

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАТИКА

УДК 519.6

Математическая модель анализа 2-фазного равновесия смеси и ее реализация в информационной системе© Е. В. Бирюкова¹, И. М. Губайдуллин² К. Ф. Коледина³

Аннотация. Данная работа посвящена математическому моделированию анализа парожидкостного равновесия многокомпонентных углеводородных смесей. Целью работы является разработка математической модели описания фазового состояния систем природных углеводородов. Реализована информационно-вычислительная система для расчета, включающая в себя определение составов и количественного соотношения паровой и жидкой фаз при заданных давлении, температуре и общем составе смеси. База данных включает в себя множества взаимосвязанных факторов установления термодинамического равновесия, последовательные и параллельные алгоритмы расчета парожидкостного равновесия в многокомпонентных углеводородных системах, содержащих воду. Проведен анализ существующих экспериментальных исследований, посвященных моделированию термодинамических свойств нефтей и природных газов в пористой среде. Проведены вычисления для экспериментальных данных из литературы.

Ключевые слова: анализ парожидкостного равновесия, информационно-вычислительная система, многокомпонентные углеводородные системы

1. Введение

Методы прогнозирования и анализа фазовых превращений природных углеводородов базируются на комплексном использовании результатов измерений, лабораторных исследований и математического описания соответствующих процессов. При проектировании разработки и эксплуатации месторождений нефти и газа математическое моделирование фазового состояния систем природных углеводородов включает в себя определение составов и количественного соотношения равновесных паровой и жидкой фаз при заданных давлении, температуре и общем составе смеси [1]. Данная работа основана на разработанном математическом описании анализа фазового состояния систем природных углеводородов [2].

2. Описание математической модели

При заданных термобарических условиях, необходимо определить мольные доли и составы жидкой и газовой фаз, на которые разделится исходная смесь по модели:

¹ Студентка факультета математики и информационных технологий, Башкирский государственный университет, г. Уфа; lenka.birukova@mail.ru

² Ст. науч. сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; irekmars@mail.ru

³ Научный сотрудник лаборатории математической химии, Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа; koledinakamila@mail.com

$$\begin{cases} f_{i,L} - f_{i,V} = 0, i = \overline{1, N} \\ x_i * L + i_i * V - z_i = 0, i = \overline{1, N} \\ \sum_{i=1}^N y_i - 1 = 0 \\ L + V = 1 \end{cases} \quad (2.1)$$

В системе первые N уравнений описывают условия термодинамического равновесия - равенство летучестей компонентов в сосуществующих паровой и жидкой фазах. Следующие N уравнений описывают материальный баланс компонентов в фазах. Летучести компонентов в паровой $f_{i,V}$ и жидкой $f_{i,L}$ фазах рассчитываются на основе известных термодинамических соотношений с использованием уравнений состояния фаз [3].

Для решения задачи была применена разработанная информационно-вычислительная система (ИВС) [2].



Р и с у н о к 2.1

Информационно-вычислительная система анализа прожидкостного равновесия в многокомпонентных углеводородных системах

Был сформулирован алгоритм расчета равновесия системы пар-жидкость [2]

3. Вычислительный эксперимент

Рассмотрим применение разработанного метода на примере экспериментальных данных из литературы [1]. Данные замеров показали, что в залежи Б начальное давление

равно 59,1 МПа, а температура составляет 125 °С. В таблице 1 представлен компонентный состав исследованного пластового флюида.

Таблица 1. Компонентный состав пластового флюида залежи Б.

Компонент	Содержание	
	% мол	% масс
Азот	0,10	0,06
Диоксид углерода	1,81	1,71
Метан	65,82	22,73
Этан	7,41	4,80
Пропан	5,04	4,79
изо-Бутан	1,85	2,32
н-Бутан	1,96	2,46
изо-Пентан	1,23	1,91
н-Пентан	0,86	1,34
C_6	1,74	3,22
C_7	2,19	4,72
C_8	1,38	3,40
C_9	1,51	4,18
C_{10+}	7,10	42,37
Всего	100	100

Используя разработанный выше алгоритм мы получили результаты, представленные в Таблице 2.

Таблица 2. Состав газовой и жидкой фаз по результатам разработанного алгоритма флюида залежи Б

Компонент	% мол	
	Газовая фаза	Жидкая фаза
Азот	0,13	0,04
Диоксид углерода	1,38	2,44
Метан	72,5	55,79
Этан	4,06	12,43
Пропан	1,20	10,78
изо-Бутан	0,22	4,28
н-Бутан	1,77	4,63
изо-Пентан	0,06	2,98
C_6	1,26	2,45
C_7	1,02	3,94
C_8	0,3	2,99
C_9	0,1	3,56
C_{10+}	0,04	17,68
Всего	82,5	126,1

Результаты будут проанализированы с литературными данными.

4. Заключение

Таким образом, в работе реализована математическая модель для расчета парожидкостного равновесия многокомпонентных углеводородных систем, разработана

информационно-вычислительная система анализа равновесия. Методика апробирована на экспериментальных данных из литературных источников.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брусиловский А.И., “Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа”, *Грааль*, 2002, 575.
2. Бирюкова Е.В., Коледина К.Ф., “Информационно-вычислительная система анализа парожидкостного равновесия в многокомпонентных углеводородных системах”, в *сборнике: ITIDS+RRS'2014*, 2014, 170-174.
3. Новиков А. А., Чухарева Н.В., “Физико-химические основы процессов транспорта и хранения нефти и газа”, *Учебное пособие*, 2005, 111.
4. Губайдуллин И.М., Линд Ю.Б., Коледина К.Ф., “Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики”, *Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии*, 2012, № Т. 13 № 2 (26), 28-36.

Mathematical model analysis of 2-phase equilibrium mixture and its implementation in the information system

© E. V. Biryukova⁴, I. M. Gubaydullin⁵, K. F. Koledina⁶

Abstract. This paper is devoted to mathematical modeling of the vapor-liquid equilibrium analysis of multicomponent hydrocarbon mixtures. The aim is to develop a mathematical model describing the phase of the systems of natural hydrocarbons. Implemented data-processing system to calculate, including the determination of the composition and the quantitative ratio of the vapor and liquid phases at a given pressure, temperature and composition of the total mixture. The database includes a plurality of interconnected factors thermodynamic equilibrium, serial and parallel algorithms for calculating vapor-liquid equilibria in multicomponent hydrocarbon systems containing water. The analysis of existing experimental studies on the modeling of the thermodynamic properties of oil and natural gas in a porous medium. Carried out calculations to experimental data from the literature.

Key Words: analysis of the vapor-liquid equilibrium, information computer system, hydrocarbon multi-component system

⁴ Student of Department of Mathematics and Information Technologies, Bashkir State University, Ufa; lenka.birukova@mail.ru

⁵ Senior Research Associate of Laboratory of Mathematical Chemistry, Institute of petrochemistry and catalysis of the Russian Academy of Sciences, Ufa; koledinakamila@mail.com

⁶ Scientific employee of Laboratory of Mathematical Chemistry, Institute of petrochemistry and catalysis of the Russian Academy of Sciences, Ufa; koledinakamila@mail.com