

На правах рукописи

**БАЛАШОВ Владислав Александрович**

**ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ  
ЖИДКОСТИ В ПОРОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ  
ПОРОД-КОЛЛЕКТОРОВ**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование, численные  
методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении  
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики  
им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

**Научный  
руководитель:** кандидат физико-математических наук,  
заведующий сектором,  
**Савенков Евгений Борисович**

**Официальные  
оппоненты:** **Колдоба Александр Васильевич,**  
доктор физико-математических наук,  
МФТИ (ГУ), заведующий Лабораторией  
флюидодинамики и сейсмоакустики

**Кувыркин Георгий Николаевич,**  
доктор технических наук, профессор,  
МГТУ им. Н.Э. Баумана, заведующий  
кафедрой ФН-2 «Прикладная математика»

**Ведущая  
организация:** факультет ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова

Защита диссертации состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 года в «\_\_\_» час.  
«\_\_\_» мин. на заседании совета Д002.024.03 при ИПМ им. М.В. Келдыша РАН  
по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной ма-  
тематики им. М.В. Келдыша РАН и на сайте *www.keldysh.ru*.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук

Корнилина М.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** Одним из основных инструментов, широко используемых в настоящее время для анализа и оптимизации процесса разработки нефтегазовых месторождений, являются постоянно действующие геолого-технологические модели (ПДГТМ) нефтегазовых месторождений. Модели месторождений используются, в частности, для решения таких задач, как разработка и обоснование плана освоения месторождения, определение оптимального метода воздействия на пласт с целью увеличения нефтеотдачи, оптимизация и контроль разработки месторождения, прогноз и оценка технико-экономических рисков и т.д.

Успешность применения методов математического моделирования для решения этих и других задач разработки в значительной степени зависит от качества входных данных и оценки степени их неопределенности. Стандартным способом определения требуемых параметров является проведение тех или иных исследований скважин: геофизические исследования скважин (ГИС), гидродинамические исследования скважин (ГДИС), исследования образцов горной породы (керн), поднятых из ствола скважины во время бурения и др.

Полученные различными способами данные исследований используются для воссоздания полей распределения свойств пласта, не противоречащих результатам всех выполненных измерений и исследований на пространственных масштабах от десятков миллиметров (образец керна) до километров (масштаб всего месторождения).

Несмотря на постоянное совершенствование полевых и лабораторных методов исследования, точность получаемых данных, особенно для коллекторов со сложной структурой, зачастую невысока. Поэтому проблема получения достоверных данных о параметрах пласта, а также оценки степени их неопределенности неизменно остается актуальной.

Коллектор нефти и газа представляет собой систему, образованную скелетом, то есть непроницаемыми для флюида сцементированными зернами породы и подвижным флюидом, заполняющим пространство между ними. Размеры пор, сквозь которые происходит течение флюида, часто очень малы и составляют величину порядка десятков микрометров. Однако физические процессы, происходящие на этих пространственных масштабах, определяют полный спектр свойств фильтрационных моделей макроуровня. Поэтому расширение представлений о процессах, определяющих и сопровождающих процесс вытеснения флюида в масштабе пор, возможность их полноценного качественного и количественного описания являются одними из ключевых факторов, определяющих корректность, и, как следствие, «предсказательную» силу моделей макроуровня, используемых в масштабах всего месторождения или его участка.

Одним из наиболее важных методов исследования являются лабораторные эксперименты с использованием образцов керна, позволяющие опреде-

лять большое количество физических свойств образцов, включая пористость, абсолютную и относительную фазовые проницаемости. Однако они обладают рядом недостатков, среди которых отметим: сложность, а иногда и невозможность получения и обработки качественного кернового материала в достаточных количествах; высокую стоимость и практическую невозможность массового применения ряда методик лабораторных исследований; невозможность проведения множественных экспериментов на одном образце, и, как следствие, невозможность воспроизводимости, в строгом смысле, результатов исследований; невозможность воссоздания полного спектра пластовых условий; невозможность проведения полноценных параметрических исследований.

Одной из бурно развивающихся в последние десятилетия технологий, позволяющих повысить точность описания свойств системы «флюид» – «порода», является совокупность подходов, обычно называемых «цифровой керн» или «виртуальная лаборатория керна» (в англоязычной терминологии – «virtual/digital core laboratory», «digital rock physics», «E-Core technology»). Характеристическим свойством этих подходов, вне зависимости от физики исследуемого процесса (гидродинамика течения флюида в порах, анализ напряженно-деформированного состояния, электрических или акустических свойств и т.д.), является детальное разрешение геометрической структуры порового пространства и учет в используемых математических моделях в известном смысле «первичных» (по сравнению с усредненными моделями макроуровня) физико-химических механизмов, имеющих место на «микроуровне». Сущностью самого подхода является «прямое» математическое моделирование происходящих в пласте процессов на «микроуровне», определяющих как исход макроскопических лабораторных экспериментов, так и динамику фильтрационных процессов в масштабе месторождения.

Технология «цифровой керн» является достаточно «молодой»: основные попытки применения этих технологий на практике предприняты в последнее десятилетие, при этом первые направленные попытки ее применения для анализа реальных пород-коллекторов начались в 1980-х годах.

Основными преимуществами вычислительного эксперимента как дополнительного средства анализа происходящих в пласте процессов и механизмов, определяющих динамику вытеснения флюида, являются: сокращение количества лабораторных экспериментов и сокращение сроков исследования; возможность анализа практически любых образцов породы, включая неконсолидированные породы и шлам; возможность воссоздания в вычислительном эксперименте полного спектра пластовых условий; возможность проведения полноценных параметрических исследований и, как следствие, построение обоснованных оценок степени неопределенности свойств.

На текущем этапе своего развития технологию «цифровой керн» нужно рассматривать как дополнительное средство, позволяющее повысить качество и надежность определения свойств пород-коллекторов и снизить степень неопределенности результатов лабораторных исследований.

Настоящая диссертация посвящена развитию и применению методов гидродинамического моделирования течения флюида в поровом пространстве пород-коллекторов.

Задачи моделирования течений в поровом пространстве образцов горных пород характеризуются большой размерностью ( $\sim 10^6 - 10^8$  ячеек), сложной геометрией расчетной области, сложными физическими процессами (многофазность, многокомпонентность, неизотермичность, химические реакции и др.). В настоящее время для анализа таких процессов используется целый ряд математических моделей и методов расчета, среди которых: модели поровых сетей (pore-network model), метод решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann Method, LBM), метод сглаженных частиц (smoothed particle hydrodynamics, SPH), модели диффузной границы (Diffuse interface, Phase field), модели, основанные на решении уравнений Навье-Стокса/Стокса.

Все упомянутые подходы с той или иной степенью успешности можно применять для решения ряда частных задач моделирования течения флюида в поровом пространстве. Однако ни один из них не лишен некоторых недостатков как в части корректности математической модели и степени ее полноты, так и в части устойчивости вычислительных алгоритмов и возможности эффективной программной реализации.

Среди известных наиболее физически обоснованными являются, по всей видимости, модели типа «диффузной границы». Вместе с тем они являются и самыми сложными. Так, например, соответствующие дифференциальные законы сохранения содержат нелинейные члены с производными высоких (4-го и 5-го) порядков. Поэтому становится актуальным построение методов аппроксимации этих уравнений, обеспечивающих достаточную для практических приложений точность и устойчивость расчета и допускающих сравнительно простую и эффективную программную реализацию.

*Таким образом, разработка математической модели, соответствующих численных методов и комплексов программ для моделирования течений жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов является актуальной задачей.*

**Целью работы** является разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и комплексов программ для анализа течения жидкости в пористой среде с прямым разрешением геометрии порового пространства.

Ввиду высокой сеточной размерности дискретной задачи (для реалистичных образцов число расчетных ячеек может достигать до нескольких десятков миллионов) применение неявных схем в настоящее время вряд ли может дать удовлетворительное решение. По этой причине большинство методов для решения задач рассматриваемого класса основано на использовании явных схем. Построение таких схем представляет собой достаточно сложную задачу ввиду сложности расчетной области и нелинейности уравнений. Таким образом, для достижения поставленной цели потребовалось решение следующих основных задач:

1. Разработка математической модели течения многофазной, многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов на основе существующей квазигидродинамической модели.
2. Разработка разностных алгоритмов ее решения, их программная реализация и последующая оценка применимости разработанной модели для анализа многофазных течений.
3. Разработка параллельного программного комплекса для расчета течений в геометрии, построенной на основе микротомограммы образца горной породы, с использованием квазигидродинамической системы уравнений, его валидация и верификация.
4. Исследование применимости предложенной технологии для анализа однофазных однокомпонентных течений в поровом пространстве образцов горных пород.

В настоящей работе решение указанных задач осуществлено за счет применения квазигидродинамического (КГиД) подхода. Он предложен в работах Б.Н. Четверушкина, Т.Г. Елизаровой и Ю.В. Шеретова. Указанный метод основан на макроскопическом (гидродинамическом) описании среды, является консервативным, термодинамически согласованным, позволяет использовать реалистичные уравнения состояния и изначально позволяет описывать неизотермические течения. Система КГиД уравнений является модификацией системы уравнений Навье–Стокса, в которую включены малые физически обоснованные слагаемые диссипативного характера, что обеспечивает устойчивость логически простых разностных схем с аппроксимацией пространственных производных центральными разностями.

**Научная новизна.** Представленные в работе результаты являются новыми. В частности, новыми являются математическая модель течения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов на основе КГиД подхода, построенный разностный алгоритм для расчета двумерного двухфазного двухкомпонентного течения на основе разработанной модели, разработанный параллельный программный комплекс для расчета однофазных однокомпонентных вязких сжимаемых неизотермических течений на основе КГиД модели в поровом пространстве горных пород.

**Теоретическая ценность и практическая значимость** диссертационной работы состоят в разработанной квазигидродинамической математической модели течения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов, разностном алгоритме расчета двумерных двухфазных двухкомпонентных изотермических течений, программном комплексе для расчета однофазных однокомпонентных течений в поровом пространстве горных пород, в том числе для определения их макроскопических свойств.

## **На защиту выносятся следующие положения:**

1. Предложена квазигидродинамическая модель для описания многофазных многокомпонентных неизотермических течений с учетом поверхностных эффектов.
2. Разработан разностный алгоритм для расчета двумерных двухфазных изотермических течений.
3. Разработан параллельный программный комплекс для расчета вязких сжимаемых неизотермических течений в поровом пространстве образцов горных пород.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечены строгостью используемого математического аппарата и подтверждаются сравнением результатов вычислительных экспериментов с известными в литературе экспериментальными и расчетными данными, а также данными, полученными с помощью других методов.

**Апробация работы.** Результаты диссертационной работы апробированы на международной молодежной конференции «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (г. Дубна, 2014); V Всероссийской конференции «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий», (г. Новосибирск, 2015); семинарах 11-го отдела ИПМ им М.В. Келдыша РАН «Вычислительные методы и математическое моделирование» (г. Москва, 2014, 2015); V научно-практической конференции «Суперкомпьютерные технологии в нефтегазовой отрасли. Математические методы, программное и аппаратное обеспечение» (г. Москва, 2015); семинаре кафедры ФН-2 «Прикладная математика», МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 2015); семинаре «Кафедры вычислительных методов», ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова (г. Москва, 2016).

**Публикации.** Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 6 печатных работах, в том числе в 4 печатных работах в изданиях из перечня ВАК.

**Личный вклад соискателя.** Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю; заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа представлена на 108 страницах, содержит 27 иллюстраций и 7 таблиц. Список литературы содержит 141 наименование.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** проведен обзор литературы по теме исследования, обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, основные положения, выносимые на защиту, приведены данные о структуре и объеме диссертационной работы.

Помимо этого приведено обоснование направления исследования, разработке которого посвящена диссертационная работа, то есть использованию квазигидродинамического подхода для построения эффективных численных аппроксимаций уравнений для описания течений, в том числе многофазных, в геометрии микрообразцов горных пород. Применение указанной технологии требует, помимо прочего, построения КГиД варианта модели течений многофазной многокомпонентной жидкости. Решению этих задач посвящены последующие разделы диссертационной работы.

**В первой главе** приведены основные особенности задач моделирования течений жидкости в геометрии порового пространства пород-коллекторов. Сформулированы требования, обеспечивающие эффективность соответствующего численного метода и его применимость на практике. В качестве метода, удовлетворяющего указанным требованиям, предложен класс методов на основе квазигидродинамической (КГиД) системы уравнений. Приведена КГиД система уравнений для описания однокомпонентного однофазного течения вязкой сжимаемой теплопроводной жидкости. Ниже она представлена без учета массовой силы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m &= 0, & \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p &= \nabla \cdot \mathbf{\Pi}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \mathbf{j}_m \left( \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \nabla \cdot \mathbf{q} &= \nabla \cdot (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}), \end{aligned}$$

где  $\rho$  — плотность,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости,  $\mathbf{j}_m$  — вектор плотности потока массы,  $p$  — давление,  $\mathbf{\Pi}$  — тензор вязких напряжений,  $\varepsilon$  — внутренняя энергия единицы массы,  $\mathbf{q}$  — вектор плотности теплового потока.

Определяющие соотношения:  $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}_{NS} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$ ,  $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$ ,  $\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$ . Здесь  $\mathbf{\Pi}_{NS}$  — классический тензор вязких напряжений Навье-Стокса. Эти соотношения отличаются от классических присутствием в них вектора  $\mathbf{w} = \tau/\rho [(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p]$ , который имеет размерность скорости,  $\tau > 0$  — вещественный параметр, имеющий размерность времени.

При описании течений плотных газов и жидкостей входящие в уравнения члены, пропорциональные  $\tau$ , следует рассматривать как физически обоснованные регуляризаторы, обеспечивающие монотонность центральных разностных аппроксимаций, входящих в уравнения дифференциальных операторов. В этом случае  $\tau$  — малый регуляризирующий параметр, вообще говоря, зависящий от шага пространственной сетки. Термин «физически обоснованные» здесь отражает как способ получения КГиД системы, так и факт наличия

естественных для математических моделей гидродинамики свойств: в частности, соответствующих балансовых соотношений для энергий различных видов и энтропийного неравенства.

**Во второй главе** приведено описание используемой геометрической модели, разностной схемы, включая способ реализации граничного условия прилипания, и разработанного программного комплекса «3dqh» для моделирования течений однофазной жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов.

В разделе 2.1 описана используемая геометрическая модель. В рамках технологии «цифровой керн» геометрия расчетной области является результатом следующей последовательности действий: проводится микротомография образца горной породы, в результате которой получается набор изображений в оттенках серого; затем они объединяются в единое трехмерное «изображение» в виде трехмерного массива; к полученному массиву применяют алгоритмы сегментирования (бинаризации), то есть определения пустотного пространства и породы. В итоге получается трехмерный бинарный массив, описывающий расчетную область: нулевое значение соответствует поровому пространству, а единичное — скелету образца. Отметим, что результат, вообще говоря, зависит от примененного алгоритма сегментирования.

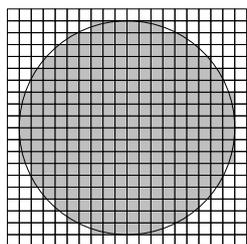
В разделе 2.2 приведено описание используемой разностной схемы. Пространственные производные аппроксимированы центральными разностями. Схема является явной по времени. Поскольку расчетная область строится на основе бинарного трехмерного массива, во всех расчетах использована декартова ортогональная разностная сетка с равными шагами по пространству, значение которых определяется разрешением микротомографии. В разделе 2.3 приведено описание способа реализации граничного условия прилипания.

В разделе 2.4 приведено описание параллельного программного комплекса. Программный комплекс реализован на языке C++ и распараллелен с помощью интерфейса MPI. Расчетная область предварительно разбивается на подобласти с помощью библиотеки Metis. Для задания параметров задачи и расчета используются конфигурационные файлы, написанные на скриптовом встраиваемом языке программирования Lua. Такой подход обладает рядом преимуществ по сравнению с обычными текстовыми файлами. Для ускорения расчета реализован специальный препроцессор, удаляющий из области изолированные от границы расчетной области пустоты. Для визуализации результатов расчетов используется один из распространенных форматов — vtk. Он позволяет использовать мощные средства визуализации, в том числе параллельные. Все расчеты проведены на суперкомпьютере K-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

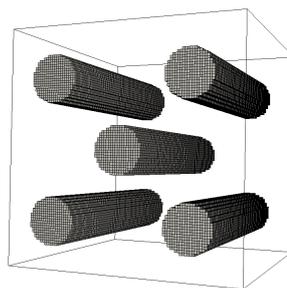
**В третьей главе** рассмотрено моделирование течений однофазной однокомпонентной жидкости при малых числах Маха  $Ma \sim 0.01 - 0.1$ . В рамках валидации и верификации используемой математической модели, вычислительных алгоритмов и разработанного программного комплекса в разделе 3.1 рассмотрен ряд модельных задач, включая задачи обтекания цилиндра квад-

Размер сетки	$h, 10^{-5}\text{м}$	$k, 10^{-10}\text{м}^2$	Число ячеек на радиус трубки
$50^3$	2.0	2.003541	5
$100^3$	1.0	1.956676	10
$200^3$	0.5	1.968025	20
—	точное значение	1.963495	—

Таблица 1. Полученные в расчете значения коэффициента проницаемости  $k$  для модельной пористой среды, состоящей из пяти трубок круглого сечения



(а) Пример приближения геометрии на декартовой ортогональной сетке с равными по пространству шагами



(б) *Поровое пространство* модельной пористой среды, состоящей из пяти трубок круглого сечения

Рис. 1

ратного сечения в ограниченном канале, течения в кубической каверне, в трубе квадратного сечения. Результаты расчетов хорошо согласуются с опубликованными данными или аналитическими решениями.

В рамках валидации методики определения значения коэффициента проницаемости, описанной в разделе 3.2, в пункте 3.3 представлены результаты моделирования течений в образцах модельных пористых сред, для которых значение коэффициента проницаемости может быть найдено аналитически.

Для случая как модельной, так и реалистичной пористых сред на входной и выходной границах расчетной области фиксируются значения давления. На остальных границах области ставятся условия прилипания. Объемный расход  $Q$  вычисляется на основании скорости, усредненной по образцу (скорости фильтрации):

$$U = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \frac{j_y}{\rho} d\Omega, \quad (1)$$

где  $\Omega$  — область, занимаемая всем образцом,  $|\Omega|$  — объем образца. Отметим, что  $\Omega$  включает в себя как поровое пространство, так и скелет. Тогда для объемного расхода имеем выражение  $Q/A = U$ , где  $A$  — площадь сечения образца плоскостью, перпендикулярной направлению течения. В дискретном

случае выражение (1) принимает вид

$$U = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_i \frac{(j_y)_i}{\rho_i},$$

где суммирование ведется только по активным ячейкам. Тогда коэффициент проницаемости  $k$  определяется из закона Дарси:

$$\frac{Q}{A} = -\frac{k}{\eta} \cdot \frac{p_1 - p_2}{L}, \quad (2)$$

где  $p_1, p_2$  — значения давления на входной и выходной границах,  $L$  — длина образца вдоль исследуемого направления. Расчет проводится до тех пор, пока коэффициент проницаемости не перестанет существенно меняться.

В пункте 3.3.1 рассмотрены результаты моделирования течения в образце модельной пористой среды, состоящей из трубок квадратного сечения. Характерной особенностью данного расчета является точное приближение геометрии разностной сеткой. В данном случае на основании решения задачи Пуазейля для течения несжимаемой жидкости в трубе квадратного сечения и закона Дарси (2) можно получить аналитическое значение коэффициента проницаемости.

В пунктах 3.3.2, 3.3.3 рассмотрены результаты моделирования течения жидкости в образцах модельных пористых сред, один из которых состоит из пяти параллельных трубок круглого сечения, а другой — из одной наклонной трубки эллиптического сечения. В данном случае не удается приблизить геометрию расчетной области точно (см. рисунок 1а). В проведенных расчетах значение коэффициента проницаемости стремилось к аналитическому по мере сгущения сетки (см. таблицу 1).

В пункте 3.4 приведены результаты моделирования течений в микрообразцах реальных горных пород с помощью разработанного программного комплекса. На рисунке 2 показаны линии тока, получившиеся при моделировании течения в образце `sandstone_5` вдоль направления  $Ox$ . В таблице 2 приведено сравнение полученных значений коэффициентов проницаемости  $k^{gh}$  с результатами  $k^{plb}$  моделирования течения свободно доступным программным комплексом `Palabos`, основанным на методе решеточных уравнений Больцмана.

**Четвертая глава** посвящена квазигидродинамической модели для описания многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов. В пункте 4.1 представлен краткий обзор методов типа «четкой» и «диффузной» границы, использующихся для моделирования многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов в областях со сложной геометрией. Приведено краткое описание метода функционала плотности и моделей на основе решеточных уравнений Больцмана.

Среди множества используемых в настоящее время вычислительных подходов для моделирования движения многофазной жидкости с прямым разре-

образец	напр.	$k^{qh}$	$k^{plb}$	$\Delta^{plb}$
sandstone_9	$x$	3441	3413	0.8%
	$y$	2803	2784	0.7%
	$z$	2563	2533	1.0%
sandstone_5	$x$	6330	6342	0.2%
	$y$	6590	6602	0.2%
	$z$	6556	6579	0.4%
carbonate_1	$x$	1139	1155	1.4%
	$y$	2107	2135	1.3%
	$z$	1363	1380	1.2%

Таблица 2. Значения коэффициентов проницаемости (мДарси) для микрообразцов горной породы.  $\Delta^{plb}$  — относительные отклонения значений  $k^{qh}$  от значения  $k^{plb}$

шением контактных границ известно два подхода для физико-математической формализации описания процессов, происходящих на границе раздела жидкостей (например, двух фаз с одним компонентным составом, но в разных агрегатных состояниях). Эти подходы носят названия моделей «четкой границы» («sharp interface») и «диффузной границы» («diffuse interface»).

Модель «четкой границы» предполагает, что граница раздела фаз является математической поверхностью (геометрическим объектом нулевой «толщины»). Значения описывающих течение параметров, отнесенных к различным сторонам границы раздела (рис. 3а), могут иметь разрыв и связаны между собой дополнительными условиями, по сути и определяющими модель. Модели типа «диффузной границы» предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы (рис. 3б). Ширина «границы» определяется действующими в жидкости силами межмолекулярного притяжения и отталкивания.

При использовании моделей «четкой границы» в ряде вычислительных алгоритмов «размазывание» границы между фазами также происходит, однако является лишь удобным вычислительным приемом или дефектом разностной схемы, связанным с ее диссипативными свойствами. В моделях типа «диффузной границы» конечная ширина границы является физическим, а не численным эффектом.

В разделе 4.2 в рамках модели типа «диффузной границы» феноменологически выведены уравнения движения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов на основе квазигидродинамического подхода с использованием концепции микросил и микронапряжений.

В основе вывода лежат две ключевые идеи. Во-первых, фазовый состав (микроструктура) жидкости в области пространства описывается заданным в области непрерывным полем «параметра порядка». В качестве последне-

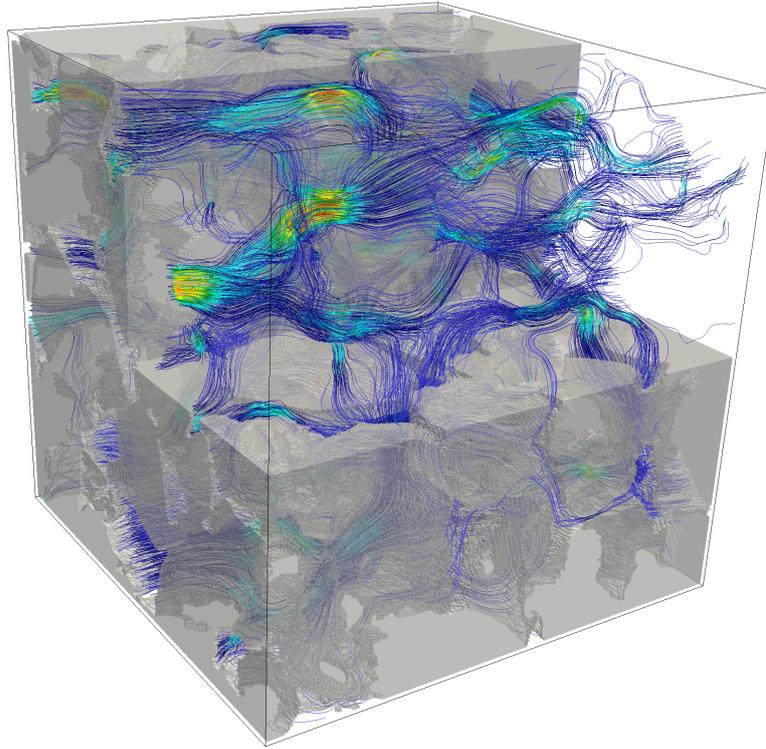


Рис. 2. Линии тока, полученные в расчете течения в образце sandstone\_5 вдоль направления  $Ox$

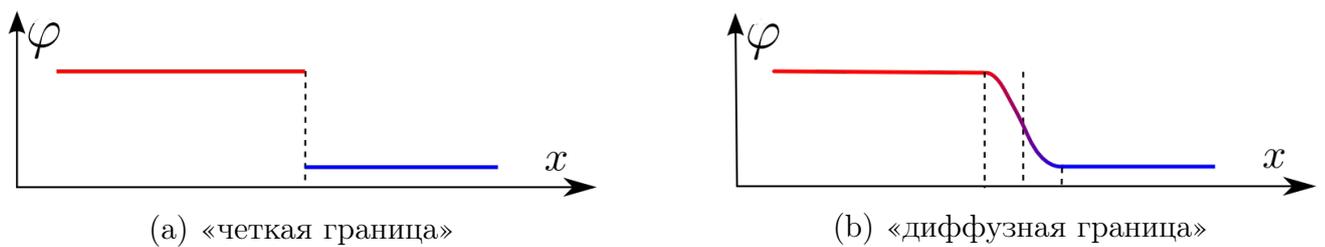


Рис. 3. Представление межфазной границы в моделях «четкой границы» и «диффузной границы». Параметр  $\varphi(x)$  описывает, например, концентрацию одной из фаз в пространстве

го выступают плотность жидкости и/или концентрации образующих его фаз. Предполагается, что в жидкости действует набор микросил и микронапряжений, которые отвечают за эволюцию параметров порядка. Во-вторых, выражения для микросил, микронапряжений и дополнительных квазигидродинамических слагаемых выводятся на основании требования выполнения второго закона термодинамики. Таким образом, безотносительно конкретной содержательной интерпретации микросил и микронапряжений, математическая модель не противоречит основным физическим законам (сохранения массы, импульса, энергии и момента импульса) и положениям термодинамики.

С технической точки зрения проведенный вывод основан на комбинации двух подходов, а именно: подхода, основанного на концепции микросил и микронапряжений, и применении процедуры Колмана-Нолла; феноменологического вывода КГид системы уравнений, предложенного Ю.В. Шеретовым.

При выводе считается, что жидкость состоит из  $N$  компонентов, причем в произвольном физически бесконечно малом объеме могут присутствовать все из них. Пусть в объеме пространства  $dV$  содержится жидкость массы  $dm$ , и отдельные компоненты занимают объем  $dV_\alpha$  и имеют массу  $dm_\alpha$ ,  $dm = \sum_{\alpha=1}^N dm_\alpha$ . Плотность жидкости  $\rho = dm/dV$ , плотность компонента  $\alpha$ , отнесенная к объему  $dV$  жидкости  $\rho_\alpha = dm_\alpha/dV$ . Тогда  $\rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha$ . Массовая концентрация  $C_\alpha = \rho_\alpha/\rho$ . Тогда  $\rho_\alpha = C_\alpha \rho$  и  $\sum_{\alpha=1}^N C_\alpha = 1$ . Законы сохранения для течения многокомпонентной многофазной вязкой теплопроводной сжимаемой жидкости имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0, \quad \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) = \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{f},$$

$$\frac{\partial \rho C_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C_\alpha) = \operatorname{div}(M \nabla \mu_\alpha), \quad \alpha = \overline{1, N-1}.$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m E) = \\ = \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[ \operatorname{div} \left( \frac{d\rho}{dt} \lambda \nabla \rho \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \mu_\alpha m_\alpha + \operatorname{div}(\mu_\alpha M_\alpha \nabla \mu_\alpha) + \operatorname{div} \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \lambda_\alpha \rho \nabla C_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right], \end{aligned}$$

где  $E = \varepsilon + \mathbf{u}^2/2$  — массовая плотность полной энергии,  $\varepsilon$  — массовая плотность внутренней энергии,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости,  $\mathbf{f}$  — вектор массовой плотности внешних сил,  $\mathbf{q}$  — вектор плотности потока тепла,  $\mathbf{a}$  — вектор плотности потока энергии, связанный с работой внутренних напряжений,  $r$  — массовая плотность внешних источников энергии,  $\gamma_\alpha, \gamma, \lambda_\alpha, \lambda$  — внешние микросилы и соответствующие коэффициенты,  $M$  — коэффициент подвижности.

Выписанные выше уравнения необходимо дополнить определяющими соотношениями, которые приведены ниже.

Свободная энергия Гельмгольца

$$\Psi(\rho, \nabla \rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T) = \Psi_0(\rho, C_\alpha, T) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla \rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2, \quad (3)$$

где  $\lambda = \lambda(C_\alpha) \geq 0$ ,  $\lambda_\alpha = \operatorname{const} \geq 0$ . «Локальная часть»  $\Psi_0$  может быть представлена в виде  $\Psi_0(\rho, C_\alpha, T) = \Psi_{sep}(C_\alpha, T) + \sum_{i=1}^N C_i \Psi_i(\rho, T)$ .

Свободная энергия  $\Psi_{sep}$  в случае  $N = 2$  имеет вид, показанный на рисунке 4. При таком выборе  $\Psi_{sep}$  имеет два локальных минимума и один локальный максимум. Поскольку свободная энергия Гельмгольца убывает по мере приближения системы к состоянию равновесия, положение является  $C = 1/2$  неустойчивым, а  $C = 0$  и  $C = 1$  — устойчивыми.

Плотность потока массы определена выражением  $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$ . Для век-

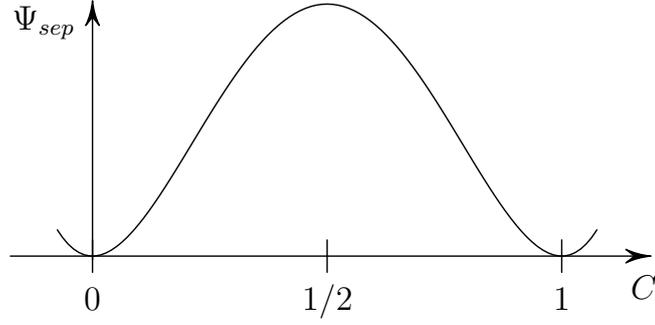


Рис. 4. Вид свободной энергии  $\Psi_{sep} = A_\psi C^2(1 - C)^2$

торов  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$  может быть выбрано, по крайней мере, два определяющих соотношения, причем одно из них оказывается «неявным»: выражение для  $\mathbf{w}$  имеет вид уравнения. Однако, если положить объемную вязкость нулевой  $\zeta = 0$ , то оба замыкания совпадают. В этом случае, имеем:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} \left[ \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \rho\mathbf{f} + \nabla p - \nabla \left( \frac{\lambda}{2} |\nabla\rho|^2 \right) - \right. \\ \left. - \nabla(\rho \operatorname{div}(\lambda\nabla\rho)) + \operatorname{div} \mathbf{Q} - \nabla(\rho\gamma) \right], \\ \mathbf{a} = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - p(\mathbf{u} - \mathbf{w}) + \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} + \\ + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \left[ \rho \operatorname{div}(\lambda\nabla\rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla\rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho\gamma \right]. \end{aligned}$$

Выражение для тензора  $\mathbf{Q}$ , учитывающего поверхностные эффекты:

$$\mathbf{Q} = \lambda \nabla\rho \otimes \nabla\rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha.$$

Выражение для тензора напряжений  $\mathbf{P}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = \eta \left[ \nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T \right] - \eta \frac{2}{3} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} - p\mathbf{I} + \\ + \left( \rho \operatorname{div}(\lambda\nabla\rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla\rho|^2 \right) \mathbf{I} - \mathbf{Q} + \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \end{aligned}$$

где  $\eta$  — коэффициент динамической вязкости,  $\mathbf{I}$  — единичный тензор,  $p = \rho^2(\partial\Psi_0/\partial\rho)$  — термодинамическое давление.

Обобщенный химический потенциал:

$$\mu_\alpha = \frac{\partial\Psi_0}{\partial C_\alpha} - \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\lambda_\alpha \rho \nabla C_\alpha) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial\lambda}{\partial C_\alpha} |\nabla\rho|^2 - \frac{\gamma_\alpha}{\rho} + B_\alpha \frac{1}{\rho} \frac{dC_\alpha}{dt}.$$

Построенная модель является термодинамически корректной, то есть для нее выполняется закон необывания энтропии.

В пункте 4.3 представлена система уравнений для двумерного двухфазного изотермического течения вязкой жидкости и соответствующая разностная схема. Считается, что присутствует два компонента  $N = 2$ , которые не смешиваются. Течение изотермическое, массовые силы и объемная вязкость отсутствуют:  $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ ,  $\zeta = 0$ . Коэффициент  $\lambda_1$  считаем постоянным,  $\lambda = 0$ ,  $\gamma_\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $B_\alpha = 0$ ,  $\Psi_1(\rho) = \Psi_2(\rho) = c_s^2 \ln(\rho/\rho_0)$ , где  $c_s$  — скорость звука (постоянная в рассматриваемом случае),  $\rho_0$  — некоторая постоянная отсчетная плотность,  $\Psi_{sep} = A_\psi C^2(1 - C)^2$ .

Расчетная область имеет форму квадрата, на границах которого заданы периодические граничные условия.

Для построения разностной аппроксимации приведенной системы уравнений использована явная схема с центральными разностями по пространству. Разностная сетка является декартовой ортогональной с равными шагами по пространству.

Для валидации описанной модели, разностного алгоритма и программной реализации проведены следующие расчеты: эволюция капли квадратной формы, слияние двух круглых капель и спинодальный распад (спонтанное разделение однородной смеси на две фазы). Результаты расчетов показывают, что предложенная модель качественно верно описывает эволюцию межфазной границы. На рисунках 5а–5f показаны последовательные этапы слияния двух капель. На рисунке 5а представлено начальное распределение концентрации: синий цвет соответствует 0.1, красный — 0.9.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

Основными результатами выполненной работы являются:

1. Математическая модель течения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов, построенная на основе квазигидродинамической модели. Предложенная модель является термодинамически корректной.
2. Разностный алгоритм для расчета двумерного двухфазного двухкомпонентного изотермического течения. Результаты проведенных расчетов демонстрируют, что предложенная модель и разностный алгоритм качественно верно описывают течение.
3. Параллельный программный комплекс для моделирования вязких сжимаемых неизотермических течений в поровом пространстве, реализованный на основе однофазной однокомпонентной КГиД модели. Серия расчетов течений жидкости, в том числе и в микрообразцах горных пород, показала, что предложенная вычислительная технология может быть применена к рассматриваемому классу задач.

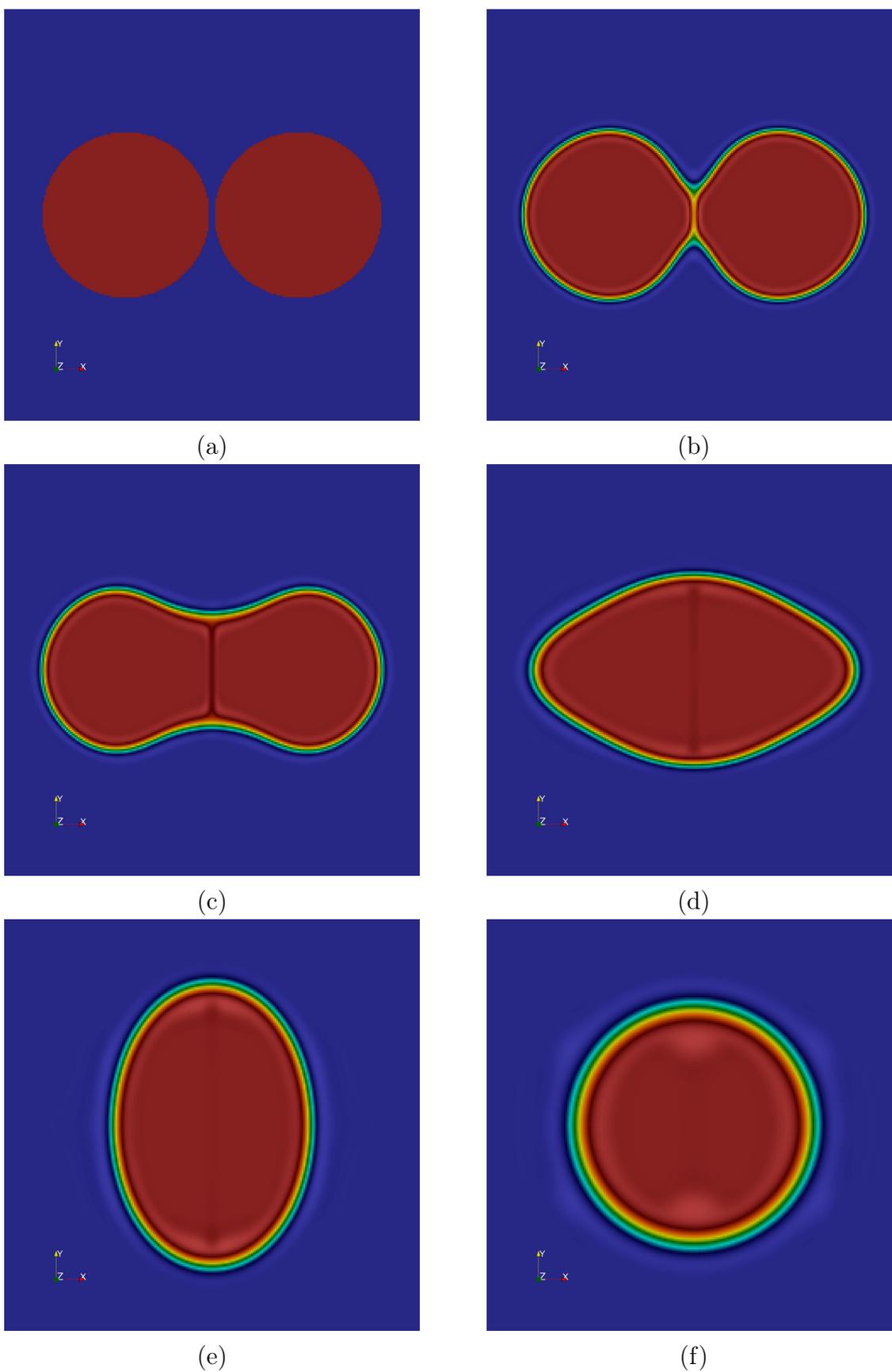


Рис. 5. Последовательные этапы слияния двух капель

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ИЗЛОЖЕНЫ В РАБОТАХ

### В изданиях, рекомендованных ВАК:

1. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численное исследование квазигидродинамической системы уравнений для расчета течений при малых числах Маха // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2015, том 55, №10, с. 1773–1782;
2. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в образцах керна // Доклады академии наук, 2016, том 467, №5, с. 534-536
3. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в микрообразцах горных пород // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. №84. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-84>;
4. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численное исследование двумерной квазигидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. №13. 20 с. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-13>

### Другие публикации:

5. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Феноменологический вывод квазигидродинамической системы уравнений с учетом объемной вязкости. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. №68. 25 с. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-68>;
6. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. №75. 37 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>;