ICHMT2014-XXXX

بررسی کارائی روش دینامیک مولکولی در پیش بینی برخی خواص انتقالی گاز متان در دماهای کرایوژنیک

محمدرضا رجبی[1]، علی رجب پور[2]، مصطفی مافی[2]

[1] دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی قزوین

[2] عضو هیأت علمی گروه مهندسی مکانیک دانشگاه بین المللی امام خمینی قزوین

چکیده

متان یکی از مولکول‌های اصلی تشکیل دهنده‌ی گاز طبیعی و مخلوطهای مبرد طبیعی است. بیش از 90٪ سهم مولی در مبردهای چند جزئی متعلق به گاز متان می‌باشد. این ماده به همراه گازهایی چون نیتروژن و اتان و پروپان تشکیل دهنده‌ی مبرد چند جزئی در صنایع کرایوژنیک و تبرید در گستره‌ی دماهای فوق سرد هستند. این تحقیق سعی در مقایسه و مطابقت نتایج حاصل از شبیه سازی دینامیک مولکولی جزء متان با داده‌های تجربی دارد. نتایج نشان دهنده ی تطبیق قابل قبول مقادیر چگالی بر حسب دما با استفاده از تابع پتانسیل باکینگهام میباشد، در حالی‌که پتانسیل لنارد-جونز از دقت کافی برای شبیه سازی چگالی متان برخوردار نیست. همچنین منحنی‌های انتالپی بر حسب دما برای هر دو تابع پتانسیل مذکور رسم شده است که حاکی از عدم کارائی توابع پتانسیل دو جزئی باکیینگهام و لنارد-جونز در پیش بینی انرژی درونی گاز متان در دماهای فوق سرد است.

واژه های کلیدی

شبیه سازی دینامیک مولکولی، متان، کرایوژنیــک، ، لنــارد-جونز، باکینگهام

مقدمه

امروزه در علم تعادل فازی[1] که یکی از زیر شاخه های فیزیک محاسباتی محسوب می‌شود، تعیین دقیق خواص ترمودینامیکی سیالات، خصوصا در دماهای خیلی پایین از چالش برانگیزترین مباحث است. پیش گویی رفتار مواد در دماهای پایین به دلیل عدم تبعیت از قوانین فیزیک کلاسیک، همواره دور از نتایج حاصل از آزمایشات تجربی بوده است. با بیشتر شدن اهمیت خواص مواد در دمای پایین گرایشی در فیزیک و شیمی و علوم مهندسی ظهور کرده است که آن را علم کرایوژنیک[2] می‌نامند. در مهندسی مکانیک و سیستم‌های انرژی منظور از کرایوژنیک بررسی راه‌های دستیابی به این دماها با استفاده از چرخه‌های تبریدی و راه‌های بهینه سازی چرخه های ترمودینامیکی می باشد[1]. در آنالیز یک سیکل تبریدی، مبرد استفاده شده در آن از اهمیت بسیار زیای برخوردار می‌باشد. امروزه مبردهای متنوعی در صنعت کرایوژنیک مورد استفاده قرار می‌گیرند. مبردهای دما پایین را میتوان به دو دسته‌ی مبردهای خالص مانند هلیوم، آرگون ، نیتروژن، متان و مبردهای چند جزئی مانند مخلوط گازی نیتروژن و متان و اتان تقسیم کرد.

به منظور دستیابی به خواص ترمودینامیکی مبردهای چندجزئی در وهله ی اول به خواص ترمودینامیکی دقیق هر یک از اجزاء نیازمندیم. خواصی همچون چگالی و آنتالپی که داده‌های ورودی و خروجی یک مساله است. به همین دلیل ما نیازمند تهیه‌ی یک بانک اطلاعاتی از تک‌تک اجزاء مخلوط هستیم. معادلاتی که در ترمودینامیک کلاسیک از آنها برای بدست آوردن این خواص استفاده می‌شوند، معادلات حالت هستند. این معادلات را می‌توان با استفاده از داده های تجربی و آزمایشگاهی تقریب زد و معمولا به دو دسته معادلات حالت کلاسیک و معادلات حالت بنیادی[3] تقسیم می شوند. از پر کاربردترین معادلات حالت کلاسیک در پیش بینی خواص گازها در دماهای پایین میتوان به معادله حالت پنگ رابینسون[4] و معادله حالت لی-کسلر[5] اشاره کرد[2]. معادله حالت پنگ-رابینسون یک معادله حالت درجه سوم نیمه تجربی بوده و از نوع معادله های حالت مشتق شده از فرم واندروالس می‌باشد [3]. این معادله در دماهای پایین یعنی در نقطه ی سه گانه و در دماهای نزدیک به نقطه‌ی بحرانی خواص ترمودینامیکی را با خطای بسیار زیادی پیش بینی میکند و یا در محدوده هایی از دما، توانایی پیشگویی این خواص را

[1] Phase equilibria

[2] cryogenic

[3] Fundamental EOS

[4] Peng-Robinson EOS

[5] Lee-Kesler EOS