

УДК 665.5:536

В.П. Железный, А.С. Никулина, Б.А. Григорьев

Новые структурно-аддитивные методы прогнозирования теплофизических свойств углеводородов

Ключевые слова: термодинамические свойства, структурно-аддитивные комплексы, принципы скейлинга, прогнозирование, уравнение состояния.

Keywords: thermodynamic properties, structural-additive complex, scaling principles, prediction, equation of state.

Нефтегазовый комплекс России включает нефтегазодобывающую, нефтегазоперерабатывающую, нефтегазохимическую отрасли промышленности, сырьем для которых являются различного состава нефти, газовые конденсаты, природные газы и продукты их переработки. Эффективность эксплуатации предприятий нефтегазового комплекса определяется наличием данных о теплофизических свойствах сырья и промежуточных продуктов их переработки. К сожалению, эта информация для подавляющего большинства многокомпонентных углеводородных соединений отсутствует.

К настоящему времени для расчета теплофизических свойств углеводородов предлагаются различные феноменологические методы [1–5]. Среди многообразия предложенных в литературе корреляций для чистых веществ широкое применение получили методики, основанные на структурно-аддитивном определении некоторых свойств с использованием информации о строении химического соединения. Однако при изучении таких сложных объектов исследования, как нефти, газовые конденсаты, природный газ и продукты их переработки, получение информации о теплофизических свойствах в рамках известных структурных методов расчета (прогнозирования) превращается в достаточно трудную по нескольким причинам задачу.

Во-первых, нефти и их фракции являются сложными многокомпонентными растворами, которые состоят из газообразных, жидких и твердых углеводородов различного химического строения с числом атомов углерода до 100. Кроме того, нефти содержат примеси гетероорганических соединений серы, азота, кислорода и некоторых металлов. Во-вторых, точный состав нефтей из различных месторождений, как правило, неизвестен. Более доступной информацией являются ее групповой состав и некоторые характеристические параметры, такие как: показатель преломления при 20 °С, относительная плотность при 20 °С, средняя молярная масса и температура кипения. Эти параметры применяются при идентификации нефти и их фракций. В-третьих, современные структурно-аддитивные методы расчета свойств веществ хорошо зарекомендовали себя только при расчете критических параметров чистых веществ. Получение информации о других термодинамических свойствах в широком интервале параметров с использованием этих методов вряд ли представляется возможным. Накопленный опыт расчета теплофизических свойств веществ показывает, что далеко не все термодинамические функции могут быть рассчитаны с использованием структурно-аддитивных методов, а структурные доли (инкременты) зависят от температуры.

С учетом изложенного очевидно, что проблема дальнейшего развития методов прогнозирования свойств многокомпонентных углеводородов с использованием ограниченной исходной информации в настоящее время остается актуальной.

В опубликованных недавно статьях [6, 7] авторы для определения термодинамических параметров газовых конденсатов предложили использовать новую методику прогнозирования теплофизических свойств на линии кипения – SP-QSPR. В основу этой методики положено использование малокоэффициентных уравнений расширенного скейлинга (1)–(6) и установленных в работах [6] зависимостей между критическим молярным объемом и различными структурно-аддитивными комплексами:

$$a^2 = a_0 \cdot t^{n \cdot \Psi(t)}; \quad (1)$$

$$\sigma = \sigma_0 \cdot t^{\mu \cdot f(t)}; \tag{2}$$

$$\ln(n) = \ln(n_c) + B_n \cdot \Omega^{\beta \cdot F(\Omega)}; \tag{3}$$

$$\ln \omega' = B_1 \cdot \Omega^{\beta_1 \cdot F_1(\Omega)}; \tag{4}$$

$$\rho' - \rho'' = \rho_0 \cdot t^{\beta \cdot F(t)}; \tag{5}$$

$$\ln(1/\pi_s) = \alpha_R \cdot \Omega + b \cdot \Omega^c, \tag{6}$$

где a^2 – капиллярная постоянная; ρ – плотность; n – показатель преломления; σ – поверхностное натяжение; $a_0, \rho_0, \sigma_0, B_1, B_n$ – амплитуды, характеризующие индивидуальные свойства веществ; α_R, b – индивидуальные коэффициенты, определяемые из опытных данных; $c = 2,64$; $\Omega = \ln(\bar{T}_c/T)$ и $t = 1 - T/\bar{T}_c$ – приведенные температуры; n, β, μ – критические показатели степени; $\psi(t), f(t), F(t), F_1(\Omega), F(\Omega)$ – универсальные кроссоверные функции; $\pi_s = \bar{P}_c/P_s$ – приведенное давление; $\omega' = \rho'/\bar{\rho}_c$ – приведенная плотность насыщенной жидкости; $\bar{T}_c, \bar{\rho}_c, \bar{P}_c$ – псевдокритические температура, плотность и давление.

Значения универсальных для различных веществ кроссоверных функций в интервале приведенных температур $0,005 \leq t \leq 0,65$ могут быть рассчитаны по уравнениям [8, 9]:

$$F(t) = 1 - 1,2278 \cdot \frac{t^2}{\ln t} + 1,3282 \cdot \frac{t^3}{\ln t}; \tag{7}$$

$$f(t) = 1 - 0,03534 \cdot \frac{t^{1,5}}{\ln t} - 0,31656 \cdot \frac{t^2}{\ln t} + 0,34246 \cdot \frac{t^3}{\ln t}; \tag{8}$$

$$F_1(\Omega) = 1 - 1,113 \cdot \Omega^{0,4} / \ln \Omega; \tag{9}$$

$$F(\Omega) = 1 + 0,743 \cdot \Omega^{0,255} / \ln \Omega; \tag{10}$$

$$\psi(t) = 1 - 0,04762 \cdot \frac{t^{1,5}}{\ln t}. \tag{11}$$

Следует отметить, что метод SP-QSPR применительно к сложным термодинамическим системам, в отличие от существующих структурно-аддитивных методов расчета теплофизических свойств на линии кипения, не опирается на информацию о структурных долях компонентов нефти. Для реализации этого метода достаточно располагать информацией о групповом составе углеводородов объекта исследования и нескольких характеристических параметрах. Объем исходной информации для расчета псевдокритических параметров, плотности, вязкости, поверхностного натяжения в широком интервале температур приведен в табл. 1.

В качестве примера для верификации предложенной модели прогнозирования теплофизических свойств авторы использовали данные о теплофизических свойствах Мангышлакской нефти, информация о которых содержится в монографии [1].

Был применен следующий алгоритм прогнозирования теплофизических свойств фракций Мангышлакской нефти:

- определение группового углеводородного состава нефти или ее фракций (при отсутствии информации);
- расчет псевдокритических параметров фракций нефти;
- расчет плотности фракций нефти и амплитуд (коэффициентов уравнений (4), (5));
- прогнозирование давления насыщенных паров на линии кипения с использованием уравнения (6);
- определение значений парахора, ортохора с использованием уравнений связи между структурно-аддитивными комплексами [6];
- прогнозирование поверхностного натяжения и вязкости фракций нефти на линии кипения.

Таблица 1

Свойства Мангышлакской нефти (технологические фракции)

Диапазон выкипания, °С	Физико-химические свойства фракций нефти (исходная информация)				Концентрация углеводородов (расчет по формулам (12)–(16))		
	n_D^{20}	ρ_4^{20}	M	T_{bv}, K	$X_p, \%$	$X_n, \%$	$X_a, \%$
НК–62	1,3712	0,656	81	322,1	91,4	8,6	–
НК–20	1,402	0,7222	96	367,4	66,67	19,26	14,07
62–140	1,406	0,7283	109	380,7	63,44	21,76	14,8
НК–180	1,4138	0,7432	119	399,7	57,75	24,3	17,95
140–180	1,4262	0,7652	148	437,3	48,91	28,75	22,34
180–240	1,439	0,7891	160	485,7	41,37	30,25	28,38

Групповой углеводородный состав нефтей является наиболее доступным и важным показателем их качества, определяющим выбор метода переработки, ассортимент и эксплуатационные свойства получаемых нефтепродуктов. В нефтях содержатся в различных соотношениях практически все классы углеводородов: алканы, цикланы, арены, а также гетероатомные соединения.

С целью минимизации объема исходной информации при верификации методики SP-QSPR авторы специально не рассматривали в качестве исходной информации данные о групповом углеводородном составе для Мангышлакской нефти. Для определения состава ее фракций использовалась методика, представленная в монографии [1]. Выбор данной методики определения концентрации углеводородов во фракциях Мангышлакской нефти обусловлен отсутствием в объеме исходной информации данных о вязкости.

Мольная концентрация парафиновых X_p , нафтеновых X_n и ароматических X_a углеводородов во фракциях Мангышлакской нефти рассчитывается по следующим зависимостям [1] (для легких фракций $M < 200$):

$$X_p = 373,87 - 408,29 \cdot \rho_{15}^{15} + 1,4772 \cdot m; \quad (12)$$

$$X_n = -150,27 + 210,155 \cdot \rho_{15}^{15} - 2,388 \cdot m; \quad (13)$$

$$X_a = 100 - X_p - X_n, \quad (14)$$

где ρ_{15}^{15} – относительная плотность; m – параметр, зависящий от структуры углеводорода.

$$\rho_{15}^{15} = \rho_4^{20} + 0,0035 / \rho_4^{20}; \quad (15)$$

$$m = M \cdot (n_D^{20} - 1,4750), \quad (16)$$

где M – средняя молярная масса.

Полученные результаты определения группового состава Мангышлакской нефти представлены в табл. 1. Согласно приведенным в ней данным, в исходной информации для расчета теплофизических свойств фракций Мангышлакской нефти отсутствуют значения плотности на линии кипения в ограниченном интервале температур. Поэтому расчет псевдокритических параметров производился в одножидкостном приближении в рамках гипотезы о неизменности группового углеводородного состава.

В соответствии с этой гипотезой для расчета псевдокритических параметров фракций нефти целесообразно использовать модель эквивалентного углеводорода (эквивалентного алкана, эквивалентного нафтена, эквивалентного ароматического углеводорода) [6]. Эти углеводороды должны иметь температуру кипения, близкую к температуре выкипания фракции нефти. В таком случае псевдокритические параметры фракций нефти рекомендуется [6] рассчитывать с использованием простых правил аддитивности для эквивалентных углеводородов:

$$\bar{T}_c = T_c^p \cdot X_p + T_c^n \cdot X_n + T_c^a \cdot X_a; \quad (17)$$

$$\bar{P}_c = P_c^p \cdot X_p + P_c^n \cdot X_n + P_c^a \cdot X_a; \quad (18)$$

$$\bar{\rho}_c = \rho_c^p \cdot X_p + \rho_c^n \cdot X_n + \rho_c^a \cdot X_a, \quad (19)$$

где T_c^p, T_c^n, T_c^a – критические температуры эквивалентных углеводородов (парафина, нафтена и ароматических); P_c^p, P_c^n, P_c^a – критические давления эквивалентных углеводородов (парафина, нафтена и ароматических); $\rho_c^p, \rho_c^n, \rho_c^a$ – критические плотности эквивалентных углеводородов (парафина и нафтена и ароматических); X_p, X_n, X_a – мольные концентрации парафинов, нафтенов и ароматических углеводородов во фракции нефти.

Вычисленные по предложенной методике значения псевдокритических параметров для фракций Мангышлакской нефти приведены в табл. 2. Там же указаны значения псевдокритических температур и плотностей, рассчитанные по формулам Риози и Доуберта [10].

Анализ данных табл. 2 показывает, что значения, полученные в рамках модели эквивалентных углеводородов (без привлечения эмпирической информации), хорошо согласуются с результатами расчета по формулам Риози и Доуберта [10].

Для расчета плотности нефтяных фракций на линии кипения использовалось уравнение расширенного скейлинга (4). Значение единственного неизвестного коэффициента B_1 в корреляции (4) получено из данных о плотности при $t = 20$ °C (см. табл. 1):

$$B_1 = \frac{\ln\left(\frac{\rho_{20}}{\rho_c}\right)}{\tau^{\beta \cdot F(\tau)}}. \quad (20)$$

Таблица 2

Псевдокритические параметры фракций Мангышлакской нефти

Диапазон выкипания, °С	\bar{T}_c , К	\bar{P}_c , МПа	$\bar{\rho}_c$, кг/м ³	\bar{T}_c , К [11]	\bar{P}_c , МПа [11]	$\bar{\rho}_c$, кг/м ³ [11]
НК-62	510,799	3,369	246,421	491,475	3,360	245,707
НК-120	574,478	2,890	253,874	549,447	3,088	254,334
62-140	553,618	3,047	252,2476	562,744	2,899	253,335
НК-180	640,352	2,394	253,796	583,284	2,714	253,645
140-180	618,394	2,559	254,702	621,380	2,357	252,646
180-240	673,289	2,146	250,787	668,241	1,984	250,859

Температурные зависимости плотности фракций нефти на линии кипения представлены на рис. 1.

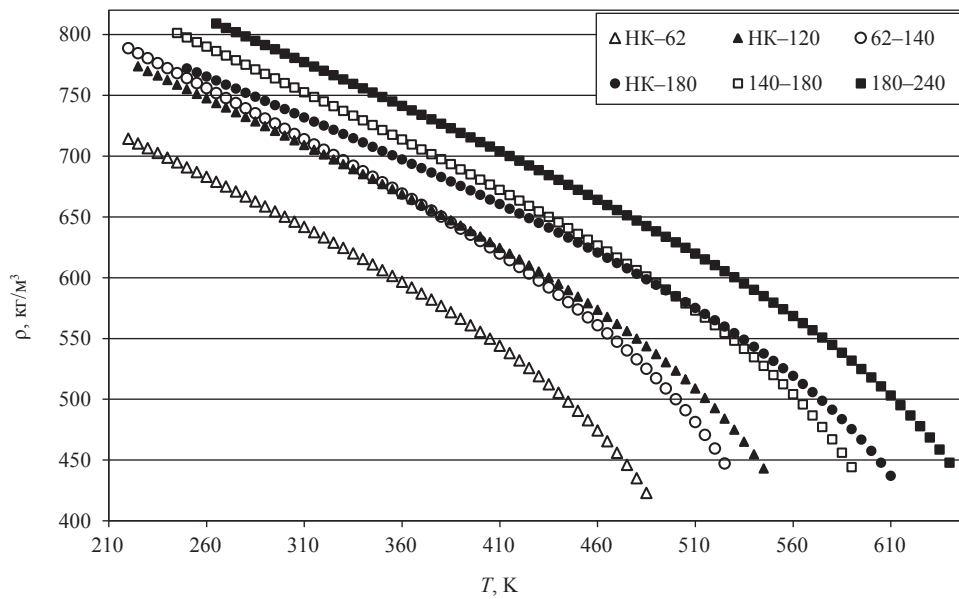


Рис. 1. Температурные зависимости плотности фракций Мангышлакской нефти

Информация о качестве рассчитанных значений плотности Мангышлакской нефти получена при сопоставлении с данными, приведенными в монографии [1]. В качестве интегральных критериев погрешности использовались следующие величины:

$$AVR = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N |Y_i^{[1]} - Y_i^{calc}|; \tag{21}$$

$$RMS = \frac{100\%}{N} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{(Y_i^{[1]} - Y_i^{calc})^2}{(Y_i^{calc})^2}}; \tag{22}$$

$$AAD = \frac{100\%}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \left| \frac{Y_i^{[1]} - Y_i^{calc}}{Y_i^{calc}} \right|; \tag{23}$$

$$Bias = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N (Y_i^{[1]} - Y_i^{calc}), \tag{24}$$

где Y^{calc} – рассчитанное значение теплофизического свойства; $Y^{[1]}$ – данные, приведенные в работе [1]; N – число рассчитанных значений физической величины.

В табл. 3 отражены значения критериев погрешности расчета плотности фракций Мангышлакской нефти.

Таблица 3

Значения критериев погрешности расчета плотности фракций Мангышлакской нефти в диапазоне приведенных температур $0,05 \leq t \leq 0,6$

Диапазон выкипания, °С	$ADD, \%$	$Bias, \text{кг/м}^3$	$RMS \cdot 10^1, \%$	$AVR, \text{кг/м}^3$
НК–62	0,39	–1,7	0,65	2,1
НК–120	0,39	–2,1	0,61	2,2
62–140	0,38	–1,9	0,60	2,2
НК–180	0,41	–2,2	0,57	2,3
140–180	0,39	–2,1	0,56	2,2
180–240	0,36	–2,0	0,49	2,1

Информация о давлении насыщенных паров фракций нефти является едва ли не самой востребованной при проектировании и эксплуатации оборудования предприятий нефтеперерабатывающих заводов. Данные о давлении насыщенных паров на линии кипения необходимы для определения числа ступеней разделения и температурных полей в ректификационной колонне.

Для прогнозирования давления насыщенных паров фракций нефти авторы предлагают использовать малокоэффициентную корреляцию (6). Значения коэффициентов α_r и b , входящих в эту корреляцию, могут быть определены с использованием данных о средней объемной температуре кипения T_{bv} . Этой информации достаточно для расчета фактора ацентричности по формулам, представленным в работе [4]:

$$\omega = \frac{3}{7} \cdot \frac{\theta}{1-\theta} \cdot \lg \bar{P}_c - 1 \quad (25)$$

или

$$\omega = \frac{-\ln \bar{P}_c - 5,92714 + 6,09648 \cdot \theta^{-1} + 1,28862 \cdot \ln \theta - 0,169347 \cdot \theta^6}{15,2518 - 15,6875 \cdot \theta^{-1} - 13,4721 \cdot \ln \theta + 0,43577 \cdot \theta^6}, \quad (26)$$

где \bar{P}_c – выражено в физических единицах; $\theta = \frac{T_{bv}}{T_c}$.

Располагая значением фактора ацентричности, можно определить значение критерия Риделя уравнения (6) по корреляции, предложенной в работе [11]:

$$\alpha_r = 4,919 \cdot \omega + 5,811. \quad (27)$$

Значение оставшегося неизвестным коэффициента b в уравнении (6) определялось с использованием информации о средней объемной температуре кипения T_{bv} :

$$b = \frac{\ln \frac{\bar{P}_c}{P_{nb}} - \alpha_r \cdot \ln \frac{\bar{T}_c}{T_{bv}}}{\ln \frac{\bar{T}_c}{T_{bv}}^{2,64}}, \quad (28)$$

где P_{nb} – нормальное атмосферное давление ($P_{nb} = 1$ атм).

Температурные зависимости давления насыщенных паров фракций Мангышлакской нефти представлены на рис. 2.

Так как авторы не располагают информацией о давлении насыщенных паров для фракций Мангышлакской нефти, сравнение качества предложенной методики выполнено для газовых конденсатов.

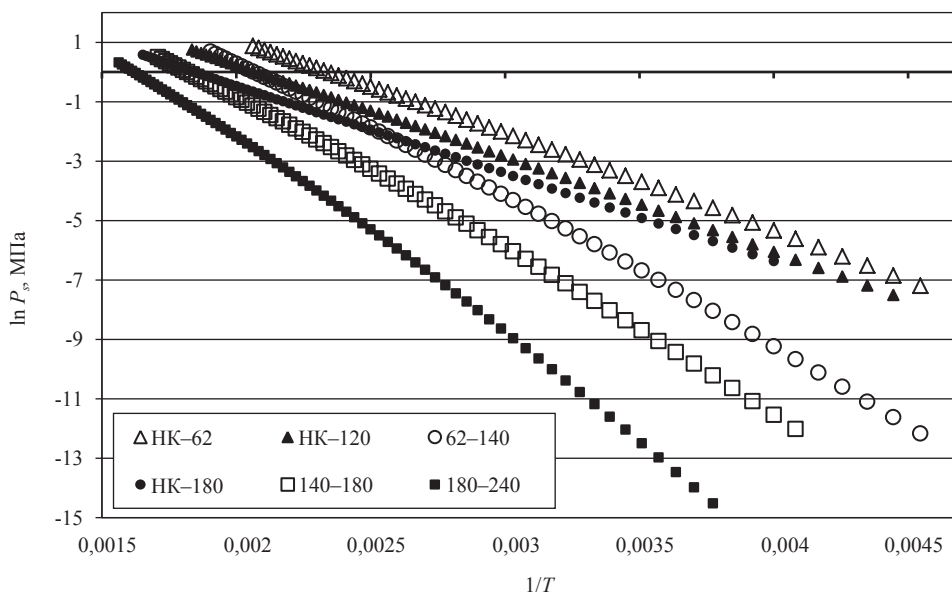


Рис. 2. Температурные зависимости давления насыщенных паров фракций Мангышлакской нефти

Информация о погрешности рассчитанных значений давления насыщенных паров для газовых конденсатов получена при сопоставлении с данными, приведенными в монографии [2] (табл. 4).

Таблица 4

Значения критериев погрешности расчета давления насыщенных паров для газовых конденсатов в диапазоне приведенных температур $0,25 \leq t \leq 0,6$

Месторождение	<i>ADD</i> , %	<i>Bias</i> · 10 ² , МПа	<i>RMS</i> , %	<i>A/R</i> · 10 ² , МПа
Астраханское	0,87	0,75	0,25	0,75
Карачаганакское	0,23	-0,17	0,06	0,17
Уренгойское	0,49	-0,33	0,16	0,33
Шурган	0,66	-0,23	0,27	0,23

Данные о поверхностном натяжении нефтяных фракций в литературе практически отсутствуют. В рамках реализации модели SP-QSPR для расчета поверхностного натяжения фракций нефти достаточно располагать исходной информацией, приведенной в табл. 1. Для этого необходимо воспользоваться одним из предложенных авторами уравнений, которые устанавливают связь изингового значения парахора [P_c] с мольным объемом при различных температурах:

$$[P_c] = 1,944 \cdot V_{nb}; \tag{29}$$

$$[P_c] = 3,027 \cdot V_0; \tag{30}$$

$$[P_c] = 0,768 \cdot \bar{V}_c, \tag{31}$$

где V_{nb} – мольный объем при температуре нормального кипения; V_0 – мольный объем переохлажденной до $T = 0$ К жидкости; \bar{V}_c – псевдокритический мольный объем.

С учетом погрешности определения мольного объема фракций нефти вполне определенные преимущества имеет соотношение (29), поскольку значения V_0 и \bar{V}_c получены экстраполяцией уравнения (4) на значения температур $T = 0$ К и $T = \bar{T}_c$.

Полученная информация об изинговом парахоре позволяет рассчитать значение единственного коэффициента в уравнении (2) – критической амплитуды для поверхностного натяжения:

$$\sigma_0 = \left(\frac{[P_c] \cdot \rho_0}{M} \right)^{\mu/\beta} \quad (32)$$

Температурные зависимости поверхностного натяжения фракций Мангышлакской нефти представлены на рис. 3.

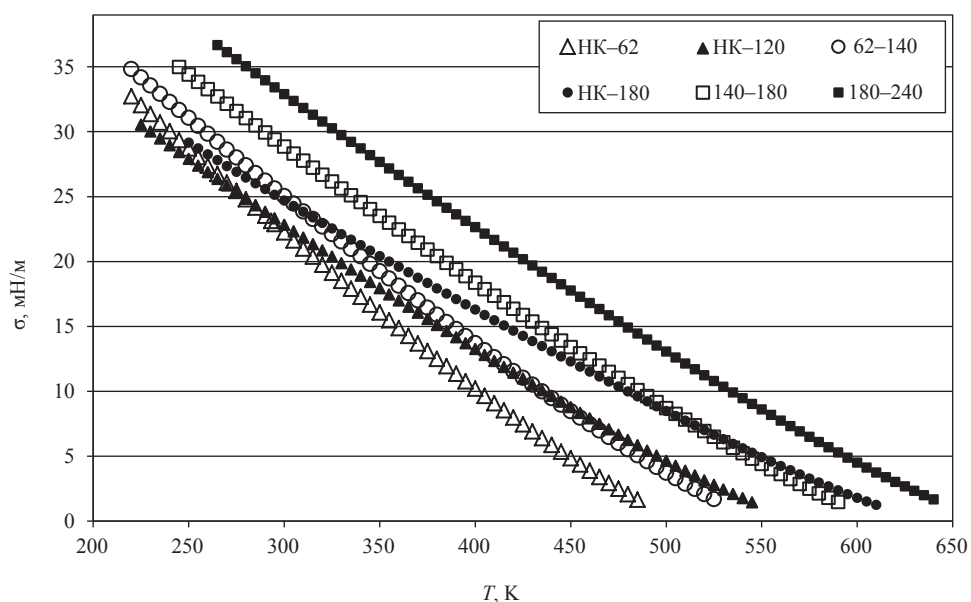


Рис. 3. Температурные зависимости поверхностного натяжения фракций Мангышлакской нефти

В табл. 5 отражены значения критериев погрешности расчета поверхностного натяжения фракций Мангышлакской нефти в сопоставлении с данными, приведенными в монографии [1].

Таблица 5

Значения критериев погрешности расчета поверхностного натяжения фракций Мангышлакской нефти в диапазоне приведенных температур $0,1 \leq t \leq 0,55$

Диапазон выкипания, °С	<i>Bias</i> , мН/м	<i>RMS</i> , %	<i>AVR</i> , мН/м
НК-62	-3,57	2,86	3,57
НК-120	-1,43	1,07	1,43
62-140	-2,51	1,74	2,51
НК-180	-1,42	1,04	1,42
140-180	-2,91	1,72	2,91
180-240	-4,32	2,22	4,32

Выполненный анализ показывает, что данные о динамической вязкости жидкостей, рассчитанные в широком интервале температур по представленным в литературе методам прогнозирования, обладают высокой погрешностью [1–5] вследствие нескольких причин, объясняющих низкое качество предложенных корреляций:

- в широком интервале температур значения вязкости жидкостей изменяются на несколько порядков;

• узкий интервал температур, в котором вязкость проявляет автомодельность, объясняется ростом влияния ориентационных эффектов в жидкой фазе при приведенных температурах $t \geq 0,4$ [12].

С другой стороны, при изучении вязкости нефтей нет технических проблем измерения вязкости при температурах ниже средней объемной температуры кипения T_{bv} . Поэтому ограниченные экспериментальные данные о вязкости фракций нефти в узком интервале температур могут быть получены сравнительно легко. При этом остается проблема выбора малокоэффициентных уравнений для расчета вязкости нефтей и их фракций на линии кипения в широком интервале параметров.

В рамках реализации модели SP-QSPR для прогнозирования вязкости фракций нефти авторы рекомендуют использовать предложенную в работе [12] корреляцию:

$$\frac{1}{\eta} = a_{\eta} (V - Or)^{b_{\eta}}, \quad (33)$$

где a_{η} и b_{η} – эмпирические коэффициенты, определяемые по экспериментальным данным; Or – ортохор (мольный объем жидкости при температуре кристаллизации). Его значение может быть рассчитано в рамках модели SP-QSPR с использованием зависимостей между структурно-аддитивными термодинамическими функциями и комплексами [6]:

$$Or = 0,788 \cdot V_{nb}; \quad (34)$$

$$Or = 1,227 \cdot V_0; \quad (35)$$

$$Or = 0,4053 \cdot [P_c]; \quad (36)$$

$$Or = 0,3113 \cdot V_c; \quad (37)$$

$$\text{где } V_0 = \frac{M}{\rho_0}. \quad (38)$$

Два оставшихся в уравнении (33) неизвестных коэффициента a_{η} и b_{η} можно определить по зависимостям (39) и (40), располагая эмпирической информацией о вязкости при двух температурах (например, при T_{293} и температуре нормального кипения T_{nb}):

$$a_{\eta} = \exp\left(\frac{\ln(V_2 - Or) \cdot \ln \eta_1 - \ln(V_1 - Or) \cdot \ln \eta_2}{\ln(V_1 - Or) - \ln(V_2 - Or)}\right); \quad (40)$$

$$b_{\eta} = \frac{\ln \eta_2 - \ln \eta_1}{\ln(V_1 - Or) - \ln(V_2 - Or)}. \quad (41)$$

Предложенную в работе [12] корреляцию рекомендуется применять в диапазоне приведенных температур $0,1 \leq t \leq 0,5$.

При анализе данной модели прогнозирования авторы не располагали необходимой исходной информацией для фракций Мангышлакской нефти. Поэтому указанная методика прогнозирования вязкости была протестирована на газовых конденсатах.

Информация о качестве рассчитанных значений вязкости для газовых конденсатов получена при сопоставлении с данными, приведенными в монографии [2] (табл. 6).

Таким образом, проведенная верификация предложенной методики прогнозирования вязкости газовых конденсатов показывает, что она может быть рекомендована при выполнении инженерных расчетов.

Полученные в результате прогнозирования теплофизических свойств фракций Мангышлакской нефти значения коэффициентов уравнений (1)–(6) приведены в табл. 7.

В статье рассмотрены возможности применения модели SP-QSPR для прогнозирования теплофизических свойств фракций Мангышлакской нефти в широкой области параметров состояния. Показано, что при вычислении различных теплофизических свойств веществ можно использовать такие конститутивные комплексы, как ортохор, значения изинго-

Таблица 6

Значения критериев погрешности расчета вязкости для газовых конденсатов в диапазоне приведенных температур $0,25 \leq t \leq 0,5$

Месторождение	<i>Bias</i> , мкПаc	<i>RMS</i> , %	<i>AVR</i> , мкПаc
Астраханское	9,4	2,7	18,6
Карачаганакское	4,5	1,9	15,3
Оренбургское	-0,1	0,9	9,1
Уренгойское	2,4	1,2	7,2
Шуртан	7,3	1,2	11,9

Таблица 7

**Значения коэффициентов уравнений (1)–(6) для рассмотренных фракций
Мангышлакской нефти**

Диапазон выкипания, °С	ρ_0	σ_0	α_R	b	B_1
НК–62	971,31	71,22	6,512	4,608	1,577
НК–120	1000,69	61,33	5,846	3,659	1,618
62–140	994,25	70,71	8,046	7,243	1,660
НК–180	1000,38	58,39	5,170	2,796	1,615
140–180	1003,95	70,86	7,876	6,946	1,668
180–240	988,52	73,91	8,660	8,666	1,702

вого парахора, мольный объем переохлажденной до $T = 0$ К жидкости, а также мольный критический объем. Наличие корреляций между конститутивными свойствами, критическими параметрами и амплитудами, открывает широкие возможности для прогнозирования тер-

модинамических свойств смесей углеводородов в широких интервалах параметров состояния. Применение предложенной методики целесообразно при оценке термодинамических свойств фракций нефти в условиях использования ограниченной эмпирической информации.

Список литературы

1. Григорьев Б.А. Теплофизические свойства нефти, нефтепродуктов, газовых конденсатов и их фракций / Б.А. Григорьев, Г.Ф. Богатов, А.А. Герасимов; под ред. Б.А. Григорьева. – М.: Изд. МЭИ, 1999. – 372 с.
2. Григорьев Б.А. Теплофизические свойства и фазовые равновесия газовых конденсатов и их фракций / Б.А. Григорьев, А.А. Герасимов, Г.А. Лапчак; под общ. ред. Б.А. Григорьева. – М.: Изд. дом МЭИ, 2007. – 344 с.
3. Методы расчета теплофизических свойств газов и жидкостей / ВНИПИНефть, Термодинамический Центр В/О «Нефтехим». – М.: Химия, 1974. – 248 с.
4. Рид Р. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд; пер. с англ. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
5. VDI Heat Atlas. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2010.
6. Железный В.П. Новые структурно-аддитивные методы прогнозирования теплофизических свойств углеводородов. Ч. 1: Прогнозирование псевдокритических параметров газовых конденсатов и их фракций / В.П. Железный, А.С. Маркварт; под ред. Б.А. Григорьева // Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов: сб. науч. ст. – М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2011. – Ч. 2. – С. 207–219.
7. Железный В.П. Новые структурно-аддитивные методы прогнозирования теплофизических свойств углеводородов. Ч. 2: Термодинамические свойства газовых конденсатов / В.П. Железный, А.С. Маркварт, Б.А. Григорьев; под ред. Б.А. Григорьева // Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов: сб. науч. ст. – М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2012. – С. 353–370.
8. Zhelezny V.P. The Temperature Dependence of Parachor / V.P. Zhelezny, Yu. V. Semenyuk, S.N. Ancherbak et al. // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2009. – Vol. 83 – № 2. – P. 182–186.
9. Zhelezny V.P. The Methods of Prediction of the Properties for Substances on the Coexistence Curve Including Vicinity of the Critical Point / S.J. Rzoska, V.P. Zhelezny // Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on Nonlinear Dielectric Phenomena in Complex Liquids. Jaszowiec-Ustron. – Poland, 2003. – P. 163–175.
10. Riazi M.R. Simplifi property prediction / M.R. Riazi, Th.E. Daubert // Hydrocarbon Processing. – 1980. – Vol. 59. – № 3. – P. 115–116.
11. Филиппов Л.П. Методы расчета и прогнозирования свойств веществ / Л.П. Филиппов. – М.: Изд-во МГУ, 1988. – 252 с.
12. Sechenniyh V.V. Predicting the Viscosity of Halogenated Alkane Mixtures at the Boiling Line / V.V. Sechenniyh, V.P. Zhelezny // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2010. – V. 84. – № 6. – P. 1079–1081.