**Численное моделирование парожидкостных равновесий бинарных смесей углеводородов с использованием кубических уравнений состояния**

**Коваленко А.С.**

студент

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,физический факультет, Москва, РоссияE–mail: kovalenko.artyom7*@gmail.com*

В настоящее время ведутся интенсивные исследования, направленные на развитие методов описания фазового равновесия многокомпонентных, в том числе бинарных смесей углеводородов. Эти исследования обусловлены потребностью практики. Именно поэтому одним из основных направлений математического моделирования парожидкостного равновесия нефтегазоконденсатных смесей является применение единых уравнений состояния для описания свойств сосуществующих равновесных фаз. В данной работе используются кубические уравнения состояния, такие как уравнение Пенга—Робинсона и Соаве—Редлиха—Квонга, которые модифицируют известное уравнение Ван-дер-Ваальса [1].

Для определения параметров смеси углеводородов используется алгоритм прямой минимизации энергии многокомпонентной системы [2]. Этот алгоритм заключается в нахождении минимального значения энергии Гиббса системы, находящейся при постоянной температуре и заданном давлении. Важные особенности данного метода: 1) переход от нелинейной задачи минимизации энергии системы к задаче линейного программирования; 2) упрощение расчетов с использованием различных уравнений состояния; 3) хорошие вычислительные характеристики в околокритической области.

Целью настоящей работы является исследование предсказательной способности уравнений Пенга—Робинсона и Соаве—Редлиха—Квонга, примененных в методе прямой минимизации энергии. Проводятся расчеты состава фаз, который определяется долями каждого компонента в смеси, составляющей фазу. Были выбраны пять смесей углеводородов, рассчитаны фазовые диаграммы «давление-состав» при постоянной температуре. Результаты данной работы сопоставляются с экспериментальными данными [3]. Изучены температурные зависимости среднего относительного отклонения расчетных значений мольной доли компонентов газовой и жидкой фазах от соответствующих экспериментальных значений.

**Литература**

1. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. –М.: «Грааль», 2002, 575 с.
2. Исаева А.В., Доброжанский В.А., Хакимова Л.А., Подлачиков Ю.Ю. Численное моделирование фазовых равновесий многокомпонентных углеводородных систем с помощью прямой минимизации энергии // Газовая промышленность. 2021. №2 (812). С. 20-29.
3. Jaubert J. N., Guennec Y. L., Pina-Martinez A., Velez N. R. A benchmark database containing binary-system-high-quality-certified data for cross-comparing thermodynamic models and assessing their accuracy // Industrial & Engineering Chemistry Research. **1083** (2020).