
基于熵溶解度参数修正的Peng-Robinson状态方程（eSPT-PR EoS）MDPI Liquids

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36227.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

基于熵溶解度参数修正的Peng-Robinson状态方程（eSPT-PR EoS）MDPI Liquids。论文标题：Entropy-Based Solubility Parameter-Translated Peng – Robinson Equation of State (eSPT-PR EoS)

论文链接：<https://www.mdpi.com/2673-8015/5/3/21>

期刊名：Liquids

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/liquids>

Peng-Robinson状态方程（PR EoS）因能精准预测纯物质及混合物相图，广泛应用于石油化工、超临界过程模拟，但存在关键缺陷——对液相密度预测偏差大，尤其水、甲醇等高级性物质在标准温压（SATP）下误差达20%左右。传统体积平移修正法（VT-PR EoS）虽能改善精度，却依赖实验密度数据，在缺乏数据或特殊工况下难以适用。

本文提出熵基溶解度参数平移 PR EoS（eSPT-PR EoS）解决这一问题：以熵基溶解度参数（eSP）为修正依据，eSP与经典Hildebrand溶解度参数线性关联，可描述气液多相及超临界单相体系。通过引入物质特异性常数C，关联eSP理论值与理想值，重新拟合PR EoS核心参数（ a_0 、 b_0 等）；更关键的是，发现C与临界压缩因子（ Z_c ）呈完美线性关系（ $C = -27.6704Z_c + 8.73306$ ， $R^2 = 1.0$ ），无需为每种物质单独拟合，大幅提升通用性。

对27种常见化学品（涵盖水、醇类、芳烃等）的验证显示：SATP下液相密度平均相对偏差（ARD）从原始PR EoS的~20%降至4.2%，临界密度ARD从21.8%降至3.9%；对比VT-PR EoS，无需依赖实验数据；与pc-SAFT EoS相比，虽气相密度预测稍逊，但液相精度相当，且保留PR EoS的工程简洁性。

该模型为石油加工、超临界萃取等领域提供了通用、精准的密度预测工具，尤其适用于缺乏实验数据的新体系，推动PR EoS在热力学模拟中的实用价值提升。

来源：Liquids

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发