

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ РІВНОВАГ ВУГЛЕВОДНІВ

Заїка С.О., Лобурець А.Т., Ульченко Н.С.

Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка

Інформація про фазовий стан вуглеводневої системи, компонентний склад її фаз, газовий фактор, результати одноразового розгазування і ступінчастої сепарації вкрай важлива при підрахунку запасів нафти і газу та прийнятті правильних рішень у процесі проектування розробки й експлуатації родовищ нафти і газу. Експериментальне визначення складу і властивостей вуглеводневих систем та води пов'язано з проведенням трудомістких і тривалих досліджень з використанням спеціальної апаратури високого тиску. На практиці поряд з експериментальними даними широко використовуються технології обчислювального експерименту, що дозволяє визначити характеристики продукції свердловин, отримання за вихідними даними необхідної інформації про склад, властивості та фазовий стан вуглеводневих систем у різних термобаричних умовах.

Основним напрямком до середини 70 років при математичному моделюванні паро-рідинної рівноваги нафтогазоконденсатних сумішей було використання принципу відповідних станів. Суть цього напівемпіричного підходу, сформульованого в 1945 році Гугенхейма [1], полягала в тому, що існують групи речовин, бінодалі яких, будучи представленими в безрозмірному (приведеному) вигляді, виявляються дуже близькими. Ця обставина означає, що речовини, які входять до такої групи, є термодинамічно подібними. Для наочності на рис. 1 ми демонструємо приклад узагальненого графіка, взятого з піонерської роботи Гугенхейма [1]. Про шляхи подальшого розвитку принципу відповідних станів, які свого часу були досить плідними, можна дізнатися з робіт [2, 3]. Однак, в разі вуглеводневої сировини застосування принципу виявилось вельми проблематичним внаслідок того, що навіть алкани (C_2H_{2n+2}) не є термодинамічно подібними (рис. 2). Приведена температура визначається

як $\tilde{T} = \frac{T}{T_C}$, а приведена густина – $\tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_C}$, де T_C та ρ_C відповідно критична температура і критичний тиск.

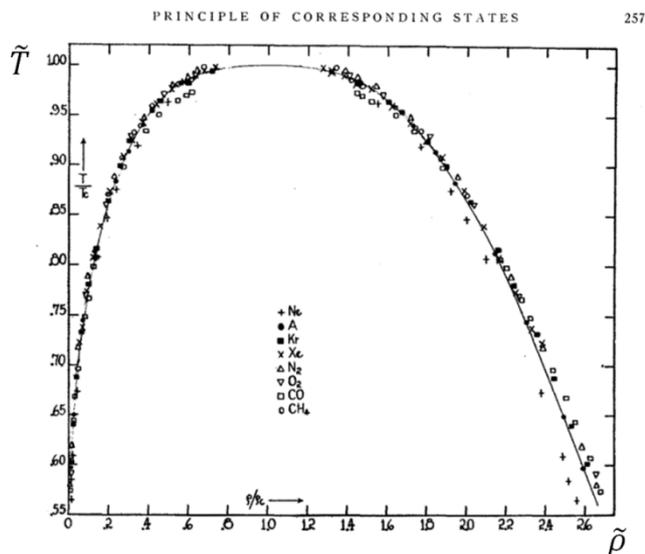


Рис. 1. Суцільна лінія є спільною бінодаллю для чотирьох інертних газів, трьох двоатомних та метану. Це яскраво демонструє прояв принципу термодинамічної подібності [1]

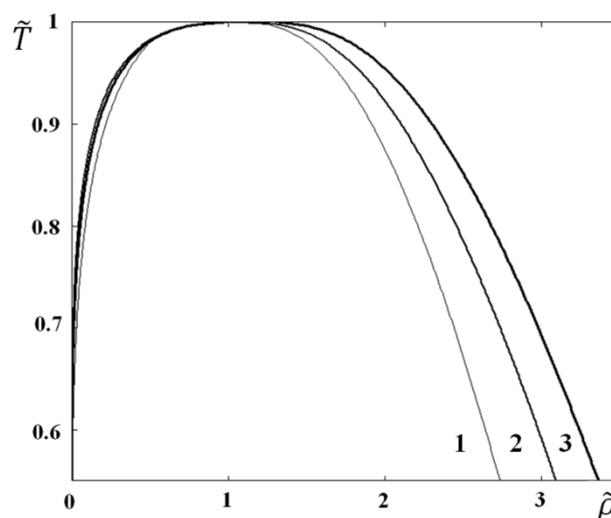


Рис. 2. Розраховані нами лінії 1, 2 і 3 є бінодалями відповідно пропану, октану та декану. З ростом в молекулах алканів кількості атомів карбону рідинні вітки бінодалей сильно зміщуються вправо

У нафтогазовій справі для опису властивостей співіснуючих рівноважних фаз досить ефективним виявилось застосування єдиних рівнянь стану. Такі рівняння в компактній аналітичній формі містять максимальну інформацію про дану систему. Розрахунок фазової рівноваги з використанням рівнянь стану заснований на застосуванні класичних положень термодинаміки багатокомпонентних систем – рівності хімічних потенціалів (летючості) компонентів суміші у всіх співіснуючих фазах [4].

Для чистої речовини рівняння стану одночасно описують властивості парової і рідкої фаз на лінії насичення. Для багатокомпонентної системи рівняння стану є термодинамічною моделлю рівноважних парової і рідинної фаз окремо. Специфічні труднощі при дослідженні нафти виникають внаслідок великої кількості компонентів, що входять до її складу. У зв'язку з цим отримали широке поширення емпіричні рівняння стану. В інженерній практиці найбільш широке застосування знайшли два їх види: багатокоефіцієнтні та кубічні [4, 5]. Багатокоефіцієнтні рівняння є досить складними і для отримання коренів цих рівнянь потрібні ітераційні процедури. Для кожної речовини

кількість коефіцієнтів і їхні значення є індивідуальними. Для інженерних розрахунків зручнішими є кубічні рівняння стану, які іноді не поступаються багатокоефіцієнтним рівнянням за точністю передбачення термодинамічних властивостей чистих речовин і їх сумішей. В той же час істотним недоліком кубічних рівнянь є досить значні погрішності, які можуть досягати кількох відсотків при розрахунках рідкої фази [5].

Ми ставили задачу знайти універсальну математичну структуру, використання якої дозволяє з хорошою точністю за експериментальними даними відтворювати обидві вітки бінодалі та здійснювати екстраполяцію в ті області співіснування фаз, які через аномально високі значення температур і тисків та відповідно високу реакційну здатність досліджуваних речовин є недоступними для вивчення за допомогою сучасного наукового обладнання. Застосовано ступінчастий регресивний аналіз [6]. Метод базується на деякому наборі даних і загальному підході, що містить всі доданки, які вважаються ефективними. Створюється матриця регресії, у якій для знаходження ефективної комбінації доданків застосовуються математичні алгоритми. У якості критерію оцінки використовують суму найменших квадратів. Математичний алгоритм покрокового регресивного аналізу спочатку включає вибраний доданок, який найбільш ефективно зменшує суму найменших квадратів, будучи включеним у відповідне рівняння.

Література

1. Guggenheim E. A. The Principle of Corresponding States // J. Chem. Phys. – 1945. – Vol. 13. – P. 253-261.
2. Филиппов Л. П. Подобие свойств веществ. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1978. – 256 с.
3. Скрипов В. П., Файзуллин М. З. Фазовые переходы кристалл – жидкость – пар и термодинамическое подобие. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 160 с.
4. Grigorev B.A., Modeling and calculation of thermodynamic properties and phase equilibria of oil and gas condensate fractions based on two generalized multiparameter equations of state / A. Gerasimov, I. Alexandrov // Fluid Phase Equilibria. – 2016. – Vol. 418. – P. 204-223.
5. Брусилковский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. – М.: “Грааль”, 2002. – 575 с.
6. Zayika S.O. Application of statistical methods for modeling of "liquid-gas" thermodynamic systems of real substances / S.O. Zayika, A.T. Loburets // Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2018 : міжнар. наук.-практ. конф., 25 - 29 черв. 2018 р. : тези доп. – Чернігів, 2018. – P. 106 – 108.