

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХФАЗНОГО РАВНОВЕСИЯ ПО УРАВНЕНИЮ ПЕНГА-РОБИНСОНА С УЧЕТОМ ПОЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТОВ

М. Ю. Патрихин

Научный руководитель – к.т.н., доцент ОХИ И. М. Долганов

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, дом 30, тур11@tpu.ru*

Уравнение состояния Пенга-Робинсона – модификация уравнения Ван-дер-Ваальса, связывающая основные термодинамические параметры реального газа за счёт введения дополнительного объёмозависимого кубического трёхчлена, учитывающего межмолекулярные взаимодействия в реальном газе [1].

Уравнение Пенга-Робинсона чаще всего используется для расчета двухфазного равновесия углеводородных смесей с определением доли отгона и составов газа и углеводородного конденсата. Однако в 1976 году авторами оригинальной статьи была предложена методика расчета трехфазного равновесия для расчета доли и состава водной фазы, в которой растворяются полярные компоненты [2]. Наибольшую ценность имеет расчет метанола, который добавляется в природный и попутный нефтяной газ в процессе подготовки и распределяется во всех трех фазах, преимущественно в водной. Несмотря на существование более современных термодинамических пакетов для расчета водометанольных смесей, в частности CPA, пакет Peng Robinson

до сих пор используется как наиболее универсальный и быстрый.

Расчет углеводородных смесей с водной фазой по уравнению состоянию Пенга-Робинсона чаще всего осуществляется в программных моделирующих комплексах, таких как Aspen Hysys и UnisimDesign. Однако, на данный момент существует сложность в работе с данными лицензируемыми импортными программными комплексами, что создает предпосылки к созданию собственного расчетного программного комплекса.

В работе проводилась разработка математического аппарата для расчета составов смесей по уравнению Пенга-Робинсона на языке программирования Python.

Для расчета фазового и компонентного состава углеводородных смесей использовалось уравнение Пенга-Робинсона [2].

Сравнение составов и долей фаз написанной на Python программы и рассчитанных в Hysys приведены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнение расчетов по Пенгу-Робинсону в Hysys и в Python

Параметр	Газовая фаза		δ , %	Жидкая фаза		δ , %	Водная фаза		δ , %
	Python	Hysys		Python	Hysys		Python	Hysys	
Доля в смеси	0,9423	0,9426	0,03 %	0,0574	0,0571	0,51 %	0,0003	0,0003	1,21 %
Температура, °C	минус 8,5								
Давление, кПа	6000								
Состав, мол. доля:									
N ₂	9,94E-04	9,95E-04	0,1 %	1,45E-04	1,45E-04	0,04 %	3,45E-06	4,93E-06	30,0 %
CO ₂	6,83E-03	6,83E-03	0,1 %	6,14E-03	6,14E-03	0,02 %	7,08E-04	8,75E-04	19,0 %
CH ₄	0,8921	0,8919	0,0 %	0,3615	0,3614	0,04 %	4,21E-05	3,86E-05	9,0 %
C ₂ H ₆	5,32E-02	5,32E-02	0,1 %	0,0952	0,0952	0,00 %	3,32E-07	2,94E-07	13,0 %
C ₃ H ₈	2,99E-02	2,99E-02	0,1 %	0,1573	0,1574	0,02 %	9,20E-09	7,82E-09	17,7 %
i-C ₄ H ₁₀	6,11E-03	6,12E-03	0,1 %	0,0679	0,0680	0,06 %	3,46E-11	2,81E-11	23,1 %
n-C ₄ H ₁₀	6,81E-03	6,83E-03	0,3 %	0,1036	0,1038	0,18 %	7,07E-11	5,75E-11	22,9 %
i-C ₅ H ₁₂	1,75E-03	1,76E-03	0,4 %	0,0558	0,0560	0,31 %	3,25E-13	2,52E-13	28,8 %
n-C ₅ H ₁₂	1,28E-03	1,29E-03	0,4 %	0,0535	0,0536	0,25 %	3,29E-13	2,55E-13	29,1 %
n-C ₆ H ₁₄	7,53E-04	7,60E-04	0,8 %	0,0822	0,0827	0,59 %	3,58E-15	2,64E-15	35,6 %
H ₂ O	4,53E-05	4,09E-05	10,8 %	4,54E-05	4,55E-05	0,12 %	0,6720	0,6763	0,6 %
CH ₃ OH	2,78E-04	3,35E-04	17,0 %	0,0165	0,0156	5,74 %	0,3273	0,3228	1,4 %

В последующих работах планируется разработка программного кода для расчета других термодинамических пакетов, расчет термодинамических характеристик потока – энтальпия, эн-

тропия, теплоемкость и т. д., а также полноценного интерфейса для расчета процессов двух- и трехфазной сепарации в статическом и динамическом режимах.

Список литературы

1. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
2. Peng D. Y., Robinson D. B. // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1976. – Т. 54. – № 5. – С. 595–599.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПЛАЗМЕННОЙ ПЕРЕРАБОТКИ АСФАЛЬТЕНОСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ

П. В. Повалев^{1,2}, Е. В. Францина^{1,2}, В. В. Аркаченкова^{1,2}

Научный руководитель – д.т.н., заведующий лабораторией перспективных материалов энергетической отрасли А. Я. Пак¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, pvp13@tpu.ru

²Сургутский государственный университет
628403, Россия, г. Сургут, пр. Ленина 1

Синтез углеродных наноструктур (УН) является чрезвычайно актуальным, ввиду того что углеродные наноструктуры различной морфологии привлекают огромное внимание благодаря своим необычным свойствам и большому потенциалу применения. Например, УН нашли свое применение в изготовлении эластичных композитов и гибких электродов, также благодаря физико-химическим свойствам УН широко используются в электронике, катализе и фотоэлектронике [1, 2]. На сегодняшний день известно несколько методов синтеза УН: термический отжиг наноалмазов, химическое осаждение из газовой фазы, пиролиз и плазменный синтез. В большинстве методов для синтеза УН прибегают к использованию коммерческого углерода, что в некоторой степени приводит к повышению стоимости синтеза, но при этом обеспечивается чистота получаемого продукта. Данная работа посвящена плазменной переработке асфальтеносодержащих отходов с получением углеродных наноструктур различной морфологии.

Для проведения плазменной переработки асфальтеносодержащих отходов использовался безвакуумный электродуговой реактор постоянного тока, отличающийся от своих аналогов низкими временными и энергетическими затратами, необходимыми для проведения синтеза. Помимо этого, благодаря особенностям методики переработки, предотвращается окисление

образца путем самоэкранирования реакционной зоны, выделяющимися газами CO и CO₂ [3].

При проведении исследования по плазменной переработке асфальтеносодержащих отходов, использовались отходы различного происхождения: а) асфальтены выделенные из битума природного происхождения; б) асфальтены полученные с использованием технологии SDA; в) асфальтены выделенные из битума кармального месторождения с использованием SARA-анализа. Полученные образцы были проанализированы методом просвечивающей электронной микроскопии с использованием просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM 2100F (рис. 1).

По данным просвечивающей электронной микроскопии (рис. 1, а, б, в) исследуемый материал характеризуется присутствием нескольких кристаллических углеродных наноструктур: нанотрубок (1), нанолуковиц (2) и полиэдрического графита (3). Типы частиц идентифицированы в соответствии с известными представлениями о данных морфологических типах. Таким образом, методом плазменной переработки асфальтеносодержащих отходов получены углеродные наноструктуры различной морфологии, такие материалы относятся к классу углеродных графитоподобных материалов. Многообразие полученных частиц можно объяснить природным происхождением исходного сырья, что вызыва-