

УДК 519.8:544.77

ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В НЕФТЯНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ

И. З. Мухаметзянов¹, А. С. Шайхисламов¹

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.

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

¹ 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 τ . 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 τ .

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 τ . 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 па-

раметр), 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 ρ (естественная метрика для рассматриваемой системы) определяется спецификой конкретной системы и критерием качества параметра S_ρ . 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 ρ_{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 γ .

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 ρ_{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:

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

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., Одеа 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