https://doi.org/10.58805/ct.V.1(32)-6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СЛОЕВОЙ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЕЙ

Н.У. Нургалиев[1]✉, Н.Т. Смайлова[1], Ж.Т. Нұртай[1], Г.М. Нургазина[2]✉, А.Ж. Хамит[1]

[1] *Казахский университет технологии и бизнеса им. К.Кулажанова, Астана, Казахстан*
[2] *Международный университет Астана, Астана, Казахстан*
✉ *Корреспондент-автор: nurgaliev_nao@mail.ru, ast.gulnar@mail.ru*

Received: 19 July 2026
Accepted: 03 September 2026
Published: 30 September 2026
Citation: N.U. Nurgaliyev, et al. « МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СЛОЕВОЙ ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЕЙ ». Chemical Technology, vol. 1, no. 32, Sept. 2026, doi: https://doi.org/10.58805/ct.V.1(32)-6
License CC BY 4.0

В работе представлено математическое моделирование процесса слоевой газификации углей различных месторождений Казахстана для установления закономерностей влияния основных технологических факторов на формирование состава генераторного газа и показатели эффективности газификации. Исследование выполнено для углей Шубаркульского и Сарыадырского месторождений (пласты «Пятиметровый», «Надежный»), а также Майкубенского угольного бассейна. Разработанная математическая модель процесса позволяет рассчитывать состав генераторного газа, его теплотворную способность, выход сухого газа, коэффициент полезного действия газификации и определять влияние расходов воздуха, кислорода и водяного пара при паровоздушном и паро-кислородном дутье. Установлено, что увеличение расхода водяного пара обеспечивает рост объемного отношения H_2/CO до требуемых значений, однако сопровождается снижением концентрации CO, теплотворной способности генераторного газа и коэффициента полезного действия процесса. Показано, что паро-кислородное дутье способствует получению газа с более высокой теплотворной способностью, тогда как паро-воздушное дутье обеспечивает больший выход сухого генераторного газа. Среди исследованных образцов наиболее высокие технологические показатели получены для Шубаркульского угля, а наименьшая эффективность газификации установлена для угля Сарыадырского месторождения (пласт «Надежный»). Сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными подтвердило адекватность разработанной модели и возможность ее использования для прогнозирования характеристик процесса и выбора рациональных режимов газификации.

Ключевые слова: уголь, математическое моделирование, слоевая газификация, генераторный газ, паро-воздушное дутье, паро-кислородное дутье, выход газа.

КӨМІРДІ ҚАБАТТЫ ГАЗДАНДЫРУ ПРОЦЕСІН МОДЕЛЬДЕУ

Н.У. Нургалиев[1]✉, Н.Т. Смайлова[1], Ж.Т. Нұртай[1], Г.М. Нұрғазина[2]✉, А.Ж. Хамит[1]

[1] *Қ. Құлажанов атындағы Қазақ технология және бизнес университеті, Астана, Қазақстан*
[2] *Астана Халықаралық Университеті, Астана, Казахстан*
✉ *e-mail: nurgaliev_nao@mail.ru, ast.gulnar@mail.ru*

Жұмыста генераторлық газдың құрамын қалыптастыруға негізгі технологиялық факторлардың әсер ету заңдылықтарын және газдандыру тиімділігінің көрсеткіштерін анықтау үшін Қазақстанның әртүрлі кен орындарындағы көмірді қабатты газдандыру процесін математикалық модельдеу ұсынылған. Зерттеу Шұбаркөл және Сарыадыр кен орындарының («Пятиметровый», «Надежный» қабаттары), сондай-ақ Майкубен көмір бассейнінің көмірі үшін

жүргізілді. Процестің математикалық моделі генераторлық газдың құрамын, оның калориялық құндылығын, құрғақ газдың шығуын, газдандырудың пайдалы әсер ету коэффициентін есептеуге және бу-ауа және бу-оттегі үрлеуіндегі ауа, оттегі және су буы шығындарының әсерін анықтауға мүмкіндік береді. Су буының шығынын ұлғайту H_2/CO көлемдік қатынасының қажетті мәндерге дейін өсуін қамтамасыз ететіні анықталды, бірақ CO концентрациясының, генератор газының калориялық құндылығы мен процестің пайдалы әсер ету коэффициентінің төмендеуімен бірге жүреді. Бу-оттегі үрлеуі жоғары калориялы газды шығаруға ықпал ететіні көрсетілген, ал бу-ауа үрлеуі құрғақ генератор газының көбірек шығуын қамтамасыз етеді. Зерттелген үлгілердің ішінде Шұбаркөл көмірі үшін ең жоғары технологиялық көрсеткіштер алынды, ал газдандырудың ең төмен тиімділігі Сарыадыр кен орнындағы көмір үшін белгіленді («Надежный» қабаты). Модельдеу нәтижелерін эксперименттік деректермен салыстыру әзірленген модельдің сәйкестігін және оны процестің сипаттамаларын болжау, газдандырудың ұтымды режимдерін таңдау және өнеркәсіптік газдандыру қондырғыларын оңтайландыру үшін пайдалану мүмкіндігін растады.

Түйін сөздер: көмір, математикалық модельдеу, қабатты газдандыру, генераторлық газ, бу-ауа үрлеуі, бу-оттегі үрлеуі, газ шығымы.

MODELING OF THE FIXED-BED GASIFICATION PROCESS OF COALS

N.U. Nurgaliyev[1]✉, N.T. Smailova[1], Zh.T. Nurtai[1], G.M. Nurgazina[2]✉, A. Zh. Khamit[1]

[1] *Kazakh University of Technology and Business named after K.Kulazhanov, Astana, Kazakhstan*
[2] *Astana International University, Astana, Kazakhstan*
✉ *e-mail: nurgaliev_nao@mail.ru, ast.gulnar@mail.ru*

This paper presents a mathematical modeling study of the fixed-bed gasification process for coals from various deposits in Kazakhstan, with the aim of identifying patterns in how key technological factors influence the composition of the synthesis gas and gasification efficiency indicators. The study was conducted for coals from the Shubarkul and Saryadyr deposits (the “Pyatimetrovy” and “Nadezhny” seams), as well as the Maikuben coal basin. A mathematical model of the process has been developed that allows for the calculation of the composition of the generator gas, its calorific value, dry gas yield, and gasification efficiency, as well as the determination of the influence of air, oxygen, and steam flow rates during steam-air and steam-oxygen blowing. It has been established that increasing the steam flow rate raises the H_2/CO volume ratio to the required values; however, this is accompanied by a decrease in CO concentration, the calorific value of the generator gas, and the process efficiency. It has been shown that steam-oxygen blowing contributes to the production of gas with a higher calorific value, whereas steam-air blowing yields a greater amount of dry generator gas. Among the samples studied, the highest process performance indicators were obtained for Shubarkul coal, while the lowest gasification efficiency was observed for coal from the Saryadyr deposit (the “Nadezhny” seam). A comparison of the simulation results with experimental data confirmed the adequacy of the developed model and its applicability for predicting process characteristics and selecting rational gasification operating conditions.

Keywords: coal, mathematical modeling, fixed-bed gasification, producer gas, steam-air gasification, steam-oxygen gasification, gas yield.

Введение. Казахстан располагает значительными запасами угля, который продолжает играть важную роль в энергетическом балансе страны. Однако традиционное сжигание угля сопровождается высокими выбросами CO_2, оксидов серы и азота, а также твердых частиц, что приводит к ухудшению экологической обстановки и стимулирует поиск более эффективных и экологически безопасных технологий переработки твердых топлив.

Одним из наиболее перспективных решений является газификация угля, позволяющая преобразовывать органическую массу топлива в горючий газ, состоящий преимущественно из CO, H_2 и CH_4. Полученный газ может использоваться как энергетическое топливо или как синтез-газ для производства химической продукции. По сравнению с прямым сжиганием газификация обеспечивает более эффективное использование энергии топлива, снижение выбросов загрязняющих веществ и возможность интеграции с технологиями улавливания углерода.

Несмотря на значительный объем исследований, экспериментальное изучение процессов газификации требует сложного оборудования и значительных материальных затрат. В связи с этим особую актуальность приобретают методы математического моделирования, позволяющие исследовать влияние

состава угля, режима дутья и технологических параметров на температурное поле, кинетику процесса и состав генераторного газа без проведения большого числа дорогостоящих экспериментов.

Особый интерес представляет моделирование слоевой газификации углей, свойства которых существенно различаются в зависимости от месторождения и оказывают значительное влияние на эффективность процесса. Разработка адекватных математических моделей позволяет оптимизировать режимы газификации, повысить энергетическую эффективность процесса и обеспечить рациональное использование угольных ресурсов. Современные модели позволяют описывать сложные физико-химические процессы, протекающие в реакторе, а также прогнозировать состав генераторного газа и основные технологические параметры процесса. Математические модели газификации основываются на системе уравнений сохранения массы, энергии и импульса для газовой и твердой фаз. При этом учитываются процессы теплопередачи, диффузии компонентов газовой смеси, а также химические реакции, протекающие между газообразными реагентами и твердым углеродом топлива. В общем случае такие модели включают уравнения теплопроводности, уравнения массообмена для отдельных компонентов газовой смеси и кинетические уравнения химических реакций [1].

В зависимости от уровня детализации математического описания выделяют несколько основных типов моделей газификации твердых топлив [2]. Одним из наиболее распространенных подходов являются термодинамические равновесные модели, основанные на предположении, что химические реакции в реакторе протекают достаточно быстро и система стремится к термодинамическому равновесию. Такие модели широко применяются для оценки состава генераторного газа и энергетической эффективности процесса, поскольку они относительно просты и требуют ограниченного числа исходных параметров [3]. Другим распространенным типом являются кинетические модели, в которых учитываются реальные скорости химических реакций между углеродом и газифицирующими агентами (водяным паром, кислородом, диоксидом углерода). Эти модели позволяют более точно описывать процессы газификации, особенно в условиях, когда реакции протекают с конечной скоростью и система не достигает полного термодинамического равновесия [4].

Для инженерных расчетов и анализа работы промышленных газификаторов часто применяются одномерные стационарные модели, в которых слой топлива рассматривается как система зон с различными температурами и химическими реакциями. Такие модели представляют собой систему уравнений тепломассопереноса между неподвижным слоем топлива и движущимся потоком газа, с учетом выхода летучих веществ, испарения влаги и реакций газификации углерода [5]. В более сложных исследованиях применяются нестационарные модели, позволяющие анализировать динамику процессов в газификаторе при изменении технологических режимов [6]. Эти модели используются для изучения переходных процессов, движения фронта горения и распространения температурных волн в слое топлива [7].

Современное развитие цифровых технологий привело к широкому применению методов численного моделирования на основе вычислительной гидродинамики. Такие модели позволяют учитывать пространственное распределение температуры, скорости газового потока и концентраций компонентов, а также моделировать сложные процессы взаимодействия газовой и твердой фаз в газификационных реакторах различной конструкции [8]. В ряде исследований газификатор рассматривается как система последовательно соединенных реакционных зон или как совокупность реакторов идеального смешения, что позволяет упростить математическое описание процесса и использовать такие модели для инженерных расчетов и оптимизации технологических параметров [9].

Таким образом, существующие математические модели газификации позволяют описывать основные физико-химические процессы, протекающие в газификаторе, и прогнозировать влияние различных технологических факторов на характеристики процесса. Однако, несмотря на значительный прогресс в области математического моделирования, вопросы, связанные с учетом реальных свойств углей различных месторождений, оптимизацией режимов газификации и повышением энергоэффективности процесса, остаются актуальными.

Целью настоящей работы является математическое моделирование слоевой газификации (в неподвижном слое) углей различных месторождений Казахстана с анализом влияния основных технологических параметров на состав генераторного газа и эффективность процесса.

Материалы и методы. В качестве объектов исследования были выбраны угли Шубаркульского

и Сарыадырского месторождений (пласты «Пятиметровый», «Надежный»), а также Майкубенского угольного бассейна (далее- угли Шубаркуль, Сарыадыр и Майкубен соответственно).

В ходе исследования среди различных методов расчета был выбран метод Доброхотова Н.Н., который используется при расчетах слоевой газификации каменных и бурых углей, и впоследствии усовершенствовался [10]. Основным результатом расчета является определение состава и выхода генераторного газа при различных технологических режимах газификации, отличающихся расходами воздуха, кислорода и водяного пара, а также соотношением H_2/CO (от 1 до 2).

В данном методе расчет ведется отдельно по обеим стадиям: а) стадии сухого разложения без доступа воздуха (в верхней части газификатора) и
б) собственно процесса газификации (в нижней части генератора). При этом, исходя из практических данных (полученных ранее экспериментальным путем исследователями), задаются распределением содержащихся в топливе углерода, кислорода и водорода между компонентами газа (*CO, H_2, CH_4, CO_2, H_2O* и др.). Затем подсчитывают количество *CO, H_2, CO_2 и H_2O* в газе, полученном по основному генераторному процессу в нижней части газификатора. Для определения количества каждого из этих компонентов решают систему уравнений балансов для углерода, водорода, кислорода (для воздушного и кислородного дутья), а также уравнение константы равновесия [11]:

При данном расчете газификации угля использовали основные уравнения реакций:

$$C + O_2 \Leftrightarrow \mathrm{CO_2}$$
$$\Delta H = -406.4 \text{ кДж/моль} \quad (1)$$

$$\mathrm{CO_2} + C \Leftrightarrow 2\ \mathrm{CO}$$
$$\Delta H = 160.1 \text{ кДж/моль} \quad (2)$$

$$H_2O + C \Leftrightarrow H_2 + \mathrm{CO}$$
$$\Delta H = 118.6 \text{ кДж/моль} \quad (3)$$

$$\mathrm{CO} + H_2O \Leftrightarrow \mathrm{CO_2} + H_2$$
$$\Delta H = -41.0 \text{ кДж/моль} \quad (4)$$

$$C + 2H_2 \Leftrightarrow \mathrm{CH_4}$$
$$\Delta H = -83.8 \text{ кДж/моль} \quad (5)$$

$$2H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2H_2O$$
$$\Delta H = -482.2 \text{ кДж/моль} \quad (6)$$

$$2C + O_2 \Leftrightarrow 2\ \mathrm{CO}$$
$$\Delta H = -246.4 \text{ кДж/моль} \quad (7)$$

Уравнение константы равновесия

$$\frac{\mathrm{CO} \cdot H_2O}{\mathrm{CO_2} \cdot H_2} = K_\mathrm{p} \quad (8)$$

Константу равновесия K_p из уравнения (5) определяли по формуле:

$$\lg K_\mathrm{p} = -\frac{2203.24}{T} - 5.1588 \cdot 10^{-}5T - 2.5426 \cdot 10^{-}7T^2 + 7.461 \cdot 10^{-}11T^3 + 2.3 \quad (9)$$

Теплотворную способность газа $Q_г$ и коэффициент полезного действия газификации (КПД) $H_г$ рассчитывали по известным формулам [11]:

$$Q_\mathrm{г} = 0.01 \cdot \left(n_C Q_C + n_{\mathrm{H_2}} Q_{\mathrm{H_2}} + n_{\mathrm{CH_4}} Q_{\mathrm{CH_4}} + n_{\mathrm{H_2S}}\ Q_{\mathrm{H_2S}}\right) \quad (10)$$

$$\eta_\mathrm{г} = \frac{V_\mathrm{г} Q_\mathrm{г}}{V_\mathrm{y} Q_\mathrm{y}} \cdot 100\% \quad (11)$$

где n_C, n_{H2}, n_{CH4}, n_{H2S} – концентрации компонентов CO, H_2, CH_4, H_2S (об. %) в газе; Q_C, Q_{H2}, Q_{CH4}, Q_{H2S} – соответственно теплотворные способности компонентов CO, H_2, CH_4, H_2S (кДж/м^3); $V_г$ – общее количество газа (м^3); $Q_г$ и Q_y – теплотворные способности газа (кДж/м^3) и угля (кДж/кг); V_y – количество газифицируемого угля (кг).

Реализация расчета по данной методике с учетом уравнений (1)-(11) осуществляли с помощью программного обеспечения MATLAB, предназначенной для численного моделирования и решения инженерных задач. Компьютерный расчет в данной модели проводился в двух режимах, в которых в качестве дутья использованы следующие газовые реагенты: 1) водяной пар и воздух (паро-воздушное дутье); 2) водяной пар и кислород (паро-кислородное дутье).

Расход водяного пара при моделировании варьировали таким образом, чтобы объемное соотношение H_2/CO в генераторном газе находилось в диапазоне от 1 до 2. Это обусловлено тем, что указанный

диапазон соотношений широко используется при получении синтез-газа, предназначенного для последующего синтеза метанола, альдегидов, алифатических углеводородов и других химических продуктов. Полученные результаты моделирования позволяют определить рациональные технологические параметры процесса газификации, обеспечивающие получение генераторного газа, пригодного как для использования в качестве энергетического топлива, так и в качестве сырья для последующего химического синтеза.

Результаты и их обсуждение. Для проведения моделирования использованы характеристики процесса слоевой газификации углей Шубаркуль, Майкубен и Сарыадыр, представленные в таблице 1.

Таблица 1 – Характеристики газифицируемых видов топлив

Топливо (месторождение)	Состав угля (на рабочую массу), %								Теплота сгорания, (ккал/кг)	
									высшая	низшая
	W^r_t	A^r	V^{daf}	C^r	O^r	H^r	N^r	S^r	$Q^r_в$	$Q^r_н$
Шубаркуль	11,42	2,76	57,48	66,78	12,75	4,63	1,37	0,29	6435	6127
Майкубен	9,50	13,00	49,99	57,2	15,1	3,87	0,78	0,55	5416	5150
Сарыадыр («Пятиметровый»)	2,56	19,71	50,54	64,73	7,55	4,29	0,77	0,39	6104	5831
Сарыадыр «Надежный»	2,94	46,47	27,68	40,71	6,56	2,66	0,39	0,27	3932	3771

Примечание: W^r_t и A^r – влажность и зольность угля (на рабочую массу); V^{daf} – содержание летучих веществ в угле; C^r, O^r, H^r, N, S^r – концентрации углерода, кислорода, водорода, азота, серы соответственно (на рабочую массу).

На рисунках 1-4 приведены зависимости концентрации основных компонентов газа (сухого) от расхода водяного пара (на 1 кг угля). Обозначения на рисунках: CO (п-в), H_2 (п-в), CH_4 (п-в), CO_2 (п-в) – компоненты газа при паро-воздушном дутье (п-в-дутье) (отмечены синим цветом); CO (п-к), H_2 (п-к), CH_4 (п-к), CO_2 (п-к) – компоненты газа при паро-кислородном дутье (п-к-дутье) (отмечены красным цветом).

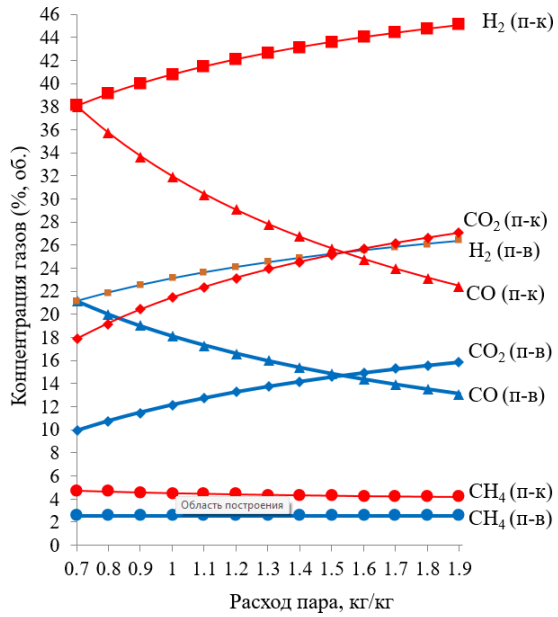


Рис. 1 - Зависимость концентрации компонентов газа из Шубаркульского угля от расхода водяного пара

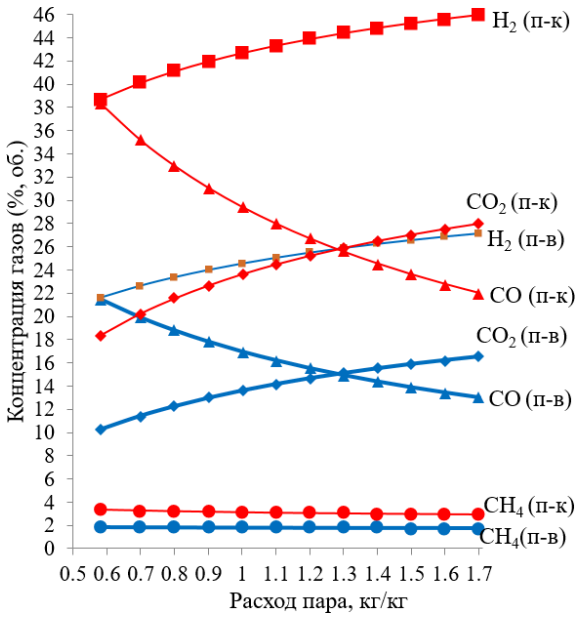


Рис. 2 - Зависимость концентрации компонентов газа из Майкубенского угля от расхода водяного пара

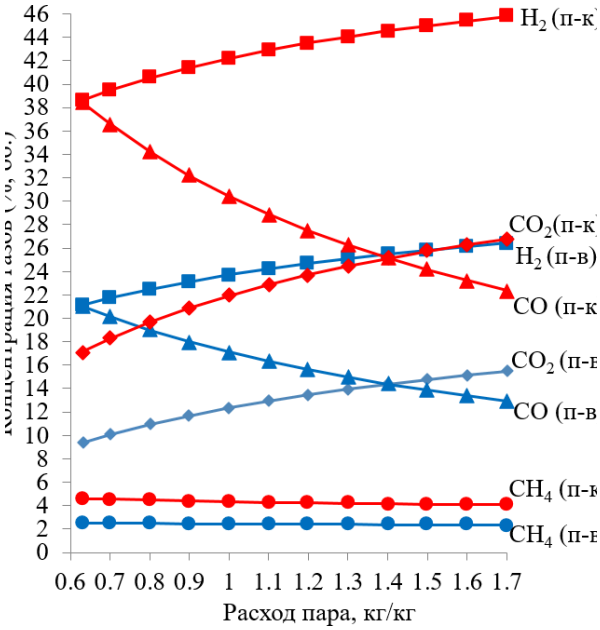


Рис. 3 - Зависимость концентрации компонентов газа из Сарыадырского угля (пласт «Пятиметровый») от расхода водяного пара

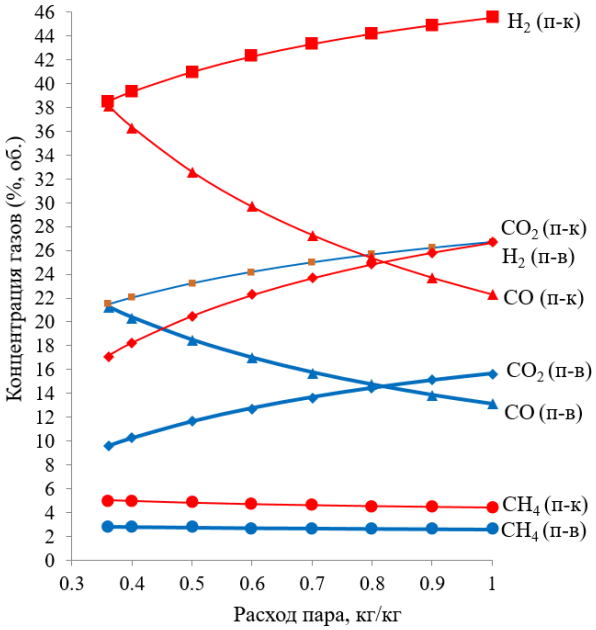


Рис. 4 - Зависимость концентрации компонентов газа из Сарыадырского угля (пласт «Надежный») от расхода водяного пара

Как видно, закономерности влияния расхода водяного пара (на 1 кг угля) на выход компонентов газа при обоих видах дутья носят идентичный характер для всех исследуемых углей различных месторождений. Основное отличие состоит лишь в интервале значений расхода водяного пара и расхода воздуха (или кислорода).

Анализ полученных данных показывает, что при одинаковых расходах водяного пара при повышении расхода воздуха (или кислорода) соотношение H_2/CO почти не изменяется, по-видимому из-за малого интервала изменения расхода. Согласно работам [11, 12], увеличение подачи водяного пара способствует смещению равновесия реакции водяного газа в сторону образования водорода и диоксида углерода, что приводит к росту отношения H_2/CO в синтез-газе. При этом наблюдается снижение концентрации оксида углерода и некоторое уменьшение общей теплотворной способности получаемого газа. Современные математические модели и экспериментальные исследования также подтверждают, что увеличение парового коэффициента сопровождается ростом общего выхода газа и изменением его компонентного состава, что важно учитывать при оптимизации режимов работы слоевых газификаторов и получении синтез-газа с заданными характеристиками. Однако, максимальный выход основных компонентов газа H_2, CO, CH_4 ($V_{г.}$, м³/кг) наблюдается при наименьшем расходе воздуха. Аналогичная зависимость наблюдается и при паро-кислородном дутье. С учетом этого, указанные параметры по синтез-газу характеризуют рациональные условия ведения процесса газификации (таблица 2).

Результаты проведенного расчета показывают, что увеличение расхода водяного пара при п-в-дутье и п-к-дутье в достаточно широких диапазонах (от 0,36-0,7 до 1,0-1,9 кг/кг) приводит (для сухого газа) к существенному уменьшению концентрации CO (об. %), некоторому повышению объемного содержания H_2 и CO_2 в газе и соотношения H_2/CO (от 1 до 2). Такое влияние H2O происходит в соответствии с реакцией водяного газа (4), что непосредственно отражается на некотором уменьшении общей концентрации горючих компонентов газа (CO,H_2,CH_4), и соответственно на снижении калорийности газа и КПД газификации. Это обусловлено тем, что снижение концентрации CO существенно превышает увеличение содержания H_2. Кроме того, теплотворная способность CO выше, чем H_2. Вместе с тем, незначительно уменьшается доля компонентов CH_4, N_2, C_2H_4. В связи с этим, как при паро-кислородном, так и при паро-воздушном дутьях увеличение расхода водяного пара приводит к: 1) повышению целевого соотношения H_2:CO (от 1 до 2) (в соответствии с реакцией водяного газа: $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$); 2) снижению общей концентрации горючих компонентов газа, и как следствие этого уменьшается калорийность газа и КПД газификации; 3) увеличению общего выхода газа.

Сравнение данных по двум режимам ведения процесса газификации показывает, что при паро-

кислородном дутье (по сравнению с паро-паровоздушным), общая концентрация горючих компонентов (CO,H_2,CH_4) и соответственно калорийность газа при п-к-дутье существенно выше (примерно в 1,7-1,8 раз на всем интервале изменения соотношения H_2/CO), что обусловлено отсутствием балластного газа N_2 и окисляющим действием кислорода. Отсутствие N_2 облегчает условия дальнейшего использования полученного газа. Однако при п-к-дутье концентрация CO_2 в сухом газе выше по сравнению с п-в-дутьем, ввиду протекания реакции (1). При этом, общие концентрации горючих компонентов газа для всех углей варьируется в пределах от 61-67 до 37-42 % (при паро-кислородном дутье) и от 38-40 до 27-29 % (при паро-паровоздушном дутье) на всем интервале изменения соотношения H_2 и CO (от 1 до 2). Выход сухого газа при паро-воздушном дутье существенно выше, чем при паро-кислородном дутье (≈1,7-1,8 раз), из-за большого содержания N_2. Вместе с тем, КПД для обоих видов дутья составляют одинаковые значения, так как более низкий выход сухого газа при п-к-дутье компенсирует его более высокая калорийность, в соответствии с формулой (10).

Таблица 2 - Основные параметры процесса газификации углей

Топливо	Расход воздуха ($м^3$/кг), п-в-дутье/ п-к-дутье	Расход водяного пара (кг/кг),	Калорийность газа (ккал/$м^3$), п-в-дутье/ п-к-дутье	КПД газификации (%) п-в-дутье/ п-к-дутье
Шубаркуль	1,944 / 0,583	0,7-1,9	1288,1-1410,0 / 2200-2536	77,88-79,63 / 77,88-79,63
Майкубен	1,625 / 0,487	0,58-1,7	1244,1-1370,7 / 2107,9-2450,4	75,66-77,53 / 75,66-77,53
Сарыадыр («Пятиметровый»)	1,912 / 0,574	0,63-1,7	1275,7-1399,1 / 2208,9-2557,3	78,22-80,03 / 78,22-80,03
Сарыадыр «Надежный»	1,046 / 0,314	0,36-1,0	1311,4-1437,8 / 2233,7-2579,9	69,60-71,17 69,60-71,17

Примечание: интервалы расходов водяного пара для двух222-х видов дутья одинаковы, поэтому даны по одному диапазону (для каждого месторождения)

Несмотря на то, что концентрации горючих компонентов газа (%) для всех образцов углей незначительно отличаются друг от друга, их абсолютные величины (в $м^3$/кг) заметно различаются, что показано на рисунках 5,6. Наибольший общий выход сухого газа наблюдается у Шубаркульского угля, наименьший – у Сарыадырского угля (пласт «Надежный»), значения $V_{сух.}$ которых отличаются друг от друга почти в 2 раза. Исследованные образцы углей можно расположить в порядке убывания выхода сухого газа при паро-воздушном дутье следующим образом: Шубаркуль → Сарыадыр («Пятиметровый») → Майкубен → Сарыадыр («Надежный»). Такое ранжирование обусловлено различиями в физико-химических свойствах углей, прежде всего содержанием углерода, водорода, кислорода, влаги и золы, определяющими степень газифицируемости топлива и эффективность образования генераторного газа. Характерные особенности каждого исследованного угля представить следующим образом:

1) Шубаркуль ($V_{сух.}$ = 3,46-3,70 $м^3$/кг) (наименьшее содержание зольности (A^r = 2,76 %); наибольшее содержание элементов C и H_2, высокое содержание O_2);

2) Сарыадыр («Пятиметровый») ($V_{сух.}$ = 3,33-3,57 $м^3$/кг) (относительно высокое содержание элементов C и H_2, наименьшее содержание влаги (W^r_t = 2,56 %);

3) Майкубен ($V_{сух.}$ = 2,91-3,13 $м^3$/кг) (относительно невысокое содержание углерода C, относительно низкое содержание зольности (A^r = 13,0 %), наибольшее содержание кислорода O_2);

4) Сарыадыр («Надежный») ($V_{сух.}$ = 1,87-2,00 $м^3$/кг) (наибольшее содержание зольности (A^r = 46,47 %), наименьшее содержание элементов C, H_2, O_2).

Выход сухого газа является одним из ключевых показателей эффективности процесса газификации, поскольку непосредственно определяет потенциальную производительность установки и экономическую целесообразность технологии. Повышенные концентрации N_2, CO_2, H_2O в газе увеличивают нагрузку на газоочистку для дальнейшей переработки в целевые продукты. Указанные недостатки при получении газа в газификаторах частично устраняют

повышением температуры водяного пара (свыше 300°C), что способствует более благоприятному протеканию деструктивных процессов разложения угля.

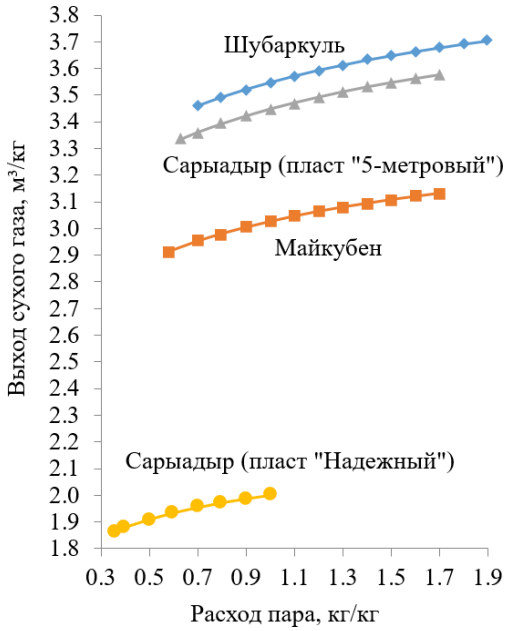


Рис. 5 - Влияние расхода водяного пара (на 1 кг угля) на выход сухого газа при паро-воздушном дутье

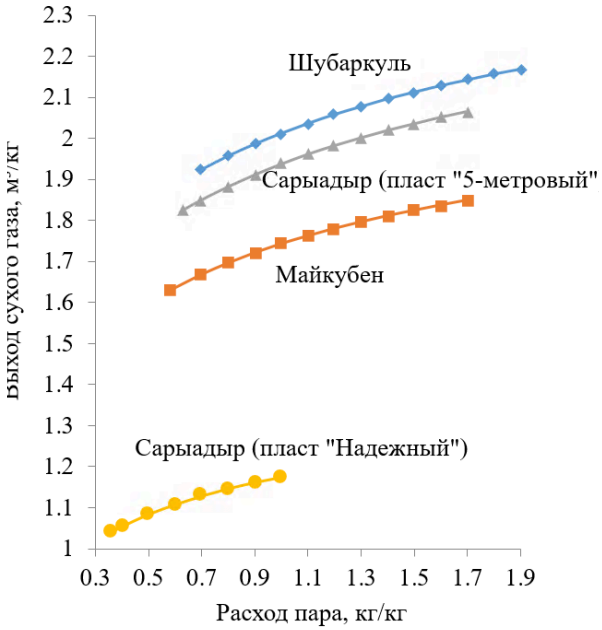


Рис. 6 - Влияние расхода водяного пара (на 1 кг угля) на выход сухого газа при паро-кислородном дутье

Для оценки адекватности разработанной математической модели результаты моделирования процесса слоевой газификации были сопоставлены с ранее полученными экспериментальными данными [11-13] для исследуемых углей при идентичных условиях проведения экспериментов. Сравнение выполнялось по основным технологическим показателям процесса, включая состав генераторного газа, расходы дутьевых реагентов, температурный режим газификации и выход газообразных продуктов. Полученные результаты показали хорошее согласование расчетных и экспериментальных данных: отклонения по содержанию основных компонентов генераторного газа находились в допустимых пределах, а рассчитанные значения адекватно воспроизводили наблюдаемые экспериментальные зависимости. Это свидетельствует о корректности принятых модельных допущений и возможности использования разработанной модели для прогнозирования характеристик слоевой газификации углей, а также для оптимизации технологических режимов процесса.

Выводы. В результате проведенного исследования разработана и реализована математическая модель процесса слоевой газификации углей различных месторождений Казахстана с использованием программного комплекса MATLAB. Выполнено моделирование газификации при паро-воздушном и паро-кислородном дутье с анализом влияния расходов водяного пара, воздуха и кислорода на состав генераторного газа, его теплотворную способность, выход сухого газа и коэффициент полезного действия процесса. Установлено, что увеличение расхода водяного пара обеспечивает повышение объемного отношения H_2/CO в диапазоне от 1 до 2, что благополучно для получения синтез-газа. Однако это сопровождается уменьшением концентрации CO, снижением теплотворной способности генераторного газа и КПД газификации. Максимальная теплотворная способность газа достигается при минимально допустимых расходах дутьевых реагентов, обеспечивающих устойчивое протекание процесса газификации. Показано, что при паро-кислородном дутье формируется генераторный газ с более высокой концентрацией горючих компонентов и повышенной теплотворной способностью по сравнению с паро-воздушным режимом, что делает его более предпочтительным для получения энергетического газа. Вместе с тем, при паро-воздушном дутье достигается более высокий выход сухого газа вследствие присутствия балластного азота в составе газовой смеси. Среди исследованных углей наиболее эффективным для процесса слоевой газификации оказался Шубаркульский уголь, обеспечивающий наиболее высокий выход генераторного газа и наиболее благоприятные

технологические показатели процесса, тогда как наименее эффективным является Сарыадырский уголь (пласт «Надежный»), что обусловлено его высокой зольностью и низким содержанием органической массы. Сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными показало хорошее согласование расчетных и экспериментальных значений основных технологических параметров, что подтверждает адекватность разработанной математической модели. Полученная модель может быть использована для прогнозирования характеристик процесса, выбора оптимальных режимов слоевой газификации различных видов твердых топлив, а также при проектировании и оптимизации промышленных газификационных установок.

Литература

1. Zheng M., Pan Y., Wang Z., Li X.X., Guo L. Capturing the dynamic profiles of products in Hailaer brown coal pyrolysis with reactive molecular simulations and experiments // Fuel. - 2020. - Vol. 268(5):117290. DOI 10.1016/j.fuel.2020.117290.
2. Gao M.J., Li X.X., Guo L. Pyrolysis simulations of Fugu coal by large-scale ReaxFF molecular dynamics// Fuel Processing Technology.-2018.-Vol.178.-P.197-205. DOI 10.1016/j.fuproc.2018.05.023.
3. Wang J., Hou Q.L., Zeng F.G., Guo G.J. Gas generation mechanisms of bituminous coal under shear stress based on ReaxFF molecular dynamics simulation // Fuel.- 2021. - Vol. 298. - P.120240. DOI 10.1016/j.fuel.2021.120240.
4. Huang Z.B., Zhou W.J., Wei J.J. Study on the molecular structure model of tar-rich coal and its pyrolysis process // Journal of Molecular Structure.-2023.-Vol.1286: 135613. DOI 10.1016/j.molstruc.2023.135613.
5. Cui R.T., Xu W.L., Zhang Y.P., Wang J.X., Qiao Y.Y., Tian Y.Y. In-depth understanding of the rapid pyrolysis free radical reaction regulation mechanism of C–S bonds in coal at the molecular level // Fuel. - 2025. - Vol. 389:134630. DOI 10.1016/j.fuel.2025.134630.
6. Zhou J.J., Wang J., Tang S.Z., Li Z.C., Xu Y.Y., Niu X. Simulations on coal water slurry gasification by molecular dynamics method with ReaxFF // Journal of Molecular Modeling. – 2024. - Vol. 30(7). - 213. DOI 10.1007/s00894-024-06017-9.
7. O'Rourke P.J., Snider D.M. A new blended acceleration model for the particle contact forces induced by an interstitial fluid in dense particle/fluid flows // Powder Technology. −2014. - Vol. 256. - P. 39-51. DOI 10.1016/j.powtec.2014.01.084.
8. Carlo, Borello D., Bocci E. Process simulation of a hybrid SOFC/mGT and enriched air/steam fluidized bed gasifier power plant // International Journal of Hydrogen Energy. - 2013. - Vol. 38. - P. 5857-5874. DOI 10.1016/j.ijhydene.2013.03.005.
9. Solnordal C.B., Kenche V., Hadley T.D., Feng Y., Witt P.J., Lim K.S. Simulation of an internally circulating fluidized bed using a multiphase particle-in-cell method // Powder Technology. - 2015. - Vol. 274. - P. 123-134. DOI 10.1016/j.powtec.2014.12.045.
10. Зубилин И.Г., Рудыка В.И. Получение синтез-газов для производства экологически чистых моторных топлив: теория и технология.- Харьков: Издат. центр Харьков. нац. университета, 2002.– 313 с. ISBN 966-623-108-5.
11. Ермагамбет Б.Т., Нургалиев Н.У., Набиев М.А., Касенова Ж.М., Реминный Р.А., Букетаев А.С. Исследование процесса паро-воздушной газификации углей различных месторождений Казахстана // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. 2014. - Ч. 2. - № 6(103). - С. 355-359.
12. Набиев М.А., Ермагамбет Б.Т., Нургалиев Н.У., Касенова Ж.М, Реминный Р.А. Получение синтетического газа из угля // Промышленность Казахстана. 2014. - № 6(87). - С. 68-71.
13. Ермагамбет Б.Т., Нургалиев Н.У., Касенова Ж.М., Зикирина А.М., Холод А.В. Получение горючего газа из Сарыадырского угля // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. 2016. - Ч. 2. - №4(113). - С. 312-315.

References

1. Zheng M., Pan Y., Wang Z., Li X.X., Guo L. Capturing the dynamic profiles of products in Hailaer brown coal pyrolysis with reactive molecular simulations and experiments // Fuel. - 2020. - Vol. 268(5):117290. DOI 10.1016/j.fuel.2020.117290.
2. Gao M.J., Li X.X., Guo L. Pyrolysis simulations of Fugu coal by large-scale ReaxFF molecular dynamics// Fuel Processing Technology.-2018.-Vol.178.-P.197-205. DOI 10.1016/j.fuproc.2018.05.023.

3. Wang J., Hou Q.L., Zeng F.G., Guo G.J. Gas generation mechanisms of bituminous coal under shear stress based on ReaxFF molecular dynamics simulation // Fuel.- 2021. - Vol. 298. - P.120240. DOI 10.1016/j.fuel.2021.120240.
4. Huang Z.B., Zhou W.J., Wei J.J. Study on the molecular structure model of tar-rich coal and its pyrolysis process // Journal of Molecular Structure.-2023.-Vol.1286: 135613. DOI 10.1016/j.molstruc.2023.135613.
5. Cui R.T., Xu W.L., Zhang Y.P., Wang J.X., Qiao Y.Y., Tian Y.Y. In-depth understanding of the rapid pyrolysis free radical reaction regulation mechanism of C–S bonds in coal at the molecular level // Fuel. - 2025. - Vol. 389:134630. DOI 10.1016/j.fuel.2025.134630.
6. Zhou J.J., Wang J., Tang S.Z., Li Z.C., Xu Y.Y., Niu X. Simulations on coal water slurry gasification by molecular dynamics method with ReaxFF // Journal of Molecular Modeling. – 2024. - Vol. 30(7). - 213. DOI 10.1007/s00894-024-06017-9.
7. O'Rourke P.J., Snider D.M. A new blended acceleration model for the particle contact forces induced by an interstitial fluid in dense particle/fluid flows // Powder Technology. −2014. - Vol. 256. - P. 39-51. DOI 10.1016/j.powtec.2014.01.084.
8. Carlo, Borello D., Bocci E. Process simulation of a hybrid SOFC/mGT and enriched air/steam fluidized bed gasifier power plant // International Journal of Hydrogen Energy. - 2013. - Vol. 38. - P. 5857-5874. DOI 10.1016/j.ijhydene.2013.03.005.
9. Solnordal C.B., Kenche V., Hadley T.D., Feng Y., Witt P.J., Lim K.S. Simulation of an internally circulating fluidized bed using a multiphase particle-in-cell method // Powder Technology. - 2015. - Vol. 274. - P. 123-134. DOI 10.1016/j.powtec.2014.12.045.
10. Zubilin I.G., Rudyka V.I. Poluchenie sintez-gazov dlja proizvodstva jekologicheski chistyh motornyh topliv: teorija i tehnologija.- Har'kov: Izdat. centr Har'kov. nac. universiteta, 2002.– 313 s. ISBN 966-623-108-5. [in Russian]
11. Ermagambet B.T., Nurgaliev N.U., Nabiev M.A., Kasenova Zh.M., Reminnyj R.A., Buketaev A.S. Issledovanie processa paro-vozdushnoj gazifikacii uglej razlichnyh mestorozhdenij Kazahstana // Vestnik ENU im. L.N. Gumileva. 2014. - Ch. 2. - № 6(103). - S. 355-359. [in Russian]
12. Nabiev M.A., Ermagambet B.T., Nurgaliev N.U., Kasenova Zh.M, Reminnyj R.A. Poluchenie sinteticheskogo gaza iz uglja // Promyshlennost' Kazahstana. 2014. - № 6(87). - S. 68-71. [in Russian]
13. Ermagambet B.T., Nurgaliev N.U., Kasenova Zh.M., Zikirina A.M., Holod A.V. Poluchenie gorjuchego gaza iz Saryadyrskogo uglja // Vestnik ENU im. L.N. Gumileva. 2016. - Ch. 2. - №4(113). - S. 312-315. [in Russian]

Информация об авторах

Нургалиев Н.У.- кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Казахский университет технологии и бизнеса имени К.Кулажанова, Астана, Казахстан, e-mail: nurgaliev_nao@mail.ru;

Смайлова Н.Т.- доктор технических наук, профессор, Казахский университет технологии и бизнеса им. К.Кулажанова, Астана, Казахстан, e-mail: ganibek2006@mail.ru

Нұртай Ж.Т.- доктор PhD, ассоциированный профессор, Казахский университет технологии и бизнеса им. К.Кулажанова, Астана, Казахстан, e-mail: zhadira_nurtai@mail.ru;

Нургазина Г.М.- доктор PhD, и.о. асс.профессора, Международный университет Астана, Астана, Казахстан, e-mail: ast.gulnar@mail.ru;

Хамит А.Ж.- магистр, старший преподаватель, Казахский университет технологии и бизнеса им.К.Кулажанова, Астана, Казахстан, e-mail: aytolkyn.khamit-76@mail.ru.

Information about the authors

Nurgaliyev N.U.-Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, K.Kulazhanov Kazakh University of Technology and Business, Astana, Kazakhstan, e-mail: nurgaliev_nao@mail.ru;

Smailova N.T.- Doctor of Technical Sciences, Professor, K. Kulazhanov Kazakh University of Technology and Business, Astana, Kazakhstan, e-mail: ganibek2006@mail.ru

Nurtai Zhadira - PhD, Associate Professor, K.Kulazhanov Kazakh University of Technology and Business, Astana, Kazakhstan, e-mail: zhadira_nurtai@mail.ru;

Nurgazina G.M.- PhD, Acting Associate Professor, PhD, Astana International University, Astana, Kazakhstan, e-mail: ast.gulnar@mail.ru;

Khamit A.- Master's degree, senior lecturer, K.Kulazhanov Kazakh University of Technology and Business, Astana, Kazakhstan, e-mail: aytolkyn.khamit-76@mail.ru.