

การทำนายสมมูลไอ-ของเหลวของก๊าซธรรมชาติ
โดยใช้แนวทางโมเลกุลเทอร์โมไดนามิกส์



นางสาวอัญชลี สว่างปัญญางกูร

ศูนย์วิทยพัทธยากร

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2530


ISBN 974-567-722-1

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

012461

1 10208716

PREDICTION OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM
OF NATURAL GAS USING A MOLECULAR
THERMODYNAMIC APPROACH



Miss Anchalee Sawangphanyangkul

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirement
for the Degree of Master of Engineering

Department of Chemical Engineering

Graduate School

Chulalongkorn University

1987

ISBN 974-567-722-1

Thesis Title Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium of Natural
Gas Using a Molecular Thermodynamic Approach
By Miss Anchalee Sawangphanyangkul
Department Chemical Engineering
Thesis Advisor Associate Professor Kroekchai Sukanjanaatee,
Ph.D.



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

Thavorn Vajarabhaya Dean of the Graduate School

(Professor, Thavorn Vajarabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

Chairit Sattayasert Chairman
(Assistant Professor Chairit Sattayasert, Dr. Ing.)

Kroekchai Sukanjanaatee Thesis Adviser
(Associate Professor Kroekchai Sukanjanaatee, Ph.D.)

Woraphat Arthayukti Member
(Associate Professor Woraphat Arthayukti, Dr. Ing.)

Vichitra Chongvisal Member
(Assistant Professor Vichitra Chongvisal, Ph.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การทำนายสมมูลไอ-ของเหลวของก๊าซธรรมชาติ โดยใช้แนวทางโมเลกุลลาเทอร์โมไดนามิกส์
ชื่อนิสิต	นางสาวอัญชลี สว่างบุญญางกูร
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร.เกริกชัย สุกาญจน์จติ
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา	2529



บทคัดย่อ

ในการหาแบบจำลองสมมูลไอ-ของเหลวของก๊าซธรรมชาติที่ความดันสูง, ได้เลือกศึกษาสมการสถานะของโลวา โดยพารามิเตอร์อันตรกิริยาอยู่ในมิติ ซึ่งรูปลักษณ์ได้ถูกคำนวณขึ้นจากข้อมูลขององค์ประกอบคู่ สมการสถานะของโลวาได้ถูกทดสอบกับระบบ 2 องค์ประกอบก่อน จากนั้นประยุกต์กับระบบก๊าซธรรมชาติในช่วง 310-366 K, 19-206 บรรยากาศ เมื่อเปรียบเทียบความสามารถในการคำนวณที่จุดเดือดระหว่างสมการสถานะของโลวาและของ SRK พบว่าสมการของโลวาให้ค่าที่ถูกต้องกว่าสมการของ SRK ที่อุณหภูมิสูง นอกจากนี้สมการของโลวายังให้ผลการคำนวณปริมาตรของของเหลวที่ศึกษาว่าสมการของ SRK มาก ในขณะที่ความแม่นยำในการคำนวณปริมาตรของไอพอ ๆ กัน

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Thesis Title Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium of Natural Gas Using a Molecular Thermodynamic Approach

Name Miss Anchalee Sawangphanyangkul

Thesis Advisor Associate Professor Kroekchai Sukanjanaatee, Ph.D

Department Chemical Engineering

Academic Year 1986



ABSTRACT

The Leiva equation of state has been selected for modelling Vapor-Liquid Equilibrium of natural gas at high pressure. The binary interaction parameter, K_{ij} was evaluated from binary experimental data. Initially the Leiva equation was tested on binary systems, and then applied to a number of natural gas mixtures in the range 310-366 K, 17-206 atm.

Comparing to the Soave(SRK) equation on binary and ternary systems, the Leiva equation offers some improvement in accuracy over the Soave equation in bubble point pressure calculatons at high temperatures. Its representation of vapor molar volume is similar to that of the Soave but gives better results for liquid molar volume predictions.



ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express her sincere thanks to Associate Prof. Dr. Kroekchai Sukanjanajtee, her advisor, for his providing helpful and constructive suggestions, throughout the research. The author also wishes to thank Miss Suchada Pongdaycha for her typing of this manuscript, and to Mr. Vithaya Yongkidcharearnlarp for the graphic works.

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



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

CONTENTS



	Page
ABSTRACT IN THAI.....	iv
ABSTRACT IN ENGLISH.....	v
ACKNOWLEDGEMENTS.....	vi
CONTENTS.....	vii
CHAPTER.....	
1. INTRODUCTION.....	
1.1 Recent Approaches to VLE Calculations.....	1
1.2 Statement of Problems.....	3
1.3 Purpose of the Research.....	4
1.4 Scope of the Research.....	4
2. HIGH-PRESSURE VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA.....	
2.1 Thermodynamics of Phase Equilibria.....	5
2.1.1 Fugacity Coefficient.....	6
2.2 Phase Behavior of Natural Gas at High Pressure.....	7
3. EQUATIONS OF STATE FOR PHASE EQUILIBRIUM.....	
3.1 Classification.....	12
3.2 Application of an Equation of State to Mixtures.....	17

	PAGE
4. SELECTION OF EOS	20
4.1 Criteria of Selection.....	23
4.1.1 Prediction of Compressibility factor at the Critical Point....	23
4.1.2 Prediction of Vapor Pressure....	28
4.1.3 Prediction of Saturated Volume..	30
4.1.4 Its Z - chart Sum.....	34
4.2 Selected EOS.....	36
5. APPLICATION OF THE SELECTED EOS FOR MULTICOMPONENT SYSTEMS	
5.1 Mixing Rules.....	38
5.2 Binary Interaction Parameters (K_{ij})...	39
5.3 Evaluation of Binary Interaction Parameters.....	40
5.4 Prediction of VLE at high Pressure.....	43
6. RESULTS OF CALCULATIONS AND DISCUSSION.....	
6.1 Binary Interaction Parameters.....	47
6.1.1 Temperature Dependence of K_{ij} ...	57
6.1.2 Sensitivity Analysis.....	62
6.1.3 Vitality of K_{ij}	67
6.2 Leiva EOS VLE Calculations.....	
6.2.1 Binary Systems.....	71
6.2.2 Multicomponent Systems.....	79
6.3 Comparisons with the Soave EOS.....	
6.3.1 Binary VLE Calculations.....	84
6.3.2 Ternary VLE Calculations.....	94
6.3.3 Liquid Molar Volume Calculations	98

	PAGE
7. CONCLUSION AND RECOMMENDATION.....	101
REFERENCE	103
APPENDIX	112



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย