

doi 10.26089/NumMet.v25r108

УДК 532.23;
553.048

Особенности использования итерационных методов последовательных приближений для расчета фазового равновесия с капиллярным скачком

М. И. Райковский

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Российская Федерация

ORCID: 0000-0003-2776-6105, e-mail: maksim.raykovskiy@phystech.edu

Аннотация: В статье представлены модификации методов последовательных приближений, которые используются для расчета фазового равновесия многокомпонентной термодинамической системы. В качестве примера рассмотрены два метода: метод последовательных приближений и метод квазиньютоновских последовательных приближений. Эти методы можно использовать для расчета равновесия между газовой и жидкой фазами со скачком капиллярного давления. Для проверки корректности методов результаты расчетов как фазового равновесия при заданных температуре и давлениях в фазах, так и фазовых диаграмм для различных температур сравнивались между собой. Получено малое расхождение в результатах при расчете фазового равновесия многокомпонентной смеси с учетом скачка капиллярного давления для летучей нефти.

Ключевые слова: итерационные численные методы, нелинейные уравнения, капиллярный скачок давления, фазовое равновесие.

Для цитирования: Райковский М.И. Особенности использования итерационных методов последовательных приближений для расчета фазового равновесия с капиллярным скачком // Вычислительные методы и программирование. 2024. 25, № 1. 92–100. doi 10.26089/NumMet.v25r108.

Features of using iterative successive substitutions methods for calculating phase equilibrium with a capillary jump

Maxim I. Raikovskiy

Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

ORCID: 0000-0003-2776-6105, e-mail: maksim.raykovskiy@phystech.edu

Abstract: This article presents modifications of Successive Substitution methods that are used to calculate the phase equilibrium of a multicomponent thermodynamic system. As an example, two methods are considered: the Successive Substitution method and the Quasi-Newton Successive Substitution method. These methods can be used to calculate the equilibrium between gas and liquid phases with a capillary pressure jump. To check the correctness of these methods, the results of calculations of both phase equilibrium at set temperature and pressures in the phases and phase



diagrams for different temperatures were compared with each other. A low error in the results was obtained when calculating the phase equilibrium of a multicomponent mixture taking into account the capillary pressure jump for volatile oil.

Keywords: iterative numerical methods, nonlinear equations, capillary pressure jump, phase equilibrium.

For citation: M. I. Raikovskiy, “Features of using iterative successive substitutions methods for calculating phase equilibrium with a capillary jump,” Numerical Methods and Programming, **25** (1), 92–100 (2024). doi 10.26089/NumMet.v25r108.

1. Введение. Нефтегазовая промышленность основана на добыче углеводородов, которые находятся в системе поровых каналов. Углеводороды могут находиться в двух различных фазах: газовой и жидкой [1, 2]. В газоконденсатных и летучих нефтяных месторождениях обе эти фазы могут присутствовать в порах и, следовательно, участвовать в фазовых переходах газ–жидкость [3, 4]. В настоящее время основные известные симуляторы для моделирования фазового равновесия газа и жидкости в порах не учитывают скачок капиллярного давления. Поэтому существует практическая необходимость в инновационном численном методе или модификации существующих численных методов для описания термодинамического фазового равновесия с различными фазовыми давлениями.

В настоящей работе осуществлено сравнение численных методов последовательных приближений (МПП) [2] и квазиньютоновских последовательных приближений (МКНПП) [2] путем анализа вида рассчитанных фазовых диаграмм летучей нефти при разных давлениях в фазах на основе уравнения состояния Пенга–Робинсона [1, 2, 5–7]. При этом привязка к какой-либо конкретной пористой среде не учитывается, а только используются условия фазового равновесия при разных давлениях в фазах. Более подробное описание применения МПП для расчета двухфазного равновесия при разных давлениях в жидкой и газовой фазах имеется в [8].

2. Математическое описание. Рассматривается состояние смеси при некоторой заданной температуре T . Принимается, что учитывается только поровое пространство, приходящееся на исследуемую смесь, т.е. за вычетом возможно присутствующей неподвижной связанной пластовой воды. Таким образом, все параметры смеси соотносятся с объемом пор, заполненным данной смесью.

Состояние рассматриваемой углеводородной смеси характеризуется набором мольных плотностей компонентов n_i , которые образуют N -мерный вектор $\mathbf{n} = (n_i)$, $i = \overline{1, N}$. При двухфазном равновесии образуются газовая и жидкая фазы с соответствующими мольными плотностями $\mathbf{n}_g = (n_{gi})$ и $\mathbf{n}_l = (n_{li})$. Им соответствуют векторы мольных концентраций компонентов $\mathbf{c} = (c_i)$, $\mathbf{c}_g = (c_{gi})$ и $\mathbf{c}_l = (c_{li})$, которые определяются соотношениями $c_i = n_i/n$, $c_{gi} = n_{gi}/n_g$, $c_{li} = n_{li}/n_l$, $i = \overline{1, N}$, и значениями n , n_g , n_l :

$$n = \sum_{i=1}^N n_i, \quad n_g = \sum_{i=1}^N n_{gi}, \quad n_l = \sum_{i=1}^N n_{li}.$$

При использовании полуэмпирических уравнений состояния в аналитической форме задается выражение для летучести $f(P, T, c)$. Для уравнения состояния Пенга–Робинсона $f(P, T, c)$ определяется соотношениями

$$\ln f_i = \ln(Pc_i) - \ln(Z - b) + \frac{a}{2\sqrt{2}b} \left[\frac{2s_i}{a} - \frac{b_i}{b} \right] \ln \left[\frac{Z + (1 - \sqrt{2}b)}{Z + (1 + \sqrt{2}b)} \right] + \frac{b_i}{b}(Z - 1), \quad i = \overline{1, N}, \quad (1)$$

в которых значение Z -фактора ($Z = PV_m/RT$, где P — давление смеси, V_m — молярный объем, R — универсальная газовая постоянная) является решением кубического уравнения

$$Z^3 - (1 - b)Z^2 + (a - 2b - 3b^2)Z - (ab - b^2 - b^3) = 0. \quad (2)$$

Остальные величины как для (2), так и для (3) определяются выражениями

$$a = \sum_{i,j=1}^N a_{ij}c_i c_j, \quad b = \sum_{i=1}^N b_i c_i,$$

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= (1 - k_{ij})(a_i a_j)^{1/2}, \\
s_i &= \sum_{j=1}^N a_{ij} c_j, \\
a_i &= \Omega_{Ai} (1 + m_i (1 - T_{ri}^2))^2 \frac{p_{ri}}{T_{ri}^2}, \\
m_i &= 0.37964 + 1.408503 \omega_i - 0.16442 \omega_i^2 + 0.016666 \omega_i^3, \\
b_i &= \Omega_{Bi} \frac{p_{ri}}{T_{ri}}.
\end{aligned}$$

Здесь величины T_{ri} , p_{ri} определяются как $T_{ri} = T/T_{ci}$, $p_{ri} = P/P_{ci}$, где T_{ci} , P_{ci} — критические температура и давление для i -го компонента смеси, k_{ij} — коэффициенты бинарного взаимодействия молекул, ω_i — ацентрический фактор i -го компонента смеси, Ω_{Ai} , Ω_{Bi} — безразмерные параметры, определяющие соответствие рассчитанной по уравнению состояния критической точки заданным значениям T_{ri} , p_{ri} .

Традиционный подход к решению задачи поиска термодинамического равновесия углеводородной смеси заключается в решении системы нелинейных уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} f_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi}) - f_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li}) = 0, \quad i = \overline{1, N}, \\ c_i - \lambda_g c_{gi} + \lambda_l c_{li} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \\ \lambda_g + \lambda_l - 1 = 0, \\ \sum_{i=1}^N c_{gi} - 1 = 0. \end{array} \right. \quad (3)$$

При решении задачи фазового равновесия используются $2N + 2$ нелинейных уравнения (3) и определяются $2N + 2$ концентрации компонентов c_{gi} , c_{li} и мольные доли фаз λ_g , λ_l . Мольные доли фаз определяются выражениями $\lambda_g = N_g/N_m$ и $\lambda_l = N_l/N_m$, где N_g , N_l , N_m — число молей в газовой и жидкой фазах и общее число молей смеси соответственно. Для решения задачи поиска двухфазного равновесия с учетом скачка капиллярного давления P_{cap} нелинейные уравнения (3) необходимо дополнить условием на давления

$$P_{\text{liq}} = P_{\text{gas}} + P_{\text{cap}}. \quad (4)$$

Таким образом, система уравнений (3), (4) описывает задачу поиска фазового равновесия с капиллярным скачком и является замкнутой. Ее решение находится численными расчетами фазового равновесия со скачком капиллярного давления с помощью указанных методов поиском неподвижной точки в N -мерном пространстве мольных концентраций компонентов c_{gi} и c_{li} в фазах.

Для МПП был изменен подход к расчету мольных концентраций компонентов газовой и жидкой фаз путем добавления процедуры сглаживания. В итоге значения величин c_{gi} и c_{li} получались по следующему алгоритму.

1. Если счетчик итераций равен 0, то:

$$c_{gi}^{(0)} = \frac{c_i K_i^{(0)}}{\lambda_l (K_i^{(0)} - 1) + 1}, \quad c_{li}^{(0)} = \frac{c_i}{\lambda_l (K_i^{(0)} - 1) + 1}, \quad i = \overline{1, N},$$

где $K_i^{(0)}$ определяются из корреляции Вилсона [1, 2].

2. Если счетчик итераций больше 0, то:

$$\begin{aligned}
\tilde{c}_{gi} &= \frac{c_i K_i^{(m)}}{\lambda_l (K_i^{(m)} - 1) + 1}, & c_{gi}^{(m)} &= \gamma \tilde{c}_{gi} + (1 - \gamma) c_{gi}^{(m-1)}, \quad i = \overline{1, N}, \\
\tilde{c}_{li} &= \frac{c_i}{\lambda_l (K_i^{(m)} - 1) + 1}, & c_{li}^{(m)} &= \gamma \tilde{c}_{li} + (1 - \gamma) c_{li}^{(m-1)}, \quad i = \overline{1, N},
\end{aligned}$$

где $K_i = c_{gi}/c_{li}$, $\gamma \in [0, 1]$.



МКНПП предназначен для решения системы уравнений (3), когда отсутствует скачок капиллярного давления [2]. При решении системы уравнений (3), (4) МКНПП дает результат, противоречащий расчетам МПП со скачком капиллярного давления [8], так как введение скачка капиллярного давления приводит к некорректному расчету величин c_{gi} и c_{li} , результат расчета которых с помощью МКНПП совпадает при решении систем нелинейных уравнений (3) и (3), (4). Причиной такого противоречия являются функции F_i , $i = \overline{1, N}$, из алгоритма МКНПП [2], которые обращаются в нуль при разных давлениях в фазах и при разных значениях легучестей:

$$F_i = \ln(K_i) + \ln(\varphi_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi})) - \ln(\varphi_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li})), \quad (5)$$

где [1, 2]

$$\varphi_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi}) = \frac{f_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi})}{P_{\text{gas}} c_{gi}}, \quad (6)$$

$$\varphi_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li}) = \frac{f_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li})}{P_{\text{liq}} c_{li}}. \quad (7)$$

Для устранения указанного противоречия МКНПП был модифицирован. Первое изменение опирается на следующие утверждения:

1. Изменяются только функции F_i , которые являются безразмерными. Выражения под логарифмом в (5) также безразмерные. В состоянии равновесных фаз функции F_i принимают значения 0.
2. В точке фазового равновесия в N -мерном пространстве мольных концентраций $f_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi}) = f_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li})$, $i = \overline{1, N}$, и, следовательно, с ростом числа итераций МКНПП

$$\left| \frac{f_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi})}{f_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li})} - 1 \right| \rightarrow 0, \quad i = \overline{1, N}.$$

3. В точке фазового равновесия $c_{gi}/c_{li} = K_i$.

В итоге измененные функции F_i описываются следующим выражением:

$$F_i = \ln(K_i) + \ln(\varphi_i(P_{\text{gas}}, c_{gi}, T)) - \ln(\varphi_i(P_{\text{liq}}, c_{li}, T)) + \ln\left(\frac{P_{\text{gas}}}{P_{\text{liq}}}\right). \quad (8)$$

Значения $\varphi_i(P_{\text{gas}}, T, c_{gi})$ и $\varphi_i(P_{\text{liq}}, T, c_{li})$ рассчитываются, как и раньше, по формулам (6), (7) для $i = \overline{1, N}$.

Второе изменение направлено на улучшение сходимости МКНПП. В расчет значений мольных концентраций c_{gi} и c_{li} добавляется процедура сглаживания.

Итоговый алгоритм модифицированного МКНПП:

1. Устанавливаются начальные значения $\sigma^{(0)} = 1$, $a_i^{(0)} = \ln K_i^{(0)}$, $i = \overline{1, N}$, где $K_i^{(0)}$ определяются из корреляции Вилсона [1, 2]. Счетчик итераций m устанавливается равным 0.
2. Решается уравнение относительно переменной λ_1

$$\sum_{i=1}^N \frac{c_i(K_i^{(m)} - 1)}{\lambda_1(K_i^{(m)} - 1) + 1} = 0.$$

3. Рассчитываются векторы молярных концентраций компонентов газовой и жидкой фаз. Для случая, когда $m = 0$, элементы векторов мольных концентраций считаются по формулам

$$c_{gi}^{(0)} = \frac{c_i K_i^{(0)}}{\lambda_1(K_i^{(0)} - 1) + 1}, \quad c_{li}^{(0)} = \frac{c_i}{\lambda_1(K_i^{(0)} - 1) + 1}, \quad i = \overline{1, N}.$$

Для случаев, когда $m > 0$, элементы векторов мольных концентраций считаются по формулам, в которые включена процедура сглаживания,

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{gi}^{(m)} &= \frac{c_i K_i^{(m)}}{\lambda_1(K_i^{(m)} - 1) + 1}, & c_{gi}^{(m)} &= \gamma \tilde{c}_{gi}^{(m)} + (1 - \gamma) c_{gi}^{(m-1)}, & i &= \overline{1, N}, \\ \tilde{c}_{li}^{(m)} &= \frac{c_i}{\lambda_1(K_i^{(m)} - 1) + 1}, & c_{li}^{(m)} &= \gamma \tilde{c}_{li}^{(m)} + (1 - \gamma) c_{li}^{(m-1)}, & i &= \overline{1, N}. \end{aligned}$$

Значение безразмерного параметра $\gamma \in [0, 1]$.

4. Проверяется неравенство $|F_i^{(m)}| \leq \varepsilon$. Если неравенство выполняется для всех $i = \overline{1, N}$, то решение нелинейной системы уравнений (3), (4) найдено. В противном случае, если найдется хотя бы одно значение k , для которого $|F_k^{(m)}| > \varepsilon$, то переходим к следующему пункту.
5. Если значение счетчика итераций кратно 10 ($m \bmod 10 = 0$), то $\sigma^{(m)} = 1$. В остальных случаях $\sigma^{(m)}$ рассчитывается по формуле

$$\sigma^{(m)} = - \frac{(\Delta \mathbf{a}^{(m-1)}, \mathbf{F}^{(m-1)})}{(\Delta \mathbf{a}^{(m-1)}, \Delta \mathbf{F}^{(m-1)})} \sigma^{(m-1)},$$

где $\Delta \mathbf{F}^{(m-1)} = \mathbf{F}^{(m)} - \mathbf{F}^{(m-1)}$.

6. Рассчитывается $\Delta \mathbf{a}^{(m)} = -\sigma^{(m)} \mathbf{F}^{(m)}$.
7. Находится новое значение $\mathbf{a}^{(m+1)} = \mathbf{a}^{(m)} + \Delta \mathbf{a}^{(m)}$.
8. Выполняется переход к пункту 2.

Для корректного описания равновесия углеводородной смеси используется большое число компонентов. В данной работе исследовалась летучая нефть Карачаганакского нефтегазоконденсатного месторождения, которая состоит из 15 компонентов [9]. В подобных задачах наблюдается сильная зависимость решения от малых изменений мольных концентраций тяжелых компонентов начального состава смеси. Состав рассматриваемой смеси приведен в табл. 1.

3. Результаты.

3.1. Анализ скорости сходимости методов. Первым шагом является определение оптимального значения параметра γ , при котором фазовое равновесие (решение системы (3), (4)) определяется за минимальное число итераций МПП и МКНПП для заданных параметров P_{gas} , P_{liq} и T . Для этого рассматриваются разные наборы параметров (P_{gas} , P_{liq} , T). Зависимость количества итераций (n) МКНПП от γ для четырех наборов показана на рис. 1.

Таблица 1. Параметры летучей нефти Карачаганакского нефтегазоконденсатного месторождения
 Table 1. Parameters of the volatile oil from Karachaganack oil and gas condensate field

Состав	N ₂	CO ₂	H ₂ S	C1	C2	C3	IC4	NC4	IC5	NC5	C6	C7	C8	C9	C10+
c_i %	0.81	2.9	13.32	43.24	8.53	4.78	1.06	2.4	1.2	1.25	1.94	2.33	2.64	2.22	1.13

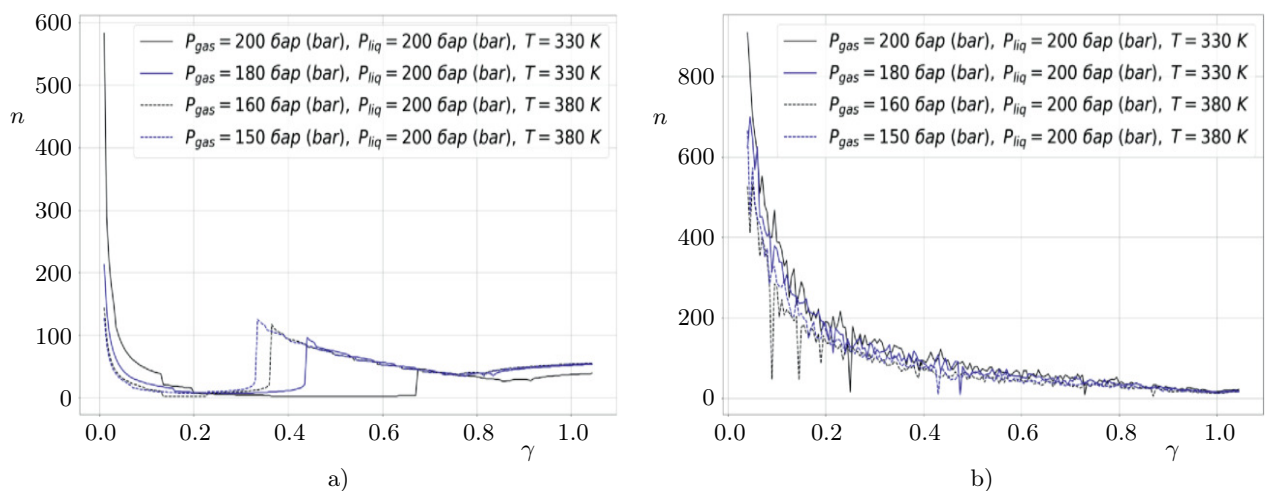


Рис. 1. Зависимость количества итераций методов последовательного приближения и квазиньютоновского последовательного приближения от параметра γ : а) для метода последовательного приближения; б) для метода квазиньютоновского последовательного приближения

Fig. 1. Dependence of the number of iterations Successive Substitution and Quasi-Newton Successive Substitution methods: a) Successive Substitution method; b) Quasi-Newton Successive Substitution method



Для МПП, опираясь на рис. 1, оптимальное значение лежит в диапазоне от 0.2 до 0.32. При этом число итераций МПП для этих значений находится в диапазоне $n \in [2, 10]$. Однако при $\gamma_{opt} \in [0.2, 0.32]$ метод сходится к ошибочному решению. Иное подходящее оптимальное значение параметра γ_{opt} для МПП лежит в диапазоне от 0.72 до 0.78. При этом число итераций $n \in [26, 30]$.

Для МКНПП значение n падает с ростом γ для всех рассмотренных наборов (P_{gas}, P_{liq}, T) . Общий оптимальный параметр γ_{opt} лежит в диапазоне значений от 0.975 до 1. Число итераций для МКНПП для этих значений $n \in [14, 18]$.

Исходя из данных результатов, для МПП оптимальное значение γ_{opt} было взято равным $\gamma_{opt} = 0.75$, а для МКНПП равным $\gamma_{opt} = 0.985$.

3.2. Расчет фазового равновесия при заданных давлениях в фазах и температуре. Вторым шагом был расчет фазового равновесия термодинамической системы для величины скачка капиллярного давления $P_{cap} = 2$ бар. Численные методы сверялись по четырем параметрам: молярная масса M , Z -фактор, плотность ρ , молярный объем V_m . Результаты расчетов МКНПП и МПП с γ_{opt} этих параметров и погрешность между методами приведены в табл. 2. Расчеты сравнивались для двух наборов давлений и температур: $(P_{gas} = 180$ бар, $T = 331$ К), $(P_{gas} = 200$ бар, $T = 381$ К). В таблице значения погрешности представляют собой относительную погрешность (δ), выраженную в процентах.

Максимальное значение относительной погрешности составляет 0.79%, а средняя арифметическая относительная ошибка, рассчитанная по формуле

$$\delta_{am} = \frac{1}{16} \sum_{k=1}^{16} \delta_k,$$

равна 0.098%. Здесь δ_k — значения относительных ошибок, взятые из табл. 2. Значения данных показателей свидетельствуют о высокой схожести результатов расчета МКНПП и МПП.

3.3. Расчет фазовой диаграммы. Следующим шагом было сравнение расчетов фазовых диаграмм [8], пример которых, полученный с помощью МКНПП для температуры $T = 381$ К, показан на рис. 2. На фазовой диаграмме показано значение насыщенности жидкой фазы (S_1) в зависимости от P_{gas} и P_{liq} ; S_1 — безразмерная величина, которая определяется выражением [1, 2, 8]

$$S_1 = \frac{\lambda_l V_l}{\lambda_g V_g + \lambda_l V_l}, \tag{9}$$

где V_g и V_l — молярные объемы газовой и жидкой фаз.

Значение насыщенности варьируется от 0 до 1. Нижняя граница фазовой диаграммы определяется как область, где значение S_1 становится равным 0. С другой стороны, окрестность верхней границы — это область неустойчивых решений нелинейной системы уравнений (3), (4).

Таблица 2. Сравнение данных, рассчитанных с учетом скачка капиллярного давления для двух наборов давлений и температур методами последовательных приближений и квазиньютоновских последовательных приближений: $(P_1 = P_{gas} = 180$ бар, $T_1 = 331$ К), $(P_2 = P_{gas} = 200$ бар, $T_2 = 381$ К)

Table 2. Comparison of data calculated with a capillary pressure jump for two sets pressure and temperature using the Successive Substitution and Quasi-Newton Successive Substitution methods:

$(P_1 = P_{gas} = 180$ бар, $T_1 = 331$ К), $(P_2 = P_{gas} = 200$ бар, $T_2 = 381$ К)

Параметр Parameter	Жидкость (P_1, T_1) Liquid (P_1, T_1)			Газ (P_1, T_1) Gas (P_1, T_1)			Жидкость (P_2, T_2) Liquid (P_2, T_2)			Газ (P_2, T_2) Gas (P_2, T_2)		
	МПП	МКНПП	$\delta, \%$	МПП	МКНПП	$\delta, \%$	МПП	МКНПП	$\delta, \%$	МПП	МКНПП	$\delta, \%$
$M, \text{ г/моль}$ $M, \text{ g/mol}$	71.218	71.218	0	23.857	23.857	0	73.56	73.56	0	26.37	26.37	0
Z -фактор Z -factor	0.727	0.73	0.41	0.706	0.707	0.14	0.778	0.779	0.128	0.7927	0.793	0.04
$\rho, \text{ г/м}^3$ $\rho, \text{ g/m}^3$	647.41	647.411	0	220.71	220.72	0.004	602.48	602.47	0.002	210.05	210.04	0.001
$V_m, \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{моль})$ $V_m, \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{моль})$	71.21	71.22	0.014	23.85	23.86	0.04	0.122	0.122	0	0.126	0.125	0.79

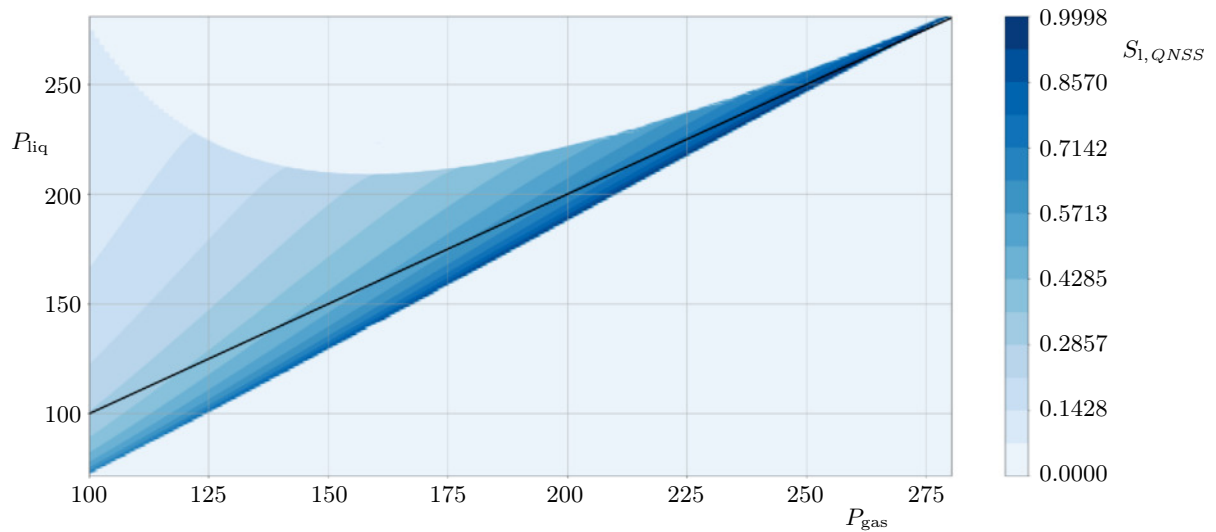


Рис. 2. Фазовая диаграмма значений $S_{1,QNSS}$, рассчитанных методом квазиньютоновского последовательного приближения для температуры $T = 381$ К

Fig. 2. Phase diagram for $S_{1,QNSS}$ values calculated by the Quasi-Newton Successive Substitution method for temperature $T = 381$ K

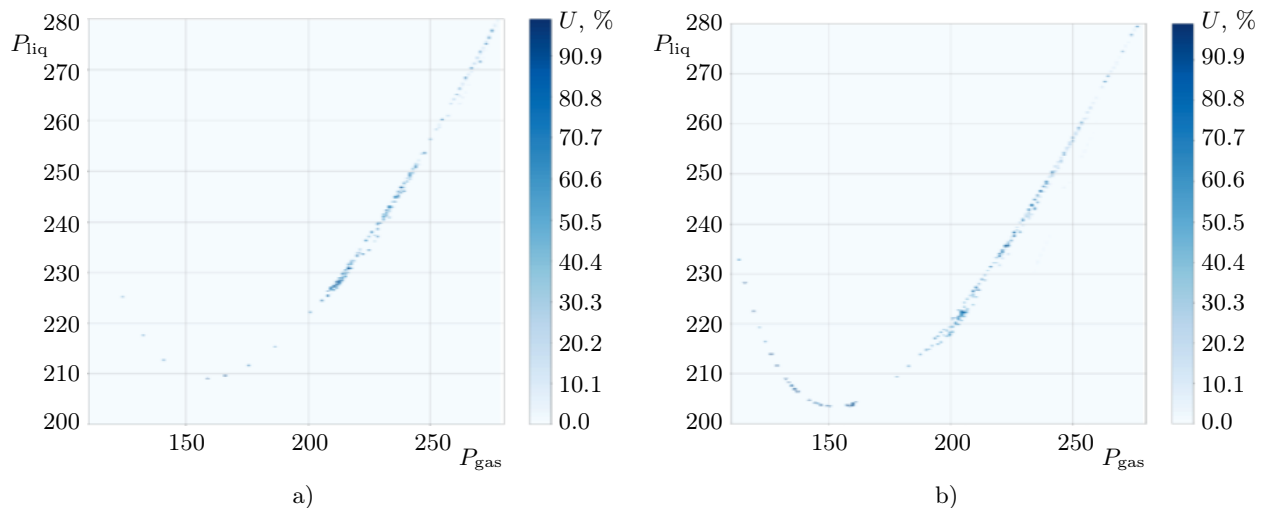


Рис. 3. Диаграммы для величины U для двух разных температур: а) $T_1 = 331$ К; б) $T_2 = 381$ К

Fig. 3. Diagrams for the value of U for two different temperatures: а) $T_1 = 331$ К; б) $T_2 = 381$ К

Величины P_{gas} и P_{liq} на рис. 2 и для всех рисунков в дальнейшем определяются в барах, а величина $S_{1,QNSS}$ — насыщенность жидкой фазы, вычисленная по формуле (9), в которой величины V_g , V_l , λ_g и λ_l рассчитаны с помощью МКНПП с оптимальным параметром $\gamma_{opt} = 0.985$. При этом расчет фазовой диаграммы для температуры $T = 381$ К с использованием МКНПП быстрее по времени, чем с использованием МПП на 13.6%.

Сопоставление фазовых диаграмм проводилось для двух разных температур. Результаты сравнения для $T_1 = 331$ К и $T_2 = 381$ К представлены на рис. 3. Значения давлений P_{gas} и P_{liq} варьируются от 100 до 280 бар. Диаграммы показывают значения величины

$$U = \frac{|S_{1,SS} - S_{1,QNSS}|}{S_{1,SS}},$$

где $S_{1,SS}$ — значение насыщенности, вычисленное по формуле (9), в которой величины V_g , V_l , λ_g и λ_l рассчитываются с помощью МПП с $\gamma_{opt} = 0.76$. На рис. 3 величина U выражена в процентах. Заметная ошибка возникает исключительно в небольшой области вблизи верхней границы фазовой диаграммы.



Для большинства рассматриваемых значений P_{gas} и P_{liq} величина U лежит в диапазоне $[0\%, 10\%]$, что означает, что отличие в расчетных данных вдали от верхней границы не превышает 10%. Более детальный анализ ошибки показал следующие результаты: ошибка для T_1 по абсолютной величине не превышает 0.46%, а ошибка для T_2 по абсолютной величине не превышает 0.6%.

Эти результаты показывают, что рассматриваемые методы имеют значительные различия лишь в определении верхней границы фазовой диаграммы, разделяющей область устойчивых и неустойчивых решений [8].

3.4. Анализ верхней границы. Неустойчивость решения системы уравнений (3), (4) на верхней границе фазовой диаграммы свидетельствует о неустойчивости фазового равновесия в данной области. Такое поведение смеси характерно вблизи спинодали, в окрестности которой значение детерминанта гессиана свободной энергии Гельмгольца близко к нулю [10].

Вследствие больших перепадов значений детерминанта удобно сделать некоторое преобразование. Вводится матрица H , которая определяется выражением

$$H = \frac{\{\det(G)_{ij}\}}{\max_{ij}(\det(G)_{ij})},$$

где $\{\det(G)_{ij}\}$ — матрица всех полученных значений детерминантов гессиана свободной энергии Гельмгольца. Элементы матрицы изменяются в диапазоне от 0 до 1. Это позволяет проанализировать поведение детерминанта гессиана в окрестности верхней границы фазовой диаграммы. Зависимость элементов H_{ij} матрицы H от давлений в газовой и жидкой фазах представлена на рис. 4 в виде цветовой палитры. Расчет был выполнен для $T = 381$ К с использованием МКНПП. На рис. 4 значения H_{ij} стремятся к 0 при приближении к верхней границе фазовой диаграммы, что характеризует границу как спинодали. Таким образом, основное различие рассматриваемых методов наблюдается в малой окрестности спинодали.

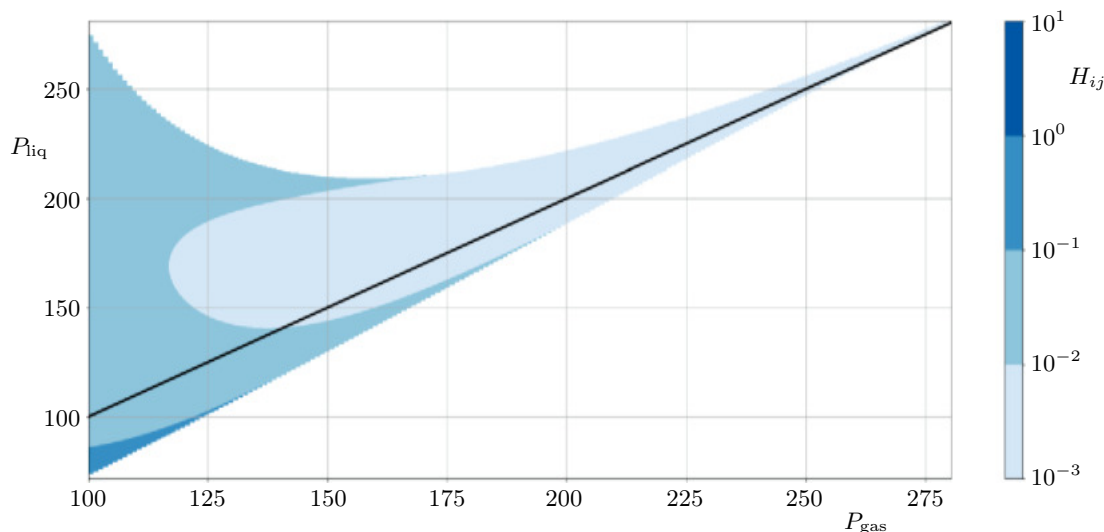


Рис. 4. Зависимость элементов H_{ij} матрицы H от давлений в газовой и жидкой фазах

Fig. 4. The dependence of the elements H_{ij} of the matrix H on the pressures in the gas and liquid phases

4. Заключение. Модификации МПП и МКНПП позволяют проводить расчеты фазового равновесия термодинамических систем со скачком капиллярного давления при различных термобарических параметрах ($P_{\text{gas}}, P_{\text{liq}}, T$) с оптимальными значениями параметра γ_{opt} равными 0.75 и 0.985 соответственно, а также осуществлять построение соответствующих фазовых диаграмм.

Для рассмотренных двух пар давлений и температур относительная ошибка не превышает 0.79%, а δ_{am} равна 0.098%. При расчете с применением процедуры сглаживания (параметр γ_{opt}) решение МКНПП сходится к решению системы нелинейных уравнений (3), (4) за вдвое меньшее количество итераций, чем решение МПП, а расчет фазовой диаграммы с использованием МКНПП тратит на 13.6% меньше времени.

Для всех расчетов фазовых диаграмм относительная ошибка не превышает 0.6%. Малые погрешности на рис. 3 для МПП и МКНПП демонстрируют хорошее соответствие результатов.

Список литературы

1. Панфилов М.Б. Физико-химическая гидродинамика пористых сред. С приложениями к геонаукам и нефтяной инженерии. Долгопрудный: Интеллект, 2020.
2. Брусиловский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. М.: Грааль, 2002.
3. Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. О роли капиллярных сил при фильтрации газоконденсатной смеси вблизи скважины // Инженерно-физический журнал. 2004. 77, № 2. 17–23.
4. Bedrikovetsky P. Mathematical theory of oil and gas recovery. Dordrecht: Springer, 1993. <https://doi.org/10.1007/978-94-017-2205-6>. Cited February 14, 2024.
5. Firoozabadi A. Thermodynamics of hydrocarbon reservoirs. New York: McGraw-Hill, 1999.
6. Ahmed T. Reservoir engineering handbook. Burlington: Elsevier, 2006.
7. Donnez P. Essentials of reservoir engineering. Paris: Editions Technip, 2007.
8. Райковский М.И., Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю. Об учете капиллярных сил при моделировании газоконденсатных смесей // Известия высших учебных заведений. Нефть и газ. 2022. № 2. 37–52. doi 10.31660/0445-0108-2022-2-37-52.
9. Wang L., Ismailova J., Uteubayeva Y., et al. Effect of pore size distribution on phase behavior of sour gas and hydrocarbon mixtures in tight oil reservoirs. 2020. <https://doi.org/10.2118/202567-MS>. Cited February 15, 2024.
10. Скрипов В.П., Скрипов А.В. Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) // Успехи физических наук. 1979. 128, № 2. 193–231. doi 10.3367/UFNr.0128.197906a.0193.

Поступила в редакцию
18 декабря 2023 г.

Принята к публикации
4 января 2024 г.

Информация об авторе

Максим Игоревич Райковский — аспирант, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., 9, 141701, Долгопрудный, Российская Федерация.

References

1. M. B. Panfilov, *Physicochemical Fluid Dynamics in Porous Media: Applications in Geosciences and Petroleum Engineering* (Wiley, Weinheim, 2019; Intellect, Dolgoprudnyi, 2020).
2. A. I. Brusilovsky, *Phase Transformations in the Development of Oil and Gas Fields* (Graal, Moscow, 2002) [in Russian].
3. O. Yu. Dinariev and N. V. Evseev, “Role of Capillary Forces in Filtration of a Gas–Condensate Mixture near a Well,” *Inzh. Fiz. Zh.* 77 (2), 17–23 (2004) [*J. Eng. Phys. Thermophys.* 77 (2), 266–274 (2004)]. doi 10.1023/B:JOEP.0000028503.58759.9b.
4. P. Bedrikovetsky, *Mathematical Theory of Oil and Gas Recovery* (Springer, Dordrecht, 1993). <https://doi.org/10.1007/978-94-017-2205-6>. Cited February 14, 2024.
5. A. Firoozabadi, *Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs* (McGraw-Hill, New York, 1999).
6. T. Ahmed, *Reservoir Engineering Handbook* (Elsevier, Burlington, 2006).
7. P. Donnez, *Essentials of Reservoir Engineering* (Editions Technip, Paris, 2007).
8. M. I. Raikovskiy, A. Yu. Demianov, and O. Yu. Dinariev, “On the Accounting of Capillary Forces in the Modeling of Gas-Condensate Mixtures,” *Oil and Gas Studies*, No. 2, 37–52 (2022). doi 10.31660/0445-0108-2022-2-37-52.
9. L. Wang, J. Ismailova, Y. Uteubayeva, et al., “Effect of Pore Size Distribution on Phase Behavior of Sour Gas and Hydrocarbon Mixtures in Tight Oil Reservoirs,” <https://doi.org/10.2118/202567-MS>. Cited February 15, 2024.
10. V. P. Skripov and A. V. Skripov, “Spinodal Decomposition (Phase Transitions via Unstable States),” *Usp. Fiz. Nauk* 128 (2), 193–231 (1979) [*Sov. Phys. Usp.* 22 (6), 389–410 (1979)]. doi 10.1070/PU1979v022n06ABEH005571.

Received
December 18, 2023

Accepted for publication
January 4, 2024

Information about the author

Maxim I. Raikovskiy — PhD student, Moscow Institute of Physics and Technology, Institutskiy pereulok, 9, 141701, Dolgoprudny, Russia.