

© И. Г. ЗАХАРОВА, И. Э. МАЩИЦКИЙ

Тюменский государственный университет  
izaharova@utmn.ru, MaschitskiyIE@tngg.ru

УДК 622.276

**МЕТОД РАСЧЕТА ДИСКРЕТНЫХ ФУНКЦИЙ  
ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ  
УГЛЕВОДОРОДНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ  
КУБИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ**

**COMPUTATIONAL METHOD OF DISCRETE  
FUNCTIONS FOR PHASE DIAGRAMS  
OF MULTICOMPONENT HYDROCARBON SYSTEMS  
BASED ON CUBIC EQUATIONS OF STATE**

*В статье предлагается метод расчета дискретных функций фазовых диаграмм типа «жидкость-газ» многокомпонентных углеводородных систем на поле «температура-давление». Главным средством расчета служит стандартный алгоритм моделирования сепарации на основе кубического уравнения состояния. Дается описание специального геометрического подхода к организации вычислений целевой функции, позволяющего эффективно использовать современные многопроцессорные ЭВМ и получать результаты высокой степени детализации, практически не требующие дальнейшей математической обработки. Приводится конкретная алгоритмическая реализация данного подхода, а также результаты его применения к построению фазовых диаграмм реальных углеводородных флюидов, извлеченных на месторождениях Тюменской области. Производительность предлагаемого метода оценивается посредством вычислительного эксперимента в сравнении с методом, реализующим концепцию строгой последовательности вычислений. Статья представляет интерес для специалистов нефтедобывающей химии и инженеров, занимающихся вопросами моделирования и расчета фазовых равновесий в химической технологии.*

*The computational method of discrete functions for “liquid-gas”-type phase diagrams of multicomponent hydrocarbon systems is introduced in the paper. The main calculation tool is the standard algorithm of separation modeling based on the cubic equation-of-state. The special geometric approach for the organization of target function calculation, which allows modern multi-processor computers to be efficiently used and highly detailed results to be received without needs in further math processing, is described. The specific algorithm for the implementation of this approach, as well as the results of its implementation to the construction of phase diagrams of hydrocarbon fluids extracted at the fields of Tyumen region are given. The efficiency of the offered*

*method is evaluated by computing experiment in comparison with the method that realizes the concept of strict-sequence calculations. The paper is of interest for chemical engineering experts who are engaged in modeling and calculation of phase equilibria in the chemical technology.*

*КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА. Фазовая диаграмма, природные углеводороды, численные методы, программная реализация.*

*KEY WORDS. Phase diagram, natural hydrocarbons, numerical methods, software implementation.*

### **Введение**

Для повышения качества проектирования и эксплуатации нефтяных и газоконденсатных месторождений, определения оптимальных условий промышленной обработки, транспортировки и заводской переработки добываемого сырья нефтегазовой отрасли требуются точные и низкокзатратные методы описания фазового поведения углеводородных систем. Тема разработки таких методов до сих пор весьма актуальна [4, 6, 9].

Эмпирический подход к описанию фазового равновесия углеводородных систем подразумевает построение изобар и/или изотерм посредством ряда экспериментов на PVT-установке [7]. Безусловно, результаты, полученные таким образом, обладают высокой степенью точности, однако обширные требования к материальному обеспечению и значительные временные затраты, необходимые на подготовку и проведение экспериментов, нивелируют этот способ в качестве основного для комплексного описания фазового равновесия углеводородов. В связи с этим возникает потребность в расчетном методе: во-первых, для своевременной актуализации управления технологическими процессами на месторождениях, а во-вторых, для статистической обработки ранее полученной информации об углеводородных системах.

В настоящей статье предлагается численный метод, позволяющий на поле «температура-давление» рассчитывать дискретные функции фазовых диаграмм типа «жидкость-газ» многокомпонентных углеводородных систем по данным об их составе и физико-химических характеристиках. Наиболее приоритетной при разработке метода являлась задача реализации расчета целевой функции в распараллеленном режиме.

*Расчет фазового равновесия.* Основой для аналитических методов построения фазовых диаграмм служит алгоритм расчета фазового равновесия (также именуется в научной литературе алгоритмом моделирования сепарации и, в случае системы «жидкость-газ», алгоритмом расчета парожидкостного равновесия), возвращающий значения долей фаз системы для заданных термобарических условий. Существует множество вариантов таких алгоритмов [2], однако наиболее перспективным направлением в этой сфере является расчет фазового равновесия на основе уравнений состояния, в частности, кубических, представляющих собой модификации уравнения Ван-дер-Ваальса [1]. Такая тенденция обусловлена не только аутентичностью моделей, получаемых с помощью уравнений состояния, но и универсальностью и относительной простотой реализации соответствующих алгоритмов. Поскольку алгоритм расчета парожидкостного равновесия для всех уравнений Ван-дер-Ваальсового типа имеет один и тот же вид, а сами эти уравнения достаточно многочисленны и досто-

верны в областях своего применения [5], было решено использовать именно его в ядре математического аппарата предлагаемого метода.

*Входные данные.* Для проведения расчетов потребуются компонентный состав (возможно формирование псевдокомпонентов по различным критериям), а также покомпонентное (пофракционное) описание таких физико-химических свойств, как дифференциальная и молекулярная массы, ацентрический фактор, критические температура и давление.

#### Обозначения и умолчания

ФД — фазовая диаграмма.

Базовые точки — точки на плоскости «температура-давление», ограничивающие по температуре двухфазную область при фиксированном малом давлении; принадлежат фазовой диаграмме.

$T$  — текущая температура,  $P$  — текущее давление.

Моделирование сепарации — вычисление мольной доли  $W$  газа всего состава при текущих термобарических условиях ( $T, P$ ). В опытных реализациях описываемых методов был использован алгоритм на основе уравнения состояния Пенга-Робинсона [10].

Метод бисекции (метод срединного отрезка) — численный метод решения нелинейных уравнений [3].

Единицей температуры служит Кельвин, давления — физическая атмосфера.

Под равенством подразумевается отклонение на заданную малую величину.

*Базовые точки.* Идентификация базовых точек дает первичное представление о положении двухфазной области фазовой диаграммы. Алгоритм расчета базовых точек представлен ниже (рис. 1):

- 1) задается произвольное малое начальное давление  $P_c$ , минимальная критическая температура  $T_p$ , максимальная критическая температура  $T_r$  и шаг по температуре  $T_{st}$ . Для текущей температуры  $T$  устанавливается значение  $T_i$ , для текущего давления —  $P_c$ ;
- 2) последовательно текущая температура  $T$  увеличивается на  $T_{st}$ , и моделируется сепарация в точке  $(T, P)$ ;
- 3) пункт (2) повторяется до тех пор, пока вычисляемая с помощью моделирования сепарации мольная доля  $W$  находится вне интервала  $(0,1)$ , т. е. пока не будет достигнута двухфазная область;
- 4) методом бисекции между точками  $(T - T_{st}, P_c)$  и  $(T, P_c)$  определяется первая базовая точка;
- 5) методом бисекции между точками  $(T, P_c)$  и  $(T_r, P_c)$  определяется вторая базовая точка.

Последние два пункта алгоритма независимы, следовательно, могут быть выполнены параллельно.

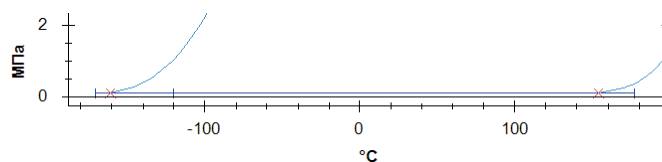


Рис. 1. Синими отрезками выделены шаги поиска, красными маркерами — найденные базовые точки

### Расчет фазовой диаграммы

Отрезок между базовыми точками разбивается точкой  $(T_C, P_C)$  в произвольном соотношении (в ходе вычислительных экспериментов было установлено, что соотношение 4:1 применимо для большинства исследуемых систем). В зависимости от требований к детализации конечного результата (запрашиваемое количество точек дискретной функции), из обозначенной точки опускается  $N$  лучей. Угол отклонения от положительного направления оси  $X$  каждого луча определяется распределением Гаусса, нормированным по  $\pi$ . Затем на всех лучах по отдельности производятся следующие операции (рис. 2):

- 1) задается радиус шага на луче  $R_{st}$ ;
- 2) на луче от точки  $(T_C, P_C)$  с шагом  $R_{st}$  последовательно откладывается точка  $(T_R, P_R)$ , и в ней моделируется сепарация;
- 3) действия пункта 2 повторяются до тех пор, пока вычисляемое значение мольной доли  $W$  находится в интервале  $(0,1)$ , т. е. пока не будет достигнута однофазная область;
- 4) методом бисекции между точкой  $(T_R, P_R)$  и последней точкой в двухфазной области вычисляется точка дискретной функции фазовой диаграммы.

Следует заметить, что лучей может быть неограниченно много, и расчеты по каждому из них независимы друг от друга.

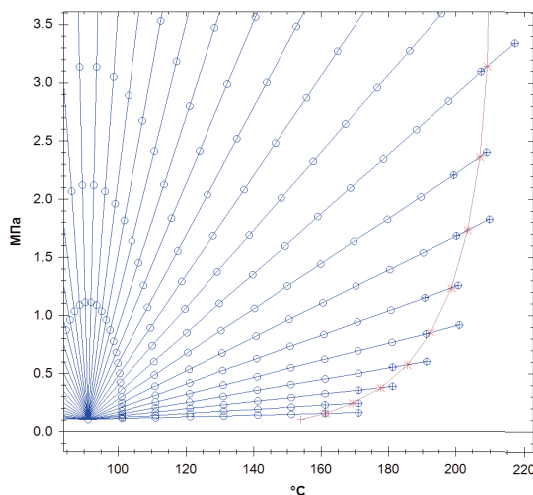


Рис. 2. Часть рассчитанной фазовой диаграммы пластового флюида. Шаги по лучам обозначены синими маркерами, границы поиска точек ФД — перечеркнутыми синими маркерами, искомые точки — красными.

### Применение метода

Изложенный метод расчета был реализован в программном продукте HCSPD [8] и опробован для построения фазовых диаграмм различных составов, добываемых на месторождениях Тюменской области. На всех последующих рисунках представлены линейно интерполированные дискретные функции фазовых диаграмм, содержащие по 100 точек каждая.

Как можно заметить, фазовая диаграмма относительно «тяжелого» флюида Ачимовского типа (рис. 3) имеет искривление в критической области, что связано с ограничением уравнения состояния, используемого программой в отношении плотности узких фракций системы. Для получения наиболее достоверных данных о фазовом поведении такого флюида следует использовать другое уравнение состояния, однако представленный случай иллюстрирует, что пробелы в целевой дискретной функции, вызванные несовершенством моделирования сепарации, иногда могут быть исключены (пусть и с меньшей точностью) методом бисекции.

Фазовые диаграммы менее «тяжелых» систем природных углеводородов Валанжинского типа (рис. 4, 5) рассчитываются без явных отклонений.

*Вычислительный эксперимент.* Цель — продемонстрировать преимущество предлагаемого метода, с точки зрения быстродействия, над методом, не предусматривающим распараллеливание. Объектами эксперимента послужили две программы:

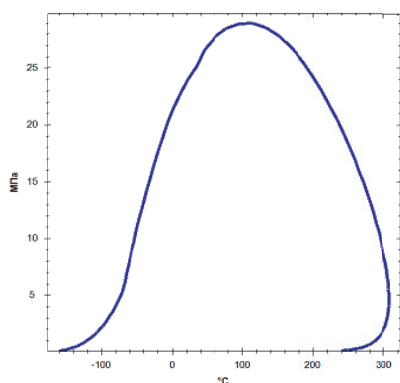


Рис. 3. Фазовая диаграмма пластового флюида Ачимовского типа

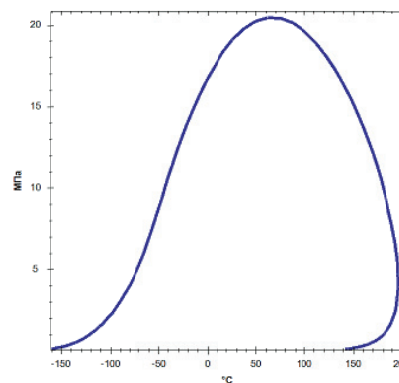


Рис. 4. Фазовая диаграмма пластового флюида Валанжинского типа

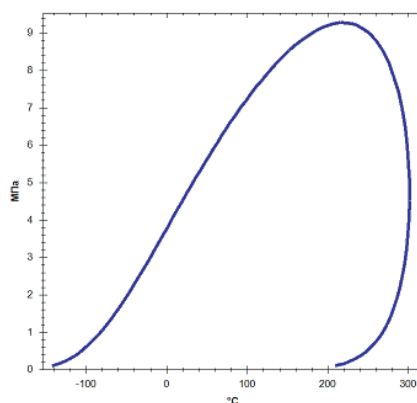


Рис. 5. Фазовая диаграмма нестабильного конденсата, полученного из флюида Валанжинского типа

1) HCSPD — использует предлагаемый метод и реализует возможности параллельного выполнения заложенных в него алгоритмов в зависимости от кратности ядер процессора исполняющей ЭВМ;

2) программа (здесь и далее используется условное название Phase Diagram), которая использует метод, связывающий расчет каждой точки целевой дискретной функции друг с другом и, тем самым, исключающий распараллеливание; ранее программа использовалась в некоторых проектных организациях.

Обе программы были настроены на расчет сопоставимого числа точек целевой дискретной функции. Эксперимент производился в системе под управлением ОС Microsoft Windows 7 (x64) на 4-ядерном процессоре Intel Xeon CPU E3-1240 3.30GHz. В каждую программу загружалось по четыре углеводородных системы трех разных типов (пластовый флюид, нестабильный конденсат, газ сепарации).

В таблице 1 представлены результаты эксперимента по сопоставлению времени расчетов HCSPD и Phase Diagram.

Таблица 1

## Анализ снижения временных затрат HCSPD

Проба	Время выполнения (с)		Снижение временных затрат (%)
	Phase Diagram	HCSPD	
Пластовый флюид 1	77.55	9.72	-87.47
Пластовый флюид 2	62.70	17.81	-71.59
Пластовый флюид 3	29.64	14.93	-49.63
Пластовый флюид 4	24.16	8.96	-62.91
Нестабильный конденсат 1	27.62	6.39	-76.86
Нестабильный конденсат 2	21.19	3.11	-85.32
Нестабильный конденсат 3	28.76	4.19	-85.43
Нестабильный конденсат 4	22.03	5.94	-73.04
Газ сепарации 1	9.16	0.84	-90.83
Газ сепарации 2	9.17	1.18	-87.13
Газ сепарации 3	13.38	1.37	-89.76
Газ сепарации 4	18.44	2.17	-88.23
Среднее снижение временных затрат			-79.01

Сопоставление времени расчетов свидетельствует о почти пятикратном среднем снижении временных затрат при использовании HCSPD. Таким образом, цель эксперимента достигнута.

*Замечания.* Представленный в статье метод пригоден только для выделения областей термобарических условий двухфазного состояния. Расчет границ об-

ластей с определенным содержанием жидкой или газовой фазы многокомпонентных углеводородных систем с помощью метода невозможен ввиду характерных для этих систем явлений — ретроградных кипения-конденсации. Исследования по данной проблеме уже ведутся: изучаются и разрабатываются способы построения изоплер — линий на плоскости «температура-давление», точки которых соответствуют условиям содержания в системе заданного значения одной из фаз.

Производительность упомянутой выше программы HCSPD может быть еще больше увеличена с помощью технологий расчета на базе графических процессоров, например, CUDA.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брилл Дж. П. Многофазный поток в скважинах / Дж. П. Брилл, Х. Мукерджи; пер. с англ. Ю. В. Русских; под ред. М. Н. Кравченко. М. — Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. 384 с.
2. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке нефти и газа / А. И. Брусиловский. М.: Грааль, 2002. 575 с.
3. Вержбицкий, В. М. Основы численных методов: учебник для вузов / В. М. Вержбицкий. Москва: Высшая школа, 2002. 840 с.
4. Григорьев Б. А. Теплофизические свойства и фазовые равновесия газовых конденсатов и их фракций / Б. А. Григорьев, А. А. Герасимов, Г. А. Ланчаков; под общ. ред. Б. А. Григорьева. Москва: МЭИ, 2007. 344 с.
5. Гуревич Г. Р. Справочное пособие по расчету фазового состояния и свойств газоконденсатных смесей / Г. Р. Гуревич, А. И. Брусиловский. М.: Недра, 1984. 264 с.
6. Лапшин В. И. Фазовые превращения углеводородных нефтегазоконденсатных систем / В. И. Лапшин, А. Н. Волков, А. А. Константинов // Вести газовой науки. 2014. № 2. С. 121-128.
7. Люгай Д. В. Совершенствование методик экспериментального изучения фазовых превращений газоконденсатных систем / Д. В. Люгай, В. И. Лапшин, А. Н. Волков, И. М. Шафиев // Вести газовой науки. 2011. № 1. С. 103-119.
8. Машицкий И. Э. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014616892 «Программа для построения фазовой диаграммы и изолиний массового процента газа углеводородных флюидов (HCSPD)»
9. Фаловский В. И. Современный подход к моделированию фазовых превращений углеводородных систем с помощью уравнения состояния Пенга-Робинсона / В. И. Фаловский, А. С. Хорошев, В. Г. Шахов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2011. № 4-1. С. 120-125.
10. Peng, D. Y. A new two-constant equation of state / D. Y. Peng, D. B. Robinson // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1976. T. 15. Pp. 59-64.

#### REFERENCES

1. Brill J. P., Mukherjee H. *Mnogofaznyj potok v skvazhinah* [Multiphase Flow in the Wells] / Ju. V. Russkih (Transl. from English.), M. N. Kravchenko (Ed.). Moscow-Izhevsk: Institut komp'yuternyh issledovaniy [Institute of Computer Science], 2006. 384 p. (In Russian).
2. Brusilovsky A. I. *Fazovie prevrascheniya pri razrabotke nefiti i gaza* [Phase Transformations in Oil and Gas Development]. M.: Graal, 2002. 575 p. (In Russian)



3. Verzhbickiy V. M. Osnovi chislennih metodov: uchebnik dlya vuzov [Basics of Numerical Methods: Textbook for High Schools]. M.: Vysshaja shkola [Higher School], 2002. 840 p. (In Russian)
4. Grigor'ev B. A. Gerasimov A. A., Lanchakov G. A. Teplofizicheskie svoystva i fazovye ravnovesija gazovyh kondensatov i ih frakcij [Thermophysical Properties and Phase Equilibria of Gas Condensates and Fractions]. M.: MEI, 2007. 344 p. (In Russian)
5. Gurevich G. R., Brusilovskiy A. I. Spravochnoe posobie po raschetu fazovogo sostoyaniya i svoystv gazokondensatnih smesei [The Guidebook on Calculation of Phase State and Properties of Gas-condensate Mixtures]. M.: Nedra, 1984. 264 p. (In Russian)
6. Lapshin V. I., Volkov A. N., Konstantinov A. A. Fazovye prevrashhenija uglevodorodnyh neftegazokondensatnyh sistem [On the Problem of Classification of Stratal Fluids in Oil/Gas/Condensate Deposits] // Vesti gazovoy nauki [Actual Problems of Research of Stratal Hydrocarbon Systems]. M.: Gazprom VNIIGAZ, 2014. No 2 (18). Pp. 113-119. (In Russian)
7. Ljugaj D. V., Lapshin V. I., Volkov A. N., Shafiev I. M. Sovershenstvovanie metodik jeksperimental'nogo izuchenija fazovyh prevrashhenij gazokondensatnyh sistem [The Enhancement of Experimental Techniques for Gas-condensate Systems Studying] // Vesti gazovoy nauki [Actual Problems of Research of Stratal Hydrocarbon Systems]. M.: Gazprom VNIIGAZ, 2011. No 1. Pp. 103-119. (In Russian)
8. Maschitskiy I. E. Svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii programmy dlja JeVM № 2014616892 "Programma dlja postroenija fazovoj diagrammy i izolinij massovogo procenta gaza uglevodorodnyh fljuidov (HCSPD)" [Certificate of State Registration of Computer Program "The Program for Phase Diagram and Gas Mass Percent Isolines of Hydrocarbon Fluids Construction (HCSPD)" No 2014616892]. (In Russian)
9. Falovskij V. I. Horoshev A. S., Shahov V. G. Sovremennyj podhod k modelirovaniju fazovyh prevrashhenij uglevodorodnyh sistem s pomoshh'ju uravnenija sostojanija Penga-Robinsona [The Modern Approach to Phase Behavior Predictions of Hydrocarbon Systems by Means of the Peng-Robinson Equation of State] // Izvestija Samarskogo nauchnogo centra Rossijskoj akademii nauk [Proceedings of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences]. 2011. No 4-1. Pp. 120-125. (In Russian)
10. Peng D. Y., Robinson D. B. A new two-constant equation of state // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1976. Vol.15. Pp.59-64.

#### Авторы публикации

**Захарова Ирина Гелиевна** — доктор педагогических наук, профессор, заведующая кафедрой программного обеспечения Тюменского государственного университета

**Мащицкий Игорь Эдуардович** — аспирант Тюменского государственного университета

#### Authors of the publication

**Irina G. Zakharova** — Dr. Sci. (Ped.), Professor, Head of the Department of Software, Tyumen State University

**Igor E. Maschitskiy** — Postgraduate at the Tyumen State University