Ольга Кутова, Анатолій Журавський,

Дмитро Кутовий, Григорій Гринь, Інна Ковалевська І.В.

(Харків, Україна)

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛООБМІНУ

ПРИ КОКСУВАННІ ВУГІЛЛЯ З ДОМІШКАМИ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ВІДХОДІВ

В даний час проблема утилізації лікарських засобів екологічно чистими і безпечними для здоров'я людини методами є одночасно актуальною і складною, обумовлюється різноманіттям хімічної структури лікарських засобів, що вимагає комплексного вирішення.

Аналіз передового досвіду та практики у сфері утилізації небезпечних відходів [1-3], в тому числі фармацевтичних, показав, що найбільш ефективним і економічно доцільним методом є використання існуючих промислових підприємств, де застосовуються високотемпературні технології, що забезпечують реальну та економічно доступну альтернативу.

В якості такого рішення може бути розглянута утилізація відходів фармацевтичного виробництва у камерах коксування коксохімічних підприємств. Добавка у кількості 0,5 - 1,0% не погіршує, а в ряді випадків й покращує якість коксу та хімічних продуктів коксування [4]. Кількість утилізованих фармацевтичних відходів може становити до 200 - 220 тис. т / рік. Коксохімічні підприємства мають розвинену систему уловлювання продуктів утилізації, які утворюються в процесі, що запобігає забрудненню повітряного і водного басейнів.

Для спрощення та здешевлення процесів переробки рідких продуктів фармацевтичних відходів пропонується утилізовувати їх разом з упаковками, які в більшості своїй представляють пластикові (полімерні) композиції, які повністю розкладаються при термічній переробці на коксохімічних підприємствах.

Ефективність досліджень по створенню технології утилізації фармацевтичних відходів в коксових батареях, ведуться нами в даний час, буде значно вище при використанні методів математичного моделювання. Розробка режимів коксування та апаратурного оформлення процесу безпосередньо пов'язана з тепловим режимом. Крім того існує нерозривний взаємозв'язок теплообміну з усіма фізико-хімічними процесами при коксуванні вугілля з домішками фармацевтичних відходів. З одного боку, все що відбуваються фізико-хімічні явища у вугільному завантаженні будуть визначатися температурою процесу, а з іншого боку, ці явища будуть надавати відповідний вплив на теплообмін. Математичне моделювання процесу теплообміну має бути необхідним етапом для визначення закономірностей його взаємозв'язку і взаємодії з іншими явищами при коксуванні.

Широке впровадження комп'ютерних технологій сприяє розвитку методів математичного моделювання для аналізу та проектування самих різних технологічних процесів. Найбільш ефективними виявляються дослідження, де побудова математичної моделі ґрунтується на взаємодії та взаємозв'язку всіх процесів, які відбуваються в системі, що вивчається. Однак такий підхід, особливо при розгляді складних систем, пов'язаний з виникненням ускладнень при створенні математичного опису та реалізацією рівнянь моделі. Ця проблема успішно може бути вирішена при використанні методологічних принципів системного аналізу - основного методу дослідження великих і складних об'єктів.

Модель складної фізико-хімічної системи з точки зору об'єкта математичного моделювання, представляє собою багатофазну, багатокомпонентну суцільну середу, локалізовану в просторової області. У кожній точці цієї області відбуваються процеси масопереносу і теплопереносу. Системний аналіз такого об'єкта можна розділити на три етапи: якісний аналіз структури фізико-хімічної системи, виявлення характерних закономірностей у вигляді відповідних математичних виразів і перевірка адекватності отриманого математичного опису.

Важливим етапом якісного аналізу є встановлення ієрархії між рівнями явищ, що відбуваються в досліджуваній системі. Можна виділити, наприклад, такі основні ієрархічні структури: фізико-хімічні закономірності на атомному і міжмолекулярному рівні; рівень макромолекулярних структур; фізико-хімічні явища, пов'язані з перенесенням маси і тепла при русі матеріальних і теплових потоків; сукупність процесів в масштабі системи.

Рівень опису визначається завданнями дослідження та зумовлює використання певного математичного апарату.

Викладену класифікацію рівнів ієрархії можна ефективно застосувати до процесу коксування вугілля з домішками фармацевтичних відходів, розглядаючи завантаження в якості складної фізико-хімічної системи [5]. Зазначені явища мають місце на всіх її рівнях: руйнування бічних ланцюгів, що входять до складу органічних сполук, їх взаємодія в газовій фазі; взаємодія макромолекул, руйнування їх структури, конденсаційні процеси; перенос маси і тепла між твердою, рідкою та газовою фазами; формування пластичної маси, формування макроструктури завантаження при високих температурах; утворення газоподібних компонентів, поширення тепла в масштабі завантаження.

Моделювання теплообміну в масштабі всього завантаження передбачає, що більш низькі рівні повинні доставляти інформацію про теплофізичні характеристики завантаження, теплові ефекти та вплив масопереносу на теплообмін в робочій зоні. Теплофізичні характеристики можуть бути визначені експериментально або розраховані в результаті аналізу теплообміну на більш низьких рівнях. Найбільш доцільним буде комбінований метод, що включає як експериментальні дослідження, так і розрахунки модельних систем.

Вплив масопереносу на теплообмін необхідно розглядати в зв'язку з конкретною моделлю фізико-хімічних перетворень при термічному розкладанні органічних сполук.

Вплив фізико-хімічних процесів на теплообмін пов'язаний як з їх вирішальною роллю у формуванні макроструктури завантаження, яке визначає теплофізичні характеристики, так і з їх енергетичної стороною, яка визначає теплові ефекти. Складність аналізу такого явища полягає у тому, що теплові ефекти мають місце практично при будь-яких явищах на всіх рівнях. Відповідно до рівня опису математична модель повинна включати сукупність хімічних реакцій, що протікають одночасно і розглядати їх як єдиний процес з ефективними кінетичними характеристиками.

При створенні математичної моделі завантаження розглядається як багатокомпонентна суцільне середовище, в якому відбувається перенесення маси і енергії, а компоненти піддаються хімічним перетворенням і вступають між собою в хімічні реакції. З математичної точки зору ця модель являє собою двомірну систему рівнянь. Така модель досить складна та вимагає максимальних спрощень. При цьому, всі дії щодо спрощення повинні мати фізико-математичне обґрунтування, щоб уникнути побудови неадекватною моделі.

Висновок одновимірних рівнянь можливий в рамках спрощуючих припущень, пов'язаних, по-перше, з можливістю використання квазістаціонарного наближення для газоподібних компонентів. Це можливо, якщо час перебування газоподібних продуктів в камері значно менше часу нагріву завантаження та протікання фізико-хімічних перетворень, результатом яких є поява летючих речовин. Ця умова точно виконується в камері спалювання. По-друге, можна припустити, що зміни потоків за шириною та висотою камери знаходяться в постійному співвідношенні. Це призводить до того, що впливом масопереносу на теплообмін в середній по висоті частини завантаження можна знехтувати, якщо газоподібні продукти рухаються у вертикальному напрямку. Це досить добре досягається для рухомих в більш холодному напрямку летючих продуктів, що утворюються, та вологи.

Таким чином, математична модель теплообміну при коксуванні вугілля, що містить фармацевтичні домішки, спирається на певні вимоги. Модель повинна містити мінімальну кількість змінних. Рівняння моделі повинні відповідати реальним змінам досліджуваної системи на обраному рівні. Змінні, що входять в модель, повинні мати певний фізичний зміст і допускати хоча б непряму експериментальну оцінку.

Важлива закономірність, яка повинна бути обов'язково розкрита в математичній моделі, це правильний опис теплофізичних характеристик, що враховують наявність при коксуванні двох яскраво виражених температурних областей, в яких теплопровідність і температуропровідність завантаження буде відрізняється на порядок і більше. Така поведінка теплофізичних характеристик пояснюється тим, що в термічній камері, завантаження знаходиться при певних температурах в двох абсолютно різних станах. Низькотемпературна область відповідає вихідному стану завантаження, яка ще не порушена основними термохімічними перетвореннями. Високотемпературна відповідає завантаженню в стані золи. Проміжна область відповідає розплавленому стану. Така поведінка завантаження в ході процесу вимагає явної кореляції теплофізичних характеристик відповідно до макроскопічних змін у системі.

Таким чином, математична модель теплообміну в процесі коксування вугілля з домішками фармацевтичних відходів повинна спиратися на систему взаємопов'язаних між собою рівнянь тепло-масопереносу, що враховує незворотні фізико-хімічні перетворення при високотемпературній обробці, а також кінетичні рівняння, що описують ці перетворення.

У разі, якщо кінетичні рівняння, що описують ці явища, можна прийняти незалежними від концентрацій газоподібних компонентів, які утворюються, то система рівнянь спрощується та її можна вирішити без урахування конкретного механізму масопереносу.

Перехід до одновимірної моделі можливий при розгляді області завантаження без урахування матеріальних і теплових потоків у вертикальному напрямку або при використанні усереднених величин за відповідною координатою.

Теплофізичні характеристики повинні бути представлені функціональними залежностями від температури та змінних, які визначають стан завантажувальної маси.

Таким чином, математична модель теплообміну в процесі утилізації фармацевтичних відходів в коксових батареях може мати різну ступінь деталізації процесів. Для опису теплообміну та теплофізичних характеристик задачі моделювання можна обмежити аналізом двох процесів: переходом органічних сполук в розплавлений стан і утворенням золи.

Литература:

1. Руководство по безопасному уничтожению ненужных фармацевтических препаратов во время и после экстренных ситуаций. Всемирная организация здравоохранения, 1999 г.
2. Гаврилов Р. В., Гладкий В. В., Бескорсый А. П., Постникова В. А., Костенко О.В. Альтернативный способ уничтожения высокотоксичных отходов // Сотрудничество для решения проблемы отходов: 2-я Международная конференция (9-10 февраля 2005 г. Харьков). – Харків: [www.waste.com.ua](http://www.waste.com.ua).
3. Кутовая О.В., Кутовой Д.С., Гринь Г.И. Газификация как эффективный способ охраны окружающей среды // Актуальні проблеми сучасної хімії: 2 Всеукраїнська науково-практична конференції студентів, аспірантів та молодих науковців (24-25 травня, м. Миколаїв). ‒ Миколаїв: Вид-во Торубара В.В., 2018. ‒ с. 59.
4. Журавский А.А, Кутовая О.В., Кутовой Д.С., Гринь Г.И. Разработка способа утилизации отходов фармацевтической промышленности. // Науково-практичні засади загально-інженерної підготовки фахівців фармації : І Міжнародна науково-практична інтернет-конференція (25-26 жовтня 2018, Харків). – Х. : НФаУ, 2018. – с. 101-104.
5. Кутова О.В., Ковалевська І.В., Журавський А. А., Гринь Г.И., Кутовой Д.С. Принципи математичного моделювання теплообміну у процесі піролізу таблеток з терміном придатності, що закінчився // Науково-практичні засади загально-інженерної підготовки фахівців фармації : І Міжнародна науково-практична інтернет-конференція (25-26 жовтня 2018, Харків). – Х. : НФаУ, 2018. – с. 137-142.