**Метод прямой минимизации энергии Гельмгольца: расчет парожидкостных равновесий бинарных смесей углеводородов**

***Бевзо М.О.***

*Cтудент*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *bevzomo@gmail.com*

В общем случае природные нефти, газоконденсатные смеси состоят из множества компонентов, таких как, например, н-алканы (метан, этан, пропан, н-бутан и т.д.) [1]. Эти смеси могут находиться в различном фазовом состоянии: как в жидком, так и газообразном, а также в состоянии, при котором присутствующие фазы существуют совместно в равновесии. Знание фазового состояния углеводородных смесей, а также их параметров парожидкостного равновесия необходимо для проектирования процессов их добычи и транспортировки.

В настоящей работе в качестве модели газоконденсатных смесей рассматриваются бинарные смеси н-алканов. Параметры фазового равновесия смесей рассчитываются с помощью метода прямой минимизации энергии Гельмгольца [2], позволяющего свести нелинейную задачу минимизации, которую в нефтегазовой промышленности преимущественно решают итерационными методами, к задаче линейного программирования на поиск минимума энергии Гельмгольца смеси, находящейся при постоянной температуре, объеме и компонентном составе. Для расчетов используется перспективное уравнение состояния PC-SAFT [3], задающее явное выражение для энергии Гельмгольца. Также расчеты проводятся с использованием уравнения состояния Пенга—Робинсона, являющегося традиционным для нефтегазовой отрасли.

Для сравнения точности расчетов по уравнениям состояния Пенга—Робинсона и PC-SAFT таких параметров парожидкостного равновесия, как доли компонентов в сосуществующих фазах, рассматриваются относительные отклонения результатов численного моделирования, проведенного с помощью метода прямой минимизации энергии, от экспериментальных данных, взятых из литературы [4—7].

**Литература**

1. Брусиловский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. - М.: «Грааль», 2002.
2. Исаева А.В., Доброжанский В.А., Хакимова Л.А., Подладчиков Ю.Ю. Численное моделирование фазовых равновесий многокомпонентных углеводородных систем с помощью прямой минимизации энергии. Газовая промышленность N2, 2021, с. 812.
3. Gross J., Sadowski G. Application of perturbation theory to a hard-chain reference fluid: an equation of state for square-well chains. Fluid Phase Equilibria 168, 2000, 183-199.
4. Mehra V.S., Thodos G. Vapor-Liquid Equilibrium in the Ethane-n-Butane System. Journal of Chemical & Engineering Data. 1965, 10, 4, 307–309.
5. Seong G., Yoo K.-P., Lim J. S. Vapor−Liquid Equilibria for Propane (R290) + n-Butane (R600) at Various Temperatures. Journal of Chemical & Engineering Data. 2008, 53, 2783– 2786.
6. Wei M.S.-W. et al. Vapor + Liquid Equilibria for the Ternary System Methane + Ethane + Carbon Dioxide at 230 K and Its Constituent Binaries at Temperatures from 207 to 270 K. Journal of Chemical & Engineering Data. 40 (1995) 726-731.
7. Wichterle I., Kobayashi R. Vapor-liquid equilibrium of methane-ethane system at low temperatures and high pressures. Journal of Chemical & Engineering Data. 17 (1972) 9-12.