

$$\Delta_{As} = \sqrt{\Delta_{FAO}^2 + \Delta_{Sp}^2}.$$

Программа разработана средствами Visual Basic. Программа предназначена как для практических аналитиков контрольно-аналитических лабораторий фармацевтических предприятий, так и для разработчиков аналитической нормативной документации. Имеет дружественный интерфейс и проста в обращении, может применяться для анализа других лекарственных средств методами газовой и жидкостной хроматографии.

Таким образом, разработанная нами программа помимо конкретной практической задачи обработки результатов хроматографического анализа готовых лекарственных средств может быть применима на стадии разработки указанных методик с целью их оптимизации и валидации.

- 1) Статистичний аналіз результатів хімічного експерименту // Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Науково-експертний фармакопейний центр».- Доповнення 1.- Харків: РІРЕГ, 2004.- С. 187-214.
- 2) Государственная Фармакопея СССР XI: Вып. 1. Общие методы анализа / МЗ СССР – 11-е изд., доп. – М.: Медицина, 1987. – С. 199-251.
- 3) Валідація аналітичних методик і випробувань // 1-е вид. - Харків: РІРЕГ, 2001. – С. 58-67. – Доповнення 1. – 2004. – С. 2-4.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА АКТИВИРОВАНИЯ УГЛЯ-СЫРЦА

Швец Д.И.*, Сангинова О.В., Гуля Н.В.

*Институт сорбции и проблем эндоэкологии НАНУ,
Национальный технический университет Украины «КПИ», kxtp@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Активные угли применяются в промышленности как адсорбенты для разделения и очистки веществ в газовой и жидких фазах, в качестве катализаторов и носителей катализаторов, хемосорбентов и осушителей. Эффективное использование угля для решения той или иной производственной задачи возможно при соответствии его качества (пористая структура, природа поверхности, состав минеральной части, механическая прочность) условиям проведения технологического процесса.

Технологический процесс активирования угля-сырца (конденсированного углерода), заключается в термической обработке его парогазовой смеси при следующих параметрах: температура – 850÷900 °С, давление газа – 0,03 МПа, давление воздуха – 0,3 МПа, водяного пара – 0,6 МПа. Данный процесс является фактически окислением и сопровождается удалением части скелетного углерода в виде оксидов углерода, в результате чего происходит развитие пористой структуры и уголь становится активным, т.е. эффективным поглотителем веществ из газовой среды и растворов (адсорбентом).

Повышение температуры активации выше 900°С приводит к ухудшению качества углерода и графитизации поверхности угля. Понижение температуры ниже 800 - 850°С приводит к резкому снижению интенсивности процесса за счет уменьшения коэффициента разложения пара; последний при оптимальных условиях (850 – 900 °С) составляет 40 - 45%.

Поддержание температуры активации требует притока тепла. Применение программ-симуляторов, таких как Hysys, Unisim, ChemCad, для отыскания оптимальных условий использования тепла, получаемого при сжигании продуктов активации, позволяет снизить себестоимость полученного продукта и количество твердых отходов – золы и пылевидного угля. Основным преимуществом таких программ является то, что пользователю не требуется разрабатывать модели каждого аппарата технологической схемы; он лишь конфигурирует блоки, входящие в состав библиотеки. Каждый блок моделирует часть процесса – аппарат, поток или регулятор.

В данной работе рассмотрены вопросы моделирования процесса активирования угля-сырца в среде ChemCad. На первом этапе моделирования из библиотеки выбираются стандартные блоки, соответствующие элементам технологической схемы. В случае, если требуемые компоненты отсутствуют в библиотеке, в программе ChemCad предусмотрена возможность создания так называемых псевдокомпонентов с заданными химико-физическими свойствами. Далее задаются параметры каждого из блоков, формируется перечень всех химических компонентов и выбирается термодинамический пакет, в соответствии с которым рассчитываются физико-химические свойства компонентов. Следующий этап связан непосредственно с расчетом материального баланса, моделированием различных режимов работы объекта и поиском оптимальных условий проведения процесса. Технологическая схема производства активных углей в ChemCad представлена на рис. 1.

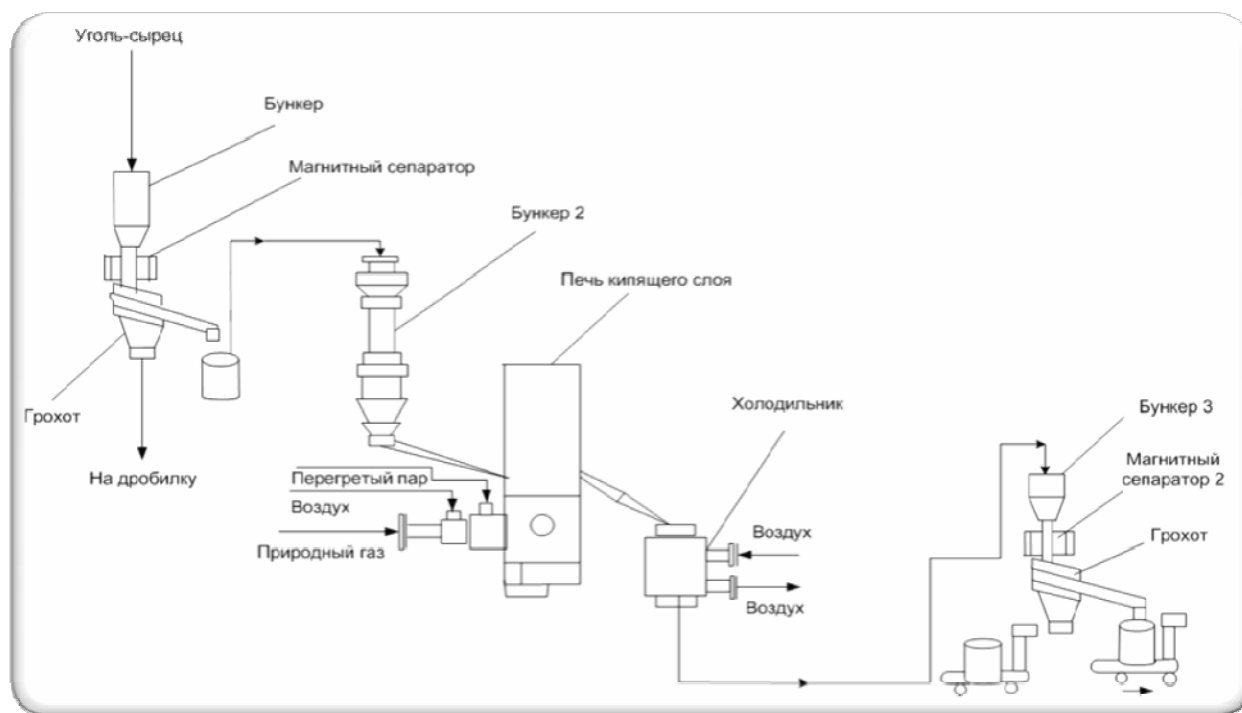


Рис. 1. Схема процесса активирования угля-сырца в ChemCad

В соответствии с технологией активирования угля-сырца взвешенный на весах уголь-сырец (карбонизат) засыпается в приемный бункер, проходит магнитный сепаратор для удаления ферромагнитных примесей (включений), разделяется на грохоте с набором сит по фракциям от 0,3 до 3,0 мм, свыше 3,0 мм и менее 0,3 мм. Емкость бункера - 0,12 м³. На конусной части бункера установлено запорное устройство, которое регулирует поступление угля в печь. Загрузка периодическая. Максимальное количество загружаемого угля - сырца в печь - 80 кг.

Для активации угля - сырца в печи кипящего слоя в камере сгорания сжигают газообразное топливо - природный газ. Продукты сгорания смешивают с перегретым водяным паром, подаваемым из теплообменника, где происходит выравнивание температуры смеси за счет дальнейшего перемешивания ее компонентов. Распределяясь под беспровальной колпачковой решеткой, паро-газовая смесь при $t = 950 - 1000^{\circ}\text{C}$ проходит под давлением снизу вверх через слой угля - сырца, псевдооживая его. Процесс активации происходит при температуре кипящего слоя 800-950^oC в течении 3 часов. Высота кипящего слоя составляет 300-400 мм. В результате взаимодействия углерода угля-сырца с реагентом (водяным паром), в зависимости от длительности процесса, образуется пористая структура угля, включающая все разновидности пор с адсорбционным объемом 0,4 - 1,0 см³/г, при степени выгорания углерода 50 - 60%. Насыпная плотность - 0,3-0,4 г/см³. После активации уголь

поступает в разгрузочный бункер для охлаждения. Охлаждение осуществляется атмосферным воздухом от воздуходувки до температуры 40 - 60°C. Межтрубное пространство разгрузочного бункера продувают азотом под давлением 0,03 мПа для создания инертной атмосферы, а в трубы подают атмосферный воздух давлением 0,3 мПа. Охлажденный активный уголь подается в приемочный бункер магнитного сепаратора для удаления ферромагнитных примесей (включений), а затем поступает в грохот с набором сит для фракционирования.

Фракции от 0,5 мм до 2,0 мм (КАУ-1, -2; САУ-1, -2, тип А); от 0,2 мм до 0,63 мм (КАУ-1, -2; САУ-1, -2, тип Б); собирают и передают на склад готовой продукции. Фракции от 0,2 мм и ниже идут в отходы. Твердые отходы (зола и пылевидный уголь) собираются в циклоне и утилизируются как удобрение.

Проведенные расчеты показали, что из 80 кг угля - сырца можно получить около 32 кг готового товарного продукта- активных углей КАУ-1 и КАУ-2, САУ-1 и САУ-2. Выход продукта составляет в среднем 40%.

Поиск оптимальных условий использования тепла, получаемого при сжигании продуктов активации, выполняется для конкретного предприятия отдельно, в зависимости от установленного оборудования. Таким образом, применение программ-симуляторов позволяет снизить стоимость полученного угля-сырца за счет перераспределения потоков тепла, получаемого при сжигании продуктов активации.

MODELLING OF UNCATALYZED OXIDATION OF CYCLOHEXANE

Pohorecki R.A.^a, Moniuk W.I.^a, Wierzchowski P.P.^b

^aWarsaw University of Technology, www.ichip.pw.edu.pl

^bPolish Academy of Science, www.icho.edu.pl

The process of cyclohexane oxidation is widespread in chemical industries all over the world, mostly to get cyclohexanone and cyclohexanol, being in turn processed into caprolactam, adipic acid, and – subsequently – polyamide fibers and plastics (as nylon 6, nylon 66). Practically all of the adipic acid and about 63% of the caprolactam produced in the world in 1990 used cyclohexane oxidation as the first step. The amount of cyclohexane oxidized this way exceeds 4 million t/year. The process is a relatively difficult one, since the desired products (i.e., cyclohexanone and cyclohexanol) are intermediates in a sequence of reactions, and the overoxidation results easily in a number of useless (or hardly recuperable) by-products.

Cyclohexane oxidation is a two – phase process, carried out in a gas – liquid system. The course of the process may be affected both by chemical kinetics and by hydrodynamic factors. One of the processes commercially employed to oxidize cyclohexane is the Polish CYCLOPOL process. In this process, cyclohexane is oxidized by air or mixture O₂/air in a horizontal flow reactor. The reactor is divided into 4 – 6 chambers, to which air is introduced through spargers. In order to keep pace with other leading companies, the owners of the CYCLOPOL process continue to carry on research and development work, aimed at increasing productivity and selectivity of the process.

The mechanism of cyclohexane oxidation is a complicated, multistage, free-radical chain reaction with degenerated chain, comprising different chain inhibition, chain propagation and chain termination steps. A reaction scheme comprising up to 154 reactions has been developed by Tolman, but was never published (at least not in the open literature). A number of simplified kinetic models for both catalytic and noncatalytic oxidation have been described in our earlier paper [1].

An early model of noncatalytic cyclohexane oxidation was presented by Kharkova et al. [2]. The model was based both on the literature data and the author's own experiments. The model comprises 19 reactions, but for some of them only the ranges of values of the reactions rate constants were given, which renders it useless for detailed design purposes.

On the basis of that model and our own experimental data we formulated a new, modified kinetic model shown in Table 1.