

Введение В настоящее время в химической, нефтехимической и нефтедобывающей промышленности, для расчетов трехфазных равновесий систем «углеводород-вода-газ» используют различные кубические уравнения состояния и их модификации, в том числе уравнение состояния Соава-Редлиха-Квонга, принятое для расчета фазовых равновесий при высоких параметрах состояния, необходимость использования которого обоснована снижением погрешности расчета при давлениях выше 20 МПа для известных уравнений состояния. Расчет Мольная доля растворенного вещества находится по уравнению (1) Эмпирический параметр бинарного межмолекулярного взаимодействия в уравнении состояния Соава-Редлиха-Квонга определяется при фиксированной температуре путем минимизации функции ошибок по растворимости. (2) где F - функция ошибок, характеризующая минимальное отклонение расчета от эксперимента; n - количество экспериментальных точек; x - растворимость, определяемая из эксперимента. Совместное решение уравнений (1) и (2) позволяет описывать растворимость в бинарной системе в широком диапазоне давлений и температур, включая окрестность критической точки чистого растворителя. Уравнение состояния Соава-Редлиха-Квонга: (3) где v - удельный объем смеси, a и b - параметры уравнения для смеси, учитывающие межмолекулярные взаимодействия. Параметры a и b вычисляются следующим образом: v_i - мольные доли компонентов в любой из равновесных фаз. Параметры чистых компонентов и определяются следующим образом: (4) (5) (6) (7) где P_c и T_c - критическое давление, температура и фактор ацентричности i -го компонента смеси. Для расчета "перекрестных" параметров смеси вводятся эмпирические поправки, называемые параметрами бинарного межмолекулярного взаимодействия и k_{ij} , где P^s - давление насыщенного пара растворенного вещества при данной температуре, v^s - молярный объем растворенного вещества, V_c - коэффициент летучести. Давление насыщенного пара рассчитывается по уравнению Антуана (8) где A , B , C - постоянные Антуана. Если ввести следующие обозначения: z_1 и z_2 , то уравнение (1.1) можно переписать в виде кубического уравнения относительно Z : (9) Для нахождения корней уравнения (9) используют итерационную процедуру Ньютона-Рафсона. Таблица 1 - Параметры бинарного взаимодействия в системе «метан-вода» Температура, К Коэффициент бинарного взаимодействия, k_{12} 377,1 0,075 411,1 0,081 Результаты и обсуждение В настоящей работе уравнения состояния были апробированы путем расчета растворимости воды в метане [4] при двух различных температурах 377,1 и 411,1 К. В качестве уравнения состояния было выбрано уравнение Соава-Редлиха-Квонга (SRK), так как при условиях проведения экспериментов [5,6], обосновывается снижением погрешности расчета при давлениях выше 20 МПа. На рис. 1 и 2 приведены результаты экспериментальных и расчетных значений растворимости воды. Рис. 1 - Растворимость воды в метане при температуре 377,1 К Рис. 2 - Растворимость воды в метане при температуре 411,1 К Вывод В

ходе работы получены бинарные параметры взаимодействия в приближении уравнения состояния Соава-Редлиха-Квонга, которые позволяют адекватно описать растворимость воды в метане во всем интервале параметров состояния охваченных экспериментом.