

УДК 536.27

Барышева О.Б. – кандидат технических наук, доцентE-mail: obbars@mail.ru**Хабибуллин Ю.Х.** – кандидат технических наук, доцентE-mail: a0an@mail.ru**Вагизов А.З.** – студентE-mail: Zalmaz@mail.ru**Казанский государственный архитектурно-строительный университет**

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зелёная, д. 1

Математическая модель расчета химически неравновесного состава для утилизации твердых бытовых отходов

Аннотация

Постановка задачи. Для большинства агрегатов, в которых процессы протекают при высокой температуре, свойственны различного рода неравновесные эффекты. Важнейшим из них является неравновесное изменение состава рабочего тела продуктов сгорания, нагрева или разложения, вызванное конечными скоростями протекающих химических реакций, приводящих к существенному влиянию на основные энергетические параметры процесса. Авторами было принято решение создать математическую модель расчета химически неравновесного состава для утилизации твердых бытовых отходов.

Результаты. Авторами рассмотрен процесс утилизации твердых бытовых и промышленных отходов. На основе имеющихся методов расчета разработан альтернативный метод, позволяющий находить состав продуктов сгорания в условиях неравновесности в процессе сгорания строительного мусора. Полученные разработанным методом расчетные данные состава и свойств ТБО позволяют прогнозировать выход суперэкоотоксикантов в продуктах сгорания.

Выводы. На основе уравнений формальной химической кинетики мы создали альтернативную методику расчета состава продуктов сгорания с учетом скоростей химических реакций. Данная методика заключается в определении состава рабочего тела по заданному механизму и константам скоростей реакций. Принимается, что все превращения в газовой фазе элементарны, то есть протекают в одну стадию. Любые химические взаимодействия могут быть представлены совокупностью этих элементарных стадий. Рассматривались наиболее вероятны химические реакции трех типов: моно-, би- и тримолекулярные. Данная методика позволяет найти состав продуктов сгорания твердых бытовых отходов еще до процесса сжигания топлива.

Ключевые слова: неравновесные процессы, химическая кинетика, равновесие, состав, твердые бытовые отходы.

Диоксины на частицах дыма, образующегося при сжигании ТБО, обнаружены почти четверть века назад. Однако, несмотря на многочисленные лабораторные и натурные исследования в настоящее время отсутствует полное количественное описание процессов образования и распада полихлорированных диоксинов, фуранов, бифенилов. Концентрации диоксинов, образующихся при сжигании ТБО обычно малы, а публикуемые результаты исследований имеют широкий разброс в измеренных концентрациях [1, 2]. Поскольку образование диоксинов является лишь незначительной побочной реакцией в общем процессе распада и синтеза органических соединений, интерпретация экспериментальных результатов является гораздо более сложной процедурой по сравнению с исследованиями основного реакционного процесса.

Важным результатом анализа состава диоксинов на частицах дыма и направляемых в дымовую трубу газов было установление распределения атомов хлора в дибензо-*p*-диоксинах. В большинстве случаев предпочтительнее образуются более сильно хлорированные соединения, и часто максимум распределения соответствует шести замещений атомами хлора атомов водорода [3, 4].

В некоторых случаях предпочтительными оказываются октохлорзамещенные соединения. Изомер 2,3,7,8-тетрахлордибензо-*p*-диоксин образуется не в самом большом количестве. Пока нет общепринятой теоретической модели механизма образования диоксинов, воспроизводящей наблюдаемое распределение. Это связано в частности со сложным набором физико-химических процессов, протекающих в установках для сжигания ТБО [5, 6].

Обобщенно процесс преобразования ТБО в конечные продукты можно представить следующим образом. Отходы загружаются различными способами на колосниковую решетку, где они продуваются горячим воздухом. Это ведет к выпариванию воды и пиролизическому разложению органики при низкой температуре в обедненной кислородом области вблизи решетки, что способствует дополнительному образованию воды и низкомолекулярных органических соединений, которые выносятся в газовую фазу [7]. Происходит значительная олигомеризация продуктов, некоторые из которых могут остаться в конденсированной фазе и продолжать пиролизоваться. При контакте органических соединений с кислородом при достаточно высоких температурах начинается процесс горения, который продолжается до конца расходования кислорода. Некоторые из твердых и жидких веществ, находящихся на решетке или в виде мелких частиц, также могут гореть, а те, которые не горят, в результате дальнейших пиролизических реакций преобразуются во все более ненасыщенные структуры. Процесс полимеризации в конечном итоге приводит к образованию углерода. Чтобы минимизировать такие пиролизические процессы при сжигании, естественным является желание осуществлять весь процесс горения при избытке кислорода, а это может способствовать большей эмиссии диоксинов. Непосредственно в камере сгорания, если образуются диоксины, то при прохождении через высокотемпературные зоны происходит их разложение [8]. Поэтому концентрация диоксинов в камере сгорания незначительна. Результаты взятия проб указывают на образование все более хлорированных веществ в направлении от выхода из камеры сгорания к выпускной трубе. Роль самой камеры сгорания состоит в поставке молекул – предвестников, образования диоксинов. Отсюда важным является определение оптимальных условий для минимизации процесса образования этих предвестников, что может ограничить и процесс образования диоксинов.

Анализ литературных источников показывает [9, 10], что образование диоксинов происходит в диапазоне температур 500-800 К. В присутствии частиц дыма, хлора и при избытке кислорода многие ароматические соединения могут образовывать соединения типа диоксинов с соответствующим распределением по семейству хлорзамещенных диоксинов. Наиболее вероятными предвестниками могут быть хлорированные фенолы и высокохлорированные ароматические эфиры. Эксперименты показывают, что образование диоксинов легче всего происходит при наличии пентохлорфенола (C_6Cl_5OH).

С помощью объектно-ориентированного языка программирования C++ нами создана программа расчета состава продуктов сгорания топлива для локального термодинамического равновесия. Однако, процессы, протекающие в мусоросжигательных печах, носят неравновесный характер, поэтому прогнозировать выход диоксинов и суперэкоксидантов практически невозможно. Можно лишь обнаружить предвестников диоксинов. Поэтому наша цель запрограммировать метод расчета продуктов сгорания с учетом неравновесности.

Рассмотрим метод расчета состава продуктов сгорания ТБО в условиях неравновесности:

$$\sum_{i=1}^n n'_{ij} B_{i \rightarrow} - \sum_{i=1}^n n''_{ij} B_{i \leftarrow}, j = 1, \dots, m, \quad (1)$$

где B_i ($i=1, \dots, n$) – компонент (реагирующая система состоит из n – компонентов, между которыми протекают m обратимых химических реакций, то есть протекающих как в прямом, так и в обратном направлении); n'_{ij} , n''_{ij} – стехиометрические коэффициенты j -й реакции.

Основным законом формальной химической кинетики является закон действующих масс, согласно которому скорость изменения содержания i -го компонента по прямому направлению j -й реакции есть соотношение:

$$W_{ij}^+ = (n''_{ij} - n'_{ij}) k_j^+ \prod_{k=1}^n C_k^{n'_{kj}}. \quad (2)$$

Аналогично для обратного направления:

$$W_{ij}^- = (n_{ij}' - n_{ij}'')k_j^- \prod_{k=1}^n C_k^{n_{kj}'}, \quad (3)$$

где k_j^+, k_j^- – константы скорости j -й реакции в прямом и обратном направлении.

В формальной химической кинетики константы скоростей как прямых, так и обратных химических реакций обычно принято представлять в аррениусовой форме, так для прямого направления:

$$k_j^+ = A_j^+ T^{n_j^+} \exp\left(-\frac{E_j^+}{R_0 T}\right), \quad (4)$$

где A_j^+ , n_j^+ , E_j^+ – коэффициенты характеризующие прямое направление j -й реакции: предэкспоненциальный множитель, температурный коэффициент и энергию активации. В зависимости (4) размерность A_j^+ определяется порядком реакции, n_j^+ – безразмерная величина, E_j^+ – имеет размерность обычно Дж/моль. В этом случае $R_0 = 8,314 \frac{\text{Дж}}{(\text{моль} \cdot \text{К})}$ – универсальная газовая постоянная. Коэффициенты A_j^+ , n_j^+ , E_j^+ – определяются эмпирически.

Константы скорости прямого и обратного направления реакций связаны через константы равновесия последних:

$$K_{pj} = k_j^+ / k_j^-. \quad (5)$$

Константа равновесия, являясь функцией температуры, определяет вместе с тем отношение равновесных значений концентраций реагирующих компонентов, т.е. концентраций, при которых $W_{ij}^+ = W_{ij}^-$. В этом случае:

$$K_{pj} = \prod_k C_k^{n_{kj}''} / \prod_k C_k^{n_{kj}'}. \quad (6)$$

Константу равновесия целесообразно представить в виде комбинации констант диссоциации, выраженных через парциальные давления:

$$K_{pj} = \prod_k (K_k^D)^{n_{kj}''} / \prod_k (K_k^D)^{n_{kj}'} R_0 T \sum_k (n_{kj}' - n_{kj}''), \quad (7)$$

где $K_k^D = p_k / \prod_s p_s^{a_{sk}}$, a_{sk} – стехиометрические коэффициенты в реакции диссоциации вещества на атомы.

В формальной химической кинетике предусматривается принцип независимости протекания элементарных химических реакций в реагирующей смеси. То есть, общая скорость изменения любого компонента в смеси равна алгебраической сумме скоростей его изменения в результате протекания всех элементарных реакций, идущих при постоянном объеме:

$$\frac{dc_i}{d\tau} = W_i = \sum_{j=1}^m W_{ij}^+ + \sum_{j=1}^m W_{ij}^-, \quad (8)$$

где $i=1, \dots, n$, $j=1, \dots, m$, n – число индивидуальных веществ; m – количество химических реакций.

С использованием формул (2) и (3) формулу (8) можно записать в следующем виде:

$$\frac{dc_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^m (n_{ij}'' - n_{ij}') k_j^+ \prod_k C_k^{n_{kj}''} + \sum_{j=1}^m (n_{ij}' - n_{ij}'') k_j^- \prod_k C_k^{n_{kj}'}. \quad (9)$$

Химическая реакция характеризуется порядком, который равен сумме показателей степеней при всех концентрациях, стоящих в правой части кинетического уравнения.

Метод решения уравнений химической кинетики

Рассматривается реагирующая газовая система, в которой между компонентами $A_i (i=1, \dots, n)$ протекают обратимые элементарные химические реакции ($S=1, \dots, m$).

Каждая обратимая химическая реакция рассматривается как совокупность двух односторонних. Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} n_{ij} &= n_{is}'' - n_{is}', n_{ij} = n_{is}', j = s, s = 1, \dots, m, \\ n_{ij} &= n_{is}' - n_{is}'', n_{ij} = n_{is}'', j = s + m, s = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (10)$$

В соответствии с принятыми обозначениями прямые направления химических реакций имеют индексы $j=1, \dots, m$ обратные направления-индексы $j=(m+1), \dots, 2m$.

Применяя соотношение $C_i = n_i/V$ и $r_i = n_i/N = C_i/C = p_i/p$ можно уравнение (9) переписать в следующем виде:

$$\frac{1}{V} \frac{dn_i}{d\tau} = \sum_j n_{ij} k_j (\prod_p C_p^{n_{pj}}) C^{m_j}, \quad (11)$$

где $i, p=1, \dots, n, j=1, \dots, 2m$, C – мольная концентрация газовой смеси; C_p – мольная парциальная концентрация p -го компонента газовой смеси; m_j – признак участия в j -ой реакции каталитической частицы $M(m_j=1)$, реакция протекает с участием этой частицы, в противном случае $m_j=0$; n_i – количество молей i -го компонента в объеме V , k – константа скорости обратимых химических реакций.

Используя соотношения $n_i = Nr_i$, $C_i = pr_i/(R_0T)$, где N – общее число молей в объеме V , получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{dn_i}{d\tau} &= \frac{1}{V} \left(r_i \frac{dN}{d\tau} + N \frac{dr_i}{d\tau} \right) = \sum_j n_{ij}'' k_j \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{m_j} \prod_p \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{n_{pj}} r_p^{n_{pj}} = \\ &= \sum_j n_{ij}'' k_j \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{\sum_p n_{pj} + m_j} \prod_p r_p^{n_{pj}}, \quad i, p = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (12)$$

Число уравнений (12) равно числу компонент газовой смеси. Суммируя по i все эти уравнения, получим:

$$\sum_i \frac{r_i}{V} \frac{dN}{d\tau} + \sum_i \frac{N}{V} \frac{dr_i}{d\tau} = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\tau} + \frac{N}{V} \frac{d(\sum_i r_i)}{d\tau} = \sum_q \sum_j n_{qj} k_j \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{m_j + \sum_p n_{pj}} \prod_p r_p^{n_{pj}}, \quad (13)$$

где $q=1, \dots, n$.

Введя обозначение, $\bar{m}_j = m_j + \sum_p n_{pj} - 1$ и, используя равенство $N/V = p/(R_0T)$ получим:

$$\frac{dr_i}{d\tau} = \sum_j n_{ij} k_j \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{\bar{m}_j} \prod_p r_p^{n_{pj}} - r_i \sum_q \sum_p n_{iq} k_q \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{\bar{m}_q} \prod_p r_p^{n_{pq}}, \quad (14)$$

где $i, p, q=1, \dots, n, j=1, \dots, 2m$.

Соотношение (14) является нелинейным дифференциальным уравнением, которое интегрируется с помощью численных методов, и в этом случае для достаточно малых концентраций r_i ошибки округления могут привести к получению физически нереальных отрицательных концентраций r_i . Для предотвращения этого вводится следующая замена:

$$g_i = -\ln r_i.$$

Тогда уравнение изменения состава примет следующий вид:

$$\frac{dg_i}{d\tau} = e^{-g_i} \sum_j n_{ij} k_j \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{\bar{m}_j} \exp(-\sum_p n_{pj} g_p) + + \sum_q \sum_j n_{iq} k_q \left(\frac{p}{R_0T} \right)^{\bar{m}_q} \exp(-\sum_p n_{pq} g_p), \quad (15)$$

где $i, p, q=1, \dots, n, j=1, \dots, 2m$.

Одно из уравнений (15) можно заменить уравнением нормировки:

$$\sum_i e^{-g_i} = 1. \quad (16)$$

Заменяется уравнение, которое описывает изменение компонента, содержащегося в газовой смеси в максимальной концентрации.

Изменение температуры рабочего тела влияет на его термодинамические и теплофизические свойства и на скорости химических реакций. Поэтому требуется в математическую модель включить соотношение, которое связывает состав рабочего тела с температурой. Это делается на основе формулы для энтальпии смеси:

$$i = \sum_i I_i r_i / \sum_i \mu_i r_i, \quad (17)$$

где I_i, μ_i – значения мольной энтальпии и молекулярная масса i -го компонента.

Значения мольной энтальпии, энтропии и теплоемкость индивидуальных веществ смеси аппроксимируются полиномами базы ИВТАНТЕРМО, отличающихся тем, что рабочий диапазон 298,15...20000 К разбит на шесть температурных диапазонов, каждый из которых описан полиномами с уникальными коэффициентами $\langle a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_L, a_1, a_2, a_3 \rangle$:

$$\begin{aligned} I_i(T) &= [H(T) - H(0)]_i + \Delta H_{f0i} \cdot 10^3, \\ [H(T) - H(0)]_i &= 10^4 [-2a_{-2}x^{-1} + a_{-1} + a_L x + a_1 x^2 + 2a_2 x^3 + 3a_3 x^4], \\ S_i(T) &= -a_{-2}x^{-2} + a_L \ln x + a_0 + a_L + a_1 x^2 + 2a_1 x + 3a_2 x^2 + 4a_3 x^3, \\ c_{pi} &= -2a_{-2}x^{-2} + a_L + 2a_1 x + 6a_2 x^2 + 12a_3 x^3, \quad x = T/10000. \end{aligned}$$

В ходе выполнения расчетов приходится очень часто обращаться к этим соотношениям, поэтому для уменьшения объема вычислений их целесообразно аппроксимировать кусочно-линейными зависимостями типа:

$$I_i = I_{i \text{ оп}} + c_{pi}^{\text{оп}} (T - T_{\text{оп}}), \quad (18)$$

где $I_{i \text{ оп}}$ – «опорное» значение мольной энтальпии i -го компонента, $T_{\text{оп}}$ – опорное значение температуры; $c_{pi}^{\text{оп}}$ – опорная мольная теплоемкость, равная среднему значению

на интервале линеаризации. С достаточной для решения прикладных задач точностью этот интервал ΔT можно принять 100 К.

При использовании (18) соотношение (17) принимает следующий вид:

$$i = \sum_i (I_{ion} + c_{pi}^{on}(T - T_{on})) r_i / \sum_i \mu_i r_i. \quad (19)$$

После простых преобразований получим:

$$T - T_{on} - \sum_i (i\mu_i - I_{ion}) / \sum_i c_{pi}^{on} r_i = 0. \quad (20)$$

Система уравнений, использованная для определения состава продуктов сгорания твердых бытовых отходов, включает в себя уравнения (15), (16), (20):

$$\begin{aligned} \frac{dy_i}{dt} &= -e^{\gamma_i} \sum_j n_{ij} k_j \left(\frac{p}{R_0 T}\right)^{\bar{m}_j} \exp(-\sum_p n_{pj} \gamma_p) + \sum_q \sum_j n_{ij} k_j \left(\frac{p}{R_0 T}\right)^{\bar{m}_j} \exp(-\sum_p n_{pj} \gamma_p), \\ \sum_i e^{-\gamma_i} &= 1, \\ T - T_{on} - \frac{\sum_i (i\mu_i - I_{ion})}{\sum_i c_{pi}^{on} r_i} &= 0. \end{aligned} \quad (21)$$

где $i, p, q=1, \dots, n, j=1, \dots, 2m$.

Неизвестными в системе (21) являются n -мольных концентраций индивидуальных веществ, составляющих газовую смесь и значение температуры T . Для индивидуальных веществ составляющих газовую смесь и для всей смеси в целом справедливо уравнение состояния идеального газа:

$$pV = R_0 T. \quad (22)$$

Система (21) представляет собой $(n-1)$ обыкновенных дифференциальных уравнений и 1 алгебраическое уравнение.

Специфика решения системы (21) заключается в «жесткости» уравнений изменения состава (15). Получение решений для таких уравнений возможно только при использовании неявных разностных методов. Эффективным неявным методом конечно-разностной аппроксимации дифференциальных уравнений является метод У.Г. Пирумова с последующим использованием метода Ньютона.

Для применения метода Ньютона дифференциальные уравнения предварительно представляются в виде однородных конечно-разностных уравнений вида:

$$F_i^s \equiv X_{ks}^{n+1} - X_{ks}^n - h[(X_{ks}^n) + (1-a)f_i^s((X_{ks}^{n+1}))] \equiv 0, \quad (23)$$

где $i, k=1, \dots, q, q$ – число неизвестных; h – шаг интегрирования; a – параметр аппроксимации (обычно $a=0,4$); X_{ks}^n, X_{ks}^{n+1} – значения неизвестной величины в начале и конце шага интегрирования.

Полученная система представляет собой нелинейные алгебраические уравнения, которые преобразовываются для реализации схемы Ньютона к виду:

$$\left[\frac{\partial F_i^s}{\partial X_{ks}} \right] [\Delta X_{ks}] = [F_k^{ms}], \quad (24)$$

где $\left[\frac{\partial F_i^s}{\partial X_{ks}} \right]$ – матрица частных производных (матрица Якоби).

Система вида (24) является системой линейных уравнений относительно поправок ΔX_k^m , которая решается методом Гаусса. Для нахождения неизвестных применяется итерационная схема:

$$X_i^{n+1, m+1} = X_i^{n+1, m} + \Delta X_i^{n+1, m}, \quad (25)$$

где m – номер итерации; $\Delta X_i^{n+1, m}$ – поправки на m -ой итерации; $n+1$ – номер шага интегрирования, на котором реализуется схема; $i=1, \dots, q, q$ – число неизвестных.

На шаге интегрирования итерации выполняются до получения таких значений (X_i^m) , которые отличаются от своих предыдущих значений (X_i^{m-1}) на заранее заданную малую величину. Затем осуществляется переход на следующий шаг интегрирования. При этом в качестве схемы интегрирования принята схема с «замороженным» на ряде шагов якобианом, что существенно сокращает время вычислительного процесса.

Наиболее трудоемкой частью алгоритма является вычисление матрицы Якоби. Применение для нее аналитического вычисления позволяет сохранять «замороженный» якобиан на большем числе шагов интегрирования.

Особые требования предъявляются к уравнениям изменения состава: они должны быть вычислены в обобщенном виде. Это позволит создать программу расчета независимую от набора реагирующих веществ и совокупности химических реакций.

Для системы (21), приведенная к конечноразностной форме матрица Якоби имеет следующие элементы:

$$\frac{dF_{\gamma_i}}{d\gamma_k} = \delta_i^k + h(1-a)e^{\gamma_i} \sum_j n_{ij} (\delta_i^k - n_{kj}) \Omega_j - \sum_p \sum_j n_{pj} n_{kj} \Omega_j, \quad (26)$$

$$i = 1, \dots, (L-1), (L+1), \dots, n,$$

$$p, k = 1, \dots, n, j = 1, \dots, 2m,$$

где δ_i^k – символ Кронекера,

$$\frac{dF_{\gamma_i}}{d\gamma_i} = \exp(-\gamma_i), \quad (27)$$

$$\frac{dF_{\gamma_i}}{dT} = h(1-a)e^{\gamma_i} \sum_j n_{ij} \Omega_j \left[\left(\frac{1}{A_j} \frac{\partial A_j}{\partial T} + \frac{n_j - \bar{m}_j}{T} + \frac{E_j}{R_0 T^2} \right) - \right. \quad (28)$$

$$\left. - \sum_p \sum_j n_{pj} \Omega_j \left(\frac{1}{A_j} \frac{\partial A_j}{\partial T} + \frac{n_j - \bar{m}_j}{T} + \frac{E_j}{R_0 T^2} \right) \right].$$

$$\Omega_j = k_j \left(\frac{p}{R_0 T} \right)^{\bar{m}_j} \exp(-\sum_p n_{pj} \gamma_p).$$

В алгоритме расчета предусмотрено вычисление констант скоростей обратных химических реакций, причем константы скоростей прямых реакций относятся к исходным данным, а константы равновесия находятся как комбинации констант диссоциации.

Константы диссоциации определяются по аппроксимирующим коэффициентам, которые позволяют представлять эти константы в виде усеченной зависимости вида Аррениусовой:

$$K_i^D = A_i^D \exp(-E_i^D / (R_0 T)). \quad (29)$$

Для сокращения времени расчета весь рабочий температурный интервал (300...4200 K) разбит 20 «опорными» точками на равные температурные интервалы. В этих опорных точках для каждого индивидуального вещества, принимающего участие в расчетах, предварительно рассчитываются и записываются в соответствующий массив «опорные» значения констант диссоциации:

$$\ln K_{on}^D = (\sum_i a_{im} S_i^0 - S_m^0) / R_0 - (\sum_i a_{im} I_i^0 - I_m^0) / R_0 T, \quad (30)$$

где a_{im} – число атомов «i» в молекуле диссоциирующего вещества «m».

По опорным значениям констант диссоциации рассчитываются аппроксимирующие коэффициенты для определения констант диссоциации на правых и левых границах температурных интервалов:

$$T_1 = T_{on} + 100 \text{ K}, T_2 = T_{on} - 100 \text{ K}, (A^{+D}, A^{-D}, E^{+D}, E^{-D}).$$

Этот метод позволяет спрогнозировать выход диоксинов и суперэкоксикантов еще до самого процесса утилизации ТБО.

Список библиографических ссылок

1. Подавалов Ю. А. Экология нефтегазового производства. М.: Инфра-Инженерия, 2010. 416 с.
2. Савельева В. А., Попова М. Н., Андропова М. М. Экологическая безопасность учреждений УИС в сфере обращения с отходами. М. : ВИПЭ ФСИН России, 2010. 250 с.
3. Бычкова В. А. Коробко В. И. Твердые бытовые отходы. Экономика. Экология. Предпринимательство. М. : Юнити-Дана, 2014. 132 с.
4. Муравьев А. Г., Родин А. А. Другов Ю. С. Экспресс-анализ экологических проб. М. : Бином. Лаборатория знаний, 2010. 424 с.
5. Почаева Е. И. Экология и безопасность жизнедеятельности. М. : Феникс, 2010. 560 с.
6. Porter M. What is strategy? Harvard : Business Review, 2009. 108 p.
7. Mill R. S., Morrison A. M. Nature and Ecology. Boston : Prentice-Hall, 2009. 230 p.
8. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2008. 256 p.
9. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2010. 338 p.
10. Chapman J. L. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2009. 336 p.

Barysheva O.B. – candidate of technical sciences, associate professor

E-mail: obbars@mail.ru

Khabibullin Iu.Kh. – candidate of technical sciences, associate professor

E-mail: a0an@mail.ru

Vagizov A.Z. – student

E-mail: 3almaz@mail.ru

Kazan State University of Architecture and Engineering

The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya str., 1

A mathematical model for calculating the chemical nonequilibrium components for solid waste management

Abstract

Problem statement. For the majority of units in which processes occur at high temperatures characteristic of various types of non-equilibrium effects. The most important of these is the change in non-equilibrium of the working fluid composition of the products of combustion, heating or decomposition caused by finite speed the chemical reactions that lead to a significant impact on the basic energy parameters of the process. The authors decided to create a mathematical model for calculating the chemical nonequilibrium components for solid waste management.

Results. The authors reviewed the process of solid waste and industrial waste. On the basis of calculation methods developed an alternative method to find the composition of the combustion products in the non-equilibrium conditions during the combustion of construction debris. The resulting method of calculation of the data structure and properties of solid waste can be predictive superecotoxicants access to the products of combustion.

Conclusions. On the basis of the formal chemical kinetics equations, we have created an alternative methodology for calculating the composition of the combustion products, taking into account the rates of chemical reactions. This technique consists in the definition of the working fluid composition for a given mechanism and rate constants of reactions. It is assumed that all of the conversions in the gas phase – elementary, i.e. occur in one step. Any chemical interactions may be represented by a set of elementary stages. They were considered the most likely chemical reactions of three types: a mono-, bi- and trimolecular. This technique allows you to find the composition of the products of combustion of municipal solid waste before combustion.

Keywords: nonequilibrium processes, chemical kinetics, balance, composition, municipal solid waste.

References

1. Podavalov Ju. A. Oil and Gas Production Ecology. M. : Infra-Engineering, 2010. 416 p.
2. Saveleva V. A., Popova M. N., Andronova M. M. Environmental security penal institutions in the field of waste management. M. : VIPE FSIN of Russia, 2010. 250 p.
3. Bychkova V. A., Korobko V. I. Municipal solid waste. Economy. Ecology. Entrepreneurship. M. : Unity-Dana, 2014. 132 p.
4. Muravev A. G., Rodin A. A., Drugov Ju. S. Rapid analysis of environmental samples. M. : Binom. Laboratory znaniy, 2010. 424 p.
5. Pochekaeva E. I. Ecology and life safety. M. : Fenix, 2010. 560 p.
6. Porter M. What is strategy? Harvard : Business Review, 2009. 108 p.
7. Mill R. S., Morrison A. M. Nature and Ecology. Boston : Prentice-Hall, 2009. 230 p.
8. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2008. 256 p.
9. Odum Yu. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2010. 338 p.
10. Chapman J. L. Ecology. Cambridge : Second Edition, 2009. 336 p.