

## Evaluasi aturan pencampuran wong-sandler untuk perhitungan kesetimbangan fase cair-uap dan entalpi eksek

Ratri Ariatmi N., author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=70654&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Penggunaan persamaan keadaan kubik untuk memprediksi perilaku Kesetimbangan Fase Cair-Uap, saat ini sudah banyak dilakukan. Pengembangan aturan pencampuran untuk perhitungan kesetimbangan cair-uap yang antara lain diusulkan oleh Huron-Vidal, Michelsen, Heidemann-Kokal dan Wong-Sandler adalah dengan menggabungkan pendekatan Koefisien Aktivitas ( $\gamma$ ) dan Koefisien Fugasitas ( $\phi$ ). Wong-Sandler mengaplikasikan perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair tersebut dengan menggunakan pendekatan  $\gamma$ - $\phi$  dan Persamaan Keadaan Peng-Robinson.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa Aturan pencampuran Wong-Sandler dapat digunakan untuk memprediksi kesetimbangan fase cair-uap sistem tidak ideal pada rentang suhu dan tekanan yang luas (343-473 K dan tekanan rendah sampai dengan 40 bar). Aturan Pencampuran Wong-Sandler yang menghubungkan dengan persamaan NRTL 6 parameter ( $A_{12}, A_{21}, B_{12}, B_{21}, a_{12}$ , dan  $k_{12}$ ) bersifat fleksibel dan memberikan hasil yang lebih akurat (PDAR P bervariasi dari 0.7 % - 16.0 %) dibandingkan dengan aturan pencampuran van der Waals (PDAR P bervariasi dari 2 % - 39 %) dan aturan pencampuran Wong-Sandler 5 parameter ( $A_{12}, A_{21}, B_{12}, B_{21}$ , dan  $a_{12}$ ). Sedangkan prediksi kesetimbangan fase sistem tidak ideal dengan Persamaan Vidal kedua korelasi NRTL (B-NRTL) memberikan hasil PDAR P yang baik yaitu bervariasi dari 0.5% - 2.9 % pada suhu rendah.

Suatu metoda termodinamika diuji kemampuannya, disamping didalam memprediksi Kesetimbangan Cair-Uap juga didalam mengevaluasi sifat termodinamika yang lain (entalpi, kapasitas panas, dan entropi). Hasil perhitungan menunjukkan bahwa meskipun Aturan pencampuran Wong-Sandler memberikan hasil yang baik di dalam memprediksi Kesetimbangan fase cair-uap sistem tidak ideal dibandingkan dengan aturan pencampuran van der Waals, tetapi masih harus dipertimbangkan jika akan digunakan untuk perhitungan entalpi eksek, hal ini disebabkan karena adanya ketergantungan yang kompleks dan implisit dari term  $a$  dan  $b$  persamaan keadaan terhadap suhu dan pada model eksek Gibbs yang digunakan, sehingga akan memberikan perilaku entalpi eksek yang tidak konsisten. Sedangkan dengan menggunakan persamaan keadaan virial kedua dengan korelasi NRTL (B-NRTL) memberikan hasil yang baik pada suhu yang relatif rendah dengan penyimpangan bervariasi dari 4.3 J/mol - 934.3 J/mol.

Application of cubic equation of state for predicting of vapor liquid equilibrium (VLE) behavior, have been used. Development of mixing rule for calculation of VLE proposed by Huron-Vidal, Michelsen, Heideman-Kokal and Wong-Sandler is combining activity coefficient ( $\gamma$ ) and fugacity coefficient ( $\phi$ ) approach. Wong-Sandler has applied  $\gamma$ - $\phi$  approach for VLE calculation and used Peng-Robinson equation of state.

The result of Wong-Sandler mixing rule has been shown to be suitable to predict VLE non-ideal system at high pressure and temperature. Wong-Sandler mixing rule correlated with NRTL model 6 parameters ( $A_{12}, A_{21}, B_{12}, B_{21}, a_{12}$ , dan  $k_{12}$ ) flexible and to give result more accurate with average absolute pressure deviation (MPD) is 0.7 % - 16.0 % than van der Waals mixing rule with MPD is 2 % - 39 % and Wong-

Sandler mixing rule 5 parameters ( $A_{12}, A_{21}, B_{12}, B_{21}$ , dan  $a_{12}$ ). For prediction VLE of non-ideal system used second virial equation with NRTL correlation (B-NRTL) has good result, at low temperature with AAPD is 0.5% - 2.9 %.

A thermodynamic method are tested with regard to their ability to predict VLE and for an evaluation of derived thermodynamic properties (enthalpies, heat capacities, and entropies) The result of excess enthalpies calculation has been shown, although the Wong-Sandler mixing rule to give better result than van der Waals mixing rule to predict VLE non-ideal system , but must be considered to excess enthalpies calculation.

Because of the complex dependency of a and b term equation of state in temperature and the choise of Gibbs excess model being used, so give inconsistent excess enthalpies behavior. For using second virial equation with NRTL correlation (B-NRTL) give the good result at low temperature with deviation is 4.3 J/mol- 934.3 J/mol.