

RAVNOTEŽA KAPLJEVINA-KAPLJEVINA

VIII. Proračun ravnotežnog sastava: $z, (T, \pi) \rightarrow x^I, x^{II}$

1. Ulazni podaci su temperatura T , tlak, π , odgovarajuće konstante modela, koji opisuje ovisnost koeficijenta aktivnosti o sastavu kapljevine, $\gamma_i=f(x_i)$, te vektor ukupnog sastava sustava, z_i .
2. Pretpostavi se vektor sastava kapljevite faze I, x_i^I , te ukupni udio kapljevite faze I u sustavu, Ψ .
3. Iz materijalne bilance po komponentama izračuna se vektor sastava kapljevite faze II, x_i^{II} , prema izrazu:

$$x_i^{II} = \frac{z_i - x_i^I \Psi}{1 - \Psi}$$

4. Normiraju se vektori sastava objiju kapljeviti faza prema izrazu:

$$x_i = \frac{|x_i|}{\sum_{i=1}^{nk} |x_i|}$$

5. Izračunaju se vektori koeficijenata aktivnosti u objema fazama: γ_i^I , odnosno γ_i^{II} , prema odabranom modelu, te vektor omjera koeficijenata aktivnosti: $K_{\gamma i}$:

$$K_{\gamma i} = \frac{\gamma_i^{II}}{\gamma_i^I}$$

6. Izračuna se novi iznos Ψ prema:

$$\Psi^{(n+1)} = \Psi^{(n)} - \frac{\Omega(\Psi^{(n)})}{\Omega'(\Psi^{(n)})}$$

gdje je:

$$\Omega(\Psi) = -1 + \sum_{i=1}^{nk} \frac{z_i}{1 + (K_{\gamma i} - 1)\Psi}$$

i

$$\Omega' = \frac{d\Omega}{d\Psi} = - \sum_{i=1}^{nk} \frac{z_i (K_{\gamma i} - 1)}{[1 + (K_{\gamma i} - 1)\Psi]^2}$$

7. Izračuna se odstupanje dviju uzastopno izračunatih vrijednosti Ψ :

$$\Delta\Psi = |\Psi^{(n+1)} - \Psi^{(n)}|$$

Ako je $\Delta\Psi > \varepsilon_1$, nije zadovoljena bilanca tvari i proračun se vraća u točku 6.

Ako je $\Delta\Psi < \varepsilon_1$, prelazi se na sljedeću točku proračuna:

8. Izračunavaju se novi vektori sastava objiju kapljeviti faza, prema izrazima:

$$x_i^{II} = \frac{z_i}{1 + (K_{\gamma i} - 1)\Psi},$$

odnosno

$$x_i^I = K_{\gamma i} x_i^{II}$$

9. Izračunava se razlika dvaju uzastopno izračunatih vektora sastava druge faze:

$$\Delta x^{\text{II}} = \sum_{i=1}^{\text{nk}} [(x_i^{\text{II}})_{\text{novi}} - (x_i^{\text{II}})_{\text{stari}}]^2$$

Ako je $\Delta x^{\text{II}} > \varepsilon_2$, nije zadovoljen uvjet ravnoteže i proračun se vraća u točku 4.

Ako je $\Delta x^{\text{II}} < \varepsilon_2$, posljednje izračunati sastavi faza konačno su rješenje proračuna.