https://doi.org/10.15350/17270529.2023.1.3

УДК 544.452

Численная оценка эффекта синглетного дельта-кислорода на горение полиоксиметилена

А. А. Шаклеин

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Россия, 426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

Аннотация. В работе проведено численное исследование влияния молекулярного кислорода, находящегося в возбужденном состоянии, на горение полиоксиметилена в реакторе по сжиганию твердых бытовых отходов. Рассматриваемый в данной работе сигнглетный дельта-кислород может быть получен за счет воздействия электрического разряда на кислород в обычном состоянии. Поэтому данное исследование можно рассматривать как частный случай общей задачи применения плазмы для изменения параметров горения. Методика расчетов и использованные кинетические механизмы проверены на задачах горения формальдегида, а также метано-воздушной смеси с заменой части кислорода на $O_2(a^1\Delta_g)$. Показано, что замена в реагентах 10 % молекулярного кислорода на $O_2(a^1\Delta_g)$ при горении полиоксиметилена позволяет поднять максимальную температуру в камере сгорания, повысить массовую скорость горения полимера и температуру горящей поверхности.

Ключевые слова: горение, химический механизм, плазма, полиоксиметилен, численное моделирование.

✉ *Артем Шаклеин, e-mail:* shaklein@udman.ru

Numerical Estimation of Singlet Delta Oxygen Effect on Polyoxymethylene Burning

Artem A. Shaklein

Udmurt Federal Research Center UB RAS (34, T. Baramzina St., Izhevsk, 426067, Russian Federation)

Summary. Continuously growing consumption of products results in various problems such as the necessity of the polymeric waste disposal, which creats a new worldwide field of research. Polymer incineration is one of available techniques, which major disadvantage is the pollutant and exhaust formation in the atmosphere. Plasma assisted combustion is a promising technology providing the reduction of the ignition delay time, enhancement of flame speed and stabilization of flame, which also affects the composition of combustion products and can reduce air pollution. However, a brief review shows various uncovered areas in the theory of plasma effects on flame such as unknown kinetic parameters for many reactions with excited species. In the present work a mechanism for the numerical estimation of the plasma effect on the polymer burning behavior is proposed. A reactor previously introduced for studying the incineration of polymers is employed here. The coupled formulation of a mathematical model s is proposed including heat and mass transfer between gas phase flame and solid material. The set of one-dimensional gas phase governing equations is solved using Cantera; for proper solving radiative heat transfer in optically thick medium the P1 radiation model is introduced into the source code. The one-dimensional equations of solid fuel are solved in the in-house code. Polyoxymethylene was selected as a sample of polymeric material to be incinerated. Plasma discharge is able to excite molecular oxygen from ground state (is present in the air supplied into the reactor as oxidizer) to singlet delta oxygen, $O_2(a^1\Delta_g)$. The isolated effect of $O_2(a^1\Delta_g)$ on combustion could be considered as a special case of plasma assisted combustion. Thus, the effect of plasma was modeled by partial replacement of ground state molecular oxygen (was present in air supplied into the reactor as oxidizer) by singlet delta oxygen, $O_2(a^1\Delta_g)$. Two detailed kinetic mechanisms (based on GriMech and Konnov) were chosen to resolve the $O_2(a^1\Delta_g)$ effect on formaldehyde combustion. At first, the numerical approach was tested on formaldehyde flames and methane-air flame with the addition of $O_2(a^1\Delta_g)$. The calculated results of the current study are in good agreement with the results presented in the literature. Then, the numerical study of polyoxymethylene combustion was carried out. It is shown that the replacement of 10 % of O_2 by $O_2(a^1\Delta_g)$ increases the maximal temperature in the reactor, polymer's mass loss rate, temperature of the burning surface, molecular and radiative heat fluxes from flame to solid material. The concentrations of some species such as O_2, $O_2(a^1\Delta_g)$, H_2O, CO, CH_2O, OH are changed only locally in the vicinity of the burning surface, while the replacement of 10% O_2 by $O_2(a^1\Delta_g)$ has a permanent effect on the concentrations of CH_4 and CO_2.

Keywords: combustion, chemical mechanism, plasma, polyoxymethylene, numerical simulation.

✉ *Artem Shaklein, e-mail:* shaklein@udman.ru

Обозначения		Греческие символы	
C	удельная теплоемкость (specific heat capacity), [J/(kg·K)]	α	степень превращения (donversion degree), [–]
E	энергия активации (activation energy), [J/mol]	ε	степень черноты (emissivity), [–]
G	интеграл интенсивности излучения (incident radiation), [W/m^2]	ϕ	коэффициент избытка горючего (fuel-air equivalence ratio), [–]
k	предэкспонент скорости реакции (pre-exponential factor), [s^{-1}]	Γ	коэффициент диффузии diffusion coefficient), [m]
L	длина (length), [m]	κ	коэффициент поглощения (absorption coefficient), [m^{-1}]
m	массовая скорость горения (mass burning rate), [kg/(s·m^2)]	λ	теплопроводность (thermal conductivity), [W/(m·K)]
n	порядок реакции пиролиза (pyrolysis reaction order), [–]	ρ	плотность (density), [kg/m^3]
p	давление (pressure), [Pa]	σ_{SB}	постоянная Стефана-Больцмана (Stefan-Boltzmann constant), [W/(m^2·K^4)]
Q	тепловой эффект реакции (heat effect of reaction), [J/kg]	ω	мольная скорость реакции (molar reaction rate), [mol/s]
q	тепловой поток (heat flux), [W/m^2]	**Нижние индексы**	
R_0	универсальная газовая постоянная (universal gas constant), [J/(mol·K)]	a	окружающая среда (ambient)
T	температура (temperature), [K]	f	горючее (fuel)
t	время (time), [s]	g	газ (gas)
u	скорость (velocity), [m/s]	m	молекулярный (molecular)
W	скорость реакции (reaction rate), [s^{-1}]	o	окислитель (oxidizer)
X	объемная доля (volume fraction), [–]	r	радиационный (radiative)
Y	массовая доля (mass fraction), [–]	s	твердое тело (solid)
z	координата (coordinate), [m]	w	на поверхности (at surface)

ВВЕДЕНИЕ

Проблема утилизации полимерных отходов остро стоит перед мировым сообществом. Утилизация сжиганием является одним из способов обращения с полимерными отходами. При утилизации твердых бытовых отходов сжиганием следует акцентировать внимание на образующиеся в результате реакций пиролиза и горения вредные вещества, такие как диоксины, фураны, оксиды азота, оксиды серы, гидрохлориды, сажа. Так, например, диоксины и фураны являются опасными веществами, способными вызывать онкологические заболевания и снижать иммунитет. Поэтому важно проводить исследования, направленные на повышение эффективности утилизации отходов из полимерных материалов сжиганием и снижение выброса вредных веществ в атмосферу.

Применение плазмы для изменения параметров горения является перспективной технологией. Исследования в области плазменного горения проводятся уже давно, на сегодняшний день представлено множество обзорных работ [1 – 4], в которых отмечается прогресс в применении плазмы для снижения времени задержки зажигания, увеличения скорости распространения пламени, стабилизации пламени. Однако следует заметить, что теория воздействия электрического разряда на горение находится в процессе развития, и многие факторы не достаточно хорошо изучены. Например, в работе [4] сообщается, что к моменту написания статьи эффект влияния $N_2(v)$ на окисление и зажигание горючих смесей не ясен. В обзоре [2] отмечается исследование [5], в котором проводится оценка влияния $O_2(a^1\Delta_g)$ на характеристики пламени C_2H_4 при низких давлениях. В этой работе отмечается, что для количественного соответствия результатов расчетов измерениям по эффекту влияния $O_2(a^1\Delta_g)$ на скорость распространения пламени потребовалось учесть релаксацию $O_2(a^1\Delta_g)$ при реакции с C_2H_4. Однако предварительные оценки кинетических параметров данной реакции не привели к желаемым результатам, и авторы подобрали предэкспонент и энергию

активации для соответствия расчетов экспериментам по скорости распространения пламени. В работе [6] представлены результаты численных расчетов по исследованию влияния концентрации и типа (Ar, He, N_2) разбавляющего газа на передачу энергии электронов компонентам смеси. Показано, что исследуемые параметры разбавляющего газа оказывают существенное влияние на передачу энергии.

Из работ, посвященных воздействию электрического поля на горение полимерных материалов, следует отметить исследование [7]. В этой работе рассматривается горение полиметилметакрилата. Здесь в качестве механизмов влияния электрического поля на пламя учитывается только передача момента ионам и передача тепла ("омический нагрев"). Результаты расчетов авторами сравниваются с данными из своей предыдущей экспериментальной работы по скорости выгорания, и отмечается, что наблюдается хорошее согласование.

Основными механизмами влияния плазмы (электрического разряда) на пламя являются: передача тепла, передача импульса, ионизация, диссоциация и возбуждение. На основе решения уравнения Больцмана получена функция распределения электронов по энергии [1], что позволяет оценить передачу энергии электронов, образующихся в результате воздействия плазмы, на ионизацию, диссоциацию молекул, а также их возбуждение. На примере воздействия плазмы на смеси N_2, H_2, O_2 и легких углеводородов при разных значениях приведенного электрического поля (E/n) показаны доли энергии, передающейся от электронов газовой смеси различными механизмами, отмеченными в начале текущего абзаца. Следует отметить, что при любом значении приведенного электрического поля происходит одновременное воздействие на газовую смесь плазмой посредством различных механизмов. В разных диапазонах значений E/n преобладают какие-либо конкретные механизмы, однако, переходы между ними являются плавными. При наличии большого числа разнообразных газообразных веществ затрудняется или становится невозможным проведение численных оценок влияния плазмы на горение в виду отсутствия экспериментальных данных по взаимодействию как электрического поля с различными веществами, а также веществ, образованных в результате взаимодействия с плазмой (например, возбужденных молекул), между собой и исходными веществами в газовой смеси.

Исходя из вышесказанного, в данной работе предложен следующий подход для оценки влияния плазмы на горение полимерных материалов. При воздействии электрического разряда на молекулярный кислород, находящийся в основном состоянии, можно получить синглетный дельта-кислород с энергией возбуждения 0.98 [eV]. Изучение влияния только синглетного дельта-кислорода на горение можно рассматривать как частный обособленный случай более широкой задачи применения плазмы для изменения параметров горения. Время существования $O_2(a^1\Delta_g)$ составляет по разным оценкам порядка миллисекунды вблизи поверхностей [8] и порядка секунды в воздухе при 23 [°C] и 1 [atm] [9]. В связи с этим, проводимое в настоящей работе исследование можно рассматривать при соблюдении определенных условий не как исключительно фундаментальное, а в том числе и ориентированное на практическое применение. При этом можно отдельно воздействовать электрическим разрядом на молекулярный кислород в обычном состоянии для получения $O_2(a^1\Delta_g)$, чтобы избежать влияния электрического разряда на молекулы азота. Далее, кислород смешивается с азотом для получения смеси окислителя, соотношение компонентов в котором аналогично воздушной смеси: $0.21x\ O_2(a^1\Delta_g)$, $0.21(1-x)\ O_2$ и $0.79\ N_2$ (по объему), где x – доля синглетного дельта кислорода в молекулярном кислороде. При таком подходе отсутствует воздействие электрического поля на азот, горючее и продукты сгорания, что позволяет оценить влияние на процесс горения одного параметра – доли синглетного дельта кислорода в молекулярном кислороде. В связи с этим, в данной работе в качестве предварительного этапа рассмотрен только вариант с подачей в газофазную область кислорода в уже возбужденном состоянии.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Идея данной работы заключается в проведении оценок влияния плазмы на горение полимерных материалов (конкретно — полиоксиметилена) на примере замены части молекулярного кислорода, находящегося в основном состоянии в воздухе, на одно из метастабильных состояний — синглетный дельта-кислород, $O_2(a^1\Delta_g)$.

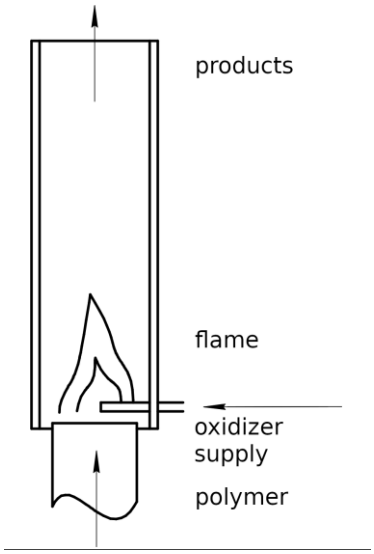

Рис. 1. Схема реактора по сжиганию

Fig. 1. The scheme of the combustion reactor

Для оценки эффекта влияния $O_2(a^1\Delta_g)$ на горение полиоксиметилена предлагается использовать модельный реактор по сжиганию (рис. 1), предложенный в предыдущей работе [10]. Так, в [10] методика численного исследования сжигания полимерных материалов в реакторе была применена для оценки эффекта внешнего теплового источника на горение полиоксиметилена. В настоящей работе варьируется концентрация $O_2(a^1\Delta_g)$ в подаваемом окислителе.

Модельный реактор выглядит следующим образом (рис. 1). Рассматривается режим горения предварительно перемешанной смеси. Через верхнюю часть реактора продукты сгорания вытекают в окружающую среду. Нижняя часть соединена с полимерным материалом, и через нее в реактор поступают газообразные продукты пиролиза полимерного материала. Вблизи поверхности полимера располагается система для подачи окислителя, часть кислорода из которого заменяется на $O_2(a^1\Delta_g)$. Смесь газообразных продуктов пиролиза полимера и окислителя сгорает в реакторе с образованием тепловой энергии, часть которой поступает обратно в твердый материал за счет теплопроводности и излучения. Образец твердого материала термически разлагается с выделением горючих продуктов. Образец полимерного материала перемещается с постоянной скоростью для того, чтобы компенсировать выгорание материала и поддерживать неизменное положение поверхности горения.

Задача решается численно. Математическая модель формулируется с акцентом на разрешении наибольшего числа основных существенных факторов: многокомпонентного течения реагирующего газа, детальной газофазной химической кинетики, тепло- и массопереноса, теплопереноса излучением, пиролиза твердого горючего материала. Рассматривается сопряженная постановка с разрешением взаимодействия между газофазным горением и термически разлагающимся полимером, в рамках которой основные параметры горения полимера (массовая скорость горения, теплоперенос от пламени) не задаются на основе эмпирических зависимостей, а определяются в результате расчетов основных уравнений сохранения.

Использование одномерной постановки позволяет упростить модель без существенного изменения тепло- и массопереноса, в то время как процесс горения может быть разрешен с использованием детального кинетического механизма. Таким образом, основное внимание акцентируется на оценке влияния $O_2(a^1\Delta_g)$ на горения полимера. Этот подход позволяется получить адекватное расчетное время по сравнению с дву- и трехмерной постановками из-за высоких вычислительных затрат на расчет детальной химической кинетики. Пренебрегается тепловыми потерями в стенку реактора. Рассматривается стационарный режим горения без переходных режимов (зажигание, погасание). Предполагается, что течение несжимаемое и ламинарное.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для описания горения полимерного материала сформулирована математическая модель, учитывающая газофазное горение, теплопередачу излучением, теплопроводность и пиролиз в твердом материале.

Газовая фаза

Поскольку решение уравнений течения реагирующего многокомпонентного газа с учетом химических превращений осуществлялось в программном пакете Cantera [11], то в данном разделе приведены лишь основные уравнения сохранения:

$$\frac{\mathrm{d}\rho u}{\mathrm{d}z} = 0, \tag{1}$$

$$\rho u C_p \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\lambda\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z} - \sum_k h_k M_k \omega_k - \frac{\mathrm{d}q_r}{\mathrm{d}z}, \tag{2}$$

$$\rho u \frac{\mathrm{d}Y_k}{\mathrm{d}z} = -\frac{\mathrm{d}J_k}{\mathrm{d}z} + M_k\omega_k. \tag{3}$$

В программном пакете Cantera [11] для описания теплопередачи излучением имеется только модель оптически тонкого слоя. Для текущей постановки задачи, в рамках которой предполагается, что труба реактора достаточно длинная и отсутствуют потери тепла в окружающую среду через стенки реактора, газовая среда является оптически толстой. Поэтому, теплопередача излучением для текущей постановки оценивается по модели P1 [12] в следующем виде

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\Gamma\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}z} + \kappa\left(4\sigma T^4 - G\right) = 0. \tag{4}$$

Предполагается, что газовая среда поглощает, излучает, но не рассеивает тепловую энергию. Коэффициент диффузии в уравнении переноса излучения определяется в виде $\Gamma = 1/(3\kappa)$, где $\kappa = \sum \kappa_i X_i$, а параметры функциональной зависимости $\kappa_i = f(T,p)$ взяты из [13].

Радиационный тепловой поток в уравнении (2) определяется как

$$q_r = -\Gamma\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}z}. \tag{5}$$

Конденсированная фаза

Тепловое состояние полимерного материала описывается уравнением сохранения энергии в следующем виде

$$mC_s\frac{\mathrm{d}T_s}{\mathrm{d}z} = \lambda_s\frac{\mathrm{d}^2T_s}{\mathrm{d}z^2} + \rho_s W_s Q_s. \tag{6}$$

Конвективное слагаемое в уравнении (6) определяет теплопередачу в твердом теле за счет подачи образца в сторону пламени, которая обеспечивает фиксированное положение горящей поверхности в пространстве.

В твердом материале рассматривается одна реакция пиролиза в виде

$$\textit{Полимер} \rightarrow \textit{Газообразные продукты (мономер).} \tag{7}$$

Скорость реакции пиролиза полимерного материала определяется в виде

$$W_s = k_s \left(1-\alpha_s\right)^n \exp\left(-\frac{E_s}{R_0 T_s}\right). \tag{8}$$

Степень превращения реакции пиролиза определяется в виде

$$\rho_s \frac{\mathrm{d}\alpha_s}{\mathrm{d}z} = W_s . \tag{9}$$

Массовая скорость газификации определяется линейным интегралом по всей длине твердого материала

$$m = \rho_s \int_{-L_s}^{0} W_s \mathrm{d}z . \tag{10}$$

Граничные условия

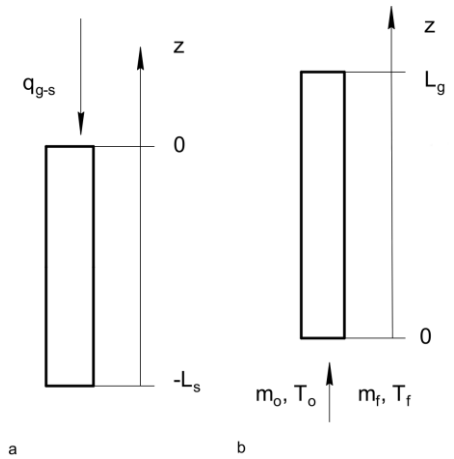

Рис. 2. Схема расчетных областей

Fig. 2. The scheme of the computational domains

Для представленного набора дифференциальных уравнений задаются следующие граничные условия в соответствии с расчетными областями, изображенными на рис. 2.

газовая фаза

$$z = L_g: \qquad \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} = 0,\ \varphi = \{T, Y_k\},\ \varepsilon = \varepsilon_a, \tag{11}$$

твердая фаза

$$z = -L_s: \qquad T_s = T_0,\ \alpha_s = 0; \tag{12}$$

общая граница

$$z = 0: \qquad T_{s,w} = T_g,\ C_s m_s T_{s,w} - \lambda_s \frac{\mathrm{d}T_s}{\mathrm{d}z} + q_{w,r} = C_g m_{g,f} T_g - \lambda_g \frac{\mathrm{d}T_g}{\mathrm{d}z},\ \varepsilon = \varepsilon_w,$$

$$J_k + m_g Y_k = m_g Y_{k,w},\ q_{w,r} = \frac{\varepsilon_w}{2\left(2-\varepsilon_w\right)}\left(4\sigma_{SB} T_{s,w}^4 - G_w\right). \tag{13}$$

Вычислительный алгоритм

При решении задач газофазного горения в пакете Cantera используются постановки свободного ("free flame") и стабилизированного у горелки пламени ("burner stabilized flame"), для которых детальное описание математических формулировок и вычислительных алгоритмов здесь не приводится, при необходимости предлагается воспользоваться инструкцией на сайте программы [11].

Для решения задачи горения полимерного материала в работе применяется итерационная методика для разрешения тепло- и массопереноса между твердым телом и газовой фазой. Математическая модель данных процессов описана в разделе **"Граничные условия"** уравнением (13). Алгоритм имеет следующий порядок. Сначала в постановке стабилизированного у горелки пламени решаются уравнения газовой фазы (1) – (4) в программном пакете Cantera [11], в который была добавлена модель теплопередачи излучением P1 в соответствии с уравнением (4). Для определения для газовой фазы значений расчетных параметров на входном граничном условии ($z = 0$) используется следующий подход. В результате решения уравнений (6) и (9), описывающих состояние твердого тела, определяются температура горящей поверхности твердого тела, $T_{s,w}$, и массовая скорость газификации, m_s, которые задаются в качестве параметров газообразного горючего на входе в газовую расчетную область: $T_f = T_w$, $m_{g,f} = m_s$. Предполагается, что окислитель подается с такой же температурой и массовым расходом как и горючее: $T_o = T_f$, $m_{g,o} = m_{g,f}$, а массовый расход в газовой фазе на входной границе ($z = 0$) составляет $\rho u = m_g = m_{g,o} + m_{g,f}$.

В результате решения уравнений в газовой фазе по полю температуры и коэффициенту теплопроводности смеси определяется значение молекулярного теплового потока у горящей поверхности твердого материала. Общий тепловой поток в твердый материал от газофазного пламени, который является суммой молекулярного и радиационного, задается в качестве граничного условия при решении уравнений (6) и (9), описывающих состояние твердого материала. В результате решения этих уравнений в собственном программном коде определяется температура горящей поверхности твердого тела, T_w, и массовая скорость газификации, m_s.

В пакете Cantera были использованы следующие параметры численного решения: конвективные слагаемые аппроксимируются первым порядком, диффузионные – вторым. Дифференциальные уравнения, описывающие состояние твердого тела, решаются методом конечных разностей на равномерной расчетной сетке. Конвективные слагаемые аппроксимируются первым порядком, диффузионные – вторым.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На первом этапе на задачах газофазного горения проводится тестирование как методики решения, так и кинетических механизмов на известных данных. Использующиеся в данном исследовании детальные кинетические механизмы приведены в табл. 1.

Таблица 1. Механизмы газофазного горения формальдегида

Table 1. Chemical mechanisms for formaldehyde combustion

No.	Decription	Number of reactions	Number of species	Reference
1	GriMech	964	100	[14]
2	Konnov	2300	201	[15]

Все необходимые для проведения расчетов горения данные (используемые реакции, параметры для определения скорости реакции, термодинамические данные компонентов, параметры для расчета коэффициентов переноса) имеются в соответствующих источниках (столбец Reference в табл. 1).

Тестирование методики на задачах горения формальдегида

Проводятся расчеты горения предварительно перемешанной смеси формальдегида с воздухом и сравнение полученных результатов с опубликованными в литературе данными на постановках задач в виде стабилизированного у горелки [16] и свободного пламени [17]. В первом случае рассматривается горение формальдегида при давлении 30 [mbar] в

стехиометрическом соотношении с кислородом [16]. Параметры смеси реагентов: 17.7 % CH_2O, 16.3 % O_2 и 66.0 % Ar (по объему), температура 300 [K], скорость подачи 80 [cm/s]. В работе [16] приведены данные по собственным измерениям, а также результаты расчетов по детальному кинетическому механизму UCL.

На рис. 3 и 4 представлено сравнение распределений измеренных и рассчитанных температур и концентраций. Здесь на рис. 3 не приведены расчетные значения температур из работы [16], поскольку авторами при расчетах уравнение энергии не использовалось, а при решении уравнений для концентраций были взяты измеренные значения температур. Применение механизма на основе GriMech позволяет получить хорошее количественное согласование с экспериментальными данными по температуре. Значения температур при расчетах по механизму на основе Konnov оказываются заметно ниже, чем измеренные, что может быть связано с низким давлением (30 [mbar]), на что используемый кинетический механизм может быть не рассчитан. Распределения расчетных значений концентраций основных компонентов (CH_2O, CO, рис. 4, *a*) вдоль пламени хорошо согласуются между собой и измерениями. Расчетные значения концентраций промежуточных компонентов (H, OH, O, рис. 4, *b*) оказались завышенными по сравнению с результатами измерений.

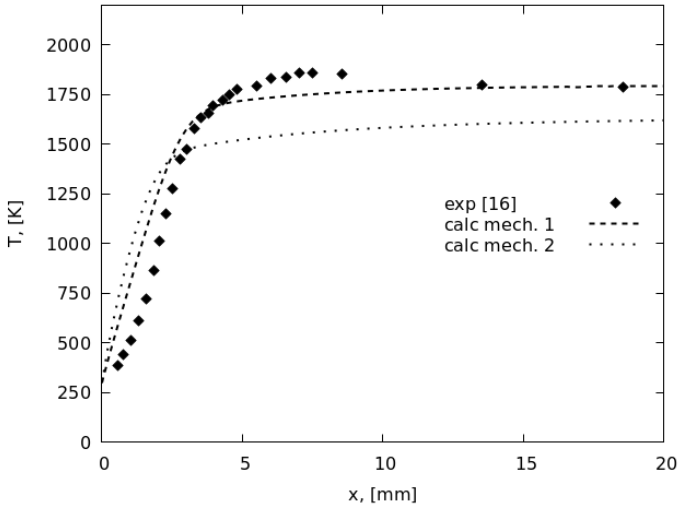

Рис. 3. Профили температур при горении формальдегида

Fig. 3. Temperature profiles for formaldehyde combustion

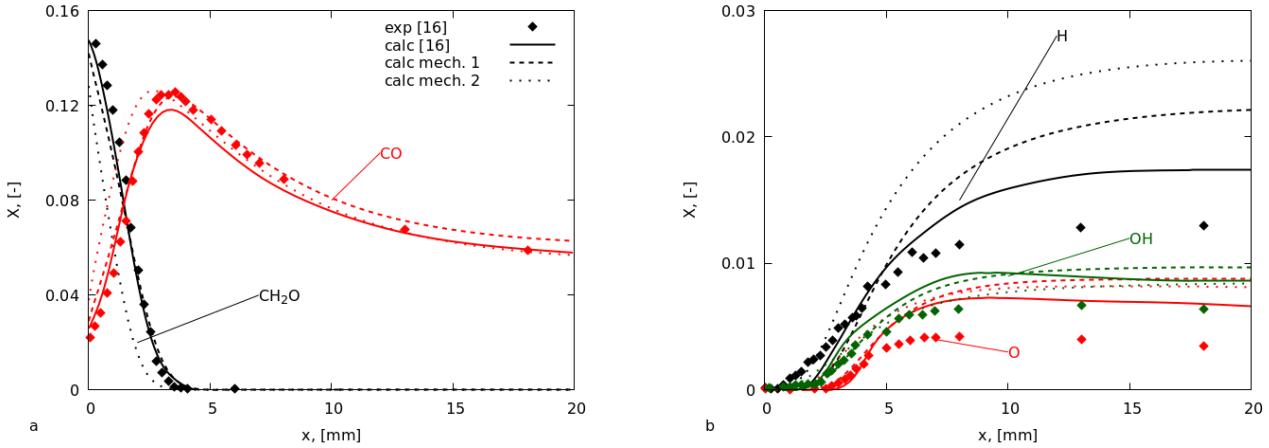

Рис. 4. Профили концентраций при горении формальдегида

Fig. 4. Species profiles for formaldehyde combustion

Численное моделирование горения формальдегида в конфигурации свободного пламени рассмотрено в работе [17]. Используются следующие параметры: температура 300 [K], давление 1 [atm], 18 % CH_2O, 12 % O_2, 70 % Ar. Расчеты в [17] проводятся с использованием детального кинетического механизма AramcoMech [18]. Данный механизм

для текущей задачи был рассмотрен также в предыдущей работе [10]. Результаты расчетов (рис. 5) по механизмам 1 и 2 (табл. 1) хорошо согласуются между собой и результатами расчетов из работы [17].

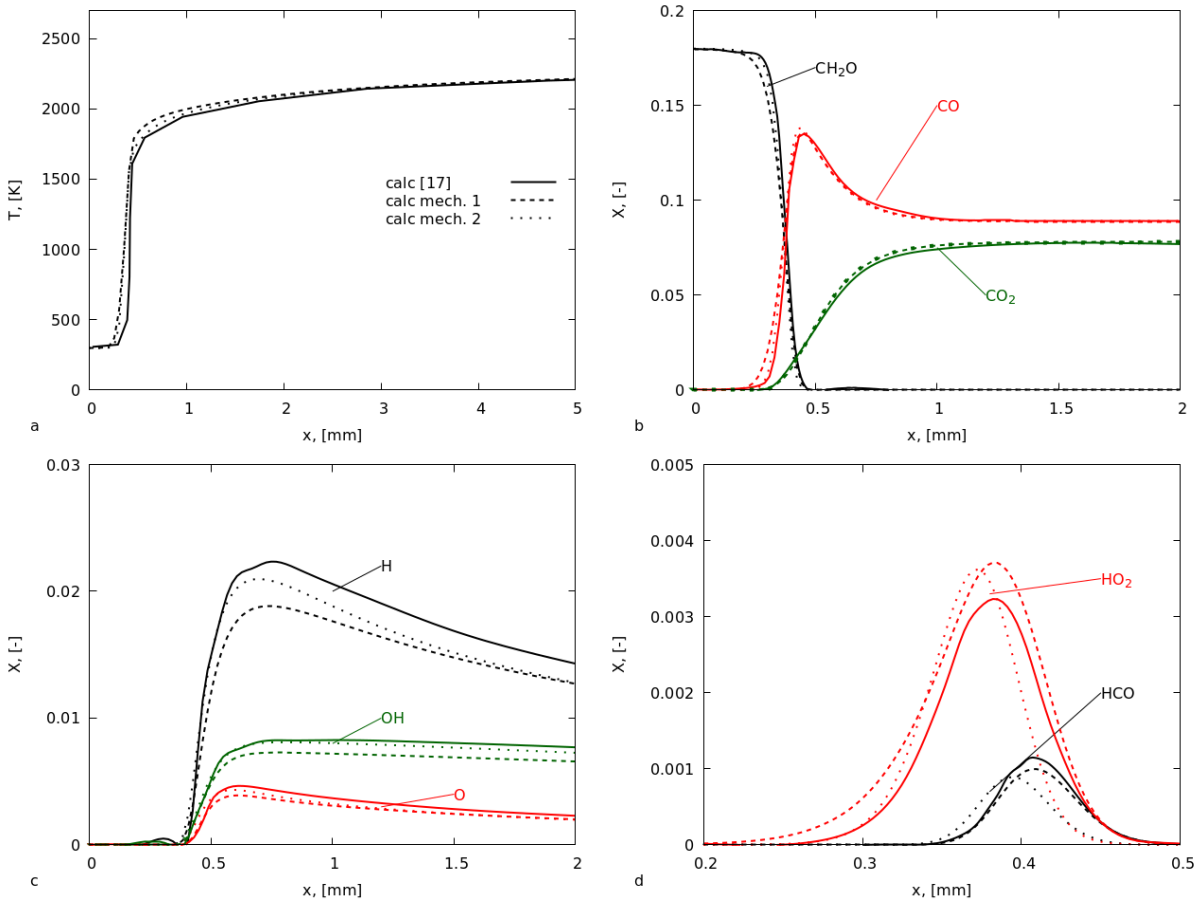

Рис. 5. Профили температур и концентраций при горении формальдегида

Fig. 5. Temperature and species profiles for formaldehyde combustion

Тестирование методики на задачах с заменой части кислорода на $O_2(a^1\Delta_g)$ на горение газовой смеси

В литературе имеется небольшое количество работ, посвященных исследованию влияния синглетного дельта кислорода на пламена, поскольку в основном исследуется задержка зажигания горючих смесей. Так, опубликованных работ по изучению горения формальдегида не нашлось, поэтому представленная методика, а также выбранные химические механизмы тестируются на задачах горения метана. В одной из работ [19] представлены численные результаты расчетов влияния синглетного кислорода на скорость распространения пламени метано-воздушной смеси.

Сначала проводятся стандартные расчеты скорости распространения пламени. Рассматривается постановка свободного пламени в пакете Cantera. Параметры реагентов: температура 300 [K], давление 1 [atm], горючее – метан, окислитель – воздух (с объемным соотношением 21 % O_2 и 79 % N_2), коэффициент избытка горючего (ϕ) варьируется в диапазоне от 0.5 до 1.5. Результаты расчетов, а также данные из других источников представлены на рис. 6. Данная задача является стандартной, и используемые кинетические механизмы позволяют хорошо предсказывать скорость распространения пламени для метано-воздушной смеси в рассматриваемом диапазоне коэффициент избытка горючего. В области графика (рис. 6), соответствующей богатой смеси ($\phi > 1$), наблюдается заметное количественное отличие между расчетными значениями скорости распространения пламени по собственному механизму из работы [19] от остальных расчетных и экспериментальных данных.

В работе [19] представлены результаты численного исследования влияния замены части O_2 в воздухе на $O_2(a^1\Delta_g)$. По представленной в настоящей работе методике проведены расчеты с заменой 5 и 10 % кислорода, на синглетный кислород. Результаты представлены на рис. 7. Следует отметить, что значения скоростей распространения пламени, рассчитанные по использованным в работе механизмам (табл. 1), количественно согласуются между собой лучше, чем с численными результатами из работы [19]. Отличие может быть обосновано как учетом (или не учетом) какой-либо реакции с участием $O_2(a^1\Delta_g)$, а также использованием разных кинетических параметров для одной и той же реакции в разных механизмах. Однако, установление причин качественных отличий между результатами в настоящем исследовании и в [19] не входит в задачу текущей работы, а предлагается в качестве отдельной темы исследования. Что касается исключения реакций из химического механизма, в том числе и с участием $O_2(a^1\Delta_g)$, следует отметить работу [20], в которой обсуждается сборка кинетического механизма с участием веществ в возбужденном состоянии для расчетов горения водорода. Автор приводит в табл. 2 [20] список реакций, которые описаны в литературе, но не используются в текущем механизме по различным причинам.

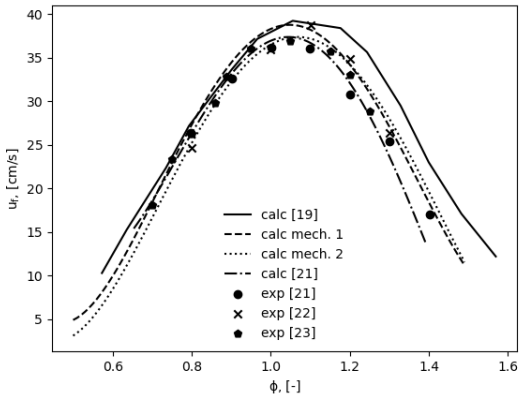

Рис. 6. Зависимость скорости распространения пламени от коэффициента избытка горючего для метано-воздушной смеси

Fig. 6. Flame speed as a function of fuel-air equivalence ratio for methane-air mixture

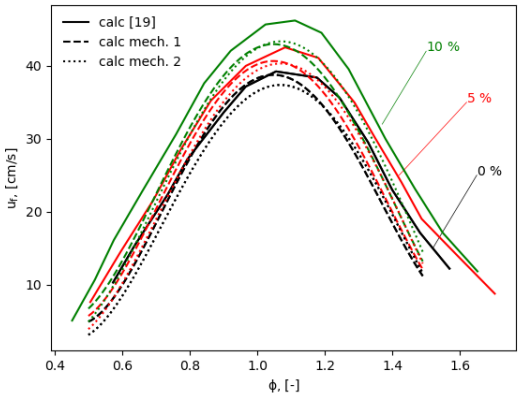

Рис. 7. Зависимость скорости распространения пламени от коэффициента избытка горючего метано-воздушной смеси при разных концентрациях $O_2(a^1\Delta_g)$

Fig. 7. Flame speed as a function of fuel-air equivalence ratio for methane-air mixture at different $O_2(a^1\Delta_g)$ concentrations

Также, в работе [19] представлены зависимости концентрации компонентов от температуры. Рассматривается постановка свободного пламени, на входе давление и температура составляют 1 [atm] и 450 [K] соответственно. В качестве результатов приводятся зависимости концентраций основных компонентов от температуры (рис. 8). Здесь расчеты с механизмом 2 (табл. 1) предсказали хорошее согласование по распределению $O_2(a^1\Delta_g)$ как при 0 % $O_2(a^1\Delta_g)$ в доле кислорода в исходной смеси, так и при 10 %.

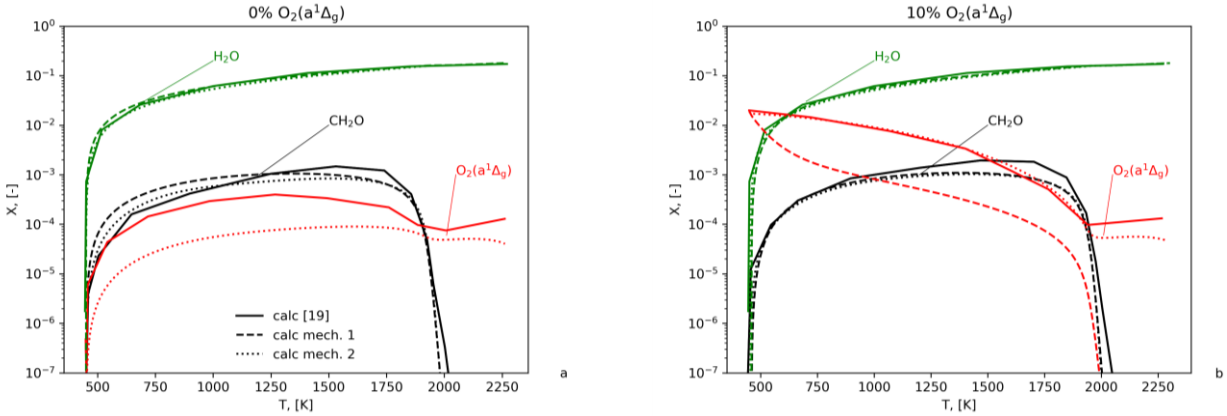

Рис. 8. Зависимость мольных долей некоторых компонентов от температуры при разных концентрациях $O_2(a^1\Delta_g)$ в кислороде

Fig. 8. Species mole fractions as a function of temperature at various $O_2(a^1\Delta_g)$ concentrations in oxygen

Расчет влияния замены части кислорода на $O_2(a^1\Delta_g)$ на горение полиоксиметилена

При формулировке задачи горения полимерного материала предлагается следующий подход определения параметров на входе в газовую область. Решение уравнений твердого тела позволяет вычислить температуру поверхности и массовую скорость газификации горючего. При этом в данной задаче из различных вариантов задания параметров для подачи окислителя выбирается такой, при котором температура и массовый расход соответствуют потоку в результате пиролиза полимерного материала. Таким образом, используются следующие параметры: $p = 101325$ [Pa], $T_o = T_f$, $m_o = m_f$, $\rho_s = 1380$ [kg/m^3], $\lambda_s = 0.292$ [W/(m K)] [24], $C_s = 1.11 + 0.00811\,T$ [J/(g °C)] для $T \le T_m$, $1.34 + 0.00275\,T$ [J/(g °C)] для $T > T_m$, $T_m = 165$ [°C], $Q_s = -2.68 \cdot 10^6$ [J/kg] [25], $k_s = 9.98 \cdot 10^{32}$ [s^{-1}], $E_s = 381$ [kJ/mol], $n = 1.3$ [26], $\varepsilon_w = 0.82$ [27]. В качестве газообразных продуктов пиролиза полиоксиметилена принят его мономер – формальдегид [28].

Результаты расчетов по двум механизмам (табл. 1) представлены на рис. 9 и в табл. 2.

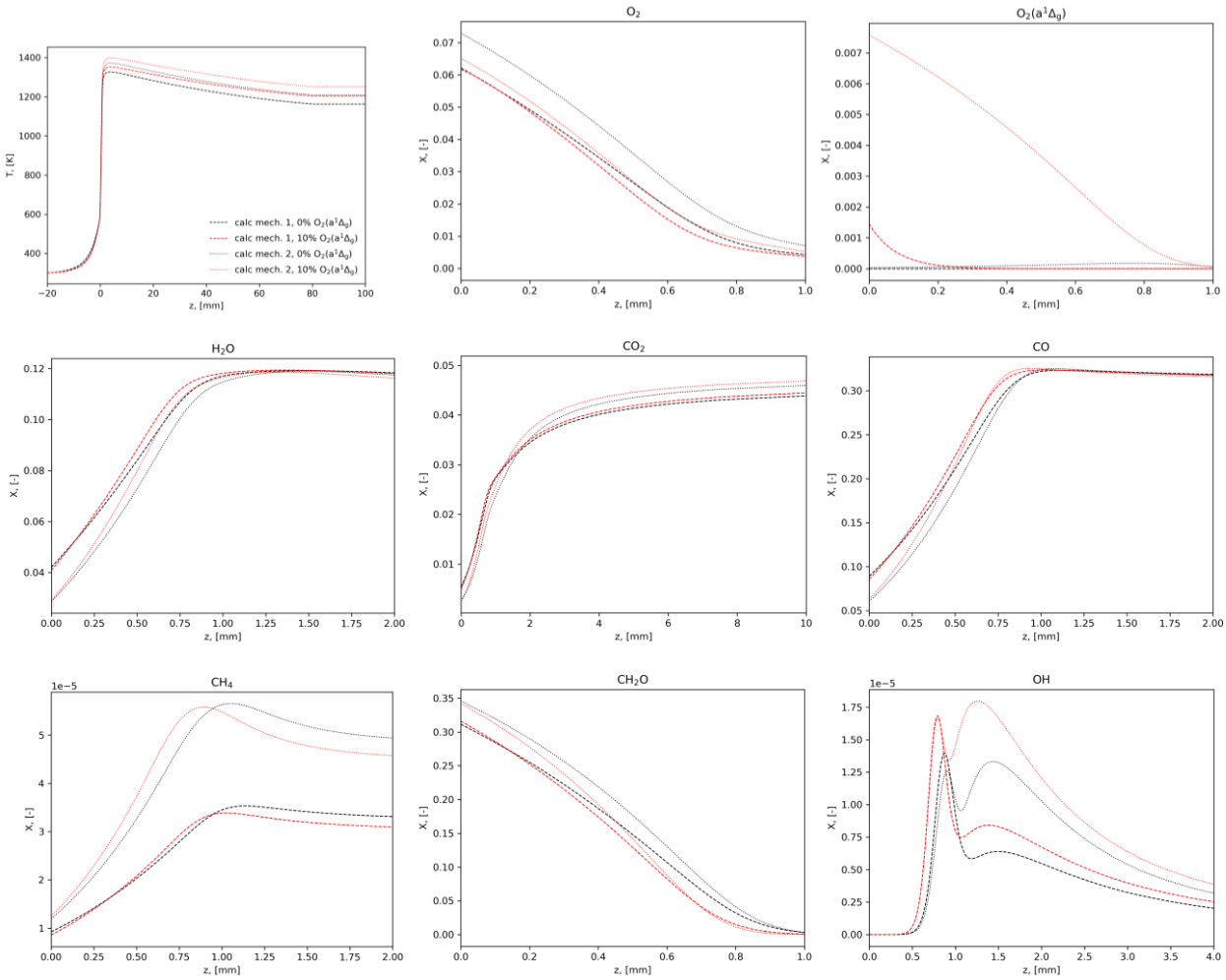

Рис. 9. Распределение мольных долей некоторых компонентов в реакторе при разных концентрациях $O_2(a^1\Delta_g)$ в кислороде

Fig. 9. Distribution of species mole fractions in the reactor at various $O_2(a^1\Delta_g)$ concentrations in oxygen

Увеличение максимальной температуры и температуры на выходе из расчетной области при горении полиоксиметилена при замене в окислителе 10 % O_2 на $O_2(a^1\Delta_g)$ (рис.°9) логично и обусловлено тем, что кислород в синглетном состоянии обладает большей энергией, чем в основном состоянии. Также, 10 % $O_2(a^1\Delta_g)$ позволяет увеличить основные параметры горения полимера: массовую скорость горения, температуру горящей поверхности, радиационный и молекулярный тепловые потоки из пламени в твердый материал (табл. 2).

Таблица 2. Параметры горения полиоксиметилена

Table 2. Parameters of polyoxymethylene burning

Fraction of $O_2(a^1\Delta_g)$	Chemical mechanism	m, [kg/(m^2 s)]	T_w, [K]	$q_{w,m}$, [kW/m^2]	$q_{w,r}$, [kW/m^2]
0	1	0.041	643	55	83
	2	0.044	645	52	97
0.1	1	0.047	654	64	95
	2	0.051	664	61	111

Некоторые эффекты замены 10 % O_2 на $O_2(a^1\Delta_g)$ оказываются локальными (рис.°9): концентрации O_2, $O_2(a^1\Delta_g)$, H_2O, CO, CH_2O, OH при 10 % $O_2(a^1\Delta_g)$ отличаются от результатов расчетов без замены O_2 только вблизи поверхности горения, а затем выравниваются. С другой стороны, наблюдается заметное отличие концентраций таких веществ как CH_4 и CO_2 вплоть до выходной границы расчетной области (рис.°9).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено численное исследование влияния плазмы на горение полиоксиметилена. Для исследования горения полимерного материала рассмотрен ранее предложенный модельный реактор по сжиганию твердых бытовых отходов. Использована сопряженная постановка, в рамках которой учитывается тепло- и массообмен между пламенем в газовой фазе и твердым горючим материалом. Расчеты проведены по двум кинетическим механизмам (на основе GriMech и Konnov), расширенным для учета реакций с $O_2(a^1\Delta_g)$. Для оценки влияния плазмы на горение использован подход с заменой части молекулярного кислорода, находящегося в основном состоянии в окислителе, на синглетный дельта-кислород, $O_2(a^1\Delta_g)$, для моделирования ситуации с воздействием плазмы на воздух до подачи его в камеру сгорания реактора.

Проведены численные расчеты горения полиоксиметилена в реакторе с заменой части O_2 на $O_2(a^1\Delta_g)$. В результате расчетов получены тепловые потоки в твердый материал от пламени, массовая скорость горения, температура поверхности, а также профили температур и концентраций по длине реактора. Показано, что замена в реагентах 10 % молекулярного кислорода на $O_2(a^1\Delta_g)$ позволяет увеличить максимальную температуру в камере сгорания, повысить массовую скорость горения полимера, температуру горящей поверхности, молекулярный и радиационный тепловые потоки от пламени в твердый материал. Концентрации O_2, $O_2(a^1\Delta_g)$, H_2O, CO, CH_2O, OH изменяются локально вблизи поверхности горения, а концентрации CH_4 и CO_2 остаются отличными с заменой 10 % O_2 на $O_2(a^1\Delta_g)$ и без замены во всей расчетной области.

Работа выполнена при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ (регистрационный номер СП-4916.2022.1).

This work was supported by the Russian Presidential Scholarship (registration number СП-4916.2022.1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Starikovskiy A., Aleksandrov N. Plasma-assisted ignition and combustion // Progress in Energy and Combustion Science, 2013, vol. 39, iss. 1, pp. 61-110. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.05.003

2. Starikovskaia S. M. Plasma-assisted ignition and combustion: nanosecond discharges and development of kinetic mechanisms // Journal of Physics D: Applied Physics, 2014, vol. 47, 353001. https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/35/353001

3. Ju Y., Sun W. Plasma assisted combustion: Dynamics and chemistry // Progress in Energy and Combustion Science, 2015, vol. 48, pp. 21-83. http://doi.org/10.1016/j.pecs.2014.12.002

REFERENCES

1. Starikovskiy A., Aleksandrov N. Plasma-assisted ignition and combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2013, vol. 39, iss. 1, pp. 61-110. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.05.003

2. Starikovskaia S. M. Plasma-assisted ignition and combustion: nanosecond discharges and development of kinetic mechanisms. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2014, vol. 47, 353001. https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/35/353001

3. Ju Y., Sun W. Plasma assisted combustion: Dynamics and chemistry. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2015, vol. 48, pp. 21-83. http://doi.org/10.1016/j.pecs.2014.12.002

4. Popov N. A. Kinetics of plasma-assisted combustion: effect of non-equilibrium excitation on the ignition and oxidation of combustible mixtures // Plasma Sources Science and Technology, 2016, vol. 25, 043002. https://doi.org/10.1088/0963-0252/25/4/043002

5. Ombrello T., Won S. H., Ju Y., Williams S. Flame propagation enhancement by plasma excitation of oxygen: II. Effects of $O_2(a^1\Delta_g)$ // Combustion and Flame, 2010, vol. 157, pp. 1916-1928. https://doi.org/10.1016/j.combustflam e.2010.02.004

6. Snoeckx R., Cha M. S. Inevitable chemical effect of balance gas in low temperature plasma assisted combustion // Combustion and Flame, 2021, vol. 225, pp. 1-4. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.10.028

7. Yang X., Wei Z., Zhang Z., Zhang J. Study of the effect of DC high-voltage electric fields on the regression rate of PMMA // Acta Astronautica, 2019, vol. 165, pp. 117-128. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2019.07.017

8. Durantini A. M., Greer A. Interparticle Delivery and Detection of Volatile Singlet Oxygen at Air/Solid Interfaces // Environmental Science and Technology, 2021, vol. 55, pp. 3559-3567. https://doi.org/10.1021/acs.est.0c07922

9. Wang K. K., Song S., Jung S.-J., Hwang J.-W., Kim M.-G., Kim J.-H., Sung J., Lee J.-K., Kim Y.-R. Lifetime and diffusion distance of singlet oxygen in air under everyday atmospheric conditions // Physical Chemistry Chemical Physics, 2020, vol. 22, pp. 21664-21671. https://doi.org/10.1039/d0cp00739k

10. Shaklein A. A. Numerical Study of the External Heat Source Effect on Polymer Burning // Combustion Science and Technology, 2022, vol. 194, no. 14, pp. 2864-2879. https://doi.org/10.1080/00102202.2021.1894139

11. Goodwin D. G., Speth R. L., Moffat H. K., Weber B. W. 2018. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 2.4.0. https://www.cantera.org (дата обращения: 10.10.2022).

12. Modest M. F. Radiative heat transfer. Second Edition. Academic Press, Elsevier Science, London, New York, 2003, 842 p.

13. Hongmei Z., Modest M. F. Evaluation of the Planck-mean absorption coefficients from HITRAN and HITEMP databases // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2002, vol. 73, pp. 649-653. https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00178-9

14. Cheng L., Barleon N., Cuenot B., Vermorel O., Bourdon A. Plasma assisted combustion of methane-air mixtures: Validation and reduction // Combustion and Flame, 2022, vol. 240, 111990. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.111990

15. Lavadera M. L., Brackmann C., Konnov A. A. Experimental and modeling study of laminar burning velocities and nitric oxide formation in premixed ethylene/air flames // Proceedings of the Combustion Institute, 2021, vol. 38, pp. 395-404. https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.062

16. Dias V., Duynslaegher C., Contino F., Vandooren J., Jeanmart H. Experimental and modeling study of formaldehyde combustion in flames // Combustion and Flame, 2012, vol. 159, pp. 1814-1820. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.01.006

17. Luo M., Liu D. On the effects of hydrogen addition in premixed formaldehyde flames. International Journal of Hydrogen Energy // 2017, vol. 42, pp. 3824-3832. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.046

4. Popov N. A. Kinetics of plasma-assisted combustion: effect of non-equilibrium excitation on the ignition and oxidation of combustible mixtures. *Plasma Sources Science and Technology*, 2016, vol. 25, 043002. https://doi.org/10.1088/0963-0252/25/4/043002

5. Ombrello T., Won S. H., Ju Y., Williams S. Flame propagation enhancement by plasma excitation of oxygen: II. Effects of $O_2(a^1\Delta_g)$. *Combustion and Flame*, 2010, vol. 157, pp. 1916-1928. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.02.004

6. Snoeckx R., Cha M. S. Inevitable chemical effect of balance gas in low temperature plasma assisted combustion. *Combustion and Flame*, 2021, vol. 225, pp. 1-4. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.10.028

7. Yang X., Wei Z., Zhang Z., Zhang J. Study of the effect of DC high-voltage electric fields on the regression rate of PMMA. *Acta Astronautica*, 2019, vol. 165, pp. 117-128. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2019.07.017

8. Durantini A. M., Greer A. Interparticle Delivery and Detection of Volatile Singlet Oxygen at Air/Solid Interfaces. *Environmental Science and Technology*, 2021, vol. 55, pp. 3559-3567. https://doi.org/10.1021/acs.est.0c07922

9. Wang K. K., Song S., Jung S.-J., Hwang J.-W., Kim M.-G., Kim J.-H., Sung J., Lee J.-K., Kim Y.-R. Lifetime and diffusion distance of singlet oxygen in air under everyday atmospheric conditions. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, vol. 22, pp. 21664-21671. https://doi.org/10.1039/d0cp00739k

10. Shaklein A. A. Numerical Study of the External Heat Source Effect on Polymer Burning. *Combustion Science and Technology*, 2022, vol. 194, no. 14, pp. 2864-2879. https://doi.org/10.1080/00102202.2021.1894139

11. Goodwin D. G., Speth R. L., Moffat H. K., Weber B. W. *2018. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 2.4.0.* https://www.cantera.org (accessed October 10, 2022).

12. Modest M. F. *Radiative heat transfer*. Second Edition. Academic Press, Elsevier Science, London, New York, 2003, 842 p.

13. Hongmei Z., Modest M. F. Evaluation of the Planck-mean absorption coefficients from HITRAN and HITEMP databases. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002, vol. 73, pp. 649-653. https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00178-9

14. Cheng L., Barleon N., Cuenot B., Vermorel O., Bourdon A. Plasma assisted combustion of methane-air mixtures: Validation and reduction. *Combustion and Flame*, 2022, vol. 240, 111990. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.111990

15. Lavadera M. L., Brackmann C., Konnov A. A. Experimental and modeling study of laminar burning velocities and nitric oxide formation in premixed ethylene/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, vol. 38, pp. 395-404. https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.062

16. Dias V., Duynslaegher C., Contino F., Vandooren J., Jeanmart H. Experimental and modeling study of formaldehyde combustion in flames. *Combustion and Flame*, 2012, vol. 159, pp. 1814-1820. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.01.006

17. Luo M., Liu D. On the effects of hydrogen addition in premixed formaldehyde flames. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2017, vol. 42, pp. 3824-3832. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.046

18. Metcalfe W. K., Burke S. M., Ahmed S. S., Curran H. J. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C1−C2 hydrocarbon and oxygenated fuels // International Journal of Chemical Kinetics, 2013, vol. 45, pp. 638-675. https://doi.org/10.1002/kin.20802

19. Starik A. M., Kozlov V. E., Titova N. S. On the influence of singlet oxygen molecules on the speed of flame propagation in methane-air mixture // Combustion and Flame, 2010, vol. 157, pp. 313-327. https://doi.org10.1016/j.combustflame.2009.11.008

20. Konnov A. A. On the role of excited species in hydrogen combustion // Combustion and Flame, 2015, vol. 162, no. 10, pp. 3755-3772. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.07.014

21. Goswami M., Derks S. C. R., Coumans K., Slikker W. J., Oliveira M. H. A., Bastiaans R. J. M., Luijten C. C. M., Goey L. P. H., Konnov A. A. The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane+air mixtures // Combustion and Flame, 2013, vol.°160, pp.°1627-1635. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.03.032

22. Rozenchan G., Zhu D. L., Law C. K., Tse S. D. Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 ATM // Proceedings of the Combustion Institute, 2002, vol.°29, pp.°1461-1470. https://doi.org/10.1016/S1540-7489(02)80179-1

23. Park O., Veloo P. S., Liu N., Egolfopoulos F. N. Combustion characteristics of alternative gaseous fuels // Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol.°33, pp.°887-894. https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.06.116

24. Korobeinichev O., Glaznev R., Karpov A., Shaklein A., Shmakov A., Paletsky A., Trubachev S., Hu Y., Wang X., Hu W. An experimental study and numerical simulation of horizontal flame spread over polyoxymethylene in still air // Fire Safety Journal, 2020, vol. 111, 102924. https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2019.102924

25. Stoliarov S. I., Walters R. N. Determination of the heats of gasification of polymers using differential scanning calorimetry // Polymer Degradation and Stability, 2008, vol. 93, pp. 422-427. https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2007.11.022

26. Shi J., Jing B., Zou X., Luo H., Dai W. Investigation on thermo-stabilization effect and nonisothermal degradation kinetics of the new compound additives on polyoxymethylene // Journal of Materials Science, 2009, vol. 44, pp. 1251-1257. https://doi.org/10.1007/s10853-008-3227-4

27. Inagaki T., Okamoto Y., Kaminaga F., Sekiya M., Nakamura H., Sato M. Thermal visualization study of friction surface and its estimation // In: M.D. Kelleher, R.K. Shah, K.R. Sreenivasan, Y. Joshi (Eds.), Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Elsevier, 1993, pp. 739-744.

28. Beyler C. L., Hirschler M. M. Thermal decomposition of polymers // In: SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, 2nd edition, National Fire Protection Organisation, Boston, 2002, pp. 110-131.

18. Metcalfe W. K., Burke S. M., Ahmed S. S., Curran H. J. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C1−C2 hydrocarbon and oxygenated fuels. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2013, vol. 45, pp. 638-675. https://doi.org/10.1002/kin.20802

19. Starik A. M., Kozlov V. E., Titova N. S. On the influence of singlet oxygen molecules on the speed of flame propagation in methane-air mixture. *Combustion and Flame*, 2010, vol. 157, pp. 313-327. https://doi.org10.1016/j.combustflame.2009.11.008

20. Konnov A. A. On the role of excited species in hydrogen combustion. *Combustion and Flame*, 2015, vol. 162, no. 10, pp. 3755-3772. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.07.014

21. Goswami M., Derks S. C. R., Coumans K., Slikker W. J., Oliveira M. H. A., Bastiaans R. J. M., Luijten C. C. M., Goey L. P. H., Konnov A. A. The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane+air mixtures. *Combustion and Flame*, 2013, vol.°160, pp.°1627-1635. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.03.032

22. Rozenchan G., Zhu D. L., Law C. K., Tse S. D. Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 ATM. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2002, vol.°29, pp.°1461-1470. https://doi.org/10.1016/S1540-7489(02)80179-1

23. Park O., Veloo P. S., Liu N., Egolfopoulos F. N. Combustion characteristics of alternative gaseous fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, vol.°33, pp.°887-894. https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.06.116

24. Korobeinichev O., Glaznev R., Karpov A., Shaklein A., Shmakov A., Paletsky A., Trubachev S., Hu Y., Wang X., Hu W. An experimental study and numerical simulation of horizontal flame spread over polyoxymethylene in still air. *Fire Safety Journal*, 2020, vol. 111, 102924. https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2019.102924

25. Stoliarov S. I., Walters R. N. Determination of the heats of gasification of polymers using differential scanning calorimetry. *Polymer Degradation and Stability*, 2008, vol. 93, pp. 422-427. https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2007.11.022

26. Shi J., Jing B., Zou X., Luo H., Dai W. Investigation on thermo-stabilization effect and nonisothermal degradation kinetics of the new compound additives on polyoxymethylene. *Journal of Materials Science*, 2009, vol. 44, pp. 1251-1257. https://doi.org/10.1007/s10853-008-3227-4

27. Inagaki T., Okamoto Y., Kaminaga F., Sekiya M., Nakamura H., Sato M. Thermal visualization study of friction surface and its estimation. In: M.D. Kelleher, R.K. Shah, K.R. Sreenivasan, Y. Joshi (Eds.), Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Elsevier, 1993, pp. 739-744.

28. Beyler C. L., Hirschler M. M. Thermal decomposition of polymers. In: SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, 2nd edition, National Fire Protection Organisation, Boston, 2002, pp. 110-131.

Поступила 23.12.2022; после доработки 16.01.2023; принята к опубликованию 15.02.2023
Received December 23, 2022; received in revised form January 16, 2023; accepted February 15, 2023

Информация об авторе

***Шаклеин Артем Андреевич**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Российская Федерация, e-mail: shaklein@udman.ru*

Information about the author

***Artem A. Shaklein**, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russian Federation, e-mail: shaklein@udman.ru*