УДК 517.958

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ФАКЕЛА БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ

PREDICTION OF THE PLUME TEMPERATURE OF BINARY MIXTURES

Хейрабади Газаля
Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности
qezale@mail.ru

Мусави Саида
Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности
aykar.ragimova@mail.ru

Аннотация. Обсуждается метод расчета температуры вспышки по результатам моделирования равновесия жидкость-твердое тело при постоянном давлении с использованием уравнения Гиббса. Используется модель для прогнозирования температуры вспышки смеси на основе модифицированного уравнения Ле Шателье, уравнения Антуана и модели для оценки коэффициента активности. Опасность воспламенения жидкостей в первую очередь характеризуется их температурой вспышки. Температура вспышки определяется как температура, при которой жидкость испаряется и образует горючую смесь с воздухом. Для измерения температуры вспышки используются приборы закрытого и открытого типа. В приборах закрытого типа изучается состояние равновесия между жидкой и паровой составляющими смеси. Приборы открытого типа учитывают взаимодействие смеси легковоспламеняющихся жидкостей с атмосферой. Температура вспышки смеси является критическим свойством, но экспериментальные данные для многих смесей отсутствуют, а их получение дорого и требует много времени. Поэтому разработка математических моделей для анализа состояния окружающей среды в условиях возрастающего риска возникновения чрезвычайных ситуаций является важной научной и практической задачей. В данной работе рассматривается возможность прогнозирования температуры вспышки в устройствах закрытого типа, то есть влияние атмосферных условий в данном приближении не учитывается. Ранее было предложено несколько моделей для прогнозирования температуры вспышки для смесей различных типов.

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

Kheyrabadi Qazala
Azerbaijan State University of Oil and Industry
qezale@mail.ru

Musavi Saida
Azerbaijan State University of Oil and Industry
aykar.ragimova@mail.ru

Annotation. A method for calculating the flash point from the results of simulating liquid–solid equilibrium at constant pressure using the Gibbs equation is discussed. A model is used to predict the flash point of the mixture based on the modified Le Chatelier equation, the Antoine equation and a model for estimating the activity coefficient. The flammability hazard of liquids is primarily characterized by their flash point. The flash point is defined as the temperature at which a liquid evaporates and forms a flammable mixture with air. To measure the flash point, closed and open type devices are used. In closed-type devices, the state of equilibrium between the liquid and vapor components of the mixture is studied. Open type devices take into account the interaction of a mixture of flammable liquids with the atmosphere. The flash point of a mixture is a critical property, but experimental data for many mixtures are lacking and obtaining such data is expensive and time-consuming. Therefore, the development of mathematical models for analyzing the state of the environment under conditions of increasing risk of emergency situations is an important scientific and practical task. This paper examines the possibility of predicting the flash point in closed-type devices, i.e. the influence of atmospheric conditions is not taken into account in this approximation. Several models for predicting the flash point for mixtures of various types have been proposed previously.

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

Введение. Обеспечение безопасности при производстве и хранении легковоспламеняющихся жидкостей является одной из важнейших задач, поскольку часто возникают опасные ситуации, такие как взрывы на автозаправочных станциях, аварии при транспортировке горючих веществ и т.д. При оценке пожарной опасности жидкостей с температурой плавления менее 50 °C используется ряд показателей пожаро- и взрывоопасности: группа горючести, температура вспышки, температура воспламенения, температура самовоспламенения, нижний и верхний концентрационные пределы распространения пламени, способность взрываться и гореть при взаимодействии с водой, кислородом атмосферы и другими веществами и др. Эти параметры взаимосвязаны. Например, температура вспышки линейно связана с температурой кипения: $t_{fp} = a + bt_b$, которая зависит от давления окружающей среды. В связи с этим задача оценки влияния давления и температуры на термодинамические характеристики смесей жидкостей является актуальной. Особенно важно изучить поведение при различных температурах, давлении, концентрации, теплофизических параметрах окружающей

среды и т.д. таких горючих жидких смесей, как топливные смеси, тормозные жидкости, антифризы, используемые для охлаждения двигателей внутреннего сгорания, охлаждающие жидкости в системах отопления и кондиционирования. Наряду с этим необходимо решить проблему теплопередачи, которая делится на внешнюю или внутреннюю в зависимости от характеристик источника тепла и формы теплоаккумулятора. Таким образом, прогнозирование температуры вспышки – это лишь часть проблемы изучения условий пожаро- и взрывобезопасности.

Модели, разработанные для идеальных растворов [4–6], непригодны для неидеальных смесей, которые встречаются чаще всего. Несовершенство растворов обусловлено взаимодействием молекул. Влияние неидеальности жидкой фазы на коэффициенты активности учитывается при построении соответствующих термодинамических моделей, которые можно разделить на две категории: модели, использующие экспериментальные данные, и так называемые априорные предсказательные модели. Для моделирования свойств раствора необходимо уметь рассчитывать коэффициенты активности компонентов смеси в жидкой фазе.

Общая модель для прогнозирования температуры вспышки. Часто используются термодинамические модели NRTL, Wilson и UNIQUAC, но в этих моделях параметры бинарного взаимодействия рассчитываются по экспериментальным данным. Поэтому эти модели не являются прогностическими. Модель UNIFAC [12] является прогностической, так как не требует экспериментальных данных для расчета параметров бинарного взаимодействия. Для оценки взаимодействия используются параметры группового вклада [10, 13]. Известна общая модель для прогнозирования температуры вспышки смеси [1], усовершенствованная Лю и др. [2] на основе модифицированного уравнения Ле Шателье (1), уравнения Антуана (2) и модели для оценки коэффициентов активности [3]:

$$\sum_i x_i \gamma_i P_i \ / P_{i,fp}^0 = 1, \tag{1}$$

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

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

Уравнение Ле Шателье $L = 1/\sum_i \frac{p_i}{L_i}$ используется для определения предела воспламенения парогазовой смеси и представляет собой формулу для расчета среднего гармонического значения, 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 возможно возникновение факела, т.е. при $L_i = P_{i,\text{fp}}^0$. При условии фазового равновесия жидкости и пара парциальное давление пара одного из компонентов неидеальной жидкости имеет вид $p_i = x_i P_i$. Коэффициент активности вводится как характеристика несовершенства смеси. Если коэффициент активности равен единице, это означает, что взаимодействия между разными или одинаковыми молекулами одинаковы 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 является приближенным представлением уравнения Клаузиуса-Клапейрона для равновесия жидкой и паровой фаз и позволяет перейти от давления к температуре, характеризующей температуру вспышки, и найти зависимость температуры вспышки от состава. Для расчета температуры вспышки на основе равновесных моделей определяют коэффициенты активности компонентов γi для заданного состава раствора, затем по уравнению Антуана находят давление паров компонентов смеси $P_{i,fp}^0$ при температуре вспышки чистых компонентов. Температура вспышки Tfp для смеси находится путем совместного решения уравнения Антуана (2) и уравнения (1). Подставив давление P_i из уравнения Антуана в уравнение Ле Шателье, можно рассчитать температуру вспышки для всего диапазона составов растворов, то есть зависимость $T(x)$. Основной проблемой является определение коэффициентов активности компонентов неидеальной смеси. Эта проблема может быть решена при использовании методов математического моделирования.

Термодинамические модели фазового равновесия растворов Из моделей коэффициентов активности жидкой фазы можно выделить два типа:

1) модели, используемые для неполярных систем, например, смесей углеводородов, изомеров и гомологов, к которым относятся модели регулярной теории растворов (RST) и модели Флори-Хаггинса;

2) модели, используемые для неполярных и полярных систем. Эти модели обычно используются для прогнозирования коэффициентов активности жидкой фазы и включают уравнение Ван Лаара, уравнение Вильсона, NRTL, уравнение UNIQUAC, уравнение UNIFAC и др.

Видал и др. [13] объединили прогноз температуры вспышки Лю и др. [2] с моделью UNIFAC для прогнозирования минимума для сильно неидеальных растворов. Гмелинг и Расмуссен рассчитали

температуру вспышки бинарных систем, используя модель UNIFAC для оценки коэффициентов активности [10, 14]. При минимальной температуре 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 температуры вспышки связан с отрицательным отклонением от закона Рауля, что приводит к снижению риска взрыва [16].

В оригинальной модели UNIFAC [12] логарифм коэффициента активности состоит из комбинаторной и остаточной частей. Для улучшения характеристик оригинальной модели UNIFAC при прогнозировании равновесия жидкость-пар (VLE), жидкость-жидкость (LLE) и избыточных энтальпий 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] прогнозируется температура вспышки смесей (модель прогнозирования температуры вспышки Liaw and Chiu [3]); для расчета поведения коэффициентов активности жидкой фазы используются модели типа UNIFAC, которые не требуют экспериментальных данных для нахождения параметров бинарной системы. На рисунке 1 представлены экспериментальные данные [22], а также результаты расчета коэффициентов активности и температуры вспышки для систем этанол – бутанол-1, этанол – ацетон. Для идеальной системы этанол – бутанол-1 (рис. 1, а) и системы этанол – ацетон с положительным отклонением от идеальности (рис. 1, б) были использованы различные версии модели UNIFAC и модели NRTL. Фазовое поведение смесей усложняется при большом различии их физических свойств, типов полярности или критических свойств. Как видно из рисунка 1, наблюдается значительный разброс результатов расчетов коэффициентов активности и температуры вспышки для различных моделей.

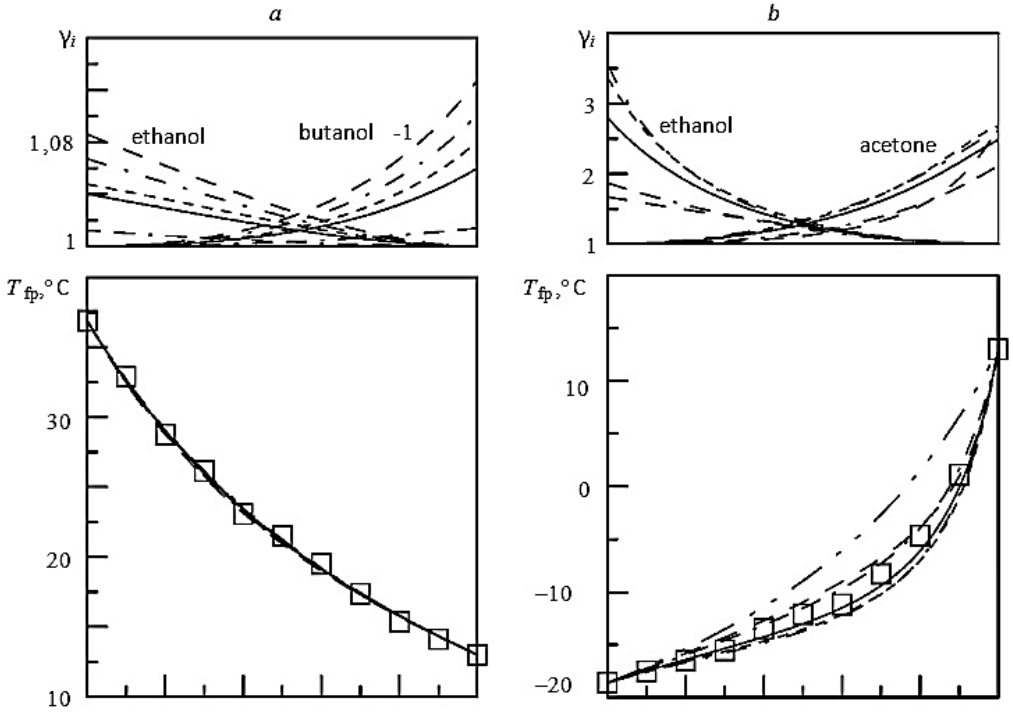

Рисунок 1 – Сравнение коэффициентов активности и прогнозируемой температуры вспышки с экспериментальными данными [22] для идеального раствора этанол – бутанол-1 (а) и раствора с положительным отклонением от идеальности этанол – ацетон (б): «» – экспериментальные данные; «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; « — - — :» – UNIFAC Linghby; «— — —» – версия UNIFAC Bastos и другие; «— — - —» – NRTL; «— --» – идеальное решение

Одна из форм уравнения, связывающего различные параметры системы с внутренней энергией, может быть записана как:

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

где $U = f(S, V, N_1, N_2,\ldots,N_n)$- внутренняя энергия фазы как функция энтропии, объема и количества 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.

В данной статье рассматривается метод расчета температуры вспышки, основанный на результатах моделирования равновесия жидкость-твердое тело при постоянном давлении. Рассматривается связь между коэффициентами активности γ*i* и избыточной свободной энергией **Gibbs** GE:

$$RT\sum x_i \ln \gamma = {}_iG^E.$$

Уравнение (3) можно записать в другой форме, используя в качестве характеристической функции энергию Gibbs $G^E(P, T, x_1, x_2, ..., x_n)$:

$$dG^E = -SdT + VdP + \sum^n_{i=1}\mu_i\, dx_i.$$

Уравнение также можно записать в виде:

$$-SdT + VdT - \sum^n_{i=1} x_i\, d\mu_i = 0,$$

где осуществляется переход от числа молей компонентов к их мольным долям xi. Различие между уравнениями состояния бинарной системы для реальной и идеальной равновесных фаз можно представить в виде [23]:

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

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 Gibbs используется для представления фазового равновесия в широком диапазоне температур и давлений, а также для расчета тепловых и объемных характеристик.

Таким образом, уравнение (4) позволяет найти коэффициенты активности компонентов, если известны 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 отношение 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 мольным долям для получения термодинамически непротиворечивых моделей.

В работах [24–27] рассмотрен метод моделирования диаграмм фазовых равновесий жидкость-твердое тело и жидкость-пар в реальных растворах и возможность прогнозирования температуры вспышки бинарной жидкой смеси.

В большинстве реальных растворов компоненты взаимодействуют, что приводит к образованию молекулярных соединений типа AB. Коэффициент сольватации $\lambda = \lambda_1 / \lambda_2$ показывает отношение числа молекул A к числу молекул B в образовавшемся молекулярном соединении. Молекулы компонентов A и B также могут образовывать кластеры, состоящие из молекул одного типа. Отношение числа молекул компонента A к числу молекул компонента B, объединенных в ассоциаты, будет характеризоваться 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 отношению к параметру сольватации λ приводит к уравнению, которое моделирует диаграмму равновесия жидкость-твердая фаза при P = 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 мольные доли компонентов бинарной смеси.

Модель PCEAS (Phase Chart Eutectic and Azeotropic Systems), предложенная авторами данной работы [28], основана на минимизации избыточной энергии Гиббса с помощью параметра сольватации λ, который характеризует 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 позволяет рассчитать равновесие жидкость-твердое тело, 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 значения коэффициента сольватации λ, а также коэффициента ассоциации k, и рассчитать коэффициенты активности.

При атмосферном давлении рассчитаны фазовые равновесия жидкость – твердое тело и жидкость – пар в бинарных системах, а также зависимость температуры вспышки от состава раствора.

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

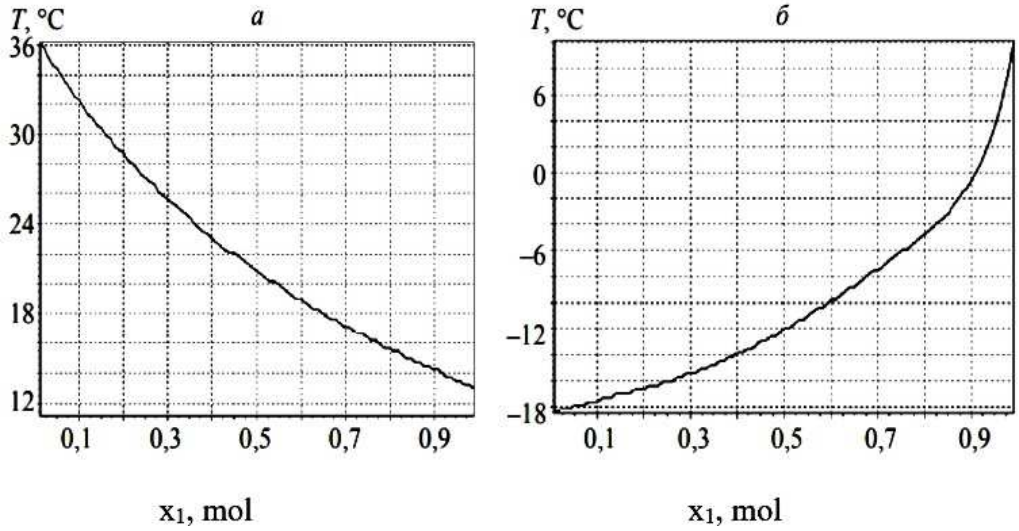

Рисунок 2 – Зависимость температуры вспышки от состава раствора по модели PCEAS:
a – для системы этанол - бутанол-1; b – для системы этанол – ацетон

На рисунке 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 тело. В работе [22] представлены результаты моделирования и экспериментальные кривые зависимости температуры вспышки от состава для систем с образованием экстремума температуры вспышки. Отмечается, что существующие термодинамические модели не совсем точно описывают такие системы. Причиной этого является недостаточное внимание к процессам сольватации и ассоциации в жидкой и паровой фазах, а также к согласованности термодинамических данных.

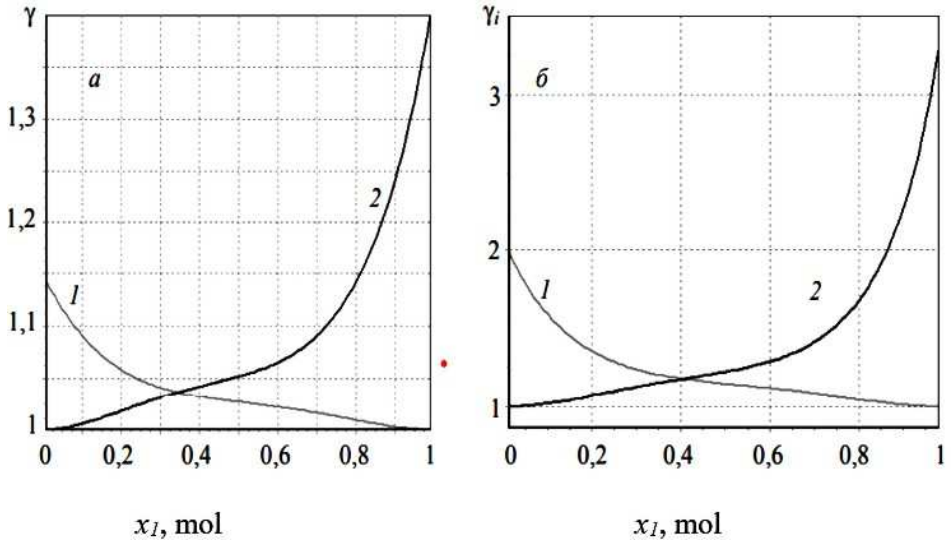

Рисунок 3 – Расчет коэффициентов активности при P = 101,4 кПа по модели PCEAS для растворов:
а – этанол – бутанол-1: 1 – коэффициент активности (этанол); 2 – коэффициент активности (бутанол-1);
б – этанол – ацетон с положительным отклонением от идеальности; 1 – коэффициент активности (этанол);
2 – коэффициент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

На рисунках 4, 5 приведены результаты расчетов и экспериментальные данные для систем с образованием минимальной температуры вспышки [22].

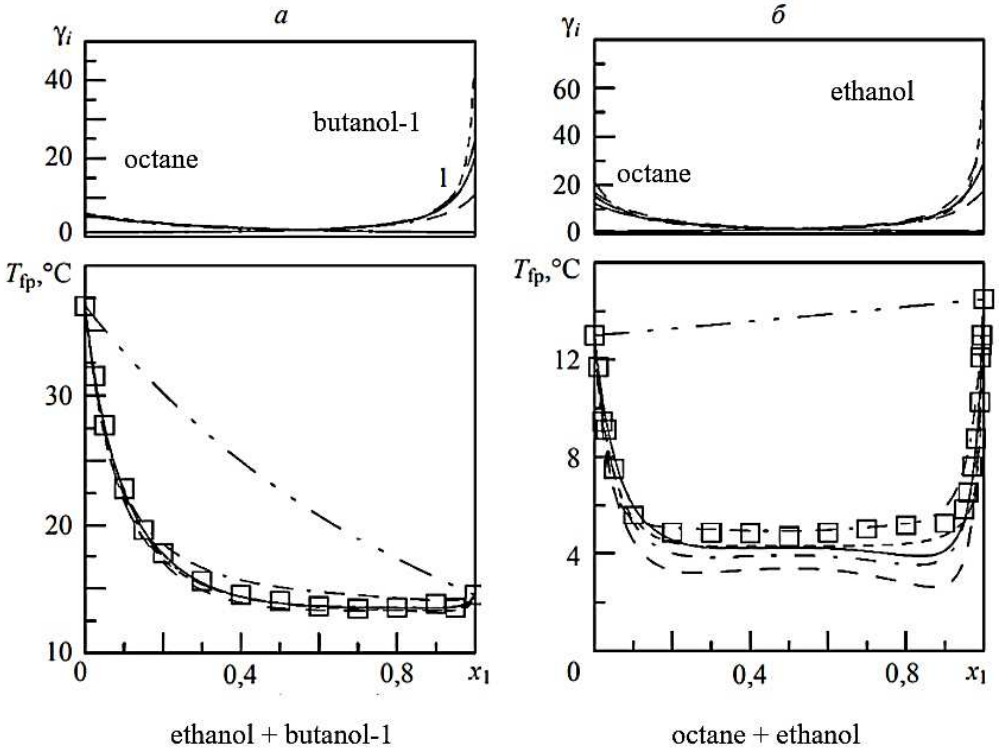

Рисунок 4 – Сравнение коэффициентов активности и прогнозируемой температуры вспышки с экспериментальными данными [3] для растворов с образованием минимальной температуры вспышки октан – бутанол-1 (а) и октан – этанол (б): «» – экспериментальные данные; «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; « — - — :» – UNIFAC Linghby; «— — —» – версия UNIFAC Bastos и другие; «— — - —» – NRTL; «— --» – идеальное решение

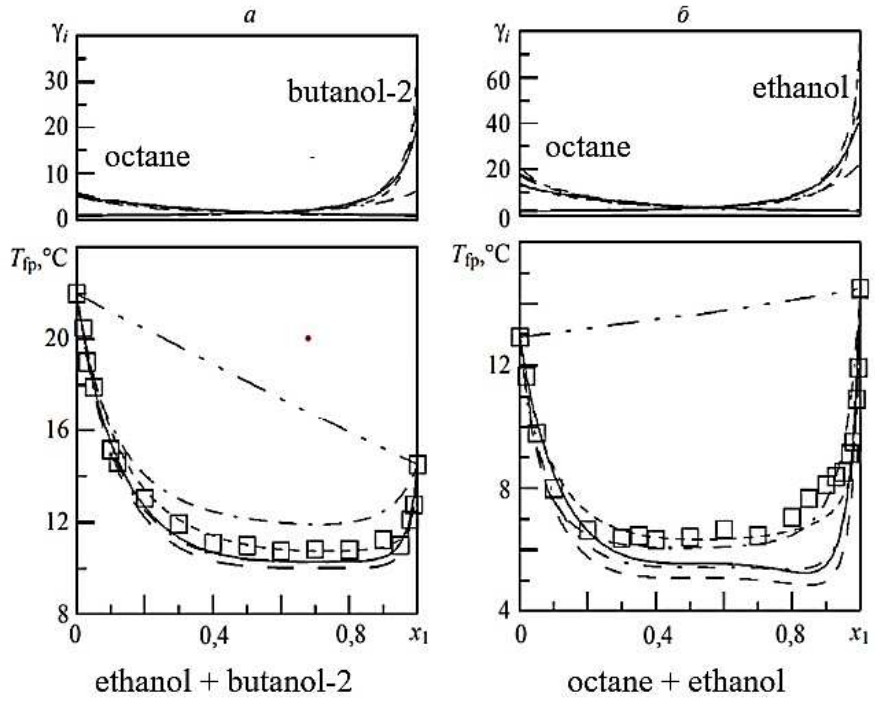

Рисунок 5 – Сравнение коэффициентов активности и прогнозируемой температуры вспышки с экспериментальными данными [22] для растворов с образованием минимальной температуры вспышки октан – бутанол-2 (а) и октан – изопропанол (б): «» – экспериментальные данные; «-» – оригинал UNIFAC; «----» – UNIFAC DORTMUND; « — - — :» – UNIFAC Linghby; «— — —» – версия UNIFAC Bastos и другие; «— — —» – NRTL; «— --» – идеальное решение

На рисунке 6 представлены результаты расчета температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для раствора октан – бутанол-1 с образованием экстремумов температуры вспышки.

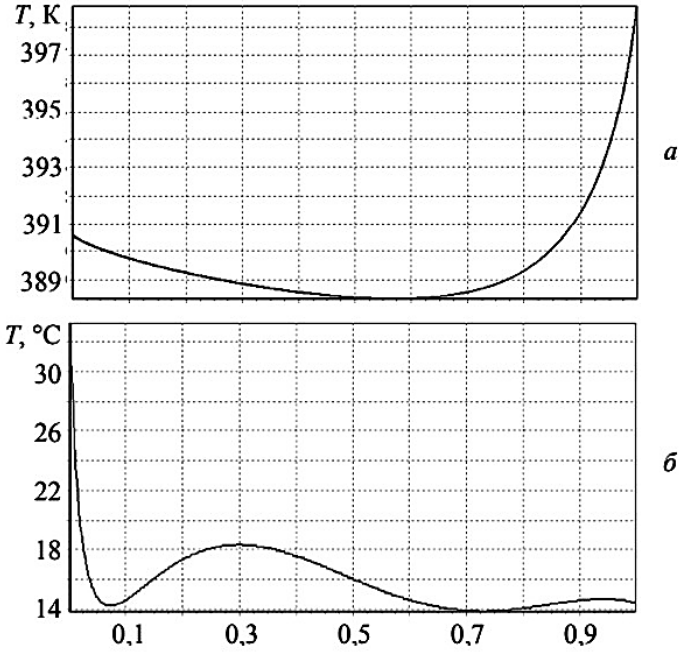

Рисунок 6 – Расчет температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для раствора октан-бутанола-1 с образованием экстремумов температуры вспышки: а – температура кипения – расчет; б – температура вспышки – расчет

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

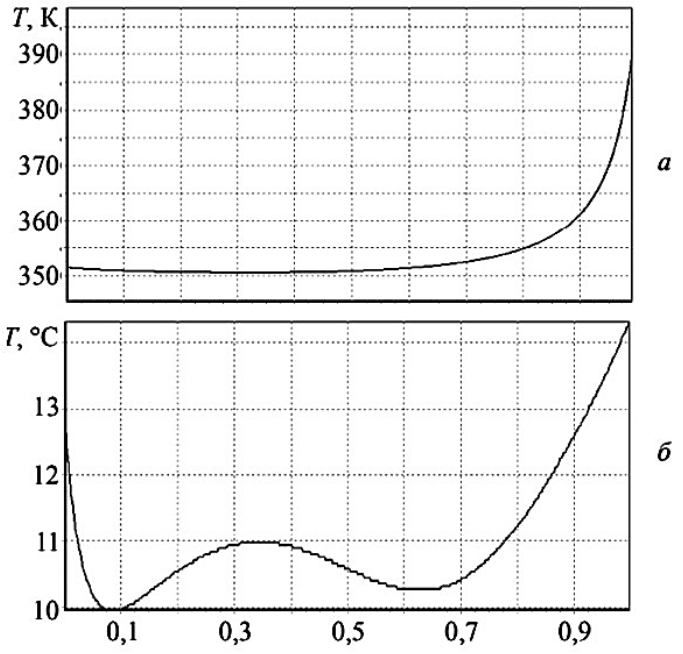

Рисунок 7 – Расчет температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для раствора октан-этанол с образованием экстремумов температуры вспышки: а – температура кипения – расчет; b – температура вспышки – расчет

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

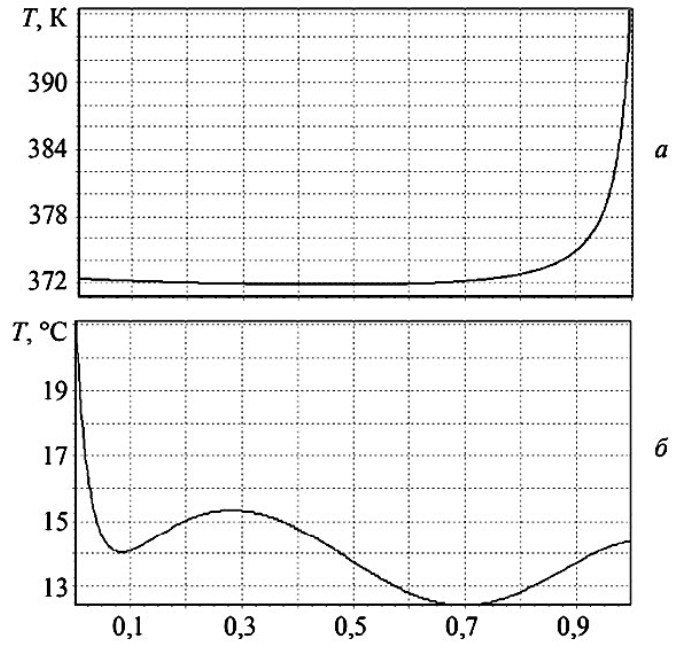

Рисунок 8 – Расчет температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для раствора октан – бутанол-2 с образованием экстремумов температуры вспышки: a – температура кипения – расчет; b – температура вспышки – расчет

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

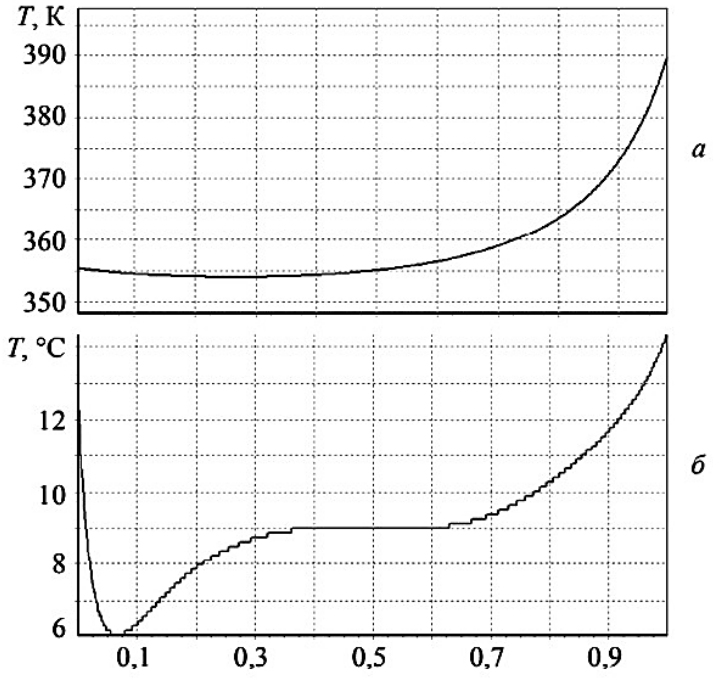

Рисунок 9 – Расчет температуры кипения и температуры вспышки по модели PCEAS для раствора октан – изопропанол с образованием минимальной температуры вспышки: a – температура кипения – расчет; b – температура вспышки – расчет

Выводы

Представлен метод прогнозирования зависимости температуры вспышки бинарных смесей горючих жидкостей от состава раствора. Метод основан на использовании данных о давлении смеси, полученных с помощью математического моделирования фазового равновесия в 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.

Список литературы:

1. Торсуев Н.С. Границы воспламеняемости смеси паров летучих растворителей // Журнал химической промышленности. – 1930. – № 22–23. – С. 1413–1414.
2. A mathematical model for predicting the flash point of binary solutions / H.-J. Liaw [et al.] // J. Loss Prev. Process. – 2002. – № 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. – № 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. – № 17. – P. 482–488.
5. Flame spread on aviation fuels / D. White [et al.] // Fire Saf. J. – 1997. – № 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. – № 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. – № 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. – № 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. – № 35. – P. 9–14.
10. Gmehling J. Flash points of flammable liquid mixtures using UNIFAC / J. Gmehling, P. Rasmussen // Ind. Eng. Chem. Fundam. – 1982. – № 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. – № 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. – № 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. – № 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. Binary liquid solutions exhibiting minimum flash-point behavior / H.-J. Liaw [et al.] // J. Loss Prev. Process. – 2003. – № 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. – № 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. – № 26. – P. 1372–1381.
18. Gmehling J. A modified UNIFAC model. 2. Present parameter matrix and for different thermodynamic propertie / J. Gmehling, J. Li, M. Schiller // Ind. Eng. Chem. Res. – 1993. – № 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. – № 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. – № 20. – P. 331–339.
21. The UNIFAC Consortium. – URL : http://unifac.ddbst.de (date of reference 2010).
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. – № 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). – М. : Издательство «Горная книга», 2009. – № ОВ17. – 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.

29. Durability study of specialized sealing elements / J.N. Aslanov [et al.] // International Journal on «Technical and Physical Problems of Engineering» (IJTPE) Published by International Organization of IOTPE, September. – 2022. – Iss. 52. – Vol. 14. – № 3. – P. 8–13.

List of references:

1. Torsuev, N.S. The Limits of Flammability of a Mixture of Volatile Solvent Vapors. Journal of Chemical Industry. – 1930. – № 22–23. – P. 1413–1414.

2. A mathematical model for predicting the flash point of binary solutions / H.-J. Liaw [et al.] // J. Loss Prev. Process. – 2002. – № 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. – № 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. – № 17. – P. 482–488.

5. Flame spread on aviation fuels / D. White [et al.] // Fire Saf. J. – 1997. – № 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. – № 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. – № 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. – № 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. – № 35. – P. 9–14.

10. Gmehling J. Flash points of flammable liquid mixtures using UNIFAC / J. Gmehling, P. Rasmussen // Ind. Eng. Chem. Fundam. – 1982. – № 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. – № 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. – № 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. – № 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. Binary liquid solutions exhibiting minimum flash-point behavior / H.-J. Liaw [et al.] // J. Loss Prev. Process. – 2003. – № 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. – № 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. – № 26. – P. 1372–1381.

18. Gmehling J. A modified UNIFAC model. 2. Present parameter matrix and for different thermodynamic propertie / J. Gmehling, J. Li, M. Schiller // Ind. Eng. Chem. Res. – 1993. – № 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. – № 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. – № 20. – P. 331–339.

21. The UNIFAC Consortium. – URL : http://unifac.ddbst.de (date of reference 2010).

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. – № 300. – P. 70–82.

23. Kogan V.B. Heterogeneous Equilibria. – L. : Chemistry, 1968. – 432 p.

24. Yesina Z.N. Mathematical Modeling of the Liquid-Solid Phase Transition / Z.N. Yesina, M.R. Korchuganova, V.V. Murashkin // Bulletin of Tomsk State University. Control, Computer Engineering, and Computer Science. – 2011. – № 3(16). – P. 13–23.

25. Zakharov Yu.N. Phase Transitions as a Cause of Disasters at Coal and Oil Processing Plants / Yu.N. Zakharov, Z.N. Esina, and M.R. Korchuganova // Kuzbass-2: Collection of Articles. A separate issue of the Mining Information and Analytical Bulletin (scientific and technical journal) Mining Information and Analytical Bulletin (Scientific and Technical Journal). – M. : Gornaya Kniga Publishing House, 2009. – № OB17. – P. 54–58.

26. Yesina Z.N. Forecasting the flash point of binary liquid mixtures / Z.N. Yesina, M.R. Korchuganova, V.V. Murashkin // Problems of environmental monitoring: Proceedings of the XI All-Russian Conference with the participation of foreign scientists (October 24–28, 2011). – Kemerovo : KemGU, 2011. – P. 177–182.

27. Esina Z.N. Mathematical Modeling of Phase Transitions in Real Solutions : monograph. – Kemerovo : Kemerovo State University, 2011. – 228 p.

28. Esina Z.N. Phase Chart Eutectic and Azeotropic System (PCEAS): Certificate of State Registration of a Computer Program № 2012618394 / Z.N. Esina, M.R. Korchuganova, V.V. Murashkin (RU) – № 2012616324; applied for on July 25, 2012; registered in the Register of Computer Programs, Moscow, September 17, 2012.

29. Durability study of specialized sealing elements / J.N. Aslanov [et al.] // International Journal on «Technical and Physical Problems of Engineering» (IJTPE) Published by International Organization of IOTPE, September. – 2022. – Iss. 52. – Vol. 14. – № 3. – P. 8–13.