

История создания программной системы “ГазКондНефть”

Канд.техн.наук Калашиников О.В.

По материалам обзорной статьи в научно-техническом журнале “Энерготехнологии и ресурсосбережение” (2009 г., № 4, с. 73-79) “Истоки и достижения “машинной термодинамики” углеводородов”.

“Машинная термодинамика” - именно так, в середине 60-х годов прошлого столетия, непривычно для специалистов по прикладной термодинамике, кратко и ёмко сформулировал новое научное направление в отделе разделения и очистки газовых смесей Института газа Академии Наук Украины (ИГ) его руководитель д.т.н. проф. А.П.Клименко. Он сформулировал задачу так (дословно): “При машинном расчете процессов и аппаратов свойства смесей веществ должна считать сама машина.” Эту фразу А.П.Клименко повторял на семинарах отдела, на организованных им республиканских, а затем всесоюзных семинарах “Алгоритмизация расчета процессов и аппаратов химических производств, технологии переработки и транспорта нефти и газа на ЭВМ”.

К этому времени Г.Е.Каневцем уже была проведена определенная работа по расчетам на ЭВМ теплообменных аппаратов. Оказалось, однако, что при подготовке исходных данных для таких расчетов львиная доля времени уходила на предварительный расчет теплофизических свойств теплообменивающихся потоков. Стало очевидным, что без автоматизации расчета термодинамических и транспортных свойств смесей веществ нельзя ожидать эффективного использования ЭВМ.

Задача эта поначалу казалась не столь сложной. Имеются таблицы обобщенных (единых) значений коэффициентов сжимаемости газа Z в зависимости от двух параметров – “приведенной” температуры τ и “приведенного” давления π :

$$Z=f(\tau,\pi); \quad (1)$$

$$\tau=T/T_K; \quad (2)$$

$$\pi=P/P_K, \quad (3)$$

где T_K - критическая температура вещества; P_K - критическое давление.

Для смесей веществ принимаются не их истинные критические параметры, а условные “псевдокритические” $T_{пк}$ и $P_{пк}$:

$$\tau_{см} = T/T_{пк}; \quad (4)$$

$$\pi_{см}=P/P_{пк}; \quad (5)$$

$$T_{пк} = \sum T_{к,i}Y_i; \quad (6)$$

$$P_{пк} = \sum P_{к,i}Y_i, \quad (7)$$

где $T_{к,i}$ и $P_{к,i}$ – критические температура и давление компонента смеси; y_i – мольная доля компонента в смеси.

Предполагалось с помощью дифференциальных уравнений термодинамики по обобщенным таблицам Z находить энтальпию, энтропию и теплоемкость реального газа любого состава.

Анализ точности полученных результатов показал, что такой подход приемлем лишь при небольших и средних давлениях (порядка 2-3 МПа), в то время как для расчета технологических процессов в газовой промышленности необходимо знать термодинамические свойства многокомпонентных газовых и жидких смесей (газовых конденсатов) до пластовых давлений (30-80 МПа). Предложенный Питцером “третий параметр” обобщения – “фактор ацентричности” ω (кроме τ и π , учитывающий расположение обобщенных линий насыщения индивидуальных веществ), – хотя и позволил дать новые, более точные таблицы и графики для коэффициентов сжимаемости и изотермических составляющих энтальпии, теплоемкости и энтропии, всё же не способствовал непосредственному использованию обобщенных базовых коэффициентов сжимаемости и поправок к ним для автоматизированного расчета калорических свойств смесей веществ.

При “ручных” расчетах термодинамических свойств смесей веществ использовались различные графики и номограммы со своими ограничениями, особенно в плане распространения на вещества, вовлекаемые в процессы подготовки природного газа (в частности, метанол и гликоли). Пластовый газ, кроме тяжелых углеводородов (выпадающих при выходе на поверхность), содержит значительное количество водяного пара: температуры в пласте довольно высоки – до 80-100°C и выше. Были попытки аппроксимации упомянутых номограмм для целей расчетов на ЭВМ. Однако со временем становилось все более и более ясным, что необходим некий общий, универсальный подход, дающий точность, приемлемую для технических расчетов.

Несколько слов о формулировке “точность, приемлемая для технических расчетов”. Очевидно, что главным требованием к любым техническим расчетам является точность. Однако для термодинамических и технологических расчетов процессов подготовки и переработки природного газа и нефти пока нет ни нормативных принятых пределов погрешности расчетов, ни нормативных методик определения термодинамических свойств. Поэтому здесь действует правило: для конкретных процессов рекомендуется использовать наиболее точные расчетные методики. Однако выявление наиболее точных методик – дело крайне трудоемкое из-за огромного количества публикаций. В проектных организациях считают, что для многокомпонентных смесей удовлетворительной будет методика с точностью расчетов на уровне 5%, максимум 10-15%.

Для чистых веществ, в частности, для легких углеводородов, высокая точность определения термодинамических свойств была достигнута еще в 30-х – 40-х годах. Этому способствовали многочисленные экспериментальные работы, проводимые в основном в США. Как упоминалось выше, эти работы обобщались в различных графиках и номограммах. В эти же годы получило развитие направление аналитического описания P - V - T -свойств газов с помощью уравнений состояния вириального типа на базе экспериментальных данных. Крупным достижением явилось предложенное еще в 40-х годах Бенедиктом, Веббом и Рубиным весьма точное единое для газов и жидкостей 8-константное уравнение состояния для

легких углеводородов (C1-C7) (с погрешностью расчета плотности газов и жидкостей в пределах до 1-3% при давлениях до 20-30 МПа):

$$P=RTd+(B_0RT-A_0-C_0/T^2)d^2-(bRT-a)d^3+a\alpha d^6+cd^3(1+\gamma d^2)\exp(-\gamma d^2)/T^2, \quad (8)$$

где d -плотность, B_0 , A_0 , C_0 , b , a , α , c , γ - индивидуальные коэффициенты для каждого углеводорода.

Для смесей веществ коэффициенты предложено находить по комбинационным формулам линейного, квадратичного и кубического типов.

В 50-х годах Бенедикт и соавторы показали возможность применения их уравнения для расчета фазовых равновесий жидкость-пар: погрешности расчетов констант фазового равновесия, выполненных ими, находились в пределах 3-6% и редко превышали 10%. Поскольку непосредственное применение уравнения БВР в проектно-конструкторских организациях было еще невозможно, фирма Келлог выпустила сборник графиков для расчета фазовых равновесий, построенных на базе уравнения БВР.

В ИГ уравнение БВР и его производные функции (калорические свойства, равновесие жидкость-пар, температуры росы газа и кипения жидких смесей) запрограммировал С.И.Красноокый. С помощью этого уравнения им были проведены аналитические исследования технологической схемы сжижения природного газа, предложенной А.П.Клименко ("однопоточный каскадный холодильный цикл"). Однако попытки многих исследователей распространить уравнение БВР на тяжелые углеводороды газовых конденсатов оказались безуспешными.

Уже в начале изучения поставленной задачи стало ясным, что отправной точкой машинного расчета термодинамических свойств углеводородов и сопутствующих веществ для целей подготовки и переработки природного газа и нефти является автоматизация определения агрегатного состояния многокомпонентных смесей и составов сосуществующих фаз в довольно широком диапазоне температур и давлений: по температуре от -200 С (процессы обогащения гелия) до $+350$ С (фракционирование конденсата и нефти), по давлению от глубокого вакуума, порядка 20-30 мм рт. ст. (вакуумная перегонка тяжелых фракций конденсата и нефти), до 40 – 60 МПа (фазовые превращения газоконденсатных смесей в пластовых условиях). Причем, поскольку и в скважинах, и в шлейфовых трубопроводах, и в сепараторах при снижении давления выпадает не только газовый конденсат, но и вода, а в связи с антигидратным ингибированием вместе с нею и метанол или другие ингибиторы, необходимо было создать алгоритм определения количества фаз в смеси с любыми концентрациями этих компонентов, с одновременным расчетом расходов и составов газа, конденсата и водного раствора. Забегая вперед, отметим, что такой алгоритм и соответствующая программа были созданы автором настоящей статьи. Они являются сердцевинной практически всех компьютерных программ в системе моделирования технологических процессов, о которых будет сказано ниже.

Применительно к газоконденсатным промысловым технологическим средам уравнение фазового равновесия в общем виде записывается так:

$$f_i^g = f_i^c = f_i^w, \quad (9)$$

где f_i^g , f_i^c и f_i^w – летучести каждого из компонентов в газовой (паровой) фазе, конденсате и водном растворе.

Величины f_i являются функциями температуры, давления и концентраций каждого из компонентов в каждой из фаз. Как известно, они находятся с помощью дифференциальных уравнений термодинамики. Для использования в инженерных расчетах в газовой и нефтяной промышленности предложены, развиваются и конкурируют два подхода: единое уравнение состояния и метод коэффициентов активности (с отдельным описанием свойств газовой и жидкой фаз).

Как упоминалось выше, Бенедикт, Вебб и Рубин первыми создали инженерное единое уравнение состояния. Но, поскольку это уравнение не охватывало всего необходимого круга веществ, для расчетов на ЭВМ фазовых равновесий смесей широкого состава в некоторых проектно-конструкторских организациях (в частности, в институте ЛенНИИхиммаш) был запрограммирован и использовался ставший широко известным метод коэффициентов активности Чао-Сидера. Серьезный недостаток последнего – невозможность покрытия технически важных параметрических зон смесей, в частности, зон, примыкающих к критическим точкам (например, области выпадения конденсата из пластового газа при снижении давления).

В проектных организациях использовались графики зависимости констант фазового равновесия от температуры и давления при различных т.н. “давлениях сходимости” (графики американской газовой ассоциации NGAA). Позже эти графики были аппроксимированы в некоторых организациях и в этом виде стали использоваться для программирования фазовых равновесий, но со временем, с увеличением быстродействия ЭВМ, были вытеснены более точными моделями – уравнениями состояния.

К началу 70-х годов среди специалистов-разработчиков моделей фазовых равновесий углеводородов сложилось твердое убеждение, что охват единой и точной моделью всех компонентов сырого природного газа и сопутствующих веществ невозможен, по крайней мере, в ближайшей перспективе. Причем, дальнейшее уточнение и термодинамических моделей смесей и распространение их на новые вещества может базироваться только на все более точных моделях P-V-T-свойств чистых веществ. Некоторые модели содержали по несколько десятков коэффициентов. Интерес некоторых исследователей к одной из модификаций уравнения Ван-дер-Ваальса – уравнению Редлиха-Квонга – расценивался как непрофессиональный интерес к “старью”.

В 1972 г. появляется работа Соава [1], совершившая переворот в моделировании фазовых превращений пар-жидкость в многокомпонентных смесях. Соав разработал модель Редлиха-Квонга (РК) и дал обобщенную температурную поправку к коэффициенту “а” уравнения состояния, используя параметры τ и ω :

$$P=RT/(V-b) - a(T)/(V(V+b)); \quad (10)$$

$$a(T) = a_k \alpha(T), \quad (11)$$

где a_k – коэффициент, определяемый только критическими параметрами индивидуальных веществ; $\alpha(T)$ – поправочная функция:

$$\alpha(T) = (1 + m(1 - \tau^{0.5}))^2, \quad (12)$$

где $\tau = T/T_k$ (T_k – критическая температура); m – параметр, определяемый фактором ацентричности Питцера ω :

$$m = 0,48 + 1,574 \omega - 0,176 \omega^2. \quad (13)$$

Для газовых и жидких смесей веществ Соав предложил следующие комбинационные правила:

$$b = \sum b_i x_i \quad (14)$$

$$a = \sum \sum x_i x_j a_{ij}; \quad (15)$$

$$a_{ij} = (1 - c_{ij})(a_i a_j)^{0.5}, \quad (16)$$

где c_{ij} – величина, названная “коэффициентом парного взаимодействия” и определяемая по экспериментальным данным о равновесии жидкость-пар бинарных систем; x_i – мольная доля компонента в жидкой смеси. Такие же правила применяются и для газовой смеси: в формулы (14) и (15) вместо x_i подставляются y_i – мольные доли компонентов в газовой смеси.

В настоящей статье опускаются выражения для калорических свойств и летучести, которые следуют из уравнения РК-С.

С помощью уравнений для коэффициентов летучести (f_i^g/y_i , f_i^c/x_i^c соответственно газовой и жидкой углеводородной смеси и f_i^w/x_i^w – водного раствора), для предварительных составов газа, конденсата и водного раствора, определяются промежуточные величины – коэффициенты распределения (константы фазового равновесия) для трех поверхностей раздела фаз ($K_i^{g-c} = f_i^c/x_i^c : f_i^g/y_i$, $K_i^{g-w} = f_i^w/x_i^w : f_i^g/y_i$, $K_i^{c-w} = f_i^w/x_i^w : f_i^c/x_i^c$), которые в состоянии, отвечающем равновесию и определенном последовательными приближениями материального баланса, принимают значения $K_i^{g-c} = y_i/x_i^c$, $K_i^{g-w} = y_i/x_i^w$, $K_i^{c-w} = x_i^c/x_i^w$.

Благодаря находке Соава, модификации уравнения Ван-дер-Ваальса неожиданно превратились в повсеместно используемые и достаточно достоверные инженерные модели агрегатного состояния смесей веществ в широких интервалах параметров, в том числе и в области, примыкающей к критической точке. Со временем появление новых модификаций уравнения состояния Ван-дер-Ваальса для самых разнообразных смесей веществ приняло лавинообразный характер. Как ни парадоксально, модификации кубического уравнения Ван-дер-Ваальса 70-х годов и сего времени, намного более простые, чем модификации уравнения Бенедикта-Вебба-Рубина, оказались более точными при описании фазовых равновесий

углеводородов и легко распространяемыми на другие вещества. Все существующие в настоящее время программные системы промышленного назначения используют различные модификации уравнения Ван-дер-Ваальса (Соава, Пенга-Робинсона (ПР) [2], Патела – Тея (ПТ) [3] и т.д.).

В настоящей работе приведем лишь изменения температурной поправки в уравнениях ПР и ПТ, предложенные в [4], уточняющие эти уравнения в области низких температур:

$$\alpha(T) = (1 + m(1 - \tau^n))^2; \quad (17)$$

$$n = 0,5 + 0,001\omega / (0,8 + \omega) / \tau^5. \quad (18)$$

При расчете энтальпии и теплоемкости

$$n = 0,5 + 10^{-3}\omega / (0,25 + \omega) / \tau^3. \quad (19)$$

Для уравнения ПР получено новое обобщение параметра m , улучшающее описание давления насыщения тяжелых углеводородов и их фракций (с температурой кипения от 40 до 700⁰С):

$$m = 0,38214 + 1,4769\omega - 0,13449\omega^2. \quad (20)$$

Для обоснованного выбора наиболее точной модификации уравнений состояния создан банк экспериментальных данных о фазовых равновесиях бинарных, тройных и многокомпонентных смесей, связанный со свободно подключаемыми к банку расчётными моделями [5]. С помощью банка выполнено автоматизированное сравнение точности наиболее широко используемых в мировой инженерной практике уравнений состояния: Бенедикта-Вебба-Рубина с поправками Орая (БВР-О), Редлиха-Квонга с уточнениями Соава (РК-С), Патела-Тея (ПТ) и уравнения Пенга-Робинсона: оригинального (ПР) и уточненного (ПР^o) [4]. Ниже приводятся результаты сравнения 2630 расчетных и экспериментальных значений коэффициентов фазового распределения K углеводородов, гелия, азота, диоксида углерода и сероводорода в интервале температур от 77 К до 583 К при давлениях от 0,2 до 26,2 МПа:

Уравнение состояния	Среднее абсолютное отклонение расчетных значений K от экспериментальных, %
БВР-О	10.7
РК-С	7.5
ПТ	7.8
ПР	7.7
ПР ^o	6.6

В [4] сделан вывод, что «уравнение ПР, записанное совместно с уточняющими функциями и коэффициентами парного взаимодействия, может быть использовано в качестве единой модели фазовых превращений в процессах обогащения гелия, сжижения природного газа, получения легких углеводородов, фракционирования конденсата».

В [6] обсуждается точность описания давления паров воды, метанола, гликолей и взаимной растворимости этих веществ и углеводородов в газообразном и жидком состояниях. Показано, что усовершенствованное уравнение состояния ПР обеспечивает точность, достаточную для инженерных расчетов, и для указанных систем (как правило, в пределах 5-10 %).

В [7] рассматривается точность расчета энтальпии газов и жидкостей, используемой для определения тепловых нагрузок теплообменных аппаратов. На основании сравнения с другими уравнениями состояния сделан вывод о предпочтительности применения уточненного уравнения ПР^о и для расчета тепловых балансов. Средние погрешности расчета теплот парообразования парафиновых, нефтяных и ароматических углеводородов находятся в пределах от 0,9 до 3,2 %, теплоемкости от 2,1 до 4,2%.

Необходимо отметить, что исследовательские работы по поиску и разработке единой термодинамической модели газожидкостных многокомпонентных смесей углеводородов и сопутствующих веществ проводились в контакте с ведущими научно-исследовательскими, проектно-конструкторскими и производственными организациями газовой и нефтяной промышленности – ВНИИгаз, ЮжНИИгипрогаз, ВНИПИгаздобыча, ВНИПИтрансгаз, ТюменНИИгипрогаз, Волго-УралНИПИгаз, ЦКБН, БелНИПИнефть, Уренгойгазпром, - которым непрерывно наращиваемое программное обеспечение передавалось по договорам. Фактически ИГ и позднее Научно-техническая фирма ТЕРМОГАЗ стали термодинамическим компьютерно-информационным центром в СНГ по многокомпонентным углеводородным газожидкостным системам.

Научно-технической фирмой “ТЕРМОГАЗ” осуществлялась сборка инженерных расчетных моделей в программной системе (ПС) “ГазКондНефть” (www.gascondoil.com) для моделирования технологических процессов, в основе которых – изменение термодинамических параметров одно-, двух- и трехфазных смесей: сепарации, дросселирования, смешения, эжекции, детандирования, компрессии, теплообмена (с выбором аппаратов воздушного охлаждения и кожухотрубчатых теплообменников), ректификации и абсорбции многокомпонентных смесей (в частности, процессов осушки газа гликолями, их регенерации, сжижения и разделения газов, стабилизации и фракционирования конденсата и нефти).

Программы для отдельных процессов были связаны таким образом, чтобы получить возможность моделирования установок по подготовке и переработке углеводородного сырья. Стал возможным расчет материальных и энергетических балансов установок промышленной обработки природного газа и нефти, газоразделения и фракционирования нефти и конденсата, с учетом применения антигидратных ингибиторов, и их регенерации (метанол, гликоли).

Комплекс программ дополнен подпрограммами определения затрат антигибратных ингибиторов, упругости паров жидких смесей, давления насыщенных паров по Рейду, точек росы по воде и углеводородам, параметров разгонки продуктов разделения, предсказания истинных температур кипения (ИТК) по данным разгонки конденсата или нефти в колбе Энглера. Предусмотрена возможность адаптации расчетных методик программного комплекса к данным промысловых и лабораторных исследований пластовых и дегазированных флюидов по молекулярной массе, плотности, вязкости, давлению начала конденсации, газосодержанию конденсата, давлению насыщения и изотермическому коэффициенту сжимаемости пластовой нефти, температурам застывания и помутнения.

Комплекс программ наращивался подпрограммами, позволяющими определять компонентно-фракционный состав исходного сырья - пластовых газоконденсатных и нефтяных смесей, с учетом данных по разгонке нефти и конденсата, и прогнозировать дифференциальную конденсацию пластового газа при снижении давления.

Разработаны и включены в единый комплекс программные средства для определения гидравлического и температурного режимов трубопроводов (горизонтальных, наклонных, рельефных), транспортирующих смеси в одно-, двух- и трехфазном состояниях (шлейфовые газоводоконденсатные и газоводонефтяные трубопроводы, трубопроводы, транспортирующие нестабильный конденсат или нефть, газопроводы, нефтепроводы, продуктопроводы, в том числе с лупингами и многониточными участками; сборные сети промысловых трубопроводов (кустовые, коллекторные, лучевые), с возможностью "обратного" счета трубопроводов и сетей как с фиксированными расходами, так и с учетом характеристик скважин.

В состав расчетно-графических средств моделирования в ПС ГазКондНефть включены подсистемы интерфейса и графики, с созданием и редактированием черно-белых и цветных изображений аппаратов и технологических схем (с возможностью блочного структурирования), с передачей их и результатов расчетов в WORD и EXCEL.

Важно провести проверку точности расчёта температурных режимов и материальных балансов газопромысловых установок. В [8] приводятся результаты сравнения расчетных и фактических данных, измеренных на установке комплексной подготовки газа (УКПГ) Ханчейского газоконденсатного месторождения (Тюменская обл.):

Таблица 1. Фактические и расчетные температуры в аппаратах УКПГ

Аппарат	$t_{\text{факт}}, ^\circ\text{C}$	PRO-2	HYSYS	ГазКондНефть
Разделитель	20,9	19,7	19,6	19,5
Выветриватель	-9,9	-12,6	-13,7	-13,0
Буферная емкость	-19,2	-18,3	-19,5	-18,6

Таблица 2. Фактические и расчетные данные по продукции УКПГ и расходу метанола

Продукция УКПП	Фактич. данные	PRO-2	HYSYS	ГазКондНефть
Газ в магистральный трубопровод тыс. ст. м ³ /час	314,27	312,23	312,28	312,65
Нестабильный конденсат, т/час	76,40	78,23	77,71	77,67
Расход метанола (95%), кг/час	730	**	1250*	600*

Примечание. *Минимально необходимый расход.

**Расход метанола не определяется.

Из приведенных данных видно, что расчётные модели газопромысловых установок дают хорошие результаты, причем, по сравнению с известными аналогами, модели ПС ГазКондНефть не приводят к неприемлемым погрешностям. В настоящее время программно-методический комплекс ПС ГазКондНефть (авторы к.т.н. Калашников О.В., Будняк С.В., к.ф.-м.наук Гамалея Р.В., Иванов Ю.В.) для компьютерного моделирования технологий промышленного сбора, подготовки и переработки природного газа и нефти занял ведущие позиции в СНГ (Россия, Украина, Белоруссия). Непрерывно осуществляется техническая поддержка (расширение, модернизация, сопровождение, обновление) поставляемого программного обеспечения.

Литература

1. Soave G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state // Chem. Eng. Sci. – 1972. – Vol. 27, № 6. – P. 1197 – 1203.
2. Peng D.-Y., Robinson D. B. A new two-constant equation of state // Ind. Eng. Chem. Fundam. – 1976. – Vol. 15, № 1. – P. 59 – 64.
3. Patel N.C., Teja A.S. A new cubic equation of state for fluid and mixtures // Chem. Eng. Sci. – 1982. – Vol. 37. № 3. P. 463 – 473.
4. Калашников О.В., Иванов Ю.В. Инженерные расчетные модели технологических сред газопереработки. 1. Фазовое состояние жидкость – пар // Хим. технология. – 1990. - № 6. – С. 28 – 36.
5. Онопа Л.Р., Иванов Ю.В., Калашников О.В. Модернизация банка данных по фазовым равновесиям и термодинамическим свойствам углеводородов // Экотехнологии и ресурсосбережение.- 2004.- № 6. – с. 78-79.
6. Калашников О.В., Иванов Ю.В., Будняк С.В. Инженерные расчетные модели технологических сред нефтяных и газовых промыслов. 1. Фазовые равновесия углеводородов, воды, метанола и гликолей//Экотехнологии и ресурсосбережение. – 1995.- № 3 - С.25-29.
7. Калашников О.В., Иванов Ю.В. Инженерные расчетные модели технологических сред газопереработки. 2. Калорические свойства // Хим. технология. – 1991. - № 1. – С. 38 – 43.
8. Калашников О.В., Касперович А.Г., Будняк С.В., Гамалея Р.В., Рычков Д.А. Вопросы адекватности теплофизической базы программных систем HYSYS, PRO-2 и ГазКондНефть. 4. Расчетные и действительные данные по установке низкотемпературной сепарации природного газа // Экотехнологии и ресурсосбережение.- 2005.- № 4. – с. 70-74.