多孔介质中强间断条件下多组分物质渗流模拟

张鑫¹, 曹渊², 王铁良², 何增², 郝有志¹, 卢德唐^{1*}

1. 中国科学技术大学工程科学学院, 合肥 230027;

2. 西北核技术研究所, 西安 710024

*联系人, E-mail: dtlu@ustc.edu.cn

收稿日期: 2021-06-01; 接受日期: 2021-08-09; 网络出版日期: 2021-12-21

国家重大科技专项(编号: 2017ZX05009005)资助项目

摘要 多孔介质强间断情况表现为地层爆炸腔体与周围介质间存在极高的温度和压力梯度, 且因爆炸产物的参与形成多相多组分的渗流过程. 针对该情形, 建立了多孔介质中多相多组分物质非等温渗流数值模型. 根据对流传导及地层渗流速度特征对压力和温度进行了解耦; 对能量方程采用显式, 渗流方程采用全隐式计算. 通过对比等温和非等温两种渗流环境计算结果, 认为随着时间推移, 非等温地层压力呈先上升后下降特点, 且位置越靠近空腔, 压力上升越快. 在温度梯度影响下, 地层压力曲线呈波形, 达到平衡需要较长时间. 而在等温渗流情况下, 压力曲线表现平滑, 达到平衡较快. 此外, 该数值模型能够预测各组分气体在地层扩散过程, 对地层污染物扩散、垃圾填埋、地层爆破有害气体扩散等有一定指导意义.

关键词 多孔介质, 多相, 多组分, 温度梯度, 压力梯度, 气液运输

PACS: 44.30.+v, 47.11.+j, 51.10.+y, 51.20.+d

1 引言

多相、多组分物质在多孔介质中的输运与扩散广泛存在于能源、环境及化工等诸多领域, 例如石油及天然气开采、地下污染物扩散、有害气体防护及地下爆炸等^[1-4].

在油气田勘探开发中, 地层中油气水等多相物质渗流过程的再现主要是通过油藏数值模拟来完成的. 目前, 油藏数值模拟主要有黑油和组分两种模型^[5,6]. 在黑油模型中, 地层流体仅为油、气、水三相, 各相的达西定律、质量守恒、流体状态方程、岩石本构关

系及相渗关系形成完备的微分方程组^[7,8]. 因Standing^[9]提出泡点压力的概念, 允许油气分离, 在黑油模型中可以考虑界面传质. Du和Nojabaei^[10]计算了原始泡点压力以上的连续黑油流体的特性, 并对泡点和露点曲线进行了扩展. Nickens^[11]和Santos^[12]基于基本流动假设的漂移通量模型描述了井筒内的气、液两相流动. 油气是以烃为主体的多组分混合物, 但是黑油模型忽略了流体中各组分对压力和温度变化的影响, 为对油气进行准确计算, 采用组分模型进行了计算模拟. 组分模型考虑了流体中每种组分的特性, 可以更准确地模拟组分对压力分布、温度分布和流体流动特性的

引用格式: 张鑫, 曹渊, 王铁良, 等. 多孔介质中强间断条件下多组分物质渗流模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 244711
Zhang X, Cao Y, Wang T L, et al. Simulation of multicomponent material seepage in porous media under strong discontinuous conditions (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 244711, doi: 10.1360/SSPMA-2021-0163

影响, 计算结果更加精确可靠^[13]. Gregory和Aziz^[14]及Gould^[15]基于组分模型模拟了管道内流体流动, 计算了两相流中压力、温度和液体析出之间的关系.

地下非水相液体污染是21世纪环境治理面临的巨大挑战. 多孔介质的污染主要包括土壤中有有机物和重金属离子的迁移. 这些有机溶剂的溶解度较低, 如氯化溶剂, 一旦进入地下, 就会以非水溶液的形式存在于环境中^[16,17]. 这些有机溶剂具有毒性和持久性, 会对地下水资源造成严重而持久的污染^[18-20]. 因此, 多相流数值模拟在地下水污染的修复和处理中具有重要作用^[21-23]. Sookhak等人^[24]在考虑迟滞影响的基础上, 提出了一种多相、多组分模型框架. 与非滞后情况相反, 滞后影响非水相液体的摩尔分数和污染物的分布.

随着社会发展、工业进步, 对能源需求日益增大. 核能具有体积相对较小而能量巨大的特点, 被认为是减缓能源危机的一项有效措施, 大量应用于工业(http://www.nea.gov.cn/2017-09/25/c_136636892.htm). 核燃料生产和核反应堆使用过的核废料对环境有着巨大危害, 如放射性、热能释放等. 目前, 核废料最常见的处理措施是深度掩埋. 由于核废料中放射性核素仍然继续放出射线以及衰变释放热能, 可能造成核废料填埋泄露, 对地下水和土壤造成污染. 多孔介质渗流数值模拟对于预测和治理土壤中的核泄漏污染有着重要意义.

2015年8月12日, 天津滨海新区危险化学品仓库发生爆炸, 事故中的爆炸总能量相当于450吨TNT当量, 给人民生命财产安全造成巨大损失. 事后检测出100多种危险化学品爆炸对以爆炸仓库为中心的一定区域内的地下水、土壤、大气造成了污染, 多种污染物严重超标(http://www.xinhuanet.com/politics/2015-08/21/c_1116336758.htm).

随着多相、多组分流模型应用领域的不断扩大, 模型的类型也越来越多. 然而, 大多数渗流模型只能处理等温条件的问题, 对于变温条件无法进行精确计算. 此外, 现有模型的计算速度还有待提高.

本文建立了多相、多组分流体的数学模型, 爆炸点和地层之间存在温度压力强间断条件, 基于径向流速、压力和计算半径之间的关系, 提出了一种新的温压解耦方法. 在此基础上采用非结构网格隐式全离散进行数值求解, 并由两个数值案例研究温度对地层压

力平衡时间和气体扩散半径的影响.

2 数学模型

描述的物理背景模型如图1所示. 假设爆炸源及其腔体被埋在地下深处. 爆炸后, 爆炸腔体内形成高温高压环境, 温度可达数千K, 压力可达数十MPa. 随着时间的推移, 空腔中的压力向地层扩散. 爆炸产物也随着地层压力平衡的过程在地层中迁移.

2.1 数学模型假设

为方便计算分析, 将物理模型简化为如图2所示的数学模型. 假设坐标原点在爆炸腔体中心, 计算区域是一个半径为500 m、计算高度为100 m的圆柱体, 腔体是一个半径为5 m、高为6 m的小圆柱体.

为建立气、水两相流数学模型, 本文作如下假设: (1) 水及岩体是微可压缩; (2) 气相不溶于水相; (3) 渗流方程采用气水两相黑油模型, 但气相的PVT (Pressure-Volume-Temperature)性质采用多组分混合法计算; (4) 在气、水相迁移过程中, 各组分遵循相平衡和热平衡, 没有化学反应和生物衰变; (5) 每个网格采用多组分混合物闪蒸计算气和液相比例.

2.2 质量守恒和能量守恒控制方程

基于上述假设, 模型的控制方程为

(1) 质量守恒方程

水相:

图1 (网络版彩图)物理背景模型. 该图为地层的剖面图, 中心部分是爆炸室. 爆炸后, 压力在土壤中扩散, 多相多组分物质在地下运移

Figure 1 (Color online) The physical background model. The figure is a cross-sectional view of the formation, with the explosion in the center. After the explosion, the pressure spreads in the soil, and the multi-phase and multi-component substances migrate underground.

图 2 (网络版彩图)物理模型

Figure 2 (Color online) Physical model.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi S_w}{B_w} \right) - \nabla \cdot \mathbf{V}_w = q_w, \quad (1)$$

气相:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi S_g}{B_g} \right) - \nabla \cdot \mathbf{V}_g = q_g, \quad (2)$$

其中, t 是时间(单位: s), ϕ 是孔隙度, B_w 是水相地层体积系数, B_g 是气相地层体积系数, S_w 是水相饱和度, q_w 是单位时间单位体积水相的源/汇强度(单位: s^{-1}), S_g 是气相饱和度, q_g 是单位时间单位体积气相的源/汇强度(单位: s^{-1}).

(2) 达西定律

水相:

$$\mathbf{V}_w = -\frac{k_{rw}k}{\mu_w B_w} (\nabla P_w - \gamma_w \nabla D), \quad (3)$$

气相:

$$\mathbf{V}_g = -\frac{k_{rg}k}{\mu_g B_g} (\nabla P_g - \gamma_g \nabla D), \quad (4)$$

其中, V_w 是水相流速(单位: m/s), k_{rg} 是水相相对渗透率, k 是绝对渗透率(单位: m^2), μ_w 是水相的黏度(单位: Pa s), P_w 是水相压力(单位: Pa), γ_w 是水的容重系数 ($\gamma_w = \rho_w g$, 单位: N/m^3), D 是深度(单位: m), V_g 是气相流速(单位: m/s), k_{rg} 是气相相对渗透率, μ_g 是气相的黏度(单位: Pa s), P_g 是气相压力(单位: Pa), γ_g 是气的容重系

数 ($\gamma_g = \rho_g g$, 单位: N/m^3)^[25].

(3) 能量守恒方程

热传导发生在气相、水相和岩石骨架中, 不受压力的影响. 在热对流计算中, $\mathbf{v} \cdot \text{grad} T$ 虽然主要受温度梯度的影响, 但也与流体速度和岩石表面粗糙度有关^[26]. 在对流换热过程中, 速度 $\mathbf{v}$ 与压力 p 有关. 通过计算分析, 渗流过程中速度 $\mathbf{v}$ 相对较小(在 $\mu m/s$ 量级). 在 Cheng 等人^[27]的研究中, 当储层为非饱和多孔介质时, 流体渗流速度较小, 能量传递方式主要通过温度梯度引起的热传导. 因此对流换热效应极小, 可以忽略. 因此, 对压力和温度进行解耦计算. 在能量守恒计算中, 导热项采用傅里叶定律计算^[28]:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = -k \nabla T, \quad (5)$$

其中, $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ 是热通量密度(矢量, 由高温指向低温方向, 单位: W/m^2), k 是导热系数(单位: $W/(m \cdot K)$), T 是温度(单位: K).

关于固-液的能量方程, 早期已经有了相关的研究资料^[29,30].

固体骨架:

$$(1 - \phi) k_s \nabla^2 T + (1 - \phi) q_s = (1 - \phi) \frac{\partial}{\partial t} [(\rho c_p \Delta T)_s], \quad (6)$$

孔隙内流体:

$$\nabla \cdot [\phi k_f \nabla T] + \phi q_f = \frac{\partial}{\partial t} [\phi (\rho_w S_w U_w + \rho_g S_g U_g)], \quad (7)$$

所以气、水两相非等温渗流的能量方程为

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot [k_t \nabla T] + q_t \\ &= \frac{\partial}{\partial t} [\phi (\rho_w S_w U_w + \rho_g S_g U_g) + (1 - \phi) (\rho c_p)_s T], \end{aligned} \quad (8)$$

其中, 下标 s 和 f 分别表示固体骨架与液相流体, 下标 w 和 g 分别代表水相和气相, 下标 t 表示固体骨架与液相流体的总和. ρ 是密度(单位: kg/m^3), ϕ 是孔隙度, c_p 是比热(单位: $J/(kg \cdot K)$), q 是单位时间单位体积热源强度(单位: W/m^3).

(4) 辅助方程

仅考虑气、水两相, 所以

$$S_w + S_g = 1. \quad (9)$$

孔隙度^[31,32]

$$\phi = \phi(p, T) = \phi_{\text{ref}} \exp[c_s(p - p_{\text{ref}}) - \beta_s(T - T_{\text{ref}})], \quad (10)$$

其中, p_{ref} 是参考压力(单位: Pa), ϕ_{ref} 是参考压力下的参考孔隙度, c_{ϕ} 是孔隙的压缩系数(单位: Pa^{-1}), T_{ref} 是参考温度, β_s 是多孔介质的热膨胀系数.

在两相流计算中, 相对渗透率 k_r 是采用水饱和度 S_w 的幂函数^[33-35], 所以

$$\begin{aligned} k_{rg} &= k_{rg}^0 \cdot \left[1 - \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{gr}} \right]^{n_g}, \\ k_{rw} &= k_{rw}^0 \cdot \left[\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{gr}} \right]^{n_w}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中, k_{rg}^0 和 k_{rw}^0 分别是气、水相最大相对渗透率, S_{wr} 是束缚水饱和度, S_{gr} 是残余气饱和度, n_g 和 n_w 分别是气水两相因数.

水的黏度 μ_w 是温度 T 和压力 p 的函数 ($\mu = \mu(p, T)$). 一般来说, 水的黏度随压力变化很小, 可以忽略不计. 但它随温度变化很大^[31]. 气体黏度按 Carr 等人^[36] 的方法计算:

$$\mu_w = \mu_w(T) = \sum_{k=0}^5 (-1)^k a_k T^k, \quad (12)$$

其中, 常数 a_k 是与流体类型有关的经验系数.

密度 ρ 是温度 T 和压力 p 的函数^[31], 所以

$$\begin{aligned} \rho &= \rho(p, T) \\ &= \rho_{\text{ref}}(p_{\text{ref}}, T_{\text{ref}}) \left[1 + c_{pf}(p - p_{\text{ref}}) - \beta(T - T_{\text{ref}}) \right], \end{aligned} \quad (13)$$

其中, ρ_{ref} 为参考密度, c_{pf} 为压缩系数, β 为热膨胀系数:

$$\beta = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p.$$

不考虑毛细管力^[37], 所以

$$P_w = P_g. \quad (14)$$

地层体积系数 B 是温度 T 和压力 p 的函数, 所以

$$\begin{cases} B_w = 1, \\ B_g = \frac{p_{sc} T}{p T_{sc}} z, \end{cases} \quad (15)$$

其中, z 为真实状态气体偏差因子, T_{sc} , p_{sc} 分别是地面标准状态下温度和压力 ($T_{sc} = 288.16 \text{ K}$, $p_{sc} = 101325 \text{ Pa}$).

$$(\rho c_p)_t = \phi(\rho c_p)_f + (1 - \phi)(\rho c_p)_s, \quad (16)$$

$$k_t = \phi k_f + (1 - \phi) k_s, \quad (17)$$

$$q_t = \phi q_f + (1 - \phi) q_s, \quad (18)$$

$$V = \phi v, \quad (19)$$

$$h = U + \frac{P}{\rho}, \quad (20)$$

其中, $(\rho c_p)_t$ 是总热容(单位: $\text{J}/(\text{kg K})$), k_t 是总热传导率(单位: $\text{W}/(\text{m K})$), q_t 是总热源强度(单位: W/m^3), V 是渗流速度(单位: m/s), h 是比焓(单位: J), U 是内能(单位: J).

2.3 初始和边界条件

所建立数学模型的初始条件和边界条件如下.

初始条件:

$$t = 0 : 0 \leq z \leq L : P(z) = P_i. \quad (21)$$

边界条件:

$$\begin{aligned} t > 0 : z = 0 : P &= 1 \text{ atm}, \\ t > 0 : z = z_c : T^* &= \frac{k k_r}{\mu B} = 0, \\ t > 0 : r = R_c : T^* &= \frac{k k_r}{\mu B} = 0, \end{aligned} \quad (22)$$

其中, z 是距离地表垂直距离(单位: m), z_c 是垂直方向上地层计算最大距离(单位: m), r 是地层计算半径(单位: m), R_c 是水平方向地层计算边界处距中心高温高压腔体距离(单位: m), T^* 是流体通量传导系数(单位: $\text{m}^2 \text{ Pa}^{-1} \text{ s}^{-1}$).

3 数值模拟

3.1 数值模型和网格划分

方程求解区域和爆炸腔体都是圆柱体, 采用柱坐标系, 以爆炸点为原点, 径向和纵向采用等比数列递增布点, 最终形成 PEBI (Perpendicular Bisection) 网格, 进行离散控制方程. 图 2 为物理模型图, 图 3 为所建立的数值模拟计算模型. 数值模拟计算过程中所使用参数如表 1.

3.2 离散控制方程

由于温度和压力的解耦, 能量方程和渗流方程采用了不同的格式. 能量方程采用显式方法计算, 渗流方程采用全隐式方法计算.

将式(3)和(4)代入式(1)和(2)得

图 3 (网络版彩图)数值模拟计算模型

Figure 3 (Color online) The numerical simulation calculation model.

表 1 计算参数

Table 1 Calculation parameters

参数	值	单位
K_H	水平方向绝对渗透率	30 mD
K_V	垂直方向绝对渗透率	3 mD
P_{ref}	参考压力	10^5 Pa
Φ_{ref}	参考孔隙度	0.15
P_s	固体密度	2600 kg/m ³
T_{sc}	标准状态温度	288.16 K
P_{sc}	标准状态压力	101325 Pa
K_{fl}	液相热传导系数	0.6 W/(m K)
K_{fg}	气相热传导系数	0.0233 W/(m K)
K_s	固体热传导系数	3.0 W/(m K)
c_{ps}	固体热容	1000 J/(kg K)
$c_{pf,l}$	液相热容	4200 J/(kg K)
$c_{pf,g}$	气相热容	1003 J/(kg K)

用下标 L 代替下标 w 和 g , 分别表示水相和气相:

$$T_{ij,L} = \lambda_{ij,L} \cdot G_{ij,L}, \quad (24)$$

$$\lambda_{ij,L} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_{i,L} B_{i,L}} + \frac{1}{\mu_{j,L} B_{j,L}} \right). \quad (25)$$

水平径向:

$$G_{ij,L} = \frac{2\pi h}{\ln \frac{r_j}{r_i}} \left(\frac{2K_i K_{i,rL} \cdot K_j K_{j,rL}}{K_i K_{i,rL} + K_j K_{j,rL}} \right), \quad (26)$$

垂直方向:

$$G_{ij,L} = \frac{\pi(r_{i+1}^2 - r_i^2)}{\Delta z} \left(\frac{2K_i K_{i,rL} \cdot K_j K_{j,rL}}{K_i K_{i,rL} + K_j K_{j,rL}} \right). \quad (27)$$

所有系数中与 p^{n+1} , S_w^{n+1} , S_g^{n+1} 有关的项, 均是未知量, 这些相关的量需要线性化. 采用牛顿迭代法对方程中的参数进行线性化处理. 与 $n+1$ 步的压力 p 及饱和度 S 有关的项均采用 $n+1$ 步前一迭代步(v 迭代步)值计算. 下面的过程忽略下标 w 和 g .

$$\begin{aligned} \sum_j [T_{ij,w}(\Delta P_w - \gamma_w \Delta D)]^{n+1} &= \frac{V_i}{\Delta t} \left[\left(\frac{\phi S_w}{B_w} \right)^{n+1} - \left(\frac{\phi S_w}{B_w} \right)^n \right] + q_w, \\ \sum_j [T_{ij,g}(\Delta P_g - \gamma_g \Delta D)]^{n+1} &= \frac{V_i}{\Delta t} \left[\left(\frac{\phi S_g}{B_g} \right)^{n+1} - \left(\frac{\phi S_g}{B_g} \right)^n \right] + q_g. \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} T_{ij}^{n+1} \approx T_{ij}^{(v+1)} &= T_{ij}^{(v)} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial p_i} \bigg|^{(v)} \delta p_i + \frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{L,i}} \bigg|^{(v)} \delta S_{L,i} \\ &\quad + \frac{\partial T_{ij}}{\partial p_j} \bigg|^{(v)} \delta p_j + \frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{L,j}} \bigg|^{(v)} \delta S_{L,j}, \end{aligned} \quad (28)$$

Figure 4 The calculation process.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\phi S}{B} \right)^{n+1} - \left(\frac{\phi S}{B} \right)^n \\ &= S^n \left[\frac{1}{B^n} \frac{\partial \phi}{\partial p} + \phi^{n+1} \frac{\partial (1/B)^n}{\partial p} \right] \left[p^{(v)}_{n+1} - p^n \right] \\ &+ \left(\frac{\phi}{B} \right)^n \left[S^{(v)}_{n+1} - S^n \right]. \end{aligned} \quad (29)$$

将空腔与围岩相接触的壁面按照内边界处理. 空腔与围岩之间的流动服从达西定律, 利用空腔与围岩之间压力梯度的变化来计算空腔流出物质总量, 然后根据气体状态方程(30), 计算出腔体的压力变化^[31]:

$$PV = ZRT, \quad (30)$$

$$Z = V_a / V_i, \quad (31)$$

其中, Z 是气体偏差因子, 表示某一温度和压力下, 同一质量气体的真实体积 V_a (单位: m^3) 和理想体积 V_i (单位: m^3) 之比.

由于整个地层中存在着较大压力梯度, 所以流体对流扩散远大于分子扩散. 因此, 忽略气、液相中浓度梯度引起的分子扩散^[38]. 气液传质仅考虑对流通量, 由压力梯度引起的对流通量如下:

$$q_{ij} = T_{ij}(P_j - P_i - \gamma_w \Delta D). \quad (32)$$

方程(8)离散后形式如下:

$$\begin{aligned} & \sum_j (k_t)_{ij} \frac{w_{ij}}{d_{ij}} (T_j - T_i)^n \\ &= \frac{V_i}{\Delta t} (1 - \phi_i)^n (\rho_i c_{p,i})^n (T_i^{n+1} - T_i^n), \end{aligned} \quad (33)$$

其中, w_{ij} 为相邻网格之间的流动横截面积, d_{ij} 为相邻网格中心之间的距离, 传导系数 $(k_t)_{ij}$ 采用上游加权, 即使用网格 i 的固、液相参数.

3.3 数值求解步骤

在数值模拟过程中, 每个时间步均采用温度和压力解耦计算方法. 首先, 根据式(33)计算地层温度 T , 并根据渗流控制方程(23)计算 p , S_w , S_g . 然后, 利用式(32)确定网格中各组分的摩尔浓度比 x_i , 进行传质计算. 最后, 采用基于压力 p 、温度 T 和组分浓度 x_i 的多组分闪蒸计算进行气液相平衡计算^[39,40]. 具体计算过程如图4所示.

4 程序正确性验证

对于本文建立的强间断条件下非等温多相渗流模型, 难以找到现有程序或者模型进行对比验证, 所以本文采用解析解进行验证. 如果温度恒定, 本文方程退化为气、水两相渗流的黑油模型, 建立相应解析解(附录所示). 假设地层恒温 $T=293.15 \text{ K}$, 空腔恒压 4 MPa , 地层初始压力为 2 MPa , 其他参数如表1所示, 计算时间为 $t=24 \text{ h}$, 解析解与本程序计算结果如图5所示. 结果表明, 解析解计算结果与本文的模型吻合较好, 证实了本程序的正确性和准确性.

5 结果与讨论

基于所建立的数值模型, 计算并分析了温度梯度对地层压力和气体扩散的影响. 在初始时刻, 地层中心的空腔压力为 20 MPa , 温度为 2000 K . 地层初始压力是平衡的, 且随深度呈线性分布. 周向地层初始温度为 293.15 K . 空腔内的气体组成仅考虑一氧化碳 ($100\% \text{ CO}$), 空腔外地层的气体成分按照空气成分考虑 ($78\% \text{ N}_2$, $22\% \text{ O}_2$). 其他地层参数如表1所示.

由图6可知, 计算域内地层温度随时间呈先升高后降低的趋势, 最终趋于平衡. 能量方程中只考虑热传导, 因此地层传热更快. 地层的水平导热系数大于垂直导热系数, 所以在同一时间、相同的距离, 水平温度高于垂直温度. 图7为计算域内地层温度场随时间的变化情况.

图8(a)为与空腔相同垂直深度 $z=50 \text{ m}$ 处, 水平方

图5 (网络版彩图)解析解与数值解计算对比

Figure 5 (Color online) Comparison of analytical solution and numerical solution calculation.

图 6 (网络版彩图)非等温地层各点温度随时间变化。(a) $z=50$ m, $0 < r < 500$ m 地层温度随时间的变化; (b) $r=0$ m, $0 < z < 47$ m 地层温度随时间的变化; (c) $r=50$ m, $53 < z < 100$ m 地层温度随时间的变化

Figure 6 (Color online) The temperature of each point in the non-isothermal formation changes with time. (a) The temperature change with time in the formation range $z=50$ m, $0 < r < 500$ m; (b) the temperature change with time in the formation range $r=0$ m, $0 < z < 47$ m; (c) the temperature change with time in the formation range $r=50$ m, $53 < z < 100$ m.

图 7 (网络版彩图)整个计算域的地层温度场随时间变化

Figure 7 (Color online) The temperature field of formation in the entire calculation domain changes with time.

向地层压力随时间的变化情况. 图8(b)和(c)分别为与空腔相同水平位置 $r=0$ m时地层压力垂直方向随时间的变化情况. 图8(b)为 $0<z<47$ m深度范围内的地层压力随时间变化, 图8(c)为 $53<z<100$ m深度范围内的地

层压力随时间变化. 空腔压力从初始时间的20 MPa开始随时间逐渐减小, 最终略高于444325 Pa ($z=50$ m处初始地层压力为444325 Pa), 整个地层压力达到平衡. 从图8可以看出, 整个地层压力先上升后下降. 离空腔

图 8 (网络版彩图)非等温地层与等温地层各点压力随时间变化. (a), (d) $z=50$ m, $0 < r < 500$ m地层范围内压力随时间的变化; (b), (e) $r=0$ m, $0 < z < 47$ m地层范围内压力随时间的变化; (c), (f) $r=50$ m, $53 < z < 100$ m地层范围内压力随时间的变化

Figure 8 (Color online) The pressure of each point in the non-isothermal formation and the isothermal formation changes with time. (a), (d) The pressure change with time in the formation range $z=50$ m, $0 < r < 500$ m; (b), (e) the pressure change with time in the formation range $r=0$ m, $0 < z < 47$ m; (c), (f) the pressure change with time in the formation range $r=50$ m, $53 < z < 100$ m.

越近, 地层压力上升越快, 地层中各点的压力曲线呈波形. 从图8(b)和(c)可以看出, 当 $r=0$ m时, 在 $0<z<100$ m 范围内, 由于重力的存在, 在与空腔垂直距离相同的情况下, 上部地层压力上升相对于底部地层压力上升相对较低. 图9显示了非等温情况下整个地层的压力场随时间的变化.

对比计算了地层恒温条件, 即空腔与围岩初始温

度相等, 计算域内地层温度 $T=293.15$ K, 地层压力随时间变化如图8(d)–(f)所示. 结果表明, 整个地层压力同样先上升后下降. 对比图8(a)–(c)和8(d)–(f)可以看出, 等温条件下, 地层各点压力随时间变化曲线较为平滑, 没有波形. 此外, 在等温环境下, 地层压力峰值低于非等温环境, 整个地层压力在更短的短时间内达到平衡. 因此, 空腔的高温会影响地层压力的传播过程. 图10为恒

图 9 (网络版彩图)地层压力场在变温条件下随时间变化

Figure 9 (Color online) The pressure field of formation in the entire calculation domain changes with time.

图 10 (网络版彩图)地层压力场在恒温条件下随时间变化

Figure 10 (Color online) The pressure field of formation in the entire calculation domain changes with time under constant temperature conditions.

温情况下整个计算区域内地层压力场随时间的变化情况。

图11为CO气体从空腔向地层中扩散半径随时间的变化。初始时, 地层中一氧化碳浓度为0%, 空腔中的一氧化碳浓度为100%。由于地层中温度梯度和压力梯度的存在, 腔内气体向外扩散和渗透。1 h水平扩散半径为15.24 m。在垂直方向上, 向上扩散深度为42.4 m, 向下扩散深度为56.6 m。5 h时, 水平扩散半径为27.49 m。垂直方向向上扩散深度为33.99 m, 向下扩散深度为59.01 m。水平扩散半径40 h为43.01 m, 垂直方

向向上扩散至深度22.27 m, 向下扩散至深度59.84 m。由于水平渗透率远大于垂向渗透率, 且上部地层压力梯度小于下部地层压力梯度, 因此水平扩散距离大于垂向扩散距离, 垂直方向向上扩散距离大于向下扩散距离。整个计算区域的地层气体扩散浓度分布如图12所示。

6 结论

针对地下爆炸导致腔体与地层温度和压力强间断

图 11 (网络版彩图)整个计算域内空腔气体进入地层随时间的渗透和扩散距离。(a) 水平方向上气体扩散半径;(b) 垂直方向上气体扩散距离

Figure 11 (Color online) Permeation and diffusion distance of the cavity gas into the formation over time in the entire calculation domain. (a) The gas diffusion radius in the horizontal direction; (b) the gas diffusion distance in the vertical direction.

图 12 (网络版彩图)整个计算域的气体浓度分布随时间变化

Figure 12 (Color online) Gas concentration distribution in the formation of the whole calculation domain varies with time.

问题, 本文建立了多相、多组分非等温渗流模型. 通过忽略地层中能量方程中的对流项, 实现了温度和压力的解耦, 并基于非结构PEBI网格对方程进行数值求解, 获得了温度和压力梯度及气体浓度随时间的变化关系.

强间断对模拟初期且爆炸腔体附近区域有较大影响. (1) 温度影响: 在距离爆炸越近位置温度升高较快, 并且整个地层内温度先升高后降低. (2) 压力影响: 存在温度梯度时, 地层压力曲线呈波浪形, 地层压力趋于

平衡的时间较长; 地层恒温时, 地层压力曲线平滑, 并且各点地层压力峰值远小于变温条件下各点地层压力峰值.

本程序为地下爆炸后的地层压力变化和空腔内气体运移分布的计算和预测提供了帮助. 在环境治理上, 利用该模型可以计算预测污染物物质在地层扩散过程, 这对于地层污染物扩散、垃圾填埋、地层爆破有害气体扩散等污染治理、环境修复具有重要意义.

参考文献

- 1 Rocco S, Woods A W, Harrington J, et al. An experimental model of episodic gas release through fracture of fluid confined within a pressurized elastic reservoir. *Geophys Res Lett*, 2017, 44: 751–759
- 2 Li B, Benson S M. Influence of small-scale heterogeneity on upward CO₂ plume migration in storage aquifers. *Adv Water Resour*, 2015, 83: 389–404
- 3 Baer M R, Nunziato J W. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials. *Int J Multiph Flow*, 1986, 12: 861–889
- 4 Zhu Y, Qian X, Liu Z, et al. Analysis and assessment of the Qingdao crude oil vapor explosion accident: Lessons learnt. *J Loss Prev Process Ind*, 2015, 33: 289–303
- 5 Amooie M A, Moortgat J. Higher-order black-oil and compositional modeling of multiphase compressible flow in porous media. *Int J Multiph Flow*, 2018, 105: 45–59
- 6 Santim C G S, Fulchignoni L P, Rosa E S, et al. Transient multiphase flow modeling and validation in a real production system with high CO₂ content using the drift-flux model. *J Pet Sci Eng*, 2020, 188: 106903
- 7 Yang H, Sun S, Li Y, et al. A fully implicit constraint-preserving simulator for the black oil model of petroleum reservoirs. *J Comput Phys*, 2019, 396: 347–363
- 8 Békri S, Vizika O, Thovert J F, et al. Binary two-phase flow with phase change in porous media. *Int J Multiph Flow*, 2001, 27: 477–526
- 9 Standing M B. A pressure-volume-temperature correlation for mixtures of California oils and gases. *Drill Prod Pract*, 1947, API-47-275
- 10 Du F S, Nojabaei B. A black-oil approach to model produced gas injection in both conventional and tight oil-rich reservoirs to enhance oil recovery. *Fuel*, 2020, 263: 116680
- 11 Nickens H V. A dynamic computer model of a kicking well. *SPE Drill Eng*, 1987, 2: 159–173
- 12 Santos O L A. Well-control operations in horizontal wells. *SPE Drill Eng*, 1991, 6: 111–117
- 13 Pourafshary P, Varavei A, Sepehrnoori K, et al. A compositional wellbore/reservoir simulator to model multiphase flow and temperature distribution. *J Pet Sci Eng*, 2009, 69: 40–52
- 14 Gregory G, Aziz K. Calculation of pressure and temperature profiles in multiphase pipelines and simple pipeline networks. *J Can Pet Technol*, 1978, 17: PETSOC-78-01-04
- 15 Gould T L. Compositional two-phase flow in pipelines. *J Pet Technol*, 1979, 31: 373–384
- 16 Kueper B H, Stroo H F, Vogel C M, et al. Chlorinated Solvent Source Zone Remediation. Berlin: Springer, 2014
- 17 Wang J, Grant G P, Gerhard J I. The influence of porous media heterogeneity on smouldering remediation. *J Contam Hydrol*, 2021, 237: 103756
- 18 Han L, Qian L, Yan J, et al. A comparison of risk modeling tools and a case study for human health risk assessment of volatile organic compounds in contaminated groundwater. *Environ Sci Pollut Res*, 2016, 23: 1234–1245
- 19 McLaren R G, Sudicky E A, Park Y J, et al. Numerical simulation of DNAPL emissions and remediation in a fractured dolomitic aquifer. *J Contam Hydrol*, 2012, 136-137: 56–71
- 20 Brock T D, Lee D R, Janes D, et al. Groundwater seepage as a nutrient source to a drainage lake; Lake Mendota, Wisconsin. *Water Res*, 1982, 16: 1255–1263
- 21 Karaoglu A G, Coptly N K, Akyol N H, et al. Experiments and sensitivity coefficients analysis for multiphase flow model calibration of enhanced

- DNAPL dissolution. *J Contam Hydrol*, 2019, 225: 103515
- 22 Mahmoodi M, Rezaei N, Zendejboudi S, et al. Fluid dynamic modeling of multiphase flow in heterogeneous porous media with matrix, fracture, and skin. *J Hydrol*, 2020, 583: 124510
- 23 Wu Y S, Forsyth P A. On the selection of primary variables in numerical formulation for modeling multiphase flow in porous media. *J Contam Hydrol*, 2001, 48: 277–304
- 24 Sookhak L K, Davis G B, Johnston C D. Incorporating hysteresis in a multi-phase multi-component NAPL modelling framework; a multi-component LNAPL gasoline example. *Adv Water Resour*, 2016, 96: 190–201
- 25 Li D L, Zha W S. Theory and Method of Numerical Well Testing (in Chinese). Beijing: Petroleum Industry Press, 2013 [李道伦, 查文舒. 数值试井理论与方法. 北京: 石油工业出版社, 2013]
- 26 Feng W, Were P, Li M, et al. Numerical study on hydraulic fracturing in tight gas formation in consideration of thermal effects and THM coupled processes. *J Pet Sci Eng*, 2016, 146: 241–254
- 27 Cheng W L, Nian Y L, Li T T, et al. Estimation of oil reservoir thermal properties through temperature log data using inversion method. *Energy*, 2013, 55: 1186–1195
- 28 Bonetto F, Joel L L, Luc R B. Fourier's Law: A Challenge to Theorists. London: Imperial College Press, 2000. 128–150
- 29 Maubeuge F, Arquies E, Bertrand O. Mother: A model for interpreting thermometrics. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 1994. SPE-28588-MS
- 30 Cao Z, Li P, Li Q, et al. Integrated workflow of temperature transient analysis and pressure transient analysis for multistage fractured horizontal wells in tight oil reservoirs. *Int J Heat Mass Transf*, 2020, 158: 119695
- 31 Kong X Y. Advanced Mechanics of Fluids in Porous Media (in Chinese). 2nd ed. Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 2010 [孔祥言. 高等渗流力学. 第二版. 合肥: 中国科技大学出版社, 2010]
- 32 App J F. Nonisothermal and productivity behavior of high-pressure reservoirs. *SPE J*, 2009, 15(1): 50–63
- 33 Corey A T, Rathjens C H, Henderson J H, et al. Three-phase relative permeability. *J Pet Technol*, 1956, 8(11): 63–65
- 34 Sun J, Dong H, Arif M, et al. Influence of pore structural properties on gas hydrate saturation and permeability: A coupled pore-scale modelling and X-ray computed tomography method. *J Nat Gas Sci Eng*, 2021, 88: 103805
- 35 Chen X, Verma R, Espinoza D N, et al. Pore-scale determination of gas relative permeability in hydrate-bearing sediments using X-ray computed micro-tomography and lattice Boltzmann method. *Water Resour Res*, 2018, 54: 600–608
- 36 Carr N L, Kobayashi R, Burrows D B. Viscosity of hydrocarbon gases under pressure. *J Pet Technol*, 1954, 6: 47–55
- 37 Moortgat J, Firoozabadi A. Three-phase compositional modeling with capillarity in heterogeneous and fractured media. *SPE J*, 2013, 18: 1150–1168
- 38 Class H, Helmig R, Bastian P. Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. *Adv Water Resour*, 2002, 25: 533–550
- 39 Firoozabadi A, Pan H Q. Fast and robust algorithm for compositional modeling: Part I - Stability analysis testing. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 2000. SPE-63083-MS
- 40 Pan H Q, Firoozabadi A. Fast and robust algorithm for compositional modeling: Part II - Two-phase flash computations. In: SPE Annual Technical Conference and Exhibition, 2001. SPE-71603-MS

附录

正确性验证解析解推导.

根据物理模型建立以下控制方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1}{\chi} \frac{\partial p}{\partial t}, & (a < r < \infty, t > 0), \\ p|_{r=a} = p_e, & (t \geq 0), \\ p(r, t = 0) = p_i, & (a < r < \infty). \end{cases} \quad (\text{a1})$$

采用以下无量纲定义:

$$\text{无量纲时间 } t_D = \frac{\chi t}{a^2},$$

$$\text{无量纲压力 } p_D = \frac{p_i - p(r, t)}{p_i - p_e},$$

$$\text{无量纲半径 } r_D = \frac{r}{a}.$$

将上述控制方程组变换为无量纲方程组:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 p_D}{\partial r_D^2} + \frac{1}{r_D} \frac{\partial p_D}{\partial r_D} = \frac{\partial p_D}{\partial t_D}, & (1 < r_D < \infty, t_D > 0), \\ p_D|_{r_D=1} = 1, & (t_D \geq 0), \\ p_D(r_D, t_D = 0) = 0, & (1 < r_D < \infty). \end{cases} \quad (\text{a2})$$

$$\text{其中, } f(0) = \begin{cases} p_i - p_e, & (r_D = 1), \\ 0, & (r_D > 1), \end{cases}$$

求解得

对方程组(a2)进行Laplace变换可以得到:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Delta \overline{p}_D}{\partial r_D^2} + \frac{1}{r_D} \frac{\partial \Delta \overline{p}_D}{\partial r_D} = s \Delta \overline{p}_D - f(0), & (1 \leq r_D < \infty), \\ \Delta \overline{p}_D|_{r_D=1} = \frac{1}{s}, \\ \Delta \overline{p}_D|_{r_D \rightarrow \infty} = 0, \end{cases} \quad (\text{a3})$$

$$\Delta \overline{p}(r, s) = \frac{K_0 [r_D \sqrt{s}]}{s K_0 [\sqrt{s}]}.$$

(a4)

对式(a4)进行Laplace变换^[31]可得到不同时间下的压力分布数值解.

Simulation of multicomponent material seepage in porous media under strong discontinuous conditions

ZHANG Xin¹, CAO Yuan², WANG TieLiang², HE Zeng², HAO YouZhi¹ & LU DeTang^{1*}

¹ Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China;

² Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China

The strong discontinuity of porous media is manifested in the presence of extremely high temperature and pressure gradients between the explosive cavity of a formation and the surrounding media after an underground explosion. Because of the participation of explosive products, a multiphase and multicomponent seepage process is developed. Considering this situation, a numerical model of nonisothermal seepage flow for multiphase and multicomponent materials in porous media is established. In the numerical model, pressure and temperature are decoupled according to the velocity sensitive characteristics of heat convection while formation seepage has low velocity. The energy equation is calculated using an explicit method, while the seepage equation is calculated with a fully implicit method. Comparing the calculation results of isothermal and nonisothermal seepage environments, it is concluded that with the passage of time, the formation pressure in a nonisothermal environment first rises and then falls, and the closer the position is to the cavity, the faster the pressure rises. Under the influence of a temperature gradient, the formation pressure curve presents a wave shape, taking fifty-two hours to reach equilibrium; while in the case of isothermal seepage, the formation pressure curve is smoother and takes less time (forty-five hours) to reach equilibrium. Additionally, the numerical model can predict the diffusion process of each component gas in the formation. This has a guiding significance for pollution control and environmental remediation, such as diffusing ground pollutants, landfills, and harmful gases from ground blasting.

porous media, multi-phase, multi-component, temperature gradient, pressure gradient, gas-liquid transportation

PACS: 44.30.+v, 47.11.+j, 51.10.+y, 51.20.+d

doi: 10.1360/SSPMA-2021-0163