

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ И ИХ СМЕСЕЙ

Бевзо М.О., Исаева А.В.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, 119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, +7 (917) 544-28-70, bevsomo@gmail.com

Задача численного моделирования фазового поведения углеводородов возникает в ряде технологических процессов, связанных с их добычей, переработкой и транспортировкой. Эта задача сводится к поиску параметров фазового равновесия тех или иных чистых веществ и их смесей при заданных условиях. Традиционно для решения этой задачи используются итерационные алгоритмы в сочетании с распространенным в нефтегазовой промышленности уравнением Пенга—Робинсона [1]. В настоящей работе для расчетов был использован метод прямой минимизации энергии Гельмгольца, а в качестве уравнений состояния рассмотрены как «классическое» уравнение Пенга—Робинсона, так и относительно новое уравнение PC-SAFT [2]. Целью настоящей работы является демонстрация возможности расчетов параметров фазовых равновесий углеводородов и их смесей с помощью метода прямой минимизации энергии Гельмгольца совместно с уравнением состояния PC-SAFT, а также сравнение результатов, полученных с помощью выбранных уравнений состояния.

Метод прямой минимизации энергии [3] позволяет свести в общем случае нелинейную задачу поиска минимума функции (энергии Гельмгольца изохорно-изотермической системы) к решению задачи линейного программирования, что обеспечивает модульную и компактную программную реализацию расчетов.

В настоящей работе были проведены расчеты параметров фазового равновесия с помощью вышеописанного метода прямой минимизации энергии Гельмгольца и уравнений состояния Пенга—Робинсона и PC-SAFT для ряда чистых веществ, (метан, этан, пропан, н-бутан и углекислый газ), а также различных их бинарных смесей. Полученные значения параметров были сопоставлены с опубликованными экспериментальными данными. В результате было показано, что уравнение PC-SAFT дает сопоставимую с уравнением Пенга—Робинсона точность расчетов рассматриваемых параметров при применении метода прямой минимизации энергии Гельмгольца.

Литература

1. Брусиловский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. - Москва: Грааль, 2002. 575 стр.
2. Gross J., Sadowski G. Application of perturbation theory to a hard-chain reference fluid: an equation of state for square-well chains // *Fluid Phase Equilibria* **168**, 2000. P. 183-199.
3. Исаева А.В., Доброжанский В.А., Хакимова Л.А., Подладчиков Ю.Ю. Численное моделирование фазовых равновесий многокомпонентных углеводородных систем с помощью прямой минимизации энергии // *Газовая промышленность* **812**, 2, 2021. Стр. 20-29.