

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΙΑΣ ΚΥΒΙΚΗΣ ΚΑΤΑΣΤΑΤΙΚΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΣΥΝΕΙΣΦΟΡΑΣ ΟΜΑΔΩΝ ΜΕ ΕΜΦΑΣΗ ΣΕ ΜΙΓΜΑΤΑ ΦΥΣΙΚΟΥ ΑΕΡΙΟΥ**Γ. Τασιός^{1,*}, Α. Κλεισιούνης¹, Β. Λούλη¹, Ε. Βουτσάς¹**¹ Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, Ζωγράφου, Αθήνα* akis.tassios@gmail.com**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Διανύοντας την πιο κρίσιμη περίοδο αναφορικά με το ενεργειακό ζήτημα, η εξασφάλιση ενεργειακών πόρων αποτελεί κυρίαρχη πρόκληση για τη βιομηχανία. Παρά την αλματώδη εμφάνιση νέων ενεργειακών λύσεων, όπως π.χ. υδρογόνο, ΑΠΕ κλπ., εξαιτίας του πρώιμου ακόμα σταδίου ανάπτυξης που βρίσκονται, οι βασικοί ορυκτοί καύσιμοι πόροι, με κύριο εκπρόσωπο το φυσικό αέριο, συνεχίζουν να βρίσκονται στην πρώτη θέση του ενεργειακού μίγματος. Σήμερα, η εκμετάλλευση τέτοιων πόρων συνοδεύεται από αυξανόμενους περιορισμούς, ως προς την παραγωγή και επεξεργασία τους, σε μια προσπάθεια να μετασχηματιστεί η τεχνολογία αξιοποίησης των υδρογονανθράκων σε πιο φιλική ως προς το περιβάλλον.

Η προσομοίωση των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στη βιομηχανία του φυσικού αερίου γίνεται κατεξοχήν με αξιοποίηση θερμοδυναμικών εργαλείων, όπως οι Κυβικές Καταστατικές Εξισώσεις. Εξαιτίας, λοιπόν, των αυξανόμενων περιβαλλοντικών προκλήσεων που αντιμετωπίζει η βιομηχανία φυσικού αερίου, οι οποίες αντανakλούν σημαντικά και στο ενεργειακό κόστος, η απαίτηση για ακριβή θερμοδυναμικά μοντέλα γίνεται ολοένα και μεγαλύτερη.

Στο πλαίσιο αυτό, παρουσιάζεται μια νέα Κυβική Καταστατική Εξίσωση (ΚΚΕ) συνεισφοράς ομάδων, που όπως τα αποτελέσματα καταδεικνύουν, μπορεί να ανταποκριθεί επιτυχώς στις δυναμικές απαιτήσεις της βιομηχανίας. Η νέα αυτή εξίσωση έχει ως βάση την ΚΚΕ Peng-Robinson [1], ενώ εισάγονται δυο τροποποιήσεις: μια 5-παραμετρική θερμοκρασιακά εξαρτώμενη συνάρτηση στον ελκτικό όρο της καταστατικής εξίσωσης και μια θερμοκρασιακά εξαρτημένη διόρθωση του γραμμομοριακού όγκου της. Η επέκταση του μοντέλου σε μίγματα γίνεται με χρήση των Γενικευμένων Κανόνων Ανάμιξης (Universal Mixing Rules, UMR) [2], οι οποίοι αξιοποιούν το μοντέλο συντελεστή ενεργότητας συνεισφοράς ομάδων UNIFAC [3].

Το αναπτυχθέν μοντέλο αξιολογείται ως προς την πρόρρηση αρχικά της ισορροπίας φάσεων και πιο συγκεκριμένα των σημείων δρόσου μιγμάτων φυσικού αερίου. Επιπρόσθετα, εξετάζεται η απόδοση του μοντέλου και ως προς την πρόβλεψη της πυκνότητας μιγμάτων φυσικού αερίου. Τέλος, το μοντέλο εφαρμόζεται και για την πρόβλεψη άλλων σημαντικών θερμοδυναμικών ιδιοτήτων, όπως π.χ. ισοβαρής θερμοχωρητικότητα, ταχύτητα του ήχου.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Καταστατικές Εξισώσεις, Φυσικό Αέριο, Ισορροπία Φάσεων, Θερμοδυναμικές Ιδιότητες,**ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ:** Το ερευνητικό αυτό έργο χρηματοδοτήθηκε από τις εταιρείες Gassco και Equinor. Η Gassco διαχειρίζεται το Νορβηγικό σύστημα μεταφοράς φυσικού αερίου καθώς και αρκετούς σταθμούς επεξεργασίας και παραλαβής του φυσικού αερίου στη Νορβηγία και στην Ευρώπη. Η Equinor δραστηριοποιείται στον τομέα της ενέργειας με σημαντική διεθνή παρουσία ενώ παράλληλα η παραγωγή της σε φυσικό αέριο καλύπτει σημαντικό τμήμα της Ευρωπαϊκής αγοράς.**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**

- [1] Peng, D.Y. & Robinson, D. B. (1976). *Ind. Eng. Chem.* **15**(1): 59-64.
- [2] Voutsas, E., Magoulas, K., Tassios, D. (2004). *Ind. Eng. Chem. Res.* **43**(19): 6238-6246.
- [3] Fredenslund, A.A., Jones, R.L., Prausnitz, J. (1975). *AIChE*. **21**(6): 1086-1099