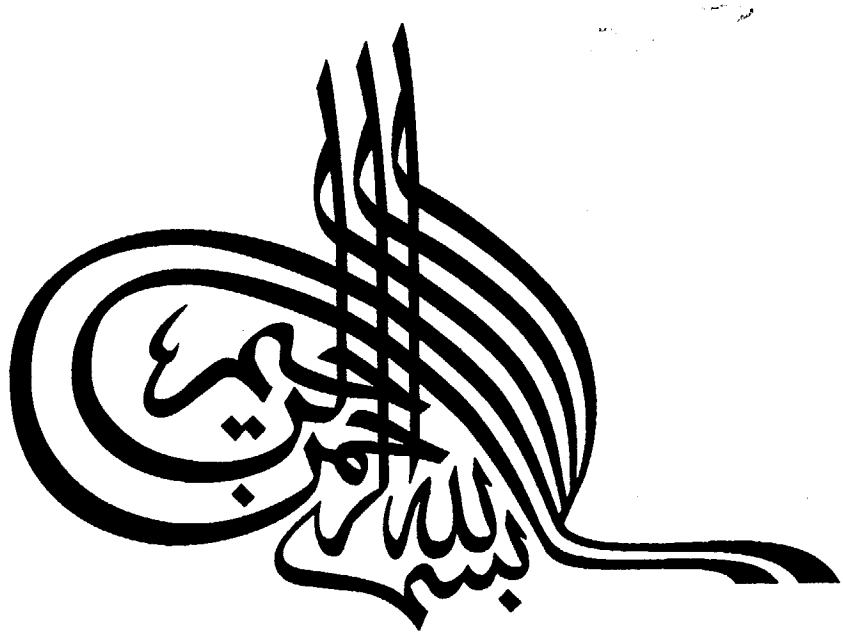
٧٧٨
٣ جزء
٢ قرص



٢٤٨١٧

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه کارشناسی ارشد

مهندسی شیمی

بررسی تعادلات فازی با استفاده از یک آلفای جدید در معادله حالت هاین و بدست آوردن خواص ترمودینامیکی مواد با استفاده از این معادله حالت

نگارش:

امیر عباس ایزدپناه

استاد راهنما:

دکتر محسن وفایی سفتی

استاد مشاور:

محمد محمدزاده بهار

بهار ۱۳۷۸

۲۴۸۱۷

1809/2

۱۳۷۸/۴/۲۰

دانشگاه تربیت مدرس

تاییدیه هیات داوران

آقای امیرعباس ایزدپناه پایان‌نامه ۹ واحدی خود را با عنوان بررسی مقالات فازی با استفاده از یک آلفای جدید در معادله حالت هاین و بدست آوردن خواص ترمودینامیکی مواد با استفاده از این معادلات حالت در تاریخ ۷۸/۲/۸ ارائه کردند. اعضای هیات داوران نسخه نهائی این پایان‌نامه را از نظر فرم و محتوی تایید و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی باگرایش ترموانرژی پیشنهاد می‌کنند. ۱ب۲

اعضای هیات داوران	نام و نام خانوادگی	امضاء
۱ـ استاد راهنما :	آقای دکتر محسن وفائی	
۲ـ استاد مشاور :	آقای دکتر محمد محمدزاده	
۳ـ استادان ممتحن :	آقای دکتر سیدمحمد میلانی	
	آقای دکتر حمید مدرس	
۴ـ مدیر گروه :	آقای دکتر مهرداد منطقیان	
(یا نمایندهٔ گروه تخصصی)		

این نسخه به عنوان نسخه نهایی پایان‌نامه/رساله مورد تایید است.

امضای استاد راهنما:

شماره:.....
تاریخ:.....
پیوست:.....

آیین‌نامهٔ چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرّس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرّس مبیّن بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

مادّهٔ ۱ در صورت اقدام به چاپ پایان‌نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به مرکز نشر دانشگاه اطلاع دهد.

مادّهٔ ۲ در صفحهٔ سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه)، عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد/رسالهٔ دکتری نگارنده در رشتهٔ مهندسی سیمی است که در سال ۱۳۷۸ در دانشکدهٔ فنی و مهندسی دانشگاه تربیت مدرّس به راهنمایی سرکارخانم/جناب آقای دکتر حسن ونکی و مشاورهٔ سرکارخانم/جناب آقای دکتر محمد محمد زاده از آن دفاع شده است.»

مادّهٔ ۳ به منظور جبران بخشی از هزینه‌های نشریات دانشگاه تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به مرکز نشر دانشگاه اهدا کند دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

مادّهٔ ۴ در صورت عدم رعایت مادّهٔ ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ‌شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرّس، تأدیه کند.

مادّهٔ ۵ دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در مادّهٔ ۴ را از محلّ توقیف کتابهای عرضه‌شدهٔ نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

مادّهٔ ۶ اینجانب/امیرعباس ابدنیاد دانشجوی رشته مهندسی سیمی مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

تقدیم به:

- پدر و مادر مهربانم که در تمامی دوران تحصیلم همواره مشوق من بودند و تمام مرارتهای دوران تحصیلم را بجان خریدند تا مرا انسانی فرهیخته بار آورند.

- خواهرانم که بدون پشتگرمی و محبت آنان این مهم بوقوع نمی‌پیوست.

- و همهٔ پویندگان راه علم و دانش

تشکر و قدردانی:

سپاس بیکران خدای را که بی او هیچ است و با او همه چیز.

حال که با عنایات خداوند مهربان موفق به تنظیم و تدوین این پایان نامه شده‌ام، وظیفه خود می‌دانم از زحمات پیگیر و مستمر اساتید ارجمندم در طی دورهٔ کارشناسی ارشد صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم.بدون شک در این راه از تلاشهای بی‌شائبهٔ اساتید محترم، جناب آقایان: دکتر وفائی، دکتر توفیقی، دکتر مهدیزاده، دکتر کوکبی،دکتر پهلوانزاده و دکتر زرین‌قلم بهره‌ها جسته‌ام، لذا بنا به فرمایش حضرت علی(ع) که فرموده‌اند: " من علمنی حرفا فقد صیرنی عبدا " خود را مرهون علم و تلاش آنان می‌دانم.

از استاد راهنمای گرامی جناب آقای دکتر محسن وفائی که با راهنمائیهای ارزشمند و همکاریهای صمیمانهٔ خویش راهگشای این تحقیق بوده‌اند، صمیمانه تشکر و قدردانی می‌نمایم. از همفکری و مساعدت استاد مشاور محترم جناب آقای مهندس محمد محمدزاده بهار نهایت تشکر و قدردانی را می‌نمایم.

از آقای مهندس سید علی موسوی که در طول تحصیل از مشورت با ایشان و همچنین همکاری بی‌شائبه ایشان نکته‌ها آموختم صمیمانه تشکر و قدردانی می‌نمایم.

امیر عباس ایزدپناه

بهار ۱۳۷۸

چکیده :

در اینجا مدل بهتری برای تابع α درمعادله حالت هـاین پیشـنهاد می‌شـود. پارامترهـا و ضریـب تراکم پذیری بحرانی ظاهری Zc ،برای ۳۹ ماده خالص، با محاسبه دانسیته مایع اشباع در حـالی که تساوی فوگاسیته ها در طول منحنی اشباع ارضا می‌شـوند، بدسـت آورده شـده اسـت. بـرای کاربرد آسانتر، این پارامترها بوسیله معادله ای برحسب ضریب بی مرکزی بیان شده اند. هنگامی که این تابع α با معادله حالت هاین بکار برده می‌شـود، داده هـای فشـار بخـار و دانسـیته مـایع اشباع را از نقطه سه گانه تا نقطه بحرانی بخوبی پیش بینی می‌کنـد. ایـن اصلاحیـه فشـار بخـار مواد خالص را دقیقتر از معادلات دیگر مثل SRK ، PR یا معادله اولیـه هـاین پیـش بینـی مـی نماید.

این تحقیق با بکار بردن قوانین اختلاط استاندارد و داده‌های تعادلی بخار - مـایع بـه مخلوطهـا توسعه داده شد. ضریب اثر متقابل بین دو جزء k_{ij} برای ۴۷ سیستم هیدروکربـن - هیدروکربـن، هیدروکربن - غیر هیدروکربن و غیر هیدروکربن - غیر هیدروکربن بدست آورده شـد. همچنیـن نسبت تعادل K برای این سیستمها توسط این اصلاحیه پیش بینی شد و با مقادیر آزمایشـگاهی مقایسه گردید.

واژگان کلیدی: تعادلات فازی، معادلات حالت، تابع آلفا

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست علائم .....

- فصل اول: مقدمه ۱

- فصل دوم: مروری بر مطالعات انجام شده

۲-۱- قانون گازهای ایده‌آل ۴

۲-۲- معادلات حالت دوپارامتری ۵

۲-۲-۱- معادله حالت واندروالس ۵

۲-۲-۲- معادله حالت زدلیچ -کونگ ۸

۲-۲-۳- اصلاحیه سوآو بر معادله حالت RK ۱۲

۲-۲-۴- معادله حالت پنگ - رابینسون ۱۶

۲-۲-۵- اصلاحیه معادله RK توسط تو و همکاران ۱۹

۲-۲-۶- اصلاحیه معادله PR توسط تو و همکاران ۲۵

۲-۳- معادلات حالت سه پارامتری ۲۸

۲-۳-۱- معادله حالت اشمیت - ونزل ۲۹

۲-۳-۲- معادله حالت هارمنز و کناپ ۳۳

۲-۳-۳- معادله حالت کوبیک ۳۵

۲-۳-۴- معادله حالت پتل و تجا ۳۶

۲-۳-۵- معادله حالت هاین ۳۹

۲-۳-۶- معادله حالت یو - لو ۴۲

۲-۳-۷- معادله حالت تو-کون -کانینگهام ۴۴

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل سوم: روش انجام کار

۳-۱- معادله حالت مورد استفاده ۴۸

۳-۲- بدست آوردن ضریب فوگاسیته ۵۱

۳-۳- بدست آوردن رابطه $\frac{H-H^*}{RT}$ برای مواد خالص ۵۳

۳-۴- بدست آوردن پارامترها و آزمایش مدل جدید α ۵۴

۳-۵- بدست آوردن پارامترهای مواد خالص بصورت تابعی از ضریب بی‌مرکزی ω ۵۷

۳-۶- بدست آوردن ضریب اثر متقابل بین دوجزء k_{ij} و پیش‌بینی نسبت تعادل K ۵۷

۳-۷- محاسبات تعادلی بخار- مایع (VLE) ۵۸

۳-۷-۱- محاسبات نقطه حباب ۵۸

۳-۷-۲- محاسبات نقطه شبنم ۶۱

۳-۷-۳- محاسبات تبخیر آنی در دما و فشار ثابت ۶۵

- فصل چهارم: نتایج و بحث

۴-۱- نتایج بدست آمده از اصلاحیه جدید ۶۸

۴-۱-۱- پیش‌بینی فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص ۶۸

۴-۱-۲- تعمیم پارامترها ۱۰۱

۴-۱-۳- تعادل بخار- مایع برای سیستمهای دوجزئی و بدست آوردن ضریب اثر متقابل k_{ij} ۱۱۸

۴-۲- بحث و نتایج ۱۲۹

۴-۲-۱- دقت خواص پیش بینی شده برای مواد خالص ۱۲۹

۴-۲-۲- دقت پیش بینی تعادل بخار-مایع برای مخلوطهای دوجزئی ۱۳۲

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

- فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادها

۵-۱- نتیجه گیری ۱۳۴

۵-۲- پیشنهادها ۱۳۵

- فهرست منابع ۱۳۶

- ضمیمه الف .....

- ضمیمه ب .....

- چکیده انگلیسی .....

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

۱- جدول (۲-۱) : پارامتر m_1 برای مواد خالص..... ۱۸

۲- جدول (۲-۲) : مقدار پارامتر شیفت برای بعضی هیدروکربنها..... ۱۹

۳- جدول (۲-۳) : مقادیر پارامترهای M,L وN برای برخی مواد خالص برای
اصلاحیه معادله R K ۲۲

۴- جدول (۲-۴) : مقدار پارامترهای M,L وN که در تابع α تعمیم یافته بکار می‌رود..... ۲۴

۵- جدول (۲-۵) : مقادیر پارامترهای M,L وN برای برخی مواد خالص برای
اصلاحیه معادله P R..... ۲۵

۶- جدول (۲-۶) : مقادیر پارامترهای M,L وN که در تابع α تعمیم یافته بکارمی‌رود..... ۲۶

۷- جدول (۲-۷) : نمایی از برخی معادلات حالت با مقادیر w,u..... ۳۰

۸- جدول (۲-۸) : خواص فیزیکی و پارامترهای F و Z_m برای برخی مواد..... ۳۸

۹- جدول (۲-۹) : پارامترهای N,M,L و Z_c برای برخی مو د برای معادله TCC..... ۴۵

۱۰- جدول (۲-۱۰) : پارامترهای M,L وN برای α تعمیم یافته ۴۶

۱۱- جدول (۴-۱) : پارامترهای Z_c,θ,m,N,M,L و ثابتهای بحرانی به همراه
ضریب بی‌مرکزی برای پارافینها ۷۰

۱۲- جدول (۴-۲) : پارامترهای Z_c,θ,m,N,M,L و ثابتهای بحرانی به همراه
ضریب بی‌مرکزی برای اولفینها و سیکلو پارافینها ۷۲

۱۳- جدول (۴-۳) : پارامترهای Z_c,θ,m,N,M,L و ثابتهای بحرانی به همراه
ضریب بی‌مرکزی برای آروماتیکها ۷۳

۱۴-جدول(۴-۴): پارامترهای Z_c,θ,m,N,M,L و ثابتهای بحرانی به همراه
ضریب بی‌مرکزی برای موادغیرآلی..... ۷۴

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

۱۵- جدول (۴-۵) : درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص و محدوده دما و فشار و تعدادنقاط آزمایشگاهی برای پارافینها ۷۵

۱۶- جدول (۴-۶) : درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص و محدوده دما و فشار و تعداد نقاط آزمایشگاهی برای اولفینها و سیکلو پارافینها . ۷۷

۱۷- جدول (۴-۷) : درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص و محدوده دما و فشار و تعداد نقاط آزمایشگاهی برای آروماتیکها..... ۷۸

۱۸- جدول (۴-۸) : درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص و محدوده دما و فشار و تعداد نقاط آزمایشگاهی برای مواد غیرآلی ۷۹

۱۹- جدول (۴-۹) : مقادیر Z_c بعد از تعمیم پارامترها و درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص برای پارافینها ۱۰۸

۲۰- جدول (۴-۱۰) : مقادیر Z_c بعد از تعمیم پارامترها و درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص برای اولفینها و سیکلو پارافینها ۱۰۹

۲۱- جدول (۴-۱۱) : مقادیر Z_c بعداز تعمیم پارامترها و درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص برای آروماتیکها ۱۰۹

۲۲- جدول (۴-۱۲) : مقادیر Z_c بعد از تعمیم پارامترها و درصد انحراف متوسط و متوسط مطلق در فشار بخار و دانسیته مایع اشباع مواد خالص برای مواد غیرآلی ۱۱۰

۲۳- جدول (۴-۱۳) : مقایسه بین نتایج بدست آمده از اصلاحیه جدید و معادله ونیه هاین، SRKو PR برای پارافینها..... ۱۱۱

۲۴- جدول (۴-۱۴) : مقایسه بین نتایج بدست آمده از اصلاحیه جدید و معادله ونیه هاین، SRKو PR برای اولفینها و سیکلو پارافینها ۱۱۳

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

۲۵- جدول (۴-۱۵) : مقایسه بین نتایج بدست آمده از اصلاحیه جدید و
معادله اولیه هاین، SRKو PR برای آروماتیکها ۱۱۴
۲۶- جدول (۴-۱۶) : مقایسه بین نتایج بدست آمده از اصلاحیه جدید و
معادله اولیه هاین، SRKو PR برای مواد غیرآلی ۱۱۵
۲۷- جدول (۴-۱۷) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای این اصلاحیه جدید و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی متان ۱۱۹
۲۸- جدول (۴-۱۸) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای این اصلاحیه جدید و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی اتان ، پروپان و نرمان بوتان ۱۲۰
۲۹- جدول (۴-۱۹) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای این اصلاحیه جدید و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی دی اکسید کربن ۱۲۱
۳۰- جدول (۴-۲۰) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای این اصلاحیه جدید و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی سولفید هیدروژن ۱۲۲
۳۱- جدول (۴-۲۱) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای این اصلاحیه جدید و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی نیتروژن ۱۲۳

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

۳۲- جدول (۴-۲۲) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای معادله اولیه هاین و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی متان ۱۲۴

۳۳- جدول (۴-۲۳) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای معادله اولیه هاین و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی اتان ، پروپان و نرمال بوتان ۱۲۵

۳۴- جدول (۴-۲۴) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای معادله اولیه هاین و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی دی اکسید کربن ۱۲۶

۳۵- جدول (۴-۲۵) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای معادله اولیه هاین و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی سولفید هیدروژن ۱۲۷

۳۶- جدول (۴-۲۶) : محدوده دما و فشار ، تعداد نقاط آزمایشگاهی ،
مقدار بهینه k_{12} برای معادله اولیه هاین و درصد انحراف متوسط مطلق
در K_1 ,K_2 و P_b برای سیستمهای حاوی نیتروژن ۱۲۸

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

۱- شکل (۲-۱) : رفتار حجمی یک مادهٔ خالص که توسط معادلات درجه سه واندروالسی پیش‌بینی می‌شود ۶

۲- شکل (۲-۲) : وابستگی a به ω در چند دمای کاهیده مختلف برای معادله RK ۲۳

۳- شکل (۲-۳) : وابستگی a' و a'' به دمای کاهیده ۲۴

۴- شکل (۲-۴) : وابستگی a نسبت به ω برای چند دمای کاهیده مختلف برای معادله PR ۲۷

۵- شکل (۲-۵) : وابستگی a' و a'' نسبت به دمای کاهیده ۲۸

۶- شکل (۳-۱) : نمودار تابع α برحسب T_r برای پرویان ، برای سه مدل مختلف تابع α ۵۰

۷- شکل (۳-۲) : روند نمای محاسبات نقطه حباب ۶۰

۸- شکل (۳-۳) : روند نمای محاسبات نقطه شبنم ۶۲

۹- شکل (۳-۴) : روش همگرایی برای محاسبات دمای نقطه حباب یا نقطه شبنم ۶۳

۱۰- شکل (۳-۵) : روش همگرایی برای محاسبات فشار نقطه حباب یا نقطه شبنم ۶۴

۱۱- شکل (۳-۶) : روند نمای محاسبات تبخیر آنی در دما و فشار ثابت ۶۷

۱۲- شکل (۴-۱) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای متان ۸۰

۱۳- شکل (۴-۲) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای اتان ۸۱

۱۴- شکل (۴-۳) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای نرمال بوتان ۸۲

۱۵- شکل (۴-۴) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای دکان ۸۳

۱۶- شکل (۴-۵) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای اتیلن ۸۴

۱۷- شکل (۴-۶) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای نیتروژن ۸۵

۱۸- شکل (۴-۷) : نمودار داده‌های فشار بخار تجربی و محاسبه شده برای دی‌اکسیدکربن .. ۸۶