчетных (2) значений массовых долей сажи (а) и оксидов азота (б) в 14 рабочих режимах дизеля

Заключение

Предложена макрокинетическая модель сажеобразования, которая может быть включена в детальные и сокращенные кинетические механизмы окисления углеводородов и их смесей, моделирующих моторные топлива. Модель включает три эффективных необратимых реакции: реакцию пиролиза ацетилена и две реакции окисления сажи — диоксидом углерода и водяным паром. Аррениусовские параметры в выражениях констант скоростей эффективных реакций определены из условия наилучшего соответствия результатов расчетов по выходу сажи, полученных на основе макрокинетического механизма и на основе многократно проверенного ДКМ сажеобразования, который включает в себя НАСА механизм, механизм образования полиинов и полиароматических углеводородов, а также гетерогенные реакции и реакции образования кластеров. Для ряда углеводородов (CH_4 , C_3H_8 , изо- C_8H_{18} , н- $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$, н- $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$, C_6H_6 , C_7H_8 и $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) определены значения коэффициента склонности к сажеобразованию по отношению к базовому углеводороду — н-гептану.

Разработанную макрокинетическую модель сажеобразования применили к многомерному расчету 14 разных режимов работы дизеля, используя ДКМ окисления и горения высших углеводородов, который дополнен ДКМ образования оксидов азота. Получено удовлетворительное согласие расчетных и измеренных результатов по эмиссии сажи и оксидов азота.

Авторы признательны П. А. Власову за расчеты сажеобразования на основе ДКМ [6].

Литература

1. *Nagle J., Strickland-Constable R. F.* Oxidation of carbon between 1000–2000 °C // 5th Conference on Carbon Proceedings. — New York, NY, USA: Pergamon Press, 1962. P. 154–164.
2. *Magnussen B. F., Hjertager B. H.* On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion // 16th Symposium (International) on Combustion. — Pittsburgh, PA, USA: The Combustion Institute, 1977.
3. *Hiroyasu H., Nishida K.* Simplified three dimensional modeling of mixture formation and combustion in a DI diesel engine. SAE Paper No. 890269, 1989.
4. *Mauss F., Balthasar M.* Simplification of a detailed kinetic soot model for application in 3D programs // Combustion technologies for a clean environment / Ed. S. Samuelson. — Energy, combustion and the environment ser. — London: Gordon and Breach Publishing, 1998. Vol. 4.
5. *Басевич В. Я., Власов П. А., Скрипник А. А., Фролов С. М.* Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания // Горение и взрыв, 2008. Вып. 1. С. 40–43.
6. *Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М.* Образование сажи при пиролизе и окислении ацетилен и этилена в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–35.
7. *Clarke A. E., Hunter T. G., Garner F. H.* The tendency to smoke of organic substances on burning. Part 1 // J. Inst. Petrol. Technol., 1946. Vol. 32. P. 627–642.
8. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М.* Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₁₀ к C₁₁–C₁₆ // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.
9. *Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Frolov F. S., Frolov S. M., Medvedev S. N.* Detailed chemistry of heavy alkane hydrocarbon fuel oxidation: Application to combustion and detonation of gaseous and liquid fuels // Transient combustion and detonation phenomena: Fundamentals and applications / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov. — Moscow: TORUS PRESS, 2014. P. 14–25.
10. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. San Diego mechanism web page. Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research). University of California at San Diego. <http://combustion.ucsd.edu>.
11. AVL FIRE: Computational fluid dynamics for conventional and alternative powertrain development. <https://www.avl.com/fire2>.

Поступила в редакцию 18.12.15

MACROKINETIC MODEL FOR CALCULATION OF SOOT EMISSIONS IN DIESEL ENGINE

V. Ya. Basevich¹, S. N. Medvedev¹, S. M. Frolov^{1,2}, F. S. Frolov¹, B. Basara³,
and P. Priesching³

¹N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation

³AVL LIST GmbH, 1 Hans-List-Platz Graz A-8020, Austria

Abstract: The macrokinetic model of soot formation is proposed, which may be included in the detailed and reduced kinetic mechanisms of hydrocarbon fuel oxidation and combustion. The model includes three overall irreversible reactions, namely, the acetylene pyrolysis reaction and two soot oxidation reactions — by carbon dioxide and water vapor. Arrhenius parameters entering the rate constants of overall reactions were obtained from the best fit of the results of calculations of soot yields obtained based on the macrokinetic model and on the thoroughly validated detailed kinetic mechanism (DKM). For a number of hydrocarbons (CH_4 , C_3H_8 , $i\text{-C}_8\text{H}_{18}$, $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$, $n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$, C_6H_6 , C_7H_8 , and $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$), the values of soot propensity coefficient with respect to the reference fuel (n -heptane) are obtained. The macrokinetic model is applied to multidimensional calculations of 14 different operating modes of diesel engine using the DKM of oxidation and combustion of high hydrocarbons supplemented with the DKM of NOx formation. A satisfactory agreement between the calculated and measured results for soot and NOx emissions is obtained.

Acknowledgments

The authors are grateful to P. A. Vlasov for calculation of soot formation using a detailed kinetic mechanism [6].

References

1. Nagle, J., and R. F. Strickland-Constable. 1962. Oxidation of carbon between 1000–2000 °C. *5th Conference on Carbon Proceedings*. New York, NY: Pergamon Press. 154–164
2. Magnussen, B. F., and B. H. Hjertager. 1977. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *16th Symposium (International) on Combustion*. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute.
3. Hiroyasu, H., and K. Nishida. 1989. Simplified three dimensional modeling of mixture formation and combustion in a DI diesel engine. SAE Paper No. 890269.
4. Mauss, F., and M. Balthasar, M. 1998. Simplification of a detailed kinetic soot model for application in 3-D programs. *Combustion technologies for a clean environment*. Ed. S. Samuelson. Energy, combustion and the environment ser. London: Gordon and Breach Publishing. Vol. 4.

5. Basevich, V. Ya., P. A. Vlasov, A. A. Skripnik, and S. M. Frolov. 2008. Modelirovanie sazhе-obrazovaniya v dvigatelyakh vnutrennego sgoraniya [Simulation of soot formation in internal combustion engines]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 1:40–43.
6. Agafonov, G. L., I. V. Bitera, P. A. Vlasov, Yu. A. Kolbanovskii, V. N. Smirnov, and A. M. Teresa. 2015. Soot formation during the pyrolysis and oxidation of acetylene and ethylene in shock waves. *Kinet. Catal.* 56(1):12–30.
7. Clarke, A. E., T. G. Hunter, and F. H. Garner. 1946. The tendency to smoke of organic substances on burning. Part 1. *J. Inst. Petrol. Technol.* 32:627–642.
8. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and S. M. Frolov. 2013. Mechanisms of the oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons: Transition from C₁–C₁₀ to C₁₁–C₁₆. *Russ. J. Phys. Chem. B* 7(2):161–169.
9. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, F. S. Frolov, S. M. Frolov, and S. N. Medvedev. 2014. Detailed chemistry of heavy alkane hydrocarbon fuel oxidation: Application to combustion and detonation of gaseous and liquid fuels. *Transient combustion and detonation phenomena: Fundamentals and applications*. Eds. G. D. Roy and S. M. Frolov. Moscow: TORUS PRESS. 14–25.
10. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. The San Diego Mechanism web page. Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego. Available at: <http://combustion.ucsd.edu> (accessed July 25, 2016).
11. AVL FIRE: Computational fluid dynamics for conventional and alternative powertrain development. Available at <https://www.avl.com/fire2> (accessed July 25, 2016).

Received December 18, 2015

Contributors

Basevich Valentin Ya. (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; basevich@chph.ras.ru

Medvedev Sergey N. (b. 1985) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; medvedevs@chph.ras.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Frolov Fedor S. (b. 1981) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; f.frolov@chph.ru

Basara B. (b. 1964) — Dr. hab., Chief Developer, Advanced Simulation Technologies AVL LIST GmbH, 1 Hans-List-Platz Graz A-8020, Austria; branislav.basara@avl.com

Priesching P. (b. 1971) — Ph.D., Senior Project Leader, Advanced Simulation Technologies, AVL LIST GmbH, 1 Hans-List-Platz Graz A-8020, Austria; peter.priesching@avl.com