

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НЕПРОНИЦАЕМОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ

М.В. Алексеев¹

Н.Г. Судобин²

А.А. Кулешов¹

Е.Б. Савенков¹

mikhail.alekseev@phystech.edu

ngsudobin@yandex.ru

andrew_kuleshov@mail.ru

e.savenkov@googlemail.com

¹ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Российская Федерация

² «НТО «ИТИН», Москва, Российская Федерация

Аннотация

Проведено математическое моделирование поведения пористой среды с изолированными пустотами, заполненными химически активным веществом, в рамках математической модели термомеханического поведения матрицы и термохимических процессов в порах. Для описания поведения среды использованы трехмерные уравнения термомеханики. Процессы в порах описаны сосредоточенной моделью с учетом химических реакций и фазового равновесия. Кратко описана математическая модель среды и соответствующий вычислительный алгоритм. Приведены результаты параметрических расчетов с использованием реалистичных теплофизических и термодинамических параметров, компонентного состава органического вещества внутри пор (продуктов термодеструкции керогена) и химических реакций, которые демонстрируют необходимость применения комплексных, связанных моделей для описания рассматриваемого класса процессов

Ключевые слова

Математическое моделирование, термомеханика, фазовое равновесие, химическая кинетика, термодеструкция, кероген, пористая среда

Поступила 22.07.2019

Принята 26.08.2019

© Автор(ы), 2020

Введение. В настоящее время одним из перспективных методов увеличения нефтеотдачи является тепловое воздействие на пласт [1, 2]. При этом нефтеносный пласт прогревается за счет подведения к нему энергии извне либо путем активации внутренних источников энергии непосредственно в пласте (например, с помощью закачки в пласт окислителя для инициирования управляемого внутрипластового горения).

Для описания происходящих в ходе теплового воздействия процессов требуется согласованный учет влияния термомеханических, термодинамических, химических и других факторов. Большая часть исследований в области моделирования подобных процессов рассматривает математические модели макроуровня, описывающие динамику системы в масштабе километр и более. В свою очередь, эта крупномасштабная динамика во многом определяется динамикой процессов на микроуровне, т. е. в масштабе пор нефтесодержащих пород, состоящих из неорганических компонентов (матрицы) и органического вещества (керогена). В силу того, что окончательного понимания динамики этих процессов, достаточного для предсказательного применения моделей макроуровня, в настоящее время не существует, представляет интерес рассмотрение моделей микроуровня.

Абсолютное большинство работ по моделированию процессов в масштабе порового пространства рассматривает гидродинамику многофазного многокомпонентного флюида в порах. Среди работ, в которых приведены результаты анализа процессов в матрице, отметим [3–6]. Здесь даны расчеты напряженно-деформированного состояния моделей микрообразцов горных пород.

Цель работы — математическое моделирование процессов, сопровождающих внешнее тепловое воздействие на сплошную среду (матрицу). Эта среда содержит пустоты (поры), заполненные химически активным органическим веществом. Математическая модель включает в себя уравнения термомеханики для описания поведения скелета (матрицы) породы, уравнения законов сохранения массы и энергии с учетом химических реакций и фазового равновесия компонентов для вещества в порах [7–9]. Такая постановка задачи соответствует схеме процессов, протекающих на микроуровне в масштабе отдельных пор при применении тепловых методов добычи углеводородов с пиролизом керогена нефтематеринских пород, индуцированным нагревом. Основное внимание уделено результатам моделирования и их содержательной интерпретации.

Математическая модель. Пусть термоупругая среда (матрица) вмещает N_v пустот (пор), заполненных химически активным веществом, которое может испытывать химические и фазовые превращения. Область пространства, занятую матрицей, обозначим V_s , занятую пустотами — V_i , где $i = \overline{1, N_v}$.

Напряженно-деформированное и термодинамическое состояние скелета породы, занимающего объем V_s , опишем линейной термоупругой моделью [10]:

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = \rho \mathbf{b}, \quad \rho c_\varepsilon \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{Q} = \rho q, \quad \mathbf{x} \in V_s, \quad (1)$$

где $\mathbf{T} = \mathbf{C} : (\mathbf{e} - \mathbf{e}_T)$ — тензор напряжений, \mathbf{C} — тензор упругих коэффициентов, $\mathbf{e} = [\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T] / 2$ — тензор деформаций, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ — поле перемещений, $\mathbf{e}_T = \mathbf{A}(T - T_0)$ — тензор температурных деформаций, \mathbf{A} — тензор температурных коэффициентов линейного расширения, T — температура, T_0 — некоторое опорное значение температуры; ρ — плотность; \mathbf{b} — вектор массовой плотности внешних сил; $\mathbf{Q} = -\mathbf{L} \cdot \nabla T$ — тепловой поток, \mathbf{L} — тензор коэффициентов теплопроводности.

Система уравнений (1) должна быть дополнена граничными и начальными условиями, заданными на всей границе $S_s \equiv \partial V_s$ области V_s , $S_s = S_0 \cup \left[\bigcup_{i=1}^{N_v} S_i \right]$, где S_0 — внешняя граница области V_s ; $S_i \equiv \partial V_i$ — поверхность пустот. «Внешние» граничные условия формулируются согласно термодинамическим и геомеханическим условиям во внешней среде. Граничные условия на внутренних границах S_i определяются состоянием вещества внутри пустот V_i . Для уравнения (1) они имеют вид: $\mathbf{T} \cdot \mathbf{n} = P_i \mathbf{n}_i$, $\mathbf{x} \in S_i$, $i = \overline{1, N_v}$, где $\mathbf{n}_i = \mathbf{n}_i(\mathbf{x})$ — вектор единичной внешней нормали к S_i ; P_i — давление в поре i .

Поведение вещества в порах описывается уравнениями законов сохранения массы и энергии, дополненными алгебраическими уравнениями для фазового равновесия системы. Масса компонентов изменяется за счет химических реакций, энергия смеси — за счет притока энергии из матрицы в результате эффектов теплопроводности и за счет химических реакций. Массообмен через границу пор в такой модели не рассматривается, матрица породы не является химически активной. Процесс расчета фазового равновесия — алгоритмически трудная, но стандартная задача [11–15].

В настоящей работе рассматриваются только изолированные поры V_i . Пусть $V = V(t)$ — объем одной поры, вещество внутри которой является многокомпонентным и многофазным. Определим подвижные компоненты среды номерами от 1 до N_f , твердые компоненты — от N_{f+1} до N . Состоящие из подвижных компонентов фазы — жидкую водную фазу, жидкую углеводородную фазу, газовую фазу — также будем называть подвижными и обозначать индексом $\alpha = W, L, G$.

Пусть объем V поры содержит флюиды и химически активную твердую фазу: $V = V_S + V_W + V_L + V_G = V_S + V_f$, где V_α , $\alpha = S, W, L, G$ — объем,

занятый активной твердой, жидкой водной, жидкой углеводородной и газообразной фазами. Доля объема поры, занятая подвижными фазами, определяется как $\phi_f = V_f / V$.

Введем понятие объемной концентрации (насыщенности) подвижных и неподвижных фаз, как $S_\alpha = V_\alpha / V_f$, $\alpha = W, L, G$, $\tilde{S}_S = V_S / V = 1 - \phi_f$, $\tilde{S}_f = 1 - \tilde{S}_S$. Пусть n_i — число молей i -го компонента, n_α — число молей фазы α , $n_{i\alpha}$ — число молей компонента i в фазе α . Тогда молярная концентрация компонента i в фазе α определяется как $x_{i\alpha} = n_{i\alpha} / n_\alpha$, $n_\alpha > 0$, молярная плотность компонента i подвижных фаз $\alpha = W, L, G$ — $m_i = n_i / V_f$, молярная плотность компонента i твердой фазы — $m_i = n_i / V$, $i = \overline{N_f + 1, N}$, молярная плотность фазы — $b_\alpha = n_\alpha / V_\alpha$. В этом случае

$$m_{\text{tot}} = \sum_{n=1}^{N_f} m_i, \quad m_i = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha C_\alpha x_{i\alpha}, \quad i = \overline{1, N_f};$$

$$m_i = b_S x_{iS} \tilde{S}_S, \quad i = \overline{N_f + 1, N}.$$
(2)

Термодинамические свойства фаз и их компонентный состав могут быть определены, если известны уравнения состояния компонентов [12].

Уравнения законов сохранения массы и энергии для компонентов вещества в порах могут быть записаны в виде

$$\frac{d}{dt} (\phi_f m_i) = Q_i^{(m)}, \quad i = \overline{1, N_f};$$

$$\frac{d}{dt} m_i = Q_i^{(m)}, \quad i = \overline{N_f + 1, N};$$

$$\frac{d}{dt} E = Q_E,$$
(3)

где $Q_i^{(m)}$ — интенсивность изменения количества компонента i вследствие химических реакций; $E = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha U_\alpha + b_S U_S$ — полная энергия вещества в порах, U_α — молярные плотности энергии фаз, которые могут быть вычислены исходя из компонентного состава и уравнений состояния фаз [7]; $Q_E = Q_E^{\text{ext}} + Q_E^{\text{ch}}$, Q_E^{ch} — приток энергии за счет химических реакций, Q_E^{ext} — приток энергии из вмещающей среды.

Пусть распределение температуры в матрице описывается полем температуры $T = T(\mathbf{x}, t)$, температура в поре постоянна по ее объему и задается как $T_f = T_f(t)$. Рассмотрим одну пору, занимающую объем V_f ,

ограниченный поверхностью ∂V_f . В каждой точке ∂V_f определен поток $Q_s \equiv Q_{s \rightarrow f}$ из матрицы в пору и из поры в матрицу: $Q_f \equiv Q_{f \rightarrow s}$. Следствием закона сохранения энергии является локальное условие непрерывности потоков в каждой точке $\mathbf{x} \in \partial V_f$: $Q_{s \rightarrow f} + Q_{f \rightarrow s} = 0$. Полагая, что $Q_s(\mathbf{x}) = -L \partial T / \partial \mathbf{n}_s(\mathbf{x})$, $Q_f(\mathbf{x}) = -\alpha(T(\mathbf{x}) - T_f)$, α — коэффициент теплоотдачи, получаем

$$-L \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}_s} - \alpha(T - T_f) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial V_f; \quad (4)$$

$$\bar{Q}_s = \frac{1}{|\partial V_f|} \int_{\partial V_f} -L \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}_s} dV_{\mathbf{x}}, \quad \bar{T} = \frac{1}{|\partial V_f|} \int_{\partial V_f} T(\mathbf{x}) dV_{\mathbf{x}}, \quad \bar{Q}_f = \alpha(\bar{T} - T_f). \quad (5)$$

Уравнение (5) можно полагать определяющим соотношением для вычисления потока в пору из вмещающей ее матрицы, т. е. $Q_E^{\text{ext}} = \bar{Q}_f |\partial V_f|$; оно обеспечивает выполнение глобального баланса энергии в системе.

Предположим, что в объеме V происходит N_r химических реакций, которые схематически могут быть представлены как



где $v_{ki}^{\alpha} \geq 0$, $\bar{v}_{ki}^{\alpha} \geq 0$ — стехиометрические коэффициенты; k — номер реакции, $k = \overline{1, N_r}$; C_i — символьное обозначение (псевдо)компонента с номером i ; $[C_i]_{\alpha}$ — символьное обозначение (псевдо)компонента с номером i в фазе α ; H_k^{ch} — энтальпия реакции с номером k . Объемная скорость реакции с номером k определяется законом Аррениуса [14]:

$$r_k = A_r \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \prod_{i=1}^N \prod_{\alpha=W,L,G,S} (C_i^{\alpha})^{n_i^{\alpha}}.$$

Здесь A_r — константа скорости реакции, в общем случае зависящая от температуры; E_r — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; T — температура; C_i^{α} — концентрация компонента i в фазе α ; n_i^{α} — порядок зависимостей скорости реакции.

Изменение количества компонента i в результате всех реакций и приток энергии за счет реакций имеет вид

$$Q_i^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} \sum_{\alpha=W,L,G,S} Q_{i\alpha,k}^{\text{ch}}, \quad Q_{i\alpha,k}^{\text{ch}} = (\bar{v}_{ki}^{\alpha} - v_{ki}^{\alpha}) r_k, \quad Q_E^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} Q_{E,k}^{\text{ch}} = \sum_{k=1}^{N_r} H_k^{\text{ch}} r_k, \quad (7)$$

где $Q_{i\alpha,k}^{\text{ch}}$ — изменение количества компонента i в фазе α в результате реакции с номером k .

Вычислительный алгоритм. Для решения уравнений описанной выше модели использовался следующий алгоритм.

Шаг 1. Расчет температурного поля \hat{T} в матрице путем интегрирования на отрезке $[t, t + \Delta t]$ уравнения теплопроводности в системе (1) при известной температуре в поре T_f .

Шаг 2. Расчет $\hat{\mathbf{u}}$ и \hat{V}_f как решения уравнения упругости (1) при заданных \hat{T} и P .

Шаг 3. Расчет потока \bar{Q}_s из матрицы в пору, исходя из распределения температуры \hat{T} в матрице по формулам (7).

Шаг 4. Расчет количества вещества компонентов в пору путем решения уравнений (4) на отрезке $[t, t + \Delta t]$ при известных T_f и компонентному составу фаз.

Шаг 5. Расчет энергии в пору интегрированием уравнения (5) на отрезке $[t, t + \Delta]$ при известных на момент времени t термодинамических параметрах в поре.

Шаг 6. Расчет по вычисленным на момент времени $t + \Delta t$ значениям энергии в пору, количеству вещества и объему поры, температуры вещества в пору, давления в ней, насыщенности фаз и их компонентного состава.

Первичными переменными задачи являются перемещения $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, температуры $T(\mathbf{x}, t)$ и $T_f(t)$, давление $P(t)$ в пору, объем поры $V_f(t)$, масса компонентов в пору m_i , объемные концентрации фаз \tilde{S}_s , S_α и концентрации $x_{i\alpha}$. Используются следующие обозначения: Δt — шаг по времени, $f = f(t)$, $\hat{f} = f(t + \Delta)$.

Пространственные аппроксимации задачи строятся методом конечных элементов. Расчетная сетка состоит из одинаковых ячеек кубической формы — «вокселей». Такое представление данных максимально соответствует цифровым моделям микрообразцов керна, получаемых с помощью компьютерной микротомографии. Для анализа термохимического состояния вещества в порах разработаны алгоритм и программа расчета фазового равновесия, т. е. определения компонентного состава фаз при заданных термодинамических условиях.

Результаты моделирования. Проведены серии расчетов по моделям с возрастающим уровнем сложности:

– моделирование процесса термодеструкции керогена в единичной пору без учета процессов во вмещающей пору среде (матрице);

– с учетом теплообмена с окружающей средой, уравнений (3), теплообмена и напряженно-деформированного состояния среды.

Набор использованных в моделировании псевдокомпонент и их термодинамические свойства представлены в табл. 1. Плотность керогена 1100 кг/м³, теплоемкость твердой фазы, включающей в себя кероген и кокс пиролиза, 16 Дж·моль⁻¹·К⁻¹. Зависимость теплоемкости компонентов от температуры ($[T] = \text{K}$, $[C_p] = \text{Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$):

$$c_p = C_0 + C_1\tilde{T} + C_2\tilde{T}^2 + C_3\tilde{T}^3 + C_{-2}\tilde{T}^{-2}, \quad \tilde{T} = T/1000. \quad (8)$$

Значения коэффициентов корреляций для теплоемкости приведены в табл. 2.

Таблица 1

Участвующие в реакциях внутри поры компоненты

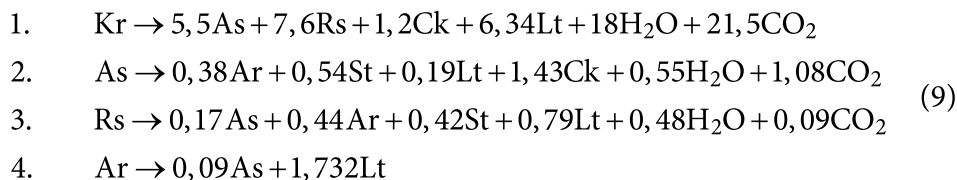
Псевдокомпонент	Молекулярная масса M , г/моль	Критическое давление P_c , атм	Критическая температура T_c , К	Ацентрический фактор w
Кероген Kr	17034,7	–	–	–
Асфальтен As	1231,9	4,66	1474	2
Кокс Ck	674,8	–	–	–
Смолы Rs	760,0	8,1	1279	1,76
Ароматические углеводороды Ar	352,1	12,34	999	1,4
Парафины St	291,8	11,85	930	0,9
Летучие углеводороды Lt	190,5	17,8	658,1	0,574
Вода H ₂ O	18	217,7	647,1	0,344
Диоксид углерода CO ₂	44	72,05	304,1	0,228

Таблица 2

Значения коэффициентов корреляций для теплоемкости

Компонент	C_0	C_1	C_2	C_3	C_{-2}
Kr	–	–	–	–	–
As	250,0	0	0	0	0
Ck	–	–	–	–	–
Rs	250,0	0	0	0	0
Ar	250,0	0	0	0	0
St	250,0	0	0	0	0
Lt	19,8	$7,34 \cdot 10^{-2}$	$-5,6 \cdot 10^{-5}$	$1,71 \cdot 10^{-8}$	0
H ₂ O	30,09	$6,83 \cdot 10^{-2}$	$6,79 \cdot 10^{-6}$	$-2,53 \cdot 10^{-9}$	$0,08 \cdot 10^6$
CO ₂	24,99	$55,18 \cdot 10^{-3}$	$-33,69 \cdot 10^{-6}$	$7,94 \cdot 10^{-9}$	$-0,13 \cdot 10^6$

Схема реакций построена на основе данных, приведенных в [13], и имеет вид



Значения параметров реакций приведены ниже:

Номер реакции	1	2	3	4
Энергия активации				
E_a , кДж/моль	222,00	222,00	184,45	184,45
Предэкспоненциальный множитель A , 1/ч	$9,02 \cdot 10^{-1}$	$2,01 \cdot 10^1$	$6,20 \cdot 10^{13}$	$3,10 \cdot 10^{13}$
Энтальпия реакции				
ΔH , кДж/моль	-780,0	-225,0	-116,0	-74,3

В начальный момент времени в порах присутствовал только один компонент — кероген. Эмпирическая химическая формула керогена рассчитана из следующего массового содержания элементов: углерод 76,9 %, водород 9,2 %, кислород 12,0 %, сера 1,9 %. Во всех расчетах матрица полагалась однородной с модулем Юнга $E = 5,0 \cdot 10^4$ МПа, коэффициентом Пуассона $\nu = 0,25$, коэффициентом теплопроводности $\lambda = 1,7$ Вт·м⁻¹·К⁻¹, коэффициентом теплового расширения $\alpha = 10^{-5}$ К⁻¹.

Исследуемый в вычислительном эксперименте образец имеет форму куба с длиной ребра 10 мкм. Диаметр поры 1 мкм. На боковых гранях куба приложено нормальное напряжение 45 МПа, на верхней и нижней — 75 МПа. Начальная температура в порах и матрице зависит от варианта расчета и равна поддерживаемой на границе температуре.

Кинетика преобразования керогена в поре без учета теплообмена. В рассматриваемой серии расчетов объект исследования — процессы, протекающие непосредственно внутри единичной поры фиксированного объема, который термоизолирован от окружающей среды. Температура вещества в порах задана в начальный момент времени. Далее рассчитывалась эволюция системы: изменение с течением времени температуры, давления, компонентного состава и состава фаз вещества в поре.

Расчеты выполнялись для начальных значений температуры, °С: 300; 350; 400; 450. Установлена сравнительно низкая степень превращения керогена при всех значениях температуры. Это связано с тем, что в расчете не учитывается нагрев вещества в поре за счет теплообмена с матрицей.

Одновременно с этим реакции термодеструкции являются эндотермическими. В совокупности это при заданной внутренней энергии приводит к снижению температуры вещества и замедлению реакции (рис. 1).

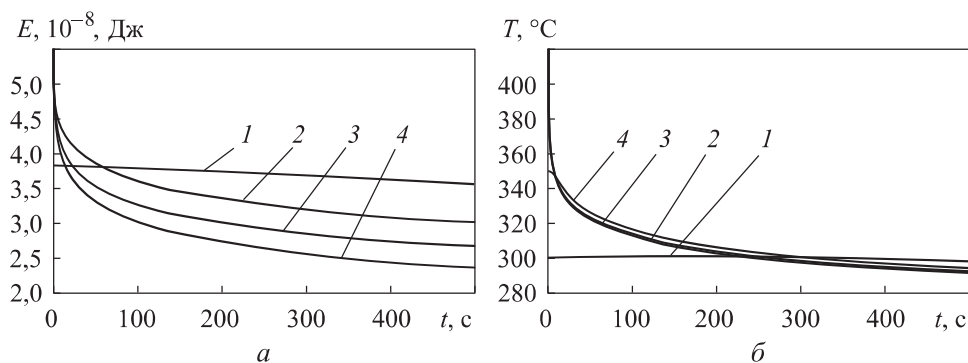


Рис. 1. Зависимость суммарного теплового эффекта в поре от времени при отсутствии теплообмена (а) и зависимость температуры вещества в поре от времени при отсутствии теплообмена (б) при значениях начальной температуры 300 (1), 350 (2), 400 (3) и 450 °С (4)

Проведенные расчеты показывают, что теплообмен с окружающей пору матрицей принципиален для обеспечения эффективной деструкции керогена, а одно только высокое значение начальной температуры в поре не гарантирует возможность активного преобразования керогена в подвижные компоненты. В текущем эксперименте степень превращения керогена не возрастает более 1 % для всего диапазона значений температуры.

Зависимость давления подвижных фаз в поре от времени приведена на рис. 2, а. Давление монотонно возрастает для всех значений температуры, кроме минимальной. Максимальное значение давления увеличивается с течением времени и достигает 500...550 атм, что может приводить к разрушению вещества матрицы в окрестности поры.

Существенное отличие наблюдается и в зависимости температуры от времени (рис. 2, б): с течением времени она не убывает, но выходит на стационарное значение порядка начальной температуры. В этом случае матрица играет роль теплового резервуара, обеспечивающего приток энергии в пору и поддерживающего процесс термодеструкции. Энергия, поступающая в пору из матрицы, в основном уходит на поддержание эндотермических химических реакций, а не на монотонный нагрев вещества в поре.

Зависимость объема подвижных фаз от времени приведена на рис. 2, в. Объем увеличивается с возрастанием температуры, что связано в первую очередь с ростом термодеструкции керогена и образованием компонентов для подвижных фаз.

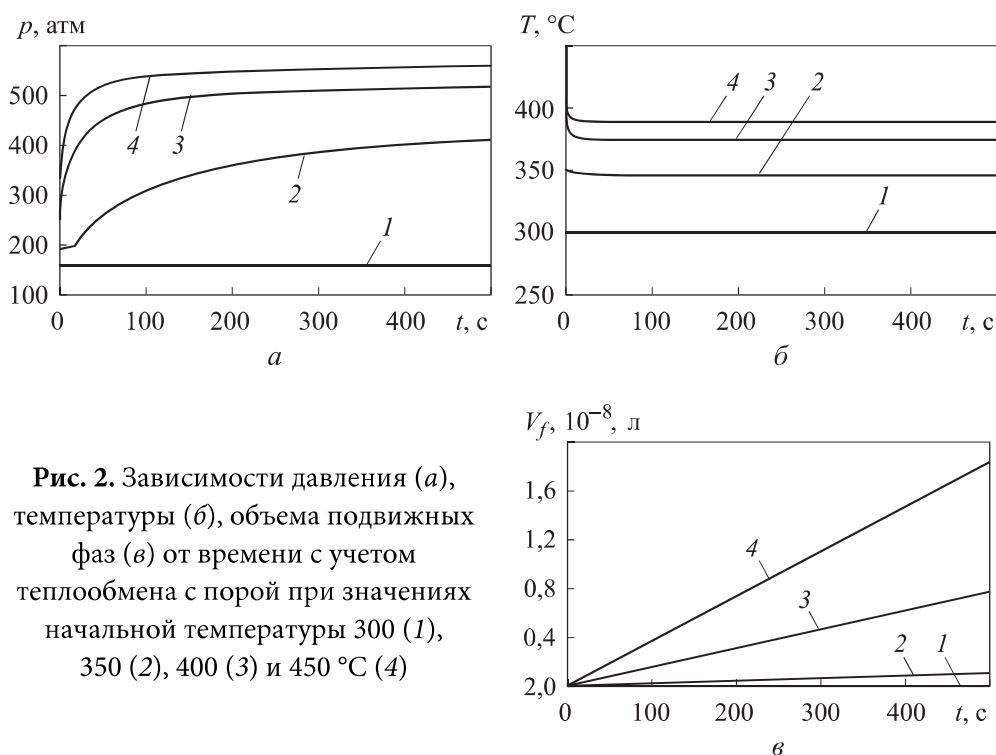


Рис. 2. Зависимости давления (а), температуры (б), объема подвижных фаз (в) от времени с учетом теплообмена с порой при значениях начальной температуры 300 (1), 350 (2), 400 (3) и 450 °C (4)

Кинетика преобразования керогена в поре с учетом теплообмена. В этой серии численных экспериментов пора не является термоизолированной, а обменивается энергией с окружающей ее матрицей. Распределение температуры в среде описывается уравнением теплопроводности. В начальный момент времени температуры матрицы и вещества в поре одинаковы, на внешней границе области температура поддерживается постоянной во время расчета и принимает те же значения, которые приведены выше.

Степень преобразования (деструкции) керогена как функция времени показана на рис. 3, а. В отличие от полученных ранее результатов ее максимальное значение достигает 14 % (верхнее значение на соответствующем графике), что на порядки больше, чем в случае теплоизолированной поры.

Зависимость деструкции керогена от времени при температуре 300 °C (рис. 3, б) практически совпадает с осью времени, что свидетельствует о малой степени термопреобразования органического вещества. Вместе с тем установлено [16–18], что при температуре 300 °C (и менее) происходит частичная деструкция керогена. Разрываются наиболее слабые связи, содержащие гетероатомы (кислород, азот, серу), протекают реакции

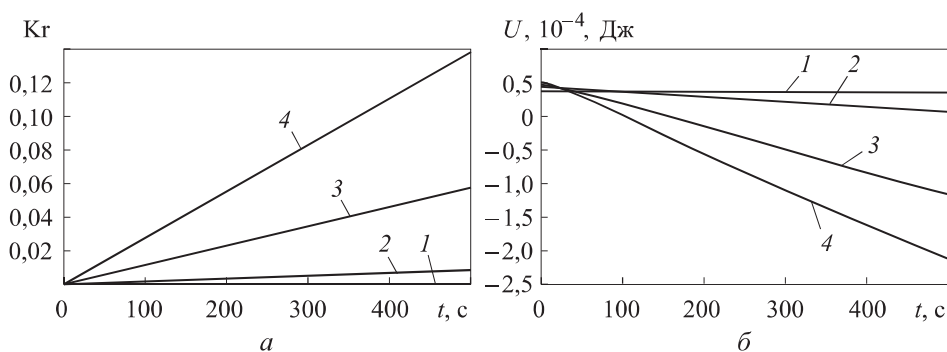


Рис. 3. Зависимость степени превращения керогена (а) и внутренней энергии вещества в поре (б) от времени с учетом теплообмена с породой при значениях начальной температуры 300 (1), 350 (2), 400 (3) и 450 °С (4)

декарбоксилирования, происходит разрыв эфирных связей и др. Выделяется значительное количество газообразных продуктов (CO , CO_2 , легкие углеводороды) и H_2O . Твердый кероген превращается в условно жидкую систему тяжелых гетероатомных соединений. При этом выделяется значительное количество высокомолекулярных соединений (смолы, асфальтены), их количество (мольные доли) сокращается во времени (рис. 4 и 5). Образуются также углеводороды (парафины, ароматические и легкие), газы (CO_2 и H_2O), количество которых во времени увеличивается. Все это в совокупности подтверждает протекание деструкции керогена и его продуктов при температуре 300 °С. Динамика изменения количества (мольных долей) практически всех компонентов (продуктов деструкции керогена) при температуре 300 °С гораздо менее интенсивная (почти линейная) в сравнении с аналогичными зависимостями при более высоких значениях температуры (рис. 4 и 5, кривые 1 и 5).

Изменение внутренней энергии вещества в поре приведено на рис. 4, б. Как и в случае изолированной поры, внутренняя энергия убывает. Это означает, что приток внутренней энергии из матрицы идет на поддержание эндотермических реакций деструкции керогена. Проведенные расчеты показывают, что теплообмен с окружающей пору матрицей является принципиальным для обеспечения эффективной деструкции керогена.

Рассмотрим временные зависимости мольных долей подвижных компонентов в поре. Изменения мольных долей компонентов химических реакций в поре (продуктов деструкции керогена) как функции времени с учетом и без учета теплообмена с матрицей приведены на рис. 4 и 5. Характерная особенность зависимостей — существенное увеличение полноты преобразования керогена в случае теплообмена с матрицей.

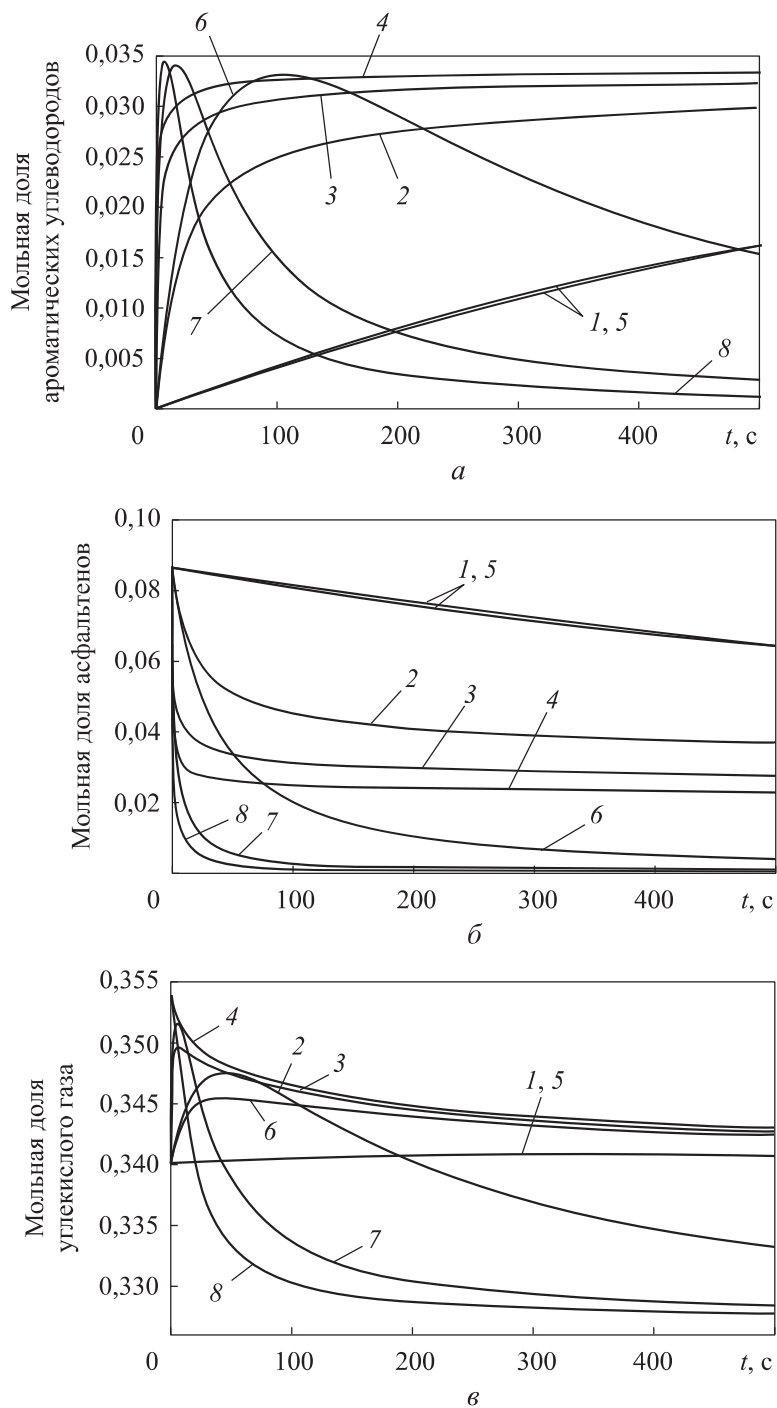


Рис. 4. Зависимость мольной доли ароматических углеводородов (а), асфальтенов (б) и углекислого газа (в) в поре от времени с учетом и без учета теплообмена с породой при значениях начальной температуры 300 (1, 5), 350 (2, 6), 400 (3, 7) и 450 °С (4, 8) с учетом (1–4) и без учета (5–8) теплообмена

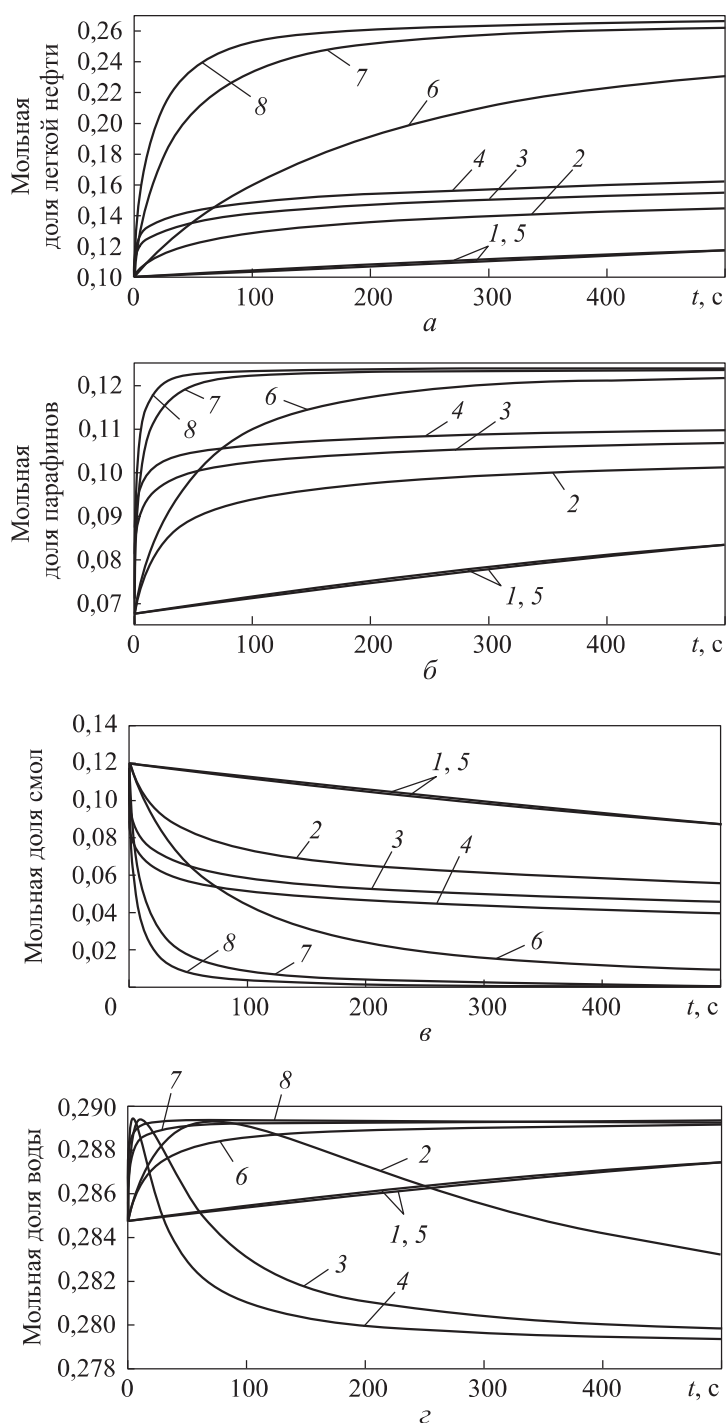


Рис. 5. Зависимость мольной доли в поре от времени для легкой нефти (а), парафинов (б), смол (в) и воды (г) при значениях начальной температуры 300 (1, 5), 350 (2, 6), 400 (3, 7) и 450 °С (4, 8) с учетом (1–4) и без учета (5–8) теплообмена с породой

Моделирование с учетом термомеханических процессов в скелете породы. Предположим, что в области, занятой матрицей и имеющей форму куба, расположена единственная сферическая пора. Начальная температура системы 400 °С.

Зависимости максимального и минимального значений эффективных напряжений Мизеса σ_v от времени по области расчета $\sigma_v = \sqrt{\mathbf{T}^{(d)} : \mathbf{T}^{(d)}} / 2$, $\mathbf{T}^{(d)} = \mathbf{T} - \text{tr} \mathbf{T} / 3$

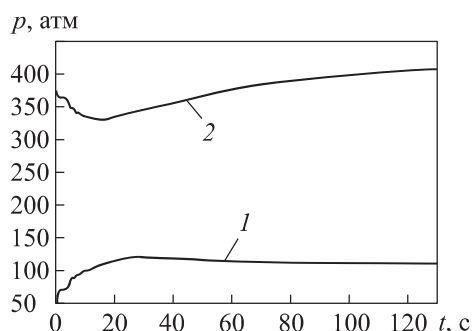


Рис. 6. Зависимости максимальных (1) и минимальных (2) эффективных напряжений по Мизесу от времени

приведены на рис. 6. С течением времени графики выходят на стационарное значение, что означает сравнительно медленное изменение температурного поля в среде, а также затухание реакции горения.

Для максимальных главных напряжений максимальное по области значение доходит в окрестности границы поры до 1000 атм.

Приведем пример расчета для случая образца с тремя сферическими порами. Диаметр пор выбирался, как и ранее, равным 1 мкм, пористость — 9 %. Выбранные параметры соответствуют значениям изолированной (закрытой) пористости в ряде керогенсодержащих пород баженовской свиты Западной Сибири.

Схема расчетной области показана на рис. 7, а. Постановка задачи в целом не отличается от ранее рассмотренной и здесь не приводится. Часть расчетной области, которая находится ниже плоскости, проведенной через центры пор, представлена на рис. 7, б и в: на рис. 7, б — пространственное распределение поля эффективных напряжений Мизеса, которые характеризуют интенсивность сдвиговых напряжений и деформаций; на рис. 7, в — распределение поля максимальных главных напряжений. Результаты анализа показывают, что и в рассматриваемом случае в матрице возникают высокие напряжения: сдвиговые и напряжения растяжения/сжатия. Области концентрации высоких напряжений являются окрестности границ пор и «стенки» между ними, которые представляют собой вероятные области разрушения. Если поры распределены в среде достаточно плотно (т. е. расстояние между ними имеет величину порядка радиуса поры, что реализуется в рассматриваемом случае), то с высокой вероятностью будет происходить разрушение среды с образованием связанной пористости и конечной проницаемости.

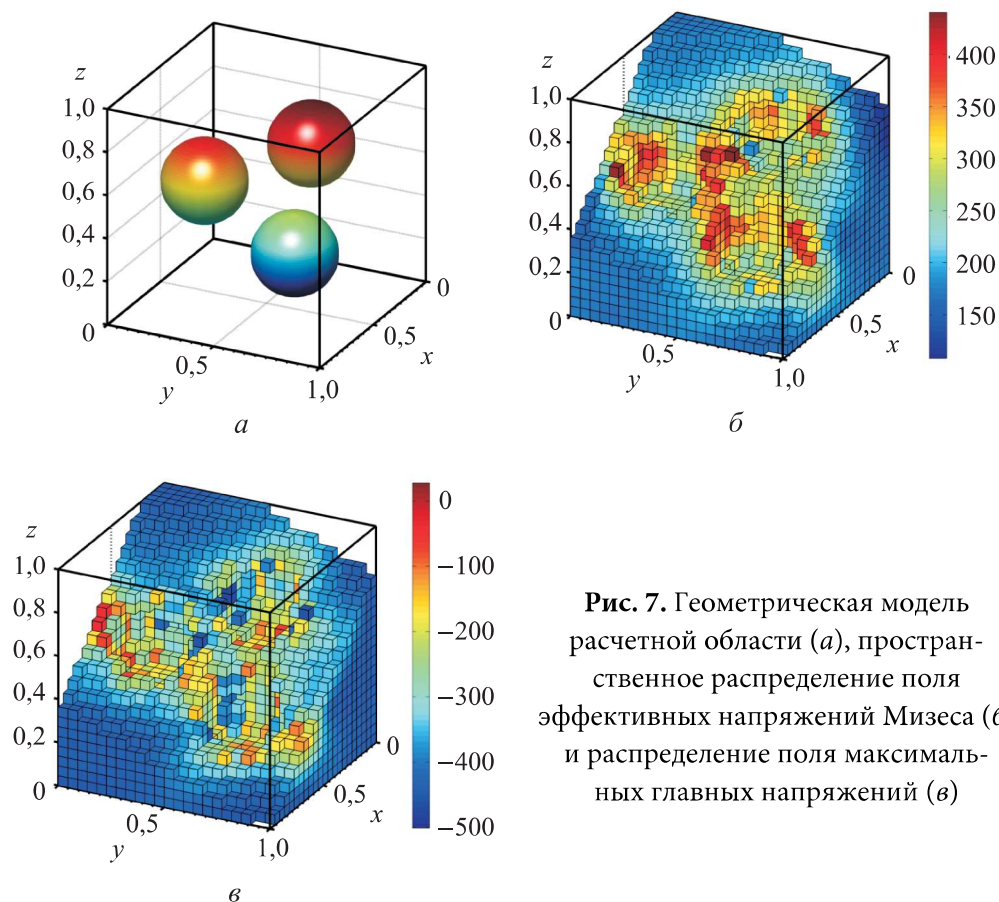


Рис. 7. Геометрическая модель расчетной области (а), пространственное распределение поля эффективных напряжений Мизеса (б) и распределение поля максимальных главных напряжений (в)

Заключение. Рассмотрены результаты вычислительных экспериментов по математическому моделированию динамики термоупругой среды (матрицы), в которой расположены изолированные поры — замкнутые ограниченные области, заполненные химически активным органическим веществом (керогеном). При увеличении температуры среды в порах начинают происходить химические реакции, результатом которых является изменение термодинамического состояния как органического вещества в порах (керогена), так и неорганического (матрицы). Поведение скелета описывается пространственно-трехмерными уравнениями термоупругости, поведение вещества в порах — сосредоточенной (нульмерной) моделью, включающей в себя уравнения химической кинетики, рассматриваемые совместно с законом сохранения энергии и условиями фазового равновесия. Указанные уравнения дополнены условиями согласования потоков консервативных величин. Кратко описан алгоритм численного

решения, основанный на методах расщепления по физическим процессам и декомпозиции области.

Основная часть работы посвящена анализу взаимосвязи полной системы процессов деструкции органического вещества, описывающих поведение керогенсодержащей среды. Исследована степень влияния теплообмена между порами и матрицей на скорость химических реакций и характер их протекания, напряженно-деформированное и тепловое состояние матрицы.

Благодарности

Авторы выражают признательность С.А. Власову, А.М. Полищуку и С.Е. Якушу за полезные советы и обсуждения, способствовавшие улучшению работы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lake L.W. Enhanced oil recovery. Society of Petroleum Engineers, 2010.
- [2] Lake L.W., Johns R., Rossen B., et al. Fundamentals of enhanced oil recovery. Society of Petroleum Engineers, 2014.
- [3] Catalano E., Chareyre B., Cortis A., et al. A pore-scale hydro-mechanical coupled model for geomaterials. *II Int. Conf. PARTICLES 2011*. URL: <https://pdfs.semanticscholar.org/8f8b/f95bd79030ba0ec0361680e901f3a569d67a.pdf> (дата обращения: 15.09.2019).
- [4] Saenger E.H., Enzmann F., Keehm Y., et al. Digital rock physics: effect of fluid viscosity on effective elastic properties. *J. Appl. Geophys.*, 2011, vol. 74, iss. 4, pp. 236–241. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2011.06.001>
- [5] Lan H., Martin C.D., Hu B. Effect of heterogeneity of brittle rock on micro-mechanical extensile behavior during compression loading. *J. Geophys. Res.*, 2010, vol. 115, iss. B1, art. B01202. DOI: <https://doi.org/10.1029/2009JB006496>
- [6] Cao H., Boyd A., Da Silva Simoes V. Numerical simulation of the elastic properties of porous carbonate rocks. *13th Int. Cong. of the Brazilian Geophysical Society*, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1190/sbgf2013-224>
- [7] Алексеев М.В., Кулешов А.А., Савенков Е.Б. Математическая модель поведения непроницаемой пористой среды при температурном воздействии. *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 2017, № 35. 34 с. DOI: 10.20948/prepr-2017-35
- [8] Алексеев М.В., Кулешов А.А., Савенков Е.Б. Термомеханическая модель непроницаемой пористой среды с химически активным наполнителем. *Матем. моделирование*, 2017, т. 29, № 12, с. 117–133.
- [9] Alekseev M.V., Savenkov E.B., Sudobin N.G. Mathematical modeling of thermo-mechanical behavior of porous impermeable medium with active filler. In: *Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes 2017*. Springer, 2018. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-77788-7_22

- [10] Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели термомеханики. М., ФИЗМАТЛИТ, 2002.
- [11] Баталин О.Ю., Брусиловский А.И., Захаров М.Ю. Фазовые равновесия в системах природных углеводородов. М., Недра, 1992.
- [12] Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K. The properties of liquids and gases. McGraw-Hill, 1977.
- [13] Bauman J.H., Deo M. Simulation of a conceptualized combined pyrolysis, in situ combustion, and CO₂ storage strategy for fuel production from green river oil shale. *Energy & Fuels*, 2012, vol. 26, no. 3, pp. 1731–1739.
DOI: <https://doi.org/10.1021/ef2017072>
- [14] Краснов К.С., ред. Физическая химия. Т. 1, 2. М., Высш. шк., 2001.
- [15] Mollerup J.M., Michelsen M.L. Calculation of thermodynamic equilibrium properties. *Fluid Phase Equilib.*, 1992, vol. 74, pp. 1–15.
DOI: [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(92\)85049-E](https://doi.org/10.1016/0378-3812(92)85049-E)
- [16] Behar F., Roy S., Jarvie D. Artificial maturation of a type I kerogen in closed system: mass balance and kinetic modelling. *Org. Geochem.*, 2010, vol. 41, iss. 11, pp. 1235–1247.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2010.08.005>
- [17] Ru X., Cheng Z., Song L., et al. Experimental and computational studies on the average molecular structure of Chinese Huadian oil shale kerogen. *J. Mol. Struct.*, 2012, vol. 1030, pp. 10–18. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2012.07.027>
- [18] Кокорев В.И., Судобин Н.Г., Полищук А.М. и др. Термодеструкция керогена битуминозных пород тутлеймской (баженовской) свиты месторождений Краснотеннинского района. *Матер. II междунар. науч. симп. «Теория и практика применения методов увеличения нефтеотдачи пластов»*. Т. 1. М., ВНИИнефть, 2009, с. 45–49.

Алексеев Михаил Владиславович — аспирант, младший научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Российская Федерация, 125047, Москва, Миусская пл., д. 4).

Судобин Николай Григорьевич — канд. хим. наук, ведущий научный сотрудник АНО «НТО «ИТИН» (Российская Федерация, 127422, Москва, Дмитровский проезд, д. 10, стр. 1).

Кулешов Андрей Александрович — д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Российская Федерация, 125047, Москва, Миусская пл., д. 4).

Савенков Евгений Борисович — канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Российская Федерация, 125047, Москва, Миусская пл., д. 4).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Алексеев М.В., Судобин Н.Г., Кулешов А.А. и др. Математическое моделирование термомеханического поведения непроницаемой пористой среды. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2020, № 4 (91), с. 4–23.

DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2020-4-4-23>

**MATHEMATICAL SIMULATION OF THERMOMECHANICS
IN AN IMPERMEABLE POROUS MEDIUM**

M.V. Alekseev¹

mikhail.alekseev@phystech.edu

N.G. Sudobin²

ngsudobin@yandex.ru

A.A. Kuleshov¹

andrew_kuleshov@mail.ru

E.B. Savenkov¹

e.savenkov@googlemail.com

¹ Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russian Federation

² Scientific and Technological Group ITIN, Moscow, Russian Federation

Abstract

The paper reports on mathematically simulating behaviour of a porous medium featuring isolated interstices filled with a chemically active substance by using a mathematical model of thermomechanics in the matrix and thermochemical processes inside the pores. We used three-dimensional thermomechanical equations to describe the behaviour of the medium. A lumped-element model accounting for chemical reactions and phase equilibrium describes the processes in pores. We outline the mathematical model of the medium and the respective computational algorithm. We provide parametric computation results using realistic thermophysical and thermodynamical parameters, composition of the organic substance found inside pores (products of thermal decomposition of kerogen) and chemical reactions, which show that it is necessary to employ complex, interconnected models to simulate the process class under consideration

Keywords

Mathematical simulation, thermomechanics, phase equilibrium, chemical kinetics, thermal decomposition, kerogen, porous medium

Received 22.07.2019

Accepted 26.08.2019

© Author(s), 2020

REFERENCES

- [1] Lake L.W. Enhanced oil recovery. Society of Petroleum Engineers, 2010.
- [2] Lake L.W., Johns R., Rossen B., et al. Fundamentals of enhanced oil recovery. Society of Petroleum Engineers, 2014.

- [3] Catalano E., Chareyre B., Cortis A., et al. A pore-scale hydro-mechanical coupled model for geomaterials. *II Int. Conf. PARTICLES 2011*. Available at: <https://pdfs.semanticscholar.org/8f8b/f95bd79030ba0ec0361680e901f3a569d67a.pdf> (accessed: 15.09.2020).
- [4] Saenger E.H., Enzmann F., Keehm Y., et al. Digital rock physics: effect of fluid viscosity on effective elastic properties. *J. Appl. Geophys.*, 2011, vol. 74, iss. 4, pp. 236–241. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2011.06.001>
- [5] Lan H., Martin C.D., Hu B. Effect of heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behavior during compression loading. *J. Geophys. Res.*, 2010, vol. 115, iss. B1, art. B01202. DOI: <https://doi.org/10.1029/2009JB006496>
- [6] Cao H., Boyd A., Da Silva Simoes V. Numerical simulation of the elastic properties of porous carbonate rocks. *13th Int. Cong. of the Brazilian Geophysical Society*, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1190/sbgf2013-224>
- [7] Alekseev M.V., Kuleshov A.A., Savenkov E.B. A mathematical model for impermeable porous media under thermomechanical loads. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha* [Keldysh Institute Preprints], 2017, no. 35, 34 p. (in Russ.). DOI: 10.20948/prepr-2017-35
- [8] Alekseev M.V., Kuleshov A.A., Savenkov E.B. Thermomechanical model of an impermeable porous medium with a chemically active filler. *Math. Models Comput. Simul.*, 2018, vol. 10, no. 4, pp. 459–471. DOI: <https://doi.org/10.1134/S2070048218040026>
- [9] Alekseev M.V., Savenkov E.B., Sudobin N.G. Mathematical modeling of thermomechanical behavior of porous impermeable medium with active filler. In: *Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes 2017*. Springer, 2018. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-77788-7_22
- [10] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli termomekhaniki* [Mathematical models of thermomechanics]. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2002.
- [11] Batalin O.Yu., Brusilovskiy A.I., Zakharov M.Yu. *Fazovye ravnovesiya v sistemakh prirodnykh uglevodorodov* [Phase equilibria in natural hydrocarbon systems]. Moscow, Nedra Publ., 1992.
- [12] Reid R.C., Prausnitz J.M., Sherwood T.K. *The properties of liquids and gases*. McGraw-Hill, 1977.
- [13] Bauman J.H., Deo M. Simulation of a conceptualized combined pyrolysis, in situ combustion, and CO₂ storage strategy for fuel production from green river oil shale. *Energy & Fuels*, 2012, vol. 26, no. 3, pp. 1731–1739. DOI: <https://doi.org/10.1021/ef2017072>
- [14] Krasnov K.S., ed. *Fizicheskaya khimiya*. T. 1, 2 [Physical chemistry. Vol. 1, 2]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 2001.
- [15] Mollerup J.M., Michelsen M.L. Calculation of thermodynamic equilibrium properties. *Fluid Phase Equilib.*, 1992, vol. 74, pp. 1–15. DOI: [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(92\)85049-E](https://doi.org/10.1016/0378-3812(92)85049-E)

[16] Behar F., Roy S., Jarvie D. Artificial maturation of a type I kerogen in closed system: mass balance and kinetic modelling. *Org. Geochem.*, 2010, vol. 41, iss. 11, pp. 1235–1247. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.orggeochem.2010.08.005>

[17] Ru X., Cheng Z., Song L., et al. Experimental and computational studies on the average molecular structure of Chinese Huadian oil shale kerogen. *J. Mol. Struct.*, 2012, vol. 1030, pp. 10–18. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2012.07.027>

[18] Kokorev V.I., Sudobin N.G., Polishchuk A.M., et al. [Thermal destruction of bituminous kerogen from Tutley (Bazhenov) suite of deposits in Krasnoleninsky region]. *Mater. II mezhdunar. nauch. simp. "Teoriya i praktika primeneniya metodov uvelicheniya nefteotdachi plastov". T. 1* [Proc. II Int. Sci. Conf. "Theory and practice of enhanced oil recovery methods". Vol. 1]. Moscow, VNIIneft Publ., 2009, pp. 45–49 (in Russ.).

Alekseev M.V. — Post-Graduate Student, Junior Researcher, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Miuskaya ploschad 4, Moscow, 125047 Russian Federation).

Sudobin N.G. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Scientific and Technological Group ITIN (Dmitrovskiy proezd 10, str. 1, Moscow, 127422 Russian Federation).

Kuleshov A.A. — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Miuskaya ploschad 4, Moscow, 125047 Russian Federation).

Savenkov E.B. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Miuskaya ploschad 4, Moscow, 125047 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Alekseev M.V., Sudobin N.G., Kuleshov A.A., et al. Mathematical simulation of thermomechanics in an impermeable porous medium. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2020, no. 4 (91), pp. 4–23 (in Russ.).

DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2020-4-4-23>