

Программный комплекс DiMP-Hydro для прямого численного моделирования многофазных течений

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Шестой профессиональный слёт разработчиков отечественных CFD кодов «Отечественные CFD коды – 2019»,
Москва, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 30 ноября - 01 декабря

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, уникальный идентификатор проекта RFMEFI60419X0209



Outline

- 1 Основное назначение DiMP-Hydro — технология «цифровой керн»
- 2 Математическая модель
- 3 Программный комплекс DiMP-Hydro
- 4 Результаты расчетов



Outline

- 1 Основное назначение DiMP-Hydro — технология «цифровой керн»
- 2 Математическая модель
- 3 Программный комплекс DiMP-Hydro
- 4 Результаты расчетов



Математическое моделирование добычи УВ

Назначение:

- Подбор оптимальных вариантов воздействия на пласт
- Определение вида, параметров и технических пределов МУН
- Оптимизация и контроль разработки месторождения
- Прогноз и оценка технико-экономических рисков и т.д.

Основной инструмент:

Предсказательная модель процесса вытеснения, в том числе с использованием современных МУН.

Осложняющие факторы:

- Сложная физика (мн.-ф./мн.-к., поверхностные эффекты, неизотермичность, химия, ...)
- Широкий диапазон масштабов (микрометры → километры)

Основные требования:

Необходимость *корректной* интеграции в ПДГТМ разнородной и разномасштабной информации.

Решения:

- Иерархии моделей разных масштабов + иерархические солверы
- физически-обоснованное ремасштабирование и перенос свойств (существующие методики → в основном, статические свойства)

Примеры:

«макро» расчеты на геологических сетках

«мезо» поры/каверны

«микро» **прямое численное моделирование с разрешением пустотного пространства**
(образец керна → керн → ...)

Фильтрационные процессы на микроуровне

Микроуровень:

- определяет параметры течения на макро-уровне (статические и динамические свойства фильтрационных моделей)
- физический масштаб воздействия широкого спектра МУН на процесс вытеснения

Характеристические свойства модели микроуровня:

- Детальный учет структуры порового пространства
- Мн.-ф./мн.-к. гидродинамика в пустотном^а пространстве (+ поверхностные и контактные эффекты, хим. реакции, седиментация/растворение и т.д.)

^апоры, каверны, трещиноватость и др.

Лабораторные исследования

Сложности:

- Получение и обработки качественного кернового материала в требуемых количествах
- Высокая стоимость и практическая невозможность *массового* применения ряда методик лабораторных исследований
- Проведение множественных экспериментов на одном образце
- Воссоздание полного спектра пластовых условий
- Полноценные параметрических исследований



Вычислительный эксперимент: основные возможности

Возможности:

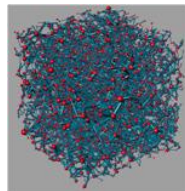
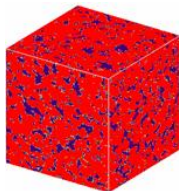
- Достоверная (с обоснованной оценкой степени неопределенности) количественная информация
- Учет широкого спектра физико-химических механизмов
- Массовость «виртуальных» экспериментов
- Практически неограниченные возможности параметрических исследований
- «Сложные» образцы: шлам, неконсолидированные породы и т.д.

Гибкий инструмент дополняющий и
качественно расширяющий стандартные подходы



Основные компоненты цифровой модели

- Геометрическая модель образца:
 - томограмма образца
 - поровая сеть
- Модель течения:
 - мн.-ф./мн.-к. гидродинамика в поровых каналах
 - сетевые модели
- Инструменты калибровки моделей образца керна
- Инструменты ремасштабирования свойств



Образец керна и его модели¹

¹Imperial College Consortium on Pore-scale Modelling



Математические модели

Поровая сеть

- + скорость
- общность, простые модели вытеснения, корректная модель сети

Решеточные уравнения Больцмана

- + простота, выч. эффективность+распараллеливание
- проблемы с устойчивостью расчета → ограничение класса задач

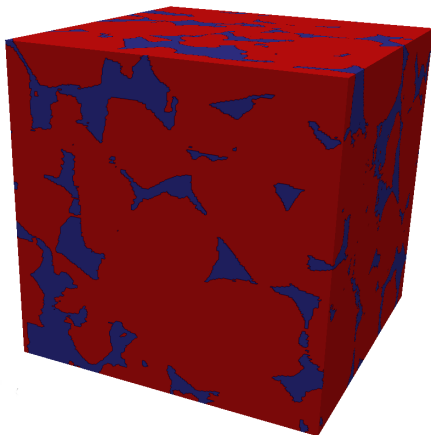
Методы частиц (SPH)

- + простота, устойчивость счета, гибкость
- скорость, калибровка параметров солвера и модели

Гидродинамика + динамика интерфейсов (Навье-Стокс+)

- + скорость, устойчивость, гибкость, общность
- сложность реализации

- Геометрия: микротомограмма образца
- Источник: Imperial Colledge of London



- Sandstone_5
- $300 \times 300 \times 300$



Outline

- 1 Основное назначение DiMP-Hydro — технология «цифровой керн»
- 2 Математическая модель**
- 3 Программный комплекс DiMP-Hydro
- 4 Результаты расчетов



Quasi-Hydrodynamic (QHD) approach

- Basic idea of QHD-approach “in large”:

$$\mathbf{j}_m \neq \rho \mathbf{u} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$$

- Derivation of constitutive relation for \mathbf{w} is based on the 2-nd thermodynamics law
- Physically based regularization of (Cahn–Hilliard–)Navier–Stokes equations, which allows using *simply implementable* explicit finite difference schemes



Special case

Isothermal two-component flow with surface effects

Basic equations

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m &= 0 \\ \frac{\partial(\rho C_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C) &= \operatorname{div}(M \nabla \mu) \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - \mathbf{P}) &= \mathbf{0}\end{aligned}$$

Helmholtz free energy

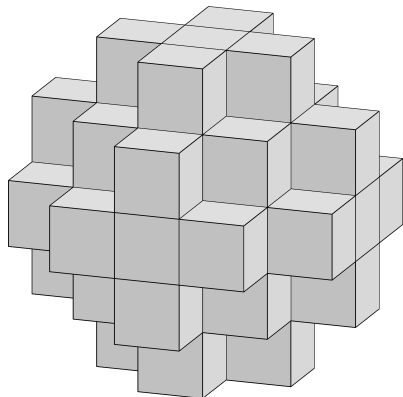
$$\begin{aligned}\Psi(\rho, C, \nabla C) &= \Psi_0(\rho, C) + \frac{\lambda_1}{2} |\nabla C|^2 \\ \Psi_0 &= C \Psi_1 + (1 - C) \Psi_2 + \Psi_{sep} \\ \Psi_1 = \Psi_2 &= c_s^2 \ln \rho, \quad M = M_0 C(1 - C)\end{aligned}$$

Constitutive relations

$$\begin{aligned}\mathbf{w} &= \frac{\tau}{\rho} [\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p + \operatorname{div} \mathbf{Q}] \\ \mathbf{Q} &= -\rho \lambda_1 \nabla C \otimes \nabla C \\ \mathbf{j}_m &= \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \mathbf{P}_{NS} - p \mathbf{I} + \mathbf{Q} + \mathbf{P}_{QHD} \\ \mu &= \frac{\partial \Psi_0}{\partial C} - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C) \\ p &= \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho}\end{aligned}$$

Finite difference scheme



- Additional dissipative terms provide numerical stability of central difference approximations
- Cartesian orthogonal grid
 $h_x = h_y = h_z$
- $\tau \rightarrow \tau_h = \alpha^* \frac{h}{c_s}$
- 51-point stencil in 3D



Outline

- 1 Основное назначение DiMP-Hydro — технология «цифровой керн»
- 2 Математическая модель
- 3 Программный комплекс DiMP-Hydro
- 4 Результаты расчетов

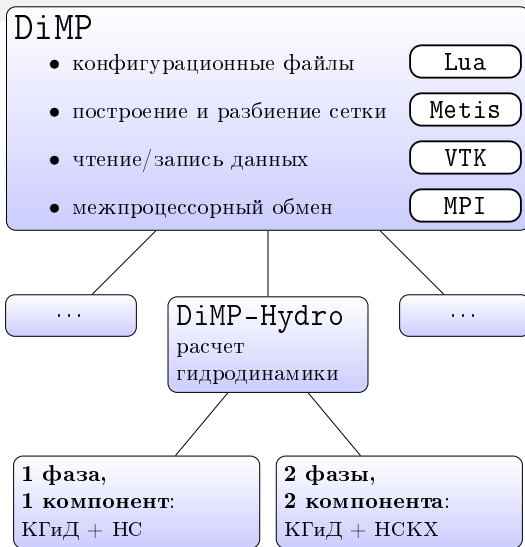


Общая информация

- Разрабатывается в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН с 2014 года
- Язык: C++
- Интерфейс параллельного программирования: MPI
- Декомпозиция расчетной области: Metis
- Конфигурационные файлы: Lua
- Операционная система: Linux
- Чтение/запись данных: VTK
- Успешно используется на вычислительных комплексах в ИПМ (К-60, К-100), Сколтехе (Zhores), Курчатовском институте.



Структура



Пример конфигурационного файла на Lua

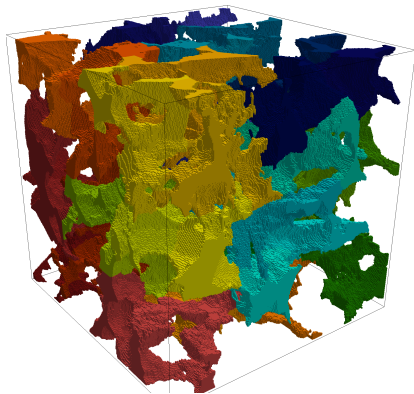
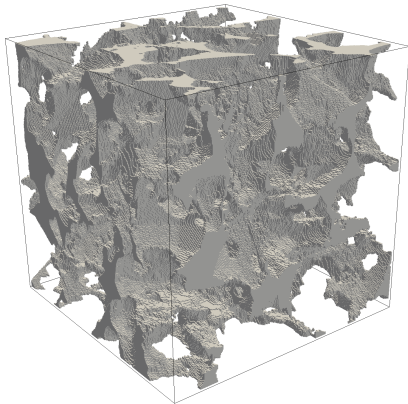
```

1 Source = "RAW" — read simulation geometry from File
2 File = "../sandstone_3.raw" — path to core sample
3 A_psi = 1e+4
4 lambda_1 = 1.25e-4
5 space_step = 1e-4
6 time_step = 6e-8
7 .....
8 — boundary conditions on sides of simulation domain
9 Left = "IFLW" — inflow
10 Right = "OFLW" — outflow
11 ....
12 — initial concentration
13 function Concentration(x,y,z)
14     if (y < 0.1*Ly)
15         return 1.0
16     else
17         return 0.0
18     end
19 end

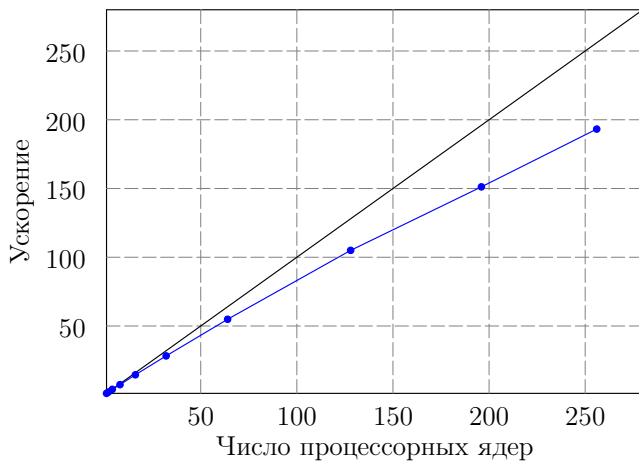
```



Пример декомпозиции расчетной области, Metis



Наблюдаемое ускорение

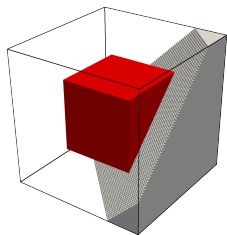


Outline

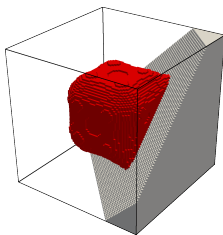
- 1 Основное назначение DiMP-Hydro — технология «цифровой керн»
- 2 Математическая модель
- 3 Программный комплекс DiMP-Hydro
- 4 Результаты расчетов**



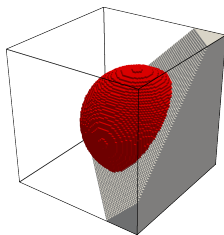
Разные тесты: слияние, растекание



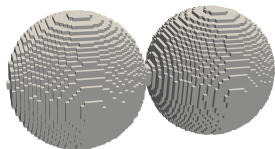
(a)



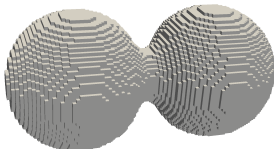
(b)



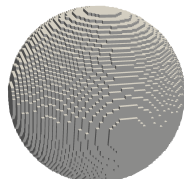
(c)



(a)



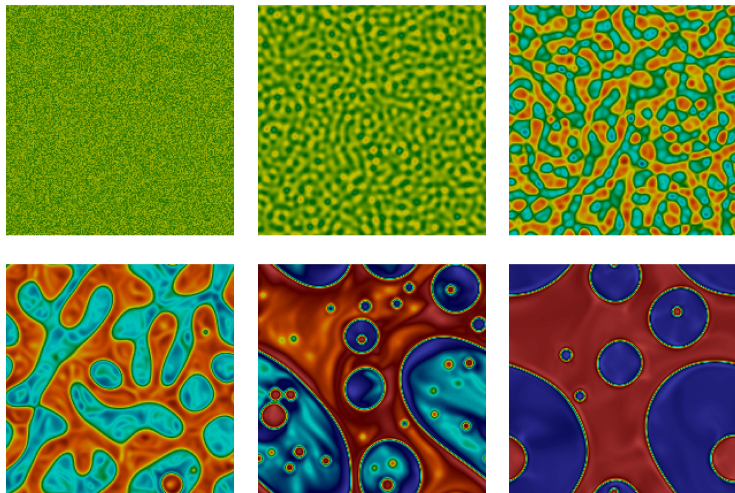
(b)



(c)



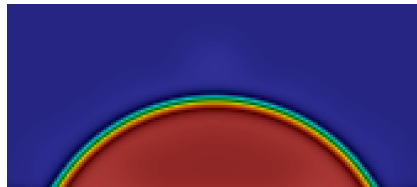
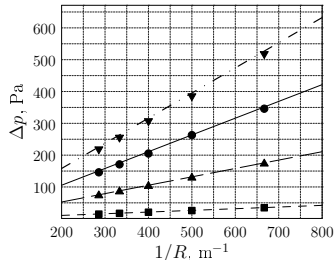
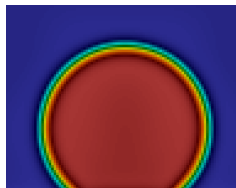
Разные тесты: спинодальный распад

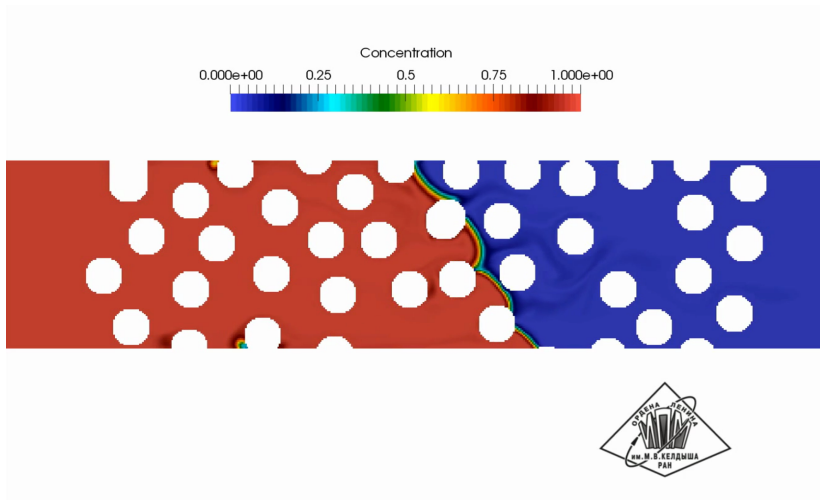


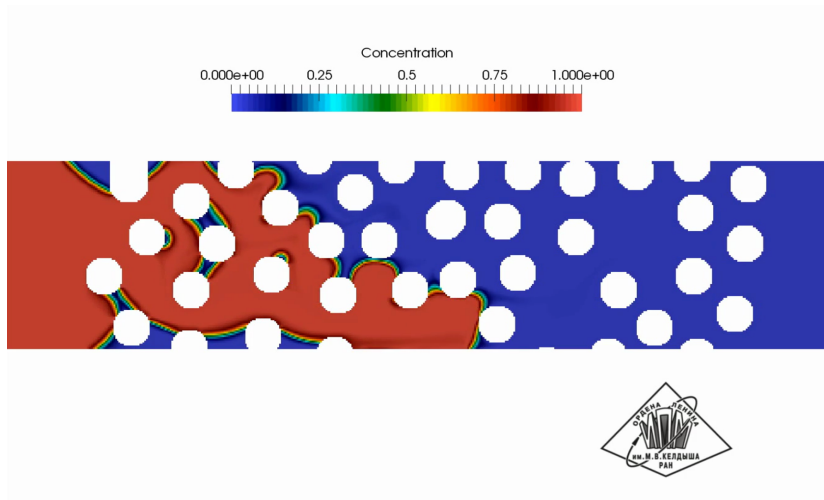
Разные тесты: капиллярное давление, углы смачивания

$$\Delta p = \sigma/R, \quad \Delta p = p_{in} - p_{out},$$

$$\sigma = \rho \sqrt{A_\psi \lambda_1 / 18} = 0.53 \text{ N/m}.$$

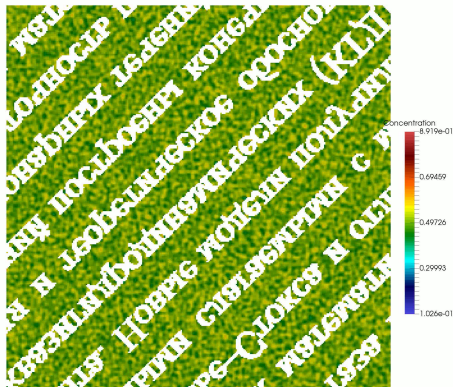
(a) $\theta = 120^\circ$ (b) $\theta = 45^\circ$ 

Двухфазное вытеснение: $\theta = 150^\circ$ 

Двухфазное вытеснение: $\theta = 30^\circ$ 

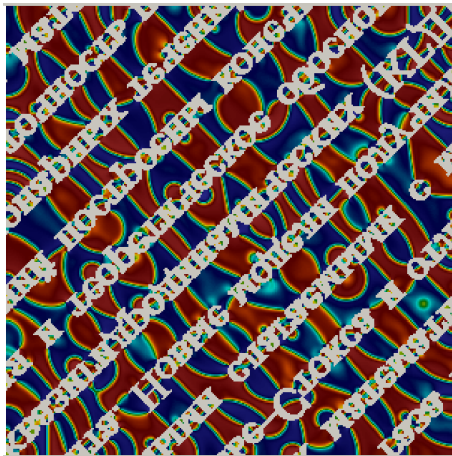
Вытеснение 2D случай, : расчет начального состояния

Спинодальный распад для определения начального состояния системы для последующего расчета вытеснения.



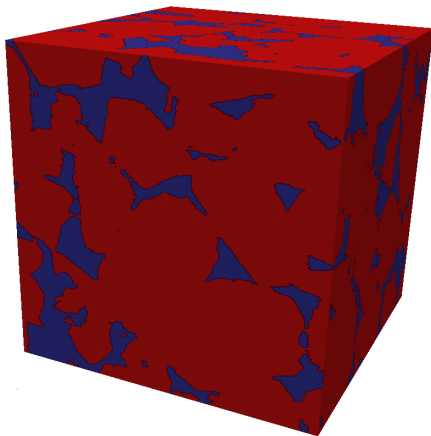
Вытеснение: 2D случай

Контактный угол = 90° .



Расчеты реальных образцов

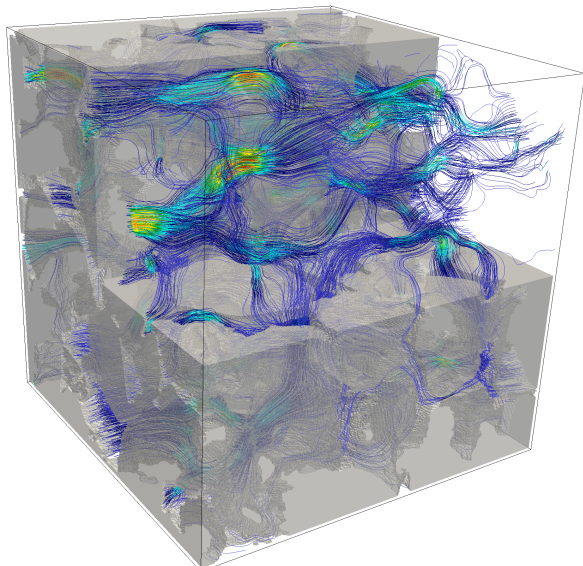
- Геометрия: микротомограмма образца
- Источник: Imperial Colledge of London



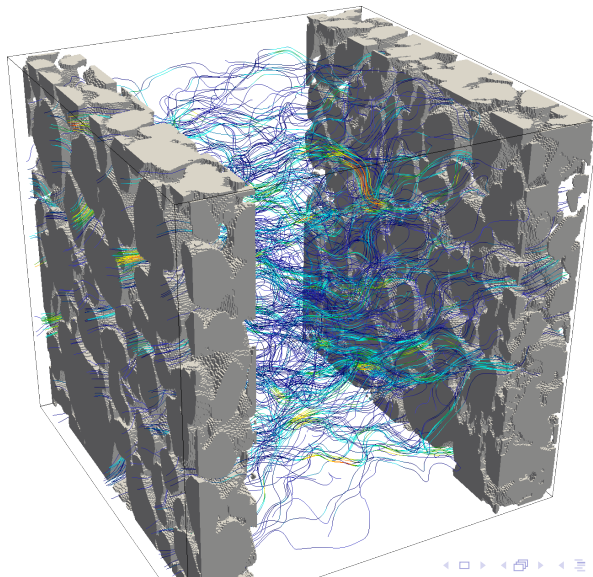
- Sandstone_5
- $300 \times 300 \times 300$



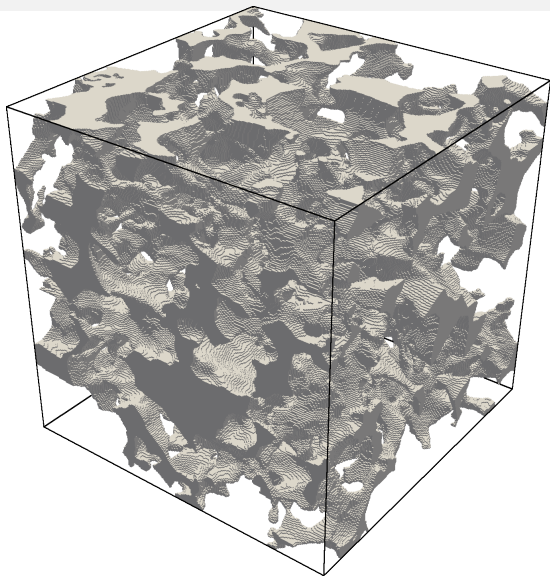
Линии тока



Линии тока



Вытеснение в образце керна



Спасибо за внимание!



Diffuse interface method

- Idea: Van-der-Waals; development: Kortweg, Ginsburg, Landau, Cahn, Hilliard; \Rightarrow “weakly non-local” or “gradient” theories \Rightarrow Navier–Stokes–Cahn–Hilliard–Ginsburg–Landau equations
- Phases are separated by thin layer of finite thickness, where interphase forces take place
- Interface finite thickness is physical rather than numerical effect

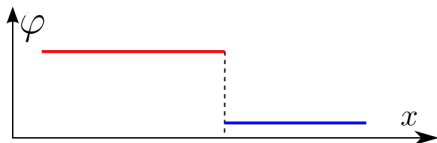


Рис.: “sharp interface”

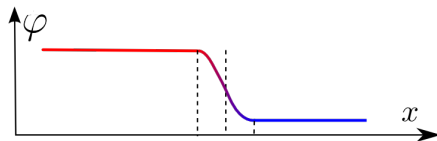


Рис.: “diffuse interface”



Special case: Ψ_{sep} and \mathbf{P}

“Separating” free energy

Ψ_{sep} provides phase separation

$$\Psi_{sep} = A_{\psi} C_1^2 C_2^2 = A_{\psi} C^2 (1 - C)^2$$

Stress tensor

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{NS} - p\mathbf{I} + \mathbf{P}_{QHD} + \mathbf{Q}$$

- Capillary stress tensor $\mathbf{Q} := -\rho\lambda_1 \nabla C \otimes \nabla C$
Provides capillary forces on interface
- QHD-stress term $\mathbf{P}_{QHD} := \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$.

