

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

<b>Riešiteľ:</b> Doc.Ing. Elena Graczová, PhD.	<b>Evidenčné číslo projektu:</b> APVV-0353-06
<b>Názov projektu:</b> Spresnenie termodynamického opisu viaczožkovej rovnováhy kvapalina–para a kvapalina–kvapalina–para pre potreby modelovania separačných zariadení	

<b>Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:</b>	Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava
<b>Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):</b>	

<b>Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:</b>	
<b>Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače):</b>  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Pavol Steltenpohl and Elena Graczová: Vapor–Liquid Equilibria of Selected Components in Propylene Oxide Production. <i>J. Chem. Eng. Data</i> 53, 1579-1582 (2008).
	Elena Graczová and Pavol Steltenpohl: Phase Equilibria of Binary Systems Comprising Formic Acid, N,N-dimethylformamide, 1-Chloro-2-ethylhexane and 2-Ethyl-1-hexanol. <i>J. Chem. Eng. Data</i> 53, 1785-1788 (2008).
	Elena Graczová and Pavol Steltenpohl: Vapor–Liquid Equilibria of Binary Systems Comprising 1-Chloro-2-ethylhexane and 2-Ethyl-1-hexanol. <i>J. Chem. Eng. Data</i> 53, 2475-2478 (2008).
	Elena Graczová, Pavol Steltenpohl, Matúš Chlebovec and Juraj Labovský: More Component Vapor–Liquid Equilibria Prediction for the Purpose of Separation Process Modelling. <i>Chemical Engineering Transactions</i> 18, 208-212 (2009).
	Steltenpohl Pavol, Elena Graczová: Application of the extended NRTL equation for the ternary liqui – liquid and vapor – liquid – liquid simulation. <i>Chem. Papers</i> 64 (3), 310-317 (2010).
<b>V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:</b>	Výsledkom je skvalitnenie opisu viaczožkových viacfázových rovnováh, sprístupnenie výsledkov formou elektronickej a knižnej databázy, skvalitnenie návrhových výpočtov destilačných kolón.

## Charakteristika výsledkov

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

Hlavným cieľom projektu bolo skvalitnenie termodynamického opisu viaczožkových viacfázových rovnováh a jeho aplikácia v modelových výpočtoch separačných zariadení. • Plánované ciele projektu boli splnené. Vychádzajúc z predchádzajúcich výsledkov, využili sme poznatky o V-L, resp. V-L-L rovnováhach dvoj- a trojzožkových systémov a pre skvalitnenie opisu štvor a viaczožkových viacfázových rovnováh sme použili  $G^E$  rovnice (konkrétne: NRTL, Wilson, UNIQUAC, Redlichov - Kisterov rozvoj) rozšírené o univerzálny ternárny príspevok. • Zamerali sme sa na koreláciu izobarických V-L rovnováh trojzožkových systémov a závislosť parametrov ternárnych príspevkov ku  $G^E$ -rovniciam sme vyjadrili ako funkciu teploty. Otestovali sme rôzne tvary závislostí; vypracovali algoritmus výpočtu parametrov ternárnej korekcie, vytvorili výpočtové programy pre ich vyhodnotenie (Uni\_ab, VL3m\*) a grafické spracovanie (VL3m\*). Sady parametrov ternárnej korekcie sme vyhodnotili pre 27 izobarických ternárnych systémov. • Použitie ternárnych príspevkov pre presnejšiu predpoveď viaczožkovej V-L rovnováhy, konkrétne štvorzožkovej, sme prezentovali na troch kvartérnych izobarických VLE systémoch. • Skvalitnili sme experimentálnu techniku a namerali sady originálnych rovnovážnych údajov viaczožkových systémov. • Vytvorili sme **knižnú a elektronickú databázu** parametrov ternárnych príspevkov 4-roch najbežnejšie používaných  $G^E$ -rovníc (**TCDB** - Ternary Correction Database). Program elektronickej databázy pozostáva zo základnej obslužnej Win32 aplikácie a samotnej databázy, ktorá v súčasnosti obsahuje 257 binárnych a 105 ternárnych izotermických a izobarických systémov. Jedná sa o rôzne systémy obsahujúce organické zložky rôzneho druhu: alkány, alkény, cykloalkány, aromáty, étery, estery, halogénderiváty, dusíkaté zlúčeniny, vodu. Demo verzia databázy je **voľne dostupná verejnosti** na www stránke pracoviska. • Skvalitnenie termodynamického opisu troj- a viaczožkových viacfázových systémov sa premietlo aj v návrhových výpočtoch separačných zariadení. Naše práce s diplomantmi a zverejnené štúdie v oblasti separácie alkánov a aromátov v prítomnosti prídavných rozpúšťadiel to jasne dokumentujú.

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

The main aim of this project was the improvement of the quality of more component more phase equilibrium prediction and application of this approach in separation equipment modeling and simulation. • The aims of this project were fulfilled. Based on our previous results, we employed the vapor-liquid (V-L) and vapor-liquid-liquid (V-L-L) equilibrium data of binary and ternary systems to improve the quality of quaternary and more component phase equilibria prediction based on the excess molar Gibbs energy ( $G^E$ ) equations (NRTL, Wilson, UNIQUAC, and Redlich-Kister expansion) extended by the universal ternary contribution terms. • The work was focused on the correlation of isobaric VLE of ternary systems and the variation of the ternary term parameters with temperature was assumed. We have checked different expressions for this variation; prepared an algorithm for the calculation of the ternary parameters, and computer programs for their evaluation (Uni\_ab, VL3m\*) and graphical representation (VL3m\*). The sets of ternary contribution parameters were evaluated for 27 isobaric equilibria of ternary systems. • The utility of the ternary contribution term in the improvement of more component phase equilibrium prediction was illustrated on basis of four quaternary systems. • We have prepared a **book and electronic database** of parameters of the ternary contribution for four most frequently used  $G^E$  equations (Ternary Correction Database, **TCDB**). The electronic database is composed of the main Win32 application and a database containing actually 257 binary and 105 ternary isothermal and isobaric equilibrium data. These systems are composed of organic compounds characterized by different nature and properties: alkanes, alkenes, cycloalkanes, aromatics, alcohols, ethers, esters, halogenated hydrocarbons, nitrogen containing compounds, water, etc. Demo version of this database is **freely accessible at the department www page**. • Improvement of the quality of ternary and more component equilibrium prediction was manifested also in the separation equipment design, as shown in our published works and diploma/bachelor theses of our students dealing with aromatics separation by distillation in the presence of an extractive solvent.

**Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas so zverejnením údajov v nej uvedených.**

Podpis zodp. riešiteľa: .....

Dátum: .....

Podpis štatutárneho zástupcu: .....

Pečiatka: