

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу ЗАХАРОВА Степана Алексеевича «Алгоритмы расчета фазовых диаграмм флюидов на основе численной оптимизации», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника» в диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2).

Актуальность. Диссертационная работа Захарова С.А. посвящена совершенствованию современных методов расчета и моделирования фазового поведения углеводородов и углеводородных смесей. Это является важной теоретической задачей, имеющей практическую ценность. За последнее время разработано большое количество моделей жидкостей, позволяющих рассчитывать все типы жидких смесей. Среди указанных моделей наиболее применимыми на практике и теоретически обоснованными являются модели, основанные на фундаментальных уравнениях состояния. На сегодняшний день, в различных симуляторах для проектирования технологий разработки месторождений широко применяются модели Ван-дер-Ваальсового типа. Наряду с кубическими уравнениями набирает популярность и рассматривается как альтернатива им уравнения состояния на основе статистической теории ассоциированных жидкостей (SAFT).

В диссертационной работе Захарова С.А. разработаны и реализованы алгоритмы расчета двухфазного равновесия во флюидах в изохорно-изотермической постановке. Исследованы численные проблемы и выполнен сравнительный анализ точности двух уравнений состояния из разных семейств - кубическое уравнение состояния А.И. Брусилковского и Critical Point Perturbed Chain SAFT И. Полищука (CP-PC-SAFT). Целями диссертационной работы Захарова С.А. являются разработка и валидация методов изохорно-изотермических расчетов фазового равновесия, сравнение точности моделей флюида в предсказании термодинамических параметров смесей в фазовом равновесии. Полученные в диссертационной работе методы решения задачи двухфазного равновесия позволяют проводить, с одной стороны, самостоятельные термодинамические исследования, и, с другой, решать возникающую термодинамическую подзадачу в композиционной изотермической модели течения флюидов в пористой среде. В связи с вышесказанным тема диссертационной работы Захарова С.А. является, несомненно, актуальной.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положением, диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника, в части пункта 2 - Исследование и разработка рекомендаций по повышению качества и улучшению теплофизических свойств веществ в жидком, твердом (кристаллическом и аморфном) состояниях для последующего использования в народном хозяйстве.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из шести глав, включая обзор литературы, заключения, списков сокращений, литературы, рисунков и таблиц. Полный объем диссертации составляет 124 страницы, включая 29 рисунков, 10 таблиц и одно приложение. Список литературы содержит 69 наименований.

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в диссертационной работе, формулируются цели и задачи работы, излагается научная новизна, обоснованы теоретическая и практическая значимости работы, представлены выносимые на защиту положения.

В первой главе представлен обзор литературы, относящейся к теме диссертации. Приведен обзор алгоритмов и методов решения задачи фазового равновесия в смесях в изобарно-изотермической и изохорно-изотермической постановках, описание кубического и SAFT семейств уравнений состояния, классификация методов численной оптимизации.

Во второй главе представлен численный метод решения задачи ограниченной оптимизации, используемый для решения задачи изохорно-изотермического фазового равновесия. Последовательно излагаются выбор направления спуска, алгоритм метода оптимизации и метод поиска вдоль направления, учитывающий ограничения оптимизации.

В третьей главе приведено описание используемых в работе уравнений состояния. В диссертации используются кубическое уравнение состояния А.И. Брусилковского и Critical Point Perturbed Chain SAFT И. Полищука (CP-PC-SAFT). Представлены выражения уравнений состояния для случаев чистого вещества и смесей. Для кубического уравнения состояния получен аналитический вид свободной энергии Гельмгольца, для уравнения состояния CP-PC-SAFT необходимые производные величины предлагается определять с помощью автоматического дифференцирования.

Четвертая глава посвящена задаче проверки термодинамической устойчивости однофазного состояния флюида. Последовательно излагаются постановка задачи в виде ограниченной оптимизации, замена основных переменных, алгоритм решения, результаты расчетов бинодалей нескольких смесей и анализ быстродействия и отказоустойчивости алгоритма решения. Расчеты бинодалей и оценки положения критических точек проведены для шести смесей, встречающихся в литературе и содержащих от одного до семи компонентов. По результатам анализа быстродействия и отказоустойчивости алгоритма решения по входным данным предлагается решать задачу с заменой переменных. Кроме того, обосновывается возможность решения задачи без вычисления вторых производных свободной энергии Гельмгольца.

Пятая глава посвящена задаче расчета двухфазного равновесия в флюидах. Задача решается из начального приближения, получаемого в проверке термодинамической устойчивости. Приводится постановка задачи в виде ограниченной оптимизации, алгоритм расчета, результаты расчетов двухфазного равновесия, анализ быстродействия и отказоустойчивости алгоритма фазового расслоения и эффективность параллельного расчета фазовых диаграмм. Результаты расчетов фазового равновесия для нескольких смесей согласуются с расчетами из литературы по вычислительной термодинамике. На примере расчетов для углекислого газа продемонстрирована возможность отличать в расчете состояния насыщенного пара от насыщенной жидкости. На примере смеси из семи компонентов продемонстрировано предсказание ретроградной конденсации обоими уравнениями состояния. В полном расчете двухфазного равновесия наблюдаются отказы на входных данных, доля отказов от общего числа расчетов не превышает 0.32%. Для параллельного расчета фазовой диаграммы приводятся рекомендации по выбору числа потоков в зависимости от алгебраической сложности используемого уравнения состояния.

В шестой главе проводится сравнение результатов расчета фазового равновесия по уравнениям состояния с использованием разработанных алгоритмов и литературных данных. Рассчитаны давление насыщенных паров и плотности фаз на бинодали для десяти нормальных алканов, азота, сероводорода и углекислого газа. В графическом сравнении расчетов с данными референсного уравнения состояния показано, что уравнение состояния CP-PC-SAFT точнее предсказывает плотности фаз на бинодали, чем уравнение состояния А.И. Брусилковского. Проведены расчеты фазового равновесия 11 бинарных систем, составленных из веществ, упомянутых выше. Демонстрировано влияние парного коэффициента взаимодействия в уравнении состояния CP-PC-SAFT на точность расчета фазового равновесия. Из сравнения расчетов по уравнению состояния CP-PC-SAFT с экспериментальными данными приводятся рекомендации качественного характера для параметризации этого уравнения состояния. Показано, что уравнение состояния CP-PC-SAFT точнее предсказывает плотности сосуществующих фаз и при этом не менее точно предсказывает равновесные составы фаз, чем уравнение состояния А.И. Брусилковского.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Научная новизна работы. Широкое использование углеводородов и углеводородных смесей в промышленности настоятельно требует развития теоретических методов описания и прогнозирования их свойств в широкой области параметров состояния. Вышесказанное тесно связано с результатами, полученными в диссертации. В частности, разработан алгоритм расчета изохорно-изотермического двухфазного равновесия с общим подходом относительно уравнения состояния флюида. Впервые были унифицированы постановки задач проверки термодинамической устойчивости и фазового расслоения. Впервые создан алгоритм проверки термодинамической устойчивости однофазного состояния флюида в изохорно-изотермических условиях, не требующий обращения матрицы вторых производных. Для ряда бинарных смесей впервые про-

ведены расчеты по уравнению состояния CP-PC-SAFT и проведен сравнительный анализ точности расчетов с экспериментальными данными.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, подтверждается использованием фундаментальных положений термодинамики многокомпонентных систем, а также сравнением с надежными экспериментальными данными, полученными разными авторами и разными методами исследования, а также сопоставлением полученных результатов с результатами аналогичных исследований.

Практическая и научная значимость работы состоит в следующем:

1. Разработан алгоритм проверки термодинамической устойчивости, не требующий обращения матрицы вторых производных свободной энергии Гельмгольца, что позволяет проводить быстрые расчеты по алгебраически сложным уравнениям состояния.

2. Разработано программное обеспечение с открытым исходным кодом для изохорно-изотермических расчетов двухфазного равновесия, достаточно эффективное для использования в изотермической композиционной модели фильтрации без химических превращений. Разработанное автором программное обеспечение может быть использовано для расчетов фазового равновесия, проводимых в ФГБОУ ВО «Калининградский государственный технический университет», Институте проблем нефти и газа Российской академии наук (ИПНГ РАН), Российском государственном университете нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина (РГУ им. Губкина).

3. Проведен сравнительный анализ точности расчетов по кубическому и SAFT-уравнению состояния. Показана перспективность использования уравнения состояния CP-PC-SAFT для расчетов фазового равновесия. Полученные автором результаты могут быть использованы в ИПНГ РАН, РГУ им. Губкина.

4. Исследована численная обусловленность задачи расчета фазового равновесия в изохорно-изотермической постановке и применимость квазиньютоновских методов оптимизации для решения этой задачи. Полученные автором результаты могут быть использованы в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

5. Предложенные методы расчета термодинамических свойств природных углеводородных систем могут использоваться на практике в специализированном программном обеспечении, применяемом в нефтегазовой отрасли для моделирования свойств пластовых флюидов.

Апробация работы. Полученные Захаровым С.А. результаты исследования обсуждались и получили одобрение на 11 различных всероссийских и международных конференциях.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации опубликованы автором достаточно полно в 14 печатных изданиях, 3 из которых — статьи в журналах, рекомендованных ВАК, 11 — тезисы докладов.

Замечания. По содержанию работы Захарова С.А. имеются следующие вопросы и замечания:

1. При анализе и идентификации фазового состояния пластовых систем важную роль играет взаимное расположение характерных точек на пограничной кривой – критическая точка, крикондентерма и криконденбара. Насколько эффективно предложенный алгоритм позволяет определять значения параметров этих точек?
2. Природные углеводородные смеси зачастую контактируют в пласте с остаточной водой коллекторов и, как следствие, содержат в своем составе пары воды. Насколько эффективен, предлагаемый автором подход расчета фазовых равновесий для систем, содержащих воду?
3. Разработанный автором алгоритм и программное обеспечение тестировались на двух принципиально разных уравнениях состояния (УС) – кубические и SAFT. Однако в практике расчетов фазового равновесия широкое распространение получили многоконстантные УС (multiparameter equation of state). На базе таких УС разработана модель GERG-2004, которая является международным стандартом для расчета свойств природного газа. Модель интегрирована в широко известное программное обеспечение REFPROP. Поэтому возникает вопрос, как соотносится точность расчета по кубическим и SAFT - моделям на основе предлагаемого алгоритма с точностью расчета по модели GERG-2004? Возможно

