

УДК 532.546

О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЛЬТРАЦИИ ВОДЫ ПРИ ОКОЛОКРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

© 2020 г. А. А. Афанасьев^{1,*}¹Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*e-mail: afanasyev@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 15.04.2020 г.

После доработки 21.09.2020 г.

Принята к публикации 25.09.2020 г.

Рассмотрена проблема численного моделирования неизотермических течений воды и пара в пористой среде при околоскритических термодинамических условиях. Показано, что уравнения однофазной и двухфазной фильтрации вырождаются в критической точке воды. Обсуждаются недостатки методов расчета течений, позволяющих исключить вырождение с помощью выбора давления и энтальпии в качестве независимых переменных модели. Предложен новый метод расчета при околоскритических термодинамических условиях в стандартных переменных давление–температура. В основе метода лежит приближенное описание фазовой диаграммы жидкости линейными сплайнами, которое позволяет исключить вырождение законов сохранения в критической точке и использовать уравнения состояния, задающие свойства жидкости в зависимости от давления и температуры.

Ключевые слова: пористая среда, фильтрация, критическая точка, неизотермическое течение, численное моделирование

DOI: 10.31857/S0032823520060028

1. Введение. Течения в геологических пористых средах часто сопровождаются усложненными термодинамическими равновесиями насыщающих жидкостей и газов [1, 2]. Например, при фильтрации воды (H_2O) в геотермальных системах могут достигаться критические давление ($P_c = 220.9$ бар) и температура ($T_c = 647$ К), при которых плотность, энтальпия и другие параметры жидкости и пара быстро изменяются в зависимости от P и T . Причем, в пределе $P \rightarrow P_c$, $T \rightarrow T_c$ выполняются условия [3]

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial P} \right|_T \rightarrow \infty, \quad \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_P \rightarrow \infty, \quad (1.1)$$

где ρ и h – плотность и удельная энтальпия H_2O . Условиям (1.1) соответствуют плотное расположение изохор (т.е. линий $\rho = \text{const}$) на рис. 1а и горизонтальные касательные к кривым 2–4 на рис. 1б в критической точке C . Подобное поведение теплофизических параметров приводит к системе нелинейных уравнений, описывающих течения. Их решение, как правило, возможно только с привлечением методов численного моделирования, при создании которых приходится учитывать связанное с условиями (1.1) вырождение системы уравнений при критических параметрах. Для того чтобы исключить вырождение выполняется переход от широко использующихся независимых переменных давление–температура $\mathbf{X} = \{P, T\}$ к нестандартным переменным, например,

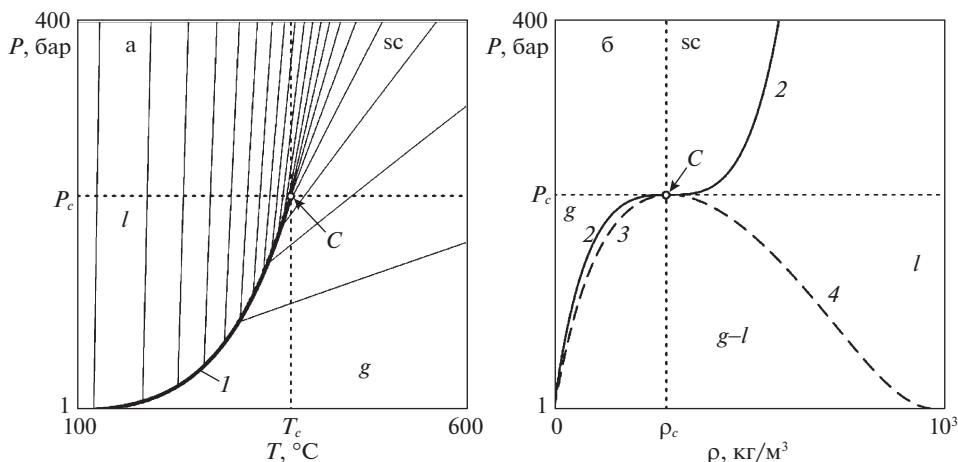


Рис. 1. Фазовая диаграмма H_2O . Кривая 1 – линия термодинамического равновесия пар–жидкость. Линии уровня – изохоры с шагом 50 кг/м^3 (а). Кривые 2–4 – плотность H_2O при $T = T_c$, а также плотности пара и воды в термодинамическом равновесии, соответственно (б). Символами g , l , sc и $g-l$ обозначены области пара, воды, сверхкритической жидкости и двухфазных состояний пар–вода.

давление–энтальпия $\mathbf{Y} = \{P, \bar{h}\}$ [4]. С одной стороны, это позволяет решить отмеченные проблемы в точке C , а, с другой стороны, требует создания новых уравнений состояния, формулируемых в переменных \mathbf{Y} . Подобный подход применялся ранее в исследованиях фильтрации только однокомпонентных жидкостей и бинарных смесей [1, 2, 4], так как он не допускает простого обобщения на смеси трех и более компонент. Обобщение затруднено из-за необходимости создания и калибровки к экспериментальным данным уравнений состояния многокомпонентных смесей в нестандартных переменных \mathbf{Y} .

Учитывая накопленный в прикладных термодинамических расчетах опыт создания уравнений состояния в переменных \mathbf{X} (например, уравнения состояния типа Ван-дер-Ваальса [3]), актуально развитие методов расчета фильтрации при околокритических параметрах именно в этих переменных. Для создания таких методов необходимо решить отмеченную проблему вырождения уравнений модели, что позволит использовать существующие отлаженные подходы для расчета теплофизических свойств смесей при заданных P и T и, следовательно, расширить область приложения моделей фильтрации.

В настоящей работе на примере однокомпонентных течений H_2O дан обзор проблем расчета фильтрации в переменных \mathbf{X} и недостатки их решения с помощью переформулирования модели в переменных \mathbf{Y} . Кратко описывается с чем именно связано вырождение уравнений фильтрации при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$, где $\mathbf{X}_c = \{P_c, T_c\}$. Предложена идея нового метода расчета фильтрации в переменных \mathbf{X} , позволяющего обойти вырождение и, следовательно, использовать существующие уравнения состояния.

2. Основные уравнения. Неизотермическая фильтрация H_2O описывается следующей системой уравнений [4–6]:

$$\partial_t R_j + \nabla \cdot (\mathbf{Q}_j + \Psi_j) = 0, \quad j = m, e \quad (2.1)$$

$$R_m = \phi \sum \rho_i s_i, \quad R_e = \phi \sum \rho_i e_i s_i + (1 - \phi) \rho_r e_r \quad (2.2)$$

$$\mathbf{Q}_m = \sum \rho_i \mathbf{w}_i, \quad \mathbf{Q}_e = \sum \rho_i h_i \mathbf{w}_i$$

$$\mathbf{w}_i = -K \frac{K_{ri}}{\mu_i} (\nabla P - \rho_i \mathbf{g}), \quad i = 1, 2, \quad (2.3)$$

где $\partial_t = \partial/\partial t$, сумма Σ берется по всем фазам $i = 1, \dots, p$, $p \leq 2$ – число фаз, на которые расслаивается H_2O , R_m и R_e – плотности жидкости и внутренней энергии в элементарном объеме сплошной среды, \mathbf{Q}_m – поток массы, \mathbf{Q}_e – конвективный поток энергии, Ψ – потоки, обусловленные теплопроводностью и другими диссипативными процессами, ϕ – пористость, ρ – плотность, s – насыщенность, т.е. объемная доля фазы, e – удельная внутренняя энергия, \mathbf{w} – скорость фильтрации, h – удельная энтальпия, K – абсолютная проницаемость, K_{ri} – относительная фазовая проницаемость, μ – вязкость, P – давление, \mathbf{g} – ускорение свободного падения, индексами $i = 1, 2$ обозначены параметры i -й фазы, а индексом r – скелета пористой среды, соответственно. Уравнения (2.1) – законы сохранения массы H_2O ($j = m$) и энергии ($j = e$), а (2.3) – закон Дарси. Конкретный вид диссипативных потоков Ψ несущественен для дальнейших рассуждений.

Насыщенности фаз удовлетворяют следующему соотношению

$$\sum s_i = 1 \quad (2.4)$$

Тогда, обозначив $s \equiv s_1$, имеем $s_2 = 1 - s$.

Число фаз p не превосходит 2. При $p = 1$ H_2O находится в однофазном состоянии пара, воды или сверхкритической жидкости (области g , l и sc на рис. 1а), а параметры фазы $i = 2$ (ρ_2 , e_2 , h_2 , μ_2) не определены. Они сокращаются в уравнениях (2.1)–(2.3), так как $s_2 = 0$. При $p = 2$ H_2O находится в двухфазном термодинамическом равновесии пар–вода ($g - l$). В этом случае P и T связаны соотношением [5, 6]

$$T = T_f(P), \quad (2.5)$$

где T_f – температура кипения воды при давлении P . Для определенности предполагается, что в двухфазных равновесиях индекс $i = 1$ в уравнениях (2.1)–(2.4) соответствует пару, а $i = 2$ – воде.

На плоскости $\{P, T\}$ уравнение (2.5) задает кривую термодинамического равновесия между паром и водой (рис. 1а, кривая l). Правее этой кривой, при низких P и высоких T , H_2O находится в однофазном состоянии пара (g), а левее – при высоких P и низких T – в однофазном состоянии жидкости (l). Двухфазные состояния ($g - l$) возможны только при P и T , принадлежащих линии (2.5). При возрастании P и T кривая (2.5) обрывается в критической точке C при $P = P_c$, $T = T_c$ ($T_c = T_f(P_c)$). При $P > P_c$ и $T > T_c$ H_2O находится в однофазном состоянии сверхкритической жидкости (sc).

Теплофизические параметры H_2O задаются следующими тремя функциями давления и температуры:

$$\Phi(P, T), \quad \Phi = \{\rho, h, \mu\}, \quad (2.6)$$

для которых кривая (2.5) является линией разреза. На линии (2.5) при $P < P_c$ и $T < T_c$ функции (2.6) принимают два значения, первое из которых соответствует пару ($i = 1$), а второе – воде ($i = 2$). При $p = 2$ оба этих значения используются для замыкания уравнений переноса (2.1)–(2.3). При любых P и T , не принадлежащих кривой (2.5), единственное значение каждой из функций (2.6) используется для замыкания уравне-

ний переноса (2.1)–(2.3) при $p = 1$. Значения функций (2.6) могут рассчитываться, например, с помощью кубического уравнения состояния [3] или многокоэффициентных корреляций [7]. Удельная внутренняя энергия при данных P и T определяется из (2.6) с помощью соотношения $e = h - P/\rho$.

Для определенности предполагается, что скелет пористой среды – несжимаемая среда, внутренняя энергия которой есть линейная функция температуры:

$$\rho_r = \text{const}, \quad e_r = c_r T, \quad (2.7)$$

где $c_r = \text{const}$ – теплоемкость скелета пористой среды.

Функции относительной фазовой проницаемости задаются в виде соотношений

$$K_{ri}(s_i, T), \quad (2.8)$$

удовлетворяющих следующему условию в точке C :

$$\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c: K_{ri}(s_i, T) \rightarrow s_i \quad (2.9)$$

В соотношении (2.8) зависимость K_{ri} от T характеризует изменение поверхностного натяжения между водой и паром при увеличении T . Данная зависимость становится существенной при приближении к критической точке C , в которой, согласно условию (2.9), относительные фазовые проницаемости должны быть равны соответствующим насыщенностям s_i [4, 8].

Подставляя (2.2)–(2.8) в уравнения (2.1) получим замкнутую систему двух уравнений относительно переменных $\mathbf{X} = \{P, T\}$ при $p = 1$ и $\mathbf{X} = \{P, s\}$ при $p = 2$. Здесь \mathbf{X} обозначает независимые переменные, т.е. минимальный набор параметров, распределение которых позволяет восстановить все другие параметры течения. При изменении числа фаз p независимые переменные “переключаются” между $\{P, T\}$ и $\{P, s\}$ [5, 6].

2. О конечно-разностной схеме. При численном моделировании фильтрации часто используются полностью неявные конечно-разностные схемы, построенные методом конечных объемов [9]. Для описания проблем, возникающих при моделировании течений при окологкритических условиях, рассмотрим расчет на сетке, содержащей всего 2 связанные ячейки a и b . Считается, что параметры в ячейке b ($\mathbf{X}^b = \text{const}$) зафиксированы, а изменяются только параметры в ячейке a (\mathbf{X}) из-за перетоков между a и b . Подобную постановку расчета можно интерпретировать следующим образом: ячейка a принадлежит расчетной области Ω , граница которой $\partial\Omega$ совпадает с гранью между a и b , а ячейка b используется для задания условий Дирихле (фиксированных переменных \mathbf{X}^b) на $\partial\Omega$. Здесь и далее параметры в ячейке b обозначены верхним индексом b , а параметры в ячейке a не имеют верхнего индекса.

Конечно-разностные аналоги законов сохранения (2.1) для ячейки a записываются в виде

$$B_j = 0, \quad j = m, e, \quad (3.1)$$

где введено обозначение

$$B_j = (R_j - R_{j,0})V + (Q_j^{ab} + \Psi_j^{ab})S^{ab}\tau \quad (3.2)$$

Здесь V – объем ячейки, $Q_j^{ab}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^b)$ и $\Psi_j^{ab}(\mathbf{X}, \mathbf{X}^b)$ – конечно-разностные аппроксимации потоков \mathbf{Q} и Ψ из a в b , вид которых несущественен для дальнейших рассуждений, S^{ab} – площадь грани между ячейками a и b , а τ – шаг по времени. Величины с нижним индексом 0 – параметры с явного ($t = t_0$), а без индекса – с неявного слоя по времени ($t = t_0 + \tau$).

По постановке расчета предполагается, что \mathbf{X}_0 и \mathbf{X}^b заданы, а \mathbf{X} – неизвестно. Для определения параметров \mathbf{X} необходимо решить систему нелинейных уравнений (3.1). При численном моделировании фильтрации это решение часто ищется итерационным методом Ньютона (методом касательных), основывающемся на линеаризации (3.1) [10]. Учитывая (3.2), линеаризованные уравнения (3.1) запишутся в виде

$$\mathbf{A}\mathbf{X}^T + \mathbf{B} = 0, \quad (3.3)$$

где введен вектор $\mathbf{B} = \{B_m, B_e\}^T$, верхний индекс T обозначает операцию транспонирования, а коэффициенты матрицы \mathbf{A} , имеющей размерность 2×2 , даются соотношениями

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}_R \mathcal{V} + \mathbf{A}_Q \tau, & \mathbf{A}_R &= \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}}, & \mathbf{A}_Q &= \left(\frac{\partial \mathbf{Q}^{ab}}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \Psi^{ab}}{\partial \mathbf{X}} \right) S^{ab} \\ \mathbf{R} &= \{R_m, R_e\}^T, & \mathbf{Q}^{ab} &= \{Q_m^{ab}, Q_e^{ab}\}^T, & \Psi^{ab} &= \{\Psi_m^{ab}, \Psi_e^{ab}\}^T \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для решения уравнений (3.1) относительно \mathbf{X} , на каждой итерации метода Ньютона они линеаризуются и полученная система (3.3) используется для определения нового приближения $\mathbf{X}^T = -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$ [10]. Итерационный процесс повторяется пока не будет достигнута требуемая точность ε ($\|\mathbf{B}\| < \varepsilon$). В системе линейных уравнений (3.3) \mathbf{A} и \mathbf{B} – постоянные, вычисленные при текущем приближении \mathbf{X} . Для надежной работы алгоритма необходимо, чтобы матрица \mathbf{A} удовлетворяла следующим условиям при любых \mathbf{X} (т.е. при любых параметрах фильтрационного течения), в том числе при \mathbf{X}_c :

$$A_{\max} \mathbf{X}\mathbf{X}^T \geq \mathbf{X}\mathbf{A}\mathbf{X}^T \geq A_{\min} \mathbf{X}\mathbf{X}^T > 0 \quad (3.5)$$

Здесь \mathbf{X} – произвольный вектор переменных, а A_{\min} и A_{\max} – некоторые положительные константы. Неравенства (3.5) означают, что матрица \mathbf{A} положительно определена и ее коэффициенты ограничены [11].

Согласно соотношениям (3.4), \mathbf{A} есть сумма двух матриц $\mathbf{A}_R \mathcal{V}$ и $\mathbf{A}_Q \tau$, соответствующих членам с операторами ∂_t и ∇ в законах сохранения (2.1). При $\tau \rightarrow 0$ выполняется условие $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_R \mathcal{V}$, а при $\tau \rightarrow \infty$ – условие $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_Q \tau$. Следовательно, в этих асимптотических случаях выполнение неравенств (3.5) зависит только от коэффициентов матрицы \mathbf{A}_R или \mathbf{A}_Q , соответственно. При численном моделировании фильтрации конечно-разностные аппроксимации \mathbf{Q}^{ab} и Ψ^{ab} часто не приводят к знакоопределенным матрицам \mathbf{A}_Q . В результате, условия (3.5) при $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_Q \tau$ нарушаются, а расчет с большим шагом по времени τ часто невозможен из-за отсутствия сходимости метода Ньютона. Для продолжения расчета приходится уменьшать шаг τ . Для гарантированной возможности расчета течения необходимо потребовать выполнение (3.5) при малых τ , когда $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_R \mathcal{V}$. Тогда, даже если при больших τ сходимость отсутствует, то при уменьшении τ неравенства (3.5) выполняются, а расчет продолжается. Ниже проверяется выполнение условий (3.5) в асимптотическом случае $\tau \rightarrow 0$.

4. Вырождение в критической точке. Рассмотрим проблемы численного моделирования фильтрации, к которым приводят неограниченные производные (1.1) и совпадение параметров пара и воды ($\rho_1 \rightarrow \rho_2$, $h_1 \rightarrow h_2$) при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$. Как отмечено в разделе 2, при $p = 1$ уравнения (2.1) образуют замкнутую систему уравнений относительно пере-

менных $\mathbf{X} = \{P, T\}$. В соответствии с (3.2) и (3.4), вычисляя для этого случая матрицу \mathbf{A}_R , получим:

$$p = 1: \quad \mathbf{A}_R = \begin{pmatrix} \left. \phi \frac{\partial \rho}{\partial P} \right|_T & \left. \phi \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_P \\ \left. \phi \frac{\partial \rho e}{\partial P} \right|_T & \left. \phi \frac{\partial \rho e}{\partial T} \right|_P + (1 - \phi) \rho_r c_r \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

$$\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c: \quad \det \mathbf{A}_R \rightarrow \phi^2 \frac{\partial \rho}{\partial P} \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} - 1 \right) \rightarrow \infty \quad (4.2)$$

При моделировании двухфазных течений ($p = 2$) в переменных $\mathbf{X} = \{P, s\}$ матрица \mathbf{A}_R удовлетворяет следующим соотношениям:

$$p = 2: \quad \mathbf{A}_R = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial R_m}{\partial P} \right|_s & \phi (\rho_1 - \rho_2) \\ \left. \frac{\partial R_e}{\partial P} \right|_s & \phi (\rho_1 h_1 - \rho_2 h_2) \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c: \quad \det \mathbf{A}_R \rightarrow 0 \quad (4.4)$$

При $\mathbf{X} \not\rightarrow \mathbf{X}_c$ расчет параметров (2.6) в соответствии с непротиворечивой термодинамической моделью жидкости (например, основывающейся на уравнении состояния) гарантирует выполнение условий (3.5) для матриц (4.1) и (4.3) и, следовательно, сходимость алгоритмов расчета фильтрации. При $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$, согласно соотношению (4.2), коэффициенты матрицы \mathbf{A}_R неограниченны при $p = 1$ ($A_{\max} \rightarrow \infty$), а, согласно соотношению (4.4) и критерию Сильвестра [11], \mathbf{A}_R не знакоопределена при $p = 2$ ($A_{\min} \rightarrow 0$). В результате, \mathbf{A}_R нельзя обратить, а линеаризованная система (3.3) не имеет решения при $\tau \rightarrow 0$ или ее решение неединственно. Применение метода Ньютона в случаях (4.2) и (4.4) приводит к значительному в пределе $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$ стремящемуся к бесконечности изменению \mathbf{X} за одну итерацию, а численное решение не сходится при любом сколь угодно малом шаге по времени τ .

Общепринятый подход для исключения вырождения в точке C заключается в переходе от \mathbf{X} к другим независимым переменным. Часто используются переменные $\mathbf{Y} = \{P, \bar{h}\}$ [4] или $\{\bar{p}, T\}$ [1], где \bar{h} и \bar{p} – полные, т.е. просуммированные по фазам, удельная энтальпия и плотность:

$$\bar{h} = \sum \rho_i h_i s_i / \bar{\rho}, \quad \bar{\rho} = \sum \rho_i s_i \quad (4.5)$$

Согласно определению (4.5), $\bar{h} = h_1$ и $\bar{\rho} = \rho_1$ при $p = 1$. Предполагается, что в случае переменных \mathbf{Y} , уравнения состояния H_2O задаются вместо уравнений (2.6) в виде

$$\rho(P, h), \quad T(P, h), \quad \mu(P, h), \quad (4.6)$$

а насыщенности фаз вычисляются по \bar{h} из уравнений (4.5). Преимущество \mathbf{Y} перед \mathbf{X} заключается в том, что частные производные функций (4.6) остаются ограниченными при любых осуществимых термобарических параметрах, в том числе в критической точке C (при $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_c = \{P_c, \bar{h}_c\}$). В работе [4] показано, что это гарантирует выполнение (3.5) при любых параметрах однофазных и двухфазных течений.

5. Проблемы использования переменных $\mathbf{Y} = \{P, \bar{h}\}$. Применение нестандартных переменных, в частности \mathbf{Y} , требует определения и быстрого расчета функций (4.6). Это может представлять значительную вычислительную проблему, так как большинство

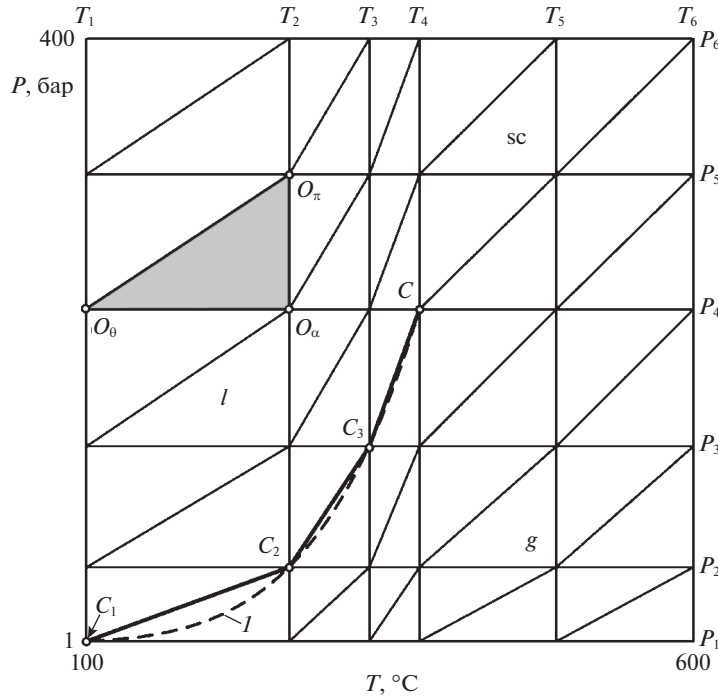


Рис. 2. Триангуляция пространства $\{P, T\}$. Разрывная кривая l – линия термодинамического равновесия.

уравнений состояния жидкостей и газов формулируются в переменных $\mathbf{X} = \{P, T\}$, как, например, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса [3]. Для решения этой проблемы требуется либо создавать новые уравнения состояния в переменных \mathbf{Y} , либо в существующих уравнениях состояния переходить от \mathbf{X} к \mathbf{Y} . Подобная замена переменных используется в [2, 4, 12] для одно- и двухкомпонентных жидкостей, в которых по уравнению состояния Ван-дер-Ваальса рассчитывается термодинамический потенциал жидкости в \mathbf{Y} . Потенциал сохраняется в виде коэффициентов полиномиального сплайна, а расчет термодинамического равновесия сводится к поиску экстремума потенциала. Такой подход сталкивается со значительными техническими проблемами, связанными с необходимостью хранения функций (4.6) в виде усложненных многокоэффициентных сплайнов и неустойчивой сходимостью алгоритмов поиска экстремальных значений потенциала. В этой связи актуально создание метода расчета фильтрации в переменных \mathbf{X} , который позволит с одной стороны использовать существующие уравнения состояния, а с другой стороны исключить вырождение (2.1) при критических термодинамических параметрах. В данной работе для демонстрации основной идеи метода рассмотрим его на примере однокомпонентной жидкости (H_2O).

6. Новый метод расчета фильтрации в переменных \mathbf{X} . Разобьем пространство $\{P, T\}$ прямоугольной сеткой

$$P = P_k, \quad k = 1, \dots, N_P; \quad T = T_n, \quad n = 1, \dots, N_T \quad (6.1)$$

так, чтобы линия термодинамического равновесия (2.5) пересекала ребра ячеек сетки только в их вершинах C, C_1, C_2, C_3 и т.д. Проведем триангуляцию пространства $\{P, T\}$,

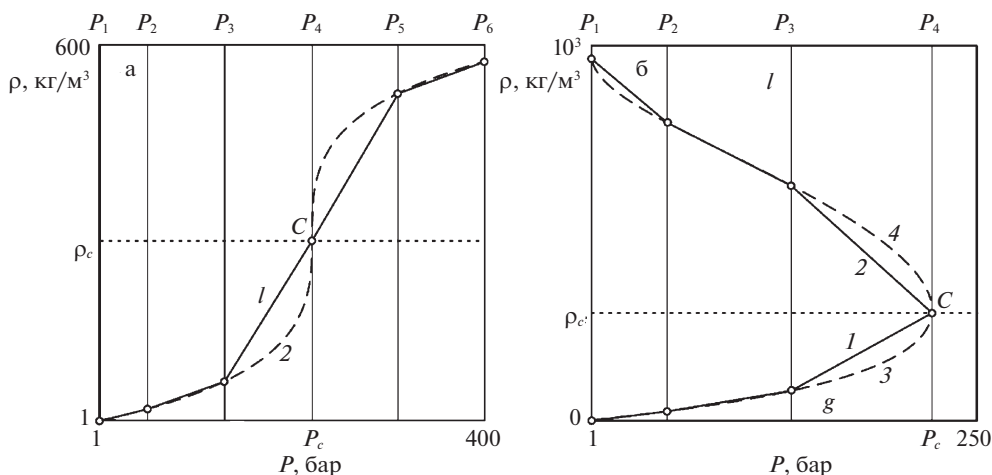


Рис. 3. Плотность H_2O в зависимости от P при $T = T_c$ (а) и на кривой термодинамического равновесия (б). Разрывными линиями показаны зависимости (2.6), а сплошными – их интерполяции сплайнами (6.2).

разбив каждую ячейку диагональю на два треугольника так, чтобы ломаная линия $C_1C_2 \dots C$ состояла из диагоналей – ребер симплексов (т.е. треугольников; рис. 3).

На построенной триангуляции элементы вектора Φ аппроксимируются кусочно-линейными функциями. Для этого в каждом узле сетки (6.1) вычисляются значения (2.6) при соответствующих P_k и T_n . Причем, в вершинах C_1, C_2, C_3 и т.д. вычисляется два значения Φ , одно из которых соответствует воде $\{\rho_1, h_1, \mu_1\}$, а другое – пару $\{\rho_2, h_2, \mu_2\}$. Параметры H_2O (2.6) внутри каждого треугольника аппроксимируются линейными функциями от P и T :

$$\Phi = \mathbf{D}_{\alpha l} + \mathbf{D}_{\pi l}P + \mathbf{D}_{\theta l}T, \quad \Phi, \mathbf{D} = \{\rho, h, \mu\}, \quad l = 1, \dots, L \quad (6.2)$$

Здесь $L = 2(N_P - 1)(N_T - 1)$ – число симплексов, а $\mathbf{D}_{\alpha l}, \mathbf{D}_{\pi l}$ и $\mathbf{D}_{\theta l}$ – коэффициенты сплайна, однозначно определяющиеся значениями (2.6) в вершинах соответствующего симплекса. Например, рассмотрим произвольный треугольник $O_\alpha O_\pi O_\theta$ из построенного разбиения, параметры в вершинах которого обозначим индексами α, π и θ . Для определенности положим, что $P_\alpha = P_\theta < P_\pi$ и $T_\alpha = T_\pi > T_\theta$ (рис. 2). Тогда коэффициенты сплайна (6.2) выражаются в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{\alpha l} &= \Phi_\alpha - \mathbf{D}_{\pi l}\Phi_\pi - \mathbf{D}_{\theta l}\Phi_\theta \\ \mathbf{D}_{\pi l} &= \frac{\Phi_\pi - \Phi_\alpha}{P_\pi - P_\alpha}, \quad \mathbf{D}_{\theta l} = \frac{\Phi_\theta - \Phi_\alpha}{T_\theta - T_\alpha} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Здесь Φ_α, Φ_π и Φ_θ – значения функций (2.6) в O_α, O_π и O_θ , соответственно. Таким образом, на множестве треугольников строятся непрерывные сплайны для (2.6), а ломаная $C_1C_2 \dots C$, интерполирующая линию термодинамического равновесия (2.5) между водой и паром, является линией их разреза. Точность такого приближенного описания соотношений (2.5) и (2.6) сплайнами повышается при использовании более плотной сетки (6.1).

Построенные сплайны обладают двумя важными свойствами. Во-первых, они сохраняют монотонность функций (2.6) вдоль осей P и T и, если сетка (6.1) достаточно плотная, знак определенности матрицы \mathbf{A}_R . В частности, как интерполируемые функции (2.6), так и интерполирующие их сплайны удовлетворяют неравенствам

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial P} \right|_T > 0, \quad \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_P < 0, \quad \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_P > 0 \quad (6.4)$$

Условия (6.4) гарантируют положительный знак коэффициентов сжимаемости и теплового расширения и теплоемкости H_2O при постоянном давлении. Действительно, так как $\partial \rho / \partial P|_T > 0$, то $\rho_\pi > \rho_\alpha$ и соответствующий коэффициент сплайна $\rho_{\pi l} = (\rho_\pi - \rho_\alpha) / (P_\pi - P_\alpha) > 0$ положительный. Следовательно, неравенство $\partial \rho / \partial P|_T = \rho_{\pi l} > 0$ выполняется для сплайна (6.2). Аналогично проверяется выполнение остальных неравенств (6.4).

Известно, что для двухпараметрической среды достаточно задать только одну из функций $\rho(P, T)$ или $h(P, T)$, например, достаточно задать только термическое уравнение состояния $\rho(P, T)$. Используя термодинамические соотношения, другие параметры среды можно выразить через заданную функцию, например, $h(P, T)$ можно выразить из $\rho(P, T)$ [3, 12]. При этом гарантируется выполнение термодинамических неравенств (6.4). Применение сплайна (6.2) предполагает независимое задание $\rho(P, T)$ и $h(P, T)$. В этом смысле термодинамическая модель (6.2), (6.3) является несогласованной. Однако, как показано выше, термодинамические неравенства (6.4), обеспечивающие диссипативность модели фильтрации, для (6.2) выполняются. Этого свойства модели (6.2), (6.3) достаточно для проведения устойчивых расчетов фильтрации.

Если свойства H_2O задаются в форме (6.2) и (6.3), то, согласно (3.2) и (3.4), \mathbf{A}_R имеет вид:

$$\mathbf{A}_R = \begin{pmatrix} \frac{R_{m,\pi} - R_{m,\alpha}}{P_\pi - P_\alpha} & \frac{R_{m,\theta} - R_{m,\alpha}}{T_\theta - T_\alpha} \\ \frac{R_{e,\pi} - R_{e,\alpha}}{P_\pi - P_\alpha} & \frac{R_{e,\theta} - R_{e,\alpha}}{T_\theta - T_\alpha} \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

Если $\mathbf{X} \not\rightarrow \mathbf{X}_c$, то при измельчении сетки (6.1), т.е. при $N_P, N_T \rightarrow \infty$, матрица (6.5) стремится к знакоопределенной матрице (4.1) при $p = 1$ или (4.3) при $p = 2$. Следовательно, матрица (6.5) также знакоопределена при достаточно больших N_P и N_T . Таким образом, построенная триангуляция, использующая выравнивание ребер симплексов вдоль осей P и T , гарантирует выполнение неравенств (3.5) и (6.4) при $\mathbf{X} \not\rightarrow \mathbf{X}_c$. Линейная интерполяция на произвольной триангуляции пространства $\{P, T\}$, отличной от построенной выше, может не удовлетворять условиям (3.5) и (6.4).

Второе важное свойство сплайнов (6.2) заключается в том, что их коэффициенты $\mathbf{D}_{\alpha l}$, $\mathbf{D}_{\pi l}$ и $\mathbf{D}_{\theta l}$ — ограничены, а значит ограничены и производные (6.4) интерполирующих функций в том числе в критической точке C . Действительно, на рис. За построены графики $\rho(P, T_c)$ (кривые 1 и 2, соответственно), а на рис. 3б плотности пара ρ_1 (кривые 1 и 2) и воды ρ_2 (кривые 3 и 4) для (2.6) и сплайна (6.2), соответственно. В отличие от зависимостей (2.6), производные от сплайнов конечные, что обеспечивает выполнение неравенств (3.5) при $p = 1$ и, следовательно, устойчивую сходимость расчета однофазных течений H_2O при околоскритических условиях.

Так как при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$ плотности и энтальпии пара и воды, интерполируемые сплайнами (6.2), совпадают ($\rho_1 \rightarrow \rho_2$, $h_1 \rightarrow h_2$), то, согласно (4.4), расчет двухфазной фильтрации в переменных $\mathbf{X} = \{P, s\}$ при околоскритических условиях невозможен. Это связано с тем, что матрица \mathbf{A}_R дается соотношением (4.3), а неравенства (3.5) не выполняются ($A_{\min} \rightarrow 0$). Покажем, что вырождение можно исключить, выбрав в качестве независимых переменных $\mathbf{X} = \{P, \bar{\rho}\}$, где полная плотность $\bar{\rho}$ дается (4.5). В этом случае \mathbf{A}_R дается соотношением

$$\mathbf{A}_R = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial R_m}{\partial P} \right|_{\bar{\rho}} & \phi \\ \left. \frac{\partial R_e}{\partial P} \right|_{\bar{\rho}} & \phi \frac{\rho_1 h_1 - \rho_2 h_2}{\rho_1 - \rho_2} \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Коэффициенты в правом столбце (6.6) ограничены при любом \mathbf{X} , в том числе при \mathbf{X}_c , а условия (3.5) выполняются. Это обеспечивает устойчивую сходимость расчета двухфазных течений H_2O при околоскритических условиях.

Таким образом, применение кусочно-линейных сплайнов позволяет исключить вырождение уравнений фильтрации при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$. При этом, однофазные течения необходимо рассчитывать в переменных $\mathbf{X} = \{P, T\}$, а двухфазные – в $\mathbf{X} = \{P, \bar{\rho}\}$. Вырождение удастся исключить за счет приближенного описания теплофизических свойств линейными функциями, причем погрешность этого описания увеличивается при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$ (рис. 3). Сплайны (6.2) описывают (2.5) и (2.6) точнее на более подробных сетках (6.1). Однако, при $N_P, N_T \rightarrow \infty$ константа A_{\min} в условии (3.5) уменьшается, имея предел $A_{\min} \rightarrow 0$. Следовательно, более точная аппроксимация (2.5) и (2.6) сплайнами, приводит к ухудшению сходимости алгоритма расчета фильтрации (методом Ньютона) при $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_c$. Применение сплайнов (6.2) в численном моделировании требует соблюдения баланса между точностью расчета свойств H_2O и сходимостью алгоритмов. Важно, что область околоскритических параметров, где необходимо приближенное описание, мала по сравнению с гораздо более широким диапазоном P и T , при которых происходят течения в геотермальных системах. Следовательно, задав неравномерную сетку (6.1), более грубую в окрестности C , можно обеспечить удовлетворительную точность расчета свойств при всех параметрах за исключением околоскритических значений и, таким образом, обеспечить достаточную точность расчета течений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-71-10051).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Croucher A., O'Sullivan M. Application of the computer code TOUGH2 to the simulation of supercritical condition in geothermal system // *Geothermics*, 2008. V. 37. № 6. P. 622–634.
2. Afanasyev A., Costa A., Chiodini G. Investigation of hydrothermal activity at Campi Flegrei caldera using 3D numerical simulations: extension to high temperature processes // *J. Volcanol. Geothermal Res.* 2015. V. 299. P. 68–77.
3. Брусиловский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. М.: Грааль, 2002. 575 с.
4. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. О математическом моделировании многофазной фильтрации при околоскритических условиях // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 1, Математика. Механика.* 2013. Т. 68. № 3. С. 68–72.

5. Бармин А.А., Цыпкин Г.Г. Математическая модель инъекции воды в геотермальный пласт, насыщенный паром // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 6. С. 92–98.
6. Афанасьев А.А., Бармин А.А. Нестационарные одномерные фильтрационные течения воды и пара с учетом фазовых переходов // Изв. РАН. МЖГ. 2007. № 4. С. 134–143.
7. Wagner W., Pruss A. The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use // J. Phys. Chem. Ref. Data 2002. V. 31. № 2. P. 387–535.
8. Schechter D., Haynes J. Relative permeabilities of a near critical binary fluid // Transport Porous Med. 1992. V. 9. № 3. P. 241–260.
9. Aziz K., Settari A. Petroleum reservoir simulation. London: Appl. Sci. Publ., 1979. 476 p.
10. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.
11. Гантмахер Ф.П. Теория матриц (2-е изд.). М.: Наука, 1966. 576 с.
12. Афанасьев А.А. Моделирование свойств бинарной смеси углекислый газ-вода при до- и за-критических условиях // Теплофизика высоких температур. 2012. Т. 50. № 3. С. 363–370.

On Numerical Modelling of Water Flows in Porous Media under Near-Critical Conditions

A. Afanasyev^{a, #}

^a Institute of Mechanics, Moscow State University, Moscow, Russia

[#]e-mail: afanasyev@imec.msu.ru

The problem of numerical modeling of non-isothermal flows of water and steam under near-critical thermodynamic conditions is considered. It is shown that the equations of single-phase and two-phase flows become degenerate at the critical point of water. The disadvantages of the methods for modelling the flows are discussed, which are based on choosing pressure and enthalpy as independent variables of the model to exclude the degeneracy. A new method for modelling the flows under near-critical thermodynamic conditions in standard pressure-temperature variables is proposed. The method is based on an approximate description of the fluid phase diagram by linear splines. The method allows for elimination of the degeneracy of conservation laws at the critical point and application of the equations of state formulated in pressure and temperature variables.

Keywords: porous medium, flow in porous medium, critical point, non-isothermal flow, numerical modelling

REFERENCES

1. Croucher A., O'Sullivan M. Application of the computer code TOUGH2 to the simulation of supercritical condition in geothermal system // Geothermics, 2008, vol. 37, no. 6, pp. 622–634.
2. Afanasyev A., Costa A., Chiodini G. Investigation of hydrothermal activity at Campi Flegrei caldera using 3D numerical simulations: extension to high temperature processes // J. Volcanol. Geothermal Res., 2015, vol. 299, pp. 68–77.
3. Brusilovskii A.I. Phase Transformations in the Development of Oil and Gas Fields. Moscow: Graal'; 2002. 575 p. (in Russian).
4. Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E. Mathematical modeling of multiphase seepage under near-critical conditions // Moscow Univ. Mech. Bull., 2013, vol. 68, no 3, pp. 76–79.
5. Barmin A.A., Tsyppkin G.G. Mathematical model of water injection into a steam-saturated geothermal reservoir // Fluid Dyn., 1996, vol. 31, no. 6, pp. 874–879.
6. Afanas'ev A.A., Barmin A.A. Unsteady one-dimensional water and steam flows through a porous medium with allowance for phase transitions // Fluid Dyn., 2007, vol. 42, no. 4, pp. 627–636.

7. *Wagner W. Pruss A.* The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use // *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 2002, vol. 31, no. 2, pp. 387–535.
8. *Schechter D., Haynes J.* Relative permeabilities of a near critical binary fluid // *Transport Porous Med.*, 1992, vol. 9, no. 3, pp. 241–260.
9. *Aziz K., Settari A.* *Petroleum Reservoir Simulation*. London: Appl. Sci. Publ., 1979. 476 p.
10. *Bakhvalov N.S.* *Numerical Methods (Analysis, Algebra and Ordinary Differential Equations)*. Moscow: Nauka, 1975. 632 p. (in Russian)
11. *Gantmacher F.R.* *Theory of Matrix*. Moscow: Nauka, 1966. 576 p. (in Russian)
12. *Afanasyev A.A.* Simulation of the properties of a binary carbon dioxide-water mixture under sub- and supercritical conditions // *High Temperature*, 2012, vol. 50, no. 3, pp. 340–347.