

УДК 662.62:544.342-13

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОЦЕНКИ ТЕПЛОТЫ СГОРАНИЯ ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД ПРИ НЕДОСТАТКЕ ВОЗДУХА

© 2023 г. С. Г. Заварухин^{1,2,*}, Ю. В. Дубинин^{1,**}, Н. А. Языков^{1,***}, В. А. Яковлев^{1,****}

¹ ФГБУН Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (ИК СО РАН), 630090 Новосибирск, Россия

² ФГБОУ ВО Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 630073 Новосибирск, Россия

*e-mail: zsg@catalysis.ru

**e-mail: dubinin@catalysis.ru

***e-mail: yazykov@catalysis.ru

****e-mail: yakovlev@catalysis.ru

Поступила в редакцию 20.07.2022 г.

После доработки 29.07.2022 г.

Принята к публикации 05.10.2022 г.

Предложена методика оценки теплоты сгорания осадка сточных вод (ОСВ) в условиях недостатка воздуха, основанная на модифицировании формулы Д.И. Менделеева и расчете химического равновесия в исходной смеси. Равновесный состав смеси предлагается рассчитывать на основе прикладных программ или на основе уравнений химического равновесия. Для второго метода приводятся исходные уравнения и методы их решения. При этом рассмотрены два случая. Первый случай – отсутствие углерода в равновесной смеси и второй – присутствие углерода в равновесной смеси. Предложена методика расчета коэффициента недостатка воздуха, при котором начинает появляться углерод в равновесной смеси. Тестовые расчеты проведены для сухого и влажного ОСВ при температуре сжигания 700°C с использованием программы NASA и на основе уравнений химического равновесия. Сравнение результатов расчета по обоим методам показало удовлетворительное совпадение. Для иллюстрации выполнен расчет теплоты сгорания ОСВ при 700°C и коэффициенте недостатка воздуха 0.5–1. Методика может использоваться для топлив, у которых вкладом серы в теплоту сгорания топлива можно пренебречь.

Ключевые слова: осадок сточных вод, теплота сгорания, недостаток воздуха, химическое равновесие

DOI: 10.31857/S0023117723010115, EDN: IWZWIO

ВВЕДЕНИЕ

При составлении тепловых балансов в некоторых задачах возникает необходимость расчета теплоты сгорания топлива в условиях недостатка воздуха по сравнению с его стехиометрическим количеством. В частности, при сжигании осадков сточных вод (ОСВ) в аппарате с кипящим слоем катализатора во время пусконаладочных работ возможны отклонения от расчетного режима в сторону уменьшения количества воздуха или увеличения расхода ОСВ. Для расчета температуры в реакторе и отладки автоматической системы управления установки необходимо знать теплоту сгорания топлива для этих условий.

При избытке воздуха низшую теплоту сгорания топлива Q_H можно оценить по формуле Д.И. Менделеева [1, 2]

$$Q_H = 81C + 246H - 26(O-S) - 6W, \text{ ккал/кг,}$$

где С, Н, О, S и W – массовые доли углерода, водорода, кислорода, серы и воды в топливе (%) соответственно.

Для получения результата в кДж/кг в формуле добавляют переводной множитель k , равный 4.187 кДж/ккал.

$$Q_H = k[81C + 246H - 26(O-S) - 6W], \text{ кДж/кг. (1)}$$

Известно достаточно большое число работ, посвященных оценке теплоты сгорания различных топлив на основе их состава [3–8]. В данной работе выбрана наиболее распространенная на территории России формула Д.И. Менделеева, которая используется для контроля качества измерения теплоты сгорания минеральных твердых топлив [9].

Недостаток воздуха приводит к уменьшению теплоты сгорания топлива, так как часть углерода окисляется только до СО с меньшей теплотой сгорания по сравнению с окислением до СО₂ и

Таблица 1. Элементный состав сухого осадка сточных вод

Компонент	C	H	N	O	S
мас. %	41.8	5.6	2.7	19.1	0.8

Таблица 2. Состав влажного осадка сточных вод

Компонент	C	H	N	O	S	H ₂ O	Зола
мас. %	10.45	1.40	0.68	4.78	0.20	75.0	7.5

часть углерода и водорода могут остаться непро-реагировавшими после завершения реакции.

Завершение реакции как в случае избытка, так и недостатка воздуха можно рассматривать как установление химического равновесия. Если проанализировать состав смеси, полученной после установления химического равновесия в системе топливо–воздух в условиях недостатка воздуха, то на основе полученных закономерностей можно модифицировать формулу Д.И. Менделеева для этого случая.

Следует отметить, что подход, основанный на анализе химического равновесия, широко применяется в задачах газификации различных материалов для расчета состава продуктов газификации. Обзор работ по использованию равновесного метода в процессах газификации приведен в обзорах [10–14].

Существующие методики расчета теплоты сгорания топлива позволяют рассчитывать низшую теплоту сгорания в условиях избытка воздуха. Для случая недостатка воздуха работ по этой теме авторами не обнаружено.

Цель настоящей работы – разработка методики оценки теплоты сгорания осадков сточных вод в условиях недостатка воздуха.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Элементный состав сухого ОСВ определяли на анализаторе *CHNS VARIO EL CUBE* производства фирмы *Elementar Analysensysteme GmbH, Germany*. Результаты анализа приведены в табл. 1.

Зольность сухого ОСВ определяли по ГОСТ 32988-2014 (Биотопливо твердое. Определение зольности). Зольность сухого ОСВ составила 30%.

Измерение теплоты сгорания сухого ОСВ проводили с помощью калориметра С 200 (*IKA-Werke GmbH & Co. KG, Германия*). Теплота сгорания сухого ОСВ, определенная экспериментально в калориметрической бомбе, равнялась $17.73 \cdot 10^3$ кДж/кг. Расчет по формуле Д.И. Менделеева (1) дает $17.95 \cdot 10^3$ кДж/кг. Отличие составляет 1.2%, что

подтверждает правомерность использования формулы Д.И. Менделеева.

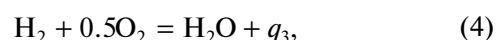
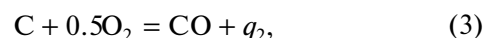
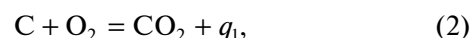
Содержание влаги в аналитической пробе ОСВ определяли по ГОСТ 32975.3-2014 (Биотопливо твердое. Определение содержания влаги высушиванием. Часть 3. Влага аналитическая.). Во влажном ОСВ содержание влаги составило 75%. В табл. 2 приводится состав влажного ОСВ с учетом золы, рассчитанный на основе табл. 1.

В публикуемой работе анализ и расчеты проводили для диапазона температур 650–750°C, характерного для сжигания топлива в кипящем слое катализатора.

МОДИФИКАЦИЯ ФОРМУЛЫ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Вклад серы в теплоту сгорания топлива можно оценить на основе формулы Д.И. Менделеева. Теплота сгорания влажного ОСВ, рассчитанная по формуле (1), составляет $2.60 \cdot 10^3$ кДж/кг. Вклад серы – 21.8 кДж/кг, что составляет 0.8% от теплоты сгорания. Таким образом, вкладом серы в теплоту сгорания топлива можно пренебречь и при оценке теплоты сгорания ограничиться анализом окисления углерода и водорода.

Углерод и водород окисляются по следующим реакциям:



где $q_1 = 395$ кДж/моль, $q_2 = 109.5$ кДж/моль, $q_3 = 231$ кДж/моль [15].

Обозначим x_1 – конверсию углерода по реакции (2), x_2 – конверсию углерода по реакции (3) и x_3 – конверсию водорода по реакции (4). Тогда при сжигании 1 моля углерода выделяется следующее количество тепла:

$$Q_C = q_1x_1 + q_2x_2 = q_1(x_1 + \beta x_2), \quad (5)$$

где $\beta = q_2/q_1 = 0.2772$.

При сжигании 1 моля водорода количество выделившегося тепла составит

$$Q_H = q_3x_3. \quad (6)$$

На основе зависимостей (5) и (6) можно модифицировать формулу Д.И. Менделеева для случая недостатка воздуха

$$Q_H = 81C(x_1 + \beta x_2) + 246Hx_3 - 26O - 6W. \quad (7)$$

Расчет равновесных конверсий x_1 , x_2 и x_3 можно выполнить двумя способами – с использованием специализированных прикладных программ или на основе уравнений химического равновесия. В первом случае используется метод минимизации энергии Гиббса (для изобарно-

Таблица 3. Число молей компонент в исходной смеси и после протекания реакций

Компонент	C	H ₂	H ₂ O	O ₂	N ₂	CO ₂	CO
В исходной смеси, моль	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	0	0
После протекания реакций, моль	<i>a</i> - <i>x</i> - <i>y</i>	<i>b</i> - <i>z</i>	<i>c</i> + <i>z</i>	<i>d</i> - <i>x</i> - <i>y</i> /2 - <i>z</i> /2	<i>e</i>	<i>x</i>	<i>y</i>

изотермических процессов), а во втором – константы химического равновесия протекающих реакций.

РАСЧЕТ НА ОСНОВЕ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ

Существует ряд программ (*ASPEN PLUS*, *NASA* [16] и др.), позволяющих рассчитывать химическое равновесие в различных системах. Как правило, на входе программы задаются мольный состав исходной смеси, температура и давление, а результатом расчета является равновесный состав смеси в мольных долях. В работе [12] дан обзор работ, использовавших программу *ASPEN PLUS* для анализа состава газа в газификаторе. В настоящей работе анализ проводили с использованием программы *NASA*. В зависимости от количества подаваемого воздуха наблюдались следующие закономерности. При подаче стехиометрического количества воздуха равновесная смесь содержала только CO₂, H₂O и N₂. При недостатке воздуха, который характеризовали коэффициентом недостатка воздуха α , равном отношению количества воздуха к его стехиометрическому количеству, наблюдались два случая. При $\alpha^* < \alpha < 1$ в равновесной смеси кроме CO₂, H₂O, N₂ появлялись CO и H₂, а при $\alpha < \alpha^*$ в смеси присутствовал углерод. Значение α^* зависит от состава топлива и температуры. При больших недостатках воздуха в равновесной смеси наблюдались следы метана, которые не учитывались в расчетах. Во всех случаях кислорода в равновесной смеси не было.

Для того, чтобы вывести формулы для расчета x_1 , x_2 и x_3 по исходному и равновесному составам смеси, составим таблицу изменения числа молей компонент при протекании реакций (2)–(4).

Обозначим число молей каждого компонента в исходной смеси топливо–воздух для C, H₂, H₂O, O₂ и N₂ – *a*, *b*, *c*, *d* и *e*, соответственно, и введем по каждой из реакций (2)–(4) химические переменные *x*, *y* и *z* соответственно. В табл. 3 во второй строке указано число молей каждого компонента в исходной смеси, в третьей строке – число молей после протекания реакций в зависимости от химических переменных.

Полное число молей *s* после протекания реакций будет

$$s = a + b + c + d + e - x - \frac{y}{2} - \frac{z}{2}.$$

Связь химических переменных *x*, *y* и *z* с конверсиями x_1 , x_2 и x_3 имеет вид

$$x_1 = \frac{x}{a}, \quad x_2 = \frac{y}{a}, \quad x_3 = \frac{z}{b}. \quad (8)$$

Мольная доля каждого компонента (*m*C, *m*H₂, *m*H₂O, *m*O₂, *m*N₂, *m*CO₂ и *m*CO) в смеси после протекания реакций вычисляется как отношение числа молей компонента к полному числу молей. В частности,

$$mC = \frac{a - x - y}{s} = \frac{a(1 - x_1 - x_2)}{s}, \quad (9)$$

$$mCO_2 = \frac{x}{s} = \frac{ax_1}{s}, \quad (10)$$

$$mCO = \frac{y}{s} = \frac{ax_2}{s}. \quad (11)$$

Из соотношений (9)–(11) следуют формулы для расчета x_1 и x_2 :

$$x_1 = \frac{mCO_2}{mC + mCO_2 + mCO}, \quad (12)$$

$$x_2 = \frac{mCO}{mC + mCO_2 + mCO}. \quad (13)$$

Выражения для мольных долей водорода и воды имеют вид

$$mH_2 = \frac{b - z}{s} = \frac{b(1 - x_3)}{s}, \quad (14)$$

$$mH_2O = \frac{c + z}{s} = \frac{c + bx_3}{s}. \quad (15)$$

Из соотношений (14)–(15) можно получить зависимость для расчета x_3 :

$$x_3 = \frac{bmH_2O - cmH_2}{b(mH_2 + mH_2O)}. \quad (16)$$

Алгоритм расчета теплоты сгорания топлива состоит в следующем. Необходимо рассчитать:

- 1) число молей каждого компонента в исходном топливе для выбранной навески;
- 2) стехиометрическое количество молей кислорода, необходимое для полного окисления топлива nO_2^s . Оно равно количеству кислорода, подсчитанному по реакциям (2)–(4), за вычетом кислорода, присутствующего в топливе;
- 3) количество кислорода, подаваемого на сжигание топлива, $nO_2 = nO_2^s \cdot \alpha$;

4) количество азота, поступающего с воздухом, и полное количество азота, которое равно сумме количеств азота в воздухе и топливе;

5) мольный состав равновесной смеси, используя прикладные программы или уравнения химического равновесия;

6) конверсии x_1 , x_2 и x_3 по формулам (12), (13) и (16);

7) теплоту сгорания топлива Q_H по формуле (7).

РАСЧЕТ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ

Если нет доступа к специализированным прикладным программам для расчета химического равновесия, расчет можно провести на основе уравнений химического равновесия.

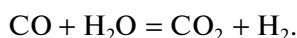
Случай отсутствия углерода в равновесной смеси. Для случая отсутствия углерода в равновесной смеси ($\alpha^* < \alpha < 1$) задача расчета x_1 , x_2 и x_3 решается аналитически.

Учитывая, что равновесие по реакциям (2)–(4) сильно сдвинуто вправо, а углерода и кислорода в равновесной смеси нет, то выполняются соотношения

$$a - x - y = 0, \quad (17)$$

$$d - x - \frac{y}{2} - \frac{z}{2} = 0. \quad (18)$$

Путем линейной комбинации трех независимых реакций (2), (3) и (4) можно получить реакцию, в которую не входят углерод и кислород:



Для данной реакции уравнение химического равновесия имеет вид

$$\frac{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}}{p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}} = K_1, \quad (19)$$

где p_{CO_2} , p_{CO} , p_{H_2} и $p_{\text{H}_2\text{O}}$ – парциальные давления CO_2 , CO , H_2 и H_2O , K_1 – константа равновесия, зависимость логарифма которой от температуры приводится в [17],

$$\lg(K_1) = \frac{2203.24}{T} + 5.1588 \cdot 10^{-5} + 2.5426 \cdot 10^{-7} T^2 - 7.4617 \cdot 10^{-11} T^3 - 2.3, \quad (20)$$

где T – температура, К.

Учитывая связь парциальных давлений и мольных долей компонент, а также зависимости (10), (11), (14) и (15), уравнение (19) запишется в виде

$$\frac{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}}{p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{m_{\text{CO}_2} m_{\text{H}_2}}{m_{\text{CO}} m_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{x(b-z)}{y(c+z)} = K_1. \quad (21)$$

Уравнения (17), (18) и (21) являются системой уравнений для определения трех неизвестных x , y и z .

Из (17) и (18) можно выразить x и y через z :

$$x = 2d - a - z, \quad (22)$$

$$y = 2(a - d) + z. \quad (23)$$

Подставляя полученные выражения (22) и (23) в (21), получаем квадратное уравнение для определения z

$$\begin{aligned} (2d - a - z)(b - z) &= K_1[2(a - d) + z](c + z), \\ (2d - a)b - (2d - a + b)z + z^2 &= \\ = 2K_1(a - d)c + K_1[2(a - d) + c]z + K_1z^2, \\ (K_1 - 1)z^2 + Az + B &= 0, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$A = K_1[2(a - d) + c] + 2d - a + b,$$

$$B = 2K_1(a - d)c - (2d - a)b.$$

Решение уравнения (24) имеет вид

$$z = \frac{-A + \sqrt{A^2 - 4(K_1 - 1)B}}{2(K_1 - 1)}.$$

Мольные доли CO_2 , CO , H_2 и H_2O рассчитываются по формулам (10), (11), (14) и (15), а мольная доля N_2 – по формуле

$$m_{\text{N}_2} = \frac{e}{s}, \quad (25)$$

где $s = a + b + c + e$.

Проверка правильности расчетных формул была выполнена путем сравнения результатов расчета при температуре 700°C по вышеприведенным формулам и программе *NASA*. В качестве тестовой смеси была выбрана смесь следующего состава (моль): С 0.871, H_2 0.7, H_2O 4.167, O_2 1.114, N_2 3.652. Эта смесь по составу соответствует осадку сточных вод массой 100 г (табл. 2) при недостатке воздуха $\alpha = 0.9$. Результаты расчетов приведены в табл. 4.

Во втором столбце приведены результаты расчета по программе *NASA*, в третьем и четвертом столбцах – по предлагаемой методике, но в третьем столбце константа равновесия рассчитана на основе зависимости (20), а в четвертом – на основе данных первого столбца по формуле (19). Сравнение показывает, что второй и четвертый столбцы полностью совпадают, а различие второго и третьего столбцов наблюдается в четвертом знаке после запятой. Таким образом, предлагаемая методика позволяет рассчитывать равновесный состав смеси при отсутствии углерода в равновесной смеси.

Появление углерода в равновесной смеси. При уменьшении количества кислорода в исходной смеси углерод появляется в системе, как только выполнится условие химического равновесия для реакции



Данная реакция является линейной комбинацией реакций (2) и (3). Уравнение химического равновесия для нее имеет вид

$$\frac{p_{\text{CO}_2}}{p_{\text{CO}}^2} = K_2. \quad (27)$$

Зависимость $K_2(T)$ можно получить на основе зависимостей от температуры констант равновесия для реакций (2) и (3), приведенных в [17]. Для сравнения была также построена зависимость $K_2(T)$ на основе программы *NASA*, которая в диапазоне температур 650–800°C хорошо описывается формулой

$$K_2(T) = \exp\left(\frac{20528}{T} - 21.072\right). \quad (28)$$

Поскольку зависимость $K_2(T)$ (28) практически совпадает с зависимостью, полученной на основе [17], то в расчетах использовалась формула (28).

Учитывая, что процесс рассматривается при атмосферном давлении и парциальные давления измеряются в атмосферах, уравнение (27) запишется в виде

$$\frac{x(d)s(d)}{y(d)^2} = K_2, \quad (29)$$

где зависимости $x(d)$ (22) и $y(d)$ (23) приведены в предыдущем параграфе, а

$$s(d) = a + b + c + e(d).$$

Зависимость $e(d)$ – это связь количества азота с количеством кислорода. Количество азота равняется сумме азота, содержащегося в топливе, и азота, входящего в состав воздуха.

Уравнение (29) не решается аналитически, но его можно решить численно, например используя программу *Mathcad*. Найденное значение параметра d , показывает, при каком количестве молей кислорода в исходной смеси начинает появляться углерод в равновесной смеси.

Для проверки правильности расчетных формул был выполнен расчет при 700°C для следующей упрощенной тестовой смеси (моль): С 0.871, Н₂ 0.7. Это соответствует сухому ОСВ без кислорода и азота. Был выбран сухой ОСВ, так как наличие воды подавляет появление углерода. При этом $K_1 = 1.619$, $K_2 = 1.026 \text{ атм}^{-1}$. Установлено, что при количестве О₂ в составе воздуха, равном 0.549 моль, что соответствует $\alpha = 0.45$, в равновесной смеси появляется углерод. Для сравнения

Таблица 4. Равновесный состав смеси, рассчитанный по разным методикам

Методика	[16]	Предлагаемая	Предлагаемая
K_1	–	1.537 [17]	1.619 [16]
m_{CO}	0.0023	0.0024	0.0023
m_{CO_2}	0.0905	0.0904	0.0905
m_{H_2}	0.0205	0.0204	0.0205
$m_{\text{H}_2\text{O}}$	0.4978	0.4979	0.4978
m_{N_2}	0.3889	0.3889	0.3889

были также выполнены расчеты равновесной смеси по программе *NASA*. Согласно расчетам, углерод появлялся при количестве кислорода 0.539. Отличие составляет 2%. Таким образом, предложенная методика хорошо предсказывает начало появления углерода.

Случай наличия углерода в равновесной смеси. Исходными уравнениями для расчета x , y и z будут:

1) Отсутствие кислорода в равновесной смеси

$$d - x - \frac{y}{2} - \frac{z}{2} = 0. \quad (30)$$

2) Равновесие по реакции $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$

$$\frac{x(b-z)}{y(c+z)} = K_1. \quad (31)$$

3) Равновесие по реакции $2\text{CO} = \text{C} + \text{CO}_2$

$$\frac{x \cdot s}{y^2} = K_2, \quad (32)$$

где $s = a + b + c + e$.

Из уравнения (32) следует

$$x = \frac{K_2}{s} y^2 = k_2 y^2, \quad (33)$$

где $k_2 = K_2/s$.

Выражая из (30) z и используя (33), получим

$$z = 2d - 2x - y = 2d - 2k_2 y^2 - y. \quad (34)$$

Подставляя (33) и (34) в (31), получим уравнение для расчета y :

$$k_2 y^2 (b - 2d + 2k_2 y^2 + y) = K_1 y (c + 2d - 2k_2 y^2 - y). \quad (35)$$

Уравнение (35) сводится к кубическому уравнению относительно y :

$$2k_2^2 y^3 + k_2(1 + 2K_1)y^2 + [k_2(b - 2d) + K_1]y - K_1(c + 2d) = 0. \quad (36)$$

Решение уравнения (36) можно выписать аналитически, используя формулу Кардано, однако она слишком громоздкая и проще решить уравнение численно, используя программу *Mathcad*.

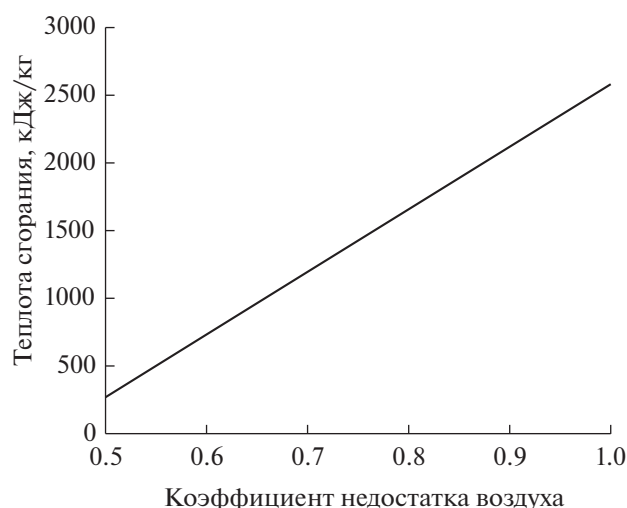
Таблица 5. Равновесный состав смеси, рассчитанный по программе *NASA* и предлагаемой методике

Методика	[16]	Предлагаемая
m_{CO}	0.191	0.190
m_{CO_2}	0.038	0.037
m_{H_2}	0.177	0.183
m_{H_2O}	0.022	0.022
m_{N_2}	0.544	0.539
m_C	0.025	0.028

Проверка правильности расчетных формул была выполнена путем сравнения результатов расчетов при температуре 700°C по программе *NASA* и по приведенным выше формулам. В качестве тестовой была выбрана смесь (C 0.871, H₂ 0.7, O₂ 0.488, N₂ 1.836 моль), соответствующая сухому осадку сточных вод при недостатке воздуха $\alpha = 0.4$. Результаты расчетов приведены в табл. 5.

Во втором столбце расчет выполнен по программе *NASA*, а в третьем – по предлагаемой методике. Как видно из табл. 5, отличие в данных наблюдается в третьем знаке после запятой, что можно считать вполне приемлемым для практических расчетов.

Расчет теплоты сгорания ОСВ в зависимости от степени недостатка воздуха. В качестве примера рассчитана теплота сгорания ОСВ, состав которого приведен в табл. 2, при 700°C в зависимости от коэффициента недостатка воздуха α . Расчет выполнен на основе уравнений химического равновесия с использованием зависимости

**Рис. 1.** Зависимость теплоты сгорания ОСВ в зависимости от коэффициента недостатка воздуха при 700°C.

(20), $K_1 = 1.537$. При данных условиях углерода в равновесной смеси не наблюдалось.

Результаты расчета приведены на рис. 1, из которого видно, что зависимость является практически линейной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена методика оценки теплоты сгорания ОСВ в условиях недостатка воздуха, основанная на модифицировании формулы Д.И. Менделеева и расчете химического равновесия в исходной смеси. Равновесный состав смеси предлагается рассчитывать на основе прикладных программ или уравнений химического равновесия. Для второго метода приводятся исходные уравнения и методы их решения. Для условий недостатка воздуха рассмотрены два случая. Первый случай – отсутствие углерода в равновесной смеси (при $\alpha^* < \alpha < 1$) и второй – присутствие углерода (при $\alpha < \alpha^*$) в равновесной смеси. Предложена методика расчета α^* , при котором начинает появляться углерод в равновесной смеси. Для проверки правильности метода, основанного на уравнениях химического равновесия, расчеты химического равновесия для влажного и сухого ОСВ при 700°C и недостатке воздуха сравнивались с результатами расчетов по программе *NASA*. Расчеты показали удовлетворительное совпадение. Для иллюстрации выполнен расчет теплоты сгорания ОСВ при 700°C и $\alpha = 0.5-1$. Предлагаемая методика может использоваться для других топлив, у которых вкладом серы в теплоту сгорания можно пренебречь.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Института катализа СО РАН при финансовой поддержке РНФ (проект № 17-73-30032).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Менделеев Д.И. О теплоте горения углей и другого топлива. Сочинения. Т. XV. М.: Изд-во АН СССР, 1949. 584 с.
2. БСЭ. М.: Советская энциклопедия, 1976. Т. 25. 600 с.
3. Dolmatov V.Y., Ozerin A.N., Eidelman E.D., Kozlov A.S., Naryzhny S.Y., Martchukov V.A., Vehanen A., Myllymäkie V. // J. Adv. Mater. Technol. 2022. V. 7. P. 122.
4. Yin C. -Y. // Fuel. 2011. V. 90. P. 1128.
5. Parikh J., Channiwala S.A., Ghosal G.K. // Fuel. 2005. V. 84. P. 487.
6. Языков Н.А., Симонов А.Д., Яковлев В.А. // Журнал СФУ. Химия. 2018. Т. 11. С. 93.
7. Равич М.Б. Эффективность использования топлива. М.: Наука, 1977. 344 с.

8. Ван-Кревелен Д.В., Шуер Ж. Наука об угле. М.: Государственное научно-техническое издательство литературы по горному делу, 1960. 303 с.
9. Тепловой расчет котлов (нормативный метод). Издание 3-е, переработанное и дополненное. СПб.: Изд-во НПО ЦКТИ, 1998. 256 с.
10. Kushwah A., Reina T.R., Short M. // *Sci. Total Environ.* 2022. V. 834. P. 155243.
11. Silva I.P., Lima R.M.A., Santana H.E.P., Silva G.F., Ruzene D.S., Silva D.P. // *Energy.* 2022. V. 241. P. 122894.
12. Ajorloo M., Ghodrati M., Scott J., Strezov V. // *J. Energy Inst.* 2022. V. 102. P. 395.
13. Safarian S., Unnthorsson R., Richter C. // *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2020. V. 131. P. 109982.
14. Ferreira S., Monteiro E., Brito P., Vilarinho C. // *Energies.* 2019. V. 12. P. 160.
15. Померанцев В.В., Арефьев К.М., Ахмедов Д.В., Конович М.Н., Корчунов Ю.Н., Рундыгин Ю.А., Шагалова С.Л., Шестаков С.М. Основы практической теории горения. Л.: Энергоатомиздат, Ленинград. отделение, 1986. 312 с.
16. Gordon S., McBride B.J. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations. NASA SP-273, Interim Revision, March 1976. 136 p.
17. Туболкин А.Ф., Тумаркина Е.С., Тарат Э.Я., Румянцева Е.С., Авербух А.Я., Холоднов В.А., Мужленов И.П. Расчеты химико-технологических процессов. Л.: Химия, 1982. 248 с.