

**MEGÚJÍTHATÓ EREDETU KOMPONENST TARTALMAZÓ ÜZEMANYAG  
CSEPP PÁROLGÁSÁNAK MODELLEZÉSE**  
**Kontos János, Járvás Gábor, Dallos András**

*Pannon Egyetem,  
8200, Veszprém, Egyetem u. 10,  
kontosjan@gmail.com*

A vegyipari biztonságtechnikában rendkívüli jelentőséggel bír a különböző oldószer-elegyek párolgási tulajdonságainak pontos ismerete. A vészhelyzetek, haváriák esetén a bioszférába kerülő anyagok mennyiségének meghatározása elsődleges fontosságú. A párolgó folyadékelegyeket legtöbbször nem tekinthetjük ideálisnak, ezért a viselkedésük pontos leírásához szükséges egy olyan modell kifejlesztése, mely bonyolult összetételű elegyek esetén is képes a reális viselkedést figyelembe venni. A párolgó felület geometriája szerint többféle párolgásról beszélhetünk. Ezek közül az egyik legfontosabb a csepp párolgás, melynek megismerése nem csak a veszteség megelőzésben, de az ipar számos területén felhasználható. Munkánk során egy olyan, a többkomponensű folyadékelegyek csepp párolgását leíró modellt hoztunk létre, mely képes figyelembe venni a párolgó elegy ideálistól eltérő viselkedését.

A kifejlesztett párolgási modell kvázi-egyensúlyi lépéseken keresztül képes a párolgó csepp fizikai-kémiai paraméterei (méret, összetétel, hőmérséklet) időbeli változásainak és a csepp élettartamának számítására. Az intermolekuláris kölcsönhatások modellezésére és a folyadékfázis reális viselkedésének leírására a COSMO-RS elméletre épülő COSMOtherm kvantumkémiai programot használtuk. A molekulák gázfázisbeli transzportjának szimulációjához a Maxwell-Stefan féle diffúziós és konvekciós elméletet alkalmaztuk. A párolgási tömeg-fluxus számításához szükséges parciális differenciálegyenletek megoldására, illetve a környezet felől a cseppbe vezetéssel közölt hőmennyiségének meghatározásához a COMSOL Multiphysics programcsomagot alkalmaztuk, mely a végelemek módszerén alapszik. A számítások elvégzéséhez és a különböző szoftverplatformok közötti kapcsolat kialakításához saját fejlesztésű Matlab keretprogramot készítettünk.

A létrehozott csepp-párolgási modellt kísérleti adatok felhasználásával validáltuk. A tesztelés során megállapítottuk, hogy a modell alkalmas többkomponensű folyadék-elegyek cseppjei párolgásának becslésére annak ellenére, hogy a szimulációkba bevont rendszerek igen változatos összetételűek voltak. A kifejlesztett modell gyakorlati alkalmazását motorbenzin-etanol elegyeken mutatjuk be. A validált modell segítségével különböző összetételű (0-100 m/m%) benzin és bioetanol elegyet tartalmazó cseppek párolgását szimuláltuk. A számítások során kapott eredmények összhangban vannak a kísérleti tapasztalatokkal.

A munka a Magyar Állam és az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 projekt keretében.