

Вопросы адекватности теплофизической базы программных систем HYSYS, PRO-2 и ГазКондНефть. 5. Проблемы выбора расчетных моделей газо- и нефтепромысловых технологических сред.

Калашиников О.В. Иванов Ю.В., Онопа Л.Р.

Институт газа НАН Украины, г. Киев

Отмечено, что предоставляемая в программах HYSYS и PRO-2 возможность выбора термодинамических моделей газожидкостных смесей веществ не гарантирует достоверности всего комплекса технологических расчетов устройств газоконденсатных и нефтяных месторождений. Предлагается при включении в программные системы расчетных моделей проводить их сравнительное тестирование и адаптацию с помощью банка экспериментальных данных.

Расчет материальных и тепловых балансов в HYSYS, PRO-2 и ГазКондНефть ведется с использованием кубических уравнений состояния Соава [1], Пенга-Робинсона (ПР) [2] и их модификаций. В программах HYSYS и PRO-2 насчитывается до 10 таких модификаций с рекомендациями их выбора для определенных смесей. Однако, при моделировании промысловых технологических схем сталкиваются с таким разнообразием смесей, при котором принимают наиболее известную расчетную модель. На практике при расчетах по программам HYSYS и PRO-2 обычно выбирают уравнение ПР. Игнорирование других расчетных моделей можно объяснить тем, что в этих программах отсутствуют численные сравнительные оценки точности предлагаемых вариантов моделей, а при собственной проверке пользователями точности описания этими программами свойств сложных технологических сред возникают вопросы по достоверности результатов. В программу ГазКондНефть включена модификация уравнения ПР, опубликованная в [3]. В работе [4] выполнено выборочное сравнение точности расчета свойств газов и жидкостей по обсуждаемым программам, в результате которого сделан общий вывод о близости расчетных данных по всем обсуждаемым программам для углеводородных смесей и лучшей точности описания свойств смесей углеводородов, метанола, гликолей и солей программой ГазКондНефть.

За последние 10-15 лет появились работы, в которых предлагаются новые модификации уравнений состояния. Очевидно, что системное сравнение и выбор наилучших расчетных моделей можно выполнить только с помощью систематизированных массивов экспериментальной информации о фазовых равновесиях и свойствах веществ и связанных с ними программ тестируемых расчетных моделей. Такой банк данных был ранее создан в Институте газа НАН Украины и модернизирован в последние годы [5] под объявляемым в настоящей работе названием “СиБДМ-углеводороды” (Система Баз Данных и расчетных Моделей по фазовым равновесиям и термодинамическим свойствам газовых и жидких смесей углеводородов и сопутствующих веществ).

“Программой-максимумом” для банка данных было бы хранение и ”обсчет” всего существующего экспериментального материала, касающегося фазового поведения и свойств углеводородов и их смесей, других примесей, а также веществ, применяемых при промышленной подготовке и заводской переработке природных газов и нефтегазовых смесей. Существующий на сегодняшний день банк СиБДМ-углеводороды можно было бы назвать отвечающим такой “программе-минимум”, которая позволяет провести основные сравнительные тесты расчетных моделей, используя данные по свойствам на линии

насыщения индивидуальных веществ и данные по фазовым равновесиям бинарных, тройных и многокомпонентных смесей.

Тестирование единых уравнений состояния на данных о свойствах индивидуальных веществ выполняется по соотношениям, используемым при описании равновесия жидкость-пар и свойств паро-жидкостных смесей.

На линии насыщения:

$$f^V = f^L,$$

где f^V и f^L – летучести равновесных пара и жидкости.

При температуре насыщения подбирается такое давление, при котором расчетные летучести паровой и жидкой фазы чистого вещества равны. Найденное давление сравнивается с экспериментальным (литературным) значением давления насыщенного пара.

С экспериментальными значениями теплот парообразования сравнивается величина:

$$L = \Delta H^V - \Delta H^L$$

где ΔH^V и ΔH^L - изотермические составляющие энтальпии пара и жидкости (определяются по единым уравнениям состояния при условиях насыщения).

Изобарная теплоемкость жидкости C_p^L определяется по единому уравнению состояния и соотношению:

$$C_p^L = (\partial H^L / \partial T)_p,$$

где энтальпия H^L – энтальпия жидкости, определяемая по выражению:

$$H^L = H^0 + \Delta H^L$$

где H^0 - энтальпия в идеально-газовом состоянии.

В [5] отмечалось, что с помощью банка данных можно выполнять как локальные, так и глобальные тестирования расчетных моделей. Приведем пример локального тестирования.

В [6] при сравнении расчетных и фактических параметров двухступенчатой низкотемпературной сепарации газоконденсатной смеси с применением метанола замечено, что в программе HYSYS меньшие погрешности при прогнозировании расходов и составов выходных потоков – газа, конденсата и водометанольного раствора – дает модель ПРСВ - модификация Стрижека-Вера [7] уравнения ПР. В связи с этим представляет интерес сравнительное тестирование двух модификаций уравнения ПР - ПРСВ и ПРКИ [3] - с помощью банка СисБДМ-углеводороды. С целью экономии места представляем результаты ограниченного тестирования на данных только 4 веществ – метана, гептана, тетрадекана и метанола.

В табл. 1-3 приводятся погрешности описания этими уравнениями давления насыщенных паров, теплоты парообразования и теплоемкости жидкости. Из таблиц видно, что при близкой точности уравнений для углеводородов модификация ПРСВ приводит к значительным погрешностям при расчете теплоемкости метанола.

Таблица 1. Погрешности описания давления насыщенных паров индивидуальных веществ кубическим единым уравнением состояния газожидкостных смесей

Вещество	Число точек	Интервал Т, К	ПР		ПРСВ		ПРКИ	
			% ср. абс	% макс.	% ср. абс	% макс	% ср. абс	% макс
Метан	22	91-170	1,6	+3,1	0,8	+2,1	0,23	+0,73
Н-гептан	26	243-483	2,5	+16,1	1,0	+3,1	1,1	-1,7
Н-тетрадекан	15	393-533	7,0	+12,1	1,9	+3,1	1,5	-3,3
Метанол	17	229-487	9,4	-35,6	4,6	+7,6	3,0	+6,8

Таблица 2. Погрешности расчета теплоты парообразования

Вещество	Число точек	Интервал Т, К	ПР		ПРСВ		ПРКИ	
			% ср. абс	% макс.	% ср. абс	% макс	% ср. абс	% макс
Метан	22	91-170	0,3	-1,5	0,4	-1,2	0,3	-1,5
Н-гептан	25	243-483	0,5	-1,2	0,9	+2,0	0,5	+1,0
Н-тетрадекан	15	393-533	7,0	+12,1	2,5	-3,5	2,1	-3,3
Метанол	17	223-443	7,4	+12,4	3,7	+6,6	0,8	1,6

Таблица 3. Погрешности расчета теплоемкости жидкости

Вещество	Число точек	Интервал Т, К	ПР		ПРСВ		ПРКИ	
			% ср. абс	% макс.	% ср. абс	% макс	% ср. абс	% макс
Метан	22	91-170	3,5	+13,6	3,6	+13,9	3,5	+13,6
Н-гептан	29	243-483	3,8	-8,5	3,5	-8,2	2,7	+8,0
Н-тетрадекан	15	393-533	8,9	-9,3	8,4	-8,9	2,5	-2,6
Метанол	9	273-453	27,9	+42,7	24,2	+37,1	8,4	+10,0

Выводы

1. Хотя в программах HYSYS и PRO-2 имеется возможность выбора термодинамических моделей технологических сред, однако это не гарантирует достоверности всего комплекса технологических расчетов нефтегазодобывающих производств.
2. Поскольку в настоящее время единственно приемлемой инженерной моделью нефтегазоконденсатных смесей в широкой области давлений и температур является кубическое уравнение состояния ван-дер-ваальсового типа, неопределенность, существующая при выборе расчетной модели, может быть устранена путем всесторонней адаптации одной базовой модели (например, уравнения ПР) к экспериментальным данным. Это подтверждено практикой использования программной системы ГазКондНефть для моделирования технологических схем нефтяных и газовых промыслов.

Список литературы

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. Калашников О.В., Иванов Ю.В. Инженерные расчетные модели технологических сред газопереработки. 1. Фазовое состояние жидкость – пар // Хим. технология. – 1990. - № 6. – С. 28 – 36; 2. Калорические свойства, там же – 1991. - № 1. – С. 38 – 43.
4. Калашников О.В., Иванов Ю.В., Будняк С.В. Вопросы адекватности теплофизической базы программных систем HYSYS, PRO-2 и ГазКондНефть. 1. Углеводородные смеси // Экотехнологии и ресурсосбережение.-1999.- № 6.- С.13-18; 2. Смеси углеводородов, воды, метанола и гликолей .- 2000.- № 1.- С. 31-35.
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., 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.
7. Stryjek R., Vera J. PRSV: An Improved Peng-Robinson ... // Can. J. Chem. Eng. – 1986. – Vol. 64, . – P. 323 – 333; PRSV – An- P. 334-340; PRSV2: A Cubic...- P. 820-826.