

Обратная задача кинетики при исследовании термохимической конверсии биомассы методами термогравиметрии

Баденко В.В., Козлов А.Н, Сидоров Д.Н.

Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева СО РАН

badenکو@isem.irk.ru

Была рассмотрена обратная задача кинетики, возникающая при проведении аналитических исследований конверсии альтернативных топлив. В рамках этой задачи предложен численный метод обработки данных эксперимента на установке термогравиметрического анализа, совмещенного с масс-спектрометрией, позволяющий получить кинетические коэффициенты, используемые для моделирования. Метод строится на использовании промежуточной величины, характеризующей объем выделения конкретного газообразного через данные масс-спектрометрии и включающей в себя все основные параметры эксперимента. Полученная характеристика используется для расчета энергии активации и предэкспоненциального множителя, по аналогии с общепринятыми методами вычисления кинетических коэффициентов [1]. В расчетах применяется приближение первого порядка реакции, а также приближения прямоугольных трапеций для интегрирования сигналов масс-спектров и метод скользящего среднего для исключения влияния шума в исходном сигнале. При рассмотрении двухстадийного выделения газообразных веществ расчет коэффициентов проводится для каждой стадии в отдельности. Методика была исследована на устойчивость и оценены погрешности, вносимые приближениями и ошибками.

Работа проводилась в рамках гранта Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-15-2022-1215) с использованием ресурсов ЦКП «Высокотемпературный контур» (проект № 13.ЦКП.21.0038).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. N.A. Liu, W. Fan, R. Dobashi, L. Huang. Kinetic modeling of thermal decomposition of natural cellulosic materials in air atmosphere // Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, Volume 63, Issue 2, 2002, Pages 303-325, ISSN 0165-2370, [https://doi.org/10.1016/S0165-2370\(01\)00161-9](https://doi.org/10.1016/S0165-2370(01)00161-9).