

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Игорь Эдуардович МАЩИЦКИЙ<sup>1</sup>

Ирина Гелиевна ЗАХАРОВА<sup>2</sup>

УДК 665.62

## РАСЧЕТ ДИСКРЕТНЫХ ФУНКЦИЙ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ КРИВЫХ ФАЗОВОГО ПОВЕДЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СИСТЕМ

<sup>1</sup> аспирант, Тюменский государственный университет  
mashchitskiy@inbox.ru

<sup>2</sup> кандидат физико-математических наук,  
профессор кафедры программного обеспечения,  
Тюменский государственный университет  
i.g.zakharova@utmn.ru

### Аннотация

Описывается оригинальный способ расчета характеристических кривых фазового поведения систем типа «нефть» на плоскости температура — давление (термобарической). В статье затронуты такие аспекты моделирования фазового поведения, как метод определения равновесного парожидкостного соотношения в данных термобарических условиях, построение формальной модели исследуемой системы, схема локализации областей фазового поведения и алгоритм расчета изолиний массового содержания

---

**Цитирование:** Мащицкий И. Э. Расчет дискретных функций характеристических кривых фазового поведения многокомпонентных углеводородных систем / И. Э. Мащицкий, И. Г. Захарова // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2018. Том 4. № 3. С. 103-119.  
DOI: 10.21684/2411-7978-2018-4-3-103-119

---

газа/жидкости. Основой математического аппарата для предлагаемого метода служит уравнение состояния Пенга — Робинсона, в связи с чем отдельно рассматриваются вопросы формирования компонентно-фракционного состава углеводородных смесей и подбора соответствующих зависимостей для определения физико-химических параметров фракций. Целевые кривые представляются как дискретные функции, описывающие фиксированное сепарационное соотношение в двухфазной области системы, а алгоритм их построения — как набор геометрических правил на термобарической плоскости, составляющих управляющую логику вычислений. Ключевой особенностью предлагаемого метода является учет для каждой конкретной изолинии явлений ретроградного испарения/конденсации без привязки к другим характеристическим кривым, а также высокая масштабируемость конечного результата. Приведенные в статье расчетные алгоритмы были программно реализованы в среде .NET с использованием технологий распараллеливания. Модель фазового поведения, полученная на основе разработанного программного обеспечения, графически иллюстрируется и проверяется на примере эксперимента контактной конденсации для пробы пластового флюида реальной газоконденсатной системы. Поскольку добыча, переработка и транспортировка углеводородного сырья немислимы без достоверной теории фазовых состояний, данное исследование может найти свое применение в самых различных областях нефтегазовой отрасли.

#### **Ключевые слова**

Многокомпонентные углеводородные системы, компонентно-фракционный состав, модель фазового поведения, изолиния, ретроградное фазовое поведение, программное обеспечение.

**DOI: 10.21684/2411-7978-2018-4-3-103-119**

#### **Введение**

В научной литературе под фазовой диаграммой на термобарической плоскости понимается любая кривая, характеризующая соотношение фаз исследуемой системы. Для удобства изложения автор называет фазовой диаграммой только кривую, отделяющую однофазную и двухфазную области, а все кривые, описывающие конкретное соотношение фаз — изолиниями. Ретроградным фазовым поведением называется группа явлений испарения/конденсации, обратного направления по температуре и/или давлению относительно аналогичных явлений, составляющих фазовое поведение чистого вещества.

На термобарической плоскости простейшим составным элементом как фазовой диаграммы, так и изолиний углеводородной системы, является модель сепарации — расчетное соотношение газа и жидкости в данных условиях давления и температуры. Примерно с 1970-ых гг. основным способом расчета парожидкостного равновесия нефтяных смесей стало использование уравнений состояния, основанное на строгом применении классических положений термодинамики многокомпонентных систем [3]. Однако использование уравнений состояния не-

возможно без ряда значений физико-химических параметров исследуемого состава, а поскольку набор данных, которые можно получить лабораторно, из-за технических и методологических ограничений не обеспечивает необходимого объема информации, извлечь эти значения остается возможным лишь с помощью эмпирических зависимостей. Важно отметить (и это отдельно подчеркивается в [17]), что подбор указанных зависимостей осуществляется с учетом, помимо всего прочего, качества построенных на их основе целевых моделей. Различные варианты формул, применимые к расчету требуемых параметров углеводородных смесей, приводятся в изданиях [1, 5].

При выборе уравнения состояния многие исследователи отдают предпочтение уравнениям ван-дер-ваальсового типа (известным также как кубические) [8, 14, 15], что обусловлено, с одной стороны, высокой достоверностью кубических уравнений состояния в широких диапазонах давления и температуры, с другой — наличием единого для всех уравнений этого типа алгоритма расчета парожидкостного равновесия [6]. А. И. Брусиловский в своем обзоре уравнений ван-дер-ваальсового типа [16, 19] выделяет модификации Соаве — Редлиха — Квонга и Пенга — Робинсона как наиболее точные инструменты для описания фазового поведения многокомпонентных углеводородных систем, хотя и с определенными ограничениями, описанными и частично разрешенными в [2, 13].

Формального описания собственно алгоритмов расчета дискретных функций фазового поведения в публикациях по рассматриваемой тематике практически никогда не дается, поскольку такие алгоритмы зачастую служат предметом коммерческой тайны в составе различного ПО для нефтегазового сектора. Предлагаемый здесь геометрический подход позволяет избежать использования характеризующегося низкой масштабируемостью результатов метода прямого перебора (как, например, в [7]).

Данная работа является важным дополнением уже опубликованной ранее статьи автора [9], посвященной расчету фазовых диаграмм многокомпонентных углеводородных систем: если в предыдущей публикации излагался метод построения только кривой, отделяющей двухфазную область системы от однофазной, и основной акцент был сделан на производительности соответствующего алгоритма, то здесь, во-первых, более подробно будут рассмотрены подготовка исходных экспериментальных данных и алгоритм расчета парожидкостного соотношения, а, во-вторых, фазовое поведение будет рассматриваться уже внутри двухфазной области.

### **Расчет парожидкостного равновесия**

На термобарической плоскости характеристические кривые фазового поведения строятся на основе расчета соотношения фаз исследуемой системы в конкретных условиях давления и температуры. Эмпирически эти значения можно получить, проведя ряд экспериментов на PVT-установке, но, хотя такой подход и обеспечивает высокую точность конечных результатов, сопутствующие временные и трудовые затраты вынуждают отказаться от него в пользу математической модели сепарации.

Наиболее распространенным способом расчета парожидкостного равновесия углеводородных систем является применение кубических уравнений состояния, среди которых исследователи отдают предпочтение модификации Пенга — Робинсона по ряду причин: в контексте описания фазового поведения как наиболее важную характеристику следует выделить высокую точность этого уравнения в критических областях. Отметим также, что несмотря на существующие ограничения, накладываемые на термобарическую область применения уравнения состояния Пенга — Робинсона, с его помощью может быть описан большой класс природных углеводородных смесей, в том числе практически все газоконденсатные системы.

Уравнение состояния Пенга — Робинсона имеет следующий вид [18]:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b) + b(v-b)}, \quad (1)$$

Здесь  $P$  — давление,  $R$  — газовая постоянная ( $\approx 8.31441$ ),  $T$  — температура,  $v$  — молярный объем, коэффициенты  $a$  и  $b$  рассчитываются по формулам

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_{кр}^2}{P_{кр}} \left( 1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \left( 1 - \left( \frac{T}{T_{кр}} \right)^{0.5} \right) \right)^2, \quad (2)$$

$$b = 0.0778 \frac{RT_{кр}}{P_{кр}}, \quad (3)$$

где  $T_{кр}$  — критическая температура,  $P_{кр}$  — критическое давление,  $\omega$  — ацентрический фактор. Соответствующий алгоритм расчета парожидкостного равновесия описан в [6, с. 130-131], ниже приведена его общая структура.

1. Начальные приближения покомпонентных коэффициентов распределения рассчитываются по формуле:

$$K_i^{(0)} = \frac{P_{кр} i}{P} e^{5.372697(1+\omega_i) \left( 1 - \frac{T_{кр} i}{T} \right)}, \quad i = \overline{1, N}. \quad (4)$$

2. С помощью уравнения фазовых концентраций

$$\sum_{i=1}^N \frac{\eta_i (K_i - 1)}{W(K_i - 1) + 1} = 0, \quad (5)$$

определяется молярная доля газовой фазы  $W$  ( $\eta_i$  — молярная доля компонента смеси).

3. По формулам

$$x_i = \frac{\eta_i}{W(K_i - 1) + 1}, \quad y_i = \frac{\eta_i K_i}{W(K_i - 1) + 1}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (6)$$

вычисляются молярные доли компонентов системы в жидкой  $x_i$  и газовой  $y_i$  фазах.

4. Рассчитываются коэффициенты для подстановки в кубическое уравнение

$$A_y = \frac{Pa_y^2}{R^2 T^2}, \quad B_y = \frac{Pb_y}{RT}, \quad (7)$$

$$A_x = \frac{Pa_x^2}{R^2 T^2}, \quad B_x = \frac{Pb_x}{RT}, \quad (8)$$

где

$$a_y = \sum_{i=1}^N (y_i a_i^{0.5}), b_y = \sum_{i=1}^N (y_i b_i), \quad (9)$$

$$a_x = \sum_{i=1}^N (x_i a_i^{0.5}), b_x = \sum_{i=1}^N (x_i b_i), \quad (10)$$

Значения  $a_i, b_i$  могут быть получены по формулам (2)-(3).

5. Коэффициенты сжимаемости газовой ( $z_y$ ) и жидкой ( $z_x$ ) фазы вычисляются соответственно через подстановку (7) и (8) в уравнение

$$z^3 - (1 - B)z^2 + (A - 3B^2 - 2B)z - (AB - B^2 - B^3) = 0. \quad (11)$$

В качестве  $z_y$  выбирается максимальный из положительных действительных корней,  $z_x$  — минимальный из положительных действительных корней.

6. Затем (7, 9,  $z_y$ ) и (8, 10,  $z_x$ ) используются для определения летучестей компонентов смеси в газовой ( $f_i''$ ) и жидкой ( $f_i'$ ) фазах по формуле

$$\ln(f_i) = \ln(\eta_i P) - \ln(z - B) + \frac{b_i}{b} (z - 1) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left( \frac{2 \sum_{j=1}^N \mu_j (a_i a_j)^{0.5}}{a} - \frac{b_i}{b} \right) \times \\ \times \ln \left( \frac{(z + (1 + \sqrt{2})B)}{z - (\sqrt{2} - 1)B} \right), i = \overline{1, N}, \quad (12)$$

где  $\mu_i$  — молярная доля компонента смеси в соответствующей фазе.

7. Производится проверка условия

$$\left| \frac{f_i''}{f_i'} - 1 \right| > \Delta, i = \overline{1, N}, \quad (13)$$

где  $\Delta$  — заданная точность схождения летучестей фаз компонентов смеси.

Если неравенства (13) не выполняются для всех компонентов смеси, алгоритм завершается: найдено парожидкостное равновесие в заданных  $P$  и  $T$ , по последнему значению  $W$  может быть выделено мольное соотношение фаз системы, а при наличии данных о массе ее компонентов — массовый процент определенной фазы.

8. Производится корректировка коэффициентов распределения

$$K_i^{(m)} = K_i^{(m-1)} \frac{f_i'}{f_i''}, i = \overline{1, N}, \quad (14)$$

и возврат к п. 2.

### Подготовка экспериментальных данных

Исходный массив данных об углеводородной системе, необходимый для построения ее фазовой модели на основе кубических уравнений состояния, составляют результаты экспериментов на газовом хроматографе (если система нестабильна в стандартных условиях) и ректификационной колонне (иначе

говоря, разгонки)<sup>1</sup>. На основе этих данных записывается компонентно-фракционный состав, минимально содержащий объемно-массовые характеристики и (среднюю) температуру кипения компонентов (фракций) исследуемой смеси. Список других полей, которые должен содержать компонентно-фракционный состав для возможности применения к нему алгоритма расчета парожидкостного равновесия (4)-(14), включает в себя критические давление и температуру, молярную массу и ацентрический фактор. Недостающие параметры, как правило, рассчитываются с помощью эмпирических зависимостей.

### Критические параметры

В критической точке ( $T_{кр}$ ,  $P_{кр}$ ) свойства обеих сосуществующих фаз отождествляются: плотность жидкости и ее насыщенного пара становятся равны, а поверхностное натяжение жидкости падает до нуля, поэтому исчезает граница раздела жидкость — пар. В литературе приведено множество различных формул расчета критических свойств (основные перечислены в [12]), однако оценить их достоверность относительно эксперимента в случае природных углеводородных систем часто не представляется возможным ввиду технических ограничений лабораторного оборудования. Наибольшее распространение для расчета  $T_{кр}$  и  $P_{кр}$  получили следующие группы зависимостей: Кэветта, Ли — Кеслера и Риизи — Дюберта. Поскольку значения, полученные с помощью указанных формул, имеют достаточно узкий диапазон, в качестве критерия выбора можно принять, например, отклонение от среднего значения, тогда наиболее точным представляется вариант Риизи — Дюберта (15)-(16):

$$T_{кр} = 19.0623 \cdot T_{кип}^{0.58848} (\rho_{15.6}^{15.6})^{0.3596}, \quad (15)$$

$$P_{кр} = 5.5303 \cdot 10^6 T_{кип}^{-2.3125} (\rho_{15.6}^{15.6})^{2.3201}. \quad (16)$$

### Ацентрический фактор

Формально понятие ацентрического фактора не применимо к смесям: его значение характеризует сложность молекулы вещества в отношении ее геометрии и полярности. Параметр имеет вполне определенную формулу (17)-(19), но в большинстве случаев необходимые для ее использования данные о кривой упругости насыщенных паров конкретной углеводородной смеси отсутствуют:

$$\omega = -lg(\pi)_{\tau=0.7} - 1, \quad (17)$$

где  $\tau$  — приведенная температура:

<sup>1</sup> Разбиение на фракции в ходе разгонки может осуществляться двумя способами: по С-группам, объединяющим вещества по признаку количества атомов углерода в строении их молекул, и по температурному диапазону кипения. Предпочтительным способом является последний, поскольку он позволяет выделять более «узкие» фракции смеси, и, следовательно, снижает погрешность дальнейших вычислений.

$$\tau = \frac{T}{T_{кр}} = 0.7, \quad (18)$$

$\pi$  — приведенное давление насыщенного пара:

$$\pi = \frac{P_{вр}}{P_{кр}}. \quad (19)$$

Тогда для расчета ацентрического фактора рекомендуется использовать формулу Эдмистера (20).

$$\omega = \frac{3}{7} \cdot \frac{T_{кип}/T_{кр}}{1 - T_{кип}/T_{кр}} \log_{10} P_{кр}. \quad (20)$$

### Молярная масса

Лабораторное определение молярной массы осуществляется криоскопическим методом и представляет собой длительный эксперимент, требующий специальной подготовки реагентов (обезвоженный бензол) и не обеспечивающий высокую точность результатов. Существующие зависимости для определения молярной массы разрабатывались как средство интегральной характеристики смесей. К ним относятся, например, известные формулы Риизи — Доуберта и Вильсона. Практика показывает, что в рамках описания фазового поведения формула Вильсона (21)-(22) вполне применима и к узким фракциям.

$$M = 1.77 \cdot 10^{-5} K_w T_{кип}^2, \quad (21)$$

где  $K_w$  — фактор Ватсона:

$$K_w = \sqrt[3]{1.8 T_{кип} / \rho_{15.6}^{15.6}}. \quad (22)$$

### Относительная плотность

Часть зависимостей, представленных выше, имеют своим аргументом  $\rho_{15.6}^{15.6}$  — отношение плотности фракции при 15,6 °C (60 °F) к плотности воды при аналогичной температуре (давление стандартное). Среди существующих способов конвертации плотности высокую точность демонстрирует подход, описанный в [4]: эксперименты выявили, что для 10-градусных фракций углеводородных смесей различного типа его абсолютная погрешность не превышает 1,5 кг.

### Программная реализация

Часто в процессе эксперимента на ректификационной колонне не удается выделить достаточного количества той или иной высококипящей фракции. Далеко не всегда исследуется тяжелый остаток разгонки. Не исключен также и человеческий фактор, порою служащий причиной порчи/утраты информации. Восстановление и дополнение экспериментальных данных — сложный процесс, требующий применения целого арсенала численных методов и постоянного контроля опытного химика-специалиста. Для этих целей разработана программа, в которой реализуется ком-

плекс математической подготовки лабораторных данных [10], включающий в себя приведенную выборку формул, а также средства для восстановления части характеристик системы численными методами интерполяции и экстраполяции.

### Расчет дискретных функций изолиний

На рис. 1 изображена фазовая диаграмма (ФД) газоконденсатной системы и две ее изолинии массового процента газа (ИМПП) — 10 и 90% массовых. Форма кривых ИМПП позволяет наблюдать две важные закономерности, установленные для всех многокомпонентных углеводородных смесей:

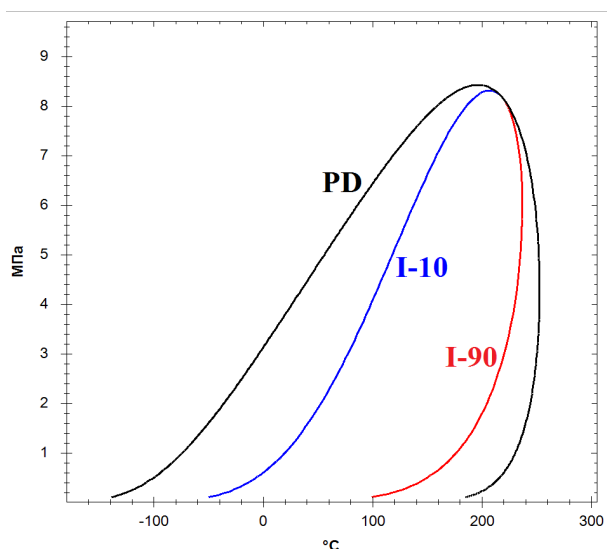


Рис. 1. Фазовая диаграмма и изолинии 10, 90% масс. газа газоконденсатной системы  
 Fig. 1. Phase diagram and isolines of 10 and 90% gas mass of gas-condensate system

- 1) все изолинии сходятся в критической области системы (ФД, очевидно, тоже может рассматриваться как пара изолиний — 0 и 100% масс. газа);
- 2) фазовое поведение смеси отличается от фазового поведения чистого вещества: I-10 имеет двойные точки на оси давления, I-90 — на оси температуры.

Первая закономерность может служить критерием при поиске конечной точки изолинии, вторая — обозначает характерные для рассматриваемых систем явления ретроградного испарения/конденсации. Оба положения легли в основу предлагаемой методики.

В предыдущей публикации [16] было введено понятие базовых точек (БТ) — точек, ограничивающих двухфазную область системы при фиксированном малом давлении (для природных углеводородных смесей  $\approx 5-10$  атм), и описан метод их вычисления. Для алгоритма расчета изолиний исходным пунктом также являются БТ, но если в случае фазовой диаграммы ограниченный ими отрезок делился эвристически, то теперь на нем методом бисекции разыскивается одна из точек целевой дискретной функции.



Выделение точки изолинии методом бисекции на отрезке произвольной непрерывной кривой, определенной в термобарической плоскости, предполагает, что, во-первых, выбранный отрезок пересекает искомую ИМПГ и, во-вторых, во всех точках этого отрезка исследуемая система демонстрирует однородное фазовое поведение. Для первой точки изолинии выполнение означенных условий следует из определения БТ: образуемая ими прямая включает в себя точки всех ИМПГ при заданном фиксированном давлении, малое значение которого в то же время детерминирует нормальное фазовое поведение вдоль соответствующего отрезка двухфазной области<sup>1</sup>. Таким же образом могут быть вычислены и остальные точки изолинии, однако необходимые кривые при этом должны подбираться с учетом ретроградного фазового поведения.

### Ретроградное фазовое поведение

В границах ФД ретроградные процессы наблюдаются в термобарических областях трех типов:

- 1) область, ретроградная по давлению — наблюдается увеличение газовой (жидкой) фазы при увеличении (уменьшении) давления;
- 2) область, ретроградная по температуре — наблюдается увеличение газовой (жидкой) фазы при уменьшении (увеличении) температуры;
- 3) область, ретроградная по давлению и температуре — наблюдается увеличение газовой (жидкой) фазы при уменьшении (увеличении) температуры и увеличении (уменьшении) давления.

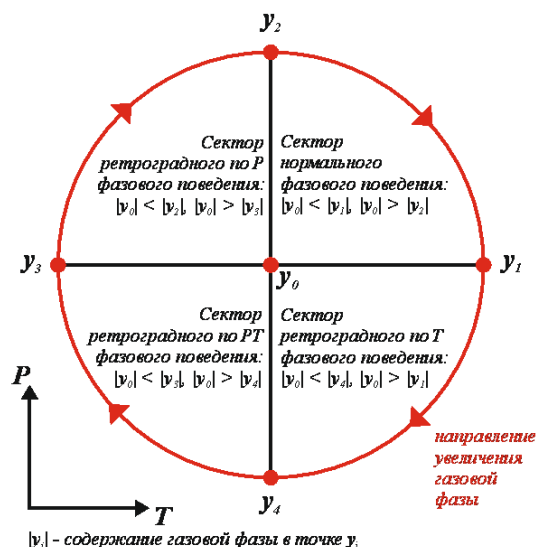


Рис. 2. Схема определения областей фазового поведения

Fig. 2. Phase behavior determination scheme

<sup>1</sup> На практике природные углеводородные системы демонстрируют ретроградное фазовое поведение только при относительно высоких давлениях.

Для локализации областей фазового поведения автором была разработана схема, изображенная на рис. 2. С ее помощью принадлежность произвольной точки  $y_0$  к той или иной области определяется по значениям фазовых соотношений в выбранной и четырех окрестных точках  $y_1, y_2, y_3, y_4$ .

### Алгоритм расчета дискретной функции изолинии

Входные данные алгоритма включают в себя:

- компонентно-фракционный состав исследуемой системы;
- целевой массовый процент содержания газовой фазы  $y$ ;
- начальный радиус окрестности  $R_d$  точек изолинии;
- декрементирующий множитель  $0 < R_{\text{mip}} < 1$  радиуса окрестности точек изолинии;
- минимальное значение  $R_{\text{min}} < R_d$  радиуса окрестности точки изолинии.

Сам алгоритм имеет следующий вид:

1. Методом бисекции между БТ вычисляется первая точка изолинии.
2. На схеме (см. рис. 2) выбирается сектор поиска следующей точки изолинии. Радиусом сектора служит текущий радиус  $R$ , приравниваемый на данном шаге  $R_d$ .
3. Если  $R < R_{\text{min}}$ , производится переход к п. 7. На концевых точках выбранного сектора с центром в последней достоверной точке изолинии и радиусом  $R$  рассчитывается фазовое соотношение.
4. Если условия для выбранного сектора согласно схеме (см. рис. 2) не выполняются,  $R$  умножается на  $R_{\text{mip}}$  и производится возврат к п. 3.

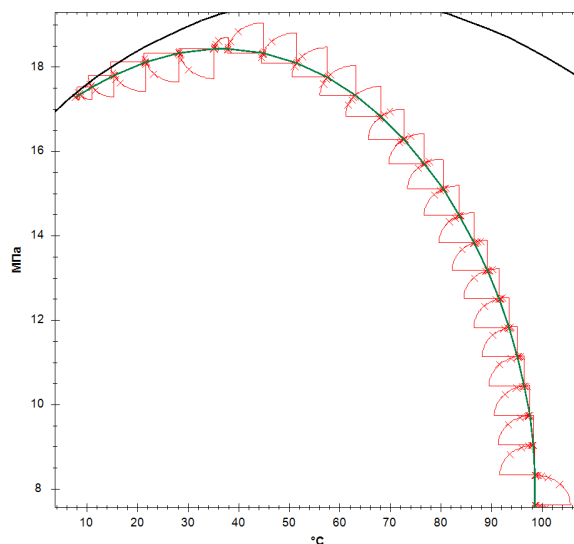


Рис. 3. Расчетная схема изолинии 90% масс. газа

Fig. 3. Calculation scheme of isoline of 90% gas mass

5. На дуге выбранного сектора методом бисекции вычисляется следующая точка изолинии. Если массовый процент газа во вновь найденной точке соответствует целевому значению  $y_p$ , она считается достоверной и вносится в дискретную функцию, в противном случае производится переход к п. 7.
6. Производится возврат к п. 3.
7. Если данное условие было достигнуто три раза, алгоритм завершается, если нет — производится возврат к п. 2.

Т. к. первая точка изолинии находится в области нормального фазового поведения, при первом проходе алгоритма всегда выбирается соответствующий сектор схемы. Количество проходов алгоритма ограничено тремя, поскольку изолинии на своем протяжении имеют не более двух изгибов. По признаку вхождений в области фазового поведения выделяется всего три типа изолиний:

- 1) нормальное — ретроградное по  $P$ ;
- 2) нормальное — ретроградное по  $T$ ;
- 3) нормальное — ретроградное по  $P$  — ретроградное по  $P$  и  $T$ .

На рис. 3 изображена графическая схема алгоритма для изолинии третьего типа.

Крикндедетермы и крикндебары изолиний образуют границы фазовых областей. Учетом этого факта венчается построение модели фазового поведения по авторской методике.

На рис. 4 изображена ФД пластового флюида газоконденсатной системы и группа его ИМПГ 57-99% масс. (деление — 3%), на основании которых выделены три области фазового поведения — нормальная (Н), ретроградная по давлению (Р) и ретроградная по давлению и температуре (РТ). Отмечается слияние ретроградной по РТ и критической области, т. к. подробное описание модели в околокритических зонах ограничено возможностями используемого уравнения состояния.

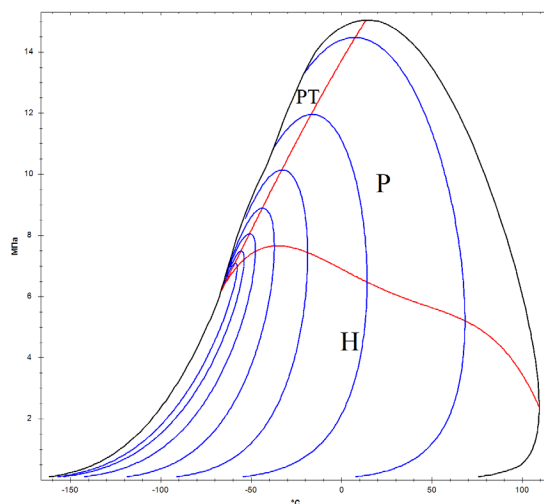


Рис. 4. Модель фазового поведения пластового флюида

Fig. 4. Phase behavior model of reservoir fluid

### Программная реализация

В настоящий момент проводится тестирование разработанного на основе методики ПО [11]: оцениваются производительность алгоритмов и качество конечных моделей.

Время выполнения алгоритма расчета изолиний серьезно варьируется в зависимости от входных данных: в среднем, извлечение дискретной функции с достаточно высоким расширением занимает не более минуты. Построение групп изолиний может осуществляться в распараллеленном режиме, поскольку методика не связывает их расчет ни с какими другими характеристическими кривыми. Таким образом, очевидно, что модель формируется тем быстрее, чем выше число потоков приемлемой мощности может предоставить вычислительная система. Так, например, изображенная на рис. 4 модель на компьютере с восьмипоточным четырехядерным процессором (Intel Xeon E3-1240 3.30 GHz) была построена за 63 секунды.

Оценка достоверности фазовых моделей проводится путем их сравнения с экспериментальными данными. Как правило, ввиду узкой направленности соответствующих лабораторных исследований, такие данные носят частичный характер, что усложняет задачу проверки. Как вариант, эталоном может служить эксперимент контактной конденсации — процесс образования жидкой фазы газоконденсатной смеси при изотермическом снижении давления.

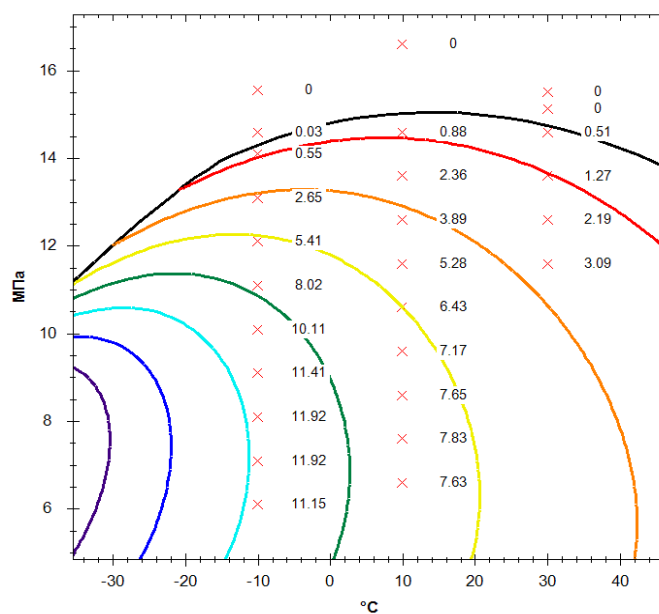


Рис. 5. Оценка достоверности фазовой модели пластового флюида

Fig. 5. Reliability check of phase model of reservoir fluid

На рис. 5 изображен фрагмент фазовой модели и маркерами (со значениями содержания жидкой фазы) отмечены результаты экспериментов контактной конденсации по температурам  $-10$ ,  $10$  и  $30$  °С, исследуемая система — пластовый флюид газоконденсатной смеси. Практически полностью подтверждаются границы двухфазной области в целом и ретроградной по давлению в частности, не обнаруживается противоречий вдоль температурной оси.

### Заключение

Как итог, разработана оригинальная методика описания фазового поведения многокомпонентных углеводородных систем на термобарической плоскости. Основным преимуществом методики является эффективный (как с точки зрения времени, так и качества результата) расчет дискретных функций фазовых кривых при относительно небольшом объеме исходных данных.

Основные перспективы исследования фазового поведения углеводородных систем связаны с теорией ретроградных фазовых превращений и критических областей. Когда появится возможность формального описания ретроградных процессов, тогда будут разработаны более совершенные уравнения состояния, а следовательно, возрастет и качество описываемых с их помощью фазовых моделей.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брилл Дж. П. Многофазный поток в скважинах / Дж. П. Брилл, Х. Мукерджи; пер. с англ. Ю. В. Русских; под ред. М. Н. Кравченко. М.: Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. 384 с.
2. Брусиловский А. И. Методология и результаты применения кубических уравнений состояния для моделирования термодинамических свойств природных углеводородных флюидов / А. И. Брусиловский // Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов: сб. науч. статей в 2 ч. 2011. Ч. 2. С. 150-163.
3. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке нефти и газа / А. И. Брусиловский. М.: Грааль, 2002. 575 с.
4. ГОСТ 8.602-2010. Государственная система обеспечения единства измерений. Плотность нефти. Таблицы пересчета. М.: Стандартинформ, 2006. 16 с.
5. Григорьев Б. А. Теплофизические свойства и фазовые равновесия газовых конденсатов и их фракций / Б. А. Григорьев, А. А. Герасимов, Г. А. Ланчаков; под общ. ред. Б. А. Григорьева. М.: МЭИ, 2007. 344 с.
6. Гуревич Г. Р. Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойств газоконденсатных смесей / Г. Р. Гуревич, А. И. Брусиловский. М.: Недра, 1984. 264 с.
7. Касперович А. Г. Построение фазовых диаграмм углеводородных систем для анализа процессов добычи, подготовки и транспорта сырья газоконденсатных месторождений / А. Г. Касперович, О. А. Омельченко, Д. А. Рычков, Т. В. Турбина // Вести газовой науки. 2014. № 4. С. 146-155.

8. Лапшин В. И. Фазовые превращения углеводородных нефтегазоконденсатных систем / В. И. Лапшин, А. Н. Волков, А. А. Константинов // Вести газовой науки. 2014. № 2. С. 121-128.
9. Мащицкий И. Э. Метод расчета дискретных функций фазовых диаграмм многокомпонентных углеводородных систем на основе кубических уравнений состояния / И. Э. Мащицкий, И. Г. Захарова // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2015. Том 1. № 3. С. 147-154.
10. Мащицкий И. Э. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016611751 «Программа для комплексного моделирования результатов разгонки углеводородных флюидов (Distillation Modeling)».
11. Мащицкий И. Э. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014616892 «Программа для построения фазовой диаграммы и изолиний массового процента газа углеводородных флюидов (HCSPD)».
12. Рид Р. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд; пер. с англ. под ред. Б. И. Соколова. Ленинград: Химия, 1982. 592 с.
13. Фаловский В. И. Современный подход к моделированию фазовых превращений углеводородных систем с помощью уравнения состояния Пенга — Робинсона / В. И. Фаловский, А. С. Хорошев, В. Г. Шахов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2011. № 4-1. С. 120-125.
14. Шабаров А. Б. Физико-математическая модель и метод расчета течения газоконденсатной смеси в пласте / А. Б. Шабаров // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2014. № 7. С. 7-18
15. Ющенко Т. С. Моделирование PVT-свойств природных газоконденсатных смесей с учетом наличия остаточной воды в коллекторе / Т. С. Ющенко, А. И. Брусиловский // Вести газовой науки. 2015. № 4. С. 38-45.
16. Danesh A. PVT and Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids / A. Danesh // Elsevier Science B.V. 1998. 104 p.
17. Pedersen K. S. Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids / K. S. Pedersen, P. L. Christensen. Boca Raton: CRC Press, 2007. 408 p.
18. Peng D. Y. A New Two-Constant Equation of State / D. Y. Peng, D. B. Robinson // Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals. 1976. Vol. 15. No 3. Pp. 59-64. DOI: 10.1021/i160057a011
19. Whitson C. H. Phase Behavior / C. H. Whitson, M. R. Brule. Richardson: Henry L. Doherty Memorial Fund of AIME, Society of Petroleum Engineers, 2000. 233 p.

**Igor E. MASHCHITSKIY**<sup>1</sup>

**Irina G. ZAKHAROVA**<sup>2</sup>

**UDC 665.62**

**THE CALCULATION OF DISCRETE FUNCTIONS OF PHASE  
BEHAVIOR CHARACTERISTIC CURVES FOR MULTICOMPONENT  
HYDROCARBON SYSTEMS**

<sup>1</sup> Postgraduate Student,  
University of Tyumen  
mashchitskiy@inbox.ru

<sup>2</sup> Cand. Sci. (Phys.-Math.), Professor,  
Software Department, University of Tyumen  
i.g.zakharova@utmn.ru

**Abstract**

This article describes a new and unique way to calculate the characteristic curves of phase behavior for oil-type systems on pressure-temperature (thermobaric) plane. The authors touch upon such aspects of phase behavior modeling as method of determining the equilibrium vapor-liquid ratio in specific thermobaric conditions, formal model of system under study structure, determination scheme of phase behavior regions and calculation algorithm of isolines of gas/liquid mass-content. The basic mathematical apparatus of the proposed method is the Peng-Robinson equation-of-state, in this connection the problems of component-fractional composition formation for hydrocarbon mixtures and the selection of relevant formulas for the physical and chemical parameters of fractions are considered. Target curves represented as the discrete functions, each one describe a fixed separation relation in the two-phase region of the system, and their calculation algorithm — as geometric rule set on thermobaric plane consisting computation logic. The key feature of proposed method is the accounting of retrograde evaporation/condensation phenomena for each isoline without reference to

---

**Citation:** Mashchitskiy I. E., Zakharova I. G. 2018. “The Calculation of Discrete Functions of Phase Behavior Characteristic Curves for Multicomponent Hydrocarbon Systems”. Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 4, no 3, pp. 103-119.

DOI: 10.21684/2411-7978-2018-4-3-103-119

any other characteristic curves, and also high scalability of the final result. The calculation algorithms listed in the article were implemented as .NET-software using parallelization technologies. Software-based phase behavior model is graphically illustrated and verified by contact condensation experimental data gathered on reservoir sample of real gas-condensate sample. Since the extraction, processing and transportation of hydrocarbons is unthinkable without a reliable phase states theory, this research can be applied in the most diverse areas of the oil and gas industry.

### **Keywords**

Multicomponent hydrocarbon systems, component-fractal composition, phase behavior model, isoline, retrograde phase behavior, software.

**DOI: 10.21684/2411-7978-2018-4-3-103-119**

### **REFERENCES**

1. Brill J. P., Mukherjee H. 1987. *Mnogofaznyy potok v skvazhinakh* [Multiphase Flow in Wells]. SPE, vol. 39, no 1, pp. 15-21.
2. Brusilovsky A. I. 2011. "Metodologiya i rezultaty primeneniya kubicheskikh uravneniy sostoyaniya dlya modelirovaniya termodinamicheskikh svoystv prirodnikh uglevodorodnykh flyuidov" [Methodology and Results of Cubic Equations-of-State Application for Simulation of Thermodynamic Properties of Natural Hydrocarbon Fluids]. In: *Aktualnye voprosy issledovaniy plastovykh system mestorozhdeniy uglevodorodov*. Vol. 2, pp. 150-163.
3. Brusilovsky A. I. 2002. *Fazovye prevrascheniya pri razrabotke nefiti i gaza* [Phase Transformations in Oil and Gas Development]. Moscow: Graal.
4. GOST 8.602-2010. *Gosudarstvennaya sistema obespecheniya edinstva izmereniy (GSI)* [State System for Ensuring the Uniformity of Measurements. Density of Oil].
5. Grigoriev B. A., Gerasimov A. A., Lanchakov G.A. 2007. *Teplofizicheskie svoystva i fazovye ravnovesiya gazovikh kondensatov* [Thermophysical Properties and Phase Equilibriums of Gas Condensates]. Moscow: MEI.
6. Gurevich G. R., Brusilovsky A. I. 1984. *Spravochnoe posobie po raschetu fazovogo sostoyaniya i svoystv gazokondensatnykh smesey* [The Guidebook on Calculation of Phase State and Properties of Gas-Condensate Mixture]. Moscow: Nedra.
7. Kasperovich A. G., Omelchenko O. A., Rychkov D. A., Turbina T. V. 2014. "Postroenie fazovykh diagramm uglevodorodnykh system dlya analiza protsessov dobychi, podgotovki, i transporta syrya gasokondensatnykh mestorozhdeniy" [Phase Diagram Calculation of Hydrocarbon Systems for Analysis of Extraction, Preparation, and Transport Processes of Gas-Condensate Raw Materials]. *Vesti gazovoy nauki*, no 4, pp. 146-155.
8. Lapshin V. I., Volkov V. I., Konstantinov A. A. 2014. "Fazovye prevrascheniya uglevodorodnykh neftegazokondensatnykh sistem" [Phase Transformations of Hydrocarbon Oil/Gas/Condensate Systems]. *Vesti gazovoy nauki*, no 2, pp. 121-128.



9. Mashchitskiy I. E. 2015. "Metod rascheta diskretnikh funkciy fazovykh diagramm mnogokomponentnykh uglevodorodnykh sistem na osnove kubichskikh uravneniy sostoyaniya" [Computational Method of Discrete Functions for Phase Diagrams of Multicomponent Hydrocarbon Systems Based on Cubic Equations of State]. Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 1, no 3, pp. 147-154.
10. Mashchitskiy I. E. Certificate of state registration of computer program no 2016611751 "Programma dlya kompleksnogo modelirovaniya rezul'tatov razgonki uglevodorodnykh flyuidov (Distillation Modeling)" [Complex Modeling Program for the Results of Hydrocarbon Fluids Distillation (Distillation Modeling)].
11. Mashchitskiy I. E. Certificate of state registration of computer program no 2014616892 "Programma dlya postroyeniya fazovoy diagrammy i izoliniy massovogo protsenta gaza uglevodorodnykh flyuidov (HCSPD)" [The Program for Phase Diagram and Gas Mass Percent Isolines of Hydrocarbon Fluids Construction (HCSPD)].
12. Reid R. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K. 1982. Svoystva zhidkostey i gazov [The Properties of Gases and Liquids]. Leningrad: Khimiya.
13. Falovskiy V. I., Horoshev A. S., Shahov V. G. 2011. "Sovremenniy podkhod k modelirovaniyu fazovykh prevrascheniy uglevodorodnykh sistem s pomoschyu uravneniya sostoyaniya Penga-Robinsona" [The Modern Approach to Phase Behavior Predictions of Hydrocarbon Systems by Means of the Peng-Robinson Equation-of-State]. Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiyskoy akademii nauk, no 4 (1), pp. 120-125.
14. Shabarov A. B. 2014. "Phiziko-matematicheskaya model i metod rascheta techeniya gazokondensatnoy smesi v plaste" [Physical-Mathematical Model and Flow Method of Gas-Condensate Mixture in Reservoir]. Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, no 7, pp. 7-18.
15. Yuscshenko T. S., Brusilovsky A. I. 2015. "Modelirovanie PVT-svoystv prirodnykh gazokondensatnykh smesey s uchedom nalichiya ostatochnoy vody" [PVT-Properties Modeling with Account of the Residual Water for Natural Gas-Condensate Mixtures]. Vesti gazovoy nauki, no 4, pp. 38-45.
16. Danesh A. 1998. PVT and Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids. London: Elsevier Science B.V.
17. Pedersen K. S., Christensen P. L. 2007. Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids. Boca Raton, Florida: CRC Press.
18. Peng D. Y., Robinson D. B. 1976. "A New Two-Constant Equation of State". Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, vol. 15, pp. 59-64. DOI: 10.1021/i160057a011
19. Whitson C. H., Brule M. R. 2000. Phase Behavior. Richardson, Texas: SPE Monograph Series.