

Desztilláció modellezésére alkalmas új korrelációs függvények azeotróp elegyek gőz-folyadék egyensúlyi görbéire

New correlation functions of VLE-curves of azeotropic mixtures for distillation modelling purposes

dr. ANDRÁS Csaba Dezső¹, dr. MOLNOS Éva¹,
dr. MÁTYÁS László², prof. dr. SZÉP Alexandru¹

¹Sapientia EMTE, Élelmiszertudományi Tsz., Csíkszereda, Szabadság tér 1.
andrascsaba@uni.sapientia.ro

²Sapientia EMTE, Biomérnöki Tsz., Csíkszereda, Szabadság tér 1.

ABSTRACT

The simulation of distillation processes require accurate vapour-liquid equilibrium (VLE) data, since even minor (few percent) of deviation of them could cause major differences between the model results and the real system behavior. The azeotropic mixtures are highly non-ideal systems, displaying exotic phase behavior, as inflection points, which create difficulties in fitting attempts. The VLE data are available in general as discrete values, but for modeling and design of the separation processes, continuous function would be more practical. We developed a simple method to identify several function types for fitting on VLE data for whole concentration domain. The results are empirical, as do not imply thermodynamic considerations. The fitting parameters of binary ethanol-water mixture VLE curve were determined, and give the lowest relative error, compared with the results from the literature data. The best fitted function was suitable for calculation of tray number of distillation column with McCabe-Thiele method, implementing them in an Excel spreadsheet, giving similar result with Vaxa McCabe-Thiele software. The methodology is suitable for fitting continuous functions on VLE data for non-ideal binary or multi-component mixtures both.

Keywords: distillation modelling, vapour-liquid equilibria, curve fitting, azeotropic mixtures

KIVONAT

A desztillációs folyamatok szimulációja pontos gőz-folyadék egyensúlyi adatokat igényel, mivel ezek kismértékű (néhány százalékos) eltérése jelentős eltéréseket okozhat a modell eredményei és a rendszer valós viselkedése között. Az azeotróp keverékek fokozottan nem-ideális rendszerek, amelyek különös viselkedést mutatnak pl. áthajlási ponttal rendelkeznek, ami nehézségeket okoz az illesztési megvalósításában. Az egyensúlyi adatok általában diszkrét értékeként állnak rendelkezésre, de az elválasztási folyamatok modellezéséhez és tervezéséhez a folyamatos görbék célszerűbbek. Egyszerű módszert dolgoztunk ki függvénytípusok azonosítására, melyek az egyensúlyi görbe teljes koncentráció-tartományában illeszkednek. Az eredmények empirikusak, mivel nem alkalmaztuk termodinamikai megfontolásokat. Meghatároztuk a bináris etanol-víz keverék egyensúlyi görbéjének illeszkedési paramétereit, amelyek az irodalmi adatok eredményeivel összehasonlítva a legalacsonyabb relatív hibát adták. A legjobban illeszkedő függvény alkalmas volt a desztillációs oszlop tányérszámának McCabe-Thiele módszerrel történő kiszámítására, Excel táblázattal, hasonló eredményt adva a Vaxa McCabe-Thiele szoftverre. A módszer alkalmas folytonos egyensúlyi függvények illesztésére, nem-ideális bináris vagy többkomponensű keverékek esetére is.

Kulcsszavak: desztilláció modellezés, gőz-folyadék egyensúly, görbeillesztés, azeotróp elegyek