

# 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**

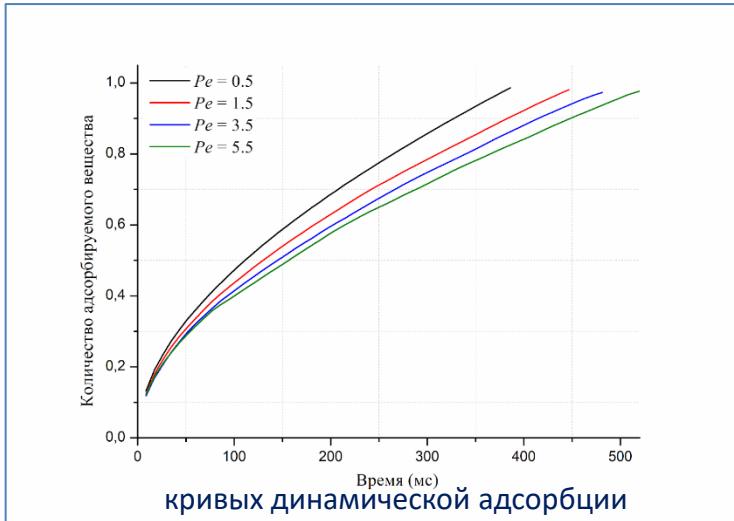
**Закиров Тимур Рустамович**

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

[tirzakirov@kpfu.ru](mailto: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 ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ), 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;

$\mu$  – 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,

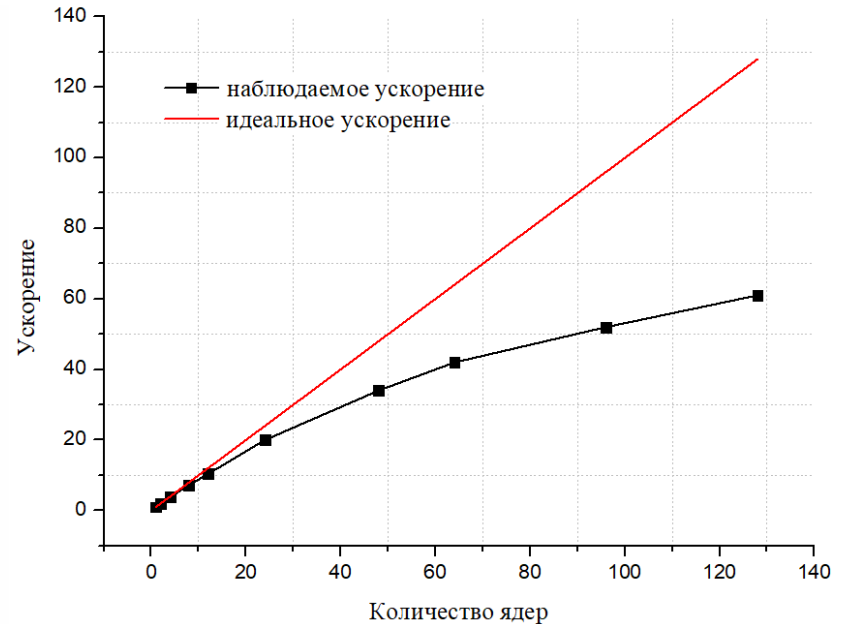
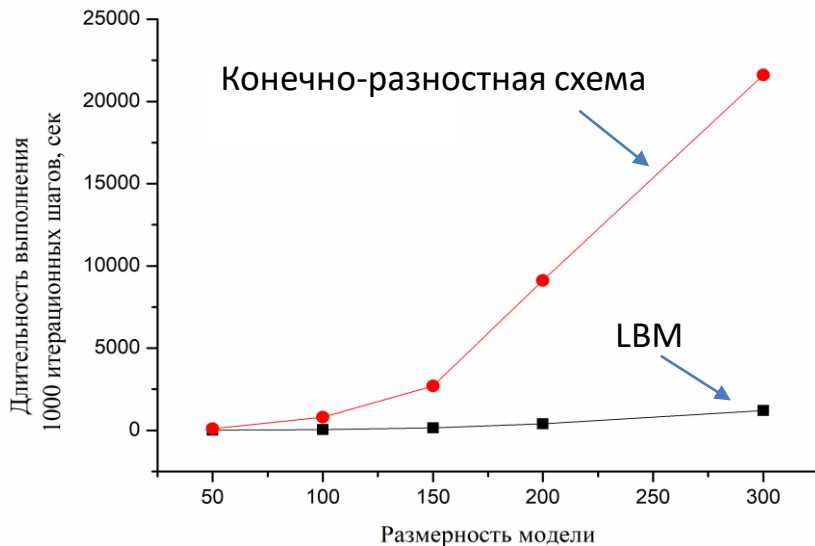
адсорбирующегося на внутренней

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**

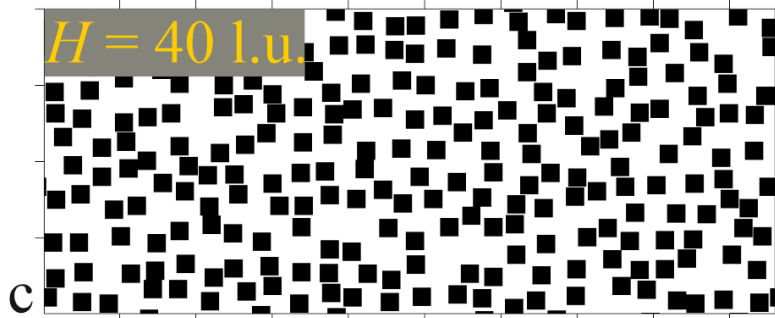
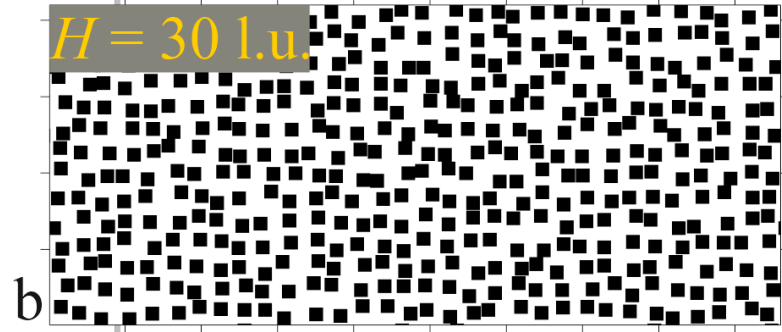
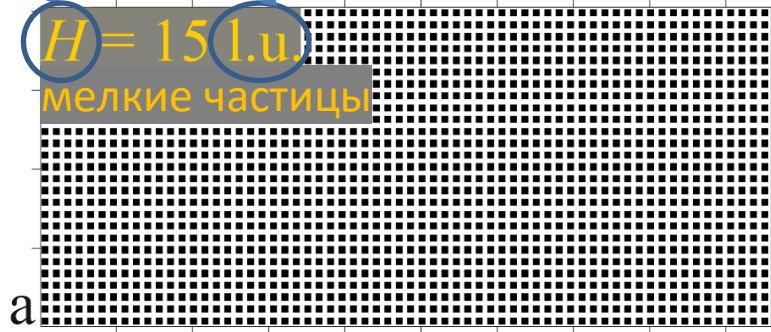
Двухмерные искусственно сгенерированные модели

размер частицы

lattice units – ячейки

$N = 15$  l.u.

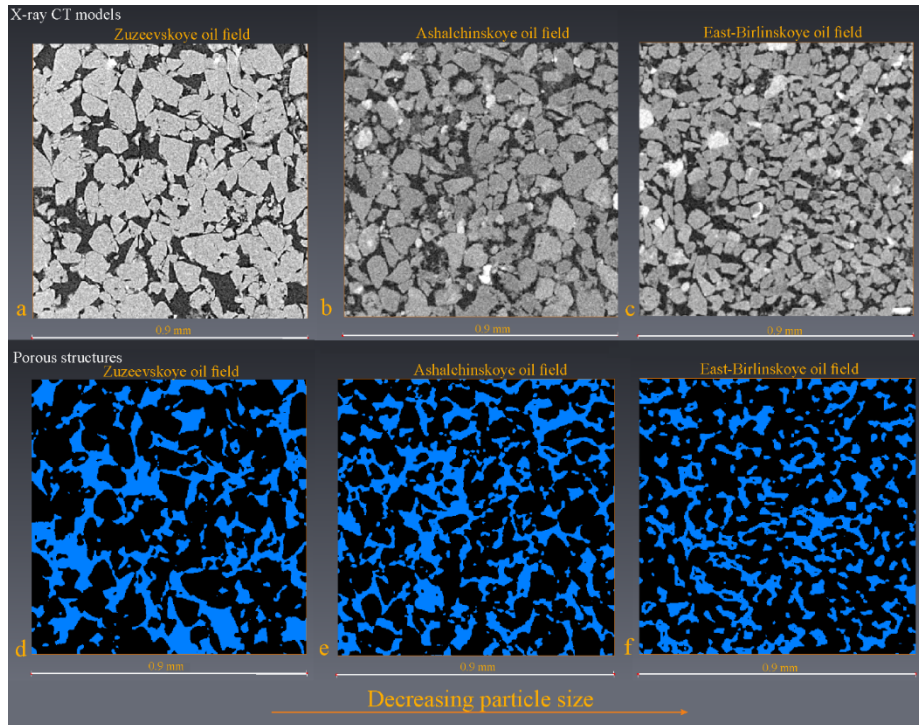
мелкие частицы



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

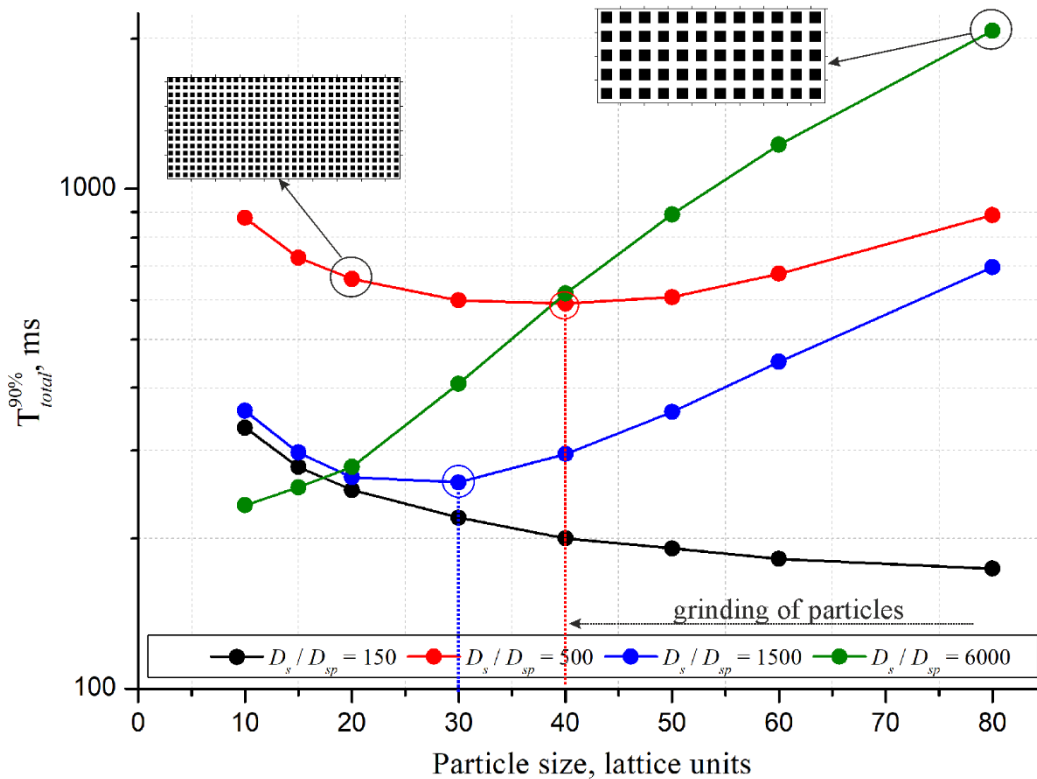


| Происхождение песчаника   | Разрешение модели, мкм | пористость, отн. ед. | Удельная поверхность пор ( $S_V$ ), $\text{мм}^{-1}$ | Абсолютная проницаемость ( $k_{xx}$ ), $\text{мкм}^2$ |
|---------------------------|------------------------|----------------------|--|---|
| Zuzeevskoye oil field     | 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 $D_s / D_{sp}$



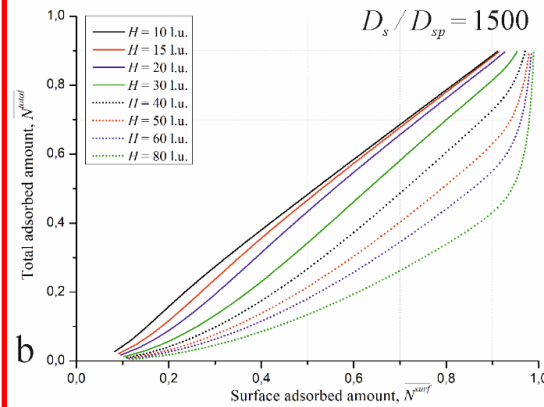
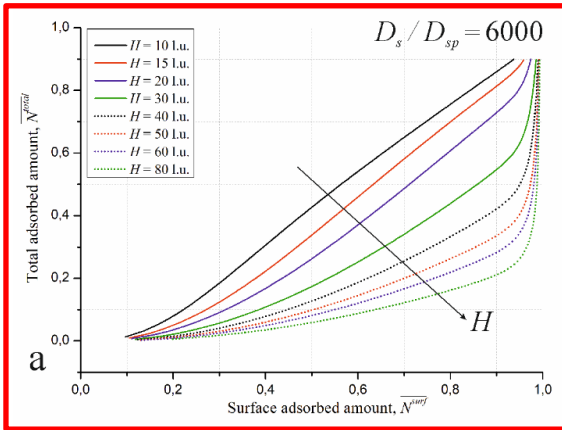
### Обозначения

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

### Закономерности

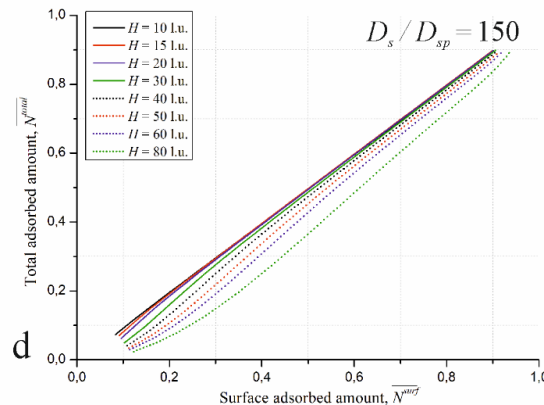
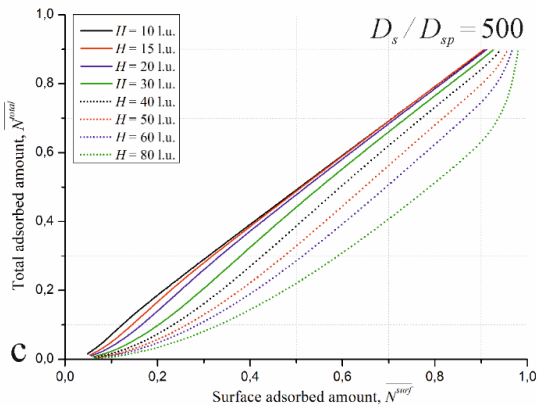
1. Высокое  $D_s / D_{sp} = 6000$  - измельчение частиц способствует интенсификации динамической адсорбции (**ожидаемый эффект**);
2. Низкое  $D_s / D_{sp} = 150$  - измельчение частиц способствует замедлению динамической адсорбции (**обратный эффект!!!**);
3. Средние  $D_s / D_{sp} = 500$  и  $1500$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

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



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

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

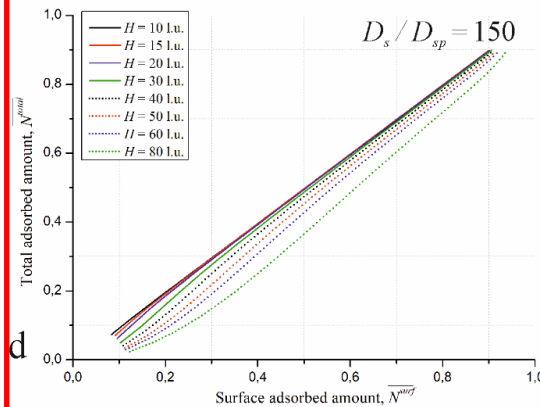
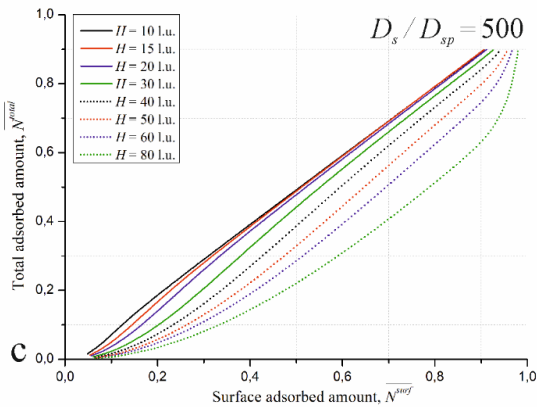
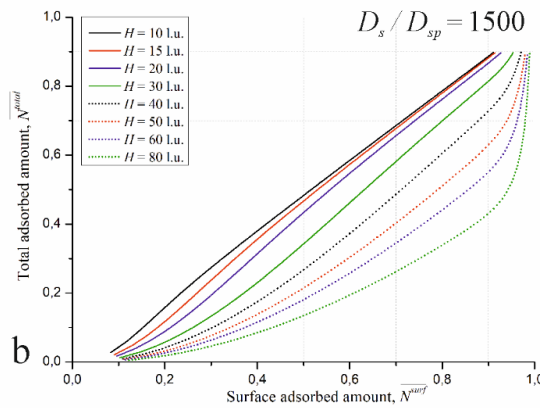
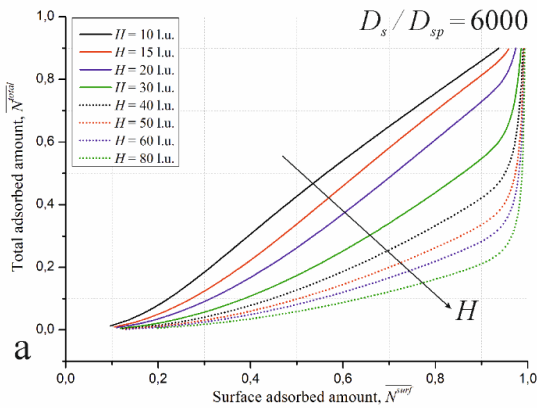


**Увеличение размера частиц способствует замедлению внутренней адсорбции (ожидаемый эффект)**

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 – ( $\overline{N^{surf}}$ )

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

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

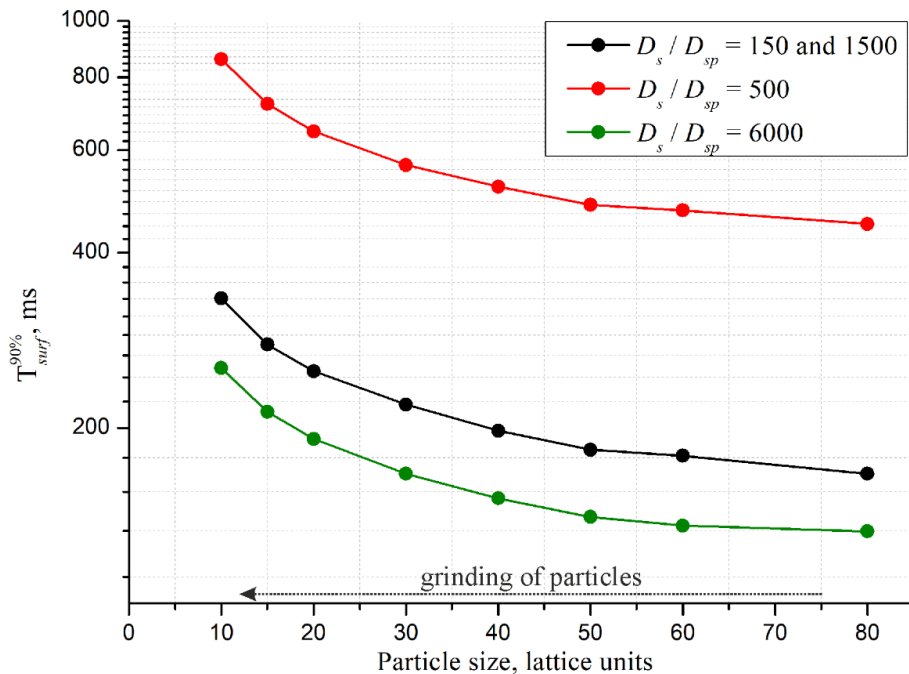
Интенсивности поверхностной и внутренней адсорбции практически совпадают независимо от размера частиц

↓

**Интенсивность внутренней адсорбции определяется интенсивностью поверхностной адсорбции**

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 $D_s / D_{sp}$

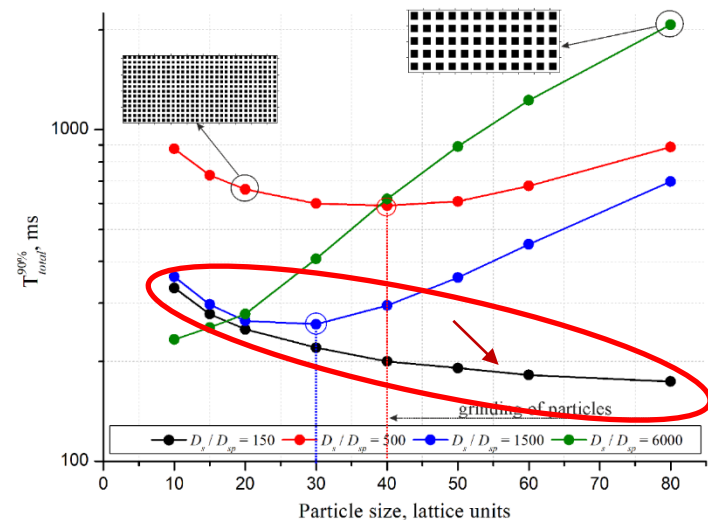


Влияние размера частиц на скорость динамической адсорбции на поверхности частиц

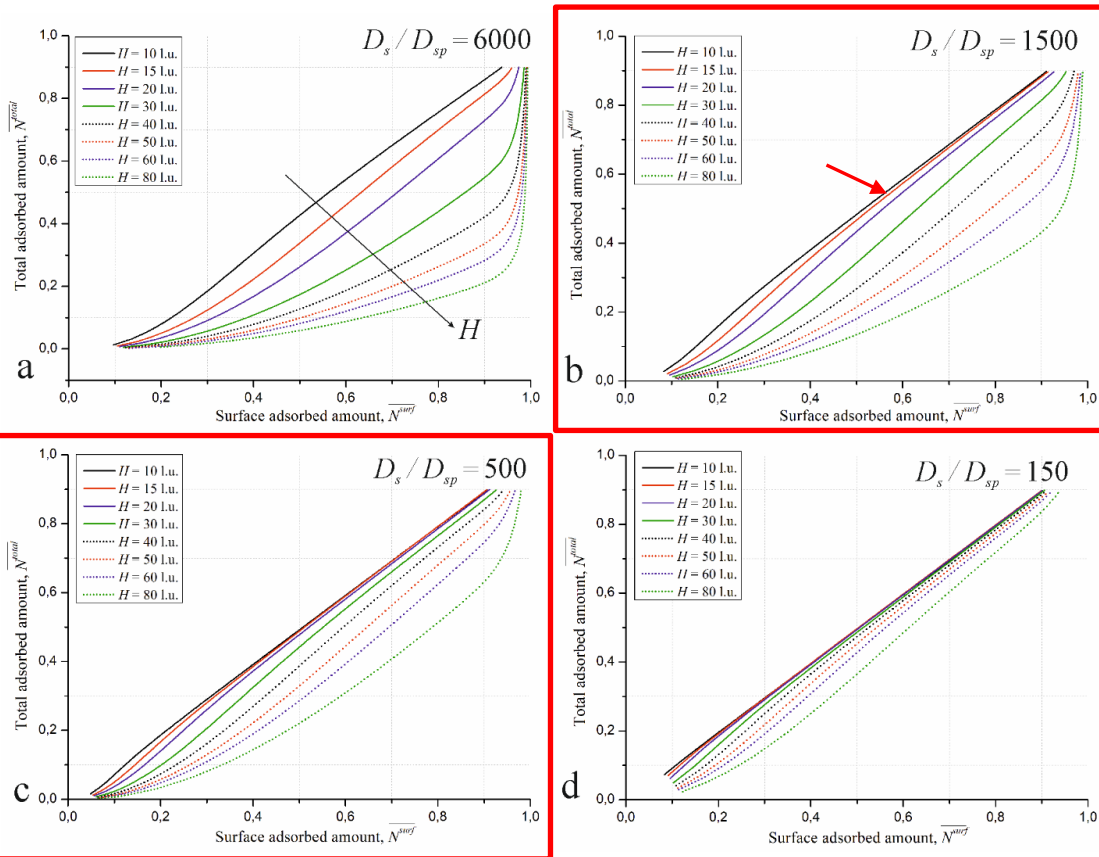
Обозначения

$D_s$  - 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 $D_s / D_{sp}$

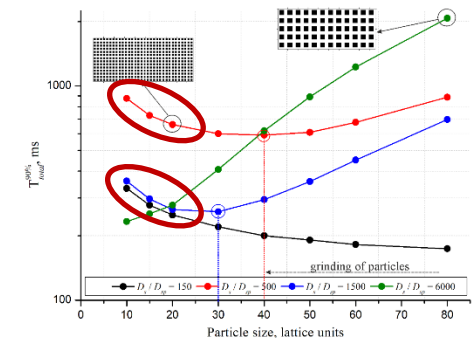


При малых размерах частиц  $H < 30$  l.u.

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

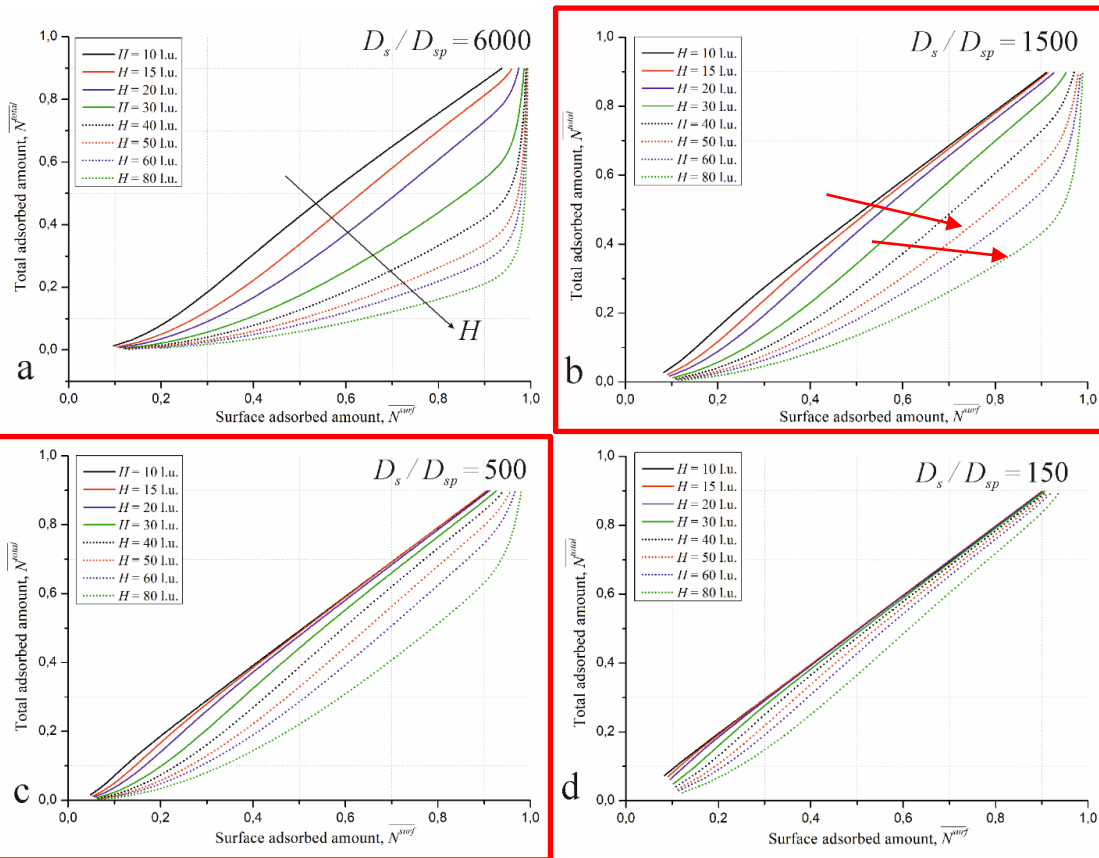
Интенсивность внутренней адсорбции определяется интенсивностью поверхностной адсорбции

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 $D_s / D_{sp}$

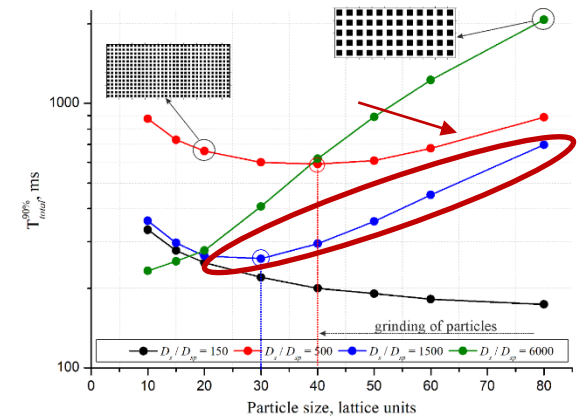


При увеличении размера частиц  $H > 30$  l.u.

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

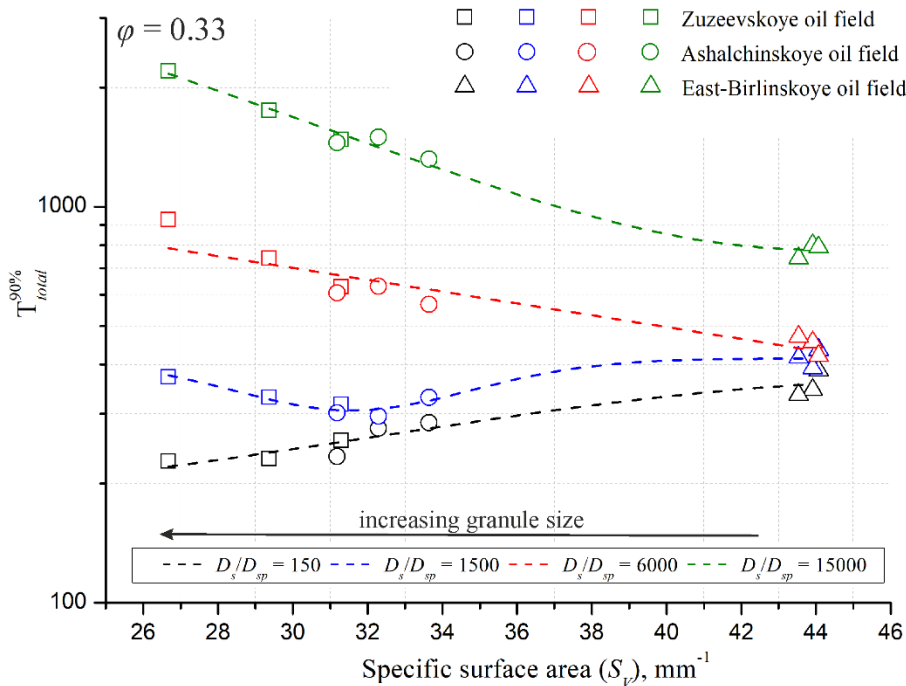


**Увеличение размера частиц способствует замедлению внутренней адсорбции**

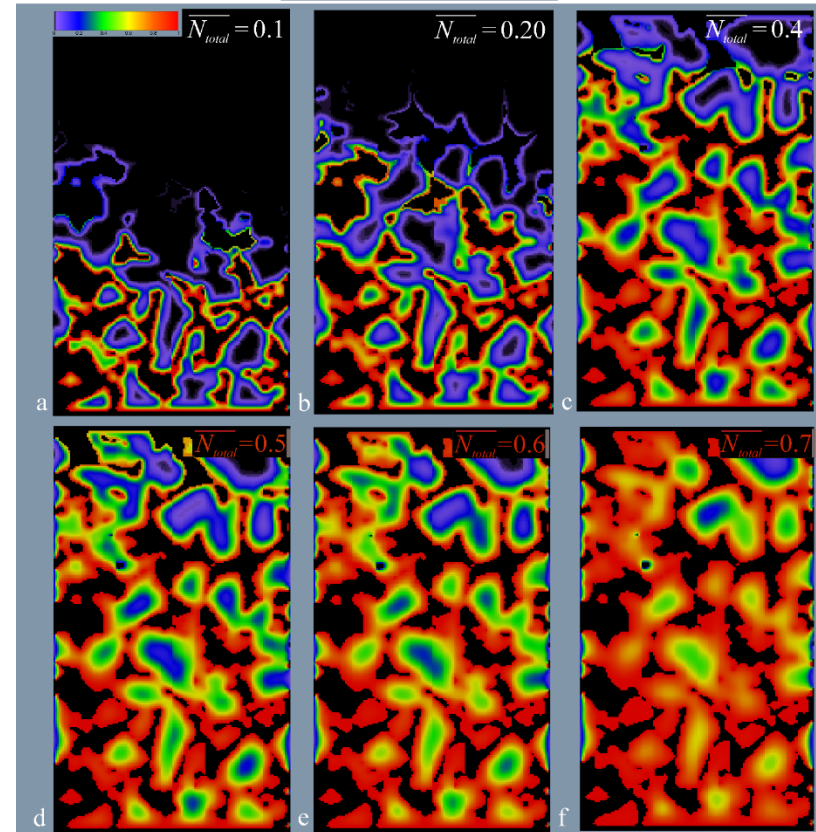


Соотношение между количеством вещества, адсорбированным на внешней поверхности частиц и в области их внутреннего пространства

## 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!

