

УДК 544.015

## ПРОГРАММА ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ БИНАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ

**С.Б. Коныгин**

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

*Рассмотрены вопросы модернизации ранее разработанного программного продукта, позволяющего анализировать адекватность моделей, используемых для расчета свойств газовых и жидких сред. В результате модернизации появляется возможность анализа адекватности моделирования фазовых равновесий в газожидкостных системах и поиска оптимальных значений параметров бинарного взаимодействия между компонентами. Данная программа может помочь разработчику технологического процесса выбрать уравнения состояния и определить значения бинарных коэффициентов для каждого конкретного случая. В качестве примера приведены результаты сравнительного анализа результатов моделирования фазового равновесия в системе «метан – пентан» с помощью уравнения Пенга – Робинсона со справочными данными.*

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

Проведение расчетов различных процессов и аппаратов нефтегазовой и химической промышленности зачастую связано с использованием различных кубических уравнений состояния вещества [1–5]. Они позволяют проводить расчет фазовых равновесий и определять объемы и составы паровой и жидкой фаз.

Для повышения точности прогнозирования составов фаз в многокомпонентных системах используются параметры бинарного взаимодействия  $k_{ij}$ , которые участвуют в усреднении свойств. Так, например, для уравнения Пенга – Робинсона параметры перекрестного взаимодействия  $(a\alpha)_{ij}$  определяются по формуле [1]

$$(a\alpha)_{ij} = (1 - k_{ij}) \sqrt{(a\alpha)_i (a\alpha)_j},$$

где  $(a\alpha)_i$ ,  $(a\alpha)_j$  – константы уравнения для чистых веществ.

Значения параметров бинарного взаимодействия  $k_{ij}$  определяются эмпирическим путем. В настоящее время существует большое количество справочных данных по значениям указанных параметров [1–3].

Однако зачастую специалисту целесообразно иметь в своем распоряжении программный продукт, который бы позволял провести сравнение результатов моделирования фазового равновесия с экспериментальными данными и при необходимости подобрать оптимальные значения  $k_{ij}$ , обеспечивающие их наилучшее согласование.

Ранее был описан программный продукт для проверки адекватности расчетных моделей, используемых для прогнозирования свойств газов и жидкостей [6]. В рамках настоящей статьи представлено расширение возможностей указанной

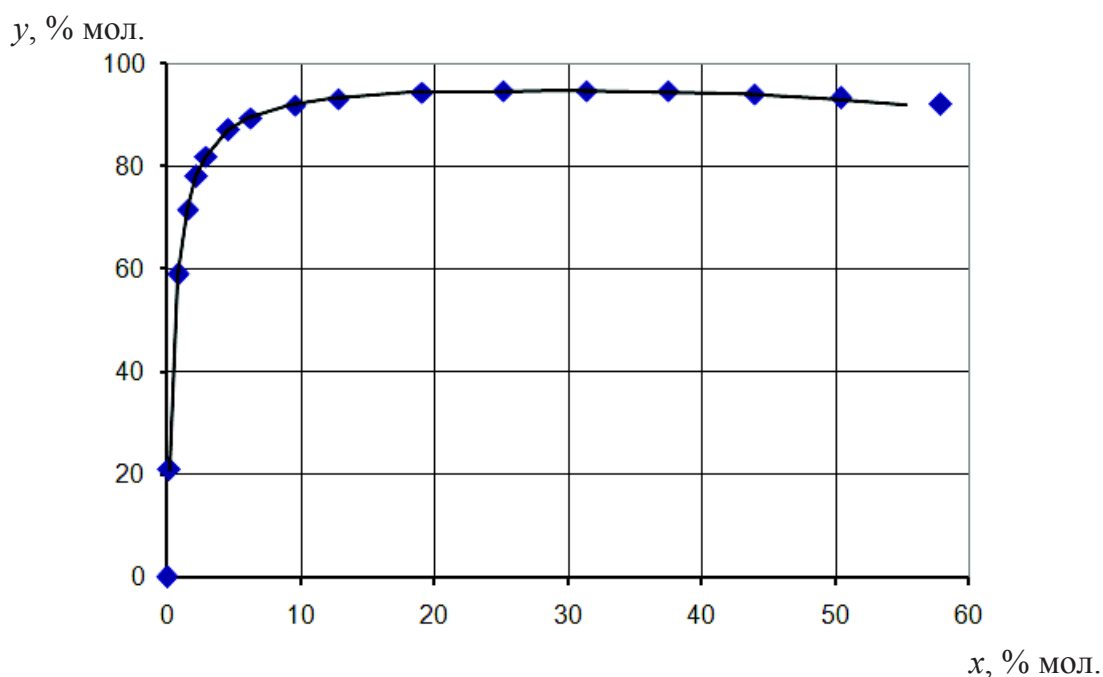
---

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

программы, позволяющее проводить сравнение теоретических и экспериментальных составов фаз и оптимизировать значения параметров бинарного взаимодействия  $k_{ij}$ .

**Сравнение экспериментальных данных [1] и результатов моделирования  
для системы «метан – пентан»**

$x_Э$ , % мол.	$y_Э$ , % мол.	$t_Э$ , °C	$p_Э$ , атм	$t_P$ , °C	$x_P$ , % мол.
0,15	20,9	37,8	1,36	38,0	0,15
0,84	58,9	37,8	2,72	38,3	0,82
1,54	71,6	37,8	4,08	38,6	1,49
2,20	78,0	37,8	5,44	38,9	2,15
2,90	81,8	37,8	6,80	39,2	2,81
4,58	87,0	37,8	10,2	39,8	4,44
6,26	89,4	37,8	13,6	40,8	6,03
9,58	91,9	37,8	20,4	41,8	9,16
12,8	93,2	37,8	27,1	42,0	12,2
19,1	94,3	37,8	40,8	42,8	18,2
25,1	94,6	37,8	54,3	43,7	23,8
31,4	94,7	37,8	68,0	43,4	29,4
37,5	94,6	37,8	85,0	42,2	36,2
43,9	94,1	37,8	102,0	41,8	42,7
50,4	93,3	37,8	119,0	41,5	49,0



В качестве примера работы программы представлены результаты моделирования с помощью уравнения состояния Пенга – Робинсона газожидкостного равновесия для системы «метан – пентан», экспериментальные данные для которой имеются в справочной литературе [7] (см. таблицу и рисунок).

Моделирование проводилось в следующем порядке:

– для каждой точки в качестве исходных данных задавались состав пара и давление в системе, соответствующие результатам эксперимента [7];

– производилось определение расчетного значения температуры начала конденсации пара;

– для указанных значений температуры и давления определялся состав жидкой фазы.

Результаты сравнения приведены в таблице и на рисунке. Здесь через  $x$  и  $y$  обозначены мольные доли метана в жидкой и паровой фазах соответственно. Линия соответствует результатам расчетов с помощью уравнения состояния Пенга – Робинсона, точки – экспериментальным данным [7]. Анализируя расхождения между расчетом и экспериментом данных таблицы, пользователь программы может оптимизировать значение параметров бинарного взаимодействия.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии. Т. 1. – М.: Мир, 1987. – 304 с.
2. Гуревич Г.Р., Брусиловский А.И. Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойств газоконденсатных смесей. – М.: Недра, 1984. – 264 с.
3. Термодинамика равновесия жидкость – пар / Под ред. А.Г. Морачевского. – Л.: Химия, 1989. – 344 с.
4. Коныгин С.Б., Крючков Д.А. Моделирование и расчет процессов и аппаратов (МиР ПиА). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015613176.
5. 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.
6. Коныгин С.Б. Программа для проверки адекватности расчетных моделей, используемых для прогнозирования свойств газов и жидкостей // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Технические науки. – 2016. – № 2(50). – С. 208–210.
7. Коган В.Б., Фридман В.М., Кафаров В.В. Равновесие между паром и жидкостью: Справ. пособие. Кн. 1. – М.–Л.: Наука, 1966. – 646 с.

*Статья поступила в редакцию 23 июня 2016 г.*

## SOFTWARE FOR EQUATION OF STATE BINARY COEFFICIENTS OPTIMIZATION

**S.B. Konygin**

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

*This paper is devoted to modernization software that allows check the correctness of gas and liquid properties models. After modernization this software can compare calculated phases compositions with available experimental data and find the optimal binary coefficients values. This software can help the process developers to choose equation of state and binary coefficients in each specific case. Also this paper contains a comparison example of calculated and experimental compositions in "methane – pentane" system.*

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

---

*Sergey B. Konygin (Dr. Sci. (Techn.)), Head of Department.*