DOI 10.12851/EESJ201404ART44

Sergey A. Polozhaenko,
ScD, Professor;

Yuri V. Grigorenko,
Post-graduate;
Odessa National Polytechnic University

Method of Numerical Implementing Mathematical Models for the Primary Processing of Raw Hydrocarbons

***Keywords**: mathematical model, iterative process, difference scheme, parametric non-linearity, the convergence of the iterative procedure, compactness display*
***Annotation**: Generalization of the mathematical description of primary processing of raw hydrocarbons (PRH) in the form of nonstationary and nonlinear partial differential equations, which gives the opportunity to apply the principle of typification subsequent mathematical modeling of these processes. Proposed and justified efficient numerical method of realization of the mathematical model (MM) of processes of PRHs, based on the iterative procedure of solving nonlinear unsteady discrete MM investigated processes.*

Введение. Решение задачи математического моделирования в значительной мере определяется выбором математической модели (ММ). В равной мере это относится и к моделированию процессов первичной переработки сырых углеводородов (ППСУ). *Адекватно* выбранная ММ обеспечивает *достоверность* результатов математического моделирования. Кроме того, на результаты математического моделирования (в частности, его *точность*) влияют *численные методы*, какими реализуется выбранная ММ. Поэтому совокупный выбор ММ и численного метода ее реализации являются важным этапом математического моделирования, который определяет эффективность процесса исследования.

В работе (1) предложены ММ процессов (и аппаратов) ППСУ в виде дифференциальных уравнений (систем дифференциальных уравнений) в частных производных (ДУЧП), полученных на основе фундаментальных законов материального баланса и сохранения (энергии, импульса и.д.).

Адекватность предложенной совокупности ММ определяется тем, что они наиболее полно отражают характер физико-химических явлений, присущих исследуемому классу процессов. Особенностью предложенных ММ есть то, что они имеют нелинейный и нестационарный характер, обусловленный соответствующей вариативностью параметров сырых углеводородов. Например, вязкость сырой нефти в значительной степени зависит от температуры, что приводит к нелинейности ММ, а изменение во времени функции состояния сырья в ходе технологического процесса (например, той же температуры сырой нефти) определяет нестационарность ММ.

Однако следует отметить, что существующие численные методы (1-2) не обеспечивают в полной мере эффективную реализацию нелинейных нестационарных ММ процессов ППСУ.

Постановка задачи и цели исследования. Целью предложенной работы является разработка эффективного численного метода реализации ММ процессов ППСУ, который предусматривает применение принципа типизации.

Основная часть. Предложенные в (1) ММ ППСУ можно представить в виде *обобщенной* модели:

$$\frac{\partial\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)}{\partial t} = f_i\left[\overline{\Phi}_i(r_j,z,t), \frac{\partial\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)}{\partial z}, \frac{\partial^2\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)}{\partial r_j^2}, \frac{\partial\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)}{\partial r_j}, \overline{U}_g(r_j,z,t)\right] + D_i(\overline{\Phi}_i,r_j,z,t),$$

(1)

$$\forall i = 1,\dots,k;\ \forall j = 1,\dots,N;\ \forall(r_j,z)\in\Omega;\ \forall t\in(0,t_k),\quad \overline{\Phi} = [\Phi_1,\Phi_2,\dots,\Phi_k]^{\text{т}}$$

с учетом начальных

$$\overline{\Phi}_i(r_j,z,0) = \overline{\Phi}_{i_0}(r_j,z),\ \forall i = 1,\dots,k;\ \forall j = 1,\dots,N;\ \forall(r_j,z)\in\Omega \qquad (2)$$

и граничных условий следующих типов:

— граничных условий первого рода, ГУ-1 (типа Дирихле)

$$\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)\Big|_{\substack{r_i=0\\ r_i=r_{i\max}\\ z=0\\ z=z_{\max}}} = \varphi_i\left[P_i(r_j,z,t)\right],\ \forall i = 1,\dots,k;\ \forall j = 1,\dots,N;\ \forall(r_j,z)\in\Omega \qquad (3)$$

— граничных условий третьего рода, ГУ-3

$$\left.\frac{\partial\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)}{\partial r_i}\right|_{\substack{r_i=0\\ r_i=r_{i\max}}} = \lambda_i\left[\overline{\Phi}(r_j,z,t), P_i(r_j,z,t)\right], \qquad (4)$$

$$\forall i = 1,\dots,k;\ \forall j = 1,\dots,N;\ \forall(r_j,z)\in\Omega,$$

где $\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)$ — непрерывные функции состояния, которые зависят от временной $t\in(0,t_k)$ и пространственной $\forall(r_j,z)\in\Omega$ координат (координаты r_j, z изменяются в открытом (цилиндрическом) множестве $\Omega\in R^{M_k}$ с гладкой границей $\partial\Omega$; R^{M_k} — евклидово пространство действительных чисел размерности M_k); функции состояния $\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)$ получаются из решения системы (1) — (4), которое (по определению) существует и есть единственным; $\overline{U}_g(r_j,z,t),\ g = 1,\dots,k^*$ — функции распределенного управления, которые принадлежат гильбертову пространству $\overline{U}_{g_{\text{д}}}$ на R^{M_k}.

Переменные состояния $\overline{\Phi}_i(r_j,z,t)$ и управления $\overline{U}_g(r_j,z,t)$ определены на открытых гильбертовых пространствах с границами соответственно $\Omega_{\Phi_i}, \Omega_{U_r}$ $\forall i = 1,\dots,k;\ \forall r = 1,\dots,k^*$.

Функции $f_i[\cdot]$ и $y_i[\cdot]$ — непрерывные линейные или нелинейные функции; $D_i(\overline{\Phi}_i,r_j,z,t) = D_i\{r_i,z,t,\Phi_1(r_j,z,t),\Phi_2(r_j,z,t),\dots,\Phi_k(r_j,z,t)\}$ — линейные или нелинейные функции, которые характеризуют действие внешних возбуждений; $P_i(r_j,z,t),\ \forall i = 1,\dots,k;\ \forall j = 1,\dots,N;\ \forall(r_j,z)\in\Omega$ — заданные функции на границе $\partial\Omega$ области, которые могут выступать в качестве граничных управляющих воздействий; $\lambda_i,\ \forall i = 1,\dots,k$ — параметр, который характеризует энергетические свойства элементов объекта (технологического аппарата); N — число поверхностей теплообмена (в частности, ректификационных тарелок).

Переменные состояния $\overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)$ и управления $\overline{U}_g\left(r_j, z, t\right)$ могут определять разные физические (в частности, температуру, расход), или геометрические (например, уровень) величины, а также отклонения этих величин от стационарных значений; параметры λ_i определяют: коэффициент теплопроводности, коэффициент теплопередачи, и т.д.

Таким образом, применение ММ в виде (1) — (4) дает возможность в дальнейшем применить принцип *типизации* — т.е. ориентации на определенный класс ММ — при разработке численного метода реализации ММ частных случаев процессов (аппаратов) ППСУ.

Представим (с целью конкретности дальнейших математических выкладок) обобщенную ММ (1) — (4) в следующем виде:

$$\frac{\partial \overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial t}=\sum_{i=1}^{3} A_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)\frac{\partial^2 \overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial r_j^2}+\sum_{i=1}^{3} B_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)\frac{\partial \overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial r_j}+$$

$$+\sum_{i=1}^{3} B_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)\frac{\partial \overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial z}+C_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)\overline{\Phi}_i\left(r_j, z, t\right)+$$

$$+D_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)U_i\left(r_j, z, t\right)+E_i\left(\overline{\Phi_i}, r_j, z, t\right)F_i\left(r_j, z, t\right), \forall j=\overline{1, N}; \qquad (5)$$

$$\overline{g}=\left\{r_1, r_2, r_3, z\right\}, \overline{g}\in\Omega\subset R^3;\ \overline{\Phi_i}=\left[\Phi_{1_i}, \Phi_{2_i}, \ldots, \Phi_{k_i}\right]; t\in\left(0, t_k\right),\ Q=\Omega\times\left(0, t_k\right);$$

$$\overline{U}\left(r_j, z, t\right)=\left[U_1, U_2, \ldots, U_{k_1}\right]^{\mathrm{T}},\ \overline{F}\left(r_j, z, t\right)=\left[F_1, F_2, \ldots, F_k\right]^{\mathrm{T}}, k_1\le k;$$

$$\Phi_i\left(0, \overline{g}\right)=\Phi_{0_i}\left(\overline{g}\right); \overline{g}\in\Omega; \qquad (6)$$

$$\lambda_j\left(0, 0, t\right)\frac{\partial \Phi_i\left(0, 0, t\right)}{\partial r_j}+K_j\left(t\right)\Phi_i\left(0, 0, t\right)=\Psi_j\left(t\right), \forall j=\overline{1, N}. \qquad (7)$$

Преобразование исходной дифференциальной задачи (5) — (7) в разностную может быть выполнено с помощью различных разностных схем (3), что обусловливает также получение целого ряда аппроксимирующих дискретных ММ с разными качественными характеристиками. Анализ указанной литературы показывает, что с точки зрения структурной полноты рассмотрения возможных вариантов разностных схем, для ДУЧП гиперболического и гиперболо-параболического типа целесообразно использовать *шести точечный шаблон* (4). Он позволяет построить схемы *двухслойные по времени* и *трехслойные по пространству*, т.е. дает возможность решить задачи: стационарные и нестационарные, а также одно- (линейные), двух- (плоские) и трехмерные (объемные).

Введем следующие сетки:

$$\overline{\omega}_{\Delta g}=\left\{\overline{g}_n=l\,\Delta\overline{g}, l=0,1,\ldots,L\right\}; \omega_{\Delta t}=\left\{t_m=m\,\Delta t, m=0,1,\ldots,M\right\};$$

$$\overline{\omega}_{\Delta g\Delta t}=\overline{\omega}_{\Delta g}\times\omega_{\Delta t}=\left\{\left(l\,\Delta g, m\,\Delta t\right), l=0,1,\ldots,L, m=0,1,\ldots,M\right\},$$

с шагами по пространственным координатам $\Delta\overline{g}=\left\{\Delta r_j, \Delta z\right\}$; $\Delta r_j=r_{\max}/L_r$; $j=\overline{1, N}$; $\Delta z=z_{\max}/L_z$ (для равномерных сеток $\Delta r=\Delta z$) и по временной координате $\Delta t=t_k/M$.

Обозначим через Φ_l^m значение сеточной функции в узле $\left(\bar{g}_l, t_m\right)$, определенной на $\overline{\omega}_{\Delta\bar{g}\Delta t}$. Тогда, заменяя непрерывные производные в уравнениях системы (5) на соответствующие разностные производные, получим:

$$\Phi_{l_i}^{m+1} - \Phi_{l_i}^{m} = \frac{A_i\{\cdot\}}{\Delta r_j^{\,2}}\left[\sigma\left(\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - 2\Phi_{l_i}^{m+1} + \Phi_{(l-1)_i}^{m+1} + (1-\sigma)\left(\Phi_{(l+1)_i}^{m} - 2\Phi_{l_i}^{m} + \Phi_{(l-1)_i}^{m}\right)\right)\right] + \frac{B_i\{\cdot\}}{\left(\Delta r_j + \Delta z\right)}\left[\Phi_{(l-1)_i}^{m+1} -\right.$$

$$\left. - 4\Phi_{l_i}^{m+1} + 3\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} + \Phi_{l_i+1}^{m} - \Phi_{(l-1)_i}^{m}\right] + C_i\{\cdot\}\Phi_{l_i}^{m} + D_i\{\cdot\}U_{l_i}^{m} + E_i\{\cdot\}F_{l_i}^{m};\quad j = \overline{1,N},$$

(8)

где $i = 1, 2, ..., k$; σ — произвольный вещественный параметр $\left(0 \le \sigma \le 1\right)$. Как разностный аналог граничных условий (7) используем следующие выражения:

$$\lambda_j^m \frac{\Phi_{l_i}^m - \Phi_{l_i-1}^m}{\Delta r_j} - K_j^m\, \Phi_{n_i}^m = \Psi_j^m;\, r_j = 0, t \ge 0, i = 1, 2, ..., k;\ j = \overline{1,N}. \qquad (9)$$

Начальные условия имеют вид:

$$\Phi_i(0,l) = \Phi_i^0(l). \qquad (10)$$

Схема (8) описывает однопараметрическое (относительно σ) семейство разностных схем и, в соответствии с общепринятой терминологии, носит название *схемы с весами*. От выбора параметра σ зависит *устойчивость* и *точность* схемы (8) (3).

Рассмотрим схемы, которые соответствуют частным значениям σ. При $\sigma = 0$ и замене частных производных первого порядка по пространству на центральную разницу, т.е.

$$\frac{\partial\Phi_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial r_j} = \frac{\Phi_{(l+1)_i}^m - \Phi_{(l-1)_i}^m}{2\,\Delta r_j},\ j = \overline{1,N};\quad \frac{\partial\Phi_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial z} = \frac{\Phi_{(l+1)_i}^m - \Phi_{(l-1)_i}^m}{2\,\Delta z}$$

получим четырех точечную схему (вырожденный случай для шести точечного шаблона):

$$\frac{\Phi_{l_i}^{m+1} - \Phi_{l_i}^m}{\Delta t} = A_i\{\cdot\}\frac{\Phi_{(l+1)_i}^m - 2\Phi_{l_i}^m + \Phi_{(l-1)_i}^m}{\Delta r_j^2} + B_i\{\cdot\}\frac{\Phi_{(l+1)_i}^m - \Phi_{(l-1)_i}^m}{\left(r_j + \Delta z\right)} +$$

$$+ C\{\cdot\}\Phi_{l_i}^m + D_i\{\cdot\}U_l^m + E_i\{\cdot\}F_{l_i}^m,\ i = 1,2,..., k;\ j = \overline{1,N}. \qquad (11)$$

Данная схема является *явной*. Значения сеточной функции Φ_l^{m+1} в каждой точке слоя $t = (m+1)\Delta t$ (нового слоя) выражается через известные значения $\Phi_{(l+1)_i}^m, \Phi_{l_i}^m, \Phi_{(l-1)_i}^m$ на слое $t = m\,\Delta t$ (старом слое). Поскольку при $t = 0$ задано начальное условие (10), то схема (11) позволяет последовательно определить значения сеточной функции на любом временном слое. Если $\sigma \ne 0$, то схема (8) будет содержать как *явные*, так и *неявные* члены (так называемая *явно-неявная* схема). При $\sigma = 1$ и замене частной производной первого порядка по пространству следующим выражением

$$\frac{\partial\Phi_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial r_j} = \frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - \Phi_{(l-1)}^{m+1}}{2\Delta r_j},\ j = \overline{1,N};\qquad \frac{\partial\Phi_i\left(r_j, z, t\right)}{\partial z} = \frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - \Phi_{(l-1)_i}^{m+1}}{2\Delta z}$$

получим чисто *неявную* схему:

$$\frac{\Phi_{l_i}^{m+1} - \Phi_{l_i}^m}{\Delta t} = A_i\{\cdot\}\frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - 2\Phi_{l_i}^{m+1} + \Phi_{(l-1)_i}^{m+1}}{\Delta r_j^2} + B_i\{\cdot\}\frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - \Phi_{(l-1)_i}^{m+1}}{\left(\Delta r_{j+}\Delta z\right)} +$$

$$+ C_i\{\cdot\}\Phi_l^m + D_i\{\cdot\}U_l^m + E_i\{\cdot\}F_{l_i}^m \ , i = 1,2,..., k; \ j = \overline{1, N} \ . \qquad (12)$$

Уравнение (10) может быть использовано во всей пространственной области $0 < r_j < r_{\max}$; $j = \overline{1, N},\ 0 < z < z_{\max}$, за исключением граничных точек: $r_j = 0$, $r_j = z_{\max}$ та $z = 0$, $z = z_{\max}$. Для указанных точек сеточная функция определяется из граничных условий (9).

Для случая $\sigma = 0{,}5$ получим шести точечную симметричную относительно явных членов схему:

$$\frac{\Phi_{l_i}^{m+1} - \Phi_{l_i}^m}{\Delta t} = A_i\{\cdot\}\left[\frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} - 2\Phi_{l_i}^{m+1} + \Phi_{(l-1)_i}^{m+1}}{2\Delta r_j^2} + \frac{\Phi_{(l+1)_i}^{m} - 2\Phi_{l_i}^{m} + \Phi_{(l-1)_i}^{m}}{2\Delta r_j^2}\right] +$$

$$+ \frac{B_i\{\cdot\}}{2\left(\Delta r_j + \Delta z\right)}\left[\Phi_{(l-1)_i}^{m+1} - 4\Phi_{l_i}^{m+1} + 3\Phi_{(l+1)_i}^{m+1} + \Phi_{(l+1)_i}^{m} - \Phi_{(l-1)_i}^{m}\right] +$$

$$+ C_i\{\cdot\}\Phi_{l_i}^m + D_i\{\cdot\}U_{l_i}^m + E_i\{\cdot\}F_{l_i}^m \ , i = 1,2,..., k; \ j = \overline{1, N} \ . \qquad (13)$$

Схема (13) известна в литературе (1-3) как схема *Кранка-Николсона*. Для нее справедливо замечание, сделанное для схемы (12).

Таким образом, схемы (11), (12) и (13) представляют собою конечномерные (дискретные) аналоги обобщенной ММ основных технологических аппаратов процессов ППСУ и они суть составляют основу программно-алгоритмических инструментальных средств математического моделирования указанных процессов.

Опираясь на работу (3)легко показать, что явная схема (11) устойчива лишь при условии $\left[\Delta t / \left(\Delta r_j \ \Delta z\right)\right] \le 1/2$, $j = \overline{1, N}$ которое связывает шаги $\Delta r_j, \Delta z;\ j = \overline{1, N}$ та Δt. При этом схемы (12) и (13), для которых $\sigma \ge 0{,}5$, устойчивы для любых значений $\Delta r_j, \Delta z;\ j = \overline{1, N}$ и Δt. Кроме того, выполнив разложение в ряд Тейлора для задачи (8) получим, что при $\sigma = 0$ схема аппроксимирует исходную задачу с точностью $e = 0\left[(\Delta t)\right] + 0\left[(\Delta z)^2\right]$, а при $\sigma \ge 0{,}5$ ошибка соответственно составляет $e = 0\left[(\Delta t)^2\right] + 0\left[(\Delta z)^2\right]$.

Разностные схемы (11), (12) и (13) получены с допущением о *нелинейном* и *нестационарном* характере матриц коэффициентов $\mathbf{A}_i$ — $\mathbf{E}_i$ обобщенной ММ вида (1) — (4). Такое допущение достаточно существенно и возникает из того обстоятельства, что в технологическом цикле, даже в пределах одной смены, у сырых углеводородов, поступающих на переработку, могут значительно изменяться такие физико-химические параметры как вязкость, газированность, температура и т.д. Это вызвано тем, что сырые углеводороды могут подаваться на переработку, например, непосредственно из железнодорожных цистерн или из хранилищ, а переход между сырьем с разными параметрами («легкие» и «тяжелые» нефти) может осуществляться за короткое, в технологическом понимании, время. Покажем возможность учета *параметрической нелинейности* разностных схем (11), (12) и (13). Для конкретности дальнейших рассуждений рассмотрим схему (13).

Используя матричную форму записи, представим уравнения схемы (13) в следующем виде:

$$\left[\Phi_{l_i}^{m+1} - \Phi_{l_i}^{m}\right] = \Delta t\left[\left(\mathbf{A}_i + \frac{\mathbf{B}_i}{2(\Delta r_j + \Delta z)}\right)\nabla^2 \Phi_{l_i}\right]^{m+1} +$$

$$+\Delta t\left[\left(\mathbf{A}_i + \frac{\mathbf{B}_i}{2(\Delta r_j + \Delta z)} + \mathbf{C}_i\right)\nabla \Phi_{l_i}\right]^{m} = \left[\mathbf{D}_i U^m + \mathbf{E}_i F^m\right]. \qquad (14)$$

Исходя из предположения о том, что отображение $G:\phi \to \phi$ (где ϕ — банахово пространство, а отображение g задает преобразование по схеме (13)) — *сжатое*, можно утверждать, что для любых $\Phi_{l_i}^1$, $\Phi_{l_i}^2 \in \phi$ выполняется неравенство [6]

$$\left\| G\left(\Phi_{l_i}^1\right) - G\left(\Phi_{l_i}^2\right)\right\| \le q\left\|\Phi_{l_i}^1 - \Phi_{l_i}^0\right\|;\ q \le 1. \qquad (15)$$

Далее воспользуемся методом *простой итерации* (3). При этом, если отображение $G:\phi \to \phi$ — сжато, то (14) имеет единственное решение $\Phi_{l_i}^*$:

$$\left\|\Phi_{l_i}^* - \Phi_{l_i}^{\nu}\right\| \le \frac{q^{\nu}}{1-q}\left\|\Phi_{l_i}^1 - \Phi_{l_i}^0\right\|, \text{ где } \nu \text{ — номер итерации.} \qquad (16)$$

Тогда можно утверждать, что в достаточно малой окрестности решения $\Phi_{l_i}^*$ уравнения (14) для приближений методом простой итерации имеет вид

$$\Phi_{l_i}^{\nu+1} - \Phi_{l_i}^{\nu} = T\left(\Phi_{l_i}^{\nu}\right) - G\left(\Phi_{l_i}^{*}\right). \qquad (17)$$

Принимая, что характер нелинейности одинаков для всех узлов области дискретизации Ω, итерационный процесс (17) завершается условии выполнения критерия

$$\max_{L_r, L_z}\left|\frac{\Phi_{l_i}^{\nu+1} - \Phi_{l_i}^{\nu}}{\Phi_{l_i}^{\nu+1}}\right| \le \delta_{l_i}, \qquad (18)$$

где δ_{l_i} — заданная точность решения.

Отличие предложенного метода состоит в том, что применение при численной реализации обобщенной ММ (выражения вида (1) — (4)) схемы Кранка — Николсона (выражение (13)) обеспечивает на первом шаге решения первую итерацию итерационного процесса (выражение (17)).

Конструктивность и эффективность предложенного метода подтверждено решением прикладных задач по моделированию процесса электро-(термо)обессоливания и обезвоживания сырой нефти. В частности, моделировалось динамическое состояние термодегидраторов, предназначенных для отделения сырой нефти от минеральных солей и пластовой воды. Решение плоской нелинейной нестационарной задачи для дискретной области в 192 узла (сетка размером 16×12) при шаге дискретизации по времени $\Delta t = 90\,\text{с}$ потребовало не более чем 7 итераций для сходимости итерационного процесса (17) и не зависело от изменения входных данных, определяющих значения коэффициентов обобщенной ММ вида (1) — (4).

Вывод. Таким образном, *разработан метод* реализации обобщенной ММ процессов ППСУ, сводящийся к дискретизации непрерывной обобщенной ММ по схеме с весами и дальнейшего решения полученной системы нелинейных дискретных уравнений по процедуре простой итерации.

References

1. AYu P. A design of physical processes and technological informatization is in oil industry and energy / A. Yu. Pogosov, S. A. Polozhaenko, Yu. V. Grigorenko. Odessa: Nauka i technika; 2013. [Google Scholar]
2. Rey W. Methods of management technological processes. M. Mir; 1983. [Google Scholar]
3. Samarsky AA. Methods of decision of net equalizations. M. Nauka; 1988. [Google Scholar]