

مدل سازی معادله حالت PC-SAFT برای سیستم های تجمعی و غیر تجمعی

سپیده دلسوز هفشجانی^{۱*}، حسینعلی زارعی^۲، آرش پاکروش^۳

۱ و * - دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا همدان،
(Sepideh.Delsouaz@gmail.com)

۲ - استاد تمام، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا همدان،
(zareih@basu.ac.ir)

۳ - دکتر، شیمی فیزیک، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و علوم نفت، دانشگاه بوعلی سینا همدان،
(arashpakraves@basu.ac.ir)

واژگان کلیدی: معادله حالت، PC-SAFT، تعادل مایع-بخار

۱- مقدمه

معادله های حالت بعنوان ابزار کلیدی در پیش بینی خواص ترمودینامیکی مورد توجه هستند. چاپمن و همکاران (Huang and Chapman, Gubbins et al. 1989, Chapman, Gubbins et al. 1990) و هوانگ و رادوس (Radosz 1990) نظریه آماری سیال تجمع یافته (SAFT)، که برای سیالات خالص و مخلوط های شامل سیال های تجمعی دقیق می باشند را پیشنهاد دادند. یک اصلاح مهم از معادله حالت SAFT که به کاربردن تئوری اغتشاش بارکر و هندرسون (Barker and Henderson 1967) برای سیال مرجع زنجیره سخت توسعه یافت، معادله حالت PC-SAFT است که بصورت مجموع تابع های هلمهولتز جزئی بیان می شود. پارامترهای این مدل مبنای تئوری دارند و معمولاً با داده های فشار بخار و چگالی اشباع بدست می آیند. در این کار با استفاده از داده های دما، چگالی و فشار پارامترها محاسبه شده است.

۲- روش

قدم اول برای مدل کردن سیستم ها با معادله حالت انتخاب داده مناسب و معتبر است که در کار قبلی ما انجام شده است (Pakraves, Zarei et al. 2021). انتخاب تابع هدف نیز قدم مهم بعدی برای شروع محاسبه پارامترها است. تابع هدف انتخابی شامل جمله های فشار (P)، چگالی (ρ) و دما (T) در معادله (۲) است. در نهایت پارامتری که کمترین مقدار درصد انحراف مطلق (%AAD) تابع هدف را دارا بود به عنوان پارامتر سیستم انتخاب شد.

$$OF = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{|P_{exp} - P_{cal}|}{P_{exp}} \right) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{|\rho_{exp} - \rho_{cal}|}{\rho_{exp}} \right) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{|T_{exp} - T_{cal}|}{T_{exp}} \right) \right] \quad (2)$$

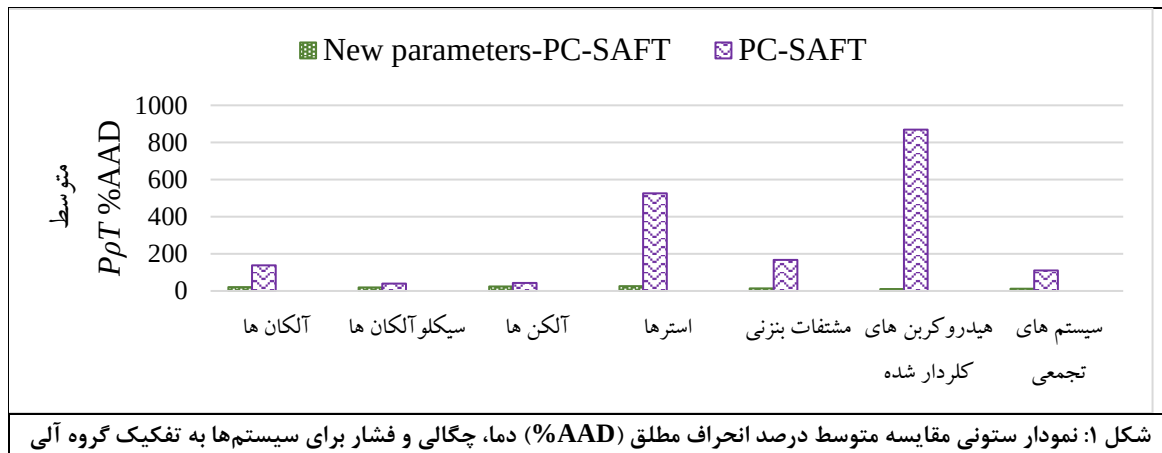
در معادله (۲) exp ، cal و n به ترتیب نشان دهنده داده تجربی، محاسبه شده و تعداد داده ها می باشند.

۳- بحث و نتیجه گیری

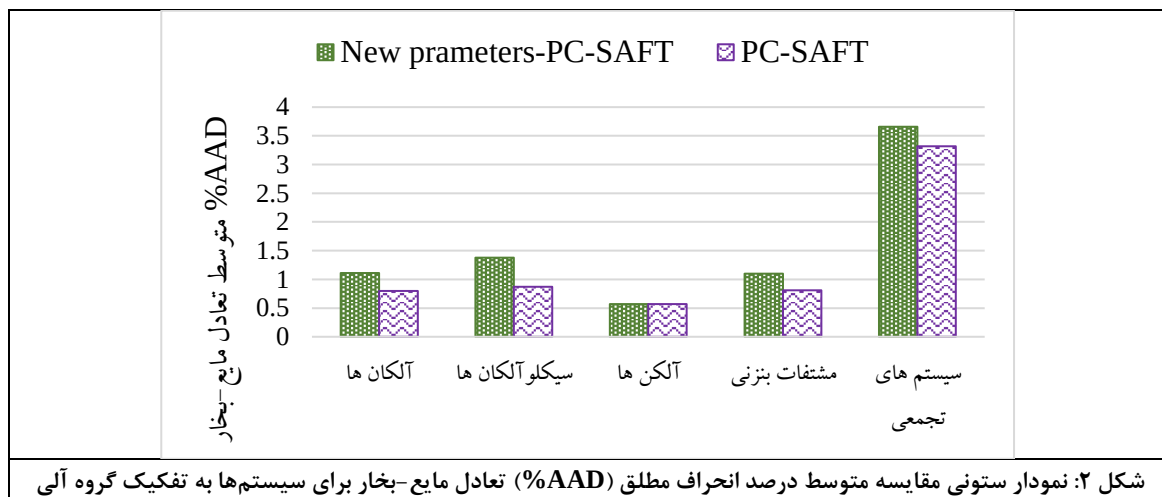
سیستم های بررسی شده شامل شش گروه ترکیبات آلی و چهار ماده تجمعی آب، هیدروژن سولفید، آمونیاک و متانول است. درصد انحراف مطلق نتایج محاسبه شده از داده های تجربی از رابطه (۳) محاسبه شده است. که Y نمایانگر خاصیت ترمودینامیکی مورد بررسی می باشد.

$$\%AAD = \frac{100}{n} \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{|Y_{exp} - Y_{cal}|}{Y_{exp}} \right) \right] \quad (3)$$

شکل (۱) نتیجه محاسبه دما، دانسیته و فشار را برای سیستم‌ها را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود نتیجه با پارامترهای جدید بهبود قابل توجهی داشته‌است.



شکل (۲) نتیجه تعادل مایع-بخار را نمایش می‌دهد. از آنجاکه در محاسبه پارامترهای PC-SAFT از داده‌های فشار بخار و چگالی اشباع استفاده شده است و در کار ما از داده‌های دما چگالی و فشار استفاده شده‌است، پیش‌بینی کار جدید قابل قبول است.



۴- منابع و مراجع

- Barker, J. A. and D. Henderson (1967). "Perturbation theory and equation of state for fluids. II. A successful theory of liquids." The Journal of chemical physics 47(11): 4714-4721.
- Chapman, W. G., K. E. Gubbins, G. Jackson and M. Radosz (1989). "SAFT: Equation-of-state solution model for associating fluids." Fluid Phase Equilibria 52: 31-38.
- Chapman, W. G., K. E. Gubbins, G. Jackson and M. Radosz (1990). "New reference equation of state for associating liquids." Industrial & engineering chemistry research 29(8): 1709-1721.
- Huang, S. H. and M. Radosz (1990). "Equation of state for small, large, polydisperse, and associating molecules." Industrial & Engineering Chemistry Research 29(11): 2284-2294.
- Pakraves, A., F. Zarei and H. Zarei (2021). "PpT parameterization of SAFT equation of state: developing a new parameterization method for equations of state." Fluid Phase Equilibria 538: 113024.