

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ГОРЕНИЕ КАПЕЛЬ*

В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев², С. Н. Медведев³, С. М. Фролов⁴, Ф. С. Фролов⁵

Аннотация: Рассмотрено влияние теплового излучения на самовоспламенение и горение капель *n*-гептана. Как показывают эксперименты с углеводородным горючим, проведенные на Международной космической станции в условиях микрогравитации (Российско-американский космический эксперимент CFI («Зарево»)), после зажигания одиночной крупной капли диаметром 2–5 мм происходит радиационное погасание пламени с ее последующим низкотемпературным окислением и горением. Расчеты свидетельствуют о том, что это явление обязано тепловому излучению сажи, образующейся при горении капли. В отличие от крупных капель горение мелких капель субмиллиметрового диаметра происходит без определяющего влияния теплового излучения: капля успевает сгореть, прежде чем проявятся эффекты теплового излучения.

Ключевые слова: горение капель; тепловое излучение; задержка самовоспламенения; константа скорости горения капли

DOI: 10.30826/CE18110210

Введение

В [1] и других более поздних публикациях сообщалось о ненаблюдавшемся ранее в экспериментах радиационном затухании «горячего» пламени и последующем низкотемпературном окислении крупных (диаметром 2–5 мм) одиночных капель углеводородного топлива (*n*-гептан, *n*-декан и др.) в условиях микрогравитации. Используя модель горения капель [2], при учете образования сажи согласно [3] и ее излучения, в [4, 5] применительно к *n*-гептану и *n*-додекану мы воспроизвели все основные особенности обнаруженного явления, подтвердили определяющее влияние теплового излучения и предсказали существование новых режимов низкотемпературного окисления крупных капель без стадии горячего пламени.

Сферически-симметричная модель окисления и горения капли [2] основана на нестационарных дифференциальных уравнениях сохранения вещества и энергии в жидкой и газовой фазах при переменных теплофизических свойствах. В постановке задачи использована концепция многокомпонентной диффузии в газовой фазе и применен детальный кинетический механизм (ДКМ) окисления углеводородного горючего. Модель построена для

условий постоянного давления в системе «газ–капля». Важным достоинством используемого ДКМ является то, что он описывает как многостадийное низкотемпературное окисление с «холодными» и «голубыми» пламенами, так и высокотемпературное горение капли и не требует дополнительных проверок.

Цель данной работы — изучение влияния теплового излучения на горение мелких капель субмиллиметрового диаметра в условиях микрогравитации. Для выяснения вопроса, всегда ли тепловое излучение играет важную роль, нами проведены расчеты вынужденного зажигания и самовоспламенения с последующим горением капель *n*-гептана для разных значений начальной температуры газа T_{g0} и жидкости T_{d0} , давления газа P и начального диаметра капель d_0 . Метод численного решения определяющих уравнений задачи такой же, как в [4, 5], и детально описан в [6].

Вынужденное зажигание

Вынужденное зажигание капли в воздухе нормальной температуры $T_{g0} = 293$ К моделируется размещением вокруг нее тонкого сферического

* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания (темы 0082-2016-0011, AAA-A17-117040610346-5 и 0082-2014-0004, AAA-A17-117040610283-3).

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

² Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

⁴ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

⁵ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, f.frolov@chph.ru

слоя с высокой температурой газа (2000 К). Толщина поджигающего слоя мала по сравнению с диаметром капли d_0 , но достаточна для возникновения горячего пламени благодаря испарению жидкости под действием теплового потока на поверхности капли, смешению паров горючего с окружающим воздухом и самовоспламенению образовавшейся паровоздушной смеси внутри поджигающего сферического слоя. Тепло, выделяемое в горячем пламени, с одной стороны, поступает на поверхность капли, а с другой — в окружающий холодный воздух. В окрестности капли в приповерхностной зоне, обогащенной парами горючего, образуется сажевая оболочка, которая отбирает часть теплового потока, идущего от пламени к капле, и излучает тепло в окружающее пространство. Тепловые потери на излучение могут привести к погасанию первичного горячего пламени.

На рис. 1 показаны расчетные зависимости максимальной температуры газа T_{\max} (рис. 1, *a*) и квадрата диаметра одиночных капель разного начального диаметра (рис. 1, *б*) от времени при их вынужденном зажигании. Расчеты проведены для капель начального диаметра $d_0 = 2,8, 2, 1,4$ и 1 мм с учетом теплового излучения образующейся сажи. Толстая сплошная кривая 1, построенная для капли с $d_0 = 2,8$ мм, повторяет кривую на рис. 1 в [4]. В этом случае максимальная температура газа T_{\max} вокруг капли постепенно снижается вследствие потерь энергии на излучение, приводя через некоторое время к погасанию первичного горячего пламени и к установлению режима низкотемпературного окисления с трехкратным ступенчатым повышением температуры (вспышками «голубого» пламени [4]) до $T_{\max} \approx 1000$ К и последующим ее понижением до начального уровня и даже с од-

ной высокотемпературной вспышкой до $T_{\max} \approx 1750$ К (кратковременная вспышка вторичного горячего пламени). В ходе такого процесса диаметр капли непрерывно уменьшается (толстая сплошная кривая 1 на рис. 1, *б*). Отметим, что по наклону прямого участка кривых на рис. 1, *б* определяют константу скорости горения k в известном квадратичном законе

$$d_0^2 - d^2 = kt,$$

где d — текущий диаметр капли; t — время. Для капли с $d_0 = 2,8$ мм $k = 0,53$ мм²/с.

При зажигании капли с $d_0 = 2$ мм максимальная температура газа T_{\max} вокруг капли также постепенно снижается, приводя к погасанию первичного горячего пламени и к установлению режима низкотемпературного окисления, но без вспышек голубого пламени. При этом наклон прямого участка на соответствующей кривой уменьшается, а константа скорости горения принимает значение $k = 0,45$ мм²/с.

Уменьшение начального диаметра капли до $d_0 = 1,4$ и 1 мм приводит к полному погасанию первичного горячего пламени, возникающего при зажигании. Если при погасании капли с $d_0 = 1,4$ мм на кривой $T_{\max}(t)$ еще наблюдается некоторая нерегулярность при $T_{\max} \approx 700$ К, вызванная кратковременным периодом низкотемпературного окисления паров горючего с заметным энерговыделением, то при погасании капли с $d_0 = 1$ мм максимальная температура газов в окрестности капли монотонно снижается до 293 К без каких-либо нерегулярностей. Константа скорости горения таких капель снижается до уровня $k = 0,03$ мм²/с и $k \approx 0$ при $d_0 = 1,4$ и 1 мм соответственно. Интересно, что до полного погасания первичного горячего пламе-

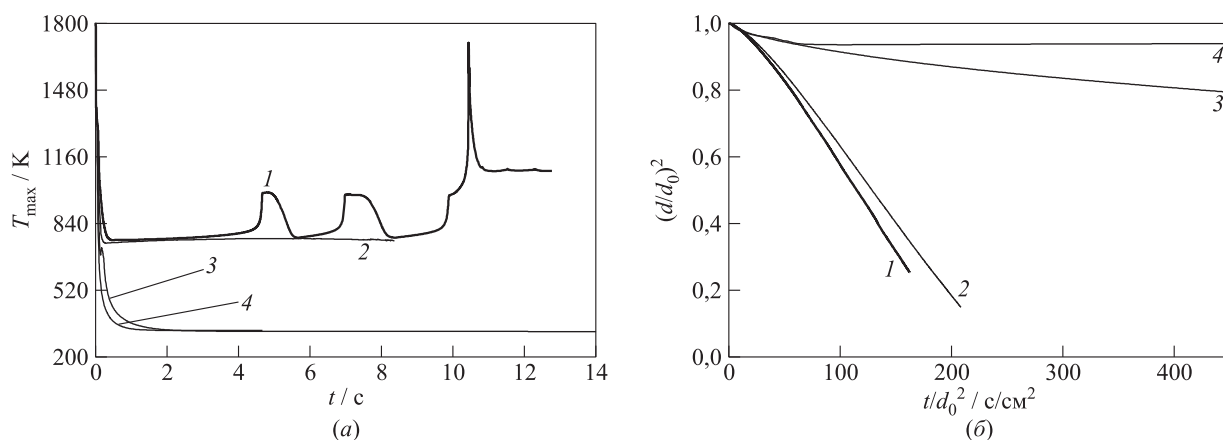


Рис. 1 Расчетные зависимости максимальной температуры газа T_{\max} вокруг капель н-гептана (*a*) и квадрата диаметра капель (*б*) от времени при их вынужденном зажигании; $T_{d_0} = T_{g_0} = 293$ К; $P = 0,1$ МПа: 1 — $d_0 = 2,8$ мм; 2 — 2; 3 — 1,4; 4 — $d_0 = 1$ мм

ни ($t \approx 0,7$ с) миллиметровая капля теряет всего около 5% массы.

Отключение тепловых потерь на излучение во всех рассмотренных выше случаях приводило к зажиганию и устойчивому горению капель.

В целом расчеты показали, что динамика всего процесса горения капли — радиационного затухания первичного горячего пламени и последующего беспламенного окисления с возможными вспышками голубого и горячего пламени — существенно зависит от теплосодержания поджигающего слоя. Это может означать, что изменение каких-либо особенностей зажигания в космическом эксперименте (расстояние электродов от капли и др.) или характеристик поджигающего электрического разряда может повлиять на наблюдаемую динамику процесса. Поскольку в настоящее время адекватное физико-математическое моделирование трехмерного процесса зажигания капли электрическим разрядом не представляется возможным, для изучения фундаментальных особенностей горения капель необходимо использовать постановку задачи, исключающую неопределенности такого рода. Следуя результатам [4], мы предлагаем исследовать не вынужденное зажигание капли, а ее самовоспламенение в равномерно нагретом газе.

Самовоспламенение

Самовоспламенение капель моделируется мгновенным размещением капли в равномерно нагретом газе с температурой $T_{g0} = 1000$ К. Фактически, в этом случае толщина поджигающего слоя выбирается очень большой по сравнению с диаметром капли d_0 . Несмотря на то что феноменология процессов испарения капли, смещения паров горючего с воздухом, самовоспламенения паровоздушной смеси и образования сажевой оболочки здесь такая же, как при вынужденном зажигании, условия радиационного погасания капли изменяются. По-видимому, это связано с изменением (уменьшением) оттока тепла из зоны горячего пламени в окружающий воздух, нагретый до $T_{g0} = 1000$ К вместо $T_{g0} = 293$ К при вынужденном зажигании. Ниже основное внимание уделено самовоспламенению мелких (субмиллиметровых) капель н-гептана с начальной температурой $T_{d0} = 293$ К в воздухе при давлении до 10 МПа.

На рис. 2 представлены результаты расчетов для капель начального диаметра $d_0 = 0,05, 0,1, 0,2, 0,5$ и 1 мм в виде зависимостей максимальной температуры газа T_{\max} от приведенного времени t/d_0^2 . Для удобства все кривые построены так, что самовоспламенение капель происходит в момент времени

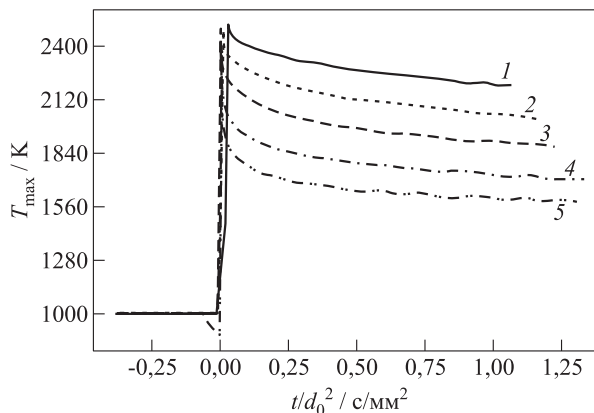


Рис. 2 Расчетные зависимости максимальной температуры газа в окрестности капли от приведенного времени при самовоспламенении капель разного начального диаметра (1 — 0,05 мм; 2 — 0,1; 3 — 0,2; 4 — 0,5; 5 — 1 мм) в воздухе, однородно нагретом до температуры $T_{g0} = 1000$ К и при $P = 10$ МПа

$t = 0$. Обрывы кривых при $t > 0$ соответствуют полному сгоранию капель.

В отличие от случая с вынужденным зажиганием, когда первичное горячее пламя вокруг миллиметровой капли полностью погасает при $t \approx 0,7$ с, оставляя массу капли практически неизменной, при самовоспламенении миллиметровая капля полностью сгорает в первичном горячем пламени за время около 1,26 с, хотя потери на тепловое излучение снижают температуру пламени почти на 900 К (см. рис. 2): от 2500 до 1600 К. При уменьшении начального размера капли до 50 мкм влияние потерь на тепловое излучение уменьшается: за время жизни капли температура пламени снижается всего на 300 К, от 2500 до 2200 К.

На рис. 3 показаны мгновенные пространственные распределения температуры и массовой доли сажи вокруг капли с $d_0 = 50$ мкм в моменты времени $t = 1,5, 2$ и 3 мс. Вдоль оси абсцисс отложено безразмерное радиальное расстояние от центра капли $2r/d_0$. Распределение температуры вокруг капли имеет куполообразную форму с ярко выраженным максимумом, соответствующим температуре горения. Распределение массовой доли сажи тоже имеет куполообразную форму, причем максимум этого распределения находится между поверхностью капли и пламенем, т. е. в области, где аккумулируются пары горючего, а молекулярный кислород воздуха отсутствует. Если максимум температуры находится на расстоянии $d_0 \dots 2d_0$ от поверхности капли, то максимум массовой доли сажи — на расстоянии $\sim 0,5d_0$, а характерная ширина сажевой «оболочки» составляет $\sim d_0$.

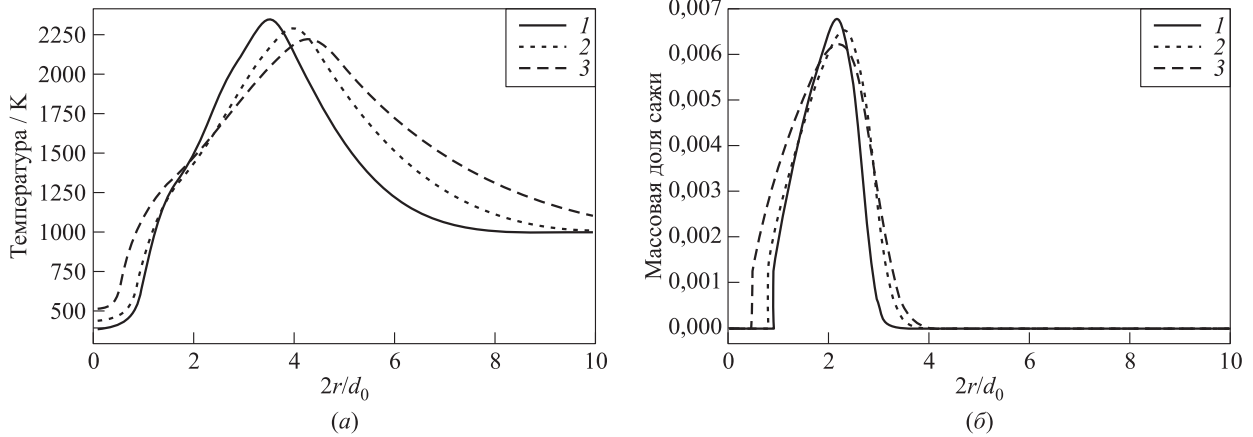
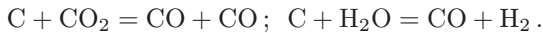


Рис. 3 Мгновенные пространственные распределения температуры (а) и массовой доли сажи (б) вокруг капли начального диаметра $d_0 = 50$ мкм при ее самовоспламенении при $T_{g0} = 1000$ К и $P = 10$ МПа: 1 – $t = 1,5$ мс; 2 – 2; 3 – $t = 3$ мс

Напомним, что в соответствии с макрокинетическим механизмом сажеобразования [4] сажа представлена эквивалентным газом с молекулярной массой 12 кг/кмоль, состоящим из сферических частиц диаметром 1 нм и плотностью 2000 кг/м³. Сажа (С) образуется в брутто-реакции



и окисляется в реакциях



Как отмечено в [4], сажевая «оболочка», образовавшись вокруг капли после возникновения первичного горячего пламени, отбирает часть теплового потока, идущего от пламени к поверхности капли, и излучает тепло в окружающее пространство. При определенных условиях это приводит

к погасанию первичного горячего пламени. В случае, представленном на рис. 3, капля успевает сгореть в первичном горячем пламени до того, как произойдет его радиационное погасание.

Чтобы оценить влияние теплового излучения сажи на горение мелких субмиллиметровых капель, была проведена серия расчетов с учетом и без учета излучения сажи.

На рис. 4 представлены примеры расчетных зависимостей максимальной температуры газа T_{max} вокруг одиночных мелких капель диаметром 20 (рис. 4, а) и 40 мкм (рис. 4, б) при их двухстадийном самовоспламенении и последующем горении с учетом и без учета теплового излучения образующейся сажи. Видно, что по мере возрастания до наибольшего значения обе кривые на рис. 4, а и на рис. 4, б сливаются, а после достижения максимума они немного расходятся. Слияние кривых на

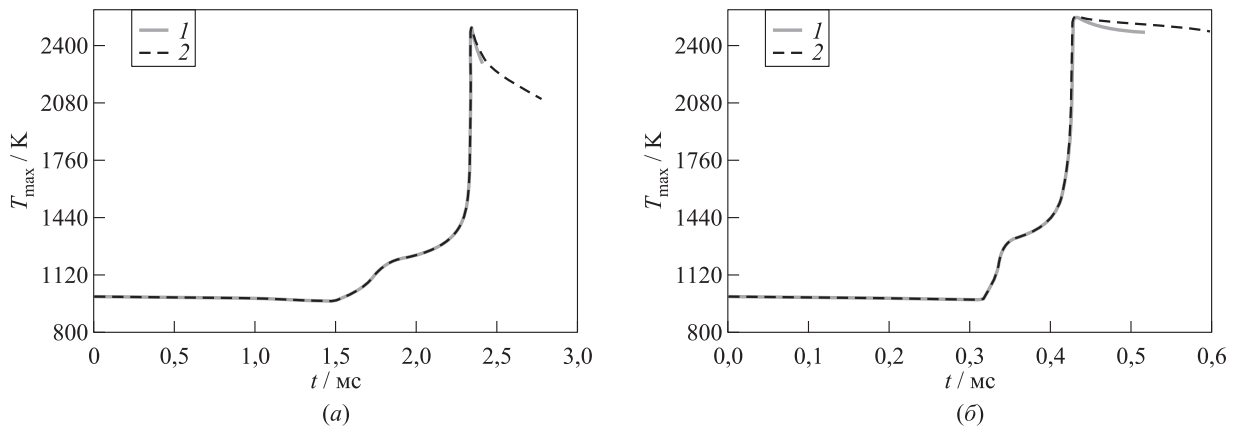


Рис. 4 Расчетные зависимости максимальной температуры газа T_{max} вокруг капли при ее самовоспламенении и последующем горении; $T_{d0} = 293$ К; $T_{g0} = 1000$ К: (а) $d_0 = 40$ мкм, $P = 2,5$ МПа; (б) $d_0 = 20$ мкм, $P = 10$ МПа; 1 – расчет с учетом теплового излучения сажи; 2 – расчет без учета теплового излучения сажи

начальном участке объясняется пренебрежимо малой интенсивностью потерь тепла на излучение по сравнению с интенсивностью химического энерговыделения при самовоспламенении паровоздушной смеси в окрестности капли. Потери тепла на излучение начинают сказываться лишь после того, как температура достигает максимального значения и скорость энерговыделения снижается до уровня, характерного для диффузионного горения капли.

Слабое влияние теплового излучения на самовоспламенение мелких капель подтверждается пространственными распределениями температуры вокруг капель, построенными для моментов времени, близких к моменту самовоспламенения (рис. 5), а также временными зависимостями квадрата диаметра капли от времени (рис. 6). Как следует из рис. 5 и 6, учет потерь на излучение практически никак не сказывается на температурных кривых

и на величине константы скорости горения k . Более того, потери на излучение начинают проявляться, когда капли почти полностью испарились.

Заключение

Проведены расчеты горения капель *n*-гептана субмиллиметрового диаметра в условиях микрогравитации как при вынужденном зажигании в воздухе с комнатной температурой (293 К), так и при самовоспламенении в воздухе, однородно нагретом до температуры 1000 К. В расчетах использован ДКМ окисления и горения *n*-гептана и макрокинетический механизм сажеобразования.

Вынужденное зажигание мелких капель моделировалось размещением вокруг капли тонкого сферического слоя с высокой температурой газа

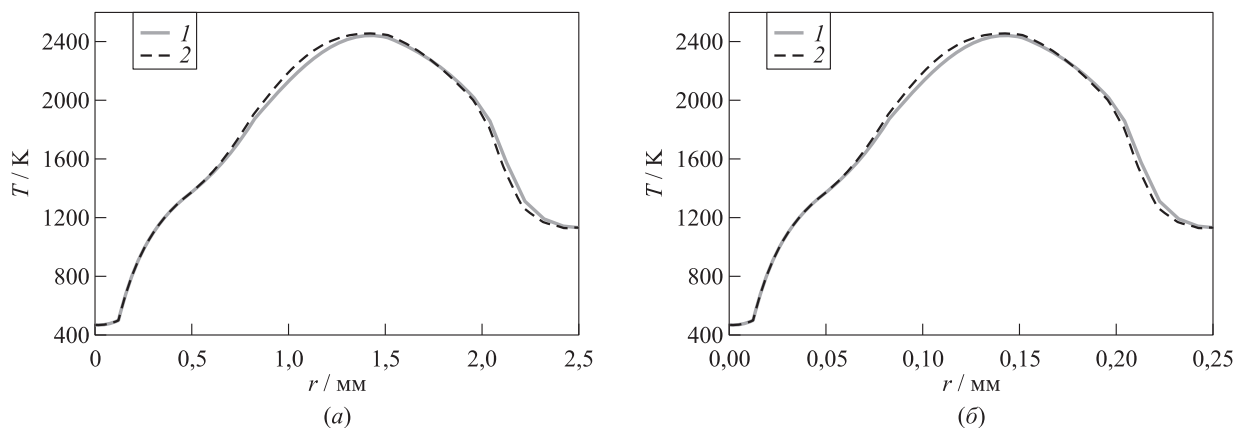


Рис. 5 Расчетные мгновенные распределения температуры в капле и в газе в зависимости от расстояния от центра капли; $T_{a0} = 293$ К; $T_{g0} = 1000$ К: (а) $d_0 = 40$ мкм, $P = 2,5$ МПа, $t = 2,35$ мс; (б) $d_0 = 20$ мкм, $P = 10$ МПа, $t = 0,425$ мс; 1 — расчет с учетом теплового излучения сажи; 2 — расчет без учета теплового излучения сажи

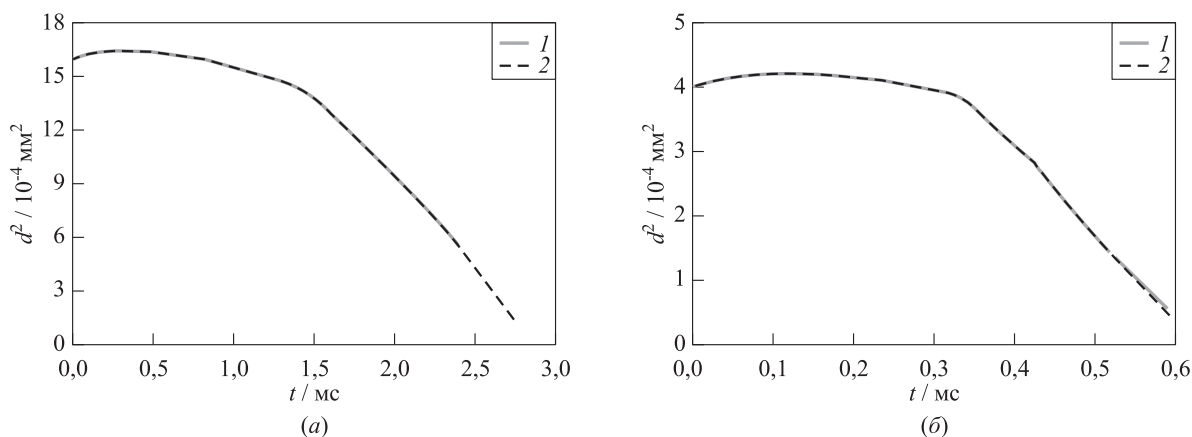


Рис. 6 Расчетные зависимости квадрата диаметра капли от времени при ее самовоспламенении и последующем горении; $T_{a0} = 293$ К; $T_{g0} = 1000$ К: (а) $d_0 = 40$ мкм, $P = 2,5$ МПа; (б) $d_0 = 20$ мкм, $P = 10$ МПа; 1 — расчет с учетом теплового излучения сажи; 2 — расчет без учета теплового излучения сажи

(2000 K), причем толщина поджигающего слоя была малой по сравнению с размером капли, но достаточной для образования горячего пламени вокруг капли. В этих условиях учет тепловых потерь на излучение образующейся сажи приводил к радиационному погасанию первичного горячего пламени. При прочих равных условиях в расчетах без учета эффекта теплового излучения сажи мелкие капли полностью сгорали в диффузионном пламени.

Самовоспламенение мелких капель моделировалось мгновенным размещением капли в равномерно нагретом газе. Фактически, в этом случае толщина поджигающего слоя выбиралась очень большой по сравнению с размером капли. Несмотря на то что феноменология процессов испарения капли, смешения паров горючего с воздухом, самовоспламенения паровоздушной смеси и образования сажевой оболочки здесь была такой же, как при вынужденном зажигании, радиационного погасания капли не происходило, хотя с течением времени температура горения монотонно снижалась. При прочих равных условиях в расчетах без учета эффекта теплового излучения сажи температура горения была выше, но незначительно, т. е. влияние теплового излучения сажи при самовоспламенении и последующем горении мелких капель оказалось слабым: капли успевали сгореть прежде чем проявлялись эффекты теплового излучения. Последнее представляется важным при моделировании рабочего процесса в транспортных двигателях на жидком топливе. Самовоспламенение и горение капель в таких условиях можно приближенно моделировать без учета теплового излучения сажи. Кроме

того, следует иметь в виду, что при наличии направленных конвективных потоков в окрестности капли сажевая оболочка деформируется и фрагментируется, что также снижает влияние теплового излучения сажи на горение капли.

Литература

1. Nayagam V., Dietrich D. L., Ferkul P. V., et al. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning? // *Combust. Flame*, 2012. Vol. 159. P. 3583–3588.
2. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Моделирование самовоспламенения и горения капель *n*-гептана с использованием детального кинетического механизма // *Хим. физика*, 2010. Т. 12. № 12. С. 50–59.
3. Басевич В. Я., Медведев С. Н., Фролов С. М., Фролов Ф. С., Basara B., Priesching P. Макрокинетическая модель для расчета эмиссии сажи в дизеле // *Горение и взрыв*, 2016. Т. 9. № 3. С. 36–47.
4. Фролов С. М., Басевич В. Я., Медведев С. Н. Моделирование низкотемпературного окисления и горения капель // *ДАН*, 2016. Т. 470. № 4. С. 427–430.
5. Фролов С. М., Басевич В. Я., Медведев С. Н., Фролов Ф. С. Беспламенное горение крупной капли *n*-додекана в условиях микрогравитации // *Горение и взрыв*, 2017. Т. 10. № 3. С. 36–42.
6. Фролов С. М., Посвянский В. С., Басевич В. Я., Беляев А. А., Сметанюк В. А., Марков В. В., Семенов И. В. Испарение и горение капли углеводородного топлива. II. Неэмпирическая модель испарения капли с учетом многокомпонентной диффузии // *Хим. физика*, 2004. Т. 23. № 4. С. 75–83.

Поступила в редакцию 02.02.18

EFFECT OF THERMAL RADIATION ON DROPLET COMBUSTION

V. Ya. Basevich¹, A. A. Belyaev¹, S. N. Medvedev¹, S. M. Frolov^{1,2,3}, and F. S. Frolov^{1,3}

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

³Scientific Research Institute of System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation

Abstract: The effect of thermal radiation on self-ignition and combustion of *n*-heptane droplets is considered. As shown by the experiments with hydrocarbon fuel performed at the International Space Station in microgravity conditions (the Russian–American space experiment CFI (“Zarevo”)), after ignition of a single large droplet 2–5 mm in diameter, the arising flame quenches and the droplet undergoes subsequent low-temperature oxidation and combustion. Calculations show that this phenomenon is due to the thermal emission of soot formed during the burning of the droplet. Unlike large droplets, the combustion of small droplets of submillimeter diameter occurs

without the determining influence of thermal radiation: the droplet has time to burn nearly completely before the effects of thermal radiation manifest themselves.

Keywords: droplet combustion; thermal radiation; self-ignition delay; combustion constant

DOI: 10.30826/CE18110210

Acknowledgments

This work was carried out due to a subsidy allocated by the Institute of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences for the performance of the state task (topics 0082-2016-0011, AAA-A17-117040610346-5 and 0082-2014-0004, AAA-A17-117040610283-3).

References

1. Nayagam, V., D. L. Dietrich, P. V. Ferkul, et al. 2012. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning? *Combust. Flame* 159:3583–3588.
2. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, S. N. Medvedev, V. S. Posvyanskii, F. S. Frolov, and S. M. Frolov. 2010. Simulation of the autoignition and combustion of *n*-heptane droplets using a detailed kinetic mechanism. *Russ. J. Phys. Chem. B* 4(6):995–1004.
3. Basevich, V. Ya., S. N. Medvedev, S. M. Frolov, F. S. Frolov, B. Basara, and P. Priesching. 2016. Makrokineticheskaya model' dlya rascheta emissii sazhi v dizele [Macrokinetic model for calculation of soot emissions in Diesel engine]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 9(3):36–47.
4. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, and S. N. Medvedev. 2016. Modeling of low-temperature oxidation and combustion of droplets. *Dokl. Phys. Chem.* 470(2):150–153.
5. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, S. N. Medvedev, and F. S. Frolov. 2017. Besplamennoe gorenie krupnoy kapli *n*-dodekana v usloviyakh mikrogravitatsii [Flameless burning of large *n*-dodecane drops in microgravity conditions]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 10(3):36–42.
6. Frolov, S. M., V. S. Posvyanskii, V. Ya. Basevich, V. A. Smetanyuk, V. V. Markov, and I. V. Semenov. 2004. Isparenie i gorenie kapli uglevodorodnogo topliva. II. Neempiricheskaya model' ispareniya kapli s uchetom mnogokomponentnoy diffuzii [Evaporation and combustion of hydrocarbon fuel droplet. Part II: Nonempirical model of droplet evaporation with regard for multicomponent diffusion]. *Khim. Fiz.* 23(4):75–83.

Received February 2, 2018

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

Belyaev Andrey A. (b. 1954) — 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; belyaevIHF@yandex.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, professor, 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; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, 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; research scientist, Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; f.frolov@chph.ru