

УДК 517.958

З.Н. Есина, В.В. Мурашкин, М.Р. Корчуганова

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВСПЫШКИ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ ПО ДАННЫМ О КОЭФФИЦИЕНТАХ АКТИВНОСТИ

Обсуждается метод расчета температуры вспышки по результатам моделирования равновесия жидкость – твердое при постоянном давлении с использованием уравнения Гиббса. Используется модель предсказания температуры вспышки смеси на основе модифицированного уравнения Ле-Шателье, уравнения Антуана и модели для оценки коэффициента активности.

Ключевые слова: бинарные смеси, температура вспышки, температура кипения, коэффициенты активности, коэффициент сольватации, коэффициент ассоциации.

Безопасность при производстве и хранении горючих жидкостей является одной из важнейших задач, поскольку часто случаются опасные ситуации, такие, как взрывы на бензозаправках, аварии при перевозке горючих веществ и т.д. При оценке пожарной опасности жидкостей с температурой плавления менее 50 °С применяют ряд показателей пожаровзрывоопасности: группа горючести, температура вспышки, температура воспламенения, температура самовоспламенения, нижний и верхний концентрационные пределы распространения пламени, способность взрываться и гореть при взаимодействии с водой, кислородом воздуха и другими веществами и др. Эти параметры связаны между собой. Так, например, температура вспышки линейно связана с температурой кипения: $t_{fp} = a + bt_b$, которая зависит от давления окружающей среды. В связи с этим актуальной является задача оценки влияния давления и температуры на термодинамические характеристики смесей жидкостей. Особенно важно изучить поведение при различных температуре, давлении, концентрации, теплофизических параметрах среды и др. таких горючих жидких смесей, как топливные смеси, тормозные жидкости, антифризы, применяемые для охлаждения двигателей внутреннего сгорания, теплоносители в системах отопления и кондиционирования. Наряду с этим, необходимо решать задачу теплообмена, которая разделяется на внешнюю или внутреннюю в зависимости от характеристики источника тепла и формы аккумулятора тепла. Таким образом, прогнозирование температуры вспышки является только частью проблемы изучения условий пожаровзрывобезопасности.

Опасность воспламенения жидкостей прежде всего характеризуется их точкой вспышки. Точка вспышки определяется как температура, при которой жидкость испаряется и образует горючую смесь с воздухом. Для измерения температуры вспышки применяют приборы закрытого и открытого типов. В приборах закрытого типа изучается состояние равновесия между жидкостью и паром компонентов смеси. В приборах открытого типа учитывается взаимодействие смеси горючих жидкостей с атмосферой. Точка вспышки смеси – критическое свойство, но экспериментальные данные для многих смесей отсутствуют, а получение таких данных дорого и занимает много времени. Поэтому разработка математических моделей для анализа состояния окружающей среды в условиях увеличения риска

возникновений чрезвычайных ситуаций является важной научной и практической задачей.

В настоящей работе рассматривается возможность прогнозирования температуры вспышки в приборах закрытого типа, т.е. влияние атмосферных условий в этом приближении не учитывается.

Несколько моделей для предсказания точки вспышки для смесей различных типов были предложены ранее [1–11]. Модели, разработанные для идеальных растворов [4–6], непригодны для неидеальных смесей, которые встречаются наиболее часто. Неидеальность растворов обусловлена взаимодействием молекул. Влияние неидеальности жидкой фазы на коэффициенты активности учитывается посредством построения соответствующих термодинамических моделей, которые можно разделить на две категории: модели с использованием экспериментальных данных и так называемые априори прогнозирующие модели. Для моделирования свойств раствора необходимо уметь рассчитывать коэффициенты активности компонентов смеси в жидкой фазе.

Общая модель для предсказания температуры точки вспышки

Часто используются термодинамические модели NRTL, Вильсона и UNIQUAC, но в этих моделях бинарные параметры взаимодействия рассчитываются по экспериментальным данным. Поэтому эти модели не являются прогнозирующими. Модель UNIFAC [12] является прогнозирующей, так как не нуждается в экспериментальных данных для расчета параметров бинарного взаимодействия. Для оценки взаимодействия используются параметры групповых вкладов [10, 13].

Общая модель для предсказания температуры вспышки смеси известна [1] и усовершенствована Лиу и др. [2] на основе модифицированного уравнения Ле-Шателье (1), уравнения Антуана (2) и модели для оценки коэффициентов активности [3]:

$$\sum_i x_i \gamma_i P_i / P_{i,fp}^0 = 1; \quad (1)$$

$$\log P_i = A - B_i / (T + C_i), \quad (2)$$

где x_i – мольная доля i -го компонента в жидкости; γ_i – коэффициент активности компонента; P_i – давление насыщенного пара i -го компонента смеси при заданной температуре; $P_{i,fp}^0$ – давление пара чистого горючего компонента i в его точке вспышки соответственно.

Уравнение Ле-Шателье $L = 1 / \sum_i p_i / L_i$ применяется для определения границы взрыва смеси паров и представляет собой формулу для расчета средней гармонической величины, где L – предел воспламенения смеси; L_i – пределы воспламеняемости отдельных компонентов; p_i – вклад отдельных компонентов в изучаемое свойство жидкой смеси. В частности, уравнение позволяет определить среднее давление P_{fp} , при котором может произойти вспышка, т. е. при $L_i = P_{i,fp}^0$. При условии фазового равновесия жидкости и пара парциальное давление компонента неидеальной жидкости имеет вид $p_i = x_i \gamma_i P_i$. Коэффициент активности вводится как характеристика неидеальности смеси. Если коэффициент активности равен единице, это означает, что взаимодействия между различными или теми же самыми молекулами идентичны и смесь находится в идеальном состоянии; если коэффициент активности отличен от единицы, смесь находится в неидеальном состоянии. В случае идеального раствора, $\gamma_i = 1$, парциальное давление компонента

пропорционально его доле в растворе $p_i = x_i P_i$, что является формулировкой закона Рауля. Уравнение Антуана представляет собой приближенную запись уравнения Клаузиуса – Клапейрона для равновесия жидкой и паровой фаз и дает возможность от давления перейти к температуре, характеризующей точку вспышки, и найти зависимость температуры вспышки от состава. Для расчета температуры вспышки на базе моделей равновесия по заданному составу раствора определяют коэффициенты активности компонентов γ_i , затем по уравнению Антуана находят давление пара компонентов смеси $P_{i,fp}^0$ при температуре вспышки чистых компонентов. Температура вспышки T_{fp} для смеси находится в результате совместного решения уравнения Антуана (2) и уравнения (1). Подстановка давления P_i из уравнения Антуана в уравнение Ле-Шателье позволяет рассчитать температуру вспышки для всего диапазона составов раствора, т.е. зависимость $T(x)$. Основная проблема заключается в определении коэффициентов активности компонентов неидеальной смеси. Эта задача может быть решена, если использовать методы математического моделирования.

Термодинамические модели фазового равновесия растворов

Из моделей коэффициентов активности жидкой фазы можно выделить два вида: 1) модели, применяемые для неполярных систем, например смеси углеводородов, изомеров, и гомологов, которые включают теорию регулярного раствора (RST) и модели Флори – Хаггинса; 2) модели, применяемые для неполярных и полярных систем. Эти модели обычно используются для предсказания коэффициентов активности жидкой фазы и включают уравнение Ван-Лаара, уравнение Вильсона, NRTL, уравнение UNIQUAC, уравнение UNIFAC и др.

Видал и др. [13] объединили прогноз точки вспышки Лиу и др. [2] с моделью UNIFAC, чтобы предсказать минимум для сильно неидеальных растворов. Гмелинг и Расмуссен рассчитывали точку вспышки бинарных систем, применяя для оценки коэффициентов активности модель UNIFAC [10, 14]. В минимуме точки вспышки смеси температура вспышки может понизиться на несколько градусов, увеличивая риск взрыва, что часто сопровождается положительным отклонением равновесия жидкость – пар от закона Рауля [9, 13, 15]. Максимум на кривой поведения точки вспышки связан с отрицательным отклонением от закона Рауля, что приводит к понижению риска взрыва [16].

В оригинале модели UNIFAC [12] логарифм коэффициента активности складывается из комбинаторной и остаточной частей. Чтобы улучшить характеристики оригинальной модели UNIFAC, прогнозирующей равновесие жидкость – пар (VLE), жидкость – жидкость (LLE) и избыточные энтальпии, было предложено несколько версий модели [17–20].

Основным недостатком модели UNIFAC и ее версий является необходимость создания базы данных групповых параметров чистых компонентов и параметров взаимодействия. Групповые вклады этих параметров систематически улучшаются консорциумом UNIFAC [21].

В работе [22] предсказывается точка вспышки смесей (модель прогноза точки вспышки Liaw и Chiu [3]), для расчета поведения коэффициентов активности жидкой фазы используются модели типа UNIFAC, которые не нуждаются в экспериментальных данных, чтобы найти параметры бинарной системы. На рис. 1 представлены экспериментальные данные [22], а также результаты расчета коэффициентов активности и температуры точки вспышки для систем этанол – бутанол-1, этанол – ацетон. Использовались различные версии модели UNIFAC и мо-

дели NRTL для идеальной системы этанол – бутанол-1 (рис. 1, а) и системы этанол – ацетон с положительным отклонением от идеальности (рис. 1, б). Фазовое поведение смесей усложняется, если имеется большая разница в их физических свойствах, типах полярности или критических свойствах. Как можно видеть на рис. 1, имеется значительный разброс в результатах расчетов коэффициентов активности и температуры вспышки по разным моделям.

Одну из форм уравнения, связывающего различные параметры системы с внутренней энергией, можно записать как

$$dU = TdS - PdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dN_i, \quad (3)$$

где $U = f(S, V, N_1, N_2, \dots, N_n)$ – внутренняя энергия фазы как функция энтропии, объема и числа молей компонентов, образующих фазу; $\mu_i = (\partial U / \partial N_i)_{S, V, N_{j \neq i}}$ – химический потенциал i -го компонента; $T = (\partial U / \partial S)_{V, N_{j \neq i}}$ – температура; $P = (\partial U / \partial V)_{S, N_{j \neq i}}$ – давление.

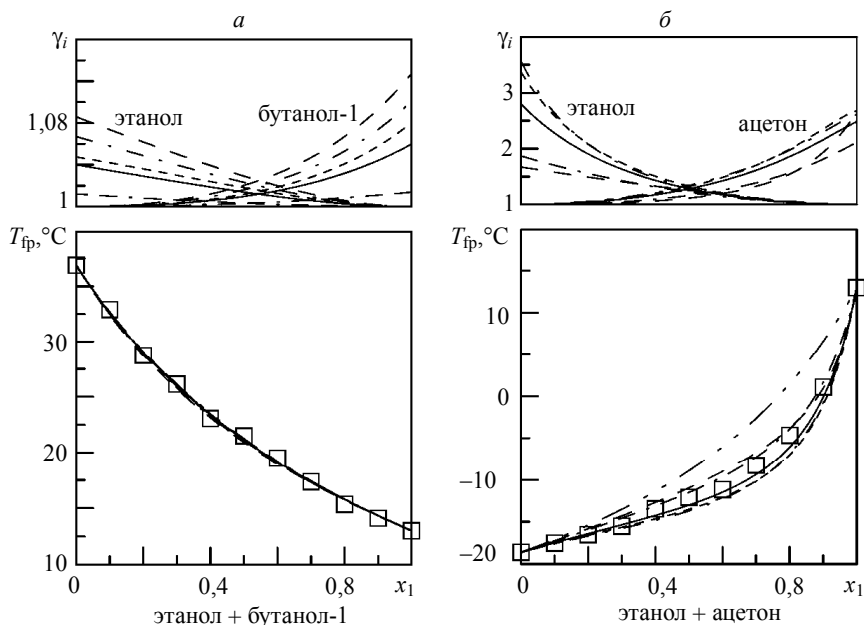


Рис. 1. Сравнение коэффициентов активности и предсказанной точки вспышки с экспериментальными данными [22] для идеального раствора этанол – бутанол-1 (а) и раствора с положительным отклонением от идеальности этанол – ацетон (б): «□» – экспериментальные данные, «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; «- · - ·» – UNIFAC Lingham; «- - - -» – версия UNIFAC Bastos и др.; «- - -» – NRTL; «- - -» – идеальный раствор

В данной работе обсуждается метод расчета температуры вспышки по результатам моделирования равновесия жидкость – твердое при постоянном давлении. Соотношение, связывающее между собой коэффициенты активности γ_i и избыточную свободную энергию Гиббса G^E :

$$RT \sum x_i \ln \gamma_i = G^E.$$

Уравнение (3) можно записать в другой форме, используя в качестве характеристической функции энергии Гиббса $G^E(P, T, x_1, x_2, \dots, x_n)$:

$$dG^E = -SdT + VdP + \sum_{i=1}^n \mu_i dx_i.$$

Уравнение можно записать также как

$$-SdT + VdP - \sum_{i=1}^n x_i d\mu_i = 0,$$

где от числа молей компонентов сделан переход к их молярным долям x_i . Разность уравнений состояния бинарной системы для реальной и идеальной равновесных фаз можно представить в виде [23]

$$-(H^E/RT^2) dT + (V^E/RT) dP = \sum_{i=1}^2 x_i d \ln \gamma_i,$$

где γ_i – коэффициент активности компонента, $i = 1, 2$; H^E – энтальпия смешения; V^E – избыточный объем; P – давление раствора; T – абсолютная температура; R – универсальная газовая постоянная.

Уравнение Гиббса используется для представления фазового равновесия в широком диапазоне температур и давлений, а также для расчета тепловых и объемных свойств.

Таким образом, уравнение (4) позволяет найти коэффициенты активности компонентов, если известна энтальпия смешения и избыточный объем. Если происходит образование ассоциатов молекул чистых компонентов, то эффективная молярная масса компонента в растворе может быть рассчитана по формуле $M' = \lambda_i M_i$, где M_i – молярная масса компонента до смешения, λ_i – поправочные коэффициенты. Среднее соотношение числа молекул в ассоциатах чистых компонентов $\lambda = \lambda_1/\lambda_2$ характеризует устойчивую структуру раствора. Отличие коэффициента λ от единицы свидетельствует о наличии отклонения от идеальности в бинарной системе и необходимости перехода к эффективным молярным долям для получения термодинамически согласованных моделей.

В [24 – 27] рассматривается метод моделирования диаграмм фазового равновесия жидкость – твердое и жидкость – пар в реальных растворах и возможность прогнозирования температуры вспышки бинарной жидкой смеси.

В большинстве реальных растворов происходит взаимодействие компонентов, приводящее к образованию молекулярных соединений типа AB . Коэффициент сольватации $\lambda = \lambda_1/\lambda_2$ показывает отношение числа молекул A к числу молекул B в образующемся молекулярном соединении. Молекулы компонент A и B могут также образовывать кластеры, состоящие из молекул одного вида. Отношение числа молекул компонента A к числу молекул компонента B , объединившихся в ассоциаты, будем характеризовать коэффициентом ассоциации $k = k_1/k_2$. Коэффициент ассоциации k_1 показывает, сколько молекул компонента A в жидкой фазе объединились в кластер типа AA , аналогично, коэффициент ассоциации k_2 показывает, сколько молекул компонента B в жидкой фазе объединились в кластер типа BB .

Минимизация избыточной энергии Гиббса по параметру сольватации λ приводит к уравнению, моделирующему диаграмму фазового равновесия жидкость – твердое при $P = \text{const}$:

$$T(z_1) = [H_1^E z_1 + H_2^E (1 - z_1)] / [(H_1^E/T_1^0) z_1 + (H_2^E/T_2^0)(1 - z_1) - R(z_1 \ln z_1 + (1 - z_1) \ln(1 - z_1))], \quad (5)$$

где T – температура ликвидуса; H_i^E – энтальпия и T_i^0 – температура плавления компонента, образующего однокомпонентную фазу, $i = 1, 2$; $z_1 = x_1/(x_1 + \lambda x_2)$, $z_2 = x_1/(x_1/\lambda + x_2)$ – эффективные молярные доли компонентов бинарной смеси.

Модель PCEAS (Phase Chart Eutectic and Azeotropic Systems), предлагаемая авторами данной работы [28], основана на минимизации избыточной энергии Гиббса по параметру сольватации λ , характеризующему отношение числа молекул A к числу молекул B в молекулярном соединении. Уравнение (5) позволяет найти зависимость температуры смеси от состава при постоянном давлении. Программа PCEAS дает возможность рассчитать равновесие жидкость – твердое, а также равновесие жидкость – пар при постоянном давлении или при постоянной температуре. Входными данными являются температура T_i и энтальпия фазовых переходов H_i^0 чистых компонентов. Программа позволяет определить средние величины коэффициента сольватации λ , а также коэффициента ассоциации k и рассчитать коэффициенты активности.

Фазовые равновесия жидкость – твердое и жидкость – пар в бинарных системах, а также зависимость температуры вспышки от состава раствора рассчитывались при атмосферном давлении.

Результаты расчетов

На рис. 2 представлены результаты расчета температуры точки вспышки с использованием модели PCEAS для идеальной системы этанол – бутанол-1 (рис. 2, а) и системы этанол – ацетон с положительным отклонением от идеальности (рис. 2, б).

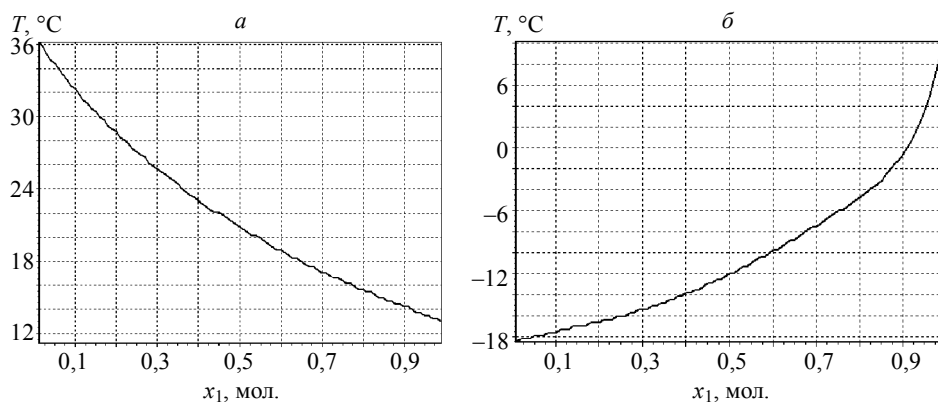


Рис. 2. Зависимость температуры точки вспышки от состава раствора по модели PCEAS: а – для системы этанол – бутанол-1; б – для системы этанол – ацетон

На рис. 3 приведены результаты расчета коэффициентов активности по модели PCEAS для систем этанол – бутанол-1 и этанол – ацетон при нормальном атмосферном давлении.

Для прогнозирования температуры вспышки смесей, близких к идеальным, достаточно использовать коэффициенты активности жидкой фазы, полученные по результатам моделирования равновесия жидкость – твердое.

В работе [22] приведены результаты моделирования и экспериментальные кривые зависимости температуры вспышки от состава для систем с формированием экстремума точки вспышки. Отмечается, что существующие термодинамические модели недостаточно точно описывают такие системы. Причина этого заключается в недостаточном внимании к процессам сольватации и ассоциации в жидкой и паровой фазах, а также согласованности термодинамических данных.

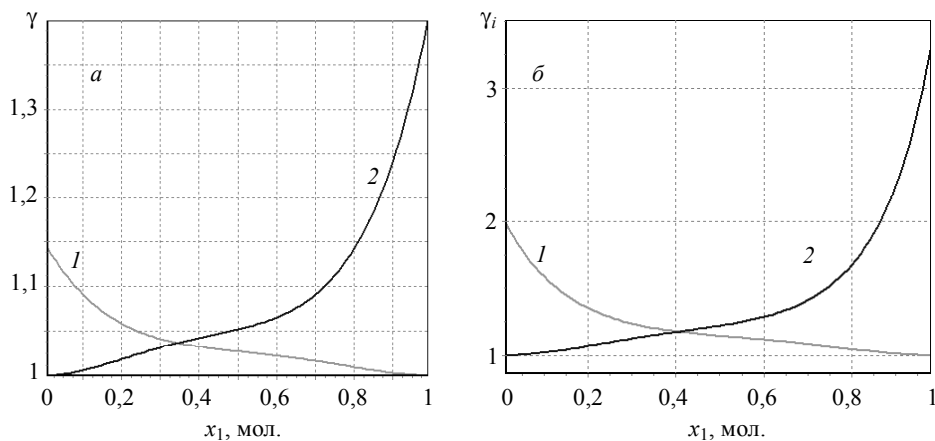


Рис. 3. Расчет коэффициентов активности при $P = 101,4$ кПа по модели PCEAS для растворов: а – этанол – бутанол-1: кр. 1 – коэффициент активности (этанол), кр. 2 – коэффициент активности (бутанол-1); б – этанол – ацетон с положительным отклонением от идеальности, кр. 1 – коэффициент активности (этанол), кр. 2 – коэффициент активности (ацетон)

На рис. 4, 5 приведены результаты расчета и экспериментальные данные для систем с формированием минимума точки вспышки [22].

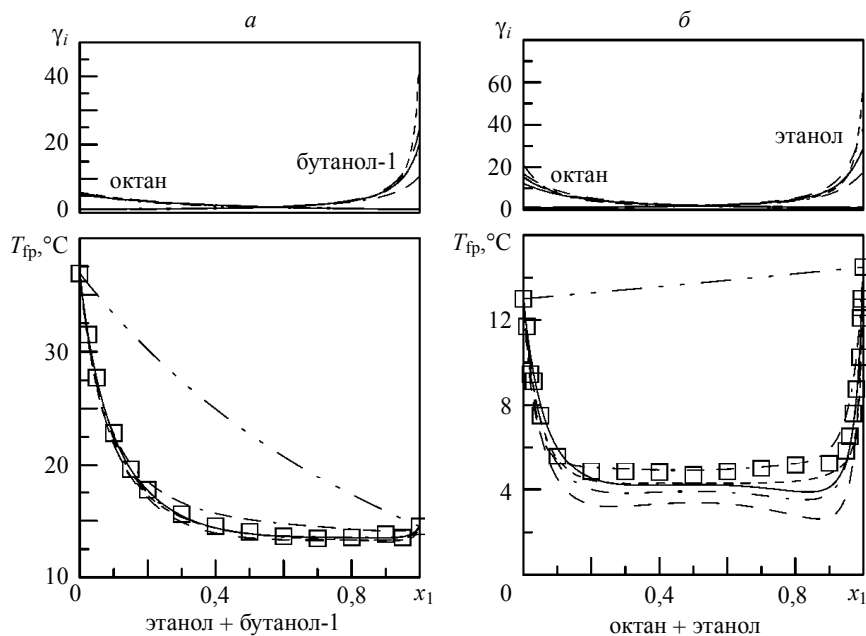


Рис. 4. Сравнение коэффициентов активности и предсказанной точки вспышки с экспериментальными данными [3] для растворов с формированием минимума точки вспышки октан – бутанол-1 (а) и октан – этанол (б): «□» – экспериментальные данные, «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; «- · - ·» – UNIFAC Linghamby; «- - - -» – версия UNIFAC Bastos и др.; «- - · -» – NRTL; «- - -» – идеальный раствор

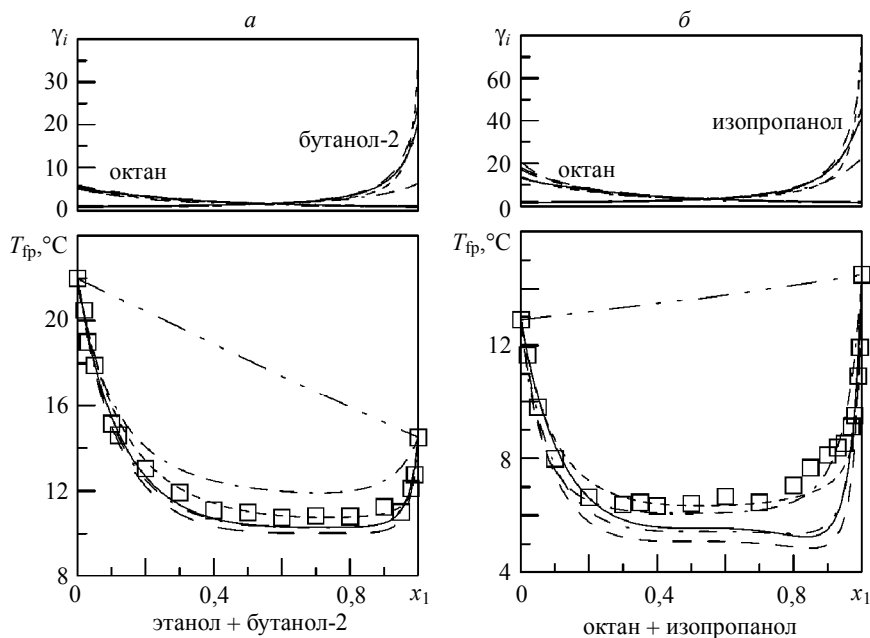


Рис. 5. Сравнение коэффициентов активности и предсказанной точки вспышки с экспериментальными данными [22] для растворов с формированием минимума точки вспышки октан – бутанол-2 (а) и октан – изопропанол (б): «□» – экспериментальные данные, «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; «- · - ·» – UNIFAC Lingham; «— — —» – версия UNIFAC Bastos и др.; «— — —» – NRTL; «- - -» – идеальный раствор

На рис. 6. приведены результаты расчета температуры кипения и температуры точки вспышки по модели PCEAS для раствора октан – бутанол-1 с формированием экстремумов точки вспышки.

На рис. 7 – результаты расчета температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для системы октан – этанол при нормальном атмосферном давлении.

На рис. 8 – результаты расчета температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для системы октан – бутанол -2 при нормальном атмосферном давлении.

На рис. 9 – результаты расчета температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для системы октан – изопропанол при нормальном атмосферном давлении.

Выводы

Представлен метод прогнозирования зависимости температуры вспышки бинарных горючих жидких смесей от состава раствора. Метод основан на использовании данных о давлении смеси, полученных с применением математического моделирования фазового равновесия при изобарных условиях. Для прогнозирования температуры вспышки бинарной смеси необходимы данные об энтальпии и температуре плавления, энтальпии и температуре кипения, а также температуре вспышки чистых компонентов.

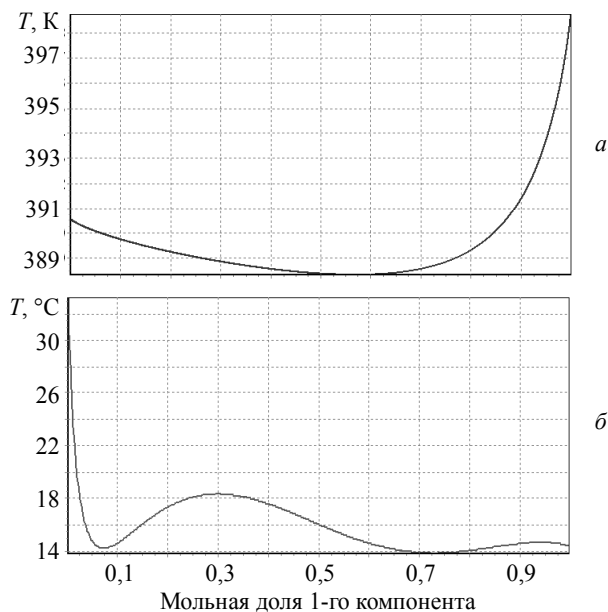


Рис. 6. Расчет температуры кипения и температуры точки вспышки по модели PCEAS для раствора октан –бутанол-1 с формированием экстремумов точки вспышки: *a* – температура кипения – расчет; *б* – температура точки вспышки – расчет

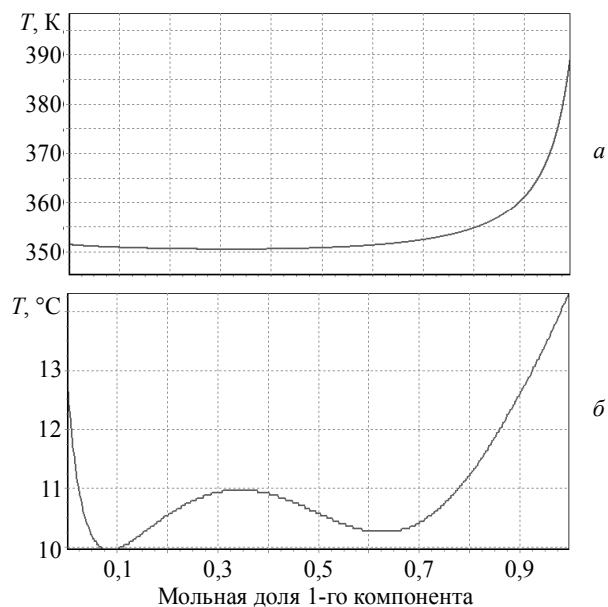


Рис. 7. Расчет температуры кипения и температуры точки вспышки по модели PCEAS для раствора октан – этанол с формированием экстремумов точки вспышки: *a* – температура кипения – расчет; *б* – температура точки вспышки – расчет

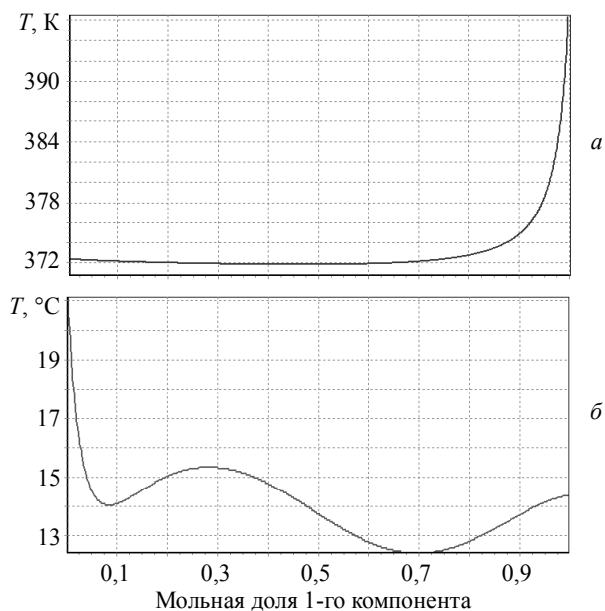


Рис. 8. Расчет температуры кипения и температуры точки вспышки по модели PCEAS для раствора октан – бутанол-2 с формированием экстремумов температуры вспышки: *a* – температура кипения – расчет; *б* – температура точки вспышки – расчет

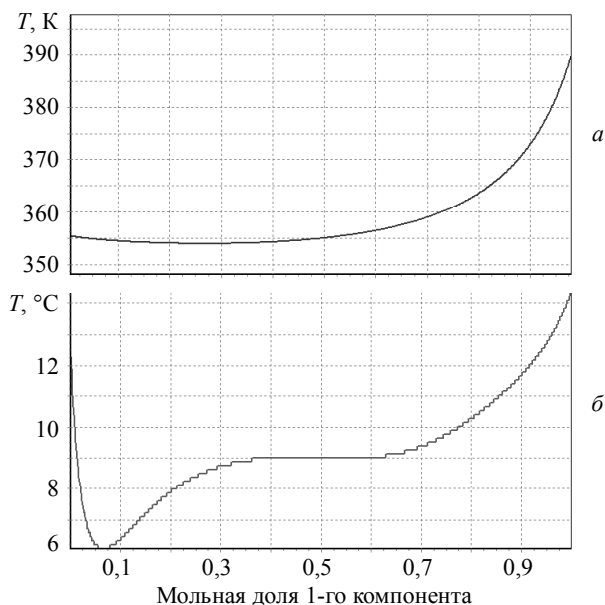


Рис. 9. Расчет температуры кипения и температуры точки вспышки по модели PCEAS для раствора октан – изопропанол с формированием минимума точки вспышки: *a* – температура кипения – расчет; *б* – температура точки вспышки – расчет

ЛИТЕРАТУРА

1. Торсуев Н.С. Границы воспламеняемости смеси паров летучих растворителей // Журнал химической промышленности. 1930. № 22–23. С. 1413–1414.
2. Liaw H.-J., Lee Y.-H., Tang C.-L., et al. A mathematical model for predicting the flash point of binary solutions // J. Loss Prev. Process. 2002. No. 15. P. 429–438.
3. Liaw H.-J. A general model for predicting the flash point of miscible mixture / H.-J. Liaw, Y.-Y. Chiu // J. Hazard Mater. 2006. No. 137. P. 38–46.
4. Affens W.A. Flammability properties of hydrocarbon solutions in air / W.A. Affens, G.W. McLaren // J. Chem Eng. Data. 1972. No. 17. P. 482–488.
5. White D. Flame spread on aviation fuels / D. White, C.L. Beyler, C. Fulper, J. Leonard // Fire Saf. J. 1997. No. 28. P. 1–31.
6. Garland R.W. Evaluating vent manifold inerting requirements: flash point modeling for organic acid-water mixtures / R.W. Garland, M.O. Malcolm // Process Saf. Prog. 2002. No. 21. P. 254–260.
7. Liaw H.-J. A model for predicting the flash point of ternary flammable solutions of liquid / H.-J. Liaw, C.-L. Tang, J.-S. Lai // Combust. Flame. 2004. No. 138. P. 308–319.
8. Liaw H.-J. A non-ideal model for predicting the effect of dissolved salt on the flash point of solvent mixtures / H.-J. Liaw, T.-A. Wang // J. Hazard Mater. 2007. No. 141. P. 193–201.
9. Catoire L. Estimation of closed cup flash points of combustible solvent blends / L. Catoire, S. Paulmier, V. Naudet // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2006. No. 35. P. 9–14.
10. Gmehling J. Flash points of flammable liquid mixtures using UNIFAC / J. Gmehling, P. Rasmussen // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1982. No. 21. P. 186–188.
11. Lee S.-J. The Lower Flash Points of Binary Systems Containing Non-flammable Component / S.-J. Lee, D.-M. Ha // Korean J. Chem. Eng. 2003. No. 20. P. 799–802.
12. Fredenslund A. Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures / A. Fredenslund, R.L. Jones, J. M. Prausnitz // AIChE J. 1975. No. 21. P. 1086–1099.
13. Vidal M. Prediction of minimum flash point behaviour for binary mixtures / M. Vidal, W.J. Rogers, M.S. Mannan // Process Saf. Environ. Prot. 2006. No. 84. P. 1–9.
14. Zabetakis M. G. Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors // U.S. Dept of the Interior, Bureau of Mines, Washington, 1965.
15. Liaw H.-J. Binary liquid solutions exhibiting minimum flash-point behavior / H.-J. Liaw, T.-P. Lee, J.-S. Tsai, W.-H. Hsiao, M.-H. Chen, T.-T. Hsu // J. Loss Prev. Process. 2003. No. 16. P. 173–186.
16. Liaw H.-J. Binary mixtures exhibiting maximum flash-point behavior / H.-J. Liaw, S.-C. Lin // J. Hazard. Mater. 2007. No. 140. P. 155–164.
17. Weidlich U. A modified UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, hE, and gamma Infinite / U. Weidlich, J. Gmehling // Ind. Eng. Chem. Res. 1987. No. 26. P. 1372–1381.
18. Gmehling J. A modified UNIFAC model. 2. Present parameter matrix and for different thermodynamic properties / J. Gmehling, J. Li, M. Schiller // Ind. Eng. Chem. Res. 1993. No. 32. P. 178–193.
19. Larsen B.L. A modified UNIFAC group contribution method for prediction of phase equilibria and heats of mixing / B.L. Larsen, P. Rasmussen, A. Fredenslund // Ind. Eng. Chem. Res. 1987. No. 26. P. 2274–2286.
20. Magnussen T. UNIFAC parameter table for prediction of liquid-liquid equilibria / T. Magnussen, P. Rasmussen, A. Fredenslund // Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 1981. No. 20. P. 331–339.
21. The UNIFAC Consortium / <http://unifac.ddbst.de/> (accessed 2010)[электронный ресурс].
22. Liaw H.-J. Prediction of miscible mixtures flash-point from UNIFAC group contribution methods / H.-J. Liaw, V. Gergaud, Y.-H. Li // Fluid Phase Equilibria. 2011. No. 300. P. 70–82.
23. Коган В.Б. Гетерогенные равновесия. Л.: Химия, 1968. 432 с.
24. Есина З.Н. Математическое моделирование фазового перехода жидкость – твердое / З.Н. Есина, М.Р. Корчуганова, В.В. Мурашкин // Вестник Томского государственного

- университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2011. № 3 (16). С. 13–23.
25. Захаров Ю.Н. Фазовые переходы как причина катастроф на предприятиях переработки угля и нефти / Ю.Н. Захаров, З.Н. Есина, М.Р. Корчуганова // Кузбасс-2: сб. статей. Отдельный выпуск Горного информационно-аналитического бюллетеня (научно-технического журнала) Mining Informational and Analitical Bulletin (Scientific and Technical Journal). 2009. № ОВ17. М.: Издательство «Горная книга». С. 54–58.
26. Есина З.Н. Прогнозирование температуры вспышки бинарных жидких смесей / З.Н. Есина, М.Р. Корчуганова, В.В. Мурашкин // Проблемы мониторинга окружающей среды: сб. трудов XI Всероссийской конференции с участием иностранных ученых (24–28 октября 2011 г.). Кемерово: КемГУ, 2011. С. 177–182.
27. Есина З.Н. Математическое моделирование фазовых переходов в реальных растворах: монография. Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2011. 228 с.
28. Есина З.Н. Phase Chart Eutectic and Azeotropic System (PCEAS): Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012618394 / З.Н. Есина, М.Р. Корчуганова, В.В. Мурашкин (RU) – № 2012616324; заявл. 25.07.2012; Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ, г. Москва, 17 сентября 2012 г.

Статья поступила 27.06.2012 г.

Esina Z.N., Murashkin V.V., Korchuganova M.R. PREDICTION OF THE FLASH POINT OF BINARY INTERMIXTURES ACCORDING TO DATA ABOUT ACTIVITY COEFFICIENTS. A method for calculating the flash point by results of simulation of the liquid–solid body equilibrium at constant pressure using the Gibbs equation is discussed. The applied prediction model for the flash point is based on the modified Le Chatelier equation, Antoine equation, and the model for estimating the activity coefficient.

Keywords: binary intermixtures, flash point, boiling point, activity coefficients, coefficient of solvation, coefficient of association.

ESINA Zoya Nikolaevna (Kemerovo state university)

E-mail: ezn2@rambler.ru

MURASHKIN Vitaly Vasilyevich (Representative office «Weishaupt»)

E-mail: markarina@mail.ru

KORCHUGANOVA Margarita Rashidovna (Kemerovo state university)

E-mail: zitner@mail.ru