

УДК 550.4.46(575.2)

ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И ОЦЕНКИ УГЛЕРОДНОГО СЛЕДА В ПРОЦЕССЕ СЖИГАНИЯ МАЗУТА В КОТЛОАГРЕГАТАХ СРЕДНЕЙ И МАЛОЙ МОЩНОСТИ

© 2023 г. Т. З. Маймеков^{a, *}, Д. А. Самбаева^b, М. Б. Молдобаев^c,
Т. С. Бажиров^d, З. К. Маймеков^{c, *}

^aМосковский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

^bКыргызский государственный технический университет им. И. Раззакова, г. Бишкек, КР

^cКыргызско-Турецкий университет “Манас”, г. Бишкек, КР

^dЮжно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова, г. Шымкент, РК

*e-mail: zarlyk.maymekov@manas.edu.kg

Поступила в редакцию 18.07.2023 г.

После доработки 19.07.2023 г.

Принята к публикации 23.07.2023 г.

С целью прогнозирования и оценки величины углеродного следа в газовой фазе изучен процесс окисления мазута в избытке воздуха (альфа-фактор 1.3) в широких пределах изменения температуры ($T = 298–3000$ К, $P = 0.1$ МПа). Рассчитаны равновесные термодинамические параметры (энтропия, энтальпия и внутренняя энергия) и определены концентрационные распределения С, S, N, O, H – содержащих компонентов и активных частиц в газовой фазе. На основе суммарного концентрационного распределения С, S, N, O, H – содержащих компонентов и активных частиц в газовой фазе рассчитано весовое содержание углерода. С учетом химической матрицы системы мазут-воздух и весового содержания углерода найдена техногенная нагрузка углерода в газовой фазе. Результаты работы позволили оценить величины углеродного следа в газовой фазе в процессе горения топлива, в частности мазута в воздухе. Снижение техногенной нагрузки оксидов углерода (CO, CO₂) в газовой фазе достигнуто модифицированием и сжиганием мазута в виде обратных водомазутных эмульсий в промышленных котлоагрегатах типа Е-1/9М.

Ключевые слова: мазут-воздух, концентрационное распределение, газовая фаза, техногенная нагрузка, углеродный след

DOI: 10.31857/S0040357123050147, **EDN:** MFXFSS

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время оценка величины углеродоемкости осуществляется на основе анализа межстрановых таблиц “затраты-выпуск” с учетом продукции по видам экономической деятельности (экспорта и импорта выбросов) [1]. При этом расчеты производятся по трем категориям (Score 1, 2 и 3). Прямые выбросы (Score 1) от: собственной генерации энергии (пара, тепла); производственных процессов; обращения с отходами, а также фугитивные выбросы (организованные постоянные или залповые выбросы) в результате удаления технологических газов, например, метана. Энергетические выбросы (Score 2) – выбросы парниковых газов в атмосферу в результате производства потребленной компанией электроэнергии, пара, тепла и холода (энергии для охлаждения, и энергия, которая закупается, а не генери-

руется на собственных мощностях). Косвенные выбросы (Score 3) – прочие выбросы парниковых газов, образованных в результате эксплуатации транспортных средств; выбросы от складирования продукции в сторонних логистических центрах, энергия, потребляемая при использовании клиентами продукции компании, выбросы парниковых газов от утилизации отходов продукции [2, 3].

Совокупность указанных выше выбросов парниковых газов, прямо и косвенно произведенных организацией или продуктом составляет ее (его) углеродный след (англ.: carbon footprint) [4]. С целью реализации этой задачи страны составляют национальные кадастры по техногенным нагрузкам потоков [1]. Задача сложная, поскольку требуется строгий учет удельных прямых выбросов парниковых газов при производстве продукции, величины которых определяются: с учетом годо-

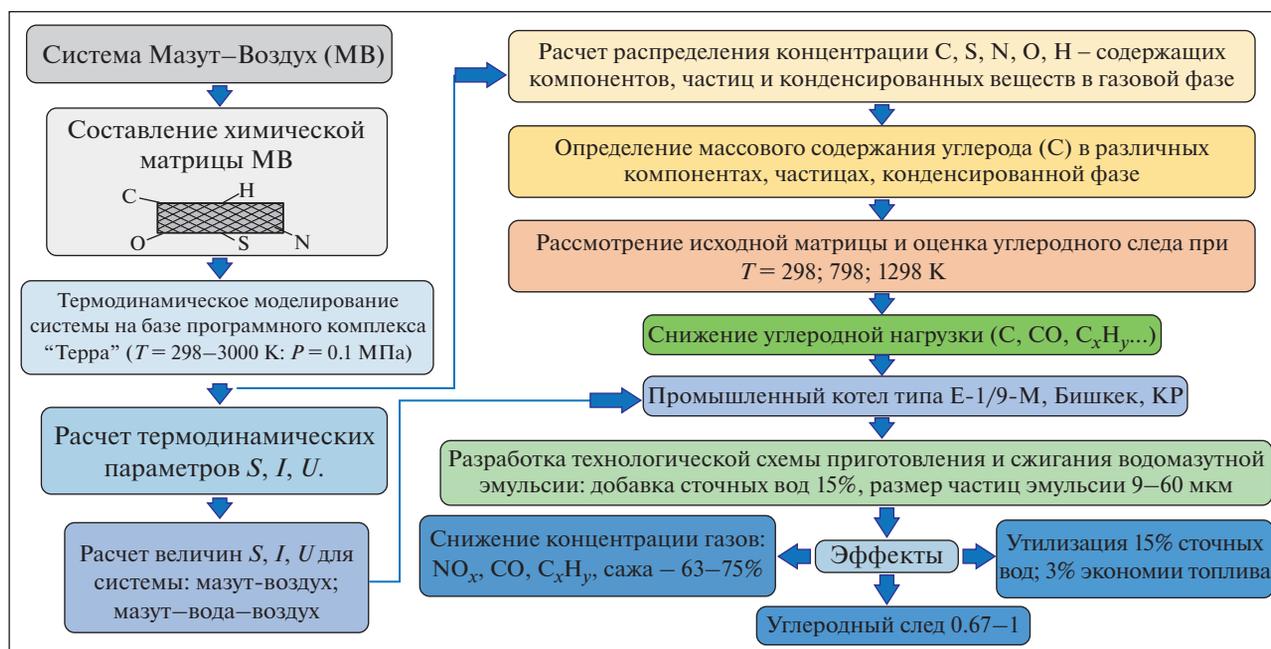


Рис. 1. Схема расчета углеродного следа для системы мазут–воздух.

вого объема прямых выбросов при производстве продукции (тСО₂экв); годового объема производства продукции (тонн); число и вида использованного топлива; фактического годового потребления каждого вида топлива в условных единицах при производстве продукции (т. усл. т); коэффициентов выбросов (СО₂, СН₄, N₂O) при сжигании каждого вида топлива; множителей потенциалов глобального потепления парниковых газов. Здесь возможны два основных способа оценки углеродного следа: прямой расчет углеродного следа продукции; расчет по бенчмаркам (эталонным значениям) [5–13]. Соответственно, требуется строгие методы осуществления химической диагностики и анализа концепций наилучших доступных технологий и зеленой химии [14, 15].

Исходя из изложенных выше положений, в настоящей работе осуществлено термодинамическое моделирование системы [16–21]: жидкое топливо–воздух при избытке окислителя (альфа-фактор 1.3) в широких пределах изменения температуры ($T = 298–3000$ К, $P = 0.1$ МПа) с целью прямого расчета углеродного следа на основе концентрационного распределения: конденсированных веществ; C, S, N, O, H – содержащих компонентов и активных частиц в газовой фазе.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В работе рассмотрена система по схеме (рис. 1): жидкое топливо–воздух при среднем химическом

составе топочного мазута (%): C(83–87), H(10–12), S(1–3.5), N + O(0.2–0.9) с избыточным количеством воздуха (альфа-фактор 1.3); общая химическая матрица расчетной модели включила (%): (C – 84.8) + (H – 11.2) + (S – 2.0) + (N – 0.5) + (O – 1.5) + (O – 3.3) + (N – 12.43); (моль/кг) C – 61.006, H – 96.018, S – 0.539, N – 7.977, O – 2.592.

В расчетных экспериментах использовано термодинамическое моделирование процесса окисления топочного мазута при максимуме энтропии системы на основе программного комплекса "Терра" в широких пределах изменения температуры ($T = 298–3000$ К, $P = 0.1$ МПа) [22, 23].

Модифицирование топочного мазута в виде водомазутных эмульсий в промышленных котлоагрегатах типа Е-1/9М с целью снижения концентрации вредных веществ осуществлено составлением принципиальной технологической схемы (рис. 3) приготовления обратных эмульсий с оптимальным количеством воды в мазуте (15%), которое не приводит к его обводнению [16, 21]. Размеры частиц водомазутной эмульсии (9–60 мкм) найдены методом седиментационного анализа с использованием торзионного веса модификации ВТ-500. Отбор пробы из дымовой трубы осуществлен газоуловителем типа Vortex Ultra Flow, мультифункциональным газоанализатором Visit 01-L/LR, а также переносным газоанализатором типа УГ-2. Пробы анализированы по стандартной методике 5506 и 5515 "NIOSH Manual of Analytical Methods" с последующим использованием

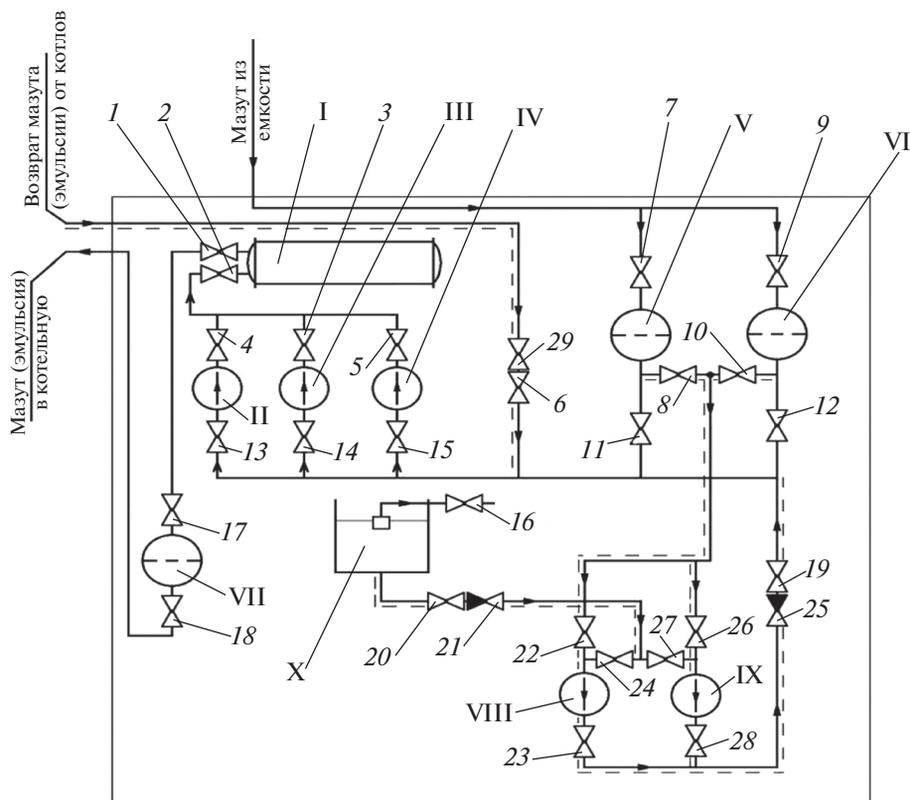


Рис. 3. Принципиальная технологическая схема приготовления и сжигания водомазутной эмульсии в котлоагрегатах типа Е-1/9-М: I – подогреватель мазута; II, III, IV – фильтры грубой очистки; V, VI, VII – фильтры тонкой очистки; VIII, IX – роторно-пульсационные аппараты; X – бак для воды; 1–20, 22–24, 26–29 – вентили; 21, 25 – обратные клапаны.

эмульсии, и полученные расчетные результаты апробированы согласно разработанной принципиальной технологической схеме в котлоагрегатах типа Е-1/9М Мостостроительного отряда Кыргызской железной дороги, г. Бишкек (рис. 3, табл. 3–5). По схеме (рис. 3) мазут после прохождения подогревателя мазута, фильтров грубой и тонкой очистки, насосами подаются роторно-пульсационные аппараты (РПА) [15, 20]. Вода из бака поступает в РПА и на основе смеси, состоящей из 85% мазута и 15% воды образуются полидисперсные водомазутные эмульсии и они направляются в зону горения. Управление расхода потоков на трубопроводах осуществляется вентилями и обратными клапанами. Технические характеристики установки: электродвигатель, кВт (об/мин) – 4.0 (1500); расход мазута, 0.1–0.15 м³/ч; расход воды, 0.01–0.015 м³/ч; температура воды и ВМЭ, 40–45°С (прерывистая линия (рис. 3) – путь водомазутной эмульсии) [16, 21].

Измерения и расчет концентраций загрязняющих веществ в дымовых газах проводили в процессах сжигания мазута (табл. 3) и водомазутных эмульсий (табл. 4) с учетом параметров дымовой

трубы: $H = 18$ м, $D = 0.5$ м, объема газовой смеси $V_{g.m.} = 0.889$ м³/с, температуры дымовых газов $t_{f.g.} = 220$ °С, скорости осаждения частиц $F = 1$, скорости ветра $v = 5.0$ м/с [16].

Процессы приготовления и сжигания водомазутной эмульсии, апробированные на промышленных котлоагрегатах типа Е-1/9-1М показали снижения концентраций оксидов азота, углерода, углеводородов нефти и сажи при сжигании водомазутной эмульсии в среднем на 63–75%, а диоксида серы незначительно (4.06%). Результаты проведенных исследований показывают, что в эмульсиях обратного типа (вода в мазуте), когда вода в виде мельчайших капелек диаметром 9–60 мкм равномерно распределена по всей массе мазута, способствует более эффективному процессу сгорания жидкого топлива, снижению сажеобразования и уменьшению содержания в выбросах С, S, O, H, N – содержащих вредных веществ (табл. 3–5) [16].

Сравнение термодинамических параметров системы: мазут–воздух и мазут–вода–воздух показали высоких значений энтропии в обратной эмульсии (табл. 6), обусловленные более хаотичным движением взаимодействующих частиц [16].

Таблица 1. Концентрационное распределение углеродсодержащих частиц, молекул и конденсированной фазы (моль/кг) в газовой фазе в зависимости от температуры окисления системы: мазут–воздух, $T = 298\text{--}3000\text{ К}$, $P = 0.1\text{ МПа}$

Молекулы и частицы	Температура, К						
	298	798	1298	1798	2298	2798	2998
CS	1.9×10^{-22}	2.4×10^{-13}	6.3×10^{-6}	1.3×10^{-2}	2.9×10^{-1}	4.8×10^{-1}	4.9×10^{-1}
CS ₂	3.7×10^{-17}	7.3×10^{-8}	3.1×10^{-4}	1.8×10^{-2}	1.7×10^{-2}	9.0×10^{-4}	3.2×10^{-4}
COS	2.1×10^{-9}	2.7×10^{-4}	1.2×10^{-3}	1.0×10^{-3}	3.1×10^{-4}	3.3×10^{-5}	1.7×10^{-5}
CO	7.5×10^{-12}	1.8×10^{-1}	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5
CO ₂	2.1×10^{-3}	9.2×10^{-2}	6.4×10^{-4}	9.3×10^{-6}	9.1×10^{-7}	2.1×10^{-7}	1.6×10^{-7}
C ₂ O	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	9.7×10^{-15}	3.3×10^{-10}	1.2×10^{-7}	5.6×10^{-6}	1.5×10^{-5}
C ₃ O ₂	1.9×10^{-22}	2.2×10^{-18}	4.5×10^{-13}	1.2×10^{-11}	8.0×10^{-11}	2.6×10^{-10}	3.1×10^{-10}
C _(c)	38.56	47.68	58.10	58.23	56.52	7.51	5.7×10^{-29}
C	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.1×10^{-19}	1.3×10^{-11}	4.4×10^{-7}	3.6×10^{-4}	2.4×10^{-3}
C ₂	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.3×10^{-22}	4.6×10^{-13}	7.5×10^{-8}	1.6×10^{-4}	1.2×10^{-3}
C ₃	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	3.1×10^{-21}	5.8×10^{-12}	8.8×10^{-7}	1.7×10^{-3}	1.0×10^{-2}
C ₄	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	7.6×10^{-17}	2.2×10^{-10}	3.1×10^{-6}	2.9×10^{-5}
C ₅	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.5×10^{-16}	1.0×10^{-9}	1.6×10^{-5}	1.3×10^{-4}
CH	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	3.3×10^{-17}	1.5×10^{-10}	8.4×10^{-7}	2.0×10^{-4}	8.9×10^{-4}
CH ₂	1.9×10^{-22}	4.5×10^{-22}	5.7×10^{-12}	1.0×10^{-7}	2.5×10^{-5}	7.5×10^{-4}	1.7×10^{-3}
CH ₃	1.9×10^{-22}	7.7×10^{-10}	7.7×10^{-6}	2.5×10^{-4}	1.7×10^{-3}	4.7×10^{-3}	5.0×10^{-3}
CH ₄	22	13	3.2×10^{-1}	3.2×10^{-2}	8.9×10^{-3}	3.0×10^{-3}	1.6×10^{-3}
C ₂ H	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.4×10^{-13}	1.2×10^{-7}	2.8×10^{-4}	3.7×10^{-2}	1.1×10^{-1}
C ₂ H ₂	1.9×10^{-22}	2.5×10^{-11}	2.8×10^{-5}	8.7×10^{-3}	2.1×10^{-1}	1.4	1.7
C ₂ H ₃	1.9×10^{-22}	1.1×10^{-15}	6.9×10^{-9}	3.8×10^{-6}	1.2×10^{-4}	9.4×10^{-4}	1.1×10^{-3}
C ₂ H ₄	3.2×10^{-20}	1.7×10^{-6}	6.8×10^{-5}	1.7×10^{-4}	2.7×10^{-4}	2.8×10^{-4}	1.8×10^{-4}
C ₂ H ₅	1.9×10^{-22}	3.3×10^{-12}	3.1×10^{-9}	2.8×10^{-8}	9.1×10^{-8}	1.3×10^{-7}	9.4×10^{-8}
C ₂ H ₆	4.1×10^{-7}	1.7×10^{-4}	3.0×10^{-6}	1.9×10^{-7}	4.0×10^{-8}	9.5×10^{-9}	3.7×10^{-9}
C ₃ H	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	6.4×10^{-13}	9.2×10^{-7}	2.5×10^{-3}	3.8×10^{-1}	1.0
C ₃ H ₄	1.9×10^{-22}	3.4×10^{-20}	7.1×10^{-13}	6.3×10^{-10}	2.7×10^{-8}	2.3×10^{-7}	2.4×10^{-7}
C ₃ H ₆	1.9×10^{-22}	2.3×10^{-13}	1.2×10^{-11}	3.0×10^{-11}	4.8×10^{-11}	4.3×10^{-11}	2.1×10^{-11}
C ₃ H ₈	4.2×10^{-13}	1.1×10^{-8}	8.2×10^{-11}	2.9×10^{-12}	4.0×10^{-13}	5.7×10^{-14}	1.5×10^{-14}
C ₄ H	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	4.3×10^{-20}	8.4×10^{-12}	3.7×10^{-7}	3.2×10^{-4}	1.2×10^{-3}
C ₄ H ₂	1.9×10^{-22}	1.3×10^{-20}	4.6×10^{-10}	1.3×10^{-5}	4.3×10^{-3}	1.4×10^{-1}	2.0×10^{-1}
C ₄ H ₄	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	4.3×10^{-17}	6.1×10^{-13}	1.2×10^{-10}	2.9×10^{-9}	3.4×10^{-9}
C ₄ H ₆	1.9×10^{-22}	3.9×10^{-19}	8.6×10^{-15}	2.9×10^{-13}	2.1×10^{-12}	5.0×10^{-12}	2.8×10^{-12}
C ₄ H ₁₀	8.5×10^{-19}	8.6×10^{-13}	2.6×10^{-15}	5.1×10^{-17}	5.0×10^{-18}	4.9×10^{-19}	9.1×10^{-20}
C ₅ H ₆	1.9×10^{-22}	4.7×10^{-17}	2.5×10^{-13}	4.6×10^{-12}	2.3×10^{-11}	4.3×10^{-11}	1.9×10^{-11}
C ₆ H ₆	1.9×10^{-22}	1.7×10^{-14}	5.2×10^{-12}	2.6×10^{-11}	6.2×10^{-11}	7.0×10^{-11}	2.2×10^{-11}
СНО	1.9×10^{-22}	9.5×10^{-14}	1.0×10^{-8}	5.0×10^{-7}	4.5×10^{-6}	1.7×10^{-5}	2.5×10^{-5}

Таблица 1. Окончание

Молекулы и частицы	Температура, К						
	298	798	1298	1798	2298	2798	2998
CHO ₂	1.9×10^{-22}	2×10^{-15}	8.1×10^{-13}	1.1×10^{-12}	1.4×10^{-12}	1.6×10^{-12}	2.0×10^{-12}
CH ₂ O	2.2×10^{-22}	6.0×10^{-8}	1.0×10^{-6}	9.5×10^{-7}	9.0×10^{-7}	7.6×10^{-7}	$6. \times 10^{-7}$
CH ₂ O ₂	1.8×10^{-15}	2.7×10^{-8}	6.3×10^{-10}	1.2×10^{-11}	1.5×10^{-12}	3.6×10^{-13}	2.6×10^{-13}
CH ₃ O	1.9×10^{-22}	6.4×10^{-19}	1.4×10^{-14}	2.7×10^{-13}	1.5×10^{-12}	3.6×10^{-12}	4.4×10^{-12}
C ₂ H ₄ O ₂	6.7×10^{-16}	1.0×10^{-10}	1.3×10^{-13}	$6. \times 10^{-16}$	3.0×10^{-17}	3.3×10^{-18}	$1. \times 10^{-18}$
C ₃ H ₆ O	1.9×10^{-22}	3.1×10^{-12}	1.6×10^{-13}	6.6×10^{-15}	1.1×10^{-15}	2.2×10^{-16}	8.5×10^{-17}
CN	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	5.6×10^{-12}	4.3×10^{-7}	2.3×10^{-4}	5.8×10^{-3}	1.3×10^{-2}
CN ₂	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.5×10^{-14}	8.2×10^{-10}	2.7×10^{-7}	2.2×10^{-6}	3.7×10^{-6}
C ₂ N	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	4.8×10^{-17}	2.9×10^{-10}	1.8×10^{-6}	2.1×10^{-4}	6.7×10^{-4}
C ₂ N ₂	1.9×10^{-22}	3.6×10^{-18}	2.7×10^{-10}	8.6×10^{-7}	7.5×10^{-5}	2.5×10^{-4}	2.7×10^{-4}
NCO	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.3×10^{-15}	2.6×10^{-12}	1.9×10^{-10}	1.3×10^{-9}	2.4×10^{-9}
HCN	1.9×10^{-22}	1.2×10^{-6}	3.6×10^{-3}	1.0×10^{-1}	6.2×10^{-1}	8.2×10^{-1}	7.5×10^{-1}
HNC	1.9×10^{-22}	2.0×10^{-17}	1.1×10^{-9}	2.5×10^{-6}	1.8×10^{-4}	1.1×10^{-3}	1.6×10^{-3}
C ₂ HN	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.0×10^{-14}	3.0×10^{-9}	2.4×10^{-6}	7.1×10^{-5}	1.4×10^{-4}
C ₃ HN	1.9×10^{-22}	1.3×10^{-15}	9.6×10^{-8}	2.2×10^{-4}	1.6×10^{-2}	1.0×10^{-1}	1.1×10^{-1}
C ₅ HN	1.9×10^{-22}	5.2×10^{-21}	9.0×10^{-10}	6.8×10^{-5}	3.5×10^{-2}	7.9×10^{-1}	8.4×10^{-1}
C ₇ HN	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.5×10^{-12}	6.1×10^{-6}	2.2×10^{-2}	1.7	1.91
C ₉ HN	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	6.0×10^{-15}	4.6×10^{-7}	1.1×10^{-2}	3.1	3.50
N ₂ C	1.9×10^{-22}	3.5×10^{-18}	1.7×10^{-10}	4.9×10^{-7}	4.1×10^{-5}	1.3×10^{-4}	1.7×10^{-4}
C ⁺	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	7.1×10^{-18}	3.4×10^{-12}	1.4×10^{-10}
C ₂ ⁺	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.8×10^{-20}	8.2×10^{-14}	4.8×10^{-12}
C ₂ ⁻	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	7.5×10^{-20}	1.6×10^{-14}	6.2×10^{-11}	6.5×10^{-10}
CO ⁺	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.1×10^{-16}	7.7×10^{-13}	1.0×10^{-11}
CH ⁺	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.1×10^{-16}	9.1×10^{-12}	2.1×10^{-10}
CHO ⁺	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	2.3×10^{-24}	6.4×10^{-15}	1.0×10^{-10}	1.2×10^{-8}	4.7×10^{-8}
CN ⁻	1.9×10^{-22}	1.9×10^{-22}	1.7×10^{-20}	4.4×10^{-13}	2.2×10^{-10}	7.6×10^{-9}	2.2×10^{-8}

Величины энтальпии и внутренней энергии отрицательные в пределах температуры от 500 до 750 К для системы мазут–воздух, а для системы мазут–вода–воздух направление химических превращений соответствует к интервалу от 500 до 950 К. Число Прандтля для системы мазут–вода–воздух меняется от 0.69 до 0.47, и она более подвержена к разбавлению; доля конденсированной фазы (z) в указанных выше системах составляет 0.79/0.41 при 500 К и 0.78/0.54 при 950 К, соответственно образование конденсированного углерода (C_c) в два раза меньше в системе мазут–вода–воз-

дух. Таким образом, термодинамические параметры и величины число Прандтля тоже показали в эффективности использования системы мазут–вода–воздух в процессе снижения техногенных нагрузок газовых выбросов. Отмечено, что концентрация оксида углерода, углеводородов нефти и сажи при сжигании водомазутной эмульсии уменьшилась в среднем на 63–75%. Величины углеродного следа в газовой фазе составили от 0.6 до 1, что и полезна при оценке углеродной емкости на единицу продукции.

Таблица 2. Сжигание мазута в воздухе и содержание углерода (С, г) в различных компонентах и частицах при температурах: 298, 798 и 1298 К

Молекулы и частицы	Температура, К		
	298	798	1298
CS	2.3×10^{-21}	2.9×10^{-12}	7.65×10^{-5}
CS ₂	4.5×10^{-16}	8.7×10^{-7}	3.8×10^{-3}
COS	2.6×10^{-8}	3.32×10^{-3}	7.75×10^{-3}
CO	9.04×10^{-11}	2.22	30.84
CO ₂	0.026	0.22	7.75×10^{-3}
C ₂ O	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	1.17×10^{-14}
C ₃ O ₂	6.95×10^{-21}	8.2×10^{-17}	5.51×10^{-12}
C _(с)	462.72	572.16	697.2
C	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	1.43×10^{-18}
C ₂	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	2.87×10^{-21}
C ₃	6.95×10^{-21}	6.9×10^{-21}	1.12×10^{-19}
C ₄	9.3×10^{-21}	9.3×10^{-21}	9.3×10^{-21}
C ₅	1.16×10^{-20}	1.1×10^{-20}	1.16×10^{-20}
CH	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	4.04×10^{-16}
CH ₂	2×10^{-21}	5×10^{-21}	9×10^{-5}
CH ₃	2×10^{-21}	9×10^{-9}	6×10^{-11}
CH ₄	26.88	15.72	3.91
C ₂ H	4×10^{-21}	4×10^{-21}	3×10^{-12}
C ₂ H ₂	4×10^{-21}	6×10^{-10}	6×10^{-4}
C ₂ H ₃	4×10^{-21}	2×10^{-14}	1×10^{-7}
C ₂ H ₄	7×10^{-19}	4×10^{-5}	1×10^{-3}
C ₂ H ₅	4×10^{-21}	8×10^{-11}	7×10^{-8}
C ₂ H ₆	1×10^{-5}	4×10^{-3}	7×10^{-5}
C ₃ H	6×10^{-21}	6×10^{-21}	2×10^{-11}
C ₃ H ₄	6×10^{-21}	1×10^{-18}	2×10^{-11}
C ₃ H ₆	6×10^{-21}	8×10^{-12}	4×10^{-10}
C ₃ H ₈	1×10^{-11}	3×10^{-7}	2×10^{-9}
C ₄ H	9×10^{-21}	9×10^{-21}	2×10^{-18}
C ₄ H ₂	9×10^{-21}	6×10^{-19}	2×10^{-8}
C ₄ H ₄	9×10^{-21}	9×10^{-21}	2×10^{-15}
C ₄ H ₆	9×10^{-21}	1×10^{-17}	4×10^{-13}
C ₄ H ₁₀	5×10^{-17}	4×10^{-11}	1×10^{-13}
C ₅ H ₆	1×10^{-20}	2×10^{-15}	1×10^{-11}
C ₆ H ₆	1×10^{-20}	1×10^{-12}	3×10^{-10}
CHO	2.32×10^{-21}	1.1×10^{-12}	1.3×10^{-6}
CHO ₂	2.32×10^{-21}	3.4×10^{-14}	9.83×10^{-11}
CH ₂ O	2.65×10^{-21}	7.24×10^{-7}	1.28×10^{-4}
CH ₂ O ₂	2.22×10^{-14}	3.36×10^{-7}	7.6×10^{-9}

Таблица 2. Окончание

Молекулы и частицы	Температура, К		
	298	798	1298
CH ₃ O	2.32×10^{-21}	7.7×10^{-18}	1.73×10^{-13}
C ₂ H ₄ O ₂	1.62×10^{-14}	2.52×10^{-9}	3.2×10^{-12}
C ₃ H ₆ O	6.95×10^{-21}	1.1×10^{-10}	5.6×10^{-12}
CN	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	6.83×10^{-11}
CN ₂	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	3.1×10^{-13}
C ₂ N	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	1.16×10^{-15}
C ₂ N ₂	4.63×10^{-21}	8.8×10^{-17}	6.7×10^{-9}
NCO	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	1.7×10^{-14}
N ₂ C	2.32×10^{-21}	4.3×10^{-17}	2.15×10^{-9}
HCN	2.32×10^{-21}	1.46×10^{-5}	4.43×10^{-2}
HNC	2.32×10^{-21}	2.4×10^{-16}	1.37×10^{-8}
C ₂ HN	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	7.84×10^{-13}
C ₃ HN	6.95×10^{-21}	5×10^{-14}	3.47×10^{-13}
C ₅ HN	1.16×10^{-20}	3.1×10^{-19}	5.4×10^{-8}
C ₇ HN	1.62×10^{-20}	1.6×10^{-20}	2.13×10^{-10}
C ₉ HN	1.85×10^{-20}	1.8×10^{-20}	5.85×10^{-13}
C ⁺	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	2.32×10^{-21}
C ₂ ⁺	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	4.63×10^{-21}
C ₂ ⁻	4.63×10^{-21}	4.6×10^{-21}	4.63×10^{-21}
CO ⁺	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	2.3×10^{-21}
CH ⁺	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	2.32×10^{-21}
CHO ⁺	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	2.8×10^{-23}
CN ⁻	2.32×10^{-21}	2.3×10^{-21}	2.1×10^{-19}
Количество в граммах	489.62	590.33	732.01

Таблица 3. Сжигание мазута и расчет концентраций вредных веществ в газовой фазе

Компоненты газовых выбросов	ПДК, мг/м ³	Количество веществ, выбрасываемых в атмосферу		Сумма максимальных приземных концентраций (доли ПДК), создаваемых выбросами источника
		макс., г/с	сум., т/год	
CO	3.0	0.071	2.242	0.00356
NO _x	0.085	0.069	2.186	0.12205
SO ₂	0.5	0.444	14.016	0.13351
C _x H _y	1.5	1.067	33.638	0.10695
Сажа	0.15	0.046	1.458	0.04611

Таблица 4. Сжигание водомазутных эмульсий и расчет концентраций вредных веществ в газовой фазе

Компоненты газовых выбросов	ПДК, мг/м ³	Количество веществ, выбрасываемых в атмосферу		Сумма максимальных приземных концентраций (доли ПДК), создаваемых выбросами источника
		макс., г/с	сум., т/год	
CO	3.0	0.021	0.673	0.00145
NO _x	0.085	0.023	0.729	0.04953
SO ₂	0.5	0.427	13.455	0.12299
C _x H _y	1.5	0.391	12.334	0.04901
Сажа	0.15	0.012	0.364	0.02005

Таблица 5. Снижение концентраций вредных веществ в дымовых газах котлоагрегатов типа Е-1/9М на основе сжигания водомазутных эмульсий

Компоненты газовых выбросов	количество вредных веществ						снижение газовых выбросов, %
	мазут			водомазутная эмульсия			
	мг/м ³	г/с	т/год	мг/м ³	г/с	т/год	
SO ₂	500	0.444	14.016	480	0.427	13.455	4.06
NO _x	78	0.069	2.186	26	0.023	0.729	66.67
CO	80	0.071	2.242	24	0.021	0.673	70.00
C _x H _y	1200	1.067	33.638	440	0.391	12.334	63.33
Сажа	52	0.046	1.458	13	0.012	0.364	75.00

Таблица 6. Сравнительные характеристики термодинамических параметров системы: мазут–воздух и мазут–вода–воздух

Термодинамические и физические параметры	Системы	
	мазут–воздух	мазут–вода–воздух
	Т, К	
	500–750	500–950
Энтродпия S , кДж/(кг К)	2.49–3.28	7.44–11.49
Энтальпия I , кДж/кг	(–498)–(–94.7)	(–3252)–(–162)
Внутренняя энергия U , Дж/кг	(–510)–(–125)	(–3307)–(–452)
Число Прандтля ($Pr = \gamma/D$)	0.68–0.59	0.69–0.47
Доля конденсированной фазы (z)	0.79–0.78	0.41–0.54

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучена система мазут–воздух при избытке окислителя (альфа-фактор 1.3) при широких пределах изменения температуры ($T = 298–3000$ К, $P = 0.1$ МПа). Рассчитаны равновесные параметры и определены концентрационные распределения С, S, N, O, H – содержащих компонентов и активных частиц в газовой фазе. На основе суммарного концентрационного распределения С, S,

N, O, H – содержащих компонентов и активных частиц рассчитаны весовое содержание углерода в газовой фазе. С учетом химической матрицы системы мазут–воздух и весового содержания углерода найдена техногенная нагрузка углерода в газовой фазе. Рассчитаны величины углеродного следа (0.6–1) в газовой фазе и отмечено снижение концентрации оксида углерода, углеводородов нефти и сажи при сжигании водомазутной эмульсии в среднем на 63–75%.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

<i>I</i>	энтальпия, Дж/кг
<i>P</i>	давление, Па
<i>S</i>	энтропия, Дж/К
<i>T</i>	температура, К
<i>U</i>	внутренняя энергия, Дж
<i>V</i>	объем, м ³
ρ	плотность, кг/м ³
<i>Pr</i>	число Прандтля

ИНДЕКСЫ

<i>c</i>	конденсированный
<i>g.m.</i>	газовоздушная смесь
<i>f.g.</i>	дымовые газы

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Baranov E., Kim I., Staritsyna E.* Estimation of Russian constant-price input-output accounts according to NACE/CRA // Higher School of Economics Research Paper. 2011. 7.
2. *Порфирьев Б.Н., Широков А.А., Колпаков А.Ю., Единак Е.А.* Возможности и риски политики климатического регулирования в России // Вопр. экон. 2022. № 1. С. 72
3. *Durojaye O., Laseinde T., Oluwafemi I.* A descriptive review of carbon footprint // Proceeding of 2nd International Conference on Human Systems Engineering and Design (IHSED2019). Munich.: Springer Int. Publishing, 2020. p. 960
4. ISO 14067: (2018) "Greenhouse gases – Carbon footprint of products – Requirements and guidelines for quantification"
5. *Magacho G., Espagne E., Godin A.* Impacts of the CBAM on EU trade partners: consequences for developing countries // Climate Policy. 2023. P. 1
6. *Lazaryan S., Sudakov S.* Impact of EU's CBAM on EAEU Countries: The Case of Russia // Global Challenges of Climate Change. V. 2: Risk Assessment, Political and Social Dimension of the Green Energy Transition. – Cham: Springer International Publishing. 2022. P. 157.
7. *Eicke L., Weko S., Apergi M., Marian A.* Pulling up the carbon ladder? Decarbonization, dependence, and third-country risks from the European carbon border adjustment mechanism // Energy Research & Social Science. 2021. 80. 102240.
8. *Böhringer C., Fischer C., Rosendahl K.E., Rutherford T.F.* Potential impacts and challenges of border carbon adjustments // Nature Climate Change. 2022. 12(1). P. 22.
9. IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories. 2006. Kanagawa, Japan.
10. *Davis S., Peters G., Caldeira K.* The Supply Chain of CO₂ Emissions // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2011. V. 108. №. 45. P. 18554.
11. *Boitier B.* CO₂ emissions production-based accounting vs consumption // Insights from the WIOD databases. Proceeding of WIOD Conference. Brussels. 2012
12. *Пискулова Н.А., Костюнина Г.М., Абрамова А.В.* Климатическая политика основных торговых партнеров России и ее влияние на экспорт ряда российских регионов // Всемирный фонд дикой природы (WWF). М.: 2013
13. "Газы парниковые (2014). Определение количества выбросов парниковых газов в организациях и отчетность. Руководство по применению стандарта ИСО 14064-1".
14. *Meshalkin V.P.* Current Theoretical and Applied Research on Energy- and Resource-Saving Highly Reliable Chemical Process Systems Engineering // Theor. Found. Chem. Eng. 2021. V. 55. № 4. P. 563. [*Мешалкин В.П.* Актуальные теоретические и прикладные исследования по инжинирингу энергоресурсосберегающих высоконадежных химико-технологических систем // Теор. осн. хим. технол. 2021. Т. 55. № 4. С. 399]
15. *Maimekov Z.K., Sambaeva D.A., Izakov J.B., Shaikieva N.T., Dolaz M., Kobyta M.* Concentration distribution of molecules and other species in the model system Fe–NaCl–Na₂S–H₂SO₄–H₂O at various temperatures of the electrocoagulation process // Theor. Found. Chem. Eng. 2023. V. 57. № 2. P. 205. [*Маймеков З.К., Самбаева Д.А., Изаков Ж.Б., Шайкиева Н.Т., Долаз М., Кобыта М.* Концентрационное распределение молекул и частиц в модельной системе: Fe–NaCl–Na₂S–H₂SO₄–H₂O при различных температурах процесса электрокоагуляции // Теор. осн. хим. технол. 2023. Т. 57. № 2. С. 218]
16. *Sambaeva D.A., Moldobaev M.B., Kemelov K.A., Maimekov Z.K.* Water is an effective additive to fuel oil to reduce the concentration of soot in the gas phase // Manas J. Eng. 2022. V. 10. № 2. P. 145
17. *Кемелов К.А., Молдобаев М.Б., Самбаева Д.А., Маймеков З.К.* Влияние воды в водотопливных эмульсиях на процессы снижения концентрации сажи в газовой фазе // Проблемы региональной экологии. 2016. № 4. С. 30.
18. *Молдобаев М.Б., Самбаева Д.А., Маймеков З.К.* Снижение концентрации сажи в газовой фазе на основе использования водотопливных эмульсий в катлоагрегатах типа КЕВ-4-14 // Инженер. 2015. № 9. С. 354
19. *Маймеков З.К., Самбаева Д.А., Молдобаев М.Б., Кемелов К.А.* Влияние воды в топливных эмульсиях на процессы образования и уменьшения концентрации сажи в газовой фазе // Изв. вузов. 2014. № 5. С. 8
20. *Самбаева Д.А., Молдобаев М.Б.* Модифицирование топлива в виде водотопливных эмульсий с целью снижения концентрации сажи в газовой фазе // Изв. КГТУ им. И. Раззакова. 2014. № 33. С. 399
21. *Маймеков З.К.* Научные основы оптимизации процессов сжигания жидкого топлива и рекарбонизации водно-солевых систем. Бишкек, 2015.
22. *Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Мусеев Г.К.* Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М.: Наука, 1982.
23. *Белов Г.В., Трусов Б.Г.* Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. М.: МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2013.