

Использование модифицированного метода конечных объемов для моделирования потоков жидкости

И.Н. Чередниченко

НИИСИ РАН, Москва, Россия

Аннотация. Рассматривается решение задачи численного моделирования формирования потоков жидкости под давлением в среде, с изменяемой пористостью. В качестве источника для построения цифровой модели твердой породы, использовались данные, полученные в процессе m-СТ томографии реальных образцов породы. Для численного решения уравнений Навье-Стокса при моделировании поведения жидкости, использовался модифицированный метод конечных объемов, в реализацию которого был добавлен учет изменения проницаемости среды расчетного поля. Для проведения численного эксперимента был построен программный комплекс, позволяющий выбирать различные входные данные среды моделирования, параметров нагнетаемой жидкости и визуализировать полученные результаты. Описываемый подход позволяет проводить многократные неразрушающие исследования образцов породы с различными начальными условиями. Описаны основные модификации разностной схемы метода конечных объемов для учета изменяющейся проницаемости среды. Приведены результаты численного моделирования.

Ключевые слова: цифровой керн, вычислительный эксперимент, метод конечных объемов, визуализация течений, параллельные вычисления.

The modified finite volume method for simulate fluid flows

I.N. Cherednichenko¹

¹ *NIISI RAS, Moscow Nakhimovsky pr. 36/1*

Abstract. The solution of the problem of numerical simulation of the formation of fluid flows under pressure in a medium with variable porosity is considered. The data obtained in the process of m-CT tomography of real rock samples were used as a source for building a digital model of solid rock. For the numerical solution of the Navier-Stokes equations when simulating the behavior of a liquid, a modified finite volume method was used, in the

implementation of which, taking into account the change in the permeability of the computational field medium was added. To conduct a numerical experiment, a software package was built that allows you to select various input data of the simulation environment, parameters of the injected fluid and visualize the results. The described approach allows multiple non-destructive studies of rock samples with different initial conditions. The main modifications of the difference scheme of the finite volume method are described to take into account the changing permeability of the medium. The results of numerical simulation are presented.

Keywords: digital rock physics, computational experiment, finite volume method, flow visualization, parallel computing.

1. Введение

Современные подходы к изучению внутренней структуры образцов твердой породы широко используют результаты компьютерной томографии с высоким пространственным разрешением (m-СТ томография). Такие методы исследования позволяют инструментально исследовать образцы породы с высокой детализацией результатов. Выходные данные таких исследований широко представлены на веб-сайтах коллективов, занимающихся геологическим изучением строения земли[1]. Эти данные доступны в необработанном виде как 3D-карты оптической плотности поглощения рентгеновского излучения. Данные таких исследований могут быть использованы для построения цифровой модели исходного вещества породы исследуемого образца. Для проведения численных экспериментов по воздействию на эти образцы, необходимо построить модель среды, соответствующую реальным данным томографических исследований.

Введем равномерную кубическую сетку, покрывающую область моделирования. Выберем размерность этой области равной размерности данных томографического исследования образца керна и будем считать, что одна точка 3D карты поглощения соответствует одной расчетной ячейке этой области. Для моделирования пористости среды примем упрощение, что идеально твердая порода – это субстанция без пор и пустот, с максимальной оптической плотностью поглощения рассматриваемого образца. Тогда, все изменения плотности породы в сторону уменьшения, можно рассматривать как наличие в породе пор и пустот. Таким образом, для каждой расчетной ячейки можно поставить в соответствие значение коэффициента оптического поглощения из данных томографии. Однако следует отметить, что оптическая плотность поглощения излучения является интегральной характеристикой текущего объема моделирования. Это не позволяет получить дополнительную информацию о поверхностях разделов различных включений и пустот

внутри такого объема, но позволяет оценить общую плотность среды расчетной ячейки. Поэтому, будем рассматривать элементарный объем как некоторую комбинацию твердой породы и пустот, доступных для заполнения жидкостью или газом. Таким образом, исходя из значения поглощения излучения для каждой элементарной ячейки твердой породы, можно построить функцию свободного объема в каждой расчетной ячейке.

Для вычисления этого свободного объема используем тот факт, что реальные значения оптической плотности поглощения можно условно поделить на три группы.

Первая – это ячейки с максимальным коэффициентом поглощения. Они могут быть интерпретированы как ячейки, заполненные сплошной породой и нулевым свободным объемом.

Вторая – это ячейки с минимальным значением коэффициента поглощения, что соответствует свободному объему, занятому воздухом.

Третья группа – промежуточные значения поглощения, которые соответствуют пористой породе.

Для моделирования параметров вычислительной ячейки, связанных с плотностью породы, введем понятие “эффективного объема”, под которым будем понимать отношение пустого пространства к общему объему ячейки:

$$V_e = V_0 \left(1 - \frac{Ro - Ro_{\min}}{Ro_{\max} - Ro_{\min}}\right), Ro > 0$$

$$V_e = V_0, Ro = 0$$

Индексы ячеек по координатам x, y, z опущены, а $V_0 = \Delta x \Delta y \Delta z$ - геометрический объем расчетной ячейки.

Таким образом, из реальных значений карты оптической плотности построена 3D функция эффективных объемов ячеек моделируемой среды, которая позволяет учесть пористость твердой породы и может быть использована для решения задачи компьютерного моделирования наполнения породы жидкостью.

2. Метод конечных объемов

Как уже было сказано ранее, задача данного исследования – изучение процесса заполнения образца породы жидкостью, нагнетаемой под давлением. Жидкость в такой постановке считается несжимаемой, а порода не разрушается. Для решения этой задачи численными методами, необходимо сделать несколько допущений. Первое – рассматривается идеальная несжимаемая жидкость. Второе – жидкости в расчетной ячейке не может быть больше, чем вмещает эффективный объем этой ячейки.

Третье – пока весь доступный эффективный объем не заполнен – жидкость может только втекать в расчетную ячейку.

В остальном, поведение жидкости описывается системой уравнений Навье-Стокса [2], дополненных законами сохранения.

$$\left\{ \begin{array}{l} \oint_{\partial\Omega} (\rho dx - \rho u dt) = 0 \\ \oint_{\partial\Omega} (\rho u dx - (P + \rho u^2) dt) = 0 \\ \oint_{\partial\Omega} (E dx - u(P + E) dt) = 0 \end{array} \right.$$

Для численного решения этой системы уравнений могут использоваться различные численные методы, но из-за изменяемой пористости среды, наиболее подходящими являются консервативные методы, основанные на локальных балансах и законах сохранения всех физических параметров расчетной ячейки. Один из таких методов - метод конечных объемов (FVM), как раз основывается на преобразовании уравнений Навье-Стокса к дифференциальному виду и подсчету локальных балансов для каждой ячейки [3,4]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla u + O(M^2) = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial P}{\rho \partial x} - (\nabla u)u + \nu \Delta u + O(M^3) \\ \nu = (\tau - 0.5) \frac{l^2}{3\delta t} \end{array} \right.$$

где ν - кинематическая вязкость.

Различные реализации численного решения методом конечных объемов присутствуют в таких пакетах как: FLUENT [5], CFX, STAR-CD и т.д. Однако, существующие реализации не позволяют учитывать в разностной схеме изменяемую проницаемость среды. Поэтому было принято решение об оригинальной реализации разностной схемы с модификациями, учитывающими эту особенность решаемой задачи.

Остановимся на существенных отличиях от существующих реализаций и внесенных изменениях.

Как и в классической реализации, решение происходит в два этапа – Эйлера и Лагранжева. На Эйлеровом этапе жидкость считается замороженной и вычисляются мгновенные значения всех параметров на границах ячеек.

Вычисление скоростей потоков не отличалось от стандартной схемы, с аппроксимацией на границах по значениям в соседних ячейках:

$$\Delta u = \frac{\Delta t (P_{+0.5} - P_{-0.5})}{\rho (\Delta x + (u_{+0.5} + u_{-0.5}) \cdot 0.5 \Delta t - \mu \Delta t \Delta x)},$$

здесь μ - вязкость, ρ - плотность жидкости, Δt - шаг по времени. Значения переменных с дробными индексами относятся к аппроксимированным значениям на границах ячеек, координатные индексы $x y z$ опущены для краткости.

Вычисление потоков масс через границы в модифицированном виде уже использует понятие эффективного объема ячейки для учета пористости:

$$\Delta M = \Delta u \cdot \Delta t \cdot (\Delta x_e \cdot \Delta x_e), \text{ где } \Delta x_e = (V_e)^{1/3}.$$

Существенные изменения в реализации разностной схемы были сделаны для выполнения условий заполнения ячейки жидкостью.

Так как поток не может течь из ячейки, в которой еще нет жидкости, то скорость потока на границах будет вычисляться по следующей формуле:

$$u_{\pm 0.5} = \Delta u \cdot I(M_{\pm 1} > V_e \cdot \rho).$$

Условие, того что жидкость не может занять объем, превосходящий эффективный объем ячейки, реализуется выражением:

$$\Delta M = \Delta u \cdot \Delta t \cdot (\Delta x_e \cdot \Delta x_e) I(M_{\pm 0.5} > 0).$$

Здесь I - это индикаторная функция, которая равна 1 при выполнении условия и 0 в обратном случае.

На Лагранжевом этапе происходил учет перемещения жидкости через границы и подсчет окончательных значений параметров потоков.

Давление в ячейке считалось пропорционально отношению доступного и занятого жидкостью объемов:

$$P = P_f + \frac{(P_i - P_f) \cdot \tilde{M}}{V_e \cdot \rho}, V_e > 0$$

$$P = P_f, V_e = 0$$

P_f - фоновое давление воздуха, P_i - давление нагнетаемой жидкости, поступающей в образец породы.

Окончательная скорость жидкости в ячейке вычислялась из закона сохранения импульса и баланса масс.

Реализация граничных условий для расчетной области состояла из трех областей.

Первая область – грань расчетной области, где происходит втекание жидкости. Для этой области задавался слой ячеек, заполненных жидкостью под фиксированным давлением.

Вторая область – боковые грани, на которых формировались слои ячеек с нулевым эффективным объемом, что соответствует условию непротекания.

Третья область – выходная грань расчетной области, где было поставлено условие свободного вытекания жидкости.

Как и все явные схемы, метод конечных объемов чувствителен к выбору шага интегрирования по времени. Оценка устойчивости вполне соответствует физики процесса. Из уравнения зависимости скорости от разницы давления:

$$\Delta u = -\frac{\Delta P \Delta t}{\rho(\Delta x + u \Delta t)}$$

можно увидеть, что если $\Delta x < u \Delta t$, то значение выражения равно 0 или отрицательное. Физический смысл этого явления в том, что жидкость за квант времени моделирования (шаг интегрирования по времени) протекает расстояние большее, чем геометрический размер ячейки и моделирование некорректно. Отсюда получаем оценку максимально возможного шага интегрирования по времени: $\Delta t > \Delta x / u$, или $\Delta t < \Delta x \rho / \Delta P$, что, как оказалось, вполне соответствует действительности.

3. Результаты моделирования

Программа была написана на языке C++, вычислительный алгоритм был построен с использованием распараллеливания расчетов по объему (по координате z). Для реализации параллельных вычислений на Эйлеровом и Лагранжевом этапе использовалась многопоточность с технологией вытесняющей многозадачности с синхронизацией завершения вычислительных потоков. После каждых пяти шагов по времени, вычислялись линии тока, которые визуализировались на экране монитора. Расчет проводился для данных томографических исследований образцов породы с разрешением $200 \times 200 \times 200$ ячеек. В качестве нагнетаемой жидкости использовалась вода, с плотностью 1000 кг/м^3 под давлением от 3 до 7 атмосфер.

На рис. 1 приведены результаты одного из таких расчетов при разных отсчетах времени.

Рис. 2 иллюстрирует результирующую установившуюся картину сформировавшихся потоков жидкости в исследуемом образце породы.

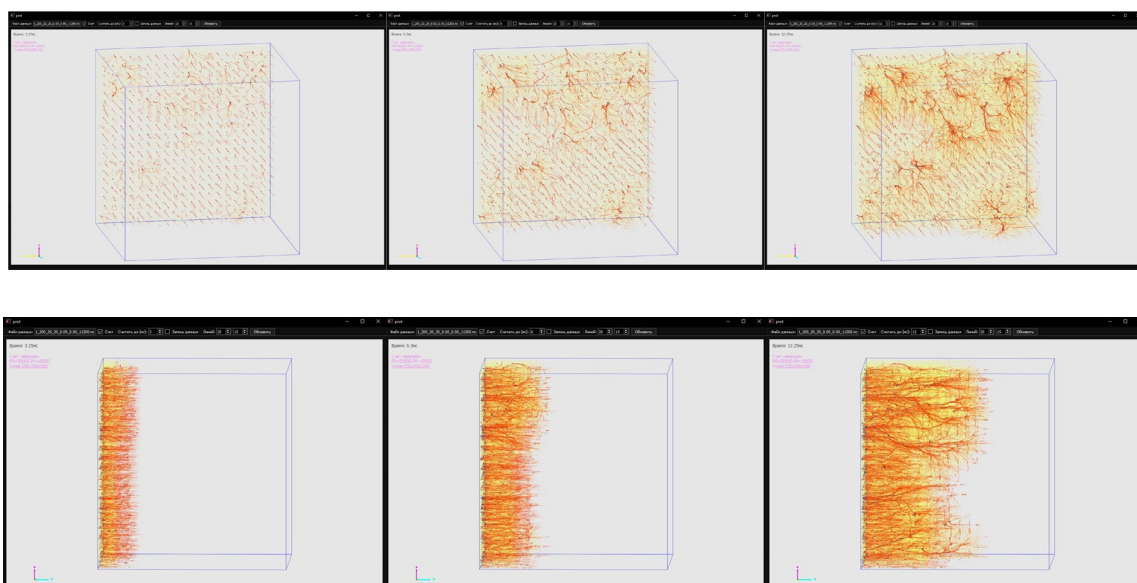


Рис. 1. Процесс формирования потоков в твердой породе

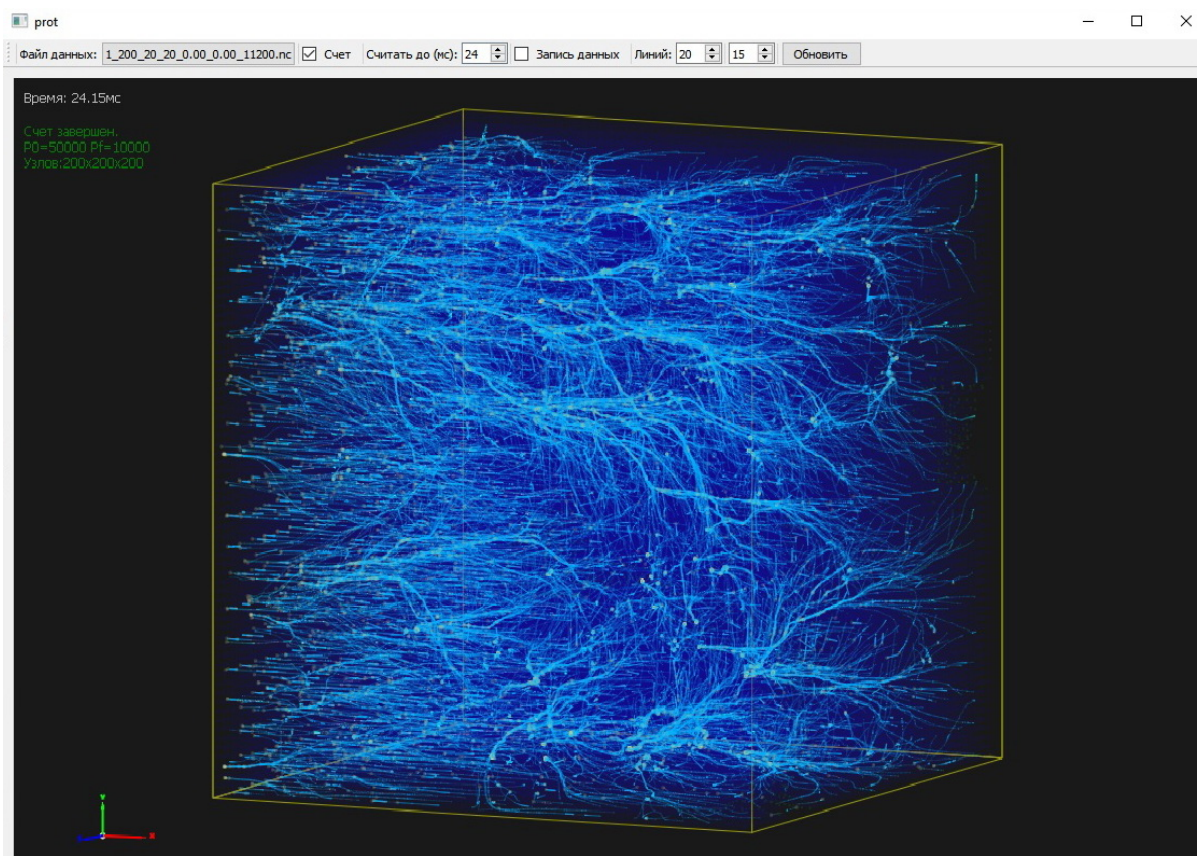


Рис. 2. Установившаяся картина потоков

Интерфейс программы и графическая часть были реализованы с помощью библиотеки QT 5.13 [6].

4. Заключение

В результате выполнения работы, был создан программный комплекс, позволяющий моделировать процесс наполнения различных образцов породы жидкостью под давлением. К особенностям комплекса относится интерактивная 3D визуализация текущего процесса формирования потоков жидкости в твердой породе.

К научным достижениям выполненной работы относится реализация идеи интегрального подхода к учету пористости породы на основе данных томографических исследований, переработанная разностная схема метода конечных объемов, учитывающая структуру проницаемости расчетного поля и проведенные численные эксперименты с визуализацией результатов расчетов.

Созданный программный комплекс позволяет проводить неразрушающие численные эксперименты с существующими данными, полученными в результате томографии геологических образцов. К дополнительным плюсам относится тот факт, что такой подход реализует многократное исследование исходных данных при различных начальных условиях.

Проект выполнен в рамках работы над государственным заданием по проведению фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме «34.9. Системы виртуального окружения: технологии, методы и алгоритмы математического моделирования и визуализации» (0065-2019-0012).

Литература

1. Rock Physics, <http://www.rockphysics.org/>, ссылка в сети Интернет.
2. С. Патанкар. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984.
3. Toro E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics // Springer-Verlag. 1999 г.
4. LeVeque R. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems // Cambridge University Press. 2002.
5. Ansys Fluent, <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>, ссылка в сети Интернет.
6. QT platform, <https://www.qt.io/>, ссылка в сети Интернет.

References

1. Rock Physics, <http://www.rockphysics.org/>, WEB, Internet.

2. S. Patankar. Chislennyye metody resheniya zadach teploobmena I dinamiki zhidkosti. M.: Ehnergoatomizdat, 1984.
3. Toro E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics // Springer-Verlag. 1999 г.
4. LeVeque R. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems // Cambridge University Press. 2002.
5. Ansys Fluent, <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>, WEB, Internet.
6. QT platform, <https://www.qt.io/>, WEB, Internet.