

【問 1】 混合物の等エントロピー計算。 h/s モード=5. 気相での等エントロピー操作。
P, z, S → T を求める

【問 1】 温度 T=261K, 圧力 P=8.00MPa, 質量 1.00kg の圧搾空気を P=1.00MPa まで断熱膨張した。このときの空気温度と吸熱量を求めよ。

【ヒント】 h/s モード = 5. P, z, S → T を求める

(1) 断熱なので等エントロピー計算。Target (既知量) は温度 T=261K, 圧力 P=8.00MPa (気体), 未知量は P=1.00MPa (気体) の時の温度とエンタルピー差を求める。

(2) P を与えたときの等エントロピー計算はアルゴリズム不良のため (バグ), 手動で T を与え, T, P 下でのエントロピーを計算し, Target のエントロピーと一致するまで繰り返す。

(3) 空気なので N₂:O₂=4:1 (モル比) の混合物として扱う

【解】

成分数 (nn:2 桁), 物質コード入力 (4 桁)

Help (nn) 0: 物質コード -1: 物性 -2: mi j -3: H, S (混合物) -4: 固流体平衡 -9: 終了
nn----- 最大成分数: 19
-3

これからエンタルピーh/エントロピーs 計算を開始します。

★系の入力:

成分数 (nn:2 桁), 物質コード入力 (4 桁)

Help (nn) 0: 物質コード -1: 物性 -2: mi j -3: H, S (混合物) -4: 固流体平衡 -9: 終了
nn----- 最大成分数: 19
2 117 135

- 1: K, atm, l/mol, cal
- 2: C, atm, l/mol, cal
- 3: R, psi, cu. ft. /lb-mol, Btu
- 4: F, psi, cu. ft. /lb-mol, Btu
- 5: C, mmHg, l/mol, cal
- 6: K, MPa, l/mol, J 7: C, MPa, l/mol, J
- 8: C, atm, cm³/g, cal or J
- 9: C, kgf/cm², m³/kg, cal
- 10: K, kgf/cm², m³/kg, cal 11: fin

1

Enter: 通常計算 1: 通常計算+m12+物性表示 2: チェック 9: 終了

Enter

原料モル分率 z(1)=

.8

最終成分のモル組成= 0.200

★ h/s 選択

- 0: h/s 計算無し
- 1: s&h=0 を状態方程式の計算値で与える (推奨)
- 2: s&h=0 をキーボード入力
- 3: s&h-理想 s&h の値を計算で与える
- 4: 理想 s&h 計算 (base=298 K, 1 atm)

5:T, Pにおける理想 s&h が与えられたときの s&h
6:過剰 h&s 計算(予定)

1

===== Base enthalpy, H (or entropy, S) calculation starts =====

★Base-h/s 入力

Enter=キーボード入力

1 = 沸点 (273.15K) 液相を Base 値として

Enter

1234. ... T. ----P-----... V/F. 8:Help, 9:計算終了

2 100. 0.

base enthalpy or entropy 1:liquid 2:vapor phase ?

1

**** 気液平衡(沸点) ****

T = 100.00 (deg-K) P = 0.6482E+01 (atm)

i	成分	原料	液相 x	気相 y	K-value y/x
1	N2	0.800000	0.800000	0.897625	0.113E+01
2	O2	0.200000	0.200000	0.102375	0.514E+00
	密度 (mol/L)	26.7595	26.7595	0.9368	
	相モル比		1.00000	0.00000	
	enthalpy (cal/g)	-91.7	-91.7	-52.3	
	enthalpy (cal/mol)	-2641.1	-2641.1	-1486.4	
	entropy (cal/g.K)	-0.82	-0.82	-0.42	
	entropy (cal/mol.K)	-23.53	-23.53	-12.06	

===== Base Enthalpy or Entropy calc. is just finished =====
(Above values h or s will be set to 0)

★ h/s モードの選択

4=等エンタルピー計算、エンタルピー差計算の参照点

5=等エントロピー計算、エントロピー差計算の参照点

6=h/s 参照点無し。Base 値と比較

5

***** Target S Calculation starts *****

★等エントロピー-Target の状態を指定してください

1234. ... T. ----P-----... V/F. 8:Help, 9:計算終了

7 2 261 80 ←気体

**** Properties of Homogenous VAPOR phase ****

T = 261.00 (deg-K) P = 0.8000E+02 (atm)

mole fraction feed fugacity

i	component		(atm)
1	N2	0.8000	60.90
2	O2	0.2000	14.54
compressibility factor		0.9594	
density (mol/l)		3.8937	
delta(g)mixture/r/t(-)		3.823	
enthalpy (cal/g)		77.1	
enthalpy (cal/mol)		2221.9	
entropy (cal/g.K)		0.46	
entropy (cal/mol.K)		13.40	←10 atm でこの値と同じになる温度を見つける。

Entropy: Calc. = -23.53 Target= 13.40 Difference -36.93(cal/mol.K)

1234....T.....----P-----...V/F.... 8:Help, 9:計算終了
 7 2 10.

++ density calc. trouble in "fugllv(denstq)"(over 50 iteration) ++
 initial pressure: 0.100E+02(atm),
 final pressure: 0.100E+02(atm)

収束しない。プログラム不備のため手作業でTを与え、繰り返し計算を行う
 10 atm でこの値と同じになる温度を見つける。

等 H/S 計算では、①T, z, H/S→P あるいは②P, z, H/S→T を求める。①はOK。②は時に正しい値に収束することもあるが、初めの T 仮定に失敗すると解が得られない。当面の対応策として T, P, z→ H/S, x, y を利用して手動で T を動かし、H/S の一致性を見ることにより T を決定する方法を取る。以下に実例を示す。

1234....T.....----P-----...V/F.... 8:Help, 9:計算終了
 7 2 160 10

```

**** Properties of Homogenous VAPOR phase ****
T = 160.00 (deg-K)      P = 0.1000E+02 (atm)
mole fraction          feed          fugacity
i      component
1      N2              0.8000          7.61
2      O2              0.2000          1.88
compressibility factor 0.9464
density ( mol/l )     0.8049
delta(g)mixture/r/t(-) 1.749
enthalpy ( cal/g )    56.3
enthalpy ( cal/mol )  1621.6
entropy ( cal/g.K )   0.50
entropy ( cal/mol.K ) 14.37

```

← =13.40 になるような T を探す
 ただし、この方法は手動でバグの対応策にすぎない

Entropy: Calc. = 13.40 Target= 14.37 Difference -0.97(cal/mol.K)

~~~~~

~~~~~

1234. . . . T. . . . ----P----- . . . V/F. . . . 8:Help, 9:計算終了
7 2 142 10

**** Properties of Homogenous VAPOR phase ****

T = 142.00 (deg-K)	P = 0.1000E+02 (atm)
mole fraction	feed fugacity
i component	(atm)
1 N2	0.8000 7.43
2 O2	0.2000 1.83
compressibility factor	0.9208
density (mol/l)	0.9321
delta(g)mixture/r/t(-)	1.725
enthalpy (cal/g)	51.4
enthalpy (cal/mol)	1480.1
entropy (cal/g.K)	0.47
entropy (cal/mol.K)	13.43

Entropy: Calc.= 13.40 Target= 13.43 Difference -0.03(cal/mol.K)

1234. . . . T. . . . ----P----- . . . V/F. . . . 8:Help, 9:計算終了
7 2 141.5 10.

**** Properties of Homogenous VAPOR phase ****

T = 141.50 (deg-K)	P = 0.1000E+02 (atm)
mole fraction	feed fugacity
i component	(atm)
1 N2	0.8000 7.42
2 O2	0.2000 1.82
compressibility factor	0.9199
density (mol/l)	0.9363
delta(g)mixture/r/t(-)	1.724
enthalpy (cal/g)	51.2
enthalpy (cal/mol)	1476.0
entropy (cal/g.K)	0.47
entropy (cal/mol.K)	13.40 ← これが Target の S と同じ値

Entropy: Calc.= 13.40 Target= 13.40 Difference -0.01(cal/mol.K)

1234. . . . T. . . . ----P----- . . . V/F. . . . 8:Help, 9:計算終了
9

吸熱量: Entahpy ΔH=77.1-51.2= 25.9 cal/g =108.8 kJ/kg
温度 141.5 K