**Математическое моделирование фазовых равновесий многокомпонентных смесей углеводородов**

***Волкова В.М.***

*Студент*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова*

*Физический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: volkovavm040929@gmail.com*

В работе рассматривается применение численного моделирования для исследования фазового равновесия многокомпонентных углеводородных смесей. Особое внимание уделено методам термодинамического анализа, основанным на уравнениях состояния. Подчеркнута важность учета фазовых превращений при разработке нефтяных и газовых месторождений, так как они напрямую влияют на процессы добычи, транспортировки и переработки углеводородов [1].

Современные методы прогнозирования фазовых состояний углеводородных систем требуют высокой точности, поскольку малые изменения в составе могут приводить к значительным изменениям в фазовом поведении [1]. Это важно для оптимизации технологических процессов, таких как транспортировка газа, конденсация углеводородов и работа оборудования. Традиционные эмпирические методы дают лишь приближенные оценки, поэтому численное моделирование с использованием уравнений состояния становится востребованным инструментом анализа [5].

Цель исследования — разработка и применение численного алгоритма для расчета фазовых равновесий многокомпонентных углеводородных смесей.

Задачи:

- проанализировать состав нефтей и природных газов;

- описать условия термодинамического равновесия многокомпонентных систем;

- рассмотреть существующие методы расчета фазовых равновесий;

- разработать итерационный алгоритм определения фазовых параметров;

- провести вычислительный эксперимент и сравнить результаты моделирования с экспериментальными данными.

Для расчета фазовых равновесий использован итерационный метод, основанный на равенстве летучестей всех компонентов смеси в каждой из фаз [3, 4, 5]. В качестве стартового приближения применена формула Вильсона для коэффициентов фазового равновесия (K-values). В алгоритме используются:

- уравнения состояния для определения параметров фаз,

- уравнение Рэчфорда-Райса для нахождения мольной доли газовой фазы,

- метод последовательных итераций для уточнения фазовых характеристик.

Дополнительно проведены расчеты вязкости и плотности фаз, что позволяет оценить физические свойства системы.

В рамках вычислительного эксперимента рассчитаны K-values для метана и гептана при различных давлениях. Сравнены результаты, полученные по уравнению Вильсона, с экспериментальными данными. Выявлено, что метод Вильсона дает отклонения, особенно значимые для тяжелых компонентов. Итерационный алгоритм позволил уточнить фазовые характеристики, улучшив соответствие с экспериментом.

В ходе исследования установлено, что фазовые равновесия многокомпонентных углеводородных систем можно эффективно рассчитывать с помощью численных методов, основанных на уравнениях состояния. Итерационный алгоритм обеспечивает высокую точность и может быть использован для прогнозирования фазового поведения пластовых флюидов. Выявлено, что формула Вильсона дает лишь приближенные оценки, и ее необходимо дополнять итерационными процедурами. Полученные результаты могут быть применены в нефтегазовой промышленности для оптимизации процессов добычи и переработки углеводородов.

**Литература**

1. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа //М.: Грааль. – 2002. – Т. 575. – С. 2002-233.

2. Isaeva, A., Grushnikov, I., Dobrozhanskiy, V. 2018. Analysis of Vapor-Liquid Equilibrium Parameters of Multicomponent Hydrocarbon Mixtures Using Cubic Equations of State. Presented at the SPE Russian Petroleum Technology Conference, 15-17 October, Moscow, Russia. SPE-191619-18RPTC-RU. https://doi.org/10.2118/191619-18RPTC-MS.

3. Brusilovskiy, A. 1992. Mathematical Simulation of Phase Behavior of Multicomponent Systems at High Pressures with an Equation of State. SPE Reservoir Engineering 7(01): 117–122. SPE-20180-PA. https://doi.org/10.2118/20180-PA.

4. Ahmed, T. 2007. Equations of State and PVT Analysis: Applications for Improved Reservoir Modeling. Houston, Texas: Gulf Publishing Company.

5. Danesh, A. 1998. PVT and Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids, Vol. 47, Developments in Petroleum Science. Oxford, UK: Elsevier Science. https://doi.org/10.2118/141399-PA.