

## محاسبه پارامترهای ضریب فعالیت در مدل‌های ترمودینامیکی با استفاده از دمای اشتعال محفظه بسته

منصور نورالهی\* و عبدالصمد زرین قلم مقدم\*\*\*

دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مهندسی شیمی  
(دریافت: ۱۳۸۶/۸/۱۱، پذیرش: ۱۳۸۷/۱۲/۱۱)

در تحقیق حاضر دمای اشتعال ترکیب‌های دوجزئی اتانول+اکتان نرمال، ۱-پروپانول+اکتان نرمال، ۱-پروپانول+دکان نرمال و همچنین دکان نرمال+اکتان نرمال در فشار اتمسفریک اندازه‌گیری شد. با استفاده از دماهای اشتعال آزمایشگاهی، پارامترهای برهم‌کنش دوتایی ترکیب‌های یادشده در مدل‌های ترمودینامیکی Wilson، NRTL و UNIQUAC محاسبه شد. همچنین غلظت‌های تعادلی بخار-مایع برای ترکیب دوجزئی اتانول+اکتان نرمال با استفاده از پارامترهای برهم‌کنش دوتایی (Binary parameters) به دست آمده از دمای اشتعال محاسبه شد و نتایج با داده‌های گزارش شده در مراجع مقایسه، و توافق بسیار نزدیکی مشاهده شد.

واژگان کلیدی: دمای اشتعال، مدل‌های ضریب فعالیت، پارامترهای برهم‌کنش دوتایی، مخلوط‌های دوجزئی

### مقدمه

یکی از مهم‌ترین خصوصیات فیزیکی یک مایع اشتعال‌پذیر که بیانگر میزان توانایی آن در ایجاد آتش و انفجار است، دمای اشتعال آن است. این پارامتر به صورت پایین‌ترین دمایی که در آن بخارهای حاصل از یک ماده توانایی شعله‌ور شدن را دارند، تعریف می‌شود. به عبارت دیگر در این دما بخارهای حاصل از مایع در حد پایین اشتعال خود قرار دارند [۱].

به طور کلی دو روش برای اندازه‌گیری دمای اشتعال وجود دارد که هر کدام از این دو روش بر اساس استاندارد خاص خود انجام می‌شود. این روش‌ها و استانداردهای مربوط عبارت‌اند از [۱]:

- ۱- روش محفظه باز<sup>۱</sup> ASTM D93, D56
- ۲- روش محفظه بسته<sup>۲</sup> ASTM D92

دمای اشتعال به روش محفظه باز به طور معمول چند درجه بالاتر از دمای اشتعال روش محفظه بسته است و از آن بیش‌تر برای مواد با دمای اشتعال بالاتر نظیر روغن‌ها استفاده می‌شود. با توجه به این که در روش محفظه بسته بخارات قابل اشتعال نزدیک‌تر به حالت تعادل با مایع‌اند لذا در این مقاله دمای اشتعال اندازه‌گیری شده به این روش برای تعیین پارامترهای تعادلی استفاده شده است. از آنجا که در فرایندهای مختلف شیمیایی به جای مواد خالص اغلب با ترکیب مواد سروکار داریم، محاسبه پارامترهای اشتعال‌پذیری ترکیب در برآورد میزان خطرناکی آن اهمیت بالایی دارد، از سویی داده‌های مربوط به دمای اشتعال ترکیب‌ها در مراجع، محدود به غلظت‌های خاص‌اند و همچنین اندازه‌گیری این پارامترها به روش آزمایشگاهی مستلزم صرف هزینه و وقت کافی است، بنابراین استفاده از مدل‌هایی علمی که بتوانند این پارامترها را به با دقت بالایی پیش‌بینی کنند همواره مورد توجه بوده است.

\* دانشجوی دکترا (ایمیل: m\_nourallahy@yahoo.com)  
\*\* دانشیار - نویسنده مخاطب (ایمیل: zarrin@modares.ac.ir)

<sup>1</sup> Open cup flash point

<sup>2</sup> Closed cup flash point

تا کنون مدل‌های مختلفی برای محاسبه دمای اشتعال ترکیب‌های اشتعال‌پذیر ارائه شده است. از اولین مدل‌های ارائه شده می‌توان به مدل استخراج شده توسط آفن و مک‌لارن اشاره کرد. آن‌ها در سال ۱۹۷۲ با استفاده از روابط مربوط به حد پایین اشتعال‌پذیری<sup>۱</sup> (LFL) و همچنین فرض حالت ایدئال برای مخلوط، مدلی را برای محاسبه دمای اشتعال مخلوط‌ها استخراج کردند. فرض مخلوط ایدئال در استخراج این مدل باعث عدم کارایی آن در محاسبات دمای اشتعال مخلوط‌های غیر ایدئال که طیف وسیعی از مخلوط‌ها را به خود اختصاص می‌دهند، شد [۲].

در سال ۱۹۹۷ وایت و همکاران با ناچیز در نظر گرفتن تاثیر دما به حد پایین اشتعال‌پذیری اجزای تشکیل دهنده مخلوط، مدل خود را به مدلی ساده‌تر تبدیل کرده و از آن برای تخمین دمای اشتعال مخلوط‌های دوتایی متشکل از سوخت‌های هواپیمایی نظیر JP 4/JP 8 و JP 5/JP 8 استفاده کردند [۳].

لیبا و همکاران در سال ۲۰۰۲ با به کار بردن ضرایب فعالیت در مدل وایت و همکاران، این مدل را به مدلی دقیق‌تر در پیش‌بینی دمای اشتعال ترکیب‌های مختلف از جمله ترکیب‌های ایدئال و غیر ایدئال تبدیل کردند [۴ و ۵]. کاتوری و همکاران نیز در سال ۲۰۰۶ با استفاده از نتایج آزمایشگاهی حاصل از دمای اشتعال ۶۰۰ ترکیب دوجزیی به معادله‌ای تجربی برای محاسبه دمای اشتعال ترکیب‌های دوجزیی دست یافتند. بررسی‌ها نشان می‌دهد استفاده از این روش نیز در محاسبات دمای اشتعال انواع ترکیب‌های دوجزیی می‌تواند علاوه بر سادگی مدل، با نتایج خوبی همراه باشد [۶]. لازم به ذکر است که این روش محاسبه، برای ترکیب‌های دوجزیی قابل اشتعال در فشار اتمسفری مناسب است.

در این مقاله دمای اشتعال محفظه‌ی بسته ترکیب‌های دوجزیی اتانول+اکتان نرمال، ۱-پروپانول+اکتان نرمال، ۱-پروپانول+دکان نرمال و دکان نرمال+اکتان نرمال در غلظت‌های مختلف اندازه‌گیری شده و با استفاده از این مقادیر و همچنین با به کارگیری مدل لیبا، پارامترهای برهم‌کنش دوتایی مربوط به هر یک از مدل‌های مختلف ضریب فعالیت محاسبه شده است. لازم به توضیح است این پارامترها تا کنون با استفاده از داده‌های تعادلی هم‌فشار و یا هم‌دمای ترکیب دوجزیی و قرار دادن آنها در روابط تعادلی محاسبه می‌شدند.

## مدل پیش‌بینی دمای اشتعال به روش لیبا

همان‌طور که گفته شد در این مدل برای تخمین دمای اشتعال از پارامترهای دخیل در تعادل مایع بخار نظیر مدل‌های مختلف ضریب فعالیت استفاده شده است. بنابراین در استفاده از این مدل نیازمند به استفاده از یکی از مدل‌های انرژی گیبس اضافی ( $G^{ex}$ ) خواهیم بود. در این قسمت به معرفی مدل لیبا در محاسبه‌ی دمای اشتعال می‌پردازیم.

بر اساس قانون چاتلییر در صورتی بخارات یک مخلوط قابل اشتعال خواهد بود که در مورد آن‌ها رابطه زیر صدق کند:

$$\sum_i \frac{y_i}{LFL_i} = 1 \quad (1)$$

از تعریف حد پایین اشتعال‌پذیری و دمای اشتعال خواهیم داشت:

$$LFL_i = \frac{P_{i,sp}^{sat}}{p} \quad (2)$$

جزء مولی ماده اشتعال‌پذیر  $i$  در فاز بخار را می‌توان با استفاده از روابط تعادلی مایع بخار به صورت زیر استخراج کرد:

$$y_i \hat{\phi}_i p = x_i \gamma_i f_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (3)$$

در فشار اتمسفریک می‌توان فاز بخار را گاز ایدئال فرض کرد:

$$\hat{\phi}_i = 1 \quad (4)$$

<sup>1</sup> Lower flammability limit

همچنین فوگاسیته مایع در دما و فشار سیستم را می‌توان با تقریب خوبی با فشار اشباع آن برابر در نظر گرفت:

$$f_i \cong p_i^{sat} \quad (5)$$

با اعمال فرضیات ساده‌کننده در رابطه (۳) و جایگزینی روابط (۲) و (۳) در رابطه (۱) نتیجه نهایی به صورت زیر حاصل خواهد شد:

$$\sum_i \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P_i^{sat}} = 1 \quad (6)$$

با به کار بردن معادله آنتوان می‌توان تغییرات فشار بخار اشباع  $p_i^{sat}$  بر حسب دما را محاسبه کرد. دمایی که در رابطه ۶ صدق کند برابر با دمای اشتعال مخلوط خواهد بود. همان‌گونه که از رابطه ۶ مشخص است محاسبه دمای اشتعال بر اساس این مدل بر اساس حدس و خطا استوار خواهد بود [۵].

در محاسبه‌ی دمای اشتعال بر اساس مدل لیلیا ضرایب فعالیت اجزا در مخلوط مورد نیاز خواهد بود که برای محاسبه‌ی این پارامترها در این مقاله از مدل‌های  $G^{ex}$  مختلفی از قبیل Wilson، NRTL و UNIQUAC استفاده شده است. روابط مربوط به محاسبه‌ی ضرایب فعالیت بر اساس هر یک از این مدل‌ها در جدول (۱) آمده است [۷].

جدول ۱- مدل‌های مختلف  $G^{ex}$  در محاسبه ضرایب فعالیت [۷]

مدل	پارامترهای دوتایی	$\ln \gamma_1$ and $\ln \gamma_2$
Wilson	$\Lambda_{12}, \Lambda_{21}$	$\ln \gamma_i = -\ln(x_i + \Lambda_{ij} x_j) + x_j \left( \frac{\Lambda_{ij}}{x_i + \Lambda_{ij} x_j} - \frac{\Lambda_{ji}}{\Lambda_{ji} x_i + x_j} \right)$ where $i = 1, j = 2$ or $i = 2, j = 1$ $\Lambda_{ij} = \frac{v_j^l}{v_i^l} \exp \left( -\frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ii}}{RT} \right)$
NRTL	$g_{12}, g_{22}, g_{21}, g_{11}$	$\ln \gamma_i = x_j^2 \left[ \tau_{ji} \left( \frac{G_{ji}}{x_i + x_j G_{ji}} \right)^2 + \frac{\tau_{ij} G_{ij}}{(x_j + x_i G_{ij})^2} \right]$ where $i = 1, j = 2$ or $i = 2, j = 1$ $\tau_{ij} = \frac{g_{ij} - g_{jj}}{RT}; \ln G_{ij} = -\alpha_{ij} \tau_{ij}$
UNIQUAC	$u_{12}, u_{22}, u_{21}, u_{11}$	$\ln \gamma_i = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + \Phi_j \left( l_i - \frac{r_i}{r_j} l_j \right) - q_i \ln \left( \theta_i + \theta_j \tau_{ji} \right)$ $+ \theta_j q_i \left( \frac{\tau_{ji}}{\theta_i + \theta_j \tau_{ji}} - \frac{\tau_{ij}}{\theta_j + \theta_i \tau_{ij}} \right)$ where $i = 1, j = 2$ or $i = 2, j = 1$ $\ln \tau_{ij} = -\frac{u_{ij} - u_{jj}}{RT}; \Phi_i = \frac{x_i r_i}{x_i r_i + x_j r_j}; \theta_i = \frac{x_i q_i}{x_i q_i + x_j q_j}; l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$ $z = 10$

همان‌گونه که در جدول (۱) مشاهده می‌شود، مدل ویلسون دارای دو پارامتر قابل تغییر  $\Lambda_{12}, \Lambda_{21}$  است که به اختلاف انرژی‌های تعامل بین مولکولی  $(\lambda_{12}, \lambda_{21})$  وابسته‌اند. مدل NRTL (1964) دارای سه پارامتر قابل تغییر  $g_{12}, g_{21}, \alpha_{12}$  است که پارامتر  $\alpha$  مربوط به نظم مخلوط است و معمولاً مقداری بین ۰/۳ تا ۰/۴۷ به خود می‌گیرد. نظریه شبه شیمیایی جامع یا به عبارت دیگر مدل UNIQUAC (1975) برای انواع مختلفی از مخلوط‌ها از قبیل الکترولیت و غیر الکترولیت قابلیت کاربرد دارد. این معادله نیز دارای دو پارامتر قابل تنظیم  $u_{12}, u_{21}$  است که معیاری از انرژی‌های مشخصه‌اند [۷].

## جزئیات آزمایش‌ها

اندازه‌گیری دمای اشتعال مخلوط نمونه‌ها با دستگاه پنسکی مارتینز، محفظه بسته مدل STANHOPE-SETA ساخت انگلستان و بر اساس روش استاندارد ASTM D93 انجام شده است [۸]. میزان خطا در اندازه‌گیری دمای اشتعال به روش یاد شده  $\pm 3$  درجه سانتی‌گراد است. مواد مورد آزمایش در ساخت ترکیبات دو جزئی عبارت‌اند از: نرمال اکتان ۹۹ درصد، نرمال دکان ۹۶ درصد، ۱-پروپانول ۹۹ درصد و اتانول ۹۶ درصد ساخت شرکت مرک آلمان. دمای اشتعال هر ترکیب سه بار اندازه‌گیری شده و میانگین این مقادیر به عنوان دمای اشتعال ترکیب گزارش شده است.

## خواص فیزیکی اجزا

در محاسبات مربوط به دمای اشتعال مخلوط مایعات با استفاده از مدل لیبیا یک سری از داده‌های مربوط به خواص فیزیکی اجزا از قبیل پارامترهای معادله آنتوان و هم‌چنین برای محاسبه ضرایب فعالیت با استفاده از مدل‌های ویلسون و UNIQUAC داده‌هایی از قبیل حجم مولی مایع جزء خالص ( $v_i$ ) و هم‌چنین مقادیر پارامترهای  $q$  و  $r$  (وابسته به اندازه مولکولی و مساحت سطح خارجی مولکول) مواد مورد نیاز است که این مقادیر به ترتیب در جداول (۲) و (۳) ارائه شده است.

جدول ۲- پارامترهای معادله آنتوان

ترکیب	A	B	C	شکل معادله آنتوان	مرجع
Ethanol	۷/۲۴۲۲	۱۵۹۵/۸	-۴۶/۷	$\log(p/kPa) = A - B[(T/K) + C]$	[۴]
1-Propanol	۱۷/۵۴۳۹	۳۱۶۶۳/۳۸	-۸۰/۱۵	$\log(p/mmHg) = A - B[(T/K) + C]$	[۴]
n-octane	۶/۰۴۳۹	۱۳۵۱/۹۳۸	-۶۴/۰۳	$\log(p/kPa) = A - B[(T/K) + C]$	[۴]
n-decane	۱۴/۰۱۹۶۴	۳۴۷۴/۰۳	۷۷/۷۸	$\log(p/kPa) = A - B[(T/K) - C]$	[۱۰]

جدول ۳- حجم مخصوص مایع ( $v_i$ )، حجم نسبی واندروالسی  $r$  و پارامتر سطحی مولکول  $q$  مورد نیاز در مدل‌های Wilson و UNIQUAC

ترکیب	$v_i = \frac{MW_i}{\rho_i} \text{ (cm}^3/\text{mol)} \text{ [۱۱]}$	$r$ [۹]	$q$ [۹]
اتانول	۵۸/۶۸	۲/۱۰۵۵	۱/۹۷۲
۱-پروپانول	۷۵/۰۹	۲/۷۷۹۹	۲/۵۱۲
نرمال اکتان	۱۶۳/۱۶	۵/۸۴	۴/۹
نرمال دکان	۱۹۵/۵۹	۷/۱۹۷۴	۶/۰۱۵۹

## آزمایش‌ها و تحلیل نتایج

مقادیر دمای اشتعال اندازه‌گیری شده برای ترکیب‌های یاد شده‌ی غلظت‌های مختلف در جدول (۴) آمده است. با توجه به تفاوت ماهیت پیوندهای بین مولکولی اجزای تشکیل دهنده‌ی ترکیب‌های دوجزئی شامل آلکان‌ها و الکل‌ها، از این ترکیبات رفتاری غیر ایدئال قابل انتظار است. همان‌گونه که از مقادیر مشخص است برای این‌چنین ترکیبات، در محدوده‌ای از غلظت دمای اشتعال ترکیب از مقدار آن برای دو جزء به صورت خالص پایین‌تر است. این ویژگی رفتار، دمای اشتعال مینیمم (MFPB)<sup>۱</sup> نامیده می‌شود که در نتیجه‌ی انحراف مثبت مخلوط از مخلوط ایدئال بروز می‌کند.

<sup>۱</sup> Minimum flash point behavior

با استفاده از مقادیر دمای اشتعال و استفاده از مدل لیبیا در تخمین این پارامتر و به کار بردن روش حداقل کردن مقدار خطا بین مقادیر تخمینی و مقادیر آزمایشگاهی به محاسبه پارامترهای تاثیر متقابل بین مولکولی مربوط به هر یک از مدل‌های انرژی گیبس اضافی ( $G^{ex}$ ) در مورد این ترکیبات پرداختیم که نتایج حاصل در جدول (۵) قابل ملاحظه است.

جدول ۴- مقادیر دمای اشتعال اندازه‌گیری شده دوجزیی‌های مختلف

غلظت مولی جزء ۱	دمای اشتعال			
	اتانول(۱)+اکتان(۲)	۱-پروپانول(۱)+اکتان(۲)	۱-پروپانول+دکان(۲)	اکتان(۱)+دکان(۲)
۰	۲۸۶/۱۵	۲۸۶/۱۵	۳۱۸/۱۵	۳۱۸/۱۵
۰/۱	۲۷۸/۷	۲۸۰/۳	۲۹۱/۱۵	۳۱۰/۸
۰/۲	۲۷۸/۸	۲۷۹/۲	۲۹۰/۹	۳۰۵/۲
۰/۳	۲۷۸/۸	۲۷۹/۸	۲۹۱/۷۶	۲۹۸/۵
۰/۴	۲۷۸/۹	۲۸۰	۲۹۲/۰	۲۹۵/۸
۰/۵	۲۷۸/۸	۲۷۹/۷	۲۹۲/۶	۲۹۳/۳
۰/۶	۲۷۸/۸	۲۷۹/۸	۲۹۲/۶	۲۸۹/۱
۰/۷	۲۷۸/۸	۲۸۰/۳	۲۹۲/۰	۲۸۸/۵
۰/۸	۲۷۸/۹	۲۸۰/۹	۲۹۲/۰۳	۲۸۵/۸
۰/۹	۲۷۸/۸	۲۸۲/۰۳	۲۹۲/۶	۲۸۵/۵
۱/۰	۲۸۵/۱۵	۲۹۴/۱۵	۲۹۴/۱۵	۲۸۶/۱

جدول ۵- مقادیر پارامترهای دوتایی محاسبه شده مربوط به مدل‌های مختلف  $G^{ex}$  برای ترکیبات مختلف

ترکیبات دو جزیی	پارامترهای محاسبه شده						
	NRTL			Wilson		UNIQUAC	
	$A_{12}$	$A_{21}$	$\alpha_{12}$	$A_{12}$	$A_{21}$	$A_{12}$	$A_{21}$
دکان(۱)+اکتان(۲)	-۳۸۸/۷۱	۱۰۲۵/۵	۰/۳۱	۲۹۷۳/۳	-۲۲۳/۵	-۲۴۳/۰	۴۸۵/۱۴
۱-پروپانول(۱)+دکان(۲)	۶۲۱/۵۴	۷۵۰/۷۱	۰/۳۹	۲۴۴۸/۵۲	۶۷۱/۱	-۹۴/۶۵	۴۹۹/۲۳
۱-پروپانول(۱)+اکتان(۲)	۵۵۰/۹	۷۴۶/۳۸	۰/۴۳	۱۲۹۳/۶	۳۳۸/۸	-۵۷/۹	۳۹۰/۰۸
اتانول(۱)+اکتان(۲)	۷۹۸/۱۶	۷۹۲/۷۰	۰/۴۹	۹۱۶/۶۴	۱۹۱/۷۵	-۷۰/۲۲	۴۷۱/۸۸

$$NRTL \text{ equation} : A_{12} = (g_{12} - g_{22}) / R, A_{21} = (g_{21} - g_{11}) / R$$

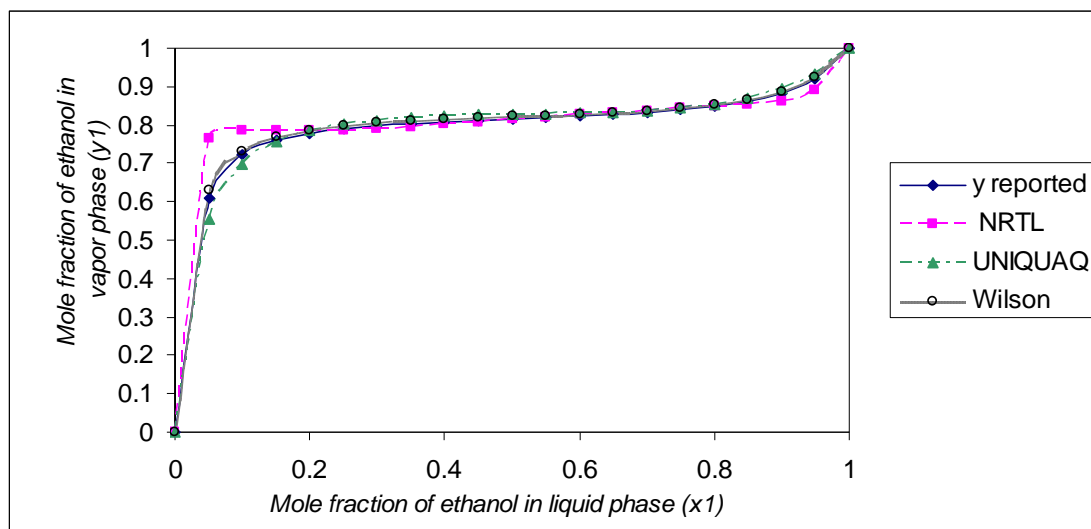
$$Wilson \text{ equation} : A_{12} = (\lambda_{12} - \lambda_{11}) / R, A_{21} = (\lambda_{21} - \lambda_{22}) / R$$

$$UNIQUAC \text{ equation} : A_{12} = (u_{12} - u_{22}) / R, A_{21} = (u_{21} - u_{11}) / R$$

## بررسی صحت نتایج

برای بررسی دقت عمل پارامترهای محاسبه شده از این روش، پارامترهای مربوط به ترکیب اتانول + اکتان نرمال را در محاسبات تعادلی فشار اتمسفریک این ترکیب به کار گرفته و نتایج حاصل را با مقادیر گزارش شده در مرجع [۹] مقایسه می‌کنیم. نتیجه حاصل در شکل (۱) آمده است.

در جدول (۶) مقادیر متوسط خطای حاصل در به کارگیری پارامترهای به دست آمده در مورد این ترکیب گزارش شده است. با توجه به شکل (۱) و مقادیر متوسط خطای به دست آمده می‌توان نتیجه گرفت پارامترهای حاصل را می‌توان با تقریب بسیار مطلوبی در محاسبات تعادلی به کار برد.



شکل ۱- مقایسه‌ی مقادیر تخمینی غلظت تعادلی فشار اتمسفریک اتانول در ترکیب اتانول + اکتان با مقادیر گزارش شده در مرجع [۹]

جدول ۶- مقادیر خطای ناشی از کاربرد پارامترهای به دست آمده در محاسبات تعادلی اتانول + اکتان نرمال

مدل اکتیویته	درصد خطا
NRTL	٪۲/۶۹
UNIQUAC	٪۱/۷۰
WILSON	٪۰/۸۴

## نتیجه گیری

دمای اشتعال محفظه بسته‌ی ترکیبات دو جزئی اتانول + اکتان نرمال و ۱-پروپانول + اکتان نرمال و ۱-پروپانول + دکان نرمال و هم‌چنین دکان نرمال + اکتان نرمال در غلظت‌های مختلف اندازه‌گیری شد. پارامترهای مدل‌های مختلف انرژی گیبس اضافی با استفاده از دمای اشتعال ترکیب‌های دو جزئی محاسبه شد. مقایسه داده‌های تعادلی فشار اتمسفریک حاصل از مدل با نتایج موجود در مراجع در مورد ترکیب اتانول + اکتان نرمال توافق نزدیکی نشان داده و روش عمل را تایید می‌کند. همان‌گونه که مشاهده شد، در روش پیشنهادی برای محاسبه‌ی پارامترهای برهم‌کنش دوتایی، تنها به داده‌های مربوط به دمای اشتعال ترکیب در غلظت‌های مختلف نیاز خواهیم داشت که به سادگی از طریق آزمایش قابل دست‌یابی‌اند. اما در روش‌های قبلی، محاسبه‌ی پارامترهای یادشده تنها با استفاده از داده‌های تعادلی ترکیب در شرایط مختلف امکان‌پذیر است که به دست آوردن داده‌های تعادلی در مقایسه با اندازه‌گیری دمای اشتعال ترکیب کاری به مراتب دشوارتر و پیچیده‌تر است. بنابراین سادگی و دقت مدل ارائه شده در محاسبه‌ی پارامترهای برهم‌کنش می‌تواند از مزیت‌های آن نسبت به روش قبلی باشد.

## واژه نامه

پارامترهای معادله آنتوان	A,B,C
فوغاسیته جزء خالص، $kPa$	$f$
پارامترهای معادله NRTL	$g$
حد پایین اشتعال پذیری	LFL
فشار محیط، $kPa$	$P$

فشاربخار اشباع، $kPa$	$P^{sat}$
فشار بخار اشباع جزء $i$ در دمای اشتعال	$P_{fp}^{sat}$
پارامتر معیار سطح مولکولی	$q_i$
ثابت گازها $8.314 J/mol$	$R$
حجم مولکولی واندروالسی	$r_i$
دما، $K$	$T$
پارامترهای دوتایی UNIQUAC، $J/mol$	$u$
حجم مولکولی مایع خالص، $m^3/mole$	$v^l$
جزء مولی فاز مایع	$x$
جزء مولی فاز بخار	$y$
عدد هم آرابی	$z$
کسر قطعه <sup>۱</sup>	$\Phi_i$
ضریب فوگایتته جزء $i$ در مخلوط	$\hat{\Phi}_i$
ضریب اکتیویته	$\gamma$
در جدول ۱ تعریف شده	$\Lambda$
پارامترهای دوتایی معادله ویلسون، $J/mol$	$\lambda$
جزء حجمی جزء $i$	$\theta_i$
در جدول ۱ تعریف شده	$\tau$
دمای اشتعال	$fp$
مخلوط	$m$

## مراجع

1. Frank p. Lees, Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 2, Second Edition, Reed Publishing Ltd 1996.
2. Affens, W. A., and McLaren, G. W., "Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in air," J. Chem. Eng. Data, 17, pp. 482-488, 1972.
3. White, D., Beyler, C. L., Fulper, C., and Leonard, J., "Flame Spread on Aviation Fuels," Fire Safety Journal, 28, pp. 1-31, 1997.
4. Horng-Jang Liaw, Yi-Huah Lee, Chia-Ling Tang, Hua-Hsuan Hsu, and Jia-Huey Liu, "A Mathematical Model for Predicting the Flash Point of Binary Solutions," Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 15, pp. 429-438, 2002.
5. Horng-Jang Liaw, and Yi-Yu Chiu, "A General Model for Predicting the Flash Point of Miscible Mixtures," Journal of Hazardous Materials, 137, Issue 1, pp. 38-46, 2006.
6. Laurent Catoire, Ste phanie Paulmier, and Valerie Naudet, "Experimental Determination and Estimation of Closed Cup Flash Points of Mixtures of Flammable Solvents," Wiley Inter Science, 2005.
7. Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., and Azevedo, E. G., Molecular Thermodynamics of Fluid - Phase Equilibria, Third Edition, Prentice Hall Inc, 1999.
8. ASTM D 93, Standard Test Methods for Flash Point by Pensky-Martens Closed Cup Tester, West Conshohocken, PA: American Society for Testing and Materials, 2000.
9. Marian Go ral, and Paweł Oracz "Recommended Vapor-Liquid Equilibrium Data, Part 1: Binary n-Alkanol-n-Alkane Systems," J. Phys. Chem. Ref. Data, 31, No. 3, 2002.
10. Poling, B. E., Prausnitz, J. M., and O'Connell, H. P., The Properties of Gases and Liquids, Fifth ed., McGraw-Hill: New York, 2001.
11. <http://www.inchem.org/pages/icsc.html>

<sup>1</sup> Segment fraction

## English Abstract

# Calculation of Mixture Equilibrium Binary Interaction Parameters in Thermodynamic Models Using Closed Cup Flash Point

**M. Noorollahy and A. Zarringhalam Moghaddam**

Chemical Engineering Group, Faculty of Engineering, Tarbiat Modarres University

*In the present work, the flash points of binary systems (ethanol+n-octane, 1-propanol+n-octane, 1-propanol+n-decane, and n-octane+ n-decane) were measured in atmospheric pressure. The resulting flash points data were used in NRTL, Wilson and UNIQUAC models to calculate the mixture binary parameters. The results were subsequently compared with experimentally produced VLE data, and revealed that this method is able to predict the binary interaction parameters of binary mixtures with high accuracy.*

**Key Words:** Flash points, Activity models, Binary interaction parameters, Vapor-liquid equilibrium, Binary mixtures.