

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ ВОДА – ПРОПИОНОВАЯ КИСЛОТА С РАЗДЕЛЯЮЩИМИ АГЕНТАМИ

А.А. Сотников

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.К. Фролкова

*Московский технологический университет*

*Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова*

*Россия, г. Москва, пр. Вернадского 86 frolova@gmail.com*

Разделение азеотропных смесей часто проводят в присутствии дополнительных веществ, образующих с одним из исходных компонентов гетероазеотроп с минимальной температурой кипения. Данный метод носит название гетероазеотропная ректификация (ГАР).

В работе [1] для ГАР смеси (В)–пропионовая кислота (ПК) предложено использовать ряд растворителей: метилизопропилкетон (МИПК), метилбутилкетон (МБК), метилизобутилкетон (МИБК). Авторы [1] в натурном эксперименте

получили данные по равновесию жидкость-жидкость в тройных системах В–ПК–растворитель.

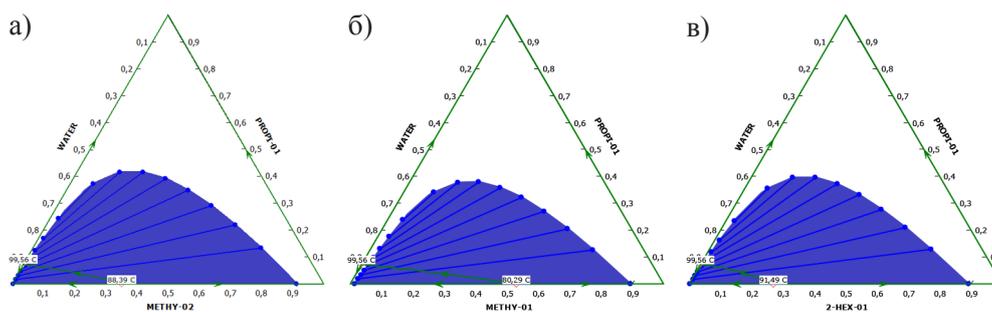
Настоящая работа посвящена математическому моделированию фазовых равновесий жидкость-пар и жидкость-жидкость в указанных тройных системах с использованием уравнения NRTL-НОС и программного комплекса AspenPlus. Задача состояла в поиске набора параметров бинарного взаимодействия, одновременно описывающих с удовлетворительной погрешностью два вида равновесий. Часть пара-

**Таблица 1.** Экспериментальные [2–3] и расчетные характеристики бинарных азеотропов

Р, кПа	$x_1$ (расч.), мол. %	$T_{\text{кип}}$ (расч), °С	$x_1$ (эксп), мол. %	$T_{\text{кип}}$ (эксп), °С	$\Delta x_1, \%$	$\Delta T, \%$
Вода (1) – Пропионовая кислота (2)						
101,3	92,72	99,56	95,03	99,87	2,43	0,31
Вода (1) – Метилизобутилкетон (2)						
101,3	64,89	88,39	64,1	87,9	-1,23	-0,56
Вода (1) – Метилбутилкетон (2)						
101,3	73,05	91,49	–	–	–	–
Вода (1) – Метилизопропилкетон (2)						
101,3	46,98	80,29	–	–	–	–

**Таблица 2.** Экспериментальные и расчетные составы равновесных жидких слоев при 101,3 кПа и 20 °С

Система	Расч. состав, %		Эксп. состав, %		[Лит.]	Погрешности, %	
	$x'$	$x''$	$x'$	$x''$		$\Delta x'$	$\Delta x''$
В-МБК	0,892	0,003	0,912	0,005	[4]	2,19	-0,20
В-МИБК	0,913	0,004	0,898	0,003	[5]	-1,67	0,10
В-МИПК	0,895	0,014	0,895	0,014	[6]	0,00	0,00



**Рис. 1.** Диаграммы фазового равновесия систем ПК–В–растворитель: МИБК (а); МИПК(б); МБК (в); затонирована область двухфазного расслаивания

метров взята из базы данных программного комплекса; для трех бинарных систем (ПК-МИПК, ПК-МБК, ПК-МИБК) параметры оценены нами по псевдоэкспериментальным данным, полученным по модели UNIFAC.

Сравнение экспериментальных и расчетных азеотропных характеристик, а также составов равновесных жидких слоев в бинарных системах вода – растворитель (табл. 1 и 2) свидетельствует об адекватности математического моделирования, поскольку относительные ошибки

описания не превышают 3%.

Проведен расчет равновесия жидкость-пар (101,3 кПа) и жидкость-жидкость (101,3 кПа и 20 °С) и построены фазовые диаграммы для трех тройных систем (рисунок 1). Все растворители образуют азеотропы с минимальной температурой кипения с водой, причем последние расположены в области двухфазного расслаивания, а, следовательно, каждый может быть использован для разделения смеси В-ПК в комплексе гетероазеотропной ректификации.

### Список литературы

1. Roy Bhupesh C., Awual M.R. and Goto M. // *Journal of Applied Sciences*, 2008.– P.411–415.
2. Rivenq F. *Bull // Soc. Chim. Fr.*, 1961.– P.1392–1395.
3. Огородников С.К., Лестева Т.М., Коган В.Б. *Азеотропные смеси.– Л.: Химия*, 1971.– 849с.
4. Stephenson R.M. // *J. Chem. Eng. Data*, 1992.– 37.– P.80–95.
5. Ratkovics F., Palagyi-Fenyés B., Hajos Szikczay E., Dallos A. // *J; Chem. Thermodyn.*, 1991.– 23(9).– P.859–865.
6. Ginnings P.M., Plonk D., Carter E.J. // *Am. Chem. Soc.*, 1940.– P.62–67.

## ВАРИАНТНОСТЬ РАСЧЕТА МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА В СХЕМАХ С ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫМ РАССЛАИВАНИЕМ РАЗДЕЛЯЕМОЙ СМЕСИ

В.В. Спирякова

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.К. Фролкова

Московский технологический университет

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

Россия, г. Москва, пр. Вернадского 86, frolova@gmail.com

На этапе решения балансовой задачи схемы разделения заданной структуры можно определить количества рециркуловых потоков, которые связаны с термодинамическими ограничениями

фазового равновесия и влияют на энергоемкость схемы. Нами на примере тройной системы циклогексанол (ЦГол) – циклогексанон (ЦГон) – вода (В), структура фазовой диаграммы которой

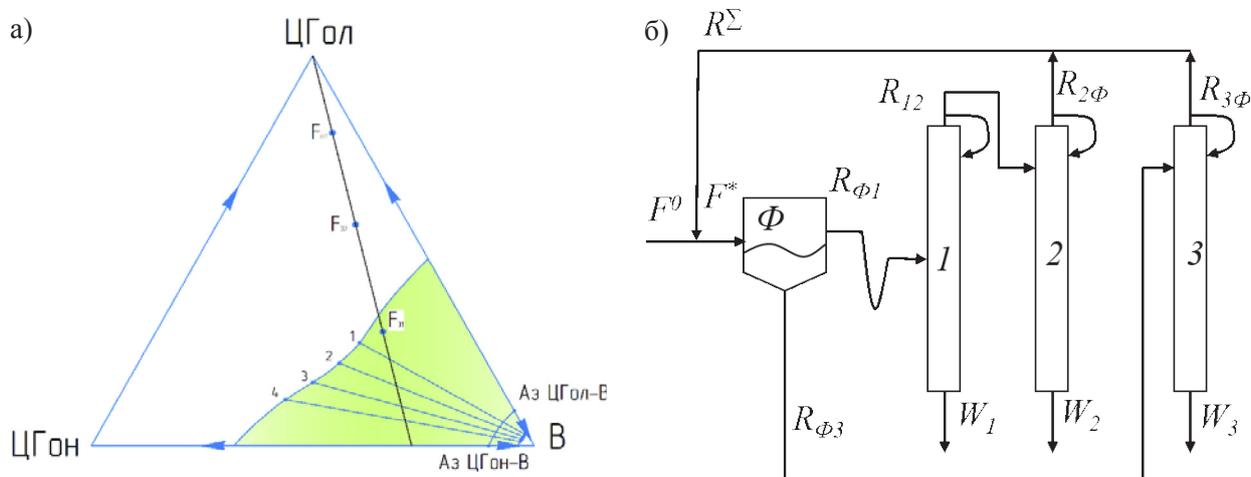


Рис. 1. Диаграмма фазового равновесия с заданными составами  $F^{0i}$  (а) и схема разделения тройной смеси циклогексанол (ЦГол)( $W_1$ )–циклогексанон (ЦГон)( $W_2$ )–вода ( $W_3$ ) (б)