

تعیین پارامترهای معادله حالت آماری SSAFT و بهبود مدل ریاضی رایانه ای با الگوریتم بهینه سازی Nelder-Mead

مجتبی یوسفی^(۱)، شهره فاطمی^(۲)

(۱)-دانشجو کارشناسی ارشد

(۲)-استادیار گروه مهندسی شیمی

دانشگاه تهران-دانشکده فنی-گروه مهندسی شیمی

[Email: myousefi@engineer.com](mailto:myousefi@engineer.com)

چکیده

معادلات حالت آماری برخلاف معادلات حالت کلاسیک به علت داشتن پایه های تئوری ترمودینامیکی آماری دارای دقت بالایی در پیشگویی خواص ترمودینامیکی مواد در فشار های بالا هستند و از این رو در بررسی تعادلات فازی سیستمها در استخراج فوق بحرانی بسیار کارآمد می باشند. در کار حاضر معادله حالت SSAFT که دارای دقت بالاتر و فرم ریاضی ساده تری هستند در نظر گرفته شده است. برای بدست آوردن پارامترهای این معادلات که عبارتند از: m تعداد سگمنت ها، u^0/k انرژی برهمکنش سگمنت ها و σ قطر سگمنت از مدل بهینه سازی ریاضی Nelder-Mead استفاده شده است که به علت عدم نیاز به مشتق توابع به کار رفته در تابع هدف قادر به کمینه کردن فشار بخار و دانسیته مایع بطور همزمان خواهیم بود، که این کار با استفاده از سایر روشهای ریاضی نظیر مارکواردت (Marquardt) به علت مستقل بودن متغیر حجم در تمام معادلات حالت آماری و عدم توانایی بیان آن بصورت یک تابع ریاضی، بدون پذیرفتن خطای ریاضی کاری نشدنی است. در مقاله حاضر پارامترهای معادله SSAFT برای هیدروکربنهای متوسط تا سنگین به کمک الگوریتم Nelder-Mead بدست آمده و با نتایج آزمایشی موجود در مراجع مقایسه شده است که نشان می دهد در محدوده وسیعی از دما و فشار از دقت خوبی برخوردار است. همچنین دقت بکار گیری الگوریتم Nelder-Mead نسبت به سایر الگوریتم ها مقایسه شده که برتری استفاده از این روش و معادله SSAFT را نسبت به معادله SAFT و سایر الگوریتم های بهینه سازی، در تعیین فشار بخار و دانسیته مایع ثابت می کند.

واژه های کلیدی: معادلات حالت آماری ; SSAFT ; Nelder-Mead

مقدمه

مخلوطها برای هر دو فاز مایع و بخار یکی از مهمترین اهداف تحقیقات ترمودینامیکی در سده اخیر و یکی از مهمترین مسائل و نیازهای صنایع امروز میباشد. اندازه گیریهای تجربی مستلزم وقت و هزینه زیادی است و داشتن معادله ای که بتواند رفتار فازی سیستمها را در دامنه وسیعی از شرایط عملیاتی پیشگویی کند نیازمند پایه تئوری قوی است. در تمام معادلات حالت

معادلات حالت نقش عمده ای را در مهندسی شیمی بازی می کند و بعنوان روابطی در حال توسعه در مطالعات تعادلات فازی سیالات و مخلوطها به کار میرود. نیاز به یک مدل ترمودینامیکی کارآمد در پیش بینی دقیق تعادلات فازی سیستم ها و پیشگویی خواص ترمودینامیکی مواد خالص و