

УДК 532.546:519.63

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОСТОРОННЕЙ КОНВЕКЦИИ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

© 2025 г. Е. Б. Соболева*

Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

**e-mail: soboleva@ipmnet.ru*

Поступила в редакцию 16.01.2025 г.

После доработки 10.03.2025 г.

Принята к публикации 16.03.2025 г.

Выполнено численное моделирование односторонней концентрационной конвекции в пористой среде в приложении к гидродинамическим процессам, происходящим при закачке углекислого газа в подземные пористые образования. При растворении углекислоты в воде или нефти плотность раствора увеличивается, что приводит к развитию неустойчивости. Использована гидродинамическая модель, которая включает уравнения неразрывности, движения (в форме уравнения Дарси) и конвекции-диффузии. Уравнение состояния, связывающее плотность жидкой фазы с концентрацией углекислоты, является нелинейным. Плотность раствора достигает максимума при некотором значении концентрации, которое варьируется. Для решения задачи создан новый вычислительный код, основанный на конечно-разностном методе. Исследовано влияние концентрации, дающей максимум плотности, на параметры конвективного движения и массопереноса. В частности, найдено, что если максимум плотности имеет место при большей концентрации, то увеличивается количество углекислоты, которое переносится вниз конвективным течением. Это значит, что конвективное растворение эффективней удерживает углекислоту на глубине.

Ключевые слова: углекислый газ, пористая среда, нелинейное уравнение состояния, односторонняя конвекция, конвективное растворение, численное моделирование

DOI: 10.31857/S1024708425030094

В результате человеческой деятельности все больше углекислого газа (CO_2) выбрасывается в атмосферу, приводя к увеличению средней температуры около поверхности Земли (из-за парникового эффекта) и негативному воздействию на климат. В [1] отмечено, что в атмосферу попадает около 32 гигатонн CO_2 ежегодно. Чтобы избежать вредного влияния углекислоты, в настоящее время развиваются и широко применяются технологии ее улавливания и хранения. Объемы CO_2 закачивают в истощенные месторождения нефти и газа, в подводные естественные хранилища, в водонасыщенные пласты. На глубине более 800 м в силу высокого давления и температуры углекислый газ переходит в сверхкритическое жидкоподобное состояние. Флюид CO_2 легче воды при аналогичных условиях, но может в ней растворяться. Из-за взаимного притяжения молекул плотность раствора несколько повышается (примерно на 1 %). При закачке CO_2 в нефтяное месторождение может происходить смешение CO_2 с углеводородами (в зависимости от компонентного состава нефти), которое также сопровождается возрастанием плотности смеси. В этих случаях формируется более тяжелый, чем две исходные жидкости, диффузионный слой, который неустойчив в поле силы тяжести. Развитие неустойчивости приводит к односторонней естественной конвекции — все конвективные «пальцы» распространяются вниз [2]. Конвективное перемешивание флюида CO_2 с водой или нефтью ускоряет растворение, в этом случае говорят о конвективном растворении. Данный механизм препятствует всплыванию CO_2 , повышая тем самым надежность его захоронения в долгосрочной перспективе.

Важность конвективного растворения при захоронении CO_2 привела к многочисленным исследованиям на эту тему; обзоры подходов, методов и результатов исследований можно найти в [1, 3, 4]. Одна из первых математических моделей для описания поведения CO_2 предложена в [2]. Полагалось, что флюид

CO_2 , лежащий над слоем воды, моделируется граничным условием постоянной концентрации. Таким образом, в исследуемой области находилась вода, а с верхней границы диффундировала примесь (в данном случае CO_2), увеличивая плотность воды. Уравнение состояния, связывающее плотность раствора ρ с концентрацией растворенной примеси c , считается линейной функцией: $\rho \sim c$. При попадании примеси в воду под верхней границей формируется диффузионный слой, более тяжелый чем чистая вода, который затем деформируется, приводя к развитию концентрационной гравитационной конвекции. В рамках данной модели выполнены аналитические исследования устойчивости диффузионного слоя [2, 5], проведено численное моделирование конвективного перемешивания [2, 5–7].

Рассмотренная выше модель представляет физическую систему упрощенно, поскольку граница, отделяющая верхнюю жидкость, не деформируется и не перемещается. В более полной модели, представленной в [8–10], исследуемая область исходно заполнена двумя жидкостями, а положение интерфейса определяется при решении задачи. Важной особенностью такой модели является использование нелинейного уравнения состояния, то есть, нелинейной функции $\rho(c)$ (рис. 1). При небольших концентрациях примеси плотность раствора ρ возрастает, однако, после некоторого значения c_m начинает уменьшаться; c_m — это концентрация, дающая максимальную плотность раствора ρ_m . В экспериментах и численном моделировании [8] в качестве CO_2 берется модельная жидкость — смесь метанола с этиленгликолем, — которая растворяется в соленой воде, в [9] проведен линейный анализ устойчивости пары « CO_2 — вода», в [10] выполнено численное моделирование конвективного растворения CO_2 в углеводороде (бутане или октане).

Стоит заметить, что в [9] в качестве нелинейного уравнения состояния взят полином четвертой степени, в [10] — кубическое уравнение Пенга–Робинсона. В обоих работах коэффициенты уравнений не приводятся. В [8] представлены численные результаты по конвективному растворению CO_2 , однако, какое уравнение состояния выбрано для моделирования, не сообщается. Тем не менее, функции $\rho(c)$ следует уделить особое внимание, поскольку именно она задает распределение плотности в образующемся диффузионном слое и, в конечном счете, определяет конвективную неустойчивость. В настоящей работе показано, что в качестве уравнения состояния можно взять полином третьей степени. Показано, как найти коэффициенты полинома по параметрам смешивающихся слоев. На основе гидродинамической модели разработан новый вычислительный код и проведено моделирование конвективного течения и массопереноса при растворении CO_2 в жидкости. Концентрация c_m , при которой плотность раствора максимальна, точно неизвестна и может меняться в зависимости от температуры и давления, а значит, от глубины захоронения. В связи с этим выполнено исследование, показывающее как влияет c_m на параметры конвективного процесса.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

1.1. Базовые уравнения

Пористая среда заполнена парой смешивающихся жидкостей, образующих два горизонтальных слоя, которые соприкасаются друг с другом. Нижний слой — это жидкость 1 с плотностью ρ_{10} , верхний слой — жидкость 2 (флюид CO_2) с плотностью ρ_{20} . Верхняя жидкость менее плотная: $\rho_{10} > \rho_{20}$ (рис. 2). Система находится в поле силы тяжести; в начальный момент она неподвижна и устойчива. Верхняя жидкость начинает растворяться в нижней, между ними образуется диффузионный слой, расширяющийся со временем.

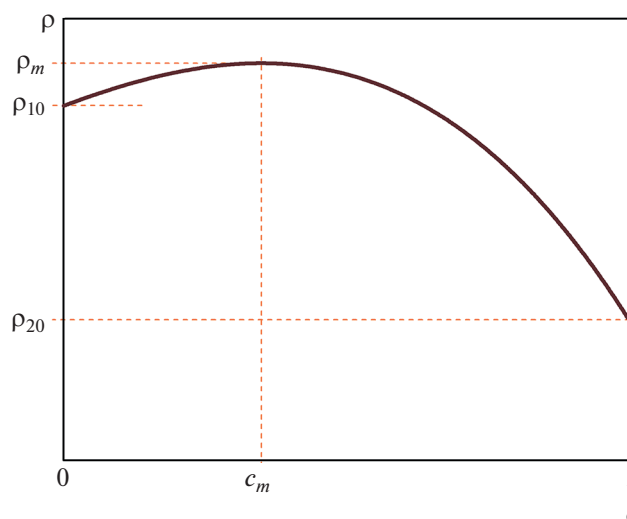


Рис. 1. Общий вид зависимости плотности жидкой фазы ρ от концентрации примеси c .

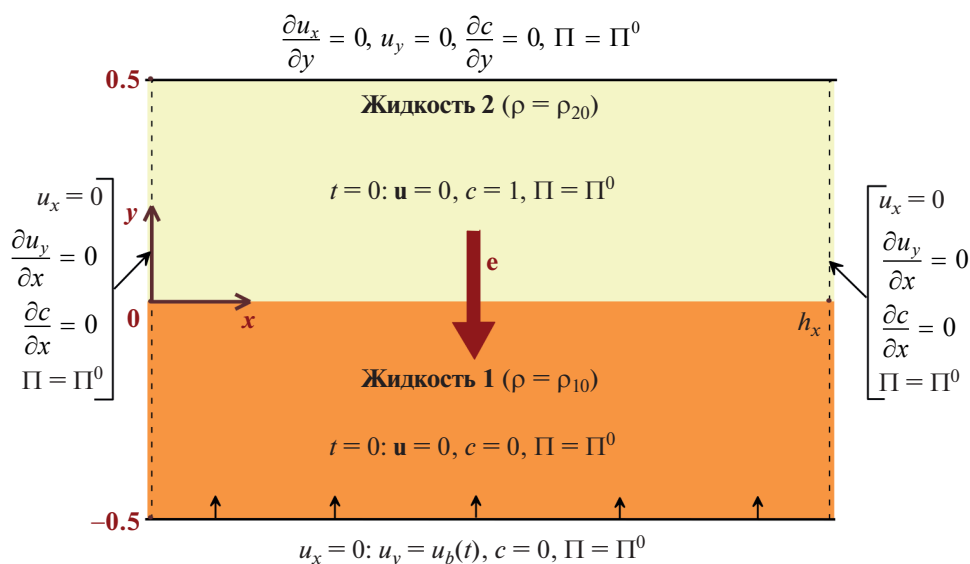


Рис. 2. Постановка задачи.

Плотность раствора в диффузионном слое превосходит значения ρ_{10} и ρ_{20} , поэтому со временем этот слой теряет устойчивость, деформируется и появляются распространяющиеся вниз конвективные «пальцы».

Движение жидкой фазы и массоперенос в пористой среде описываются в рамках гидродинамической модели (приближение Обербека–Буссинеска), которая включает уравнения неразрывности, движения (уравнение Дарси), переноса примеси. Замыкается система уравнением состояния:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1.1)$$

$$\mathbf{U} = -\frac{K}{\mu} (\nabla P - \rho \mathbf{g} \mathbf{e}), \quad (1.2)$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\phi D \nabla c), \quad (1.3)$$

$$\rho = \rho(c). \quad (1.4)$$

Здесь t , $\mathbf{U}$, P , ρ , μ , D , c , K , ϕ , $\mathbf{g}$, $\mathbf{e} = (0, -1)$ — время, скорость фильтрации, давление, плотность, вязкость жидкой фазы, коэффициент диффузии, концентрация вещества 2, проницаемость и пористость твердой фазы, ускорение свободного падения и единичный вектор, сонаправленный с силой тяжести. Плотность ρ представляет собой сумму: $\rho = \rho_1 + \rho_2$, где ρ_1 (или ρ_2) — это суммарная масса молекул вещества 1 (или вещества 2) в единице объема раствора. При частичном смешении жидкостей двухфазная жидкая среда представляется как однородная среда с эффективной плотностью ρ . Концентрация представляет собой массовую долю вещества 2: $c = \rho_2/\rho$. Считаем, что в растворе значения μ и D постоянны, а параметры пористой среды K и ϕ могут меняться по пространству.

Сначала из уравнения (1.2) вычтем уравнение $\nabla P^0 = \rho_{10} \mathbf{g} \mathbf{e}$, которое получается из (1.2) для жидкости 1 в состоянии покоя ($\mathbf{U} = 0$). Здесь P^0 — гидростатическое давление в жидкости 1. Далее уравнения (1.1)–(1.4) приводятся к безразмерному виду. Поскольку естественная конвекция обуславливается разностью максимальной плотности раствора и плотности нижней жидкости $\rho_m - \rho_{10}$, то в качестве масштаба плотности берется эта величина. Другие масштабы: высота расчетной области H , скорость D/H , время H^2/D , давление $(\rho_m - \rho_{10})gH$, проницаемость K_* (средняя по пространству величина). Появляются безразмерные переменные

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{U}H}{D}, \quad S = \frac{\rho - \rho_{10}}{\rho_m - \rho_{10}}, \quad \Pi = \frac{P - P^0}{(\rho_m - \rho_{10})gH},$$

которые представляют собой скорость фильтрации, относительную плотность и давление. Безразмерная проницаемость $k = K/K_*$. Безразмерное время t обозначено так же, как и размерное. Уравнения (1.1)–(1.4) в безразмерных переменных принимают вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{u} = -Ra\phi_*k(\nabla \Pi - S\mathbf{e}), \quad (1.6)$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\phi \nabla c), \quad (1.7)$$

$$S = S(c). \quad (1.8)$$

В системе уравнений (1.5)–(1.8) имеется безразмерный параметр — число Рэлея–Дарси:

$$\text{Ra} = \frac{K_*(\rho_m - \rho_{10})gH}{\mu D \phi_*}. \quad (1.9)$$

Здесь ϕ_* — средняя по пространству пористость. Размерное уравнение состояния включает характерные значения плотности ρ_{10} , ρ_{20} , ρ_m (см. рис. 1), по которым можно построить безразмерные комплексы:

$$\Sigma_d = \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}}, \quad \Sigma_\rho = \frac{\rho_{10} - \rho_{20}}{\rho_m - \rho_{10}}.$$

Максимальная плотность ρ_m достигается при концентрации c_m . Таким образом, постановка задачи включает безразмерные параметры Ra , ϕ_* , Σ_d , Σ_ρ , c_m .

Граничные и начальные условия приведены на рис. 2. Условия на боковых и верхней границах расчетной области соответствуют непротеканию жидкости через эти границы; выражения записаны для компонент скорости $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$. Поскольку при растворении жидкости 2 в жидкости 1 плотность полученного раствора увеличивается, то это значит, что суммарная масса жидкой фазы в области должна со временем стать больше. Чтобы граничные условия соответствовали происходящему процессу, считается, что через нижнюю границу втекает жидкость 1. Скорость этого потока рассчитывается так, чтобы скомпенсировать суммарный прирост массы в области.

В начальный момент жидкие слои неподвижны и находятся в гидростатическом равновесии. Распределение давления Π по вертикали в условиях гидростатического равновесия обозначается как Π^0 и определяется из (1.6) при $\mathbf{u} = 0$. Можно получить следующее:

$$\Pi^0 = \begin{cases} 0, & y \in [-0.5, 0] \\ \Sigma_\rho y, & y \in [0, 0.5]. \end{cases}$$

Наряду с относительной плотностью S будем рассматривать безразмерную плотность раствора r и безразмерную плотность вещества 2 в растворе r_2 , которые по определению есть $r = \rho/(\rho_m - \rho_{10})$ и $r_2 = \rho_2/(\rho_m - \rho_{10})$. Легко показать, что величины S , r , r_2 связаны следующим образом:

$$r = S + \frac{\Sigma_\rho}{1 - \Sigma_d}, \quad r_2 = r. \quad (1.10)$$

1.2. Уравнение состояния

Размерная плотность ρ связана с безразмерной переменной S , исходя из определения последней, соотношением:

$$\rho = \rho_{10} + (\rho_m - \rho_{10})S. \quad (1.11)$$

Чтобы кривая $\rho(c)$ имела вид как на рис. 1, должны выполняться следующие условия:

$$c = 0 : \rho = \rho_{10}; \quad c = 1 : \rho = \rho_{20}; \quad c = c_m : \rho = \rho_m; \quad c = c_m : \frac{\partial \rho}{\partial c} = 0. \quad (1.12)$$

Равенство нулю производной $\partial \rho / \partial c$ в точке c_m — это условие экстремума функции $\rho(c)$. Из (1.12) следуют условия для $S(c)$:

$$c = 0 : S = 0; \quad c = 1 : S = -\Sigma_\rho; \quad c = c_m : S = 1; \quad c = c_m : \frac{\partial S}{\partial c} = 0. \quad (1.13)$$

Простой функцией с четырьмя константами, которые можно однозначно найти из четырех условий (1.13), является полином третьей степени. Считаем, что безразмерное уравнение состояния имеет вид:

$$S(c) = a_0 + a_1 c + a_2 c^2 + a_3 c^3, \quad (1.14)$$

где $a_0, \dots, a_3$ — константы. Применяя условия (1.13) к (1.14), получаем линейную систему четырех уравнений, решая которую находим константы:

$$a_0 = 0, \quad a_3 = \frac{1 - 2c_m - c_m^2 \Sigma_\rho}{c_m^2(1 - 2c_m + c_m^2)}, \quad a_2 = \frac{1 + c_m \Sigma_\rho - a_3(c_m^3 - c_m)}{c_m^2 - c_m}, \quad a_1 = -\Sigma_\rho - a_2 - a_3.$$

Для рассматриваемой пары жидкостей типичны следующие значения: $\rho_{10} = 1.0 \cdot 10^3$ кг/м³, $\rho_{20} = 0.9 \cdot 10^3$ кг/м³, $\rho_m = 1.01 \cdot 10^3$ кг/м³, по которым легко вычислить, что $\Sigma_\rho = 10.0$. В данной ра-

боте положение максимума на кривой $\rho(c)$, то есть, значение c_m варьируется. Были выбраны значения $c_m = 0.3; 0.5; 0.7$. Для них рассчитаны наборы коэффициентов:

$$\begin{aligned} c_m = 0.3 : \quad & a_0 = 0, \quad a_1 = 5.6463, \quad a_2 = -4.3084, \quad a_3 = -11.338; \\ c_m = 0.5 : \quad & a_0 = 0, \quad a_1 = -6.0000, \quad a_2 = 36.000, \quad a_3 = -40.000; \\ c_m = 0.7 : \quad & a_0 = 0, \quad a_1 = -56.032, \quad a_2 = 166.21, \quad a_3 = -120.18. \end{aligned} \quad (1.15)$$

На рис. 3а показаны кривые $\rho(c)$ для данных вариантов; они получены по (1.11) при подстановке $S(c)$ (1.14) с коэффициентами (1.15). Видно, что только при $c_m = 0.3$ кривая $\rho(c)$ имеет заданный вид. При $c_m = 0.5, 0.7$ на кривых появляется нефизический минимум. Дело в том, что условия (1.13) являются необходимыми, но не достаточными. Кроме прочего, функция $\rho(c)$ должна монотонно возрастать при $c < c_m$ и монотонно убывать при $c > c_m$.

Чтобы построить функцию $\rho(c)$, которая при любых c_m удовлетворяет необходимым и достаточным условиям, предлагается сделать следующее. Сначала выбирается базовая кривая надлежащего вида. Пусть это будет кривая (1) на рис. 3а. Положение максимума на базовой кривой обозначается как c_{m0} . В данном случае $c_{m0} = 0.3$. Далее выполняется линейное преобразование переменной c в c' так, чтобы на участке $c \in [0, c_{m0}]$ кривая $\rho(c)$ растянулась (если $c_m > c_{m0}$) и точка $\rho(c_{m0})$ перешла в $\rho(c_m)$, а на участке $c \in [c_{m0}, 1]$ кривая $\rho(c)$ соответственно сжалась. При таком преобразовании зависимость (1.14) имеет прежний вид, но включает новую переменную c' :

$$\begin{aligned} S(c) &= a_0 + a_1 c' + a_2 c'^2 + a_3 c'^3, \\ c' &= \begin{cases} c \frac{c_{m0}}{c_m}, & c \in [0, c_{m0}], \\ c_{m0} + (c - c_m) \frac{1 - c_{m0}}{1 - c_m}, & c \in [c_{m0}, 1]. \end{cases} \end{aligned} \quad (1.16)$$

Коэффициенты $a_0, \dots, a_3$ в (1.16) такие же, как в первой строке (1.15). На рис. 3б представлены зависимости $\rho(c)$, построенные данным методом. Кривая с максимумом при $c_m = 0.3$ переходит сама в себя. Видно, что все кривые удовлетворяют заданным условиям. Ниже используется уравнение состояния (1.16).

2. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для решения системы уравнений (1.5)–(1.7), (1.16) создан новый вычислительный код, основанный на конечно-разностном методе. Формируется разнесенная пространственная сетка: расчетная область разбивается на прямоугольные ячейки, скалярные величины определяются в центрах ячеек, горизонтальная компонента скорости — на боковых гранях ячеек, вертикальная компонента скорости — на верхней и нижней гранях.

При представлении уравнения переноса примеси (1.7) в конечно-разностном виде конвективный член аппроксимируется по схеме третьего порядка точности QUICK [11], которая имеет преимущества по сравнению с центрально-разностной и противоточной схемами. Диффузионный член заменяется центрально-разностным аналогом. Интегрирование по времени производится по схеме Рунге–Кутты вто-

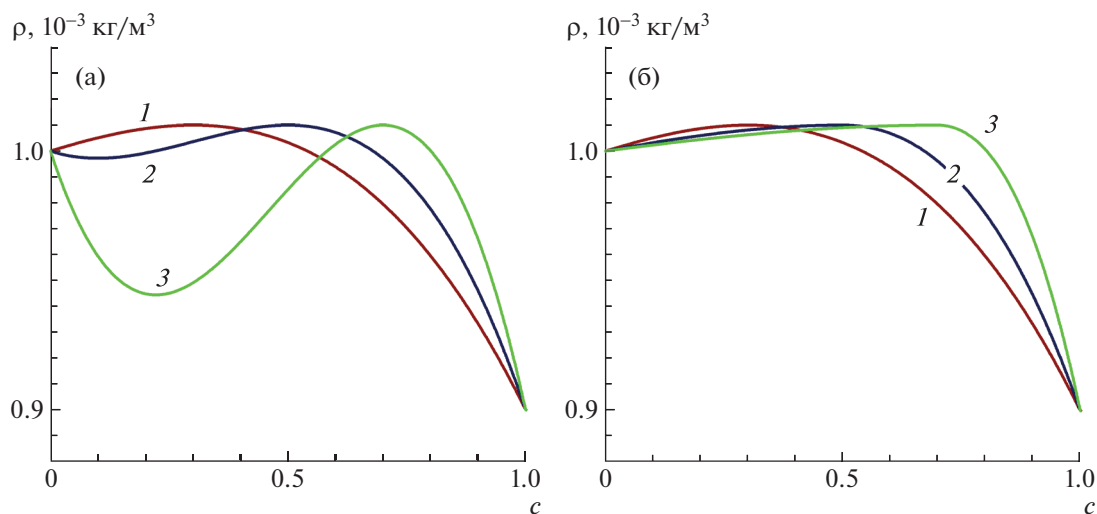


Рис. 3. Функция $\rho(c)$: (а) полином третьей степени: 1–3 — $c_m = 0.3, 0.5, 0.7$; (б) полином третьей степени с линейным преобразованием переменной: 1–3 — $c_m = 0.3, 0.5, 0.7$.

рого порядка точности. Уравнения неразрывности (1.5) и движения (1.6) решаются совместно по алгоритму типа SIMPLE [12]. Полученные конечно-разностные уравнения для давления решаются методом прогонки.

Значения пористости слегка отклоняются от среднего значения ϕ_* в каждой ячейке пространственной сетки, чтобы приблизить математическое описание к реальным условиям и инициировать начало конвекции. В центре ячейки задается $\phi = \phi_*(1 + \Delta)$, где $\Delta \ll 1$. Считается, что $\Delta = \alpha_\phi R$, где α_ϕ — амплитуда отклонения, R — случайное число, которое меняется от ячейки к ячейке; $R \in [-0.5; 0.5]$. Проницаемость k зависит от ϕ по формуле Козени—Кармана [13] и тоже слегка колеблется около среднего значения. При решении системы уравнений (1.5)—(1.8) с возмущенными значениями k и ϕ появляются возмущения у всех переменных во всей расчетной области. В диффузионном слое малые возмущения растут, кооперируются, приводя к развитию конвекции.

Переход с n -го на $(n + 1)$ -й временной слой происходит следующим образом. На n -ом слое известны значения всех переменных. По значениям плотности вычислена суммарная масса жидкости во всей расчетной области M^n (безразмерная величина). Сначала интегрируется уравнение переноса примеси (1.7), в результате определяются значения концентрации на $(n + 1)$ -м слое c^{n+1} . Далее рассчитывается относительная плотность жидкости S^{n+1} по уравнению состояния (1.16). Затем находится плотность жидкой фазы ρ^{n+1} (1.10) и путем суммирования по ячейкам сетки — суммарная масса жидкости M^{n+1} . Выше отмечено, что при растворении жидкости 2 в жидкости 1 плотность раствора возрастает и масса жидкой фазы в расчетной области увеличивается, то есть, $M^{n+1} > M^n$. Чтобы скомпенсировать прирост массы, считаем, что через нижнюю границу поступает жидкость 1 со скоростью v_b , направленной вертикально вверх. Значения на границе отмечаются индексом “ b ”. На интервале времени τ , где τ — шаг интегрирования по времени, можно записать баланс массы:

$$M^{n+1} - M^n = \int_0^{h_x} \rho_b v_b \phi \tau dx.$$

Вместо скорости движения v_b введем скорость фильтрации $u_b = v_b \phi$ и получим граничное условие в виде:

$$u_b = \frac{M^{n+1} - M^n}{\tau \rho_b h_x}. \quad (2.1)$$

Далее совместно решаются уравнения неразрывности (1.5) и движения (1.6) с граничным условием (2.1) — находятся переменные u^{n+1} и P^{n+1} .

Вычислительный код протестирован. Взяты значения: $\phi_* = 0.2$, $\Sigma_d = 0.9$, $\Sigma_\rho = 10.0$, $\alpha_\phi = 10^{-6}$. Величины Ra и c_m менялись: $Ra = 5 \cdot 10^2$, $3 \cdot 10^3$ и $c_m = 0.3, 0.5, 0.7$. Расчетная область в безразмерных переменных: 2×1 . В тестовых расчетах размер пространственной сетки и временной шаг варьировались для определения оптимальных параметров. Выбраны параметры: сетка 200×100 , $\tau = 1.0 \cdot 10^{-7}$ при $Ra = 5 \cdot 10^2$; сетка 1000×1000 , $\tau = 1.0 \cdot 10^{-9}$ при $Ra = 3 \cdot 10^3$.

При создании вычислительного кода использованы подходы и методы, которые успешно применялись ранее в другом вычислительном коде, предназначенном для моделирования концентрационно-конвективных течений с линейным уравнением состояния в пористых средах [7, 14–18].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Диффузионный режим и начало конвекции

Сначала выполнялось моделирование системы при отсутствии силы тяжести, что задается условием $e = 0$. Число Ra (1.9) в данном случае по-прежнему включает земное ускорение свободного падения g и является формальным безразмерным параметром. В расчетах задано $Ra = 5 \cdot 10^2$. При отсутствии силы тяжести движения жидкости не возникает и происходит только диффузионный массоперенос. На рис. 4а показано распределение концентрации c в различные моменты времени. Исходно имеется концентрационная ступень, которая со временем сглаживается из-за взаимной диффузии жидкостей 1 и 2 друг в друга. Между чистыми жидкостями формируется слой раствора (диффузионный слой), который со временем расширяется. Вид кривых $c(y)$ определяется уравнением диффузии и одинаков для всех уравнений состояния.

На рис. 4б—г представлены кривые плотности жидкой фазы ρ при использовании уравнений состояния, которые отличаются друг от друга точкой максимума, то есть, значениями концентрации c_m . В начальный момент плотность менялась скачком на границе раздела жидкостей, далее кривые плотности стали сглаживаться и на них появился локальный максимум. Можно заметить, что при $c_m = 0.3$ максимум кривой $\rho(y)$ попадает в нижнюю половину области и со временем опускается (рис. 4б). Такая закономерность

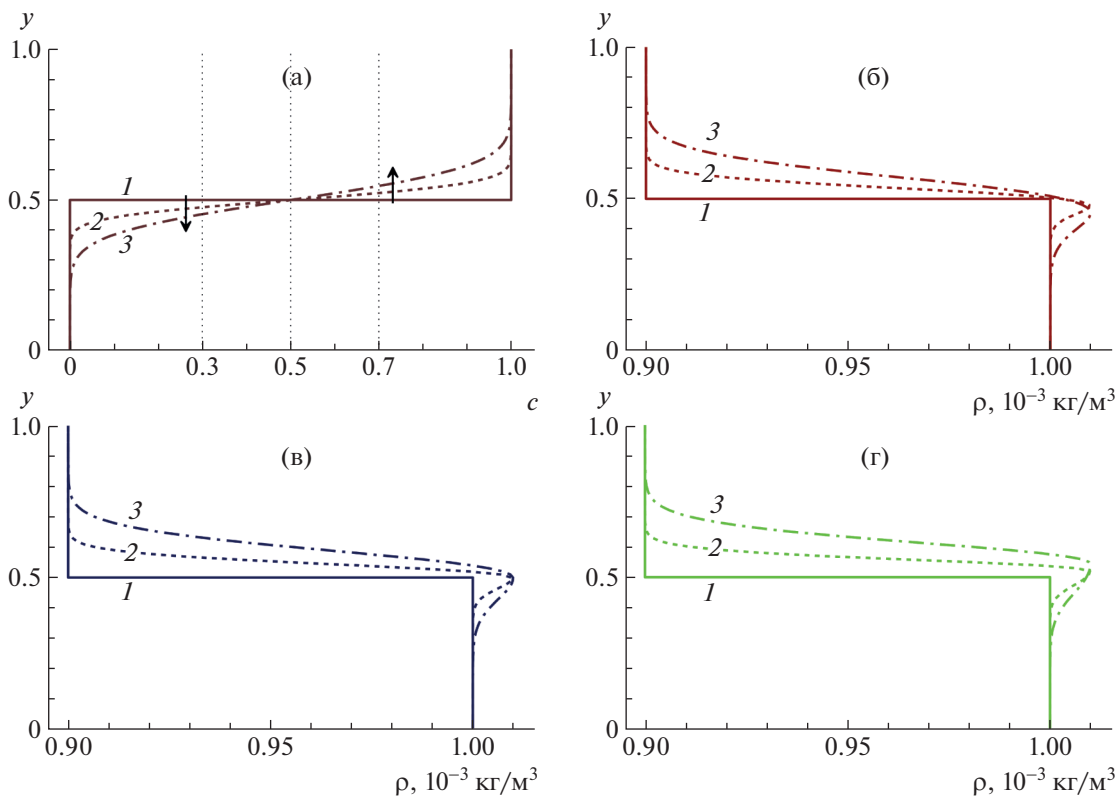


Рис. 4. Распределения: (а) концентрации $c(y)$ и (б–г) плотности $\rho(y)$ в случае уравнения состояния с максимумом плотности при $c_m = 0.3, 0.5, 0.7$ в моменты времени: 1–3 — $t = 0, 1 \cdot 10^{-3}, 4 \cdot 10^{-3}$.

проявляется при всех $c_m < 0.5$, поскольку данные значения концентрации находятся в нижней половине кривой $c(y)$ (см. рис. 4а) и чем позднее, тем ниже оказывается c_m из-за сглаживания кривой $c(y)$. При $c_m > 0.5$ тенденция противоположная. На рис. 4г, полученном при $c_m = 0.7$, видно, что кривая $\rho(y)$ имеет максимум в верхней половине области и он со временем перемещается вверх, поскольку здесь сглаживание кривой $c(y)$ сопровождается перемещением вверх значений c_m . При $c_m = 0.5$ максимум кривой $\rho(y)$ все время остается на одном уровне $y = 0$ (рис. 4в).

Далее проведено моделирование эволюции системы в поле силы тяжести при прочих равных условиях. Начало процесса совпадает с диффузионным режимом — между исходными жидкостями появляется диффузионный слой. Плотность раствора в диффузионном слое достигает максимума и в некотором диапазоне координаты y превосходит плотность нижней жидкости (жидкости 1), что при действии силы тяжести приводит в развитии неустойчивости. Тяжелый раствор стремится опуститься, образуются конвективные “пальцы”, распространяющиеся вниз; вверх они всплывать не могут, так как тяжелее жидкости 2. Молекулы вещества 1 перемещаются вверх только за счет диффузии. Наблюдается односторонняя концентрационная конвекция.

На рисунках 5 и 6 показано, как влияет уравнение состояния на начало конвекции. Слева представлено поле концентрации; значения c уменьшаются сверху вниз монотонно. Сверху, где чистая жидкость 2, выполняется $c = 1$. Снизу, где чистая жидкость 1, $c = 0$. Справа показаны поля относительной плотности S : $S = 0$ в жидкости 1, $S = -10$ в жидкости 2. В растворе плотность достигает максимального значения $S = 1$. Хорошо видно, что, как и следовало ожидать, величина S оказывается наибольшей в центральной зоне (красный цвет). Можно заметить, что если функция $S(c)$ имеет максимум при $c_m = 0.3$, то наиболее тяжелый раствор в диффузионном слое смещен вниз (рис. 5а, справа) относительно положения при $c_m = 0.7$ (рис. 6а, справа), что соответствует результатам на рис. 4. Следовательно, и конвекция зарождается на разных уровнях: при $c_m = 0.3$ конвективные “пальцы” появляются в нижней половине области (рис. 5б), а при $c_m = 0.7$ выходят из верхней половины (рис. 6б).

3.2. Развитая конвекция

Проведено моделирование в уменьшенном масштабе при $Ra = 3 \cdot 10^3$, чтобы исследовать динамику и массоперенос в стадии развитой конвекции. На рис. 7 даны поля относительной плотности жидкой фазы S при $c_m = 0.3$ в последовательные моменты времени. Рисунок 7а как и рис. 5б, 6б демонстрирует рождение

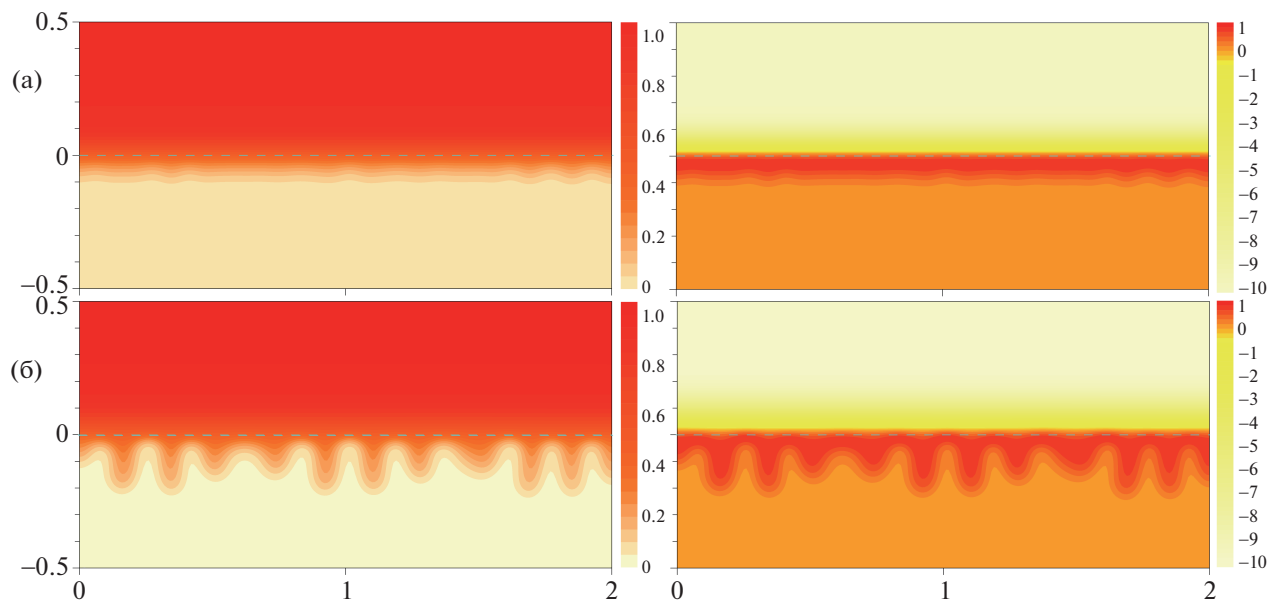


Рис. 5. Поля: (слева) концентрация c и (справа) относительная плотность S в случае уравнения состояния с максимумом плотности при $c_m = 0.3$ в моменты времени: а–б — $t = 2 \cdot 10^{-3}, 4 \cdot 10^{-3}$. Голубой пунктирной линией отмечено начальное положение границы раздела жидкостей.

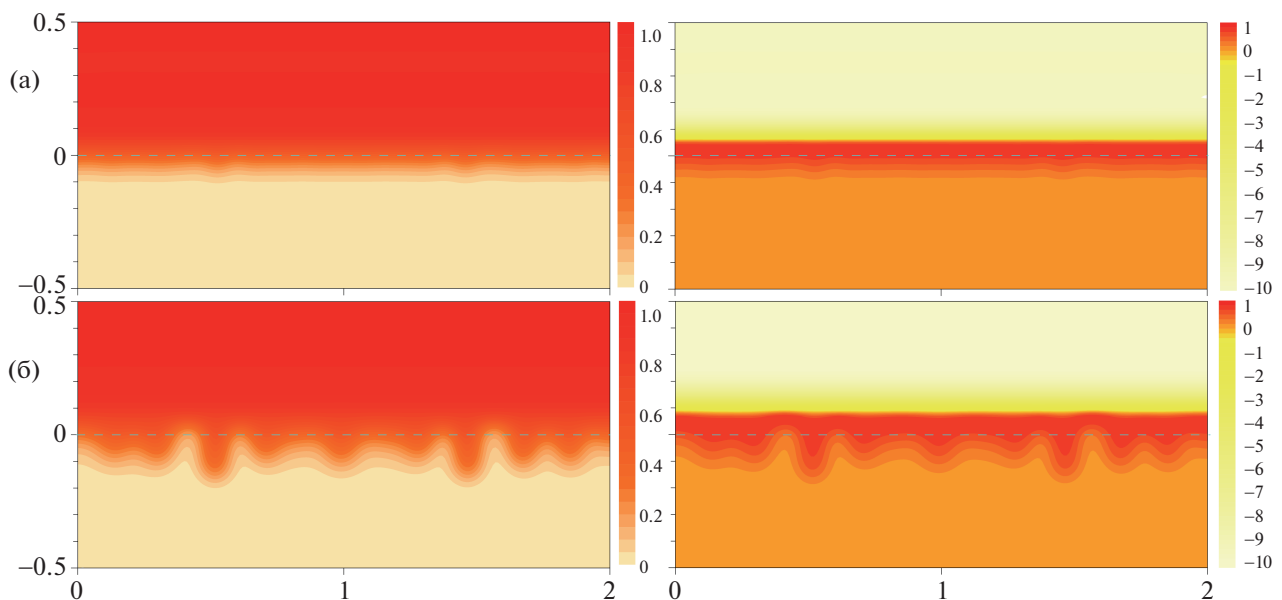


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но в случае уравнения состояния с максимумом плотности при $c_m = 0.7$.

конвективных “пальцев” из диффузионного слоя. Ширина “пальцев” различается незначительно, поэтому можно говорить об образовании квазипериодической структуры конвекции. Далее “пальцы” вытягиваются вниз (рис. 7б), некоторые из них распространяются быстрее, другие медленнее, происходит их слияние и деформация, течение становится стохастическим, раствор опускается все глубже (рис. 7в,г). На врезке к рис. 7г стрелками показано поле скоростей движения в зоне формирования “пальцев”; стрелки начерчены в каждом 2-м узле пространственной сетки по оси x и каждом 3-ем узле по оси y . Видно, что самая тяжелая жидкость, находящаяся в узком слое (красный цвет), движется горизонтально влево и вправо и, сталкиваясь с аналогичным встречным потоком, дает начало конвективному “пальцу”, который уносит жидкость вниз.

Чтобы количественно описать интенсивность движения и массоперенос, рассматриваются интегральные характеристики — глубина проникновения конвективных “пальцев” в нижнюю жидкость h_p и относительное уменьшение массы вещества 2 в верхней половине области Q_M . Величина h_p — это расстояние, на которое опускается вещество 2, считая от начального положения границы раздела жидкостей $y = 0$. Сначала вычисляется средняя концентрация вещества 2 $\langle c(y) \rangle$ в нижней половине области, куда оно попадает

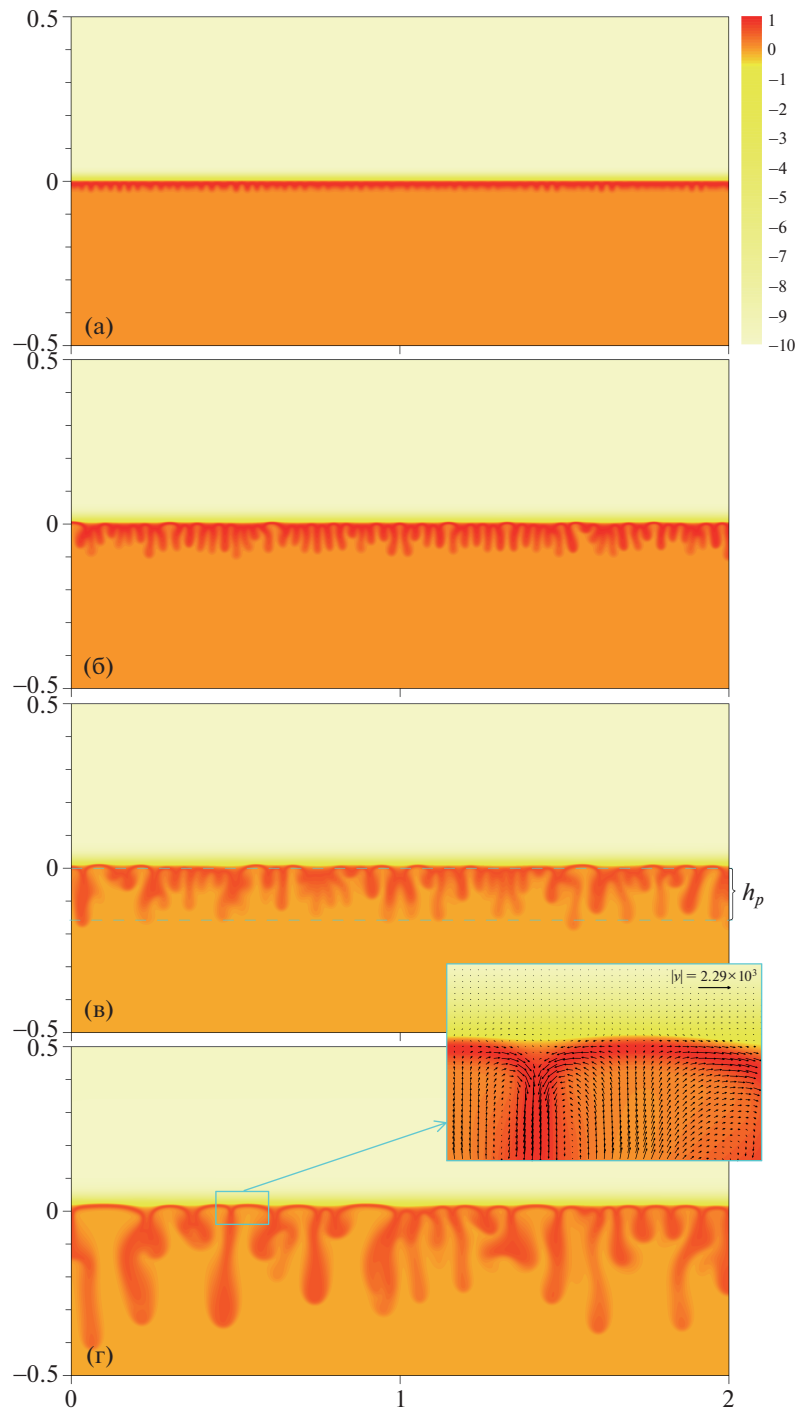


Рис. 7. Поле относительной плотности S в моменты времени: а–г — $t = 1.2 \cdot 10^{-4}, 2.4 \cdot 10^{-4}, 3.6 \cdot 10^{-4}, 6.0 \cdot 10^{-4}$. Врезка: поля относительной плотности S и скорости (стрелки) в увеличенном масштабе.

благодаря диффузии и конвекции, на некотором уровне y ($y < 0$).

$$\langle c(y) \rangle = \frac{1}{h_x} \int_0^{h_x} (x, y) dx.$$

Считается, что на глубине h_p концентрация составляет 1 %, то есть, если $\langle c(y) \rangle = 0.01$, то $h_p = -y$. В качестве примера на рис. 7в указана глубина h_p . Величина Q_M определяется следующим образом:

$$Q_M = \frac{M_{20} - M_2}{M_{20}/h_2}, \quad M_2 = \int_0^{0.5} \int_0^{h_x} r_2 \phi dx dy.$$

При этом M_{20} рассчитывается в начальный момент времени по той же формуле, что и M_2 . В знаменателе берется начальная масса в слое единичной высоты M_{20}/h_2 ; h_2 — начальная высота верхнего слоя, в данной задаче $h_2 = 0.5$. В численном методе интегрирование заменяется суммированием по ячейкам пространственной сетки.

На рис. 8 показаны зависимости $h_p(t)$ (а) и $Q_M(t)$ (б) для уравнений состояния с максимумом плотности при различных c_m . Пунктирные линии получены при отсутствии силы тяжести ($\mathbf{e} = 0$), поэтому характеризуют диффузионный режим. Сплошные кривые начинают отклоняться от пунктирных, когда конвекция начинает влиять на массоперенос: глубина проникновения примеси и ее количество, транспортируемое из верхнего слоя вниз, при наличии конвективного переноса увеличиваются. Сравнивая поведение кривых, полученных при различных c_m , можно заметить, что в течение длительного времени значения h_p практически совпадают, то есть, конвективные “пальцы” проникают примерно на одну и ту же глубину во всех рассмотренных случаях (рис. 8а). Кривые $h_p(t)$ несколько расходятся после времени $t \approx 4.6 \cdot 10^{-4}$, что можно объяснить влиянием отдельных “пальцев”, которые стали довольно крупными, и, соответственно, увеличился разброс значений, полученных усреднением по длине расчетной области.

Однако масса вещества 2, покидающая верхнюю половину области, $Q_M(t)$ при наличии конвективного переноса заметно зависит от c_m (рис. 8б); чем больше c_m , тем больше Q_M , то есть, больше вещества 2 уносится вниз конвективным течением. В частности, в момент времени $t = 6.0 \cdot 10^{-4}$ в случае $c_m = 0.3$ уменьшение массы составляет $Q_M = 0.0203$ (кривая 1), а при $c_m = 0.7$ — $Q_M = 0.0331$ (кривая 3), что в полтора раза больше. Такую тенденцию можно объяснить следующим образом. В тяжелом растворе, который опускается вниз под действием силы тяжести, вещество 2 присутствует в концентрации, близкой к c_m , поскольку именно при c_m плотность раствора наибольшая. Таким образом, при изменении c_m меняется количественный состав раствора в конвективных “пальцах”. При $c_m = 0.7$ “пальцы” несут больше вещества 2, чем при $c_m = 0.3$, обеспечивая более существенный отток массы из верхней половины вглубь области и, следовательно, более эффективное удержание вещества 2 при конвективном растворении.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные результаты даны в безразмерном виде, однако было бы полезно представить, на каких пространственных и временных масштабах происходят исследуемые процессы.

Рассмотрим типичные параметры подземной пористой породы, содержащей сверхкритический флюид CO_2 и воду. Характерная разность плотности, которая создает силу плавучести, составляет $\rho_m - \rho_{10} = 10 \text{ кг/м}^3$. Коэффициент вязкости CO_2 на глубине от 800 до 3000 м варьируется в диапазоне $\mu = 0.023 \div 0.0611 \text{ мПа}\cdot\text{с}$ [1], для оценки возьмем $\mu = 0.04 \text{ мПа}\cdot\text{с}$. Коэффициент диффузии CO_2 в воде зависит от температуры и давления, а также от того, находятся ли жидкости в свободном состоянии или в пористой среде. В последнем случае наблюдается некоторая зависимость от свойств пористой среды [19]. Исходя из экспериментов [19], выполненных при температуре $T = 393 \text{ К}$ и давлении $P = 50 \text{ МПа}$ и посвященных определению коэффициента диффузии CO_2 в горных породах в геологических условиях, для оценки можно принять, что $D = 1.6 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$. Пористость меняется незначительно, возьмем $\phi_* = 0.2$. Самым сильно меняющимся параметром является проницаемость пористой среды. В частности, проницаемость песчаника может меняться на четыре порядка: $K_* = 5.0 \cdot 10^{-16} \div 3.0 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$ [20]. Наличие столь сильно меняющейся величины указывает на то, что исследуемые явления могут наблюдаться на временных и пространственных масштабах, которые отличаются друг от друга также на несколько порядков.

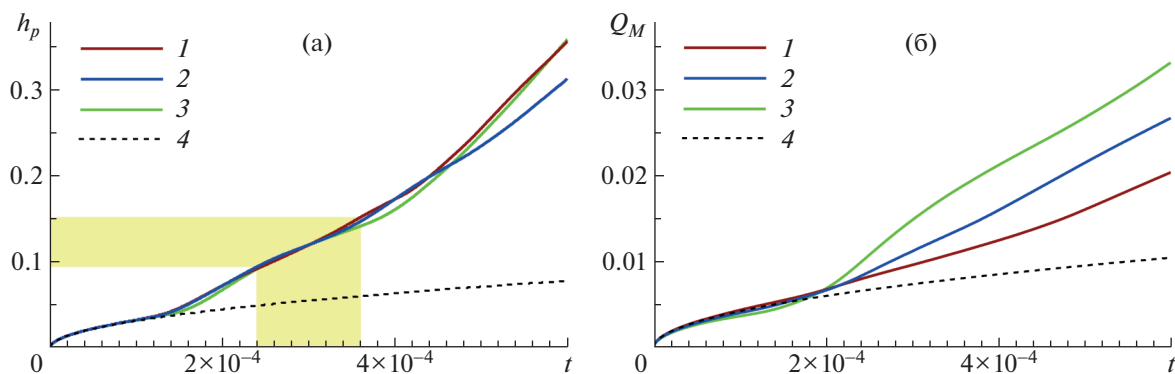


Рис. 8. Зависимости от времени: (а) глубина проникновения конвективных “пальцев” h_p и (б) относительное уменьшение массы вещества 2 в верхней половине области Q_M : 1–3 — $c_m = 0.3, 0.5, 0.7$; 4 — диффузионный режим. Желтым цветом выделен интервал времени $\Delta t = 2.4 \cdot 10^{-4} \div 3.6 \cdot 10^{-4}$ и соответствующий ему интервал Δh_p .

Данные на рисунках 7 и 8 получены при числе Рэлея–Дарси $Ra = 3 \cdot 10^3$. Пользуясь определением Ra (1.9), вычислим геометрический масштаб H и масштаб времени H^2/D для различной проницаемости K_* . На рис. 7б, в поля плотности показаны в моменты времени $t = 2.4 \cdot 10^{-4}$ и $t = 3.6 \cdot 10^{-4}$. На интервале времени $\Delta t = 1.2 \cdot 10^{-4}$ между указанными значениями наблюдается развитая конвекция, глубина проникновения конвективных “пальцев” h_p возрастает практически линейно и меняется на величину $\Delta h_p = 0.052$; на рис. 8а данные интервалы выделены желтым цветом. Найдем размерные значения интервала времени $\Delta t H^2/D$ и интервала глубины $\Delta h_p H$ и рассчитаем среднюю скорость $\langle V \rangle$, с которой вещество 2 распространяется вниз: $\langle V \rangle = \Delta h_p D / (\Delta t H)$. Результаты представлены в табл. 1. Если конвекция происходит в низкопроницаемой горной породе (первая строка), то выделенный временной интервал соответствует $4.6 \cdot 10^9$ с, что составляет около 146 лет. За это время конвективные “пальцы” углубляются примерно на 4.1 м, транспортируя вниз вещество 2 со средней скоростью, которая составляет $8.8 \cdot 10^{-10}$ м/с или $7.6 \cdot 10^{-2}$ мм/сут. В высокопроницаемой пористой породе (вторая строка) тот же безразмерный временной интервал в размерных единицах равен $1.3 \cdot 10^2$ с, что чуть больше 2-х мин. За это время конвективные “пальцы” продвигаются вниз на расстояние меньше миллиметра, но скорость продвижения оказывается гораздо больше — примерно $5.3 \cdot 10^{-6}$ м/с или 46 мм/сут. Сравнение показывает, сколь широкий диапазон характерных размеров, времени, скорости охватывает исследуемый процесс.

Можно также оценить, в каком диапазоне меняется число Рэлея–Дарси Ra при конвекции в целевом пласте, в который произошла закачка CO_2 . Характерная высота пласта составляет $H = 10$ м, возьмем эту величину в качестве геометрического масштаба. Используя приведенные выше значения физических величин и два предельных значения проницаемости K_* (см. табл. 1), можно найти, что $Ra = 3.8 \cdot 10^2 \div 2.3 \cdot 10^6$. Моделирование выполнено при значениях Ra , которые попадают в указанный диапазон.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Создан новый вычислительный код, предназначенный для моделирования односторонней концентрационной конвекции в пористой среде в приложении к технологии захоронения CO_2 в подземных пористых образованиях. В силу высокого давления и температуры вещество CO_2 находится в сверхкритическом состоянии. Использована гидродинамическая модель, которая включает нелинейное уравнение состояния, то есть, нелинейную зависимость плотности жидкой фазы от концентрации CO_2 . Показано, что данную зависимость можно описать полиномом третьей степени. Получены выражения для коэффициентов полинома как функции параметров системы.

При попадании CO_2 в воду или нефть плотность раствора увеличивается, достигает максимума при некоторой концентрации c_m и уменьшается при дальнейшем росте концентрации. Положение максимума, которое задается значением c_m , точно неизвестно и может меняться. Решалась задача о влиянии c_m на параметры конвективного течения и массопереноса. Показано, что на начальной стадии процесса, когда жидкости неподвижны и массоперенос происходит только за счет диффузии, наиболее тяжелый раствор образуется в нижней половине области, если $c_m < 0.5$, или в верхней половине, если $c_m > 0.5$. Данная закономерность приводит к тому, что при потере устойчивости диффузионного слоя конвективные “пальцы” зарождаются на разном уровне в зависимости от c_m , уровень повышается при увеличении c_m .

В стадии развитой конвекции оценивались глубина проникновения конвективных “пальцев” в воду h_p и относительное уменьшение массы CO_2 в захоронении, обозначенное как Q_M , которое происходит за счет направленных вниз диффузионного и конвективного потоков. Получено, что величина h_p ведет себя практически одинаково длительное время вне зависимости от c_m . Получено также, что в развитом конвективном течении с ростом c_m величина Q_M становится больше — течение уносит вниз больше CO_2 , поскольку меняется количественный состав раствора в конвективных “пальцах”. Действительно, под действием силы тяжести опускается наиболее тяжелый раствор, а концентрация CO_2 в нем близка к точке максимума c_m . Следовательно, чем больше c_m , тем эффективней происходит конвективное растворение.

Выполнены оценки, которые показали, что в реальных физических системах конвективный процесс характеризуется пространственным и временным масштабами, а также скоростью переноса CO_2 , которые могут меняться на несколько порядков. Это зависит от того, развивается ли конвекция в высокопроницаемой или низкопроницаемой пористой среде.

Таблица 1. Размерные параметры задачи при различной проницаемости пористой среды K_*

K_*, m^2	H, m	$H^2/D, c$	$\Delta h_p H, m$	$\Delta t H^2/D, c$	$\langle V \rangle, m/c$
$5.0 \cdot 10^{-16}$	78	$3.8 \cdot 10^{13}$	4.1	$4.6 \cdot 10^9$	$8.8 \cdot 10^{-10}$
$3.0 \cdot 10^{-12}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^6$	$6.7 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^2$	$5.3 \cdot 10^{-6}$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (код проекта 24-11-00222).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Huppert H.E., Neufeld J.A.* The fluid mechanics of carbon dioxide sequestration // *Ann. Rev. Fluid Mech.* 2014. V. 46. P. 255–272.
2. *Ennis-King J., Paterson L.* Role of convective mixing in the long-term storage of carbon dioxide in deep saline formations // *SPE Journal.* 2005. V. 10. No. 3. P. 349–356.
3. *Paoli M.De.* Convective mixing in porous media: a review of Darcy, pore-scale and Hele-Shaw studies // *Eur. Phys. J. E.* 2023. V. 46. P. 129.
4. *Soboleva E.* Instability problems and density-driven convection in saturated porous media linking to hydrogeology: A review // *Fluids.* 2023. V. 8. No. 2. P. 36.
5. *Riaz A., Hesse M., Tchelepi H.A., Orr F.M.* Onset of convection in a gravitationally unstable diffusive boundary layer in porous media // *J. Fluid Mech.* 2006. V. 548. P. 87–111.
6. *Pau G.S.H., Bell J.B., Pruess K., Almgren A.S., Lijewski M.J., Zhang K.* High-resolution simulation and characterization of density-driven flow in CO₂ storage in saline aquifers // *Adv. Water Res.* 2010. V. 33. P. 443–455.
7. *Soboleva E.B.* Density-driven convection in an inhomogeneous geothermal reservoir // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2018. V. 127 (C). P. 784–798.
8. *Neufeld J.A., Hesse M.A., Riaz A., Hallworth M.A., Tchelepi H.A., Huppert H.E.* Convective dissolution of carbon dioxide in saline aquifers // *Geophys. Res. Lett.* 2010. V. 37. P. 22404.
9. *Daniel D., Riaz A.* Effect of viscosity contrast on gravitationally unstable diffusive layers in porous media // *Phys. Fluids.* 2014. V. 26. P. 116601.
10. *Elenius M.T., Gasda S.E.* Convective mixing driven by non-monotonic density // *Transp. Porous Med.* 2021. V. 138. P. 133–155.
11. *Leonard B.P.* A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 1979. V. 19. P. 59–98.
12. *Патанкар С.* Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоиздат, 1984. 124 с.
13. *Nield D.A., Bejan A.* Convection in Porous Media. New York: Springer, 2006. 640 p.
14. *Соболева Е.Б., Цыпкин Г.Г.* Численное моделирование конвективных течений в грунте при испарении воды, содержащей растворенную примесь // *Изв. РАН. МЖГ.* 2014. № 5. С. 88–99.
15. *Соболева Е.Б.* Метод численного моделирования концентрационно-конвективных течений в пористых средах в приложении к задачам геологии // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2019. Т. 59. № 11. С. 162–173.
16. *Соболева Е.Б.* Начало конвекции Рэлея–Тейлора в пористой среде // *Изв. РАН. МЖГ.* 2021. № 2. С. 52–62.
17. *Соболева Е.Б.* Влияние конечных возмущений плотности на развитие неустойчивости Рэлея–Тейлора в пористой среде // *Теор. и матем. физ.* 2022. Т. 211. № 2. С. 333–346.
18. *Соболева Е.Б.* Численное моделирование фильтрационных концентрационно-конвективных течений с контрастом вязкости // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2022. Т. 62. № 11. С. 1927–1939.
19. *Wang Zh., Hou J.* Measurement of CO₂ diffusion coefficients in both bulk liquids and carved filling porous media of fractured-vuggy carbonate reservoirs at 50 MPa and 393 K // *RSC Adv.* 2021. V. 11. P. 19712.
20. *Коллинз Р.* Течения жидкостей через пористые материалы. М.: Мир, 1964. 352 с.

Simulation of One-Sided Convection in a Porous Medium Using a Nonlinear Equation of State

© 2025 E. B. Soboleva*

Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

**e-mail: soboleva@ipmnet.ru*

One-sided density-driven convection in a porous medium is simulated numerically with reference to hydrodynamic processes occurring during injection of carbon dioxide into underground porous formations. When carbon dioxide dissolves in water or oil, the density of solution increases. This leads to the growth of instability. A hydrodynamic model that includes the continuity equation, the equation of motion (in the form of Darcy equation), and the convection-diffusion equation has been used. The equation of state that relates the density of the fluid phase to the concentration of carbon dioxide is nonlinear. The density of solution reaches a maximum at a certain concentration, which varies. A new computational code based on the finite-difference method has been developed to solve the problem. The effect of the concentration that gives the maximum density on the parameters of convective motion and mass transfer is investigated. In particular, it is found that if the maximum density occurs at a higher concentration, the amount of carbon dioxide that is transported downward by the convective flow increases. This means that, in this case, convective dissolution is more effective in trapping of carbon dioxide at depth.

Keywords: carbon dioxide, porous medium, nonlinear equation of state, one-sided convection, convective dissolution, numerical simulation