М.Н. Овчинников
Казанский государственный университет
Marat.Ovchinnikov@ksu.ru

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИИ

Методами молекулярной динамики рассматривается процесс нестационарной фильтрации жидкости в модельной двумерной пористой системе. Показано существование эффекта запаздывания между изменением градиента концентрации частиц жидкости и скоростью фильтрационного потока, что является предпосылкой для обоснования феноменологических релаксационных теорий нестационарной фильтрации.

Введение

Целью данного исследования является определение соотношения между скоростью фильтрации жидкости в пористой среде и градиентом давления. Для стационарных фильтрационных потоков оно известно как закон Дарси:

$$\overline{W} = -\frac{k}{\mu}\nabla p, \tag{1}$$

где $\overline{W}$ – скорость фильтрации, p – давление, k – проницаемость среды, μ – вязкость жидкости. А как будет выглядеть ситуация для нестационарных потоков? Ответ на этот вопрос актуален как для интерпретации результатов натурных исследований нестационарными гидродинамическими методами насыщенных жидкостями пористых пластов, так и при анализе фильтрации жидкостей в мезоскопических системах.

Ряд исследователей (Христианович, 2000; Молокович и др., 1980) для описания нестационарных потоков используют феноменологические модели фильтрации с уравнением эволюции в виде:

$$\overline{W}\left(\overline{x},t\right) + \tau\frac{\partial \overline{W}\left(\overline{x},t\right)}{\partial t} = -\frac{k}{\mu}\nabla p\left(\overline{x},t\right), \tag{2}$$

где введен локально-неравновесный член релаксационного типа с характерным временем релаксации τ (Соболев, 1997). В данной же работе процесс рассматривается на мезоскопическом уровне, путем моделирования движения тысяч частиц жидкости, взаимодействующих с частицами модельного твердого тела.

Модель

Исследуемая нами система представляла собой прямоугольный «ящик», состоящий из трех отсеков. На границах этого ящика располагались жестко зафиксированные частицы. Отсек II (центральный) представлял собой, собственно, модель двумерной пористой среды, в которой размещались ячейки пористого скелета и поровые ячейки с частицами жидкости. Пример нескольких таких ячеек, располагающихся на границе между первым и вторым отсеками, показан на рис.1. Черным цветом снизу и сверху показаны непроницаемые границы. Точки в пределах голубых ячеек (поровых каналов) показывают местоположение частиц жидкости, темные прямоугольники обозначают элементы пористого скелета. Первый и третий отсеки заполнены только жидкостью. Отсек III соприкасается, с одной стороны, с пористой средой (отсеком II), а с противоположной от него стороны находилась жесткая стенка. Первый же отсек, с одной стороны, также соприкасается с пористой средой, а с другой – с подвижным поршнем. Поверхность поршня представляет собой непроницаемую для частиц жидкости границу. Движение поршня приводит к сокращению объема первого отсека, занятого частицами жидкости, и повышению концентрации частиц в нем, что, в свою очередь, увеличивает концентрацию частиц жидкости в пористом отсеке и вызывает их перемещение – фильтрацию.

Взаимодействие частиц жидкости между собой осуществлялось посредством потенциала вида

$$U = \alpha\,(\mathrm{r} - \rho)^2, \tag{3}$$

где параметр ρ принимал обычно значение 1, а параметр α изменялся в пределах от 0 до 100 (обычно α =72). Частицы пористого скелета взаимодействовали с частицами жидкости посредством потенциала Леннарда-Джонса

$$U = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right), \tag{4}$$

где r – расстояние между частицами, а параметры потенциала (4) принимались равными ε =1, σ =$2^{-1/6}$. Массы всех частиц принимались равными 1.

В пределах пористого отсека II мы выделяли прямоугольные подсистемы (пример которой показан на рис. 1 красным цветом) с площадью $\Delta x^k \cdot h$, где Δx^k – ширина k-го прямоугольника в направлении x, которое совпадает с направлением движения поршня (показано стрелками) и, в соответствии с геометрией задачи, направлением фильтрационного потока, h – высота прямоугольной подсистемы. Обычно Δx^k включало в себя от 1 до 8 фильтрационных ячеек. Сами ячейки представляли собой квадратные прямоугольники с размерами от 2x2 до 10x10.

При молекулярно-динамическом моделировании методом частиц (Хокни и др., 1987; Хеерман, 1990), в результате решения уравнений Гамильтона, мы вычисляем в любой момент времени координаты каждой i-ой частицы и компоненты ее скорости (v_{xi},v_{yi}). Временной шаг интегрирования был равен $2\cdot 10^{-3}$. Далее мы рассчитываем $V_x^k = \sum_{i=1}^{N} v_{xi} \Big/ N_t^k$ – среднюю скорость частиц жидкости в k-ой подсистеме $\Delta x^k \cdot h$, где N_t^k – полное число частиц в выбранном интервале $\Delta x^k \cdot h$ в момент времени t (обычно $N_0^k \sim 10^2$ в начальный момент времени t=0). V_x^k принимается далее за скорость фильтрационного потока в применяемом нами мезоскопическом подходе. Отметим, что всюду в данном изложении используется истинная скорость фильтрационного потока V_x, а не применяемая, зачастую, для удобства фиктивная скорость фильтрации W_x=$V_x m$, где m – пористость блока II.

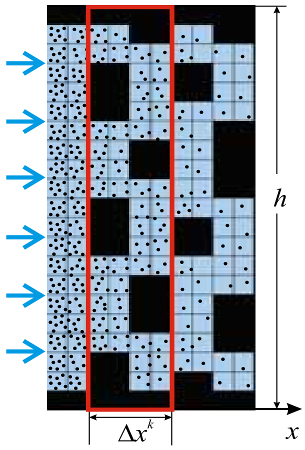

Рис. 1. Пример модельной пористой среды

Аналогом давления выступала концентрация частиц ρ^k (площадная плотность частиц жидкости) в каждом k-ом элементе $\Delta x^k \cdot h$ и вычислялась как $\rho^k = N_t^k / N_0^k$, где N_t^k – текущее число частиц в элементе $\Delta x^k \cdot h$, а N_0^k – начальное невозмущенное (нормировочное) число частиц. Градиент концентрации частиц (градиент "давления") вычислялся как $\nabla\rho^k = (\rho_{k+1} - \rho_{k-1})/(x_{k+1} - x_{k-1})$. Начальные значения координат частиц жидкости и их скоростей (импульсов) выбирались таким образом, чтобы суммарные значения компонент скоростей V_x^k, V_y^k в пределах каждой ячейки были равны нулю, также, как и моменты импульсов $\sum_i^{N_0^k} \bar{r}_i \times \bar{v}_i$, а суммарные значения кинетической и потенциальной энергии были бы одинаковы для каждой ячейки, что исключало возникновение «нефильтрационных» внутренних перетоков частиц между элементами системы в начальный момент времени. В процессе эволюции системы, по мере продвижения поршня, V_x^k – компонента приобретает ненулевое значение, компоненты же V_y^n колеблются вблизи нулевых значений.

Отметим, что в исследуемой системе движение поршня с постоянной скоростью $V_П$ не приводит к постоянному расходу жидкости на границе I и II отсеков: число частиц жидкости, пересекающих в единицу времени границу между отсеками, изменяется. Некоторое время такой расход равен нулю, затем возмущение концентрации, создаваемое в I блоке, достигает границы I и II блоков, далее расход непрерывно нарастает.

Результаты

Вычислительные эксперименты проводились нами для систем разных размеров, при различных значениях параметров потенциалов (3) и (4), различных скоростях движения поршня, создающего давление. Качественно, картина всюду была одинаковой. Так, на рис.2 показано изменение во времени концентрации частиц в системе с поровыми размерами ячеек 2x2 для прямоугольных участков, вбирающих в себя подсистемы $\Delta x^k \cdot h$, где Δx^k охватывает участок с координатами $0 \le x < 4$, $4 \le x < 8$, $8 \le x < 12$, $12 \le x < 16$. Мы видим, что рост концентрации частиц наблюдается, начиная с некоторого порогового момента $t_{пор} \sim 4$, когда возмущение концентрации частиц в отсеке I достигает границы с отсеком II.

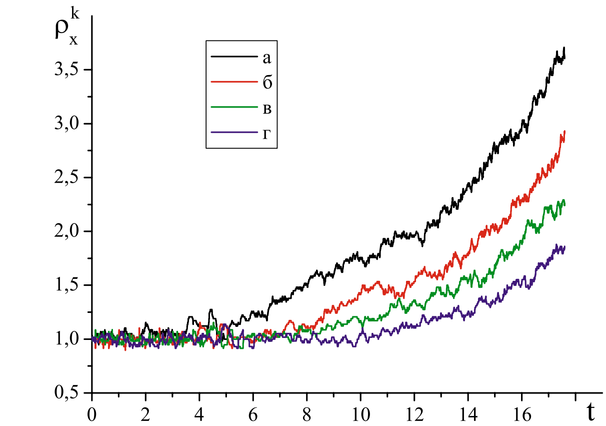

Рис. 2. Изменение во времени концентрации ρ_x^k для прямоугольных подсистем $\Delta x^k \cdot h$, где ширина прямоугольника Δx охватывает ячейки с координатами $0 \le x < 4$ (кривая а), $4 \le x < 8$ (б), $8 \le x < 12$ (в), $12 \le x < 16$ (г).

Аналогично выглядит (рис. 3) и картина для x-компонент средних скоростей V_x^k этих участков. Поначалу распространяется возмущение типа ударной волны с уменьшающейся амплитудой по мере распространения вглубь отсека II. Скорость распространения этой волны $V_{уд}^0 \sim 10$, что существенно больше скорости фильтрационного потока V_x^k.

Со временем устанавливается относительно стабильный фильтрационный поток, возникает распределение концентрации частиц, убывающее по мере удаления от границы раздела I и II блоков. Отметим, что по мере продвижения вглубь пористого образца ударные волны рассеиваются, и их амплитуда достаточно быстро спадает на расстояниях $L \sim 20$. В целом, наблюдаемая картина соответствует эффектам рассеяния упругих колебаний на неоднородностях среды.

Таким образом, в модельной пористой системе возникает чередование изменений концентраций и скоростей потоков, связанных друг с другом, при этом между изменениями этих величин в пределах выделенной ячейки пористого пространства возникает временная задержка между V_x^k и $\nabla\rho_x^k$. Это видно из рис. 4, несмотря на значительные флуктуации V_x^k и $\nabla\rho_x^k$, что связано с относительной малостью числа частиц и малостью размеров исследуемой системы. При этом можно выделить мелкомасштабные флук-

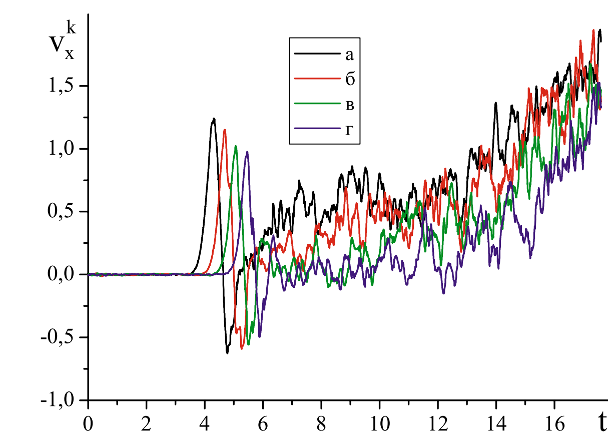

Рис. 3. Изменение во времени скорости V_x^k для прямоугольных подсистем $\Delta x^k \cdot h$, где ширина прямоугольника Δx охватывает ячейки с координатами $0 \le x < 4$ (а), $4 \le x < 8$ (б), $8 \le x < 12$ (в), $12 \le x < 16$ (г).

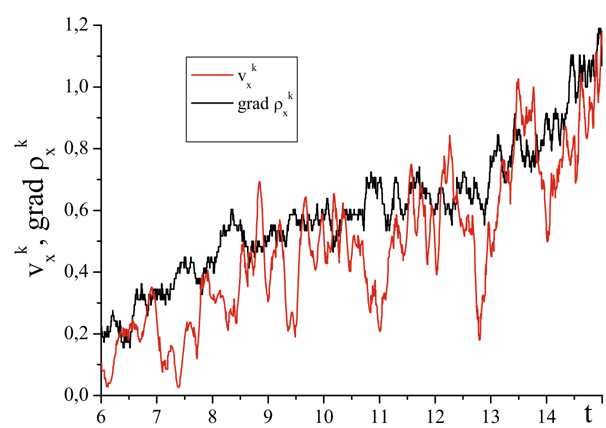

Рис. 4. Временная зависимость скорости фильтрации V_x^k и градиента концентрации $\nabla\rho_x^k$ для прямоугольной подсистемы при $0 \le x < 4$.

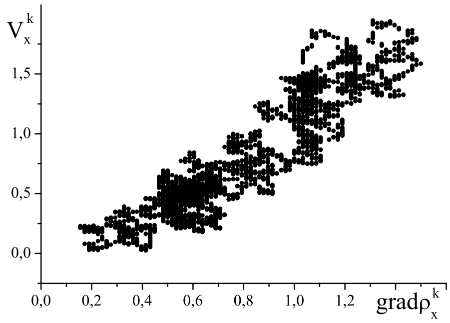

Рис. 5. Зависимость скорости фильтрации от градиента концентрации для прямоугольной подсистемы $\Delta x^k \cdot h$ при $4 \le x < 8$.

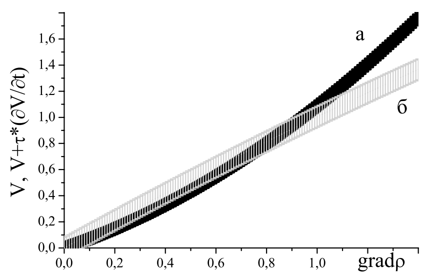

Рис. 7. Линии трендов зависимостей $V\leftrightarrow\nabla\rho$ (кривая а) и $V+\tau^*\dfrac{\partial V}{\partial t}\leftrightarrow\nabla\rho$ при $\tau^*=0.3$ (б).

туации рассматриваемых величин с резкими изменениями их значений в диапазоне времен $\Delta t_s^f < 10^{-2}$ и крупномасштабные флуктуации, охватывающие значительные изменения рассматриваемых величин на временах $\Delta t_b^f \sim 0.1-0.5$.

На рисунке 5 показаны корреляции значений расчетных скоростей V_x^k в определенные моменты времени и соответствующих этим моментам времени значений градиентов концентрации $\nabla\rho_x^k$. Мы видим, что, хотя и с учетом довольно больших разбросов значений вследствие флуктуаций, бульшим значениям градиентов соответствуют большие значения скоростей потоков, и можно предположить, что после статистического усреднения по значительному количеству вычислительных экспериментов будет получена зависимость между V_x^k и $\nabla\rho_x^k$, близкая к линейной, соответствующей закону Дарси.

Рассмотрим подробнее временные корреляции между значениями скоростей V_x^k и градиентами концентрации $\nabla\rho_x^k$ для прямоугольной подсистемы $\Delta x^k \cdot h$ при $4 \le x < 8$. Для этого рассчитаем корреляционные функции следующего вида:

$$C(\tau_c) = \frac{1}{N_M} < \nabla\hat{\rho}_x^k(t), \hat{V}_x^k(t+\tau_c) >, \qquad (5)$$

где $\nabla\hat{\rho}_x^k(t) = \nabla\rho_x^k(t) - \overline{\nabla\rho_x^k}(t), \hat{V}_x^k(t) = V_x^k(t) - \overline{V_x^k}(t), N_M$ – нормировочный множитель, угловые скобки означают усреднение по времени t, а за средние значения величин градиентов плотностей $\overline{\nabla\rho_x^k}(t)$ и скоростей $\overline{V_x^k}(t)$ в момент времени t принимаются значения линейных трендов этих величин, построенных на протяжении временных интервалов $\Delta t_T \sim 1$. Мы видим, что максимальная корреляция наблюдается на временах $\tau_c \sim 0.2-0.4$.

Аналогичная картина наблюдается и для уменьшенного участка Δx^l, охватывающего прямоугольную подсистему с координатами $4 \le x < 6$. Максимум корреляций наблюдается при $\tau_c \sim 0.3$. Данное значение интервала времени можно принять за характерное время релаксационного процесса τ^*.

Заметим, что в макроскопических системах могут существовать более острые пики корреляционных функций при условии, что образующие их подсистемы мезоскопического уровня имеют идентичные корреляционные функции. В общем же случае, очевидно, следует говорить о спектре времен релаксации.

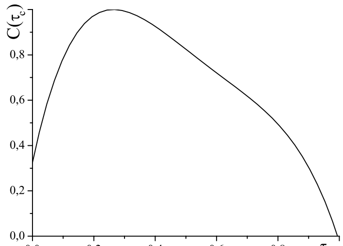

Рис. 6. Корреляционная функция $C(\tau_c)$.

Рассмотрение корреляционных функций, аналогичных (5), но для компонент скоростей фильтрационного потока, измеряемых в соседних прямоугольных подсистемах, показывает, что такие корреляции существуют на расстояниях $L_c < 10$ и исчезают на больших расстояниях.

Теперь вернемся к рис. 5 и построим новый график не только в переменных $V\leftrightarrow\nabla\rho$, но и в переменных $V+\tau^*\dfrac{\partial V}{\partial t}\leftrightarrow\nabla\rho$ при $\tau^*=0.3$. Производная $\dfrac{\partial V(x,t)}{\partial t}$ легко вычисляется по известным значениям $V(x,t)$. Чтобы полученная картина не выглядела как хаотический набор точек, подобно рис. 5, изобразим на рисунке только линии трендов для зависимостей $V\leftrightarrow\nabla\rho$ и $V+\tau^*\dfrac{\partial V}{\partial t}\leftrightarrow\nabla\rho$ (рис. 7). Ширина линий тренда, показанных на рисунке, пропорциональна величине флуктуаций V и $V+\tau^*\dfrac{\partial V}{\partial t}$ для фиксированных значений $\nabla\rho$.

Мы видим, что в новых координатах корреляционная зависимость $\nabla\rho\leftrightarrow V+\tau^*\dfrac{\partial V}{\partial t}$ для случая $\tau^*=0.3$ значительно более близка к линейной, нежели для случая $\tau^*=0$, особенно при больших значениях $\nabla\rho$. Данное обстоятельство, на наш взгляд, может служить дополнительным подтверждением необходимости учета релаксационных процессов в условиях нестационарной фильтрации, по крайней мере, на малых временах наблюдения в мезоскопических системах.

Литература

Христианович С.А. *Избранные работы.* М.: изд-во МФТИ, 2000.

Молокович Ю.М., Непримеров Н.Н., Пикуза В.И., Штанин А.В. *Релаксационная фильтрация.* Казань: изд-во Казанского ун-та, 1980.

Соболев С.Л. Локально-неравновесные процессы модели процессов переноса. *Успехи физических наук.* 167. 1997. №10. 1095-1106.

Хокни Р., Иствуд Дж. Ч*исленное моделирование методом частиц.* М.: Мир, 1987.

Хеерман Д.В. *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.* М.: Наука, 1990.