Experimental Data Prediction of Acidic Gases Solubility in Ionic Liquids Using PR-EoS and SRK-EoS with Three Different Mixing Rules

Soran University (SUN)

By Shagul Muslih Ali

This Master's thesis discussion is arranged by SUN's Engineering faculty, Chimical Engineering Department (DCHE)

پۆختە

گرنگی ڕێگرتن لەکاریگەریی گازە خانوییەکان دەناسێتەوە کەزۆر بەرپرسیارە لەگۆڕانکاریە ناگەڕێتەوەکانی کەش و هەواو کاریگەریی نەرێنی لەسەر ژینگە، کەمبوونەوەی گازە ترشیەکان وەک ئۆکسیدی کاربۆن و سولفیدی هایدرۆجین لەڕووی کاریگەری ژینگەییەوە. توانەوەی گازە ترشییەکان لە کاتی گەشەکردندا کاریگەری لەسەر شلە ئایۆنییەکان هەبووە کە لە مێژوودا وەک چارەسەرکەرێکی نوێ بۆ هەردوو پرۆسەی جیاکردنەوە و کیمیایی بیری لێکراوەتەوە.

لەم تۆێژینەوەیەدا، پینگ ڕۆبنسن هاوکێشەکانی (PR-EoS) و سۆف ڕێدلیچ کونگ (SRK-EoS) بەکارهاتون لەگەڵ سێ یاسای تێکەڵکردنی جیاوازەوە کە بەکاردێت بۆ پێشبینیکردنی داتای چارەسەری تاقیکردنەوەی دوو گازی ترش، دوانەی ئۆکسیدی کاربۆن (CO2) و هایدرۆجین سولفید (H2S) لە نۆزدە شلەی ئایۆنی. داتای توانەوە لەتۆێژینەوەکانی پێشوتر وەرگیراون لە مەودای پەستان (65.2-0.608) bar و مەودای راستی پلەی گەرما (298.2-363.15) K یاسای میکسینگ بەدەست هات، فان دێر والّ (MR1) و کوادراتیک (MR2) و وۆنگ ساندلەر (MR3) بەکارهێنا. تایبەتمەندیە گرنگەکانی شلە ئایۆنیەکان بە تەکنیکی Lydersen-Joback-Reid دۆزیمانەوە. تێکڕای لادانی ڕێژەی ڕەها (AARD٪) جێبەجێکرا بۆ بەراوردکردنی داتای تاقیکاری و کە لە مۆدێلەکەوە بەدەست هاتووە. تایبەتمەندییە ڕەخنەییە هەڵسەنگێنراوەکان ئەنجامێکی زۆر نزیک دەدەن بەتۆێژینەوەکە. مۆدێلی بیرکاری لە نزیکەی سیستەمەکان بە بەکارهێنانی سێ یاسای تێکەڵکردن ڕێکەوتنێکی باش دەدات لەگەڵ داتای تاقیکاری تەنها لە سیستەمی H2S - ILS نەبێت لادانی زۆر بەرز دەدات لە داتای تاقیکاری لەکاتی بەکارهێنانی MR3. یاسای تێکەڵکردنی MR2) quadratic) باشترین ئەنجامی هەبوو بە بەراورد لەگەڵ MR1 و MR3، کەمترین مەودای ٪1 AARD بۆ 21 بۆ PR-EoS. وە هەروەها، بۆ SRK-EoS کەمترین مەودای ٪AARD بە بەراورد لەگەڵ ئەوانی تر بوو، کە 1 بۆ 24 دەبەخشێت لە AARD٪ . MR2 بۆ H2S لە SRK-EoS بەرزتر بوولە MR3 بە بەراورد لەگەڵ یاساکانی تری تێکەڵکردن.

الملخص

يدرك أهمية منع ظاهرة الاحتباس الحراري ، المسؤولة جدا عن التغيرات المناخية التي لا رجعة فيها والآثار السلبية على البيئة ، وقد حظي الحد من الغازات الحمضية مثل ثاني أكسيد الكربون وكبريتيد الهيدروجين بالكثير من الاهتمام من حيث الآثار البيئية. كان لذوبان الغازات الحمضية أثناء النمو تأثير على السوائل الأيونية ، والتي كان يعتقد تاريخيا أنها مذيبات جديدة لكل من عمليات الفصل والعمليات الكيميائية.

في هذه الدراسة ، ترتبط معادلات Peng-Robinson للحالة (PR-EoS) و Soave Redlich Kwong (SRK-EoS) بثلاث قواعد خلط مختلفة تستخدم للتنبؤ ببيانات الذوبان التجريبية لغازين حمضيين ، ثاني أكسيد الكربون (CO2) وكبريتيد الهيدروجين (H2S) في تسعة عشر سائلا أيونيا. م الحصول على بيانات الذوبان من أدبيات مختلفة في نطاق الضغط (65.2-0.608) بار ونطاق درجات الحرارة الحقيقية (298.2 - 363.15) K. قواعد الخلط ، استخدمت Van der Waal المعدلة (MR1) ، التربيعية (MR2) و (MR3) Wong Sandler). تم ربط الخصائص الحرجة للسوائل الأيونية بواسطة تقنية Lydersen-Joback-Reid المعدلة. تم تطبيق متوسط الانحراف النسبي المطلق (٪ AARD) لمقارنة البيانات التجريبية وتلك التي تم الحصول عليها من النموذج. الخصائص الحرجة التي تم تقييمها تعطي نتيجة قريبة جدا مع الأدبيات. يعطي النموذج الرياضي في الأنظمة تقريبا التي تستخدم قاعدة الخلط الثلاثة توافقا جيدا مع البيانات التجريبية فقط في أنظمة H2S ILs - يعطي انحرافا عاليا جدا عن البيانات التجريبية عند استخدام MR3. كانت قاعدة الخلط التربيعي (MR2) هي الأفضل مقارنة مع MR1 و MR3 ، حيث تعطي أقل نطاق٪ 1 AARD إلى 21 ل PR-EoS. وأيضا ، بالنسبة لشاروخان ، كان الحد الأدنى للنطاق من ٪ AARD في MR2 مقارنة بالآخرين ، مما يعطي 1 إلى 24. كان AARD٪ ل H2S في SRK-EoS أعلى في MR3 مقارنة بقواعد الخلط الأخرى.

Abstract

Recognizes the importance of preventing the greenhouse effect, which is too responsible for irreversible climatic changes and negative effects on the environment, the reduction of acidic gases such as carbon dioxide and hydrogen sulfide has been getting a lot of attention in terms of environmental impacts. The solubility of acidic gases during the growth has had an impact on ionic liquids, which have historically been thought of as novel solvents for both separations and chemical processes.

In this study, Peng-Robinson equations of state (PR-EoS) and Soave Redlich Kwong (SRK-EoS) are associated with three different mixing rules used to predict the experimental solubility data of two acid gases, carbon dioxide (CO2) and hydrogen sulfide (H2S) in nineteen ionic liquids. The solubility data were obtained from different literature in pressure range (0.608–65.2) bar and verity range of temperatures (298.2 – 363.15) K. Mixing rules, used the modified Van der Waal (MR1), the Quadratic (MR2) and the Wong Sandler (MR3). The ionic liquids critical properties were correlated by modified Lydersen-Joback-Reid technique. The Average Absolute Relative Deviation (%AARD) was applied to compare the experimental data and that obtained from the model. The evaluated critical properties give a very close result with the literature. The mathematical model in almost systems using the three mixing rule gives good agreement with experimental data only in H2S - ILs systems gives very high deviation from the experimental data when use MR3. Quadratic mixing rule (MR2) was the best comparing with MR1 and MR3, give the lowest range %AARD 1 to 21 for PR-EoS. and also, for SRK the minimum range of %AARD was in MR2 compare to the others, which gives 1 to 24. The %AARD for H2S in SRK-EoS was higher in MR3 compare to the other mixing rules.

ئەندامانی لیژنەی تاوتێکردن

ناو	نازناوی زانستی	زانکۆ	پلەی ئەندامیەتی
پ. د. عبدالمنعم عباس کریم	پرۆفیسۆر	دیالە	سەرۆک لیژنە
پ.د. ایسر طالب جارالله	پرۆفیسۆر	تکریت	ئەندام
پ. ی. د. بدیع عبدالله محمد	پرۆفیسۆری یاریدەدەر	سۆران	ئەندام
پ. ی. د. ارکان جاسم هادی	پرۆفیسۆری یاریدەدەر	سۆران	ئەندام و سەرپەرشتیار

About Soran University

Soran University (SUN) is located in the city of Soran, which is about a two-hour drive north-east of Erbil (Arbil, Hewlér), the capital of the Kurdistan Region of Iraq (KRIQ). The city is flanked by the famous Korek, Zozik, Henderén, and Biradost mountains. The medieval mountain village of Rewandiz (Rawanduz, ڕەواندز) is a stone-cast away, and the two cities share this lovely, harmonious upland. While waiting for its green, environmentally friendly building to be erected on a hilltop overlooking the cities of Soran and Rewandiz, its existing city campus has been meticulously set out to accommodate the lovely natural landscape. The new campus will be the first of its type, being walkable, balanced, powered by renewable energy, and compliant with all international environmental regulations. There are 5 Faculties in SUN; Faculty of Arts (FAAR), Faculty of Science (FSCN), Faculty of Education (FEDU), Faculty of Law, Political Science, and Management (FLAW/PSM), and Faculty of Engineering (FENG). Also, there is SUN research centre. Moreover, at SUN, there is a Language Center. SUN signed many Memoranda of Understandings (MoU) with many International Universities,

How to get here

Soran University (SUN) is located in the heart of the city of Soran. The main city campus is easily found on Google Maps for direction.