

ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΦΥΣΙΚΟΥ ΑΕΡΙΟΥ**Ε. Πετροπούλου^{1*}, Ν. Νόβακ¹, Β. Κουλοχέρης¹, Β. Λούλη¹, Γ. Παππά¹, Χρ. Μπουκουβάλας¹, Ε. Βουτσάς¹**¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα(*epetr@chemeng.ntua.gr)**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Το φυσικό αέριο (ΦΑ) αποτελείται κατά κύριο λόγο από υδρογονάνθρακες, όμως περιέχει σε μικρότερες ή μεγαλύτερες ποσότητες άλλες προσμίξεις, όπως νερό και αδρανή αέρια, η παρουσία των οποίων μπορεί να επιφέρει προβλήματα στις διεργασίες επεξεργασίας και μεταφοράς του. Για την εξασφάλιση της ποιότητας του τελικού προϊόντος, το ΦΑ υφίσταται μία σειρά από σύνθετες διεργασίες, από την εξόρυξή του μέχρι τη διάθεσή του στον τελικό καταναλωτή, με σκοπό την απομάκρυνση των προσμίξεων αλλά και την επίτευξη των επιθυμητών προδιαγραφών. Η ομαλή λειτουργία αλλά και η βελτιστοποίηση αυτών των διεργασιών αποτελεί έναν από τους βασικούς στόχους της βιομηχανίας του φυσικού αερίου και πραγματοποιείται συνήθως με τη βοήθεια προσομοιώσεων με κατάλληλα υπολογιστικά εργαλεία.

Η παρουσία βαρέων υδρογονανθράκων, πολικών συστατικών, όπως νερό και αλκοόλες, μετάλλων, όπως ο υδράργυρος, καθώς και μη συμπυκνώσιμων συστατικών, όπως το υδρογόνο, καθιστούν τη θερμοδυναμική μοντελοποίηση του μίγματος ιδιαίτερα δύσκολη με αποτέλεσμα οι κυβικές καταστατικές εξισώσεις, που χρησιμοποιούνται κατά κόρον από τη βιομηχανία αερίου, να μην οδηγούν σε ικανοποιητικά αποτελέσματα. Στο εργαστήριο Θερμοδυναμικής και Φαινομένων Μεταφοράς του ΕΜΠ έχει αναπτυχθεί το μοντέλο UMR-PRU^[1-4], που ανήκει στην κατηγορία των ΕoS/G^E και συνδυάζει την καταστατική εξίσωση Peng-Robinson με το μοντέλο συντελεστή ενεργότητας UNIFAC. Πρόκειται για ένα αξιόπιστο θερμοδυναμικό εργαλείο που προβλέπει με ακρίβεια την ισορροπία φάσεων, την ογκομετρική συμπεριφορά και τις θερμοφυσικές ιδιότητες μιγμάτων ΦΑ σε όλη την γραμμή επεξεργασίας και μεταφοράς του.

Στην παρούσα εργασία θα παρουσιαστούν αποτελέσματα πρόβλεψης των προαναφερθέντων ιδιοτήτων ΦΑ καθώς και προσομοίωση διεργασιών επεξεργασίας ΦΑ με το μοντέλο UMR-PRU, με την εισαγωγή του σε εμπορικούς προσομοιωτές, όπως είναι το HYSYS και το UniSim, μέσω του πρωτοκόλλου Computer Aided Process Engineering (CAPE) OPEN. Τα αποτελέσματα αυτά αποδεικνύουν την ικανότητα του μοντέλου να προβλέπει με ικανοποιητική ακρίβεια τη θερμοδυναμική συμπεριφορά μιγμάτων φυσικού αερίου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Voutsas E, Magoulas K, Tassios D. (2004). *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43 (19): 6238-6246.
- [2] Novak N, Louli V, Skouras S, Voutsas E. (2018). *Fluid Phase Equilib.*, 457: 62-73.
- [3] Petropoulou E, Pappa G, Voutsas E. (2017). *Fluid Phase Equilib.*, 433: 135-148.
- [4] Koulocheris V, Louli V, Panteli E, Skouras S, Voutsas E. (2018). *Fuel*, 233: 558-564.