

НАУЧНЫЕ ЗАМЕТКИ

Ս. Ս. ХАЧАТՐՅԱՆ, Ա. Բ. ԿԱՆՈՎՅԱՆ, Կ. Ս. ԿՈՒՆՅԱՆՈՎԱ

ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ВИЛЬСОНА ДЛЯ КОРРЕКЦИИ  
 ПАРОВИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ

В последнее время как у нас в стране, так и за рубежом делаются попытки создать математические модели, наиболее точно соответствующие процессу паровидкостного равновесия. Требуемая точность модели определяется тем, что полученные результаты в дальнейшем используются как основные составляющие методов расчета многокомпонентной ректификации.

В работе [1] были рассмотрены уравнения Ван-Лаара, Маргулеса, Редлиха-Кистера применительно к бинарным смесям. Целью настоящей работы является изучение модели реальных растворов, предложенной Вильсоном [2], и в ней рассматривается применение модели для бинарных систем.

Отклонение системы от идеальной учитывается коэффициентом активности, поэтому он и является основной характеристикой при расчете паровидкостного равновесия.

Зависимость коэффициента активности от состава смеси приближенно выражается следующим образом

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_i X_i \ln \gamma_i, \quad (1)$$

где  $g^E$  — мольная энергия Гиббса;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T$  — температура;  $X$  — мольный состав  $i$ -го компонента в жидкой фазе;  $\gamma$  — коэффициент активности  $i$ -го компонента.

Энергия Гиббса как функция от мольных долей всех компонентов смеси по уравнению Вильсона определяется так:

$$\frac{g^E}{RT} = - \sum_i X_i \ln \left( 1 - \sum_j X_j A_{ji} \right), \quad (2)$$

где  $A$  — бинарные константы ( $A_{ii} = 0$ ,  $A_{ij} = A_{ji}$ ).

Проделив подстановку, получим зависимость коэффициентов активности от состава смеси:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left| \sum_j X_j A_{ji} \right| - \frac{\sum_j X_j A_{ij}}{\sum_j X_j A_{ji}} \quad (3)$$

Константы  $A$  определяются из системы уравнений, дающих зависимость коэффициентов от состава в бинарных смесях.

Таблица 1

Вода—уксусная кислота			Ацетон—винилацетат		
X	У <sub>жид</sub>	У <sub>газ</sub>	X	У <sub>жид</sub>	У <sub>газ</sub>
0.270	0.394	0.34955	0.1	0.173	0.25308
0.455	0.595	0.49456	0.2	0.306	0.31424
0.588	0.707	0.62823	0.3	0.424	0.38319
0.690	0.790	0.74785	0.4	0.530	0.46282
0.769	0.844	0.84440	0.5	0.626	0.55332
0.833	0.886	0.92231	0.6	0.715	0.66230
0.886	0.919	0.97903	0.7	0.794	0.77346
0.930	0.950	0.98103	0.8	0.869	0.89119
0.968	0.977	0.99754	0.9	0.938	0.99190

Таблица 2

Метилацетат—бензол			Этилацетат—уксусная кислота		
X	У <sub>жид</sub>	У <sub>газ</sub>	X	У <sub>жид</sub>	У <sub>газ</sub>
0.055	0.133	0.23062	0.138	0.327	0.36819
0.076	0.175	0.24327	0.182	0.422	0.40850
0.139	0.262	0.29180	0.286	0.589	0.50672
0.189	0.356	0.32587	0.420	0.732	0.63001
0.212	0.387	0.34061	0.561	0.854	0.75965
0.620	0.749	0.66170	0.872	0.978	0.99129
0.735	0.832	0.79197			
0.863	0.914	0.94033			
0.895	0.933	0.97059			

$$\ln \gamma_1 = -\ln(1 - A_{21}X_2) + X_2 \left[ \frac{X_2 A_{12}}{1 - X_1 A_{12}} - \frac{X_1 A_{21}}{1 - X_2 A_{21}} \right]; \quad (4)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(1 - A_{12}X_1) - X_1 \left[ \frac{X_2 A_{12}}{1 - X_1 A_{12}} - \frac{X_1 A_{21}}{1 - X_2 A_{21}} \right]; \quad (5)$$

Данная система решалась на ЭВМ методом последовательных приближений [4].

Модель Вильсона была применена для ряда бинарных систем. В качестве примера для анализа процесса парожидкостного равновесия в таблицах 1 и 2 (где У—состав паровой фазы) приводятся расчетные данные следующих бинарных смесей: ацетон-винилацетат, вода-уксусная кислота, метилацетат-бензол, этилацетат-уксусная кислота. Средняя абсолютная ошибка по составу паровой фазы составляет соответственно 4,6; 4,8; 4,9; 5,9%. Расчеты показывают, что уравнение Вильсона дает удовлетворительные результаты для корреляции парожидкостного равновесия в бинарных системах по сравнению с вышеуказанными моделями [1].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Татевосиц А. В., Зочирчи С. С., Килешова Ю. И. «Известия АН АрмССР» (серия Г-III), т. XXVII, № 3, 1974.
2. Коган В. Б. Гетерогенные равновесия. 1968.
3. Кабарян В. В., Бодрица А. И., Тигрчик В. А., Ветцман В. И. ТОНТ, 1 (1), 1970.