

DOI: 10.7511/jslx201601013

# 基于伪势格子 Boltzmann 模型修正 PR 状态方程

曾建邦<sup>\*1</sup>, 蒋方明<sup>2</sup>, 胡安杰<sup>3</sup>, 李隆键<sup>3</sup>

(1. 华东交通大学 机电工程学院, 南昌 330013; 2. 中国科学院 可再生能源重点实验室, 广州 510640;  
3. 重庆大学 动力工程学院, 重庆 400030)

**摘要:**探讨势函数对伪势格子 Boltzmann 模型基于 PR 状态方程计算饱和水气液两相密度的影响, 发现选取合适的势函数形式虽可使模拟结果与 Maxwell 理论解吻合良好, 但其与实验值的差距却较大, 需修正 PR 方程。基于伪势模型分析文献中的 PR 型状态方程发现, 单独修正引力或斥力项, 均无法同时兼顾计算精度和模型适用的温度范围。为此, 本文基于该模型同时对 PR 方程的引、斥力项系数进行修正, 得到了一个新的能够准确地描述饱和水气液两相性质的状态方程。

**关键词:**伪势格子 Boltzmann 模型; PR 状态方程; 势函数; Maxwell 定律

**中图分类号:** O359 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-4708(2016)01-0083-06

## 1 引言

在现有多相格子 Boltzmann(LB)模型中, 伪势模型可方便描述流体粒子间的相互作用, 其作用力源于相邻粒子间作用势, 其形式有, (1) 有效密度形式<sup>[1-3]</sup>。(2) 状态方程形式<sup>[4,5]</sup>。(3) 复合形式<sup>[5-7]</sup>。这类模型能揭示多相流的物理本质, 且编程简单, 故近年来得到较为充分的发展。然而, 基于上述任意形式计算粒子间作用力均涉及状态方程。PR 状态方程<sup>[8]</sup>因包含参数少、灵活性大且能较好地描述物质气液两相行为, 因而在工程上得到较为广泛的应用。为进一步拓宽该方程的应用范围, 人们对其进行了大量的修正或完善工作, 包括(1) 修正引力项, 即修正引力项系数  $\alpha$  与温度的函数关系式<sup>[9-18]</sup>。(2) 修正斥力项, 即采用体积平移法修正引力项系数  $b$ <sup>[19-22]</sup>。(3) 同时修正引、斥力项系数<sup>[23,24]</sup>。

Hu 等<sup>[7]</sup>基于伪势模型对 PR 方程进行修正, 但未给出引入参数的具体物理含义。本文将基于伪势模型找出合适的势函数形式, 使得模拟结果尽可能地接近 Maxwell 理论解; 然后, 利用其对 PR 方程引、斥力系数进行修正, 从而获得一个新的能

够准确地描述饱和水气液两相性质的状态方程。

## 2 计算模型及相关理论

伪势模型演化方程可表示为<sup>[4,5]</sup>

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i + S_i \quad (1)$$

式中  $S_i$  为体积力项, 碰撞项  $\Omega_i = -(f_i - f_i^{eq})/\tau$ , 松弛时间  $\tau = 0.5 + 3\nu/(c \Delta x)$ ,  $\nu$  为物质粘度,  $\Delta x$  为格子步长, 格子速度  $c = \Delta x/\Delta t$ ,  $\Delta t$  为时间步长,  $f_i$  和  $f_i^{eq}$  分别为  $t$  时刻位置  $x$  处离散方向  $i$  上的粒子和平衡态分布函数<sup>[4,5]</sup>,  $e_i$  为离散方向  $i$  上的速度矢量。流体宏观密度  $\rho$  和速度  $u'$  分别为

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \quad \rho u' = \sum_{i=0}^8 e_i f_i \quad (2)$$

伪势模型作用势形式有, (1) 有效密度形式, 最初在计算有效密度时涉及开根号<sup>[1]</sup>, 难以保证有效密度具有明确的物理意义, 为此, Zeng 等<sup>[3]</sup>对其进行了改进。(2) 状态方程形式, 最初计算稳定性较差<sup>[4]</sup>, 为此, Kupershtokh<sup>[2]</sup>对其进行了改进, 取得一定的效果。(3) 复合形式, Kupershtokh<sup>[5]</sup>尝试结合两种状态方程形式<sup>[4,5]</sup>构建了一个复合形式的势函数, Gong 等<sup>[6]</sup>则结合两种有效密度形式<sup>[1,3]</sup>提出了一个复合形式的势函数, Hu 等<sup>[7]</sup>结合有效密度<sup>[1]</sup>和状态方程形式<sup>[5]</sup>构建了一个新的势函数形式为

$$V = G \{ A \Psi(x) \Psi(x') + [(1-A)/g\beta] U(x') \} \quad (3)$$

式中, 有效密度  $\Psi(x)$  和  $U(x)$  形式参考文献<sup>[7]</sup>。体积力项  $S_i = f_i^{eq}(\rho, u' + \Delta t F/\rho) - f_i^{eq}(\rho, u')$ , 其

收稿日期: 2014-09-26; 修改稿收到日期: 2014-12-23.

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(51206171); 中国科学院广州能源所所长创新基金(y207r31001); 中国科学院“百人计划”资助项目.

作者简介: 曾建邦\*(1981-), 男, 博士, 副研究员 (E-mail: jbzeng68@sina.com);  
蒋方明(1973-), 男, 博士, 研究员.

中粒子间的相互作用力为

$$F = -\nabla V \quad (4)$$

$$\text{流体真实速度 } u = \frac{1}{2} \Delta t F / \rho + 1 / \rho \sum_{i=0}^8 e_i f_i$$

### 3 势函数对模拟结果的影响

采用  $200 \times 200$  的计算网格; 为避免表面张力对计算区域内密度分布的影响, 初始假定相界面平直; 四周采用周期性边界; 式(3)中状态方程为 PR 方程, 状态方程系数及其内部各参数取值参考文献 [3]。为判断模拟结果的准确性, 定义其与 Maxwell 理论解之间的平均相对误差为

$$\epsilon^{\text{Theo}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |[\rho^{\text{LB}}(T^i) - \rho^{\text{Theo}}(T^i)] / \rho^{\text{Theo}}(T^i)| \quad (5)$$

计算时,  $T^{i+1} - T^i = 10 \text{ K}$ , 其中  $T^1 = 643.15 \text{ K}$ 。若将上标为 Theo 的量换成实验值, 则可根据式(5)计算模拟结果与实验值之间的平均相对误差。

改变  $A$  值, 不仅会改变模型计算的气液两相密度与 Maxwell 理论解之间的平均相对误差, 而且还会改变模型适应的温度范围, 如图 1 所示。当

$A=1.25$  时, 模型计算结果与 Maxwell 理论解吻合良好, 平均相对误差均不超过  $1.0\%$ , 且模型适用的温度范围达  $[0.575T_c, T_c]$ 。可见, 选择合适的势函数形式模型可准确地计算 PR 状态方程的气液两相密度。然而, 此时模型计算结果却与实验值存在较大的差距, 平均相对误差分别为  $33.30\%$  和  $10.72\%$ , 如图 2 所示。据此可说明该方程并不太适合描述饱和水的热力学性质。因此, 有必要对 PR 方程系数进行修正。

### 4 状态方程系数对模拟结果的影响

#### 4.1 引力项系数对模拟结果的影响

为提高 PR 方程计算气相密度的精度, 学者对其引力项进行了大量的修正工作, 见表 1。本文基于表 1 的 PR 型状态方程, 利用伪势模型探讨引力项中的  $\alpha$  函数形式对模拟结果的影响, 据此说明引力项系数对状态方程计算精度的影响。

当  $A=1.25$  时, 模型可准确地预测表 1 中任一状态方程的饱和密度共存曲线, 模型计算模拟结果与实验值之间的平均相对误差列入表 2。由表 2

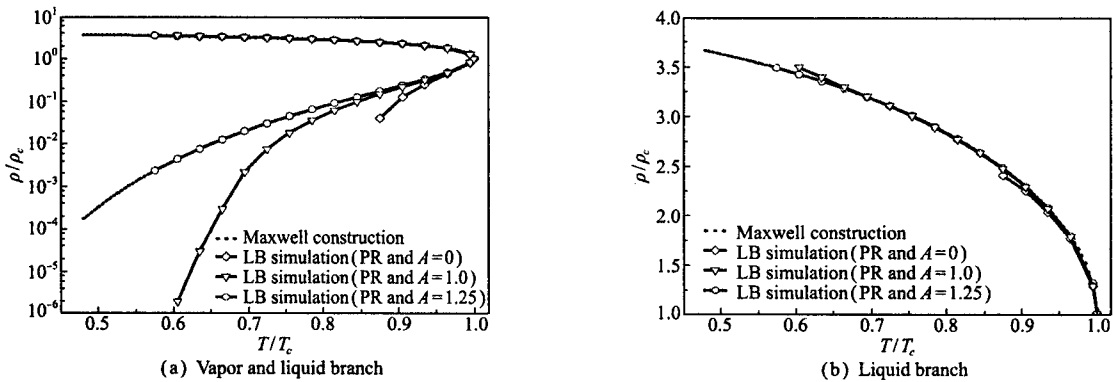


图 1 势函数对模型计算结果的影响  
Fig. 1 Effects of the potential function on the simulations

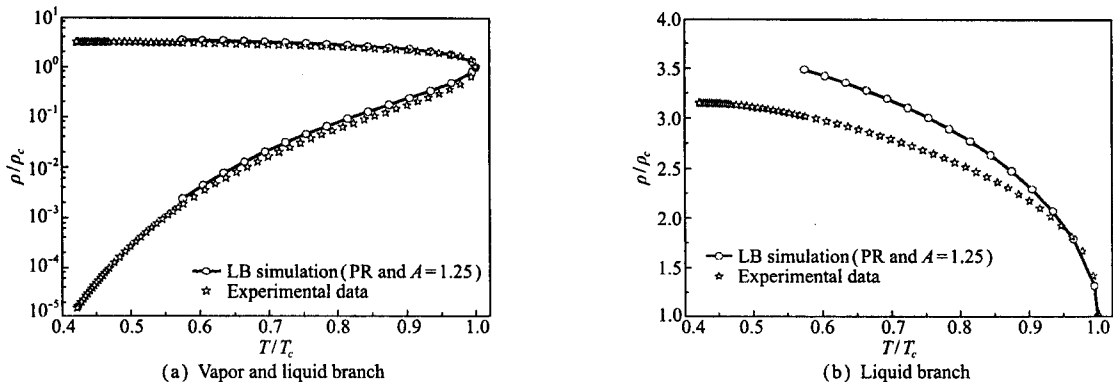


图 2 基于 PR 状态方程计算的饱和水气液两相密度与实验值的对比

Fig. 2 Comparison of the saturated density of water and vapor obtained from simulations with experimental data for PR EOS

可知,在 MPR1 至 MPR10 中,模型基于 MPR4 计算的饱和水气相密度与实验值之间的平均相对误差最大,为 568.5%,但液相密度与实验值之间的平均相对误差最小,为 9.56%,模型适应的温度范围最宽,为 $[0.435T_c, T_c]$ ;模型基于 MPR9 计算的饱和水气相密度与实验值之间的平均相对误差最小,为 6.39%,但液相密度与实验值间的平均相对误差最大,为 14.04%,且模型适用的温度范围相对较小,为 $[0.597T_c, T_c]$ 。可见,修正引力项系数  $\alpha$  与温度之间的函数关系,可大幅度地提高状态方程计算气相密度精度。

4.2 斥力项系数对模拟结果的影响

为提高状态方程计算液相密度的精度,一般引入体积平移量  $c$  对斥力项系数  $b$  进行修正,列入表 3。本文基于表 3 中 PR 型方程,利用伪势模型

探讨斥力项中  $c$  的函数式对模拟结果的影响,以此揭示斥力项系数对状态方程计算精度的影响。

当  $A=1.25$  时,模型可准确地预测表 3 中任一状态方程的饱和密度共存曲线,模型计算模拟结果与实验值之间的平均相对误差列入表 2。据此表数据可知,在 MPR11 至 MPR14 中,模型基于 MPR11 计算的饱和水气液两相密度与实验值的平均相对误差均最大,分别为 30.09%和 17.33%,但模型适用的温度范围最大,为 $[0.545T_c, T_c]$ ;模型基于 MPR14 计算的饱和水液相密度与实验值间的平均相对误差最小,为 4.95%,气相密度与实验值间的相对误差仅为 5.57%,但模型适用的温度范围相对较小,为 $[0.629T_c, T_c]$ 。可见,修正斥力项,即修正体积平移量  $c(T)$ ,仅可较大幅度地提高状态方程计算饱和水气液两相密度的精度。

表 1 PR 型状态方程引力项中的  $\alpha$  函数形式  
Tab.1  $\alpha$ -function in the attractive term of the PR-type EOS

状态方程	$\alpha(T)$	系数 $k_i(i=1,2,3,\dots)$
MPR1 <sup>[9]</sup>	$[1+k_1(1-\sqrt{T_r})]^2$	$k_1=0.3882+1.5613\omega-0.2901\omega^2+0.0618\omega^3$
MPR2 <sup>[10]</sup>	$1+(1-T_r)(k_1+k_2/T_r)$	$k_1=0.7811, k_2=0.1671$
MPR3 <sup>[11]</sup>	$1+k_1(1-T_r)+k_2(1-T_r^2)+k_3(1-T_r^3)$	$k_1=2.7366, k_2=-1.7118, k_3=0.5428$
MPR4 <sup>[12]</sup>	$[1+[k_1+f(T_r)]g(T_r)](1-\sqrt{T_r})^2$ $f(T_r)=k_2+k_3(k_4-T_r)(1-\sqrt{T_r})$ $g(T_r)=(1+\sqrt{T_r})(0.7-T_r)$	$k_1=0.3789+1.4897\omega-0.1713\omega^2+0.0197\omega^3$ $k_2=-0.0913, k_3=-0.0600, k_4=-0.8531$
MPR5 <sup>[13]</sup>	$e^{[k_1(1-T_r)]}$	$k_1=0.4180+1.5800\omega-0.5800\omega^2$
MPR6 <sup>[14]</sup>	$e^{[k_1(1-T_r)+k_2(1-\sqrt{T_r})^2]}$	$k_1=0.3806+1.3637\omega$ $k_2=0.5134-2k_1^2+3.6544\omega+0.7834\omega^2$
MPR7 <sup>[15]</sup>	$10^{(k_1+k_2T_r+k_3T_r^2)(1-T_r)}$	$k_1=0.4293, k_2=-0.1473, k_3=0.1206$
MPR8 <sup>[16]</sup>	$e^{(k_1(1-T_r)+k_2\ln[1+k_3g(T_r)])^2}, g(T_r)=1-\sqrt{T_r}$	$k_1=0.1308-0.0505\omega+0.2595\omega^2, k_2=0.8177$ $k_3=0.3136+1.8675\omega-0.5260\omega^2$
MPR9 <sup>[17]</sup>	$1+k_1T_r \ln T_r+k_2(1-T_r)+k_3(1-T_r^3)$	$k_1=1.5522, k_2=1.3385, k_3=0.5704$
MPR10 <sup>[18]</sup>	$e^{[k_1(1-T_r)+k_2\ln T_r+k_3g(T_r)]}, g(T_r)=1-\sqrt{T_r}$	$k_1=0.0031+0.0131\omega, k_2=0.0065-0.4822\omega$ $k_3=0.7213+3.5862\omega$

表 2 模型适用的温度范围以及模拟结果与实验值之间的平均相对误差  
Tab.2 Applicable temperature range of the model and the average relative error between the simulations and experimental data

状态方程	$\epsilon_{\text{vapor}}^{\text{exp}}/\%$	$\epsilon_{\text{liquid}}^{\text{exp}}/\%$	温度范围	状态方程	$\epsilon_{\text{vapor}}^{\text{exp}}/\%$	$\epsilon_{\text{liquid}}^{\text{exp}}/\%$	温度范围
PR	33.30	10.72	$[0.558T_c, T_c]$	MPR9	6.39	14.04	$[0.597T_c, T_c]$
MPR1	30.54	10.60	$[0.578T_c, T_c]$	MPR10	17.94	13.63	$[0.648T_c, T_c]$
MPR2	34.45	10.21	$[0.583T_c, T_c]$	MPR11	30.09	17.33	$[0.545T_c, T_c]$
MPR3	33.67	10.33	$[0.596T_c, T_c]$	MPR12	15.85	9.18	$[0.568T_c, T_c]$
MPR4	568.5	9.56	$[0.435T_c, T_c]$	MPR13	5.54	10.41	$[0.576T_c, T_c]$
MPR5	33.16	10.47	$[0.586T_c, T_c]$	MPR14	5.57	4.95	$[0.629T_c, T_c]$
MPR6	33.58	10.63	$[0.548T_c, T_c]$	MPR15	29.03	18.08	$[0.605T_c, T_c]$
MPR7	33.63	10.86	$[0.549T_c, T_c]$	MPR16	32.87	11.49	$[0.575T_c, T_c]$
MPR8	33.97	10.52	$[0.564T_c, T_c]$	NPRT	1.86	0.82	$[0.575T_c, T_c]$

### 5 新的 PR 型状态方程

以饱和水气液两相密度实验值为基准,基于伪势模型同时对 PR 方程的引、斥力项系数进行修正,构建了一个新的 PR 型(NPRT)状态方程为

$$p = \frac{RT}{v'-b} - \frac{aa'(T)}{v'(v'+b) + b(v'-b)} \quad (6)$$

式中  $a'(T)$  可根据模型预测结果拟合而得

$$a'(T) = [1 + \eta(\omega)(1 - \sqrt{T_r})]^2 f(T) \quad (7)$$

式中

$$f(T) = k_1 + (1 - k_1)e^{[k_2(1-\sqrt{T_r}) + k_3(1-T_r) - k_4(1-T_r)^2]}$$

$c(T)$  也可根据模型预测结果拟合而得

$$c(T) = k[k_6 + (1 - k_6)e^{(-k_7|a'(T)-T_r|)}] \quad (8)$$

式中  $k = k_5 RT_c(0.3074 - z_c)/p_c, v' = v - c(T)$ 。

式(6)中引、斥力项系数内各参数取值列入表 4。式(8)与 MPR14 中的体积平移量表达式完全相同,但其内各参数的取值不一样,列入表 4。同时对 PR 方程引、斥力项系数进行修正的相关研究文献较少,由表 5 可知,MPR15 引入温度函数对引力项系数  $\alpha$  进行修正的同时,还采用体积平移法

对斥力项系数  $b$  进行修正;MPR16 则引入不同的温度函数分别对引、斥力项系数进行了修正。由表 2 可知,相比 MPR15 和 MPR16,模型基于 NPRT 计算的饱和水气液两相密度与实验值间的平均相对误差均最小,分别为 1.86% 和 0.82%,模型适用温度范围为  $[0.575T_c, T_c]$ ;模型基于 MPR15 计算的饱和水液相密度与实验值间的平均相对误差最大,为 18.08%,此时气相密度与实验值间的平均相对误差为 29.03%,模型适用温度范围最窄,为  $[0.605T_c, T_c]$ ;模型基于 MPR16 计算的饱和水气相密度与实验值间的平均相对误差最大,为 32.87%,此时液相密度与实验值间的平均相对误差为 11.49%,模型适用温度范围为  $[0.575T_c, T_c]$ 。图 3 给出了模型基于 NPRT、MPR15 和 MPR16 计算的饱和水气液两相密度与实验值的对比。可以看出,相比于 MPR15 和 MPR16,模型基于 NPRT 计算的饱和水气液两相密度与实验值之间吻合良好。结合图 3 和表 2 可知,相对于现有文献报道的 PR 型方程,基于 NPRT 计算饱和水气液两相密度的精度均最高;相对于 MPR9 和 MPR14, NPRT 适用的温度范围更广。

表 3 PR 型状态方程斥力项中的体积平移量

Tab. 3 Volume translation term in the repulsive term of the PR-type EOS

状态方程	$c(T)$	系数 $k_i (i=1,2,3,\dots)$
MPR11 <sup>[19]</sup>	$k_1 RT_c(1.5448z_c - 0.4024)/p_c$	$k_1 = 0.2520$
MPR12 <sup>[20]</sup>	$(0.3074 - z_c)(RT_c/p_c)\{0.35/[0.35 + (k_1 T_r - \alpha(T_r) )^{k_2}]\}$	$k_1 = -74.4580z_c + 26.9660$ $k_2 = 246.7800z_c^2 - 107.2100z_c + 12.6700$
MPR13 <sup>[21]</sup>	$(0.3074 - z_c)(RT_c/p_c)[k_1 + (1 - k_1)e^{k_2 1-T_r }]$	$k_1 = -2.8431e^{-64.2184(0.3074-z_c)} + 0.1735$ $k_2 = -99.2558 + 301.6201z_c$
MPR14 <sup>[22]</sup>	$(0.3074 - z_c)(RT_c/p_c)[k_1 + (1 - k_1)e^{k_2 a(T_r)-T_r }]$	$k_1 = -7.3410 \times 10^{13} z_c^{25.916} + 0.1100$ $k_2 = -44.2260e^{-5.364z_c} + 0.8060$

表 4 NPRT 和 MPR14 系数中各参数取值

Tab. 4 Parameters in the attractive and repulsive terms of the NPRT and MPR14

状态方程	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$k_4$	$k_5$	$k_6$	$k_7$
NPRT	0.4523	0.7223	0.1123	1.0534	0.5816	0.0112	10.5231
MPR14	—	—	—	—	1.000	0.1080	12.1144

表 5 具有不同形式引力项和斥力项系数的 PR 型状态方程

Tab. 5 PR-type EOS with different coefficients in the attractive and repulsive terms

状态方程	$\alpha(T), c(T)$ 或 $b(T)$	系数 $k_i (i=1,2,3,\dots)$
MPR15 <sup>[23]</sup>	$\alpha(T) = [1 + k_4(1 - T_r) + k_5 f(T_r)]^2$ $f(T) = (1 - T_r)(0.7 - T_r)$ $c(T) = -(RT_c/p_c)[k_1 + g(T_r)]$ $g(T) = k_2(1 - T_r^{2/3}) + k_3(1 - T_r^{2/3})^2$	$k_1 = 0.0019 + 0.0044\omega + 0.3632\omega^2 - 0.9083\omega^3 + 0.5589\omega^4$ $k_2 = -0.0054 - 0.5111k_3 + 0.0453k_3^2 + 0.0745k_3^3 - 0.0383k_3^4$ $k_3 = 0.0147$ $k_4 = 0.2047 + 0.8355\omega - 0.1847\omega^2 + 0.1668\omega^3 - 0.0988\omega^4$ $k_5 = 0.1156$
MPR16 <sup>[24]</sup>	$\alpha(T) = e^{(1-k_2 \ln T_r)}$ $b(T) = 0.07780(RT_c/p_c)[1 + k_1(1 - T_r)]$	$k_1 = 0.2476 - 0.8857\omega + 0.1900\omega^2$ $k_2 = 1.7309 + 1.6571\omega + 0.1554\omega^2$

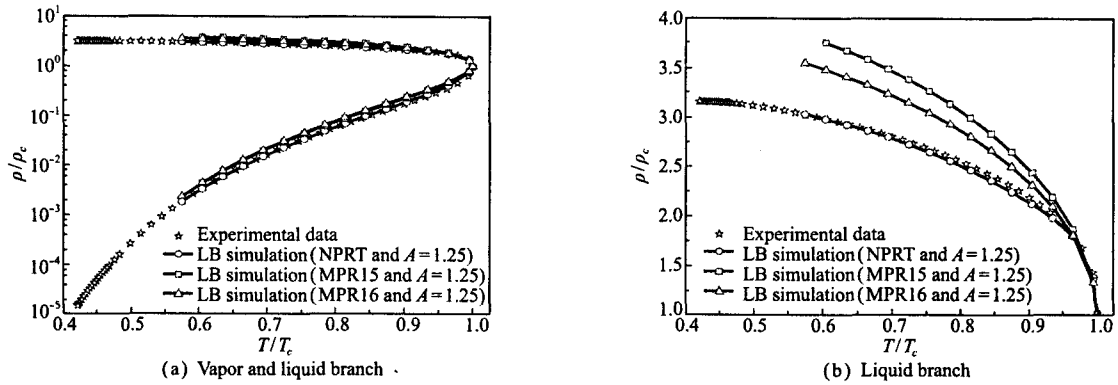


图3 基于 NPRT、MPR15 和 MPR16 计算的饱和水气液两相密度与实验值的对比

Fig. 3 Comparison of the saturated density of water obtained from simulations with experimental data for NPRT, MPR15 and MPR16

## 6 结论

基于伪势模型同时对 PR 方程引、斥力项系数进行修正,得到 NPRT 状态方程。主要结论如下。

(1) 当气液两相分离后为平直界面时,势函数中的权重系数  $A=1.25$ ,可使模型基于任意适合描述物质(如水)气液两相性质状态方程计算的结果与 Maxwell 理论吻合良好。

(2) 修正 PR 方程引力项系数,可大幅度提高状态方程气相密度的计算精度,却难于提高其液相密度的计算精度和扩大模型适用的温度范围;修正斥力项系数,虽然可较大幅度地提高状态方程气液两相密度的计算精度,但模型适用温度范围偏窄。

(3) 基于特定物质(如水)气液两相密度实验值,利用伪势模型构建的 NPRT 状态方程,可兼顾模型计算精度和适用的温度范围。

(4) 结合特定物质气液两相密度实验值,基于伪势模型构建流体状态方程的方法可推广应用于构建描述其他物质气液两相性质的状态方程。

## 参考文献(References):

- [1] Shan X W, Chen H D. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components [J]. *Phys. Rev. E*, 1993, **47**(3): 1815-1819.
- [2] Kupershtokh A L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation [A]. Proceeding of the 5<sup>th</sup> International EHD Workshop[C]. Poitiers, France, 2004.
- [3] Zeng J B, Li L J, Liao Q, et al. Simulation of phase transition process using lattice Boltzmann method [J]. *Chin. Sci. Bull.*, 2009, **54**(24): 4596-4603.
- [4] Zhang R Y, Chen H D. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows [J]. *Phys. Rev. E*, 2003, **67**: 066711.
- [5] Kupershtokh A L. A Lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of Liquid and vapor phases [J]. *Comput. Math. Appl.*, 2011, **61**(12): 3537-3548.
- [6] Gong S, Cheng P. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved Lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows [J]. *Comput. Fluids*, 2012, **53**(15): 93-104.
- [7] Hu A J, Li L J, Chen S X, et al. On equations of state in pseudo-potential multiphase lattice Boltzmann model with large density ratio [J]. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2013, **67**: 159-163.
- [8] Peng D Y, Robinson D B. A new two-constant equation of state [J]. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 1976, **15**(1): 56-64.
- [9] Nji G N, Svrcek W Y, Yarranton H W, et al. Characterization of heavy oils and bitumens 2: improving the prediction of low reduced temperature vapor pressures of heavy hydrocarbons by the Peng-Robinson equation of state [J]. *Energy Fuels*, 2009, **23**(1): 366-373.
- [10] Soave G. Rigorous and simplified procedures for determining the pure-component parameters in the Redlich Kwong-Soave equation of state [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1980, **35**(8): 1725-1729.
- [11] Mathias P M. A versatile phase equilibrium equation of state [J]. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 1983, **22**(3): 385-391.
- [12] Stryjek R, Vera J H. PRSV: An improved Peng-Robinson equation of state for pure compounds and mixtures [J]. *Can. J. Chem. Eng.*, 1986, **64**(2): 323-333.
- [13] Coquelet C, Chapoy A, Richon D. Development of a new alpha function for the Peng-Robinson equation of state: comparative study of alpha function models for pure gases (natural gas components) and water-gas

- systems [J]. *Int. J. Thermophys.*, 2004, **25**(1): 133-158.
- [14] Melhem G A, Saini R, Goodwin B M. A modified Peng-Robinson equation of state [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 1989, **47**(2-3): 189-237.
- [15] Yu J M, Lu B C Y. A three-parameter cubic equation of state for asymmetric mixture density calculations [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 1987, **34**(1): 1-19.
- [16] Li H Z, Yang D Y. Modified a function for the Peng-Robinson equation of state to improve the vapor pressure prediction of non-hydrocarbon and hydrocarbon compounds [J]. *Energy Fuels*, 2011, **25**(1): 215-223.
- [17] Zabalo M S, Vera J H. Cubic equation of state for pure compound vapor pressures from the triple point to the critical point [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1996, **35**(3): 829-836.
- [18] Hamid S, Alireza Z. A new alpha-function for the Peng-Robinson equation of state; application to natural gas [J]. *Chinese J. Chem. Eng.*, 2013, **21**(10): 1155-1161.
- [19] Peneloux A, Rauzy E, Freze R. A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 1982, **8**(1): 7-23.
- [20] Ahlers J, Gmehling J. Development of a universal group contribution equation of state. 2: prediction of vapor-liquid equilibria for asymmetric systems [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 2002, **41**(14): 3489-3498.
- [21] Lin H, Duan Y Y. Empirical correction to the Peng-Robinson equation of state for the saturated region [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 2005, **233**(2): 194-203.
- [22] Nazarzadeh M, Moshfeghian M. New volume translated PR equation of state for pure compounds and gas condensate systems [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 2013, **337**(15): 214-223.
- [23] Tsai J C, Chen Y P. Application of a volume-translated Peng-Robinson equation of state on vapor-liquid equilibrium calculations [J]. *Fluid Phase Equilib.*, 1998, **145**(2): 193-215.
- [24] Haghtalab A, Mahmoodi P, Mazloumi S H. A modified Peng-Robinson equation of state for phase equilibrium calculation of liquefied, synthetic natural gas, and gas condensate mixtures [J]. *Can. J. Chem. Eng.*, 2011, **89**(6): 1376-1387.

## Modification of PR equation of state based on pseudo-potential Lattice Boltzmann model simulations

ZENG Jian-bang<sup>\*1</sup>, JIANG Fang-ming<sup>2</sup>, HU An-jie<sup>3</sup>, LI Long-jian<sup>3</sup>

(1. School of Mechatronics Engineering, East China JiaoTong University, Nanchang 330013, China;

2. Key Laboratory of Renewable Energy, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China;

3. School of Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

**Abstract:** Exploring the effects of potential function on the saturated liquid and vapor densities of water calculated by pseudo-potential Lattice Boltzmann model (PLBM) based on PR equation of state (EOS). Choosing proper potential function form, the simulation results agree well with the Maxwell theoretical values, but there are noticeable differences existing between the simulation results and experimental data. The parameters in PR EOS need modifications. Analyzing the PR-type EOSs available in literatures, we find from simulations by PLBM that only modifications to the attractive or repulsive parameter in the PR EOS cannot increase the calculation precision of both liquid and vapor density, and at the same time enlarge the applicable temperature range of the PLBM. Therefore, we establish a more accurate PR-type EOS for saturated water and vapor by modifying both the attractive and repulsive parameters in the PR EOS based on PLBM simulations.

**Key words:** pseudo-potential Lattice Boltzmann model; PR equation of state; potential function; Maxwell law