

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۴۲۲ھ



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده فنی و مهندسی - گروه مهندسی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc.»

گرایش: مهندسی شیمی

عنوان:

بررسی ارتقاء، و یا تصدیق روابط موجود برای پیش بینی فشار بخار

استاد راهنما:

دکتر کامیار موقرنژاد

استاد مشاور:

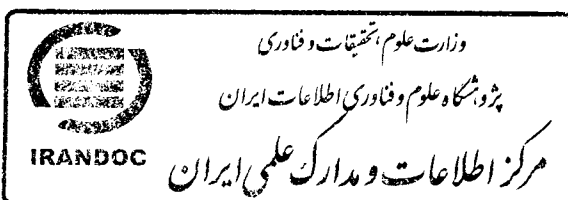
دکتر حسین عیسی زاده

نگارش:

مهدی کیاکجوری

۱۳۸۹/۱۰/۵

پائیز 1389



ب ۱۴۹۶۲۴



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده فنی و مهندسی ، گروه مهندسی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش : مهندسی شیمی


عنوان :

بررسی ، ارتقاء و یا تصدیق روابط موجود برای پیش بینی فشار بخار

نگارش :

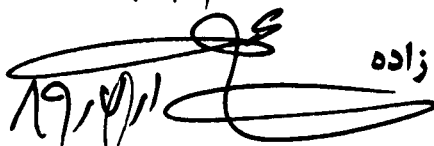
مهدی کیاکجوری

پاییز ۱۳۸۹



۸۹، ۶، ۱

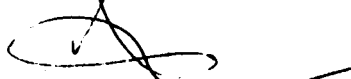
۱ . دکتر کامیار موقر نژاد



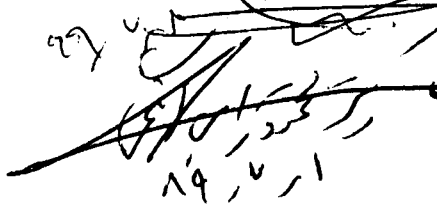
۱۹، ۷، ۱

۲ . دکتر حسین عیسی زاده

هیأت داوران :



۳ . دکتر علی اصغر روحانی



۸۹، ۷، ۱

۴ . دکتر محمود ترابی انگجی

خدایا برای چندمین بار می خواهم هر آنچه مصلحت من در آن است را نصیبم کنی چرا که بینایی و توانایی بر همه عالم و بر کائنات محاطی و بصیری ، پس ای معبود من مرا در راه نیل به اهدافم که تحصیل علم و دانش یکی از آنهاست یاری فرما که تو حکیمی ، دانایی و صلاح بنده خویش را بهتر از خود وی می دانی، و با سپاس از استاد گرامی جناب آقای دکتر کامیار موقرنژاد که راهنمایی های ارزشمند و حمایت های بی دریغ ایشان مرا در انجام کار حاضر رهنمون شد و با تشکر از جناب آقای دکتر حسین عیسی زاده که در پیشبرد اهداف این پروژه زحمات زیادی را متقبل گردیدند. شاگردی این بزرگواران افتخار بزرگی است که نصیب این بنده ی حقیر گردید.

با سپاس بی‌کران از جناب دکتر علی اصغر روحانی که با راهنماییها و مشاوره‌های به‌جای خود، همواره یاری‌رسانم بوده‌اند.

همچنین از مساعدت‌ها و کمک‌های آقایان مهندس مجتبی نصرتی، مهندس محمد خاوری نژاد، مهندس مهدی آل احمد و مدیریت محترم خدمات کامپیوتری اهورا چالوس و همه عزیزانی که مرا در انجام این پروژه یاری دادند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

تقدیم به:

پدر و مادر عزیزم

که خیال سبز شدن رادر روح من پروراندند
و عطر طراوت و شادابی را در آسمان زندگی ام پراکندند،
آنان که مظهر پاکی و زیبایی در دنیا هستند.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

1 چکیده

2 مقدمه

فصل اول : کلیات

5 1-1. تعریف فشار بخار

5 2-1. اندازه گیری فشار بخار مایعات

7 3-1. حالت تعادل و وضعیت مولکولها در حالت تعادل

8 4-1. فشاربخار و حالت تعادل

8 5-1. فشار بخار مایعات خالص

9 6-1. منحنیهای فشار بخار

فصل دوم : روشهای تعیین فشار بخار

12 1-2. مقدمه

15 2-2. ارتباط و برون یابی داده های فشار بخار

15 3-2. معادله آنتوان

17 4-2. معادله واگنر

20 5-2. توسعه و تعمیم معادله آنتوان

20 6-2. روش حالت های متناظر آمبروس- والتون

22 7-2. روش حالت های متناظر ریدل

فصل سوم : معرفی معادلات حالت و تعیین فشار بخار با استفاده از معادله حالت

25 1-3. تاریخچه

28 2-3. انواع معادلات حالت

29 3-3. مزایا و معایب معادلات مکعبی

30 1-3-3. مزایا

30 2-3-3. معایب

31 4-3. معادله ون دروالس

34 5-3. معادله ردلیچ - کوانگ (RK)

35 6-3. معادله سوآو - ردلیچ - کوانگ (SRK)

36 7-3. معادله پنگ - رایینسون (PR)

37 8-3. توسعه و بهبود معادلات PR و SRK

37 9-3. محاسبه فشار بخار با استفاده از نرم افزار MATLAB

38 1-9-3. محاسبات معادله ون در والس برای بدست آوردن فشار بخار

41 2-9-3. محاسبات معادله ردلیچ - کوانگ برای بدست آوردن فشار بخار

42 3-9-3. محاسبات معادله سوآو - ردلیچ - کوانگ برای بدست آوردن فشار بخار

42 4-9-3. محاسبات معادله پنگ - رایینسون برای بدست آوردن فشار بخار

فصل چهارم : مقایسه محاسبات با نتایج تجربی

- 1-4. مقدمه ای بر چگونگی محاسبه فشار بخار برای پنج گروه از هیدروکربنها 45
- 2-4. محاسبه فشار بخار آلکانها با استفاده از معادلات حالت PR, SRK, RK, Vdw 46
- 3-4. محاسبه فشار بخار سیکلوآلکانها با استفاده از معادلات حالت PR, SRK, RK, Vdw 60
- 4-4. محاسبه فشار بخار اترها با استفاده از معادلات حالت PR, SRK, RK, Vdw 75
- 5-4. محاسبه فشار بخار کتون ها با استفاده از معادلات حالت PR, SRK, RK, Vdw 85
- 6-4. محاسبه فشار بخار الکل ها با استفاده از معادلات حالت PR, SRK, RK, Vdw 95
- 7-4. بدست آوردن فشار بخار با استفاده از روابط تجربی 109

فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادها

- 1-5. نتیجه گیری 120
- 2-5. پیشنهادها 122
- منابع و مآخذ 124
- چکیده انگلیسی 128

فهرست شکل ها

صفحه

عنوان

- 1-1. شکل: توزیع انرژی های مولکولی در یک مایع 6
- 1-2. شکل: دستگاه اندازه گیری فشار بخار..... 9
- 1-3. شکل: فشار بخار تعادلی بر حسب دما 10

فهرست جدول ها

صفحه

عنوان

- 1-2 . جدول : ثوابت واگنر برای معادله (2-10) 17
- 1-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای پروپان 47
- 2-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای n- هگزان 50
- 3-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای n- تترادکان 53
- 4-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای n- نونادکان 56
- 5-4 . جدول : میانگین خطای فشار بخار گروه آلکانها 59
- 6-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای سیکلو پروپان 61
- 7-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای سیکلوهپتان 64
- 8-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای سیکلو هگزان 67
- 9-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای سیکلو هپتان 71
- 10-4 . جدول : میانگین خطای فشار بخار گروه سیکلو آلکانها 74
- 11-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای دی میتیل اتر .. 76
- 12-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای دی پروپیل اتر 79
- 13-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای متیل فنیل اتر .. 82
- 14-4 . جدول : میانگین خطای فشار بخار گروه اترها 85
- 15-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای استون 86

- 16-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای 2- هگزانول ... 89
- 17-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای اتیل کتون..... 92
- 18-4 . جدول : میانگین خطای فشار بخار گروه کتون ها 95
- 19-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای متانول..... 96
- 20-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای اتانول 99
- 21-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای 1- پروپانول 102
- 22-4 . جدول : مقایسه بین فشاربخارهای محاسبه شده معادلات حالت مختلف برای 1- بوتانول 105
- 23-4 . جدول : میانگین خطای فشار بخار گروه الکلهای 108
- 24-4 . جدول : مقایسه بین فشار بخارهای محاسبه شده و تجربی برای استون 110
- 25-4 . جدول : مقایسه بین فشار بخارهای محاسبه شده و تجربی برای 1- اکتانول..... 113
- 26-4 . جدول : مقایسه بین فشار بخارهای محاسبه شده و تجربی برای n - تترادکان 114
- 27-4 . جدول : مقایسه روش های واگنر و آمبروس برای فشار بخار n - اکتان 117
- 28-4 . جدول : مقایسه روش های واگنر و آمبروس برای فشار بخار 1- بوتن 118
- 1-5 . جدول: مقایسه درصد های خطای معادلات حالت برای گروه های مختلف در
- 120 محدوده $T_{Trip} - T_b$
- 2-5 . جدول : مقایسه درصد های خطای معادلات حالت برای گروه های مختلف در
- 121 محدوده $T_b - T_c$

فهرست نمودارها

| عنوان | صفحه |
|--|------|
| 1-2. نمودار: مقایسه معادله کلاپیرون ساده با داده های فشار بخار تجربی | 13 |
| 2-2. نمودار: پیش بینی فشار بخار اتیل بنزن توسط روش دو مایع مرجع با استفاده از معادلات (9-2) و (19-2) | 22 |
| 1-3. نمودار: منحنی فشار- حجم دارای خطوط همدمای برای مواد خالص | 32 |
| 2-3. نمودار: نمودار فشار-دمای برای یک ماده خالص | 38 |
| 1-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی پروپان | 48 |
| 2-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی پروپان | 48 |
| 3-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی پروپان | 48 |
| 4-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی پروپان | 48 |
| 5-4. نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی پروپان | 49 |
| 6-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی n- هگزان | 51 |
| 7-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی n- هگزان | 51 |
| 8-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی n- هگزان | 51 |
| 9-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی n- هگزان | 51 |
| 10-4. نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی n- هگزان | 52 |
| 11-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی n- تترادکان | 54 |

- 12-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی n - تترادکان 54
- 13-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی n - تترادکان 54
- 14-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی n - تترادکان 54
- 15-4. نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی n - تترادکان ... 55
- 16-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی n - نونادکان 57
- 17-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی n - نونادکان 57
- 18-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی n - نونادکان 57
- 19-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی n - نونادکان 57
- 20-4. نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی n - نونادکان 58
- 21-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی سیکلو پروپان 62
- 22-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی برای سیکلو پروپان 62
- 23-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی برای سیکلو پروپان 62
- 24-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی برای سیکلو پروپان 62
- 25-4. نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی سیکلو پروپان ... 63
- 26-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی سیکلو بوتان 65
- 27-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی سیکلو بوتان 65
- 28-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی سیکلو بوتان 65
- 29-4. نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی سیکلو بوتان 65

- 30-4 . نمودار: مقایسه معادلات PR ، SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی سیکلوبوتان 66
- 31-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی سیکلو هگزان 68
- 32-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی سیکلو هگزان 68
- 33-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی سیکلو هگزان 68
- 34-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی سیکلو هگزان 68
- 35-4 . نمودار : مقایسه معادلات PR ، SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی سیکلو هگزان ... 70
- 36-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی سیکلو هپتان 72
- 37-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی سیکلو هپتان 72
- 38-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی سیکلو هپتان 72
- 39-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی سیکلو هپتان 72
- 40-4 . نمودار : مقایسه معادلات PR ، SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی سیکلو هپتان 73
- 41-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی دی میتل اتر 77
- 42-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی دی میتل اتر 77
- 43-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی دی میتل اتر 77
- 44-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی دی میتل اتر 77
- 45-4 . نمودار : مقایسه معادلات PR ، SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی دی میتل اتر ... 78
- 46-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی دی پروپیل اتر 80
- 47-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی دی پروپیل اتر 80

- 48-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی دی پروپیل اتر 80
- 49-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی دی پروپیل اتر 80
- 50-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی دی پروپیل اتر . 81
- 51-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی متیل فنیل اتر 83
- 52-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی متیل فنیل اتر 83
- 53-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی متیل فنیل اتر 83
- 54-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی متیل فنیل اتر 83
- 55-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی متیل فنیل اتر ... 84
- 56-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی استون 87
- 57-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی استون 87
- 58-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی استون 87
- 59-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی استون 87
- 60-4 . نمودار: مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی برای استون 88
- 61-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی 2-هگزانون 90
- 62-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی 2- هگزانون 90
- 63-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی 2-هگزانون 90
- 64-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی 2- هگزانون 90
- 65-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی 2- هگزانون 91

- 66-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی اتیل کتون 93
- 67-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی اتیل کتون 93
- 68-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی اتیل کتون 93
- 69-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی اتیل کتون 93
- 70-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی اتیل کتون 94
- 71-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی متانول 97
- 72-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی متانول 97
- 73-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی متانول 97
- 74-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی متانول 97
- 75-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی متانول 98
- 76-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی اتانول 100
- 77-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی اتانول 100
- 78-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی اتانول 100
- 79-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی اتانول 100
- 80-4 . نمودار : مقایسه معادلات Vdw ، RK ، SRK ، PR با داده های تجربی اتانول 101
- 81-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی 1-پروپانول 103
- 82-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی 1-پروپانول 103
- 83-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی 1-پروپانول 103

- 84-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی 1- پروپانول 103
- 85-4 . نمودار : مقایسه معادلات PR ، SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی 1- پروپانول ... 104
- 86-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار Vdw با داده های تجربی 1- بوتانول..... 106
- 87-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار RK با داده های تجربی 1- بوتانول..... 106
- 88-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار SRK با داده های تجربی 1- بوتانول 106
- 89-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار PR با داده های تجربی 1- بوتانول 106
- 90-4 . نمودار : مقایسه معادلات PR و SRK ، RK ، Vdw با داده های تجربی 1- بوتانول 107
- 91-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار کلاپرون با داده های تجربی استون 111
- 92-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار آنتوان با داده های تجربی استون 111
- 93-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار واگنر با داده های تجربی استون 111
- 94-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار آمبروس با داده های تجربی استون..... 111
- 95-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار ریدل با داده های تجربی استون..... 112
- 96-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار کلاپرون با داده های تجربی n-تترادکان 115
- 97-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار آنتوان با داده های تجربی n-تترادکان..... 115
- 98-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار واگنر با داده های تجربی n-تترادکان 115
- 99-4 . نمودار: مقایسه مقادیر فشار بخار آمبروس با داده های تجربی n-تترادکان 115
- 100-4 . نمودار : مقایسه مقادیر فشار بخار ریدل با داده های تجربی n-تترادکان 116

چکیده :

رفتار فشار ، حجم و دمای حاصل از سیستم‌های هیدروکربنی یک موضوع پیچیده و مشکل رایج برای بسیاری از زیر شاخه های صنعت نفت و گاز است ، روشهای محاسبه خواص ترمودینامیک جزء مقدماتی ترین ابزار برای مهندسانی است که امروزه در صنعت نفت فعالیت می کنند ، تخمین صحیح از خواص ترمودینامیکی و اندازه گیری فشار بخار به صورت تجربی به منظور طراحی فرایندهای مهندسی ، لازم و ضروری است . پیش بینی دقیق خواص ترمودینامیکی یکی از احتیاجات ضروری در طراحی بهینه اکثر تجهیزات موجود در صنایع پتروشیمی ، فرایندی و سیستم نقل و انتقال است .

از زمانی که ون در والس اولین معادله خود را بیش از یک قرن پیش ارائه کرد اصلاحات زیادی به منظور بهبود پیش بینی خواص ترمودینامیکی حجمی و تعادل فازی پیشنهاد شده است . در این پروژه سعی کرده ایم که چهار معادله حالت PR , SRK , RK , Vdw را برای پیش بینی فشار بخار پنج گروه از هیدروکربنها با استفاده از برنامه نویسی $MATLAB$ با هم مقایسه کنیم و نتایج بدست آمده هر یک از معادلات را با مقدار تجربی برای هر ماده بسنجیم .

با توجه به نتایج بدست آمده و مقایسه با مقادیر واقعی به این نتیجه رسیدیم که نتایج معادله حالت PR و SRK بسیار به نتایج واقعی آن نزدیک است و درصد خطاهای بسیار کمی دارند و معادلات RK و Vdw دقت کمی دارند و برای پیش بینی فشار بخار ، معادلات مناسبی نیستند .

همچنین معادلات تجربی معروفی مانند کلاپیرون آنتوان، واگنر ، آمبروس و ریدل را نیز بررسی کردیم که برای این معادلات نتایج بدست آمده با مقادیر واقعی نزدیک بوده و درصد خطاهای کمی دارند مخصوصاً برای معادلات واگنر و آمبروس که در هر دمایی دارای نتایج دقیق هستند .



در صنایع شیمیایی، به دست آوردن خواص ترمودینامیکی دشوار است. در بیشتر موارد خواص ترموفیزیکی مثل روابط PVT از طریق آزمایش تعیین می‌شوند. انجام چنین آزمایش‌هایی نه تنها وقت‌گیرند، بلکه هزینه‌بر نیز می‌باشند. علاوه بر این ایجاد همه شرایط واقعی صنعتی در محیط آزمایشگاه بسیار مشکل است.

بنابراین وجود مدل‌هایی که خواص ترموفیزیکی را پیش‌بینی کنند، بدون شک یکی از ضرورت‌های مهندسی است. برای پیش‌بینی این خواص داشتن ابزاری دقیق ضروری می‌باشد. روش‌ها و مدل‌های متفاوتی را می‌توان در قالب مدل‌های فعالیت^۱ و معادلات حالت^۲ به عنوان ابزار به کار برد. معادله حالت در مدل‌سازی تعادل بین مایع و بخار (VLE)^۳ بسیار با اهمیت است. تلاش‌های زیادی برای بهبود این مدل انجام پذیرفته است.

یک معادله حالت عبارتی است که فشار یا ضریب تراکم‌پذیری را به عنوان تابعی از دما و حجم بیان می‌کند. معادله حالت می‌تواند نیمه تئوری یا تئوری باشد. معادله حالت نیمه تئوری ترکیبی است از تئوری و داده‌های تجربی در حالی که معادله حالت تئوری بر پایه تئوری جنبشی یا مکانیک آماری است که نیروهای بین مولکولی را در نظر می‌گیرد.

بعد از ارائه معادله حالت توسط ون‌دروالس (vdW)^۴ بیشتر محققان توجه خود را به سوی بهبود دقت معادله حالت سوق دادند. معادلات حالت مختلفی توسط محققان به صورت عبارات ساده، شامل چندین ثابت یا عبارات پیچیده ارائه شده است. برای دقت بالاتر در محاسبات صنعتی، مهندسين ممکن است از معادلات بسیار پیچیده استفاده کنند مثل معادله بندیکت - وب - روبین (BWR)^۵.

امروزه چنین معادلاتی برای محاسبه خواص ترموفیزیکی، مثل VLE مخلوط‌های چندجزئی، استفاده نمی‌شوند؛ چون این معادلات نیازمند انجام محاسبات پیچیده و وقت و حافظه بالای کامپیوتر می‌باشند. محاسبه ثوابت این معادلات غالباً نیازمند منحنی و تعیین ضرایب وزنی و انجام عملیات حدس و خطا است.

-
- 1- Activity models
 - 2- Equation of state
 - 3 - Vapor Liquid Equilibria
 - 4 - Van der Waals
 - 5- Benedict-webb-rubin