

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА DiMP-HYDRO ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОТЕЧЕНИЙ

© 2019 г. *В.А. Балашов, Е.Б. Савенков, Б.Н. Четверушкин*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
vladislav.balashov@gmail.com

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Программа СКИФ-НЕДРА, Государственный контракт №14.964.11.0001 от 17 июня 2015г.)

DOI: 10.1134/S0234087919070025

Настоящая работа посвящена описанию программного комплекса DiMP-Hydro, разрабатываемого в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Его назначение состоит в моделировании микротечений однофазных и двухфазных вязких сжимаемых жидкостей с различной реологией в пространственных областях, геометрия которых имеет воксельное представление. Такие геометрические модели являются актуальными ввиду развития и широкого применения методов компьютерной микротомографии. Одной из основных областей приложения данного программного комплекса является расчет микротечений в поровых пространствах образцов горных пород для определения их макроскопических свойств (например, коэффициентов абсолютной проницаемости) и особенностей процессов вытеснения на микроуровне, что составляет одну из задач технологии «цифровой керн». Приведено описание используемых математических моделей, численных алгоритмов и непосредственно программного комплекса. Для описания динамики жидкости используются уравнения Навье–Стокса (в однофазном случае) и Навье–Стокса–Кана–Хилларда (в двухфазном случае), регуляризованные согласно квазигидродинамическому подходу, который является физически обоснованным и позволяет применять сравнительно простые в реализации явные устойчивые численные алгоритмы. Программный комплекс является параллельным и ориентирован на использование высокопроизводительных вычислительных систем. Представлены результаты применения DiMP-Hydro для моделирования микротечений жидкости (в том числе двухфазной) и газа (в том числе умеренно-разреженного) в поровом пространстве образцов горных пород.

Ключевые слова: микротечения, программный комплекс, цифровой керн, квазигидродинамическая регуляризация, уравнения Навье–Стокса–Кана–Хилларда.

DIMP-HYDRO SOLVER FOR DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF FLUID MICROFLOWS WITHIN PORE SPACE OF CORE SAMPLES*V.A. Balashov, E.B. Savenkov, B.N. Chetverushkin*

Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow

The paper is devoted to the description of the software package DiMP-Hydro, being developed in Keldysh Institute of Applied Mathematics (Russian Academy of Sciences). It is intended to simulate microflows of single- and two-phase viscous compressible fluids with different rheology in spatial voxel domains. Such geometric models are relevant due to development and widespread usage of computer microtomography methods. One of the main areas of application of this software package is the simulation of microflows within pore spaces of core (rock) samples. Simulation results can be used to determine macroscopic properties of core samples (for instance, absolute permeability) and features of displacement processes at the micro level, which is one of main tasks of the “digital rock” technology. The description of the used mathematical models, numerical algorithms and the software package is given. To describe the fluid dynamics, the regularized Navier–Stokes (for single-phase flows) and Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations (for two-phase flows) are used. The regularization is based on the quasi-hydrodynamic approach, which is physically justified and makes it possible to use explicit stable numerical algorithms that are relatively simple to implement. The software package is parallel and focused on the use of high-performance computing systems. The results of the use of DiMP-Hydro for simulation of microflows of fluid (including two-phase) and gas (including moderately rarefied) in the pore space of core samples are presented.

Key words: microflows, software package, digital rock physics, quasi-hydrodynamic regularization, Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations.

1. Введение

В настоящее время математическое моделирование является одним из основных средств расширения представлений о механизмах развития сложных естественных и техногенных процессов различной природы. До недавнего времени исследование того или иного процесса в основном проводилось с использованием только одной математической модели, наиболее пригодной для решения конкретной задачи в рамках рассматриваемых допущений. Однако хорошо известно, что для многих процессов принципиально невозможно построение полноценной практической физико-математической формализации конкретного процесса в рамках единой модели. Наиболее полное описание возможно только при использовании иерархии математических моделей различной степени детализации.

Типичной иллюстрацией данного утверждения является цепочка моде-

лей, описывающих течение газов: «молекулярная динамика» → «кинетические уравнения» → «макроскопические уравнения гидродинамики (Эйлера или Навье–Стокса)». Выбор конкретной модели определяется существом рассматриваемой прикладной задачи. При этом модели более низкого уровня («более фундаментальные») по отношению к рассматриваемой обычно определяют ее параметры («коэффициенты переноса»). Альтернативой такому подходу является идентификация параметров модели путем проведения соответствующих лабораторных экспериментов и анализ данных наблюдений. Одновременно с этим, как правило, более «старшие» модели в иерархии являются менее вычислительно затратными. До недавнего времени такая методика была абсолютно преобладающей. Однако современный рост вычислительных мощностей 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 является крайне плодотворным, так как, с одной стороны, позволяет изучить взаимосвязь «элементарных» процессов, протекающих на микроуровне, с феноменологическими макроскопическими законами, а с другой – дает практический способ вычислить те или иные параметры моделей макроуровня на основе проведения виртуальных «лабораторных» экспериментов с привлечением более фундаментальных моделей. Принципиальная возможность применения такого подхода в настоящее время обеспечивается непрерывным ростом мощности современных 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.

В контексте геофизических приложений такой подход в совокупности с современными микротомографическими методами определения геометрии порового пространства имеет название «цифровой керн» («digital rock physics») [1–3]. Применительно к решению задач, связанных с анализом течений флюида (жидкости и/или газа) в пористой среде, он предполагает использование «первичных» (по сравнению с макроскопическими фильтрационными) математических моделей для анализа течений флюида непосредственно в поровом пространстве горных пород. Соответствующие модели активно развиваются в последние десятилетия.

Исторически первым классом моделей такого типа были модели поровых сетей (pore-network models), основанные на представлении геометрии

ческой структуры керна в виде графа, вершины которого соответствуют порам, а ребра – (условным) каналам между ними. Указанный граф строится на основе анализа микротомограммы образца керна. Модель течения представляет собой систему законов сохранения для узлов графа [4–6]. Явным преимуществом этих моделей является сравнительно высокая скорость расчета и экономичность в плане вычислительных ресурсов. Одним из недостатков является наличие этапа построения самой поровой сети. Этот этап может рассматриваться как излишний в силу того, что в практических приложениях соответствующий граф строится на основе «первичной» геометрии порового пространства, являющейся наиболее полной. Отдельную сложность представляет необходимость разработки математической модели течения на геометрическом графе и идентификации ее параметров для конкретного образца породы – эта задача является нетривиальной при необходимости использования сколько-нибудь сложных моделей течения в порах.

По этим причинам в последнее время большое внимание уделяется построению новых моделей, основанных на решении уравнений гидродинамики и непосредственно использующих первичное представление порового пространства образца породы.

Одними из наиболее популярных (в силу сравнительной простоты и эффективности расчета на высокопроизводительных вычислительных машинах) являются решеточные методы Больцмана [7, 8]. Для однофазных задач уравнения решеточного метода Больцмана, с одной стороны, могут быть построены как специального вида аппроксимации уравнений Больцмана [9], с другой – уравнения Навье–Стокса могут быть получены как их гидродинамический предел, то есть с помощью предельного перехода при стремлении к нулю параметров решеточных уравнений Больцмана [10, 11]. Поэтому указанный метод можно рассматривать как специальные аппроксимации непосредственно уравнений однофазной гидродинамики.

Для многофазных задач ситуация качественно иная: в этом случае дискретная модель среды строится искусственно, так чтобы гидродинамический предел решеточных уравнений с некоторой точностью совпадал с макроскопическими уравнениями гидродинамики многофазного флюида. Обоснование корректности и применимости решеточного метода Больцмана (и как численного метода, и как дискретной модели среды) сводится к построению дифференциальной формы (гидродинамического предела) соответствующих дискретных уравнений метода. Если получающиеся в результате уравнения «близки» (то есть отличаются на асимптотически малые

поправки) к дифференциальным уравнением, описывающим течение, то применимость метода считается обоснованной [12]. Так в [13] в явном виде построен вид гидродинамического предела целого ряда распространенных вариантов решеточного метода Больцмана и проанализирован вид дополнительных слагаемых, отличающих эти уравнения от уравнений многофазной гидродинамики с использованием модели «диффузной границы» (см. ниже). Отметим, что не все из них приводят (в рамках перехода к гидродинамическому пределу) к корректным уравнениям течения многофазной жидкости: получающиеся уравнения могут содержать слагаемые, не являющиеся асимптотически малыми при стремлении параметров дискретизации к нулю и не имеющие физического смысла [13]. В настоящее время известно несколько разновидностей решеточного метода Больцмана для описания течений многофазной многокомпонентной жидкости, которые в основном отличаются способом учета межфазного взаимодействия [14–16].

Другие подходы для прямого моделирования течений жидкости в геометрии порового пространства основаны на непосредственном решении уравнений Навье–Стокса или их обобщений, учитывающих межфазное взаимодействие. Несмотря на множество используемых вычислительных подходов для моделирования движения многофазного флюида с прямым разрешением динамики контактных границ, в настоящее время известно два основных подхода для описания процессов, происходящих на границе раздела флюидов (двух фаз с одним компонентным составом, но в разных агрегатных состояниях, – или двух различных флюидов в жидкой фазе). Эти подходы носят названия методов «четкой границы» («sharp interface») и «диффузной границы» («diffuse interface»). В рамках каждого из них в настоящее время предложен целый ряд моделей для описания течений многофазного флюида.

Модель «четкой границы» предполагает, что граница раздела фаз является математической поверхностью (геометрическим объектом нулевой «толщины»). Значения описывающих течение параметров, отнесенных к различным сторонам границы, могут иметь разрыв и связаны между собой дополнительными условиями, по сути и определяющими модель.

Модели типа «диффузной границы», также известные как модели фазового поля, предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы. Более детальное изложение приведено, например, в обзорных работах [17–20]. Проводя аналогию с уравнениями газовой динамики, можно сказать, что модель «четкой грани-

цы» с условием Юнга–Лапласа соответствует модели ударной волны с условиями Гюгонио, в то время как модель «диффузной границы» соответствует моделям, описывающим структуру ударной волны в рамках макроскопической термодинамики. Таким образом, в моделях типа «диффузной границы» скачкообразное изменение свойств смеси заменяется непрерывным, но быстрым их изменением.

При использовании модели «четкой границы» в ряде вычислительных алгоритмов «размазывание» границы между фазами также происходит, однако является лишь схемным эффектом, связанным с ее диссипативными свойствами. В моделях типа «диффузной границы» конечная ширина «границы» является физическим, а не численным эффектом. Более детальное описание уравнений моделей типа «четкой границы», их численного решения и примеров применения можно найти, например, в [21–23]. Отметим, что для многих моделей «диффузной границы» показано, что в пределе исчезающе малой толщины переходного слоя они вырождаются в классические модели «четкой границы».

К методам, которые могут быть использованы при моделировании течений многофазного флюида в системе пор пород–коллекторов, относятся методы, использующие «неявное» описание геометрии границы раздела, среди которых наиболее популярны метод «множеств уровня» («level set method») [24, 25] и метод «жидкого объема» («volume of fluid method», VoF) [26–28].

Отметим, что описанные выше модели типа «четкой границы» верны только в том случае, если размеры «капель» достаточно велики, то есть радиус кривизны капель существенно больше ширины реальной границы раздела фаз (составляющей для жидкостей микроскопические размеры величиной порядка размеров молекул жидкости). Это условие обеспечивает применимость соотношения Юнга–Лапласа. По этой причине рассматриваемый подход, вообще говоря, не описывает процессы, связанные с изменением топологии границ раздела фаз – например, слияние двух областей, занятых одной фазой («капель») или их разделение. Однако на практике такие эффекты наблюдаются в расчетах по рассматриваемой методике. Наличие их связано исключительно с диссипативными свойствами используемых разностных схем. Реальных физических механизмов, обеспечивающих возможность слияния «капель», в моделях типа «четкой границы» не существует. Однако такие механизмы естественным образом присутствуют в моделях типа «диффузной границы». Одной из наиболее популярных моделей данного типа являются уравнения Навье–Стокса–Кана–Хилларда (НСКХ)

[18], в которых пространственное распределение фаз жидкости описывается непрерывным скалярным полем массовой концентрации одного из компонентов смеси. Отметим, что в явном виде понятие фазы в рассматриваемом типе моделей не вводится. Однако благодаря специальному виду свободной энергии смеси, содержащей слагаемые, зависящие от градиента концентраций компонент, в области течения образуются подобласти, занятые смесью с практически однородным по пространству составом. Это позволяет считать, что указанные подобласти пространства заняты отдельными фазами. При этом вид выражения для свободной энергии смеси препятствует их смешению.

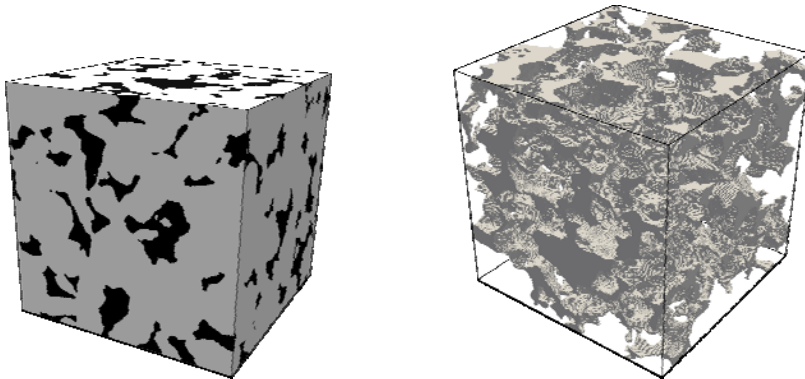
В последние десятилетия интерес к моделям диффузной границы сильно вырос, прежде всего по той причине, что они предоставляют естественный и термодинамически согласованный способ описания процессов, пригодный для прямого моделирования многофазных течений. Отметим, что к моделям этого типа можно отнести и метод функционала плотности [29, 30], составляющий основу симулятора Schlumberger CoreFlow [31].

В программном комплексе DiMP-Hydro для описания многофазных течений используется квазигидродинамическая (КГиД) регуляризация модели НСКХ, которая заключается в добавлении в уравнения системы специальных диссипативных слагаемых, пропорциональных малому параметру, который имеет размерность времени. Для моделей без учета поверхностных эффектов этот подход представлен в монографиях [32–34]. В работах авторов [35, 36] выполнено его обобщение на случай многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов. Существенно, что указанная регуляризация является физически обоснованной (то есть обеспечивает выполнение фундаментальных термодинамических свойств) и может быть построена непосредственно при выводе системы уравнений НСКХ в рамках процедуры Колмана–Нолла [35] (а не в результате последующей «дополнительной» регуляризации).

С точки зрения описания динамики многофазных сред используемая модель аналогична известным ранее вариантам моделей типа НСКХ и переходит в них при $\tau = 0$. С другой стороны, наличие в уравнениях диссипативных слагаемых позволяет использовать для численной аппроксимации уравнений модели сравнительно простые явные устойчивые симметричные по пространству разностные схемы.

При использовании гидродинамических моделей для анализа течений в поровом пространстве микрообразцов горных пород стандартным способом описания геометрии порового пространства является его воксельное пред-

ставление. По существу, геометрия области задается трехмерным бинарным массивом, каждый элемент которого имеет значение «1» или «0». При этом области течения соответствует значение «0». Другими словами, область течения задается в виде трехмерной двухцветной «фотографии» образца зерна, где один из цветов соответствует породе, а второй – поровому пространству. По аналогии с обычными растровыми изображениями, ячейки массива с центрами в узлах декартовой ортогональной расчетной сетки, называются вокселями (voxel – VOlumtric ELement, аналогично pixel – PICTure Element). Актуальность воксельного представления геометрии расчетной области связана с тем, что для ряда искусственных и природных сред геометрия расчетной области не может быть охарактеризована точно (например, это касается рассматриваемых здесь и далее микрообразцов горных пород). Для построения геометрических моделей таких сред часто используют компьютерную микротомографию. На основе ее результатов строят бинарное трехмерное («воксельное») изображение образца исследуемого материала [1,37]. Часто для таких задач геометрию расчетной области выбирают фактически совпадающей с построенным воксельным изображением. На рис. 1а, б показан образец песчаника [38] и его поровое пространство.



а) Микрообразец. Черный цвет соответствует поровому пространству, серый – породе.

б) Поровое пространство. Для наглядности порода не представлена.

Рис.1. Образец песчаника S_9 .

В рамках работ по рассматриваемому направлению в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН с 2015 года разрабатывается комплекс средств математического моделирования (математические модели, вычислительные алгоритмы и их программная реализация), которые привели к разработке программной платформы DiMP и программного комплекса DiMP-Hydro, которому посвящена представленная работа. В настоящее время основное назначение

DiMP-Hydro – математическое моделирование течений различных жидкостей и газов в поровом пространстве горных пород. С помощью DiMP-Hydro возможен расчет течений следующих сред: однофазных жидкостей; газов с учетом эффекта проскальзывания на границе с твердой поверхностью в случае умеренно-разреженных течений; двухфазных двухкомпонентных жидкостей с учетом межфазных эффектов взаимодействия: поверхностного натяжения, контактного угла на твердой стенке и др.; расчет однофазных жидкостей с неньютоновской реологией. Функциональность разрабатываемого программного симулятора позволяет определять коэффициент абсолютной проницаемости образца, коэффициент Клинкенберга, кривые капиллярных давлений и относительные фазовые проницаемости.

Геометрия расчетной области предполагается воксельной и строится на основе сегментированных результатов микротомографии образцов горных пород. Программный комплекс DiMP-Hydro является параллельным и позволяет проводить расчеты как на настольных ЭВМ, так и на высокопроизводительных суперкомпьютерных вычислительных комплексах. Особенностью реализованного подхода является использование квазигидродинамических регуляризаций уравнений однофазной и многофазной гидродинамики [32, 35].

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 [39, 40], что обеспечивает определенную расширяемость программной реализации. DiMP-Hydro может применяться на большинстве современных вычислительных систем, однако ориентирован прежде всего на высокопроизводительные вычислительные системы с использованием интерфейса параллельного программирования MPI [41].

В представленной работе описаны используемые в программном комплексе математические модели и основные вычислительные алгоритмы. Приведено описание программной реализации. Приведены результаты расчетов, иллюстрирующие работоспособность предложенных научных и технических решений. Более детальное описание численных алгоритмов, математических моделей и результатов моделирования представлено в работах [35, 36, 42–49].

2. Математические модели

Основу DiMP-Hydro составляют уравнения Навье–Стокса (НС) и Навье–Стокса–Кана–Хилларда (НСКХ) [18], регуляризованные согласно

квазигидродинамическому (КГиД) подходу [32–34]. Суть КГиД-регуляризации состоит в термодинамически согласованном введении в основные уравнения модели малых слагаемых диссипативного характера, которые позволяют использовать логически простые явные устойчивые разностные схемы, что является важным аспектом для обеспечения хорошей масштабируемости при расчете на высокопроизводительных суперкомпьютерных комплексах. Также стоит отметить, что в случае моделирования течений умеренно-разреженных газов КГиД-добавки обеспечивают хорошее совпадение получаемых с их использованием результатов с экспериментальными данными при числах Кнудсена порядка 0.1 [32,33].

2.1. Модель однофазного однокомпонентного течения. КГиД-система уравнений для описания вязких сжимаемых теплопроводных однокомпонентных однофазных жидкостей и газов представлена в [32, 34]. Здесь мы ограничимся случаем изотермических течений жидкости без учета внешних сил:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{\Pi}, \quad (2)$$

где ρ – плотность, \mathbf{u} – вектор скорости, $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$ – вектор плотности потока массы, $p = c_s^2 \rho$ – давление, c_s – скорость звука, $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{\text{NS}} + \mathbf{\Pi}^\tau$ – тензор вязких напряжений, $\mathbf{\Pi}^{\text{NS}} = \eta \left[(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - (2/3) \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} \right]$ – классический тензор вязких напряжений Навье-Стокса, \mathbf{I} – единичный тензор, η – коэффициент динамической вязкости, $\mathbf{\Pi}^\tau = \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$ – регуляризирующий тензор напряжений, $\mathbf{w} = (\tau / \rho)(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p)$, τ – малый параметр, имеющий размерность времени. Для течений газа параметр τ с точностью до коэффициента порядка единицы равен среднему времени свободного пробега молекул [32, стр. 42].

В случае течения умеренно-разреженного газа КГиД-параметр вычисляется согласно выражению $\tau = \eta / (p \operatorname{Sc})$, где Sc – число Шмидта, а на границе с твердой поверхностью задаются классические условия скольжения Максвелла:

$$\partial_{\mathbf{n}} \rho = 0, \quad u_n = 0, \quad \mathbf{u}_\tau = \lambda \frac{2 - \sigma}{\sigma} \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u}_\tau, \quad (3)$$

где σ – коэффициент аккомодации, λ – длина свободного пробега, \mathbf{n} – единичная внутренняя нормаль к границе, $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ – нормальная составляющая скорости, а $\mathbf{u}_\tau = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \mathbf{u}$ – касательная. Отметим, что из первого и второго условий (3) следует отсутствие потока массы через границу $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0$.

Если рассматривается течение плотного газа или жидкости, то на границе области используются условия прилипания $\mathbf{u} = \mathbf{0}$. В этом случае КГид-слагаемые рассматриваются исключительно как регуляризаторы, а для регуляризирующего параметра можно использовать выражение $\tau = \alpha^* h / c_s$, где α^* – безразмерное число, выбираемое из соображений устойчивости расчета, h – пространственный шаг разностной сетки.

2.2. Модель двухфазного двухкомпонентного течения. В [35,36] авторами выполнено построение квазигидродинамической регуляризации полной системы уравнений многофазной многокомпонентной гидродинамики с учетом различных межфазных взаимодействий. Исследованию частного случая двухфазной двухкомпонентной изотермической системы посвящены работы [46–49]. КГид-регуляризованная система уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда, описывающая эволюцию изотермической вязкой двухфазной двухкомпонентной жидкости без учета внешних сил, имеет следующий вид:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0,$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \mathbf{\Pi},$$

$$\partial_t (\rho C) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m C) = \operatorname{div} (M \nabla \mu).$$

Здесь ρ – полная плотность (плотность смеси), \mathbf{u} – скорость жидкости; C – массовая концентрация первого компонента жидкости: $C = C_1$, $C_2 = 1 - C_1$, $C_i = \rho_i / \rho$, ρ_i – массовая плотность i -го компонента, $i = 1, 2$ – номер компонента.

Следуя [50], предположим, что свободная энергия Гельмгольца зависит как от состава смеси в рассматриваемой точке пространства, так и от состава смеси в непосредственной ее окрестности, то есть $\Psi = \Psi(C, \nabla C, \nabla^2 C, \dots)$. Разлагая эту функцию в ряд Тейлора в окрестности однородного состояния, используя соображения симметрии и отбрасывая старшие слагаемые получим [50, 51]

$$\Psi = \Psi_0(C) + (\lambda_1 / 2) |\nabla C|^2. \quad (4)$$

Здесь первое слагаемое, зависящее только от локального состояния (значения C в рассматриваемой точке пространства), отвечает за разделение фаз и представляет собой свободную энергию смеси, которую она имела бы в од-

нородном состоянии. Второе слагаемое в (4), зависящее от ∇C (а значит, от распределения концентрации в малой окрестности рассматриваемой точки пространства), представляет собой «градиентную энергию», которая является «поправкой» на неоднородность и позволяет моделировать межфазные эффекты (например поверхностное натяжение) [50, 51]. Выражение (4) часто называют представлением свободной энергии в форме Гинзбурга–Ландау [51, 52].

Часто первое слагаемое в (4) представляют в виде «двухъямного» потенциала $\Psi_0(C) = A_\psi C^2(1-C)^2$ (double well potential) [18,53,54]. В этом случае Ψ_0 имеет минимумы при $C = 0$ и $C = 1$, что соответствует «чистым» компонентам (фазам). Ширина межфазного слоя и величина поверхностного натяжения определяются параметрами A_ψ и λ_1 .

На основе (4) строятся определяющие соотношения для тензора напряжений, КГиД-слагаемых и др. (например, с помощью процедуры Колмана–Нолла) [35,36,55]. Результирующий тензор напряжений задается выражением $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{NS} - \mathbf{Q} + \mathbf{\Pi}^\tau$, где $\mathbf{Q} = \lambda_1 \rho \nabla C \otimes \nabla C$ – тензор капиллярных напряжений. Параметр $M > 0$ – коэффициент подвижности, а обобщенный химический потенциал $\mu(\rho, C)$ задается выражением

$$\mu(\rho, C) = \partial_C \Psi_0(\rho, C) - (\lambda_1 / \rho) \operatorname{div}(\rho \nabla C).$$

Регуляризирующая скорость имеет вид $\mathbf{w} = (\tau / \rho)[\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p + \operatorname{div} \mathbf{Q}]$.

Для задания контактного угла θ между твердой границей и межфазной поверхностью используется следующее граничное условие [56]:

$$\partial_{\mathbf{n}} C = \frac{6\sigma \cos \theta}{\rho \lambda_1} C(1-C),$$

которое дополняется условиями

$$\partial_{\mathbf{n}} \mu = 0, \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \partial_{\mathbf{n}} p = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (5)$$

Последнее условие в (5) необходимо, поскольку оно, в совокупности с условием прилипания, обеспечивает равенство $\mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0$, а значит, и условие непротекания $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0$.

В приведенных ниже результатах расчетов для простоты рассматривалась смесь двух жидкостей с одинаковыми уравнениями состояния. В этом случае для давления имеем $p = c_s^2 \rho$, где c_s – скорость звука.

3. Численные алгоритмы

Подробное описание используемых алгоритмов для расчета однофазных течений можно найти в [44, 45]; для двухфазных двухкомпонентных – в [46-49]. В данном разделе мы кратко опишем используемую разностную схему. При этом ограничимся случаем однофазных течений с условиями прилипания.

Пусть $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ – область расчета. На $[0, L_x]$ введем равномерную сетку $\bar{\omega}_{xh}$ с шагом $h_x = h$ с узлами $h/2 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x} = L_x - h/2$. Узлы с индексами $0, -1, \dots$ и $N_x + 1, N_x + 2, \dots$ являются фиктивными, то есть такими, что они заведомо относятся либо к неактивным ячейкам, либо используются для постановки краевых условий (втекания, вытекания, периодичности и т.п.). Пусть ω_{xh} состоит из узлов x_m , $2 \leq m \leq N_x - 1$, являющихся внутренними для $\bar{\omega}_{xh}$. Введем вспомогательную двойственную сетку $\bar{\omega}_{xh}^*$ с узлами $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2$, $0 \leq m \leq N_x$ и соответствующую внутреннюю сетку ω_{xh}^* с узлами $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2$, $1 \leq m \leq N_x - 1$. Аналогично вводятся сетки с шагами $h_y = h_z = h$ на $[0, L_y]$ и $[0, L_z]$ соответственно. Введем трехмерные сетки $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh} \times \bar{\omega}_{zh}$ и $\bar{\omega}_h^* = \bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^* \times \bar{\omega}_{zh}^*$. Аналогично для ω_h , ω_h^* . Пусть сетка $\bar{\omega}_{l^*,h}$ получается из $\bar{\omega}_h$ в результате замены множителя $\bar{\omega}_{lh}$ на $\bar{\omega}_{lh}^*$, а сетка $\bar{\omega}_{l^*,h}^*$ – из $\bar{\omega}_h^*$ в результате замены множителя $\bar{\omega}_{lh}^*$ на $\bar{\omega}_{lh}$. Аналогично вводятся сетки $\omega_{l^*,h}$, $\omega_{l^*,h}^*$. Здесь $l \in \{x, y, z\}$.

Будем считать, что сетка $\bar{\omega}_h$ содержит центры расчетных ячеек. Тогда центры граней лежат на сетках $\bar{\omega}_{l^*,h}$, центры ребер – на $\bar{\omega}_{l^*,h}^*$ ($l \in \{x, y, z\}$), а угловые узлы – на сетке $\bar{\omega}_h^*$. Скорость \mathbf{u} и плотность ρ определим в узлах основной сетки $\bar{\omega}_h$.

Пусть $H(\omega)$ – множество функций, определенных на некоторой сетке ω . Для функций $v \in H(\bar{\omega}_{lh})$ и $u \in H(\bar{\omega}_{lh}^*)$ введем операторы сеточного усреднения $s_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*)$, $s_l^* : H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$, разностного дифференцирования $\delta_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*)$, $\delta_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh})$, $\delta_l^* : H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ и разностного дифференцирования по времени δ_t с шагом Δt по следующим формулам:

$$(s_l v)_{m-1/2} = \frac{v_m + v_{m-1}}{2}, \quad (s_l^* u)_m = \frac{u_{m+1/2} + u_{m-1/2}}{2},$$

$$(\delta_l v)_m = \frac{v_{m+1} - v_{m-1}}{2h}, \quad (\delta_l v)_{m-1/2} = \frac{v_m - v_{m-1}}{h},$$

$$(\delta_l^* u)_m = \frac{u_{m+1/2} - u_{m-1/2}}{h}, \quad \delta_l v = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t}.$$

Отметим, что $\delta_l = \delta_l^* s_l = s_l^* \delta_l$.

Выпишем разностную схему для узлов внутренней сетки ω_h . Рассмотрим такие ячейки, все ближайшие соседи которых являются только активными ячейками (то есть их грани и ребра не инцидентны неактивным ячейкам). Тогда разностная схема для (1) и (2), предложенная в [34], имеет вид

$$\delta_l \rho + \delta_x^* j_{mx} + \delta_y^* j_{my} + \delta_z^* j_{mz} = 0,$$

$$\delta_l (\rho u_k) + \delta_x^* (j_{mx} s_x u_k) + \delta_y^* (j_{my} s_y u_k) + \delta_z^* (j_{mz} s_z u_k) = \delta_x^* \Pi_{xk} + \delta_y^* \Pi_{yk} + \delta_z^* \Pi_{zk},$$

где $k \in \{x, y, z\}$. Дискретизации для $\Pi_{xk} = \Pi_{xk}^{NS} + \Pi_{xk}^\tau$, j_{mx} определены на $\omega_{x^*,h}$:

$$w_x = \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_x + (s_x u_y) \delta_y s_x u_x + (s_x u_z) \delta_z s_x u_x + \frac{\delta_x p}{s_x \rho} \right], \quad \tau^{(x)} = \frac{\eta}{(s_x \rho) c_s^2 \text{Sc}},$$

$$j_{mx} = (s_x \rho) (s_x u_x - w_x), \quad \Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x u_x - \frac{2}{3} \eta (\delta_y s_x u_y + \delta_z s_x u_z),$$

$$\Pi_{xy}^{NS} = \eta \delta_y s_x u_x + \eta \delta_x u_y, \quad \Pi_{xz}^{NS} = \eta \delta_z s_x u_x + \eta \delta_x u_z,$$

$$\Pi_{xx}^\tau = (s_x \rho) (s_x u_x) w_x, \quad \Pi_{xy}^\tau = (s_x \rho) (s_x u_x) w_y^{(x)}, \quad \Pi_{xz}^\tau = (s_x \rho) (s_x u_x) w_z^{(x)},$$

$$w_l^{(x)} = \tau^{(x)} \left[(s_x u_x) \delta_x u_l + (s_x u_y) \delta_y s_x u_l + (s_x u_z) \delta_z s_x u_l + \frac{\delta_l s_x p}{s_x \rho} \right], \quad l \in \{y, z\}.$$

Аналогично определяются Π_{lk} , j_{ml} на $\omega_{l^*,h}$ при $l \in \{y, z\}$, $k \in \{x, y, z\}$.

4. Архитектура программного комплекса

Программную реализацию для численного решения задачи условно можно разбить на две части: подготовительную и основную. Подготовительная часть состоит в считывании входных (конфигурационных) данных (начальные условия, физические параметры задачи, шаги по времени и по пространству и др.), формировании расчетной сетки и ее декомпозиции, организации межпроцессорного обмена. Эта часть кода во многом универсальна и является общей для многих задач, которые можно решать с использованием явных схем на декартовой сетке. Основная же часть опреде-

ляется конкретной физико-математической моделью и используемой разностной схемой. Поэтому эти две части при реализации отделены друг от друга (см. схему на рис.2): подготовительная часть реализована в виде программной платформы DiMP, а основная – в виде программного комплекса DiMP-Hydro.



Рис.2. Структура кода DiMP.

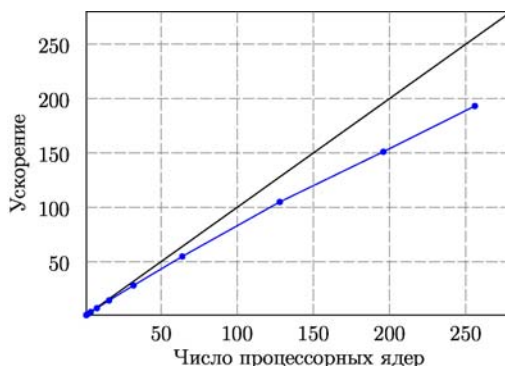


Рис.3. Ускорение, наблюдаемое при расчете однофазных течений в образце S_9 размером 300^3 вокселей.

В качестве языка реализации используется C++. Программа распараллелена с помощью интерфейса параллельного программирования MPI [41]. Для разбиения расчетной сетки между процессами используется библиотека Metis [57]. Для написания конфигурационных файлов используется встраиваемый язык программирования Lua [39, 40]. Это дает множество преимуществ, среди которых отметим возможность использования собственных функций (например, для задания начального распределения какого-либо параметра), развитых структур данных (массивы, списки, таблицы и др.), а также возможности реализации части функциональности программы непосредственно в конфигурационном файле. Язык Lua является очень «легковесным» (в части требуемых вычислительных ресурсов) и хорошо документированным, распространяется под лицензией MIT. В листинге 1 приведен пример конфигурационного файла для расчета двухфазного вытеснения в образце зерна с помощью DiMP-Hydro. Результаты расчетов (распределение полей всех параметров) могут быть сохранены в формате VTK [58].

```

Source = "RAW" -- read simulation geometry from File
File = "../sandstone_3.raw" -- path to binarized core sample image

nx = 300 -- number of cells along Ox axis
ny = 300 -- number of cells along Oy axis
nz = 300 -- number of cells along Oz axis

A_psi = 1e+4 -- coefficient in double well potential [J/kg]
lambda_1 = 1.25e-4 -- gradient energy coefficient [J*m^2/kg]
contact_angle = 30 -- value of contact (wetting) angle [degrees]
init_density = 1 -- initial density [kg/m^3]
init_velocity_x = 0.0 -- initial velocity, x-component [m/s]
init_velocity_y = 0.0 -- initial velocity, y-component [m/s]
init_velocity_z = 0.0 -- initial velocity, z-component [m/s]
dynamic_viscosity = 5e-3 -- dynamic viscosity [Pa*s]
sound_speed = 500 -- speed of sound [m/s]
mobility_zero = 5e-10 -- component mobility [kg*s/m^3]
qhd_alpha = 0.5 -- qhd-regularization parameter

space_step = 1e-4 -- value of space step [m]
time_step = 6e-8 -- value of initial time step [sec]
until_iter = 2e+8 -- whole number of iterations
write_iter = 1000 -- save simulation results on every 1000-th iteration
use_contig_partition = 1 -- contiguity option (Metis)
activity_flag = 0 -- pore space voxel identifier

Lx = nx*space_step -- size of simulation domain along Ox [m]
Ly = ny*space_step -- size of simulation domain along Oy [m]
Lz = nz*space_step -- size of simulation domain along Oz [m]

-- boundary conditions on sides of simulation domain
Top = "WALL" -- solid wall
Bottom = "WALL" -- solid wall
Back = "WALL" -- solid wall
Front = "WALL" -- solid wall
Left = "IFLW" -- inflow
Right = "OFLW" -- outflow

-- initial distribution of concetration
function Concentration(x,y,z)
    if (y < 0.1*Ly)
        return 1.0
    else
        return 0.0
    end
end
end

```

Листинг 1. Пример конфигурационного файла на языке Lua для численного моделирования двухфазного вытеснения в образце горной породы.

Результаты анализа эффективности параллельной реализации программного комплекса представлены на рис.3 в виде зависимости ускорения от числа используемых процессорных ядер. Под ускорением здесь понимается отношение среднего времени t_1 , затраченного при расчете с одним ядром, к среднему времени t_N , затраченному при расчете на N ядрах: t_1/t_N . Черная

сплошная линия соответствует идеальному ускорению. Расчет проведен на образце S_9 размером 300^3 вокселей с использованием суперкомпьютера К-60 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

5. Примеры применения программного комплекса DiMP-Hydro

В настоящем разделе описаны примеры применения программного комплекса DiMP-Hydro для расчета течений в поровом пространстве образцов горных пород. Во всех случаях использованы образцы из коллекции, свободно доступной на сайте Имперского Колледжа Лондона [38].

5.1. Результаты моделирования однофазных течений. При расчете течений в образцах горной породы на двух противоположных гранях рассматриваемого образца задаются граничные условия, соответствующие перепаду давления (как правило ~ 1 Па), а на остальных, включая границу порового пространства, – условия, соответствующие твердой стенке: условия прилипания для жидкости или плотного газа, условия проскальзывания для умеренно-разреженного газа.

Об-ц	$b(N_2)$	k_∞	k_∞ [61]	k_∞ [59]
S_1	645.75	2.168	2.613	1.729
S_2	838.57	4.293	4.928	3.931
S_3	869.09	0.9205	1.264	0.415
S_4	879.12	0.455	0.652	0.285
S_5	743.87	5.915	6.516	4.810
S_6	544.84	13.215	14.588	10.543
S_7	658.87	9.410	10.387	7.495
S_8	643.00	14.930	16.564	13.330
S_9	800.87	2.539	2.747	2.066
S_b	907.91	1.542	1.856	1.287

Таблица 1. Значения b и k_∞ для некоторых образцов из коллекции [38], полученные с помощью DiMP-Hydro и другими методами [59,61].

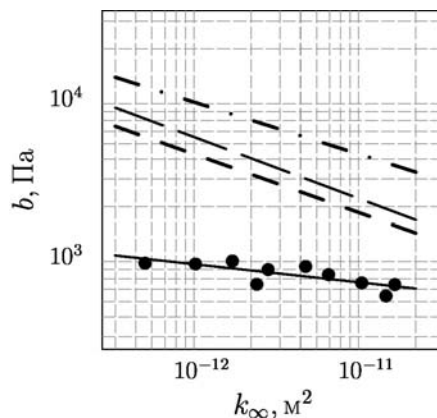


Рис.4. Зависимости b от k_∞ для азота N_2 , полученные с DiMP-Hydro, и из [62-64].

Коэффициент проницаемости k определяется из закона Дарси. Если расчет проводился с условиями прилипания, то полученный коэффициент будем считать абсолютным и обозначать k_∞ . При расчете умеренно-разреженного газа можно определить коэффициент Клинкаберга b , проведя серию расчетов с разными средними значениями давления.

В табл.1 представлены значения коэффициентов k_∞ , полученные с помощью DiMP-Hydro для исследуемых образцов. Там же для сравнения

представлены результаты из работы [59] и значения проницаемости, полученные с помощью открытого программного комплекса Palabos, основанного на методе решеточных уравнений Больцмана [60, 61]. Также в табл.1 представлены значения коэффициента Клинкенберга b , рассчитанного для азота N_2 . На рис.4 полученные значения b (обозначены символами «•») сравниваются с результатами для азота N_2 из других работ: длинный штрих соответствует работе [62], короткий штрих – работе [63], штрих-пунктир – работе [64]; сплошная линия построена методом наименьших квадратов на основе значений b , полученных с помощью DiMP-Hydro. На рис.5 представлены полученные в расчете течения в образце S_8 линии тока.

Результаты других расчетов однофазных течений, в том числе валидационного характера, можно найти в [42, 43].

5.2. Результаты моделирования двухфазных течений. В численных экспериментах по моделированию двухфазного течения в образце S_9 через одну из граней в образец «вытекала» вытесняющая жидкость (фаза) со скоростью u_y^l , а через противоположную грань «вытекала», вообще говоря, смесь вытесняющей и вытесняемой фаз. Последнее обеспечивалось постановкой «свободных» граничных условий (то есть нормальные производные всех параметров равны нулю). На остальных гранях расчетной области, а также на границах порового пространства фиксировались условия, соответствующие твердой стенке. Угол смачивания задавался нейтральным ($\theta=90^\circ$).

На рис.6 представлено изменение насыщенности при различном значении скорости «втекания» u_y^l . Хорошо видна разница в динамике заполнения порового пространства вытесняющей жидкостью. На рис.7а–г представлены последовательные моменты вытеснения для случая $u_y^l=10$ м/с. При этом для наглядности представлена только вытесняющая фаза. В подписях к рисункам указано значение S – насыщенности (объемной доли) образца вытесняющей жидкостью.

Теперь рассмотрим результаты моделирования вытеснения в двумерной (для наглядности) модельной пористой среде. Рассмотрены два случая, в которых твердая стенка имеет разные свойства смачиваемости: (i) $\theta=150^\circ$, то есть вытесняющая жидкость хорошо смачивает твердую поверхность; (ii) $\theta=30^\circ$, то есть вытесняющая жидкость плохо смачивает твердую поверхность.

Длина и высота расчетной области выбраны как $L_x=0.025$ м, $L_y=11L_x/50$ соответственно. Расчетная сетка состоит из 500×110 ячеек.

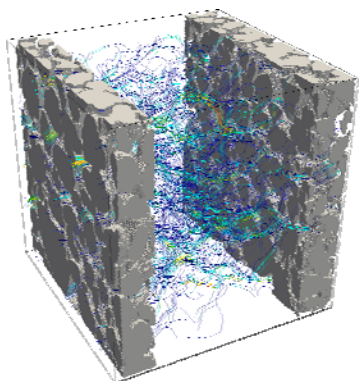


Рис.5. Линии тока в образце горной породы. Полупрозрачным серым цветом обозначена порода.

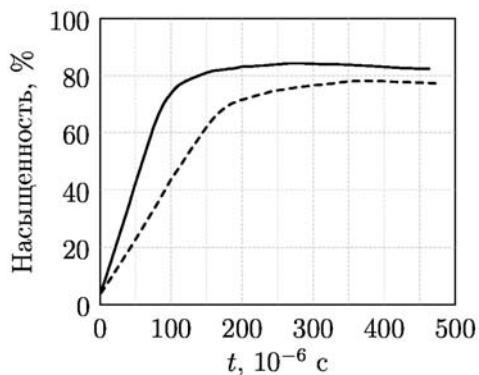
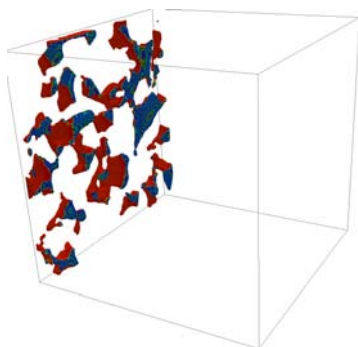
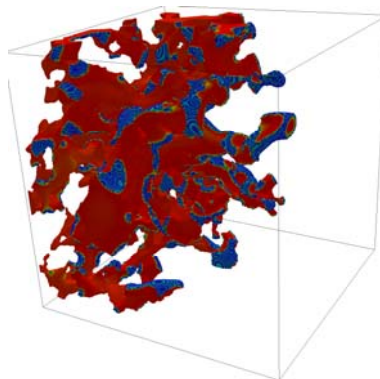


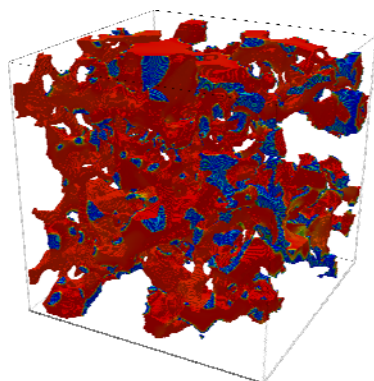
Рис.6. Зависимость насыщенности образца S от времени t для случаев $u_y^l=5\text{м/с}$ (пунктир) и $u_y^l=10\text{м/с}$ (сплошная линия).



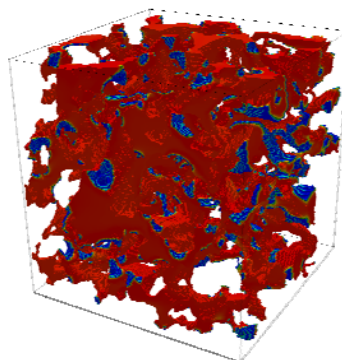
(а) $t=10^{-6}\text{c}$, $S=4.3\%$



(б) $t=50 \cdot 10^{-6}\text{c}$, $S=42.4\%$



(в) $t=100 \cdot 10^{-6}\text{c}$, $S=73.7\%$



(г) $t=200 \cdot 10^{-6}\text{c}$, $S=82\%$

Рис.7. Последовательные этапы вытеснения в образце песчаника S_9 для случая $u_y^l=10\text{м/с}$.

На рис.8 и 9 представлены результаты моделирования для нескольких последовательных моментов времени $t_1=7.5 \cdot 10^{-6} \text{ с}$, $t_2=20 \cdot 10^{-6} \text{ с}$, $t_3=40 \cdot 10^{-6} \text{ с}$. Черным цветом обозначена вытесняющая жидкость, а серым – вытесняемая. Белым цветом отмечены твердые включения («скелет породы»). Ясно видна качественная разница между случаями (i) и (ii): при $\theta=150^\circ$ черная жидкость заполняет почти все поровое пространство, а в случае $\theta=30^\circ$ значительная часть порового пространства остается заполненной серой жидкостью.

а) $t = t_1$ б) $t = t_2$ в) $t = t_3$ Рис.8. $\theta = 30^\circ$.а) $t = t_1$ б) $t = t_2$ в) $t = t_3$ Рис.9. $\theta = 150^\circ$.

6. Заключение

В работе представлено описание программного комплекса DiMP-Hydro, предназначенного для численного моделирования различных микротечений жидкости в областях, имеющих воксельное представление. Одним из основных его применений является расчет течений жидкости в образцах горных пород с прямым разрешением геометрии порового пространства. При этом в качестве жидкости может выступать как газ (в том числе умеренно-разреженный), так и двухфазная жидкость. Особенность DiMP-Hydro заключается в использовании КГид-регуляризованных уравнений Навье–Стокса и Навье–Стокса–Кана–Хилларда. Это позволяет использовать логически простые явные устойчивые разностные алгоритмы, которые имеют большой потенциал при параллельном расчете на высокопроизводительных вычислительных системах. Приведены результаты моделирования течений однофазных и двухфазных жидкостей в различных образцах горных пород.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *M.J. Blunt, B. Bijeljic, H. Dong, O. Gharbi, S. Iglauer, P. Mostaghimi, A. Paluszny, C. Pentland.* Pore-scale imaging and modelling // *Advances in Water Resources*, 2013, v.51, p.197-216.
2. *M.J. Blunt.* Multiphase Flow in Permeable Media: A Pore-Scale Perspective. – Cambridge: Cambridge University Press, 2017, 482 p.
3. *C.F. Berg, O. Lopez, H. Berland.* Industrial applications of digital rock technology // *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2017, v.157, p.131-147.
4. *A. Raoof, H.M. Nick, S.M. Hassanizadeh, C.J. Spiers.* PoreFlow: A complex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated porous media // *Computers & Geosciences*, 2013, v.61, p.160-174.
5. *L. Algive, S. Bekri, O. Vizika.* Pore-Network Modeling Dedicated to the Determination of the Petrophysical-Property Changes in the Presence of Reactive Fluid // *SPE Journal*, 2010, v.15, №3, p.618–633.
6. *M.J. Blunt.* Flow in porous media and pore-network models and multiphase flow // *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 2001, v.6, №3, p.197-207.
7. *F.O. Alpak, F. Gray, N. Saxena, J. Dietderich, R. Hofmann, S. Berg.* A distributed parallel multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method on general-purpose graphics processing units for the rapid and scalable computation of absolute permeability from high-resolution 3D micro-CT images // *Computational Geosciences*, 2018, v.22, № 3, p.815–832.
8. *Q. Kang, P.C. Lichtner, D.R. Janecky.* Lattice Boltzmann Method for Reacting Flows in Porous Media // *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 2010, v.2, №5, p.545–563.
9. *X. He, L.-S. Luo.* Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation // *Physical Review E*, 1997, v.56, №6, p.6811–6817.
10. *W. Yong, W. Zhao, L. Luo.* Theory of the Lattice Boltzmann method: Derivation of macroscopic equations via the Maxwell iteration // *Physical Review E*, 2016, v.93, №3, p.033310.
11. *S. Chen, G.D. Doolen.* Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows // *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, v.30, p.329–364.
12. *H.W. Zheng, C. Shu, Y.T. Chew.* A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio // *Journal of Computational Physics*, 2006, v.218, №1, p.353–371.
13. *E. Aurell, M. Do-Quang.* An inventory of Lattice Boltzmann models of multiphase flows // arXiv:cond-mat/0105372v1 [cond-mat.soft]
14. *S. Succi.* The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. – Oxford: Clarendon Press, 2001, 304 p.
15. *M.C. Sukop, D.T. Thorne.* Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers. 2nd. corrected printing. – Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, p.172.
16. *X. Shan, G. Doolen.* Multicomponent Lattice-Boltzmann Model with Interparticle Interaction // *Journal of Statistical Physics*, 1995, v.81, №1-2, p.379-393.
17. *D.M. Anderson, G.B. McFadden.* A Diffuse-Interface Description of Fluid Systems. – Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 1996, p.35.
18. *D.M. Anderson, G.B. McFadden, A.A. Wheeler.* Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, v.30, p.139-165.
19. *K. Kim.* Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // *Communications in Computational Physics*, 2012, v.12, №3, p.613-661.

20. R. Mauri. Multiphase microfluidics: The Diffuse Interface Model, CISM Courses and Lectures vol. 538. – Springer-Verlag Wien, 2012, p.176.
21. S. Groß. Numerical methods for three-dimensional incompressible two-phase flow problems, Dissertation, 2008, RWTH Aachen.
22. S. Gross, A. Reusken. Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows. - Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2011, p.482.
23. A. Smolianski. Numerical Modeling of Two-Fluid Interfacial Flows, Dissertation, 2001, University of Jyväskylä.
24. C. Gunde, B. Bera, S.K. Mitra. Investigation of water and CO₂ (carbon dioxide) flooding using micro-CT (micro-computed tomography) images of Berea sandstone core using finite element simulations // Energy, 2010, v.35, №12, p.5209-5216.
25. Q. Zhu, Q. Zhou, X. Li. Numerical simulation of displacement characteristics of CO₂ injected in pore-scale porous media // Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 2016, v.8, №1, p.87-92.
26. A.Q. Raeini, M.J. Blunt, B. Bijeljic. Modelling two-phase flow in porous media at the pore scale using the volume-of-fluid method // Journal of Computational Physics, 2012, v.231, №17, p.5653-5668.
27. J. Maes, C. Soulaine. A new compressive scheme to simulate species transfer across fluid interfaces using the Volume-Of-Fluid method // Chemical Engineering Science, 2018, v.190, p.405-418.
28. M. Shams, A.Q. Raeini, M.J. Blunt, B. Bijeljic. A numerical model of two-phase flow at the micro-scale using the volume-of-fluid method // J. of Comp. Phys., 2018, v.357, p.159-182.
29. А.Ю. Демьянов, О.Ю. Динариев, Н.В. Евсеев. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. – М.: Физматлит, 2009, 312 с.;
O.Yu. Dinariev, N.V. Evseev, A.Yu. Demianov. Introduction to the Density Functional Method in Hydrodynamics. – М.:Fizmatlit, 2014, 328 p.
30. R.T. Armstrong, S. Berg, O. Dinariev, N. Evseev, D. Klemin, D. Koroteev, S. Safonov. Modeling of Pore-Scale Two-Phase Phenomena Using Density Functional Hydrodynamics // Transport in Porous Media, 2016, v.112, №3, p.577–607.
31. URL:http://www.slb.com/services/characterization/reservoir/core_pvt_lab/coreflow.aspx [дата обращения: 26.09.2018]
32. Ю.В. Шеретов. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009, 400 с.;
Yu.V. Sheretov. Dinamika sploshnyh sred pri prostranstvenno-vremennom osrednenii. – М.-Izhevsk: RChD, 2009, 400 s.
33. Б.Н. Четверушкин. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. – М.: МАКС Пресс, 2004, 332 с.;
B.N. Chetverushkin. Kinetic schemes and quasi-gasdynamic system of equations. – Barcelona: CIMNE, 2008, 298 p.
34. Т.Г. Елизарова. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. – М.: Научный мир, 2007, 352 с.;
T.G. Elizarova. Quasi-gas dynamic equations. – Springer, Berlin-Heidelberg, 2009, p.286.
35. В.А. Балашов, Е.Б. Савенков. Квазигидродинамическая модель для описания течений многофазной жидкости с учетом межфазного взаимодействия // Прикладная механика и техническая физика, 2018, т. 59, № 3, с. 57–68;

- V.A. Balashov, E.B. Savenkov.* Quasi-Hydrodynamic Model of Multiphase Fluid Flows Taking into Account Phase Interaction // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, 2018, v.59, №3, p.434–444.
36. *В.А. Балашов, Е.Б. Савенков.* Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2015, № 75, с. 1–37;
V.A. Balashov, E.B. Savenkov. Kvazigidroinamicheskaya sistema uravnenij dlya opisaniya techenij mnogofaznoj zhidkosti s uchetom poverhnostnyh effektov // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2015, №75, s. 1-37.
37. *J. Dvorkin, N. Derzhi, E. Diaz, Q. Fang.* Relevance of computational rock physics // Geophysics, 2011, v.76, №5, p.E141–E153.
38. Imperial College London. URL:<http://www.imperial.ac.uk/earth-science/research/research-groups/perm/research/pore-scale-modelling/micro-ct-images-and-networks/> [дата обращения: 26.09.2018]
39. *R. Ierusalimschy, L. Henrique de Figueiredo, W.C. Filho.* Lua – an extensible extension language // Software-Practice & Experience, 1996, v.26, №6, p.635–652.
40. *Р. Иерузалимски.* Программирование на языке Lua. – М.: ДМК Пресс, 2014, 382 с.;
R. Ierusalimschy. Programming in Lua. – Lua.Org, 2016, 388 p.
41. *R.L. Graham, T.S. Woodall, J.M. Squyres.* Open MPI: A Flexible High Performance MPI. In Proceedings, 6th Annual International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Poznan, Poland, September 2005.
42. *В.А. Балашов, Е.Б. Савенков.* Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в микрообразцах горных пород // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2015, № 84, с.1-20;
V.A. Balashov, E.B. Savenkov. Primenenie kvazigidroinamicheskoy sistemy uravnenij dlya pryamogo modelirovaniya techenij v mikroobrazcah gornyh porod // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2015, № 84, s.1-20.
43. *В.А. Балашов, Е.Б. Савенков.* Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в образцах ядра // Доклады академии наук, 2016, т.467, №5, с.534-536;
V.A. Balashov, E.B. Savenkov. Direct pore-scale flow simulation using quasi-hydrodynamic equations // Doklady Physics, 2016, v.61, №4, p.192-194.
44. *В.А. Балашов, В.Е. Борисов.* Алгоритм расчета трехмерных течений умеренно-разреженного газа в областях с воксельной геометрией // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017, № 99, с.1-24;
V.A. Balashov, V.E. Borisov. Algoritm rascheta trekhmernih techenij umerenno-razrezhenogo gaza v oblastiakh s voksel'noj geometriy // Preprinty IPM im. M.V.Keldysha, 2017, № 99, s.1-24.
45. *В.А. Балашов.* Прямое моделирование микротечений умеренно-разреженного газа в образцах горных пород // Матем. Моделирование, 2018, т. 30, № 9, с.3-20.
V.A. Balashov. Pryamoe modelirovanie mikrotechenij umerenno-razrezhenogo gaza v obrazcah gornyh porod // Matem. Modelirovanie, 2018, t. 30, № 9, s.3-20.
46. *V. Balashov, A. Zlotnik, E. Savenkov.* Numerical method for 3D two-component isothermal compressible flows with application to digital rock physics, Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 2019, v.34, №1, p.1-13.
47. *В.А. Балашов, Е.Б. Савенков.* Численный расчет двумерных течений двухфазной жидкости с учетом смачиваемости с помощью квазигидродинамических уравнений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2018, № 131, с.1-18;

- V.A. Balashov, E.B. Savenkov. Chislennyj raschet dvumernyh techenij dvuhfaznoj zhidkosti s uchetom smachivaemosti s pomoshch'yu kvazigidrodinamicheskikh uravnenij // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2018, №131, s.1-18.
48. V. Balashov, A. Zlotnik, E. Savenkov. 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.
49. В.А. Балашов, А.А. Злотник, Е.Б. Савенков. Численный алгоритм для расчета трехмерных двухфазных течений с поверхностными эффектами в областях с воксельной геометрией // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017, № 91, с.1-28;
V.A. Balashov, A.A. Zlotnik, E.B. Savenkov. Chislennyj algoritm dlya rascheta trekhmernyh dvuhfaznyh techenij s poverhnostnymi ehffektami v oblastiakh s voksel'noj geometriiej // Preprinty IPM im. M.V.Keldysha, 2017, № 91, s. 1-28.
50. J.W. Cahn, J.E. Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // The Journal of Chemical Physics, 1958, v.28, No. 2, p.258–267.
51. A. Novick-Cohen, L.A. Segel. Nonlinear aspects of the Cahn-Hilliard equation // Physica D: Nonlinear Phenomena, 1984, v.10, №3, p.277-298.
52. O. Wodo, B. Ganapathysubramanian. Computationally efficient solution to the Cahn-Hilliard equation: Adaptive implicit time schemes, mesh sensitivity analysis and the 3D isoperimetric problem // Journal of Computational Physics, 2011, v.230, №15, p.6037-6060.
53. M.I.M. Copetti, C.M. Elliott. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy // Numerische Mathematik, 1992, v.63, №1, p.39–65.
54. G. Tierra, F. Guillén-González. Numerical Methods for Solving the Cahn-Hilliard Equation and Its Applicability to Related Energy-Based Models // Archives of Computational Methods in Engineering, 2015, v.22, №2, p.269–289.
55. J. Liu. Thermodynamically consistent modeling and simulation of multiphase flows – Austin, the university of Texas, PhD dissertation, 2014.
56. A. Carlson, M. Do-Quang, G. Amberg. Modelling of dynamic wetting far from equilibrium // Physics of fluids, 2009, v.21, №12, p.121701.
57. G. Karypis, V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM Journal on Scientific Computing, 1998, v.20, №1, p.359–392.
58. W. Schroeder, K. Martin, B. Lorensen. The Visualization Toolkit (4th ed.) – Kitware, 2006.
59. H. Dong, M.J. Blunt. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images // Phys. Rev. E, 2009, v.80, p.036307.
60. W. Degruyter, A. Burgisser, O. Bachmann, O. Malaspinas. Synchrotron X-ray microtomography and lattice Boltzmann simulations of gas flow through volcanic pumices // Geosphere, 2010, v.6, №5, p.470-481.
61. Palabos: Parallel lattice Boltzmann solver. URL: <http://www.palabos.org/>
62. J.G. Heid, J.J. McMahon, R.F. Nielsen, S.T. Yuster. Study of the Permeability of Rocks to Homogeneous Fluids // American Petroleum Institute, Drilling and Production Practice, 1950, p.230–244.
63. W. Tanikawa, T. Shimamoto. Comparison of Klinkenberg-corrected gas permeability and water permeability in sedimentary rocks // International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2009, v.46, №2, p.229–238.
64. F.O. Jones, W.W. Owens. A Laboratory Study of Low-Permeability Gas Sands // Journal of Petroleum Technology, 1980, v.32, №9.

Поступила в редакцию 18.10.2018
После доработки 18.10.2018
Принята к публикации 19.11.2018