

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН

На правах рукописи

Гасилова Ирина Владимировна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ  
В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ С ГАЗОГИДРАТНЫМИ ОТЛОЖЕНИЯМИ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

*Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук*

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., профессор

*Повещенко Ю. А.*

Москва – 2016

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
Актуальность проблемы.....	5
Цель работы.....	13
Основные задачи.....	13
Методы решения поставленных задач.....	14
Научная новизна.....	14
Практическая значимость.....	15
Положения, выносимые на защиту.....	15
Достоверность результатов.....	16
Апробация результатов.....	16
Личный вклад автора.....	17
Публикации.....	17
Структура и объем диссертации.....	19
Благодарности.....	19
ГЛАВА 1. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ГАЗОВЫХ ГИДРАТАХ.....	20
1.1 Строение и термодинамика образования газовых гидратов.....	20
1.2 Физико-химические и теплофизические свойства газовых гидратов.....	24
1.3 Основные характеристики гидратосодержащих пород.....	26
1.4 Методы извлечения газа из гидратосодержащих пластов.....	29
ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 1.....	31
ГЛАВА 2. МОДЕЛЬ ФИЛЬТРАЦИИ ФЛЮИДОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С ГИДРАТНЫМИ ОТЛОЖЕНИЯМИ.....	33

2.1 Существующие подходов к математическому моделированию задач тепломассопереноса в пористых средах, содержащих газы гидраты.	34
2.2 Модель фильтрации флюидов в пористой среде, содержащей газогидраты: исходная система уравнений и расщепление на функциональные блоки .....	36
2.3 Основное диссипативное уравнение теории гидратов.....	42
2.4 Исследование гиперболических свойств сатурационного блока.....	44
ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 2 .....	48
ГЛАВА 3. ТРЕХМЕРНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ СХЕМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ОПОРНЫХ ОПЕРАТОРОВ.....	50
3.1 Метод опорных операторов для построения дивергентно- консервативных разностных схем на неструктурированных сетках.....	51
3.1.1 Метрические сетки метода опорных операторов .....	54
3.1.2 Аппроксимация дифференциальных операторов второго порядка .....	56
3.1.3 Аппроксимация оператора квадрата градиента скалярной функции.....	59
3.2 Практическое исследование сходимости схемы по методу опорных операторов и решение модельных задач .....	63
3.2.1 Постановка задачи о распространении бегущей волны и результаты моделирования .....	63
3.2.2 Постановка задачи о распространении бегущей волны и результаты моделирования .....	68
3.2.3 Решение задачи о распространении тепловой волны в области с различными коэффициентами теплопроводности .....	70
3.3 Практическое исследование устойчивости аппроксимационной схемы квадрата градиента.....	72

3.4	Схема расчета конвективных потоков.....	75
3.4.1	Метод коррекции потоков.....	76
3.4.2	Практическое исследование сходимости схемы расчета конвективных потоков методом коррекции.....	81
	ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 3 .....	83
	ГЛАВА 4. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	86
4.1	Актуальность разработки и развития специализированных научных кодов.....	86
4.2	Исследовательский программный комплекс MARPLE .....	89
4.2.1	Технологии проектирования, программирования, сборки и коллективной разработки кода.....	89
4.2.2	Архитектура кода и организация расчета .....	91
4.3	Исследовательский программный комплекс MARPLE .....	95
	ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 4 .....	99
	ГЛАВА 5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ.....	100
5.1	Расчеты переноса сатурационных возмущений .....	100
5.2	Расчеты диссипативного блока .....	104
	ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 5 .....	110
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	111
	ЛИТЕРАТУРА .....	112

# ВВЕДЕНИЕ

## Актуальность проблемы

В последние десятилетия программы поиска углеводородных ресурсов все чаще включают исследования нетрадиционных источников газа в связи с прогнозируемым истощением углеводородных ресурсов, усложнением и увеличением стоимости их добычи. На начало 2002 года разведанные запасы нефти составляли  $142 \cdot 10^9$  тонн, природного газа –  $150 \cdot 10^{12}$  м<sup>3</sup> [1]. По общим прогнозам, при текущем уровне потребления энергоресурсов нефти должно хватить еще на 40-50 лет, а природного газа – на 60-100 лет. Из-за выработки доступных месторождений в разработку вовлекаются более глубокие, плохо доступные месторождения со сложным структурным составом пластов, плохой проницаемостью для добываемых ресурсов, зачастую, сложного фазового состава. Это требует разработки дорогих, сложных, наукоемких технологий добычи, и, как следствие, повышается себестоимость конечного продукта. На этом фоне все больший интерес в качестве нетрадиционных источников газа вызывают залежи гидратов природных газов, которые образуются при определенных термобарических условиях из воды и низкомолекулярных газов. Наиболее распространены в природе газовые гидраты метана и диоксида углерода, при этом они обладают большой энергоемкостью: из 1 м<sup>3</sup> гидрата можно получить до 164 м<sup>3</sup> метана. Согласно имеющимся в литературе оценкам мировые запасы газа, заключенного в газовых гидратах, составляют порядка  $2 \cdot 10^{16}$  -  $2 \cdot 10^{17}$  м<sup>3</sup> [2, 3], что на несколько порядков превышает известные запасы традиционного природного газа. Значительный объем потенциальных ресурсов при сравнительно неглубоком залегании на суше и на морском шельфе, а также их широкое распространение являются предпосылками к рассмотрению газовых гидратов в качестве реальной альтернативы традиционным газовым месторождениям. При налаживании

технологий добычи, они будут вводиться в разработку в предстоящие десятилетия.

Запасы природного газа в твердом гидратном состоянии имеет на своей территории множество стран, в том числе Япония, Корея, Индия, не обладающие собственными традиционными месторождениями нефти и газа и вынужденные на сегодняшний день импортировать порядка 90-98% потребляемых энергоресурсов. Выявление и промышленное освоение месторождений газовых гидратов будет способствовать восполнению дефицита энергоресурсов и экономическому развитию отдельных стран, а также развитию нефтегазовой отрасли в целом. Поэтому по всему миру ведутся активные работы по изучению газовых гидратов в государственных и отраслевых коммерческих институтах, проводятся практические и теоретические исследования, экспериментально разрабатываются первые месторождения, учреждаются национальные целевые программы по промышленному освоению газогидратных месторождений. Ежегодно результаты фундаментальных исследований докладываются на различных мировых конференциях и научных форумах, посвященных как нефтегазовой и энергетической отрасли в целом, так и газогидратной тематике в частности. Обсуждаются различные направления данной проблематики: непосредственно природа и свойства газогидратов, технологии разведки и добычи газа из них, методы хранения и транспортировки газа в твердом состоянии, возможность захоронения на дне океана парниковых газов в гидратном состоянии, экологические последствия выделения больших объемов метана в атмосферу и воды океанов вследствие глобального потепления климата.

Исследования газовых гидратов начались еще в конце XVIII века Дж. Пристли, Б. Пелетье и В. Карстеном, первые описания гидрата хлора даны Г. Дэви в 1810 г., а в 1832 М. Фарадеем был приближенно определен его состав. В течении XIX изучаются вещества, способные к образованию гидратов, и условия их образования, получены гидраты компонентов

природного газа: метана, этана и др. В середине XX века после рентгеноструктурных исследований ряда ученых выявляется клатратная природа газовых гидратов. Интенсивному изучению газовых гидратов в это время способствует разработка газонефтяных месторождений в США, так как при транспорте газа в газопроводах возникает проблема образования гидратных пробок. Важным этапом развития газогидратной отрасли послужила выдвинутая советскими учеными в 1940-е годы гипотеза о возможности скопления газовых гидратов в зонах вечной мерзлоты и последующее ее подтверждение в ходе лабораторных исследований. В 1971 г. отечественными специалистами Ю.Ф. Макогоном, А. А. Трофимуком, Н. В. Черским, Ф. А. Требиным, В. Г. Васильевым было сделано важное научное открытие «Свойство природных газов находиться в твердом состоянии в земной коре», зарегистрированное в Государственном реестре открытий СССР под номером 75. Следом за ним дают результаты поиски гидратосодержащих пород в природе: с глубоководной части Черного моря впервые в мире были подняты образцы природных морских газовых гидратов сотрудниками ВНИИГАЗа А.Г. Ефремовой и Б.П. Жижченко, а на севере СССР геологами обнаружены первые месторождения на суше. Так в 1969 г. началось промышленное освоение газ-газогидратного Мессояхского месторождения в Сибири, где впервые природный газ был получен непосредственно из гидратов (по имеющимся на начало 1990 г. данным [4] до 36% общего объема добычи газа приходилось на гидраты). Это дало огромный толчок к развитию газогидратной тематики во всем мире, так как впервые было получено практическое подтверждение возможности промышленного освоения газогидратных залежей и извлечения из них природного газа. На основе исследований А. Г. Ефремовой и Б. П. Жижченко в США стали разрабатываться методы отбора образцов субмаринных газогидратов, а результаты исследований Мессояхского месторождения сотрудниками Норильской лаборатории ВНИИГАЗа М.Х. Сапира, А.Э. Беньяновича и др.

получили развитие в США, Канаде, Японии и других странах и легли в основу методик выделения гидратоносных пород. С начала 2000 г. в Японии в рамках национальной программы по освоению газогидратных месторождений под началом Министерства Экономики, Торговли и Промышленности Японии ведутся активные работы в Тихом океане в районе впадины Нансей, расположенной вдоль юго-западного побережья острова и протянувшейся более чем на 700 км. Это зона повышенной геофизической активности и сейсмичности, богатая скоплениями газовых гидратов метана. Участниками данного проекта являются несколько крупных государственных и коммерческих концернов из Японии, США, а также других стран – промышленных партнеров. В рамках проекта под дном океана были пробурены шесть экспериментальных скважин в 50-ти км от побережья около Токийского залива на разной глубине. Часть из них используется для определения оптимальной конструкции скважин и технологии добычи, часть – для анализа состава различных пластов и возможности извлечения газа из них. Этот всесторонний проект, включающий в себя полевые испытания в сочетании с теоретическими исследованиями и разработкой и использованием современных инженерных пакетов по компьютерному моделированию, является первым проектом по освоению подводных газогидратных месторождений. Результатами данной программы должно явиться создание к 2018 году методики и отработанного процесса для коммерческой добычи газа из субмаринных гидратных месторождений и начало промышленной разработки впадины Нансей.

Природные газовые гидраты представляют собой метастабильные минералы, образование и разложение которых зависит от многих факторов: соотношения температуры и давления, химического состава газа и воды, наличия пористых сред и др. [1]. Теоретические и лабораторные исследования условий стабильности гидратов метана показали, что соответствующие термобарические условия для их образования и



нахождения в твердом состоянии присутствуют в зонах вечной мерзлоты, в шельфовой прибрежной зоне и в глубоководной морской зоне. Т.е. до 20% суши (зоны вечной мерзлоты) и до 90% дна морей, океанов и глубоких озер потенциально могут содержать запасы газа в гидратной форме. При этом на сушу приходится лишь около 2% от общего объема залежей гидратов, а сказать точно, сколько запасов гидратов находится на дне океанов на сегодняшний день не представляется возможным, так как глубоководные исследования сопряжены с большими затратами и трудностями, что и объясняет значительный разброс в оценках запасов газа в гидратах. В России условия для залегания газовых гидратов присутствуют на обширных территориях в зонах вечной мерзлоты и районах северных и восточных морей, глубоководных озер. Залежи газовых гидратов были открыты в Сибири и Забайкалье, на Дальнем Востоке, в озере Байкал, Черном, Каспийском, Охотском, Беринговом и северных морях. Основными организациями, проводящими исследования по газовым гидратам в России, являются ОАО «Газпром», ООО «ВНИИГАЗ», ФГУП ВНИИОкеанологии, а также ряд академических научно-исследовательских институтов и некоторые университеты, например: Институт криосферы Земли СО РАН в Тюмени, институты неорганической химии, катализа, геологии и геофизики в СО РАН в Новосибирске, Тихоокеанский океанологический институт им. В.И.Ильичева ДВО РАН, РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина. Основными направлениями, по которым проводятся исследования, являются: термодинамика и кинетика гидратообразования и разложения, геология и геофизика субмаринных гидратов и гидратов на суше, технологии разработки газогидратных залежей, методы предотвращения техногенного гидратообразования как при разработке газовых и газогидратных месторождений, так и при транспортировке газа, безопасность газодобывающих конструкций в гидратосодержащих грунтах.

На данный момент газогидратная проблематика подвержена всестороннему интенсивному изучению, и можно выделить три основных направления: лабораторные исследования физикохимии, термодинамики, кинетики и различных свойств газогидратов на передовом оборудовании; полевые и морские исследования; развитие математических моделей и создание на их основе компьютерных пакетов – симуляторов для моделирования разработки газогидратных залежей. Несмотря на широкое распространение и кажущуюся доступность газогидратных месторождений их разработка сопряжена с большими рисками и трудностями, а экономически эффективное извлечение газа из гидратного соединения является отдельной сложной задачей. Так, при освоении месторождений Западной Сибири столкнулись с периодическими спонтанными выбросами газа, приводившими к остановкам работ и к пожарам. Крайняя нестабильность, но высокая прочность гидратосодержащих грунтов в сочетании с низкой прочностью подгидратных отложений, в которых присутствует свободный газ [5], создают условия для возникновения подводных оползней по границе контакта пород. Такие оползни создают угрозу неустойчивости и механических повреждений сооружений, опирающихся на дно, будь то добывающие платформы или трубопроводы. Оттаивание гидратов, вызванное присутствием в пластах теплых нефтегазодобывающих конструкций, может привести к потере грунтами своих несущих свойств и, тем самым, деформации и аварийному состоянию скважин и оборудования. Сильное нарастание давления в пласте при разложении гидратов в замкнутом объеме может привести к вспучиванию грунта, спонтанным выбросам газа, образованию провалов. Решение проблем разработки того или иного газогидратного месторождения в пределах одной страны, и даже одного региона, требует индивидуального подхода. Геологические и географические условия залегания газогидратов крайне разнообразны, и одну и ту же технологию добычи нельзя применить для разработки месторождений в условиях

вечной мерзлоты, шельфовых зонных или океанических впадин, не говоря уже о том, что присутствие скопления газовых гидратов еще не означает перспективность его разработки.

Процесс разработки газогидратного месторождения осуществляется вследствие фазового перехода – диссоциация газогидрата на жидкость и газ, с последующим извлечением газа. Разложение газового гидрата может осуществляться различными способами: отклонением термодинамических параметров от равновесных (т.е. повышением температуры или/и снижением давления в пласте), закачкой ингибиторов, электромагнитными или акустическими воздействиями. Коэффициент извлечения газа из гидратов в различных геологических условиях может варьироваться от 10 до 60% в зависимости от многих факторов: эффективности используемой технологии извлечения, коэффициента гидратонасыщенности породы, размеров и потенциальных запасов залежи, степени переохлаждения гидратов [1]. Задача освоения газогидратного месторождения характеризуется совокупностью различных сложных процессов и носит общий характер. В таком случае компьютерное моделирование как отдельных явлений, так технологии разработки в целом, становится неотъемлемой частью освоения газогидратных месторождений.

Численное моделирование гидромеханических и теплообменных процессов в настоящее время получило широкое распространение и активно используется как в фундаментальных, так и в прикладных исследованиях. Сеточные методы решения уравнений термогидромеханических моделей, конечно-разностные или конечно-элементные, изучены очень глубоко, и известно большое количество схем высокого качества [6–9]. Сеточные методы решений уравнений флюидодинамики с учетом диссипативных процессов развиты как для регулярных, так и для неструктурированных сеток. На основе разработанных теоретических методов были созданы пакеты прикладных программ для решения разнообразных индустриальных задач: FLUENT,

ANSYS, LSDYNA, ABAKUS, OPEN FOAM. Так называемые «индустриальные» пакеты программ включают программные средства, разработанные на основе «типовых» постановок задач и соответствующих (конечно-элементных) аппроксимаций. Такие задачи, как правило, хорошо изучены, как и сеточные методики решения соответствующих уравнений. В то же время задачи о динамике флюидов в областях, имеющих сложную, вообще говоря, разноматериальную пространственную структуру, зачастую трудноформализуемы, их постановки не всегда можно свести к «типовым», а численные методы их решения должны обладать специфическими качествами.

Для моделирования традиционных месторождений углеводородов созданы различные программные продукты – симуляторы, и накоплен многолетний опыт их использования нефтегазовыми компаниями. Некоторые из них получили международное признание, в том числе и в России. Однако, полноценные программные пакеты, позволяющие моделировать эксплуатацию газогидратных месторождений, ещё находятся в разработке. Таким образом, является **актуальной** задача разработки новых математических моделей и вычислительных алгоритмов для высокопроизводительных вычислительных систем и их реализации в виде комплексов программ для моделирования процессов флюидодинамики в пористых средах, содержащих газогидраты. В перспективе такие средства позволят оценивать параметры, характеристики и перспективность разработки нового месторождения в конкретных геологических условиях его залегания и прогнозировать ожидаемый объем добычи; восстанавливать историю уже разработанного месторождения; выбирать оптимальную технологию разработки месторождения и выделения газа из гидрата; обеспечивать безопасность людей и конструкций и анализировать экологические последствия освоения месторождения.

## **Цель работы**

Целью данной работы является разработка и реализация численной методики трехмерного моделирования диссипативных процессов в пористых средах, содержащих газы гидраты. Работа включает в себя развитие математической модели, разработку разностных аппроксимаций уравнений модели, алгоритмов и программного обеспечения для проведения вычислительных экспериментов.

## **Основные задачи**

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие основные задачи:

- 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 процессов, происходящих в газогидратных пластах при наличии забойных скважин.

## **Методы решения поставленных задач**

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.

### **Практическая значимость**

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, располагаясь малым числом узлов сетки, детально учитывать сложную структуру пласта.

### **Положения, выносимые на защиту**

- Двухблочная математическая модель, описывающая многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов.

- Операторно-согласованные разностные схемы решения начально-краевых задач для уравнений параболического типа на трехмерных неструктурированных сетках общего вида.
- Разработанное 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.
- Результаты численного моделирования процессов, происходящих в газогидратных пластах при наличии забойных скважин.

### **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**

- 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.
- 3<sup>rd</sup> ECCOMAS Young Investigators Conference (YIC GACM), Aachen, Germany, July 20-23, 2015.
- 3<sup>rd</sup> International Exascale Applications and Software Conference (EASC2015), Edinburgh, Scotland, UK, April 21-23, 2015.



- 10<sup>th</sup>, 12<sup>th</sup> 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.

### **Личный вклад автора**

Все основные результаты получены соискателем самостоятельно. На совместный материал в работе даны ссылки. С научным руководителем Повещенко Юрием Андреевичем обсуждены постановки задач, выполнен анализ системы уравнений и проведено обсуждение результатов вычислительных экспериментов.

### **Публикации**

По результатам диссертационной работы опубликовано 9 статей, из них 6 в рецензируемых научных журналах.

*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.

## **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.

## **Благодарности**

Особую благодарность автор выражает своему научному руководителю, Повещенко Юрию Андреевичу, за помощь в освоении и разборе материалов, легших в основу данной диссертационной работы, и за переданные научные знания.

Большую признательность за помощь в разрешении различных вопросов, возникавших по мере написания работы, автор выражает коллективу сотрудников отдела № 13 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН под руководством д.ф.-м.н., профессора Гасилова Владимира Анатольевича.

Научного руководителя ИПМ им. М. В. Келдыша РАН академика Четверушкина Бориса Николаевича автор благодарит за постоянное внимание к работе.

За постоянное сотрудничество и внимание к работе автор выражает благодарность д.ф.-м.н., профессору Якобовскому Михаилу Владимировичу.

Отдельно благодарит автор свою семью: родителей Надежду и Владимира, брата Сергея и мужа Альберто. Их постоянная поддержка, помощь и участие в жизни автора сделали возможным написание данной работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РНФ № 16-11-00100 и РФФИ № 16-31-00350.

# ГЛАВА 1. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ГАЗОВЫХ ГИДРАТАХ

Газовые гидраты представляют собой нестехиометрические твердые кристаллические соединения-включения – клатраты [11], образующиеся вследствие взаимодействия низкомолекулярных газов и легколетучих органических жидкостей с водой. Молекулы воды за счет водородных связей образуют кристаллическую решетку из ячеек различной пространственной конфигурации, в полости которых захватываются молекулы газа. Слабые межмолекулярные взаимодействия (ван-дер-ваальсовы) между молекулами воды и молекулами газа обеспечивают стабильное и индивидуальное строение ячеек решетки и удерживают молекулы газа в полостях.

По внешнему виду газовые гидраты напоминают собой снег или рыхлый лед и характеризуются общей формулой  $M \cdot nH_2O$  ( $n \geq 5,67$ ), где  $M$  – молекула газа-гидратообразователя [12]. Помимо индивидуальных гидратов также известны двойные и смешанные, в состав которых входят несколько газов. Соединения такого типа образуются при определенном сочетании термобарических и геофизических условий, имеют относительно малую область термодинамической устойчивости и чрезвычайно чувствительны к изменениям условий равновесия своего стабильного существования [13].

## 1.1 Строение и термодинамика образования газовых гидратов

В середине XX века активно исследовалась природа газовых гидратов. В 1936 г. академик Б.А. Никитин в ходе своих исследований предположил, что газовые представляют собой твердые растворы [14]. В 1950х гг. немецкие ученые М. Штакельберг и Г. Мюллер после рентгеноструктурных исследований подтвердили клатратную структуру газовых гидратов [15], их работу продолжили Л. Полинг и Р. Марш.

Большой вклад в понимание структуры газовых гидратов внес американский ученый В. Клауссен, занимаясь кристаллохимическим моделированием [13].

На сегодняшний день выделяют три основные структуры газовых гидратов в зависимости от геометрии и пространственного расположения ячеек водяной решетки, представленные на рисунке 1.1: кубические структуры I и II и гексагональная структура H.

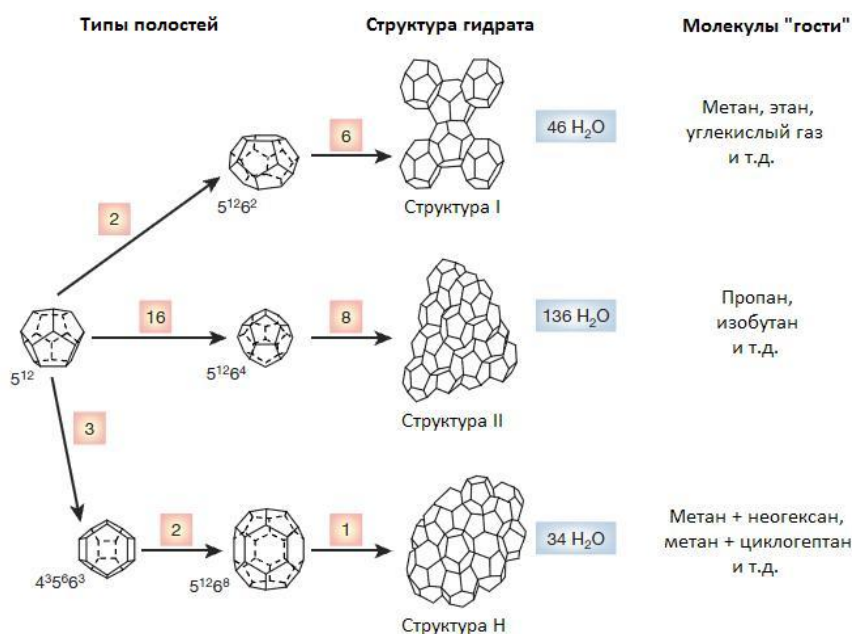


Рисунок 1.1: Основные структуры газовых гидратов. Выражения вида  $5^{12}6^2$  означают, что водный каркас состоит из 12-ти пятиугольных и 4-х шестиугольных граней.

Выделенные числа показывают количество полостей каждого типа. Например, монокристалл структуры I состоит из двух полостей типа  $5^{12}$ , шести полостей типа  $5^{12}6^4$  и 46-ти молекул воды [16].

Каждый кристаллический блок объединяет в себя несколько ячеек водной решетки с различным размером полостей, определяющим диаметр «гостевой» молекулы газа, которая может находиться в той или иной полости. Гидраты со структурой I наиболее распространены в природе, для них характерен самый маленький размер полостей, поэтому они содержат молекулы газа с маленьким диаметром (0,4 - 0,55 нм): метан, этан, аргон, сероводород и т.п. Структура II содержит молекулы газов большего

размера (до 0,7 нм): пропан, изобутан, и преобладает в техногенных средах, а гексагональная структура H может встречаться как в естественных, так и техногенных средах, но только как композиция из малых и больших (до 0,9 нм) молекул [2].

Газовые гидраты образуются и стабильно существуют при низких температурах и высоких давлениях в условиях постоянного притока органического вещества и наличии достаточного количества газа для образования клатратной структуры: в чистом виде кристаллическая решетка из молекул воды, в отличие от решетки льда, существовать не может. При формировании гидрата из газа и воды удельный объем газа становится значительно меньше. Так, при наличии до 164 куб. м. метана в 1 куб. м. гидрата при нормальных условиях, газ в гидрате занимает до 20% от общего объема гидрата [17]. При разложении гидрата удельный объем, занимаемый газами, соответственно увеличивается на несколько порядков, водой – на 26-32%.

Проблеме определения равновесных условий образования, стабильного существования и разложения газовых гидратов посвящено множество работ по всему миру. Большой вклад в экспериментальные исследования по фазовым равновесиям газовых гидратов и кинетики их образования внесли Дитон и Фрост [18], продолжившие их исследования Кац и Кобаяши [19], Ю. Ф. Макогон [20], С. Ш. Бык и В. И. Фомина [12]. Было получено множество экспериментальных данных по термодинамическим условиям образования и разложения основных компонентов природного газа (метан, этан, пропан, изобутан, азот, диоксид углерода, сероводород), которые можно найти во многих источниках [12, 17, 20-22]. На основе экспериментальных данных получены графические и аналитические методы определения равновесных параметров гидратообразования, построены гетерогенные фазовые диаграммы, представляющие графически области существования гидратов конкретных газов. Наиболее распространены p, T-диаграммы Розебома –

Штакельберга, одна из которых, представленная на рисунке 1.2, описывает гетерогенное равновесие в трехфазной двухкомпонентной системе:

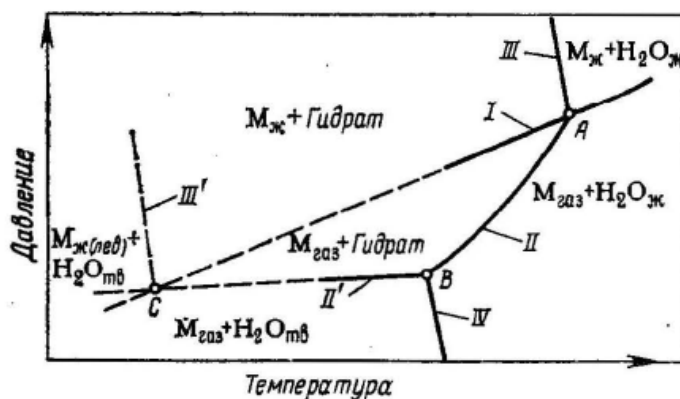
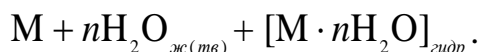


Рисунок 1.2: Фазовая диаграмма Розебома для трехфазной двухкомпонентной системы: I – температурная зависимость давления насыщенного пара гидратообразователя (M); II и II' – зависимость давления пара M над гидратом в присутствии жидкой воды и льда соответственно; III и III' – зависимость температуры плавления гидрата от давления в области существования жидкой воды и льда соответственно; IV – изменение температуры замерзания воды при растворении в ней гидратообразователя M [12].

Область существования гидрата, образованного из газа M и жидкой воды или льда ограничена кривыми II'–II–III. По правилу фаз Гиббса трехфазная двухкомпонентная гидратная система является моновариантной, т.е. обладает одной степенью свободы (температурой или давлением) [12]. Следовательно, для газового гидрата, находящегося в равновесии с жидкой водой или льдом, зависимости  $P_{дис} = f(T)$ ,  $T_{дис} = f(P)$  носят однозначный характер. Равновесные параметры разложения гидрата описываются аналитическими зависимостями следующего вида[10]:

$$\ln p = A - B / T, \quad (1.1)$$

где  $T$  - температура в K,  $P$  - давление в МПа,  $A$  и  $B$  – эмпирические параметры, характерные для определенного газового гидрата и месторождения, при этом параметр  $B$  связан с энтальпией процесса

разложения гидрата. Аналитические формулы позволяют производить расчеты с достаточно степенью точности при решении инженерных задач. Соответствующие параметры широко представлены в литературе и руководствах по разработки газовых месторождений [12, 17, 23].

В основе теоретических моделей изучения процессов образования и свойств клатратов лежит аппарат статистической термодинамики. Процесс гидратообразования рассматривается как формирование метастабильной пустой клатратной решетки, которая затем заполняется молекулами газа согласно изотерме Лэнгмюра [12]. Первыми упрощенную модель гидратообразования предложили в своих работах Ван-дер-Ваальс [24] и Ван-дер-Ваальс с Платтеу [25]. Над ее развитием и уточнением работали и Баррер и Стюарт [26], Пэрриш и Праустниц [27], Энг и Робинсон [28]. Современные пакеты компьютерного моделирования, такие как: CSMHYD, EQUI-PHASE Hydrate, Hysys, Prosim, K-factor method, содержат методы для расчета условий гидратообразования, его прогнозирования и предупреждения, основанные на данных моделях.

## **1.2 Физико-химические и теплофизические свойства газовых гидратов**

На сегодняшний момент различные свойства газовых гидратов изучены достаточно хорошо, полный их обзор можно найти в литературе [12, 17, 20-22, 29]. Большое количество физических параметров имеет схожие значения для гидрата и льда, что осложняет изучение свойств газовых гидратов в естественных условиях. Однако газовые гидраты обладают рядом принципиально важных особенностей.

Одним из важнейших параметров при моделировании процессов фазового равновесия и процессов диссоциации газовых гидратов является теплота гидратообразования (или энтальпия диссоциации) [21]. Она равна количеству теплоты, которое необходимо для разложения гидратного соединения на воду и газ при равновесных температурах и давлениях и, в



таком случае, является функцией температуры и давления. Экспериментально полученные значения [22] для теплоты фазового перехода гидратов лежат в пределах 480–540 кДж/кг. При гидратообразовании теплота выделяется, и энтальпия положительна, при разложении гидрата – отрицательна.

Особенность формирования клатратных соединений за счет благоприятной геометрии расположения молекул-гостей в полостях водного каркаса, малых затрат энергии на перестройку льда в клатратный каркас и существования таких структур за счет сил Ван-дер-Ваальса дает выигрыш энергии по сравнению с энергией смеси составляющих структуру компонентов при тех же условиях. Гидратообразующие вещества, будучи заключенными в водный клатратный каркас, в основном сохраняют свою химическую индивидуальность, равно как и вода [13]. Для сравнения, теплота разложения гидрата метана  $\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  на газ и жидкую воду при 0°C и 1 атм составляет лишь 54,2 кДж/моль [21], тогда как теплота сгорания свободного метана – 890 кДж/моль.

В 1979 г. Брайаном и Столом [30] был впервые замечен аномально низкий коэффициент теплопроводности у гидратов метана и пропана, который составил 0,4 Вт/м·К при температуре 273 К. Дальнейшие исследования теплопроводности [30, 32-34] показали, что теплопроводность газовых гидратов (0,55–0,65 Вт/м·К) ниже теплопроводности льда (2,23 Вт/м·К) приблизительно в 4 раза и почти равна теплопроводности воды (0,6 Вт/м·К). Интересен также тот факт, что теплопроводность газового гидрата (в отличие от теплопроводности большинства кристаллических тел, в т.ч. льда) резко возрастает с повышением температуры, причем состав самого газового гидрата незначительно влияет на величину коэффициента теплопроводности.

Теплоемкость газовых гидратов в работе [22] рекомендуется вычислять по аддитивной схеме учета их компонентов, т.е. клатратной

водной решетки и включенных молекул. Широкий обзор экспериментальных данных оценки теплопроводности приведен в [21]. Так как основной вклад в теплоемкость гидратов вносит водная составляющая, то теплоемкость газогидратов можно приближенно принимать равной теплоемкости льда – 2250 Дж/кг·К.

Молярные массы гидратов природного газа, в которые также основной вклад вносит вода, слабо различаются и лежат в пределах 17,74 – 21,59 г/моль. Плотности газовых гидратов вычисляется аналитически в работах [12, 17, 34, 35] в зависимости от структуры и состава гидрата. Для большинства гидратов природного газа их плотности ниже плотности воды и льда (для гидрата метана плотность составляет 900 кг/м) и слабо изменяются в зависимости от давления.

### **1.3 Основные характеристики гидратосодержащих пород**

Специфические условия, необходимые для образования газовых гидратов, ограничивают зоны стабильного их существования в природе поясами вечной мерзлоты и дном глубоководных озер и океанов. В областях вечной мерзлоты гидраты образуются ниже зоны промерзания, в донных отложениях морей и океанов – на глубинах ниже 300 м. При отрицательных температурах возможно образование гидратов на меньших глубинах. Наиболее распространенным газом, принимающим участие в образовании природных газовых гидратов, является метан.

Равновесные параметры образования и разложения гидратов в естественных условиях в значительной степени определяются физико-геологическими свойствами породы, как то: пористость, степень минерализации воды в пористой среде, состав пород и т.д. Влияние этих факторов широко освещено в работах [36-40]. Процессы формирования и диссоциации гидратов в поровом пространстве характеризуются понижением температуры образования гидратов со свободной водой при

одинаковых давлениях и наличием явления гистерезиса («самоконсервации» газовых гидратов) [36].

В литературе [21] в результате экспериментов с кварцевыми песками авторами показано, что при гидратообразовании удельный объем поровой воды увеличивается до 30% , вследствие чего происходит пучение породы. Увеличение объема образца ведет к увеличению пористости при незначительном понижении плотности. В свою очередь разложение газовых гидратов в песчаных и глинистых породах ведет к усадке образцов, повышению плотности, деформации пласта вследствие потери связности минеральных частиц.

Одними из важнейших характеристик гидратосодержащих пластов являются пористость и проницаемость породы. Они определяют фильтрационные свойства породы, влияющие на возможность и технологию добычи газа из гидратосодержащих пластов. Пористая среда содержит большое число пустот (пор), соединенных между собой системой каналов, по которым могут течь жидкости и газы. Простейшим примером пористой среды является песок, хорошо пропускающий воду. В общем случае пористые среды представляют собой твердый скелет спрессованных частиц, пронизанный системой сообщающихся пустот, заполненных жидкостями и (или) газами [41]. В свою очередь, под пористостью среды  $m$  понимают безразмерную величину, равную объемной доли пустот в единице объема пористой среды. При этом с точки зрения фильтрационной способности интересна только так называемая активная пористость, учитывающая только сообщающиеся между собой поры.

Проницаемость пористой среды  $k$  характеризует пропускную способность пористой среды для жидкостей и газов. Она имеет размерность  $m^2$ , в инженерной практике часто используется размерность Дарси, 1 Д приблизительно равен  $1 \text{ мкм}^2$ . Пористость и проницаемость сред

изменяются в широких пределах, в таблице 1.1 представлены значения данных величин для наиболее распространенных сред.

Таблица 1.1. Значения пористости и проницаемости для некоторых пород [41]

	Пористость, бр	Проницаемость, м <sup>2</sup>
Торф	0,6 – 0,8	10 <sup>-12</sup> – 10 <sup>-13</sup>
Грунт	0,4 – 0,6	10 <sup>-12</sup> – 10 <sup>-16</sup>
Глина	0,35 – 0,55	10 <sup>-16</sup> – 10 <sup>-19</sup>
Песок	0,25 – 0,35	10 <sup>-12</sup> – 10 <sup>-14</sup>
Песчаник	0,1 – 0,2	10 <sup>-14</sup> – 10 <sup>-16</sup>
Сланец, известняк	0,01 – 0,1	10 <sup>-16</sup> – 10 <sup>-18</sup>

Экспериментальными исследованиями проницаемости для газа гидратонасыщенных пористых сред активно занимались А. С. Схалыхо и А. Ф. Безносиков. В работах [42-44] показано, что фильтрационные свойства пласта ухудшаются по мере повышения степени заполнения гидратами порового пространства. При достижении определенной степени насыщенности породы гидратом, она становится практически непроницаемой. Также высокая степень водонасыщенности пласта ухудшает проницаемость, способствуя образованию гидрата.

В. А. Ненаховым изучались фильтрационные свойства гидратонасыщенных пород для воды [45]. В результате было выявлено влияние градиента давления на фильтрацию воды через гидратонасыщенный керн. Полученную нелинейную зависимость В. А. Ненаховым связал с тем, что воды в гидратонасыщенных средах ведет себя аналогично вязкопластичным жидкостям.

В результате экспериментальных исследований был предложен ряд аналитических формул для определения проницаемости среды в зависимости от степени ее гидратонасыщенности. Исходя из того, что присутствие гидратов ухудшает исходную абсолютную проницаемость пласта, в работе [46] результирующая абсолютная проницаемость задается следующей формулой:

$$k(v) = k_0 (1 - v)^N, \quad (1.2)$$

где  $k_0$  – абсолютная проницаемость породы в отсутствии гидрата,  $v$  – гидратонасыщенность,  $N$  – показатель степени, эмпирический параметр. Некоторые экспериментально полученные значения для параметра  $N$  приведены в работе [47]. Зависимости относительных фазовых проницаемостей от водонасыщенности, определенные из уравнений Козени, даны в работах [48, 49].

Теплофизические свойства гидратонасыщенных пород на сегодняшний день недостаточно изучены, что обусловлено сложным строением самих пород, а также компонентным составом и фазовыми превращениями, происходящими внутри пород [50]. Экспериментальные данные, представленные в работах [22, 31], показывают, что теплопроводность гидратосодержащих пород значительно ниже теплопроводности чистых мерзлых пород, при этом теплопроводность мерзлых гидратосодержащих пород, как правило, повышается по отношению к немерзлomu состоянию [51, 52]. Так, в работе [51] для теплопроводности гидратосодержащего кварцевого песка приведено значение около 2,7 Вт/м·К, что на 80% ниже значения теплопроводности чистого мерзлого кварцевого песка. В целом, теплопроводность гидратосодержащих сред зависит от процесса формирования гидрата, влияние которого в настоящее время исследуется экспериментально [50, 53].

#### **1.4 Методы извлечения газа из гидратосодержащих пластов**

Ключевым моментом в разработки газогидратных залежей является выбор эффективной и безопасной технологии извлечения газа.

На сегодняшний день существуют три теоретически возможных подхода к разложению гидрата на газ и воду непосредственно в пласте с последующим отбором выделившегося газа [5]:

1) повышение температуры в пласте выше равновесной температуры стабильного существования гидрата и последующее ее поддержание;

2) депрессионный метод, т.е. понижение пластового давления по отношению к равновесному;

3) воздействие на гидрат ингибиторами, сдвигающими фазовое равновесие.

Возможно, также, комбинировать тепловой и депрессионный метод, применять методы электромагнитного и акустического воздействия, а также гидравлические и термогидравлические методы [54, 55].

Выбор того или иного метода обуславливается многими факторами, в первую очередь, местом залегания газовых гидратов – пласт или шельф. Далее необходимо учитывать размер месторождения, физические свойства, состав и структуру пласта, характер и скорость диссоциации гидрата и выделения газа.

Известен лишь один случай успешной добычи газа из газогидратной залежи Мессояхского месторождений в Западной Сибири, где газ добывался депрессионным методом [17, 56]. При разработке этого газ-газогидратного месторождения, изначально как газового, снижение пластового давления с последующим разложением гидратов произошло вследствие извлечения газа. Однако этот метод совершенно не применим к субмаринным отложениям газовых гидратов, так как в таких условиях свободный газ может находиться лишь ниже зоны стабильности гидрата [57]. Депрессионное воздействие приведет к нарушению устойчивости осадочных пород, в которых гидрат является связующим материалом. В таких случаях является целесообразным использование теплового и ингибиторного методов. Некоторые схемы и численные модели для таких методов, а также результаты моделирования, рассмотрены в работах [35, 58-65].

В настоящий момент ни один из теоретических методов разработки газогидратных месторождений не был реализован на практике. Разработка пластовых месторождений депрессионным методом является экономически выгодной и рассматривается специалистами в мире как наиболее перспективная. В работах [66-68] решаются соответствующие численные модели по оценке перспективности разработки гидратных месторождений при откачке из них свободного газа.

Помимо понижения пластового давления путем отбора газа рассматривается метод так называемой наведенной трещиноватости, например, в работе [65], где понижение давления в пласте осуществляется созданием протяженных гидравлических трещин и поддержанием низкого (близкого к атмосферному) забойного давления. Такой метод добычи актуален, когда месторождение не содержит значительных запасов свободного газа и характеризуется высокой степенью гидратонасыщенности.

## **ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 1**

Проанализировав текущее состояние знаний и исследований по газовым гидратам, можно сделать вывод, что к настоящему моменту накоплена большая научно-техническая база данных по различным свойствам гидратов и гидратосодержащих сред. Наряду с активно развивающимися суперкомпьютерными средствами она позволяет выйти на принципиально новый уровень моделирования процессов освоения газогидратных залежей.

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, среди которых наиболее перспективным и экономически выгодным для пластовых месторождений выглядит депрессионный.

В настоящее время создание компьютерных средств прогнозирования термодинамических свойств и поведения гидратов при воздействии на них является одним из приоритетных направлений в газогидратных исследованиях.

Для моделирования процессов, происходящих при эксплуатации газогидратных месторождений, необходима разработка соответствующих математических моделей многофазной фильтрации в пласте с учетом известных физико-химических, теплофизических и механических свойств газовых гидратов и содержащих их сред, а также эффективных вычислительных алгоритмов с последующей их реализацией в виде пакетов прикладного программного обеспечения для многопроцессорных вычислительных машин.



## ГЛАВА 2. МОДЕЛЬ ФИЛЬТРАЦИИ ФЛЮИДОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С ГИДРАТНЫМИ ОТЛОЖЕНИЯМИ

Численное моделирование является мощным инструментом изучения физических процессов в полной трехмерной постановке, и сопряжено с большим объемом вычислений повышенной сложности. Благодаря активному развитию высокопроизводительных вычислительных средств, появилась возможность проведения полномасштабным численных экспериментов в сложных, близких к реальным, областях на очень подробных вычислительных сетках больших размерностей. Моделирование процессов миграции флюидов в гидратоносных пластах, является важным этапом разработки газогидратных месторождений.

Процесс добычи газа из газогидратных залежей происходит вследствие фазового перехода гидрата – его диссоциации на жидкость и газ – и сопровождается совокупностью сложных физико-химических явлений. Диссоциация газового гидрата может быть обусловлена повышением температуры, снижением давления, закачкой ингибиторов, а также другими механизмами и их комбинациями.

Математическая модель должна включать в себя описание различных механизмов и явлений, как то: диффузионный и конвективный теплоперенос, «растепление» газового гидрата, многофазную фильтрацию его компонентов, скачки удельных объемов и масс при фазовом превращении, эффект Джоуля-Томпсона и пр. Описание происходящих нестационарных процессов осуществляется с использованием основных уравнений движения сплошной среды – законы сохранения массы, импульса и энергии, дополненных фазовыми равновесными соотношениями.

## **2.1 Существующие подходов к математическому моделированию задач тепломассопереноса в пористых средах, содержащих газы гидраты**

Анализ отечественно и зарубежной литературы показывает, что можно выделить несколько принципиально разных подходов к моделированию процессов разложения гидратов в пористой среде.

Один из подходов включает в себя модели, основанные на решении фильтрационных задач тепломассопереноса в предположении, что диссоциация гидрата происходит в узкой зоне – на некоторой поверхности. Диссоциация гидрата в таком случае определяется движением поверхности разложения, которое, в свою очередь, зависит от процессов перераспределения давления в пласте или от величины теплового потока через нее. Таким образом, модель предполагает собой наличие двух зон с разными параметрами насыщенности, разделенных подвижной границей. На границе заданы массовые источники газа и воды и источник тепла, работающие при разложении газового гидрата. Такое представление позволяет рассматривать данную задачу аналогично задаче Стефана о плавлении. Соответствующие математические модели на основе классической задачи Стефана при различных допущениях и их аналитические решения можно найти в работах [17, 20, 21, 69–71]. Однако, решение задачи диссоциации гидрата в пласте как задачи с резким фронтом справедливо только в случае полного насыщения породы газовым гидратом. Такая модель позволяет описывать процессы в призабойной зоне и не дает представление о процессах, происходящих в пласте. В общем случае, когда гидрат, газ и вода находятся в пласте изначально в состоянии термодинамического равновесия, фронтальная модель противоречит физическому смыслу.

Для рассмотрения задач диссоциации газового гидрата в пласте были развиты следующие модели: модели, основанные на балансовых соотношениях массы и тепла между средневзвешенными по

газогидратному пласту термобарическими параметрами и кинетические модели разложения гидратов.

Моделям, основанным на балансовых соотношениях массы и тепла [72–75] характерны решения, справедливые для всего месторождения в целом. Затруднительно их использование при изучении процессов тепломассопереноса вблизи скважин и расчете их производительности.

Основу кинетических моделей диссоциации гидрата составляет уравнение Кима и Бишного [76], связывающее количество выделившегося газа из гидратов с изменением термодинамических параметров – давления и температуры. Задача о разложении гидрата в этом случае сводится к системе уравнений с дополнительными источниками массы в правой части [77]. Так как численные методы решения такой системы хорошо известны [78], эта модель получила широкое распространение за рубежом [65, 79–81]. Она положена в основу описания кинетики разложения метанового гидрата в единственном на сегодняшний день полноценном симуляторе газогидратного месторождения MH21-HYDRES [82], созданном в рамках национальной гидратной программы в Японии при поддержке ряда научных и коммерческих организаций. Симулятор учитывает пять фаз (газ, вода, лед, гидрат и соляные отложения) и позволяет производить расчеты в трехмерной (декартовой) и двумерной (радиальной) системе координат с возможным локальным измельчением сетки. Среди возможностей пакета есть следующие: определение проницаемости в зависимости от насыщенности пор гидратом и льдом; определение равновесного давления в зависимости от температуры и концентрации метанола и соли; использование различных граничных условий, соответствующих режиму разработки. Однако экспериментальное определение кинетического уравнения для фазовых превращений – задача весьма сложная из-за обилия параметров состояния твердого скелета и образующихся флюидов. Экспериментальным работам в этом направлении должна предшествовать тщательная теоретическая проработка. Другим недостатком данного

подхода является трудность численной реализации данной жесткой системы, связанная с измельчением шага по времени.

Важным моментом является сопоставление характерных времен моделируемых процессов. По результатам ряда экспериментов по изучению кинетики разложения гидратов в пористой среде [21, 22, 36] характерное время разложения гидратов составляет  $10^2 - 10^4$  секунд, тогда как процесс разработки газогидратного месторождения длится годами ( $10^6 - 10^8$ ). Отсюда можно сделать вывод, что в реальных условиях кинетика не будет оказывать существенное влияние на диссоциацию гидрата в пористой среде.

Таким образом, наиболее адекватными с физической точки зрения являются математические модели, основанные на балансовых соотношениях в предположении о равновесном характере процесса диссоциации газовых гидратов. Математическая модель трехмерной многофазной фильтрации, реализуемая в рамках данной диссертационной работы, является развитием данного класса моделей. Стоит отметить сложность численной реализации систем уравнений таких моделей, также связанной с измельчением шага по времени.

## **2.2 Модель фильтрации флюидов в пористой среде, содержащей газогидраты: исходная система уравнений и расщепление на функциональные блоки**

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. В данном направлении была выполнена редукция общих уравнений модели Маскета-Мереса «black oil» [78, 83] применительно к уравнениям неизотермической двухфазной фильтрации несмешивающихся сжимаемых флюидов в гидратизированной пористой среде с анизотропными свойствами. В основу

для построения сеточных аппроксимаций положен универсальный принцип аддитивного учета физических процессов [84].

Многокомпонентное течение в пористой среде с учетом диссоциации газовых гидратов описывается уравнениями механики сплошной среды, выражающими законы сохранения массы, импульса и энергии [78, 85-87]. Процесс фильтрации будем описывать как двухфазную фильтрацию воды и газа в пористой среде с изменяющейся пористостью и проницаемостью (вследствие диссоциации гидратов).

Закон сохранения массы для газа и воды дается выражениями:

$$m \frac{\partial}{\partial t} ((1-\nu)S\rho_w) + \nabla \cdot (\rho_w \vec{V}_w) = M_w, \quad (2.1a)$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} ((1-\nu)(1-S)\rho_g) + \nabla \cdot (\rho_g \vec{V}_g) = M_g. \quad (2.1б)$$

Здесь  $m(\vec{r}, P)$  – пористость минерального скелета (без гидрата),  $P$  – давление,  $\vec{r}$  – радиус-вектор;  $S$  – насыщенность по воде,  $(1-S)$  – насыщенность по газу;  $\nu$  – гидратонасыщенность;  $\rho_w(P, T)$ ,  $\rho_g(P, T)$  – плотности воды и газа,  $T$  – температура;  $\vec{V}_w$ ,  $\vec{V}_g$  – фазовые скорости фильтрации воды и газа;  $M_w$ ,  $M_g$  – источники массы воды и газа, обусловленные разложением гидрата;  $t$  – время.

Фазовые скорости фильтрации равны, соответственно,

$$\vec{V}_w = mS(1-\nu)\vec{w}_w, \quad (2.2a)$$

$$\vec{V}_g = m(1-S)(1-\nu)\vec{w}_g, \quad (2.2б)$$

где  $\vec{w}_g$ ,  $\vec{w}_w$  – истинные скорости газа и воды.

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

$$\vec{V}_w = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w}(\nabla P - \rho_w \vec{g}), \quad (2.3)$$

$$\vec{V}_g = -\frac{kk_{rg}}{\mu_g}(\nabla P - \rho_g \vec{g}), \quad (2.4)$$

где  $k(v)$  – 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,  $\vec{g}$  – ускорение свободного падения.

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, описываемое экспериментальными зависимостями вида (1.1). В [10] уравнение состояние фазового равновесия дается в виде:

$$T = A \ln P + B, \quad (2.5)$$

где  $A$  и  $B$  – эмпирические константы.

Необходимо отметить, что распад газогидратов и их образование, происходят при разных термодинамических условиях. Гетерогенная газогидратная смесь, вообще говоря, является многоскоростной и многотемпературной. Равновесные условия означают, что смесь является однотемпературной. Тем не менее, термодинамические параметры, входящие в формулу (2.5) при распаде газогидратов и их образовании имеют разные значения. Различия связаны в первую очередь с тем обстоятельством, что смещения внутренней границы, определяющие относительные объемные доли фаз отсчитываются от исходной конфигурации. При распаде клатратов исходная конфигурация внутренних границ известна, и поэтому описывающих их соотношения в эйлеровом представлении выглядят проще. При образовании газогидратов отсчетная конфигурация неизвестна. Это неизбежно приводит к усложнению уравнений движения (в первую очередь – уравнений непрерывности).

По указанной причине величины  $M_w$  и  $M_g$  (источники в правых частях уравнений непрерывности масс) имеют совершенно разный смысл в зависимости от режима движения. При фазовых превращениях мы должны следить за изменениями пористости и насыщенности, связанными с превращением частицы массы. В неподвижном скелете эйлеров и лагранжев подходы совпадают. При распаде гидрата мы можем принять эйлерову точку зрения и следить за распадом частицы газогидрата, который в момент распада неподвижен. Тогда эти источники определяются из условия баланса массы, претерпевающей физико-химические превращения:

$$M_w = -m\rho_v \frac{\partial}{\partial t}(\beta_w v), \quad (2.6)$$

$$M_g = -m\rho_v \frac{\partial}{\partial t}[v(1-\beta_w)]. \quad (2.7)$$

Здесь  $\rho_v$  – плотность гидрата,  $\beta_w$  – массовая доля воды в гидрате, зависящая от его структуры:

$$\beta_w = \frac{L}{(M + L \cdot n)}, \quad (2.8)$$

где  $M$  – молекулярный вес газа-гидратообразователя,  $n$  – постоянная, зависящая от состава гидрата и численно равная количеству молекул воды, связанных в гидрате с одной молекулой газа,  $L$  – молекулярный вес воды.

Считаем, что в момент образования гидрата его частички мгновенно прилипают к скелету и становятся неподвижными. Тогда соотношения (2.6) – (2.8) сохраняют свою силу и при образовании гидрата. Подставим эти соотношения в (2.1) и получим исходные уравнения неразрывности (покомпонентный массовый флюидобаланс в свободном и связанном состояниях) в следующей форме:

$$\frac{\partial}{\partial t} \{m(S_v S_w \rho_w + (1-S_v) \rho_v \beta_w)\} + \text{div}[\rho_w \vec{V}_w] + q_w = 0, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \{m(S_v (1-S_w) \rho_g + (1-S_v) \rho_v (1-\beta_w))\} + \text{div}[\rho_g \vec{V}_g] + q_g = 0. \quad (2.10)$$

Здесь индексы  $g, w, v, s$  – относятся, соответственно, к газу, воде, гидрату и скелету пористой среды;  $S \equiv S_w$ ;  $S_v = 1 - v$  – растепленность;  $q_g(t, \vec{r}, S_w, S_v, P)$ ,  $q_w(t, \vec{r}, S_w, S_v, P)$  – плотности массовых источников.

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

$$\rho_g = \frac{P}{z(P, T)RT}, \quad \rho_w = Const, \quad \rho_v = Const. \quad (2.11)$$

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

Зависимость от температуры в выражениях для всех параметров, входящих в уравнения, сводится к зависимости от давления в силу соотношения фазового равновесия (2.5). Нужно отметить, что равновесная температура (одинаковая по определению в скелете и флюиде) может существенно отличаться для двух разнонаправленных процессов при наличии гистерезиса в уравнении состояния.

Систему уравнений (2.9), (2.10) при фиксированных значениях определяющих термодинамических переменных (давление и температура) будем называть сатурационным блоком, так как эти уравнения служат для определения водонасыщенности  $S_w$  и растепленности  $S_v$ .

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \{ m(S_v(S_w \rho_w \varepsilon_w) + (1 - S_w) \rho_g \varepsilon_g) \} + (1 - S_v) \rho_v \varepsilon_v + (1 - m) \rho_s \varepsilon_s + \\ + \text{div} \{ \rho_w \varepsilon_w \vec{V}_w + \rho_g \varepsilon_g \vec{V}_g + P(\vec{V}_w + \vec{V}_g) \} + \text{div} \vec{W} + q_s = 0, \end{aligned} \quad (2.12)$$

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



Система уравнений (2.9) – (2.12) полностью описывает фильтрационные процессы в пористой среде с жестким скелетом, насыщенной газовыми гидратами, как при распаде, так и при образовании гидратов.

Выше приведенная неформализованная краевыми условиями задача (2.9) – (2.12) с учетом (2.3) – (2.5) 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 [82]. Для математического исследования и применения того или иного численного метода для ее решения в случае двухфазной фильтрации применяется расщепление ее на уравнение относительно насыщенности одной из фаз и уравнение для давления [78]. Результаты этих исследований позволяют как корректно строить вычислительные алгоритмы для соответствующих типов задач математической физики, так и адаптивно привлекать ранее существовавшие наработки в вычислительной физике применительно к численному моделированию гидратно-флюидодинамических пластовых явлений.

Применив подобную процедуру расщепления в рассматриваемой задаче, получили систему, состоящую из двух функциональных блоков. Первый блок – сатурационный – отвечает за характеристический перенос сатурационных возмущений, с математической точки зрения это гиперболическое уравнение в независимых переменных  $S_v$ ,  $S_w$  на фоне фиксированных давлений  $P$ . Второй функциональный блок – диссипативный (или термодинамический) – описывает диссипативные и характеристические процессы, представленные разворачивающейся нестационарностью по времени первого порядка  $(\partial/\partial t)$  над пространственными дифференциальными операциями второго порядка (в

терминах вектора  $\nabla$ ). В последнем случае в математическом смысле блок – параболический (хотя там есть и диссипативная функция, связанная с квадратом градиента давления), независимой переменной является давление  $P$  при фиксированных значениях сатураций  $S_v$  и  $S_w$ .

Принципиально важным является то обстоятельство, что в приводимой ниже системе уравнений в диссипативном блоке не содержатся производные по времени насыщенностей. Этот блок вычисляет давление на неявном слое по времени, которое затем подставляется в сатурационный блок (по  $S_v$  и  $S_w$ ), в том числе в его нестационарную часть и считаются там заданными величинами. Для численной реализации данной системы уравнений в общем случае можно использовать чисто явную разностную схему, однако необходимо отметить, что для проведения расчетов с крупным шагом по времени расщепление исходной задачи на указанные блоки оказывается совершенно необходимым. С этой целью были проведены изложенные ниже выкладки.

Оказалось, что полученное диссипативное гидратное уравнение содержит в своей структуре «термодинамические» блоки с некоторыми интегрирующими множителями  $\psi/m\rho_v$  и  $\delta_\varepsilon$  в виде скачков удельных (на единицу массы) объемов и внутренней энергии при фазовом переходе. Эти неотрицательные множители или их аддитивные компоненты, отсутствующие в исходной дивергентной форме записи уравнений (2.1) – (2.12), могут быть использованы как для физического анализа задачи (например, по величинами  $S_{w\min}$  и  $S_{w\max}$  или по относительным фазовым проницаемостям), так и для явного выделения эволюционно устойчивых аппроксимирующих блоков численными методами.

### **2.3 Основное диссипативное уравнение теории гидратов**

Ниже проведен вывод основного диссипативного уравнения теории гидратов.

Из уравнений массовых флюидобалансов (2.9), (2.10) следует:

$$\frac{S_w}{\rho_w} \frac{\partial}{\partial t} (m S_v \rho_w) + \frac{1-S_w}{\rho_g} \frac{\partial}{\partial t} (m S_v \rho_g) + \left( \frac{\beta_w}{\rho_w} + \frac{1-\beta_w}{\rho_g} \right) \frac{\partial}{\partial t} [m(1-S_v) \rho_v] + DIG = c \quad (2.13)$$

Где

$$DIG = \frac{1}{\rho_w} \operatorname{div}(\rho_w \vec{V}_w) + \frac{1}{\rho_g} \operatorname{div}(\rho_g \vec{V}_g) + \left( \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_g}{\rho_g} \right). \quad (2.14)$$

Из уравнения баланса внутренней энергии (2.12) с учетом (2.9), (2.10) аналогично следует:

$$m S_v \left[ S_w \rho_w \frac{\partial \varepsilon_w}{\partial t} + (1-S_w) \rho_g \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial t} \right] + \frac{\partial}{\partial t} [m(1-S_v) \rho_v \varepsilon_v + (1-m) \rho_s \varepsilon_s] - \\ - [\varepsilon_w \beta_w + \varepsilon_g (1-\beta_w)] \frac{\partial}{\partial t} [m(1-S_v) \rho_v] + DIG_\varepsilon = 0, \quad (2.15)$$

где

$$DIG_\varepsilon = \left[ \operatorname{div}(\rho_w \varepsilon_w \vec{V}_w) - \varepsilon_w \operatorname{div}(\rho_w \vec{V}_w) \right] + \left[ \operatorname{div}(\rho_g \varepsilon_g \vec{V}_g) - \varepsilon_g \operatorname{div}(\rho_g \vec{V}_g) \right] + \\ + \operatorname{div} \left[ P(\vec{V}_w + \vec{V}_g) \right] + \operatorname{div} \vec{W} + (q_s - \varepsilon_w q_w - \varepsilon_g q_g) = \\ = \rho_w \vec{V}_w \nabla \varepsilon_w + \rho_g \vec{V}_g \nabla \varepsilon_g + \operatorname{div} \left[ P(\vec{V}_w + \vec{V}_g) \right] + \operatorname{div} \vec{W} + (q_s - \varepsilon_w q_w - \varepsilon_g q_g). \quad (2.16)$$

В уравнениях (2.15), (2.16) водонасыщенность  $S_w$  уже не содержится под знаком дифференцирования по времени  $\partial/\partial t$ .

Действуя аналогичным образом и вводя при фазовом переходе неотрицательные множители:

– скачок удельного объема (на единицу массы)

$$\frac{\psi}{m \rho_v} = \left( \varphi - \frac{1}{\rho_v} \right) \geq 0, \quad \varphi = \frac{\beta_w}{\rho_w} + \frac{(1-\beta_w)}{\rho_g}; \quad (2.17)$$

– скачок удельной внутренней энергии (на единицу массы)

$$\delta_\varepsilon = \beta_w \varepsilon_w + (1-\beta_w) \varepsilon_g - \varepsilon_v \geq 0, \quad (2.18)$$

исключим из под знака дифференцирования по времени  $\partial/\partial t$  в уравнениях (2.13) и (2.15) вторую сатурационную переменную – растепленность  $S_v$ .

Получим:

$$\begin{aligned}
& m\delta_\varepsilon \left\{ S_v \left[ S_w \frac{(\rho_w)_t}{\rho_w} + (1-S_w) \frac{(\rho_g)_t}{\rho_g} \right] + (1-S_v) \frac{(\rho_v)_t}{\rho_v} + \frac{(m)_t}{m} \right\} + \\
& + \frac{\psi}{m\rho_v} \left\{ m \left\{ S_v \left[ S_w \rho_w (\varepsilon_w)_t + (1-S_w) \rho_g (\varepsilon_g)_t \right] + (1-S_v) \rho_v (\varepsilon_v)_t \right\} + [(1-m) \rho_s \varepsilon_s]_t \right\} \\
& + \delta_\varepsilon DIG + \frac{\psi}{m\rho_v} DIG_\varepsilon = 0.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Здесь и далее  $(\rho_v)_t \equiv \frac{\partial \rho_v}{\partial t}$ ,  $(\rho_w)_t \equiv \frac{\partial \rho_w}{\partial t}$ .

Выражение (2.19) есть основное диссипативное уравнение теории гидратов для определения давления  $P$ . Вводя новую величину – бароемкость гидратной системы  $D_p$  – соотношением

$$\begin{aligned}
D_p = m\delta_\varepsilon \left\{ S_v \left[ S_w \frac{(\rho_w)_p}{\rho_w} + (1-S_w) \frac{(\rho_g)_p}{\rho_g} \right] + (1-S_v) \frac{(\rho_v)_p}{\rho_v} + \frac{(m)_p}{m} \right\} + \\
+ \frac{\psi}{m\rho_v} \left\{ m \left\{ S_v \left[ S_w \rho_w (\varepsilon_w)_p + (1-S_w) \rho_g (\varepsilon_g)_p \right] + (1-S_v) \rho_v (\varepsilon_v)_p \right\} + [(1-m) \rho_s \varepsilon_s]_p \right\}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

можно переписать уравнение (2.19) в компактной форме:

$$D_p \frac{\partial P}{\partial t} + \delta_\varepsilon DIG + \frac{\psi}{m\rho_v} DIG_\varepsilon = 0. \tag{2.21}$$

Здесь переменные  $DIG$  и  $DIG_\varepsilon$  задаются соответственно соотношениями (2.14) и (2.16). В (2.20) берется полная производная по давлению с учетом зависимости (2.5).

## 2.4 Исследование гиперболических свойств сатурационного блока

Сатурационный функциональный блок (2.9), (2.10) на фоне «зафиксированной термодинамики», т.е. при фиксированных давлении  $P$  и температуре  $T$  обладает, в основном, гиперболическими свойствами. Термин «в основном» говорит о том, что строго это удастся доказать либо в отсутствии гравитации, либо при нахождении градиента давления

$p'_x = \frac{\partial p}{\partial x}$  вне интервала  $(g\rho_g, g\rho_w)$ . Это означает, что сеточные

аппроксимации необходимо строить с учетом того, чтобы они соответствовали гиперболичности системы (если она имеет место) или просто допустимы в ее отсутствии. С другой стороны даже в «чисто гиперболическом» случае применение классических разностных схем (типа схемы Роу [88]), переносящих инварианты гиперболической системы уравнений вдоль характеристик, слишком громоздко в случае моделирования гидратных процессов. После теоретического анализа «чистой гиперболичности» сатурационного блока (из которого следует, что характеристики направлены в разные стороны – налево и направо) представляется разумным для непосредственного конструирования разностного алгоритма перейти в приближенную «диагонально-характеристическую» форму записи системы гиперболических уравнений. В этой форме оба инварианта понимаются упрощенно. Ими являются сами сатурации: растепленность  $S_v$  и водонасыщенность  $S_w$ , а их перенос вдоль характеристик связан, соответственно, со сносом вниз и вверх по потоку. Выбор потоковых знаков отдельно для флюидокомпонент после выкладок, следующих ниже.

Из системы уравнений (2.9), (2.10) следует:

$$(S_v)_t' + \frac{k_{sv}'}{\psi} \left[ \frac{k_{rw}}{\mu_w} (p_x' - g\rho_w) + \frac{k_{rg}}{\mu_g} (p_x' - g\rho_g) \right] (S_v)_x' + \frac{k}{\psi} \left[ \frac{(k_{rw})'_{sw}}{\mu_w} (p_x' - g\rho_w) + \frac{(k_{rg})'_{sw}}{\mu_g} (p_x' - g\rho_g) \right] (S_w)_x' = \langle \dots \rangle, \quad (2.22)$$

$$(S_w)_t' - \frac{k_{sv}'}{mS_v\psi} \left[ \frac{k_{rw}}{\mu_w} (p_x' - g\rho_w)\psi_g - \frac{k_{rg}}{\mu_g} (p_x' - g\rho_g)\psi_w \right] (S_v)_x' - \frac{k}{mS_v\psi} \left[ \frac{(k_{rw})'_{sw}}{\mu_w} (p_x' - g\rho_w)\psi_g + \frac{(k_{rg})'_{sw}}{\mu_g} (p_x' - g\rho_g)\psi_w \right] (S_w)_x' = \langle \dots \rangle. \quad (2.23)$$

Здесь:

– запись  $\langle \dots \rangle$  означает отсутствие в ней пространственно-временных производных от величин  $S_v$  и  $S_w$ ;

$$-\frac{\psi_g}{m\rho_v} = \frac{1-\beta_w}{\rho_g} - \frac{1-S_w}{\rho_v} \text{ при } S_w > S_{w\min};$$

$$-\frac{\psi_w}{m\rho_v} = \frac{\beta_w}{\rho_w} - \frac{S_w}{\rho_v} \text{ при } S_w < S_{w\max}.$$

Очевидно, что  $\psi = \psi_w + \psi_g > 0$ .

Поскольку потоково-характеристический анализ знаков потоков системы уравнений, аналогичной (2.9) – (2.12), но без гидратов (случай  $S_v = 1$ ), содержит для инварианта  $S_w$  выражения, аналогичные  $-(p'_x - g\rho_w)\psi_g$  и  $-(p'_x - g\rho_w)\psi_w$ , но без функций  $\psi_g$  и  $\psi_w$ , то условием сшивки гидратной и безгидратной областей течений являются требования

$$\frac{\psi_g}{m\rho_v} = \frac{1 - \beta_w}{\rho_g} - \frac{1 - S_w}{\rho_v} > 0 \text{ при } S_w > S_{w\min}, \quad (2.24)$$

$$\frac{\psi_w}{m\rho_v} = \frac{\beta_w}{\rho_w} - \frac{S_w}{\rho_v} > 0 \text{ при } S_w < S_{w\max}. \quad (2.25)$$

С точки зрения покомпонентных скачков удельного (на единицу массы) объема при фазовом переходе требования (2.24), (2.25) могут быть проинтерпретированы следующим образом. При полном разложении единицы массы гидрата объем освободившегося газа должен быть больше  $(1 - S_w)$ -доли объема в гидратном льде. При полном разложении единицы массы гидрата объем освободившейся воды должен быть больше  $S_w$ -доли объема в гидратном льде.

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} -\bar{k}_w &= \frac{k_{rw}}{\mu_w}(p'_x - g\rho_w), \quad \bar{k}_g = \frac{k_{rg}}{\mu_g}(p'_x - g\rho_g); \\ -\bar{k}'_w &= \frac{(k_{rw})'_{sw}}{\mu_w}(p'_x - g\rho_w), \quad \bar{k}'_g = \frac{(k_{rg})'_{sw}}{\mu_g}(p'_x - g\rho_g), \end{aligned}$$

и перепишем систему (2.22), (2.23) в более компактной форме:

$$(S_v)'_t + \frac{k'_{sv}}{\psi}(\bar{k}_w + \bar{k}_g)(S_v)'_x + \frac{k}{\psi}(\bar{k}'_w + \bar{k}'_g)(S_w)'_x = \langle \dots \rangle, \quad (2.26)$$

$$(S_w)'_t - \frac{k'_{sv}}{mS_v\psi}(\bar{k}_w\psi_g + \bar{k}_g\psi_w)(S_v)'_x - \frac{k}{mS_v\psi}(\bar{k}'_w\psi_g + \bar{k}'_g\psi_w)(S_w)'_x = \langle \dots \rangle. \quad (2.27)$$

Собственные значения  $\lambda$  матрицы этой системы дифференциальных уравнений, составленной из коэффициентов при пространственных производных, удовлетворяют следующему дифференциальному уравнению:

$$\lambda^2 - \left[ \frac{k'_{sv}}{\psi} (\bar{k}_w + \bar{k}_g) - \frac{k}{mS_v \psi} (\bar{k}_w \psi_g - \bar{k}_g \psi_w) \right] \lambda + \frac{kk'_{sv}}{mS_v \psi} \frac{(p'_x - g\rho_w)}{\mu_w} \frac{(p'_x - g\rho_g)}{\mu_g} [k_{rw} (k_{rg})'_{sw} - k_{rg} (k_{rw})'_{sw}] = 0. \quad (2.28)$$

Поскольку  $[k_{rw} (k_{rg})'_{sw} - k_{rg} (k_{rw})'_{sw}] \leq 0$  (т.к.  $(k_{rg})'_{sw} \leq 0$ ), корни уравнения (2.28) действительны и различны. Причем, различны по знаку, т.е. сатурационный блок (2.9), (2.10) гиперболичен, и характеристики направлены в разные стороны. Однако, строго говоря, все это имеет место либо в случае отсутствия гравитации, либо при нахождении градиента давления  $p'_x = \frac{\partial p}{\partial x}$  вне интервала  $(g\rho_g, g\rho_w)$ .

Таким образом, математический анализ гиперболических свойств сатурационного функционального блока (2.9), (2.10) показал следующее.

1. Понимая под знаками потоков по растепленности  $S_v$  знаки соответствующих величин  $-(p'_x - g\rho_w)$  и  $-(p'_x - g\rho_g)$ , необходимо брать соответствующие в флюидокомпонентах проницаемости  $k$  (и производные  $k'_{sv} = \frac{\partial k}{\partial S_v}$ ) вниз по потоку. Аналогично, понимая под знаками потоков по водонасыщенности  $S_w$  знаки величин  $-(p'_x - g\rho_w)\psi_g$  и  $-(p'_x - g\rho_g)\psi_w$ , будем брать соответствующие в флюидокомпонентах относительные проницаемости  $k_{rw}$ ,  $k_{rg}$  (и производные  $(k_{rw})'_{sw} = \frac{\partial k_{rw}}{\partial S_w}$ ,  $(k_{rg})'_{sg} = \frac{\partial k_{rg}}{\partial S_w}$ ) вверх по потоку.

2. Определившиеся в ходе анализа некоторые аддитивные фазовые скачки объемов воды и газа  $\frac{\psi_w}{m\rho_v} + \frac{\psi_g}{m\rho_v} = \frac{\psi}{m\rho_v}$

- определяют знаки потоков флюидокомпонентов при  $S_v < 1$  в приближенном потоково-характеристическом анализе переноса водонасыщенности  $S_w$  (в схеме вверх по потоку),
- зависят от водонасыщенности  $S_w$ ,
- существенны покомпонентно при не превышении максимального (для  $\psi_w$ ) и после достижения минимального (для  $\psi_g$ ) значений водонасыщенности  $S_w$ .

Таким образом, система свелась к сатурационному блоку (2.9), (2.10) и диссипативному уравнению (2.21). При численном решении этой системы для сатурационного блока можно адаптировать методы, разработанные для систем гиперболического типа, а для диссипативного уравнения – методы решения параболических уравнений.

## **ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 2**

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 данной главе применительно к газогидратным фильтрационным задачам было проведено теоретическое исследование системы уравнений,



составляющих математическую модель фильтрации флюидов в пористой гидратонасыщенной среде.

В результате исследована система массово-энергетических балансов, описывающая флюидодинамику совместного поведения гидратов, свободных воды, газа и их энергетическое взаимодействие с неподвижным скелетом. Исходная краевая задача расщеплена на основное диссипативное уравнение теории гидратов, определяющее «термодинамическую» эволюцию параметров системы, и сатурационную часть, описывающую «гиперболическое» поведение насыщенностей среды гидратом и флюидами. Проведен анализ поведения поля характеристик сатурационного блока.

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. Сформулированы условия эволюционности характеристической сшивки решений в гидратной и безгидратной частях пространства.

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

### **ГЛАВА 3. ТРЕХМЕРНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ СХЕМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ОПОРНЫХ ОПЕРАТОРОВ**

В настоящее время, благодаря быстрому развитию массивно-параллельных вычислительных систем появилась возможность проведения полномасштабных численных экспериментов с компьютерными моделями механики и физики сплошных сред, существенно лучше прежних отражающими структуру изучаемых объектов. Используемые при этом расчетные сетки имеют весьма большую размерность – от сотен миллионов до миллиардов ячеек. Такие сетки позволяют получить высокое разрешение структур в сплошной среде. Однако сами по себе сетки большой размерности еще не гарантируют хорошее качество расчетных результатов. Чтобы эффективно использовать сетки, пригодные для воспроизведения мультимасштабных процессов, необходимо развивать численные методики заданного качества, адекватно отражающие основные свойства исходных дифференциальных операторов и постановки начально-краевых задач, и гарантирующие устойчивость вычислительных процессов. Одной из таких методик является методика на основе метода опорных операторов разработанного в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН академиком А.А. Самарским и его учениками [89]. 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 рамках данной работы предлагается развитие метода опорных операторов для его использования в трехмерном моделировании гидродинамических задач на высокопроизводительных системах. Метод опорных операторов основан на построении сопряженных аппроксимаций основных дифференциальных операторов с использованием интегральных тождеств векторного анализа. Его достоинством является обеспечение численных решений гарантированного качества при использовании

неструктурированных сеток общего вида. Развиваемый метод примечателен также тем, что позволяет строить ротационно-инвариантные разностные схемы [90], что особенно важно при решении ряда задач напряженного деформирования сред, уравнений Навье-Стокса и т.п. с аппроксимацией твердотельных вращений (вихрей) с нулевой энергией деформации.

### **3.1 Метод опорных операторов для построения дивергентно-консервативных разностных схем на неструктурированных сетках**

Если расчет требуется провести в области с сильно неоднородными физико-химическими свойствами, то разностная схема должны быть построена на нерегулярной сетке, адаптированной как в отношении неоднородности свойств среды, так и в отношении геометрии расчетной области. Схема должны обладать порядком аппроксимации, согласованным с априорной гладкостью решения, причем порядок аппроксимации определяется в нормах, которые также зависят от априорной гладкости, например в разностных аналогах норм Соболева. Наконец, схемы должны обеспечивать законы сохранения с погрешностью, которая должна быть ограничена во времени для того, чтобы было возможно рассматривать асимптотические решения задач. Таким образом, схема должна удовлетворять требования консервативности, введенным А.А. Самарским и Ю.П. Поповым [9], а также специальным программно-реализованным видам контроля балансов, связанных с ошибками округления в процессе вычислений.

Одним из подходов к построению полностью консервативных разностных схем для уравнений математической физики, записанных в терминах инвариантных дифференциальных операторов *div*, *grad*, *rot*, на нерегулярных сетках является метод опорных операторов. Название метода связано с тем, что, выбрав аппроксимацию для одного какого-либо оператора в качестве исходной, «опорной», прочие разностные аналоги

дифференциальных операторов строятся так, чтобы выполнялись разностные аналоги интегральных теорем векторного либо тензорного анализа [89]. Другими словами, при непосредственной аппроксимации одного из вышеперечисленных операторов, аппроксимации остальных могут быть получены из условия выполнения разностных аналогов определенных интегральных тождеств. Таким образом, помимо фундаментальных требований аппроксимации и устойчивости схемы метода опорных операторов строятся с учетом ряда дополнительных ограничений, что позволяет отразить физическую природу рассчитываемых процессов. За рубежом такого рода схемы получили название «подражательных» [91]. Применительно к математическому моделированию тепло-массообменных, фильтрационных, упругопластических и пр. процессов в прикладных исследованиях предлагаемый подход, основанный на методе опорных операторов, позволяет производить расчеты в областях сложной формы на нерегулярных сетках. Отдельное важное направление – поворотно-инвариантные аппроксимации – перспективны для вязких, турбулентных течений, для расчетов диссипативных процессов. Получаемые с помощью метода опорных операторов ротационно-инвариантные схемы перспективны для квазипрямого моделирования эффектов турбулентного перемешивания.

На основе вышеизложенного было решено расширить область использования метода опорных операторов на новые постановки начально-краевых задач гидромеханики и теплопереноса, а также в плане использования сеток нерегулярной структуры, вплоть до использования неконформных (например, мортарных) сеток.

Рассмотрим принцип построения конечно-разностного алгоритма методом опорных операторов, из которого, в частности, будет вытекать самосопряженность рассматриваемой задачи. В качестве иллюстрации достаточно ограничиться двумерной краевой задачей для оператора

Лапласа с однородными граничными условиями (Дирихле или Неймана) на внешней границе объекта.

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

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{X}_u &= f(\vec{r}), & u|_{\partial O} &= u_*(x). \\ \vec{X}_u &= K \nabla u; \end{aligned} \quad (3.1)$$

Традиционный подход к решению таких задач заключается в применении теоремы Гаусса для независимой аппроксимации дифференциальных операторов:

$$\int_O \operatorname{div} \vec{X} dV = \int_{\partial O} \vec{X} d\vec{S}, \quad \int_O \nabla u dV = \int_{\partial O} u d\vec{S}.$$

Подход, лежащий в основе метода опорных операторов, состоит в согласованной аппроксимации дифференциальных операторов: система уравнений (3.1) аппроксимируется таким образом, чтобы выполнялся разностный аналог интегрального тождества:

$$\int_O (\vec{X} \nabla u) dv + \int_O u \cdot \operatorname{div} \vec{X} dv = \int_{\partial O} u (\vec{X} d\vec{S}). \quad (3.2)$$

Интегральное тождество (3.2) вытекает из дифференцирования произведения функций:  $\operatorname{div}(\vec{X} \nabla u) = u \cdot \operatorname{div} \vec{X} + (\vec{X} \nabla u)$ .

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 ( $\operatorname{div}$  и  $\operatorname{grad}$ ) 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.

Для построения разностной схемы введем следующие необходимые понятия и обозначения.

### 3.1.1 Метрические сетки метода опорных операторов

В области  $O$  введем семейство нерегулярных разностных сеток. Ограничимся случаем, когда сетка состоит из треугольных и четырехугольных ячеек ( $\Omega$ ), базисов ( $\varphi$ ), узлов ( $\omega$ ), ребер ( $\lambda$ ) и связанных с ними ( $\sigma(\omega)$ ) – границами балансовых узловых доменов ( $d(\omega)$ ) (см. рис. 3.1).

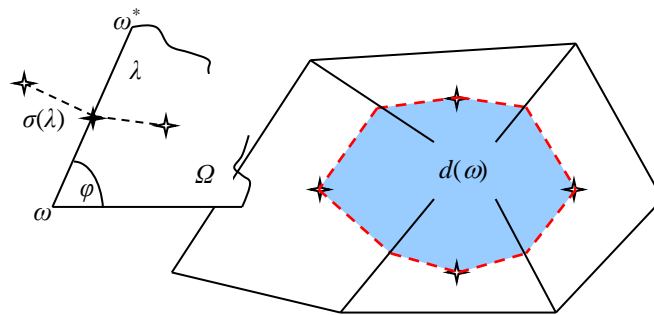


Рисунок 3.1: Узловой балансовый домен (синий) на нерегулярной сетке. Красной линией обозначена «сдвинутая» результирующая разностная сетка.

Базисы ( $\varphi$ ) создаются системой исходных (ковариантных) ортов  $\vec{e}(\lambda)$ , образованных ребрами, исходящими из общего угла треугольной и четырехугольной ячеек ( $\Omega$ ) (рис. 3.2). Под центрами ячеек ( $\Omega$ ) и ребер ( $\lambda$ ) будем понимать средние арифметические радиус-векторов узлов ( $\omega$ ) их образующих. Кривая, соединяющая эти центры (двух смежных через ребро ячеек или ячейки и граничного ребра  $\partial\lambda$ ), представляет собой векторную линию (грань узлового балансового домена), заданную формулой

$$\vec{\sigma}(\lambda) = \sum_{\varphi(\lambda)} V_{\varphi} \vec{e}'_{\varphi}(\lambda), \quad (3.3)$$

ориентированную в ту же сторону, что и орт  $\vec{e}(\lambda)$ . Здесь  $\vec{e}'_{\varphi}(\lambda)$  – орты взаимных (контравариантных) базисов по отношению к исходным базисам, образованным ортами  $\vec{e}(\lambda)$  (см. рис. 3.2), а  $V_{\varphi}$  – базисный объем.

Замкнутые вокруг узла  $\omega$  векторные линии  $(\vec{\sigma}(\lambda(\omega)))$  образуют балансовые узловые домены  $(d(\omega))$ .

Метрическая калибровка 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. Это треугольно-четыреугольные 2D сетки, тетраэдральные, параллелепипедные, призматические и т.д. 3D сетки, а также их мортарные сшивки, адаптация (с введением новых узлов в ячейках  $(\Omega)$ ) с сохранением самосопряженности и знакоопределенности соответствующих «дивергентно-градиентных» операций векторного анализа континуальных краевых задач.

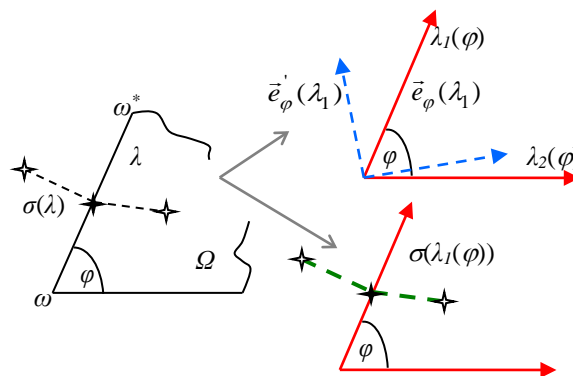


Рисунок 3.2: Построение базисов и узловых балансовых доменов.

Красным обозначены исходные (ковариантные) орты  $\vec{e}_{\varphi}(\lambda_{1,2})$  базиса  $\varphi$ , образованного ребрами  $\lambda_1(\varphi)$  и  $\lambda_2(\varphi)$ ; штрихованными синими линиями обозначены орты  $\vec{e}'_{\varphi}(\lambda_{1,2})$  взаимного к базису  $\varphi$  (контравариантного) базиса. Зеленой штрихованной линией обозначена вектор-линия  $\sigma(\lambda_1(\varphi))$  – граница узлового домена.

Базисный объем для треугольной ячейки  $\Omega$ , содержащий базис  $\varphi$  дается следующей формулой:

$$V_{\varphi} = \frac{1}{6} [\vec{e}(\lambda_1) \times \vec{e}(\lambda_2)], \quad (3.4)$$

а для четырехугольной ячейки – соответственно формулой:

$$V_\varphi = \frac{1}{4} [\vec{e}(\lambda_1) \times \vec{e}(\lambda_2)], \quad (3.5)$$

если  $\vec{e}(\lambda_1)$  и  $\vec{e}(\lambda_2)$  – ребра, образующие базис  $\varphi$ , символ  $\sum_{\varphi(\lambda)}$  обозначает суммирование по всем базисам ( $\varphi$ ), в образовании которых приняло участие ребро  $\lambda$ .

### 3.1.2 Аппроксимация дифференциальных операторов второго порядка

Для построения разностной схемы отнесем к узлам сетки ( $\omega$ ) искомую скалярную сеточную функцию  $u$ . Таким образом, естественно аппроксимируется дифференциальный оператор  $grad$ .

На ребрах исходной сетки выделим положительные направления (рис. 3.3) и отнесем к ним сеточную функцию

$$\Delta_\lambda u = - \sum_{\omega(\lambda)} S_\lambda(\omega) \cdot u_\omega = u_{\omega^*} - u_\omega, \quad (3.6)$$

где  $S_\lambda(\omega) = \pm 1$  в зависимости от того, является ли соответствующая вершина  $\omega$  началом или концом ребра при данном выборе положительного направления (рис. 3.3).

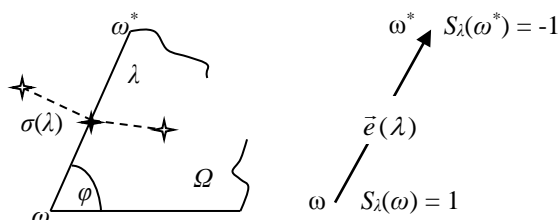


Рисунок 3.3: Выбор положительных направлений на ребрах.

Сеточные векторные поля  $\vec{X}$  задаются своими представлениями в базисах  $\vec{X}_\varphi$ . Внутреннюю дивергенцию векторного поля, обозначим как  $DIN : (\varphi) \rightarrow (\omega)$ , определим из аппроксимации теоремы Гаусса на узловом домене  $d(\omega)$  (рис. 3.1):

$$DIN \vec{X} = \sum_{\lambda(\omega)} S_\lambda(\omega) \cdot \tau_\lambda(\lambda), \quad \tau_\lambda(\lambda) = \sum_{\varphi(\lambda)} V_\varphi \cdot (\vec{e}'_\varphi(\lambda), \vec{X}_\varphi), \quad (3.7)$$



где  $\sum_{\lambda(\omega)}$  – суммирование по всем ребрам  $\lambda$ , имеющим общий узел  $\omega$ .

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

$$\begin{aligned} \left\langle \int_{\mathcal{O}} \vec{X} \cdot \nabla u \cdot dV \right\rangle_{\Delta} &= - \left\langle \int_{\mathcal{O}} u \cdot \operatorname{div} \vec{X} \cdot dV - \int_{\partial \mathcal{O}} (u \cdot \vec{X}, d\vec{s}) \right\rangle_{\Delta} = \\ &= - \sum_{\omega} (u_{\omega} \cdot (DIN \vec{X})_{\omega}) = \sum_{\lambda} \Delta_{\lambda} u \cdot \tau_X(\lambda) = \sum_{\lambda} \Delta_{\lambda} u \cdot \sum_{\varphi(\lambda)} V_{\varphi} \cdot (\vec{e}'_{\varphi}(\lambda), \vec{X}_{\varphi}) = \\ &= \sum_{\varphi} V_{\varphi} \cdot \left( \vec{X}_{\varphi}, \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_{\lambda} u \cdot \vec{e}'_{\varphi}(\lambda) \right) = \sum_{\varphi} V_{\varphi} \cdot (\vec{X}_{\varphi}, (\nabla u)_{\varphi}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

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

$$(\nabla u)_{\varphi} = \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_{\lambda} u \cdot \vec{e}'_{\varphi}(\lambda), \quad (3.9)$$

где  $\sum_{\lambda(\varphi)}$  – суммирование по ребрам  $\lambda$ , образующим базис  $\varphi$ .

Для скалярного сеточного поля  $v$  на узлах  $(\omega)$  положим  $\vec{X}_{v\varphi} = (\nabla v)_{\varphi}$ .

Тогда получим следующее равенство:

$$- \sum_{\omega} (u_{\omega} \cdot (DIN \nabla v)_{\omega}) = \sum_{\varphi} V_{\varphi} \cdot ((\nabla v)_{\varphi}, (\nabla u)_{\varphi}), \quad (3.10)$$

Равенство (3.10) можно продолжить следующим образом:

$\sum_{\varphi} V_{\varphi} \cdot ((\nabla v)_{\varphi}, (\nabla u)_{\varphi}) = - \sum_{\omega} ((DIN \nabla u)_{\omega} \cdot v_{\omega})$ . Последнее равенство показывает

самосопряженность и знакоопределенность оператора  $DIN GRAD: (\omega) \rightarrow (\omega)$  в подобласти  $O$ , если принять под произвольным скалярным сеточным полем  $v$  искомое поле величин  $u$ .

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

(3.10) примет вид:

$$- \sum_{\omega} (u_{\omega} \cdot (DIN \cdot K_{\varphi} \cdot \nabla v)_{\omega}) = \sum_{\varphi} V_{\varphi} \cdot K_{\varphi} \cdot ((\nabla v)_{\varphi}, (\nabla u)_{\varphi}), \quad (3.11)$$

Тем самым получаем самосопряженный неотрицательный  $-DIN \vec{X}_v: (\omega) \rightarrow (\omega)$  или  $-DIN K GRAD: (\omega) \rightarrow (\omega)$ :

$-DIN K GRAD = -(DIN K GRAD)^* \geq 0$ . 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  $(\omega)$ , и сеточным тензорным полем проводимости  $K$ , задаваемым своими представлениями в базисах  $K_\varphi$ . Этот оператор будет строго положительным, если хотя бы в одном граничном узле связной разностной сетки задана первая краевая задача, т.е. в этом граничном узле скалярная сеточная функция обращается в ноль.

Итого, аппроксимация исходного дифференциального оператора второго порядка в рассматриваемой задаче (3.1) запишется в следующем виде:

$$\left\langle \int_{\mathcal{O}} \operatorname{div} K \nabla u \right\rangle_{\Delta} = \sum_{\lambda(\omega)} S_{\lambda}(\omega) \cdot \tau_x(\lambda), \quad (3.12)$$

где  $\tau_x(\lambda) = \sum_{\varphi(\lambda)} V_{\varphi} \cdot (\vec{e}'_{\varphi}(\lambda), \vec{X}_{\varphi})$  (см. (3.7)), в свою очередь  $\vec{X}_{\varphi} = (\nabla u)_{\varphi}$ , а

выражение для градиента скалярной функции  $(\nabla u)_{\varphi}$  дается формулой  $(\nabla u)_{\varphi} = \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_{\lambda} u \cdot \vec{e}'_{\varphi}(\lambda)$  (см. (3.9)). Вместо оператора внутренней

дивергенции можно записать просто дивергенцию поля в области, так как известные значения функции на границе уйдут в правую часть первого уравнения системы, поэтому отпадает необходимость аппроксимации данного оператора в граничных точках.

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.

### 3.1.3 Аппроксимация оператора квадрата градиента скалярной функции

Если вернуться к уравнению (2.21), которое нам необходимо численно решить, и переписать в более наглядном виде с выделением дифференциальных операторов, которые необходимо аппроксимировать, то получится следующее выражение:

$$D_p \frac{\partial P}{\partial t} + [\dots \operatorname{div}(\dots \nabla P)] + [\dots] \cdot (\nabla P)^2 + [\dots] \cdot \alpha(P - P_0) = 0, \quad (3.13)$$

где многоточие заменяет соответствующие коэффициенты, получившиеся после подстановки всех членов в уравнение (2.21), а параметр  $\alpha$  является некоторой характеристикой источника (стока) давления в призабойной зоне, обусловленного перепадом давления внутри скважины и в пласте. В (3.13) имеется несколько диссипативных членов вида  $[\dots \operatorname{div}(\dots \nabla P)]$ , а также из энергетической составляющей появляется член вида  $(\nabla P)^2$ . Так как давление находится на неявном слое по времени, аппроксимация данного члена является задачей, требующей отдельного рассмотрения. Представим далее один из возможных способов аппроксимации квадрата градиента скалярной функции, применительно к уравнению (2.21) – квадрату градиента давления. Аппроксимация, по возможности, должна обладать определенными свойствами, гарантирующими точное решение.

Запишем квадрат градиента в виде  $(\nabla P)^2 = (\nabla P) \cdot (\nabla P)$  и положим  $(\nabla P) = \vec{a}$ , тогда получим  $(\nabla P)^2 = \vec{a} \cdot (\nabla P)$ . В таком виде член  $(\nabla P)^2$  можно трактовать как нелинейный перенос. Будем искать решение по методу Ньютона. Линеаризовав  $(\nabla P)^2$ , получим

$$(\nabla P)^2 = 2 \cdot (\nabla P)^s \nabla(\delta P^{s+1}), \quad (3.14)$$

где  $s$  – номер итерации,  $\delta P$  – приращение давления на  $s+1$  итерации. Будем аппроксимировать (3.14) схемой «вверх по потоку» (UPWIND), чтобы выполнялся принцип максимума. В соответствии с (3.9) для каждого множителя из (3.4) запишем его аппроксимацию:

$$(\nabla P)_\varphi^s = \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_\lambda P^s \vec{e}'_\varphi(\lambda) \equiv \vec{a}_\varphi^s, \quad (3.15)$$

$$\nabla(\delta P^{s+1})_\varphi = \sum_{\lambda(\varphi)} \Delta_\lambda (\delta P^{s+1}) \vec{e}'_\varphi(\lambda) \quad (3.16)$$

Рассмотрим трехмерный базис  $\varphi$ , образованный ребрами исходной сетки, в общем случае, направленными произвольным образом относительно вершины базиса  $\omega$ , и вектор градиента давления, выходящий из его вершины (рис. 3.4).

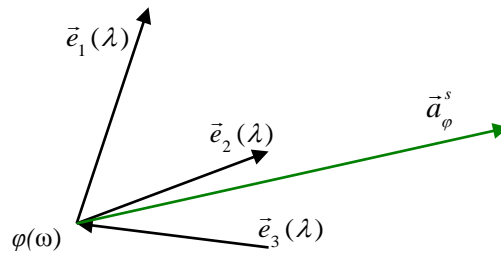


Рисунок 3.4: Аппроксимация квадрата градиента схемой «вверх по потоку».

Далее определяем, лежит ли вектор градиента давления «внутри» базиса. Для этого поочередно проверяем знаки скалярных произведений вектора градиента с векторами обратного базиса:  $(\vec{a}_\varphi^s, \vec{e}'_{\varphi_i}(\lambda)) \geq 0, i = 1, 2, 3$ . Вектор обратного базиса перпендикулярен остальным двум другим векторам исходного базиса и направлен в ту же сторону, что и исходный вектор, поэтому зная знак скалярного произведения, можно сказать, смотрит ли вектор градиента внутрь базиса (т.е. внутрь ячейки, ребрами которой являются вектора базиса). Необходимо также учитывать направление исходного базисного вектора. Для базисных векторов  $\vec{e}_1(\lambda)$  и  $\vec{e}_2(\lambda)$  имеем:  $(\vec{a}_\varphi^s, \vec{e}'_{\varphi_{1,2}}(\lambda)) \geq 0$ . Для базисного вектора  $\vec{e}_3(\lambda)$ , «входящего» в базис, меняем его знак на противоположный:  $\vec{e}_3^*(\lambda) = -\vec{e}_3(\lambda)$ , затем находим к нему обратный вектор  $\vec{e}_3^{*\prime}(\lambda)$  и также проверяем знак скалярного произведения  $(\vec{a}_\varphi^s, \vec{e}_3^{*\prime}(\lambda)) \geq 0$ . Если все три скалярных произведения больше нуля, т.е. вектор градиента, отложенный из вершины  $\omega$  базиса  $\varphi$  смотрит в этот базис (свой базис), то такой вектор градиента обеспечит диагональное

преобладание при решении (3.14). Процедуру определения попадания вектора градиента в свой базис последовательно применяем для всех базисов с данной вершиной  $\omega$ . Далее выбираем только те вектора градиентов, которые смотрят в свои базисы, и вычислим итоговый квадрат вектора градиента в точке  $\omega$ , осредняя их по следующей формуле:

$$\begin{aligned}
 (\nabla P)_\omega^2 &= \frac{1}{\sum_{\varphi(\omega) \supset \vec{a}_\varphi^s} V_\varphi} \left[ 2 \cdot \sum_{\varphi(\omega) \supset \vec{a}_\varphi^s} V_\varphi \cdot (\nabla P)_\varphi^s (\nabla(\delta P^{s+1}))_\varphi \right] = \\
 &= \frac{1}{\sum_{\varphi(\omega) \supset \vec{a}_\varphi^s} V_\varphi} \left[ 2 \cdot \sum_{\varphi(\omega) \supset \vec{a}_\varphi^s} V_\varphi \cdot (\vec{a}_\varphi^s, \vec{e}'_\varphi(\lambda)) \Delta_\lambda(\delta P^{s+1}) \right], \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

где суммирование проводится только по тем базисам, которые содержат свой вектор градиента. На рисунке 3.5 (для наглядности, двумерный случай) заштрихованы те базисы, которые содержат свой вектор градиента и по которым проводится суммирование в выражении (3.17).

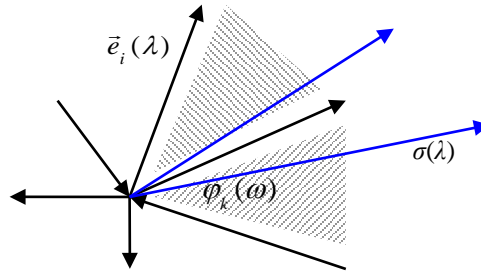


Рисунок 3.5: Выбор базисов для расчета квадрата градиента в узле. Заштрихованные те базисы, внутрь которых направлены вектора градиентов, исходящие из вершины этих базисов.

Может возникнуть ситуация, когда ни один из векторов не смотрит в свой базис. В таком случае вектор градиента находим для узла  $\omega$  как среднее значение векторов градиентов во всех базисах  $\varphi$ , принадлежащих узлу  $\omega$ :

$$\vec{a}_\omega^s = \frac{1}{\sum_{\varphi(\omega)} V_\varphi} \sum_{\varphi(\omega)} V_\varphi (\nabla P)_\varphi^s, \quad (3.18)$$

где суммирование проводится по всем базисам  $\varphi$ , содержащих узел  $\omega$ . Далее повторяем процедуру отыскания попадания в базис вектора  $\vec{a}_\omega^s$  (3.18), аналогичную описанной выше. Проходя последовательно по всем базисам  $\varphi(\omega)$ , находим первый базис  $\tilde{\varphi}(\omega)$ , в который попал вектор  $\vec{a}_\omega^s$ . Перенос линеаризованных приращений давления  $(\delta P^{s+1})$  в таком случае осуществляется только в этом базисе  $\tilde{\varphi}(\omega)$  в направлении  $\vec{a}_\omega^s$ , т.е. значение для квадрата вектора градиента (3.14) запишется следующим образом:

$$(\nabla P)_\omega^2 = 2 \cdot \sum_{\lambda(\tilde{\varphi})} (\vec{a}_\omega^s, \vec{e}'_\varphi(\lambda)) \Delta_\lambda(\delta P^{s+1}), \quad (3.19)$$

В обеих формулах (3.17) и (3.19) скалярные произведения  $(\vec{a}_\omega^s, \vec{e}'_\varphi(\lambda))$  и  $(\vec{a}_\omega^s, \vec{e}'_{\tilde{\varphi}}(\lambda))$  соответственно заведомо больше либо равны нулю (по условию выбора базиса, в который идет перенос), что обеспечивает требуемое диагональное преобладание и выполнение принципа максимума.

Данная трехмерная разностная схема представляет собой в некотором смысле аналог одномерной противопоточной уголковой схемы для уравнения конвективного переноса, обеспечивающей устойчивое решение. Однако ее алгоритмическая и программная реализация в трехмерном случае сопряжена с большим объемом вычислений, и при наличии массивных объемных сеток с большим количеством данных расчеты по данной схеме потребуют значительного вычислительного времени. Для ряда физических задач, в том числе рассматриваемых в данной работе, возможен упрощенный и более экономичный с точки зрения вычислительных затрат вариант аппроксимации оператора квадрата градиента на основе уже имеющихся аппроксимаций дифференциальных операторов второго порядка. Рассмотрим нелинейное уравнение вида:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \hat{L}(f) = (\nabla P)^2 = \text{div}(f \cdot \nabla f) - f \cdot \text{div}(\nabla f), \quad (3.20)$$

Каждое из слагаемых (3.20) по сути представляет собой диссипативный член с нелинейным коэффициентом, аппроксимация которого описывалась выше. Решение данного уравнения включается в схему суммарной

аппроксимации, по нелинейности предлагается устроить итерации, беря коэффициенты с предыдущей итерации.

Необходимо учесть, что оператор квадрата вектора градиента определен неотрицательно, значит, чтобы решение гарантированно существовало, нужна строгая положительность. В данном случае представляется возможным ввести в уравнение регуляризационный параметр – небольшой диссипативный член с маленьким положительным коэффициентом, для обеспечения диагонального преобладания:

$$\hat{L}(f) \geq 0: \tilde{L}(f) \Rightarrow \hat{L}(f) + \alpha \cdot (\nabla f) > 0, \quad (3.21)$$

где  $\alpha$  – небольшая положительная константа (равная, например, шагу сетки). Итого, выражение для аппроксимации уравнения (3.20) запишется в следующем виде:

$$\frac{f^{s+1} - f^n}{\Delta t} = \operatorname{div}(f^s \cdot \nabla f^{s+1}) - f^s \cdot \operatorname{div}(\nabla f^{s+1}) + \alpha \cdot \operatorname{div}(\nabla f^{s+1}), \quad (3.22)$$

В пункте 3.3 данной главы будет практически исследована устойчивость предложенной схемы аппроксимации квадрата вектора градиента и проведено сравнение схемы (3.22) с устойчивой противопоточной уголковой схемой.

## **3.2 Практическое исследование сходимости схемы по методу опорных операторов и решение модельных задач**

Сходимость построенной по методу опорных операторов разностной схемы исследовалась с помощью численных экспериментов на двух модельных задачах нелинейной теплопроводности, имеющих автомодельное решение [9, 92].

### **3.2.1 Постановка задачи о распространении бегущей волны и результаты моделирования**

Рассмотрим уравнение теплопроводности в следующем виде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \left( \kappa_0 \cdot T^\alpha \cdot \frac{\partial T}{\partial s} \right), \quad (3.23)$$

где  $T$  – искомая функция (температура),  $\kappa_0$ ,  $\alpha$  – свободные коэффициенты,  $s \equiv x|y|z$ . Это уравнение при следующих начальных и граничных условиях:

$$T(s, 0) = \begin{cases} \left[ \frac{\alpha D}{\kappa_0} (s - s_0) \right]^{1/\alpha}, & s \leq s_0, \\ 0, & s > s_0, \end{cases} \quad (3.24)$$

$$T(0, t) = \left[ \frac{\alpha D}{\kappa_0} (Dt + s_0) \right]^{1/\alpha}, \quad t > 0,$$

имеет аналитическое решение в виде бегущей с постоянной скоростью волны:

$$T(s, 0) = \begin{cases} \left[ \frac{\alpha D}{\kappa_0} (Dt + s_0 - s) \right]^{1/\alpha}, & s \leq s_0 + Dt, \\ 0, & s > s_0 + Dt, \end{cases} \quad (3.25)$$

где  $D$  – скорость распространения волны,  $s_0$  – свободный параметр.

Если в качестве начального и граничного условий взять:

$$T(s, 0) = \begin{cases} \left[ \frac{\alpha (s - s_0)^2}{2\kappa_0 (\alpha + 2) t_1} \right]^{1/\alpha}, & s \leq s_0, \\ 0, & s > s_0, \end{cases} \quad (3.26)$$

$$T(0, t) = \left[ \frac{\alpha s_0^2}{2\kappa_0 (\alpha + 2) (t_1 - t)} \right]^{1/\alpha}, \quad t < t_1,$$

то решение уравнения (3.23) примет вид стоячей волны:

$$T(x, t) = \left[ \frac{\alpha (s - s_0)^2}{2\kappa_0 (\alpha + 2) (t_1 - t)} \right]^{1/\alpha}, \quad t < t_1, \quad (3.27)$$

где  $t_1$  – скорость свободный параметр.

Численное решение данного нелинейного уравнения теплопроводности проводилось в одно-, двух- и трехмерных расчетных областях с характерным размером  $s=3$ . В расчетах участвовали однородные расчетных сетки, состоящие из правильных гексаэдров, призм с треугольным основанием и тетраэдров (рис. 3.6). Для одно- и двумерных



расчетов использовались однослойные трехмерные сетки с периодическими или граничными условиями по соответствующим направлениям.

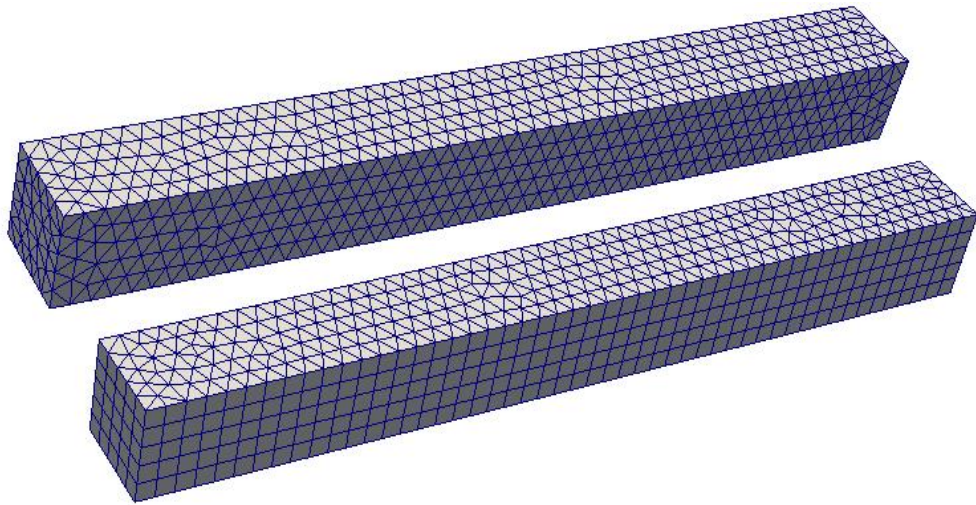


Рисунок 3.6: Пример трехмерных тетраэдральной и призматической сеток.

Для теста с бегущей волной использовались следующие значения свободных параметров:  $\alpha=2.0$ ,  $\kappa_0=0.5$ ,  $s_0=0.5$ ,  $D=5.0$ . Модельное время  $t$  изменялось от 0 до 0.4 с постоянным шагом  $\tau=2\cdot 10^{-4}$ . На рис. 8 представлены одномерные профили температуры, полученные на трех различных трехмерных сетках с шагом вдоль направления  $s$  равным  $h=0.06$ , т.е. состоящей из 50 точек по  $s$ , справа представлена укрупненная часть профиля на фронте волны, где наблюдается наибольшее расхождение.

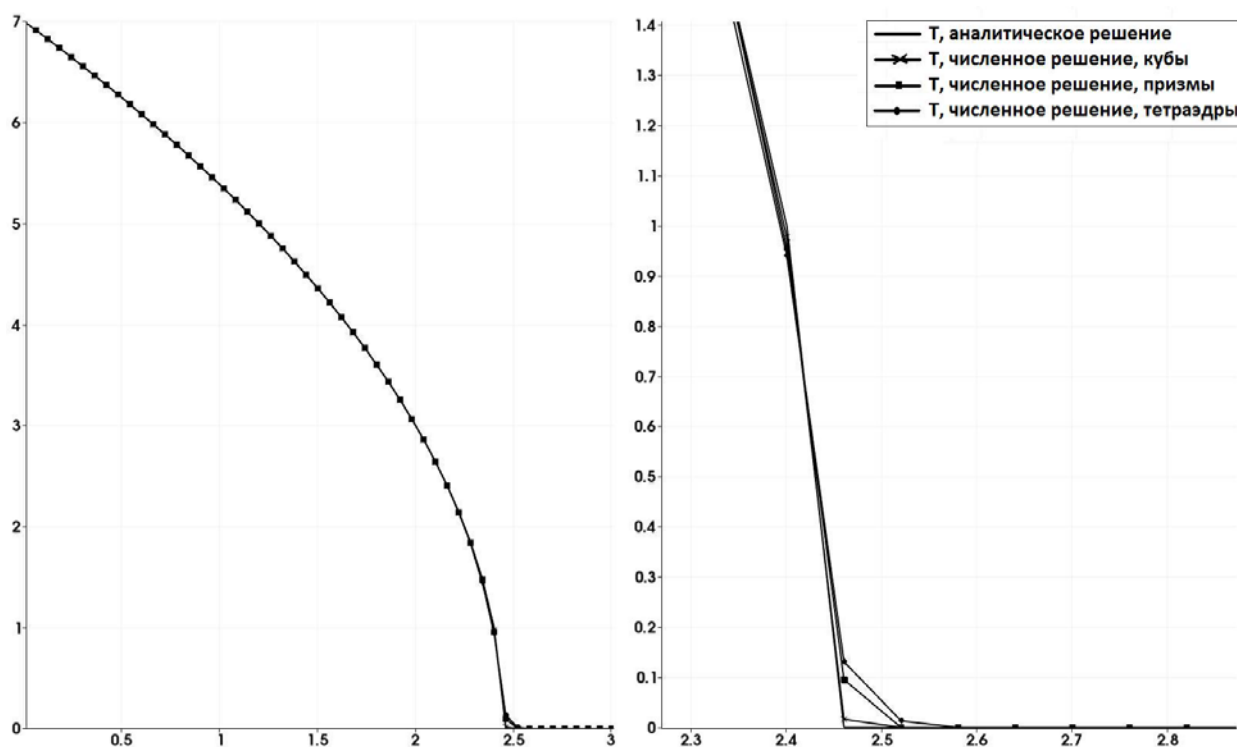


Рисунок 3.7: Одномерные температурные профили теста с бегущей волной на кубической, призматической и тетраэдральной сетках соответственно. Вдоль оси  $OY$  – температура  $T$ , вдоль оси  $OX$  отложено направление  $s$ , справа – увеличенная часть профиля с наибольшим отклонением расчетных решений от аналитического.

Для теста со стоячей волной использовались следующие значения свободных параметров:  $\alpha=2.0$ ,  $\kappa_0=0.5$ ,  $s_0=2.0$ ,  $t_1=1.0$ . Модельное время  $t$  изменялось от 0 до 0.2 с постоянным шагом  $\tau=1\cdot 10^{-4}$ . На рис. 9 представлены одномерные профили температуры, полученные на тех же трех сетках, что и в предыдущем тесте с бегущей волной. Справа также увеличена та часть графика, где наблюдается наибольшее отклонение численных решений от аналитического.

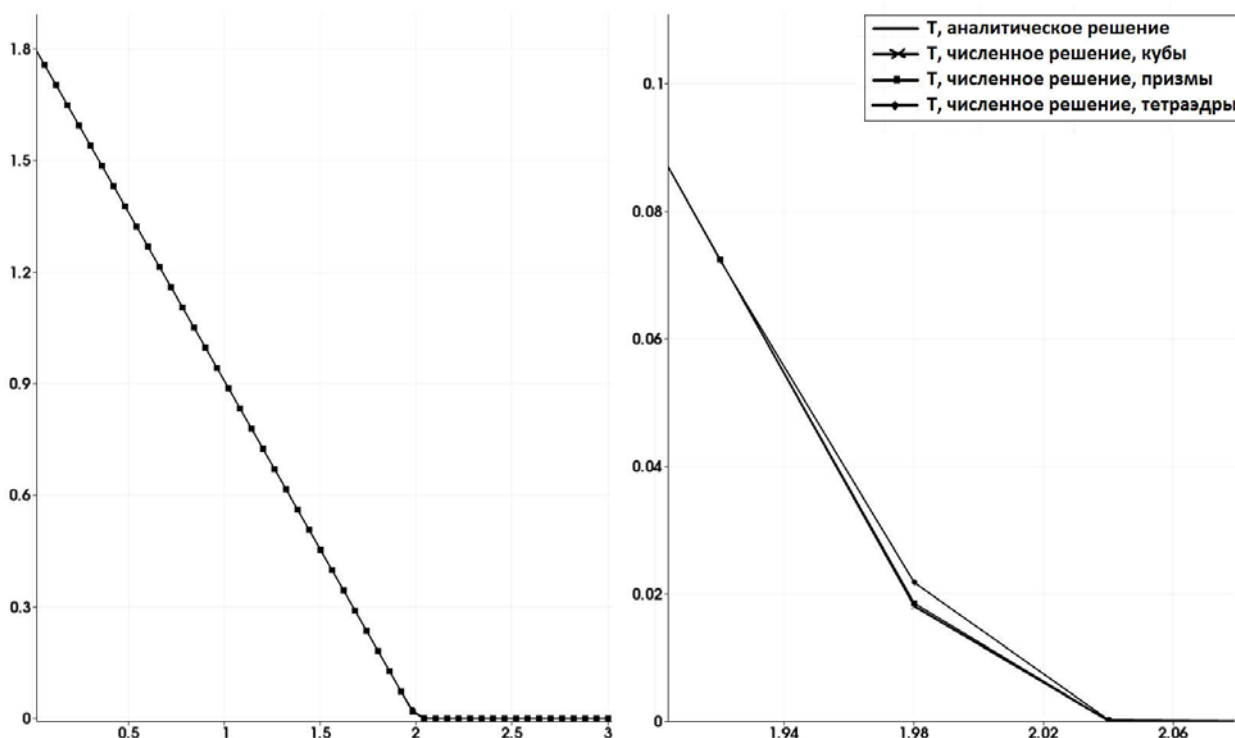


Рисунок 3.8. Одномерные температурные профили теста со стоячей волной на кубической, призматической и тетраэдральной сетках соответственно. Вдоль оси  $OY$  – температура  $T$ , вдоль оси  $OX$  отложено направление  $s$ , справа – увеличенная часть профиля с наибольшим отклонением расчетных решений от аналитического.

На графиках выше сплошной линией представлено численное решение, пунктирной – аналитическое. Видно, что оба результата хорошо согласованы. Расчетный профиль заметно отличается от аналитического только на фронте волны (данные части профилей увеличены на рисунках). Это связано с физическими особенностями данной модельной задачи: на фронте волны градиент температуры стремиться к бесконечности, тогда как коэффициент теплопроводности равен нулю. Возникает математическая неопределенность, и какой бы мелкой ни был шаг сетки, неоднородность, обусловленная физикой процесса, будем все время присутствовать. Решения в таких точках близки к разрывным, расчеты по устойчивым, но немонотонным схемам, могут давать осцилляции или даже расходиться. Численная схема по методу опорных операторов в целом хорошо справляется со своей задачей.

### 3.2.2 Постановка задачи о распространении бегущей волны и результаты моделирования

Для каждого сеточного элемента строились две сетки, отличающиеся характерным шагом в два раза для практической оценки порядка аппроксимации. Если принять, что погрешность численного решения равна  $\varepsilon = c \cdot h^n$ , то порядок аппроксимации вычислялся по формуле:

$$n = \log_2 \left( \frac{L_2^h / N^h}{L_2^{h/2} / N^{h/2}} \right), \quad (3.28)$$

где  $L_2$  – ошибка в норме  $L_2$ ,  $N$  – количество расчетных ячеек, верхний индекс при  $N$  – шаг сетки.

В таблице 2 представлены практические оценки порядка аппроксимации для трех типов сеток (состоящих из кубов, тетраэдров и призм), которые были получены на серии однородных сеток с последовательно уменьшающимся шагом:  $h$ ,  $h/2$ ,  $h/4$ .

Таблица 3.1. Практические оценки порядка аппроксимации

	Кубическая	Призматическая	Тетраэдральная
Бегущая волна	1.97	1.78	1.76

Практические оценки показывают, что построенная схема обеспечивает повышенный порядок аппроксимации на сетках, близких к равномерным, в том числе и для нелинейного уравнения. На регулярных сетках из прямоугольных параллелепипедов построенная схема представляет собой аналог разностной схемы «крест». Схема имеет достаточно компактный сеточный шаблон, требующий при проведении параллельных вычислений включать в межпроцессорные обмены два слоя ячеек на границах вычислительных обменов.

Стоит также отметить, что реализованный неявный солвер теплопроводности тестировался на данной задаче о распространении бегущей волны на возможность высокого распараллеливания в работе алгоритмов на основе метода опорных операторов. Тестирование солвера теплопроводности проводилось на суперкомпьютере «Ломоносов» (НИВЦ

МГУ) с использованием различного количества ядер (от 12 до более 1500) на сетке, состоящей из 8 млн. ячеек (рис. 3.9).

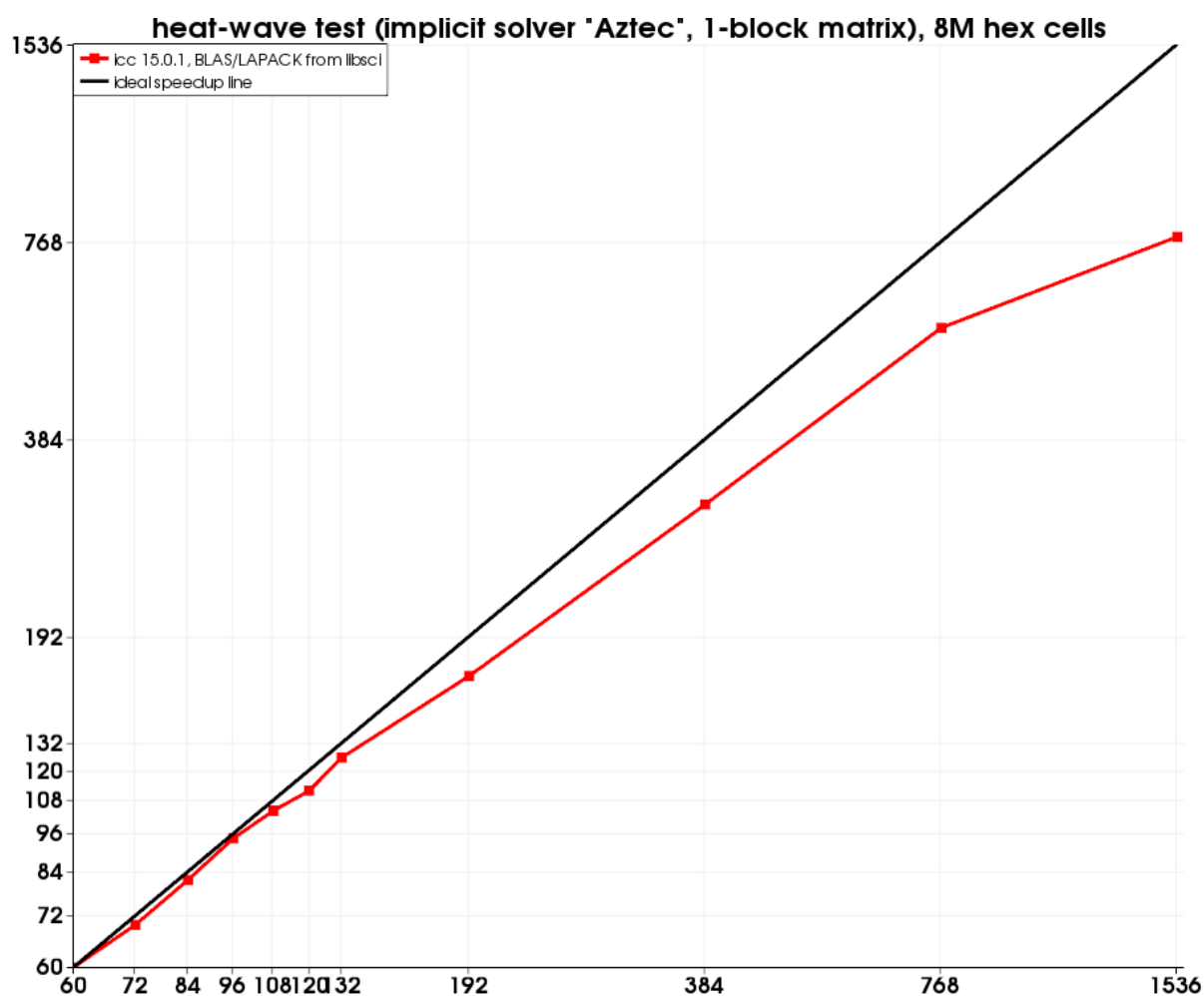


Рисунок 3.9. График ускорения счета при распараллеливании неявного солвера.

Результаты таких тестовых запусков дали стандартные для солверов пакета MARPLE оценки, показывающие, что для достижения наибольшего распараллеливания на один процессоров должно приходиться порядка 30-50 тысяч узлов в случае одного солвера (рис. 3. 10)

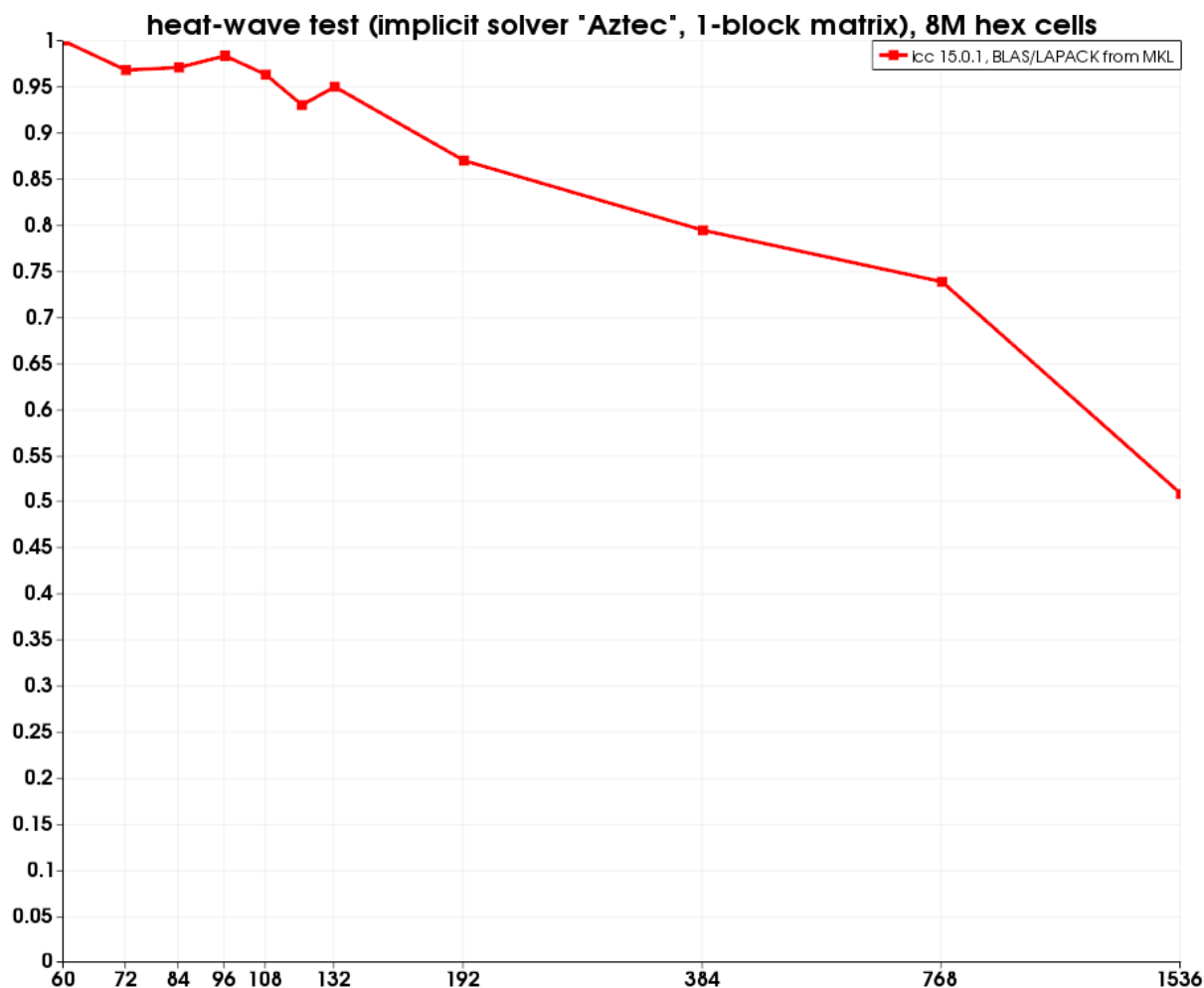


Рисунок 3.10. График эффективности распараллеливания неявного солвера.

Метод показал себя эффективным для проведения мультимасштабных расчетов, требующих подробных сеток и работы на высокопроизводительных вычислительных системах.

### 3.2.3 Решение задачи о распространении тепловой волны в области с различными коэффициентами теплопроводности

Исследуем сходимость реализованной разностной схемы на основе метода опорных операторов в классе разрывных коэффициентов [84]: будем решать уравнение (3.23) в рамках модельной задачи о распространении тепловой волны в среде с различными коэффициентами теплопроводности. Рассмотрим следующую постановку задачи: в области с характерным размером  $l$  вдоль направления  $s$  распространения волны и значениями температуры на левой и правой границах соответственно

$T_{s \min}$  и  $T_{s \max}$  задано начальное распределение температуры в виде линейной зависимости  $T = T_{s \min} + (T_{s \max} - T_{s \min}) \cdot s/l$ . Коэффициент теплопроводности представляет собой скалярное поле, в части области, соответствующей координатам  $s \leq l/k$ , он принимает одно значение, в части с координатой  $s > l/k$  – другое ( $k$  – произвольное число). На границе разрыва должен сохраняться баланс тепла. В таком случае при прохождении тепловой волны от более горячей границы к более холодной в среде со скачкообразно изменяющимся коэффициентом теплопроводности начальный линейный профиль будет претерпевать излом на границе подобластей с различными коэффициентами теплопроводности.

На рисунках 3.11 и 3.12 приведены результаты численного решения данной задачи и сетка, на которой проводился расчет, для случаев двух и трех различных коэффициентов теплопроводности в среде.

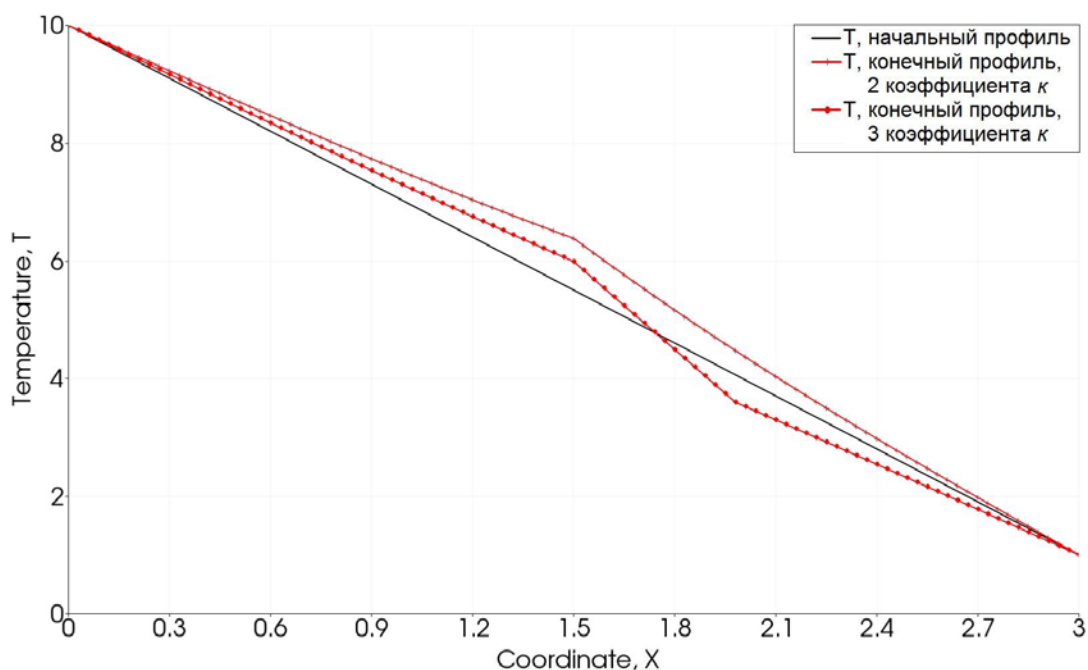


Рисунок 3.11: Одномерные температурные профили теста с различными коэффициентами теплопроводности на тетраэдральной сетке для случаев двух и трех различных значений  $k$  в среде на момент времени. Сплошной линией показано начальное распределение температуры в среде.

Параметры счета были следующими: область представляет собой параллелепипед с размерами  $3 \times 0.3 \times 0.3$ , шаг тетраэдральной сетки (одномерная дискретизация по осям)  $h = 0.06$ , волна распространяется вдоль координаты  $X$ ,  $l = 3$ ,  $T_{s \min} = 10.0$ ,  $T_{s \max} = 1.0$ . В первом случае коэффициент теплопроводности задан следующим образом: при  $x \leq 1.5$  коэффициент  $\kappa = 4.0$ , при  $x > 1.5$  –  $\kappa = 2.0$ , во втором случае: при  $x \leq 1.0$  и  $x > 1.5$   $\kappa = 4.0$ , при  $1.0 < x \leq 1.5$  –  $\kappa = 2.0$ . Шаг по времени  $\tau = 10^{-4}$ , счет проводился до времени  $t = 0.2$ . Черная прямая на графике (рис. 10) представляет собой начальное линейное распределение температуры. Как и следовало ожидать, представленные не момент времени  $t = 0.2$  конечные температурные профили (выделенные красным на графике) в обоих случаях претерпевают изломы на границе подобластей с различными коэффициентами теплопроводности. Во втором случае, для наглядности, в первой и третьей подобластях задано одно значение коэффициента  $\kappa = 4.0$ , что выражается одинаковым наклоном прямых на этих отрезках. Сетка, на который проводился счет, а также трехмерный вид распределения температуры в среде представлены на рисунке 3.12.

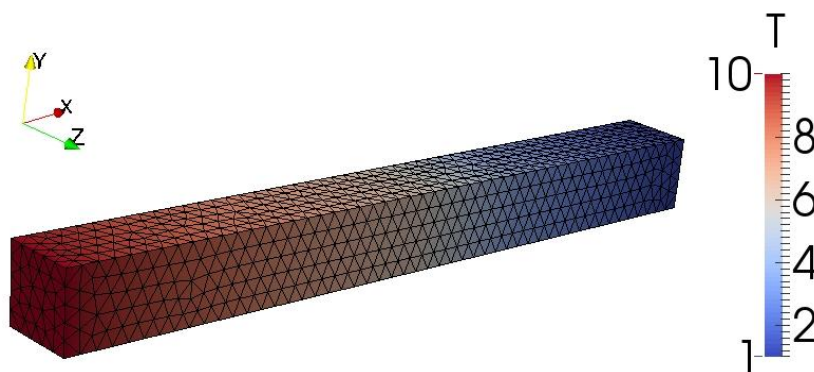


Рисунок 3.12: Тест с разрывными коэффициентами: сетка и объемное распределение температуры после прохождения тепловой волны.

### **3.3 Практическое исследование устойчивости аппроксимационной схемы квадрата градиента**

Для практического исследования устойчивости предложенной ранее схемы аппроксимации квадрата градиента рассмотрим одномерный



вариант уравнения (3.19) для некоторой скалярной функции, например, для давления:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2, \quad (3.29)$$

Это уравнение при следующих начальных и граничных условиях:

$$\begin{aligned} P(x, 0) &= x^2, \\ P(0, t) &= 0, \\ P(1, t) &= \frac{1}{1-4t}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

имеет автомодельное решение в виде:

$$P(x, t) = \frac{x^2}{1-4t}, \quad (3.31)$$

В момент времени  $t=0.25$  решение уравнения (3.31) уходит на бесконечность.

Введем одномерную пространственно-временную сетку  $\{x_i, t^n\}$ :  $0 \leq x \leq 1$ ,  $x_i = i \cdot h$ ,  $i = 1 \dots N$ ;  $t^n = n \cdot \tau$ ,  $n = 1 \dots K$ ;  $h$  и  $\tau$  – шаги сетки по пространству и времени соответственно. Рассмотрим две конечноразностные схемы аппроксимации: левую  $\hat{P}_i = P_i + \frac{\Delta t}{h^2} (P_i - P_{i-1})^2$  и правую  $\hat{P}_i = P_i + \frac{\Delta t}{h^2} (P_{i+1} - P_i)^2$ . Если провести аналогию с уравнением конвекции и представить уравнение (3.29) в виде  $\frac{\partial P}{\partial t} - \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) \cdot \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) = \frac{\partial P}{\partial t} - \vec{v} \cdot \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) = 0$ , где  $\vec{v} = \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) < 0$  – скорость конвективного переноса, то так как  $\vec{v} < 0$ , устойчиво себя должна вести правая противопоточная схема. Это подтверждают результаты расчета, представленного на рисунке 3.13 для функции  $P(0.5, t)$ . Одномерный расчет проводился на равномерной сетке с шагом  $h = 0.01$  и постоянным шагом по времени  $\Delta t = 0.001$ .

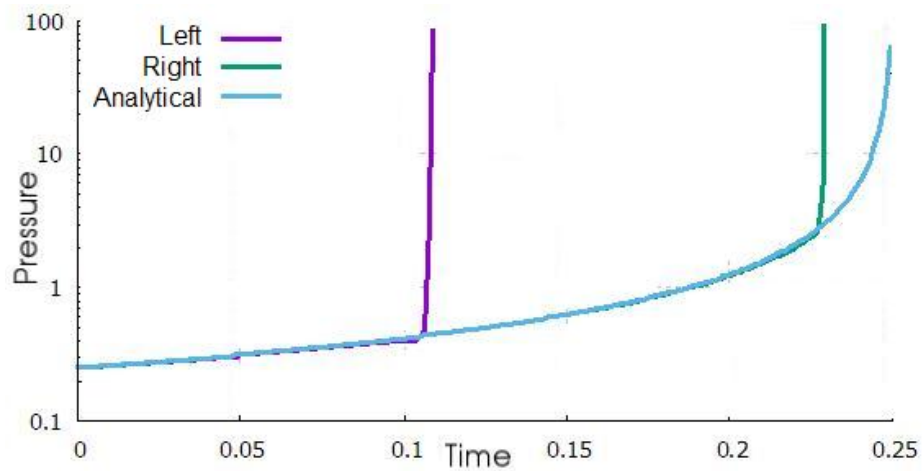


Рисунок 3.13: График функции  $P(0.5, t)$ : синим представлено аналитическое решение, фиолетовым – решение по левой схеме, зеленым – по правой.

На графике 3.13 видно, что правая схема остается устойчивой дольше. В левой схеме бесконечности возникают на 70-м шаге по времени, в правой на 230-м. Можно предположить, что при измельчении шага по времени численно решение все дольше будет удерживаться на аналитическом.

На рисунке 3.14 и 3.15 представлены результаты расчета по предложенной численной схеме на кубической и тетраэдральной сетках соответственно.

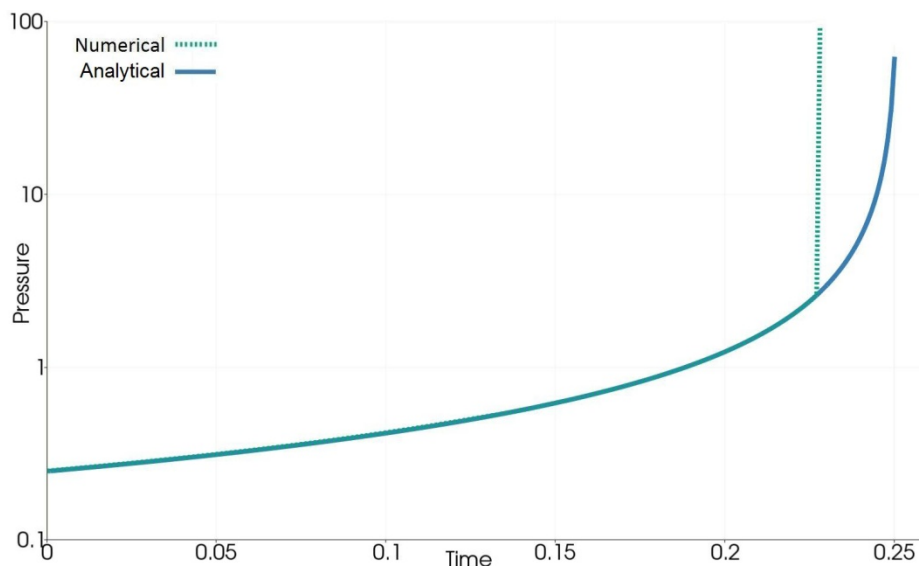


Рисунок 3.14: График функции  $P(0.5, t)$ : синим сплошным представлено аналитическое решение, зеленым пунктирным – численное решение с использованием предложенной аппроксимации квадрата градиента. Кубическая сетка, без регуляризации.

На кубической сетке (рис. 3.14) алгоритм не требует введение регуляризационного параметра, он эквивалентен противопоточной разностной схеме. Бесконечность в данном случае возникает на 229-м шаге по времени. На тетраэдральной сетке (рис. 3.15) требуется введение регуляризационного параметра для обеспечения диагонального преобладания, например, в виде (3.21). Бесконечность возникает на 252-м шаге по времени.

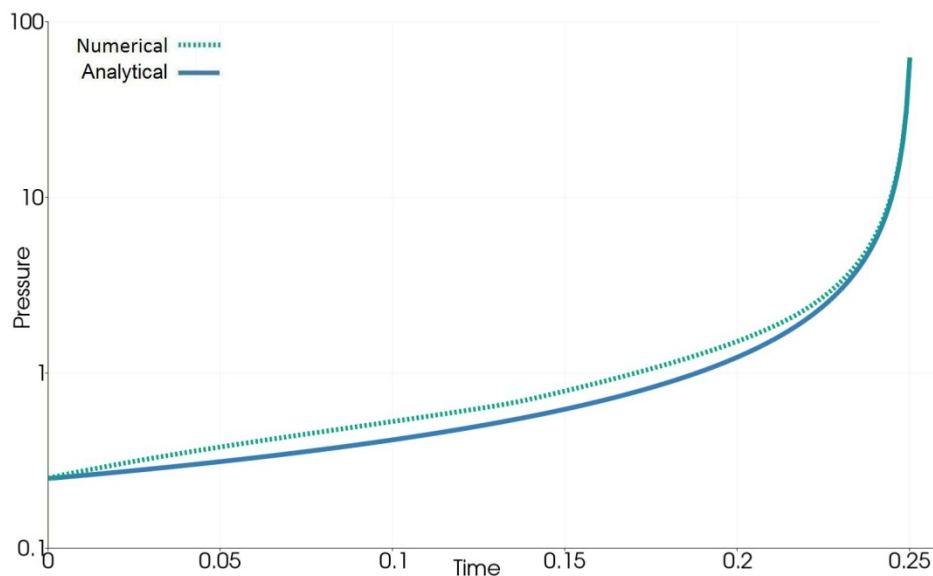


Рисунок 3.15: График функции  $P(0.5, t)$ : синим сплошным представлено аналитическое решение, зеленым пунктирным – численное решение с использованием предложенной аппроксимации квадрата градиента. Тетраэдральная сетка, с регуляризацией.

В данном расчете шаг по оси  $X$  для тетраэдральной и ортогональной сеток выдерживался одинаковым. Для такой крупной сетки выбранный данным образом параметр регуляризации велик и сильно выглаживает решение. При расчетах на сгущающихся сетках решение сходится к аналитическому быстрее.

### 3.4 Схема расчета конвективных потоков

Выше были рассмотрены методы решения уравнений с диффузионными членами, входящими в состав диссипативного уравнения теории гидратов, которому уделено основное внимание в данной работе (2.21). Но реализуемая гидратная модель имеет также сатурационный блок,

отвечающий за конвективный перенос сатурационных параметров и обладающий, в основном, гиперболическими свойствами. Для задач, связанных с газогидратной тематикой, при решении сатурационного блока результаты необходимой на данный момент точности дает противопоточная схема или схема «наветренных разностей» (в зарубежной литературе – UPWIND). Однако, с заделом на возможные задачи, которые требуют большей точности решения, рассматривается возможность реализации сатурационного блока по более точным схемам расчета конвективных потоков, одна из которых, реализованная автором, описывается в данном разделе.

### 3.4.1 Метод коррекции потоков

Рассмотрим линейное уравнение переноса в следующем виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(u\vec{v}) = 0, \quad (3.32)$$

где  $\vec{v}$  – некоторое заданное поле скоростей, которое будем считать для удобства не зависящим от времени.

В работах [93, 94] подробно исследованы различные вопросы и методы решений гиперболических уравнений на неструктурированных сетках методами коррекции потоков. В частности, на примере аппроксимации двумерного уравнения переноса с постоянной скоростью на треугольных сетках показано появление дополнительного нефизического диффузионного члена вида

$$\mu \nabla \vec{v} \vec{v} \nabla u, \quad (3.33)$$

где  $\mu$  – параметр, зависящий от разностной сетки. Выражение для данного члена совпадает с выражением для искусственной вязкости, полученным в работе [95]. Основу метода коррекции потоков на неструктурированных сетках составляет предложенное С. Залесаком [96] обобщение одномерного алгоритма Бориса-Бука [97]. Суть метода состоит в нахождении решения по двум схемам – первого и повышенного порядков

точности с последующим построением их комбинации таким образом, что в областях гладкого решения работает схема высокого порядка, а вблизи разрывов – низкого, обеспечивающего монотонность решения. Таким образом, метод направлен на получение скорректированного решения максимально высокой точности и свободного от нефизических осцилляций, которые дают схемы повышенного порядка.

По существу, метод коррекции потоков заключается в добавлении к схеме первого порядка точности некоторым образом ограниченного антидиффузионного потока. В работе [94] предложен альтернативный равносильный подход – метод тензорной вязкости – заключающийся во введении в схему высокого порядка точности диффузионного члена в форме искусственной вязкости. Такая добавка служит для повышения устойчивости явной схемы с центрально-разностной аппроксимацией конвективного потока. Достоинством такого подхода служит то, что дифференциальный член записан в тензорной инвариантной форме, и его дискретизация не требует специальных приемов. Также существенное значение для построения консервативных схем играет тот факт, что выражение (3.33) для искусственной вязкости – дивергентного вида. Ключевым моментом в реализации данного подхода является выбор коэффициента дополнительной диффузии на основе анализа гладкости решения. В работе [93] разобран ряд высокоточных и надежных алгоритмов коррекции потоков применительно к проекционной численной схеме и предложен свой экономичный алгоритм выбора корректирующего коэффициента искусственной вязкости, обеспечивающего необходимое качество решения для двумерных неструктурированных сеток. Одно из предположений, на которых он основан, заключается в том, что при выполнении условия Куранта  $\tau \leq h/|\vec{v}|$  решение уравнения переноса на  $(n+1)$ -м слое по времени  $u(t+\tau, \vec{x}) = u(t, \vec{x} - \tau \cdot \vec{v})$  в  $i$ -м узле не должно выходить за границы значений функции  $u$  с  $n$ -го временного слоя в пределах шаблона аппроксимации для  $i$ -го узла. Поэтому при определении

допустимых значений  $u_i^{\min}$  и  $u_i^{\max}$  можно ограничиться анализом решения только на  $n$ -м слое. Второе предположение говорит о том, что монотонная схема, близкая по свойствам схеме первого порядка точности (схеме с направленными разностями) может быть построена введением в базовую проекционную схему тензорной вязкости (3.33) с коэффициентом  $\mu = h \cdot |\vec{v}|$ .

Этот алгоритм лег в основу реализованной автором схемы расчета гиперболического уравнения на трехмерных неструктурированных сетках. Схема работает в два этапа. На этапе предиктора на полуцелом слое по времени по схеме повышенного порядка точности (центрально-разностной) ищется решение линейного уравнения переноса (3.32). На этапе корректора на целом слое по времени при расчете конвективных потоков по немонотонной центрально-разностной схеме в уравнение для монотонизации решения искусственно добавляется слагаемое вида (3.33) – тензорная вязкость, которое аппроксимируется по методу опорных операторов. В итоге, ищем решение для следующего уравнения:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \vec{v} u + \nabla h \cdot \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|} \nabla u, \quad (3.34)$$

где для обеспечения дивергентности коэффициент вязкости, вообще говоря, переменный, внесен под знак производной. 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  $0 \leq c \leq 1$  выбирается на основе анализа гладкости решения.

Разностные сетки и контрольные объемы описаны в пункте 3.1.1 текущей главы: элементы границ контрольного объема  $\vec{\sigma}(\lambda)$ , выстроенные описанным там способом, являются поверхностями  $\vec{S}_{ij}$ , через которые идут потоки вдоль ребер между парой узлов. Шаблон аппроксимации (Ш) для вычисления потока в  $i$ -ом узле  $\omega$  представлен на рисунке 3.16.

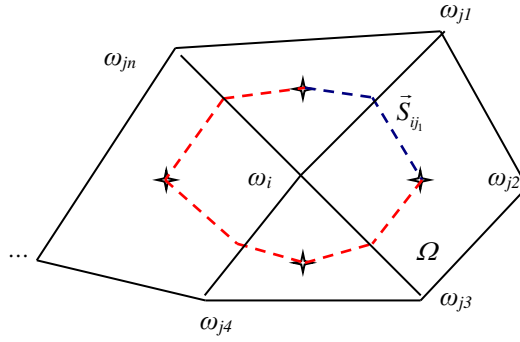


Рисунок 3.16: Шаблон аппроксимации  $i$ -го узла  $\omega$  (III). Пунктирная ломаная ограничивает приузловой домен с объемом  $V_i$ . Часть ломаной, выделенная синим цветом, является поверхность обмена между парой узлов.

Двухэтапную схему с корректирующей искусственной вязкостью для расчета конвективных потоков для  $i$ -го узла разностной сетки в общем виде можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 &\text{предиктор: } \tilde{u}_i = u_i^n + \frac{\tau}{2V_i} \langle \nabla \vec{v} u^n \rangle_{\Delta_{i1}} ; \\
 &\text{корректор: } \begin{cases} \hat{u}_i = u_i^n + \frac{\tau}{V_i} \langle \nabla \vec{v} \tilde{u} \rangle_{\Delta_{i1}} , \\ u_i^{n+1} = \hat{u}_i + \frac{\tau}{V_i} \left\langle \nabla c \cdot \vec{h} \cdot \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|} \nabla u^{n+1} \right\rangle_{\Delta_{i2}} ; \end{cases} \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

где  $\langle \rangle_{\Delta_1}$  и  $\langle \rangle_{\Delta_2}$  обозначают соответственно центрально-разностную аппроксимацию конвективных потоков и аппроксимацию дифференциального оператора второго порядка по методу опорных операторов;  $\tau$  – шаг по времени;  $n$  – номер шага по времени;  $V_i$  – приузловой объем;  $0 \leq c \leq 1$  – коэффициент коррекции потока в узле, определяется на нижнем слое по времени. Диадное произведение скоростей в выражении для искусственной вязкости учитывает направление скорости, что в некотором роде позволяет получить трехмерный аналог схемы направленных разностей. Так как на этапе предиктора происходит только вычисление потоков по центрально-разностной схеме на полуцелом слое по времени, остановимся подробнее на этапе корректора, в том числе на алгоритме вычисления коэффициента

коррекции потока  $c$  и коэффициента искусственной вязкости  $\mu$ . На этапе корректора выполняется следующая последовательность действий:

- 1) Для каждого узла  $i$  по шаблону  $\mathcal{M}$  вычисляется поток приращения функции в данном узле по схеме высокого порядка (центрально-разностной):  $\Delta u_i^n = \frac{\tau}{V_i} \langle \nabla \tilde{v} \tilde{u} \rangle_{\Delta_i^n}$  (см. (3.35)) и находится новое значение функции  $u_i^h$  по схеме высокого порядка.
- 2) В соответствии с упомянутым выше предположением определяются допустимые значения функции:  $u_i^{\min} = \min_{i \in \mathcal{M}} \{u_i^n\}$  и  $u_i^{\max} = \max_{i \in \mathcal{M}} \{u_i^n\}$ .
- 3) Сравниваются значения функции, найденные по схеме высокого порядка точности  $u_i^h$ , с допустимыми значениями для каждого узла  $i$ , на основе чего определяется коэффициент коррекции  $c_i$  для узла  $i \in \mathcal{M}$ :

$$c_i = \begin{cases} 0, & \text{если } u_i^{\min} \leq u_i^h \leq u_i^{\max} \\ 1, & \text{если } u_i^h < u_i^{\min} \text{ или } u_i^h > u_i^{\max} \end{cases}$$

- 4) В каждой ячейке  $\Omega$  шаблона  $\mathcal{M}$  выбирается корректирующий коэффициент  $c_\Omega = \text{avg}_{\omega_j(\Omega)}(c_i)$ , где среднее значение ищется по всем узлам  $\omega_j$ , принадлежащим ячейке  $\Omega$ .
- 5) Для каждой ячейки  $\Omega$  определяется коэффициент искусственной вязкости  $\mu_\Omega = c_\Omega \cdot h \cdot \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{|\vec{v}|}$ . Направление скорости должно отвечать за

«наветренность» значения, поэтому скорость предлагается брать

средней по всем узлам  $\omega$  ячейки:  $\vec{v} = \frac{1}{n_{\omega(\Omega)}} \sum_{\omega(\Omega)} \vec{v}_\omega$ , а значение  $h$  (шаг

сетки для равномерных сеток) можно вычислять несколькими способами: в двумерном случае для сетки, состоящей из правильных треугольников, это будет высота треугольника; в трехмерном случае  $h$  для тетраэдрального сеточного элемента можно вычислять как



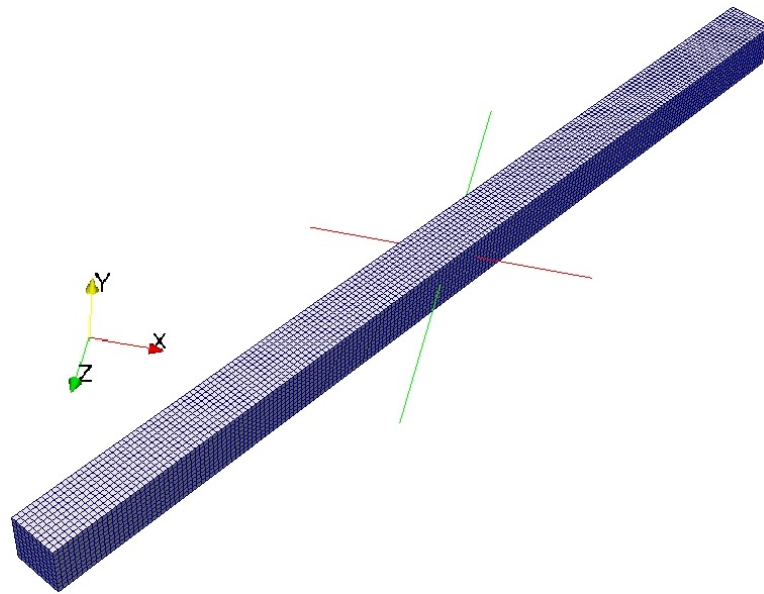
максимальную из высот тетраэдра или их среднее значение, для произвольного трехмерного элемента можно взять  $h = \sqrt[3]{V_{\Omega}}$ .

- б) Вычисляется значение в узлах с добавлением корректирующей вязкости:  $u_i^{n+1} = \hat{u}_i + \frac{\tau}{V_i} \langle \nabla \mu_{\Omega} \nabla u^{n+1} \rangle_{\Delta_{i2}}$ .

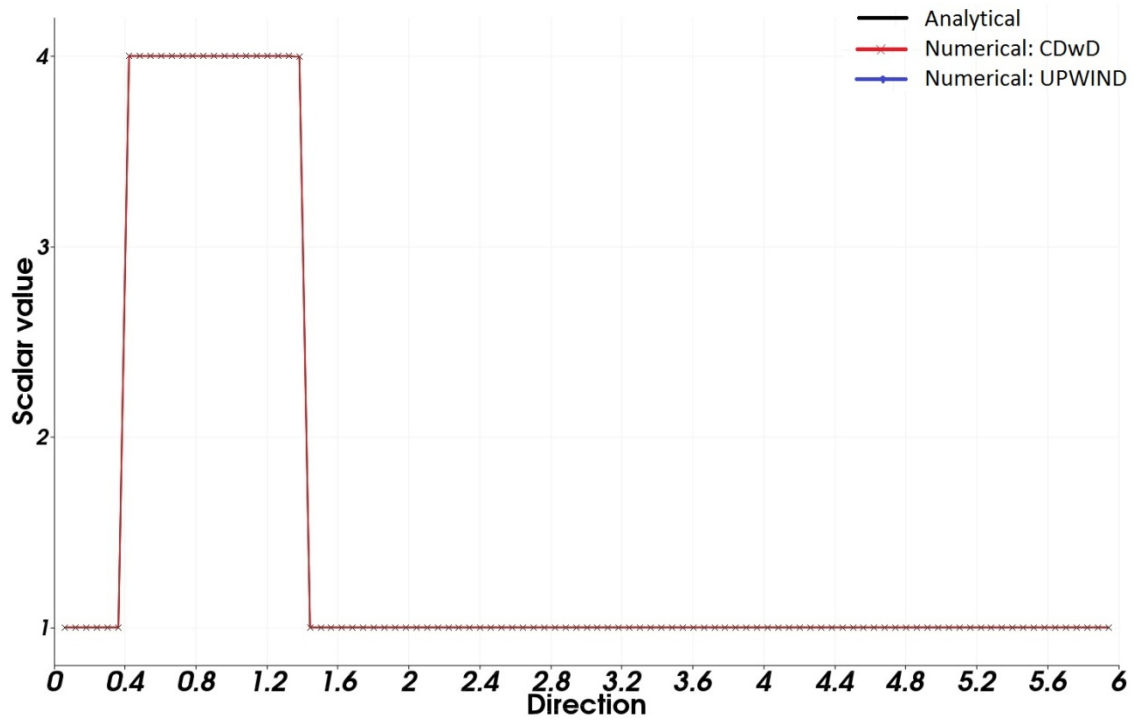
### 3.4.2 Практическое исследование сходимости схемы расчета конвективных потоков методом коррекции

Тестирование реализованной схемы расчета конвективных потоков проводилось на простой модельной задаче о распространении фронта скалярной величины, например, тепла от подвижного теплового фронта. Практическое исследование сходимости схемы выполнялось посредством моделирования задачи на сгущающихся трехмерных сетках с шагом одномерной дискретизацией вдоль оси движения источника  $h = 0.5 | 0.25 | 0.01$  по предложенной численной схеме и по схеме противопоточной устойчивой схеме первого порядка. Модельное время  $t$  изменялось от 0 до 1.0 с соответствующими временными шагами. Скорость распространения теплового фронта  $v = 1$ , начальная температура в области  $T = 1$ , начальная температура подвижного фронта  $T = 4$ .

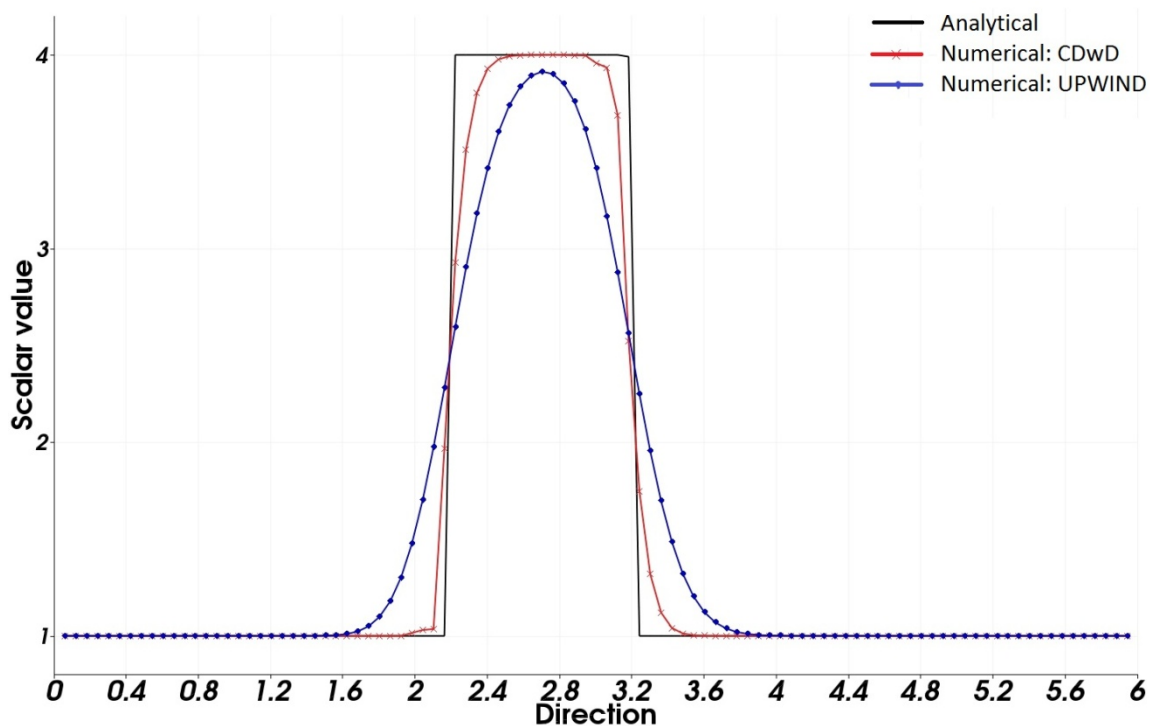
На рисунке 3.17 представлен один из результатов практического исследования предлагаемого алгоритма и расчетная область, использованная для моделирования. Расчетная область (рис. 3.17а) повернута вокруг осей, чтобы показать тензорный характер коэффициента искусственной вязкости. Для сравнения результатов также проводится расчет по схеме первого порядка UPWIND. Результаты приведены для кубической сетки.



a)



b)



в)

Рисунок 3.17: а) развернутая расчетная область б) начальное распределение; в) конечное распределение теплового фронта. Черной линией представлено аналитическое решение, красной и синей линиями соответственно численные решения по предложенной схеме с искусственной вязкостью и по схеме UPWIND.

По мере сгущения сетки численное решение становилось ближе к аналитическому, решение по предложенной схеме передавало аналитическое решение точнее, чем схема UPWIND. На тетрадральной сетке, однако, требуется более аккуратный выбор коэффициента диффузии для сглаживания возникающих нефизических осцилляций.

## ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 3

В данной главе описаны основные принципы методики опорных операторов, эффективной применительно к газогидратным фильтрационным задачам в пластах сложной разномасштабной и разноматериальной структуры. Построено семейство трехмерных консервативных монотонных устойчивых операторно-согласованных численных схем. На ортогональной гексагональной сетке система

уравнений, получаемая по методу опорных операторов, «эквивалентна» получаемой по методу конечных разностей, что позволяет эффективно использовать методику как для задач на нерегулярной сетке с различной топологией, так и для задач на ортогональных и регулярных сетках.

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. Для рассматриваемых сеток построенная схема обеспечила порядок аппроксимации  $n \geq 1,7$ . Решена модельная задача о стационарном распределении температуры в среде с разрывным (кусочно-постоянным) коэффициентом теплопроводности. Решение проводилось с учетом установившегося состояния. Показано, что схема правильно воспроизводит разрыв производной решения на границе подобластей с различными коэффициентами теплопроводности.

Рассмотрена устойчивая монотонная схема аппроксимации дифференциального оператора «квадрата градиента» скалярной функции, представляющая собой в некотором смысле трехмерный аналог одномерной противопоточной уголкового схемы, а также представлена альтернативная устойчивая аппроксимация посредством представления квадрата градиента через два диссипативных оператора, которая проще в реализации и требует меньших затрат машинного времени при выполнении. Устойчивость аппроксимации «квадрата градиента» скалярной функции, предложенной для использования в расчетах по теме данной работы, была исследована на одномерной задаче, имеющей аналитическое решение. Проводилось сравнение с уголковыми конечно-разностными схемами 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».

Также в данной главе предложена одна из возможных численных схем расчета конвективных потоков с введением искусственной вязкости. 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.

## **ГЛАВА 4. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Описанные в предыдущих главах численная методика на основе метода опорных операторов и трехмерная математическая модель флюидодинамики в пористых гидратосодержащих средах, а также некоторые дополнительные необходимые функциональные блоки, были реализованы непосредственно автором в качестве модулей расширения программного комплекса MARPLE (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012660911 от 30.12.2012).

Научный программный комплекс MARPLE [98], созданный коллективом разработчиков из ИМП им. М.В. Келдыша РАН, является расширяемым пакетом для трехмерного моделирования физических процессов в областях сложной геометрической формы на сетках общего вида и больших размерностей на параллельной вычислительной технике. Авторами проекта MARPLE была разработана и реализована уникальная архитектура пакета и организована эффективная система коллективной работы программистов, включающая передовые средства коллективной разработки.

Для описания реализованных автором работы программных средств внутри пакета MARPLE, необходимо рассмотреть вначале сам комплекс, его цели, архитектуру, реализацию и функциональное наполнение.

### **4.1 Актуальность разработки и развития специализированных научных кодов**

В настоящее время численное моделирование гидромеханических и теплообменных процессов получило широкое распространение и активно используется в фундаментальных и прикладных исследованиях. Сеточные методы решения уравнений флюидодинамики с учетом диссипативных процессов развиты как для регулярных, так и для неструктурированных

сеток, и на их основе создан ряд программных комплексов для решения различных индустриальных задач – FLUENT, ANSYS, LSDYNA, ABAKUS, OPEN FOAM и др. Однако «индустриальные» пакеты программ разработаны на основе «типовых» постановок задач и соответствующих разностных (конечно-элементных) аппроксимаций. Такие постановки задач и сеточные методы их решения, как правило, хорошо изучены. В то же время, задачи о динамике флюидов в областях, имеющих сложную разноматериальную структуру, в общем случае трудно формализуемы, их постановки далеко не всегда можно свести к «типовым», а численные методы их решения должны обладать специфическими качествами.

Возможность проведения расчетов на подробных трехмерных сетках больших размерностей в областях с реальной геометрией, появившаяся с развитием суперкомпьютеров, дала возможность делать прогнозы разнообразного поведения сред в результате того или иного воздействия, что особенно важно, например, при исследовании газогидратных месторождений для избегания техногенных катастроф (растепление газогидратов в зонах бурения нефтяных платформ и т.п.). Однако, суперкомпьютерные вычисления требуют разработки новых стабильных и робастных параллельных алгоритмов или, если возможно, адаптации существующих, а увеличение количества вычислений, возникающее при моделировании трехмерных физических задач в полной постановки, требует повышения параллельности вычислений и освоения новых технологий распараллеливания, например, CUDA. Возможность высокого распараллеливания вычислений должна быть заложена изначально в архитектуре программного пакета. Однако большинство коммерческих пакетов развивается на протяжении десятилетий на основе существующей серийной архитектуры, которая была спроектирована во времена, когда вычисления на кластерах еще не были распространены. Нарастающая таким образом функциональность вносит ограничения на степень распараллеливания вычислений. Программный комплекс ANSYS,

например, разработан для вычислений не более чем на 100 вычислительных ядрах, в то время как программный комплекс MARPLE, в расширении которого принимает участие автор, был распараллелен более чем на 16 000 вычислительных ядер.

Совместное развитие математических моделей и методов их решения с учетом современной техники позволит использовать всю предлагаемую вычислительную мощность. Поэтому актуальной становится задача разработки линейки универсальных «прогнозирующих» кодов для моделирования физических явлений в реальных областях с реализацией на современных гибридных высокопроизводительных системах.

Одной из таких разработок является исследовательский программный комплекс MARPLE, созданный в ИПМ РАН на основе современных технологий программирования. Программный комплекс представляет собой совокупность вычислительных модулей для трехмерного моделирования начально-краевых задач в полной трехмерной постановке, учитывающих сложные уравнения состояния. Также поддерживается разработка численных схем повышенного порядка точности. Такие схемы позволяют производить вычисления в сложных областях с реальной геометрией на подробных неструктурированных сетках с произвольными элементами (шестигранники, призмы с треугольным основанием, тетраэдры и др.). Возможно использование различных степеней симметрии в расчетной области (зеркальных, периодических и их комбинаций). При таком моделировании объем вычислительных данных огромен. Поэтому в пакете реализована возможность параллельной работы кода на всех этапах проведения численного эксперимента: реализованы средства параллельной генерации сеток, параллельного счета и параллельного анализа полученных данных (на основе пакета Paraview). Пакет MARPLE активно развивается в сотрудничестве с ФГУП «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», НИЦ «Курчатовский институт», МФТИ и другими научными организациями и ВУЗами.



## **4.2 Исследовательский программный комплекс MARPLE**

В данном разделе будут даны общие сведения о структуре и технологиях пакета MARPLE для лучшего понимания того, какие программные модули необходимо было создать для реализации численных схем и фильтрационной модели, описанных в главах 2 и 3 соответственно.

### **4.2.1 Технологии проектирования, программирования, сборки и коллективной разработки кода**

Специфика решаемых исследовательских задач в сложных геометрических областях обусловила выбор объектно-ориентированного подхода для проектирования и реализации программного комплекса MARPLE. При таком подходе упрощается поддержание многих различных вычислительных моделей и численных методов.

Для написания кода MARPLE был выбран распространенный объектно-ориентированный язык программирования C++, легко переносимый и предоставляющий широкую функциональность для решения прикладных вычислительных задач. Разрабатываемый пакет совместим с распространенными операционными системами (MS Windows, GNU/Linux, BSD UNIX, Mac OS), работает на различных платформах (персональные компьютеры, параллельная техника высокой производительности) с компиляторами C++, поддерживающими стандарт языка 2003 года.

При проектировании объектов и иерархий классов для их наглядного представления используется унифицированный язык моделирования UML (Unified Modeling Language). В качестве объектов выступают геометрические данные, вычислительные солверы, аппроксимации, граничные условия и т.д.

Описание проекта в общем случае дается объемным списком исходных файлов и параметров, необходимых компилятору и компоновщику для сборки исполняемого файла, которые обусловлены

использование различных аппаратных и программных платформ и инструментов для сборки при коллективном написании кода. Для поддержки унифицированного описания проекта существуют кросс-платформенные системы сборки, одна из которых – Stake – используется в качестве стандартной системы сборки проекта MARPLE. Файл для сборки Stake представляет собой простой текстовый файл с инструкциями на специальном языке макросов. Система Stake обладает большим количеством поисковых макросов, упрощающих запись зависимостей кода от внешних библиотек и компонентов. Результатом ее работы являются файлы управления сборкой для различных платформ и сред разработки.

Работа над кодом осуществляется при использовании эффективных приемов и средств коллективной разработки. Приняты некоторые стандарты программирования и единый стиль оформления кода, что позволяет достичь легкой переносимости кода (важно при написании программных средств для суперкомпьютеров с заранее неизвестной архитектурой) и владения кодом всем коллективом разработчиков (позволяет быстро включать в команду новых разработчиков).

Большое внимание при разработке кода MARPLE уделяется написанию подробной документации и руководств для пользователей по сборке и работе пакетом. Для исследовательских кодов в целом характерно большое количество конфигурационных параметров, которые задаются во внешних файлах или внутри программного кода. Поэтому такое требование является необходимым для сопровождения проекта и эффективной работы с кодом, как для разработчиков, так и для пользователей. Посредством кросс-платформенной системы Doxygen существует возможность автоматического формирования документации по исходному коду в распространенных форматах (HTML, RTF, PDF и др.), если комментарии в коде оформлены в соответствии с некоторыми правилами.

Так как пакет MARPLE является коллективной разработкой, для отслеживания его развития необходима система управления версиями – Version Control System, VCS. Она отслеживает конфликты при внесении изменений несколькими разработчиками в один файл, хранит историю документа и авторство каждой модификации, позволяет вернуться к предыдущим версиям документа и т.д. Для сопровождения проекта MARPLE была выбрана централизованная система контроля версий Subversion, стабильная, кросс-платформенная, простая в использовании, основанная на клиент-серверной архитектуре с единым хранилищем (репозиторием) документов и истории на сервере и клиентскими приложениями на машинах разработчиков. В качестве системы управления проектом MARPLE используется web-ориентированная система trac, предназначенная для разработки программного обеспечения небольшим коллективом и отличающаяся простотой конфигурирования, администрирования и работы с ней.

#### **4.2.2 Архитектура кода и организация расчета**

Код MARPLE имеет модульную структуру, облегчающую его поддержку и развитие. Основными модулями предметной области являются: работа с сетками, аппроксимация, солверы, граничные условия и уравнения состояния. В целом код представляет собой совокупность солверов систем уравнений базовых физико-математических моделей и вычислительной среды (инфраструктуры), поддерживающей выполнение расчетов начально-краевых задач математической физики на массивно-параллельных системах с распределенной памятью и сопровождение всех этапов проведения численного эксперимента: от построения геометрии расчетной области до обработки полученных в ходе моделирования результатов.

Для примера, перечислим некоторые основные модули MARPLE:

- Модуль подготовки данных: выполняет построение геометрической модели физической расчетной области, генерацию расчетной сетки, а также усвоение начальных и граничных условий;
- Модуль решения трехмерных идеальных (т.е. в приближении отсутствия диссипации) уравнений магнитной гидродинамики для расчетов в декартовой координатной системе;
- Модуль расчета физических свойств плазмы (термодинамическое состояние вещества, коэффициенты переноса, коэффициенты поглощения и излучения);
- Модуль расчета диссипативных процессов;
- Модуль расчета лучистого теплообмена;
- Модуль управления расчетом, включая определение параметров расчетной методики, процедуры управления итерационными процессами и продвижением решения по времени, диагностику, а также обработку промежуточных результатов расчета в режиме реального времени.

Структура кода MARPLE схематично представлена на рисунке 4.1.

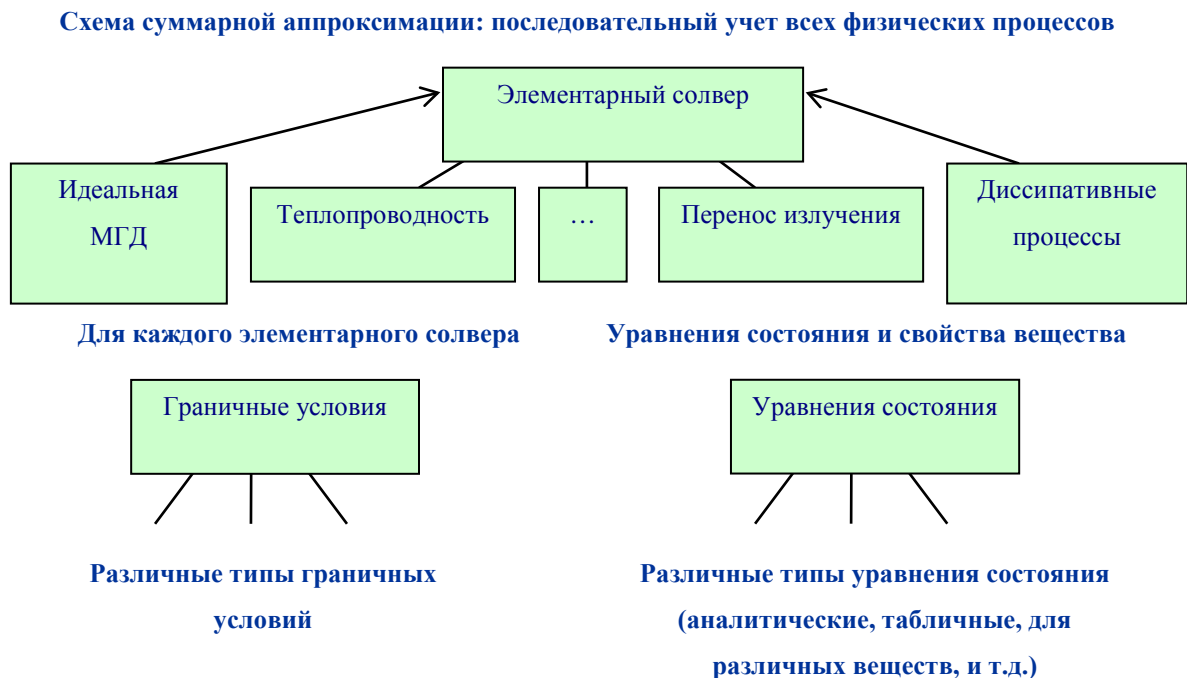


Рисунок 4.1: Структура вычислительной части пакета MARPLE

Для поддержания полного всех этапов выполнения численного эксперимента, включающего подготовку расчетной области, осуществление параллельных вычислений и обработку результатов моделирования, необходимо взаимодействие со сторонним программным обеспечением. На рисунке 4.2 представлена схема всего цикла вычислительного процесса – это три основных компоненты пакета MARPLE: препроцессор, солвер и постпроцессор, в свою очередь состоящие из множества мелких модулей, отвечающих за соответствующие задачи. Так, например, вычислительные модули солвера включают в себя непосредственно солверы уравнений, а также аппроксимации, вычисления сеточных метрик и т.д.

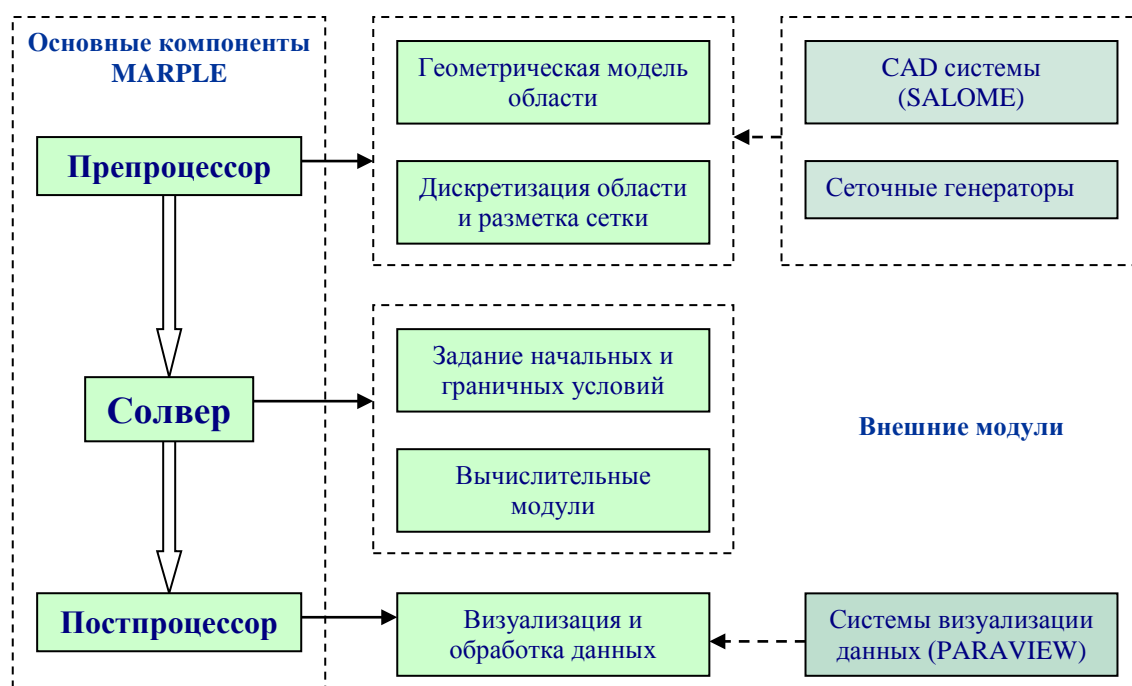


Рисунок 4.2: Организация полного цикла моделирования в пакете MARPLE

Так, для компактного хранения внешних данных (файлов с сеткой, выходных файлов для визуализации, файлов восстановления) используется библиотека zlib. В качестве универсального средства подготовки расчетной области (задания геометрии произвольной формы, разметки границ, дискретизации) используется открытая кросс-платформенная CAD-CAE система Salome. Для подготовки сеточных данных к

распределенным расчетам используется библиотека ParMETIS, реализующая эффективную декомпозицию сеточных графов. При решении распределенных систем линейных уравнений, получаемых в результате построения неявных численных схем, используется библиотека Aztec. В библиотеке реализованы параллельные итерационные алгоритмы, основанные на методах подпространства Крылова, применяемы при решении больших линейных систем, возможно плохо обусловленных или полученных при моделировании нестационарных процессов. Библиотека Aztec, в свою очередь, использует функции стандартных пакетов линейной алгебры BLAS и LAPACK. Для реализации параллельного счета используется среда параллельного программирования MPI. Наконец, для визуализации и анализа полученных данных используется система Paraview.

Для всего этого в пакете содержится большое число вспомогательных модулей, обеспечивающих полноценную работу физической и вычислительной инфраструктур MARPLE. Например, для взаимодействия с системой Salome разработана подсистема импорта расчетных сеток с необходимой разметкой. Для использования библиотек линейной алгебры разработаны специальные классы, обеспечивающие работу с распределенными разреженными матрицами и упрощающие взаимодействие вычислительных модулей с функциями библиотеки Aztec. Для упрощения реализации параллельных алгоритмов отдельными разработчиками и обеспечения интерфейса, скрывающего технические детали параллелизма, специальными классами-обертками поддерживается набор необходимых функций для взаимодействия с MPI. Для визуализации расчетных данных в системе Paraview реализована подсистема вывода данных, включающая возможность применения различных фильтров для обработки результатов. Следует заметить, что суммарный объем исходного кода вспомогательных (сервисных) модулей существенно превышает объем исходного кода основных расчетных модулей.

### 4.3 Исследовательский программный комплекс MARPLE

Далее будут представлены разработанные автором модули программного комплекса MARPLE для реализации описанной ранее математической модели многофазной фильтрации пористой среды, содержащей газы гидраты с использованием численной схемы на основе метода опорных операторов.

Численные схемы, которые на настоящий момент реализованы в пакете MARPLE, написаны для ячеечных величин. Реализованная автором численная схема требовала хранения величин в узлах, поэтому были модифицированы некоторые существующие модули кода MARPLE и добавлены дополнительные компоненты для хранения и работы с узловыми величинами:

- физический солвер подобласти (*Node\_Domain\_Solver*), осуществляющий все операции на уровне физических подобластей, контролирующей работу всех элементарных солверов физических процессов для узловых величин в данной физической подобласти;

- инфраструктура вывода данных (*ParaviewRegionDataWriterNode*) физической области в систему визуализации и обработки данных Paraview.

Модули, связанные с аппроксимациями и расчетом метрик.

- класс для работы со СЛАУ (*NodeSampleMatrix*), представленной в матричной форме для узловых схем. Используется во всех элементарных солверов, где реализованы неявные по времени схемы;

- аппроксимации (*NodeApproximation{Base}*), иерархия классов для аппроксимации дифференциальных операторов первого и второго порядка методом опорных операторов. Результаты аппроксимации выдаются в виде матрицы коэффициентов для всех узлов расчетной сетки. Здесь также осуществляется расчет всех используемых методом опорных операторов сеточных метрик.

Наконец, разработанные солверы физических процессов и учет граничных условий.

Диссипативные:

– солвер теплопроводности (*Heat\_Cond\_Node\_Solver*), предназначенный для решения нелинейного (квазилинейного) уравнения теплопроводности с использованием неявной по времени схемы и аппроксимации дифференциального оператора второго порядка по методу опорных операторов;

– диссипативный блок сатурационно-диссипативной гидратной модели (описанной ранее) (*DissipativeBlock\_Node\_Solver*), предназначенный для решения основного барического уравнения теории гидратов (2.21) для вычисления давления на неявном по времени слое.

Конвективные:

– потоковый солвер (*Convection\_Node\_Solver*), предназначенный для расчета конвективных потоков. Солвер реализован по схеме предиктор-корректор и имеет второй порядок точности по времени. Для пространственной аппроксимации потоков используется две схемы. Первая – распространенная монотонная схема UPWIND для счета вверх по потоку и имеющая первый порядок точности по пространству. Вторая – монотонизированная центрально-разностная схема повышенного порядка по пространству, монотонизация осуществляется введением искусственной вязкости;

– сатурационный блок сатурационно-диссипативной гидратной модели (*SaturationBlock\_Node\_Solver*), предназначенный для решения системы уравнений сатурационного блока и нахождения значений насыщенности на явном по времени слое в описанной ранее модели фильтрации.

Для каждого солвера реализованы необходимые в расчетах виды граничных условий в виде иерархии классов: Дирихле, Неймана и третьего рода. Также для некоторых солверов реализованы специфические



граничные условия: периодические, симметричные, свободного выхода или заданные в тестах определенными зависимостями. Перечислим список граничных условий, например, для неявного солвера теплопроводности (для остальных солверов список классов аналогичен):

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_Base* – базовый класс для всех граничных условий, используемых солвером теплопроводности, от которого наследуются все остальные граничные условия;

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_Const* реализует граничное условие Дирихле:  $T(t) = T_0(r, t)$ ;

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_Flux* реализует граничное условие Неймана:  $\frac{\partial T(t)}{\partial \vec{n}} = W(r, t)$ ;

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_ParamFlux* реализует граничное условие третьего рода:  $\alpha T_0 + \beta \frac{\partial T(t)}{\partial \vec{n}} = \gamma$ ;

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_Periodic* служит для маркировки граничных условий периодичности для задач в симметричных или периодических постановках;

- класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_NoFlux* реализует граничное непротекания (стенка):  $\frac{\partial T(t)}{\partial \vec{n}} = 0$ ;

- Класс *Heat\_Cond\_Node\_Boundary\_Condition\_Test* позволяет задавать граничные условия произвольными функциональными зависимостями для конкретных тестовых расчетов. Например, для теста с бегущей тепловой волной (раздел 3.2) использовалась зависимости вида (3.24) и (3.26).

На рисунке 4.3 схематично представлена структура разработанных для пакета MARPLE основных программных модулей.

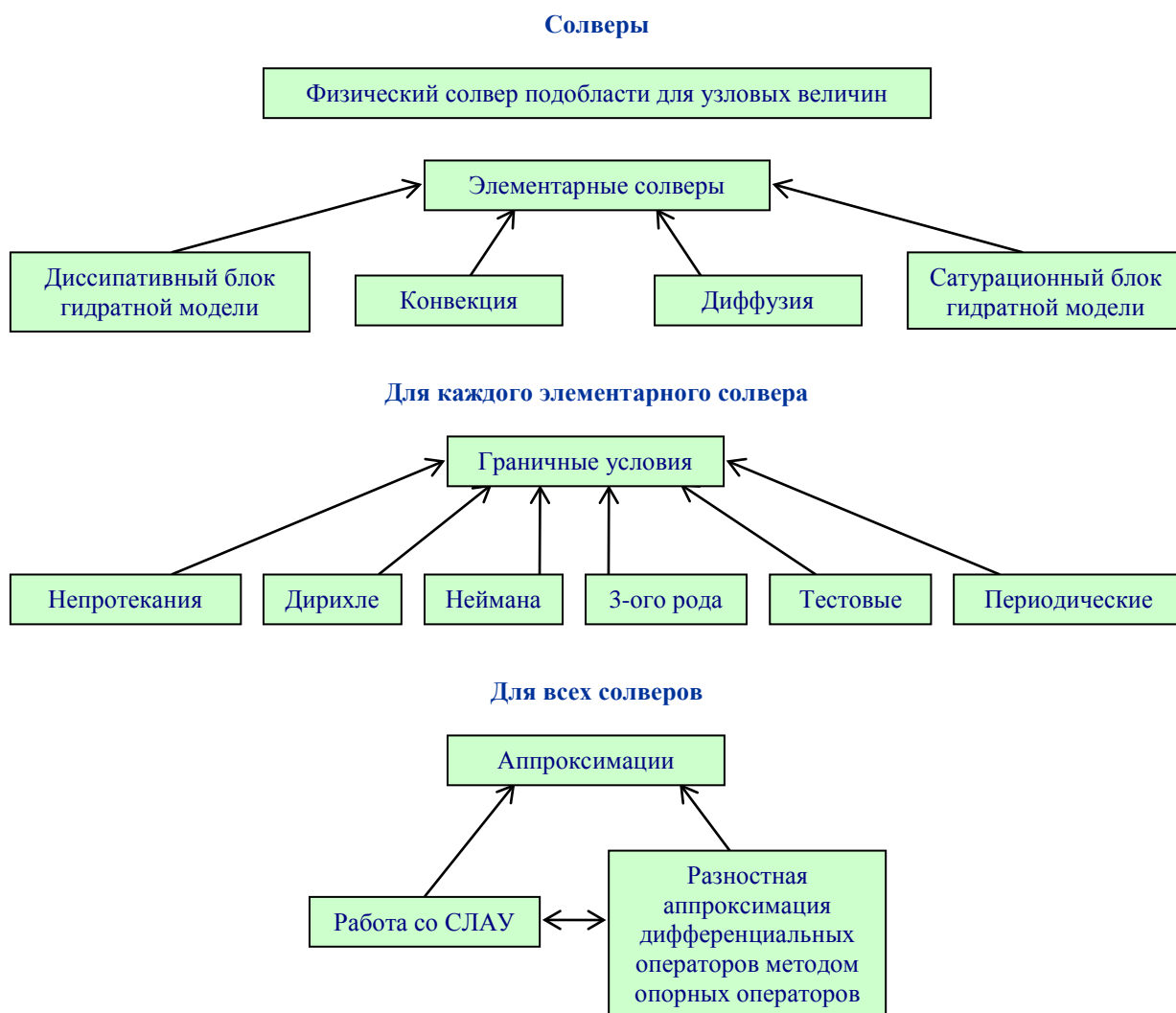


Рисунок 4.3: Структура разработанного программного обеспечения для пакета MARPLE

Так, для компактного хранения внешних данных (файлов с сеткой, выходных Подмодуль вывода данных *ParaviewRegionDataWriterNode* и класс для работы со СЛАУ *NodeSampleMatrix* впоследствии были слиты с существующими аналогичными реализациями для сеточных величин с применением технологии шаблонных классов, в данном случае, параметризованных по размерности величин (0 – для узловых величин, 3 – для сеточных величин). Стоит отметить, что в общем случае, при реализации некоторой дополнительно инфраструктуры, пакет MARPLE может хранить и работать с величинами на сеточных элементах любой размерности.

Схема суммарной аппроксимации физических процессов заключается в последовательном вызове элементарных солверов на каждом шаге по времени. Так, для реализации расчета по полной диссипативно-сатурационной модели флюидодинамики необходимо включить в схемы работу двух солверов *DissipativeBlock\_Node\_Solver* и *SaturationBlock\_Node\_Solver*, отвечающих, соответственно, за диссипативную и сатурационную части модели.

## **ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 4**

В данной главе описаны программные модули, реализующие в рамках пакета MARPLE предложенные выше математическую модель, численную схему и алгоритмы расчета и необходимые для моделирования физических процессов, имеющих место при решении газогидратных задач. В программе учитывались такие свойства как трехмерность, неизотермия, двухфазность, нестационарная фильтрация сжимаемого флюида в неоднородной анизотропной по проницаемости пористой среде. Основное модули модели – это модуль расчета диссипативных процессов для решения основного гидратного уравнения диссипативной части модели и блок расчета сатурационной части модели для расчета конвективного переноса.

Разработанные программные средства позволяют проводить вычислительные эксперименты в полной трехмерной постановке на неструктурированных сетках в областях сложной геометрии на многопроцессорных вычислительных системах. Функциональность программных средств легко расширяема и модифицируема за счет модульной структуры.

## **ГЛАВА 5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ**

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

Моделировались отдельно конвективный перенос сатурационных возмущений и термодинамическая эволюция параметров системы при наличии забойных скважин в газогидратных пластах.

На ряде модельных задач был проведен цикл расчетов, целью которого было показать возможности предлагаемой методики (выделение «барического» уравнения) на ряде модельных расчетов. Трехмерные расчеты диссипативного блока показывают характер распределения давления в призабойных зонах и в пласте и не противоречат реальной ситуации, имевшей место при разработке месторождения. Все эти задачи решаются в случае объемного равновесия компонентов - газ, вода, гидрат.

Для проведения вычислительных экспериментов использовалось созданное автором программное обеспечение..

### **5.1 Расчеты переноса сатурационных возмущений**

В пункте 4 главы 2 при теоретическом исследовании сатурационно блока – блока, отвечающего за характеристический перенос сатурационных возмущений – были выявлено, что характеристики гиперболического блока направлены в разные стороны. Это проверялось при моделировании одномерной задачи о распаде разрыва в сатурационном блоке. Расчет проводился на фоне фиксированного пространственного перепада давлений.

При моделировании всех задач в данной главе были взяты термобарические и фильтрационные параметры и физические константы, характерные для Мессояхского месторождения (таблице 5.1) [99-101].

Таблица 5.1. Данные, использованные в расчетах газогидратных задач

Параметр		Значение	ЕИ
Давление в пласте $P$	начальное	$7,4 \cdot 10^6$	Па
	забойное	$10^5$	
Температура в пласте $T$	начальная	283	К
	зависимость	$A \ln P + B$	
Молярная масса $M$	газа	0,0164	$\frac{\text{кг}}{\text{моль}}$
	гидрата	0,02	
Универсальная газовая постоянная $R$		8,31	$\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$
Коэффициенты уравнения	A	7,28	К
	B	167,9	б/р
Массовая теплоемкость $c_p$	воды	4200	$\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$
	газа	3018	
	гидрата	3200	
	скелета	873	
Плотность $\rho$	воды	1000	$\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$
	газа (const)	0,670	
	гидрата	910	
	скелета	2800	
	газа	$P \cdot M / R(A \ln P + B)$	
Массовая доля в гидрате $\beta$	воды	0,9	б/р
	газа	0,1	
Растепленность $S_v$		0,5	б/р
Водонасыщенность $S_w$	максимальная	0,9	б/р
	минимальная	0,55	
	средняя	0,6	
Пористость породы $m$		0,35	б/р
Вязкость $\mu$	воды	$10^{-6}$	Па · с
	газа	$0,014 \cdot 10^{-6}$	
Абсолютная проницаемость пласта $k_0$		$10^{-15}$	$\text{м}^2$
Относительные проницаемости	воды $k_{rw}$	$1,477S_w^5 - 1,587S_w^6 + 1,11S_w^7$	$\text{м}^2$
	газа $k_{rg}$	$1,044 - 1,7S_w + 0,6S_w^2$	
Теплопроводность скелета $\lambda_s$		6,43	$\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$

Таблица 5.1 (продолжение)

Теплота фазового перехода $h$		$0,33 \cdot 10^6$	$\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$
Энергия	воды $\varepsilon_w$	$c_{pw} \cdot T$	$\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$
	газа $\varepsilon_g$	$c_{pg} \cdot T$	
	гидрата $\varepsilon_v$	$\beta_w \cdot \varepsilon_w + (1 - \beta_w) \cdot \varepsilon_g - h$	
	скелета $\varepsilon_s$	$c_{ps} \cdot T$	

На рис. 5.1 представлены графики зависимости растепленности от расстояния: начальный профиль и моменты времени  $1 \cdot 10^3$ ,  $3 \cdot 10^3$  и  $6 \cdot 10^3$  сек.

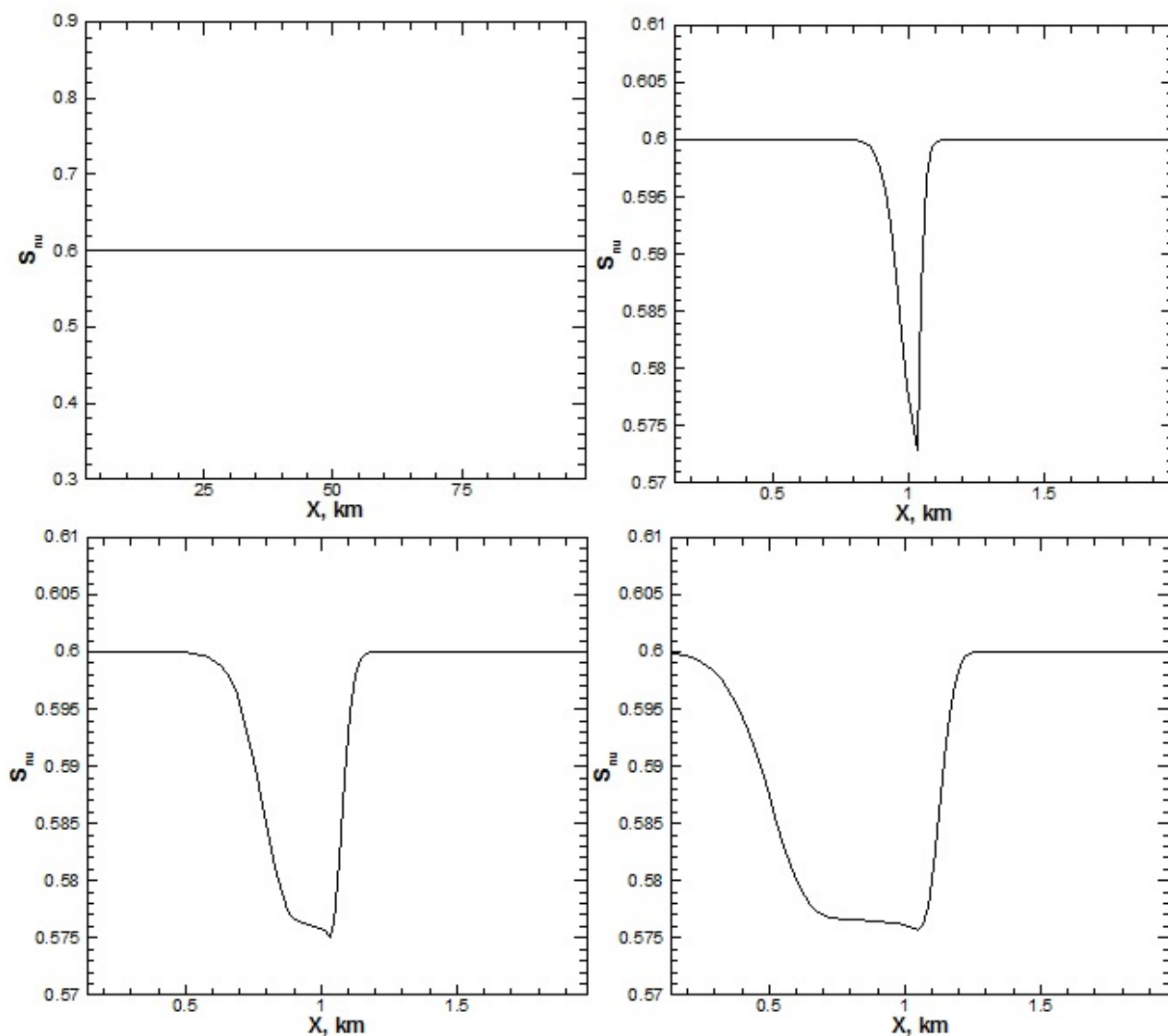


Рисунок 5.1: Результаты расчета задачи о распаде разрыва для переноса растепленности.

На рис. 5.2 представлены графики зависимости водонасыщенности от расстояния: начальный профиль и моменты времени  $1 \cdot 10^3$ ,  $3 \cdot 10^3$  и  $6 \cdot 10^3$  сек.

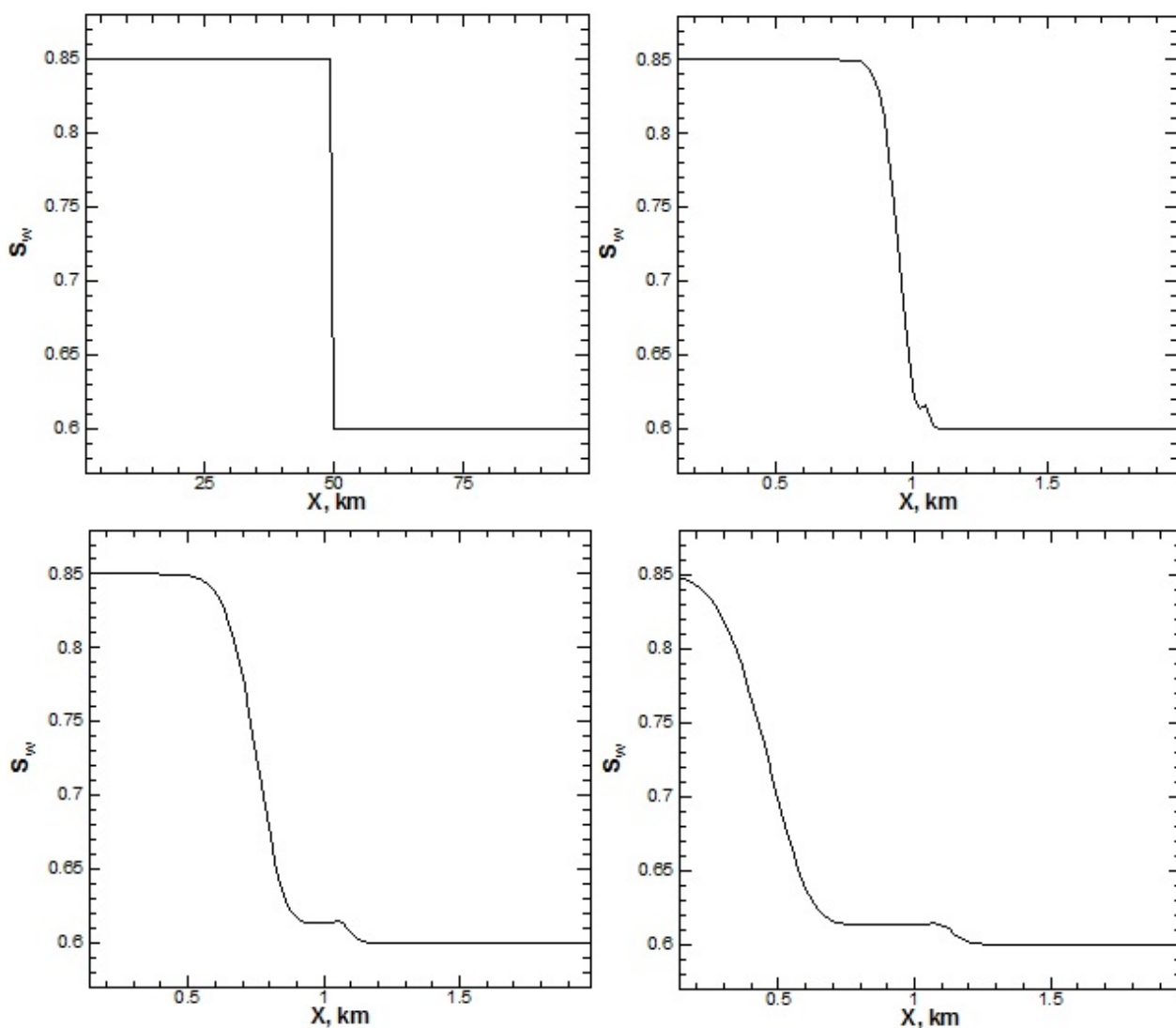


Рисунок 5.2: Результаты расчета задачи о распаде разрыва для переноса водонасыщенности.

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. В данном случае снос растепленности можно интерпретировать не как снос самого вещества, а как снос вместимости для вещества.

## 5.2 Расчеты диссипативного блока

В диссипативном блоке (по давлениям  $P$ ) не дифференцируются по времени сатурации  $S_v$  и  $S_w$ . Этот блок вычисляет давления на неявном слое по времени, которые подставляются затем в сатурационный блок ( $S_v$  и  $S_w$ ), в том числе в его нестационарную часть, и считаются там параметрически заданными. Для вычисления давлений на неявном слое используется полученной во второй главе данной работы барическое уравнение (2.21).

Параметры расчета представлены в таблице 5.1. Решалось три задачи: для одной забойной скважины, для куста из трех скважин и для центральной зоны разработки (нескольких кустов). Все задачи рассмотрены в трехмерной постановке. Шаг по времени в расчетах  $10^6$  с, счет на установление. Размер одной цилиндрической скважины  $1 \times 20$  м. Расчеты проводились в параллельном режиме на кластере К-100 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), первые две задачи считались на 4х ядрах, третья – на 12ти. Все сетки в расчетах – тетраэдральные, сгущающиеся к особенностям расчетной области (скважинам).

Задача 1. Исследование одной забойной скважины. Размер области  $500 \times 500 \times 500$  м. Сетка состоит из 378200 элементов (рис. 5.3). Распределение давления объемное и профили давления и температуры представлены соответственно на рисунках 5.4 и 5.5.



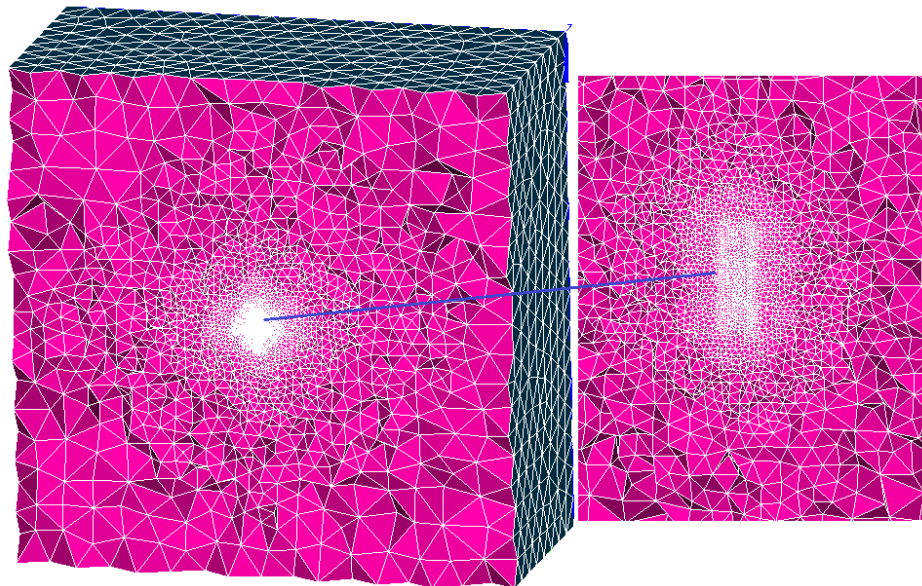


Рисунок 5.3: Расчетная сетка для моделирования одной депрессионной воронки.

Для наглядности образовавшаяся в районе скважины депрессионная воронка показана в перевернутом виде.

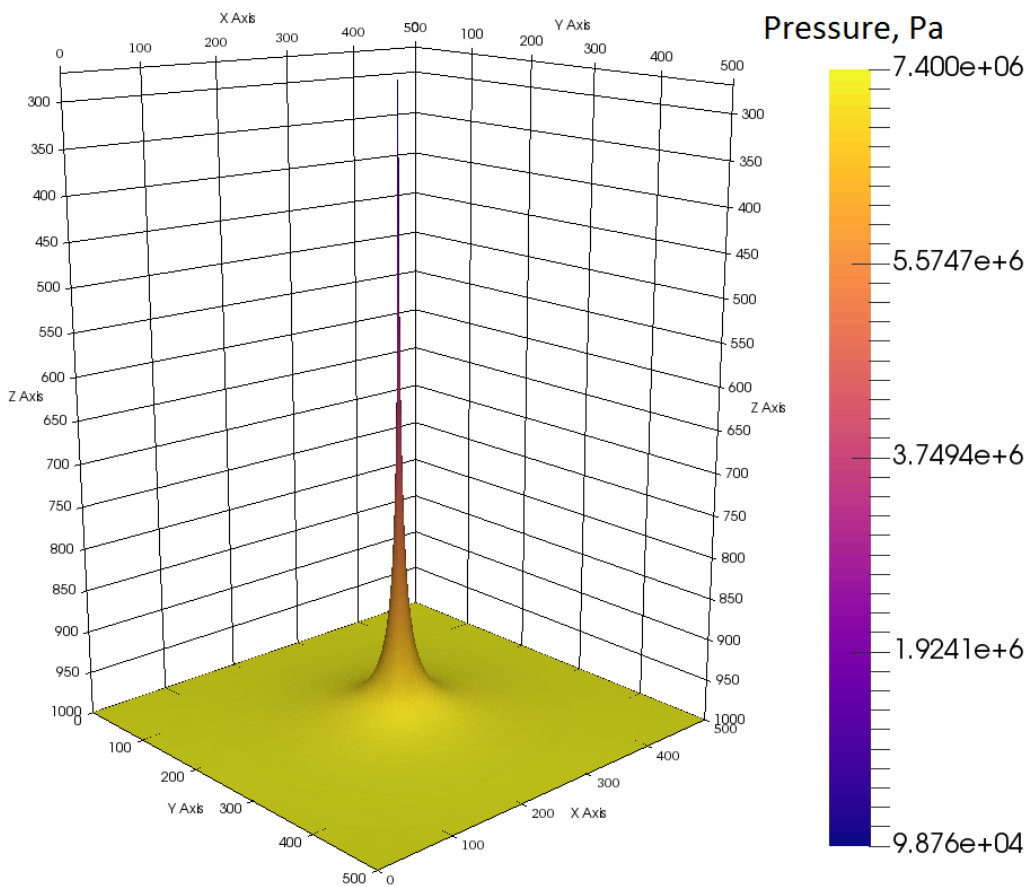


Рисунок 5.4: Объемное распределение давления: образование депрессионной воронки.

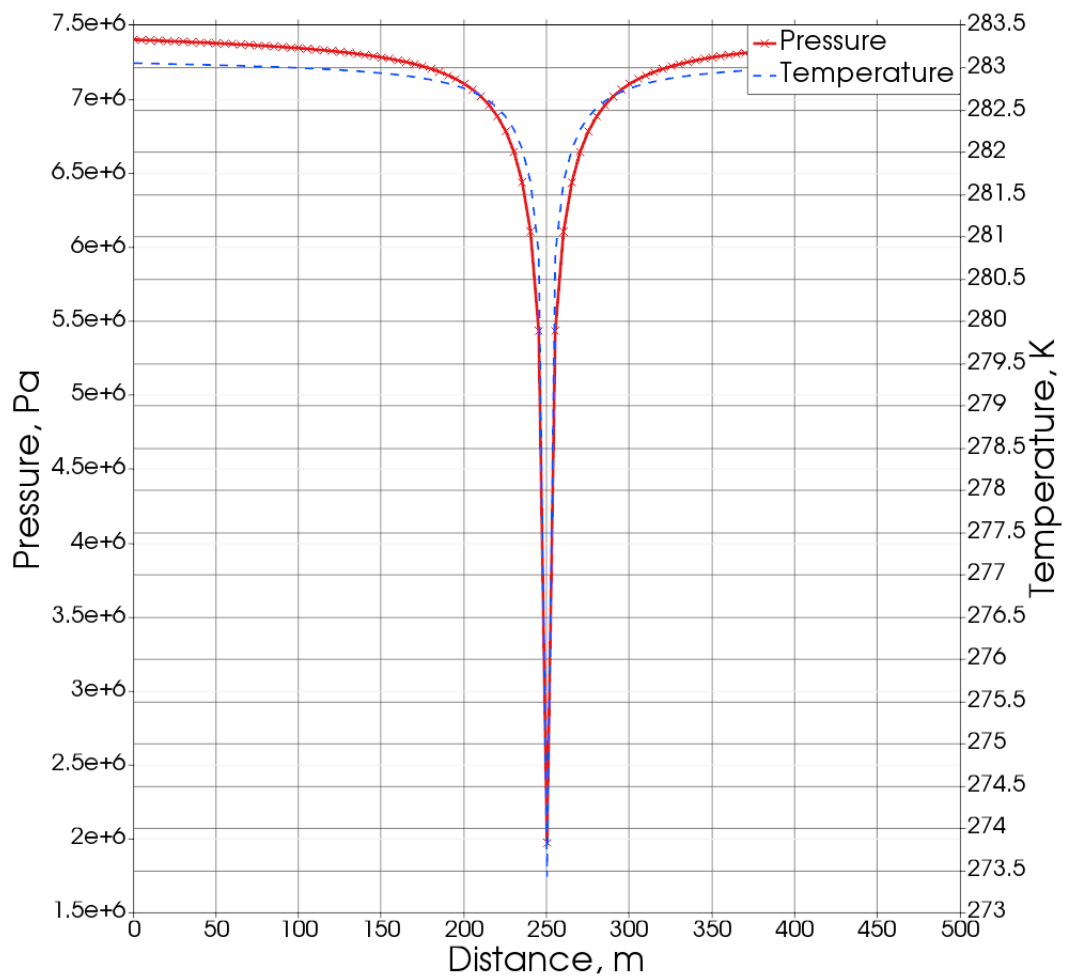


Рисунок 5.5: Одномерные профили давления и температуры для одной скважины.

Задача 2. Типичная конфигурация добывающих скважин, 1 куст, состоящий из трех скважин. Размер области  $800 \times 800 \times 800 \text{ м}$ . Расстояние между скважинами порядка 100 м. Размер сетки – 1101715 элементов.

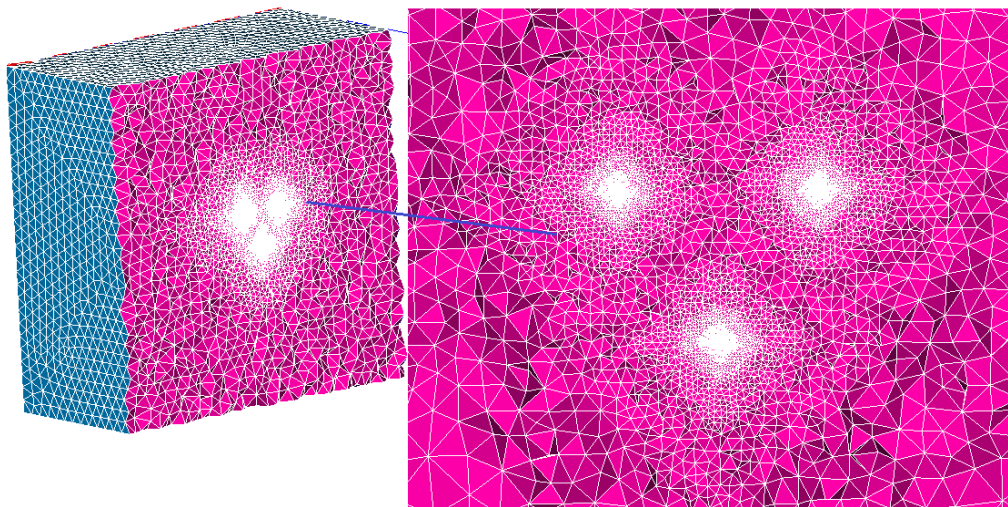


Рисунок 5.6: Расчетная сетка для моделирования одного куста скважин.

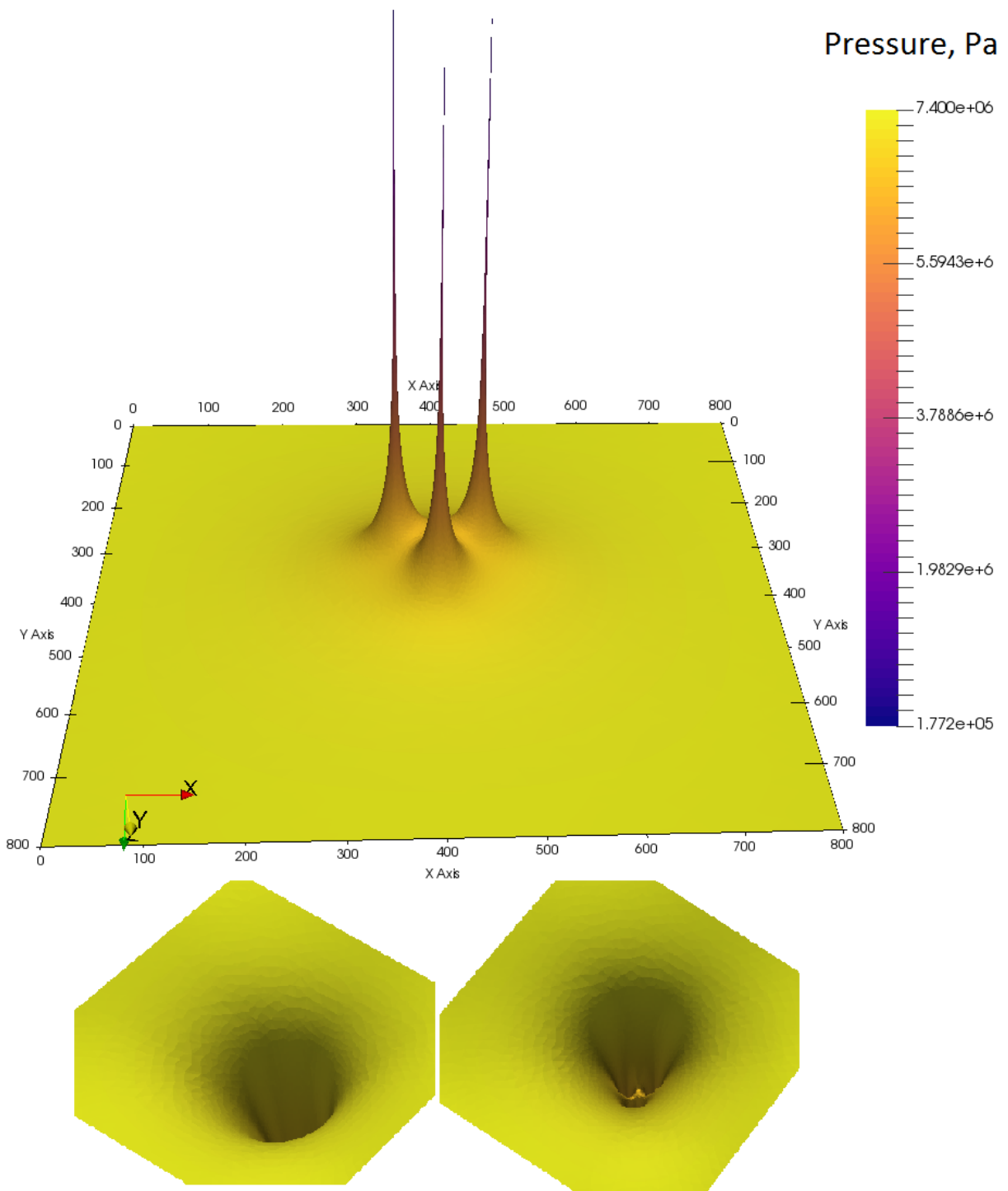


Рисунок 5.7: Объемное распределение давления в пласте вблизи забойной скважины:  
вид «снаружи» и «изнутри».

Задача 3. Моделирования эффекта части центральной зоны разработки (три куста). Размер области  $2000 \times 2000 \times 2000 \text{ м}$ . Расстояние между скважинами порядка  $100 \text{ м}$ , между кустами –  $1 \text{ км}$ . Размер сетки – 2114202 элементов. Сетка и объемное распределение давления представлены на рисунках 5.8 и 5.9.

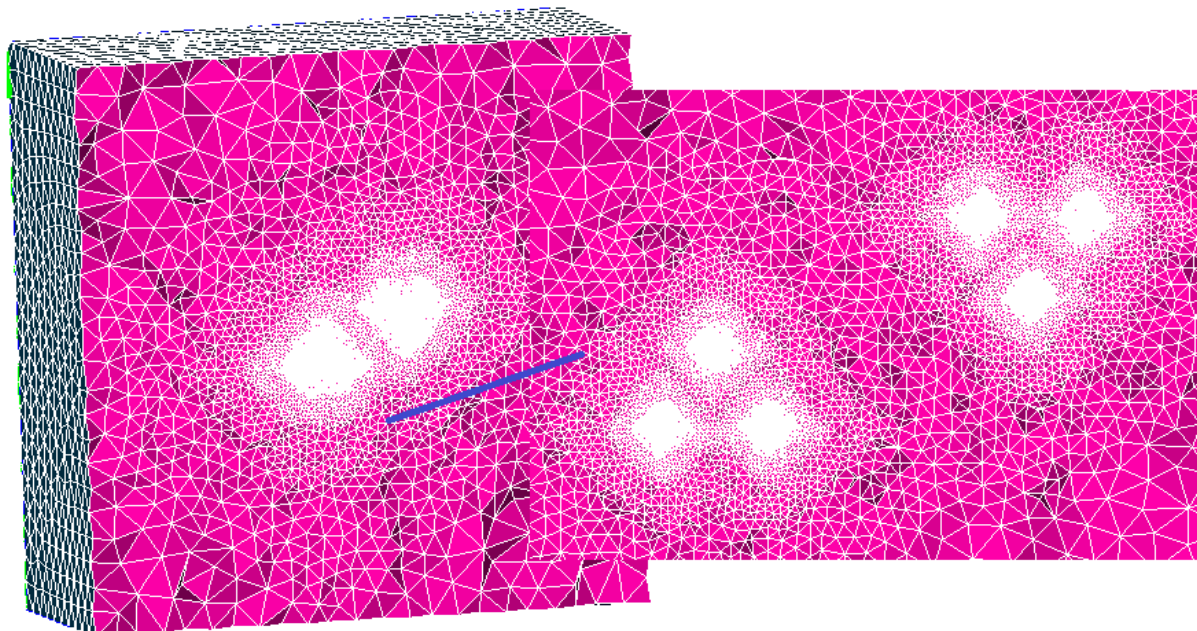


Рисунок 5.8: Расчетная сетка для моделирования центральной зоны.

На рисунке 5.9 представлены несколько видов распределения давления в центральной зоне разработки с разным масштабом, для того, чтобы нагляднее показать эффект от центральной части зоны. Видно, что отдельно стоящие кусты скважин взаимодействуют между собой, тем самым образуя протяженные области депрессии.

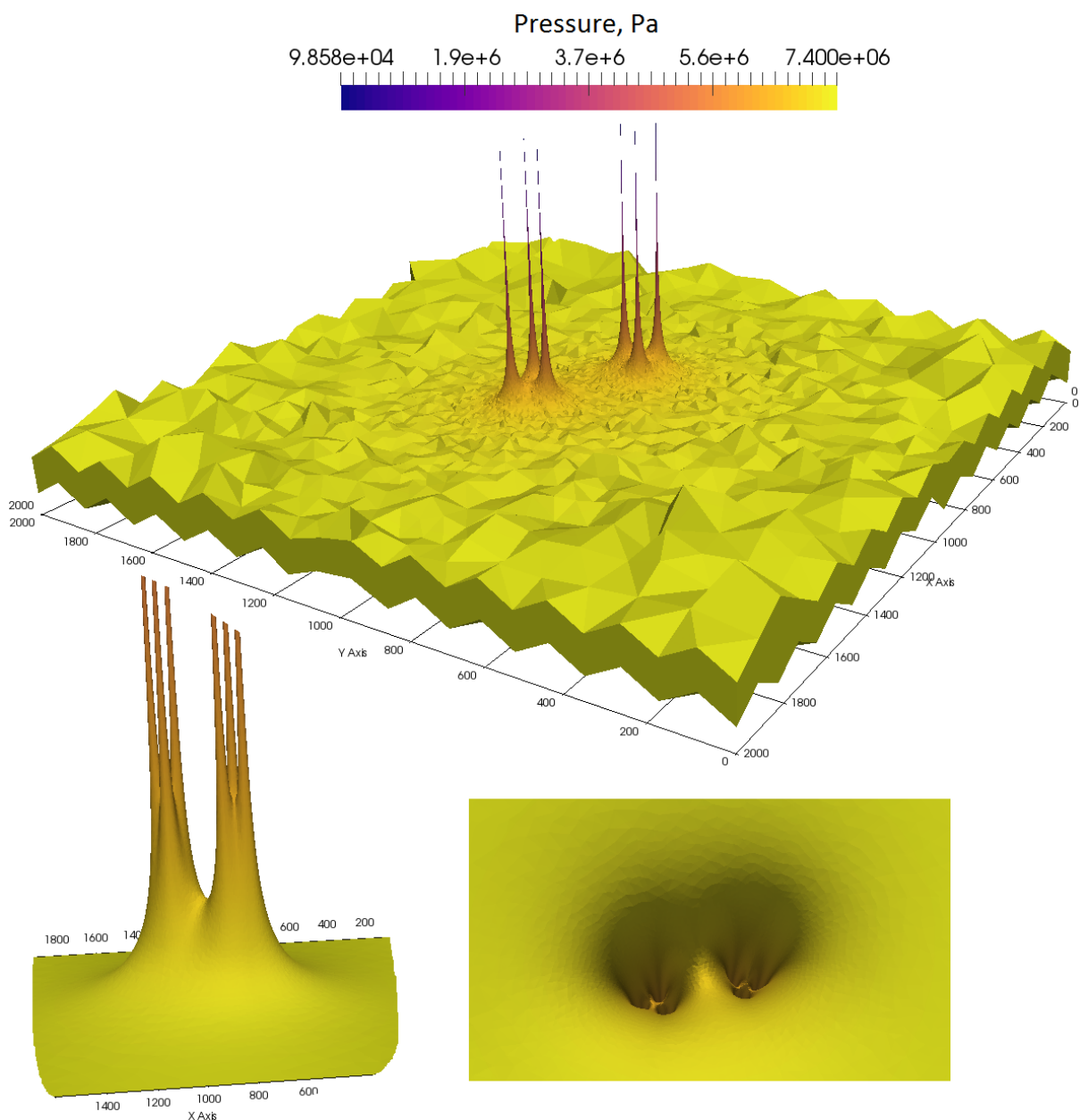


Рисунок 5.9: Объемное распределение давления центральной зоны разработки:  
различные виды.

Результаты проведенных расчетов показывают, что в зонах депрессии (одна скважина или протяженные области, содержащие кусты скважин) имеется понижение температуры. В рамках предложенной модели это говорит об увеличении концентрации гидратов в депрессионных зонах, что соответствует физическому содержанию задачи.

## **ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 5**

В последней главе сформулированы исходные данные для проведения вычислительных экспериментов и представлены результаты исследования актуальных задач газогидратной тематики.

Результаты моделирования для сатурационного блока подтверждают теоретические выкладки, полученные в пункте 4 главы 2 о том, что насыщенность по воде считается вверх по потоку, а по газу – вниз.

Расчеты для диссипативной части показывают характер разложения газовых гидратов и его влияние на распределение давления в пласте и зонах разработки. Вычислительные эксперименты подтверждают пригодность разработанного алгоритма для решения задач в практически значимом диапазоне параметров пластовых процессов.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

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.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Макогон Ю.Ф. Природные газовые гидраты: распространение, модели образования, ресурсы. Российский химический журнал, Т. 48, № 3, с.70-79, 2003.
- [2] Kvenvolden K.A. Ann. N.Y. Acad. Sci. Vol. 715, pp. 232-246, 1994.
- [3] Kvenvolden K.A. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. Vol. 96, pp. 3420-3426, 1999.
- [4] Коллет Т.С., Льюис Р., Такаши У. Растущий интерес к газовым гидратам. Schlumberger, Нефтегазовое обозрение, Т. 6, № 2, с. 38-54, 2001.
- [5] Соловьёв В. А. Природные газовые гидраты как потенциальное полезное ископаемое. Российский химический журнал, Т. 48, № 3, с. 59-69, 2003.
- [6] Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. – М.: «Мир», 1986. – 318 с.
- [7] Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: «Наука», 1978. – 592 с.
- [8] Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы математической физики. – М.: «Научный мир», 2003. – 316 с.
- [9] Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. Учебное пособие. – 3-е изд., доп. – М.: Наука. Гл. ред. Физ.-мат. Лит., 1992. – 424 с.
- [10] Дегтярев Б.В., Бухгалтер Э.Б. Борьба с гидратами при эксплуатации газовых скважин в северных районах. – М.: Недра, 1976. – 195 с.
- [11] Дядин Ю.А. Супрамолекулярная химия: Клатратные соединения. Соросовский образовательный журнал, № 2, с. 79-88, 1998.
- [12] Бык С.Ш., Макогон Ю.Ф., Фомина В.И. Газовые гидраты. – М.: Химия, 1980. – 296 с.



- [13] Дядин Ю. А., Гушин А.Л. Газовые гидраты. Соросовский образовательный журнал, № 3, с. 55-64, 1998.
- [14] Кузнецов Ф.А., Истомина В.А., Родионова Т.В. Газовые гидраты: исторический экскурс, современное состояние, перспективы исследований. Российский химический журнал, Т. 48, № 3, с. 5-18, 2003.
- [15] Stackelberg, v.M., Müller, H.R. Feste Gashydrate. Z. für Elektrochemie, V. 58, pp. 25-32, 1954.
- [16] Sloan Jn., E.D. Fundamental principles and applications of natural gas hydrates. Nature, Vol. 426, pp. 353, 2003.
- [17] Макогон Ю. Ф. Гидраты природных газов. – М.: «Недра», 1974. – 208 с.
- [18] Frost E.M., Deaton M.N. Gas hydrates and their relation to the operation of natural gas pipelines. N.-Y.: Bur. Mines, p. 219, 1946.
- [19] Катц Д.Л., Корнелл Д., Кобояши Р. и др. Транспорт нефти и газа: Руководство по добыче, транспорту и переработке природного газа. – М.: Недрa, 1965. – 677 с.
- [20] Makogon Yu.F. Hydrates of hydrocarbons. – Tulsa: Pennwell Publishing C., 1997. – 484 pp.
- [21] Истомина В.А., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. – М.: Недрa, 1992. – 236 с.
- [22] Гройсман А.Г. Теплофизические свойства газовых гидратов. – Новосибирск: Наука, 1985. – 94 с.
- [23] Гриценко А.И., Алиев З.С., Ермилов О.М., Ремизов В.В., Зотов Г.А. Руководство по исследованию скважин. – М.: Наука, 1995. – 523с.
- [24] Van der Waals J. H. Trans. Faraday Soc. Vol. 52, pp. 184-193, 1956.
- [25] Van der Waals J. H., Platteeuw J. C. Mol. Phys., Vol. 1, pp. 91-97, 1958.
- [26] Barrer R. M., Stuart W. J. Proc. Roy. Soc., Vol. A243, pp. 172-179, 1957.
- [27] Parrish W.R., Prausnitz J.M. Dissociation pressures of gas mixtures. Ind Eng Chem Process Des Devel. Vol. 11, pp. 26-35, 1972.

- [28] Ng H.J., Robinson D.B. The prediction of hydrate formation in condensed systems. *AIChE J.* Vol. 23, pp. 477-482, 1977.
- [29] Sloan Jn., E. D. Clathrate hydrates of natural gases. – New York and Basel: Dekker, 1990. – 641 pp.
- [30] Stoll, R.D., Bryan, G.M., Physical properties of sediments containing gas hydrates. *Journal of geophysical research*, No. 84, pp. 1629-1634, 1979.
- [31] Waite F.W. Stern L.A., Kirby S.H. et al. Simultaneous determination of thermal conductivity, thermal diffusivity and specific heat in sI methane hydrate. *Geophys J. Int*, pp. 767-774, 2007.
- [32] Sloan Jn., E. D. Clathrate hydrates of natural gases. – 2nd ed., New York, Basel Hong Kong: Marcel Dekker, 1997. – 705 pp.
- [33] Rosenbaum E.J., English N.J. et al. Thermal conductivity of methane hydrate from experiment and molecular simulation. *J. Phys. Chem. B*, 111(46), 2007.
- [34] Кэрролл Д. Гидраты природного газа. – М.: ЗАО «Премиум Инжиниринг», 2007. – 289 с.
- [35] Бондарев Э.А., Бабе Г.Д., Гройсман А.Г. и др. Механика образования гидратов в газовых потоках. – М.: Наука (Сибирское отд.), 1976. – 158 с.
- [36] Макогон Ю.Ф. Эффект самоконсервации газогидратов. Доклады АН. Т. 390, №1, с. 1-5, 2003.
- [37] Схаляхо А.С. Исследование условий образования гидратов природных газов в пористой среде и их влияние на продуктивную характеристику скважин. Диссертация канд. техн. наук. – М., 1974. – 24 с.
- [38] Тохиди Б., Андерсон Р., Масоуди А. и др. Газогидратные исследования в университете Хериот-Ватт (Эдинбург). *Российский химический журнал*, Т. 47, № 3, с. 49-58, 2003.
- [39] Федосеев С.М., Ларионов В.Р. Исследование гидратообразования в пористой среде. Спец. выпуск журнала «Газовая промышленность» по проблемам газовых гидратов, с. 28-29, 2006.

- [40] Tang L.G., Li. G., Hao, Y.M., et al. Effects of Salt on the Formation of Gas Hydrate in Porous Media. Proceedings of the 126 Fifth International Conference on Gas Hydrates, Trondheim, Norway, 2005.
- [41] Ципкин Г.Г. Течения с фазовыми переходами в пористых средах. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 232 с.
- [42] Коротаев Ю.П., Схаляхо А.С. Влияние наличия в пористой среде неподвижной водогидратной фазы на фильтрацию газа. ВНИИЭГазпром, Инф. сбор. Разработка и эксплуатация газовых и газоконденсатных месторождений, № 11, с. 19-23, 1974.
- [43] Безносиков А.Ф., Маслов В.Н. Влияние воды, льда, гидратов в коллекторе на его проницаемость. В кн: Тр. ВНИИЭГазпрома, вып. 8, с.84-89, 1975.
- [44] Коротаев Ю.П., Схаляхо А.С. Экспериментальная установка и методика исследования влияния гидратов в пористой среде на фильтрацию газа. ВНИИЭГазпром, Инф. сбор. Разработка и эксплуатация газовых и газоконденсатных месторождений, № 10, с.16-19, 1974.
- [45] Ненахов В.А. Особенности фильтрации воды через гидратонасыщенные пористые среды. ЭИ, ВНИИЭГазпром, сер. Геология, бурение и разработка газовых месторождений, № 10, С.9-10, 1982.
- [46] Masuda Y., Fujinaga Y., et al. Modeling and experimental studies on dissociation of methane gas hydrates in Berea sandstone cores. Proceedings of the 3rd international conference on gas hydrates, Salt Lake City, 1999.
- [47] Minagawa H., Ohmura R., et al. Water Permeability Measurements of Gas Hydrate-Bearing Sediments. Proceedings of the Fifth International Conference on Gas Hydrates, Trondheim, Norway, 2005.
- [48] Сыртланов В.Р., Шагапов В.Ш. Диссоциация гидратов в пористой среде при депрессионном воздействии. Прикладная механика и техническая физика, Т. 36, № 4, с. 120-130, 1995.

- [49] Carman P.C. Flow of gases through porous media. – London: Butterworths, 1956.
- [50] Чувилин Е., Буханов Б. Изменение теплопроводности газонасыщенных пород при гидратообразовании и замораживании-оттаивании. Часть 1. Методика исследований. Криосфера Земли, Т. 18, № 1, с. 70–76, 2014.
- [51] Asher G.B. Development of computerized thermal conductivity measurement system utilizing the transient needle probe technique. Dissertation T-3335, Colorado, 1987.
- [52] Wright J.F., Nixon, S.R., et al. Thermal conductivity of sediments within the gas-hydrate-bearing interval at the JAPEX/JNOC/GSC et al. Mallik 5L-38 gas hydrate production research well. Scientific results from the Mallik 2002 gas hydrate production research well program, Mackenzie delta, Northwest Territories, Canada, Bulletin 585, 2005.
- [53] Чувилин Е., Буханов Б. Изменение теплопроводности газонасыщенных пород при гидратообразовании и замораживании-оттаивании. Часть 2. Результаты исследований. Криосфера Земли, Т. 18, № 2, с. 57–65, 2014.
- [54] Islam, M.R. A New Recovery Technique for Gas Production From Alaskan Gas Hydrates, SPE 22924, 1991.
- [55] Саяхов Ф.Л., Фатыхов М.А., Хабибуллин И.Л. Исследование динамики разложения газогидрата при электромагнитном воздействии. В кн. Ресурсы нетрадиционного газового сырья и проблемы его освоения. – Л.: ВНИГРИ, 1990. – 261с.
- [56] Макогон Ю.Ф., Омельченко Р.Ю. Мессояха – газогидратная залежь, роль и значение. Геология и полезные ископаемые Мирового океана, № 3, с. 5–19, 2012.
- [57] Гинсбург Г.Д., Соловьев В.А. Субмаринные газовые гидраты. С-Пб., ВНИИОкеангеология, с. 200, 1994.

- [58] Макогон Ю.Ф., Саяхов Ф.Л., Хабибуллин И.Л., Халиков Г.А. Физические принципы и модели разложения гидратов природного газа: Обз. инф. Сер. Разработка и эксплуатация газовых и газоконденсатных месторождений. – М.:ВНИИЭгазпром. – Вып. 3. – 1988. – 32 с.
- [59] Саяхов Ф.Л., Насыров Н.М., Фатыхов М.А. Физико-технические особенности разрушения газогидрата в скважине высокочастотным электромагнитным воздействием. Вопросы интенсификации и разработки газовых и газоконденсатнонефтяных месторождений: Межвуз. Сб. науч. Тр., Уфим. Гос. Нефт. Техн. Ун-т, Уфа, 234 с., 1994.
- [60] Басниев К.С., Кульчицкий В.В., Щebetов А.В., Нифантов А.В. Способы разработки газогидратных месторождений. Газовая промышленность, № 7, с. 22-24, 2006.
- [61] Гусейн-Заде М.А., Макогон Ю.Ф. и др. Теоретические основы и рекомендации к разработке газогидратных залежей. – Якутск, изд. Якутского филиала СО АН СССР, 1975. – 32 с.
- [62] Sung, W., H. Lee, et al. Numerical study for production performances of a methane hydrate reservoir stimulated by inhibitor injection. Energy Sources, V.24, No 6, pp. 499-512, 2002.
- [63] Masuda Yoshihiro, Kurihara Masanori, et al. A Field-Scale Simulation Study on Gas productivity of formations Containing Gas Hydrates. Proceedings of the Fourth International Conference on Gas Hydrates, Yokohama, 2002.
- [64] Moridis G.J. Numerical studies of gas production from methane hydrates. SPE Journal, December, pp. 359-370, 2003.
- [65] McGuire, P.L. Recovery of Gas from Hydrate Deposits Using Conventional Technology, SPE/DOE 10832 presented at Conventional Gas Recovery Symposium, Pittsburg, PA, May 1982.

- [66] Цыпкин Г.Г. Влияние разложения газового гидрата на добычу газа из пласта, содержащего гидрат и газ в свободном состоянии. Механика жидкости и газа, № 1, с. 132-142, 2005.
- [67] Burshears, T.J. A Multi-Phase, Multi-Dimensional, Variable Composition Simulation of Gas Reservoir in Contact with Hydrates, paper 15246 presented at the 1986 Unconventional Gas Technology Symposium, Louisville, 1986.
- [68] Holder, G.D., Angert, P.F. Simulation of Gas Production from a reservoir Containing Both Gas Hydrate and Free Natural gas. SPE11105 at Annual fall Technical Conference and Exhibition, SPE, New Orleans, Louisiana, 1982.
- [69] Веригин Н.Н., Хабибулин И.Л., Халиков Г.А. Линейная задача о разложении гидратов газа в пористой среде. Изв. АН СССР: Механика жидкости и газа, № 1, 1980.
- [70] Коротаев Ю.П. Избранные труды: В 3-х томах. – Под ред. Р.И. Вяхирева. – М.: Недра, 1996. – Т.1 – 606 с.
- [71] Веригин Н.Н., Хабибуллин И.Л., Халиков Г.А. Осесимметричная задача тепло- и массопереноса в насыщенной пористой среде. Инженерно-физический журнал, Т. 38, № 5, с. 913-917, 1980.
- [72] Закиров С.Н., Богатыренко Р.С. Балансовые соотношения для газогидратной залежи. Газовая промышленность, № 5, 1979.
- [73] Богатыренко Р.С. Особенности разработки и эксплуатации газогидратных месторождений (на примере Мессояхского месторождения). Дисс. на соиск. ученой степени к.т.н. – М., 1979. – С.151.
- [74] Дубровский Д.А. Создание методик анализа и прогнозирования показателей разработки газогидратных залежей. Дисс. На соиск. ученой степени к.т.н., М., 1989. – С.189.

- [75] Ненахов В.А., Панфилов М.Б. Математическая модель процесса истощения газ-газогидратной залежи. М.: Труды МИНХ и ГП, вып.174, с.38-48, 1983.
- [76] Kim, H.C., Bishnoi, P.R., Heidemann, R.A., Rizvi, S.S. Kinetics of methane hydrate decomposition, *Chemical Engineering Science*, Vol. 42, No 7, pp. 1645-1653, 1987.
- [77] Yousif M.H., Abass H.H., Selim M.S., Sloan E.D. Experimental and theoretical investigation of methane-gas-hydrate dissociation in porous media. *SPE RE*, Vol. 6, № 1, 1991.
- [78] Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. – 416 с.
- [79] Goel, N., M. Wiggins and S. Shah. Analytical Modeling of Gas Recovery from in-situ Hydrates Dissociation, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 29, No 2, pp. 115-127, 2001.
- [80] Khataniar, S., V. A. Kamath, et al. Modeling and economic analysis of gas production from hydrates by depressurization method. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 80, No. 1, pp. 135-143, 2002.
- [81] Jeannin L., Bayi A., et al. Formation and Dissociation of Methane hydrates in Sediments. Part II: numerical modeling. *Proceedings of the Fourth International Conference on Gas Hydrates*, Yokohama, 2002.
- [82] Kurihara M., Ouchi H., et al. Gas production from methane hydrate reservoirs. *Proceeding of the 7th international conference on gas hydrates*, Edinburg, 2011.
- [83] Muskat M. *Physical properties of oil production*. New-York: Mc. Grow Hill, 1949.
- [84] Самарский А.А. Теория разностных схем. – 3-е изд., испр. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 616 с.
- [85] Цыпкин Г.Г. Течения с фазовыми переходами в пористых средах. – М.: Физматлит, 2009. – 232 с.

- [86] Басниев К.С., Кочина И.Н., Максимов В.М. Подземная гидромеханика. – М.: Недра, 1993. – 416 с.
- [87] Басниев К.С., Нифантов А.В. Трехмерная математическая модель разложения гидратов метанов в пористой среде под действием тепла. М.: Наука и техника в газовой промышленности, № 1–2, с. 61-67, 2004.
- [88] Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М: Физматлит, 2001. – 608 с.
- [89] Самарский А.А., Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Разностные схемы на нерегулярных сетках. – Минск: ЗАО «Критерий», 1996.
- [90] Дремов О.А., Колдоба, А.В., Пергамент А.Х., Повещенко Ю.А., Попов Ю.П., Симус Н.А. Разностные схемы метода опорных операторов для уравнений теории упругости. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, № 131, 23 с., 1995.
- [91] Lipnikov K., Manzini G, Shashkov M. Mimetic finite difference method. Journal of Computational Physics, № 257, pp. 1163–1227, 2014.
- [92] Самарский А.А., Соболев И.М. Примеры численного расчета температурных волн. ЖВМиМФ, Т. 3, № 4, с. 702-719, 1963.
- [93] Гасилова В.А., Ольховская О.Г. Проекционные схемы расчета конвективных потоков на неструктурированных сетках. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, № 67, 1992 г.
- [94] Болдарев А.С., Гасилов В.А., Ольховская О.Г. К решению гиперболических уравнений на неструктурированных сетках. Математическое моделирование, Т. 8, № 3, с. 51-78, 1996.
- [95] Dukowicz J.K., Ramshaw J.D. Tensor Viscosity Method for Convection in Numerical Fluid Dynamics. J. Comp. Phys., V. 32, pp. 71-79, 1979.
- [96] Zalesak S.T. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. J. Comp. Phys., V. 11, pp. 38-69, 1973.



- [97] Boris J.P., Book D.L. Flux-corrected transport. I. SHASTA, a transport algorithm that works. J. Comp. Phys., V. 32, pp. 71-79, 1979.
- [98] V.A. Gasilov et al. The package of applied programs MARPLE3D for the modelling at high performance computers pulsed magnetically accelerated plasma. Preprint KIAM RAS No. 20, Moscow, Russia, 2011.
- [99] Чухарева Н.В. Определение условий гидратообразования при транспорте природного газа в заданных технологических условиях эксплуатации промысловых трубопроводов. Расчет необходимого количества ингибиторов для предотвращения загидрирования. Издательство Национального исследовательского Томского политехнического университета, Томск, 2010. – 30 с.
- [100] Басниев К.С., Щебетов А.В. Перспективы освоения газогидратных залежей. Наука и техника в газовой промышленности, № 2, с. 48-54, 2004.
- [101] Аргунова К.К., Бондарев Э.А., Попов В.В., Рожин И.И. О математическом моделировании разработки Мессояхского месторождения. Нефтегазовое дело, 2008, <http://www.ogbus.ru>.