

Глікіна І.М., Зубцов Є.І.

### Дослідження процесу парової конверсії вугілля в аерозолі каталізатора за допомогою математичних додатків

*В статті розглянуті основні джерела енергії України. Детальніше розглянуто одно з найстаріших джерел – вугілля. Розповсюдженість країною невелика, але використання вугілля є одним з перших джерел в енергетиці. Стаття розглядає процес парової конверсії вугілля. При чому розглянуто перебіг цього процесу не за всім знайомою технологією, а з використанням нової перспективної технології аерозольного нанокаталіза. Технологія дуже гарно зарекомендувала себе в процесах окиснення тому, що каталізатор у стані аерозолу набуває високої активності. Зараз розглядаємо новий напрям процес парової конверсії з отриманням синтез-газу як основного продукту. В статті представлена можливість планування перебігу процесу за допомогою програмних систем SciLab та Microsoft Excel. Система SciLab створена як помічник для тих, хто займається науковими дослідженнями. Там можливо не тільки скласти баланси перебігу хімічних процесів, а також є можливість математичної та статистичної обробки чи аналізу даних наукових досліджень. Система Microsoft Excel трохи простіша в використанні, але за своєю професійною функціональністю не відступає від інших систем. За допомогою цієї системи також можливо скласти розрахунки різного рівня складності, робити обробку та аналіз експериментальних даних різними методами статистичної обробки. Також система дозволяє розглядати графічні залежності, що дуже допомагає при визначенні впливу того чи іншого параметру хімічного процесу. Це дозволило передбачити вплив співвідношення сировини на отримання енергетичний продуктів для процесу парової конверсії вугілля. Також дозволило обрати параметри хімічного процесу, які зможуть дозволити йому наблизитись до оптимального режиму його перебігу. Розглянуто можливий аеродинамічний режим перебігу процесу парової конверсії вугілля за визначеними основними параметрами процесу. Це дозволило припустити принципову схему основного апарату для перебігу процесу парової конверсії вугілля за технологією аерозольного нанокаталізу. В результаті було виявлено, що процес парової конверсії вугілля за технологією аерозольного нанокаталіза має право на життя.*

**Ключові слова:** парова конверсія, каталізатор, аерозольний каталіз, вугілля, активність

### Актуальність дослідження

Зараз в Україні промисловість шукає шляхи до використання альтернативних джерел енергії. Найсильнішими конкурентами вугільній промисловості можливо враховувати вітряні та сонячні джерела. Далі слід мати на увазі згоряння деревини які відходів та безпосередньо побутових відходів. Також у агропромисловому комплексі є можливість отримувати енергію компостуванням відходів рослинного та тваринного походження. Повітряна енергетика є промисловістю, яка пов'язана з перетворенням кінетичних повітряних мас в електричну, механічну, теплову та інші. Загальний потенціал повітряної енергетики складає десь 1200 ТВт. Україна має значні ресурси повітряної енергії, однак вона залежить від природно-кліматичних характеристик. На формування клімату окремих районів країни впливає висота і напрямок розташування карпатських і кримських гір, Подільської, Волинської і Придніпровської піднесеностей, Донецького кряжу, близькості регіонів до Чорного і Азовського морів та інші фактори. Енергія повітря розповсюджена по території України дуже нерівномірно. На півдні країни потенціал її вище, ніж на півночі. Найбільш сприятливими регіонами можливо вважати: Крим, Карпати (Львівська, Івано-Франківська, Закарпатська, західна частина Чернівецької області), узбережжя Чорного і Азовського морів (Одеська, Ніколаєвська, Херсонська, Запорозьська та Донецька області), а також Луганська область. Площі територій, які підходять до спорудження ВЕС оцінюються у 8-9 тис. км<sup>2</sup>. Якщо використати 20-30% цих площ, то можливо побудувати ВЕС загальною потужністю 8-24 тис. МВт та генерувати 16-48 млрд. кВт\*год електроенергії на рік [1]

На Рис. 1 представлено найпотужніші ВЕС України, які побудували з 2011 до 2019 р. [2]

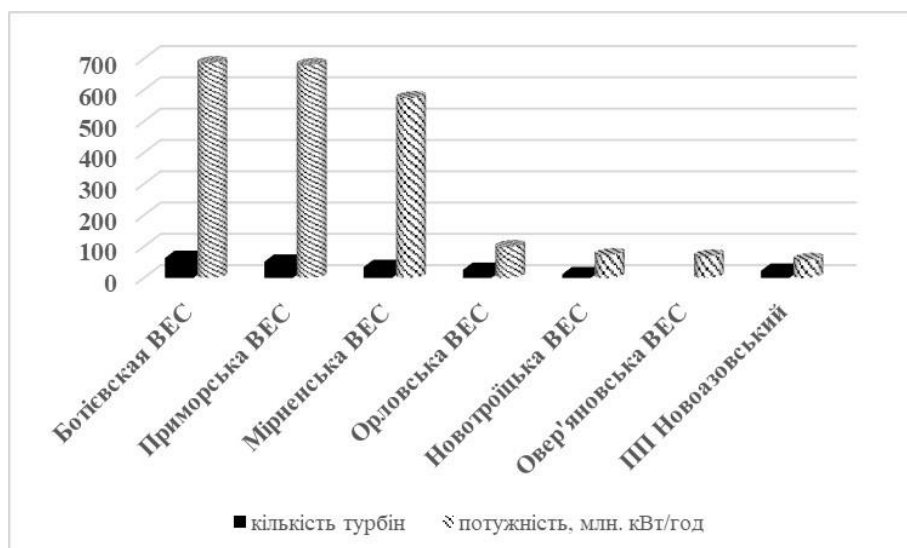


Рисунок 1 - Сім найпотужніших вітряних електростанцій України

Потужність й кількість ВЕС охоплюють тільки деякі райони країни. Тобто для інших регіонів потрібно шукати інші джерела енергії. Одним з таких джерел є вугілля, запаси якого розміщуються як на східній частині країни, так і на західній.

**Постановка проблеми.** Вугілля це один з найцінніших видів палива і сировини для хімічної та будь-якої промисловості. В середньому згорання 1 кг вугілля може дати до 27 МДж енергії. А з КПД 30% може дати 2 кВт\*год електроенергії. В Україні вугільні шахти в основному зосереджені в Донецькій та Луганській областях, але декілька є і в західній частині.

За статистикою на 2020-2021 рр. добування вугілля в країні збільшилось на 16,8% [3]. Але станом на 2022 р. кількість шахт країни різко зменшилась.

Дивлячись на ситуацію в країні та світі, такий цінний продукт необхідно використовувати повністю для потреб населення. З 2018 р. багато країн Європи закрили свої вугільні шахти. Але зараз в епоху кризи європейським країнам доведеться знову відкрити шахти та почати добування вугілля як найбільш цінного енергетичного продукту. Наприклад, у Англії шахта була відкрита у 1897 р. та пропрацювала до 1977 р. Тоді був поставлений рекорд по добуванню вугілля десь 4000 т. вугілля [4].

#### Теоретичний аналіз дослідження

Одним із розповсюджених способів переробки вугілля є процес його газифікація. Газифікацію твердого палива можливо представити як сукупність гетерогенних та гомогенних реакцій. Бажаними продуктами реакції є: CO, H<sub>2</sub> и CH<sub>4</sub>. Відомо, що газоподібна суміш синтез-газу (CO+H<sub>2</sub>) є самою розповсюдженою сировиною для більшості синтезів. В залежності від родовищ природне кам'яне вугілля містить невеликі домішки. В таблиці 1 представлений усереднений склад кам'яного вугілля. Питома теплота згорання вугілля складає біля 6900-8600 ккал/кг [5].

Таблиця 1.

Усереднений склад кам'яного вугілля України

компонент	C	S	H	O	зола	волога
склад, %	72-96	до 1,6	1,5-5,9	1,4-16	2-45	3-15

При розгляданні моделі процесу вводим припущення, що тверде паливо містить тільки вуглець. Тоді до основного можливо віднести наступне рівняння:



Ці рівняння описує гетерогенну частину процесу газифікації вуглецю з утворення газоподібних сполук. З твердого палива також получаются продукти його термічного розпаду. Тому гомогенну складову процесу газифікації можливо представити рівняннями:



Гомогенні та гетерогенні реакції перебігають при суттєвою зміною енергії системи. Основні з них, близькі до парової конверсії вугілля, представимо в таблиці 2.

Таблиця 2.

Ентальпія деяких реакцій, що перебігають при газифікації палив

№ реакції	Реакція	$\Delta H$ , 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

Способи і методи газифікації твердого палива, їх переваги й недоліки [6], фактори, які впливають на процес газифікації вугілля [7] дозволяють припустити перебіг процесу парової конверсії вугілля в умовах технології аерозольного нанокаталіза. Це дало можливість скласти SWOT-аналіз перебігу процесу парової конверсії в умовах аерозольного нанокаталіза.

**Сильні сторони (Strengths).** Застосування дрібнодисперсного каталізатора та подрібненого вугілля безпосередньо в реакторі покращують теплопередачу і ефективність перебігу процесу. Дозволяє перебіг процесу при атмосферному тиску.

**Слабкі сторони (Weaknesses).** Існують складності при поділу газоподібних продуктів реакції від продуктів полукоксування (смолоподібні); подача твердих компонентів в реактор з віброзрідженим шаром.

**Можливості (Opportunities).** Для покращення перебігу процесу конверсії планується детальне вивчення кінетики та каталітичної складової процесу, а також розглядання конструкцій реактора для перебігу конверсії в реакторі з віброзрідженим шаром.

**Погрози (Threats).** Технологія аерозольного нанокаталіза є унікальною та єдиною в світовій практиці. Зараз, українська промисловість має складнощі щоб здійснювати впровадження технології в економічну реальність, а також детальне вивчення та для інших процесів хімічної і нафтопереробної промисловості.

#### Ціль дослідження

Вивчити перебіг каталітичного процесу парової конверсії вугілля при атмосферному тиску за допомогою програми SciLab та Microsoft Excel. Проаналізувати вплив вихідних реагентів на можливість перебігу цільової реакції.

**Задачі дослідження.** Для здійснення даної цілі необхідно вирішити задачі дослідження:

1. вивчити методику складання програмного опису для розрахунку матеріального балансу в системі SciLab;
2. скласти програм розрахунку матеріального балансу процесу газифікації вугілля за допомогою програмного забезпечення SciLab та Microsoft Excel;
3. провести теоретичні дослідження матеріального балансу процесу за допомогою складених програм та провести аналіз результатів.

#### Метод складання програми розрахунку

Програмне забезпечення SciLab передбачений для інженерних та наукових обчислень. Це містить складання програми математичних розрахунків та оптимізації технологічних схем процесів, також є можливість побудови графічних залежностей.

SciLab має математичну структуру записи програми розрахунку. Це призводить до правильного складання програми, щоб здійснити розрахунок того чи іншого процесу.

Матеріальний баланс є головною складовою при опису технологічного об'єкта. Основою балансу для любого технологічного об'єкта є хімічне перетворення. Воно показує яким чином з вихідних матеріалів в результаті хімічних, масообмінних та інших процесів отримати вихідні потоки. На Рис. 2 представлена схема простого хімічного перетворення за яким вивчають процес за допомогою моделювання.

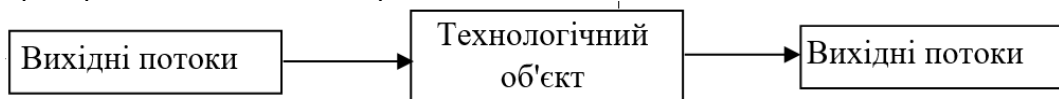


Рисунок 2 - Схема матеріальних потоків для підготовки до моделювання процесу

Складання загального матеріального балансу базується на використанні кількості речовин, що містять одиниці маси.

$$m_i = n_i * M_i \quad (5)$$

де  $m_i$  – маса речовини, кг;  $n_i$  – мольне співвідношення речовини, кмоль;  $M_i$  – молекулярна маса речовини, кг/кмоль.

Також при опису матеріальних потоків можуть знадобитися наступні знання [8]:

- масових або молярних концентрацій, щоб отримати кількість речовини в одиниці об'єму

$$\rho_i = \frac{m_i}{V_\Sigma}, \quad c_i = \frac{n_i}{V_\Sigma} \quad (6)$$

де  $\rho_i$  – масова концентрація, кг/м<sup>3</sup>;  $c_i$  – молярна концентрація, кмоль/м<sup>3</sup>;  $V_\Sigma$  - об'єм газової суміші, м<sup>3</sup>;

• масові або молярні частки компонентів в суміші

$$w_i = \frac{m_i}{m_\Sigma}, \quad x_i = \frac{n_i}{n_\Sigma} \quad (7)$$

де  $m_\Sigma$  – маса суміші речовин, кг;  $n_\Sigma$  – кількість усіх речовин в суміші, кмоль.

Для складання програми розрахунку матеріального балансу можуть знадобитися наступні оператори системи

[9]:

- текстові – для пояснення відповідної дії – команда «// текст»;
- робота зі змінними – надання дії визначної змінної – «ім'я змінної=значення виразу»;
- використання символу «;» в кінці виразу передає керування наступній командній строці програми;
- функції, типу «ім'я змінної=ім'я функції (змінна 1, змінна 2);»

### Складання програм розрахунку

При складанні програми розрахунку за допомогою SciLab слід пам'ятати, що усі математичні вирази записуються лінійно з описом дій символами програмування. У даній статті показуємо варіант розрахунку матеріального балансу з втіленням знань програмування. Для кращого сприйняття програми необхідно кожен дію супроводжувати текстом.

На Рис. 3 представлена програма розрахунку матеріального балансу процесу газифікації вугілля в умовах технології аерозольного нанокаталіза. Відмінністю від будь-якої іншої технології є додавання концентрації каталізатора та азоту для створення псевдозрідженого шару.

```

0001 //calculation of the material balance of coal steam reforming with aerosol catalyst
0002 //productivity G, kg/h*
0003 G=1000
0004 //three main reactions take place simultaneously: 1 - C+H2O=CO+H2, 2 - C+2H2O=CO2+2H2, 3 - CO
+H2O=CO2+H2*
0005 //the proportion of these reactions in the system, f*
0006 f1=0.7, f2=0.3, f3=0.5
0007 //ratio #H2O=1:10, s*
0008 s=10
0009 //coal density, rho kg/m3*
0010 rho=1300
0011 //molecular weight of substances, Mr, g/mol*
0012 MrH2O=18, MrCO=28, MrCO2=44, MrH2=2, MrC=12, MrN2=28
0013 //stoichiometric coefficients for reactions*
0014 n1=1, n1h2o=-1, n1co=1, n1h2=1, n2=1, n2co=-1, n2h2o=-2, n2co2=-1, n2h2=-2, n3co=-1, n3h2o=-1, n3co2=-1, n3h2=1
0015 //calculation of consumption of initial reagents according to reactions 1 and 2, G (kg/h), V(m3/h)*
0016 G1=0*f1,
0017 G2=0*f2,
0018 V1=0*G1/rho,
0019 V2=0*G2/rho,
0020 G1h2o=G1*f1*1,
0021 G2h2o=G2*f2*2,
0022 V1h2o=G1h2o*22.4/MrH2O,
0023 V2h2o=G2h2o*22.4/MrH2O,
0024 //water consumption required for the reaction, G(h2o, V(h2o)*
0025 G1h2o=G1*n1h2o*MrH2O/MrC,
0026 V1h2o=G1h2o*22.4/MrH2O,
0027 G2h2o=G2*n2h2o*MrH2O/MrC,
0028 V2h2o=G2h2o*22.4/MrH2O,
0029 //content in the vapor-gas mixture of substances*
0030 G1co=G1co*1/Mrco,
0031 V1co=G1co*22.4/Mrco,
0032 G2co2=G2*n2co2*Mrco2/MrC,
0033 V2co2=G2co2*22.4/Mrco2,
0034 G1h2-G1*n1h2*MrH2/MrC,
0035 V1h2-G1h2*22.4/MrH2,
0036 G2h2-G2*n2h2*MrH2/MrC,
0037 V2h2-G2h2*22.4/MrH2,
0038 //consumption of substances by reaction 3*
0039 G3co=G3co*f3
0040 V3co=G3co*22.4/Mrco,
0041 G3co2=G3co*n3co2*Mrco2/Mrco,
0042 V3co2=G3co2*22.4/Mrco2,
0043 G3h2-G3co*n3h2*MrH2/Mrco,
0044 V3h2-G3h2*22.4/MrH2,
0045 G1h2o-G3co*n3h2o*MrH2O/Mrco,
0046 V1h2o-G3h2o*22.4/MrH2O,
0047 Gresidueh2o=(G1h2o-G2h2o)-(G1h2o+G2h2o-G1h2o)
0048 Vresidueh2o=(V1h2o-V2h2o)-(V1h2o+V2h2o-V1h2o)
0049 //steam-gas mixture consumption*
0050 Vpgs=(V1co-V3co+V2co2+V1h2+V2h2+V3h2+Vresidueh2o),
0051 Gpgs=(G1co-G3co+G2co2+G1h2+G2h2+G3h2+Gresidueh2o),
0052 //nitrogen density, rho2, kg/m3*
0053 rho2=1.25
0054 //nitrogen consumption for fluidization*
0055 Vn2=Vpgs*1.05/(Vpgs)
0056 Gn2=Vn2*22.4/(MrN2)
0057 //catalyst concentration, g/m3*
0058 Coat=1
0059 Gcat=Coat*Vpgs/1000
0060 //compiling a balance sheet*
0061 //coming, kg/h*
0062 coal=G
0063 H2o=(G1h2o+G2h2o)
0064 H2=Gn2
0065 catalyst=Gcat
0066 //consumption, kg/h*
0067 CO=(G1co-G3co)
0068 CO2=(G2co2+G3co2)
0069 H2=(G1h2+G2h2+G3h2)
0070 H2Oresidue=H2O-Gresidueh2o
0071 H2=H2
0072 catalyst=Gcat

```

Рисунок 3 - Схема програми розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля в аерозолі каталізатора за допомогою програмного ресурсу Scilab

Далі надаємо програму розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля в аерозолі каталізатора за допомогою Microsoft Excel (Рис. 4).

	A	B	C	D	E	F
1	calculation of material balance of coal steam reforming					
2	productivity:					
3	G1=	1000	kg/h	95	%C	
4	reactions	C+H2O=CO+H2		1		
5		C+2H2O=CO2+2H2		2		
6		CO+H2O=CO2+H2		3		
7	the proportions of these reactions in system:					
8	f1=	0,7				
9	f2=	0,3				
10	f3=	0,5				
11	ratio C:H2O=1:z					
12	z=	10				
13	water consumption:					
14	G2=	10000	kg/h			
15	coal density:					
16	rc=	1300	kg/m3			
17	molecular weight:					
18	MrC=	12	g/mol			
19	MrCO=	28	g/mol			
20	MrCO2=	44	g/mol			
21	MrH2O=	18	g/mol			
22	MrH2=	2	g/mol			
23	stoichiometric coefficient:					
24	reaction 1:	n1C=		1		
25		n1H2O=		1		
26		n1CO=		1		
27		n1H2=		1		
28	reaction 2:	n2C=		1		
29		n2H2O=		2		
30		n2CO2=		1		
31		n2H2=		2		
32	reaction 3:	n3CO=		1		
33		n3H2O=		1		
34		n3CO2=		1		
35		n3H2=		1		
36	consumption of initial reagents according to reactions 1 and 2:					
37	carbon:	G1C=	655	kg/h	6,0	%mas
38		V1C=	0,51	m3/h		
39		G2C=	285	kg/h	2,6	%mas
40		V2C=	0,22	m3/h		
41	water:	G1H2O=	6650	kg/h	60,5	%mas
42		G2H2O=	2850	kg/h	25,9	%mas
43		V1H2O=	8,28	m3/h		
44		V2H2O=	3,55	m3/h		
45	water consumption required for the reaction:					
46	Gr1H2O=	997,5	kg/h	13,6	%mas	
47	Gr2H2O=	855	kg/h	11,7	%mas	
48	Vr1H2O=	1,24	m3/h			
49	Vr2H2O=	1,06	m3/h			

	A	B	C	D
50	content of gas out mixture by reactions 1 and 2:			
51				
52	G1CO=	1551,67	kg/h	
53	V1CO=	1,24	m3/h	
54	G1H2=	738,89	kg/h	
55	V1H2=	8,28	m3/h	
56	G2CO2=	1045	kg/h	
57	V2CO2=	0,532	m3/h	
58	G2H2=	633,33	kg/h	
59	V2H2=	7,09	m3/h	
60	consumption of substances by reaction 3			
61	G3CO=	775,83	kg/h	
62	V3CO=	0,62	m3/h	
63	G3CO2=	1219,17	kg/h	
64	V3CO2=	0,62	m3/h	
65	G3H2=	55,42	kg/h	
66	V3H2=	0,62	m3/h	
67	GrH2O=	498,75	kg/h	
68	VrH2O=	0,62	m3/h	
69	GresidueH2O=	7648,75	kg/h	
70	VresidueH2O=	8,90	m3/h	
71	coal residue:			
72	VresidueC=	767,46	m3/h	
73	GresidueC=	678,22	kg/h	
74	gas-vapour mixture consumption:			
75	Gvym=	12116,39	kg/h	
76	Vvym=	26,66	m3/h	
77	catalyst concentration in reactor:			
78	Ccat=	5	g/m3	
79	consumption of catalyst:			
80	Gcat=	0,13	kg/h	
81	conversion degree:			
82	XC=	10,58	%	
83	XCO=	6,40	%	
84	XH2=	11,78	%	
85	XCO2=	18,69	%	

Рисунок 4 - Схема програми розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля в аерозолі каталізатора за допомогою Microsoft Excel

Обидві програмні комплекси складаються з того, що необхідно створювати програму розрахунку. Для кращого сприйняття програми бажано супроводжувати кожну дію описом. Різниця все ж таки існує. В SciLab складаємо програму за правилами програмування та потім тільки переходимо до розрахунку. В системі Microsoft Excel складаємо програму розрахунку за допомогою посилань на значення, які ввели раніше. Також бажано супроводжувати кожну дію описом для кращого сприйняття програми.

### Результати розрахунку та обговорення

Припустимо, що процес парової конверсії перебігає наступним чином:



Процес перебігає в псевдозрідженому шарі, який підтримується потоком азоту та використовуємо аерозоль каталізатора в кількості до 5 г/м<sup>3</sup>. Це дозволяє знизити температуру процесу до 700-800 °С.

Вплив вихідних параметрів дозволить виявити можливість перебігу процесу та розглянути можливі режими його перебігу. Вивчення впливу подачі сировини на процес конверсії (Таблиця 3).

Таблиця 3.

Результати розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля (частка реакцій в системі (8):(9):(10)=70:30:50, C:H<sub>2</sub>O=1:8, режим ізотермічний)

прихід	кг/год	витрата	кг/год
вугілля	1000	CO	775,83
H <sub>2</sub> O	8000	CO <sub>2</sub>	2264,17
		H <sub>2</sub>	261,25
		H <sub>2</sub> O	5648,75
		C	564,38
Разом:	9000	Разом:	9514,38

Похибка складає 5,6%, що не заперечує при розрахунку балансів.

Далі розглянемо як впливає співвідношення води перетворення вуглецю. Згідно теоретичних досліджень виявлено, що близьким режимом до оптимального можливо вважати співвідношення C:H<sub>2</sub>O=1:8. При цьому співвідношенні та (8):(9):(10)=70:30:50 отримуємо не дуже високий вихід продуктів. Вихід синтез-газу незначний, тому спробуємо розглянути вплив співвідношення основних реакцій на її перебіг (Таблиця 4).

Таблиця 4.

Результати розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля (частка реакцій в системі  $C:H_2O = 1:8$ , режим ізотермічний), витрата вугілля 1000кг/год, витрата води 8400 кг/год

(8):(9):(10)	$X_C$ , %	$X_{CO}$ , %	$X_{CO_2}$ , %	$X_{H_2}$ , %
70:30:50	14,33	8,67	25,30	2,92
70:30:30	12,84	12,14	19,85	2,67
70:20:50	13,41	8,76	21,64	2,59
80:30:50	15,75	9,80	26,96	3,15
80:30:30	14,07	13,72	20,80	2,87
80:20:50	14,86	9,91	23,35	2,83

Згідно теоретичних досліджень виявлено, що близьким режимом до оптимального можливо вважати співвідношення реакцій в системі (8):(9):(10)= 70:30:30. Далі розглянемо вплив витрати вугілля на перебіг процесу (Таблиця 5).

Таблиця 5.

Результати розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля (частка реакцій в системі  $C:H_2O = 1:8$ , (8):(9):(10)= 70:30:30, режим ізотермічний),

Витрата вугілля, кг/год	Витрата води, кг/год	Продукти реакції, кг/год				
		CO	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	C
1000	8000	1086,17	1776,5	239,08	5848,25	632,33
5000	40000	5430,83	8882,5	1195,42	29241,25	3161,66
8000	64000	8689,33	14212,0	1912,67	46786,00	5058,65
800	6400	868,93	1421,2	191,27	4678,6	505,86
1500	12000	1629,25	2664,25	358,63	8772,38	948,5
2000	16000	2172,33	3553,0	478,17	11696,5	1264,6

Згідно теоретичних досліджень було виявлено такі характеристики, які можливо вважати близькими до оптимального режиму:  $C:H_2O = 1:8$ , (8):(9):(10)= 70:30:30, витрата вуглецю 2000 кг/год. Далі спробуємо визначити основні параметри аеродинамічного режиму, який можливо застосувати для реактору аерозольного нанокаталіза з псевдозрідженим шаром.

Таблиця 6.

Результати розрахунку матеріального балансу парової конверсії вугілля (частка реакцій в системі (8):(9):(10)=70:30:30,  $C:H_2O=1:8$ , режим ізотермічний)

прихід	кг/год	витрата	кг/год
вугілля	2000	CO	2172,33
H <sub>2</sub> O	16000	CO <sub>2</sub>	3553,00
		H <sub>2</sub>	478,17
		H <sub>2</sub> O	11696,5
		C	1264,66
Разом:	18000	Разом:	19164,66

Похибка складає 6,4%, що не заперечує при розрахунку балансів.

Для розрахунку характеристик аеродинамічного режиму необхідно визначити наступне: діаметр диспергуючого матеріалу 1,35 мм; щільність диспергуючого матеріалу 2500 кг/м<sup>3</sup>; витрата азоту для підтримки псевдозрідженого шару 1000 кг/год. В результаті розрахунку отримуємо діаметр реактора 2 м, висота реакційної зони 2 м, діаметр сепараційної зони 4,4 м, висота сепараційної зони 2 м. При цьому маємо пористість псевдозрідженого шару 0,54 та робоча швидкість 1,55 м/с. Зараз припустимо як буде виглядати реактор аерозольного нанокаталіза з псевдозрідженим шаром (Рис.5) для перебігу процесу парової конверсії вугілля.

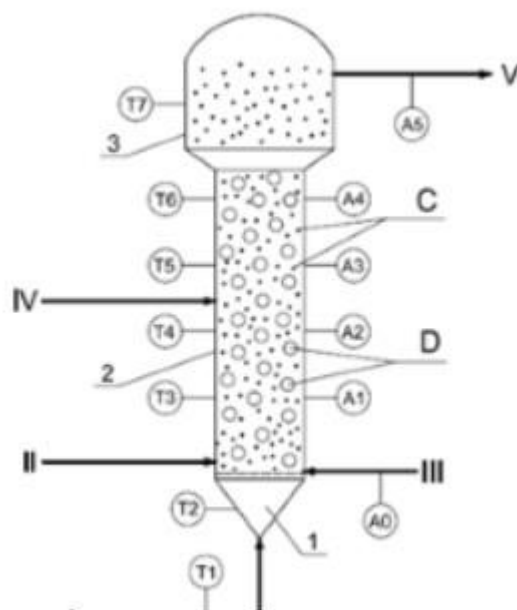


Рисунок 5 - Принципова схема реактору аерозольного нанокаталізу вугілля: 1. газорозподільча зона; 2. реакційна зона; 3. сепараційна зона; T1-T7 – термомпари; A0-A6 – аналізні потоки; C – частинки каталізатора; D – диспергуючий матеріал; Потоки: I – нітроген; II - сировина; III - каталізатор; IV – сировина (за необхідності); V – відходячі гази, непрореаговане вугілля та каталізатор.

При розробці технологічної схеми необхідно передбачити дозування вугілля у реактор, а також відділення його від частинок каталізатора після фільтру. Це необхідно для рециклу вугілля та каталізатору в реактор.

#### **Виводи.**

Проведено ознайомлення з програмним комплексом Scilab для передбачення можливих теоретичних досліджень процесів, обробки чи аналізу даних.

Розроблена методика складання програми розрахунку матеріального балансу процесу для Scilab та методики розрахунку матеріального балансу процесу для Microsoft Excel.

Проведені теоретичні дослідження можливості перебігу процесу парової конверсії вугілля, визначено вплив основних параметрів процесу (співвідношення сировини, співвідношення основних реакцій в системі, витрати сировини). Визначені параметри близькі до оптимальних та передбачено основні характеристики процесу при перебігу у реакторі з псевдозрідженим шаром за технологією аерозольного нанокаталіза.

Розглянутий тільки один процес перебігу хімічних перетворень, але є можливість також розглянути інші процеси. Показано, що в режимі on-line є можливість проводити тільки теоретичні дослідження. Але й це дозволяє робити деякі висновки з приводу можливості перебігу процесу та невеликих досліджень впливу основних параметрів.

#### **Література**

1. Ветроэнергетика Украины: потенциал и перспективы развития - Статьи :: Международный Электротехнический Журнал Электрик [Електронний ресурс] // Международный Электротехнический журнал Электрик. – Режим доступу: <http://electrician.com.ua/posts/1280> (дата звернення: 11.11.2022). – Назва з екрана.
2. GREEN ENERGY TECHNOLOGIES MARKET. – Режим доступу: <https://getmarket.com.ua/ru/news/top-7-samyh-moshnyh-ves-ukrainy#:~:text=Итак,%20по%20состоянию%20на%202019,установленной%20«зеленой»%20мощности%20Украины> (дата звернення: 11.11.2022). – Назва з екрана..
3. Украина за 5 месяцев увеличила добычу угля на 16,8% [Електронний ресурс] // Головна | Энергореформа. – Режим доступу: <http://reform.energy/news/ukraina-za-5-mesyatsev-uvelichila-dobychu-uglya-na-168-17936> (дата звернення: 11.11.2022). – Назва з екрана.
4. <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B1%D0%B5%D1%80%D0%B1%D0%B0%D1%80%D0%B3%D0%BE%D0%B9%D0%B4>.
5. <http://www.uglya.net/kamennyiy-ugol-v-ukraine/> - Каменный уголь в Украине
6. Химические вещества из угля / ред. И. Калечица. – Москва : Химия, 1980. – 616 с.

7. Glikina I. Coal gasification process as an alternative for oil and gas processing / I. Glikina, M. Glikin, Ye Zubtsov // Сучасні технології в науці та освіті / ред.: О. Б. Целіщев, Г. О. Татарченко, Г. М. Хорошун. – Сєверодонецьк, 2021. – С. 256–259
8. Савельев Н. Балансовые расчеты химико-технологических процессов : навч. посіб. / Н. Савельев. – Чебоксары : Чуваш. Ун-та, 2014. – 136 с.
9. Scilab: Решение инженерных и математических задач / Е. Р. Алексеев, О. В. Чеснокова, Е. А. Рудченко. — М. : ALT Linux ; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. — 260 с.

### References

1. Vetroenerhetyka Ukrainy: potentsyal u perspektyvy razvytyia - Staty :: Mezhdunarodnyi Elektrotekhnicheskyy Zhurnal Elektryk [Elektronnyi resurs] // Mezhdunarodnyi Elektrotekhnicheskyy zhurnal Elektryk. – Rezhym dostupu: <http://electrician.com.ua/posts/1280> (data zvernennia: 11.11.2022). – Nazva z ekrana.
2. GREEN ENERGY TECHNOLOGIES MARKET. – Rezhym dostupu: <https://getmarket.com.ua/ru/news/top-7-samyh-moshnyh-ves-ukrainy#:~:text=Ytak,%20po%20sostoianiyu%20na%202019,ustanovlennoi%20«zelenoi»%20moshchnosti%20Ukrainy> (data zvernennia: 11.11.2022). – Nazva z ekrana..
3. Ukraina za 5 mesiatsev uvelychyla dobychu uhlia na 16,8% [Elektronnyi resurs] // Holovna | Enerhoreforma. – Rezhym dostupu: <http://reform.energy/news/ukraina-za-5-mesyatsev-uvelichila-dobychu-uglya-na-168-17936> (data zvernennia: 11.11.2022). – Nazva z ekrana.
4. <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B1%D0%B5%D1%80%D0%B1%D0%B0%D1%80%D0%B3%D0%BE%D0%B9%D0%B4>.
5. <http://www.uglya.net/kamennyiy-ugol-v-ukraine/> - Камєнный ухол v Украйне
6. Khymycheskye veshchestva yz uhlia / red. Y. Kalechytsa. – Moskva : Khymyia, 1980. – 616 s.
7. Glikina I. Coal gasification process as an alternative for oil and gas processing / I. Glikina, M. Glikin, Ye Zubtsov // Suchasni tekhnolohii v nauksi ta osviti / red.: О. Б. Tselishchev, Н. О. Tatarchenko, Н. М. Khoroshun. – Sievierodonetsk, 2021. – S. 256–259

*The article considers the main sources of energy in Ukraine. Coal as one of the most ancient sources of energy is considered in more detail. The distribution of coal mines throughout the country is small, but the use of coal occupies one of the first places in the energy sector. The article considers the process of steam reforming of coal. At the same time, the course of this process is considered not according to the well-known technology, but according to a new promising technology of aerosol nanocatalysis. This technology has proven itself in oxidation processes, because the catalyst in the aerosol state becomes highly active. At the moment, we are considering a new direction - the process of steam reforming with the production of synthesis gas as the main product. The possibility of planning the process using the SciLab and Microsoft Excel software systems is presented in the article. The SciLab system was created as an assistant for those who are engaged in scientific research. There you can not only draw up balances of chemical processes, but there is the possibility of mathematical and statistical processing of scientific research data. Microsoft Excel is easier to use and similar in professional functionality to other systems. With the help of this system, it is also possible to make calculations of different levels of complexity, to analyze experimental data by various methods of statistical processing. The system allows you to view graphical dependencies that help determine the effects of any parameter of a chemical process. Due to this property, it is possible to foresee the influence of the ratio of raw materials on the production of energy products for the steam reforming of coal. It is possible to choose the parameters of the chemical process to determine the optimal mode of the process. The article considers the possible aerodynamic mode of the process of steam reforming of coal according to certain basic parameters of the process. This allows us to suggest a schematic diagram of the main apparatus for the process of steam reforming of coal using the technology of aerosol nanocatalysis. As a result, it was found that the process of steam reforming of coal using the technology of aerosol nanocatalysis has the right to exist.*

**Keywords:** steam reforming, catalyst, aerosol catalysis, coal, activity

**Глікіна І. М.** д. т. н., професор кафедри хімічної інженерії та екології Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, [irenne5555@ukr.net](mailto:irenne5555@ukr.net)

**Зубцов Є. І.** к. т. н., доцент кафедри хімічної інженерії та екології Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля [minning707@gmail.com](mailto:minning707@gmail.com)