

DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.2.28

УДК 532.546, 519.688

## О ПОСТРОЕНИИ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ РАСЧЁТА ФИЛЬТРАЦИИ ПРИ ОКОЛОКРИТИЧЕСКИХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

А.А. Афанасьев<sup>1,2</sup>, О.Э. Мельник<sup>1,2</sup>*Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия**<sup>2</sup>ЗАО «Т-Сервисы», Москва, Россия*

Исследуется математическая модель трёхфазной неизотермической фильтрации бинарной смеси при до- и закритических термодинамических условиях. Рассматриваются проблемы численного моделирования течений в пористой среде, обусловленные выбором энтальпии в качестве одной из независимых переменных. Предложена аппроксимация конвективных членов, позволяющая непрерывным образом задавать конечно-разностные потоки при околокритических термодинамических условиях. Математическая модель может использоваться в задачах, связанных с подземным захоронением углекислого газа, производством геотермальной энергии и разработкой месторождений углеводородов.

*Ключевые слова:* численное моделирование, конечно-разностная схема, аппроксимация, пористая среда, многофазная фильтрация, критическая точка

## CONSTRUCTION OF FINITE-DIFFERENCE SCHEME FOR SIMULATION OF FLOWS IN POROUS MEDIA UNDER NEAR-CRITICAL THERMODYNAMIC CONDITIONS

A.A. Afanasyev<sup>1,2</sup> and O.E. Melnik<sup>1,2</sup>*<sup>1</sup>Institute of Mechanics of Moscow State University, Moscow, Russia**<sup>2</sup>ZAO «T-Services», Moscow, Russia*

We investigate the mathematical model of three-phase non-isothermal binary mixture flows in porous media under sub- and supercritical conditions. We analyze the problems of numerical simulation of flows in a porous medium assuming that enthalpy is an independent variable of the model. We propose a continuous finite-difference approximation of convective fluxes under near-critical thermodynamic conditions. The model can be used for numerical simulation of the problems of underground carbon dioxide storage, geothermal energy production and hydrocarbon deposits exploration.

*Key words:* numeric simulations, finite-difference method, approximation, porous media, multiphase flows, critical point

### 1. Введение

Неизотермические течения в пористой среде при критических термодинамических условиях возникают при захоронении углекислого газа в недрах Земли [1, 2], производстве геотермальной энергии [2, 3] и разработке месторождений углеводородов [4]. Данные процессы могут сопровождаться фазовыми переходами и трёхфазными фильтрационными течениями, которые существующими математическими моделями не описываются. Например, фильтрация, вызванная подземным захоронением углекислого газа CO<sub>2</sub>, происходит при относительно низких пластовых температурах 0÷100°C и как до-, так и закритических давлениях (критическое давление CO<sub>2</sub> — 7,28 МПа) [1]. В подобных условиях вода, насыщающая породы, всегда находится в жидком состоянии, а CO<sub>2</sub> может присутствовать как в газообразном или сжиженном виде, так и в состоянии закритического флюида. Таким образом, при докритических условиях возможны двухфазные течения с термодинамическими равновесиями типа газ–жидкость (газообразный CO<sub>2</sub>–вода), жидкость–жидкость (жидкий CO<sub>2</sub>–вода) и трёхфазные течения с термодинамическими равновесиями типа жидкость–газ–жидкость (жидкий CO<sub>2</sub>–газообразный CO<sub>2</sub>–вода).

При исследовании фильтрации широко применяются численные модели, в которых независимыми переменными являются давление и температура [1, 4, 5]. Недостатки подобных моделей связаны с тем, что, во-первых, они не учитывают некоторые термодинамические равновесия флюидов в пластовых условиях. Например, в задачах захоронения CO<sub>2</sub> использование температуры в качестве одной из переменных ограничивает приложения модели только однофазными и двухфазными течениями. Кроме того, они не могут быть применены при трёхфазных течениях воды и углекислого газа в сжиженном и газообразном состояниях [1]. Во-вторых, выраженные в переменных давление–температура уравнения фильтрации имеют математическую особенность при критических термодинамических условиях [6]. Это приводит к замедлению сходимости алгоритмов расчёта фильтрации при критических термодинамических условиях.

В настоящей работе предлагается новая модель многофазной фильтрации бинарной смеси, в которой отсутствуют отмеченные выше недостатки. Вместо температуры в качестве одной из независимых

переменных выступает энтальпия. Такая замена позволяет исключить особенность уравнений фильтрации при критических условиях [6]. Для заданной энтальпии реальные теплофизические свойства смеси находятся с помощью ускоренного метода расчёта, не содержащего вложенных итерационных процессов [7]. Метод даёт возможность определять трёхфазные термодинамические равновесия смеси, в том числе в упомянутых проблемах захоронения CO<sub>2</sub>.

В задачах численного моделирования значительное внимание уделяется развитию новых конечно-разностных схем интегрирования уравнений механики сплошной среды [8]. Иногда, как например в [9], необходима разработка специальных итерационных методов и разностных схем, учитывающих специфику модели механики сплошной среды. В настоящей работе исследуются проблемы, возникающие при конечно-разностной аппроксимации уравнений фильтрации при околокритических термодинамических условиях. Показано, что классические аппроксимации конвективных потоков [1, 2] могут быть разрывными в критической точке вещества и, следовательно, могут приводить к замедлению или отсутствию сходимости вычислительного алгоритма. Предложено обобщение аппроксимаций на основе сравнения энтальпий фаз бинарной смеси в ячейках расчётной сетки, что позволяет задавать потоки непрерывным образом.

## 2. Математическая модель фильтрации

### 2.1. Законы сохранения

Предположим, что различные компоненты многофазной бинарной смеси формируют не смешивающиеся друг с другом различные фазы. Первая компонента  $c_1$  может расслаиваться на жидкую и газовую фазы ( $i = 1, 2$ ), а вторая компонента  $c_2$  присутствует в виде отдельной жидкой фазы ( $i = 3$ ). В данном случае система законов сохранения, описывающих фильтрацию, принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m \sum_{i=1}^2 \rho_i s_i \right) + \operatorname{div} \left( \sum_{i=1}^2 \rho_i \mathbf{w}_i \right) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (m \rho_3 s_3) + \operatorname{div} (\rho_3 \mathbf{w}_3) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m \sum_{i=1}^3 \rho_i e_i s_i + (1-m) \rho_r e_r \right) + \operatorname{div} \left( \sum_{i=1}^3 \rho_i h_i \mathbf{w}_i - \lambda_m \operatorname{grad} T \right) = 0. \quad (3)$$

Здесь:  $m$  — пористость породы;  $s_i$  — насыщенность;  $\rho_i$  — плотность;  $e_i$  — внутренняя энергия;  $h_i$  — энтальпия;  $\mathbf{w}_i$  — скорость фильтрации;  $\lambda_m = m \sum_{i=1}^3 s_i \lambda_i + (1-m) \lambda_r$  — эффективный коэффициент теплопроводности среды;  $T$  — температура среды. Индекс  $i$  обозначает параметры  $i$ -й фазы, а индекс  $r$  — параметры скелета породы.

Уравнения (1) и (2) есть законы сохранения массы первой ( $c_1$ ) и второй ( $c_2$ ) компонент смеси, а уравнение (3) — закон сохранения энергии. Соотношения (1)–(3) дополняются законом фильтрации Дарси:

$$\mathbf{w}_i = -K \frac{f_i}{\mu_i} (\operatorname{grad} P - \rho_i \mathbf{g}), \quad (4)$$

где  $K$  — проницаемость породы,  $f_i$  — относительная фазовая проницаемость  $i$ -й фазы,  $\mu_i$  — вязкость,  $P$  — давление,  $\mathbf{g}$  — ускорение свободного падения.

Для насыщенностей фаз выполняется условие

$$\sum_{i=1}^3 s_i = 1. \quad (5)$$

Согласно (1), (2), (5) насыщенность  $s_3$  характеризует объёмную долю компонент смеси. Действительно,  $s_3$  есть объёмная доля компоненты  $c_2$ , формирующей отдельную фазу  $i = 3$ , а  $s_1 + s_2 = 1 - s_3$  — объёмная доля компоненты  $c_1$ , присутствующей в двух фазах  $i = 1, 2$ . Таким образом, при  $s_3 = 0$  в составе смеси содержится только компонента  $c_1$ . При увеличении  $s_3$  доля компоненты  $c_2$  растёт, а доля компоненты  $c_1$  уменьшается. При  $s_3 = 1$  состав смеси включает только компоненту  $c_2$ .

## 2.2. Уравнения состояния

Обозначим символом  $h_m$  осреднённую по фазам  $i=1, 2$  удельную энтальпию первой компоненты смеси:  $h_m = \frac{\sum_{i=1}^2 \rho_i h_i s_i}{\sum_{i=1}^2 \rho_i s_i}$ . Предположим, что фильтрация происходит в условиях локального термодинамического равновесия, а критические термодинамические условия могут реализоваться только для компоненты  $c_1$ .

На рисунке представлен характерный вид фазовой диаграммы компоненты  $c_1$  на плоскости переменных давление–энтальпия ( $P, h_m$ ) [7]. Точка  $C$  — критическая точка компоненты  $P = P_c$ . При низких (или высоких) значениях энтальпии, а значит, и температуры  $T$ , которым на рисунке соответствует область  $I$  (или  $II$ ), компонента  $c_1$  находится в однофазном состоянии жидкости (или газа). При  $P < P_c$  линия  $LCG$  ограничивает область  $III$  двухфазных состояний. При закритических давлениях  $P \geq P_c$  возможны только однофазные состояния компоненты  $c_1$ , причём между состояниями жидкости и газа нет чёткого разграничения. Линия  $CQ$ , разделяющая области  $I$  и  $II$  при закритических условиях, проведена условно. Ниже, без ограничения общности, считается, что фаза  $i=1$  компоненты  $c_1$  имеет свойства жидкости, а фаза  $i=2$  — свойства газа. При закритических условиях ( $P \geq P_c$ ) деление на фазы посредством линии  $CQ$  также условно.

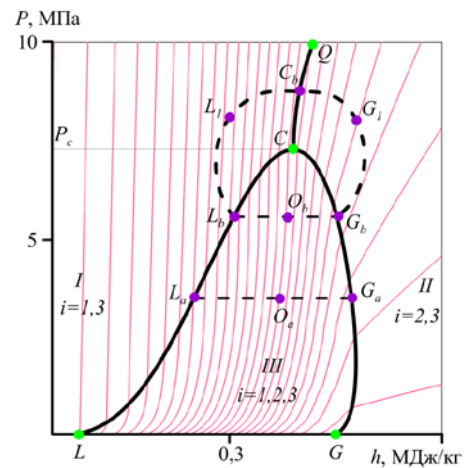
Так как различные компоненты между собой не смешиваются, то для установления теплофизических свойств многофазной смеси достаточно определить свойства каждой компоненты. В силу того, что компонента  $c_1$  может находиться при околоскритических условиях, её теплофизические свойства будем рассчитывать в рамках метода, основывающегося на замене классических переменных давление–температура ( $P, T$ ) на переменные давление–энтальпия ( $P, h$ ). Преимущество переменных ( $P, h$ ) по сравнению с ( $P, T$ ) заключается в том, что уравнения фильтрации, представленные в этих переменных, не вырождаются [7]. Для уравнений состояния, описывающих реальные свойства вещества, сделать замену переменных ( $P, T$ ) на ( $P, h$ ) явным образом не удаётся, так как для заданных давления  $P$  и энтальпии  $h$  теплофизические свойства фазы находятся из решения системы нелинейных уравнений. Построить решение данной системы можно только численно, организовав итерационный процесс.

Итерационный способ нахождения свойств существенно замедляет гидродинамическое моделирование, поэтому в рамках используемого здесь метода [7] рассчитываются кубические сплайн-интерполяции для функций

$$\rho(P, h), \quad T(P, h), \quad \mu(P, h), \quad \lambda(P, h), \quad T_f(P); \quad (6)$$

$T_f$  — температура кипения компоненты  $c_1$ . При этом до начала гидродинамического моделирования коэффициенты сплайнов (6) достаточно вычислить лишь один раз, чтобы затем многократно применять для ускоренного, безытерационного способа расчёта параметров фаз  $i=1, 2$ .

Если компонента  $c_1$  смеси находится в однофазном состоянии ( $s_1 = 0$  или  $s_2 = 0$ ), то энтальпия фазы, содержащей данную компоненту, равняется средней энтальпии  $h_m$  ( $h_1 = h_m$  или  $h_2 = h_m$ ). И тогда теплофизические свойства фазы определяются с помощью прямой подстановки параметров  $P$  и  $h_m$  в аргументы сплайн-функций (6). Если же компонента смеси  $c_1$  пребывает в двухфазном состоянии ( $s_i > 0$ ,  $i=1, 2$ ), то сначала необходимо найти энтальпии фаз  $h_i$  ( $i=1, 2$ ), решив уравнения, формулирующие условия термодинамического равновесия в области  $III$ :  $T(P, h_i) - T_f(P) = 0$  ( $i=1, 2$ ), где функции  $T(P, h)$  и  $T_f(P)$  есть сплайны (6). Затем, подставляя параметры  $P$ ,  $h_i$  в функции (6), рассчитать теплофизические



Области существования  $I, II, III$  различных фаз бинарной смеси на фазовой диаграмме компоненты  $c_1$  ( $\text{CO}_2$ ); тонкие линии – изолинии распределения плотности  $\rho$

свойства фаз  $i = 1, 2$ , а с помощью следующих уравнений  $s_1 = \frac{\rho_2(h_m - h_2)(1 - s_3)}{\rho_1(h_1 - h_m) + \rho_2(h_m - h_2)}$ ,  $s_2 = \frac{\rho_1(h_1 - h_m)(1 - s_3)}{\rho_1(h_1 - h_m) + \rho_2(h_m - h_2)}$  — их насыщенности.

Предположим, что компонента  $c_2$  не может находиться при критических условиях, поэтому для определения её свойств обратимся к уравнениям состояния фазы  $i = 3$  в классических переменных  $(P, T)$  [7]:

$$\rho_3(P, T), \quad h_3(P, T), \quad \mu_3(P, T), \quad \lambda_3(P, T). \tag{7}$$

Эти соотношения удобнее уравнений состояния в переменных  $(P, h)$  (6), так как в (7) для задания функций могут применяться существующие аналитические модели свойств среды, которые формулируются именно в переменных  $(P, T)$ . Заметим, что аналитических моделей свойств среды в переменных  $(P, h)$  не существует. Например, используя модель линейно-сжимаемой среды, можно представить функции (7) в виде:  $\rho_3 = \rho_0(1 + \alpha(P - P_0) - \beta(T - T_0))$ ,  $h_3 = C_3T$ ,  $\rho_0, \alpha, \beta, C_3, \mu_3, \lambda_3 = \text{const}$ . Здесь  $\alpha$  — коэффициент сжимаемости,  $\beta$  — коэффициент теплового расширения,  $C_3$  — теплоёмкость фазы  $i = 3$  при  $P = \text{const}$ ,  $\rho_0$  — плотность фазы при давлении  $P_0$  и температуре  $T_0$ .

Для заданных параметров  $P, \rho_i, h_i$  фазы бинарной смеси внутренняя энергия  $e_i$ , входящая в уравнение (3), находится из соотношения

$$h_i = e_i + P/\rho_i \quad (i = 1, 2, 3). \tag{8}$$

Свойства породы, так же, как и свойства фазы  $i = 3$ , зададим в переменных  $(P, T)$ :

$$\rho_r(P, T), \quad e_r(P, T), \quad m(P, T), \quad K(P, T). \tag{9}$$

В частном случае функции (9) могут иметь вид  $e_r = C_rT$ , где  $C_r$  — теплоёмкость породы;  $\rho_r, m, K = \text{const}$ .

В дальнейшем символом  $E$  будем обозначать термодинамическое равновесие бинарной смеси, а следующими за ним числами в скобках — фазы с насыщенностью  $s_i > 0$ , присутствующие в равновесии и законах сохранения (1)–(3) (Табл.). Согласно (5) при  $s_i = 1$  имеем однофазное термодинамическое равновесие  $E(i)$ , в котором присутствует только  $i$ -я фаза, а насыщенности двух других фаз равны нулю. Однофазные  $s_1 = 1$  (или  $s_2 = 1$ ),  $s_3 = 0$  состояния  $E(1)$  (или  $E(2)$ ) жидкости (или газа) компоненты  $c_1$  возможны только для термобарических условий  $P, h_m$ , соответствующих области  $I$  (или  $II$ ) (см. рисунок). Однофазные  $s_3 = 1$  состояния  $E(3)$  жидкой фазы компоненты  $c_2$  возможны при любых термобарических условиях  $P, h_m$ .

Таблица. Типы термодинамических равновесий смеси в зависимости от переменных  $P, h_m, s_3$ .

Давление и энтальпия \ Насыщенность	$(P, h_m) \in I$	$(P, h_m) \in II$	$(P, h_m) \in III$
$s_3 = 0$	Жидкость $E(1)$	Газ $E(2)$	Жидкость–газ $E(1-2)$
$0 < s_3 < 1$	Жидкость–жидкость $E(1-3)$	Газ–жидкость $E(2-3)$	Жидкость–газ–жидкость $E(1-2-3)$
$s_3 = 1$	Жидкость $E(3)$		

Если неравенство  $0 < s_i < 1$  выполняется для двух фаз, а насыщенность оставшейся фазы равняется нулю, то смесь находится в двухфазном равновесии. При параметрах  $P, h_m$ , принадлежащих области  $III$  (или  $II$ ), двухфазное равновесие смеси имеет тип жидкость–газ  $E(1-2)$ ,  $s_3 = 0$  (или газ–жидкость  $E(2-3)$ ,  $s_3 \in (0, 1)$ ), то есть одна из двух фаз жидкая, а другая газовая. Параметры  $P$  из области  $I$  отвечают двухфазному равновесию смеси, имеющему тип жидкость–жидкость  $E(1-3)$ ,  $s_3 \in (0, 1)$ ,

то есть обе фазы жидкие. В данных случаях  $E(1-2)$  есть двухфазное равновесие чистой компоненты  $c_1$  ( $s_3 = 0$ ), а  $E(1-3)$  и  $E(2-3)$  — двухфазные равновесия бинарной смеси ( $s_3 \in (0, 1)$ ).

При выполнении неравенства  $0 < s_i < 1$  для всех фаз  $i = 1, 2, 3$  реализуется трёхфазное термодинамическое равновесие смеси типа жидкость–газ–жидкость  $E(1-2-3)$ . Данные состояния возможны только при докритических условиях ( $P < P_c$ ), если параметры  $P$ ,  $h_m$  принадлежат области III.

Тип термодинамического равновесия смеси удобно определять с помощью приведённой таблицы.

### 2.3. Относительные фазовые проницаемости (ОФП)

При однофазной фильтрации  $E(i)$  относительная фазовая проницаемость  $f_i$  равна единице, а ОФП двух других фаз равны нулю:  $f_k = 0$ ,  $k \neq i$ .

Пусть в областях двухфазной фильтрации  $E(1-2)$  компоненты  $c_1$  функции ОФП задаются соотношениями

$$f_1 = f_l^{(1)}(s_1), \quad f_2 = f_g^{(1)}(s_1), \quad f_3 = 0, \quad (10)$$

а в областях двухфазной фильтрации  $E(1-3)$  и  $E(2-3)$  — соотношениями

$$f_1 = f_g^{(2)}(s_3), \quad f_2 = 0, \quad f_3 = f_l^{(2)}(s_3). \quad (11)$$

Здесь индексы  $l$  и  $g$  обозначают параметры жидкой и газовой фаз в соответствующем двухфазном течении. В двухкомпонентных течениях  $E(1-3)$  и  $E(2-3)$  всегда считается, что фаза компоненты  $c_1$  газовая, а фаза компоненты  $c_2$  жидкая. Для течений типа газ–жидкость  $E(2-3)$  (или жидкость–жидкость  $E(1-3)$ ) и течений типа жидкость–газ  $E(1-2)$  функции  $f_l$ ,  $f_g$  различны. В частных случаях  $f_l$ ,  $f_g$  имеют линейную связь с насыщенностями  $s_i$ :

$$f_l = s_l, \quad f_g = s_g = 1 - s_l. \quad (12)$$

Определение ОФП в области трёхфазных течений, как правило, основывается на эмпирических моделях. Согласно распространённому подходу [11] необходимо выполнить интерполяцию кривых ОФП из области двухфазных  $s_i > 0$ ,  $s_k = 0$  ( $i = 1, 2, 3$ ,  $i \neq k$ ) в область трёхфазных  $s_i > 0$  ( $i = 1, 2, 3$ ) течений. При использовании предлагаемой модели для вычисления ОФП необходимо учитывать особенность, которая заключается в том, что фазы  $i = 1, 2$  могут находиться при околоскритических условиях. Следовательно, в соответствии с (11), кривые ОФП в области двухфазного течения  $E(1-3)$  и  $E(2-3)$  должны совпадать хотя бы при околоскритических условиях. Действительно, предположим, что давление  $P$  стремится к критическому давлению снизу  $P \rightarrow P_c^-$ , а энтальпия  $h_m$  равняется критической энтальпии компоненты  $c_1$  (точка  $C$  на рисунке). Тогда незначительное изменение энтальпии ( $\Delta h_m \rightarrow 0$ ) может привести к изменению фазового состояния с  $E(1-3)$  на  $E(2-3)$  или, наоборот, с  $E(2-3)$  на  $E(1-3)$ . Причём при  $P \rightarrow P_c^-$  различие между фазой  $i = 1$  в состоянии  $E(1-3)$  и фазой  $i = 2$  в состоянии  $E(2-3)$  стремится к нулю. Следовательно, здесь отклонение друг от друга кривых ОФП для двухфазных течений  $E(1-3)$  и  $E(2-3)$  также стремится к нулю. Таким образом, естественным представляется следующий вид функций ОФП для трёхфазных течений:

$$f_1 = f_l^{(1)}\left(\frac{s_1}{s_1 + s_2}\right) f_g^{(2)}(s_3), \quad f_2 = f_g^{(1)}\left(\frac{s_1}{s_1 + s_2}\right) f_g^{(2)}(s_3), \quad f_3 = f_l^{(2)}(s_3). \quad (13)$$

Согласно (10), (11), (13) функции  $f_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) оказываются непрерывными, если одна из трёх фаз в течении появляется или исчезает.

### 2.4. Независимые переменные

Определим полный вектор параметров фильтрации в виде:

$$P, T, h_m, \rho_s, e_s, m, K, \rho_i, e_i, h_i, \mu_i, \lambda_i, s_i, f_i \quad (i = 1, 2, 3). \quad (14)$$

Подставляя соотношения (4), (10), (11), (13) в законы сохранения (1)–(3), получим, что для заданного распределения параметров (14) можно вычислить все величины в уравнениях (1)–(3).

В качестве независимых переменных модели (1)–(3) выберем давление  $P$ , удельную энтальпию  $h_m$  компоненты  $c_1$  и насыщенность  $s_3$  фазы  $i = 3$ :

$$P, h_m, s_3. \tag{15}$$

Переменные (15) описывают все параметры фильтрации (14). Действительно, используя метод [7], сначала для заданных  $P, h_m$  установим число фаз компоненты  $c_1$ , их параметры  $\rho_i, h_i, s_i$  ( $i=1,2$ ) и температуру  $T$ . Воспользовавшись сплайнами (6), рассчитаем также коэффициенты вязкости и теплопроводности  $\mu_i, \lambda_i$  ( $i=1,2$ ). Далее, для известных значений  $P$  и  $T$  вычислим с помощью (7) свойства фазы  $i=3$ :  $\rho_3, h_3, \mu_3, \lambda_3$ , а с помощью функций (9) — свойства породы:  $\rho_s, e_s, m, K$ . Внутреннюю энергию  $e_i$  ( $i=1,2,3$ ) фаз бинарной смеси найдём из уравнения (8). Для известного числа фаз в равновесии бинарной смеси (Табл.) из соотношений (10), (11), (13) определим относительные фазовые проницаемости  $f_i$  ( $i=1,2,3$ ). Таким образом, законы сохранения (1)–(3), после подстановки в них закона Дарси (4) и уравнений состояния, представляют собой замкнутую систему уравнений относительно переменных (15).

### 3. Конечно-разностная схема

#### 3.1. Конечно-разностные законы сохранения

Конечно-разностную схему для расчёта фильтрации бинарной смеси сформулируем в рамках метода конечных объёмов. Для каждой ячейки  $a$  декартовой расчётной сетки выполняются следующие конечно-разностные законы сохранения:

$$(\mathbf{R}^a - \mathbf{R}_0^a)V^a + \Delta t \sum_{b=1}^{N_a} \mathbf{Q}_{ab} S_{ab} = \mathbf{0}. \tag{16}$$

Здесь и далее верхний индекс  $a$  обозначает параметры в соответствующей ячейке  $a$ , нижний индекс  $ab$  — параметры на грани между  $a$  и  $b$ ,  $0$  — параметры на предыдущем временном слое. Величина  $\mathbf{R}^a$  — вектор плотностей в ячейке  $a$ ,  $V^a$  — геометрический объём ячейки,  $N_a$  — число ячеек, имеющих общую грань (связанных) с ячейкой  $a$ ,  $\mathbf{Q}_{ab}$  — вектор потоков через общую грань между ячейками  $a$  и  $b$ ,  $S_{ab}$  — площадь грани,  $\Delta t$  — шаг по времени. Вектор  $\mathbf{R}^a$  ( $\mathbf{Q}_{ab}$ ) имеет размерность 3: первая и вторая компоненты вектора есть плотности (потоки) компоненты бинарной смеси  $c_1$  и  $c_2$ , а третья компонента — плотность (поток) энергии. В уравнениях (16) сумма берётся по всем ячейкам, связанным с  $a$ . Предполагается, что положительное значение потока  $\mathbf{Q}_{ab}$  соответствует течению из ячейки  $a$  в ячейку  $b$ . Соотношения (16) определяют полностью неявную конечно-разностную схему [2, 4].

В соответствии с (1)–(3) плотности  $\mathbf{R}^a$  и потоки  $\mathbf{Q}_{ab}$  представляются в виде:

$$\mathbf{R}^a = m^a \begin{pmatrix} \sum_{i=1,2} s_i \rho_i \\ s_3 \rho_3 \\ \sum_{i=1,2,3} s_i \rho_i e_i \end{pmatrix} + (1 - m^a) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_s e_s \end{pmatrix}; \quad \mathbf{Q}_{ab} = \begin{pmatrix} Q_{ab}^{(1)} \\ Q_{ab}^{(2)} \\ Q_{ab}^{(3)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda_{ab} (T^b - T^a) / d_{ab} \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Здесь  $d_{ab}$  — расстояние между центрами ячеек,  $\lambda_{ab}$  — аппроксимация эффективного коэффициента теплопроводности  $\lambda_m$ .

Первый член в правой части  $\mathbf{Q}_{ab}$  в соотношении (17) описывает конвективный перенос тепла, а второй — кондуктивный перенос, связанный с теплопроводностью. В дальнейшем считаем, что аппроксимации коэффициентов проницаемости  $K_{ab}$  и теплопроводности  $\lambda_{ab}$  для грани между ячейками  $a$  и  $b$  заданы, например, следующими соотношениями [2]:  $K_{ab} = 2K^a K^b / (K^a + K^b)$ ,  $\lambda_{ab} = 2\lambda_m^a \lambda_m^b / (\lambda_m^a + \lambda_m^b)$ .

Конечно-разностная схема (17) имеет первый порядок аппроксимации, обусловленный нелинейной зависимостью теплофизических свойств бинарной смеси от давления и температуры, фазовыми

переходами, нелинейным видом кривых относительной фазовой проницаемости, а в прикладных расчётах и неоднородным геологическим строением проницаемого резервуара.

### 3.2. Аппроксимации конвективных потоков при околокритических условиях

Рассмотрим проблемы, возникающие при конечно-разностной аппроксимации конвективных потоков  $Q_{ab}^{(i)}$  ( $i=1, 2, 3$ ) в (17) при околокритических термодинамических условиях. Зафиксируем две связанные ячейки  $a$  и  $b$  (в дальнейшем для некоторых параметров на грани между ячейками индекс  $ab$  опускается). Как и ранее предполагаем, что положительное значение скорости фильтрации соответствует течению из ячейки  $a$  в  $b$ . Каждая фаза  $i=1, 2, 3$  из ячеек  $\alpha = a, b$  может давать вклад в поток массы и энергии бинарной смеси через грань. Широко распространённые аппроксимации скоростей фаз  $w_i^\alpha$  на грани между ячейками представляем в виде [1, 2, 4, 12]:

$$w_i^a = -\frac{K_{ab}}{d_{ab}} \eta_i^a \min(\Delta\Phi_i^a, 0), \quad w_i^b = -\frac{K_{ab}}{d_{ab}} \eta_i^b \max(\Delta\Phi_i^b, 0), \quad (18)$$

где  $\eta_i^\alpha = \frac{f_i^\alpha}{\mu_i^\alpha}$ ,  $\Delta\Phi_i^\alpha = P^b - P^a - \tilde{\rho}_i^\alpha (z^b - z^a)$  ( $i=1, 2, 3$ ,  $\alpha = a, b$ ). Здесь  $\eta_i^\alpha$  — подвижность соответствующей фазы,  $z$  — глубина центра ячейки (направление оси  $z$  совпадает с направлением действия силы тяжести),  $\tilde{\rho}_i^\alpha$  — аппроксимация плотности фазы  $i$  из ячейки  $\alpha = a, b$  на грани между ячейками. Операции нахождения минимума и максимума в соотношениях (18) соответствуют схеме с разностями против потоков [1, 2, 4, 12].

Согласно (1)–(4) и (18) потоки массы  $Q_{ab}^{(j)}$  ( $j=1, 2$ ) компоненты  $c_j$  и энергии  $Q_{ab}^{(3)}$  из ячейки  $a$  в ячейку  $b$  записываем в виде:

$$Q_{ab}^{(1)} = \sum_{\substack{\alpha=a,b \\ i=1,2}} \rho_i^\alpha w_i^\alpha, \quad Q_{ab}^{(2)} = \sum_{\alpha=a,b} \rho_3^\alpha w_3^\alpha, \quad Q_{ab}^{(3)} = \sum_{\substack{\alpha=a,b \\ i=1,2,3}} \rho_i^\alpha h_i^\alpha w_i^\alpha. \quad (19)$$

Для аппроксимации плотностей фаз  $\tilde{\rho}_i^\alpha$  на грани часто применяются соотношения вида:

$$\tilde{\rho}_i^\alpha = \frac{\rho_i^a + \rho_i^b}{2}, \quad (20)$$

$$\tilde{\rho}_i^\alpha = \frac{\rho_i^a s_i^a + \rho_i^b s_i^b}{s_i^a + s_i^b}. \quad (21)$$

Здесь следует учитывать, что индекс  $i=1, 2, 3$  соответствует фазе одного и того же типа (жидкая фаза компоненты  $c_j$  ( $j=1, 2$ ) или газ) в каждой из ячеек  $a$  и  $b$ . Аппроксимация (20) используется в классических моделях фильтрации, в которых теплофизические свойства среды задаются явным образом [1, 2, 4]. Более сложная аппроксимация (21) применяется в композиционных моделях фильтрации, в которых свойства флюидов рассчитываются итерационными методами, например, с помощью кубического уравнения состояния [5, 7, 13].

В предложенной модели фильтрации бинарной смеси аппроксимация (20) подходит для компоненты  $c_2$ :  $\tilde{\rho}_3^\alpha = (\rho_3(P^a, T^a) + \rho_3(P^b, T^b))/2$ . В данном случае  $\tilde{\rho}_3^a = \tilde{\rho}_3^b$ , поэтому, согласно (18), в вычислении потоков (19) участвует только одна из двух фаз  $i=3$  в ячейках  $\alpha = a, b$ . Относительно компоненты  $c_1$  предложенная модель является композиционной (свойства компоненты  $c_1$  задаются итерационным методом [7]), поэтому аппроксимацию  $\tilde{\rho}_i^\alpha$  ( $i=1, 2$ ,  $\alpha = a, b$ ) удобнее проводить по формуле (21).

Пусть параметрам  $P^\alpha$ ,  $h_m^\alpha$  ( $\alpha = a, b$ ) на фазовой диаграмме компоненты  $c_1$  соответствуют точка  $O_\alpha$  в области двухфазных состояний III (см. рисунок). В силу этого  $\tilde{\rho}_i^\alpha$  вычисляется непосредственно по формуле (21). Пусть при постоянных давлениях  $P^a, P^b = \text{const}$  точки  $O_a, O_b$  стремятся к точкам  $L_a, L_b$  соответственно. Тогда  $s_1^a \rightarrow 1, s_2^a \rightarrow 0$  ( $\alpha = a, b$ ) [7]. Если  $O_a = L_a, O_b = L_b$ , то соотношения (21) сводятся к виду:  $\tilde{\rho}_1^\alpha = (\rho_1^a + \rho_1^b)/2$  ( $\alpha = a, b$ ). Так как насыщенности соответствующих фаз равны нулю ( $s_2^\alpha = 0, \alpha = a, b$ ), то плотности  $\tilde{\rho}_2^\alpha$  вычислять не нужно. Таким образом, если термобарические условия

в ячейках отвечают однофазным состояниям одинакового типа (жидкости или газу), то аппроксимация (21) преобразуется к виду (20).

Пусть теперь при постоянных давлениях  $P^a, P^b = \text{const}$  точка  $O_a$  стремится к  $L_a$ , а точка  $O_b$  к  $G_b$ . Тогда  $s_1^a \rightarrow 1, s_2^a \rightarrow 0, s_1^b \rightarrow 0, s_2^b \rightarrow 1$ . Если  $O_a = L_a$  и  $O_b = G_b$ , то соотношения (21) сводятся к виду:  $\tilde{\rho}_1^a = \rho_1^a, \tilde{\rho}_2^b = \rho_2^b$ . Плотности  $\tilde{\rho}_2^a, \tilde{\rho}_1^b$  вычислять не нужно, так как насыщенности соответствующих фаз равны нулю ( $s_2^a = 0, s_1^b = 0$ ). Следовательно, при термобарических условиях в ячейках и однофазных состояниях различного типа аппроксимация плотности на грани равна плотности соответствующей фазы.

Из вышеизложенного следует, что при  $P < P_c$  аппроксимация (21) позволяет непрерывным образом задавать плотности  $\tilde{\rho}_i^a$  в зависимости от параметров в ячейках. Однако заметим, что в рассмотренных случаях формулы (21) используются при известной информации о типе фазы (жидкость или газ).

Рассмотрим пример, в котором тип фазы, присутствующей в ячейке, не определен (закритический флюид). Пусть параметры  $P^a, h_m^a$  согласуются с точкой  $O_a$ , а параметры  $P^b, h_m^b$  — с точкой  $O_b = L_b$ . Изменим параметры  $P^b, h_m^b$  так, чтобы точка  $O_b$  на фазовой диаграмме переместилась по линии  $L_b L_1 C_b G_1 G_b$  вокруг критической точки  $C$  (см. рисунок). Если выполнится  $O_b = L_1$ , то в ячейке  $b$  компонента  $c_1$  будет находиться в однофазном состоянии жидкости. Следовательно, из соотношений (21) получим:

$$\tilde{\rho}_1^a = \tilde{\rho}_1^b = \frac{\rho_1^a s_1^a + \rho_1^b}{s_1^a + 1}, \quad \tilde{\rho}_2^a = \rho_2^a. \quad (22)$$

При условии  $O_b = G_1$  компонента  $c_1$  будет пребывать в ячейке  $b$  в однофазном состоянии газа, и тогда

$$\tilde{\rho}_1^a = \rho_1^a, \quad \tilde{\rho}_2^a = \tilde{\rho}_2^b = \frac{\rho_2^a s_2^a + \rho_2^b}{s_2^a + 1}. \quad (23)$$

При перемещении  $O_b$  по линии  $L_1 C_b G_1$  не существует непрерывного перехода между аппроксимациями (22) и (23). Это связано с неопределённостью выбора для фазы в ячейке  $b$  соответствующей ей фазы в ячейке  $a$ , так как компонента  $c_1$  в ячейке  $b$  находится в закритических условиях. Двигаясь вместе с точкой  $O_b$  по линии  $L_1 C_b G_1$  от точки  $L_1$  к  $G_1$ , компонента непрерывным образом переходит из жидкого в газообразное состояние, и аппроксимация (21), опирающаяся на информацию об определённом типе однофазного состояния, здесь перестаёт работать. Это представляет проблему для численного решения уравнений фильтрации.

Решить отмеченную проблему можно, если установить соответствие между фазами в различных ячейках, сравнивая значения энтальпий фаз  $h_i^\alpha$  ( $i=1,2, \alpha=a,b$ ). Введём следующую весовую функцию:  $W(h) \equiv 1$  при  $h \leq h_{\min}$ ,  $W(h) \equiv 0$  при  $h \geq h_{\max}$  и монотонно убывает от единицы до нуля в интервале  $h \in (h_{\min}, h_{\max})$ . Полагаем, что константы  $h_{\min}, h_{\max}$  удовлетворяют неравенствам  $0 < h_{\min} < h_{\max}$ . Для вычисления  $\tilde{\rho}_i^\alpha$  используем следующую аппроксимацию:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_i^a &= \left( \rho_i^a s_i^a + \sum_{k=1,2} \rho_k^b s_k^b W(|h_k^b - h_i^a|) \right) \left( s_i^a + \sum_{k=1,2} s_k^b W(|h_k^b - h_i^a|) \right)^{-1}, \\ \tilde{\rho}_i^b &= \left( \rho_i^b s_i^b + \sum_{k=1,2} \rho_k^a s_k^a W(|h_k^a - h_i^b|) \right) \left( s_i^b + \sum_{k=1,2} s_k^a W(|h_k^a - h_i^b|) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (24)$$

При докритических условиях ( $P < P_c$ ) аппроксимации (24) совпадают с (21). Действительно, пусть точки  $O_a, O_b$ , соответствующие параметрам в ячейках, располагаются в области двухфазных состояний III так, как показано на рисунке. В этом случае параметрам фаз  $P^\alpha, h_i^\alpha$  в ячейке  $\alpha = a, b$  отвечают точки  $L_\alpha, G_\alpha$  [7]. Абсциссы точек  $L_a$  и  $L_b$  ( $G_a$  и  $G_b$ ) находятся близко друг к другу, то есть энтальпии жидких (газовых) фаз в различных ячейках приблизительно равны. Следовательно, выбирая подходящим образом параметры  $h_{\min}, h_{\max}$  для рассматриваемых точек  $O_a, O_b$ , можно добиться выполнения условий:



$$W(|h_1^a - h_1^b|) = 1, \quad W(|h_2^a - h_1^b|) = 0, \quad W(|h_1^a - h_2^b|) = 0, \quad W(|h_2^a - h_2^b|) = 1. \quad (25)$$

Подставляя равенства (25) в (24), получаем аппроксимацию (21).

Рассмотрим теперь поведение соотношений (24) при околоскритических условиях. Зафиксируем положение точки  $O_a$ , а для другой выполним условие  $O_b = L_b$ . Тогда, согласно (25), справедливы равенства  $W(|h_1^a - h_1^b|) = 1$ ,  $W(|h_2^a - h_1^b|) = 0$ , и аппроксимации (24) сводятся к (21). Перемещаем точку  $O_b$  по линии  $L_b L_1 C_b G_1 G_b$ . Вследствие непрерывности весовой функции  $W(h)$  соотношения (24) непрерывным образом переходят из аппроксимации (22) при  $O_b = L_b$  ( $O_b = L_1$ ) в аппроксимацию (23) при  $O_b = G_b$  ( $O_b = G_1$ ), когда выполняются равенства  $W(|h_1^a - h_1^b|) = 0$ ,  $W(|h_2^a - h_1^b|) = 1$ . Здесь единственная фаза компоненты  $c_1$  в ячейке  $b$  непрерывным образом переходит из жидкого ( $i = 1$ ) в газовое состояние ( $i = 2$ ), а функции  $\tilde{\rho}_i^a$  в (24) не имеют разрыва. Таким образом, при околоскритических условиях аппроксимация (24), в отличие от (21), задаёт плотности на гранях  $\tilde{\rho}_i^a$  непрерывным образом и позволяет улучшить сходимость вычислительных алгоритмов при моделировании фильтрации.

Выбор энтальпии  $h$  в качестве аргумента весовой функции  $W$  не является обязательным. Для определения соответствия между фазами в различных ячейках можно в качестве аргумента использовать другие термодинамические параметры, например, плотность  $\rho$  (см. изолинии на рисунке).

### 3.3. Масштабирование ОФП при критических условиях

Относительные фазовые проницаемости (ОФП) служат интегральными характеристиками фильтрационного течения, зависящими как от свойств смеси, так и от свойств породы. Кривые ОФП на плоскости  $(s, f)$  деформируются, если давление, температура и, следовательно, теплофизические свойства смеси и поверхностные свойства гранул породы существенно изменяются. Согласно работе [14] при околоскритических условиях относительная проницаемость фазы  $f_i$  должна равняться насыщенности этой фазы  $s_i$  (12).

Покажем, что если в окрестности критической точки  $C$  компоненты  $c_1$  функций  $f_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)}$  (см. (10), (13)) не равны (12), то в критической точке потоки (19) имеют особенность, что может привести к замедлению или отсутствию сходимости вычислительного алгоритма. Не ограничивая общности, предположим, что насыщенность фазы  $i = 3$  равна нулю ( $s_3 = 0$ ), тогда кривые ОФП для двухфазного  $E(1-2)$  течения компоненты  $c_1$  имеют вид (10). Примем, что параметрам  $P$ ,  $h_m$  в выделенной точке пространства  $\mathbf{r}$  на фазовой диаграмме соответствует критическая точка  $C$  (см. рисунок). Значит, термодинамическое равновесие компоненты  $c_1$  можно рассматривать как однофазное состояние за критического флюида или как вырождение двухфазного состояния. В первом случае ОФП единственной фазы равновесия равняется единице. Во втором случае параметры обеих фаз  $i = 1, 2$  компоненты  $c_1$  совпадают, поэтому их насыщенности не определяются однозначно: могут быть выбраны любые их значения  $0 \leq s_i \leq 1$  ( $i = 1, 2$ ), удовлетворяющие условию  $s_1 + s_2 = 1$ . Для обеспечения непрерывности потоков (19) необходимо потребовать, чтобы их значения, отвечающие обоим случаям, были одинаковыми. Согласно (1)–(4), этого можно добиться, только если для любого  $s_l$  выполняется равенство  $f_l^{(1)}(s_l) + f_g^{(1)}(s_l) = 1$ . Следовательно, в соответствии с работой [14], естественно считать  $f_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)}$  линейными функциями насыщенностей (12).

Для того чтобы при докритических условиях ОФП  $f_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)}$  имели заданный для рассматриваемого флюида и породы вид, а при критических условиях  $f_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)}$  были линейными функциями, выполним их масштабирование в окрестности критической точки  $C$ :  $f_l^{(1)}(s_l) = W_{12}s_l + (1 - W_{12})\bar{f}_l^{(1)}(s_l)$ ,  $f_g^{(1)}(s_l) = W_{12}(1 - s_l) + (1 - W_{12})\bar{f}_g^{(1)}(s_l)$ , где параметр  $W_{12} = W(|h_2 - h_1|)$ , а функции  $\bar{f}_l^{(1)}$ ,  $\bar{f}_g^{(1)}$  есть заданные относительные фазовые проницаемости при докритических условиях. При критических условиях величина  $|h_2 - h_1|$  мала, поэтому, согласно определению весовой функции  $W(h)$ ,  $W_{12} = 1$ , а функции  $f_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)}$  ведут себя линейно. При докритических условиях величина  $|h_2 - h_1|$  относительно велика, поэтому  $W_{12} = 0$ , а  $f_l^{(1)} = \bar{f}_l^{(1)}$ ,  $f_g^{(1)} = \bar{f}_g^{(1)}$ .

#### 4. Заключение

Предложена математическая модель неизотермической фильтрации бинарной смеси. Модель позволяет исследовать многофазные течения смеси при до- и закритических условиях с учётом как двухфазных термодинамических равновесий типа жидкость–газ, жидкость–жидкость, так и трёхфазных равновесий типа жидкость–газ–жидкость. Сформулирована полная система уравнений модели в случае, когда одной из независимых переменных является энтальпия.

Исследованы конечно-разностные аппроксимации потоков при околоскритических условиях. Показано, что классические аппроксимации могут приводить к замедлению или отсутствию сходимости алгоритмов численного моделирования фильтрации. Для улучшения сходимости предложено обобщение классической аппроксимации, которое основано на введении весовой функции, дающей возможность проводить сравнение параметров фаз в различных ячейках расчётной сетки.

Рассмотрена проблема определения относительных фазовых проницаемостей при околоскритических условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (контракт № 07.514.11.4157).

#### Литература

1. Pruess K., Spycher N. ECO2N - A fluid property module for the TOUGH2 code for studies of CO<sub>2</sub> storage in saline aquifers // *Energ. Convers. Manage.* – 2007. – V. 48, N. 6. – P. 1761-1767. [DOI](#)
2. TOUGH2 User's Guide, Version 2.1: Report (revised) / Lawrence Berkeley National Laboratory: Pruess K., et al. – Berkeley, Calif., U.S., 2011. – 214 p. – LBNL-43134.
3. Croucher A.E., O'Sullivan M.J. Application of the computer code TOUGH2 to the simulation of supercritical conditions in geothermal system // *Geothermics.* – 2008. – V. 37, N. 6. – P. 622-634. [DOI](#)
4. Aziz K., Settari A. Petroleum Reservoir Simulation. – London – NY: Applied Science Publishers, 1979. – 476 p.
5. Coats K.H. An equation of state compositional model // *SPE Journal.* – 1980. – V. 20, N. 5. – P. 363-376. [DOI](#)
6. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. О математическом моделировании многофазной фильтрации при околоскритических условиях // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1.* – 2013. – В печати.
7. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. Об одном методе расчёта теплофизических свойств при до- и закритических условиях // *Физ.-хим. кин. в газ. динамике.* – 2013. – Том. 14. (URL: <http://www.chemphys.edu.ru/media/files/2013-04-04-001.pdf>)
8. Труфанов Н.А. О направлениях развития вычислительной механики сплошных сред на примере анализа публикаций одного журнала // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 4. – С. 114-124. [DOI](#)
9. Гришин А.М., Зинченко В.И., Ефимов К.Н., Якимов А.С. Применение итерационно-интерполяционного метода для решения задач математической физики // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 57-65. [DOI](#)
10. Цыпкин Г.Г. Математическая модель фазовых переходов вода–пар в гидротермальных пластах // *МЖГ.* – 1994. – № 6. – С. 98-105.
11. Stone H.L. Estimation of three-phase relative permeability and residual oil data // *J. Can. Petrol. Technol.* – 1973. – V. 12, N. 4. – P. 53-61. [DOI](#)
12. Guide to the revised ground-water flow and heat transport simulator: HYDROTHERM — Version 3: Report / U.S. Geological Survey: Kipp K.L., Hsieh P.A., Charlton S.R. – U.S. Geological Survey Techniques and Methods, U.S., 2008. – 160 p. – Report N. 6-A25.
13. <http://www.slb.com/services/software/reseng/eclipse.aspx> (дата обращения: 19.06.2013).
14. Schechter D.S., Haynes J.M. Relative permeabilities of a near critical binary fluid // *Transport Porous Med.* – 1992. – V. 9, N. 3. – P. 241-260. [DOI](#)

Поступила в редакцию 01.04.2013; опубликована в электронном виде 15.07.13

---

#### Сведения об авторах

Афанасьев Андрей Александрович, кфмн, внс, Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова (МГУ ИМех), вед. инж.-расчетчик ЗАО «Т-Сервисы», 119192, Москва, Мичуринский проспект, д. 1; E-mail: afanasjev@yandex.ru  
Мельник Олег Эдуардович, дфмн, член-корр. РАН, зав.лаб., МГУ ИМех, научн. рук. центра вычислительной экспертизы ЗАО «Т-Сервисы»; E-mail: Oleg.Melnik@t-services.ru