

W analizowanym przykładzie należy obliczyć składy fazy parowej i ciekłej wynikające z równowagi osiągananej przez mieszaninę składającą się z 30 mol% metanolu, 30 mol% propanolu i 40 mol% acetonu. Obliczenia PT-flash przeprowadza się w temperaturze 340 K i ciśnieniem 1 atm. Jako termodynamiczny model mieszaniny należy zastosować dwuparametryczne równanie Margulesa estymowane dla danych eksperymentalnych podanych przez Holmesa i van Winkle'a [**Błąd! Nie można odnaleźć źródła odwołania.**] oraz Reida i współpracowników [**Błąd! Nie można odnaleźć źródła odwołania.**]. Dla mieszaniny trzech związków model termodynamiczny przedstawia się następująco:

$$\frac{G^E}{R \cdot T} = -0,0753 \cdot x_1 \cdot x_2 + 0,6495 \cdot x_1 \cdot x_3 + 0,557 \cdot x_2 \cdot x_3 \quad (1)$$

a współczynniki aktywności poszczególnych związków opisują poniższe korelacje:

$$\ln \gamma_1 = -0,0753 \cdot x_2^2 + 0,6495 \cdot x_3^2 + 0,0172 \cdot x_2 \cdot x_3 \quad (2)$$

$$\ln \gamma_2 = -0,0753 \cdot x_1^2 + 0,557 \cdot x_3^2 - 0,1678 \cdot x_1 \cdot x_3 \quad (3)$$

$$\ln \gamma_3 = -0,6495 \cdot x_1^2 + 0,557 \cdot x_2^2 + 1,2818 \cdot x_1 \cdot x_2 \quad (4)$$

W celu wyznaczenia ciśnienia cząstkowego gazów należy wykorzystać równanie Antoine'a:

$$\ln P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad (5)$$

gdzie P_i^0 jest ciśnieniem cząstkowym wyrażonym w mmHg, a temperatura T jest wyrażona w K. Stałe równania (5) dla metanolu, propanolu i acetonu przedstawiono w tabeli 1.

Analizowany przykład został opracowany na podstawie danych przedstawionych w zadaniu z [**Błąd! Nie można odnaleźć źródła odwołania.**]. Tok prowadzonych obliczeń jest zgodny z algorytmem przedstawionym na rys. **Błąd! Nie można odnaleźć źródła odwołania.**

Tabela 1: Współczynniki w równaniu Antoine'a

Stałe	Metanol	Propanol	Aceton
A_i	18,59	17,54	16,65
B_i	3626,55	3166,38	2940,46
C_i	-34,29	-80,15	-35,93