

DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.4.46

УДК 532.546, 51.37

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ ПРИ ПОДЗЕМНОМ ЗАХОРОНЕНИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

А.А. Афанасьев^{1,2}, О.Э. Мельник^{1,2}, Ю.Д. Цветкова¹¹Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²ЗАО «Т-Сервисы», Москва, Россия

Рассмотрена задача закачки углекислого газа в водонасыщенный проницаемый пласт. Методами прямого численного моделирования определена граница области, занимаемой CO₂ в пласте при различных параметрах нагнетания. Проведено сравнение результатов трёхмерных расчётов по полной модели фильтрации с приближённым автомодельным решением задачи. Установлены условия применимости автомодельной асимптотики. Исследована производительность вычислений и дана оценка эффективности распараллеливания алгоритмов численного моделирования.

Ключевые слова: подземное захоронение, численное моделирование, параллельные вычисления, фильтрация, многофазное течение

MODELING OF FLOWS IN POROUS MEDIA RELATED TO UNDERGROUND CARBON DIOXIDE STORAGE USING HIGH PERFORMANCE COMPUTING SYSTEMS

A.A. Afanasyev^{1,2}, O.E. Melnik^{1,2} and Yu.D. Tsvetkova¹¹Institute of Mechanics of Moscow State University, Moscow, Russia²ZAO "T-Services", Moscow, Russia

In this work, the problem of carbon dioxide injection into a water saturated permeable layer is investigated. Using direct numerical simulations, we evaluate the CO₂ plume extension in the layer for different parameters of injection. The simulation results obtained for the complete mathematical model are compared with the approximate self-similar solution of the problem. The conditions of applicability of the self-similar asymptotics are determined. The computational capability of the model and the parallel efficiency of numerical simulations are estimated.

Key words: underground storage, numerical modelling, parallel simulations, flows in porous media, multiphase flows

1. Введение

В последнее десятилетие интенсивно исследуются проблемы, связанные с подземным захоронением углекислого газа (CO₂) [1–3]. Цель захоронения заключается в снижении выбросов парниковых газов, в частности CO₂, в атмосферу и, таким образом, в замедлении развития глобального потепления на Земле. Возможные источники CO₂ — промышленные предприятия и теплоэлектростанции, а также, как в наиболее крупномасштабном действующем проекте захоронения в геологической формации Sleipner [4], этот газ является побочным продуктом при разработке месторождений углеводородов. В данном случае растворённый в нефти CO₂ извлекают из недр и после отделения от него полезных углеводородных компонентов газ не выбрасывают в атмосферу, а закачивают обратно в водонасыщенные породы для захоронения.

Закачка углекислого газа в недра сопряжена с рисками загрязнения атмосферы, обусловленными возможной утечкой CO₂ через проницаемые породы и геологические разломы поверхности Земли. Для определения наиболее вероятных направлений течения CO₂ и оценки рисков проводят математическое моделирование процесса захоронения в рамках уравнений многофазной фильтрации [5, 6]. При этом в модели должны учитываться нелинейные эффекты, обусловленные многофазным характером течения и фазовыми переходами [7, 8]. В результате исследование фильтрации аналитическими методами сопряжено со значительными трудностями, а точные решения задач удаётся построить только при введении предположений, которые зачастую не выполняются в реальных процессах, протекающих в недрах Земли. Например, в работе [9] аналитическое решение задачи, имеющей приложение к захоронению CO₂, получено в сильных предположениях однофазного течения и стремящейся к нулю вязкости воды. Данное решение использовалось для оценки распространения CO₂ в формации Sleipner [10]. В случае применения для описания фильтрации полной модели точных решений задач, связанных с захоронением CO₂, не существует, поэтому для надёжного прогнозирования последствий этого процесса необходимы методы прямого численного моделирования.

Авторами данной работы ранее предложена модель трёхфазной фильтрации [11, 12], описывающая течения в пористой среде с фазами сжиженного и газообразного CO_2 и фазой воды (H_2O). Обсуждались проблемы конечно-разностной аппроксимации уравнений с учётом силы тяжести.

Здесь приводятся и анализируются результаты, которые получены с помощью программы для ЭВМ, разработанной для моделирования трёхфазной фильтрации [11, 12] на высокопроизводительных вычислительных системах. Дополнительно к исследованиям фильтрации даётся оценка эффективности распараллеливания алгоритмов численного моделирования, используемых в созданной программе. Для тестирования программы проведено сравнение численного решения задачи закачки CO_2 в водонасыщенный пласт с приближённым автомодельным решением [9, 10] и продемонстрировано, что решения совпадают, если устремить вязкость воды, в соответствии с постановкой автомодельной задачи, к нулю. Осуществлённые расчёты захоронения в полной постановке, то есть с конечной вязкостью, показали, что скорость распространения CO_2 в недрах, найденная с помощью приближённого аналитического решения, существенно занижена. Таким образом, вязкость воды в задачах захоронения CO_2 играет важную роль, и пренебрегать ею нельзя.

2. Математическая модель

2.1. Законы сохранения

Для описания течений в пористой среде, связанных с закачкой углекислого газа в водонасыщенный пласт, используется математическая модель фильтрации бинарной смеси $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ [11, 12], которая применима к одно-, двух- и трёхфазным течениям сжиженного и газообразного CO_2 и пластовой воды. В настоящей работе исследуются только закритические термодинамические условия для CO_2 [11, 13], при которых возможна лишь одна фаза сверхкритического CO_2 , поэтому уравнения модели формулируются для одно- и двухфазных течений, а трёхфазные течения не рассматриваются.

Предполагается, что различные компоненты бинарной смеси формируют не смешивающиеся друг с другом различные фазы. Первая фаза газовая — CO_2 в закритическом состоянии, а вторая фаза жидкая — H_2O . В данном случае система законов сохранения, описывающих фильтрацию, принимает вид [5, 6, 12]

$$\frac{\partial}{\partial t}(m\rho_1s_1) + \text{div}(\rho_1\mathbf{w}_1) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(m\rho_2s_2) + \text{div}(\rho_2\mathbf{w}_2) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(m\sum_{i=1}^2\rho_i e_i s_i + (1-m)\rho_r e_r\right) + \text{div}\left(\sum_{i=1}^2\rho_i h_i \mathbf{w}_i - \lambda_m \text{grad}T\right) = 0, \quad (3)$$

$$s_1 + s_2 = 1, \quad \lambda_m = m\sum_{i=1}^2 s_i \lambda_i + (1-m)\lambda_r,$$

$$\mathbf{w}_i = -K \frac{f_i}{\mu_i} (\text{grad}P - \rho_i \mathbf{g}) \quad (i=1, 2). \quad (4)$$

Здесь индекс i обозначает параметры фаз — углекислого газа ($i=1$) и воды ($i=2$), а индекс r — параметры материала породы; m — пористость породы; s — насыщенность фаз; ρ — плотность; e — внутренняя энергия, h — энтальпия; \mathbf{w} — скорость фильтрации; λ — коэффициент теплопроводности породы (λ_r) и эффективный в пласте (λ_m); T — пластовая температура; K — проницаемость породы; f — относительная фазовая проницаемость; μ — вязкость; P — пластовое давление; \mathbf{g} — вектор ускорения свободного падения. Уравнения (1), (2) и (3) — это законы сохранения массы CO_2 , массы воды и энергии соответственно, (4) — многофазный закон фильтрации Дарси.

2.2. Уравнения состояния

Теплофизические свойства CO_2 задаются в виде:

$$\rho_1(P, h_1), \quad T(P, h_1), \quad \mu_1(P, h_1), \quad \lambda_1(P, h_1), \quad (5)$$

где h_1 — энтальпия CO_2 , а функции (5) — полиномиальные сплайны, рассчитываемые по кубическому уравнению состояния CO_2 [11].

Свойства воды определяются линейными соотношениями [14, 15]:

$$\begin{aligned} \rho_2(P, T) &= \rho_{2(0)} \left(1 + \alpha(P - P_0) - \beta(T - T_0) \right), \\ h_2 &= C_2 T, \quad \mu_2, \lambda_2 = \text{const}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь: $\rho_{2(0)}$ — плотность при опорных значениях давления и температуры $P = P_0$, $T = T_0$; α — коэффициент сжимаемости; β — коэффициент теплового расширения; C_2 — теплоёмкость при постоянном давлении.

Во многих случаях захоронения углекислый газ находится при окологкритических условиях, и его термодинамические параметры изменяются сложным нелинейным образом [7, 11, 13]. Такое их поведение не может быть описано простыми соотношениями, например типа (6), и требует привлечения более сложных, вообще говоря, итерационных методов расчёта [11], которые и используются в настоящей работе. При этом выбор в (5) энтальпии h_1 в качестве независимой переменной позволяет избежать математических особенностей в критической точке CO_2 [16]. При подземном захоронении вода находится при существенно докритических условиях, поэтому для описания её теплофизических свойств применяются более простые уравнения состояния — (6).

Теплофизические свойства материала породы принимаются в виде

$$e_r = C_r T, \quad \rho_r, \lambda_r = \text{const}, \quad (7)$$

где C_r — теплоёмкость породы.

Относительные фазовые проницаемости являются функциями насыщенности жидкой фазы, то есть воды s_2 [17]

$$f_1 = (1 - s_2^2)(1 - s_2)^2, \quad f_2 = s_2^4. \quad (8)$$

Подставляя уравнения (4)–(8) в (1)–(3) и учитывая термодинамическое соотношение $h_i = e_i + P/\rho_i$, можно получить замкнутую систему трёх уравнений относительно неизвестных

$$P, h_1, s_2. \quad (9)$$

3. О расчёте фильтрации

3.1. Алгоритм расчёта

Для прямого численного моделирования фильтрации, описываемой уравнениями (1)–(8), разработана программа на языке Фортран, позволяющая проводить трёхмерные параллельные расчёты на системах с распределённой памятью. В рамках метода конечных объёмов используется классическая при исследовании течений в пористой среде полностью неявная схема первого порядка точности при аппроксимации по времени и по пространству [5, 8]. Двухточечные аппроксимационные выражения для потоков между смежными ячейками расчётной сетки сформулированы в [12]. На отдельном шаге по времени решение нелинейной системы конечно-разностных уравнений находится в рамках метода Ньютона [18]. На каждой итерации метода коэффициенты матрицы системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вычисляются методом численного дифференцирования в соответствии с математическим определением производной функции нескольких переменных.

Согласно идеям параллельного решения задач механики сплошной среды, сначала проводится декомпозиция расчётной области [19], и затем в каждой из подобластей осуществляется отдельный вычислительный процесс. В частности, нахождение теплофизических свойств смеси $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ и породы, а также линеаризация конечно-разностных уравнений в ячейках каждой подобласти производится в рамках одного процесса. Для коммуникаций используется MPI — наиболее распространённый стандарт интерфейса обмена.

Программа для ЭВМ тестировалась на задачах фильтрации, имеющих аналитическое или численное решение, полученное с помощью существующих пакетов программ [20]. В данной работе результаты расчётов в описанной ниже задаче закачки сравнивались с её автомодельным решением. Тестирование подтвердило корректность программной реализации алгоритма.

3.2. Параметры линейного решателя

При численном моделировании прикладных задач фильтрации на сетках, содержащих $10^5 - 10^7$ ячеек, наиболее трудоёмким является решение СЛАУ, соответствующей линеаризованной системе

конечно-разностных уравнений [19, 21, 22]. Затраты вычислительных ресурсов центрального процессорного устройства (ЦПУ) на данный процесс могут превышать 95%, поэтому эффективность набора процедур для решения СЛАУ, который ниже называется линейным решателем, является критичной. Правильная настройка и распараллеленность линейного решателя может снизить на порядки величину общего времени расчёта фильтрационной задачи.

В программе для ЭВМ решение СЛАУ осуществляется с помощью библиотеки параллельных подпрограмм Aztec [23, 24], которая свободно распространяется в составе пакета Trilinos (разработчик — Национальная лаборатория Сандия, США) [25]. Разреженная матрица представляется в формате MSR. Для решения системы применяется обобщенный метод минимальных невязок GMRES, предобусловленный алгоритмом ILUT. Размерность подпространства Крылова — 30; коэффициент заполнения предобуславливателя — 5; порог отбрасывания ненулевых элементов — 10^{-6} [23, 26]. Перед решением СЛАУ с помощью алгоритмов ILUT и GMRES применяется блочное предобуславливание методом Якоби [23]. Также выполняется обезразмеривание неизвестных, входящих в (9): $\tilde{P} = P/\bar{P}$, $\tilde{h}_1 = h_1/\bar{h}_1$, $\tilde{s}_2 = s_2$, где $\bar{P} = 10^6$ Па, $\bar{h}_1 = 10^6$ Дж/кг. СЛАУ представляется в переменных \tilde{P} , \tilde{h}_1 , \tilde{s}_2 , имеющих один порядок величины, а не в переменных (9), различающихся на 6 порядков. Это повышает скорость сходимости итерационного метода GMRES.

Параметры линейного решателя, которые не описаны выше, приведены в таблице 1. Значения подобраны экспериментально, исходя из результатов серии расчётов задач фильтрации, проведённых с целью определения настроек решателя, минимизирующих затраты ЦПУ на решение СЛАУ. Также учитывались рекомендации авторов работ [23, 27].

Таблица 1. Параметры линейного решателя (описание аббревиатур дано в [23])

Параметр линейного решателя	Значение или библиотечное средство для его определения	Параметр линейного решателя	Значение или библиотечное средство для его определения
solver	gmres	overlap	2
kspace	30	reorder	1
max_iter	300	subdomain_solve	ilut
conv	r0	ilut_fill	5
tol	10^{-6}	ilut_drop	10^{-6}
precond	dom_decomp		

4. Решение задачи закачки углекислого газа

4.1. Постановка задачи

Задача нагнетания углекислого газа в водонасыщенный пласт рассматривается в радиально-симметричной постановке (Рис. 1). Пласт, имеющий толщину H ($z \in [0, H]$), ограничен сверху ($z < 0$) и снизу ($z > H$) непроницаемыми породами, а в горизонтальном направлении имеет бесконечную протяжённость ($r \in [0, +\infty)$). Распределение петрофизических параметров (m и K) предполагается однородным (Табл. 2). В начальный момент времени ($t = 0$) проницаемый резервуар насыщен водой ($s_2 = 1$); температура пласта составляет $T = 40^\circ\text{C}$; давление распределено по гидростатическому закону, причем при $z = H/2$ $P = 15$ МПа. Начальные условия в пласте соответствуют породам, залегающим на глубине 1,5 км.

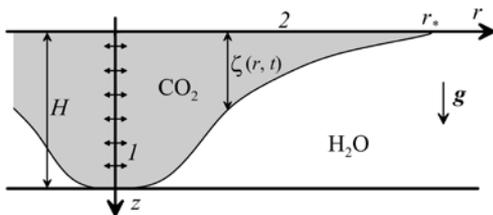


Рис. 1. Схема задачи (выделена область, насыщенная CO_2); r – радиальная координата, z – глубина нагнетания; прямая 1 – нагнетательная скважина, 2 – кровля пласта

Закачка CO_2 в пласт производится с постоянным расходом Q_m (Табл. 3) через вертикальную скважину, с которой совпадает ось r . Температура нагнетаемого CO_2 равняется пластовой температуре $T = 40^\circ\text{C}$. Следовательно, по постановке задача практически является изотермической, а значения параметров ρ_r , C_r , λ_r , C_2 , λ_2 , определяющих распределение температуры, по сути, не влияют на решение (Табл. 2). Незначительное отклонение температуры от начальной $T = 40^\circ\text{C}$ связано с изменением энтальпии углекислого газа при его расширении.

Так как пластовое давление ($P \approx 15$ МПа) выше критического давления газа (7,3 МПа), то в течении присутствует только одна фаза сверхкритического CO_2 [13]. Согласно уравнению состояния [11] при $P \approx 15$ МПа, $T = 40^\circ\text{C}$ плотность углекислого газа ($\rho_1 = 762$ кг/м³) меньше плотности воды (Табл. 2), поэтому CO_2 , как более легкая фаза, всплывает в водонасыщенной пористой среде, растекаясь вдоль непроницаемой кровли (Рис. 1). Таким образом, наибольшая горизонтальная скорость течения CO_2 в пласте достигается именно у кровли. Определение значения этой скорости важно для прогнозирования распространения CO_2 в недрах и оценки возможных последствий захоронения [4, 10].

Таблица 2. Параметры для задачи о закачке CO_2

Характеристики породы			Характеристики насыщающей пласт воды		
Толщина пласта	H , м	50	Коэффициент сжимаемости	α , Па ⁻¹	$4,55 \cdot 10^{-10}$
Пористость	m	0,25	Коэффициент теплового расширения	β , К ⁻¹	$2,78 \cdot 10^{-4}$
Проницаемость	K , м ²	10^{-13}	Опорное давление	P_0 , МПа	15
Плотность	ρ_r , кг/м ³	2500	Опорная температура	T_0 , °C	40
Теплоёмкость	C_r , Дж/(кг·К)	1000	Теплоёмкость	C_2 , Дж/(кг·К)	4207
Коэффициент теплопроводности	λ_r , Вт/(м·К)	2	Коэффициент теплопроводности	λ_2 , Вт/(м·К)	0,62
			Плотность при P_0 и T_0	$\rho_{2(0)}$, кг/м ³	993

4.2. Автомодельное решение

В работах [9, 10] получено приближённое автомодельное решение сформулированной задачи в аналитическом виде. При этом предполагалось, что

- 1) течение изотермическое;
- 2) вытеснение воды углекислым газом носит поршневой характер, то есть в каждой точке пористой среды имеется однофазное состояние H_2O или сверхкритическое состояние CO_2 , а области двухфазной фильтрации не формируются;
- 3) вязкость воды стремится к нулю ($\mu_2 \rightarrow 0$), то есть H_2O создаёт только гидростатическое распределение давления в пласте и не препятствует фильтрации CO_2 .

С учётом данных предположений решение задачи закачки CO_2 задаётся уравнениями

$$r_*(t) = \omega \left(\gamma \frac{Q}{m} \right)^{1/4} \sqrt{t}, \quad \zeta(r, t) = \frac{1}{2} \omega^2 \left(\frac{Q}{m\gamma} \right)^{1/4} \left(1 - \frac{r}{r_*(t)} \right), \quad r \rightarrow r_*(t); \quad (10)$$

$$\omega = \left(\frac{6}{\pi} \right)^{1/4}, \quad \gamma = \frac{K(\rho_2 - \rho_1)g}{m\mu_2}, \quad Q = \frac{Q_m}{\rho_1}.$$

Здесь: $r_*(t)$ — радиус пятна CO_2 на непроницаемой кровле пласта (Рис. 1); $\zeta(r, t)$ — толщина области, насыщенной CO_2 при $r \rightarrow r_*$; $Q = \text{const}$ — объёмный расход, а Q_m — массовый расход CO_2 через скважину; ω , γ — константы. Согласно (10) r_* растёт пропорционально \sqrt{t} , а в фиксированный момент времени ζ есть линейная функция радиуса r .

В дальнейшем рассматриваются два варианта нагнетания при различных расходах CO_2 (Табл. 3). Согласно уравнениям (10) и таблице 2 прямая $z = \zeta(r, t)$ на плоскости $\{r, z\}$ проходит в случае *A* через точку $(0, H/2)$, а в случае *B* — через точку $(0, H)$.

Таблица 3. Скорость нагнетания CO_2

Вариант нагнетания	$z = \zeta(0, t)$	Q , м ³ /с	Q_m , кг/с
<i>A</i>	$H/2$	$0,416 \cdot 10^{-2}$	3,44
<i>B</i>	H	$1,806 \cdot 10^{-2}$	13,76

4.3. Численное решение в полной постановке

В соответствии с постановкой задача обладает симметрией, поэтому достаточно провести численное моделирование течения в области, ограниченной сектором $\pi/2$ радиального угла (Рис. 2). Таким образом, в качестве расчётной области выбирается прямоугольный параллелепипед, одно из вертикальных рёбер которого совпадает с нагнетательной скважиной I (и осью z). Оси x и y направлены по взаимно перпендикулярным горизонтальным рёбрам параллелепипеда. Размеры области вдоль осей x и y одинаковые — $L=1775$ м, а её высота равна H . На границах $x=L$ и $y=L$ для давления выполняются условия гидростатического равновесия, а температура поддерживается равной начальной $T=40^\circ\text{C}$. Границы $x=0$, $y=0$, $z=0$ и $z=H$ — непроницаемые и теплоизолированные.

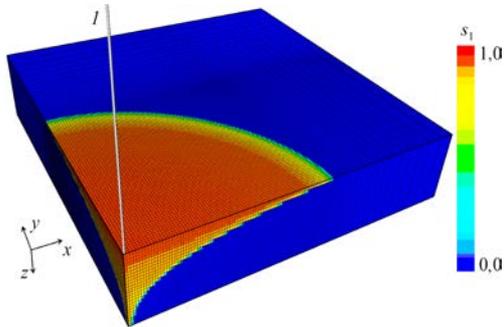


Рис. 2. Трёхмерная визуализация (в перспективе) расчётной области и сетки; распределение CO_2 (насыщенность s_1) отвечает нагнетанию A с сеткой III в момент времени $t=12000$ дней (масштаб вдоль оси z увеличен в 7,5 раз)

Число ячеек вдоль оси z равнялось 25, а в горизонтальных направлениях разрешение сетки варьировалось. Рассмотрены сетки, состоящие из ячеек ($x \times y \times z$): I — $25 \times 25 \times 25$, II — $50 \times 50 \times 25$, III — $100 \times 100 \times 25$, IV — $200 \times 200 \times 25$. В области закачки CO_2 ($x, y \in [0, 1000]$ м) применяется равномерная сетка,

а на периферии ($x, y > 1000$ м) размер ячеек увеличивается по мере удаления от нагнетательной скважины (Рис. 2). Границы области, насыщенной CO_2 , совпадают для всех сеток $I - IV$, что подтверждает сеточную независимость численного решения.

На рисунке 3 представлены результаты для вариантов нагнетания A и B (см. Табл. 3). Сначала рассматривался случай малой вязкости воды $\mu_2 \rightarrow 0$ (Рис. 3, a, ϵ), соответствующий предположениям, при которых получено автомодельное решение. В расчёте, согласно закону Дарси (4), нельзя положить $\mu_2 = 0$, поэтому берётся вязкость $\mu_2 = 6,53 \cdot 10^{-5}$ кг/(м·с), что в 10 раз меньше вязкости воды ($6,53 \cdot 10^{-4}$ кг/(м·с)) при рассматриваемых пластовых условиях $P \approx 15$ МПа, $T = 40^\circ\text{C}$ [15]. Радиус пятна CO_2 на кровле r_* и функция $\zeta(r, t)$, описывающая границу области насыщения CO_2 при $r \rightarrow r_*$, установленные при численном и автомодельном решениях, совпадают. Этим подтверждается корректность разработанной программы для ЭВМ. При $r \rightarrow 0$ решения не обязаны совпадать в силу того, что уравнения (10) асимптотические ($r \rightarrow r_*$) [9, 10].

На рисунках 3, b, z приведены результаты расчётов для реальной вязкости воды $\mu_2 = 6,53 \cdot 10^{-4}$ кг/(м·с), то есть $\mu_2 \not\rightarrow 0$. При этом CO_2 растекается по кровле пласта намного быстрее, чем это предсказывается автомодельной асимптотикой. Вытеснение воды углекислым газом не является поршневым: в области распределения CO_2 насыщенность воды не равна нулю, поэтому формируется двухфазное течение.

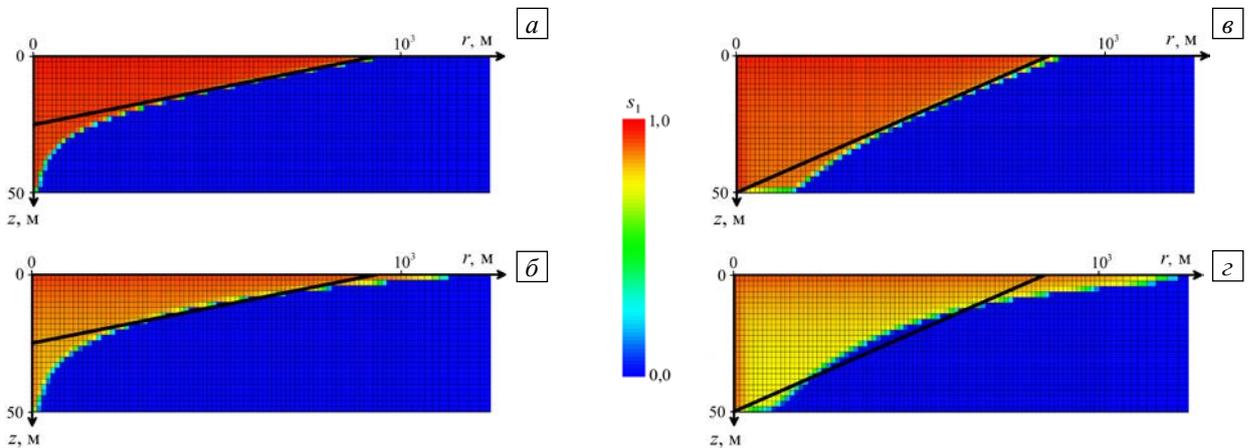


Рис. 3. Насыщенность CO_2 (s_1) при различных вариантах нагнетания: вариант A , насыщенность через $t=15000$ дней при $\mu_2 \rightarrow 0$ (a), при $\mu_2 \not\rightarrow 0$ ($б$); вариант B , насыщенность через $t=6000$ дней при $\mu_2 \rightarrow 0$ ($в$), при $\mu_2 \not\rightarrow 0$ ($г$); прямая линия ограничивает область CO_2 в автомодельном решении

Таким образом, обсуждаемые решения существенно различаются. Это связано с тем, что предположения, при которых получена автомодельная асимптотика (10) (см. подраздел 4.2), нарушаются и, в частности, нельзя пренебрегать вязкостью воды. Действительно, в пластовых условиях $\mu_2/\mu_1 > 1$ [1–4], а объёмы CO_2 и H_2O , перемещаемые в результате закачки, одинаковы (одна жидкость вытесняет другую). Так как вязкость велика во всём объёме перемещаемой жидкости, то вязкими эффектами в области H_2O можно пренебречь только при условии $\mu_2/\mu_1 \ll 1$. Однако данное неравенство в реальных процессах не выполняется [1–4].

Из анализа рисунка 3 следует, что автомодельное решение не работает в важных для практических приложений вариантах нагнетания. В частности, оно даёт существенно недооцененную (в полтора раза, см. Рис. 3, 2) скорость распространения CO_2 в пласте. Кроме того, в реальных течениях важную роль играют эффекты, связанные с растворимостью CO_2 в воде [7] и с остаточной насыщенностью H_2O , приводящей к двухфазному течению смеси. Роль гидродинамической неустойчивости фронта вытеснения, о которой упоминается в [10], по-видимому, вторична (Рис. 2). Отмеченные эффекты относительно легко могут быть учтены в численной модели, но не в аналитическом решении.

5. Исследование масштабируемости

Для определения зависимости производительности разработанной программы для ЭВМ от числа параллельно работающих процессов p проведена серия расчётов задачи закачки CO_2 на различных сетках (Табл. 4). В вычислительных экспериментах использовался многопроцессорный комплекс, произведённый компанией Т-Платформы. Кластер имеет 70 узлов по 24 ядра на основе процессоров Intel Xeon 5472 Nagregtown (тактовая частота 3,0 ГГц), объединённых через локальную сеть Infiniband.

В таблице 4 приведено время работы ЦПУ, затраченное на численное решение задачи на отрезке времени $t \in [7000, 8000]$ дней при параметрах нагнетания A и меньшей в 10 раз по сравнению с реальной вязкости воды. Данное время содержит в себе как затраты непосредственно на расчёт течения, так и на инициализацию вычислительной задачи, загрузку начальных условий при $t = 7000$ дней и выгрузку результатов при $t = 8000$ дней. При каждом числе ячеек сеток $I - IV$ используются одинаковые настройки программы для ЭВМ; в частности, максимальный шаг по времени ограничен величиной 50–100 дней.

Таблица 4. Время расчёта t , с при различном числе процессов

Сетка Число процессов p	I ($25 \times 25 \times 25$)	II ($50 \times 50 \times 25$)	III ($100 \times 100 \times 25$)	IV ($200 \times 200 \times 25$)
1	162	1026	6822	–
2	93	532	3260	–
4	58	311	1785	–
8	39	205	1212	–
16	22	119	628	–
24	18	88	475	8332
32	14	75	382	6067
48	–	55	272	4328
64	–	44	205	3462
96	–	36	166	2622
128	–	–	140	2145
144	–	–	127	1894
160	–	–	119	1730

Применяется декомпозиция расчётной области на прямоугольные подобласти, число которых вдоль осей x и y задаётся как можно более близким друг другу. Разбиение по оси z отсутствует. Например, при распараллеливании на 160 процессов используется декомпозиция $16 \times 10 \times 1$, то есть 16 (или 10) подобластей вдоль оси x (или y), а при 144 процессах — $12 \times 12 \times 1$. В случае сетки IV расчёты при $p < 24$ не проводились из-за ограничений оперативной памяти: настройки линейного решателя настолько ресурсоёмки (см. Табл. 1), что её объём недостаточен.

Обозначим: τ_p — время счёта при разбиении задачи на p процессов, $S_p = \tau_1/\tau_p$ — ускорение, а $E_p = S_p/p$ — эффективность распараллеливания. Величину S_p часто описывают законом Амдала [28]:

$$S_p = (\chi + (1-\chi)/p)^{-1}, \tag{11}$$

где χ — доля нераспараллеленных операций.

На рисунке 4, *a* точками показано достигнутое ускорение в соответствии с таблицей 4. Для каждой из сеток *I–IV* построена регрессия (сплошные линии, Рис. 4, *a*) в виде функции (11). Доля последовательных вычислений χ (Рис. 4, *б*) составляет: *I* — 6,65%; *II* — 2,92%; *III* — 1,26%; *IV* — 0,68%. Возрастание количества параллельных операций и, следовательно, ускорения S_p при увеличении числа ячеек сетки N связано с уменьшением доли затрат на пересылку информации между процессами в более сложной вычислительной задаче [19].

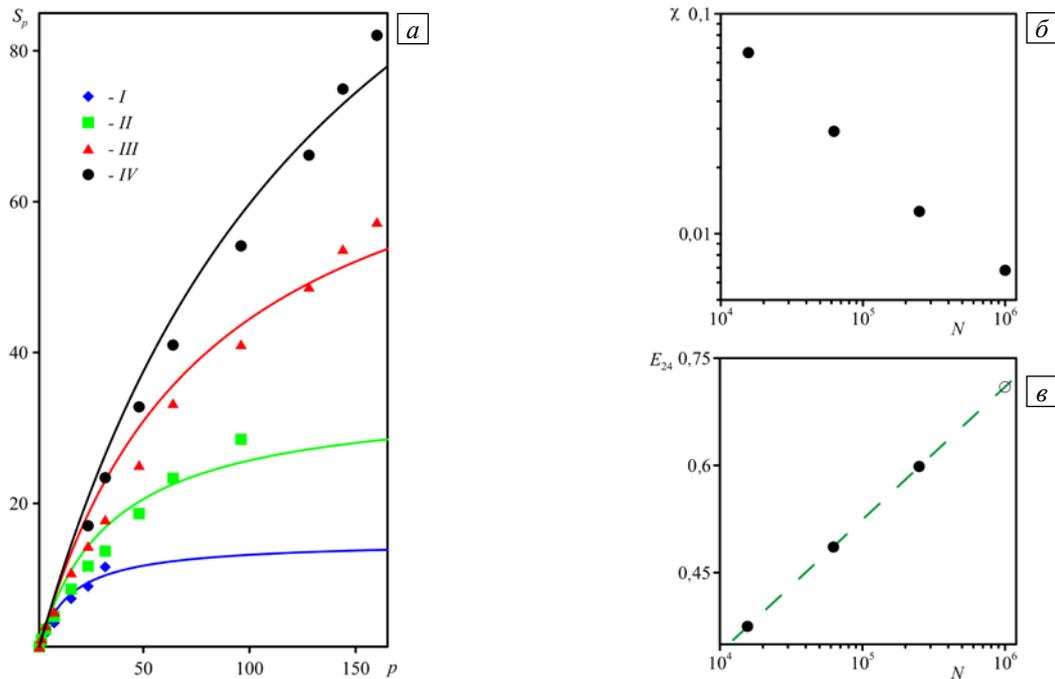


Рис. 4. Зависимость ускорения S_p от числа процессов (*a*); доля последовательных операций χ (*б*) и эффективность распараллеливания E_{24} (*в*) как функция числа ячеек N

Согласно таблице 4 в случаях *I – III* эффективность распараллеливания E_{24} при использовании 24 процессов вычисляется явно (*I* — $E_{24} = 37,5\%$, *II* — $E_{24} = 48,6\%$, *III* — $E_{24} = 59,8\%$). Для рассматриваемой задачи величина E_{24} с хорошей точностью аппроксимируется линейной функцией логарифма числа ячеек $\lg N$ (Рис. 4, *в*), с учётом которой получается оценка E_{24} для сетки *IV* ($E_{24} = 71,0\%$; выколотая точка). Учитывая это значение, величину ускорения S_p для сетки *IV* можно найти по формуле $S_p = 24E_{24}(\tau_{24}/\tau_p)$, где τ_{24} — время расчёта при распараллеливании на 24 процесса.

Проведённое исследование подтверждает хорошую масштабируемость алгоритмов расчёта фильтрации. В частности, для сетки, содержащей 10^6 ячеек (случай *IV*), можно получить ускорение в 60 раз при распараллеливании на 100 процессов. Вместе с тем следует отметить, что полученные экспериментальные точки для ускорения (Рис. 4, *a*) довольно плохо удовлетворяют закону Амдала (11). Вероятно, это можно объяснить тем, что, во-первых, декомпозиция расчётной области не оптимизируется. На различные процессы приходится, вообще говоря, различное количество ячеек, а число граничных ячеек [23], для которых необходимо выполнять пересылку информации между процессами, не минимизируется. Разброс точек в окрестности кривых (11) связан с тем, что некоторые из разбиений не оптимальны. Для улучшения качества декомпозиции необходимо применять более совершенные методы [29]. Во-вторых, на практике нельзя провести чёткое разделение вычислительного алгоритма на последовательные и параллельные процедуры. По-видимому, корректнее рассматривать процедуры с различной степенью распараллеленности и использовать более сложное, чем (11), соотношение для оценки производительности [28].

6. Заключение

Проведено трёхмерное исследование закачки углекислого газа в водонасыщенный пласт с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. Сравнение результатов расчёта с приближённым автомоделным решением, описывающим течение в пласте, подтвердило корректность разработанной программы для моделирования фильтрации. Показано, что автомоделное решение даёт существенно заниженную оценку для скорости распространения углекислого газа в пласте при значимых для практических приложений условиях. Для различных сеток оценена масштабируемость алгоритмов расчёта. Показано, что эффективность распараллеливания на 100 процессов достигает 60%.

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

Литература

1. Michael K., Golab A., Shulakova V. et al. Geological storage of CO₂ in saline aquifers – A review of the experience from existing storage operations // Int. J. Greenh. Gas Con. – 2010. – V. 4, N. 4. – P. 659-667. DOI
2. Würdemann H., Möller F., Kühn M. et al. CO₂SINK – From site characterisation and risk assessment to monitoring and verification: One year of operational experience with the field laboratory for CO₂ storage at Ketzin, Germany // Int. J. Greenh. Gas Con. – 2010. – V. 4, N. 6. – P. 938-951. DOI
3. Special report on carbon dioxide capture and storage // Technical report, Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). – Cambridge: Cambridge Univ Press, 2005. – 443 p. (URL: <http://www.ipcc-wg3.de/special-reports/files-images/SRCCS-WholeReport.pdf>).
4. Singh V., Cavanagh A., Hansen H. et al. Reservoir modeling of CO₂ plume behavior calibrated against monitoring data from Sleipner, Norway // Society of Petroleum Engineers. – 2010. – paper SPE-134891-MS. – 18 p. DOI
5. Aziz K., Settari A. Petroleum reservoir simulation. – London–NY: Applied Science Publishers, 1979. – 476 p.
6. Баренблат Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Движение жидкостей и газов в природных пластах. – М.: Недра, 1984. – 208 с.
7. Pruess K., Spycher N. ECO2N – A fluid property module for the TOUGH2 code for studies of CO₂ storage in saline aquifers // Energ. Convers. Manage. – 2007. – V. 48, N. 6. – P. 1761-1767. DOI
8. TOUGH2 User's Guide, Version 2.1: Report (revised) / K. Pruess et al. – Berkeley, Calif., U.S.: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2011. – 214 p. – LBNL-43134.
9. Lyle S., Huppert H.E., Hallworth M. et al. Axisymmetric gravity currents in porous medium // J. Fluid Mech. – 2005. – V. 543. – P. 293-302. DOI
10. Bickle M., Chadwick A., Huppert H.E. et al. Modelling carbon dioxide accumulation at Sleipner: Implications for underground carbon storage // Earth Planet. Sc. Lett. – 2007. – V. 255, N. 1-2. – P. 164-176. DOI
11. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. Об одном методе расчёта теплофизических свойств при до- и закритических условиях // Физ.-хим. кин. в газ. динамике. – 2013. – Т. 14. (URL: <http://istina.msu.ru/publications/article/4786108/>).
12. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. О построении конечно-разностной схемы расчёта фильтрации при околокритических термодинамических условиях // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2013. – Т. 6, № 2 – С. 246-255. DOI
13. Алтунин В.В. Теплофизические свойства двуокиси углерода. – М.: Издательство стандартов, 1975. – 546 с.
14. Афанасьев А.А., Бармин А.А. Нестационарные одномерные фильтрационные течения воды и пара с учётом фазовых переходов // МЖГ. – 2007. – № 4. – С. 134-143.
15. Ривкин С.Л., Александров А.А. Теплофизические свойства воды и водяного пара. – М.: Энергия, 1980. – 424 с.
16. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. О математическом моделировании многофазной фильтрации при околокритических условиях // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1. Математика, механика. – 2013. – № 3. – С. 68-72.
17. Brooks R.H., Corey A.T. Hydraulic properties of porous media // Hydrol. Papers. – Fort Collins, Colorado: Colorado State University, 1964. – N. 3. – 37 p.
18. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 424 с.
19. Кудряшов И.Ю., Максимов Д.Ю. Моделирование задач многофазной многокомпонентной фильтрации на многопроцессорных вычислительных комплексах: Препр. / ИПМ им. М.В. Келдыша. – М., 2009. – № 68. – 25 с. (URL: http://www.keldysh.ru/papers/2009/prep68/prep2009_68.pdf).
20. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. Численное моделирование трёхфазной фильтрации при закачке углекислого газа в водонасыщенный пласт // Физ.-хим. кин. в газ. динамике. – 2013. – Т. 14. (URL: <http://istina.msu.ru/publications/article/4786125/>).
21. Коновалов А.В., Толмачев А.В., Партин А.С. Параллельное решение упругопластической задачи с применением трехдиагонального алгоритма LU-разложения из библиотеки ScaLAPACK // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2011. – Т. 4, № 4. – С. 34-41. DOI
22. Борисов В.Е., Савенков Е.Б. Численное исследование метода преобуславливания Generalized Nested Factorization для промышленных задач пластовой фильтрации: Препр. / ИПМ им. М.В. Келдыша. – М., 2013. – № 12. – 18 с. (URL: http://www.keldysh.ru/papers/2013/prep2013_12.pdf).
23. Official Aztec User's Guide. Version 2.1: Report / Sandia National Laboratories: Tuminaro R.S., Heroux M., Hutchinson S.A., Shadid J.N. – Albuquerque, NM, U.S., 1999. – 63 p. – SAND99-8801J.
24. URL: <http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html> (дата обращения: 21.10.2013).
25. URL: <http://trilinos.sandia.gov/> (дата обращения: 21.10.2013).
26. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. – SIAM, Philadelphia, PA, US, 2000.
27. Saad Y. ILUT: A dual threshold incomplete LU factorization // Numer. Linear Algebr. – 1994. – V. 1, N. 4. – P. 387-402. DOI

28. *Amdahl G.M.* Validity of the single processor approach to achieving large-scale computing capabilities // AFIPS'67 Conf. Proc. NY, USA, April 18-20, 1967. – P. 483-485. DOI
29. *Karypis G., Kumar V.* A fast and highly quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM J. Sci. Comput. – 1999. – V. 20, N. 1. – P. 359-392. DOI

References

1. *Michael K., Golab A., Shulakova V. et al.* Geological storage of CO₂ in saline aquifers – A review of the experience from existing storage operations // Int. J. Greenh. Gas Con. – 2010. – V. 4, N. 4. – P. 659-667. DOI
2. *Würdemann H., Möller F., Kühn M. et al.* CO₂SINK – From site characterisation and risk assessment to monitoring and verification: One year of operational experience with the field laboratory for CO₂ storage at Ketzin, Germany // Int. J. Greenh. Gas Con. – 2010. – V. 4, N. 6. – P. 938-951. DOI
3. Special report on carbon dioxide capture and storage // Technical report, Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). – Cambridge: Cambridge Univ Press, 2005. – 443 p. (URL: <http://www.ipcc-wg3.de/special-reports/.files-images/SRCCS-WholeReport.pdf>).
4. *Singh V., Cavanagh A., Hansen H. et al.* Reservoir modeling of CO₂ plume behavior calibrated against monitoring data from Sleipner, Norway // Society of Petroleum Engineers. – 2010. – paper SPE-134891-MS. – 18 p. DOI
5. *Aziz K., Settari A.* Petroleum reservoir simulation. – London–NY: Applied Science Publishers, 1979. – 476 p.
6. *Barenblat G.I., Entov V.M., Ryzhik V.M.* Dvizhenie zhidkosti i gazov v prirodnykh plastakh. – M.: Nedra, 1984. – 208 s.
7. *Pruess K., Spycher N.* ECO₂N – A fluid property module for the TOUGH2 code for studies of CO₂ storage in saline aquifers // Energ. Convers. Manage. – 2007. – V. 48, N. 6. – P. 1761-1767. DOI
8. TOUGH2 User's Guide, Version 2.1: Report (revised) / K. Pruess et al. – Berkeley, Calif., U.S.: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2011. – 214 r. – LBNL-43134.
9. *Lyle S., Huppert H.E., Hallworth M. et al.* Axisymmetric gravity currents in porous medium // J. Fluid Mech. – 2005. – V. 543. – P. 293-302. DOI
10. *Bickle M., Chadwick A., Huppert H.E. et al.* Modelling carbon dioxide accumulation at Sleipner: Implications for underground carbon storage // Earth Planet. Sc. Lett. – 2007. – V. 255, N. 1-2. – P. 164-176. DOI
11. *Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E.* Ob odnom metode rascheta teplofizicheskikh svoystv pri do- i zakriticheskikh usloviyakh // Fiz.-khim. kin. v gaz. dinamike. – 2013. – T. 14. (URL: <http://istina.msu.ru/publications/article/4786108/>).
12. *Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E.* O postroenii konechno-raznostnoi skhemy rascheta fil'tratsii pri okolo-kriticheskikh termodinamicheskikh usloviyakh // Vychisl. mekh. splosh. sred. – 2013. – T. 6, N. 2 – S. 246-255. DOI
13. *Altunin V.V.* Teplofizicheskie svoystva dvuokisi ugleroda. – M.: Izdatel'stvo standartov, 1975. – 546 s.
14. *Afanas'ev A.A., Barmin A.A.* Unsteady one-dimensional water and steam flows through a porous medium with allowance for phase transitions // Fluid Dyn. – V. 42, N. 4. – P. 627-636. DOI
15. *Rivkin S.L., Aleksandrov A.A.* Teplofizicheskie svoystva vody i vodianogo para. – M.: Energiia, 1980. – 424 s.
16. *Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E.* Mathematical modeling of multiphase seepage under near-critical conditions // Mosc. Univ. Math. Bull. – 2013. – V. 68, N. 3. – P. 76-79. DOI
17. *Brooks R.H., Corey A.T.* Hydraulic properties of porous media // Hydrol. Papers. – Fort Collins, Colorado: Colorado State University, 1964. – N. 3. – 37 p.
18. *Samarskii A.A., Popov Iu.P.* Raznostnye metody resheniya zadach gazovoi dinamiki. – M.: Editorial URSS, 2004. – 424 s.
19. *Kudriashov I.Iu., Maksimov D.Iu.* Modelirovanie zadach mnogofaznoi mnogokomponentnoi fil'tratsii na mnogoprotessornykh vychislitel'nykh kompleksakh: Prepr. / IPM im. M.V. Keldysha. – M., 2009. – N. 68. – 25 s. (URL: http://www.keldysh.ru/papers/2009/prep68/prep2009_68.pdf).
20. *Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E.* Chislennoe modelirovanie trekhfaznoi fil'tratsii pri zakachke uglekislogo gaza v vodonasyschennyi plast // Fiz.-khim. kin. v gaz. dinamike. – 2013. – T. 14. (URL: <http://istina.msu.ru/publications/article/4786125/>).
21. *Konovalov A.V., Tolmachev A.V., Partin A.S.* Parallelnoe reshenie uprugoplasticheskoi zadachi s primeneniem trekhdiagonal'nogo algoritma LU-razlozheniya iz biblioteki ScaLAPACK // Vychisl. mekh. splosh. sred. – 2011. – T. 4, N. 4. – S. 34-41. DOI
22. *Borisov V.E., Savenkov E.B.* Chislennoe issledovanie metoda predobuslavlivaniya Generalized Nested Factorization dlia promyshlennykh zadach plastovoi fil'tratsii: Prepr. / IPM im. M.V. Keldysha. – M., 2013. – N. 12. – 18 s. (URL: http://www.keldysh.ru/papers/2013/prep2013_12.pdf).
23. Official Aztec User's Guide. Version 2.1: Report / Sandia National Laboratories: Tuminaro R.S., Heroux M., Hutchinson S.A., Shadid J.N. – Albuquerque, NM, U.S., 1999. – 63 p. – SAND99-8801J.
24. URL: <http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html> (data obrashcheniya: 21.10.2013).
25. URL: <http://trilinos.sandia.gov/> (data obrashcheniya: 21.10.2013).
26. *Saad Y.* Iterative methods for sparse linear systems. – SIAM, Philadelphia, PA, US, 2000.
27. *Saad Y.* ILUT: A dual threshold incomplete LU factorization // Numer. Linear Algebr. – 1994. – V. 1, N. 4. – P. 387-402. DOI
28. *Amdahl G.M.* Validity of the single processor approach to achieving large-scale computing capabilities // AFIPS'67 Conf. Proc. NY, USA, April 18-20, 1967. – P. 483-485. DOI
29. *Karypis G., Kumar V.* A fast and highly quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM J. Sci. Comput. – 1999. – V. 20, N. 1. – P. 359-392. DOI

Поступила в редакцию 29.07.2013; опубликована в электронном виде 27.12.2013

Сведения об авторах

Афанасьев Андрей Александрович, кфмн, внс, Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова (МГУ ИМех), вед. инж.-расчетчик ЗАО «Т-Сервись», 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-Сервись»; E-mail: Oleg.Melnik@t-services.ru
Цветкова Юлия Дмитриевна, мнс, МГУ ИМех; E-mail: jultsv@gmail.com