

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ**

# **ВІСНИК**

**Східноукраїнського  
національного університету  
імені ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ**

**№ 3 (244)  
2018**

**НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ**

Сєверодонецьк 2018

# ВІСНИК

СХІДНОУКРАЇНСЬКОГО  
НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ  
ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ

**№ 3 (244) 2018**

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ  
ЗАСНОВАНО У 1996 РОЦІ  
ВИХІД З ДРУКУ - ВІСІМНАДЦЯТЬ РАЗІВ НА РІК  
Засновник

Східноукраїнський національний університет  
імені Володимира Даля

Журнал зареєстровано  
в Міністерстві юстиції України  
Свідоцтво про державну реєстрацію  
серія КВ № 15607-4079ПР  
від 18.08.2009 р.

# VISNIK

OF THE VOLODYMYR DAHL EAST  
UKRAINIAN NATIONAL UNIVERSITY

**№ 3 (244) 2018**

THE SCIENTIFIC JOURNAL  
WAS FOUNDED IN 1996  
IT IS ISSUED EIGHTEEN TIMES A YEAR  
Founder

Volodymyr Dahl East Ukrainian National  
University

Registered by the Ministry  
of Justice of Ukraine  
Registration Certificate  
KB № 15607-4079ПР  
dated 18.08.2009

Журнал включено до Переліків наукових фахових видань України (Наказ МОН №1328 21.12.2015 р.), (Наказ МОН №515 16.05.2016 р.), в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук з технічних, економічних та історичних наук відповідно.

ISSN 1998-7927

## Головна редакційна колегія:

*Поркуян О.В.*, докт. техн. наук (головний редактор),  
*Голубенко О.Л.*, член-кор. Академії педагогічних наук,  
докт. техн. наук (заступник головного редактора),  
*Марченко Д.М.*, докт. техн. наук (заступник головного  
редактора),  
*Бузько І.Р.*, докт. екон. наук, (заступник головного  
редактора),

*Архипов О.Г.*, докт. техн. наук,  
*Глікін М.А.*, докт. техн. наук,  
*Горбунов М.І.*, докт. техн. наук,  
*Рач В.А.*, докт. техн. наук,  
*Рязанцев О.І.*, докт. техн. наук,  
*Смолій В.М.*, докт. техн. наук,  
*Соколов В.І.*, докт. техн. наук,  
*Стенцель Й.І.*, докт. техн. наук,  
*Суворін О.В.*, докт. техн. наук,  
*Татарченко Г.О.*, докт. техн. наук,  
*Чернецька-Білецька Н.Б.*, докт. техн. наук,  
*Харламов Ю.О.*, докт. техн. наук,  
*Даніч В.М.*, докт. екон. наук,  
*Заблоцька І.В.*, докт. екон. наук,  
*Костирко Л.А.*, докт. екон. наук,  
*Рамазанов С.К.*, докт. техн. наук, докт. екон. наук,  
*Чернявська Є.І.*, докт. екон. наук,  
*Овчаренко Є. Ю.*, докт. екон. наук,  
*Д'яченко Ю.Ю.*, докт. екон. наук,

*Koško A.*, zw., dr. hab,  
*Бровендер Ю.М.*, докт. іст. наук,  
*Бут О.М.*, докт. іст. наук,  
*Дацків І.Б.*, докт. іст. наук,  
*Дефорж Г.В.*, докт. іст. наук,  
*Довжук І.В.*, докт. іст. наук,  
*Залізняка Л.Л.*, докт. іст. наук,  
*Запорожченко Ю.В.*, докт. іст. наук,  
*Коропченко А.А.*, докт. іст. наук,  
*Кривоконь О.Г.*, докт. іст. наук,  
*Литвиненко Р.О.*, докт. іст. наук,  
*Михайлюк В.П.*, докт. іст. наук,  
*Моця О.П.*, член-кор. НАН України, докт. іст. наук,  
*Отрощенко В.В.*, докт. іст. наук,  
*Пекарчук В.М.*, докт. іст. наук,  
*Пилипчук О.Я.*, докт. біол. наук,  
*Тригуб О.П.*, докт. іст. наук,  
*Сапицька О.М.*, канд. іст. наук,  
*Фомін А.В.*, канд. іст. наук,  
*Новіков В.П.*, докт. хім. наук,  
*Кондратов С.О.*, докт. хім. наук,  
*Галстян Г.А.*, докт. хім. наук,  
*Галстян А.Г.*, докт. хім. наук,  
*Потапенко Е.В.*, докт. хім. наук,  
*Голосман Є.З.*, докт. хім. наук

**Відповідальний за випуск: к.т.н., доцент Кудрявцев С.О.**

Рекомендовано до друку Вченою радою Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (Протокол №8 від 24.06.2018 р.)

Матеріали номера друкуються мовою оригіналу.

© Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, 2018  
© Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, 2018

## ЗМІСТ

<b>Баранов І.О.</b> ФОРМУВАННЯ ОПТИМІЗАЦІЙНОЇ МОДЕЛІ ВИБОРУ ПАРАМЕТРІВ ТРАНСПОРТУВАННЯ ВОДОВУГІЛЬНОГО ПАЛИВА ПРОМИСЛОВИМ ГІДРОТРАНСПОРТОМ.....	7
<b>Блінова Н. К., Кравченко О.В.</b> СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ БІОЛОГІЧНОЇ ОЧИСТКИ СТІЧНИХ ВОД ТА ШЛЯХИ ЇХ ВИРІШЕННЯ.....	14
<b>Бродский А.Л.</b> ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИМЕРОВ И КОНТРПРИМЕРОВ В ПРЕПОДАВАНИИ МАТЕМАТИКИ .....	20
<b>Булгакова І.В.</b> ТЕХНОЛОГІЯ ТА МЕТОДИ РОЗРОБКИ 3D-ТУРІВ СОЦІАЛЬНИХ ОБ'ЄКТІВ МІСТА БАХМУТ .....	23
<b>Гликіна І.М., Гликін М.А., Кудрявцев С.А.</b> МЕТОДИКА СОЗДАНИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЯ.....	27
<b>Голубева С.М., Морнева М.О.</b> АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРИВОДОВ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЦЕПНЫХ КОНВЕЙЕРОВ .....	33
<b>Демчук І.М., Столярченко Г.С.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ ГІДРАЗИНУ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ РЕАКТОРІ З КОНДЕНСАТІВ СОКОВОЇ ПАРИ ВИРОБНИЦТВА КАРБАМІДУ .....	37
<b>Дьомін Р.Ю.</b> РОЗРАХУНКОВА ОЦІНКА ДИНАМІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ ШВИДКІСНОГО ВАГОНА .....	44
<b>Жидков А.Б., Шевкун Р.Ю., Литовка Я.О.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЕНЕРГОСПОЖИВАННЯ В КОМУНАЛЬНИХ ЗАКЛАДАХ .....	49
<b>Забірко І.І., Кудрявцев С.О., Леоненко С.В.</b> ВПЛИВ КОНЦЕНТРАЦІЇ КАТАЛІЗАТОРА НА КРЕКІНГ МАЗУТУ ЗА ТЕХНОЛОГІЄЮ АЕРОЗОЛЬНОГО НАНОКАТАЛІЗУ .....	55
<b>Золотарьова О. В.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ ПРОЦЕСУ ОДЕРЖІННЯ ХІМІЧНО ОСАДЖЕНОЇ КРЕЙДИ ВИСОКОЇ ЧИСТОТИ .....	59
<b>Коваленко Н. П.</b> УПАКОВКА НУКЛООНОВ В ЯДРАХ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	63
<b>Масуд Абдо-Аллах , Шипидченко М.В., Попов Е. В., Кульгіна З.П., Исак А. Д.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ АЛКОГОЛИЗА НА ОСНОВЕ 6-МЕТИЛУРАЦИЛ-5-СУЛЬФОХЛОРИДА И СПИРТОВ.....	68
<b>Мищенко С.О., Глікіна І.М., Глікін М.А.</b> СТВОРЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ ПЕРЕРОБКИ СКЛОВІСНИХ ВІДХОДІВ В РОЗПЛАВІ ТЕПЛОНОСІЯ .....	74
<b>Москалик В. М., Карпюк Л. В.</b> О ВЛИЯНИИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ ОБСТАНОВКИ В СЛОЕ ОРОШАЕМОЙ НАСАДКИ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ МАССООБМЕНА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ.....	78
<b>Небеснюк О.Ю., Никонова А.А., Хрипко С.Л., Никонова З.А.</b> ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ И СОЗДАНИЯ КАЧЕСТВЕННЫХ КОНТАКТНЫХ СИСТЕМ .....	83
<b>Пасічник А.М., Кутирев В. В., Мірошніченко С. В.</b> АНАЛІЗ СУЧАСНИХ ТЕХНОЛОГІЙ РЕАЛІЗАЦІЇ СИСТЕМ УПРАВЛІННЯ ТРАНСПОРТНОЮ ІНФРАСТРУКТУРОЮ .....	89

УДК 661.9:311.2

## МЕТОДИКА СОЗДАНИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ УГЛЯ

Гликина И.М., Гликин М.А., Кудрявцев С.А.

## METHOD OF CREATION OF THE COMPUTER'S MODEL OF CARRYING OUT THE CATALYTIC PROCESS OF STEAM COAL CONVERSION

Glikina Irene M., Glikin Marat A., Kudryavtsev Sergey A.

*В статье показано построение математической модели процесса паровой конверсии угля в системе моделирования ChemCad. Рассмотрено влияние основных параметров процесса: температура, расход угля и расход воды на выход газовых продуктов реакции. Проанализирована возможная скорость реакции осуществления процесса и обсуждены условия протекания процесса по технологии аэрозольного нанокатализа.*

**Ключевые слова:** паровая конверсия угля, компьютерная модель, ChemCad, аэрозольный нанокатализ

### 1. Введение

Для построения компьютерной модели мы выбрали программный комплекс ChemCad.

Программа ChemCad математически моделирует химико-технологических процессы для решения задач исследования и проектирования.

ChemCad имеет модульную структуру. Это позволяет составить химико-технологическую схему и осуществить ее расчет.

Одним из многочисленных сырьевых источников в Украине является каменный уголь.

Угольная промышленность Украины представлена главным образом предприятиями Донецкого, Львовско-Волинского каменноугольных и Днепровского бурогоугольного бассейна. Основной базой каменного угля Украины является Донецкий каменноугольный бассейн. Кризис осени 2013—2014 гг. оказал отрицательное влияние на состояние экономики страны. В 2015 году объём добычи коксующихся углей снизился на 1,6% — до уровня 39,76 млн т [1]. Газификацию твердого топлива можно представить как совокупность гетерогенных и гомогенных реакций. Наиболее желательными есть продукты реакции: CO, H<sub>2</sub> и CH<sub>4</sub>. Известно, что газообразную смесь синтез-газа (CO+H<sub>2</sub>) широко используют как сырье для многих синтезов. Природный каменный уголь имеет небольшие примеси, что зависит от месторождений.

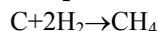
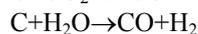
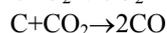
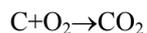
Представим усредненный состав каменного угля в таблице 1.

Таблица 1

### Усредненный состав каменного угля Украины [2]

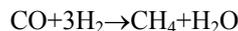
компонент	состав, %	удельная теплота сгорания, ккал/кг
С	72-96	6900 - 8600
S	до 1,6	
H	1,5-5,9	
O	1,4-16	
зола	2-45	
влага	3-15	

Если допустить, что твердое топливо состоит только из углерода, то можно предположить такие уравнения:



Эти уравнения описывают гетерогенную часть от процесса газификации углерода с образованием газообразных соединений. Следует учитывать, что из твердого топлива также получают продукты его термического разложения: диоксид углерода, вода, водород и продукты полукоксования (углеводороды), которые могут реагировать с раскаленным углеродом.

Гомогенную же составляющую процесса газификации можно описать следующими уравнениями:



И гомогенные, и гетерогенные реакции протекают при существенном изменении энергии системы. Основные из них, близкие к паровой конверсии угля, представим таблице 2.

Таблица 2

**Энтальпия некоторых реакций,  
протекающих при газификации топлив**

№	Реакция	$\Delta H$ , кДж/кмоль
1	$C+H_2O=CO+H_2$	+118577
2	$C+2H_2O=CO_2+2H_2$	+16258
3	$CO+H_2O=CO_2+H_2$	-42361
4	$C+2H_2=CH_4$	-83800

Способы и методы газификации твердого топлива, их преимущества и недостатки рассмотрим в таблице 3 [3].

При паровой конверсии метана активными катализаторами являются металлы VIII группы. Их ряд активностей выглядит следующим образом:  $Rh>Ru>Ni>Ir>Pt, Pd>>Co>Fe$ .

Типичным носителем для никелевых катализаторов является оксидная керамика:  $\alpha-Al_2O_3$ ,  $MgO$ ,  $MgAl_2O_4$ ,  $ZrO_2$ . Для повышения прочности применяют цементные связки, не содержащие  $SiO_2$ , чаще всего  $CaAl_2O_4$ . Оксид магния менее подвержен закоксовыванию, чем  $Al_2O_3$ .

В таблице 4 приведены условия протекания процесса газификации угля и встречаемые на пути трудности осуществления процесса.

Мы рассмотрели преимущества и недостатки процесса газификации угля и это позволило предположить возможность проведение процесса паровой конверсии угля в условиях технологии аэрозольного нанокатализа.

## 2. Цель исследования

Составить компьютерную модель при помощи комплекса ChemCad для осуществления каталитического процесса паровой конверсии угля при атмосферном давлении.

Рассмотреть влияние соотношения исходных реагентов на возможность протекания целевой реакции.

Для осуществления цели поставим перед собой следующие задачи исследования:

1. определить компьютерные модули программы, которые смогут описать исследуемый процесс;
2. составить схему в программном комплексе ChemCad;
3. осуществить расчет при различных входящих параметрах и провести анализ.

## 3. Методика и построение схемы модели

Перед началом работы установим единицы измерения. Для этого воспользуемся командой  $Format \Rightarrow Engineering Units$ , открываем панель единиц измерения и устанавливаем модифицированную систему единиц СИ (Alt Si).

Для исследования нашего процесса установим следующие единицы измерения: время, сек; масс/моль, кг; температура, С; давление, кПа; объемные величины,  $m^3$ .

Таблица 3

### Различные способы газификации угля

Фактор, который влияет на процесс	Способ	Преимущества	Недостатки
размер частиц угля - кусковой уголь	стационарный: кусковой уголь медленно опускается, газифицирующие агенты вводят снизу	хорошая теплопередача; снижаются расходные показатели; повышается общая эффективность процессов	протекает полукоксование угля с образованием продуктов (масло, смола, фенолы), загрязняющих газ
тип угля - спекающиеся угли	создают специальные устройства, которые находятся в движении, и вращающиеся решетки	возможность удаления золы из реакционного объема в твердом состоянии	изнашиваемость вращающейся решетки; большое время простоя; большая стоимость ремонтных работ
размер частиц угля – мелкий (пылевидный) уголь	уголь и газообразный газифицирующий агент подают в газификатор в одном направлении	небольшая стоимость угля; применение угля различной углефикации; не образуется побочных продуктов; возможность применения др. жидкого и газообразного углеородного топлива; осуществление газификации при повышенном давлении позволяет: повысить производительность газогенератора; снижение расходов на компримирование синтез-газа; повышается КПД газификации	для углей с высокой температурой плавления золы затруднен выбор материала для футеровки реакционной камеры; для газификации с жидким шлакоудалением: резкое снижение КПД при большом содержании золы и проведении процесса при высоких температурах; проблемы с непрерывным подводом пылевидного топлива, выгрузкой шлака через шлюз и достижение полного превращения топлива

Таблица 4

Условия протекания процесса конверсии ископаемого сырья [4]

Процесс	Условия	Трудности
паровая конверсия метана (паровой риформинг)	сильноэзотермический процесс; никелевый катализатор, 900-1000 °С, объемная скорость ≈1000 ч <sup>-1</sup> ; при паровой конверсии высших углеводородов проводят предконверсию на никелевом катализаторе при 350-550 °С.	высокая стоимость перегретого водяного пара; образование избыточных количеств CO <sub>2</sub> ; получаемый состав синтез-газа пригоден для синтеза аммиака, а не для синтеза метанола, диметилового эфира или углеводородов.
паровая конверсия СО (реакция водяного газа)	эндотермический процесс; 370-440 °С – высокотемпературная, 230-260 °С – низкотемпературная; железо-хромовооксидный катализатор, давление может достигать 3 МПа и выше, время контакта 3-9 с (с ростом давления до снижается 1 с); цинк-медный катализатор, температура до 250 С, давление до 1,3 МПа, время контакта около 1 с; одностадийная среднетемпературная конверсия СО (320-350 С) на медьсодержащем катализаторе на носителе.	железо-хромовооксидный катализатор чувствителен к сере; медьсодержащий катализатор более чувствителен к ядам и имеет меньшую термостабильность.
парциальное окисление метана, кислородный риформинг)	сильноэзотермический процесс; гомогенный некаталитический – при 1100-1300 °С наступает термодинамическое равновесие; при 750 °С, 1 атм и соотношении CH <sub>4</sub> :O <sub>2</sub> =2:1 получаем состав газа H <sub>2</sub> :CO=2:1. При снижении температуры получаемое соотношение выше двух. гетерогенный каталитический – 1 атм и выше 750 °С достигается равновесие системы. На практике процесс протекает при 3 МПа и 1000 °С без добавления пара. При введении пара конверсия метана увеличивается, снижается температура до 950 °С. При этом объемная скорость ≈10000 ч <sup>-1</sup> .	высокая стоимость кислорода (около 50% общей стоимости получения синтез-газа); взрывоопасность смеси; возможность разрушения катализатора за счет локальных перегревов; возможность образования углерода за счет газофазных реакций.
углекислотная конверсия метана (сухой риформинг)	сильно эндотермический процесс; никелевый катализатор на носителе; катализатор К. Фудзимото Ni <sub>0,03</sub> Mg <sub>0,97</sub> O работает при 700-900 °С и активен в течение 3000 ч (никель восстанавливается до металла); активный стабильный и селективный катализатор Ni или Co нанесенный на α-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> работает при 650-750 °С при равновесной конверсии; катализатор Ni/MgO-Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> составом 6% Ni-1% Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /MgO наиболее активен и обеспечивает равновесную конверсию при 700 °С; оксидно-марганцевая система 5% CaO-12% MnO/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> оказалась лучшей при 900-950 °С и не заакоксывается.	потеря активности при закоксовывании катализатора; при использовании катализатора К. Фудзимото дезактивация катализатора вызвана реокислением Ni до NiO; добавление даже незначительных количеств металлов платиновой группы к никелевому катализатору увеличивает его стоимость; получаемый состав синтез-газа пригоден для синтеза диметилового эфира или поликарбонатов.

Для модели необходимо выбрать из списка используемые компоненты. Сделать это можем командой ThermoPhysical ⇒ Component List, открывается панель «Выбор компонентов». У нас в процессе участвуют следующие компоненты: 48 Carbon Monoxide, 49 Carbon Dioxide, 64 Carbon, 1 Hydrogen, 62 Water.

В процессе присутствует твердая фаза, поэтому ее необходимо указать в ThermoPhysical ⇒ Pick Solids и выбрать компонент, который находится в твердом состоянии в системе.

Схема всегда начинается с входных и выходных потоков. Для этого в ChemCad предусмотрены модули: Feed (Питание) и Product (Продукт) соответственно. В нашем процессе входных потоков два: уголь (твердое вещество) и вода (жидкость переходящая в пар). Поэтому мы используем два потока Питание. Однако теплообменный модуль имеет один входящий поток, следовательно, чтобы организовать вход двух потоков в модуль Heat Exchanger #3 (Теплообменник), используем модуль MIXE (Смеситель).

Для исследования процесса, использующего гетерогенные фазы, применяют модуль GIBS (Реактор Гиббса) [5, 6].

На рис. 1 можно увидеть результат построения в ChemCad, согласно описанной методике.

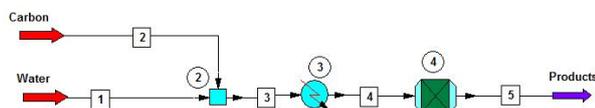


Рис. 1. Схема осуществления процесса паровой конверсии угля

Исследование будем проводить при атмосферном давлении изотермическом режиме. При этом изменяемыми параметрами возьмем температуру 600-800 °С, расход угля 5-60 кг/с, расход воды 5-60 кмоль/с.

#### 4. Результаты исследований и их обсуждение

При 800 °С были изучены режимы с различным соотношением C:H<sub>2</sub>O. Рассмотрены зависимости выхода газообразных продуктов реакции от массы подаваемого сырья (угля) (Рис. 2). Зависимость

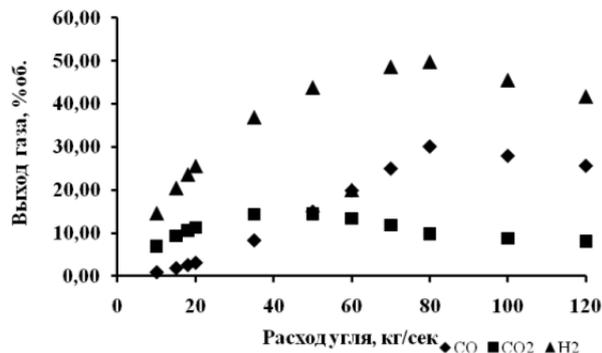


Рис. 2. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода угля ( $T=800\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{H}_2\text{O}}=10\text{ кмоль/с}$ )

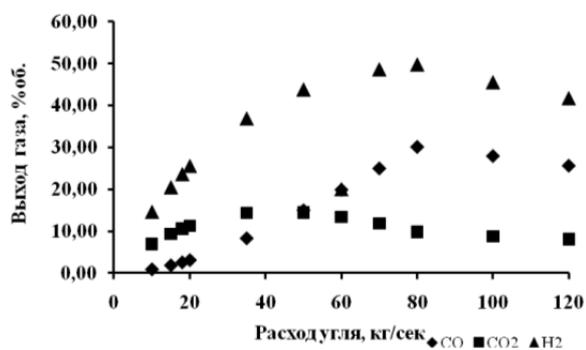


Рис. 4. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода угля ( $T=700\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{H}_2\text{O}}=10\text{ кмоль/с}$ )

выхода газообразных продуктов реакции от расхода подаваемого сырья (воды) показана на Рис. 3.

Отмечено, что в данных условиях можно предположить режим получения синтез-газа (CO+H<sub>2</sub>) с минимальным выходом CO<sub>2</sub> происходит с расходом угля 110 кг/сек. Это соответствует соотношению C:H<sub>2</sub>O=1:1,2. Однако при расходе угля в 120 кг/с уголь не полностью превращается в газообразные продукты. Поэтому этот расход принимаем за максимальную граничную величину расхода угля.

При 700 °С зависимость выхода газообразных продуктов реакции от массы подаваемого сырья (угля) предстала на Рис. 4, а зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода подаваемого сырья (воды) показана на Рис. 5. В данных условиях процесс каталитической паровой конверсии угля вероятен с расходом угля около 80 кг/с, и расходом воды 10 кмоль/с. Данные значения можно считать как оптимальные.

При 600 °С зависимость выхода газообразных продуктов реакции от массы подаваемого сырья (угля) предстала на Рис. 6, а зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода подаваемого сырья (воды) показана на Рис. 7. В данном случае процесс каталитической паровой конверсии угля вероятен с расходом угля около 50 кг/с, и расходом воды 10 кмоль/с.

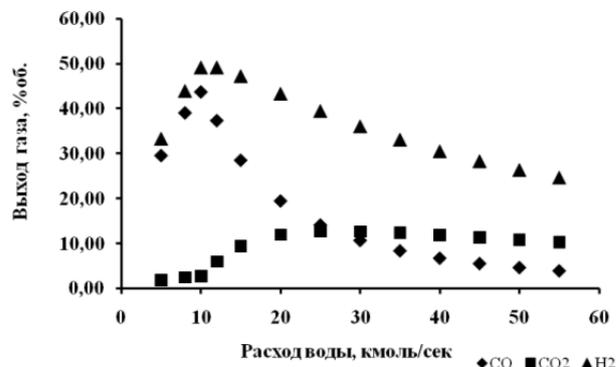


Рис. 3. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода воды ( $T=800\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{C}}=110\text{ кг/с}$ )

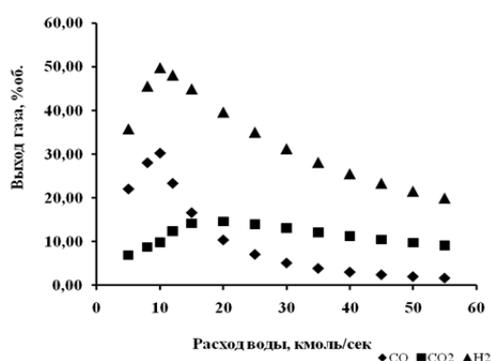


Рис. 5. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода воды ( $T=700\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{C}}=80\text{ кг/с}$ )

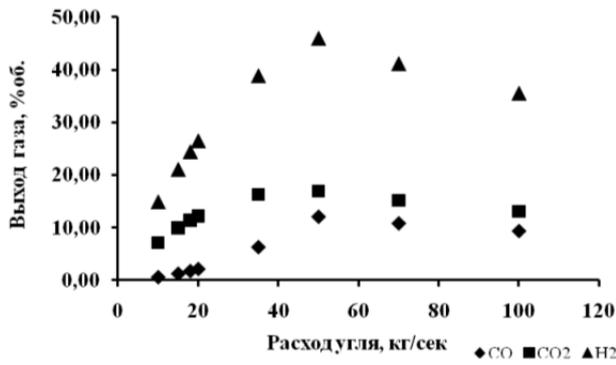


Рис. 6. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода угля ( $T=600\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{H}_2\text{O}}=10\text{ кмоль/с}$ )

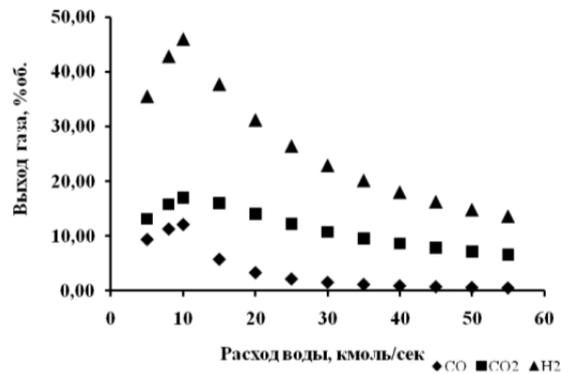


Рис. 7. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода воды ( $T=600\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{C}}=50\text{ кг/с}$ )

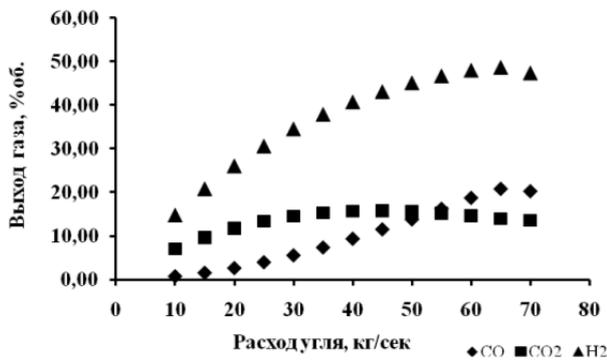


Рис. 8. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода угля ( $T=650\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{H}_2\text{O}}=10\text{ кмоль/с}$ )

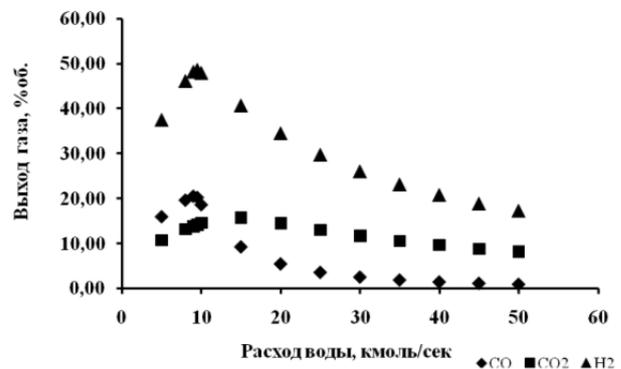


Рис. 9. Зависимость выхода газообразных продуктов реакции от расхода воды ( $T=650\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $V_{\text{C}}=60\text{ кг/с}$ )

Анализируя полученные данные видим, что оптимальным расходом воды можно считать 10 кмоль/с. Расход же по основному компоненту (углю) зависит от выбранного нами температурного режима. Так как большинство процессов в условиях аэрозольного нанокатализа протекают при 600-700 °C, то следует рассмотреть влияние выхода продуктов реакции в этом интервале подробнее. Результаты исследований представлены на Рис. 8 и 9.

Проанализировав результаты можно предположить, что оптимальными являются следующие величины: расход угля 60 кг/с, расход воды 9,5 кмоль/с, температура 650 °C. В условиях технологии аэрозольного нанокатализа применим концентрацию катализатора 5 г/м<sup>3</sup>. Катализатор принимаем оксид железа Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Рассмотрим скорости образования продуктов реакции от количества подаваемого угля (Рис. 10 – 12).

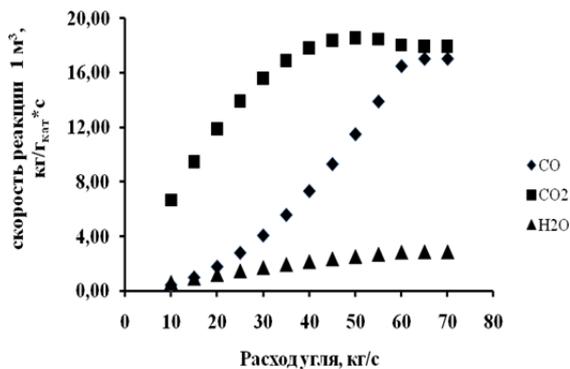


Рис. 10. Зависимость скорости реакции на массу катализатора в объеме реактора от количества угля

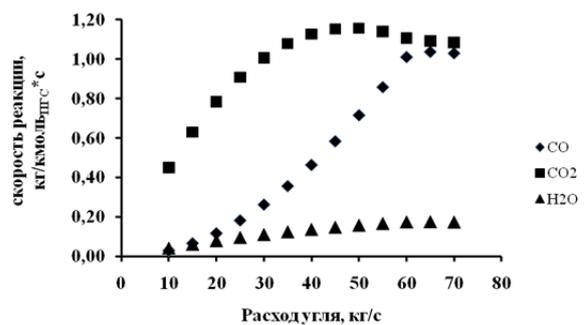


Рис. 11. Зависимость скорости реакции на объем парогазовой смеси от количества угля

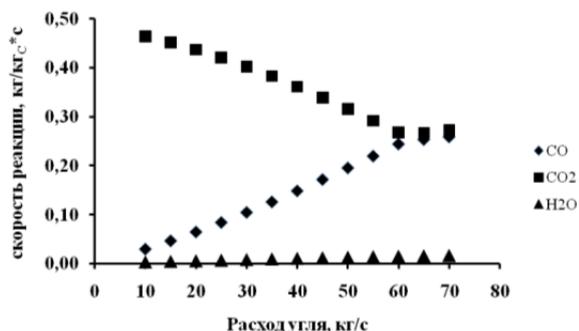


Рис. 12. Залежність швидкості реакції на масу вугля від подаваного його кількості реактор

Рис. 10 – 12 підтверджують, що оптимальними умовами може бути расход вугля 60 кг/с, расход оди 9,5 кмоль/с, температура 650 °С. Після реактора необхідно ставити очистку від CO<sub>2</sub> з використанням його в інших синтезах.

### Выводы

Визначено необхідні модулі для створення схеми процесу парової конверсії вугля.

Створено методика і схема при допомозі комплексу ChemCad для процесу парової конверсії вугля.

Проведено дослідження процесу в інтервалі температур 600-800 °С. Також розглянуто протікання процесу в інтервалі расходов вугля 5-70 кг/с і води 5-70 кмоль/с.

Виявлено оптимальні умови протікання процесу парової конверсії вугля: температура 650 °С, расход вугля 60 кг/с і расход води 9,5 кмоль/с. Розглянуто залежності швидкості реакції від кількості подаваного вугля.

### Литература

- <https://economics.unian.net/energetics/1233151-dobyicha-uglya-v-ukraine-za-god-sokratilas-v-16-raza.html> - Добыча угля в Украине за год сократилась в 1,6 раза, 11 января 2016.
- <http://www.uglya.net/kamennyiy-ugol-v-ukraine/> - Каменный уголь в Украине
- Химические вещества из угля. Под ред. И.В. Калечица. – М.:Химия, 1980. – 616 с.
- Крылов О.В. Гетерогенный катализ. – М.:Академкнига, 2004. – 679 с.
- Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad: Учебно-методическое пособие / Казан. гос. технол. ун-т. Сост.: Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов. – Казань, 2008. – 160 с.
- Савельев Н.И. Балансовые расчеты химико-технологических процессов: учеб. пособие. – Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та, 2014. – 136 с.

### References

- <https://economics.unian.net/energetics/1233151-dobyicha-uglya-v-ukraine-za-god-sokratilas-v-16-raza.html> - Dobycha uglya v Ukraine za god sokratilas' v 1.6 raza, 11 yanvarya 2016.
- <http://www.uglya.net/kamennyiy-ugol-v-ukraine/> - Kamennyiy ugol' na Ukraine
- Khimicheskie veschestva iz uglya. Pod red. I.V. Kalechitsa. – M.:Khimiya, 1980. – 616 s.
- Krylov O.V. Geterogeniy kataliza. – M.:Akademkniga, 2004. – 679 s.
- Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh sistem s ispol'zovaniem programi ChemCad: Uchebno-metodicheskoe posobie / Kazan. Gos. Tekhnol. Univ. Sost. : N.N. Ziyatdinov, T.V. Lapteva, D.A. Ryzhov. – Kazan', 2008. – 160 s.
- Savel'ev N.I. Balansovie raschety khimiko-tekhnologicheskikh protsesov : ucheb. posobie. – Cheboksary:Izd. Chuvash. Univ., 2014. – 136 s.

### Глікіна І.М., Глікін М.А., Кудрявцев С.О. Методика створення комп'ютерної моделі здійснення каталітичного процесу парової конверсії вугілля

У статті показано побудову математичної моделі процесу парової конверсії вугілля в системі моделювання ChemCad. Розглянуто вплив основних параметрів процесу: температура, витрата вугілля і витрата води на вихід газових продуктів реакції. Проаналізовано можливі швидкості реакції здійснення процесу і обговорені умови протікання процесу за технологією аерозольного нанокаталізу.

**Ключові слова:** парова конверсія вугілля, комп'ютерна модель, ChemCad, аерозольний нанокаталіз

### Glikina Irene M., Glikin Marat A., Kudryavtsev Sergey A. Method of creation of the computer's model of carrying out the catalytic process of steam coal conversion

The article shows the construction of a mathematical model for the process of steam coal conversion in the ChemCad simulation system. The influence of the main process parameters such as temperature, coal consumption and water flow on the yield of reaction gas products is considered. The possible rate of reaction of the process is analyzed and the conditions of the process proceeding are discussed using the technology of aerosol nanocatalysis.

**Key-words:** steam coal conversation, computer's model, ChemCad, aerosol nanocatalysis

**Глікіна Ірина Маратівна.** – доктор технічних наук, доцент, професор кафедри хімічної інженерії та екології, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, м. Северодонецьк, Україна; e-mail: irene555@i.ua

**Глікін Марат Аронович.** – доктор технічних наук, професор, професор кафедри хімічної інженерії та екології, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, м. Северодонецьк, Україна.

**Кудрявцев Сергій Олександрович** – кандидат технічних наук, доцент, декан факультету інженерії, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, м. Северодонецьк, Україна; e-mail: sergeykudryavtsevsn@gmail.com

Рецензент: д. т. н, проф. **Суворін О.В.**