

На правах рукописи

КУДИНОВ Илья Владимирович

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ В
МИКРОКАНАЛАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА
ПЛОТНОСТИ**

Специальность 01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

г. Долгопрудный – 2010

Работа выполнена на кафедре прикладной механики Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор

Кондауров Владимир Игнатьевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Вараксин Алексей Юрьевич

доктор физико-математических наук,
профессор Петров Игорь Борисович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Институт динамики геосфер РАН

Защита состоится 29 декабря 2010 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д.212.156.08 при Московском физико-техническом институте по адресу: 141700, г. Долгопрудный Московской области, Институтский пер. 9, главный корпус, аудитория 119.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского физико-технического института.

Автореферат разослан «____» ноября 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д.212.156.08
кандидат физико-математических наук

В.П. Коновалов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Настоящая работа посвящена изучению течений несмешивающихся жидкостей на микромасштабе, то есть на таком масштабе, на котором для корректного описания процесса необходимо непосредственно учитывать положение и структуру межфазной границы и связанные с ней силы поверхностного натяжения. В этом случае становится неприменим многоконтинуальный подход, основанный на осредненных характеристиках, который часто используется для описания гетерогенных сред на макромасштабе. Необходимость аккуратного воспроизведения поверхностных сил (как на границе жидкость-жидкость, так и на контакте флюида со стенками) при микромасштабном моделировании требует применения специальных методов, существенно выходящих за рамки классической гидродинамики. Поэтому разработка моделей многофазных микротечений представляет собой интересную задачу с фундаментально-научной точки зрения.

Кроме того, многофазные микротечения играют важную роль во многих природных, биологических и технических системах. Их точное количественное описание необходимо для различных практических приложений, например, в области добычи, транспортировки и переработки углеводородного сырья. Особо отметим активно развивающееся в последние годы направление по разработке миниатюрных устройств, оперирующих очень малыми объемами жидкостей, порядка $мм^3$ и меньше (microfluidic devices). Наиболее перспективными сферами применения подобных устройств является прецизионный химический анализ (в первую очередь, биомедицинские чипы) и прецизионный химический синтез (в фармацевтическом производстве). Поведение жидкостей в микросистемах нельзя считать вполне изученным, оно может существенно отличаться от макроскопических течений, так как характеризуется другим соотношением вязких, инерционных и поверхностных сил. Таким образом, микромасштабное моделирование многофазных течений является весьма востребованным с прикладной точки зрения.

Цели и задачи работы:

- 1) Анализ современных подходов к моделированию многофазных течений, применимых для микромасштабного описания многокомпонентных жидкостей. Сравнение теоретических оснований, принципиальных

возможностей и ограничений данных подходов. Сопоставление различных моделей с точки зрения их численной реализации.

- 2) Исследование возможностей метода функционала плотности по моделированию многофазных течений на примере двухфазного течения в микроканале. Проведение серии численных экспериментов, воспроизводящих условия ранее выполненных лабораторных опытов, и прямое сопоставление результатов. В качестве целевых объектов для сопоставления используются: наблюдаемые режимы течения, их карта на плоскости капиллярных чисел для каждой из жидкостей, корреляции для характерных геометрических параметров течения (таких как нормированный диаметр жидкой нити, ее критическая длина, поперечный и продольный размеры капель) в зависимости от скоростей закачки жидкостей.
- 3) Исследование вопроса о роли вязких эффектов при макроскопическом описании однофазного фильтрационного течения. Выполнение численных экспериментов по моделированию однофазного течения через канал, заполненный высокопористой модельной средой (решеткой из сфер). Определение микроскопических и макроскопических профилей скорости. Сравнение последних с параболическим профилем, соответствующим течению Пуазейля, и плоским профилем, соответствующим закону Дарси. Расчет вязкой диссипации на микро- и на макромасштабе.

В работе получены следующие **новые результаты**, выносимые на защиту:

- 1) Изучен вопрос о макроскопических проявлениях вязких свойств при фильтрационном течении. Продемонстрировано преобладание вязкой диссипации на контакте флюида со стенками поровых каналов над вязкой диссипацией в объеме жидкости вплоть до высоких значений пористости среды (порядка 90 %). Показана корректность закона Дарси, не учитывающего девиаторную часть тензора напряжений флюида, для макроскопического описания процесса фильтрации.
- 2) Продемонстрирована адекватность метода функционала плотности при микромасштабном моделировании течения двух несмешивающихся жидкостей. А именно, в численных экспериментах были воспроизведены все лабораторно-выделенные режимы течения и

переходы между ними при изменении внешних параметров. Было проверено, что геометрические характеристики течений, полученные по данным численного моделирования, находятся в согласии с экспериментальными корреляциями.

- 3) Обнаружено существенное влияние свойств смачиваемости стенок канала на картину двухфазного течения. Тем самым показано, что картирование режимов в зависимости только от двух капиллярных чисел не может быть универсальным для всех пар жидкостей, поскольку не учитывает особенности их взаимодействия со стенками.
- 4) Проведен анализ постановки граничных условий на входе и выходе из канала в многофазном случае. Установлено принципиальное отличие от однофазного случая при использовании условия постоянства давления на стоке (выходе из канала): данное условие не может быть корректно задано *локально*, то есть на выделенной границе расчетной области, вместо этого допустимо накладывать условие постоянства *среднего* давления в некотором объеме. Также были исследованы два подхода к постановке граничных условий на входе в канал при осуществлении закачки жидкостей.

Научная значимость работы состоит в апробации метода функционала плотности, изучении его возможностей посредством сравнения с лабораторными наблюдениями и получении новой информации о зависимости структуры двухфазного течения от свойств смачиваемости. Проведенные расчеты однофазного течения сквозь модельную пористую среду позволили проследить эволюцию профиля скорости фильтрации в канале при увеличении пористости.

Практическая значимость работы связана с возможностью замены натурального эксперимента в области многофазных течений на численный, основанный на методе функционала плотности. Сферы применения подобного численного моделирования указаны выше при обосновании актуальности работы. Кроме того, полученные выводы о роли вязких эффектов при макроскопическом описании фильтрационных течений позволяют аргументировать использование гидродинамических симуляторов на основе закона Дарси при проектировании разработки месторождений тяжелой нефти и нефти со сложной реологией.

Достоверность результатов диссертации обусловлена строгим выводом используемых динамических уравнений из первых принципов, а также привлечением хорошо известных определяющих соотношений, таких как тензор вязких напряжений Навье-Стокса. Для системы уравнений метода функционала плотности выполняется проверка термодинамической согласованности и согласованности с классическими гидродинамическими уравнениями в однофазном пределе. Применяемый численный алгоритм является многократно апробированным и обладает известными аппроксимационными свойствами. Перед проведением основной серии расчетов решается ряд тестовых однофазных и двухфазных задач, и показывается сходимость по сетке к аналитическому решению. Основным подтверждением достоверности результатов служит прямое сопоставление с лабораторными данными, которому посвящена существенная часть диссертации.

Апробация работы. Представленные в диссертации результаты докладывались на 10 научных конференциях: 49-52 научных конференциях МФТИ (2006-2009), VIII международной научно-практической конференции Геомодель (г. Геленджик, 2006), XV международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (г. Алушта, Украина, 2007), научно-технической студенческой конференции под эгидой общества SPE (г. Тюмень, 2007), XXIV международной конференции “Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter” (п. Эльбрус, 2009), международной летней школе-конференции “Advanced Problems in Mechanics” (г. Санкт-Петербург, 2009), международной летней школе “Role of Interfacial Area in Two-Phase Flow and Transport in Porous Media” (г. Утрехт, Голландия, 2009).

Результаты диссертационной работы обсуждались на заседании кафедры Прикладной механики МФТИ (24 сентября 2010), на совместном научном семинаре МФТИ–«Шлюмберже» под председательством чл.-корр. РАН Четверушкина Б.Н. (29 сентября 2010), на семинаре кафедры Физической механики МФТИ под председательством чл.-корр. РАН Сола Э.Е. (8 октября 2010).

По материалам, вошедшим в состав диссертации, были опубликованы 12 научных работ, из которых 9 написаны в соавторстве. Личный вклад соискателя во все работы, выполненные в соавторстве, был существенным, а во многих

случаях – основным. Две статьи напечатаны в журналах, входящих в перечень ВАК на момент публикации.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из 5 глав, а также введения и выводов. В работе содержится 32 рисунка и 3 таблицы. Список цитированной литературы насчитывает 82 источника. Общий объем диссертации составляет 134 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** описывается основная проблематика работы, обосновывается ее актуальность, формулируются цели и задачи исследования.

В **главе 1** делается обзор различных современных методов моделирования многофазных течений и указывается место метода функционала плотности среди них. Все обсуждаемые методы подразделяются на три класса, каждый из которых затем рассматривается подробнее. В основу используемой классификации положены концептуальные различия в физических моделях, на базе которых строятся конкретные методы. Данная классификация подчеркивает то, как многофазные системы могут быть описаны с точки зрения различных областей современной физики.

В **разделе 1.1** рассматривается класс методов, который условно назван «гидродинамическим подходом». Подобные методы основаны на решении классических гидродинамических уравнений (уравнений Эйлера или Навье-Стокса) во всей области течения. При этом материальные параметры жидкости (плотность, вязкость) задаются исходя из пространственного распределения фаз, которое отслеживается по положению межфазной границы. В методах типа Front Tracking положение границы описывается явным образом (посредством введения маркеров, подвижных относительно узлов сетки, на которой решаются гидродинамические уравнения), в методах Front Capturing оно описывается неявно (например, в широко распространенном методе Level Set поверхность раздела фаз задается как множество уровня 0 некоторой гладкой скалярной функции). Опуская дальнейшие детали разнообразных конкретных реализаций, отметим два принципиальных противоречия, присущих всем методам данного класса: 1) непрерывность поля скорости, которая предполагается при формулировке единой системы уравнений для всей многофазной области, приводит к тому, что топология межфазной границы не может изменяться в процессе течения – отрыв и слияние капель не могут быть

корректно воспроизведены; 2) условие отсутствия проскальзывания на границе со стенкой, которое традиционно ставится для вязкого течения, запрещает движение контактной линии (линии соприкосновения жидкостей) по стенке – перемещение капли по твердой поверхности невозможно. Указанные противоречия, хотя они и могут быть преодолены в практических расчетах введением каких-либо *ad hoc* правил, демонстрируют принципиальную недостаточность классической (однофазной) гидродинамики для описания многофазных течений.

Раздел 1.2 посвящен классу методов, условно названному «дискретно-кинетическим подходом» (английское название *Lattice Boltzmann Method*). Данный подход заключается в восстановлении макроскопических характеристик среды (плотности, давления, скорости течения) по решению упрощенного кинетического уравнения Больцмана в дискретном времени и фазовом пространстве. Его теоретическим базисом является процедура разложения Чепмена-Энскога, позволяющая установить связь между решениями уравнений Больцмана и Навье-Стокса (или Эйлера) при определенных предположениях. Моделирование течений осуществляется посредством моделирования динамики ансамбля частиц, распределенных по узлам решетки, и подчиняющихся уравнению Больцмана с оператором столкновений в форме BGK (Bhatnagar-Gross-Krook, 1954). В многофазном случае вводится несколько семейств частиц и правила их взаимного рассеяния при столкновении в узлах решетки. Однако, несмотря на большое число работ, посвященных *Lattice Boltzmann* моделированию многофазных систем, опубликованных в последние годы, правила рассеяния во всех известных автору работах задаются сугубо эвристическим образом (без должного обоснования) с целью воспроизвести (феноменологически) базовые явления: разделение смеси на фазы, минимизацию площади межфазной поверхности (поверхностное натяжение), образование угла смачивания. При этом обычно заимствуются излагаемые ниже концепции, основанные на введении членов, пропорциональных градиентам концентраций частиц.

В **разделе 1.3** обсуждается класс методов, в которых традиционные балансовые уравнения механики сплошной среды дополняются термодинамическим описанием многокомпонентной смеси, учитывающим энергетический вклад межфазной границы. Данный класс назван «термодинамическим подходом», к нему относится используемый в дальнейшем метод функционала плотности. В моделях термодинамического

типа распределение жидкостей в пространстве задается с помощью непрерывных полей концентраций или плотностей, так что межфазная граница представляет собой область конечной ширины, в которой состав смеси и ее характеристики изменяются непрерывным образом. Формирование размытых фронтов согласуется с современными молекулярно-кинетическими представлениями о взаимной диффузии молекул жидкостей, находящихся в контакте. Однако с термодинамической точки зрения смешанные состояния макроскопически несмешивающихся жидкостей являются неустойчивыми в объеме. Чтобы их уравновесить на фронте, в выражение для свободной энергии системы должны быть введены слабо нелокальные (градиентные) члены. Эти члены учитывают зависимость энергии смеси не только от состава в данной точке, но и от состава в ее окрестности, и таким образом позволяют описать энергетический вклад межфазной поверхности. В разделе 1.3 приведена история развития подобных концепций, начиная с работ Релея и Ван дер Ваальса 1890-х годов. Затем на примере современной модели Кана-Хиллиарда-Навье-Стокса (CHNS) показано, как классические гидродинамические уравнения для вязкой жидкости могут быть обобщены на основе определяющих соотношений, полученных в результате термодинамического анализа.

Глава 2 посвящена изложению теории метода функционала плотности, с помощью которого проводились численные эксперименты, описанные в последующих главах. В данной работе рассматривается и используется метод функционала плотности в изотермическом приближении, впервые предложенный в работе: *Динариев О.Ю. О гидродинамическом описании многокомпонентной многофазной смеси в узких порах и тонких слоях // Прикладная математика и механика, 1995, Т. 59, вып. 5, с. 776 – 783.* Более подробное изложение теории, включая неизотермический случай, содержится в монографии: *Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009, 312 с.*

В **разделе 2.1** описывается базовая концепция метода. Предполагается, что состояние системы определяется непрерывно-дифференцируемыми полями молярных плотностей компонентов смеси $n_a(x, y, z, t)$, $a = 1 \dots N$ и среднемассовой скорости $\bar{v}(x, y, z, t)$. Чтобы учесть поверхностную энергию межфазной границы, в выражение для плотности свободной энергии включаются члены, пропорциональные градиентам молярных плотностей, так что полная свободная энергия задается функционалом

$$F = \int_D \left(f(n_a) + \frac{1}{2} k_{ab} \frac{\partial n_a}{\partial x_i} \frac{\partial n_b}{\partial x_i} \right) dV + \int_{\partial D} f_*(n_a) dS$$

где f – свободная энергия единицы объема однородной по пространству смеси (определяет состав чистых фаз, которым соответствуют локальные минимумы f), k_{ab} – некоторая симметричная положительно определенная матрица, f_* – свободная энергия единицы площади поверхности ∂D , являющейся внешней границей области D . Предполагается суммирование по повторяющимся индексам. В **разделе 2.2** рассматриваются условия термодинамического равновесия многофазной многокомпонентной смеси со свободной энергией указанного вида. Исходя из того что в положении равновесия свободная энергия системы достигает минимума и вариация функционала F равна нулю, выводится следующее условие: $\Phi_a = const$ (для всего рассматриваемого объема),

где $\Phi_a \equiv \frac{\partial f}{\partial n_a} - k_{ab} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} n_b$ – обобщенный химический потенциал. Из постоянства

химического потенциала следует также условие механического равновесия в

виде: $\frac{\partial}{\partial x_i} \sigma_{ij} = 0$, здесь $\sigma_{ij} = -k_{ab} \frac{\partial n_a}{\partial x_i} \frac{\partial n_b}{\partial x_j} + \left(f + \frac{1}{2} k_{ab} \frac{\partial n_a}{\partial x_k} \frac{\partial n_b}{\partial x_k} - \Phi_a n_a \right) \delta_{ij}$ – тензор

статических напряжений в неоднородной по составу среде. Полученное выражение обобщает классическую формулу для давления в однородной (однофазной) среде.

В **разделе 2.3** формулируется полная система динамических уравнений в рамках механики сплошной среды с учетом найденных выше соотношений. Для каждого компонента смеси записывается уравнение неразрывности в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} n_a + \frac{\partial}{\partial x_i} I_{ai} = 0$$

где I_{ai} – потоки компонентов. Закон сохранения импульса записывается для среды в целом:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j - p_{ij}) = \rho g_i$$

Здесь v_i – среднемассовая скорость среды, $\rho = M_a n_a$ – плотность смеси (M_a – молярные массы компонент), p_{ij} – тензор внутренних напряжений, g_i – ускорение внешней массовой силы. Определяющие соотношения формулируются следующим образом:

$$p_{ij} = \sigma_{ij} + \tau_{ij}$$

где $\tau_{ij} = \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu_s \right) \frac{\partial}{\partial x_k} v_k \delta_{ij} + \mu_s \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$ – тензор вязких напряжений Навье-Стокса. Предполагается, что движение компонент определяется двумя процессами: переносом посредством поля среднemasсовой скорости и диффузией. Соответственно получаем:

$$I_{ai} = n_a v_i + Q_{ai}$$

Для диффузионных потоков принимается соотношение $Q_{ai} = -D_{ab} \frac{\partial}{\partial x_i} \Phi_b$, которое обобщает классический закон Фика. Выписанные уравнения представляют собой замкнутую систему. В конце раздела 2.3 для нее ставятся граничные условия, соответствующие зонам контакта флюида с внешними непроницаемыми стенками.

Раздел 2.4 посвящен проверке термодинамической согласованности полученной системы уравнений. Прямой расчет объемной диссипации приводит к выражению $\delta \equiv -\frac{dE}{dt} \Big|_V = -\int_G \left(Q_{ai} \frac{\partial \Phi_a}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) dV$, которое для выбранных определяющих соотношений гарантирует неотрицательность диссипации, что в изотермическом случае эквивалентно выполнению неравенства энтропии. Далее обсуждается вопрос о связи метода функционала плотности с теоремами, доказываемыми во многих курсах по механике сплошной среды, которые запрещают включать пространственные производные температуры или плотности в число параметров состояния. Показывается, что противоречия между методом функционала плотности и подобными теоремами нет, так как последние в своем доказательстве существенно опираются на так называемую «гипотезу о равноприсутствии», которой метод функционала плотности не подчиняется. «Гипотеза о равноприсутствии» предполагает, что все функции реакции среды (тензор напряжений, поток тепла, поток вещества, плотность свободной энергии и др.) зависят строго от одного и того же набора параметров, в то время как в методе функционала плотности, свободная энергия зависит от первых производных молярных плотностей, тензор напряжений – от первых и вторых, а диффузионные потоки – от третьих. Это обстоятельство выводит метод функционала плотности из-под действия указанных теорем.

В **разделе 2.5** приводится алгоритм задания параметров модели, связанных с материальными свойствами флюидов, на основе табличных данных, а также

описывается параболическая аппроксимация функции $f(n_a)$, которая использовалась в последующих расчетах. Обосновывается применимость такой аппроксимации в тех случаях, когда точное уравнение состояния системы, по которому можно было бы восстановить $f(n_a)$, не известно. Матрица k_{ab} , определяющая вклад градиентного члена, предполагается диагональной: $k_{ab} = k\delta_{ab}$. Коэффициент k однозначно фиксируется по заданному коэффициенту поверхностного натяжения.

Глава 3 посвящена численной реализации метода функционала плотности. В **разделе 3.1** описывается схема, применявшаяся для численного решения приведенной выше системы уравнений. Использовался метод конечных объемов на разнесенных сетках, обеспечивавший второй порядок аппроксимации по пространству и первый – по времени. Расчет производных по времени выполнялся по явной схеме, при этом устойчивость достигалась с помощью адаптивного временного шага. Выбор шага сетки по пространственным координатам определялся необходимостью гладкой аппроксимации межфазных фронтов и зависел от значений материальных параметров системы.

В **разделе 3.2** проводится проверка корректности численного алгоритма в однофазном случае, когда уравнения метода функционала плотности сводятся к уравнениям Навье-Стокса для вязкой слабо-сжимаемой жидкости. На сетках с различной дискретизацией выполнялся расчет двух тестовых задач, допускающих сравнение с аналитическими решениями: течение Пуазейля (течение в цилиндрической трубе круглого сечения) и обтекание сферы однородным ламинарным потоком. В обоих случаях наблюдалась сходимость по сетке к аналитическим профилям скорости.

В **разделе 3.3** приводятся результаты расчета тестовых двухфазных задач: о равновесии капли в объеме и капли на твердой поверхности, а также о распространении капиллярных волн. Численное моделирование показало, что независимо от начальной конфигурации в отсутствии внешнего силового поля капля, находящаяся в объеме жидкости, приобретает сферическую форму, а давление внутри нее возрастает по сравнению с окружающим в соответствии с формулой Лапласа. Аналогично, при моделировании равновесия капли, контактирующей с твердой поверхностью, наблюдалось установление угла смачивания, зависящего от поверхностного натяжения на стенке, в согласии с уравнением Юнга. Задача о распространении капиллярных волн решалась в

следующей постановке: на плоский межфазный фронт накладывалось гармоническое возмущение определенной длины волны и наблюдались возникающие колебания поверхности. При этом измеренный по численным данным период колебаний отличался не более чем на 5 % от теоретического значения, найденного из дисперсионного соотношения для капиллярных волн.

В **разделе 3.4** анализируются возможные подходы к постановке граничных условий на входе и выходе из канала при многофазном потоке. Продемонстрировано принципиальное отличие многофазного случая от однофазного при задании условия постоянства давления на выходе (стоке): в многофазном случае данное условие не может быть поставлено *локально* (то есть на выделенной границе расчетной области), вместо этого оно может использоваться только применительно к *среднему* давлению в некотором объеме. Кроме того, были предложены и сопоставлены два способа задания граничных условий на входном сечении канала: с прямым присвоением значений скорости и молярных плотностей, либо с добавлением некоторого количества вещества в граничные ячейки на каждом временном шаге. В численных экспериментах было установлено, что второй способ является более устойчивым, но при этом требует большего времени для установления стационарного режима течения.

В **главе 4** описанный выше численный метод применяется для изучения вязких эффектов при макроскопическом описании процесса фильтрации. В отличие от других глав диссертации, в данной главе рассматривается однофазное течение. Представленные результаты моделирования позволяют оценить роль вязких напряжений флюида с точки зрения континуальной теории фильтрации, а также служат дополнительным обоснованием корректности используемого численного метода. В **разделе 4.1** описывается предмет исследования, его научная проблематика и актуальность. Указывается на противоречивую роль вязкости в законе Дарси, который имеет следующий вид:

$$\bar{V} = -\frac{k}{\mu} \nabla P \quad (\bar{V} \text{ – скорость фильтрации, определяемая как отношение объемного}$$

расхода через некоторое сечение к его площади, μ – вязкость жидкости, ∇P – макроскопический градиент давления, k – проницаемость среды). Вязкость входит в данное уравнение подобно коэффициенту сопротивления, при этом скорость фильтрации определяется только скалярным полем давления, а девиаторная часть тензора напряжений флюида, соответствующая вязким напряжениям, опущена. Закон Дарси может быть легко обоснован, если

пористую среду представить в виде набора независимых капилляров, однако подобная модель становится неприменима в случае высокой пористости и связности порового пространства. Таким образом, возникает вопрос о пределе применимости закона Дарси для высокопористых сред. Данный предел может быть обнаружен по изменению профиля скорости фильтрации при течении в канале, заполненном пористой средой: плоский профиль, соответствующий закону Дарси, должен с увеличением пористости переходить в параболический профиль, соответствующий течению Пуазейля (в свободном канале).

В разделе 4.2 описывается постановка численных экспериментов по моделированию течения сквозь модельную пористую среду – решетку из сферических частиц – помещенную между непроницаемыми стенками (рис. 1). Исследуется профиль скорости фильтрации в зависимости от объемной доли твердой фазы, которая варьировалась за счет изменения периода решетки. Каждое значение скорости фильтрации находилось с помощью прямого осреднения микроскопического поля скорости по объему, содержащему 10 частиц (всего на сечение канала приходилось 100 частиц). На рис. 2 приведены примеры полученных микроскопических распределений скорости в пристеночной области, на рис. 3 показаны соответствующие им профили скорости фильтрации. Отклонения от плоского профиля, который следует из закона Дарси, служат индикатором макроскопических проявлений вязких свойств. В рассмотренных случаях такие отклонения возникали при пористости $0.97 \div 0.98$ (рис. 3). Кроме того, рассчитывались и сравнивались значения средней вязкой диссипации на микроуровне, $\delta_v = \frac{\mu}{2} \int \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right)^2 dV$, и диссипации фильтрации на макроуровне, $\delta_f = -\bar{V} \cdot \nabla P$. Было установлено, что для всех изученных решеток соотношение $\delta_f / \langle \delta_v \rangle$ близко к единице.

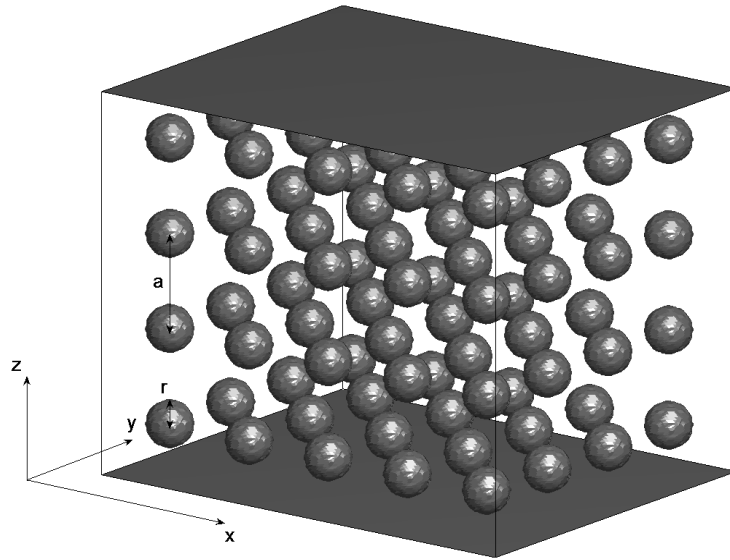


Рис. 1. Идеализированная пористая среда – кубическая решетка из сферических частиц – в плоском канале.

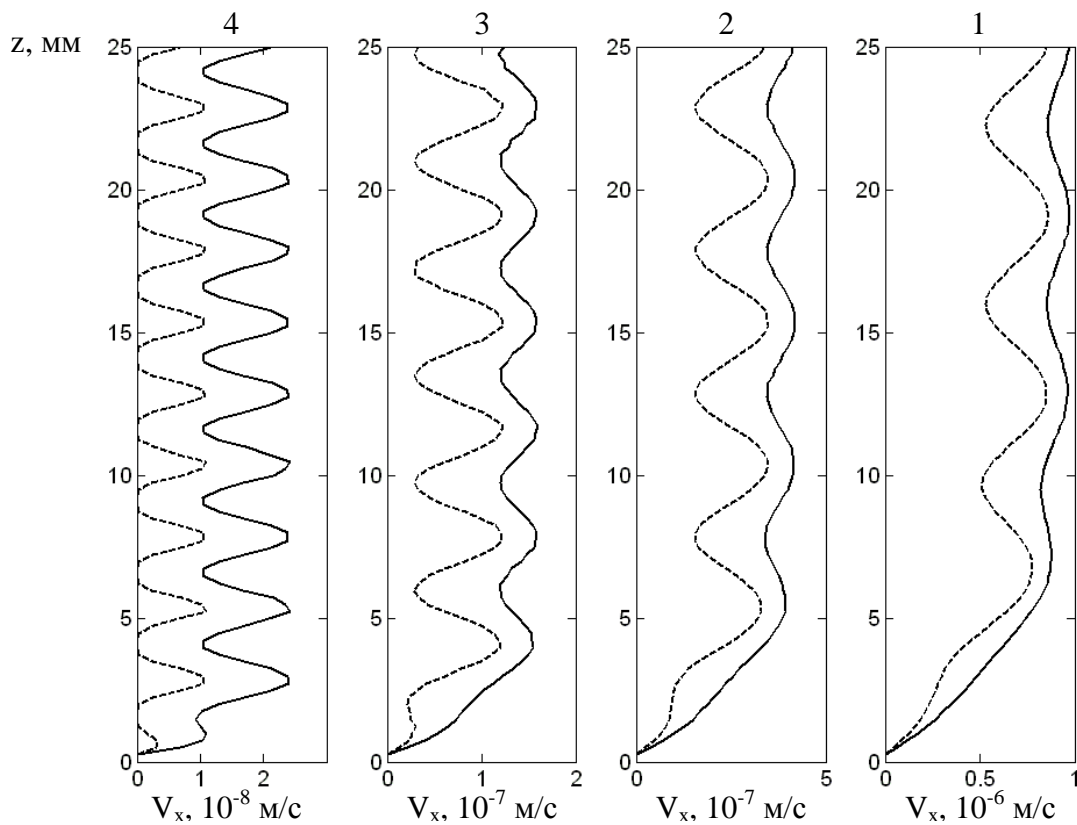


Рис. 2. Минимальное (пунктир) и максимальное (сплошная линия) значения продольной компоненты скорости в пристеночном слое для решеток с пористостью 0.98 (1), 0.97 (2), 0.92 (3), 0.73 (4).

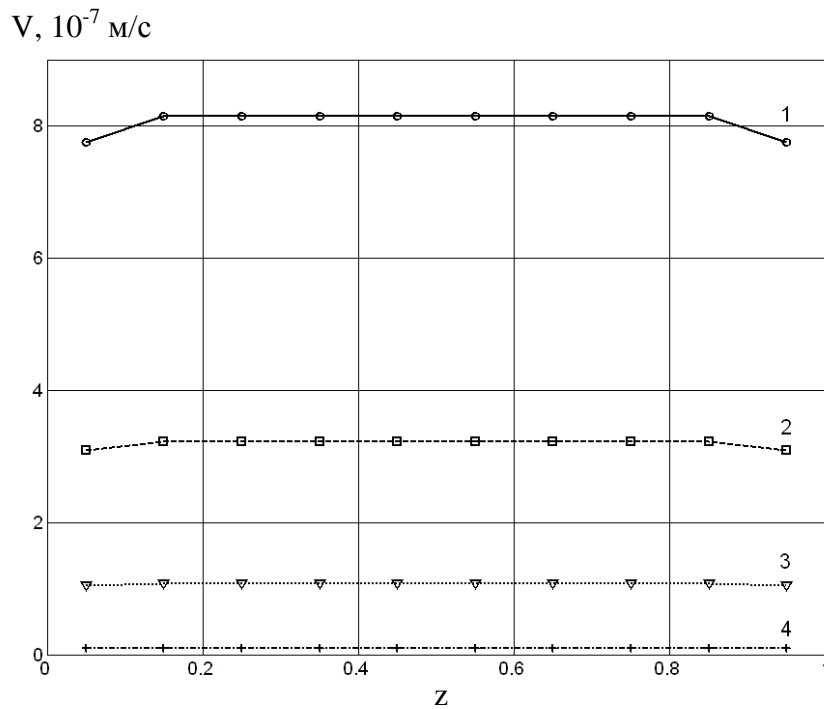


Рис. 3. Профили скорости фильтрации для решеток с пористостью 0.98 (1), 0.97 (2), 0.92 (3), 0.73 (4). Градиент давления был фиксирован для всех случаев.

В разделе 4.3 на основании полученных численных данных делаются обобщающие выводы по четвертой главе. Отмечается, что вплоть до пористости 0.9 осредненное поле скорости соответствует идеальной жидкости (плоский профиль), хотя протекающий флюид является вязким. Несмотря на высокую связность порового пространства в рассмотренных случаях, гидродинамическая связь была недостаточна для передачи возмущения, создаваемого внешними непроницаемыми стенками, на заметное, с макроскопической точки зрения, расстояние. Причина этого заключается в преобладании вязкой диссипации на контакте жидкость – твердое тело над вязкой диссипацией в объеме жидкости, что было подтверждено прямым расчетом величины $\delta_f / \langle \delta_v \rangle$. Таким образом была обоснована применимость закона Дарси, не учитывающего девиаторную часть тензора напряжений флюида, вплоть до указанных значений пористости.

Глава 5 посвящена исследованию двухфазного течения в микроканале квадратного сечения $0.1 \times 0.1 \text{ мм}^2$ с гидродинамической фокусировкой (рис. 4). Целью является проведение серии численных экспериментов с помощью метода функционала плотности, воспроизводящих условия ранее выполненных лабораторных опытов, и сопоставление их результатов. В разделе 5.1 описываются подробности экспериментальной работы, взятой за основу: схема

установки, свойства жидкостей, использовавшихся в опытах, наблюдавшиеся режимы течения и корреляционные зависимости для геометрических характеристик (таких как диаметр жидкой нити, критическая длина, размер капель). Авторами было предложено картировать выделенные режимы в зависимости от значений капиллярных чисел для двух жидкостей (капиллярное число характеризует отношение вязко-инерционных сил к поверхностным: $Ca \equiv \frac{\mu V}{\gamma} = \frac{\mu Q}{\gamma h^2}$, μ – вязкость флюида, V – характерная скорость, γ – поверхностное натяжение, Q – объемный расход, h – ширина канала). Для каждой пары жидкостей проводились эксперименты с различными скоростями закачки, и строилась карта режимов на плоскости Ca_1, Ca_2 (рис. 5).

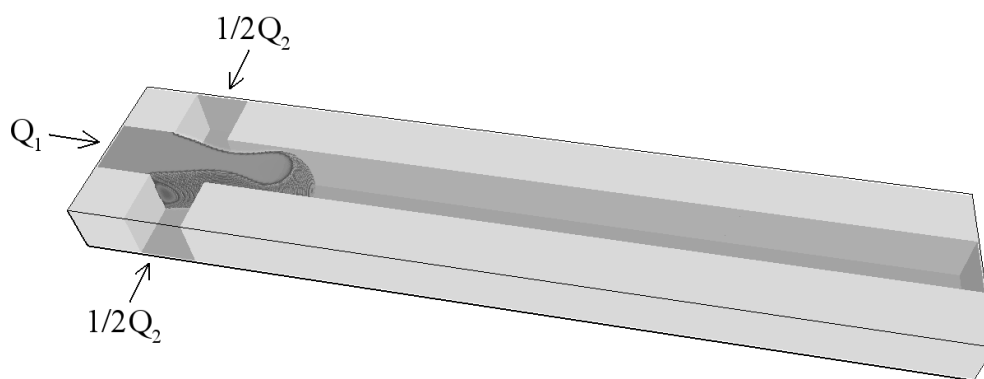


Рис. 4. Двухфазное течение в микроканале с гидродинамической фокусировкой: более вязкая жидкость закачивается непосредственно в основной канал, менее вязкая подводится по двум боковым каналам, подходящим под углом 90° (Q_1, Q_2 – объемные расходы жидкостей).

В разделе 5.2 излагаются подробности постановки основной серии из 19 численных экспериментов. Расчеты проводились на двумерной сетке с шагом 2 мкм, скорость закачки жидкостей варьировалась от 0.003 до 3 м/с, поверхностное натяжение составляло 26 мН/м. Значения всех остальных параметров модели, использованные в расчетах, указаны в тексте диссертации. Затем приведены примеры полученных численно решений, показывающие, что все режимы течения, наблюдавшиеся лабораторно, воспроизводятся при моделировании. В разделе 5.3 строится карта режимов на основе результатов моделирования (рис. б) и сравнивается с лабораторной картой. Переход между нитеобразным и пленочным режимами в расчетах происходил непрерывным образом, поэтому граница между ними определялась достаточно условно. Для

прочих режимов топология границ на численной и лабораторной картах совпадает, что подтверждает корректное воспроизведение закономерностей смены режимов. При этом конкретное положение границ на картах несколько отличается.

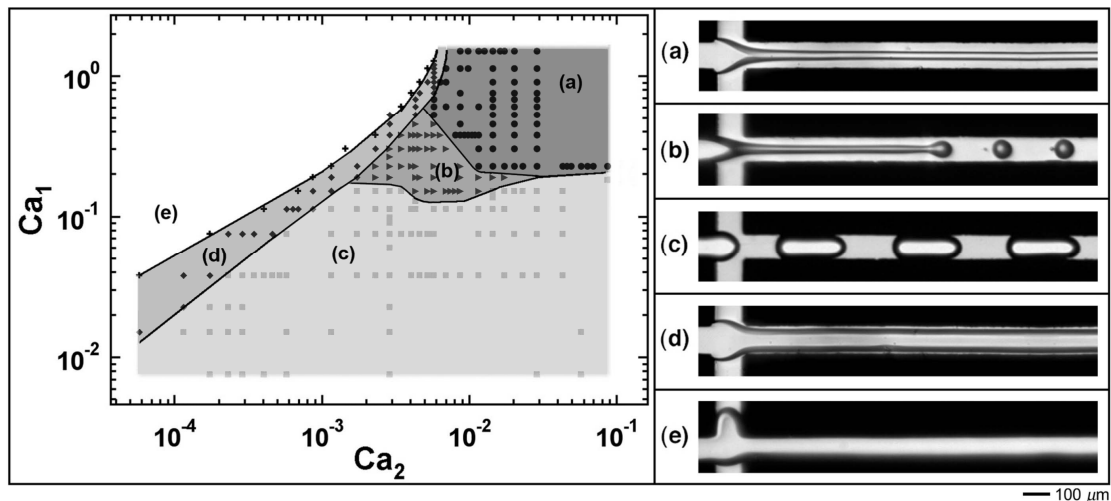


Рис. 5. Карта режимов течения (слева) и их классификация (справа): нитеобразное течение (а), струйное течение (б), капельное течение (с), пленочное течение (д), вязкое вытеснение (е). Заимствовано из статьи: *Cubaud T., Mason T. G. Capillary threads and viscous droplets in square microchannels. // Phys. Fluids., V. 20, Issue 5, 2008.*

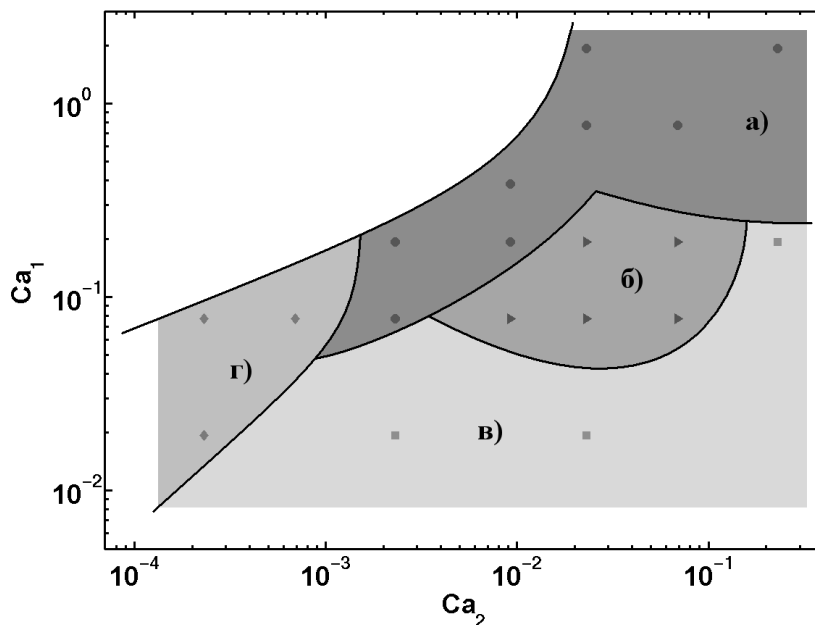


Рис. 6. Карта режимов течения в зависимости от капиллярных чисел, построенная по результатам моделирования: нитеобразное течение (а), струйное течение (б), капельное течение (в), пленочное течение (г).

В работе выделяются следующие возможные причины расхождений: несовпадение некоторых параметров жидкостей в лабораторных и численных экспериментах (в частности, из-за технических ограничений на допустимый шаг по времени в расчетах соотношение вязкостей было ограничено значением 50, в то время как в лабораторных опытах $\mu_1/\mu_2 = 264$); недостаточное разрешение расчетной сетки для воспроизведения мелкомасштабных деталей (тонких пленок, перемычек, капель малого диаметра); двумерная постановка задачи вместо трехмерной; различия в граничных условиях на входе и выходе из канала, которые не были известны точно.

В разделе 5.4 проводится сопоставление геометрических характеристик полученных численно течений с лабораторными корреляциями. Для нитеобразного режима на основе экспериментальных данных была установлена следующая зависимость диаметра жидкой нити ε от объемных расходов флюидов: $\varepsilon/h \propto (Q_1/Q_2)^\alpha$, $\alpha=0.5$. Построенная по результатам моделирования корреляция имеет аналогичный вид с показателем $\alpha=0.62$. Для струйного и капельного режимов не представлялось возможным провести количественное сравнение лабораторных и численных корреляций в виду ограниченности данных для построения последних. Однако качественное сопоставление было выполнено для таких параметров как критическая длина (расстояние до точки отрыва капель при струйном течении) и продольный размер капель. Изменение указанных характеристик при варьировании скоростей закачки жидкостей происходило в согласии с экспериментально установленными зависимостями.

В разделе 5.5 представлены результаты контрольных численных экспериментов, выполненных в трехмерной постановке. Эти эксперименты проводились для двух произвольно выбранных случаев с целью проверки адекватности двумерного моделирования. Были рассмотрены два варианта задания условий смачиваемости на верхней и нижней стенках канала: нейтральная смачиваемость (нулевое поверхностное натяжение для обоих флюидов), и преимущественная смачиваемость для жидкости, подводимой по боковым каналам. В первом варианте не наблюдалось существенных различий между трехмерным и двумерным численными решениями. Во втором варианте картина трехмерного течения принципиально менялась по сравнению с двумерным расчетом: в одном случае устанавливался режим течения, не подпадающий под принятую классификацию (вместо пленочного течения, жидкость, подводимая по боковым каналам, текла в виде отдельных капель, перемещающихся по стенкам), во втором случае имел место сложный

переходный процесс с образованием таких структур, как «капля в капле». Устойчивость полученных решений не анализировалась, поэтому нельзя сделать вывод о возможности лабораторного наблюдения описанных течений. Однако, безотносительно к вопросу об устойчивости, они демонстрируют существенное влияние свойств смачиваемости поверхности стенок на процесс двухфазного микротечения.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

1. Все режимы двухфазного течения в микроканале с гидродинамической фокусировкой, выделенные по данным лабораторных наблюдений, были воспроизведены в численных экспериментах на основе метода функционала плотности. При этом не производилось дополнительной адаптации модели под каждый конкретный режим, а только варьировались объемные расходы закачиваемых жидкостей, в соответствии с постановкой лабораторных экспериментов.

2. Построенная по данным численных экспериментов карта режимов на плоскости капиллярных чисел по своей структуре близка к лабораторной, что доказывает правильное воспроизведение базовых закономерностей при переходе одного режима в другой. Анализ расхождений между положениями границ на численной карте и на лабораторной показывает, что они связаны скорее с особенностями постановки конкретных численных экспериментов и некоторой неполнотой информации о лабораторной установке, а не с недостатками самого метода моделирования.

3. Новым, с физической точки зрения, результатом является демонстрация влияния свойств смачиваемости стенок канала как на количественные, так и на качественные характеристики формирующегося течения. В том случае, когда внешние (горизонтальные) стенки канала обладали преимущественной смачиваемостью для одной из жидкостей, картина течения существенно менялась по сравнению со случаем нейтральной смачиваемости. При этом наблюдались течения, которые не могут быть отнесены ни к одному из ранее выделенных режимов. Процесс установления таких течений мог включать сложную динамику межфазных фронтов и образование таких структур, как «капля в капле».

4. Сопоставление измеренных на основе численного моделирования геометрических характеристик течения с лабораторными корреляциями для

этих величин показывает их качественное согласие. Для нитеобразного режима течения также было установлено хорошее количественное согласие, для остальных же режимов набранная статистика была не достаточна для количественного сравнения.

5. В части теоретического обоснования метода функционала плотности настоящая работа дополняет указанную выше монографию, так как здесь более детально обсуждается вопрос о термодинамической согласованности (пусть и для более узкого класса систем), что представляется важным с методической точки зрения.

6. Существенным результатом данной работы является анализ принципиальных различий при постановке граничных условий в однофазном и многофазном случаях. Потказано, что для многофазного потока условие постоянства давления на стоке нельзя использовать локально (то есть на выделенной границе расчетной области), допустимо только требовать постоянства среднего давления в некотором объеме. Также были предложены и изучены два подхода к заданию граничных условий на входе в канал.

7. Исследован вопрос о макроскопических проявлениях вязких эффектов при фильтрационном течении. Численные эксперименты на модельных пористых средах показали преобладание вязкой диссипации на границе жидкость–твердое тело над вязкой диссипацией в объеме жидкости вплоть до пористости 0.9. Тем самым была обоснована применимость закона Дарси, в котором не учитывается девиаторная часть тензора напряжений флюида, для высокопористых сред.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Кудинов И.В. Изучение линейного и нелинейного режимов фильтрации с помощью численного моделирования // Труды VIII международ. научно-практич. конф. Геомодель (г. Геленджик, 17–22 сентября 2006), с. 236–237
2. Кудинов И.В., Борисова Е.А. Исследование фильтрационных свойств пористых сред с помощью численного моделирования // Труды 49-й науч. конф. МФТИ (г. Долгопрудный, ноябрь 2006), Аэрофизика и космические исследования, с. 180–181
3. Кудинов И.В., Борисова Е.А. Численное моделирование течения однофазной жидкости через упаковку жестких частиц // Труды XV

- международ. конф. по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (г. Алушта, Украина, 25–31 мая 2007), с. 310–311
4. Кудинов И.В. Изучение фильтрационных свойств пористых сред с помощью численного моделирования // Сб. тез. докл. научно-технич. студенческой конф. SPE (г. Тюмень, 18–19 апреля 2007), с. 53–58
 5. Кудинов И.В. Современные подходы к моделированию течений многофазных жидкостей // Труды 50-й науч. конф. МФТИ (г. Долгопрудный, ноябрь 2007), Ч. III, Т. 2, с. 73–75
 6. Кудинов И.В., Евсеев Н.В. Влияние соотношения вязкостей флюидов на кривые фазовых проницаемостей при двухфазной фильтрации. Результаты численных экспериментов // Труды 51-й науч. конф. МФТИ (г. Долгопрудный, ноябрь 2008), Ч. III, Т. 1, с. 162–165
 7. Dinariev O.Yu., Kudinov I.V., Evseev N.V. Modeling interfacial phenomena in multicomponent mixtures using gradient terms introduced in free energy // Proc. of XXIV Intern. conference “Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter” (Elbrus, Russia, 1–6 March 2009), p. 187–188
 8. Kudinov I.V., Evseev N.V. Role of viscosity in continuum mechanics approach to describe flow through porous media // Proc. of intern. summer school-conference “Advanced Problems in Mechanics” (St. Petersburg, Russia, 30 June – 5 July 2009), CD, p. 413–420
 9. Kudinov I.V., Evseev N.V. Density functional simulation of two-phase flow in a square microchannel with hydrodynamic focusing // Summer school “Role of Interfacial Area in Two-Phase Flow and Transport in Porous Media” (Utrecht, The Netherlands, 19–24 July 2009), List of abstracts, p. 1
 10. Кудинов И.В., Евсеев Н.В. Моделирование двухфазного течения в микроканале с помощью метода функционала плотности // Труды 52-й науч. конф. МФТИ (г. Долгопрудный, ноябрь 2009), Ч. III, Т. 2, с. 47–49
 11. **Евсеев Н.В., Кудинов И.В. К вопросу о вязких эффектах при макроскопическом описании течения через пористую среду // Изв. РАН. МЖГ, 2009, № 3, с. 120–128**
 12. **Кудинов И.В., Евсеев Н.В. Моделирование двухфазного течения в микроканале с помощью метода функционала плотности // Мат. Моделирование, 2010, № 8, с. 83–96**