

14-15 сентября 2022, МОСКВА

XIV научно-практическая конференция

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПРОЦЕССАХ РАЗРАБОТКИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ



**Режимы динамической адсорбции полимеров в
искусственных и природных цифровых ядрах:
численное моделирование
с использованием решеточных уравнений Больцмана**

Докладчик

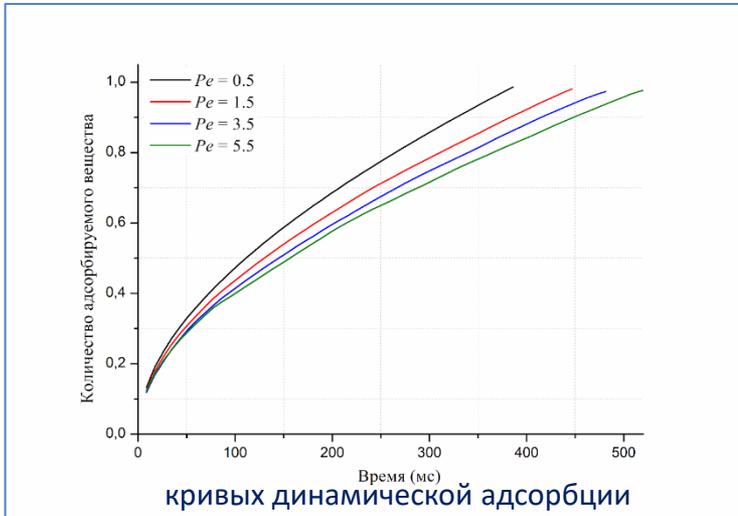
Закиров Тимур Рустамович

Кандидат физико-математических наук, доцент института геологии и нефтегазовых технологий Казанского федерального университета

tirzakirov@kpfu.ru
8-950-317-77-24

Явления динамической адсорбции имеют место во многих процессах, возникающих при закачке в пористую среду активных веществ – ПАВы, катализаторы, газы (CH_4 , N_2 , CO_2), полимеры...

Интенсивность динамической адсорбции зависит от ряда параметров:



- 1) вязкость и плотность флюидов;
- 2) скорость потока;
- 3) коэффициенты меж- и внутрочастичной диффузии;
- 4) константы адсорбции и десорбции;
- 5) концентрация активного вещества;
- 6) предельная насыщенность адсорбатом.

Определяют тип активной компоненты и адсорбента

Межчастичная диффузия – перенос вещества в поровом пространстве, вызванная градиентом концентрации

Внутрочастичная диффузия – перенос вещества во внутренней области частиц (адсорбция)

Цель работы – исследование режимов динамической адсорбции полимеров в цифровых ядрах, состоящих из частиц различного размера, при различных соотношениях между коэффициентами меж- и внутрочастичной диффузии

Постановка задачи: керн целиком насыщен водой, находящейся в состоянии покоя. Вода с растворенной в ней компонентой, способной к адсорбции, нагнетается в керн.

1) $\nabla \mathbf{u} = 0$ – уравнение неразрывности для воды;

2) $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \mu \Delta \mathbf{u}$ – уравнения Навье-Стокса для воды;

3) $\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} = D_s \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right)$ – уравнение конвективно-диффузионного переноса растворенной в воде компоненты;

4) $D_s \frac{\partial c}{\partial n} = [k^a c (N^{sat} - N^{surf}) - k^d N^{surf}]$ – уравнение адсорбции на поверхности частиц (кинетика Ленгмюира);

5) $\frac{\partial N^{total}}{\partial t} = D_{sp} \Delta N^{total}$ – уравнение диффузии внутри частиц (закон Фика).

Система уравнений решается методом решеточных уравнений Больцмана



Zakirov, T.R., Khranchenkov, M.G., 2022. Effect of pore space heterogeneity on the adsorption dynamics in porous media at various convection-diffusion and reaction conditions: A lattice Boltzmann study. Journal of Petroleum Science and Engineering, 212, 110300. 10.1016/j.petrol.2022.110300

Обозначения:

\mathbf{u} – скорость течения;

P – давление;

μ – кинематическая вязкость;

D_s – коэффициент межчастичной диффузии;

D_{sp} – коэффициент внутрочастичной диффузии;

C – концентрация растворенного в воде вещества;

k^a и k^d – константы адсорбции и десорбции;

N^{surf} – количество вещества,

адсорбирующегося на внешней

поверхности частиц;

N^{total} – количество вещества,

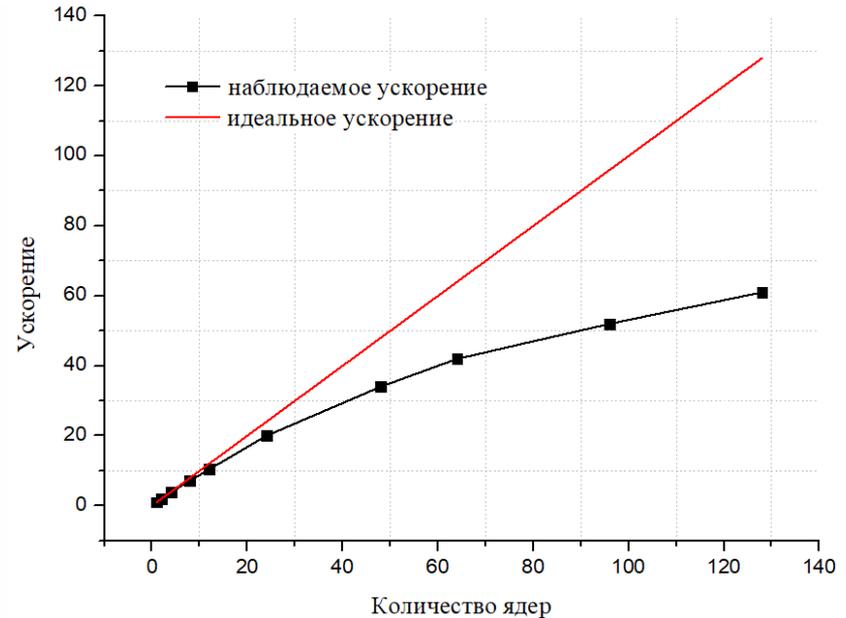
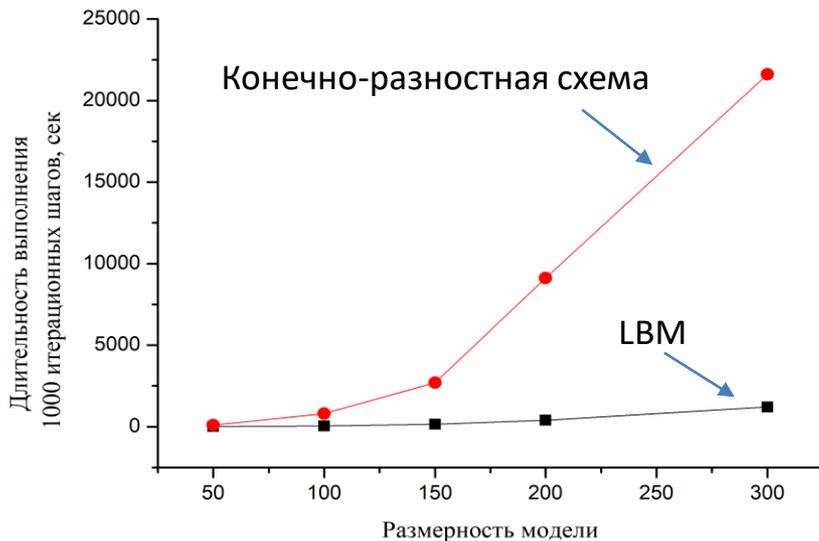
адсорбирующегося на внутренней

поверхности частиц;

N^{sat} – предельное насыщение адсорбатом.

Ключевые преимущества решеточных уравнений Больцмана (LBM) –

- 1) не нужно решать СЛАУ каждый итерационный шаг по времени;**
- 2) эффективная адаптация для технологий параллельных вычислений (OpenMP, GPGPU).**



Модель процессора – **AMD Threadripper, 3990X**,
128 ядер, технология OpenMP

Результаты исследования основаны на численном моделировании в **цифровых ядрах**

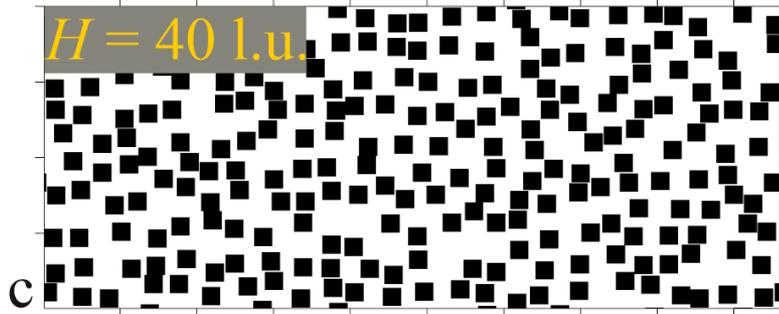
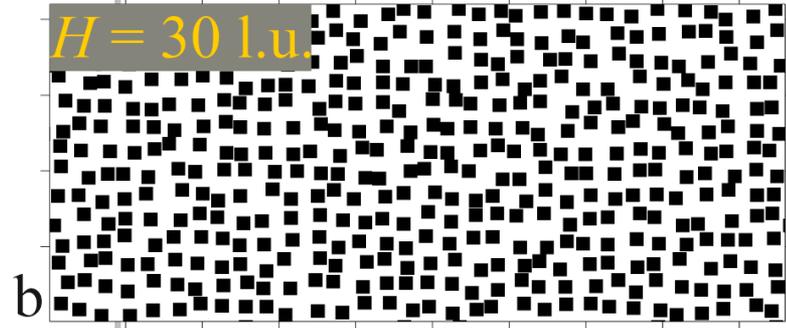
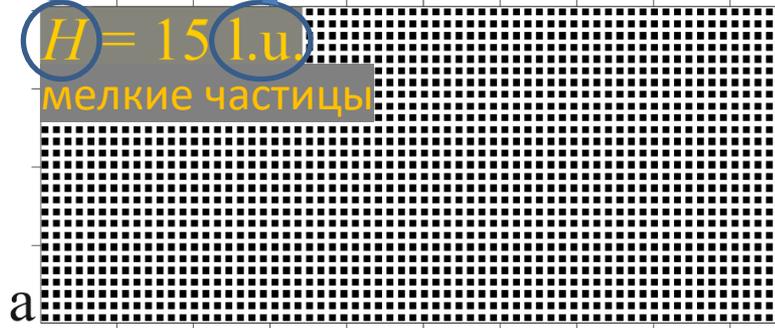
Двухмерные искусственно сгенерированные модели

размер частицы

lattice units – ячейки

$N = 15$ l.u.

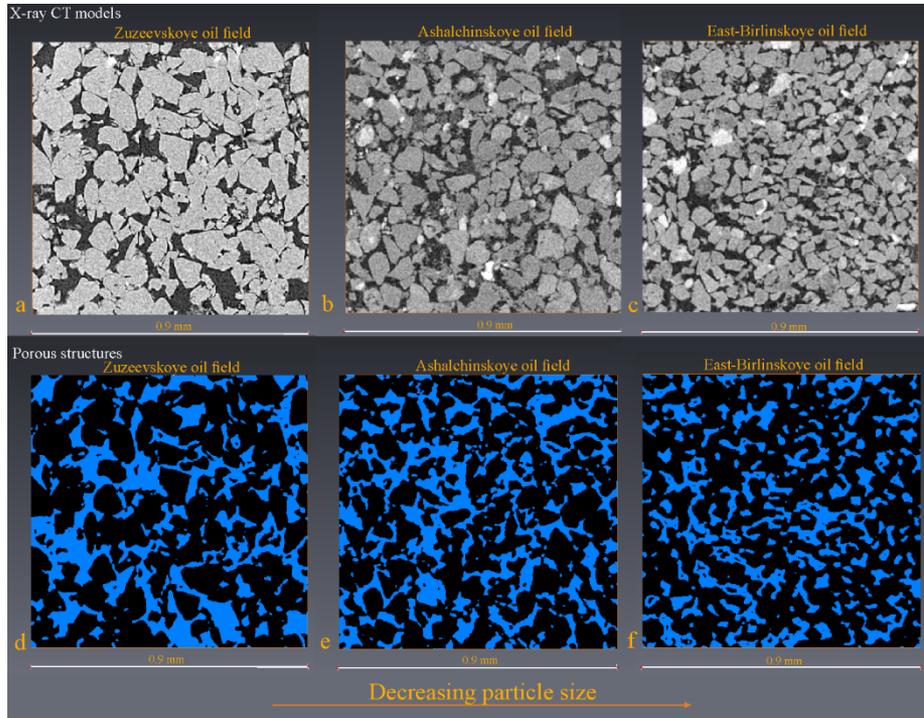
мелкие частицы



Метод генерации цифровых моделей – перемешивание Монте-Карло.
Форма адсорбирующих частиц – квадраты различного размера.

Результаты исследования основаны на численном моделировании в **цифровых ядрах**

Трёхмерные рентгеномногографические (X-ray CT) модели песчаников

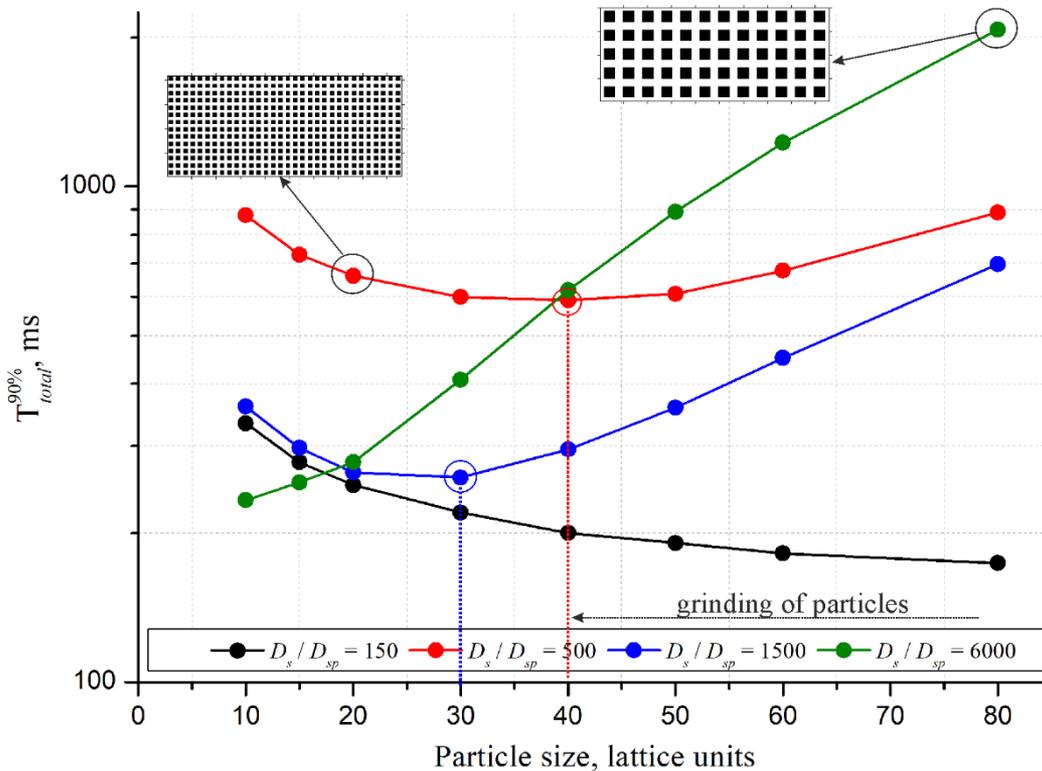


Происхождение песчаника	Разрешение модели, мкм	пористость, отн. ед.	Удельная поверхность пор (S_V), мм^{-1}	Абсолютная проницаемость (k_{xx}), мкм^2
Zuzeevskoye oil field	5.2	0.314	26.41	4.12
Ashalchinskoye oil field	5.5	0.32	32.89	4.89
EastBirlinskoye oil field	5.1	0.347	44.4	5.89

Образцы сгруппированы по следующим признакам:

- 1) близкие значения пористости;
- 2) различные удельные поверхности пор, характеризующие средний размер частиц.

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}



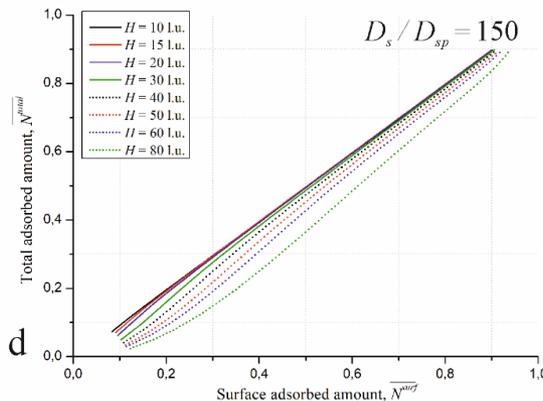
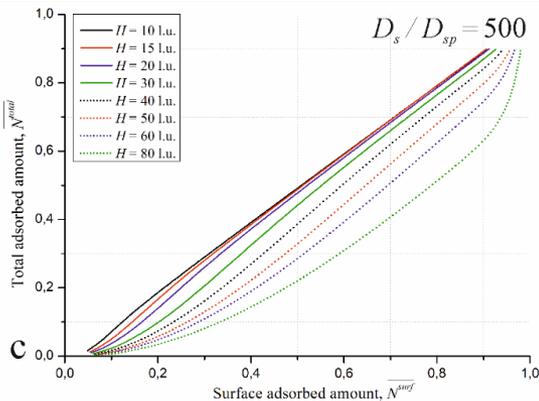
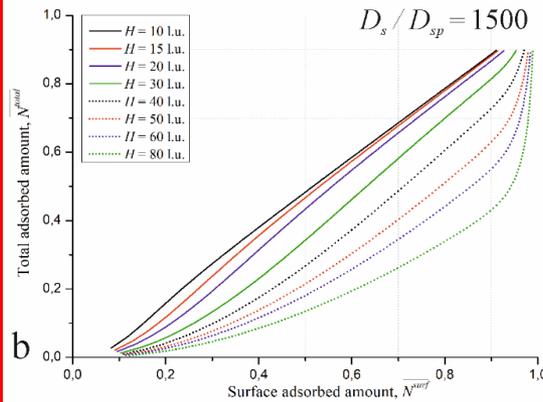
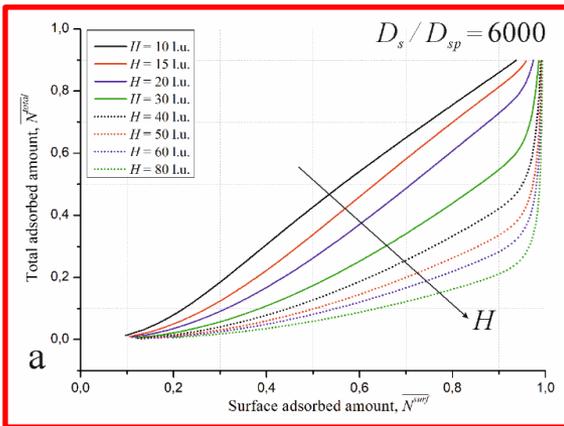
Обозначения

D_s - коэффициент межчастичной диффузии;
 D_{sp} - коэффициент внутричастичной диффузии;
 $T_{total}^{90\%}$ - время, за которое количество поглощенного вещества **внутренним объемом частиц** составляет 90% от максимально возможного.

Закономерности

1. Высокое $D_s / D_{sp} = 6000$ - измельчение частиц способствует интенсификации динамической адсорбции (**ожидаемый эффект**);
2. Низкое $D_s / D_{sp} = 150$ - измельчение частиц способствует замедлению динамической адсорбции (**обратный эффект!!!**);
3. Средние $D_s / D_{sp} = 500$ и 1500 - измельчение частиц способствует сначала интенсификации динамической адсорбции, а затем замедлению

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}



По оси ОХ отложено количество вещества, адсорбированного на внешней поверхности частиц – ($\overline{N^{surf}}$)

По оси ОУ отложено количество вещества, адсорбированного в области внутреннего объема частиц – ($\overline{N^{total}}$)

$$\overline{N^{total}} < \overline{N^{surf}} \text{ и } \overline{N^{total}} \ll \overline{N^{surf}}$$

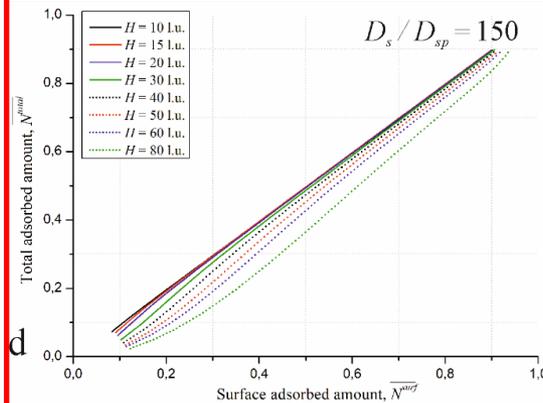
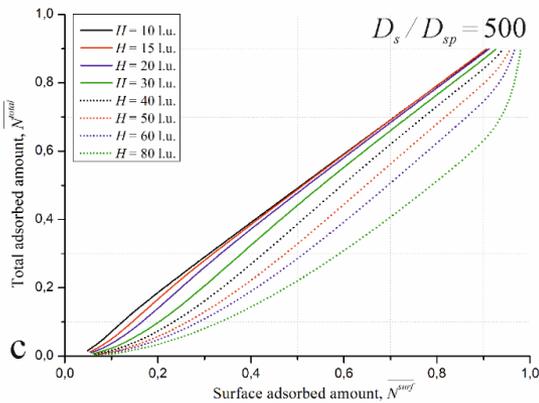
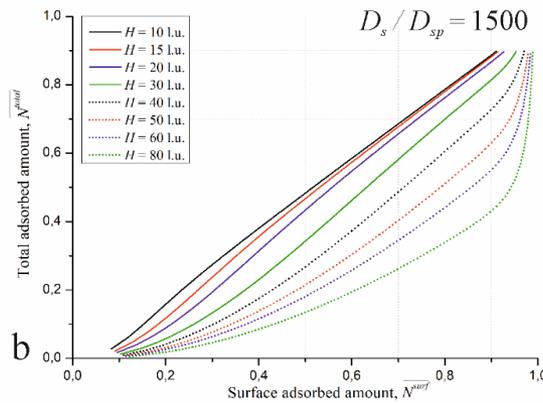
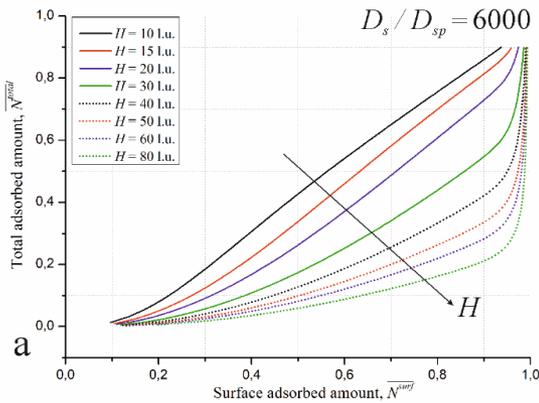
Интенсивность внутренней адсорбции ниже, чем интенсивность поверхностной адсорбции. Значительное замедление внутренней адсорбции по отношению к поверхностной адсорбции возникает при увеличении размера частиц.



Увеличение размера частиц способствует замедлению внутренней адсорбции (ожидаемый эффект)

Соотношение между количеством вещества, адсорбированным на внешней поверхности частиц и в области их внутреннего пространства

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}



По оси ОХ отложено количество вещества, адсорбированного на внешней поверхности частиц – (N^{surf})

По оси ОУ отложено количество вещества, адсорбированного в области внутреннего объема частиц – (N^{total})

Соотношение между количеством вещества, адсорбированным на внешней поверхности частиц и в области их внутреннего пространства

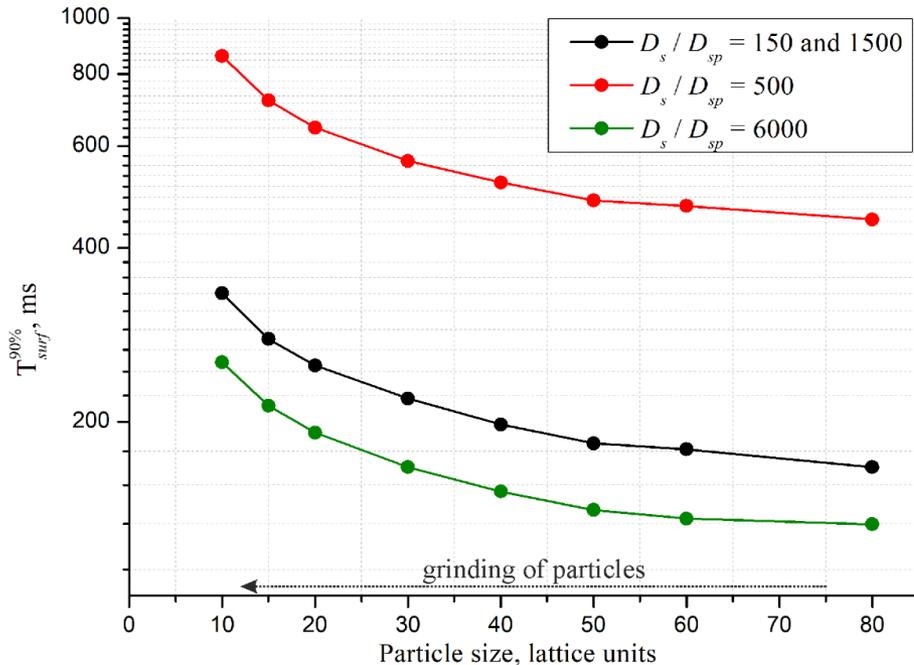
$\overline{N^{total}} \approx \overline{N^{surf}}$

Интенсивности поверхностной и внутренней адсорбции практически совпадают независимо от размера частиц

↓

Интенсивность внутренней адсорбции определяется интенсивностью поверхностной адсорбции

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}

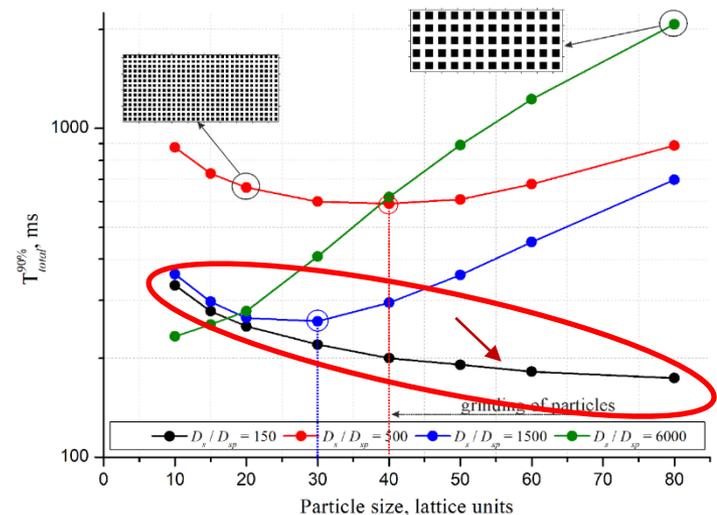


Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции на поверхности частиц

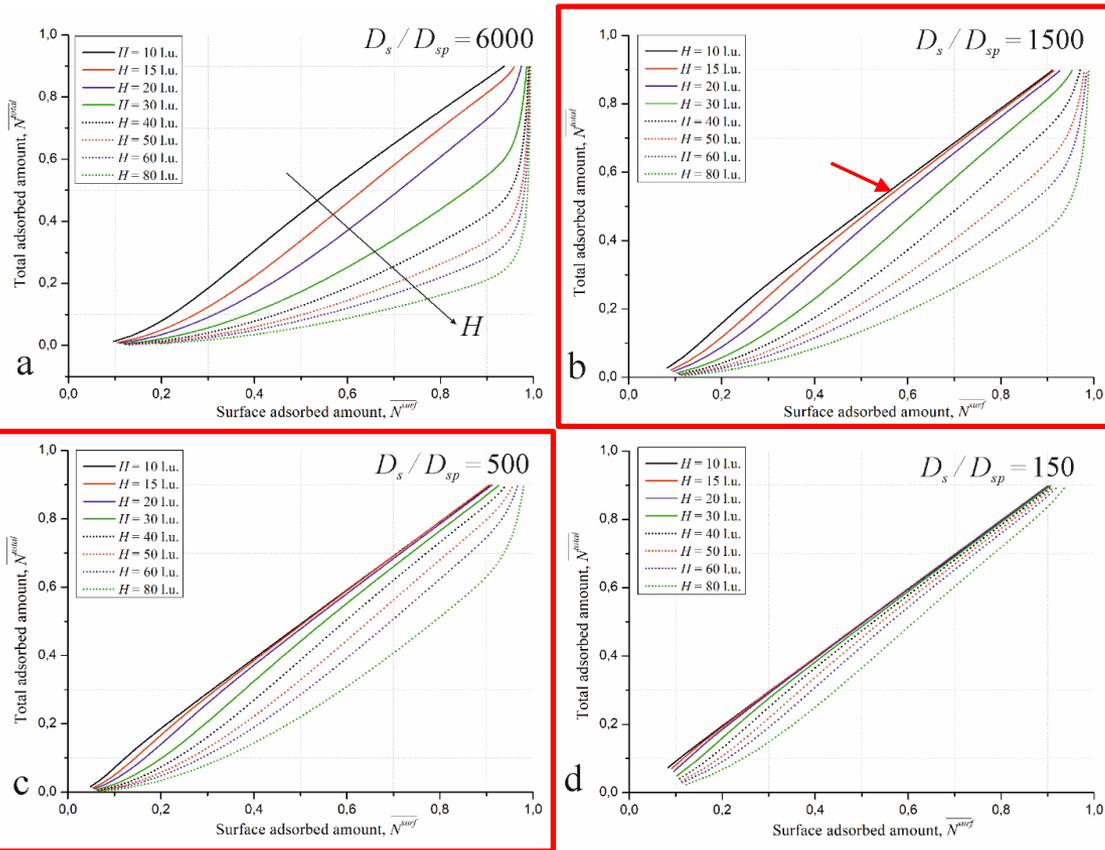
Обозначения

D_s - коэффициент межчастичной диффузии;
 D_{sp} - коэффициент внутрочастичной диффузии;
 $T_{surf}^{90\%}$ - время, за которое количество поглощенного вещества на поверхности частиц составляет 90% от максимально возможного.

Измельчение частиц способствует замедлению поверхностной динамической адсорбции.



Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}

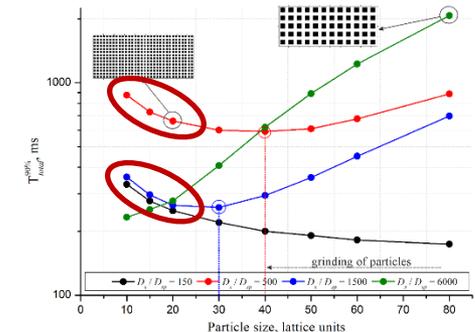


При малых размерах частиц $H < 30$ l.u.

$$\overline{N^{total}} \approx \overline{N^{surf}}$$

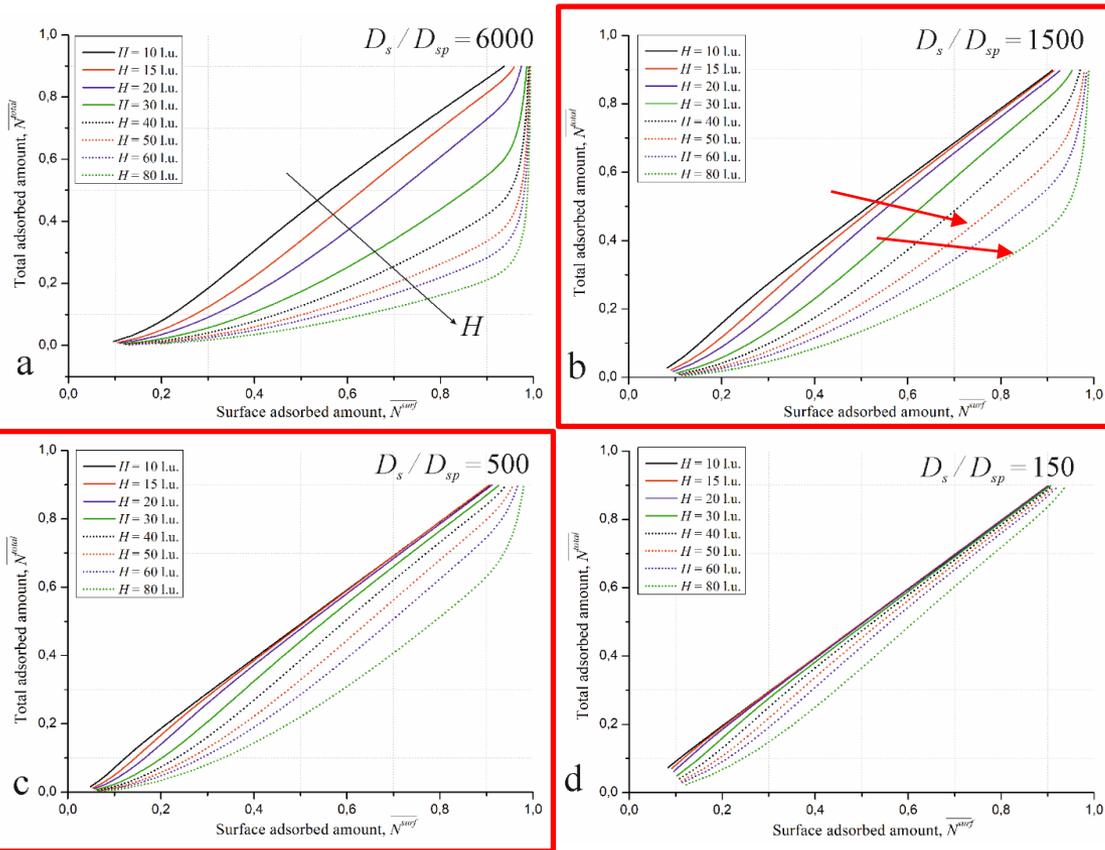
Интенсивность внутренней адсорбции определяется интенсивностью поверхностной адсорбции

Измельчение частиц способствует замедлению поверхностной динамической адсорбции



Соотношение между количеством вещества, адсорбированным на внешней поверхности частиц и в области их внутреннего пространства

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}

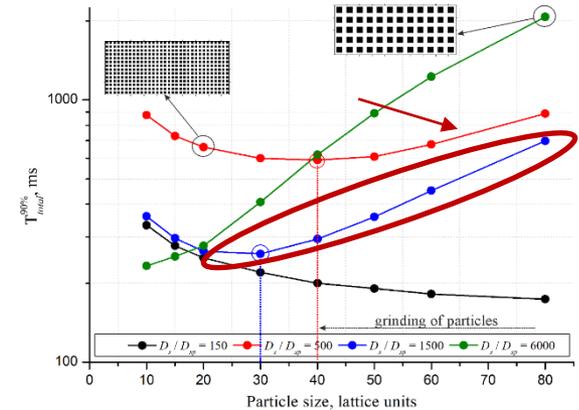


При увеличении размера частиц $H > 30$ l.u.

$$\overline{N^{total}} < \overline{N^{surf}} \text{ и } \overline{N^{total}} \ll \overline{N^{surf}}$$

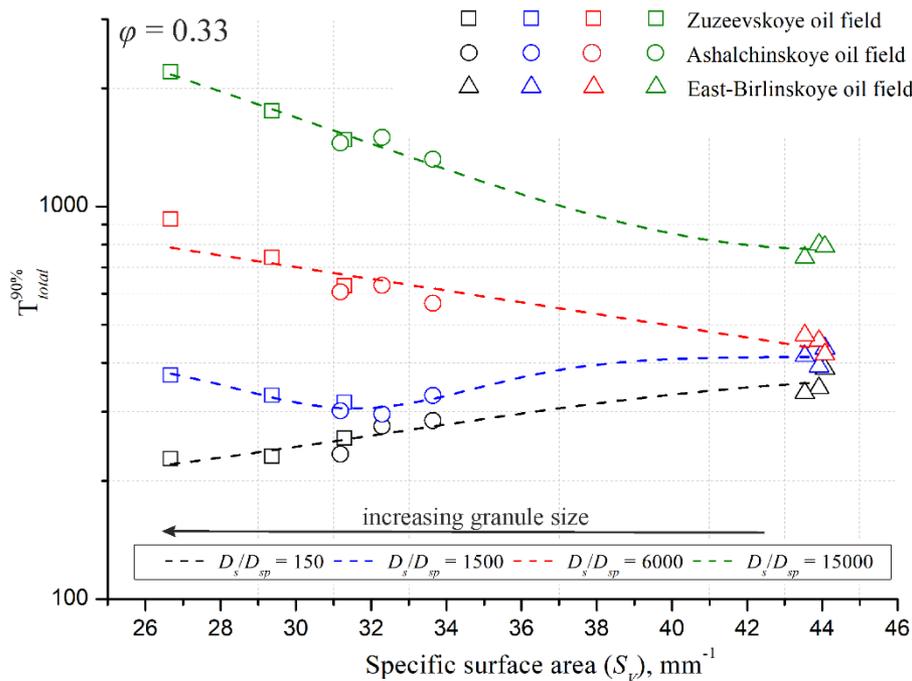


Увеличение размера частиц способствует замедлению внутренней адсорбции

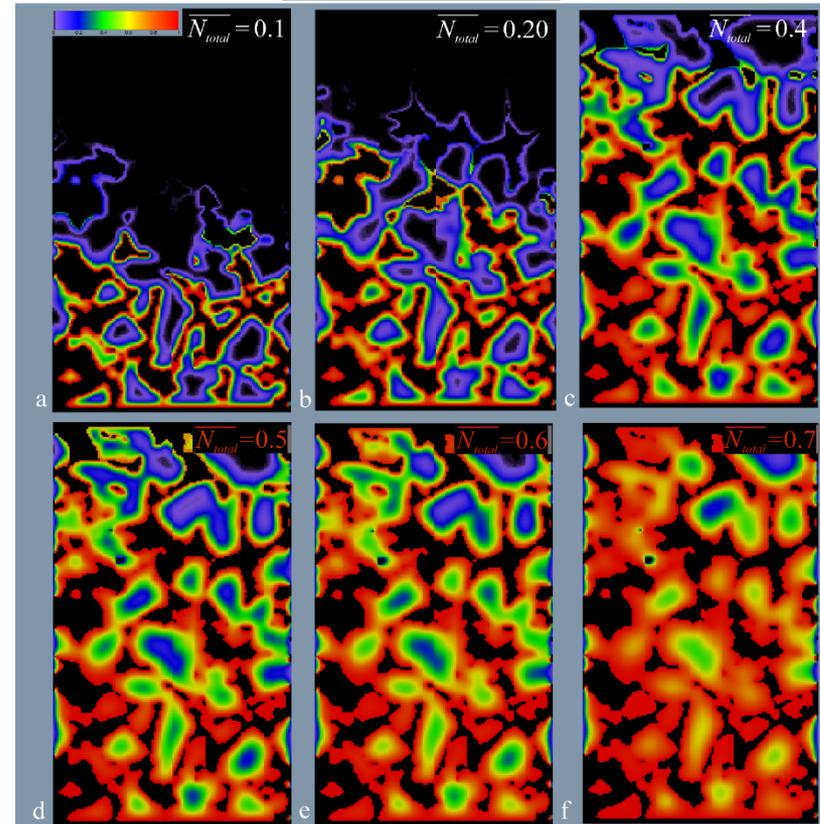


Соотношение между количеством вещества, адсорбированным на внешней поверхности частиц и в области их внутреннего пространства

Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции при различных соотношениях D_s / D_{sp}



Результаты, полученные на синтетических цифровых ядрах, верифицированы на природных моделях



Эволюция распределения полимера в частицах песчанника из Восточно-Бирлинского месторождения при $D_s / D_{sp} = 15000$

Спасибо за внимание!

