

شبیه‌سازی مولکولی کاربردها در صنعت نفت و گاز

(روشهای مونت کارلو)

فیلیپ آنگقق

برنارد تویتن

ان بوئن

مترجم:

دکتر علی اکبر رحمانی

عضو هیئت علمی دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)

سرشناسه	:	اونزره، فلیپ (Philippe). Ungerer, Ph
عنوان و نام پدیدآور	:	شبیه‌سازی مولکولی : کاربردها در صنعت نفت و گاز.../فلیپ آنگق ، برنارد توتین ، آن بوتن ؛ مترجم علی‌اکبر رحمانی.
مشخصات نشر	:	قزوین: آلائی اندیشه، ۱۳۹۴.
مشخصات ظاهری	:	۳۹۳ ص.
شابک	:	۲۹۰۰۰ ریال: ۸-۰۱-۸۰۱۸-۶۰۰-۹۷۸
وضعیت فهرست نویسی	:	فیا
یادداشت	:	عنوان اصلی: Monte Applications of : molecular simulation in the oil and gas industry
موضوع	:	۳۰۰methods, Carlo
موضوع	:	گازها -- دینامیک -- الگوهای ریاضی
موضوع	:	دینامیک مولکولی -- الگوهای ریاضی
موضوع	:	سیالات -- دینامیک -- الگوهای ریاضی
موضوع	:	روش مونت کارلو
شناسه اثرده	:	تاوینیا، برنار
شناسه افزودنی	:	(Tavitian, B. (Bernard
شناسه اثرده	:	بوتن، آن
شناسه افزودنی	:	(Boutin, A. (Anne
شناسه اثرده	:	رحمانی، علی‌اکبر، ۱۳۳۱ - مترجم
رده بندی کنگره	:	۱۳۹۴۱۶۸QC ۲شالف/
رده بندی دیویی	:	۳۳۳
شماره ملی	:	۹۲۸۳۲۱

عنوان کتاب: شبیه‌سازی مولکولی کاربردها در صنعت نفت و گاز

مترجم: علی اکبر رحمانی

ناشر: آلائی اندیشه

تایپ و صفحه آرایی: سیما امیدبخش

ویراستار: شهره کریمی

لیتوگرافی چاپ و صحافی: افق بی پایان

طراح جلد: مهندس کمیل رحمانی

شمارگان: ۵۰۰

نوبت چاپ: اول - پاییز ۱۳۹۴

قیمت: ۲۹۰۰۰۰ ریال

شابک: ۸-۰۱-۸۰۱۸-۶۰۰-۹۷۸

نشانی: قزوین - ملا صدرا - اندیشه ۴ - پلاک ۲۰

مرکز پخش: انتشارات دانش‌نگار، میدان انقلاب، خیابان اردیبهشت، نبش وحید نظری، ۶۶۴۰۰۱۴۴

ترمودینامیک در تمام مراحل اکتشاف و تولید نفت، لازم است. در سه دهه‌ی گذشته، معادلات حالات (EOS) equations of states تجربی، برای گسترش تعداد کمی از آزمایشهای قابل اعتماد در آثار چاپ شده، به امری اساسی تبدیل گردیده است. ولی علی‌رغم تلاشهای صورت گرفته، زمینه‌ی فیزیکی مناسب‌ترین EOS، ضعیف باقی می‌ماند و ماهیت پیش‌بینی‌کننده‌ی آنها، جز در مورد مولکولهای بسیار ساده، به اثبات نرسیده است. ولی وجود تعداد زیادی از پارامترها به این امر کمک شایانی کرده است.

توسعه‌ی فناوری نفت و گاز، به خواص سیالات دقیق‌تر احتیاج دارد و حوزه‌ی کاربرد به ناحیه‌ی بدیای مانند شرایط حداکثر P و T یا سطح بالایی از اجزای گاز اسیدی، گسترش می‌یابد. از این گذشته، رتبه‌ی در مورد سناریوی توسعه‌ی بهینه در مفهوم اقتصادی متزلزل، احتیاج به دانش کلی‌انگهار، ترکیب جریان رو به بیرون (effluent) در حین تولید دارد. در صورت عدم کنترل رضایت بخشی از جوانب ترمودینامیکی، چون اغلب براساس تکامل ترکیبی پیچیده‌تر استوار می‌باشند، سرسخت‌ترین سناریوها، حذف خواهند شد.

اندازه‌ی تأسیسات سطحی، براساس خواص سیالات، طراحی و تعیین می‌شود. چون تجهیزات نصب شده، باید تعدادی از روشنیهای محمول را برآورده سازند و همچنین مصرف انرژی و سرمایه‌گذاری لازم را به حداقل برسانند، به همین علت، تعیین ویژگی درست، از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد. عدم قطعیت بسیار زیاد در ارتباط با رفتار جریان رو به بیرون، به سرمایه‌گذاری غیرضروری و واحد تولید بزرگی منجر می‌شود یا برعکس، دستیابی به ویژگیهای محصول را با استفاده از واحد موجود غیرممکن می‌سازد.

صنعت نفت نیز باید با چالش جدیدی مواجه شود. پایش و کنترل انتشار گازهای گلخانه‌ای و تولید پسماند نهایی. برای رسیدن به این هدف، فرایندهای جدید را توسعه یابند. برای مثال، تزریق گاز اسیدی در فشار بالا با مواد سمی از قبیل سولفید هیدروژن (H_2S) به آزمایشهای زیادی احتیاج دارد.

آزمایشگاه‌هایی که به کسب داده‌ها تخصیص داده شده‌اند، نمی‌توانند تقاضای رو به افزایش را برآورده کنند و به نظر می‌رسد شبیه‌سازی مولکولی، قبل از اتمام پروژه‌ها، تنها جایگزین ارزشمند برای به دست آوردن این داده‌ها باشد.

به همین علت، شرکت توتال (TOTAL)، برای توسعه و رونق روشهای شبیه‌سازی مولکولی، حمایت پیوسته‌ی خود را از مؤلفان این کتاب به عمل آورده است.

این قطعه‌ی تحسین برانگیز کار، سنگ بنای مهمی در این فرایند محسوب می‌شود و نشان می‌دهد این روش به چه رشد و بلوغی رسیده است البته هنوز جا برای بسیاری از بهبودها در این رشته از روشهای عددی و توضیح بالقوه‌ی میان مولکولی، وجود دارد، ولی امروزه به اثبات رسیده است که شبیه‌سازی مولکولی، می‌تواند داده‌های قابل اطمینانی از بسیاری از سامانه‌های موردنظر در صنعت نفت و گاز، ارائه دهد. که پایان تضاد درباره‌ی مفید بودن آن برای کاربردهای صنعتی می‌باشد.

یکی از مهم‌ترین پیشرفتهای غیرمنتظره‌ی علمی، قابلیت انتقال میادین نیروی مورد استفاده به وسیله‌ی مولفان در مثال‌های کاربردی متفاوت می‌باشد. چون توضیح مولکول دقیقاً در سطح درست دقت قرار داشته، امکان ایجاد بهبودهای به دست آمده بر روی ترکیبات شیمیایی جدید وجود دارد. این، به ویژه برای سیالات نفت که مخلوطهایی از تعداد زیادی همپاری باشند، مهم تلقی می‌گردد. کاربرد شبیه‌سازی مولکولی در فرایندهای جداسازی صنعتی به وسیله‌ی جذب (سطحی) (adsorption) نیز مبحث امیدوارکننده‌ای است و علت آن محدود بودن ملاحظات ترمودینامیکی موجود در پیش‌بینی تعادلهای جذب بر روی ژئولیت‌ها می‌باشد.

ما وارد چرخه‌ای از تربید داده می‌شویم و این برای صنعت خبر خوشی محسوب می‌شود.

فرانکوئیس مونتِل

متخصص ترمودینامیک شرکت توتال

شبیه‌سازی مولکولی، فناوری در حال ظهوری است که برای تعیین خواص بسیاری از سامانه‌های جالب در صنعت نفت و گاز و کلی‌تر، صنعت شیمیایی، مورد استفاده قرار می‌گیرد. شبیه‌سازی مولکولی، براساس زمینه‌ی نظری، که از نظر جهانی پذیرفته شده است، ساختار دقیق مولکول‌ها را جهت ارزیابی برهم‌کنش‌ها توضیح می‌دهد.

امروزه شبیه‌سازی مولکولی با بهره‌مندی از رایانه‌های قوی و هزینه‌ی متوسط، پیش‌بینی‌ها قابل اطمینانی در بسیاری از موارد، فراهم می‌نماید. در حالیکه روشهای قدیمی (از قبیل روش‌های معادلات حالت) توانایی‌های پیش‌بینی محدودی دارند. این امر، به ویژه برای طراحی فرایندهایی که شامل اجزای سمی، شرایط فشار بالا یا گزینش‌پذیری جذب در جاذب‌های ریزتخلخل هستند، مفید ارزیابی می‌گردد. گذشته از این، شبیه‌سازی مولکولی، درک تفصیلی رفتار سامانه را برای علاقمندان به موضوع، فراهم می‌آورد. از تمام عزیزانی که در به سر رسیدن این کتاب با اینجانب همکاری نمودند، کمال تشکر را دارم.

الحمد لله رب العالمین

مهر ۱۳۹۴

فهرست مطالب

پیشگفتار

مقدمه‌ی مترجم

۱	فصل ۱: مقدمه
۷	فصل ۲-۱ اصول شبیه‌سازی مولکولی
۸	۲-۱-۱. ترمودینامیک آماری
۹	۲-۱-۲. مجموعه‌های آماری و براع جداساز
۱۸	۲-۱-۲. تعیین خواص میانگین
۲۰	۲-۱-۳. تعیین خواص مشتق از نوسانات
۲۰	۲-۱-۴. راه‌های ممکن شبیه‌سازی مجسم‌ها
۲۳	۲-۲. انرژی پتانسیل سامانه‌های مولکولی
۲۴	۲-۲-۱. تجزیه‌ی استاندارد انرژی پتانسیل
۲۵	۲-۲-۲. انرژی الکتروستاتیکی
۲۸	۲-۲-۳. انرژی قطبش
۳۰	۲-۲-۴. انرژی پخش و دافعه
۳۸	۲-۲-۵. انرژی درونی
۴۲	۲-۲-۶. تمام اتمها در مقایسه با اتمهای متحد
۴۳	۲-۳. اصول شبیه‌سازی مونت کارلو
۴۳	۲-۳-۱. اصل اساسی
۴۹	۲-۳-۲. حرکات مونت کارلو استاندارد یک جعبه‌ی تکی
۵۴	۲-۳-۳. حرکات جازدن و انهدام در مجموع کانونینیک کل
۵۶	۲-۳-۴. حرکات ویژه نسبت به مجموعه‌ی گیز
۵۸	۲-۳-۵. ارزیابی پتانسیل شیمیایی
۵۹	۲-۳-۶. حرکات مونت کارلو با گرایش آماری

۶۴	۲-۳-۷. تعیین نقاط حباب و شبنم
۶۶	۲-۳-۸. انتگرال گیری ترمودینامیکی
۶۹	۲-۳-۹. برگشت دادن موازی
۷۱	۲-۴-۴. اجرای عملی
۷۱	۲-۴-۱. جعبه‌ی شبیه‌سازی چیست؟
۷۹	۲-۴-۲. مدل سازی جاذبه‌های با تخلخل ریز
۸۱	۲-۴-۳. نوع پتانسیل مورد استفاده
۸۶	۲-۴-۴. بهینه سازی پتانسیل میان مولکولی
۹۶	۲-۴-۵. انتخاب پارامترهای عددی
۹۹	۲-۴-۶. انتخاب اندازه و شرایط اولیه‌ی سامانه
۱۰۰	۲-۴-۷. همگرایی و عدم قطعیت‌های آماری
۱۰۴	۲-۴-۸. محاسبه‌ی خواص ترمودینامیکی
۱۱۲	۲-۴-۹. ملاحظات سخت افزار و نرم افزار رایانه‌ای
۱۱۷	فصل ۳: تعادل‌های فازي - خواص سیالات
۱۱۸	۳-۱. پیش‌بینی خواص هیدروکربنهای مایع
۱۱۸	۳-۱-۱. راه کار کلی
۱۲۳	۳-۱-۲. پیش‌بینی خواص آلکانهای خطی
۱۳۱	۳-۱-۳. آلکانهای انشعابی
۱۳۳	۳-۱-۴. آلکانهای حلقوی
۱۳۶	۳-۱-۵. اولفین‌ها
۱۴۵	۳-۱-۶. آروماتیکها
۱۴۸	۳-۱-۷. چشم‌اندازها
۱۵۲	۳-۲. خواص مشتق ترمودینامیکی هیدروکربنهای سبک
۱۵۳	۳-۲-۱. پیش‌بینی‌ها در فشار بالا
۱۶۲	۳-۲-۲. پیش‌بینی خواص مشتقی در شرایط نزدیک بحرانی
۱۶۵	۳-۳. خواص ترکیبات آلی قطبی
۱۶۹	۳-۳-۱. سولفیدهای آلی و تیولها
۱۷۴	۳-۳-۲. ترکیبات آلی - جیوه‌ای
۱۷۹	۳-۳-۳. کتون‌ها و آلدیدها

۱۸۳	 ۴-۳-۴. الکل‌ها
۱۸۶	 ۴-۳-۴. رفتار فازی مخلوط‌ها
۱۸۷	 ۴-۳-۱. مخلوط‌های دوتایی و سه‌تایی آلکان‌ها
۱۹۱	 ۴-۳-۲. مخلوط‌های دوتایی H_2S با هیدروکربن‌های مایع
۱۹۹	 ۴-۳-۳. تعادل‌های فازی CO_2 با آلکان‌ها و پلی‌اتیلن
۲۰۳	 ۴-۳-۴. تعادل‌های فازی شامل متانول
۲۰۹	 ۴-۳-۵. خواص گازهای طبیعی در فشار بالا
۲۰۹	 ۴-۳-۱-۵. هم‌بستن شبیه‌سازی مولکولی به ضرورت‌های صنعتی
۲۱۴	 ۴-۳-۲. نمایش ترکیب گاز طبیعی در شبیه‌سازی مونت کارلو
۲۲۱	 ۴-۳-۳. خواص حجمی
۲۲۴	 ۴-۳-۴. ضریب زول - تامسون در خدای مشتقی
۲۲۷	 ۴-۳-۶. خواص ترمودینامیکی گازهای اسید در فشار بالا
۲۳۰	 ۴-۳-۱-۶. پتانسیل میان مولکولی برای CH_4 ، آب، H_2S
۲۳۸	 ۴-۳-۲-۶. رفتار فازی سامانه‌ی $H_2S - CH_4 - H_2O$
۲۴۴	 ۴-۳-۳. خواص حجمی
۲۴۹	 ۴-۳-۴. پیش‌بینی آنتالپی‌های اضافی
۲۴۹	 ۴-۳-۵. پیش‌بینی خواص مشتق
۲۵۱	 فصل ۴. جذب (سطحی)
۲۵۳	 ۴-۱. مثال عملی از شبیه‌سازی مونت کارلو کانونی کلی جذب
۲۵۳	 ۴-۱-۱. ساختن سامانه: جامد
۲۵۷	 ۴-۱-۲. محاسبه‌ی شبکه‌های انرژی
۲۵۷	 ۴-۱-۳. اجرای شبیه‌سازی کانونی کل
۲۵۸	 ۴-۱-۴. محاسبه‌ی گرماهای جذب
۲۶۱	 ۴-۲. گزینش پذیری جذب متاگزین نسبت به اورتوگزین
۲۶۲	 ۴-۲-۱. توزیع کاتیون در مقایسه با نسبت Si/Al

۲۷۳	۲-۲-۴. گزینش پذیری جذب متاگزین نسبت به اورتوگزین
۲۷۹	۳-۲-۴. جذب آب در فوزاسیت
۲۸۳	۴-۲-۴. جذب مشترک آب و گزین ها بر فوزاسیتها NaY
۲۸۷	۳-۴. بهینه سازی پارامترهای برهم کنش ویژه ی ژئولیت ها
۲۹۲	۴-۴. همدماهای جذب و گزینش پذیری هیدروکربن ها بر روی سیلیکات
۲۹۳	۱-۴-۴. آلکان های خطی
۳۰۲	۲-۴-۴. آلکان های انشعابی
۳۰۳	۳-۴-۴. برآزش همدمها با استفاده از اصل لنگمویر
۳۰۸	۴-۴-۴. گرماهای جذب
۳۱۱	۱-۴-۴. جذب آلکن ها در سیلیکات
۳۱۹	۴-۴-۴. همدماهای جذب مشترک مخلوط دوتایی
۳۲۵	۷-۴-۴. جداسازی آلکان های انشعابی بر روی ژئولیت های نوع فوزاسیت
۳۳۲	۵-۴. جداسازی آلکن ها بر روی فوزاسیت ها
۳۳۳	۱-۵-۴. همدماهای جذب آلکان ها
۳۳۵	۲-۵-۴. جذب مشترک آلکان ها با اجزای دیگر گازهای طبیعی
۳۹۹	فصل ۵. نتیجه گیری و چشم انداز
۳۴۶	ضمیمه
۳۴۶	A-۱. پارامترهای پتانسیل اتم های متحد شده ی اسمتنگرد
۳۵۰	A-۲. اجرای حرکات مونت کارلو با استفاده از مدل اتم های متحد شده ی
۳۵۱	A-۲-۱. تغییرات مربوط به انتقال، دوران، حجم
۳۵۱	A-۲-۲. حرکات سریع و ناگهانی، حرکت به دور محور
۳۵۱	A-۲-۳. حرکات CBMC
۳۵۶	A-۲-۴. عدم تعادل ($bias$) مخزن
	واژگان انگلیسی - فارسی
۳۵۹	واژگان فارسی - انگلیسی
۳۶۱	نمادها
	نمایه ها