

УДК 544.015

МОДИФИКАЦИЯ АЛГОРИТМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОЛИ ОТГОНА ПРИ РАСЧЕТЕ ГАЗОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ

С.Б. Коныгин

Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Рассмотрены вопросы модификации алгоритма для определения доли отгона при расчете газожидкостного равновесия. Выявлены недостатки традиционного алгоритма расчета доли отгона. Предложены способы исправления указанных недостатков, которые легли в основу модифицированного алгоритма. Приведены схема и описание модифицированного алгоритма. Проведено тестирование работы нового алгоритма для различных значений компонентных составов, констант фазового равновесия и погрешностей расчета. В результате тестирования показано, что алгоритм решает поставленную задачу с требуемой точностью за 7–10 итераций, что вполне приемлемо для технических расчетов. Количество комбинаций компонентного состава и констант фазового равновесия, требующих большего числа итераций, составляет порядка 3 %.

Ключевые слова: алгоритм расчета, доля отгона, константа фазового равновесия.

Задача определения доли отгона является одним из основных этапов расчета газожидкостных равновесий [1]. В своей классической постановке задача заключается в определении мольной доли газа e при заданных значениях компонентного состава смеси z_i и констант фазового равновесия k_i (i – номер компонента). При этом на единичном интервале $e = [0; 1]$ решается уравнение

$$f(e) = \sum_i y_i - \sum_i x_i = \sum_i \frac{(k_i - 1)z_i}{1 + e(k_i - 1)} = 0, \quad (1)$$

где y_i, x_i – мольные составы пара и жидкости соответственно.

Уравнение (1) обычно предлагается решать с помощью алгоритма Ньютона – Рафсона, причем в качестве начального приближения рекомендуется значение $e = 1$ [1].

Однако при практической реализации указанного метода расчета на ЭВМ возникают следующие проблемы:

- из-за ограниченной точности чисел с плавающей точкой величина $k_i - 1$ некорректно вычисляется при очень малых значениях k_i и при значениях k_i , очень близких к единице;

- при наличии очень малых констант фазового равновесия k_i определение доли отгона алгоритмом Ньютона – Рафсона при начальном значении $e = 1$ требует большого количества итераций.

Указанные проблемы приводят к тому, что при проведении значительного количества расчетов для многокомпонентных смесей в широком диапазоне температур могут возникнуть дополнительные погрешности определения доли отгона или потребоваться значительные временные затраты. В этой связи необходи-

Сергей Борисович Коныгин (д.т.н.), заведующий кафедрой «Машины и оборудование нефтегазовых и химических производств».

ма модификация алгоритма, которая гарантированно обеспечивает небольшое число итераций при самых различных значениях z_i и k_i .

Для устранения первой проблемы предлагается модифицировать уравнение (1) следующим образом:

$$f(e) = \sum_i z_i \left(\frac{k_i}{1-e+ek_i} - \frac{1}{1-e+ek_i} \right) = 0. \quad (2)$$

Уравнение (2) тождественно уравнению (1), но вычисления на ЭВМ производятся в другом порядке, что снижает погрешность расчетов.

Для решения второй проблемы предлагается первые несколько итераций делать с помощью метода половинного деления. Это позволит исключить попадание алгоритма Ньютона – Рафсона в область вертикальной асимптоты и, как следствие, большого числа итераций.

С учетом вышеизложенного был разработан модифицированный алгоритм определения доли отгона (см. рисунок).

В начале расчета проверяются условия существования чистой жидкости и чистого газа. При их выполнении доли отгона устанавливаются равными соответственно $e = 0$ и $e = 1$ и расчет заканчивается. Затем устанавливаются минимальная $e_L = 0$ и максимальная $e_R = 1$ границы доли отгона для половинного деления, а также вычисляются значения функции $f(e)$ в этих точках.

Первые итерации (в ходе исследований было определено, что достаточно четырех) выполняются методом половинного деления, а затем происходит переход к алгоритму Ньютона – Рафсона. Специфической особенностью является то, что за начальное приближение здесь берется результат метода половинного деления и при определенных значениях z_i и k_i возможен выход за пределы интервала $e = [0; 1]$. Для исключения этого предусмотрена следующая коррекция значений:

$$e^{n+1} = 0 \text{ при } e^{n+1} < 0 \text{ и } e^{n+1} = 1 \text{ при } e^{n+1} > 1. \quad (3)$$

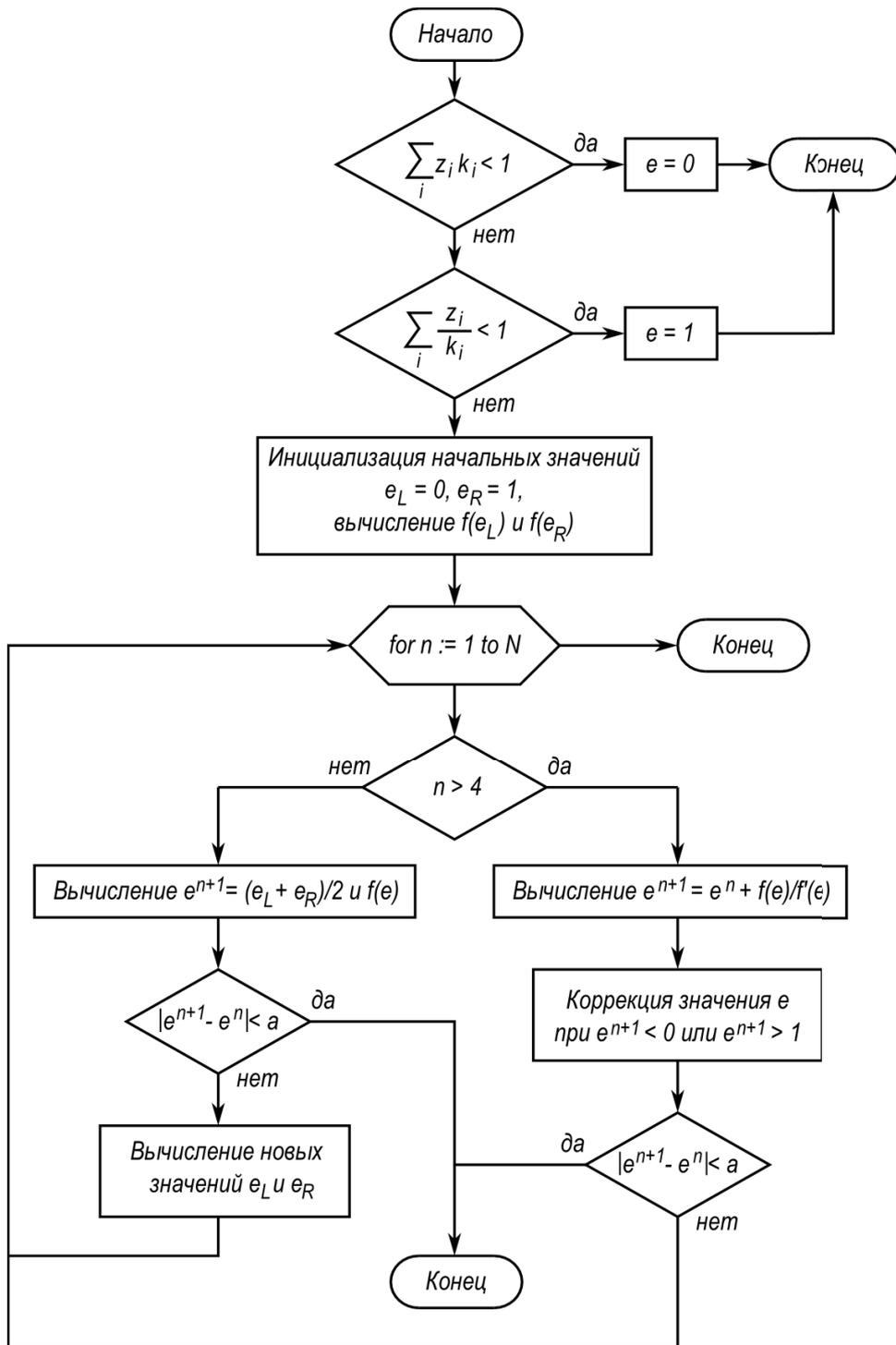
Решение считается найденным, если значения доли отгона на текущей и предыдущей итерациях не превышают величину погрешности a :

$$\left| e^{n+1} - e^n \right| < a. \quad (4)$$

Если решение не найдено за максимальное количество итераций N , то алгоритм выдает ошибку.

Для апробации данного алгоритма была проведена серия вычислительных экспериментов с различными значениями z_i и k_i . Тестирование проводилось на системе из четырех компонентов для трех различных значений погрешности a . Каждый тест состоял из 10 000 вычислений доли отгона. При каждом вычислении доли отгона составы z_i создавались с помощью равномерно распределенного генератора случайных чисел r_i с последующей нормировкой:

$$z_i = \frac{r_i}{\sum_{i=1}^4 r_i}. \quad (5)$$



Модифицированный алгоритм расчета доли отгона

Результаты тестирования модифицированного алгоритма

Параметр	Значение		
	при $a = 10^{-8}$	при $a = 10^{-10}$	при $a = 10^{-12}$
Число итераций:			
6	0,1 %	0,0 %	0,0 %
7	10,6 %	3,7 %	1,2 %
8	42,7 %	38,3 %	29,1 %
9	12,5 %	21,9 %	30,9 %
10	2,5 %	5,2 %	6,6 %
11 и более	2,3 %	2,3 %	3,0 %
Чистые газ или жидкость (0 итераций)	29,3 %	28,6 %	29,2 %
Ошибки	0 %	0 %	0 %
Максимальное число итераций	56	58	58

В свою очередь, константы фазового равновесия k_i также формировались с помощью случайных чисел R_i следующим образом:

$$k_i = A \exp(BR_i). \quad (6)$$

Здесь случайные числа R_i являлись аналогом температуры, а параметры A и B подбирались таким образом, чтобы константы фазового равновесия находились в пределах от 10^{-16} до 10^7 .

Результаты тестирования сведены в таблицу. Из рассмотрения данных таблицы видно, что предлагаемый вариант алгоритма расчета доли отгона:

- обеспечивает сходимость в среднем за 7–10 итераций при значениях погрешностей, достаточных для проведения технических расчетов (в число итераций входят четыре итерации, выполняемые по методу половинного деления);
- допускает порядка 2–3 % вычислений с числом итераций более 10;
- обеспечивает определение чистых газа или жидкости;
- не приводит к появлению ошибок.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Коныгин С.Б., Крючков Д.А.* Моделирование и расчет процессов и аппаратов (МиР ПиА). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015613176.
2. *Уэйлес С.* Фазовые равновесия в химической технологии. Т. 2. – М.: Мир, 1987. – 300 с.
3. *Гуревич Г.Р., Брусиловский А.И.* Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойства газоконденсатных смесей. – М.: Недра, 1984. – 264 с.
4. Термодинамика равновесия жидкость – пар / Под. ред. А.Г. Морачевского. – Л.: Химия, 1989. – 344 с.
5. *Коныгин С.Б.* Моделирование двумерных фазовых переходов в адсорбционных слоях // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Технические науки. – 2011. – № 1(29). – С. 238-241.

Статья поступила в редакцию 1 октября 2015 г.

ALGORITHM MODIFICATION FOR VAPOR FRACTION CALCULATION AT GAS-LIQUID EQUILIBRIUM MODELLING

S.B. Konygin

Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation

This paper is devoted to modification of vapor fraction calculation algorithm used in gas-liquid equilibrium solving. Drawbacks of traditional calculation algorithm are revealed and solutions are offered. Scheme and description of modified algorithm are presented. A testing of new algorithm reveals that solution reaches in 7-10 iterations. It is acceptably for technical calculations. A part of cases with more iterations amount to 3 %.

Keywords: calculation algorithm, vapor fraction, phase equilibrium constant.