

APPENDIX L

STEEPEST DESCENT METHOD IN EQUILIBRIUM COMPUTATION

AND

RESULTS OF THERMODYNAMIC SIMULATIONS

The Steepest Descent Method For Equilibrium In Chemically Reacting System

The method described here in determining the mixture composition corresponding to the minimum total Gibbs free energy of a reacting system was first developed by White, Johnson and Dantzig [13], and was later extended by Balzhiser, Samuels and Eliassen [13]. The underlined assumptions were:

- 1) All reacting components were present in gaseous phase.
- 2) The law of ideal gas-phase solution was applicable at the reacting conditions.
- 3) The details of mechanical transformation between reactant and product species on the catalyst surface were not considered.

The total Gibbs free energy of a reacting system of C compounds containing n_i moles of component i is written as

$$G = \sum_{i=1}^C n_i \{ \underline{G}_i^{\circ} + RT \ln(\frac{n_i}{n}) \} \quad (L.1)$$

where $\underline{G}_i^{\circ}$ is standard-state Gibbs free energy of component i ,

n is total number of moles,
 R is ideal gas constant,
 and T is temperature.

Rearranging Eqn. (L.1) yields

$$\frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^C n_i \left\{ \frac{G_i^\circ}{RT} + \ln\left(\frac{n_i}{n}\right) \right\} \quad (\text{L.2})$$

The problem is reduced to finding the component amounts, n_i , which correspond to the minimum in G/RT , subject to the conservation relations of atomic species:

$$\sum_{i=1}^C a_{ji} n_i = b_j \quad \text{for } 1 \leq j \leq M \quad (\text{L.3})$$

where a_{ji} are the number of gram-atom of atomic element j in a mole of molecule i ,
 b_j is the total number of gram-atoms of element j in the reacting mixture,
 and M is the number of elements present in the reacting mixture.

Let $n_1^{(k)}, n_2^{(k)}, \dots, n_C^{(k)}$ be the mole numbers of some approximate solution after k iterations, which satisfies the conservation-of-atom equations of Eqns. (L.3). The total Gibbs-free-energy function $G^{(k)}/RT$ s expressed as

$$\frac{G^{(k)}}{RT} \equiv F^{(k)} = \sum_{i=1}^C n_i^{(k)} \left\{ \frac{G_i^0}{RT} + \ln \left[\frac{n_i^{(k)}}{n^{(k)}} \right] \right\} \quad (\text{L.4})$$

Expanding F in a Taylor's series around $n_1^{(k)}, n_2^{(k)}, \dots, n_C^{(k)}$:

$$F^{(k+1)} = F^{(k)} + \sum_{i=1}^C [n_i^{(k+1)} - n_i^{(k)}] \frac{\partial F^{(k)}}{\partial n_i} +$$

$$\sum_{i=1}^C \sum_{\ell=1}^C \frac{1}{2} [n_i^{(k+1)} - n_i^{(k)}] [n_\ell^{(k+1)} - n_\ell^{(k)}] \frac{\partial^2 F^{(k)}}{\partial n_i \partial n_\ell} +$$

$$\text{higher-order terms} \quad (\text{L.5})$$

Perform differentiation to obtain,

$$\frac{\partial F^{(k)}}{\partial n_i} = \frac{G_i^0}{RT} + \ln\left(\frac{n_i}{n}\right) \quad (\text{L.6})$$

$$\frac{\partial^2 F^{(k)}}{\partial n_i^2} = \frac{1}{n_i} - \frac{1}{n} \quad (\text{L.7})$$

$$\frac{\partial^2 F^{(k)}}{\partial n_i \partial n_\ell} = -\frac{1}{n} \quad (\text{L.8})$$

The approximation for $F^{(k+1)}$ becomes

$$\begin{aligned} F^{(k+1)} = F^{(k)} &+ \sum_{i=1}^C \left\{ \frac{G_i^0}{RT} + \ln\left[\frac{n_i^{(k)}}{n_\ell^{(k)}}\right] \right\} [n_i^{(k+1)} - n_i^{(k)}] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^C n_i^{(k)} \left[\frac{n_i^{(k+1)} - n_i^{(k)}}{n_i^{(k)}} - \frac{n^{(k+1)} - n^{(k)}}{n^{(k)}} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{L.9})$$

$$\text{Let } \phi^{(k+1)} \equiv F^{(k+1)} + \sum_{j=1}^M \pi_j \left[- \sum_i^C a_{ji} n_i^{(k+1)} + b_j \right] \quad (\text{L.10})$$

where π_j are the Lagrangian multipliers. Minimizing $\phi^{(k+1)}$ requires

$$\frac{\partial \phi^{(k+1)}}{\partial n_i^{(k+1)}} = 0 \quad \text{for } 1 \leq i \leq C \quad (\text{L.11})$$

Differentiating $\phi^{(k+1)}$ gives

$$\frac{\partial \phi^{(k+1)}}{\partial n_i^{(k+1)}} = \left[\frac{G_i^0}{RT} + \ln \frac{n_i^{(k)}}{n^{(k)}} \right] + \left[\frac{n_i^{(k+1)}}{n^{(k)}} - \frac{n^{(k+1)}}{n^{(k)}} \right] - \sum_{j=1}^M \pi_j a_{ji} = 0 \quad (\text{L.12})$$

This is a system of $C+M+1$ dimension and has C values of $n_i^{(k+1)}$,

M values of π_j , and $n^{(k+1)}$ as unknowns.

Elimination simplifies and reduces the system to $M + 1$ unknowns (M 's of π_ℓ and one $n^{(k+1)}$):

$$\sum_{\ell=1}^M \pi_\ell b_\ell = \sum_{i=1}^C n_i^{(k)} \left\{ \frac{G_i^\circ}{RT} + \ln \left[\frac{n_i^{(k)}}{n^{(k)}} \right] \right\}, \text{ and} \quad (\text{L.13})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=1}^M \pi_\ell \sum_{i=1}^C a_{ji} a_{\ell i} n_i^{(k)} + b_j \left[\frac{n^{(k+1)}}{n^{(k)}} \right] \\ = \sum_{i=1}^C a_{ji} n_i^{(k)} \left\{ \frac{G_i^\circ}{RT} + \ln \left[\frac{n_i^{(k)}}{n^{(k)}} \right] \right\} \text{ for } j=1, 2, \dots, M \end{aligned} \quad (\text{L.14})$$

$$\text{Let } u \equiv \frac{n^{(k+1)}}{n^{(k)}} \quad (\text{L.15})$$

The linear system is solved for M 's of π_j and u .

$$\text{Let } \Delta_i \equiv n_i^{(k+1)} - n_i^{(k)} \quad (\text{L.16})$$

be the direction numbers which indicate the best direction of

travel. The method restricts the distance traveled to some fraction λ of the calculated travel. The value of λ will be chosen as the largest value that satisfies two conditions:

(1) $n_i^{(k+1)}$ are positive, and (2) the derivative $d(G/RT)/d\lambda$ does not become positive. When the solution is near, λ will approach to unity.

Table L.1. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation I
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	5.17x10 ⁻²	8.82x10 ⁻³	1.75x10 ⁻⁶
CO	4.86x10 ⁻²	2.33x10 ⁻²	1.96x10 ⁻³
CO ₂	5.36x10 ⁻²	1.48x10 ⁻²	7.42x10 ⁻²
CH ₄	2.83x10 ⁻²	6.63x10 ⁻³	7.58x10 ⁻²
C ₂ H ₄	2.43x10 ⁻²	9.95x10 ⁻³	3.00x10 ⁻⁸
C ₂ H ₆	0.0	1.08x10 ⁻¹	7.47x10 ⁻⁵
C ₅ H ₁₄	0.0	1.40x10 ⁻⁶	0.0
C ₇ H ₁₆	0.0	4.30x10 ⁻⁶	0.0
C ₈ H ₁₈	0.0	5.10x10 ⁻⁶	0.0
C ₉ H ₂₀	0.0	5.70x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₀ H ₂₂	0.0	5.70x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₁ H ₂₄	0.0	4.60x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₂ H ₂₆	0.0	3.50x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₃ H ₂₈	0.0	2.60x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₄ H ₃₀	0.0	1.90x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₅ H ₃₂	0.0	1.20x10 ⁻⁶	0.0
C ₁₆ H ₃₄	0.0	7.00x10 ⁻⁷	0.0
C ₁₇ H ₃₆	0.0	4.00x10 ⁻⁷	0.0

Table L.1. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial	Equilibrium
		Guess	
$C_{18}H_{38}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	1.90×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	2.90×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	3.00×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	2.30×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	2.10×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	1.20×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	1.10×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	9.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{14}H_{29}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{15}H_{31}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{11}H_{22}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{13}H_{26}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0

Table L.2. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation II
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	7.56×10^{-1}	5.98×10^{-1}	1.74×10^{-6}
CO	2.59×10^{-1}	2.77×10^{-1}	6.74×10^{-2}
CO ₂	1.41×10^{-1}	1.56×10^{-1}	2.37×10^{-1}
CH ₄	1.58×10^{-1}	1.55×10^{-1}	8.11×10^{-1}
C ₂ H ₄	2.85×10^{-1}	2.16×10^{-1}	1.58×10^{-5}
C ₂ H ₆	0.0	3.61×10^{-2}	6.52×10^{-3}
C ₆ H ₁₄	0.0	1.90×10^{-6}	2.80×10^{-7}
C ₁₀ H ₂₂	0.0	8.40×10^{-6}	0.0
C ₁₁ H ₂₄	0.0	3.06×10^{-5}	0.0
C ₁₂ H ₂₆	0.0	4.51×10^{-5}	0.0
C ₁₃ H ₂₈	0.0	3.44×10^{-5}	0.0
C ₁₄ H ₃₀	0.0	2.31×10^{-5}	0.0
C ₁₅ H ₃₂	0.0	1.50×10^{-5}	0.0
C ₁₆ H ₃₄	0.0	9.30×10^{-6}	0.0
C ₁₇ H ₃₆	0.0	5.70×10^{-6}	0.0
C ₁₈ H ₃₈	0.0	3.70×10^{-6}	0.0
C ₁₉ H ₄₀	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
C ₂₀ H ₄₂	0.0	1.70×10^{-6}	0.0
C ₂₁ H ₄₄	0.0	1.20×10^{-6}	0.0

Table L.2. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial	Equilibrium
		Guess	
$C_{22}H_{46}$	0.0	8.00×10^{-7}	0.0
$C_{23}H_{48}$	0.0	6.00×10^{-7}	0.0
$C_{24}H_{50}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{25}H_{52}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{26}H_{54}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{27}H_{56}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{28}H_{58}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{31}H_{64}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{32}H_{66}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{33}H_{68}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{34}H_{70}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	7.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	6.70×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	5.40×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	3.90×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{14}H_{29}$	0.0	1.70×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{15}H_{31}$	0.0	1.20×10^{-6}	0.0

Table L.2. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	9.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	7.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{20}\text{H}_{41}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{21}\text{H}_{43}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{22}\text{H}_{45}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{23}\text{H}_{47}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{24}\text{H}_{49}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{25}\text{H}_{51}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{26}\text{H}_{53}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{27}\text{H}_{55}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{28}\text{H}_{57}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{10}\text{H}_{20}$	0.0	1.00×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{11}\text{H}_{22}$	0.0	4.70×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	0.0	1.35×10^{-5}	0.0
$\text{C}_{13}\text{H}_{26}$	0.0	7.30×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{14}\text{H}_{28}$	0.0	5.20×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{15}\text{H}_{30}$	0.0	3.60×10^{-6}	0.0

Table L.2. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{16}H_{32}$	0.0	2.30×10^{-6}	0.0
$C_{17}H_{34}$	0.0	1.50×10^{-6}	0.0
$C_{18}H_{36}$	0.0	1.00×10^{-6}	0.0
$C_{19}H_{38}$	0.0	7.00×10^{-7}	0.0
$C_{20}H_{40}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$C_{21}H_{42}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{22}H_{44}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{23}H_{46}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{24}H_{48}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{25}H_{50}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{26}H_{52}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0

Table L.3. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation III
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	2.65x10 ⁻¹	2.15x10 ⁻¹	2.60x10 ⁻⁷
CO	2.59x10 ⁻¹	2.49x10 ⁻¹	2.41x10 ⁻¹
CO ₂	1.41x10 ⁻¹	1.47x10 ⁻¹	1.50x10 ⁻¹
CH ₄	1.58x10 ⁻¹	1.55x10 ⁻¹	3.91x10 ⁻¹
C ₂ H ₄	1.42x10 ⁻¹	1.37x10 ⁻¹	3.04x10 ⁻⁴
C ₂ H ₆	0.0	9.24x10 ⁻³	1.93x10 ⁻²
C ₆ H ₁₄	0.0	3.30x10 ⁻⁶	1.15x10 ⁻³
C ₇ H ₁₆	0.0	5.00x10 ⁻⁷	4.87x10 ⁻⁴
C ₈ H ₁₈	0.0	3.10x10 ⁻⁶	2.00x10 ⁻⁴
C ₉ H ₂₀	0.0	1.83x10 ⁻⁵	1.01x10 ⁻⁴
C ₁₀ H ₂₂	0.0	4.82x10 ⁻⁵	3.30x10 ⁻⁵
C ₁₁ H ₂₄	0.0	5.99x10 ⁻⁵	1.58x10 ⁻⁵
C ₁₂ H ₂₆	0.0	4.87x10 ⁻⁵	8.35x10 ⁻⁶
C ₁₃ H ₂₈	0.0	3.20x10 ⁻⁵	3.29x10 ⁻⁶
C ₁₄ H ₃₀	0.0	2.03x10 ⁻⁵	1.30x10 ⁻⁶
C ₁₅ H ₃₂	0.0	1.26x10 ⁻⁵	6.40x10 ⁻⁷
C ₁₆ H ₃₄	0.0	7.90x10 ⁻⁶	1.90x10 ⁻⁷
C ₁₇ H ₃₆	0.0	4.80x10 ⁻⁶	1.00x10 ⁻⁷
C ₁₈ H ₃₈	0.0	3.00x10 ⁻⁶	6.00x10 ⁻⁸

Table L.3. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{19}H_{40}$	0.0	2.00×10^{-6}	2.00×10^{-8}
$C_{20}H_{42}$	0.0	1.40×10^{-6}	1.00×10^{-8}
$C_{21}H_{44}$	0.0	1.00×10^{-6}	0.0
$C_{22}H_{46}$	0.0	1.00×10^{-6}	0.0
$C_{23}H_{48}$	0.0	8.00×10^{-7}	0.0
$C_{24}H_{50}$	0.0	7.00×10^{-7}	0.0
$C_{25}H_{52}$	0.0	6.00×10^{-7}	0.0
$C_{26}H_{54}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$C_{27}H_{56}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{28}H_{58}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{29}H_{60}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	4.00×10^{-7}	5.89×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	3.40×10^{-6}	2.54×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	1.31×10^{-5}	1.09×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	2.30×10^{-6}	5.84×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	1.02×10^{-5}	3.14×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	7.80×10^{-6}	1.07×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	5.50×10^{-6}	4.17×10^{-6}
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	3.30×10^{-6}	1.68×10^{-6}

Table L.3. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{13}\text{H}_{27}$	0.0	2.20×10^{-6}	7.40×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{14}\text{H}_{29}$	0.0	1.50×10^{-6}	3.00×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{15}\text{H}_{31}$	0.0	1.00×10^{-6}	1.20×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	7.00×10^{-7}	5.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	5.00×10^{-7}	2.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	4.00×10^{-7}	1.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	0.0	1.16×10^{-5}	3.97×10^{-6}
$\text{C}_{13}\text{H}_{26}$	0.0	8.00×10^{-6}	1.50×10^{-6}
$\text{C}_{14}\text{H}_{28}$	0.0	4.90×10^{-6}	5.80×10^{-7}
$\text{C}_{15}\text{H}_{30}$	0.0	3.00×10^{-6}	3.30×10^{-7}
$\text{C}_{16}\text{H}_{32}$	0.0	1.90×10^{-6}	1.60×10^{-7}
$\text{C}_{17}\text{H}_{34}$	0.0	1.30×10^{-6}	5.00×10^{-8}
$\text{C}_{18}\text{H}_{36}$	0.0	8.00×10^{-7}	3.00×10^{-8}
$\text{C}_{19}\text{H}_{38}$	0.0	6.00×10^{-7}	1.00×10^{-8}
$\text{C}_{20}\text{H}_{40}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{21}\text{H}_{42}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{22}\text{H}_{44}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{23}\text{H}_{46}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0

Table L.3. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$1\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
H_2O	0.0	3.90×10^{-6}	0.0

Table 1.4. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation IV
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	2.65×10^{-1}	2.15×10^{-1}	2.70×10^{-7}
CO	2.59×10^{-1}	2.49×10^{-1}	2.44×10^{-1}
CO ₂	1.41×10^{-1}	1.47×10^{-1}	1.49×10^{-1}
CH ₄	1.58×10^{-1}	1.55×10^{-1}	3.93×10^{-1}
C ₂ H ₄	1.42×10^{-1}	1.37×10^{-1}	3.02×10^{-4}
C ₂ H ₆	0.0	9.25×10^{-3}	1.90×10^{-2}
C ₆ H ₁₄	0.0	1.70×10^{-6}	1.06×10^{-3}
C ₇ H ₁₆	0.0	2.00×10^{-7}	4.43×10^{-4}
C ₈ H ₁₈	0.0	2.90×10^{-6}	1.80×10^{-4}
C ₉ H ₂₀	0.0	1.22×10^{-5}	9.16×10^{-5}
C ₁₀ H ₂₂	0.0	2.64×10^{-5}	3.00×10^{-5}
C ₁₁ H ₂₄	0.0	3.37×10^{-5}	1.42×10^{-5}
C ₁₂ H ₂₆	0.0	3.22×10^{-5}	7.38×10^{-6}
C ₁₃ H ₂₈	0.0	2.58×10^{-5}	2.88×10^{-6}
C ₁₄ H ₃₀	0.0	1.79×10^{-5}	1.14×10^{-6}
C ₁₅ H ₃₂	0.0	1.21×10^{-5}	5.90×10^{-7}
C ₁₅ H ₃₄	0.0	8.20×10^{-6}	1.60×10^{-7}
C ₁₇ H ₃₆	0.0	5.50×10^{-6}	9.00×10^{-8}

Table L.4. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial	Equilibrium
		Guess	
$C_{18}H_{33}$	0.0	3.80×10^{-6}	5.00×10^{-8}
$C_{19}H_{40}$	0.0	2.80×10^{-6}	1.00×10^{-8}
$C_{20}H_{42}$	0.0	2.00×10^{-6}	1.00×10^{-8}
$C_{21}H_{44}$	0.0	1.40×10^{-6}	0.0
$C_{22}H_{46}$	0.0	1.00×10^{-6}	0.0
$C_{23}H_{48}$	0.0	6.00×10^{-7}	0.0
$C_{24}H_{50}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{25}H_{52}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{26}H_{54}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{27}H_{56}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{29}H_{60}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$C_{30}H_{62}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{31}H_{64}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{32}H_{66}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{33}H_{68}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{34}H_{70}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$C_{35}H_{72}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{36}H_{74}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0

Table L.4. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_5\text{H}_{11}$	0.0	6.00×10^{-7}	5.31×10^{-4}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_6\text{H}_{13}$	0.0	2.80×10^{-6}	2.36×10^{-4}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_7\text{H}_{15}$	0.0	8.70×10^{-6}	9.73×10^{-5}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_9\text{H}_{19}$	0.0	5.70×10^{-6}	2.92×10^{-5}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{10}\text{H}_{21}$	0.0	5.00×10^{-6}	9.96×10^{-6}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{11}\text{H}_{23}$	0.0	4.00×10^{-6}	3.80×10^{-6}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{12}\text{H}_{25}$	0.0	2.90×10^{-6}	1.58×10^{-6}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{13}\text{H}_{27}$	0.0	1.90×10^{-6}	6.40×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{14}\text{H}_{29}$	0.0	1.30×10^{-6}	2.70×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{15}\text{H}_{31}$	0.0	1.00×10^{-6}	1.10×10^{-7}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	8.00×10^{-7}	5.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	6.00×10^{-7}	2.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	5.00×10^{-7}	1.00×10^{-8}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{20}\text{H}_{41}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{21}\text{H}_{43}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{22}\text{H}_{45}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{23}\text{H}_{47}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{24}\text{H}_{49}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0

Table L.4. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{25}\text{H}_{51}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{26}\text{H}_{53}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{27}\text{H}_{55}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{11}\text{H}_{22}$	0.0	1.27×10^{-5}	7.31×10^{-6}
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	0.0	6.50×10^{-6}	3.60×10^{-6}
$\text{C}_{13}\text{H}_{26}$	0.0	5.20×10^{-6}	1.31×10^{-6}
$\text{C}_{14}\text{H}_{28}$	0.0	3.60×10^{-6}	5.00×10^{-7}
$\text{C}_{15}\text{H}_{30}$	0.0	2.50×10^{-6}	2.90×10^{-7}
$\text{C}_{16}\text{H}_{32}$	0.0	1.70×10^{-6}	1.40×10^{-7}
$\text{C}_{17}\text{H}_{34}$	0.0	1.20×10^{-6}	4.00×10^{-8}
$\text{C}_{18}\text{H}_{36}$	0.0	9.00×10^{-7}	2.00×10^{-8}
$\text{C}_{19}\text{H}_{38}$	0.0	6.00×10^{-7}	1.00×10^{-8}
$\text{C}_{20}\text{H}_{40}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{21}\text{H}_{42}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{22}\text{H}_{44}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{23}\text{H}_{46}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{24}\text{H}_{48}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{25}\text{H}_{50}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0

Table L.4. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial	Equilibrium
		Guess	
$C_{26}H_{52}$	0.0	2.00×10^{-7}	0.0
$1-C_{37}H_{76}OH$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
H_2O	0.0	3.90×10^{-6}	0.0

Table L.5. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation V
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	5.17×10^{-2}	8.10×10^{-3}	6.00×10^{-8}
CO	4.86×10^{-2}	2.21×10^{-2}	8.03×10^{-3}
CO ₂	5.36×10^{-2}	1.37×10^{-2}	7.38×10^{-2}
CH ₄	2.83×10^{-2}	7.56×10^{-3}	5.27×10^{-2}
C ₂ H ₄	2.43×10^{-2}	1.07×10^{-2}	9.81×10^{-6}
C ₂ H ₆	0.0	1.06×10^{-1}	4.13×10^{-3}
C ₆ H ₁₄	0.0	7.59×10^{-5}	8.07×10^{-4}
C ₇ H ₁₆	0.0	8.78×10^{-5}	5.06×10^{-4}
C ₈ H ₁₈	0.0	8.65×10^{-5}	3.08×10^{-4}
C ₉ H ₂₀	0.0	9.33×10^{-5}	1.84×10^{-4}
C ₁₀ H ₂₂	0.0	8.82×10^{-5}	1.11×10^{-4}
C ₁₁ H ₂₄	0.0	6.61×10^{-5}	6.69×10^{-5}
C ₁₂ H ₂₆	0.0	4.89×10^{-5}	3.99×10^{-5}
C ₁₃ H ₂₈	0.0	3.61×10^{-5}	2.42×10^{-5}
C ₁₄ H ₃₀	0.0	2.47×10^{-5}	1.46×10^{-5}
C ₁₅ H ₃₂	0.0	1.58×10^{-5}	8.74×10^{-5}
C ₁₆ H ₃₄	0.0	9.20×10^{-6}	5.28×10^{-6}
C ₁₇ H ₃₆	0.0	5.50×10^{-6}	3.15×10^{-6}

Table L.5. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{18}H_{38}$	0.0	2.60×10^{-6}	1.90×10^{-6}
$C_{19}H_{40}$	0.0	1.10×10^{-6}	1.13×10^{-6}
$C_{20}H_{42}$	0.0	6.00×10^{-7}	6.80×10^{-7}
$C_{21}H_{44}$	0.0	3.00×10^{-7}	4.10×10^{-7}
$C_{22}H_{46}$	0.0	3.00×10^{-7}	2.50×10^{-7}
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	3.23×10^{-5}	6.60×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	4.47×10^{-5}	4.85×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	4.06×10^{-5}	3.08×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	3.33×10^{-5}	1.95×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	2.34×10^{-5}	1.20×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	1.71×10^{-5}	7.63×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	1.30×10^{-5}	4.82×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	9.50×10^{-6}	2.98×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	6.00×10^{-6}	1.88×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{14}H_{29}$	0.0	4.00×10^{-6}	1.19×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{15}H_{31}$	0.0	2.50×10^{-6}	7.54×10^{-6}
$H_3CHC(CH_3)C_{16}H_{33}$	0.0	1.30×10^{-6}	4.66×10^{-6}
$H_3CHC(CH_3)C_{17}H_{35}$	0.0	7.00×10^{-7}	2.94×10^{-6}
$H_3CHC(CH_3)C_{18}H_{37}$	0.0	4.00×10^{-7}	1.85×10^{-6}

Table L.5. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	2.00×10^{-7}	1.16×10^{-6}
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	0.0	2.00×10^{-6}	2.25×10^{-6}
$\text{C}_{13}\text{H}_{26}$	0.0	1.90×10^{-6}	1.36×10^{-6}
$\text{C}_{14}\text{H}_{28}$	0.0	1.40×10^{-6}	8.10×10^{-7}
$\text{C}_{15}\text{H}_{30}$	0.0	9.00×10^{-7}	4.90×10^{-7}

Table L.6. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation VI
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	1.28x10 ⁻¹	6.85x10 ⁻²	1.60x10 ⁻⁷
CO	1.31x10 ⁻¹	9.60x10 ⁻²	4.15x10 ⁻²
CO ₂	6.91x10 ⁻²	5.42x10 ⁻²	1.14x10 ⁻¹
CH ₄	6.50x10 ⁻²	5.19x10 ⁻²	1.24x10 ⁻¹
C ₂ H ₄	8.07x10 ⁻²	3.37x10 ⁻²	7.22x10 ⁻⁵
C ₂ H ₆	0.0	1.02x10 ⁻¹	1.06x10 ⁻²
C ₆ H ₁₄	0.0	8.71x10 ⁻⁵	2.51x10 ⁻³
C ₇ H ₁₆	0.0	1.35x10 ⁻⁴	1.65x10 ⁻³
C ₈ H ₁₈	0.0	1.25x10 ⁻⁴	1.05x10 ⁻³
C ₉ H ₂₀	0.0	1.54x10 ⁻⁴	6.60x10 ⁻⁴
C ₁₀ H ₂₂	0.0	1.63x10 ⁻⁴	4.18x10 ⁻⁴
C ₁₁ H ₂₄	0.0	1.22x10 ⁻⁴	2.64x10 ⁻⁴
C ₁₂ H ₂₆	0.0	8.30x10 ⁻⁵	1.65x10 ⁻⁴
C ₁₃ H ₂₈	0.0	5.64x10 ⁻⁵	1.05x10 ⁻⁴
C ₁₄ H ₃₀	0.0	3.95x10 ⁻⁵	6.68x10 ⁻⁵
C ₁₅ H ₃₂	0.0	2.77x10 ⁻⁵	4.18x10 ⁻⁵
C ₁₆ H ₃₄	0.0	1.93x10 ⁻⁵	2.65x10 ⁻⁵
C ₁₇ H ₃₆	0.0	1.13x10 ⁻⁵	1.66x10 ⁻⁵

Table L.6. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{18}H_{38}$	0.0	6.40×10^{-6}	1.05×10^{-5}
$C_{19}H_{40}$	0.0	3.70×10^{-6}	6.57×10^{-6}
$C_{20}H_{42}$	0.0	2.10×10^{-6}	4.15×10^{-6}
$C_{21}H_{44}$	0.0	1.20×10^{-6}	2.62×10^{-6}
$C_{22}H_{46}$	0.0	7.00×10^{-7}	1.65×10^{-6}
$C_{23}H_{48}$	0.0	5.00×10^{-7}	1.04×10^{-6}
$C_{24}H_{50}$	0.0	7.00×10^{-7}	6.60×10^{-7}
$C_{25}H_{52}$	0.0	8.00×10^{-7}	4.20×10^{-7}
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	6.01×10^{-5}	2.19×10^{-3}
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	6.35×10^{-5}	1.70×10^{-3}
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	8.26×10^{-5}	1.14×10^{-3}
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	7.07×10^{-5}	7.61×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	5.28×10^{-5}	4.87×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	4.07×10^{-5}	3.26×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	3.13×10^{-5}	2.17×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	2.47×10^{-5}	1.40×10^{-4}
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	1.83×10^{-5}	9.28×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{14}H_{29}$	0.0	1.13×10^{-5}	6.21×10^{-5}
$H_3CHC(CH_3)C_{15}H_{31}$	0.0	6.70×10^{-6}	4.12×10^{-5}

Table L.6. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	3.20×10^{-6}	2.66×10^{-5}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	2.90×10^{-6}	1.76×10^{-5}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	1.90×10^{-6}	1.16×10^{-5}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	1.20×10^{-6}	7.67×10^{-6}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{20}\text{H}_{41}$	0.0	8.00×10^{-7}	5.06×10^{-6}
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{21}\text{H}_{43}$	0.0	5.00×10^{-7}	3.33×10^{-6}
$\text{C}_{18}\text{H}_{36}$	0.0	7.00×10^{-7}	1.62×10^{-6}
$\text{C}_{19}\text{H}_{38}$	0.0	1.40×10^{-6}	1.01×10^{-6}

Table L.7. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation VII
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	1.06	9.22×10^{-1}	4.76×10^{-5}
CO	1.04	1.06	1.10
CO ₂	5.69×10^{-1}	5.85×10^{-1}	5.38×10^{-1}
CH ₄	6.79×10^{-1}	7.00×10^{-1}	1.76
C ₂ H ₄	5.69×10^{-1}	4.13×10^{-1}	3.20×10^{-4}
C ₂ H ₆	0.0	9.25×10^{-2}	1.31×10^{-2}
C ₅ H ₁₂	0.0	3.95×10^{-5}	2.31×10^{-6}
C ₆ H ₁₄	0.0	5.67×10^{-5}	1.30×10^{-7}
C ₇ H ₁₆	0.0	1.14×10^{-4}	1.00×10^{-8}
C ₈ H ₁₈	0.0	1.55×10^{-4}	0.0
C ₉ H ₂₀	0.0	1.33×10^{-4}	0.0
C ₁₀ H ₂₂	0.0	8.92×10^{-5}	0.0
C ₁₁ H ₂₄	0.0	8.29×10^{-5}	0.0
C ₁₂ H ₂₆	0.0	9.83×10^{-5}	0.0
C ₁₃ H ₂₈	0.0	7.60×10^{-5}	0.0
C ₁₄ H ₃₀	0.0	4.24×10^{-5}	0.0
C ₁₅ H ₃₂	0.0	2.17×10^{-5}	0.0
C ₁₆ H ₃₄	0.0	1.13×10^{-5}	0.0

Table L.7. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{17}H_{36}$	0.0	5.50×10^{-6}	0.0
$C_{18}H_{38}$	0.0	2.70×10^{-6}	0.0
$C_{19}H_{40}$	0.0	1.80×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_4H_9$	0.0	4.93×10^{-5}	1.00×10^{-8}
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	5.96×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	5.85×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	3.73×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	3.19×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	4.23×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	4.70×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	3.06×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	1.63×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	8.60×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{14}H_{29}$	0.0	4.70×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{15}H_{31}$	0.0	2.40×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{16}H_{33}$	0.0	1.20×10^{-6}	0.0
C_2H_5OH	0.0	2.69×10^{-5}	0.0
1- C_3H_7OH	0.0	4.58×10^{-4}	0.0
2- C_3H_7OH	0.0	1.99×10^{-5}	0.0
1- C_4H_9OH	0.0	2.69×10^{-5}	0.0
H_2O	0.0	4.51×10^{-3}	4.40×10^{-7}

Table L.8. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation VIII
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	1.28x10 ⁻¹	3.85x10 ⁻²	6.57x10 ⁻⁶
CO	1.31x10 ⁻¹	6.66x10 ⁻²	1.62x10 ⁻¹
CO ₂	6.91x10 ⁻²	4.59x10 ⁻²	5.37x10 ⁻²
CH ₄	6.50x10 ⁻²	4.64x10 ⁻²	2.07x10 ⁻¹
C ₂ H ₄	8.07x10 ⁻²	1.34x10 ⁻²	6.30x10 ⁻⁵
C ₂ H ₆	0.0	1.41x10 ⁻¹	1.77x10 ⁻³
C ₆ H ₁₄	0.0	3.78x10 ⁻⁴	2.00x10 ⁻⁸
C ₇ H ₁₆	0.0	3.05x10 ⁻⁴	0.0
C ₈ H ₁₈	0.0	4.48x10 ⁻⁴	0.0
C ₉ H ₂₀	0.0	4.57x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₀ H ₂₂	0.0	3.98x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₁ H ₂₄	0.0	2.72x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₂ H ₂₆	0.0	1.90x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₃ H ₂₈	0.0	1.33x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₄ H ₃₀	0.0	9.28x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₅ H ₃₂	0.0	6.37x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₆ H ₃₄	0.0	4.48x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₇ H ₃₆	0.0	2.44x10 ⁻⁵	0.0

Table L.8. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{18}H_{38}$	0.0	1.24×10^{-5}	0.0
$C_{19}H_{40}$	0.0	7.00×10^{-6}	0.0
$C_{20}H_{42}$	0.0	4.30×10^{-6}	0.0
$C_{21}H_{44}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$C_{22}H_{46}$	0.0	1.60×10^{-6}	0.0
$C_{23}H_{48}$	0.0	2.10×10^{-6}	0.0
$C_{24}H_{50}$	0.0	1.40×10^{-6}	0.0
$C_{25}H_{52}$	0.0	1.70×10^{-6}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_4H_9$	0.0	2.42×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	3.35×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	3.49×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	2.79×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_8H_{17}$	0.0	2.08×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_9H_{19}$	0.0	1.39×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{10}H_{21}$	0.0	1.07×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{11}H_{23}$	0.0	9.08×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{12}H_{25}$	0.0	7.04×10^{-5}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_{13}H_{27}$	0.0	4.51×10^{-5}	0.0

Table L.8. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{14}\text{H}_{29}$	0.0	2.51×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{15}\text{H}_{31}$	0.0	1.62×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	9.90×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	6.00×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	3.90×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{20}\text{H}_{41}$	0.0	1.60×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{12}\text{H}_{24}$	0.0	1.57×10^{-5}	0.0
$\text{C}_{13}\text{H}_{26}$	0.0	1.27×10^{-5}	0.0
$\text{C}_{16}\text{H}_{32}$	0.0	3.20×10^{-6}	0.0
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.0	6.12×10^{-5}	0.0
1- $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$	0.0	1.08×10^{-3}	0.0
2- $\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$	0.0	4.69×10^{-5}	0.0
1- $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$	0.0	6.34×10^{-5}	0.0
H_2O	0.0	1.06×10^{-2}	5.00×10^{-8}

Table L.9. Component Molar Rates in Thermodynamic Simulation IX
(gm-mol/hr).

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
H ₂	1.28x10 ⁻¹	8.62x10 ⁻²	2.16x10 ⁻⁵
CO	1.31x10 ⁻¹	1.28x10 ⁻¹	1.62x10 ⁻¹
CO ₂	6.91x10 ⁻²	7.26x10 ⁻²	5.33x10 ⁻²
CH ₄	6.50x10 ⁻²	7.75x10 ⁻²	2.08x10 ⁻¹
C ₂ H ₄	8.07x10 ⁻²	2.15x10 ⁻²	4.70x10 ⁻⁵
C ₂ H ₆	0.0	2.70x10 ⁻²	1.13x10 ⁻³
C ₆ H ₁₄	0.0	1.07x10 ⁻⁴	0.0
C ₇ H ₁₆	0.0	1.64x10 ⁻⁴	0.0
C ₈ H ₁₈	0.0	2.24x10 ⁻⁴	0.0
C ₉ H ₂₀	0.0	2.33x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₀ H ₂₂	0.0	2.24x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₁ H ₂₄	0.0	1.74x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₂ H ₂₆	0.0	1.31x10 ⁻⁴	0.0
C ₁₃ H ₂₈	0.0	9.77x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₄ H ₃₀	0.0	6.71x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₅ H ₃₂	0.0	4.59x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₆ H ₃₄	0.0	3.31x10 ⁻⁵	0.0
C ₁₇ H ₃₆	0.0	2.14x10 ⁻⁵	0.0

Table L.9. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$C_{18}H_{38}$	0.0	1.37×10^{-5}	0.0
$C_{19}H_{40}$	0.0	9.00×10^{-6}	0.0
$C_{20}H_{42}$	0.0	5.90×10^{-6}	0.0
$C_{21}H_{44}$	0.0	4.00×10^{-6}	0.0
$C_{22}H_{46}$	0.0	3.00×10^{-6}	0.0
$C_{23}H_{48}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$C_{24}H_{50}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$C_{25}H_{52}$	0.0	2.20×10^{-6}	0.0
$C_{26}H_{54}$	0.0	2.00×10^{-6}	0.0
$C_{27}H_{56}$	0.0	1.60×10^{-6}	0.0
$C_{28}H_{58}$	0.0	1.10×10^{-6}	0.0
$C_{29}H_{60}$	0.0	7.00×10^{-7}	0.0
$C_{30}H_{62}$	0.0	4.00×10^{-7}	0.0
$C_{31}H_{64}$	0.0	5.00×10^{-7}	0.0
$C_{32}H_{66}$	0.0	3.00×10^{-7}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_4H_9$	0.0	1.15×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_5H_{11}$	0.0	1.44×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_6H_{13}$	0.0	1.70×10^{-4}	0.0
$H_3CHC(CH_3)C_7H_{15}$	0.0	1.67×10^{-4}	0.0

Table L.9. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_8\text{H}_{17}$	0.0	1.47×10^{-4}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_9\text{H}_{19}$	0.0	1.22×10^{-4}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{10}\text{H}_{21}$	0.0	9.88×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{11}\text{H}_{23}$	0.0	7.28×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{12}\text{H}_{25}$	0.0	5.35×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{13}\text{H}_{27}$	0.0	3.68×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{14}\text{H}_{29}$	0.0	2.41×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{15}\text{H}_{31}$	0.0	1.71×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{16}\text{H}_{33}$	0.0	1.11×10^{-5}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{17}\text{H}_{35}$	0.0	6.00×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{18}\text{H}_{37}$	0.0	4.40×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{19}\text{H}_{39}$	0.0	3.20×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{20}\text{H}_{41}$	0.0	2.50×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{21}\text{H}_{43}$	0.0	2.10×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{22}\text{H}_{45}$	0.0	2.00×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{23}\text{H}_{47}$	0.0	1.90×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{24}\text{H}_{49}$	0.0	1.80×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{25}\text{H}_{51}$	0.0	2.40×10^{-6}	0.0

Table L.9. (Continued.)

Component	In Feed	In Product	
		Initial Guess	Equilibrium
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{26}\text{H}_{53}$	0.0	1.80×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{27}\text{H}_{55}$	0.0	1.20×10^{-6}	0.0
$\text{H}_3\text{CHC}(\text{CH}_3)\text{C}_{28}\text{H}_{57}$	0.0	9.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{19}\text{H}_{38}$	0.0	9.00×10^{-7}	0.0
$\text{C}_{20}\text{H}_{40}$	0.0	2.70×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{21}\text{H}_{42}$	0.0	2.10×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{22}\text{H}_{44}$	0.0	1.70×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{23}\text{H}_{46}$	0.0	1.60×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{24}\text{H}_{48}$	0.0	1.40×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{25}\text{H}_{50}$	0.0	1.40×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{26}\text{H}_{52}$	0.0	1.40×10^{-6}	0.0
$\text{C}_{27}\text{H}_{54}$	0.0	1.10×10^{-6}	0.0
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.0	5.08×10^{-5}	0.0
$1\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$	0.0	8.97×10^{-4}	0.0
$2\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$	0.0	3.90×10^{-5}	0.0
$1\text{-C}_4\text{H}_9\text{OH}$	0.0	5.27×10^{-5}	0.0
H_2O	0.0	8.84×10^{-3}	2.30×10^{-7}

List of Components in Thermodynamic Simulations

437

- | | |
|-----------------------------|-------------------------------|
| 1. Hydrogen | 36. 3-methyl decane |
| 2. Carbon monoxide | 37. 3-methyl undecane |
| 3. Carbon dioxide | 38. 3-methyl dodecane |
| 4. Methane | 39. 3-methyl tridecane |
| 5. Ethylene | 40. 3-methyl tetradecane |
| 6. Ethane | 41. 3-methyl pentadecane |
| 7. Propane | 42. 2,2-dimethyl nonane |
| 8. Butane | 43. 2,2-dimethyl decane |
| 9. Pentane | 44. 2,2-dimethyl undecane |
| 10. Hexane | 45. 2,3-dimethyl nonane |
| 11. Heptane | 46. 2,3-dimethyl undecane |
| 12. Octane | 47. Methyl cyclohexane |
| 13. Nonane | 48. Ethyl cyclohexane |
| 14. Decane | 49. Trans-3-hexene |
| 15. Undecane | 50. Cis-3-heptene |
| 16. Dodecane | 51. Octene |
| 17. Tridecane | 52. Nonene |
| 18. Tetradecane | 53. Decene |
| 19. Pentadecane | 54. Undecene |
| 20. Hexadecane | 55. Dodecene |
| 21. 2-methyl propane | 56. Tridecene |
| 22. 2-methyl butane | 57. Benzene |
| 23. 3-methyl pentane | 58. Toluene |
| 24. 2-methyl pentane | 59. O-xylene |
| 25. 3-methyl hexane | 60. M-xylene |
| 26. 2-methyl hexane | 61. P-xylene |
| 27. 3-methyl heptane | 62. 1-methyl 3-methyl benzene |
| 28. 2-methyl heptane | 63. 1,2,3-trimethyl benzene |
| 29. 2,4-dimethyl hexane | 64. 1,2,4-trimethyl benzene |
| 30. 2,2,4-trimethyl pentane | 65. 1,3,5-trimethyl benzene |
| 31. 3-methyl octane | 66. Ethanol |
| 32. 2-methyl octane | 67. 1-propanol |
| 33. 2,6-dimethyl octane | 68. 2-propanol |
| 34. 3-methyl nonane | 69. 2-butanol |
| 35. 2-methyl nonane | 70. Water |

Table L.10. Molar Rates (gm-mol/hr) in Thermodynamic Simulation I.

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	°K
1	2.06	1.40×10^{-1}	2.73	2.48	9.74	8.25×10^{-1}	5.04	1.09×10^1	
2	1.18×10^1	2.17×10^{-2}	2.69×10^{-1}	1.95	9.80	2.76×10^1	3.57×10^1	3.61×10^1	
3	1.05×10^1	1.66×10^1	1.57×10^1	1.58×10^1	1.15×10^1	4.27	2.27×10^{-1}	3.51×10^{-2}	
4	5.03	4.53×10^1	4.34×10^1	4.10×10^1	4.09×10^1	4.09×10^1	3.94×10^1	3.56×10^1	
5	6.34×10^{-1}	9.72×10^{-10}	1.66×10^{-8}	4.35×10^{-7}	5.10×10^{-6}	2.20×10^{-3}	1.85×10^{-2}	6.22×10^{-2}	
6	1.76×10^1	1.04×10^{-4}	8.22×10^{-5}	2.36×10^{-4}	3.33×10^{-4}	2.22×10^{-2}	2.30×10^{-2}	2.34×10^{-2}	
7	1.90×10^{-3}	2.16×10^{-9}	9.66×10^{-10}	7.34×10^{-9}	1.20×10^{-8}	4.41×10^{-5}	4.01×10^{-5}	4.15×10^{-5}	
8	2.30×10^{-3}	1.04×10^{-13}	2.30×10^{-14}	4.39×10^{-13}	7.82×10^{-13}	1.47×10^{-7}	1.07×10^{-7}	1.06×10^{-7}	
9	3.24×10^{-2}	2.41×10^{-18}	2.93×10^{-19}	1.45×10^{-17}	2.90×10^{-17}	2.91×10^{-10}	1.78×10^{-10}	1.77×10^{-10}	
10	7.91×10^{-2}	7.41×10^{-23}	4.43×10^{-24}	5.60×10^{-22}	1.28×10^{-21}	6.56×10^{-13}	3.68×10^{-13}	3.52×10^{-13}	

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	532.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	
11	9.92×10^{-2}	2.01×10^{-27}	6.24×10^{-29}	2.02×10^{-26}	5.22×10^{-26}	1.58×10^{-15}	6.59×10^{-16}	6.41×10^{-16}	
12	1.68×10^{-1}	6.04×10^{-32}	1.02×10^{-33}	8.62×10^{-31}	2.33×10^{-30}	3.56×10^{-18}	1.32×10^{-18}	1.29×10^{-18}	
13	3.67×10^{-2}	1.35×10^{-36}	1.32×10^{-38}	2.98×10^{-35}	9.49×10^{-35}	7.45×10^{-21}	2.36×10^{-21}	2.23×10^{-21}	
14	8.81×10^{-2}	3.89×10^{-41}	1.93×10^{-43}	1.13×10^{-39}	4.14×10^{-39}	1.64×10^{-23}	4.47×10^{-24}	4.06×10^{-24}	
15	8.54×10^{-2}	9.20×10^{-46}	2.36×10^{-48}	3.51×10^{-44}	1.37×10^{-43}	3.07×10^{-26}	6.52×10^{-27}	6.01×10^{-27}	
16	5.87×10^{-2}	2.68×10^{-50}	3.23×10^{-53}	1.24×10^{-48}	5.49×10^{-48}	6.50×10^{-29}	1.16×10^{-29}	1.06×10^{-29}	
17	4.52×10^{-2}	6.34×10^{-55}	4.50×10^{-58}	4.46×10^{-53}	2.20×10^{-52}	1.39×10^{-31}	2.09×10^{-32}	1.77×10^{-32}	
18	3.98×10^{-2}	1.66×10^{-59}	6.25×10^{-63}	1.61×10^{-57}	8.86×10^{-57}	2.92×10^{-34}	6.74×10^{-36}	3.29×10^{-35}	
19	2.04×10^{-2}	4.86×10^{-64}	8.56×10^{-68}	5.70×10^{-62}	3.54×10^{-61}	8.60×10^{-38}	5.27×10^{-38}	5.77×10^{-38}	
20	1.56×10^{-2}	9.75×10^{-69}	1.19×10^{-72}	2.05×10^{-66}	1.41×10^{-65}	1.32×10^{-39}	1.17×10^{-40}	1.01×10^{-40}	
21	3.00×10^{-3}	1.49×10^{-13}	2.39×10^{-14}	4.04×10^{-13}	5.85×10^{-13}	9.01×10^{-8}	5.32×10^{-8}	4.78×10^{-8}	

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	
22	2.89×10^{-2}	1.02×10^{-17}	9.35×10^{-19}	4.19×10^{-17}	6.61×10^{-17}	5.51×10^{-10}	2.75×10^{-10}	2.48×10^{-10}	
23	2.54×10^{-2}	1.40×10^{-22}	6.60×10^{-24}	7.64×10^{-22}	1.59×10^{-21}	7.50×10^{-13}	3.48×10^{-13}	3.19×10^{-13}	
24	3.80×10^{-2}	2.45×10^{-22}	9.79×10^{-24}	1.11×10^{-21}	2.09×10^{-21}	9.60×10^{-13}	4.36×10^{-13}	3.90×10^{-13}	
25	1.84×10^{-2}	4.13×10^{-27}	1.12×10^{-28}	3.40×10^{-26}	8.29×10^{-26}	2.19×10^{-15}	9.22×10^{-16}	8.67×10^{-16}	
26	1.38×10^{-2}	5.12×10^{-27}	1.29×10^{-28}	3.86×10^{-26}	8.44×10^{-26}	1.98×10^{-15}	7.80×10^{-16}	6.74×10^{-16}	
27	3.56×10^{-2}	1.46×10^{-31}	1.86×10^{-33}	1.47×10^{-30}	3.65×10^{-30}	4.71×10^{-18}	1.40×10^{-18}	1.29×10^{-18}	
28	3.47×10^{-2}	1.51×10^{-31}	1.87×10^{-33}	1.46×10^{-30}	3.70×10^{-30}	5.34×10^{-18}	1.85×10^{-18}	1.66×10^{-18}	
29	6.10×10^{-3}	6.79×10^{-32}	6.11×10^{-34}	4.16×10^{-31}	8.35×10^{-31}	8.58×10^{-19}	2.33×10^{-19}	1.90×10^{-19}	
30	2.39×10^{-2}	2.02×10^{-32}	1.68×10^{-34}	1.16×10^{-31}	2.42×10^{-31}	2.61×10^{-19}	6.81×10^{-20}	5.99×10^{-20}	
31	2.74×10^{-2}	3.69×10^{-36}	2.60×10^{-38}	5.28×10^{-35}	1.38×10^{-34}	9.39×10^{-21}	2.50×10^{-21}	2.23×10^{-21}	
32	2.61×10^{-2}	4.36×10^{-36}	3.18×10^{-38}	6.58×10^{-35}	1.89×10^{-34}	1.38×10^{-20}	3.70×10^{-21}	3.51×10^{-21}	

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium						
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K
33	9.60×10^{-3}	1.77×10^{-40}	5.59×10^{-43}	2.69×10^{-39}	7.27×10^{-39}	2.33×10^{-23}	4.73×10^{-24}	3.86×10^{-24}
34	2.60×10^{-2}	1.17×10^{-40}	3.63×10^{-43}	1.82×10^{-39}	5.71×10^{-39}	2.15×10^{-23}	4.73×10^{-24}	4.06×10^{-24}
35	2.06×10^{-2}	1.13×10^{-40}	4.66×10^{-43}	2.54×10^{-39}	7.80×10^{-39}	2.93×10^{-23}	7.00×10^{-24}	6.07×10^{-24}
36	6.30×10^{-3}	3.40×10^{-45}	6.82×10^{-48}	9.79×10^{-44}	3.14×10^{-43}	6.28×10^{-26}	1.33×10^{-26}	1.10×10^{-26}
37	8.90×10^{-3}	1.06×10^{-49}	9.55×10^{-53}	3.44×10^{-48}	1.35×10^{-47}	1.42×10^{-28}	2.52×10^{-29}	2.11×10^{-29}
38	7.20×10^{-3}	2.46×10^{-54}	1.40×10^{-57}	1.33×10^{-52}	5.37×10^{-52}	3.14×10^{-31}	2.10×10^{-32}	3.84×10^{-32}
39	2.20×10^{-2}	6.09×10^{-59}	2.04×10^{-62}	5.05×10^{-57}	2.38×10^{-56}	7.11×10^{-34}	8.56×10^{-35}	6.99×10^{-35}
40	1.33×10^{-2}	1.59×10^{-63}	2.87×10^{-67}	1.80×10^{-61}	9.41×10^{-61}	1.54×10^{-36}	1.61×10^{-37}	7.75×10^{-38}
41	1.46×10^{-2}	4.10×10^{-68}	4.18×10^{-72}	6.84×10^{-66}	4.13×10^{-65}	3.46×10^{-39}	3.05×10^{-40}	2.43×10^{-40}
42	1.42×10^{-2}	1.78×10^{-45}	2.36×10^{-48}	2.79×10^{-44}	7.56×10^{-44}	1.11×10^{-26}	1.67×10^{-27}	1.33×10^{-27}
43	5.40×10^{-3}	5.52×10^{-50}	3.46×10^{-53}	1.07×10^{-48}	2.98×10^{-48}	2.45×10^{-29}	3.18×10^{-30}	2.55×10^{-30}
44	7.70×10^{-3}	1.55×10^{-54}	4.84×10^{-58}	3.78×10^{-53}	1.28×10^{-52}	5.61×10^{-32}	6.04×10^{-33}	4.64×10^{-33}

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	
45	7.10×10^{-3}	1.22×10^{-45}	2.43×10^{-48}	3.33×10^{-44}	1.11×10^{-43}	2.03×10^{-26}	3.87×10^{-27}	3.30×10^{-27}	
46	9.50×10^{-3}	1.13×10^{-54}	4.98×10^{-58}	4.50×10^{-53}	1.89×10^{-52}	1.03×10^{-31}	1.77×10^{-34}	1.15×10^{-32}	
47	1.05×10^{-2}	2.27×10^{-24}	1.93×10^{-26}	1.10×10^{-23}	1.61×10^{-23}	2.11×10^{-13}	4.57×10^{-14}	3.65×10^{-14}	
48	1.82×10^{-2}	2.26×10^{-29}	1.27×10^{-31}	1.99×10^{-28}	3.48×10^{-28}	2.65×10^{-16}	5.56×10^{-17}	4.66×10^{-17}	
49	2.65×10^{-2}	2.36×10^{-26}	2.10×10^{-26}	2.07×10^{-23}	2.82×10^{-22}	7.28×10^{-13}	2.29×10^{-12}	6.36×10^{-12}	
50	2.54×10^{-2}	6.03×10^{-31}	2.91×10^{-31}	7.42×10^{-28}	1.13×10^{-26}	1.54×10^{-15}	4.08×10^{-15}	1.12×10^{-14}	
51	2.48×10^{-2}	1.67×10^{-35}	4.03×10^{-36}	2.66×10^{-32}	4.52×10^{-31}	3.28×10^{-18}	7.27×10^{-18}	1.97×10^{-16}	
52	3.25×10^{-2}	4.18×10^{-40}	5.52×10^{-41}	9.40×10^{-37}	1.80×10^{-35}	6.97×10^{-21}	1.29×10^{-20}	3.46×10^{-20}	
53	2.02×10^{-2}	1.06×10^{-44}	7.64×10^{-46}	3.37×10^{-41}	7.22×10^{-40}	1.48×10^{-23}	2.30×10^{-23}	6.11×10^{-23}	
54	1.34×10^{-2}	3.21×10^{-49}	1.06×10^{-50}	1.21×10^{-45}	2.89×10^{-44}	3.13×10^{-26}	4.10×10^{-26}	1.07×10^{-25}	
55	1.20×10^{-3}	9.01×10^{-54}	1.47×10^{-55}	4.35×10^{-50}	1.16×10^{-48}	6.64×10^{-29}	7.35×10^{-29}	1.89×10^{-28}	

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	
56	3.10×10^{-3}	2.14×10^{-58}	2.04×10^{-60}	1.56×10^{-54}	4.64×10^{-53}	9.40×10^{-32}	1.32×10^{-31}	3.33×10^{-31}	
57	1.63×10^{-2}	9.54×10^{-13}	5.48×10^{-14}	4.29×10^{-10}	2.29×10^{-9}	1.09	7.01×10^{-1}	1.28	
58	3.25×10^{-2}	2.67×10^{-15}	4.82×10^{-17}	7.99×10^{-13}	3.47×10^{-12}	6.33×10^{-2}	2.39×10^{-2}	3.62×10^{-2}	
59	3.00×10^{-3}	5.68×10^{-19}	3.69×10^{-21}	1.36×10^{-16}	5.23×10^{-16}	3.99×10^{-4}	9.74×10^{-5}	1.28×10^{-4}	
60	4.80×10^{-2}	1.57×10^{-18}	9.18×10^{-21}	3.25×10^{-16}	1.16×10^{-15}	8.24×10^{-4}	1.86×10^{-4}	2.33×10^{-4}	
61	4.80×10^{-2}	6.86×10^{-19}	4.06×10^{-21}	1.45×10^{-16}	5.21×10^{-16}	3.71×10^{-4}	8.41×10^{-5}	1.05×10^{-4}	
62	1.05×10^{-2}	7.04×10^{-23}	2.36×10^{-25}	2.23×10^{-20}	9.39×10^{-20}	3.75×10^{-6}	7.64×10^{-7}	9.82×10^{-7}	
63	7.90×10^{-3}	9.72×10^{-23}	2.41×10^{-25}	2.02×10^{-20}	6.77×10^{-20}	2.13×10^{-6}	3.31×10^{-7}	3.72×10^{-7}	
64	2.01×10^{-2}	5.87×10^{-22}	1.22×10^{-24}	9.49×10^{-20}	2.87×10^{-19}	8.25×10^{-6}	1.15×10^{-6}	1.22×10^{-6}	
65	8.80×10^{-3}	2.74×10^{-22}	5.05×10^{-25}	3.77×10^{-20}	1.07×10^{-19}	2.86×10^{-6}	3.68×10^{-7}	3.77×10^{-7}	
66	1.61×10^{-2}	2.42×10^{-15}	3.81×10^{-14}	1.25×10^{-13}	7.26×10^{-13}	1.79×10^{-10}	9.36×10^{-10}	2.46×10^{-10}	

Table L.10. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	533.2 °K	573.2 °K	650.0 °K	750.0 °K	900.0 °K	1000.0 °K	
67	5.21×10^{-1}	1.26×10^{-19}	9.91×10^{-19}	8.12×10^{-18}	4.90×10^{-17}	5.89×10^{-13}	7.15×10^{-13}	6.28×10^{-13}	
68	1.24×10^{-2}	1.62×10^{-18}	6.71×10^{-18}	4.36×10^{-17}	1.84×10^{-16}	1.58×10^{-12}	1.34×10^{-12}	9.98×10^{-13}	
69	1.67×10^{-2}	1.44×10^{-22}	3.37×10^{-22}	5.73×10^{-21}	2.76×10^{-20}	1.26×10^{-14}	9.01×10^{-15}	6.62×10^{-15}	
70	2.81	2.72×10^{-1}	2.10	4.94×10^{-1}	7.31×10^{-1}	2.09×10^{-2}	1.40×10^{-2}	7.35×10^{-3}	

Table L.11. Molar Rates (gm-mol/hr) in Thermodynamic Simulation XI.

Species	Initial	Equilibrium								
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K		
1	6.26	4.45×10^{-2}	2.65	6.50×10^{-1}	2.84	2.33×10^1	2.10	1.21×10^1		
2	1.21×10^1	5.07×10^{-2}	1.36×10^{-1}	2.07	4.25	2.13×10^1	3.17×10^1	3.61×10^1		
3	1.07×10^1	1.66×10^1	1.52×10^1	1.60×10^1	1.48×10^1	5.01	2.23	3.82×10^{-2}		
4	8.25	8.71×10^1	4.59×10^1	4.38×10^1	4.33×10^1	3.68×10^1	4.36×10^1	3.76×10^1		
5	6.55×10^{-1}	7.60×10^{-9}	6.75×10^{-9}	1.05×10^{-6}	2.04×10^{-6}	1.68×10^{-5}	3.62×10^{-3}	5.83×10^{-2}		
6	1.64×10^1	3.56×10^{-4}	7.07×10^{-5}	6.14×10^{-4}	4.43×10^{-4}	2.86×10^{-4}	2.06×10^{-2}	2.36×10^{-2}		
7	1.60×10^{-3}	2.42×10^{-8}	7.03×10^{-10}	4.96×10^{-8}	2.28×10^{-8}	8.82×10^{-9}	3.28×10^{-5}	3.99×10^{-5}		
8	2.0×10^{-3}	3.83×10^{-12}	1.44×10^{-14}	7.89×10^{-12}	2.21×10^{-12}	4.74×10^{-13}	9.17×10^{-8}	9.75×10^{-8}		
9	2.75×10^{-2}	2.91×10^{-16}	1.55×10^{-19}	6.87×10^{-16}	1.19×10^{-16}	1.48×10^{-17}	1.44×10^{-10}	1.54×10^{-10}		
10	6.71×10^{-2}	2.93×10^{-20}	1.99×10^{-24}	7.13×10^{-20}	7.82×10^{-21}	5.39×10^{-22}	2.67×10^{-13}	2.93×10^{-13}		
11	8.41×10^{-2}	2.61×10^{-24}	2.41×10^{-29}	6.66×10^{-24}	4.50×10^{-25}	1.96×10^{-26}	5.00×10^{-16}	5.09×10^{-16}		

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium								
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K		
12	1.42×10^{-1}	2.58×10^{-28}	3.35×10^{-34}	7.46×10^{-28}	3.06×10^{-29}	7.14×10^{-31}	9.39×10^{-19}	9.75×10^{-19}		
13	3.11×10^{-2}	1.89×10^{-32}	3.65×10^{-39}	6.67×10^{-32}	1.76×10^{-33}	2.42×10^{-35}	1.55×10^{-21}	1.61×10^{-21}		
14	7.47×10^{-2}	1.79×10^{-36}	4.54×10^{-44}	6.65×10^{-36}	1.10×10^{-37}	8.79×10^{-40}	2.73×10^{-24}	2.79×10^{-24}		
15	7.24×10^{-2}	1.39×10^{-40}	4.72×10^{-49}	5.46×10^{-40}	5.49×10^{-42}	2.47×10^{-44}	4.01×10^{-27}	3.94×10^{-27}		
16	4.98×10^{-2}	1.33×10^{-44}	5.50×10^{-54}	5.08×10^{-44}	3.19×10^{-46}	8.29×10^{-49}	5.94×10^{-30}	6.58×10^{-30}		
17	3.84×10^{-2}	1.03×10^{-48}	6.53×10^{-59}	4.81×10^{-48}	1.86×10^{-50}	2.80×10^{-53}	9.80×10^{-33}	1.11×10^{-32}		
18	3.38×10^{-2}	8.85×10^{-53}	7.71×10^{-64}	4.55×10^{-52}	1.10×10^{-54}	9.42×10^{-58}	1.95×10^{-35}	9.32×10^{-36}		
19	1.73×10^{-2}	8.52×10^{-57}	8.98×10^{-69}	4.23×10^{-56}	6.38×10^{-59}	3.16×10^{-62}	6.73×10^{-39}	3.12×10^{-38}		
20	1.32×10^{-2}	5.61×10^{-61}	1.06×10^{-73}	4.00×10^{-60}	3.73×10^{-63}	1.05×10^{-66}	5.85×10^{-41}	5.23×10^{-41}		
21	2.60×10^{-3}	5.48×10^{-12}	1.54×10^{-14}	7.71×10^{-12}	1.87×10^{-12}	3.19×10^{-13}	5.17×10^{-8}	4.38×10^{-8}		
22	2.45×10^{-2}	1.23×10^{-15}	5.10×10^{-19}	2.08×10^{-15}	3.07×10^{-16}	3.06×10^{-17}	2.52×10^{-10}	2.16×10^{-10}		

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K	
23	2.15×10^{-2}	5.54×10^{-20}	3.06×10^{-24}	9.97×10^{-20}	1.01×10^{-20}	6.69×10^{-22}	2.84×10^{-13}	2.65×10^{-13}	
24	3.22×10^{-2}	9.73×10^{-20}	4.56×10^{-24}	1.46×10^{-19}	1.41×10^{-20}	8.30×10^{-22}	3.65×10^{-13}	3.24×10^{-13}	
25	1.56×10^{-2}	5.37×10^{-24}	4.40×10^{-29}	1.16×10^{-23}	7.44×10^{-25}	3.02×10^{-26}	6.85×10^{-16}	6.88×10^{-16}	
26	1.17×10^{-2}	6.66×10^{-24}	5.08×10^{-29}	1.32×10^{-23}	8.09×10^{-25}	2.81×10^{-26}	6.04×10^{-16}	5.35×10^{-16}	
27	3.02×10^{-2}	6.22×10^{-28}	6.22×10^{-34}	1.31×10^{-27}	5.06×10^{-29}	1.02×10^{-30}	1.13×10^{-18}	9.75×10^{-19}	
28	2.95×10^{-2}	6.44×10^{-28}	6.25×10^{-34}	1.31×10^{-27}	5.06×10^{-29}	1.10×10^{-30}	1.37×10^{-18}	1.25×10^{-18}	
29	5.20×10^{-3}	2.90×10^{-28}	2.12×10^{-34}	3.99×10^{-28}	1.32×10^{-29}	2.10×10^{-31}	1.95×10^{-19}	1.44×10^{-19}	
30	2.02×10^{-2}	8.62×10^{-29}	5.81×10^{-35}	1.11×10^{-28}	3.76×10^{-30}	6.20×10^{-32}	5.89×10^{-20}	4.53×10^{-20}	
31	2.32×10^{-2}	5.17×10^{-32}	7.39×10^{-39}	1.24×10^{-31}	2.91×10^{-33}	3.22×10^{-35}	1.88×10^{-21}	1.61×10^{-21}	
32	2.22×10^{-2}	6.11×10^{-32}	8.98×10^{-39}	1.53×10^{-31}	3.74×10^{-33}	4.62×10^{-35}	2.74×10^{-21}	2.53×10^{-21}	
33	8.10×10^{-3}	8.15×10^{-36}	1.38×10^{-43}	1.74×10^{-35}	2.34×10^{-37}	1.35×10^{-39}	3.51×10^{-24}	2.65×10^{-24}	

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K	
34	2.20×10^{-2}	5.37×10^{-36}	8.87×10^{-44}	1.15×10^{-35}	1.67×10^{-37}	1.17×10^{-39}	3.30×10^{-24}	2.79×10^{-24}	
35	1.75×10^{-2}	5.22×10^{-36}	1.11×10^{-43}	1.54×10^{-35}	2.34×10^{-37}	1.56×10^{-39}	4.81×10^{-24}	4.17×10^{-24}	
36	5.40×10^{-3}	5.14×10^{-40}	1.38×10^{-48}	1.55×10^{-39}	1.46×10^{-41}	5.29×10^{-44}	8.30×10^{-27}	7.23×10^{-27}	
37	7.50×10^{-3}	5.25×10^{-44}	1.66×10^{-53}	1.45×10^{-43}	8.43×10^{-46}	1.92×10^{-48}	1.34×10^{-29}	1.32×10^{-29}	
38	6.10×10^{-3}	4.00×10^{-48}	2.06×10^{-58}	1.46×10^{-47}	5.27×10^{-50}	6.50×10^{-53}	2.20×10^{-32}	2.29×10^{-32}	
39	1.87×10^{-2}	3.26×10^{-52}	2.54×10^{-63}	1.45×10^{-51}	3.30×10^{-54}	2.36×10^{-57}	3.37×10^{-35}	3.97×10^{-35}	
40	1.13×10^{-2}	2.78×10^{-56}	3.06×10^{-68}	1.38×10^{-55}	1.90×10^{-58}	8.00×10^{-62}	8.44×10^{-38}	6.76×10^{-38}	
41	1.24×10^{-2}	2.36×10^{-60}	3.78×10^{-73}	1.37×10^{-59}	1.19×10^{-62}	2.91×10^{-66}	1.44×10^{-40}	1.25×10^{-40}	
42	1.20×10^{-2}	2.69×10^{-40}	5.04×10^{-49}	4.85×10^{-40}	3.83×10^{-42}	1.09×10^{-44}	1.25×10^{-27}	8.74×10^{-28}	
43	4.60×10^{-3}	2.74×10^{-44}	6.25×10^{-54}	4.87×10^{-44}	2.39×10^{-46}	3.68×10^{-49}	2.14×10^{-30}	1.59×10^{-30}	
44	6.50×10^{-3}	2.52×10^{-48}	7.51×10^{-59}	4.57×10^{-48}	1.38×10^{-50}	1.34×10^{-53}	3.49×10^{-33}	2.80×10^{-34}	

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium							
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K	
45	6.00×10^{-3}	1.85×10^{-40}	4.98×10^{-49}	5.39×10^{-40}	4.92×10^{-42}	1.80×10^{-44}	2.50×10^{-27}	2.16×10^{-27}	
46	8.00×10^{-3}	1.84×10^{-48}	7.42×10^{-59}	5.07×10^{-48}	1.77×10^{-50}	2.21×10^{-53}	6.94×10^{-33}	6.83×10^{-33}	
47	8.90×10^{-3}	6.76×10^{-21}	5.55×10^{-27}	7.44×10^{-21}	2.21×10^{-22}	5.49×10^{-24}	4.27×10^{-14}	2.69×10^{-14}	
48	1.55×10^{-2}	2.22×10^{-25}	3.05×10^{-32}	3.44×10^{-25}	6.65×10^{-27}	1.04×10^{-28}	4.52×10^{-17}	3.28×10^{-17}	
49	2.25×10^{-2}	2.15×10^{-23}	4.70×10^{-27}	2.59×10^{-21}	6.14×10^{-22}	4.00×10^{-22}	4.72×10^{-13}	4.93×10^{-12}	
50	2.16×10^{-2}	1.80×10^{-27}	5.54×10^{-32}	2.44×10^{-25}	3.59×10^{-26}	1.35×10^{-26}	8.06×10^{-16}	8.25×10^{-15}	
51	2.10×10^{-2}	1.63×10^{-31}	6.52×10^{-37}	2.30×10^{-29}	2.10×10^{-30}	4.52×10^{-31}	1.38×10^{-18}	1.39×10^{-17}	
52	2.75×10^{-2}	1.34×10^{-35}	7.59×10^{-42}	2.14×10^{-33}	1.22×10^{-34}	1.52×10^{-35}	2.35×10^{-21}	2.32×10^{-20}	
53	1.71×10^{-2}	1.12×10^{-39}	8.95×10^{-47}	2.01×10^{-37}	7.13×10^{-39}	5.11×10^{-40}	4.00×10^{-24}	3.91×10^{-23}	
54	1.14×10^{-2}	1.11×10^{-43}	1.05×10^{-51}	1.90×10^{-41}	4.17×10^{-43}	1.72×10^{-44}	6.67×10^{-27}	6.54×10^{-26}	
55	1.00×10^{-3}	1.02×10^{-47}	1.24×10^{-56}	1.79×10^{-45}	2.44×10^{-47}	5.77×10^{-49}	9.22×10^{-30}	1.10×10^{-28}	

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium						
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K
56	2.60×10^{-3}	7.98×10^{-52}	1.46×10^{-61}	1.69×10^{-49}	1.43×10^{-51}	1.94×10^{-53}	3.32×10^{-34}	1.84×10^{-31}
57	1.38×10^{-2}	1.04×10^{-8}	4.54×10^{-15}	3.85×10^{-7}	1.23×10^{-8}	3.75×10^{-9}	2.14×10^{-1}	8.00×10^{-1}
58	2.76×10^{-2}	9.57×10^{-11}	3.58×10^{-18}	2.07×10^{-9}	3.32×10^{-11}	4.02×10^{-12}	7.58×10^{-3}	2.15×10^{-2}
59	2.50×10^{-3}	6.67×10^{-14}	2.43×10^{-22}	1.00×10^{-12}	8.45×10^{-15}	4.48×10^{-16}	4.04×10^{-5}	7.28×10^{-5}
60	4.08×10^{-2}	1.85×10^{-13}	6.11×10^{-22}	2.43×10^{-12}	1.96×10^{-14}	9.58×10^{-16}	7.91×10^{-5}	1.26×10^{-4}
61	4.08×10^{-2}	8.06×10^{-14}	2.70×10^{-22}	1.08×10^{-12}	8.76×10^{-15}	4.31×10^{-16}	3.58×10^{-5}	5.72×10^{-5}
62	8.90×10^{-3}	2.71×10^{-17}	1.32×10^{-26}	4.32×10^{-16}	2.24×10^{-18}	6.71×10^{-20}	2.66×10^{-7}	5.31×10^{-7}
63	6.70×10^{-3}	3.75×10^{-17}	1.40×10^{-26}	4.15×10^{-16}	1.85×10^{-18}	4.27×10^{-20}	1.35×10^{-7}	2.01×10^{-7}
64	1.70×10^{-2}	2.26×10^{-16}	7.20×10^{-26}	2.02×10^{-15}	8.37×10^{-18}	1.72×10^{-19}	5.09×10^{-7}	6.59×10^{-7}
65	7.40×10^{-3}	1.06×10^{-16}	3.02×10^{-26}	8.19×10^{-16}	3.25×10^{-18}	6.18×10^{-20}	1.70×10^{-7}	2.03×10^{-7}
66	1.21×10^{-2}	3.55×10^{-15}	3.52×10^{-14}	1.12×10^{-13}	3.64×10^{-13}	8.55×10^{-13}	2.86×10^{-10}	2.71×10^{-10}

Table L.11. (Continued.)

Species	Initial	Equilibrium						
		450.0 °K	523.2 °K	553.2 °K	600.0 °K	700.0 °K	800.0 °K	1000.0 °K
67	4.14×10^{-1}	6.06×10^{-19}	7.86×10^{-19}	1.94×10^{-17}	3.73×10^{-17}	4.69×10^{-17}	7.42×10^{-13}	6.59×10^{-13}
68	9.30×10^{-3}	7.78×10^{-18}	5.67×10^{-18}	1.16×10^{-16}	1.75×10^{-16}	1.47×10^{-16}	1.74×10^{-12}	1.05×10^{-12}
69	1.25×10^{-2}	2.28×10^{-21}	2.42×10^{-22}	4.00×10^{-20}	3.78×10^{-20}	1.86×10^{-20}	1.12×10^{-14}	6.62×10^{-15}
70	2.11	3.69×10^{-2}	3.28	9.10×10^{-2}	3.49×10^{-1}	6.74×10^{-1}	3.38×10^{-2}	8.90×10^{-3}