На правах рукописи

Гасилова Ирина Владимировна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ С ГАЗОГИДРАТНЫМИ ОТЛОЖЕНИЯМИ

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2016

Работа выполнена в ФГБУН ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Научный руководитель:	**Повещенко Юрий Андреевич**, д.ф.-м.н., профессор, в.н.с. отдела № 11 «Вычислительные методы и математическое моделирование» ФГБУН ИПМ им. М. В. Келдыша РАН
Официальные оппоненты:	**Каракин Андрей Владимирович**, д.ф.-м.н., профессор, академик РАЕН, г.н.с. Института проблем нефти и газа РАН (г. Москва)
	Лобанов Алексей Иванович, д.ф.-м.н., профессор кафедры вычислительной математики Московского физико-технического института МФТИ (г. Москва)
Ведущая организация:	ФГБУН Институт автоматизации проектирования РАН (г. Москва)

Защита состоится 26 мая 2016 г. в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.03, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В. Келдыша РАН http://keldysh.ru

Автореферат разослан «____» ___________ 2016 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
к.ф.-м.н. М.А. Корнилина

Общая характеристика работы

Актуальность диссертационной работы. Разработка новых математических моделей и вычислительных алгоритмов для моделирования процессов поведения флюидов в пористых средах, содержащих газогидраты, и их реализация в виде комплексов программ для высокопроизводительной вычислительной техники, позволяющих проводить вычислительные эксперименты в полной трехмерной постановке, являются необходимым звеном в развитии энергетической отрасли, связанной с поиском альтернативных источников углеводородных ресурсов. Несмотря на широкое распространение и кажущуюся доступность газогидратных месторождений их освоение сопряжено с большими рисками и трудностями инженерного характера, а экономически эффективное извлечение газа из гидратного соединения является отдельной сложной задачей: коэффициент извлечения газа в различных геологических условиях может варьироваться от 10 до 60% в зависимости от многих факторов. Задача освоения газогидратного месторождения характеризуется совокупностью различных сложных процессов и носит общий характер. Компьютерное моделирование как отдельных явлений, так и технологии разработки в целом является эффективным инструментом в разработке газогидратных залежей.

К настоящему времени сеточные методы расчета флюидодинамики в пористых средах развиты как для регулярных, так и для нерегулярных (неструктурированных) сеток. На их основе для моделирования традиционных месторождений углеводородов создано прикладное программное обеспечение и накоплен многолетний опыт его использования нефтегазовыми компаниями. Однако, полноценные программные пакеты (симуляторы), позволяющие моделировать эксплуатацию газогидратных месторождений, пока ещё находятся в стадии разработки.

Многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов описывается уравнениями механики сплошной среды, выражающими законы сохранения массы, импульса и энергии. Непосредственная явная по времени аппроксимация исходной системы балансов масс и энергий флюидов и каркаса для гидратонасыщенной пористой среды, приводит к условно устойчивой дивергентно-консервативной разностной схеме, требующей измельчения шага по времени по ходу вычислительного процесса. Так, например, происходит в достаточно полном по описанию газогидратных процессов симуляторе MH21-HYDRES, созданном в рамках национальной «гидратной» программы в Японии при поддержке ряда научных и коммерческих организаций. В частности, на конференции по перспективам освоения ресурсов газогидратных месторождений, проходившей в 2009 г. в РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, разработчиками пакета было отмечено, что непосредственное использование схем такого типа крайне затрудняет расчеты эволюционных прикладных задач.

Цели и задачи диссертационной работы. Целью данной работы является разработка и реализация численной методики трехмерного моделирования диссипативных процессов в пористых средах, содержащих газовые гидраты. Работа включает в себя развитие математической модели, разработку разностных аппроксимаций уравнений модели, алгоритмов и программного обеспечения для проведения вычислительных экспериментов. Таким образом, основными задачами в рамках данной работы являются:

- Разработка трехмерной математической модели фильтрации флюидов в пористых средах при наличии газогидратов, учитывающей процессы тепло- и массопереноса, разложения и образования газовых гидратов в поровом пространстве (в предположении о равновесном характере процесса диссоциации газовых гидратов) и сопутствующие изменения в геофизических свойствах пласта (проницаемость, пористость и др.).

- Построение разностных схем на основе метода опорных операторов, применительно к изучаемому классу задач, для уравнений параболического типа на трехмерных неструктурированных сетках.

- Реализация предложенных численных схем и математической модели в виде робастных алгоритмов и программного обеспечения для высокопроизводительных вычислительных систем.

- Исследование и верификация реализованной численной методики на модельных задачах.

- Исследование, с помощью созданного программного обеспечения, диссипативных процессов, происходящих в газогидратных коллекторах при наличии скважин, в частности, на Мессояхском газ-газогидратном месторождении в Западной Сибири.

Методы исследования. Основными методами исследования задач, сформулированных и изученных в процессе выполнения диссертационной работы, являются методы вычислительной математики и вычислительный эксперимент с использованием разработанного программного обеспечения.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые результаты:

- Двухблочная математическая модель, описывающая многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов с расщеплением по физическим процессам, включающая в себя блок с системой гиперболических уравнений относительно водонасыщенности и растепленности на фоне фиксированных скоростей фильтрации, и уравнение пьезопроводности для определения давления в пласте с газогидратными включениями. Расщепление исходной задачи на указанные блоки позволяет проводить расчеты с достаточно крупным шагом по времени и редуцировать систему к матрицам меньшей размерности.

- Применительно к геофизическим задачам с разрывными свойствами пласта и сложной разномасштабной структурой коллекторной зоны разработан новый класс операторно-согласованных разностных схем решения начально-краевых задач для уравнений параболического типа на трехмерных неструктурированных сетках общего вида. Свойства схем (порядок аппроксимации, устойчивость, сходимость) установлены в вычислительных экспериментах с модельными постановками задач.

- Программная реализация разработанной модели, разностных схем и вычислительных алгоритмов в виде программных модулей пакета MARPLE (ИПМ им. М.В. Келдыша), предназначенного для моделирования физических процессов в трехмерных постановках в областях сложной геометрической формы на массивно параллельной вычислительной технике.

- Результаты моделирования диссипативных процессов, происходящих в газогидратных пластах, при наличии добывающих скважин. Моделирование с использованием разработанного программного обеспечения позволило получить количественные данные по формированию депрессионной воронки в зоне разработки пласта с газогидратными отложениями, в том числе дебет-добычные характеристики обработки кустов скважин. В вычислительных экспериментах показано существенное влияние энергии разложения гидратов на распределение давления в коллективной зоне разработки, что соответствует наблюдаемым свойствам реальных месторождений, в частности, Мессояхского газогидратного месторождения.

Теоретическая и практическая значимость работы. В теоретическом отношении методами математической физики исследована система массово-энергетических балансов, описывающая флюидодинамику совместного поведения гидратов, свободной воды, газа и их энергетическое взаимодействие с неподвижным скелетом. В результате исходная краевая задача расщеплена на диссипативную часть, в которой получено основное диссипативное уравнение теории гидратов, определяющее «термодинамическую» эволюцию параметров системы, и сатурационную часть, описывающую «гиперболическое» поведение насыщенностей среды гидратом и флюидами. Установлена определяющая роль скачков удельных объемов и внутренней энергии в процессе фазовых превращений, влияющая на устойчивость эволюции системы как в диссипативно-термодинамическом блоке системы, так и в формировании ее характеристического поведения в сатурационно-гиперболической части. Результаты этих исследований позволяют корректно строить вычислительные алгоритмы для соответствующих уравнений математической физики и адаптивно привлекать ранее существовавшие наработки в вычислительной физике флюидодинамических пластовых явлений.

В практическом отношении созданные программные средства обеспечивают возможность трехмерного моделирования миграции углеводородов в осадочных бассейнах при наличии газогидратной компоненты с учетом неструктурированности сеток (т.е. сетка адаптируется к неоднородному строению пласта и к расположению депрессионных воронок парка разбуриваемых скважин). В сочетании с технологией метода опорных операторов в задаче теории фильтрации это позволяет, распоряжаясь малым числом узлов сетки, детально учитывать сложную структуру пласта.

Достоверность результатов. Достоверность изложенных в работе основных положений гарантируется строгостью математического аппарата, верификацией разработанных разностных схем в численных экспериментах на модельных задачах и апробацией разработанного программного комплекса в вычислительных экспериментах.

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

- German-Russian Conference “Supercomputing in scientific and industrial problems”, Moscow, Russia, March 9-11, 2016.
- 58-я Научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, Россия, 23-28 ноября, 2015.
- International Conference “Parallel Computing ParCo2015”, Edinburgh, Scotland, UK, September 1-4, 2015.
- 3rd ECCOMAS Young Investigators Conference (YIC GACM), Aachen, Germany, July 20-23, 2015.
- 3rd International Exascale Applications and Software Conference (EASC2015), Edinburgh, Scotland, UK, April 21-23, 2015.
- 10th, 12th International seminar "Mathematical Models & Modeling in Laser-Plasma Processes and Advanced Science Technologies", Montenegro, 2012, 2014.
- International Conference “Parallel Computing ParCo2013”, Munich, Germany, September 10-13, 2013.
- VI Сессия научной школы-практикума молодых ученых и специалистов «Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования: технологии eScience», г. Санкт-Петербург, Россия, 9-12 апреля 2013.

Публикации. По теме диссертации всего опубликовано 9 статей, из которых 4 в журналах перечня ВАК, остальные – в рецензируемых изданиях и сборниках трудов научных конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 121 страницу, включая 31 рисунок и 3 таблицы. Список литературы включает 101 наименование.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы исследования, формулируются основные цели исследования и ставятся задачи, которые необходимо решить для достижения целей, раскрывается научная новизна и практическая значимость работы.

На данный момент газогидратная проблематика подвержена всестороннему интенсивному изучению, и одним из основных направлений является развитие математических моделей и вычислительных алгоритмов и создание на их основе компьютерных пакетов – симуляторов для моделирования разработки газогидратных залежей. Анализируется текущее состояние этого вопроса и дается краткий обзор существующих работ в данном направлении.

В **первой главе** даются необходимые сведения о газовых гидратах и гидратосодержащих породах и выделяются основные методы извлечения газа из гидратосодержащих пластов, а также раскрываются практические трудности каждого их подходов.

Приведенные в данной главе основные физико-химические и теплофизические свойства газовых гидратов и гидратонасыщенных сред, такие как энтальпия диссоциации гидратов, теплоемкость и теплопроводность, плотность и молярная масса и т.д., используются при моделировании природных и техногенных процессов образования и разложения газовых гидратов и рассмотрении задач тепломассопереноса в пласте.

Основными способами разложить гидрат на газ и воду непосредственно в пласте являются понижение давления ниже равновесного, тепловое воздействие, комбинация теплового и депрессионного метода и закачка ингибиторов. Наиболее перспективным и экономически выгодным для пластовых месторождений выглядит депрессионный способ, который и был взят за основу работы.

Во **второй главе** описываются идеи и принципы создания математических моделей, и проводится анализ отечественной и зарубежной литературы по существующим подходам к математическому моделированию задач тепломассопереноса в пористых средах, содержащих газовые гидраты, обосновывается выбор развития математических моделей, основанных на балансовых соотношениях в предположении о равновесном характере процесса диссоциации газовых гидратов.

Для моделирования процессов фильтрации и выброса газа в системе газ-вода-гидрат в качестве основы был реализован подход к решению задачи, как краевой задачи математической физики. Многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов описывается уравнениями механики сплошной среды, выражающими законы сохранения массы, импульса и энергии.

Исходные уравнения неразрывности (покомпонентный массовый флюидобаланс в свободном и связанном состояниях):

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\left\{m\left(S_v S_w \rho_w + \left(1-S_v\right)\rho_v \beta_w\right)\right\} + div\left[\rho_w \vec{V}_w\right] + q_w = 0, \\ &\frac{\partial}{\partial t}\left\{m\left(S_v\left(1-S_w\right)\rho_g + \left(1-S_v\right)\rho_v\left(1-\beta_w\right)\right)\right\} + div\left[\rho_g \vec{V}_g\right] + q_g = 0. \end{aligned} \qquad (1)$$

Здесь индексы *g, w, v, s* – относятся, соответственно, к газу, воде, гидрату и скелету пористой среды; $m\left(\vec{r},P\right)$ – пористость минерального скелета (без гидрата); β_w – массовая доля воды в гидрате; S_w– водонасыщенность, S_v – растепленность; $q_{w,g}\left(t,\vec{r},S_w,S_v,P\right)$ – плотности массовых источников.

Уравнения баланса массы дополняются уравнениями фильтрации Маскета-Леверетта, аналогичными закону Дарси для однофазного флюида (с учетом гравитации в среде с общим давлением):

$$\vec{V}_w = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}\left(\nabla P - \rho_w \vec{g}\right),$$
$$\vec{V}_g = -\frac{kk_{rg}}{\mu_g}\left(\nabla P - \rho_g \vec{g}\right). \tag{2}$$

Здесь $k(v)$ – абсолютная проницаемость пористой среды в присутствии гидратов, $k_{rw}(S_w)$, $k_{rg}(S_w)$ – функции относительных фазовых проницаемостей для воды и газа, $\mu_w(P,T)$, $\mu_g(P,T)$ – вязкости воды и газа

Считаем, что процессы распада и возникновения газогидратов происходят в равновесном режиме, когда время кинетических процессов фазовых превращений много меньше характерных времен в элементарном объеме, в котором устанавливается локальное термодинамическое равновесие. Уравнение состояние фазового равновесия дается в виде:

$$T = A\ln P + B. \tag{3}$$

где A и B – эмпирические константы.

Уравнения состояния для реального газа, воды и гидрата имеют вид:

$$\rho_g = \frac{P}{z(P,T)RT},\ \rho_w = Const,\ \rho_v = Const. \tag{4}$$

Здесь $z(P,T)$ – коэффициент сжимаемости газа.

Внутренняя энергия гидрата выражается через энергии составляющих его газа и воды следующим образом:

$$\beta_w i_w + (1-\beta_w) i_g = i_v + h,$$

где h – скрытая теплота фазового перехода единицы массы гидрата, $i_l = \varepsilon_l + P/\rho_l$ – энтальпия, индекс $l \equiv g\,|\,w\,|\,v\,|\,s$ указывает фазу.

Уравнение баланса энергии имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\{m\left(S_v\left(S_w\rho_w\varepsilon_w\right)+\left(1-S_w\right)\rho_g\varepsilon_g\right)\right\}+\left(1-S_v\right)\rho_v\varepsilon_v+\left(1-m\right)\rho_s\varepsilon_s+$$
$$+div\left\{\rho_w\varepsilon_w\vec{V}_w+\rho_g\varepsilon_g\vec{V}_g+P\left(\vec{V}_w+\vec{V}_g\right)\right\}+div\vec{W}+q_s=0, \tag{5}$$

где $\vec{W} = -\left(m\left(S_v\left(S_w\lambda_w+\left(1-S_w\right)\lambda_g\right)+\left(1-S_v\right)\lambda_v\right)+\left(1-m\right)\lambda_s\right)\nabla T$,

$\lambda_l(P,T)$ – коэффициенты теплопроводности.

Система уравнений (1) – (5) полностью описывает фильтрационные процессы в пористой среде с жестким скелетом, насыщенной газовыми гидратами, как при распаде, так и при образовании гидратов. Данная неформализованная краевыми условиями задача является сложной квазилинейной системой уравнений математической физики смешанного типа. Непосредственная аппроксимация исходной дивергентной совокупности балансов масс и энергий флюидов и каркаса в гидратонасыщенной пористой среде явной по времени разностной схемой приводит к измельчающимся в процессе расчетов, неоправданно мелким шагам по времени. Причина этого явления может заключаться в развитии нелинейной неустойчивости данной схемы.

С целью построения эффективных численных методик решения было осуществлено расщепление задачи по физическим процессам на два блока. Первый – сатурационный, выражается системой уравнений (1), которые служат для определения водонасыщенности S_w и растепленности S_v (и скоростей фильтрации). Второй – диссипативный, вычисляет давление на неявном слое по времени, которое затем подставляется в сатурационный блок (по S_v и S_w). Для вычисления давления путем преобразования системы уравнений (1) и (5) с исключением из-под знака дифференцирования по времени обоих сатурационных переменных было получено основное диссипативное уравнение теории гидратов – уравнение пьезопроводности:

$$\begin{gathered} m\delta_\varepsilon\left\{S_v\left[S_w\frac{(\rho_w)_t}{\rho_w}+(1-S_w)\frac{(\rho_g)_t}{\rho_g}\right]+(1-S_v)\frac{(\rho_v)_t}{\rho_v}+\frac{(m)_t}{m}\right\}+ \\ +\frac{\psi}{m\rho_v}\left\{m\left\{S_v\left[S_w\rho_w(\varepsilon_w)_t+(1-S_w)\rho_g(\varepsilon_g)_t\right]+(1-S_v)\rho_v(\varepsilon_v)_t\right\}+\left[(1-m)\rho_s\varepsilon_s\right]_t\right\}+ \\ +\delta_\varepsilon DIG+\frac{\psi}{m\rho_v}DIG_\varepsilon=0 \end{gathered} \tag{6}$$

или в компактной форме: $D_p \frac{\partial P}{\partial t} + \delta_\varepsilon DIG + \frac{\psi}{m\rho_v} DIG_\varepsilon = 0$, где D_p – бароемкость гидратной системы. Величины DIG и DIG_ε даются следующими выражениями:

$$DIG = \frac{1}{\rho_w} div\left(\rho_w \vec{V}_w\right) + \frac{1}{\rho_g} div\left(\rho_g \vec{V}_g\right) + \left(\frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_g}{\rho_g}\right),$$

$$DIG_\varepsilon = \left[div\left(\rho_w \varepsilon_w \vec{V}_w\right) - \varepsilon_w div\left(\rho_w \vec{V}_w\right)\right] + \left[div\left(\rho_g \varepsilon_g \vec{V}_g\right) - \varepsilon_g div\left(\rho_g \vec{V}_g\right)\right] +$$

$$+ div\left[P\left(\vec{V}_w + \vec{V}_g\right)\right] + div\vec{W} + \left(q_s - \varepsilon_w q_w - \varepsilon_g q_g\right) =$$

$$= \rho_w \vec{V}_w \nabla \varepsilon_w + \rho_g \vec{V}_g \nabla \varepsilon_g + div\left[P\left(\vec{V}_w + \vec{V}_g\right)\right] + div\vec{W} + \left(q_s - \varepsilon_w q_w - \varepsilon_g q_g\right).$$

Полученное диссипативное гидратное уравнение содержит в своей структуре «термодинамические» блоки с некоторыми интегрирующими множителями $\psi / m\rho_v$ и δ_ε в виде скачков удельных (на единицу массы) объемов и внутренней энергии при фазовом переходе. Эти неотрицательные множители, отсутствующие в исходной дивергентной форме записи уравнений, могут быть использованы для физического анализа задачи и для явного выделения эволюционно устойчивых аппроксимирующих блоков численными методами.

Исследование свойств каждого из блоков с целью выбора численных схем для их реализации показало, что сатурационный блок отвечает за характеристический перенос сатурационных возмущений, с математической точки зрения это система гиперболических уравнений в независимых переменных S_v, S_w на фоне фиксированных давлений P. При этом показано, что характеристики системы уравнений направлены в разные стороны и, что для устойчивого счета в потоках по растепленности S_v соответствующие в флюидокомпонентах проницаемости k (и производные $k'_{sv} = \frac{\partial k}{\partial S_v}$) необходимо брать вниз по потоку, а в потоках по водонасыщенности S_w соответствующие в флюидокомпонентах относительные проницаемости k_{rw}, k_{rg} (и производные $\left(k_{rw}\right)'_{sw} = \dfrac{\partial k_{rw}}{\partial S_w}$, $\left(k_{rg}\right)'_{sg} = \dfrac{\partial k_{rg}}{\partial S_w}$) – вверх по потоку.

При численном решении этой системы для сатурационного блока можно адаптировать методы, разработанные для систем гиперболического типа, а для диссипативного уравнения – методы решения параболических уравнений.

Проведенное исследование способствует построению явно-неявных разностных схем численного расчета, хорошо масштабируемых и пригодных для вычислений с крупным шагом по времени на технике сверхвысокой производительности.

В **третьей главе** описаны развитые автором разностные схемы для решения поставленных задач на основе метода опорных операторов применительно к геофизическим задачам с разрывными свойствами и сложной разномасштабной структурой пласта. В развитие метода опорных операторов решающий вклад был внесен учеными ИПМ им. М. В. Келдыша РАН –
А. А. Самарским, А. П. Фаворским, В. Ф. Тишкиным, Ю. А. Повещенко,
А. В. Колдобой, М. Ю. Шашковым и др.

В области O с границей ∂O рассмотрим распространенную скалярно-дивергентную краевую задачу, для примера, с граничным условием первого рода:

$$\begin{array}{l} div\vec{X}_u = f(\vec{r}), \\ \vec{X}_u = K\nabla u; \end{array} \quad u|_{\partial O} = u_*(x). \tag{7}$$

Подход, лежащий в основе метода опорных операторов, состоит в согласованной аппроксимации дифференциальных операторов: система уравнений (7) аппроксимируется таким образом, чтобы выполнялся разностный аналог интегрального тождества:

$$\int_O \left(\vec{X}\nabla u\right) dv + \int_O u \cdot div\vec{X} dv = \int_{\partial O} u\left(\vec{X} d\vec{S}\right). \tag{8}$$

В традиционной технике построения разностных схем с помощью опорных операторов, математической основой которой является определение обобщенной производной С. Л. Соболева, выделяются исходный и выводимый с помощью интегральных тождеств разностные операторы. Отличие развиваемого в данной работе подхода заключается в том, что сопряженные друг другу операторы векторного анализа (*div* и *grad*) равноценным образом представлены в разностном аналоге интегрального тождества векторного анализа (8) и оба обладают локальной аппроксимацией (т.е. первично существуют в смысле интегрального соотношения (8)). В этом смысле предлагаемые схемы являются операторно-согласованными, а термин опорный оператор носит традиционно-употребительный характер.

В области O вводится семейство нерегулярных разностных сеток, состоящих из ячеек (Ω), базисов (φ), узлов (ω), ребер (λ) и связанных с ними ($\sigma(\omega)$) – границами балансовых узловых доменов ($d(\omega)$). Базисы (φ) создаются системой исходных (ковариантных) ортов $\vec{e}(\lambda)$, образованных ребрами, исходящими из общего угла треугольной и четырехугольной ячеек (Ω). Под центрами ячеек (Ω) и ребер (λ) будем понимать средние арифметические радиус-векторов узлов (ω) их образующих. Кривая, соединяющая эти центры, представляет собой векторную линию (грань узлового балансового домена):

$$\vec{\sigma}(\lambda) = \sum_{\varphi(\lambda)} V_\varphi \vec{e}'_\varphi(\lambda).$$

Здесь $\vec{e}'_\varphi(\lambda)$ – орты взаимных базисов по отношению к исходным, а V_φ – базисный объем. Замкнутые вокруг узла ω векторные линии ($\vec{\sigma}(\lambda(\omega))$) образуют балансовые узловые домены ($d(\omega)$). Метрическая калибровка трехмерной разностной сетки состоит в выборе объемов базисов (с естественным условием нормировки $\sum_{\varphi(\Omega)} V_\varphi = V_\Omega$). Она определяет конструкцию замкнутой сопряженной сетки для различных классов сеток.

К ребрам исходной сетки отнесем к ним сеточную функцию $\Delta_\lambda u = -\sum\limits_{\omega(\lambda)} S_\lambda(\omega)\cdot u_\omega = u_{\omega^*} - u_\omega$, где $S_\lambda(\omega) = \pm 1$ в зависимости от того, является ли соответствующая вершина ω началом или концом ребра при данном выборе положительного направления. Сеточные векторные поля $\vec{X}$ задаются своими представлениями в базисах $\vec{X}_\varphi$.

Дивергенцию векторного поля, обозначим как $DIV:(\varphi)\to(\omega)$, определим из аппроксимации теоремы Гаусса на узловом домене $d(\omega)$:

$$DIV\ \vec{X} = \sum_{\lambda(\omega)} S_\lambda(\omega)\cdot\tau_X(\lambda),\ \ \tau_X(\lambda) = \sum_{\varphi(\lambda)} V_\varphi\cdot\left(\vec{e}'_\varphi(\lambda),\vec{X}_\varphi\right).$$

Обозначая через $\langle\cdot\rangle_\Delta$ аппроксимацию соответствующих дифференциальных выражений, имеем:

$$\left\langle \int\limits_{\mathcal{O}} \vec{X}\cdot\nabla u\cdot dV \right\rangle_\Delta = -\left\langle \int\limits_{\mathcal{O}} u\cdot div\vec{X}\cdot dV - \int\limits_{\partial\mathcal{O}} \left(u\cdot\vec{X}, d\vec{s}\right) \right\rangle_\Delta =$$

$$= -\sum_\omega \left(u_\omega\cdot(DIV\ \vec{X})_\omega\right) = \sum_\lambda \Delta_\lambda u\cdot\tau_X(\lambda) = \sum_\lambda \Delta_\lambda u\cdot\sum_{\varphi(\lambda)} V_\varphi\cdot\left(\vec{e}'_\varphi(\lambda),\vec{X}_\varphi\right) =$$

$$= \sum_\varphi V_\varphi\cdot\left(\vec{X}_\varphi, \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_\lambda u\cdot\vec{e}'_\varphi(\lambda)\right) = \sum_\varphi V_\varphi\cdot\left(\vec{X}_\varphi,(\nabla u)_\varphi\right).$$

Т.е. оператор $GRAD:(\omega)\to(\varphi)$ задается полем сопряженных (ковариантных) компонент $\Delta_\lambda u$ на сетке (λ) с представлением градиентного векторного поля в локальных базисах (φ):

$$(\nabla u)_\varphi = \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_\lambda u\cdot\vec{e}'_\varphi(\lambda).$$

Для скалярного сеточного поля v на узлах (ω) положим $\vec{X}_{v\varphi} = (\nabla v)_\varphi$. Тогда получим следующее равенство:

$$-\sum_\omega \left(u_\omega\cdot(DIV\ \nabla v)_\omega\right) = \sum_\varphi V_\varphi\cdot\left((\nabla v)_\varphi,(\nabla u)_\varphi\right).$$

Для рассматриваемой системы (3.1) $\vec{X}_{v\varphi} = K_\varphi\cdot(\nabla v)_\varphi$. Тогда последнее равенство примет вид:

$$-\sum_\omega \left(u_\omega\cdot(DIV\cdot K_\varphi\cdot\nabla v)_\omega\right) = \sum_\varphi V_\varphi\cdot K_\varphi\cdot\left((\nabla v)_\varphi,(\nabla u)_\varphi\right).$$

Тем самым получаем самосопряженный неотрицательный оператор $-DIV\ \vec{X}_v : (\omega) \to (\omega)$ или $-DIV\ K\ GRAD : (\omega) \to (\omega)$. Здесь потоковое векторное поле $\vec{X}_v$ дается своими компонентами в базисах $\vec{X}_{v\varphi}$. Оно определяется градиентными свойствами скалярной сеточной функции *v*, заданной в узлах (ω), и сеточным тензорным полем проводимости *K*, задаваемым своими представлениями в базисах K_φ. Этот оператор будет строго положительным, если хотя бы в одном граничном узле связной разностной сетки задана первая краевая задача.

В приведенных выше выкладках рассматривались скалярные и векторные поля величин, определенных в узлах и базисах сетки. Отметим, однако, что аналогичным образом устроенные разностные аналоги векторных и тензорных полей аппроксимируют стационарные уравнения линейной теории упругости. Для них строится семейство поворотно-нейтральных разностных схем метода опорных операторов, не изменяющих силовые и энергетические характеристики разностной среды при параллельных переносах и твердотельных вращениях.

Аппроксимирующие свойства построенной схемы исследовались в численных экспериментах на модельных задачах нелинейной теплопроводности, имеющих автомодельное решение. На решении задачи о распространении фронта температурной волны выполнена практическая оценка порядка аппроксимации схемы опорных операторов. Вычисления проводились на серии сгущающихся сеток с шагом $h,\ h/2,\ h/4$, состоящих из кубических и призматических элементов, а также на серии сгущающихся тетраэдральных сеток. В норме L_2 проводилось сравнение аналитического решения с численным. Принимая погрешность аппроксимации численного решения равной $\varepsilon = c \cdot h^n$, порядок аппроксимации вычислялся по формуле $n = \log_2\left(\dfrac{L_2^h / N^h}{L_2^{h/2} / N^{h/2}}\right)$, где L_2^h – ошибка в норме L_2 на сетке с шагом *h*, *N* –

количество расчетных ячеек, верхний индекс при N – шаг сетки. Для рассматриваемых сеток построенная схема обеспечила порядок аппроксимации $n \geq 1,7$. Также исследовались экспериментально свойства данной схемы в классе разрывных коэффициентов. Решена модельная задача о стационарном распределении температуры в среде с разрывным (кусочно-постоянным) коэффициентом теплопроводности. Решение проводилось счетом на установление. Показано, что схема правильно воспроизводит разрыв производной решения на границе подобластей с различными коэффициентами теплопроводности.

Проведено исследование быстродействия и масштабирования реализованных параллельных вычислительных алгоритмов. Тестирование солвера теплопроводности проводилось на суперкомпьютере «Ломоносов» (НИВЦ МГУ) с использованием различного количества ядер (от 12 до 1500) на сетке, состоящей из 8 млн. ячеек. Метод показал себя эффективным для проведения мультимасштабных расчетов, требующих подробных сеток и работы на высокопроизводительных вычислительных системах.

Основное диссипативное уравнение теории гидратов также содержит дифференциальный оператор вида $(\mathrm{grad}\vec{u})^2$. Для аппроксимации данного оператора рассмотрена устойчивая монотонная схема, представляющая собой трехмерный аналог одномерной противопоточной схемы. В диссертации предложена также более экономичная по затратам машинного времени аппроксимация – посредством представления оператора «квадрата градиента» в виде разности двух операторов второго порядка. Ее реализация обладает тем алгоритмическим удобством, что может быть выполнена на основе все той же схемы опорных операторов. Устойчивость реализованных аппроксимаций была практически исследована на задаче, имеющей автомодельное решение, на последовательно сгущающихся сетках. При использовании регулярных сеток аппроксимации «квадрата градиента» по противопоточной схеме и в форме разности двух операторов второго порядка дают практически одинаковые результаты. Для обеспечения устойчивости расчетов на неструктурированных сетках во второй схеме требуется регуляризация, которая была реализована путем введения поправочных коэффициентов для усиления «диагонального преобладания».

Таким образом, вычислительные эксперименты показали, что разработанная методика эффективна для решения задач как на нерегулярных сетках с различной топологией, так и на ортогональных и регулярных сетках.

В данной работе основное внимание уделено построению схем повышенного порядка для параболического уравнения модели. Для решения гиперболических уравнений сатурационного блока полной модели флюидодинамики на неструктурированных сетках разработана разностная схема «предиктор-корректор» с применением корректирующей искусственной вязкости.

Подход основан на методе тензорной вязкости, заключающийся во введении в схему второго порядка точности диффузионного члена в форме искусственной вязкости вида $\nabla c \cdot h \cdot \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|} \nabla u$. Такая добавка служит для повышения устойчивости явной схемы с центрально-разностной аппроксимацией конвективного потока. В итоге рассчитывается решение трехмерного уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \vec{v} u + \nabla c \cdot h \cdot \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|} \nabla u.$$

Здесь h – характерный размер сеточного элемента. Диадное произведение скоростей в выражении для искусственной вязкости учитывает направление скорости, что при c=1 позволяет получить трехмерный аналог схемы направленных разностей. Корректирующий множитель $0 \le c \le 1$ выбирается на основе анализа гладкости решения. Двухэтапную схему с корректирующей искусственной вязкостью для расчета конвективных потоков для i-го узла разностной сетки в общем виде можно записать следующим образом:

$$\text{предиктор: } \tilde{u}_i = u_i^n + \frac{\tau}{2V_i}\left\langle \nabla \vec{v} u^n \right\rangle_{\Delta_{i1}};$$

$$\text{корректор: } \begin{cases} \widehat{u}_i = u_i^n + \dfrac{\tau}{V_i}\left\langle \nabla \vec{v}\tilde{u} \right\rangle_{\Delta_{i1}}, \\ u_i^{n+1} = \widehat{u}_i + \tau \left\langle \nabla c \cdot h \cdot \dfrac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|} \nabla u^{n+1} \right\rangle_{\Delta_{i2}} \end{cases};$$

Здесь $\langle \cdot \rangle_{\Delta_1}$ и $\langle \cdot \rangle_{\Delta_2}$ обозначают соответственно центрально-разностную аппроксимацию конвективных потоков и аппроксимацию дифференциального оператора второго порядка по методу опорных операторов.

Тестирование реализованной схемы расчета конвективных потоков проводилось на модельной задаче для нестационарного уравнения переноса скаляра (температуры, концентрации и т.п.). Практическое исследование сходимости схемы выполнялось на последовательно сгущающихся трехмерных сетках. Решение по предложенной схеме воспроизводит аналитическое решение точнее, чем противопоточная схема первого порядка. При использовании тетраэдральной сетки требуется более аккуратная настройка корректирующего коэффициента для сглаживания возникающих нефизических осцилляций и сохранения приемлемого качества решения.

В **четвертой главе** описывается программная реализация предложенной модели и численных схем в рамках программного комплекса MARPLE, разрабатываемого в ИПМ им. М.В. Келдыша для трехмерного моделирования физических процессов в областях сложной геометрической формы на сетках общего вида и больших размерностей на параллельной вычислительной технике. Пакет MARPLE написан на языке высокого уровня C++ и основан на передовых методах коллективной разработки программного обеспечении, как то: совместимость с различными ОС и платформами, документирование, система контроля версий, тестирование, модульная структура, интеграция со сторонними пакетами.

В главе подробно описаны разработанные автором классы, реализующие физические солверы и аппроксимации пространственных производных, и их место в общей структуре кода. Функциональность программных средств легко расширяема и модифицируема за счет модульной структуры.

В **пятой главе** представлены результаты моделирования некоторых задач газогидратной тематики, затронутых в данной работе. Начальные данные и константы для постановки задач взяты для газ-газогидратного Мессояхского месторождения в западной Сибири.

Для подтверждения теоретических выкладок, сделанных во второй главе для гиперболического блока о разном направлении характеристик, были проведены расчеты одномерной задачи о распаде разрыва в сатурационном блоке гидратной среды для переноса водонасыщенности и растепленности. Результаты моделирования сатурационного блока находятся в согласии с теоретическими выкладками о характере переноса возмущений. Устойчивый счет гиперболического блока идет, когда относительные проницаемости берутся вверх по потоку (зависящие от водонасыщенности и газонасыщенности), а абсолютная (зависящая от растепленности) – вниз.

По результатам моделирования термодинамической эволюции параметров системы при наличии добывающих скважин в газогидратных пластах можно наблюдать влияние энергии разложения гидратов на распределение давления в пласте. Трехмерные численные эксперименты позволяют наблюдать также коллективный эффект от разложения гидратов в центральной зоне разработки.

В заключении диссертации приведены основные итоги работы и даны необходимые комментарии.

Основные результаты

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Разработана и исследована двухблочная математическая модель, описывающая многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов. На основе принципа расщепления по физическим процессам получено основное диссипативное уравнение теории гидратов для давления – уравнение пьезопроводности.

2. Построены и исследованы операторно-согласованные разностные схемы решения начально-краевых задач для уравнений параболического типа на трехмерных неструктурированных сетках общего вида.

3. Разработано программное обеспечение, реализующее предложенную математическую модель, разностные схемы и вычислительные алгоритмы в виде программных модулей пакета MARPLE (ИПМ им. М.В. Келдыша) для проведения вычислительных экспериментов на многопроцессорных вычислительных системах.

4. Результаты численного моделирования, полученные с помощью созданных программных средств, показали существенное влияние энергии разложения гидратов на рост давления в пласте. Трехмерные численные эксперименты, проведенные впервые, позволяют наблюдать взаимный коллективный эффект влияния энергии разложения гидратов на распределение давления в центральной зоне разработки, в частности, для Мессояхского газогидратного месторождения.

Публикации автора по теме диссертации

В рецензируемых журналах, включенных в список ВАК:

- Гасилов В.А., Гасилова И.В., Клочкова Л.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф. Разностные схемы на основе метода опорных операторов для задач динамики флюидов в коллекторе, содержащем газогидраты. Журнал вычислительной математики и математической физики, Т. 55, № 8, с. 57-71, 2015.
- Повещенко О.Ю., Гасилова И.В., Галигузова И.И., Дорофеева Е.Ю., Ольховская О.Г., Казакевич Г.И. Об одной модели флюидодинамики в пористой среде, содержащей газогидраты. Математическое моделирование, Т. 25, № 10, с. 32-42, 2013.
- Повещенко Ю.А., Галигузова И.И., Гасилова И.В., Дорофеева Е.Ю., Ольховская О.Г., Казакевич Г.И.. Математическое моделирование автоколебательных режимов формирования месторождений нефти и газа. Математическое моделирование, Т. 25, № 11, с. 44-52, 2013.
- Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Гасилова И.В., Дорофеева Е.Ю. Разностные схемы метода опорных операторов для уравнений теории упругости. Математическое моделирование, Т. 24, № 12, с. 86-89, 2012.

В рецензируемых журналах:

- Gasilov V.A., Gasilova I.V., Klochkova L.V., Poveshchenko Yu.A., Tishkin V.F. Difference schemes based on the support operator method for fluids dynamics problems in a collector containing gas hydrates. Computational Mathematics and Mathematical Physics, Vol. 55, No. 8, pp. 1310-1323, 2015.
- Poveshchenko Ju.A., Galiguzova I.I., Gasilova I.V., Dorofeeva E.Ju., Olkhovskaya O.G., Kazakevich G.I. Modeling of Self Oscillating Modes of Formation of Oil and Gas Fields. Mathematical Models and Computer Simulations, Pleiades Publishing, Ltd., Vol. 6, No. 3, pp. 317-323, 2014.

В сборниках трудов конференций:

- Gasilova I., Poveshenko Yu., Boldarev A., Bagdasarov G., Yakobovkiy M. Support Operators Technique for 3D Simulations of Dissipative Processes at High Performance Computers. Proceedings of the 3rd International Conference on Exascale Applications and Software, Edinburgh, Scotland, UK, pp. 32-35, 2015.
- Golovchenko E., Dorofeeva E., Gasilova I., Boldarev A. Numerical experiments with new algorithms for parallel decomposition of large computational meshes. In: Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering (CSE). IOS Press: Advances in Parallel Computing, Vol. 25, pp. 441-450, 2014.
- Агеев П.Г., Колдоба А.В., Гасилова И.В., Повещенко Ю.А., Якобовский М.В., Ткаченко С.И.. Комплексная модель отклика пласта на плазменно-импульсное воздействие. Mathematica Montisnigri, Vol. XXVIII, pp. 75-98, Podgorica, Montenegro, 2013.