

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША  
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

На правах рукописи

Балашов Владислав Александрович

**Прямое численное моделирование течений  
жидкости в поровом пространстве  
пород-коллекторов**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени кандидата  
физико-математических наук

Научный руководитель:  
кандидат физико-математических наук  
Савенков Евгений Борисович

Москва — 2016

# Оглавление

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>1 Квазигидродинамическая модель однофазного однокомпонентного течения</b>	<b>9</b>
<b>2 Разностная схема и комплекс программ</b>	<b>15</b>
2.1 Геометрическая модель . . . . .	15
2.2 Разностная схема . . . . .	16
2.3 Граничное условие прилипания . . . . .	18
2.4 Программный комплекс . . . . .	20
<b>3 Моделирование однофазных течений</b>	<b>26</b>
3.1 Области с простой геометрией . . . . .	26
3.1.1 Обтекание цилиндра . . . . .	27
3.1.2 Течение в кубической каверне . . . . .	29
3.1.3 Течение в трубе квадратного сечения . . . . .	29
3.1.4 Выбор шага по времени . . . . .	33
3.2 О расчете коэффициента проницаемости . . . . .	35
3.3 Модельная пористая среда . . . . .	36
3.3.1 Трубки квадратного сечения . . . . .	36
3.3.2 Трубки круглого сечения . . . . .	37
3.3.3 Наклонная трубка эллиптического сечения . . . . .	39
3.4 Моделирование течений в микрообразцах горных пород . . . . .	43
<b>4 Модель многофазного многокомпонентного течения</b>	<b>46</b>
4.1 Обзор математических моделей . . . . .	46
4.1.1 Модели типа «четкой границы» . . . . .	47
4.1.2 Модели типа «диффузной границы» . . . . .	52
4.1.3 Метод функционала плотности . . . . .	54
4.1.4 Модели на основе решеточных уравнений Больцмана . . . . .	56
4.2 Квазигидродинамическая модель многофазного многокомпонентного течения с учетом поверхностных эффектов . . . . .	59
4.2.1 Основные идеи концепции «микросил» . . . . .	60
4.2.2 Поток массы и массовая скорость . . . . .	63

4.2.3	Модель компонентного состава . . . . .	64
4.2.4	Законы сохранения в интегральной форме . . . . .	65
4.2.5	Законы сохранения в дифференциальной форме . . . . .	68
4.2.6	Диссипативное неравенство для свободной энергии . . . . .	71
4.2.7	Процедура Колмана–Нолла . . . . .	72
4.2.8	Определяющие соотношения . . . . .	83
4.2.9	Основные уравнения . . . . .	87
4.3	Моделирование двухфазных течений . . . . .	89
4.3.1	Примеры расчетов . . . . .	93
<b>Заключение</b>		<b>98</b>
<b>Список литературы</b>		<b>99</b>

# Введение

Одним из основных инструментов, широко используемых в настоящее время для анализа и оптимизации процесса разработки нефтегазовых месторождений, являются постоянно-действующие геолого-технологические модели (ПДГТМ) нефтегазовых месторождений [1]. Модели месторождений используются, в частности, для решения таких задач, как разработка и обоснование плана освоения месторождения, определение оптимального метода воздействия на пласт с целью увеличения нефтеотдачи, оптимизация и контроль разработки месторождения, прогноз и оценка технико-экономических рисков и т.д.

Успешность применения методов математического моделирования для решения этих и других задач разработки в значительной степени зависит от качества входных данных и оценки степени их неопределенности. Стандартным способом определения требуемых параметров является проведение тех или иных исследований скважин: геофизические исследования скважин (ГИС), гидродинамические исследования скважин (ГДИС), исследования образцов горной породы (керн), поднятых из ствола скважины во время бурения и др.

Полученные различными способами данные исследований используются для воссоздания полей распределения свойств пласта, не противоречащих результатам всех выполненных измерений и исследований на пространственных масштабах от десятков миллиметров (образец керна) до километров (масштаб всего месторождения).

Несмотря на постоянное совершенствование полевых и лабораторных методов исследования, точность получаемых данных, особенно для коллекторов со сложной структурой, зачастую невысока. Поэтому проблема получения достоверных данных о параметрах пласта, а также оценки степени их неопределенности неизменно остается актуальной.

Коллектор нефти и газа представляет собой систему, образованную скелетом, то есть непроницаемыми для флюида сцементированными зернами породы и подвижным флюидом, заполняющим пространство между ними. Размеры пор, сквозь которые происходит течение флюида, часто очень малы и составляют величину порядка десятков микрометров. Однако физические процессы, происходящие на этих пространственных масштабах, определяют полный спектр свойств фильтрационных моделей макроуровня. Поэтому расширение представлений о процессах, определяющих и сопровождающих процесс вытеснения флюида в масштабе пор, возможность их полноценного каче-

ственного и количественного описания являются одними из ключевых факторов, определяющих корректность, и, как следствие, «предсказательную» силу моделей макроуровня, используемых в масштабах всего месторождения или его участка.

Одним из наиболее важных методов исследования являются лабораторные эксперименты с использованием образцов керна, позволяющие определять большое количество физических свойств образцов, включая пористость, абсолютную и относительную фазовые проницаемости. Однако они обладают рядом недостатков, среди которых отметим: сложность, а иногда и невозможность получения и обработки качественного кернового материала в достаточных количествах; высокую стоимость и практическую невозможность массового применения ряда методик лабораторных исследований; невозможность проведения множественных экспериментов на одном образце, и, как следствие, невозможность воспроизводимости, в строгом смысле, результатов исследований; невозможность воссоздания полного спектра пластовых условий; невозможность проведения полноценных параметрических исследований.

Одной из бурно развивающихся в последние десятилетия технологий, позволяющих повысить точность описания свойств системы «флюид» – «порода», является совокупность подходов, обычно называемых «цифровой керн» или «виртуальная лаборатория керна» («virtual/digital core laboratory», «digital rock physics», «E-Core technology»). Характеристическим свойством этих подходов, вне зависимости от физики исследуемого процесса (гидродинамика течения флюида в порах, анализ напряженно-деформированного состояния, электрических или акустических свойств и т.д.), является детальное разрешение геометрической структуры порового пространства и учет в используемых математических моделях в известном смысле «первичных» (по сравнению с усредненными моделями макроуровня) физико-химических механизмов, имеющих место на «микроуровне». Сущностью самого подхода является «прямое» математическое моделирование происходящих в пласте процессов на «микроуровне», определяющих как исход макроскопических лабораторных экспериментов, так и динамику фильтрационных процессов в масштабе месторождения.

Технология «цифровой керн» является достаточно «молодой»: основные попытки применения этих технологий на практике предприняты в последнее десятилетие, при этом первые направленные попытки ее применения для анализа реальных пород-коллекторов начались в 1980-х годах [2–4].

Основными преимуществами вычислительного эксперимента как дополнительного средства анализа происходящих в пласте процессов и механизмов, определяющих динамику вытеснения флюида, являются: сокращение количества лабораторных экспериментов и сокращение сроков исследования, возможность анализа практически любых образцов породы, включая неконсолидированные породы и шлам; возможность воссоздания в вычислительном эксперименте полного спектра пластовых условий; возможность проведения

полноценных параметрических исследований и, как следствие, построение обоснованных оценок степени неопределенности свойств.

На текущем этапе своего развития технологию «цифровой керн» нужно рассматривать как дополнительное средство, позволяющее повысить качество и надежность определения свойств пород-коллекторов и снизить степень неопределенности результатов лабораторных исследований.

Настоящая диссертация посвящена развитию и применению методов гидродинамического моделирования течения флюида в поровом пространстве пород-коллекторов.

Задачи моделирования течений в поровом пространстве образцов горных пород характеризуются большой размерностью ( $\sim 10^6 - 10^8$  ячеек), сложной геометрией расчетной области, сложными физическими процессами (многофазность, многокомпонентность, неизотермичность, химические реакции и др.). В настоящее время для анализа таких процессов используется целый ряд математических моделей и методов расчета, среди которых: модели поровых сетей (pore-network model) [5–12], метод решеточных уравнений Больцмана (lattice Boltzmann Method, LBM) [13–16], метод сглаженных частиц (smoothed particle hydrodynamics, SPH) [17–19], модели диффузной границы (Diffuse interface, Phase field) [20], модели, основанные на решении уравнений Навье-Стокса/Стокса [21–26].

Все упомянутые подходы с той или иной степенью успешности можно применять для решения ряда частных задач моделирования течения флюида в поровом пространстве. Однако ни один из них не лишен некоторых недостатков как в части корректности математической модели и степени ее полноты, так и в части устойчивости вычислительных алгоритмов и возможности эффективной программной реализации.

Среди известных наиболее физически обоснованными являются, по всей видимости, модели типа «диффузной границы». Вместе с тем они являются и самыми сложными. Так, например, соответствующие дифференциальные законы сохранения содержат нелинейные члены с производными высоких (4-го и 5-го) порядков. Поэтому становится актуальным построение методов аппроксимации этих уравнений, обеспечивающих достаточную для практических приложений точность и устойчивость расчета и допускающих сравнительно простую и эффективную программную реализацию.

*Таким образом, разработка математической модели, соответствующих численных методов и комплексов программ для моделирования течений жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов является актуальной задачей.*

**Целью работы** является разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и комплексов программ для анализа течения жидкости в пористой среде с прямым разрешением геометрии порового пространства.

Ввиду высокой сеточной размерности дискретной задачи (для реалистичных образцов число расчетных ячеек может достигать до нескольких десят-

ков миллионов) применение неявных схем в настоящее время вряд ли может дать удовлетворительное решение. По этой причине большинство методов для решения задач рассматриваемого класса основано на использовании явных схем. Построение таких схем представляет собой достаточно сложную задачу ввиду сложности расчетной области и нелинейности уравнений. Таким образом, для достижения поставленной цели потребовалось решение следующих основных задач:

1. Разработка математической модели течения многофазной, многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов на основе существующей квазигидродинамической модели.
2. Разработка разностных алгоритмов ее решения, их программная реализация и последующая оценка применимости разработанной модели для анализа многофазных течений.
3. Разработка параллельного программного комплекса для расчета течений в геометрии, построенной на основе микротомограммы образца горной породы, с использованием квазигидродинамической системы уравнений, его валидация и верификация.
4. Исследование применимости предложенной технологии для анализа однофазных однокомпонентных течений в поровом пространстве образцов горных пород.

В настоящей работе решение указанных задач осуществлено за счет применения квазигидродинамического (КГиД) подхода. Он предложен в работах Б.Н. Четверушкина, Т.Г. Елизаровой и Ю.В. Шеретова [27–30]. Указанный метод основан на макроскопическом (гидродинамическом) описании среды, является консервативным, термодинамически согласованным, позволяет использовать реалистичные уравнения состояния и изначально позволяет описывать неизотермические течения. Система КГиД уравнений является модификацией системы уравнений Навье–Стокса, в которую включены малые физически обоснованные слагаемые диссипативного характера, что обеспечивает устойчивость логически простых разностных схем с аппроксимацией пространственных производных центральными разностями.

**Научная новизна.** Представленные в работе результаты являются новыми. В частности, новыми являются математическая модель течения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов на основе КГиД подхода, построенный разностный алгоритм для расчета двухмерного двухфазного двухкомпонентного течения на основе разработанной модели, разработанный параллельный программный комплекс для расчета однофазных однокомпонентных вязких сжимаемых неизотермических течений на основе КГиД модели в поровом пространстве горных пород.

**Теоретическая ценность и практическая значимость** диссертационной работы состоят в разработанной квазигидродинамической математической модели течения многофазной многокомпонентной жидкости с уче-

том поверхностных эффектов, разностном алгоритме расчета двухмерных двухфазных двухкомпонентных изотермических течений, программном комплексе для расчета однофазных однокомпонентных течений в поровом пространстве горных пород, в том числе для определения их макроскопических свойств.

**На защиту выносятся следующие положения:**

1. Предложена квазигидродинамическая модель для описания многофазных многокомпонентных неизотермических течений с учетом поверхностных эффектов.
2. Разработан разностный алгоритм для расчета двухмерных двухфазных изотермических течений.
3. Разработан параллельный программный комплекс для расчета вязких сжимаемых неизотермических течений в поровом пространстве образцов горных пород.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечены строгостью используемого математического аппарата и подтверждаются сравнением результатов вычислительных экспериментов с известными в литературе экспериментальными и расчетными данными, а также данными, полученными с помощью других методов.

**Апробация работы.** Результаты диссертационной работы апробированы на международной молодежной конференции «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (г. Дубна, 2014); V Всероссийской конференции «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий», (г. Новосибирск, 2015); семинарах 11-го отдела ИПМ им М.В. Келдыша РАН «Вычислительные методы и математическое моделирование» (г. Москва, 2014, 2015); V научно-практической конференции «Суперкомпьютерные технологии в нефтегазовой отрасли. Математические методы, программное и аппаратное обеспечение» (г. Москва, 2015); семинаре кафедры ФН-2 «Прикладная математика», МГТУ им. Н.Э. Баумана (г. Москва, 2015); семинаре «Кафедры вычислительных методов», ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова (г. Москва, 2016).

**Публикации.** Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 6 печатных работах [31—36], в том числе в 4 печатных работах [31, 34—36] в изданиях из перечня ВАК.

**Личный вклад соискателя.** Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю; заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа представлена на 108 страницах, содержит 27 иллюстраций и 7 таблиц. Список литературы содержит 141 наименование.



# Глава 1

## Квазигидродинамическая модель однофазного однокомпонентного течения

В данной главе приведены основные особенности задач моделирования течений жидкости в геометрии порового пространства пород-коллекторов. Сформулированы требования, обеспечивающие эффективность соответствующего численного метода и его применимость на практике. В качестве метода, удовлетворяющего указанным требованиям, предложен класс методов на основе квазигидродинамической (КГид) системы уравнений. Приведена КГид система уравнений для описания однокомпонентного однофазного течения вязкой сжимаемой теплопроводной жидкости. В однокомпонентном однофазном случае течение вязкой сжимаемой теплопроводной жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов описывается системой уравнений Навье-Стокса.

В настоящее время предложено достаточно много способов ее численного решения. Успешность применения того или иного конкретного метода обусловлена тем, насколько хорошо он адаптирован к особенностям конкретного класса задач. Поэтому сначала приведем основные особенности задачи моделирования течений в поровом пространстве пород-коллекторов:

- геометрия расчетной области, аппроксимирующая поровое пространство, может иметь очень сложный вид. На практике она обычно определяется путем обработки компьютерной томограммы микрообразца керна (образца горной породы). В силу этого расчетная сетка состоит из кубических ячеек («вокселей»). Типичный вид геометрии расчетной области представлен на рисунке 1.1;
- обработанная томограмма микрообразца керна и, как следствие, сеточная расчетная область, имеют очень высокую сеточную размерность:

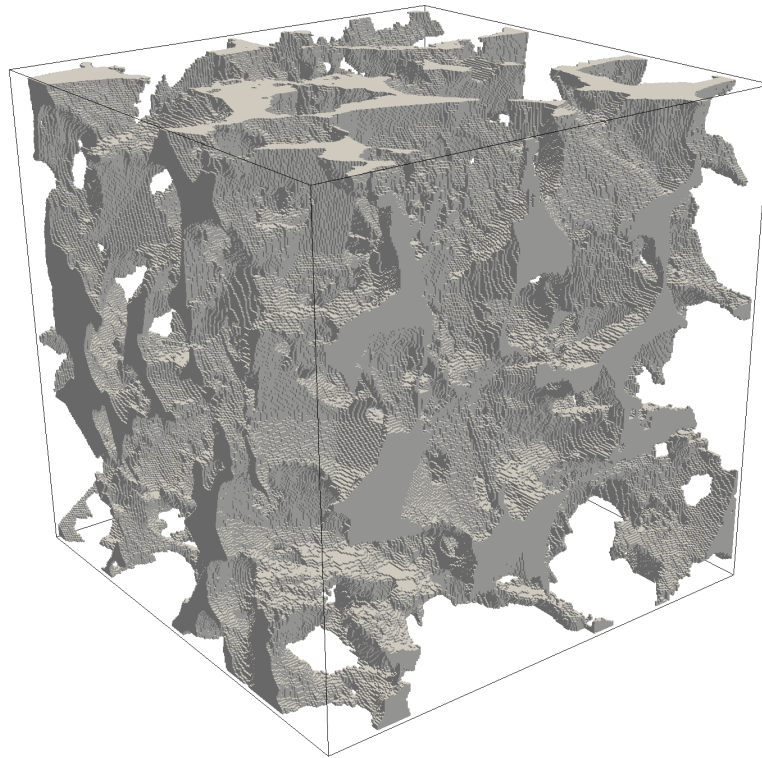


Рис. 1.1. Поровое пространство образца горной породы `sandstone_5`

для реалистичных образцов число расчетных ячеек может достигать до  $10^6 - 10^8$  и более;

- системы уравнений для описания многофазных и многокомпонентных течений содержат нелинейные члены с производными высокого (4-го–5-го) порядков.

Эти особенности существенно ограничивают выбор методов решения задачи. В частности, в силу высокой размерности задачи применение неявных методов вряд ли может дать удовлетворительное решение. Помимо этого, метод построения аппроксимаций должен быть универсальным по отношению к используемой (однокомпонентной или многокомпонентной) модели течения, а сам метод должен допускать эффективную реализацию при использовании высокопроизводительных вычислительных систем. Для практического применения метод так же должен быть надежным по отношению к особенностям дискретной, «воксельной» геометрии.

В настоящей работе для ее решения используется явная разностная схема. Для обеспечения устойчивости расчета используется модификация системы уравнений Навье-Стокса специального вида, называемая квазигидродинамической (КГид) системой уравнений. Модификация заключается в добавлении в классические уравнения малых физически обоснованных слагаемых диссипативного характера, пропорциональных некоторому малому вещественному параметру  $\tau$ . Эти дополнительные слагаемые позволяют использовать для расчета логически простые устойчивые разностные схемы с центральными

аппроксимациями пространственных производных, а их малость гарантирует, что модифицированную систему можно использовать для анализа течений, описываемых классическими моделями гидродинамики.

В 1980-х годах как первое дифференциальное приближение кинетически-согласованных разностных схем для решения уравнений газовой динамики [27] была построена родственная КГиД системе квазигазодинамическая (КГД) система. Результаты дальнейшего развития этого подхода представлены в монографиях [28, 29]. Позднее был предложен альтернативный способ построения КГД уравнений, основанный на усреднении классических уравнений гидродинамики по малому временному интервалу. КГиД система была предложена и детально исследована в работах Ю.В. Шеретова в 1997 году [29]. От КГД системы ее отличают допущения, в рамках которых она была получена. КГиД система также может быть получена усреднением классических уравнений гидродинамики по малому временному интервалу [30].

Оба подхода активно развиваются в последние годы. В частности, предложены варианты КГД-системы для задач теории мелкой воды [37, 38], магнитной гидродинамики [39, 40]. Перспективные результаты получены при использовании КГД подхода для расчета турбулентных течений [41].

Изначально КГД система построена для случая совершенного газа. В работе А.А. Злотника [42] (см. также [43]) эта модель обобщена на случай произвольного уравнения состояния, удовлетворяющего условиям термодинамической устойчивости<sup>1</sup>, наличия внешних сил и источников тепла.

Активно ведется и теоретическое исследование свойств КГД и КГиД систем: для КГиД системы установлены условия параболичности и равномерной параболичности по Петровскому, доказана локальная по времени теорема о существовании и единственности решения задачи Коши [44], найдены общие точные решения систем Эйлера, Навье-Стокса и КГиД для плоских установившихся течений [45], исследованы свойства решений КГиД системы в баротропном приближении [46].

КГиД система уравнений для описания течений вязкого теплопроводного сжимаемого газа без учета внешних сил имеет вид [28, 29]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{\Pi}, \quad (1.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \mathbf{j}_m \left( \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \nabla \cdot \mathbf{q} = \nabla \cdot (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}), \quad (1.1c)$$

где  $\rho$  — плотность,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости,  $\mathbf{j}_m$  — вектор плотности потока массы,  $p$  — давление,  $\mathbf{\Pi}$  — тензор вязких напряжений,  $\varepsilon$  — внутренняя энергия

<sup>1</sup> То есть удовлетворяющего условиям  $(\partial p / \partial \rho)_T > 0$ ,  $(\partial \varepsilon / \partial T) > 0$ ,  $p = p(\rho, T)$ ,  $\varepsilon = \varepsilon(\rho, T)$ .

единицы массы,  $\mathbf{q}$  — вектор плотности теплового потока. Определяющие соотношения для потоков консервативных величин имеют вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_m &= \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}), \quad \mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad \mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}_{\text{NS}} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \\ \mathbf{\Pi}_{\text{NS}} &= \eta \left[ \nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T - (2/3)(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I} \right] + \zeta(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I},\end{aligned}$$

где  $\mathbf{\Pi}_{\text{NS}}$  — классический тензор вязких напряжений Навье-Стокса,  $T$  — температура,  $\mathbf{I}$  — единичный тензор,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности,  $\eta$  — коэффициент динамической вязкости,  $\zeta$  — коэффициент объемной вязкости, в дальнейшем, если не сказано противное, равный нулю  $\zeta = 0$ .

Эти соотношения отличаются от классических присутствием в них вектора  $\mathbf{w}$ , который имеет размерность скорости и определяется выражением:

$$\mathbf{w} = \tau \left[ (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p \right],$$

где  $\tau > 0$  — вещественный параметр, имеющий размерность времени. Для разреженных газов параметр  $\tau$  может быть интерпретирован как среднее время столкновений между молекулами газа [29]. При описании течений плотных газов и жидкостей входящие в (1.1) члены, пропорциональные  $\tau$ , следует рассматривать как физически обоснованные регуляризаторы, обеспечивающие устойчивость центральных разностных аппроксимаций. Термин «физически обоснованные» здесь отражает как способ получения КГиД системы, так и факт наличия у нее необходимых для математических моделей гидродинамики свойств таких как справедливость балансового соотношения для энергии и выполнение энтропийного неравенства [28, 29, 44].

Приведенная выше КГиД система формально может быть получена двумя способами. Первый способ феноменологический. Он заключается в том предположении, что плотность потока массы в общем случае не равна среднему импульсу единицы объема  $\rho \mathbf{u} - \mathbf{j}_m = \rho \mathbf{w} \neq 0$ . Определяющие соотношения для векторов  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$ , описывающего плотность потока энергии, связанную с работой внутренних напряжений, получаются на основании выполнения второго закона термодинамики. При этом, в силу необходимости выполнения закона сохранения момента импульса, также модифицируется вид тензора напряжений. Детально вывод описан в работе [29].

Второй способ состоит в усреднении уравнений Навье-Стокса по малому интервалу времени  $[t, t + \Delta t]$ . Предполагается, что за время усреднения существенно изменяется только скорость течения, а изменение плотности и давления пренебрежимо мало. Вводится параметр сглаживания по времени  $\tau \in [0, \Delta t]$ . При выводе считают, что коэффициенты вязкости и теплопроводности имеют порядок  $O(\tau)$ . Членами порядка  $O(\tau^2)$  пренебрегают. Напри-

Обозначение	Название	Определение
Re	число Рейнольдса	$V_\infty L \rho_\infty / \eta$
Ma	число Маха	$V_\infty / c_\infty$
Pr	число Прандтля	$\eta c_p / \varkappa$
Pe	число Пекле	$Pe = Pr \cdot Re$
St	число Струхалия	$fL/V$

Таблица 1.1. Используемые параметры подобия

мер, для плотности такое среднее определяется как [30]:

$$\rho^*(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho(t') dt'.$$

Для остальных величин средние определяются аналогично. Подробно такой подход к выводу КГиД системы описан в работах [28, 30].

Для полноты приведем безразмерную форму уравнений КГиД системы. Пусть  $L$ ,  $V_\infty$ ,  $p_\infty$ ,  $\rho_\infty$ ,  $f$  — масштабы длины, скорости, давления, плотности и частоты соответственно. Конкретные значения этих параметров определяются постановкой задачи. Выражения для параметров подобия представлены в таблице 1.1.

Связь между размерными и безразмерными параметрами имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= V_\infty \tilde{\mathbf{u}}, & x_i &= \tilde{x}_i L, & t &= \tilde{t} \frac{L}{V_\infty}; \\ \rho &= \rho_\infty \tilde{\rho}, & p &= p_\infty \tilde{p}; & T &= \tilde{T} \frac{p_\infty}{\rho_\infty \mathcal{R}}, & c_s &= V_\infty \tilde{c}_s; \\ \varepsilon &= \tilde{\varepsilon} \frac{p_\infty}{\rho_\infty}, & \mathbf{q} &= V_\infty p_\infty \tilde{\mathbf{q}}; \\ \mathbf{j}_m &= \rho_\infty V_\infty \tilde{\mathbf{j}}_m, & \mathbf{w} &= V_\infty \tilde{\mathbf{w}}, & \tau &= \tilde{\tau} \frac{L}{V_\infty}; \\ \mathbf{f} &= \frac{V_\infty^2}{L} \tilde{\mathbf{f}}. \end{aligned}$$

Здесь  $\mathcal{R}$  — газовая постоянная. Таким образом, в безразмерном виде определяющие соотношения для течения совершенного газа имеют вид (знак « $\sim$ » для краткости опущен):

- калорическое и термическое уравнения состояния:

$$\varepsilon = \frac{1}{\gamma - 1} T, \quad p = \rho T,$$

где  $\gamma$  — постоянная адиабаты;

- выражение для полной энергии  $E$  и энтальпии  $H$ :

$$E = \rho \left( \varepsilon + \frac{1}{2} \gamma \text{Ma}^2 \mathbf{u}^2 \right), \quad H = \frac{1}{\rho} (E + p);$$

- выражение для скорости звука  $c_s$  и давления  $p$ :

$$c_s = \frac{1}{\text{Ma}} \sqrt{\frac{p}{\rho}} = \frac{1}{\text{Ma}} \sqrt{T}, \quad p = (\gamma - 1) \left( E - \frac{1}{2} \gamma \text{Ma}^2 \mathbf{u}^2 \rho \right);$$

- выражение для теплового потока:

$$\mathbf{q} = -\frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{1}{\text{Pe}} \nabla T;$$

- выражение для тензора вязких напряжений:

$$\mathbf{\Pi} = \frac{1}{\text{Re}} \left[ (\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \mathbf{I}(\text{div } \mathbf{u}) \right] + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w};$$

- выражение для вектора  $\mathbf{w}$ :

$$\mathbf{w} = \tau \left[ (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\gamma \text{Ma}^2 \rho} \nabla p - \mathbf{f} \right].$$

В безразмерном виде КГиД система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (1.2a)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\gamma \text{Ma}^2} \nabla p = \rho \mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi}, \quad (1.2b)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m H) + \nabla \cdot \mathbf{q} = \gamma \text{Ma}^2 \mathbf{f} \cdot \mathbf{j}_m + \gamma \text{Ma}^2 \nabla \cdot (\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}). \quad (1.2c)$$

Далее в работе приведенная выше система уравнений (1.1) использована как базовая модель для описания течений однокомпонентной однофазной жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов. В главе 4 приведено ее обобщение на случай многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов. При этом система (1.1) является ее частным случаем.

## Глава 2

# Разностная схема и комплекс программ

В данной главе приведено описание используемой геометрической модели порового пространства микрообразца горной породы, описана разностная схема, включая способ реализации граничного условия прилипания. В заключение приведено описание параллельного программного комплекса «3dqh» для моделирования однофазных однокомпонентных вязких течений в поровом пространстве пород-коллекторов.

### 2.1 Геометрическая модель

Современная компьютерная томография решает задачи получения изображения и восстановления внутренней структуры (от греч. *τομή* — сечение) [47] объекта исследования. Эта технология имеет широкое применение в том числе и в геологии в целом и в задачах исследования геометрической структуры микрообразцов пород-коллекторов нефти и газа.

Для построения геометрической модели исследуемого образца предварительно проводится его томография. В результате получается набор изображений в оттенках серого (grey scale images), которые объединяются в единое трехмерное «изображение». На следующем этапе проводится сегментирование — выделение контуров, разделяющих фазы, то есть выделение межфазных границ. Если задача состоит в отделении пустотного пространства от породы, то сегментирование называют бинаризацией. Обзор алгоритмов сегментирования и вычисления порога бинаризации (thresholding) представлен, например, в работах [48, 49]. Конечным результатом описанных процедур является трехмерный бинарный массив, лежащий в основе построения геометрической модели порового пространства. Отметим, что результатом такой процедуры является практически готовая к использованию структурированная расчетная сетка, шаг которой определяется разрешением томографа.

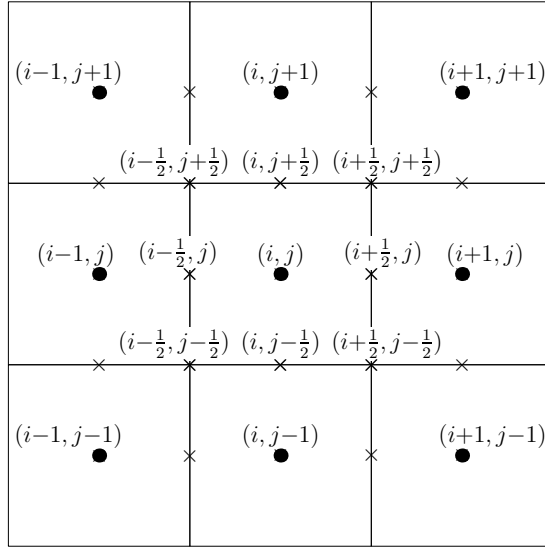


Рис. 2.1. Ячейки и узлы расчетной сетки в двумерном случае

Ячейки такой сетки (обычно называемые «вокселями») имеют вид кубов.

Для рассмотренных в диссертации изображений образцов единичное значение в массиве соответствует ячейке сетки, отнесенной к породе (*неактивные* ячейки), нулевое — ячейке, отнесенной к поровому пространству (*активные* ячейки). Расчет проводится только в активных ячейках.

Пример геометрической модели микрообразца горной породы приведен на рисунке 1.1.

## 2.2 Разностная схема

Выпишем разностную аппроксимацию системы уравнений (1.1). Для аппроксимации по времени используется явная схема первого порядка точности. Все пространственные производные аппроксимируются центральными разностями. В связи с особенностями геометрической модели естественно использовать ортогональную декартову сетку с равными шагами по пространству  $h_x = h_y = h_z = h$ , причем значение  $h$  определяется разрешением микрофотографии. Узел с номером  $(i, j, k)$  совпадает с геометрическим центром расчетной ячейки с номером  $(i, j, k)$ . Если полуцелый индекс один, то узел приходится на грань расчетной ячейки, если два — на ребро, если три — на угол.

На рисунке 2.1 приведена иллюстрация обозначения узлов для двумерного случая. Координаты геометрического центра ячейки с номером  $(i, j, k)$  имеют вид:  $(x_i, y_j, z_k) = (ih, jh, kh)$ . Незвестные величины отнесены к центрам ячеек.

Формулы для вычисления значения переменной  $\xi \in \{\rho, u_x, u_y, u_z, p\}$  в узлах с полуцелыми координатами имеют следующий вид. В узлах с одной



полуцелой координатой:

$$\begin{aligned}\xi_{i\pm\frac{1}{2},j,k} &= \frac{1}{2}(\xi_{i\pm 1,j,k} + \xi_{i,j,k}), & \xi_{i,j\pm\frac{1}{2},k} &= \frac{1}{2}(\xi_{i,j\pm 1,k} + \xi_{i,j,k}), \\ \xi_{i,j,k\pm\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(\xi_{i,j,k\pm 1} + \xi_{i,j,k}).\end{aligned}$$

В узлах с двумя полуцелыми координатами:

$$\begin{aligned}\xi_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2},k} &= \frac{1}{4}(\xi_{i\pm 1,j\pm 1,k} + \xi_{i\pm 1,j,k} + \xi_{i,j\pm 1,k} + \xi_{i,j,k}), \\ \xi_{i\pm\frac{1}{2},j,k\pm\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4}(\xi_{i\pm 1,j,k\pm 1} + \xi_{i\pm 1,j,k} + \xi_{i,j,k\pm 1} + \xi_{i,j,k}), \\ \xi_{i,j\pm\frac{1}{2},k\pm\frac{1}{2}} &= \frac{1}{4}(\xi_{i,j\pm 1,k\pm 1} + \xi_{i,j,k\pm 1} + \xi_{i,j\pm 1,k} + \xi_{i,j,k}).\end{aligned}$$

В узлах с тремя полуцелыми координатами:

$$\begin{aligned}\xi_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2},k\pm\frac{1}{2}} &= \frac{1}{8}(\xi_{i,j,k} + \xi_{i,j\pm 1,k} + \xi_{i\pm 1,j\pm 1,k} + \xi_{i\pm 1,j,k} + \\ &+ \xi_{i,j,k\pm 1} + \xi_{i,j\pm 1,k\pm 1} + \xi_{i\pm 1,j\pm 1,k\pm 1} + \xi_{i\pm 1,j,k\pm 1}).\end{aligned}$$

Значение некоторой функции  $f$  от переменной  $\xi$  в узле  $(i, j, k)$ :  $f_{i,j,k}(\xi) = f(\xi_{i,j,k})$ .

Для краткости введем следующие обозначения

$$\begin{aligned}D_h^x(\xi)_{i,j,k} &= \frac{(\xi)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (\xi)_{i-\frac{1}{2},j,k}}{h}, & D_h^y(\xi)_{i,j,k} &= \frac{(\xi)_{i,j+\frac{1}{2},k} - (\xi)_{i,j-\frac{1}{2},k}}{h}, \\ D_h^z(\xi)_{i,j,k} &= \frac{(\xi)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - (\xi)_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{h}.\end{aligned}$$

Обозначим  $\widehat{\xi}_{i,j,k} = \xi_{i,j,k}^{n+1}$ ,  $\xi_{i,j,k} = \xi_{i,j,k}^n$ . Верхние индексы обозначают номер временного слоя, а нижние индексы соответствуют узлам по пространству.

Разностные аппроксимации системы уравнений 1.1 имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\widehat{\rho}_{i,j,k} - \rho_{i,j,k}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx})_{i,j,k} + D_h^y(j_{my})_{i,j,k} + D_h^z(j_{mz})_{i,j,k} &= 0, \\ \frac{\widehat{(\rho u_x)}_{i,j,k} - (\rho u_x)_{i,j,k}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}u_x)_{i,j,k} + D_h^y(j_{my}u_x)_{i,j,k} + D_h^z(j_{mz}u_x)_{i,j,k} &= \\ = -D_h^x p_{i,j,k} + D_h^x(\Pi_{xx})_{i,j,k} + D_h^y(\Pi_{yx})_{i,j,k} + D_h^z(\Pi_{zx})_{i,j,k},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{(\widehat{\rho u_y})_{i,j,k} - (\rho u_y)_{i,j,k}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}u_y)_{i,j,k} + D_h^y(j_{my}u_y)_{i,j,k} + D_h^z(j_{mz}u_y)_{i,j,k} = \\
& = -D_h^y p_{i,j,k} + D_h^x(\Pi_{xy})_{i,j,k} + D_h^y(\Pi_{yy})_{i,j,k} + D_h^z(\Pi_{zy})_{i,j,k}, \\
& \frac{(\widehat{\rho u_z})_{i,j,k} - (\rho u_z)_{i,j,k}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}u_z)_{i,j,k} + D_h^y(j_{my}u_z)_{i,j,k} + D_h^z(j_{mz}u_z)_{i,j,k} = \\
& = -D_h^y p_{i,j,k} + D_h^x(\Pi_{xz})_{i,j,k} + D_h^y(\Pi_{yz})_{i,j,k} + D_h^z(\Pi_{zz})_{i,j,k}, \\
& \frac{\widehat{E}_{i,j,k} - E_{i,j,k}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}H)_{i,j,k} + D_h^y(j_{my}H)_{i,j,k} + D_h^z(j_{mz}H)_{i,j,k} + \\
& + D_h^x(q_x)_{i,j,k} + D_h^y(q_y)_{i,j,k} + D_h^z(q_z)_{i,j,k} = \\
& = D_h^x(\Pi_{xx}u_x)_{i,j,k} + D_h^x(\Pi_{xy}u_y)_{i,j,k} + D_h^x(\Pi_{xz}u_z)_{i,j,k} + \\
& + D_h^y(\Pi_{yx}u_x)_{i,j,k} + D_h^y(\Pi_{yy}u_y)_{i,j,k} + D_h^y(\Pi_{yz}u_z)_{i,j,k} + \\
& + D_h^z(\Pi_{zx}u_x)_{i,j,k} + D_h^z(\Pi_{zy}u_y)_{i,j,k} + D_h^z(\Pi_{zz}u_z)_{i,j,k}.
\end{aligned}$$

Приведенная схема является условно устойчивой, ограничение на шаг по времени имеет вид [28, 29, 50]:

$$\Delta t \leq \beta \frac{h}{c_s^{max}}, \quad (2.2)$$

где  $c_s^{max}$  — максимальное по всем расчетным ячейкам значение скорости звука,  $\beta$  — число Куранта.

Как уже было сказано, устойчивость описанной разностной схемы обеспечена наличием дополнительных слагаемых диссипативного характера, пропорциональных параметру  $\tau$ , который в общем случае зависит от шага разностной сетки и может быть вычислен в каждой расчетной ячейке по формуле [28]:

$$\tau = \frac{\eta}{c_s^2 \rho} + \alpha^* \frac{h}{c_s},$$

где  $\alpha^*$  — некоторая постоянная, за счет выбора которой обеспечивается устойчивость вычислений. Поскольку в настоящей работе рассматриваются слабожимаемые жидкости, первое слагаемое значительно меньше второго.

## 2.3 Граничное условие прилипания

Для учета граничных условий на границе между активной и неактивной областью используется метод «фиктивных» ячеек: в неактивную ячейку, граничащую с активной, копируется значение плотности и давления, а скорость записывается с обратным знаком, так что на границе выполняется условие прилипания. Поскольку в разностной схеме используется двадцатисемиточеч-

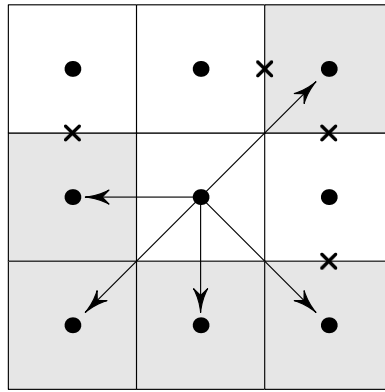


Рис. 2.2. Пример «противоречивой» конфигурации ячеек в расчетном шаблоне. Серым цветом помечены неактивные ячейки

ный шаблон (девятиточечный в двумерном случае, см. рисунок 2.1), то конфигурация неактивных ячеек может оказаться «причудливой» и в некотором смысле «противоречивой». Например, на рисунке 2.2 показан случай, когда неясно какие значения скорости, плотности и давления записать в неактивную ячейку, расположенную в верхнем правом углу, чтобы на всех ее гранях точно выполнялось условие прилипания. В алгоритме граничные условия прилипания учтены специальным образом, не усложняющим программную реализацию математической модели: при расчете значений гидродинамических переменных в текущей ячейке значения плотности и давления записываются во все неактивные ячейки ее шаблона, а значение скорости записывается с обратным знаком. Таким образом, для некоторых ячеек шаблона граничное условие прилипания выполняется с первым порядком точности по пространству. На рисунке 2.2 условно обозначена упомянутая процедура. В точках, обозначенных «крестиками», граничные условия прилипания выполняются приближенно. Подчеркнем, что конечной целью расчета течения в геометрии образцов горных пород является определение значения коэффициента проницаемости по соответствующей сегментированной микротомограмме, которая, вообще говоря, обладает некоторой погрешностью (в частности, она зависит от разрешения томографа и, как уже было сказано, выбранного алгоритма сегментирования). Иными словами, истинная геометрия порового пространства известна *заведомо* неточно, и поэтому аппроксимация граничных условий прилипания с точностью  $O(h)$  для рассматриваемой задачи является приемлемой.

Как видно из описанных ниже численных экспериментов, такой подход к реализации граничных условий не оказывает существенного влияния на значения как коэффициента проницаемости, так и гидродинамических полей.

## 2.4 Программный комплекс

На основе приведенной системы уравнений (1.1) и описанных алгоритмов реализован параллельный программный комплекс «3dqh» для моделирования течений в геометрии порового пространства микрообразцов горных пород. В качестве языка реализации выбран язык C++. Для обеспечения параллельности использован программный интерфейс MPI [51, 52].

Начальные параметры, геометрия и другая необходимая для работы программы информация задается в конфигурационном файле на скриптовом встраиваемом языке программирования (см., например, [53], глава 67). Такой подход имеет ряд преимуществ по сравнению с обычными текстовыми файлами, среди которых выделим:

1. отсутствие необходимости перекомпилировать исходный текст программы при изменении некоторых параметров (например геометрии области, начальных данных, констант и др.);
2. возможность написания собственных функций, за счет чего можно расширить функционал основной программы, не изменяя ее основного исходного текста;
3. возможность использования комментариев, что является мелкой особенностью, но существенно облегчающей работу с программой.

Существует множество различных скриптовых языков, которые можно использовать как встраиваемые: Python, Perl, Ruby и др. В настоящей работе для этих целей был выбран язык Lua [54—56] по следующим причинам:

- его интерпретатор реализован на языке C, поэтому работает на большинстве операционных систем, что позволяет его использовать в кросс-платформенных приложениях;
- имеет простой синтаксис;
- сам язык и взаимодействие с кодом на языках C/C++ хорошо документированы;
- является стабильным и популярным языком программирования, используемым в большом числе проектов в качестве встраиваемого языка программирования (World of Warcraft, Adobe Photoshop Lightroom и др.);
- является легковесным (в проекте исходные тексты занимают меньше 1 Мб, достаточно иметь всего лишь одну динамическую библиотеку);
- распространяется под «свободной» лицензией MIT.

В листинге 1 приведен пример задания геометрии следующей конфигурации: на верхней и нижней части расчетной области ставятся условия прилипания, на входной границе задана скорость согласно профилю Пуазейля, на

```

1 function Sphere (x, y, z, Ox, Oy, Oz, r)
2     return (x-Ox)^2 + (y-Oy)^2 + (z-Oz)^2 <= r^2
3 end
4
5 function SimpleSphereCubicPacking(x,y,z, lx, ly, lz, r, shift_y)
6     ny = math.floor(ly/(2*r))
7     nx = math.floor(lx/(2*r))
8     nz = math.floor(lz/(2*r))
9     res = false
10    for i = 1,nx do
11        for j = 1,ny do
12            for k = 1,nz do
13                res = res or Sphere(x,y,z, (i - 0.5)*2*r,
14                                     (j - 0.5)*2*r + shift_y ,
15                                     (k - 0.5)*2*r, r)
16            end
17        end
18    end
19
20    return res
21 end
22 -----
23
24 Source = "GENERATE"
25
26 Top     = "WALL"
27 Bottom = "WALL"
28 Back   = "OPEN"
29 Front  = "OPEN"
30 Left   = "POIS"
31 Right  = "OFLOW"
32
33 Nx = 80 -- number of cells along x axis
34 Ny = 160 -- number of cells along y axis
35 Nz = 80 -- number of cells along z axis
36 Re = 100.0 -- Reynolds number
37 Ma = 0.1 -- Mach number
38 Beta = 0.2 -- Courant number
39 Alpha = 0.5 -- parameter in QHD definition of tau
40 H = 1.0 -- characteristic length
41 R = H*0.25 -- "radius"
42 LX = 1.0*H
43 Step = LX/(Nx) -- space step
44 LY = (Ny)*Step
45 LZ = (Nz)*Step
46 EOS = "PERFECT_GAS" -- equation of state
47
48 -- Initial values
49 Velocity_X = 0.0
50 Velocity_Y = 0.0
51 Velocity_Z = 0.0
52 Pressure = 1.0
53 Density = 1.0
54
55 iflow_density = Density
56 iflow_velocity = Velocity_Y
57 oflow_pressure = Pressure
58
59 function Obstacle(x,y,z)
60     return SimpleSphereCubicPacking(x,y,z, LX, LY*0.5, LZ, R*0.5, LY*0.25)
61 end

```

Листинг 1. Пример конфигурационного файла на языке Lua

выходной границе фиксировано давление, а для производные остальных величин по нормали равны нулю, на передней и задней границах заданы «мягкие» граничные условия, то есть производные всех величин по нормали к границе равны нулю. На обтекаемом теле ставятся условия прилипания. Само обтекаемое тело задается с помощью функции `Obstacle`. Эта функция на вход принимает координаты точки и возвращает `true`, если точка принадлежит обтекаемому телу, возвращает `false` — в противном случае. Здесь обтекаемое тело представляет собой простую упаковку шаров, которая задается функцией `SimpleSphereCubicPacking`. Функция `Obstacle` вызывается в основном коде программы, тогда как ее тело определяется в конфигурационном файле. Таким образом, пользователь свободен менять геометрию, не изменяя исходный текст основной программы, меняя тело `Obstacle` в конфигурационном файле.

При дальнейшем развитии программы при необходимости также легко и в известной степени однотипно могут быть добавлены новые переменные, новые функции и т.д.

Смысл всех переменных в листинге 1 следует из их названия или из комментариев. Поясним значения лишь некоторых. Переменная `Source` задает источник входных данных. Возможны следующие значения:

- `Source = "GENERATE"` используется для построения геометрии расчетной области по заданным в конфигурационном файле данным;
- `Source = "RESTART"` используется для возобновления счета;
- `Source = "RAW"` используется, для задания геометрии расчетной области на основе некоторого трехмерного бинарного массива (например, 3d изображения образца керна).

Для распределения ячеек расчетной области между процессами используется библиотека `Metis` [57]. Далее кратко описана процедура, предшествующая началу параллельного счета:

1. в процессе с рангом 0 происходит инициализация расчетной области и, в частности, построение сетки;
2. сетка передается объекту класса `Partitioner`, который в том числе выполняет вызов функции `METIS_PartGraphKway`, осуществляющей разметку ячеек расчетной сетки, формируя соответствующие подобласти;
3. для каждой подобласти определяется содержащей ее минимальный параллелепипед со сторонами, параллельными координатным плоскостям (эти параллелепипеды используются для построения сетки каждым процессом в отдельности);

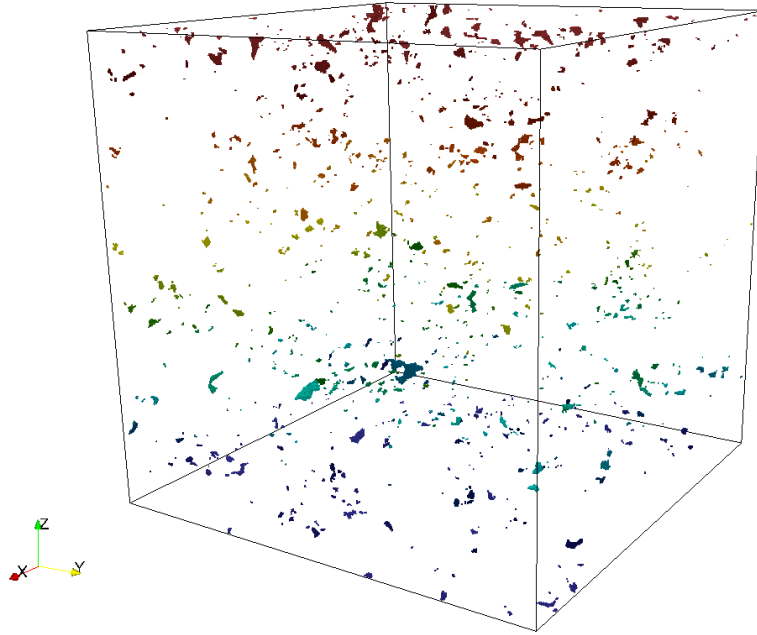


Рис. 2.3. Изолированные области порового пространства для изображения образца размером  $400^3$

4. для каждой подобласти определяются обменные ячейки с другими областями;
5. вся полученная информация рассылается процессам с рангом  $nr \geq 1$ .

Одним из основных условий, которым должна удовлетворять программная реализация симулятора для моделирования течений в воксельной геометрии, является возможность использования практически любой подаваемой на вход геометрии. Разработанный программный комплекс удовлетворяет этому условию. Однако для ускорения расчета перед его проведением геометрическая модель проходит дополнительную обработку. В частности, удаляются все изолированные активные области (см. рисунок 2.3). Ясно, что эта процедура никак не влияет на течение и, как следствие, на конечное значение коэффициента проницаемости. В некоторых случаях эта процедура может существенно ускорить счет за счет более качественной балансировки нагрузки между потоками исполнения.

Запись результатов расчетов осуществляется в отдельную директорию. В эту директорию записывается  $nr + 1$  файлов, где  $nr$  – число процессов, с которым проводились вычисления. Из них  $nr$  файлов имеют название вида `proc_rank.qh` и содержат результаты расчета течения в подобласти с номером `rank`. В файле `data.qhx` в xml-формате содержится описание данных, хранящихся в файлах `proc_rank.qh`, а также значения всех необходимых для возобновления расчета констант. Пример `data.qhx` приведен в листинге 2.

Для последующей визуализации файлы с данными расчетов конвертируются в один из распространенных форматов – `vtk`. Этот формат позволя-

```

1 <?xml version="1.0"?>
2 <qh_output version="1">
3   <format>binary</format>
4   <output_files total_num="4">
5     <file color="0" min_i="1" min_j="1" min_k="1"
6       active_cells="172723">proc_0.qh</file>
7     <file color="1" min_i="27" min_j="1" min_k="1"
8       active_cells="172728">proc_1.qh</file>
9     <file color="2" min_i="1" min_j="66" min_k="1"
10      active_cells="173756">proc_2.qh</file>
11     <file color="3" min_i="32" min_j="86" min_k="1"
12      active_cells="173777">proc_3.qh</file>
13   </output_files>
14   <parameters>
15     <time>0.0024708524745956</time>
16     <next_time_step>0.0002440175354330</next_time_step>
17     <iteration>10</iteration>
18     <size_x>80</size_x>
19     <size_y>160</size_y>
20     <size_z>80</size_z>
21     <space_step>0.0125</space_step>
22     <mach>0.1</mach>
23     <reynolds>100.0</reynolds>
24     <prandtl>0.6666666865348816</prandtl>
25     <alpha>0.5</alpha>
26     <beta>0.2</beta>
27     <oflow_pressure>1.0</oflow_pressure>
28     <iflow_density>1.0</iflow_density>
29     <iflow_velocity>0.0</iflow_velocity>
30     <gamma>1.4</gamma>
31     <Equation_of_state>1</Equation_of_state>
32     <total_active_cells>692984</total_active_cells>
33     <sample_active_cells>692984</sample_active_cells>
34     <offset>0</offset>
35     <duct>0</duct>
36   </parameters>
37 </qh_output>

```

Листинг 2. Пример файла data.qhx



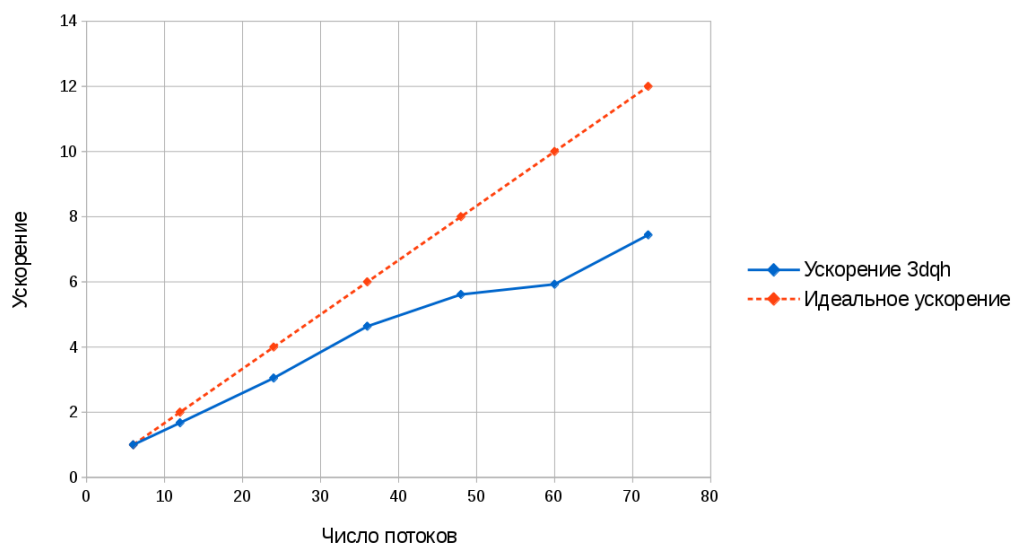


Рис. 2.4. Полученное ускорение при счете с различным числом потоков на образце размером  $400^3$  ячеек

ет использовать мощные средства визуализации, в том числе параллельные. Это может быть важно, поскольку даже для образца с числом ячеек  $\approx 400^3$  необходимы довольно большие объемы оперативной памяти. Тем более остро встает вопрос о визуализации и анализе данных еще больших объемов.

В качестве средства визуализации использован пакет Paraview [58], являющийся свободным и кросс-платформенным. Он разработан специально для визуализации данных очень больших объемов и может работать на системах с распределенной памятью, в том числе на кластере в режиме «клиент-сервер». При этом рендеринг и все расчеты, связанные с визуализацией и обработкой данных, могут осуществляться на стороне сервера.

Для анализа эффективности параллельной реализации программного комплекса проведены замеры времени работы программы на различном числе процессоров. Результаты показаны на рисунке 2.4 в виде зависимости ускорения от числа процессов. Под ускорением здесь понимается отношение времени, затраченного при расчете с 6 процессами, ко времени, затраченного при расчете на  $NP$  процессах:  $t_6/t_{NP}$ . Бралось среднее время за первые 10 временных шагов. Расчет проведен на образце размером  $400^3$  ячеек. Все расчеты проведены на суперкомпьютере К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

По результатам проведенного исследования разработанная реализация признана пригодной для расчета течений в микрообразцах реалистичной размерности. Отметим, однако, что в текущей реализации потенциал ускорения использован не полностью, так как задача оптимизации программы с точки зрения максимального сокращения времени расчета в настоящей работе в принципе не ставилась. Так, существенного сокращения времени расчета можно добиться путем адаптации программы для использования графических ускорителей (GPGPU) и комбинированных систем CPU/GPGPU.

## Глава 3

# Моделирование однофазных течений

В данной главе рассмотрено моделирование течений однофазной однокомпонентной жидкости при малых числах Маха. В рамках валидации и верификации используемой математической модели, вычислительных алгоритмов и разработанного программного комплекса рассмотрен ряд модельных задач, включая задачи обтекания цилиндра квадратного сечения в ограниченном канале, течения в кубической каверне, в трубе квадратного сечения. Результаты расчетов хорошо согласуются с опубликованными данными или аналитическими решениями. В рамках валидации методики определения значения коэффициента проницаемости проведен ряд расчетов течений в модельных пористых средах, для которых значение коэффициента проницаемости может быть найдено аналитически.

### 3.1 Области с простой геометрией

В настоящем разделе представлены результаты расчетов ряда тестовых задач в «простой» геометрии и приведены результаты сравнения полученных численных решений с известными. Рассмотренные «эталонные» решения соответствуют случаю несжимаемой жидкости, поэтому для корректного сравнения полученных результатов с «эталонными», параметры течения заданы такими, чтобы в расчетах реализовывался случай практически несжимаемого течения (числа Маха  $Ma = 10^{-2} \div 10^{-1}$ , что обеспечивает относительное изменение плотности  $\Delta\rho \sim Ma^2 = 10^{-4} \div 10^{-2}$ ). Относительные отклонения плотности и температуры от начального значения контролировались и не превышали величину порядка процентов. Выбор шага интегрирования по времени производился в соответствии с критерием Куранта. Подробнее этот вопрос рассмотрен в разделе 3.1.4.

### 3.1.1 Обтекание цилиндра

Рассмотрим двумерную задачу об обтекании цилиндра квадратного сечения в канале. Схема расчетной области изображена на рисунке 3.1. В обозначениях рисунка  $D$  — длина стороны квадрата, являющегося сечением цилиндра плоскостью рисунка,  $H$  — высота расчетной области,  $V$  — максимальная скорость входного потока. При обезразмеривании в качестве соответствующих масштабов взяты  $D$ ,  $V$ , плотность входного потока  $\rho_\infty$ , давление входного потока  $p_\infty$ .

Значения коэффициента перекрытия  $B = D/H = 1/8$  и длины расчетной области  $L = 30D$  были выбраны в соответствии с [59].

Граничные условия на левой границе расчетной области ( $x = 0$ ) соответствуют втеканию жидкости с паузейлевским профилем скорости:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{8\gamma\text{Ma}^2}{L_y^2\text{Re}}, \quad \rho = 1, \quad u_x = \frac{4}{L_y^2}(L_y y - y^2), \quad u_y = 0,$$

где  $L_y$  — безразмерная высота канала ( $L_y = H/D = 8$ ).

На правой границе заданы граничные условия вытекания:

$$p = 1, \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_y}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0.$$

На нижней и верхней границах расчетной области ( $y = 0, L_y$ ) и на границе цилиндра задавались условия прилипания:

$$u_x = u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0.$$

Расчет проводился на сетке с числом ячеек по координатным направлениям  $N_x = 300$ ,  $N_y = 82$  и  $N_x = 600$ ,  $N_y = 162$ . Таким образом, на длину стороны квадрата приходилось 10 ячеек и 20 ячеек соответственно.

Расчет стационарных режимов течения проводился до установления в соответствии с критерием:

$$\left\| \frac{\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}}{\Delta t} \right\|_\infty < 10^{-6},$$

где максимум величины вычисляется по всем ячейкам расчетной области,  $\mathbf{u}$  и  $\hat{\mathbf{u}}$  — сеточное поле скорости для двух последовательных шагов по времени соответственно,  $\Delta t$  — величина шага по времени.

Характерное время установления составляло величину порядка сотен, что соответствует времени, за которое набегающий поток пробегает несколько десятков длин каналов. Например, для  $\text{Re} = 20$  время установления составляет  $\approx 700$  единиц безразмерного времени (при шаге  $\Delta t \approx 10^{-3}$ ). Это соответствует тому, что жидкая частица, движущаяся со скоростью  $V$ , преодолевает расстояние порядка 23 длин канала.

Известно, что для рассматриваемых геометрических параметрах канала и обтекаемого тела в диапазоне чисел Рейнольдса  $Re \in (5, 60)$  за обтекаемым цилиндром образуется рециркуляционный вихрь, длина которого линейно растет при увеличении числа Рейнольдса. Параметры указанной зависимости хорошо известны и приведены, например, в [59]. На рисунке 3.2а показана зависимость из [59] и полученные в настоящей работе значения. Наблюдается хорошее совпадение расчетных и ожидаемых результатов.

На рисунке 3.2b приведены значения силы сопротивления  $f_d$  как функции числа Рейнольдса  $Re$ , полученные в расчетах, и значения из работы [59]. Поскольку рассматривается двумерная задача, то сила сопротивления  $f_d$  и коэффициент силы сопротивления  $c_d$  рассчитываются на единицу длины тела вдоль направления, перпендикулярного плоскости  $Oxy$ , в которой расположена расчетная область. В безразмерном виде выражение для вектора силы, действующей на тело со стороны потока, имеет вид:

$$\mathbf{f} = \rho_\infty V^2 \oint_{\partial\Omega} \left( \mathbf{\Pi} - \frac{1}{\gamma Ma^2} p \mathbf{I} \right) \cdot \mathbf{n} dl,$$

где  $\mathbf{n}$  — вектор единичной внешней нормали к поверхности обтекаемого тела. Сила сопротивления  $f_d$  и подъемная сила  $f_l$  определяются как проекция  $\mathbf{f}$  на ось  $Ox$  и  $Oy$  соответственно. Выражения для коэффициента сопротивления  $c_d$  и коэффициента подъемной силы  $c_l$  имеют вид:

$$c_d = f_d / \left( \frac{1}{2} \rho_\infty V^2 L \right), \quad c_l = f_l / \left( \frac{1}{2} \rho_\infty V^2 L \right).$$

Отметим, что входящие в выражение для тензора напряжений  $\mathbf{\Pi}$  дополнительные (по сравнению с уравнениями Навье-Стокса) слагаемые обращаются в ноль на границе обтекаемого тела. Как следствие, сила, действующая на тело, не зависит от  $\tau$ . Кроме того, при заданных на твердых стенках граничных условиях прилипания обращается в ноль и величина  $\mathbf{w}$ , вследствие чего не возникает потока массы через границу.

Безразмерная величина вертикальной составляющей действующей на тело силы (подъемной силы) во всех проведенных расчетах при  $Re < 60$  имела значение порядка  $10^{-13}$ – $10^{-15}$ , незначительно отличающееся от машинного нуля.

Известно [59], что для рассматриваемой задачи число  $Re = 60$  является критическим: при числах  $Re \geq 60$  течение становится нестационарным, и наступает автоколебательный режим. Результаты расчетов с использованием КГиД системы согласуются с этим фактом, см., в частности, рисунок 3.3.

На рисунке 3.4 показана зависимость коэффициента подъемной силы  $c_f$  от времени  $t$  для  $Re = 100$  на сетке  $600 \times 162$ . Видно, что начиная с момента времени  $t \approx 350$  величина подъемной силы осциллирует, а с момента  $t \approx 450$

автоколебательный режим «устанавливается». На рисунке 3.6 показана зависимость величины числа Струхала  $St$  от числа Рейнольдса  $Re$ , полученная в диссертации и в [59]. В качестве характерной частоты для определения числа Струхала выбиралась частота изменения коэффициента подъемной силы  $c_f$ .

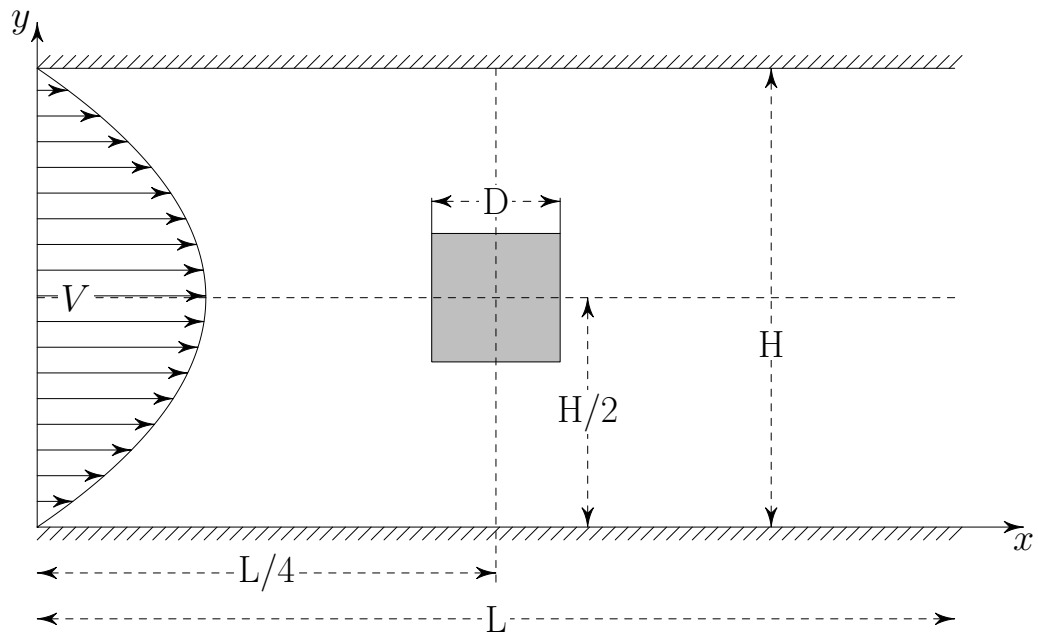


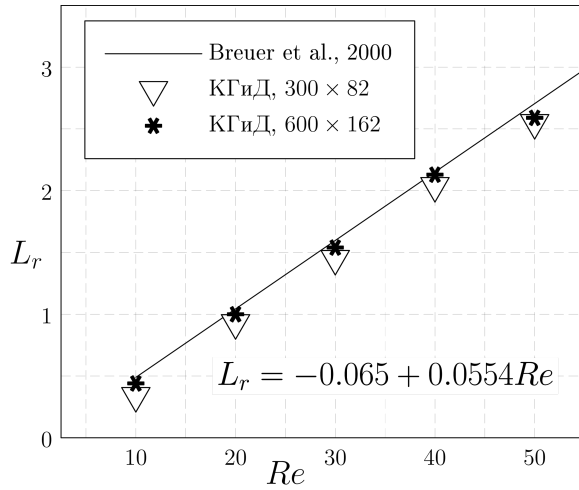
Рис. 3.1. Схема расчетной области.

### 3.1.2 Течение в кубической камере

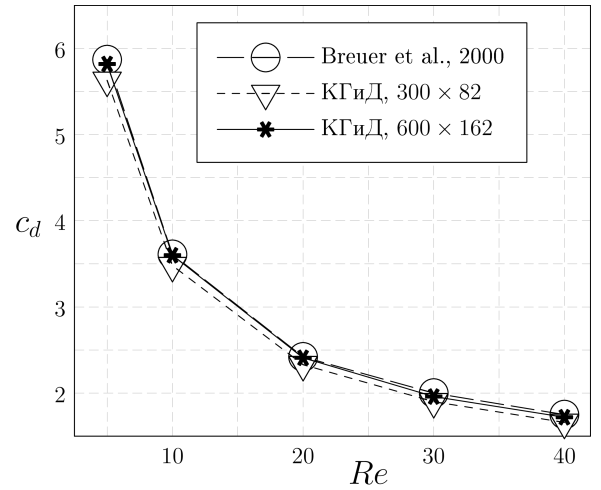
В данном разделе рассмотрим задачу о течении жидкости в кубической камере с подвижной верхней крышкой и длиной ребра  $L = 1$ . На всех границах стоят условия прилипания. На рисунках 3.7 показаны линии, касательные к векторным полям  $(0, u_y, u_z)$ ,  $(u_x, u_y, 0)$ ,  $(u_x, 0, u_z)$ , в плоскостях, параллельных координатным плоскостям и проходящих через центр куба  $(L/2, L/2, L/2)$ . Расчет проводился для числа Рейнольдса  $Re = 100$  и числа Маха  $Ma = 0.01$ . Верхняя граница движется со скоростью  $\mathbf{v} = (0, V, 0)$ ,  $V = 1$ . Полученное решение хорошо совпадает с известными результатами, см., например, [60]. На рисунке 3.5 показано распределение компоненты скорости  $u_y$  вдоль прямой  $x = y = L/2, z \in (0, L)$ , полученное в настоящей работе и в работе [61].

### 3.1.3 Течение в трубе квадратного сечения

Рассмотрим течение вязкой несжимаемой жидкости в трубе квадратного сечения. Пусть высота и ширина трубы  $L_x = L_z = a$ , её ось параллельна координатной оси  $Oy$ , стороны параллельны координатным плоскостям  $xOy$



(a) Зависимость длины вихря от числа Рейнольдса  $Re$



(b) Зависимость коэффициента сопротивления в задаче обтекания цилиндра от числа Рейнольдса  $Re$

Рис. 3.2



(a) Переход к автоколебательному режиму при  $Re = 60$



(b) Автоколебательный режим.  $Re = 100$

Рис. 3.3. Визуализация поля модуля вектора  $\text{rot } \mathbf{u}$  для случая обтекания цилиндра при  $Re = 60$  и  $Re = 100$  на сетке  $600 \times 162$

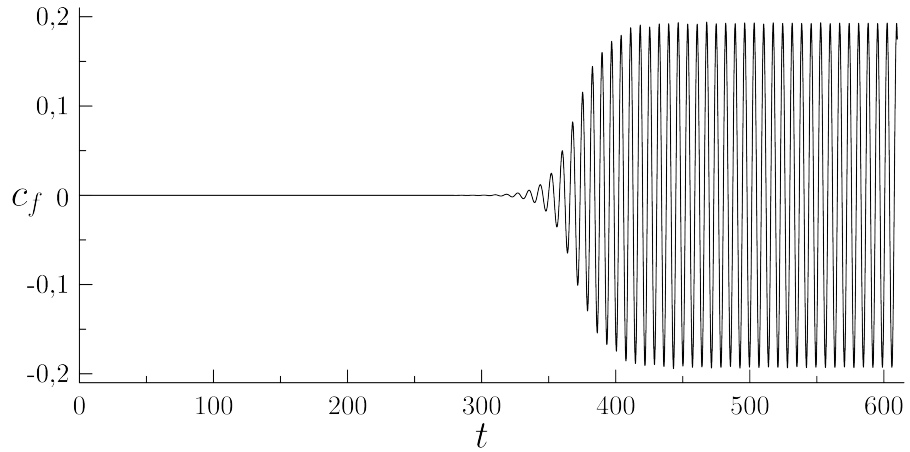


Рис. 3.4. Изменение коэффициента подъемной силы  $c_f$  в зависимости от времени  $t$  при  $Re = 100$  в задаче обтекания цилиндра квадратного сечения на сетке  $600 \times 162$

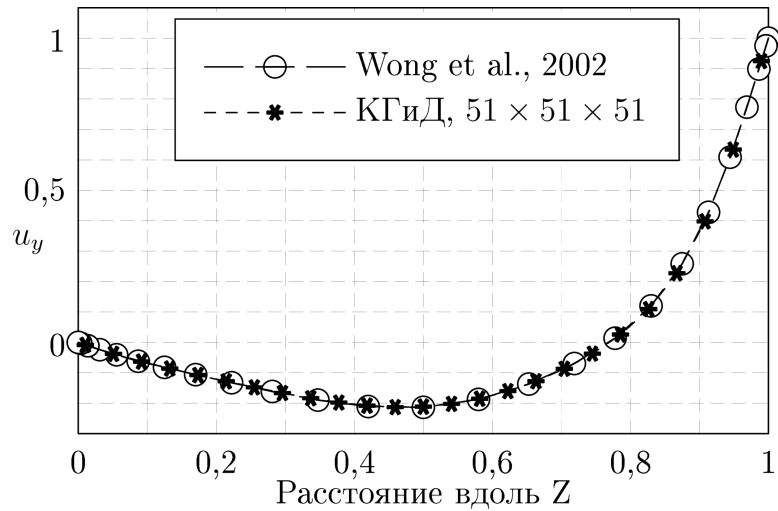


Рис. 3.5. Распределение  $u_y$  вдоль прямой  $x = y = L/2, z \in (0, L)$  в кубической камере

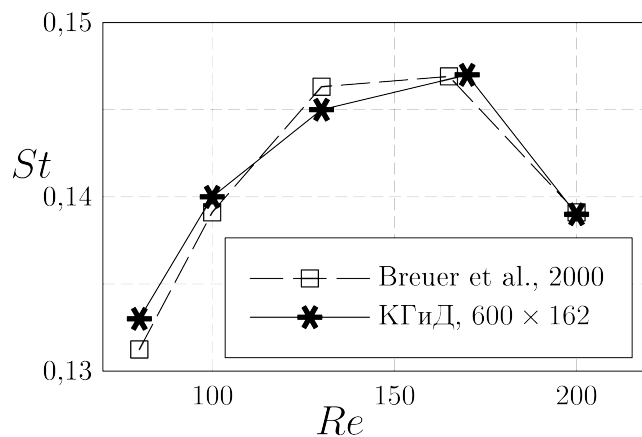


Рис. 3.6. Зависимость  $St$  от  $Re$ , полученная в данной работе и в работе [59]

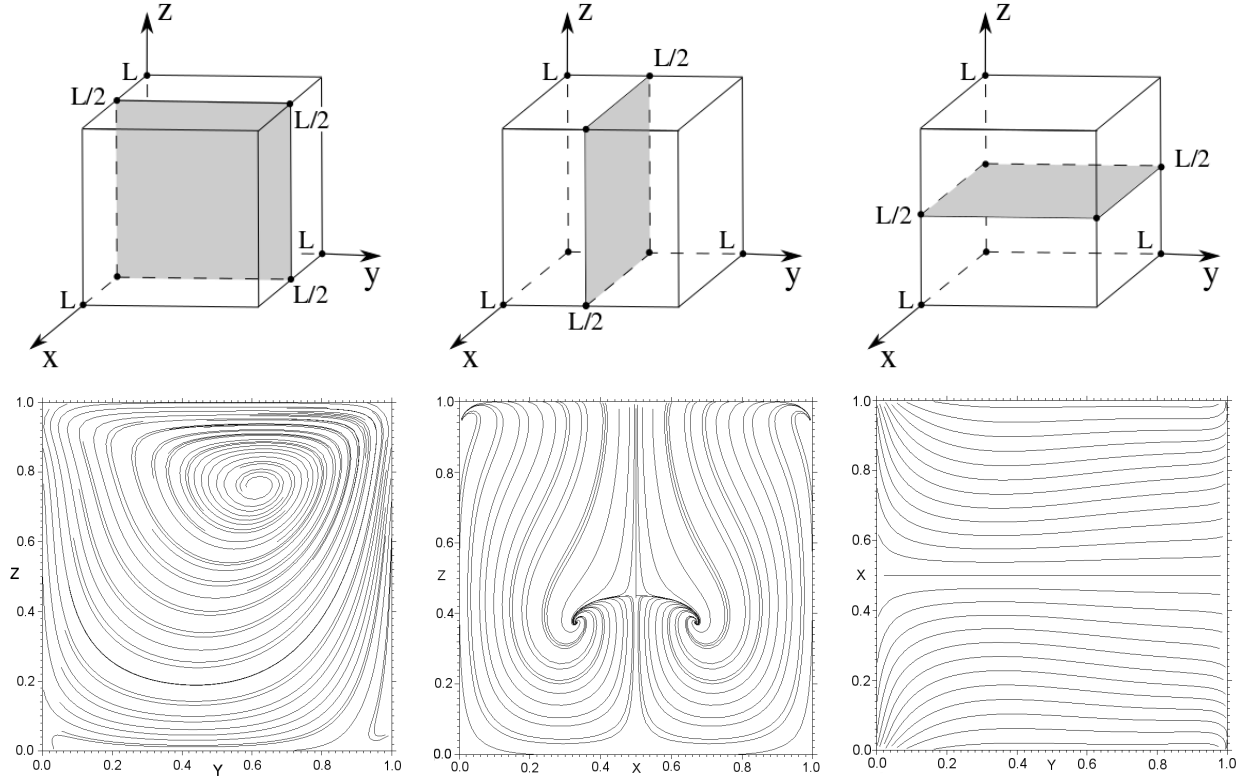


Рис. 3.7. Проекция линий тока на соответствующие плоскости в задаче о течении жидкости в трехмерной камере при  $Re = 100$

и  $yOz$ . Тогда из системы уравнений Навье-Стокса для определения скорости в трубе в стационарном случае имеем ([62], стр. 244):

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \eta \left( \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right), \quad v_y = v_y(x, z), \quad p = p(y).$$

Решая это уравнение, получаем выражение для скорости  $\mathbf{v} = (0, v_y, 0)$ , где:

$$v_y(x, z) = -\frac{16a^2}{\pi^4 \eta} \frac{\partial p}{\partial y} \sum_{k,n=1}^{\infty} \frac{1}{nk(n^2 + k^2)} \sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi kz}{a}\right). \quad (3.1)$$

Отсюда для объемного расхода получаем:

$$Q = -\frac{64a^4}{\pi^6 \eta} \frac{\partial p}{\partial y} \sum_{n,k=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 k^2 (n^2 + k^2)} \approx -\frac{a^4}{\eta} \frac{\partial p}{\partial y} 0.035144, \quad (3.2)$$

где суммирование в выражениях ведется по нечетным  $n$  и  $k$ .

Рассматривается течение совершенного вязкого теплопроводного газа со следующими параметрами:  $\eta = 0.1665$  Па · сек,  $\varkappa = 0.0233$  кг · м<sup>2</sup> / (К · сек<sup>3</sup>),  $\mathcal{R} = 296.8$  Дж / (кг · К). Начальные значения:  $p_0 = 10^5$  Па,  $\rho_0 = 1.251$  кг / м<sup>3</sup>. Для расчета выбрана сетка размером  $19 \times 57 \times 19$ ,  $L_x = L_z = a$ ,  $L_y = 3a$ ,



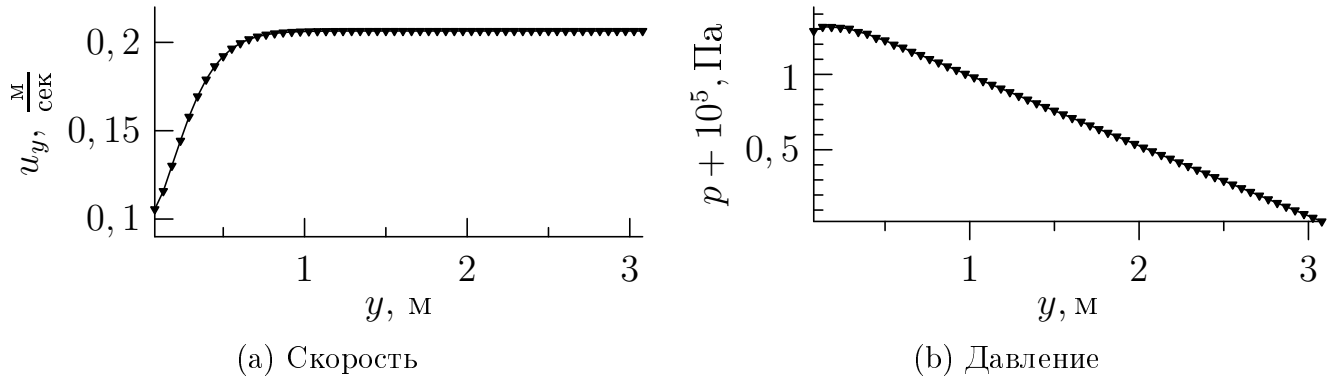


Рис. 3.8. Распределение давления  $p$  и компоненты скорости  $u_y$  вдоль оси трубы  $x = L_x/2$ ,  $y \in [0, L_y]$ ,  $z = L_z/2$ .

$a = 1$  м, с шагом  $h = 1/19$  м. Граничные условия:

- на входной границе ( $y = 0$ ):  $\mathbf{u} = (0, 0.1, 0)$ ,  $\rho = 1.251$ ,  $\partial p / \partial y = 0$ ;
- на выходной границе ( $y = L_y$ ):  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\partial \rho / \partial y = 0$ ,  $p = 10^5$ ;
- на остальных границах расчетной области ставятся условия прилипания:  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ,  $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0$ ,  $\partial \rho / \partial \mathbf{n} = 0$ , где  $\mathbf{n}$  — нормаль к границе.

Перепад давления на единицу длины  $\partial p / \partial y = -0.4650$  Па/м (в области, где граничные условия на входной границе не оказывают существенного влияния на характер течения). По формуле (3.2) получаем  $Q_{\text{теор}} = 0.0982$  м<sup>3</sup>/сек, в расчетах объемный расход  $Q = 0.0992$  м<sup>3</sup>/сек. Относительное отклонение составляет 1%.

На рисунках 3.8 представлено распределение компоненты скорости  $u_y$  и давления  $p$  вдоль оси трубы. Видно, что у входной границы наблюдается «концевой» эффект, вызванный заданием значения скорости на входе. В таблице 3.1 и на рисунке 3.9 представлены полученные в расчете и по формуле (3.1) значения скорости вдоль прямой  $x = L_x/2$ ,  $y = 2L_y/3$ ,  $z \in [0, L_z]$ .

Отметим, что еще один вариант постановки граничных условий — фиксация давления на входной и выходной границах области. В этом случае все расчеты дают то же самое решение с той лишь разницей, что нет концевых эффектов.

Заметим, что сравнение с аналитическим решением, полученным в рамках несжимаемого приближения, является корректным, поскольку рассмотрен случай *слабосжимаемого* течения.

### 3.1.4 Выбор шага по времени

В рассмотренных выше примерах течений число Маха достаточно мало, то есть характерные скорости течения существенно меньше звуковых. При использовании для расчета таких течений явных разностных схем естественным является вопрос о том, насколько жестким с практической точки зрения

$z$ -координата	расчет	формула (3.1)
$1.5h$	0.06696	0.06612
$3.5h$	0.13176	0.13107
$5.5h$	0.17439	0.17380
$7.5h$	0.19848	0.19795
$9.5h$	0.20627	0.20575

Таблица 3.1. Значения скорости  $u_y$ , полученные в расчетах, в некоторых точках прямой  $x = L_x/2$ ,  $y = 2L_y/3$ ,  $z \in [0, L_z]$ .

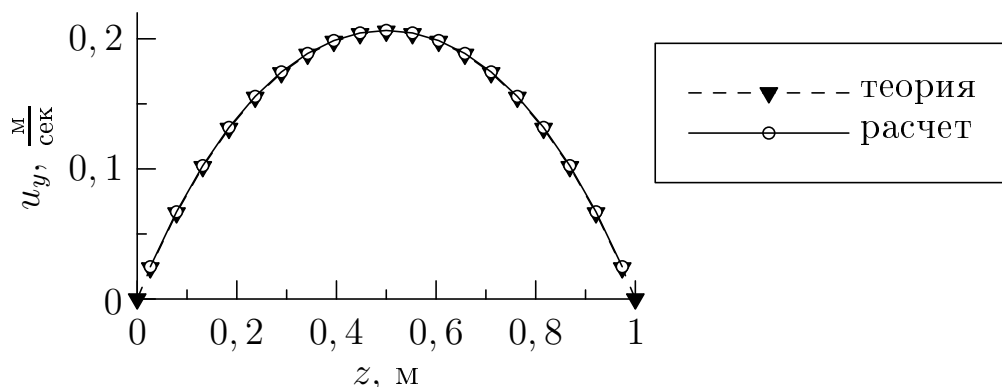


Рис. 3.9. Распределение скорости  $u_y$ , полученное в расчетах, вдоль прямой  $x = L_x/2$ ,  $y = 2L_y/3$ ,  $z \in [0, L_z]$ . Относительное отклонение полученного решения  $\mathbf{u}_{qh}$  от аналитического  $\mathbf{u}_{th}$  составляет  $\|\mathbf{u}_{th} - \mathbf{u}_{qh}\|_\infty / \|\mathbf{u}_{th}\|_\infty \approx 0.5\%$ .

является условие (2.2). При этом наличие в системе уравнений дополнительных регуляризирующих слагаемых ставит вопрос о том, насколько существенно может быть увеличено фактическое значение шага по времени за счет их правильного выбора при сохранении достаточно хорошего качества численного решения.

Рассмотрим уже описанную задачу обтекания цилиндра квадратного сечения (см. рисунок 3.1) для случая малых чисел Рейнольдса. На рисунке 3.10 представлена зависимость  $\Delta t$  от  $\alpha^*$ . Исследование проводилось по следующей схеме: фиксировалось число Рейнольдса  $Re$  и параметр  $\alpha^*$ , выбиралось некоторое число Куранта  $\beta$ . Если при выбранных параметрах решение задачи оказывалось численно неустойчивым (возникали нефизические, схемные, осцилляции) или же не наблюдалось сходимости решения к стационарному, то число Куранта  $\beta$  уменьшалось на 0.05 и расчет повторялся. Таким образом выбиралось максимальное (с точностью до 0.05) для заданных значений параметров  $Re$  и  $\alpha^*$  значение число Куранта  $\beta$  (а значит, и максимально возможная величина шага по времени).

На основе приведенных на рисунке 3.10 результатов можно сделать вывод о том, что путем изменения значения параметра  $\alpha^*$  можно добиться заметного увеличения числа Куранта  $\beta$ , а значит и шага по времени  $\Delta t$ .

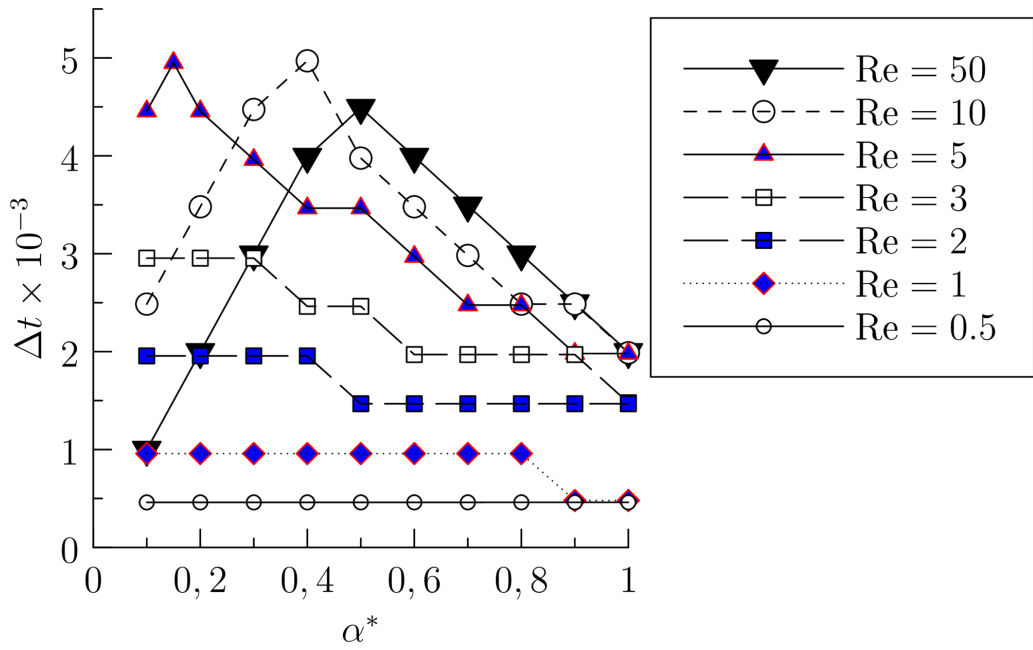


Рис. 3.10. Полученная зависимость шага по времени  $\Delta t$  от параметра  $\alpha^*$ .

## 3.2 О расчете коэффициента проницаемости

Для случая как модельной так и реалистичной (см. раздел 3.4) пористой среды на входной и выходной границах расчетной области фиксируются значения давления, а для скорости ставятся «мягкие» условия (см. ниже). На остальных границах области заданы условия прилипания. Объемный расход  $Q$  вычисляется на основании скорости, усредненной по образцу (скорости фильтрации) [63–66]:

$$U = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \frac{j_y}{\rho} d\Omega, \quad (3.3)$$

где  $\Omega$  — область, занимаемая всем образцом,  $|\Omega|$  — объем образца. Отметим, что  $\Omega$  включает в себя как поровое пространство, так и скелет. Тогда для объемного расхода имеем выражение  $Q/A = U$ , где  $A$  — площадь сечения образца плоскостью, перпендикулярной направлению течения. Для дискретного случая выражение (3.3) принимает вид

$$U = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_i \frac{(j_y)_i}{\rho_i}, \quad (3.4)$$

где суммирование ведется только по активным ячейкам (поскольку в неактивных скорость формально можно положить равной нулю). Тогда коэффициент проницаемости  $k$  определяется из закона Дарси [67]:

$$\frac{Q}{A} = -\frac{k}{\eta} \cdot \frac{p_1 - p_2}{L}, \quad (3.5)$$

где  $p_{1,2}$  — значения давления на входной и выходной границах,  $L$  — длина образца вдоль исследуемого направления. Расчет проводится до тех пор, пока значение коэффициента проницаемости не перестанет существенно меняться.

Отметим, что есть и другие подходы и методики постановки вычислительного эксперимента для расчета коэффициента проницаемости (см., например, [64]).

Далее во всех расчетах используется совершенный вязкий теплопроводный газ с параметрами  $\varkappa = 0.0233 \text{ кг} \cdot \text{м}^2 / (\text{К} \cdot \text{сек}^3)$ ,  $\mathcal{R} = 296.8 \text{ Дж} / (\text{кг} \cdot \text{К})$ .

## 3.3 Модельная пористая среда

В данном разделе рассмотрены задачи моделирования течения жидкости в образцах модельных пористых сред с целью валидации методики определения значения коэффициента проницаемости, описанной в разделе 3.2.

### 3.3.1 Трубки квадратного сечения

Рассмотрим задачу определения коэффициента проницаемости модельной пористой среды, состоящей из пяти параллельных трубок квадратного сечения. На рисунке 3.11 схематично изображено сечение расчетной области плоскостью, параллельной плоскости  $zOx$ . Оси трубок параллельны и направлены вдоль оси  $Oy$ . Серым цветом обозначен скелет образца пористой среды, белым — поровое пространство. Для рассматриваемого случая значение коэффициента проницаемости  $k$  возможно вывести аналитически. Действительно, из закона Дарси (3.5) и на основании (3.2) имеем:

$$Q = -\frac{ma^4(p_1 - p_2)}{L\eta} 0.035144,$$

где  $a$  — ширина стороны каждой трубки,  $m = 5$  — число трубок. Выражая из этих соотношений  $k$ , окончательно получаем для рассматриваемой модельной пористой среды:

$$k = \frac{ma^4}{A} 0.035144 = a^2\phi 0.035144, \quad (3.6)$$

где  $\phi$  — пористость.

Расчет проводился для случая совершенного вязкого теплопроводного газа для нескольких сеток с различным числом ячеек. Коэффициент динамической вязкости газа  $\eta = 1.665 \cdot 10^{-4}$ . Начальные значения:  $\rho_0 = 1.251$ ,  $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ ,  $p_0 = 10^5$ . Граничные условия:

- на входной границе:  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\rho = 1.251$ ,  $p = 10^5 + 1$ ;
- на выходной границе:  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\partial \rho / \partial y = 0$ ,  $p = 10^5$ ;

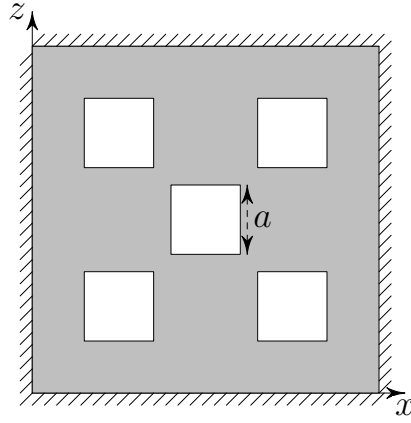


Рис. 3.11. Поперечное сечение образца модельного порового пространства, состоящего из пяти одинаковых параллельных трубок квадратного сечения, направленных вдоль оси  $Oy$ . Серым цветом обозначена порода.

Размер сетки	$h, 10^{-5}\text{м}$	$k^{qh}, 10^{-10}\text{м}^2$	Число ячеек на сторону одной трубки
$25^3$	4.00	3.24014	5
$50^3$	2.00	2.92764	10
$80^3$	1.25	2.85955	16
$100^3$	1.00	2.84339	20
$200^3$	0.50	2.82091	40
$400^3$	0.25	2.81399	80
—	точное значение (3.6)	2.81152	—

Таблица 3.2. Полученные в расчете значения коэффициента проницаемости  $k$  в зависимости от пространственного шага сетки  $h$

- на остальных сторонах расчетной области, а также на скелете образца ставятся условия прилипания:  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ,  $\partial\rho/\partial\mathbf{n} = 0$ ,  $\partial p/\mathbf{n} = 0$ .

Ширина, длина и высота образца:  $L_x = L_y = L_z = L = 10^{-3}\text{м}$ . Длина стороны трубки  $a = 2 \cdot 10^{-4}\text{м}$ . Тогда для пористости имеем

$$\phi = \frac{ma^2L_y}{L_xL_yL_z} = \frac{ma^2}{L^2} = 0.2.$$

Из соотношения (3.6) получаем  $k \approx 2.81152 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2$ . В таблице 3.2 представлены значения коэффициента проницаемости  $k^{qh}$ , полученные в расчете для различных сеток.

### 3.3.2 Трубки круглого сечения

Теперь рассмотрим такую же модельную пористую среду, только с трубками *круглого* сечения. Поскольку рассматривается только декартова сетка

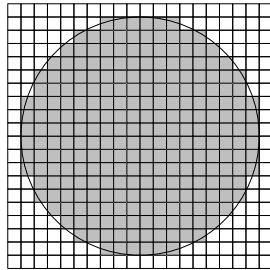
с равными шагами по пространству, то в данном случае нельзя приблизить геометрию точно. Данный тест покажет насколько сильно приближенная геометрия влияет на итоговое значение коэффициента проницаемости. На рисунке 3.12а приведен пример истинного сечения и сечения, используемого в расчетах.

Аналитическое выражение для коэффициента проницаемости рассматриваемой пористой среды получается аналогично предыдущему случаю с той лишь разницей, что выражение для объемного расхода при течении через пять одинаковых трубок круглого сечения имеет вид:

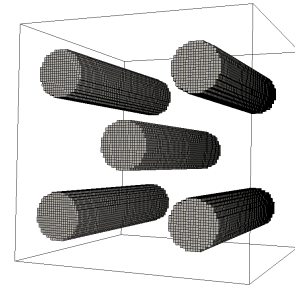
$$Q = -\frac{m\pi R^4}{8\eta} \cdot \frac{p_1 - p_2}{L},$$

где  $R$  — радиус трубки. Здесь также  $m = 5$ . Таким образом, для коэффициента проницаемости справедливо:

$$k = \frac{m\pi R^4}{8A}. \quad (3.7)$$



(а) Пример приближения геометрии на декартовой ортогональной сетке с равными по пространству шагами.



(б) *Поровое пространство* для модельной пористой среды, состоящей из пяти параллельных трубок круглого сечения. Сетка  $100 \times 100 \times 100$ .

Рис. 3.12

*Поровое пространство* показано на рисунке 3.12б. Параметры газа, начальные и граничные условия выбраны такими же как и в предыдущем случае. В таблице 3.3 представлены рассчитанные значения коэффициентов проницаемости для образца рассматриваемой пористой среды на разных сетках и видно, что при мельчении шага значение  $k$  стремится к аналитическому. Таким образом, с одной стороны, наблюдается сходимость решения к точному значению, с другой — даже в самом «грубом» случае из рассмотренных отличие полученного значения  $k$  от аналитического составляет  $\approx 2\%$ , что является приемлемой погрешностью.

Размер сетки	$h, 10^{-5}\text{м}$	$k, 10^{-10}\text{м}^2$	Число ячеек на радиус трубки
$50^3$	2.0	2.003541	5
$100^3$	1.0	1.956676	10
$200^3$	0.5	1.968025	20
—	точное значение	1.963495	—

Таблица 3.3. Полученные в расчете значения коэффициента проницаемости  $k$  в зависимости от пространственного шага сетки  $h$  для случая модельной пористой среды, состоящей из пяти одинаковых трубок круглого сечения.

### 3.3.3 Наклонная трубка эллиптического сечения

Теперь рассмотрим случай одной трубки эллиптического сечения с осью, имеющей угол  $45^\circ$  к оси  $Oy$  и лежащей в плоскости  $zOy$  (см. рисунок 3.13а). Здесь геометрия стенок трубки аппроксимируется «хуже», чем в рассматриваемых до этого случаях: стенки представляют собой «лесенку» из ячеек, а не ровную поверхность, параллельную координатной оси, как, например, в случае трубок квадратного сечения.

Сечения трубки плоскостями, параллельными  $xOz$ , являются окружностями радиуса  $R$ . Следовательно, сечение плоскостью, перпендикулярной оси трубки, является эллипсом с полуосями  $a = R$  и  $b = R \cos(\pi/4) = R/\sqrt{2}$ . Как известно (см., например, [68]), для течения Пуазейля в трубе эллиптического сечения выражение для объемного расхода имеет вид:

$$Q = \frac{\pi \Delta p^*}{4\eta l^*} \cdot \frac{a^3 b^3}{a^2 + b^2}, \quad (3.8)$$

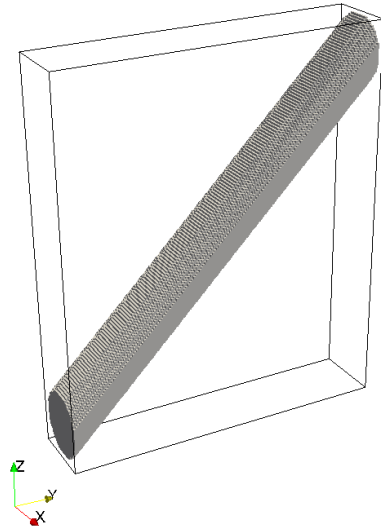
где  $\Delta p^*$  — скачок давления между плоскостями, расположенными на расстоянии  $l^*$  друг от друга (см. рисунок 3.13b).

Граничные условия:

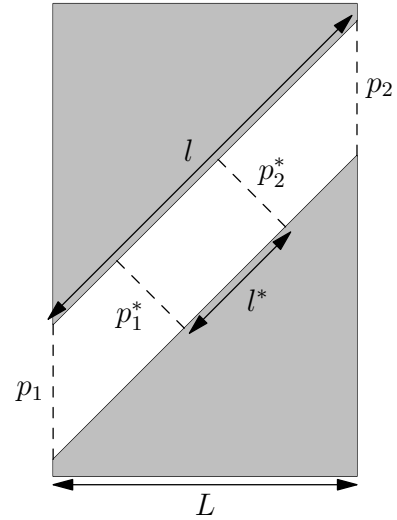
- на входной границе ( $y = 0$ ):  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\rho = 1.251$ ,  $p = 10^5 + 0.1$ ;
- на выходной границе ( $y = L_y$ ):  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\partial \rho / \partial y = 0$ ,  $p = 10^5$ ;
- на остальных сторонах расчетной области ставятся условия прилипания.

На рисунке 3.15а показано распределение модуля скорости в сечении, перпендикулярном оси трубки, а на рисунке 3.15b — изоповерхности давления. Видно, что на некотором расстоянии от входной и выходной границ трубки изоповерхности являются плоскими. Неплоская форма около границ связана с тем, что давление там задано на плоскостях, *неперпендикулярных* к оси трубки.

Получим аналитическое выражение для коэффициента проницаемости для рассматриваемого случая. При установившемся течении несжимаемой



(а) Вид «порового пространства» в расчетной программе.



(б) Схема геометрии образца. Серым цветом обозначен скелет, белым – поровое пространство.

Рис. 3.13. Модельная пористая среда, состоящая из одной трубки с осью, наклоненной под углом  $45^\circ$  по отношению к оси  $Oy$  и параллельной плоскости  $zOy$ .

жидкости в трубе объемный расход через любое сечение постоянен. Поэтому для определения расхода в рассматриваемом случае постановки граничных условий можно измерить перепад давления между плоскостями, расположенными вдали от краев и воспользоваться формулой (3.8). С другой стороны, расход получается из формулы Дарси (3.5). Тогда выражение для коэффициента проницаемости принимает вид:

$$k = \frac{L\Delta p^*}{Al^*\Delta p} \cdot \frac{\pi a^3 b^3}{4(a^2 + b^2)}. \quad (3.9)$$

Вводя обозначение  $\tilde{\tau} = l/L$  (*извилистость*), получим:

$$k = \frac{\pi a^3 b^3}{4(a^2 + b^2)} \cdot \frac{1}{A\tilde{\tau}} \cdot \delta, \quad (3.10)$$

где  $\delta = \Delta p^* l / (\Delta p l^*)$ . В работе [2] принимают  $\delta = 1$ .

Из соотношения (3.8) заключаем, что отношение объемного расхода к градиенту давления является величиной постоянной и может быть найдено аналитически. В таблице 3.4 представлены значения  $Ql^*/\Delta p^*$ , полученные в расчетах на различных сетках, и аналитическое значение.

На рисунке 3.16 показано распределение давления вдоль оси трубки, полученное при расчете на различных сетках. На нем также видно, что вдали от входной и выходной границ давление изменяется линейно.



Размер сетки	$h, 10^{-6}\text{м}$	$k^{qh}, 10^{-11}\text{м}^2$	$Ql^*/\Delta p^*,$ $10^{-13}\text{м}/(\text{Па} \cdot \text{сек})$	$N_R$
$32 \times 160 \times 192$	6.25	6.30	1.23	16
$64 \times 320 \times 384$	3.125	5.92	1.17	32
—	«точное» значение	5.45	1.11	—

Таблица 3.4. Полученные в расчете значения коэффициента проницаемости  $k^{qh}$  в зависимости от пространственного шага сетки  $h$  для случая модельной пористой среды, состоящей из одной наклоненной трубки эллиптического сечения. Последняя колонка соответствует числу ячеек на радиус окружности  $N_R$ .

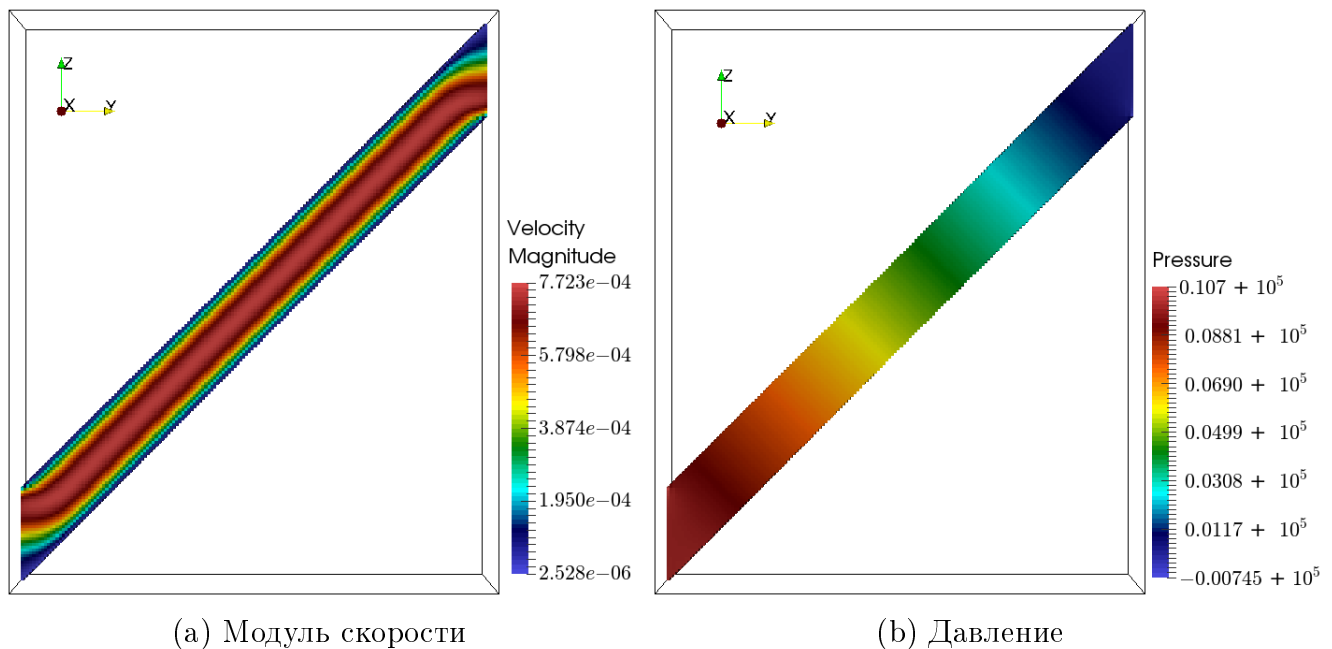


Рис. 3.14. Распределение модуля скорости и давления в сечении  $x = L_x/2$ .

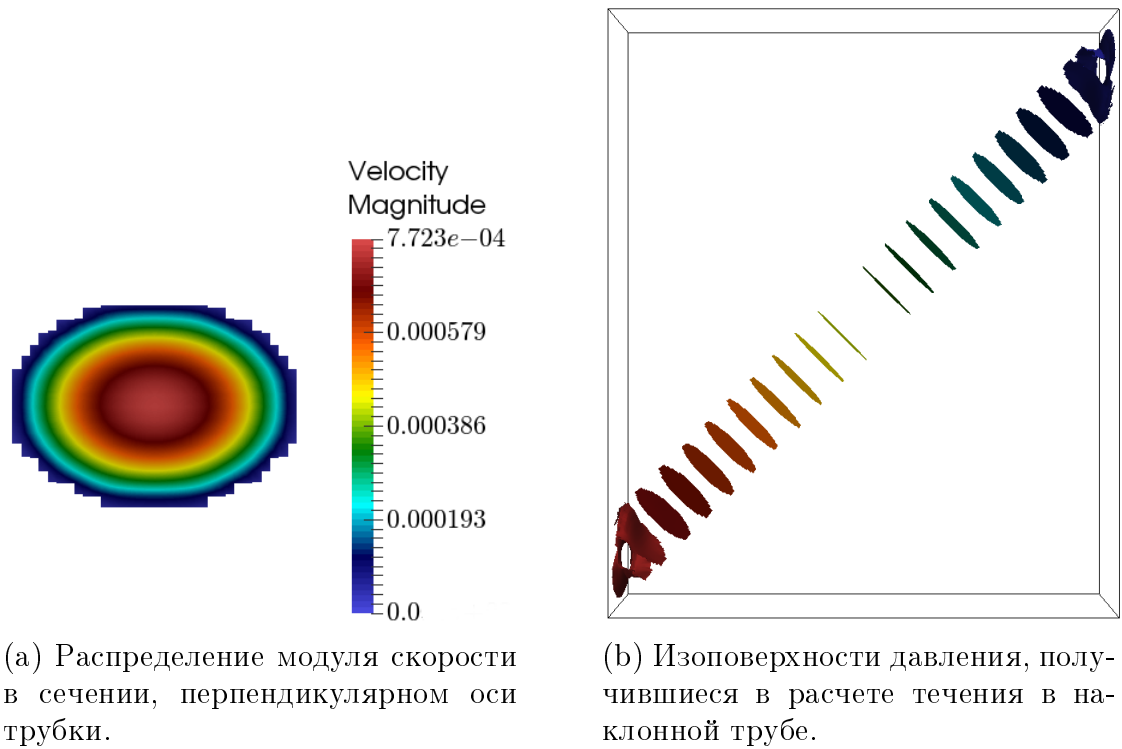


Рис. 3.15

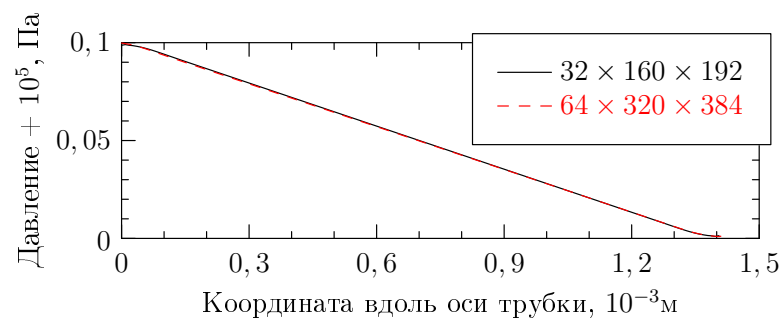


Рис. 3.16. Распределение давления вдоль оси наклонной трубки эллиптического сечения, полученное в расчетах.

Образец	Направление	$k^{qh}$	$k^{plb}$	$\Delta^{plb}$
sandstone_9 (300 <sup>3</sup> /22.2%/3.398 <sub>МКМ</sub> )	$x$	3441	3413	0.8%
	$y$	2803	2784	0.7%
	$z$	2563	2533	1.0%
sandstone_5 (300 <sup>3</sup> /21.1%/3.997 <sub>МКМ</sub> )	$x$	6330	6342	0.2%
	$y$	6590	6602	0.2%
	$z$	6556	6579	0.4%
carbonate_1 (400 <sup>3</sup> /23.3%/2.85 <sub>МКМ</sub> )	$x$	1139	1155	1.4%
	$y$	2107	2135	1.3%
	$z$	1363	1380	1.2%

Таблица 3.5. Значения коэффициентов проницаемости (в мДарси) для микрообразцов горной породы. Значения  $\Delta^{plb}$  соответствуют относительным отклонениям полученной проницаемости  $k^{qh}$  от значений  $k^{plb}$ . В названии образцов представлены размерность (число ячеек), пористость и разрешение соответственно.

### 3.4 Моделирование течений в микрообразцах горных пород

В данном разделе представлены результаты расчетов коэффициентов проницаемости реальных пористых сред. Полученные значения сравниваются со значениями, вычисленными методом решеточных уравнений Больцмана.

Во всех приведенных ниже расчетах использовался совершенный вязкий теплопроводный газ с параметрами, соответствующими азоту  $N_2$  при нормальных условиях:  $\eta = 1.665 \cdot 10^{-5}$  Па · сек,  $\kappa = 0.0233$  кг · м<sup>2</sup>/(К · сек<sup>3</sup>),  $\mathcal{R} = 296.8$  Дж/(кг · К). В начальный момент времени газ покоится:  $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ ,  $\rho_0 = 1.251$  кг/м<sup>3</sup>,  $p_0 = 10^5$  Па. Граничные условия:

- на левой границе ( $y = 0$ ):  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\rho = 1.251$ ,  $p = 10^5 + 0.1$ ;
- на правой границе ( $y = L$ ):  $\partial \mathbf{u} / \partial y = \mathbf{0}$ ,  $\partial \rho / \partial y = 0$ ,  $p = 10^5$ ;
- на остальных сторонах расчетной области, а также на скелете образца ставятся условия прилипания:  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ,  $\partial \rho / \partial \mathbf{n} = 0$ ,  $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0$ .

Для расчетов использовались свободно доступные цифровые микрообразцы горных пород [69]. На рисунке 3.17 показаны линии тока, полученные в результате моделирования для образца sandstone\_5 с перепадом давления, приложенным вдоль оси  $Ox$ .

В таблице 3.5 представлены полученные в результате моделирования коэффициенты проницаемости  $k^{qh}$  образца. Там же приведены значения  $k^{plb}$  коэффициента проницаемости, полученные в настоящей работе с использованием свободно доступной программы Palabos [70, 71], основанной на методе

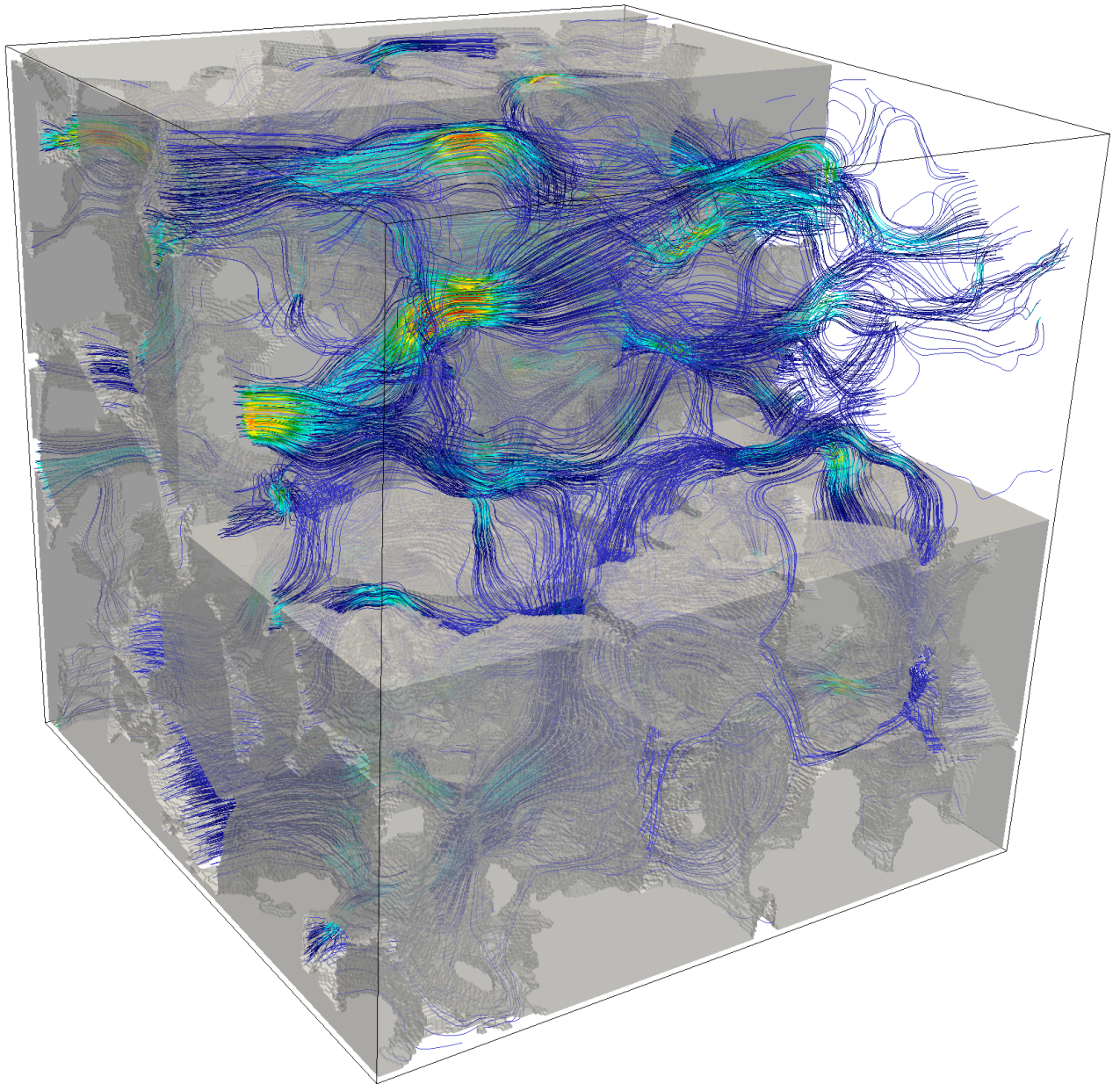


Рис. 3.17. Линии тока, полученные в расчете течения в образце sandstone\_5 вдоль направления  $Ox$ .

степень измельчения	сетка	$k^{qh}, 10^{-12}\text{м}^2$	$k^{plb}, 10^{-12}\text{м}^2$
×1	100 <sup>3</sup>	2.97505	2.90547
×2	200 <sup>3</sup>	2.36869	2.44105
×4	400 <sup>3</sup>	2.18531	2.20491

Таблица 3.6. Значения коэффициента проницаемости части образца sandstone\_1 размером 100<sup>3</sup>, полученные в расчетах для разных степеней измельчения сетки.

решеточных уравнений Больцмана. Как видно из этой таблицы, имеет место хорошее совпадение представленных в данной работе результатов с опубликованными и полученными другим методом. Подчеркнем, что при этом особое внимание было уделено тому, чтобы обеспечить совпадение условий вычислительного эксперимента для разработанного в рамках настоящей работы программного комплекса «3dqh» и комплекса Palabos.

Теперь рассмотрим как увеличение разрешения может влиять на значение проницаемости. Для этого «вырежем» угол размером 100 × 100 × 100 ячеек из образца sandstone\_1 ( $h = 8.683 \cdot 10^{-6}\text{м}$ ) и измельчим его в 2 и в 4 раза, то есть каждую ячейку поделим на 8 (соответственно на 64) одинаковых ячейки. Причем все новые ячейки считаем активными (неактивными), если исходная была активной (неактивной). Подчеркнем, что при этом область течения остается неизменной, меняется лишь разрешение, с которым описывается структура течения. Полученные значения коэффициентов проницаемости представлены в таблице 3.6. Уменьшение коэффициента проницаемости с увеличением степени мельчения расчетной сетки также наблюдается в работе [65]. Это подтверждает тот факт, что, вообще говоря, значение коэффициента проницаемости может зависеть от качества разрешения самых мелких участков порового пространства.

## Глава 4

# Модель многофазного МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ

В данной главе дан краткий обзор методов, использующихся для моделирования многофазных многокомпонентных течений в областях со сложной геометрией. Представлен феноменологический вывод уравнений движения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов в рамках КГиД подхода. Для случая двумерного двухфазного двухкомпонентного изотермического течения приведены построенная разностная схема и результаты расчетов, которые показали, что предложенная модель качественно верно описывает эволюцию межфазной границы.

### 4.1 Обзор математических моделей

Безотносительно множества используемых в настоящее время вычислительных подходов для моделирования движения многофазного флюида с прямым разрешением динамики контактных границ, в настоящее время известно два основных подхода физико-математической формализации описания процессов, происходящих на границе раздела флюидов (двух фаз с одним компонентным составом, но в разных агрегатных состояниях, — или двух различных флюидов в жидкой фазе). Эти подходы носят названия моделей «четкой границы» («sharp interface») и «диффузной границы» («diffuse interface»). В рамках каждого из подходов в настоящее время предложен целый ряд моделей для описания течений многофазного флюида.

Модель «четкой границы» предполагает, что граница раздела фаз является математической поверхностью (геометрическим объектом нулевой «толщины»). Значения описывающих течение параметров, отнесенных к различным сторонам контактной границы (границы раздела)  $\Gamma$  (см. рисунок 4.1a),

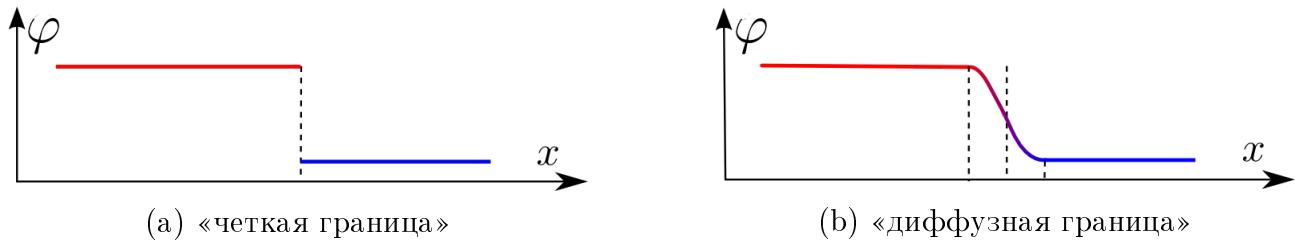


Рис. 4.1. Представление межфазной границы в моделях «четкой границы» и «диффузной границы». Параметр  $\varphi(x)$  описывает, например, концентрацию одной из фаз в пространстве.

могут иметь разрыв и связаны между собой дополнительными условиями, по сути, и определяющими модель.

Модели типа «диффузной границы» предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы (см. рисунок 4.1b). Ширина «границы» определяется действующими в жидкости силами межмолекулярного притяжения и отталкивания. Отметим, что для многих моделей «диффузной границы» показано, что в пределе исчезающе малой толщины переходного слоя они вырождаются в классические модели «четкой границы».

При использовании модели «четкой границы» в ряде вычислительных алгоритмов «размазывание» границы между фазами также происходит, однако является лишь удобным вычислительным приемом или дефектом разностной схемы, связанным с ее диссипативными свойствами. В моделях типа «диффузной границы» конечная ширина «границы» является физическим, а не численным эффектом.

Далее представлены основные идеи рассматриваемых моделей. Более детальное изложение приведено, например, в обзорных работах [20, 72, 73].

#### 4.1.1 Модели типа «четкой границы»

В настоящем разделе рассмотрим основные идеи вычислительных алгоритмов для моделирования течений многофазной вязкой жидкости в рамках модели «четкой границы».

Пусть жидкость состоит из двух несмешивающихся фаз, состоящих из двух различных компонентов (например, вода и нефть). Будем считать, что жидкость занимает объем  $\Omega$ , причем фаза  $\alpha$  занимает область  $\Omega_\alpha$ ,

$$\Omega = \bigcup_{\alpha=1,2} \Omega_\alpha(t), \quad \bigcap_{\alpha=1,2} \Omega_\alpha(t) = \emptyset$$

и свойства фаз (плотности, вязкости и т.д.) различны. Параметры, отнесенные к фазе  $\alpha$  будем отмечать нижним индексом  $\alpha$ . На рисунке 4.2 показаны

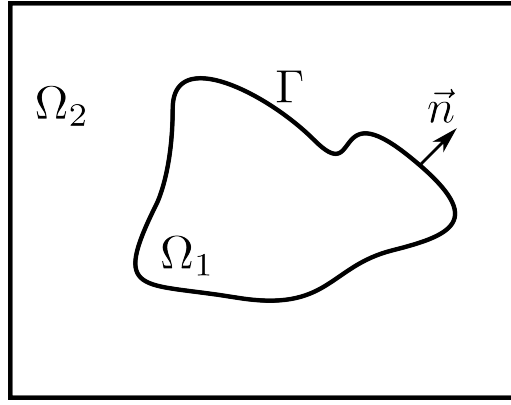


Рис. 4.2. Области, занятые каждой фазой  $\alpha = 1, 2$ , и граница  $\Gamma$  между ними

области  $\Omega_\alpha$ , занимаемые фазами, и граница  $\Gamma$  между ними. Для простоты показан случай, когда граница раздела фаз содержится целиком внутри расчетной области и не имеет общих точек с ее внешней границей. Пусть  $\mathbf{n}$  — вектор внешней нормали к границе  $\Gamma$ , направленный из области, занятой фазой 1, в область, занятую фазой 2. Форма областей  $\Omega_\alpha$ , а значит, и форма разделяющей их границы  $\Gamma$ , вообще говоря, зависят от времени  $t$ :

$$\Omega_\alpha = \Omega_\alpha(t), \quad \alpha = 1, 2; \quad \Gamma = \Gamma(t).$$

Будем считать, что в каждой из подобластей течение описывается классической системой уравнений Навье-Стокса в баротропном приближении без учета массовых сил:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}) = 0, \quad (4.1b)$$

где плотность потока массы и тензор напряжений задаются выражениями:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_m &= \rho \mathbf{u}, \quad \mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}_{NS} - p \mathbf{I}, \\ \mathbf{\Pi}_{NS} &= \eta \left[ \nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \zeta (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}. \end{aligned}$$

Пусть  $\mathbf{u}^\Gamma(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} \in \Gamma$  — скорость движения точек границы  $\Gamma$ . При этом для простоты считаем, что через поверхность  $\Gamma$  нет потока массы. Также на  $\Gamma$  должны выполняться условия, учитывающие наличие поверхностного натяжения. Таким образом, на  $\Gamma$  выполнено [68, 74, 75]

$$\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} = u_n^\Gamma, \quad (4.2a)$$

$$[\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{n}] = 2\sigma H \mathbf{n} + \nabla_\Gamma \sigma, \quad (4.2b)$$



где  $u_n^\Gamma$  — скорость движения границы в направлении  $\mathbf{n}$ ,  $H = -(\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{n})/2$  — средняя кривизна поверхности,  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения, вообще говоря, зависящий от температуры и концентрации примесей (например, поверхностно-активных веществ). Поверхностный градиент  $\nabla_\Gamma$  определен как векторный дифференциальный оператор вида  $\nabla_\Gamma = \nabla - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla)$ . Заметим, что для любой скалярной гладкой функции  $g$ , определенной в окрестности поверхности  $\Gamma$ , выполнено  $\mathbf{n} \cdot \nabla_\Gamma g = 0$ . Поэтому для вычисления  $\nabla_\Gamma g$  достаточно знать значения функции  $g$  лишь в точках этой поверхности. Подробнее см., например, работы [74, 76]. Здесь символом  $[\cdot] = (\cdot)_2 - (\cdot)_1$  обозначен скачок соответствующей величины при переходе через границу  $\Gamma$ .

Отметим, что для значения средней кривизны поверхности  $\Gamma$  также справедливо выражение  $H = -(\nabla \cdot \mathbf{n})/2$  [76]. Действительно,

$$\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{n} = n_i n_j \nabla^j n_i = \frac{1}{2} n_j \nabla^j (n_i n_i) = 0,$$

так как вектор  $\mathbf{n}$  — единичный. Здесь по повторяющимся индексам проводится суммирование. Окончательно имеем:  $\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \mathbf{n}$ .

Поскольку скорости течения фаз на  $\Gamma$  совпадают, для произвольной (лагранжевой) точки границы ее траектория является решением уравнения [77]:

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}(t), t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma(t) \quad (4.3)$$

с начальным условием  $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ ,  $\mathbf{x}_0 \in \Gamma(t_0)$ .

Полная система уравнений, описывающая эволюцию течения, состоит из систем уравнений Навье-Стокса (4.1) для каждой из фаз, условий согласования (4.2) и уравнения (4.3), описывающего кинематику точек границы раздела фаз.

Уже в такой постановке рассматриваемая задача может быть решена численно с использованием методов, применяемых для решения задач со свободной границей. Однако такие подходы не являются практичными при моделировании динамики, например, водо-нефтяной эмульсии в образце горной породы, так как требуют аккуратного разрешения (лагранжевой) сеткой границ большого количества «капель» с последующим расчетом их эволюции непосредственно с использованием уравнения (4.3) и учета условий согласования (4.2). По этой причине рассматриваемая система преобразуется с целью исключить тем или иным методом *явный* учет условий согласования (4.2) и использовать описание границы и ее кинематики, не требующее непосредственного интегрирования уравнения (4.3) и позволяющее вместе с тем удобно вычислять ее геометрические характеристики (кривизны и поля нормалей).

Примером такого метода является метод «непрерывной поверхностной силы» («continuous surface force», CSF), предложенный в работе [78]. В соответ-

ствии с этим методом, вместо двух систем уравнений и условий согласования, записывается одна система с дополнительным слагаемым  $\mathbf{f}_s$  в правой части уравнения движения. Это слагаемое описывает силу поверхностного натяжения, сосредоточенную на границе раздела  $\Gamma$ . В этом случае уравнение движения можно записать в виде:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - \nabla \cdot \Pi) = \mathbf{f}_s, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.4)$$

где

$$\mathbf{f}_s = (2\sigma H\mathbf{n} + \nabla_{\Gamma}\sigma)\delta_{\Gamma}. \quad (4.5)$$

Здесь  $\delta_{\Gamma}$  — дельта-функция, определяемая равенством

$$\int_{\Omega} \delta_{\Gamma}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} \phi(s) ds.$$

Как следует из выражения (4.5), поверхностная сила является суммой капиллярной силы, направленной по нормали к границе, и силы Марангони [79], направленной тангенциально.

Значения плотности и коэффициента динамической вязкости в уравнении (4.4) вычисляются как:

$$\rho(\mathbf{x}) = \begin{cases} \rho_1, & \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ \rho_2, & \mathbf{x} \in \Omega_2, \end{cases} \quad \eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \eta_1, & \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ \eta_2, & \mathbf{x} \in \Omega_2, \end{cases}$$

где  $\rho_{\alpha} = \rho_{\alpha}(p_{\alpha})$ .

Для решения задачи (4.4) (при известной в каждый момент времени границе раздела фаз  $\Gamma$ ) могут быть использованы стандартные методы, применяемые для решения уравнений Навье-Стокса.

Для решения задачи об описании кинематики границы  $\Gamma$  могут быть использованы различные методы. Как уже отмечалось, одним из подходов может быть отслеживание положения границы, основанное на непосредственном решении уравнения (4.3) — «interface tracking methods» [80–86]. В контексте задач о течении многофазного флюида в поровых каналах образцов горных пород такие методы не могут быть эффективными, так как требуют детальной аппроксимации границ капель, что неприемлемо с вычислительной точки зрения.

К методам, которые могут быть использованы при моделировании течений многофазного флюида в системе пор пород–коллекторов, относятся методы, использующие «неявное» описание геометрии границы раздела, среди которых наиболее популярны метод «множеств уровня» («level set method») и метод «жидкого объема» («volume of fluid method», VoF).

В первом случае граница раздела фаз представляется как поверхность

уровня 0 некоторой функции  $\phi$ , заданной всюду в области  $\Omega$ :

$$\phi(\mathbf{x}) : \begin{cases} > 0, & \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ = 0, & \mathbf{x} \in \Gamma, \\ < 0, & \mathbf{x} \in \Omega_2. \end{cases}$$

В качестве  $\phi$  обычно выбирают функцию знакового расстояния от точки области до поверхности  $\Gamma$ :

$$\phi(\mathbf{x}) = \text{dist}(\mathbf{x}) := \begin{cases} \inf_{\mathbf{y} \in \Gamma} \text{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & x \in \Omega_1, \\ - \inf_{\mathbf{y} \in \Gamma} \text{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & x \in \Omega_2, \end{cases}$$

где  $\inf$  обозначает инфимум,  $\text{dist}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$  — расстояние.

Это позволяет легко определять как положение точки области относительно границы раздела фаз (по знаку функции  $\phi$ ), так и вычислять вектор внешней нормали к поверхности  $\mathbf{n} = \nabla\phi / \|\nabla\phi\|$  и ее среднюю кривизну  $H = -(\nabla \cdot \mathbf{n})/2$ .

Для описания кинематики границы уравнение (4.3) заменяется на специальное уравнение переноса относительно функции  $\phi(\mathbf{x})$ :

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla\phi = 0,$$

где  $\tilde{\mathbf{u}}$  — подходящее продолжение скорости течения  $\mathbf{u}_\Gamma$  на границе во всю область. Последнее уравнение аппроксимируется на сетке вместе с остальными уравнениями, описывающими течение. Более подробное описание подхода приведено, например, в [87].

В методе «жидкого объема» вместо функции знакового расстояния используется функция  $\phi$ , которая является, по сути, индикаторной функцией области  $\Omega_1(t)$  (или  $\Omega_2(t)$ ). В случае несмешивающихся фаз она совпадает с объемной концентрацией первой фазы. Построенная таким образом функция имеет постоянное значение (0 или 1) внутри областей, занятых фазами и непостоянна в маленькой окрестности границы  $\Gamma$ . В отличие от метода множеств уровня, метод жидкого объема является консервативным. Описание этого метода, и примеры его применения к анализу течений в микрообразцах горных пород рассмотрены, например, в [88].

Более детальное описание уравнений методов типа «четкой границы», их численного решения и примеров применения можно найти, например, в работах [76, 89, 90].

Отметим следующий факт. Описанные выше модели типа «четкой границы», вообще говоря, верны только в том случае, если размеры «капель» достаточно велики, то есть радиус кривизны капель существенно больше ширины реальной границы раздела фаз (составляющей, для жидкостей, микроскопи-

ческие размеры величиной порядка размеров молекул жидкости). Это условие обеспечивает применимость соотношения Юнга–Лапласа (4.2b). По этой причине рассматриваемый подход, вообще говоря, не описывает процессы, связанные с изменением топологии границ раздела фаз — например, слияние двух областей, занятых одной фазой («капель») или их разделение. Однако на практике такие эффекты наблюдаются в расчетах по рассматриваемой методике. Наличие их связано исключительно с диссипативными свойствами разностных схем, используемых в расчетах. Реальных физических механизмов, обеспечивающих возможность слияния «капель», в моделях типа «четкой границы» не существует. Однако, такие механизмы естественным образом присутствуют в моделях типа «диффузной границы», рассмотренных ниже.

### 4.1.2 Модели типа «диффузной границы»

Модели типа «диффузной границы» являются альтернативным способом описания взаимодействия между фазами на границе их раздела. Напомним, что в модели «четкой границы» поверхность раздела фаз рассматривается как поверхность «нулевой» толщины, на которой термодинамические переменные могут претерпевать скачок, величина которого определяется условиями заданного вида. Вид этих условий и определяет модель взаимодействия. В моделях диффузной границы считается, что фазы разделены слоем малой, но конечной ширины, в пределах которого термодинамические параметры изменяются непрерывно. Проводя аналогию с уравнениями газовой динамики, можно сказать, что модель «четкой границы» с условием Юнга–Лапласа соответствует модели ударной волны с условиями Гюгонио, в то время как модель «диффузной границы» соответствует моделям, описывающим структуру ударной волны в рамках макроскопической термодинамики. Таким образом, в моделях типа «диффузной границы» скачкообразное изменение свойств смеси заменяется непрерывным, но быстрым их изменением, см. рисунок 4.1.

Модель «четкой границы» предложена в работах Т. Юнга, С. Лапласа и К.-Ф. Гаусса в 1805–1830 гг. [91–93] и, по сути, в современном виде имеет вид уравнения (4.2b), определяющего величину скачка тензора напряжений при переходе через границу раздела фаз.

Представление о границе раздела фаз как о слое конечной «толщины» впервые предложено Ван-дер-Ваальсом в 1893 г. ([94]) и далее развито в работах Максвелла, Гиббса и Кортвега. В современной форме модель «диффузной границы» развита в серии работ Кана и Хилларда, начиная с [95] применительно к моделям фазовых переходов в металлах. В настоящее время модели этого типа широко применяются для анализа самых разных процессов в физике твердого тела и гидродинамике [20, 72, 73, 96].

В последние десятилетия интерес к моделям диффузной границы сильно вырос, прежде всего по той причине, что они предоставляют естественный

и термодинамически согласованный способ описания процессов, пригодный для прямого моделирования многофазных течений.

Рассмотрим пример такой модели течения двухфазной вязкой несжимаемой жидкости в изотермическом приближении, предложенной в работе [97]. Модель компонентного состава является «стандартной»: вводятся массовые концентрации  $C_{1,2}$  фаз, средняя массовая скорость  $\rho \mathbf{u}$ . Концентрацию первой фазы будем обозначать просто  $C$ ,  $C = C_1$ . Плотность смеси  $\rho$  определяется из соотношения

$$\frac{1}{\rho} = \frac{C}{\rho_1} + \frac{1-C}{\rho_2},$$

где  $\rho_{1,2}$  — не зависящие от температуры и давления плотности фаз.

Предполагается, что удельная плотность свободной энергии является функцией не только плотности  $\rho$ , но и концентрации  $C$  и ее градиента  $\nabla C$ . Уравнения движения выведены исходя из вариационного принципа для лагранжиана рассматриваемой системы. При этом в тензоре напряжений появляется дополнительное слагаемое, зависящее от  $\nabla C$ .

Выражение для свободной энергии Гельмгольца в рассматриваемой модели имеет вид:

$$f(\rho, C, \nabla C) = f_0(\rho, C) + \frac{1}{2}\varepsilon \|\nabla C\|^2,$$

где первое слагаемое соответствует свободной энергии смеси и описывает механизм разделения фаз, а второе слагаемое необходимо для описания сил поверхностного натяжения, действующих «внутри» диффузной границы. При этом величина  $\varepsilon$  определяет «толщину» границы.

Предложенная в [97] система уравнений, описывающая динамику изотермической двухфазной жидкости, имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (4.6a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{\Pi}) = 0, \quad (4.6b)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla \cdot \mathbf{J}, \quad \mathbf{J} = \left[ \nu \nabla \left( \frac{\partial f_0}{\partial C} - \frac{\varepsilon}{\rho} \nabla \cdot (\rho \nabla C) \right) \right]. \quad (4.6c)$$

Второе уравнение (4.6b) — закон сохранения импульса. Тензор напряжений имеет вид:  $\mathbf{\Pi} = -p_0 \mathbf{I} + \mathbf{\Pi}_{\text{NS}} + \mathbf{\Pi}_{\text{CH}}$ . В этом выражении

$$\mathbf{\Pi}_{\text{CH}} = -\varepsilon \rho \nabla C \otimes \nabla C$$

— дополнительное слагаемое, отвечающее за возникновение в переходном слое сил поверхностного натяжения. В областях, занятых одной фазой, где  $C \approx 0$  или  $C \approx 1$ , эти силы равны нулю.

Третье уравнение (4.6c) является так называемым уравнением Кана–Хил-

ларда. При нулевой правой части оно является обычным уравнением переноса, описывающим кинематику условной «границы раздела» фаз (которой условно можно считать поверхность уровня  $C = 1/2$ ). Нелинейное слагаемое в правой части этого уравнения содержит как диссипативные, так и антидиссипативные слагаемые. Так же, как и в случае уравнения закона сохранения импульса (4.6b), слагаемое в правой части равно нулю в областях «чистых» фаз. С физической точки зрения поток  $\mathbf{J}$  описывает взаимную диффузию фаз друг в друга. Неотрицательный параметр  $\nu$  называют подвижностью.

Именно второе слагаемое в этом выражении, впервые введенное Каном и Хиллардом [95, 98, 99], обеспечивает эффект устойчивого разделения фаз «диффузной границей», имеющей толщину порядка  $\varepsilon$ . В рассматриваемой модели величина  $C$  является так называемым параметром порядка, по сути, являющимся «индикаторной функцией» фазы.

Отметим следующий факт, важный для практического применения моделей «диффузной границы». Ширина «размазывания» границы для реальных сред составляет величину порядка размеров молекул жидкости. Проводить расчет с таким значением параметра  $\varepsilon$  естественно, не представляется возможным. По этой причине при применении методов «диффузной границы» величина  $\varepsilon$  является, по сути, сеточным параметром и подбирается так, чтобы структура границы достаточно хорошо разрешалась бы расчетной сеткой.

Отметим, что к моделям этого типа можно отнести и метод функционала плотности [100], составляющий основу симулятора Schlumberger CoreFlow [101].

### 4.1.3 Метод функционала плотности

Модель функционала плотности является феноменологической гидродинамической моделью типа «диффузной границы» и представляет собой термодинамически согласованное описание многофазной многокомпонентной смеси с учетом межфазного взаимодействия. Подробное описание модели представлено, например, в работах [100, 102, 103].

Модель является термодинамически согласованной, позволяет описывать неизотермические многофазные многокомпонентные течения с учетом поверхностных эффектов, в том числе в присутствии ПАВ (поверхностно-активных веществ) [104], а также с подвижной твердой фазой [105].

Опишем коротко рассматриваемую модель для изотермического случая. Будем считать, что по повторяющимся индексам подразумевается суммирование если не сказано противное.

Также как и во многих других моделях типа «диффузной границы» основной идеей является включение в выражение для удельной свободной энергии (для энтропии в неизотермическом случае) членов, квадратичных по гради-

ентам плотностей:

$$F = \int_D \left( f(\mathbf{n}) + \frac{1}{2} \Lambda_{ij} \frac{\partial n_i}{\partial x_l} \frac{\partial n_j}{\partial x_l} \right) dV + \int_{\partial D} f_*(\mathbf{n}) dS, \quad (4.7)$$

где  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$  — вектор молярных плотностей  $n_i$ ,  $N$  — число компонентов,  $f$  — объемная плотность свободной энергии смеси,  $\Lambda_{ij}$  — элементы симметричной и положительно определенной матрицы  $\mathbf{\Lambda}$ ,  $f_*$  — свободная энергия единицы площади поверхности внешней границы области  $\partial D$ . В общем случае поверхностное натяжение на межфазной границе не является постоянным, поэтому  $\Lambda_{ij} = \Lambda_{ij}(\mathbf{n})$ . Здесь положим  $\Lambda_{ij}$  постоянными.

Основные уравнения законов сохранения для смеси имеют вид:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mathbf{u} + \mathbf{Q}_i) = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad (4.8a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{\Pi}) = \boldsymbol{\theta}, \quad (4.8b)$$

где  $\rho = \sum M_i n_i$  — массовая плотность смеси,  $M_i$  — молярная масса компонента  $i$ ,  $\mathbf{Q}_i$  — вектор плотности диффузионного потока компонента  $i$ ,  $\mathbf{u}$  — средняя массовая скорость смеси,  $\mathbf{\Pi}$  — тензор напряжений в смеси,  $\boldsymbol{\theta}$  — плотность внешней массовой силы.

Тензор напряжений имеет вид:  $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Sigma} + \mathcal{T}$ , где  $\mathbf{\Sigma}$  — статическая часть тензора напряжений (в случае классических уравнений Навье–Стокса для однокомпонентной однофазной жидкости определяется термодинамическим давлением:  $\mathbf{\Sigma} = -p\mathbf{I}$ ),  $\mathcal{T}$  — динамическая часть тензора напряжений, которая в случае ньютоновских жидкостей определяются как  $\mathbf{\Pi}_{NS}$ . Динамическая и объемная вязкости являются функциями молярных плотностей. Статическая часть  $\mathbf{\Sigma}$  тензора напряжений содержит члены, определяющие межфазные взаимодействия.

Определяющие соотношения в компонентном виде для диффузионного потока массы компонента и статической части тензора напряжений имеют вид:

$$Q_{i\alpha} = -D_{ij} \frac{\partial \Phi_j}{\partial x_\alpha}, \quad i = \overline{1, N},$$

$$\Sigma_{\alpha\beta} = \left[ f + \frac{1}{2} \Lambda_{ij} \frac{\partial n_i}{\partial x_\alpha} \frac{\partial n_j}{\partial x_\alpha} - \sum_{i=1}^N \Phi_i n_i \right] \delta_{\alpha\beta} - \Lambda_{ij} \frac{\partial n_i}{\partial x_\alpha} \frac{\partial n_j}{\partial x_\beta},$$

где

$$\Phi_i = \kappa_i - \Lambda_{ij} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \frac{\partial n_j}{\partial x_\alpha} \right)$$

— обобщенный химический потенциал компонента  $i$ ,  $\kappa_i$  — его химический потенциал,  $D_{ij}$  — компоненты симметричной, неотрицательно определенной

матрицы  $\mathbf{D}$ . Причем на  $\mathbf{D}$  дополнительно наложено условие  $D_{ij}M_j = 0$ . Через  $\delta_{\alpha\beta}$  обозначен символ Кронекера.

Граничные условия на твердых поверхностях с нормалью  $\mathbf{l}$ , направленной внутрь области течения, имеют вид:

$$u_i = 0, \quad Q_{ij}l_j = 0, \quad \Lambda_{ij} \frac{\partial n_j}{\partial x_k} l_k = \frac{\partial f_*}{\partial n_i}.$$

Для полной детализации модели, рассмотренные выше соотношения должны быть дополнены уравнениями состояния и выражением для плотности свободной энергии Гельмгольца  $f$ .

В рассматриваемом изотермическом случае выражение для объемной плотности свободной энергии имеет вид:

$$f = -p + \sum_{i=1}^N \kappa_i n_i, \quad \kappa_i = \left. \frac{\partial f}{\partial n_i} \right|_{p, T, n_{j \neq i}}.$$

Для задания свободной энергии может быть использовано несколько подходов. В частности, как показано в [100, 102], она может быть вычислена если известно уравнение состояния вида  $p = p(T, n_i)$ :

$$f = f_0 + \int_0^1 \frac{1}{\lambda^2} \left( p(T, \lambda n_i) - \mathcal{R}T \sum_{i=1}^N n_i \right) d\lambda,$$

где  $f_0$  является свободной энергией идеальной смеси газов,

$$f_0 = \mathcal{R}T \sum_{i=1}^N n_i \ln(n_i \xi_{i*}(T)),$$

$\mathcal{R}$  — универсальная газовая постоянная, функции  $\xi_{i*}(T)$  являются заданными функциями температуры.

Такой подход удобен тем, что для задания  $p(T, n_i)$  могут использоваться стандартные и хорошо известные кубические уравнения состояния (например Редлиха–Квонга, Пенга–Робинсона и др. [106]).

#### 4.1.4 Модели на основе решеточных уравнений Больцмана

В настоящее время одними из самых распространенных методов для моделирования многофазных течений с учетом поверхностных эффектов в областях со сложной геометрией являются методы, в основе которых лежит модель решеточных уравнений Больцмана. Популярность такого подхода мож-



но связать с относительной простотой реализации и большим потенциалом для расчета на высокопроизводительных системах.

Для однофазных задач уравнения решеточного метода Больцмана могут быть построены как специального вида аппроксимации уравнений Больцмана [107].

Для многофазных задач ситуация качественно иная: в этом случае дискретная модель среды строится без реальной опоры на корректность математической модели на мезоуровне (уровне кинетического описания), искусственно, так, чтобы гидродинамический предел решеточных уравнений с некоторой точностью совпадал с макроскопическими уравнениями гидродинамики многофазного флюида в рамках модели «диффузной границы». Получающиеся при этом решеточные уравнения, вообще говоря, мало связаны с уравнениями Больцмана, описывающими течение многофазного флюида.

Обоснование корректности и применимости метода Больцмана (и как численного метода, и как дискретной модели среды) сводится к построению дифференциальной формы (гидродинамического предела) соответствующих дискретных уравнений метода. Если получающиеся в результате уравнения «близки» (то есть отличаются на асимптотически малые поправки) к дифференциальным уравнением, описывающим течение, то применимость метода считается обоснованной. Основным техническим средством для построения дифференциального приближения решеточных уравнений является процедура Чепмена–Энскога, стандартно используемая, например, при выводе уравнений Эйлера или Навье–Стокса из (континуального) уравнения Больцмана.

Наиболее точно суть подхода отражает следующая цитата из [108]:

«A Lattice Boltzmann equation is a kinetic level description of a fictitious microworld with the same conserved quantities as the real world. If properly constructed (see below), it will then give rise to the same hydrodynamics.»

«Решеточный метод Больцмана является кинетическим описанием фиктивного микромира с теми же консервативными параметрами, что и в реальном мире. Будучи правильно построенным, он приводит к той же гидродинамике.»

Отметим, что первичной, «правильной» моделью, описывающей течение, является именно макроскопическая (например классические уравнения Навье–Стокса), а не уравнения Больцмана. В частности, обоснование применимости рассматриваемых ниже многофазных и многокомпонентных моделей сводится к построению соответствующего гидродинамического предела и его сравнением с макроскопической моделью течения. Параметры решеточной модели при этом подбираются так, чтобы дифференциальное приближение решеточной модели совпадало с макроскопической моделью, которая описывает течение [109]. В работе [108] в явном виде вычислен вид гидродинамического предела целого ряда распространенных вариантов решеточного метода

Больцмана и проанализирован вид дополнительных слагаемых, отличающих эти уравнения от уравнений многофазной гидродинамики с использованием модели «диффузной границы».

В силу изложенных причин (неоднозначность построения модели мезоуровня, когда различные решеточные уравнения имеют один и тот же гидродинамический предел), в настоящее время известно несколько разновидностей решеточного метода Больцмана для описания течений многофазной многокомпонентной жидкости, которые в основном отличаются способом учета межфазного взаимодействия, определяемого силами взаимодействия между молекулами, составляющими фазы. Эти силы отвечают за процесс разделения фаз и поверхностные эффекты на контактной границе между ними [110]. Одними из наиболее употребительных методов этого типа являются [111, 112]:

**Shan–Chen model** — модель Шана и Чена [113] и ее обобщения. Частицы одного типа (составляющие один компонент) описываются собственной функцией распределения с характерным временем между столкновениями. Для описания совместного движения различных фаз используются специально определенные силы взаимодействия между частицами, образующими различные фазы. Уравнение состояния жидкости при этом корректируется (по сравнению с уравнением состояния идеального газа) так, чтобы учитывать потенциал далекодействующих сил.

В рассматриваемом типе моделей взаимодействие между фазами учитывается на мезоуровне. Самосогласованность такого способа описания межфазного взаимодействия с точки зрения термодинамики является предметом активного обсуждения [114–117].

**Color–gradient–based LBM** — модель, предложенная в работе [118]. Описывает течение двух несмешивающихся жидкостей. Каждый компонент смеси условно «помечается» своим цветом (красным или синим), и для каждого компонента вводится своя функция распределения. Интеграл столкновений для каждого компонента является комбинацией трех операторов [119, 120]: первый является стандартным и описывает столкновения частиц одного сорта («цвета»), второй отвечает за взаимодействие частиц разных сортов и определяет поверхностное натяжение, а третий («перекрашивание», «recoloring») контролирует толщину межфазной границы на основе значений цветового градиента, который вычисляется в каждом узле решетки.

**Free energy LBM** — модель, предложенная в работах [121–123]. Для учета межфазных взаимодействий и динамики межфазной границы вводится свободная энергия аналогично моделям типа «диффузной границы». При этом для случая бинарной смеси в качестве параметров порядка выступают полная плотность смеси и разница между плотностями от-

дельных компонентов [122]. Также вводятся соответствующие функции распределения.

Подход является более обоснованным с точки зрения макроскопического описания среды по сравнению с моделью Шана-Чена [124].

В рамках методов многофазного многокомпонентного LBM не требуется наличие независимой модели разделения фаз: эти эффекты изначально заложены в решеточную модель течения, и зачастую вводятся на макроуровне с использованием модели «диффузной границы».

Отметим, что существуют и комбинированные модели, использующие для описания одновременно подходы мезо- и макроуровней. Такой подход используется, например, в работе [125], для того, чтобы обеспечить возможность эффективно проводить расчеты с большими скачками плотностей фаз.

Детали и расчетные схемы различных вариантов методов решеточных уравнений Больцмана для расчета многофазных многокомпонентных течений здесь не приводятся. С ними можно ознакомиться, например, в [14, 15].

## 4.2 Квазигидродинамическая модель многофазного многокомпонентного течения с учетом поверхностных эффектов

В данном разделе приведен феноменологический вывод квазигидродинамической системы уравнений движения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов в рамках модели типа «диффузной границы».

Уравнения, описывающие течения указанного типа, могут быть построены различными способами. В настоящей работе выбран способ, основанный на концепции микросил и микронапряжений, предложенный в работах [126, 127].

В основе вывода лежат две ключевые идеи:

- фазовый состав (микроструктура) жидкости в области пространства описывается заданным в области непрерывным полем «параметра порядка». В качестве последнего выступают плотность жидкости и/или концентрации образующих его фаз. Следуя работам [126, 128], предполагается, что в жидкости действует набор микросил и микронапряжений (см. ниже), которые отвечают за эволюцию параметров порядка;
- выражения для микросил, микронапряжений и дополнительных квазигидродинамических слагаемых выводятся на основании требования выполнения второго закона термодинамики. Таким образом, безотносительно конкретной содержательной интерпретации микросил и мик-

ронапряжений, математическая модель не противоречит основным физическим законам (сохранения массы, импульса, энергии и момента импульса) и положениям феноменологической термодинамики.

Вывод модели в целом повторяет вывод, представленный в [126, 128], с тем отличием, что, в соответствии с КГиД подходом, плотность потока массы не совпадает с импульсом единицы объема среды.

Представленный ниже вывод основан на комбинации двух подходов, а именно:

- детально изложенного в [128] способа получения уравнений многофазной гидродинамики с учетом поверхностных эффектов, основанного на концепции микросил и микронапряжений, а также применении процедуры Колмана–Нолла [129];
- феноменологического вывода квазигидродинамической системы уравнений, предложенного Ю.В. Шеретовым и изложенного в [29].

#### 4.2.1 Основные идеи концепции «микросил»

В некоторых задачах возникает необходимость описания на макроскопическом уровне процессов, связанных с эволюцией микроструктуры среды. В контексте настоящей работы примером таких процессов являются разделение фаз в смеси жидкостей с различными свойствами или, наоборот, слияние капель одной фазы в более крупные. Чтобы описывать микроструктуру среды на макроуровне, часто вводят скалярную функцию, называемую «параметром порядка» или «фазовым полем».

Например, в случае описания однокомпонентной жидкости с фазовыми переходами («жидкость–пар») в качестве параметра порядка может выступать плотность среды, а для двухкомпонентных несмешивающихся двухфазных сред (например, смесь «вода–масло») — объемная или массовая концентрация одной из фаз.

Для создания математической модели, описывающей подобные процессы, в настоящей работе используется подход, предложенный в работах [126, 127, 130]. Он основан на том соображении, что фундаментальные физические законы, определяющие эволюцию энергии жидкости, должны учитывать работу, связанную с каждым кинематическим процессом (который в нашем случае связан с изменением параметра порядка). Таким образом, весьма правдоподобно наличие некоторых «микросил», чья работа сопровождает изменения параметра порядка (по сути, микроструктуры среды).

В полной системе, описывающей динамику процесса в рамках моделей подобного типа, обычно можно выделить две связанные группы уравнений: первая описывает макроскопическую динамику среды и соответствующих полей, вторая — изменение параметра порядка. Так, например, в гидродинамике многофазной жидкости эволюция формы капли одной жидкости внутри

другой и ее макроскопическое движение описываются уравнениями Навье–Стокса, в которые добавляются специальные члены, описывающие силы поверхностного натяжения, и уравнение, описывающее эволюцию распределения фаз и компонентов в пространстве и времени.

Более детально формализм математических моделей с использованием концепции микросил и микронапряжений и его приложения для построения математических моделей в различных областях физики описаны в работах [126–128, 130, 131].

Приведем основные уравнения систем микросил и микронапряжений, используемых в настоящей работе. Будем считать, что в среде действуют:

- (векторное) поле внутренних микронапряжений  $\xi$ ;
- (скалярное) поле внутренних микросил  $\pi$ ;
- (скалярное) поле внешних микросил  $\gamma$ .

Отдельно отметим, что здесь «микросилы» используются в широком смысле и, вообще говоря, не имеют никакого отношения к классическому понятию «сила» (подобно обобщенным термодинамическим силам).

Внутренние микросилы описывают силы, возникающие от взаимодействия «элементарных» частиц, составляющих среду. Внешние микросилы описывают внешнее воздействие, играющее роль только на микроуровне, но в масштабах задачи («макроуровень») не оказывающее никакого влияния. Микронапряжения описывают воздействие на микроструктуру через поверхность жидкого объема со стороны групп «элементарных» частиц окружающего вещества [126].

Для указанной системы микросил и микронапряжений *постулируется* выполнение следующих соотношений, справедливых для произвольного материального объема  $V = V(t)$ :

- уравнение баланса микросил, которое в интегральном виде имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \xi \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi dV + \int_{V(t)} \gamma dV = 0,$$

и, как следствие, в дифференциальном:

$$\operatorname{div} \xi + \pi + \gamma = 0.$$

Здесь  $\mathbf{n}$  — внешняя нормаль к границе  $\partial V$  области  $V$ ;

- выражение для мощности, т.е. работы в единицу времени, микронапря-

жений при изменении параметра порядка  $\varphi$ :

$$\int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma$$

и мощности внутренних и внешних микросил:

$$\int_{V(t)} f \frac{d\varphi}{dt} dV, \quad f = \pi, \gamma.$$

Здесь и далее  $d(\cdot)/dt$  — полная (субстанциональная, лагранжева, материальная) производная по времени.

По сути, считая  $\varphi$  «кинематической» переменной, последние соотношения выражают тот факт, что

$$[\text{мощность}] = [\text{скорость изменения } \varphi] \times \left[ \begin{array}{c} \text{«сила», вызывающая} \\ \text{изменение } \varphi \end{array} \right]$$

или, эквивалентно,

$$[\text{работа}] = [\text{изменение } \varphi] \times \left[ \begin{array}{c} \text{«сила», вызывающая} \\ \text{изменение } \varphi \end{array} \right],$$

причем «сила» понимается в широком смысле.

Отсюда видно, что поскольку фазовое поле выбрано скалярным, то и соответствующая микросила должна быть скалярной, а не векторной величиной.

Выражение для мощности микросил и микронапряжений имеет вид:

$$W = \int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \gamma dV,$$

причем считается, что соответствующая работа совершается *над объектом  $V$  его окружением*. Отметим, что в этом выражении не присутствуют внутренние микросилы. Более подробное изложение этого вопроса представлено в [126, 127];

- диссипативное неравенство, содержащее мощность микросил и микронапряжений. В том случае, если в среде не происходят никакие процессы, кроме как связанные с наличием микросил и микронапряжений,

это неравенство имеет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \Psi \rho dV \leq \int_{\partial V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\varphi}{dt} \gamma dV,$$

где  $\Psi$  — массовая плотность свободной энергии Гельмгольца. Для более сложных процессов, в частности, рассматриваемых в настоящей работе, в правой части последнего неравенства должны присутствовать слагаемые, отвечающие за работу других сил, действующих в системе (внешние силы, напряжения в жидкости и т.д.).

Приведенные выше уравнения определяют основные балансовые законы для микросил и микронапряжений, но не определяют вид зависимостей этих величин от параметров, описывающих среду.

## 4.2.2 Поток массы и массовая скорость

В соответствии с квазигидродинамическим подходом, будем полагать, что плотность потока массы  $\mathbf{j}_m$  не равна среднему импульсу единицы объема  $\rho \mathbf{u}$ :

$$\rho \mathbf{u} - \mathbf{j}_m =: \rho \mathbf{w} \neq 0.$$

Последнее выражение следует считать определением вектора  $\mathbf{w}$ . Конкретный вид определяющего соотношения для  $\mathbf{w}$  как функции физических полей, описывающих течение (плотности, скорости, давления и др.), будет получен ниже. Таким образом, для вектора плотности потока массы имеем:

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}). \quad (4.9)$$

Величину

$$\mathbf{u}_m := \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} = \mathbf{u} - \mathbf{w} \quad (4.10)$$

будем называть «массовой скоростью».

В дальнейшем будем считать, что жидкая частица движется вдоль интегральной линии дифференциального уравнения

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{j}_m}{\rho}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0.$$

Тогда формула дифференцирования по времени интеграла функции  $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$  по жидкому объему примет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \phi \right) \right] dV \quad (4.11)$$

для скалярных полей и

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi dV = \int_{V(t)} \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \otimes \phi \right) \right] dV \quad (4.12)$$

для векторных.

В соответствии с вышесказанным, выражение для полной производной по времени имеет вид:

$$\frac{d}{dt}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \cdot \nabla(\cdot) \equiv \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla(\cdot) \equiv \frac{\partial}{\partial t}(\cdot) + \mathbf{u}_m \cdot \nabla(\cdot). \quad (4.13)$$

### 4.2.3 Модель компонентного состава

Будем считать, что жидкость состоит из  $N$  компонентов, причем в произвольном физически бесконечно малом объеме могут присутствовать все из них. Пусть в объеме пространства  $dV$  содержится жидкость массы  $dm$ , причем отдельные компоненты занимают объем  $dV_\alpha$  и имеют массу  $dm_\alpha$ ,  $\alpha = \overline{1, N}$ :

$$dm = \sum_{\alpha=1}^N dm_\alpha.$$

Плотность жидкости и («натуральную») плотность составляющих ее компонентов определим как:

$$\rho = \frac{dm}{dV}, \quad \hat{\rho}_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha}, \quad \alpha = \overline{1, N},$$

при этом выполняется соотношение:

$$\rho dV = \sum_{\alpha=1}^N \hat{\rho}_\alpha dV_\alpha.$$

Введем также плотность компонента, отнесенную к объему  $dV$  жидкости в целом:

$$\rho_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV} = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha} \cdot \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Тогда

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha, \quad \rho_\alpha = \hat{\rho}_\alpha \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Величину

$$C_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \quad (4.14)$$



будем называть массовой концентрацией (массовой долей) компонента  $\alpha$ . Тогда

$$\rho_\alpha = C_\alpha \rho$$

и

$$\sum_{i=1}^N C_\alpha = 1. \quad (4.15)$$

#### 4.2.4 Законы сохранения в интегральной форме

Далее будем считать, что для произвольного подвижного жидкого объема  $V = V(t)$  выполняются классические законы сохранения массы, импульса и энергии, которые имеют приведенный ниже вид.

##### Законы сохранения массы компонент

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho_\alpha dV = \int_{\partial V(t)} -\mathbf{h}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} m_\alpha dV, \quad \alpha = \overline{1, N}, \quad (4.16)$$

где  $\mathbf{h}_\alpha$  и  $m_\alpha$  — вектор плотности потока массы компонента  $\alpha$  через границу *жидкого объема* и объемная плотность источников массы компонента  $\alpha$ , соответственно.

##### Закон сохранения массы

Суммируя  $N$  уравнений (4.16), получим:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = \int_{\partial V(t)} -\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} m d\sigma,$$

где

$$\mathbf{h} = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{h}_\alpha, \quad m = \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha.$$

При отсутствии *внешних* потоков и источников массы должно выполняться:

$$\mathbf{h} = 0, \quad m = 0. \quad (4.17)$$

Тогда закон сохранения массы примет вид:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0. \quad (4.18)$$

Его можно использовать в качестве замены одного из уравнений (4.16).

## Закон сохранения импульса

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \int_{\partial V(t)} \mathbf{p}^{(n)} d\sigma + \int_{V(t)} \rho \mathbf{f} dV, \quad (4.19)$$

где  $\mathbf{p}^{(n)}$  — сила, действующая на границе  $\partial V(t)$ ,  $\mathbf{f}$  — вектор массовой плотности внешних сил,  $\mathbf{u}$  — скорость жидкости.

## Баланс микросил

Будем считать, что в жидкости действуют две системы микросил. Первая из них связана с изменением массовых концентраций компонент и призвана описывать такие эффекты, как перемешивание и разделение компонент жидкости и прочие эффекты, связанные с «кинематикой» концентраций  $C_\alpha$ . Соответствующие микронапряжения, внутренние и внешние микросилы будем обозначать как:

$$C_\alpha \longleftrightarrow \{\boldsymbol{\xi}_\alpha, \pi_\alpha, \gamma_\alpha\}, \quad \alpha = \overline{1, N}.$$

Соответствующая система балансовых уравнений имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi_\alpha dV + \int_{V(t)} \gamma_\alpha dV = 0, \quad \alpha = \overline{1, N}, \quad (4.20)$$

где  $\boldsymbol{\xi}_\alpha$  — поле микронапряжений (векторное),  $\pi_\alpha$  — поле внутренних микросил (скалярное),  $\gamma_\alpha$  — поле внешних микросил (скалярное),  $\alpha = \overline{1, N}$ .

Вторая система микросил связана с изменением плотности жидкости и призвана описывать такие эффекты, как фазовые переходы (которые могут происходить и в том случае, когда компонент всего один и его концентрация всегда равна единице):

$$\rho \longleftrightarrow \{\boldsymbol{\xi}, \pi, \gamma\}. \quad (4.21)$$

Соответствующее балансовое соотношение имеет вид:

$$\int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \pi dV + \int_{V(t)} \gamma dV = 0, \quad (4.22)$$

где  $\boldsymbol{\xi}$  — поле микронапряжений (векторное),  $\pi$  — поле внутренних микросил (скалярное),  $\gamma$  — поле внешних микросил (скалярное).

## Закон сохранения момента импульса

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mathbf{x} \times (\rho \mathbf{u}) dV = \int_{V(t)} \mathbf{x} \times (\rho \mathbf{f}) dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{x} \times \mathbf{p}^{(n)} d\sigma. \quad (4.23)$$

## Второй закон термодинамики

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho s dV + \int_{\partial V(t)} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} d\sigma - \int_{V(t)} \frac{\rho r}{T} dV \geq 0. \quad (4.24)$$

## Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \left( \varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) dV &= [\text{Скорость изменения энергии}] \\ &+ \int_{V(t)} \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} dV \quad [\text{Мощность внешних сил}] \\ &+ \int_{\partial V(t)} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Мощность внутренних сил}] \\ &- \int_{\partial V(t)} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Тепловой поток}] \\ &- \int_{\partial V(t)} \left( \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha \right) \cdot \mathbf{n} d\sigma \quad [\text{Приток энергии за счет притока вещества}] \\ &+ \int_{V(t)} \sum_{\alpha=1}^{N-1} m_\alpha \mu_\alpha dV \quad [\text{Приток энергии за счет объемных источников массы компонентов}] \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left( \int_{\partial V(t)} \frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha dV \right) \quad [\text{Мощность изменения параметра порядка } \varphi_\alpha \equiv C_\alpha, \alpha = 1, N-1] \\ &+ \int_{\partial V(t)} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V(t)} \frac{d\rho}{dt} \gamma dV \quad [\text{Мощность изменения параметра порядка } \varphi_N \equiv \rho] \\ &+ \int_{V(t)} r \rho dV. \quad [\text{Внешний источник энергии}] \end{aligned} \quad (4.25)$$

Здесь  $\varepsilon$  — массовая плотность внутренней энергии жидкости,  $\mathbf{q}$  — вектор

плотности потока тепла,  $\mathbf{a}$  — вектор плотности потока энергии, связанный с работой внутренних напряжений,  $\mu_\alpha$  — обобщенный химический потенциал,  $r$  — массовая плотность внешних источников энергии.

Выражения в последних трех строках уравнения закона сохранения энергии описывают скорость изменения энергии за счет работы микронапряжений и внешних микросил в единицу времени.

#### 4.2.5 Законы сохранения в дифференциальной форме

В этом разделе приведены дифференциальные законы сохранения, соответствующие сформулированным ранее интегральным законам.

Сначала рассматриваются законы сохранения в консервативной форме, которые представляют собой «основную» систему уравнений. Далее рассматриваются законы сохранения в лагранжевой форме. Они потребуются в дальнейшем при применении процедуры Колмана–Нолла.

##### Законы сохранения в консервативной форме

Используя формулы дифференцирования интеграла по подвижному объему (4.11), (4.12) и формулу Гаусса–Остроградского, можно получить приведенные ранее законы сохранения в дифференциальной форме.

##### Закон сохранения массы компонентов

Закон сохранения массы компонента  $\alpha$ ,  $\alpha = \overline{1, N}$  имеет вид:

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \rho_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N},$$

или, эквивалентно,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_\alpha) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N}.$$

##### Закон сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0.$$

Легко заметить, что это уравнение является суммой  $N$  предыдущих уравнений, выражающих законы сохранения масс отдельных компонентов.

##### Закон сохранения импульса

Считая, что величина силы, действующей на границе  $\partial V(t)$  области  $V(t)$ , определяется с помощью тензора напряжений  $\mathbf{P}$ , имеем  $\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}$ .

Отсюда:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \otimes \rho\mathbf{u} - \mathbf{P}) = \rho\mathbf{f}.$$

Величина

$$\mathbf{A} = \mathbf{u}_m \otimes \rho\mathbf{u} - \mathbf{P}$$

является тензором плотности потока импульса.

### Баланс микросил

Уравнения баланса микросил и микронапряжений имеют вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha &= 0, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \\ \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma &= 0. \end{aligned}$$

### Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\rho E \mathbf{u}_m) &= \\ &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[ \operatorname{div} \left( \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \mu_\alpha m_\alpha - \operatorname{div}(\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \operatorname{div} \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right], \quad (4.26) \end{aligned}$$

где

$$E = \varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2}$$

— массовая плотность полной энергии.

Недивергентные слагаемые в правой части уравнения соответствуют мощности внешних сил и микросил, а также внешним источникам энергии.

### Второй закон термодинамики

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \rho s \mathbf{u}_m + \frac{1}{T} \mathbf{q} \right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0.$$

### Закон сохранения момента импульса

Исходя из предположения о выполнении закона сохранения момента импульса, вид тензора напряжений получается точно так же, как в работе [32]:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^s + \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \quad (4.27)$$

где  $\mathbf{P}^s$  — некоторый симметричный тензор второго ранга. В то же время этого достаточно для выполнения закона сохранения момента импульса, в

чем можно убедиться непосредственной подстановкой.

При таком выборе  $\mathbf{P}$  тензор плотности потока импульса является симметричным и имеет следующее выражение:

$$\mathbf{A} = \mathbf{u}_m \otimes \rho \mathbf{u} - \mathbf{P} = -\mathbf{P}^s + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \rho (\mathbf{w} \otimes \mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}).$$

## Законы сохранения в лагранжевой форме

Ниже для полноты выписаны дифференциальные уравнения законов сохранения в лагранжевой форме.

### Закон сохранения массы для компонентов

$$\rho \frac{dC_\alpha}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{h}_\alpha + m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N}. \quad (4.28)$$

### Закон сохранения массы

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div} \mathbf{u}_m. \quad (4.29)$$

### Закон сохранения импульса

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{f}. \quad (4.30)$$

### Баланс микросил

Так как в уравнения баланса микросил и микронапряжений не входят производные по времени, они имеют точно такой же вид, как и ранее:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha = 0, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (4.31)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma = 0. \quad (4.32)$$

### Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \rho \frac{dE}{dt} &\equiv \rho \left( \frac{d\varepsilon}{dt} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} \right) = \\ &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[ \operatorname{div} \left( \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \mu_\alpha m_\alpha - \operatorname{div} (\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \operatorname{div} \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right]. \quad (4.33) \end{aligned}$$

## Второй закон термодинамики

$$\rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0. \quad (4.34)$$

### 4.2.6 Диссипативное неравенство для свободной энергии

Получим уравнение баланса внутренней энергии. Для этого умножим:

- уравнение (4.30) — на  $\mathbf{u}$ , получим:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{f},$$

или

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \right) + \left( \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}^2 \right) \operatorname{div} \mathbf{u}_m = \operatorname{div} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P} : (\nabla \otimes \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}.$$

- уравнение (4.31) — на  $dC_\alpha/dt$ ,
- уравнение (4.32) — на  $d\rho/dt$ ,
- уравнение (4.28) — на  $\mu_\alpha$ ,

и подставим результат в уравнение энергии (4.33). В результате получим:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\varepsilon}{dt} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} = \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[ \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left( \frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \rho \frac{dC_\alpha}{dt} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \rho r. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Получим теперь диссипативное неравенство для свободной энергии Гельмгольца. Выражение для свободной энергии Гельмгольца единицы массы имеет вид:

$$\Psi = \varepsilon - T s, \quad (4.36)$$

где  $s$  — энтропия единицы массы.

Вычисляя полную производную по времени обеих частей (4.36), получим:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} - T \frac{ds}{dt} = \frac{d\Psi}{dt} + s \frac{dT}{dt}.$$

Отсюда, воспользовавшись вторым началом термодинамики (4.34) и балансовым уравнением для внутренней энергии (4.35), получим неравенство для свободной энергии Гельмгольца:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\Psi}{dt} \leq & -\rho s \frac{dT}{dt} - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} - \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[ \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left( \frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \rho \frac{dC_\alpha}{dt} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T. \end{aligned} \quad (4.37)$$

### 4.2.7 Процедура Колмана–Нолла

В настоящем разделе полученное выше неравенство для свободной энергии будет использовано для нахождения вида определяющих соотношений, замыкающих модель. Указанная процедура называется процедурой Колмана–Нолла [129]. Она основана на той идее, что, как только определен факт наличия функциональных связей между параметрами, описывающими течение, неравенство для свободной энергии можно рассматривать не как ограничение на термодинамический процесс, а как ограничение на реологические и другие соотношения, определяющие модель процесса.

Для дальнейшего нам понадобится несколько технических утверждений.

**Утверждение 1.** *Для градиента произвольного векторного поля  $\mathbf{u}$  справедливо следующее представление:*

$$\nabla \otimes \mathbf{u} = \mathbf{L}_u^d + \mathbf{L}_u^h + \mathbf{S}_u,$$

или

$$\nabla \otimes \mathbf{u} = \mathbf{D}_u + \mathbf{L}_u^h,$$

где

$$\mathbf{L}_u^d = \frac{1}{2}[(\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T] - \frac{1}{3}(\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}, \quad \mathbf{L}_u^h = \frac{1}{3} \operatorname{tr} (\nabla \otimes \mathbf{u}) \mathbf{I} \equiv \frac{1}{3}(\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I}$$

— девиатор и шаровая часть тензора градиента  $\mathbf{u}$ ,

$$\mathbf{S}_u = \frac{1}{2}[\nabla \otimes \mathbf{u} - (\nabla \otimes \mathbf{u})^T]$$

— его кососимметричная часть,

$$\mathbf{D}_u = \mathbf{L}_u^d + \mathbf{S}_u$$

— его часть с нулевым следом.



**Утверждение 2.** Для любой скалярной величины  $\alpha$  справедливо тождество:

$$\nabla \left( \frac{d\alpha}{dt} \right) = \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla \alpha.$$

*Доказательство.* Имеем:

$$\nabla \left( \frac{d\alpha}{dt} \right) = \nabla \left( \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha \right) = \frac{\partial (\nabla \alpha)}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha). \quad (4.38)$$

Преобразуем второе слагаемое:

$$[\nabla (\mathbf{u}_m \cdot \nabla \alpha)]_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( u_{m,j} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) = u_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \alpha}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial u_{m,j}}{\partial x_i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}.$$

Следовательно:

$$\left[ \nabla \left( \frac{d\alpha}{dt} \right) \right]_i = \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right) + u_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\partial u_{m,j}}{\partial x_i} \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}$$

Тогда окончательно:

$$\begin{aligned} \nabla \left( \frac{d\alpha}{dt} \right) &= \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + (\nabla \otimes \mathbf{u}_m)^T \cdot \nabla \alpha = \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + (\mathbf{D}_{u_m}^T + \mathbf{L}_{u_m}^h) \cdot \nabla \alpha = \\ &= \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + \left( \mathbf{D}_{u_m}^T + \frac{1}{3} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u}_m \right) \cdot \nabla \alpha = \frac{d}{dt} (\nabla \alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla \alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla \alpha. \end{aligned}$$

□

**Утверждение 3.** Пусть  $\mathbf{A}$  — симметричный тензор второго ранга,  $\mathbf{B}$  — произвольный тензор второго ранга. Тогда

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = \mathbf{A}^d : \mathbf{B}^d + \mathbf{A}^h : \mathbf{B}^h,$$

где верхними индексами « $d$ » и « $h$ » обозначены девиатор и шаровая часть соответствующего тензора.

В частности, при  $\mathbf{B} = \nabla \otimes \mathbf{u}$  получаем:

$$\mathbf{A} : (\nabla \otimes \mathbf{u}) = \mathbf{A}^d : \mathbf{L}_u^d + \frac{1}{3} (\operatorname{div} \mathbf{u}) \operatorname{tr} \mathbf{A}.$$

*Доказательство.* Доказательство сводится к непосредственной проверке тождества с учетом того, что свертки (i) симметричного и кососимметричного тензора и (ii) шарового тензора и тензора с нулевым следом равны нулю.

□

Перейдем непосредственно к реализации процедуры Колмана–Нолла, следуя [128]. Для этого преобразуем неравенство (4.37) для свободной энергии.

Рассмотрим сначала третью строку неравенства (4.37). В соответствии с утверждением 2 имеем для  $\rho$  и  $C_\alpha$ ,  $\alpha = \overline{1, N-1}$ :

$$\nabla \left( \frac{d\rho}{dt} \right) = \frac{d}{dt}(\nabla\rho) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla\rho - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla\rho, \quad (4.39)$$

$$\nabla \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right) = \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) + \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla C_\alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \nabla C_\alpha. \quad (4.40)$$

Отсюда получаем:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left( \frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} &= \\ &= \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{d}{dt}(\nabla\rho) + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla\rho - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla\rho - \pi \frac{d\rho}{dt} = \\ &= \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{d}{dt}(\nabla\rho) + (\nabla\rho \otimes \boldsymbol{\xi}) : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla\rho - \pi \frac{d\rho}{dt} \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} &= \\ &= \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) + \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \mathbf{D}_{u_m}^T \cdot \nabla C_\alpha - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla C_\alpha - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} = \\ &= \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) + (\nabla C_\alpha \otimes \boldsymbol{\xi}_\alpha) : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla C_\alpha - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt}. \end{aligned}$$

Тогда для второй строки неравенства (4.37) имеем:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \nabla \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[ \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla \left( \frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] &= \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \boldsymbol{\xi}_\alpha \cdot \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[ \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{d}{dt}(\nabla\rho) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \\ &\quad + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} - \frac{1}{3\rho} \frac{d\rho}{dt} \operatorname{tr} \mathbf{Q}, \quad (4.41) \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{Q} := \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla C_\alpha \otimes \boldsymbol{\xi}_\alpha + \nabla\rho \otimes \boldsymbol{\xi} \quad (4.42)$$

и, соответственно,

$$\operatorname{tr} \mathbf{Q} = \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla C_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\xi}_{\alpha} + \nabla \rho \cdot \boldsymbol{\xi}.$$

Для слагаемого  $\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}$  в первой строке неравенства (4.37), учитывая вид тензора напряжений (4.27), получим

$$\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} = \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \quad (4.43)$$

Представим  $\mathbf{P}^s$  в виде суммы девиатора и шаровой части:

$$\mathbf{P}^s = \mathbf{P}^d + \bar{p} \mathbf{I}, \quad \bar{p} = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{P}^s. \quad (4.44)$$

Тогда для первого слагаемого в (4.43) имеем:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s &= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \mathbf{u} \cdot \nabla \bar{p} = \\ &= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \mathbf{u}_m \cdot \nabla \bar{p} + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} = \\ &= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \operatorname{div}(\bar{p} \mathbf{u}_m) - \bar{p} \operatorname{div} \mathbf{u}_m + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} = \\ &= \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d + \operatorname{div}(\bar{p} \mathbf{u}_m) + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

где, далее,

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^d &= \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : (\nabla \otimes \mathbf{u})^T = \\ &= \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : (\mathbf{L}_u^d + \mathbf{L}_u^h + \mathbf{S}_u)^T = \\ &= \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d. \end{aligned}$$

Подставляя результат в (4.45), получим:

$$\mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P}^s = -\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt}$$

и, как следствие, из (4.43):

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \mathbf{P} &= -\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \\ &+ \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \bar{p} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Теперь подставим выражения (4.41) и (4.46) в неравенство для свободной

энергии (4.37). После перегруппировки слагаемых, получим:

$$\begin{aligned}
\rho \frac{d\Psi}{dt} &\leq \frac{dT}{dt}(-\rho s) + \frac{d\rho}{dt} \left[ -\frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} \right) - \pi \right] + \frac{d}{dt} (\nabla \rho) \cdot \boldsymbol{\xi} + \\
&+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{dC_\alpha}{dt} (-\pi_\alpha + \rho \mu_\alpha) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d}{dt} (\nabla C_\alpha) \cdot \boldsymbol{\xi}_\alpha - \\
&- \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \Delta,
\end{aligned} \tag{4.47}$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta = \operatorname{div} \mathbf{a} - \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} - \operatorname{div} (\mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m) + \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d - \\
- \mathbf{w} \cdot \nabla \bar{p} + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}).
\end{aligned}$$

После перегруппировки слагаемых в последнем выражении получим:

$$\begin{aligned}
\Delta = \operatorname{div} (\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p} \mathbf{u}_m) + \mathbf{w} \cdot (-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p}) + \\
+ (\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m}) - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}). \tag{4.48}
\end{aligned}$$

Для третьего слагаемого в (4.48) имеем:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{D}_{u_m} &= \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{L}_{u_m}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\
&= \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_{u_m}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \mathbf{P}^d : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q}^d : (\mathbf{L}_u^d - \mathbf{L}_w^d) + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\
&= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d - \mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_w^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} = \\
&= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d - \operatorname{div} (\mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m}.
\end{aligned}$$

Здесь было использовано разложение:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^d + \mathbf{Q}^h + \mathbf{Q}^a,$$

где индексами  $d$ ,  $h$  и  $a$  обозначены соответственно девиатор, шаровая часть и кососимметричная часть тензора  $\mathbf{Q}$ :

$$\mathbf{Q}^d = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T) - \mathbf{Q}^h, \quad \mathbf{Q}^h = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q}, \quad \mathbf{Q}^a = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T).$$

Также использовано тождество  $\mathbf{Q}^d : \mathbf{L}_w^d = \mathbf{Q}^d : (\nabla \otimes \mathbf{w})$ .

Для последнего слагаемого в (4.48) получим:

$$\begin{aligned}\mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}) &= u_j \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i w_j) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j w_j) - \rho u_i w_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \\ &= \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})) - \rho \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}.\end{aligned}$$

Подставляя результаты последних преобразований в (4.48), придем к выражению:

$$\begin{aligned}\Delta &= (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} + \\ &+ \operatorname{div}(\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}) + \\ &+ \mathbf{w} \cdot (-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d).\end{aligned}\quad (4.49)$$

Далее, в соответствии с принципом равноприсутствия [132–134] будем считать, что массовая плотность свободной энергии  $\Psi = \Psi(\mathcal{X})$  зависит от следующего вектора параметров:

$$\mathcal{X} = \left\{ \rho, \nabla \rho, \frac{d\rho}{dt}, C_\alpha, \nabla C_\alpha, \frac{dC_\alpha}{dt}, T, \nabla T, \mu_\alpha, \nabla \otimes \mathbf{u} \right\},$$

где  $\alpha = \overline{1, N-1}$ .

Тогда для полной производной по времени свободной энергии  $\Psi$  имеем:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \sum_{\bar{\mathcal{X}} \in \mathcal{X}} \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\mathcal{X}}} \frac{d\bar{\mathcal{X}}}{dt}.\quad (4.50)$$

Подставив соотношения (4.49) и (4.50) в неравенство для свободной энергии (4.47), получим:

$$\begin{aligned}0 &\leq \frac{dT}{dt} \left( -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial T} - \rho s \right) - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \\ &+ \frac{d\rho}{dt} \left[ -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} \right) - \pi \right] + \frac{d}{dt}(\nabla \rho) \cdot \left( -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla \rho)} + \boldsymbol{\xi} \right) + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{dC_\alpha}{dt} \left( -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} - \pi_\alpha + \rho \mu_\alpha \right) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d}{dt}(\nabla C_\alpha) \cdot \left( -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla C_\alpha)} + \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) - \\ &+ (\mathbf{P}^d + \mathbf{Q}^d) : \mathbf{L}_u^d + \mathbf{Q} : \mathbf{S}_{u_m} + \Delta_2 + \Delta_3,\end{aligned}\quad (4.51)$$

где

$$\begin{aligned}\Delta_2 &= \operatorname{div}(\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}) + \\ &+ \mathbf{w} \cdot (-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d),\end{aligned}$$

$$\Delta_3 = \frac{\partial \Psi}{\partial(d\rho/dt)} \frac{d^2 \rho}{dt^2} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial(dC_\alpha/dt)} \frac{d^2 C_\alpha}{dt^2} + \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla T)} \cdot \frac{d(\nabla T)}{dt} +$$

$$+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \mu_\alpha} \frac{d\mu_\alpha}{dt} + \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla \otimes \mathbf{u})} : \frac{d(\nabla \otimes \mathbf{u})}{dt}.$$

Следующие условия достаточны для выполнения этого неравенства:

- свободная энергия единицы массы зависит только от набора переменных  $\rho, \nabla \rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T$ , где  $\alpha = \overline{1, N-1}$ . При этом получаем  $\Delta_3 = 0$ ;
- энтропия единицы массы определяется как:

$$s = -\frac{\partial \Psi}{\partial T}; \quad (4.52)$$

- микронапряжения задаются соотношениями:

$$\boldsymbol{\xi} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla \rho)}, \quad \boldsymbol{\xi}_\alpha = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial(\nabla C_\alpha)}, \quad \alpha = \overline{1, N-1}; \quad (4.53)$$

- выражения для микросил имеют вид:

$$\pi = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{Q} \right) - B_\rho \frac{d\rho}{dt}, \quad (4.54)$$

$$\pi_\alpha = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} + \rho \mu_\alpha - B_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt}, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (4.55)$$

где  $B_\rho, B_\alpha, \alpha = \overline{1, N-1}$  — неотрицательные скалярные величины;

- определяющее соотношение для вектора плотности потока массы компонента  $\alpha$  имеет вид:

$$\mathbf{h}_\alpha = -\mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N-1}, \quad (4.56)$$

где  $\mathbf{M}_\alpha, \alpha = \overline{1, N-1}$  — симметричные неотрицательно определенные тензоры второго ранга;

- вектор плотности теплового потока определен как:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla T, \quad (4.57)$$

где  $\mathbf{K}$  — симметричный неотрицательно определенный тензор второго ранга;

- девиатор тензора  $\mathbf{P}^s$  задается в соответствии с:

$$\mathbf{P}^d = \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d) \mathbf{I} - \left( \mathbf{Q}^s - \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{Q}^s \right),$$

где  $\mathbf{Q}^s$  — симметричная часть тензора  $\mathbf{Q}$ ,

$$\mathbf{Q}^s = \frac{1}{2} (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^T);$$

- тензор  $\mathbf{Q}$  является симметричным. Как будет видно ниже, это условие является ограничением на вид функциональной зависимости свободной энергии  $\Psi$  от своих аргументов.

Выражение для девиатора тензора  $\mathbf{P}^s$  упрощается:

$$\mathbf{P}^d = \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d - \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d) \mathbf{I} - \mathbf{Q}^d, \quad (4.58)$$

где  $\mathbf{Q}^d$  — девиатор тензора  $\mathbf{Q}$ .

Тензор  $\mathbf{G}$  является неотрицательно определенным тензором четвертого ранга, задающим линейное отображение пространства симметричных тензоров второго ранга в себя.

После подстановки описанных соотношений в неравенство для свободной энергии (4.51) получим:

$$0 \leq \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \Delta_2. \quad (4.59)$$

В этом неравенстве все слагаемые, кроме  $\Delta_2$ , всегда являются неотрицательными. Выбирая  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$ , обеспечим неотрицательность  $\Delta_2$  и, как следствие, выполнение неравенства (4.59). Это можно сделать двумя способами, причем:

- оба замыкания приводят к одинаковому набору всех определяющих соотношений модели, за исключением выражений для векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{w}$ ;
- в первом замыкании вектор  $\mathbf{w}$ , обеспечивающий справедливость неравенства для свободной энергии и энтропийного неравенства, задается *неявно*, то есть должен удовлетворять определенному дифференциальному уравнению. Во втором замыкании  $\mathbf{w}$  явно выражается через остальные параметры задачи;
- оба замыкания совпадают, если объемная вязкость равна нулю.

Рассмотрим эти замыкания последовательно.

## Замыкание I

Определим  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{w}$  так, чтобы в неравенстве (4.59) слагаемое, содержащее  $\mathbf{a}$ , стало равным нулю, а слагаемое, содержащее (в виде множителя)  $\mathbf{w}$ , всегда было бы положительным. Тогда получим:

- определяющее соотношение для вектора  $\mathbf{w}$ :

$$\mathbf{w}_1 = \tau \frac{1}{\rho} \left( -\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d \right). \quad (4.60)$$

Здесь  $\tau$  — некоторая положительная скалярная величина, имеющая размерность времени;

- определяющее соотношение для вектора  $\mathbf{a}$ :

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \bar{p} \mathbf{u}_m + \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}.$$

Тогда получим

$$\Delta_2 = \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2,$$

и неравенство (4.59) примет вид:

$$\begin{aligned} 0 \leq \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2, \end{aligned}$$

что всегда выполняется при указанных выше свойствах коэффициентов переноса.

Полученные определяющие соотношения также приводят к выполнению энтропийного неравенства (4.34), а именно, по существу повторяя описанную выше процедуру «в обратном порядке», можно показать, что:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} := \rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{\rho r}{T} = \frac{1}{T} \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + \\ + \frac{1}{T} \left[ B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha \right] + \\ + \frac{1}{T^2} \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{T\tau} \mathbf{w}_1^2 \geq 0. \end{aligned}$$



## Замыкание II

Сначала получим выражение для  $\bar{p}$ . Для этого выразим его из соотношения (4.54), используем закон сохранения массы (4.29) и уравнение баланса микросил и микронапряжений (4.32). Получим:

$$\bar{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}_m.$$

С учетом определения (4.10) массовой скорости, представим ее в виде двух слагаемых, а именно:

$$\bar{p} = \tilde{p} - B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{w}, \quad (4.61)$$

где:

$$\tilde{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}. \quad (4.62)$$

Подставляя это выражение в  $\Delta_2$ , получим:

$$\begin{aligned} \Delta_2 = & \operatorname{div} [\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \tilde{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} + B_\rho \rho^2 \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{w}] + \\ & + \mathbf{w} \cdot [-\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d] - B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Далее, из закона сохранения массы имеем:

$$\begin{aligned} B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 &= B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u} - \operatorname{div} \mathbf{w})^2 = \\ &= B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 - \\ &\quad - \operatorname{div} (2B_\rho \rho^2 \mathbf{w} \operatorname{div} \mathbf{u}) + \mathbf{w} \cdot \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}). \end{aligned}$$

Выражая из этого соотношения величину  $B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})^2$  и подставляя результат в (4.63), получим:

$$\begin{aligned} \Delta_2 = & -B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \\ & + \operatorname{div} [\mathbf{a} - \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - \tilde{p} \mathbf{u} - \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} + \\ & \quad + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w}) \mathbf{u} - 2B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{w}] + \\ & + \mathbf{w} \cdot [-\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u})]. \end{aligned}$$

Выберем теперь:

- определяющее соотношение для  $\mathbf{w}$ :

$$\mathbf{w}_2 = \tau \frac{1}{\rho} \left[ -\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d + \nabla (2B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}) \right];$$

- определяющее соотношение для  $\mathbf{a}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_2 = & \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \tilde{p}\mathbf{u} + \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w} - \\ & - B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{w})\mathbf{u} + 2B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{w}. \end{aligned}$$

Подставляя теперь эти соотношения в выражение для  $\Delta_2$ , получим:

$$\Delta_2 = -B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2. \quad (4.64)$$

Другими словами, для замыкания 1 имеем:

$$B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \Delta_2 \Big|_{\substack{\mathbf{a}=\mathbf{a}_1 \\ \mathbf{w}=\mathbf{w}_1}} = B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_1^2,$$

а для замыкания 2:

$$B_\rho \left( \frac{d\rho}{dt} \right)^2 + \Delta_2 \Big|_{\substack{\mathbf{a}=\mathbf{a}_2 \\ \mathbf{w}=\mathbf{w}_2}} = B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2.$$

С учетом (4.64) неравенство (4.59) примет вид:

$$\begin{aligned} 0 \leq & \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha + \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{\tau} \mathbf{w}_2^2. \end{aligned}$$

Так же как и в случае первого замыкания, можно показать, что для указанного выбора  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$  энтропийное неравенство выполняется с диссипативной функцией:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} := & \rho \frac{ds}{dt} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} - \frac{\rho r}{T} = \frac{1}{T} \mathbf{L}_u^d : \mathbf{G} : \mathbf{L}_u^d + \\ & + \frac{1}{T} \left[ B_\rho \rho^2 (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_\alpha \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_\alpha \cdot \mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha \right] + \\ & + \frac{1}{T^2} \nabla T \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T + \frac{\rho}{T\tau} \mathbf{w}_2^2 \geq 0. \end{aligned}$$

## 4.2.8 Определяющие соотношения

В этом разделе приведен полный набор определяющих соотношений рассматриваемой модели.

### Свободная энергия Гельмгольца

Выберем свободную энергию Гельмгольца единицы массы в виде:

$$\Psi(\rho, \nabla\rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T) = \Psi_0(\rho, C_\alpha, T) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla\rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2, \quad (4.65)$$

где далее будем считать, что

$$\lambda = \lambda(C_\alpha) \geq 0, \quad \lambda_\alpha = \text{const} \geq 0$$

— заданы. Такой вид свободной энергии типичен для течений рассматриваемого типа и удовлетворяет достаточным условиям выполнения неравенства (4.51).

Вид «локальной части»  $\Psi_0$  определяется следующим образом:

$$\Psi_0 = \Psi_{sep} + \Psi_{mix}, \quad (4.66)$$

$$\Psi_{mix}(\rho, T) = \sum_{\alpha=1}^N C_\alpha \Psi_\alpha(\rho_\alpha, T)$$

— массовая плотность свободной энергии Гельмгольца, соответствующей однородной смеси  $N$  невзаимодействующих компонент. Слагаемое  $\Psi_{sep}$  отвечает за разделение фаз. Его конкретный вид выбирают по-разному.

Так, например, в работе [135] для случая  $N = 2$ :

$$\Psi_{sep} = A_\psi C_1^2 C_2^2 = A_\psi C^2 (1 - C)^2. \quad (4.67)$$

Здесь явно видно, что  $\Psi_{sep}$  имеет два локальных минимума в точках  $C = 0$  и  $C = 1$ , и один локальный максимум при  $C = 1/2$ . Т.к. свободная энергия Гельмгольца убывает по мере приближения системы к состоянию равновесия, то положение  $C = 1/2$  неустойчиво, а положения  $C = 0$  и  $C = 1$  устойчивы.

В этой же работе для  $N \geq 3$  выбрано

$$\Psi_{sep} = \sum_{\beta < \alpha} A_\psi^{\alpha, \beta} C_\alpha^2 C_\beta^2 + \sum_{\alpha=1}^N l_\alpha(T) C_\alpha^2 (3 - 2C_\alpha),$$

где  $A_\psi^{\alpha, \beta}$  — некоторые положительные константы, а  $l_\alpha(T)$  — линейные функции температуры. Другие примеры задания вида свободной энергии можно найти, например, в работах [128, 135–138].

## Микронапряжения

С учетом общих определяющих соотношений для микронапряжений (4.53), из (4.65) имеем:

$$\boldsymbol{\xi} = \lambda \nabla \rho, \quad \boldsymbol{\xi}_\alpha = \lambda_\alpha \rho \nabla C_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N-1}. \quad (4.68)$$

Отсюда и из определения (4.42) следует, что:

$$\mathbf{Q} = \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha.$$

Таким образом, при указанном выборе вида свободной энергии Гельмгольца и определяющих соотношений для микронапряжений тензор  $\mathbf{Q}$  является симметричным, что является одним из достаточных условий выполнения неравенства (4.51).

След тензора  $\mathbf{Q}$  имеет вид:

$$\text{tr } \mathbf{Q} = \lambda |\nabla \rho|^2 + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha |\nabla C_\alpha|^2,$$

а его девиатор:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^d &= \mathbf{Q} - \frac{1}{3}(\text{tr } \mathbf{Q})\mathbf{I} = \\ &= \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha - \frac{1}{3} \left( \lambda |\nabla \rho|^2 + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha |\nabla C_\alpha|^2 \right). \end{aligned} \quad (4.69)$$

## Обобщенный химический потенциал

Выражая  $\mu_\alpha$  из соотношения (4.55) и используя уравнение баланса микросил и микронапряжений (4.31), получим:

$$\mu_\alpha = \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} - \frac{1}{\rho} \text{div } \boldsymbol{\xi}_\alpha - \frac{\gamma_\alpha}{\rho} + B_\alpha \frac{1}{\rho} \frac{dC_\alpha}{dt}.$$

Отсюда, с учетом выражения для микронапряжений (4.68) и вида свободной энергии (4.65) имеем:

$$\mu_\alpha = \frac{\partial \Psi_0}{\partial C_\alpha} - \frac{1}{\rho} \text{div} (\lambda_\alpha \rho \nabla C_\alpha) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial \lambda}{\partial C_\alpha} |\nabla \rho|^2 - \frac{\gamma_\alpha}{\rho} + B_\alpha \frac{1}{\rho} \frac{dC_\alpha}{dt}.$$

## Векторы плотности потока массы компонентов

Вектор  $\mathbf{h}_\alpha$  имеет вид (4.56). Полагая

$$\mathbf{M}_\alpha = M_\alpha \mathbf{I}, \quad M_\alpha \geq 0,$$

получим

$$\mathbf{h}_\alpha = -M_\alpha \nabla \mu_\alpha.$$

## Вектор плотности теплового потока

Вектор  $\mathbf{q}$  определяется соотношением (4.57). Полагая

$$\mathbf{K} = K \mathbf{I}, \quad K \geq 0,$$

получим

$$\mathbf{q} = -K \nabla T.$$

## Тензор напряжений

Сначала получим выражение для  $\bar{p}$ . Для этого выразим его из соотношения (4.54) и используем закон сохранения массы (4.29) и уравнение баланса микросил и микронапряжений (4.32). Получим:

$$\bar{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + B_\rho \rho^2 \operatorname{div} \mathbf{u}_m.$$

Далее, с учетом выбранного вида свободной энергии (4.65), имеем:

$$\rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} = \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} - \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2.$$

Введем обозначение:

$$\zeta := \rho^2 B_\rho. \quad (4.70)$$

Величина  $\zeta$  имеет размерность вязкости и, как будет видно из анализа выражения для тензора напряжений  $\mathbf{P}$ , является коэффициентом объемной (второй) вязкости.

Окончательно получим следующее выражение:

$$\bar{p} = \rho \operatorname{div} \boldsymbol{\xi} - \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + \zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m. \quad (4.71)$$

Теперь рассмотрим тензор  $\mathbf{P}^d$ , определяемый соотношением (4.58). Положим в этом выражении  $[\mathbf{G}]_{ijkl} = G_{ijkl} = 2\eta \delta_{ik} \delta_{jl}$ , где  $\eta$  — неотрицательная скалярная величина. Тогда непосредственной подстановкой можно убедиться, что в этом случае:

$$\mathbf{P}^d = 2\eta \mathbf{L}_u^d - \mathbf{Q}^d.$$

Отсюда видно, что  $\eta$  — коэффициент динамической вязкости.

Наконец, подставляя полученные соотношения в выражение (4.27) и (4.44) и явно учитывая вид параметров модели  $(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}_\alpha, \dots)$  при заданном виде (4.65) свободной энергии, после перегруппировки слагаемых получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & [2\eta\mathbf{L}_u^d + \zeta(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}] - \\ & - p\mathbf{I} + \\ & + \left[ -\lambda\nabla\rho \otimes \nabla\rho + \left( \rho \operatorname{div}(\lambda\nabla\rho) + \frac{\lambda}{2}|\nabla\rho|^2 + \rho\gamma \right) \mathbf{I} \right] - \\ & - \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha + \\ & + [\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \zeta(\operatorname{div} \mathbf{w})\mathbf{I}], \end{aligned}$$

где в первой строке стоит

$$\mathbf{P}_{\text{NS}} := 2\eta\mathbf{L}_u^d + \zeta(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}$$

— обычный тензор вязких напряжений Навье–Стокса, во второй строке —

$$p := \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho}$$

— термодинамическое давление, в третьей —

$$\mathbf{Q}_K := -\lambda\nabla\rho \otimes \nabla\rho + \left( \rho \operatorname{div}(\lambda\nabla\rho) + \frac{\lambda}{2}|\nabla\rho|^2 + \rho\gamma \right) \mathbf{I}$$

— тензор напряжений Кортвега, который связан с капиллярными силами на (диффузной) границе раздела двух фаз, состоящих из одного компонента, в четвертой —

$$\mathbf{Q}_C := -\rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_\alpha \nabla C_\alpha \otimes \nabla C_\alpha$$

— тензор капиллярных напряжений, который может быть связан с капиллярными силами на (диффузной) границе раздела фаз, состоящих из различных компонентов, в пятой —

$$\mathbf{P}_{\text{QHD}} := \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \zeta(\operatorname{div} \mathbf{w})\mathbf{I},$$

— дополнительное слагаемое в тензоре напряжений, связанное с отличием вектора плотности потока массы от импульса единицы объема.

## Внутренняя энергия

Выражение для плотности внутренней энергии может быть получено из определения (4.36) свободной энергии Гельмгольца, выражения (4.52) для плотности энтропии и вида свободной энергии (4.65):

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \Psi - T \frac{\partial \Psi}{\partial T} = \Psi - T \frac{\partial \Psi_0}{\partial T} = \\ &= \left( \Psi_0 - T \frac{\partial \Psi_0}{\partial T} \right) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla \rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2.\end{aligned}$$

Непосредственной проверкой можно показать, что различные замыкающие соотношения для векторов  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$  совпадают,

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_2, \quad \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2,$$

если положить  $\zeta = 0$ .

Поскольку вопрос о выборе единственного способа замыкания пока открыт, далее будем рассматривать случай именно нулевой объемной вязкости. Тогда имеем:

## Выражение для вектора $\mathbf{w}$

$$\mathbf{w} = \tau \frac{1}{\rho} \left( -\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d \right).$$

При этом входящее в тензор напряжений «давление»  $\bar{p}$  в рассматриваемом случае нулевой объемной вязкости тождественно равно  $\tilde{p}$ :

$$\bar{p} \equiv \tilde{p} = \rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho) - \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma.$$

## Выражение для вектора $\mathbf{a}$

$$\mathbf{a} = \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} + \tilde{p} \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}.$$

## 4.2.9 Основные уравнения

Общий вид законов сохранения в консервативной форме был сформулирован ранее в разделе 4.2.5. Приведем их здесь в конечном виде.

### Закон сохранения массы компонентов

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_\alpha) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = m_\alpha, \quad \alpha = \overline{1, N-1},$$

где  $m_\alpha$  — источник массы компонента  $\alpha$ .

### Закон сохранения массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0.$$

### Закон сохранения импульса

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\mathbf{u}_m \otimes \rho \mathbf{u} - \mathbf{P}) = \rho \mathbf{f}.$$

### Закон сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\rho E \mathbf{u}_m) &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \operatorname{div}(\mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha) + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} m_\alpha \mu_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \operatorname{div} \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right] + \left[ \operatorname{div} \left( \frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \rho r. \end{aligned}$$

Выражения для  $\boldsymbol{\xi}$  и  $\boldsymbol{\xi}_\alpha$  задаются определяющими соотношениями, приведенными в предыдущем разделе, а выражения для полных временных производных плотности и концентраций по времени следуют из законов сохранения в лагранжевой форме (4.28) и (4.29):

$$\frac{d\rho}{dt} := -\rho \operatorname{div} \mathbf{u}_m, \quad \frac{dC_\alpha}{dt} := \frac{1}{\rho} (m_\alpha - \operatorname{div} \mathbf{h}_\alpha), \quad \alpha = \overline{1, N-1}.$$

Отметим следующие свойства построенной модели:

**1.** Применение процедуры Колмана-Нолла приводит к двум вариантам замыкания квазигидродинамической системы для описания движения многокомпонентной многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов на границе раздела фаз.

Для обоих замыканий выполняется закон неубывания энтропии и неравенство для свободной энергии. При этом определяющие соотношения для обеих моделей полностью совпадают, за исключением выражений для вектора  $\mathbf{w}$  и вектора плотности потока энергии за счет работы внутренних сил  $\mathbf{a}$ .

Уравнения, выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии, совпадают с точностью до входящих в них выражений для векторов  $\mathbf{w}$  и  $\mathbf{a}$ . При этом для замыкания 1 определяющее соотношение для  $\mathbf{w}$  задает ее неявно. Соответствующее уравнение является следствием соотноше-



ний (4.60), (4.61), (4.62) и (4.70) и имеет вид:

$$\mathbf{w}_1 + \frac{\tau}{\rho} \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{w}_1) = \frac{\tau}{\rho} [-\rho \mathbf{f} - \nabla \tilde{p} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{u} + \operatorname{div} \mathbf{Q}^d],$$

где правая часть не зависит от  $\mathbf{w}_1$ . Для замыкания 2 определяющее соотношение явно задает  $\mathbf{w}$ . Но при условии  $\zeta = 0$  оба замыкания совпадают.

Все сказанное выше не специфично для рассматриваемого случая многокомпонентной модели. Возможность замыкания системы уравнения двумя способами появляется и в случае однофазного течения [32]. Случай ненулевой объемной вязкости, таким образом, требует отдельного исследования.

**2.** Если в построенных уравнениях и определяющих соотношениях положить  $\tau = 0$ , то получим  $\mathbf{w} = 0$  и построенная модель будет совпадать с ранее опубликованными моделями типа «диффузной границы», в том числе общепринятыми (в частности, с моделью Навье–Стокса–Кортвега и моделью Навье–Стокса–Кана–Хилларда).

**3.** Если положить число компонент  $N = 1$ , объемную вязкость  $\zeta = 0$  и исключить из модели эффекты, связанные с межфазным взаимодействием (то есть положить  $\lambda = \lambda_\alpha = 0$ ), то получим ранее опубликованную «обычную» систему КГиД уравнений.

### 4.3 Моделирование двухфазных течений

В настоящем разделе приведен более простой вариант построенной выше модели, который в дальнейшем выбран для численного исследования.

А именно, будем рассматривать пространственно-двумерный случай, и будем считать, что присутствует всего два компонента  $N = 2$ , течение изотермическое, массовые силы и объемная вязкость отсутствуют:  $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ ,  $\zeta = 0$ . Коэффициент  $\lambda_1$  считаем постоянным. Положим  $\lambda = 0$ ,  $\gamma_\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $B_\alpha = 0$ .

Расчетная область имеет форму квадрата, на границах которого заданы периодические граничные условия.

Положим  $\Psi_1(\rho) = \Psi_2(\rho) = c_s^2 \ln(\rho/\rho_0)$ , где  $c_s$  — постоянная скорость звука,  $\rho_0$  — некоторая постоянная отсчетная плотность.

Для энергии  $\Psi_{sep}$  выберем выражение (4.67). Тогда

$$\Psi_0 = C\Psi_1(\rho) + (1 - C)\Psi_2(\rho) + A_\psi C^2(1 - C)^2, \quad (4.72)$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial C} = 2A_\psi C(1 - C)(1 - 2C), \quad (4.73)$$

так как в рассматриваемом случае имеем  $\Psi_1(\rho) - \Psi_2(\rho) = 0$ .

Обобщенный химический потенциал принимает вид

$$\mu = 2A_\psi C(1 - C)(1 - 2C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C).$$

Уравнения для двумерного случая в декартовой ортогональной системе координат имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial j_{my}}{\partial y} = 0, \quad (4.74a)$$

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} u_x}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} u_x}{\partial y} = \frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yx}}{\partial y}, \quad (4.74b)$$

$$\frac{\partial \rho u_y}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} u_y}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} u_y}{\partial y} = \frac{\partial P_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y}, \quad (4.74c)$$

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} C}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( M \frac{\partial \mu}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( M \frac{\partial \mu}{\partial y} \right). \quad (4.74d)$$

Компоненты тензора напряжений:

$$P_{xx} = 2\eta \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2\eta}{3} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - p - Q_{xx} + \rho u_x w_x, \quad (4.75a)$$

$$P_{xy} = \eta \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) - Q_{xy} + \rho u_x w_y, \quad (4.75b)$$

$$P_{yx} = \eta \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) - Q_{yx} + \rho u_y w_x, \quad (4.75c)$$

$$P_{yy} = 2\eta \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{2\eta}{3} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - p - Q_{yy} + \rho u_y w_y. \quad (4.75d)$$

Компоненты вектора  $\mathbf{w}$ :

$$w_x = \frac{\tau}{\rho} \left( \rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial Q_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial Q_{yx}}{\partial y} \right), \quad (4.76a)$$

$$w_y = \frac{\tau}{\rho} \left( \rho u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial Q_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial Q_{yy}}{\partial y} \right). \quad (4.76b)$$

Компоненты тензора  $\mathbf{Q}$ :

$$Q_{xx} = \rho\lambda_1 \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)^2, \quad (4.77a)$$

$$Q_{yx} = Q_{xy} = \rho\lambda_1 \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (4.77b)$$

$$Q_{yy} = \rho\lambda_1 \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right)^2. \quad (4.77c)$$

Обобщенный химический потенциал:

$$\mu = 2A_\psi C(1-C)(1-2C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]. \quad (4.78)$$

### Разностная схема

Для аппроксимации по времени системы уравнений (4.74) использована явная схема по времени с первым порядком точности. Производные по пространству аппроксимированы центральными разностями.

Расчетная сетка является декартовой ортогональной с равными шагами по пространству  $h_x = h_y = h$ . Шаг по времени —  $\Delta t$ . Во всех приведенных ниже расчетах  $\tau = \alpha^* h / c_s$ . Устойчивость используемых аппроксимаций обеспечивается дополнительными физически обоснованными квазигидродинамическими добавками, пропорциональными  $\tau$ .

Расчетный узел с целыми индексами  $(i, j)$  соответствует геометрическому центру ячейки разностной сетки. Координаты геометрического центра ячейки с номером  $(i, j)$  имеют вид:  $(x_i, y_j) = (ih, jh)$ . Узел с одним полуцелым индексом соответствует грани ячейки, а с двумя — углу (см. рисунок 2.1). Неизвестные величины отнесены к центрам ячеек.

Для краткости введем обозначения для пространственных производных в узле с индексами  $(i, j)$ :

$$D_h^x(\xi)_{i,j} = \frac{(\xi)_{i+\frac{1}{2},j} - (\xi)_{i-\frac{1}{2},j}}{h}, \quad D_h^y(\xi)_{i,j} = \frac{(\xi)_{i,j+\frac{1}{2}} - (\xi)_{i,j-\frac{1}{2}}}{h}.$$

Также обозначим  $\widehat{\xi}_{i,j} = \xi_{i,j}^{n+1}$ ,  $\xi_{i,j} = \xi_{i,j}^n$ . Всюду нижние индексы соответствуют узлам по пространству, а верхние — временным слоям.

Значение переменной  $\xi \in \{\rho, u_x, u_y, p, C\}$  в полуцелых узлах вычисляется

по формулам:

$$\xi_{i\pm\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2}(\xi_{i\pm 1,j} + \xi_{i,j}), \quad (4.79a)$$

$$\xi_{i,j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\xi_{i,j\pm 1} + \xi_{i,j}), \quad (4.79b)$$

$$\xi_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}(\xi_{i\pm 1,j\pm 1} + \xi_{i\pm 1,j} + \xi_{i,j\pm 1} + \xi_{i,j}). \quad (4.79c)$$

Значение некоторой функции  $f$  от переменной  $\xi$  в узле  $(i, j)$ , в том числе и в полуцелых точках, вычисляется как:  $f_{i,j}(\xi) = f(\xi_{i,j})$ .

В приведенных ниже разностных соотношениях индексы  $i, j$  могут принимать только целые значения. В результате разностная аппроксимация уравнений (4.74)–(4.78) примет вид:

$$\frac{\widehat{\rho}_{i,j} - \rho_{i,j}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx})_{i,j} + D_h^y(j_{my})_{i,j} = 0, \quad (4.80a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\widehat{(\rho u_x)}_{i,j} - (\rho u_x)_{i,j}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}u_x)_{i,j} + D_h^y(j_{my}u_x)_{i,j} = \\ = D_h^x(P_{xx})_{i,j} + D_h^y(P_{yx})_{i,j}, \end{aligned} \quad (4.80b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\widehat{(\rho u_y)}_{i,j} - (\rho u_y)_{i,j}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}u_y)_{i,j} + D_h^y(j_{my}u_y)_{i,j} = \\ = D_h^x(P_{xy})_{i,j} + D_h^y(P_{yy})_{i,j}, \end{aligned} \quad (4.80c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\widehat{(\rho C)}_{i,j} - (\rho C)_{i,j}}{\Delta t} + D_h^x(j_{mx}C)_{i,j} + D_h^y(j_{my}C)_{i,j} = \\ = \frac{1}{h} \left[ M_{i+\frac{1}{2},j} \left( \frac{\mu_{i+1,j} - \mu_{i,j}}{h} \right) - M_{i-\frac{1}{2},j} \left( \frac{\mu_{i,j} - \mu_{i-1,j}}{h} \right) \right] + \\ + \frac{1}{h} \left[ M_{i,j+\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu_{i,j+1} - \mu_{i,j}}{h} \right) - M_{i,j-\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu_{i,j} - \mu_{i,j-1}}{h} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.80d)$$

В приведенных ниже соотношениях индексы  $i, j$  могут принимать как

целые так и полуцелые значения.

$$(P_{xx})_{i,j} = 2\eta D_h^x(u_x)_{i,j} - \frac{2\eta}{3} (D_h^x(u_x)_{i,j} + D_h^x(u_y)_{i,j}) - p_{i,j} - (Q_{xx})_{i,j} + (\rho)_{i,j}(u_x)_{i,j}(w_x)_{i,j}, \quad (4.81a)$$

$$(P_{xy})_{i,j} = \eta (D_h^y(u_x)_{i,j} + D_h^x(u_y)_{i,j}) - (Q_{xy})_{i,j} + \rho_{i,j}(u_x)_{i,j}(w_y)_{i,j}, \quad (4.81b)$$

$$(P_{yx})_{i,j} = \eta (D_h^x(u_y)_{i,j} + D_h^y(u_x)_{i,j}) - (Q_{yx})_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j}(w_x)_{i,j}, \quad (4.81c)$$

$$(P_{yy})_{i,j} = 2\eta D_h^y(u_y)_{i,j} - \frac{2\eta}{3} (D_h^x(u_x)_{i,j} + D_h^x(u_y)_{i,j}) - p_{i,j} - (Q_{yy})_{i,j} + (\rho)_{i,j}(u_y)_{i,j}(w_y)_{i,j}. \quad (4.81d)$$

$$(w_x)_{i,j} = \frac{\tau_{i,j}}{\rho_{i,j}} [\rho_{i,j}(u_x)_{i,j} D_h^x(u_x)_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j} D_h^y(u_x)_{i,j} + D_h^x p_{i,j} + D_h^x (Q_{xx})_{i,j} + D_h^y (Q_{yx})_{i,j}], \quad (4.82a)$$

$$(w_y)_{i,j} = \frac{\tau_{i,j}}{\rho_{i,j}} [\rho_{i,j}(u_x)_{i,j} D_h^x(u_y)_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j} D_h^y(u_y)_{i,j} + D_h^y p_{i,j} + D_h^x (Q_{xy})_{i,j} + D_h^y (Q_{yy})_{i,j}]. \quad (4.82b)$$

$$(Q_{xx})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_h^x C_{i,j})^2, \quad (4.83a)$$

$$(Q_{xy})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_h^x C_{i,j}) (D_h^y C_{i,j}), \quad (4.83b)$$

$$(Q_{yx})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_h^y C_{i,j}) (D_h^x C_{i,j}), \quad (4.83c)$$

$$(Q_{yy})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_h^y C_{i,j})^2. \quad (4.83d)$$

$$\begin{aligned} \mu_{i,j} = & 2A_\psi C_{i,j} (1 - C_{i,j}) (1 - 2C_{i,j}) - \\ & - \frac{\lambda_1}{h} \left[ \rho_{i+\frac{1}{2},j} \left( \frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{h} \right) - \rho_{i-\frac{1}{2},j} \left( \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{h} \right) \right] - \\ & - \frac{\lambda_1}{h} \left[ \rho_{i,j+\frac{1}{2}} \left( \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{h} \right) - \rho_{i,j-\frac{1}{2}} \left( \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{h} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

### 4.3.1 Примеры расчетов

В данном разделе представлены примеры расчетов по описанной выше схеме с целью численного исследования описанной модели двумерного изо-

термического двухфазного течения с учетом поверхностных эффектов.

Значения параметров:  $M_0 = 10^{-6}$ ,  $\lambda_1 = 0.25$ ,  $A_\psi = 0.25$ ,  $\eta = 0.08$ ,  $\alpha^* = 0.5$ , шаг по времени  $\Delta t = 10^{-6}$ ,  $\tau = \alpha^* h / c_s$ , скорость звука  $c_s = 1400$ .

Для удобства выпишем размерности основных величин:

Координата  $[x] = \text{м}$ ; скорость  $[u] = \text{м/сек}$ ; время  $[t] = \text{сек}$ ; динамическая вязкость  $[\eta] = \text{Па}\cdot\text{сек}$ ; массовая плотность свободной энергии  $[\Psi] = \text{Дж/кг}$ ; плотность  $[\rho] = \text{кг/м}^3$ ; универсальная газовая постоянная  $[\mathcal{R}] = \text{Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ ; температура  $[T] = \text{К}$ ; постоянная «разделения»  $[A_\psi] = \text{Дж/кг}$ ; коэффициенты микросил  $[\lambda_\alpha] = \text{Дж}\cdot\text{м}^2/\text{кг}$ ,  $[\lambda] = \text{Дж}\cdot\text{м}^5/\text{кг}^2$ ; коэффициент подвижности  $[M] = \text{кг}\cdot\text{сек}/\text{м}^3$ ; шаг разностной сетки  $[h] = \text{м}$ ; обобщенный химический потенциал  $[\mu_\alpha] = \text{Дж/кг}$ .

### «Квадратная» капля

Рассмотрим теперь результаты расчета эволюции капли, изначально имеющей квадратную форму (см. рисунок 4.3а). Красным цветом помечена область с концентрацией  $C = 0.85$ , а синим — с концентрацией  $1 - C = 0.15$ . Постепенно граница капли начинает размываться, что естественно для моделей рассматриваемого типа. Первыми начинают округляться углы, поскольку в них кривизна границы самая большая, и, как следствие, большая величина поверхностных сил. Через некоторое время капля приобретает круглую форму (см. рисунок 4.3). Для расчетов выбрана сетка  $250 \times 250$  с шагом  $h = 1/250$ .

### Слияние двух капель

Рассмотрим результаты расчета слияния двух близко расположенных капель. На рисунке 4.4а показано начальное распределение поля концентрации. Красным цветом помечена область с концентрацией  $C = 0.9$ , а синим — с концентрацией  $1 - C = 0.1$ . Как и в предыдущем случае, граница постепенно начинает размываться. Границы капель соприкасаются друг с другом, образуется «шейка», и довольно быстро капли сливаются. Затем новообразовавшаяся капля, постепенно, принимает круглую форму. Для расчета выбрана сетка  $250 \times 250$  ячеек с шагом  $h = 1/250$ .

### Спинодальный распад

Ниже представлены результаты расчета спинодального распада — спонтанного разделения однородной среды на две фазы [139—141].

В начальный момент времени значение в каждой расчетной ячейке выбрано случайным образом из промежутка  $[0.45, 0.55]$ . Смесь начинает «распадаться» на отдельные фазы, поскольку значение  $C = 0.5$  неустойчиво по отношению к малым возмущениям. По мере распада образуется множество капель, которые начинают сливаться. Сначала процесс происходит довольно

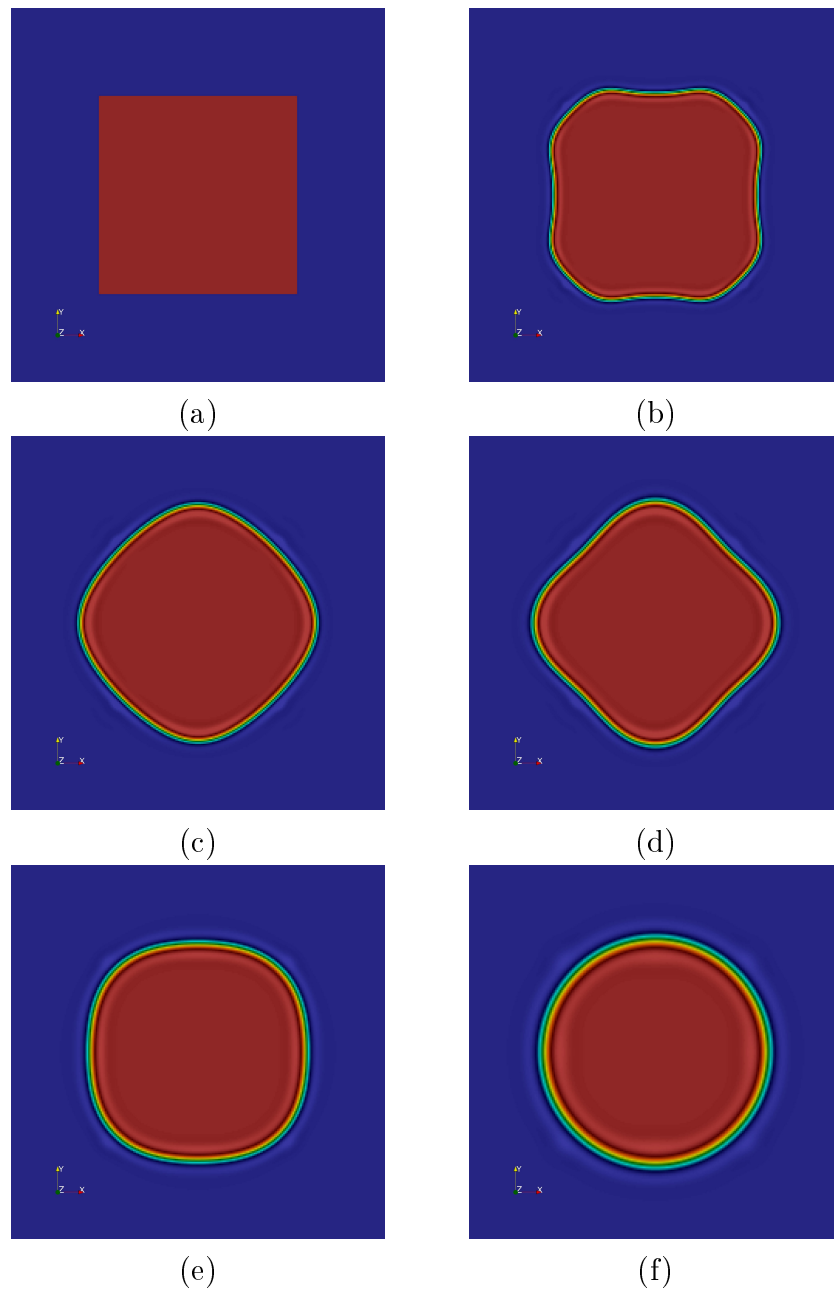


Рис. 4.3. Последовательные этапы эволюции капли квадратной формы

быстро, затем постепенно начинает замедляться. На рисунках 4.5 показаны последовательные этапы разделения смеси. В данном расчете использовано  $A_\psi = 10^4$ , расчетная сетка  $200 \times 200$  ячеек с шагом  $h = 1/200$ .

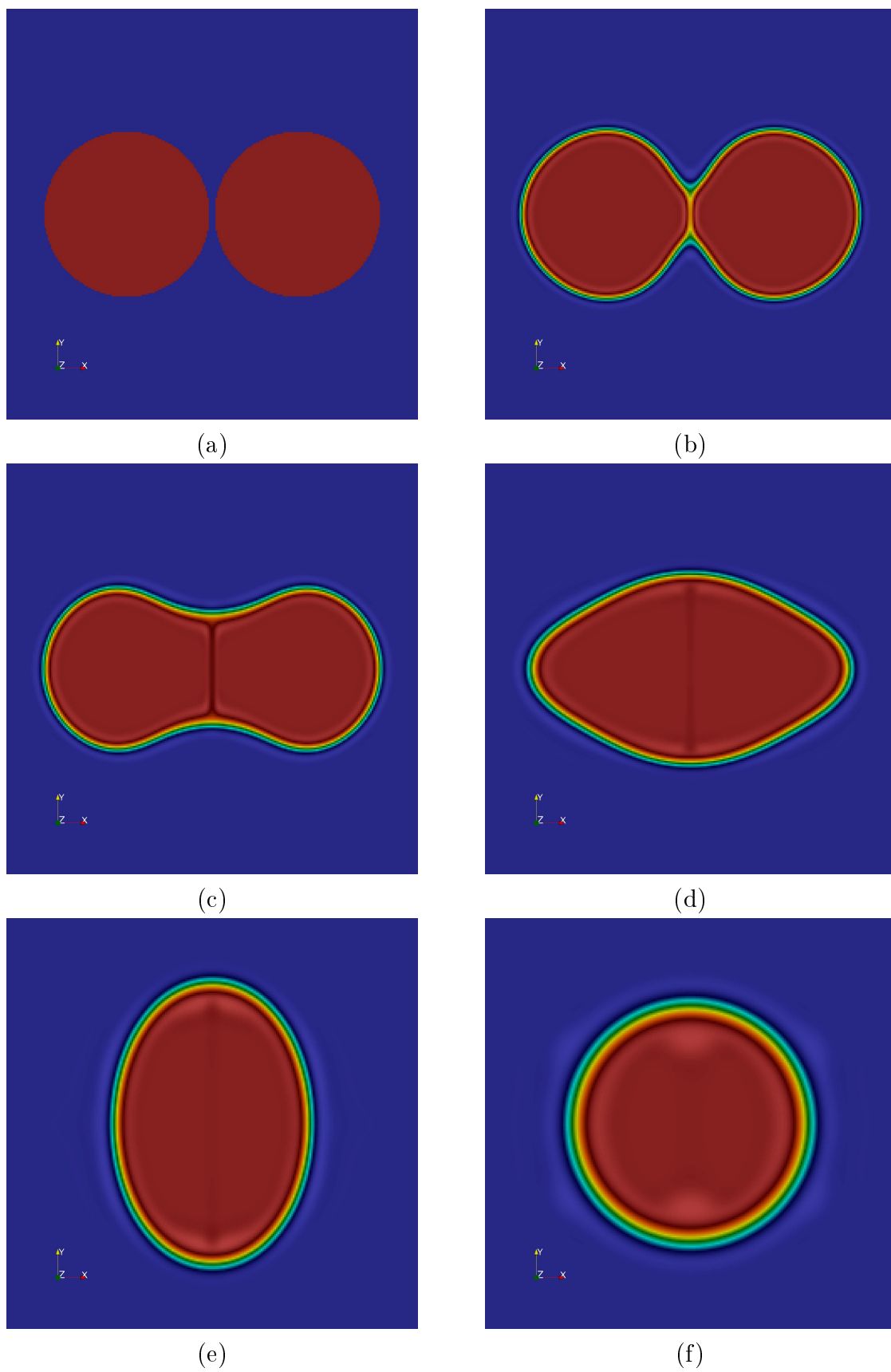


Рис. 4.4. Последовательные этапы слияния двух капель



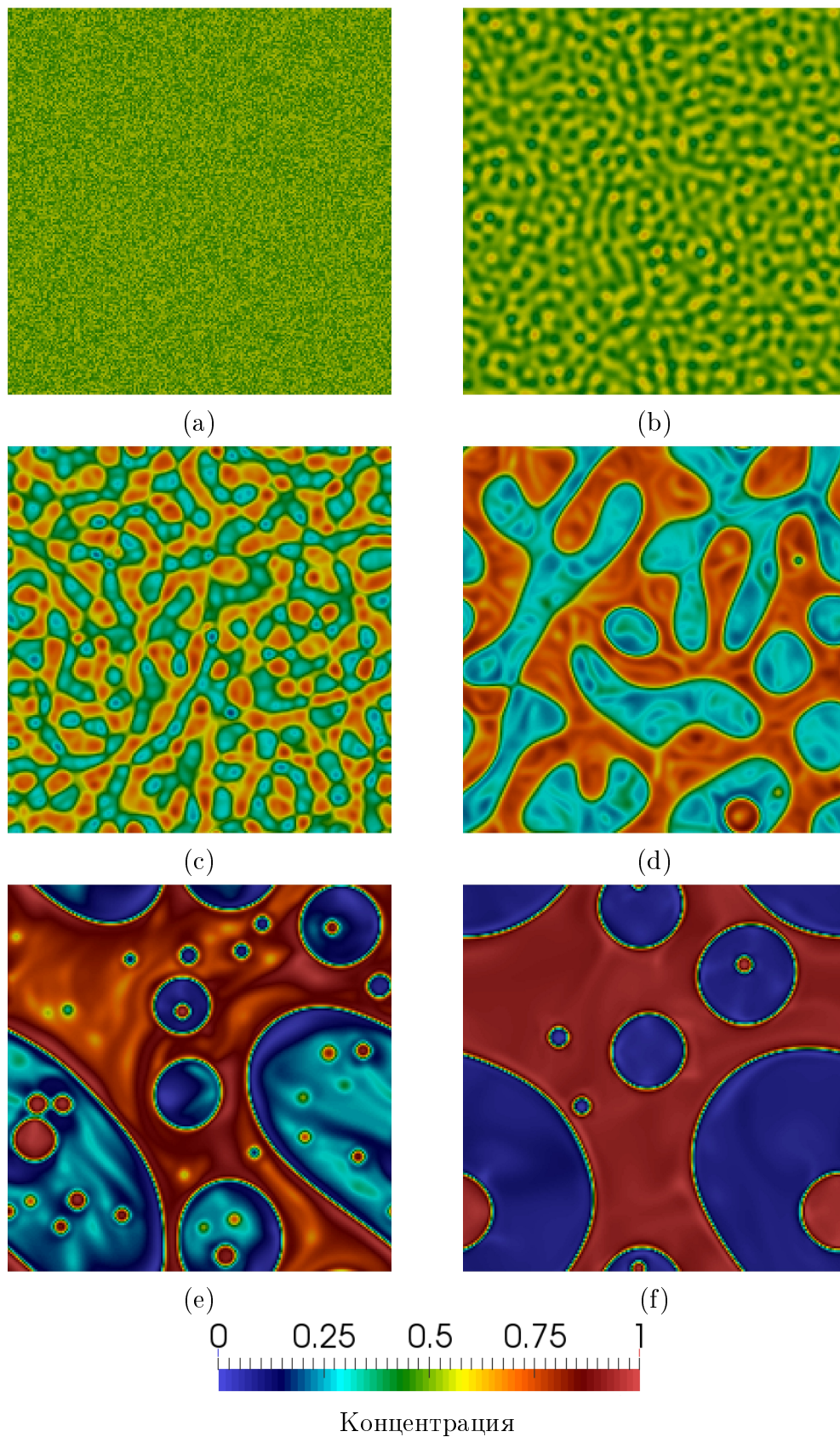


Рис. 4.5. Последовательные этапы развития спиnodального распада

# Заключение

В диссертационной работе рассмотрено применение квазигидродинамической системы уравнений для моделирования течений жидкости в поровом пространстве пород-коллекторов. Обоснована актуальность, приведен обзор основных существующих методов для моделирования однофазных и многофазных течений в поровом пространстве. На основе существующей однофазной КГиД модели реализован программный комплекс для расчета течений в поровом пространстве образцов горных пород. Приведено обобщение указанной модели на многофазный многокомпонентный случай с учетом поверхностных эффектов, которое в дальнейшем позволит развить реализованный программный комплекс для расчета многофазных течений с целью определения таких макроскопических характеристик образцов горных пород как относительные фазовые проницаемости.

Основными результатами выполненной работы являются:

1. Математическая модель течения многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов, построенная на основе квазигидродинамической модели. Предложенная модель является термодинамически корректной.
2. Разностный алгоритм для расчета двухмерного двухфазного двухкомпонентного изотермического течения. Результаты проведенных расчетов демонстрируют, что предложенная модель и разностный алгоритм качественно верно описывают течение.
3. Параллельный программный комплекс для моделирования вязких сжимаемых неизотермических течений в поровом пространстве, реализованный на основе однофазной однокомпонентной КГиД модели. Серия расчетов течений жидкости, в том числе и в микрообразцах горных пород, показала, что предложенная вычислительная технология может быть применена к рассматриваемому классу задач.

# Список литературы

- [1] Регламент по созданию постоянно действующих геолого-технологических моделей нефтяных и газонефтяных месторождений. Министерство топлива и энергетики Российской Федерации, 2000.
- [2] Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J. *The Rock Physics Handbook: Tools for Seismic Analysis of Porous Media*. Cambridge University Press, 2009.
- [3] Kalam M. Z. Digital Rock Physics for Fast and Accurate Special Core Analysis in Carbonates // *New Technologies in the Oil and Gas Industry*. 2012, p. 201–226.
- [4] Knackstedt M. A. et al. Digital rock physics: 3D imaging of core material and correlations to acoustic and flow properties. // *The Leading Edge*. 2009. V. 28, № 1, p. 260–264.
- [5] Lopez X., Valvatne P. H., Blunt M. J. Predictive network modeling of single-phase non-Newtonian flow in porous media // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2003. V. 264, № 1, p. 256–265.
- [6] Oren P.-E., Bakke S., Arntzen O. Extending Predictive Capabilities to Network Models // *SPE Journal*. 1998. V. 3, № 4, p. 324–336.
- [7] Patzek T. W. Verification of a complete pore network simulator of drainage and imbibition // *SPE Journal*. 2001. V. 6, № 2, p. 144–156.
- [8] Blunt M. J. Flow in porous media — pore-network models and multi-phase flow // *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2001. V. 6, № 3, p. 197–207.
- [9] Li L., Peters C. A., Celia M. A. Upscaling geochemical reaction rates using pore-scale network modeling // *Advances in Water Resources*. 2006. V. 29, № 9, p. 1351–1370.
- [10] Algive L., Bekri S., Vizika O. Pore-Network Modeling Dedicated to the Determination of the Petrophysical-Property Changes in the Presence of Reactive Fluid // *SPE Journal*. 2010. V. 15, № 3, p. 618–633.
- [11] Lu C., Yortsos Y. A Pore-Network Model of In-Situ Combustion in Porous Media // *SPE International Thermal Operations and Heavy Oil Symposium*. Porlamar, Margarita Island, Venezuela, 2001.

- [12] Dong H., Blunt M. J. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images // *Phys. Rev. E*. 2009. № 3. V. 80, p. 036307.
- [13] Wolf-Gladrow D. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000.
- [14] Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Clarendon Press, 2001.
- [15] Sukop M., Thorne D. T. Lattice Boltzmann Modeling. An Introduction for Geoscientists and Engineers. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [16] Heubes D. Lattice Boltzmann Method in Theory and in Application to Coupled Problems. MA thesis. University of Wuppertal, 2010.
- [17] Tartakovsky A. M., Meakin P. Pore scale modeling of immiscible and miscible fluid flows using smoothed particle hydrodynamics // *Advances in Water Resources*. 2006. V. 29, № 10, p. 1464–1478.
- [18] Tartakovsky A. M. et al. Smoothed particle hydrodynamics and its applications for multiphase flow and reactive transport in porous media // *Computational Geosciences*. 2015, p. 1–28.
- [19] Kunz P. et al. Study of Multi-phase Flow in Porous Media: Comparison of SPH Simulations with Micro-model Experiments // *Transport in Porous Media*. 2015, p. 1–20.
- [20] Anderson D., McFadden G., Wheeler A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. V. 30, p. 139–165.
- [21] Manwart C. et al. Lattice-Boltzmann and finite-difference simulations for the permeability for three-dimensional porous media // *Phys. Rev. E*. 2002. № 1. V. 66, p. 016702.
- [22] Васильев Р. В. и др. Решение уравнения Стокса в трехмерной геометрии конечно-разностным методом // *Математическое моделирование*. 2015. Т. 27, № 6, с. 67–80.
- [23] Mourzenko V. et al. Geometrical and transport properties of random packings of polydisperse spheres // *Phys. Rev. E*. 2008. № 6. V. 77, p. 066306.
- [24] Muljadi B. P. et al. The impact of porous media heterogeneity on non-Darcy flow behaviour from pore-scale simulation // *Advances in Water Resources*. 2015.
- [25] Issa R. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // *Journal of Computational Physics*. 1986. V. 62, № 1, p. 40–65.
- [26] Fourar M. et al. On the non-linear behavior of a laminar single-phase flow through two and three-dimensional porous media // *Advances in Water Resources*. 2004. V. 27, № 6, p. 669–677.

- [27] Четверушкин Б. Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
- [28] Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Москва: Научный мир, 2007.
- [29] Шеретов Ю. В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
- [30] Елизарова Т. Г. Осреднение по времени как приближенный способ построения квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2011. Т. 51, № 11, с. 2096—2105.
- [31] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Численное исследование квазигидродинамической системы уравнений для расчета течений при малых числах Маха. // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2015. Т. 55, № 10, с. 1773—1782.
- [32] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Феноменологический вывод квазигидродинамической системы уравнений с учетом объемной вязкости // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2015, № 68, с. 25.
- [33] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2015, № 75, с. 37.
- [34] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в микрообразцах горных пород // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2015, № 84, с. 20.
- [35] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Применение квазигидродинамической системы уравнений для прямого моделирования течений в образцах керна // *Доклады Академии Наук*. 2016. Т. 467, № 5, с. 534—536.
- [36] Балашов В. А., Савенков Е. Б. Численное исследование двумерной квазигидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2016, № 13, с. 20.
- [37] Булатов О. В., Елизарова Т. Г. Регуляризованные уравнения мелкой воды и эффективный метод численного моделирования течений в неглубоких водоемах // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2011. Т. 51, № 1, с. 170—184.
- [38] Елизарова Т. Г., Афанасьева М. В. Регуляризованные уравнения мелкой воды // *Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия*. 2010. Т. 65, № 1, с. 15—18.

- [39] Попов М. В., Елизарова Т. Г. Моделирование трехмерных МГД-течений в рамках магнитной квазигазодинамики // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2013, № 23, с. 32.
- [40] Елизарова Т. Г., Устюгов С. Д. Квазигазодинамический алгоритм решения уравнений магнитной гидродинамики. Одномерный случай // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2011, № 1, с. 20.
- [41] Shirokov I. A., Elizarova T. G. Simulation of laminar–turbulent transition in compressible Taylor–Green flow basing on quasi-gas dynamic equations // *Journal of Turbulence*. 2014. V. 15, № 10, p. 707–730.
- [42] Злотник А. А. О квазигазодинамической системе уравнений с общими уравнениями состояния и источником тепла // *Математическое моделирование*. 2010. Т. 22, № 7, с. 53–64.
- [43] Злотник А. А. О построении квазигазодинамических систем уравнений и баротропной системы с потенциальной массовой силой // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24, № 4, с. 65–79.
- [44] Злотник А. А. О параболичности квазигидродинамической системы уравнений и устойчивости малых возмущений для нее // *Математические заметки*. 2008. Т. 83, № 5, с. 667–682.
- [45] Шеретов Ю. В. Об общих точных решениях систем Эйлера, Навье–Стокса и квазигидродинамической системы для плоских установившихся течений // *Вестник Тверского государственного университета. Серия «Прикладная математика»*. 2013, № 2, с. 29–36.
- [46] Шеретов Ю. В. О свойствах решений квазигидродинамических уравнений в баротропном приближении // *Вестник Тверского государственного университета. Серия «Прикладная математика»*. 2009, № 3, с. 5–19.
- [47] Грузман И. С. Математические задачи компьютерной томографии // *Соросовский образовательный журнал*. 2001. Т. 7, № 5, с. 117–121.
- [48] Wirjadi O. Survey of 3D image segmentation methods. Tech. rep. 123. Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, 2007.
- [49] Sezgin M., Sankur B. Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation // *Journal of Electronic Imaging*. 2004. V. 13, № 1, p. 146–168.
- [50] Elizarova T. G., Bulatov O. V. Numerical Simulation of Gas Flows On the Basis of Quasi-Hydrodynamic Equations // *Moscow University Physics Bulletin*. 2009. V. 64, № 6, p. 589–593.
- [51] Gabriel E. et al. Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface: 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting Budapest, Hungary, September 19 - 22, 2004. Proceedings. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004, p. 97–104.

- [52] Graham R., Woodall T., Squyres J. Open MPI: A Flexible High Performance MPI. *Parallel Processing and Applied Mathematics*. V. 3911. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin Heidelberg, 2006, p. 228–239.
- [53] Gonzalez T., Diaz-Herrera J., Tucker A. Computing Handbook, Third Edition: Computer Science and Software Engineering. Chapman & Hall/CRC, 2014.
- [54] Ierusalimschy R., Figueiredo L. H. de, Filho W. C. Lua—An Extensible Extension Language // *Software: Practice and Experience*. 1996. V. 26, № 6, p. 635–652.
- [55] Ierusalimschy R. Programming in Lua. Lua.Org, 2013.
- [56] Иерузалымски Р. Программирование на языке Lua. ДМК Пресс, 2014.
- [57] Karypis G., Kumar V. A Fast and High Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs // *SIAM J. Sci. Comput.* 1998. V. 20, № 1, p. 359–392.
- [58] Ayachit U. The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application. USA: Kitware, Inc., 2015.
- [59] Breuer M. et al. Accurate computations of the laminar flow past a square cylinder based on two different methods: lattice-Boltzmann and finite-volume // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2000. V. 21, p. 186–196.
- [60] Шапеев В. П. и др. Метод коллокаций и наименьших невязок для трехмерных уравнений Навье-Стокса // *Вычислительные методы и программирование*. 2013. Т. 14, с. 306–322.
- [61] Wong K. L., Baker A. J. A 3D incompressible Navier-Stokes velocity-vorticity weak form finite element algorithm // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2002. V. 38, p. 99–123.
- [62] Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. 2. М.Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1984.
- [63] Леонтьев Н. Е. Основы теории фильтрации. Издательство Центра прикладных исследований при механико-математическом факультете МГУ Москва, 2009, с. 88.
- [64] Guibert R. et al. A Comparison of Various Methods for the Numerical Evaluation of Porous Media Permeability Tensors from Pore-Scale Geometry // *Mathematical Geosciences*. 2015, p. 1–19.
- [65] Guibert R. et al. Computational Permeability Determination from Pore-Scale Imaging: Sample Size, Mesh and Method Sensitivities // *Transport in Porous Media*. 2015. V. 107, № 3, p. 641–656.

- [66] Piller M. et al. Analysis of Hydraulic Permeability in Porous Media: From High Resolution X-ray Tomography to Direct Numerical Simulation // *Transport in Porous Media*. 2009. V. 80, № 1, p. 57–78.
- [67] Басниев К. С., Дмитриев Н. М., Розенберг Г. Д. Нефтегазовая гидромеханика. Институт компьютерных исследований, Москва-Ижевск, 2005.
- [68] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. Т. VI. Гидродинамика. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986.
- [69] Dong H., Blunt M. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images // *Physical Review E*. 2009. V. 80, № 3, pages.
- [70] Degruyter W. et al. Synchrotron X-ray microtomography and lattice Boltzmann simulations of gas flow through volcanic pumices // *Geosphere*. 2010. V. 6, № 5, p. 470–481.
- [71] URL: <http://www.palabos.org>.
- [72] Anderson D. M., McFadden G. B. A Diffuse-Interface Description of Fluid Systems // *NIST IR 5887 (National Institute of Standards and Technology)*. 1996.
- [73] Kim K. Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // *Commun. Comput. Phys.* 2012. V. 12, p. 613–661.
- [74] Андреев В. К. и др. Современные математические модели конвекции. ФИЗМАТЛИТ, 2008.
- [75] Shikhmurzaev Y. D. Capillary Flows with Forming Interfaces. Chapman and Hall/CRC, 2007.
- [76] Gross S., Reusken A. Numerical Methods for Two-phase Incompressible Flows. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [77] Osher S., Fedkiw R. P. Level set methods and dynamic implicit surfaces. V. 153. Applied mathematical science. New York, N.Y.: Springer, 2003.
- [78] Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // *Journal of Computational Physics*. 1992. V. 100, p. 335–354.
- [79] Xu J.-J., Ren W. A level-set method for two-phase flows with moving contact line and insoluble surfactant // *Journal of Computational Physics*. 2014. V. 263, p. 71–90.
- [80] Rosenhead L. The Formation of Vortices from a Surface of Discontinuity // *Proceedings of the Royal Society of London Series A*. 1931. V. 134, p. 170–192.



- [81] Hou T. et al. A hybrid method for moving interface problems with application to the Hele-Shaw flow // *J. Comput. Phys.* 1997, p. 236–252.
- [82] Hou T. Y., Lowengrub J. S., Shelley M. J. Boundary Integral Methods for Multicomponent Fluids and Multiphase Materials // *J. Comput. Phys.* 2001. V. 169, № 2, p. 302–362.
- [83] Unverdi S. O., Tryggvason G. A Front-tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows // *J. Comput. Phys.* 1992. V. 100, № 1, p. 25–37.
- [84] Tryggvason G. et al. A Front-tracking Method for the Computations of Multiphase Flow // *J. Comput. Phys.* 2001. V. 169, № 2, p. 708–759.
- [85] Peskin C. The immersed boundary method // *Acta Numerica.* 2002, p. 1–39.
- [86] Lee L., LeVeque R. J. An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations // *SIAM J. Sci. Comput.* 2003. V. 25, p. 832–856.
- [87] Kim J., Lowengrub J. Interfaces and multicomponent fluids // 2004.
- [88] Raeini A. Modelling multiphase flow through micro-CT images of the pore space. PhD thesis. Imperial Colledge London, 2013.
- [89] Groß S. Numerical methods for three-dimensional incompressible two-phase flow problems. PhD thesis. RWTH Aachen, 2008.
- [90] Smolianski A. Numerical Modeling of Two-Fluid Interfacial Flows. PhD thesis. University of Jyväskylä, 2001.
- [91] Young T. An essay on the cohesion of fluids // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London.* 1805. V. 95, p. 65–87.
- [92] Laplace P. S. *Traité de Mécanique Céleste* // *Courcier.* 1806. V. 4.
- [93] Gauss C. F. Principia generalia Theoriae Figurae Fluidorum in statu Aequilibrii [General principles of the theory of fluid shapes in a state of equilibrium] // *Dieterichs.* 1830.
- [94] Waals J. van der. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density // *Journal of Statistical Physics.* 1979. V. 20, № 2, p. 200–244.
- [95] Cahn J. W., Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 28, p. 258–267.
- [96] Provatas N., Elder K. *Phase-Field Methods in Material Science and Engineering.* Wiley, 2010.
- [97] Lowengrub J., Truskinovsky L. Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // *Proceedings of the Royal Society of Lon-*

- don A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1998. V. 454, № 1978, p. 2617–2654.
- [98] Cahn J. W. Free Energy of a Nonuniform System. II. Thermodynamic Basis // *J. Chem. Phys.* 1959. V. 30, p. 1121–1124.
- [99] Cahn J. W., Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. III. Nucleation in a Two-Component Incompressible Fluid // *J. Chem. Phys.* 1959. V. 31, p. 688–699.
- [100] Демьянов А. Ю., Динариев О. Ю., Евсеев Н. В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
- [101] URL: [http://www.slb.com/services/characterization/reservoir/core\\_pvt\\_lab/coreflow.aspx](http://www.slb.com/services/characterization/reservoir/core_pvt_lab/coreflow.aspx).
- [102] Demianov F. Y., Dinariev O. Y., Evseev N. V. Introduction to the density functional method in hydrodynamics. M. FIZMATLIT, 2014.
- [103] Кудинов И. В. Моделирование многофазных течений в микроканалах с помощью метода функционала плотности. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. МФТИ, 2010.
- [104] Динариев О. Ю., Евсеев Н. В. Моделирование поверхностных явлений в теории функционала плотности в присутствии поверхностно-активных веществ // *Механика жидкости и газа*. 2010. Т. 1, с. 96–107.
- [105] Динариев О. Ю., Евсеев Н. В. Описание течений вязкой жидкости с подвижной твердой фазой в теории функционала плотности // *Инженерно-физический журнал*. 2007. Т. 80, № 5, с. 70–77.
- [106] Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. Москва: Грааль, 2002.
- [107] He X., Luo L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation // *Phys. Rev. E*. 1997. № 6. V. 56, p. 6811–6817.
- [108] Aurell E., Do-Quang M. An inventory of Lattice Boltzmann models of multiphase flows. Version 1. 18, 2001. arXiv: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0105372v1> [cond-mat.soft].
- [109] Zheng H. W., Shu C., Chew Y. T. A Lattice Boltzmann Model for Multiphase Flows with Large Density Ratio // *J. Comput. Phys.* 2006. V. 218, № 1, p. 353–371.
- [110] Shan X., Doolen G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction // *Journal of Statistical Physics*. 1995. V. 81, № 1-2, p. 379–393.
- [111] Scarbolo L. et al. Unified Framework for a Side-by-side Comparison of Different Multicomponent Algorithms: Lattice Boltzmann vs. Phase Field Model // *J. Comput. Phys.* 2013. V. 234, p. 263–279.

- [112] Liu H. et al. Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications // *Computational Geosciences*. 2015, p. 1–29.
- [113] Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Phys. Rev. E*. 1993. № 3. V. 47, p. 1815–1819.
- [114] He X., Doolen G. Thermodynamic Foundations of Kinetic Theory and Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows // *Journal of Statistical Physics*. 2002. V. 107, № 1-2, p. 309–328.
- [115] Shan X. Pressure tensor calculation in a class of nonideal gas lattice Boltzmann models // *Phys. Rev. E*. 2008. № 6. V. 77, p. 066702.
- [116] Benzi R. et al. Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle // *Phys. Rev. E*. 2006. № 2. V. 74, p. 021509.
- [117] Sbragaglia M. et al. Lattice Boltzmann method with self-consistent thermo-hydrodynamic equilibria // *Journal of Fluid Mechanics*. 2009. V. 628, p. 299–309.
- [118] Gunstensen A. K. et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids // *Phys. Rev. A*. 1991. № 8. V. 43, p. 4320–4327.
- [119] Tölke J. Lattice Boltzmann simulations of binary fluid flow through porous media // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2002. V. 360, № 1792, p. 535–545.
- [120] Liu H., Valocchi A. J., Kang Q. Three-dimensional lattice Boltzmann model for immiscible two-phase flow simulations // *Phys. Rev. E*. 2012. № 4. V. 85, p. 046309.
- [121] Swift M. R., Osborn W. R., Yeomans J. M. Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids // *Phys. Rev. Lett.* 1995. № 5. V. 75, p. 830–833.
- [122] Swift M. R. et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems // *Phys. Rev. E*. 1996. № 5. V. 54, p. 5041–5052.
- [123] Osborn W. R. et al. Lattice Boltzmann Study of Hydrodynamic Spinodal Decomposition // *Phys. Rev. Lett.* 1995. № 22. V. 75, p. 4031–4034.
- [124] Wagner A. J. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice Boltzmann simulations // *Phys. Rev. E*. 2006. № 5. V. 74, p. 056703.
- [125] Thömmes G. et al. A lattice Boltzmann method for immiscible multiphase flow simulations using the level set method // *Journal of Computational Physics*. 2009. V. 228, № 4, p. 1139–1156.
- [126] Gurtin M. E. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1996. V. 92, № 3–4, p. 178–192.

- [127] Gurtin M. E., Polignone D., Vinals J. Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter. Tech. rep. 95-NA-001. Carnegie Mellon University, 1995, p. 178–192.
- [128] Liu J. Thermodynamically Consistent Modeling and Simulation of Multiphase Flows. PhD thesis. The University of Texas at Austin, 2014.
- [129] Coleman B. D., Noll W. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity // *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1963. V. 13, № 1, p. 167–178.
- [130] Fried E., Gurtin M. E. Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1993. V. 3–4, № 68, p. 326–343.
- [131] Miranville A., Schimperna G. Global solution to a phase transition model based on a microforce balance // *Journal of Evolution Equations*. 2005. V. 5, № 2, p. 253–276.
- [132] Труделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. МИР, 1975.
- [133] Gurtin M. E., Fried E., Anand L. The mechanics and thermodynamics of continua. Cambridge University Press, 2010.
- [134] Truesdell C., Noll W. The Non-Linear Field Theories of Mechanics. Springer, 1965.
- [135] Garcke H., Nestler B., Stoth B. On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits // *Physica D*. 1998. V. 115, p. 87–108.
- [136] Kim J. Phase field computations for ternary fluid flows // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2007, p. 4779–4788.
- [137] Cherfils L., Miranville A., Zelik S. The Cahn-Hilliard Equation with Logarithmic Potentials // *Milan Journal of Mathematics*. 2011. V. 79, № 2, p. 561–596.
- [138] Boyer F. et al. Cahn–Hilliard/Navier–Stokes Model for the Simulation of Three-Phase Flows // *Transport in Porous Media*. 2010. V. 82, № 3, p. 463–483.
- [139] Cahn J. W. On spinodal decomposition // *Acta Metallurgica*. 1961. V. 9, № 9, p. 795–801.
- [140] Липатов Ю. С., Шилов В. В. Спинодальный распад в полимерных системах // *Успехи химии*. 1984. Т. 53, № 7, с. 1197–1221.
- [141] Скрипов В. П., Скрипов А. В. Спинодальный распад // *Успехи физических наук*. 1979. Т. 128, № 2, с. 193–231.