

МИНИСТЕРСТВО
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

**«Национальный
исследовательский ядерный
университет «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)»**

Каширское шоссе, д.31, г. Москва, 115409
Тел. (499) 324-77-77, факс (499) 324-21-11
<http://www.mephi.ru>

04.12.2023 № 004-26/22

На № _____ от _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Первый проректор Федерального
государственного автономного
образовательного учреждения
высшего образования «Национальный
исследовательский ядерный
университет «МИФИ»

доктор физико-математических наук,
профессор



О.В. Нагорнов

«04» декабря 2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию 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

Диссертационная работа посвящена разработке и программной реализации алгоритмов расчета фазового равновесия флюидов в изохорно-изотермической постановке для моделирования фазового состава флюидов в композиционной модели фильтрации в газоконденсатных месторождениях с активным массовым обменом между фазами и сравнительному анализу применимости двух уравнений состояния, используемых в таких задачах. Целями диссертационной работы Захарова С.А. являются разработка и валидация методов изохорно-изотермических расчетов фазового равновесия, сравнение точности моделей уравнений состояния флюидов в предсказании термодинамических параметров смесей в фазовом равновесии.

Тема диссертационной работы является актуальной, т.к. при моделировании добычи в нефтегазоносных пластах используется предположение о равновесности протекающих термодинамических процессов. При решении задачи в рамках этой модели возникает изохорно-изотермическая задача фазового равновесия. Однако решение задачи в данной постановке мало исследовано. 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 фильтрации.

Кроме того, в расчетах фазового равновесия в нефтегазовой отрасли используются, как правило, кубические уравнения состояния. В последнее время применяется семейство уравнений состояний, основанное на статистической теории ассоциированных жидкостей (SAFT), которое можно рассматривать как альтернативу кубическим. Полученные в диссертационной работе методы позволяют решать задачу двухфазного равновесия для обоих указанных семейств уравнений состояния. В частности, автором используются кубическое уравнение состояния А.И. Брусилковского и Critical Point Perturbed Chain SAFT И. Полищука (CP-PC-SAFT) для расчетов фазового равновесия ряда нормальных алканов, азота, углекислого газа, сероводорода и их смесей. Автором проведен сравнительный анализ точности этих уравнений состояния на массиве экспериментальных данных по фазовому равновесию в чистых веществах и бинарных смесях. Были получены рекомендации для параметризации уравнения состояния CP-PC-SAFT. Показано, что уравнение состояния CP-PC-SAFT точнее уравнения состояния А.И. Брусилковского предсказывает плотности и составы фаз в равновесии.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из шести глав, включая обзор литературы, заключения, списков сокращений, литературы, рисунков и таблиц. Полный объём 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 флюидов. 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 конденсации обоими уравнениями состояния. В полном расчете двухфазного равновесия наблюдаются отказы на входных данных, но доля отказов от общего числа расчетов не превышает 0.32%. Для расчета фазовых диаграмм с распараллеливанием 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. Продемонстрировано 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 для параметризации этого уравнения состояния. Показано, что уравнение состояния CP-PC-SAFT точнее предсказывает плотности сосуществующих фаз и равновесные составы фаз, чем уравнение состояния А.И. Брусилковского.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Научная новизна работы. В диссертационной работе 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 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 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 НИЯУ МИФИ, 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.

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:

1. В Заключение п.3 написано, что, разработанные в диссертации методы и алгоритмы, работают с произвольным уравнением состояния без указания конкретных типов уравнений состояния. Работоспособность разработанных методов и алгоритмов не подтверждена для потенциальных уравнений типа Ленарда-Джонса, Морзе или уравнений состояния Грюнайзена.
2. Нет информации о проверке и применимости алгоритма расчета фазовых диаграмм для уравнений состояния, дающих разрывы термодинамических потенциалов или их производных или имеющих другие запрещенные области на термодинамических диаграммах.
3. Выбор изохорно-изотермической (V, T, c_i) задачи (V - объем, T -температура, c_i – концентрация) для расчетов фазового равновесия недостаточно обоснован для моделирования фильтрационных течений в пористой среде применительно к добыче углеводородов из природных месторождений [диссертация Афанасьева А.А. 2016 г.]
4. В Главе 5 не конкретизированы условия, по которым оценивались критические параметры системы.
5. В диссертации есть опечатки, например стр. 8, 93. Используются некоторые термины, отличающиеся от общепринятых, например, «сверхсжимаемость» (стр. 34, 54, 55, 78) вместо фактора сжимаемости, «размер фазы» вместо максимальной плотности вещества, разрешенной уравнением состояния (стр. 20, 36, 46).

Отмеченные замечания не влияют на общую положительную оценку рассматриваемой диссертации. Полученные в ней результаты и выводы обоснованы и достоверны, что подтверждается сравнением полученных результатов с массивом доступных экспериментальных данных и с результатами аналогичных расчетов по другим вычислительным моделям, зарекомендованным в научном сообществе. Личный вклад Захарова С.А. является определяющим, все основные результаты диссертации получены лично автором. Автореферат и опубликованные работы в полной мере отражают содержание диссертации.

Заключение.

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.). Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации, которое соответствует паспорту научной специальности 1.3.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника». Захаров Степан Алексеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 — «Теплофизика и теоретическая теплотехника».

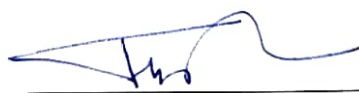
Диссертация соискателя рассмотрена на научном семинаре кафедры химической физики Института лазерных и плазменных технологий (ЛаПлаз) НИЯУ МИФИ 13.11.2023 г. Отзыв был одобрен по результатам голосования участников заседания: «за» – 8 чел., «против» – 0 чел., «воздержался» – 0 чел.

Отзыв подготовил заведующий
кафедрой химической физики института
лазерных и плазменных технологий
НИЯУ МИФИ

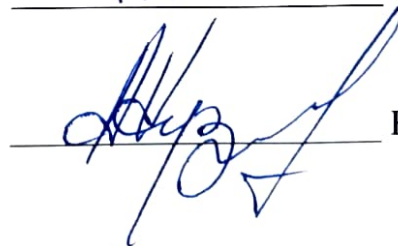
д. ф.-м. н., профессор
Тел. +7 (495) 788 56 99, доб. 9035
sagubin@mephi.ru

Директор института лазерных и
плазменных технологий НИЯУ МИФИ
д. ф.-м. н., профессор

Председатель совета по аттестации и
подготовке научно-педагогических
кадров НИЯУ МИФИ
д. ф.-м. н., профессор



Губин С.А.



Кузнецов А.П.



Кудряшов Н.А.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31

Телефон: +7 495 788-5699, +7 499 324-7777

Сайт: [https:// mephi.ru/](https://mephi.ru/)

e-mail: info@mephi.r