

4 - Молекулярная физика, физика жидкостей и газов

Бандо Роман Дмитриевич, аспирант
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Численное исследование морфологической устойчивости фазовой границы при вытеснении одной жидкости другой жидкостью
Мартюшев Леонид Михайлович, д.ф.-м.н.
e-mail: romanbando@gmail.com стр. 164

Гатиятуллин Данияр Тагирович, магистрант 2 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический
Применение ударных волн для повышения октанового числа прямогонного бензина
Шайхитдинов Рамиль Зайниевич, д.ф.-м.н.
e-mail: d9279315694@mail.ru стр. 165

Каргаполов Александр Сергеевич, 3 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Расчет разделительной мощности прамоточной центрифуги для обогащения бора по изотопу 10B
Токманцев Валерий Иванович, д.т.н.
e-mail: kargapolov1541@gmail.com стр. 166

Карпей Татьяна Викторовна, 3 курс
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический институт
Микрофлюидное устройство для исследования кристаллообразования карбоната кальция в водном растворе солей
Саметов Сергей Павлович, к.ф.-м.н.
e-mail: tkarpey@mail.ru стр. 167

Кузнецов Максим Александрович, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Численное моделирование течения газа в каналах с учетом микроструктуры поверхности
Токманцев Валерий Иванович, д.т.н.
e-mail: maxbsp@mail.ru стр. 168

Панасенко Анна Сергеевна, 4 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, институт естественных наук и математики, физический
Капиллярная постоянная раствора метан-водород
Байдаков Владимир Георгиевич, д.ф.-м.н.
e-mail: Elf13274@gmail.com стр. 169

Петрова-Богданова Ольга Олеговна, аспирант
Новосибирск, Новосибирский государственный технический университет, энергетики
Топология поверхностей скоростей нуклеации над фазовой диаграммой бинарных систем с эвтектическими линиями pm и wq
Анисимов Михаил Прокопьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: petrovabogdanovao@mail.ru стр. 170

Проценко Ксения Романовна, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Институт теплофизики УрО РАН
Расчет параметров межфазной границы кристалл-газ на линии сублимации методом молекулярно-динамического моделирования
Байдаков Владимир Георгиевич, д.ф.-м.н.
e-mail: protcenko.kseniya@gmail.com стр. 171

Хисамов Артур Альфирович, магистрант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический институт
Моделирование нестационарного притока жидкости из пласта в скважину через трещину гидроразрыва
Хабибуллин Ильдус Лутфурахманович, д.ф.-м.н.
e-mail: khisamovartur@list.ru стр. 172

Численное исследование морфологической устойчивости фазовой границы при вытеснении одной жидкости другой жидкостью

Бандо Роман Дмитриевич

Червонцева Евгения Александровна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Мартюшев Леонид Михайлович

romanbando@gmail.com

В настоящей работе исследуется морфологическая устойчивость границы при радиальном вытеснении в ячейке Хеле-Шоу [1] жидкости большей вязкости жидкостью с меньшей вязкостью.

Ячейка Хеле-Шоу представляет собой две плоскопараллельные пластины, находящиеся на небольшом расстоянии друг от друга, пространство между ними заполнено жидкостью большей вязкости. Через отверстие в центре нижней пластины подается жидкость меньшей вязкости, вытесняя жидкость, заполняющую пространство между пластинами.

Рассматривается медленное квазистационарное вытеснение одной жидкости другой в ячейке Хеле-Шоу (когда время вытеснения много больше времени установления распределения давления). Обе жидкости считаются несмешивающимися и несжимаемыми. Движение рассматривается квазидвумерным, все характеристики потока усреднены по толщине ячейки. Учитывается размер внешней границы ячейки и радиус отверстия, через которое поступает вытесняющая жидкость.

Математическая постановка задачи следующая:

$$\Delta p_1 = 0, \quad (1)$$

$$\Delta p_2 = 0, \quad (2)$$

$$\vec{V}_1 \vec{n} \Big|_{R_0} = \frac{Q}{2\pi R_0}, \quad (3)$$

$$\vec{V}_1 \vec{n} \Big|_{R_{sp}} = \vec{V}_2 \vec{n} \Big|_{R_{sp}}, \quad (4)$$

$$p_1 - p_2 \Big|_{R_{sp}} = \frac{2\varepsilon}{b} + K\varepsilon, \quad (5)$$

$$p_2 \Big|_{R_{\infty}} = 0, \quad (6)$$

где p_i – давление в жидкости ($i=1, 2$ для вытесняющей либо для вытесняемой жидкости, соответственно), \vec{V}_i – скорость движения жидкости, \vec{n} – нормаль к поверхности, R_0 – радиус отверстия, через которое поступает вытесняющая жидкость с постоянным расходом (Q , мм²/с), R_{∞} – размер ячейки Хеле-Шоу, занятой вытесняемой жидкостью, R_{sp} – уравнение границы раздела двух жидкостей, K – кривизна поверхности раздела, ε – поверхностное натяжение, b – расстояние между пластинами.

Уравнения (1-2) являются следствием закона Дарси и условия непрерывности потока. Граничные условия (3) определяет вытеснение жидкости при постоянном расходе поступающей жидкости. Граничное условие (4) представляет собой условие непрерывности скорости движения жидкостей на границе раздела. Формула (5) – условие Лапласа, задающее скачок давления на искривленной границе двух жидких фаз. Давление вытесняемой жидкости на внешней границе ячейки считается постоянным (6) и для удобства расчета выбрано нулевым (в связи с этим можно считать некими избыточными давлениями по сравнению с внешним).

Исследование морфологической устойчивости – традиционный линейный анализ позволяет определить лишь устойчивость по отношению к бесконечно малым возмущениям и не дает информации о том, будет ли переход до- или критический, если возмущение будет не бесконечно малым [1]. Так как в реальных условиях всегда будут присутствовать возмущения различной амплитуды, то в программном комплексе COMSOL Multiphysics была создана программа по численному решению (1-6) и исследованию морфологической устойчивости границы раздела двух жидкостей при произвольных амплитудах. В результате получены зависимости критического размера устойчивости от амплитуды возмущения, при различных модах возмущения, Q и b .

Работа частично выполнена при поддержке РФФИ (№ 16-31-00255 мол_a).

Список публикаций:

[1] *Martyushev L.M., Birzina A.I. Kononov M.S. Sergeev A.P. Experimental investigation of the onset of instability in a radial Hele-Shaw cell // Physical Review E 80(6) (2009) 066306*

Применение ударных волн для повышения октанового числа прямогонного бензина

Гатиятуллин Данияр Тагирович

Сагидуллин Рамиль Камильевич

Башкирский государственный университет

Шайхитдинов Рамиль Зайниевич д.ф.-м.н.

d9279315694@mail.ru

Известно, что после обычной перегонки нефти получают бензин прямой перегонки, октановое число (ОЧ) которого не превышает 60 единиц. Поэтому нефть подвергают специальной переработке в присутствии катализаторов. Существуют два возможных способа переработки прямогонного бензина. Первый способ называется «каталитический крекинг». Метод заключается в нагреве нефти или ее тяжелых фракций до 510–540°C, после чего молярная масса исходных алканов уменьшается; из них получают алкены и ароматические углеводороды. При этом удается превратить исходное сырье в бензин с выходом до 60%. Октановое число бензина каталитического крекинга составляет 91–92 единиц. В бензине, полученном каталитическим крекингом, велика доля ароматических углеводородов, а также алкенов, которые со временем полимеризуются, поэтому такой бензин не может долго храниться. Второй способ называется «каталитический риформинг» – бензины прямой перегонки нагревают до 480–520°C при повышенном атмосферном давлении примерно до 35 атмосфер. На выходе получают 74% бензина марки АИ-95. Как видно, оба метода имеют низкий объемный выход необходимого продукта – бензина. Поэтому для получения высокооктановых бензинов зачастую используют специальные добавки. Самая эффективная из таких добавок – тетраэтилсвинец $Pb(C_2H_5)_4$. Однако он очень ядовит, к тому же приводит к быстрому выходу из строя специальные каталитические дожигатели топлива. Наименее вредная добавка к бензину – метилтретбутиловый эфир $CH_3-O-C(CH_3)_3$, имеющий октановое число 117. Этот эфир широко применяется в Европе и в России. Его доля в бензине велика (5–12%). Требуется массовое производство данного продукта. Перспективным считается использование в качестве моторного топлива этилового спирта (октановое число 105), однако он дороже бензина. Основным недостатком данного метода добавок является то, что из-за испарения присадок ОЧ бензина со временем сильно уменьшается.

По этой причине представляет большой практический и научный интерес разработка новых энергоэкономичных способов физического воздействия на бензин с целью получения высокооктанового бензина, со стабильными временными параметрами. Также существуют нетрадиционные способы увлечения ОЧ, такие как ультразвуковые и кавитационный. Эти упомянутые способы требуют значительных энергозатрат на производство единицы продукции, что не ведет к повышению их конкурентоспособности по сравнению с традиционными методами. Кроме того они слабо контролируемы из-за ограниченной области воздействия в объеме, где происходит обработка.

Нами предлагается новый способ ударно-волнового воздействия на прямогонный бензин. Импульсы разряда, возникающие в жидких средах, приводят к возникновению ударных волн давлением до 10^5 атмосфер. Проведенные расчеты показывают, что полученная энергия при известной крутизне и амплитуды ударных волн намного превышает энергии связи С-С и С-Н в молекулах углеводородов. Поэтому из-за разрыва этих связей происходит увеличение доли легких фракций в нефтепродуктах.

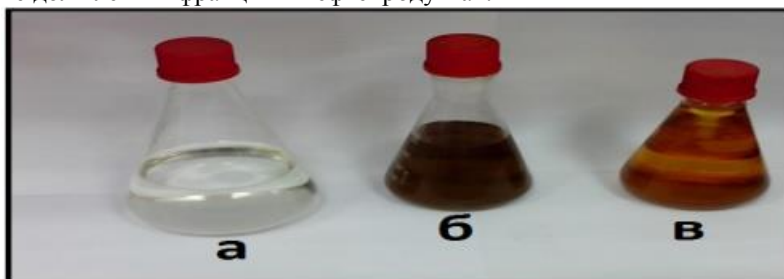


рис.1 Прямогонный бензин (а) до обработки, (б) сразу после обработки, (в) после фильтрации

Эксперименты проводились при различных режимах работы генератора импульсов; менялись мощность и время обработки. На рисунке приводятся фотографии образцов, полученных до (а) и после (б) обработки. Как видно, после обработки бензин темнеет. Результаты проведенных анализов показали, что это происходит за счет выделения углерода. Это обусловлено тем, что по мере уменьшения молярной массы углеводородов доля атомов углерода уменьшается. Поэтому при расщеплении молекул выделяется избыток углерода. После фильтрации образец становится прозрачным (в).

Эксперименты проводились при различных амплитудах ударных волн и длительностях обработки. Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о возможности применения ударных волн для повышения ОЧ бензина.

Расчет разделительной мощности прямоточной центрифуги для обогащения бора по изотопу ^{10}B

Каргаполов Александр Сергеевич
Уральский федеральный университет
Токманцев Валерий Иванович, д.т.н.
kargaplov1541@gmail.com

Для развития атомной энергетики необходим изотоп бора в ^{10}B (содержание в природном образце 19,2%) который, в частности, используется в качестве поглотителя нейтронов для реакторов БН-600 и БН-800, а в современной электронной промышленности при изготовлении радиационно-стойких полупроводников применяется изотоп ^{11}B . В России промышленное производство изотопов бора отсутствует.[1]

Одним из возможных способов разделения изотопов бора является известный метод центрифугирования в газовой фазе (молярная масса $M = 0.067$ г/моль, разность молярных масс изотопов $\Delta M = 0.001$ г/моль, диффузный параметр $\rho D = 2.2 \cdot 10^{-5}$ мкпз). Хотя при промышленном разделении изотопов урана в виде гексафторида урана используются противоточные центрифуги, но при разделении изотопов бора в виде трифторида бора также представляет интерес оценка возможностей применения более дешевых прямоточных центрифуг[2]. Даже в быстровращающемся роторе радиальный градиент плотности для трифторида бора оказывается относительно малым. Это означает, что в случае трифторида бора и в отличие от [2] необходимо учитывать торможение газа на центральной штанге, через которую в ротор вводятся и выводятся потоки газа, что приводит к изменению разделительных характеристик центрифуги.

В работе рассматривается модельная центрифуга Игуассу (радиус ротора $a = 0,06$ м, линейная скорость стенки ротора $v = 600$ м/с, температура рабочего газа $T = 320$ К) с двумя точками подачи питания, точки отбора и отвала расположены напротив точек подачи питания. Таким образом, вдоль оси вращения формируются два тонких цилиндрических потока прозывающих весь объем ротора, таких что $g_1 = g_2 = \frac{G}{2}$, $G = 3.78 \cdot 10^{-4}$ г/с, где G оптимальный поток, найденный в ходе оптимизации. Один из потоков располагается вблизи стенки ротора. Целью данной работы является поиск оптимального с точки зрения разделительных характеристик радиального положения R_1 другого потока при наличии неподвижного цилиндрического центрального тела (далее ЦТ) радиусом R_0 . В изотопном приближении[2] для заданной геометрии решено уравнение конвективной диффузии, получено поле концентраций и найден коэффициент разделения.

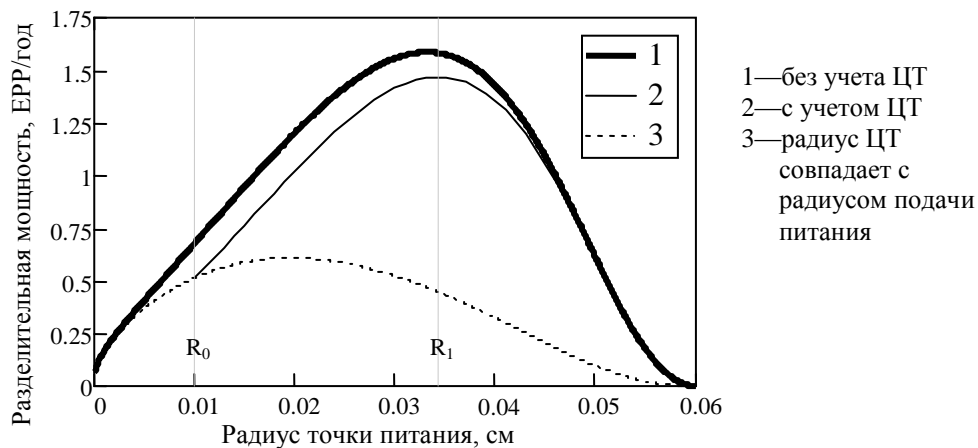


рис 1. Зависимость разделительной мощности радиуса

На рисунке показана разделительная мощность центрифуги в зависимости от радиуса R . По сравнению с зависимостью без учета ЦТ разделительная мощность с учетом торможения газа на ЦТ падает (в области максимума падение составляет около 7.5%), а оптимальный радиус R_1 слегка смещается к боковой стенке ротора.

Список публикаций:

[1]Рисованый В.Д. Кому нужен изотоп ^{10}B ? ProAtom, 26/01/2007,

<http://www.proatom.ru/modules.php?name=News&file=article&sid=801>

[2]Cohen K. The theory of isotope separation as applied to the large-scale production of . NY: McGraw-Hill, New York, 1951.

Микрофлюидное устройство для исследования кристаллообразования карбоната кальция в водном растворе солей

Карней Татьяна Викторовна
Бакирский государственный университет
Саметов Сергей Павлович, к.ф.-м.н.
tkarpey@mail.ru

Одним из самых распространенных видов осложнений при эксплуатации нефтяных скважин является солеотложение на скважинном оборудовании [1]. Выпадение неорганических солей приводит к увеличению числа аварийного ремонта скважин, простоев скважин, уменьшению дебита нефти, удорожанию себестоимости нефти. Среди неорганических солей можно выделить такие соли, как карбонат кальция, магния, сульфат кальция, бария, кальция, хлорид натрия, встречающиеся во многих нефтедобывающих регионах Российской Федерации: Западная Сибирь, Башкирия, республика Татарстан, Пермь, Оренбург [2].

Солеобразование при разработке и эксплуатации залежей нефти – достаточно сложный и многофакторный процесс, обусловленный как природными, так и техногенными явлениями. Попутно добываемая вода является основным источником солеотложений в нефтедобыче. Это связано с ее перенасыщением труднорастворимыми солями, что происходит под действием меняющихся условий добычи – температуры, давления, концентрации солеобразующих ионов и других факторов. Вода представляет собой хороший растворитель для многих веществ и способна при этом переносить большие количества растворенных минеральных солей.

В настоящей работе проведено экспериментальное исследование динамики образования кристаллов карбоната кальция при смешивании водных растворов солей хлорида кальция и карбоната натрия. Кристаллы карбоната кальция образовывались в каналах микрофлюидного устройства, который был изготовлен с помощью метода мягкой литографии. Микрофлюидное устройство оптически прозрачно и имеет два входных канала для подачи исходных реагентов и один выходной для вывода продуктов реакции (рис.1). Ячейка изготовлена с применением оптически прозрачных материалов – стекло и полимер полидиметилсилоксан (ПДМС), что позволяет вести регистрацию оптических изображений микроканала при течении реагентов и регистрировать образование кристаллов. Высота микроканалов составляет 100 мкм.

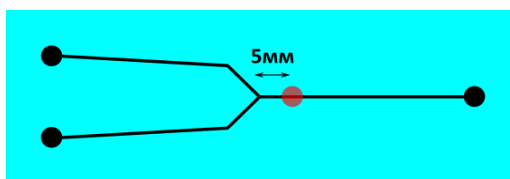


рис.1. Схема экспериментальной ячейки.

В работе использовались растворы Na_2CO_3 и $CaCl_2$ с концентрацией 0,01 моль/л, скорость течения смеси устанавливалась 2 мкл/мин. Регистрация изображения микроканала производилась в месте удаленном от места смешения на 5 мм. Реагенты прокачивались через микроканал в течение 20 минут. Процесс осаждения кристаллов регистрировался на видеокамеру.

На рисунке 2 показаны изображения кристаллов карбоната кальция, осажденные в микроканале. Во всех экспериментах наблюдались кристаллы двух типов. Кристаллы 1-го типа с четко выраженными гранями, вероятнее всего, являются кристаллами кальцита, а поликристаллические образования округлой формы (тип 2) – ватеритом.

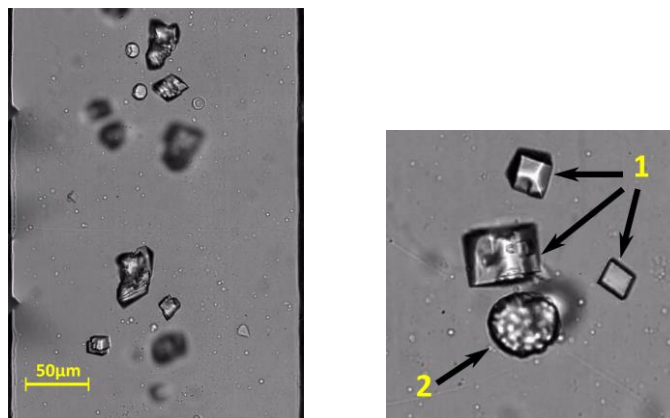


рис.2. Кристаллы карбоната кальция в микроканале.

Полученные изображения иллюстрируют возможность использования микрофлюидного устройства для получения, визуализации и анализа роста кристаллов карбоната кальция. Однако многочисленные эксперименты показывают плохую повторяемость для размера и количества кальцитов и ватеритов. Качественный анализ образования и скорости роста кристаллов сильно зависит от условий, которые должны быть воспроизводимы [3]. Одним из эффективных методов для получения воспроизводимых данных следует считать образование кристаллов внутри капель [4].

Список публикаций:

- [1] Канзафаров Ф. Я. и др. Влияние солеотложения на процесс коррозии эксплуатационных колонн добывающих скважин // Вестник ЦКР Роснедра. – 2013. – №. 1.
[2] Исаева Г.Ю. Разработка методики и модели компьютерного прогнозирования процесса солеотложения в нефтяных пластах при заводнении // Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.15.06. – Москва, 2000. – 163 с.
[3] Yashina A., Meldrum F., deMello A. Calcium carbonate polymorph control using droplet-based microfluidics // Biomicrofluidics. – 2012. – Т. 6. – №. 2. – С. 022001.
[4] Laval P. et al. Microfluidic screening of potassium nitrate polymorphism // Journal of Crystal Growth. – 2008. – Т. 310. – №. 12. – С. 3121-3124.

Численное моделирование течения газа в каналах с учетом микроструктуры поверхности

Кузнецов Максим Александрович

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Токманцев Валерий Иванович

taxbsp@mail.ru

Задача расчета параметров течений внутри каналов в свободномолекулярном и промежуточном режимах до сих пор не имеет полного решения, в то время, как её актуальность достаточно высока. Решение этой задачи могло бы открыть новые возможности науки и техники при создании систем охлаждения и в области передачи тепловой энергии, при проектировании микро-электромеханических систем (MEMS) и приборов точного измерения давления и температуры.

С увеличением степени разреженности газа влияние микроструктуры стенки канала на параметры течения газа значительно возрастает. Это обусловлено увеличением длины свободного пробега и уменьшением частоты межмолекулярных столкновений. В то же время, учет кристаллической решетки и микронеровности стенки сильно усложняет процесс моделирования [1].

В данной работе проводится численное моделирование течения газа в микроканале с учетом микронеровности стенки. Расчет производился с использованием 10^7 частиц методом прямого статистического моделирования. Микроструктура поверхности стенки канала моделируется на основе данных, полученных экспериментальным путем методами атомно-силовой микроскопии с реальных образцов кремния. В работе были использованы данные атомно-силовой микроскопии реального кремниевого образца размером (20×20) мкм (с базой данных по $N = 400 \times 400 = 1,6 \cdot 10^5$ измерений высоты) с высотой микронеровностей от нескольких до ~ 2000 нм.

В качестве характеристики шероховатости канала использовалась относительная высота микронеровности $h = \bar{h}/R$, где \bar{h} - средняя высота неровностей образца, R - радиус цилиндрического канала [2].

Для расчета точки столкновения частицы с элементом поверхности использовался специализированный алгоритм, позволивший существенно сократить время расчета и увеличить число модельных частиц, повысив точность получаемых результатов.

В работе были получены вероятности прохождения, профили температуры, давления и макроскопической плотности для цилиндрических каналов в свободномолекулярном режиме с различной относительной длиной L , относительной шероховатостью стенок \bar{h} и долей ε диффузно-зеркального рассеяния частиц на стенке [3].

Список публикаций:

- [1] Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. Аккомодация энергии гелия на чистой и частично заполненной адсорбатом поверхности вольфрама // Перспективные материалы. Специальный выпуск №8. Февраль 2010. С. 42-48.
[2] Саксаганский Г.Л., Молекулярные потоки в сложных атомных структурах. Москва: Атомиздат, 1980. С. 216
[3] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. Москва: Мир, 1981, С. 319

Капиллярная постоянная раствора метан-водород

Панасенко Анна Сергеевна¹

Гришина Ксения Александровна², Хотииенкова Мария Николаевна²

¹Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина

²Институт теплофизики Уральского отделения РАН

Байдаков Владимир Георгиевич, д.ф.-м.н.

elf13274@gmail.com

Капиллярная постоянная a^2 является важным теплофизическим свойством жидкости. Ее значение определяет параметры многих капиллярных явлений – распространения капиллярных волн, капиллярного поднятия и др. Капиллярная постоянная входит в уравнения, определяющие поверхностное натяжение и описывающие процессы кипения и конденсации.

В условиях активного потребления топливных ресурсов ведется поиск альтернативных нефти источников энергии. Большим преимуществом перед остальными источниками обладает сжиженный природный газ. Исследование свойств его компонентов важно в топливно-энергетической промышленности и имеет практическое значение при решении проблем транспортировки и хранения. Метан является основным компонентом природных газов большинства месторождений и важным сырьевым источником химической промышленности, где его используют для производства водорода, спиртов, синтетического каучука, ряда растворителей и многих других продуктов.

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования капиллярной постоянной раствора метан – водород. В опытах использовался дифференциальный вариант метода капиллярного поднятия [1]. Чистый метан конденсировался в вакуумированную измерительную ячейку, находящуюся при заданной температуре. Ячейка содержала три стеклянных капилляра разного внутреннего диаметра: $r_1 = 0,6393$ мм, $r_2 = 0,2297$ мм, $r_3 = 0,09607$ мм. После установления равновесия измерялась разность высот поднятия менисков в капиллярах и определялась капиллярная постоянная. Раствор готовился напуском в ячейку водорода. Опыты проведены по изотермам в интервале температур 120 – 150 К при давлениях от давления насыщения чистого растворителя до 4 МПа. Использовались газы высокой чистоты. Паспортная чистота метана составляла 99.99%, водорода – 99.999%.

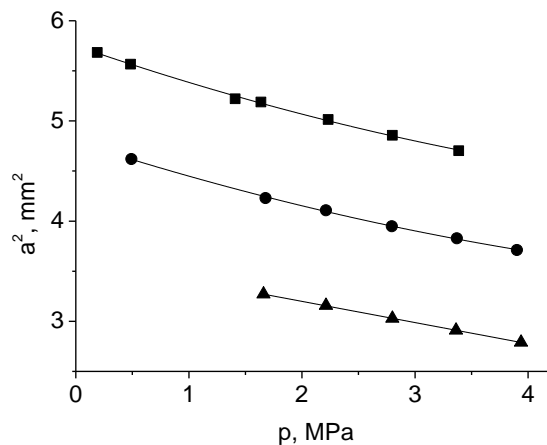


рис.1. Барическая зависимость капиллярной постоянной раствора метан – водород
■ – Изотерма 120 К, ● - 135 К, ▲ - 150 К

Результаты измерений представлены на рис.1. Видно, что на всем интервале температур с повышением давления капиллярная постоянная уменьшается. Рост температуры приводит к понижению влияния добавок водорода на a^2 . При температурах 120, 135 К зависимость a^2 от давления близка к квадратичной, а при 150 К наблюдается линейная зависимость капиллярной постоянной от давления.

Работа поддержана РФФИ (грант №15-08-03399) и Комплексной программой фундаментальных исследований УрО РАН (грант №15-1-2-6)

Список публикаций:

[1] Байдаков В.Г. Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. – Екатеринбург: УИФ “Наука”, 1994, 374 с.

Топология поверхностей скоростей нуклеации над фазовой диаграммой бинарных систем с эвтектическими линиями nt и wq

Петрова-Богданова Ольга Олеговна

Новосибирский государственный технический университет

Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН

Анисимов Михаил Прокопьевич, д.ф.-м.н.

petrovabogdanovaoo@mail.ru

В работе представлено применение аксиоматических выражений для полуэмпирических построений поверхностей скорости нуклеации над диаграммами фазового равновесия. На сегодняшний день эксперименты по нуклеации являются трудоемкими, а теоретические оценки - не надежными [1-3], поэтому развитие новых методов представления скоростей зародышеобразования становится актуальной задачей. На *рис. 1* представлена диаграмма состояния для системы с двумя эвтектическими точками. Легко увидеть, что она состоит из двух самостоятельных подсистем. Каждая подсистема может быть представлена в виде диаграмм фазовых равновесий $A-A_xB_y$ и $B-A_xB_y$, где A_xB_y представляет стехиометрический состав нового соединения.

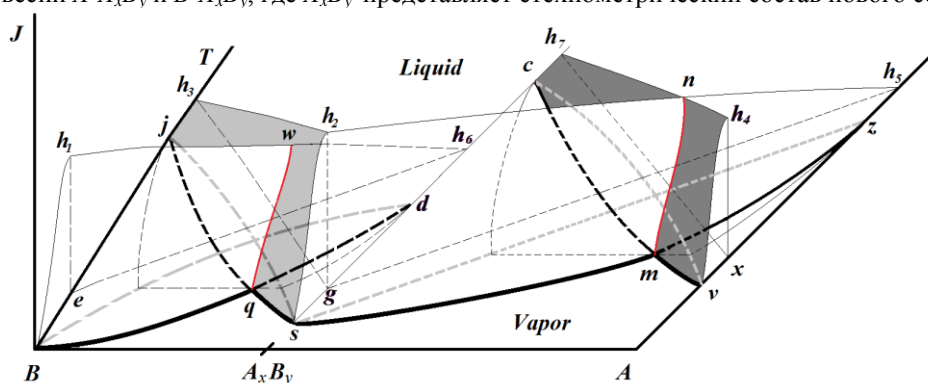


рис. 1. Схематические поверхности скоростей нуклеации над фазовой диаграммой бинарных систем с эвтектическими линиями nt и wq

При соблюдении всех правил построения поверхностей скорости нуклеации [4] получаем контур h_1wh_6dqB схематично соответствующий поверхности скоростей зародышеобразования раствора B в A_xB_y . Контур h_2h_3jqS – поверхность, отвечающая зародышеобразованию раствора A_xB_y в B , показана серым цветом. При пересечении этих двух поверхностей возникает линия wq , соответствующая множеству эвтектических точек для динамических равновесий.

А для второй подсистемы (*рис. 1*, правая часть) получаем контуры h_2nh_5zms и h_4nh_7ctv ограничивают поверхности скоростей нуклеации для двух растворов, т.е. A_xB_y в A (белый цвет) и A в A_xB_y (темно-серый цвет). При пересечении данных поверхностей, так же возникает эвтектическая линия nt . Линии h_1wh_6 , h_2h_3 , h_2nh_5 и h_4h_7 схематично иллюстрируют спинодальные скорости нуклеации, которые вблизи нулевой концентрации второго компонента обретают нулевые значения. Участки поверхностей скорости нуклеации, ограниченные пунктирными линиями, соответствуют невидимым областям скорости. Полуэмпирическое построение поверхностей скорости нуклеации позволит оптимизировать технологические процессы с зародышеобразованием, и, несомненно, позволит более четко обозначить современные проблемы в развитии теории нуклеации [5]. Можно надеяться, что в недалеком будущем инженеры будут располагать пакетом программ, позволяющим эффективно выполнять оптимизации технологических процессов с фазовыми переходами первого рода. Следует отметить, что к настоящему времени идея построения поверхностей скорости нуклеации находится на начальной стадии своего развития.

Работа поддерживается грантом Министерства Науки и Образования Российской Федерации в соответствии с договором № 14.Z50.31.0041 от 13 февраля 2017 года.

Список публикаций:

- [1] Ford I.J. // *Proc. Instn Mech. Engrs 218 Part C: J. Mech. Eng. Sci.* 2004. P. 883-899.
- [2] Hirsikko A., Nieminen T., Gagne S., Lehtipalo K., Manninen H. E., etc. M // *Atmos. Chem. Phys.* 2011. Vol. 11. P. 767-798.
- [3] Anisimov M.P., Fominykh E.G., Akimov S.V., Hopke P.K. // *J. Aerosol Sci.* 2009. Vol. 40. P. 733-746.
- [4] Анисимов М.П., Фоминьх Е.Г., Петрова-Богданова О.О. // *ЖФХ.* 2013. Т. 87. № 2. С. 256.
- [5] Анисимов М. П. // *ДАН.* 1997. Т.352. №.6. С.816-818.

Расчет параметров межфазной границы кристалл-газ на линии сублимации методом молекулярно-динамического моделирования

Проценко Ксения Романовна

Институт теплофизики УрО РАН

Байдаков Владимир Георгиевич, д.ф.-м.н.

protcenko.kseniya@gmail.com

Поверхности твердых тел ответственны за протекание многих важных в практическом отношении процессов, таких, как адсорбция, смачивание, адгезия и др. Описание этих процессов требует знания поверхностной свободной энергии твердого тела, которая в отличие от поверхностной свободной энергии жидкость-пар не может быть непосредственно измерена в эксперименте. В этой связи актуальным становится компьютерное моделирование свойств межфазной границы кристалл-пар.

В данной работе методом МД получены температурные зависимости механического поверхностного натяжения γ , поверхностных плотностей энергии \bar{u} , энтропии \bar{s} , свободной энергии \bar{f} на линии сублимации Леннард-Джонсовской (ЛД) системы при ориентациях (100), (110) и (111) кристаллической фазы по отношению к межфазной границе.

Исследуемые двухфазные системы содержали от 64000 до 108000 частиц с радиусом обрезания потенциала взаимодействия $r_c = 6.78\sigma$ (σ – линейный параметр ЛД потенциала). Расчеты выполнены для 20 значений температур в интервале от абсолютного нуля до температуры тройной точки $T_t = 0.692$ (в единицах ε/k_B , ε – энергетический параметр потенциала, k_B – постоянная Больцмана). Поверхностное натяжение рассчитывалось по формуле:

$$\gamma = \int (P_n - P_\tau) dz, \quad (1)$$

где P_n и P_τ – нормальная и тангенциальная компонента тензора давления, ось z направлена перпендикулярно плоскости раздела фаз. Избыточная поверхностная энтропия при $T = 0$ получена методом, предложенным Броутоном и Гилмером [1], основанным на расчете частот нормальных мод кристалла. Используя значения $\bar{u}(T)$ и $\gamma(T)$, методом термодинамического интегрирования [2] определена температурная зависимость поверхностной энтропии:

$$\left[\frac{d(\bar{s}\rho_s^{-2/3})}{dT} \right]_{\text{coex}} = \rho_s^{-2/3} \left(\frac{1}{T} \left[\frac{d\bar{u}}{dT} \right]_{\text{coex}} - \frac{2}{3\rho_s} \frac{\bar{u} - \gamma}{T} \left[\frac{d\rho_s}{dT} \right]_{\text{coex}} \right), \quad (2)$$

где ρ_s – плотность кристаллической фазы, $[\]_{\text{coex}}$ – означает, что производная берется вдоль линии сублимации.

Поверхностная свободная энергия рассчитана согласно формуле $\bar{f} = \bar{u} - T\bar{s}$. Проведено сравнение полученных результатов с данными работы [1], в которой исследовалась система кристалл-газ с радиусом обрезания ЛД потенциала $r_c = 2.5\sigma$ и числом частиц от 1200 до 1320.

Показано, что $\bar{f}(T)$ является монотонно убывающей функцией температуры. В любой точке линии сублимации $\bar{f}_{111} < \bar{f}_{100} < \bar{f}_{110}$, аналогичное соотношение справедливо для \bar{u} и \bar{s} . При достижении температуры $T \approx 0.5$ наблюдается резкое изменение характера температурной зависимости параметров межфазной границы, что связано с процессом поверхностного расплавления кристалла.

Путем анализа профиля числовой плотности системы рассчитана толщина квазижидкостного слоя l на поверхности кристалла и исследована ее температурная зависимость. Показано, что величина l растет с увеличением температуры, а вблизи тройной точки $l(T) \sim \ln(1 - T/T_t)$.

Молекулярно-динамические вычисления проведены в программе LAMMPS на суперкомпьютере Института математики и механики УрО РАН (г. Екатеринбург).

Работа выполнена при поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований Уральского Отделения Российской Академии наук (проект № 15-1-2-6), РФФИ (проект № 15-08-03399).

Список публикаций:

[1] Broughton J. Q., Gilmer G. H., *J. Chem. Phys.* **84**, 5741 (1986).

[2] Laird B. V., et al., *J. Chem. Phys.* **131**, 114110 (2009).

Моделирование нестационарной фильтрации в пластах с наличием трещин гидроразрыва

Хисамов Артур Альфирович

Баширский государственный университет

Хабибуллин Ильдус Лутфурахманович, д.ф.-м.н.

khisamovartur@list.ru

В настоящее время интенсивно развивается разработка малопроницаемых и неоднородных коллекторов нефти и газа. При этом основным методом, обеспечивающим эффективную разработку, является гидравлический разрыв пласта. Наличие трещин гидроразрыва качественно и количественно меняет характер фильтрационных потоков вокруг скважины, поэтому является актуальным развитие теории фильтрации в пластах с трещинами гидроразрыва [1]. Эта теория в стационарном приближении достаточно полно развита. Нестационарные процессы распределения давления исследованы в основном применительно к гидродинамическим методам исследования скважин, которые охватывают ограниченный интервал пространственно-временных изменений давления (расстояния порядка радиуса скважины и асимптотически малые времена). Поэтому представляет интерес исследование задач теории фильтрации в пластах с трещиной гидроразрыва для представительных пространственно-временных интервалов порядка размеров пластов и характерного времени их разработки. Решению одной из таких задач посвящена данная работа.

С учетом симметрии геометрии задачи относительно скважины и трещины, схема области фильтрации представлена на рис. 1.

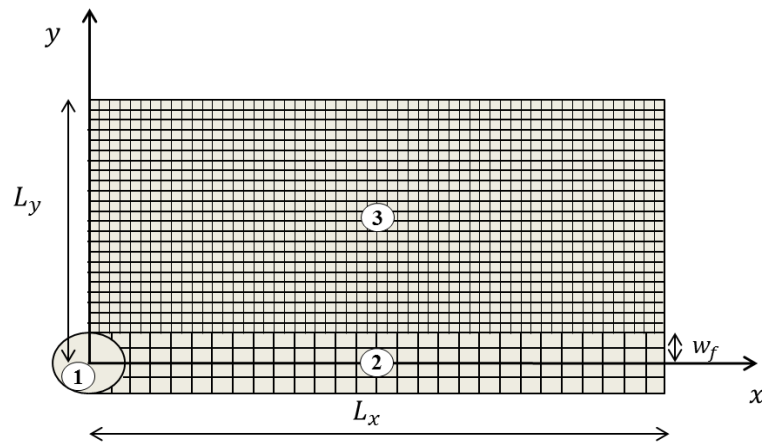


рис. 1. Схема области течения. 1 – скважина, 2 – трещина, 3 – пласт.

Рассматривается фильтрационный поток в пласте вокруг скважины при наличии вертикальной трещины. При $t = 0$ начинается отбор жидкости в скважину. В трещине и в пласте создается нестационарный фильтрационный поток. Ширина пласта h_r и ширина трещины w_f и их проницаемости k_r и k_f удовлетворяют условиям $k_f \gg k_r, w_f \ll h_r$.

Распределение давления в трещине и в пласте в случае, когда на скважине задается постоянный дебит, имеет вид:

$$\bar{P}_r(\bar{x}, \bar{y}, \bar{t},) = -\frac{2b\sqrt{\bar{t}}}{\sqrt{a}\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-\frac{x^2}{4a\bar{t}z^2}} \operatorname{erfc} \frac{z^2 b \bar{t} + \bar{y}}{2\sqrt{\bar{t}(1-z^2)}} dz.$$

В работе построено решение задачи о распределении давления при нестационарной фильтрации жидкости вокруг скважины, пересеченной вертикальной трещиной гидроразрыва, при задании постоянного дебита на скважине. При этом, решая уравнения фильтрации методом преобразования Лапласа, получены выражения для распределения давления в трещине и в пласте. Получено выражение, при помощи которого можно определить долю в дебите скважины потока жидкости из пласта в трещину в зависимости от времени.

[1] Список публикаций:

[1] Каневская Р.Д. Математическое моделирование разработки месторождений нефти и газа с применением гидравлического разрыва пласта. – М.: ООО «Недра-Бизнесцентр», 1999. – 212с. [2] Рубинштейн Л.И. Температурные поля в нефтяных пластах. М.: Недр, 1972 – 276с.

[2] Cinco-Ley H., Samaniego V.F. Transient Pressure Analysis for fractured wells // J. Petrol. Technol. – 1981. – V.33, N9. – P. 1749-1766.