

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ  
ИМ. М.Г. МЕЩЕРЯКОВА

*На правах рукописи*

ВОЛОХОВА  
Алина Викторовна

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАБЛЮДАЕМЫХ  
ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК В МОДЕЛЯХ  
ГИДРАТАЦИИ ЭЛЕКТРОНА И ФИЛЬТРАЦИИ  
ГАЗОКОНДЕНСАТНОЙ СМЕСИ

Специальность: 05.13.18 - математическое моделирование, численные  
методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна - 2022

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий  
им. М.Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:

**Земляная Елена Валериевна**  
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты:

**Цирулев Александр Николаевич**  
доктор физико-математических наук  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Тверской государственный университет»  
профессор кафедры общей математики и математической физики

**Финкельштейн Михаил Янкелевич**  
доктор технических наук  
Федеральное государственное бюджетное учреждение  
«Всероссийский научно-исследовательский геологический  
нефтяной институт»  
заведующий отделом 3D моделирования  
геолого-геофизических объектов

С электронной версией диссертации можно ознакомиться на официаль-  
ном сайте Объединенного института ядерных исследований в информационно-  
телекоммуникационной сети "Интернет" по адресу: <https://dissertations.jinr.ru>.  
С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-технической  
библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
ОИЯИ 05.01.2019.П,  
доктор физ.-мат. наук

Земляная Е.В.

## Общая характеристика работы

В диссертации представлены методы, комплексы программ и результаты численного исследования двух математических моделей физических процессов, описываемых начально-краевыми задачами для систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, объединенных необходимостью массовых расчетов в широком диапазоне параметров моделей для поиска условий адекватного воспроизведения наблюдаемых в эксперименте динамических характеристик. Такие исследования требуют существенных затрат компьютерных ресурсов и делают необходимым применение параллелизма для повышения производительности вычислений.

Первая модель — поляронная модель формирования состояний гидратированного электрона; вторая — модель прохождения (фильтрации) многокомпонентных углеводородных газоконденсатных смесей через пористую среду. Неотъемлемой составляющей численного исследования обеих моделей является расчет измеряемых в лабораторных условиях характеристик на основе численного решения соответствующих начально-краевых задач. Длительность таких расчетов затрудняет применение традиционных методов подгонки параметров модели на основе минимизации невязки между расчетными и экспериментальными данными. В диссертации реализовано прямое варьирование значений параметров в физически значимых интервалах. Такие вычисления могут быть эффективно выполнены на современных высокопроизводительных системах с параллельной архитектурой. В совокупности с параллельной реализацией численного решения самих начально-краевых задач такой подход позволил успешно провести численное моделирование изучаемых эволюционных процессов.

В диссертации для указанных моделей сформулированы математические постановки задач, подобраны подходящие методы численного решения, построены вычислительные схемы, созданы комплексы проблемно-ориентированных программ с применением технологии параллельного программирования MPI, проведен численный анализ моделей на основе сопоставления результатов вычислений с имеющимися данными экспериментов и теоретическими оценками, получены значимые для соответствующих областей знаний численные результаты, позволяющие сделать заключения о свойствах изучаемых физических процессов, об адекватности используемых теоретических подходов и перспективах их дальней-

шего использования и развития.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИ-ЯИ в рамках Проблемно-тематического плана 05-6-1119-2014/2023 - методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных при поддержке следующих грантов и проектов:

- проект РФФИ 13-01-00060А «Исследование структуры ядерных и органических объектов на основе математического моделирования процесса рассеяния частиц»;
- проект РФФИ 17-08-01270А «Разработка экспериментального программного комплекса для инженерно-физического исследования и физико-математического моделирования фильтрационных процессов в газоконденсатных и нефтегазоконденсатных пластах с целью создания новых технологий повышения углеводородоотдачи реальных месторождений»;
- проект «Моделирование сложных процессов квантовой физики с применением высокопроизводительных вычислений» программы «Соловьев-Христов» сотрудничества ОИЯИ с Болгарией, 2017;
- проект «Высокопроизводительное компьютерное моделирование динамически сложных систем в физике конденсированных состояний» программы «Соловьев-Христов», 2018.

### **Актуальность темы диссертации**

Вопросы, связанные с электрон-фононными взаимодействиями, или полярными эффектами, являются в настоящее время одними из наиболее актуальных в физике твердого тела.

Связанные (сольватированные) состояния электронов, в которых электрон не образует химических связей можно представить себе как захват избыточного электрона поляризационной потенциальной ямой, образованной индуцированной им поляризацией окружающих его молекул среды. Таким образом, под действием облучения в ультрафиолетовом диапазоне вода переходит в особое состояние, характеризующееся специальными физическими и химическими свойствами. Если средой является вода, то такой электрон называется гидратированным.

Изучение свойств сольватированных электронов имеет огромное теоретическое и прикладное значение. С их участием происходит большое количество химических реакций, изучаемых как в неорганической, так и в органической химии. Особый интерес представляет гидратированный электрон, являющийся в воде самым сильным восстановителем. Сольватированные электроны участвуют в электродных процессах, которые представляют собой широкую область со многими техническими приложениями (электросинтез, гальванопокрытие, электрообработка). В биологических системах гидратированный электрон играет большую роль в процессах переноса заряда на большое расстояние. Поэтому изучение динамики и условий формирования гидратированного электрона представляет несомненный интерес для понимания механизмов переноса заряда и энергии в различных физических, химических и биологических системах [1]. Таким образом, численное моделирование процесса формирования гидратированного электрона в сравнении с имеющимися данными экспериментов является актуальной задачей.

Актуальность исследования динамики прохождения газоконденсатной смеси сквозь пористую среду обусловлена, в том числе, необходимостью оптимизации углеводородоотдачи в нетрадиционных газоконденсатных месторождениях путем снижения конденсации.

В настоящее время расширяется разработка газовых месторождений в России. В ближайшие десятилетия основной резерв наращивания сырьевой базы добывающих компаний составят газоконденсатные и нефтегазоконденсатные месторождения, содержащие в больших количествах газовый конденсат, являющийся ценнейшим сырьем для нефтехимической промышленности. Для процессов освоения и разработки месторождений с нетрадиционными запасами углеводородов, к которым относятся данные типы месторождений, необходимо знание базовых закономерностей, характеризующих процессы внутрипластовой фильтрации, включая, в том числе, такое характерное физическое явление как выпадение конденсата в пласте в жидкой фазе, что существенно затрудняет добычу газа. Интенсивные теоретические и экспериментальные исследования в этом направлении ведутся российскими и зарубежными научными группами [2].

В этой связи актуальной задачей является разработка обоснованных математических моделей и комплексов программ, обеспечивающих адекватное воспроизведение получаемых экспериментальных данных при расчетах гидродинамических и термодинамических характеристик филь-

трации углеводородных смесей через пористую среду.

Нужно отметить, что при значительном числе публикаций в указанных областях исследований, лишь в относительно небольшом количестве работ проводится сопоставление получаемых численных результатов с данными натурных и лабораторных измерений. Между тем, численный анализ результатов лабораторных экспериментов представляется актуальным с точки зрения проверки адекватности модели и численного подхода, дает основу для сравнения различных моделей и оценки перспективы их использования для прогностических расчетов, позволяет понять – какие факторы являются наиболее существенным для реалистичного описания конкретных моделируемых процессов. Также, обычно, не все значения физико-химических параметров, входящих в математическую постановку задачи, известны, так что сравнение расчетных и экспериментальных данных позволяет получить эти неизвестные значения.

В эпоху высокопроизводительных вычислений на многопроцессорных вычислительных машинах появляется необходимость в параллельной модификации классических численных методов. Для решения практических задач численными методами требуется разработка программных продуктов с использованием технологий параллельного программирования. В диссертации в ходе практического решения каждой из двух задач разработан параллельный аналог классического численного метода, реализованный в виде отдельного модуля, который можно использовать для решения задач, выходящих за рамки диссертационного исследования.

## **Цели и задачи диссертационной работы**

Целью диссертационной работы является разработка и программная реализация методов высокопроизводительного численного исследования моделей формирования гидратированного электрона и прохождения газоконденсатной смеси сквозь пористую среду, а также численное исследование этих моделей для получения новой информации об изучаемых процессах на основе сопоставления расчетных данных с наблюдаемыми динамическими характеристиками.

Для достижения поставленной цели нужно решить следующие задачи:

- изучить физические особенности процессов в поставленных задачах и литературу, посвященную данной проблемной области,

- в рамках исследуемых моделей сформулировать математические постановки задач и подобрать численные методы решения,
- разработать комплексы программ для реализации вычислительных экспериментов,
- увеличить быстродействие вычислений за счет реализации параллельных алгоритмов в разработанных комплексах программ,
- произвести численное исследование и проанализировать полученные результаты в сравнении с экспериментальными данными,
- разработанные параллельные версии популярных численных методов, использованных в рамках созданных программных комплексов, оформить в отдельные программные модули, доступные для широкого использования.

## **Научная новизна**

Впервые в рамках динамической модели полярона проведено численное исследование процесса формирования гидратированного электрона под действием фемтосекундного лазерного облучения .

В ходе вычислительных экспериментов показано, что данная модель обеспечивает адекватное согласие с экспериментальными данными по динамике поглощения света гидратированным электроном.

В рамках комплекса программ для моделирования формирования гидратированного электрона применен параллельный алгоритм на основе метода разбиений, обеспечивающий сокращение затрат компьютерного времени счета более, чем на порядок, при работе на вычислительных системах с параллельной архитектурой.

В рамках модели на основе закона Дарси и уравнения неразрывности потоков сформулирована математическая постановка стационарной задачи для исследования режима стабилизации прохождения двухкомпонентной газоконденсатной смеси через пористую среду, позволившая воспроизвести соответствующие экспериментальные данные.

Сформулирована начально-краевая задача для моделирования процесса прохождения многокомпонентной газоконденсатной смеси в пористой среде и получено согласие с лабораторными экспериментами.

## Научно-практическая значимость работы

Проведенное численное моделирование показало адекватность используемого теоретического подхода на основе квантово-полевой поляронной модели для реалистичного описания процесса формирования гидратированного электрона.

Разработанный комплекс программ для численного исследования процесса формирования гидратированных электронов может быть использован в фундаментальных и прикладных исследованиях в областях биофизики, биохимии и математического моделирования для дальнейшего изучения процессов формирования сольватированных электронов в конденсированных средах.

Численное исследование подтвердило адекватность подхода на основе закона Дарси и уравнения неразрывности потоков для описания прохождения многокомпонентной газоконденсатной углеводородной смеси сквозь пористую среду в режимах стабилизации и истощения. Созданные комплексы программ могут использоваться в дальнейших фундаментальных и прикладных исследованиях, в том числе, и при решении задачи поиска оптимальных значений параметров, необходимых для реальных условиях газодобычи.

Параллельная реализация алгоритма разбиений SPLIT и метода Рунге-Кутты RK4-MPI разработаны программно в обобщенном виде так, что конкретика задачи задается независимо от самого численного метода. Эти программы могут быть применены к решению иных задач соответствующего типа и доступны по ссылкам:

<http://wwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/split/index.html>

<http://wwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/rk4-mpi/index.html>

Разработанные методы и комплексы программ могут быть адаптированы для исследования других моделей, описываемых системой уравнений полярона и системой уравнений на основе закона Дарси и уравнения неразрывности потоков.

## Методология и методы исследования

Исследования проводились в рамках методологии проведения вычислительного эксперимента. Для численного решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих моделируемые процессы, использовались конечно-разностные схемы. Про-



граммные комплексы выполнены на языках C++ и Maple. Для реализации разработанных алгоритмов в параллельном режиме использовалась технология Message Passing Interface (MPI).

## **Положения, выносимые на защиту**

1. Математические постановки начально-краевых задач для систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающие динамику формирования состояний сольватированных электронов и динамику прохождения газоконденсатной смеси в пористой среде в режимах стабилизации и истощения.
2. Вычислительные схемы, реализованные, в том числе, с применением технологии параллельных вычислений, для решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, позволяющие моделировать эволюцию процесса формирования сольватированных электронов и процесс прохождения многокомпонентной газоконденсатной углеводородной смеси сквозь пористую среду в режиме стабилизации и в режиме истощения.
3. Результаты численного моделирования наблюдаемых динамических характеристик, согласующиеся с данными лабораторных экспериментов, что подтверждает адекватность используемых подходов для исследования изучаемых процессов.
4. Программы SPLIT и RK4-MPI, реализующие в составе созданных проблемно-ориентированных комплексов программ методы параллельных вычислений для алгоритмов разбиений и Рунге-Кутты и переданные для свободного доступа в электронную библиотеку JINRLIB ОИЯИ.

## **Достоверность результатов**

Достоверность и обоснованность полученных численных результатов при исследовании многопараметрических моделей подтверждены тестированием разработанных методов и программ с применением известных решений, и согласием полученных результатов с известными теоретическими оценками и экспериментальными данными.

## Апробация

Результаты представлены автором на научных семинарах в ЛИТ ОИЯИ и на российских и международных научных конференциях:

1. International Conference on Mathematical Modeling and Computational Physics (ММСР 2013), 2013, JINR, Dubna, Russia.
2. Двадцать первая международная конференция "Математика. Компьютер. Образование." (МКО 2014), Дубна, Россия.
3. 39th meeting of the Program Advisory Committee for Condensed Matter Physics, 2014, Дубна, Россия (poster session).
4. International Conference "Mathematical Modeling and Computational Physics (ММСР 2017), JINR, Dubna, Russia.
5. Двадцать шестая международная конференция "Математика. Компьютер. Образование" (МКО 2018), Дубна, Россия.
6. Всероссийская научно-практическая конференция "Природа. Общество. Человек" (университет "Дубна"), 2019, Дубна, Россия.
7. Двадцать седьмая международная конференция "Математика. Компьютер. Образование" (МКО 2020), Дубна, Россия.

## Публикации и личный вклад автора в работу

По теме диссертации в соавторстве опубликовано 11 работ в рецензируемых изданиях, соответствующих требованиям к публикациям Положения о присуждении ученых степеней в ОИЯИ.

Личный вклад автора отражен в содержании диссертации, в основных результатах и в положениях, выносимых на защиту. Автор принимал активное участие в обсуждении и выработке математических постановок задач и анализе численных результатов вместе с руководителем и соавторами публикаций. Все результаты численного моделирования, представленные в диссертации, получены автором лично на основе созданных автором методов и комплексов программ. Тестирование производительности разработанной автором MPI программы на суперкомпьютерах "Говорун" и "Авитохол" проводилось автором с участием соавторов работы [А7] Атанасовой П.Х. и Башашиным М.В.. Все публикации по теме диссертации подготовлены с определяющим вкладом автора.

## **Соответствие диссертации паспорту специальности**

В диссертационной работе присутствуют результаты в четырех областях, соответствующих следующим пунктам паспорта специальности:

3. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

4. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

6. Разработка новых математических методов и алгоритмов для проверки адекватности математических моделей объектов на основе данных натурального эксперимента.

Соответствие диссертации физико-математической отрасли науки определяется преобладанием математических (численных) методов в качестве аппарата исследований и получением результатов в виде новой физически значимой информации об исследуемых процессах.

## **Структура и объем работы**

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка публикаций автора по теме диссертации (11 пунктов), списка цитируемой литературы (106 пунктов). Работа содержит 103 страницы и включает в себя 26 рисунков и 5 таблиц.

## **Краткое содержание работы по главам**

### **Введение**

Во введении обосновывается актуальность исследований диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи, излагаются научная новизна, теоретическая значимость и практическая ценность работы, методология и методы исследования, приводятся положения, выносимые на защиту.

## **Первая глава**

В первой главе обсуждаются особенности численных подходов для исследования изучаемых моделей. Дан краткий обзор наиболее известных методов численного решения дифференциальных уравнений различного типа. Отмечается, что, несмотря на многообразие различных подходов, учитывающих специфику конкретных задач, типовые методы вычислительной математики продолжают активно использоваться в составе вычислительных схем решения большого числа задач. В этой связи актуальной задачей является параллельная реализация таких методов для ускорения вычислений при расчетах, требующих значительных затрат компьютерного времени. Обсуждаются особенности различных технологий параллельного программирования, обоснован выбор для задач диссертации технологии Message Passing Interface (MPI) как универсального инструмента параллельного программирования, поддерживаемого практически на всех системах с параллельной архитектурой, включая многопроцессорные и многоядерные системы.

Наконец, в главе 1 представлены две программы, применяемые в составе разработанных программных комплексов и оформленные для свободного доступа через библиотеку электронных программ - JINRLIB, реализующие с использованием технологии параллельного программирования MPI метод разбиений для решения системы алгебраических уравнений с матрицей трехдиагональной структуры и четырехшаговый метод Рунге-Кутты для решения задачи Коши. Первая из них использовалась в составе комплекса программ для численного исследования процесса формирования гидратированного электрона. Вторая - для численного исследования динамики прохождения многокомпонентной газоконденсатной углеводородной смеси через пористую среду.

## **Вторая глава**

В этой главе представлены результаты численного исследования процесса формирования фотовозбужденных сольватированных (гидратированных) электронов в воде.

Важную информацию о структуре гидратированного электрона и кинетике химических реакций с его участием дает динамика спектров поглощения света при его образовании в облученной воде. Экспериментальное исследование динамических процессов при формировании по-

ляронных состояний в воде проводят путем лазерного сканирования в инфракрасном диапазоне. В [5] были получены первые экспериментальные данные интенсивности поглощения света поляризованной водой с течением времени. В [6] представлена другая серия экспериментальных кривых для различных значений частоты света, поглощаемой гидратированным электроном.

В данной главе представлены методы, программная реализация и результаты численного исследования поляронной модели гидратированного электрона в сравнении с имеющимися теоретическими оценками и экспериментальными данными.

Основы теоретического подхода, используемого для моделирования гидратированного электрона, описаны в работе [1].

В сферически симметричном случае модель описывается системой пространственно одномерных дифференциальных уравнений в частных производных относительно радиальных составляющих функций  $\psi(x, t)$  - волновой функции электрона,  $\phi(x, t)$  - потенциала поляризации, индуцируемый электроном,  $\Theta(x, t)$  - плотности распределения поляризационного заряда. При переходе к безразмерным величинам система уравнений имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \left[ i2\bar{m}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\bar{m}\frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}}\frac{\phi(x, t)}{x} \right] \psi(x, t) = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x, t) = \Theta(x, t), \\ \left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \bar{\gamma}\frac{\partial}{\partial t} + \bar{\omega}^2 \right] \Theta(x, t) = -\bar{\omega}^2\frac{|\psi(x, t)|^2}{x} \end{cases} \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\phi(0, t) = \phi'(R_{max}, t) = 0, \quad \psi(0, t) = \psi(R_{max}, t) = 0, \quad (2)$$

$$\Theta(0, t) = \Theta(R_{max}, t) = 0, \quad R_{max} \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Уравнения (1) с граничными условиями (2), (3) описывают эволюцию заданного в начальный момент времени состояния.

Здесь  $\tilde{\epsilon} = 1.81$  - коэффициент диэлектрической проницаемости,  $\bar{m} = 2.692$ ,  $\bar{\gamma} = 2.145$ ,  $\bar{\omega} = 1$  - безразмерные параметры эффективной массы гидратированного электрона, релаксации (трения) и частоты;  $r_{00}$  - масштабирующий множитель, введенный чтобы "уравновесить" отличающиеся более чем на 10 порядков исходные значения физических параметров.

Интеграл энергии рассчитывается по формуле

$$W(t) = \frac{1}{2\bar{m}} \int \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \int \frac{\varphi(x, t) |\psi(x, t)|^2}{x} dx. \quad (4)$$

Для численного решения система (1) заменяется системой разностных уравнений на равномерной дискретной сетке с узлами  $x_m = m \times h_x$  и  $t_n = n \times h_t$ , где  $h_x$  и  $h_t$  – шаги по пространственной и временной переменным. Система сеточных уравнений относительно значений функций  $\psi_m^n = \psi(x_m, t_n)$ ,  $\varphi_m^n = \phi(x_m, t_n)$ ,  $\Theta_m^n = \Theta(x_m, t_n)$  в узлах дискретной сетки с граничными условиями имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ 0.5 \left[ \frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \left. + 0.5 \left[ \frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^n}{mh_x} \psi_m^n \right] \right\} \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1} \\ \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\omega^2 \frac{|\psi_m^n|^2}{mh_x}, \\ \Theta_m^{-1} = -\frac{|\psi_m^0|^2}{mh_x}; \quad \Theta_m^0 = \Theta_m^{-1}; \\ \varphi_0^n = 0; \quad \varphi_l^n = \varphi_{l-1}^n; \quad m = 1, 2, \dots, l; \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (5)$$

Следуя работе [3] вычислительная схема построена так, чтобы обеспечить возможность на каждом  $n$ -ом временном слое последовательно вычислять значения  $\Theta^{n+1}$ ,  $\varphi^{n+1}$  и  $\psi^{n+1}$ , избегая тем самым численного решения для каждого  $n$  системы трех нелинейных уравнений. Корректность вычислительной схемы применительно к численному решению задачи (5) проверена путем тестового расчета. Итак, на каждом слое с номером  $n$  выполняется следующая последовательность действий.

На первом шаге из третьего уравнения системы (5) при известных  $\psi^n$  явно вычисляем  $\Theta^{n+1}$  для всех  $m$ . На втором шаге найденные  $\Theta_m^{n+1}$  подставляются во второе уравнение. Полученная система  $N = l - 1$  алгебраических уравнений решается тем или иным методом для вычисления  $\varphi_m^{n+1}$ . На третьем шаге полученные значения  $\varphi_m^{n+1}$  подставляются в первое уравнение системы (5). После этого процедура повторяется для следующего значения  $n$ .

Численное решение трехдиагональных алгебраических систем уравнений на втором и третьем шагах вышеописанного алгоритма может осуществляться разными способами. В начальном варианте компьютерной реализации использовался классический метод прогонки. Использование на втором этапе метода встречных прогонок обеспечило возможность двухкратного ускорения расчетов путем распределения вычислений на два параллельно работающих процесса. В дальнейшем для решения алгебраических систем на 2м и 3м шаге алгоритма используется метод разбиений, позволяющий распределить вычисления на произвольное число процессов [4]. Параллельный алгоритм основан на разбиении на каждом временном слое, расчеты на множестве  $x_k$ -узлов распределяются между  $P$  параллельными MPI-процессами. Расчеты на первом шаге алгоритма также распараллеливаются по пространственной координате между задействованными параллельными процессами.

Тестовые расчеты с различным количеством вычислительных узлов для проверки эффективности параллельной реализации были выполнены на гетерогенном кластере HybridIT (ЛИТ ОИЯИ) с  $2 \cdot 10^6$  шагами во времени. Время выполнения в зависимости от количества  $P$  параллельных вычислительных узлов показано на рис. 1 (левая панель). Видно, что время выполнения гиперболически уменьшается при  $P \leq 12$ . На правой панели рис. 1 указано максимальное ускорение в зависимости от количества  $x$ -узлов. В дальнейшем, аналогичные тестовые расчеты были проведены на суперкомпьютерах "Авитохол" (БАН, г. София) и "Говорун" (ЛИТ ОИЯИ, г. Дубна), на которых получено 20-ти кратное ускорение вычислений.

Проверка корректности математической модели, вычислительной схемы и C++/MPI реализации проводилась путем тестовых расчетов с использованием стационарных решений и путем сравнения с теоретической оценкой интеграла энергии (4).

Интенсивность поглощения света поляризованной водой определяется следующим образом [1]:

$$I(\Omega, t) = \frac{4\Omega^2\gamma_s^2(t)}{(W(t)^2 - \Omega^2)^2 + 4\Omega^2\gamma_s^2(t)}, \quad (6)$$

где,  $\Omega$  - частота света, поглощаемая гидратированным электроном,  $\gamma_s(t)$  - ширина полосы поглощения сольватированных электронов,  $W(t)$  - интеграл энергии (4).

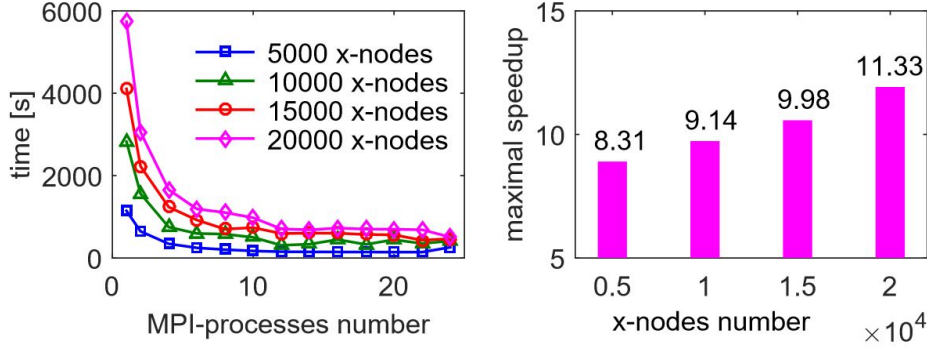


Рис. 1: Левая панель: зависимость времени выполнения от количества параллельных MPI-процессов для случаев 5000, 10000, 15000 и 20000  $x$ -узлов дискретной сетки. Правая панель: Максимальное ускорение в зависимости от количества  $x$ -узлов. Расчеты на кластере HybriLIT (Дубна)

Первоначально численное моделирование проводилось в предположении постоянной  $\gamma_s = 0.38$  eV. Это значение соответствует стадии стабильности сольватированного (гидратированного) электрона [1]. В дальнейших вычислениях учитывалась зависимость  $\gamma_s$  от времени на основе формул, приведенных в [A7].

Начальное условие для системы уравнений (1) в Гауссовой форме имеет вид:

$$\psi(x, 0) = F_g(\tilde{x}) \times \sqrt{4\pi} \times \tilde{x} \times \sqrt{r_{00}}, \quad \tilde{x} = x \times r_{00}, \quad (7)$$

$$F_g(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/4} \frac{1}{\sigma^{3/2}} \exp(-x^2/\sigma^2), \quad (8)$$

где параметр  $\sigma$  варьировался в широком диапазоне значений для получения согласия с экспериментальными данными.

Рисунки 2 и 3 демонстрируют расчетные кривые, полученные с учетом зависимости параметра  $\gamma_s$  от времени, в сравнении с экспериментальными данными.

В расчетах относительная погрешность, вычисляемая по формуле:

$$\bar{R} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|I(t_i) - I_{exp}(t_i)|}{I_{exp}(t_i)} * 100\%, \quad (9)$$



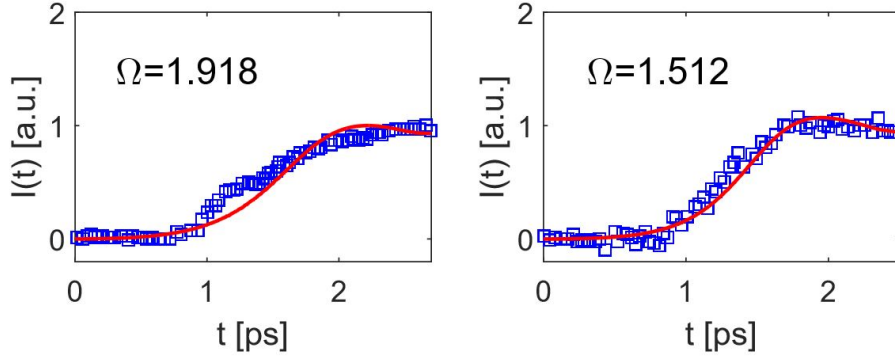


Рис. 2: Численное моделирование поглощения света гидратированным электроном для экспериментальных данных [5], полученных при частотах света сканирующего лазера  $\Omega = 1,918$  эВ (слева) и  $\Omega = 1,512$  эВ (справа)

где  $i$  - номер экспериментальной точки,  $N$  - количество экспериментальных точек, составляет 0.01-0.05%.

Средний радиус гидратированного электрона, определяемый по формуле:

$$R(t) = \int |\Psi|^2 r dr^3, \quad (10)$$

имеет значения между  $2 \cdot 10^{-8}$  см и  $3 \cdot 10^{-8}$  см, что соответствует теоретическим оценкам.

### Третья глава

В главе 3 представлены результаты моделирования процессов прохождения углеводородных смесей сквозь пористую среду и расчетов физических характеристик этих процессов в сравнении с соответствующими экспериментальными данными.

В диссертационной работе в рамках численного исследования процесса фильтрации газоконденсатного пласта были решены две задачи. Первая состояла в численной проверке возможности количественного воспроизведения экспериментальных характеристик, полученных в [7], а именно – данных по пространственному распределению относительных плотностей компонент двухфазной двухкомпонентной смеси в режиме

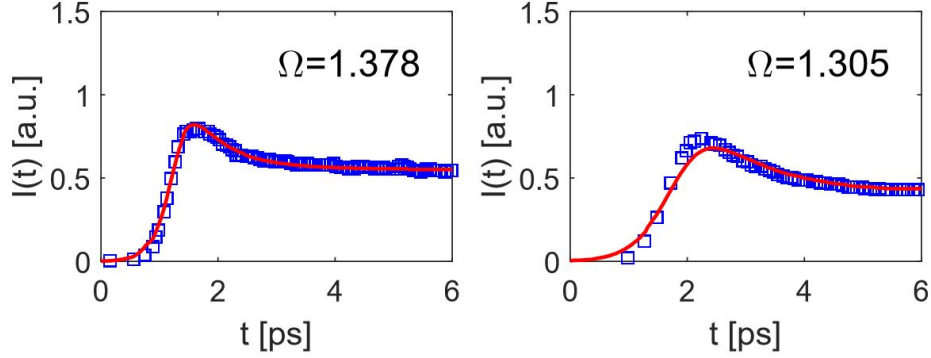


Рис. 3: То же, что и на рис. 2 для экспериментальных данных [6] при  $\Omega = 1,378$  EV (слева) и  $\Omega = 1,305$  EV (справа)

стабилизации. Вторая направлена на исследование прохождения многокомпонентной газоконденсатной смеси через газоносный пласт в режиме истощения на основе данных эксперимента, моделирующего этот процесс на лабораторной установке во ВНИИГАЗ, г. Ухта [8].

В общем случае динамический процесс фильтрации  $n$ -компонентной газоконденсатной смеси углеводородов через пористую среду описывается системой уравнений:

$$u_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \nabla P_\alpha, \quad (11a)$$

$$\frac{\partial \rho_{i\alpha}}{\partial t} + \nabla(u_\alpha \rho_{i\alpha}) = V_{i\alpha}, \quad (11b)$$

где  $\nabla = \left\langle \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\rangle$ .

Здесь уравнение (11a) – закон Дарси, описывающий скорость течения потока, уравнение (11b) – закон неразрывности потоков.

В процессе участвуют  $n$  компонент с номерами  $i$  ( $i = 1 \dots n$ ), которые находятся при давлении  $P_\alpha$  в  $\alpha$ -фазе, где  $\alpha = L$  соответствует жидкой фазе, а  $\alpha = G$  – газообразной фазе.

В системе (11)  $u_\alpha$  – линейная скорость течения в фазе  $\alpha$ ,  $\rho_{i\alpha}$  – молярная плотность  $i$ -й компоненты в фазе  $\alpha$ ,  $V_{i\alpha}$  – скорость межфазного перехода  $i$ -й компоненты из фазы  $\alpha$ ,  $k_\alpha$  и  $\mu_\alpha$  – соответственно проницаемость и вязкость фазы  $\alpha$ .

Внутри газа и жидкости давление описывается формулой Пенга-Робинсона:

$$P_\alpha = P_\alpha(v_\alpha) = \frac{RT}{v_\alpha - b_{m\alpha}} - \frac{a_{m\alpha}}{v_\alpha(v_\alpha + b_{m\alpha}) + b_{m\alpha}(v_\alpha - b_{m\alpha})}. \quad (12)$$

где  $v_\alpha$  – молярный объем с учетом пористости  $m$  и насыщенности  $S_\alpha$

$$v_\alpha = \frac{mS_\alpha}{\rho_\alpha}, \quad \rho_\alpha = \sum_{i=1}^n \rho_{i\alpha}. \quad (13)$$

Газонасыщенность  $S_G$  определяется из уравнений

$$P_G = P_G \left( \frac{mS_G}{\rho_G} \right) = P_L \left( \frac{m(1 - S_G)}{\rho_L} \right) + P_{capillar}, \quad S_G + S_L = 1, \quad 0 \leq S_\alpha \leq 1. \quad (14)$$

Мольные доли компонент в жидкой и газовой фазах  $C_{i\alpha}$  в формулах для  $A_{i\alpha}$  и  $B_{i\alpha}$  вычисляются как

$$C_{i\alpha} = \frac{\rho_{i\alpha}}{\rho_\alpha}. \quad (15)$$

Скорости межфазных переходов удовлетворяют условию

$$V_{iG} + V_{iL} = 0 \quad (16)$$

и определяются из следующего соотношения:

$$V_{i\alpha} = \eta_i(\phi_i^{\bar{\alpha}} - \phi_i^\alpha), \quad \text{где } \bar{G} = L, \bar{L} = G, \quad (17)$$

где  $\phi_i^L, \phi_i^G$  – химические потенциалы Гиббса  $i$ -й компоненты,  $\eta_i$  – коэффициент межфазного перехода.

В первом эксперименте, проведенном в Стенфордском университете [7], исследуется одномерное течение двухкомпонентной газоконденсатной смеси из 85 мол.% метана ( $i = 1$ ) и 15 мол.% н-бутана ( $i = 2$ ). Трубчатая модель пласта (МП) представляет собой узкий корпус, заполненный пористой средой (песчаник) с пористостью 16% с расположенными на равномерном расстоянии друг от друга 7 датчиками. МП заполнялась метаном при давлении, превышающем давление начала конденсации для выбранной двухкомпонентной смеси. Затем метан вытеснялся метан-бутановой смесью, находящейся в газовой фазе. При этом

обнаруживается, что через несколько минут наблюдается стабилизация фазового состава метан-бутановой смеси на выходе из модели пласта

С учетом особенности эксперимента и наблюдаемой в эксперименте стабилизации процесса фильтрации на основе исходной системы уравнений (11) сформулирована задача Коши для системы обыкновенных пространственно одномерных дифференциальных уравнений:

$$\frac{\mu_\alpha}{\kappa} u_\alpha = -\frac{\partial}{\partial x} P_\alpha, \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (u_\alpha \rho_{\alpha i}) + V_{\alpha i} = 0. \quad (19)$$

Для условий в точке  $x = 0$  использовались соотношения

$$\rho_{\alpha i}(0) = \rho_0 \bar{C}_i \bar{C}_{\alpha i}, \quad \bar{C}_{ci} = 1 - \bar{C}_{gi},$$

где  $\bar{C}_i$  – мольные доли  $i$ -ых компонент в смеси ( $i = 1, 2$ ,  $\bar{C}_1 + \bar{C}_2 = 1$ ).

Цель численного исследования состояла в проверке возможности воспроизведения экспериментальных результатов из работы [7] по распределению вдоль координаты  $x$  значений мольных долей плотностей  $i$ -х компонент двухкомпонентной смеси  $\text{CH}_4 + n\text{C}_4\text{H}_{10}$  в газовой и жидкой фазах в режиме стабилизации. Эти характеристики для каждой  $i$ -й компоненты рассчитываются через решения системы (18-19) по формуле:

$$C_{\alpha i}(x) = \frac{\rho_{\alpha i}(x)}{\sum_k \rho_{\alpha k}(x)}, \quad k = 1, 2 \quad (20)$$

Путем варьирования параметров в начальных условиях и некоторых параметров модели, не имеющих известных значений, получено согласие с экспериментальными данными из [7]. Значение  $\chi^2$ , рассчитанное по формуле:

$$\chi^2 = \sum_{\Omega} \left( C_{(\text{эксп})\alpha i}(x_k) - C_{\alpha i}(x_k) \right)^2. \quad (21)$$

где  $\Omega$  – весь набор имеющихся экспериментальных значений  $C_{(\text{эксп})\alpha i}(x_k)$ , измеренных в точках  $x_k$ , расположенных вдоль длины МП, составляет 0.000123.

Соответствующие расчетные кривые в сравнении с экспериментальными данными из [7] представлены на рис. 4(а). Треугольниками и квадратами показаны соответственно распределение мольной доли газовой

фазы компоненты  $nC_4H_{10}$  и распределение мольной доли ее конденсата. Видно, что доля газовой составляющей существенно снижается в правой (выходной) части коллектора, в то время как доля конденсата близка к константе по всей длине коллектора.

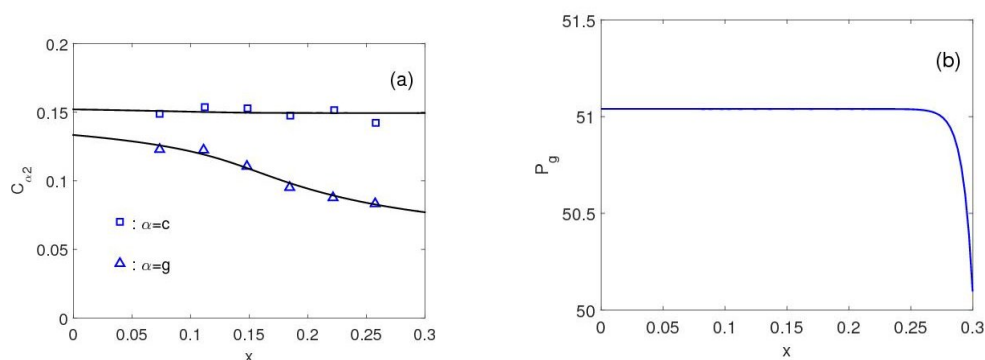


Рис. 4: (а) Расчетные кривые  $C_{\alpha 2}(x)$ ,  $\alpha = c, g$  в сравнении с экспериментальными данными из [7]; (б) распределение давления  $P_g$  (в атм.) по координате  $x$ .

На рис. 4(б) показано распределение давления  $P_g = P_c$  вдоль длины коллектора. Видно, что изменение давления в зависимости от координаты  $x$  очень слабое, заметное понижение давления происходит лишь в области  $L_{max}$ .

Во втором эксперименте [8] лабораторная модель пласта (МП) представляет собой термостатический цилиндр с размещенной внутри узкой трубой диаметра 3 см и длины 93.27 см. На начальном этапе эксперимента в трубу, заполненную пористым материалом, нагнетается при давлении 35 МПа девятикомпонентная углеводородная смесь, состоящая из  $CH_4$ ,  $C_3H_8$ ,  $nC_4H_{10}$ ,  $nC_6H_{14}$ ,  $nC_7H_{16}$ ,  $nC_9H_{20}$ ,  $nC_{10}H_{22}$ ,  $nC_{12}H_{26}$ ,  $nC_{16}H_{34}$  соответственно в мольных концентрациях 87,01%; 7,00%; 1,11%; 0,70%; 0,86%; 1,19%; 0,94%; 1,02%; 0,17%, и оба конца трубы закрываются. Далее, после установления в МП фазового равновесия, один конец трубы приоткрывается, тем самым обеспечивается постепенный выход вещества через этот конец при сохранении постоянной скорости его расхода за счет регулирования темпа снижения давления не более 0.2 МПа/ч.

В эксперименте измерялся выход тяжелых ( $C_{5+}$ ) и легких ( $C_{2-4}$ ) уг-

углеводородов в жидкой и газовой фазах в зависимости от давления. Совокупность  $C_{5+}$  включает компоненты  $nC_6H_{14}$ ,  $nC_7H_{16}$ ,  $nC_9H_{20}$ ,  $nC_{10}H_{22}$ ,  $nC_{12}H_{26}$ ,  $nC_{16}H_{34}$  исследуемой углеводородной смеси, а совокупность  $C_{2-4}$  – компоненты  $C_3H_8$ ,  $nC_4H_{10}$ . Эксперименты проводились при двух значениях температуры с использованием двух типов пористого наполнителя: в эксперименте при  $T=25^\circ C$  использовалась теригенная смесь с коэффициентом пористости  $m = 0.1377$ ; в эксперименте при  $T=60^\circ C$  использовалась карбонатная смесь с пористостью  $m = 0.1844$ .

В эксперименте [8], где газоконденсатная смесь проходит через длинную трубу малого диаметра, естественно рассматривать пространственно одномерный случай ( $d=1$ ) с единственной координатой  $x \in [0, L_{\max}]$  вдоль длины трубы. При этом оператор дифференцирования в (11) будет иметь вид  $\nabla f = \frac{\partial}{\partial x} f$ .

Правый конец трубы  $x = L_{\max}$  всегда закрыт, а извлечение газоконденсата производится через левый конец  $x = 0$ . Тогда краевое условие на закрытом (правом) конце для  $u_\alpha$  имеет вид  $u_\alpha|_{x=L_{\max}} = 0$ . При  $t > 0$  с учетом достигнутого по условиям эксперимента фазового равновесия и постоянного выхода вещества, граничное условие формулируется в виде  $(u_\alpha \rho_\alpha)|_{x=0} = q_\alpha|_{x=0}$ , где  $q_\alpha|_{x=0}$  – заданная константа. Начальные условия для функций  $\rho_{i\alpha}$  выбираются так, чтобы давление  $P$  в начальный момент времени  $t = 0$  составляло 35 МПа. Вычисления продолжались до достижения внутри пласта атмосферного давления.

Для численного решения системы уравнений (11) вводится дискретная сетка по координате  $x$  вдоль длины МП с шагом  $h_x = 1/N$ , с  $N$  основными узлами  $x_k = h_x/2 + (k - 1) \cdot h_x$  ( $k = 1, \dots, N$ ) и с промежуточными узлами  $x_{k\pm 1/2} = x_k \pm h_x/2$ .

Разностные уравнения для системы (11) в узлах  $x_k$  имеют вид:

$$u_\alpha^{(k\pm 1/2)} = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \frac{P_\alpha^{(k\pm 1)} - P_\alpha^{(k)}}{x_{k\pm 1} - x_k}, \quad (22a)$$

$$\frac{\partial \rho_{i\alpha}^{(k)}}{\partial t} + \frac{u_\alpha^{(k+1/2)} \rho_{i\alpha}^{(k+1/2)} - u_\alpha^{(k-1/2)} \rho_{i\alpha}^{(k-1/2)}}{(x_{k+1/2} - x_{k-1/2})} = V_{i\alpha}^{(k)}, \quad (22b)$$

$$\rho_{i\alpha}^{(k\pm 1/2)} = \frac{1}{2}(\rho_{i\alpha}^{(k)} + \rho_{i\alpha}^{(k\pm 1)}). \quad (22c)$$

Здесь  $u_\alpha^{(k)} = u(t, x_k)_\alpha$ ,  $\rho_{i\alpha}^{(k)} = \rho(t, x_k)_{i\alpha}$ ,  $k$  – номер узла по координате.

Система (22) с учетом граничных и начальных условий представляет

собой задачу Коши относительно значений функций  $u_\alpha$  и  $\rho_{i\alpha}^{(k)}$  в узлах дискретной сетки.

Программная реализация основана на комбинированном применении инструментов Maple, C++ и MPI. Ввод данных, фитирование и визуализация результатов выполнены на Maple, а численное решение системы (22) написано на C++ с использованием технологии параллельного программирования MPI для высокопроизводительных вычислений. Расчеты проводились на кластере HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ). Тестовые расчеты показали, что ускорение в 6 раз можно получить при использовании в расчетах 12 процессов.

Численное интегрирование уравнений выполнено методом Рунге-Кутты 4 порядка по времени  $t$  и методом конечных разностей по координате  $x$  на сетке с  $N$  узлами в по формулам (22).

Параметры  $\eta_0$ ,  $\mu_\alpha$ ,  $\kappa$  варьировались для обеспечения согласия с совокупностью трех наборов экспериментальных точек из [8] для величин  $M_{C_{5+}}^{exp}$ ,  $C_{2-4}^{exp}$ ,  $C_{5+}^{exp}$ , измерявшихся при разных значениях давления  $P$ , равномерно уменьшающегося со временем.

Расчет содержания тяжелых компонент в составе извлекаемой смеси при атмосферном давлении выполнен по формуле:

$$M_{C_{5+}} = \frac{\sum_{\alpha} \sum_{i \in 5+} \frac{\rho_{i\alpha}}{\rho_{\alpha}} q_{\alpha} M_i}{\sum_{\alpha} q_{\alpha} Z_{0\alpha} \frac{RT}{P_0}} \quad (23)$$

Здесь  $M_i$  – молярная масса,  $Z_{0\alpha} = \frac{P_{\alpha} v_{\alpha}}{RT}$  – коэффициенты сверхсжимаемости при атмосферном давлении  $P_{\alpha}(v_{\alpha}) = P_0 = 0.1$  МПа. Для расчета  $C_{2-4}$  и  $C_{5+}$  использовалась формула (20).

Результаты вычислительного эксперимента показаны на рис. 5. Здесь представлены графики выхода тяжелых и легких углеводородов в зависимости от давления в сравнении с данными лабораторного эксперимента [8] при  $T=25^{\circ}\text{C}$  и  $T=60^{\circ}\text{C}$ . Значения  $\chi^2$ , рассчитанные по формулам:

$$\chi^2 = \frac{1}{N_{M_{C_{5+}}^{exp}}} \chi_{M_{C_{5+}}}^2 + \frac{1}{N_{C_{2-4}^{exp}}} \chi_{C_{2-4}}^2 + \frac{1}{N_{C_{5+}^{exp}}} \chi_{C_{5+}}^2 \quad (24)$$

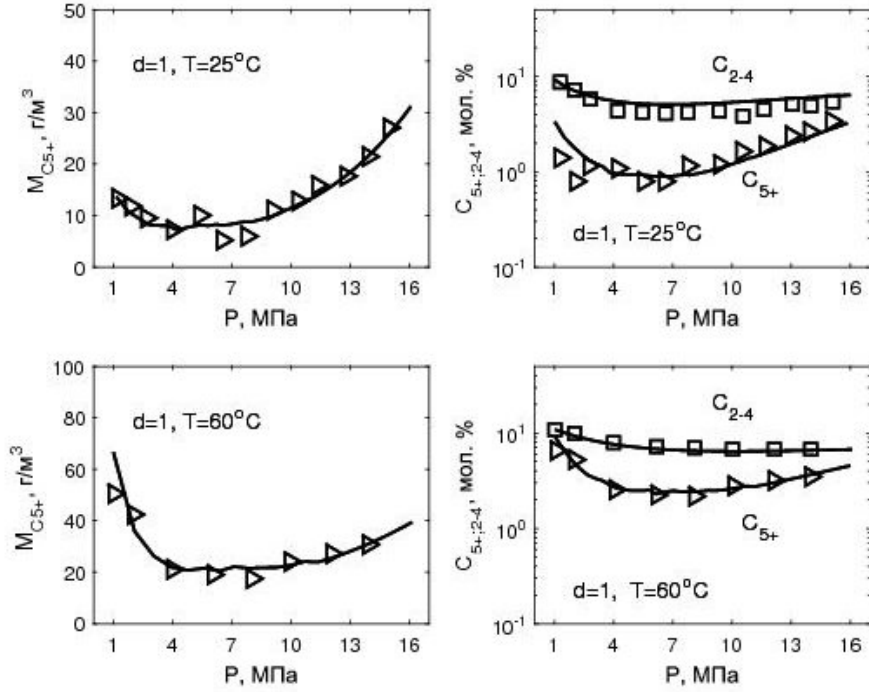


Рис. 5: Содержание (г/куб.м) тяжелых углеводородов  $C_{5+}$  (слева) и мольная доля в % тяжелых углеводородов  $C_{5+}$  и легких углеводородов  $C_{2-4}$  (справа) в зависимости от давления на выходе из МП в режиме истощения при температуре  $25^{\circ}\text{C}$  (вверху) и  $60^{\circ}\text{C}$  (внизу) в сравнении с экспериментальными данными [8].

где

$$\chi_{M_{C_{5+}}}^2 = \sum_{M_{C_{5+}}^{exp}} [\ln(M_{C_{5+}}) - \ln(M_{C_{5+}}^{exp})]^2,$$

$$\chi_{C_{2-4}}^2 = \sum_{C_{2-4}^{exp}} [\ln(C_{2-4}) - \ln(C_{2-4}^{exp})]^2,$$

$$\chi_{C_{5+}}^2 = \sum_{C_{5+}^{exp}} [\ln(C_{5+}) - \ln(C_{5+}^{exp})]^2.$$

составляют 0.046 для  $T=25^{\circ}\text{C}$  и 0.145 для  $T=60^{\circ}\text{C}$ .

Видно, что реализованный подход обеспечивает адекватное согласие с данными измерений, включая наблюдаемое в эксперименте некоторое



повышение углеводородоотдачи при низком давлении. Представленные зависимости являются результатом сложной динамики всего набора углеводородных компонент, фазовое поведение каждой из которых имеет свои особенности в режиме истощения. С понижением давления происходит переход разных компонент углеводородной смеси из жидкой в газовую фазу, что приводит к “всплескам” на графиках плотности. Поскольку “всплески” плотности происходят при разных давлениях и имеют разное распределение по координате, общая зависимость совокупной извлекаемости  $C_{5+}$  и  $C_{2-4}$  от давления на рис. 5 не имеет резких скачков.

В случае обобщения схемы на двумерный случай ( $d=2$ ) для моделирования тонкого газоносного пласта с круговой симметрией с учетом перехода в полярную систему координат для  $\nabla P_\alpha$  в (11a) сохраняется формула  $\nabla f = \frac{\partial}{\partial x} f$ . Что касается выражения  $\nabla(u_\alpha \rho_{i\alpha})$  в (11b), здесь оператор дифференцирования принимает вид  $\nabla f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rf)$ , поскольку в приближении круговой симметрии ненулевой является только радиальная компонента.

При моделировании плоского газоносного пласта в форме круга предполагается, что отбор газоконденсата происходит через стенку скважины радиуса  $r_0$ , расположенной в центре круга, в то время как выхода вещества через внешнюю границу  $r = r_0 + L_{\max}$  не происходит. Это дает основание в *двумерном* случае использовать для радиальной составляющей функции  $u_\alpha$  граничные условия, аналогичные вышеприведенным:  $u_\alpha|_{r=r_0+L_{\max}} = 0$  и  $(u_\alpha \rho_\alpha)|_{r=r_0} = q_\alpha|_{r=r_0}$ . Начальные условия выбираются так же, как в случае ( $d=1$ ).

При расчетах для  $d = 2$  получены результаты, близкие к представленным на рис. 5. Это дает основание полагать, что в достаточно тонком реальном пласте в области с радиусом, близким к длине МП (около 1м) и имеющем физико-химические параметры, аналогичные лабораторной МП, динамика извлекаемости тяжелых ( $C_{5+}$ ) и легких ( $C_{2-4}$ ) углеводородов в зависимости от давления окажется близкой к наблюдаемой в лабораторных условиях.

## Заключение

Проведено численное исследование полярной модели формирования гидратированного электрона.

Показано, что в рамках рассмотренного подхода удается адекватно воспроизвести результаты эксперимента по формированию фотовозбужденных электронов в воде под действием лазерного облучения в ультрафиолетовом диапазоне с частотами от 1,18 эВ до 1,918 эВ.

Проведено численное исследование прохождения газоконденсатной смеси через пористую среду в режиме стабилизации и в режиме истощения.

Показано, что использованный подход позволяет воспроизвести экспериментальные данные по прохождению углеводородной газоконденсатной смеси в этих двух режимах.

Разработанные подходы и комплексы программ могут быть использованы для дальнейших исследований.

Разработаны параллельные реализации алгоритма разбиений и метода Рунге-Кутты 4 порядка. Они оформлены в виде универсальных программных модулей SPLIT и RK4-MPI:

<http://wwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/split/index.html>,

<http://wwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/rk4-mpi/index.html>,

размещенных в электронной библиотеке JINRLIB для свободного доступа и возможности использования в составе иных программных комплексов для решения соответствующих задач в параллельном режиме.

## Публикации автора по теме диссертации

А1. Волохова А.В., Земляная Е.В., Лахно В.Д., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Компьютерное моделирование формирования состояний гидратированного электрона. // Вестник РУДН, серия: Математика. Информатика. Физика, 2014. -№2. -стр. 244-247.

А2. Волохова А.В., Земляная Е.В., Лахно В.Д., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Численное исследование фотовозбужденных поляронных состояний в воде. // Компьютерные исследования и моделирование, 2014. -т. 5, №2. -стр. 253-261.

А3. Лахно В.Д., Волохова А.В., Земляная Е.В., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. Поляронная модель формирования состояний гидратированного электрона. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2015. -№1. -стр. 82-87; препринт

P11-2014-19. -Издательский отдел ОИЯИ, 2014.

A4. Волохова А.В., Земляная Е.В., Рихвицкий В.С. Параллельная оптимизация метода решения системы уравнений полярона с использованием алгоритма разбиений. //Вычислительные методы и программирование, 2015. -т. 16 -стр. 281-289; препринт P11-2015-19. -Издательский отдел ОИЯИ, 2015.

A5. Zemlyanaya E.V., Volokhova A.V. , Lakhno V.D., Amirkhanov I.V. Puzynin I.V., Puzynina T.P.,Rikhvitskiy V.S., Atanasova P.Kh. Numerical simulation of photoexcited polaron states in water. //AIP Conference Proceedings, 2015. -v. 1684 . -p. 100006.

A6. Volokhova A., Zemlyanaya E., Lakhno V., Amirkhanov I., Bashashin M., Puzynin I., Puzynina T. Numerical Simulation of the Formation of Hydrated Electron States. //European Physics Journal. Web of Conferences, 2018. - v. 173. - p. 06013.

A7. Zemlyanaya E.V., Volokhova A.V. , Lakhno V.D., Bashashin M.V., Amirkhanov I.V. Puzynin I.V., Puzynina T.P., Atanasova P.Kh. Numerical Study of Formation of Hydrated Electron States. // AIP Conference Proceedings, 2018. -v. 2025. -p. 10008.

A8. Волохова А.В., Земляная Е.В., Качалов В.В., Сокотущенко В.Н., Рихвицкий В.С. Численное исследование фильтрации газоконденсатной смеси в пористой среде. // Компьютерные исследования и моделирование, 2018. -т. 10, №2. -стр. 209-219.

A9. Волохова А.В., Земляная Е.В., Качалов В.В., Рихвицкий В.С., Сокотущенко В.Н. Численное моделирование динамики извлечения многокомпонентной газоконденсатной углеводородной смеси в режиме истощения фильтрационной модели пласта. // Геоинформатика, 2019. -№3. -стр. 27-33.

A10. Volokhova AV., Zemlyanaya E. V., Kachalov V.V., Rikhvitsky V.S., Sokotushchenko V.N. Simulation of a gas-condensate mixture passing through a porous medium in depletion mode. // Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science, 2019. -№27(3). -p. 205–216.

A11. Волохова А.В., Земляная Е.В., Качалов В.В., Рихвицкий В.С. Моделирование процесса истощения газоконденсатного пласта. //Компьютерные исследования и моделирование. (Computer Research and Modeling), 2020.-т. 12, №5. - стр. 1081–1095.

## Список литературы

- [1] Lakhno V.D. Dynamical polaron theory of the hydrated electron. //Chemical Physics Letters. - 2007. - V.437. - p.198-202.
- [2] Качалов В.В., Сокотущенко В.Н., Земляная Е.В., Волохова А.В. Обзор методов повышения компонентоотдачи при разработках газоконденсатных месторождений. //Наука. Инновации. Технологии, 2019. - Вып. 2. - с. 23–52.
- [3] Amirkhanov I.V., Zemlyanaya E.V., Lakhno V.D. et all Mathematical Modeling of the Evolution of Polaron States. //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - V.5, №1. - 2011. - p. 60–64.
- [4] Wang H. H. A Parallel Method for Tridiagonal Equations. //ACM Trans. Math. Software. - 1981. - No.7. - p. 170–183.
- [5] Long F.H., Lu H., Eisenthal K.B.. Femtosecond Studies of the Presolvated Electron: An Excited State of the Solvated Electron. //Physical Review Letters. - V. 64, №12. -1990. - p.1469–1472.
- [6] Lian R., Crowell R. A., Shkrob I. A. Solvation and thermalization of electrons generated by above-the-gap (12.4 eV) two-photon ionization of liquid H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O. //The journal of physical chemistry. A 109, 1510. - 2005.
- [7] Vo Hai Xuan Composition Variation During Flow of Gas-Condensate Wells. //A report submitted to the Department of energy resources engineering of Stanford University. - 2010. - p. 441.
- [8] Волков А.Н., Лапшин В.И., Поляков А.В. Моделирование фазового поведения газоконденсатной системы в пористой среде. //Газовая промышленность. - 2016. - Вып. 10. - с. 26–31.