

УДК 544.015

ПРОГРАММА ДЛЯ ПРОВЕРКИ АДЕКВАТНОСТИ РАСЧЕТНЫХ МОДЕЛЕЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

С.Б. Коньгин

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

Рассмотрены вопросы разработки программного продукта, позволяющего проанализировать адекватность моделей, используемых для расчета свойств газовых и жидких сред. Созданный продукт позволяет провести сравнение расчетных значений плотности, энтальпии, теплопроводности, вязкости и поверхностного натяжения с экспериментальными значениями, содержащимися в базе данных. Также имеется возможность проверки расчетных условий наступления фазовых переходов. Данная программа может помочь разработчику технологического процесса выбрать модели фазовых равновесий и свойств газов и жидкостей для каждого конкретного случая. В качестве примера приведены результаты сравнительного анализа результатов расчета плотности пропана с помощью уравнения Пенга – Робинсона со справочными данными.

Ключевые слова: свойства газов и жидкостей, фазовые равновесия, уравнения состояния.

В настоящее время при проектировании технологических процессов нефтегазовой и химической промышленности широко используются различные программные продукты [1]. В основе расчетных алгоритмов, реализованных в данных программах, обычно лежат всевозможные уравнения состояния и корреляционные зависимости, позволяющие определить параметры фазовых равновесий и свойства фаз [2–5]. Однако в каждом конкретном случае перед проектировщиком встает вопрос о выборе расчетных моделей, позволяющих адекватно описать свойства перерабатываемых сред. В этой связи специалисту целесообразно иметь в своем распоряжении программный продукт, который наряду с расчетными методиками содержал бы базу данных по свойствам компонентов и фазовым равновесиям при различных температурах и давлениях [6].

Для решения указанной задачи был разработан программный продукт, основное окно которого представлено на рис. 1. Он позволяет выбрать из базы данных химический компонент, указать интересующее свойство и сравнить результаты расчетов с помощью указанной модели с имеющимися в программе экспериментальными данными. К основным свойствам, представляющим практический интерес для проектирования технологических процессов, отнесены плотность, энтальпия, теплопроводность, вязкость и поверхностное натяжение. Сравнение свойств может быть выполнено для газовой и жидкой фаз как для докритических значений температур и давлений, так и в сверхкритических условиях. Кроме того, программа может автоматически определять фазовое состояние компонента и сравнивать условия наступления фазового перехода с их реальными значениями.

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

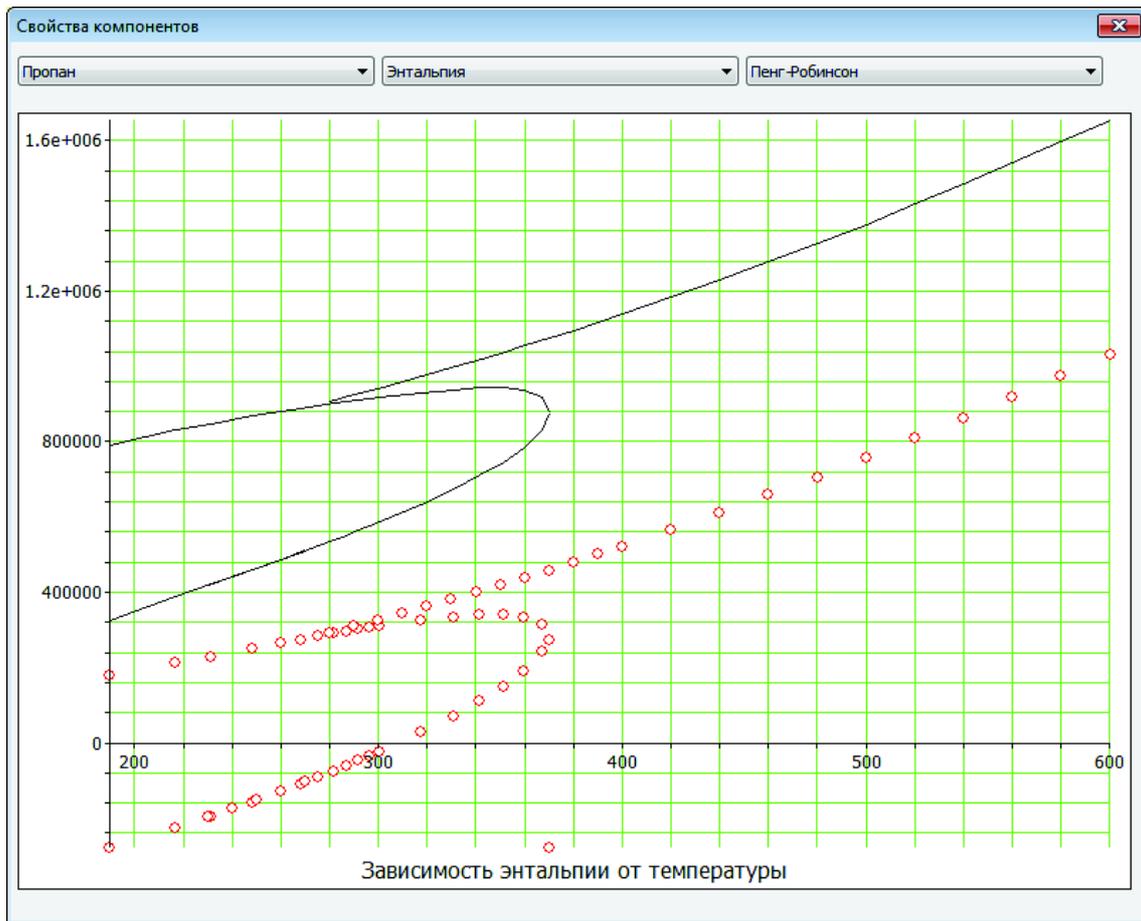


Рис. 1. Окно разработанной программы

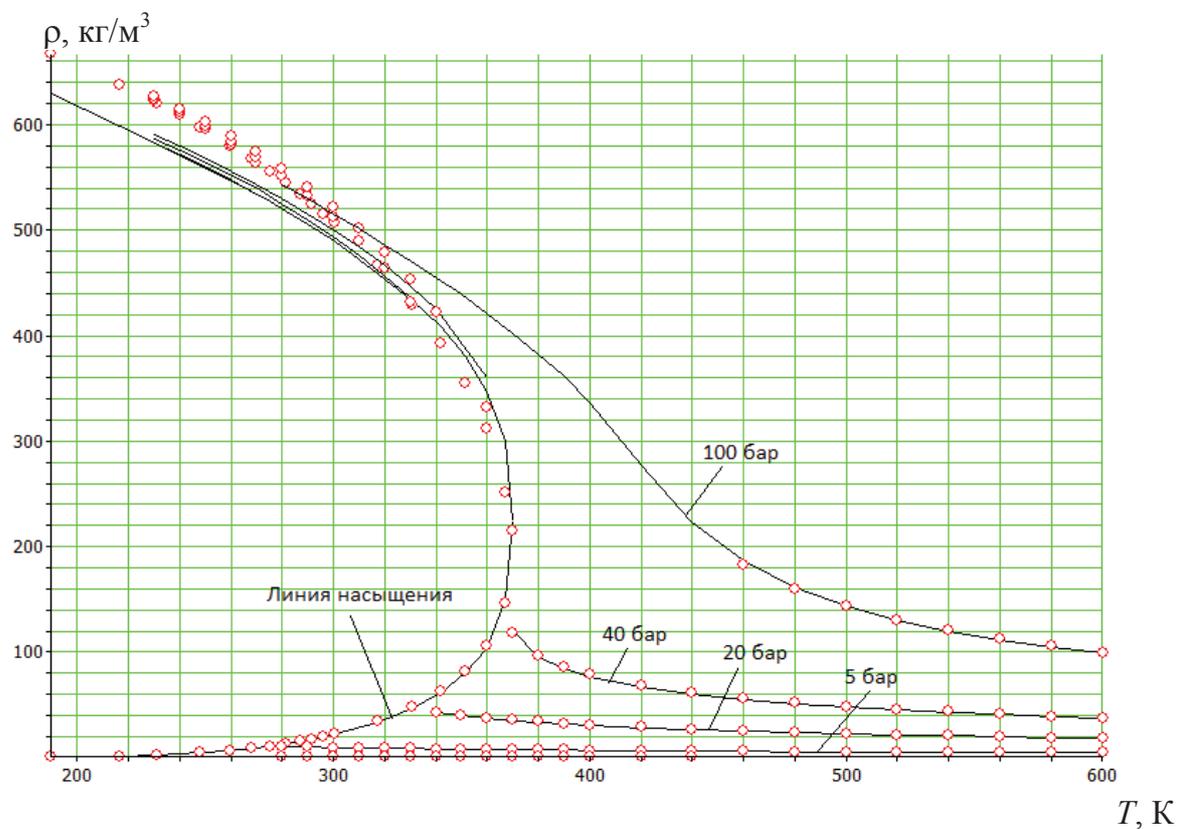


Рис. 2. Результаты анализа плотности пропана
(сплошные линии – экспериментальные зависимости [6], точки – расчетные данные)

В качестве примера работы программы на рис. 2 представлена зависимость плотности пропана от температуры и давления. Линии соответствуют экспериментальным данным [6], точками обозначены результаты расчетов с помощью уравнения состояния Пенга – Робинсона [3, 4]. Из рассмотрения указанного рисунка пользователь программы может сделать выводы, что уравнение состояния Пенга – Робинсона:

- хорошо описывает плотность газа в широком диапазоне термодинамических условий;
- хорошо описывает плотность сверхкритической фазы;
- имеет высокие погрешности при расчете плотности жидкой фазы (причем как положительные, так и отрицательные в зависимости от приведенной температуры).

Кроме графического представления сравнительные данные могут иметь вид таблиц с указанием значений погрешности расчетов.

Проводя аналогичные сравнения для других компонентов, присутствующих в технологическом процессе, проектировщик может сделать вывод о целесообразности использования той или иной модели для расчета свойств фаз.

В качестве дальнейшего развития программы рассматривается возможность сравнения экспериментальных и расчетных данных по фазовому равновесию для бинарных систем. К основным параметрам, по которым будет проводиться сравнение, отнесены составы паровой и жидкой фаз.

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. *Коныгин С.Б.* Модификация алгоритма определения доли отгона при расчете газожидкостного равновесия // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Технические науки. – 2015. – № 4(48). – С. 135–139.
3. *Уэйлес С.* Фазовые равновесия в химической технологии. Т. 2. – М.: Мир, 1987. – 300 с.
4. *Гуревич Г.Р., Брусиловский А.И.* Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойства газоконденсатных смесей. – М.: Недра, 1984. – 264 с.
5. Термодинамика равновесия жидкость – пар / Под. ред. А.Г. Морачевского. – Л.: Химия, 1989. – 344 с.
6. *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Старс, 2006. – 720 с.

Статья поступила в редакцию 21 марта 2016 г.

SOFTWARE FOR CHECKING MODELS THAT USING FOR GAS AND LIQUID PROPERTIES CALCULATION

S.B. Konygin

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

This paper is devoted to create software that allows check the correctness of gas and liquid properties models. This software can compare calculated values of density, enthalpy, thermal conductivity, viscosity and surface tension with available experimental data. Also it can check phase transition conditions. This software can help the process developers to choose models for specific case. Also this paper contains an comparison example of calculated propane density with experimental values.

Keywords: *gas and liquid properties, phase equilibrium, equation of state.*

Sergey B. Konygin, Doctor of Technical Sciences, Head of Department.