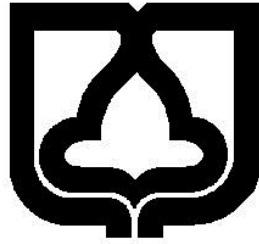


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه سمنان

دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی مهندسی شیمی

بررسی تعادلات فازی آب - هیدروکربن با استفاده از معادلات حالت درجه ی سه

دانشجو:

آرمان مهرانی

استاد راهنما:

پروفسور محمد نادر لطف الهی

بهمن ماه ۱۳۹۰

تقدیم به:

خانوادہ می عزیز و استاد کرامت قدم بہ خاطر زحمات بی دریغشان

چیدم کلی زباغ ادب تابروز عید

دربار گاہ میر ادب پرور آورم

حیف است باخسان گل دانش کنی نثار

من گل نثار مردم دانشور آورم

شہریار

تشکر و قدردانی:

به رسم ادب و به مصداق کلام نیک "کسی که از مخلوق تشکر نکند از خالق تشکر نمی کند" وظیفه دیدم تا از کسانی که یاریم دادند تا بتوانم سختی های این برهه از زندگی را پشت سر نهم تشکر می کنم.

در ابتدا از استاد گرانقدرم آقای پروفیسور لطف اللهی که در ناملايمات پيش رويم صبر پيشه کردند و با راهنمایی های خود چراغ راهم شدند تشکر می کنم و امیدوارم این تلاش تا حدودی خستگی را از ایشان زدوده باشد.

و تشکر ویژه ای تقدیم به پدر، مادر و خواهرم که همیشه و در تمام مراحل زندگیم پشتیبانم بوده اند.

چکیده

تعادل آب و هیدروکربن ها در صنایع نفت و پتروشیمی و ملاحظات زیست محیطی بسیار حائز اهمیت می باشند و به دلیل کمبود داده های آزمایشگاهی نیازمند مدلی صحیح برای تخمین مقدار حلالیت متقابل آنها هستیم. از آنجا که آب خود دارای پیوند هیدروژنی می باشد در نتیجه باید از مدلی استفاده شود که بتواند جواب گوی این خاصیت فیزیکی باشد. در این پروژه از معادله ی حالت^۱ CPA برای مدل سازی مخلوط های آب - هیدروکربن استفاده شده است. این معادله ی حالت مجموع یک معادله ی حالت درجه ی سه و عبارت همبسته ی ورتهایم می باشد. در ابتدا به مدل سازی ترکیبات همبسته ی تک جزئی پرداخته و فشار بخار اشباع و دانسیته ی مولی به دست آمد. سپس مدلسازی ترکیبات آب - آلکان که ترکیبی خود همبسته^۲ است پرداختیم و در ادامه به مدلسازی ترکیبات آب - الکل که هر دو ترکیبات همبسته بوده و به اصطلاح به آنها مخلوط های همبسته ی متقابل^۳ گویند پرداخته شده است. در نهایت داده های آزمایشگاهی و مدل های قبلی که از قواعد اختلاط پیچیده ای هم استفاده کرده بودند با جواب هایی حاصل از معادله ی CPA مقایسه شده است. ابتدا مواد خالص مثل آب و متانول بررسی شد. مقدار خطای متوسط ۲/۳۵ درصد برای دانسیته ی مولی و خطای ۱/۴۱ درصد برای فشار بخار به دست آمد. در ترکیب آب - آلکان خطای متوسط ۴/۶۱ درصد و در ترکیب آب - الکل خطای متوسط ۱/۸۴ درصد به دست آمده است. برای تعادل آب - آلکان از یک پارامتر برهم کنش تابع دما استفاده شد ولی برای آب - الکل پارامترهای برهم کنش وابسته به دما و مستقل از دما جواب های تقریباً مشابهی ارائه کردند. نتایج به دست آمده

¹ Cubic Plus Association

²Self Association

³Cross Association

نشان داد که این مدل می تواند مقدار فشار بخار اشباع و دانسیته ی مولی برای ترکیبات همبسته ی تک جزئی و حلالیت متقابل آب - آلکان و آب - الکل را به خوبی پیش بینی کند و از طرفی جواب های دقیق تری نسبت به معادله های قبلی حتی با قواعد اختلاط پیچیده ارائه دهد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل ۱ مقدمه
۲	۱-۱. مقدمه
۴	۱-۱-۱. چه چیزی به طور خاص معادله حالت CPA را بهبود داد؟
	۱-۱-۲. اهمیت تعادل فازي آب-هیدروکربن طی استخراج و تولید هیدروکربن ها و عملیات حفاری
۵	۱-۲-۱-۱. مروری بر پدیده ها
۹	۱-۱-۲-۱-۱. داده های آزمایشگاهی تعادل فازي
۱۷	۱-۲-۱-۱. چالشهای جدید
۱۷	۱-۲-۲-۱-۱. مشکلات مربوط به حضور آب در سیال هیدروکربنی
۱۹	۱-۲-۲-۱-۱. مشکلات مربوط به حلالیت هیدروکربن ها در آب
۲۳	فصل ۲ معادله ی حالت
۲۴	۱-۲. مقدمه
۲۶	۲-۲. فرمولاسیون
۲۶	۲-۲-۲. انرژی همبسته و پارامترهای حجمی
۲۹	۳-۲-۲. ترم همبسته در معادله حالت CPA
۳۰	۲-۳-۲-۲. کسری از مولکول ها که تشکیل پیوند نداده اند؛ X_A
۳۳	۳-۳-۲-۲. تابع توزیع شعاعی
۳۴	۴-۳-۲-۲. شکل های همبسته
۴۰	۵-۳-۲-۲. پتانسیل شیمیایی و ضریب فوگاسیته از معادله ی حالت CPA
۴۲	۴-۲-۲. محاسبه ی حجم از معادله ی CPA
۴۴	۲-۴-۲-۲. تکنیک نیوتن-رافسون برای محاسبه ی حجم کل برای معادله ی حالت CPA
۴۶	۳-۴. محاسبات جداسازی فاز ها

۴۶ ۱-۳-۲. محاسبات فلش

فصل ۳ مروری بر منابع مطالعاتی

۴۹ ۱-۳. مقدمه

۵۰ ۲-۳. تخمین پارامترها

۵۱ ۱-۲-۳. تخمین کلی و یک جا

۵۲ ۲-۲-۳. تخمین سه پارامتری

۵۴ ۳-۲-۳. تخمین از طریق تغییر همگن

۵۶ ۴-۲-۳. تخمین پارامترها فقط با استفاده از داده های فشار بخار

۵۸ ۳-۳. تخمین پارامترهای بحرانی برای بخش فیزیکی معادله ی حالت CPA

۵۸ ۲-۳-۳. شکل های مختلف معادله ی حالت CPA

۶۰ ۴-۳. کاربردهای معادله ی حالت CPA

۶۲ ۱-۴-۳. دی اکسید کربن - آب

۶۲ ۲-۴-۳. الکل - آلکان

۶۵ ۳-۴-۳. آب خالص و مخلوط آب و هیدروکربن ها

۷۱ ۴-۴-۳. سیستم های دارای همبستگی متقابل

۷۶ ۵-۴-۳. سیستم های چند ماده ای

۸۰ ۶-۴-۳. بسط معادله ی حالت CPA برای هیدروکربن های آروماتیک

فصل ۴ نتایج و پیشنهادات

۸۵ ۱-۴. تعادلات فازی سیستم های تک جز شامل پیوند هیدروژنی

۸۶ ۲-۴. ترکیبات خود همبسته شامل آب

۸۹ ۳-۴. ترکیبات با همبستگی متقابل

۹۵ ۴-۴. پیشنهادات

مراجع

۱۰۳ پیوست الف

۱۰۸ پیوست ب

۱۱۲ پیوست ج

۱۳۰

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۱	فصل ۱ مقدمه
۱-۱	شکل ۱-۱. میزان آب موجود در متان دما و فشارهای مختلف ارائه شده توسط مدل ویستون و سورید در سال ۱۹۹۲ [۲].....
۲-۱	شکل ۲-۱. میزان متان موجود در آب در دما و فشارهای مختلف، توسط مدل ویستون و سورید در سال ۱۹۹۲ [۲].....
۳-۱	شکل ۳-۱. میزان آب موجود در پنتان به عنوان تابعی از دما و فشار توسط گیلسپی و ویلسون در سال ۱۹۸۲ [۳].....
۴-۱	شکل ۴-۱. مقدار آب موجود در هیدروکربن گازی توسط GPA [۴].....
۵-۱	شکل ۵-۱. درصد مولی حلالیت آب در گازهای اسیدی [۶-۷].....
۶-۱	شکل ۶-۱. حلالیت آب در جزء های نفتی [۸].....
۷-۱	شکل ۷-۱. جمع بندی کلی حلالیت هیدروکربن ها در آب در $F 300 (150C)$ [۱۰].....
۸-۱	شکل ۸-۱. حلالیت هیدروکربن های C_8 در مقابل درماهای مختلف در تعادل سه فاز [۱۲].....
۹-۱	شکل ۹-۱. میزان آب موجود در سیال مخزنی بر حسب تابعی از فشار و میزان نمک [۱۷].....
۱۰-۱	شکل ۱۰-۱. نمایش خطر حضور پوسته تشکیل شده درون چاه [۱۷].....
۱۱-۱	شکل ۱۱-۱. ارزیابی H_2S موجود در سیال مخزنی بر حسب فشار [۳۱].....
۲۳	فصل ۲ معادله ی حالت
۱-۲	شکل ۱-۲. مدل کره های سخت با یک سایت همبسته که فقط یک مورد ساده از تجمع مولکولی به علت فاصله ی کم و جهت گیری مناسب و جاذبه سایت - سایت را نشان می دهد [۲۸].....
۲-۲	شکل ۲-۲. مدل کره سخت و مولکول های زنجیره ای با دو سایت A و B؛ مولکول زنجیره ای نمایانگر یک مولکول غیرکروی می باشد [۲۸].....
۳-۲	شکل ۳-۲. انواع اشکال پیوندی در سیال های همبسته ی واقعی.....
۴-۲	شکل ۴-۲. سایت های همبسته برای آب و الکل.....
۵-۲	شکل ۵-۲. محاسبات فلش دما ثابت.....
۴۹	فصل ۳ مروری بر منابع مطالعاتی
۱-۳	شکل ۱-۳. پارامتر b معادله ی حالت CPA بر حسب حجم واندروالس برای مواد مختلف [۳۱].....

- شکل ۳-۲. مسیر تخمین پارامترهای معادله ی حالت CPA برای نرمال آلکان ها [۳۱]..... ۵۴
- شکل ۳-۳. دیاگرام فازی برای ۱-بوتانول؛ برای COCPA [۳۹]..... ۶۱
- شکل ۳-۴. ضریب هنری CO₂ در آب بصورت تابعی از دما با استفاده از $K_{ij} = -0.06$ برای CPA برای $k_{ij} = -0.05$ و SRK و MC-SRK [۴۰]..... ۶۳
- شکل ۳-۵. نتایج حاصل از معادله CPA در دمای K ۲۹۸ با $K_{ij} = -0.08$ (خط تیره) و در دمای K ۳۲۳ با $K_{ij} = -0.06$ (خط ممتد) [۴۰]..... ۶۳
- شکل ۳-۶. حلالیت CO₂ در فشارهای بالا در دمای K ۳۴۸ با $K_{ij} = -0.06$ ۶۴
- شکل ۳-۷. نمودار فشار - جز مولی CO₂ با معادله حالت CPA با پارامتر بر هم کنش $K_{ij} = -0.06$ ۶۴
- شکل ۳-۸. تعادل بخار - مایع برای سیستم بوتانول - هگزان در دما های مختلف [۴۱]..... ۶۵
- شکل ۳-۹. تعادل بخار - مایع برای سیستم متانول - بوتان در دمای K ۲۷۳-۳۷۳ [۴۱]..... ۶۶
- شکل ۳-۱۰. تعادل جامد - مایع برای سیستم اکتانول - دودکان در فشار ۱ بار و با در نظر گرفتن ساختار دو سایت قابل تشکیل پیوند هیدروژنی برای الکل [۴۱]..... ۶۷
- شکل ۳-۱۱. تعادلات مایع-مایع بخار-مایع جامد-مایع برای سیستم متانول - سیکلو هگزان با معادله حالت CPA با $k_{ij} = 0.04$ [۴۱]..... ۶۸
- شکل ۳-۱۲. پیش بینی تصحیح تعادلات مایع - مایع و بخار و مایع برای سیستم متانول - هپتان با معادله ی CPA [۴۲]..... ۶۹
- شکل ۳-۱۳. پیش بینی و تصحیح تعادلات مایع - مایع و بخار - مایع برای سیستم متانول - هگزان با معادله ی CPA [۴۲]..... ۶۹
- شکل ۳-۱۴. تعادل مایع - بخار برای سیستم متانول - پروپان در دمای K ۲۹۳/۵ با تمرکز در ناحیه تشکیل آزنوترپ [۴۲]..... ۷۰
- شکل ۳-۱۵. مقایسه عملکرد سایت های قابل تشکیل پیوند هیدروژنی در تصحیح حلالیت سیستم آب - هگزان [۴۳]..... ۷۲
- شکل ۳-۱۶. نمودار فازی آب خالص [۴۳]..... ۷۲
- شکل ۳-۱۷. نمودار فشار بخار اشباع اب از نقطه سه گانه تا نقطه بحرانی [۴۳]..... ۷۳
- شکل ۳-۱۸. حلالیت متقابل آب - هگزان در تعادل مایع - مایع [۳۱]..... ۷۴
- شکل ۳-۱۹. حلالیت پنتان در آب که با دو k_{ij} های مختلف رسم شده [۴۶]..... ۷۵
- شکل ۳-۲۰. حلالیت متقابل آب - اکتان در k_{ij} های مختلف [۳۱]..... ۷۵
- شکل ۳-۲۱. تعادل مایع - بخار و مایع - مایع سیستم آب - بوتانول با روش ترکیب CR-1 و استفاده از حالت دو سایت برای بوتانول [۴۲]..... ۷۷
- شکل ۳-۲۲. تعادل بخار - مایع سیستم اسید (1-site) - آب (4-site) در دمای K ۳۱۳/۱۵ با روش ترکیب ECR و $k_{ij} = -0.222$ [۱]..... ۷۸
- شکل ۳-۲۳. تعادل بخار - مایع سیستم اسید (2-site) - آب (4-site) در دمای K ۳۵۳/۱۵ با روش ترکیب ECR و $k_{ij} = -0.154$ [۴۲]..... ۷۸
- شکل ۳-۲۴. تعادل بخار - مایع سیستم متانول (2-site) - اسید (1-site) در دمای K ۳۰۸/۱۵ با روش ترکیب ECR و $k_{ij} = -0.04$ [۳۱]..... ۷۹
- شکل ۳-۲۵. تعادل بخار - مایع سیستم بوتانول (2-site) - استیک اسید (1-site) در دمای K ۳۰۸/۱۵ با $k_{ij} = -0.06$ ۷۹
- شکل ۳-۲۶. نمودار سه تایی آب - استیک اسید - هگزان [۴۱]..... ۸۰

- شکل ۳-۲۷. پیش بینی توزیع استیک اسید بین هیدروکربن ها و محلول آبی با معادله حالت CPA [۴۲] ۸۱
- شکل ۳-۲۸. پیش بینی توزیع متانول در محلول آلی و آبی سیستم سه تایی آب - متانول - نرمال هگزان و مقایسه ان با معادلات SRK و NRTL [۴۱] ۸۱
- شکل ۳-۲۹. پیش بینی توزیع متانول در محلول آلی و آبی سیستم سه تایی آب - متانول - پروپان [۴۲] ۸۲
- شکل ۳-۳۰. پیش بینی توزیع متانول در محلول آلی و آبی سیستم چهار تایی آب - متانول - متان - نرمال هپتان با مقایسه معادله SRK [۴۲] ۸۲
- شکل ۳-۳۱. نمودار حلالیت آب در تولوئن از دو دیدگاه مختلف [۵۲] ۸۴

فصل ۴ نتایج و پیشنهادات ۸۵

- شکل ۴-۱. نمودار فشار-دما برای آب ۸۶
- شکل ۴-۲. نمودار دما بر حسب چگالی برای آب ۸۷
- شکل ۴-۳. نمودار فشار-دما برای متانول ۸۷
- شکل ۴-۴. نمودار دما بر حسب چگالی برای متانول ۸۷
- شکل ۴-۵. حلالیت متان در فاز آبی در دماهای ثابت ۹۱
- شکل ۴-۶. حلالیت اتان در فاز آبی در فشارهای ثابت ۹۱
- شکل ۴-۷. حلالیت پروپان در فاز آبی در دماهای ثابت ۹۲
- شکل ۴-۸. حلالیت n-بوتان در فاز آبی در دماهای ثابت ۹۲
- شکل ۴-۹. حلالیت متانول در آب $T=۳۲۳/۱۵$ ۹۶
- شکل ۴-۱۰. حلالیت متانول در آب $T=۳۲۸/۱۵$ ۹۶
- شکل ۴-۱۱. حلالیت متانول در آب $T=۳۳۳/۱۵$ ۹۶
- شکل ۴-۱۲. تابعیت حلالیت متانول در آب به دما ۹۷
- شکل ۴-۱۳. حلالیت اتانول در آب $T=۳۲۳/۱۵$ ۹۸
- شکل ۴-۱۴. حلالیت اتانول در آب $T=۳۲۸/۱۵$ ۹۸
- شکل ۴-۱۵. حلالیت اتانول در آب $T=۳۳۳/۱۵$ ۹۸
- شکل ۴-۱۶. حلالیت اتانول در آب ۹۹

۱۰۳ مراجع

۱۰۸ پیوست الف

۱۱۲ پیوست ب

۱۳۰ پیوست ج

فهرست جداول

فصل ۱ مقدمه	۱
جدول ۱-۱. تخمین حلالیت های گونه های شیمیایی مختلف هیدروکربنی در آب در ۲۰۰°C و در شرایط سه فازی (بر حسب ppm) [۱۴].....	۱۶
فصل ۲ معادله ی حالت	۲۳
جدول ۲-۱. مقایسه ی توابع توزیع شعاعی مختلف برای سیستم های آب-متانول با معادله ی حالت CPA [۲۹]..	۳۴
جدول ۲-۲. قواعد اختلاط پیشنهادی برای پارامترهای انرژی و حجم مخلوطهایی با همبستگی متقابل برای ترم همبسته ی معادله CPA.....	۳۹
فصل ۳ مروری بر منابع مطالعاتی	۴۹
جدول ۳-۱. تخمین پارامترهای معادله ی حالت CPA برای نرمال الکل ها، تری بوتیل الکل، تری اتیلن گلیکول، فنل و آب [۳۱].....	۵۳
جدول ۳-۲. تخمین پارامترها و تصحیح فشار بخار و حجم مایع اشباع برای الکل ها با معادله ی CPA [۳۱].....	۵۶
جدول ۳-۳. تخمین پارامترهای معادله ی حالت SRK-CPA و تصحیح داده ها با مدل های همبسته مختلف برای آب [۳۷].....	۵۹
جدول ۳-۴. تخمین پارامترهای معادله ی حالت PR-CPA و تصحیح داده ها با مدل های همبستگی مختلف برای آب [۳۷].....	۵۹
جدول ۳-۵. پارامترهای معادله حالت CPA برای الکل ها با در نظر گرفتن سه سایت قابل تشکیل پیوند هیدروژنی [۱].....	۶۶
جدول ۳-۶. پیش بینی تصحیح تعادل جامد-مایع برای سیستم های الکل-الکان با دو سه سایت قابل تشکیل پیوند هیدر وژنی [۱].....	۶۷
فصل ۴ نتایج و پیشنهادات	۸۵
جدول ۴-۱. خطای به دست آمده از تخمین تک جز به وسیله معادله ی حالت CPA.....	۸۸
جدول ۴-۲. مقادیر بهینه شده برای پارامترهای برهمکنش بین هیدروکربن های غیر همبسته و آب.....	۹۰
جدول ۴-۳. پارامترهای CPA مربوط به اجزای خالص [۴۶].....	۹۰
جدول ۴-۴. مقایسه ی CPA با معادلات حالت دیگر در ترکیب آب - متان [۵۷].....	۹۴
جدول ۴-۵. مقایسه ی CPA با معادلات حالت دیگر در ترکیب آب - اتان [۵۷].....	۹۴

- جدول ۴-۶. پارامترهای CPA مربوط به اجزای خالص [۴۶]..... ۹۵
- جدول ۴-۷. مقایسه قاعده اختلاط CR-1 و ECR با پارامترهای متغیر با دما در استفاده از CPA [This work]. ۱۰۰
- جدول ۴-۸. مقایسه ی خطاهای SRK/MHV2 و CPA با قاعده ی اختلاط ECR با پارامترهای برهمکنش ثابت ۱۰۱

۱۰۳

مراجع

۱۰۸

پیوست الف

۱۱۲

پیوست ب

۱۳۰

پیوست ج

فهرست علائم اختصاری

نمادهای عمومی

A: انرژی آزاد هلمهولتز

K: ثابت تعادل، K-value

P: فشار، بار

R: ثابت گازها، $0.08314 \text{ bar dm}^3/\text{mol-K}$

T: دما، K

V: حجم مولی، dm^3

X_A : کسر مولی از مولکول که در سایت A تشکیل پیوند نمی دهد

Z: ضریب تراک پذیری

a_0 : پارامتری در ترم انرژی، $\text{bar-dm}^6/\text{mol}^2$

b: پارامتر هم حجم، dm^3/mol

c_1 : پارامتری در ترم انرژی (ضریب بی مرکزی)، بدون بعد

g: تابع توزیع شعاعی

k_{ij} : پارامتر بر همکنش دوتایی

n: تعداد مول

x: کسر مولی در فاز مایع

y: کسر مولی در از گازی

نمادهای یونانی

Δ : انرژی همبسته

$\Theta, \eta, \varepsilon$: نمادهایی برای عمومی سازی معادلات حالت درجه ی سه

β : پارامتر حجمی همبسته، بدون بعد

ε : پارامتر انرژی همبسته، $\text{bar}\cdot\text{dm}^3/\text{mol}$

K : حجم برهمکنش

σ : قطر سگمنت

ρ : چگالی مولی، mol/dm^3

ϕ : ضریب فوگاسیته

ω : ضریب بی مرکزی، بدون واحد

زیروند و بالانویس ها:

\bar{z}_i : اجزای موجود در مخلوط

\bar{r} : تابع باقی مانده

vap : بخار

ig : گاز ایده ال

فصل ۱

مقدمه

۱-۱. مقدمه

سیستم های همبسته به سیستم هایی گویند که قابلیت تشکیل پیوند هیدروژنی دارند، از این دست میتوان الکل ها، آب، آمین ها، اسیدها و ... را نام برد. تعادل فازي سیستم های همبسته در صنایع مختلف حائز اهمیت می باشد. برای مثال، در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی وهیدروکربنی و نیز به منظور وضع قوانینی برای حلالیت کم ولی مخرب هیدروکربن ها در زیست محیط، سیستم های شامل اجزای شدیداً قطبی، یک ترکیب غیر قطبی و یک کمک حلال؛ ترکیباتی مثل الکل ها، گلیکول ها وغیره. نقش الکل و گلیکول به عنوان یک کمک حلال می باشد، این ترکیبات به طور مشخص حلالیت متقابل آب و هیدروکربن ها را به ترتیب در فاز غنی از هیدروکربن و فاز غنی از آب بهبود می دهند. بدون این کمک حلال ها، این حلالیت بسیار کم می باشد. در زیر به مثال هایی اشاره شده که در آنها تعادل سیستم های همبسته مهم می باشد:

❖ در صنایع نفتی:

- مشخص کردن ترکیب درصد هیدروکربن و آب در تعادل بین آنها
- در تشکیل هیدرات گازی؛ محاسبات مربوط به اثر بازدارنده های تشکیل

هیدرات

- استفاده از الکل ها به عنوان افزودنی ها در بنزین برای بهبود عدد اکتان
- جداسازی آزئوتروپیک در کارخانه های الکل
- واحد های بازیابی گلایکول (استفاده از تری اتیلن گلایکول برای جلوگیری از تشکیل هیدرات گازی)
- جداسازی ترکیبات شامل سولفور از جریان گاز و نفت
- ❖ برای محاسبات زیست محیطی:
- در جداسازی اکتانول - آب و دیگر هیدروکربن های خطرناک از آب
- مدلسازی جریان های پسماند
- ❖ در مهندسی بیوتکنولوژی و بیوشیمی
- ❖ در فرآورده های غذایی و طراحی فرآیند
- ❖ در صنایع شیمیایی
- روش های جداسازی جدید برای داروسازی (برای مثال استخراج با سیال فوق بحرانی)
- بازیابی الکل ها از محلولهای آبی با استفاده از پروپان (یا گازهای دیگر) در فشار بالا؛ به این دلیل از پروپان استفاده می شود که احتمال تشکیل آزئوتروپ بسیار کم است و از طرفی به خاطر قابلیت خوب استخراجی آن در فشار بالا
- ❖ در صنایع پلیمری:
- در مخلوط های پلیمری
- تعادل فازی در غشای حلال های آب - ترکیب آلی

۱-۱-۱. چه چیزی به طور خاص معادله حالت CPA را بهبود داد؟

معادله حالت ^۱ CPA از ترکیب معادله حالت ^۲ SRK با یک ترم همبسته پیشرفته، تشکیل شده است. هدف از ارائه معادله حالت CPA رسیدن به مدلی است که بر پایه ی SRK (یا هر معادله ی درجه سه ی دیگر)، که به طور گسترده در صنایع نفتی استفاده می شوند، و با استفاده از تئوری همبسته ی ورتهایم بتوان توضیحی قابل قبول برای مخلوط های همبسته ارائه کرد. مدل CPA در غیاب ترکیبات شامل پیوند هیدروژنی مثل آب، الکل، اسید ها و ... برای کاربرد در ترکیبات نفت و گاز به معادله SRK ساده می شود. علاوه بر دقت مدل و سادگی آن، باید به زمان محاسبات هم دقت کرد تا از مدل های درجه سه خیلی بیشتر نشود. از نظر کاربردی هدف از ارائه ی معادله ی حالت CPA، بهبود توانایی مدل ترمودینامیکی در توضیح تعادل مخلوط های پیچیده (چند جزئی و چند فازي) شامل هیدروکربن ها و دیگر ترکیبات شیمیایی (مثل سولفولان، الکل های سنگین، گلایکول ها و ...) می باشد. علاوه بر این، هدف های زیر مطرح بودند:

- محاسبات مخلوط های چندجزئی توسط پارامترهایی که از داده های دوتایی به دست می آیند.
 - استفاده از فرمولاسیون ریاضی ساده، اما با یک پیش زمینه تئوری برای توضیح مواد پیچیده.
 - این مدل برای سیستم هایی که ساده بوده و پیوند هیدروژنی نداشته و با معادله ی SRK هم مدل سازی به خوبی انجام می گرفت قابل ساده شدن بود
- مدلی که بر اساس اهداف بالا ارائه شد و معادله حالت CPA نام گرفت و برای اولین بار در

¹ Cubic Plus Association

² Soave-Redlich Kwong

سال ۱۹۹۶ در نتایج تحقیقات ارائه شد [۱]. کاربردهایی که تا سال ۱۹۹۹ بیشتر مورد بررسی قرار گرفت مخلوط های الکل، آب و آلکان ها بود در حالی که نتایج برای بقیه مواد شیمیایی قطبی (مثل گلایکول، اسیدها، آمین ها، آلکانول آمین ها، گلیسول اترها و ...) و کاربردهایی برای هیدروکربن های آروماتیک - اولفینیک که بعد از سال ۱۹۹۹ ارائه شد.

دلیل و ضرورت ارائه این مدل عملکرد ضعیف معادلات حالت درجه ی سه برای تعادل های سه فازي به خصوص برای اجزای با خاصیت اختلاط بالا و یا تعادل مایع-مایع ترکیبات آب هیدروکربن که شامل پیوند هیدروژنی می باشند بود. البته مدل هایی مثل SRK با قانده اختلاط هورون-ویدال^۱ بسیاری از اوقات نتایج قابل قبولی نسبت به مدل های ضریب اکتیویته مثل NRTL و UNIQUAK ارائه می دهند. اما این نوع معادلات حالت اغلب برای توضیح مخلوط هایی با پیوند هیدروژنی ناتوان هستند.

در کل معادله حالت CPA (که ترکیبی از SRK یا معادلات حالت درجه سه ی دیگر و ترم همبسته معادله ورتهایم است) به خاطر دقت و سادگی در جاهایی که نیازی به استفاده از معادله پیچیده SAFT نمی باشد استفاده می شود، حداقل برای ترکیبات فاقد پلیمرها.

۱-۱-۲. اهمیت تعادل فازي آب- هیدروکربن طی استخراج و تولید هیدروکربن ها و عملیات حفاری

حضور اجتناب ناپذیر آب در شرایط دما و فشار بالا باعث به وجود آمدن چالش های جدیدی برای مهندسين صنعت نفت شده که در اینجا به طور مختصر به بعضی از این چالش ها اشاره می شود.

¹ Huron – Vidal mixing rule