

**Семёнов Иван Александрович,**

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

**Шишкин Марк Дмитриевич,**

магистрант каф. ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: mark.shishkin.00@mail.ru

## **РАСЧЁТ ПАРОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КОЭФФИЦИЕНТОВ АКТИВНОСТИ**

**Semenov I.A., Shishkin M.D.**

## **CALCULATION OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM BASED ON THERMODYNAMIC MODELS OF ACTIVITY COEFFICIENTS**

**Аннотация.** Рассмотрены основные термодинамические модели для расчета коэффициентов активности компонентов неидеальных растворов. Показана необходимость точной оценки парожидкостного равновесия при моделировании массообменных процессов.

**Ключевые слова:** коэффициенты активности, растворы, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC.

**Abstract.** The main thermodynamic models for calculating the activity coefficients of components of non-ideal solutions are considered. The need for an accurate assessment of vapor-liquid equilibrium when modeling mass transfer processes is shown.

**Keywords:** activity coefficients, solutions, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC.

Равновесие пар–жидкость имеет огромное значение при выполнении технологических расчетов в области химической технологии. В частности, точная оценка концентраций равновесных фаз необходима для проектирования, оптимизации и моделирования процессов ректификации.

При описании парожидкостного равновесия важным аспектом является степень идеальности жидкого раствора. Идеальные и неидеальные растворы представляют собой две фундаментальные концепции в изучении смесей. Понимание их различий имеет решающее значение для прогнозирования поведения смесей в различных процессах.

Идеальный раствор – это теоретическая концепция, предполагающая идеальное смешивание и неспецифическое взаимодействие компонентов друг с другом. В идеальном растворе свойства, такие как объем, энтальпия и энтропия, подчиняются правилу аддитивности свойств отдельных компонентов.

Однако реальные смеси в большинстве случаев относятся к неидеальным растворам. Такое отклонение от идеальности вызвано специфическим взаимодействием между отдельными компонентами. Эти взаимодействия могут проявляться в нелинейных связях между свойствами и концентрациями, а также в образовании межмолекулярных сил, таких как водородные связи или силы Ван-дер-Ваальса.

Термодинамическое описание неидеальности смесей сводится к оценке коэффициентов активности каждого компонента раствора. Расчёт коэффициен-

тов активности в зависимости от концентраций веществ выполняют на основе термодинамических моделей.

Существует несколько моделей коэффициентов активности, каждая из которых имеет свой собственный набор допущений и математических выражений. Некоторые распространенные модели включают уравнение Маргулеса, уравнение Вильсона, модель NRTL (NonRandomTwoLiquid) и модель UNIQUAC (UniversalQuasiChemical). Эти модели включают различные параметры и условия взаимодействия и позволяют математически описать сложность фазового равновесия в различных системах [1].

Одной из известных моделей коэффициентов активности, широко используемых в расчетах парожидкостного равновесия, является модель UNIFAC. Модель UNIFAC выходит за рамки многих других моделей, поскольку включает подробную информацию о молекулярной структуре и взаимодействиях веществ друг с другом, что делает ее особенно подходящей для сложных смесей, встречающихся в различных отраслях промышленности.

UNIFAC действует по принципу группового вклада, при котором молекулы делятся на функциональные группы, каждая из которых характеризуется своими параметрами взаимодействия. Эти параметры описывают энергетический вклад различных групп в общее поведение раствора. Суммируя вклады отдельных групп, UNIFAC дает всестороннее описание неидеального поведения в многокомпонентных смесях.

Одним из ключевых преимуществ модели UNIFAC является ее универсальность и применимость к широкому кругу систем, включая полярные и неполярные вещества. Она может точно предсказывать равновесие пар–жидкость, равновесие жидкость–жидкость и другие термодинамические свойства в системах, содержащих различные органические соединения, электролиты и смеси растворителей.

Применение моделей коэффициентов активности для моделирования массообменных процессов широко распространено в таких отраслях, как нефтехимия, нефтепереработка, органический синтез. Однако важно отметить, что модели коэффициентов активности имеют свои специфические ограничения и допущения. Они часто полагаются на эмпирические корреляции и требуют экспериментальных данных для оценки своих параметров. Кроме того, эти модели могут неточно отражать поведение сильно неидеальных систем и систем со сложными молекулярными взаимодействиями. Поэтому важно тщательно выбирать подходящую модель активности под конкретную систему веществ и проверять результаты ее расчета на экспериментальных данных.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Уэйлес, С. Фазовые равновесия в химической технологии: В 2-х ч., Ч. 2. Пер. с англ / С. Уэйлес – М.: Мир, 1989. – 360 с.