

## 状态方程模型

对于油, 气以及石油类应用而言, 一般是推荐使用 Peng-Robinson 状态方程。Hyprotech 对此状态方程模型的增强使其对于在一个更广泛范围内的众多体系变得精确。该模型能高度有效而可靠地对大多数的单相、两相和三相体系提供严格的解算。

各种状态方程及其特殊应用的表述都列入下表:

EOS	描述
GCEOS	该模型允许用户定义并运用自己定制的普遍化三次状态方程, 包括混合规则和体积转化
Kabadi Danner	这种方法是对原来的 SRK 状态方程法的改进, 改进了对水-烃体系的汽-液-液平衡, 特别是在稀溶液下的计算, 精度有所提高
Lee-Kesler Plocker	对于非极性的物质或其混合物, 该模型是最为精确的一般方法。
Peng-Robinson	该模型对计算汽-液平衡以及听类体系中液体的密度非常理想。经过对原始的 PR 模型的数处改动其适用范围拓宽了, 并且对某些非理想体系的预测也有所提升。但是如果遇到高度非理想体系, 还是推荐使用活度模型系的模拟方法。
PRSV	这是对 PR 状态方程做了 two-fold 改进 (two-fold modification), 以使其适用范围拓展到中度非理想体系。
SRK	在很多情况下, 该模型能提供(精度)不逊于 PR 模型的结果, 但其适用范围却明显的要小得多。对非理想体系, 该模型并不是很可靠。
Sour PR	综合了 PR 状态方程和 Wilson 的 API-Sour 模型以处理酸性水体系。
Sour SRK	综合了 Soave Redlich Kwong 状态方程和 Wilson 的 API-Sour 模型
Zudkevitch Joffee	是对 Redlich Kwong 状态方程的改进。此模型经改进可以更好的预测烃类体系和含氢体系的汽-液平衡。

## 活度模型

尽管状态方程模型已经证明在预测广泛操作条件下烃类流体的性质时是十分可靠的, 但其应用还是被限制在非极性或非极性组分上。高度非理想的体系使用活度模型时模拟的最好。

可用的活度模型物性包是可行的:

活度模型	描述
Chien Null	提供了以一对一的组分为基础, 使用现有的活度模型时的一个相互一致的框架。该模型下用户可以针对自己的例子为每对组分选择最恰当的活度模型。
Extended NRTL	这种 NRTL 模型的变型允许用户在定义组分的活度系数时输入 $A_{ij}$ , $B_{ij}$ , $C_{ij}$ , $Alp1_{ij}$ 及 $Alp2_{ij}$ 等参数的值。对下列体系可以使用该模型: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 各组分的沸点范围很宽。</li> <li>• 当用户需要对汽-液平衡和液-液平衡求联立解, 而体系中的各组分的沸点范围或浓度范围相差很大时。</li> </ul>
General NRTL	这种 NRTL 模型的变型允许用户选择方程的参数 $\tau$ 和 $\alpha$ 的方程形式。对下列体系可以使用该模型: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 各组分的沸点范围很宽。</li> <li>• 当用户需要对汽-液平衡和液-液平衡求联立解, 而体系中的各组分的沸点范围或浓度范围相差很大时。</li> </ul>
Margules	这是人们所开发出的第一个表现了超额吉布斯能 (Gibbs excess energy)。此方程并无任何理论的基础, 但对于快速估算和数据内插有用。
NRTL	这是 Wilson 方程的推广, 该模型使用了统计数学和液体池理论 (liquid cell theory) 以描述液体的结构。该理论可以模拟出汽-液平衡、液-液平衡以及汽-液-液平衡的状态。
UNIQUAC	该模型使用了统计数学和古根海姆 (Guggenheim) 的准化学理论来描述液体的结构。该理论模拟出的汽-液平衡、液-液平衡以及汽-液-液平衡数据精度可与 NRTL 模型相比, 但是不再需要一个非随机因子。
van Laar	此方程能够很好地符合众多体系, 特别是对 LLE (液-液平衡) 中的组分分布预测很好。相对于拉乌尔定律 (Raoult's Law) 表现出正负偏差的体系可以使用本模型, 但是该模型对活性系数的为最大或最小值的体系不能预测。因此对于含有卤代烃类和醇类组分的体系, 该模型的预测一般很不准确。
Wilson	这是第一个活度系数方程, 它使用了局部组成模型以推导出超额吉布斯能表达式。该模型提供了一种与热力学相一致的方法, 通过对二元平衡体系数据的回归对多元体系的状态作出预测。

## Chao Seader 和 Grayson Streed 模型

Chao Seader法和Grayson Streed法都是比较老的半经验的方法。Grayson Streed 关联式是基于对氢的特殊经验尔对Chao Seader 法的一种推广。HYSYS中仅使用由此类关联式产生的平衡数据，对于液体和气体的焓与熵则由Lee-Kesler法得出。

模型	描述
Chao Seader	对重质烃类可以使用此种方法, 适用条件: 压力小于绝压 10342 kPa (1500 psia), 温度范围为 -17.78 至 260 °C (0-500 °F)
Grayson Streed	推荐对氢含量很高的重质烃类体系使用此种方法。

## 蒸气压力模型

蒸气压力 - K值法模型可在低压下对理想混合物使用，“理想混合物”包括烃类体系如酮类和醇类的混合物等，这种情况下其液相装代基本上是理想的。此类模型也可用于对非理想体系的初步近似值。共有下列蒸气压力模型可用：

模型	描述
Antoine	此方法适用于在低压下表现出理想性质的体系。
Braun K10	这一模型对低压下的重质烃类体系严格适用。该模型采用了 Braun 强制收敛法，即，给出某组分的正常沸点，而后在体系的温度和 10 Psia(68.95 kPa)下计算得到其 K 值。
Esso Tabular	这一模型对低压下的烃类体系严格适用，它采用了一种经改进的 Maxwell- Bonnel 蒸气压力模型。

## 其他

“其他”这一组中的物性包都是很独特的因而不能归入上述4中划分中的物性包。

物性包	描述
Amine Pkg	含有由 D.B. Robinson 及其同事为其专利性的氨装置模拟器而开发的热力学模型 - AMSIM, 用户可以使用此物性包在 HYSYS 里对安装之做模拟。
ASME Steam	仅限于对一种组分,即H2O适用. 采用的是ASME 1967蒸汽表.
NBS Steam	仅限于对一种组分,即 H2O 适用. 利用的是 NBS 1984 蒸汽表.
MBWR	这是对最初的 Benedict/Webb/Rubin 方程的改进. 这个含有 32 项的状态方程模型仅对一套特殊的组分和操作条件适用。
OLI_Electrolyte	由OLI Systems Inc. 开发, 用于含有在水溶液中的相及反应的化学品体系平衡数据的预测.

