

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОПОНЕНТА

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 созданию и программной реализации алгоритмов расчета двухфазного равновесия в изохорно-изотермических условиях. Исследование также включает в себя анализ численных проблем, связанных с этой задачей, а также сравнительный анализ точности двух уравнений состояния из различных семейств. Основными целями диссертационной работы являются разработка и валидация методов расчета фазового равновесия в изохорно-изотермических условиях, а также 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. Расчеты фазового равновесия в нефтегазовой отрасли часто включают использование кубических уравнений состояния, но современные уравнения на основе статистической теории ассоциированных жидкостей (SAFT) становятся все более популярными. Методы, разработанные в диссертационной работе, применимы к задаче двухфазного равновесия для обоих семейств уравнений состояния. В частности, использовались кубическое уравнение состояния А.И. Брусилковского и Critical Point Perturbed Chain SAFT И. Полищука (CP-PC-SAFT) для расчетов фазового равновесия различных веществ и их смесей. Сравнительный анализ точности этих уравнений проведен на основе экспериментальных данных по фазовому равновесию в чистых веществах и бинарных смесях, что позволило выделить рекомендации для параметризации уравнения состояния CP-PC-SAFT. Полученные результаты показывают, что уравнение состояния CP-PC-SAFT более точно предсказывает плотности и составы фаз в равновесии по сравнению с уравнением состояния А.И. Брусилковского.

Выше сказанное позволяет сделать вывод о соответствии темы диссертации Захарова С.А. паспорту специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника» (физ.-мат. науки).

**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.

*Первая глава* имеет обзорный характер. В ней диссертант приводит обзор алгоритмов и методов решения задачи фазового равновесия в смесях в изобарно-изотермической и изохорно-изотермической постановках, краткое описание кубического и SAFT семейств уравнений состояния, а также классификацию методов численной оптимизации.

*Во второй главе* представлен численный метод решения задачи ограниченной оптимизации, который используется в Главах 4, 5 и 6 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. Брусиловского 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 определяются численно, с помощью автоматического дифференцирования.

Четвертая глава посвящена анализу проблемы, связанной с проверкой термодинамической устойчивости однофазного состояния флюида. В этой главе представлены шаги по постановке задачи в виде ограниченной оптимизации, замена основных переменных, описание алгоритма решения, анализ результатов расчетов бинодалей для нескольких смесей, а также изучение быстродействия и отказоустойчивости используемого алгоритма. Расчеты бинодалей и оценки положения критических точек выполнены для шести смесей с различным числом компонентов, описанных в литературе. Исходя из анализа быстродействия и отказоустойчивости, предлагается решать задачу в масштабированных переменных. Кроме того, обсуждается 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%. Исследуется параллельный расчет фазовой диаграммы и 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. Брусиловского. Проведены расчеты фазового равновесия 11 бинарных систем, составленных из веществ, упомянутых выше. Продemonстрировано 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. Брусиловского.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

**Научная новизна работы.** В диссертационной работе разработан алгоритм расчета изохорно-изотермического двухфазного равновесия, адаптированный для различных уравне-

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

**Практическая и научная значимость работы** состоит в следующем:

1. Разработан алгоритм для проверки термодинамической устойчивости, который не требует обращения матрицы вторых производных свободной энергии Гельмгольца. Это ускоряет расчеты для сложных алгебраических уравнений состояния из семейства SAFT.

2. Создано программное обеспечение с открытым исходным кодом для расчетов двухфазного равновесия при изохорных и изотермических условиях. Оно может быть эффективно использовано в изотермической композиционной модели фильтрации без химических превращений. Это программное обеспечение может быть применено для проведения расчетов фазового равновесия в центре добычи и переработки углеводородов Сколковского института науки и технологий, 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, используя кубическое и SAFT-уравнение состояния. Показана перспективность применения уравнения состояния CP-PC-SAFT для расчетов фазового равновесия. Полученные результаты могут быть внедрены в работу ИПНГ РАН и РГУ им. Губкина.

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

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на 11 международных и российских 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 замечания, которые фактически можно расценивать как рекомендации по дальнейшему развитию направления исследования:

1. В работе рассмотрены примеры расчетов фазового расслоения для многокомпонентных смесей (глава 5), но не приведено сравнение с экспериментальными данными и не дано пояснение относительно нарушения сортировки фаз для четырехкомпонентной смеси при некоторых диапазонах давления.

2. Кроссвалидация результатов расчетов параметров парожидкостного равновесия и их сравнение с экспериментальными данными представлены только для бинарных смесей (глава 6). Существенным преимуществом в демонстрации области применения разработанного алгоритма было бы рассмотрение углеводородных смесей с большим количеством компонентов, включая CO<sub>2</sub>. В случае трёхкомпонентных и более систем возможно образование равновесия «пар-жидкость-жидкость». Позволяет ли функционал разработанного алгоритма необходимую адаптацию для учета подобного поведения смесей?

Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Захарова С.А. Полученные в ней результаты и выводы обоснованы и достоверны, что подтверждается сравнением полученных результатов с крупным массивом доступных экспериментальных данных и с результатами аналогичных расчетов по другим теоретическим и вычислительным моделям, зарекомендованным в научном сообществе. Личный вклад Заха-

рова С.А. является определяющим, все основные результаты диссертации получены лично автором. **Автореферат и опубликованные работы** в полной мере отражают содержание диссертации.

Диссертация Захарова С.А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая удовлетворяет всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК № 842 от 24 сентября 2013 г. (ред. 07.06.2021 г.). Захаров Степан Алексеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника».

Отзыв составлен официальным оппонентом, старшим научным сотрудником Центра науки и технологий добычи углеводородов Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», Ph.D, Хакимовой Людмилой Асановной.

Официальный оппонент,  
Ph.D., старший научный сотрудник Центра  
науки и технологий добычи углеводородов  
Сколковского института науки и технологий  
121205, г. Москва, территория инновационного  
центра «Сколково», Большой бульвар, д.  
30 стр. 1.  
+7 (495) 280-14-81, L.Khakimova@skoltech.ru



Л.А. Хакимова

Руководитель отдела кадрового администрирования  
Сколковского института науки и технологий



О.С. Гук