

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО СОВЕРШЕНСТВА ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА

А.С. Андреев, К.В. Аксенчик

Александр Сергеевич Андреев (ORCID 0000-0002-2244-1590), Константин Васильевич Аксенчик (ORCID 0000-0001-8096-0674)*

Кафедра химических технологий, Череповецкий государственный университет, пр. Луначарского, 5, Череповец, Российская Федерация, 162600

E-mail: asandreev@chsu.ru, kvaksenchik@chsu.ru*

В статье изложена разработка формализованной математической модели для количественной и качественной оценки термодинамического совершенства газового химического реактора. Реактор рассматривался как система энерготехнологическая, то есть в единстве преобразования вещества и энергии. Математическое моделирование и оценка термодинамического совершенства химического реактора обобщены на класс известных химически активных газовых систем, характерных для синтеза аммиака, окисления диоксида серы, синтеза метанола, окисления оксида азота и др. В качестве определяющих параметров при моделировании и оценке термодинамического совершенства химического реактора приняты равновесная степень превращения вещества и эксергия. Эти параметры являются функциями температуры и отражают противоборствующие тенденции процесса при ее изменении, оценка которых позволяет количественно определять нахождение максимума эксергии в координатах (E-T) при обосновании оптимальных температур проведения процесса. Апробация модели проведена на конкретном примере реактора окисления диоксида серы в производстве серной кислоты. Для компьютерного моделирования использовалась общедоступная среда программирования Octave. Разработанную математическую модель рекомендуется использовать при оперативной подготовке и оптимизации исходных данных на проектирование газовых реакторов. Математическая модель может быть дополнена разработанной авторами ранее математической моделью для количественной оценки текущего профиля степеней превращения целевого компонента химически активной реакционной газовой смеси по ходу ее движения в политропическом трубчатом реакторе типа «труба в трубе». После апробации и настройки модели на практике ее можно использовать в автоматизированной системе управления химическими реакторами, и в том числе при создании адаптивных систем управления.

Ключевые слова: энерготехнологическая система, химически активная газовая система, математическая модель, эксергия, термодинамическая степень превращения, энтальпия процесса, компьютерное моделирование

MATHEMATICAL MODELING AND EVALUATION OF THERMODYNAMIC PERFECTION OF A CHEMICAL REACTOR

A.S. Andreev, K.V. Aksenchik

Aleksandr S. Andreev (ORCID 0000-0002-2244-1590), Konstantin V. Aksenchik (ORCID 0000-0001-8096-0674)*

Department of Chemical Technologies, Cherepovets State University, Lunacharskogo ave., 5, Cherepovets, 162600, Russia

E-mail: asandreev@chsu.ru, kvaksenchik@chsu.ru*

The development of a formalized mathematical model for quantitative and qualitative assessment of the thermodynamic perfection of a gas chemical reactor is described in the article. The reactor was considered as an energy technology system, that is, in the unity of the transformation

of matter and energy. Mathematical modeling and evaluation of the thermodynamic perfection of a chemical reactor is generalized to a class of known chemically active gas systems characteristic of ammonia synthesis, sulfur dioxide oxidation, methanol synthesis, nitric oxide oxidation, etc. The equilibrium degree of transformation of a substance and exergy are taken as the determining parameters for modeling and evaluating the thermodynamic perfection of a chemical reactor. These parameters are functions of temperature and reflect the opposing tendencies of the process when it changes, the evaluation of which allows us to quantify the finding of the maximum exergy in the coordinates (E-T) when justifying the optimal temperatures of the process. The model was tested on a specific example of a sulfur dioxide oxidation reactor in the production of sulfuric acid. The public Octave programming environment was used for computer modeling. The developed mathematical model is recommended to be used in the operational preparation and optimization of the initial data for the design of gas reactors. The mathematical model can be supplemented with a mathematical model developed by the authors earlier for quantifying the current profile of the degrees of transformation of the target component of a chemically active reactive gas mixture in the course of its movement in a polytropic tubular reactor of the "pipe in a pipe" type. After testing and setting up the model in practice, it can be used in an automated control system for chemical reactors, including when creating adaptive control systems.

Key words: energy technology system, chemically active gas system, mathematical model, exergy, thermodynamic degree of transformation, enthalpy of the process, computer modeling

Для цитирования:

Андреев А.С., Аксенчик К.В. Математическое моделирование и оценка термодинамического совершенства химического реактора. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2024. Т. 67. Вып. 5. С. 114–120. DOI: 10.6060/ivkkt.20246705.6964.

For citation:

Andreev A.S., Aksenchik K.V. Mathematical modeling and evaluation of thermodynamic perfection of a chemical reactor. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 5. P. 114–120. DOI: 10.6060/ivkkt.20246705.6964.

ВВЕДЕНИЕ

При проектировании производства любая химико-технологическая система представляется в единстве преобразования вещества и энергии, поэтому ее следует рассматривать как *систему энерготехнологическую*. Для оценки таких систем в качестве определяющего параметра помимо равновесной степени превращения вещества в рассмотрение вводится эксергия, которая характеризует термодинамическое совершенство химического реактора как потенциальную *возможность преобразования генерируемой в системе энергии в электрическую*.

Оптимизацию исходных данных на проектирование энерготехнологических систем целесообразно проводить методом математического моделирования. При этом предполагается предварительная разработка формализованной математической модели и ее конкретизация в виде компьютерной моделирующей программы.

В литературе имеются многочисленные работы по моделированию и оптимизации конкретных химико-технологических процессов, химических реакторов и производств в целом, в том числе

с применением эксергетического анализа, например, по оценке эффективности риформинга метана [1, 2], производства водорода из углеводородного топлива [3, 4].

В предлагаемой статье математическое моделирование и оценка термодинамического совершенства химического реактора обобщены на класс известных химически активных газовых систем, характерных для синтеза аммиака, окисления диоксида серы, синтеза метанола, окисления оксида азота и др. Для указанных систем индивидуальные модели их термодинамического равновесия известны и описываются в обширном перечне литературных источников, например, в [5-11].

Целью данной работы являлась разработка формализованной математической модели для количественной и качественной оценки термодинамического совершенства газового химического реактора.

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Поскольку нас интересует *формализованная модель* термодинамического равновесия, пригодная для указанного класса газовых систем, то для ее разработки необходимо воспользоваться

теоретическими основами химической термодинамики, изложенными, например, в [12-15].

В качестве теоретической модели константы химического равновесия принимается уравнение изобары реакции:

$$\ln(K_f^*) = -\frac{\Delta G_T^0}{R \cdot T}, \quad (1)$$

где K_f^* – теоретическая константа химического равновесия; ΔG_T^0 – изменение потенциала Гиббса, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$; R – универсальная газовая постоянная, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$; T – температура, К.

Изменение потенциала Гиббса определяется моделью:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \cdot \Delta S_T^0, \quad (2)$$

где ΔH_T^0 – изменение энтальпии системы, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$;

ΔS_T^0 – изменение энтропии системы, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Стехиометрическую модель газовой химически активной системы целесообразно представить обобщенным уравнением:

$$\sum_{i=1}^n m_i \cdot A_i + IN = \sum_{k=1}^l r_k \cdot B_k + IN, \quad (3)$$

где m_i и r_k – соответственно стехиометрические коэффициенты исходных веществ A_i и конечных веществ B_k ; n, l – число исходных и конечных веществ, участвующих в реакции; IN – инертные вещества.

Для оценки термодинамических процессов в системах введем в рассмотрение обобщенную регрессионную модель изобарной мольной теплоемкости неорганических и органических веществ [13-16]:

$$c_p^0(T) = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + \frac{c'}{T^2}, \quad (4)$$

где a, b, c, c' – индивидуальные для вещества экспериментальные коэффициенты функции регрессии, значения которых приводятся в справочной литературе, например, [16].

Математическая модель изменения энтальпии газовой системы представляется формулой Кирхгоффа в развернутом виде:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \Delta c_p^0(T) dT =$$

$$= \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^T \left(\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{T^2} \right) dT, \quad (5)$$

$$\Delta H_{298}^0 = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot \Delta H_{298 k}^0) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot \Delta H_{298 i}^0), \quad (6)$$

где ΔH_{298}^0 – изменение энтальпии системы при стандартных условиях, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$; $\Delta H_{298 i}^0, \Delta H_{298 k}^0$ – справочные стандартные энтальпии образования исходных и конечных веществ, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$; $\Delta a, \Delta b, \Delta c, \Delta c'$ – коэффициенты для подынтегрального полинома, которые определяются разностями:

$$\Delta a = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot a_k) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot a_i), \quad (7)$$

$$\Delta b = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot b_k) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot b_i), \quad (8)$$

$$\Delta c = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot c_k) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot c_i), \quad (9)$$

$$\Delta c' = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot c'_k) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot c'_i). \quad (10)$$

где i, k – индексы исходных и конечных веществ соответственно.

Математическая модель изменения энтропии системы формируется аналогично модели изменения энтальпии (5), (6):

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 +$$

$$+ \int_{298}^T \left(\Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{T^2} \right) \cdot \frac{1}{T} \cdot dT, \quad (11)$$

$$\Delta S_{298}^0 = \sum_{k=1}^l (r_k \cdot S_{298 k}^0) - \sum_{i=1}^n (m_i \cdot S_{298 i}^0), \quad (12)$$

где $S_{298 i}^0, S_{298 k}^0$ – справочные стандартные энтропии исходных и конечных веществ, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Для оценки равновесного состава химически активной газовой системы необходимо ввести в рассмотрение формализованную модель константы равновесия химического превращения, включающую в качестве определяющего параметра степень превращения целевого исходного вещества.

По определению *термодинамическая константа равновесия* – это отношение произведений равновесных летучестей конечных веществ к произведению равновесных летучестей исходных веществ. При этом все летучести берутся в степенях, равных стехиометрическим коэффициентам участников реакции:

$$K_f = \frac{f_{B_1}^{r_1} \cdot f_{B_2}^{r_2} \cdot \dots \cdot f_{B_k}^{r_k}}{f_{A_1}^{m_1} \cdot f_{A_2}^{m_2} \cdot \dots \cdot f_{A_i}^{m_i}}, \quad (13)$$

где f_{A_i}, f_{B_k} – равновесные парциальные летучести исходных и конечных веществ, Па (далее для упрощения обозначим их как f_i, f_k , соответственно).

Равновесные парциальные летучести исходных и конечных веществ газовой системы пропорциональны их парциальным давлениям:

$$f_i = \bar{\Phi}_i \cdot P_i, f_k = \bar{\Phi}_k \cdot P_k, \quad (14)$$

где $\bar{\Phi}_i, \bar{\Phi}_k$ – коэффициенты парциальной летучести исходных и конечных веществ газовой системы; P_i, P_k – парциальные давления исходных и конечных веществ газовой системы, Па.

Воспользовавшись следствием из закона Дальтона, парциальное давление можно выразить через мольную долю вещества и общее давление в системе:

$$P_i = \frac{N_i}{N} \cdot P, P_k = \frac{N_k}{N} \cdot P, \quad (15)$$

где N_i, N_k – текущее количество исходных и конечных веществ, моль; N – текущее общее количество исходных, конечных и инертных веществ в системе, моль; P – общее давление в системе, Па.

С учетом приведенных зависимостей путем алгебраических преобразований константа химического равновесия представляется следующим уравнением:

$$K_f = \frac{\prod_{k=1}^l \bar{\Phi}_k^{r_k}}{\prod_{i=1}^n \bar{\Phi}_i^{m_i}} \cdot \frac{\prod_{k=1}^l N_k^{r_k}}{\prod_{i=1}^n N_i^{m_i}} \cdot \left(\frac{P}{N}\right)^{(\sum_{k=1}^l r_k - \sum_{i=1}^n m_i)}. \quad (16)$$

Первый множитель в уравнении является коэффициентом летучести газовой смеси и оценивает отклонение свойств изучаемой реальной газовой системы от идеальной:

$$K_l = \frac{\prod_{k=1}^l \bar{\Phi}_k^{r_k}}{\prod_{i=1}^n \bar{\Phi}_i^{m_i}}. \quad (17)$$

Второй множитель в уравнении характеризует равновесный состав системы:

$$K_N = \frac{\prod_{k=1}^l N_k^{r_k}}{\prod_{i=1}^n N_i^{m_i}}. \quad (18)$$

Третий множитель в уравнении учитывает влияние давления и изменения объема системы в процессе реакции. При этом текущее количество веществ в химически активной газовой системе представляется следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} N = N_0 + \frac{N_{0A} \cdot X_A}{m_A} \cdot \Delta n \\ N_0 = \sum_{i=1}^n N_{0i} + \sum_{k=1}^l N_{0k} + N_{IN} \\ \Delta n = \sum_{k=1}^l r_k - \sum_{i=1}^n m_i \\ N_i = N_{0i} - \frac{m_i}{m_A} \cdot N_{0A} \cdot X_A \\ N_k = N_{0k} - \frac{r_k}{m_A} \cdot N_{0A} \cdot X_A \end{cases}, \quad (19)$$

где N_0 – начальное общее количество исходных, конечных и инертных веществ в системе, моль; N_{0i} , N_{0k} – начальное количество исходных и конечных веществ, моль; N_{IN} – количество инертных веществ в системе, моль; Δn – изменение числа молей в реакции; m_A , N_{0A} , X_A – стехиометрический коэффициент, начальное количество и степень превращения целевого исходного вещества.

В результате обобщенная модель константы химического равновесия свелась к следующему уравнению:

$$K_f = K_l \cdot K_N \cdot \left(\frac{P}{N}\right)^{\Delta n}. \quad (20)$$

При итерационном поиске равновесной степени превращения в левую часть данного уравнения подставляется теоретическая константа химического равновесия K_f^* .

При оценке термодинамического совершенства процесса химического превращения на основе эксергетического анализа, основы которого подробно изложены в классической монографии В.М. Бродянского [17], авторы исходили из допущения того, что потери эксергии в химическом ре-

акторе складываются из потери термической эксергии выделяющейся тепловой энергии и потери химической эксергии, связанные с неравновесностью процесса химического превращения.

Для моделирования потерь эксергии в газовом реакторе из-за неравновесности процесса химического превращения можно воспользоваться следующим уравнением [18]:

$$\Delta E = T_0 \cdot \frac{\Delta G_T^0}{T}, \quad (21)$$

где ΔE – потери эксергии, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$; T_0 – температура окружающей среды, К.

При преобразовании веществ в реакторе химическая работа не производится, а химическое превращение сопровождается самопроизвольным процессом выделения тепловой энергии, оцениваемой изменением энтальпии системы. Оценку потенциальной возможности преобразования выделяющейся тепловой энергии в электрическую следует производить по известной из литературных источников модели Карно [19]:

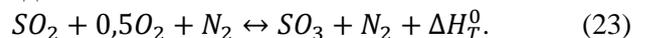
$$E = \Delta H_T^0 \cdot \left(1 - \frac{T_0}{T}\right), \quad (22)$$

где E – термическая эксергия, $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$.

В качестве подведения итога изложенному выше математическая модель для оценки термодинамического совершенства химического реактора представляется системой уравнений (1)–(22). Параметры, входящие в модель, пояснены по ходу ее разработки.

МОДЕЛИРОВАНИЕ, РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для примера проведена апробация модели для оценки термодинамического совершенства контактного аппарата для окисления диоксида серы. В качестве системы выступает химически активная смесь газов, описываемая обобщенной моделью:



Расход газовой смеси на входе реактора 100000 м³/ч, объемные концентрации ингредиентов SO_2 , O_2 , SO_3 , N_2 соответственно равны 8%, 10%, 0%, 82%. Моделирование проведено в удобной общедоступной среде программирования Octave [20] в диапазоне температур 400-600 °С.

На рис. представлена зависимость термодинамических параметров реактора от температуры процесса.

Максимум эксергии тепловой энергии химического превращения составляет 585 МВт, что соответствует оптимальной температуре проведе-

ния процесса 460 °С. Равновесная степень превращения SO_2 при этом достигает 97%, что совпадает с литературными данными [9].

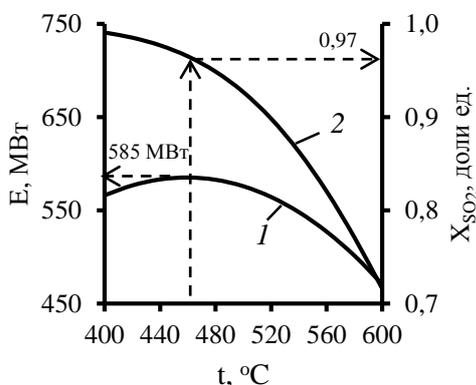


Рисунок. Термодинамические параметры химического реактора: 1 – эксергия тепловой энергии химического превращения; 2 – равновесная степень превращения SO_2

Figure. Thermodynamic parameters of a chemical reactor: 1 – exergy of thermal energy of chemical transformation; 2 – equilibrium degree of transformation of SO_2

Анализируя полученные результаты, можно констатировать, что равновесная степень превращения и эксергия являются основными параметрами, характеризующими термодинамическое совершенство химического реактора. Оба параметра являются функциями от температуры, которые определяют их как противоборствующие тенденции процесса. Действительно, для экзотермических процессов эксергия тепловой энергии с увеличением температуры возрастает, а равновесная степень превращения с увеличением температуры процесса уменьшается.

Наличие таких противоборствующих тенденций приводит к наличию максимума эксергии химического превращения на графике в координатах $(E-T)$. При проектировании химического реактора как энерготехнологической системы и оценке его термодинамического совершенства этот факт несомненно надо учитывать при обосновании оптимальных температур. В качестве практической рекомендации предлагаемая математическая модель может быть дополнена разработанной ранее математической моделью для количественной оценки текущего профиля степеней превращения целевого компонента химически активной реакционной газовой смеси по ходу ее движения в политрубочном трубчатом реакторе типа «труба в трубе», представленная в работе авторов [21].

ВЫВОДЫ

Модель рекомендуется использовать при оперативном компьютерном моделировании для

оценки термодинамического совершенства и оптимизации проектируемого газового химического реактора с возможностью необходимого варьирования исходных данных.

Модель способна к развитию и может конкретизироваться введением в рассмотрение математических моделей дополнительных функций.

После апробации и настройки модели на практике ее можно использовать в автоматизированной системе управления химическими реакторами, и в том числе при создании адаптивных систем управления.

Авторы при компьютерном моделировании использовали удобную общедоступную среду программирования Octave.

Приведенная апробация модели на конкретном примере газового реактора говорит о достаточном совпадении полученных результатов с известными данными из литературных источников.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

T – температура, К; T_0 – температура окружающей среды, К; R – универсальная газовая постоянная, $\frac{Дж}{моль \cdot К}$; A_i, B_k, IN – исходные, конечные и инертные вещества в стехиометрической модели газовой химически активной системы; n, l – число исходных и конечных веществ, участвующих в реакции; m_i, r_k – стехиометрические коэффициенты исходных и конечных веществ; $c_p^0(T)$ – изобарная мольная теплоемкость вещества, $\frac{Дж}{моль \cdot К}$; a, b, c, c' – индивидуальные для вещества экспериментальные коэффициенты в обобщенной регрессионной модели изобарной мольной теплоемкости веществ; $\Delta a, \Delta b, \Delta c, \Delta c'$ – коэффициенты для подынтегрального полинома в развернутой формуле Кирхгоффа; $\Delta H_{298 i}^0, \Delta H_{298 k}^0$ – справочные стандартные энтальпии образования исходных и конечных веществ, $\frac{Дж}{моль}$; ΔH_{298}^0 – изменение энтальпии системы при стандартных условиях, $\frac{Дж}{моль}$; ΔH_T^0 – изменение энтальпии системы при температуре T , $\frac{Дж}{моль}$; $S_{298 i}^0, S_{298 k}^0$ – справочные стандартные энтропии исходных и конечных веществ, $\frac{Дж}{моль \cdot К}$; ΔS_T^0 – изменение энтропии системы при температуре T , $\frac{Дж}{моль \cdot К}$; ΔG_T^0 – изменение потенциала Гиббса при температуре

$T, \frac{Дж}{\text{моль}}$; K_f^* – теоретическая константа химического равновесия; K_f – термодинамическая константа равновесия, выраженная через коэффициент летучести газовой смеси; $f_{A_i}, f_{B_k}(f_i, f_k)$ – равновесные парциальные летучести исходных и конечных веществ, Па; $\bar{\Phi}_i, \bar{\Phi}_k$ – коэффициенты парциальной летучести исходных и конечных веществ газовой системы; P_i, P_k – парциальные давления исходных и конечных веществ газовой системы, Па; P – общее давление в системе, Па; N_i, N_k – текущее количество исходных и конечных веществ, моль; N, N_0

– текущее и начальное общее количество исходных, конечных и инертных веществ в системе, моль; N_{0i}, N_{0k} – начальное количество исходных и конечных веществ, моль; N_{IN} – количество инертных веществ в системе, моль; Δn – изменение числа моль в реакции; m_A, N_{0A}, X_A – стехиометрический коэффициент, начальное количество и степень превращения целевого исходного вещества; E – термическая эксергия, $\frac{Дж}{\text{моль}}$; ΔE – потери эксергии, $\frac{Дж}{\text{моль}}$.

ЛИТЕРАТУРА

REFERENCES

- Zhang F., Zhu L., Rao D.** The evaluation of a methane autothermal chemical looping reforming experiment based on exergy analysis. *RSC Adv.* 2019. V. 9. P. 22032-22044. DOI: 10.1039/c9ra03315g.
- Durán F.J., Dorado F., Sanchez-Silva L.** Exergetic and Economic Improvement for a Steam Methane-Reforming Industrial Plant: Simulation Tool. *Energies.* 2020. V. 13(15). 3807. DOI:10.3390/en13153807.
- Farzin S., Salehi G.** Analyzing and Comparing Energy and Exergy of POXR and SMR Reactors for Producing Hydrogen from Methane Gas. *Gas Proc. J.* 2017. V. 5. N 1. P. 24-33. DOI: 10.22108/gpj.2017.78140.
- Khan M.N., Shamim T.** Energy and Exergy Analysis of a Power Plant Based on a Three Reactor Chemical Looping Reforming System. *Int. J. Therm. Environ. Eng.* 2016. V. 11. N 2. P. 125-130. DOI: 10.5383/ijtee.11.02.007.
- Русин В.Н., Тарчигина Н.Ф.** Технология связанного азота. М.: Изд-во МГОУ. 2009. 199 с.
- Воробьев Н.И.** Технология связанного азота и азотных удобрений. Минск: БГТУ. 2011. 216 с.
- Ахметов Т.Г., Ахметова Р.Т., Гайсин Л.Г., Ахметова Л.Т.** Химическая технология неорганических веществ. Кн. 1. С-Пб.: Лань. 2017. 688 с.
- Аксенчик К.В.** Химическая технология неорганических веществ. Череповец: ЧГУ. 2018. 141 с.
- Аксенчик К.В.** Технология серной кислоты. Череповец: Череповецкий гос. ун-т. 2017. 209 с.
- Общая химическая технология. Ч.1: Теоретические основы химической технологии. Под ред. И.П. Мухленова. М.: ИД "Альянс". 2009. 254 с.
- Ильин А.П., Кунин А.В.** Производство азотной кислоты. СПб.: Изд-во «Лань». 2013. 256 с.
- Кириллин В.А., Шейндлин А.Е., Сычев В.В.** Техническая термодинамика. М.: Изд-во МЭИ. 2016. 496 с.
- Гамбург Ю.Д.** Химическая термодинамика. М.: Лаборатория знаний. 2016. 240 с.
- Логина А.Ю.** Основы химической термодинамики. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2012. 88 с.
- Зуев А.Ю., Цветков Д.С.** Химическая термодинамика. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та. 2020. 183 с.
- Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. СПб.: "Иван Федоров". 2003. 240 с.
- Zhang F., Zhu L., Rao D.** The evaluation of a methane autothermal chemical looping reforming experiment based on exergy analysis. *RSC Adv.* 2019. V. 9. P. 22032-22044. DOI: 10.1039/c9ra03315g.
- Durán F.J., Dorado F., Sanchez-Silva L.** Exergetic and Economic Improvement for a Steam Methane-Reforming Industrial Plant: Simulation Tool. *Energies.* 2020. V. 13(15). 3807. DOI:10.3390/en13153807.
- Farzin S., Salehi G.** Analyzing and Comparing Energy and Exergy of POXR and SMR Reactors for Producing Hydrogen from Methane Gas. *Gas Proc. J.* 2017. V. 5. N 1. P. 24-33. DOI: 10.22108/gpj.2017.78140.
- Khan M.N., Shamim T.** Energy and Exergy Analysis of a Power Plant Based on a Three Reactor Chemical Looping Reforming System. *Int. J. Therm. Environ. Eng.* 2016. V. 11. N 2. P. 125-130. DOI: 10.5383/ijtee.11.02.007.
- Rusin V.N., Tarchigina N.F.** Fixed nitrogen technology. M.: Izd. MGOU. 2009. 199 p. (in Russian).
- Vorobiev N.I.** Fixed nitrogen and nitrogen fertilizers technology. Minsk: BGTU. 2011. 216 p. (in Russian).
- Akhmetov T.G., Akhmetova R.T., Gaisin L.G., Akhmetova L.T.** Chemical technology of inorganic substances. Book. 1. S-Pb.: Lan'. 2017. 688 p. (in Russian).
- Aksenchik K.V.** Chemical technology of inorganic substances. Cherepovets: CGU. 2018. 141 p. (in Russian).
- Aksenchik K.V.** Sulfuric acid technology. Cherepovets: Cherepovets gos. Univ. 2017. 209 p. (in Russian).
- General chemical technology. Part 1: Theoretical foundations of chemical technology. Ed. by I.P. Mukhlenov. M.: ID "Al'yans ". 2009. 254 p. (in Russian).
- Ilyin A.P., Kunin A.V.** Nitric acid production. S-Pb.: Lan'. 2013. 256 p. (in Russian).
- Kirillin V.A., Sheindlin A.E., Sychev V.V.** Technical thermodynamics. M.: MEI, 2016. 496 p. (in Russian).
- Hamburg Yu.D.** Chemical thermodynamics. M.: Laboratoriya znaniy. 2016. 240 p. (in Russian).
- Loginova A.Yu.** Fundamentals of chemical thermodynamics. M.: MGTU im. N. E. Bauman. 2012. 88 p. (in Russian).
- Zuev A.Yu., Tsvetkov D.S.** Chemical thermodynamics. Yekaterinburg: Izd. UrFU. 2020. 183 p. (in Russian).
- A brief reference of physico-chemical quantities. Ed. by A.A. Ravdelya and A.M. Ponomarevoj. SPb.: Ivan Fedorov. 2003. 240 p. (in Russian).

17. **Бродянский В.М.** Эксергетический метод термодинамического анализа. М.: Энергия. 1973. 296 с.
18. **Чечеткин А.В., Занемонетц Н.А.** Теплотехника. М.: Высш. шк. 1976. 344 с.
19. **Трубаев П.А.** Термодинамический и эксергетический анализ в тепло-технологии. М.: Инфра-Инженерия. 2019. 229 с.
20. **Алексеев Е.Р., Чеснокова О.В.** Введение в Octave для инженеров и математиков. М.: ALT Linux. 2012. 368 с.
21. **Андреев А.С., Аксенчик К.В.** Компьютерное моделирование и оценка возможности управления каталитическим процессом при политропическом режиме работы трубчатого реактора. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2023. Т. 66. Вып. 2. С. 120-127. DOI: 10.6060/ivkkt.20236602.6727.
17. **Brodyansky V.M.** Exergetic method of thermodynamic analysis. M.: Energiya. 1973. 296 p. (in Russian).
18. **Chechetkin A.V., Zanemonets N.A.** Heat engineering. M.: Vyssh. shk. 1976. 344 p. (in Russian).
19. **Trubaev P.A.** Thermodynamic and exergetic analysis in heat technology. M.: Infra-Inzheneriya. 2019. 229 p. (in Russian).
20. **Alekseev E.R., Chesnokova O.V.** Introduction to Octave for Engineers and mathematicians. M.: ALT Linux. 2012. 368 p. (in Russian).
21. **Andreev A.S., Aksenchik K.V.** Computer modeling and evaluation of the possibility of controlling the catalytic process in the polytropic mode of operation of a tubular reactor. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.].* 2023. V. 66. N 2. P. 120-127 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20236602.6727.

Поступила в редакцию 31.08.2023

Принята к опубликованию 12.01.2024

Received 31.08.2023

Accepted 12.01.2024