

Численное исследование изменений структуры порового пространства и фильтрационных свойств породы под действием химически активных флюидов

Т. С. Хачкова^{1}, В. В. Лисица¹, Д. И. Прохоров², Я. В. Базайкин²*

¹ Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

² Институт математики СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

* e-mail: khachkovats@ipgg.sbras.ru

Аннотация. В работе представлен численный алгоритм для моделирования химического взаимодействия флюида с породой на масштабе пор. Этот алгоритм позволяет проводить расчет изменений пористости, форм. фактора и абсолютной проницаемости породы в процессе растворения матрицы породы или осаждения минеральной фазы. Для анализа и классификации таких изменений в работе предлагается использовать топологическую метрику порового пространства – персистентные диаграммы для циклов размерности один, которая позволяет с уверенностью разделять принципиально разные сценарии растворения породы (образование червоточин, растворение фронтом, равномерное растворение). На основе полученных модельных данных были построены корреляционные зависимости между пористостью и проницаемостью для различных сценариев растворения.

Ключевые слова: вычислительная физика горных пород, химическое воздействие, численное моделирование

Numerical study of the porosity-permeability evolution due to chemically-active fluid injection

T. S. Khachkova^{1}, V. V. Lisitsa¹, D. I. Prokhorov², Ya. V. Bazaikin²*

¹ Institute of Petroleum Geology and Geophysics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

² Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

* e-mail: khachkovaTS@ipgg.sbras.ru

Abstract. The paper presents a numerical algorithm for simulation of the reactive transport at the pore scale. The algorithm allows simulating pore space evolution, porosity, absolute permeability, and form factor changes due to core matrix dissolution or precipitation. We also, introduce the topological measure; the persistence diagrams of independent cycles in pore space to classify different dissolution scenarios. Using derived classification, we constructed the statistically reliable porosity-permeability relations for different dissolution scenarios.

Keywords: digital rock physics, reactive transport, numerical simulation

Введение

Декарбонизация экономики и переход к нулевой эмиссии включает в себя ряд мер: снижение выбросов CO₂ в производстве и в транспортной системе; повышение эффективности биологической переработки углекислого газа; сбор CO₂ из атмосферы, его последующая транспортировка и захоронение. При этом основным

способом снижения карбонового следа во всем мире является захоронение CO₂ в геологические формации, что обусловлено как высокой емкостью пористых пластов, так и активными геохимическими процессами, приводящими к формированию химически-связанных форм углерода и его надежной консервации. Однако геологическое захоронение CO₂ сопряжено с рядом технологических сложностей. Во-первых, необходимо учитывать изменение структуры геологической формации на масштабе пор, вызванное геохимическими процессами при закачке. Например, выщелачивание карбонатных пород или карбонатного цемента, которое повышает емкость резервуара, но может потенциально приводить к перераспределению напряжений в пласте, развитию процессов трещинообразования и, в конечном счете, к прорыву плюма через породу-покрышку [1,2]. Поэтому при выборе резервуаров необходимо проводить учет геохимического воздействия на пласт и эффект такого воздействия на разные физические параметры пласта (гидродинамические, геомеханические, сейсмические и пр.) Во-вторых, организация систем наблюдения для сейсмического мониторинга состояния пласта требует тщательной проработки, поскольку получаемые данные должны обеспечивать возможность высокоточной оценки изменения свойств резервуара по сейсмическим (микросейсмическим и акустическим) данным. Планирование таких систем возможно только на основе комплексного многофизического предварительного предсказательного моделирования процесса закачки CO₂ в пласт.

В данной работе, приводится алгоритм численного моделирования химического воздействия закачиваемого флюида на матрицу породы, протекающего на масштабе пор. В частности, проводится прямое моделирование гетерогенных химических реакций, приводящих к растворению матрицы породы, либо к осаждению минеральной фазы. Алгоритм основан на комбинировании метода конечных разностей для расчета полей скоростей флюидопотока и переноса активных компонент с методом поверхности уровня или level-set [3] для учета изменения границы раздела поровое пространство – матрица породы. С использованием предложенного метода в работе проведена серия численных экспериментов по растворению матрицы карбонатной породы кислым рассолом с учетом различных режимов закачки флюида, его химической активности и пр. На основе таких экспериментов выделены различные сценарии изменения геометрии и топологии порового пространства, что приводит к существенно различным зависимостям между пористостью и проницаемостью, а также пористостью и форм фактором породы, который используется для оценки ряда макроскопических свойств среды (удельное электрическое сопротивление, эффективная диффузия, теплопроводность). Установленные зависимости могут быть использованы при моделировании химического воздействия на пласт уже на масштабе резервуара [4,5].

Математическая модель и численные методы

В работе рассматривается воздействие потока химически-активного флюида на матрицу породы на масштабе пор. В рамках такой постановки, флюидопоток описывается уравнением Навье-Стокса, однако в предположении низкой скорости реакции и слабой изменчивости структуры порового пространства, за-

дача может рассматриваться в квази-статической постановке, когда поток описывается уравнением Стокса:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad \nabla p - \mu \Delta \vec{u} = 0, \quad \vec{x} \in \Omega, \quad (1)$$

где \vec{u} – скорость потока, p – давление, ν – вязкость жидкости, Ω – поровое пространство. Перенос активного компонента описывается уравнением адвекции-диффузии:

$$C_t + \nabla \cdot (\vec{u}C - D\nabla C) = 0, \quad \vec{x} \in \Omega, \quad (2)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} = k_r (C - C_s), \quad \vec{x} \in \partial\Omega, \quad (3)$$

где C – массовая концентрация активного компонента, D – коэффициент диффузии, k_r – скорость гетерогенной реакции, C_s – равновесная концентрация. Перемещение границы при ее растворении/осаждении удовлетворяет уравнению:

$$v_n(\vec{x}, t) = k / \rho (C - C_s), \quad \vec{x} \in \partial\Omega. \quad (4)$$

где v_n – нормальная скорость смещения границы, ρ – плотность минеральной матрицы.

В начальный момент времени предполагается, что концентрация активного вещества в пластовом флюиде соответствует равновесной. В качестве граничных условий для уравнения Стокса, обеспечивающих поток флюида, использовался перепад давления на двух противоположных границах и условия прилипания.

Для численного решения полученной задачи используется метод конечных разностей на регулярной кубической сетке, которая определяется разрешением микротомографических изображений породы [6]. При этом предполагается, что граница раздела между матрицей и поровым пространством изменяется с течением времени и может не совпадать с границами ячеек сетки. Для моделирования эволюции порового пространства в работе используется метод поверхности уровня или level-set [3]. Суть этого подхода в представлении границы как поверхности заданного (нулевого) уровня некоторой скалярной функции пространственных переменных. Такое представление позволяет проводить учет изменения топологии порового пространства – появления новых каналов, соединение изолированных пор и пр. Уравнение Стокса (1) решается с использованием проекционного метода [7]. Для решения уравнения адвекции-диффузии применяется явная по времени схема, с использованием схемы WENO для аппроксимации конвективного члена [8]. Детальное описание алгоритма представлено в работе [9].

Топология порового пространства

Для анализа изменений порового пространства используется топологическая мера – персистентные диаграммы, рассчитываемые по получаемым в процессе расчета модели порового пространства. В отличие от представленных ра-

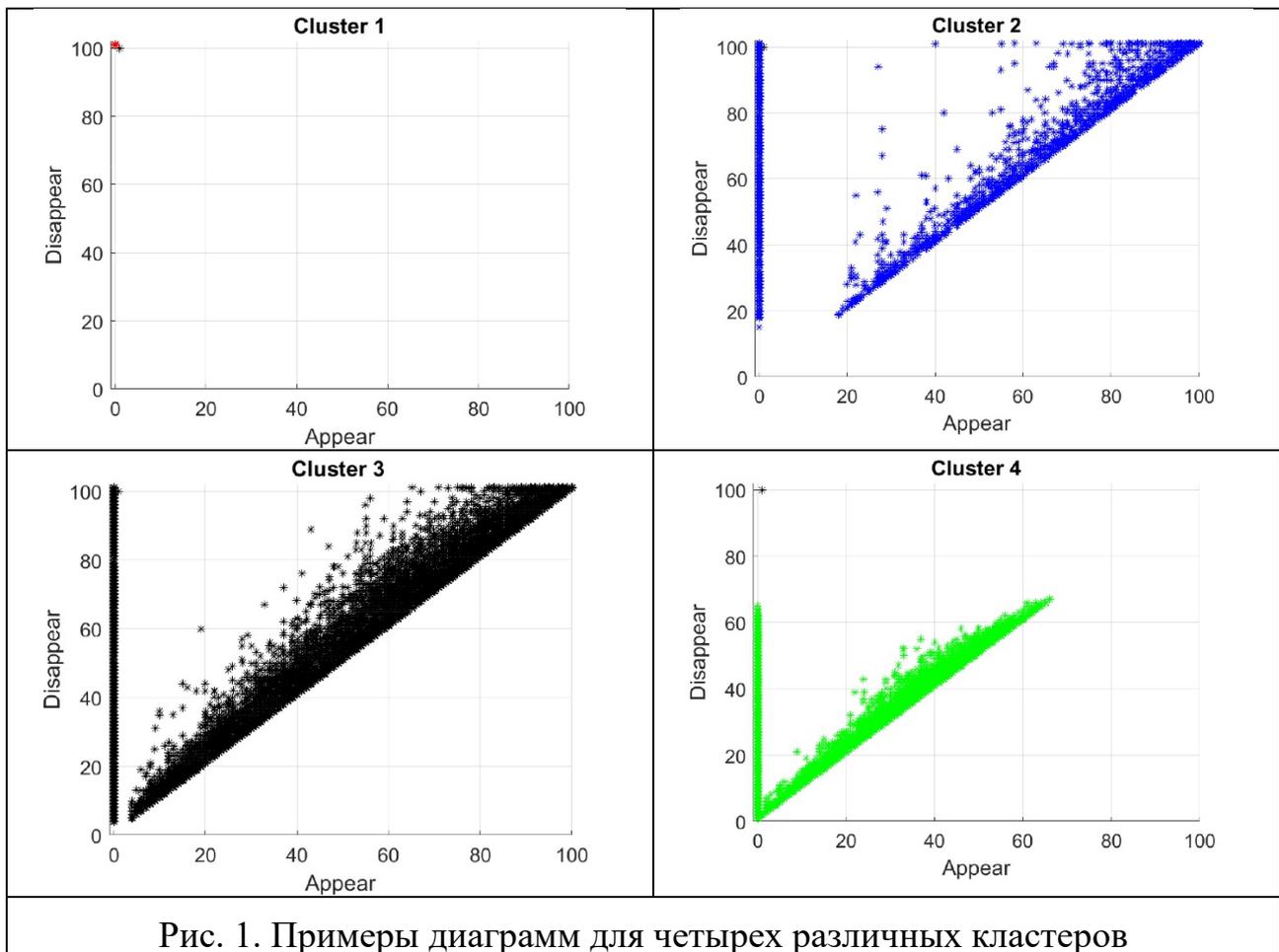
нее двумерных результатов [10], где рассматривались диаграммы для нуль-мерных циклов (количество изолированных пор), в этой работе приводится анализ одномерных циклов в поровом пространстве, диаграммы для которых рассчитываются алгоритмом, приведенным в [11]. Следует напомнить, что персистентные диаграммы отражают изменения в количестве независимых циклов (замкнутых каналов) в поровом пространстве. В частности, на диаграммах, приведенных на рисунке 1, горизонтальная ось соответствует моменту времени появления нового цикла, а вертикальная – моменту исчезновения независимого цикла. В пространстве персистентных диаграмм возможно введение метрики, которая характеризует близость изменения топологии порового пространства и позволяет проводить кластеризацию результатов моделирования по степени схожести таких изменений. В частности, на рисунке 1 приведены персистентные диаграммы, соответствующие четырем разным сценариям растворения породы, согласно топологическому критерию.

Численные эксперименты

Для оценки влияния свойств флюида и параметров закачки на изменение структуры порового пространства и макроскопические свойства породы была проведена серия расчетов, в которой изменялись перепад давления dP , скорость реакции k_r , коэффициент молекулярной диффузии компонента во флюиде D и начальная кислотность закачиваемого флюида.

В качестве модели порового пространства использовались микротомографические изображения карбонатной породы, представленные в базе данных [12]. В частности, использовался образец АН, описанный в [13]. Моделирование проводилось для объема 200^3 вокселей с разрешением 5.2 мкм на воксель. Матрица породы предполагалась состоящей исключительно из кальцита с массовой плотностью $\rho = 2710$ кг/м³. При моделировании также предполагалось, что свойства флюида не зависят от концентрации активного компонента, то есть вязкость жидкости предполагалась постоянной $\mu = 0.00028$ Па·с, что соответствует вязкости воды. В качестве равновесной концентрации выбиралась соответствующая $pH = 7$. Четыре других входных параметра изменялись в следующих пределах $k_r \in \{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0\}$ м/с, $D \in \{10^{-9}, 10^{-8}, 10^{-7}\}$ м²/с, $dP \in \{0.5, 1, 2\}$ Па, $pH \in \{3, 4, 5\}$. Модельное время составляло 1000 с. Функция уровня, извилистость, абсолютная проницаемость и форм фактор записывались с интервалом 10 с. В результате для каждого эксперимента фиксировались зависящие от времени макроскопические параметры среды для 100 различных состояний образца. После окончания моделирования функции уровня использовались для построения персистентных диаграмм.

Аналогично анализу, приведенному для двумерного случая в работе [10], в пространстве персистентных диаграмм вводилась мера, относительно которой проводилась кластеризация диаграмм с использованием метода K-means. В результате были выделены четыре кластера, соответствующие четырем принципиально различным сценариям растворения матрицы породы. Средние диаграммы в каждом кластере приведены на рис. 1.



Для используемых входных параметров большая часть экспериментов попадает в первый (красный) кластер, в котором не происходит никаких изменений порового пространства. В этом случае все независимые циклы появляются в начальный момент времени и остаются в модели вплоть до самого последнего момента времени. В этом случае пористость и проницаемость породы на изменяются (рис. 2 и 3). Второй (синий) кластер характеризуется умеренной скоростью изменения топологии. В частности, изменения начинаются только с момента времени 20, при достаточно большом количестве циклов присутствующих в модели вплоть до последнего момента времени. Дальнейшее увеличение интенсивности воздействия флюида на породы (черный и зеленый кластеры) приводит к быстрому изменению топологии порового пространства, вплоть до полного растворения матрицы породы, что, конечно, нефизично, но может рассматриваться в качестве предельного случая. Разные типы изменения топологии порового пространства характеризуются и различием в изменении макроскопических свойств породы. В частности, на рис. 3 и 4 приведены изменения пористости и проницаемости образца в зависимости от времени. Разные цвета линий соответствуют разным кластерам, полученным в результате топологического анализа. Видно, что такое разделение устойчиво проявляется и графиках изменения пористости и проницаемости. Более того, согласно графикам, приведен-

ным на рис. 5, зависимости проницаемости от пористости принципиально различные для разных кластеров. Поэтому использование универсальных зависимостей на макромасштабе не корректно, по крайней мере при моделировании фильтрации химически-активных флюидов в пласте.

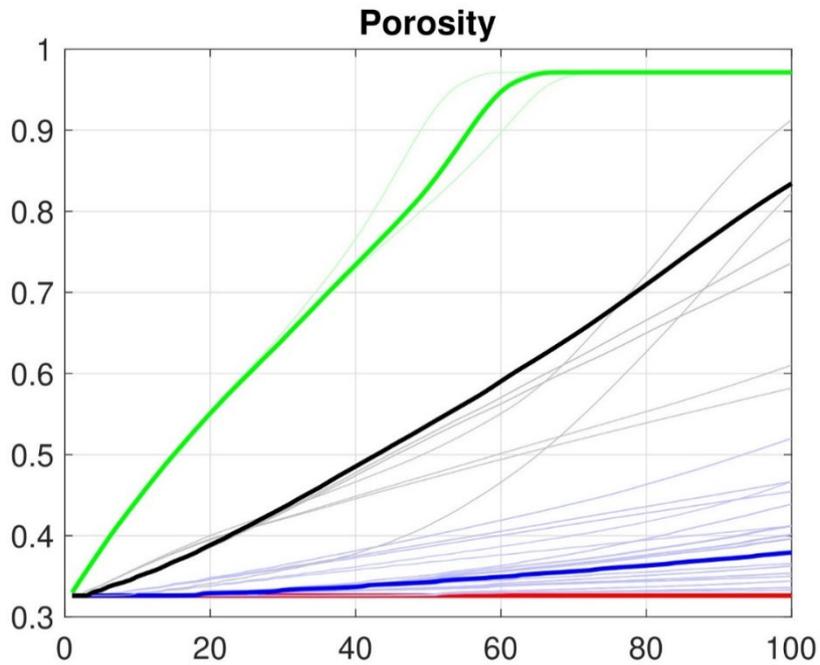


Рис. 2. Зависимость пористости от модельного времени

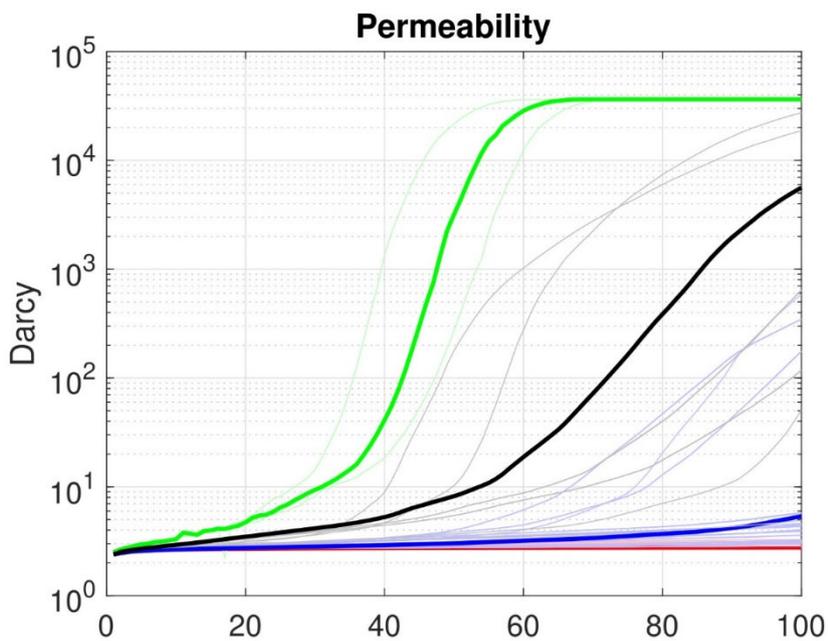


Рис. 3. Зависимость проницаемости от модельного времени

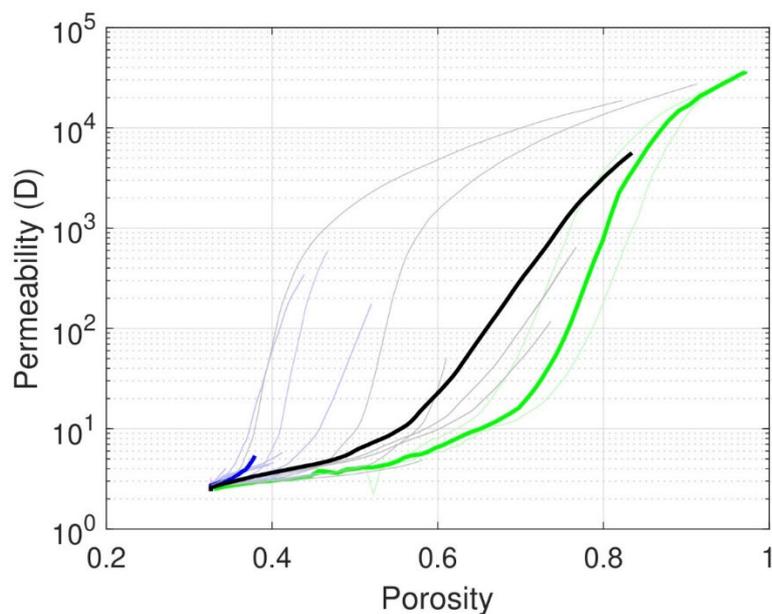


Рис. 4. Зависимость проницаемости от пористости для разных сценариев растворения породы

Заключение

В работе приведен алгоритм численного моделирования химически-активного флюида с породой, позволяющий проводить прямой учет гетерогенных реакций на масштабе пор и явно учитывать изменение геометрии и топологии порового пространства. Численные эксперименты, проведенные для широкого диапазона входных параметров (перепад давления, начальная кислотность флюида, скорость реакции, коэффициент диффузии) показали, что эти параметры оказывают существенное влияние на изменение геометрии и топологии порового пространства, что приводит к формированию различных сценариев растворения породы. При этом каждый топологически обособленный сценарий растворения характеризуется определённой зависимостью между пористостью и проницаемостью, что необходимо учитывать при моделировании геохимических процессов на масштабе пласта.

Благодарности

Исследование поддержано Российским научным фондом грант № 21-71-20003. Расчеты проводились на кластере суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского технического университета им. Петра Великого.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Meng C., and Fehler M. The role of geomechanical modeling in the measurement and understanding of geophysical data collected during carbon sequestration // *The Leading Edge*. - 2021. - V. 40. - N. 6. - pp. 413-417.
2. Prasad M., et al. CO₂ messes with rock physics // *The Leading Edge*. - 2021. - V. 40. - N. 6. - pp. 424-432.
3. Gibou F., Fedkiw R., and Osher S. A review of level-set methods and some recent applications // *Journal of Computational Physics*. - 2018. - V. 353. - pp. 82-109.

4. Abd A. S., and Abushaikha A. S. Reactive transport in porous media: a review of recent mathematical efforts in modeling geochemical reactions in petroleum subsurface reservoirs // *SN Applied Sciences*. - 2021. - V. 3. - N. 4. - pp. 401.
5. Steefel C. I., et al. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation // *Computational Geosciences*. - 2015. - V. 19. - N. 3. - pp. 445-478.
6. Andra H., et al. Digital rock physics benchmarks—Part I: Imaging and segmentation // *Computers & Geosciences*. - 2013. - V. 50. - N. 0. - pp. 25-32.
7. Brown D. L., Cortez R., and Minion M. L. Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations // *Journal of Computational Physics*. - 2001. - V. 168. - N. 2. - pp. 464-499.
8. Qiu J.-M., and Shu C.-W. Conservative high order semi-Lagrangian finite difference WENO methods for advection in incompressible flow // *Journal of Computational Physics*. - 2011. - V. 230. - N. 4. - pp. 863-889.
9. Lisitsa, V., Khachkova, T., Prokhorov, D., Bazaikin, Y., Yang, Y. Numerical Simulation of the Reactive Transport at Pore Scale in 3D. // *Lecture Notes in Computer Science*. 2021. – V. 12958. – pp. 375-387.
10. Lisitsa V., Bazaikin Y., and Khachkova T. Computational topology-based characterization of pore space changes due to chemical dissolution of rocks // *Applied Mathematical Modelling*. - 2020. - V. 88. - pp. 21-37.
11. Prokhorov D., Lisitsa V., and Bazaikin Y. Digital image reduction for the analysis of topological changes in the pore space of rock matrix // *Computers and Geotechnics*. - 2021. - V. 136. - pp. 104171.
12. Al-Khulaifi Y., et al., Pore-Scale Dissolution by CO₂ Saturated Brine in a Multi-Mineral Carbonate at Reservoir Conditions: Impact of Physical and Chemical Heterogeneity // *Database of British Geological Survey*. – 2019, <http://dx.doi.org/10.5285/52b08e7f-9fba-40a1-b0b5-dda9a3c83be2>.
13. Al-Khulaifi Y., et al. Pore-Scale Dissolution by CO₂ Saturated Brine in a Multimineral Carbonate at Reservoir Conditions: Impact of Physical and Chemical Heterogeneity // *Water Resources Research*. - 2019. - V. 55. - N. 4. - pp. 3171-3193.

© Т. С. Хачкова, В. В. Лисица, Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, 2022