– построитель гидродинамической модели, определяющей геометрию, гидрогеологические свойства области фильтрации, начальные и граничные условия решаемой начально-краевой задачи;

– модуль расчета полей давления и нефтенасыщенности;

– модуль 2D/3D визуализации результатов численного моделирования, ретроспективы и актуального состояния реального процесса разработки нефтяного месторождения.

С помощью созданного программного обеспечения численно исследован процесс вытеснения вязкопластической нефти водой из неоднородной по проницаемости залежи, вскрытой системой добывающих и нагнетательных скважин. Получены зависимости локальных и интегральных показателей процесса от динамических и геометрических характеристик течения. На примере задачи о динамике образования застойной зоны остаточной вязкопластической нефти в элементе симметрии пятиточечной системы расстановки скважин проведено количественное сопоставление результатов расчетов асимптотической картины нестационарного процесса заводнения и соответствующих решений теории предельно-равновесных целиков. Полученные результаты могут служить дополнительным подтверждением применимости упомянутой теории для оценки эффективности вытеснения неньютоновских нефтей.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИБРАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ В ЖИДКОСТЯХ

В. С. Вихренко, К. Хейдельбах, Д. Шварцер, Й. Шредер
Белорусский государственный технологический университет
(Минск, Беларусь)

В кинетике химических реакций важнейшую роль играют процессы накопления и рассеяния энергии реагентов, обусловленные их взаимодействием с растворителем. Эти процессы часто протекают за короткие промежутки времени порядка нано- или даже пикосекунд, что сильно затрудняет экспериментальные исследования деталей этих процессов. Поэтому машинное моделирование при условии разработки и использования адекватной механической модели способно обеспечить необходимую информацию.

Рассматриваются два метода проведения и анализа результатов молекулярно-динамического моделирования вибрационной релаксации сильно возбужденных органических молекул средних размеров (состоящих из нескольких десятков атомов) в жидкостях и плотных газах. Первый состоит в моделировании реального неравновесного процесса деактивации возбужденной молекулы в первоначально равновесной среде, а второй основан на моделировании равновесного состояния жидкости (растворителя) и органической молекулы. Помимо исследования эволю-

ции потенциальной, кинетической и полной энергий возбужденной молекулы, что позволяет определить время релаксации процесса, рассмотрено поведение ее собственных колебаний, распределение между нормальными модами потоков энергии от возбужденной молекулы к растворителю, зависимость этих потоков от собственных частот, вращательно-колебательное взаимодействие.

Экспериментально установлено, что энергия возбужденной молекулы убывает по экспоненте. Рассмотрение в рамках статистической двухтемпературной модели показало, что независимость константы скорости процесса от температуры возбужденной молекулы (что и приводит к экспоненциальному уменьшению ее энергии) обусловлена взаимной компенсацией нелинейностей, определяющих термодинамическую силу (обратная температура) и поведение временных корреляционных функций скоростей атомов возбужденной молекулы и ее коэффициентов трения в жидкости. Предложены зависимости для анализа потоков энергии в растворителе. Последние записаны как в форме, включающей временные корреляционные функции мощностей, так и в традиционной форме уравнения теплопроводности с учетом пространственной и временной дисперсии.

Моделирование выполнено на мощных рабочих станциях и ЭВМ типа Крэй вычислительного центра Института биоорганической химии имени Макса Планка (Геттинген, Германия). Моделируемая система состояла из одной молекулы азулена ($C_{10}H_8$) и нескольких сот молекул диоксида углерода (CO_2) или ксенона (Xe). На ЭВМ интегрировались классические уравнения движения атомов.

Времена релаксации, полученные как на основании исследования неравновесного процесса, так и по зависимостям для равновесного состояния, оказались близкими к экспериментальным данным (порядка 20 пс в плотном диоксиде углерода). Это свидетельствует о том, что предложенная динамическая модель адекватно описывает реальный процесс деактивации возбужденных молекул.

Результаты моделирования позволили установить ряд важных особенностей вибрационной релаксации молекул средних размеров в жидкостях:

а) в передаче энергии от возбужденной молекулы к растворителю участвуют практически все нормальные колебания, а не только низкочастотные, как предполагалось ранее. Доля энергии, передаваемой высокочастотными модами существенно возрастает с увеличением плотности растворителя;

б) колебательно-вращательное взаимодействие не играет существенной роли в энергообмене;

в) взаимодействие возбужденной молекулы с растворителем играет важнейшую роль во внутримолекулярном перераспределении энергии. Обмен энергии между модами изолированной молекулы происходит медленно и нерегулярно и на протяжении длительного времени, состав-

ляющего сотни пикосекунд, распределение энергии между модами остается далеким от равновесного. В то же время при наличии взаимодействия с растворителем энергия всех мод убывает синхронно, удовлетворяя принципу равнораспределения. Это позволяет говорить о квазиравновесном изменении состояния возбужденной молекулы в процессе ее релаксации и характеризовать это состояние неравновесной температурой, определяемой средней кинетической энергией на одну степень свободы. В плотном растворителе квазиравновесное состояние устанавливается за время порядка одной пикосекунды.

Работа выполнена при поддержке Фольксвагеновского фонда, проект I70/627.

МЕХАНИКА ОБРАЗОВАНИЯ ВЫСОКОДИСПЕРСИОНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

В. В. Доморацкий
Полоцкий государственный университет
(Новополоцк, Беларусь)

При получении эмульсии двух несмешивающихся жидкостей наиболее важным является вопрос достижения высокой дисперсности и стабильности конечного продукта при минимальных энергетических затратах. На кафедре "Теоретическая механика" Полоцкого государственного университета разработан Способ получения вторичных энергоресурсов из нефтесодержащих сточных вод (заявка на изобретение Республики Беларусь N970255 от 16.05.97). Изобретение относится к области получения жидкого топлива и может быть использовано для получения водотопливных эмульсий термически утилизируемых в топках котлов промышленных и отопительных котельных. Способ внедрен на ОАО Полоцкий завод Проммашремонт.

Способ получения вторичного энергоресурса из нефтесодержащих сточных вод (НССВ) включает отстаивание НССВ и отделение отстоявшейся воды, предварительное эмульгирование отстоявшихся нефтесодержащих фракций, эжектирование подогретых эмульгированных нефтесодержащих фракций магистральным мазутом, подачу смеси НССВ и мазута в эмульсатор с последующим эмульгированием в нем и термическую утилизацию полученной водо-топливной эмульсии. Предварительное эмульгирование НССВ может осуществляться с помощью пневмоизлучателя.

Благодаря отстаиванию НССВ и отделению отстоявшейся воды способ дает возможность получать водо-топливную эмульсию с повышенным содержанием горючих нефтяных фракций НССВ в водо-нефтемазутной эмульсии, что позволяет экономить до 40% мазута при его сжигании в топках котлов. Предварительное эмульгирование отстоявшихся нефтесодержащих фракций НССВ пневматическим излучателем обеспе-