DUŠAN K. GROZDANIĆ

Tehnološko–metalurški fakultet, Beograd

PREGLEDNI RAD

533.12:661.7:62.001/.57/.572/.573

KRITIČKI PRIKAZ MODELA ZA PREDSKAZIVANJE GUSTINE GASOVA ORGANSKIH SUPSTANCI

U ovom radu prikazani su modeli (jednačine stanja) za predskazivanje gustine gasova ρ organskih supstanci.
Prikazano je i testirano 67 modela pomoću eksperimentalnih podataka za 40 organskih supstanci, koje pripadaju različitim grupama jedinjenja, sa ukupno 7310 eksperimentalnih podataka.
Na osnovu dobijenih rezultata preporučuje se BWR–Lee–Kesler jednačina stanja za koju je izračunato srednje procentualno odstupanje od 1,89%. Dobri rezultati dobijeni su i sa BWR–Lee–Kesler–Munoz–Reich (1,96%), BWRSP–Twu (2,70%) i Sugie–Lu (2,77%) jednačinama stanja. Joffe–Barner–Adler (2,89%) jednačina stanja ima ograničenu primenu, pre svega za uslov $\nu_r > 0,6$. Prihvatljivi rezultati dobijeni su i sa Adachi–Lu–Sugie (3,08%), PR–Yu–Lu (3,10%), BWR–Edmister–Vairogs–Klekers (3,18%), BWRSP–Brule–Lin–Lee–Starling (3,18%), Patel–Teja (3,20%), BWRSP–Starling–Han (3,31%), BWRSPSH–Nishiumi–Saito

Vrednost gustine gasa ρ (masa supstance po jedinici zapremine) zavisi od vrednosti temperature T i pritiska p. Ove tri veličine čine volumetrijske, odnosno pρT, ili pvT, podatke. Zavisnost između ove tri veličine opisuje se modelima, koji se nazivaju jednačine stanja. Razvijene su brojne jednačine stanja u kojima pored temperature T, pritiska p i gustine ρ (ili molarne zapremine v) figurišu dve ili više konstanti. Sa računskog aspekta mogu se grubo razvrstati u dve osnovne grupe. Jednu grupu čine jednačine stanja u kojima se vrednost jedne, više ili svih konstanti izračunava iz eksperimentalnih volumetrijskih podataka, a drugu jednačine stanja u kojima se sve vrednosti konstanti izračunavaju na osnovu uslova u kritičnoj tački. Prema tome, jednačine stanja iz prve grupe mogu se tretirati kao korelacioni, a iz druge kao modeli za predskazivanje.

U ovom radu prikazani su modeli za predskazivanje vrednosti gustine gasa ρ i rezultati, koji se pomoću njih dobijaju. Prikazani su modeli, koji zadovoljavaju kriterijum usvojen u prethodnim radovima [50–3, 62–4, 69–72], a koji se zasniva na tome da se predskazivanje izvodi po nivoima, odnosno da se u proračunu na nekom nivou predskazivanja ne mogu koristiti veličine sa višeg nivoa. Prema tome, odabrani modeli mogu se u principu zasnivati na vrednostima normalne temperature ključanja T_b, kritične temperature T_c, kritičnog pritiska p_c, kritične molarne zapremine v_c, faktora acentričnosti ω, latentne toplote isparavanja na normalnoj temperaturi ključanja ΔH_{vb}, latentne toplote isparavanja ΔH_v, napona pare p^o, gustine tečnosti na normalnoj temperaturi ključanja ρ_b, gustine zasićene tečnosti ρ_s i gustine tečnosti ρ_l. Eksperimentalne vrednosti ovih veličina (izuzev napona pare, latentne toplote isparavanja, gustine zasićene tečnosti i gustine tečnosti) mogu se pronaći u bazi podataka SBANKA [101]. Ukoliko eksperimentalna vrednost neke od ovih veličina nije dostupna može se predskazati [51,62,64,69–72]. Prema tome, predskazivanje vrednosti gustine gasa ρ čini jedanaesti nivo predskazivanja, odnosno sledeći korak posle predskazivanja normalne temperature ključanja T_b (nulti nivo), kritičnih veličina T_c, p_c i v_c, faktora acentričnosti ω, latentne toplote isparavanja na normalnoj temperaturi ključanja ΔH_{vb}, latentne toplote isparavanja ΔH_v, napona pare p^o, gustine tečnosti na normalnoj temperaturi ključanja ρ_b, gustine zasićene tečnosti ρ_s i gustine tečnosti ρ_l.

PRIKAZ MODELA

Na osnovu usvojenog kriterijuma o redosledu predskazivanja navedenih veličina pregledom literature odabrano je 67 jednačina stanja. Posle testiranja na odabranim eksperimentalnim volumetrijskim podacima ustanovljeno je da sledeće jednačine stanja daju najbolje rezultate:

1. **BWR-Edmister-Vairogs-Klekers** (BWREVK) [39]

$$p_r = T_r\rho_r + (B_0T_r - A_0 - C_0/T_r^2)\rho^2 + (bT_r - a)\rho_r^2 + a\alpha\rho_r^6 + (c/T_r^2)(1+\gamma\rho_r^2)\exp(-\gamma\rho_r^2)\rho_r^3$$

$$\rho_r = RT_c/(vp_c)$$

$$A_0 = 0{,}343258 - 0{,}127521\omega - 0{,}509131\omega^2$$

$$B_0 = 0{,}113747 + 0{,}127349\omega - 0{,}243280\omega^2$$

$$C_0 = 0{,}098224 + 0{,}401236\omega - 0{,}0397267\omega^2$$

$$a = 0{,}0235866 + 0{,}290284\omega - 0{,}295413\omega^2$$

$$a\alpha = 0{,}0000875$$

$$b = 0{,}0275404 + 0{,}131009\omega - 0{,}134924\omega^2$$

$$c = 0{,}035694 + 0{,}185297\omega - 0{,}230125\omega^2$$

$$\gamma = 0{,}052058 - 0{,}09064\omega + 0{,}10506\omega^2$$

Adresa autora: D.K. Grzdanić, Tehnološko-metalurški fakultet, Karnegijeva 4, 11000 Beograd
Rad primljen: Decembar 20, 1999.
Rad prihvaćen: Mart 30, 2000.

2. **Sugie-Lu** (SL) [114]

$$p = RT/(v-b+c) - a/[T^{0,5}(v+c)(v+b+c)] + \\ + dT^2/v^2 + \sum_{j=1}^{5}(e_j + f_jT + g_j/T^2)/v^{j+1}$$

$$a_c = 0{,}42748R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b_c = 0{,}08664RT_c/p_c$$
$$c = [(1-3Z_c)/3]RT_c/p_c$$
$$d = (-0{,}0049882 + 0{,}074904\omega)R^2/p_c$$
$$e_1 = (-0{,}067421 - 0{,}055509\omega)R^2T_c^2/p_c$$
$$e_2 = (-0{,}042765 - 0{,}010221\omega)R^3T_c^3/p_c^2$$
$$e_3 = (-0{,}00022213 - 0{,}0058986\omega)R^4T_c^4/p_c^3$$
$$e_4 = (0{,}00041495 + 0{,}00041457\omega)R^5T_c^5/p_c^4$$
$$e_5 = (0{,}000047332 + 0{,}000036809\omega)R^6T_c^6/p_c^5$$
$$f_1 = (0{,}086454 + 0{,}19838\omega)R^2T_c/p_c$$
$$f_2 = (0{,}010935 - 0{,}066320\omega)R^3T_c^2/p_c^2$$
$$f_3 = (0{,}0037028 + 0{,}018764\omega)R^4T_c^3/p_c^3$$
$$f_4 = (-0{,}00053805 - 0{,}0017176\omega)R^5T_c^4/p_c^4$$
$$f_5 = (0{,}000025478 - 0{,}000011957\omega)R^6T_c^5/p_c^5$$
$$g_1 = (0{,}031751 - 0{,}19409\omega)R^2T_c^4/p_c$$
$$g_2 = (-0{,}00068871 + 0{,}054512\omega)R^3T_c^5/p_c^2$$
$$g_3 = (0{,}0070579 - 0{,}0055635\omega)R^4T_c^6/p_c^3$$
$$g_4 = (-0{,}0019279 + 0{,}00079439\omega)R^5T_c^7/p_c^4$$
$$g_5 = (0{,}00010455 - 0{,}000091929\omega)R^6T_c^8/p_c^5$$

3. **Joffe-Barner-Adler** (JBA) [9]

$$p = RT/(v-b) - af_a/[v(v-b)] + cf_c/[v(v-b)^2] - \\ - df_d/[v(v-b)^3] + ef_e/[v(v-b)^4] \quad ,$$
$$T_r < 1{,}5 \;\; i \;\; v_r > 0.6$$
$$a = (1/4)[5h - 1 + 5(1-h)^2/2]R^2T_c^2/p_c$$
$$b = (1/4)(5h-1)RT_c/p_c$$
$$c = (5/32)(1-h)^3R^3T_c^3/p_c^2$$
$$d = (5/256)(1-h)^4R^4T_c^4/p_c^3$$
$$e = (1/1024)(1-h)^5R^5T_c^5/p_c^4$$
$$h = 1 - [8(0{,}3361 + 0{,}0713\omega)/5]^{0,5}$$
$$f_a = 1 + [(0{,}904 + 3{,}716\omega)(1/T_r - 1)]/[(5h-1) + \\ + 5(1-h)^2/2]$$
$$f_c = 1 + [32(0{,}043 + 0{,}17\omega)(1/T_r - 1)]/[5(1-h)^3]$$
$$f_d = -0{,}30 - 6{,}28\omega^{2/3} + (1{,}89 + 13{,}59\omega^{2/3})/T_r - \\ - (0{,}59 + 7{,}31\omega^{2/3})/T_r$$
$$f_e = 0{,}23 - 2{,}58\omega^{2/3} + (1{,}25 + 8{,}99\omega^{2/3})/T_r^2 - \\ - (0{,}48 + 6{,}41\omega^{2/3})/T_r^4$$

4. **BWRSP-Starling-Han** (BWRSPSH) [110]

$$p = RT/v + (B_0RT - A_0 - C_0/T^2 + D_0/T^3 + \\ + E_0/T^4)/v^2 + (bRT - a - a/T)/v^3 + \alpha(a + d/T)/v^6 + \\ + (c/T^2)(1 + \gamma/v^2)\exp(-\gamma/v^2)/v^3$$
$$A_0 = (1{,}28438 - 0{,}920731\omega)RT_cv_c$$
$$B_0 = (0{,}443690 + 0{,}115449\omega)v_c$$
$$C_0 = (0{,}356306 + 1{,}70871\omega)RT_c^3v_c$$
$$D_0 = (0{,}0307452 + 0{,}179433\omega)RT_c^4v_c$$
$$E_0 = [0{,}006450 - 0{,}022143\omega\exp(-3{,}8\omega)]RT_c^5v_c$$
$$a = (0{,}484011 + 0{,}754130\omega)RT_cv_c^2$$
$$\alpha = (0{,}0705233 - 0{,}044448\omega)v_c^3$$
$$b = (0{,}528629 + 0{,}349261\omega)v_c^2$$
$$c = (0{,}504087 + 1{,}32245\omega)RT_c^3v_c^2$$
$$d = (0{,}07327828 + 0{,}463492\omega)RT_c^2v_c^2$$
$$\gamma = (0{,}544979 - 0{,}270896\omega)v_c^2$$

5. **BWR-Lee-Kesler** (BWRLK) [78]

$$Z = Z^0 + (\omega/\omega^R)(Z^R - Z^0)$$
$$Z^0 = p_rv_r^0/T_r = 1 + B^0/v_r^0 + C^0/(v_r^0)^2 + D^0/(v_r^0)^5 + \\ + \{0{,}042724/[T_r^3(v_r^0)^2]\}[0{,}65392 + \\ + 0{,}060167/(v_r^0)^2]\exp[-0{,}060167/(v_r^0)^2]$$
$$B^0 = 0{,}1181193 - 0{,}265728/T_r - 0{,}154790/T_r^2 - \\ - 0{,}030323/T_r^3$$
$$C^0 = 0{,}0236744 - 0{,}0186984/T_r$$
$$D^0 = 0{,}0000155488 + 0{,}0000623689/T_r$$
$$Z^R = p_rv_r^R/T_r = 1 + B^R/v_r^R + C^R/(v_r^R)^2 + \\ + D^R/(v_r^R)^5 + \{0{,}041577/[T_r^3(v_r^R)^2]\}[1{,}226 + \\ + 0{,}03754/(v_r^R)^2]\exp[-0{,}03754/(v_r^R)^2]$$
$$B^R = 0{,}2026579 - 0{,}331511/T_r - 0{,}027655/T_r^2 - \\ - 0{,}203488/T_r^3$$
$$C^R = 0{,}0313385 - 0{,}0503618/T_r + 0{,}016901/T_r^3$$
$$D^R = 0{,}000048736 + 0{,}00000740336/T_r$$
$$\omega^R = 0{,}3978$$

6. **Peng-Robinson** (PR) [91]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+b) + b(v-b)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + \kappa(1-T_r)^{0,5}]^2$$
$$\kappa = 0{,}37464 + 1{,}54226\omega - 0{,}26992\omega^2$$
$$a_c = 0{,}45724R^2T_c^2/p_c$$
$$b = 0{,}07780RT_c/p_c$$

7. **Harmens-Knapp** (HK) [55]

$$p = RT/(v-b) - a/[v^2 + vcb - (c-1)b^2]$$
$$a = \alpha\Omega_a R^2 T_c^2 / p_c$$
$$b = \Omega_b RT_c / p_c$$
$$c = 1 + (1-3\zeta)/(\beta\zeta)$$
$$\alpha = \begin{cases} [1 + A(1-T_r^{0,5}) - B(1-1/T_r)]^2 & , \quad T_r < 1 \\ 1 - (0{,}6258 + 1{,}5227\omega)\ln(T_r) + \\ \quad + (0{,}1533 + 0{,}41\omega)\ln^2(T_r) & , \quad T_r > 1 \end{cases}$$
$$A = \begin{cases} 0{,}5 + 0{,}27767\omega + 2{,}17225\omega^2 & , \quad \omega < 0{,}2 \\ 0{,}41311 + 1{,}14657\omega & , \quad \omega > 0{,}2 \end{cases}$$
$$B = \begin{cases} -0{,}022 + 0{,}338\omega - 0{,}845\omega^2 & , \quad \omega < 0{,}2 \\ 0{,}0118 & , \quad \omega > 0{,}2 \end{cases}$$
$$\Omega_a = 1 - 3\zeta + 3\zeta^2 + \beta\zeta(3 - 6\zeta + \beta\zeta)$$
$$\Omega_b = \beta\zeta$$
$$\beta = 0{,}10770 + 0{,}76405\zeta - 1{,}24282\zeta^2 + 0{,}96210\zeta^3$$
$$\zeta = 0{,}3211 - 0{,}080\omega + 0{,}0384\omega^2$$

8. **Schmidt-Wenzel** (SW) [102]

$$p = RT/(v-b) - a/[v^2 + (1+3\omega)bv - 3\omega b^2]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + \kappa(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$\kappa = \begin{cases} \kappa_0 + (5T_r - 3\kappa_0 - 1)^2/70 & , \quad T_r < 1 \\ \kappa_0 + (4 - 3\kappa_0)^2/70 & , \quad T_r > 1 \end{cases}$$
$$\kappa_0 = 0{,}465 + 1{,}347\omega - 0{,}528\omega^2$$
$$a_c = [1 - \zeta_c(1-\beta_c)]^3 R^2 T_c^2 / p_c$$
$$\beta_c = 0{,}25989 - 0{,}0217\omega + 0{,}00375\omega^2$$
$$(6\omega + 1)\beta_c^3 + 3(\beta_c^2 + \beta_c) - 1 = 0$$
$$\zeta_c = 1/[3(1 + \beta_c\omega)]$$
$$b = \beta_c\zeta_c RT_c / p_c$$

9. **BWRSPSH-Nishiumi-Saito** (BWRSPSHNS) [85,86]

$$p = RT/v + (B_0RT - A_0 - C_0/T^2 + D_0/T^3 + E_0/T^4)/v^2 + \\ + (bRT - a - d/T - e/T^4 - f/T^{23})/v^3 + \alpha(a + d/T + \\ + e/T^4 + f/T^{23})/v^6 + (c/T^2 + g/T^8 + h/T^{17})(1 + \\ + \gamma/v^2)\exp(-\gamma/v^2)/v^3$$
$$A_0 = (1{,}28438 - 0{,}920731\omega + 0{,}095\omega^3)RT_c v_c$$
$$B_0 = (0{,}443690 + 0{,}115449\omega)v_c$$
$$C_0 = (0{,}356306 + 1{,}70871\omega)RT_c^3 v_c$$
$$D_0 = (0{,}0307452 + 0{,}179433\omega)RT_c^4 v_c$$
$$E_0 = [0{,}006450 - 0{,}022143\omega\exp(-3{,}8\omega)]RT_c^5 v_c$$
$$a = (0{,}484011 + 0{,}754130\omega)RT_c v_c^2$$
$$\alpha = (0{,}0705233 - 0{,}044448\omega)v_c^3$$
$$b = (0{,}528629 + 0{,}349261\omega)v_c^2$$
$$c = (0{,}504087 + 1{,}32245\omega)RT_c^3 v_c^2$$
$$d = (0{,}0732828 + 0{,}463492\omega)RT_c^2 v_c^2$$
$$e = [0{,}00465593 - 0{,}0307393\omega + 0{,}0558125\omega^2 - \\ - 0{,}00340721\exp(-7{,}72753\omega - 45{,}3152\omega^2)]RT_c^5 v_c^2$$
$$f = [0{,}697 \cdot 10^{-13} + 8{,}08 \cdot 10^{-13}\omega - 16{,}0 \cdot 10^{-13}\omega^2 - \\ - 0{,}363078 \cdot 10^{-13}\exp(30{,}9009\omega - 283{,}680\omega^2)]RT_c^{24} v_c^2$$
$$g = [0{,}0000220 - 0{,}0001065\omega + \\ - 0{,}0000109\exp(-26{,}024\omega)]RT_c^9 v_c^2$$
$$h = [2{,}40 \cdot 10^{-11} + 11{,}8 \cdot 10^{-11}\omega - \\ - 2{,}05 \cdot 10^{-11}\exp(-21{,}52\omega)]RT_c^{18} v_c^2$$
$$\gamma = (0{,}544979 - 0{,}270896\omega)v_c^2$$

10. **BWRSP-Brule-Lin-Lee-Starling** (BWRSPBLLS) [24]

$$Z = 1 + \rho^*[E_1 - E_2/T^* - E_3/(T^*)^3 + E_9/(T^*)^4 - \\ - E_{11}/(T^*)^5] + (\rho^*)^2[E_5 - E_6/T^* - E_{10}/(T^*)^2] + \\ + (\rho^*)^5[E_7/T^* + E_{12}/(T^*)^2] + \\ + E_8(\rho^*)^2[(1 + E_4(\rho^*)^2]\exp[-E_4(\rho^*)^2]/(T^*)^3$$
$$E_i = a_i + \gamma b_i \quad , \quad i = 1{,}12$$
$$T^* = 1{,}2593T$$
$$\rho^* = 0{,}3189\rho_c$$
$$\gamma = 333{,}333 + 151{,}244(1/T_{br}) - 519{,}841T_{br} + 38{,}9063T_{br}^4 + \\ + 1255{,}01\log(T_{br})$$

11. **Patel-Teja** (PT) [89]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+b) + c(v-b)]$$
$$a = \alpha\Omega_a R^2 T_c^2 / p_c$$
$$b = \Omega_b RT_c / p_c$$
$$c = \Omega_c RT_c / p_c$$
$$\Omega_a = 3\zeta_c^2 + 3(1 - 2\zeta_c)\Omega_b + \Omega_b^2 + 1 - 3\zeta_c$$
$$\Omega_b^3 + (2 - 3\zeta_c)\Omega_b^2 + 3\zeta_c^2\Omega_b - \zeta_c^3 = 0$$
$$\Omega_c = 1 - 3\zeta_c$$
$$\alpha = [1 + f(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$f = 0{,}452413 + 1{,}30982\omega - 0{,}295937\omega^2$$

12. **BWRLK-Munoz-Reich** (BWRLKMR) [84]

$$Z = Z^0 + (\omega/\omega^R)(Z^R - Z^0)$$
$$Z^0 = p_r v_r^0 / T_r = 1 + B^0/v_r^0 + C^0/(v_r^0)^2 + D^0/(v_r^0)^5 + \\ + \{0{,}04483937/[T_r^3(v_r^0)^2]\}[0{,}58038985 + \\ + 0{,}06016921/(v_r^0)^2]\exp[-0{,}06016921/(v_r^0)^2]$$
$$B^0 = 0{,}10860082 - 0{,}25376417/T_r - \\ - 0{,}15050929/T_r^2 - 0{,}03162790/T_r^3$$
$$C^0 = 0{,}02625350 - 0{,}02259126/T_r$$
$$D^0 = 0{,}000010230228 + 0{,}000066165073/T_r$$
$$Z^R = p_r v_r^R / T_r = 1 + B^R/v_r^R + C^R/(v_r^R)^2 + \\ + D^R/(v_r^R)^5 + \{0{,}04243370/[T_r^3(v_r^R)^2]\}[1{,}12426050 + \\ + 0{,}03546442/(v_r^R)^2]\exp[-0{,}03546442/(v_r^R)^2]$$
$$B^R = 0{,}21920638 - 0{,}32551775/T_r - 0{,}03243116/T_r^2 - \\ - 0{,}21435900/T_r^3$$

$$C^R = 0{,}02671930 - 0{,}04687909/T_r + 0{,}01794783/T_r^3$$
$$D^R = 0{,}000042211457 + 0{,}000003285757/T_r$$
$$\omega^R = 0{,}3978$$

13. **Adachi-Lu-Sugie** (ALS) [3]

$$p = RT/(v-b_1) - a/[(v-b_2)(v+b_3)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1+m(1-T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}4070 + 1{,}3787\omega - 0{,}2933\omega^2$$
$$a_c = (0{,}44869 + 0{,}04024\omega + 0{,}01111\omega^2 - 0{,}00576\omega^3)R^2T_c^2/p_c$$
$$b_1 = (0{,}08974 - 0{,}03452\omega + 0{,}0033\omega^2)RT_c/p_c$$
$$b_2 = (0{,}03686 + 0{,}00405\omega - 0{,}01073\omega^2 + 0{,}00157\omega^3)RT_c/p_c$$
$$b_3 = (0{,}15400 + 0{,}14122\omega - 0{,}00272\omega^2 - 0{,}00484\omega^3)RT_c/p_c$$

14. **BWRSP-Twu** (BWRSPT) [120]

$$Z = 1 + \rho^*[B_1 - B_2/T^* - B_3/(T^*)^3 + B_9/(T^*)^4 - B_{11}/(T^*)^5] + (\rho^*)^2[B_5 - B_6/T^* - B_{10}/(T^*)^2] + (\rho^*)^5[B_7/T^* - B_{12}/(T^*)^2] + B_8(\rho^*)^2[(1+B_4(\rho^*)^2]\exp[-B_4(\rho^*)^2]/(T^*)^3$$
$$B_i = a_i + \beta b_i \quad , \quad i = 1{,}12$$
$$\beta(T_b[R]) = -0{,}0793627 + 0{,}526852\cdot 10^{-3}T_b + 0{,}218337\cdot 10^{-9}T_b^3 + 0{,}533260\cdot 10^{-13}T_b^4 - 0{,}486459\cdot 10^{12}/T_b^6$$
$$T^* = 1{,}2593T_r$$
$$\rho^* = 0{,}3189\rho_r$$

15. **Trebble-Bishnoi** (TB) [118]

$$p = RT/(v-b) - a/[v^2 + v(b+c) - bc - d^2]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = \exp[q_1(1-T_r)]$$
$$q_1 = \begin{cases} 0{,}66208 + 4{,}63961\omega + 7{,}45183\omega^2 & , \omega < -0{,}10 \\ -0{,}31913 & , \omega < -0{,}35 \ i \ T_r \le 1 \\ 0{,}35 + 0{,}7924\omega + 0{,}1875\omega^2 - 28{,}93(0{,}3 - Z_c)^2 & , -0{,}10 \le \omega \le 0{,}40 \\ 0{,}32 + 0{,}9424\omega - 28{,}93(0{,}3 - Z_c)^2 & , \omega > 0{,}40 \end{cases}$$
$$b = \beta b_c$$
$$\beta = \begin{cases} 1 + q_2[1 - T_r + \ln(T_r)] & , \ T_r \le 1 \\ 1 & , \ T_r > 1 \end{cases}$$
$$q_2 = \begin{cases} 0 & , \ \omega < -0{,}0423 \\ 0{,}05246 + 1{,}15058\omega - 1{,}99348\omega^2 + 1{,}5949\omega^3 - 1{,}39267\omega^4 & , -0{,}0423 \le \omega \le 0{,}30 \\ 0{,}17959 + 0{,}23471\omega & , \ \omega > 0{,}30 \end{cases}$$
$$c = C_c RT_c/p_c$$
$$d = 0{,}341 v_c[dm^3/mol] - 0{,}005$$
$$a_c = A_c R^2 T_c^2/p_c$$
$$b_c = B_c RT_c/p_c$$
$$C_c = 1 - 3\zeta_c$$
$$D_c = dp_c/(RT_c)$$
$$B_c^3 + (2 - 3\zeta_c)B_c^2 + 3\zeta_c^2 B_c - (D_c^2 + \zeta_c^3) = 0$$
$$A_c = 3\zeta_c^2 + 2B_cC_c + B_c + C_c + B_c^2 + D_c^2$$
$$\zeta_c = 1{,}075Z_c$$
$$Z_c = \begin{cases} 0{,}29 - 0{,}0885\omega - 0{,}0005[(T_cp_c)^{0,5} - (T_cp_c)_H^{0,5}] & , \ \omega \ge -0{,}14 \\ 0{,}3024 & , \ \omega > -0{,}14 \end{cases}$$
$$(T_cp_c)_H = \begin{cases} 775{,}9 + 12003\omega - 57335\omega^2 + 91393\omega^3 & , \ \omega < 0{,}225 \\ 1876 - 1160\omega & , \ 0{,}225 \le \omega \le 1 \\ T_cp_c & , \ \omega > 1 \end{cases}$$

16. **PR-Yu-Lu** (PRYL) [129]

$$p = RT/(v-b) - a/[v^2 + (2 - 4c/b)bv + (2c^2/b^2 - 1)b^2]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = \begin{cases} 0{,}37464 + 1{,}54226\omega - 0{,}26992\omega^2 & , \ 0 \le \omega < 0{,}2 \\ 0{,}37964 + 1{,}48503\omega - 0{,}16442\omega^2 + 0{,}01667\omega^3 & , \ 0{,}2 \le \omega \le 2{,}0 \end{cases}$$
$$a_c = \Omega_a R^2 T_c^2/p_c$$
$$\Omega_a = 0{,}45724$$
$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$
$$\Omega_b = 0{,}088350 - 0{,}030051\omega - 0{,}0087911\omega^2$$
$$c = b(2-u)/4$$
$$u = 1{,}5251 + 1{,}1146\omega + 1{,}1538\omega^2$$

Algoritmi ostalih testiranih jednačina stanja prikazani su u Dodatku.

U prikazanim jednačinama stanja je $T_{br} = T_b/T_c$ redukovana normalna temperatura, $T_r = T/T_c$ redukovana temperatura, $p_r = p/p_c$ redukovani pritisak, $v_r = v/v_c$ redukovana molarna zapremina, Z koeficijent stišljivosti, Z_c kritični koeficijent stišljivosti, μ dipolni moment, [P] parahor i R univerzalna gasna konstanta.

Skraćenica BWR predstavlja Benedict–Webb–Rubin [19] jednačinu stanja, a BWRSP BWR–Starling–-Powers [111] modifikaciju ove jednačine stanja. Obe ove jednačine stanja su korelacioni modeli, jer se vrednosti njihovih konstanti izračunavaju iz eksperimentalnih volumetrijskih podataka, pa one nisu predmet ovog rada. U ovom radu razmatrane su samo njihove generalizacije, koje predstavljaju modele za predskazivanje pritiska, odnosno molarne zapremine.

Vrednosti konstanti a i b u BWRSP–Brule–Lin–Lee–Starling i BWRSP–Twu jednačinama stanja date su u tabelama 1 i 2.

U RK–Redlich–Ackerman–Gunn–Jacobson–Lau jednačini stanja vrednost Z_0 izračunava se kao najveća vrednost korena kubne jednačine po ovoj veličini pomoću neke od numeričkih metoda za izračunavanje korena nelinearne jednačine. U Fuller i Iwai–Margerum–Lu jednačinama stanja vrednost β_c izračunava se iz kubne jednačne po ovoj veličini pomoću neke od numeričkih metoda za izračunavanje korena nelinearne jednačine. U BWR–Lee–Kesler i BWRLK–Munoz–Reich jednačinama stanja prvo se izračunavaju vrednosti redukovanih molarnih zapremina v_r^0 i v_r^R iz datih izraza primenom neke od numeričkih metoda za rešavanje jedne nelinearne jednačine, a zatim se sa tim vrednostima izračunavaju vrednosti koeficijenata stišljivosti Z^0 i Z^R. Tek tada se izračunava vrednost molarne zapremine, odnosno gustine, iz izraza $Z = pv/(RT)$. U Schmidt–Wenzel jednačini stanja vrednost veličine β_c izračunava se tako što se prvo izračuna vrednost prve pretpostavke ove veličine na osnovu relacije, koja je data kao funkcija faktora acentričnosti ω, a zatim se pomoću neke od numeričkih metoda za rešavanje jedne nelinearne jednačine izračunava konačna vrednost ove veličine iz kubne jednačine po β_c. U Trebble–Bishnoi jednačini stanja vrednost veličine B_c izračunava se iz kubne jednačine po ovoj veličini pomoću neke od numeričkih metoda za izračunavanje korena nelinearne jednačine. U Patel–Teja jednačini stanja vrednost veličine Ω_b izračunava se iz kubne jednačine po ovoj veličini pomoću neke od numeričkih metoda za izračunavanje korena nelinearne jednačine.

RK–Redlich–Dunlop jednačina stanja predložena je kao proširenje primene RK jednačine stanja na kritičnu i tečnu oblast. RK–Redlich–Ackerman–Gunn–Jacobson–Lau jednačina stanja predložena je kao proširenje primene RK jednačine stanja na tečnu oblast uključujući i liniju zasićenja. RK–Barner–Pigford–Schreiner i RK–Gray–Rent–Zudkevitch jednačine stanja predložene su kao proširenje primene RK jednačine stanja na liniju zasićene pare. BWR–Edmister–Vairogs–Klekers jednačina stanja u originalnom radu testirana je na volumetrijskim podacima za ugljovodonike i ugljendioksid. Sugie–Lu jednačina stanja predložena je za nepolarne supstance za $T_r > 1$. Joffe–Barner–Adler jednačina stanja razvijena je za uslove $T_r < 1,5$ i $\rho_r < 1,8$. RK–Skamenca–Tassios jednačina stanja razvijena je za nepolarne i slabo polarne supstance na uslovima $1,0 < T_r < 1,6$ i $0,03 < p_r < 3,0$. Lee–Edmister jednačina stanja u originalnom radu testirana je na volumetrijskim podacima za ugljovodonike, azot i ugljendioksid. RK–Soave jednačina stanja razvijena je za nepolarne supstance. RK–Chaudron–Asselineau–Renon jednačina stanja razvijena je samo za

Tabela 1. Vrednosti konstanti u BWRSP–Brule–Lin–Lee–Starling jednačini stanja
Table 1. The values of the constants in the BWRSP-Brule-Lin-Lee-Starling equation of state

i	a_i	b_i	i	a_i	b_i	i	a_i	b_i
1	1,45907	0,32872	5	4,59311	2,79979	9	0,094624	2,76010
2	4,98813	–2,64399	6	5,06707	10,3901	10	1,48858	–3,11349
3	2,20704	11,3293	7	11,4871	10,3730	11	0,015273	0,18915
4	4,86121	0,0	8	9,22469	20,5388	12	3,51486	0,94260

Tabela 2. Vrednosti konstanti u BWRSP–Twu jednačini stanja
Table 2. The values of the constants in the BWRSP-Twu equation of state

i	a_i	b_i	i	a_i	b_i	i	a_i	b_i
1	1,48899	0,454054	5	4,47728	2,48542	9	0,0927705	2,73392
2	5,06436	–2,70728	6	4,91620	10,2970	10	1,48921	–2,75461
3	2,19018	11,5231	7	11,4665	11,7112	11	0,0139887	0,188888
4	4,89597	0,0	8	9,51138	20,6286	12	3,05376	3,00936

nepolarne supstance. Lee–Erbar–Edmister, RK–Simonet–Behar, RK–Kato–Chung–Lu i RKS–Graboski–Daubert jednačine stanja razvijene su za ugljovodonike. BWR24 jednačina stanja razvijena je za uslov $\rho_r < 1,8$ i testirana na volumetrijskim podacima nepolarnih supstanci. BWR44 jednačina stanja razvijena je za uslov $\rho_r < 2,8$ i testirana takođe samo na volumetrijskim podacima nepolarnih supstanci. Fuller jednačina stanja razvijena je prvenstveno za tečnu oblast, ali se primenjuje i na gasnu. Harmens–Knapp jednačina stanja razvijena je pod uslovima $p_r < 5$ i $T_r < 2,5$, a Schmidt–Wenzel za neasocirane supstance. BWRSPSH–Nishiumi–Saito jednačina stanja predložena je kao proširenje BWRSP–Starling–Han jednačine stanja i na oblast niskih redukovanih temperatura. BWRLK–Munoz–Reich jednačina stanja predložena je kao poboljšanje BWR–Lee–Kesler jednačine stanja za uslove $0,02 < p_r < 9,7$ i $0,6 < T_r < 1,4$. Patel–Teja jednačina stanja predložena je samo za nepolarne supstance. Adachi–Lu–Sugie i vdW–711 jednačine stanja razvijene su za nepolarne i slabo polarne supstance. BWRSP–Twu, Twu, t–vdW i t–PR jednačine stanja razvijene su za normalne alkane. Iwai–Margerum–Lu jednačina stanja predložena je za polarne supstance. Modifikovane vdW–711 i RKS jednačine stanja predložene su kao proširenje primene osnovnih jednačina stanja i na polarne supstance.

IZBOR SUPSTANCI

Modeli su ispitani na organskim supstancama, koje su prikazane u tabeli 3. U ovoj tabeli za svaku supstancu, pored njenog imena, naveden je i broj eksperimentalnih vrednosti n, opsezi temperature, pritiska i molarne zapremine, literaturni izvor eksperimentalnih volumetrijskih podataka (Lit.), vrednosti normalne temperature ključanja T_b, kritičnih veličina T_c, p_c, v_c i Z_c, faktora acentričnosti ω, dipolnog momenta μ i parahora [P]. Vrednosti normalne temperature ključanja, kritičnih vrednosti, faktora acentričnosti, dipolnog momenta i parahora preuzete su iz Baze podataka karakteristika čistih supstanci SBANKA [101].

Kvalitet predskazivanja gustine gasa ρ izražen je srednjim procentualnim odstupanjem za svaku supstancu

$$p_{av}\left[\%\right] = \left(\sum_{i=1}^{n} p_{abs,i}\right)/n$$

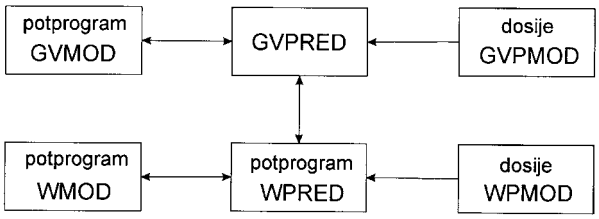
gde je

$$p_{abs}\left[\%\right] = 100|\,(\rho_{\exp} - \rho_{cal})/\rho_{\exp}|$$

Ovde je n broj eksperimentalnih volumetrijskih podataka ρ_{exp} za svaku supstancu, ρ_{cal} predskazana vrednost gustine gasa pomoću nekog od prikazanih modela, a p_{abs} pojedinačno procentualno odstupanje za svaku eksperimentalnu vrednost gustine gasa ρ.

REZULTATI I DISKUSIJA REZULTATA

Predskazivanje vrednosti gustine gasa izvedeno je pomoću programa GVPRED. šema komunikacije programa GVPRED sa potprogramima i dosijeima data je na slici 1. Pomoću glavnog programa učitavaju se podaci potrebni za proračun, izlistava na ekranu spisak raspoloživih modela, ispisuju osnovni podaci odabranog modela i ispisuje rezultat preskazivanja. Svi modeli za predskazivanje vrednosti gustine tečnosti definisani su u potprogramu GVMOD. Redni broj, naziv, oblik i literaturni izvor modela definisani su u dosijeu GVPMOD. Ovaj program ne obuhvata i predskazivanje vrednosti kritičnih i ostalih potrebnih veličina, s obzirom na to da su za većinu supstanci, koje se koriste u praksi, poznate njihove pouzdane eksperimentalne vrednosti. Međutim, ukoliko se ne raspolaže sa pouzdanom eksperimentalnom vrednošću neke od ovih veličina mogu se za preliminarno predskazivanje koristiti već opisani programi [64,69–72]. Za korišćenje jednog broja jednačina stanja neophodno je i poznavanje vrednosti faktora acentričnosti ω. Kada se ne raspolaže sa vrednošću ove veličine izračunate na osnovu eksperimentalnih podataka za napon pare p^o omogućeno je njeno predskazivanje pomoću potprograma WPRED. U potprogramu WMOD definisani su modeli za predskazivanje vrednosti faktora acentričnosti, a informativni podaci o modelima smešteni su u dosije WPMOD.



Slika 1. Šema komunikacije programa GVPRED sa potprogramima i dosijeima
Figure 1. Flowchart of the GVPRED program with subroutines and files

Sve predskazane vrednosti gustine gasa ρ izražene su u mol/cm^3. Rezultati predskazivanja pomoću 16 odabranih jednačina stanja prikazani su u tabeli 4. Za svaku supstancu dato je srednje procentualno odstupanje za sve modele, kao i ukupno srednje procentualno odstupanje za sve eksperimentalne podatke za sve modele. Rezultati predskazivanja dati su i za jednačine stanja, koje su prikazane u Dodatku (tabela 5), ali samo preko ukupnog srednjeg procentualnog odstupanja.

Za sve prikazane jednačine stanja, izuzev Joffe–Barner–Adler i RK–Chaudron–Asselineau–Renon, prikazani su rezultati predskazivanja i van uslova pod kojima su uspostavljene, jer se pokazalo da nema bitne razlike u kvalitetu predskazivanja. Za $\rho_r > 1,8$ Joffe–Barner–

Tabela 3. Literaturni izvori eksperimentalnih volumetrijskih podataka
Table 3. Literature sources of the experimental volumetric data points

	Supstanca	n	Opseg temperature [K]	Opseg pritiska [bar]	Opseg molarne zapremine [cm^3/mol]	Lit.	T_b [K]	T_c [K]	p_c [bar]	v_c [cm^3/mol]	Z_c	w	μ [D]	[P]
1.	Aceton	54	506,8–538,5	92,4–363,8	0,10–0,12	[66]	329,2	508,1	47,0	209,0	0,232	0,304	2,9	161,2
2.	Benzen	188	563,2–683,2	47,6–2960,8	0,09–0,40	[45]	353,2	562,2	48,9	259,0	0,268	0,212	0	206,1
3.	Benzen	142	513,2–628,2	25,5–66,1	0,20–1,13	[47]								
4.	Butan	126	310,9–510,9	0,7–680,5	0,11–61,41	[88]	272,2	425,2	38,0	255,0	0,274	0,199	0	190,3
5.	1–buten	53	423,2–523,2	25,6–248,9	0,13–1,00	[15]	266,9	419,6	40,2	240,0	0,277	0,191	0,3	179,0
6.	Ciklopropan	406	293,2–473,2	1,5–312,0	0,08–6,33	[79]	240,3	397,8	54,9	163,0	0,274	0,130	0	132,5
7.	Dietiletar	70	423,2–598,2	11,2–206,1	0,19–2,60	[11]	307,6	466,7	36,4	280,0	0,262	0,281	1,3	211,1
8.	Dihlordifluormetan	29	303,2–399,3	5,4–18,6	1,43–4,18	[25]	245,2	385,0	41,3	212,9	0,280	0,204	0,5	170,2
9.	Dihlorfluormetan	32	296,2–446,4	0,3–21,3	1,17–92,68	[20]	282,1	451,6	51,8	196,4	0,271	0,210	0,5	160,1
10.	Dihlormetan	125	349,5–510,0	0,1–47,0	0,58–366,87	[105]	313,0	510,0	63,0	185,9	0,235	0,199	1,8	143,0
11.	2,2–dimetilbutan	30	498,2–548,2	35,0–300,0	0,16–0,58	[42]	322,8	488,8	30,8	359,0	0,272	0,232	0	266,4
12.	2,3–dimetilbutan	19	523,2–548,2	34,5–289,4	0,17–0,67	[67]	331,1	500,0	31,3	358,0	0,269	0,247	0	266,2
13.	2,2–dimetilpropan	62	433,8–548,2	23,7–320,9	0,14–1,00	[13]	282,6	433,8	32,0	303,0	0,269	0,197	0	230,8
14.	2,2–dimetilpropan	256	303,2–473,2	0,9–73,2	0,17–34,93	[56]								
15.	Etan	174	310,9–510,9	13,6–680,5	0,06–3,04	[93]	184,6	305,4	48,7	145,5	0,279	0,099	0	110,5
16.	Etan	281	248,2–623,2	11,6–395,5	0,07–1,43	[34]								
17.	Etanol	96	533,2–623,2	81,7–680,5	0,07–0,21	[80]	351,4	513,9	61,4	167,1	0,240	0,644	1,7	172,2
18.	Eten	311	273,2–423,2	16,5– 3155,2	0,04–1,17	[83]	169,3	282,4	50,4	130,4	0,280	0,089	0	100,2
19.	Eten	26	308,1	1432,0–7872,7	0,04–0,05	[8]								
20.	Eten	333	248,2–448,2	13,7–390,4	0,06–1,25	[35]								
21.	Etilenoksid	136	294,3–477,6	0,1–61,2	0,32–575,62	[125]	283,7	469,0	71,9	140,0	0,259	0,202	1,9	112,7
22.	Fluorbenzen	53	548,2–623,2	25,1–374,5	0,13–1,33	[37]	357,9	560,1	45,5	269,0	0,263	0,244	1,4	214,5
23.	Heksan	17	523,2–548,2	25,6–297,8	0,17–1,00	[68]	341,9	507,5	30,2	368,0	0,264	0,299	0	270,4
24.	Heksan	144	443,2–553,6	9,3–37,2	0,66–3,04	[115]								
25.	Heptan	35	548,2–623,2	25,2–315,7	0,20–1,00	[106]	371,6	540,3	27,4	428,0	0,261	0,349	0	310,9
26.	Hlordifluormetan	40	297,9–413,1	0,3–21,0	1,09–94,79	[20]	232,4	369,3	49,9	167,9	0,268	0,221	1,4	130,6
27.	Hlormetan	63	323,2–498,2	6,1–311,8	0,07–4,73	[57]	249,1	416,3	67,0	138,9	0,269	0,153	1,9	109,3
28.	Hlorpentafluoretan	90	313,4–449,3	12,4–67,6	0,18–1,56	[82]	235,2	353,1	31,6	251,9	0,277	0,279	0,3	200,9
29.	Hlortrifluormetan	87	215,7–402,5	2,9–138,5	0,15–5,67	[5]	193,2	302,0	38,7	180,4	0,278	0,198	0,5	140,7
30.	Metan	280	294,3–510,9	13,6–680,5	0,05–3,08	[87]	111,6	190,4	46,0	98,6	0,286	0,011	0	72,6
31.	Metan	108	308,2–473,2	1484,3–10022,2	0,03–0,05	[98]								
32.	Metan	472	273,2–423,2	17,7– 2559,7	0,04–1,21	[117]								
33.	Metanol	23	366,5–410,9	0,7–8,5	3,45–48,98	[92]	337,7	512,6	80,9	118,0	0,224	0,556	1,7	88,2
34.	2–metilbutan	72	448,2–573,2	26,6–211,6	0,15–0,71	[58]	301,0	460,4	33,9	306,0	0,271	0,227	0,1	229,8
35.	2–metilpentan	17	523,2–548,2	34,1–187,7	0,18–0,67	[68]	333,4	497,5	30,1	367,0	0,267	0,278	0,1	269,9
36.	3–metilpentan	36	523,2–548,2	41,1–311,7	0,16–0,31	[30]	336,4	504,5	31,2	367,0	0,273	0,272	0	267,7
37.	2–metilpropan	82	294,3–394,3	0,7–27,2	0,68–47,04	[99]	261,4	408,2	36,5	263,0	0,283	0,183	0,1	190,8
38.	2–metilpropan	75	423,2–573,2	25,7–303,8	0,13–1,00	[16]								
39.	2–metilpropen	64	423,2–548,2	25,7–254,1	0,11–1,00	[14]	266,2	417,9	40,0	240,0	0,275	0,194	0,5	179,0
40.	Pentan	90	310,9–510,9	1,0–680,5	0,13–41,62	[100]	309,2	469,7	33,7	311,0	0,268	0,251	0	231,3
41.	Pentan	172	473,2–643,2	33,1–2407,1	0,11–0,41	[46]								
42.	Perfluorbutan	46	338,3–454,9	6,9–53,3	0,38–3,26	[23]	271,2	386,4	23,2	397,0	0,274	0,374	–	291,8
43.	Perfluorciklobutan	132	373,2–623,2	16,2–394,6	0,14–1,33	[38]	267,2	388,4	27,8	324,8	0,279	0,356	–	246,8
44.	Perfluormetan	290	273,2–623,2	15,5–393,7	0,08–1,33	[36]	145,1	227,6	37,4	139,6	0,276	0,177	0	111,2
45.	Propan	217	310,9–510,9	1,0–680,5	0,08–41,81	[94]	231,1	369,8	42,5	200,0	0,277	0,153	0	150,8
46.	Propan	32	372,7–473,2	1367,9–10333,1	0,06–0,08	[8]								
47.	Propan	507	323,2–623,2	15,9–394,6	0,09–1,25	[116]								
48.	2–propanol	253	473,2–573,2	22,0–132,4	0,12–1,25	[6]	355,4	508,3	47,6	220,0	0,248	0,665	1,7	164,4
49.	2–propanol	107	513,2–573,2	81,7–544,4	0,10–0,17	[119]								
50.	Propen	252	277,6–510,9	1,0–680,5	0,08–41,83	[40]	225,5	364,9	46,0	181,0	0,274	0,144	0,4	146,5
51.	Propen	35	373,2–473,1	1138,9–9558,3	0,05–0,07	[98]								
52.	Propin	365	323,2–473,2	7,1–312,4	0,08–3,38	[124]	249,9	402,4	56,3	164,0	0,275	0,215	0,7	122,9
53.	Trifluormetan	37	298,2	1,0–45,9	0,21– 24,64	[18]	191,0	299,1	48,2	133,4	0,259	0,260	0	101,1
54.	Trihlorfluormetan	34	303,1–476,8	1,0–21,0	1,26–26,48	[20]	296,9	471,2	44,1	247,8	0,279	0,189	0,5	192,2
55.	1,1,2–trihlortrifluoretan	26	377,4–487,9	4,2–21,0	1,25–6,57	[20]	320,8	487,3	34,1	325,5	0,274	0,256	–	244,2
56.	2,2,4–trimetilpentan	8	548,2	35,0–300,0	0,21–0,30	[41]	372,4	544,3	25,8	482,0	0,266	0,303	0	343,8
	Ukupno	7310												

Tabela 4. Rezultati predskazivanja vrednosti gustine gasa
Table 4. Prediction of the gas density

		Model															
	Supstanca	BWREVK	SL	JBA	BWRSPSH	BWRLK	PR	HK	SW	BWRSPSHNS	BWRSPBLLS	PT	BWRLKMR	ALS	BWRSPT	TB	PRYL
		p_{av}[%]															
1.	Aceton	12,89	11,23	–	2,64	13,39	13,38	11,27	14,17	2,38	2,07	13,46	10,04	13,85	1,84	7,54	13,78
2.	Benzen	3,82	3,66	7,81	5,11	4,49	6,32	8,76	7,07	4,77	3,71	6,43	4,59	5,94	4,89	4,39	6,00
3.	Benzen	2,01	2,60	2,37	2,39	2,26	3,78	3,54	2,60	2,35	2,44	2,94	1,65	3,23	12,56	8,14	3,32
4.	Butan	0,58	0,46	2,30	0,62	0,32	2,50	2,66	1,82	0,62	0,96	1,90	0,87	1,69	0,88	1,86	1,81
5.	1–buten	1,68	2,30	1,42	2,48	1,15	2,84	5,38	4,69	2,42	3,90	3,56	1,46	3,60	2,94	3,70	3,39
6.	Ciklopropan	1,54	2,07	4,08	2,06	2,65	2,77	4,28	5,35	1,96	1,85	4,43	1,79	4,77	1,58	3,57	4,27
7.	Dietiletar	0,55	1,05	0,91	1,16	0,86	2,22	2,74	2,16	1,04	1,66	2,15	1,02	2,33	0,75	4,85	2,22
8.	Dihlordifluormetan	1,37	0,99	1,67	1,54	1,54	2,15	2,19	1,64	1,55	2,09	1,74	1,33	1,94	1,36	3,52	1,98
9.	Dihlorfluormetan	0,33	0,74	0,26	0,37	0,28	0,44	0,46	0,40	0,37	0,47	0,40	0,34	0,41	0,26	1,24	0,41
10.	Dihlormetan	0,30	0,48	0,35	0,36	0,33	0,44	0,45	0,34	0,36	0,23	0,36	0,29	0,40	0,70	0,86	0,41
11.	2,2–dimetilbutan	2,33	1,45	2,98	2,74	1,05	5,03	6,85	5,11	2,58	3,15	4,79	2,93	4,40	2,85	3,26	4,56
12.	2,3–dimetilbutan	1,60	0,72	2,02	3,16	1,30	4,33	6,87	5,30	2,99	4,29	4,61	2,26	4,50	3,75	3,60	4,54
13.	2,2–dimetilpropan	3,89	4,25	2,67	4,78	1,65	3,81	5,75	4,80	4,52	4,53	4,13	2,36	3,91	3,32	3,84	3,84
14.	2,2–dimetilpropan	1,33	1,54	0,80	2,28	0,82	1,85	2,37	2,06	2,17	1,97	1,87	0,94	1,89	1,25	2,59	1,88
15.	Etan	1,44	0,88	3,01	1,57	0,43	3,77	3,80	3,64	1,49	1,60	2,70	0,88	2,53	1,57	2,18	2,41
16.	Etan	0,84	0,57	1,58	1,67	0,69	1,82	3,00	3,58	1,63	1,69	1,91	0,88	2,03	1,44	2,00	1,64
17.	Etanol	13,53	3,46	1,76	8,80	6,87	13,66	10,29	6,72	6,02	4,04	7,48	2,88	5,97	3,69	4,88	5,55
18.	Eten	1,45	0,77	5,67	1,87	1,16	4,22	4,51	3,89	1,84	1,49	3,12	0,96	2,77	1,64	2,53	2,64
19.	Eten	4,85	2,36	–	2,52	4,00	5,56	3,87	3,34	2,53	1,40	3,22	2,77	4,60	1,07	7,90	3,99
20.	Eten	3,23	1,62	2,32	2,60	1,05	2,80	4,46	4,74	2,42	2,04	3,27	1,20	3,41	2,74	3,18	3,00
21.	Etilenoksid	0,68	0,70	0,63	1,13	0,66	0,53	0,53	0,65	1,12	1,39	0,61	0,71	0,57	0,93	0,83	0,56
22.	Fluorbenzen	3,68	4,57	3,07	8,40	2,18	4,69	6,30	5,77	7,94	5,77	5,15	2,50	5,15	5,62	5,10	5,01
23.	Heksan	1,55	1,27	2,98	4,79	1,68	5,55	7,72	6,30	4,18	3,25	5,67	2,60	5,41	2,88	2,94	5,76
24.	Heksan	3,02	3,21	1,69	2,73	1,90	1,30	1,09	1,59	2,56	2,05	1,35	2,58	1,16	1,34	2,60	1,37
25.	Heptan	2,17	1,90	1,84	4,10	1,31	5,16	7,39	5,26	3,54	5,13	4,87	2,63	4,66	3,93	3,90	5,09
26.	Hlordifluormetan	1,27	1,42	1,10	1,20	1,18	0,87	0,86	1,09	1,19	1,23	1,03	1,29	0,94	1,51	0,82	0,93
27.	Hlormetan	1,55	1,61	2,05	2,45	1,67	1,87	2,44	3,04	2,35	2,64	2,50	1,54	2,56	1,88	2,82	2,41
28.	Hlorpentafluoretan	1,95	3,66	2,74	2,48	1,97	3,24	5,20	3,64	2,48	7,61	3,30	2,36	3,34	3,20	4,41	3,34
29.	Hlortrifluormetan	2,14	3,12	1,35	2,57	1,32	2,40	3,49	2,77	2,73	6,68	2,41	1,26	2,28	2,40	3,53	2,39
30.	Metan	0,59	0,30	1,64	2,41	0,59	2,84	0,98	2,69	2,41	3,32	0,82	0,42	0,73	2,36	0,97	0,54
31.	Metan	3,70	1,54	–	3,53	4,38	6,20	3,53	4,21	3,53	2,86	3,66	3,46	5,92	1,69	8,31	5,04
32.	Metan	0,67	0,38	2,34	1,99	0,65	3,54	1,86	2,88	1,99	2,98	1,20	0,41	0,93	1,98	1,15	0,90
33.	Metanol	2,34	2,32	2,00	2,56	2,01	2,45	2,30	2,37	2,53	3,06	2,34	1,93	2,35	3,05	2,02	2,41
34.	2–metilbutan	3,97	4,78	5,07	5,49	4,16	5,47	8,16	7,51	5,27	4,13	6,41	4,90	6,28	3,53	3,26	6,17
35.	2–metilpentan	1,05	0,75	1,31	3,64	1,37	4,81	7,73	6,00	3,37	4,24	5,14	2,42	5,07	3,28	3,73	5,19
36.	3–metilpentan	1,39	1,10	1,94	5,18	1,36	7,03	9,39	8,05	4,66	3,86	7,35	2,91	7,12	3,45	4,51	7,31
37.	2–metilpropan	0,84	1,40	0,66	0,49	0,72	0,43	0,44	0,72	0,48	0,84	0,67	0,83	0,56	0,52	0,51	0,52
38.	2–metilpropan	1,45	1,08	0,90	2,35	0,72	2,33	4,92	3,96	2,33	2,95	2,79	1,23	2,81	2,22	2,92	2,66
39.	2–metilpropen	1,67	1,78	1,39	2,68	1,20	3,08	5,94	4,99	2,52	3,14	3,82	1,70	3,84	2,35	3,72	3,67
40.	Pentan	1,01	0,78	3,91	1,31	0,99	3,60	4,21	2,83	1,32	2,08	3,07	1,59	2,69	1,79	2,59	2,89
41.	Pentan	2,80	1,71	9,91	2,47	2,94	5,83	7,61	4,94	2,35	1,64	5,14	1,91	4,00	1,75	3,01	4,51
42.	Perfluorbutan	1,35	3,51	5,47	16,09	7,43	2,67	4,51	2,87	18,78	31,68	2,94	6,22	3,18	14,35	6,58	2,61
43.	Perfluorciklobutan	2,80	3,94	4,78	4,01	3,42	3,79	4,83	3,80	4,42	6,92	4,08	4,12	3,99	5,99	5,62	4,15
44.	Perfluormetan	1,72	1,29	2,20	0,74	0,97	2,41	1,92	1,36	0,74	0,66	1,28	0,86	1,22	2,41	2,01	1,39
45.	Propan	0,57	0,35	2,05	0,66	0,30	2,25	2,31	1,74	0,65	0,80	1,56	0,73	1,45	0,74	1,54	1,51
46.	Propan	3,56	0,93	–	1,72	2,51	4,32	3,96	4,19	1,72	0,69	3,88	0,81	5,21	0,63	9,87	4,73
47.	Propan	11,31	12,78	4,10	8,70	3,93	5,95	6,82	7,47	8,11	9,42	6,76	4,61	5,64	4,71	5,72	4,78
48.	2–propanol	17,39	8,21	4,53	15,51	4,15	7,01	7,16	5,65	26,78	7,65	5,81	4,66	5,57	7,68	11,11	9,74
49.	2–propanol	7,50	9,14	6,11	5,78	1,63	9,20	5,47	3,92	3,16	1,87	4,01	5,50	4,56	1,66	9,39	5,12
50.	Propen	0,54	0,54	1,60	0,76	0,22	1,94	2,02	1,56	0,75	0,75	1,37	0,65	1,29	0,83	1,51	1,33
51.	Propen	3,70	0,97	–	1,19	3,04	5,25	4,63	3,85	1,19	0,77	3,89	1,39	4,48	0,82	7,68	4,22
52.	Propin	1,54	2,76	1,14	2,26	1,88	2,50	3,16	3,12	2,29	2,02	2,82	2,09	2,78	1,93	3,87	2,72
53.	Trifluormetan	1,45	1,61	0,53	2,80	0,67	0,62	0,67	0,71	2,71	2,61	0,66	1,16	0,61	4,79	1,91	0,64
54.	Trihlorfluormetan	0,46	0,59	0,59	0,75	0,53	0,80	0,80	0,50	0,77	1,13	0,55	0,39	0,64	1,80	1,96	0,68
55.	1,1,2–trihlortrifluoretan	0,78	0,45	1,45	1,56	1,23	1,66	1,98	1,31	1,61	3,17	1,42	0,98	1,60	2,64	3,84	1,54
56.	2,2,4–trimetilpentan	1,89	2,89	3,26	1,60	1,51	5,89	7,02	5,61	1,36	1,50	5,85	5,63	5,30	1,11	3,07	5,68
	Ukupno	3,18	2,77	2,89	3,31	1,89	3,65	3,98	3,78	3,55	3,18	3,20	1,96	3,08	2,70	3,56	3,10

Tabela 5. Ukupno srednje procentualno odstupanje jednačina stanja prikazanih u Dodatku
Table 5. Prediction of the gas density with equations of state from the Appendix

Jednačina stanja	p_{av} [%]	Jednačina stanja	p_{av} [%]	Jednačina stanja	p_{av} [%]	Jednačina stanja	p_{av} [%]	Jednačina stanja	p_{av} [%]	Jednačina stanja	p_{av} [%]
vdW	11,12	RKRAGJL	4,83	RKS	5,42	RKSB	11,28	FCPR	6,20	T	6,06
Cl	22,73	BWRSV	4,63	vdWCS	7,87	F	9,25	vdWS	14,52	YL	4,22
Ber	15,23	RKW	7,41	RKCS	5,30	RKKCL	5,12	vdWAL	14,78	IML	4,33
Diet	19,48	RKBPS	5,44	A	5,06	RKSGD	5,44	BSR	4,93	Mdw–711	6,99
Mdiet	11,70	BWRCG	20,08	RKCAR	18,26	ICL	8,97	CCOR	22,33	t–vdW	6,94
BBSC	5,63	RKGRZ	8,29	LEE	7,57	KS	4,13	vdW–711	7,24	t–PR	4,75
J	4,16	RKVH	5,26	BWR24	18,93	RKSPRF	11,94	vdWALWCMST	14,78	DP	4,86
RK	4,23	RKST	3,86	BWR44	6,29	MK	4,40	K	5,27	MRKS	5,43
RKRD	4,98	LE	4,81	BWRBMR	6,01						

Adler jednačina stanja predskazuje vrednosti gustine gasa sa znatno uvećanim vrednostima procentualnih grešaka, pa su ovi rezultati izostavljeni u tabeli 4. Kod RK–Chaudron–Asselineau–Renon jednačine stanja korelacije za veličine Ω_a i Ω_b uspostavljene su samo za nepolarne supstance, pa nije ni ispitivana na volumetrijskim podacima polarnih supstanci.

Premda RK–Skamenca–Tassios jednačina stanja nije razvijena za izrazito polarne supstance pokazalo se na ispitivanim volumetrijskim podacima polarnih supstanci da se pomoću nje mogu uspešno predskazivati gustine gasova i ovih supstanci, izuzev za 2–propanol i aceton za koje se i pomoću većine ostalih jednačina stanja dobijaju lošiji rezultati.

Lee–Edmister jednačina stanja je u originalnom radu testirana na nepolarnim supstancama, uglavnom ugljovodinicima. Dobijeni rezultati pokazuju da za neke ugljovodonika ova jednačina stanja daje lošije rezultate, sa greškom oko 15%, a da se sa druge strane može uspešno primeniti i na polarne supstance, izuzev alkohola i acetona. Ista konstatacija važi i za RK–Soave jednačinu stanja.

Sa Lee–Erbar–Edmister, RK–Simonet–Behar, RK–Kato–Chung–Lu i RKS–Graboski–Daubert jednačinama stanja sa jedne strane dobijaju se za neke ugljovodonike veoma loši rezultati (odstupanja i do 30%), a sa druge strane za neke neugljovodonike dobri rezultati.

BWR24 jednačina stanja je za većinu supstanci neprimenljiva, bez obzira na to da li je, ili nije, zadovoljen uslov $\rho_r < 1,8$. BWR44 jednačina stanja daje veoma dobre rezultate za sve testirane supstance, izuzev za alkohole i perfluorbutan, bez obzira na to što je u originalnom radu testirana samo na nepolarnim supstancama.

Pomoću Harmens–Knapp jednačine stanja dobijaju se rezultati podjednakog kvaliteta i u okviru uslova $p_r < 5$ i $T_r < 2,5$, kao i van njih.

Pomoću BWRSPSH–Nishiumi–Saito jednačine stanja ne dobija se nikakvo poboljšanje u odnosu na BWRSP–Starling–Han jednačinu stanja, kada se razmatrani volumetrijski podaci posmatraju u celosti. Ista konstatacija važi i za BWRLK–Munoz–Reich jednačinu stanja u odnosu na BWR–Lee–Kesler jednačinu stanja.

Pomoću Patel–Teja jednačine stanja podjednako dobro predskazuju se vrednosti gustine gasa, kako za nepolarne supstance, za koje je i predložena, tako i za polarne.

Dobijeni rezultati pokazuju da se Adachi–Lu–Sugie i BWRSP–Twu jednačine stanja mogu koristiti za predskazivanje vrednosti gustine gasa i izrazito polarnih supstanci, odnosno i ostalih supstanci pored normalnih alkana.

Pored toga, što se za neke vrednosti temperature i pritiska u eksperimentalnim podacima za etanol ne može predskazati vrednost gustine gasa i činjenice da je za primenu CCOR jednačine stanja neophodno poznavanje vrednosti dipolnog momenta, na osnovu dobijenih rezultata očigledno je da ona nije pogodna za ovu vrstu predskazivanja.

vdW–711, Twu, Iwai–Margerum–Lu, t–vdW i t–PR jednačine stanja sa približno istim kvalitetom predskazuju vrednosti gustine gasa, kako za grupe suspstanci za koje su razvijene, tako i za sve ostale testirane supstance.

Modifikacija RK–Soave jednačine stanja, koja je predložena kao proširenje njene primene i na polarne supstance, daje praktično iste rezultate u predskazivanju vrednosti gustine gasa, kao i originalna jednačina stanja.

ZAKLJUČAK

U ovom radu prikazani su modeli za predskazivanje vrednosti gustine gasa. U tu svrhu razvijen je program GVPRED za predskazivanje vrednosti gustine gasa pomoću neke od 67 prikazanih jednačina stanja, kao i za predskazivanje vrednosti faktora acentričnosti (6).

DODATAK

van der Waals (vdW) [122]

$$p=RT/(v-b)-a/v^2$$
$$a=(27/64)R^2T_c^2/p_c$$
$$b=(1/8)RT_c/p_c$$

Clausius (Cl) [28]

$$p=RT/(v-b)-a/[T(v+c)^2]$$
$$a=(27/64)R^2T_c^3/p_c$$
$$b=v_c-(1/4)RT_c/p_c$$
$$c=(3/8)RT_c/p_c-v_c$$

Berthelot (Ber) [21]

$$p=RT/(v-b)-a/(Tv^2)$$
$$a=(27/64)R^2T_c^3/p_c$$
$$b=(1/8)RT_c/p_c$$

Dieterici (Diet) [31]

$$p=RT/(v-b)\exp[-a/(RTv)]$$
$$a=4R^2T_c^2/[p_c\exp(2)]$$
$$b=RT_c/[p_c\exp(2)]$$

Modifikovana Dieterici (MDiet) [32]

$$p=RT/(v-b)\exp(-k)$$
$$k=aT_c^{1/2}/(vRT^{3/2})$$
$$a=4R^2T_c^2/[p_c\exp(2)]$$
$$b=RT_c/[p_c\exp(2)]$$

Beattie-Bridgeman-Su-Chang (BBSC) [12,112]

$$p=\{RT[1-c/(vT^3)][v+B_0(1-b/v)]-$$
$$-A_0(1-a/v)\}/v^2$$
$$a=0{,}1127RT_c/p_c$$
$$b=0{,}03833RT_c/p_c$$
$$c=0{,}05RT_c^4/p_c$$
$$A_0=0{,}4758R^2T_c^2/p_c$$
$$B_0=0{,}18746RT_c/p_c$$

RK-Wilson (RKW) [127]

$$p=RT/(v-b)-RTfb/[v(v+b)]$$
$$f=4{,}934[1+(1{,}57+1{,}62\omega)(1/T_r-1)]$$
$$b=0{,}0865RT_c/p_c$$

Joffe (J) [61]

$$p=RT/(v-b)-a/[T_rv(v-b)]+$$
$$+c/[T_r^{3/2}v(v-b)^2]-$$
$$-d/[T_r^2v(v-b)^3]+e/[T_r^{5/2}v(v-b)^4]$$
$$a=(53/8)p_cv_c^2$$
$$b=v_c/4$$
$$c=(270/64)p_cv_c^3$$
$$d=(405/256)p_cv_c^4$$
$$e=(243/1023)p_cv_c^5$$
$$v_c=RT_c/(4p_c)$$

Redlich-Kwong (RK) [97]

$$p=RT/(v-b)-a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$a=0{,}4278R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b=0{,}0867RT_c/p_c$$

RK-Redlich-Dunlop (RKRD) [96]

$$Z=Z'+Z''$$
$$Z'=v/(v-b)-a/[RT^{1,5}(v+b)]$$
$$a=0{,}42748022R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b=0{,}08664034RT_c/p_c$$
$$Z''=p_r\{4{,}996\omega^2(T_r-1)+[0{,}01734-$$
$$-0{,}0002754p_c-0{,}09772(T_c/1000)^2]p_r+$$
$$+(0{,}03086+0{,}07683/p_c)(T_r-1)^3-$$
$$-1{,}819\cdot10^{-6}p_cp_r^2(T_r-1)\}/$$
$$\{T_r^4+[0{,}6890-0{,}8316(T_c/1000)]$$
$$(T_c/1000)p_r^3\}$$

BWR-Su-Viswanath (BWRSV) [113]

$$p_r=T_r\rho+(T_rB'-A'-C'/T_r^2)\rho^2$$
$$\rho=RT_c/(vp_c)$$
$$A'=0{,}24180980+0{,}04407059(1-$$
$$-0{,}002579833\rho^3)\rho$$
$$B'=0{,}07643101+0{,}03715171\rho$$
$$C'=0{,}21217005-0{,}06448001(1+0{,}06\rho^2)$$
$$\exp(-0{,}06\rho^2)\rho$$

RK-Redlich-Ackerman-Gunn-Jacobson-Lau (RKRAGJL) [95]

$$Z=Z_0+Z_1+\omega Z_2+L(Z_3+\omega Z_4)$$
$$Z_0^3-Z_0^2+[0{,}42748p_r/T_r^{2,5}-0{,}0866404(1+$$
$$+0{,}0866404p_r/T_r)p_r/T_r]Z_0-$$
$$-0{,}0370371p_r^2/T_r^{1,5}=0$$
$$L=\begin{cases}1 & , \ tecnosti\\ 0 & , \ gasovi\end{cases}$$
$$Z_1=-A_1p_r^3/\{1+A_2(T_r-1)^2+A_3[p_r-A_4-$$
$$-A_5(T_r-1)]^4\}+B_1p_r(T_r-B_2-B_3p_r+$$
$$+B_4p_rT_r^2)(1-B_5p_r+B_6p_rT_r)/$$
$$[1+B_7(T_r-B_8-B_9p_r-B_{10}p_rT_r)^4]+$$
$$+B_{11}p_r^3T_r^3/(T_r^4+B_{12}p_r^4)$$
$$Z_2=p_rT_r(T_r-1-0{,}049p_r)(C_1+C_2p_r-$$
$$-C_3p_rT_r+C_4T_r)/[T_r^4+C_5(T_r-C_6-$$
$$-C_7p_r+C_8p_rT_r)^4]$$
$$Z_3=D_1(1-T_r)p_r^3T_r^2/[(D_2-T_r)^3(1+D_3p_r^3)]$$
$$Z_4=E_1(1-T_r)p_r/(1+E_2p_r^2)+$$
$$+(-E_3+E_4T_r^2)(1-T_r)p_r^2/(1+E_5p_r^4)-$$
$$-E_6(1-T_r)p_r^3T_r^6/(1+E_7p_r^6)+$$
$$+E_8(1-T_r)T_r^3(E_9-T_r)p_r[1/(1+E_{10}p_r^2)-$$
$$-E_{11}p_r/(1+E_{12}p_r^4)]/(E_{13}-T_r^2)$$

RK-Barner-Pigford-Schreiner (RKBPS) [10]

$$p=RT/(v-b)-(a/T^{0,5}+\gamma/T^2)/[v(v+b)]$$
$$a=0{,}4275(R^2T_c^{2,5}/p_c)/(1+4{,}73\omega^{1,5})$$
$$\gamma=2{,}02\omega^{1,5}(R^2T_c^4/p_c)/(1+4{,}73\omega^{1,5})$$
$$b=0{,}08664RT_c/p_c$$

BWR-Cooper-Goldfrank (BWRCG) [29]

$$p_r=T_r/\phi+(B_0T_r-A_0-C_0/T_r^2)/\phi^2+$$
$$+(bT_r-a)/\phi^3+a\alpha/\phi^6+(c/T_r^2)(1+$$
$$+\gamma/\phi^2)\exp(-\gamma/\phi^2)/\phi^3$$
$$\phi=vp_c/(RT_c)$$
$$A_0=A_0(0)+A_0(1)\omega$$
$$B_0=B_0(0)+B_0(1)\omega$$
$$C_0=C_0(0)+C_0(1)\omega$$
$$a_0=a_0(0)+a_0(1)\omega$$
$$a\alpha_0=a\alpha_0(0)+a\alpha_0(1)\omega$$
$$b_0=b_0(0)+b_0(1)\omega$$
$$c_0=c_0(0)+c_0(1)\omega$$
$$\gamma_0=\gamma_0(0)+\gamma_0(1)\omega$$

RK-Gray-Rent-Zudkevitch (RKGRZ) [49]

$$Z=Z_{RK}+Z_2$$
$$Z_{RK}=v/(v-b)-a/[RT^{1,5}(v+b)]$$
$$a=0{,}42748022R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b=0{,}08664034RT_c/p_c$$
$$Z_2=D_1T_r^2p_r^2\exp[-7000(1-T_r)^2-770(1{,}02-$$
$$-p_r)^2]+\omega(-0{,}464419+0{,}424568T_r^2)[p_r/$$
$$(T_r^4+p_r^4)]+\omega(D_3+D_4T_r)\{p_r^2/[(1+T_r)^4+$$
$$+p_r^4]\}+[D_2+\omega(D_5+D_6T_r)]\{p_r^3/$$
$$[(1+T_r)^4+p_r^4]\}$$

RK-Vogl-Hall (RKVH) [123]

$$p=RT/(v-b)-a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$a=a_ca_r$$
$$b=b_cb_r$$
$$a_c=0{,}4278R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b_c=0{,}0867RT_c/p_c$$
$$a_r=1-0{,}00863T_r-48{,}1\exp[-(T_r-90)^2/600]-$$
$$-31{,}0\exp[-(T_r-125)^2/400]$$
$$b_r=\exp[-(T_r-1)^2/7500]-0{,}2\exp[-(T_r-75)^2$$
$$/800]+0{,}125\exp[-(T_r-150)^2/1400]$$

RK-Skamenca-Tassios (RKST) [103]

$$p=RT/(v-bm)-am/[T^{0,5}v(v+bm)]$$
$$a=0{,}4278R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b=0{,}0867RT_c/p_c$$
$$am=\begin{cases}a(0{,}9890-0{,}2281\omega) & ,1<T_r<1{,}1\\ a[(0{,}61563+0{,}55945T_r- & \\ -0{,}21750T_r^2)+(2{,}3874-3{,}3192T_r+ & \\ +0{,}94143T_r^2)\omega] & ,1{,}1\le T_r\le 1{,}6\\ a & ,0<T_r<1,T_r>1{,}6\end{cases}$$
$$bm=\begin{cases}b(0{,}9526-0{,}2014\omega) & ,1<T_r<1{,}1\\ b(0{,}9317-0{,}07115\omega) & ,1{,}1\le T_r\le 1{,}6\\ b & ,0<T_r<1,T_r>1{,}6\end{cases}$$

RK-Soave (RKS) [107]

$$p=RT/(v-b)-a/[v(v+b)]$$
$$a=\alpha a_c$$
$$\alpha=[1+m(1-T_r^{0,5})]^2$$
$$m=0{,}480+1{,}574\omega-0{,}176\omega^2$$
$$a_c=0{,}42747R^2T_c^2/p_c$$
$$b=0{,}08664RT_c/p_c$$

Lee-Edmister (LE) [76]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v-b)] + c/[v(v-b)(v+b)]$$
$$a = a_1 - a_2T + a_3/T + a_4/T^5$$
$$a_1 = (0{,}2591 - 0{,}0313\omega)R^2T_c^2/p_c$$
$$a_2 = (0{,}0249 + 0{,}1537\omega)R^2T_c/p_c$$
$$a_3 = (0{,}2015 + 0{,}2164\omega)R^2T_c^3/p_c$$
$$a_4 = 0{,}04\omega R^2T_c^7/p_c$$
$$b = 0{,}0982RT_c/p_c$$
$$c = c_1/T^{0,5} + c_2/T^2$$
$$c_1 = 0{,}0599(1-\omega)R^3T_c^{3,5}/p_c^2$$
$$c_2 = (0{,}0181 + 0{,}0919\omega)R^3T_c^5/p_c^2$$

vdW-Carnahan-Starling (vdWCS) [26]

$$p = RT(1+y+y^2-y^3)/[v(1-y)^3] - a/v^2$$
$$y = b/(4v)$$
$$a = 0{,}49542R^2T_c^2/p_c$$
$$b = 0{,}18725RT_c/p_c$$

RK-Carnahan-Starling (RKCS) [26]

$$p = RT(1+y+y^2-y^3)/[v(1-y)^3] - a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$y = b/(4v)$$
$$a = 0{,}461891R^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b = 0{,}105007RT_c/p_c$$

Abbott (A) [1]

$$p_r = 12T_r/(4v_r-1) - \{(81/20)[(60-49\omega)/T_r^{3/5} + 49\omega/T_r^{13/5}]\}/(8v_r+1)^2$$
$$v_r = 3vp_c/(RT_c)$$

RK-Kato-Chung-Lu (RKKCL) [65]

$$p = RT/(v-b) - a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$a = 0{,}42748R^2(\theta T_c)^{2,5}/p_c$$
$$b = 0{,}08664R\theta T_c/p_c$$
$$\theta = \theta^{(0)} + \omega\theta^{(1)} + \omega^2\theta^{(2)}$$
$$\theta^{(0)} = 1 + (1-T_r)[-0{,}0314 - 0{,}1181(1-T_r) - 0{,}1740(1-T_r)^2]$$
$$\theta^{(1)} = (1-T_r)[1{,}1404 + 0{,}1815(1-T_r)]$$
$$\theta^{(2)} = -0{,}5636(1-T_r)$$

Lee-Erbar-Edmister (LEE) [77]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v-b)] + bc/[v(v-b)(v+b)]$$
$$a = [(0{,}246105 + 0{,}02869\omega) - (0{,}037472 + 0{,}149687\omega)T_r + (0{,}16406 + 0{,}023727\omega)/T_r + (0{,}04937 + 0{,}132433\omega)/T_r^2]R^2T_c^2/p_c$$
$$b = (0{,}086313 + 0{,}002\omega)RT_c/p_c$$
$$c = [(0{,}451169 + 0{,}00948\omega)/T_r^{0,5} + (0{,}387082 + 0{,}078842\omega)/T_r^2]R^2T_c^2/p_c$$

RK-Chaudron-Asselineau-Renon (RKCAR) [27]

$$p = RT/(v-b) - a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$a = \Omega_aR^2T_c^{2,5}/p_c$$
$$b = \Omega_bRT_c/p_c$$
$$\Omega_a = (\Omega_a^{(0)} + \omega\Omega_a^{(1)})/T_c$$
$$\Omega_b = \Omega_b^{(0)} + \omega\Omega_b^{(1)}$$
$$\Omega_a^{(0)} = 5{,}6718556 + 0{,}74164072/T_r + 0{,}71094087/T_r^2$$
$$\Omega_a^{(1)} = 16{,}679287 + 6{,}7454796/T_r + 7{,}7929031/T_r^2$$
$$\Omega_b^{(0)} = 0{,}081958137 + 0{,}0074299534/T_r + 0{,}0070756935/T_r^2$$
$$\Omega_b^{(1)} = 0{,}035656367 + 0{,}14087820/T_r + 0{,}11159947/T_r^2$$

BWR-Bishnoi-Miranda-Robinson (BWRBMR) [22]

$$p = RT/v + (B_0RT - A_0 - C_0/T^2)/v^2 + (bRT - a)/v^3 + a\alpha/v^6 + (c/T^2)(1+\gamma/v^2)\exp(-\gamma/v^2)/v^3$$
$$A_0 = (0{,}93286 + 0{,}62420\omega)RT_cv_c$$
$$B_0 = (0{,}10933 + 1{,}76757\omega)v_c$$
$$C_0 = (0{,}26996 + 1{,}87121\omega)RT_c^3v_c$$
$$a = (0{,}62505 + 1{,}75734\omega)RT_cv_c^2$$
$$\alpha = (0{,}07193 - 0{,}05891\omega)v_c^3$$
$$b = (0{,}58990 + 0{,}44613\omega)v_c^2$$
$$c = (0{,}50282 + 1{,}74568\omega)RT_c^3v_c^2$$
$$\gamma = (0{,}60360 - 0{,}48451\omega)v_c^2$$

BWR24 [128]

$$Z = 1 + (B_{0r} - A_{0r}/T_r - C_{0r}/T_r^3)/v_r + (a_r - b_r/T_r)/v_r^2 + (\alpha_r/T_r)/v_r^5 + (c_r/T_r^3)(1+\gamma_r/v_r^2)\exp(-\gamma_r/v_r^2)/v_r^2 \quad , \quad v_r > 0{,}6$$

$$A_{0r} = 1{,}14847 + 0{,}39761\omega - 6{,}66115\omega^2$$

$$B_{0r} = 0{,}39911 + 0{,}59024\omega - 2{,}89764\omega^2$$

$$C_{0r} = 0{,}39050 + 0{,}87856\omega + 3{,}38459\omega^2$$

$$a_r = 0{,}24505 + 3{,}50431\omega - 0{,}77333\omega^2$$

$$\alpha_r = 0{,}03707 + 0{,}14000\omega - 0{,}07786\omega^2$$

$$b_r = 0{,}31077 + 1{,}94019\omega - 1{,}27801\omega^2$$

$$c_r = 0{,}36622 + 2{,}30309\omega - 0{,}10514\omega^2$$

$$\gamma_r = 0{,}60200 - 0{,}35000\omega + 0{,}02500\omega^2$$

Fuller (F) [44]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+cb)]$$

$$a = \alpha a_c$$

$$\alpha = [1 + q(1-T_r)^{0,5}]^2$$

$$q = m(\beta/0{,}26)^{1/4}$$

$$m = 0{,}480 + 1{,}5740\omega - 0{,}176\omega^2$$

$$\beta = \beta_c + (\beta_0 - \beta_c)\{\frac{2}{1+\exp[\theta(T_r-1)]} - 1\}$$

$$\beta_0 = \beta_c(7{,}7880 - 36{,}8316Z_c + 50{,}7061Z_c^2)$$

$$\theta = 10{,}9356 + 0{,}0285[P]$$

$$Z_c - [(1-\beta_c)(2+c_c\beta_c) - (1+c_c\beta_c)]/[(2+c_c\beta_c)(1-\beta_c)^2] = 0$$

$$c_c = [(1/\beta_c - 0{,}75)^{1/2} - 1{,}5]/\beta_c$$

$$a_c = \Omega_a R^2 T_c^2/p_c$$

$$\Omega_a = \Omega_b(1+c\beta)^2/[\beta(1-\beta)^2(2+c\beta)]$$

$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$

$$\Omega_b = \beta[(1-\beta)(2+c\beta) - (1+c\beta)]/[(2+c\beta)(1-\beta)^2]$$

$$c = [(1/\beta - 0{,}75)^{1/2} - 1{,}5]/\beta$$

RKS-Graboski-Daubert (RKSGD) [48]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+b)]$$

$$a = \alpha a_c$$

$$\alpha = [1 + m(1-T_r^{0,5})]^2$$

$$m = 0{,}48508 + 1{,}55171\omega - 0{,}15613\omega^2$$

$$a_c = 0{,}42747R^2T_c^2/p_c$$

$$b = 0{,}08664RT_c/p_c$$

BWR44 [128]

$$Z = 1 + (B_0 - B_1/T_r - B_2/T_r^2 + B_3/T_r^3)/v_r + [C_0 - C_1/T_r + C_2/T_r^2 + (C_3/T_r^3)(1+C_4/v_r^2)\exp(-C_4/v_r^2)]/v_r^2 + (D_0 + D_1/T_r)/v_r^3 + [E_0 + (E_1/T_r)(1+E_2/v_r^4)\exp(-E_2/v_r^4)]/v_r^4 + (F_0 + F_1/T_r)/v_r^5 \quad , \quad v_r > 0{,}36$$

$$B_0 = 0{,}433757 - 3{,}246378\omega$$

$$B_1 = -0{,}862937 + 9{,}93963\omega$$

$$B_2 = -0{,}756530 - 8{,}293955\omega$$

$$B_3 = 0{,}027745 + 0{,}917885\omega$$

$$C_0 = 0{,}094959 + 8{,}236604\omega - 21{,}016663\omega^2$$

$$C_1 = 0{,}109501 - 12{,}094533\omega + 31{,}417587\omega^2$$

$$C_2 = -0{,}122534 + 2{,}069143\omega - 4{,}935475\omega^2$$

$$C_3 = 0{,}382121 + 3{,}329449\omega - 6{,}299470\omega^2$$

$$C_4 = 0{,}602403 + 0{,}479766\omega - 2{,}358322\omega^2$$

$$D_0 = 0{,}043682 - 5{,}572401\omega + 14{,}261955\omega^2$$

$$D_1 = -0{,}056852 + 2{,}793468\omega - 9{,}629090\omega^2$$

$$E_0 = 0{,}010344 + 2{,}942841\omega - 6{,}694306\omega^2$$

$$E_1 = 0{,}004545 - 0{,}024887\omega + 0{,}189640\omega^2$$

$$E_2 = 1{,}2004 + 3{,}744705\omega - 5{,}568792\omega^2$$

$$F_0 = 0{,}002304 - 0{,}764692\omega + 1{,}742159\omega^2$$

$$F_1 = 0{,}029587 + 0{,}182171\omega - 0{,}261855\omega^2$$

RK-Simonet-Behar (RKSB) [104]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+b)]$$

$$a = \Omega_a R^2 T_c^2/p_c$$

$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$

$$\Omega_a = \Omega_{ab}\Omega_b$$

$$\Omega_{ab} = \Omega_{ab}^0 + \omega\Omega_{ab}^1$$

$$\Omega_{ab}^0 = 5{,}06364$$

$$\Omega_{ab}^1 = -8{,}10914 + 8{,}81715/T_r$$

$$\Omega_b = \Omega_b^0 + \Omega_b^1|T_r - 1| + \Omega_b^2|T_r - 1|^2$$

$$\Omega_b^0 = 0{,}0826 - 0{,}0122\omega$$

$$\Omega_b^1 = 0{,}0220 - 0{,}0127\omega$$

$$\Omega_b^2 = -0{,}0072 - 0{,}02905\omega$$

Ishikawa-Chung-Lu (ICL) [59,4]

$$p = (RT/v)/[(2v+b)/(2v-b)] - a/[T^{0,5}v(v+b)]$$
$$a = \Omega_a R^2 T_c^{2,5} / p_c$$
$$b = \Omega_b RT_c / p_c$$
$$\Omega_a = (0{,}351908 - 0{,}851174\omega) + (0{,}18386 + 1{,}001033\omega)/T_r - (0{,}066362 + 0{,}222659\omega)/T_r^2$$
$$\Omega_b = 0{,}034 - 0{,}025\omega + 0{,}1/T_r - 0{,}025/T_r^2$$

Kumar-Starling (KS) [75]

$$Z = (1 + A_5\rho_r + A_2\rho_r^2)/[(1 - A_1\rho_r)(1 + A_3\rho_r + A_4\rho_r^2)]$$
$$A_1 = 0{,}262524$$
$$A_2 = (-0{,}178144 + 0{,}262524/T_r + 0{,}250865/T_r^2) + (-0{,}236048/T_r + 0{,}42057/T_r^2 + 0{,}000278052/T_r^8)\omega$$
$$A_3 = (0{,}579249/T_r - 0{,}042057/T_r^2) + (-1{,}589350/T_r + 2{,}50865/T_r^2 - 1{,}297180/T_r^3 + 0{,}236048/T_r^4)\omega$$
$$A_4 = -0{,}262524$$
$$A_5 = (-1{,}096720/T_r^2 + 0{,}042057/T_r^3) + (0{,}549559/T_r - 1{,}096720/T_r^3 + 0{,}196828/T_r^4 - 0{,}001096720/T_r^8)\omega$$

RKS-Peneloux-Rauzy-Freze (RKSPRF) [90]

$$p = RT/(v-b) - a/[(v+c)(v+b+2c)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}480 + 1{,}574\omega - 0{,}176\omega^2$$
$$a_c = 0{,}42747 R^2 T_c^2 / p_c$$
$$b = 0{,}08664 RT_c / p_c$$
$$c = 0{,}40768(0{,}29441 - Z_c)RT_c / p_c$$

vdW-Soave (vdWS) [108]

$$p = RT/(v-b) - a/v^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}4998 + 1{,}5928\omega - 0{,}1956\omega^2 + 0{,}025\omega^3$$
$$a_c = (27/64)R^2 T_c^2 / p_c$$
$$b = (1/8)RT_c / p_c$$

Martin-Kubic (MK) [73]

$$p = RT/(v-b) - a/(v+c)^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$a_c = (27/64)R^2 T_c^2 / p_c$$
$$\alpha = \alpha^0 + \omega'\alpha^1$$
$$\alpha^0 = -0{,}1514T_r + 0{,}7895 + 0{,}3314/T_r + 0{,}029/T_r^2 + 0{,}0015/T_r^7$$
$$\alpha^1 = -0{,}237T_r + 0{,}7846/T_r + 1{,}0026/T_r^2 + 0{,}019/T_r^7$$
$$\omega' = 0{,}000756 + 0{,}90984\omega + 0{,}16226\omega^2 + 0{,}14549\omega^3$$
$$b = (0{,}082 - 0{,}0713\omega')RT_c / p_c$$
$$c = \gamma RT_c / p_c$$
$$\gamma = 0{,}043\gamma^0 + 0{,}01713\omega'\gamma^1$$
$$\gamma^0 = 4{,}275051 - 8{,}878889/T_r + 8{,}508932/T_r^2 - 3{,}481408/T_r^3 + 0{,}576312/T_r^4$$
$$\gamma^1 = 12{,}856404 - 34{,}744125/T_r + 37{,}433095/T_r^2 - 18{,}059421/T_r^3 + 3{,}514050/T_r^4$$

Freze-Chevalier-Peneloux-Rauzy (FCPR) [43]

$$p = RT/(v-b) - a/[(v+c-r_1)(v+c-r_2)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}381363 + 1{,}51188\omega - 0{,}1993\omega^2$$
$$a_c = 0{,}456533 R^2 T_c^2 / p_c$$
$$b = (Z_c^* - 0{,}23)RT_c / p_c$$
$$Z_c^* = \begin{cases} 0{,}319 & , \omega \le 0{,}090 \\ 0{,}2910 + 0{,}4421\exp(-6{,}46361\omega) & , \omega > 0{,}090 \end{cases}$$
$$r_1 = (Z_c^* - 0{,}276106)RT_c / p_c$$
$$r_2 = (Z_c^* - 0{,}493894)RT_c / p_c$$
$$c = dRT_c / p_c$$
$$d = \begin{cases} 0 & , \omega \le 0{,}090 \\ 0{,}02802 - 0{,}02787\omega - 0{,}04421\exp(-6{,}46361\omega) & , \omega > 0{,}090 \end{cases}$$

Behar-Simonet-Rauzy (BSR) [17]

$$p = RT/(v-b) - a[\gamma(b/v) + \delta(b/v)^2]/[v(v+b)]$$
$$a = \alpha b R T_c$$
$$b = \beta R T_c / p_c$$
$$\beta = 0{,}11359\{1 - m[1 - \exp(-1/T_r)]\}^3$$
$$m = [1 - (\beta_c / 0{,}11359)^{1/3}]/(1 - 1/e)$$
$$\beta_c = 0{,}09436(1 - 0{,}27808\omega')$$
$$\omega' = \omega - 0{,}011$$
$$\alpha = \alpha_c(1 + F)$$
$$F = F^* + \omega' F_1$$
$$F^* = -0{,}34351t - 0{,}10985t^2 - 0{,}02517t^3$$
$$F_1 = -1{,}45708t + 0{,}58187t^2 + 0{,}58796t^3$$
$$t = (T_r - 1)/T_r$$
$$\alpha_c = 4{,}934/[1 - 0{,}27808\omega' + 0{,}02656(\omega')^2]$$
$$\gamma = \gamma_c + \gamma_1(T_r - 1)$$
$$\gamma_c = 0{,}38895 + 0{,}73478\omega'$$
$$\gamma_1 = 0{,}30587 - 1{,}23208\omega'$$
$$\delta = \delta_c + (\delta_1/\eta_c)(T_r - 1)$$
$$\delta_c = \gamma_c/\eta_c - (0{,}20848/\eta_c^2)\omega'$$
$$\delta_1 = 0{,}35669 + 0{,}08032\omega'$$
$$\eta_c = \beta_c / 0{,}26126$$

vdW-Adachi-Lu (vdWAL) [2]

$$p = RT/(v-b) - a/v^2$$
$$a = \Omega_a R^2 T_c^2 / p_c$$
$$\Omega_a = (27/64)10^{m(1-T_r)}$$
$$m = 0{,}228165 + 0{,}791981\omega - 0{,}648552\omega^2 + 0{,}654505\omega^3$$
$$b = (1/8)RT_c / p_c$$

vdW-711 [126]

$$p = RT/(v+t-b) - a/(v+t)^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}48553 + 1{,}62400\omega - 0{,}21884\omega^2$$
$$a_c = (27/64)R^2T_c^2/p_c$$
$$b = (1/8)RT_c/p_c$$
$$t = t_0 + (t_c - t_0)\exp(\beta|1 - T_r|)$$
$$t_0 = (0{,}03901 + 0{,}04451\omega - 0{,}0227\omega^2)RT_c/p_c$$
$$t_c = (3/8 - Z_c)RT_c/p_c$$
$$\beta = -12{,}07 + 9{,}35\omega - 29{,}92\omega^2$$

CCOR [54]

$$p = RT(1 + 0{,}77b/v)/(v - 0{,}42b) + c^R(0{,}055RTb/v)/(v - 0{,}42b) - a/[v(v+c)] - bd/[v(v+c)(v - 0{,}42b)]$$
$$c^R = \begin{cases} 24{,}863\omega - 33{,}368\omega^2 + 57{,}266\omega^3 & , \omega \geq 0 \\ 0 & , \omega < 0 \end{cases}$$
$$a = \alpha\Omega_a R^2T_c^2/p_c$$
$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$
$$c = \gamma\Omega_c RT_c/p_c$$
$$d = \Omega_d R^2T_c^2/p_c$$
$$\Omega_a = 0{,}42\Omega_b\Omega_c + \Omega_c + (0{,}77 + 0{,}055c^R)\Omega_b + 3Z_c^2$$
$$\Omega_b = 0{,}4756 - 3{,}396Z_c + 8{,}236Z_c^2$$
$$\Omega_c = 0{,}42\Omega_b + 1 - 3Z_c$$
$$\Omega_d = [(0{,}77 + 0{,}055c^R)\Omega_b\Omega_c + 0{,}42\Omega_a\Omega_b - Z_c^3]/\Omega_b$$
$$Z_c = 0{,}291 - 0{,}08\omega$$
$$\alpha = \begin{cases} [1 + A_1(1/T_r^{0,25} - 1) - A_2(1 - T_r^2)]^2 & , T_r \leq 1 \\ \exp[A_3(T_r - 1) - A_4(T_r^{0,5} - 1)] & , T_r > 1 \end{cases}$$
$$\gamma = \exp[C_1(1 - T_r^{C_2})]$$
$$A_1 = 2{,}66709 + 5{,}61328\omega - 2{,}65333\omega^2 - 0{,}01148(\mu^*)^2$$
$$A_2 = 0{,}18471 + 0{,}38357\omega - 0{,}32706\omega^2 - 0{,}002078(\mu^*)^2$$
$$A_3 = 0{,}38349 + 4{,}88359\omega + 14{,}2113\omega^2$$
$$A_4 = 1{,}17543 + 14{,}3109\omega + 30{,}5032\omega^2$$
$$C_1 = 7{,}04333 - 5{,}00422\omega + 1{,}88597\omega^2$$
$$C_2 = 0{,}23177 + 0{,}16896\omega + 0{,}03179\omega^2$$
$$(\mu^*)^2 = \mu^2/(9{,}8694 \cdot 10^{-5} R^2T_c^2/p_c)$$

vdWAL-Watson-Cascella-May-Salerno-Tassios (vdWALWCMST) [126]

$$p = RT/(v-b) - a/v^2$$
$$a = \Omega_a R^2T_c^2/p_c$$
$$\Omega_a = (27/64)10^{m(1-T_r)}$$
$$m = 0{,}23489 + 0{,}67662\omega - 0{,}13832\omega^2$$
$$b = (1/8)RT_c/p_c$$

Kubic (K) [74]

$$p = RT/v + 1{,}19cbRT/[v(v-0{,}42b)] - a/(v+d)^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = (\alpha^0 + \omega\alpha^1)/(0{,}481207 + 0{,}100\omega)$$
$$\alpha^0 = 0{,}330 + 0{,}1385/T_r + 0{,}0121/T_r^2 + + 0{,}000607/T_r^7$$
$$\alpha^1 = -0{,}331/T_r + 0{,}423/T_r^2 + 0{,}008/T_r^7$$
$$a_c = \Omega_a R^2 T_c^2/p_c$$
$$\Omega_a = 0{,}49939 + 0{,}09131\omega + 0{,}0605\omega^2 - - 0{,}6049\omega^3 + 0{,}43367\omega^4$$
$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$
$$\Omega_b = 0{,}13735 - 0{,}19437\omega - 0{,}0390\omega^2 + + 0{,}2015\omega^3 - 0{,}0996\omega^4$$
$$c = 1 + 1{,}7124\omega + 3{,}0195\omega^2$$
$$d = \delta d_c$$
$$\delta = \delta^0 + \omega\delta^1 + \omega^{3/2}\delta^2$$
$$\delta^0 = 1{,}07892 - 1{,}17601/T_r + 1{,}31388/T_r^2 - - 0{,}21846/T_r^3 + 0{,}00167/T_r^8$$
$$\delta^1 = 5{,}50831 - 13{,}53906/T_r + 9{,}63301/T_r^2 - - 1{,}6442/T_r^3 + 0{,}04194/T_r^8$$
$$\delta^2 = 2{,}23061 - 2{,}97690/T_r + 1{,}81552/T_r^2 - - 1{,}02142/T_r^3 - 0{,}04781/T_r^8$$
$$d_c = \Omega_d RT_c/p_c$$
$$\Omega_d = 0{,}030195 + 0{,}03310\omega - 0{,}00142\omega^2 + + 0{,}05023\omega^3 - 0{,}03459\omega^4$$

Twu (T) [121]

$$Z = 1 + [A_1 + A_2/T^* + A_3/(T^*)^2 + A_4/(T^*)^3 + + A_5/(T^*)^5]y + (A_6 + A_7/T^*)y^2 + A_8 y^3 + + [A_9/(T^*)^3 + A_{10}/(T^*)^4 + A_{11}/(T^*)^5]y^2 \exp(-A_{16}y^2) + [A_{12}/(T^*)^3 + A_{13}/(T^*)^4 + + A_{14}/(T^*)^5]y^4 \exp(-A_{16}y^2) + (A_{15}/T^*)y^5 + + (\alpha-1)y[3 + (\alpha+2)y - (5\alpha+1)y^2]/ (1-y)^3 - 3(\alpha-1)y + (\alpha^{0,25} - 1)[-0{,}533057 + + 4{,}66792\exp(1{,}29996/T^*)]y$$
$$\ln(\alpha) = -0{,}177568 + 0{,}00113026T_b[R]$$
$$A_i = \alpha C_{0,i} + (\alpha^{0,25} - 1)C_{p,i} \quad , \quad i = 1{,}16$$
$$y = \rho V_\sigma$$
$$V_\sigma = 0{,}166076 v_c$$
$$T^* = T/(\varepsilon/\kappa)$$
$$(\varepsilon/\kappa) = T_c/(1{,}22599 + 0{,}000122682T_c)$$

Yu-Lu (YL) [129]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+c) + b(3v+c)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\log(\alpha) = \begin{cases} m(0{,}536843 - 0{,}39244T_r + + 0{,}26507T_r^2)(1-T_r) & , \omega \le 0{,}49 \\ m(0{,}79355 - 0{,}53409T_r + + 0{,}37273T_r^2)(1-T_r) & , 0{,}49 \le \omega \le 1 \end{cases}$$
$$m = \begin{cases} 0{,}406846 + 1{,}87907\omega - 0{,}79263\omega^2 + + 0{,}737519\omega^3 & , \omega \le 0{,}49 \\ 0{,}581981 - 0{,}171416\omega + 1{,}84441\omega^2 - 1{,}19047\omega^3 & , 0{,}49 \le \omega \le 1 \end{cases}$$
$$a_c = \Omega_{ac} R^2 T_c^2/p_c$$
$$\Omega_{ac} = 0{,}468630 - 0{,}0378304\omega + 0{,}00751969\omega^2$$
$$b = \Omega_{bc} RT_c/p_c$$
$$\Omega_{bc} = 0{,}0892828 - 0{,}0340903\omega - 0{,}00518289\omega^2$$
$$c = \Omega_{cc} RT_c/p_c$$
$$\Omega_{cc} = (1{,}70083 + 0{,}648463\omega + 0{,}895926\omega^2 - - 3)\Omega_{bc}$$

Iwai-Margerum-Lu (IML) [60]

$$p = RT/(v-b) - a/[v^2 - ub(v-b)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$a_c = \Omega_{ac} R^2 T_c^2/p_c$$
$$\Omega_{ac} = (1 + u\beta_c - u\beta_c^2)^2 \xi_c/[(1-\beta_c)^2(2 + u\beta_c)]$$
$$u = 0{,}333/Z_c^2 - 1{,}95$$
$$u\beta_c^3 + 3\beta_c - 1 = 0$$
$$\xi_c = (1 - 2\beta_c)/[(1-\beta_c)^2(2 + u\beta_c)]$$
$$\alpha = \begin{cases} [1 + m(1 - T_r^{0,5})]/T_r^{0,4} & , T_r \ge 0{,}7 \\ [1 + m(1 - T_r^{0,5})]/(0{,}57667T_r^{0,8} + + 0{,}43352) & , T_r < 0{,}7 \end{cases}$$
$$m = 0{,}5275 - 0{,}209/Z_c + 1{,}31\omega - 0{,}25\omega^2$$
$$b = \Omega_b RT_c/p_c$$
$$\Omega_b = \beta_c \xi_c$$

Modifikovana RKS (MRKS) [109]

$$p = RT/(v-b) - a/[v(v+b)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = 1 + m(1 - T_r) + n(1 - T_r^{0,5})^2$$
$$m = 0{,}484 + 1{,}515\omega - 0{,}044\omega^2$$
$$n = 2{,}756m - 0{,}700$$
$$a_c = 0{,}42747R^2T_c^2/p_c$$
$$b = 0{,}08664RT_c/p_c$$

Modifikovana vdW-711 (MvdW-711) [7]

$$p = RT/(v+t-b) - a/(v+t)^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}48553 + 1{,}62400\omega - 0{,}21884\omega^2$$
$$a_c = (27/64)R^2T_c^2/p_c$$
$$b = (1/8)RT_c/p_c$$
$$t = t_0 + (t_c - t_0)\exp(\beta|1 - T_r|)$$
$$t_0 = (0{,}03479 + 0{,}09370\omega - 0{,}16606\omega^2 + 0{,}12499\omega^3)RT_c/p_c$$
$$t_c = (3/8 - Z_c)RT_c/p_c$$
$$\beta = -7{,}35356 - 24{,}5176\omega + 9{,}19829\omega^2$$
$$Z_c = 0{,}2890 - 0{,}0701\omega - 0{,}0207\omega^2$$

t-vdW [81]

$$p = RT/(v+t-b) - a/(v+t)^2$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + m(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$m = 0{,}483798 + 1{,}643232\omega - 0{,}288718\omega^2 + 0{,}066013\omega^3$$
$$a_c = (27/64)R^2T_c^2/p_c$$
$$b = (1/8)RT_c/p_c$$
$$t = t_0 + (t_c - t_0)\exp(\beta|1 - T_r|)$$
$$t_0 = (0{,}036722 + 0{,}063541\omega - 0{,}076221\omega^2 + 0{,}060362\omega^3 - 0{,}015772\omega^4)RT_c/p_c$$
$$t_c = (3/8 - Z_c)RT_c/p_c$$
$$\beta = -7{,}099630 - 21{,}156900\omega$$
$$Z_c = 0{,}2890 - 0{,}0701\omega - 0{,}0207\omega^2$$

t-PR [81]

$$p = RT/(v+t-b) - a/[(v+t)(v+t+b) + b(v+t-b)]$$
$$a = \alpha a_c$$
$$\alpha = [1 + \kappa(1 - T_r^{0,5})]^2$$
$$\kappa = 0{,}384401 + 1{,}52276\omega - 0{,}213808\omega^2 + 0{,}034616\omega^3 - 0{,}001976\omega^4$$
$$a_c = 0{,}45724R^2T_c^2/p_c$$
$$b = 0{,}07780RT_c/p_c$$
$$t = t_0 + (t_c - t_0)\exp(\beta|1 - T_r|)$$
$$t_0 = (-0{,}014471 + 0{,}067498\omega - 0{,}084852\omega^2 + 0{,}067298\omega^3 - 0{,}017366\omega^4)RT_c/p_c$$
$$t_c = (0{,}3074 - Z_c)RT_c/p_c$$
$$\beta = -10{,}244700 - 28{,}631200\omega$$
$$Z_c = 0{,}2890 - 0{,}0701\omega - 0{,}0207\omega^2$$

Dohrn-Prausnitz (DP) [33]

$$p = RT(1 - \eta + \eta^2 - \eta^3)/[v(1-\eta)^3] - 4a\eta(1 - 1{,}41\eta + 5{,}07\eta^2)/(vb)$$
$$\eta = b/(4v)$$
$$a = a_c[a^{(1)}\tanh(a^{(2)}|T_r - 1|^{0,7}) + 1]$$
$$a_c = 0{,}550408R^2T_c^2/p_c$$
$$a^{(1)} = 0{,}367845 + 0{,}055966\omega$$
$$a^{(2)} = (-1)^m(0{,}604709 - 0{,}008477\omega)$$
$$b = b_c\{b^{(1)}\tanh[b^{(2)}|\ln(T_r)|^{0,8}] + 1\}$$
$$b_c = 0{,}187276RT_c/p_c$$
$$b^{(1)} = 0{,}356983 - 0{,}190003\omega$$
$$b^{(2)} = (-1)^m(1{,}37 - 1{,}898981\omega)$$
$$m = \begin{cases} 0 & , \quad T_r < 1 \\ 1 & , \quad T_r \geq 1 \end{cases}$$

Tabela D1. Vrednosti konstanti u RK–Redlich–Ackerman–-Gunn–Jacobson–Lau jednačini stanja
Table D1. The values of the constants in the RK-Redlich-Ackerman-Gunn-Jacobson-Lau equation of state

i	A_i	B_i	C_i	D_i	E_i
1	0,035	0,00260913	0,825714	0,000002779	0,1068
2	14137,6	3,19325	0,00736587	1,1	0,001
3	1397,124	1,77486	0,00255204	0,002	0,02408
4	1,030	0,434418	0,00115729		0,01124
5	13,440	0,144392	0,101212		0,00001
6		0,00704658	2,46596		0,001686
7		616,830	0,220411		0,0000001
8		1,00122	0,0161963		0,698
9		0,0112141			0,84
10		0,0495574			1,0
11		0,000442593			0,090
12		0,0602768			0,1
13					1,1

Tabela D2. Vrednosti konstanti u BWR–Cooper–Goldfrank jednačini stanja
Table D2. The values of the constants in the BWR-Cooper-Goldfrank equation of state

Konstanta	Ugljovodonici	Neugljovodonici
$A_0'(0)$	1,1131242	0,31390533
$A_0'(1)$	–4,4503013	–0,25774366
$B_0'(0)$	0,77360640	0,12574497
$B_0'(1)$	–3,4350777	–0,089456807
$C_0'(0)$	0,23665420	0,15528039
$C_0'(1)$	–0,28829665	0,16083607
$a'(0)$	–0,032626908	0,0065347998
$a'(1)$	0,54684726	0,34829345
$a'\alpha'(0)$	0,00013322287	0,000060214118
$a'\alpha'(1)$	–0,00017431974	0,00027002320
$b'(0)$	–0,029927970	0,018777340
$b'(1)$	0,42060570	0,17069197
$c'(0)$	0,076608062	0,025883484
$c'(1)$	–0,08360214	0,18070543
$\gamma'(0)$	0,066066640	0,056679976
$\gamma'(1)$	–0,12791626	0,0058800768

Tabela D3. Vrednosti konstanti u RK–Gray–Rent–Zudkevitch jednačini stanja
Table D3. The values of the constants in the RK-Gray-Rent-Zudkevitch equation of state

i	D_i	i	D_i	i	D_i
1	–0,04666626	3	–41,76451266	5	12,55135462
2	–0,11386032	4	40,47298767	6	–12,55831122

Tabela D4. Vrednosti konstanti u Twu jednačini stanja
Table D4. The values of the constants in the Twu equation of state

i	$C_{0,i}$	$C_{p,i}$	i	$C_{0,i}$	$C_{p,i}$
1	2,50237	–4,45882	9	20,9891	–4,59774
2	–7,26961	11,4219	10	24,7385	–122,607
3	–4,53091	10,5946	11	–36,2897	89,3800
4	–1,52573	–12,3670	12	–207,769	3468,38
5	0,379606	–2,30649	13	1152,76	–3353,48
6	5,36243	–73,5997	14	246,496	2739,24
7	–2,86832	39,9560	15	229,899	–826,190
8	15,2887	–317,485	16	31,6711	

LITERATURA

[1] Abbot, M.M., AIChE J., **19**, 596(1973)

[2] Adachi, Y., Lu, B.C.–Y., AIChE J., **30**, 991(1984)

[3] Adachi, Y., Lu, B.C.–Y., Sugie, H., Fluid Phase Equilibria, **11**, 29(1983)

[4] Adachi, Y., Sugie, H., Lu, B.C.–Y., J.Chem.Eng.Japan, **17**, 624(1980)

[5] Albright, L.F., Martin, J.J., Ind.Eng.Chem., **44**, 188(1952)

[6] Ambrose, D., Counsell, J.F., Lawrenson, I.J., Lewis, G.B., J. Chem. Thermodynamics, **10**, 1033(1978)

[7] Androulakis, I.P., Kalospiros, N.S., Tassios, D.P., Fluid Phase Equilibria, **45**, 135(1989)

[8] Babb, S.E.Jr., Robertson, S.L., J. Chem. Phys., **53**, 1097 (1970)

[9] Barner, H.E., Adler, S.B., Ind.Eng.Chem. Fundamentals, **9**, 521(1970)

[10] Barner, H.E., Pigford, R.L., Schreiner, W.C., Proc. Am. Petrol.Inst., **26**, 244(1966)

[11] Beattie, J.A., J.Am.Chem.Soc., **46**, 342(1924)

[12] Beattie, J.A., Bridgeman, O.C., J. Am. Chem. Soc., **49**, 1665(1927)

[13] Beattie, J.A., Ouslin, D.R., Levine, S.W., J. Chem. Phys., **20**, 1619(1952)

[14] Beattie, J.A., Ingersoll, H.G., Stockmayer, W.H., J. Am. Chem.Soc., **64**, 548(1942)

[15] Beattie, J.A., Marple, S.Jr., J.Am. Chem. Soc., **72**, 4143(1950)

[16] Beattie, J.A., Marple, S.Jr., Edwards, D.G., J.Chem.Phys., **18**, 127(1950)

[17] Behar, E., Simonet, R., Rauzy, E., Fluid Phase Equilibria, **21**, 237(1985)

[18] Belzile, J.L., Kaliaguine, S., Ramahlo, R.S., Can.J.Chem.Eng., **54**, 446(1976)

[19] Benedict, M., Webb, G.B., Rubin, L.C., J.Chem.Phys., **8**, 334(1940)

[20] Benning, A.F., McHarness, R.C., Ind.Eng.Chem., **32**, 698(1940)

[21] Berthelot, D., J.phys., **8**, 263(1899)

[22] Bishnoi, P.R., Miranda, R.D., Robinson, D.B., Hydrocarbon Proc., **53** (11), 197(1974)

[23] Brown, J.A., Mears, W.H., J.Phys.Chem., **62**, 960(1958)

[24] Brule, M.R., Lin, C.T., Lee, L.L., Starling, K.E., AIChE J., **28**, 616(1982)

[25] Buffington, R.M., Gilkey, W.K., Ind.Eng.Chem., **23**, 254(1931)

[26] Carnahan, N.F., Starling, K.E., AIChE J., **18**, 1184(1972)

[27] Chaudron, J., Asselineau, L., Renon, H., Chem.Eng.Sci., **28**, 839(1973)

[28] Clausius, R., Ann.Phys.Chem., **9**, 337(1880)
[29] Cooper, H.W., Goldfrank, J.C., Hydrocarbon Proc., **46** (12), 141(1967)
[30] Day, H.O., Felsing, W.A., J.Am.Chem.Soc., **74**, 1951(1952)
[31] Dieterici, C., Ann.Phys., **69**, 685(1899)
[32] Dieterici, C., Ann.physik., **5**, 51(1901)
[33] Dohrn, R., Prausnitz, J.M., Fluid Phase Equilibria, **63**, 53(1990)
[34] Douslin, D.R., Harrison, R.H., J.Chem.Thermodynamics, **5**, 491(1973)
[35] Douslin, D.R., Harrison, R.H., J.Chem.Thermodynamics, **8**, 301(1976)
[36] Douslin, D.R., Harrison, R.H., Moore, R.T., McCullough, J.P., J.Chem.Phys., **35**, 1357(1961)
[37] Douslin, D.R., Moore, R.T., Dawson, J.P., Waddington, G., J.Am.Chem.Soc., **80**, 2031(1958)
[38] Douslin, D.R., Moore, R.T., Waddington, G., J.Phys.Chem., **63**, 1959(1959)
[39] Edmister, W.C., Vairogs, J., Klekers, A.J., AIChE J., **14**, 479(1968)
[40] Farrington, P.S., Sage, B.H., Ind.Eng.Chem., **41**, 1734 (1949)
[41] Felsing, W.A., Watson, G.M., J.Am.Chem.Soc., **65**, 780 (1943)
[42] Felsing, W.A., Watson, G.M., J.Am.Chem.Soc., **65**, 1889 (1943)
[43] Freze, R., Chevalier, J.–L., Peneloux, A., Rauzy, E., Fluid Phase Equilibria, **15**, 33(1983)
[44] Fuller, G.G., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **15**, 254(1976)
[45] Gehring, M., Lentz, H., J.Chem.Thermodynamics, **9**, 4 4 5 (1977)
[46] Gehring, M., Lentz, H., J.Chem.Thermodynamics, **11**, 291 (1979)
[47] Gornowski, E.J., Amick, E.H., Hixson, A.N., Ind.Eng.Chem., **39**, 1348(1947)
[48] Graboski, M.S., Daubert, T.E., Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., **17**, 443(1978)
[49] Gray, R.D. Jr., Rent, N.H., Zudkevitch, D., AIChE J., **16**, 991(1970)
[50] Grozdanić, D.K., Hem.ind., **52**, 93(1998)
[51] Grozdanić, D.K., Hem.ind., **52**, 143(1998)
[52] Grozdanić, D.K., Hem.ind., **53**, 8(1999)
[53] Grozdanić, D.K., Hem.ind., **53**, 89(1999)
[54] Guo, T.–M., Kim, H., Lin, H.– M., Chao, K.–C., Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., **24**, 764(1985)
[55] Harmens, A., Knapp, H., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **19**, 291(1980)
[56] Heichelheim, H.R., Kobe, K.A., Silberberg, I.H., McKetta, J.J., J.Chem.Eng. Data, **7**, 507(1962)
[57] Hsu, C.C., McKetta, J.J., J.Chem.Eng.Data, **9**, 45(1964)
[58] Isaac, R., Li, K., Canjar, L.N., Ind.Eng.Chem., **46**, 199 (1954)
[59] Ishikawa, T., Chung, W.K., Lu, B.C.–Y., AIChE J., **26**, 372(1980)
[60] Iwai, Y., Margerum, M.R., Lu, B.C.–Y., Fluid Phase Equilibria, **42**, 21(1988)
[61] Joffe, J., J.Am.Chem.Soc., **69**, 540(1947)
[62] Jovanović, J.D., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 390(1997)
[63] Jovanović, J.D., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 429(1997)
[64] Jovanović, J.D., Knežević–Stevanović, A.B., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 283(1997)
[65] Kato, M., Chung, W.K., Lu, B.C.–Y., Can.J.Chem.Eng., **55**, 701 (1977)
[66] Keller, R.M.Jr., Stiel, L.I., J.Chem.Eng.Data, **22**, 241(1977)
[67] Kelso, E.A., Felsing, W.A., Ind.Eng.Chem., **34**, 161(1942)
[68] Kelso, E.A., Felsing, W.A., J.Am.Chem.Soc., **62**, 3132(1940)
[69] Kijevčanin, M.Lj., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **50**, 155 (1996)
[70] Kijevčanin, M.Lj., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 1(1997)
[71] Kijevčanin, M.Lj., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 124 (1997)
[72] Kijevčanin, M.Lj., Grozdanić, D.K., Hem.ind., **51**, 195 (1997)
[73] Kubic, W.L., Fluid Phase Equilibria, **9**, 79(1982)
[74] Kubic, W.L., Fluid Phase Equilibria, **31**, 35(1986)
[75] Kumar, K.H., Starling, K.E., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **21**, 255(1982)
[76] Lee, B.–I., Edmister, W.C., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **10**, 32(1971)
[77] Lee, B.–I., Erbar, J.H., Edmister, W.C., AIChE J., **19**, 349(1973)
[78] Lee, B.–I., Kesler, M.G., AIChE J., **21**, 510(1975)
[79] Lin, D.C.–K., Silberberg, I.H., McKetta, J.J., J.Chem. Eng. Data, **15**, 483(1970)
[80] Lo, H.Y., Stiel, L.I., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **8**, 713 (1969)
[81] Magoulas, K., Tassios, D.P., Fluid Phase Equilibria, **56**, 119 (1990)
[82] Mears, W.H., Rosenthal, E., Sinka, J.V., J.Chem.Eng.Data, **11**, 338(1966)
[83] Michels, A., Geldermans, M., Physica, **9**, 967(1942)
[84] Munoz, F., Reich, R., Fluid Phase Equilibria, **13**, 171(1983)
[85] Nishiumi, H., J.Chem.Eng.Japan, **13**, 74(1980)
[86] Nishiumi, H., Saito, S., J.Chem.Eng.Japan, **8**, 356(1975)
[87] Olds, R.H., Reamer, H.H., Sage, H.B., Lacey, W.N., Ind.Eng.Chem., **35**, 922(1943)
[88] Olds, R.H., Reamer, H.H., Sage, B.H., Lacey, W.N., Ind.Eng.Chem., **36**, 282(1944)
[89] Patel, N.C., Teja, A.S., Chem.Eng.Sci., **37**, 463(1982)
[90] Peneloux, A., Rauzy, E., Freze, R., Fluid Phase Equilibria, **8**, 7(1982)
[91] Peng, D.–Y., Robinson, D.B., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **15**, 59(1976)
[92] Petty, L.B., Smith, J.B., Ind.Eng.Chem., **47**, 1258(1955)
[93] Reamer, H.H., Olds, R.H., Sage, B.H., Lacey, W.H., Ind.Eng.Chem., **36**, 956(1944)
[94] Reamer, H.H., Sage, B.H., Lacey, W.N., Ind.Eng.Chem., **41**, 482(1949)
[95] Redlich, O., Ackerman, F.J., Gunn, R.D., Jacobson, M., Lau, S., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **4**, 369(1965)
[96] Redlich, O., Dunlop, A.K., Chem.Eng.Prog.Symp.Ser., **59**(44), 95(1963)
[97] Redlich, O., Kwong, J.N.S., Chem.Rev., **44**, 233(1949)
[98] Robertson, S.L., Babb, S.E.Jr., J, Chem.Phys., **51**, 1357 (1969)
[99] Sage, B.H., Lacey, W.N., Ind.Eng.Chem., **30**, 673(1938)
[100] Sage, B.H., Lacey, W.N., Ind.Eng.Chem., **34**, 730(1942)
[101] SBANKA, Računski centar, Tehnološko–metalurški fakultet, Beograd 1996.
[102] Schmidt, G., Wenzel, H., Chem.Eng.Sci., **35**, 1503(1980)
[103] Skamenca, D.G., Tassios, D.P., Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., **10**, 59(1971)
[104] Simonet, R., Behar, E., Chem.Eng.Sci., **31**, 37(1976)
[105] Singh, R.P., Kudchadker, A.P., J.Chem.Thermodynamics, **11**, 205 (1979)
[106] Smith, L.B., Beattie, J.A., Kay, W.C., J.Am.Chem.Soc., **59**, 1587(1937)
[107] Soave, G., Chem.Eng.Sci., **27**, 1197(1972)
[108] Soave, G., Chem.Eng.Sci., **39**, 357(1984)
[109] Soave, G., Fluid Phase Equilibria, **84**, 339(1993)
[110] Starling, K.E., Han, M.S., Hydrocarbon Proc., **51**(5), 129 (1972)
[111] Starling, K.E., Powers, J.E., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **9**, 531(1970)
[112] Su, G.–J., Chang, C.–H., J.Am.Chem.Soc., **68**, 1080(1946)

[113] Su, G.–J., Viswanath, D.S., AIChE J., **11**, 205(1965)

[114] Sugie, H., Lu, B.C.–Y., Ind.Eng.Chem.Fundamentals, **9**, 428 (1970)

[115] Thomas, G.L., Young, S., J.Chem.Soc., **67**, 1071(1895)

[116] Thomas, R.H.P., Harrison, R.H., J.Chem.Eng.Data, **27**, 1 (1982)

[117] Trappeniers, N.J., Wassenaar, T., Abels, J.C., Physica, **98A**, 289(1979)

[118] Trebble, M.A., Bishnoi, P.R., Fluid Phase Equilibria, **35**, 1(1987)

[119] Tseng, J.K., Stiel, L.I., AIChE J., **17**, 1283(1971)

[120] Twu, C.H., Fluid Phase Equilibria, **11**, 65(1983)

[121] Twu, C.H., Fluid Phase Equilibria, **33**, 91(1987)

[122] van der Waals, Over de continuiteit van den gas – en vloeistoftoestand, Doctoral disseratation, Leiden 1873.

[123] Vogl, W.F., Hall, K.R., AIChE J., **16**, 1103(1970)

[124] Vohra, S.P., Kang, T.L., Kobe, K.A., McKetta, J.J., J.Chem.Eng.Data, **7**, 150(1962)

[125] Walters, C.J., Smith, J.M., Chem.Eng.Prog., **48**, 337(1952)

[126] Watson, P., Cascella, M., May, D., Salerno, S., Tassios, D., Fluid Phase Equilibria, **27**, 35(1985)

[127] Wilson, G.M., Adv.Cryog.Eng., **11**, 392(1966)

[128] Yamada, T., AIChE J., **19**, 286(1973)

[129] Yu, J.–M., Lu, B.C.–Y., Fluid Phase Equilibria, **34**, 1(1987)

SUMMARY

A CRITICAL REVIEW OF RELATIONS FOR PREDICTING THE GAS DENSITY OF ORGANIC COMPOUNDS

(Review paper)

Dušan K. Grozdanić, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade

This paper presents some empirical relations (equations of state) for predicting the gas density of organic compounds. Sixty seven equation of state were tested with 7310 experimental points for 40 organic compounds.
The obtained results indicate that the BWR–Lee–Kesler equation of state is superior for all the organic substances investigated (1.89%).
The equation of state proposed by BWR–Lee–Kesler–Munoz–Reich (1.96%), BWRSP–Twu (2.70%), Sugie–Lu (2.77%), Joffe–Barner–Adler (2.89% with restriction $\nu_r > 0{,}6$), Adachi–Lu–Sugie (3.08%), PR–Yu–Lu (3.10%), BWR–Edmister–Vairogs–Klekers (3.18%), BWRSP–Brule–Lin–Lee–Starling (3.18%), Patel–Teja (3.20%), BWRSP–Starling–Han (3.31%), BWRSPSH–Nishiumi–Saito (3.55%), Trebble–Bishnoi (3.56%), Peng–Robinson (3.65%), Schmidt–Wenzel (3.78%) and Harmens–Knapp (3.98%) also can be successfully applied.

Key words: Normal boiling point • Critical temperature • Critical pressure • Critical molar volume • Acentric factor • Latent heat of vaporization at normal boiling point • Latent heat of vaporization • Vapor pressure • Liquid density at normal boiling point • Saturated liquid density • Liquid density • Gas density • Model and organic compound •