

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۳۸۱ / ۴ / ۳۰

وزارتخانه صنعت، معدن و انرژی
جمهوری اسلامی ایران



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده شیمی

تعیین توابع همبستگی برای محاسبه ویسکوزیته و هدایت گرمایی
گازهای خالص در ناحیه بحرانی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

ارائه دهنده:

مصطفی کریمی

اساتید راهنما:

دکتر بیژن نجفی

دکتر یوسف غایب

۱۳۷۹

۴۱۲۴۲



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک آقای مصطفی کرمی

تحت عنوان

تعیین توابع همبستگی برای محاسبه ویسکوزیته و هدایت گرمایی
گازهای خالص در ناحیه بحرانی

در تاریخ ۱۵/۱۲/۷۹ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

۱- استاد راهنمای پایان نامه

۲- استاد راهنمای پایان نامه

۳- استاد مشاور پایان نامه

۴- استاد داور

۵- استاد داور

۶- سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده

دکتر بیژن نجفی

دکتر یوسف غایب

دکتر غلامعباس پارسافر

دکتر سید حسن قاضی عسگر

دکتر ناهید فرضی

دکتر غلامعباس پارسافر

با حمد خداوند یکتا

وبا تشکر از

دکتر بیژن نجفی

دکتر یوسف غایب

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات ،
ابتکارات و نوآوریهای ناشی از تحقیق موضوع
این پایان نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان
است

تقدیم به

مادر

و

همسر عزیزه

فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
هشت	فهرست
پانزده	چکیده

فصل اول : خواص انتقالی گازها و رفتار آنها در ناحیه بحرانی

۱	مقدمه
۴	۱-۱- نظریه جنبشی گازها
۴	۲-۱- مدل ارائه شده در نظریه جنبشی گازها
۵	۳-۱- تابع توزیع ماکسول- بولتزمن
۵	۱-۳-۱- تابع توزیع ماکسول- بولتسمن در یک بعد
۵	۲-۳-۱- تابع توزیع ماکسول- بولتسمن در دو بعد
۶	۳-۳-۱- تابع توزیع ماکسول- بولتسمن در سه بعد
۷	۴-۱- برخوردهای بین مولکولی
۸	۱-۴-۱- تعداد برخوردها
۸	۲-۴-۱- پویش آزاد میانگین
۹	۵-۱- خواص انتقالی در گازها
۹	۱-۵-۱- نظریه جنبشی خواص انتقالی
۱۱	۲-۵-۱- اثر نیروهای بین مولکولی
۱۲	۳-۵-۱- ویسکوزیته
۱۴	۱-۳-۵-۱- اثر فشار روی ویسکوزیته گازها
۱۶	۲-۳-۵-۱- تعیین تجربی ویسکوزیته سیالات
۲۱	۴-۵-۱- هدایت گرمایی
۲۳	۱-۴-۵-۱- اثر دما روی هدایت گرمایی گازها در فشار پائین
۲۳	۲-۴-۵-۱- اثر فشار روی هدایت گرمایی گازها
۲۵	۳-۴-۵-۱- تعیین تجربی هدایت گرمایی

۲۸ نفوذ ۰-۰-۱
۳۰ اثر دما و فشار بر پدیده نفوذ ۱-۰-۰-۱
۳۰ تعیین تجربی ضریب نفوذ ۲-۰-۰-۱
۳۱ ناحیه بحرانی و خواص انتقالی گازها ۶-۱
۳۱ بررسی پدیده بحرانی با استفاده از نمودار $P-V$ ۱-۶-۱
۳۳ تعیین تجربی دمای بحرانی ۲-۶-۱
۳۴ بررسی نقطه بحرانی بخار-مایع ۳-۶-۱
۳۷ رفتار گلوبال خواص انتقالی در ناحیه بحرانی ۴-۶-۱
۴۱ خلاصه ۷-۱

فصل دوم: محاسبه هدایت گرمایی و ویسکوزیته گازهای خالص در ناحیه بحرانی

۴۳ مقدمه
۴۴ ۱-۲- مروری بر کارهای قبلی
۴۷ ۲-۲- بدست آوردن داده های بحرانی با استفاده از روش تعیین خط زمینه
۴۸ ۳-۲- محاسبه ویسکوزیته و هدایت گرمایی گازهای خالص در ناحیه بحرانی
۴۸ ۱-۳-۲- محاسبه ویسکوزیته بحرانی گاز نیتروس اکساید (N_2O)
۴۹ ۲-۳-۲- محاسبه ویسکوزیته بحرانی گاز تری فلورو متان (CHF_3)
۵۰ ۳-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی بحرانی گاز نیتروژن (N_2)
۵۱ ۴-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی بحرانی گاز آرگون (Ar)
۵۱ ۵-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی بحرانی گازی اکسید کربن (CO_2)
۵۲ ۶-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی بحرانی گاز متان (CH_4)
۵۲ ۷-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی ناحیه بحرانی گاز اتان (C_2H_6)
۵۳ ۴-۲- ارائه یک معادله عمومی برای محاسبه $\Delta\lambda_{crit}$ و $\Delta\eta_{crit}$ گازهای خالص
۵۴ ۵-۲- تلاش برای کاهش پارامترهای معادلات (۱۶-۲) و (۱۷-۲)
۵۴ ۶-۲- نتیجه گیری

فصل سوم: نتیجه گیری

۱۰۲	۳- نتیجه گیری
۱۰۶	منابع

فهرست اشکال

- شکل (۱-۱): اثر دما بر توزیع سرعت‌های ماکسول-بولتسمن ۷
- شکل (۲-۱) جریان چسبنده بین صفحه ساکن بالا و صفحه متحرک پایین نشان دهنده پدیده ویسکوزیته ۱۳
- شکل (۳-۱): ویسکوزیته دی اکسید کربن نسبت به دما در فشارهای متفاوت ۱۷
- شکل (۴-۱): ویسکوزیته نیتروژن نسبت به فشار در دماهای متفاوت ۱۷
- شکل (۵-۱): ویسکومتر استوالد ۱۸
- شکل (۶-۱): دستگاه اندازه گیری ویسکوزیته گاز ۲۰
- شکل (۷-۱): دستگاه ویسکومتر استوانه ای ۲۱
- شکل (۸-۱): هدایت گرمایی گازهای مختلف نسبت به دما در فشارهای پائین ۲۴
- شکل (۹-۱): هدایت گرمایی اضافی بر حسب دانسیته برای چندین گاز ۲۶
- شکل (۱۰-۱): اثر فشار روی هدایت گرمایی چند گاز ۲۷
- شکل (۱۱-۱): وابستگی هدایت گرمایی متان روی دما و فشار ۲۷
- شکل (۱۲-۱): روش سیم-داغ برای اندازه گیری تجربی هدایت گرمایی ۲۸
- شکل (۱۳-۱): ظرف محتوی دو گاز مختلف که با یک تیغه از هم جدا شده اند ۲۹
- شکل (۱۴-۱): تعیین تجربی ضریب نفوذ ۳۱
- شکل (۱۵-۱): همدماهای دی اکسید کربن نزدیک نقطه بحرانی ۳۳
- شکل (۱۶-۱): نمایش کدوری بحرانی برای یک مایع درون یک ظرف سر بسته ۳۴
- شکل (۱۷-۱): نمایش چگالی های ارتوباریک درمورد پنتان نرمال نسبت به دما ۳۵
- شکل (۱۸-۱): منحنی فشار-بخار فازهای گزنون ۳۶
- شکل (۱۹-۱): منطقه انحراف بحرانی محدود به دمای کاهش یافته و چگالی کاهش یافته برای گاز CO_2 ۳۸
- شکل (۲۰-۱): هدایت گرمایی CO_2 در ناحیه بحرانی ۳۹
- شکل (۲۱-۱): ویسکوزیته دی اکسید کربن در ناحیه بحرانی ۴۰
- شکل (۲۲-۱): ضریب نفوذ بحرانی برای گاز دی اکسید کربن ۴۱
- شکل (۱-۲): هدایت گرمایی گاز نیتروژن در همه محدوده دما و دانسیته ۵۸
- شکل (۲-۲): هدایت گرمایی گاز نیتروژن در محدوده بحرانی ۵۹
- شکل (۳-۲): ویسکوزیته گاز نیتروس اکساید در همه محدوده دما و دانسیته ۶۰

- شکل (۲-۴): درصد خطای نسبی گاز نیتروس اکساید بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۶۱
- شکل (۲-۵): ویسکوزیته گاز تری فلوئورو متان در همه محدوده دما و دانسیته ۶۲
- شکل (۲-۶): درصد خطای نسبی گاز تری فلوئورو متان بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۶۳
- شکل (۲-۷): هدایت گرمایی گاز نیتروژن در همه محدوده دما و دانسیته ۶۴
- شکل (۲-۸): درصد خطای نسبی گاز نیتروژن بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۶۵
- شکل (۲-۹): هدایت گرمایی گاز آرگون در همه محدوده دما و دانسیته ۶۶
- شکل (۲-۱۰): درصد خطای نسبی گاز آرگون بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۶۷
- شکل (۲-۱۱): هدایت گرمایی گاز دی اکسید کربن در همه محدوده دما و دانسیته ۶۸
- شکل (۲-۱۲): درصد خطای نسبی گاز دی اکسید کربن بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۶۹
- شکل (۲-۱۳): هدایت گرمایی گاز متان در همه محدوده دما و دانسیته ۷۰
- شکل (۲-۱۴): درصد خطای نسبی گاز متان بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۷۱
- شکل (۲-۱۵): هدایت گرمایی گاز اتان در همه محدوده دما و دانسیته ۷۲
- شکل (۲-۱۶): درصد خطای نسبی گاز اتان بر حسب دانسیته کاهش یافته در دماهای مختلف ۷۳
- شکل (۲-۱۷): ویسکوزیته تجربی و محاسباتی گاز نیتروس اکساید در ناحیه بحرانی با استفاده از معادله (۲-۱۶) ۷۴
- شکل (۲-۱۸): درصد خطای نسبی برای گاز نیتروس اکساید در دماهای مختلف با استفاده از معادله (۲-۱۶) ۷۵
- شکل (۲-۱۹): همانند شکل (۲-۱۷) برای گاز تری فلوئورو متان ۷۶
- شکل (۲-۲۰): همانند شکل (۲-۱۸) برای گاز تری فلوئورو متان ۷۷
- شکل (۲-۲۱): هدایت گرمایی تجربی و محاسباتی گاز نیتروژن در ناحیه بحرانی با استفاده از معادله (۲-۱۷) ۷۸
- شکل (۲-۲۲): درصد خطای نسبی برای گاز نیتروژن در دماهای مختلف با استفاده از معادله (۲-۱۷) ۷۹
- شکل (۲-۲۳): همانند شکل (۲-۲۱) برای گاز آرگون ۸۰
- شکل (۲-۲۴): همانند شکل (۲-۲۲) برای گاز آرگون ۸۱
- شکل (۲-۲۵): همانند شکل (۲-۲۱) برای گاز دی اکسید کربن ۸۲
- شکل (۲-۲۶): همانند شکل (۲-۲۲) برای گاز دی اکسید کربن ۸۳
- شکل (۲-۲۷): همانند شکل (۲-۲۱) برای گاز متان ۸۴
- شکل (۲-۲۸): همانند شکل (۲-۲۲) برای گاز متان ۸۵
- شکل (۲-۲۹): همانند شکل (۲-۲۱) برای گاز اتان ۸۶
- شکل (۲-۳۰): همانند شکل (۲-۲۱) برای گاز اتان ۸۷
- شکل (۲-۳۱): ویسکوزیته تجربی و محاسباتی گاز نیتروس اکساید در ناحیه بحرانی با استفاده از معادله (۲-۲۰) ۸۸

- ۸۹ شکل (۳۲-۲): درصد خطای نسبی برای گاز نیتروس اکساید در دماهای مختلف با استفاده از معادله (۲۰-۲)
- ۹۰ شکل (۳۳-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز تری فلونورو متان
- ۹۱ شکل (۳۴-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز تری فلونورو متان
- ۹۲ شکل (۳۵-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز نیتروژن
- ۹۳ شکل (۳۶-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز نیتروژن
- ۹۴ شکل (۳۷-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز آرگون
- ۹۵ شکل (۳۸-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز آرگون
- ۹۶ شکل (۳۹-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز دی اکسید کربن
- ۹۷ شکل (۴۰-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز دی اکسید کربن
- ۹۸ شکل (۴۱-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز متان
- ۹۹ شکل (۴۲-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز متان
- ۱۰۰ شکل (۴۳-۲): همانند شکل (۳۱-۲) برای گاز اتان
- ۱۰۱ شکل (۴۴-۲): همانند شکل (۳۲-۲) برای گاز اتان

فهرست جداول

۴۴	جدول (۱-۲): ضرایب $\lambda_o(T)$ برای گاز نیتروژن
۴۵	جدول (۲-۲): ضرایب $\Delta\lambda_{\text{excess}}(T, \rho)$ برای گاز نیتروژن
۴۵	جدول (۳-۲): ضرایب $\Delta\lambda_{\text{crit}}$ برای گاز نیتروژن
۴۶	جدول (۴-۲): ضرایب $\lambda_o(T)$ برای گاز پروپان
۴۶	جدول (۵-۲): ضرایب B_{ij} معادله (۶-۲) برای گاز پروپان
۴۷	جدول (۶-۲): ضرایب معادله (۷-۲) برای گاز پروپان
۴۹	جدول (۷-۲): پارامترها و خطای مربوط به معادله (۱۱-۲) برای گاز N_2O
۵۰	جدول (۸-۲): پارامترها و خطای مربوطه برای گاز (CHF_3)
۵۰	جدول (۹-۲): پارامترها و خطای مربوط به گاز نیتروژن
۵۱	جدول (۱۰-۲): پارامترها و خطای مربوط به معادلات فوق برای گاز آرگون
۵۲	جدول (۱۱-۲): پارامترها و خطای مربوط به معادلات زمینه و (۱۸-۲) برای گاز دی اکسید کربن
۵۲	جدول (۱۲-۲): پارامترها و خطای مربوطه برای گاز متان
۵۳	جدول (۱۳-۲): پارامترها و خطاهای مربوطه برای گاز اتان
۵۶	جدول (۱۴-۲): ضرایب و درصد خطای نسبی برای گازهای مختلف با استفاده از معادلات (۱۶-۲) و (۱۷-۲)
۵۷	جدول (۱۵-۲): ضرایب و درصد خطای نسبی برای گازهای مختلف با استفاده از معادلات (۲۰-۲) و (۲۱-۲)
۱۰۵	جدول (۱-۳): مقایسه درصد خطاهای روش‌های مختلف

چکیده

هدف این پایان نامه استخراج توابع همبستگی برای محاسبه ویسکوزیته و هدایت گرمایی گازهای خالص در ناحیه بحرانی با استفاده از داده‌های تجربی ضرایب انتقالی ویسکوزیته و هدایت گرمایی در چگالی‌های حول چگالی بحرانی و دماهای نزدیک دمای بحرانی است. با استفاده از چنین توابعی می‌توان ویسکوزیته و هدایت گرمایی این سیالات را در ناحیه بحرانی پیش بینی نمود.

ویسکوزیته گازهای خالص در ناحیه بحرانی دارای انحراف قابل توجهی نسبت به رفتار منظم زمینه‌ای در محدوده کمی از دما و چگالی حول نقطه بحرانی است، و انحراف هدایت گرمایی آنها نسبت به انحراف ویسکوزیته بیشتر بوده و در محدوده وسیعتری از دما و چگالی حول نقطه بحرانی مشاهده می‌شود.

در این پایان نامه ابتدا مقادیر ویسکوزیته گازهای نیتروس اکساید و تری‌فلوئورومتان و هدایت گرمایی گازهای نیتروژن، آرگون، دی‌اکسید کربن، متان و اتان با استفاد از معادله AMPL و تطبیق ریاضی با مقادیر تجربی آنها، محاسبه گردیده و سعی کردیم معادله جدید و عمومی برای هر دو خاصیت انتقالی ویسکوزیته و هدایت گرمایی ارائه دهیم.

فصل اول

خواص انتقالی گازها و رفتار آنها در ناحیه بحرانی

مقدمه:

داشتن اطلاعات کامل و دقیق از خواص انتقالی گازها و مایعات خالص و مخلوط های آنها جهت طراحی، بهینه راکتورهای شیمیایی، تعیین دقیق نیروهای بین مولکولی و بسط نظریه های دقیق انتقال در سیالات چگال از اهمیت زیادی برخوردار است. به عنوان مثال در یک راکتور هسته ای از گاز دی اکسید کربن با فشار ۲۰ اتمسفر برای خنک کردن کوره راکتور استفاده می شود و بدیهی است که داده های دقیق خواص انتقالی این گاز در محدوده وسیعی از دما و فشار مورد نیاز است. هر چند روش اندازه گیری این خواص در سالهای اخیر پیشرفتهای زیادی نموده است، ولی به این نکته باید توجه نمود که اندازه گیری خواص انتقالی سیالات در کل محدوده دما و فشار مورد نیاز علوم و صنایع، علمی نیست. تخمین زده می شود که از حدود ۵۰ میلیون ماده شیمیایی شناخته شده، بیست هزار تا از آنها در صنایع مختلف کاربرد دارند. [۱]. برای هر سیال حدود سی خاصیت باید تعیین گردد که از بین آنها ۱۲ خاصیت به فشار و دما بستگی دارد. چنانچه بخواهیم برای هر سیال در ۱۰ فشار و ۱۰ دما، اندازه گیری انجام دهیم به هزار و دوست اندازه گیری برای هر سیال نیاز داریم، و اگر مخلوط های مختلف سیالات را در نظر بگیریم با یک تخمین بسیار خوشبینانه به زمانی حدود یک میلیون سال نیازمندیم تا هزار نفر بتوانند این اندازه گیریها را انجام دهند. حال می توان ادعا کرد که نیاز اطلاعاتی صنایع نمی تواند فقط با اندازه گیری برآورده شود،