

Какую роль Российская академия наук должна играть в цифровизации нефтегазового комплекса и наук о Земле? Этот вопрос обсуждался ведущими учёными РАН, руководителями федеральных агентств и служб, отраслевых институтов, представителями крупнейших отечественных нефтегазовых компаний на заседании президиума РАН, состоявшемся 28 марта 2023 г. Предлагаем вниманию читателей три статьи, подготовленные авторами на основе их докладов, заслушанных участниками этого заседания.

## ТЕХНОЛОГИЯ “ЦИФРОВОЙ КЕРН” И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

© 2023 г. В. А. Балашов<sup>а,\*</sup>, Е. Б. Савенков<sup>а,\*\*</sup>, Б. Н. Четверушкин<sup>а,\*\*\*</sup>

<sup>а</sup>Федеральный исследовательский центр “Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН”,  
Москва, Россия

\*E-mail: vladislav.balashov@gmail.com

\*\*E-mail: e.savenkov@gmail.com

\*\*\*E-mail: office@keldysh.ru

Поступила в редакцию 12.05.2023 г.

После доработки 14.05.2023 г.

Принята к публикации 25.05.2023 г.

Статья посвящена вопросам моделирования многофазных гидродинамических течений в рамках технологии “цифровой керн” для нужд нефтегазодобывающей отрасли. Суть технологии заключается в прямом численном моделировании течений в масштабе порового пространства пород-коллекторов нефти и газа с прямым разрешением структуры этого пространства и динамики межфазных границ. Подчёркивается важность развития вычислительных средств высокой производительности (суперкомпьютеров) для успешного внедрения технологии. Представлено описание работ, проводимых в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН в области математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программной реализации.

*Ключевые слова:* микротечения, программный комплекс, цифровой керн, квазигидродинамическая регуляризация.

DOI: 10.31857/S0869587323060026, EDN: VXNPZB

Углеводородное сырьё служит основным источником энергии как в России, так и в мире. Разнообразие и сложность залегания запасов промышленных углеводородов в нашей стране, наличие больших ресурсов нетрадиционного сы-

рья, ожидающих эффективного освоения (высоковязкие нефти, нефтематеринские породы, в частности, кероген Баженовской свиты, сланцевая нефть, нефть низкопроницаемых коллекторов и др.), географическая удалённость и слож-



БАЛАШОВ Владислав Александрович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. САВЕНКОВ Евгений Борисович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. ЧЕТВЕРУШКИН Борис Николаевич – академик РАН, научный руководитель ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

ные климатические условия в районах разработки значительно усложняют задачу поддержания и повышения уровня эффективности нефтегазового комплекса России по сравнению с основными международными конкурентами, в том числе из ряда государств Ближнего Востока. Нельзя сбрасывать со счетов и санкционные ограничения.

В таких условиях обеспечение высокого уровня добычи промышленных углеводородов требует внедрения новых современных технологий с целью максимально эффективного использования доступных природных ресурсов. Физическая труднодоступность объекта разработки (нефтеносный пласт залегает обычно на глубине несколько километров), несовершенство ряда методик полевых и лабораторных исследований, принципиальная невозможность их массового применения, недостаточное понимание происходящих в нефтяном пласте физико-химических процессов препятствуют решению указанной задачи. Единственным доступным в настоящее время подходом, который может обеспечить приемлемое для нужд практики решение этих проблем в рамках существующих экспериментальных методик, является, по нашему мнению, использование новых средств математического моделирования.

**Математическое моделирование в нефтедобыче.** Методы математического моделирования, например цифровые постоянно-действующие геолого-технологические модели месторождений, довольно давно стали неотъемлемой частью и одним из основных инструментов, используемых для принятия технико-экономических решений в нефтяной промышленности. Сложность построения адекватной геолого-технологической модели связана прежде всего с тем, что она должна корректно интегрировать в себе огромный объём разнородной информации, начиная с особенностей механизмов вытеснения нефти в масштабах пор породы-коллектора (от нескольких микрометров до миллиметров) заканчивая строением всего месторождения в целом (сотни квадратных километров).

До недавнего времени исследование того или иного процесса теоретическими методами, равно как и методами вычислительного эксперимента, проводилось в основном с использованием только одной математической модели, наиболее пригодной для решения конкретной задачи в рамках рассматриваемых допущений. Вместе с тем хорошо известно, что в большинстве случаев полноценная практическая физико-математическая формализация конкретного процесса в рамках единой модели принципиально недостижима. Наиболее полное описание возможно только при использовании иерархии математических моделей различной степени детализации. Использо-

вание иерархий — наиболее перспективный путь повышения качества и предсказательной силы методов математического моделирования, позволяющий согласованно и с минимальной потерей информации описывать широкий диапазон пространственных и временных масштабов, специфичных для задач разработки месторождений.

Эти утверждения иллюстрируются цепочкой моделей, описывающих течение газов: молекулярная динамика → кинетические уравнения → макроскопические уравнения гидродинамики (Эйлера или Навье—Стокса). В нефтяном инжиниринге соответствующая цепочка гораздо более сложна и разветвлённа: с точки зрения описания процесса фильтрации модели могут быть однофазными, двухфазными и трёхфазными, композиционными; с позиций пространственной детализации свойств пластовой системы — геологическими и гидродинамическими; с точки зрения пространственного разрешения — от десятков километров до масштаба элемента системы заводнения (сотни метров), призабойной зоны скважины (единицы метров) и образцов керна (единицы микрометров — единицы сантиметров).

Выбор конкретной модели определяется существом прикладной задачи. При этом модели более низкого уровня (более фундаментальные) по отношению к рассматриваемой обычно определяют её параметры (коэффициенты переноса). Такому подходу альтернативна идентификация параметров модели в процессе соответствующих лабораторных экспериментов и анализ данных наблюдений. Одновременно с этим, как правило, более “старшие” модели в иерархии менее затратны с позиций вычислений. До недавнего времени такая методика абсолютно преобладала.

Основными препятствиями на пути использования более подробных и детализированных моделей выступают прежде всего высокая сеточная размерность соответствующих дискретных моделей и необходимость идентификации их параметров на основе первых теоретических принципов либо путём насыщения данными наблюдений и лабораторных исследований. Успешное применение таких “первопринципных” моделей возможно при успешном преодолении обеих указанных проблем.

При этом возникает необходимость учитывать всё более детальные модели среды, обрабатывать огромные объёмы информации, качество которой не всегда высокое (а часто и заведомо низкое), необходимость учитывать пространственную и временную многомасштабность, а также широкий спектр физических механизмов, многофакторность и многокритериальность решаемых прикладных задач. Всё это требует использования вычислительных средств сверхвысокой производительности — суперкомпьютеров.

Планомерный рост вычислительных мощностей современной вычислительной техники приводит к тому, что постепенно появляется практическая возможность одновременного использования двух последовательных (в иерархии) моделей при описании процессов на едином пространственном и временном масштабе. Такой подход плодотворен, так как, с одной стороны, позволяет изучить связь “элементарных” процессов, протекающих на микроуровне, с феноменологическими макроскопическими законами, а с другой — даёт практический способ вычислить те или иные параметры моделей макроуровня на основе виртуальных “лабораторных” экспериментов с привлечением более фундаментальных моделей. Принципиальная возможность применения такого подхода в настоящее время обеспечивается непрерывным ростом мощности компьютеров. Однако практическое применение подобных идей требует разработки новых математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программной реализации, пригодной для эффективного использования современной и перспективной высокопроизводительной вычислительной техники.

Конкретным примером реализации этих идей в контексте нефтяного инжиниринга служит технология “цифровой керн” (digital rock physics) [1]. Керном называют образец или микрообразец горной породы размером от единиц миллиметров до единиц сантиметров, поднятой в ходе бурения с глубины залегания нефти и газа. Он представляет собой проницаемую пористую среду, образованную непроницаемым для флюидов скелетом породы и порами диаметром от долей микрометра до десятков микрометров. Именно в порах присутствует многофазный флюид, условно состоящий из несмешивающихся нефтяной, газовой и водной фазы. Процесс разработки месторождения сводится к реализации таких пластовых условий, при которых нефтесодержащий флюид достигает добывающих скважин. Таким образом, все первичные физические процессы, обеспечивающие фильтрацию флюида к скважинам, происходят в пространственных масштабах пор (единицы микрометров), при том что характерная площадь месторождения — сотни квадратных километров. Образцы керна как один из первичных и основных объектов лабораторных исследований — основной первичный источник информации о свойствах пластовой системы.

Суть технологии “цифровой керн” заключается в прямом численном моделировании не только процессов, происходящих в масштабах отдельных пор, но и микрообразцов керна с учётом реальных свойств флюидов и микроструктуры среды. Применение этой технологии на практике стало возможным лишь в последние десятилетия в связи с резким увеличением быстродействия высокопроизводительных вычислительных си-

стем и методов компьютерной микротомографии, позволяющих получать реалистичные геометрические модели геологических сред на микроуровне с прямым разрешением структуры поровых каналов. Технология включает в себя средства построения дискретных цифровых моделей порового пространства (с использованием методов компьютерной микротомографии реальных образцов керна) с последующей обработкой результатов томографического сканирования, а далее — решение целевых задач: анализ состояния насыщенной пористой среды или моделирование происходящих в ней процессов. При этом одними из основных выступают задачи многофазной гидродинамики, решаемые с учётом свойств флюидов и скелета породы, поверхностных и контактных свойств системы, которые в макромасштабе качественно и количественно определяют динамику вытеснения газовых или нефтяных флюидов. Требуется также разработка соответствующих вычислительных алгоритмов и их программная реализация для высокопроизводительных вычислительных систем, разработка сопутствующих средств усвоения данных, их визуализации и анализа, идентификации параметров моделей, способов переноса результатов моделирования на масштаб полноразмерного керна и выше.

Наличие вычислительных систем высокой производительности и соответствующего программного обеспечения — неотъемлемое условие эффективного применения технологии “цифровой керн” в добывающей промышленности. Это связано с необходимостью учёта в математических моделях широкого спектра физических механизмов и высокой сеточной размерности геометрических моделей микрообразцов керна (до  $10^9$ – $10^{10}$  расчётных ячеек, кратно большее число переменных). Существующие доступные вычислительные мощности позволяют анализировать цифровые микрообразцы керна размером несколько миллиметров с числом ячеек расчётной сетки порядка 1000 вдоль каждого измерения на вычислительных системах мощностью до 100 Тфлопс. При этом требуемый вычислительный ресурс на один расчёт составляет величину порядка 50000 ядер/час. Для анализа микрообразцов, физический размер которых сравним с используемыми в лабораторных экспериментах, а это единицы сантиметров вдоль каждого измерения, требуются системы мощностью, по крайней мере, 1–10 Пфлопс. Эти мощности обеспечат проведение расчётов со скоростью, необходимой для эффективного применения технологии в решении промышленных задач (одни сутки машинного времени на анализ одного образца). Здесь следует отметить, что задача расчёта полного набора показателей фильтрационно-ёмкостных свойств, в том числе проницаемости по направлениям,

расчёт кривых относительных фазовых проницаемостей и капиллярных давлений кратно увеличивает число необходимых запусков симулятора. Моделирование с учётом дополнительных физических эффектов, например подбор методов увеличения нефтеотдачи, требует при сохранении вычислительных мощностей увеличения времени расчёта на порядок. Необходимость новых вычислительных средств связана с промышленным аспектом технологии. При её внедрении и массовом применении в промышленности на первый план выходит не только принципиальная возможность расчёта для образца заданной сеточной размерности и его качество, но и время выполнения этой операции. Если на один образец оно достигает недели, такой вариант рассматривается как неприемлемый. Необходимо иметь в виду, что прикладные задачи требуют множественных многовариантных расчётов, это касается, например, анализа методов увеличения нефтеотдачи или калибровки низкоразмерных прокси-моделей (суррогатных, аппроксимационных моделей по данным) процесса вытеснения флюидов. Грубые оценки показывают, что кратное уменьшение длительности расчёта достижимо только при кратном увеличении вычислительных мощностей.

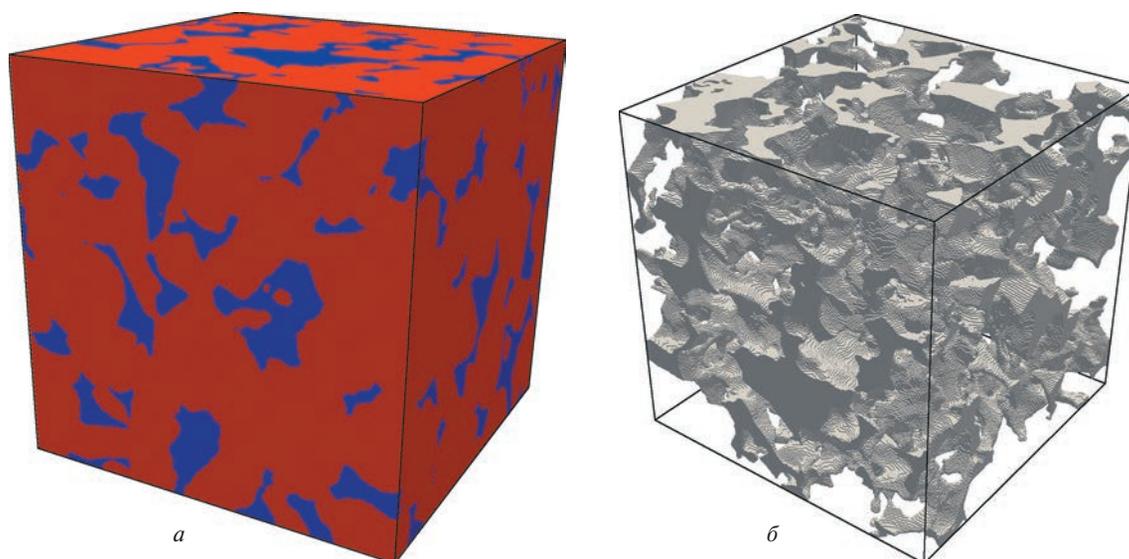
Применение технологии “цифровой керн” обеспечивает качественное и количественное повышение точности описания процессов нефтедобычи с использованием новых многомасштабных математических моделей и вычислительных алгоритмов для анализа процесса вытеснения флюидов в масштабе образца, а также полноразмерного керна, причём с разрешением структуры порового пространства и последующим корректным переносом свойств на модели макроуровня масштаба месторождения.

В настоящее время в Федеральном исследовательском центре “Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша РАН” создан цельный научный и практический задел в области технологий моделирования “цифрового керна”. Он включает в себя разработку как математических моделей, так и вычислительных алгоритмов, программного обеспечения. Используемые при этом модели класса диффузной границы являются термодинамически согласованными и позволяют однородным по пространству способом описывать течения многофазных сред (эмульсий, суспензий) с прямым разрешением границ раздела фаз и контактных углов. В случае суспензий твёрдые включения описываются моделью гиперупругой среды. Уравнения моделей имеют вид систем уравнений типа Кана–Хилларда, они сильно нелинейны и включают в себя члены с четвёртыми пространственными производными. Для их численного решения используются явные разностные схемы с улучшенными термодинами-

ческими свойствами, гарантирующими корректное поведение полной энергии системы. Устойчивость разностных схем гарантируется наличием в уравнениях модели квазигидродинамических регуляризирующих членов. Разработанные схемы реализованы в виде эффективных параллельных программных комплексов на основе гибридной модели распараллеливания и позволяют эффективно использовать вычислительные мощности современных гибридных CPU/GPGPU вычислительных систем, в том числе при решении содержательных прикладных задач.

**Модели технологии “цифровой керн”.** Исторически первым классом моделей такого типа были модели поровых сетей (pore–network models), основанные на представлении геометрической структуры керна в виде графа, вершины которого соответствуют порам, а рёбра – условным каналам между ними. Указанный граф строится на основе анализа микротомограммы образца керна. Модель течения представляет собой систему законов сохранения для узлов графа [2]. Явное преимущество этих моделей – сравнительно высокая скорость расчёта и экономичность вычислительных ресурсов. Один из недостатков – наличие этапа построения самой поровой сети. Он может рассматриваться как излишний в силу того, что в практических приложениях соответствующий граф строится на основе первичной, наиболее полной геометрии порового пространства. Отдельную сложность представляет собой необходимость разработки математической модели течения на геометрическом графе и идентификации её параметров для конкретного образца породы – эта задача нетривиальна при необходимости использования сколь-либо сложных моделей течения в порах. По этим причинам в последнее время большое внимание уделяется построению новых моделей, основанных на решении уравнений гидродинамики с использованием первичного представления порового пространства образца породы.

Наиболее полно и корректно с физической точки зрения процесс течения водо-нефтяной эмульсии в порах описывают гидродинамические модели фазового поля, или диффузной границы. Они предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы (более детальное изложение – в обзорных работах [3, 4]). Проводя аналогию с уравнениями газовой динамики, можно сказать, что модель “чёткой границы” с условием Юнга–Лапласа соответствует модели ударной волны с условиями Гюгоню, в то время как модель “диффузной границы” – моделям, описывающим структуру ударной волны в рамках макроскопической термодинамики. Таким образом, в моделях типа “диффузной гра-



**Рис. 1.** Образец песчаника  $S_9$

$a$  – микрообразец: синий цвет соответствует поровому пространству, красный – породе;  $b$  – поровое пространство, для наглядности породе не представлена

ницы” скачкообразное изменение свойств смеси заменяется непрерывным, но быстрым их изменением. В последнее время интерес к этим моделям, эффективно используемым на практике для предсказательного математического моделирования микротечений, существенно вырос. Прежде всего это связано с тем, что они предоставляют естественный и термодинамически согласованный способ описания процессов, пригодный для прямого моделирования многофазных течений.

В настоящей работе для описания многофазных течений используется квазигидродинамическая регуляризация модели Навье–Стокса–Кана–Хилларда, состоящая в добавлении в уравнения системы специальных диссипативных слагаемых, пропорциональных малому параметру, имеющему размерность времени. В ряде случаев он может предполагать минимальный масштаб, меньше которого дальнейшее разрешение поведения среды не имеет смысла [5]. Для моделей без учёта поверхностных эффектов этот подход представлен в монографиях [6, 7]. В работе [8] он обобщён на случай многокомпонентной жидкости с учётом поверхностных эффектов. Существенно, что указанная регуляризация физически обоснованна, то есть обеспечивает соответствие фундаментальным термодинамическим свойствам, и может быть построена непосредственно при выводе системы уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда в рамках процедуры Колмана–Нолла, а не в результате последующей “дополнительной” регуляризации. Наличие диссипативных слагаемых позволяет использовать для чис-

ленной аппроксимации уравнений модели сравнительно простые и устойчивые симметричные по пространству разностные схемы.

В гидродинамических моделях для анализа течений в поровом пространстве микрообразцов горных пород стандартным способом описания геометрии порового пространства служит его воксельное представление. По существу геометрия области задаётся трёхмерным массивом, каждый элемент которого имеет значение “1” или “0”, при этом области течения соответствует значение “0”. Иными словами, область течения задаётся в виде трёхмерной двухцветной “фотографии” образца керна, где один из цветов соответствует породе, другой – поровому пространству. По аналогии с обычными растровыми изображениями ячейки массива с центрами в узлах декартовой ортогональной расчётной сетки называются вокселями (voxel – VOlumtric ELement, аналогично pixel – Picture Element). Актуальность воксельного представления геометрии расчётной области связана с тем, что для геологических пористых сред эта геометрия не может быть охарактеризована точно. Для построения геометрических моделей таких сред используют компьютерную микротомографию. На основе её результатов строят бинарное трёхмерное (воксельное) изображение образца исследуемого материала [9]. На рисунке 1<sup>1</sup> представлен образец песчаника и его поровое пространство.

<sup>1</sup> Полноцветная версия рисунков к статье доступна в электронной версии журнала (*прим. ред.*).

В рамках исследований по рассматриваемому направлению в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН с 2015 г. разрабатывается комплекс средств математического моделирования (математические модели, вычислительные алгоритмы и их программная реализация), которые привели к созданию программной платформы DiMP и программного комплекса DiMP-Hydro. В настоящее время основное назначение DiMP-Hydro – математическое моделирование течений различных жидкостей и газов в поровом пространстве горных пород. С помощью DiMP-Hydro возможен расчёт течений однофазных жидкостей и газов, двухфазных двухкомпонентных жидкостей с учётом эффектов межфазного взаимодействия: поверхностного натяжения, контактного угла на твёрдой стенке, расчёт однофазных жидкостей с неньютоновской реологией.

Геометрия расчётной области предполагается воксельной и строится на основе сегментированных результатов микротомографии образцов горных пород. Программный комплекс DiMP-Hydro является параллельным и позволяет проводить расчёты как на настольных ЭВМ, так и на высокопроизводительных суперкомпьютерных вычислительных комплексах. Особенность реализованного подхода состоит в использовании квазигидродинамических регуляризаций уравнений однофазной и многофазной гидродинамики [8].

Программная платформа DiMP и программный комплекс DiMP-Hydro реализованы на языке C++ в операционной среде Linux с использованием современных технологий программирования. Комплекс позволяет задавать конфигурационные файлы на языке Lua [10], что обеспечивает определённую расширяемость программной реализации. Платформа пригодна для большинства современных вычислительных систем, однако ориентирована прежде всего на системы высокопроизводительные с использованием интерфейса параллельного программирования MPI.

В настоящей работе описаны используемые в программном комплексе математические модели и основные вычислительные алгоритмы, программная реализация. Приведены результаты расчётов, иллюстрирующие работоспособность предложенных научных и технических решений. Более детальное описание численных алгоритмов, математических моделей и результатов моделирования представлено в работах [8, 11–14].

**Математическая модель.** Коротко опишем используемую математическую модель.

Рассмотрим следующую регуляризованную (согласно квазигидродинамической методике) модель типа фазового поля, описывающую течение изотермической двухфазной двухкомпонент-

ной жидкости (смеси) с учётом межфазных эффектов (таких, как поверхностное натяжение)

$$\partial_t \rho_\alpha + \operatorname{div}(\rho_\alpha u^m) = -\operatorname{div} b_\alpha, \quad \alpha = 1, 2; \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u^m \otimes u) + \nabla p = \\ = \operatorname{div} \Pi + \operatorname{div} \Pi^\lambda + \rho \nabla \Phi, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\rho_\alpha(x, t) > 0$  – плотность компонента смеси с номером  $\alpha$ ,  $\rho(x, t)$  – полная плотность смеси,  $\rho = \rho_1 + \rho_2$ ,  $u(x, t)$  – скорость жидкости,  $w$  – регуляризирующая скорость жидкости (связана с квазигидродинамической регуляризацией),  $u^m = u - w$ . Массовая сила описывается потенциалом  $\Phi(x)$ .

В уравнении (1) векторы  $b_\alpha$  описывают диффузионные потоки компонентов:

$$b_\alpha = -M_{\alpha\beta} \nabla(\theta^{-1} \hat{\mu}_\beta), \quad \sum_{\beta=1}^2 M_{\alpha\beta} = 0, \quad \alpha = 1, 2. \quad (3)$$

$M_{\alpha\beta}(\bar{\rho}) > 0$  – коэффициенты подвижности компонентов, которые образуют положительно полуопределённую симметричную матрицу;  $\theta > 0$  – температура смеси, которая является постоянным параметром (здесь и далее для краткости использованы обозначения  $\bar{\rho} := \{\rho_1, \rho_2\}$ ). Второе свойство в (3) даёт

$$\sum_{\alpha=1}^2 b_\alpha = \mathbf{0}.$$

Диффузионные потоки  $b_\alpha$  определяются с помощью обобщённых (слабо-нелокальных) химических потенциалов  $\hat{\mu}_\alpha$ :

$$\hat{\mu}_\alpha(\bar{\rho}, \Delta \bar{\rho}) = \mu_\alpha(\bar{\rho}) - \lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta, \quad \mu_\alpha(\bar{\rho}) = \partial_{\rho_\alpha} \psi_0,$$

где  $\mu_\alpha$  – классический химический потенциал,  $\psi_0(\bar{\rho})$  – объёмная плотность локальной части свободной энергии, которая является невыпуклой функцией (см. далее).

Существенный элемент рассматриваемой модели – свободная энергия Гельмгольца:

$$\psi(\bar{\rho}, \nabla \bar{\rho}) := \psi_0(\bar{\rho}) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta. \quad (4)$$

В соотношении (4) слагаемое, зависящее от  $\nabla \bar{\rho} := \{\nabla \rho_1, \nabla \rho_2\}$ , представляет собой градиентную энергию. Это градиентное слагаемое существенно отличается от нуля только в межфазном слое. Вместе с невыпуклостью  $\psi_0(\bar{\rho})$  оно позволяет учесть такие эффекты, как поверхностное натяжение, и обеспечить конечную толщину межфазного слоя. Коэффициенты  $\lambda_{\alpha\beta}$  образуют положительно определённую симметричную матрицу  $2 \times 2$ . В настоящей работе будем считать, что  $\lambda_{\alpha\beta}$  – постоянные параметры.

Для удобства обозначим фазы буквами  $A$  и  $B$ . Рассмотрим гомогенную смесь в фазе  $A$  в равновесии со свободной энергией  $\Psi^A(\rho_1, \rho_2)$ . Определим модельный вид свободной энергии следующим образом:

$$\Psi_0(\rho_1, \rho_2) = \frac{\Psi^A \Psi^B}{\Psi^A + \Psi^B}. \quad (5)$$

$$\Psi^A(\rho_1, \rho_2) = A_\Psi [(\rho_1 - \rho_1^A)^2 + (\rho_2 - \rho_2^A)^2],$$

$$\Psi^B(\rho_1, \rho_2) = B_\Psi [(\rho_1 - \rho_1^B)^2 + (\rho_2 - \rho_2^B)^2].$$

Здесь и далее будем считать, что  $A_\Psi = B_\Psi$ . График поверхности (5) представлен на рисунке 2. Точки  $(\rho_1^A, \rho_2^A)$  и  $(\rho_1^B, \rho_2^B)$  соответствуют локальным минимумам функции  $\Psi_0(\rho_1, \rho_2)$ .

Далее везде для простоты положим  $\lambda_{12} = 0$ ,  $\lambda_{11} = \lambda_{22}$  и  $A_\Psi = B_\Psi$ . Регуляризирующий параметр будем вычислять по формуле  $\tau = \alpha^* h / \sqrt{A_\Psi \rho}$ , где  $\alpha^*$  – малый безразмерный параметр, значение которого выбирается эмпирически из соображений численной устойчивости (см. рис. 2).

Напряжения в смеси определяются с помощью тензоров  $\Pi := \Pi^{NS} + \Pi^\tau$  и  $\Pi^\lambda$ , где  $\Pi^{NS} := \Pi^{NS}(u)$  – тензор вязких напряжений Навье–Стокса,  $\Pi^\tau := \rho u \otimes w$  – тензор регуляризирующих напряжений,  $\Pi^\lambda$  – тензор капиллярных напряжений:

$$\Pi^{NS}(u) := 2\eta \mathbf{D} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta\right)(\operatorname{div} u) \mathbf{I},$$

$$\mathbf{D}(u) := \frac{1}{2}(\nabla \otimes u + (\nabla \otimes u)^\top),$$

$$\Pi^\lambda := \left(\rho_\alpha \lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta\right) \mathbf{I} - \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \otimes \nabla \rho_\beta.$$

Здесь  $\eta = \eta(\bar{\rho}) > 0$  и  $\zeta = \zeta(\bar{\rho}) \geq 0$  – коэффициенты динамической и объёмной вязкости соответственно.

Давление связано с плотностями компонентов смеси с помощью выражения

$$p(\bar{\rho}) = \rho_\alpha \mu_\alpha - \Psi_0.$$

Регуляризирующая скорость  $w$  имеет вид

$$w = \rho^{-1} \tau \{ \rho(u \cdot \nabla)u + \nabla p - \operatorname{div} \Pi^\lambda - \rho \nabla \Phi \}. \quad (6)$$

Полная свободная энергия Гельмгольца системы определяется следующим образом:

$$\Psi(t) := \int_\Omega \left( \Psi_0 + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta - \rho \Phi \right) dx + \int_{\partial\Omega} g ds,$$

где  $g = g(\bar{\rho})$  – свободная энергия твёрдой поверхности (стенки)  $\partial\Omega$ . Вид  $g$  соответствует коротко-

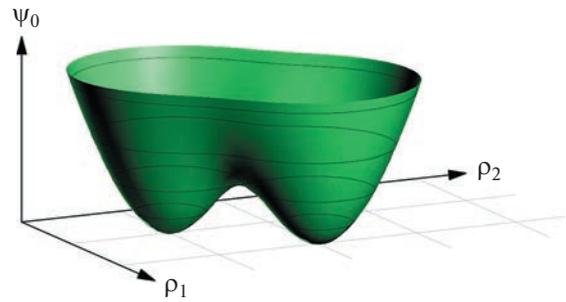


Рис. 2. Типичный график поверхности свободной энергии

действующему взаимодействию между твёрдой стенкой и жидкостью. Наличие функции  $g$  в  $\Psi$  позволяет учесть эффект смачивания. Применяют различные способы задания конкретного вида данной функции. Например, можно использовать вид  $g$ , основанный на выражении

$$\partial_{\rho_\alpha} g = b_\alpha^w \sqrt{\Psi_0},$$

где коэффициенты  $b_\alpha^w$  подбираются так, чтобы обеспечить нужное значение угла смачивания.

Если межфазная граница плоская и перпендикулярна направлению  $x_1$ , то коэффициент поверхностного натяжения  $\sigma_{AB}$  для фаз  $A$  и  $B$  определяется следующим образом:

$$\sigma_{AB} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_{\alpha\beta} (\partial_{x_1} \rho_\alpha) (\partial_{x_1} \rho_\beta) dx_1. \quad (7)$$

Дополним систему (1), (2) начальными и граничными условиями:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad \rho_\alpha(u, 0) = \rho_{\alpha,0}(u), \quad \alpha = 1, 2,$$

$$u|_{\partial\Omega} = \mathbf{0},$$

$$n \cdot \nabla \hat{\mu}_\alpha|_{\partial\Omega} = n \cdot \nabla \Phi, \quad \alpha = 1, 2,$$

$$\lambda_{\nu\beta} \partial_n \rho_\beta|_{\partial\Omega} - \partial_{\rho_\nu} g|_{\partial\Omega} = D_\nu (\partial_\tau \rho_\nu)|_{\partial\Omega},$$

$$D_\nu \geq 0, \quad \nu = 1, 2,$$

где  $n$  – единичная внутренняя нормаль к  $\partial\Omega$ .

Описанная регуляризованная система уравнений обладает свойством диссипативности, то есть при использовании соответствующих граничных условий (непротекания или периодических) обеспечивает невозрастание полной энергии.

Следующий недивергентный вид  $\operatorname{div} \Pi^\lambda$  играет важную роль:

$$\operatorname{div} \Pi^\lambda = \rho_\alpha \nabla (\lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta).$$

Используя  $\nabla \Psi_0 = (\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0) \nabla \rho_\alpha$ , получаем

$$\nabla p - \operatorname{div} \Pi^\lambda = \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha.$$

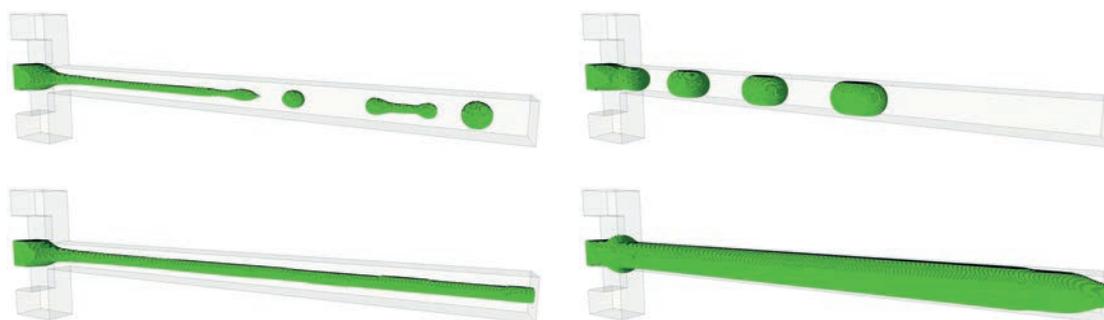


Рис. 3. Различные режимы течения в канале с гидродинамической фокусировкой

Применяя указанные равенства, несложно получить следующий недивергентный вид баланса импульса и выражения для регуляризирующей скорости:

$$\partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u_m \otimes u) + \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha = \operatorname{div} \Pi + \rho \nabla \Phi,$$

$$w = \rho^{-1} \tau [\rho(u \cdot \nabla)u + \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha - \rho \nabla \Phi].$$

Данные соотношения позволяют сравнительно просто построить конечно-разностные пространственные аппроксимации, которые обладают свойством термодинамической согласованности (диссипативности), как и исходная математическая модель. Подробное описание используемых алгоритмов для расчёта однофазных течений можно найти в цитированных выше работах авторов, а также [15–19].

**Примеры расчёта двухфазных микротечений.** На рисунке 3 представлены результаты, полученные при моделировании двухфазного течения в мик-

роканале с гидродинамической фокусировкой (в боковые каналы подаётся одна фаза, в центральный канал – другая). В зависимости от скоростей закачки фаз и их свойств могут реализовываться различные режимы течения: капельный, нитеобразный, струйный, плёночный, режим вытеснения.

На рисунке 4 приведено распределение водной фазы при моделировании дренажного вытеснения в поровом пространстве образца горной породы LV60A (из коллекции, доступной на сайте Имперского колледжа Лондона [9]). Для наглядности нефтяная фаза не показана, горная порода выделена полупрозрачным серым цветом. На рисунке 5 представлены кривые относительной фазовой проницаемости, полученные для указанного образца. Красная и синяя кривые соответствуют нефтяной и водной фазе соответственно, а зелёные – сглаженным значениям проницаемостей.

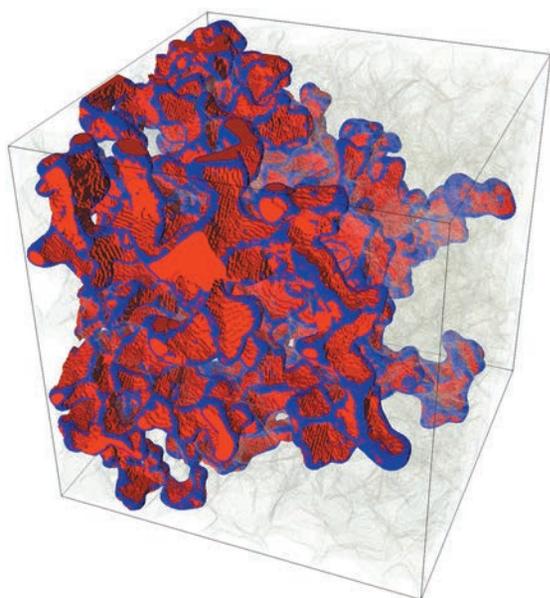


Рис. 4. Двухфазное вытеснение флюидов в образце горной породы

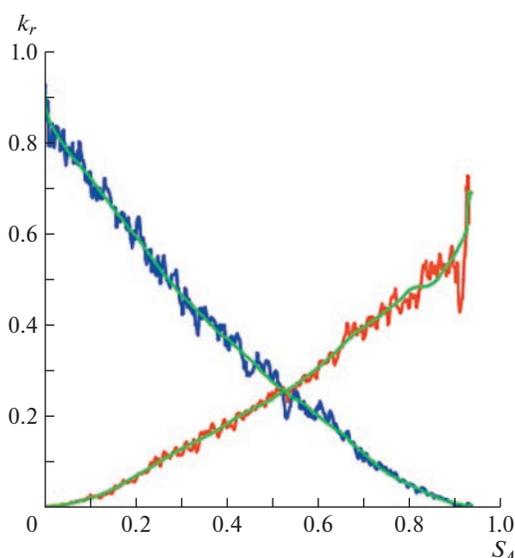


Рис. 5. Полученные кривые относительных фазовых проницаемостей

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Berg C.F., Lopez O., Berland H.* Industrial applications of digital rock technology // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2017. V. 157. P. 131–147.
2. *Blunt M.J.* Flow in porous media and pore-network models and multiphase flow // *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2001. V. 6. № 3. P. 197–207.
3. *Kim K.* Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // *Communications in Computational Physics*. 2012. V. 12. № 3. P. 613–661.
4. *Mauri R.* Multiphase microfluidics: The Diffuse Interface Model // *CISM Courses and Lectures*. V. 538. Springer-Verlag Wien, 2012.
5. *Четверушкин Б.Н.* Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред // *Матем. моделирование*. 2012. № 11. С. 33–52; *Четверушкин В.Н.* *Math. Models Comput. Simul.* 2013. № 3. P. 266–279.
6. *Четверушкин Б.Н.* Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
7. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчёта вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
8. *Балашов В.А., Савенков Е.Б.* Квазигидродинамическая модель для описания течений многофазной жидкости с учётом межфазного взаимодействия // *Прикладная механика и техническая физика*. 2018. № 3. С. 57–68.
9. Imperial College London. <https://www.imperial.ac.uk/earth-science/research/research-groups/pore-scale-modelling/micro-ct-images-and-networks/> (дата обращения 12.05.2023).
10. *Ierusalimschy L., de Figueiredo H., Filho W.C.* Lua – an extensible extension language // *Software-Practice & Experience*. 1996. V. 26. № 6. P. 635–652.
11. *Балашов В.А., Савенков Е.Б.* Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в образцах керна // *Доклады Академии наук*. 2016. Т. 467 (5). С. 534–536.
12. *Балашов В.А.* Прямое моделирование микротечений умеренно-разреженного газа в образцах горных пород // *Матем. моделирование*. 2018. № 9. С. 3–20.
13. *Balashov V., Zlotnik A., Savenkov E.* Numerical method for 3D two-component isothermal compressible flows with application to digital rock physics // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Model.* 2019. V. 34. № 1. P. 1–13.
14. *Balashov V., Zlotnik A., Savenkov E.* Analysis of a regularized model for the isothermal two-component mixture with the diffuse interface // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Model.* 2017. V. 32. № 6. P. 347–358.
15. *Балашов В.А., Савенков Е.Б., Четверушкин Б.Н.* Вычислительные технологии программного комплекса DiMP-Hydro для моделирования микротечений // *Матем. моделирование*. 2019. № 7. С. 21–44. <https://doi.org/10.1134/S0234087919070025>
16. *Balashov V.A.* Dissipative spatial discretization of a phase field model of multiphase multicomponent isothermal fluid flow // *Computers and Mathematics with Applications*. 2021. № 7. P. 112–124. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2021.03.013>
17. *Балашов В.А., Савенков Е.Б.* Регуляризованная изотермическая модель типа фазового поля двухкомпонентной двухфазной сжимаемой жидкости и её одномерная пространственная дискретизация // *Дифференциальные уравнения*. 2020. № 7. С. 887–900. <https://doi.org/10.1134/S0374064120070055>
18. *Balashov V.A., Savenkov E.B.* Thermodynamically consistent spatial discretization of the one-dimensional regularized system of the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020. V. 372. Article number 112743. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2020.112743>
19. *Balashov V., Savenkov E.* A regularized phase field model for solid–fluid dynamics description // *Continuum Mech. Thermodyn.* 2023. V. 35. P. 625–644. <https://doi.org/10.1007/s00161-023-01203-1>