

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ РАЗБИЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ФРАКЦИЙ НА ПСЕВДОКОМПОНЕНТЫ

Сладков Д.Ю.

Научный руководитель доцент В.А. Чузлов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

В моделировании нефтегазохимических процессов так или иначе встает вопрос характеризации многокомпонентных смесей. В определенных случаях возможно применение физико-химических и термодинамические свойства всех компонентов, составляющих какую-либо углеводородную многокомпонентную смесь. Однако в ряде случаев это не представляется возможным, тогда необходима декомпозиция непрерывной многокомпонентной смеси на псевдокомпоненты, которая носит достаточно условный характер и основывается на данных о фракционном составе смеси, а процедура расчета физико-химических свойств отдельных псевдокомпонентов приобретает особое значение.

Основной и минимально необходимой характеристикой псевдокомпонента температура кипения, которая является средней для заданного интервала температур кипения. Однако, одного лишь значения температура недостаточно для описания фракции в полной мере, поскольку в таком случае она не учитываются особенности состава. Молекулярная масса, плотность позволяют учесть отклонение псевдохарактеристических констант от получаемых из вероятного углеводородного состава для фракций она основаны кривой ИТК. Для получения кривых свойств на основании температур кипения, а также средних значений свойств фракции при их наличии, используя различные эмпирические корреляции, часть из них представлена в таблице 1.

Таблица 1

Корреляции расчета свойств псевдокомпонентов

Свойство	Методика/корреляция [1-4]
Молекулярная масса	TWU, Lee-Kesler, Peng-Robinson, Katz-Firoozabadi, API, Katz-Nokay, Whitson, Riazi-Daubert, Bergman, PNA, Goossens
Плотность	Katz-Firoozabadi, Bergman, Lee-Kesler, PNA, Yarborough, Constant Watson K,
Критическая температура	TWU, Lee-Kesler, Rowe, Mokay, Peng-Robinson, Edmister, Bergman, Cavett, Riazi-Daubert и др.
Критическое давление	TWU, Lee-Kesler, Rowe, Lynderson, Peng-Robinson, Edmister, Bergman, Cavett, Riazi-Daubert и др.
Критический объем	TWU, Lee-Kesler, Peng-Robinson, Edmister, Bergman, Cavett, Riazi-Daubert и др.
Ацентрический фактор	Lee-Kesler, Peng-Robinson, Edmister, Bergman
Энтальпия	Lee-Kesler, Cavett, Fallon-Watson

Для характеризации смеси с помощью псевдокомпонентов необходимо разбить кривую кипения на N интервалов (в соответствии с ожидаемым числом псевдокомпонентов) по оси температур кипения и на каждом интервале найти среднее значение температур кипения с учетом долей отгона. Для это необходимо осуществить определенное интегрирование функции кривой кипения.

$$T_{cp}(x) = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx, \quad \#(1)$$

где T_{cp} – средняя температура кипения, К; a и b – интервал интегрирования, x – доля отгона.

Однако функция применяемая функция Riazi-Daubert [3], описывающая кривую кипения, имеет следующий вид:

$$\frac{T - T_{нк}}{T} = \left[\frac{A}{B} * \ln \left(\frac{1}{1-x} \right) \right]^{\frac{1}{B}}, \quad \#(2)$$

где $T_{нк}$ – температура начала кипения, К; T – температура кипения, К; A и B – коэффициенты.

При выражении значения температуры (T) в уравнении (2) и последующем интегрировании в уравнении (1), получаем весьма сложный вид полученной функции, в которой присутствует функция Гаусса. Тогда более простым путем является применение численных методов для решения данной задачи.

Далее непосредственно осуществляется расчёт физико-химических и критических свойств по методикам, представленным в таблице 1, выбор методики и алгоритм расчета зависит от набора исходных данных, а также специфики описываемой фракции. Ряд методик имеет ограниченное применение, например применим только для относительно легких фракций с молекулярной массой не более 400.

Основываясь на вышеизложенных методиках, был разработан программный алгоритм для разбиения углеводородных фракций на псевдокомпоненты. В таблице 2 представлен пример разбиения сырья процесса гидрокрекинга – вакуумного газойля: температура начала кипения – 312 °С; 50 % точка кипения – 448 °С;

СЕКЦИЯ 8. ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ

температура конца кипения – 537 °С; средняя молекулярная масса – 363,8 г/моль; плотность при 50 °С - 891,3 кг/м³; динамическая вязкость при 50 °С - 31,45 мПа*с.

Таблица 2

Пример расчета свойств псевдокомпонентов

Имя компонента	Содержание, % мол.	T _{кип} , °С	ММ, г/моль	Плотность, кг/м ³ (15,5 °С)	Вязкость, сП (38 °С)	T _с , °С	P _с , кПа	Ацентрический фактор
NBP_322	0,04	322,3	265,7	859,2	4,9104	505,2	15,71	0,6510
NBP_335	0,39	335,2	278,4	864,5	6,0074	516,8	15,14	0,6874
NBP_349	1,30	349,6	293,0	870,3	7,5876	529,6	14,54	0,7298
NBP_364	2,83	364,4	308,4	876,0	9,7446	542,6	13,95	0,7752
NBP_379	4,97	379,3	324,4	881,7	12,6903	555,6	13,38	0,8232
NBP_394	7,52	394,3	340,8	887,2	16,7580	568,5	12,83	0,8735
NBP_409	10,10	409,3	357,7	892,6	22,4591	581,4	12,30	0,9263
NBP_424	12,21	424,3	374,9	897,8	30,5886	594,1	11,80	0,9578
NBP_439	13,33	439,3	392,5	902,9	42,4092	606,8	11,33	0,9918
NBP_454	13,12	454,3	410,4	908,0	59,9783	619,4	10,87	1,0254
NBP_469	11,58	469,3	428,6	912,9	86,7454	631,9	10,43	1,0585
NBP_484	9,11	484,3	447,1	917,7	128,6843	644,4	10,02	1,0911
NBP_499	6,32	499,3	465,8	922,4	196,5228	656,8	9,62	1,1231
NBP_514	3,82	514,2	484,7	927,1	310,3404	669,2	9,24	1,1546
NBP_529	2,00	529,1	503,8	931,6	508,7657	681,4	8,88	1,1854
NBP_544	1,36	544,6	523,8	936,3	893,2731	694,2	8,52	1,2168

Разработанный модуль позволяет получать кривые свойств отдельной пробы (расчет свойств по долям отгона пробы), создавать смеси из 1 или более проб, получать общие кривые свойств смеси (в случае двух или более проб), разбивать смеси на псевдокомпоненты и осуществлять расчет свойств псевдокомпонентов. Что позволяет в последствии использовать рассчитываемые компоненты в моделировании различных нефтегазохимических процессов.

Литература

1. Firoozabadi, A., Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs / A. Firoozabadi. – New York: McGraw Hill, 1999. – 355 p.
2. Kesler, M. G. and Lee, B. I., Improve Prediction of Enthalpy of Fractions // Hydrocarbon Processing. – 1976. – V. 55. – p. 153-158.
3. Riazi M. R. Characterization and Properties of Petroleum Fractions / M. R. Riazi. – Philadelphia: ASTM International, 2005. – 401 p.
4. Twu, C.H. Internally consistent correlation for predicting liquid viscosities of petroleum fractions // Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. – 1985. – V. 24. – p. 1293-1297.