การดัดแปลงสมการสภาวะทรงกลมแข็งสำหรับสมบัติเทอร์โมไดนามิกส์ของไฮโดรคาร์บอนเบา

นางสาว อรัญญา คชชาญ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาเทคโนโลยีปิโตรเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2533

ISBN 974-577-648-3

MODIFICATION OF HARD-SPHERE EQUATION OF STATE FOR THERMODYNAMIC PROPERTIES OF LIGHT HYDROCARBONS

Miss Arunya Kotchan

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Engineering

Program of Petrochemical Technology

Graduate School

Chulalongkorn University

1990

ISBN 974-577-648-3

Thesis Title	Modification of Hard-Sphere Equation of State for Thermodynamic Properties of Light Hydrocarbons
By	Miss Arunya Kotchan
Department	Petro-Polymer (Inter Program)
Thesis Advisor	Associate Professor Pattarapan Prasassarakich, Ph.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fullfillment of the Requirements for the Master's Degree.

.....Dean of the Graduate School

(Professor Thavorn Vajarabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

.....Chairman

(Associate Professor Woraphat Arthayukti, Dr.Ing.)

.....Thesis Advisor

(Associate Professor Patarapan Prasassarakich, Ph.D.)

.....Member

(Associate Professor Shooshat Barame, Dr.Ing.)

.....Member

(Assistant Professor Lursuang Mekasut, Dr.Ing.)

อรัญญา คชชาญ : การดัดแปลงสมการสภาวะทรงกลมแข็งสำหรับสมบัติเทอร์โมไดนามิกส์ของไฮโดรคาร์บอนเบา (MODIFICATION OF HARD-SPHERE EQUATION OF STATE FOR THERMODYNAMIC PROPERTIES OF LIGHT HYDROCARBONS) อ.ที่ปรึกษา : รศ.ดร. ภัทรพรรณ ประศาสน์สารกิจ , 180 หน้า. ISBN 974-577-[illegible]

สมการสภาวะทรงกลมแข็งได้ดัดแปลงมาจากการรวมพจน์แรงผลักของสมการสภาวะทรงกลมแข็งของอิชิกาวาและพจน์แรงดึงดูดของสมการสภาวะ SRK เพื่อนำมาใช้คำนวณคุณสมบัติของไฮโดรคาร์บอนเบา ($c_1 - c_6$) ได้ถูกต้องแม่นยำยิ่งขึ้น โดยสมการดังกล่าวมีพารามิเตอร์ 2 ตัว ซึ่งขึ้นกับอุณหภูมิ พารามิเตอร์ทั้งสองคำนวณได้จากค่าความดันไอและปริมาตรของของเหลวอิ่มตัว เมื่อเปรียบเทียบความสามารถในการคำนวณความดันไอ ปริมาตรของของเหลวอิ่มตัว และปริมาตรของไออิ่มตัว ระหว่างสมการสภาวะทรงกลมแข็งดัดแปลงกับสมการของ SRK และ PR พบว่าสมการสภาวะทรงกลมแข็งดัดแปลงให้ค่าความแม่นยำในการคำนวณปริมาตรของไอและความดันไอใกล้เคียงกับ SRK และ PR แต่สามารถคำนวณปริมาตรของของเหลวได้ถูกต้องแม่นยำกว่า SRK และ PR มาก

ภาควิชา สหสาขาปิโตรเคมี-โพลิเมอร์ ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา เทคโนโลยีปิโตรเคมี

ปีการศึกษา 2532 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

ARUNYA KOTCHAN : MODIFICATION OF HARD-SPHERE EQUATION OF STATE FOR FOR THERMODYNAMIC PROPERTIES OF LIGHT HYDROCARBONS. THESIS ADVISOR : ASSO.PROF.PATTARAPAN PRASASSARAKICH, Ph.D. 180 PP.

A modified hard-sphere equation which combines the analytical expression of Ishikawa et al. for the hard sphere repulsive term and the empirical attractive term of the Soave-Redlich-Kwong equation has been applied to the calculation of pure component properties of light hydrocarbons (C_1- C_6). The two parameters of the modified hard-sphere equation are treated as temperature functions. Molal volumes and vapor pressures of pure saturated liquids were used for evaluating the two parameters of the equation.

The calculated results obtained for pure component properties, vapor pressure, saturated liquid and vapor volumes indicate that the new equation performs as well as or better than the Soave-Redlich-Kwong equation and Peng-Robinson equation in all cases treated and shows its greatest advantages in the prediction of liquid phase densities.

ภาควิชา คณะวิศวกรรมเคมี-โพลิเมอร์

สาขาวิชา เทคโนโลยีโพลิเมอร์

ปีการศึกษา 2532

ลายมือชื่อนิสิต .....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to express her sincere gratitude to her advisor, Associate Professor Dr. Pattarapan Prasassarakich, for providing helpful advice and encouragement throughout this study including criticism and for reviewing this thesis.

The financial support for this research from Chulalongkorn University is greatfully acknowledged.

CONTENTS

LIST OF TABLES

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF FIGURES

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

NOTATION INDEX

ACRONYMS

EOS	Equation of State
ICL	Ishikawa-Chung-Lu equation of state
PR	Peng-Robinson equation of state
RK	Redlich-Kwong equation of state
SRK	Soave-Redlich-Kwong equation of state
vdW	van der Waals equation of state
VLE	Vapor-Liquid Equilibrium

LETTERS

a	attraction parameter of the van der Waals, Soave or Peng-Robinson EOS, $(L^6)/M^2$, $(liters/gmol)^2$
a	attraction parameter of Redlich-Kwong EOS, $(L^6)(T^{0.5})/(M^2)$, $(liters)^2\ (K)^{0.5}\ /(gmol)^2$
a,b,c	parameters of some cubic equations of state
A	$= aP/R^2\ T^{2.5}$, derived parameter of the RK or ICL EOS
A	$= a(T)P/R^2\ T^2$, derived parameter of the PR, SRK or this modified hard sphere EOS
b	residual volume parameter of the vdW, RK, SRK, PR, ICL, and some other cubic EOS, $(L^3)/(M)$, liters/gmol
B	$= bP/RT$, derived parameter of RK, SRK, PR, ICL and this modified hard-sphere EOS
c_{ij}	binary interaction parameter for the cross-attraction parameter of the RK, SRK, PR, ICL and this proposed EOS
f_i	partial fugacity of species i
K_i	$= y_i/x_i$, vaporization equilibrium ratio
MW	molecular weight
P	pressure of system
P_c	critical pressure
P_r	$= P/P_c$, reduced pressure

R	gas constant, (=0.08205 (liter)(atm.)/ (gmol)(K)
T	temperature,°K,°R,°C,°F
T_c	critical temperature
T_r	= T/T_c , reduced temperature
V	specific volume, the recipocal of the density, liters/gmol.
x_i	mol fraction of a species in a liquid phase mixture
y_i	mol fraction of a species in a vapor phase mixture
Z	= PV/RT, compressibility factor
Z_c	= $P_c V_c /RT_c$, critical compressibility

GREEK LETTERS

α	parameter of SRK and PR EOS
ϕ_i	= f_i /P, fugacity coefficient
$\hat{\phi}_i$	= $f_i /y_i P$, partial fugacity coefficient of species i in a mixture
ω	acentric factor

SUBSCRIPTS

A	attraction force
i,j,k,...	identifying a specie in a mixture, as in n_i
c	critical property
r	reduced property
R	Repulsion force