

На правах рукописи



Прокопьев Сергей Анатольевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНО- И ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ
БИНАРНЫХ И ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ЖИДКИХ СРЕД**

1.1.9 – Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Пермь – 2022

Работа выполнена в Институте механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук – филиале Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель: **Любимова Татьяна Петровна**, доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Демёхин Евгений Афанасьевич**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры математики и информатики ФГБОУ ВО "Финансовый университет при правительстве РФ (Краснодарский филиал)" (г. Краснодар);

Полежаев Денис Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и технологии ФГБОУ ВО "Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет", (г. Пермь).

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша Российской академии наук", г. Москва.

Защита состоится 03 марта 2022 г. в 10:30 часов на заседании диссертационного совета Д 004.036.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук (филиал – Институт механики сплошных сред УрО РАН) по адресу: 614013, г. Пермь, ул. Академика Королёва, 1; тел: (342) 237-84-61; факс: (342) 237-84-87; сайт: www.icmm.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук.

Автореферат разослан «_____» января 2022 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, доцент

 / А.Л. Зуев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность и степень разработанности темы исследования. Неоднородные по составу вещества встречаются во многих природных и технологических процессах. При этом между такими 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 среду.

Как при теоретическом, так и при экспериментальном исследовании гетерогенные и гомогенные среды требуют значительно различающихся подходов. Большую разницу при их изучении вносит наличие межфазной границы раздела (для гетерогенных сред), что влечет за собой необходимость учета различных капиллярных 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 и совершенствование уже имеющихся моделей является актуальной задачей.

Кроме этого, до сих пор остается много нераскрытых вопросов, 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 сил – 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, связанными с учетом межфазной границы, однако возникает ряд иных осложняющих факторов.

Одним из таких факторов является конечная теплопроводность массивов, окружающих исследуемую жидкость. В большинстве работ рассматривается случай о так называемых высокотеплопроводных границ, 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 изучении задач конвекции важно знание коэффициентов термодиффузии, определение которых в случае многокомпонентных смесей представляет особую сложность как для экспериментального, так и для численного исследования. Значения коэффициентов определяются с некоторой погрешностью, при этом в большинстве случаев небольшая разница в значениях измеренных коэффициентов приводит лишь к некоторым количественным различиям 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 в условиях заданного теплового потока на границах (при малой теплопроводности границ). 3) Выявить особенности поведения трехкомпонентной смеси в условиях, когда коэффициент суммарного отношения разделения близок к нулю. Для достижения этих целей необходимо было решить следующие **задачи**:

- Исследовать динамику вытеснения в капилляре и капиллярных трубках для несмешивающихся и смешивающихся систем при различных значениях поверхностного натяжения и параметрах смешения компонентов.
- Исследовать задачу о неустойчивости Релея-Тейлора для смешивающихся жидкостей 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 трехкомпонентной смеси при значениях суммарного отношения разделения, близких к нулю, когда система находится на границе устойчивости.

Методология и методы исследования. Изучение двухфазных сред проводилось методом фазового поля. Для исследования конвекции трехкомпонентных смесей использовались уравнения термоконцентрационной конвекции с эффектом Соре в приближении Буссинеска. Линейные задачи устойчивости решались численно методом пристрелки. Для решения нелинейных задач применялся метод конечных разностей. Для прямого численного моделирования использовались два подхода: 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:

1. Показано, что с помощью метода фазового поля можно дать эффективную и точную оценку капиллярного давления при вытеснении одной жидкости другой в капилляре. Полученные характеристики вытеснения хорошо согласуются с известными из литературы аналитическими формулами в предельных случаях.
2. Изучение динамики вытеснения в случае смешивающихся систем показало, что, вопреки мнению ряда исследователей, считающих неравновесное капиллярное давление незначительным фактором, неравновесные капиллярные эффекты играют заметную роль не только на начальном этапе эволюции системы. Игнорирование данного эффекта может привести к снижению точности в оценках характеристик вытеснения двухфазных систем.
3. Выполнено моделирование процесса вытеснения в матрице капилляров (системе из однородно распределенных капилляров, пересекающихся под прямым углом). Впервые проведен расчет для больших по сравнению с другими исследованиями матриц: показано, что размер матрицы 10×10 достаточен, чтобы характеристики течения сходились к предельным значениям.
4. Впервые исследована неустойчивость Релея-Тейлора для смешивающихся жидкостей с учетом капиллярных эффектов при условии, что система первоначально не находится в состоянии термодинамического равновесия (начальное значение концентрации не является равновесным).
5. При изучении конвекции трехкомпонентных смесей впервые рассмотрен случай, когда теплопроводность жидкости значительно больше теплопроводности окружающих ее массивов (что эквивалентно заданию теплового потока на границах). Найдены количественные и качественные отличия от случая идеально теплопроводных границ.
6. Исследована устойчивость механического равновесия трехкомпонентной смеси в условиях, когда значение суммарного отношения разделения близко к нулю (система находится на границе устойчивости).

Практическая и теоретическая значимость. Полученные результаты по изучению капиллярных эффектов в гетерогенных средах могут иметь практическое применение в задачах о вытеснении одной жидкости другой, что, например, встречается при добыче углеводородов путем их прокачки водой под давлением. Для решения задач, рассматриваемых в диссертации, разработана эффективная параллельная программа расчета на графических процессорах, которая может использоваться для решения других задач механики жидкости и газа, например, моделирования поведения эмульсий, дисперсных сред, различного рода неустойчивостей (неустойчивость Кельвина-Гельмгольца и пр.), всплытия/погружения капли и др. Постановка задачи конвекции трехкомпонентной смеси в условиях заданного теплового потока через границы

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. Они 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 в условиях, когда в начальный момент времени рассматриваемые жидкости не находятся в состоянии термодинамического равновесия.
3. Результаты численного исследования задачи конвекции трехкомпонентной смеси с эффектом Соре в плоском слое с заданным тепловым потоком на границах.
4. Результаты численного моделирования поведения смеси толуол-метанол-циклогексан со значением суммарного отношения разделения, близким к нулю, в замкнутой полости, нагреваемой 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. Проводился 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 Meetings 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, руководитель семинара Т.П. Любимова (Пермь, 2018, 2020, 2021, номера заседаний: 1506, 1537, 1550), научный семинар в Кубанском государственном университете (2018).

Публикации. Материалы диссертации изложены в 22 работах, включая 8 работ в журналах из списка ВАК [1-8], которые также индексируются в международных базах данных Scopus и Web of Science.

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 глав, заключения, списка литературы (195 наименований) и приложения. Объем диссертации составляет 210 страниц, включая 79 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность диссертационной работы, определены цели и задачи исследования, продемонстрированы научная новизна и достоверность результатов, описана их практическая и теоретическая значимость.

Глава 1 посвящена исследованию динамики гетерогенных двухфазных систем методом фазового поля.

В разделе 1.1 дается литературный обзор, в котором описывается история развития и текущее состояние идей по изучению двухфазных систем с межфазной границей. Приводится история развития теории фазового поля, дается детальное описание данной теории, обосновываются ее преимущества по сравнению с другими подходами.

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. Уравнения теории фазового поля в безразмерном виде записываются следующим образом^{1,2}:

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

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

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

$$\mu = \frac{\partial f}{\partial C} = \frac{\partial f_0}{\partial C} - \operatorname{Cn} \nabla^2 C. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{v}, p, C, μ – скорость, давление, концентрация и химический потенциал соответственно, f – полная функция свободной энергии, f_0 – «классическая» часть функции свободной энергии без учета капиллярных сил. Уравнения (1)-(4) содержат следующие безразмерные параметры – числа Рейнольдса (Re), Пекле (Pe), Маха (M), Кана (Cn):

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

где ρ_*, η_*, μ_* – характерные значения плотности, динамической вязкости и химического потенциала, d – характерный размер системы, V_{max} – характерная (максимальная) скорость, α, ϵ – коэффициенты мобильности и капиллярности.

Система (1)-(4) включает в себя уравнения Навье-Стокса ((1)-(2)) для несжимаемой изотермической жидкости, где в уравнении движения присутствует дополнительный член, $M^{-1} C \nabla \mu$, ответственный за вклад в скорость капиллярных эффектов. При записи уравнений (3) учтено, что движущей силой процесса диффузии является градиент химического потенциала, который определяется функцией свободной энергии f . Одной из основных особенностей метода фазового поля является предположение, что функция свободной энергии зависит не только от концентрации (состава системы), но и от градиентов концентрации. Данная функция имеет следующий вид: $f = f_0(C) + \frac{\operatorname{Cn}}{2} (\nabla C)^2$.

¹ Lowengrub J. and Truskinovsky L. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1998. – Vol. 454. – Pp. 2617-2654.

² 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.

Градиентное слагаемое $\frac{Cn}{2}(\nabla C)^2$ отвечает за капиллярные эффекты, $f_0(C)$ – «классическая» функция свободной энергии, зависящая только от концентрации. Функция $f_0(C)$ обычно имеет вид двухъямного потенциала (см. рис. 1): в рассматриваемой системе физические значения концентрации изменяются от -0.5 до 0.5 . Предельные значения ± 0.5 соответствуют чистым первой и второй фазам, при этом данные значения могут и не являться равновесными. Равновесные значения C определяются минимумами функции f_0 – подбирая вид этой функции, можно задать термодинамику смешения. В диссертации в большинстве случаев используется функция $f_0 = AC^2 + C^4$ (рис. 1 штриховая кривая), где A – параметр, пропорциональный температуре системы, он также задает равновесные значения концентрации $C_{eq} = \sqrt{-A/2}$. Значения $A > 0$ соответствуют однофазной гомогенной системе (компоненты полностью растворимы).

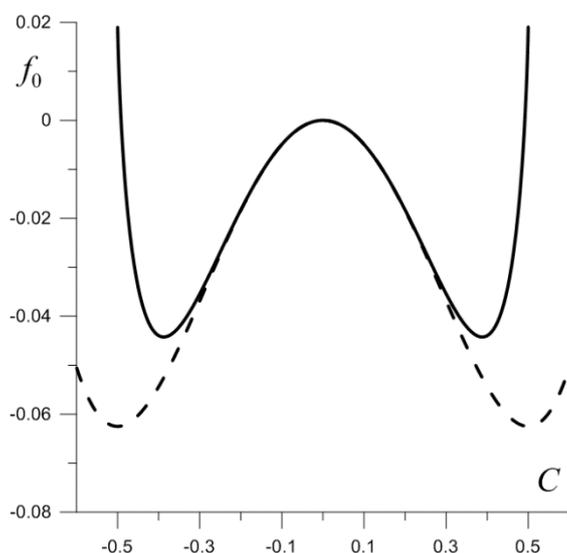


Рисунок 1. Разные варианты вида функции $f_0(C)$.

В разделе 1.2 с помощью метода фазового поля изучается динамика вытеснения одной жидкости другой в капиллярных трубках. Рассматривается несколько задач: 1) вытеснение несмешивающихся жидкостей в одиночном капилляре, 2) вытеснение смешивающихся жидкостей в одиночном капилляре с неравновесным капиллярным давлением, 3) вытеснение в матрице однородно распределенных капилляров.

Капилляр моделируется двухмерным слоем, в начальный момент времени одна жидкость насыщает капилляр, вторая прокачивается под постоянным перепадом давления с левого конца капилляра.

Обнаружено, что возможны два качественно различных сценария вытеснения (см. рис. 2). В случае малых капиллярных сил ($M = 0.01$) фронт вытеснения имеет пальцеобразную форму, профиль скорости течения лишь

незначительно отклоняется от течения Пуазейля вблизи границы раздела. Во втором случае ($M = 0.0001$) капиллярные эффекты более существенны, и вытеснение происходит поршнеобразным способом.



Рисунок 2. Вытеснение одной жидкости другой в капилляре для несмешивающихся систем, $Cn = 4 \cdot 10^{-4}$, $Re = 10^4$, $Re = 1$, $A = -0.5$ в момент времени $t = 5$, длина капилляра $L_x = 6$; слева: $M = 0.01$, справа: $M = 0.0001$.

Ряд полученных в расчетах характеристик течения согласуется с известными аналитическими выражениями. Расход жидкости согласуется с формулой Уошборна: $Q = Re \cdot (12L_x)^{-1}(\Delta p - p_c)$, где $\Delta p = 8L_x/Re$ – заданный перепад давления, p_c – капиллярное давление, L_x – длина капилляра, Q – расход жидкости. Величина Δp и коэффициент «12» подобраны для удобства, чтобы в предельном случае течения Пуазейля максимум скорости V_{max} был равен 1.

Хорошее согласие с аналитическими формулами получается и для величины капиллярного давления. Например, для случая на рис. 2 при $M = 0.0001$ безразмерное капиллярное давление $p_c \approx 28$, полученное численно из поля давления, близко к значению капиллярного давления $p_L \approx 26$, полученному из закона Лапласа (при этом значения коэффициента поверхностного натяжения и кривизны находятся численно с использованием отдельного алгоритма, который не зависит от давления). Таким образом, теория фазового поля дает хороший метод оценки капиллярного давления.

Результаты моделирования вытеснения одной жидкости другой в случае смешивающихся систем (рис. 3) показали, что неравновесное капиллярное давление для таких систем быстрее всего убывает на начальной стадии, однако при этом не падает до нуля. Таким образом, при рассмотрении динамики вытеснения в капиллярах явление неравновесного капиллярного давления является важным и существенным, и данным эффектом нельзя пренебрегать.

Капиллярное давление является сдерживающим фактором для скорости течения в капилляре, максимум скорости достигается в пределе однофазного течения с нулевым капиллярным давлением (течение Пуазейля), что реализуется при больших значениях параметра A в функции свободной энергии $f_0 = AC^2 + C^4$ (A задает степень смешения компонентов, т.е. равновесное значение концентрации). Минимальное физически релевантное значение $A = -0.5$, что соответствует полностью несмешивающимся системам. Было обнаружено, что максимальное значение капиллярного давления (минимальная скорость вытеснения) достигается не при $A = -0.5$, а при значении A , немного превышающем данное значение (см., рис. 3: $A = -0.3$, бирюзовые линии).

Данный эффект объясняется следующим образом. Как следует из закона Лапласа, капиллярное давление пропорционально произведению коэффициента поверхностного натяжения на кривизну границы: $p_L = \sigma \cdot \kappa$. С увеличением A величина коэффициента поверхностного натяжения уменьшается, мениск сильнее вытягивается, что приводит к его заострению – кривизна поверхности κ при этом возрастает. При определенных параметрах кривизна κ увеличивается на большую величину, чем уменьшается коэффициент поверхностного натяжения σ , и капиллярное давление, таким образом, уменьшается, что приводит к более медленному вытеснению. При дальнейшем увеличении A значение σ начинает уменьшаться более существенно, и капиллярное давление также уменьшается.

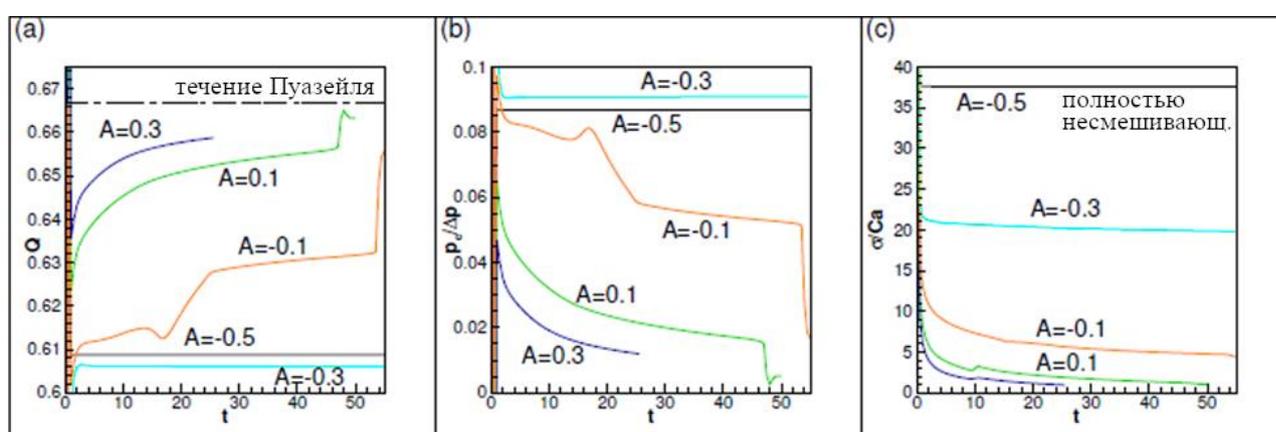


Рисунок 3, Зависимость от времени расхода (а), отношения капиллярного давления к перепаду давлений между концами (б), коэффициента поверхностного натяжения (с). Параметры: $Cn = 10^{-4}$, $Re = 1$, $M = 6.25 \cdot 10^{-5}$, $Pe = 300$, $L_x = 40$.

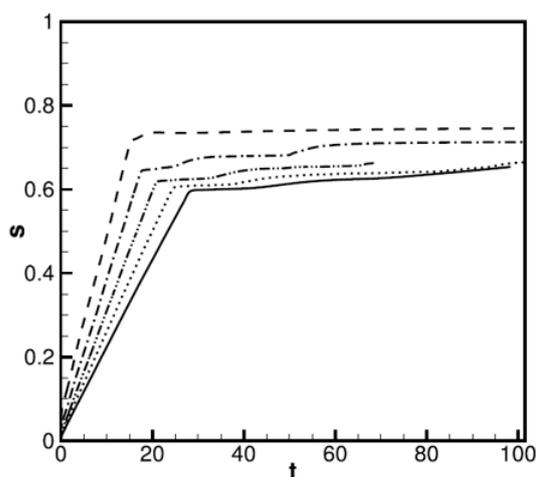


Рисунок 4, насыщенность среды, размер матрицы капилляров: 2×2 (штриховая линия), 3×3 (штрихпунктирная), 4×4 (штрихпунктирная с двумя точками), 5×5 (пунктирная), 6×6 (сплошная). Параметры: $A = -0.5$, $Cn = 10^{-4}$, $Re = 1$, $M = 2.5 \cdot 10^{-4}$, $Pe = 10^4$.

Моделирование для сети капилляров показало, что вытеснение в системе из равномерно распределенных капиллярных трубок качественно повторяет все особенности вытеснения в одиночном капилляре. В частности, обнаружено, что

уравнение Уошборна также хорошо согласуется с численными расчетами и в случае сети капилляров. При увеличении размеров матрицы характеристики течения сходятся к некоторым предельным значениям (рис. 4).

В разделе 1.3 посвящен неустойчивости Релея-Тейлора. Приводится обзор состояния проблемы. В диссертации численно исследуется задача о неустойчивости Релея-Тейлора при наличии смешивающейся границы раздела, при этом система в начальный момент времени не находится в состоянии термодинамического равновесия (начальное значение концентрации не является равновесным). Изучается как влияние диффузии на развитие неустойчивости Релея-Тейлора, так и влияние динамики развития неустойчивости на диффузию (перемешивание компонентов).

На рис. 5 приведены зависимости от времени средней концентрации одной из фаз (что характеризует степень смешения компонентов). Сплошной линией показан случай, когда более тяжелая жидкость располагается поверх легкой, после чего наблюдается развитие неустойчивости, и в конечном счете две фазы меняются местами: легкая жидкость – вверху, тяжелая – внизу. Для сравнения пунктирной линией показан чисто диффузионный процесс в случае, когда в начальный момент легкая жидкость находится поверх тяжелой. Видно, что развитие неустойчивости Релея-Тейлора способствует существенной интенсификации процесса диффузии.

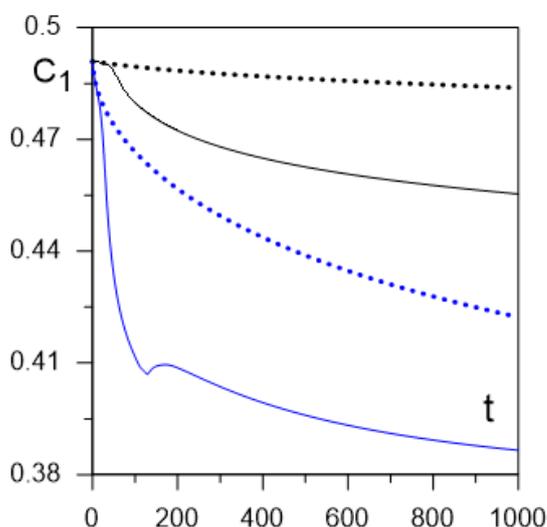


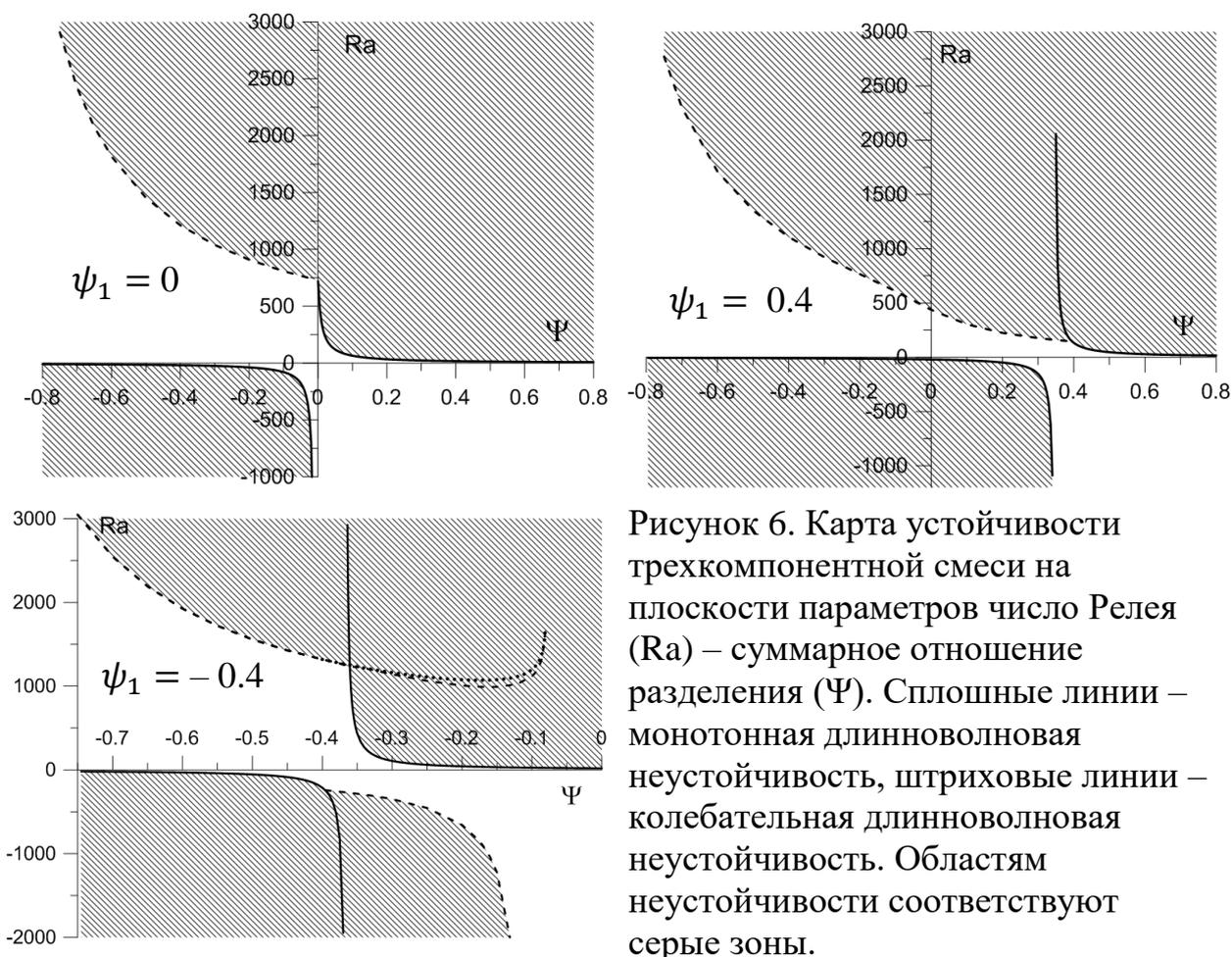
Рисунок 5. Зависимость от времени средней концентрации в одной из фаз. Черные линии – $Re = 10^7$, синие линии – $Re = 10^5$. Сплошные линии соответствуют задаче о неустойчивости Релея-Тейлора, пунктирные линии – чисто диффузионному процессу.

Глава 2 посвящена исследованию конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Сорэ.

В разделе 2.1 приводится литературный обзор, в котором описывается состояние исследований конвекции однокомпонентных и многокомпонентных смесей. Дается обоснование и актуальность задач, рассматриваемых в разделах **2.2** и **2.3** диссертации. Приводится описание модели и методов, используемых при численном решении исследуемых задач.

В разделе 2.2 описываются результаты исследования устойчивости и надкритических режимов конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в горизонтальном слое с заданным тепловым потоком на верхней и нижней границах. Рассматривалась характерная жидкая смесь со следующими параметрами: число Прандтля $Pr = 10$, числа Шмидта $Sc_1 = 100$, $Sc_2 = 1000$ при трех значениях отношения разделения одного из компонентов ψ_1 : $\psi_1 = 0, -0.4, 0.4$.

Линейная задача устойчивости решалась методом пристрелки. Получены карты устойчивости на плоскости параметров (Ra, Ψ) , где Ra – число Релея, которое, в частности, отвечает за величину нагрева слоя; Ψ – суммарное отношение разделения, которое отвечает за эффект термодиффузии. Карты устойчивости представлены на рис. 6: имеются как монотонные моды неустойчивости (сплошные линии), так и колебательные моды (штриховые линии).



Т.П. Любимовой и Е.С. Садиловым получены аналитические формулы для границ длинноволновых монотонной и колебательной неустойчивостей [5]. Результаты длинноволнового анализа и численных расчетов совпадают. Численно обнаружено, что во всех случаях наиболее опасной является именно

длинноволновая неустойчивость. Случай $\psi_1 = 0$ соответствует частному случаю бинарной жидкости. Карты устойчивости трехкомпонентных смесей ($\psi_1 \neq 0$) подобны случаю бинарной системы, но наблюдается сдвиг полученных кривых по оси Ψ на величину, приблизительно равную ψ_1 .

В нелинейных расчетах рассматривалась вытянутая ячейка слоя с отношением сторон 5:1. Найдено, что длинноволновая неустойчивость в действительности реализуется лишь вблизи порога возникновения конвекции. На рис. 7 представлена зависимость модуля максимального значения функции тока от числа Релея для монотонной моды неустойчивости. Видно, что по мере уменьшения нагрева области (уменьшение $|Ra|$) наблюдается серия перестроек к режимам с меньшим числом вихрей.

Для колебательной неустойчивости обнаружено, что при небольших $|\Psi|$ колебания существуют лишь при значениях Ra , немногим превышающим пороговое, тогда как при больших $|\Psi|$ колебания наблюдались во всей области выше порога возникновения конвекции.

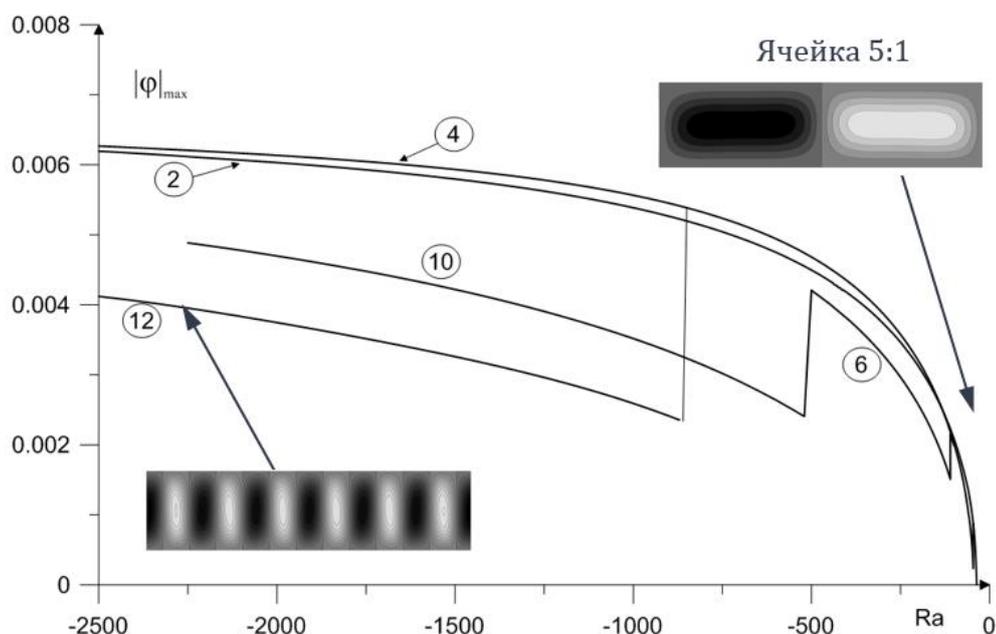


Рисунок 7. Зависимости модуля максимального значения функции тока от числа Релея, цифры в кружках соответствуют числу вихрей. $\psi_1 = 0$, $\Psi = -0.2$, подогрев сверху ($Ra < 0$).

В разделе 2.3 приводятся результаты исследования конвекции трехкомпонентной смеси толуол-метанол-циклогексан с массовыми долями компонентов 0.62/0.31/0.07. Работа выполнялась в рамках анализа и интерпретации эксперимента DCMIX-2 на Международной космической станции. Рассматривалась замкнутая область с отношением сторон 3:1 при

нагреве сверху с приложенной разницей температур $6\text{ }^{\circ}\text{C}$. В работе³ представлены результаты обработки экспериментальных данных по измерению коэффициентов $Sore$. Двумя различными исследовательскими группами получены два варианта коэффициентов $Sore$. В обоих случаях оказалось, что суммарное отношение разделения Ψ близко к нулю, однако в первом случае оно положительно $\Psi = 0.0154$, а во втором – отрицательно $\Psi = -0.0006$. В диссертации исследованы оба варианта.

В первом случае ($\Psi = 0.0154$) найдено, что в итоге система приходит к состоянию механического равновесия с линейными распределениями температуры и концентрации компонентов. При этом, однако, для концентрации C_1 (толуол) наблюдается нетривиальное поведение, обусловленное конкуренцией процессов диффузии, перекрестной диффузии и термодиффузии: на начальном этапе (до $t \sim 20$) толуол движется к верхней горячей стенке, затем «разворачивается» и движется вниз, после чего достигается состояние равновесия (см. рис. 8.)

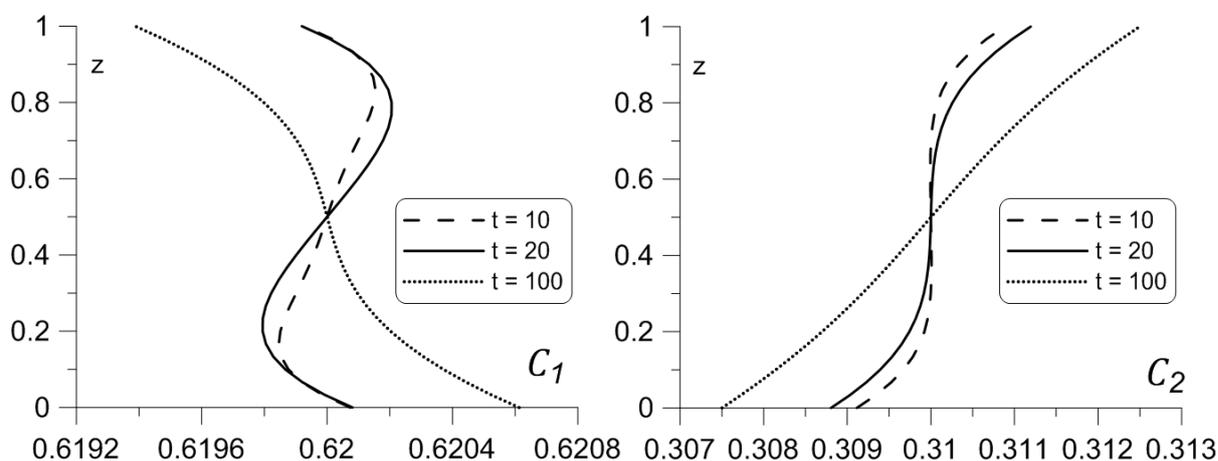


Рисунок 8. Распределения C_1 (a) и C_2 (b) с высотой концентраций в различные моменты времени, $\chi = 1.5$.

Во втором случае ($\Psi = -0.0006$) обнаружено, что поведение системы зависит от амплитуды начальных возмущений, которая задавалась в виде значения завихренности в некоторой точке области. При небольших значениях амплитуды возмущений в системе реализуется сценарий, качественно близкий к тому, что и для случая $\Psi = 0.0154$. Однако, когда амплитуда возмущений превышает некоторое критическое значение, в системе развивается неустойчивость, в результате чего формируется одновихревое конвективное течение.

В приложении к диссертации описаны параллельный алгоритм расчета на графических процессорах и его программная реализации на CUDA C.

³ 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.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено прямое численное моделирование вытеснения одной жидкости другой в капилляре под действием перепада давления. Найдено, что в зависимости от значений параметров могут реализоваться сценарии пальцеобразного или поршневого вытеснения. Получен эффективный способ оценки капиллярного давления.

Рассчитано динамически меняющееся капиллярное давление при вытеснении одной жидкости другой, смешивающейся с первой, показывающее не изученный ранее эффект неравновесного поверхностного натяжения. Найдено, что на первых стадиях капиллярное давление стремительно падает, а в дальнейшем изменяется значительно медленнее. Неравновесное капиллярное давление – эффект, который может оказывать значительное влияние на интенсивность вытеснения. Понимание данного эффекта поможет улучшить управление динамикой вытеснения многофазных сред.

Проведено моделирование вытеснения одной жидкости другой, несмешивающейся с первой, в матрице капилляров. Впервые проведен расчет для достаточно больших матриц (10×10), при которых характеристики течения сходятся к некоторым предельным значениям.

Исследованы возникновение и развитие неустойчивости Релея-Тейлора в изотермической гетерогенной системе двух смешивающихся жидкостей. Найдено, что эволюция системы состоит из двух этапов: конвективного и диффузионного. Во время обоих этапов и диффузия, и конвекция оказывают существенное влияние на развитие неустойчивости.

Исследованы возникновение и нелинейные режимы конвекции трехкомпонентных смесей с эффектом Соре в плоском горизонтальном слое с заданным тепловым потоком на границах. Обнаружено, что при всех рассмотренных значениях параметров наиболее опасной является длинноволновая монотонная или колебательная неустойчивости.

Нелинейные расчеты показали, что длинноволновый характер неустойчивости, обнаруженный с помощью линейного анализа, реализуется при малых надкритичностях и сохраняется при дальнейшем увеличении нагрева. Для обратной ситуации, когда при проведении моделирования интенсивность нагрева постепенно уменьшается, обнаружено, что длинноволновый режим реализуется лишь вблизи порога возникновения конвекции.

Исследована индуцированная эффектом Соре конвекция смеси толуол-метанол-циклогексан при значениях суммарного отношения разделения (Ψ), близких к нулю. Обнаружено, что при положительных значениях Ψ на начальных этапах поведение системы может сильно осложняться взаимодействием диффузии, перекрестной диффузии и термодиффузии; при этом общий концентрационный вклад в градиент плотности может приводить к возникновению конвективного течения. Устойчивость системы при

отрицательных значениях суммарного отношения разделения зависит от амплитуды начального возмущения. Численные расчеты позволили убедиться в корректности методики обработки данных космического эксперимента DCMIX-2.

Рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы

Следующим шагом при изучении конвекции многокомпонентных гомогенных смесей с заданным тепловым потоком на границах будет являться исследование трехмерных конвективных режимов. 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 расширение математической модели теории фазового поля. Создание такой теории позволит в рамках единой математической модели решать широкий класс задач.

Список публикаций

- 1. 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.**
- 2. 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.**
- 3. 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.**
- 4. Vorobev A., Prokopev S. and Lyubimova T. Nonequilibrium Capillary Pressure of a Miscible Meniscus // *Langmuir*. – 2021. – Vol. 37, no. 16. – Pp. 4817-4826.**
- 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. and 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. and 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 школы 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.

Отпечатано: типография ООО «Инсайт» тираж 100 штук.