

Evaluasi persamaan keadaan soave-redlich kwong berbasis pendekatan kontribusi gugus (UNIFAC) untuk perhitungan kesetimbangan fasa campuran fluida polar dan non polar

Athiek Sri Redjeki, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20275158&lokasi=lokal>

Abstrak

Aturan pencampuran yang diperkenalkan oleh Holderbaum dan Gmehling yang menggabungkan kelebihan metode kontribusi gugus (modified UN/FAG) dan kelebihan pendekatan koefisien fugasitas ($q>$) yang dapat digunakan untuk suhu dan tekanan tinggi, telah menunjukkan kemampuannya untuk memprediksi data sistim yang sangat tidak ideal, seperti untuk fluida polar - non polar. Mereka menggabungkan metode modified Unifac ke dalam parameter persamaan keadaan Soave-Redlich-Kwong dengan sebuah mixing rule yang sederhana menjadi suatu metode yang disebut Predictive Soave-Redlich-Kwong (PSRK). Hasil perhitungan tekanan gelembung memberikan petunjuk bahwa metode PSRK memberikan perbaikan yang penting dibandingkan pendekatan koefisien aktivitas tradisional (8- UNIFAC) yang menggunakan koefisien virial kedua untuk memperoleh koefisien fugasitas fase uap. Keberhasilan yang perlu dicatat adalah kemampuan PSRK menghitung kesetimbangan uap-cair dengan akurat tanpa menggunakan parameter interaksi biner, yang ditunjukkan dengan perubahan persen deviasi absolut rata-rata (PDAR) antara 0.6556%- 8.6404% tanpa parameter interaksi biner dan 0.404%- 6.478% dengan parameter interaksi biner.

.....
Mixing rules proposed by Holderbaum and Gmehling, combining the advantages of group contribution method (UN/FAG), and of fugacity coefficient (f^I) approach applicable to high pressures and temperatures, has been shown to be suitable to highly non-ideal systems such as non-polar and polar fluids. They incorporated UN/FAG into the a parameter of the Soave-Redlich-Kwong equation of state through a simple mixing rule as a method called Predictive SRK (PSRK). Bubble point calculation results indicate that the PSRK method give significant improvement over the traditional activity coefficient approach (UNIFAC-B) employing second virial coefficient to generate vapor phase fugacity coefficient. The noteworthy feature of the PSRK approach is accuracy of the vapor-liquid equilibria calculations without using binary interaction parameter, with average absolute pressure deviation (AAPD) is 0.6556% - 8.6404% without binary interaction parameter and 0.404% - 6.478% with it .