

**Formulár ZK - Záverečná karta projektu**

Riešiteľ: prof. Ing. Jozef Markoš, DrSc.	Evidenčné číslo projektu: LPP-0181-06
Názov projektu: Modelovanie procesov reaktívnej separácie	

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

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače):  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Sláva, J., Švandová, Z., Markoš, J., Modelling of reactive separations including fast chemical reactions in CSTR, Chemical Engineering Journal, 139, (2008), 517 – 522, doi: 10.1016/j.cej.2007.08.025
	Sláva, J., Jelemenský, L., Markoš, J., Numerical algorithm for modeling of reactive separation column with fast chemical reaction, Chemical Engineering Journal, 150 (2009), 252 – 260, doi: 10.1016/j.cej.2009.03.006
	Kotora, M., <u>Markoš, J.</u> , Sláva, J., Ecological treatment of waste water with organic chloroderivatives, Proceedings of SACEC 2006 (South African Chemical Engineering Congress), CD, ISBN 1 86840 617 2, Durban, JAR, 20 – 22 September 2006, lecture
	Sláva, J., Markoš, J., <i>Modelling reactive separations with very fast chemical reactions</i> , Proceedings of the 17 <sup>th</sup> European Symposium on Computer Aided Process Engineering, (CD) ISBN 978-0-444-53158-2, Bucharest, Romania, May 2007, Poster
	Sláva, J., Kotora, M., Markoš, J., Optimization of the reactive separations with very fast chemical reaction, Proceedings of the European Congress of Chemical Engineering – ECCE-6, CD, Gani R. and Dam – Johansen K. Editors, ISBN 978 – 87 – 91435 – 57 – 9,
V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:	<b>Použitie vypracovaných algoritmov a programov pri návrhu a optimalizácii zariadení reaktívnej separácie s veľmi rýchlymi reakciami</b>

## Charakteristika výsledkov

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

Práca bola zameraná na modelovanie a simuláciu procesov reaktívnych separácií, najmä takých, v ktorých prebieha jedna alebo viac rýchlych reakcií v homogénnej fáze. Dôraz bol kladený na vytvorenie numerického algoritmu, ktorý by bol dostatočne flexibilný na použitie pri reaktívnej destilácii (RD), ako aj reaktívnej absorpcii (RA). Zdrojový kód bol napísaný v programovacom jazyku Compaq Visual FORTRAN™. Procesy boli simulované v ustálenom stave, tak v miešanom prietokovom reaktore, ako aj v kolóne. Skúmané boli obidva prístupy – rovnovážny aj nerovnovážny. Pri nerovnovážnom modeli bola použitá dvojfilmová teória prestupu látky. Na opis reakcie a prestupu látky v kvapalnom filme bola využitá reakčne-difúzna rovnica. Za prípadovú štúdiu boli zvolené dva komplexné reakčné systémy pri reaktívnej destilácii a tri pri reaktívnej absorpcii. RD bola simulovaná pre miešaný prietokový reaktor s parciálnym kondenzátorom a pre RD etážovú kolónu s totálnym kondenzátorom. V prípade RA bola do úvahy braná len etážová kolóna. Prioritou pre odvodený matematický model a jeho programovú realizáciu boli flexibilita a jednoduchosť programu, aby sa mohol použiť v ďalších, zložitejších, výpočtoch (napr. optimalizácii, návrhu, atď.). Výsledky niektorých simulácií boli porovnané s výsledkami získanými základným balíkom komerčného simulačného programu ASPEN Plus. Zostavený program je schopný konvergovať a dosiahnuť riešenie aj napriek zlým odhadom hodnôt premenných.

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

The work was focused on modelling and simulation of reactive separation processes, especially those with fast homogeneously catalysed chemical reaction/s. The emphasis was put on creating numerical algorithm which would be flexible enough to be used in both reactive distillation (RD) and reactive absorption (RA). Source code of the program was built in Compaq Visual FORTRAN™ programming language. Simulated were processes in steady state, proceeding in both Continuous Stirred Tank Reactor and column. Both equilibrium and non-equilibrium (rate-based) model approaches were investigated. In non-equilibrium model, film theory was used with reaction-diffusion equation describing mass transfer coupled by chemical reactions in the liquid film. As a case study, two complex reaction systems were used for modelling reactive distillation and three for reactive absorption. In RD, both CSTR with partial condenser and RD tray column with total condenser were used. In RA, tray column was used. For developed mathematical model and its program realization, the priority was its flexibility and simplicity, in order the program could be used in more complex computations (e.g. optimization, design, etc.). The simulation results were compared with basic package of simulation program ASPEN Plus. The built program is able to converge and reach solution also from badly estimated starting values of variables.

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

Podpis zodp. riešiteľa: .....

Dátum: ..11.12.2009.....

Podpis štatutárneho zástupcu: .....

Pečiatka: