

Liquid Gas Equilibrium Simulator

気液平衡推算ソフト

概要:

Peng-Robinson 状態方程式を用いて、2成分系の気液平衡を推算するソフト
温度一定、または圧力一定の条件で、“組成-圧力”、または“組成-温度”の状態図を推算
データを csv ファイルとして出力可能

注) 設定条件によっては計算が収束せず、エラーとなる場合がある
特に臨界条件付近や性質が大きく異なる物質の組み合わせでは収束しにくい

計算方法:

使用する状態方程式

実在気体の状態方程式として Peng-Robinson 式を使用

$$P = RT / (V-b) - a / \{ V(V+b) + b(V-b) \}$$

P: 圧力 V: モル体積 T: 温度 R: 気体定数

a: 分子間力にかかわる定数 b: 分子の大きさにかかわる定数

ここで、 $a = 0.45724 \times \alpha R^2 T_c^2 / P_c$

$$b = 0.07780 \times R T_c / P_c$$

T_c, P_c はそれぞれ臨界温度、臨界圧力

$$\alpha = [1 + m \{1 - \sqrt{T/T_c}\}]^2$$

$$m = 0.37464 + 1.54226 \times \omega - 0.26992 \times \omega^2$$

ω は偏心因子

混合物においては、各成分 i の定数 a_i, b_i と、そのモル分率 x_i から、混合則により

以下の式で定数 a, b が求められる

$$a = \sum \sum x_i x_j a_{ij}$$

$$b = \sum x_i b_i$$

ただし、 $a_{ij} = (1 - k_{ij})\sqrt{a_i a_j}$ 、 k_{ij} は2つの成分間の Peng-Robinson パラメータ

平衡関係の計算

まず、計算したい液相組成 x_i を決める。温度一定の場合は、設定温度 T に加えて、圧力 P と気相組成 y_i を初期値として仮に決め、これらの値を用いて気相、液相それぞれの状態方程式を作る。この状態方程式はモル体積に関する3次方程式となるので、モル体積として3つの解が得られるが、そのうち気相の場合は最大の解を、液相の場合は最小の解を採る(中間の解は物理的意味を持たない)。これにより、気相、液相におけるモル体積 $V(g)$ 、 $V(l)$ を求めることができる。次に、得られた $V(g)$ 、 $V(l)$ と P 、 T から各成分について気相と液相の逸散度を算出し、それらを比較する。もし初めに設定した P と y_i とが真の平衡圧、気相組成になっていれば、各成分の気相と液相の逸散度は一致するはずであるが、 P 、 y_i は仮に決めた値であるから、通常は一致しない。そこでこれらの値を修正しつつ、最終的に気相と液相の逸散度が全成分で一致するまで同様の計算を繰り返す。この計算により、真の平衡圧と、気相、液相の平衡モル体積、および気相の平衡組成が得られる。

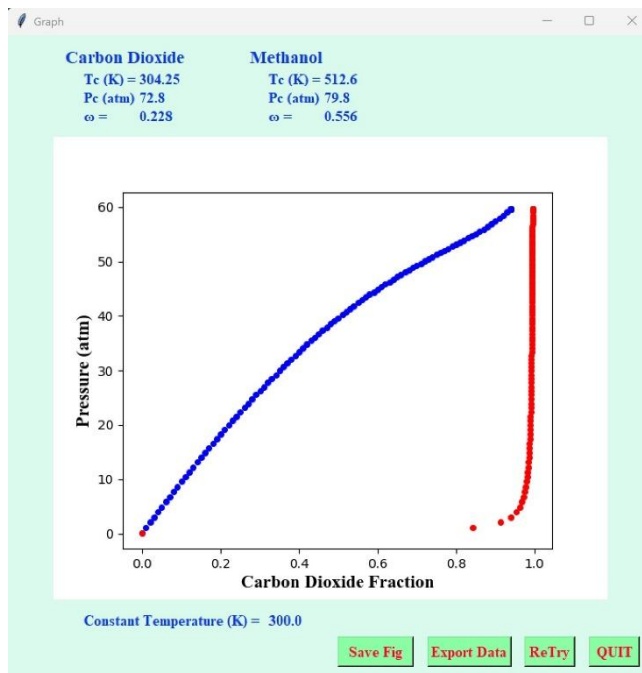
圧力一定の場合は、温度と気相組成を仮決めし、同様の操作で、仮決めした温度における平衡圧を求める。しかし仮決めした温度を用いているので、求めた平衡圧は設定圧力とは一致しない。そこで温度を修正して、平衡圧が設定圧力に一致するまで同様の操作を繰り返す。このようにして、設定した圧力に平衡圧が一致する温度と、その時の気相組成が得られる。

液相組成 x_i を連続的に変えて各 x_i ごとに上記の計算を繰り返す。

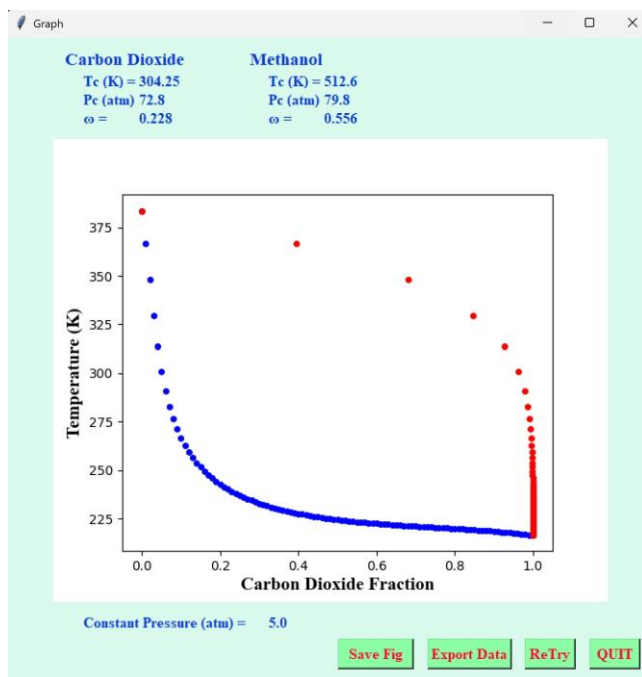
使用方法:

- 1 初めに入力画面が表示されるので、物質名、それぞれの臨界定数、偏心因子、および相互作用係数を入力
(二酸化炭素とメタノールの値がデフォルトとして設定されている)
- 2 温度一定、または圧力一定の条件を選択し、“OK?”をクリック
- 3 さらに条件入力欄が表示されるので、入力して“RUN”をクリック
温度一定の場合の入力項目 : 設定圧力、データ点数
圧力一定の場合の入力項目 : 設定温度、データ点数

4 結果の表示例



一定温度における“組成-圧力”状態図



一定圧力における“組成-温度”状態図

赤: 気相線、 青: 液相線

“Save Fig”ボタン:

グラフを png 等の形式で保存

“Export Data”ボタン:

データを csv ファイルとして出力

“ReTry”ボタン:

プログラム再実行

“QUIT”ボタン:

プログラム終了

参考: 主な物質の臨界定数

物質名	臨界温度 (K)	臨界圧力 (atm)	偏心因子
酸素	154.6	49.8	0.021
窒素	126.3	33.7	0.04
水素	33.2	12.8	-0.22
ヘリウム	5.2	2.27	-0.387
ネオン	44.4	26.8	0
アルゴン	150.7	48.2	-0.004
キセノン	289.7	57.9	0.002
クリプトン	209.4	54.3	-0.002
水	647.4	218.3	0.344
一酸化炭素	133.4	34.5	0.049
二酸化炭素	304.3	72.8	0.228
フッ素	144.1	52.7	0.048
塩素	417.1	76.4	0.073
臭素	583.2	102.0	0.132
ヨウ素	819	115.8	0.229
塩化水素	324.7	82.8	0.12
シアン化水素	456.7	51.8	0.407
アンモニア	405.5	111.8	0.25
二硫化炭素	549.4	77.8	0.115
硫化水素	373.4	88.7	0.1
一酸化窒素	179.8	64.4	0.607
二酸化窒素	431.2	99.7	0.86
二酸化硫黄	430	78.0	0.251
メタン	190.6	45.6	0.008
エタン	305.3	48.1	0.099
プロパン	370.1	42.0	0.152
ブタン	425.2	37.4	0.201
ペンタン	469.6	33.3	0.251
ヘキサン	507.4	30.1	0.300
シクロヘキサン	553.0	40.3	0.21
エチレン	282.4	49.7	0.086
プロピレン	365.0	45.6	0.145
アセチレン	308.3	60.6	-0.187
メタノール	512.6	79.8	0.556
エタノール	513.9	60.6	0.644
プロパノール	536.8	51.0	0.623
ブタノール	563.1	43.6	0.60
ベンゼン	562.0	48.5	0.21
トルエン	591.8	40.6	0.26
スチレン	467.5	39.5	0.26
ジエチルエーテル	467.0	35.5	0.28
クロロホルム	536.2	54.0	0.217
酢酸	594.5	57.1	0.454