

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

Рассмотрена задача закачки углекислого газа в водонасыщенный проницаемый пласт. Методами прямого численного моделирования определена граница области, занимаемой CO<sub>2</sub> 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<sup>1,2</sup>, O.E. Melnik<sup>1,2</sup> and Yu.D. Tsvetkova<sup>1</sup><sup>1</sup>Institute of Mechanics of Moscow State University, Moscow, Russia<sup>2</sup>ZAO "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 CO<sub>2</sub> 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 (CO<sub>2</sub>) [1–3]. Цель захоронения заключается в снижении выбросов парниковых газов, в частности CO<sub>2</sub>, в атмосферу и, таким образом, в замедлении развития глобального потепления на Земле. Возможные источники CO<sub>2</sub> — 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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> через проницаемые породы и геологические разломы поверхности Земли. Для определения наиболее вероятных направлений течения CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub>, получено в сильных предположениях однофазного течения и стремящейся к нулю вязкости воды. Данное решение использовалось для оценки распространения CO<sub>2</sub> в формации Sleipner [10]. В случае применения для описания фильтрации полной модели точных решений задач, связанных с захоронением CO<sub>2</sub>, 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  $\text{CO}_2$  и фазой воды ( $\text{H}_2\text{O}$ ). 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  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$  в недрах, найденная с помощью приближённого аналитического решения, существенно занижена. Таким образом, вязкость воды в задачах захоронения  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$  и пластовой воды. В настоящей работе исследуются только закритические термодинамические условия для  $\text{CO}_2$  [11, 13], при которых возможна лишь одна фаза сверхкритического  $\text{CO}_2$ , 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 —  $\text{CO}_2$  в закритическом состоянии, а вторая фаза жидкая —  $\text{H}_2\text{O}$ . 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;  $\rho$  — плотность;  $e$  — внутренняя энергия,  $h$  — энтальпия;  $\mathbf{w}$  — скорость фильтрации;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности породы ( $\lambda_r$ ) и эффективный в пласте ( $\lambda_m$ );  $T$  — пластовая температура;  $K$  — проницаемость породы;  $f$  — относительная фазовая проницаемость;  $\mu$  — вязкость;  $P$  — пластовое давление;  $\mathbf{g}$  — вектор ускорения свободного падения. Уравнения (1), (2) и (3) — это законы сохранения массы  $\text{CO}_2$ , массы воды и энергии соответственно, (4) — многофазный закон фильтрации Дарси.

### 2.2. Уравнения состояния

Теплофизические свойства  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$ , а функции (5) — полиномиальные сплайны, рассчитываемые по кубическому уравнению состояния  $\text{CO}_2$  [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  $P = P_0$ ,  $T = T_0$ ;  $\alpha$  — коэффициент сжимаемости;  $\beta$  — коэффициент теплового расширения;  $C_2$  — теплоёмкость при постоянном давлении.

Во многих случаях захоронения углекислый газ находится при окологранных 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  $\text{CO}_2$  [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.

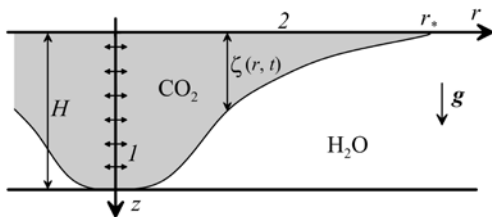


Рис. 1. Схема задачи (выделена область, насыщенная  $\text{CO}_2$ );  $r$  – радиальная координата,  $z$  – глубина нагнетания; прямая 1 – нагнетательная скважина, 2 – кровля пласта

Закачка  $\text{CO}_2$  в пласт производится с постоянным расходом  $Q_m$  (Табл. 3) через вертикальную скважину, с которой совпадает ось  $r$ . Температура нагнетаемого  $\text{CO}_2$  равняется пластовой температуре  $T = 40^\circ\text{C}$ . Следовательно, по постановке задача практически является изотермической, а значения параметров  $\rho_r$ ,  $C_r$ ,  $\lambda_r$ ,  $C_2$ ,  $\lambda_2$ , 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 закритического  $\text{CO}_2$  [13]. Согласно уравнению состояния [11] при  $P \approx 15$  МПа,  $T = 40^\circ\text{C}$  плотность углекислого газа ( $\rho_1 = 762$  кг/м<sup>3</sup>) меньше плотности воды (Табл. 2), поэтому  $\text{CO}_2$ , как более легкая фаза, всплывает в водонасыщенной пористой среде, растекаясь вдоль непроницаемой кровли (Рис. 1). Таким образом, наибольшая горизонтальная скорость течения  $\text{CO}_2$  в пласте достигается именно у кровли. Определение значения этой скорости важно для прогнозирования распространения  $\text{CO}_2$  в недрах и оценки возможных последствий захоронения [4, 10].

Таблица 2. Параметры для задачи о закачки  $\text{CO}_2$ 

Характеристики породы			Характеристики насыщающей пласт воды		
Толщина пласта	$H$ , м	50	Коэффициент сжимаемости	$\alpha$ , Па <sup>-1</sup>	$4,55 \cdot 10^{-10}$
Пористость	$m$	0,25	Коэффициент теплового расширения	$\beta$ , К <sup>-1</sup>	$2,78 \cdot 10^{-4}$
Проницаемость	$K$ , м <sup>2</sup>	$10^{-13}$	Опорное давление	$P_0$ , МПа	15
Плотность	$\rho_r$ , кг/м <sup>3</sup>	2500	Опорная температура	$T_0$ , °C	40
Теплоёмкость	$C_r$ , Дж/(кг·К)	1000	Теплоёмкость	$C_2$ , Дж/(кг·К)	4207
Коэффициент теплопроводности	$\lambda_r$ , Вт/(м·К)	2	Коэффициент теплопроводности	$\lambda_2$ , Вт/(м·К)	0,62
			Плотность при $P_0$ и $T_0$	$\rho_{2(0)}$ , кг/м <sup>3</sup>	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  $\text{H}_2\text{O}$  или закритическое состояние  $\text{CO}_2$ , а области двухфазной фильтрации не формируются;
- 3) вязкость воды стремится к нулю ( $\mu_2 \rightarrow 0$ ), то есть  $\text{H}_2\text{O}$  создаёт только гидростатическое распределение давления в пласте и не препятствует фильтрации  $\text{CO}_2$ .

С учётом данных предположений решение задачи закачки  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$  на непроницаемой кровле пласта (Рис. 1);  $\zeta(r, t)$  — толщина области, насыщенной  $\text{CO}_2$  при  $r \rightarrow r_*$ ;  $Q = \text{const}$  — объёмный расход, а  $Q_m$  — массовый расход  $\text{CO}_2$  через скважину;  $\omega$ ,  $\gamma$  — константы. Согласно (10)  $r_*$  растёт пропорционально  $\sqrt{t}$ , а в фиксированный момент времени  $\zeta$  есть линейная функция радиуса  $r$ .

В дальнейшем рассматриваются два варианта нагнетания при различных расходах  $\text{CO}_2$  (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  $\text{CO}_2$ 

Вариант нагнетания	$z = \zeta(0, t)$	$Q$ , м <sup>3</sup> /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.

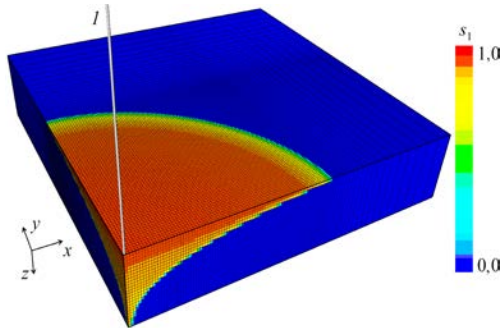


Рис. 2. Трёхмерная визуализация (в перспективе) расчётной области и сетки; распределение  $\text{CO}_2$  (насыщенность  $s_1$ ) отвечает нагнетанию  $A$  с сеткой  $III$  в момент времени  $t=12000$  дней (масштаб вдоль оси  $z$  увеличен в 7,5 раз)

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  $\text{CO}_2$  ( $x, y \in [0, 1000]$  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  $\text{CO}_2$ , 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,  $a, \epsilon$ ), 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  $\text{CO}_2$  на кровле  $r_*$  и функция  $\zeta(r, t)$ , описывающая границу области насыщения  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$  растекается по кровле пласта намного быстрее, чем это предсказывается автомодельной асимптотикой. Вытеснение воды углекислым газом не является поршневым: в области распределения  $\text{CO}_2$  насыщенность воды не равна нулю, поэтому формируется двухфазное течение.

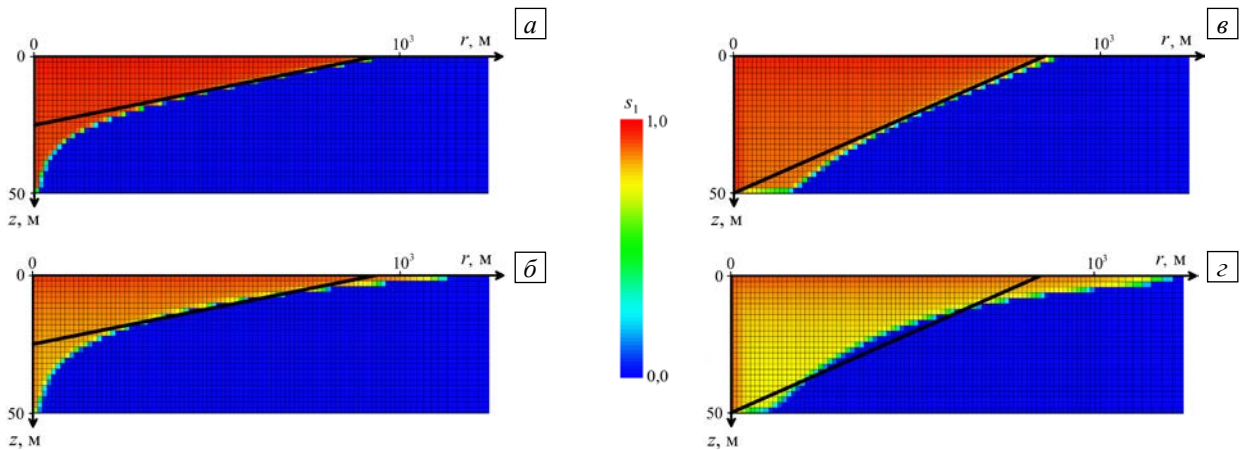


Рис. 3. Насыщенность  $\text{CO}_2$  ( $s_1$ ) при различных вариантах нагнетания: вариант  $A$ , насыщенность через  $t=15000$  дней при  $\mu_2 \rightarrow 0$  ( $a$ ), при  $\mu_2 \not\rightarrow 0$  ( $б$ ); вариант  $B$ , насыщенность через  $t=6000$  дней при  $\mu_2 \rightarrow 0$  ( $в$ ), при  $\mu_2 \not\rightarrow 0$  ( $г$ ); прямая линия ограничивает область  $\text{CO}_2$  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  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ , перемещаемые в результате закачки, одинаковы (одна жидкость вытесняет другую). Так как вязкость велика во всём объёме перемещаемой жидкости, то вязкими эффектами в области  $\text{H}_2\text{O}$  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  $\text{CO}_2$  в пласте. Кроме того, в реальных течениях важную роль играют эффекты, связанные с растворимостью  $\text{CO}_2$  в воде [7] и с остаточной насыщенностью  $\text{H}_2\text{O}$ , 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  $\text{CO}_2$  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:  $\tau_p$  — 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  $\chi$  — 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  $\chi$  (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].

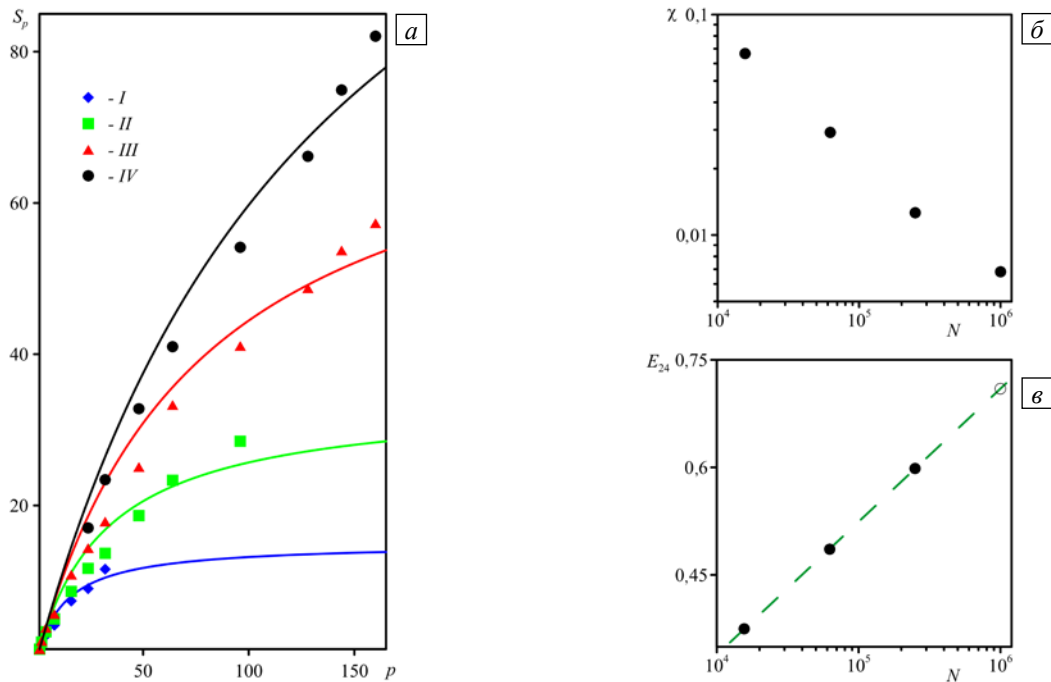


Рис. 4. Зависимость ускорения  $S_p$  от числа процессов (*a*); доля последовательных операций  $\chi$  (*б*) и эффективность распараллеливания  $E_{24}$  (*в*) как функция числа ячеек  $N$

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  $\tau_{24}$  — 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 CO<sub>2</sub> 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. CO<sub>2</sub>SINK – From site characterisation and risk assessment to monitoring and verification: One year of operational experience with the field laboratory for CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 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](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 предобуславливания 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](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 CO<sub>2</sub> 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.* CO<sub>2</sub>SINK – From site characterisation and risk assessment to monitoring and verification: One year of operational experience with the field laboratory for CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 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.* ECO<sub>2</sub>N – 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
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 dvoukisi 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](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](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](mailto: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](mailto:Oleg.Melnik@t-services.ru)  
*Цветкова Юлия Дмитриевна*, мнс, МГУ ИМех; E-mail: [jultsv@gmail.com](mailto:jultsv@gmail.com)