

УДК 519.8:544.77

## ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В НЕФТЯНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ

И. З. Мухаметзянов<sup>1</sup>, А. С. Шайхисламов<sup>1</sup>

Работа посвящена исследованию структурной организации макромолекулярных ассоциатов в нефтяных дисперсных системах. Исследование выполнено с использованием техники метода Монте-Карло и методов многомерного статистического анализа. Построена имитационная модель процессов агрегации-фрагментации в нефтяных дисперсных системах, описана программа, реализующая данную модель, и проведен вычислительный эксперимент.

**Ключевые слова:** нефтяные дисперсные системы, статистический анализ, имитационная модель, вычислительный эксперимент, метод Монте-Карло.

**Введение.** Современные представления о нефтяных системах основываются на следующих предельных случаях: истинные молекулярные растворы углеводородов и коллоидно-дисперсные системы [1]. Границы такой классификации являются размытыми и определяются как составом нефтяной системы, так и термодинамическими условиями, в которых рассматривается та или иная система. Дисперсные включения макромолекул при определенных условиях ассоциируют и образуют дисперсии микронных размеров. Структурообразующими элементами такой схемы являются макромолекулы. В нефтяных системах существуют несколько типов макромолекул, способных образовывать дисперсную фазу. Это — высокомолекулярные парафины, асфальтены и смолы.

При определенных термодинамических условиях макромолекулы взаимодействуют и образуют комплексы (ассоциаты, кластеры). Трудностью построения последовательной динамической теории сложных статистических систем является отсутствие достаточно полного знания о потенциалах взаимодействия структурообразующих частиц в веществе. Наиболее перспективным в настоящее время является имитационное моделирование эволюции дисперсной фазы и анализ структуры на основе агрегационных моделей. Реальные нефтяные системы можно моделировать как систему, состоящую из мелких и разветвленных кластеров, структурные характеристики которых рассчитываются статистическими методами [2, 3].

В настоящей работе решаются следующие задачи:

- построение имитационной модели структурообразования в нефтяных дисперсных системах (НДС);
- определение обобщенных параметров для идентификации кластерной системы;
- исследование влияния факторов модели на механизм структурообразования, численный эксперимент;
- постановка и реализация оптимального вычислительного эксперимента.

**1. Имитационная модель структурообразования в НДС.** Специфика математического описания агрегационных процессов в НДС состоит в необходимости учета: химических процессов (изменение состава структурообразующих элементов); изменения состава и свойств среды, в которой происходят процессы агрегации-фрагментации кластеров (изменение диффузионных механизмов); масштабного перераспределения кластеров в системе (иерархическое перераспределение структурных элементов); особенностей состава кластеров, состоящих из  $10^2 - 10^3$  “частиц” (трудности описания свойств кластерной системы).

В настоящее время в исследованиях используют следующие базовые имитационные модели роста кластеров: модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA) [4], модель кластер-кластерной агрегации (ССА) [5] и модель дендритного роста.

В качестве агрегационной модели использовалась гибридная модель DLA-ССА-агрегации, которая сочетается с кинетической моделью превращения групповых компонентов НДС. В настоящей работе реализована двумерная модель дисперсионно-ограниченной агрегации. Выбор двумерной модели связан с тем, что результаты по динамике и структуре образуемых кластеров в двумерном и трехмерном случаях совпадают [6].

Алгоритм агрегационной модели основан на методах Монте-Карло и состоит в следующем. В локальный объем случайным образом запускается большое количество частиц. Генерируются случайные блуждания частиц и моделируются столкновения, агрегирование и фрагментация кластеров с последующим

<sup>1</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет, кафедра математического моделирования, ул. Космонавтов, 1, 450062, г. Уфа; e-mail: mme@rusoil.net, ogbus@rusoil.net

вовлечением кластеров в процесс блуждания и агрегирования с возможностью образования кластерной сети. Такой алгоритм достаточно легко может быть реализован на компьютере.

При моделировании эволюции дисперсной фазы приняты следующие основные допущения:

1) структурообразующие элементы (частицы) являются однородными по размерам и природе;  
 2) существует минимальный размер частицы (ребро куба в решеточной модели или радиус в координатной модели); все остальные размеры вычисляются в единицах заданного размера; метрические характеристики частицы не имеют значения для расчета структуры кластеров;

3) размер локального объема определяется в единицах размера частицы;

4) идеализация взаимодействия частиц: взаимодействие происходит при “столкновениях”; агрегирование в кластер осуществляется заданием вероятности агрегирования; фрагментация кластеров осуществляется заданием вероятности фрагментации;

5) идеализация перемещения: скорости перемещения частиц и кластеров обратно пропорциональны их размерам; направление перемещения является случайным.

**2. Идентификация кластерной системы.** В соответствии с механизмом образования кластеров, рассмотренным выше, начальные этапы агрегирования приводят к системе малых кластеров с нормальным законом распределения. Для характеристики системы достаточно функции распределения кластеров по размерам. Структура же малых кластеров может быть описана линейными размерами. Например, в двумерном случае — это соотношение между двумя поперечными размерами кластера.

Последующее агрегирование приводит к росту в системе кластеров, состоящих из  $\sim 10^2 - 10^3$  частиц. Распределение по размерам для такой системы является мультимодальным. Теперь информация о системе содержится не только в функции распределения по размерам для частиц и кластеров, но и в структуре образованных кластеров, т.е. необходимо дополнить информацию о системе посредством введения параметра структуры образованных кластеров.

Предельное состояние агрегирования нефтяной системы — образование кластерной сети. Тогда вся информация о системе содержится в структуре кластера и может быть определена через параметр порядка структуры — фрактальную размерность.

Рассмотрим произвольную кластерную систему, полученную компьютерным моделированием в модели кластер-кластерной агрегации, в некоторый момент времени  $\tau$ . Такая система определяется множеством объектов (кластеров)  $Z = \{Z_1, Z_2, \dots, Z_n\}$ ; существует некоторое множество наблюдаемых показателей или характеристик объектов из  $Z$ . Таким образом, для множества объектов имеется множество векторов измерений, описывающее  $Z$ . Задача идентификации системы состоит в определении параметров, позволяющих однозначно (статистически) характеризовать всю систему объектов  $Z$ .

Применительно к нефтяным системам задача определяется изучением качественных и количественных зависимостей структурных соотношений в кластерах и выявлением характера влияния формы, размера и концентрации структурообразующих элементов на свойства нефтяных дисперсных систем:

$$\bar{U} \rightarrow Z_k \rightarrow S,$$

где  $\bar{U} = (u_1, u_2, \dots, u_r)$  — управляемые параметры модели;  $Z_k = Z_k(a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{pk})$  — множество кластеров со свойствами  $a_j = a_j(u_1, u_2, \dots, u_r)$ ;  $S = S(a_1, a_2, \dots, a_p)$  — характеристика системы в момент времени  $\tau$ .

В качестве частных параметров структуры, характеризующих кластеры, в работе были использованы следующие характеристики кластеров:  $a_1$  — плотность кластера;  $a_2$  — радиус вращения;  $a_3$  — среднее статистическое рассеяние;  $a_4$  — рассеяние относительно центра масс в  $l_1$ -метрике;  $a_5$  — рассеяние относительно центра масс в евклидовой метрике;  $a_6$  — полный периметр кластера;  $a_7$  — показатель фрактальной размерности.

Однородность частных свойств кластеров достигается нормированием по отношению к среднему значению данного параметра в группе кластеров, содержащих одинаковое число частиц для каждого фиксированного времени агрегирования  $\tau$ . Далее в формулах характеристики  $a_j$  являются нормированными и, следовательно, безразмерными.

Ни один из определенных выше параметров  $a_j$  в отдельности не отражает полностью свойства кластера. Применение же многомерного набора свойств кластеров  $(a_1, a_2, \dots, a_p)$  делает невозможным упорядочение и весьма затрудняет классификацию. Поэтому необходимо определить обобщенную характеристику кластерной системы, обладающую статистической различимостью по отношению к изменяемым факторам (управлению). В качестве таковой использовано статистическое рассеяние (структурный параметр),

определяемый по формуле

$$S_\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \rho(Z_i, Z_j) \quad \forall i < j,$$

где  $N$  — число кластеров;  $\rho(Z_i, Z_j)$  — метрика, определяющая “расстояние” между кластерами  $Z_i$  и  $Z_j$  [7].

Среднее рассеяние характеризует степень однородности кластерной системы. Данный показатель является неотрицательным; чем он меньше, тем однороднее система. В предельном случае  $S = 0$  система состоит из одинаковых кластеров. Среднее рассеяние дополняет параметр энтропии при  $x = a_2$ :

$$H = - \int_D f(a_2) \ln [f(a_2)] da_2.$$

Здесь  $f(a_2)$  — распределение кластеров по радиусу вращения. Энтропия является характеристикой меры информации, доставляемой определенной кластерной системой [8].

Выбор той или иной меры  $\rho$  (естественная метрика для рассматриваемой системы) определяется спецификой конкретной системы и критерием качества параметра  $S_\rho$ . Возможными метриками могут служить типичные геометрические метрики  $\rho_1(Z_i, Z_j)$  и  $\rho_2(Z_i, Z_j)$ , а также статистические меры  $\rho_M(Z_i, Z_j)$  и  $\rho_{CD}(Z_i, Z_j)$ , применяемые для идентификации в статистике (здесь  $\rho_1(Z_i, Z_j)$  —  $l_1$ -норма;  $\rho_2(Z_i, Z_j)$  — евклидово расстояние;  $\rho_M(Z_i, Z_j)$  — мера Джеффриса–Матуситы;  $\rho_{CD}(Z_i, Z_j)$  — мера “коэффициент дивергенции”).

Для определения оптимальной метрики в рассматриваемом классе в качестве критерия качества использовался минимум коэффициента вариации параметра  $S$ . Задача определения статистически значимой характеристики системы  $S$  решалась на основе прямых вычислительных экспериментов по имитационному моделированию кластерной системы в модели диффузионно-ограниченной агрегации. Наилучшей по рассмотренному критерию является мера  $\rho_{CD}(Z_i, Z_j)$ .

Таким образом, с использованием частных характеристик кластеров рассчитываются обобщенные характеристики системы — среднее рассеяние и энтропия (по радиусу вращения).

**3. Вычислительный алгоритм модели.** Сложность задачи (большой массив структурообразующих частиц и множественность правил) обусловлена контролем кластеров при операциях образования новых частиц, случайными перемещениями частиц и кластеров, операциями агрегирования и фрагментации и анализом структуры кластеров.

Для контроля кластеров необходимо, во-первых, хранить в памяти координаты всех частиц и, во-вторых, выполнить разбиение массива координат и его упорядочение (сортировка массивов) на группы (по отношению к кластеру как объекту и как представителю определенной группы). Понятно, что процедуры прямого (перебором всего массива) покоординатного анализа перемещения, агрегирования при столкновениях и фрагментации являются неэффективными по числу элементарных операций и, тем самым, в задачах большой размерности являются неприемлемыми.

Идея более эффективного алгоритма основана на объектно-ориентированном подходе анализа кластеров. Здесь имеется прямая аналогия с построением файловой системы операционных систем компьютеров на базе кластеров, однако “наши” кластеры подвержены более сложным процессам взаимодействия.

Все кластеры рассматриваются как объекты, имеющие одинаковые свойства и методы. Объект идентифицируется заданием абсолютных координат габаритного прямоугольника, ограничивающего кластер. Все внутренние свойства кластера являются относительными и их можно определить заданием двумерного массива, состоящего из нулей и единиц, где единица означает занятую ячейку (частица, составляющая кластер).

Важным свойством является информация о пересечениях габаритного прямоугольника данного кластера с другими кластерами, позволяющая значительно упростить проверку на столкновения при перемещении кластеров.

Методы — это набор процедур и функций, которые каким-либо образом изменяют свойства объекта. Для кластера можно определить пять основных групп методов. Это перемещения в пространстве (с учетом допустимого направления); агрегация и фрагментация (учитывая правила агрегирования и фрагментации); численный анализ структуры кластера; создание и удаление кластера.

Имитационная модель была реализована в пакете прикладных программ “Моделирование эволюции кластерных систем” [9]. В качестве среды разработки использовались объектно-ориентированные языки программирования C++ и Delphi 5. Пакет прикладных программ написан для операционной системы Windows 2000/XP и состоит из следующих модулей:

- модуль непосредственного моделирования эволюции кластерной системы, реализующий как один, так и несколько заданных наборов параметров (простой и комплексный эксперимент);
- модуль статистической обработки, рассчитывающий на основе частных характеристик кластеров обобщенные характеристики: параметр статистического рассеяния в метрике  $\rho_{CD}$  и энтропию;
- модуль, реализующий оптимальный эксперимент (определение технологических параметров для формирования кластерной системы с заданными свойствами подробно описано ниже);
- модуль вывода информации (визуализация, выгрузка в файл, вывод на печать).

**4. Оптимальный вычислительный эксперимент.** Пусть проведено  $N$  машинных экспериментов. В качестве оценок для обобщенных характеристик системы (рассеяние и энтропия) можно использовать их математические ожидания. При имитационном моделировании возникает вопрос о количестве реализаций случайного процесса для достижения заданной точности. Для метода Монте-Карло мы можем говорить о точности полученного результата только с определенной вероятностью.

Вычислительный эксперимент показывает, что случайные величины  $S$  и  $H$  удовлетворяют условиям центральной предельной теоремы, из чего можно заключить, что

$$\sqrt{N}(\widetilde{M}_{S_{CD}} - S_{CD}) \xrightarrow{P} \text{norm}(0, \widetilde{\sigma}_{S_{CD}}), \quad \sqrt{N}(\widetilde{M}_H - H) \xrightarrow{P} \text{norm}(0, \widetilde{\sigma}_H),$$

где  $\widetilde{M}$ ,  $\widetilde{\sigma}$  — оценки математического ожидания и среднего квадратического отклонения параметров рассеяния и энтропии по результатам  $N$  экспериментов.

Тогда можно использовать известную формулу для доверительного интервала математического ожидания нормально распределенной случайной величины, покрывающего неизвестный параметр ( $S_{CD}$ ,  $H$ ) с надежностью  $\gamma$ .

Факторы модели можно разделить на две группы: начальные данные модели и параметры имитации. Начальными данными модели являются начальная и конечная концентрации частиц, время прекращения образования новых частиц, время окончания процесса (соответственно  $u_1, u_2, u_3, u_4$ ). Параметры имитации — вероятности ассоциации и фрагментации частиц и кластеров, скорость роста новых структурообразующих частиц, скорость перемещения частиц и кластеров (соответственно  $u_5, u_6, u_7, u_8$ ).

Выходными параметрами являются частные параметры кластеров и обобщенные характеристики системы: статистическое рассеяние и энтропия системы, которые позволяют проводить идентификацию системы. В рамках полного факторного эксперимента [10] было выяснено, что наибольшее влияние на обобщенные характеристики системы оказывают начальные данные. Поэтому в дальнейшем в качестве факторов рассматривались лишь начальные данные.

Задача планирования оптимального эксперимента имеет следующий вид:

$$F(\overline{U}) = |S(\overline{U}) - S^*| \rightarrow \min, \tag{1}$$

где  $S$  — параметр статистического рассеяния в метрике  $\rho_{CD}$ , введенной выше;  $S^*$  — требуемое “качество”;  $\overline{U}$  —  $n$ -мерный вектор ( $n = 4$ ) факторов модели.

Ограничения имеют вид:

$$u_1^- \leq u_1 \leq u_1^+, \quad u_2^- \leq u_2 \leq u_2^+ \quad \dots \quad u_n^- \leq u_n \leq u_n^+, \tag{2}$$

где  $u_i^+$  и  $u_i^-$  — соответственно верхний и нижний уровень  $i$ -го фактора ( $i = \overline{1, n}$ ). Кроме того, необходимо наложить ограничения на параметр  $H$ :

$$H^- \leq H \leq H^+. \tag{3}$$

Таким образом, имеем задачу на условный экстремум: целевая функция (1) при наличии ограничений (2) и (3).

Перейдем к задаче на безусловный экстремум, введя штрафную функцию. Для этого преобразуем  $n + 1$  двусторонних ограничений (2), (3) в  $2n + 2$  односторонних ограничений-неравенств:

$$\begin{aligned} \varphi_1(u_1) = u_1 - u_1^- &\geq 0; & \varphi_2(u_1) = u_1^+ - u_1 &\geq 0; \\ \varphi_3(u_2) = u_2 - u_2^- &\geq 0; & \varphi_4(u_2) = u_2^+ - u_2 &\geq 0; \\ \dots\dots\dots & & \dots\dots\dots & \\ \varphi_{2n-1}(u_n) = u_n - u_n^- &\geq 0; & \varphi_{2n}(u_n) = u_n^+ - u_n &\geq 0; \\ \varphi_{2n+1}(u_1, u_2, \dots, u_n) = H - H^- &\geq 0; & \varphi_{2n+2}(u_1, u_2, \dots, u_n) = H^+ - H &\geq 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Отсюда новая целевая функция имеет вид  $J(\bar{U}) = F(\bar{U}) + \eta \sum_{k=1}^{2n+2} \varphi_k^2 [1 - \text{sign}(\varphi_k)]$ , где  $\eta > 0$ . Второе слагаемое взято таким образом, что оно увеличивает функцию  $J(\bar{U})$  при невыполнении ограничений (4) и обращает в ноль при их выполнении.

Для решения задачи был использован модифицированный метод случайного поиска с переменным радиусом поиска и случайным направлением [11]. Некоторые примеры расчетов представлены в таблице.

$S^*$	$u_1^*$	$u_2^*$	$u_3^*$	$u_4^*$	Число итераций
0.70	10.4	36.1	400	806	130
0.85	18.3	37.6	380	695	160
1.00	10.2	28.9	224	315	180

**Заключение.** 1. Разработана имитационная модель эволюции кластерных систем. Начальными данными модели являются начальная и конечная концентрации частиц, время прекращения образования новых частиц, время окончания процесса. Параметры имитации — вероятности ассоциации и фрагментации частиц и кластеров, скорость роста новых структурообразующих частиц, скорость перемещения частиц и кластеров.

2. На основании частных (геометрических и физических) показателей кластеров получены обобщенные показатели (статистическое рассеяние и энтропия), позволяющие идентифицировать систему. Определена оптимальная метрика по минимуму коэффициента вариации параметра  $S_{CD}$ .

3. Разработан комплекс программ, реализующий созданную имитационную модель. Комплекс позволяет моделировать нефтяные системы при различном наборе начальных данных и параметров имитации, проводить комплексный эксперимент.

4. На основе метода случайного поиска реализован оптимальный эксперимент. Для перехода от задачи условного экстремума к задаче на безусловный экстремум была построена штрафная функция. Задача решается методами случайного поиска.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ребиндер П.А. Поверхностные явления в дисперсных системах. Коллоидная химия. Избранные труды. М.: Наука, 1978.
2. Мухаметзянов И.З. Структурная организация макромолекулярных ассоциатов в нефтяных средах. М.: Химия, 2003.
3. Мухаметзянов И.З., Кузеев И.Р., Воронов В.Г., Спивак С.И. Структурная организация нефтяных дисперсных систем // ДАН. 2002. **387**, № 3. 353–356.
4. Witten T.A., Sander L.M. // Phys. Rev. Ser. A. 1983. **27**. 5686.
5. Kolb M., Botet R., Jullien R. // Phys. Rev. Lett. 1983. **51**. 1123.
6. Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры // Успехи физических наук. 1986. **149**, № 2. 178–219.
7. Дюран Б., Одел П. Кластерный анализ. М.: Статистика, 1977.
8. Яглом А.М., Яглом И.М. Вероятность и информация. М.: Наука, 1973.
9. Мухаметзянов И.З., Шайхисламов А.С., Новичок И.В. Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ № 2003612009. Имитационное моделирование эволюции кластерных систем. М.: Роспатент, 2003.
10. Мухаметзянов И.З., Шайхисламов А.С. Оптимизационные задачи управления структурой при компьютерном моделировании эволюции дисперсной фазы сложных нефтяных систем // Башкирский химический журнал. 2003. **10**, № 2. 66–69.
11. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.

Поступила в редакцию  
24.08.2004