ABSTRACT

In this thesis experimental and theoretical investigations have been made concerning both batch azeotropic and extractive distillation columns. The detailed dynamic modeling, simulation and optimization are made for both operations.

The experimental work was done by using batch distillation column containing 10 bubble cup trays to study both batch azeotropic and batch extractive distillation. Ethanol - water mixture used in both operations, but benzene was used as a solvent for batch azeotropic distillation, and ethylene glycol was used for batch extractive distillation.

Experimental work includes studying the effect of reflux ratio heat duty and feed composition on the behavior of batch azeotropic distillation column. It covers studying the effect of reflux ratio, solvent to vapor ratio (E/V), feed composition on the behavior of batch extractive distillation column.

A range of reflux ratio was studied for both operations, 1 to 4 for batch azeotropic distillation and 0.5 to 1.5 for batch extractive distillation. Also the studied range of initial ethanol molar composition was 50% to 80% for batch azeotropic distillation and 70% to 89% for batch extractive distillation.

The experimental boiling points were compared with that predicted from the liquid phase activity coefficient models such as Wilson, NRTL, UNIFAC, UNIQUAC but the NRTL method was found as appropriate model for ethanol-water-benzene system, while Wilson model for ethanol-water-ethylene glycol system. The residue curve map then plotted for two used systems.

A dynamic model was developed to study the behavior of multicomponent non ideal mixture in both batch azeotropic and batch extractive distillation. The column model composed of the MESH (material balance, heat balance, equilibrium, sum of mole fractions) equations. The set of nonlinear ordinary differential equations governing the unsteady state composition profile in a batch distillation column

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com

eigenvalue integration methods. Both integration methods were found to give the same results, but the eigenvalue method takes simulation time as 10% of time taken by Runge-Kutta integration method.

The calculations and simulations in this thesis were obtained by using MATLAB environment, version 6.0. Plate compositions were calculated by integration component material balance equations simultaneously. Newton's algorithm was used to calculate the actual plate temperature on each tray. Total material balance and heat balance equations were used to predict the vapor and liquid flowrates throughout the column.

The step time was adjusted to give minimum error, without any instability. The step time was 3 sec for batch azeotropic distillation and 10 sec for batch extractive distillation. Also the volatility and physical properties were calculated at every step time. The compositions and temperature were calculated in each stage. The initial still composition was adjusted according to the residue curve map.

This model shows good agreement with experimental results and explains features of the non-ideal batch distillation process. It can be employed to simulate the batch distillation operation as a function of time, and can be used to determine the following as a function of time:

- *distillate product composition*
- *bottoms product composition*
- *stage by stage composition profile*
- *stage by stage flow profile*
- *condenser, stages and reboiler holdup*
- *condenser, stages and reboiler temperatures*

Finally nonlinear optimization technique applied to optimize both systems depending on increasing the ethanol recovery and reducing batch time. The reflux ratio was found to be the most effective variable on optimization of both systems.

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com

النمذجة الرياضية للإنتشار في الزيولايت عند ظروف ذات درجة حرارة ثابتة

تقدم بها

هشام محمد مجيد

(بكالوريوس هندسة كيمياوية)

إشراف

ا.م.د. شهرزاد رفعت رؤوف

الخلاصة

تم خلال هذا البحث دراسة الإنتشار في الأنظمة المسامية، وهذه الأنظمة المسامية واسعة التطبيق مثل (العوامل المساعدة، المناخل الجزيئية، الراتنجات) ويعتبر الزيولايت بأنواعه كافة أحد هذه الأنظمة المسامية. تم إختيار نموذج رياضي لوصف عملية الإنتشار بإفتراض أن هناك جسيمة كروية تحتوي في داخلها على بلورات كروية أيضاً، إضافة الى فرضيات أخرى. تم حل هذا النموذج الرياضي مع شروطه الإبتدائية والحدودية بالطرق التحليلية متمثلة بطريقة (تحويل لابلاس) ثم قمنا بإدخال هذا الحل التحليلي في برنامج بلغة ابيسك الحديث (Visual Basic 6) رسم العلاقة بين المادة المنتشرة داخل العامل المساعد

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com

(M_t/M_o) مقابل الزمن اللابعدي $(\tau^{0.5})$ ، حيث أظهرت النتائج بالاعتماد بصورة رئيسية على قيمة المعامل (α) وثم (β)، إن هذه العملية هي متناوبة بين أن تكون عملية الانتشار المرئية أو ما بين البلورات مسيطرة حيث ($\alpha > 10^2$)، او أن تكون عملية الانتشار ألمجهري أو داخل البلورات هي المسيطرة ($\alpha < 10^{-3}$) او قد تكون وسطية بين تلك العمليتين ($10^{-3} < \alpha < 10^2$).

بينت المقارنة لدراسة الحالية مع الدراسات السابقة أن النموذج الرياضي الحالي يعطي نتائج جيدة.

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com

الخلاصة

يتـناول هـذا البحـث دراسة عملية فصل المواد الايزوتروبية باستخدام نوعين من ابراج التقطير غير المثالية.

فـي الجـزء العملي تم استخدام برج تقطير دفعة واحدة يَحتوي على عشرة صواني لدراسـة كـل من التقطير الايزوتروبي والتقطير الاستخلاصي . استخدم خليط من الماء والإيـثانول في كلتا العمليتين، لكن استخدم البنزينَ كمذيب في حالة التقطير الايزوتروبي والإثيلين كلايكول في حالة التقطير الإستخلاصي.

الجزء العملي يَتضمّنُ دِراسَة تأثير نسبة الراجع و التركيز البدائي ومعدل التسخين علـى سـلوكِ التقطـير الايزوتروبي وكذلك دُراسةُ تأثيرَ نسبة الراجع والتركيز البدائي ومعدل جريان المذيب على سلوكِ التقطير الإستخلاصي .

تـم مقارنـة درجات الغليان الفعلية مع درجات غليان مستخرجة من نماذج معامل نشـاطِ الطور السائل مثل (Wilson, UNIFAC, UNIQUAC ,NRTL)، حيث وجد أن نموذج (NRTL) هو الأكثر ملائمة لمزيج الايثانول- الماء- بنزين ، بينما نموذج (Wilson) هو الملائم لمزيج الايثانول- الماء- الإثيلين كلايكول.

تـم رسـمَ خـريطة منحنى البقيّةِ لمزيج الايثانول- الماء- البنزين وكذلك لمزيج الايثانول- الماء- الإثيلين كلايكول. خريطة منحنى البقيّةِ لتقطير الدّفعةِ تُعطي المعلوماتَ الأسـاسـية التـي تكون حيوية لتصميم برج التقطير، حيث ان التركيزالأولي يحسبُ طبقاً لخريطة منحنى البقيّةِ.

تـم تطوير النموذج الديناميكي لدُراسة سلوك برج دفعة واحدة للتقطير الايزوتروبي والاستخلاصـي . تـم حـل مجموعة المعادلاتِ التفاضليةِ اللاخطّيةِ غير المستقرةِ لعمودِ التقطـير باسـتعمال طريقتيـن للتكامل وهما طريقة التكامل العددي (Runge-Kutta) وطـريقة المصـفوفات حيـث تبيـن آن كلتا الطريقتين تعطي نفس النتائج ولكن طريقة المصفوفات تكون أسرع من طريقة التكامل العددي.

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com

استخدم البرنامج الرياضي (MATLAB 6) لدراسة الموديل الرياضي. ان حجم الموديل الرياضي يَزداد ويتعقد بزيادةِ عددِ الصّواني والمكوّناتِ . إنّ معدل الزيادة بزمن التكامل صغير جداً، يتم حساب الخواص الفيزيائية للنظام كل وقتٍ ، كذلكَ التّراكيزَ ودرجة الحرارةَ يَحْسبان على كل صينية مع الزمنَ.

هنالك تطابق جيد بين النتائج النظرية للموديل الرياضي والنتائج العملية لبرج التقطيرفي كلتا الحاتين.

يمكن استخدام الموديل الرياضي لايجاد المعلومات التالية مع الزمن.

- كمية المتقطر الناتج.
- تركيز المواد على الصواني.
- معدل جريان الطور السائل داخل البرج.
- معدل جريان الطور الغازي داخل البرج.
- كمية المواد الموجودة على الصواني.
- درجات الحرارة داخل البرج.

استخدم نظامَ nonlinear optimization لايجاد احسن الظروف اللازمة لعمل كل من التقطير الايزوتروبي والتقطيرا لاستخلاصي، حيث اعتمد في عملية المفاضلة على زيَادَة استرداد الايثانول وتقليل الوقت الازم للعملية.

PDF created with pdfFactory trial version www.pdffactory.com