

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: prof. Ing. Jozef Markoš, DrSc.	Evidenčné číslo projektu: APVT-20-000804
Názov projektu: Modelovanie, simulácia a bezpečnostná analýza zariadení reakčnej destilácie v chemickom priemysle	

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Ústav chemického a environmentálneho inžinierstva FCHPT STU v Bratislave
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Univerzita v Dortmunde, Nemecko

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uveďte i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované): <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Švandová, Z., Katora, M., Markoš, J. and Jelemenský, L., Dynamic behaviour of a CSTR with reactive distillation, Chemical Engineering Journal, 119, (2006), 113 – 120,
	Švandová, Z., Jelemenský, L., Markoš, J., Impact of Mass Transfer Coefficient Correlations on Prediction of Reactive Distillation Column Behaviour, Chemical Engineering Journal, akceptované október 2007, doi: 10.1016/j.cej.2007.10.022
	Švandová, Z., Jelemenský, L., Markoš, J., Influence of the reactive distillation column configuration on its performance, a computational study, Chemical Papers, 61 (1), (2008), 58 – 64, doi: 10.2478/s11696-007-0079-3
	Katora, M., Markoš, J., Čamaj, V., Design of the reactive distillation column for ecological decomposition of organic chloroderivatives in waste water, Chemical Engineering Science, 62 (2007) 5193 – 5197, doi: 10.1016/j.ces.2006.12.016
	Katora, M., Buchaly, C., Kreis, P., Górak, A., Markoš, J., Reactive distillation – experimental data for n-propyl propionate synthesis, Chemical Papers, 61 (1), (2008), 65 – 69, doi: 10.2478/s11696-007-0080-x
V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:	Vypracovaný súbor programov a praktické skúsenosti a nadobudnuté teoretické vedomosti môžu byť použité v budúcnosti na návrh, simuláciu a bezpečnostnú analýzu zariadení reaktívnej destilácie (homogénne aj heterogénne katalytické, v jednoduchom miešanom reaktore ako aj v etážovej alebo náplňovej kolóne),

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa:

Dátum:

Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-20-000804

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Cieľom projektu bolo s využitím teoretických poznatkov a príslušného matematického aparátu vypracovať súbor programov, ktorý by umožňoval návrh, optimalizáciu a bezpečnostnú analýzu zariadení reaktívnej destilácie (RD). Bezpečnostná analýza týchto zariadení musí zahŕňať identifikáciu existencie možných viacnásobných ustálených stavov, analýzu ich stability, určenie bezpečných operačných podmienok, vyšetrovanie operačných podmienok, ktoré spôsobia prechody systému z jedného ustáleného stavu do iného a určenie podmienok bezpečného nábehu a odstávky týchto zariadení. V rámci riešenia projektu sme sa preto venovali aj tejto otázke.

Výsledky získané počas riešenia projektu boli publikované v 9 CC časopisoch, v 1 CA časopise, v 12 zborníkoch z medzinárodných konferencií sú náplňou dvoch PhD prác. Pri riešení projektu sme:

- porovnávali modely rôznej zložitosti (rovnovážny model, nerovnovážny model založený na Maxwell-Stefanovom prístupe, heterogénny nerovnovážny model s efektívnymi difúznymi koeficientami), pričom sme sa okrem iného pokúsili poukázať na vplyv komplexnosti matematického modelu na predikciu správania zariadenia, či už v ustálenom stave (identifikácia viacnásobných ustálených stavov), alebo v dynamickom režime (nábeh zariadenia do žiadaného ustáleného stavu).

- poukázali na možnosť použitia metodiky HAZOP s matematickým modelovaním pri bezpečnostnej analýze zariadení reaktívnej destilácie. Bezpečnostná analýza zahŕňala identifikáciu viacnásobných stavov a analýzu ich stability spolu s analýzou dynamického správania zariadenia počas nábehu, alebo počas náhlych zmien operačných parametrov. Okrem iného sme sa pokúsili ukázať, že návrh a bezpečnostná analýza zariadení reaktívnej destilácie pomocou matematického modelovania je závislá od komplexnosti zvoleného matematického modelu, ako aj od kvality parametrov, ktoré sú do daného modelu nutné.

- porovnali simulačné výsledky s experimentálnymi údajmi (spolupráca s Univerzitou v Dortmunde resp. NCHZ, a.s., Nováky)

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

The aim of the presented project is the development of mathematical model of reactive distillation column and its application in design, simulation, optimisation and safety analysis of such an unit. The safety analysis of RD units must include identification of the possible multiple steady states, analysis of their stability, study of safe operating conditions, investigation of conditions and trajectories which can shift the columns from one steady state to another one and determination of safe start-up and shut-down procedure.

The obtained results were published in 9 CC journals, 1 CA journal, 12 proceedings of the international conferences and were summarised in two PhD. Thesis. The research during the project may be divided in several parts:

- development, examination and comparison of different types of mathematical models for reactive distillation (equilibrium model, nonequilibrium model based on the Maxwell-Stefan theory, nonequilibrium heterogeneous model with the concept of effective diffusivity), simultaneously the aim of this part was to show the impact of model complexity on prediction of a reactive distillation column behaviour in steady state (identification of multiple steady state) or in dynamic regime (start-up and shut-down procedure).

- it was shown that the integration of a mathematical model approach into the HAZOP analysis is powerful methodology for safety and operability analysis of reactive distillation equipments. A safety analysis of these equipments includes an analysis of multiplicity of steady states and their stability, a study of safe operating conditions, an investigation of conditions and trajectories which can shift the column from one steady state to another one and determination of a safe start-up and shut down procedure. However, it was shown that a reliable prediction of reactive distillation column behaviour during the HAZOP deviations from normal operation conditions is affected by the complexity of a mathematical model and by the determination of the model parameters.

- the simulation results were compared with the experimental outputs (collaboration with the University of Dortmund, or with NCHZ, a.s., Nováky)

Podpis riešiteľa: