

«ИНСТИТУТ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД УРО РАН» – ФИЛИАЛ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
НАУКИ ПЕРМСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА  
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи



Прокопьев Сергей Анатольевич

**Моделирование одно- и двухфазных течений  
бинарных и трехкомпонентных жидких сред**

1.1.9 – Механика жидкости, газа и плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических  
наук, профессор

Любимова Татьяна Петровна

Пермь – 2022

## Оглавление

<b>Введение</b> .....	3
<b>Глава 1. Моделирование гетерогенных систем методом фазового поля</b> .....	10
1.1 Теория фазового поля, обзор литературы .....	10
1.2 Вытеснение одной жидкости другой в капиллярных трубках.....	22
1.2.1 Обзор литературы .....	22
1.2.2 Постановка задачи.....	29
1.2.3 Результаты моделирования .....	32
1.2.4 Выводы по разделу.....	56
1.3 Неустойчивость Релея-Тейлора .....	58
1.3.1 Обзор литературы .....	58
1.3.2 Постановка задачи.....	62
1.3.3 Результаты моделирования .....	65
1.3.4 Выводы по разделу.....	82
<b>Глава 2. Конвекция трехкомпонентных смесей с эффектом Соре</b> .....	83
2.1 Обзор литературы.....	83
2.2 Устойчивость и надкритические режимы конвекции тройных смесей в горизонтальном слое при условии заданного теплового потока .....	108
2.2.1 Линейный анализ устойчивости .....	109
2.2.2 Нелинейные режимы конвекции .....	118
2.2.3 Выводы по разделу.....	142
2.3 Устойчивость механического равновесия смеси толуол-метанол-циклогексан с суммарным отношением разделения, близким к нулю.....	143
2.3.1 Положительное значение суммарного отношения разделения.....	146
2.3.2 Отрицательное значение суммарного отношения разделения.....	155
2.3.3 Выводы по разделу.....	159
<b>Заключение</b> .....	160
<b>Список литературы</b> .....	164
<b>Приложение А. Численное решение на графических процессорах</b> .....	183

## Введение

### **Актуальность и степень разработанности темы исследования.**

Неоднородные по составу вещества встречаются во многих природных и технологических процессах. При этом между подобными веществами существует огромная разница: некоторые из них образуют двухфазную гетерогенную систему с границей раздела между фазами, другие же способны смешиваться друг с другом в любых пропорциях, образуя гомогенную однофазную систему.

Гетерогенные и гомогенные среды предъявляют к себе значительно отличающиеся требования как при теоретическом, так и при практическом рассмотрении. Большую разницу при их изучении вносит наличие межфазной границы раздела (для гетерогенных сред), что влечет за собой необходимость учета различных капиллярных поверхностных эффектов. На сегодняшний день существует множество подходов для моделирования двухфазных сред с границей раздела, однако все они обладают теми или иными существенными недостатками, поэтому разработка новых методов и улучшение уже имеющихся моделей является актуальной задачей.

Кроме этого, до сих пор остается множество нераскрытых вопросов при рассмотрении задач, связанных с поведением двухфазных сред. Например, различного рода неустойчивости (Релея-Тейлора и пр.) в классических случаях являются хорошо изученными явлениями, однако на практике подобные процессы сопряжены с рядом дополнительных неисследованных факторов.

Ряд неизученных вопросов касается непосредственно межфазной границы. Вопрос о принадлежности жидкости к разряду однофазной или двухфазной среды может быть в значительной степени условным. На практике это может зависеть от стадии рассматриваемого процесса, например, в начальный момент времени две жидкости приводятся в контакт, однако это состояние может и не являться термодинамическим равновесием – жидкости начнут смешиваться. В этом случае возникает вопрос об изменении со временем капиллярных эффектов – данная задача является слабо изученной и актуальной.

При рассмотрении однофазных сред большой интерес представляют процессы тепло- и массопереноса. Данные явления являются относительно хорошо изученными в случае однокомпонентных сред, однако, когда в составе смеси присутствуют два или более компонентов, изучение таких систем осложняется наличием перекрестных эффектов (термодиффузия, перекрестная диффузия), а также сильным взаимодействием диффузии и теплопроводности. Изучение однофазных многокомпонентных систем не сопряжено с трудностями, возникающими при учете межфазной границы, однако имеется ряд иных дополнительных факторов.

Одним из таких факторов является конечная теплопроводность массивов, окружающих исследуемую жидкость. В большинстве случаев выполняется предположение о так называемых высокотеплопроводных границах, когда теплопроводность массивов значительно выше теплопроводности жидкости. Однако в природе и технике часто встречаются материалы, для которых данное предположение не выполняется – подобного рода задачи при рассмотрении многокомпонентных смесей являются слабо изученными.

При рассмотрении задач конвекции важно знание коэффициентов термодиффузии, нахождение которых в случае многокомпонентных смесей представляют особую сложность как для экспериментального, так и для численного определения. Значения коэффициентов измеряются с некоторой погрешностью, при этом на практике в большинстве случаев небольшая разница в значениях измеренных коэффициентов приводит лишь к некоторому количественному сдвигу в результатах исследования. Однако существуют системы, практически не исследованные в литературе, в которых небольшое изменение значений коэффициентов может приводить к совершенно различному поведению смеси.

**Цели работы.** 1) Установить влияние различных факторов, таких как неравновесное поверхностное натяжение, диффузия и др., на динамику двухфазных систем. 2) Определить закономерности конвекции многокомпонентных смесей при условии заданного теплового потока на границах

(при малой теплопроводности границ). 3) Выявить особенности поведения трехкомпонентной смеси в условиях, когда коэффициент суммарного отношения близок к нулю. Для достижения целей необходимо было решить следующие **задачи**:

– Исследовать динамику вытеснения несмешивающихся и смешивающихся систем в капилляре и капиллярных трубках при различных значениях поверхностного натяжения и параметрах смешения компонентов.

– Исследовать задачу о неустойчивости Релея-Тейлора для смешивающихся компонентов в условиях, когда начальное значение концентрации не является термодинамически равновесным.

– Провести исследование устойчивости и нелинейных режимов конвекции трехкомпонентной смеси в условиях заданного теплового потока на границах.

– Выполнить численные расчеты задачи устойчивости механического равновесия смеси при значениях суммарного отношения разделения, близких к нулю (система находится на границе устойчивости).

**Методология и методы исследования.** Изучение двухфазных проводилось методом фазового поля. Для исследования конвекции трехкомпонентных смесей используются уравнения термоконцентрационной конвекции с эффектом Соре в приближении Буссинеска. Линейные задачи устойчивости решаются численно методом пристрелки. Для решения нелинейных задач применяется метод конечных разностей. Используются два подхода для прямого численного моделирования: 1) численное решение в переменных функция тока – завихренность; 2) численное решение в естественных переменных скорость – давление с помощью метода проекций, адаптированного для вычислений на графических процессорах.

**Научная новизна** работы состоит в том, что в ней впервые:

1. Показано, что с помощью метода фазового поля можно дать эффективную и точную оценку капиллярного давления при вытеснении одной жидкостью другой в капилляре. Полученные характеристики вытеснения хорошо согласуются с известными в литературе аналитическими формулами в предельных случаях.

2. Изучена динамика вытеснения в случае смешивающихся систем. Продемонстрировано, что, вопреки мнению ряда исследователей, считающих неравновесное капиллярное давление незначительным фактором, неравновесные капиллярные эффекты играют заметную роль не только в начальные моменты времени. Игнорирование данного эффекта, таким образом, может служить снижению точности в оценках характеристик вытеснения двухфазных систем.
3. Выполнено моделирование вытеснения в матрице капилляров (системе из однородно распределенных капилляров, пересекающихся под прямым углом). Впервые проведен расчет для сравнительно больших матриц:  $10 \times 10$  (относительно других исследований), показано, что такой размер матрицы достаточен, чтобы характеристики течения сходились к некоторым предельным значениям.
4. Исследована неустойчивость Релея-Тейлора для смешивающихся жидкостей с учетом капиллярных эффектов при условии, что система изначально не находится в состоянии термодинамического равновесия (начальное значение концентрации не является равновесным).
5. При изучении конвекции трехкомпонентных смесей впервые детально рассмотрен случай, когда теплопроводность жидкости значительно больше теплопроводности массивов, окружающих данную жидкость (что эквивалентно заданию теплового потока на границах). Найдены количественные и качественные отличия по сравнению со случаем идеально теплопроводных границ.
6. Исследована устойчивость механического равновесия трехкомпонентной смеси при условии, что значение суммарного отношения разделения близко к нулю (система находится на границе устойчивости).

**Практическая и теоретическая значимость.** Получение результаты по изучению капиллярных эффектов могут иметь практическое значение в задачах о вытеснении одной жидкости другой, что, например, встречается при добыче углеводородных ресурсов путем их прокачки водой под давлением. Для решения задач, рассматриваемых в диссертации, разработана эффективная параллельная программа расчета на графических процессах, которая может использоваться для решения других задач механики жидкости и газа, например: моделирование

поведения эмульсий, дисперсных сред, различного рода неустойчивости (неустойчивость Кельвина-Гельмгольца и пр.), всплытие/погружение капли и др.

Постановка задачи конвекции трехкомпонентной смеси при условии заданного теплового потока через границы фактически соответствует ситуации, когда смесь находится в окружении массивов с хорошими теплоизоляционными свойствами (например, полиизоцианурат или аэрогель). Таким образом, полученные результаты могут быть применены в различных областях, где используются материалы с малой теплопроводностью.

Результаты решения задачи устойчивости трёхкомпонентной смеси с суммарным отношением разделения, близким к нулю, применялись при интерпретации данных космического эксперимента DCMIX-2. Результаты численных исследований позволили убедиться в правильности методик измерения термодиффузионных коэффициентов на Международной космической станции.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Результаты моделирования динамики вытеснения одной жидкости другой в капиллярах с помощью метода фазового поля для смешивающихся и несмешивающихся гетерогенных систем.
2. Результаты моделирования неустойчивости Релея-Тейлора методом фазового поля при условии, что первоначально две рассматриваемые жидкости не находятся в состоянии термодинамического равновесия.
3. Результаты численного исследования конвекции трехкомпонентной смеси с эффектом Соре в плоском слое с заданным тепловым потоком на границах.
4. Результаты моделирования поведения смеси толуол-метанол-циклогексан со значением суммарного отношения разделения, близким к нулю, в замкнутой области при нагреве сверху.

**Достоверность результатов** численных расчетов обеспечена согласованием в предельных случаях с аналитическими формулами и данными физических экспериментов. В ряде случаев были получены идентичные результаты при использовании различных численных методов. Расчетные алгоритмы

верифицировались с использованием различных численных схем, граничных условий, условий сходимости циклов и пр. Проведен анализ сходимости результатов при изменении шага расчетной сетки.

**Апробация результатов.** Результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на следующих конференциях: Международный симпозиум «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь, 2017); Всероссийская конференция с международным участием «Пермские гидродинамические научные чтения» (Пермь, 2018, 2020); XXI и XXII Зимние школы по механике сплошных сред (Пермь, 2019, 2021); 9th Conference of the International Marangoni Association (Guilin, China, 2018); 13th and 14th International Meeting on Thermodiffusion (London, UK, 2018 and Trondheim, Norway, 2021); 26th European Low Gravity Research Association Biennial Symposium and General Assembly 14th International Conference on "Two-Phase Systems for Space and Ground Applications" European Space Agency Topical Teams meetings (Granada, Spain, 2019), XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Уфа, 2019); 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (Milano, Italy, 2021).

Помимо перечисленных выше конференций результаты исследований также докладывались на научных семинарах: Пермском городском гидродинамическом семинаре имени проф. Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкого и Д.В. Любимова (Пермь, 2018, 2020, 2021, номера заседаний: 1506, 1537, 1550), научный семинар в Кубанском государственном университете (2018).

**Публикации.** Материалы диссертации изложены в 22 работах [1-22], включая 8 работ в журналах из списка ВАК [1-8], которые также индексируются в международных базах данных Scopus и Web of Science. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [23].

**Личный вклад автора.** Автором диссертации написаны все вычислительные программы; разработана и реализована параллельная программа расчетов на графических процессорах; получена основная часть численных результатов. Постановка задач, обсуждение и анализ результатов в первой главе

осуществлены совместно с научным руководителем Т.П. Любимовой и соавтором публикаций А.М. Воробьевым. Постановка задачи конвекции в слое с заданным тепловым потоком, а также обсуждение и анализ результатов осуществлены совместно с научным руководителем Т.П. Любимовой. Постановка задачи конвекции трехкомпонентной смеси с суммарным отношением разделения, близким к нулю, результаты исследования и их интерпретация обсуждались совместно с научным руководителем Т.П. Любимовой и соавтором публикации В.М. Шевцовой.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, 2 обширных глав, заключения, списка литературы (195 наименований) и приложения. Объем диссертации составляет 210 страниц, включая 79 рисунков.

# Глава 1. Моделирование гетерогенных систем методом фазового поля

## 1.1 Теория фазового поля, обзор литературы

Теория фазового поля – математическая модель представления гетерогенной системы с межфазной границей, сама граница раздела при этом имеет малую, но конечную толщину и определяется с помощью поля концентрации (плотности или некоторого параметра порядка).

До конца XIX века при рассмотрении задач, учитывающих капиллярные эффекты и поверхностное натяжение, общепринятой была гипотеза, что толщина межфазной границы является бесконечно тонкой. В 1893 году Ван дер Ваальс впервые предложил модель [24,25], в которой граница раздела имеет конечную толщину, при этом переходный слой является непрерывной функцией плотности. Кроме того, в данной работе делается важное для теории фазового поля допущение: свободная энергии (при фиксированной температуре) зависит не только от локальной плотности, но и от плотности в соседних точках.

Кортевег позднее (1901) предположил [26], что при наличии градиента концентрации на границе раздела возникают напряжения, аналогичные гидродинамическим напряжениям в однородной жидкости.

Важнейшей в истории развития теории фазового поля является работа Кана и Хилларда [27], в которой авторы вывели выражение для свободной энергии в предположении, что свободная энергия бинарной системы зависит не только от концентрации (здесь и далее под концентрацией подразумеваем массовую концентрацию, т.е. отношение массы компонента к общей массе смеси), но и от пространственных производных от концентрации. При этом разложение функции свободной энергии в изохорно-изотермическом процессе, с сохранением только главных членов, принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
f(C, \nabla C, \nabla^2 C, \dots) &= \\
&= f_0(C) + \sum_i L_i (\partial C / \partial x_i) + \sum_{ij} \kappa_{ij}^{(1)} (\partial^2 C / \partial x_i \partial x_j) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij} \kappa_{ij}^{(2)} [(\partial C / \partial x_i)(\partial C / \partial x_j)] + \dots
\end{aligned} \tag{1.1}$$

В уравнении (1.1) индекс «0» подразумевает однородное вещество, и введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
L_i &= [\partial f / \partial (\partial C / \partial x_i)]_0, \quad \kappa_{ij}^{(1)} = [\partial f / \partial (\partial^2 C / \partial x_i \partial x_j)]_0, \\
\kappa_{ij}^{(2)} &= [\partial f / \partial (\partial C / \partial x_i) \partial (\partial C / \partial x_j)]_0.
\end{aligned}$$

В изотропной среде должны выполняться некоторые соотношения симметрии по отношению к операциям вращения и отражения:  $x_i \rightarrow -x_i, x_i = x_j$ . В этом случае:

$$\begin{aligned}
L_i &= 0, \\
\kappa_{ij}^{(1)} &= \kappa_1 = [\partial f / \partial \nabla^2 C]_0, \quad \text{для } i = j, \\
\kappa_{ij}^{(1)} &= 0, \quad \text{для } i \neq j, \\
\kappa_{ij}^{(2)} &= \kappa_2 = [\partial^2 f / \partial |\nabla C|^2]_0, \quad \text{для } i = j, \\
\kappa_{ij}^{(2)} &= 0, \quad \text{для } i \neq j.
\end{aligned}$$

И получаем из (1.1):

$$f(C, \nabla C, \nabla^2 C, \dots) = f_0(C) + \kappa_1 \nabla^2 C + \kappa_2 (\nabla C)^2 + \dots \tag{1.2}$$

Интегрируя по объему, применяя теорему Остроградского-Гаусса и пренебрегая слагаемыми со старшими производными, будем иметь:

$$F = N_A \int_V f_0(C) + \frac{\kappa}{2} (\nabla C)^2 dV = N_A \int_V f dV, \tag{1.3}$$

$$\kappa = 2(-d\kappa_1/dC + \kappa_2),$$

$$f = f_0(C) + \frac{\kappa}{2} (\nabla C)^2. \tag{1.4}$$

Первое слагаемое в (1.4),  $f_0(C)$ , является «классической» частью свободной энергии, которая зависит лишь от концентрации бинарной системы, предполагается что функция  $f_0(C)$  имеет вид двухъямного потенциала (double well potential functions). Качественно вид такой функции изображен на рис. 1.1, минимумы соответствуют равновесию каждой из двух фаз. Слагаемое  $\kappa/2 (\nabla C)^2$  в (1.4) – ответственный за поверхностные эффекты градиентный вклад концентрации, который не присутствует в выражении для свободной энергии в рамках классической термодинамики.

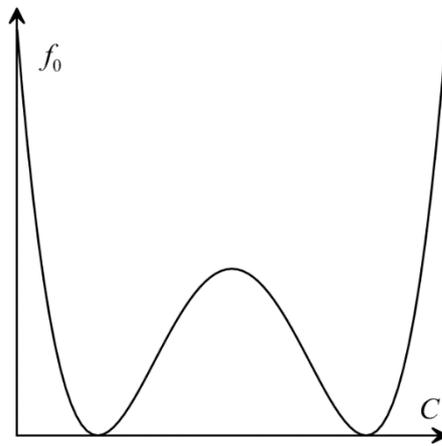


Рисунок 1.1. Двухъямный потенциал.

Кан и Хиллард в работе 1961-ого года [28], исходя из функции свободной энергии (1.4), получили выражение для диффузионного потока

$$j = -(\alpha \nabla \mu - \kappa \nabla^2 C) \quad (1.5)$$

Здесь  $\alpha$  – коэффициент мобильности,  $\mu = \partial f_0 / \partial C$  – химический потенциал. Выражение (1.5) представляет собой первый закон Фика в обобщенной форме (в качестве движущей силы – градиент химического потенциала) с добавлением слагаемого, ответственного за межфазное взаимодействие. Из (1.5) получается уравнение диффузии (1.6), которое называется уравнением Кана-Хилларда.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \nabla^2 (\mu - \kappa \nabla^2 C) \quad (1.6)$$

Ряд работ Кана и Хилларда, в которых использовались полученные теоретические выражения для свободной энергии, диффузионного потока и другие результаты, посвящены спиноподобному распаду (spinodal decomposition). В работе [28], помимо вывода выражений (1.5)-(1.6), рассматривается устойчивость твердого раствора в метастабильном состоянии с учетом поверхностного натяжения и энергии упругих деформаций. Позднее Кан [29] расширил данное исследование на случай анизотропных твердофазных сред с кубической симметрией. Каном также было рассмотрено формирование пространственных структур при разделении фаз и связность между образовавшимися областями [30]. В статье [31] исследуется зависимость степени спиноподобного разложения от скорости закалки (охлаждения), а также спектр волновых чисел, в котором происходит интенсификация процесса. Авторами также изучались процессы нуклеации (зародышеобразование) и другие близкие явления [32,33].

Метод фазового поля нашел многочисленные приложения в задачах кристаллизации. В работе [34] исследуется устойчивость плоского фронта кристаллизации для двух случаев: изотермическая задача при температуре плавления и рост кристалла с постоянной скоростью в охлажденном расплаве с использованием модели с диффузной (фазовое поле) и бесконечно тонкой границами. Сравнение показало, что для больших волновых чисел наблюдалось количественное различие между двумя моделями, тогда как для малых волновых чисел две модели давали близкие результаты, при условии, что граница раздела в фазовом поле была достаточно мала по сравнению с длиной волны начальных возмущений. Виллер, Боттинджер и МакФадден разработали модель (WBM-model) [35] для задач кристаллизации, в которой предложили использование двух параметров порядка: концентрации и параметра фазового поля. Решение, полученное с помощью данной модели, согласуется с экспоненциальным решением классических диффузионных моделей вдали от границы раздела и хорошо описывает экспериментальные данные, например, для кристаллизации без

перераспределения состава вещества при высокой скорости кристаллизации. Похожие модели также предложены в работах [36-38].

Заметный вклад в развитие теоретических моделей для описания кристаллизации методом фазового поля внес Кобаяши [39,40]. Им была представлена простая и эффективная модель роста дендритов, в которой, в частности, коэффициент при градиентном слагаемом с параметром порядка (аналог  $\kappa(\nabla C)^2$  в случае концентрации в ур. (1.4)) включал в себя анизотропную поправку:  $\sigma(\theta) = 1 - \delta \cos[j(\theta - \theta_0)]$ , где  $\sigma$  – коэффициент анизотропии,  $\theta$  – угол между направлением скорости кристаллизации и выбранной координатной осью,  $j$  – номер моды анизотропии,  $\delta$  – амплитуда анизотропии. Данная модель хорошо воспроизводит физические явления роста кристаллов в широком диапазоне параметров (амплитуды анизотропии, скрытой теплоты фазового превращения, величины шумов и пр.). Схожие результаты и модели роста дендритов представлены в работах [41,42]. Теория фазового поля также применялись к таким явлениям как переконденсация (Оствальдовское созревание) [43], распространение трещин в твердых телах [44] и к многим другим [45,46].

Применительно к гидродинамике модели фазового поля также имеют вариации. Теоретическая модель, используемая в диссертации, основана на системе уравнений, полученной Ловенграбом и Трушкиновским [47]. В то время как вывод множества уравнений фазового поля является скорее эмпирическим, вывод уравнений в работе [47] является термодинамически обоснованным. Основная идея заключается в выводе уравнений из вариационного принципа, при этом в качестве лагранжиана системы берется выражение  $\rho(\mathbf{v}^2/2 - f)$ , первое слагаемое здесь кинетическая энергия единицы массы, функция  $f$  – свободная энергия Гельмгольца (см., уравнение (1.4)). Полная система уравнений гидродинамики в подходе фазового поля имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.7)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \operatorname{div} [\eta(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) - \epsilon \rho \nabla C \otimes \nabla C] + \nabla [\lambda(\nabla \mathbf{v})], \quad (1.8)$$

$$\rho \left( \frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C \right) = \alpha \nabla^2 \mu. \quad (1.9)$$

Система уравнений (1.7)-(1.9) содержит следующие параметры и переменные:  $\mathbf{v}$  – вектор скорости,  $C$  – массовая концентрация,  $\rho$  – плотность смеси,  $P$  – давление,  $\mu$  – химический потенциал,  $\epsilon$  – константа капиллярности,  $\alpha$  – мобильность,  $\eta, \lambda$  – динамическая и объемная вязкости. Жакмин[48] и Воробьев[49] на основе системы уравнений (1.7)-(1.9) вывели уравнения Кана-Хилларда-Навье-Стокса в приближении Буссинеска для несжимаемой бинарной смеси:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho_1} + \frac{\eta}{\rho_1} \nabla^2 \mathbf{v} - C \nabla \mu, \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C = \frac{\alpha}{\rho_1} \nabla^2 \mu, \quad (1.12)$$

$$\mu = -\phi(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) + \frac{\partial f_0}{\partial C} - \epsilon \nabla^2 C \quad (1.13)$$

Здесь  $\phi = (\rho_2 - \rho_1)/\rho_1$ , где  $\rho_1, \rho_2$  – плотности однородной первой и второй фаз,  $\mathbf{g}$  – вектор ускорения свободного падения,  $\mathbf{r}$  – радиус вектор,  $f_0$  – классическая часть функции свободной энергии, которая обычно представляется в виде двухъямного потенциала. Уравнение (1.11) включает слагаемое  $C \nabla \mu$ , которое называется силой Кортвега и ответственно за поверхностное натяжение.

Система уравнений (1.10)-(1.13) дополняется следующими граничными условиями на твердой стенке:

$$\mathbf{v} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mu = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla C = 0, \quad (1.14)$$

где  $\mathbf{n}$  – вектор нормали, направленный внутрь расчетной области. Первое условие в (1.14) – условие прилипания, второе условие, накладываемое на химический потенциал, это условие непроницаемости границы для вещества, последнее условие представляет собой условие нейтрального смачивания (угол смачивания  $\pi/2$ ). Система уравнений (1.10)-(1.13) вместе с граничными условиями (1.14) используется в диссертации для решения задач о неустойчивости Релея-Тейлора и вытеснении одной жидкости другой в капиллярных трубках.

Отдельное внимание стоит уделить функции свободной энергии  $f_0$ . Как было сказано ранее, функция  $f_0$  имеет вид двухъямного потенциала. В большинстве работ, в которых применяется модель фазового поля, используются некоторые абстрактные математические функции вида  $(\phi^2 - 1)^2$ ,  $\phi^2(\phi - 1)^2$  и др., где  $\phi$  – некоторый параметр порядка. Подход, рассматриваемый в диссертации, основан на теории Ландау о фазовых переходах второго рода [50]. Ландау предложил рассматривать разложение для термодинамического потенциала вблизи критической температуры в виде полинома  $\sum_i a_i \phi^i$ , где  $a_i$  – феноменологические коэффициенты,  $\phi$  – параметр порядка (концентрация  $C$  в нашем случае). При этом для симметричной функции свободной энергии нечетные коэффициенты  $a_i$  обращаются в ноль. Таким образом, оставляя в выражении для свободной энергии главные члены, получаем:

$$f_0 = aC^2 + bC^4 \quad (1.15)$$

В излагаемой теории Ландау предполагается, что коэффициент  $a$  в выражении (1.15) пропорционален  $T - T_{cr}$ , т.е. чем меньше значение  $|a|$ , тем ближе система к критической температуре (нами рассматривается система с верхней критической температурой). Данная модель позволяет задавать состояние термодинамического равновесия, таким образом, что состоянию равновесия соответствуют частично смешивающиеся компоненты, причем значение  $a > 0$

отвечает области полностью гомогенной среды. Параметр  $b$  в выражении (1.15) считается положительно определенным и в общем случае является некоторой функцией, которая зависит от кристаллической решетки и связанной с ней группой симметрии, однако в нашем случае при рассмотрении жидких сред данный параметр можно считать некоторой феноменологической константой.

Следует сделать важное пояснение о понятии концентрации в контексте использования данного термина в рамках модели фазового поля. В общем случае возможны различные определения концентрации: объемная доля, молярная концентрация (количество молей компонента к общему объему), мольная доля (количество молей компонента к общему количеству молей) и др. В диссертации под концентрацией будем понимать массовую долю (в том числе во второй главе про изучение конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Соре). Для бинарной системы концентрация компонент  $A$  и  $B$  соответственно определяется:  $C_A = m_A/m$ ,  $C_B = m_B/m$ , где  $m_A$  – масса компонента  $A$ ,  $m_B$  – масса компонента  $B$ ,  $m = m_A + m_B$  – полная масса системы. Концентрации компонент  $A$  и  $B$  очевидно могут принимать значения от 0 до 1 (от 0% до 100%), причем  $C_A + C_B = 1$ . Таким образом, для описания поведения бинарной системы нам необходимо знать концентрацию лишь одного компонента, например,  $A$ :  $C_A \equiv C$  (в общем случае для системы из  $n$  компонент требуется знать  $n - 1$  компонент концентраций). Тогда значение  $C = 1$  соответствует чистой компоненте  $A$ , значение  $C = 0$  – чистой компоненте  $B$ .

В рамках модели фазового поля удобно сделать сдвиг значений концентраций на  $1/2$ :  $C = 1/2$  – чистый компонент  $A$ ,  $C = -1/2$  – чистый компонент  $B$ , такую систему будем называть гетерогенной абсолютно несмешивающейся (см., рис.1.4 (а)). Рассматривая гетерогенную бинарную систему, мы имеем дело с двумя фазами вещества, которые разделены границей раздела. В теории фазового поля граница (переходная зона) определяется условием  $|C| < \delta$ , где  $\delta$  предполагается

малой величиной (см., рис. 1.3). Первая и вторая фазы соответственно определяются условиями:  $C > \delta$  и  $C < -\delta$ . При этом, в силу малости  $\delta$ , для простоты допускается сказать, что граница раздела определена условием  $C = 0$ .

Термодинамическому равновесию может соответствовать концентрация, отличная от значений  $|1/2|$ , т.е. такое состояние, когда компоненты  $A$  и  $B$  частично растворимы друг в друге, при этом сохраняя четкую межфазную границу (в общем случае растворимость компонент может быть несимметричной), в этом случае будем называть систему гетерогенной частично смешивающейся. Говоря о концентрации первой или второй фазы, мы будем подразумевать концентрацию в той области, где  $C$  либо  $> 0$ , либо  $< 0$ . Термодинамическое равновесие в отсутствие внешних сил, вдали от границы раздела определяется из условия  $\partial f_0 / \partial C = 0$ , так для свободной энергии Ландау (1.15) равновесные значения концентрации  $C_{eq} = \pm \sqrt{-a/(2b)}$ . При этом чистым равновесным фазам соответствует  $a/b = -0.5$ , меньше этого значения система не отвечает физически релевантному состоянию; значениям  $a/b > 0$  соответствует гомогенная (однородная) система.

При численном решении задачи о неустойчивости Релея-Тейлора нами была выбрана альтернативная формула, предложенная Флори [52]:

$$f_0 = \left(a - \frac{3}{2}b\right)C^2 + \frac{3}{4}b\left(\frac{1}{2} + C\right)\ln\left(\frac{1}{2} + C\right) + \frac{3}{4}b\left(\frac{1}{2} - C\right)\ln\left(\frac{1}{2} - C\right) \quad (1.16)$$

Параметры  $a$  и  $b$  в формуле (1.16) имеют тот же смысл, что и в формуле (1.15). Тестовые расчеты показали, что формула (1.16) в задаче о неустойчивости Релея-Тейлора оказалась более удобной при численных расчетах. Функции свободной энергии (1.15) и (1.16) изображены на рис. 1.2.

Вывод уравнений фазового поля, предложенный Ловенгрубом и Трушкиновским, не является единственным. Антоновский в [51] вывел похожую модель фазового поля для несжимаемой жидкости из принципа максимальной энтропии.

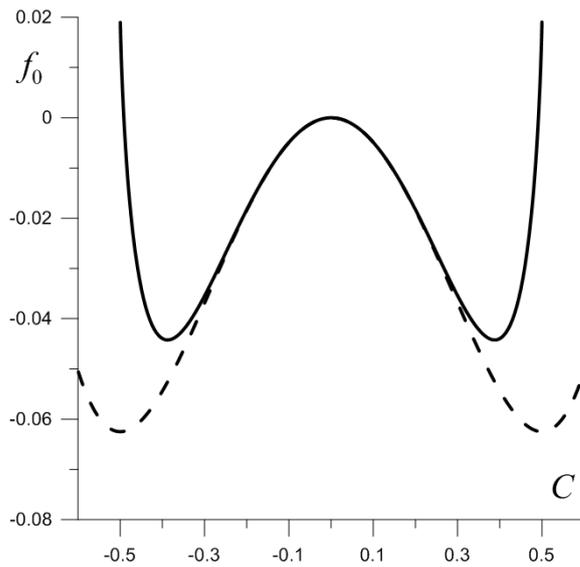


Рисунок 1.2. Свободная энергия (1.15) – штриховая линия, (1.17) – сплошная линия для  $a/b = -0.5$ . Формула (1.17) представлена со сдвигом по оси  $f_0$  на величину  $f_0(C = 0)$ .

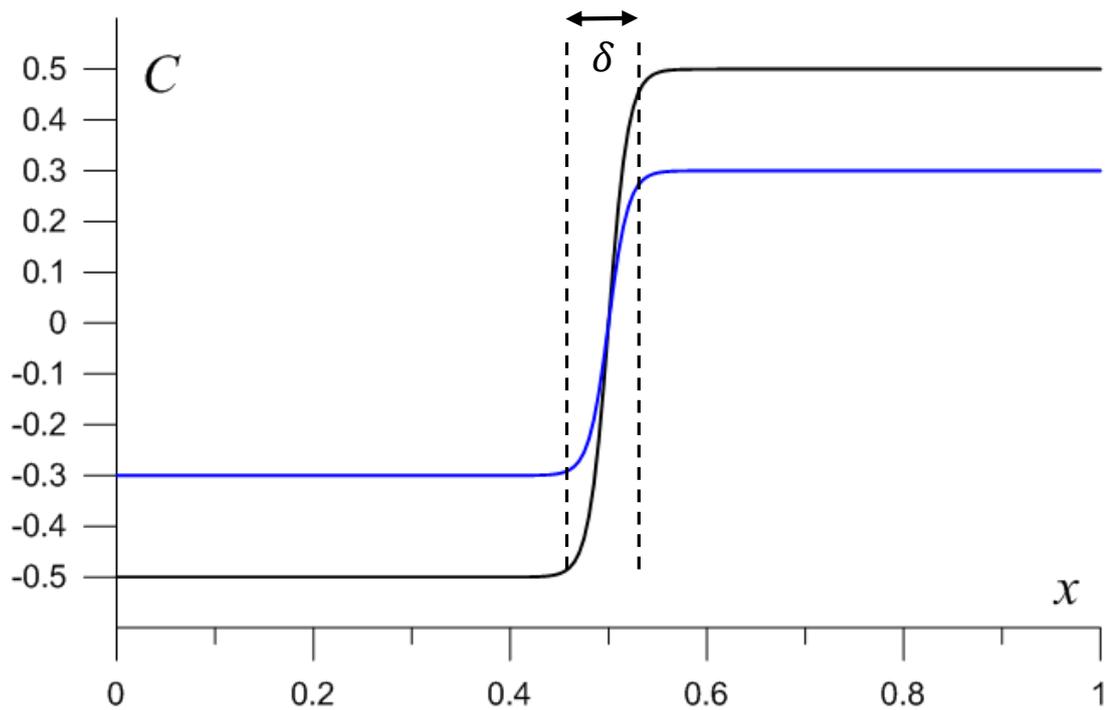


Рисунок 1.3. Равновесное одномерное распределение концентрации  $C$  в зависимости от пространственной координаты  $x$ ,  $\delta$  – толщина переходной зоны. Черная линия – гетерогенная абсолютно несмешивающаяся система, синяя линия – гетерогенная частично смешивающаяся система.

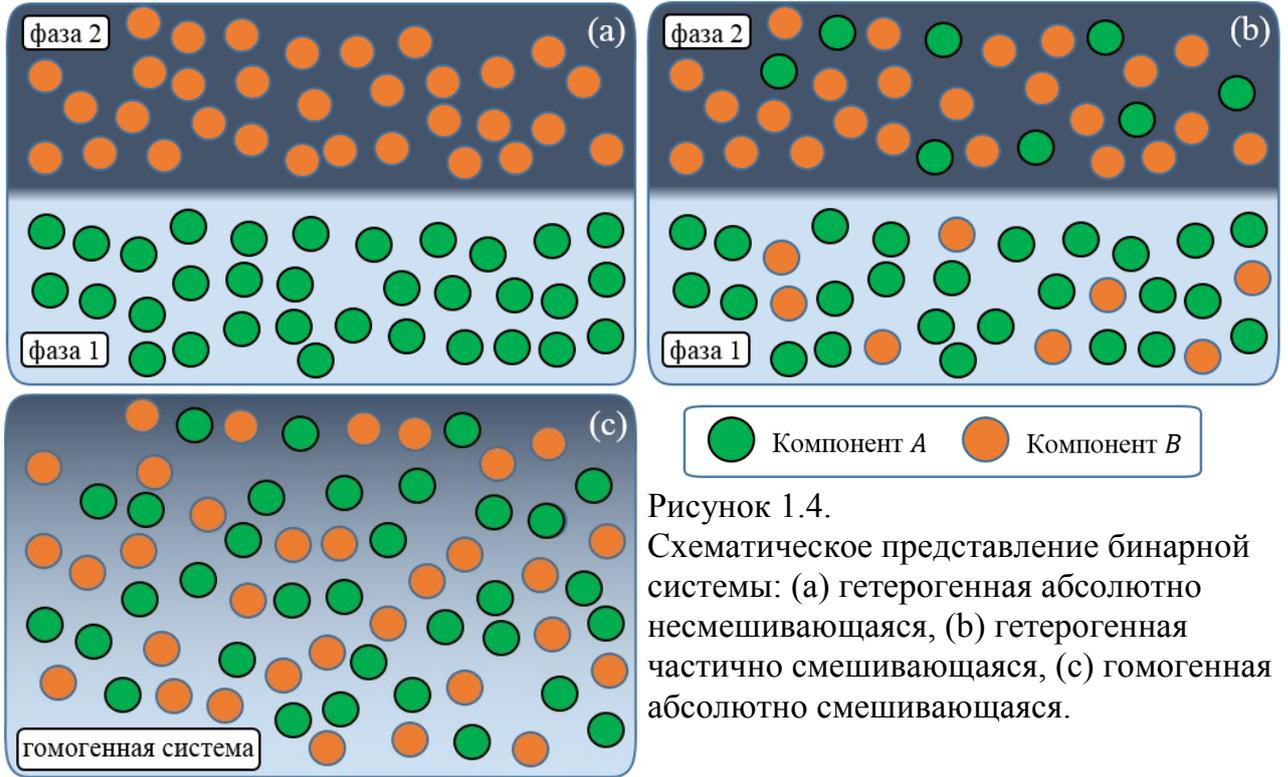


Рисунок 1.4.

Схематическое представление бинарной системы: (а) гетерогенная абсолютно несмешивающаяся, (б) гетерогенная частично смешивающаяся, (с) гомогенная абсолютно смешивающаяся.

Метод фазового поля по своей идее близок к методу функции уровня (метод сквозного счета / level-set) [53-55] и, отчасти, возник из идеи получить физически-обоснованный метод функции уровня, уравнения которого имеют вид:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_S \quad (1.17)$$

$$\mathbf{F}_S = -\gamma k(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \phi = 0. \quad (1.19)$$

Уравнения (1.17) и (1.19) представляют собой модель сквозного счета. Переменная  $\phi(\mathbf{x}, t)$  – поле функции уровня, знак которого определяет первую и вторую фазы, граница раздела при этом определяется условием  $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ ,  $\mathbf{F}_S$  – сила поверхностного натяжения (поверхностная сила аппроксимируется объемной таким образом, что данная сила сосредоточена в узком переходном слое между фазами),  $\gamma$  – коэффициент поверхностного натяжения,  $k$  – кривизна границы,  $\delta$  –

дельта-функция. Проблемой данного метода является размытие межфазной границы, из-за чего теряется устойчивость метода, в результате чего приходится применять трудоемкую процедуру реинициализации границы раздела между фазами, сложную в реализации и отнимающую большую часть расчетного времени. Данный недостаток полностью отсутствует в методе фазового поля.

Другой альтернативой при моделировании динамики гетерогенных систем является метод «front-tracking» [56,57], в котором используются разные системы уравнений для разных фаз, при этом происходит явное отслеживание границы раздела, динамически меняющейся со временем. Отслеживание границы при этом является весьма трудоемкой задачей, особенно в случае нетривиальной динамики при которой, например, меняется топология поверхности раздела. Аналогичные проблемы есть у метода «volume of fluid», в котором происходит отслеживание объема каждой фазы в расчетных ячейках, близких к поверхности раздела.

Также возможно расширение метода фазового поля на случай числа фаз больше двух. В работах [58,59] методом фазового поля моделируется динамика эмульсий и суспензий, каждая взвешенная частица (капля) имеет свой параметр порядка  $\phi_i, i = 1..N$ ,  $N$  – число частиц. Функция свободной энергии имеет следующий вид:

$$f = \frac{a}{4} \sum_i^N \phi_i^2 (\phi_i - \phi_0)^2 + \frac{\kappa}{2} \sum_i^N (\nabla \phi_i)^2 + \zeta \sum_{i,k,i < k} \phi_i \phi_k$$

Первые два слагаемых, двухъямный потенциал и градиентный член, ответственный за поверхностное натяжение, присутствуют во всех выше упомянутых моделях фазового поля. Последнее же слагаемое отвечает за отталкивание частиц в эмульсии/суспензии. При этом в систему уравнений входит  $N$  уравнений диффузии вида (1.9), а сила Кортвега в уравнении Навье-Стокса представляет собой сумму  $\sum_i \phi_i \nabla \mu_i$ .

## 1.2 Вытеснение одной жидкости другой в капиллярных трубках

### 1.2.1 Обзор литературы

Изучение вытеснения одной жидкости другой в капиллярных трубках имеет первостепенную важность при рассмотрении макроскопических процессов вытеснения в пористой среде. Многие явления в природе и промышленности могут быть сведены к этой физической конфигурации, включая добычу нефти и восстановление водоносного горизонта и почвы [60,61].

Традиционно практическое макроскопическое описание вытеснения одной жидкости другой в пористой среде рассматривается в рамках расширенной модели Дарси для многофазных течений [62,63]. В этой модели присутствуют такие феноменологические параметры, как относительные проницаемости и капиллярное давление, значения которых в каждой точке пространства сильно зависят от насыщенности пористой среды одной жидкости другой. Таким образом, данная теория включает непрерывное множество феноменологических констант, т.е. требуется определение функций относительных проницаемостей и капиллярного давления в зависимости от уровня насыщения пористой среды, что требует серии экспериментальных измерений для каждого уровня насыщения.

Для более универсального понимания многофазных течений в пористой среде необходим более фундаментальный анализ, основанный на исследовании микроструктуры данных сред. Для пористых матриц существуют различные представления их микроструктуры с разным уровнем детализации. Одним из таких представлений является модель связанных между собой капиллярных трубок (сеть капилляров). Таким образом, для глубокого понимания динамики вытеснения в пористых средах изучение динамики вытеснения в капиллярах является важной задачей.

В диссертации в рамках модели фазового поля с помощью прямого численного моделирования исследуется задача о вытеснении одной жидкости другой в одиночном капилляре для смешивающихся и несмешивающихся

жидкостей. Кроме того, исследуется динамика вытеснения в матрице связанных между собой капилляров.

Первые исследования многофазных течений в капиллярах были выполнены в начале двадцатого века Вестом [64] и Уошборном [65]. Найдено, что при малых значениях числа Рейнольдса ( $Re$ ) и капиллярного числа ( $Ca$ ) ( $Re = \rho Vd/\eta$ ,  $Ca = V\eta/\sigma$ , где  $\rho$  – плотность,  $V$  – характерная скорость,  $d$  – диаметр капилляра,  $\eta$  – динамическая вязкость,  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения) течение имеет параболический профиль Пуазейля. При этом профиль вытеснения одной жидкости другой имеет форму осесимметричного мениска, движущегося с той же скоростью, что и остальная жидкость. Скорость течения определяется разницей давлений на концах капилляра за вычетом капиллярного давления, которое связано с искривленной границей раздела. Позже было установлено [66], что связанное с фронтом вытеснения одной жидкости другой капиллярное давление должно определяться видимым контактным углом смачивания, который отличается от статического угла смачивания и определяется расходом жидкости.

В случаях более сильной прокачки, когда скорость течения и, следовательно, капиллярное число выше, вытеснение одной жидкости другой происходит иным образом: мениск в этом случае имеет пальцеобразную форму, при этом вкачиваемая жидкость проникает преимущественно через центральную часть капилляра, оставляя некоторое количество жидкости на стенке капилляра. В этом случае большое внимание уделяется отношению объема вытесненной жидкости к тому объему, что остается на стенках капилляра, в зависимости от капиллярного числа [67]. Теоретическое моделирование пальцеобразного вытеснения было предпринято Коксом [68], разработавшим приближенную теорию, способную предсказать картину течения вблизи границы раздела жидкость-жидкость, а также значение параметра  $m$  – доля жидкости, которая первоначально заполняет капилляр, но остается на стенках (данная величина является важной характеристикой вытеснения и рассматривается во многих работах).

Одними из наиболее современных работ являются труды Соареса и соавт. [69-71], в которых применяется метод конечных элементов для моделирования течений несмешивающихся жидкостей в капилляре. В данных работах основной акцент делается на изучении параметра  $m$  – доля жидкости, которая первоначально заполняет капилляр, но остается на стенках (не вымывается), в зависимости от разности вязкостей двух жидкостей и капиллярного числа, что показывает отношение вязких сил к капиллярным.

Для смешивающихся жидкостей аналогичные исследования выполнены в работах [72,73]. Для таких жидкостей, помимо числа Рейнольдса и капиллярного числа, важным параметром является число Пекле ( $Pe = Vd/D$ , где  $D$  – коэффициент диффузии). Обнаружено, что для больших значений числа Пекле ( $>1000$ ) наблюдаемое поведение аналогично поведению несмешивающихся жидкостей с четко видимой резкой границей раздела. При меньших числах Пекле получение экспериментальных результатов являлось трудоемкой задачей в силу сильного размытия границы раздела. Численная модель, разработанная Ченом и Мейбургом [73], представляла пару смешивающихся жидкостей как гомогенную систему (однофазную жидкость с примесью, в пренебрежении капиллярными эффектами), результаты моделирования в рамках данного подхода согласуются с экспериментальными данными [72], для которых, однако, капиллярное давление было невелико, чем и объясняется хорошее согласие с теорией без учета межфазного взаимодействия.

При обсуждении динамики смешивающихся систем с учетом сил поверхностного натяжения может возникнуть вопрос о корректности рассмотрения капиллярных эффектов в данном случае. Однако ряд работ безусловно подтверждают справедливость учета сил поверхностного натяжения (следовательно, и наличие капиллярного давления). В [74] изучалась динамика всплывающей / падающей капли, смешивающейся с окружающей жидкости. Форма капли была близкой к сферической. В [75] были рассмотрены гравитационно-капиллярные волны на поверхности между двумя смешивающимися жидкостями.

Для смешивающихся систем установление термодинамического равновесия может являться длительным процессом, следовательно, будет наблюдаться изменение во времени силы поверхностного натяжения и капиллярного давления, что в свою очередь повлияют на динамику вытеснения.

В различных исследованиях [72,76,77] коэффициент поверхностного натяжения для наиболее часто исследуемой пары жидкостей вода/глицерин оценивался в диапазоне от  $2 \cdot 10^{-4}$  Н/м до  $2.5 \cdot 10^{-7}$  Н/м. Однако в вышеупомянутых работах игнорировалась динамика смещения. Разные стадии эволюции смещения могут, по-видимому, характеризоваться различными значениями коэффициента поверхностного натяжения. Например, малое значение коэффициента  $2.5 \cdot 10^{-7}$  Н/м в работе [77] объясняется тем, что рассматривалась динамика во вращающемся тензиометре – перемешивание при этом происходит значительно быстрее. Таким образом, в случае смешивающихся систем возникает необходимость изучения временной эволюции капиллярных сил, что игнорируется в многих исследованиях.

При изучении двухфазных жидкостей методом фазового поля основное внимание уделяется рассмотрению движения контактной линии вблизи твердой границы, что действительно представляет собой сложность при моделировании двухфазных течений в капилляре [78]. Стандартное условие прилипания ( $\mathbf{v} = 0$ ), по-видимому, не соответствует движению контактной линии, наблюдаемому в многочисленных экспериментах. Для решения данной проблемы в традиционных моделях с резкой границей раздела вводятся дополнительные условия на твердой стенке: например, условие на скорость течения вдоль стенки ( $v_x$ )

$$\left( v_x + L_S \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)_{wall} = 0, \quad (1.20)$$

в котором вводится дополнительный параметр  $L_S$  – «длина скольжения». Однако, как было показано Жакмином [79], движение контактной линии естественным образом получается из решения уравнений модели фазового поля (уравнения (1.10)-(1.12)) без необходимости ввода дополнительных параметров.

Жакмин выполнил расчет двухфазного течения с использованием реалистичных коэффициентов диффузии системы жидкость-жидкость и модели сдвигового скольжения на твердой границе (уравнение (1.20)). В [79] им было продемонстрировано, что механизм диффузии с условием прилипания способен поддерживать межфазную границу при значениях коэффициента диффузии, больших  $D_* \sim 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/с (при  $D_* \sim 10^{-12}$  м<sup>2</sup>/с контактная линия сохраняется, но наблюдаются искажения, при  $D_* \sim 10^{-13}$  м<sup>2</sup>/с она полностью разрушается). Для коэффициента диффузии  $D_* \sim 10^{-10}$  м<sup>2</sup>/с было показано, что при  $L_S \sim 10^{-9}$  диффузионный эффект поддержания контактной линии и эффект «скольжения» являются сопоставимыми, при бóльших значениях  $L_S$  доминирующим оказывается влияние «скольжения», при меньших – диффузии, в то же время, как показано в [79] для  $D_* \sim 10^{-10}$  м<sup>2</sup>/с реалистичным является значение  $L_S \approx 3 \cdot 10^{-10}$ .

В диссертации большинство расчетов по моделированию вытеснения одной жидкости другой выполнены для числа  $Re = 10^4$ , что соответствует  $D_* \sim 10^{-10}$  м<sup>2</sup>/с при диаметре капилляра  $d \sim 10^{-4}$  м, и характерной скорости течения  $v_* \sim 10^{-2}$  м/с. Серия расчетов также проведена для  $Re = 10^3..10^5$ . Таким образом, при используемых параметрах динамика контактной линии определяется лишь механизмом диффузии без ввода в модель дополнительных параметров.

Большое число работ посвящено условиям смачивания при движении в капилляре [79,80,92-94]. В данных работах использовался подход, предложенный Жакмином [79], в котором условие смачивания имеет вид:

$$\kappa \cdot \frac{\partial C}{\partial n} + \gamma(\theta_S) \frac{\partial g}{\partial C} = 0, \quad (1.21)$$

где  $n$  – координата, нормальная к твердой стенке,  $\gamma(\theta_S)$  – некоторая функция от статического угла смачивания  $\theta_S$ ,  $g(C)$  – локальная энергия поверхностного натяжения (энергия границы раздела жидкость-твердое тело). Динг [93] показал, что возможен эквивалентный «геометрический» вывод условия смачивания, что приводит к выражению:

$$\frac{\partial C}{\partial n} = -|\nabla C| \cos \theta_S \quad (1.22)$$

В диссертации рассматривается нейтральный угол смачивания  $\theta_S = 90^\circ$ ,  $\partial C / \partial n = 0$ .

В статье [92] проводилось сравнение двух моделей: 1) модель фазового поля для квазисжимаемой жидкости, предложенная Ловенгрубом и Трушкиновским [47] и 2) модель с несжимаемой жидкостью, аналогичная используемой в диссертации. Было показано, что модель Ловенгруба и Трушкиновски менее устойчива при численных расчетах. Термин «квазисжимаемость» указывает на сжимаемость жидкости в переходном межфазном слое, тогда как в остальной части системы жидкость несжимаема. Изменение плотности в данной межфазной зоне требует перемещения значительного количества массы в окружающей несжимаемой (чистой) фазе, что и приводит к вычислительным трудностям.

В работе [80] метод фазового поля (с различными модификациями) используется для изучения условий смачивания, приводятся некоторые вычисления и сравнение с результатами Тейлора [67], однако основной акцент делается на изучении статической капли в капилляре. Авторами также изучалась неустойчивость фронта вытеснения при различных параметрах вязкости в ячейке Хеле-Шоу [81]. При этом модель фазового поля в работах [80,81] обладает недостатком: присутствует большое количество дополнительных параметров.

Моделирование вытеснения методом фазового поля в капилляре проводилось в работе [82], при этом основной целью было подкрепление экспериментальной работы теоретическим моделированием. При этом использовались два выражения для межфазных напряжений: 1) классическое для метода фазового поля выражение  $C\nabla\mu$  и 2) характерное для метода level-set выражение  $-\alpha k(C)\delta(C)\nabla C$ . Сравнение показало, что в первом случае наблюдается лучшее согласие с экспериментальными данными, во втором случае моделирование давало завышенные значения для скорости течения.

Моделирование динамики вытеснения в капилляре интересно с точки зрения применения знаний о динамике вытеснения к пористой среде, что может быть представлена на микроуровне с помощью модели сети связанных между собой капилляров. В действительности, конечно, такая модель является упрощением реальной более сложной нерегулярной структуры пористых сред.

Например, в [83] при попытке учесть различные нерегулярности и неоднородности в пористой среде потребовалось  $128^3$  структурных элементов, что едва ли реализуемо методами прямого численного моделирования. В расчетах подобного рода используются упрощенные модели, где, например, задается расход течений в капилляре исходя из профиля течения Пуазейля, и для данной величины расхода строится определенная упрощенная модель (состоящая из алгебраических или однородных дифференциальных уравнений) [84-86].

Нами ставится задача полностью разрешить задачу об эволюции границы раздела в матрице капилляров. Похожие расчеты выполнены в работах [87-91], в которых моделировалась ограниченная область из поры и нескольких капилляров, либо “Y”-образное соединение капилляров. Нами же рассматривается бóльший объем пористой среды, включающий в себя множество пор и капилляров, с целью понять, как особенности течения жидкости зависят от размеров матрицы, вывести асимптотические зависимости интегральных характеристик, которые бы не зависели от размером матрицы.

### 1.2.2 Постановка задачи

Задача о вытеснении одной жидкости другой в одиночном капилляре решалась с использованием уравнений теории фазового поля (1.10)-(1.13). В безразмерном виде данные уравнения принимают следующий вид:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{M} C \nabla \mu, \quad (1.24)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C = \frac{1}{\operatorname{Pe}} \nabla^2 \mu, \quad (1.25)$$

$$\mu = \frac{\partial f_0}{\partial C} - \operatorname{Cn} \nabla^2 C \quad (1.26)$$

В качестве единиц длины, скорости, времени, давления и химического потенциала выбраны величины  $d, V_{max}, d/V_{max}, \rho_* V_{max}^2, \mu_*$ , соответственно. Здесь  $d$  – диаметр капилляра,  $V_{max}$  – максимальная скорость,  $\rho_*$  и  $\mu_*$  – характерные значения плотности и химического потенциала. В качестве «классической» части свободной энергии выбрана функция Ландау (1.15):  $f_0 = AC^2 + C^4$ , где  $A = a/b$ .

Уравнения (1.23)-(1.26) содержат следующие безразмерные параметры: числа Рейнольдса ( $\operatorname{Re}$ ), Пекле ( $\operatorname{Pe}$ ), Маха ( $M$ ), Кана ( $\operatorname{Cn}$ ):

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho_* V_{max} d}{\eta_*}, \operatorname{Pe} = \frac{\rho_* V_{max} d}{\alpha \mu_*}, M = \frac{V_{max}^2}{\mu_*}, \operatorname{Cn} = \frac{\epsilon}{\mu_* d^2}.$$

Число Рейнольдса задает отношение сил инерции к силам вязкого трения. Число Пекле определяет роль диффузии. Число Маха ответственно за роль капиллярных эффектов в уравнении Навье-Стокса, число Кана определяет толщину границы раздела  $\delta = \sqrt{\operatorname{Cn}/A}$  [169].

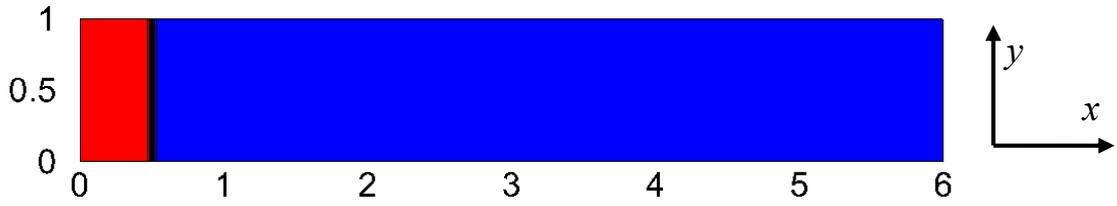


Рисунок 1.5. Вытеснение в капилляре, конфигурация задачи.

На рис. 1.5 представлена геометрия задачи: первоначально капилляр заполнен одной жидкостью, с левого конца капилляра происходит закачка другой жидкости под давлением, выходной (правый) конец считается открытым. Таким образом, уравнения (1.23)-(1.26) дополняются следующими граничными условиями: на твердых стенках,

$$y = 0,1: \mathbf{v} = 0, \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2}, \frac{\partial \mu}{\partial y} = 0, \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad (1.27)$$

на левой стенке,

$$x = 0: \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} = 0, p = p_1, \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, C = -0.5, \quad (1.28)$$

на правой стенке,

$$x = L: \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} = 0, p = 0, \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (1.29)$$

Начальное состояние системы – механическое равновесие с распределением концентрации, которое задается формулой (1.30)

$$C_0 = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x - x_0}{\delta_0}\right). \quad (1.30)$$

Как известно, в случае однофазного течения в капилляре/трубе устанавливается профиль Пуазейля с параболической зависимостью скорости от поперечной координаты. Значение давления на левой стенке задается как  $p_1 = 8L/\text{Re}$  и выбирается таким образом, чтобы в случае однофазного течения максимум скорости соответствовал единице, профиль течения при этом  $v_x = 4y(1 - y)$ .

Уравнения (1.23)-(1.26) численно решались с помощью метода дробных шагов (метод проекций) в естественных переменных скорость-давление [95], в качестве дискретизации был выбран метод конечных разностей с явной схемой по времени. Суть данного алгоритма заключается в следующем: 1) решается уравнение Навье-Стокса (1.24) без учета вклада давления – получаем значение для некоторой промежуточной квазискорости  $\mathbf{u}$ . Истинная скорость ( $\mathbf{v}$ ) при этом выражается через квазискорость  $\mathbf{u}$  и давление

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} - \tau \nabla p, \quad (1.31)$$

где  $\tau$  – временной шаг интегрирования. 2) Применяя операцию дивергенции к уравнению (1.31), получаем уравнение Пуассона для давления:

$$\nabla^2 p = \frac{\operatorname{div} \mathbf{u}}{\tau}, \quad (1.32)$$

которое решается итерационным способом. 3) На последнем этапе получаем значение истинной скорости из выражения (1.31). Более подробно процедура численного решения описана в приложении А.

### 1.2.3 Результаты моделирования

#### Несмешивающиеся жидкости, $A = -0.5$

Для проверки вычислительной программы сначала наблюдалось установление классического профиля течения Пуазейля, который реализуется при достаточно больших числах Маха ( $M \sim 1$ ), когда капиллярные эффекты несущественны. При проверке сходимости результатов для различных вычислительных сеток было обнаружено, что при уменьшении  $M$  возрастает необходимость в более точном разрешении. На рис. 1.6 показаны кривые, полученные при  $M=10^{-4}$  для четырех различных разрешений. Наблюдается сходимость при постепенном увеличении числа узлов на единицу длины. На основании текстовых результатов был сделан вывод, что разрешение 1/300 является достаточным для получения корректных результатов.

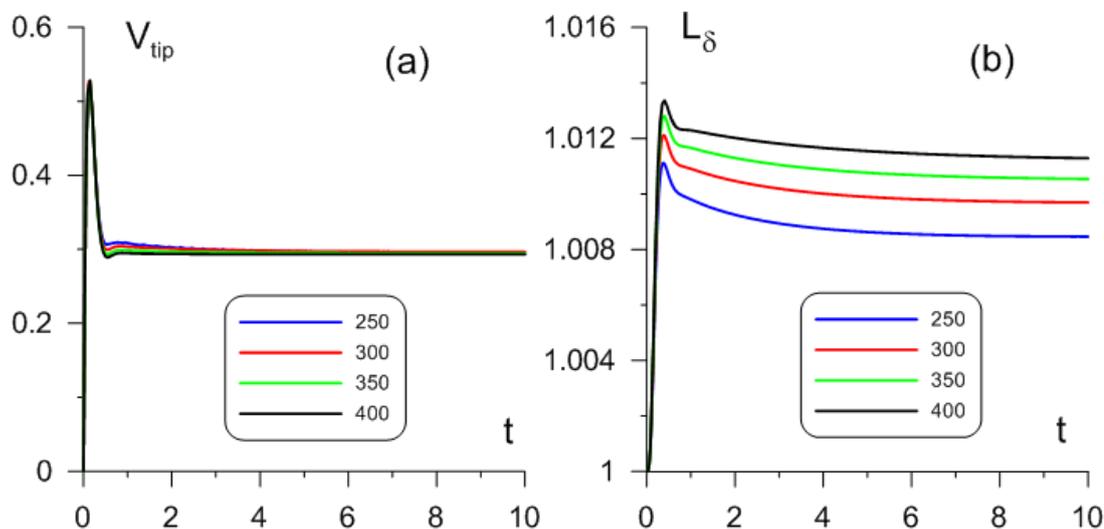


Рисунок 1.6. Зависимость скорости конца мениска (а) и длины межфазной границы (б) от времени. Значения в легенде графиков – количество узлов сетки на единицу длины. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $M = 10^{-4}$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $Pe = 10^4$

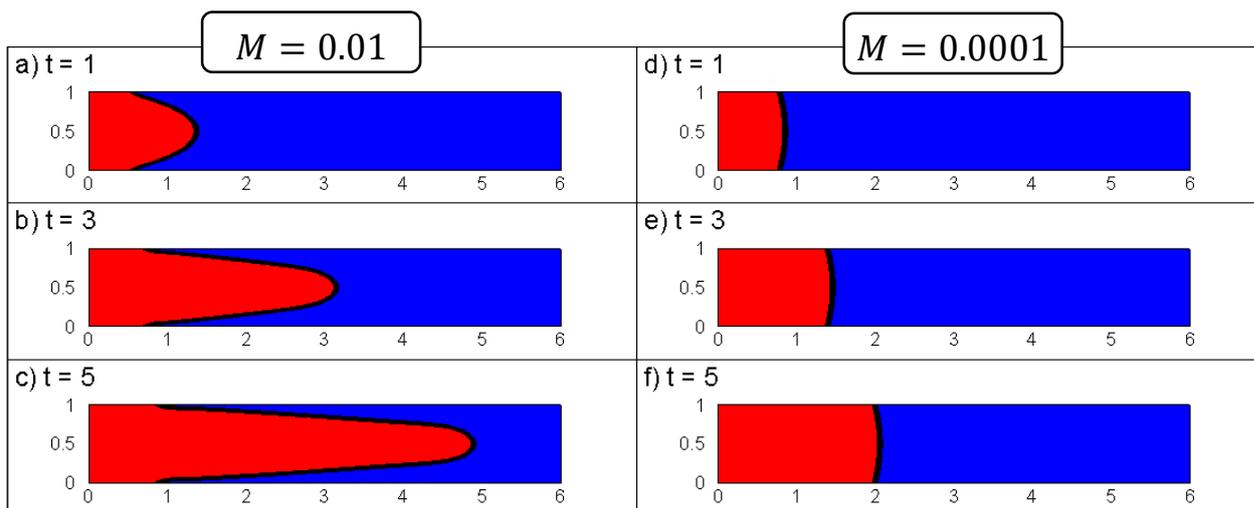


Рисунок 1.7. Поле концентрации в различные моменты времени для  $M = 10^{-2}$  (a-c) и  $M = 10^{-4}$  (d-f). Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ ,  $Re = 1$ .

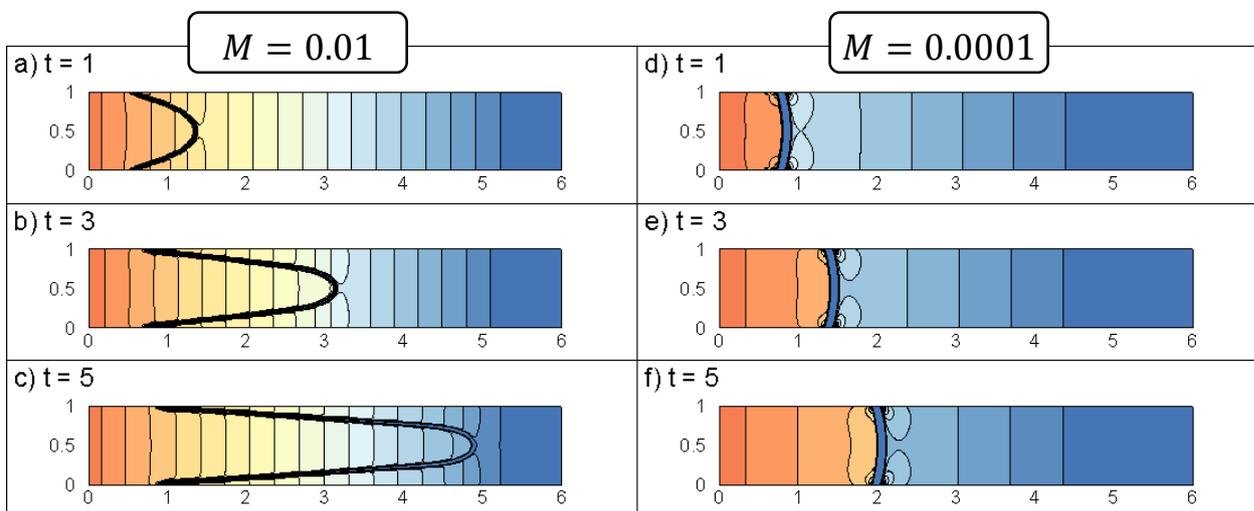


Рисунок 1.8. Поле давления в различные моменты времени для  $M = 10^{-2}$  (a-c) и  $M = 10^{-4}$  (d-f). Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ ,  $Re = 1$ .

Поведение системы определяется несколькими параметрами. В частности, значительное влияние на динамику оказывает значение числа Маха. На рис. 1.7 и 1.8 изображены поля концентрации и давления в разные моменты времени ( $t = 1, 3, 5$ ) для двух значений  $M$ :  $10^{-2}$  и  $10^{-4}$ . Эти два случая представляют два разных характерных сценария движения мениска. В случае более высокого числа Маха вытеснение жидкости из трубки имеет пальцеобразную форму, что вымывает жидкость из середины трубки, при этом оставляя некоторый объем жидкости вблизи стенок капилляра. Движение острия мениска происходит значительно

быстрее, чем движение контактной линии вблизи твердых стенок, что приводит к постоянному растягиванию границы раздела.

Видимый (динамический) угол смачивания, определяющий форму границы раздела около стенки, также постоянно изменяется, становясь меньше. Форма границы раздела определяется полем концентрации. Благодаря граничному условию для концентрации, отвечающему нейтральному углу смачивания, изолинии поля концентрации, а вследствие этого и линия контакта, всегда остаются ортогональными стенке. Однако это свойство можно заметить лишь на значительно более мелком масштабе.

В случае меньшего числа Маха мениск становится менее выраженным, и вытеснение происходит подобно поршневому выталкиванию. Наблюдается полное вытеснение первоначально насыщающей трубку жидкости, а скорость мениска при этом значительно ниже, чем при пальцеобразном вытеснении.

Из рис. 1.8 видно, что давление линейно уменьшается вдоль капилляра. Изолинии давления вблизи мениска существенно сгущаются и искривляются, таким образом межфазная граница также может быть определена по изолиниям давления. В начальный момент, когда включается перепад давления между концами трубок, жидкости находятся в состоянии покоя. Вскоре после этого в капилляре устанавливается устойчивое течение жидкости, при этом потоки на входе и выходе остаются постоянными; тем не менее, во время этого движения одна жидкость вытесняется другой, и распространение границы раздела жидкость-жидкость вызывает нестационарное вихревое движение в трубке.

На рис. 1.9 (а) показано поле скорости в промежуточный момент времени (мениск около середины трубки). Вдали от мениска скорость имеет параболический профиль течения Пуазейля – вблизи же мениска профиль отличается. На рис. 1.9 (b) показано отклонение поля скорости от течения Пуазейля – видно, что вблизи конца мениска имеется обратное течение, замедляющее общую динамику вытеснения.

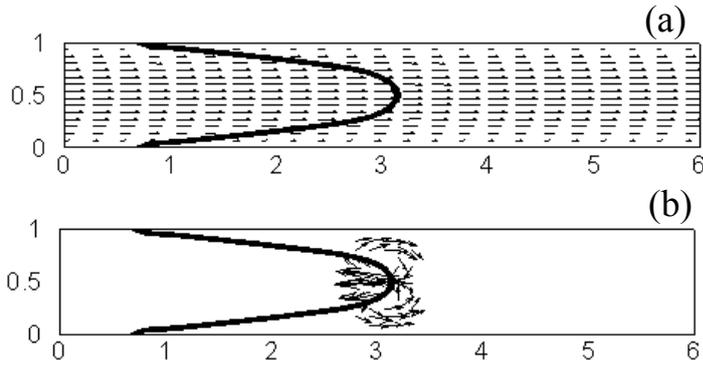


Рисунок 1.9. (а) Поле скорости (стрелки), (б) поле скорости за вычетом течения Пуазейля. Сплошная черная линия изображает межфазную границу.  $t = 3$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ ,  $Re = 1$ .

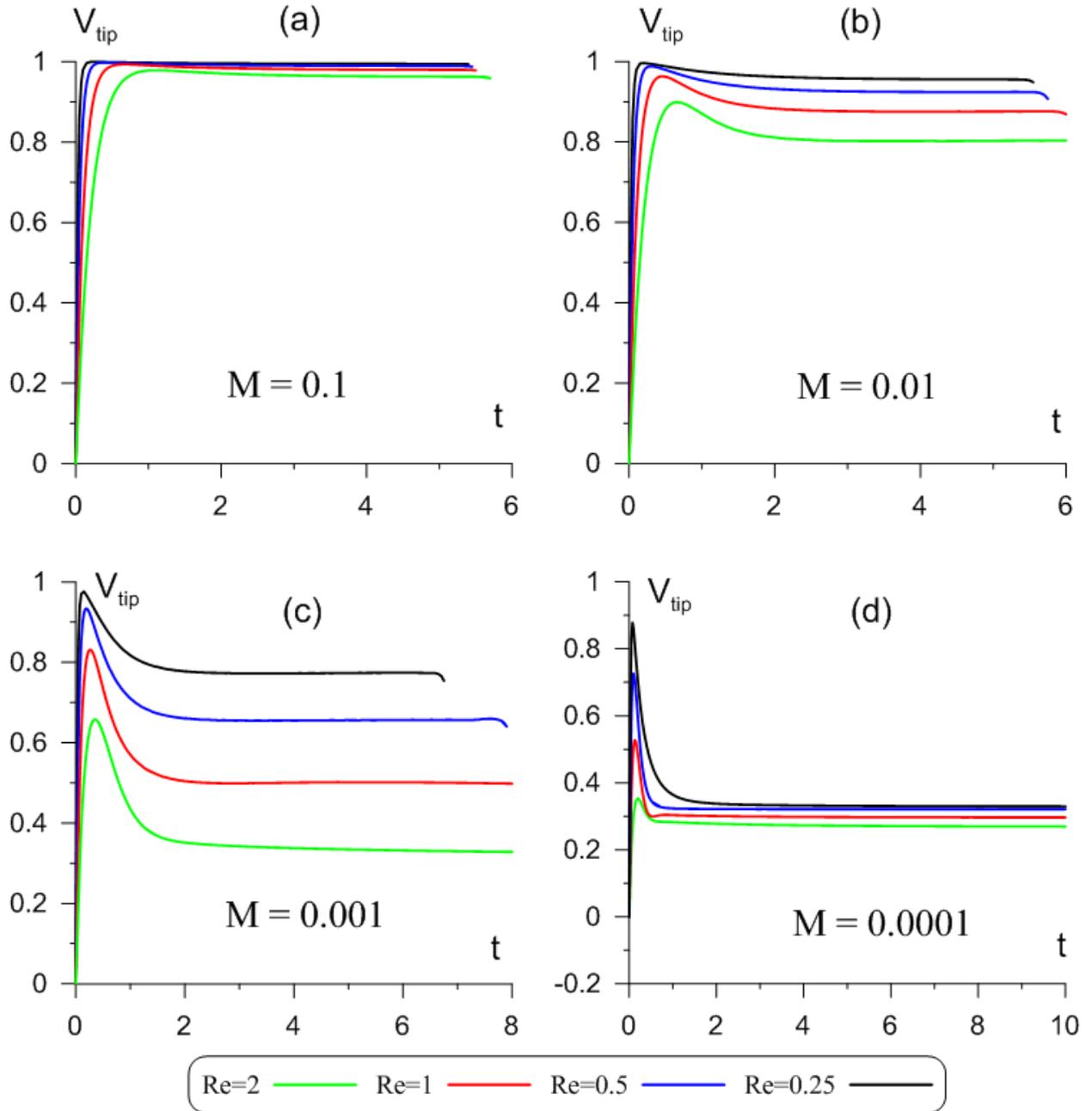


Рисунок 1.10. Зависимость скорости конца мениска от времени для различных чисел Маха и Рейнольдса. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

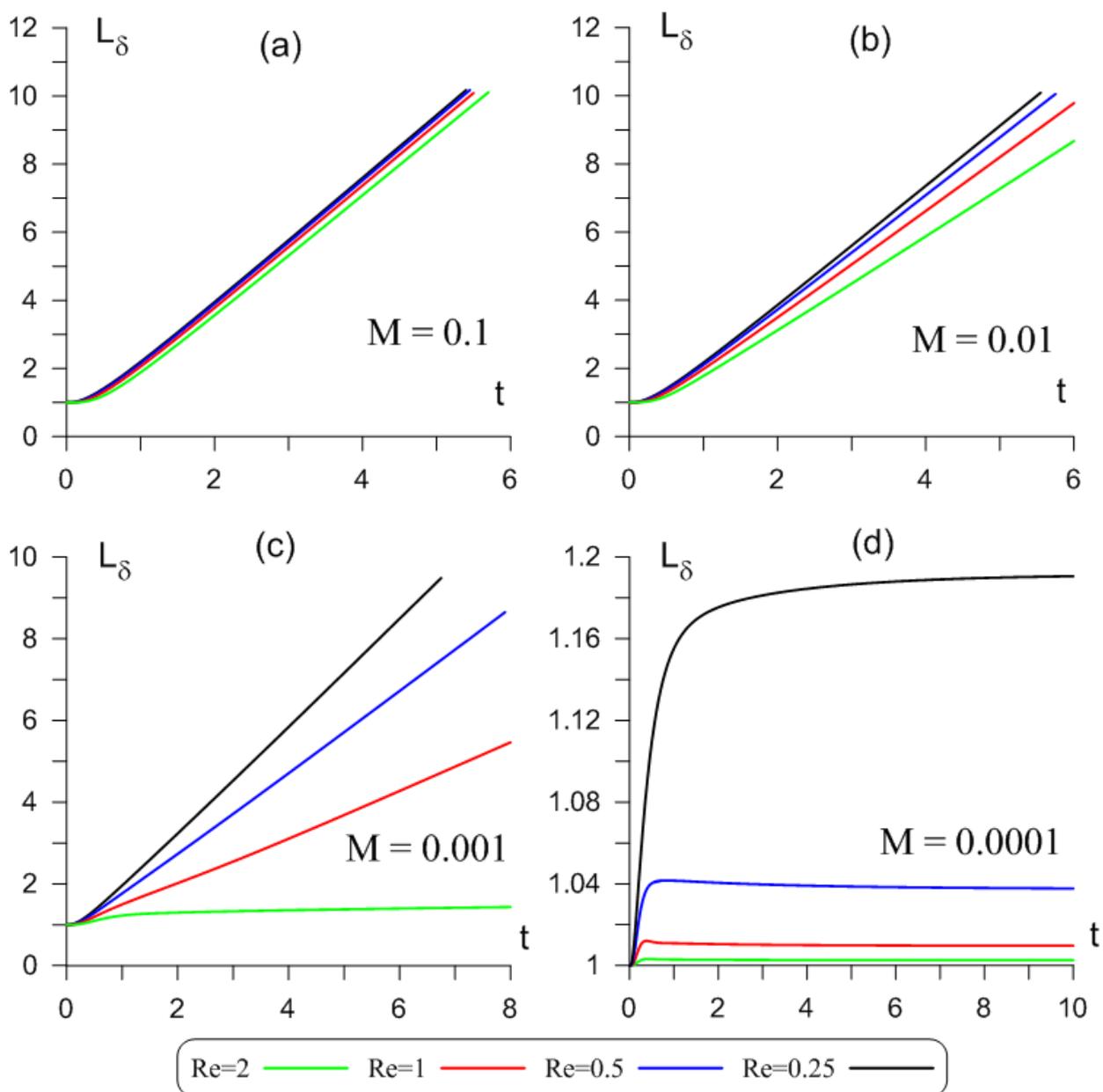


Рисунок 1.11. Зависимость длины межфазной границы от времени для различных чисел Маха и Рейнольдса. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Re = 10^4$ .

На рисунках 1.10 и 1.11 показаны характеристики движения мениска для различных чисел Маха и Рейнольдса: скорость конца мениска и длина границы раздела. Для определения границы раздела был реализован алгоритм, схожий с методом «движущихся квадратов» (marching squares): строится граница раздела (изолиния  $C = 0$ ), изолиния внутри расчетной ячейки аппроксимируется линейным отрезком, суммируется длина всех отрезков, что в итоге дает полную длину межфазной границы. При заданном перепаде давления  $\Delta p = 8L/Re$ , максимальная

скорость стремится к 1 в случае незначительных капиллярных сил. Скорость острия мениска показана на рис. 1.10: начало физического процесса характеризуется коротким периодом, за время которого характеристики течения в капилляре достигают определенного постоянного значения, которое остается неизменным до тех пор, пока мениск остается внутри трубки.

Из рис. 1.10 также видно, что для более высоких чисел Маха, когда влияние поверхностного натяжения слабо, профиль скорости лишь немного отличается от классического профиля Пуазейля. Для этих параметров чем меньше значение числа Рейнольдса, тем ближе скорость кончика мениска (соответствующая максимальной скорости потока) приближается к 1 и, следовательно, тем ближе профиль течения к классическому решению Пуазейля. Зависимость от числа Рейнольдса становится более выраженной при меньших числах Маха. При очень низких числах Маха, когда наблюдается поршневое вытеснение, скорость конца мениска становится значительно ниже 1, и зависимость от числа Рейнольдса становится очень слабой.

На рисунке 1.11 показано изменение длины мениска (границы раздела всей системы) со временем. При более высоких числах Маха наблюдается пальцеобразное вытеснение, при этом мениск постоянно растягивается, и его длина линейно растет. При очень низких числах Маха длина мениска быстро выходит на постоянное значение. Растяжение границы раздела зависит от числа Рейнольдса, причем растяжение минимально при более высоком числе  $Re$ .

На рис. 1.12 показан профиль скорости ( $v_x(y)$ ) на уровне конца мениска и на некотором расстоянии от него (этот профиль взят около выхода, при  $x = 5.5$ , хотя профиль скорости остается почти постоянным вдоль капилляра, за исключением очень узкой области вблизи мениска). Видно, что вдали от мениска профиль скорости имеет параболическую форму с максимальным значением, меньшим 1, однако вблизи мениска становится непараболическим. Наибольшие различия наблюдаются при меньших значениях числа Маха, когда скорость почти постоянна в объеме с двумя тонкими пограничными слоями, образующимися у стенок капилляра. Трудности с разрешением этих тонких пограничных слоев объясняют

более медленную численную сходимость результатов для более низких чисел Маха.

Скорость мениска может быть рассчитана на основе классического уравнения Уошберна [65]:

$$V_{tip} = 1 - \frac{\text{Re}}{8} \left( -\frac{\partial p}{\partial x} \right) = \frac{\text{Re}}{8} \frac{(p_1 - p_2) - p_c}{L} = 1 - \frac{\text{Re}}{8L} p_c. \quad (1.33)$$

Таким образом, течение в трубке замедляется капиллярными силами, и чем выше значение капиллярного давления, тем больше скорость конца мениска отличается от 1. На рисунке 1.13 показан профиль давления вдоль оси капилляра. Вне мениска давление линейно падает, но вблизи мениска наблюдается скачок давления, что соответствует капиллярному давлению (как и ожидалось, давление больше на вогнутой стороне), которое зависит от числа Маха. Причем для большего капиллярного давления (меньших чисел Маха) наблюдается большее отличие течения от классического течения Пуазейля.

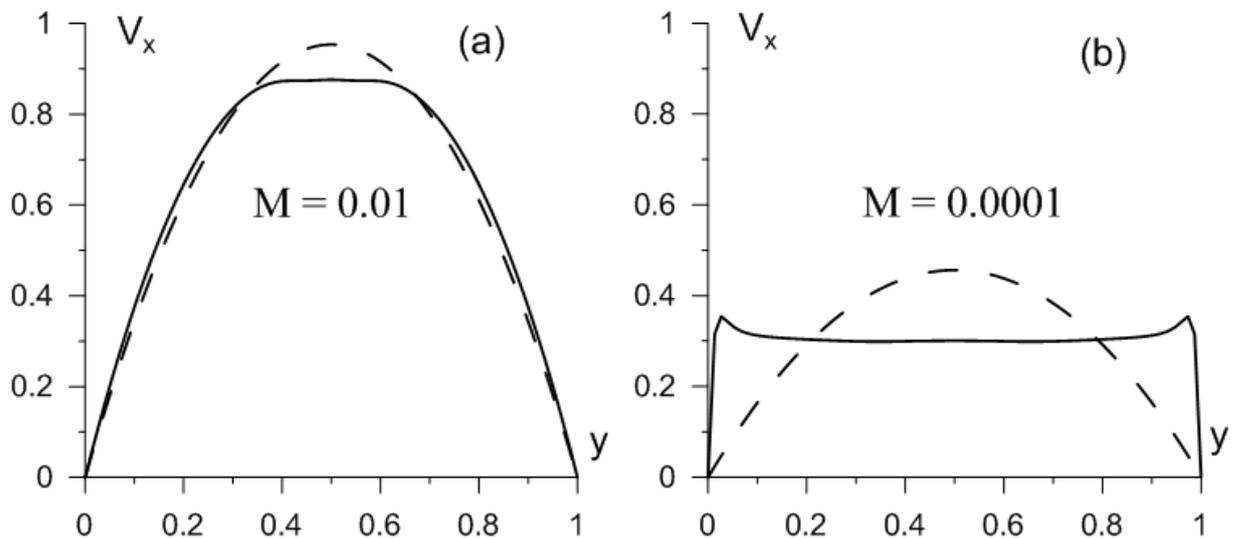


Рисунок 1.12. Распределение скорости течения поперек капилляра в момент времени  $t = 3$ . Сплошные линии – скорость вблизи мениска, штриховые линии – скорость вблизи выхода (профиль Пуазейля). Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Re = 10^4$ .

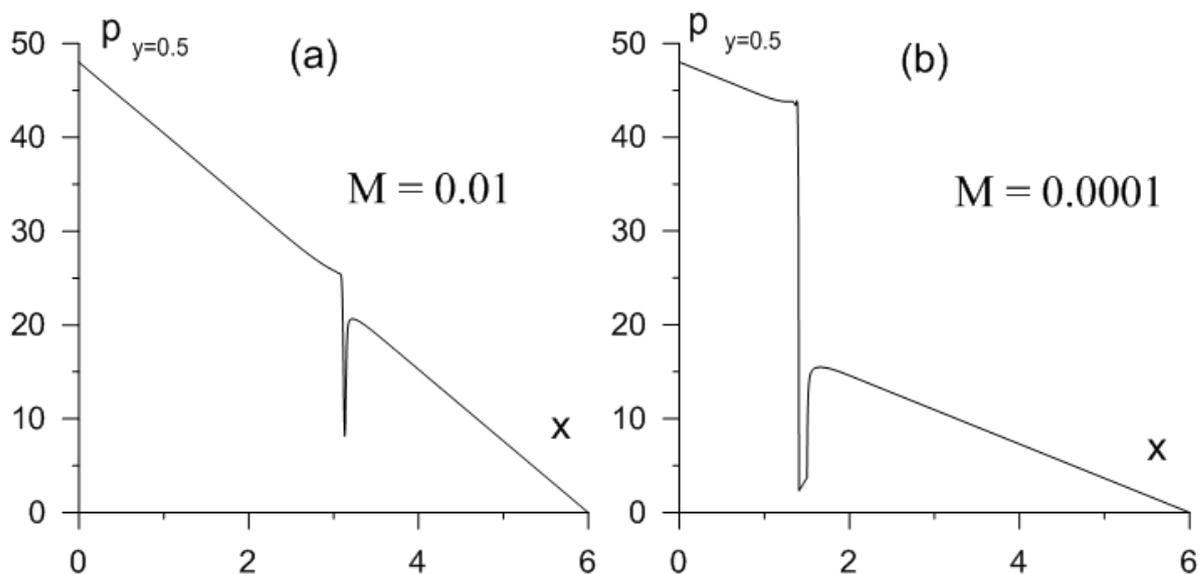


Рисунок 1.13. Распределение давление вдоль оси,  $t = 3$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

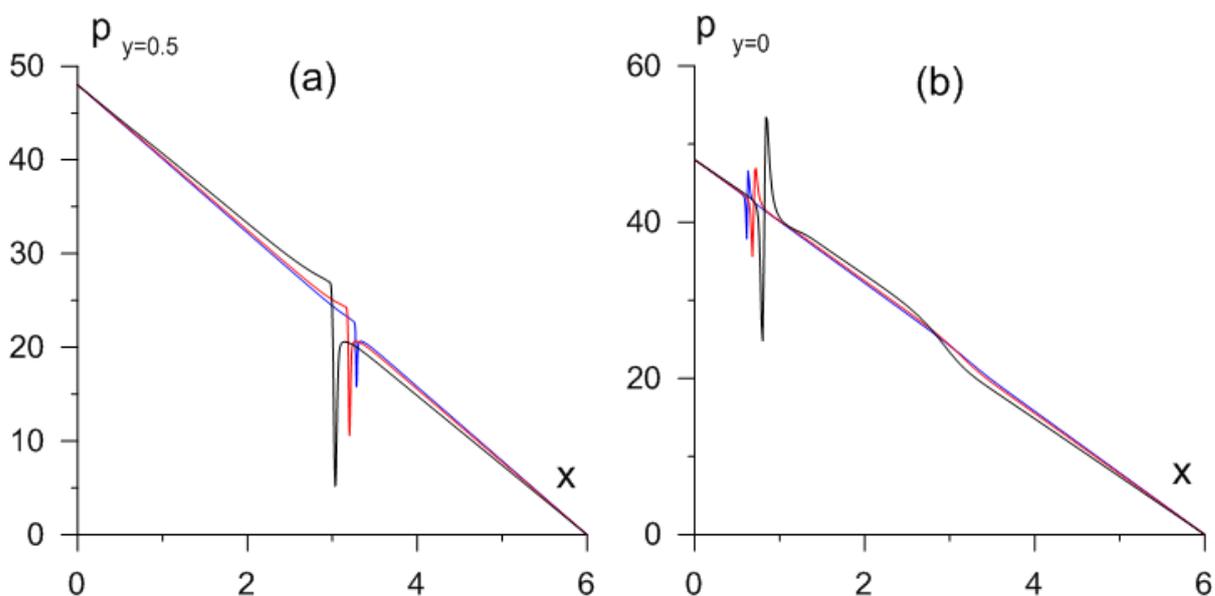


Рисунок 1.14. Распределение давления вдоль оси (a) и вдоль нижней стенки (b),  $t = 3$ . Черные линии –  $Cn = 8 \cdot 10^{-4}$ , красные линии –  $Cn = 2 \cdot 10^{-4}$ , синие линии –  $Cn = 5 \cdot 10^{-5}$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Pe = 10^4$ ,  $M = 0.01$ .

Отметим, что значение капиллярного давления и скорость конца мениска хорошо согласуются с уравнением Уошберна (1.33): из рис. 1.13 капиллярное давление  $p_c \approx 3.2$  и  $28$  для  $M = 10^{-2}$  и  $M = 10^{-4}$  соответственно, а формула Уошберна дает скорости мениска  $0.93$  и  $0.42$ , что близко к значениям  $0.87$  и  $0.32$  из рис. 1.12.

Профили давления имеют острый отрицательный пик в переходной зоне, разделяющей две жидкости. На рис. 1.13 (b) пик срезан для более отчетливого изображения. Мы считаем этот пик артефактом модели фазового поля. Это может быть связано с тем, что модель фазового поля предсказывает, что профиль равновесной концентрации на границе раздела определяется функцией гиперболического тангенса [47], что является модельным предположением, а не реальным профилем концентрации. Конкретная форма профиля давления внутри межфазной границы не является существенной (и не может быть подтверждена каким-либо экспериментальными исследованиями), но гораздо более важными являются уровни давления по сторонам границы раздела, которые являются измеримыми и правильно предсказываются моделью фазового поля. Величина этого пика зависит от чисел Маха и Кана. Например, на рис. 1.14 показаны распределения давления для трех значений числа Кана. Видно, что величина пика становится меньше, когда число Кана стремится к нулю. Физически правильное поле давления, которое можно было бы получить в пределе нулевой толщины границы раздела, по-видимому, не имело бы пика. Подчеркнем, что вне переходной зоны результаты демонстрируют корректное поведение. Жакмин в работе [79] показал, что химический потенциал внутри контактной линии также имеет сингулярное поведение (и это также наблюдается в наших расчетах).

На рис. 1.15 представлена зависимость коэффициента поверхностного натяжения от времени. Изменение данного коэффициента связано с растяжением и утончением границы раздела. Для низких чисел Маха, когда форма мениска стабилизируется, коэффициент поверхностного натяжения в конечном итоге достигает постоянного значения. Данный коэффициент рассчитывается из поля концентрации и определяется выражением (1.34).

$$\sigma = \frac{Cn}{L} \int_V \left( \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right)^2 \right) dV. \quad (1.34)$$

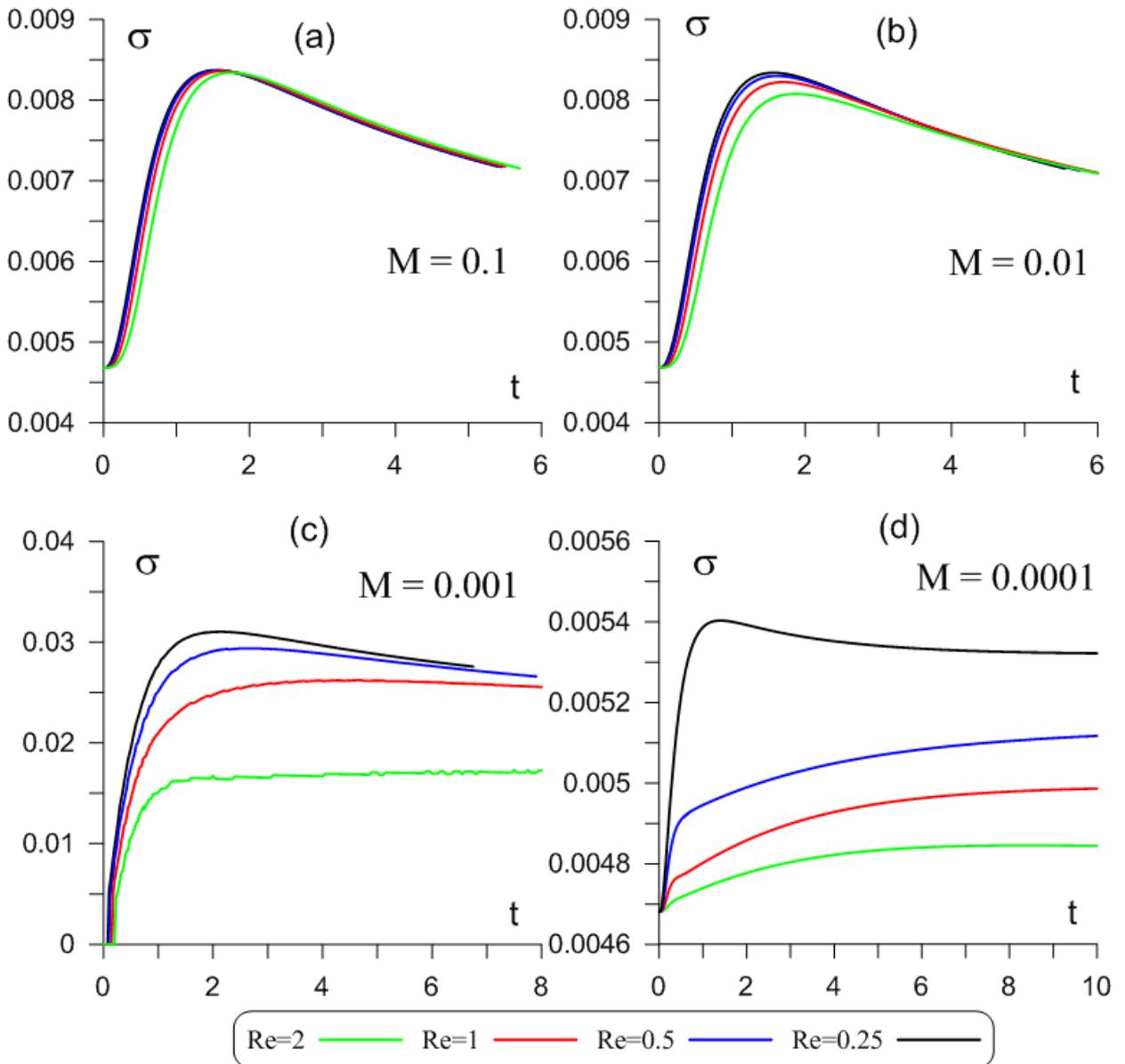


Рисунок 1.15. Зависимость коэффициента поверхностного натяжения от времени для различных чисел Маха и Рейнольдса. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

В случае, когда мениск не является сильно вытянутым, можно сопоставить значение капиллярного давления, полученное численно, с капиллярным давлением, определяемым законом Лапласа:  $p_L = \sigma M^{-1} r^{-1}$ . Здесь  $r$  – радиус кривизны, который можно определить либо через динамический угол смачивания  $r = R/\cos(\theta)$ ,  $R = 1/2$  – радиус капилляра; либо из геометрических соображений, используя формулы для сегмента круга, где хорда – диаметр капилляра (равный 1), а длина сегмента круга – длина поверхности раздела. Воспользуемся вторым

способом. Для  $M = 0.0001$  после установления стационарного течения коэффициент поверхностного натяжения  $\sigma = 0.0049$ , длина границы раздела  $L_\delta = 1.012$ , что дает значение радиуса кривизны  $r = 1.89$ . Тогда капиллярное давление по формуле Лапласа  $p_L = 26$ , что близко к значению капиллярного давления  $p_C = 28$ , полученному численно.

На рис. 1.16 показаны значения величины  $m$  – массовой доля первоначально заполняющей капилляр жидкости, которая остается на стенках капилляра. Следуя определению в работе [73], запишем:

$$m = 1 - Q/V_{tip}, \quad (1.35)$$

где  $Q$  – расход жидкости, который рассчитывается либо на входе, либо на выходе капилляра:

$$Q = \int_y (v_x)_{x=0,L} dy. \quad (1.36)$$

Для более высоких чисел Маха, когда капиллярные эффекты незначительны, профиль течения близок к профилю Пуазейля, для которого  $Q = (2/3)V_{tip}$ , следовательно,  $m = 1/3$ . Это значение отличается от асимптотического значения  $1/2$ , о котором сообщалось в различных исследованиях [67,71,72], что объясняется исключительно тем фактом, что нами рассматривается 2D-геометрия, в то время как все другие исследования в эксперименте имеют дело с 3D случаем. Легко показать, что для осесимметричного течения Пуазейля в трубе с круглым поперечным сечением массовая доля, определяемая формулой (1.35),  $m$  равной  $1/2$ .

При исследовании динамики вытеснения в капилляре во многих работах рассматривается такой параметр, как капиллярное число  $Ca = M/Re$ . На рис. 1.16 представлены данные, полученные для пальцеобразного и поршневого вытеснения, которые отмечены кружками и крестиками соответственно. Зависимость, предсказываемая нашим численным моделированием, хорошо согласуется с другими теоретическими и экспериментальными работами [67,71,72],

с той лишь разницей, что асимптотическое значение  $m$  отличается для 2D и 3D геометрий.

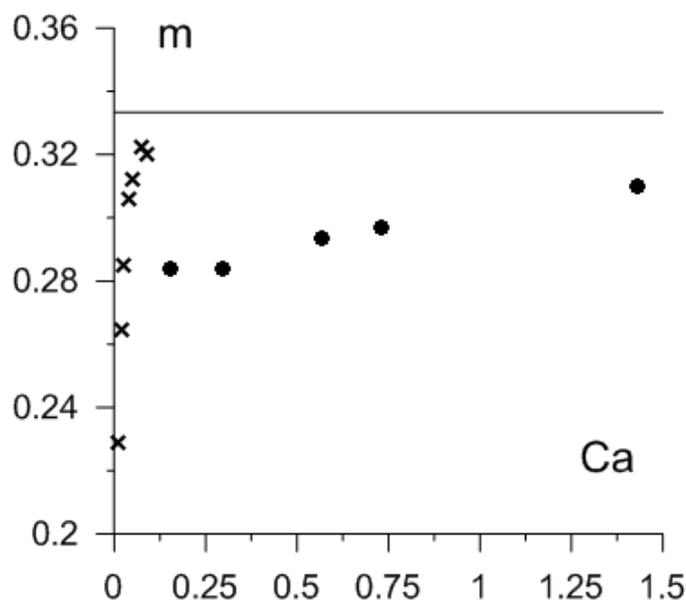


Рисунок 1.16. Массовая доля жидкости, первоначально заполняющей капилляр, которая остается на стенках капилляра, в зависимости от капиллярного числа. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Re = 10^4$ . Круги соответствуют пальцеобразному вытеснению, кресты – поршневому.

Очевидная трудность прямого численного моделирования вытеснения одной жидкости другой заключается в том, что мениск может изменять свою форму. Форма мениска влияет на величину капиллярного давления, которое в свою очередь влияет на течение в капилляре. Эта проблема кажется по своей сути нестационарной: даже при допущении, что профиль течения у мениска является параболическим, амплитуда для этого профиля остается неопределенной, поскольку она определяется переменным капиллярным давлением. Это является основной причиной того, что необходимо решать задачу в формулировке скорость-давление, имея возможность устанавливать уровни давления на входе или выходе капилляра, а не профили скорости (функции тока).

Моделирование двухфазных течений в капилляре также осложняется необходимостью воспроизвести движение контактной линии. В имеющихся в

литературе исследованиях авторы либо пытаются избежать этой проблемы, предполагая, что стенка полностью смачивается одной из жидкостей [69-71], либо используют модель скольжения, в которой вводится дополнительный феноменологический параметр, длина скольжения (см., например, [96]).

В рамках теории фазового поля положение границы раздела (в том числе движение контактной линии) отслеживается на основе поля концентрации, которое определяется уравнением диффузии (1.25). Движение контактной линии в конечном итоге определяется диффузией в тонком пристеночном слое. Диффузионный перенос определяется числом Пекле, и, таким образом, данный параметр определяет скорость скольжения контактной линии (см., рис. 1.17). Моделирование при различных значениях числа Пекле в диапазоне  $Pe=10^3 \dots 10^5$  показало, что характеристики течения слабо зависят от данного параметра, и течение не испытывает каких-либо качественных изменений.

### **Несмешивающиеся жидкости, $A > -0.5$**

Вышеописанные результаты получены для капилляра с длиной  $L = 6$ , что, тем не менее, является достаточным для моделирования вытеснения несмешивающихся жидкостей; расчеты в более длинном капилляре с  $L = 40$  подтверждают представленные выше исследования (см., рис. 1.18). При рассмотрении вытеснения смешивающихся жидкостей диффузия играет более заметную роль, в этом случае рассматривать короткий капилляр уже не представляется возможным, поскольку диффузия – процесс медленный, и эффекты смешения становятся заметны лишь на длительных временах, что можно наблюдать лишь в достаточно длинном капилляре. Для данных расчетов длина капилляра  $L$  была выбрана равной 40, и значение числа  $Pe = 300 \dots 1000$  (при больших числах Пекле процесс диффузии развивается медленнее, в этом случае необходимо рассматривать систему на больших временах, т.е. в более длинном капилляре). При решении задачи в длинном капилляре со смешивающимися компонентами потребовалось более подробное пространственное разрешение: 600 узлов на

единицу длины (в предыдущей задаче:  $1/300$ ). Расчеты проводились на графических процессорах NVidia Tesla V100, при этом один расчет занимал примерно 7-10 дней (подробно вычисления на графических процессорах представлено в приложении А).

Параметром, который задает степень смешения (равновесные значения концентрации), является коэффициент  $A$  в выражении для свободной энергии  $f_0 = AC^2 + C^4$ . Коэффициент  $A$  прямо пропорционален температуре системы и определяет положение на фазовой диаграмме. Значение  $A = -0.5$  отвечает полностью несмешивающимся жидкостям, частично смешивающиеся системы соответствуют  $-0.5 < A < 0$ , а при  $A \geq 0$  в состоянии термодинамического равновесия система является гомогенной.

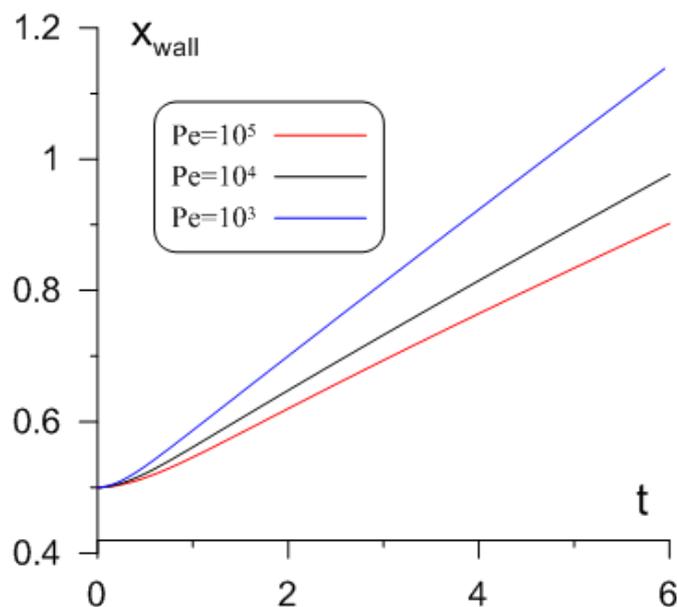


Рисунок 1.17. Положение границы раздела (контактной линии) вблизи твердой стенки в зависимости от времени для разных чисел Пекле. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 10^{-2}$ .

Характерные поля концентрации смешивающихся жидкостей при малом  $M$  показаны на рис. 1.19. для  $A = -0.1$  и  $0.1$ , соответствующих случаям ниже и выше критической точки. В обоих случаях наблюдается пальцеобразное вытеснение. Однако для  $A = -0.1$ , как можно заметить, в начале процесса вытеснения форма мениска слегка напоминает пузырь, а затем сменяется на пальцеобразную. Эти два

режима соответствуют двум обсуждавшимся ранее типам процесса вытеснения: поршневому и пальцеобразному (см, рис. 1.18). Это означает, что вначале (мениск в виде «пузыря») наблюдается высокое капиллярное давление («поршневой» режим), значение которого со временем падает, и система переходит к пальцеобразному типу вытеснения. Данное наблюдение показывает, что эффективный коэффициент поверхностного натяжения, связанный с смешивающейся границей раздела, медленно уменьшается со временем.

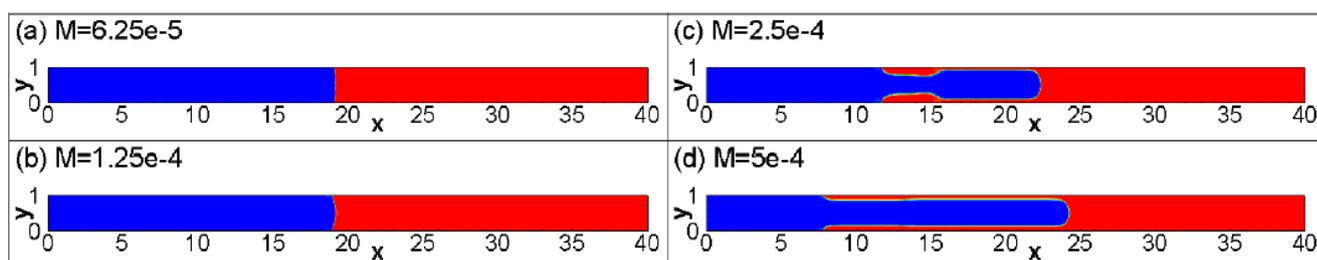


Рисунок 1.18. Поле концентрации для вытеснения несмешивающихся жидкостей при разных числах Маха, момент времени  $t = 31$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $Pe = 300$ .

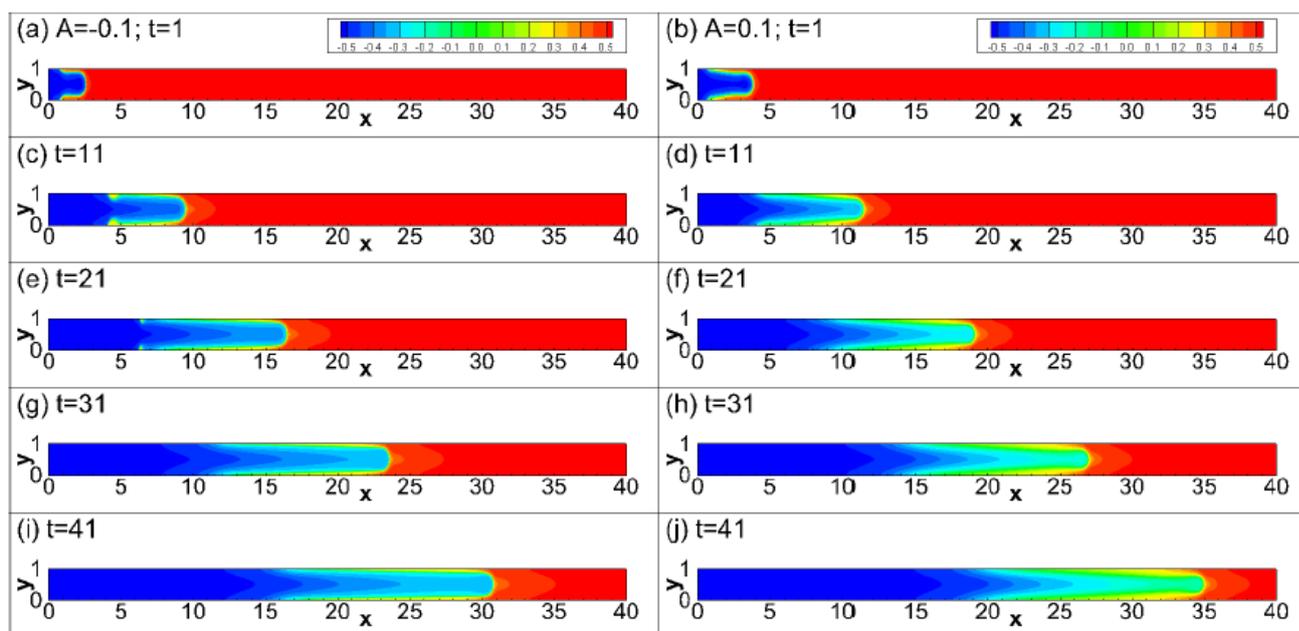


Рисунок 1.19. Поле концентрации для вытеснения смешивающихся жидкостей в разные моменты времени. Параметры:  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 6.25 \cdot 10^{-5}$ ,  $Pe = 300$ ,  $A = -0.1$  (a,c,e,g,i) и  $A = 0.1$  (b,d,f,h,j).

На рис. 1.20 показаны профили концентрации (a, b, c) и давления (d, e, f) вдоль оси капилляра при  $A = -0.1, 0.1, 0.3$ . На рис.1.21 представлены изменения во времени интегральных характеристик: расхода (a), капиллярного давления (b), коэффициента поверхностного натяжения (c), длины границы раздела (d), толщины границы раздела (e) и средние концентрации двух фаз (f).

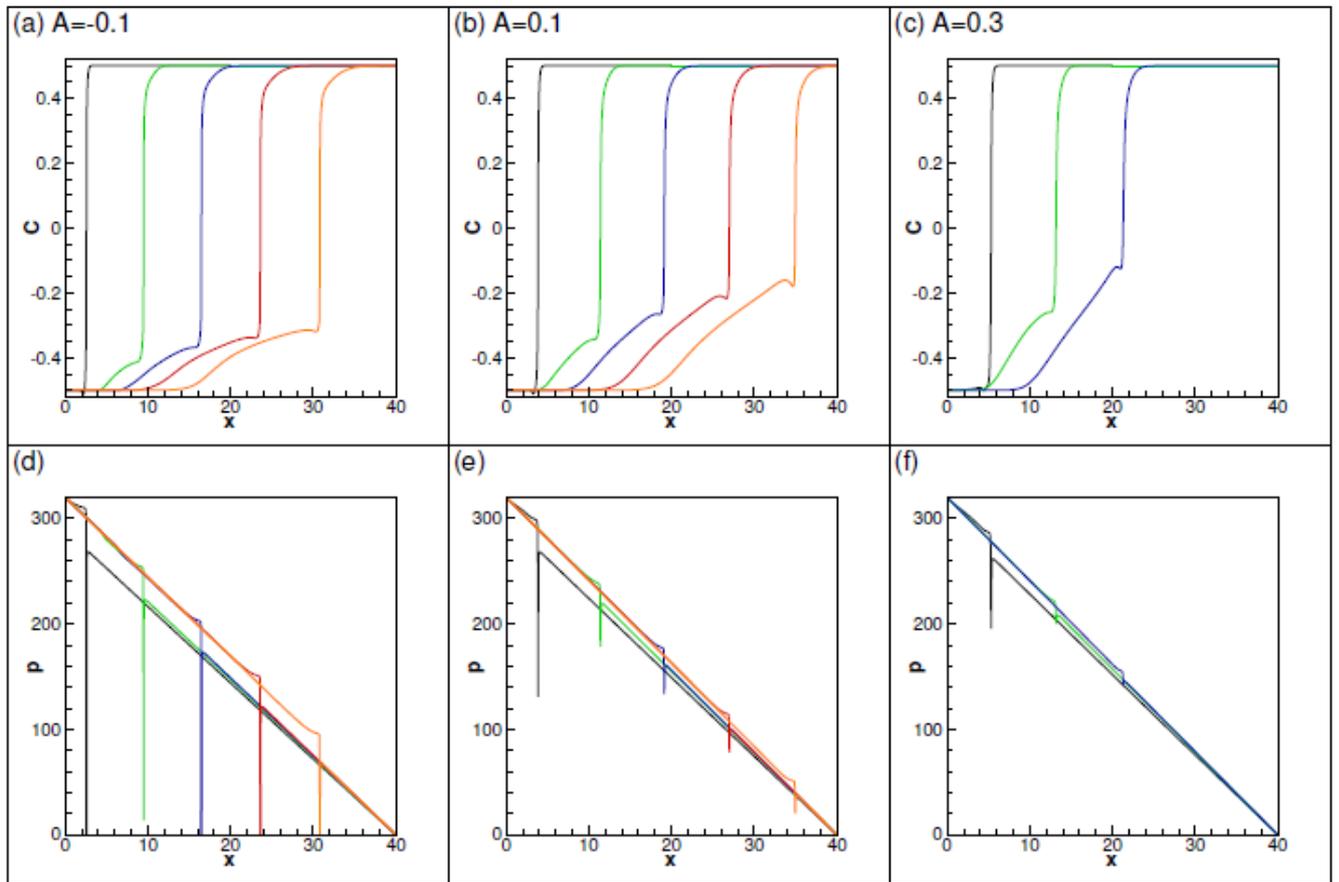


Рисунок 1.20. Вытеснение смешивающихся жидкостей. Профили концентрации (a-c) и давления (d-f) вдоль оси капилляра для разных моментов времени с шагом в 10 ед., начиная с  $t = 1$ . Параметры:  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 6.25 \cdot 10^{-5}$ ,  $Pe = 300$ , и трех разных  $A$ :  $A = -0.1$  (a,d),  $A = 0.1$  (b, e),  $A = 0.3$  (c,f).

Процесс диффузии преимущественно происходит в вытесняющую фазу (которая закачивается с левого конца). При малых  $A$  (более низкой температуре системы), поршневое вытеснение все еще может наблюдаться; при этом расход, капиллярное давление, форма мениска не зависят от времени. При больших  $A$  вытеснение всегда происходит с образованием пальцеобразного профиля в

середине капилляра, и все интегральные характеристики претерпевают сложные временные изменения.

Следует заметить, что в случае плохо смешивающихся жидкостей вытеснение может происходить с более медленной скоростью, чем в случае несмешивающихся жидкостей (см., например, рис. 1.21 (a) – кривые при  $A = -0.3$  и  $A = -0.5$ ). Поверхностное натяжение в случае смешивающейся границы раздела всегда ниже (см., рис. 1.21 (c)), и мениск имеет более острую форму с большей кривизной поверхности, что приводит к несколько большему капиллярному давлению (рис. 1.21 (b)) и, как следствие, к меньшей скорости течения. Дальнейшее уменьшение  $A$  приводит к еще более сильному уменьшению поверхностного натяжения, эффект от уменьшения коэффициента поверхностного натяжения превалирует над эффектом заострения мениска (увеличения кривизны), и, таким образом, капиллярное давление уменьшается и скорость течения и расход увеличиваются.

На рис. 1.21 (f) представлены зависимости средней концентрации в каждой из фаз от времени. Средняя концентрация каждой из фаз считается по следующей формуле:

$$C_{1,2} = \frac{1}{V_{1,2}} \int_V C dV,$$

где  $V_1, V_2$  – объем первой и второй фаз соответственно. Под концентрацией фазы 1,  $C_1$ , мы понимаем концентрацию в той области (объем  $V_1$ ), где  $C > 0$ ; соответственно концентрация фазы 2,  $C_2$  – концентрация в области (объем  $V_2$ ), где  $C < 0$ . Для вытеснения несмешивающихся жидкостей значения средней концентрации остаются постоянными, равными  $\pm 1/2$ . При вытеснении смешивающихся жидкостей диффузия преимущественно происходит в вытесняющую фазу. Изменение средней концентрации вытесняемой фракции становится сильнее при приближении к моменту достижения мениском конца капилляра.

На рис. 1.20 (d-f) изображены профили давления по осевой линии, что является одним из ключевых результатов нашего моделирования. Видно, что

капиллярное давление постепенно уменьшается по величине (что отражается в уменьшении скачка давления по обе стороны от границы раздела). При достаточно высоком значении параметра  $A$  капиллярное давление в определенный момент становится несущественным, и течение становится однофазным (с переносом пассивной примеси). Данный результат подтверждается рисунком 1.21 (b).

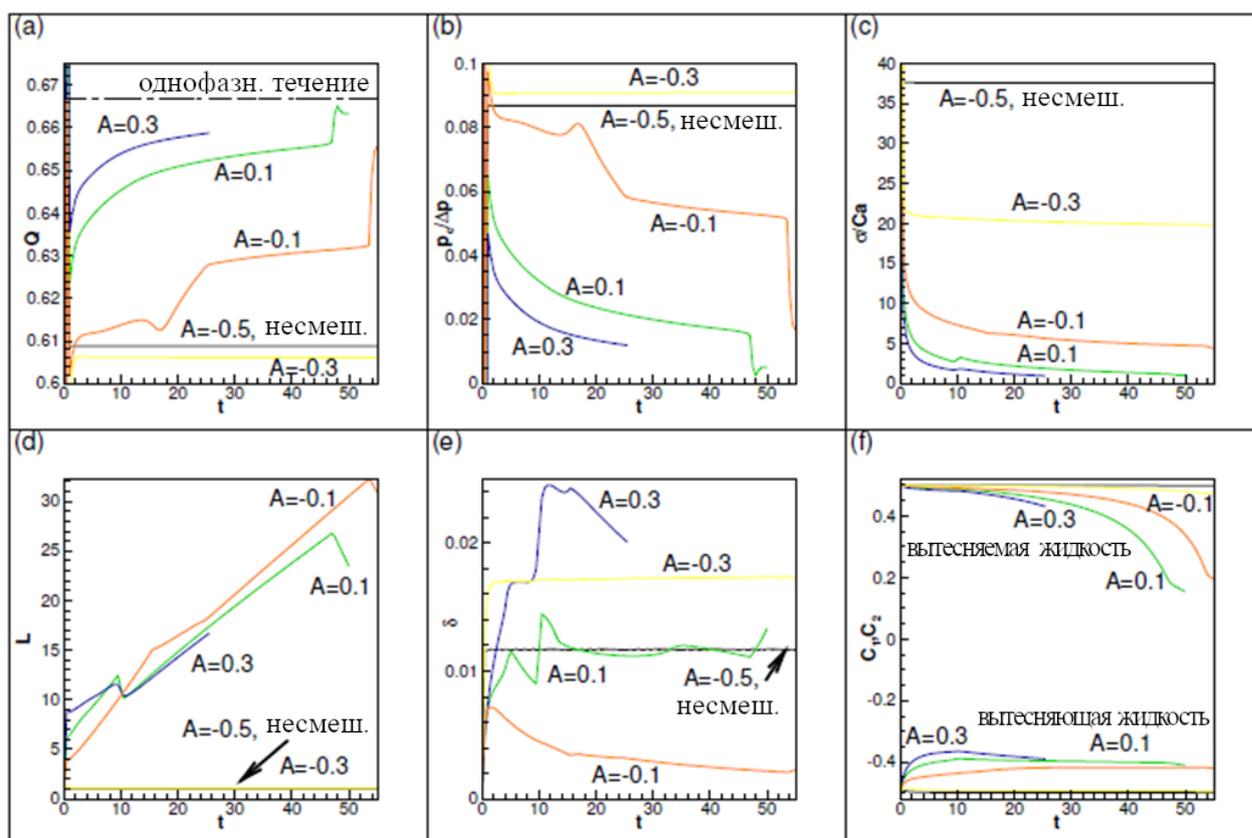


Рисунок 1.21. Вытеснение смешивающихся жидкостей. Зависимость от времени (a) расхода, (b) отношения капиллярного давления к перепаду давлений между концами, (c) коэффициента поверхностного натяжения, (d) длины и (e) толщины границы раздела, (f) средних концентраций вытесняющей жидкости и вытесняемой жидкости. Параметры:  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 6.25 \cdot 10^{-5}$ ,  $Pe = 300$ .

Исследовалась также динамика вытеснения смешивающихся жидкостей, когда система находится выше критической точки (рис. 1.22). Найдено, что при  $A = 0.1$  капиллярное давление убывает по закону  $0.086 t^{-0.43}$ , при  $A = 0.3$  по закону  $0.06 t^{-0.5}$ , а при  $A = 0.5$  по закону  $0.046 t^{-0.53}$ . Во всех случаях закон близок к  $t^{-0.5}$ , что

характерно для диффузионных процессов. Наблюдаемые небольшие различия можно объяснить влиянием течения, что, в частности, проявляется в различии площадей контакта фаз при разных  $A$ .

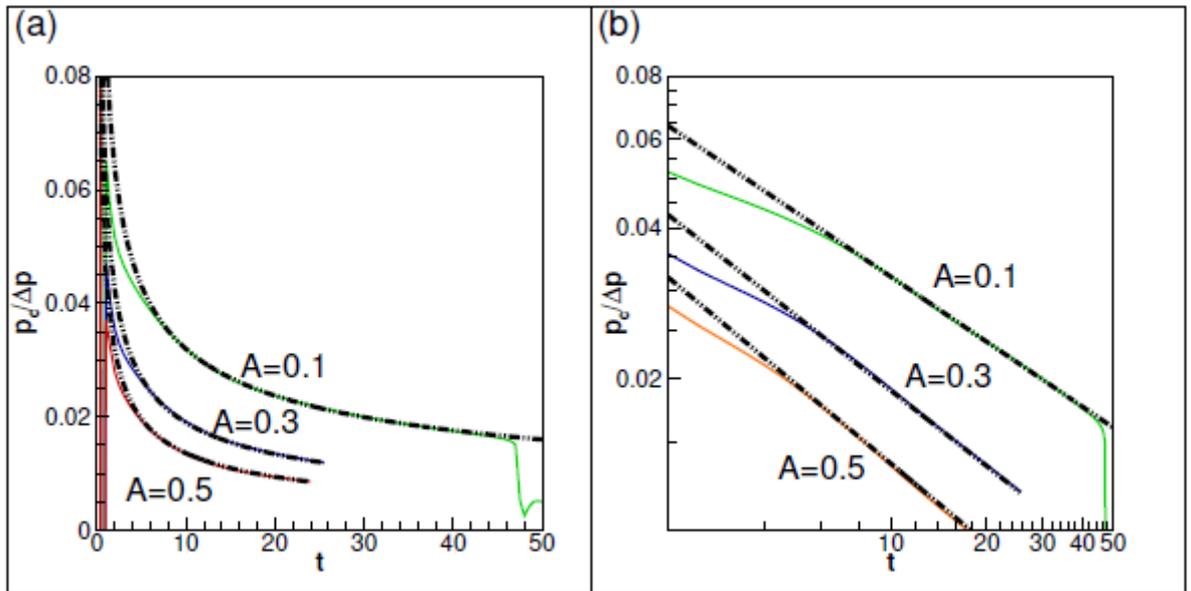


Рисунок 1.22. Вытеснение смешивающихся жидкостей. Изменение со временем капиллярного давления в нормальном (а) и логарифмическом масштабе (b) для трех  $A$  выше критической. Параметры:  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 6.25 \cdot 10^{-5}$ ,  $Pe = 300$ . Пунктирные линии показывают временные законы:  $0.086 t^{-0.43}$ ,  $0.06 t^{-0.5}$ ,  $0.046 t^{-0.53}$ .

## Моделирование в сети капилляров

Изучение процесса вытеснения в капилляре важно для рассмотрения динамики вытеснения в пористой среде. Сеть соединенных между собой капилляров это вариант представления пористой среды на микромасштабе. На рис. 1.23 (а) изображена рассматриваемая нами геометрия области. Шаг сетки был выбран равным  $1/400$ . Как и в случае одиночного капилляра, полость первоначально заполнена одной жидкостью, другая жидкость вытесняет первую путем покачивания под давлением с левой стороны области, правая граница области считается открытой. Для решения задачи использовались уравнения

теории фазового поля (1.23)-(1.26) и тот же, что и раньше, численный алгоритм – метод проекций (дробных шагов). Граничные условия для «входной» стороны матрицы имеют следующий вид:

$$x = 0: \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} = 0, p = p_1, \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, C = -0.5. \quad (1.37)$$

Для «выходной» стороны:

$$x = L_x: \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} = 0, p = p_2 = 0, \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (1.38)$$

Интенсивность течения определяется перепадом давления  $\Delta p = p_1$ , где  $p_1 = 8L_x/Re$  выбрано так же, как и для одиночного капилляра: при таком значении перепада давления максимальное значение скорости нормируется на единицу в пределе установления течения Пуазейля.

На твердых стенках граничные условия записываются в виде:

$$\mathbf{v} = 0, \frac{\partial p}{\partial n} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 v_n}{\partial n^2}, \frac{\partial \mu}{\partial n} = 0, \frac{\partial C}{\partial n} = 0, \quad (1.39)$$

где  $n$  – координата, нормальная к стенке; в угловых точках вычисляется среднее от нормальных производных по двум направлениям.

На рис. 1.23 (b) представлена схема единичного элемента матрицы: масштабирование всей матрицы задается геометрией такого элемента ( $n_x, n_y$  – число узлов), и их количеством. Цифры на рис. 1.23 (b) – внутренние детали численной программы, они отвечают типу узла сетки (входная стенка, твердая верхняя, угловая и т.д.), вместе с дополнительными массивами для хранения данных о расположении соседних ячеек. Данный подход реализует систему управления памятью в вычислительной программе. Более подробно описание работы расчетного алгоритма для сети капилляров с использованием графических процессоров и технологии CUDA представлена в статье [2] и в приложении А к текущей диссертации.

При моделировании задачи о вытеснении в сети капилляров для анализа течения акцент делается на рассмотрении поля давления и исследовании

следующих характеристик: насыщенность пористой матрицы  $s = 1/2 - \langle C \rangle$  (где  $\langle C \rangle = \int_V C dV$ ); расходы жидкости на выходе  $Q_1, Q_2$ , отнесенные к ширине матрицы/поперечному сечению  $L_y$  (для одиночного капилляра  $L_y = 1$ ), индексы 1, 2 соответственно обозначают однофазное и двухфазное течения.

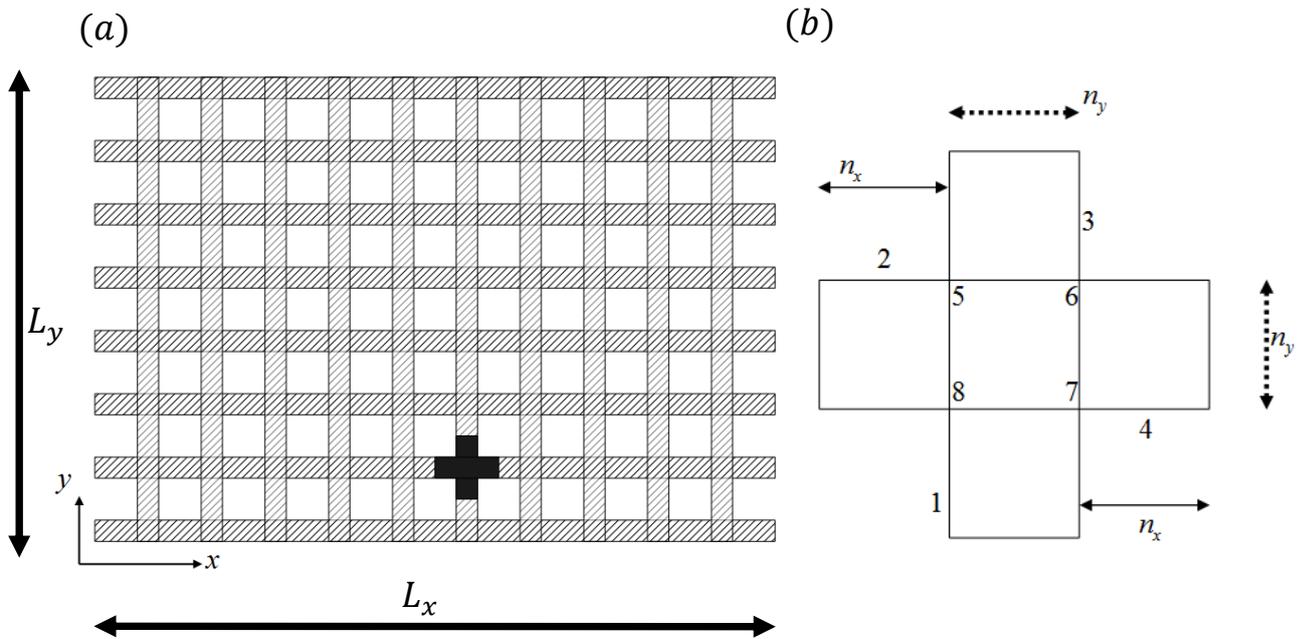


Рисунок 1.23. (а) Геометрия сети капилляров, заштрихованная область – пространство внутри капилляров, белые области – скелет пористой среды; (б) диаграмма единичного элемента матрицы.

В рамках теории Дарси вводится параметр пористой среды  $k$  – проницаемость, который является коэффициентом пропорциональности в линейном законе связи расхода и градиента давления

$$Q_1 = -kRe\nabla p. \quad (1.40)$$

Для сети капилляров выражение для расхода жидкости, соотнесенного на ширину выходного сечения, учитывая перепад давления  $\Delta p = 8L_x/Re$ , можно записать в виде:

$$Q_1 = L_y k Re \frac{\Delta p}{L_x} = 8kL_y. \quad (1.41)$$

Здесь  $L_x$  – длина всей сети капилляров,  $L_y$  – ее ширина / поперечный размер (см. рисунок 1.23). Отсюда следует  $k = Q_1/(8L_y)$ .

Сначала были проведены расчеты для однофазного течения с целью определения асимптотического поведения при увеличении числа элементов матрицы.

В таблице 1 представлены значения среднего расхода и проницаемости, полученные численно, для различного числа элементов матрицы. Как видно, при увеличении числа элементов, значение проницаемости сходится к  $k \approx 0.0350$ ; размерном виде  $k = 0.035h^2 \sim 10^{-10} \text{ м}^2$  (при  $h \sim 10^{-4} \text{ м}$ ), что характерно для пористых горных пород.

Таблица 1. Расход и проницаемость для однофазного течения в зависимости от размеров матрицы. $Re = 1, Pe = 10^4$ .						
матрица	1×1	2×2	3×3	4×4	5×5	6×6
$Q_1/L_y$	2/3	0.359	0.314	0.296	0.286	0.280
$k$	0.0834	0.0449	0.0393	0.0370	0.0358	0.0350

Для двухфазного течения в одиночном капилляре расход определялся уравнением Уошборна

$$Q_2 = \frac{Re}{12L_x} (p_1 - p_2 - p_c) = \frac{2}{3} - \frac{Re}{12L_x} p_c. \quad (1.42)$$

Как показывают расчеты, представленные далее, формула (1.42) может быть также применена к матрице капилляров. Используя уравнения (1.41) и (1.42), получаем выражением для оценки капиллярного давления:

$$p_c = \left(1 - \frac{Q_2}{Q_1}\right) (p_1 - p_2). \quad (1.43)$$

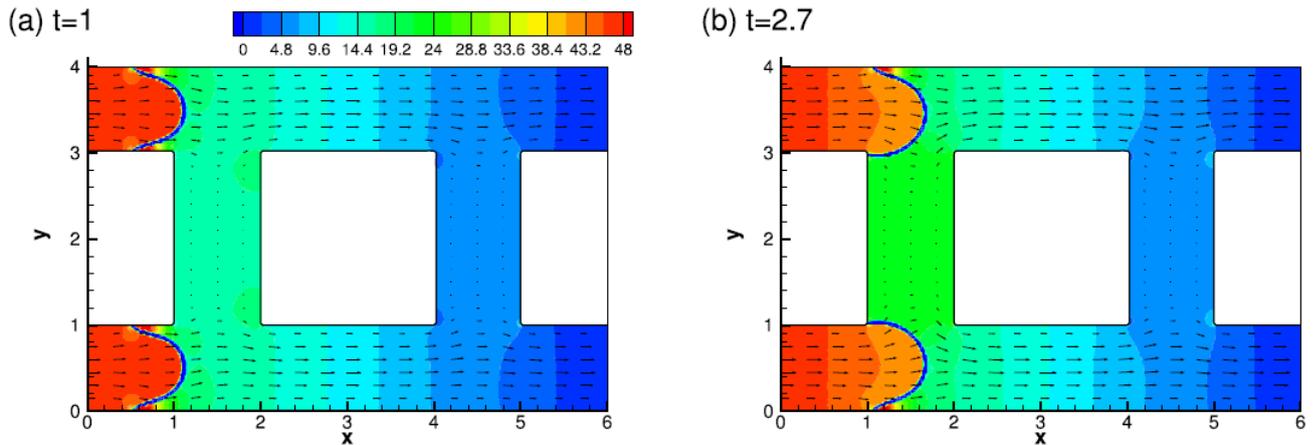


Рисунок 1.24. Поле давления для двух моментов времени в матрице  $2 \times 2$ ; стрелками показано поле скорости. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 2.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

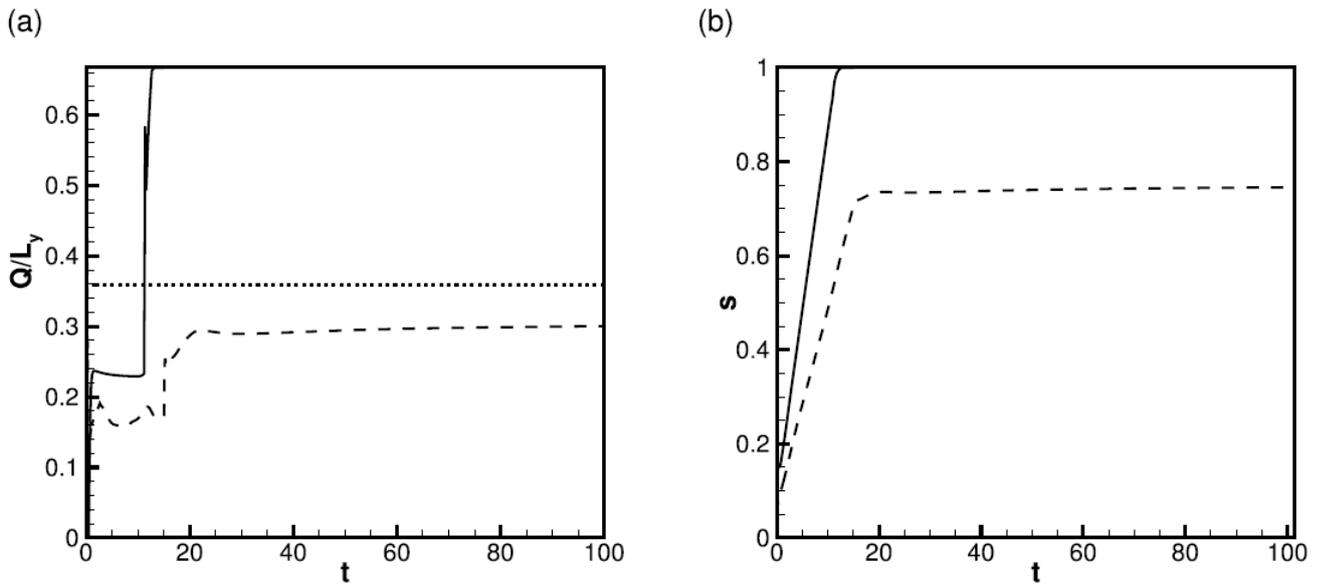


Рисунок 1.25. (a) Расход на ширину выходного сечения матрицы, (b) насыщенность среды: сплошная линия – одиночный капилляр, штриховая линия – матрица  $2 \times 2$ , пунктирная линия – матрица  $2 \times 2$ , однофазное течение. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 2.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

Обнаружено, что динамика вытеснения в сети капилляров аналогичная динамике вытеснения в одиночном капилляре. На рис. 1.24 схематически показано вытеснение в матрице  $2 \times 2$ , на рис. 1.25 представлены интегральные характеристики (расход и насыщенность) в зависимости от времени. Найдено, что

формула (1.43) дает хорошую оценку капиллярного давления для случая матрицы сети капилляров.

В то же время, по сравнению со случаем единичного капилляра возникает одно отличие. В одиночном капилляре в какой-то момент происходит полное вытеснение одной жидкости другой, после чего течение становится однофазным. Из рис. 1.25 (а) видно, что в случае двухфазного течения значение расхода жидкости не достигает уровня однофазного течения. Для одиночного капилляра после установления профиля течения Пуазейля профиль давления становится линейным вдоль трубы; в случае матрицы капилляров этого не происходит: профиль давления при этом имеет сложную нелинейную структуру, в особенности вблизи выходной стороны матрицы. (рис. 1.26).

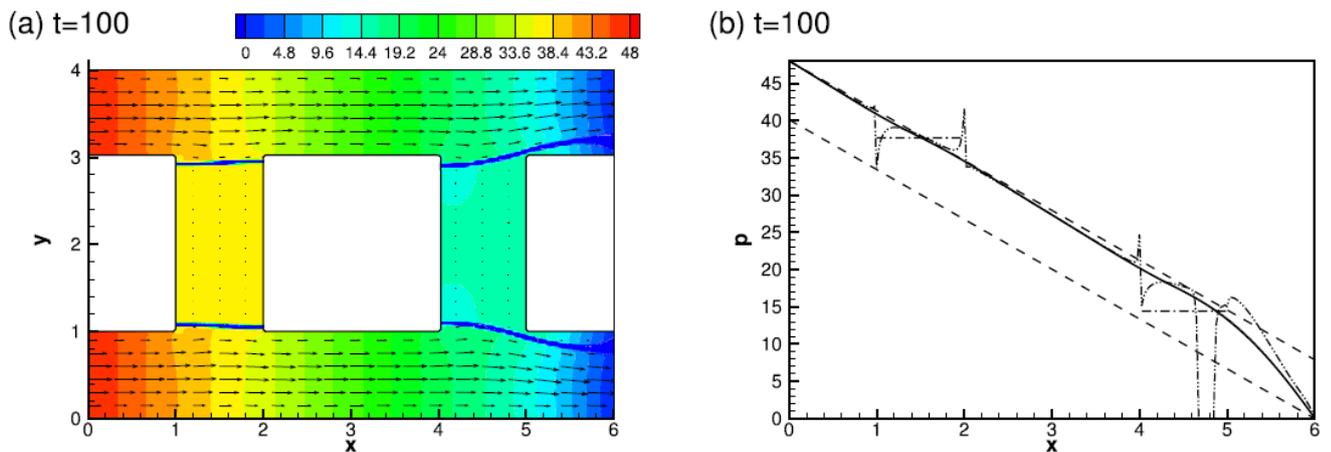


Рисунок 1.26. (а) Поле давления при  $t=100$  для матрицы  $2 \times 2$ ; стрелками показано поле скорости. (б) профиль давления посередине нижней трубки (сплошная линия), на верхней границе нижней трубки (штрихпунктирная с двумя точками), в середине матрицы (штрихпунктирная). Пунктирные линии соответствуют уровням давления  $p_1 - (p_1 - p_c)x/L_x$  и  $-(p_1 - p_c)(x - L_x)/L_x$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 2.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

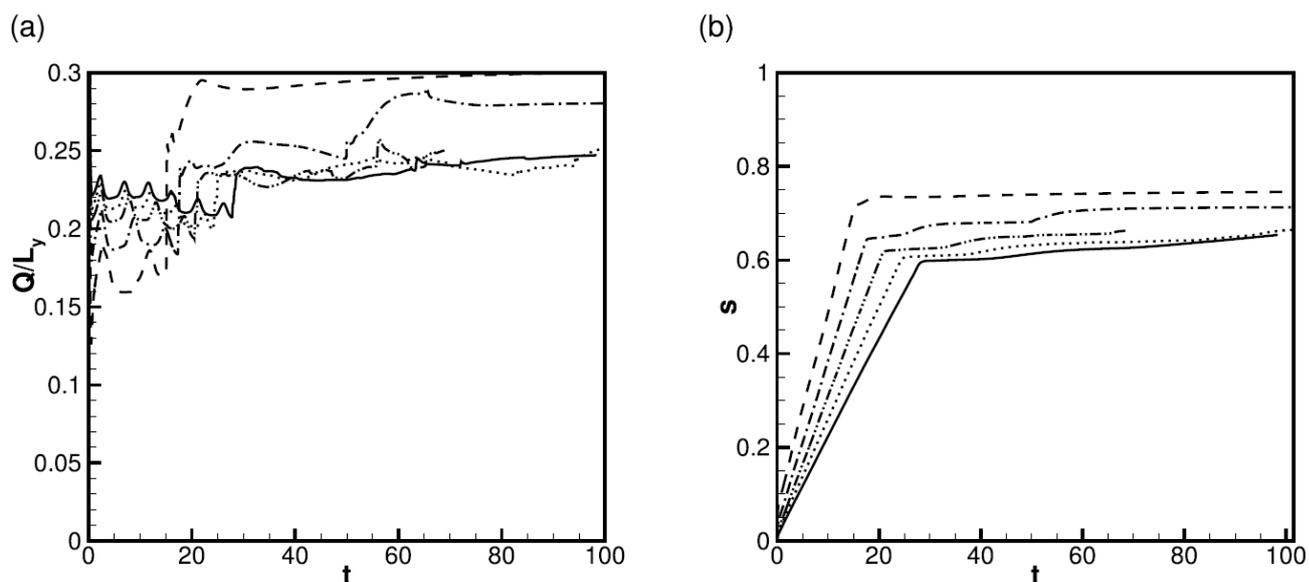


Рисунок 1.27. (a) Расход отнесенный к ширине выходного сечения матрицы, (b) насыщенность среды:  $2 \times 2$  (штриховая линия),  $3 \times 3$  (штрихпунктирная),  $4 \times 4$  (штрихпунктирная с двумя точками),  $5 \times 5$  (пунктирная),  $6 \times 6$  (сплошная). Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 10^{-4}$ ,  $Re = 1$ ,  $M = 2.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $Pe = 10^4$ .

Для больших матриц результат представлен на рис. 1.27. Качественно эволюция аналогичная тому, что и для матрицы  $2 \times 2$ : первый этап активного вытеснения сменяется стадией, на которой остается некоторое количество жидкости в застойных зонах. Так же как и для однофазных течений в матрице капилляров, уже на матрице  $6 \times 6$  достигается хорошая сходимость к некоторым предельным значениям.

#### 1.2.4 Выводы по разделу

Проведено прямое численное моделирование вытеснения одной жидкостью другой внутри капилляра. Рассмотрен широкий диапазон параметров, воспроизводящий сценарии пальцеобразного и поршневого вытеснений жидкости при прокачке под действием перепада давления.

Для моделирования гидродинамической эволюции двух несмешивающихся/смешивающихся жидкостей использована теория фазового поля. С помощью этого метода удалось воспроизвести все особенности вытеснения

жидкость-жидкость, предсказать временное изменение структуры поля скорости, формы границы раздела, капиллярного давления, связанного с мениском, и количества жидкости, остающейся на стенках капилляра. В частности, получен профиль давления искривлённого мениска, определяющий значения капиллярного давления, что было недоступно в других исследованиях, при этом процедура получения капиллярного давления является эффективной и нетрудоемкой.

Достоверность полученных данных подтверждена хорошим соответствием в предельных случаях с классическими результатами. Найдено: 1) скачок давления хорошо согласуется со значением капиллярного давления, получающегося с использованием классической формулы Лапласа и коэффициента поверхностного натяжения; 2) влияние капиллярного давления на движение жидкости по капилляру согласуется с классическим уравнением Уошборна.

Рассчитано динамически меняющееся капиллярное в капилляре с двумя смешивающимися жидкостями, показывающее не изученный ранее эффект неравновесного поверхностного натяжения. Найдено, что на первых стадиях капиллярное давление стремительно падает, а затем изменяется значительно медленнее. В частности, условия абсолютной смешиваемости двух жидкостей капиллярное давление изменяется по закону, близкому к  $t^{-0.5}$ .

Неравновесное капиллярное давление – эффект, который может оказывать значительное влияние на интенсивность течения. Понимание данного эффекта поможет улучшить управление динамики вытеснения многофазных течений.

Проведено моделирование вытеснения несмешивающихся жидкостей в матрице капилляров. Впервые был проведен расчет для достаточно больших матриц ( $10 \times 10$ ), чтобы характеристики течения сходились к некоторым предельным значениям (т.е. течение идентично при большем размере матрицы). Предложена формула для оценки капиллярного давления в матрице капилляров.

### 1.3 Неустойчивость Релея-Тейлора

#### 1.3.1 Обзор литературы

Неустойчивость Релея-Тейлора – неустойчивость границы раздела между двумя жидкостями разной плотности, возникающая при условии, что более плотная (тяжелая) жидкость находится поверх более легкой. В 1883 г. Релей [96] теоретически исследовал данную задачу в поле сил тяжести, в 1950 г. Тейлором [98] изучена схожая задача при условии, что система испытывает дополнительное ускорение в направлении перпендикулярном к границе раздела двух жидкостей. Уравнение Эйлера идеальной несжимаемой жидкости имеет аналитическое решение для задачи о неустойчивости Релея-Тейлора в рамках линейной теории устойчивости. Рассматривая малые возмущения в виде  $\sim \exp(\omega t + i(k_x x + k_y y))$ , получаем выражение для инкремента возмущений  $\omega$ :

$$\omega^2 = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 + \rho_1} g k - \frac{\sigma k^3}{\rho_2 + \rho_1}. \quad (1.44)$$

Здесь  $\rho_1, \rho_2$  – плотности нижней и верхней жидкостей соответственно,  $g$  – величина ускорения свободного падения,  $\sigma$  – коэффициент поверхностного натяжения,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  – волновое число. При  $\omega^2 > 0$  в системе присутствуют нарастающие со временем возмущения, и неустойчивость Релея-Тейлора, таким образом, развивается. Первое слагаемое в (1.44) отвечает за перепад плотностей; чем больше разница  $\rho_2 - \rho_1$ , тем быстрее нарастают возмущения. При этом, когда  $\rho_1 > \rho_2$ , сверху находится более легкая жидкость, система устойчива при любых параметрах. Второе слагаемое в правой части (1.44) показывает, что поверхностное натяжение оказывает стабилизирующее действие, причем его эффект сильнее для коротковолновых возмущений (больших  $k$ ). Релей и Тейлор в действительности исследовали данную задачу в самом простом виде – учитывая только эффект перепада плотности. Влияние поверхностного натяжения было впервые исследовано Беллманом и Пеннингтоном в 1954 г. [99], кроме того, авторами было показано, что вязкость не влияет на границу спектра опасных возмущений

(диапазон значений  $k$  в выражении (1.44) при котором  $\omega^2 > 0$ ), но приводит к уменьшению скорости роста возмущений и сдвигу наиболее опасных волновых чисел в сторону бóльших длин волн. Результаты Беллмана и Пеннингтона представлено на рис. 1.28 для следующих случаев: 1) учитывается лишь эффект перепада плотности (neither surface tension nor viscosity), 2) учитывается влияние перепада плотности и поверхностного натяжения (surface tension only), 3) учитывается влияние перепада плотности и вязкости (viscosity only), 4) учитываются все выше описанные эффекты (both surface tension and viscosity).

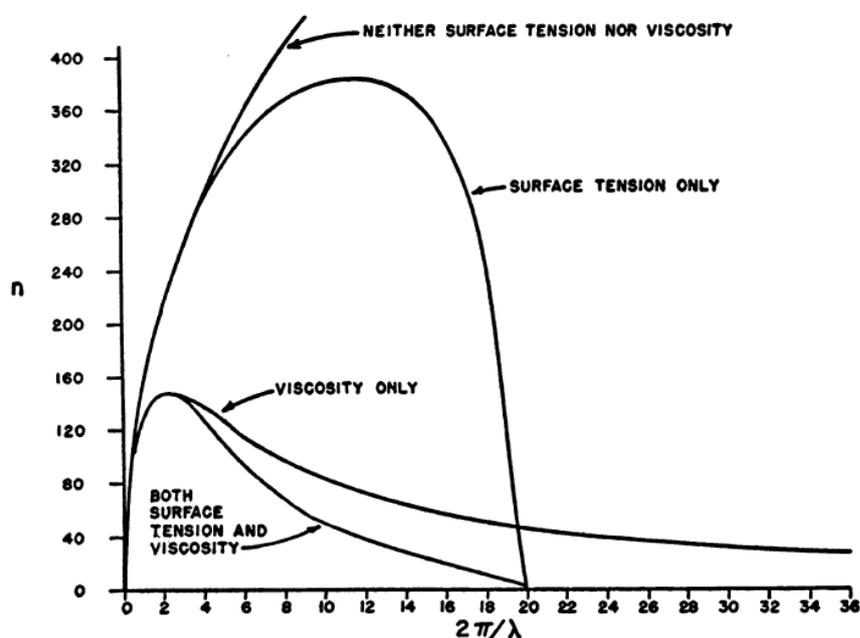


Рисунок 1.28. Зависимость инкремента возмущений от волнового числа в задаче о неустойчивости Релея-Тейлора, полученная в [99],  $n$  – инкремент возмущений,  $\lambda$  – длина волны. (Рисунок взят из статьи [99])

Экспериментально одним из первых задачу о неустойчивости Релея-Тейлора исследовал Льюис в работе [100], которая была непосредственно связана с работой Тейлора [98]. Экспериментальные данные Льюиса хорошо подтверждают результаты теории Тейлора, что объясняется тем, что Льюис исследовал систему в узком диапазоне параметров, где эффекты поверхностного натяжения, вязкости и др. не оказывают существенного влияния. Результаты линейной теории устойчивости более обстоятельно были подтверждены в работах [101-103] и многих других.

Помимо описанных выше классических эффектов, неустойчивость Релея-Тейлора может быть осложнена множеством других факторов: неравномерное ускорение [104], сжимаемость [105], градиент плотности [106], нагрев [107], нетривиальная геометрия, сложные начальные возмущения и пр. [108,109]. Частным случаем неустойчивости Релея-Тейлора является неустойчивость Рихтмайера-Мешкова [110,111] – система при этом испытывает не постоянное, а кратковременное ускорение (например, в виде ударной волны).

Классические результаты по неустойчивости Релея-Тейлора были получены в предположении несмешивающихся жидкостей с бесконечно тонкой границей раздела. Куровски и соавт. [112] разработали теорию неустойчивости Релея-Тейлора для плоской диффузной границы, профиль концентрации при этом задавался с помощью функции ошибок  $\sim \text{erf}(z/\sqrt{Dt})$  ( $z, D, t$  – координата нормальная к границе раздела, коэффициент диффузии и время). Авторами найдено, что диффузия играет роль аналогичную роли поверхностного натяжения – ограничивает рост возмущений в области малых длин волн. Найдено дисперсионное отношение в коротковолновом пределе:

$$\omega \simeq gR/(4Dk), \quad (1.45)$$

где  $R = \rho^{-1} \partial \rho / \partial C$  – коэффициент концентрационного расширения.

Развитие неустойчивости Релея-Тейлора начинается с экспоненциального роста возмущений нескольких мод, определяемых дисперсионным отношением ((1.44), (1.45) или др.). Когда амплитуда возмущений становится сопоставимой с длиной волны возмущений  $\lambda$  (согласно [108]  $\sim 0.1\lambda \dots 0.4\lambda$ ), экспоненциальный рост сменяется степенной зависимостью от времени в слабонелинейном режиме. В работах [113-115] показано, что развитие неустойчивости происходит по закону  $\sim A_T g t^2$ , где  $A_T = (\rho_2 - \rho_1) / (\rho_2 + \rho_1)$  – число Атвуда. Дальнейшее развитие неустойчивости зависит от той или иной конкретной конфигурации задачи: величины числа Атвуда (при  $A_T \approx 1$  и  $A_T \approx 0$  система ведет себя разным образом), наличия процесса смешения, развития/неразвития турбулентности, геометрии области и др. [113].

Изучение влияния смещения на неустойчивость Релея-Тейлора было выполнено в работах [114-118]. Обнаружено, что начальное развитие неустойчивости носит двумерный характер, а на более поздних временах развивается трехмерная турбулентность. Сходства и различия в динамике перемешивания в двумерных и трехмерных турбулентных течениях были также изучены в [115]. Обнаружено, что, несмотря на то, что в трехмерном случае развитие происходило вдвое быстрее, общие закономерности неустойчивости Релея-Тейлора наблюдались в обоих случаях.

Все ранние теоретические исследования неустойчивости Релея-Тейлора смешивающихся жидкостей определяли процесс диффузии в рамках классического закона Фика и пренебрегали межфазными напряжениями. Однако для более точного описания эволюции гетерогенных бинарных смесей эти положения нуждаются в пересмотре: 1) смешивание обычно происходит очень медленно, и фазы остаются четко различимыми в течение продолжительного промежутка времени; кроме того, малые включения зачастую имеют сферическую форму, что можно объяснить эффектом поверхностного натяжения, – явление, которое, например, можно наблюдать в процессе растворения капельки меда в чае; 2) закон Фика в действительности плохо применим при больших градиентах концентрации, которые типичны для смешения двух жидкостей.

В диссертации в рамках модели фазового поля, с помощью прямого численного моделирования исследуется задача о неустойчивости Релея-Тейлора при наличии частично смешиваемой границы раздела (гетерогенная двухфазная система, но начальное значение концентрации не является равновесным), а также исследуется влияние перемешивания, вызванного неустойчивостью Релея-Тейлора, на диффузию компонент. Исследование неустойчивости Релея-Тейлора с помощью теории фазового поля было проведено в [48,119,120]. Однако в данных работах предполагалось, что фазы первоначально находятся в состоянии термодинамического равновесия, а потому процесс диффузии не оказывает существенного влияния на развитие неустойчивости, что не дает проследить влияние развития неустойчивости на интенсификацию процесса смешения.

### 1.3.2 Постановка задачи

Для решения задачи о неустойчивости Релея-Тейлора с помощью метода фазового поля будем использовать уравнения Кана-Хилларда-Навье-Стокса в приближении Буссинеска (1.10)-(1.13). Перепишем данные уравнения в безразмерной форме:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (1.46)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \nabla^2 \mathbf{v} - C \nabla \mu, \quad (1.47)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C = \frac{1}{\operatorname{Pe}} \nabla^2 \mu, \quad (1.48)$$

$$\mu = \operatorname{Gr}(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r}) + \frac{\partial f_0}{\partial C} - \operatorname{Cn} \nabla^2 C. \quad (1.49)$$

Здесь  $\boldsymbol{\gamma}$  – единичные вектор вдоль силы тяжести. В качестве единиц длины  $L_*$ , скорости  $v_*$ , времени  $t_*$ , химического потенциала  $\mu_*$  и давления  $p_*$  выбраны следующие величины:

$$L_* = h, v_* = \mu_*^{1/2}, t_* = L_*/v_*, \mu_* = b, p_* = \rho_* \mu_*,$$

соответственно. Здесь  $h$  – высота области,  $\rho_*$  – характерная плотность (т.е.  $\rho_1$ ),  $b$  – феноменологический коэффициент, определяемый функцией свободной энергии  $f_0$ . Уравнения (1.46)-(1.49) содержат следующие безразмерные параметры: числа Рейнольдса, Пекле, Грасгофа и Кана

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho_* \mu_*^{1/2} L_*}{\eta}, \quad \operatorname{Pe} = \frac{\rho L_*}{\alpha \mu_*^{1/2}}, \quad \operatorname{Gr} = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_*} \frac{g L_*}{\mu_*}, \quad \operatorname{Cn} = \frac{\epsilon}{\mu_* L_*^2}$$

Следует отметить, что определения данных параметров отличаются от классических. Названия выбраны в соответствие с тем, что данные параметры стоят в аналогичных местах в уравнениях гидродинамики обычной (однофазной) жидкости и выполняют схожую роль. В качестве функции свободной энергии  $f_0$  в

задаче о неустойчивости Релея-Тейлора нами была выбрана логарифмическая формула (1.16), которая в безразмерном виде, вместе с выражением для химического потенциала (1.49), переписывается в виде:

$$f_0 = \left(A - \frac{3}{2}\right)C^2 + \frac{3}{4}\left(\frac{1}{2} + C\right)\ln\left(\frac{1}{2} + C\right) + \frac{3}{4}\left(\frac{1}{2} - C\right)\ln\left(\frac{1}{2} - C\right), \quad (1.50)$$

$$\mu = \text{Gr}(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r}) + \frac{3}{4}\ln\frac{1/2 + C}{1/2 - C} - (3 - 2A)C - \text{Cn}\nabla^2 C, \quad (1.51)$$

где параметр  $A = a/b$ .

Геометрия задачи представлена на рис.1.29. Рассматривается прямоугольная область: верхняя и нижняя грани являются твердыми непроницаемыми для вещества, на боковых гранях ставятся условия периодичности. Длина области  $Lx$  является переменной величиной, что позволяет исследовать неустойчивость при конкретной длине волны  $\lambda = Lx$ .

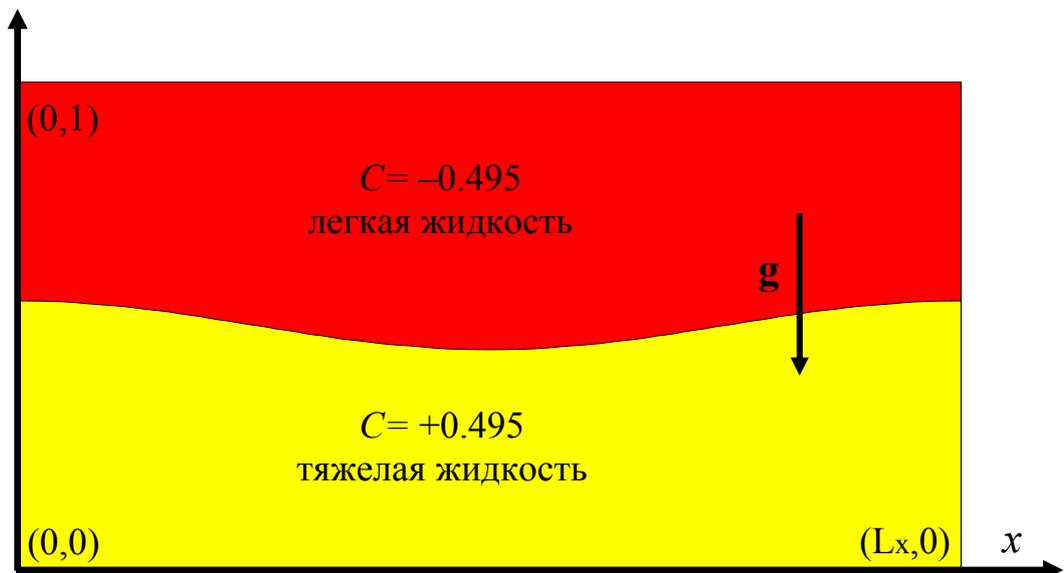


Рисунок 1.29. Геометрия задачи о неустойчивости Релея-Тейлора.

Начальное распределение концентрации задается формулой (1.52).

$$C_0(x, y) = 0.495 \tanh\left(\frac{y - 0.5(1 + 0.1\cos(kx))}{\delta_0}\right). \quad (1.52)$$

Здесь  $k = 2\pi/Lx$  – волновое число,  $\delta_0$  – начальная толщина переходной зоны (границы раздела).

Для численного решения уравнения переписывались в формулировке функция токи ( $\varphi$ ) – завихренности ( $\omega$ ):  $v_x = \partial\varphi/\partial y$ ,  $v_y = -\partial\varphi/\partial x$ ,  $\omega = -\nabla^2\varphi$ . В качестве численного алгоритма использовался метод конечных разностей с применением явной схемы.

### 1.3.3 Результаты моделирования

Для изучения неустойчивости Релея-Тейлора, нами вычислялись следующие интегральные характеристики на основе полей скорости и концентрации.

1) Полная кинетическая энергия:

$$E_k = \frac{1}{2} \int_V \mathbf{v}^2 dV. \quad (1.53)$$

Здесь  $V$  – объем всей вычислительной области.

2) Объем переходной зоны  $V_\delta$ . Данный объем вычислялся путем суммирования ячеек области, где  $|C| < 0.2$  (значение подобрано эмпирически).

3) Длина границы раздела  $L$ , и ее толщина  $\delta$ . Алгоритм вычисления длины межфазной границы аналогичен использованному в задаче о вытеснении в капилляре: внутри расчетной ячейки изолиния  $C = 0$  (граница раздела) аппроксимируется линейным отрезком, суммируется длина всех отрезков, что в итоге дает полную длину межфазной границы. Толщина границы определяется как отношение ее объема к длине:  $\delta = V_\delta/L$ .

4) Коэффициент поверхностного натяжения:

$$\sigma = \frac{Cn}{L} \int_V \left( \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right)^2 \right) dV. \quad (1.54)$$

5) Средняя концентрация каждой из фаз:

$$C_{1,2} = \frac{1}{V_{1,2}} \int_V C dV, \quad (1.55)$$

где  $V_1, V_2$  – объем первой и второй фаз соответственно. Под концентрацией фазы 1,  $C_1$ , мы понимаем концентрацию в той области (объем  $V_1$ ), где  $C > 0$ ; соответственно концентрация фазы 2,  $C_2$  – концентрация в области (объем  $V_2$ ), где  $C < 0$ .

Для выбора оптимального разрешения была выполнена серия тестовых расчетов с использованием расчетных сеток с различным числом узлов на единицу

длины. Результаты расчетов для двух характеристик, полной кинетической энергии и длины межфазной границы, представлены на рис. 1.30 для двух значений числа Пекле  $Pe = 10^5, 10^7$ . В обоих случаях хорошо видна сходимость кривых к некоторым предельным значениям. Для  $Pe = 10^5$  сходимость достигается быстрее: сетка  $512 \times 512$  является удовлетворительной, тогда как для  $Pe = 10^7$  приемлемой оказалась сетка с числом узлов  $1440 \times 1440$  у, что объясняется тем, что для бóльших

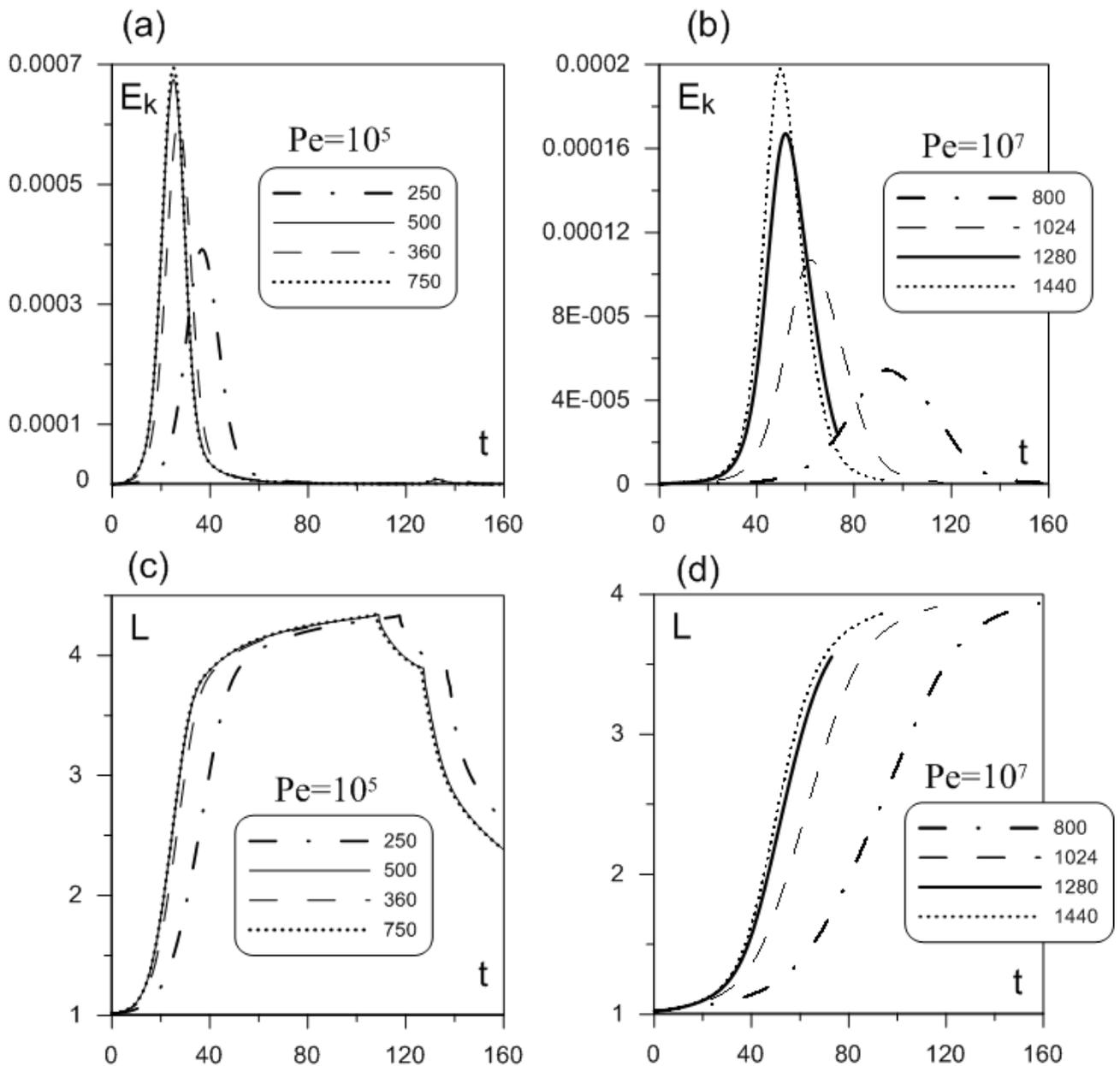


Рисунок 1.30. Зависимость полной кинетической энергии (a), (b) и длины межфазной границы (c), (d) от времени для квадратной области  $1 \times 1$ . Значения в легендах графиков – количество узлов сетки на единицу длины. Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Re = 100$ .

чисел Пекле граница раздела является более тонкой, и, как следствие, возникает необходимость в более точном разрешении.

На рис. 1.31 изображены поля концентрации и скорости в разные моменты времени, иллюстрирующие этапы временной эволюции бинарной системы. В начальный момент времени тяжелая (верхняя, изображена красным цветом) и легкая (нижняя, «желтая») фазы разделены резкой границей раздела, форма которой слегка искривлена, как задано исходным профилем концентрации (1.52). Начальная скорость течения равна нулю. Стратификация является гравитационно неустойчивой, что приводит к развитию неустойчивости Релея-Тейлора, т.е. к росту искривления границы раздела за счет течения жидкости. В какой-то момент более тяжелая фаза достигает нижней стенки и начинает занимать нижнюю половину слоя. Перераспределение фаз (особенно на начальных этапах) сопровождается гидродинамическим движением. В конце этого процесса только некоторые мелкие капли тяжелой жидкости остаются прикрепленными к верхней стенке, а некоторые капли легкой жидкости – прикрепленными к нижней границе. Размеры капель очень медленно уменьшаются в следствие процесса растворения, вызванного диффузией.

На рис. 1.32 показаны поля химического потенциала. Начальное распределение химического потенциала в фазах является разным (что соответствует термодинамически неравновесному состоянию), с резким скачком на границе раздела. В конечном состоянии равновесия система характеризуется однородным полем химического потенциала,  $\mu = 0$ . Поскольку градиент химического потенциала определяет величину диффузионного потока, можно сделать вывод, что диффузия более интенсивна в момент первоначального контакта двух жидкостей, а на более поздних стадиях интенсивность диффузии сильно уменьшается.

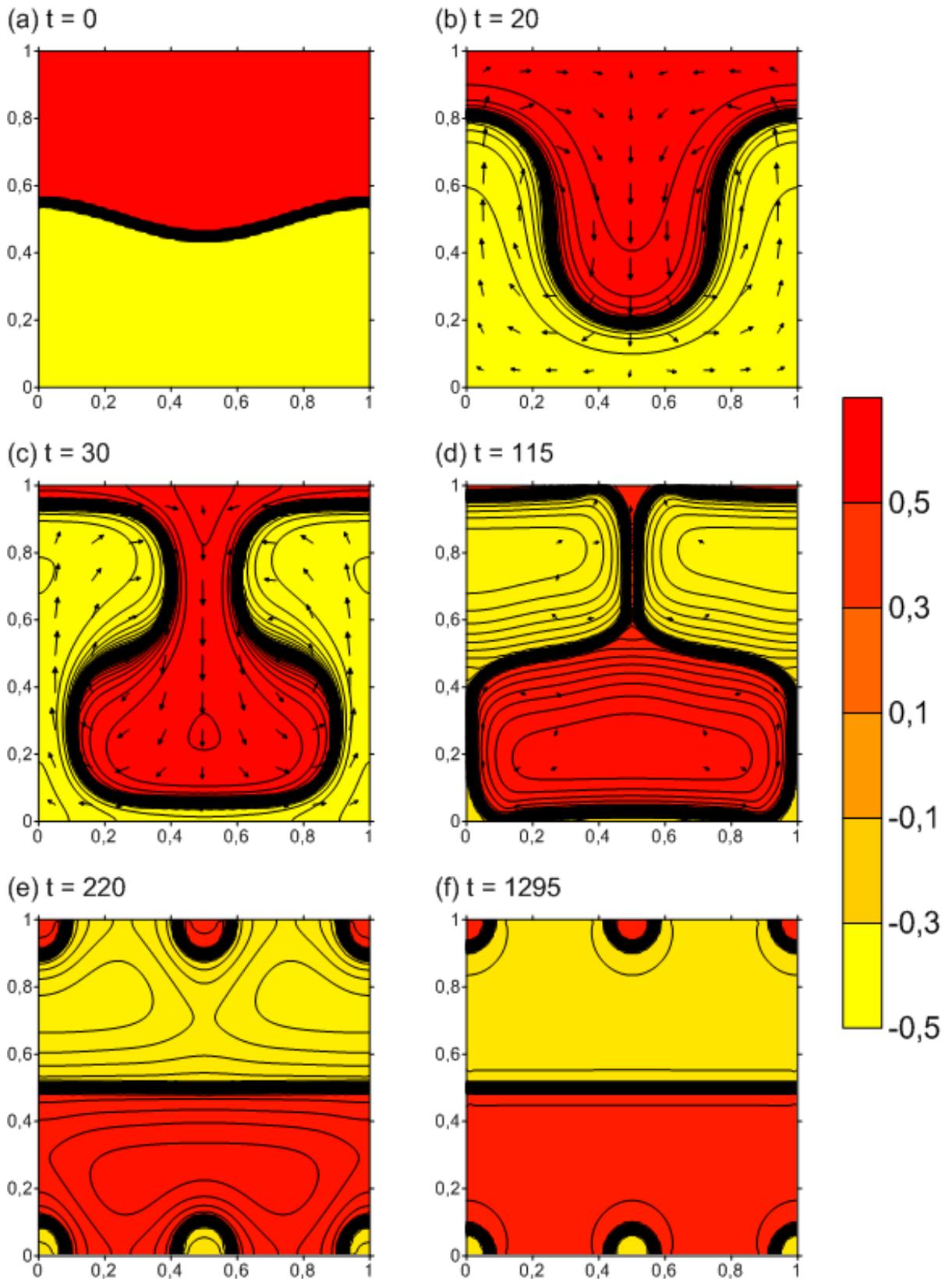


Рисунок 1.31. Поле концентрации с наложенным полем скорости (стрелки) для разных моментов времени. Красный и желтый цвета соответствуют более тяжелой и легкой компонентам. Квадратная область  $1 \times 1$  (волновое число  $k = 2\pi$ ). Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Re = 100$ ,  $Pe = 10^{-5}$ .

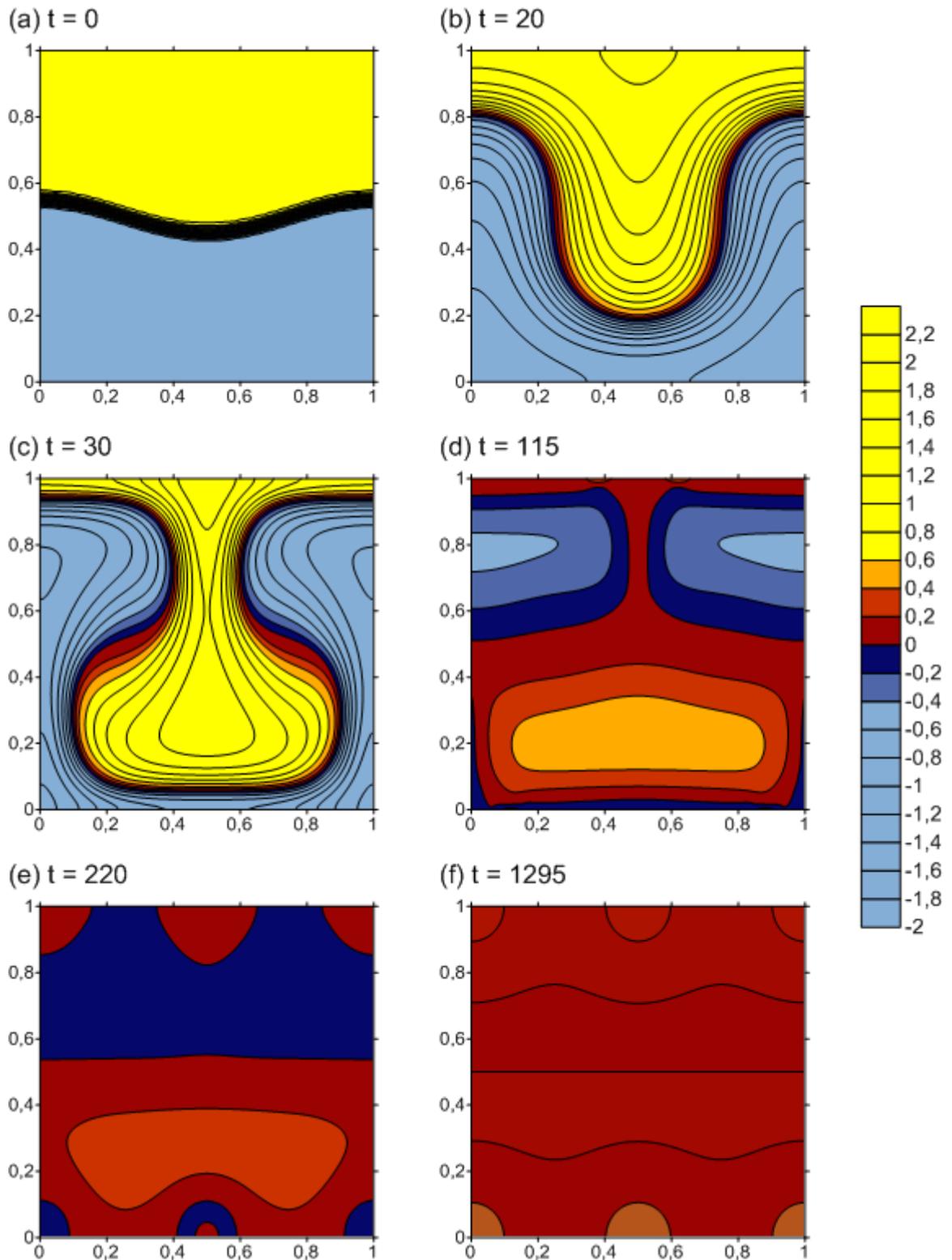


Рисунок 1.32. Поле химического для разных моментов времени. Квадратная область  $1 \times 1$  (волновое число  $k = 2\pi$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Re = 100$ ,  $Pe = 10^{-5}$ .

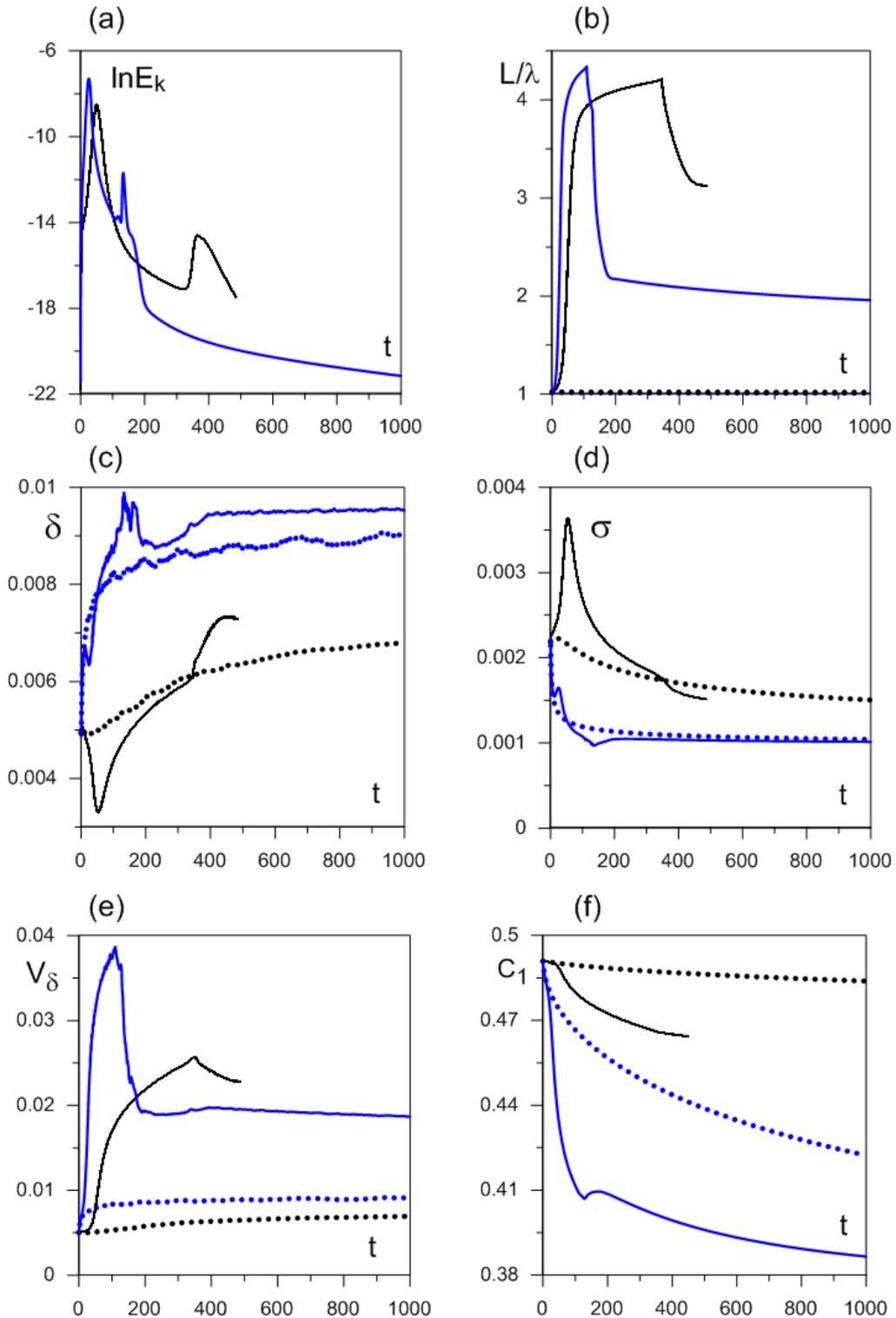


Рисунок 1.33. Зависимости от времени: (а) логарифм полной кинетической энергии; (б) длина межфазной границы, нормированная на длину волны возмущений; (с) толщина межфазной границы; (д) коэффициент поверхностного натяжения; (е) объем межфазного слоя; (ф) средняя концентрация одной из фаз. Черные линии –  $Re = 10^7$ , синие линии –  $Re = 10^5$ . Пунктирные линии – диффузионный процесс без гидродинамики, сплошные линии – расчет полной системы уравнений. Параметры:  $k = 2\pi, A = -0.5, Cn = 4 \cdot 10^{-5}, \delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}, Gr = 0.1, Re = 100$ .

На рис. 1.33 показаны изменения интегральных характеристик во времени. Развитие неустойчивости Релея-Тейлора можно проследить по изменению полной кинетической энергии гидродинамического течения, возбуждаемого в системе (рис. 1.33 (а)), и по деформации межфазной границы, определяемой ее длиной (рис. 1.33 (б)). Можно заметить, что на начальном этапе значения этих характеристик очень быстро растут, что согласуется с предположениями линейной теории. Развитие неустойчивости при более малых числах Пекле (т.е. при более сильной межфазной диффузии) происходит быстрее, и максимальное значение кинетической энергии, достигаемое в этом случае, также больше. Линейный рост возмущений наблюдается до момента, который соответствует первому пику на графиках зависимости кинетической энергии от времени (см., рис. 1.30), т. е. до моментов времени  $t \sim 20$  при  $Pe = 10^5$  и  $t \sim 50$  при  $Pe = 10^7$  (эти моменты времени отчетливо видны на рис. 1.30). На рис. 1.33 (а) также видны вторые пики, которые соответствуют движению оставшихся капель (см., рис. 1.31): при  $Pe = 10^5$  капля остается на месте, медленно диффундируя в окружающее пространство, при  $Pe = 10^7$  наблюдается отрыв капли.

Из рис. 1.33 (б) видно, что длина границы раздела увеличивается со временем из-за деформации поверхности раздела. Максимальная длина отвечает моменту времени, соответствующему рис. 1.31 (d). Разрыв границы раздела и последующая перестройка фаз приводят к резкому уменьшению длины границы раздела. В конце численных расчетов длина границы раздела не равна начальному значению из-за небольших капель, которые остаются прикрепленными к верхней и нижней стенкам.

Рис. 1.33 (с) показывает изменение толщины границы раздела со временем. Для расчетов, представленных на рис. 1.33, первоначально заданное значение толщины границы раздела в 1.5 раза меньше равновесного значения  $\delta_{eq} = \sqrt{-Cn/A}$ . В результате процесса межфазной диффузии граница раздела со временем размывается, в конечном итоге достигая своего равновесного значения. Для сравнения на рис. 1.33 также приводятся результаты моделирования чисто

диффузионного процесса (пунктирные кривые на рис. 1.33), когда фазы устойчиво распределены, и, таким образом, в системе не возбуждается гидродинамическое движение. В этом случае эволюция смещения предсказуемо происходит гораздо медленнее. Однако, процесс изменения толщины межфазной границы со временем является более сложным, чем просто диффузное размытие. В начальный период времени толщина границы раздела не увеличивается, как ожидалось, а напротив — уменьшается, и величина этого уменьшения больше, чем ожидаемое изменение из-за диффузионного роста  $|\delta_{eq} - \delta_0|$ .

По-видимому, растяжение (или удлинение) межфазного слоя в результате его деформации приводит к утончению границы раздела, подобно утончению эластичных материалов (например, эластичной мембраны) при деформациях растяжения. Этот эффект полностью игнорируется в теориях линейной устойчивости ([112,121] и др.), что является одним из основных недостатков подобных теорий. Можно также заметить, что первоначальное изменение толщины границы раздела слабее для меньшего числа Пекле, что указывает на то, что изменения толщины границы раздела определяются конкуренцией двух эффектов: утончения границы раздела из-за растяжения и размытия границы раздела из-за диффузии. При меньших числах Пекле эффект диффузии сильнее, и это частично противодействует эффекту растяжения границы раздела, ограничивая рост значения коэффициента поверхностного натяжения.

Рис. 1.33 (d) показывает изменение коэффициента поверхностного натяжения со временем. В общем случае величина коэффициента поверхностного натяжения обратно пропорциональна толщине границы раздела (например, для границы раздела с профилем, аппроксимируемым гиперболическим тангенсом, значение коэффициента поверхностного натяжения и толщина границы раздела связаны соотношением  $\sigma = Cn/3\delta$  [121]). В начальный период времени коэффициент поверхностного натяжения испытывает очень сильный рост из-за утончения границы раздела, вызванного ее растяжением, однако на более длительных

временах его значение уменьшается из-за диффузионного размытия границы раздела.

На рис. 1.33 (e) показано изменение объема переходного слоя со временем. Данная зависимость аналогична изменению длины границы раздела, что указывает на то, что увеличение длины границы раздела больше, чем увеличение в толщине границы раздела (поскольку  $V_\delta = L \cdot \delta$ ).

На рис. 1.33 (f) показана средняя концентрация одной из жидкостей (значения концентрации двух жидкостей одинаковы по величине и противоположны по знаку). Уровень концентрации меняется со начального значения  $1/2$  до своего равновесного значения (насыщение), которое примерно равно  $0.388$ . При  $Pe = 10^5$  состояние равновесия достигается при  $t \approx 1500$ , в то время как для чисто диффузионного процесса состояние равновесия достигается при  $t \approx 6000$ .

Неожиданное увеличение смещения жидкостей на молекулярном уровне (значение средней концентрации резко уменьшается на начальном этапе) можно объяснить растяжением границы раздела, что приводит к значительному увеличению площади контакта фаз. Для сравнения на рис. 1.33 (f) также показана средняя концентрация для случая, когда неустойчивость Релея-Тейлора отсутствует, и граница раздела остается плоской. Поскольку гидродинамические процессы перестают существовать примерно при  $t \approx 100$ , когда компоненты смеси уже перевернуты, но состояние термодинамического равновесия еще не достигнуто, роль диффузии остается ключевой, так что полное термодинамическое равновесие системы наступает значительно позднее при бóльших числах Пекле.

Таким образом, ожидается, что изменения толщины межфазной границы и средней концентрации будут определяться медленным процессом диффузии, так что в течение короткого периода времени они должны оставаться почти постоянными. Однако обе величины подвержены быстрым изменениям во времени, обусловленным гидродинамикой.

На рис. 1.34 и 1.35 показаны изменения толщины границы раздела и средней концентрации для различных значений безразмерных параметров (указаны в легенде) на начальном этапе. Видно (рис. 1.34 (a) и 1.35 (a)), что при меньших числах Пекле (для более интенсивной диффузии) размытие межфазной границы более выражено (более сильное изменение средней концентрации) и влияние растяжения межфазной границы становится менее значимым. Расчеты, выполненные для более высоких чисел Рейнольдса (рис. 1.34 (b), 1.35 (b)), показывают, что скорость изменения толщины границы раздела и средней концентрации больше, когда вязкие силы слабее.

Увеличение числа  $Sp$  замедляет развитие неустойчивости Релея-Тейлора (рис. 1.34 (c), 1.35 (c)), уменьшая вариацию толщины границы раздела. Уменьшение начальной толщины границы раздела,  $\delta_0$ , (рис. 1.34 (d), 1.35 (d)) также приводит к меньшим вариациям толщины границы раздела, указывая на то, что эффект утончения границы раздела, вероятно, исчезнет в пределе бесконечно резкой границы. Однако изменения средней концентрации при различных  $Sp$  или  $\delta_0$  остаются на одном уровне

На рис. 1.36 показаны зависимости от некоторых интегральных характеристик ( $Re = 10^5$ ) на начальном этапе для трех волновых чисел:  $k=2.86, 3.93, 5.03$ . Для вычисления инкремента возмущений  $\omega$  использовались линейные участки кривых зависимости кинетической энергии в логарифмическом масштабе от времени (рис. 1.36 (b)). Поскольку каждый расчет начинается с ненулевой деформацией поверхности раздела (см., начальное распределение концентрации, ур. (1.52)) при отсутствии течения, что не является точным решением уравнений движения – кривые кинетической энергии включают короткие периоды подстройки. После этого полная кинетическая энергия (и все другие величины) экспоненциально нарастает, по крайней мере, до момента времени  $t \approx 20$ , который соответствует максимальному значению кинетической энергии.

Характеризующий линейное развитие неустойчивости Рэлея-Тейлора инкремент возмущений очевидно зависит от начальной деформации границы раздела (которая определяется волновым числом  $k$ ) и от значений других управляющих параметров. Эти зависимости показаны на рис. 1.37. В частности, рис. 1.37 (a) показывает, что при большем вкладе гравитации (т.е. при большей разности плотности) неустойчивость Рэлея-Тейлора развивается быстрее. На рис. 1.37 (b) показана роль вязкости: меньшие числа Рейнольдса соответствуют более медленному темпу роста из-за дополнительного вязкого демпфирования. Рис. 1.37 (c) иллюстрирует действие капиллярных эффектов: более сильные капиллярные силы уменьшают скорость развития неустойчивости Рэлея-Тейлора, а также ограничивают рост мод с более короткими длинами волн. Все эти предсказания хорошо согласуются с общими ожиданиями в отношении неустойчивости Рэлея-Тейлора и с работами по линейной теории устойчивости [99,121].

Рис. 1.37 (d) свидетельствует о том, что диффузия вносит вклад в развитие неустойчивости Рэлея-Тейлора даже на более коротких временных масштабах. Однако зависимости инкремента возмущений от числа Пекле отличаются от тех, которые были получены на основе теории линейной устойчивости в работе [121], где был сделан вывод о том, что диффузия вводит дополнительный механизм диссипации, просто замедляя развитие неустойчивости. Поведение, изображенное на рис. 1.37 (d), противоположно сказанному, причем скорость роста выше при более низких числах Пекле (т.е. при более высоких уровнях диффузии). Данный результат можно объяснить действием капиллярных эффектов, которые определяются коэффициентом поверхностного натяжения. Как отмечалось выше, при более высоких числах Пекле влияние диффузии слабее, и растяжение границы раздела приводит к гораздо более заметным капиллярным силам (см., рис. 1.33 (d)). В результате расчеты с большим числом Пекле характеризуются более высокими коэффициентами поверхностного натяжения и, следовательно, более низкими скоростями роста неустойчивости Рэлея-Тейлора. Это капиллярное демпфирование также объясняет неожиданный результат, изображенный на рис.

1.33 (а), когда при больших значениях числа Пекле кинетическая энергия имеет более низкий пик, который достигается в более поздний момент времени.

Из рис. 1.38 следует, что предел невязких жидкостей может быть достигнут при  $Re \sim 2000$ . Видно также, что при больших значениях числа Пекле результаты приближаются к зависимости, выражаемой дисперсионным отношением (1.56), полученным в работах [108,121] для случая бесконечно-тонкой границы двух несмешивающихся жидкостей.

$$-\frac{q(q+k)(q^2-k^2)}{Re^2} = \frac{1}{2}Gr k + \frac{\sigma}{2}k^3, \quad (1.56)$$

$$q = \sqrt{k^2 - i\omega Re}.$$

Результаты по моделированию неустойчивости Релея-Тейлора методом фазового поля при больших числах Пекле (до  $10^7$ ), все еще далеки от результатов, выражаемых формулой (1.56), что указывает на то, что для точного воспроизведения результатов случая несмешивающихся жидкостей требуются расчеты при еще более высоких значениях числа  $Re$ .

В работе нами также исследуется роль чисел Кана ( $Cn$ ) и значения начальной толщины границы раздела ( $\delta_0$ ) на инкремент возмущений. Варьирование этих параметров изменяет поверхностное натяжение, поэтому мы рассматриваем их независимые изменения (рис. 1.38 (b) и (c)) и одновременное изменение обоих параметров (рис. 1.38 (d)), так что их соотношение ( $Cn/\delta_0$ ), которое должно быть пропорционально коэффициенту поверхностного натяжения, остается постоянным [121]. Зависимости инкрементов возмущений от времени, полученные для более тонких границ, ближе к теоретическим результатам, что показывает сходимость результатов моделирования методом фазового поля к результатам классическим теорий по неустойчивости Релея-Тейлора.

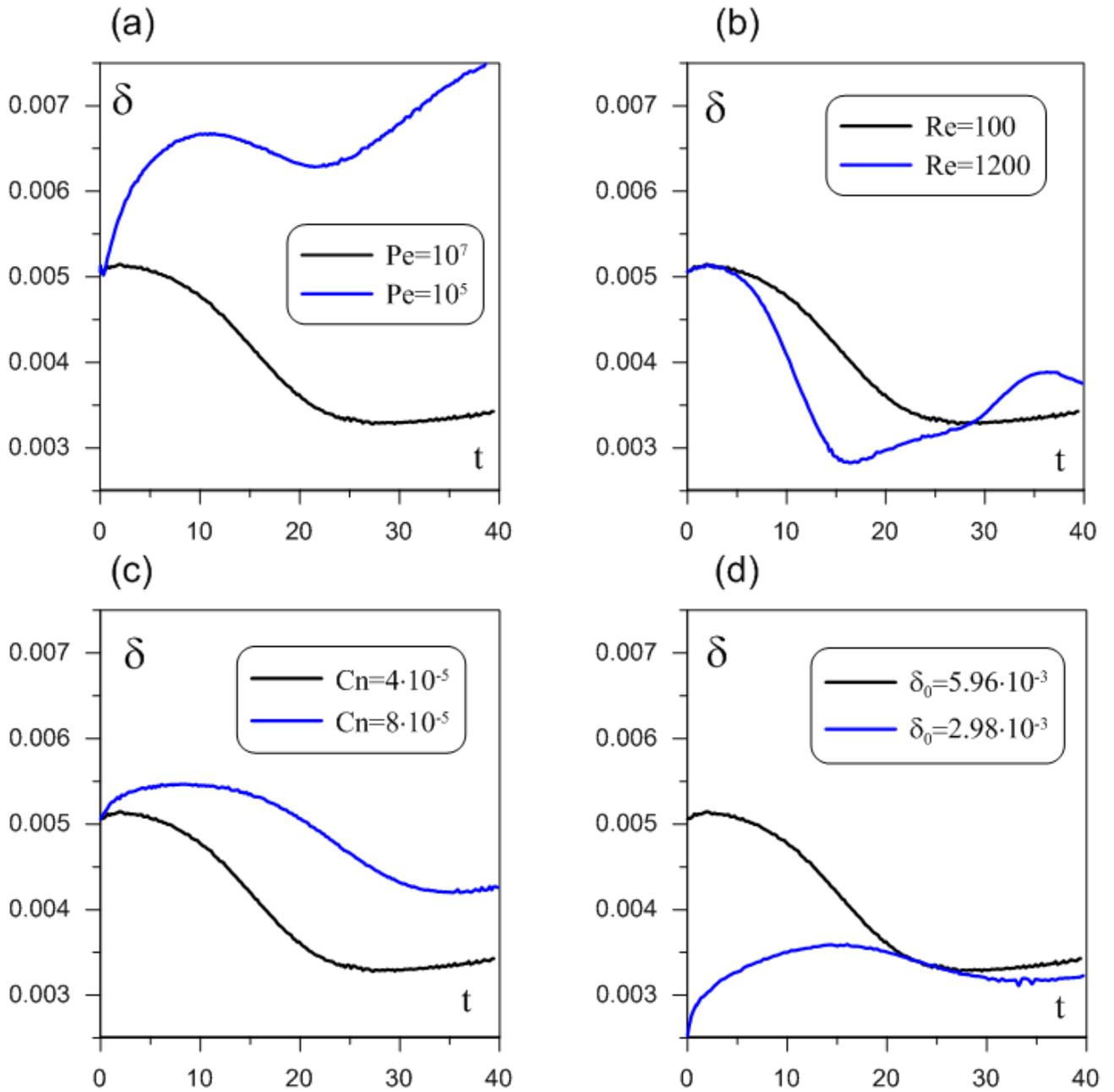


Рисунок 1.34. Зависимость толщины границы от времени при различных: (a)  $Pe$ , (b)  $Re$ , (c)  $Cn$ , (d)  $\delta_0$ . Базовые параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Pe = 10^7$ ,  $Re = 100$ ,  $k = 3.93$ .

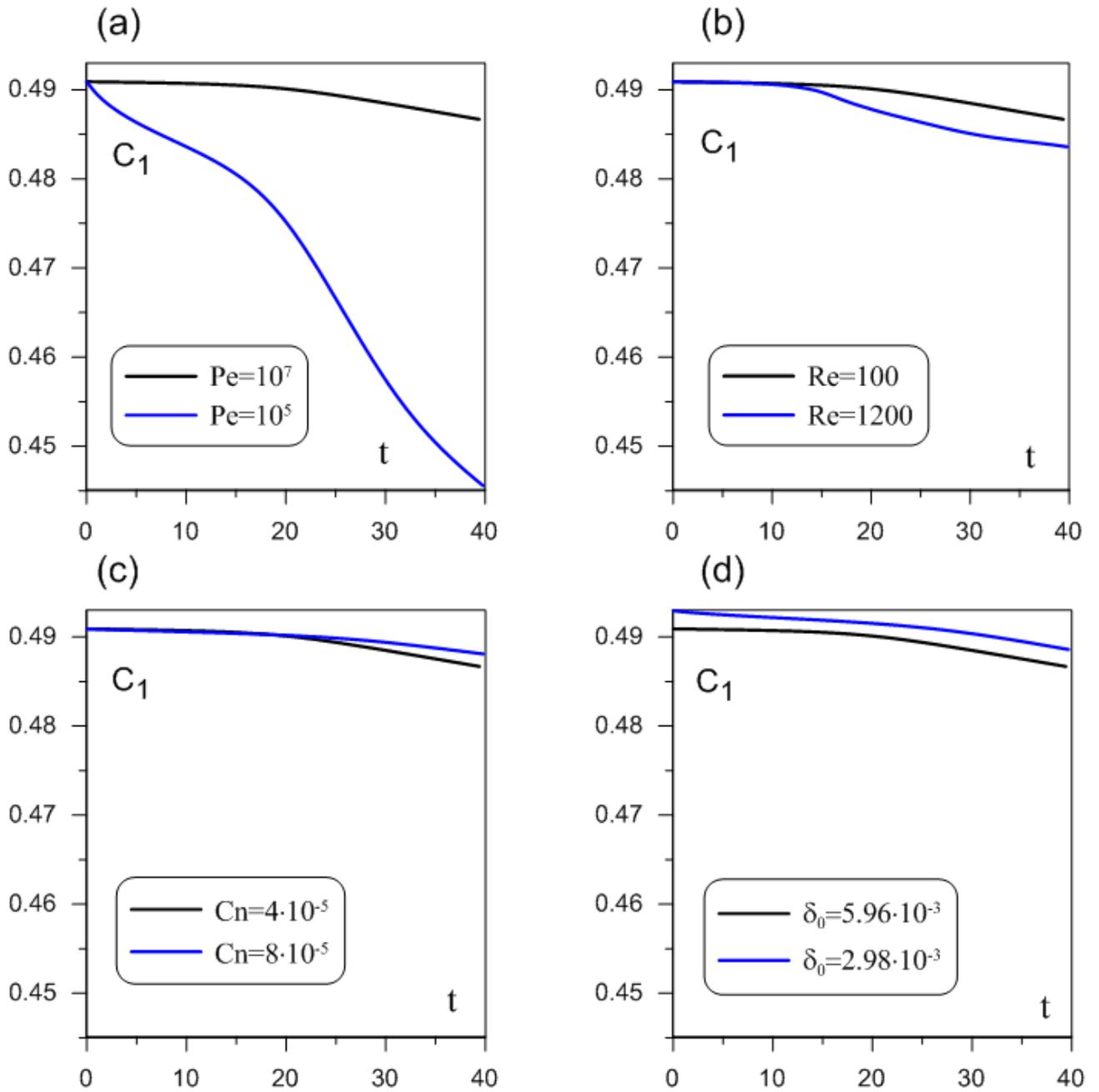


Рисунок 1.35. Зависимость средней концентрации одной из фаз от времени при различных: (a)  $Pe$ , (b)  $Re$ , (c)  $Cn$ , (d)  $\delta_0$ . Базовые параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Pe = 10^7$ ,  $Re = 100$ ,  $k = 3.93$ .

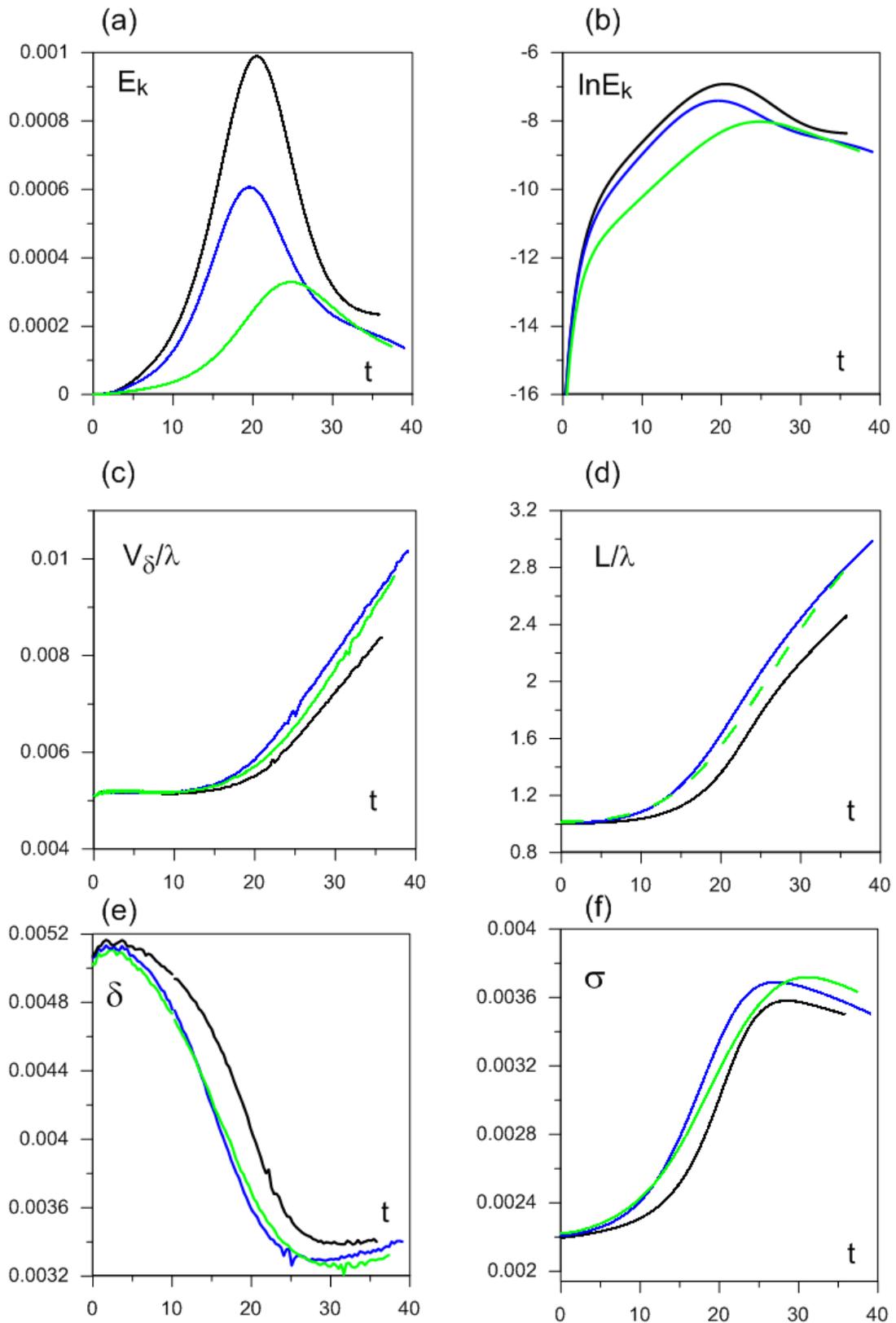


Рисунок 1.36. Зависимости от времени: (а) кинетическая энергия; (б) логарифм кинетической энергии; (с) объем межфазного слоя на длину волны возмущений; (д) длина границы раздела на длину волны возмущений; (е) толщина границы раздела; (ф) коэффициент поверхностного натяжения. Черные линии –  $k = 2.86$ , синие линии –  $k = 3.93$ , зеленые линии –  $k = 5.03$ . Параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Re = 100$ .

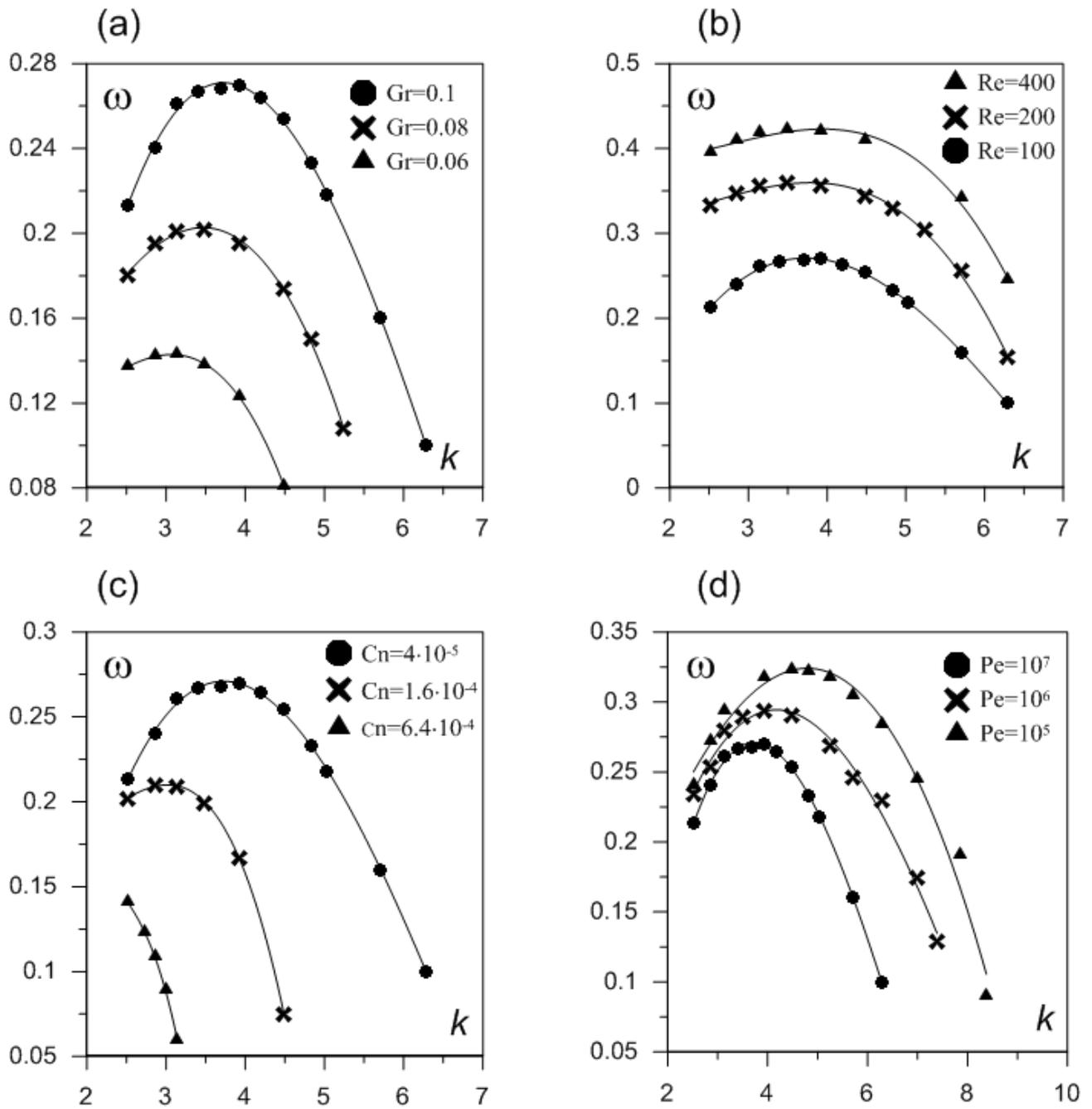


Рисунок 1.37. Зависимость инкремента возмущений от  $k$  при различных: (a) Gr, (b) Re, (c) Cn, (d) Pe. Базовые параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Pe = 10^7$ ,  $Re = 100$ .

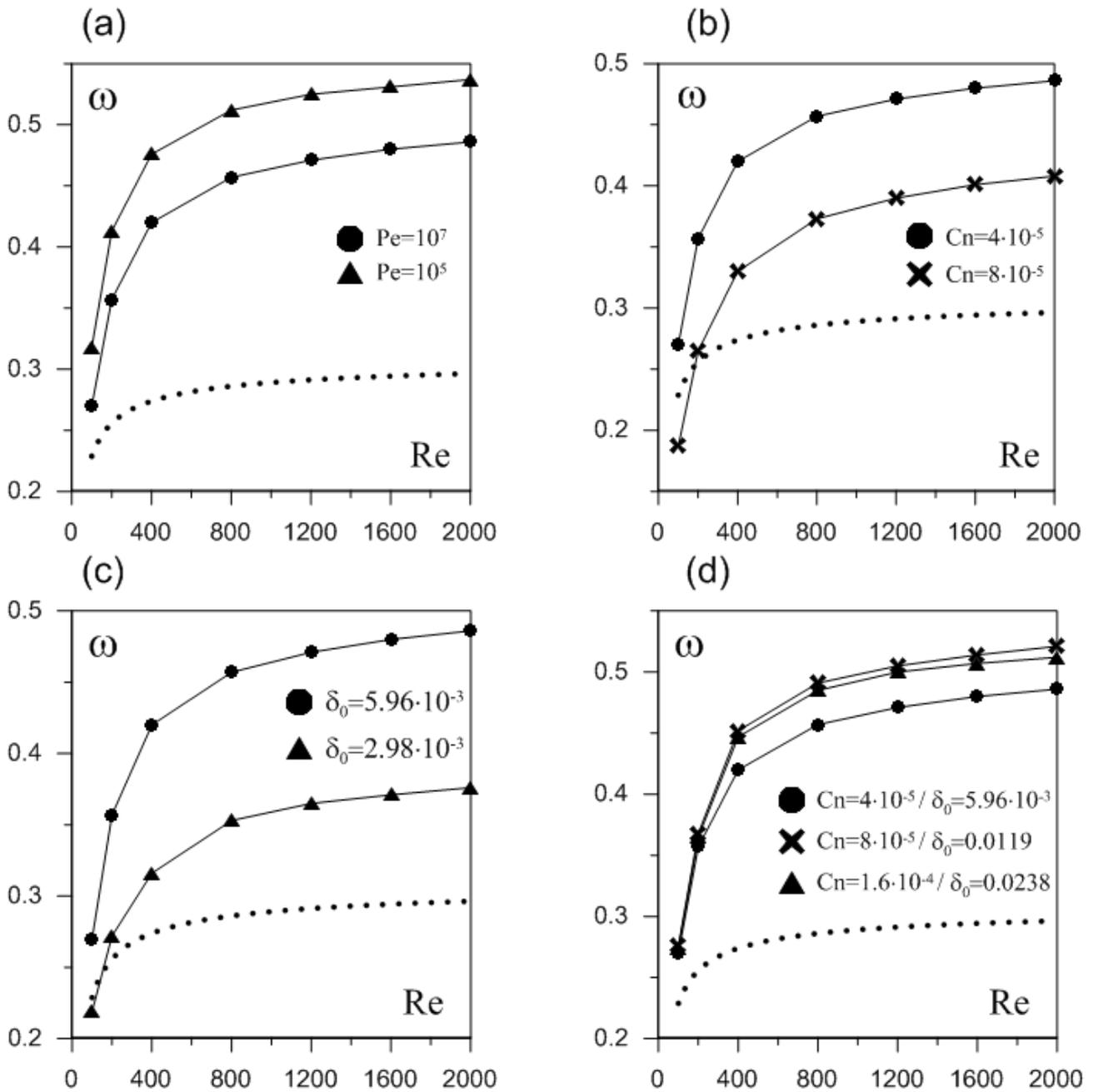


Рисунок 1.38. Зависимость инкремента возмущений от  $Re$  при различных: (a)  $Pe$ , (b)  $Cn$ , (c)  $\delta_0$  (начальная толщина), (d)  $Cn/\delta_0$ . Пунктирная линия соответствует формуле (1.56) при  $\sigma = 0.0035$ . Базовые параметры:  $A = -0.5$ ,  $Cn = 4 \cdot 10^{-5}$ ,  $\delta_0 = 5.96 \cdot 10^{-3}$ ,  $Gr = 0.1$ ,  $Pe = 10^7$ ,  $k = 3.93$ .

### 1.3.4 Выводы по разделу

В рамках модели фазового поля исследованы возникновение и развитие неустойчивости Релея-Тейлора в изотермической гетерогенной системе двух медленно смешивающихся жидкостей, исходное состояние которых термодинамически неустойчиво, что приводит к возникновению межфазной диффузии. В отличие от предшествующих исследований учитывается влияние как поверхностного натяжения, так диффузионное взаимопроникновение компонентов смеси (на основе обобщенного закона Фика).

Численно моделируется развитие бинарной системы до момента достижения состояния термодинамического и гидродинамического равновесий. Найдено, что эволюция системы состоит из двух этапов: конвективного и диффузионного. Во время двух стадий и диффузия и конвекция оказывают существенное влияние на развитие неустойчивости.

Обнаружено, что деформация (удлинение) межфазной границы приводит к ее утончению. Найдено, что утончение границы раздела на начальном этапе приводит к росту коэффициента поверхностного натяжения и изменению скорости роста возмущений и пиковых значений полной кинетической энергии. Эти эффекты не учитываются при анализе линейной устойчивости.

Влияние диффузии на начальном этапе проявляется прежде всего в ее влиянии на толщину границы раздела и, следовательно, на коэффициент поверхностного натяжения. Обнаружено, что развитие неустойчивости при больших значениях числа Пекле происходит еще более медленно в силу сильного растяжения границы раздела. Увеличение числа  $Pe$  и уменьшение начальной толщины границы раздела приводят к явной сходимости результатов к классическим, полученным для случая несмешивающихся жидкостей.

Обнаружено, что растяжение границы раздела существенно сокращает время необходимое для перехода бинарной системы в состояние термодинамического равновесия.

## Глава 2. Конвекция трехкомпонентных смесей с эффектом Соре

### 2.1 Обзор литературы

Понятие «конвекция» может трактоваться либо как вид переноса тепла (массы или другой величины) вследствие макроскопического течения, либо как само течение, возникающее в поле сил тяжести из-за неоднородности плотности жидкости (газа), которая в свою очередь возникает из-за пространственных неоднородностей температуры или массы. Так или иначе, два данных определения составляют суть одного физического явления.

В общем случае, конвекция может быть вызвана различными механизмами: конвекция Марангони (или термокапиллярная конвекция – возникает вследствие неоднородного поверхностного натяжения), термомагнитная конвекция (воздействие магнитного поля на восприимчивые к данному полю жидкости), вибрационная конвекция и др. В диссертации рассматривается термоконцентрационная конвекция в поле сил тяжести (естественная конвекция).

Процесс термоконцентрационной конвекции сопряжен непосредственно с процессами диффузии и теплопроводности. На первый взгляд может показаться, что последние два явления влияют на эволюцию системы аналогичным образом, создавая лишь некоторую количественную добавку друг к другу. На это также указывает эквивалентность математических уравнений для концентрации и температуры. Однако характерные диффузионные и тепловые времена (характерные скорости протекания процессов диффузии и теплопроводности) в большинстве случаев отличаются друг от друга на несколько порядков, что приводит к конкуренции двух механизмов и к усложнению понимания конвективного движения в целом. Кроме того, процессы тепло- и массообмена осложняются наличием перекрестных эффектов: градиент температуры приводит к потоку вещества, а градиент концентрации в свою очередь может влиять на поток тепла. Первый эффект известен как термодиффузия или эффект Соре (реже – эффект Людвиг-Соре), второй – диффузионная теплопроводность или эффект

Дюфора. На практике, в особенности для жидкостей (что является основным предметом изучения в данной диссертации), эффектом Дюфора можно пренебречь в силу его малости.

Явление термодиффузии (и конвекции, вызванной данным эффектом) можно встретить в различных природных и технологических процессах. Термодиффузия является одним из методов разделения изотопов, преимущественно с целью обогащения урана [122,123], явление термодиффузии необходимо учитывать при сооружении хранилищ ядерных отходов [124,125]. Другими областями, где необходимо учитывать данный эффект, являются: выращивание полупроводниковых кристаллов кремния [126], солнечные пруды (коллекторы термальной энергии) [127,128], транспорт макромолекул (например, ДНК [129]), разработка месторождений нефти [130], и многое другое [131].

Эффект термодиффузии одним из первых (1856 г. [132]) наблюдал Людвиг (физиолог, который прежде всего известен своими трудами в области изучения сердечно-сосудистой системы). Им была рассмотрена трубка с раствором сульфата натрия, один из концов которой был нагрет кипящей водой, другой конец охлаждался льдом. Было замечено, что концентрация сульфата натрия на холодной стороне на несколько десятых процента превышает значение на горячем конце. Тиндаль наблюдал влияние температурного градиента на движение в газовых смесях (1870 г. [133]).

Подробное и систематическое исследование эффекта термодиффузии впервые было проведено Шарлем Соре (1879 г. [134]). Соре рассматривал раствор соли в трубке, к концам которой прилагалась разница температур, и обнаружил, что у холодного конца концентрация соли была выше, чем у горячего.

Можно отметить также работу Чепмана [135] (1916 г.), в которой представлена кинетическая теория газов (имеющая некоторую схожесть с современной теорией диффузии Максвелла-Стефана), описывающая в том числе эффекты диффузии и термодиффузии. Позднее Чепман и Дутсон экспериментально подтвердили существование эффекта Соре в газовой трубке,

концы которой поддерживались при температуре  $> 200$  °C; рассматривались две смеси:  $H_2 + CO_2$  и  $H_2 + SO_2$ .

Важным моментом в изучении термодиффузии явилось развитие оптических методов в начале XX века: одними из первых в этой области являются работы Таннера [136,137], в которых рассматривались электролиты. В конце 30-х годов прошлого столетия были предложены первые варианты моделей термодиффузионных колонн [138]. В простейшем случае термодиффузионная колонна представляет вертикальный слой жидкости к которому прикладывается поперечный горизонтальный градиент температуры. Термодиффузионные колонны активно используются и по сей день при изучении эффекта Соре и измерении коэффициентов переноса.

Теоретически, процессы массо- и теплообмена, в том числе эффект Соре, в жидкостях могут протекать в отсутствие конвективного движения, однако на практике явления конвекции и диффузии/теплопроводности непосредственно связаны и оказывают друг на друга большое влияние. Начало серьезному исследованию конвективных процессов было положено в начале XX века в экспериментальных работах Бенара [139], в которых рассматривался подогреваемый снизу плоский слой чистой (однокомпонентной) жидкости. Позже задача о подогреваемом снизу слое жидкости аналитически была решена Релеем [140] (при этом, однако, рассматривались свободные нижняя и верхняя границы слоя, что на практике является не самым частым случаем).

Бурное развитие исследований конвективных процессов началось во второй половине XX века, что отчасти связано с появлением возможности численных расчетов. Большой вклад в исследование конвекции внесли Гершуни и Жуховицкий, работы которых обобщены в монографиях [141,142], а также Сорокин [143], Шапошников [144,145] и др. Было найдено, что возникновение и развитие конвекции однокомпонентной жидкости возможно лишь при подогреве снизу (причем возмущения нарастают монотонно), тогда как нагрев сверху обеспечивает абсолютно устойчивую стратификацию плотности, и конвективная

неустойчивость, таким образом, не развивается (возможны случаи, когда возмущения затухают колебательным образом).

Для смесей на практике эффект разделения компонентов в силу действия термодиффузии оказывается небольшим ( $\sim 1\%$  и меньше), а вклад концентрации в распределение плотности в несколько раз меньше, чем вклад температуры. Однако эти эффекты способны оказывать сильное влияние на пороги устойчивости и характер протекания конвективных процессов. Начало активных исследований конвекции бинарных смесей с эффектом Соре относится к 1960-м – началу 1970-х годов. Одной из первых в данной области была работа [146], в которой рассматривалась конвективная устойчивость вертикального слоя. Плоский горизонтальный слой впервые исследовался в [147-149].

Рассмотрим некоторые особенности возникновения конвекции бинарных смесей. Запишем выражения для плотности смеси  $\rho$  и потока вещества  $J$

$$J = -\rho_0(D\nabla C + D_T\nabla T). \quad (2.1)$$

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)) \quad (2.2)$$

Здесь  $C, T$  – концентрация и температура смеси;  $\rho_0$  – плотность при некоторых средних значениях концентрации  $C_0$  и температуры  $T_0$ ;  $\beta_C, \beta_T$  – коэффициенты теплового и концентрационного расширений;  $D, D_T$  – коэффициенты диффузии и термодиффузии. При этом  $D_T = C_0(1 - C_0)D'_T$ ; в литературе название коэффициента термодиффузии встречается как для  $D_T$ , так и для  $D'_T$ , далее будем пользоваться лишь коэффициентом  $D_T$ .

При условии, что границы рассматриваемой области считаются непроницаемыми для вещества, в равновесии диффузионный поток вещества обращается в ноль,  $J = 0$ , в этом случае равновесные градиенты концентрации и температуры оказываются линейно зависимыми:

$$\nabla C = -S_T\nabla T, \quad (2.3)$$

где  $S_T = D_T/D$  – коэффициент Соре. Будем считать, что  $C$  – концентрация более легкого компонента смеси (концентрация более тяжелого компонента, соответственно, равна  $1 - C$ ).

Закон теплопроводности Фурье для бинарной жидкости в общем случае также зависит не только от градиента температуры, но и от градиента концентрации, однако, как было сказано выше, при рассмотрении жидких смесей перекрестными эффектами (диффузионная теплопроводность) для потока тепла можно пренебречь в силу их малости:

$$J_q = -\kappa \nabla T. \quad (2.4)$$

Здесь  $J_q$  – плотность потока тепла,  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности. Таким образом, закон теплопроводности Фурье (2.4) записывается в таком же виде, что и для однокомпонентной жидкости.

На рис. 2.1 представлены карты устойчивости для горизонтального слоя с идеально теплопроводными верхней и нижней границами (предположение, что теплопроводность стенок много больше теплопроводности жидкости внутри полости). Параметр  $Ra$  – число Релея, которое отвечает за величину нагрева полости: при  $Ra > 0$  – нагрев снизу ( $\nabla T < 0$ ), при  $Ra < 0$  – нагрев сверху ( $\nabla T > 0$ ). Параметр  $\Psi$  – отношение разделения:  $\Psi = -\beta_C/\beta_T \cdot S_T$ . Отметим, что большинство веществ при нагревании расширяется, уменьшая при этом свою плотность, таким образом  $\beta_T > 0$ , так что с увеличением температуры смеси  $T$  ее плотность уменьшается (см. уравнение (2.2)); а поскольку мы выбрали в качестве концентрации  $C$  легкий компонент, то с увеличением  $C$  плотность смеси также должна уменьшаться, тогда  $\beta_C > 0$ .

Из рис. 2.1 видно, что при  $Ra > 0$  (подогрев снизу) и  $\Psi > 0$  устойчивость системы понижается по мере увеличения отношения разделения. В этом случае  $\nabla T < 0$  и  $S_T < 0$  (также  $D_T < 0$ ), и из уравнения (2.3) следует, что  $\nabla C < 0$ , то есть внизу области скапливается больше легкого компонента, вверху – тяжелого (схематически представлено на рис. 2.2 а). Конвекция развивается, если разделение

компонентов достигает некоторого критического значения. Термодиффузия, таким образом, вносит дестабилизирующий вклад в распределение плотности (вдобавок к теплопроводности), причем, чем больше по величине  $S_T$ , тем больше эффект разделения и тем менее устойчива система. В случае, когда легкий компонент скапливается вблизи горячей стенки, говорят об аномальном эффекте термодиффузии, в противном случае эффект термодиффузии называется нормальным.

При подогреве снизу для  $\Psi < 0$  коэффициент  $S_T > 0$ , и градиент концентрации легкого компонента  $\nabla C > 0$  (см. рис. 2.2 b), что, таким образом, повышает устойчивость. Другими словами, стабилизирующий вклад термодиффузии конкурирует с дестабилизирующим вкладом теплопроводности. Неустойчивость в этом случае также может развиваться, причем колебательным образом, однако для развития конвекции требуется более сильный нагрев области.

Для нагрева сверху ( $Ra < 0$ ) и  $\Psi < 0$  градиент концентрации  $\nabla C < 0$  (рис. 2.2 c), вверху у горячей стенке накапливается тяжелый компонент, что и приводит к неустойчивости. Устойчивость возможна лишь, если эффект разделения компонентов слаб сам по себе (малые значения  $\Psi$ ), либо при слабом нагреве (малые значения  $Ra$ ), что соответственно ведет к слабому разделению. Отметим, что в данном случае неустойчивость возможна, даже если полный градиент плотности соответствует устойчивой стратификации, что объясняется разницей теплового и диффузионного времен [141].

Последний случай, нагрев сверху ( $Ra < 0$ ) и  $\Psi > 0$ , изображен на рис. 2.2 d: в этом случае и термодиффузия, и теплопроводность оказывают стабилизирующее действие, и неустойчивость не наблюдается.

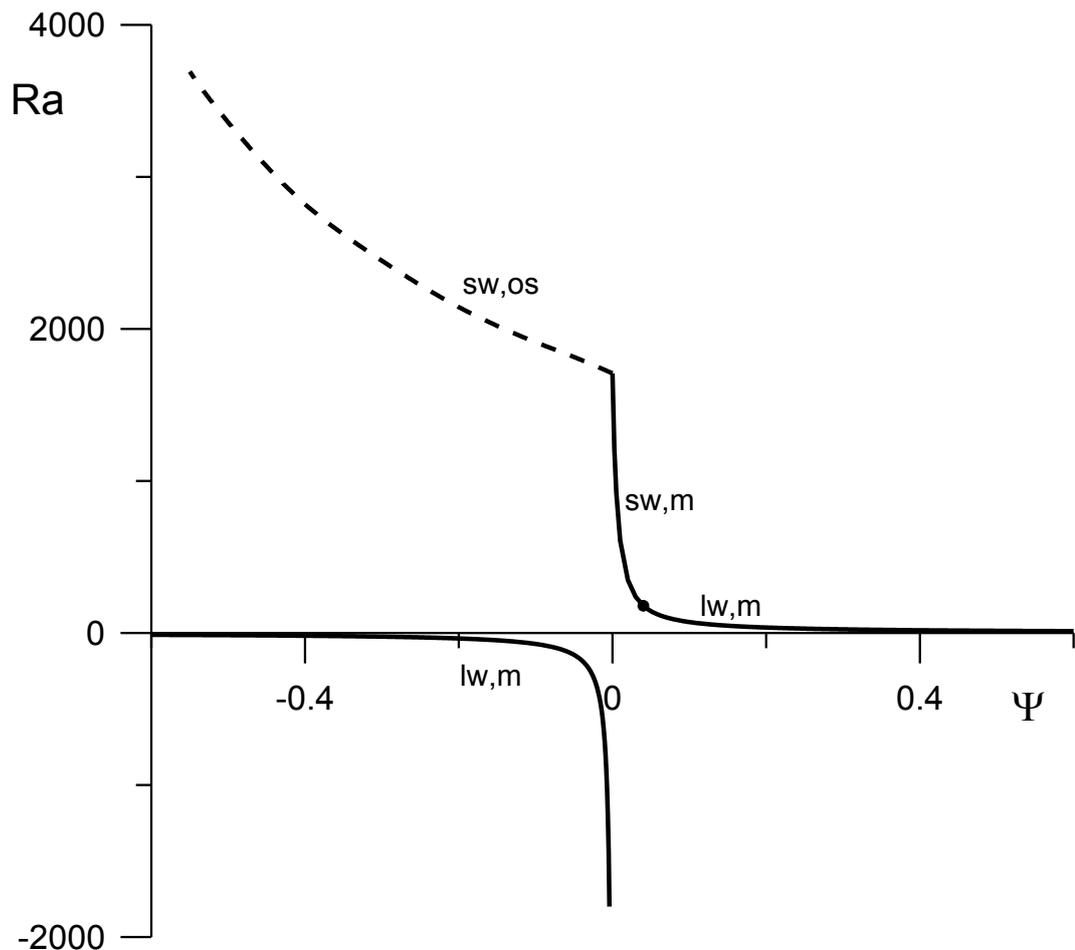


Рисунок 2.1. Карта устойчивости бинарной смеси для горизонтального слоя с идеально теплопроводными границами на плоскости параметров число Релея ( $Ra$ )–отношение разделения ( $\Psi$ ),  $Pr = 10$ ,  $Sc = 1000$ . В верхней полуплоскости области неустойчивости соответствуют зонам выше кривой, в нижней полуплоскости – зоне ниже кривой. На рисунке введены обозначения для мод неустойчивости: sw (short wave) – коротковолновая, lw (long wave) – длинноволновая, os (oscillatory) – колебательная (штриховая линия), m (monotonic) – монотонная (сплошные линии). Рисунок предоставлен Т.П. Любимовой.

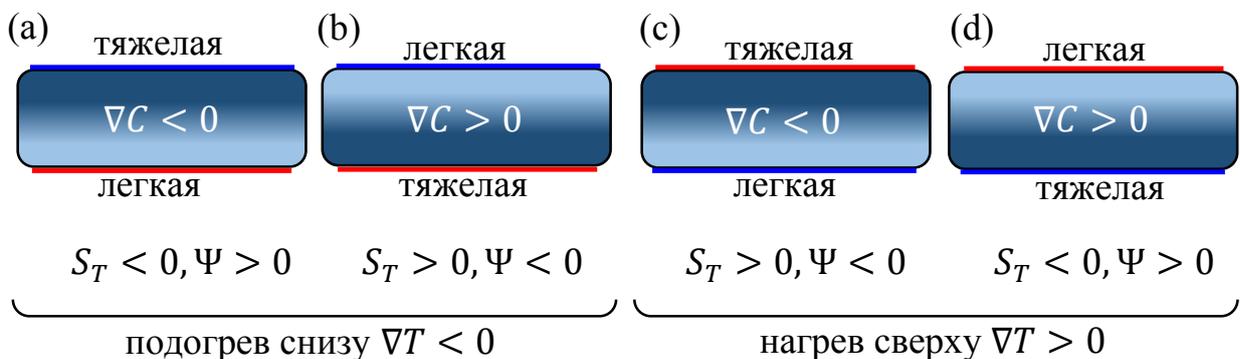


Рисунок 2.2. Равновесное распределение концентрации в зависимости от нагрева и знаков  $S_T$  и  $\Psi$ .

При рассмотрении системы из трех (и более) компонентов изучение поведения смеси осложняется взаимодействием большего числа компонентов, в частности, помимо эффектов Соре и диффузии наблюдается явление перекрестной диффузии. Для трехкомпонентной системы необходимо знать два диффузионные потока вещества  $J_1, J_2$  (для смеси из  $n$  компонентов присутствует  $n - 1$  независимых уравнений,  $\sum_i^n C_i = 1$  и  $\sum_i^n J_i = 0$ ):

$$J_1 = -\rho(D_{11}\nabla C_1 + D_{12}\nabla C_2 + D_{T1}\nabla T), \quad (2.5)$$

$$J_2 = -\rho(D_{21}\nabla C_1 + D_{22}\nabla C_2 + D_{T2}\nabla T). \quad (2.6)$$

Здесь  $C_1, C_2$  – массовые концентрации первого и второго компонентов,  $\rho, T$  – плотность и температура смеси,  $D_{ik}$  – коэффициенты диффузии (теория Фика),  $D_{Ti}$  – коэффициенты термодиффузии ( $D_{Ti} = C_i(1 - C_i)D'_{Di}$ ). Закон теплопроводности Фурье (2.4) остается в той же форме, что и для бинарных сред. В состоянии равновесия поток вещества равен нулю, в этом случае получаем связь между равновесным градиентом температуры и концентрации:

$$\nabla C_i = -S_{Ti}\nabla T, \quad i = 1, 2. \quad (2.7)$$

Коэффициенты  $S_{Ti}$  есть коэффициенты Соре:  $S_{Ti} = \sum_{k=1}^2 (D^{-1})_{ik} D_{Tk}$ ,  $D^{-1}$  – обратная матрица коэффициентов диффузии. Знаки коэффициентов  $S_{Ti}$  и  $D_{Ti}$  в бинарных смеси всегда совпадает, но в тройных могут отличаться. Также отметим, что коэффициенты, за исключением главных (диагональных) коэффициентов диффузии  $D_{ii}$ , не являются знакоопределенными. Вопрос о возможности отрицательных главных коэффициентов диффузии является открытым [150], при этом, однако, преобладающим остается мнение, что коэффициенты на главной диагонали матрицы диффузии должны быть положительно определенными.

Запишем второй закон термодинамики в дифференциальной форме в виде уравнения баланса [151]

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \operatorname{div} J_s = \sigma, \quad (2.8)$$

где  $\rho$  – плотность,  $s$  – энтропия единицы массы,  $J_s$  – поток энтропии на единицу поверхности в единицу времени,  $\sigma$  – производство энтропии (величина, которая характеризует интенсивность источника энтропии). При этом  $\sigma \geq 0$ , что выражает собой тот факт, что энтропия не может убывать: для равновесных процессов  $\sigma = 0$ , а для неравновесных  $\sigma > 0$ . Учитывая только диффузию и теплопроводность (невязкая, либо покоящаяся, среда в отсутствие химических реакций и внешних сил), для  $n$ -компонентной системы можно записать выражение:

$$\sigma = -\frac{1}{T^2} J_q \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^n J_k \cdot \nabla \mu_k. \quad (2.9)$$

Здесь  $J_q$  – поток тепла,  $J_k$  и  $\mu_k$  – соответственно диффузионный поток вещества и химический потенциал  $k$ -ого компонента смеси. В слагаемых для выражения производства энтропии (2.9) можно выделить две составляющие: потоки ( $J_q$  и  $J_k$ ,  $k = 1 \dots n$ ) и термодинамические силы  $X_k \sim \nabla(\dots)$ . Феноменологическая теория Онзагера утверждает, что связь между потоками и термодинамическими силами является линейной:

$$J_i = \sum_k L_{ik} X_k, \quad (2.10)$$

где  $L_{ik}$  – феноменологические коэффициенты Онзагера. Выражение для производства энтропии будет иметь вид  $\sigma = \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k$ . Для условия  $\sigma \geq 0$  необходимо, чтобы главные миноры матрицы  $L_{ik} + L_{ki}$  были неотрицательными [151], что эквивалентно условию положительности диагональных элементов, для недиагональных элементов при этом должно выполняться неравенство  $L_{ii} L_{kk} \geq \frac{1}{4} (L_{ik} + L_{ki})^2$ .

Найдем связь между феноменологической теорией Онзагера и параметрами смеси, которые используются в практических расчетах и физических экспериментах. Запишем явно выражения из теории Онзагера для потока тепла и диффузионных потоков вещества:

$$J_q = -\frac{L_{qq}}{T^2} \nabla T, \quad (2.11)$$

$$J_i = -\frac{L_{iq}}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^{n-1} L_{ik} \nabla(\mu_k - \mu_n), \quad i = 1 \dots n - 1. \quad (2.12)$$

Коэффициент  $L_{qq}/T^2$  в выражении (2.11) очевидно равен коэффициенту теплопроводности  $\kappa$ .

Уравнение (2.12) запишем для наглядности в частном случае бинарной жидкости ( $n = 2$ ):

$$J_1 = -\frac{L_{1q}}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} L_{11} \nabla(\mu_1 - \mu_2). \quad (2.13)$$

Используя уравнение Гиббса-Дюгема, градиент  $\nabla(\mu_1 - \mu_2)$  можно преобразовать

$$\nabla(\mu_1 - \mu_2) = \left(1 + \frac{C_1}{C_2}\right) \nabla\mu_1 = \frac{1}{C_2} \left(\frac{\partial\mu_1}{\partial C_1}\right) \nabla C_1, \quad (2.14)$$

Тогда из соотношения (2.13) получаем

$$J_1 = -\frac{L_{1q}}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} L_{11} \frac{1}{C_2} \left(\frac{\partial\mu_1}{\partial C_1}\right) \nabla C_1. \quad (2.15)$$

Из сравнения уравнений (2.1) и (2.15) видно, что коэффициент термодиффузии  $D_T = L_{1q}/(\rho T^2)$ , а коэффициент диффузии  $D = \frac{1}{\rho T} L_{11} \frac{1}{C_2} \left(\frac{\partial\mu_1}{\partial C_1}\right)$ . В случае тройных смесей связь между коэффициентами диффузии и коэффициентами Онзагера имеет похожий вид.

Для описания конвективных процессов используют безразмерные параметры – отношения разделения  $\psi_i$ , в  $n$ -компонентной среде необходимо  $n - 1$  коэффициентов  $\psi_i = \beta_{Ci}/\beta_T \cdot S_{Ti}$ . Важной величиной является суммарное отношение разделения, т.е. сумма  $n - 1$  отношений разделения отдельных компонентов:  $\Psi = \sum_i^{n-1} \psi_i$ . Напомним, что  $n$ -ая компонента смеси является зависимой, и сумма  $\sum_i^n \psi_i = 0$  (что следует из условий, накладываемых на суммарные диффузионный поток  $\sum_i^n J_i = 0$  и концентрацию  $\sum_i^n C_i = 1$ ).

Как было сказано ранее, для трехкомпонентных смесей поведение осложняется взаимодействием большего числа компонентов. В случае конвекции это обстоятельство будет продемонстрировано в рассматриваемой в диссертации задаче о подогреваемой сверху смеси толуол-метанол-циклогексан в замкнутой ячейке.

В то же время, в ряде случаев наличие дополнительного компонента оказывает лишь количественный сдвиг в поведении системы по сравнению с бинарной жидкостью. На рис. 2.3 представлены карты устойчивости тройных жидких смесей для горизонтального слоя (аналогично случаю, представленному на рис. 2.1) при значениях отношения разделения одного из компонентов  $\psi_1 = 0.4$  (рис. 2.3 а) и  $\psi_1 = -0.4$  (рис. 2.3 б). Качественно карты устойчивости аналогичны рис. 2.1, при этом наблюдается сдвиг по оси  $\Psi$  на величину, приблизительно равную  $\psi_1$ ; в случае, представленном на рис. 2.3 б, также появляется дополнительная колебательная ветвь неустойчивости при нагреве сверху.

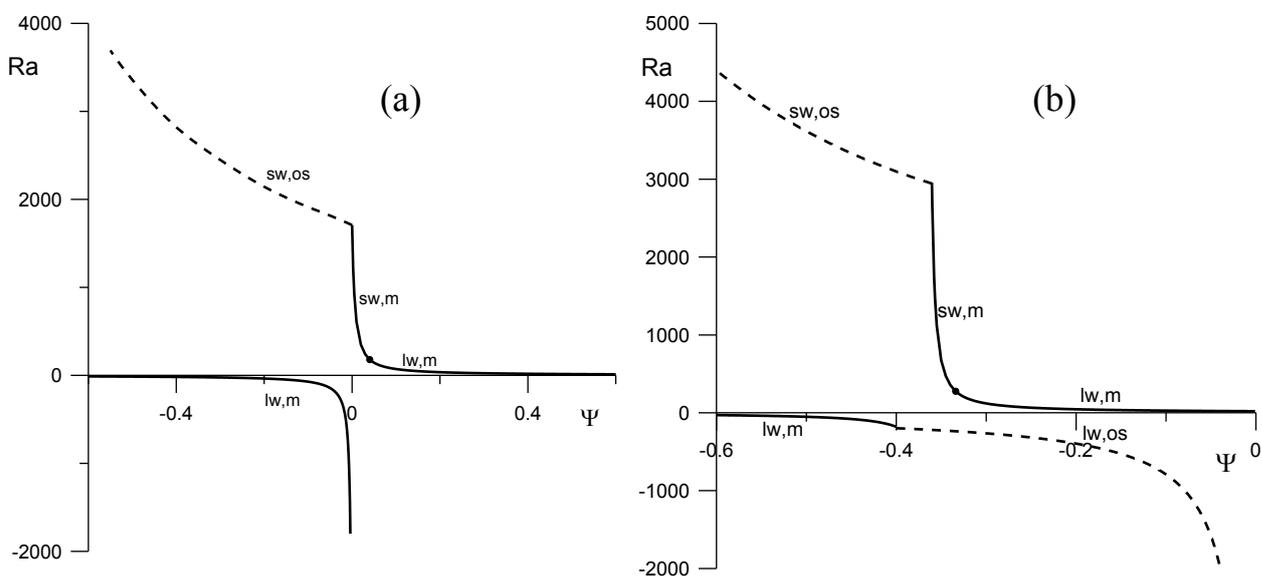


Рисунок 2.3. Карта устойчивости тройной смеси для горизонтального слоя с идеально теплопроводными границами на плоскости параметров число Релея (Ra)– суммарное отношение разделения ( $\Psi$ ),  $Pr = 10$ ,  $Sc_1 = 100$ ,  $Sc_2 = 1000$ . а)  $\psi_1 = 0.4$ , б)  $\psi_1 = -0.4$ . Обозначения кривых аналогичны обозначениям на рис. 2.1. Рисунки предоставлены Т.П. Любимовой.

Остановимся подробнее на тепловых условиях задачи. Уравнение теплопроводности без источников тепла, конвективного движения и прочих эффектов имеет вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (2.16)$$

где  $\chi = \kappa / \rho c_p$  – коэффициент температуропроводности,  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности,  $\rho$  – плотность,  $c_p$  – удельная теплоемкость.

Уравнение (2.16) является уравнением второго порядка; для решения краевой задачи в этом случае, как известно, необходимо задать по одному условию на каждой границе. Всего возможны три варианта: 1) задача Дирихле – задание значения функции на границе, т.е. в данном случае фиксированной температуры; 2) задача Неймана – задание градиента, что в случае уравнения (2.16) аналогично заданию фиксированного теплового потока  $q = -\kappa(\partial T / \partial z)$ ; 3) Задача Ньютона (Робина/Фурье) – комбинирование первых двух типов. Последний вариант граничных условий для уравнения теплопроводности также носит имя закона Ньютона-Рихмана и записывается в виде:

$$-\kappa \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\Gamma} = \alpha (T_{\Gamma} - T_{out}). \quad (2.17)$$

Здесь  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи,  $T_{out}$  – температура окружающей среды, индекс  $\Gamma$  обозначает значение функции на границе. В безразмерном виде уравнение (2.17) можно записать в виде:

$$-\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{\Gamma} = \text{Bi} \cdot (T_{\Gamma} - T_{out}), \quad (2.18)$$

где введено число Био (Biot)  $\text{Bi} = \alpha L / \kappa$ ,  $L$  – характерный масштаб задачи.

Граничные условия первого и второго рода можно рассматривать как два частных предельных случая, тогда как условия третьего рода отвечают наиболее общему варианту [152,153]. При  $\text{Bi} \rightarrow \infty$  граничные условия переходят в условия первого рода, при  $\text{Bi} \rightarrow 0$  – соответственно в условия второго рода. Как было

сказано выше, на рис. 2.1 представлены результаты для идеально теплопроводных границ, что математически соответствует задаче Дирихле.

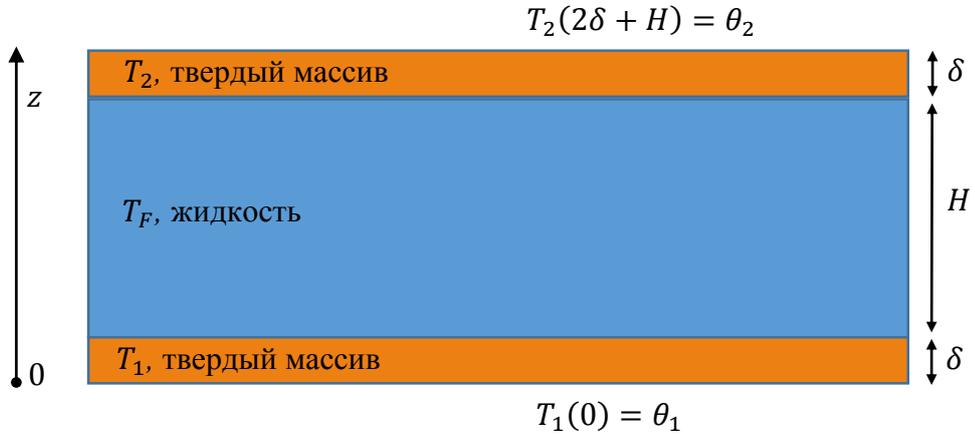


Рисунок 2.4. Геометрия слоя жидкости, окруженного твердыми массивами.

На ситуацию с граничными условиями для температуры также можно посмотреть другим образом. Рассмотрим более общую задачу, когда жидкость сверху и снизу окружена твердыми массивами конечной толщины. Данный случай представлен на рис. 2.4: нижняя твердая стенка с температурой  $T_1(z)$  и толщиной  $\delta$ , верхняя твердая стенка с температурой  $T_2(z)$  и толщиной  $\delta$  и слой жидкости между ними с температурой  $T_F(z)$  и толщиной  $H$ . Пусть в слое между твердыми массивами отсутствуют иные процессы, кроме теплопроводности. Тогда для всех трех зон можно записать уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = \chi_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial T_2}{\partial t} = \chi_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial T_F}{\partial t} = \chi_F \frac{\partial^2 T_F}{\partial z^2}. \quad (2.19)$$

В стационарном случае уравнения (2.19) сводятся к одномерным уравнениям Лапласа, решение которых в общем случае дает:

$$T_1(z) = A_1 z + B_1, \quad T_2(z) = A_2 z + B_2, \quad T_F(z) = A_F z + B_F. \quad (2.20)$$

Для определения 6 констант  $A_1, A_2, A_F, B_1, B_2, B_F$  необходимо 6 граничных условий. Пусть внешний нагрев системы определяется заданием температуры на внешних нижней и верхней границах:  $T_1(z=0) = \theta_1, T_2(z=2\delta + H) = \theta_2$ . На границах

твердых массивов и жидкости необходимо поставить условия непрерывности температуры и теплового потока [141] (в неоднородном случае для теплового потока необходима непрерывность нормальной составляющей).

$$z = \delta: \quad T_1 = T_F, \quad \kappa_1 \frac{\partial T_1}{\partial z} = \kappa_F \frac{\partial T_F}{\partial z}, \quad (2.21)$$

$$z = \delta + H: \quad T_F = T_2, \quad \kappa_F \frac{\partial T_F}{\partial z} = \kappa_2 \frac{\partial T_2}{\partial z}, \quad (2.22)$$

Таким образом, решение уравнений (2.20) запишется в следующем виде:

$$T_1 = -\frac{\theta_1 - \theta_2}{H\tilde{\kappa} + 2\delta}z + \theta_1, \quad (2.23)$$

$$T_2 = \frac{\theta_1 - \theta_2}{H\tilde{\kappa} + 2\delta}z + \theta_2 + \frac{(\theta_1 - \theta_2)(2\delta + H)}{H\tilde{\kappa} + 2\delta}, \quad (2.24)$$

$$T_F = \frac{\theta_1 - \theta_2}{H + \frac{2\delta}{\tilde{\kappa}}}z + \frac{\delta(\theta_1 + \theta_2)}{H\tilde{\kappa} + 2\delta} + \frac{\delta(\theta_1 - \theta_2) + H\theta_1}{H + \frac{2\delta}{\tilde{\kappa}}}. \quad (2.25)$$

Здесь учтено, что верхний и нижний массив состоят из одного вещества (коэффициенты теплопроводности  $\kappa_1 = \kappa_2$ ), и введено обозначение  $\tilde{\kappa} = \kappa_1/\kappa_F$ .

Идеально теплопроводными границами, с физической точки зрения, называются такие границы, теплопроводность которых много больше теплопроводности окружающей ими жидкости, т.е.  $\tilde{\kappa} \rightarrow \infty$ . Данная ситуация аналогична рассмотренной выше с  $Bi \rightarrow \infty$ . При нормальных условиях это выполняется, например, для воды, которая окружена массивами из меди ( $\tilde{\kappa} \sim 600$ ), алюминия ( $\tilde{\kappa} \sim 350$ ) или других металлов и др. При этом коэффициенты при  $z$  в уравнениях для распределения температуры в твердых массивах (2.23)-(2.24) стремятся к нулю, таким образом, в данном случае температуру внутри твердых массивов можно считать постоянной. Поэтому идеально теплопроводные границы также называют изотермическими. На рис. 2.5 а представлено распределение температуры в слое, окруженном двумя твердыми массивами высокой теплопроводности; видно, что уже при  $\tilde{\kappa} \sim 10$  наклон кривой не является крутым, т.е. в данном случае границы с хорошей точностью можно считать

изотермическими. Таким образом, рассматривая слой жидкости с идеально теплопроводными границами, нет необходимости в решении уравнений для температуры в твердых массивах; мы можем ограничиться непосредственно исследованием конвекции в жидком слое, используя для температуры на границе условие Дирихле.

Для другого предельного случая отношение  $\tilde{\kappa} \rightarrow 0$  (аналогично  $Bi \rightarrow 0$ ), что соответствует краевой задаче Неймана, т.е. заданию теплового потока на границе. Теплопроводность большинства жидкостей относительно невелика  $\kappa_F < 1$  Вт/(м·К). Тем не менее, обозначенное выше отношение  $\tilde{\kappa} \sim 1/10$  вполне достижимо. Для этого необходимо использовать материалы для твердых массивов с хорошими изоляционными свойствами, например: полиизоцианурат ( $\kappa \sim 0.023$  Вт/м·К), аэрогель ( $\kappa \sim 0.017$  Вт/м·К), некоторые разновидности ячеистого бетона ( $\kappa \sim 0.1$  Вт/м·К) и другое.

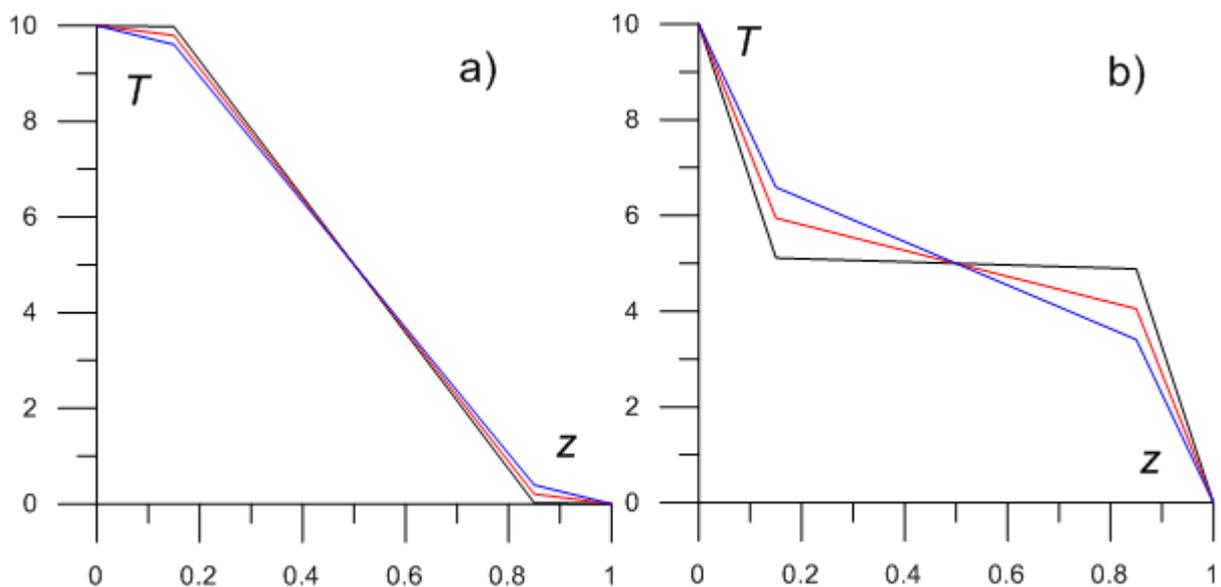


Рисунок 2.5. Равновесное распределение температуры в системе, представленной на рис. 2.4: а) отношение теплопроводности массивов больше теплопроводности слоя жидкости, черная линия  $\tilde{\kappa} = 100$ , красная линия  $\tilde{\kappa} = 10$ , синяя линия  $\tilde{\kappa} = 5$ ; б) отношение теплопроводности массивов меньше теплопроводности слоя жидкости, черная линия  $\tilde{\kappa} = 1/100$ , красная линия  $\tilde{\kappa} = 1/10$ , синяя линия  $\tilde{\kappa} = 1/5$ .

В монографии [141] представлены результаты исследований конвекции однокомпонентных жидкостей во всем диапазоне значений  $\tilde{\kappa} = \overline{0, \infty}$ . Показано, что критическое число Релея монотонно убывает от 1707 до 720 по мере уменьшения  $\tilde{\kappa}$ , при этом длина волны наиболее опасных возмущений увеличивается, так что в пределе  $\tilde{\kappa} \rightarrow 0$  неустойчивость становится длинноволновой (волновое число  $k \rightarrow 0$ ).

Отметим, что при идеально теплопроводных границах возможно эффективно экспериментально исследовать возникновение конвективной неустойчивости [141]: «В этом случае, правда, затрудняется визуальное наблюдение структуры возникающих движений, но зато значительно облегчаются тепловые измерения, с помощью которых удастся весьма четко фиксировать момент появления неустойчивости... При возникновении неустойчивости чисто тепловой режим переноса тепла нарушается, появляется конвективная составляющая теплового потока, в результате чего зависимость теплового потока от разности температур испытывает излом. Положение этого излома дает возможность с достаточной точностью определить критическую разность температур и критическое число Рэлея.»

Таким образом, модель идеально теплопроводных (изотермических) границ является удобной для теоретического и экспериментального изучения. При этом, как было показано выше, выбор такого типа тепловых граничных условий является справедливым и обоснованным для большинства случаев исследования физических процессов. Процессы конвекции, тепло- и массопереноса в предположении идеально теплопроводных границ для многокомпонентных смесей исследовались во множестве работ, например, обобщение результатов представлено в монографии [154].

Напротив, другой предельный случай (заданный тепловой поток) является практически неизученным для многокомпонентных смесей. В диссертации рассматриваются возникновение и развитие неустойчивости двух- и трёхкомпонентных смесей с эффектом Соре в плоском слое при условии заданного

теплового потока на границе. Рассматриваемая задача, таким образом, имеет новизну и актуальность.

В диссертации также рассматривается задача конвекции для конкретной смеси толуол-метанол-циклогексан в массовых пропорциях 0.61/0.32/0.07 в замкнутой прямоугольной области. Тепловые условия соответствуют идеально теплопроводным границам. Особенностью задачи является тот факт, что для данной смеси суммарное отношение разделения  $\Psi = -(\beta_{C1}/\beta_T \cdot S_{T1} + \beta_{C2}/\beta_T \cdot S_{T2})$  оказывается близким к нулю, что приводит к нетривиальному поведению.

Конвекция в замкнутых областях является хорошо изученным явлением. Для однокомпонентной смеси возникновение и надкритические режимы изучались, например, в работах [155-163]. В квадратной области при подогреве снизу порог возникновения конвекции для изотермических боковых граней  $Ra \approx 5100$ , для адиабатических –  $Ra \approx 2500$ , неустойчивость при этом развивается в виде одновихревого движения. С удлинением по горизонтали в системе формируется несколько вихрей, для достаточно длинной ячейки результаты приближаются к предельному случаю плоского слоя (с критическим числом Релея  $Ra = 1707$  и волновым числом  $k = 3.116$  для изотермических границ). Вихри, которые возникают в двухмерной геометрии, в трехмерном случае соответствуют структурам в виде вытянутых цилиндрических валов (жидкость циркулирует в азимутальном направлении), ось которых располагается параллельно меньшей стороне основания области (для ячейки с квадратным основанием возможно также диагональное расположение, которое, впрочем, неустойчиво). В ячейке с отношением сторон  $5 \times 5 \times 1$  критическое число Релея  $\sim 2000$ , что близко к случаю плоского слоя. В трехмерном случае различные факторы могут приводить к более сложным режимам, например, к образованию гексагональных ячеек, что, в частности, возможно при рассмотрении вязкости, зависящей от температуры [161, 162], или при определенных соотношениях чисел Релея, Прандтля и волнового числа [163].

Результаты исследований конвекции двух- и трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в замкнутых областях можно найти, например, в работах [164-170].

Наличие дополнительных эффектов диффузии и термодиффузии еще больше усложняет поведение системы как для двухмерных, так и для трехмерных режимов. Тем не менее, можно отметить, что при переходе от однокомпонентных жидкостей к многокомпонентным в замкнутых областях поведение системы повторяет общие закономерности, которые характерны при переходе от рассмотрения плоского слоя однокомпонентной жидкости к случаю плоского слоя многокомпонентной жидкости с эффектом Соре (см. рис. 2.1 и рис. 2.3).

В случае исследования конвекции с эффектом Соре важным моментом является знание значений коэффициентов, определяющих процесс термодиффузии в рассматриваемой жидкости. Нахождение данных коэффициентов, как теоретически, так и экспериментально, заметно усложняется с ростом числа компонентов смеси.

Среди теоретических подходов можно выделить методы молекулярной динамики, суть которых заключается в прямом численном моделировании динамики некоторого числа молекул (от нескольких тысяч до нескольких десятков миллионов молекул) за небольшой промежуток времени (обычно не больше наносекунд), при этом действующие между молекулами силы задаются некоторым потенциалом межмолекулярного взаимодействия (в простейшем случае потенциал Леннарда-Джонса). Типичным примером неравновесной молекулярной динамики [171,172] является следующая модель: первоначально в одной части области находится один сорт частиц, во второй части – другой сорт частиц, после чего начинается расчет, частицы приводятся в движение, и по величине потока частиц можно определить коэффициенты диффузии; похожим образом определяются другие коэффициенты. В равновесной молекулярной динамике [173-175] начальное распределение молекул задается смешанным, коэффициенты переноса рассчитываются посредством вычисления корреляционных функций скоростей, координат, импульсов и др.

Одним из основных и наиболее успешных экспериментальных методов определения коэффициента Соре является термодиффузионная колонна [138,154,176,177]. Термодиффузионная колонна представляет собой вертикальную

установку в виде плоского слоя или цилиндра, к которой прикладывается поперечный градиент температуры. При этом в колонне возникает конвективное движение, которое приводит к формированию вертикального градиента концентрации. Измерение данного градиента позволяет определить значения коэффициентов  $S_{ore}$ .

В другой группе экспериментальных методов используются ячейка или плоский горизонтальный слой при вертикальном нагреве [178-180]. Коэффициент  $S_{ore}$  определяется по равновесному полю концентрации с использованием оптических методов. В данных методах важным условием является отсутствие конвекции, поэтому эффективными являются измерения, проводимые в условиях невесомости, чему была посвящена серия экспериментов DCMIX – измерение коэффициентов диффузии и термодиффузии на Международной космической станции [181].

Задача, рассматриваемая в диссертации, непосредственно связана с экспериментом DCMIX-2, в котором исследовались смеси толуол-метанол-циклогексан и толуол-циклогексан в различных пропорциях. Для нахождения коэффициентов диффузии и термодиффузии проводились измерения показателя преломления среды с помощью методов оптической интерферометрии [179]. Для трёхкомпонентных смесей необходимо использование двух источников лазерного излучения с различными длинами волн (в экспериментах DCMIX интерферометр с длинами волн  $\lambda_{n1} = 670$  нм,  $\lambda_{n2} = 935$  нм), для которых отклонения показателей преломления  $n'_1, n'_2$  соответственно записываются в виде:

$$n'_1 = R_{11} \cdot C'_1 + R_{12} \cdot C'_2, \quad (2.26)$$

$$n'_2 = R_{21} \cdot C'_1 + R_{22} \cdot C'_2. \quad (2.27)$$

Здесь  $R_{ij} = (\partial n_i / \partial C_j)_{T, C_i}$  – предварительно измеренные коэффициенты,  $C'_i = C_i - C_{i0}$  – отклонения концентрации от средних значений,  $n'_i = n_i - n_{i0}$ . Характерные диффузионные времена для жидких смесей много больше, чем тепловые, т.е.

температура в системе устанавливается намного быстрее, поэтому показатель преломления  $n_{i0}$ , отвечающий средней концентрации  $C_{i0}$ , записан с учетом уже установившегося поля температуры. Таким образом, измеряя  $n'_1$ ,  $n'_2$  и решая систему уравнений (2.26)-(2.27), возможно получить поле концентрации, по значениям которого определяются коэффициенты  $S_{ore}$ .

Как показано в [180], матрица коэффициентов  $R_{ij}$  в системе линейных уравнений (2.26)-(2.27) может быть плохо обусловленной. Это означает, что при небольшой погрешности в измерении  $n'_1$ ,  $n'_2$ , мы можем получить значения коэффициентов  $S_{ore}$ , измеренных с существенной ошибкой.

В диссертации рассматривается смесь толуол-метанол-циклогексан в массовых пропорциях 0.61/0.32/0.07, результаты измерений коэффициентов  $S_{ore}$  для данной смеси представлены в работе [179]. Данные экспериментов, полученные с Международной космической станции, обрабатывались двумя группами исследователей с использованием различных методик. В результате были получены два варианта коэффициентов  $S_{ore}$ : 1)  $S_{T1} = 0.504 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  и  $S_{T2} = -1.098 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ; 2)  $S_{T1} = 0.387 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  и  $S_{T2} = -1.145 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ .

Во многих других случаях разница между двумя наборами данных могла бы быть расценена как незначительная, что приводило бы лишь к несущественным количественным различиям в поведении смеси. Однако, как показали вычисления, в рассматриваемой смеси суммарное отношение разделения  $\Psi = \psi_1 + \psi_2 = -(\beta_{C1}/\beta_T \cdot S_{T1} + \beta_{C2}/\beta_T \cdot S_{T2})$  оказывается близким к нулю, при этом в первом случае оно оказывается положительным  $\Psi = 0.0154$ , а во втором – отрицательным  $\Psi = -0.0006$ .

В теории устойчивости многокомпонентных смесей суммарное отношение разделения можно рассматривать как параметр, который определяет отношение сил плавучести, вызванных градиентами концентрации, к силам плавучести, вызванных градиентом температуры. При этом смена знака  $\Psi$  с положительного на отрицательный (с учетом фиксированного нагрева) свидетельствует о том, что сила

плавучести из-за суммарного концентрационного вклада становится дестабилизирующей.

В диссертации проводится моделирование процесса конвекции для двух представленных выше наборов значений коэффициентов  $Co_{re}$  (а также для их средних значений). Даются детальное описание и анализ эволюции происходящих в жидкой смеси процессов, приводится сравнение с экспериментальными данными из работы [179].

В работах по изучению процессов конвекции и тепломассопереноса в замкнутых областях и бесконечных слоях подобные ситуации практически не исследовались. В то же время исследование поведения системы на границе устойчивости является нетривиальным и важным для понимания процессов теплопроводности, диффузии, конвекции и их взаимодействия. Данное исследование проводилось в рамках работ по анализу и интерпретации результатов эксперимента DCMIX-2. Рассматриваемая задача, таким образом, имеет практическую значимость, новизну и актуальность.

Для описания поведения  $n$ -компонентных смесей будем пользоваться уравнениями свободной конвекции в приближении Буссинеска [146], с учетом эффекта  $Co_{re}$ .

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} - (\beta_T T + IBC) \mathbf{g}, \quad (2.28)$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \chi \nabla^2 T, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{C} = D \nabla^2 \mathbf{C} + \mathbf{D}_T \nabla^2 T. \quad (2.31)$$

Здесь  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  – вектор скорости в декартовой системе координат с радиус вектором  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ,  $\mathbf{C} = (C_1, C_2 \dots C_{n-1})^T$  – вектор компонентов концентрации,  $T$  – температура (значения температуры и концентрации будем отсчитывать от

некоторых средних значений  $T_0$  и  $\mathbf{C}_0$ ),  $p$  – давление,  $\mathbf{g} = (0,0,-g)$  – вектор ускорения свободного падения,  $\rho_0$  – средняя плотность,  $\nu$  – кинематическая вязкость,  $\chi$  – коэффициент температуропроводности,  $\mathbf{D}_T = (D_{T1}, D_{T2} \dots D_{n-1})^T$  – вектор коэффициентов термодиффузии,  $D$  – квадратная матрица коэффициентов диффузии с компонентами  $D_{ij}$  ( $i, j = 1 \dots n - 1$ ),  $\beta_T = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_C$  – коэффициент теплового расширения,  $B = \text{diag}(\beta_{C1}, \beta_{C1} \dots \beta_{Cn-1})$  – диагональная матрица, где  $\beta_{Ci} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial C_i} \Big|_{T, C_k, i \neq k}$  – коэффициенты концентрационного расширения,  $\mathbf{I} = (1, 1 \dots 1)$  – единичный вектор размерности  $n - 1$  (таким образом  $\mathbf{I} \mathbf{B} \mathbf{C} = \sum_i^{n-1} \beta_{Ci} C_i$ ).

В уравнении (2.28) давление  $p$  записано без учета гидростатической составляющей, т.е. учтено, что  $\nabla p_{st} = \rho_0 \mathbf{g}$ . Учтено также, что плотность линейно зависит от температуры и концентрации:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T T - \mathbf{I} \mathbf{B} \mathbf{C}). \quad (2.32)$$

Приближение Буссинеска подразумевает учет переменности плотности только в слагаемых с массовыми силами (последнее слагаемое в уравнении (2.28)). Как показано в [182], для оправданного использования приближения Буссинеска необходимо выполнение двух условий: 1) параметр Буссинеска  $\beta_T \Theta \rightarrow 0$ , где  $\Theta$  – характерная разница температур в системе; 2) параметр  $gl^3/\nu\chi \rightarrow \infty$ , где  $l$  – характерный размер области. Параметр Буссинеска характеризует величину изменения плотности в результате изменения температуры, для жидких сред  $\beta_T \sim 10^{-3} \dots 10^{-4} \text{ K}^{-1} (\text{°C}^{-1})$ , при рассмотрении конвективных задач  $\Theta \sim 10 \text{ K} (\text{°C})$ , так что  $\beta_T \Theta \sim 10^{-2}$  (в общем случае также необходимо выполнение аналогичного условия для концентрации, однако на практике данный параметр оказывается еще меньше, чем параметр Буссинеска). Второй параметр,  $gl^3/\nu\chi$ , характеризует относительный вклад факторов плавучести и объемного расширения жидкости в формирование поля скорости. Условие, накладываемое на данный параметр, практически всегда заведомо выполняется: коэффициенты

температуропроводности и кинематической вязкости для жидкостей  $\nu, \chi \sim 10^{-6} \dots 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $g \sim 10 \text{ м}/\text{с}^2$ , и если взять  $l \sim 1 \text{ мм}$ , то  $gl^3/\nu\chi \sim 10^4$ . Кроме того, справедливость использования приближения Буссинеска подтверждена многочисленными сравнениями результатов теоретических расчетов и физических экспериментов [146].

Перейдем к безразмерным величинам. Выберем в качестве единицы измерения длины вертикальный размер области  $h$ , времени  $h^2/\nu$ , скорости  $\nu/h$ , температуры  $\Theta$ , концентрации  $\beta_T \Theta B^{-1}$ , давления  $\rho_0 \nu^2/h^2$ , плотности  $\rho_0 \beta_T \Theta$ . Система уравнений (2.28)-(2.31) переписется в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} (T + \mathbf{IC}) \boldsymbol{\gamma}, \quad (2.33)$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^2 T, \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{C} = SC (\nabla^2 \mathbf{C} + \boldsymbol{\psi} \nabla^2 T). \quad (2.36)$$

Здесь  $\boldsymbol{\gamma}$  – единичный вектор, направленный вверх ( $\mathbf{g} = -g\boldsymbol{\gamma} = -g(0,1,0)$ ),  $\mathbf{IC} = \sum_i^{n-1} C_i$ .

Система уравнений (2.33)-(2.36) содержит следующие безразмерные параметры: число Релея  $\text{Ra} = g\beta_T \Theta h^3/\nu\chi$ , число Прандтля  $\text{Pr} = \nu/\chi$ , вектор отношений разделения  $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2 \dots \psi_{n-1}) = -\beta_T^{-1} B D^{-1} \mathbf{D}_T$ , где  $\psi_i = -\beta_T^{-1} \beta_{Ci} S_{Ti}$  ( $S_{Ti}$  – коэффициенты Соре, см. уравнение (2.7), напомним также, что сумма  $\sum_i^{n-1} \psi_i = \Psi$  – суммарное отношение разделения),  $SC = \nu^{-1} B D B^{-1}$  – модифицированная матрица чисел Шмидта,  $SC_{ij} = \beta_{Ci}/\beta_{Cj} Sc_{ij}^{-1}$ , где  $Sc_{ij} = \nu/D_{ij}$  – матрица чисел Шмидта,  $i, j = 1 \dots n - 1$ .

В большинстве случаев будем считать геометрию области двухмерной. Уравнения (2.33)-(2.36) должны быть дополнены граничными условиями. Рассмотрим условия на твердых нижней и верхней границах. Для скорости

ставится условие прилипания; для давления условие на границе можно получить, проектируя уравнение движения (2.33) на нормаль к границе; для температуры ставится условие заданного постоянного теплового потока; для концентрации граничное условие следует из условия равенства нулю потока вещества на твердой стенке. Таким образом, граничные условия на горизонтальных границах в безразмерной форме принимают вид:

$$z = 0,1: \frac{\partial T}{\partial z} = -1, \frac{\partial C}{\partial z} - \psi \frac{\partial T}{\partial z} = \mathbf{v} = 0, \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{Ra}{Pr} (T + IC). \quad (2.37)$$

На боковых границах рассматриваются два варианта граничных условий.

1) Периодические граничные условия, соответствующие ячейке плоского горизонтального слоя:

$$\begin{aligned} x = 0, L: \quad \mathbf{v}(x, z) = \mathbf{v}(x + L, z), p(x, z) = p(x + L, z), \\ T(x, z) = T(x + L, z), C(x, z) = C(x + L, z), \end{aligned} \quad (2.38)$$

где  $L = l/h$  – аспектное отношение, т.е. отношение горизонтального размера области к вертикальному.

2) Условия, соответствующие замкнутой области:

$$x = 0, L: \quad \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial z} = \mathbf{v} = 0, \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2}. \quad (2.39)$$

В (2.39) предполагается, что боковые стенки адиабатические, таким образом, ставится условие отсутствия потока тепла.

Для численного решения задачи в двумерной постановке запишем систему уравнений (2.33)-(2.36) в терминах функция тока ( $\varphi$ ) и завихренности ( $\omega$ ). Компоненты вектора скорости  $\mathbf{v} = (v_x, 0, v_z)$  связаны с функцией тока и завихренностью следующим образом:  $v_x = \partial\varphi/\partial z$ ,  $v_z = -\partial\varphi/\partial x$ ;  $\omega = \text{rot } \mathbf{v} = \partial v_x/\partial z - \partial v_z/\partial x = -(\partial^2\varphi/\partial z^2 + \partial^2\varphi/\partial x^2) = -\nabla^2\varphi$ . Система уравнений (2.33)-(2.36), таким образом, запишется в виде:

$$\left(\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \omega}{\partial y}\right) = \nabla^2 \omega + \frac{\text{Ra}}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x}\right), \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr}} \nabla^2 T, \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial x} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial y} = S\mathbf{C}(\nabla^2 \mathbf{C} + \boldsymbol{\psi} \nabla^2 T), \quad (2.42)$$

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\omega. \quad (2.43)$$

Для функции тока и завихренности граничные условия на твердых границах имеют вид:

$$\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0, \omega_{\Gamma} = \frac{2\varphi_{\Gamma-1}}{h_n}, \quad (2.44)$$

где  $n$  – координата, нормальная к твердой стенке, индекс  $\Gamma$  обозначает граничный узел,  $\Gamma - 1$  – приграничный узел,  $h_n$  – шаг сетки.

Система уравнений (2.33)-(2.36) (либо система (2.40)-(2.43)) может быть упрощена путем диагонализации матрицы  $S\mathbf{C}$ . Существует такое преобразование [154] полей концентрации и коэффициентов  $\psi_i$ , что оно не затрагивает другие переменные:

$$\mathbf{C} = BV(BQ)^{-1}\hat{\mathbf{C}}, \boldsymbol{\psi} = BV(BQ)^{-1}\hat{\boldsymbol{\psi}}, \quad (2.45)$$

где  $V$  – матрица, столбцы которой являются собственными векторами ( $v_i = (v_{i1}, v_{i2} \dots v_{in-1})^T$ ) матрицы диффузии  $D$ ,  $Q = \text{diag}(q_1, q_2 \dots q_{n-1})$  – диагональная матрица с элементами  $q_i = \beta_{ci}^{-1} \sum_i^{n-1} \beta_{cj} v_{ij}$ .

## 2.2 Устойчивость и надкритические режимы конвекции тройных смесей в горизонтальном слое при условии заданного теплового потока

Рассмотрим плоский горизонтальный слой (рис. 2.6), заполненный смесью из трех компонентов и ограниченный двумя твердыми непроницаемыми для вещества границами, находящимися при  $z = 0$  и  $z = h$ . На данных границах задается постоянный вертикальный тепловой поток  $q$  (строго говоря,  $q$  – величина теплового потока на единицу площади).

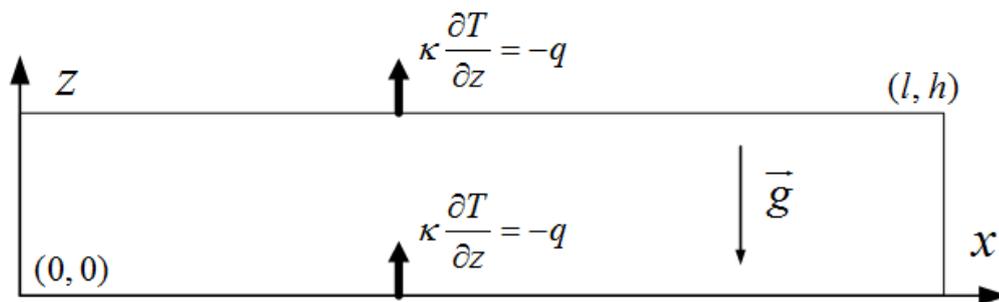


Рисунок 2.6. Плоский горизонтальный слой с заданным тепловым потоком, геометрия задачи.

При исследовании свободной конвекции будем пользоваться системой уравнений (2.33)-(2.36), при этом будем считать, что матрица  $SC$  приведена к диагональному виду с помощью преобразования (2.45). Заметим, что число Релея  $Ra = g\beta_T\Theta h^3/\nu\chi$  содержит параметр  $\Theta$  (разница температур в системе), который не задается в явном виде и определяется через величину заданного потока тепла  $q$ :  $\Theta = qh/\kappa$ .

В диссертационной работе рассматривается характерная модельная жидкая смесь с числами Шмидта  $Sc_1 = 100$ ,  $Sc_2 = 1000$  и числом Прандтля  $Pr = 10$ . Поведение данной смеси исследуется при трех значениях отношения разделения первого компонента  $\psi_1$ :  $\psi_1 = 0$  (частный случай бинарной смеси),  $\psi_1 = 0.4$  и  $\psi_1 = -0.4$ , второй параметр ( $\psi_2$ ) варьируется в широком диапазоне посредством изменения суммарного отношения разделения ( $\Psi = \psi_1 + \psi_2$ ). Примеры реальных смесей с похожими параметрами: 10% раствор этилового спирта в воде  $Pr \approx 10$ ,  $Sc \approx 1400$ ,  $\psi \approx -0.285$ ; октан(1/3)-декан(1/3)-метилнафталин(1/3)  $Pr \approx 10$ ,  $Sc_1 \approx$

400,  $Sc_1 \approx 1000$ ,  $\psi_1 \approx 0.43$ ,  $\psi_2 \approx 0.02$ ; додекан(1/3)-изолбутилбензол(1/3)-тетралин(1/3) Pr  $\approx 15$ ,  $Sc_1 \approx 1400$ ,  $Sc_1 \approx 2200$ ,  $\psi_1 \approx 0.132$ ,  $\psi_2 \approx 0.317$  (приведены значения параметров с учетом преобразования (2.45)).

### 2.2.1 Линейный анализ устойчивости

Рассмотрим линейную задачу устойчивости. Для этого введем малые возмущения полей скорости, давления, температуры и концентраций:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_b + \mathbf{v}', p = p_b + p', T = T_b + T', \mathbf{C} = \mathbf{C}_b + \mathbf{C}', \quad (2.46)$$

где индексом «*b*» обозначены равновесные поля, штрихом – малые возмущения. Подставим поля вида (2.46) в систему уравнений (2.33)-(2.36), линеаризуем получившиеся уравнения. Исключим давление и горизонтальные компоненты скорости, применив к уравнению движения (2.33) операцию взятия двойного ротора, спроецированного на ось *z*. Рассмотрим плоские нормальные возмущения в виде:

$$v'_z(x, z, t) = w(z) \exp(-\lambda t + i(k_x x + k_y y)), \quad (2.47)$$

$$T'(x, z, t) = \theta(z) \exp(-\lambda t + i(k_x x + k_y y)), \quad (2.48)$$

$$\mathbf{C}'(x, z, t) = \mathbf{c}(z) \exp(-\lambda t + i(k_x x + k_y y)). \quad (2.49)$$

Здесь  $\lambda = \lambda_R + i\omega$  – комплексный декремент возмущений (при  $\lambda_R > 0$  возмущения нарастают со временем),  $k_x, k_y$  – волновые числа. В итоге получаем следующую систему для амплитуд возмущений:

$$\lambda \Delta w + \Delta^2 w - \frac{Ra}{Pr} k^2 ((1 + \Psi)\theta + \mathbf{I}f) = 0 \quad (2.50)$$

$$\lambda \theta + w + \frac{1}{Pr} \Delta T = 0, \quad (2.51)$$

$$\lambda(f + \psi\theta) + \psi w + SC\Delta T = 0, \quad (2.52)$$

вместе с граничными условиями:

$$z = 0,1: u = du/dz = d\theta/dz = df/dz = 0. \quad (2.53)$$

Здесь  $f = c - \psi\theta$  – вспомогательная функция (для удобства записи граничных условий),  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ , оператор  $\Delta = d^2/dz^2 - k^2$  ( $\Delta^2 = d^4/dz^4 - 2k \cdot d^2/dz^2 + k^4$ ).

Система уравнений (2.50)-(2.53) представляет собой краевую задачу для однородных дифференциальных уравнений по нахождению собственных чисел  $\lambda$ . Решение данной задачи проводилось численно с помощью метода пристрелки [183]. Суть данного метода можно наглядно продемонстрировать на примере решения задачи Штурма-Лиувилля. Рассмотрим однородное дифференциальное уравнение второго порядка

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \lambda y = 0 \quad (2.54)$$

с краевыми условиями

$$y(0) = 0, y(l) = 0. \quad (2.55)$$

Уравнение второго порядка (2.54) можно свести к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка путем замены переменной  $\zeta = dy/dx$ , таким образом получаем систему:

$$\frac{d\zeta}{dx} + \lambda y = 0, \quad \frac{dy}{dx} - \zeta = 0. \quad (2.56)$$

Рассматриваемая краевая задача может быть сведена к задаче Коши, при этом у нас имеется только одно граничное условие при  $x = 0$ . Второе условие для  $\zeta = dy/dx$  при  $x = 0$  можно выбрать произвольным образом, пусть  $\zeta(0) = 1$ . Собственное число  $\lambda$  – является искомой величиной, которая нам неизвестна. Зададим некоторое произвольное значение  $\lambda_1$  и найдем частное решение, которое соответствует  $\lambda_1$ , выполняя численное интегрирование уравнений (2.56) на отрезке  $x = [0, l]$  любым возможным методом (нами использовался метод Рунге-Кутты-Мерсона четвертого порядка с автоматическим подбором шага интегрирования [183]). В результате получаем некоторое значение  $y(l) = y_1$  которое, практически

со 100% вероятностью, не будет удовлетворять второму краевому условию (2.55). После этого решаем задачу заново с другим значением  $\lambda = \lambda_2$  и получаем  $y(l) = y_2$ , которое также, вероятно, не будет удовлетворять условию (2.55). Повторяем «стрельбу» до тех пор, пока «пристрелочное» значение функции  $y(l)$  не будет в итоге удовлетворять краевому условию (2.55) – в этом случае значение  $\lambda$  и будет являться искомым решением задачи по нахождению собственных чисел.

Отметим, что, как может показаться на первый взгляд, «пристреливаться» можно бесконечно долго, что, конечно, не так. Функцию  $y$  при  $x = l$  можно рассматривать как функцию от  $\lambda$ :  $y(l) \equiv f(\lambda)$ . Как следует из краевого условия, необходимо  $f(\lambda) = 0$  – задача, таким образом, сводится к численному нахождению корней уравнения  $f(\lambda) = 0$ .

Алгоритм вычисления может быть следующим (метод дихотомии): выбираем начальные значения  $\lambda_1, \lambda_2$ , получаем соответствующие им значения  $y_1, y_2$ . Если значения  $y_1, y_2$  одного знака, значит отрезок  $[\lambda_1, \lambda_2]$  не содержит искомого корня уравнения  $f(\lambda) = 0$ . В противном же случае это означает что на отрезке  $[\lambda_1, \lambda_2]$  присутствует как минимум один корень, после этого мы сужаем диапазон до тех пор, пока значение  $\lambda$  не будет найдено с желаемой точностью.

Другим из возможных вариантов является метод секущих (метод хорд). Предполагается, что на отрезке  $[\lambda_1, \lambda_2]$ , содержащем корень уравнения, неизвестная функция  $f(\lambda)$  является линейной:  $f(\lambda) = a\lambda + b$ . Коэффициенты  $a$  и  $b$  находятся из уравнений:  $a\lambda_1 + b = y_1$  и  $a\lambda_2 + b = y_2$ . Из уравнения  $a\lambda + b = 0$  находим новое приближение искомой величины собственного числа:  $\lambda_3 = -b/a$ . Затем выбираем новое приближение ( $[\lambda_1, \lambda_3]$  или  $[\lambda_3, \lambda_2]$ ), в зависимости от того, на каком из отрезков содержится корень уравнения  $f(\lambda) = 0$ . Повторяем процедуру до достижения нужной точности.

В случае системы уравнений (2.50)-(2.52) для трёхкомпонентной смеси имеется 1 дифференциальное уравнение четвертого порядка и 3 уравнения второго порядка, которые сводятся к системе 10 уравнений первого порядка. На каждой границе (при  $z = 0$  и  $z = 1$ ) имеем по 5 граничных условий, т.е. 5 недостающих

условий для задачи Коши. В этом случае идея метода пристрелки остается такой же, но решение ищется не в виде одного частного решения, а в виде суперпозиции 5 независимых частных решений. В итоге получим систему однородных уравнений, условием разрешимости которой будет являться равенство нулю ее определителя  $D = 0$  (аналогично условию  $f(\lambda) = 0$  в рассмотренной задаче Штурма-Лиувилля). При этом определитель  $D$  будет являться функцией не только от декремента  $\lambda$  (причем комплексного  $\lambda = \lambda_R + i\omega$ ), но и от параметров задачи:  $k, Ra, Pr$ . Таким образом,  $D = D(\lambda_R, \omega, k, Ra, Pr)$ .

Число Прандтля фиксировано ( $Pr = 10$ ) и не изменяется в текущей задаче. Поскольку нас интересует граница устойчивости, положим действительную часть декремента равной нулю:  $\lambda_R = 0$ . Волновое число  $k$  табулируется с некоторым небольшим шагом (0.1...0.01). В итоге определитель остается функцией от двух переменных:  $D = D(\omega, Ra)$ , причем определитель является комплексной величиной, и уравнение  $D = 0$  в действительности представляет собой систему двух действительных уравнений:  $\text{Real}(D) = 0$  и  $\text{Im}(D) = 0$  для неизвестных  $\omega$  и  $Ra$ .

Двухмерный аналог метода дихотомии является сомнительным выбором. Для метода секущих, напротив, двухмерный аналог работает так же эффективно, как и одномерный. Вместо отрезка задается треугольник из начальных приближений:  $(\omega_1, Ra_1)$ ,  $(\omega_2, Ra_2)$  и  $(\omega_3, Ra_3)$ . Неизвестные функции  $\text{Real}(D) = 0$  и  $\text{Im}(D) = 0$  аппроксимируются функциями вида  $a\omega + bRa + c$ , где  $a, b, c$  – коэффициенты. После этого находится новое приближение  $(\omega_4, Ra_4)$ . Из четырех имеющихся точек одна отбрасывается, создается новый треугольник начальных условий. Данный треугольник сужается в точку, которая и будет являться решением системы уравнений, до достижения желаемой точности.

Реализация программы по нахождению собственных чисел методом пристрелки выполнена на языке Fortran-90. Данный язык позволяет писать быстродействующие программы, а также поддерживает встроенный комплексный тип данных.

Результаты линейного анализа представлены на рисунках 2.7 ( $\psi_1 = 0$ ), 2.8 ( $\psi_1 = 0.4$ ) и 2.9 ( $\psi_1 = -0.4$ ). Численные расчеты показали, что во всех случаях наиболее опасной является длинноволновая неустойчивость (волновое число  $k \rightarrow 0$ ) – точно так же, как и в случае однокомпонентной жидкости при исследовании устойчивости горизонтального слоя с условием заданного теплового потока на верхней и нижней границе. Расчеты также показали, что в спектре возмущений присутствуют как монотонные ( $\omega = 0$ , сплошные линии на рис. 2.7-2.9), так и колебательные возмущения ( $\omega \neq 0$ , пунктирные линии).

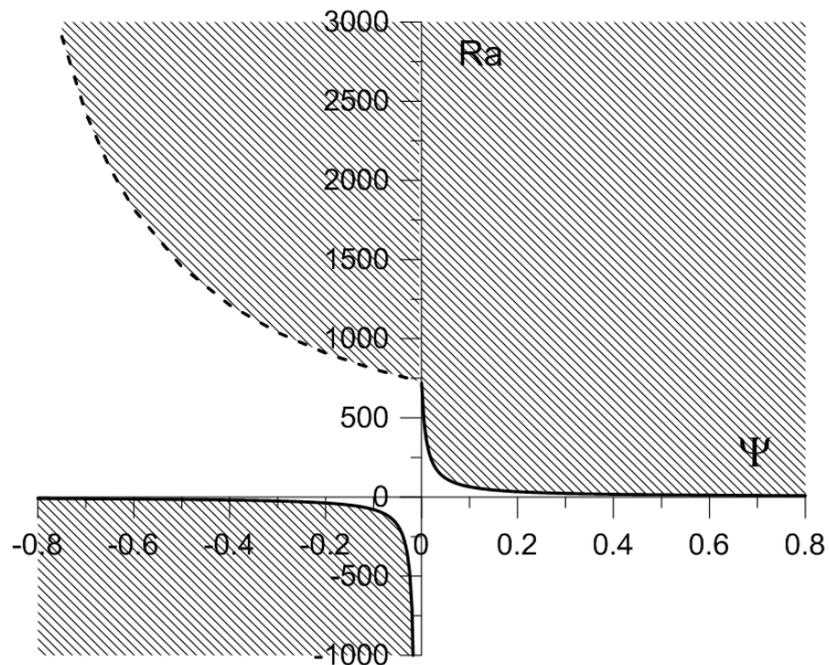


Рисунок 2.7. Карта устойчивости тройной смеси на плоскости параметров число Релея (Ra) – суммарное отношение разделения ( $\Psi$ ) для горизонтального слоя при условии заданного теплового потока;  $\psi_1 = 0$ . Сплошные линии – монотонная неустойчивость, штриховая линия – колебательная неустойчивость. Неустойчивости соответствуют серые заштрихованные зоны.

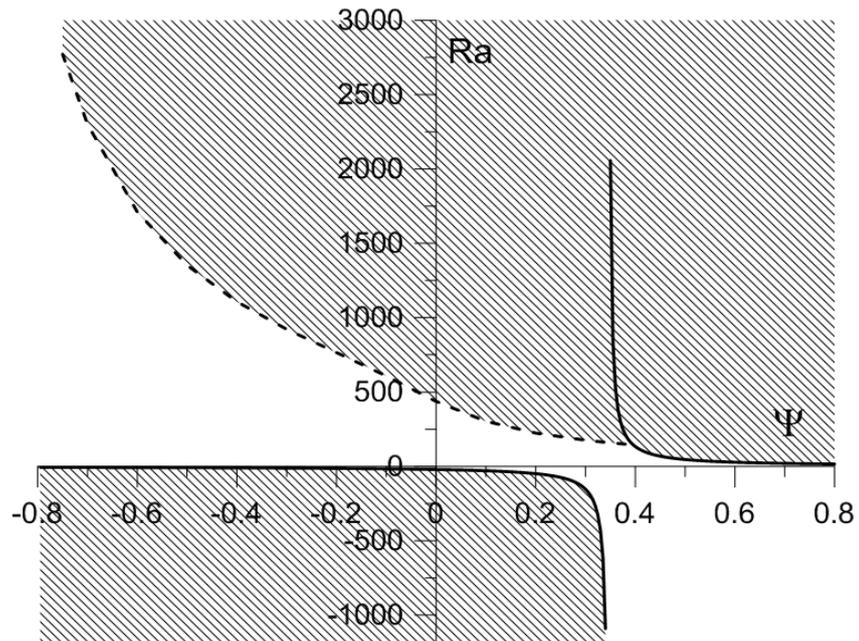


Рисунок 2.8. Карта устойчивости тройной смеси на плоскости параметров число Релея ( $Ra$ ) – суммарное отношение разделения ( $\Psi$ ) для горизонтального слоя при условии заданного теплового потока;  $\psi_1 = 0.4$ . Сплошные линии – монотонная неустойчивость, штриховая линия – колебательная неустойчивость. Неустойчивости соответствуют серые заштрихованные зоны.

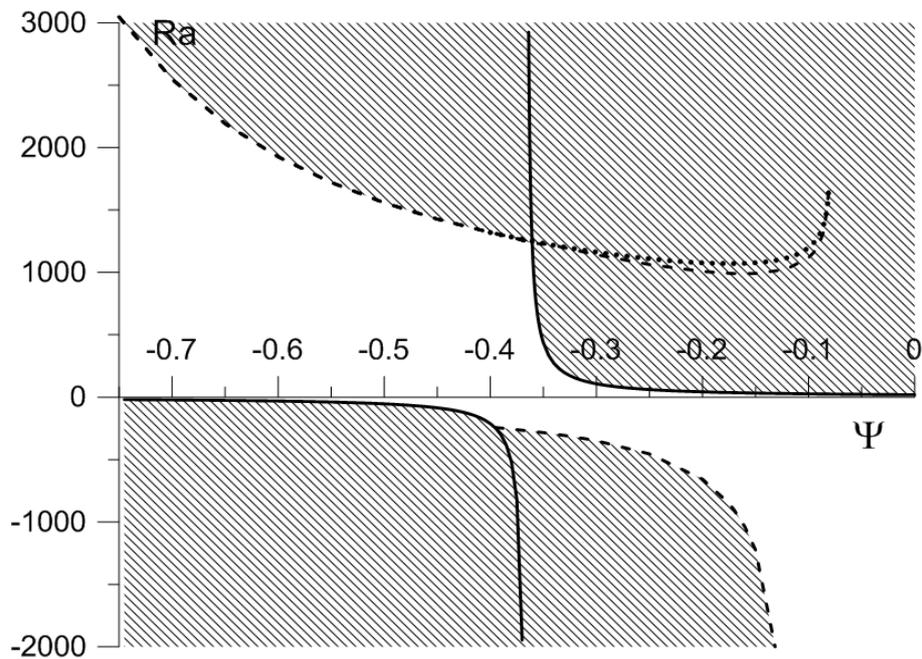


Рисунок 2.9. Карта устойчивости тройной смеси на плоскости параметров число Релея ( $Ra$ ) – суммарное отношение разделения ( $\Psi$ ) для горизонтального слоя при условии заданного теплового потока;  $\psi_1 = -0.4$ . Сплошные линии – монотонная неустойчивость, штриховые линии – колебательная неустойчивость. Неустойчивости соответствуют серые заштрихованные зоны.

Границы длинноволновых монотонной и колебательной неустойчивостей определяются выражениями (2.57) и (2.58), полученными Т.П. Любимовой и Е.С. Садиловым посредством длинноволнового анализа (для  $k \rightarrow 0$ ).

$$\begin{aligned} \text{Ra}^{(m)} = & \frac{720\text{Pr}}{\text{Pr}(\Psi + 1) + \psi_1 Sc_1 + \psi_2 Sc_2} + \\ & + \frac{2040}{77} \frac{\text{Pr} k^2}{\text{Pr}(\Psi + 1) + \psi_1 Sc_1 + \psi_2 Sc_2}. \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\text{Ra}^{(os)} = 720 \text{Pr} \frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a},$$

$$\begin{aligned} a = & \text{Pr} Sc_1 Sc_2 (\Psi + 1) (\text{Pr}(\Psi + 1)(Sc_1 + Sc_2) + \Psi Sc_1 Sc_2), \\ b = & \text{Pr} Sc_1 Sc_2 [(1 + \psi_2)Sc_1 + (1 + \psi_1)Sc_2] + \\ & + [\text{Pr}(\Psi + 1)(Sc_1 + Sc_2) + \Psi Sc_1 Sc_2] [\text{Pr}(Sc_1 + Sc_2) + Sc_1 Sc_2], \\ c = & (Sc_1 + Sc_2)(\text{Pr}(\text{Pr} + Sc_1 + Sc_2) + Sc_1 Sc_2), \end{aligned} \quad (2.58)$$

Колебательной моде неустойчивости соответствует частота

$$\begin{aligned} \omega = & \pm k^2 \frac{1}{\text{Pr} Sc_1 Sc_2} (\text{Pr} + Sc_1 + Sc_2 - \\ & - \frac{\text{Ra}^{(m)}}{720} [\text{Pr}(\Psi + 1)(Sc_1 + Sc_2)^2 + \Psi^2 Sc_1 Sc_2])^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

При этом область существования колебательной неустойчивости:

$$\text{Pr} + Sc_1 + Sc_2 - \frac{\text{Ra}^{(m)}}{720} [\text{Pr}(\Psi + 1)(Sc_1 + Sc_2) + \Psi Sc_1 Sc_2] \geq 0 \quad (2.60)$$

Результаты численных расчетов задачи (2.50)-(2.52) при малых  $k$  точно совпадают с аналитическими формулами (2.57)-(2.60).

Из рисунков 2.7-2.9 видно, что в каждом случае присутствует пара гиперболических ветвей монотонной неустойчивости: одна при подогреве снизу ( $\text{Ra} > 0$ ), другая – при нагреве сверху ( $\text{Ra} < 0$ ). В случае бинарной жидкости ( $\psi_1 = 0$ ) ветвь неустойчивости при подогреве снизу соответствует значениям параметра

$\Psi > 0$ , вторая ветвь соответственно – при значениях  $\Psi > 0$ . Для тройных смесей данная гипербола смещается по оси  $\Psi$  на величину, примерно равную значению  $\psi_1$ . Другими словами, ветви гиперболы, отвечающие монотонной неустойчивости, располагаются относительно вертикальной асимптоты, которая приближенно соответствует уравнению  $\Psi = \psi_1$ .

Во всех случаях присутствует также колебательная мода неустойчивости при подогреве снизу. Колебательная мода сливается с монотонной вблизи асимптоты  $\Psi = \psi_1$  в верхней полуплоскости ( $Ra > 0$ ).

В случае  $\psi_1 = 0.4$  (рис. 2.9) также присутствует колебательная мода при нагреве сверху. Наличие данной колебательной ветви при  $\psi_1 = 0.4$  (и ее отсутствие при  $\psi_1 = 0$  и  $\psi_1 = -0.4$ ) объясняется знаком суммарного отношения разделения. При  $\Psi < 0$  суммарный вклад концентраций компонентов смеси в плотность оказывается дестабилизирующим, т.е. вверху скапливается больше тяжелых компонентов смеси, что и сказывается на развитии неустойчивости. В случаях, соответствующих  $\psi_1 = 0$  и  $\psi_1 = 0.4$ , область справа от монотонной моды в нижней полуплоскости ( $Ra < 0$ ) полностью находится в диапазоне  $\Psi > 0$ , и неустойчивости, таким образом, не наблюдается.

Все вышеописанные ветви неустойчивости также присутствовали для случая идеально теплопроводных границ, карты устойчивости при аналогичных параметрах смеси в обоих случаях качественно совпадают (см. рис. 2.1 и 2.3). Это обстоятельство является логичным: несмотря на разницу в условиях нагрева слоя, направления градиентов температуры остаются теми же самыми, и при тех же самых параметрах смеси физические процессы должны протекать похожим образом.

Однако имеется и ряд отличий. Во-первых, отличаются пороги возникновения конвекции (значения критических чисел Релея). При  $\psi_1 = 0$  и  $\Psi = 0$  (место слияния монотонной и колебательной ветвей) порог возникновения конвекции соответствует хорошо изученному случаю однокомпонентной жидкости: для задачи конвекции в слое с заданным тепловым потоком  $Ra_{cr} = 720$ ,

в случае идеально теплопроводных границ  $Ra_{cr}^* = 1707$ . При  $\psi_1 > 0.4$  в месте слияния монотонной и колебательной ветвей пороги устойчивости соответственно равны  $Ra_{cr} \approx 1300$  и  $Ra_{cr}^* \approx 3000$ .

Как известно, в случае однокомпонентной жидкости порогу  $Ra_{cr} = 720$  соответствует волновое число  $k_{cr} \rightarrow 0$ , тогда как числу  $Ra_{cr}^* = 1707$  отвечает  $k_{cr}^* = 3.116$ . Для условия заданного теплового потока как монотонная, так и колебательная неустойчивость остается длинноволновой всюду. Для идеально теплопроводных границ монотонная неустойчивость является ячеистой (т.е. волновое число не близко к нулю) при  $Ra > 0$  в небольшом диапазоне значений  $\Psi$  вблизи асимптоты  $\Psi = \psi_1$ , в остальных случаях – длинноволновая.

Для идеально теплопроводных границ колебательная мода при  $Ra > 0$  является ячеистой при всех значениях параметров, тогда как при  $Ra < 0$  колебательная мода – длинноволновая, так же, как и в случае условий заданного теплового потока.

Отметим еще одно отличие по сравнению со случаем идеально теплопроводных границ. Как видно из рис. 2.9 ( $\psi_1 = -0.4$ ), при  $Ra > 0$  колебательная мода не исчезает при слиянии с монотонной (в точке  $\Psi \approx 0.35$ ), а продолжается дальше в область  $-0.35 < \Psi < -0.081$ . При этом в данном диапазоне значений  $\Psi$  колебательная ветвь перестает быть длинноволновой, в области  $\Psi > 0.35$  наиболее опасной становится монотонная мода, которая остается длинноволновой.

Пример нейтральной кривой из этой области  $\Psi$  приведен на рис. 2.10 (а): при  $k \rightarrow 0$  число Релея составляет  $Ra = 1077$ , минимум же достигается при  $k = 0.72$ , при этом  $Ra = 1007$  и  $\omega = 0.0253$ . На рис. 2.10 (b) и (c) соответственно изображены зависимости волнового числа и частоты (мнимой части декремента возмущений), отвечающих минимуму нейтральной кривой, от суммарного отношения разделения. Как видно из рисунков, во всем диапазоне  $-0.35 < \Psi < -0.081$  наиболее опасными колебательными возмущениями являются возмущения с конечной длиной волны.

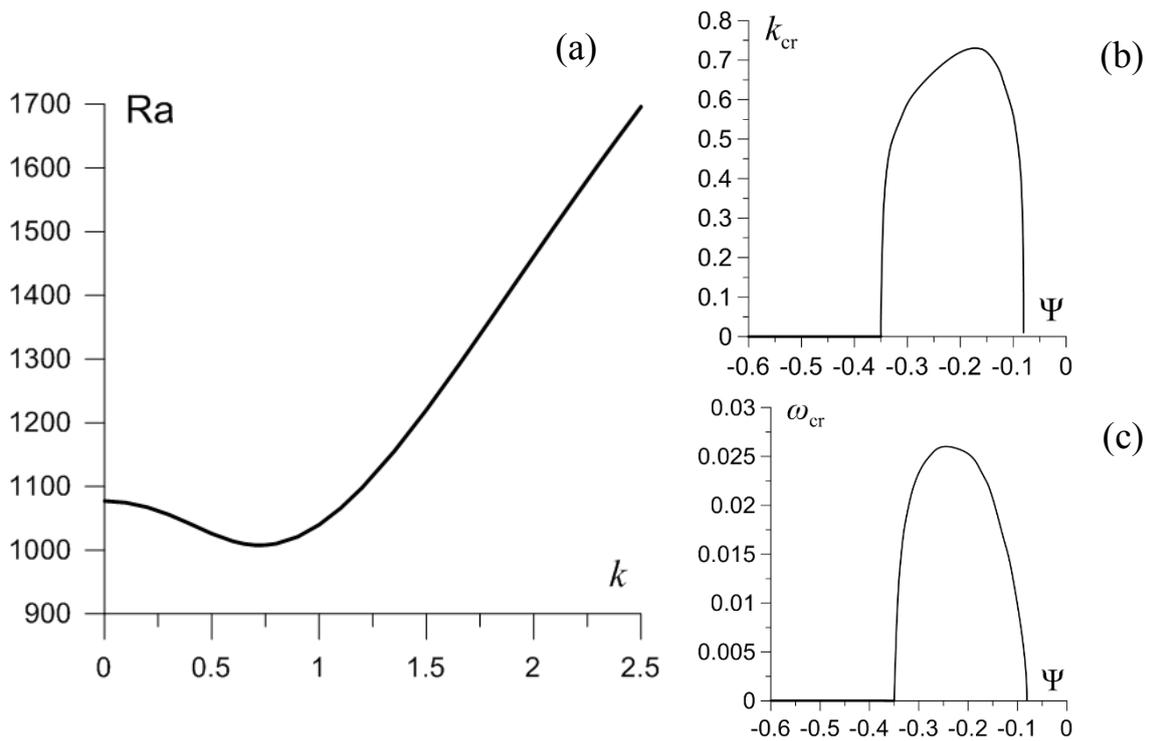


Рисунок 2.10. (а) Нейтральная кривая при  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.2$ . (б) Волновое число и (с) частота наиболее опасных возмущений колебательной моды при  $\psi_1 = -0.4$  в диапазоне  $-0.6 < \Psi < 0$ .

## 2.2.2 Нелинейные режимы конвекции

Из линейной теории следует, что наиболее опасной является длинноволновая неустойчивость, поэтому необходимо выбрать вытянутую по горизонтали ячейку слоя. Было выбрано аспектное отношение  $L = l/h = 5$ . Задача в нелинейной постановке решалась численно в переменных функция тока – завихренность с помощью уравнений (2.40)-(2.43). Применялся метод конечных разностей с использованием явной по времени схемы.

Производная по времени аппроксимируется выражением:

$$\frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial t} = \frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\tau}. \quad (2.61)$$

Здесь  $n$  – номер шага по времени,  $\tau$  – шаг по времени:  $t = \tau \cdot n$ ;  $i, j$  – индексы узлов вдоль осей горизонтальной и вертикальной осей соответственно:

$x = i \cdot h_x$ ,  $z = j \cdot h_z$ , где  $h_x, h_z$  – шаги сетки (рассматривается равномерная сетка  $h_x = h_z$ ).

Для дискретизации пространственных производных используются формулы второго порядка:

$$\frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial x} = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n}{2h_x}, \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}^n}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n - 2f_{i,j}^n}{h_x^2}. \quad (2.62)$$

В выражении (2.62) соответственно записаны аппроксимации первой и второй производной во внутренних узлах. Формулы аппроксимации производных вдоль второго направления имеют аналогичный вид.

На левой и правой границах ( $x = 0$  и  $x = L$ ) аппроксимация первых производных записывается соответственно:

$$\frac{\partial f_{0,j}^n}{\partial x} = \frac{-3f_{0,j}^n + 4f_{1,j}^n - f_{2,j}^n}{2h_x}, \quad \frac{\partial f_{N_x,j}^n}{\partial x} = \frac{3f_{N_x,j}^n - 4f_{N_x-1,j}^n + f_{N_x-2,j}^n}{2h_x}. \quad (2.63)$$

Для вторых производных:

$$\frac{\partial^2 f_{0,j}^n}{\partial x^2} = \frac{2f_{0,j}^n - 5f_{1,j}^n + 4f_{2,j}^n - f_{3,j}^n}{h_x^2}, \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial^2 f_{N_x,j}^n}{\partial x^2} = \frac{2f_{N_x,j}^n - 5f_{N_x-1,j}^n + 4f_{N_x-2,j}^n - f_{N_x-3,j}^n}{h_x^2}.$$

Из теории численных методов известно [155, 181], что в ряде случаев критичным может оказаться выбор аппроксимации завихренности на твердой границе. Простейшим вариантом является формула Тома, которая имеет первый порядок точности:

$$\omega_0 = -\frac{2\varphi_1}{h_x^2}, \quad \omega_{N_x} = -\frac{2\varphi_{N_x-1}}{h_x^2}. \quad (2.65)$$

Более точными формулами являются следующие выражения. Формула Вудса:

$$\omega_0 = -\frac{3\varphi_1}{h_x^2} - \frac{\omega_1}{2}, \quad \omega_{N_x} = -\frac{3\varphi_{N_x-1}}{h_x^2} - \frac{\omega_{N_x-1}}{2}. \quad (2.66)$$

Формула Пирсона:

$$\omega_0 = -\frac{(8\varphi_1 - \varphi_2)}{2h_x^2}, \quad \omega_{N_x} = -\frac{(8\varphi_{N_x-1} - \varphi_{N_x-2})}{2h_x^2}. \quad (2.67)$$

В рассматриваемых в диссертации задачах выбор разных формул из формул (2.65)-(2.67) не приводил к заметной разнице в результатах расчетов.

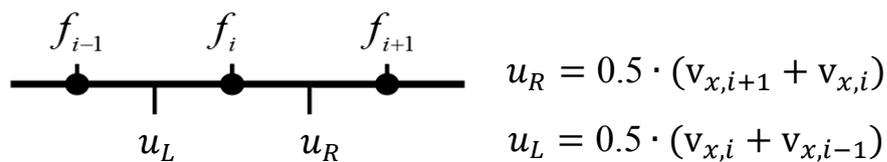
Конвективная производная имеет следующий вид:

$$(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \cdot f_{i,j}^n = v_{x,i,j}^n \cdot \frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial x} + v_{y,i,j}^n \cdot \frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial z}, \quad (2.68)$$

где производные  $\partial/\partial x$  и  $\partial/\partial z$  аппроксимируются центральными разностями (2.62). Из теории численных методов известно, что выбор центральных разностей для аппроксимации конвективных производных может быть не самым удачным выбором. Для верификации полученных результатов дополнительно использовалась «схема с донорными ячейками» [181], что представляет собой вариант схем против потока. Конвективная производная аппроксимируется следующим выражением (для простоты опустим временной и второй пространственный индексы):

$$v_{x,i} \frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{(u_R f_R - u_L f_L)}{h_x}. \quad (2.69)$$

Величина  $u_R$  – среднее значение скорости в области между узлами  $i$  и  $i + 1$ , величина  $u_L$  – соответственно среднее значение скорости в ячейке между узлами  $i - 1$  и  $i$ . Схематически это представлено на следующей диаграмме:



Значения  $f_R$  и  $f_L$  выбираются в зависимости от направления течения следующим образом:

$$f_R = \begin{cases} f_i & \text{при } u_R > 0 \\ f_{i+1} & \text{при } u_R < 0 \end{cases}, \quad f_L = \begin{cases} f_{i-1} & \text{при } u_L > 0 \\ f_i & \text{при } u_L < 0 \end{cases}.$$

Расчеты показали, что при исследовании задач конвекции, рассмотренных в диссертации, разница между аппроксимацией конвективной производной центральными разностями и схемой (2.69) оказывается несущественной.

Алгоритм расчета, таким образом, включает следующие шаги: 1) вычисление приращений функций на новом временном шаге  $f_{i,j}^{n+1}$  из эволюционных уравнений (2.40)-(2.42); 2) решение уравнения Пуассона (2.43), которое осуществлялось итерационным методом Якоби; 3) обмен значений массивов, хранящих поля  $f_{i,j}^{n+1}$  и  $f_{i,j}^n$ , запись в файл характеристик течения и др. Программа расчетов написана на языке Fortran-90 с использованием директив параллельного программирования OpenMP.

Расчет проводился на равномерной сетке с шагом  $h_x = h_z = 1/20$ . Расчеты на более подробно сетке  $1/30$  показали лишь небольшое количественное отличие в 4%.

Вычисления проводились при фиксированных значениях  $\psi_1$  и  $\Psi$ , число Релея при этом варьировалось. Расчет начинался с некоторым  $Ra$  при равновесном распределении температуры и концентрации:  $T = 1 - z$ ,  $C = \psi(1 - z)$ . В качестве начального возмущения задавалась завихренность  $\omega = 0.1$  в фиксированной точке области ( $x = 3/4L$ ,  $z = 3/4$ ), во всей остальной области поля завихренности и функции тока задавали равными нулю:  $\omega = \varphi = 0$ . После достижения в системе стационарного состояния число  $Ra$  изменялось на небольшую величину, при этом получившееся стационарное состояние бралось в качестве новых начальных условий, затем процедура повторялась.

### **Бинарная жидкость, $\Psi = -0.2$ , нагрев сверху, монотонная мода**

Рассмотрим сначала пример бинарной жидкости ( $\psi_1 = 0$ ) при  $\Psi = -0.2$  и  $Ra < 0$ . На рис. 2.11 представлены зависимости модуля максимального значения функции тока, характеризующего интенсивность конвективного течения, от числа Релея для периодических граничных условий. Вычисления начинались с некоторого большого по модулю значения числа Релея  $|Ra|$ . При этом система приходит к многовихревому режиму. С уменьшением  $|Ra|$  наблюдается перестройка к режимам с меньшим числом вихрей вплоть до течения, структура которого имеет вид двух противоположно вращающихся вихрей, что отвечает

максимально возможно для рассматриваемой области длине волны наиболее опасных возмущений  $l_\lambda \rightarrow \infty$  ( $k \rightarrow 0$ ), как было предсказано линейной теорией устойчивости. Таким образом, длинноволновая неустойчивость проявляется лишь вблизи порога возбуждения конвекции.

Количество вихрей (при большом числе  $|Ra|$ ) и конкретные сценарии переходов зависят от множества факторов, таких как начальное значение  $Ra$ , величина и форма начального возмущения и др. На рис. 2.11 представлены некоторые возможные реализации. Так 12-вихревой режим при значении  $Ra \approx -870$  трансформируется в 6-вихревой, который переходит в 4-вихревой при  $Ra \approx -110$ , а затем в двухвихревой при  $Ra \approx -45$ . При этом порог возникновения конвекции, найденный в нелинейном численном счете,  $Ra_{cr} \approx -39$ , что близко к значению критического числа Релея, предсказанному линейной теорией устойчивости,  $Ra_{cr} = -37.5$ .

На рис. 2.12 представлены зависимости модуля максимального значения функции тока при тех же параметрах ( $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra < 0$ ) для случая граничных условий, соответствующих замкнутой области. Результаты качественно и количественно близки к тем, что в случае периодических границ. Также наблюдается тенденция к уменьшению числа вихрей с уменьшением  $|Ra|$ , однако в каждом случае наблюдалась лишь однократная перестройка структуры течения: 10-вихревой и 5-вихревой режимы соответственно переходят в одновихревой при  $Ra \approx -3000$  и  $Ra \approx -990$ . Порог возникновения конвекции при этом  $Ra_{cr} \approx 30$ .

Отметим, что моделирование с периодическими граничными условиями накладывает ограничение – двухвихревой режим является предельным вариантом, тогда как для замкнутой области возможна и одновихревая мода. В последнем случае длина волны возмущений будет в два раза больше (волновое число  $k$  – в два раза меньше). Теоретически при меньшем значении  $k$  порог возникновения конвекции должен лучше согласовываться с линейной теорией устойчивости, однако этого не происходит, по-видимому, в силу влияния границ моделируемой области.

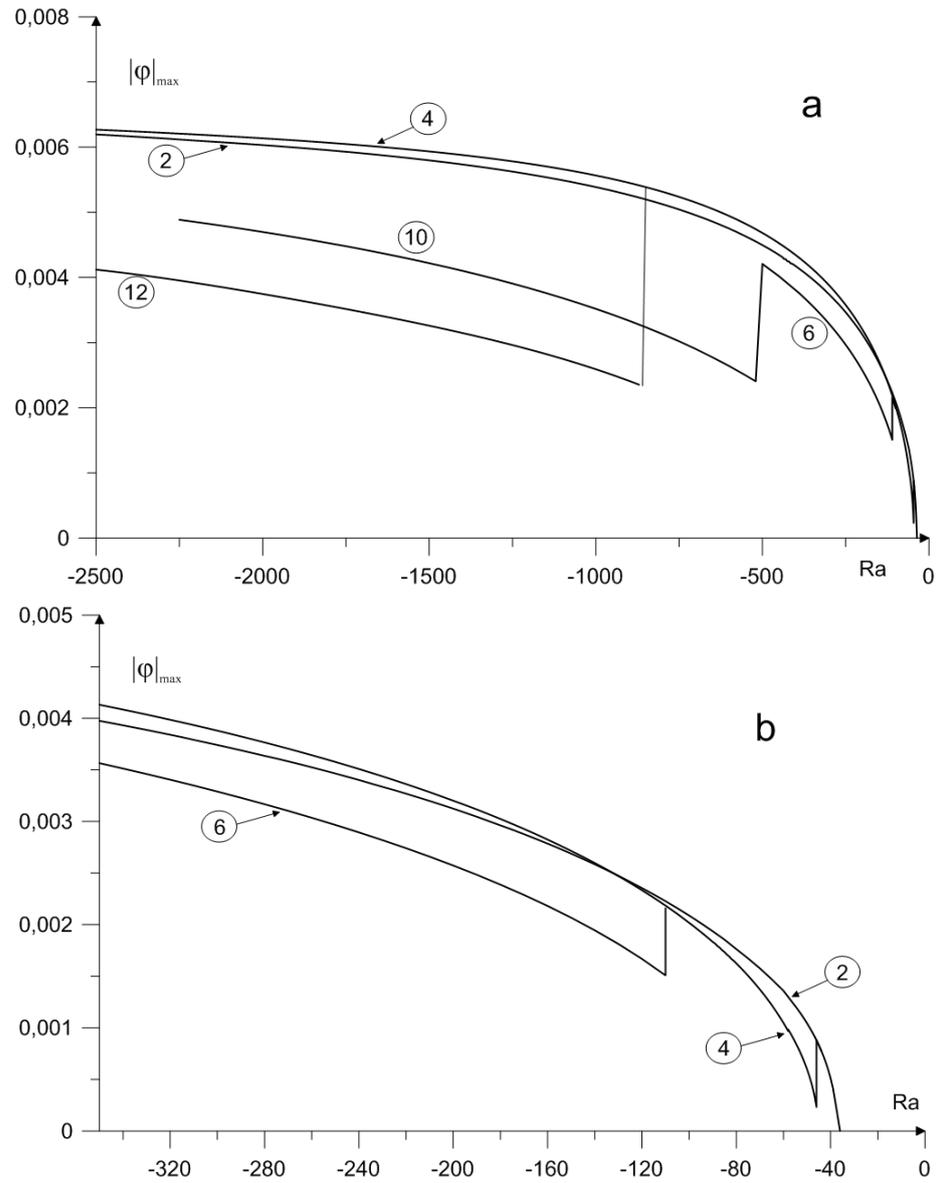


Рисунок 2.11. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra < 0$ , монотонная мода: а – полный масштаб, б – область вблизи порога возникновения конвекции. Периодические граничные условия, цифры в кружках соответствуют числу вихрей.

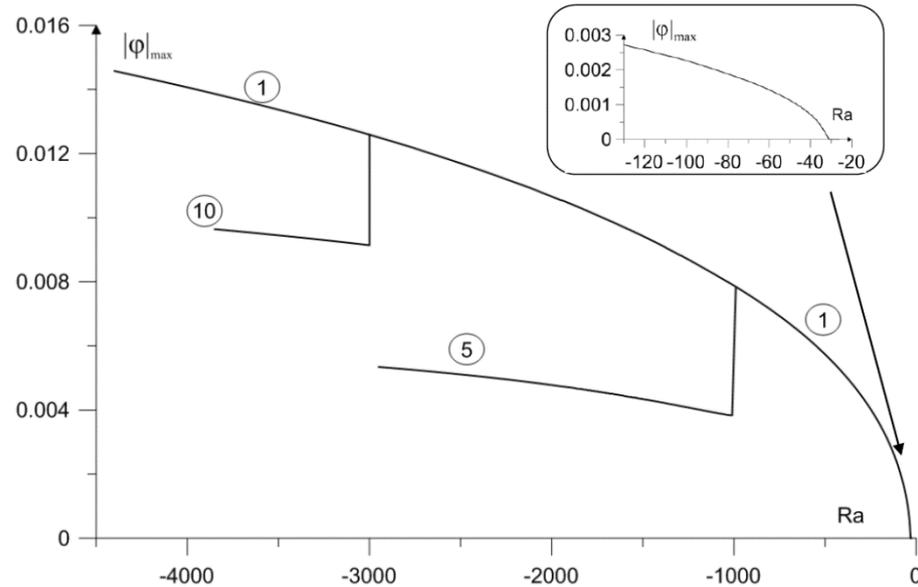


Рисунок 2.12. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = -0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra < 0$ , монотонная мода: а – полный масштаб, б – область вблизи порога возникновения конвекции. Замкнутая область, цифры в кружках соответствуют числу вихрей.

Для ситуации, когда вычисления начинались с малых значений  $|Ra|$  с последующим увеличением, обратной перестройки к многовихревым режимам не наблюдается вплоть до некоторого предельного значения  $Ra$ : двухвихревой режим существует до  $Ra \approx -2700$ , четырехвихревой – до  $Ra \approx -4100$ .

На рис. 2.13 представлены характерные картины полей функции тока (а), температуры (б) и концентрации (с) для рассмотренных выше случаев. Как видно из данного рисунка, изолинии температуры являются практически прямыми линиями, в отличие от поля концентрации, что говорит о том, что концентрационный механизм возникновения конвекции в данном случае является доминирующим.

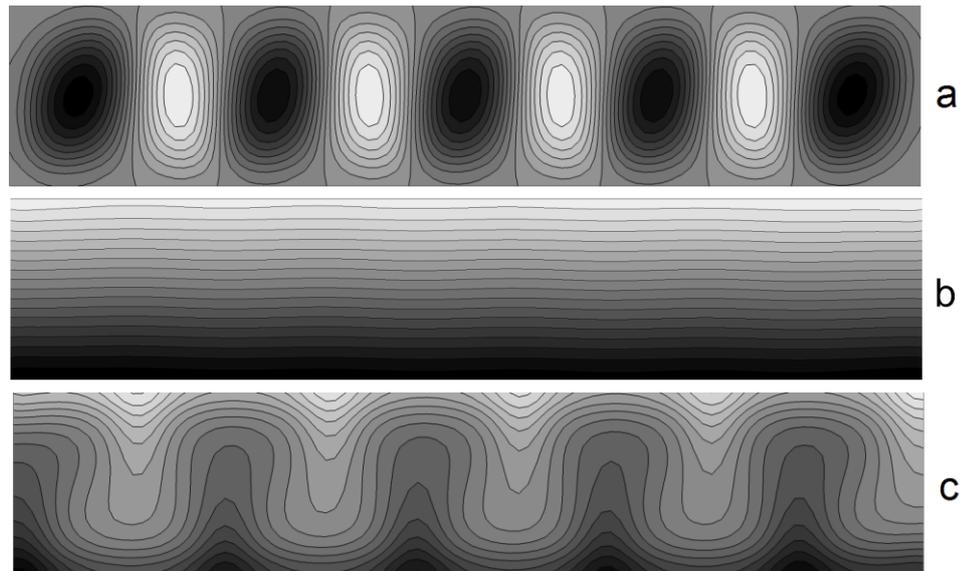


Рисунок 2.13. Поля функции тока (a), температуры (b) и концентрации (c),  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = -2500$ . Светлые и темные зоны соответствуют минимуму и максимуму представленных полей.

### **Бинарная жидкость, $\Psi = -0.2$ , подогрев снизу, колебательная мода**

На рисунке 2.14 представлены результаты численных расчетов для того же набора параметров ( $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ), но при подогреве снизу ( $Ra > 0$ ). В этом случае также наблюдается трансформация структуры течения с изменением  $Ra$ , но это происходит только один раз. Как и при нагреве сверху, длинноволновой режим наблюдается только вблизи порога возникновения конвекции. Как следует из линейного анализа устойчивости, при подогреве снизу должна наблюдаться колебательная неустойчивость. Однако колебания наблюдаются лишь в узкой области чисел Релея вблизи порога устойчивости при  $Ra \approx 842-850$  и только в случае периодических граничных условий.

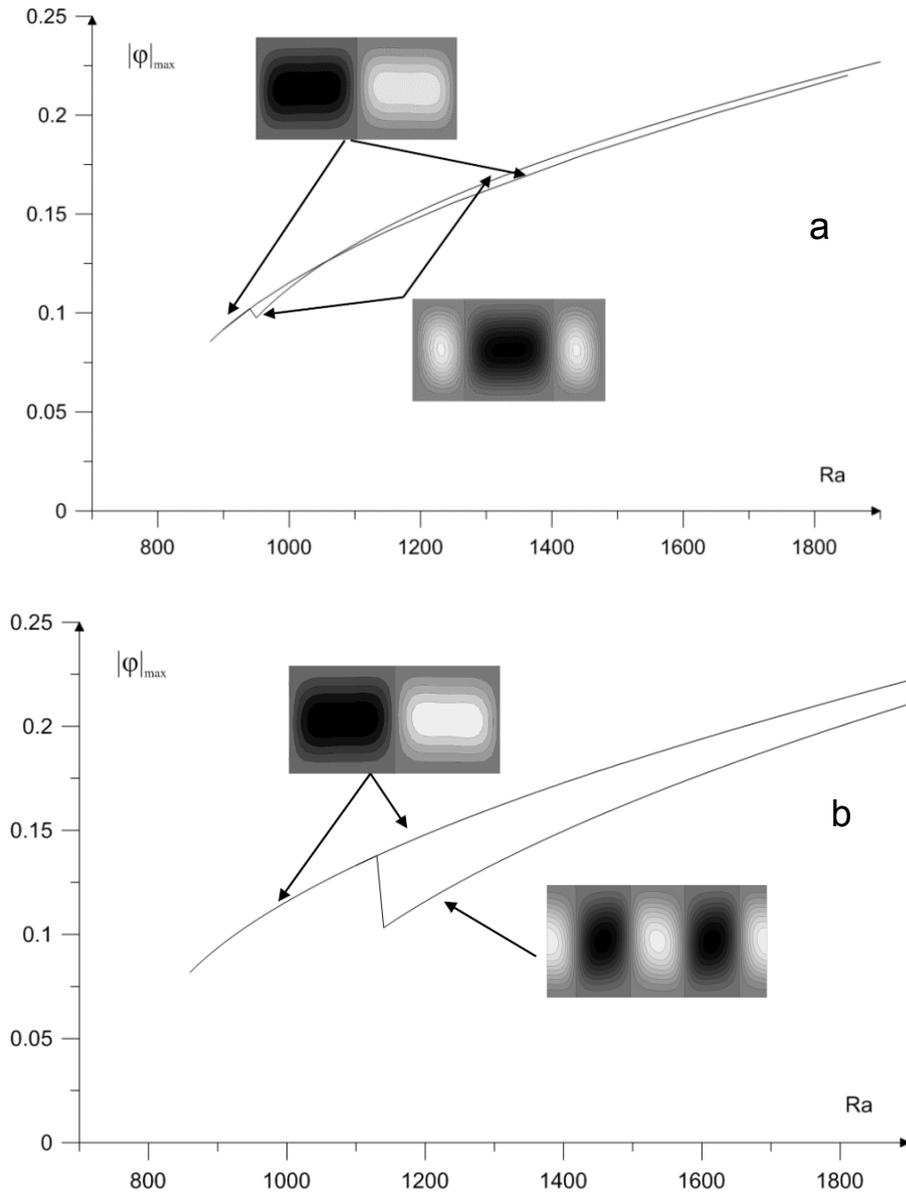


Рисунок 2.14. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra > 0$ , колебательная мода: а – замкнутая область, б – периодические граничные условия. Рисунки в градации серого вблизи кривых соответствуют полям функции тока.

На рис. 2.15 показаны зависимости от времени значения функции тока в фиксированной точке области для двух чисел Релея:  $Ra = 850$  (а) и  $Ra = 841.9$  (б). Для  $Ra = 850$  видно, что значение функции тока монотонно изменяется до  $t \sim 3500$ , после чего происходит постепенный переход к режиму стационарных колебаний, который устанавливается при  $t \sim 4000$ . При  $Ra = 841.9$  (рис. 2.15 б) наблюдается переход от колебательного режима к состоянию механического равновесия. В

диапазоне между двумя обозначенными значениями  $Ra$  наблюдается колебательная мода, как и было предсказано линейной теорией. Из линейной теории  $Ra_{cr} = 909$ , что близко к  $Ra_{cr} = 842$ , полученному в результате прямого численного моделирования.

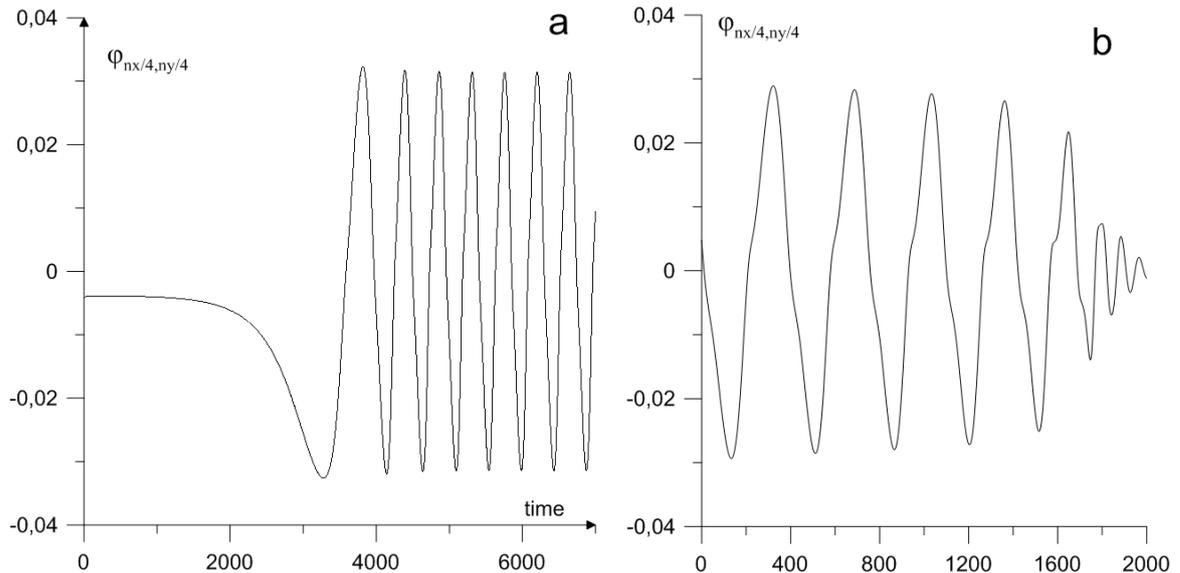


Рисунок 2.15. Временные зависимости функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ : (a)  $Ra = 850$ , (b)  $Ra = 841.9$ . Периодические граничные условия.

При моделировании с изменением  $Ra$  в обратном направлении (от меньшего к большему), колебательная мода также прослеживается. На рис. 2.16 представлены зависимости от времени значений функции тока в фиксированной точке для 5 значений  $Ra$ : 830, 950, 1000, 1020, 1030. При  $Ra = 830$  неустойчивость не развивается, возмущения затухают практически монотонно. При  $Ra = 950$  система по-прежнему устойчива, однако четко прослеживается колебательный характер затухания возмущений. Для  $Ra = 1000$  и 1020 возмущения также затухают, но колебательный характер прослеживается еще более отчетливо. Так, для  $Ra = 950$  колебания можно наблюдать до  $t \sim 500$ , для  $Ra = 1000$  – до  $t \sim 1500$ , для  $Ra = 1020$  – до  $t \sim 6000$ . Ситуация меняется при  $Ra = 1030$  – колебательные возмущения нарастают со временем (рис 2.16 e). На рис. 2.16 f также представлен случай  $Ra =$

1030, но в большем временном масштабе. Видно, что возмущения нарастают колебательным образом продолжительное время до  $t \sim 23000$ . Однако впоследствии система приходит к стационарному состоянию

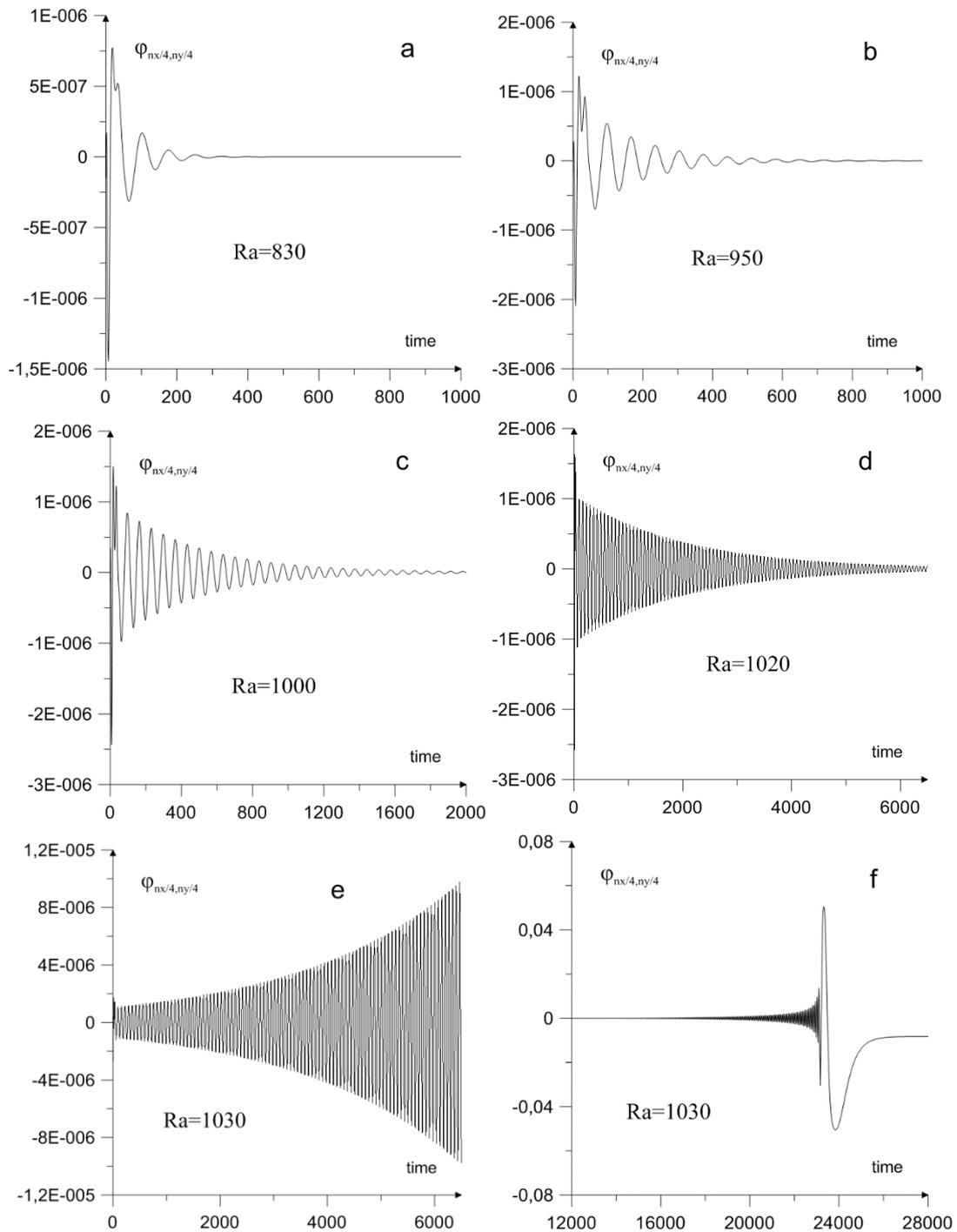


Рисунок 2.16. Временные зависимости функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ : (a)  $Ra = 830$ , (b)  $Ra = 950$ , (c)  $Ra = 1000$ , (d)  $Ra = 1020$ , (e)  $Ra = 1030$ ,  $t < 6500$ , (f)  $Ra = 1030$ ,  $t < 28000$ .

На рис. 2.17 изображены характерные картины полей функции тока (a), температуры (b) и концентрации (c) при  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = 1500$ . В отличие от случая нагрева сверху (рис. 2.13), изолинии температуры также искривлены, что говорит о термоконцентрационном механизме возникновения конвекции.

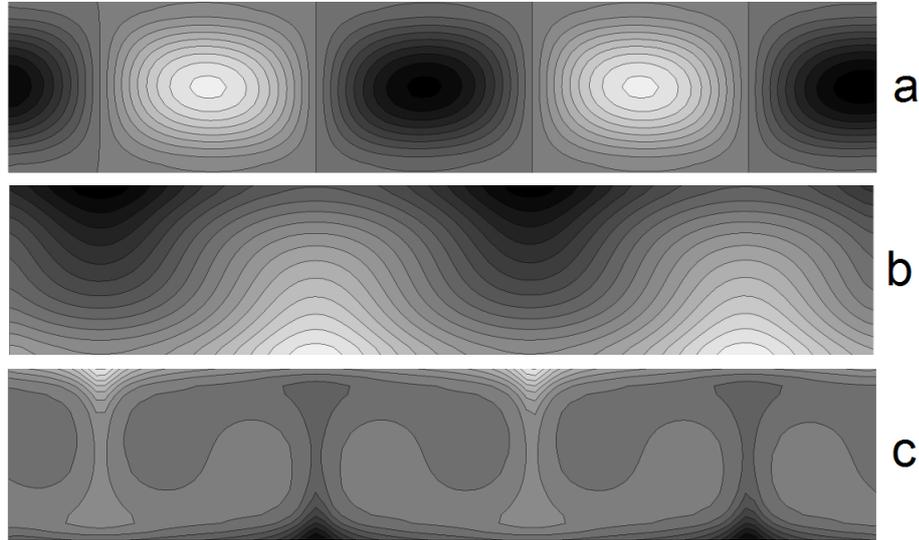


Рисунок 2.17. Поля функции тока (a), температуры (b) и концентрации (c),  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = 1500$ . Светлые и темные зоны соответствуют минимуму и максимуму представленных полей.

Выше были представлены результаты прямого численного моделирования в частном случае бинарной жидкости ( $\psi_1 = 0$ ) при значении суммарного отношения разделения  $\Psi = -0.2$ . Расчеты также проводились для значений  $\Psi = -0.3$  и  $-0.03$  – результаты вычислений качественно аналогичны тем, что и для  $\Psi = -0.2$ , как для монотонной моды при нагреве сверху, так и для колебательной моды при подогреве снизу. Если взять большее по абсолютной величине значение  $\Psi$  для монотонной моды эволюция развития конвекции остается прежней, однако для колебательной моды поведение системы немного изменяется.

### **Бинарная жидкость, $\Psi = -0.6$ , подогрев снизу, колебательная мода**

При больших значениях  $|\Psi|$  и для случая периодических граничных условий колебания наблюдались во всей области значений чисел  $Ra$  выше порога

возникновения конвекции. На рис. 2.18 представлены зависимости частоты и амплитуды колебаний от числа Рейля для двухвихревого (сплошные линии) и четырехвихревого режимов (штриховые линии). Амплитуда течения в обоих случаях приблизительно одинакова и монотонно возрастает с увеличением  $Ra$ . На рис. 2.19 показана зависимость от времени значения функции тока в точке (здесь и далее будет рассматриваться точка  $x = L/4, z = 1/4$ ) области для четырехвихревого режима при  $Ra = 5000$ . Колебательный режим устанавливается уже при  $t \sim 50$  и, в отличие от случая малого  $|\Psi|$ , колебания впоследствии не затухают.

Для случая моделирования конвекции в замкнутой ячейке колебания наблюдаются на некотором временном отрезке (рис. 2.20 при  $Ra = 5000$ ). Нарастание колебательных возмущений наблюдается вплоть до  $t \approx 250$ , после чего на короткое время устанавливается другой колебательный режим, который, в свою очередь, переходит в монотонный при  $t \approx 320$ .

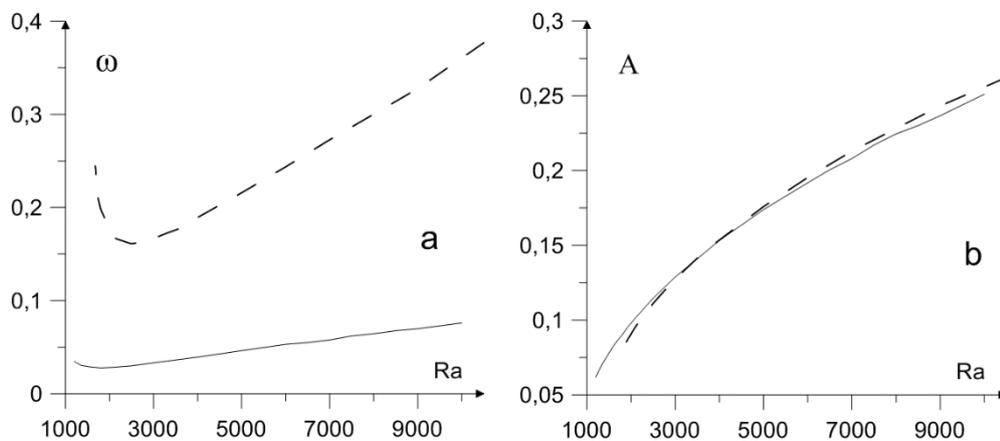


Рисунок 2.18. Зависимости частоты (а) и амплитуды (б) от  $Ra$ ,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ . Сплошные линии – двухвихревой режим, штриховые линии – четырехвихревой режим.

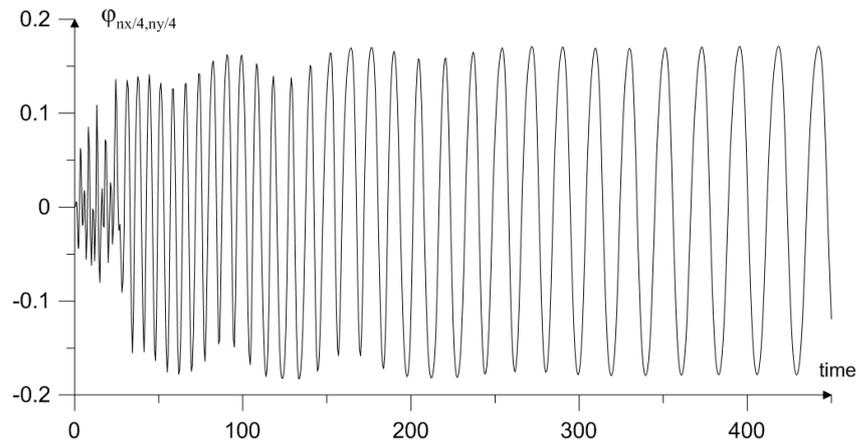


Рисунок 2.19. Временная зависимость функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.6$ ,  $Ra = 5000$ . Периодические граничные условия.

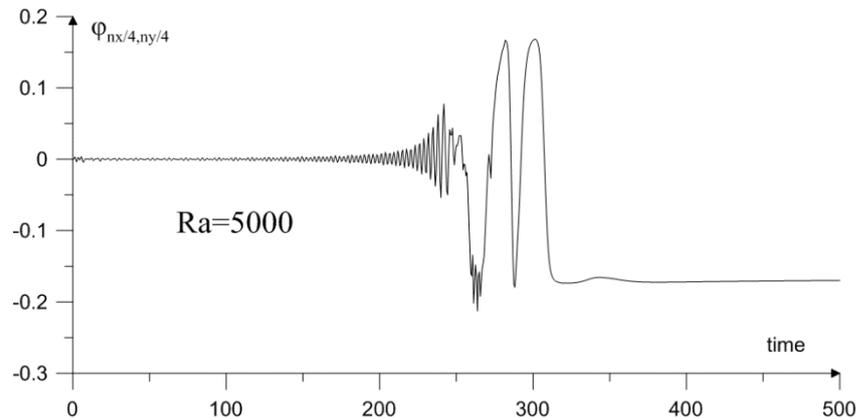


Рисунок 2.20. Временная зависимость функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.6$ ,  $Ra = 5000$ . Замкнутая область.

### Бинарная жидкость, $\Psi = 0.2$ , подогрев снизу, монотонная мода

При положительных значениях  $\Psi$  существует лишь монотонная неустойчивость в области значений  $Ra > 0$  (подогрев снизу). Результаты вычислений показаны на рис. 2.21; как видно, при  $Ra \approx 720$  наблюдается резкий скачок зависимости максимального значения функции тока от числа Релея. Значение  $Ra = 720$  является порогом возникновения конвекции в горизонтальном слое однокомпонентной жидкости. При  $Ra > 720$  картины полей идентичны

представленным на рис. 2.17 – наблюдается тепловой механизм возбуждения конвекции. В области  $Ra < 720$  структура полей аналогична полям, показанным на рис. 2.13, наблюдается концентрационный механизм возникновения неустойчивости.

Отметим также, что для данной конфигурации практически не наблюдалось отличий между результатами моделирования в ячейке слоя (с периодическими граничными условиями) и замкнутой области. Порог возникновения конвекции  $Ra_{cr} \approx 30$ , что близко к значению  $Ra_{cr} = 34$ , полученному из линейной теории устойчивости.

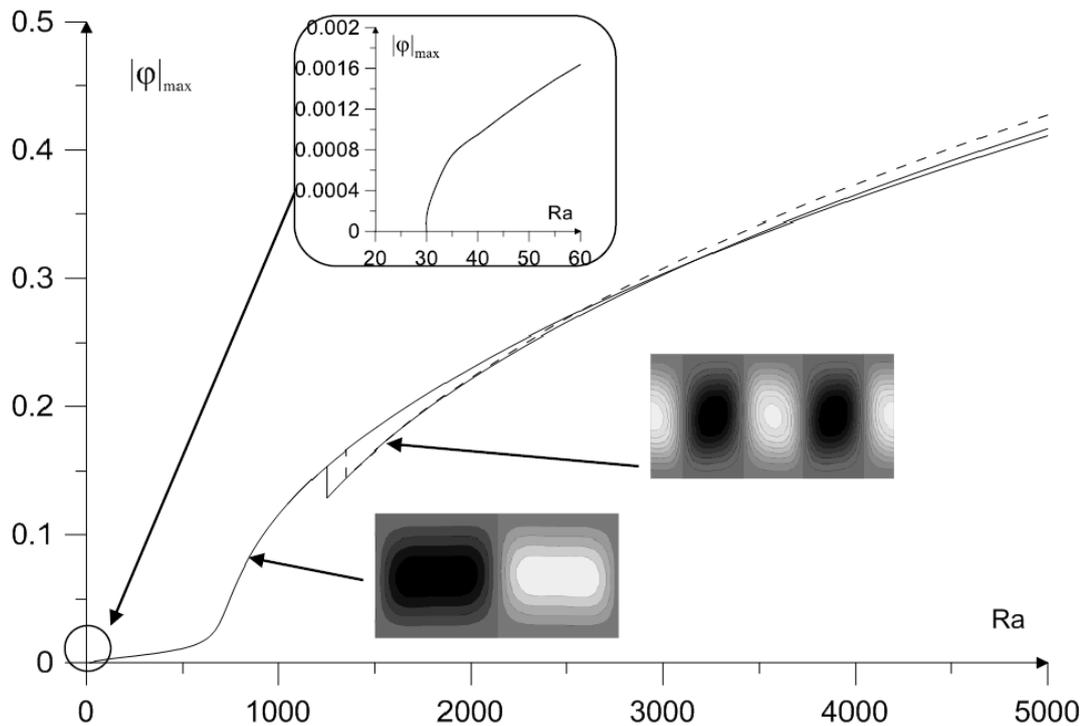


Рисунок 2.21. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = 0.2$ ,  $Ra > 0$ , монотонная мода. Сплошная линия – периодические граничные условия, штриховая – замкнутая область. Рисунки в градации серого вблизи кривых соответствуют полям функции тока.

### Трехкомпонентная жидкость, $\psi_1 = 0.4$

В линейной теории устойчивости было найдено, что существует вертикальная асимптота ветвей границ монотонной неустойчивости, которая приблизительно задается уравнением  $\Psi = \psi_1$  в пространстве параметров  $(Ra, \Psi)$ . Для  $\psi_1 = 0$  в случае колебательного режима было показано, что заметную роль играет величина суммарного отношения разделения – при большем абсолютном значении  $\Psi$  в системе более отчетливо прослеживается колебательная мода, предсказанная линейной теорией устойчивости.

Другими словами, можно сказать, что поведение системы зависит от удаления значения  $\Psi$  от асимптоты  $\Psi = \psi_1$ . Расчеты, проведенные для  $\psi_1 \neq 0$ , показали, что результаты моделирования качественно близки для случаев, когда значение  $\Psi$  равноудалено от данной асимптоты, т.е., если  $\Psi$  близко к данной асимптоте, то поведение системы идентично случаю, описанному выше для  $\psi_1 = 0$  и  $\Psi = -0.2$ , если же далеко – будет наблюдаться сценарий, похожий на случай  $\psi_1 = 0$  и  $\Psi = -0.6$ .

Режимы монотонной неустойчивости для тройных смесей при любых значениях  $\Psi$  качественно развиваются аналогично тому, что и в случаях, описанных для  $\psi_1 = 0$ .

Обсудим, например, случай  $\psi_1 = 0.4$ ,  $\Psi = 0.2$  при нагреве сверху с периодическими граничными условиями (монотонная мода). Рассмотрим рис. 2.22. Наблюдается абсолютно тот же самый сценарий, что и для случая  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$  (см, рис. 2.11 а): серия перестроек на режимы с меньшим числом вихрей, при этом длинноволновая неустойчивость наблюдается лишь вблизи порога возникновения конвекции. Для того же случая ( $\psi_1 = 0.4$ ,  $\Psi = 0.2$ ,  $Ra < 0$ ), но в замкнутой области также наблюдается аналогичный сценарий (см. рис. 2.11 b) – перестройка режимов с 11, 7, 3, 1 вихрями происходит при  $Ra$ : – 1180, – 310, – 200, – 45 соответственно, где последнее значение отвечает порогу возникновения конвекции.

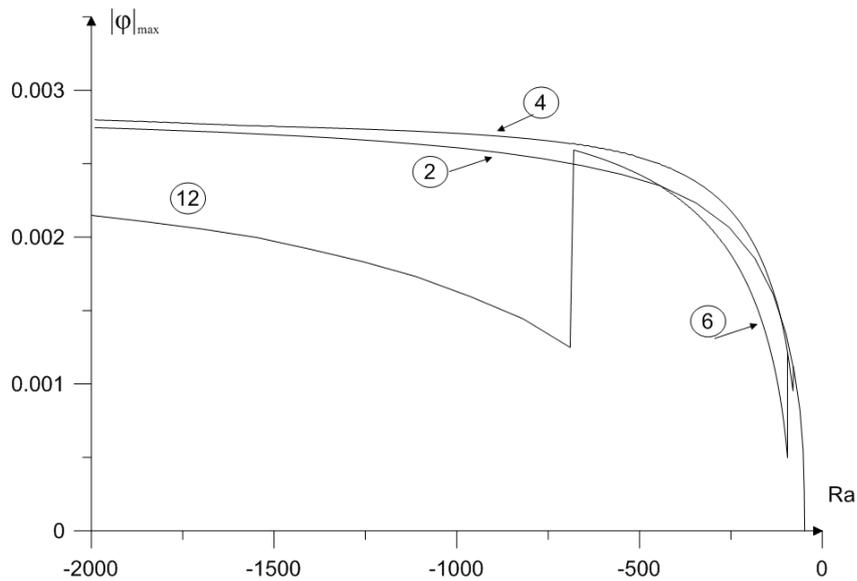


Рисунок 2.22. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = 0.4$ ,  $\Psi = 0.4$ ,  $Ra < 0$ , монотонная мода, периодические граничные условия, цифры в кружках соответствуют числу вихрей.

Для колебательной моды и подогрева снизу при  $\psi_1 = 0.4$ ,  $\Psi = 0.2$  ситуация также похожа на случай  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ . В ячейке слоя с периодическими граничными условиями наблюдается четырехвихревое течение в области  $Ra > 260$  и двухвихревое течение в области вблизи порога устойчивости  $220 < Ra < 260$ . При этом колебания также наблюдаются лишь вблизи порога. Была обнаружена ситуация, похожая на сценарий, показанный на рис. 2.16 с затухающими колебаниями.

В заключение исследования случая  $\psi_1 = 0.4$  рассмотрим поведение системы для колебательной моды и подогрева снизу при  $\Psi = -0.4$  (что достаточно далеко от асимптоты  $\Psi = \psi_1$ ). Возьмем, например,  $Ra = 3000$ , что примерно в 3 раза выше порогового значения. При этом амплитуда колебаний  $\approx 0.12$ , что близко к значению из графика на рис. 2.18 (а), а частота колебаний  $\approx 0.026$ , что примерно на порядок меньше, чем для случая  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.6$ .

### Трехкомпонентная жидкость, $\psi_1 = -0.4$

Как было сказано ранее, поведение трехкомпонентных смесей качественно похоже на случай бинарной жидкости (с учетом сдвига по оси  $\Psi$ ) что также справедливо для случая  $\psi_1 = -0.4$ . При этом, однако, при  $\psi_1 = -0.4$  существует диапазон значений  $\Psi$ :  $-0.35 < \Psi < -0.081$ ,  $Ra > 0$ , где колебательная мода существует, но не является наиболее опасной.

Исследуем подробнее случай  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.25$ ,  $Ra > 0$ , с периодическими граничными условиями. Рассмотрим рис. 2.23. В начале расчета при больших значениях  $Ra$  система ведет себя как в описанных выше ситуациях (см., например, рис. 2.14), когда колебания существуют лишь в узкой области вблизи порога устойчивости: четырехвихревая структура течения трансформируется в двухвихревую при  $Ra = 1400$ . Этот монотонный режим существует до  $Ra \approx 1290$ . На рис. 2.24 показан сценарий трансформации монотонного режима. Монотонная мода продолжает существовать до  $t \sim 3000$ , и после короткой переходной стадии в системе наблюдаются периодические колебания.

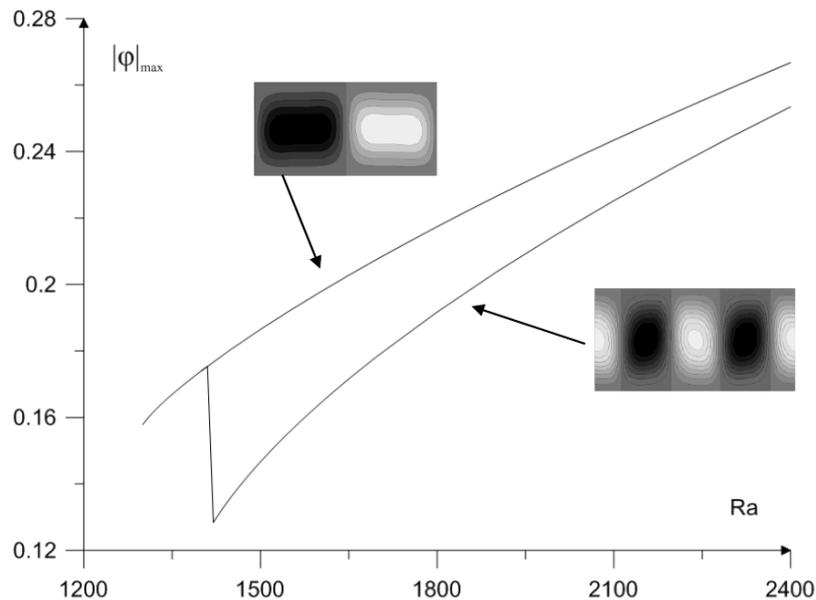


Рисунок 2.23. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.25$ ,  $Ra > 0$ , периодические граничные условия. Рисунки в градации серого вблизи кривых соответствуют полям функции тока.

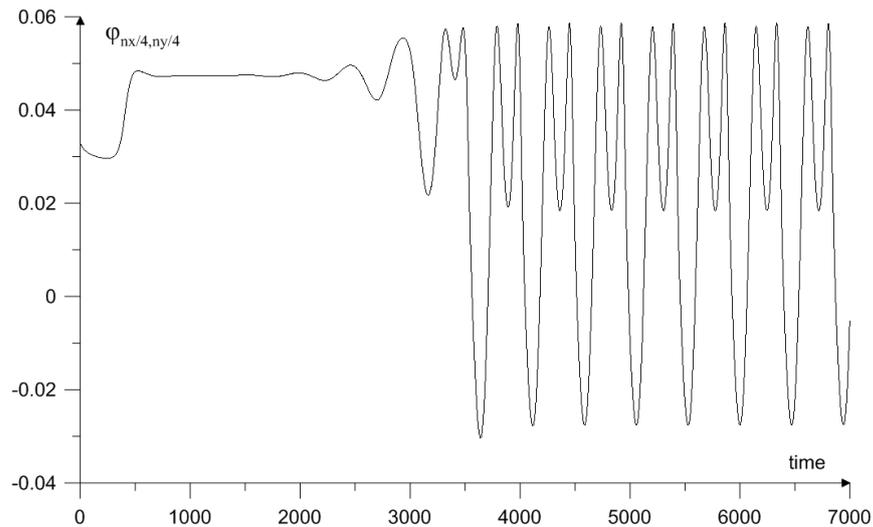


Рисунок 2.24. Временная зависимость функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.25$ ,  $Ra = 1290$ . Периодические граничные условия.

Колебания продолжают существовать в диапазоне  $Ra$ :  $1170 < Ra < 1290$ . На рис. 2.25 представлено поведение системы на границе данного интервала. Колебательный режим при  $Ra = 1170$  существует до  $t \sim 4000$ , после чего течение не затухает, а переходит к монотонной моде, предсказанной линейной теорией устойчивости (рис. 2.26). Первоначально мы снова наблюдаем четырехвихревой режим, который при еще меньших значениях  $Ra$  становится двухвихревым.

Переход от колебательного режима к монотонному наблюдался при  $Ra = 1170$ , что является близким к значению  $Ra_{cr} = 1063$ , полученному из линейной теории для порога устойчивости равновесия по отношению к колебательной. Порог возникновения конвекции из линейной теории  $Ra_{cr} = 62$ , что весьма близко к значению, полученному в нелинейных расчетах  $Ra_{cr} \approx 60$ .

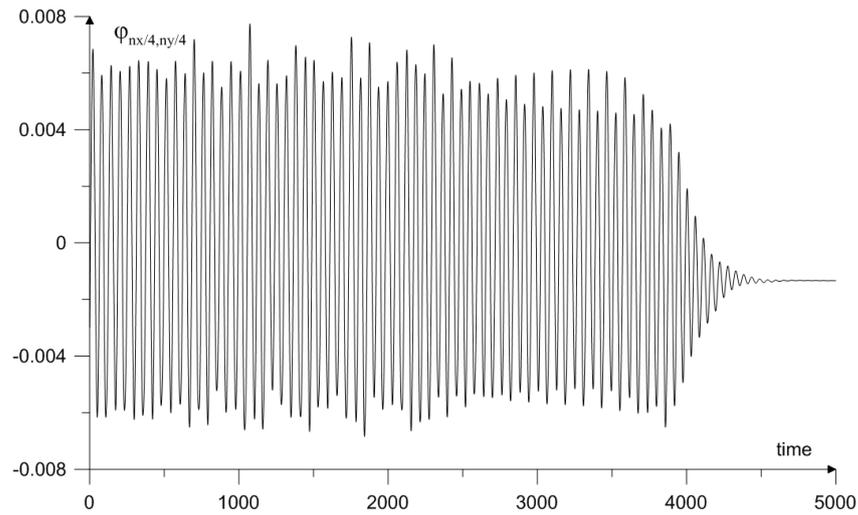


Рисунок 2.25. Временная зависимость функции тока в фиксированной точке области,  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.25$ ,  $Ra = 1170$ . Периодические граничные условия.

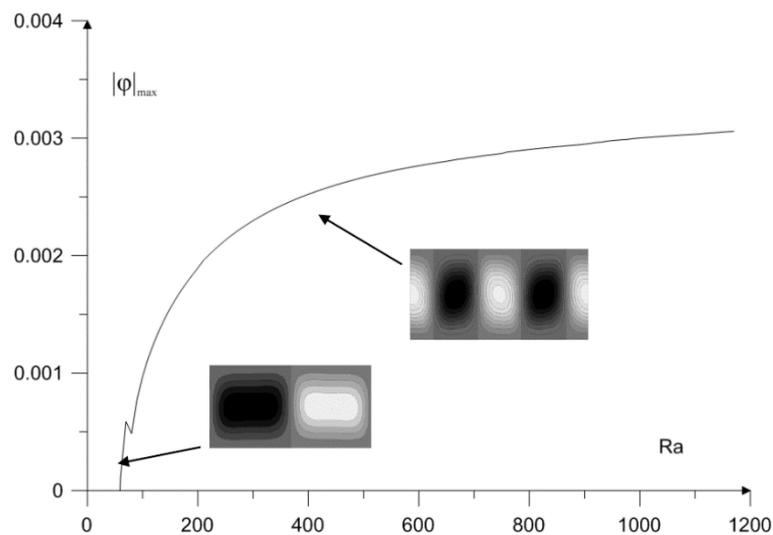


Рисунок 2.26. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея,  $\psi_1 = -0.4$ ,  $\Psi = -0.25$ ,  $Ra > 0$ , периодические граничные условия. Рисунки в градации серого вблизи кривых соответствуют полям функции тока.

## Трехмерное моделирование конвекции

Плоским двухмерным структурам в трехмерном случае соответствуют конвективные течения в виде вытянутых горизонтальных валов. Однако, как было отмечено ранее, в трехмерной геометрии в общем случае могут встречаться течения с другой структурой, например, в виде гексагональных и квадратных ячеек.

Трехмерная задача конвекции с эффектом Соре решалась в естественных переменных (скорость-давление) с помощью системы уравнений (2.33)-(2.36). Использовался численный алгоритм проекций (дробных шагов), в качестве схемы дискретизации применялся метод конечных разностей с явной по времени схемой. Аналогичная процедура использовалась при решении уравнений фазового поля в первой главе диссертации (см. приложение А). Вкратце алгоритм состоит из следующих шагов: 1) решаются эволюционные уравнения для температуры и концентрации, а также уравнение для квазискорости (поле скорости без учета градиента давления); решается уравнение Пуассона для давления; 3) вычисляется поле истинной скорости из найденных полей давления и квазискорости; 4) вызываются вспомогательные процедуры вывода в файл характеристик течения и др. После этого цикл повторяется для значений полей на новом временном шаге. Так же, как и в случае решения уравнений фазового поля, вычисления проводились на графических процессорах с использованием технологии CUDA. Подробнее процедура описана в приложении к диссертации.

Рассматривалась ячейка слоя в виде прямоугольного параллелепипеда (рис. 2.27) и параметрами жидкости  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ . Ячейка слоя имеет следующие размеры:  $L_x \times L_y \times L_z$ , где  $L_z = 1$  – вертикальный размер, горизонтальные размеры области  $L_x, L_y$  принимались в диапазоне от 0.33 до 10.

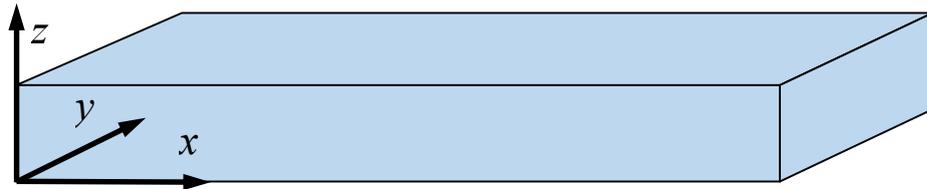


Рисунок 2.27. Трехмерная ячейка слоя

Для наглядного представления течений применялся метод визуализации частицами. Для этого использовались две программы: 1) непосредственно численная программа расчета по методу проекций, 2) программа рендеринга изображения, написанная на C++ с использованием библиотеки OpenGL.

В первом случае получается поле скорости ( $\mathbf{v}(x, y, z)$ ), оно записывается в файл. В OpenGL-программе считывается данное поле скорости и задается случайное распределение частиц внутри области. Затем проводится расчет траекторий частиц ( $\mathbf{r}(x, y, z)$ ) по методу Эйлера:  $\mathbf{r}^{n+1}(x, y, z) = \mathbf{r}^n(x, y, z) + \mathbf{v}(x, y, z) \cdot \Delta t$ , с использованием линейной интерполяции поля скорости. При этом при визуализации каждая частица имеет небольшой хвост, который показывает отрезок траектории частицы в предыдущие моменты времени. Пример визуализации течения в виде одного кадра представлен на рис. 2.28.

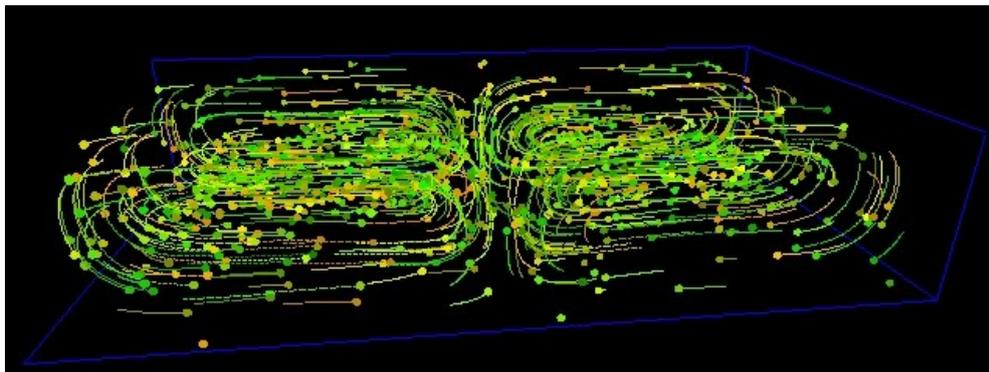


Рисунок 2.28. Структура конвективного течения в ячейке слоя с размерами  $5 \times 3 \times 1$ ,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = 1600$ .

Как известно из результатов исследования конвекции однокомпонентных жидкостей, представленных, например, в монографии Гетлинга [162], для

ситуации, отличной от случая идеально теплопроводных границ, возможно возникновение квадратных ячеек, либо валов. Численные расчеты, выполненные при различных соотношениях  $L_x$  и  $L_y$  и для различных значений  $Ra$  показали, что для смесей с эффектом Соре также наблюдаются два данных варианта.

На рис. 2.28 представлен случай  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = 1600$  и  $L_x \times L_y \times L_z = 5 \times 3 \times 1$ . В данном случае наблюдается течение в виде двух конвективных валов, вращающихся в противоположных направлениях. Результаты трехмерных расчетов близки к двумерным не только качественно, но и количественно. На рис. 2.29 представлены зависимости максимального по абсолютной величине значения скорости ( $V_{\max} = \sqrt{(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}$ ) от числа Релея, полученные в трехмерных (штриховая линия) и двумерных (сплошная линия) расчетах. Вдали от порога возникновения конвекции разница в значениях  $V_{\max}$  в двумерных и трехмерных расчетах  $\approx 2\%$ , вблизи порога эта разница  $\approx 6-7\%$ .

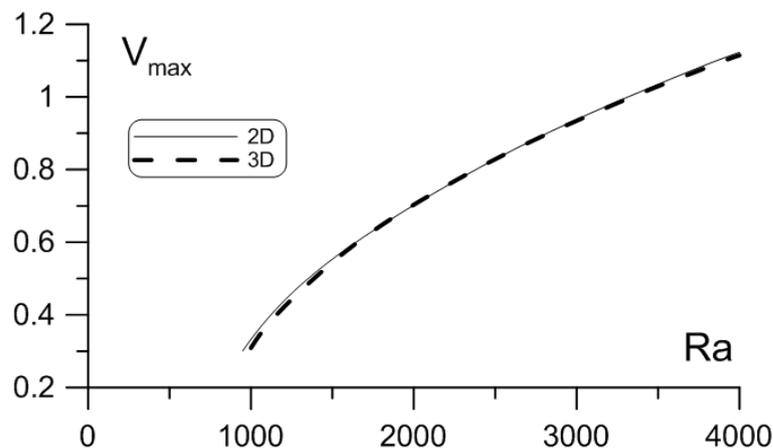


Рисунок 2.29. Зависимости максимального по модулю значения поля скорости от времени, ячейка слоя  $5 \times 3 \times 1$ ,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ . Сплошная линия – двумерные расчеты, штриховая – трехмерные.

Однако при трехмерном моделировании для более широкой ячейки возможно формирование квадратных структур. На рис. 2.30 представлен случай  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = -5000$  и  $L_x \times L_y \times L_z = 7 \times 5 \times 1$ . На данном рисунке показан вид сверху, цвет частиц не соответствует каким-либо физическим свойствам и выбран

для более наглядной визуализации структуры течения. Возникновение той или иной структуры конвективных ячеек зависит и от надкритичности: формирование квадратных ячеек в рассмотренной выше геометрии  $5 \times 3 \times 1$  возможно также при бóльших числа Релея (например,  $Ra \sim 5000$ ).

Известно, что для однокомпонентной жидкости большое влияние на формирование структур оказывает значение числа Прандтля [162] (в наших расчетах  $Pr = 10$ ). В случае многокомпонентных смесей кроме числа Прандтля имеются числа Шмидта и параметры термодиффузии, которые, по-видимому, также будут оказывать заметное влияние на структуру течений в трехмерном случае. Более подробное исследование трехмерных режимов конвекции многокомпонентных смесей с эффектом Соре в полостях с заданным тепловым потоком на границах выходит за рамки диссертационной работы и будет проведено в дальнейшем.

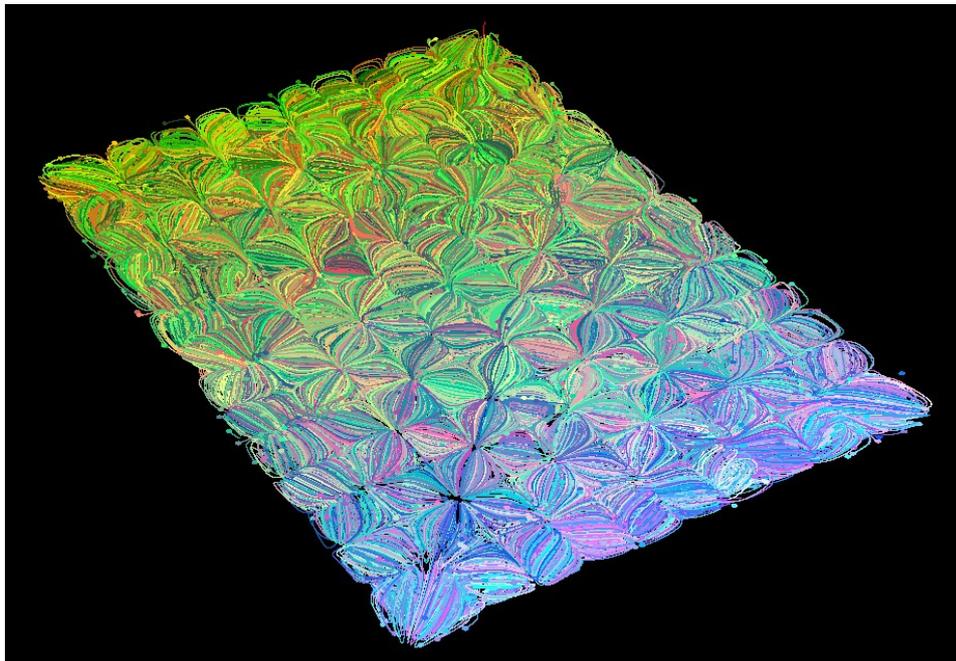


Рисунок 2.30. Структура конвективного течения в ячейке слоя с размерами  $7 \times 5 \times 1$ ,  $\psi_1 = 0$ ,  $\Psi = -0.2$ ,  $Ra = -5000$ , вид сверху.

### 2.2.3 Выводы по разделу

Исследованы возникновение и нелинейные режимы конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в плоском горизонтальном слое с заданным тепловым потоком на границах.

Численное решение линейной задачи устойчивости показало, что во всей области исследуемых параметров наиболее опасной является длинноволновая монотонная или колебательная неустойчивость.

Нелинейные расчеты показали, что длинноволновой характер неустойчивости, обнаруженный с помощью линейного анализа устойчивости, в действительности имеет место лишь вблизи порога устойчивости. Для колебательной моды неустойчивости найдено, что колебания для небольших по абсолютной величине значений суммарного отношения разделения проявляются лишь в при небольших надкритичностях (число Релея немного превышает пороговое), тогда как при больших значениях колебания наблюдаются во всех области выше порога возникновения конвекции.

Результаты двумерных вычислений в предельных случаях согласуются с моделированием в трехмерной геометрии.

### 2.3 Устойчивость механического равновесия смеси толуол-метанол-циклогексан с суммарным отношением разделения, близким к нулю

Рассмотрим задачу конвекции трехкомпонентной смеси толуол-метанол-циклогексан с массовыми долями компонентов 0.62/0.31/0.07. Под значением концентрации  $C_1$  будем понимать толуол,  $C_2$  – метанол,  $C_3$  – циклогексан.

Исследование этой задачи проводилось теоретически и экспериментально. Экспериментальная часть работ выполнена в Брюссельском свободном университете В.М. Шевцовой и А. Мьяльдунем. Эксперимент проводился в условиях земной гравитации для двух составов смеси: 0.62/0.31/0.07 и 0.623/0.306/0.071. Рассматривалась ячейка высотой 6 мм и площадью основания 18 мм × 18 мм. Исследовался случай нагрева сверху, между верхней и нижней границами поддерживалась разность температур  $\Delta T = T_h - T_c = 6$  °С.

В численном моделировании, выполненном в рамках диссертационной работы, рассматривалась двухмерная область с высотой 6 мм и длиной 18 мм (аспектное отношение  $L = 3:1$ , см. рис. 2.31). Моделирование проводилось для параметров эксперимента, физические свойства исследуемой смеси приведены в таблицах 2 и 3. Границы области считались идеально теплопроводными, непроницаемыми для вещества. Нагреву  $\Delta T = 6$  °С и характерному размеру  $h = 6$  мм соответствует число Релея  $Ra = g\beta_T\Delta Th^3/\chi\nu = 2.3417 \cdot 10^5$ .

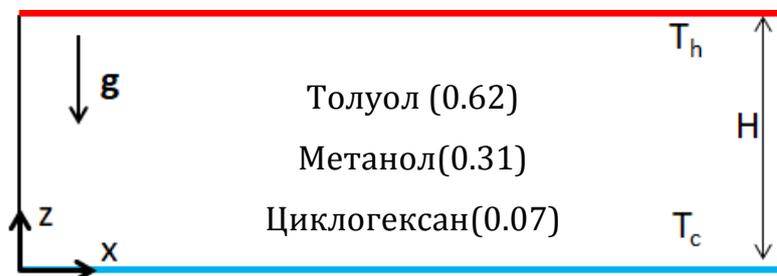


Рисунок 2.31. Геометрия области в задаче о конвекции смеси толуол-метанол-циклогексан, границы области – твердые идеально теплопроводные, непроницаемые для вещества. Аспектное соотношение  $L = 3:1$ . Нагрев сверху  $\Delta T = 6$  °С.

Таблица 2. Физические свойства смеси толуол(0.62)-метанол(0.31)-циклогексан(0.07) при температуре  $T_0 = 298.15$  К.

$\rho_0$	$\beta_T/10^{-3}$	$\beta_{c1}$	$\beta_{c2}$	$\mu/10^{-3}$	$\nu/10^{-6}$	$\chi/10^{-7}$	$D_{11}/10^{-9}$	$D_{12}/10^{-9}$	$D_{21}/10^{-9}$	$D_{22}/10^{-9}$
кг/м <sup>3</sup>	К <sup>-1</sup>			Па·с	м <sup>2</sup> /с					
829.99	1.16	-0.140	-0.048	0.56	0.67	0.94	2.244	1.337	-0.226	0.551

Таблица 3. Коэффициенты термодиффузии  $D_{Ti}/10^{-13}$  К<sup>-1</sup>·м<sup>2</sup>/с, коэффициенты Соре  $S_{T,i}/10^{-3}$ К<sup>-1</sup>, коэффициенты отношений разделения компонентов смеси  $\psi_i$  и суммарное отношение разделения  $\Psi$  для двух наборов параметров  $m_1, m_2$ , а также для их средних значений  $m_{av}$ .

	$D_{T,1}$	$D_{T,2}$	$S_{T,1}$	$S_{T,2}$	$\psi_1$	$\psi_2$	$\Psi$
$m_1$	-3.3705	-7.1890	0.504	-1.098	0.0608	-0.0454	0.0154
$m_2$	-6.6244	-7.1836	0.387	-1.145	0.0467	-0.0473	-0.0006
$m_{av}$	-5.0153	-7.1879	0.445	-1.122	0.0537	-0.0464	0.0073

Численное моделирование проводилось путем решения системы уравнений (2.40)-(2.43). При этом преобразование (2.45), которое диагонализует матрицу коэффициентов диффузии (чисел Шмидта), не использовалось. Граничные условия, соответствующие рассматриваемой замкнутой области (рис. 2.31) в безразмерных форме записываются в следующем виде:

$$z = 0,1: \mathbf{v} = 0, \quad T(z = 0) = 0, \quad T(z = 1) = 1, \quad (2.70)$$

$$z = 0,1: \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial z} - \psi \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad (2.71)$$

$$x = 0,3: \mathbf{v} = 0, \quad T = z, \quad \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x} - \psi \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (2.72)$$

Применялся тот же численный алгоритм расчета, что и при моделировании нелинейных режимов конвекции в слое при условии заданного теплового потока (см., формулы (2.61)-(2.68)).

В качестве начального возмущения задавалось значение завихренности  $\omega = 10^{-3}$  в точке с координатами  $x = 2.75$ ,  $z = 0.75$ . Во всех остальных точках области  $\omega(x, z) = 0$ . Начальное поле функции тока  $\varphi(x, z) = 0$ . Начальная температура смеси задавалась как среднее значение между горячей и холодной стенками, т.е.  $T = 1/2$ . Концентрация смеси соответствовала состоянию с однородным распределением компонентов,  $C_1 = C_2 = 0$  (напомним, что в счете используются безразмерные концентрации, отсчитываемые от  $C_{01}, C_{02}$ ). При этом в размерных величинах начальное значение концентрации соответствовало бы  $C_1 = C_{01}, C_2 = C_{02}$ , где  $C_{01} = 0.62$  и  $C_{02} = 0.31$  – массовые доли толуола и метанола в системе.

Решение задачи проводилось в безразмерных величинах, однако для удобства и наглядного представления на графиках и при обсуждении результатов для полей концентрации будут приводиться размерные.

Как отмечалось во введении к текущей главе, в результате обработки экспериментальных данных с Международной космической станции, были получены два варианта значений коэффициентов  $S_{ore}$ . (см. таблицу 3). Вариант  $m_1$ :  $S_{T1} = 0.504 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  и  $S_{T2} = -1.098 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ; вариант  $m_2$ :  $S_{T1} = 0.387 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  и  $S_{T2} = -1.145 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ . Количественно два набора коэффициентов отличаются на небольшую величину, однако эта разница приводит к смене знака суммарного отношения разделения ( $\Psi$ ), что существенно сказывается на поведении смеси. В обоих случаях  $\Psi$  близко к нулю, однако в первом случае суммарное отношение разделения положительно:  $\Psi = 0.0154$ , а во втором – отрицательно:  $\Psi = -0.0006$ . В диссертации последовательно рассматриваются оба варианта, а также приводится сравнение с экспериментальными данными.

### 2.3.1 Положительное значение суммарного отношения разделения

Расчеты показали, что в случае положительного значения суммарного отношения разделения в системе устанавливается механическое равновесие с линейными по высоте распределениями температуры и концентрации компонентов смеси. Рисунок 2.32 иллюстрирует временную эволюцию значений разницы концентрации между верхней горячей и нижней холодной стенками в центре области ( $x = 1.5$ ) для трех компонентов:  $\Delta C_i(t) = C_{i,z=1}(t) - C_{i,z=0}(t)$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Сплошной линией представлен случай  $m_1: \Psi = 0.0154$ , для сравнения штриховой линией изображен случай для средних значений  $m_{av}: \Psi = 0.0073$ . Как видно из рис. 2.32, величины  $\Delta C_i(t)$  монотонно изменяются до  $t \sim 300$ , последующее стационарное состояние отвечает механическому равновесию с линейными по высоте распределениями концентрации компонентов. Отметим, что единица безразмерного времени приблизительно равна 1 мин.

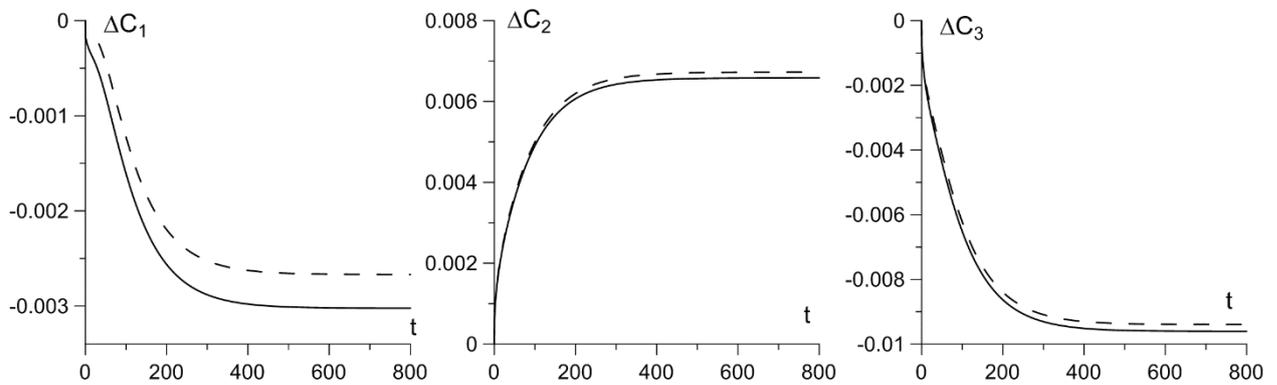


Рисунок 2.32. Зависимости от времени разницы значений концентрации между верхней и нижней стенками для трех компонентов смеси в центре области ( $x=1.5$ ):  $\Delta C_i(t) = C_{i,z=1}(t) - C_{i,z=0}(t)$  Сплошная линия соответствует  $m_1: \Psi = 0.0154$ , штриховая соответствует  $m_{av}: \Psi = 0.0073$ .

Линейное стационарное распределение концентраций в безразмерных величинах определяется уравнением  $c_i(z) = \psi_i \cdot z$ . Между случаями  $m_1$  и  $m_{av}$  наибольшая разница наблюдается для отношения разделения  $\psi_1$  ( $\approx 12\%$ ), что приводит к тому, что для  $C_1$  наблюдается бóльшая разница между кривыми, чем

для случаев  $C_2$  и  $C_3$ . Тем не менее, качественно поведение в обоих случаях ( $m_1$  и  $m_{av}$ ) близко друг к другу. Далее при обсуждении случая  $\Psi > 0$  будем иметь в виду лишь вариант  $m_1$ .

При более детальном рассмотрении случая положительных  $\Psi$  было обнаружено, что система ведет себя, на первый взгляд, парадоксальным образом. Рассмотрим выражения для диффузионных потоков вещества компонентов  $C_1$  (толуол) и  $C_2$  (метанол):

$$J_1 = -\rho_0(D_{11}\nabla C_1 + D_{12}\nabla C_2 + D_{T,1}\nabla T), \quad (2.73)$$

$$J_2 = -\rho_0(D_{21}\nabla C_1 + D_{22}\nabla C_2 + D_{T,2}\nabla T). \quad (2.74)$$

В состоянии равновесия потоки  $J_1, J_2$  обращаются в ноль. Равновесные градиенты концентрации и температуры оказываются линейно зависимыми величинами (при наличии непроницаемых для вещества границ):

$$\nabla C_i = -S_{Ti}\nabla T, \quad i = 1, 2. \quad (2.75)$$

Связь между коэффициентами Соре ( $S_{Ti}$ ), коэффициентами диффузии ( $D_{ik}$ ) и термодиффузии ( $D_{Tk}$ ) определяется соотношением:  $S_{Ti} = \sum_{k=1}^2 (D^{-1})_{ik} D_{Tk}$ .

В случае нагрева сверху градиент температуры всегда положителен:  $\nabla T > 0$ . Коэффициент  $S_{T1} > 0$  (см. таблицу 3). Из формулы (2.75) следует, что  $\nabla C_1 < 0$ . Таким образом, компонент смеси толуол должен накапливаться вблизи нижней холодной стенки.

Рассмотрим рис. 2.33, на котором изображено поле концентрации  $C_1$  в момент времени  $t = 10$ . Тoluол, вопреки ожиданиям, демонстрирует гравитационно неустойчивое распределение, которое противоречит выражению (2.75). Из рис. 2.32 была видна временная эволюция разницы концентрации между верхней и нижней стенками – внизу области накапливается больше компонента  $C_1$ , однако внутри области ( $0 < z < 1$ ) наблюдается обратное поведение. Массовая доля толуола

в система является самой большой (62%) и он является наиболее тяжелым компонентом смеси ( $\beta_{C_1} = -0.140$ , что почти в 3 раза превышает значение  $\beta_{C_2}$ ). Таким образом, устойчивость системы сильно зависит от распределения толуола.

На рис. 2.34 показано распределение концентраций  $C_1$  и  $C_2$  с высотой в различные моменты времени. Видно, что распределение компонента  $C_1$  (рис. 2.34 а) на больших временах изменяется на устойчивое и согласуется с выражением (2.75). Поведение второго компонента (рис. 2.34 б) при этом оказывается более предсказуемым – с самого начала, как и следует из выражения (2.75), метанол скапливается вблизи верхней горячей границы.

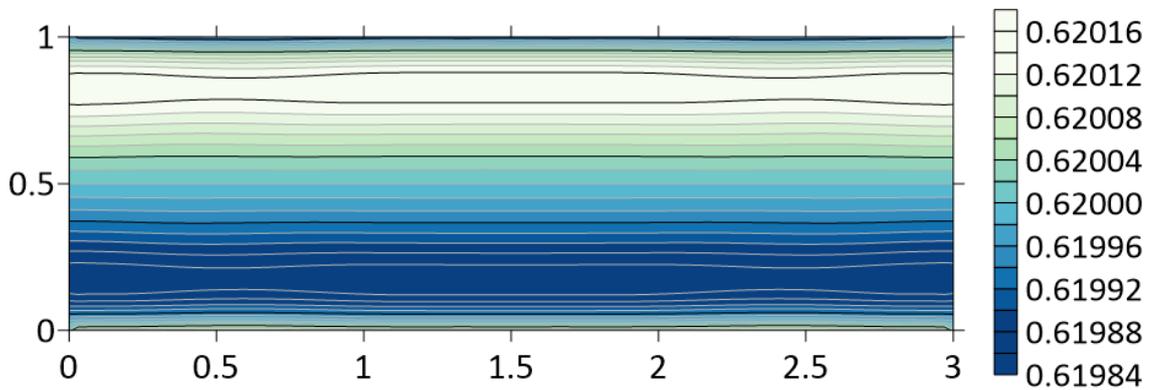


Рисунок 2.33. Поле концентрации толуола ( $C_1$ ) в момент времени  $t = 10$ ,  $m_1: \Psi = 0.0154$ .

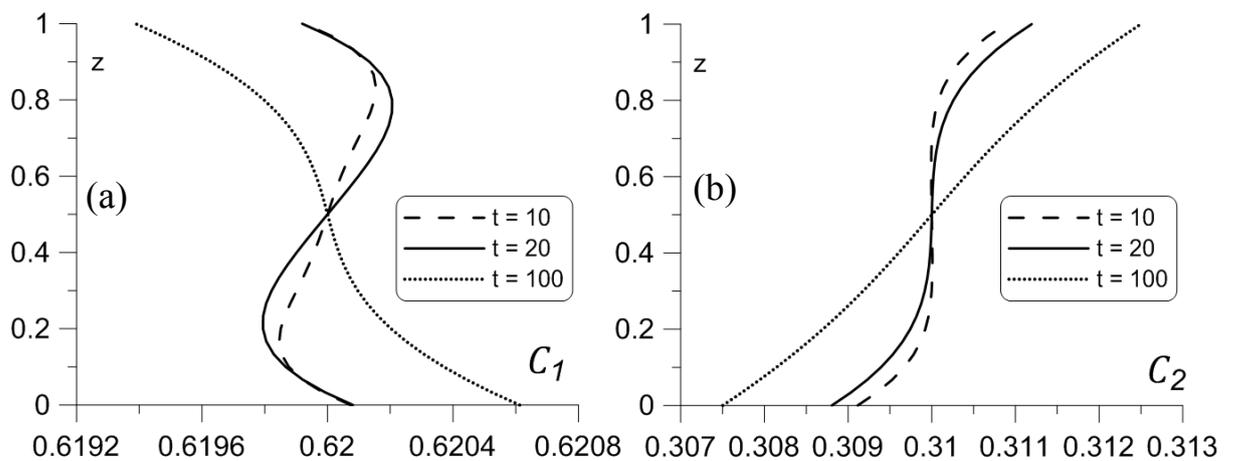


Рисунок 2.34. Распределения с высотой концентраций  $C_1$  (а) и  $C_2$  (б) в различные моменты времени,  $x = 1.5$ .

Обсудим более подробно роль различных вкладов в распределение плотности. Уравнение состояния имеет вид:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_{C1}(C_1 - C_{01}) - \beta_{C2}(C_2 - C_{02})). \quad (2.76)$$

Ему отвечает выражение для градиента плотности

$$\nabla\rho = \rho_0(-\beta_T\nabla T - \beta_{C1}\nabla C_1 - \beta_{C2}\nabla C_2). \quad (2.77)$$

На рис. 2.35 представлено распределение концентрационного вклада в плотность смеси  $\Delta\rho_{C1} + \Delta\rho_{C2} = -\beta_{C1}(C_1 - C_{01}) - \beta_{C2}(C_2 - C_{02})$  в зависимости от высоты для различных моментов времени. Как видно из данного рисунка, в начальные моменты времени (до  $t \sim 50$ ),  $\Delta\rho_{C1} + \Delta\rho_{C2}$  убывает, т.е. суммарный вклад концентрации оказывается дестабилизирующим (иначе говоря:  $\nabla\rho_C = -\beta_{C1}\nabla C_1 - \beta_{C2}\nabla C_2 > 0$ ). Заметим, что общий градиент плотности, однако, имеет гравитационно устойчивую стратификацию в силу того, что стабилизирующим оказывается температурный вклад  $\nabla\rho_T = -\beta_T\nabla T > 0$ , и при этом  $|\beta_T\nabla T| \gg |\beta_{C1}\nabla C_1|, |\beta_{C2}\nabla C_2|$ . Однако, как известно [141], неустойчивость механического равновесия может наблюдаться и в случае гравитационно устойчивой стратификации смеси по плотности. Это может происходить, когда характерные тепловые и концентрационные времена существенно отличаются.

Представим область с нагревом сверху при условии, что концентрационный вклад в плотность является дестабилизирующим (т.е.  $\nabla\rho_T > 0, \nabla\rho_C < 0$ ). Следуя рассуждениям Г. З. Гершуни и Е. М. Жуховицкого [141]: холодный элемент жидкости с более низких слоев системы может случайно (в силу различных флуктуаций) сместиться вверх в более нагретую область. Если характерные тепловые времена намного меньше концентрационных (процесс теплопроводности намного быстрее процессов диффузии), то данный элемент жидкости будет быстро нагреваться до температуры окружающей его среды, при этом становясь легче. В то же время рассматриваемый элемент будет относительно медленно диффундировать в окружающее пространство, т.е. медленно терять концентрацию легкого компонента. В этом случае может оказаться, что элемент

жидкости будет легче окружающего пространства и продолжит всплывать дальше – в системе будут нарастать возмущения.

В случае, когда концентрационный вклад в плотность является стабилизирующим ( $\nabla\rho_T > 0$ ,  $\nabla\rho_C > 0$ ), случайно сместившийся вверх элемент жидкости будет более богат тяжелым компонентом и просто вернётся назад.

В рассматриваемой нами задаче тепловое время  $\tau_T = h^2/\chi = 383$  с, концентрационные времена для  $C_1$  и  $C_2$  соответственно равны  $\tau_{C1} = h^2/d_1 = 17640$  с и  $\tau_{C2} = h^2/d_2 = 47760$  с ( $h$  – высота ячейки,  $\chi$  – температуропроводность,  $d_1, d_2$  – собственные значения матрицы диффузии). Диффузионные времена различаются между собой относительно немного, в 2.7 раз. Компоненты концентрации действуют «заодно», как единый механизм, тогда как отношения концентрационных времен к тепловому соответственно равны  $\tau_T/\tau_{C1} = 46$ ,  $\tau_T/\tau_2 = 125$ .

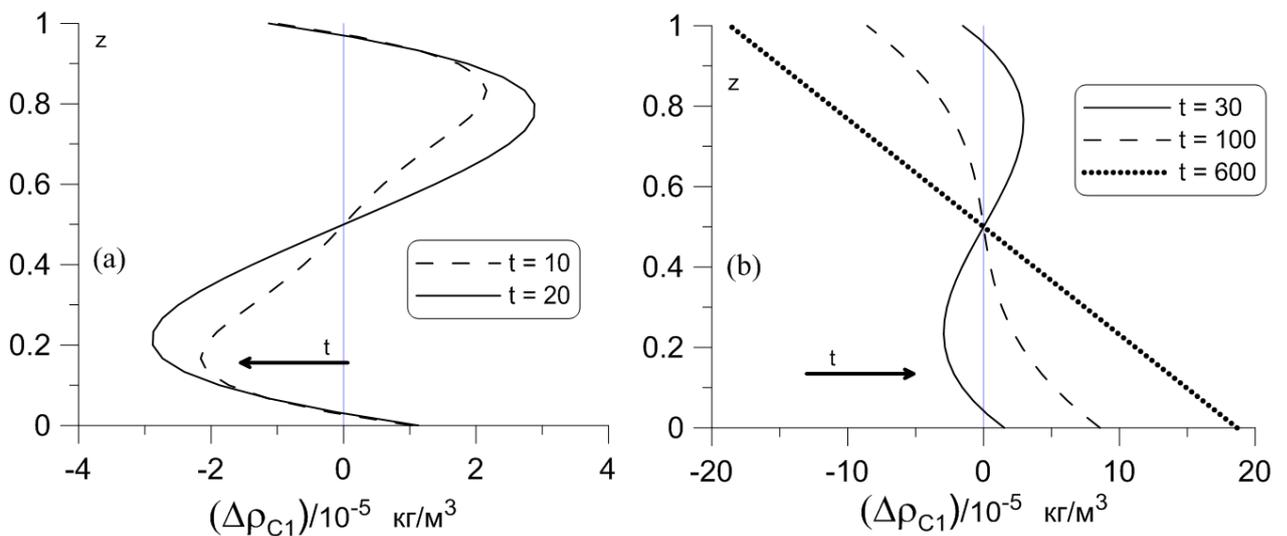


Рисунок 2.35. Распределение с высотой суммарного концентрационного вклада в плотность смеси  $\Delta\rho_{C1} + \Delta\rho_{C2} = -\beta_{C1}(C_1 - C_{01}) - \beta_{C2}(C_2 - C_{02})$  в различные моменты времени при  $x = 1.5$ : а) толуол движется вверх, б) толуол движется вниз.

Как видно из рис. 2.35, дестабилизирующий градиент плотности ( $\nabla\rho_C < 0$ ) существует до  $t \sim 100$ , и теоретически в системе можно ожидать развитие конвекции, что, однако, не происходит, и в результате взаимодействия

компонентов получается устойчивая концентрационная стратификацию ( $\nabla\rho_C > 0$ ). Отметим, что моделирование проводилось и при других начальных условиях и начальных возмущениях – в этих случаях неустойчивость также не развивалась, и поведение системы оказывалось качественно близким к описанному выше.

Объясним поведение компонента  $C_1$  (толуол). Как отмечалось выше (см. рис. 2.34), в начальные моменты времени тяжелый толуол скапливается в верхней половине области, после чего (при  $t \sim 20$ ) распределение  $C_1$  «разворачивается» и становится устойчивым.

Рассмотрим диффузионный поток вещества (2.73):

$$J_1 = -\rho_0(D_{11}\nabla C_1 + D_{12}\nabla C_2 + D_{T,1}\nabla T),$$

который состоит из диффузионного вклада  $J_{1,C1} = -\rho_0 D_{11} \nabla C_1$ , вклада перекрестной диффузии (кросс-диффузии) от второго компонента  $J_{1,C2} = -\rho_0 D_{12} \nabla C_2$  (их сумма  $J_{1,C} = -\rho_0 D_{11} \nabla C_1 - \rho_0 D_{12} \nabla C_2$ ) и термодиффузионного потока  $J_{1,DT} = -\rho_0 D_{T,1} \nabla T$ . Эволюция данных вкладов в поток  $J_1$  представлена на рис. 2.36.

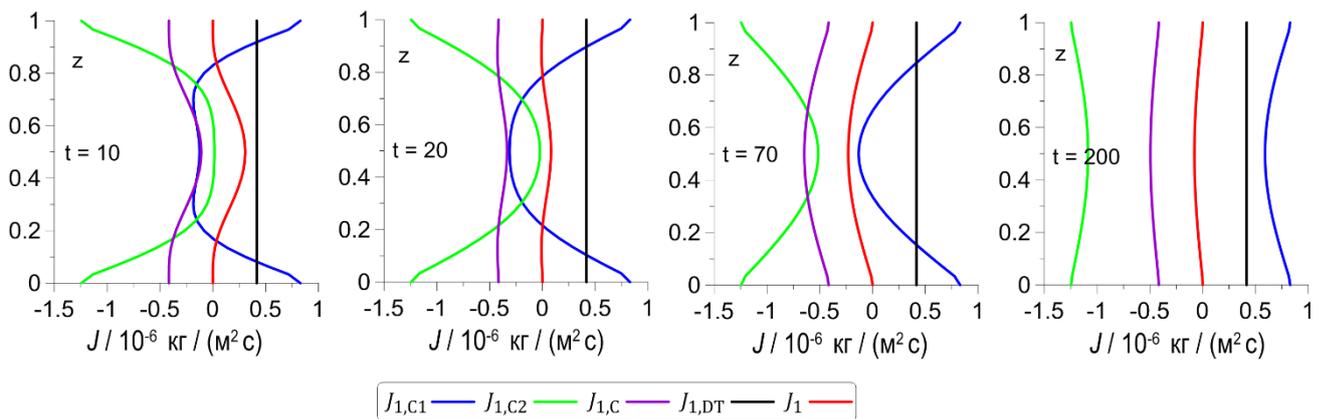


Рисунок 2.36. Распределение с высотой различных вкладов в поток вещества  $J_1$  в различные моменты времени ( $t = 10, 20, 70, 200$ ) при  $x = 1.5$ : синие линии – диффузионный вклад  $J_{1,C1}$ , зеленые линии – вклад перекрестной диффузии  $J_{1,C2}$ , бордовые линии – их сумма  $J_{1,C} = J_{1,C1} + J_{1,C2}$ , черные линии – термодиффузионный поток  $J_{1,DT}$ , красные линии – полный поток  $J_1$ .

В начальные моменты времени  $J_{1,c} \approx 0$  в силу того, что диффузионные процессы медленные, тогда как температура в системе очень быстро устанавливается, термодиффузионный поток  $J_{1,DT}$  быстро достигает равновесного значения. При этом  $J_{1,DT} > 0$ , следовательно и общий поток  $J_1 > 0$ , что приводит к движению толуола вверх.

На второй стадии становится заметным процесс диффузии. Метанол, накапливаясь вверху области, оказывает обратное действие:  $J_{1,c2} < 0$ . Распределение толуола также приводит к потоку вещества направленному вниз:  $J_{1,c1} < 0$ . При этом общий вклад концентрации  $J_{1,c} = J_{1,c1} + J_{1,c2}$  оказывается больше, чем термодиффузионный вклад  $J_{1,DT}$  – таким образом суммарный поток  $J_1 < 0$ , и толуол начинает обратное движение в сторону нижней холодной стенки. В конечном итоге потоки  $J_{1,c1}$  и  $J_{1,c2}$  приходят к своим стационарным значениям, уравниваясь с термодиффузионным потоком  $-J_1 = 0$ , в системе достигается термодинамическое равновесие.

Описанное выше поведение толуола, в частности, было возможно из-за заметного вклада перекрестной диффузии (коэффициенты  $D_{12}$  и  $D_{11}$  отличаются менее, чем в 2 раза). Отсутствие же подобного сценария для второго компонента, метанола, объясняется более сильным влиянием термодиффузии ( $S_{T,2}$  по абсолютной величине в 2 раза больше  $S_{T,1}$ ) и более слабым влиянием перекрестной диффузии ( $D_{21}$  в 6 раз меньше, чем  $D_{12}$ ).

### **Сравнение с экспериментальными данными**

Сравнение результатов физического эксперимента и численных расчетов проводилось путем сопоставления поля отклонения показателя преломления ( $n$ ) от показателя преломления в однородной среде ( $n_0$ ), которое, заметим, показывает эволюцию смеси в целом, а не отдельных компонентов. При этом предполагается, что температурный вклад учтен в поле  $n_0$ , которое соответствует показателю преломления невозмущенной среды. В этом случае для  $n$  запишем:

$$n - n_0 = \frac{\partial n}{\partial C_1} (C_1 - C_{01}) + \frac{\partial n}{\partial C_2} (C_2 - C_{02}). \quad (2.78)$$

Значения коэффициентов  $\partial n / \partial C_1 = 0.079490$ ,  $\partial n / \partial C_2 = -0.095686$  (получены в эксперименте [185]). Результаты экспериментальных исследований, представленные ниже, соответствуют составу смеси: толуол (0.623) – метанол (0.306) – циклогексан (0.071).

На рис. 2.37 (а,б) показано распределение показателя преломления с высотой в середине ячейке: а) экспериментальные данные, б) численный расчет. В начальные моменты времени в центральной части области распределения  $n$  практически вертикальны, однако на более поздних временах сходятся к линейной зависимости от высоты, что соответствует достижению стационарного состояния.

На рис. 2.37 (с,д) изображена зависимость от времени разницы значений показателя преломления ( $\Delta n$ ) между верхней и нижней стенками: с) экспериментальные данные, д) численный расчет. Сравнение экспериментально измеренных и рассчитанных значений  $\Delta n$  показывает хорошее согласие не только качественно, но и количественно. Стационарные установившиеся значения  $\Delta n$  на рис. 2.37 с и д отличаются менее, чем на 15%, что является хорошим результатом для весьма непростого физического эксперимента. Это позволяет сказать, что используемые в расчетах коэффициенты  $C_{ore}$ , измеренные путем обработки данных с Международной космической станции, получены с хорошей точностью.

Картины полного поля показателя преломления в стационарном состоянии представлена на рис. 2.38 (а – эксперимент, б – численный расчет). В обоих случаях значения  $n \sim 10^{-4}$ , однако видно, что на рисунке с экспериментальными данными поле  $n$  имеет некоторый наклон. Одной из возможных причин этого является небольшая несоосность оптической системы, регистрирующей изображение, и гравитационного поля. Другим возможным объяснением может быть следующее: как обсуждалось выше, суммарное отношение разделения близко к нулю, т.е. система в действительности находится на границе устойчивости. Таким образом, наблюдаемый наклон поля показателя преломления – крайне слабое и медленное начало развития неустойчивости.

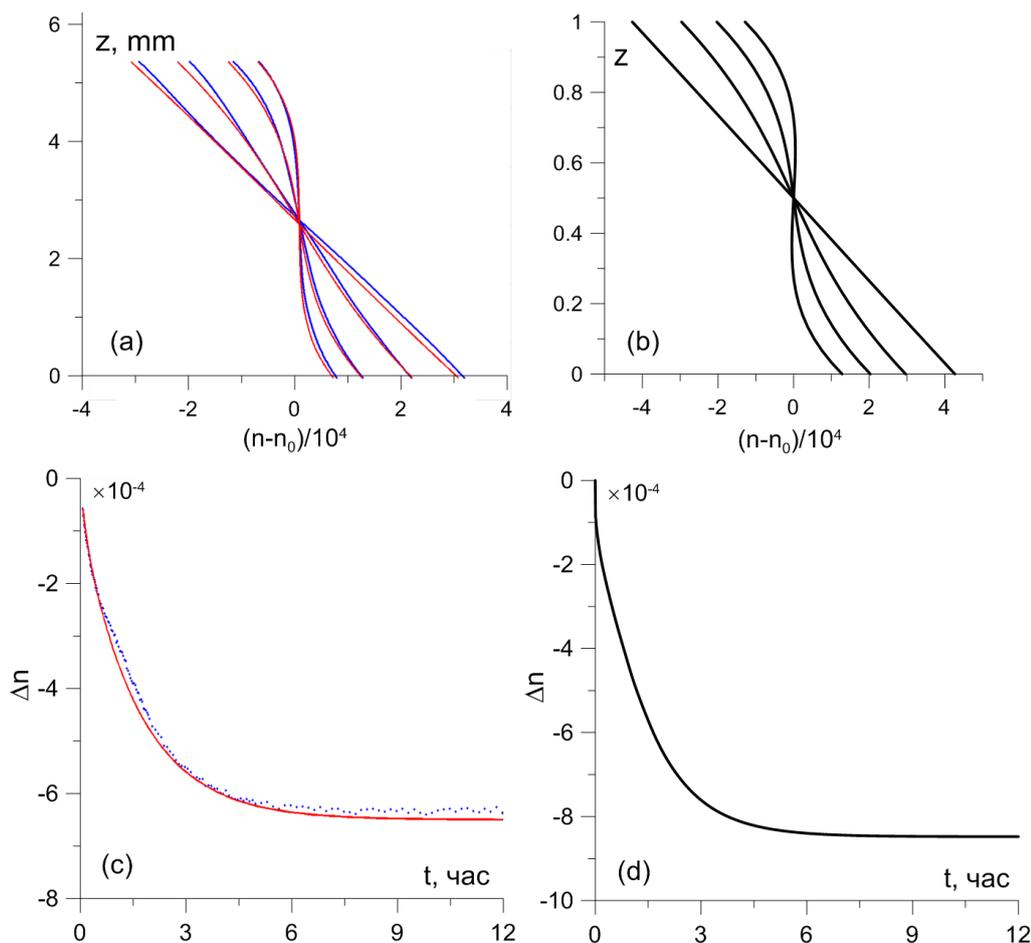


Рисунок 2.37. Сравнение экспериментальных (слева: а, с) и численных результатов (справа: b, d) результатов при  $x = 1.5$ ; а,b: показатель преломления  $n(z)$  в последовательные моменты времени; с,d: временная зависимость показателя преломления между верхней и нижней стенками.

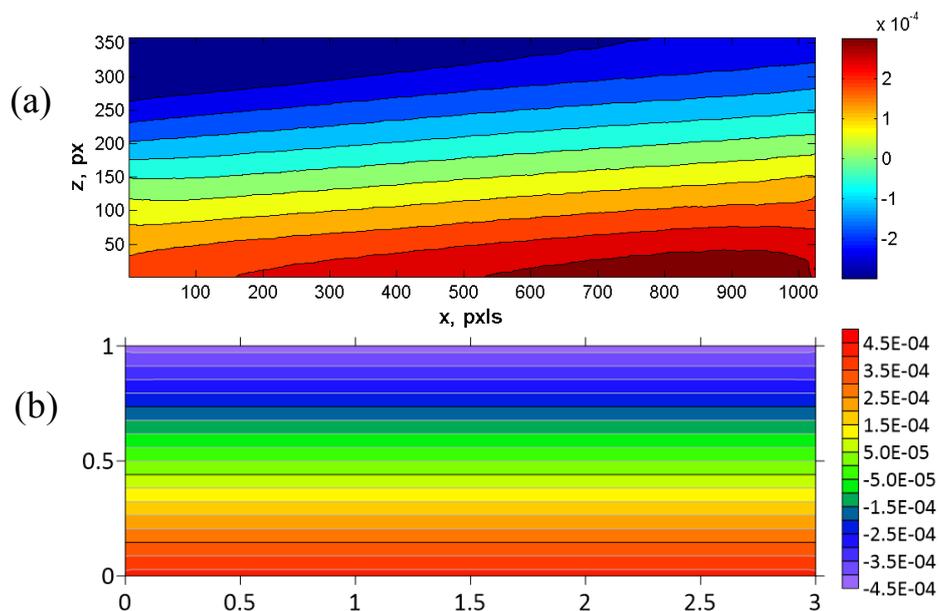


Рисунок 2.38. Поле показателя преломления в стационарном состоянии: а) физический эксперимент, б) численный расчет. Состав смеси в эксперименте: толуол (0.623) – метанол (0.306) – циклогексан (0.071).

### 2.3.2 Отрицательное значение суммарного отношения разделения

Перейдем к рассмотрению второго варианта термодиффузионных параметров,  $m_2$ . В этом случае коэффициенты разделения двух компонентов оказываются близки по абсолютной величине, но противоположны по знаку:  $\psi_1 = 0.0467$ ,  $\psi_2 = -0.0473$ , что приводит к отрицательному значению суммарного отношения разделения, близкого к нулю:  $\Psi = -0.0006$ . При столь небольшом отрицательном значении  $\Psi$  можно ожидать, что система будет находиться на границе устойчивости, что и подтверждается результатами моделирования.

Рассмотрим зависимость эволюции системы от амплитуды начальных возмущений, которая задается как значение завихренности в точке области (см. рис. 2.39). В случаях отсутствия возмущений и при небольших значениях амплитуды возмущений наблюдается поведение, качественно похожее на случай  $m_1$ :  $\Psi = 0.0154$ , т.е. система в конечном итоге приходит к состоянию механического равновесия с линейными по высоте распределениями концентраций. При этом стационарное значение  $\Delta C_1$  в равновесии равно  $-0.0023$  (для  $m_2$ ) и определяется значением  $\psi_1$ , т.е. одинаково в обоих случаях: при малых возмущениях, и при их отсутствии.

Однако при некоторой величине амплитуды возмущений, превышающей пороговое ( $\approx 6 \cdot 10^{-5}$ , см. рис. 2.39 б), наблюдается возникновение совершенно другого режима – в системе формируется стационарное конвективное течение.

Развитие конвекции проиллюстрировано на рис. 2.40 на примере динамики движения толуола. В начальные моменты времени наблюдается диффузионный процесс, похожий на описанный ранее сценарий при рассмотрении случая  $m_1$  для положительного  $\Psi$ : вверху области скапливается больше тяжелого компонента (ярко-бирюзовая зона на рис. 2.40 а). Данное состояние остается без изменений примерно до  $t = 85$ , после чего компонент  $C_1$  начинает проваливаться у левой стенки области, в системе формируется одновихревое конвективное течение. На

рис. 2.40 (е) показано стационарное распределение концентрации, а также стрелками изображено установившееся поле скорости.

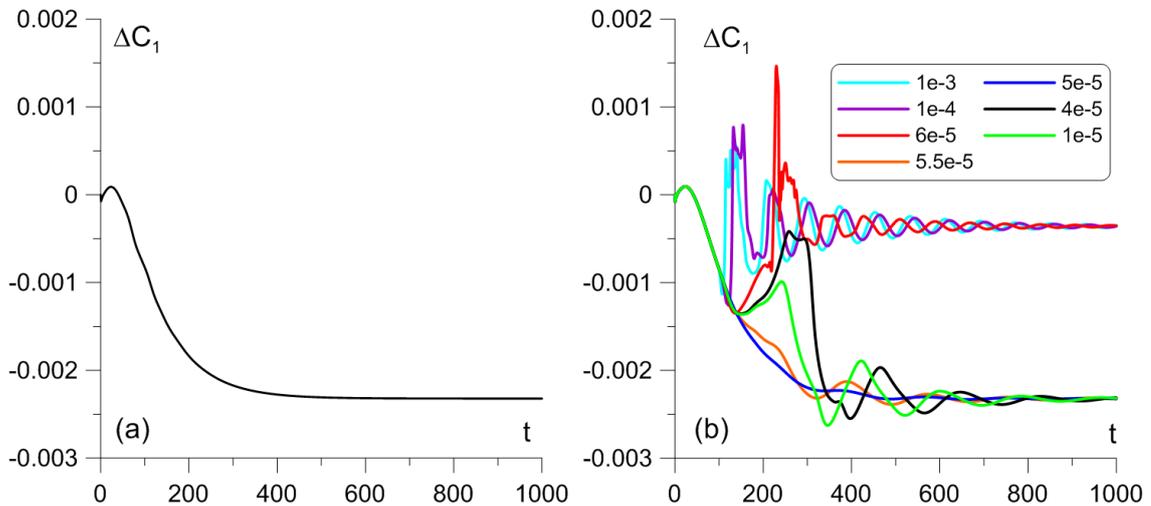


Рисунок 2.39. Зависимость от времени разницы концентрации  $C_1$  между верхней и нижней стенками в центре области ( $x = 1.5$ ):  $\Delta C_1(t) = C_{1,z=1}(t) - C_{1,z=0}(t)$ . а) в отсутствие возмущений, б) при наличии начальных возмущений, амплитуда возмущений указана в легенде на рисунке.

Как отмечалось выше, большую роль для устойчивости играет знак концентрационного вклада в градиент плотности:  $\nabla \rho_C = -\beta_{C1} \nabla C_1 - \beta_{C2} \nabla C_2$ . Фактически знак равновесного градиента  $\nabla \rho_C$  определяется знаком суммарного отношения разделения  $\Psi$ . В случае  $\Psi = -0.0006$ , как видно из рис. 2.41, вклады в плотность от толуола и метанола практически нивелируют друг друга: их сумма при этом  $\sim 10^{-6}$ , что на 2 порядка меньше, чем величина каждого вклада по отдельности. Система оказывается устойчивой лишь по отношению к возмущениям, меньше некоторого порогового значения (рис. 2.39 б).

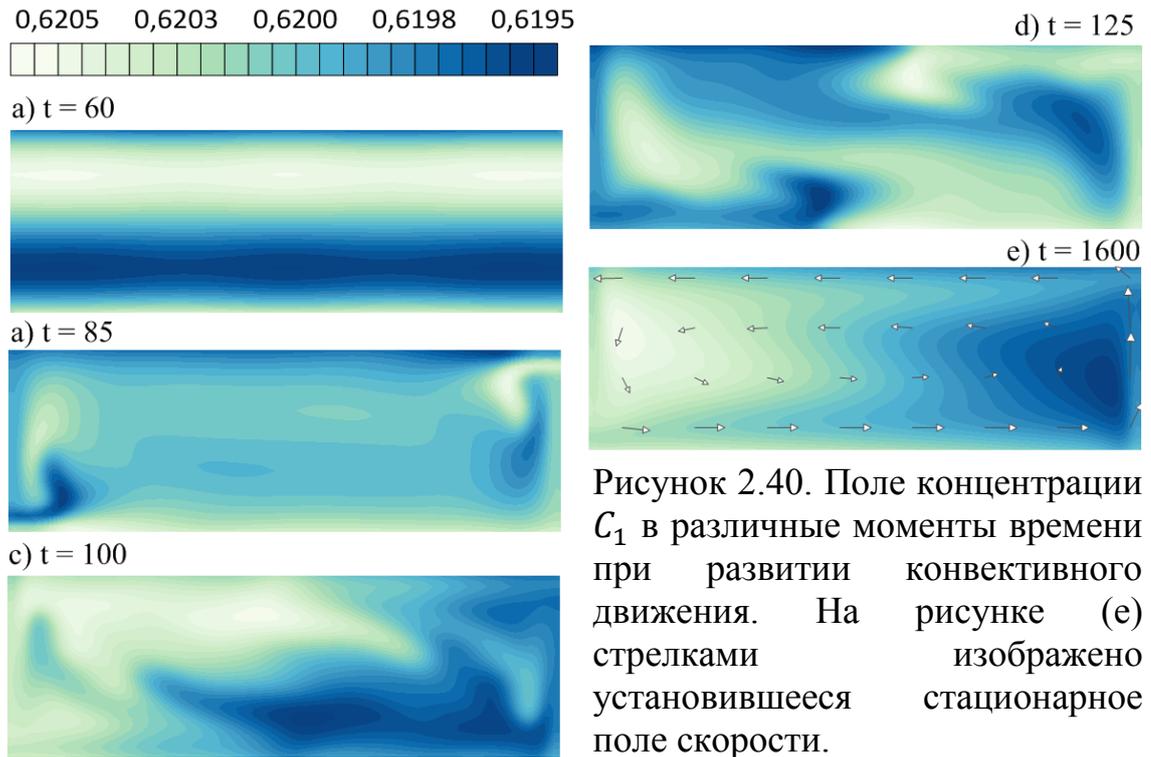


Рисунок 2.40. Поле концентрации  $C_1$  в различные моменты времени при развитии конвективного движения. На рисунке (e) стрелками изображено установившееся стационарное поле скорости.

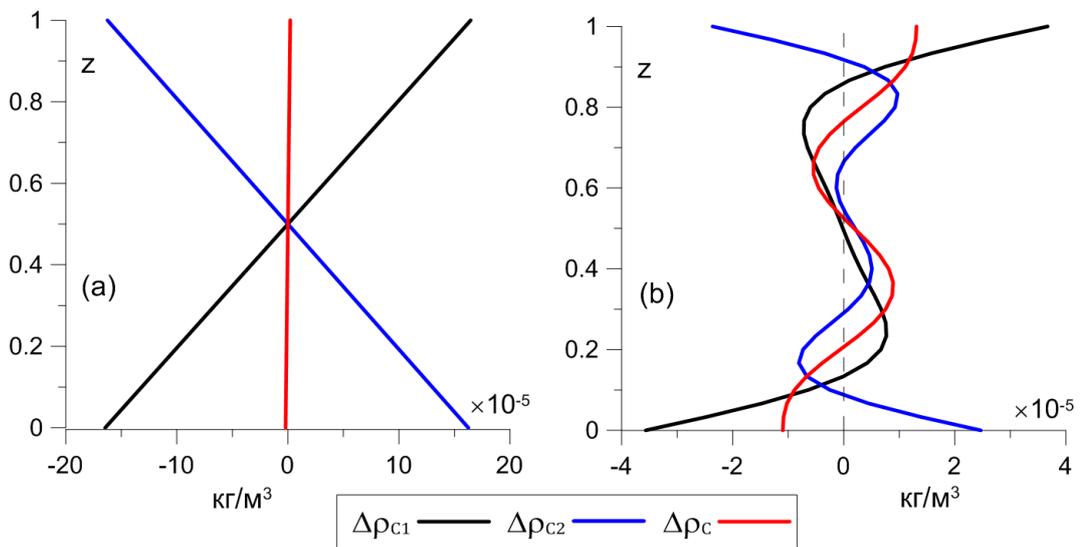


Рисунок 2.41. Распределения с высотой концентрационных вкладов в плотность смеси  $\Delta\rho_{c1} = -\beta_{c1}(C_1 - C_{01})$ ,  $\Delta\rho_{c2} = -\beta_{c2}(C_2 - C_{02})$ ,  $\Delta\rho_c = \Delta\rho_{c1} + \Delta\rho_{c2}$  при  $x = 1.5$ ,  $t = 1000$  и  $m_2: \Psi = -0.0006$ ; а) невозмущенное состояние механического равновесия, б) развитое конвективное стационарное течение.

## Сравнение с экспериментальными данными

В физическом эксперименте, проведенном в условиях земной гравитации для состава смеси 0.62/0.31/0.07, наблюдалось неустойчивое конвективное движение, похожее на описанное выше для случая  $m_2: \Psi = -0.0006$ . Развитие возмущений происходит по-разному в двухмерном (численный расчет) и трехмерном (эксперимент) случаях, что затрудняет их детальное сравнение. На рис. 2.42 изображены поля показателя преломления в стационарном состоянии, полученные численно и экспериментально. Небольшое количественное расхождение объясняется, прежде всего, тем фактом, что представленное на рис. 2.42 (a) поле показателя преломления в действительности является более сложным, трехмерным – на картинке же показано осредненное поле по третьему измерению. Качественно же результаты исследований в обоих случаях близки друг к другу.

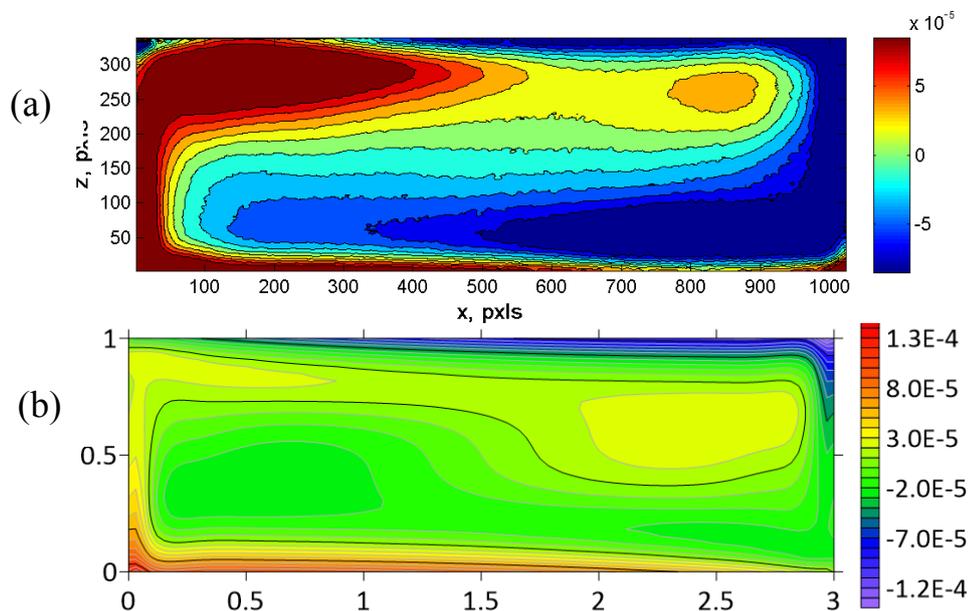


Рисунок 2.42. Поле показателя преломления в стационарном состоянии: а) физический эксперимент, б) численный расчет. Состав смеси в эксперименте: толуол (0.62) – метанол (0.31) – циклогексан (0.07).

### 2.3.3 Выводы по разделу

Исследована конвекция с эффектом Соре смеси толуол-метанол-циклогексан при суммарном отношении разделения, близком к нулю.

Обнаружено, что даже в случае, когда конечное состояние представляет собой состояние механического равновесия, на начальных временах поведение системы может сильно осложняться взаимодействием диффузии, перекрестной диффузии и термодиффузии.

Найдено, что даже при малом значении суммарного отношения разделения, близкого к нулю, образующийся при этом общий концентрационный вклад в градиент плотности может привести к возникновению конвективного течения. Причем устойчивость системы в этом случае будет сильно зависеть от начальных возмущений.

Выполнено прямое численное моделирование для двух наборов термодиффузионных коэффициентов, полученных в результате обработки данных в рамках проекта DCMIX-2:  $m_1:\Psi = 0.0154$ ,  $m_2:\Psi = -0.0006$ . В первом случае результаты расчетов согласуются с наземным экспериментом, в котором использовалась смесь с составом 0.623/0.306/0.071. Во втором случае – с экспериментом, в котором состав смеси отличался на 0.5% (0.62/0.31/0.07).

Благодаря проведенному численному моделированию, анализу полученных численных результатов и сопоставлению их с данными экспериментов, можно сделать вывод, что термодиффузионные коэффициенты измерены на Международной космической станции с хорошей точностью, что, таким образом, позволяет быть уверенным в методике измерения коэффициентов даже в тех случаях, когда обработка экспериментальных данных встречается со значительными трудностями (плохо обусловленные матрицы).

Численные расчеты позволили интерпретировать важные наземные эксперименты, в которых незначительное изменение состава смеси приводит к качественно иному поведению жидкости.

## Заключение

### Итоги выполненного исследования

В диссертационной работе выполнено прямое численное моделирование вытеснения одной жидкости другой внутри капилляра. Рассмотрен широкий диапазон параметров, воспроизводящий сценарии пальцеобразного и поршневого вытеснений жидкости при прокачке под действием перепада давления.

Для моделирования гидродинамической эволюции двух несмешивающихся/смешивающихся жидкостей использована теория фазового поля. С помощью этого метода удалось воспроизвести все особенности вытеснения жидкость-жидкость, предсказать временное изменение структуры поля скорости, формы границы раздела, капиллярного давления, связанного с мениском, и количества жидкости, остающейся на стенках капилляра. В частности, получен профиль давления искривлённого мениска, определяющий значения капиллярного давления, что было недоступно в других исследованиях, при этом процедура получения капиллярного давления является эффективной и нетрудоемкой.

Рассчитано динамически меняющееся капиллярное в капилляре с двумя смешивающимися жидкостями, Показывающее не изученный ранее эффект неравновесного поверхностного натяжения. Найдено, что на первых стадиях капиллярное давление стремительно падает, а затем изменяется значительно медленнее. Неравновесное капиллярное давление – эффект, который может оказывать значительное влияние на интенсивность течения. Понимание данного эффекта поможет улучшить управление динамики вытеснения многофазных течений.

Проведено моделирование вытеснения несмешивающихся жидкостей в матрице капилляров. Впервые был проведен расчет для достаточно больших матриц ( $10 \times 10$ ), чтобы характеристики течения сходились к некоторым предельным значениям (т.е. течение идентично при большем размере матрицы). Предложена формула для оценки капиллярного давления в матрице капилляров.

В рамках модели фазового поля исследованы возникновение и развитие неустойчивости Релея-Тейлора в изотермической гетерогенной системе двух медленно смешивающихся жидкостей, исходное состояние которых термодинамически неустойчиво, что приводит к возникновению межфазной диффузии. Найдено, что эволюция системы состоит из двух этапов: конвективного и диффузионного. Во время двух стадий и диффузия и конвекция оказывают существенное влияние на развитие неустойчивости.

Обнаружено, что деформация (удлинение) межфазной границы приводит к ее утончению. Найдено, что утончение границы раздела на начальном этапе приводит к росту коэффициента поверхностного натяжения и изменению скорости роста возмущений и пиковых значений полной кинетической энергии.

Влияние диффузии на начальном этапе проявляется прежде всего в ее влиянии на толщину границы раздела и, следовательно, на коэффициент поверхностного натяжения.

Обнаружено, что растяжение границы раздела существенно сокращает время необходимое для перехода бинарной системы в состояние термодинамического равновесия.

Исследованы возникновение и нелинейные режимы конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в плоском горизонтальном слое с заданным тепловым потоком на границах.

Численное решение линейной задачи устойчивости показало, что во всей области исследуемых параметров наиболее опасной является длинноволновая монотонная или колебательная неустойчивость.

Нелинейные расчеты показали, что длинноволновой характер неустойчивости, обнаруженный с помощью линейного анализа устойчивости, в действительности имеет место лишь вблизи порога устойчивости. Для колебательной моды неустойчивости найдено, что колебания для небольших по абсолютной величине значений суммарного отношения деления проявляются лишь в при небольших надкритичностях (число Релея немного превышает

пороговое), тогда как при больших значениях колебания наблюдаются во всех области выше порога возникновения конвекции.

Исследована конвекция с эффектом Соре смеси толуол-метанол-циклогексан при суммарном отношении разделения, близком к нулю.

Обнаружено, что даже в случае, когда конечное состояние представляет собой состояние механического равновесия, на начальных временах поведение системы может сильно осложняться взаимодействием диффузии, перекрестной диффузии и термодиффузии.

Найдено, что даже при малом значении суммарного отношения разделения, близкого к нулю, образующийся при этом общий концентрационный вклад в градиент плотности может привести к возникновению конвективного течения. Причем устойчивость системы в этом случае будет сильно зависеть от начальных возмущений.

Выполнено прямое численное моделирование для двух наборов термодиффузионных коэффициентов, полученных в результате обработки данных в рамках проекта DСMIX-2:  $m_1: \Psi = 0.0154$ ,  $m_2: \Psi = -0.0006$ . В первом случае результаты расчетов согласуются с наземным экспериментом, в котором использовалась смесь с составом 0.623/0.306/0.071. Во втором случае – с экспериментом, в котором состав смеси отличался на 0.5% (0.62/0.31/0.07).

Благодаря проведенному численному моделированию, анализу полученных численных результатов и сопоставлению их с данными экспериментов, можно сделать вывод, что термодиффузионные коэффициенты измерены на Международной космической станции с хорошей точностью, что, таким образом, позволяет быть уверенным в методике измерения коэффициентов даже в тех случаях, когда обработка экспериментальных данных встречается со значительными трудностями (плохо обусловленные матрицы).

Численные расчеты позволили интерпретировать важные наземные эксперименты, в которых незначительное изменение состава смеси приводит к качественно иному поведению жидкости.

**Рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы**

Следующим шагом при изучении конвекции многокомпонентных гомогенных смесей с заданным тепловым потоком является исследование трехмерных конвективных режимов и структуры течений. При исследовании гетерогенных систем методом фазового поля следующим этапом может стать рассмотрение неизотермических задач. Функция свободной энергии в этом случае будет иметь более сложный вид и будет зависеть не только от концентрации, но и от температуры среды, что, по-видимому, повлечет за собой усложнение всей математической модели теории фазового поля. Создание такой теории позволит в рамках единой теоретической модели решать широкий класс задач.

## Список литературы

1. Prokopev S., Vorobev A., Lyubimova T. Phase-field modeling of an immiscible liquid/liquid displacement in a capillary // *Physical Review E*. – 2019. – Vol. 99, no. 3. – P. 033113.
2. Vorobev A., Prokopev S., Lyubimova T. Phase-field modelling of a liquid/liquid immiscible displacement through a network of capillaries // *Journal of Computational Physics*. – 2020. Vol. 421. – P. 109747.
3. Vorobev A., Prokopev S., Lyubimova T. Nonequilibrium capillary pressure of a miscible meniscus // *Langmuir*. – 2021. – Vol. 37, no. 16. – Pp. 4817-4826.
4. Lyubimova T., Vorobev A., Prokopev S. Rayleigh-Taylor instability of a miscible interface in a confined domain // *Physics of Fluids*. – 2019. – Vol. 31, no. 1. – P. 014104.
5. Lyubimova T.P., Sadilov E.S., Prokopev S.A. Onset of Soret-induced convection in a horizontal layer of ternary fluid with fixed vertical heat flux at the boundaries // *The European Physical Journal E*. – 2017. – Vol. 40. – P. 15.
6. Lyubimova T.P., Prokopev S.A. Nonlinear regimes of Soret-driven convection of ternary fluid with fixed vertical heat flux at the boundaries // *The European Physical Journal E*. – 2019. – Vol. 42. – P. 76.
7. Prokopev S., Lyubimova T., Mialdun A., Shevtsova V. A ternary mixture at the border of Soret separation stability // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2021. – Vol. 23. – Pp. 8466-8477.
8. Lyubimova T., Prokopev S., Shevtsova V. Behaviour of a ternary mixture with the net separation ratio close to zero // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2021. – Vol. 1945. – P. 012030.
9. Lyubimova T., Prokopev S. Nonlinear regimes of Soret-induced convection in a horizontal layer of ternary fluid with the fixed vertical heat flux at the boundaries // *Book of abstracts IMT 13, London, UK, 11-14 September*. – 2018. – P. 50.

10. Lyubimova T., Vorobev A., Prokopev S., Zagvozhkin T. Rayleigh-Taylor and Kelvin-Helmholtz instabilities of a miscible interfaces // Book of abstracts IMA-9, Guilin, China, August 31 – September 5. – 2018. – P. 75.
11. Любимова Т.П., Прокопьев С.А. Нелинейные режимы конвекции бинарных смесей в плоском горизонтальном слое // Материалы международного симпозиума Неравновесные процессы в сплошных средах, Пермь, 15-18 мая. – 2017. – Т. 2. – С. 75-77.
12. Воробьев А.М., Любимова Т.П., Прокопьев С.А. Моделирование "пальцеобразного" вытеснения в капиллярных трубках методом фазового поля // Пермские гидродинамические научные чтения. Сборник материалов V Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого, Д. В. Любимова, Пермь. – 2018. – С. 256-258.
13. Прокопьев С.А., Любимова Т.П. Трехмерные нелинейные режимы конвекции бинарных смесей с эффектом Соре в плоском горизонтальном слое // Пермские гидродинамические научные чтения. Сборник материалов V Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого, Д. В. Любимова, Пермь. – 2018. – С. 186-188.
14. Прокопьев С.А., Любимова Т.П. Численное моделирование двухфазного течения в сети капилляров на графических процессорах // Тезисы докладов XXI Зимней школы по механике сплошных сред, Пермь, 18-22 февраля. – 2019. – С. 243.
15. Прокопьев С.А., Любимова Т.П., Загвозкин Т.Н., Воробьев А.М. Моделирование смешиваемого вытеснения в капиллярных трубках методом фазового поля // Материалы XII Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, 19-24 августа. – 2019. – Т. 2. – С. 1056-1057.
16. Lyubimova T., Prokopev S., Shevtsova V. Soret induced convection of ternary fluid with small value of the net separation ratio in closed cavity // 26th European Low Gravity Research Association Biennial Symposium and General Assembly 14th

International Conference on "Two-Phase Systems for Space and Ground Applications" European Space Agency Topical Teams meetings, Granada, Spain, 24-27 September. – 2019. – P. 179.

17. Прокопьев С.А., Любимова Т.П., Воробьев А.М. Моделирование вытеснения несмешивающихся жидкостей в системе капилляров с помощью метода фазового поля // Пермские гидродинамические научные чтения. Сборник материалов V Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого, Д. В. Любимова, Пермь. – 2020. – С. 326-328.
18. Воробьев А.М., Прокопьев С.А., Любимова Т.П., Загвозкин Т.Н. Капиллярное давление на границе двух смешиваемых жидкостей // Пермские гидродинамические научные чтения. Сборник материалов V Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессоров Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкого, Д. В. Любимова, Пермь. – 2020. – С. 120-123.
19. Любимова Т.П., Воробьев А.М., Прокопьев С.А. Моделирование динамики вытеснения в сети капилляров методом фазового поля // Всероссийская конференция молодых ученых-механиков (YSM-2020). Тезисы докладов, Сочи, «Буревестник» МГУ, 3-13 сентября. – 2020. – С. 127.
20. Shevtsova V., Prokopen S., Lyubimova T., BouAlia M.M., Errarte A., Mialdun A. Cross-diffusion and Soret separation stability in the toluene-methanol-cyclohexane mixture // 14th International Meeting on Thermodiffusion, Trondheim, Norway. – 2021.
21. Прокопьев С.А., Любимова Т.П., Шевцова В.М., Мьяльдун А. Конвекция трехкомпонентной смеси с суммарным отношением разделения, близким нулю, Тезисы докладов XXI Зимней школа по механике сплошных сред, Пермь, 22-26 марта. – 2021. – С. 265.
22. Prokopen S., Lyubimova T., Vorobev A., Zagvozhkin T. GPU-based modelling of a two-phase flow in capillary networks // 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Abstract book, Milano, Italy, 22-27 August. – 2021. – Pp. 812-813.

23. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021662655. Программа для численного моделирования двухфазных систем методом фазового поля на графических процессорах / С.А. Прокопьев; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук – Заявка №2021661940; дата поступления 28 июля 2021 г.; зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 03 августа 2021 г.
24. Rowlinson J.S. Translation of J.D. van der Waals “The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density” // *J. Stat. Phys.* 1979 Vol. 20. Pp. 197–200.
25. Van der Waals J.D. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. // *J. Stat. Phys.* – 1979. – Vol. 20. – Pp. 200–244.
26. Korteweg D.J. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité // *Arch. Néerl. Sci. Exactes Nat.* – 1901. – Vol. 6, no. 2. – Pp. 1-24.
27. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *J. Chem. Phys.* – 1958. – Vol. 28, no. 2. – Pp. 258-267.
28. Cahn J.W. On spinodal decomposition // *Acta Metallurgica.* – 1961. – Vol. 9, no. 9. – Pp. 795-801.
29. Cahn J.W. On spinodal decomposition in cubic crystals // *Acta Metallurgica.* – 1962. – Vol. 10, no. 3. – Pp. 179-183.
30. Cahn J.W. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems // *J. Chem. Phys.* – 1965. – Vol. 42. – Pp. 93-99.
31. Huston E.L., Cahn J.W., Hilliard J.E. Spinodal decomposition during continuous cooling // *Acta Metallurgica.* – 1966. Vol. 14, no. 9. – Pp. 1053-1062.

32. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. III. Nucleation in a two-component incompressible fluid // *J. Chem. Phys.* – 1959. – Vol. 31, no.1. – Pp. 688-699.
33. Cahn J.W. Coherent fluctuations and nucleation in isotropic solids // *Acta Metallurgica* 1962. – Vol. 10, no. 10. – Pp. 907-913
34. Braun R.J., McFadden G.B., Coriell S.R. Morphological instability in phase-field models of solidification // *Phys. Rev. E.* – 1994. – Vol. 49. – Pp. 4336-4352.
35. Wheeler A.A., Boettinger W.J., McFadden G.B. Phase-field model of solute trapping during solidification // *Phys. Rev. E.* – 1993. – Vol. 47, no. 3. – Pp. 1893-1909.
36. Wang S.L., Sekerka R.F., Wheeler A.A., Murray B.T., Coriell S.R., Braun R.J., McFadden G.B. Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification // *Physica D.* – 1993. – Vol. 69. – Pp. 189–200.
37. Ekhlakov A., Dimitrov S., Langhoff T.A., Schnack E. Phase-field model for deposition of pyrolytic carbon // *Comm. in Num. Methods in Eng.* – 2008. – Vol. 24. – Pp. 2139-2154.
38. Li J., Wang J., Yang G. Phase-field simulation of microstructure development involving nucleation and crystallographic orientations in alloy solidification // *J. Crystal Growth.* – 2007. – Vol. 309. – Pp. 65–69.
39. Kobayashi R. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth // *Physica D.* – 1993. – Vol. 63, no. 3. – Pp. 410-423.
40. Kobayashi R. A numerical approach to three-dimensional dendritic solidification // *Experimental Mathematics.* – 1994. – Vol. 3, no. 1. – Pp. 59-81.
41. Wheeler A.A., Murray B.T., Schaefer R.J. Computation of dendrites using a phase field model // *Physica D.* – 1993. – Vol. 66, no. 1. – Pp. 243-262.
42. Warren J.A., Boettinger W.J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method // *Acta Metallurgica et Materialia.* – 1995. – Vol. 43. no. 1. – Pp. 689-703.
43. Warren J.A., Murray B.T. Ostwald ripening and coalescence of a binary alloy in two dimensions using a phase-field model // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 1996. – Vol. 4. – Pp. 215-229.

44. Karma A., Kessler D.A., Levine H. Phase-Field Model of Mode III Dynamic Fracture // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87. – P. 045501
45. Chen L.Q. Phase-field models for microstructure evolution // *Annu. Rev. Mater. Res.* – 2002. – Vol. 32. – Pp. 113–140.
46. Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A. Phase-field simulation of solidification // *Annu. Rev. Mater. Res.* – 2002. – Vol. 32. – Pp. 163–194.
47. Lowengrub J., Truskinovsky L. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions // *Proc. R. Soc. Lond. A.* – 1998. – Vol. 454. – Pp. 2617–2654.
48. Jacqmin D. Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling // *Journal of Computational Physics.* – 1999. – Vol. 155, no.1. – Pp. 96-127.
49. Vorobeв A. Boussinesq approximation of the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equations // *Physical Review E.* – 2010. Vol. 82. – Pp. 056312.
50. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. том V. Статистическая физика. Ч. I. – М: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – С. 616.
51. Antanovskii L.K. Microscale theory of surface tension // *Phys. Rev. E.* – 1996. – Vol. 54, no. 6. – Pp. 6285-6290.
52. Flory P.J. Principles of Polymer Chemistry. – Cornell University Press, Ithaca, N.Y., 1953. – 672 p.
53. Любимов Д.В., Любимова Т.П. Об одном методе сквозного счета для решения задач с деформируемой поверхностью раздела // *Моделирование в механике.* – 1990. – Т. 4 (21), № 1. – С. 136-140.
54. Любимов Д.В., Любимова Т.П., Иванцов А.О., Черепанова А.А., Использование метода сквозного счета для моделирования динамики систем с поверхностями раздела // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2008. – Т. 1, № 2. – С. 53-62.
55. Sussman M., Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows // *Journal of Computational Physics.* – 1998. – Vol. 148, no. 1. – Pp. 81-124.

56. Hua J., Mortensen D. A front tracking method for simulation of two-phase interfacial flows on adaptive unstructured meshes for complex geometries // *International Journal of Multiphase Flow*. – 2019. – Vol. 119. – Pp. 166-179.
57. Mao D. Towards front-tracking based on conservation in two space dimensions II, tracking discontinuities in capturing fashion // *Journal of Computational Physics*. – 2007. – Vol. 226, no. 2. – Pp. 1550-1588.
58. Foglino M., Morozov A.N., Henrich O., Marenduzzo D. Flow of deformable droplets: discontinuous shear thinning and velocity oscillations // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – Vol. 119, no. 20. – P. 208002.
59. Tiribocchi A., Montessori A., Bonaccorso F., Lauricella M., Succi S. Shear dynamics of polydisperse double emulsions // *Physics of Fluids*. – 2021. – Vol. 33. – P. 047105.
60. Babadagli T. Development of mature oil fields – A review // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. – 2007. – Vol. 57, no. 3. – Pp. 221-246.
61. Jawitz J.W., Annable M.D, Rao P.S.C Miscible fluid displacement stability in unconfined porous media: Two-dimensional flow experiments and simulations // *Journal of Contaminant Hydrology*. – 1998. – Vol. 31, no. 3. – Pp. 211-230.
62. Barenblatt G.I., Patzek T.W., Silin, D.B. The mathematical model of nonequilibrium effects in water-oil displacement // *SPE Journal*. – 2003. – Vol. 8, no. 4. – Pp. 409-416.
63. Niessner J., Berg S., Hassanizadeh S.M. Comparison of two-phase Darcy's law with a thermodynamically consistent approach // *Transport in Porous Media*. – 2011. – Vol. 88. – Pp. 133–148.
64. West G.D. On the resistance to the motion of a thread of mercury in a glass tube // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1911. – Vol. 86. – Pp. 20–25.
65. Washburn E.W. The dynamics of capillary flow // *Phys. Rev.* – 1921. – Vol. 17. – Pp. 273-283.
66. Ngan C., Dussan V.E. On the nature of the dynamic contact angle: an experimental study // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1982. Vol. 118. – Pp. 27-40.
67. Taylor G. Deposition of a viscous fluid on the wall of a tube // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1961. – Vol. 10, no.2. – Pp. 161-165.

68. Cox B. On driving a viscous fluid out of a tube // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1962. – Vol. 14, no. 1. – Pp. 161-165.
69. Soares E., Thompson R. Flow regimes for the immiscible liquid–liquid displacement in capillary tubes with complete wetting of the displaced liquid // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2009. – Vol. 641. – Pp. 63-84.
70. Freitas J.F., Soares E.J., Thompson R.L. Residual mass and flow regimes for the immiscible liquid–liquid displacement in a plane channel // *International Journal of Multiphase Flow*. – 2011. – Vol. 37, no. 6. – Pp. 640-646.
71. Soares E.J., Thompson R.L., Niero D.C. Immiscible liquid–liquid pressure-driven flow in capillary tubes: Experimental results and numerical comparison // *Physics of Fluids*. – 2015. Vol. 27, no. 8. – P. 082105.
72. Petitjeans P., Maxworthy T. Miscible displacements in capillary tubes. Part 1. Experiments // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1996. – Vol. 326. – Pp. 37-56.
73. Chen C.-Y., Meiburg E. Miscible displacements in capillary tubes. Part 2. Numerical simulations // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1996. – Vol. 326. – Pp. 57-90.
74. Joseph D.D. Fluid dynamics of two miscible liquids with diffusion and gradient stresses // *European journal of mechanics. B, Fluids*. – 1990. – Vol. 9, no. 6. – Pp. 565-596.
75. Gauthier. G., Martin J., Salin D. Gravity waves at the interface between miscible fluids and at the top of a settling suspension // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 94, no. 20. – P. 204501.
76. Carbonaro A., Cipelletti L., Truzzolillo D. Ultralow effective interfacial tension between miscible molecular fluids // *Phys. Rev. Lett.* – 2020. – Vol. 5, no. 7. – P. 074001.
77. Legendre M., Petitjeans P., Kurowski P. Instabilités à l'interface entre fluides miscibles par forçage oscillant horizontal // *Comptes Rendus Mécanique*. – 2003. – Vol. 331, no. 9. – Pp. 617-622.
78. Pismen L.M., Nir A. Motion of a contact line // *The Physics of Fluids*. – 1982. Vol. 25, no. 1. – Pp. 3-7.

79. Jacqmin D. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2000. – Vol. 402. – Pp. 57-88.
80. Cueto-Felgueroso L., Juanes R. Macroscopic phase-field model of partial wetting: bubbles in a capillary tube // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – Vol. 108, no. 14. – P. 144502.
81. Cueto-Felgueroso L., Juanes R. A phase-field model of two-phase Hele-Shaw flow // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2014. – Vol. 758. – Pp. 522-552.
82. He Q., Kasagi N. Phase-Field simulation of small capillary-number two-phase flow in a microtube // *Fluid Dynamics Research*. – 2008. – Vol. 40, no. 7-8. – Pp. 497-509.
83. Oren P.E., Bakke S. Reconstruction of Berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects // *J. Pet. Sci. Eng.* – 2003. – Vol. 39. – Pp. 177–199.
84. Suchomel B.J., Chen B.M., Allen, M.B. Network model of flow, transport and biofilm effects in porous media // *Transport in Porous Media*. – 1998. – Vol. 30. – Pp. 1–23.
85. Le Bray Y., Prat M. Three-dimensional pore network simulation of drying in capillary porous media // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 1999. – Vol. 42, no. 22. – Pp. 4207-4224.
86. Laurindo J.B., Prat M. Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Drying rates // *Chemical Engineering Science*. – 1998. – Vol. 53, no. 12. – Pp. 2257-2269.
87. Huang H., Meakin P., Liu M. Computer simulation of two-phase immiscible fluid motion in unsaturated complex fractures using a volume of fluid method // *Water Resources Research*. – 2005. – Vol. 41, no. 12. – W12413.
88. Prodanovic M., Bryant S.L., A level set method for determining critical curvatures for drainage and imbibition // *J. Colloid Interface Sci.* – 2006. – Vol. 304. – Pp. 442–458.
89. Raeini A., Blunt M., Bijeljic B. Modelling two-phase flow in porous media at the pore scale using the volume-of-fluid method // *J. Comput. Phys.* – 2012. – Vol. 231. – Pp. 5653–5668.
90. Shams M., Raeini A., Blunt M., Bijeljic B., A numerical model of two-phase flow at the micro-scale using the volume-of-fluid method // *J. Comput. Phys.* – 2018. – Vol. 357. – Pp. 159–182.

91. Wang Y., Do-Duang M., Amberg G. Viscoelastic droplet dynamics in a y-shaped capillary channel // *Phys. Fluids*. – 2016. – Vol. 28. – P. 033103.
92. Dehsara M., Fu H., Mesarović S.Đ., Sekulić D.P., Krivilyov M. (In)compressibility and parameter identification in phase field models for capillary flows // *Theoretical and Applied Mechanics*. – 2017. – Vol. 44, no. 2. – Pp. 189-214.
93. Ding H., Spelt P.D.M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion // *Phys. Rev. E*. – 2007. – Vol. 75, no. 4. – P. 046708.
94. Villanueva W., Amberg G. Some generic capillary-driven flows // *International Journal of Multiphase Flow*. – 2006. – Vol. 32, no. 9. – Pp. 0301-9322.
95. Ferziger J.H., Perić M. *Computational methods for fluid dynamics*. – 3., rev. ed. – Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Tokyo: Springer, 2002. – 423 p.
96. Sui Y., Spelt P.D.M. Sustained inertial-capillary oscillations and jet formation in displacement flow in a tube // *Physics of Fluids*. – 2011. Vol. 23, no. 12. – P. 122104.
97. Rayleigh L. Investigation of the character of the equilibrium of an incompressible heavy fluid of variable density // *Proceedings of the London Mathematical Society*. – 1883. – Vol.14, no. 1. – Pp. 170-177.
98. Taylor G. The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1950. – Vol. 201. – Pp. 192-196.
99. Bellman R., Pennington R.H. Effects of surface tension and viscosity on Taylor instability // *Quart. Appl. Math.* – 1954. – Vol. 12. – Pp. 151-162.
100. Lewis D.J. The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. II // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1950. – Vol. 202. – Pp. 81-96.
101. Emmons H.W. Chang C.T., Watson B.C. Taylor instability of finite surface waves // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1960. – Vol. 7, no. 2. – Pp. 177-193.
102. Ratafia M. Experimental investigation of Rayleigh Taylor instability // *The Physics of Fluids*. – 1973. – Vol. 8, no. 16. – Pp. 1207-1210.

103. Cole R.L., Tankin R.S. Experimental study of Taylor instability // *The Physics of Fluids*. – 1973. – Vol. 16, no. 11. – Pp. 1810-1815.
104. Wolf G.H. The dynamic stabilization of the Rayleigh-Taylor instability and the corresponding dynamic equilibrium // *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*. – 1969. – Vol. 227. – Pp. 291–300.
105. Plesset M.S., Hsieh D.Y. General analysis of the stability of superposed fluids // *The Physics of Fluids*. – 1964. – Vol. 7, no. 8. – Pp. 1099-1108.
106. Munro D.H. Analytic solutions for Rayleigh-Taylor growth rates in smooth density gradients // *Physical Review A*. – 1988. – Vol. 38, no. 3. – Pp. 1433-1445.
107. Hsieh D.Y. Effects of heat and mass transfer on Rayleigh-Taylor instability // *Journal of Basic Engineering*. – 1972. – Vol. 94, no. 1. – Pp. 156-160.
108. Chandrasekhar S. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. – Oxford University Press edition, Cambridge, 1961. – 657 p.
109. Sharp D.H. An overview of Rayleigh-Taylor instability // *Physica D*. – 1984. – Vol. 12, no. 1. – Pp. 3-18.
110. Richtmyer R.D. Taylor instability in a shock acceleration of compressible fluids // *Communications on Pure and Applied Mathematics*. – 1960. – Vol.13. – Pp. 297-319.
111. Мешков Е. Е. Неустойчивость границы раздела двух газов, ускоряемой ударной волной // *Изв. АН СССР, МЖГ*. – 1969. – Т. 5. – С. 151-158.
112. Kurowski P., Misbah C., Tchourkine S. Gravitational Instability of a fictitious front during mixing of miscible fluids // *Europhysics Letters*. – 1995. – Vol. 29, no. 4. – Pp. 309-314.
113. Abarzhi S.I. Review of theoretical modelling approaches of Rayleigh–Taylor instabilities and turbulent mixing // *Review of theoretical modelling approaches of Rayleigh-Taylor instabilities and turbulent mixing*. – 2010. – Vol. 368. – Pp. 1809-1828.
114. Cook A.W., Dimotakis P.E. Transition stages of Rayleigh–Taylor instability between miscible fluids // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2001. – Vol. 443. – Pp. 69-99.

115. Young Y., Tufo H., Dubey A., Rosner R. On the miscible Rayleigh–Taylor instability: Two and three dimensions // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2001. – Vol. 447. – Pp. 377-408.
116. Payr M., Vanaparthi S., Meiburg E. Influence of variable viscosity on density-driven instabilities in capillary tubes // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2005. – Vol. 525. – Pp. 333-353.
117. Mueschke N.J., Schilling O. Investigation of Rayleigh–Taylor turbulence and mixing using direct numerical simulation with experimentally measured initial conditions. I. Comparison to experimental data // *Physics of Fluids*. – 2009. – Vol. 21, no. 1. – P. 014106.
118. Mueschke N.J., Schilling O. Investigation of Rayleigh–Taylor turbulence and mixing using direct numerical simulation with experimentally measured initial conditions. II. Dynamics of transitional flow and mixing statistics // *Physics of Fluids*. – 2009. – Vol. 21, no. 1. – P. 014107.
119. Celani A., Mazzino A., Muratore-Ginanneschi P., Vozella, L. Phase-field model for the Rayleigh-Taylor instability of immiscible fluids // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2009. – Vol. 622. – Pp. 115-134.
120. Ding H., Spelt P.D.M., Shu C. Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios // *Journal of Computational Physics*. – 2007. – Vol. 226, no. 2. – Pp. 2078-2095.
121. Kheniene A., Vorobev A. Linear stability analysis of a horizontal phase boundary separating two miscible liquids // *Phys. Rev. E*. – 2013. – Vol. 88. – P. 022404.
122. Yeh H.-M., Yeh Y.-T. Separation theory in improved thermal diffusion columns // *Chem. Eng. J.* – 1982. – Vol. 25, no. 1. – Pp. 55-62.
123. Атомный проект СССР. Документы и материалы // Под общей ред. Л. Д. Рябева, Т. 1. Кн. 2. М.: Изд. МФТИ, 2002. – 800 С.
124. Guy C., Schott J. Modelling of Soret diffusion in radioactive waste glass // *Appl. Geochem.* – 1992. – Vol. 7. – Pp. 33-40.
125. Longhurst G.R. The Soret effect and its implications for fusion reactors // *J. Nucl. Mater.* – 1985. – Vol. 131. – Pp. 61-69.

126. Hurle D.T.J. The effect of Soret diffusion on the morphological stability of a binary alloy crystal // *J. Cryst. Growth.* – 1983. – Vol. 61, no. 3. – Pp. 463-472.
127. Karim C., Jomaa S.M., Akbarzadeh A. A laboratory experimental study of mixing the solar pond gradient zone // *Sol. Energy.* – 2011. – Vol. 85, no. 2. – Pp. 404-417.
128. Rghif Y., Zeghmami B., Bahraoui F. Soret and Dufour effects on thermosolutal convection developed in a salt gradient solar pond // *Int. J. Therm. Sci.* – 2021. – Vol. 161. – P. 106760
129. Duhr S., Arduini S., Braun D. Thermophoresis of DNA determined by microfluidic fluorescence // *The European Physical Journal E.* – 2004. – Vol. 15. – Pp. 277–286.
130. Van Vaerenbergh S., Legros J.C., Daridon J.L., Karapantsios T., Kostoglou M., Saghir Z.M. // *Microgravity Sci. Technol.* – 2006. – Vol. 18. – Pp. 150–154.
131. Köhler W., Morozov K. The Soret effect in liquid mixtures – A Review // *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics.* – 2016. – Vol. 41. – Pp. 151–197.
132. Ludwig C. Diffusion zwischen ungleich erwärmten Orten gleich zusammengesetzter Lösungen // *Sitzber. Akad. Wiss. Wien Math.-Naturw. Kl.* – 1856. – Vol. 20. – P. 539.
133. Tyndall J. *Scientific Addresses.* – Charles C. Chatfield & Co., New Haven, 1870. – 74 p.
134. Soret C., Sur l'état d'équilibre que prend au point de vue de sa concentration une dissolution saline primitivement homogène dont deux parties sont portées a des températures différentes // *Arch. Sci. Phys. Nat. Geneve.* – 1879. – Vol. 2. – P. 48.
135. Chapman S. The kinetic theory of simple and composite monatomic gases: viscosity, thermal conduction and diffusion // *Proc. R. Soc. Lond. A.* – 1916. – Vol. 93. Pp. 1-20.
136. Tanner C.C. The Soret effect. Part 1 // *Trans. Faraday Soc.* – 1927.– Vol. 23. – P. 75.
137. Tanner C.C. The Soret effect. Part 2 // *Trans. Faraday Soc.* – 1953. – Vol. 49. – P. 611.
138. Clusius K., Dickel G. Neues Verfahren zur Gasentmischung und Isotopentrennung // *Naturwissenschaften.* – 1938. – Vol. 26. – Pp. 546-546.
139. Bénard, H. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquid // *Revue Générale des Sciences Pures et Appliquées.* – 1900. – Vol. 11. – Pp. 1261-1271.

140. Rayleigh On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side // *Phil. Mag.* – 1916. – V.32, no. 192. – Pp. 529-546.
141. Гершуни Г.З, Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости, М.: Наука, 1972 – 392 С.
142. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М., Непомнящий А.А. Устойчивость конвективных течений, М.: Наука, 1989 – 320 С.
143. Сорокин В.С. Вариационный метод в теории конвекции // *ПММ.* – 1953. – Т. 17, № 1. – С. 39.
144. Шапошников И.Г. К теории конвективных явлений в бинарной смеси // *ПММ.* – 1953. – Т. 17, № 5. – С. 604.
145. Шапошников И.Г. К вопросу об учете диффузионных явлений в уравнениях гидродинамики // *ЖЭТФ.* – 1951. – Т. 21, № 11. – С. 1309-1310.
146. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. О конвективной неустойчивости двухкомпонентной смеси в поле силы тяжести // *ПММ.* – 1963. Т. 27, № 2. – С. 301-308.
147. Hurler D., Jakeman E. Soret-driven thermosolutal convection // *Journal of Fluid Mechanics.* – 1971. – Vol. 47, no. 4. – Pp. 667-687.
148. Schechter R.S., Prigogine I., Hamm J.R Thermal diffusion and convective stability // *The Physics of Fluids.* – 1972. – Vol. 15. – Pp. 379-386.
149. Legros J.C., Platten J.K., Poty P.G. Stability of a two-component fluid layer heated from below // *The Physics of Fluids.* – 1972. – Vol. 15, no. 8. – Pp. 1383-1390.
150. Kozlova S., Mialdun A., Ryzhkov I., Janzen T., Vrabec J., Shevtsova V. Do ternary liquid mixtures exhibit negative main Fick diffusion coefficients? // *Physical Chemistry Chemical Physics.* – 2019. – Vol. 21, no. 4. – Pp. 2140-2152.
151. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964. – 456 С.
152. Sparrow E.M., Goldstein R.J., Jonsson V.K. Thermal instability in a horizontal fluid layer: effect of boundary conditions and non-linear temperature profile // *J. Fluid Mech.* – 1964. – Vol. 18. – Pp. 513-528.

153. Roetzel W., Luo X., Chen D. Design and operation of heat exchangers and their networks, Chapter 2 - Basic thermal design theory for heat exchangers – Academic Press, 2020. – Pp. 13-69.
154. Рыжков И.И. Термодиффузия в смесях: уравнения, симметрии, решения и их устойчивость. Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т вычислительного моделирования. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2013. – 200 С.
155. Тарунин Е.Л. Численный эксперимент в задачах свободной конвекции. – Иркутск. Изд-во Иркут. Ун-та, 1990. – 228 С.
156. Davis S. Convection in a box: Linear theory // *Journal of Fluid Mechanics*. – 1967. – Vol. 30, no. 3. – Pp. 465-478.
157. Pallares J., Grau F.X., Giralt F. Flow transitions in laminar Rayleigh–Bénard convection in a cubical cavity at moderate Rayleigh numbers // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 1999. – Vol. 42, no. 4. – Pp. 753-769.
158. Gelfgat A.Yu. Different modes of Rayleigh–Bénard instability in two- and three-dimensional rectangular enclosures // *Journal of Computational Physics*. – 1999. – Vol. 156, no. 2. – Pp. 300-324.
159. Janssen R.J.A., Henkes R.A.W.M. Instabilities in three-dimensional differentially-heated cavities with adiabatic horizontal walls // *Physics of Fluids*. – 1996. – Vol. 8, no. 1. – Pp. 62-74.
160. Puigjaner D., Herrero J., Giralt F., Simó C. Stability analysis of the flow in a cubical cavity heated from below // *Physics of Fluids*. – 2004. – Vol. 16, no. 10. – Pp. 3639-3655.
161. Varé T., Nouar C., Métivier C., Bouteraа M. Stability of hexagonal pattern in Rayleigh–Bénard convection for thermodependent shear-thinning fluids // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2020. – Vol. 905. – Pp. A33.
162. Гетлинг А.В. Конвекция Рэлея-Бенара. Структуры и динамика, М: Эдиториал УРСС, 1999 - 248 С.
163. Clever R.M., Busse F.H. Hexagonal convection cells under conditions of vertical symmetry // *Phys. Rev. E*. – 1996. – Vol. 53, no. 3. – Pp. R2037-R2040.

164. Зубова Н.А., Любимова Т.П. Конвекция тройной смеси в замкнутой полости // Вестник Пермского университета. Сер. Физика. – 2012. – Т. 4, № 22. – С. 56-60.
165. Любимова Т.П., Зубова Н.А. Устойчивость механического равновесия тройной смеси в квадратной полости при вертикальном градиенте температуры // Вычислительная механика сплошных сред. – 2014. – Т.7, №2. – С. 200-207.
166. Зубова Н.А., Любимова Т.П. Нелинейные режимы конвекции трехкомпонентных смесей в квадратной полости при установившемся вертикальном градиенте температуры // XXIV всерос. школа-конференция молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках»: сб. материалов конф., Пермь, 2015. – С. 162-165.
167. Lyubimova T.P., Zubova N.A. Onset of convection in a ternary mixture in a square cavity heated from above at various gravity levels // Microgravity Science and Technology. – 2014. – Vol. 26, no. 4. – Pp. 241-247.
168. Lyubimova T.P., Zubova N.A. Onset and nonlinear regimes of the ternary mixture convection in a square cavity // The European Physical Journal E. – 2015. – Vol. 38. – P. 19.
169. Shevtsova V., Melnikov D., Legros J.C., Yan Y., Saghir Z., Lyubimova T., Sedelnikov G., Roux B. Influence of vibrations on thermodiffusion in binary mixture: A benchmark of numerical solutions // Physics of Fluids. – 2007. – Vol. 19, no. 1. – P. 017111.
170. Melnikov D., Mialdun A., Shevtsova V. Peculiarity of 3D flow organization in Soret driven instability // J. Non-Equilib. Thermodyn. – 2007. – Vol. 32, no. 3. – Pp. 259-270.
171. Niethammer C., Becker S., Bernreuther M., Buchholz M., Eckhardt E., Heinecke A., Werth S., Bungartz H.-J., Glass C. W., Hasse H., Vrabec J., Horsch M. Is1 mardyn: The massively parallel molecular dynamics code for large systems // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2014. – Vol. 10, no. 10. – Pp. 4455-4464.
172. Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity // The Journal of Chemical Physics. – 1997. – Vol. 106, no. 14. – Pp. 6082-6085.

173. Janzen T., Vrabec J. Diffusion coefficients of a highly nonideal ternary liquid mixture: Cyclohexane–Toluene–Methanol // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2018. – Vol. 57, no. 48. – Pp. 16508-16517.
174. Krishna R., van Baten J.M. The Darken relation for multicomponent diffusion in liquid mixtures of linear alkanes: an investigation using molecular dynamics (MD) simulations // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2005. – Vol. 44, no. 17. – Pp. 6939-6947.
175. Fingerhut R., Guevara-Carrion G., Nitzke I., Saric D., Marx J., Langenbach K., Prokopev S., Celný D., Bernreuther M., Stephan S., Kohns M., Hasse H., Vrabec J. ms2: A molecular simulation tool for thermodynamic properties, release 4.0 // *Computer Physics Communications*. – 2021. – Vol. 262. – P. 107860.
176. Labrosse G. Free convection of binary liquid with variable Soret coefficient in thermogravitational column: the steady parallel base states. // *Phys. Fluids*. – 2003. – Vol. 15, no. 9. – Pp. 2694-2727.
177. Замский Б.Н., Рабинович Г.Д. Уравнения переноса в термодиффузионной колонне для многокомпонентных смесей // *ИФЖ*. – 1979. – Т. 36, № 4. – С. 668-675.
178. Kolodner P., Williams H., Moe C. Optical measurement of the Soret coefficient of ethanol/water solutions // *J. Chem. Phys.* – 1988. – Vol. 88. – Pp. 6512-6524.
179. Mialdun A., Ryzhkov I., Khlybov O., Lyubimova T., Shevtsova V. Measurement of Soret coefficients in a ternary mixture of toluene–methanol–cyclohexane in convection-free environment // *Journal of Chemical Physics*. – 2018. – Vol. 148. – P. 044506.
180. Shevtsova V., Sechenyh V., Nepomnyashchy A., Legros J. Analysis of the application of optical two-wavelength techniques to measurement of the Soret coefficients in ternary mixtures // *Philosophical Magazine*. – 2011. – Vol. 91, no. 26. – Pp. 3498–3518.
181. Braibanti M., Artola P.-A., Baaske P., Bataller H., Bazile J.-P., Bou-Ali M.M., Cannell D.S., Carpineti M., Cerbino R., Croccolo F., Diaz J., Donev A., Errarte A., Ezquerro J.M., Frutos-Pastor A., Galand Q., Galliero G., Gaponenko Y., García-Fernández L.,

- Gavaldá J., Giavazzi F., Giglio M., Giraudet C., Hoang H., Kufner E., Köhler W., Lapeira E., Laverón-Simavilla A., Legros J.-C., Lizarraga I., Lyubimova T., Mazzoni S., Melville N., Mialdun A., Minster O., Montel F., Molster F.J., Ortiz de Zárate J.M., Rodríguez J., Rousseau B., Ruiz X., Ryzhkov I.I., Schraml M., Shevtsova V., Takacs C.J., Triller T., Van Vaerenbergh S., Vailati A., Verga A., Vermorel R., Vesovic V., Yasnou V., Xu S., Zapf D., Zhang K. European Space Agency experiments on thermodiffusion of fluid mixtures in space // *European Physical Journal E*. – 2019. – Vol. 42, no. 7. – Pp. 86.
182. Андреев В.К., Гапоненко Ю.А., Гончарова О.Н., Пухначев В.В. *Современные математические модели конвекции*. – М.: Физматлит, 2008. – 368 С.
183. Лобов Н.И., Любимов Д.В., Любимова Т.П. *Решение задач на ЭВМ: учеб.-метод. пособие*, Пермь: Перм. ун-т, 2007. – 82 с.
184. Роуч П. *Вычислительная гидродинамика*. – М.: Мир, 1980. – 618 С.
185. Mialdun A., Bataller H., Bou-Ali M.M., Braibanti M., Croccolo F., Errarte A., Ezquerro J.M., Fernández J.J., Gaponenko Yu., García-Fernández L., Rodríguez J., Shevtsova V. Preliminary analysis of diffusion coefficient measurements in ternary mixtures 4 (DCMIX4) experiment on board the International Space Station // *The European Physical Journal E*. – 2019. – Vol. 42, no. 7. – P. 87.
186. Sellers G., Wright R.S., Haemel N. *OpenGL Superbible: Comprehensive Tutorial and Reference*. – Addison-Wesley, 2015. – 880 P.
187. Karimi K., Dickson N.G., Hamze F.A performance comparison of CUDA and OpenCL [Электронный ресурс] // arXiv.org. 2011. Дата обновления: 16.05.2011. URL: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0106542> (дата обращения: 11.06.2021).
188. Ahamed A.-K. C., Magoulès F. Conjugate gradient method with graphics processing unit acceleration: CUDA vs OpenCL // *Advances in Engineering Software*. – 2017. – Vol. 111. – Pp. 32-42.
189. Fang J., Varbanescu A.L., Sips H.A comprehensive performance comparison of CUDA and OpenCL // *International Conference on Parallel Processing*, 2011. – Pp. 216-225.

190. Christgau S., Spazier J., Schnor B., Hammitzsch M., Babeyko A., Waechter J. A comparison of CUDA and OpenACC: Accelerating the Tsunami Simulation EasyWave // ARCS 2014; 2014 Workshop Proceedings on Architecture of Computing Systems, 2014. – Pp. 1-5.
191. Lee S., Gounley J., Randles A., Vetter J.S. Performance portability study for massively parallel computational fluid dynamics application on scalable heterogeneous architectures // Journal of Parallel and Distributed Computing. – 2019. – Vol. 129. – Pp. 1-13.
192. Memeti S., Li L., Pllana S., Kołodziej J., Kessler C. Benchmarking OpenCL, OpenACC, OpenMP, and CUDA: programming productivity, performance, and energy consumption // ARMS-CC '17: Proceedings of the 2017 Workshop on Adaptive Resource Management and Scheduling for Cloud Computing, 2017. – Pp. 1-6.
193. Сандерс Д., Кэндрот Э. Технология CUDA в примерах. Введение в программирование графических процессоров. Пер. с англ. Слинкина А.А. – М.: ДМК Пресс. 2013. – 232 С.
194. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир. 1980. – 618 С.
195. M. Harris Optimizing parallel reduction in CUDA [Электронный ресурс] // Презентация Nvidia. – URL: <https://developer.download.nvidia.com/assets/cuda/files/reduction.pdf> (дата обращения: 19.06.2021).

## Приложение А. Численное решение на графических процессорах

### Введение

Для эффективной реализации вычислительного алгоритма с большим числом структурных элементов (большое число узлов сетки) разработан подход параллельного программирования, при котором численные расчеты выполняются на графических процессорах (GPU, graphics processing unit, графический ускоритель или просто видеокарта) от компании Nvidia с использованием технологии CUDA – программно-аппаратная архитектура параллельных вычислений. Имеется поддержка большинства операционных систем: Windows, Linux, Mac OS. В качестве языка программирования используются расширения языков C/C++ или Fortran (CUDA Fortran используется редко). Также имеются возможности вызвать выполняемые на GPU функции в различных библиотеках языков Python, Matlab, Java и пр. Нами при написании алгоритмов использовался язык CUDA C.

Вычислительная мощность одного устройства GPU сопоставима с несколькими десятками вычислительных ядер традиционно используемых центральных процессоров. Современные профессиональные графические процессоры серии Nvidia Tesla, предназначенные, в частности, для научных вычислений, обладают большим объемом памяти (до 24 GB), что позволяет проводить расчеты с большим числом узлов без необходимости передачи граничных данных между разными участками памяти. Вычисления на графических процессорах является бурно развивающейся областью, имеющей перспективы дальнейшего развития программной и аппаратной частей данной технологии. Использование графических процессоров также является эффективным с точки зрения потребления энергии и соотношения цена/качество (цена/вычислительная мощность). Таким образом, применение данной технологии к моделированию задач гидродинамики является современным и актуальным подходом, обладающим высокой степенью новизны и, как минимум, не меньшей

эффективностью, чем традиционные подходы к распараллеливанию алгоритмов, например, такие как MPI или OpenMP.

Кратко характеризуя графические процессоры (GPU), можно сказать, что на физическом уровне такие процессоры представляют собой ту же концепцию, что и сделанные на основе полупроводников центральные процессоры (ЦПУ/CPU), с той разницей, что GPU изначально разрабатывались как массивная параллельная архитектура с множеством ядер (сотнями и тысячами).

GPU состоит из потоковых мультипроцессоров (не больше десятка на среднем ноутбуке с типичным несколько урезанным GeForce GPU и несколько десятков на мощных GPU серии Nvidia Tesla). Каждый такой мультипроцессор имеет блоки арифметико-логического устройства (АЛУ) и устройства управления (УУ), кэш, регистры, что образуют так называемые ядра CUDA. Для всех потоковых мультипроцессоров и ядер CUDA есть доступ к глобальной памяти графического процессора DRAM, каждый мультипроцессор, в свою очередь, также имеет небольшой кусок доступной локальной памяти для всех своих ядер CUDA. Подробная спецификация архитектуры может отличаться для каждого поколения графических процессоров, ее легко можно найти на официальном веб-сайте Nvidia.

Первоначально, как можно догадаться из названия, графические процессоры были разработаны для обработки компьютерной графики, и первые версии GPU умели выполнять лишь операции с целыми числами (значения пикселей, такие как положение  $x$  и  $y$  и цвет, являются целыми числами). Позже были добавлены операции с плавающей запятой, как с одинарной, так и с двойной точностью. Однако изначально не было адекватных инструментов для вычислений общего назначения на GPU (General-purpose computing on graphics processing units, GPGPU, – термин, подразумевающий непрофильные задачи для графических ускорителей, в том числе численные алгоритмы). Развитие такого рода задач для графических процессоров связано с появлением шейдеров – специальных мини-программ для видеокарты с целью аппаратного ускорения эффектов компьютерной графики: отсечение невидимых поверхностей, наложений текстур, эффекты вспышек,

тумана, рассеивания света и многое другое. Подобные эффекты требуют своих специфических алгоритмов. Первые модели видеокарт не обладали свободной возможностью написания таких алгоритмов (т.е. шейдеры в них отсутствовали), вместо этого в них по умолчанию был записан неких ограниченный набор алгоритмов.

Программисты могли лишь довольствоваться тем, что имели, однако у всех были свои цели – кому-то хотелось больше производительности и скорости, кому-то качественно отрисованной картинке, кому-то же просто каких-то нестандартных эффектов – для этого производители графических процессоров и дали такую возможность, как шейдерные (мини-) программы или просто шейдеры. Однако данные мини-программы были заточены сугубо под нужды именно компьютерной графики и все еще не обладали нужной гибкостью и универсальностью. Безусловно, нашлись те, кому в голову пришла мысль попытаться использовать графические ускорители в непрофильных областях. Первым энтузиастам приходилось следовать окольному пути в достижении своих целей. Упрощенно говорят, программист мог оперировать с, например, зеленым каналом цвета пикселя, но никто не запрещал программисту думать о зеленом пикселе не как о зеленом пикселе, а как, скажем, о температуре. Таким образом, работая с цветом (проводя с ним математические операции), можно было, в теории, рассчитать, например, какое-нибудь уравнение теплопроводности. Такой процесс был несомненно медленным, сложно реализуемым и в целом неэффективным. Но, как известно, спрос рождает предложение, и производители графических процессоров снова сделали шаг навстречу рядовым пользователям.

Так, собственно, и появилась технология CUDA – одна из первых в своей области. Хорошее описание истории развития графических процессоров и стандартов компьютерной графики можно найти в книге [186] (доступна также в переводе на русский язык в более старом издании). Использование вычислительной мощности GPU может быть эффективно применено в таких областях, где возможно одновременно и независимо выполнять расчеты над различными элементами какого-либо массива, обрабатывать разные части данных и т.д. (принцип SIMD).

Первоначальное (и основное) использование видеокарт в основе своей именно такое: тысячи пикселей, которые можно обрабатывать независимо (или, во всяком случае, группы пикселей).

С такой же потребностью можно столкнуться в большом количестве других проблем, например, в гравитационной задаче N-тел или аналогичной задаче в молекулярной динамике, в иных задачах, связанных с моделированием частиц, таких как метод SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics/Гидродинамика сглаженных частиц), при распараллеливании задач линейной алгебры, при использовании решеточного метода Больцмана и во многих других областях. И конечно же, возможно, наиболее популярным применением использования GPU для вычислений общего назначения является машинное / глубокое обучение, где GPU способны значительно ускорить обучение алгоритмов нейронных сетей. Более того, нейронные сети / искусственный интеллект – гигантская движущая сила в области разработки и усовершенствования графических процессоров.

Численные алгоритмы решения дифференциальных уравнений в частных производных также могут быть эффективно распараллелены. Различные методы решения таких уравнений и разные схемы дискретизации требуют разных подходов и имеют различный потенциал для распараллеливания.

Реализуемый нами подход заключается в использовании в качестве метода дискретизации явной конечно-разностной схемы: вычислительная область состоит из множества узлов, каждый из которых может обрабатываться независимо на текущем временном шаге. В наших задачах для решения уравнений Навье-Стокса используется алгоритм дробных шагов (метод проекций).

CUDA не является единственным возможным вариантом в области вычислений на графических процессорах. Основные альтернативы это, пожалуй, OpenCL и OpenACC (существуют и другие варианты, например, современные стандарты OpenGL и DirectX имеют специальные вычислительные шейдеры). Каждый подход имеет свои преимущества и недостатки (и прочие особенности).

В работе [187] представлено сравнение между CUDA и OpenCL на примере задачи о адиабатических квантовых вычислениях, используя метод Монте-Карло. В зависимости от параметров CUDA продемонстрировала лучшую производительность, 15-50% ускорение по сравнению с OpenCL. В статье [188] рассматривается метод сопряженных градиентов для решения линейных систем, где напротив лучший результат показал OpenCL (точное значение ускорения алгоритма сильно варьируется в зависимости от конфигурации задачи).

В работе [189] проведено обширное исследование производительности OpenGL и CUDA на примере множества различных задач, таких как быстрое преобразование Фурье, молекулярная динамика, редукция (суммирование) массива, radix-сортировка и многое другое (всего 14 задач). Показано, что CUDA работает быстрее, максимум ускорения по сравнению с OpenCL составлял 30%. Авторами говорится, что OpenCL, по сути, не хватает некоторых аппаратных ресурсов из-за его кроссплатформенности, в то время как CUDA работает только на своей родной платформе от Nvidia. После проведения «честного» сравнения, сделано заключение, что в равных условиях и CUDA и OpenCL демонстрируют эквивалентные результаты.

В [190] моделировался явление цунами, используя CUDA и OpenACC, которые продемонстрировали соответственно ускорение в 10 и 2.5 раза по сравнению в последовательной программой на CPU. В работе [191] продемонстрированы результаты гидродинамического моделирования на основе решеточного метода Больцмана, CUDA и OpenACC показали сопоставимую скорость выполнения алгоритма.

В работе [192] представлен обширный список из 19 различных текстов: LU-разложение, решеточный метод Больцмана, уравнения Эйлера и др. Сравнение проводилось между CUDA, OpenACC, OpenMP и OpenCL (не все 19 текстов выполнены для всех перечисленных API, большинство тестов представлены лишь для CUDA и OpenCL). Расчеты показали сильно отличающиеся результаты производительности в зависимости от задачи.

Таким образом, в общем, наверное, можно сказать, что среди выше перечисленных подходов нет явного однозначного лидера. CUDA – хороший выбор для видеокарт Nvidia, которая для нее является родной платформой: относительно легкое написание эффективного кода, но неприменимость к устройствам других типов (большинство графических процессоров, используемых в численных расчетах, в том числе специализированные GPU из линейки Tesla, являются именно видеокартами Nvidia, так что это не является большим препятствием). OpenCL хорош своей «неприхотливостью» к выбору GPU, производительность также находится на эквивалентном с CUDA уровне, но в некоторых случаях может потребоваться большая оптимизация для достижения той же эффективности, что и на CUDA. Также некоторые авторы субъективно называют OpenCL API более запутанным и сложным в освоении. OpenACC отличается своей философией; данный стандарт больше заточен на то, чтобы упростить программирование на графических картах. Идеи OpenACC схожи с OpenMP: мы просто пишем некоторые директивы (указания для компилятора), и код автоматически распараллеливается. В связи с этим OpenACC API является менее гибким; и ускорение, достигаемое с его помощью, зачастую несколько уступает CUDA и OpenCL. OpenACC является кроссплатформенным стандартом, но поддерживается ограниченным количеством компиляторов.

Подводя итог, мы склонны думать, результаты производительности зависят от навыков программиста, и все подходы могут быть более или менее эффективно использованы для задач, которые в принципе могут распараллелены.

Вернемся непосредственно к CUDA и языку CUDA C. Как было сказано, CUDA C является расширением языка C/C++. В действительности ситуация обстоит следующим образом. Код состоит из двух частей, которые соответственно относятся к CPU и GPU. Код для CPU представляет собой обычный язык C/C++, с небольшими расширениями, которые непосредственно затрагивают процедуру вызова функций, исполняемых на GPU, выделение памяти на GPU, передачу данных между памятью GPU и оперативной памятью компьютера (DRAM) и пр.,

эта часть кода соответственно компилируется каким-нибудь обычном компилятором C/C++ (gcc, Microsoft visual C и т.д.). Код для GPU в основном представляет собой набор функций, помеченных специальным ключевым словом (`__device__` или `__global__`) и компилируется компилятором NVCC (Nvidia CUDA compiler); и хотя при этом мы имеем дело с аналогичным синтаксисом, что и в языках C и C++, в полной мере это нельзя назвать ни тем, ни другим. Разработчики из Nvidia активно выпускают новые обновления программного и аппаратного уровней, так что становится возможным реализовать все больше возможностей C/C++ (например, в CUDA C не поддерживается потоковый вывод, причем в первых версиях CUDA какой-либо вывод из функции GPU отсутствовал вообще).

Однако, если не вдаваться в детали, CUDA C – это просто язык C/C++ с поддержкой GPU, не являющийся чем-то чрезмерно сложным для освоения. Для освоения основ CUDA можно порекомендовать книгу [193].

## Основы CUDA

Для начала работы потребуется скачать CUDA toolkit с официального сайта Nvidia. На Windows все необходимое автоматически интегрируется в среду Microsoft Visual Studio. На Linux можно воспользоваться средой Nsight Eclipse Edition или просто использовать командную строку, примерный вид команды компиляции может следующий: `nvcc codefile.cu --generate-code arch=compute_35,code=compute_35 -w -O2 -o run.`

В листинге 1 представлены фрагменты кода CPU / GPU, где выделяется память под массив N элементов и вызываются функции, в которых инициализируются начальные значения элементов массива. Вызов функций, исполняемых на GPU («kernel-функции»), осуществляется посредством указания дополнительных параметров в тройных угловых скобках `<<<Grid, Block>>>`. Дело в том, что GPU хотя и обладает сотнями и тысячами ядер, но вычислительная мощность графических процессоров все же ограничена, и они не могут одновременно обрабатывать бесконечное количество элементов. Поэтому GPU

единовременно принимает порции из Block элементов (в действительности чуть больше, это зависит от количества потоковых мультипроцессоров), количество этих блоков определяется параметром Grid, эти две переменные и указываются при вызове функции, исполняемой на GPU. При этом общее количество параллельных потоков N может быть меньше, чем произведение Block × Grid (чтобы это учесть мы используем условие `if (i < N)`). Схематично данный принцип изображен на рисунке A1. В листинге 1 также присутствуют переменные `threadIdx.x`, `blockIdx.x`, `blockDim.x`. Значение `threadIdx.x` отвечает локальному номеру потока внутри блока с индексом `blockIdx.x`. Переменная `blockDim.x` есть размер блока, т.е. количество потоков в блоке (максимальное значение обычно равно 1024), при этом для удобства решения физических задач размерности вышеобозначенных переменных возможно задавать как двух- и трехмерные.

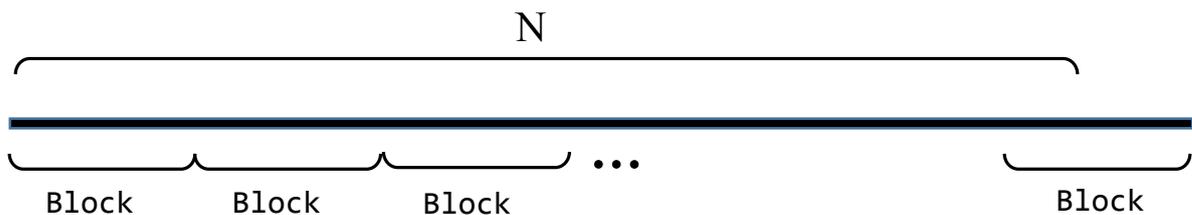


Рисунок A1. Схематическое объяснение концепции загрузки потоков GPU.

C/C++	CUDA C
Выделение памяти	
<pre>double *a_h; a_h = (double*)malloc(N * sizeof(double));</pre>	<pre>double *a_d; cudaMalloc((void**)&amp;a_d, N*sizeof(double));</pre>
функция, инициализирующая значения элементов массива, и ее вызов	
<pre>void add_one_h(double *a) {     for (int i = 0; i &lt; N; i++) {         a[i] = i + 1.0;     } }</pre>	<pre>__global__ void add_one_d(double *a) {     // тело этой функции выполняется на GPU     unsigned int i = threadIdx.x +         blockIdx.x*blockDim.x;     if (i &lt; N) {         a[i] = i + 1.0;     } }</pre>
<pre>add_one_h(a_h);</pre>	<pre>// но сама функция вызывается с CPU add_one_d &lt;&lt;&lt; Grid, Block &gt;&gt;&gt; (a_d);</pre>

Листинг 1. Сравнение C/C++ и CUDA C.

## Математическая модель, метод решения уравнений.

Рассмотрим уравнения Кана-Хилларда-Навье-Стокса.

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}} \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{M} C \nabla \mu, \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) C = \frac{1}{\operatorname{Pe}} \nabla^2 \mu, \quad (\text{A.3})$$

$$\mu = \frac{\partial (AC^2 + C^4)}{\partial C} - \operatorname{Cn} \nabla^2 C \quad (\text{A.4})$$

Здесь  $\mathbf{v}, p, C, \mu$  – вектор скорости, давление, концентрация, химический потенциал.  $\operatorname{Re}, M, \operatorname{Pe}, A, \operatorname{Cn}$  – безразмерные числа-параметры задачи, отвечающие за физические свойства жидкости и течения. В текущем месте мы не касаемся подробного описания данных уравнений, скажем лишь, что уравнения Кана-Хилларда-Навье-Стокса взяты в качестве примера, и описываемые математические методы и методы программирования могут быть применены при рассмотрении других задач: гидродинамические однофазные течения, движение в пористой среде (уравнения Дарси), неизотермические конвективные процессы и др. (забегая вперед, отметим, что давление вычисляется итерационно из уравнения Пуассона, в ряде задач может потребоваться использование дополнительной аппроксимации в приграничных узлах, подробнее в [194]).

В качестве метода дискретизации применим метод конечных разностей с явной по времени схемой. Непрерывные функции координат (2D) и времени заменяем на дискретные.

$$x_i = i \cdot h_x, \quad i = 0, N_x, \quad h_x = L_x / N_x, \quad (\text{A.5})$$

$$y_j = j \cdot h_y, \quad j = 0, N_y, \quad h_y = L_y / N_y, \quad (\text{A.6})$$

$$f(x, y, t) \rightarrow f_{i,j}^n, \quad n = t / \tau, \quad n = 0, \infty. \quad (\text{A.7})$$

Здесь  $x, y$  – декартовы координаты,  $i, j, n$  – целочисленные индексы,  $h_x, h_y$  – пространственный шаг сетки (будем считать  $h = h_x = h_y$ ),  $L_x, L_y$  – пространственные размеры области,  $t$  – время,  $\tau$  – шаг по времени.

Для временной производной запишем

$$\frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial t} = \frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\tau}. \quad (\text{A.8})$$

Для дискретизации пространственных производных первого и второго порядка формулы принимают вид: во внутренних узлах

$$\frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial x} = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n}{2h}, \quad \frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial y} = \frac{f_{i,j+1}^n - f_{i,j-1}^n}{2h}, \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial^2 f_{i,j}^n}{\partial x^2} = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n - 2f_{i,j}^n}{h^2}, \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}^n}{\partial y^2} = \frac{f_{i,j+1}^n - f_{i,j-1}^n - 2f_{i,j}^n}{h^2}, \quad (\text{A.10})$$

на границе области для первых производных

$$\frac{\partial f_{0,j}^n}{\partial x} = \frac{-3f_{0,j}^n + 4f_{1,j}^n - f_{2,j}^n}{2h}, \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial f_{N_x,j}^n}{\partial x} = \frac{3f_{N_x,j}^n - 4f_{N_x-1,j}^n + f_{N_x-2,j}^n}{2h}, \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial f_{i,0}^n}{\partial y} = \frac{-3f_{i,0}^n + 4f_{i,1}^n - f_{i,2}^n}{2h}, \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial f_{i,N_y}^n}{\partial y} = \frac{-3f_{i,N_y}^n + 4f_{i,N_y-1}^n - f_{i,N_y-2}^n}{2h}, \quad (\text{A.14})$$

на границе для вторых производных

$$\frac{\partial^2 f_{0,j}^n}{\partial x^2} = \frac{2f_{0,j}^n - 5f_{1,j}^n + 4f_{2,j}^n - f_{3,j}^n}{h^2}, \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial^2 f_{N_x,j}^n}{\partial x^2} = \frac{2f_{N_x,j}^n - 5f_{N_x-1,j}^n + 4f_{N_x-2,j}^n - f_{N_x-3,j}^n}{h^2}, \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial^2 f_{i,0}^n}{\partial y^2} = \frac{2f_{i,0}^n - 5f_{i,1}^n + 4f_{i,2}^n - f_{i,3}^n}{h^2}, \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial^2 f_{i,N_y}^n}{\partial y^2} = \frac{2f_{i,N_y}^n - 5f_{i,N_y-1}^n + 4f_{i,N_y-2}^n - f_{i,N_y-3}^n}{h^2}. \quad (\text{A.18})$$

Конвективная производная аппроксимируется центральными разностями

$$(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \cdot f_{i,j}^n = v_{x_{i,j}}^n \cdot \frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial x} + v_{y_{i,j}}^n \cdot \frac{\partial f_{i,j}^n}{\partial y} \quad (\text{A.19})$$

Для решения эволюционных уравнений нами используется метод проекций (метод дробных шагов) [95]. Запишем уравнение Навье-Стокса (A.2) в дискретном виде

$$\frac{\mathbf{v}_{i,j}^{n+1} - \mathbf{v}_{i,j}^n}{\tau} + (\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}_{i,j}^n = -\nabla p_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v}_{i,j}^n - \frac{1}{M} C_{i,j}^n \nabla \mu_{i,j}^n. \quad (\text{A.20})$$

Выразим явно значение скорости на новом шаге по времени:

$$\mathbf{v}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{v}_{i,j}^n + \tau \left( -(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}_{i,j}^n - \nabla p_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v}_{i,j}^n - \frac{1}{M} C_{i,j}^n \nabla \mu_{i,j}^n \right). \quad (\text{A.21})$$

Введем величину квазискорости  $\mathbf{u}$ , которая по смыслу представляет собой некоторую промежуточную («буферную») скорость без учета градиента давления

$$\mathbf{u}_{i,j}^n = \mathbf{v}_{i,j}^n + \tau \left( -(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}_{i,j}^n - \nabla p_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v}_{i,j}^n - \frac{1}{M} C_{i,j}^n \nabla \mu_{i,j}^n \right). \quad (\text{A.22})$$

Истинная скорость  $\mathbf{v}$  и квазискорость  $\mathbf{u}$  связаны следующим соотношением

$$\mathbf{v}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{u}_{i,j}^n - \tau \cdot \nabla p_{i,j}^n. \quad (\text{A.23})$$

При этом истинная скорость  $\mathbf{v}$  удовлетворяет уравнению неразрывности (A.1), в отличие от квазискорости  $\mathbf{u}$ . Применяя операцию дивергенции к уравнению (A.23), получим уравнение Пуассона для давления

$$\Delta p_{i,j}^n = \frac{1}{\tau} \cdot \text{div } \mathbf{u}_{i,j}^n \quad (\text{A.24})$$

Уравнения для концентрации (A.3) и химического потенциала (A.4) в дискретном виде запишутся

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \tau \left( -(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) C_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Pe}} \nabla^2 \mu_{i,j}^n \right), \quad (\text{A.25})$$

$$\mu_{i,j}^n = 2AC_{i,j}^n + 4(C_{i,j}^n)^3 - Cn \nabla^2 \mu_{i,j}^n. \quad (\text{A.26})$$

Таким образом, представленный метод проекций можно разбить на три шага:

1) Вычисляем квазискорость из уравнения (A.22). На данном шаге также решаются

уравнения для химического потенциала (A.26) и концентрации (A.25). 2) Итерационно решается уравнение Пуассона (A.24). 3) Используя уравнение (A.23), получаем выражение для истинной скорости.

## Программная реализация на CUDA

Представим основные части вычислительной программы на CUDA, опуская стандартные и понятные вещи, такие как объявление и инициализация всяческих вспомогательных переменных, ввод/вывод данных и пр. Нам потребуется подключить заголовочные файлы CUDA:

```
#include "cuda_runtime.h"
#include "device_launch_parameters.h"
```

В глобальной области видимости инициализируем переменные глобальные для GPU, которые понадобятся в дальнейшем:

```
// time and spatial parameters
__constant__ double hx, hy, tau, Lx, Ly, tau_p;
__constant__ unsigned int nx, ny, n, offset;
//physical parameters
__constant__ double A, Ca, Gr, Pe, Re, MM;
//other things
__constant__ double pi = 3.141592653;
//auxiliary arrays (explained in the end)
__device__ int *n1, *n2, *n3, *n4, *t;
```

Ключевое слово `__constant__` указывает, что переменная хранится в специальной неизменяемой «константной» памяти, скорость доступа к которой намного выше, чем к глобальной памяти GPU, общий объем такой памяти не превышает несколько килобайт, но этого хватает, чтобы хранить в ней часто используемые константы. Также можно использовать ключевое слово `__device__`, в этом случае переменные изменяемы и хранятся в глобальной памяти.

Полезно начать программу с проверки доступных GPU:

```
int main(int argc, char **argv) {
int devID = 0, deviceCount = 0;
cudaGetDeviceCount(&deviceCount);
if (deviceCount == 0) cout << "there is no detected GPU" << endl;
else cout << "GPUs available: " << deviceCount << endl;
```

Узнать подробную информацию об имеющихся графических процессорах можно, запустив утилиту `deviceQuery` в CUDA SDK. Выбрать желаемую GPU можно следующими функциями,

```
cudaSetDevice(devID);
cudaDeviceProp deviceProp;
cudaGetDeviceProperties(&deviceProp, devID);
printf("\nDevice %d: %s\n", devID, deviceProp.name);
```

где `devID` - индекс нужной GPU. Также, возможно, потребуется вручную установить размеру кучи, т.к. по умолчанию выделяется 8 МВ. Установим значение в 1 GB.

```
size_t heap = 1024 * 1024 * 1024;
cudaDeviceSetLimit(cudaLimitMallocHeapSize, heap);
```

Для полей скорости ( $v_x, v_y$ ), квазискорости ( $u_x, u_y$ ), концентрации ( $C, C_0$ ), давления ( $p, p_0$ ) и химического потенциала ( $\mu$ ) используем указатели типа `double`. Суффикс `_h` (host) обозначает массивы для CPU, суффикс `_d` (device) относится массивам на GPU.

```
double *C0_d, *C_d, *p_d, *p0_d, *ux_d, *uy_d, *vx_d, *vy_d, *mu_d;
double *C_h, *p_h, *ux_h, *uy_h, *vx_h, *vy_h, *mu_h;

//allocating memory for arrays on CPU and initializing them
C_h = (double*)malloc(sizeof(double)*N);
mu_h = (double*)malloc(sizeof(double)*N);
...

//allocating memory for arrays on GPU
cudaMalloc((void**)&mu, sizeof(double)*N);
cudaMalloc((void**)&C, sizeof(double)*N);
...
```

Отметим, что, так как мы рассматриваем 2D случай, у некоторых людей может возникнуть желание использовать указатель на указатель, чтобы было удобно оперировать с двумерными массивами. Однако при работе на CUDA этот подход нежелателен, т.к. возникают трудности при копировании памяти с CPU на GPU и обратно (`std::vector` на CUDA не доступен). Поэтому будем использовать линейризованный одномерный массив для 2D полей:  $i, j \rightarrow i + \text{offset} * j$ ;  $N$  – всего элементов массива,  $N_x+1, N_y+1$  – количество элементов в направлении  $x$  и  $y$ ,  $\text{offset} = (N_x+1)$  – «сдвиг» на индекс вверх/вниз.

Чтобы инициализировать массивы GPU, можно сперва инициализировать массивы CPU и затем скопировать их в массивы GPU с помощью функции

```
cudaMemcpy(C_d, C_h, sizeof(double)*N, cudaMemcpyHostToDevice);
```

для обратного копирования используется та же функция

```
cudaMemcpy(C_h, C_d, sizeof(double)*N, cudaMemcpyDeviceToHost);
```

Для копирования в константную память используется `cudaMemcpyToSymbol`.

```
cudaMemcpyToSymbol(hx, &hx_h, sizeof(double), 0, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpyToSymbol(hy, &hy_h, sizeof(double), 0, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpyToSymbol(offset, &offset_h, sizeof(unsigned int), 0, cudaMemcpyHostToDevice);
```

...

Также необходимо определить параметры `Grid` и `Block`, рассмотренные в листинге 1, для которых рекомендуется использовать специальный тип данных `dim3`. Если мы задаем параметры `Grid` и `Block` как одномерные, можно обойтись и обычным целочисленными типами данных, однако в ином случае использование `dim3` необходимо. Аргумент в конструкторе этого типа данных инициализирует значение переменной, в 2D и 3D случае необходимо передать соответственно 2 и 3 параметра.

```
size_t thread_x_d = 1024;
dim3 gridD(ceil((N + 0.0) / thread_x_d));
dim3 blockD(thread_x_d);
```

Теперь мы можем приступить к началу наших вычислений. Основной цикл по времени начинается с первого шага метода проекций, на котором вычисляется квазискорость, концентрация и химический потенциал:

```
// the main time loop of the whole calculation procedure
while (true) {
iter = iter + 1;
//1st step, calculating of time evolutionary parts of velocity (quasi-velocity) and
concentration and chemical potential
chemical_potential <<<gridD, blockD >>> (mu_d, C_d);
quasi_velocity <<< gridD, blockD >>> (ux_d, uy_d, vx_d, vy_d, C0_d, mu_d);
concentration <<< gridD, blockD >>> (C_d, C0_d, vx_d, vy_d, mu_d);
```

Вид данных исполняемых на GPU функций (kernel-функций) будет представлен ниже. Суть данного шага в следующем: каждое CUDA-ядро принимает на себя определенный вычислительный узел сетки, в котором вычисляется значение

химического потенциала ( $\mu_i$ ), двух компонент квазискорости ( $u_x, u_y$ ) или значение концентрации на следующем временном слое ( $C$ ).

### Уравнение Пуассона

На втором шаге метода проекций решается уравнение Пуассона для давления. Используется итерационная процедура решения (метод Якоби), для чего эллиптическое уравнение Пуассона приводится к параболическому типу:

$$\frac{\partial p_{i,j}}{\partial \tau_p} = \Delta p_{i,j} - \frac{1}{\tau} \cdot \text{div } \mathbf{u}_{i,j}. \quad (\text{A.27})$$

Здесь  $\partial p_{i,j} / \partial \tau_p = (p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k) / \tau_p$  – производная по фиктивному времени  $\tau_p$ . Вкратце процедура решения следующая: 1) вычисляем  $p_{i,j}^{k+1}$ ; 2) вычисляем невязку  $r^{k+1} = \sum_{i,j} |p_{i,j}^{k+1}|$ ; 3) если разница невязки между двумя шагами по фиктивному времени меньше некоторого  $\varepsilon$ , выходим из процедуры, ( $|r^{k+1} - r^k| < \varepsilon$ ?); 4) обмениваем значения элементов массивов для давления,  $p_{i,j}^k = p_{i,j}^{k+1}$ ; повторяем процедуру до тех пор, пока итерационный процесс не сойдется.

Вычисление невязки на GPU является нетривиальной задачей и представляет заметную сложность. Дело в том, что невязка  $r$  в вычислительной программе является глобальной переменной. При суммировании потоки не могут одновременно получить доступ к данной переменной, иначе возникает условие гонки потоков (race condition). На CPU с небольшим числом вычислительных ядер каждый поток может по очереди суммировать свою часть, т.е. пока один поток выполняет операцию присваивания, другие потоки блокируются. Однако на GPU, имея тысячи вычислительных ядер, данная процедура будет представлять «бутылочное горлышко» (bottleneck), не ускоряя, а многократно замедляя всю программу. Для данных целей применяется редукция-суммирование (см. рис. A2):

суммирование выполняется в несколько шагов, на первом мы разбиваем элементы массива по парам, каждый поток вычисляет сумму такой пары; далее из получившихся пар составляются новые пары и так далее, пока не останется единственный элемент.

На CUDA вычисления выполняются блоками потоков. Каждый такой блок составляет максимум 1024 потока (вполне эффективно загружать каждый блок на максимум, бывает, однако, что максимальная эффективность может достигаться при меньшем значении, но рекомендуется задавать значение по степеням двойки). При этом коммуникация между блоками отсутствует, так что мы не можем передавать «парные суммы» с одного блока на другой, осуществляя новый шаг редукции. Например, имея массив из 2048 элементов каждый блок может осуществить редукцию 1024 элементов, однако оставшиеся два значения находятся в разных блоках. Два элемента можно было сложить и как-нибудь вручную, но оставшихся значений может быть куда больше, для этого приходится организовывать довершение редукции повторным ее вызовом. Более того, если исходный массив длиннее чем  $1024^2$ , довершать редукцию придется более одного раза (т.е. всего вызовов больше двух).

Таким образом, алгоритм расчета невязки состоит из следующего цикла вызовов процедуры редукции. Берутся 2 массива: входной и выходной. На первой итерации вызывается процедура редукции, в которой входной массив представляет собой исходный массив  $p_{i,j}$ . Выходной массив формируется из финальных значений с каждого блока. Выходной массив затем, на следующей итерации цикла, посылается на вход процедуры редукции – повторяем цикл до тех пор, пока выходной массив не будет содержать единственный элемент (искомую невязку).

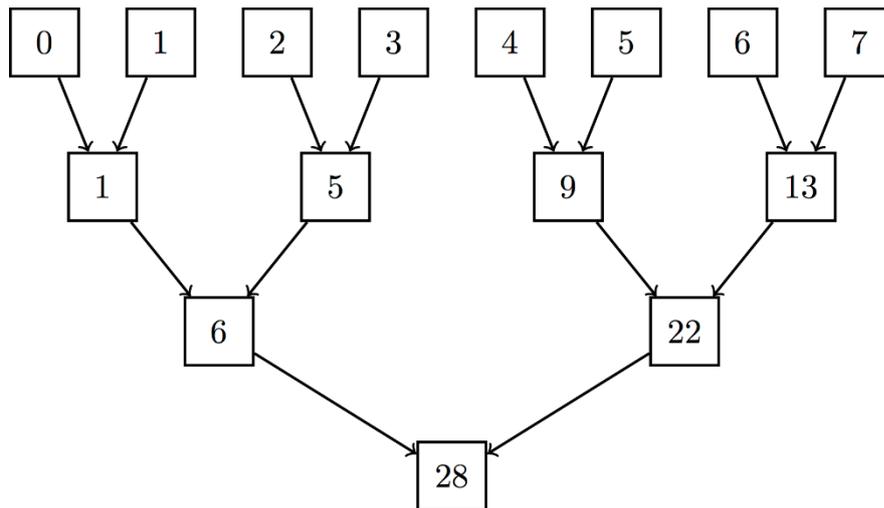


Рисунок А2. Схема выполнения процедуры редукции-суммирования.

Ниже представлен код расчета уравнения Пуассона.

```

//2nd step, Poisson equation for pressure
double eps = 1.0; // current accuracy
double eps0 = 1e-5; // setting accuracy
double psiav0 = 0.0; //r, on residual n-th step
double psiav = 0.0; //r0, onresidual (n-1)-th step
int k = 0; // iteration number

while (eps > eps0*psiav0 )
{
    psiav = 0.0; k++;
    Poisson << <gridD, blockD >> > (p_d, p0_d, ux_d, uy_d, mu_d, C_d);

    for (int i = 0; i < s; i++)
        reduction <<< Gp[i], 1024, 1024 * sizeof(double) >>> (arr[i], Np[i],
            arr[i + 1]);

    temp = p; p = p0; p0 = temp; //swap p and p0
    cudaMemcpy(&psiav, psiav_array, sizeof(double), cudaMemcpyDeviceToHost);

    eps = abs(psiav - psiav0); psiav0 = psiav;
}
  
```

Невязки на двух шагах по фиктивному времени хранятся в переменных  $\psi_{iav}$  и  $\psi_{iav0}$ . Сперва с помощью вызова kernel-функции `Poisson` вычисляются значения  $p_{i,j}^{k+1}$ . Затем идет описанный выше цикл вызовов процедуры редукции. Остановимся подробнее на данном моменте.

Цикл выполняется до  $s$  итераций, т.е.  $s$  – число вызовов операции редукции: 1 раз если число элементов не больше 1024, 2 раза, если не больше  $1024^2$  и т.д. Отметим, что все потоки на каждой итерации автоматически синхронизируются после завершения вызова kernel-функции.

```
//number of reductions
int s = ceil(log(N) / log(1024));
```

В параметрах kernel-функции reduction в тройных угловых скобках присутствует не 2, а три параметра. Первые два отвечают размеру grid (число блоков) и размеру block (число потоков в блоке), третий же параметр отвечает за количество динамически выделяемой специальной shared-памяти. Данная память доступна на каждый блок, является более быстрой, чем глобальная память (но медленнее, чем constant-память). О shared-памяти можно думать, как об управляемой кэш-памяти, которая может оказаться полезной для оптимизации алгоритма. В частности, shared-память эффективна в тех случаях, когда внутри блока потоки выполняют серию операций над одним и тем же набором элементов массива.

Массив Gp отвечает за размер grid, который необходим при каждом вызове редукции; массив Np хранит количество элементов, которые необходимо «редуцировать» на каждом шаге (причем  $Np[0] = N$ ).

```
int *Gp = new int[s];
int *Np = new int[s];
int GN = N;
for (int i = 0; i < s; i++)
    Gp[i] = GN = ceil(GN / (1024.0));
Np[0] = N;
for (int i = 1; i < s; i++)
    Np[i] = Gp[i - 1];
```

Массив arr представляет собой массив из указателей (с которыми мы работаем на GPU).

```
double *arr[10];
```

Возможно, потребуется больше 10, но обычно необходимо 3-4 элемента; arr[i] – указатель на входной массив для процедуры редукции, arr[i+1] – указатель на выходной массив для процедуры редукции, таким образом, на следующей итерации выходной массив становится входным. При этом указатель arr[0] – есть указатель на исходное поле давления p\_d ( $p_{i,j}^{k+1}$ ). Всего потребуется s+1 указатель arr[0]..arr[s], фактическая длина каждого массива arr[i] равна Np[i]. Каждый последующий массив меньше предыдущего ( $Np[i] > Np[i + 1]$ ). В действительности нет необходимости выделять память для каждого указателя arr[i] с  $i = 1 \dots s$ , мы можем использовать один и тот же массив (выделение памяти

указателю `psiav_array`) в качестве входного и выходного одновременно. Если исходный массив поля давления не больше чем 1024 элемента, то память выделяется лишь для одного элемента типа `double`, иначе для `Np[1]` шт.

```
double *psiav_array;
(s!=1) ? cudaMalloc((void*)&psiav_array, sizeof(double)*Np[1]):
        cudaMalloc((void*)&psiav_array, sizeof(double));
arr[0] = p_d;
for (int i = 1; i <= s; i++)
    arr[i] = psiav_array;
```

Некоторые аспекты представленной выше схемы расчета невязки могут показаться излишними, однако это позволяет записать данную процедуру максимально компактно и универсально применять ее к любому количеству данных.

Далее, после вычисления невязки, мы обмениваем значения  $p_{i,j}^{k+1}$  и  $p_{i,j}^k$  путем обмена указателей. Затем копируем `psiav_array` (точнее говоря, только единственный элемент `array_array[0]` – конечное значение невязки на GPU) в переменную `psiav` (невязка в памяти CPU). В общем случае копирование памяти между GPU и CPU является медленной операцией, однако в данном случае мы копируем лишь 8 байт/64 бит, что не сказывается на быстродействии (разрядность шины памяти видеокарты составляет минимум 64 бит – в самых бюджетных моделях). В заключении выполняется проверка выхода из цикла, и, в случае успеха, мы переходим к третьему шагу метода проекций.

Отметим, что в литературе можно найти похожие реализации метода проекций, но с упрощением процедуры решения уравнения Пуассона, когда невязка не высчитывается, и выход из алгоритма происходит по заранее заданному критерию (например, число итераций на каждом шаге), что ведет к чрезмерным вычислительным затратам по времени и, в некоторых случаях, к менее точному результату. Наш алгоритм, соответственно, лишен данных недостатков.

Заключительная часть метода проекций не представляет заметных трудностей. Мы просто вызываем kernel-функцию, которая, зная полученное поле давления, вычисляет значения истинной скорости ( $v_{x\_d}$ ,  $v_{y\_d}$ ). Затем обмениваем значения полей скорости и концентрации и переходим на начало главного цикла к следующему шагу по времени.

```
//3rd step, velocity correction and swapping field values
velocity_correction <<<gridD, blockD >>> (vx_d, vy_d, ux_d, uy_d, p_d);
temp = C_d; C_d = C0_d; C0_d = temp;
temp = vx_d; vx_d = ux_d; ux_d = temp;
temp = vy_d; vy_d = uy_d; uy_d = temp;
} //the end of the main time loop
} //the end of the main function
```

## Kernel-функции

Все kernel-функции, за исключением функции редукции, имеют аналогичных вид. Нами применяются два подхода: 1) более простой и наглядный, но пригодный для простой геометрии области (например, прямоугольной); 2) с вычислением дополнительных индексов и вспомогательных массивов, при котором, например, возможно посчитать матрицу из сети капилляров.

Рассмотрим первый подход и функцию, в которой вычисляется новое значение концентрации в каждой точке рассматриваемой области. В данном случае удобно использовать двумерную индексацию блоков и потоков внутри блоков, вызовы функций (что мы описывали выше) при этом никак не изменится, нужно лишь определить переменные `gridD` и `blockD` как двумерные:

```
size_t thread_x_d = 32;
size_t thread_y_d = 32;

dim3 gridD(ceil((Nx + 1.0) / thread_x_d), ceil((Ny + 1.0) / thread_y_d));
dim3 blockD(thread_x_d, thread_y_d);
```

Таким образом, все потоки в вызове kernel-функции по-прежнему разбиваются на блоки из 1024 потока, но в виде квадратов  $32 \times 32$ . Вспомним, что индексы по направлениям  $x$  и  $y$  изменяются соответственно как  $i = 0..Nx$ ,  $j = 0..Ny$ .

```
__global__ void concentration(double *C, double *C0, double *vx, double *vy, double *mu) {
unsigned int i = threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x; //global index i (x direction)
unsigned int j = threadIdx.y + blockIdx.y*blockDim.y; //global index j (y direction)
```

```

unsigned int l = i + offset*j;

if (i <= nx && j <= ny && l < n)
{
    // Inner
    if (i > 0 && i < nx && j > 0 && j < ny)
    {
        +tau * (
            //convective term
            -vx[l] * (C0[l + 1] - C0[l - 1]) / (2.0 * hx)
            - vy[l] * (C0[l + offset] - C0[l - offset]) / (2.0 * hy)
            //laplacian
            + ((mu[l + 1] - 2.0*mu[l] + mu[l - 1]) / (hx * hx)
              + (mu[l + offset] - 2.0*mu[l] + mu[l - offset]) / (hy * hy)
            ) / Pe );
    }

    // Rigid bottom wall
    else if (j == 0)
        C[l] = (4.0*C0[l + offset] - C0[l + offset * 2]) / 3.0;

    // Rigid top wall
    else if (j == ny)
        C[l] = (4.0*C0[l - offset] - C0[l - offset * 2]) / 3.0;

    // left inlet side
    else if (i == 0 && (j > 0 && j < ny))
        C[l] = -0.5;

    // right outlet side
    else if (i == nx && (j > 0 && j < ny))
        C[l] = (4.0*C0[l - 1] - C0[l - 2]) / 3.0;
} // end of if
} // end of kernel

```

Представленная kernel-функция разбита на части: вычисление во внутренних узлах и на границах области. Граничные условия соответствуют 2D капилляру, с левого конца которого происходит закачка, правый конец считается открытым, верхняя и нижняя стенки являются твердыми непроницаемыми для вещества.

Принцип программирования kernel-функций для вычисления других полей абсолютно такой же и не вызывает трудностей.

## Reduction

Процедура вычисления редукции на GPU имеет множество нюансов, связанных с архитектурой GPU и программной моделью CUDA. Представим один из возможных вариантов.

```

__global__ void reduction(double *input, unsigned int n, double* output){
    extern __shared__ double shared[];

    unsigned int id = threadIdx.x;
    unsigned int i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;

    shared[id] = (i < n) ? abs(input[i]) : 0;
    __syncthreads();

    for (unsigned int q = blockDim.x / 2; q > 0; q >>= 1)
    {
        if (id < q)
        {
            shared[id] += shared[id + q];
        }
        __syncthreads();
    }

    if (id == 0) {
        output[blockIdx.x] = shared[0];
    }
} // kernel end

```

В первой строчке объявляется массив в shared-памяти, количество памяти выделяется динамически и определяется третьим параметром в угловых скобках при вызове kernel-функции.

```
extern __shared__ double shared[];
```

Возможен также вариант статического определения:

```
__shared__ double shared[1024];
```

Далее вычисляем локальный и глобальный индексы потоков и присваиваем shared-массиву часть исходных данных из глобальной памяти (массив `input`), после чего производим синхронизацию потоков в блоке.

```

unsigned int id = threadIdx.x;
unsigned int i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;

shared[id] = (i < n) ? abs(input[i]) : 0;
__syncthreads();

```

Затем производим саму процедуру редукции

```

for (unsigned int q = blockDim.x / 2; q > 0; q >>= 1)
{
    if (id < q)
    {
        shared[id] += shared[id + q];
    }
    __syncthreads();
}

```

В заключении каждый блок формирует один элемент выходного массива для последующих шагов редукции.

```

    if (id == 0) {
        output[blockIdx.x] = shared[0];
    }
} // kernel end

```

В случае, если выполняется последний шаг редукции, то `output[blockIdx.x] = shared[0]` есть искомая величина.

Для простоты выше был представлен один из простейших вариантов, в котором практически не применяется каких-либо оптимизаций. Например, в блоке потоки в действительности сгруппированы в так называемые варпы – группы по 32 потока (в английском языке *warp* – канат, *threads* – потоки/нити), в рамках одного варпа возможно ускорить коммуникацию между потоками. Нами применялись различные модификации алгоритма редукции. Тестовые расчеты показали разницу скорости в несколько раз в зависимости от того или иного варианта алгоритма при условии, что выполняется только редукция (выполняем зациклено множество раз). Однако, внутри общего численного метода расчета гидродинамических уравнений выбор конкретной модификации алгоритма редукции не сказывается на общем быстродействии программы. Объяснение множества возможных оптимизаций можно найти в презентации Nvidia [195].

## **Второй подход написания kernel-функций.**

Для начала объясним причины написания альтернативной версии kernel-функций. Нами, помимо расчетов в простой геометрии, также рассматриваются и более сложные случаи, например, течение в сети капилляров. На рисунке А3 представлен пример рассматриваемой геометрии.

Выше, в примере для процедуры вычисления поля концентрации, мы отделяли внутренние узлы от граничных с помощью условных операторов (`if`, `elseif`). В случае варианта алгоритма на CPU мы бы могли просто сперва посчитать

все внутренние узлы, а затем – граничные условия. Для GPU такой подход бы потребовал использования отдельных kernel-функций, которые бы существенно отличались по степени загрузки GPU, что, вероятно, приводило бы к «бутылочному горлышку» (bottleneck-эффекту), поэтому используется одна kernel-функция и несколько условий if и elseif. Однако для геометрии сети капилляров нам бы пришлось использовать аномальное число таких операторов, что существенно бы усложняло код, делая программу трудно модифицируемой при изменении геометрии, и, по-видимому, приводило бы к ухудшению быстродействия.

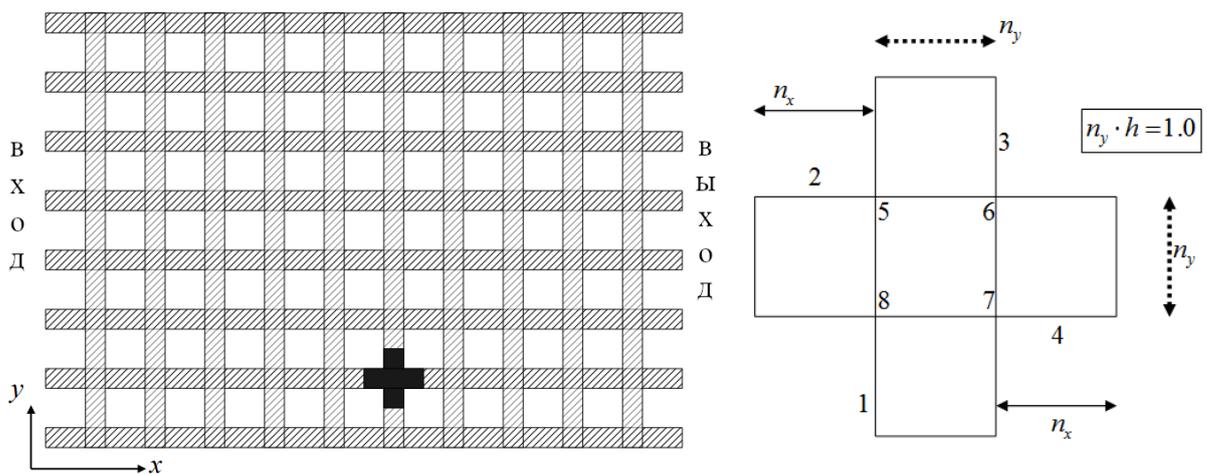


Рисунок А3. Слева: геометрия области при расчете течения в сети капилляров. Серые заштрихованные области соответствуют пространству капилляров, по которым протекает жидкость. Черный крест представляет базовый элемент (рисунок справа); количество и параметры такого элемента задают масштабирование всей системы;  $n_x, n_y$  – число узлов,  $h$  – шаг сетки.

Нами применяется следующий подход. Вводятся дополнительные массивы целочисленного типа, в которых хранятся адреса соседних элементов: n1 (сосед слева), n2 (сосед сверху), n3 (сосед справа), n4 (сосед снизу). Например,  $F[n3[i]]$  – элемент массива  $F$ , который находится правее элемента  $F[i]$ ,  $F[n2[n3[i]]]$  – элемент массива  $F$ , который находится по диагонали вправо-вверх от  $F[i]$  и т.д. Кроме того, вводится дополнительный массив  $t$ , который отвечает типу узла сетки: 0 – внутренние узлы, 1, 2, 3, 4 – левая, верхняя, правая и нижняя твердые стенки соответственно, 5, 6, 7, 8 – угловые точки на твердой стенке (см. рисунок А3

справа), 9, 10 – входная и выходная стороны соответственно. Эти массивы находятся в глобальной области видимости GPU и доступны всем kernel-функциям.

В итоге мы можем компактно записать kernel-функцию вычисления поля концентрации в следующем виде.

```

__global__ void concentration(double *C, double *C0, double *vx, double *vy, double *mu) {
  unsigned int l = threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x;

  if (l < n)
  {
    switch (t[l])
    {
      case 0: //inner
        C[l] = C0[l]
          + tau * (
            -vx[l] * dx1(l, C0)
            - vy[l] * dy1(l, C0)
            + (dx2(l, mu) + dy2(l, mu)) / Pe
          );
        break;
      case 1: //left rigid
        C[l] = dx1_eq_0_forward(l, C0);
        break;
      case 2: //upper rigid
        C[l] = dy1_eq_0_down(l, C0);
        break;
      case 3: //right rigid
        C[l] = dx1_eq_0_back(l, C0);
        break;
      case 4: //lower rigid
        C[l] = dy1_eq_0_up(l, C0);
        break;
      case 5: //left upper rigid corner
        C[l] = 0.5* (dx1_eq_0_forward(l, C0) + dy1_eq_0_down(l, C0));
        break;
      case 6: //right upper rigid corner
        C[l] = 0.5* (dx1_eq_0_back(l, C0) + dy1_eq_0_down(l, C0));
        break;
      case 7: //right lower rigid corner
        C[l] = 0.5* (dx1_eq_0_back(l, C0) + dy1_eq_0_up(l, C0));
        break;
      case 8: //left lower rigid corner
        C[l] = 0.5* (dx1_eq_0_forward(l, C0) + dy1_eq_0_up(l, C0));
        break;
      case 9: //inlet (from left)
        C[l] = -0.5;
        break;
      case 10://outlet (to right)
        C[l] = dx1_eq_0_back(l, C0);
        break;
      default:
        break;
    }
  }
}

```

С помощью конструкции switch-case происходит выбор типа узла, после чего каждый поток вычисляет свою задачу. Здесь для удобства конечно-разностные формулы записаны в виде отдельных функций.

```

__device__ double dx1(unsigned int l, double *f) {
    return 0.5*(f[n3[l]] - f[n1[l]]) / hx;
}
__device__ double dy1(unsigned int l, double *f) {
    return 0.5*(f[n2[l]] - f[n4[l]]) / hy;
}
__device__ double dx2(unsigned int l, double *f) {
    return (f[n3[l]] - 2.0*f[l] + f[n1[l]]) / hx / hx;
}
__device__ double dy2(unsigned int l, double *f) {
    return (f[n2[l]] - 2.0*f[l] + f[n4[l]]) / hy / hy;
}

```

Функции выше возвращают значения производных, аппроксимированных центральными разностями (A.9) и (A.10).

```

__device__ double dx1_eq_0_forward(unsigned int l, double *f) {
    return (4.0*f[n3[l]] - f[n3[n3[l]]]) / 3.0;
}
__device__ double dx1_eq_0_back(unsigned int l, double *f) {
    return (4.0*f[n1[l]] - f[n1[n1[l]]]) / 3.0;
}
__device__ double dy1_eq_0_up(unsigned int l, double *f) {
    return (4.0*f[n2[l]] - f[n2[n2[l]]]) / 3.0;
}
__device__ double dy1_eq_0_down(unsigned int l, double *f) {
    return (4.0*f[n4[l]] - f[n4[n4[l]]]) / 3.0;
}

```

Функции выше возвращают значение граничного узла, который выражается из условия равенства нулю нормальной производной на границе ( $\partial f / \partial n = 0$ ), используя формулы (A.11)-(A.14).

Функции с ключевым словом `__device__` могут вызываться только из других функций GPU, при этом такие функции могут возвращать различные типы данных. Функции с ключевым словом `__global__` могут быть вызваны и с CPU, и с GPU, тип таких функций всегда `void`.

Процедура расчета адресов соседей и типов узлов производится один раз в начале программы. В зависимости конкретной геометрии и направления мысли

программиста эту процедуру возможно осуществить множеством способов. Этот шаг позволяет отделить логику «решателя» от логики задания геометрии, т.е. представленная kernel-функция будет работать для любой геометрии, нужно лишь задать значения вспомогательных массивов. Потребление памяти с вводом данных вспомогательных массивов увеличивается примерно на 20-25% (что является приемлемым), а связанные с этим дополнительные вычисления индексов не сказываются на быстродействии программы.

Kernel-функции для вычисления других полей задаются аналогичным образом; при этом процедура вычисления редукции является универсальной и в модификациях не нуждается.

### **Тесты производительности**

В заключении представим тесты быстродействия параллельного алгоритма на GPU.

На рисунке А4 в виде гистограммы представлено сравнение ускорения алгоритма для трех моделей GPU: GeForce GTX 1050, Tesla K40 и Tesla V100 по сравнению с последовательной версией на CPU (процессор Intel Core i7-4770K, 3.50 GHz). На CUDA расчеты проводились, применяя второй описанный подход для kernel-функций, с использованием вспомогательных массивов. Последовательная программа написана на языке Fortran с использованием компилятора Intel Fortran Compiler. Расчеты проводились в прямоугольной области 300×900 узлов.

Модель GeForce GTX 1050 является бюджетной потребительской видеокартой, но даже на такой модели можно добиться не самых плохих результатов. Модели линейки Tesla относятся к видеокартам, специально разработанным для различных научных и технических вычислений общего назначения, задач обучения искусственного интеллекта и пр. Из рисунка А4 видно, что модель Tesla V100 позволяет добиться почти стократного ускорения алгоритма, что свидетельствует об эффективности разработанной программы.

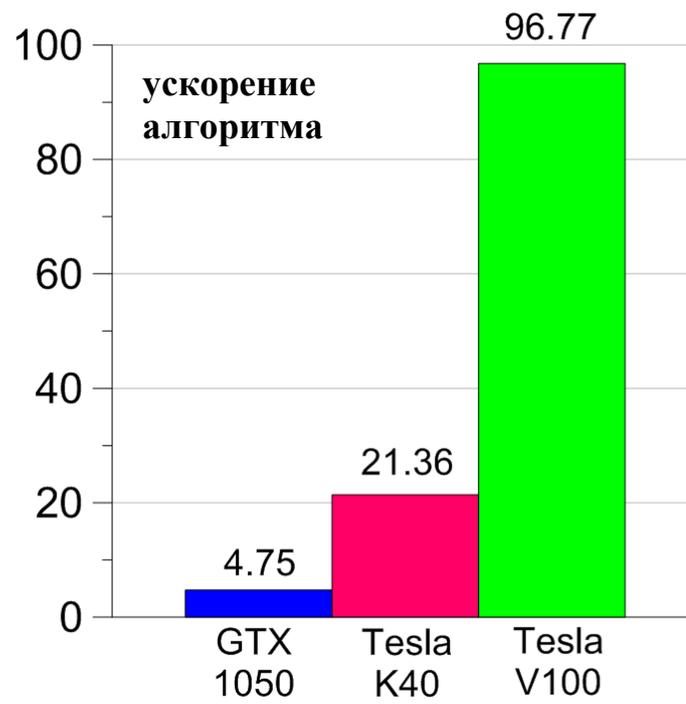


Рисунок А4. Ускорение параллельного алгоритма на GPU по сравнению с последовательным вариантом на CPU (Intel Core i7-4770K).