Учреждение Российской академии наук

Институт вычислительной математики РАН

На правах рукописи

Никитин Кирилл Дмитриевич

Метод конечных объемов для задачи конвекции-диффузии и моделей двухфазных течений

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Василевский Юрий Викторович

Москва – 2010

Содержание

Введение

При решении современных инженерных и научных задач часто возникает необходимость численного моделирования двухфазных течений. В настоящей работе рассматриваются два подхода к представлению двухфазного течения: две фазы либо заполняют один объем, выражаясь при этом через насыщенности, либо имеют явную границу раздела.

В первом случае будем рассматривать модель двухфазной фильтрации в пористой среде, которая описывает вторую стадию добычи нефти (называемую *заводнением*). На этой стадии вода закачивается в нагнетательную скважину, вытесняя нефть, которая выходит через производящую скважину. Численное моделирование этого процесса необходимо для построения оптимальной стратегии разработки нефтегазового месторождения.

Во втором случае будем изучать течение вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей. Данная модель позволяет описывать как течение двух жидкостей с явной границей раздела, так и систему жидкость-воздух или жидкость-вакуум. Рассматриваемый класс задач включает движение морских волн, заливание и обтекание объектов, падение капель, образование брызг и многое другое. Моделирование подобных явлений представляет собой технологически сложную задачу в связи с необходимостью отслеживать динамику жидкости в области с постоянно изменяющейся границей.

Процесс решения задач математической физики можно разделить на несколько этапов: построение расчетной сетки, дискретизация [10, 11, 21], позволяющая преобразовать дифференциальное уравнение в систему алгебраических уравнений, и решение системы алгебраических уравнений [9, 12, 24, 82]. В данной работе центральную часть занимают дискретизации.

Рассмотрим детально первый подход к представлению двухфазных течений. В приложениях, связанных с моделированием процесса разработки нефтегазового месторождения, широко используются неструктурированные сетки разных типов, например, гексаэдральные, призматические или гибридные, состоящие из ячеек разного типа (тетраэдральных, призматических, гексаэдральных). Данные сетки подпадают под определение конформных сеток с многогранными ячейками.

В инженерном сообществе востребованы простые консервативные схемы, применимые на произвольных неструктурированных сетках для задач с анизотропными свойствами среды. Кроме того, во многих практических задачах важно, чтобы численное решение отвечало определенным физическим требованиям, например, было неотрицательно. Консервативные линейные схемы на неструктурированных сетках хорошо известны: это метод конечных объемов с многоточечной дискретизацией потока [27] (MPFA – multipoint flux approximaion), метод смешанных конечных элементов [39] (MFE – mixed finite element), метод опорных операторов [20, 61] (MFD – mimetic finite difference). Они имеют второй порядок точности, однако не являются монотонными, в том смысле, что не гарантируют сохранение неотрицательности дискретного решения для полных анизотропных тензоров диффузии или неортогональных сеток. Метод конечных объемов со степенями свободы, связанными с центрами ячеек, и линейной двухточечной дискретизацией потока является монотонным, однако может не обеспечивать аппроксимации при решении задач с анизотропными коэффициентами на неструктурированных сетках. Тем не менее, именно этот метод традиционно используется для решения задач моделирования процессов фильтрации в пористой среде в силу своей монотонности, простоты его реализации на ЭВМ и возможности получения решения на произвольных многогранных сетках.

В первой главе диссертационной работы рассматривается метод конечных объемов для задачи конвекции-диффузии, который обеспечивает аппроксимацию потоков и сохраняет неотрицательность дискретного решения. Метод принадлежит к классу методов с нелинейной дискретизацией потока [1, 6, 46, 58, 59, 62–64, 72, 95]. Предлагаемый метод основан на схеме дискретизации уравнения диффузии с полным анизотропным разрывным тензором диффузии на неструктурированных сетках с многогранными ячейками [4, 46]. В настоящей работе предлагается расширение данной схемы на случай уравнения конвекции-диффузии с разрывным полем скорости [72]. Стоит отметить, что вопрос эффективного решения систем уравнений, возникающих при дискретизации задачи конвекции-диффузии, не рассматривается в данной работе. Этому вопросу посвящен ряд публикаций [19, 30, 45, 50]

Одной из основных трудностей при решении уравнений конвекции-диффузии является подавление нефизичных осцилляций в численном решении. Такие осцилляции могут возникать в задачах с доминирующей конвекцией в пограничных и внутренних слоях, а также в задачах с доминирующей диффузией на неортогональных сетках и в случае сильно анизотропной среды.

В методах конечных элементов распространенным способом подавления нефизичных осцилляций является метод SUPG (Streamline Upwind / Petrov-Galerkin) [40]. Однако, осцилляции все равно могут появляться при решении задачи методом SUPG. Методы, уменьшающие нефизичных осцилляции, (SOLD – Spurious Oscillations at Layers Diminishing) [56] являются обобщением метода SUPG и удовлетворяют дискретному принципу максимума, по крайней мере, на некоторых модельных задачах.

Для дискретизации конвективных потоков можно использовать противопотоковую аппроксимацию, контролируемую через ограничение наклона [37, 42, 60] или внесение искусственной вязкости [35, 67]. Предлагаемая в диссертационной работе дискретизация конвективного потока является расширением предложенного в [64] двумерного метода на случай трехмерного пространства. Метод основан на идее монотонной противопотоковой схемы для законов сохранения (MUSCL – Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws) [93] и использует кусочно-линейное разрывное восполнение с ограничителем наклона [54] для решения на многогранных ячейках. Суть линейного восполнения заключается в том, что на каждой ячейке восстанавливается линейная функция, которая минимально отклоняется от значений в заданных точках и при этом отвечает условиям монотонности схемы.

Для дискретизации диффузионного потока применяется нелинейная двухточечная дискретизация потока на многогранных ячейках, предложенная в [46]. Идея монотонного метода конечных объемов для параболических уравнений на треугольных сетках предложена К. ЛеПотье в [58]. В дальнейшем метод был распространен на более широкий класс сеток и уравнений [1, 6, 62, 95] и требовал интерполяции решения с *основных* переменных, определенных в ячейках, на *вспомогательные* переменные, определенные в узлах сетки. Использование интерполяции влияет на точность решения, а также на скорость итерационного решения нелинейной системы. Была разработана двумерная схема, не зависящая от интерполяции [63], которая впоследствии была расширена на трехмерный случай в [46]. Последняя схема формально не является безинтерполяционной и может потребовать интерполяции для небольшого числа вспомогательных переменных. Тем не менее, это не влияет на свойства схемы, поскольку бо́льшая часть интерполяций выполняется на основании *физических* принципов, таких как непрерывность полного потока на гранях сетки, по которым идет разрыв тензора диффузии.

Предлагаемый метод конечных объемов точен на линейных решениях. Благодаря этому на задачах с гладким решением можно ожидать второй порядок сходимости в сеточной L_2-норме, что подтверждается численными экспериментами. Кроме того, эксперименты демонстрируют монотонность метода в смысле сохранения неотрицательности численного решения. Двухточечная дискретизация потока привлекательна с технологической точки зрения благодаря компактности получаемого шаблона дискретизации и формированию разреженной матрицы даже на сетках с многогранными ячейками. Отметим, что для задачи диффузии с диагональным диффузионным тензором на кубических сетах шаблон сводится к традиционному семиточечному шаблону.

При использовании нелинейного метода конечных объемов, возникает необходимость решать системы нелинейных уравнений. Для решения последних используется метод последовательных приближений (метод Пикара), который гарантирует сохранение неотрицательности решения на каждом шаге. Использование метода Пикара повышает вычислительную сложность нелинейного метода конечных объемов по сравнению с линейным, поскольку требует решения нескольких систем линейных уравнений вместо одной.

На основании предложенных схем дискретизации диффузионного и конвективного потоков строится численная модель двухфазной фильтрации в пористой среде [5, 16, 23, 31, 43]. Для дискретизации по времени используются два наиболее популярных метода: метод, неявный по давлению, явный по насыщенности (IMPES-метод) и полностью неявный метод. Оба метода подразумевают использование дискретизации диффузионного потока Дарси на гранях ячеек. Стабилизация схемы осуществляется путем использования противопотоковой аппроксимации для значений насыщенности на гранях. Для сохранения второго порядка значения на гранях вычисляются на основании линейного восполнения с ограничителем наклона, аналогичного тому, который разработан для конвективного потока в первой главе диссертации.

Модель используется для описания процесса заводнения, при котором закачиваемая в нагнетательные скважины вода вытесняет из пористой среды нефть. Дебит нефтяной скважины (то есть объем добычи) – один из основных ее технико-экономических показателей. Точность его определения и предсказания напрямую влияет на эффективность добычи как отдельной скважины, так и их совокупности. Специфика процесса заводнения такова, что в тот момент, когда фронт обводнения достигает производящей скважины и происходит *водяной прорыв*, добыча нефти на производящей скважине резко сокращается. По этой причине, одной из важных задач моделирования процесса двухфазной фильтрации является точный расчет времени водяного прорыва и картины распространения фронта обводнения.

Цель второй главы диссертации – показать, что качество дискретизации диффузионного потока оказывает большое влияние на основные показатели моделирования разработки месторождения, такие как объем добычи, время прорыва и поведение водяного фронта. Производится сравнение двух схем дискретизации диффузионного потока с двухточечным шаблоном: традиционной линейной схемы и новой нелинейной. Многоточечная аппроксимация потока в данной работе не рассматривается в силу ее высокой арифметической сложности и немонотонности [27].

В случае, когда расчетная сетка ортогональна, а тензор проницаемости изотропен или анизотропен, но сонаправлен сетке, коэффициенты для линейной и нелинейной схем дискретизации потоков совпадают. В противном случае линейная схема не обеспечивает аппроксимации, в то время как нелинейная схема сохраняет первый порядок аппроксимации потока.

В третьей главе диссертации рассматривается подход к представлению двухфазного течения через явную границу раздела фаз.

Возможны разные подходы к эффективному и точному моделированию течений со свободной поверхностью. Они включают в себя методы, явно отслеживающие свободную границу [90, 91], и методы, основанные на неявном восстановлении поверхности [79, 88]. Методы конечных разностей [53], конечных объемов [51] и конечных элементов [33, 34] применяются для дискретизации задачи по пространству.

Самые важные процессы, описывающие поведение жидкости, обычно происходят вблизи свободной поверхности, а сама поверхность может претерпевать серьезные топологические изменения. В связи с этим распространенной практикой является использование адаптивных сеток, сгущающихся к текущему положению свободной границы [36, 51].

Большинство адаптивных технологий основаны на локально сгущающихся треугольных (тетраэдральных) сетках и конечно-элементных дискретизациях [36, 49], которые позволяют отслеживать сложные формы, возникающие при продвижении свободной поверхности. Недостатком подобного подхода для задач с постоянно меняющимся положением поверхности являются высокие вычислительные затраты, связанные с перестроением расчетной сетки, хранением и обработкой данных. Адаптивные декартовы сетки, напротив, хорошо подходят для динамического сгущения или разгрубления сетки. По этой причине динамические сетки типа восьмеричное дерево традиционно используются в обработке изображений [89], визуализации дыма и воды [66] и других приложениях, в которых могут возникать поверхности сложной нетривиальной формы [69].

Дискретизации, основанные на сетках типа четверичное или восьмеричное дерево активно используются при моделировании течений со свободной поверхностью [70, 80, 87], однако точные и эффективные схемы для подобных сеток все еще требуют дополнительного изучения.

В диссертационной работе предложена эффективная экономичная технология, основанная на конечно-объемных дискретизациях на декартовых сетках типа восьмеричное дерево, которая предполагает простую структуру данных, позволяет динамически перестраивать расчетные сетки, пригодна для многопроцессорной реализации и обладает достаточной точностью для изучения поведения трехмерных течений со свободной поверхностью.

Традиционная математическая модель, описывающая течение вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей, основана на одновременном решении уравнений Навье-Стокса и уравнения функции уровня, описывающего поведение свободной поверхности [85]. Помимо известных сложностей, связанных с расчетом течения жидкости, обработка свободной поверхности привносит дополнительные трудности. Во-первых, нахождение области, в которой решаются уравнения Навье-Стокса, само по себе должно быть частью вычислительного процесса. Во-вторых, свободная граница может претерпевать серьезные изменения, такие как слияние и разделение фронтов. Для отслеживания подобных изменений требуется адаптивно сгущать расчетную сетку вблизи поверхности. В-третьих, для корректного воспроизведения сил поверхностного натяжения необходимо вычислять вектор нормали и локальную кривизну свободной поверхности. Это, в свою очередь, требует, чтобы функция уровня, описывающая положение свободной границы, определяла расстояние (со знаком) до поверхности.

Предлагаемый подход основан на методе дробных шагов для дискретизации по времени [26]. Схема расщепления разбивает каждый временной шаг на отдельные подшаги для вычисления скорости, давления и функции уровня. Используются декартовы гексаэдральные сетки типа восьмеричное дерево, динамически сгущающиеся к поверхности в каждый момент времени. Для дискретизации операторов дивергенции, градиента и Лапласа используются компактные конечно-объемные и конечно-разностные схемы. Свойство расстояния до поверхности восстанавливается путем решения дискретного уравнения Эйконала (так называемая операция *реинициализации*). Метод частиц

[47] дополняет метод функции уровня и позволяет лучше сохранять объем жидкости.

Актуальность работы. При моделировании процессов переноса и фильтрации в пористой среде часто приходится сталкиваться с сильно неоднородными свойствами среды и проводить расчеты на произвольных сетках с многогранными ячейками. Важным требованием к используемым схемам является сохранение неотрицательности получаемого численного решения, поскольку отрицательные значения таких величин, как концентрация или насыщенность, могут порождать сложности при расчете свойств жидкостей и химических взаимодействий. По этой причине востребованными являются монотонные консервативные схемы дискретизации, работающие на произвольных неструктурированных расчетных сетках и позволяющие решать задачи в неоднородных средах. При изучении динамики вязкой несжимаемой жидкости со свободной поверхностью важным критерием является достоверный расчет положения и характеристик свободной поверхности. Эффективное решение подобных задач требует использования динамических адаптивных расчетных сеток высокого разрешения и экономичных методов численного моделирования совместной динамики жидкости и свободной поверхности.

Цель диссертационной работы. Целями диссертационной работы являются разработка монотонной консервативной схемы дискретизации уравнения конвекции-диффузии с компактным шаблоном дискретизации потока, создание на ее основе численной модели процессов двухфазной фильтрации в пористой среде, разработка экономичной технологии моделирования трехмерных течений вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей.

Научная новизна. В работе предложена и исследована монотонная нелинейная схема дискретизации конвективного потока для уравнения конвекции-диффузии на неструктурированных сетках с многогранными ячейками. Проведен сравнительный анализ использования традиционной линейной и новой нелинейной схем дискретизации потока с двухточечным шаблоном на примере задачи двухфазной фильтрации. Разработана и исследована экономичная технология моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей.

Практическая значимость. Практическая значимость диссертационной работы заключается в создании комплекса программ для приближенного решения уравнения конвекции-диффузии на сетках с многогранными ячейками и численного моделирования процесса двухфазной фильтрации в пористой среде, описывающего разработку нефтегазовых месторождений. Создана технологическая цепочка, включающая в себя задание расчетной области, численное моделирование течения вязкой несжимаемой жидкости со свободной поверхностью и последующую визуализацию.

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. Предложена и исследована новая монотонная нелинейная схема дискретизации уравнения конвекции-диффузии на основе метода конечных объемов на сетках с многогранными ячейками.

2. На основе предложенной схемы дискретизации разработана численная модель двухфазной фильтрации в пористой среде и проведен сравнительной анализ предложенной схемы дискретизации с традиционной линейной схемой.

3. Разработана экономичная технология, включающая численные методы, алгоритмы, структуры данных и комплекс программ, для моделирования трехмерных течений вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах Института вычислительной математики РАН, Института прикладной математики РАН, Вычислительного центра РАН, Московского физико-технического института, Механико-математического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, Upstream Research Center of ExxonMobil corp. г.Хьюстон (США) и на следующих научных конференциях: конференция "Тихоновские чтения" (МГУ, Москва, ноябрь 2007); конференции "Ломоносов" (МГУ, Москва, апрель 2008, апрель 2010); конференции "Ломоносовские чтения" (МГУ, Москва, апрель 2009, апрель 2010); конференция молодых ученых "Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования" (СПбГУ ИТМО, С.-Петербург, апрель 2009); международная конференция "SIAM Geosciences 2009" (Лейпциг, Германия, июнь 2009); международная конференция "Computational Methods in Applied Mathematics: CMAM-4" (Познань, Польша, июнь 2010); международные конференции "NUMGRID-2008" и "NUMGRID-2010" (ВЦ РАН, Москва, июнь 2008, октябрь 2010); международный научный семинар "Advances on Numerical Methods for Multiphase and Free Surface Flows" (ИВМ РАН, Москва, июнь 2009); международный научный семинар "Computational Mathematics and Applications" (Технологический университет Тампере, Тампере, Финляндия, сентябрь 2009).

Публикации. Основные материалы диссертации опубликованы в 7 печатных работах: 4 статьи – в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК, [16, 17, 71, 72] и 3 статьи – в сборниках научных трудов [15, 18, 73].

Личный вклад автора. В совместных работах [18, 71, 73] вклад автора заключался в разработке вычислительного ядра технологии моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей и проведении численных экспериментов.

В совместной работе [72] вклад автора заключался в разработке нелинейной схемы дискретизации уравнения конвекции-диффузии в трехмерном пространстве, программной реализации метода и проведении численных экспериментов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, обзора используемой терминологии, трех глав, заключения и списка литературы из 95 наименований. Диссертационная работа содержит 28 рисунков и 12 таблиц. Общий объем диссертационной работы – 105 страниц.

Благодарности

Автор диссертационной работы выражает глубокую признательность научному руководителю Ю. В. Василевскому за продолжительную поддержку, ценные советы и плодотворное обсуждение вопросов. Автор благодарен С. Ю. Малясову и В. Г. Дядечко из Upstream Research Center of ExxonMobil corp. за помощь в постановке задачи о практическом моделировании процесса двухфазной фильтрации в пористой среде. Автор также выражает благодарность М. А. Ольшанскому, И. В Капырину, А. А. Данилову, К. М. Терехову и многим другим за помощь в обсуждении идей и методов, используемых в диссертационной работе.

Работа над диссертацией была частично поддержана грантами РФФИ 08-01-00159-а, 09-01-00115-а, программой Президиума РАН "Фундаментальные науки – медицине", федеральной целевой программой "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России", а также грантом Upstream Research Center of ExxonMobil corp.

Обзор используемой терминологии

Введем необходимые понятия, которые будут использоваться в настоящей диссертационной работе.

В работе рассматриваются следующие классы расчетных сеток. В первых двух главах схемы формулируются для *конформных* сеток, любые два элемента которых либо не имеют общих точек, либо имеют ровно одну общую вершину, либо одно общее целое ребро, либо одну общую целую грань. В третьей главе рассматриваются сетки типа восьмеричное дерево (см. рис. 1), с формальной точки зрения не являющиеся конформными. Однако, при некотором допущении, можно считать кубические ячейки сетки многогранниками с гранями, лежащими в одной плоскости, и рассматривать сетку типа восьмеричное дерево как конформную.

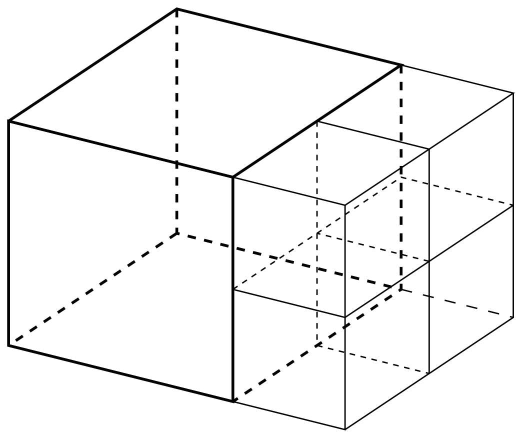


Рис. 1. Сетка типа восьмеричное дерево.

Каждая ячейка сетки является *ячейкой звездного типа* относительно центра масс, то есть каждая грань полностью видна из центра масс ячейки. Аналогично каждая грань является плоской *гранью звездного типа* относительно центра масс грани.

Скалярное поле неизвестной концентрации (первая глава), насыщенности (вторая глава) или давления (вторая и третья глава) считаем кусочно-постоянным на ячейках расчетной сетки. *Основные точки коллокации* – точки, в которых задаются независимые значения неизвестной величины – в данном случае выбираются в центрах масс ячеек. В процессе решения задачи может возникать необходимость вычислять значения неизвестных величин в дополнительных точках, называемых *вспомогательными точками коллокации*.

При описании свойств пористой среды в задаче фильтрации используется *коэффициент (тензор) абсолютной проницаемости* $\mathbb{K}$, описывающий зависимость скорости фильтрационного потока от свойств среды без учета свойств жидкости. Для изотропных сред коэффициент $\mathbb{K}$ является скалярной величиной, для анизотропных – представляет собой симметричный положительно определенный тензор размерности 3×3. В задаче конвекции-диффузии тензору абсолютной проницаемости соответствует *тензор диффузии*. Для любого тензора диффузии существует система координат, в которой он принимает диагональны вид. Если в данной системе координат ребра сетки параллельны осям координат, то говорят, что тензор *сонаправлен сетке*.

Вектор нормали к грани сетки, умноженный на тензор диффузии называется *вектором конормали*. Сетка называется $\mathbb{K}$-*ортогональной*, если вектор, соединяющий точки коллокации соседних ячеек, сонаправлен вектору конормали к общей грани этих ячеек.

Схему дискретизации уравнения конвекции диффузии, предлагаемую в первой главе будем называть *монотонной*. Под монотонностью метода или схемы здесь и далее подразумевается свойство сохранения неотрицательности получаемого численного решения при соответствующих граничных условиях и правой части, обеспечиваемое монотонностью матрицы дискретизации дифференциального оператора [2, 22]. В общем случае *дискретный принцип максимума* [29] накладывает более строгие ограничения и требует сохранения как минимума, так и максимума дискретного решения. Предлагаемый в данной работе метод дискретному принципу максимума не удовлетворяет.

Глава 1

Монотонная консервативная схема для задачи конвекции-диффузии

1.1. Стационарное уравнение конвекции-диффузии

Пусть Ω – трехмерная многогранная область с границей, состоящей из двух частей: $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$, таких что $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$, и множество Γ_D замкнуто и непусто: $\Gamma_D = \bar{\Gamma}_D$, $\Gamma_D \neq \emptyset$. Предположим, что Ω представима в виде объединения конечного числа многогранных подобластей Ω_i, $i = 1, \ldots, k$, таких что $\bar{\Omega} = \cup_i \bar{\Omega}_i$ и $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ для $i \neq j$. На замыкании каждой подобласти $\bar{\Omega}_i$ определяется симметричный, положительно определенный, полный, возможно анизотропный, непрерывный тензор диффузии $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ с компонентами из $L^2(\Omega_i)$ и непрерывное поле скорости $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ с компонентами из $L^2(\Omega_i)$, причем $\int\limits_\Omega \mathbf{v} \cdot \nabla w \; dx \leq 0$, $\forall w \in C_0^1(\Omega)$, $w \geq 0$.

Рассмотрим стационарную задачу конвекции-диффузии для неизвестной концентрации c: [7, 81]:

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \mathrm{div}\,(\mathbf{v}c - \mathbb{K}\nabla c) & = & g & \text{в} \quad \Omega, \\ c & = & g_D & \text{на} \quad \Gamma_D, \\ -(\mathbb{K}\nabla c)\cdot\mathbf{n} & = & g_N & \text{на} \quad \Gamma_N, \end{array} \right. \tag{1.1}$$

где $g \in L^2(\Omega)$ – внешние источники, $\mathbf{n}$ – вектор внешней нормали, а g_D и g_N – заданные граничные условия. Обозначим через Γ_{out} – часть границы Γ, на которой $\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} \geq 0$, а через $\Gamma_{\text{in}} = \Gamma \setminus \Gamma_{\text{out}}$. Предполагается, что $\Gamma_N \subset \Gamma_{\text{out}}$.

При вышеописанных условиях и соответствующих ограничениях на g_D, g_N, задача (1.1) имеет единственное обобщенное решение $c \in W_2^1(\Omega)$ [3, 7]. Предполагаем, что выполняются достаточные условия неотрицательности решения $c(x)$ [3]: $g(x) \geq 0$, $g_D \geq 0$, $g_N \leq 0$. Физический смысл условий $g(x) \geq 0$ и $g_N \leq 0$ состоит в отсутствии стоков внутри области и на границе Γ_N.

Граничное условие Дирихле на Γ_{out}, равно как и разрыв граничных данных на Γ_{in}, могут порождать пограничные слои. Хорошая схема дискретизации вносит численную диффузию, которая достаточно мала, чтобы не приводить к сильному размазыванию пограничных слоев, но достаточна для подавления нефизичных осцилляций.

1.2. Монотонная нелинейная схема конечных объемов на сетках с многогранными ячейками

Для приближенного решения задачи (1.1) будет использоваться метод конечных объемов (также известный как метод интегральных тождеств [11] или метод интегрирования по подобластям [13]). Введем схему конечных объемов с нелинейной двухточечной дискретизацией потока. Запишем уравнение баланса:

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = g \quad \text{в} \quad \Omega, \tag{1.2}$$

где $\mathbf{q} = -\mathbb{K}\nabla c + c\mathbf{v}$ обозначает полный поток.

Пусть $\mathcal{T}$ – конформная сетка, состоящая из $N_{\mathcal{T}}$ многогранных ячеек с плоскими гранями. Предположим, что сетка связна по граням, то есть не может быть разбита на две части, не имеющие ни одной общей грани. Обозначим через $\mathbf{n}_T$ внешнюю единичную нормаль к границе ∂T ячейки T, а через $\mathbf{n}_f$ – вектор нормали к грани f. Грани, принадлежащие границе расчетной области, назовем *внешними*. Для них вектор $\mathbf{n}_f$ всегда внешний. Остальные грани назовем *внутренними*. Предположим, что $|\mathbf{n}_f| = |f|$, где $|f|$ обозначает площадь грани f. Далее предположим, что сетка достаточно мелка и тензорная функция $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ и поле скорости $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ слабо меняются внутри каждой ячейки.

Тензор $\mathbb{K}$ и поле $\mathbf{v}$ могут иметь разрыв по граням ячейки, лежащим на $\partial\Omega_i$, и менять направления (главные направления для $\mathbb{K}$), однако потоки нормального компонента $\mathbf{v}$ на грани f – $\int_f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_f \,\mathrm{d}s$ – равны для соседних ячеек с общей гранью f.

Проинтегрируем уравнение (1.2) по многограннику T и воспользуемся формулой Грина:

$$\sum_{f\in\partial T} \chi_{T,f}\, \mathbf{q}_f \cdot \mathbf{n}_f = \int\limits_T f \,\mathrm{d}x, \qquad \mathbf{q}_f = \frac{1}{|f|}\int\limits_f \mathbf{q}\,\mathrm{d}s \tag{1.3}$$

где $\mathbf{q}_f$ – средняя плотность потока на грани f, а $\chi_{T,f}$ – это либо 1, либо -1, в зависимости от взаимной ориентации векторов $\mathbf{n}_f$ и $\mathbf{n}_T$.

Каждой ячейке T назначим одну степень свободы, C_T, для концентрации c. Обозначим через C вектор, состоящий из всех дискретных концентраций C_T. Если две ячейки T_+ и T_- имеют общую грань f, и $\mathbf{n}_f$ является внешней для T_+, тогда двухточечная дискретизация нормальной составляющей потока представляется в следующем виде:

$$\mathbf{q}_f^h \cdot \mathbf{n}_f = M_f^+ C_{T_+} - M_f^- C_{T_-} \tag{1.4}$$

где M_f^+ и M_f^- – некоторые коэффициенты. В случае линейного метода данные коэффициенты фиксированы и равны между собой. Для нелинейного метода они могут различаться и зависеть от значений концентрации в точках коллокации, окружающих T_+ и T_-. На грани $f \in \Gamma_D$ представление потока совпадает с (1.4) с той лишь разницей, что одна из концентраций задана явно. Для задачи Дирихле ($\Gamma_D = \partial\Omega$), подставив (1.4) в (1.3), получим систему из $N_\mathcal{T}$ уравнений с $N_\mathcal{T}$ неизвестными C_T.

Таким образом, для метода конечных объемов со степенями свободы, ассоциированными с ячейками, ключевым моментом является определение дискретного потока (1.4). Предлагаемая схема дискретизации потока расширяет определение диффузионного потока [46] на случай конвективно-диффузионного потока и основана на идеях, предложенных для двумерного случая в [64]. Для формирования дискретизации полного потока (1.4) разделим его на диффузионную и конвективную составляющие $M_f^{\pm} = D_f^{\pm} + A_f^{\pm}$.

Введем обозначения. Пусть $\mathcal{F}_I$ и $\mathcal{F}_B$ – непересекающиеся множества внутренних и внешних граней, соответственно. Подмножество $\mathcal{F}_J$ внутренних граней включает грани, на которых происходит разрыв тензора диффузии $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ или поля скорости $\mathbf{v}(\mathbf{x})$. Множество $\mathcal{F}_B$, в свою очередь, разбивается на подмножества $\mathcal{F}_B^D$ и $\mathcal{F}_B^N$, на элементах которых задаются граничные условия Дирихле и Неймана, соответственно. $\mathcal{F}_B^{\text{out}}$ и $\mathcal{F}_B^{\text{in}}$ обозначают подмножества внешних граней, принадлежащих границам Γ_{out} и Γ_{in}, соответственно. Наконец, через $\mathcal{F}_T$ и $\mathcal{E}_T$ обозначаются множества граней и ребер многогранника T, соответственно, а через $\mathcal{E}_f$ – множество ребер грани f.

Для каждой ячейки T из $\mathcal{T}$ точка коллокации $\mathbf{x}_T$ определяется в центре масс T. Для каждой грани $f \in \mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J$ сопоставим точку коллокации с центром грани $\mathbf{x}_f$. Кроме того, определим точки коллокации $\mathbf{x}_e$ в центрах ребер $e \in \mathcal{E}_f$, $f \in \mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J$.

Точки коллокации на гранях и ребрах являются *вспомогательными*. Значения концентрации в данных точках используются только в промежуточных вычислениях и не входят в итоговую систему алгебраических уравнений, хотя и могут влиять на значения коэффициентов в ней. Остальные точки коллокации будем называть *основными*. Значения концентрации в них образуют вектор неизвестных C в итоговой системе уравнений.

Для каждой ячейки T определим множество Σ_T окружающих ее точек коллокации. Сначала включим в Σ_T точку коллокации $\mathbf{x}_T$. Затем для каждой грани $f \in \mathcal{F}_T \setminus (\mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J)$ добавим в Σ_T точки $\mathbf{x}_{T'_f}$, где T'_f имеет с T общую грань f. Для оставшихся граней $f \in \mathcal{F}_T \cap (\mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J)$ добавим точки коллокации $\mathbf{x}_f$. Пусть $N(\Sigma_T)$ обозначает количество элементов в множестве Σ_T (мощность множества).

Аналогично, для каждой грани $f \in \mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J$, принадлежащей ячейке T, определим множество $\Sigma_{f,T}$ окружающих точек коллокации. Инициализируем множество $\Sigma_{f,T} = \{\mathbf{x}_f, \mathbf{x}_T\}$ и добавим к нему те точки из Σ_T, которые соответствуют ячейкам или граням, у которых есть общие точки с f. Мощность $\Sigma_{f,T}$ обозначается через $N(\Sigma_{f,T})$.

Пусть для каждой пары ячейка-грань $T \to f$, $T \in \mathcal{T}$, $f \in \mathcal{F}_T$ существуют три точки $\mathbf{x}_{f,1}$, $\mathbf{x}_{f,2}$ и $\mathbf{x}_{f,3}$ из множества Σ_T, для которых выполнено следующее условие (см. Рис. 1.1): вектор конормали $\boldsymbol{\ell}_f = \mathbb{K}(\mathbf{x}_f)\mathbf{n}_f$, отложенный из $\mathbf{x}_T$, лежит внутри трехгранного угла, образованного векторами

$$\mathbf{t}_{f,1} = \mathbf{x}_{f,1} - \mathbf{x}_T, \quad \mathbf{t}_{f,2} = \mathbf{x}_{f,2} - \mathbf{x}_T, \quad \mathbf{t}_{f,3} = \mathbf{x}_{f,3} - \mathbf{x}_T \tag{1.5}$$

и

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\ell}_f|}\boldsymbol{\ell}_f = \frac{\alpha_f}{|\mathbf{t}_{f,1}|}\mathbf{t}_{f,1} + \frac{\beta_f}{|\mathbf{t}_{f,2}|}\mathbf{t}_{f,2} + \frac{\gamma_f}{|\mathbf{t}_{f,3}|}\mathbf{t}_{f,3} \tag{1.6}$$

где $\alpha_f \geq 0$, $\beta_f \geq 0$, $\gamma_f \geq 0$.

Коэффициенты α_f, β_f, γ_f определяются по следующим формулам:

$$\alpha_f = \frac{D_{f,1}}{D_f}, \qquad \beta_f = \frac{D_{f,2}}{D_f}, \qquad \gamma_f = \frac{D_{f,3}}{D_f} \tag{1.7}$$

где

$$D_f = \frac{|\mathbf{t}_{f,1}\mathbf{t}_{f,2}\mathbf{t}_{f,3}|}{|\mathbf{t}_{f,1}||\mathbf{t}_{f,2}||\mathbf{t}_{f,3}|}, \quad D_{f,1} = \frac{|\boldsymbol{\ell}_f\mathbf{t}_{f,2}\mathbf{t}_{f,3}|}{|\boldsymbol{\ell}_f||\mathbf{t}_{f,2}||\mathbf{t}_{f,3}|}$$
$$D_{f,2} = \frac{|\mathbf{t}_{f,1}\boldsymbol{\ell}_f\mathbf{t}_{f,3}|}{|\mathbf{t}_{f,1}||\boldsymbol{\ell}_f||\mathbf{t}_{f,3}|}, \quad D_{f,3} = \frac{|\mathbf{t}_{f,1}\mathbf{t}_{f,2}\boldsymbol{\ell}_f|}{|\mathbf{t}_{f,1}||\mathbf{t}_{f,2}||\boldsymbol{\ell}_f|}$$

и $|\mathbf{a}\ \mathbf{b}\ \mathbf{c}| = |(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}|$.

Аналогично, предположим, что для каждой пары грань-ячейка $f \to T$, $f \in \mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J$, $T: \ f \in \mathcal{F}_T$ существуют три точки $\mathbf{x}_{f,1}$, $\mathbf{x}_{f,2}$ и $\mathbf{x}_{f,3}$ из множества $\Sigma_{f,T}$, для которых вектор $\boldsymbol{\ell}_{f,T} = -\mathbb{K}_T(\mathbf{x}_f)\mathbf{n}_f$, отложенный из $\mathbf{x}_f$, лежит

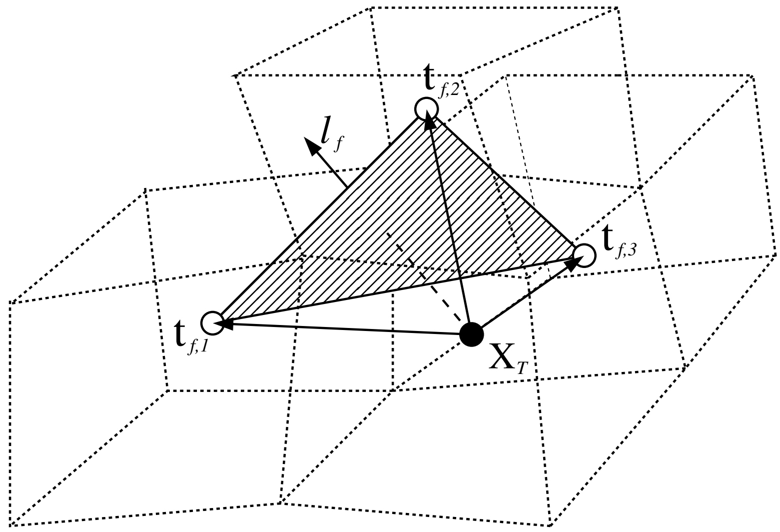


Рис. 1.1. Вектор конормали и триплет векторов.

внутри трехгранного угла, образованного векторами

$$\mathbf{t}_{f,1} = \mathbf{x}_{f,1} - \mathbf{x}_f, \quad \mathbf{t}_{f,2} = \mathbf{x}_{f,2} - \mathbf{x}_f, \quad \mathbf{t}_{f,3} = \mathbf{x}_{f,3} - \mathbf{x}_f \tag{1.8}$$

и выполнены условия (1.6), (1.7). Здесь и далее под $\mathbb{K}_T(\mathbf{x}_f)$ будем понимать

$$\mathbb{K}_T(\mathbf{x}_f) = \lim_{\mathbf{x}\in T,\ \mathbf{x}\to\mathbf{x}_f} \mathbb{K}(\mathbf{x}).$$

Тройки векторов $\mathbf{t}_{f,1}$, $\mathbf{t}_{f,1}$, $\mathbf{t}_{f,1}$ будем для краткости называть *триплетами*. Простой и эффективный алгоритм поиска триплета для пар $T \to f$ и $f \to T$ предложен в [46].

1.2.1. Нелинейная схема дискретизации диффузионного потока на внутренних гранях

Для дискретизации диффузионного потока в трехмерном пространстве воспользуемся схемой, предложенной в [46].

Пусть f – внутренняя грань, которую делят ячейки T_+ и T_-, и нормаль $\mathbf{n}_f$ внешняя для T_+, $\mathbf{x}_\pm$ (или $\mathbf{x}_{T_\pm}$) – точка коллокации в ячейке $T_\pm$, а $C_\pm$ (или $C_{T_\pm}$) – значение дискретной концентрации в этой точке.

Рассмотрим случай $f \notin \mathcal{F}_J$ и введем $\mathbb{K}_f = \mathbb{K}(\mathbf{x}_f)$. Пусть $T = T_+$. Используя введенные обозначения, определение производной по направлению

$$\frac{\partial c}{\partial \boldsymbol{\ell}_f}|\boldsymbol{\ell}_f| = \nabla c \cdot (\mathbb{K}_f\, \mathbf{n}_f)$$

и предположение (1.6), запишем

$$\mathbf{q}_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f \approx -\frac{|\boldsymbol{\ell}_f|}{|f|} \int_f \frac{\partial c}{\partial \boldsymbol{\ell}_f}\, \mathrm{d}s = -\frac{|\boldsymbol{\ell}_f|}{|f|} \int_f \left(\alpha_f \frac{\partial c}{\partial \mathbf{t}_{f,1}} + \beta_f \frac{\partial c}{\partial \mathbf{t}_{f,2}} + \gamma_f \frac{\partial c}{\partial \mathbf{t}_{f,3}} \right) \mathrm{d}s. \quad (1.9)$$

Выведем схему дискретизации диффузионного потока с двухточечным шаблоном. Сперва заменим частные производные конечными разностями. Затем выпишем другую аппроксимацию потока через грань f, используя $T = T_-$. Введем индекс $\pm$, чтобы различать $\mathbf{q}_{f,d}$ для $T = T_+$ и $T = T_-$, а индекс f опустим. Поскольку $\mathbf{n}_f$ является внутренней нормалью для T_-, знак в правой части меняется:

$$\mathbf{q}^h_{\pm,d} \cdot \mathbf{n}_f = \mp |\boldsymbol{\ell}_f| \left(\frac{\alpha_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,1}|} (C_{\pm,1} - C_\pm) + \frac{\beta_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,2}|} (C_{\pm,2} - C_\pm) + \frac{\gamma_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,3}|} (C_{\pm,3} - C_\pm) \right), \quad (1.10)$$

где $\alpha_\pm$, $\beta_\pm$ и $\gamma_\pm$ заданы формулой (1.7), и $C_{\pm,i}$ обозначают концентрации в точках $\mathbf{x}_{\pm,i}$ из множества $\Sigma_{T_\pm}$.

Определим новый дискретный поток как линейную комбинацию $\mathbf{q}^h_{\pm,d} \cdot \mathbf{n}_f$ с неотрицательными весами $\mu_\pm$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f \;&=\; \mu_+\, \mathbf{q}^h_{+,d} \cdot \mathbf{n}_f + \mu_-\, \mathbf{q}^h_{-,d} \cdot \mathbf{n}_f \\
&=\; \mu_+ |\ell_f| \left(\tfrac{\alpha_+}{|\mathbf{t}_{+,1}|} + \tfrac{\beta_+}{|\mathbf{t}_{+,2}|} + \tfrac{\gamma_+}{|\mathbf{t}_{+,3}|} \right) C_+ - \mu_- |\ell_f| \left(\tfrac{\alpha_-}{|\mathbf{t}_{-,1}|} + \tfrac{\beta_-}{|\mathbf{t}_{-,2}|} + \tfrac{\gamma_-}{|\mathbf{t}_{-,3}|} \right) C_- \\
&-\; \mu_+ |\ell_f| \left(\tfrac{\alpha_+}{|\mathbf{t}_{+,1}|} C_{+,1} + \tfrac{\beta_+}{|\mathbf{t}_{+,2}|} C_{+,2} + \tfrac{\gamma_+}{|\mathbf{t}_{+,3}|} C_{+,3} \right) \\
&+\; \mu_- |\ell_f| \left(\tfrac{\alpha_-}{|\mathbf{t}_{-,1}|} C_{-,1} + \tfrac{\beta_-}{|\mathbf{t}_{-,2}|} C_{-,2} + \tfrac{\gamma_-}{|\mathbf{t}_{-,3}|} C_{-,3} \right).
\end{aligned} \quad (1.11)$$

Веса выбираются таким образом, чтобы шаблон для $\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f$ стал двухточечным, и $\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f$ аппроксимировало исходный диффузионный поток. Эти требования приводят к следующей системе:

$$\begin{aligned} -\mu_+ d_+ + \mu_- d_- &= 0, \\ \mu_+ + \mu_- &= 1, \end{aligned} \tag{1.12}$$

где

$$d_\pm = |\boldsymbol{\ell}_f| \left(\frac{\alpha_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,1}|} C_{\pm,1} + \frac{\beta_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,2}|} C_{\pm,2} + \frac{\gamma_\pm}{|\mathbf{t}_{\pm,3}|} C_{\pm,3} \right). \tag{1.13}$$

Поскольку коэффициенты $d_\pm$ зависят как от сетки, так и от значений концентрации, соответствующие веса тоже имеют аналогичную зависимость. Поэтому итоговая схема дискретизации с двухточечным шаблоном является *нелинейной.*

Если точка коллокации $\mathbf{x}_{+,i}$ (или $\mathbf{x}_{-,i}$), $i = 1, 2, 3$, совпадает с точкой коллокации $\mathbf{x}_-$ (или $\mathbf{x}_+$), соответствующее слагаемое исключается из формулы (1.13). Таким образом на регулярной кубической сетке шаблон принимает традиционный семиточечный вид: $6, -1, -1, -1, -1, -1, -1$.

Решение (1.12) может быть выписано явно. Поскольку $\alpha_\pm$, $\beta_\pm$ и $\gamma_\pm$ неотрицательны, при любых $C \geq 0$ получаем, что $d_\pm \geq 0$.

Если $d_\pm = 0$, назначаем $\mu_+ = \mu_- = 1/2$. В противном случае,

$$\mu_+ = \frac{d_-}{d_- + d_+}, \qquad \mu_- = \frac{d_+}{d_- + d_+}.$$

Подставив выражение для $\mu_\pm$ в (1.11) получим двухточечную формулу для диффузионного потока:

$$\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f = D_f^+ C_{T_+} - D_f^- C_{T_-} \tag{1.14}$$

с неотрицательными коэффициентами

$$D_f^\pm = \mu_\pm |\boldsymbol{\ell}_f| (\alpha_\pm / |\mathbf{t}_{\pm,1}| + \beta_\pm / |\mathbf{t}_{\pm,2}| + \gamma_\pm / |\mathbf{t}_{\pm,3}|). \tag{1.15}$$

Теперь рассмотрим случай $f \in \mathcal{F}_J$, когда $\mathbb{K}_{T_+}(\mathbf{x}_f)$ и $\mathbb{K}_{T_-}(\mathbf{x}_f)$ различаются. Рассмотрим концентрацию C_f во вспомогательной точке коллокации $\mathbf{x}_f$.

Получим двухточечные дискретизации потока отдельно для пар $f \to T_+$ и $f \to T_-$:

$$(\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f)_+ = N^+ C_+ - N^+_f C_f \tag{1.16}$$

$$-(\mathbf{q}^h_{f,d} \cdot \mathbf{n}_f)_- = N^- C_- - N^-_f C_f. \tag{1.17}$$

Неотрицательные коэффициенты N^+, N^+_f, N^-, N^-_f получаются аналогично коэффициентам (1.15) на основании дискретных концентраций в точках коллокации из множеств $\Sigma_{T_\pm}$ и $\Sigma_{f,T_\pm}$. Соответствующие конормальные векторы к грани f, $\boldsymbol{\ell}_\pm = \pm\mathbb{K}_{T_\pm}(\mathbf{x}_f)\,\mathbf{n}_f$ являются внешними к $T_\pm$. Непрерывность нормальных компонентов полного потока и поля скорости требует непрерывности нормального компонента диффузионного потока. Это предположение позволяет исключить C_f из (1.16), (1.17)

$$C_f = (N^+ C_+ + N^- C_-)/(N^+_f + N^-_f) \tag{1.18}$$

и вывести схему дискретизации диффузионного потока с двухточечным шаблоном и коэффициентами

$$D^\pm_f = N^\pm N^\mp_f/(N^+_f + N^-_f). \tag{1.19}$$

Если оба коэффициента $N^\pm_f = 0$, полагаем $D^\pm_f = N^\pm/2$ и $C_f = (C_+ + C_-)/2$.

Замечание 1.2.1. *Отметим, что хотя формула* (1.10) *инвариантна относительно изменения концентрации на постоянную величину, дискретный поток* (1.14) *определен корректно только для неотрицательных значений концентрации. Для анализа схемы в разделе 1.3 требуется расширить определение дискретного диффузионного потока на отрицательные концентрации. Этого можно добиться путем добавления минимальной положительной константы ко всем значениям концентрации в* (1.11)*, чтобы сделать их неотрицательными.*

1.2.2. Нелинейная схема дискретизации конвективного потока на внутренних гранях

Предлагаемый метод построения дискретного конвективного потока был описан в [72] и является обобщением двумерного метода, предложенного в [64]. Для каждой внутренней грани $f \in \mathcal{F}_I$ конвективный поток

$$\mathbf{q}_{f,a} = \frac{1}{|f|} \int\limits_f c\mathbf{v}\,\mathrm{d}s$$

дискретизируется с использованием линейного восстановления $\mathcal{R}_T$ концентрации на ячейке T, взятой против потока

$$\mathbf{q}^h_{f,a} \cdot \mathbf{n}_f = v_f^+ \mathcal{R}_{T_+}(\mathbf{x}_f) + v_f^- \mathcal{R}_{T_-}(\mathbf{x}_f) \qquad (1.20)$$

где

$$v_f^+ = \frac{1}{2}(v_f + |v_f|), \qquad v_f^- = \frac{1}{2}(v_f - |v_f|), \qquad v_f = \frac{1}{|f|} \int\limits_f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_f \,\mathrm{d}s.$$

Определим восстановление $\mathcal{R}_T$ как линейную функцию

$$\mathcal{R}_T(\mathbf{x}) = C_T + \mathbf{g}_T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_T) \qquad \forall \mathbf{x} \in T \qquad (1.21)$$

с вектором градиента $\mathbf{g}_T$. Поскольку C_T связана с центром масс ячейки T, такое восстановление сохраняет среднее значение концентрации на ячейке при любом выборе $\mathbf{g}_T$.

Выбор градиента направлен на то, чтобы получаемая схема дискретизации была устойчива и имела второй порядок точности. Обозначим через $\mathcal{G}_T$ множество допустимых градиентов $\tilde{\mathbf{g}}_T$, которое определим позднее. Вектор градиента $\mathbf{g}_T$ будет решением следующей задачи минимизации с ограничениями:

$$\mathbf{g}_T = \arg \min_{\tilde{\mathbf{g}}_T \in \mathcal{G}_T} \mathcal{J}_T(\tilde{\mathbf{g}}_T) \qquad (1.22)$$

где функционал

$$\mathcal{J}_T(\tilde{\mathbf{g}}_T) = \sum_{\mathbf{x}_k \in \tilde{\Sigma}_T} \left[C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_T) - C_k \right]^2$$

измеряет отклонение восстановленной функции от значений концентрации C_k в точках коллокации $\mathbf{x}_k$, принадлежащих множеству $\tilde{\Sigma}_T$. Множество $\tilde{\Sigma}_T$ строится следующим образом. Сначала строится множество $\hat{\Sigma}_T$ путем исключения вспомогательных точек коллокации $\mathbf{x}_f$, $f \in \mathcal{F}_B^{\text{out}}$ из множества Σ_T. Затем множество $\tilde{\Sigma}_T$ получается из $\hat{\Sigma}_T$ путем добавления дополнительных точек в случае, если точки множества $\hat{\Sigma}_T$ лежат в одной плоскости. Если $\hat{\Sigma}_T = \{\mathbf{x}_T, \mathbf{x}_{T'}\}$ или $\hat{\Sigma}_T = \{\mathbf{x}_T, \mathbf{x}_{T'}, \mathbf{x}_{T''}\}$, то добавляем элементы из $\hat{\Sigma}_{T'}$ и $\hat{\Sigma}_{T''}$, отличные от $\mathbf{x}_T$. Если $\hat{\Sigma}_T = \{\mathbf{x}_T, \mathbf{x}_{T'}, \mathbf{x}_{T''}, \mathbf{x}_{T'''}\}$, но объем тетраэдра образованного этими четырьмя точками меньше $\varepsilon|T|$, то также добавляем к $\hat{\Sigma}_T$ элементы из $\hat{\Sigma}_{T'}$, $\hat{\Sigma}_{T''}$ и $\hat{\Sigma}_{T'''}$, отличные от $\mathbf{x}_T$.

Множество допустимых градиентов $\mathcal{G}_T$ определяется через три ограничения, предназначенные для подавления нефизичных осцилляций.

Во-первых, линейное восстановление, построенное на основании допустимого градиента $\tilde{\mathbf{g}}_T$, должно быть ограничено в точках коллокации $\mathbf{x}_k \in \hat{\Sigma}_T$:

$$\min\left\{C_1, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\} \leq C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_T) \leq \max\left\{C_1, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\}. \quad (1.23)$$

Из (1.23) следует, что $\tilde{\mathbf{g}}_T \equiv 0$ для всех локальных минимумов и максимумов.

Во-вторых, в целях получения правильного знака конвективного потока, потребуем, чтобы восстанавливаемая функция была неотрицательна в точках $\mathbf{x}_f$ на гранях $f \in \mathcal{F}_T$, где $v_f > 0$ при $T = T_+$ или $v_f < 0$ при $T = T_-$:

$$C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_T) \geq 0. \quad (1.24)$$

Отметим, что когда центр грани $\mathbf{x}_f$ лежит вне выпуклой оболочки точек $\mathbf{x}_k \in \hat{\Sigma}_T$, восстанавливаемая функция может принимать отрицательные значения в $\mathbf{x}_f$ даже при выполнении (1.23).

В-третьих, восстанавливаемая функция должна быть ограничена снизу во вспомогательных точках коллокации на Γ_{out} (они не принадлежат $\hat{\Sigma}_T$):

$$\min\left\{C_1, C_2, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\} \leq C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_T), \qquad f \in \mathcal{F}_T \cap \mathcal{F}_B^{\text{out}}. \quad (1.25)$$

Вводимые ограничения на $\mathcal{G}_T$, равно как и на множество $\tilde{\Sigma}_T$ выбирались из практических соображений, но в то же время максимально слабыми. Например, игнорирование ограничения (1.25) может порождать неустойчивость при итерационном решении итоговой нелинейной системы алгебраических уравнений.

Может быть доказано [64], что задача минимизации (1.22) с ограничениями (1.23), (1.24), (1.25) имеет единственное решение.

Покажем, что из себя представляют ограничения, накладываемые на вектор градиента $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^3$. Ограничение (1.23) определяет полосу между двумя плоскостями в трехмерном пространстве:

$$\pi_k^- : C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_T) = \min\left\{C_1, C_2, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\}$$

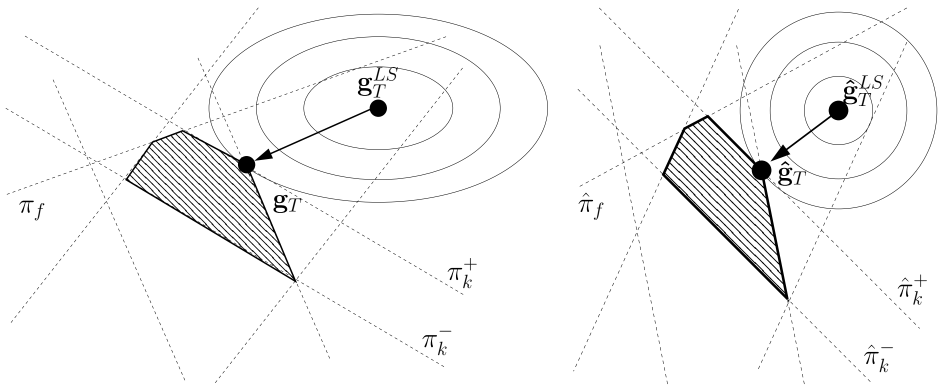
$$\pi_k^+ : C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_T) = \max\left\{C_1, C_2, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\}.$$

Ограничения (1.24) и (1.25) определяют полупространства, отделенные плоскостями π_f:

$$\pi_f = \begin{cases} C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_T) = 0, \quad f \in \mathcal{F}_T, \quad \pm v_f > 0 \text{ при } T = T_\pm \\ C_T + \tilde{\mathbf{g}}_T \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_T) = \min\left\{C_1, \ldots, C_{N(\hat{\Sigma}_T)}\right\}, \quad f \in \mathcal{F}_T \cap \mathcal{F}_B^{\text{out}}. \end{cases}$$

Обозначим через $\mathcal{P}$ множество всех плоскостей $\{\pi_k^\pm : \mathbf{x}_k \in \hat{\Sigma}_T\}$, а через $\mathcal{P}_{\text{f}}$ – множество плоскостей π_f.

Функционал отклонения $\mathcal{J}_T$ в общем случае имеет изоповерхности эллипсоидальной формы. Применим отображение (поворот и масштабирование) $\mathcal{S}_T$, которое преобразует эллипсоиды в сферы (см. Рис. 1.2). Этот же оператор отображает плоскости $\pi \in \mathcal{P} \cup \mathcal{P}_{\text{f}}$ в плоскости $\hat{\pi}$, точку $\mathbf{g}_T^{LS}$, являющуюся



(а) Исходная задача (б) задача после преобразования

Рис. 1.2. Исходная задача с ограничениями и задача после преобразования.

решением задачи минимизации (1.22) без ограничений, в $\hat{\mathbf{g}}_T^{LS}$. В результате задача минимизации с ограничениями сводится к проекции на пересечение отображений полос и полупространств. В алгоритме 1.1 для поиска решения $\mathbf{g}_T$ исходной задачи минимизации (1.22) с ограничениями используется решение преобразованной задачи.

Используя (1.20) и (1.21), получаем искомое представление конвективного потока:

$$\mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = A_f^+ C_+ - A_f^- C_- \tag{1.26}$$

где $A_f^\pm$ состоят из линейной (первый порядок аппроксимации) и нелинейной (поправка второго порядка) частей:

$$A_f^\pm = \pm v_f^\pm (1 + \mathbf{g}_\pm \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_\pm) C_\pm^{-1}) \tag{1.27}$$

индекс $\pm$ означает $T_\pm$, и $\mathbf{g}_\pm = \mathbf{g}_{T_\pm}$.

Коэффициенты $A_f^\pm$ неотрицательны для положительной концентрации C_T. Если $C_T = 0$ в ячейке T, тогда $\mathbf{g}_T$ должен быть нулевым вектором, и $A_f^\pm = \pm v_f^\pm \geq 0$.

Алгоритм 1.1 Решение задачи минимизации (1.22) с ограничениями.

Методом наименьших квадратов найти решение $\mathbf{g}_T^{LS}$ задачи (1.22) без ограничений;
если $\mathbf{g}_T^{LS}$ удовлетворяет (1.23), (1.24) и (1.25) **тогда**
    $\mathbf{g}_T = \mathbf{g}_T^{LS}$.
    Выход.
конец если
Назначить $\mathbf{g}_T = \{0, 0, 0\}$.
Применить отображение $\mathcal{S}_T$, чтобы преобразовать эллипсоидальные изоповерхности в сферические, и определить $\hat{\pi} = \mathcal{S}_T(\pi)$, $\hat{\mathbf{g}}_T^{LS} = \mathcal{S}_T(\mathbf{g}_T^{LS})$ и $\hat{\mathbf{g}}_T = \mathcal{S}_T(\mathbf{g}_T)$.
для $\pi \in \mathcal{P} \cup \mathcal{P}_\mathrm{f}$ **начало цикла**
    если $\begin{array}{l} \pi = \pi_k^{\pm} \in \mathcal{P}, \text{ и } \mathbf{g}_T^{LS} \text{ не удовлетворяет (1.23), или} \\ \pi = \pi_f \in \mathcal{P}_\mathrm{f}, \text{ и } \mathbf{g}_T^{LS} \text{ не удовлетворяет (1.24) или (1.25)} \end{array}$ **тогда**
        Спроектировать $\hat{\mathbf{g}}_T^{LS}$ на плоскость $\hat{\pi}$ в точку $\hat{\mathbf{g}}'_T$.
        если $\mathcal{S}_T^{-1}(\hat{\mathbf{g}}'_T)$ удовл. (1.23)–(1.25) и $|\hat{\mathbf{g}}_T^{LS} - \hat{\mathbf{g}}'_T| < |\hat{\mathbf{g}}_T^{LS} - \hat{\mathbf{g}}_T|$ **тогда**
            $\hat{\mathbf{g}}_T = \hat{\mathbf{g}}'_T$.
        конец если
    конец если
конец цикла
для каждой пары $\pi, \pi' \in \mathcal{P} \cup \mathcal{P}_\mathrm{f}$ **начало цикла**
    Найти линию пересечения $g = \pi \cap \pi'$.
    Выделить отрезок s на g, где все ограничения выполнены.
    если отрезок s не пуст **тогда**
        Спроектировать $\hat{\mathbf{g}}_T^{LS}$ на отрезок $\mathcal{S}_T(s)$ в точку $\hat{\mathbf{g}}''_T$.
        если $|\hat{\mathbf{g}}_T^{LS} - \hat{\mathbf{g}}''_T| < |\hat{\mathbf{g}}_T^{LS} - \hat{\mathbf{g}}_T|$ **тогда** $\hat{\mathbf{g}}_T = \hat{\mathbf{g}}''_T$.
        конец если
    конец если
конец цикла
Применить обратное отображение $\mathbf{g}_T = \mathcal{S}_T^{-1}(\hat{\mathbf{g}}_T)$.

1.2.3. Дискретизация потоков на внешних гранях

Рассмотрим внешнюю грань с граничным условием Неймана $f \in \mathcal{F}_B^N$ и ячейку T, которой она принадлежит. Диффузионный поток через эту грань есть

$$\mathbf{q}_{f,d}^h \cdot \mathbf{n}_f = \bar{g}_{N,f}|f| \tag{1.28}$$

где $\bar{g}_{N,f}$ – среднее значение g_N на грани f. Можем считать грань f ячейкой с нулевым объемом. Заменяя C_+ и C_- на C_T и C_f, соответственно, получим из формулы (1.26) схему дискретизации конвективного потока:

$$\mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = A_f^+ C_T. \tag{1.29}$$

Таким образом, уравнение для полного потока принимает следующий вид

$$(\mathbf{q}_{f,d}^h + \mathbf{q}_{f,a}^h) \cdot \mathbf{n}_f = \bar{g}_{N,f}|\mathbf{n}_f| + A_f^+ C_T, \quad f \in \mathcal{F}_B^N \tag{1.30}$$

где коэффициент A_f^+ неотрицателен для неотрицательных концентраций.

Теперь рассмотрим внешнюю грань с граничным условием Дирихле $f \in \mathcal{F}_B^D$ и содержащую ее ячейку T. Для грани f определим

$$C_f = \bar{g}_{D,f} = \frac{1}{|f|} \int\limits_f g_D \, \mathrm{d}s \tag{1.31}$$

для каждого ребра $e \in \mathcal{E}_f$ грани f:

$$C_e = \bar{g}_{D,e} = \frac{1}{|e|} \int\limits_e g_D \, \mathrm{d}x. \tag{1.32}$$

Схема дискретизации диффузионного потока представляется формулой

$$\mathbf{q}_{f,d}^h \cdot \mathbf{n}_f = D_f^+ C_T - D_f^- C_f, \tag{1.33}$$

где коэффициенты $D_f^\pm$ даны по формуле (1.15). Дискретизация конвективного потока зависит от направления скорости на грани f. Если $f \in \mathcal{F}_B^{\text{out}}$, для дискретизации используются формулы (1.27) и (1.29). Если $f \in \mathcal{F}_B^{\text{in}}$, используем

$$\mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = -A_f^- \tag{1.34}$$

где

$$A_f^- = -\bar{g}_{D,f} v_f \equiv -\bar{g}_{D,f} v_f^- \geq 0. \tag{1.35}$$

1.2.4. Восстановление дискретного решения во вспомогательных точках коллокации

Коэффициенты $D_f^\pm$ для диффузионного потока в (1.15), (1.19) и (1.28) могут зависеть от значений дискретного решения C_f и C_e во вспомогательных точках коллокации $\mathbf{x}_f$, $f \in \mathcal{F}_B \cup \mathcal{F}_J$ и $\mathbf{x}_e$, $e \in \mathcal{E}_f$. С другой стороны, дискретная система для метода конечных объемов формируется только для концентраций C_T в основных точках коллокации. Значения C_f, C_e, $f \in \mathcal{F}_B^D$, $e \in \mathcal{E}_f$ вычисляются по формулам (1.31), (1.32) в соответствии с граничными условиями Дирихле. Значения C_f, $f \in \mathcal{F}_J$ восстанавливаются по формуле (1.18). Оставшиеся значения C_f, C_e, $f \in \mathcal{F}_B^N$, $e \in \mathcal{E}_f$, $e \notin \Gamma_D$ и C_e, $e \in \mathcal{E}_f$, $e \notin \Gamma_D$, $f \in \mathcal{F}_J$ должны восстанавливаться по имеющимся данным.

Значения концентрации на внешних гранях с граничным условием Неймана восстанавливаются из концентраций C_T по формулам (1.28) и (1.33). Коэффициенты $D_f^\pm$ могут зависеть от значений в основных точках коллокации и C_f, $f \in \mathcal{F}_J \cup \mathcal{F}_B$ и C_e, $e \in \mathcal{E}_f$. По этой причине концентрации C_f на внутренних гранях f, $f \in \mathcal{F}_J \cup \mathcal{F}_B$ интерполируются по данным в ячейках, исходя из *физических* соотношений, таких как непрерывность полного потока или заданный диффузионный поток на грани. При этом коэффициенты интерполяции, в свою очередь, могут зависеть от значений концентрации C_e на ребрах $\mathbf{x}_e$, $e \in \mathcal{E}_f$, $f \in \mathcal{F}_J \cup \mathcal{F}_B^N$, $e \notin \Gamma_D$. Для каждого такого ребра предлагается вычислять значение C_e арифметическим осреднением концентраций

C_f со всех граней $f \in \mathcal{F}_B^N \cup \mathcal{F}_J$, содержащих ребро e. Точки коллокации на ребрах являются единственными, значения в которых вычисляются на основании математических, а не физических соображений.

1.3. Сеточная система и свойства дискретного решения

Подставим двухточечную схему дискретизации (1.4) с неотрицательными коэффициентами $M_f^{\pm} = D_f^{\pm} + A_f^{\pm}$, полученными из (1.15), (1.19) и (1.27), в уравнение баланса (1.3) и исключим концентрации на границе. Получим нелинейную систему из $N_{\mathcal{T}}$ уравнений с $N_{\mathcal{T}}$ неизвестными:

$$\mathbb{M}(C, C_f, C_e)\; C = \mathbb{G}(C, C_f, C_e) \tag{1.36}$$

где C – вектор дискретных концентраций в основных точках коллокации, а C_f и C_e – векторы значений концентрации во вспомогательных точках на гранях и ребрах, соответственно. Матрица $\mathbb{M}(C, C_f, C_e)$ составляется из матриц 2×2

$$\mathbb{M}_f(C, C_f, C_e) = \begin{pmatrix} M_f^{+}(C, C_f, C_e) & -M_f^{-}(C, C_f, C_e) \\ -M_f^{+}(C, C_f, C_e) & M_f^{-}(C, C_f, C_e) \end{pmatrix} \tag{1.37}$$

для внутренних граней и 1×1 матриц $\mathbb{M}_f(C, C_f, C_e) = M_f^{+}(C, C_f, C_e)$ для внешних граней, на которых задано условие Дирихле. Вектор правой части $\mathbb{G}(C, C_f, C_e)$ строится по граничным данным и внешним источникам:

$$\mathbb{G}_T(C, C_f, C_e) = \int\limits_T g \,\mathrm{d}x + \sum_{f \in \mathcal{F}_B^D \cap \partial T} M_f^{-}(C, C_f, C_e)\bar{g}_{D,f} - \sum_{f \in \mathcal{F}_B^N \cap \partial T} |f| \bar{g}_{N,f} \quad \forall T \in \mathcal{T}. \tag{1.38}$$

При $g(x) \geq 0$, $g_D \geq 0$ и $g_N \leq 0$, компоненты вектора $\mathbb{G}$ неотрицательны. Для решения нелинейной системы (1.36) используется метод Пикара. Метод составления и решения алгебраической системы описан в Алгоритме 1.2.

Линейная система на Шаге 8 с несимметричной матрицей $\mathbb{M}(C^k, C_f^k, C_e^k)$ может быть решена, например, стабилизированным методом бисопряженных

Алгоритм 1.2 Составление и решение нелинейной системы (1.36).

1: Для каждой пары ячейка-грань $T \to f$, $f \in \mathcal{F}_T$ и каждой пары грань-ячейка $f \to T$, $f \in \mathcal{F}_J \cup \mathcal{F}_B$ найти векторы $\mathbf{t}_{f,1}$, $\mathbf{t}_{f,2}$, $\mathbf{t}_{f,3}$, удовлетворяющие условиям (1.5), (1.6) и (1.8), (1.6), соответственно.

2: Выбрать начальные векторы $C^0 \in \Re^{N_{\mathcal{T}}}$ и $C_f^0 \in \Re^{N_{\mathcal{F}_J} + N_{\mathcal{F}_B^N}}$ с неотрицательными значениями и порог $\varepsilon_{\rm non} > 0$.

3: Вычислить концентрации C_e^0 во вспомогательных точках коллокации на ребрах, используя (1.32) или арифметическое осреднение с граней, содержащих ребро C_f^0.

4: **для** $k = 0, \ldots,$ **начало цикла**

5: Составить общую матрицу $\mathbb{M}_k = \mathbb{M}(C^k, C_f^k, C_e^k)$ из матриц $\mathbb{M}_f(C^k, C_f^k, C_e^k)$ для каждой грани, используя (1.15), (1.19) и (1.27).

6: Вычислить вектор правой части $\mathbb{G}^k = \mathbb{G}(C^k, C_f^k, C_e^k)$, используя (1.38).

7: Остановиться, если $\|\mathbb{M}_k C^k - \mathbb{G}^k\| \le \varepsilon_{\rm non} \|\mathbb{M}_0 C^0 - \mathbb{G}^0\|$.

8: Решить $\mathbb{M}_k C^{k+1} = \mathbb{G}^k$.

9: Вычислить концентрации C_f^{k+1} во вспомогательных точках коллокации на гранях $f \in \mathcal{F}_J \cup \mathcal{F}_B$, используя (1.18), (1.28), (1.31), (1.33), и значения C^{k+1}, C_f^k, C_e^k.

10: Вычислить концентрации C_e^{k+1} во вспомогательных точках коллокации на ребрах, используя (1.32) арифметическое осреднение с соседних граней C_f^{k+1}.

11: **конец цикла**

градиентов с предобуславливателем (BiCGStab) [92]. Итерации метода останавливаются, когда относительная норма невязки становится меньше ε_{lin}.

Отметим, что, поскольку метод точен на линейных функциях, можно ожидать асимптотически второй порядок сходимости для концентрации и первый порядок для потоков.

Следующие две теоремы показывают, что решение (1.36) неотрицательно при условии, что оно существует, и что значения концентрации на k-й итерации метода Пикара неотрицательны, если $\varepsilon_{\text{lin}} = 0$. Доказательства двумерных аналогов теорем можно найти в [64].

Теорема 1.1. *Пусть* $\Gamma_N = \emptyset$, $\mathcal{F}_B^D \equiv \mathcal{F}_B$, $g \geq 0$, $\operatorname{div} \mathbf{v} \geq 0$ *в* Ω, $g_D \geq 0$ *на* $\Gamma_D \equiv \partial\Omega$ *и решение* C *для* (1.36) *существует. Тогда* $C \geq 0$.

Доказательство. Докажем от противного.

Рассмотрим ячейку T с наименьшим значением концентрации C_T и предположим, что $C_T < 0$. Без ограничения общности считаем, что векторы $\mathbf{n}_f$ внешние для T, то есть $T = T_+$ в формулах для потоков. Поскольку C_T минимально, концентрация на ячейке T восполняется константой: $\mathcal{R}_T \equiv C_T$. По определению конвективного потока:

$$\sum_{f \in \mathcal{F}_T} \mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = \sum_{f \in \mathcal{F}_T \setminus \mathcal{F}_B^{\text{in}}} \left(v_f^+ C_T + v_f^- \, \mathcal{R}_{T_f^-}(\mathbf{x}_f) \right) + \sum_{f \in \mathcal{F}_T \cap \mathcal{F}_B^{\text{in}}} v_f^- \bar{g}_{D,f},$$

где T_f^- – соседняя ячейка, разделяющая грань f. Напомним, что $v_f = v_f^+ + v_f^-$ на внутренних гранях, и $v_f^- = v_f$ на внешних гранях $\mathcal{F}_B^{\text{in}}$. Добавляя и вычитая $v_f^- C_T$, получим

$$\sum_{f \in \mathcal{F}_T} \mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = C_T \sum_{f \in \mathcal{F}_T} v_f + \sum_{f \in \mathcal{F}_T \setminus \mathcal{F}_B^{\text{in}}} v_f^- (\mathcal{R}_{T_f^-}(\mathbf{x}_f) - C_T) + \sum_{f \in \mathcal{F}_T \cap \mathcal{F}_B^{\text{in}}} v_f^- (\bar{g}_{D,f} - C_T).$$

Из уравнения баланса (1.3) получим

$$-C_T \sum_{f \in \mathcal{F}_T} v_f + \int\limits_T g \,\mathrm{d}x - \sum_{f \in \mathcal{F}_T} \mathbf{q}_{f,d}^h \cdot \mathbf{n}_f - \sum_{f \in \mathcal{F}_T \setminus \mathcal{F}_B^{\mathrm{in}}} v_f^- (\mathcal{R}_{T_f^-}(\mathbf{x}_f) - C_T) - \\ - \sum_{f \in \mathcal{F}_T \cap \mathcal{F}_B^{\mathrm{in}}} v_f^- (\bar{g}_{D,f} - C_T) = 0. \qquad (1.39)$$

Имеем

$$\sum_{f \in \mathcal{F}_T} v_f = \int\limits_{\partial T} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_f \,\mathrm{d}s = \int\limits_T \mathrm{div}(\mathbf{v}) \,\mathrm{d}x \geq 0,$$

и, в предположении $C_T < 0$,

$$C_T \sum_{f \in \mathcal{F}_T} v_f \leq 0.$$

Из того, что C_T минимально, следует $\mathcal{R}_{T_f^-}(\mathbf{x}_f) \geq C_T$, а поскольку $C_T < 0$, то $\bar{g}_{D,f} > C_T$. Пусть $\widetilde{C}$ – вектор неотрицательных значений, полученный добавлением ко всем дискретным концентрациям положительной константы $-C_T$. Для $f \in \mathcal{F}_T$ получим

$$\mathbf{q}_{f,d}^h(\widetilde{C}) \cdot \mathbf{n}_f = D_f^+ \widetilde{C}_T - D_f^- \widetilde{C}_{T_f^-} = -D_f^- \widetilde{C}_{T_f^-} \leq 0.$$

Как отмечалось в Замечании 1.2.1, дискретный диффузионный поток для C равен дискретному потоку для $\widetilde{C}$. Таким образом, $\mathbf{q}_{f,d}^h \cdot \mathbf{n}_f \leq 0$ и

$$\sum_{f \in \mathcal{F}_T} \mathbf{q}_{f,d}^h \cdot \mathbf{n}_f \leq 0.$$

Поскольку $v_f^- \leq 0$, получим, что все члены в (1.39) неотрицательны и должны быть равны нулю. Следовательно

$$0 = \sum_{f \in \mathcal{F}_T} \mathbf{q}_{f,d}^h(\widetilde{C}) \cdot \mathbf{n}_f = -\sum_{f \in \mathcal{F}_T} D_f^- \widetilde{C}_{T_f^-}$$

что означает, что $C_{T_f^-} = C_T$ для всех $f \in \mathcal{F}_T$. Из этого следует, что вместо T можно рассматривать любую соседнюю ячейку T_f^-. Поскольку сетка $\mathcal{T}$

связна по граням, делаем вывод, что C - постоянна на $\mathcal{T}$. Из $\operatorname{div} \mathbf{v} \geq 0$, следует, что $\mathcal{F}_B^{\text{in}} \neq \emptyset$. Рассмотрим ячейку T с гранью $f \in \mathcal{F}_B^{\text{in}}$, и из $(\bar{g}_{D,f} - C_T) = 0$ получим, что C_T неотрицательна. Это противоречит предположению и доказывает теорему. $\square$

Теорема 1.2. *Пусть $g \geq 0$, $g_D \geq 0$, $g_N \leq 0$ и $\Gamma_D \neq \emptyset$ в (1.1). Если $C^0 \geq 0$ и линейные системы в методе Пикара решаются точно, тогда $C^k \geq 0$ для $k \geq 1$.*

Доказательство.

Покажем, что матрица $\mathbb{M}_k$ является М-матрицей при условии $C^k \geq 0$. Значения концентраций во вспомогательных точках коллокации восстанавливаются неотрицательными: $C_f^k \geq 0$ и $C_e^k \geq 0$. Кроме того, коэффициенты $D_f^\pm$ и $A_f^\pm$ по построению неотрицательны, следовательно $M_f^\pm = D_f^\pm + A_f^\pm \geq 0$. Матрица $\mathbb{M}_k$ составляется суммированием матриц $\mathbb{M}_f(C^k, C_f^k, C_e^k)$ из (1.37) по всем граням сетки, следовательно ее диагональные элементы неотрицательны, внедиагональные – неположительны, сумма элементов в каждом столбце неотрицательна, а для граней с граничным условием типа Дирихле – сумма положительна. Поскольку расчетная сетка связна по граням, матрицы $\mathbb{M}_k$ и $\mathbb{M}_k^T$ неприводимы.

При описанных выше условиях в [94] доказывается, что матрица $\mathbb{M}_k^T$ является М-матрицей, и, следовательно, все элементы $(\mathbb{M}_k^T)^{-1}$ положительны. Поскольку транспонирование и обращение коммутируют, то все элементы $(\mathbb{M}_k)^{-1}$ также положительны, и $C^{k+1} = \mathbb{M}_k^{-1}\mathbb{G}_k \geq 0$ при неотрицательной правой части $\mathbb{G}_k$, что доказывает теорему. $\square$

Замечание 1.3.1. *Теоремы 1.1 и 1.2 также справедливы и для линейной схемы дискретизации конвективного потока:*

$$\mathbf{q}_{f,a}^h \cdot \mathbf{n}_f = A_f^+ C_+ - A_f^- C_-, \qquad A_f^\pm = \pm v_f^\pm.$$

Эти утверждения позволяют нам называть предложенный метод монотонным, хотя он и может не удовлетворять дискретному принципу максимума, см. раздел 1.4.4.

1.4. Численные эксперименты

В экспериментах, посвященных анализу сходимости, полагаем $\Gamma_N = \emptyset$. Для задач с доминирующей конвекцией это позволяет подбирать аналитические решения такие, что все компоненты вектора правой части неотрицательны, $\mathbb{G}(C) \geq 0$, для любого неотрицательного вектора C.

Будем использовать следующие дискретные L^2-нормы для измерения относительных ошибок дискретизации для концентрации c и полного потока $\mathbf{q}$:

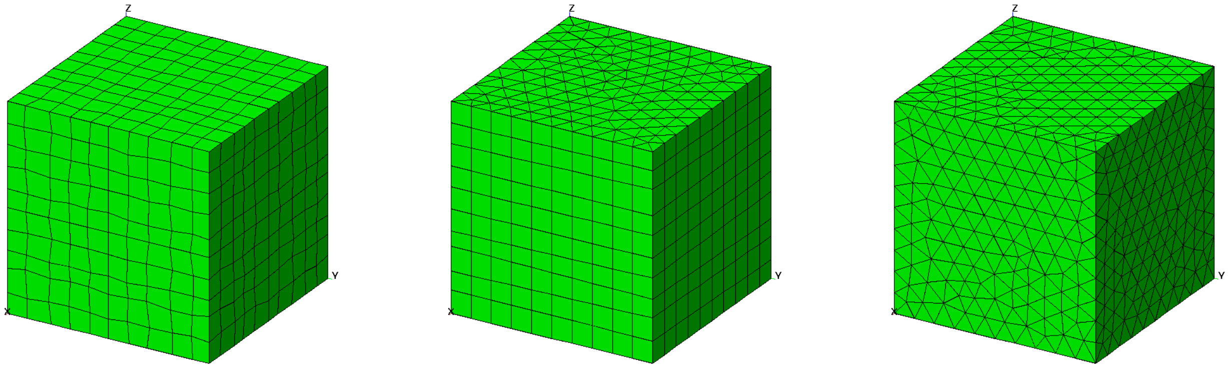
$$\varepsilon_2^c = \left[\frac{\sum\limits_{T\in\mathcal{T}} \big(c(\mathbf{x}_T) - C_T\big)^2 |T|}{\sum\limits_{T\in\mathcal{T}} \big(c(\mathbf{x}_T)\big)^2 |T|}\right]^{1/2}, \qquad \varepsilon_2^q = \left[\frac{\sum\limits_{f\in\mathcal{F}_I\cup\mathcal{F}_B} \big((\mathbf{q}_f - \mathbf{q}_f^h)\cdot\mathbf{n}_f\big)^2 |V_f|}{\sum\limits_{f\in\mathcal{F}_I\cup\mathcal{F}_B} \big(\mathbf{q}_f\cdot\mathbf{n}_f\big)^2 |V_f|}\right]^{1/2}$$

где $|V_f|$ – это среднее арифметическое объемов ячеек, содержащих грань f. Нелинейные итерации останавливаются, когда относительная невязка падает до $\varepsilon_{\text{non}} = 10^{-7}$. Критерием остановки для решения линейных систем является падение относительной невязки до $\varepsilon_{\text{lin}} = 10^{-12}$. Для вычисления порядка сходимости будет использоваться алгоритм линейной регрессии.

Ниже рассмотрим три класса многогранных квазиравномерных сеток на единичном кубе $[0, 1]^3$ (рис. 1.3).

Гексаэдральные сетки строятся на основе кубических сеток путем смещения узлов. Берется равномерная кубическая сетка с шагом h. Узлы, лежащие в плоскостях $x = 0.5$, $y = 0.5$ и $z = 0.5$, смещаются случайным образом в пределах окружности радиуса $0.2h$ на соответствующей плоскости. Остальные узлы сетки однозначно восстанавливаются по смещенным узлам, при условии, что грани ячеек плоские.

Призматические сетки имеют в основании квазиравномерную неструктурированную треугольную сетку и получаются тензорным произведением двумерной xy-сетки на одномерную z-сетку. Обе сетки имеют одинаковый шаг h. После построения начальной призматической сетки ее z-плоскости наклоняются таким образом, чтобы они не пересекались, а высота ячеек была не меньше $0.75h$ и не больше $1.25h$.



(а) (б) (в)

Рис. 1.3. Примеры гексаэдральной (а), треугольной призматической (б), и тетраэдральной (в) сеток.

Тетраэдральные сетки являются неструктурированными квазиравномерными сетками с шагом сетки h. В последовательности сеток нет иерархической связи между грубыми и мелкими сетками.

На рис. 1.3 представлены примеры сеток трех рассмотренных классов.

1.4.1. Анализ сходимости на гладком решении

Первый эксперимент посвящен изучению сходимости метода на аналитических решениях. Рассмотрим случай гладкого решения на последовательностях третраэдральных, призматических и гексаэдральных сеток в единичном кубе. Пусть точное решение, поле скорости и тензор диффузии имеют вид:

$$c(x,y,z) = x\cos\left(\frac{\pi y}{2}\right) + \frac{\pi y}{2}, \qquad \mathbf{v} = (1,1,1)^T, \qquad \mathbb{K} = K\mathbb{I},$$

где $\mathbb{I}$ - единичная матрица.

	Гексаэдральные		Призматические		Тетраэдральные	
h	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q
1/10	4.54e-4	3.64e-3	1.68e-4	2.01e-3	3.69e-4	8.59e-3
1/20	1.13e-4	1.24e-3	4.17e-5	8.09e-4	1.04e-4	3.88e-3
1/40	2.86e-5	4.15e-4	1.02e-5	2.51e-4	2.48e-5	1.89e-3
порядок	1.99	1.57	2.02	1.50	1.95	1.09

Таблица 1.1. Ошибки сеточного решения и порядок сходимости для задачи с доминирующей диффузией ($K = 1$).

	Гексаэдральные		Призматические		Тетраэдральные	
h	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q
1/10	8.14e-4	8.53e-4	7.76e-4	4.80e-4	2.04e-3	1.88e-3
1/20	1.90e-4	2.08e-4	1.24e-4	9.90e-5	3.65e-4	3.38e-4
1/40	4.50e-5	4.97e-5	2.00e-5	2.38e-5	7.02e-5	7.51e-5
порядок	2.09	2.05	2.64	2.17	2.43	2.32

Таблица 1.2. Ошибки сеточного решения и порядок сходимости для задачи с доминирующей конвекцией ($K = 0.01$).

Источник f и граничные условия Дирихле g_D подбираются в соответствии с точным решением.

Таблица 1.1 показывает относительные L^2-нормы ошибок сеточного решения и порядок сходимости для задачи с доминирующей диффузией ($K = 1$), а Таблица 1.2 содержит относительные L^2-нормы ошибок и порядок сходимости для задачи с доминирующей конвекцией ($K = 0.01$).

Для задачи с доминирующей диффузией порядок сходимости для концентрации близок ко второму, в то время как порядок сходимости для потоков выше первого. В случае задачи с доминирующей конвекцией порядки сходимости для концентрации и потоков оказываются выше второго.

1.4.2. Анализ сходимости на задаче с разрывными тензором диффузии и полем скорости

Далее рассмотрим сходимость к решению задачи с разрывными тензором диффузии и полем скорости. Пусть $\Omega = (0,1)^3$ разбита на две половины: $\Omega^{(1)} = \Omega \cap \{x < 0.5\}$, $\Omega^{(2)} = \Omega \cap \{x > 0.5\}$, с границей, проходящей в плоскости $x = 0.5$, с тензором $\mathbb{K}$ и скоростью $\mathbf{v}$, претерпевающими разрыв по этой границе (см рис. 1.4). Пусть $\mathbb{K}(\mathbf{x}) = \mathbb{K}^{(i)}$ для $\mathbf{x} \in \Omega^{(i)}$, где

$$\mathbb{K}^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbb{K}^{(2)} = \begin{pmatrix} 10 & 3 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и поле скорости $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^{(i)}$ для $\mathbf{x} \in \Omega^{(i)}$, где

$$\mathbf{v}^{(1)} = (1, 1, 0)\,, \qquad \mathbf{v}^{(2)} = (1, 0.3, 0)\,.$$

Спектральное разложение $\mathbb{K}^{(i)} = (W^{(i)})^T \Lambda^{(i)} W^{(i)}$ демонстрирует большой скачок собственных чисел и направлений собственных векторов тензора $\mathbb{K}(\mathbf{x})$ в плоскости разрыва:

$$\Lambda^{(1)} = \mathrm{diag}\{4, 2, 1\}, \qquad \Lambda^{(2)} \approx \mathrm{diag}\{10.908, 0.092, 1\}$$

$$W^{(1)} \approx \begin{pmatrix} 0.707 & 0.707 & 0 \\ -0.707 & 0.707 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad W^{(2)} \approx \begin{pmatrix} 0.957 & 0.290 & 0 \\ -0.290 & 0.957 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

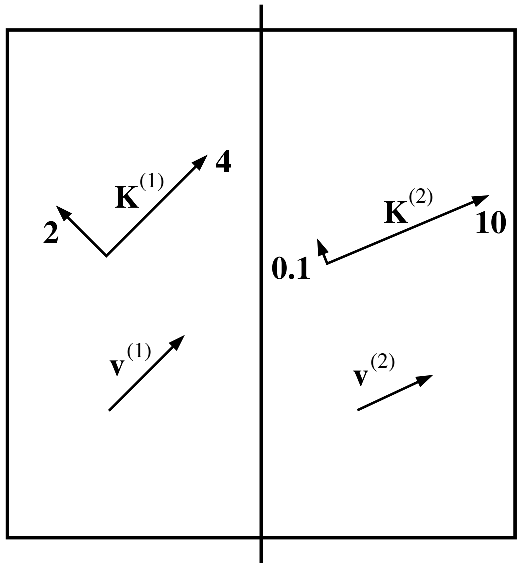


Рис. 1.4. Тензор $\mathbb{K}$ и скорость $\mathbf{v}$, разрывающиеся вдоль плоскости $x = 0.5$.

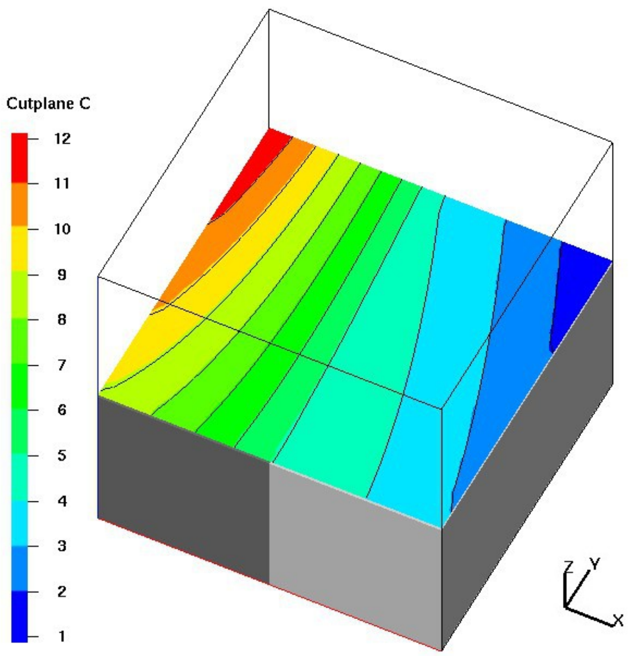


Рис. 1.5. Изолинии решения в плоскости xy для задачи с разрывными тензором диффузии и полем скорости.

	Гексаэдральные		Призматические		Тетраэдральные	
h	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q	ε_2^C	ε_2^q
1/10	1.46e-3	2.70e-3	6.78e-4	2.38e-3	8.42e-4	5.65e-3
1/20	3.76e-4	9.23e-4	1.90e-4	7.93e-4	2.36e-4	2.72e-3
1/40	9.58e-5	3.16e-4	5.08e-5	3.05e-4	5.96e-5	1.35e-3
порядок	1.96	1.55	1.87	1.48	1.91	1.03

Таблица 1.3. Ошибки сеточного решения и порядок сходимости для задачи с разрывными тензором диффузии и полем скорости.

Определим следующее точное решение задачи (1.1) с граничными условиями Дирихле $\Gamma_D = \partial\Omega$:

$$c(\mathbf{x}) = \begin{cases} 9 - 4x^2 - y^2 - 8xy - 6x + 4y, & \mathbf{x} \in \Omega^{(1)} \\ 6 - 2x^2 - y^2 - 2xy - x + y, & \mathbf{x} \in \Omega^{(2)} \end{cases}$$

тогда правая часть равна

$$g(\mathbf{x}) = \begin{cases} 44 - 16x - 10y, & \mathbf{x} \in \Omega^{(1)} \\ 53.3 - 4.6x - 2.6y, & \mathbf{x} \in \Omega^{(2)}. \end{cases}$$

Численные эксперименты проводились на гексаэдральных, призматических и тетраэдральных сетках, определенных выше. Сетки строились таким образом, чтобы граница $x = 0.5$ точно приближалась гранями сетки. Изолинии решения в плоскости xy показаны на рис. 1.5. Результаты экспериментов, приведенные в таблице 1.3, показывают, что наличие разрыва в поле скорости и тензоре диффузии не влияет на порядок сходимости на всех рассматриваемых классах сеток.

1.4.3. Монотонность и диссипативность схемы

Рассмотрим сингулярно возмущенную задачу конвекции-диффузии с разрывными граничными условиями Дирихле. Разрыв в решении на границе порождает внутренний слой. Кроме того, на границе возникают экспоненциальные пограничные слои. Данный тестовый пример специально разработан для анализа схем дискретизации для задач с доминирующей конвекцией (см. [55, 56]). Следуя [56], возьмем

$$\mathbf{v} = \left(\cos\frac{\pi}{3}, -\sin\frac{\pi}{3}, 0\right), \qquad \mathbb{K} = \nu\mathbb{I}, \qquad \nu = 10^{-8}.$$

Граничные условия Дирихле задаются следующим образом (см. рис. 1.6 (слева)):

$$c(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{если} \quad x = 1 \quad \text{или} \quad y \le 0.7 \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Для того, чтобы сохранить независимость решения от z, введем однородные условия Неймана на границах, лежащих в плоскостях $z = 0$ и $z = 1$.

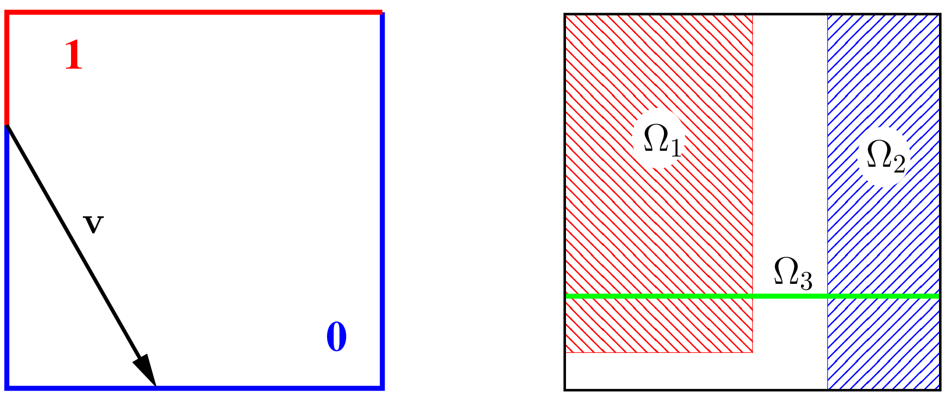
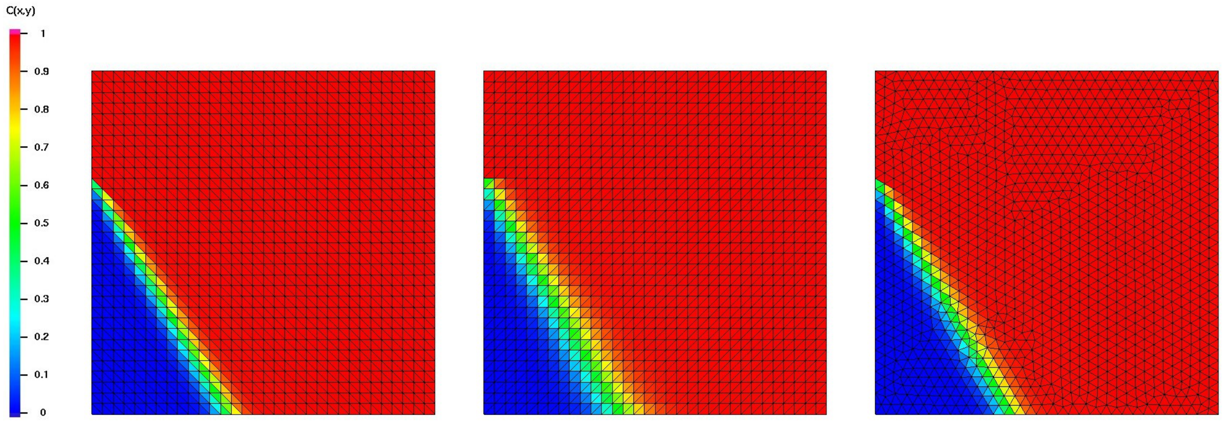


Рис. 1.6. Слева: схематичное представление условий задачи, справа: расположение областей Ω_1, Ω_2 и Ω_3.

Точное решение имеет два пограничных слоя на границах, лежащих в плоскостях $y = 0$ и $x = 1$. Кроме того, имеется внутренний слой вдоль плоскости, проходящей по направлению поля скорости через линию $(0,\, 0.7,\, z)$.

Численное решение неотрицательно во всех экспериментах, что соответствует Теоремам 1.1 и 1.2.

Вычисления проводятся на призматических сетках, в основании которых лежат структурированные (см. рис. 1.7а и 1.7б) и неструктурированные (см.



(а) Сетка M1 (б) Сетка M2 (в) Сетка M3

Рис. 1.7. Численное решение для сингулярно возмущенной задачи конвекции-диффузии ($h = 1/32$).

рис. 1.7в) треугольные сетки. Структурированные сетки получаются путем разбиения квадратных сеток северо-западной или северо-восточной диагоналями, соответственно. Эффективный шаг сетки составляет $h = 1/64$ для экспериментов и $h = 1/32$ для рисунков.

Для того, чтобы измерить качество численного решения, авторы [56] предложили несколько величин, с помощью которых можно измерить осцилляции и численную вязкость, вызываемые схемой дискретизации. Распространим двумерные величины, введенные в [56], на трехмерный случай за счет рассмотрения только одного сеточного слоя $0.5 - h \le z \le 0.5$.

Зададим области Ω_1, Ω_2 и Ω_3 (рис. 1.6 (справа)):

$$\Omega_1 = \{T \in \mathcal{T} : \mathbf{x}_T = (x_T, y_T, z_T), \quad x_T \le 0.5, \quad y_T \ge 0.1, \quad 0.5 - h \le z_T \le 0.5\},$$

$$\Omega_2 = \{T \in \mathcal{T} : \mathbf{x}_T = (x_T, y_T, z_T), \quad x_T \ge 0.7, \quad 0.5 - h \le z_T \le 0.5\},$$

и Ω_3 обозначает полосу ячеек, пересекающих линию $y = 0.25$,

$$\Omega_3 = \left\{T \in \mathcal{T} : \mathbf{x}_T = (x_T, y_T, z_T), \quad |y_T - 0.25| \le |T|^{1/3}, \quad 0.5 - h \le z \le 0.5\right\}.$$

Сначала введем величину (1.40), которая характеризует общую сумму осцилляций сеточного решения вне отрезка $[0, 1]$ в области Ω_1, покрывающей внутренний слой:

$$\mathrm{osc}_{\mathrm{int}} \equiv \left(\sum_{T\in\Omega_1} \left(\min\{0, C_T\}\right)^2 + \left(\max\{0, C_T - 1\}\right)^2 \right)^{1/2}. \qquad (1.40)$$

Далее введем величину (1.41), которая измеряет сумму осцилляций на пограничном слое, лежащем в Ω_2:

$$\mathrm{osc}_{\mathrm{exp}} \equiv \left(\sum_{T\in\Omega_2} \left(\max\{0, C_T - 1\}\right)^2 \right)^{1/2}. \qquad (1.41)$$

Наконец введем две величины (1.42) и (1.43), которые позволяют оценить толщину пограничного и внутреннего слоев, соответственно:

$$\mathrm{smear}_{\mathrm{exp}} \equiv \left(\sum_{T\in\Omega_2} \left(\min\{0, C_T - 1\}\right)^2 \right)^{1/2} \qquad (1.42)$$

$$\mathrm{smear}_{\mathrm{int}} \equiv x_2 - x_1, \qquad (1.43)$$

где

$$x_1 = \min_{T\in\Omega_3,\, C_T\geq 0.1} x_T, \qquad x_2 = \max_{T\in\Omega_3,\, C_T\leq 0.9} x_T.$$

Для непрерывного решения величины $\mathrm{osc}_{\mathrm{int}} = \mathrm{osc}_{\mathrm{exp}} = 0$, а $\mathrm{smear}_{\mathrm{int}}$ и $\mathrm{smear}_{\mathrm{exp}}$ зависят только от коэффициента диффузии, и для рассматриваемой задачи они должны быть очень малы. Для численного решения малые значения величин (1.40)–(1.43) характеризуют практически безосцилляционное и бездиссипативное дискретное решение. Чем меньше ширина внутреннего и пограничного слоев в численном решении, тем меньший диссипативный эффект вносит рассматриваемая схема дискретизации.

Метод	osc_{int}	osc_{exp}	$smear_{\mathrm{int}}$	$smear_{\mathrm{exp}}$
SUPG	5.9e-1	2.1e-0	3.7e-2	5.6e-1
MH85	6.1e-13	0	5.8e-2	1.1e-5
FVMON	7.8e-8	1.6e-6	4.7e-2	1.7e-5

Таблица 1.4. Сравнение осцилляций и диссипативности схем на сетке M1 (см. рис. 1.7a).

Метод	osc_{int}	osc_{exp}	$smear_{\text{int}}$	$smear_{\text{exp}}$
SUPG	6.9e-1	3.8e-0	6.2e-2	1.7e-0
MH85	0	0	1.0e-1	1.2e-5
FVMON	2.1e-11	1.7e-7	1.1e-1	1.8e-5

Таблица 1.5. Сравнение осцилляций и диссипативности схем на сетке M2 (см. рис. 1.7б).

Метод	osc_{int}	osc_{exp}	$smear_{\text{int}}$	$smear_{\text{exp}}$
SUPG	5.9e-1	1.5e-0	5.5e-2	4.1e-1
MH85	4.9e-15	1.8e-14	9.7e-2	5.3e-2
FVMON	3.5e-6	5.0e-7	5.9e-2	2.2e-5

Таблица 1.6. Сравнение осцилляций и диссипативности схем на сетке M3 (см. рис. 1.7в).

В таблицах 1.4, 1.5 и 1.6 приводятся результаты сравнения трех методов. SUPG – традиционный конечно-элементный метод Петрова-Галеркина с противопотоковой стабилизацией – показывает малое размазывание на внутреннем разрыве, однако вызывает заметные нефизичные осцилляции. Конечно-элементный метод MH85, предложенный в [55], напротив, является практически безосцилляционным, однако вносит бóльшую численную диффузию по сравнению с SUPG. По результатам сравнительного анализа, который проводился в [56], метод MH85 был признан лучшим из более чем 20 методов по совокупности введенных выше оценок. Предлагаемый в работе метод (FVMON) по интегральным оценкам, введенным в [56], не уступает лучшему участнику данного сравнения. Бóльшее значение ширины внутреннего разрыва на 'северо-восточной' призматической сетке вызвано бóльшим шагом сетки в направлении, перпендикулярном внутреннему слою.

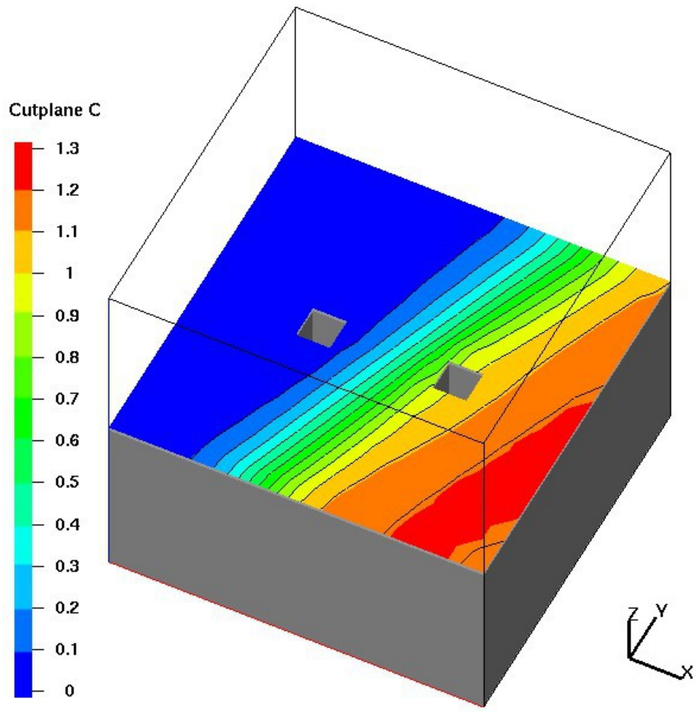


Рис. 1.8. Изолинии решения в плоскости xy для задачи с условием непротекания на внешней границе.

1.4.4. Дискретный принцип максимума

Следующий эксперимент показывает, что предложенный метод конечных объемов может нарушать дискретный принцип максимума даже на кубических сетках, хотя и сохраняет неотрицательность дискретного решения.

Распространим тестовую задачу, исследованную в [27, 46], на уравнение конвекции-диффузии. Рассмотрим единичный куб с двумя вертикальными вырезами P_1, P_2, $\Omega = (0,1)^3 \setminus (P_1 \cup P_2)$, $P_i = S_i \times (0,1)$, $i = 1,2$, $S_1 = [3/11, 4/11] \times [5/11, 6/11]$, $S_2 = [7/11, 8/11] \times [5/11, 6/11]$. Граница области разделяется на внешнюю часть Γ_N, на которой задано однородное условие Неймана, и две внутренних части $\Gamma_{D,1}$, $\Gamma_{D,2}$ на поверхностях вырезов, где задаются граничные условия Дирихле: $g_D(\mathbf{x}) = 0$ для $\mathbf{x} \in \Gamma_{D,1}$ и $g_D(\mathbf{x}) = 1$ для $\mathbf{x} \in \Gamma_{D,2}$.

h	1/11	1/22	1/44	1/88
$\max C$	1.882	1.219	1.041	1.020

Таблица 1.7. Максимальное значение концентрации для задачи с условием непротекания на внешней границе. $h = 1/22$.

Задается анизотропный тензор диффузии

$$\mathbb{K} = R_z(-\theta_z)\mathrm{diag}(k_1, k_2, k_3)R_z(\theta_z) \tag{1.44}$$

где $k_1 = k_3 = 1$, $k_2 = 10^{-3}$, $\theta_z = 67.5°$, и $R_z(\alpha)$ - матрица поворота в плоскости, ортогональной oz, на угол α.

Поле скорости $\mathbf{v} = (10^{-2}, 10^{-2}, 0)$. Согласно дискретному принципу максимума для эллиптических уравнений с частными производными, точное решение должно лежать между 0 и 1 и не может иметь строгих экстремумов на границе Γ_N с условием непротекания.

Дискретное решение на кубической сетке с шагом $h = 1/22$ показано на рис. 1.8. Оно неотрицательно, что отвечает теореме 1.1, но имеет экстремумы больше 1 вблизи границы области. Однако эти экстремумы быстро уменьшаются с измельчением сетки, как показано в таблице 1.7.

Выводы по первой главе

В первой главе разработан и протестирован новый нелинейный монотонный метод конечных объемов на неструктурированных сетках с многогранными ячейками для уравнения конвекции-диффузии с кусочно-непрерывным полным анизотропным тензором диффузии и кусочно-непрерывным полем скорости. Численное решение неотрицательно при условии неположительности граничных условий Неймана и неотрицательности внешних источников и граничных условий Дирихле. Численные эксперименты демонстрируют второй порядок сходимости для концентрации и первый порядок для потоков на задачах с гладким решением как для доминирующей диффузии, так и для доминирующей конвекции. Такой же порядок сходимости сохраняется при решении задач с разрывными коэффициентами.

Глава 2

Численная модель двухфазной фильтрации в неоднородной пористой среде

2.1. Уравнения двухфазной фильтрации

Рассмотрим уравнения двухфазной фильтрации в пористой среде [5, 31, 43, 77]. Фаза, которая смачивает среду больше, чем другая, именуется *смачивающей* и обозначается индексом w. Другая фаза называется *несмачивающей* и имеет индекс o. В модели вода-нефть первая будет смачивающей, а последняя – несмачивающей.

Запишем основные уравнения двухфазной фильтрации:

- Закон сохранения массы в каждой фазе:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\phi\rho_\alpha S_\alpha}{B_\alpha}\right) = -\mathrm{div}\left(\frac{\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha}{B_\alpha}\right) + q_\alpha, \quad \alpha = w, o. \tag{2.1}$$

- Закон Дарси:

$$\mathbf{u}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}\mathbb{K}(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g \nabla z), \quad \alpha = w, o. \tag{2.2}$$

- Уравнение на концентрации жидкостей, заполняющих все пустоты:

$$S_w + S_o = 1. \tag{2.3}$$

- Уравнение на капиллярное давление, определяющее разность давлений между фазами:

$$p_o - p_w = p_c(S_w). \tag{2.4}$$

В этих уравнениях p_α – неизвестное давление фазы α, S_α – неизвестная насыщенность, $\mathbf{u}_\alpha$ – неизвестная скорость Дарси, $\mathbb{K}$ – тензор абсолютной проницаемости, ρ_α – плотность, $\mu_\alpha = \mu_\alpha(p)$ – вязкость, $B_\alpha = B_\alpha(p)$ – фактор сжатия, $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S)$ – относительная проницаемость, $\phi = \phi(p)$ – пористость, g – гравитационный член, z – глубина, а q_α – источник или сток для скважины.

Граничные условия состоят из двух частей:

1. Условие непротекания (однородное условие Неймана) на границе расчетной области;

2. На скважинах задано фиксированное забойное давление p_{bh}.

Рассмотрим упрощенную модель скважин, в которой каждая скважина считается вертикальной с перфорацией в одном сеточном блоке. Источник или сток для скважины определяется по формуле [78]:

$$q_\alpha = \frac{\rho_\alpha k_{r\alpha}}{\mu_\alpha B_\alpha} WI(p_{\text{bh}} - p - \rho_\alpha(z_{\text{bh}} - z)), \tag{2.5}$$

где WI – коэффициент продуктивности скважины, который не зависит от свойств жидкости, а определяется только свойствами среды.

В дискретных аналогах уравнений (2.1) и (2.2) для вычисления фазовых мобильностей $\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}(S_w)}{\mu_\alpha(p_o)B_\alpha(p_o)}$ на грани f_{ij} выбирается среднее значение давления на грани, а насыщенность аппроксимируются “вверх по потоку”:

$$\lambda_\alpha(S) = \begin{cases} \lambda_\alpha(S_i) & \text{если поток направлен из ячейки } i \text{ в ячейку } j, \\ \lambda_\alpha(S_j) & \text{если поток направлен из ячейки } j \text{ в ячейку } i. \end{cases}$$

Считается, что для скважин отсутствует капиллярное давление, и, следовательно, давление воды совпадает с давлением нефти. Фазовые мобильности λ_w и λ_o на скважинах зависят от насыщенности и давления в ячейке, в которой расположена скважина, причем на нагнетательной скважине мобильность закачиваемой воды равна полной мобильности жидкостей в ячейке: $\lambda_{\text{injector}} = (\frac{k_{rw}}{\mu_w B_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o B_o})_{\text{cell}}$.

2.2. Схема, неявная по давлению, явная по насыщенности (IMPES)

Опишем метод интегрирования по времени системы уравнений двухфазной фильтрации, неявный по давлению и явный по насыщенности (IMPES – Implicit Pressure, Explicit Saturation) [5, 43]. Описываемая схема представляет из себя схему расщепления.

В качестве независимых переменных выберем давление нефти и насыщенность воды:

$$p = p_o, \quad S = S_w.$$

Определим полную скорость Дарси: $\mathbf{u} = \mathbf{u}_o + \mathbf{u}_w$.

При фиксированной пористости среды и плотностях жидкостей имеем:

$$\frac{\partial(\phi S_o)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi S_w)}{\partial t} = 0,$$

а значит:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_o}{\rho_o}. \tag{2.6}$$

Воспользовавшись (2.4), перепишем (2.2) в следующем виде:

$$\mathbf{u} = -\mathbb{K}\big(\lambda(S)\nabla p - \lambda_w(S)\nabla p_c - (\lambda_w\rho_w + \lambda_o\rho_o)g\nabla z\big), \tag{2.7}$$

где $\lambda = \lambda_w + \lambda_o$ – полная мобильность.

Подставив (2.7) в (2.6), получим уравнение для давления:

$$-\nabla \cdot (\mathbb{K}\lambda\nabla p) = \frac{q_w}{\rho_w} + \frac{q_o}{\rho_o} - \nabla \cdot \big[\mathbb{K}\big(\lambda_w\nabla p_c + (\lambda_w\rho_w + \lambda_o\rho_o)g\nabla z\big)\big]. \tag{2.8}$$

Фазовые скорости $\mathbf{u}_w$ и $\mathbf{u}_o$ могут быть выражены через полную скорость $\mathbf{u}$ следующим образом:

$$\mathbf{u}_w = \frac{\lambda_w}{\lambda}\big(\mathbf{u} + \mathbb{K}\lambda_o\nabla p_c + \mathbb{K}\lambda_o(\rho_w - \rho_o)g\nabla z\big),$$

$$\mathbf{u}_o = \frac{\lambda_o}{\lambda}\big(\mathbf{u} - \mathbb{K}\lambda_w \nabla p_c + \mathbb{K}\lambda_w(\rho_o - \rho_w) g \nabla z\big).$$

Применяя (2.4) и (2.7) к уравнениям (2.1) и (2.2) (для $\alpha = w$), выведем уравнение для насыщенности:

$$\phi\frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{\lambda_w}{\lambda}(S)\left[\mathbb{K}\lambda_o(S)\left(\frac{dp_c}{dS}\nabla S + (\rho_o - \rho_w) g \nabla z\right) + \mathbf{u}\right] = \frac{q_w}{\rho_w}. \qquad (2.9)$$

Далее сформулируем метод IMPES как серию временных подшагов:

(1) Решить уравнение (2.8) и по текущему значению насыщенности S^n получить текущее давление p^n (неявная схема):

$$-\nabla \cdot (\mathbb{K}\lambda^n \nabla p^n) = \frac{q_w}{\rho_w^n} + \frac{q_o}{\rho_o^n} - \nabla \cdot \left[\mathbb{K}\big(\lambda_w^n \nabla p_c + (\lambda_w^n \rho_w^n + \lambda_o^n \rho_o^n) g \nabla z\big)\right], \quad (2.10)$$

где $\lambda_\alpha^n = \lambda_\alpha(S^n, p^n)$ и $\rho_\alpha^n = \rho_\alpha(p^n)$.

(2) Использовать (2.7) для нахождения текущей скорости Дарси $\mathbf{u}^n$ по текущим значениям насыщенности S^n и давления p^n:

$$\mathbf{u}^n = -\mathbb{K}\big(\lambda^n \nabla p^n - \lambda_w^n \nabla p_c - (\lambda_w^n \rho_w^n + \lambda_o^n \rho_o^n) g \nabla z\big). \qquad (2.11)$$

(3) Явной схемой решить уравнение (2.9), чтобы по текущим насыщенности S^n, давлению p^n и скорости u^n получить насыщенность S^{n+1} на следующем временном шаге:

$$\frac{1}{\Delta t^{n+1}}\left[\left(\frac{\phi S}{B_w}\right)^{n+1} - \left(\frac{\phi S}{B_w}\right)^{n}\right] = \frac{q_w}{\rho_w^n} - \nabla \cdot \frac{\lambda_w^n}{\lambda^n}\left[\mathbb{K}\lambda_o^n\left(\frac{dp_c}{dS}\nabla S + (\rho_o^n - \rho_w^n) g \nabla z\right) + \mathbf{u}^n\right]. \qquad (2.12)$$

Заметим, что уравнение (2.10) представляет собой стационарное уравнение диффузии с тензором диффузии $\mathbb{K}\lambda^n$ и нелинейной правой частью. При формировании диффузионных потоков в левой и правой частях уравнения (2.10), а также в правых частях уравнений (2.11) и (2.12) воспользуемся линейной или нелинейной схемой дискретизации, которые будут введены в разделе 2.4. В разделе 2.5 приводится сравнительный анализ результатов использования линейной и нелинейной схем дискретизации.

2.3. Полностью неявная схема

Выведем полностью неявную схему для интегрирования по времени системы уравнений двухфазной фильтрации (2.1)-(2.4). Сначала воспользуемся неявной схемой для уравнений сохранения массы (2.1):

$$\frac{(\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha})^{n+1} - (\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha})^n}{\Delta t^{n+1}} = -\mathrm{div}(\mathbf{u}_\alpha^{n+1}) + \left(\frac{q_\alpha}{\rho_\alpha}\right)^{n+1}, \quad \alpha = w, o. \tag{2.13}$$

Теперь можно записать нелинейную невязку уравнений для l-го приближения к величине, изменяемой на временном шаге $n+1$ в ячейке T_i:

$$R_{\alpha,i}^l = \int\limits_{T_i} \left[\left(\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha}\right)_i^l - \left(\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha}\right)_i^n + \Delta t^{n+1} \left(\mathrm{div}\,\mathbf{u}_\alpha - \frac{q_\alpha}{\rho_\alpha}\right)_i^l \right] \mathrm{d}x, \quad \alpha = w, o. \tag{2.14}$$

Дискретный аналог уравнения (2.13) может быть записан в виде:

$$R_{\alpha,i} = 0, \quad \alpha = w, o \tag{2.15}$$

для всех ячеек сетки в каждый момент времени.

Воспользуемся методом Ньютона для решения нелинейной системы (2.15) со скоростями Дарси (2.2):

$$J(x^l)\delta x^l = -R(x^l), \tag{2.16}$$

$$x^{l+1} = x^l + \delta x^l, \tag{2.17}$$

где l – номер шага метода Ньютона, x – вектор главных (независимых) переменных по всем ячейкам сетки:

$$x = \begin{pmatrix} p_o \\ S_w \end{pmatrix},$$

R – вектор нелинейных невязок по всем ячейкам сетки:

$$R(x) = \begin{pmatrix} R_w(x) \\ R_o(x) \end{pmatrix},$$

и J – матрица якобиана:

$$J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial R_w}{\partial p_o}(x) & \frac{\partial R_w}{\partial S_w}(x) \\ \frac{\partial R_o}{\partial p_o}(x) & \frac{\partial R_o}{\partial S_w}(x) \end{pmatrix}.$$

Метод Ньютона останавливается, когда норма вектора невязок опускается ниже $\varepsilon_{\mathrm{nwt}}$.

Рассмотрим построение матрицы якобиана. Разделим невязки на две части: аккумуляцию (включая скважины) и перенос, $R_{\alpha,i} = R_{\alpha,i}^{acc} + R_{\alpha,i}^{trans}$, где

$$R_{\alpha,i}^{acc} = V_i \left[\left(\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha} \right)_i^l - \left(\frac{\phi S_\alpha}{B_\alpha} \right)_i^n - \Delta t^{n+1} \left(\frac{q_\alpha}{\rho_\alpha} \right)_i^l \right], \quad \alpha = w, o,$$

$$R_{\alpha,i}^{trans} = \Delta t^{n+1} \int\limits_{T_i} (\operatorname{div} \mathbf{u}_\alpha) \, \mathrm{d}x, \quad \alpha = w, o.$$

Следует учитывать следующие зависимости параметров системы от главных переменных:

- $S_o = 1 - S_w$, (см. (2.3)),
- $p_w = p_o - p_c(S_w)$, где $p_c(S_w)$ – заданная функция от насыщенности (см. (2.4)),
- $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_w)$ – заданная функция от насыщенности,
- $\mu_\alpha = \mu_\alpha(p_o)$ – заданная функция от давления,
- $B_\alpha = B_\alpha(p_o)$ – заданная функция от давления,
- $\phi = \phi(1 + c_R(p_o - p_o^0))$.

При формировании матрицы якобиана будем учитывать вклад вариации каждой из двух составляющих невязки.

2.3.1. Аккумуляция

Рассмотрим вариацию аккумуляционной составляющей невязки:

$$\Delta R^{acc}_{w,i} = V_i \left[\Delta \left(\frac{\phi S_w}{B_w} \right) - \Delta t^{n+1} \Delta \left(\frac{q_w}{\rho_w} \right) \right],$$

$$\Delta R^{acc}_{o,i} = V_i \left[\Delta \left(\frac{\phi S_o}{B_o} \right) - \Delta t^{n+1} \Delta \left(\frac{q_o}{\rho_o} \right) \right],$$

где

$$\Delta \left(\frac{\phi S_w}{B_w} \right) = \frac{\phi}{B_w} \Delta S_w + S_w \left(\frac{c_R}{B_w} - \frac{\phi}{B_w^2} \frac{dB_w}{dp_o} \right) \Delta p_o,$$

$$\Delta \left(\frac{\phi S_o}{B_o} \right) = -\frac{\phi}{B_o} \Delta S_w + (1 - S_w) \left(\frac{c_R}{B_o} - \frac{\phi}{B_o^2} \frac{dB_o}{dp_o} \right) \Delta p_o.$$

Для производящей скважины имеем:

$$\Delta \left(\frac{q_\alpha}{\rho_\alpha} \right) = \left(\frac{WI\ \mathcal{D}_\alpha}{\mu_\alpha B_\alpha} \right) \frac{dk_{r\alpha}}{dS_w} \Delta S_w - \frac{k_{r\alpha} WI}{\mu_\alpha B_\alpha} \left(1 + \mathcal{D}_\alpha \left(\frac{1}{\mu_\alpha} \frac{d\mu_\alpha}{dp_o} + \frac{1}{B_\alpha} \frac{dB_\alpha}{dp_o} \right) \right) \Delta p_o,$$

для нагнетательной скважины:

$$\begin{aligned} \Delta \left(\frac{q_w}{\rho_w} \right) &= WI\ \mathcal{D}_w \left(\frac{1}{\mu_w B_w} \frac{dk_{rw}}{dS_w} + \frac{1}{\mu_o B_o} \frac{dk_{ro}}{dS_w} \right) \Delta S_w - WI\ \left[\frac{k_{rw}}{\mu_w B_w} + \frac{k_{ro}}{\mu_o B_o} + \right. \\ &\left. + \mathcal{D}_w \left(\frac{k_{rw}}{\mu_w^2 B_w} \frac{d\mu_w}{dp_o} + \frac{k_{rw}}{\mu_w B_w^2} \frac{dB_w}{dp_o} + \frac{k_{ro}}{\mu_o^2 B_o} \frac{d\mu_o}{dp_o} + \frac{k_{ro}}{\mu_o B_o^2} \frac{dB_o}{dp_o} \right) \right] \Delta p_o, \end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\Delta \left(\frac{q_o}{\rho_o} \right) = 0,$$

где $\mathcal{D}_\alpha = p_{\mathrm{bh}} - p_o - \rho_\alpha (z_{\mathrm{bh}} - z)$.

2.3.2. Перенос

Теперь рассмотрим составляющую переноса в нелинейной невязке, основанную на потоках Дарси:

$$R^{trans}_{\alpha,i} = \Delta t^{n+1} \int\limits_{\partial T_i} (\mathbf{u}_\alpha \cdot \mathbf{n})\, \mathrm{d}s \approx \Delta t^{n+1} \sum_{f \in \partial T_i} \mathbf{u}_{\alpha,f} \cdot \mathbf{n}_f. \tag{2.19}$$

Для дискретизации потока Дарси воспользуемся линейной или нелинейной схемой дискретизации с двухточечным шаблоном, которые описаны в разделе 2.4:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{w,f}^h \cdot \mathbf{n}_f &= -\left(\frac{k_{rw}}{\mu_w B_w}\right)_f \left[D_f^+\big(p_w - \rho_w g z\big)_{T_+} - D_f^-\big(p_w - \rho_w g z\big)_{T_-}\right] = \\ &= -\left(\frac{k_{rw}}{\mu_w B_w}\right)_f \left[D_f^+\big(p_o - p_c(S_w) - \rho_w g z\big)_{T_+} - D_f^-\big(p_o - p_c(S_w) - \rho_w g z\big)_{T_-}\right],\end{aligned} \tag{2.20}$$

$$\mathbf{u}_{o,f}^h \cdot \mathbf{n}_f = -\left(\frac{k_{ro}}{\mu_o B_o}\right)_f \left[D_f^+\big(p_o - \rho_o g z\big)_{T_+} - D_f^-\big(p_o - \rho_o g z\big)_{T_-}\right]. \tag{2.21}$$

Здесь $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(\widetilde{S})$, $\widetilde{S}$ – противопотоковая аппроксимация для значения насыщенности на грани f. С другой стороны, $\mu_\alpha = \mu_\alpha(\bar{p})$ и $B_\alpha = B_\alpha(\bar{p})$, где $\bar{p} = \frac{p_- + p_+}{2}$ - среднее давление на грани.

Используя (2.20) и (2.21) получим следующее представление вариации потока для каждой из двух фаз:

$$\begin{aligned}\Delta(\mathbf{u}_{w,f}^h \cdot \mathbf{n}_f) &= \frac{-\mathcal{D}_{w,f}}{\mu_w B_w}\frac{dk_{rw}}{S_w}\Delta\widetilde{S}_w - \\ &- \frac{k_{rw}}{\mu_w B_w}\left[-D_f^+\left(\frac{dp_c}{dS_w}\Delta S_w\right)_{T_+} + D_f^-\left(\frac{dp_c}{dS_w}\Delta S_w\right)_{T_-}\right] + \\ &+ \frac{k_{rw}}{\mu_w B_w}\left[\left(\frac{\mathcal{D}_{w,f}}{\mu_w}\frac{d\mu_w}{dp_o} + \frac{\mathcal{D}_{w,f}}{B_w}\frac{dB_w}{dp_o}\right)\Delta\bar{p}_o - \left(D_f^+\Delta p_{o,T_+} - D_f^-\Delta p_{o,T_-}\right)\right],\end{aligned} \tag{2.22}$$

$$\begin{aligned}\Delta(\mathbf{u}_{o,f}^h \cdot \mathbf{n}_f) &= \frac{-\mathcal{D}_{o,f}}{\mu_o B_o}\frac{dk_{ro}}{S_w}\Delta\widetilde{S}_w - \\ &+ \frac{k_{ro}}{\mu_o B_o}\left[\left(\frac{\mathcal{D}_{o,f}}{\mu_o}\frac{d\mu_o}{dp_o} + \frac{\mathcal{D}_{o,f}}{B_o}\frac{dB_o}{dp_o}\right)\Delta\bar{p}_o - \left(D_f^+\Delta p_{o,T_+} - D_f^-\Delta p_{o,T_-}\right)\right],\end{aligned} \tag{2.23}$$

где

$$\mathcal{D}_{w,f} = D_f^+\big(p_o - p_c(S_w) - \rho_w g z\big)_{T_+} - D_f^-\big(p_o - p_c(S_w) - \rho_w g z\big)_{T_-},$$

$$\mathcal{D}_{o,f} = D_f^+ \big(p_o - \rho_o g z\big)_{T_+} - D_f^- \big(p_o - \rho_o g z\big)_{T_-}.$$

Считаем коэффициенты $D_f^{\pm}$ постоянными на каждой итерации метода Ньютона. В этом случае разница между линейной и нелинейной дискретизациями потока заключается в способе вычисления $D_f^{\pm}$ для (2.22) и (2.23), но не в шаблоне для разреженной матрицы.

2.4. Схемы дискретизации потоков

Для дискретизации потоков в (2.10)-(2.12) и (2.19) воспользуемся традиционной линейной и новой нелинейной схемами дискретизации потоков Дарси.

2.4.1. Линейная схема

Рассмотрим случай неортогональной сетки с анизотропным тензором проводимости: конормали $\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f$ и векторы $\mathbf{t}_f$, соединяющие точки коллокации, могут не быть ортогональными к граням сетки (см. рис. 2.1).

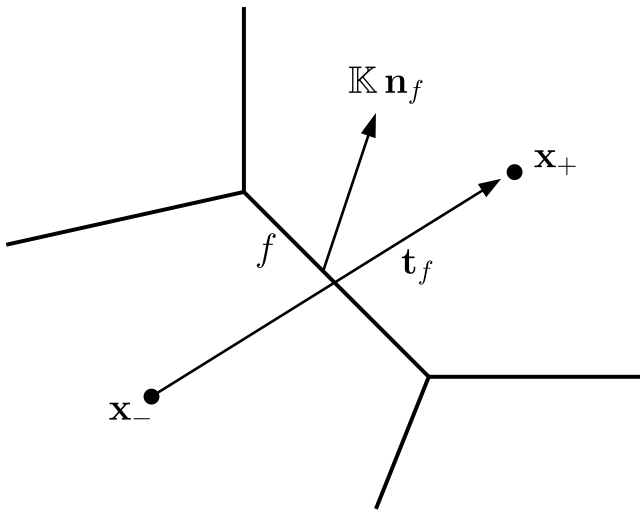


Рис. 2.1. Линейная дискретизация потока.

Считаем, что $|\mathbf{n}_f| = |f|$ и обозначим $P_\pm = p(\mathbf{x}_\pm)$. Для потока через внутреннюю грань $f \in \mathcal{F}_I$ имеем:

$$\mathbb{K}\nabla p \cdot \mathbf{n}_f = \nabla p \cdot (\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f). \tag{2.24}$$

Линейная двухточечная дискретизация $\mathbf{t}_f$-компонента градиента давления имеет вид:

$$(\nabla p)^h_{\mathbf{t}} = \frac{P_+ - P_-}{|\mathbf{t}_f|}. \tag{2.25}$$

Заменяя $\nabla p \cdot (\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f)$ на $(\nabla p)^h_{\mathbf{t}}\ (\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f) \cdot \frac{\mathbf{t}_f}{|\mathbf{t}_f|}$ и подставляя (2.25) в (2.24) получим:

$$(\mathbb{K}\nabla p)^h_f \cdot \mathbf{n}_f = \frac{P_+ - P_-}{|\mathbf{t}_f|}\,\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f \cdot \frac{\mathbf{t}_f}{|\mathbf{t}_f|} = \frac{\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{t}_f}{|\mathbf{t}_f|^2}\,(P_+ - P_-) = \mathbb{T}\,(P_+ - P_-) \tag{2.26}$$

с проводимостью $\mathbb{T} = \dfrac{\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{t}_f}{|\mathbf{t}_f|^2}$.

Потоки через внешние грани $f \in \mathcal{F}_B$ определяются через граничные условия Неймана.

В случае $\mathbb{K}$-ортогональной сетки, когда $\mathbb{K}\,\mathbf{n}_f$ и $\mathbf{t}_f$ сонаправлены, выражение (2.26) принимает вид центральной конечной разности и аппроксимирует поток как минимум с первым порядком точности. В общем случае линейная схема может не обеспечивать аппроксимации.

2.4.2. Нелинейная схема

Аппроксимация потока Дарси. В качестве альтернативы линейной схеме дискретизации используется нелинейная схема дискретизации диффузионного потока, описанная в первой главе диссертационной работы. Вместо тензора диффузии используется тензор абсолютной проницаемости среды.

$$(\mathbb{K}\nabla p)^h_f \cdot \mathbf{n}_f = D^+_f(P)P_+ - D^+_f(P)P_-. \tag{2.27}$$

В случае $\mathbb{K}$-ортогональной сетки, нелинейная схема принимает вид центральной конечной разности с постоянными коэффициентами и совпадает с линейной схемой.

Нелинейная противопотоковая аппроксимация. Как говорилось выше, для значений фазовых мобильностей на гранях используется противопотоковая стабилизация по насыщенности: значение насыщенности на грани продолжается константой с ячейки, из которой направлен поток Дарси. Для повышения точности вычислений в данной работе предлагается использовать насыщенность на грани как след линейного восполнения с ограничителем наклона, аналогичное тому, которое предложено в первой граве диссертации для конвективного потока.

2.5. Численные эксперименты

Проведем сравнительный анализ линейной и нелинейной схем дискретизации диффузионного потока. Рассмотрим псевдо-двумерные задачи на гексаэдральных сетках, состоящих $N \times N \times 1$ ячеек.

Здесь и далее величины приводятся в метрической системе мер. В скобках приводятся аналоги в британской системе. Приведем соотношения величин:

- *объем:* 1 ббл (*bbl*, баррель) = 158.988 л. = 0.158988 м^3,
- *давление:* 1 пси (*psi*, фунт на квадратный дюйм) = 6894.757 Паскаля,
- *длина:* 1 фт (*ft*, фут) = 0.3048 метра,
- *проницаемость:* 1 мд (*md*, миллидарси) = $9.869233 \cdot 10^{-16}$ м^2,
- *вязкость:* 1 сп (*cp*, сантипуаз) = 0.01 г/(см · с) = 0.001 Н · с/м^2.

Для экспериментов выбирались следующие свойства среды и жидкостей. Относительные проницаемости $k_{r\alpha}$ показаны на рис. 2.2 (слева), зависимость капиллярного давления от водонасыщенности показана на рис. 2.2 (справа). Вязкости μ_α и факторы сжатия B_α заданы в таблице 2.1, и плотности равны $\rho_w = 9.797 \cdot 10^3$ Па/м ($= 4.331 \cdot 10^{-1}$ пси/фт) и $\rho_o = 8.817 \cdot 10^3$ Па/м ($= 3.898 \cdot 10^{-1}$ пси/фт). Фактор сжатия породы $c_R = 10^{-6}$.

Забойное давление на нагнетательной скважине равно $2.827 \cdot 10^4$ кПа ($=$ 4100 пси), на производящей скважине – $2.689 \cdot 10^4$ кПа ($=$ 3900 пси). Индексы продуктивности скважины выбирались $WI = 2.67 \cdot 10^{-12}$ м^3 ($= 10\,\frac{\text{ббл}\cdot\text{сп}}{\text{день}\cdot\text{пси}}$).

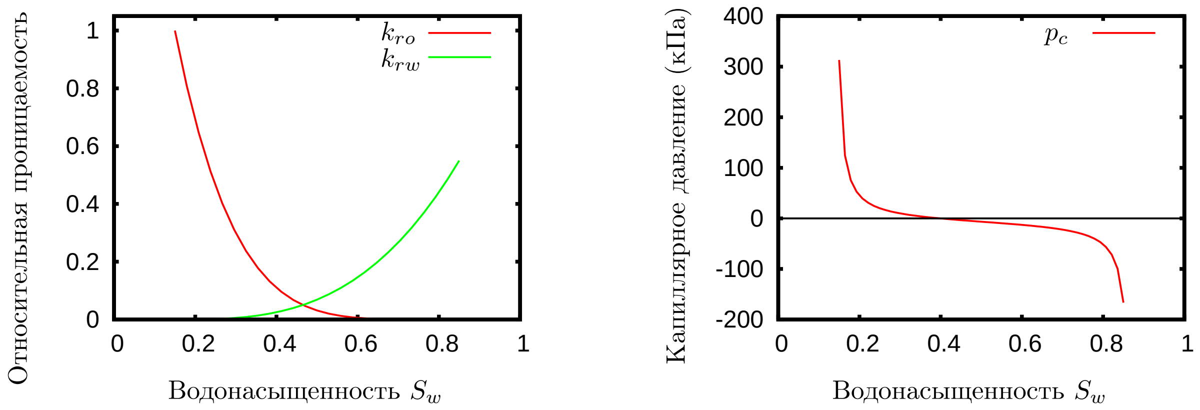


Рис. 2.2. Слева: относительные проницаемости нефти и воды, справа: зависимость капиллярного давления p_c от насыщенности S_w.

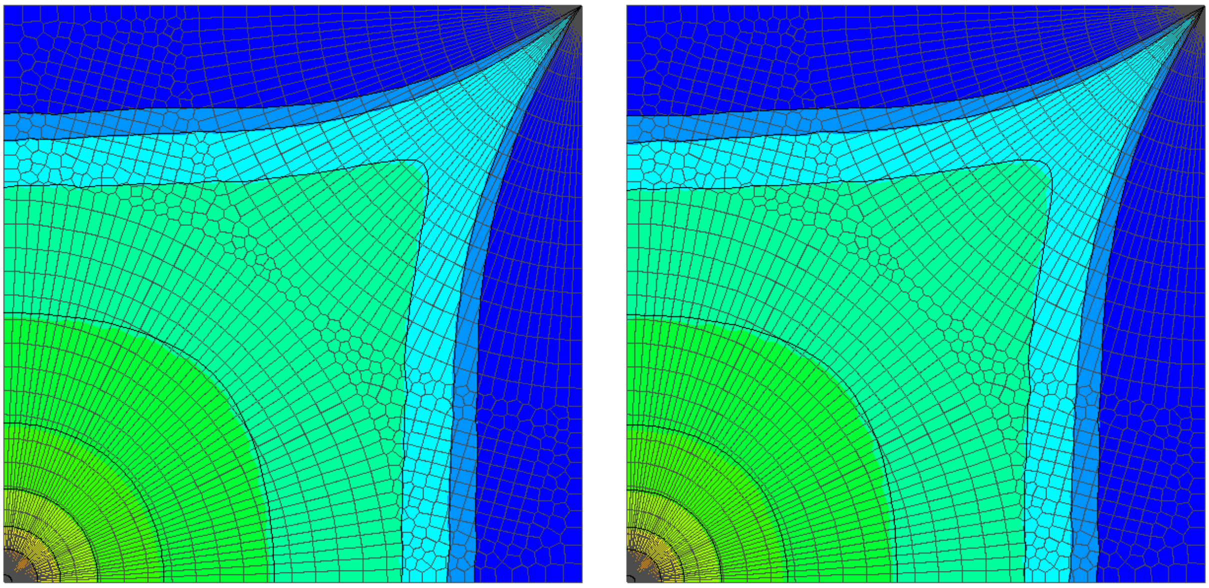
p (кПа)	B_o	B_w	μ_o (г (см $\cdot$ с)	μ_w (г (см $\cdot$ с)
$2.689 \cdot 10^4$	1.0030285	1.0131740	0.906	$5.151 \cdot 10^{-3}$
$2.758 \cdot 10^4$	1.0019665	1.0129084	0.960	$5.179 \cdot 10^{-3}$
$2.827 \cdot 10^4$	1.0009032	1.0126377	1.017	$5.207 \cdot 10^{-3}$

Таблица 2.1. Изменение свойств жидкости в зависимости от давления.

2.5.1. Ортогональные сетки

Численные эксперименты, представленные в данном разделе, показывают, что линейная и нелинейная схемы дискретизации потока дают одинаковые результаты на ортогональных сетках.

Рассматривается процесс заводнения в области $360.7 \times 360.7 \times 15.5$ м, в двух углах которой расположены скважины: нагнетательная и производящая. Сетка, показанная на рис. 2.3, состоит из радиальной сетки вблизи скважин и неструктурированной (но все же $\mathbb{K}$-ортогональной) сетки между ними. Каждая скважина связана со всеми 48 угловыми ячейками с заданным коэффициентом продуктивности скважины $WI = 3.05 \cdot 10^{-13}$ м^3 ($= 1.142\,\frac{\text{ббл}\cdot\text{сп}}{\text{день}\cdot\text{пси}}$). Среда изотропная. Тензор абсолютной проницаемости скалярный $\mathbb{K} = K\mathbb{I}$, где $K = 9.87 \cdot 10^{-14}$ м^2 ($= 100$ мд).



линейная схема — нелинейная схема

Рис. 2.3. Неструктурированная ортогональная сетка. Водонасыщенность в момент времени $T = 1500$ дней.

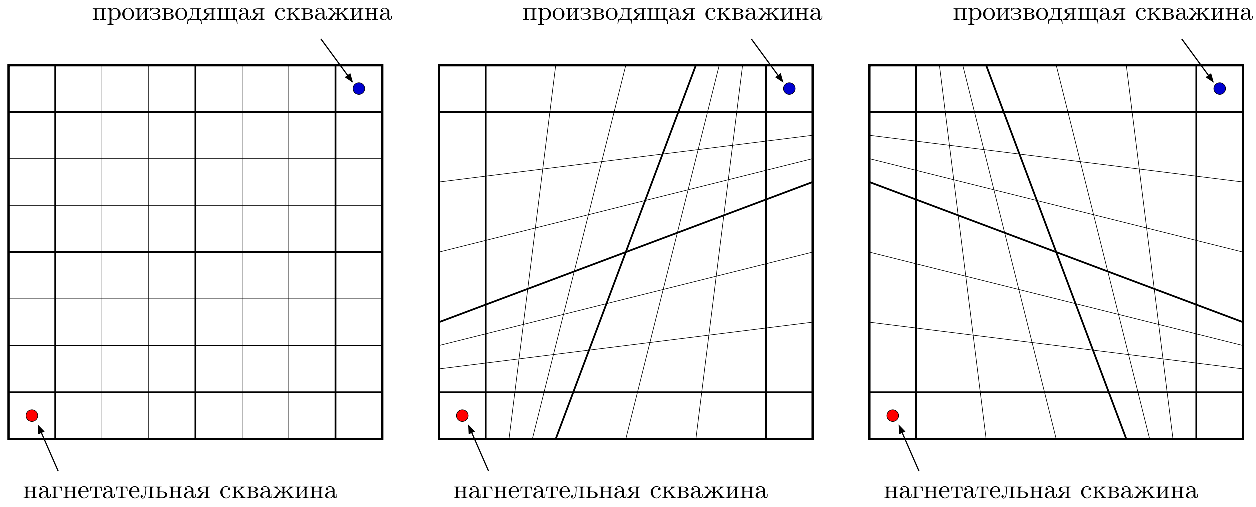
Результаты экспериментов, приведенные на рис. 2.3, для линейной и нелинейной схем дискретизации потока идентичны на предложенной сетке, что объясняется ее ортогональностью.

2.5.2. Неортогональные сетки

Проведение сравнительного эксперимента на неортогональной сетке предполагает следующий план действий: (1) построить регулярную $N \times N \times 1$ сетку с кубическими ячейками; (2) подсоединить скважины и зафиксировать ячейки, к которым они подсоединены; (3) модифицировать оставшуюся часть сетки; (4) решить задачу с использованием линейной и нелинейной схем дискретизации на модифицированной сетке; (5) сравнить результаты с теми, что были получены на регулярной сетке.

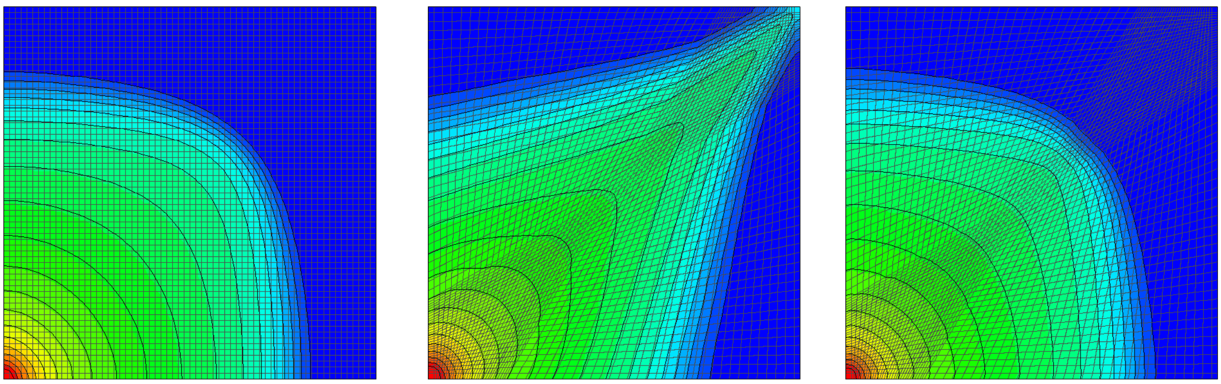
Рассматривается область $30.5 \times 30.5 \times 3.05$ м, тензор абсолютной проницаемости – скалярный, такой же, как в предыдущем эксперименте. Воспользуемся следующей модификацией сетки: на равномерной сетке $64 \times 64 \times 1$ фиксируются первая и последняя строки, а так же первый и последний столбцы, с тем, чтобы угловые ячейки оставались без изменений. В центрах двух противоположных угловых ячеек помещаются скважины (рис. 2.4 слева). Далее вертикальная и горизонтальная центральные линии поворачиваются на 30° в направлении скважин (рис. 2.4 в центре) или на 30° от них (рис. 2.4 справа). После этого сетка заполняется линейно в области между фиксированными боковыми линиями и повернутыми центральными.

На рис. 2.5 показано распределение водонасыщенности на регулярной сетке T1 (слева) и на сетке T2 для линейной (в центре) и нелинейной (справа) схем дискретизации потока. На равномерной прямоугольной сетке линейная и нелинейная схемы совпадают и имеют второй порядок аппроксимации потока. Расчет на регулярной сетке назовем *контрольным*. Хорошо видно, что при использовании линейной дискретизации, форма фронта отличается от формы контрольного фронта, в то время как для нелинейной дискретизации отличия не заметны. Аналогично, на рис. 2.6 представлено сравнение результатов расчета на ортогональной сетке T1 (слева) с расчетами на сет-



сетка T1 ($\alpha = 0°$) сетка T2 ($\alpha = -30°$) сетка T3 ($\alpha = 30°$)

Рис. 2.4. Пример ортогональной и неортогональных расчетных сеток.

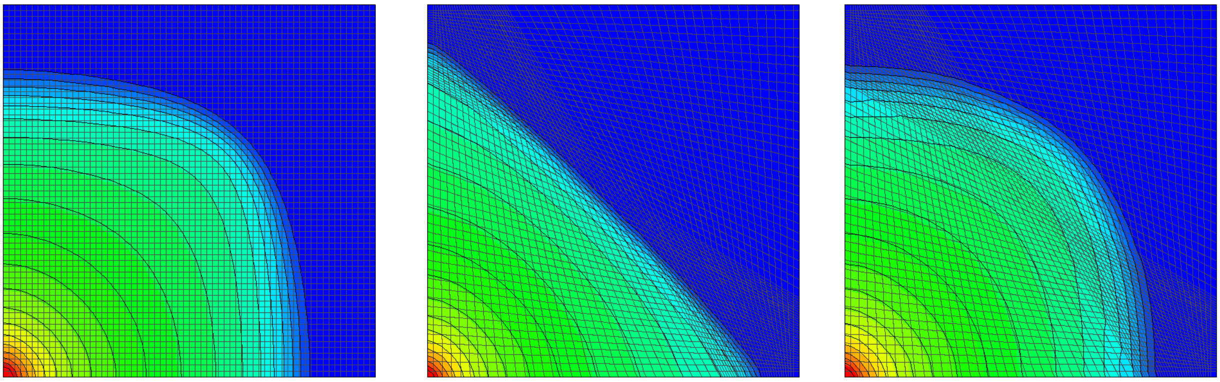


T1 линейная = нелинейная T2 линейная T2 нелинейная

Рис. 2.5. Водонасыщенность на сетках T1 и T2 для линейной и нелинейной схем в момент времени $T = 250$ дней.

ке T3 (в центре и справа). Как и в предыдущем случае, нелинейная схема дискретизации позволяет получить форму фронта, слабо отличающуюся от контрольной, в то время как для линейной схемы форма фронта не сохраняется.

На рисунках 2.7 и 2.8 показаны динамики деби́тов нефти и воды на производящей скважине. В момент, когда фронт обводнения доходит до про-



T1 | T3 | T3
линейная = нелинейная | линейная | нелинейная

Рис. 2.6. Водонасыщенность на сетках T1 и T3 для линейной и нелинейной схем в момент времени $T = 250$ дней.

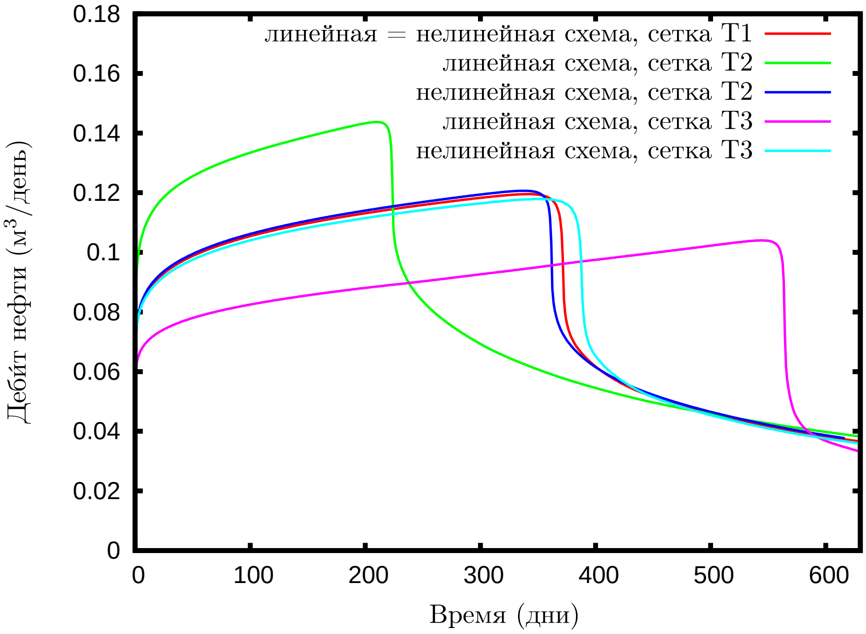


Рис. 2.7. Динамика деби́та нефти на производящей скважине на сетках T1, T2 и T3.

изводящей скважины, производство нефти заметно падает. Данный момент называется временем водяного прорыва и является важным показателем моделирования разработки месторождения. В табл. 2.2 показано время водяного прорыва при использовании линейной и нелинейной дискретизации на предлагаемых расчетных сетках. Видно, что результаты, получаемые на неортого-

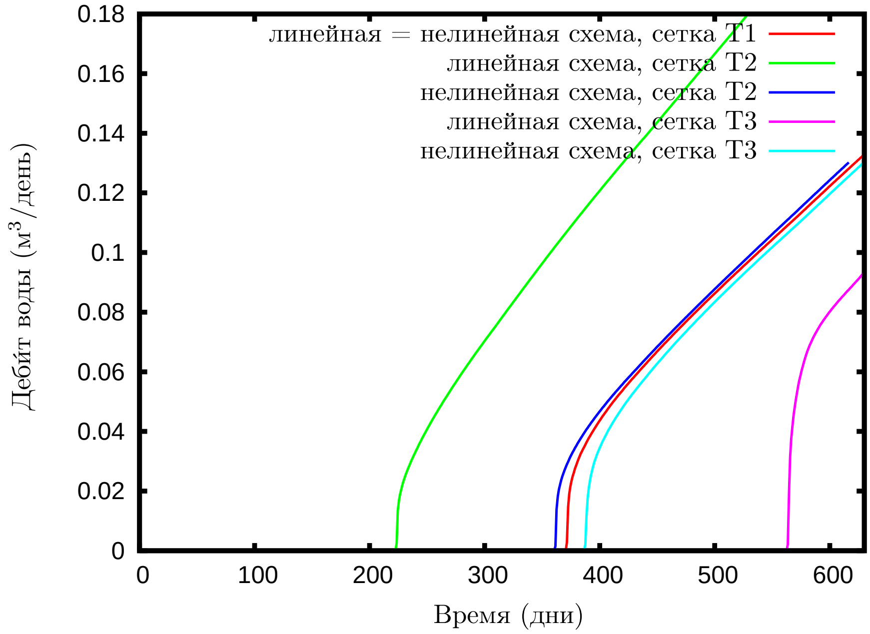


Рис. 2.8. Динамика деби́та воды на производящей скважине на сетках T1, T2 и T3.

нальных сетках при использовании нелинейной дискретизации потока, более приближены к контрольным по сравнению с результатами использования линейной дискретизации.

схема	T1	T2	T3
линейная	372.2	224.1	564.2
нелинейная	372.2	362.2	388.5

Таблица 2.2. Время водяного прорыва (в днях).

2.5.3. Разрывный анизотропный тензор

В следующем эксперименте будет рассматриваться регулярная сетка $64 \times 64 \times 1$ из предыдущего примера, но тензор абсолютной проницаемости будет полным и анизотропным:

$$\mathbb{K} = R_z(-\theta) \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix} R_z(\theta), \qquad R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Расчетная область $30.5 \times 30.5 \times 3.05$ м, $k_1 = 9.87 \cdot 10^{-13}$ м^2 (= 1000 мд), $k_2 = k_3 = 9.87 \cdot 10^{-15}$ м^2 (= 10 мд), а углы поворота следующие (см. рис. 2.9):

$$\theta(x,y,z) = \begin{cases} 0^\circ & \text{если} \;\; 15.25 \text{ м} \le x+y < 30.5 \text{ м}, \\ 90^\circ & \text{если} \;\; 30.5 \text{ м} \le x+y < 45.75 \text{ м}, \\ 45^\circ & \text{если} \;\; x+y < 15.25 \text{ м}, \quad \text{или} \quad x+y \ge 45.75 \text{ м} \end{cases}$$

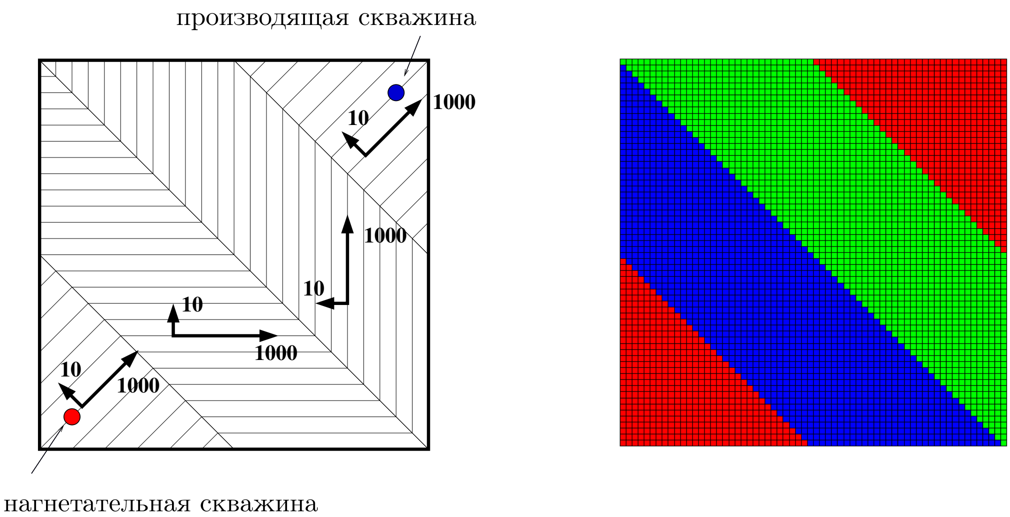
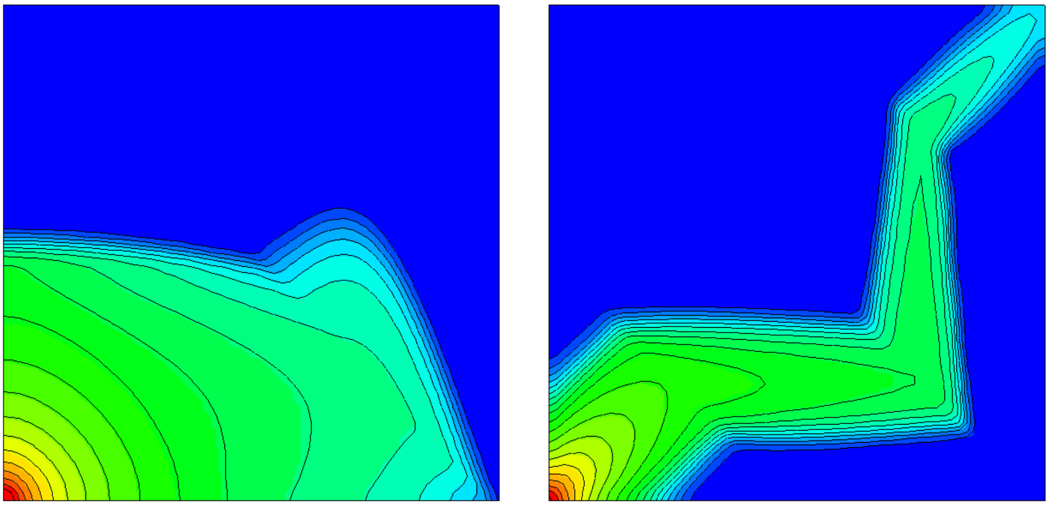


Рис. 2.9. Структура среды. Разрывный анизотропный тензор.

Стоит отметить, что при $\theta = 0^\circ$ и $\theta = 90^\circ$ линейная и нелинейная дискретизации потока совпадают, различаясь лишь при $\theta = 45^\circ$. Рисунок 2.10 иллюстрирует распределение водонасыщенности в момент времени $T = 55$ дней при использовании линейной (слева) и нелинейной (справа) дискретизаций. На рисунке 2.11 показано поле давления в момент времени $T = 10$ дней при использовании линейной (слева) и нелинейной (справа) дискретизаций.

Вблизи скважин линейная схема дает распределение насыщенности и давления, аналогичное изотропному тензору диффузии, то есть не отслеживает анизотропию среды. Видно, что различие дискретизаций лишь в небольшой части расчетной области существенно влияет на поведение водяного фронта, даже если в остальной части области дискретизации идентичны.



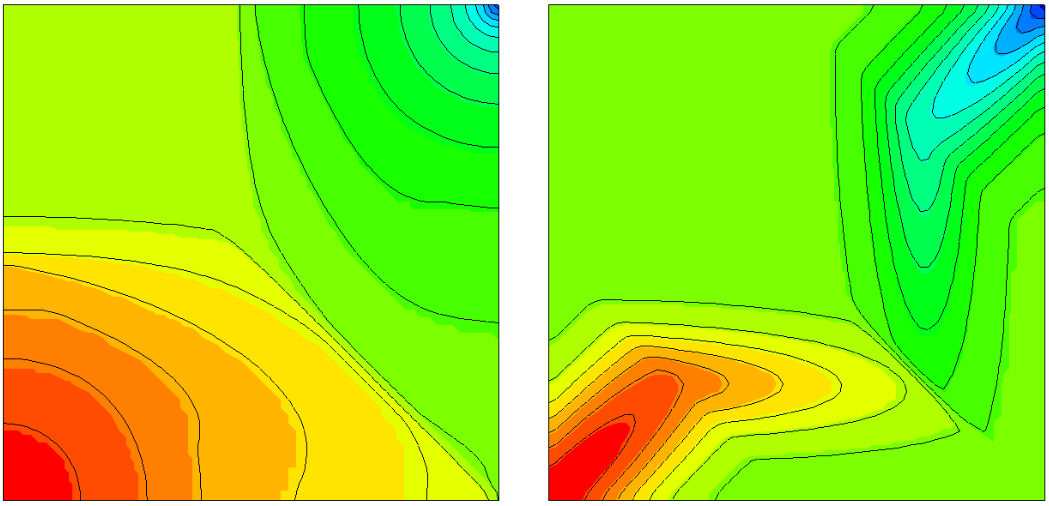
линейная нелинейная

Рис. 2.10. Водонасыщенность для линейной и нелинейной аппроксимаций потока в момент времени $T = 55$ дней в задаче с разрывным анизотропным тензором.

На рис. 2.12 показана динамика деби́тов нефти и воды на производящей скважине для двух дискретизаций. Линейная дискретизация не имеет четко выраженного направления распространения водяного фронта и поэтому вытесняет больше нефти, чем в случае с нелинейной дискретизацией. В то же время момент водяного прорыва наступает позже, чем при использовании нелинейной дискретизации потока.

2.5.4. Анализ вычислительной сложности

Проанализируем влияние линейной и нелинейной схем дискретизации потока на сложность численного решения задачи двухфазной фильтрации на примере полностью неявного метода. Рассмотрим процесс заводнения на



линейная нелинейная

Рис. 2.11. Давление нефти для линейной и нелинейной аппроксимаций потока в момент времени $T = 10$ дней в задаче с разрывным анизотропным тензором.

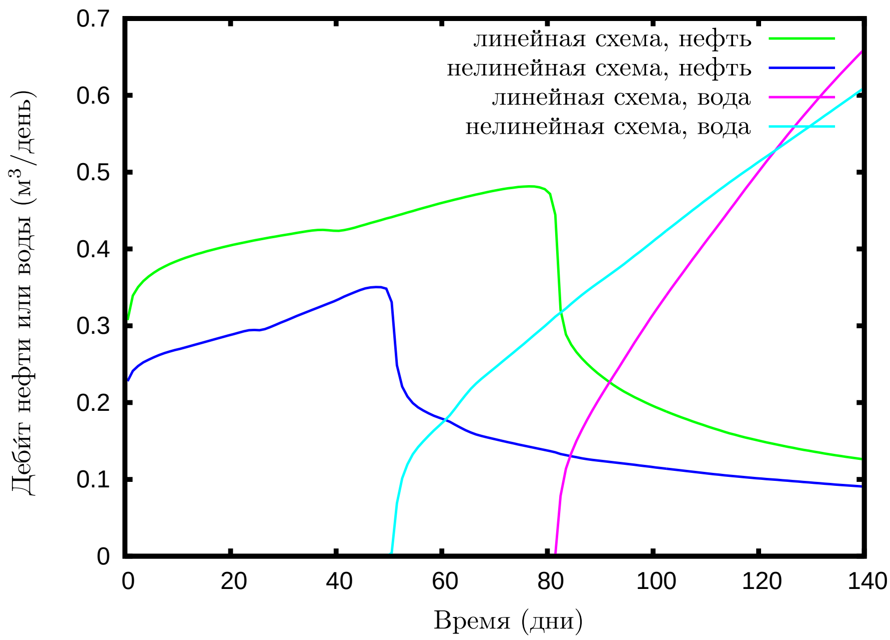


Рис. 2.12. Динамика деби́тов нефти и воды для задачи с разрывным анизотропным тензором.

сетке T3 из раздела 2.5.2 и сравним скорость работы метода Ньютона. Общее время расчета – 200 дней.

В таблице 2.3 показаны общее время расчета, общее число итераций ме-

Δt (N)	Линейная			Нелинейная		
	время	#it	#it/N	время	#it	#it/N
1.0 (200)	111s	369	1.8	120s	422	2.1
2.0 (100)	69s	211	2.1	99s	328	3.3
4.0 (50)	51s	140	2.8	76s	233	5.7
8.0 (25)	35s	86	3.4	59s	168	6.7
20.0 (10)	25s	49	4.9	46s	122	12.2

Таблица 2.3. Шаг по времени (N – число шагов), время работы, число итераций, итераций на шаг, $\varepsilon_{\text{nwt}} = 10^{-3}$

тода Ньютона и среднее число итераций на 1 шаг. Полностью неявный метод позволяет использовать большие шаги по времени без потери устойчивости. Рассматриваются шаги от 1 до 20 дней. Критерий остановки метода Ньютона – $\varepsilon_{\text{nwt}} = 10^{-3}$. С ростом временного шага общее время расчета падает, однако число итераций, необходимых на каждый шаг, растет. При небольших шагах по времени общее время работы и число нелинейных итераций при использовании нелинейной схемы дискретизации всего на 20% выше, чем для линейной схемы. С ростом шага по времени разница между схемами также возрастает (до 2.5 раз).

В таблице 2.4 указано общее время расчета, общее число итераций метода Ньютона и среднее число итераций на 1 шаг для другого критерия остановки метода Ньютона – $\varepsilon_{\text{nwt}} = 10^{-4}$. Видно, что при использовании нелинейной схемы невязка падает более медленно, и разница в числе итераций на данной задаче возрастает до 75% на малых шагах по времени и до 3.5 раз на больших.

Измерения, приведенные в таблицах 2.3 и 2.4, показывают, что вычислительная сложность каждой итерации метода Ньютона для нелинейной схемы не превосходит аналогичную сложность для линейной схемы.

	Линейная			Нелинейная		
Δt (N)	время	#it	#it/N	время	#it	#it/N
1.0 (200)	122s	412	2.1	206s	738	3.7
2.0 (100)	79s	247	2.5	159s	558	5.6
4.0 (50)	54s	158	3.1	123s	420	8.4
8.0 (25)	38s	94	3.8	97s	304	12.2
20.0 (10)	26s	53	5.3	65s	182	18.2

Таблица 2.4. Шаг по времени (N – число шагов), время работы, число итераций, итераций на шаг, $\varepsilon_{\mathrm{nwt}} = 10^{-4}$

Выводы по второй главе

Во второй главе рассмотрено применение новой нелинейной схемы дискретизации диффузионного и конвективного потоков для модели двухфазной фильтрации. Результаты численных экспериментов показывают, что в случае неортогональных сеток и полных анизотропных тензоров абсолютной проницаемости нелинейная схема позволяет более точно и реалистично рассчитывать распространение фронта обводнения и время водяного прорыва, чем традиционная двухточечная линейная схема.

Основные характеристики численной модели, созданной на основании новой дискретизации, практически не зависят от неортогональности расчетной сетки и анизотропии тензора абсолютной проницаемости.

Несмотря на то, что вычислительная сложность при использовании предлагаемой схемы выше, она сравнима со сложностью традиционной линейной схемы, а, следовательно, новая схема может найти свое применение в реальных промышленных расчетах. Отметим, что использование многоточечных аппроксимаций потока значительно повышает арифметическую сложность, а также не гарантирует неотрицательность дискретного решения.

Глава 3

Численная модель течения несжимаемой жидкости со свободной поверхностью

3.1. Математическая модель

Рассмотрим течение вязкой несжимаемой жидкости в области $\Omega(t) \in \mathbb{R}^3$ с границей, изменяющейся во времени. Предположим, что $\overline{\partial\Omega(t)} = \overline{\Gamma_D} \cup \overline{\Gamma(t)}$, где Γ_D – меняющаяся часть неподвижной границы, а $\Gamma(t)$ – свободная граница. На временном интервале $(0, T]$ течение жидкости описывается уравнениями Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в области $\Omega(t)$

$$\left\{ \begin{aligned} \rho\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}\right) - \nu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \end{aligned} \right. \quad \text{в } \Omega(t), \tag{3.1}$$

где $\mathbf{u}$ - векторное поле скорости, p - кинематическое давление, $\mathbf{f}$ - внешняя сила (например, сила тяжести), ρ - плотность и ν - кинематическая вязкость. В начальный момент времени $t = 0$ расчетная область и поле скорости известны:

$$\Omega(0) = \Omega_0, \quad \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0. \tag{3.2}$$

Предположим, что на неподвижной части границы поле скорости удовлетворяет граничному условию Дирихле:

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \quad \text{на } \Gamma_D, \tag{3.3}$$

где $\mathbf{g}$ задано. На свободной поверхности $\Gamma(t)$ накладывается кинематическое условие:

$$v_\Gamma = \mathbf{u}|_\Gamma \cdot \mathbf{n}_\Gamma \tag{3.4}$$

где $\mathbf{n}_\Gamma$ - вектор внешней нормали, а v_Γ - нормальный компонент скорости на свободной границе $\Gamma(t)$. Второе условие на $\Gamma(t)$ возникает при уравновешивании нормального компонента тензора напряжения $\boldsymbol{\sigma} = \nu[\nabla\mathbf{u}+(\nabla\mathbf{u})^T]/2 - p\,\mathbb{I}$ силами поверхностного натяжения $\tau\kappa$ и внешним давлением p_{ext}:

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}_\Gamma|_\Gamma = \tau\kappa\mathbf{n}_\Gamma - p_{\text{ext}}\mathbf{n}_\Gamma \quad \text{на} \;\; \Gamma(t). \tag{3.5}$$

Здесь κ – сумма главных кривизн, а τ – коэффициент поверхностного натяжения. Внешнее давление p_{ext} будем считать равным нулю, $p_{\text{ext}} = 0$.

Существующие подходы к численному решению (3.1)-(3.5) могут быть разделены на две группы: методы, основанные на отслеживании поверхности, и методы, в которых поверхность восстанавливается. Алгоритмы отслеживания свободной поверхности основаны на явном представлении свободной поверхности, передвигающейся по закону (3.4). В работе используется алгоритм восстановления поверхности, основанный на неявном представлении $\Gamma(t)$ как нулевой изоповерхности глобально определенной функции $\phi(t,\mathbf{x})$. Гладкая (по крайней мере, непрерывная по Липшицу) функция ϕ, для которой верно

$$\phi(t,\mathbf{x}) = \begin{cases} < 0 & \text{если } \mathbf{x} \in \Omega(t) \\ > 0 & \text{если } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega(t)} \\ = 0 & \text{если } \mathbf{x} \in \Gamma(t) \end{cases} \qquad \text{для всех} \;\; t \in [0,T]$$

называется *функцией уровня.* Начальное условие (3.2) позволяет определить $\phi(0,\mathbf{x})$. Для $t > 0$ функция уровня удовлетворяет следующему уравнению переноса [76]:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \widetilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla\phi = 0 \quad \text{в} \;\; \mathbb{R}^3 \times (0,T] \tag{3.6}$$

где $\widetilde{\mathbf{u}}$ - любое гладкое поле скорости, для которого $\widetilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$ на $\Gamma(t)$. Используемая математическая модель состоит из уравнений (3.1), (3.2), (3.3), (3.5) и (3.6). Отметим, что неявное определение $\Gamma(t)$ как нулевого уровня глобально определенной функции ϕ позволяет использовать численные алгоритмы, которые могут легко отслеживать сложные топологические изменения свободной поверхности. Функция уровня позволяет получать полезные геометрические характеристики поверхности $\Gamma(t)$. Например, единичная внешняя нормаль к $\Gamma(t)$ равна $\mathbf{n}_\Gamma = \nabla\phi/|\nabla\phi|$, а локальная кривизна поверхности равна $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}_\Gamma$. Для корректного вычисления кривизны и нормали к поверхности необходимо, чтобы функция уровня являлась расстоянием (со знаком) до поверхности, то есть удовлетворяла уравнению эйконала

$$|\nabla\phi| = 1. \tag{3.7}$$

3.2. Численное интегрирование по времени

Различные численные методы были предложены для интегрирования по времени уравнений (3.1),(3.6), начиная от полностью неявных схем и заканчивая методом дробных шагов. Полностью неявные схемы обеспечивают безусловную устойчивость, но имеют большую вычислительную сложность, поскольку требуют нескольких вложенных циклов итераций [52]. В данной работе применяется полунеявный метод расщепления [15, 71], который позволяет избежать вложенных циклов, однако накладывает ограничения на шаг по времени. Алгоритм основан на хорошо известных процедурах расщепления, см. [44, 47, 75]. Стоит отметить, что ограничение на шаг по времени, накладываемое алгоритмом, на практике не является существенным.

Каждый временной шаг метода (при известных $\mathbf{u}(t)$, $p(t)$, $\phi(t)$ найти приближенные значения $\mathbf{u}(t+\Delta t)$, $p(t+\Delta t)$, $\phi(t+\Delta t)$) состоит из подшагов, которые описывает алгоритм 3.1.

Остановимся подробнее на шагах алгоритма.

Алгоритм 3.1 Временной шаг метода.

1: Вычислить новое положение свободной поверхности.

2: Перенести функцию уровня по текущему полю скорости $\mathbf{u}(t)$.

3: Перенести частицы по текущему полю скорости $\mathbf{u}(t)$.

4: Выполнить коррекцию объема жидкости.

5: Восстановить расстояние (со знаком) до поверхности.

6: Перестроить сетку.

7: Вычислить новое поле скорости $\mathbf{u}(t + \Delta t)$.

8: Перенести $\mathbf{u}(t + \Delta t)$ по полю скорости $\mathbf{u}(t)$ с предыдущего шага.

9: Обновить $\mathbf{u}(t + \Delta t)$ с учетом вязкости и внешних сил

10: Спроектировать $\mathbf{u}(t + \Delta t)$ на подпространство бездивергентных скоростей.

11: Выбрать новый шаг по времени.

3.2.1. Продвижение функции уровня: $\Omega(t) \to \Omega(t + \Delta t)$.

На основании текущего поля скорости $\mathbf{u}(t)$ и текущего положения свободной поверхности $\Omega(t)$ определим новое положение свободной поверхности $\Omega(t + \Delta t)$.

1. Проинтерполируем скорости во внутренней части жидкости с центров граней в вершины и будем считать их кусочно-трилинейными на каждой кубической ячейке сетки.

2. Продолжим поле скоростей с поверхности на внешнюю часть объема жидкости: $\mathbf{u}(t)|_{\Omega(t)} \to \widetilde{\mathbf{u}}(t)|_{\mathbb{R}^3}$. Из каждого узла сетки не принадлежащего жидкости найдем ближайшую точку поверхности и возьмем значение скорости, проинтерполировав трилинейную функцию в данную точку поверхности. На практике продолжение необходимо выполнять лишь на небольшую часть внешнего объема: $0 < \phi(\mathbf{x}) < k\, h_{\min}$.

3. Найдем $\phi(t + \Delta t)$ по формуле (3.6) численным интегрированием с использованием полулагранжева метода [86] и продолженного поля скорости. Полулагранжев метод состоит из следующих подшагов.

   Сначала для каждой точки расчетной сетки $\mathbf{y}$ решим характеристическое уравнение назад по времени

$$\frac{\partial \mathbf{x}(\tau)}{\partial \tau} = \widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(\tau), \tau), \mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{y}, \quad \text{для} \;\; \tau \in [t + \Delta t, t]. \tag{3.8}$$

   Характеристическое уравнение численно интегрируется со вторым порядком точности:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t + \tfrac{\Delta t}{2}) &= \mathbf{y} - \tfrac{\Delta t}{2} \widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{y}, t), \\ \mathbf{x}(t) &= \mathbf{x}(t + \tfrac{\Delta t}{2}) - \tfrac{\Delta t}{2} \left[3\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t + \tfrac{\Delta t}{2}), t) - \widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t + \tfrac{\Delta t}{2}), t - \Delta t) \right]. \end{aligned} \tag{3.9}$$

   Точка пространства $\mathbf{x}(t + \frac{\Delta t}{2})$ может не являться точкой расчетной сетки, поэтому для вычисления $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t + \frac{\Delta t}{2}), t)$ и $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t + \frac{\Delta t}{2}), t - \Delta t)$ нужно использовать трилинейную интерполяцию для значения скорости.

   Обозначим

$$\phi^*(\mathbf{y}, t + \Delta t) = \phi(\mathbf{x}(t), t). \tag{3.10}$$

   Для вычисления $\phi(\mathbf{x}(t), t)$ в (3.10) вновь используется интерполяция. Обратим внимание, что на данном шаге свойство ϕ быть расстоянием (со знаком) до поверхности и сохранение объема могут нарушаться.

4. Применим коррекцию $\phi^*(t + \Delta t) \to \widehat{\phi}^*(t + \Delta t)$ для того, чтобы выполнялась глобальное сохранение массы;

5. Восстановим (реинициализируем) функцию уровня $\widehat{\phi}^*(t + \Delta t) \to \phi(t + \Delta t)$ так, чтобы $\phi(t + \Delta t)$ (приближенно) удовлетворяла уравнению эйконала (3.7).

Итоговая $\phi(t+\Delta t)$ неявно определяет новую расчетную область $\Omega(t+\Delta t)$. Для новой области обновим расчетную сетку.

3.2.2. Адаптивное перестроение сетки.

Адаптируем сетку с учетом нового положения свободной поверхности и переинтерполируем значения всех дискретных переменных на новую сетку. Процедура перестроения сетки более подробно рассмотрена в разделе 3.3.

3.2.3. Динамика жидкости: $\{\mathbf{u}(t), p(t)\} \to \{\mathbf{u}(t+\Delta t), p(t+\Delta t)\}$.

Разобьем шаг обновления поля скорости на подшаг полулагранжева переноса, диффузионный подшаг и подшаг проекции на подпространство (дискретно) бездивергентных скоростей.

1. Полулагранжев шаг выполняется, как было описано выше, с той лишь разницей, что $\mathbf{y}$ отвечает за узел, в котором задан определенный компонент скорости u_k, $k = 1, 2, 3$, и уравнение (3.10) заменяется на

$$u_k^*(\mathbf{y}, t+\Delta t) = u_k(\mathbf{x}(t), t). \tag{3.11}$$

   Для вычисления $u_k(\mathbf{x}(t), t)$ в (3.11) вновь используется интерполяция для поля скорости.

2. Учет вязких и внешних сил:

$$\widehat{\mathbf{u}}^*(t+\Delta t) = \mathbf{u}^*(t+\Delta t) + \Delta t \left[\nu \Delta \mathbf{u}(t) + \mathbf{f}(t)\right].$$

3. Проекционный шаг: решая уравнение на давление $p(t+\Delta t)$:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \nabla p(t+\Delta t) = \dfrac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \widehat{\mathbf{u}}^*(t+\Delta t) \quad \text{в} \;\; \Omega(t+\Delta t), \\ p(t+\Delta t) = \tau \kappa(t+\Delta t) \quad \text{на} \;\; \Gamma(t+\Delta t) \quad \text{и} \\ \dfrac{\partial p(t+\Delta t)}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{на} \;\; \Gamma_D, \end{cases} \tag{3.12}$$

   обновляем скорость:

$$\mathbf{u}(t+\Delta t) = \widehat{\mathbf{u}}^*(t+\Delta t) - \nabla p(t+\Delta t).$$

Отметим, что кривизна $\kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ определена глобально, то есть не только на свободной поверхности, а следовательно, граничное условие в (3.12) определено корректно.

3.2.4. Адаптация шага по времени.

Выберем новый шаг по времени Δt, удовлетворяющий условию Куранта:

$$[\Delta t]_{\text{new}} = C_{\text{cfl}} h_{\min} \left(\max_{\mathbf{x} \in \Omega(t+\Delta t)} |\mathbf{u}(t+\Delta t)| \right)^{-1},$$

где C_{cfl} - параметр, задающийся в приложении.

На этом шаг алгоритма заканчивается, и мы начинаем следующий шаг с продвижения функции уровня.

Замечание 3.2.1. Для более точного интегрирования (3.8) может быть полезно разделить интервал времени $[t, t+\Delta t]$ на n частей и применить (3.9) на каждом подинтервале. При использовании $n = 2, 3$ наблюдается заметное повышение точности вычислений по сравнению с $n = 1$, однако возрастает и вычислительная сложность алгоритма.

3.3. Пространственная дискретизация на адаптивных сетках

3.3.1. Расчетные сетки

Для вычисления сил поверхностного натяжения и отслеживания сложной топологии свободной поверхности, необходимо использовать расчетные сетки с мелким шагом в окрестности $\Gamma(t)$. В этом случае использование равномерных сеток становится непомерно дорогим, особенно в трехмерном пространстве. Локально измельчающиеся сетки требуют значительно меньших вычислительных затрат. Однако такие сетки должны динамически сгущаться и разгрубляться при продвижении свободной поверхности. При использовании регулярных триангуляций (тетраэдризаций), перестроение сетки требует больших затрат оперативной памяти и большого числа переинтерполяций сеточных данных. Данный шаг становится значительно менее затратным, если использовать декартовы сетки типа восьмеричное дерево с кубическими ячейками. Двумерный аналог сетки типа восьмеричного дерева, сгущающейся к свободной поверхности, показан на рис. 3.1. Более подробную информацию о структуре данных для четверичного и восьмеричного дерева можно найти в [83, 84]. Использование кубических ячеек также полезно в связи с экономичным распределением степеней свободы для скорости, а также эффективной и простой интерполяцией данных между двумя последовательными сетками, см. ниже. Кроме того, из-за наследственной иерархической структуры, для решения линейных систем могут применяться эффективные многоуровневые методы [32, 38].

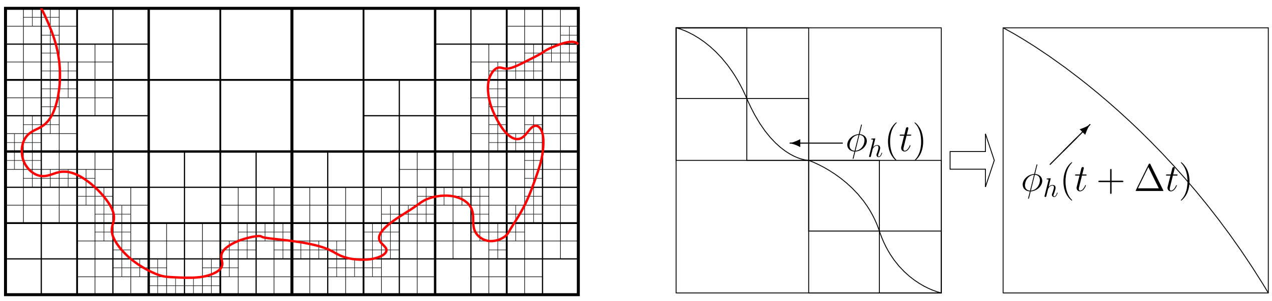


Рис. 3.1. Слева: двумерное четверичное дерево, сгущающееся к свободной поверхности. Справа: потеря точности отображения поверхности при переносе с мелкой сетки на более грубую.

Предлагаемая стратегия адаптации основана на постепенном сгущении (размеры двух соседних ячеек могут отличаться не более чем в два раза) сетки к *текущему и прогнозируемому* положению свободной поверхности. Под прогнозируемым положением в момент времени t понимается положение

$\Gamma(t + \Delta t)$, которое занимала бы поверхность на следующем шаге по времени, при условии, что функция уровня продвигается по текущему полю скорости с текущим шагом Δt. Сгущение расчетной сетки к прогнозируемому положению свободной поверхности позволяет заметно снизить потерю точности отображения поверхности при использовании больших шагов по времени (см. рис. 3.1).

Отметим, что прогнозируемое положение может немного отличаться от того положения, которое на самом деле будет занимать свободная граница $\Gamma(t + \Delta t)$ после соответствующего шага алгоритма, поскольку адаптация сетки выполняется раньше, чем будут вычислены новое поле скорости и новый шаг по времени. Однако предложенный подход позволяет лучше сохранить геометрию поверхности и не требует двойного перестроения расчетной сетки.

Для получения устойчивой аппроксимации мы используем разнесенное расположение неизвестных для скорости и давления при дискретизации уравнений Навье-Стокса [8, 53] (см рис. 3.2): давление аппроксимируется в центрах ячеек, компоненты скорости - в центрах граней, функция уровня - в вершинах ячеек.

3.3.2. Оператор градиента давления

Для каждой внутренней грани из Ω_h определим соответствующий ей компонент градиента давления. Например, будем аппроксимировать p_x на грани, соответствующей u-компоненту скорости. Так как мы используем последовательные сетки типа восьмеричное дерево, и соседние ячейки отличаются не более чем в два раза, то для любой внутренней грани ячейки могут существовать только два геометрических случая. В первом случае грань разделяют две равные ячейки, и мы используем стандартную центральную конечную разность для аппроксимации соответствующего компонента градиента.

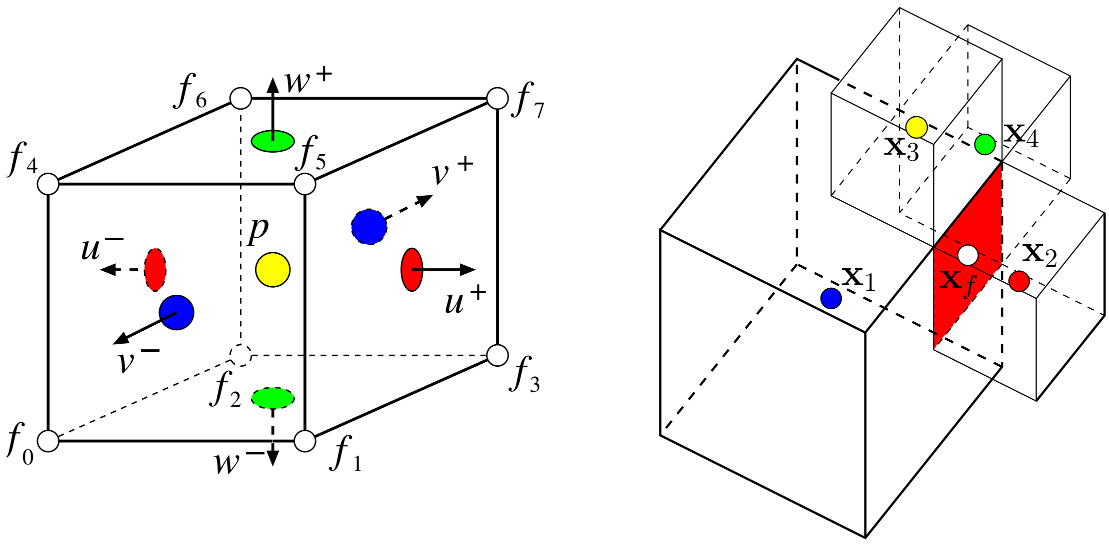


Рис. 3.2. Слева: Расположение степеней свободы на разнесенной сетке; p - давление, $\{u^{\pm}, v^{\pm}, w^{\pm}\}$ - компоненты скорости, f - скалярная функция, например, функция уровня. Справа: шаблон дискретизации $p_x(\mathbf{x}_f)$.

Во втором случае размеры ячеек, разделяющих грань, различные. Для простоты рассмотрим дискретизацию x-компонента оператора градиента в центре грани $\mathbf{x}_f$, как показано на рис. 3.2. Для этого рассмотрим центры четырех соседних ячеек $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_4$ и запишем формулу Тейлора для давления $p(\mathbf{x}_f)$ через значения $p(\mathbf{x}_i)$:

$$p(\mathbf{x}_i) = p(\mathbf{x}_f) + \nabla p(\mathbf{x}_f) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f) + O(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_f|^2).$$

Пренебрегая членами второго порядка, мы получим систему из 4 линейных уравнений с 4 неизвестными.

Решая ее методом Крамера получаем следующий шаблон для x-компонента оператора градиента:

$$p_x(\mathbf{x}_f) \approx \frac{D_{f,1}}{D_f} p_1 + \frac{D_{f,2}}{D_f} p_2 + \frac{D_{f,3}}{D_f} p_3 + \frac{D_{f,4}}{D_f} p_4, \tag{3.13}$$

где D_f - определитель матрицы системы 4×4, а $D_{f,i}$ - определители соответствующих миноров 3×3.

3.3.3. Оператор дивергенции скорости

Для аппроксимации дивергенции скорости в центре $\mathbf{x}_T$ ячейки сетки T воспользуемся формулой Гаусса

$$\int\limits_T \nabla \cdot \mathbf{u}\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int\limits_{\partial T} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\,\mathrm{d}s, \tag{3.14}$$

где $\mathbf{n}$ - внешняя единичная нормаль к границе ячейки. Пусть $\mathcal{F}_T$ - множество граней ячейки T, т.е. $\partial T = \cup_{f \in \mathcal{F}_T} f$, и $\mathbf{x}_f$ обозначает центр $f \in \mathcal{F}_T$. На основании (3.14) определим

$$(\mathrm{div}_h\,\mathbf{u}_h)(\mathbf{x}_T) = |T|^{-1} \sum_{f \in \mathcal{F}_T} |f|(\mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n})(\mathbf{x}_f). \tag{3.15}$$

Благодаря разнесенному расположению точек, в которых хранятся компоненты скорости, $(\mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n})(\mathbf{x}_f)$ определяется естественным образом.

3.3.4. Оператор Лапласа для скорости

Определим $\Delta_h \mathbf{u}_h$ для заданной дискретной функции скорости $\mathbf{u}_h$ в узлах для скорости (центрах граней) во внутренней части расчетной области. Разнесенное расположение узлов для скорости используется для обеспечения устойчивости, однако это сильно осложняет построение компактного шаблона аппроксимации для оператора Лапласа Δ_h на сетках типа восьмеричное дерево. По этой причине во многих работах, посвященных конечно-разностным аппроксимациям уравнений Навье-Стокса на декартовых сетках типа восьмеричное дерево, см. [66, 70, 80], вязкие члены игнорируются (предел Эйлера), или степени свободы для скорости располагаются в узлах ячеек (это упрощает дискретизации, но требует введения дополнительной стабилизации, например, см. [74]). Для создания компактного шаблона дискретизации при использовании степеней свободы для скорости, расположенных в центрах граней, отдельно рассматриваются "нормальные" и "касательные" производные из Δu для компонента скорости u.

В качестве примера рассмотрим вычисление дискретного лапласиана для x-компонента $\mathbf{u}_h$. Разделим оператор Лапласа на две составляющие:

$$\Delta_h u_h = \left(\frac{\partial^2 u_h}{\partial x^2}\right)_h + \Delta_{yz,h} u_h, \qquad \text{где} \;\; \Delta_{yz} u = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \tag{3.16}$$

Сначала в центральной точке $\mathbf{x}_T$ каждой внутренней ячейки T области, заполненной жидкостью, аналогично (3.14)–(3.15), вычислим первую производную компонента скорости по соответствующему направлению:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial x}\right)_h (\mathbf{x}_T) = |T|^{-1} \sum_{f \in \mathcal{F}_T} |F| (u_h n_1)(\mathbf{x}_f). \tag{3.17}$$

где $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ - внешняя нормаль к границе ячейки ∂T в точке $\mathbf{x}_f$. Теперь значения $\left(\frac{\partial^2 u_h}{\partial x^2}\right)_h$ в u-узлах внутренних ячеек находятся так же, как первый компонент градиента давления, то есть по формуле центральной разности, если грань разделяют две ячейки одного и того же размера, или по формуле (3.13) (где p заменяется на $\frac{\partial u}{\partial x}$), если грань f разделяют две ячейки разного размера.

Вклад $\partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ в формулу (3.16) вычисляется иначе. Рассмотрим любую yz-грань F любой внутренней ячейки T, заполненной жидкостью. Обозначим через $\mathcal{E}_f$ множество всех (четырех) ребер грани f, и пусть $\mathbf{n}_e$ обозначает единичный вектор внешней нормали для $e \in \mathcal{E}_f$ в плоскости yz. Если потоки $\mathbf{q}_e \approx \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_e}$ известны, то аналогично (3.15) считаем

$$(\Delta_{yz,h} u_h)(\mathbf{x}_f) = |f|^{-1} \sum_{e \in \mathcal{E}_f} \mathbf{q}_e |e|.$$

Остается вычислить $\mathbf{q}_e$ в центрах $\mathbf{x}_e$ ребер e.

Для ячеек, окружающих ребро e, может существовать три разных случая. (1) Ребро e принадлежит двум yz-граням одинакового размера. (2) e

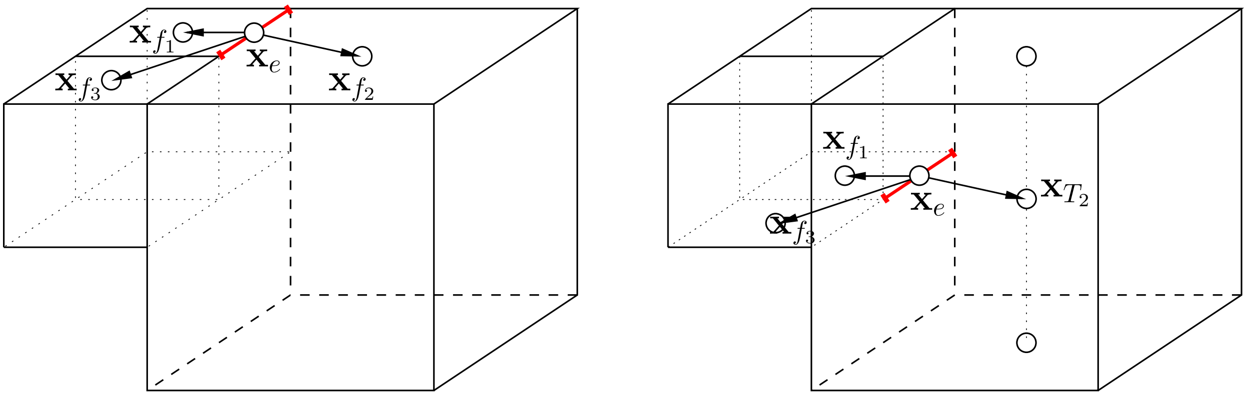


Рис. 3.3. Шаблон для потока через ребро в операторе Лапласа.

принадлежит двум yz-граням f_1 и f_2, и грань f_2 вдвое больше грани f_1. (3) e принадлежит только одной yz-грани f_1 и лежит на xy-грани (xz-грани) большей ячейки T_2. В первом случае $\mathbf{q}_e$ приближается центральной конечной разностью. В двух других случаях используется следующий подход. В зависимости от случая ((2) или (3)) формируем множество Σ_e точек коллокации $\mathbf{x}_i$, $i = 1, 2, 3$. В случае (2) множество Σ_e формируется из центров граней f_1 и f_2 и центра yz-грани f_3, граничащей с f_1 и f_2 (см. рисунок 3.3 (слева)). В случае (3) множество Σ_e состоит из центров грани f_1, ячейки T_2 и yz-грани, смежной с T_1 и T_2 (см. рисунок 3.3 (справа)). Значение компонента скорости $u(\mathbf{x}_i)$ в центре T_2 линейно интерполируется с граней ячейки.

Для полученного множества Σ_e выписываем разложение Тейлора:

$$u(\mathbf{x}_i) = u(\mathbf{x}_e) + \left(\frac{\partial u(\mathbf{x}_e)}{\partial \mathbf{n}_e}, \frac{\partial u(\mathbf{x}_e)}{\partial \mathbf{t}_e}\right)^T \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_e) + O(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_e|^2), \quad i = 1, 2, 3.$$

Здесь $\mathbf{t}_e$ обозначает тангенциальный единичный вектор для ребра e. Пренебрегая слагаемым второго порядка, получим систему из 3 линейных уравнений с 3 неизвестными: $u(\mathbf{x}_e)$, $\frac{\partial u(\mathbf{x}_e)}{\partial \mathbf{n}_e}$ и $\frac{\partial u(\mathbf{x}_e)}{\partial \mathbf{t}_e}$. Решение данной системы дает нам значение $\mathbf{q}_e$.

Численные эксперименты, проведенные в [25], показывают, что данный сеточный оператор Лапласа обеспечивает сходимость для гладких решений с первым порядком как в сеточной L_2, так и в C-норме.

3.3.5. Операторы коррекции объема и реинициализации функции уровня

В этом разделе рассматриваются один из наиболее важных аспектов алгоритма: обработка свободной поверхности и ее геометрических характеристик.

Восстановление объема. Полулагранжев перенос свободной поверхности может привести к заметному изменению (потере или росту) объема жидкости. Это изменение может быть уменьшено несколькими способами: (1) Сгущение расчетной сетки вблизи $\Gamma(t)$. Степень сгущения сетки естественным образом ограничена доступными вычислительными ресурсами. (2) Более точное интегрирование по времени уравнения функции уровня (3.6). В настоящей работе используется метод второго порядка точности с шагом интегрирования $\frac{\Delta t}{n}$ при $n = 2, 3$. Дальнейшее увеличение n не приводит к повышению точности вычислений. (3) Коррекция функции уровня с использованием метода частиц [47, 48]. В работе [71] было показано, что метода функции уровня заметно уменьшает, однако не устраняет полностью потерю объема. По этой причине в некоторых задачах в случае простой области используется (4) корректировка функции уровня путем добавления соответствующей постоянной, позволяющей сохранить объем жидкости. Методом бисекций решается следующее уравнение для поправки δ:

$$\mathrm{meas}\{\mathbf{x} : \phi(\mathbf{x}) < \delta\} = Vol^{\mathrm{reference}}$$

и вводится корректировка для функции уровня $\phi^{new} = \phi - \delta$. Метод может быть распространен на случай несвязных областей, заполненных жидкостью, и более общие функции регулировки [41].

Восстановление расстояния. Как перенос, так и коррекция объема могут приводить к потере функцией уровня свойства быть расстоянием (со знаком) до поверхности. Для непрерывной функции уровня это свойство может быть записано в форме уравнения эйконала:

$$|\nabla\phi(\mathbf{x})| = 1, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \tag{3.18}$$

с граничным условием на свободной поверхности $\Gamma(t)$:

$$\phi(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma(t).$$

Свойство (3.18) имеет важное значение для вычисления геометрических характеристик свободной границы и численной устойчивости. Для того, чтобы восстановить свойство расстояния (со знаком) до поверхности, применяется процедура *реинициализации* (или восстановления расстояния).

Сначала положение интерфейса $\Gamma(t)$ находится в явном виде. Чтобы добиться этого, для каждой ячейки, которая пересекается с дискретной свободной поверхностью (такие ячейки выявляются проверкой знака дискретной функции уровня в вершинах ячеек) строится локальная внутренняя триангуляция поверхности с использованием *метода марширующих кубов* [57, 65]. Отметим, что глобальная треугольная аппроксимация поверхности является конформной триангуляцией в пространстве.

Процедура восстановления расстояния разбивается на два шага: вычисление значений расстояния в узлах поверхностных ячеек (т.е. ячеек, которые пересекаются с поверхностью), и поиск решения дискретного аналога уравнения эйконала во всех остальных узлах.

Для первого шага разработан метод вычисления расстояние до поверхности $\Gamma(t)$ на основании построенной локальной триангуляции [73]. Учитывается тот факт, что триангуляция поверхности – это только кусочно-линейное приближение к поверхности нулевого уровня кусочно-трилинейной функции уровня ϕ. Для каждого треугольника T и каждого узла сетки $\mathbf{x}$ рассматриваем прямую, проходящую через $\mathbf{x}$ ортогонально плоскости треугольника T (см. Рисунок 3.4). След функции ϕ на данной прямой – кубическая функция

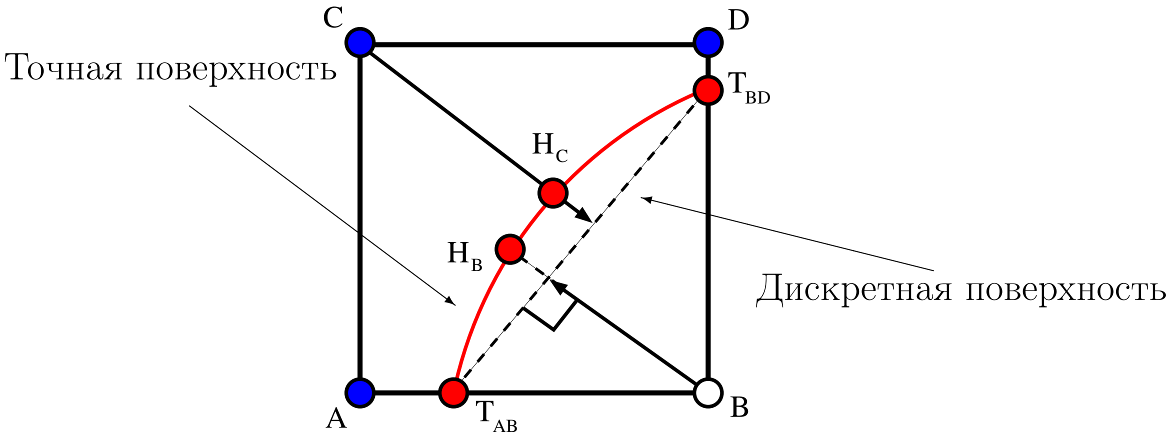


Рис. 3.4. Точная поверхность и кусочно-линейной приближение.

$\psi(t) = f_3 t^3 + f_2 t^2 + f_1 t + f_0$, где $\psi(0) = \phi(\mathbf{x})$. Наименьший положительный корень кубического уравнения $\psi(t) = 0$ определяет точку $H_{\mathbf{x}}$, где прямая пересекает нулевую изоповерхность функции ϕ.

Если вычисленное расстояние до $H_{\mathbf{x}}$ меньше, чем расстояние до треугольника T, выбираем его. В противном случае рассматриваем также расстояния до ребер и вершин треугольника. Наконец, функция уровня ϕ обновляется расстоянием до ближайшей из всех точек $H_{\mathbf{x}}$.

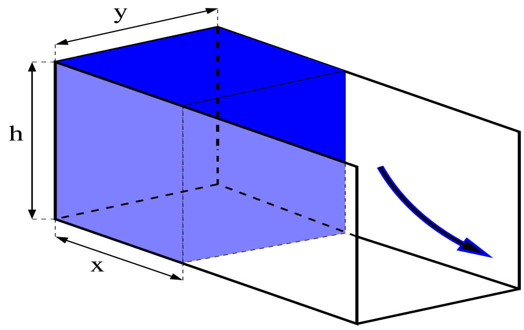
Для второго шага используется "быстрый маршируюший метод" (FSM - Fast Marching Method) [28], адаптированный для сеток типа восьмеричное дерево.

3.4. Численные эксперименты

Приведем два численных эксперимента, показывающие сравнение результатов численного моделирования с реальными физическими экспериментами.

3.4.1. Задача об обрушении дамбы

Рассматривается классический эксперимент, часто используемый для верификации результатов двумерного или трехмерного численного моделирования течений со свободной поверхностью. Постановка задачи показана на



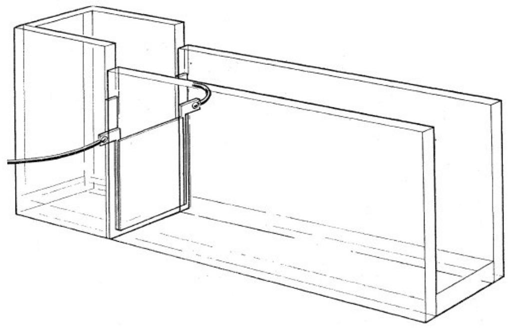


Рис. 3.5. Слева: постановка задачи, справа: схема экспериментальной установки из [68].

рис. 3.5 (слева), а схема физического эксперимента представлена на рис. 3.5 (справа). В начальный момент времени жидкость образует прямоугольную колонну размера $x = y = h = 5.46$ см в дальней части установки. Вертикальная стенка, сдерживающая колонну, отстреливается вверх и колонна обрушивается под действием силы тяжести $\mathbf{f} = (0, 0, -9.80665)$м/с^2. На стенках установки накладывается условие непротекания: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ и $\mathbf{t}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = 0$, где $\boldsymbol{\sigma}$ - обозначает тензор напряжения, а $\mathbf{t}_k$, $k = 1, 2$ - тангенциальные векторы. Параметры жидкости для численного эксперимента выбирались стандартные для воды: плотность $\rho = 0,9982$ г/см^3, кинематическая вязкость $\nu = 0.01002$ см^2/с, коэффициент поверхностного натяжения $\tau = 0.073$ кг/с^2.

Измерим две величины, характеризующие скорость обрушения водяной колонны: продвижение свободной поверхности вдоль дна установки и вдоль задней стенки.

На рис. 3.6 показано сравнение численных результатов для горизонтального продвижения свободной поверхности вдоль нижней стенки и вертикального продвижения верхней кромки свободной поверхности вдоль задней стенки с экспериментальными данными из [68]. Обе вычисленные величины находятся в близком соответствии с экспериментальными данными, и небольшое расхождение для верхней кромки наблюдается только в конце расчета.

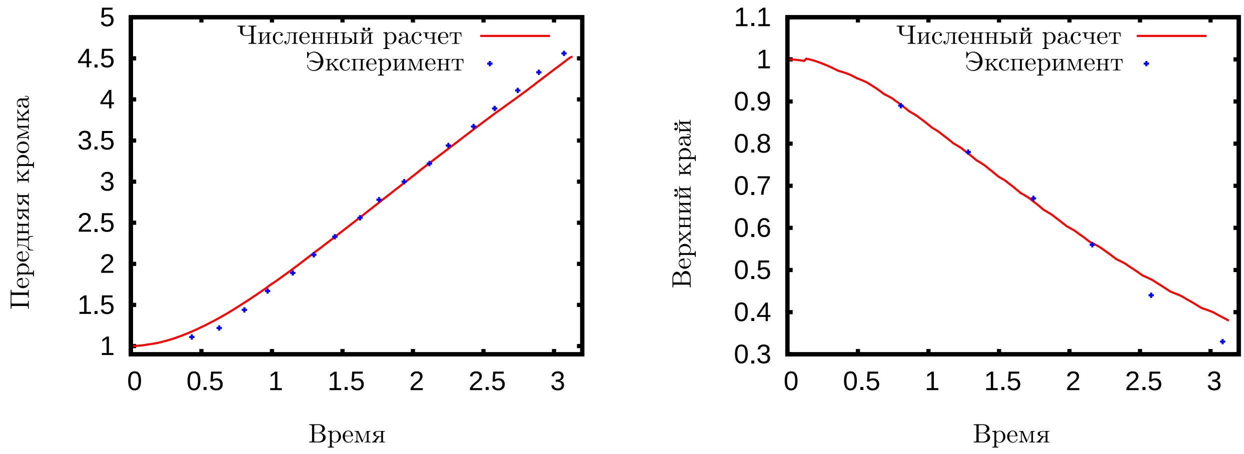


Рис. 3.6. Сравнение экспериментальных данных [68] и вычисленного положения свободной поверхности: нижней передней и верхней кромок в задаче об обрушении дамбы. Единица на графиках соответствует начальной высоте колонны $h = 5.46$ см.

3.4.2. Задача с падающей каплей

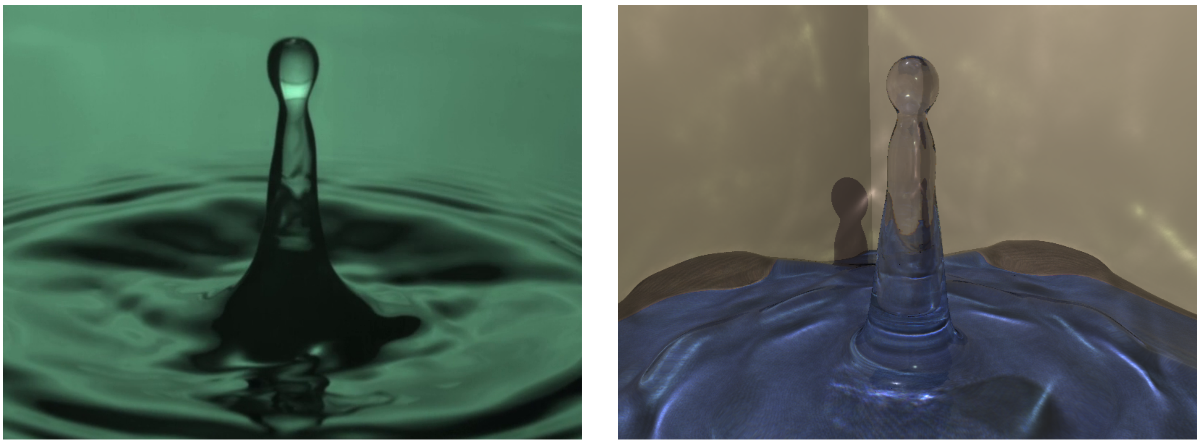


Рис. 3.7. Всплеск и образование капли. Слева: физический эксперимент из [14], справа: результат численного моделирования.

В следующем эксперименте рассматривается следующая задача. Капля воды радиуса $r = 1.1$ см, падает внутри кубического контейнера со стороной $s = 11$ см с высоты $z = 5.5$ см и с начальной скоростью $\mathbf{v} = (0, 0, -3.1)$ м/с, толщина слоя воды на дне области $h = 1.65$ см. Параметры воды и сила тяжести выбирались как в предыдущем эксперименте. После падения капли образуется всплеск. Под действием сил поверхностного натяжения на конце всплеска образуется новая капля, показанная на рис. 3.7 (справа). Для сравнения на рис. 3.7 (слева) приведен кадр из [14], показывающий всплеск и образование капли в физическом эксперименте, снятом на высокоскоростную камеру. Рисунки показывают хорошее соответствие в моделировании описываемого феномена, если не принимать во внимание отражения волн, идущие от стенок контейнера.

$h_{\min}$	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
N	18 824	37 948	109 222	426 077	1 519 554
N_{w}	4332	15 568	61 056	195 638	738 159
t_{mesh}	0.055 (17.6%)	0.17 (15.8%)	0.61 (15.1%)	2.3 (14.1%)	9.1 (14%)
t_{ls}	0.065 (20.6%)	0.20 (18.8%)	0.71 (17.7%)	2.7 (16.9%)	10.7 (16.4%)
t_{part}	0.026 (8.4%)	0.08 (7.7%)	0.29 (7.2%)	1.4 (8.5%)	5.1 (7.8%)
t_{reinit}	0.065 (20.8%)	0.18 (17.3%)	0.67 (16.6%)	3.2 (19.4%)	13.3 (20.4%)
t_{adv}	0.069 (22.1%)	0.27 (25.9%)	1.05 (26.3%)	4.1 (25.2%)	14.7 (22.6%)
t_{proj}	0.032 (10.1%)	0.15 (14.2%)	0.67 (16.7%)	2.5 (15.5%)	12.0 (18.4%)
t_{total}	0.314	1.05	4.0	16.3	65.1

Таблица 3.1. Зависимость числа ячеек и времени работы подшагов алгоритма от шага сетки $h_{\min}$ вблизи поверхности. Здесь N – общее число ячеек, N_{w} – число ячеек, заполненных водой, t_{total} – общее время шага, времена подшагов: t_{mesh} – предсказание $\Gamma(t + \Delta t)$ и перестроение сетки, t_{ls} – полулагранжев перенос функции уровня, t_{part} – перенос частиц и коррекция функции уровня, t_{reinit} – реинициализация, t_{adv} – полулагранжев перенос поля скорости, t_{proj} – проекция на подпространство бездивергентных скоростей.

В таблице 3.1 приведено число ячеек и время работы шагов метода на разных расчетных сетках. Шаг сетки вблизи поверхности выбирается $h_{\min}$ (относительное значение от стороны кубического контейнера $s = 11$ см), после этого сетка постепенно разгрубляется до 1/16 в воздухе и до 1/32 в воде.

Результаты измерений показывают, что время, необходимое на один шаг метода, *линейно* зависит от числа ячеек, заполненных жидкостью. Поскольку сгущение сетки ведется к свободной поверхности, общее число ячеек в расчетной сетке и число ячеек, заполненных жидкостью, обратно пропорционально квадрату минимального шага сетки $h_{\min}$.

Выводы по третьей главе

В третьей главе представлена экономичная технология моделирования течений вязкой несжимаемой жидкости со свободной поверхностью, основанная на одновременном решении уравнений Навье-Стокса и уравнения функции уровня, описывающего динамику свободной границы. Ключевые составляющие технологии – динамические гексаэдральные расчетные сетки, метод дробных шагов для дискретизации по времени и эффективные конечно-объемные и конечно-разностные схемы для дискретизации по пространству.

Приведенные численные эксперименты демонстрируют соответствие получаемых результатов реальным физическим экспериментам, а также эффективное и экономичное использование вычислительных ресурсов.

Заключение

Диссертационная работа посвящена разработке и исследованию численных методов, применяемых для трехмерного моделирования двухфазных течений.

В работе предложена и исследована новая монотонная нелинейная схема дискретизации уравнения конвекции-диффузии на основе метода конечных объемов на сетках с многогранными ячейками. Предлагаемая схема гарантирует сохранение неотрицательности дискретного решения, является низкодиссипативной и показывает второй порядок сходимости в дискретной L_2-норме для концентрации и первый порядок для потоков на гладком решении.

На основе предложенной схемы дискретизации разработана численная модель двухфазной фильтрации в пористой среде и проведен сравнительный анализ предложенной схемы дискретизации потока с традиционной линейной схемой. Результаты экспериментов с использованием двух схем дискретизации по времени – неявной по давлению, явной по насыщенности IMPES-схемы и полностью неявной схемы – демонстрируют устойчивость решения к неортогональности расчетной сетки и анизотропии тензора проницаемости, а также невысокую вычислительную сложность новой схемы.

Разработана экономичная технология, включающая численные методы, алгоритмы, структуры данных и комплекс программ, для моделирования трехмерных течений вязкой несжимаемой жидкости со свободной границей. Технология основана на одновременном решении уравнений Навье-Стокса и уравнения функции уровня, описывающего динамику свободной поверхности. Ключевые составляющие технологии – динамические гексаэдральные расчетные сетки, метод дробных шагов для дискретизации по времени и эффективные конечно-объемные и конечно-разностные схемы для дискретизации по пространству.

Литература

1. Василевский Ю. В., Капырин И. В. Две схемы расщепления для нестационарной задачи конвекции-диффузии на тетраэдральных сетках // Ж. Выч. Мат. и Мат. Физ. 2008. Т. 48, № 8. С. 1429–1447.

2. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.

3. Гилбарг Д., Трудингер Н. Эллиптические дифференциальные уравнения с частными производными второго порядка. М.: Наука, 1989.

4. Данилов А. А. Технология построения неструктурированных сеток и монотонная дискретизация уравнения диффузии: Кандидатская диссертация / ИВМ РАН. Москва, 2010.

5. Каневская Р. Д. Математическое моделирование гидродинамических процессов разработки месторождений углеводородов. Москва, Ижевск, 2003.

6. Капырин И. В. Семейство монотонных методов численного решения трёхмерных задач диффузии на неструктурированных тетраэдральных сетках // Доклады Академии Наук. 2007. Т. 614, № 5. С. 588–593.

7. Ладыженская О. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. М.: Наука, 1973.

8. Лебедев В. И. Разностные аналоги ортогональных разложений, основных дифференциальных операторов и некоторых краевых задач математической физики // ЖВМиМФ. 1964. Т. 4. С. 449–465,649–659.

9. Лебедев В. И., Агошков В. И. Операторы Пуанкаре-Стеклова и их приложения в анализе. М.: ОВМ АН СССР, 1983.

10. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989.

11. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981.

12. Марчук Г. И., Кузнецов Ю. А. Итерационные методы и квадратичные функционалы // Методы вычислительной математики. Новосибирск: Наука, 1975.

13. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике. М.: Наука, 1970.

14. Научно-популярная передача: Time Warp. `http://time-warp.ru/`.

15. Никитин К. Д. Технология расчёта течений со свободной границей с использованием динамических гексаэдральных сеток // Численные методы, параллельные вычисления и информационные технологии. М.: МГУ, 2008. С. 183–198.

16. Никитин К. Д. Нелинейный метод конечных объемов для задач многофазной фильтрации // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 11. С. 131–147.

17. Никитин К. Д. Реалистичное моделирование свободной водной поверхности на адаптивных сетках типа восьмеричное дерево // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2010. Т. 70, № 6. С. 60–64.

18. Никитин К. Д., Сулейманов А. Ф., Терехов К. М. Технология моделирования течений со свободной поверхностью в реалистичных сценах // Труды Математического центра им. Н.И. Лобачевского. 2009. Т. 39. С. 305–307.

19. Ольшанский М. А. Анализ многосеточного метода для уравнений конвекции-диффузии с краевыми условиями Дирихле // ЖВМ и МФ. 2004. Т. 44, № 8. С. 1450–1479.

20. Пергамент А. Х., Семилетов В. А. Метод опорных операторов для эллиптических и параболических краевых задач с разрывными коэффициентами в анизотропных средах // Математическое моделирование. 2007. Т. 19, № 5. С. 105–115.

21. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1982.

22. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 248 с.

23. Сухинов А. А. Математическое моделирование процессов переноса примесей в жидкостях и пористых средах: Кандидатская диссертация / ИММ РАН. Москва, 2009.

24. Тыртышников Е. Е. Методы численного анализа. М.: Издательский центр "Академия", 2007.

25. Чернышенко А. Ю. Разработка новой разностной схемы на сетках типа восьмеричное дерево для моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости. Дипломная работа, Мех.-мат. ф-т. МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, 2010.

26. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.

27. Aavatsmark I., Eigestad G., Mallison B., Nordbotten J. A compact multipoint flux approximation method with improved robustness // Num. Meth. for Part. Diff. Eqs. 2008. Vol. 24, no. 5. Pp. 1329–1360.

28. Adalsteinsson D., Sethian J. A. The fast construction of extension velocities in level set methods // J. Comput. Phys. 1999. Vol. 148. Pp. 2–22.

29. Adalsteinsson G. D., Sethian J. A. On maximum principles for monotone matrices // Linear Algebra Appl. 1986. Vol. 78. Pp. 147–161.

30. Agoshkov V., Gervasio P., Quarteroni A. Optimal control in heterogeneous domain decomposition methods for advection-diffusion equations // Mediterranean Journal of Mathematics. 2006. Vol. 3. Pp. 147–176.

31. Aziz K., Settari A. Petroleum Reservoir Simulation. London: Applied Sci. Publ. Ltd, 1979.

32. Bank R. E., Dupont T. F., Yserentant H. The hierarchical basis multigrid method // Numer. Mathem. 1988. Vol. 52. Pp. 427–458.

33. Bänsch E. Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface // Numer. Math. 2001. Vol. 88. Pp. 203–235.

34. Behr M. Stabilized space-time finite element formulations for free surface flows // Comm. Numer. Meth. Engrg. 2001. Vol. 11. Pp. 813–819.

35. Benson D. A new two-dimensional flux-limited shock viscosity for impact calculations // Comput. Meth. Appl. Mech. Engr. 1991. Vol. 93. Pp. 39–95.

36. Bertakis E., Gross S., Grande J. et al. Validated simulation of droplet sedimentation with finite-element and level-set methods // Chem. Eng. Science. 2001. Vol. 65. Pp. 2037–2051.

37. Bertolazzi E., Manzini G. A cell-centered second-order accurate finite volume method for convection-diffusion problems on unstructured meshes // Mathematical Models & Methods In Applied Sciences. 2004. Vol. 14, no. 8. Pp. 1235–1260.

38. Bramble J., Pasciak J., Xu. J. Parallel multilevel preconditioners // Math. Comp. 1990. Vol. 88. Pp. 1–22.

39. Brezzi F., Fortin M. Mixed and Hybrid Finite Element Methods. New York: Springer-Verlag, 1991.

40. Brooks A. N., Hughes T. J. R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1982. Vol. 32, no. 1-3. Pp. 199–259.

41. Buscaglia G. C., Dari E. A., Mut F. A new mass-conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes // Mecanica Computacional. 2004. Vol. 23. Pp. 1659–1678.

42. Chavent G., Jaffré J. Mathematical models and finite elements for reservoir simulation. B.V., Netherlands: Elsevier Science Publishers, 1986.

43. Chen Z., Huan G., Ma Y. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media. SIAM, 2006.

44. Chorin A. Numerical solution of the Navier-Stokes equations // Math. Comp. 1968. Vol. 22. Pp. 745–762.

45. Cleary A., Falgout R., Henson V. et al. Robustness and scalability of algebraic multigrid // SIAM J.Sci.Comp. 2000. Vol. 21. Pp. 1886–1908.

46. Danilov A., Vassilevski Yu. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009. Vol. 24, no. 3. Pp. 207–227.

47. Enright D., Fedkiw R., Ferziger J., Mitchell I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing // J. Comp. Phys. 2002. Vol. 183. Pp. 83–116.

48. Enright D., Losasso F., Fedkiw R. A fast and accurate semi-Lagrangian particle level set method // Comput. Struct. 2005. Vol. 83. Pp. 479–490.

49. Esser P., Grande J., Reusken A. An extended finite element method applied to levitated droplet problems // Int. J. for Numer. Meth. in Engineering. 2010. Vol. 84, no. 7. Pp. 757—-773.

50. Garbey M., Kuznetsov Yu., Vassilevski Yu. Parallel Schwarz method for a convection-diffusion problem // SIAM J.Sci.Comp. 2000. Vol. 22, no. 3. Pp. 891–916.

51. Ginzburg I., Wittum G. Two-Phase Flows on Interface Refined Grids Modeled with VOF, Staggered Finite Volumes, and Spline Interpolants // J. Comp. Phys. 2001. Vol. 166. Pp. 302–335.

52. Gross S., Reichelt V., Reusken A. A finite element based level set method for two-phase incompressible flows // Computing and Visualization in Science. 2006. Vol. 9, no. 4. Pp. 239–257.

53. Harlow F., Welch J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // Phys. Fluids. 1965. Vol. 8. Pp. 2182–2189.

54. Hubbard M. E. Multidimensional slope limiters for MUSCL-type finite volume schemes on unstructured grids // J. Comp. Phys. 1999. Vol. 155, no. 1. Pp. 54–74.

55. Hughes T. J. R., Mallet M., Mizukami A. A new finite element formulation for computational fluid dynamics. II. Beyond SUPG // Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg. 1986. Vol. 54. Pp. 341–355.

56. John V., Knobloch P. On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: Part I - A review. // Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg. 2007. Vol. 196. Pp. 2197–2215.

57. Lachaud J.-O. Topologically defined iso-surfaces // DGCI. 1996. Pp. 245–256.

58. LePotier C. Schema volumes finis monotone pour des operateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages de triangle non structures // C. C. Acad. Sci. Paris, 2005. Vol. 341. Pp. 787–792.

59. LePotier C. Finite volume scheme satisfying maxcimum and minimum principles for anisotropic diffusion operators // Finite Volumes for Complex Applications / Ed. by R. Eymard, J.-M. Hérard. 2008. Pp. 103–118.

60. LeVeque R. J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge Texts in Applied Mathematics, 2002.

61. Lipnikov K., Gyrya V. High-order mimetic finite difference method for diffusion problem on polygonal meshes // J. Comp. Phys. 2008. Vol. 227. Pp. 8841–8854.

62. Lipnikov K., Svyatskiy D., Shashkov M., Vassilevski Yu. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on unstructured triangular and shape-regular polygonal meshes // J. Comp. Phys. 2007. Vol. 227. Pp. 492–512.

63. Lipnikov K., Svyatskiy D., Vassilevski Yu. Interpolation-free monotone finite volume method for diffusion equations on polygonal meshes // J. Comp. Phys. 2009. Vol. 228, no. 3. Pp. 703–716.

64. Lipnikov K., Svyatskiy D., Vassilevski Yu. A monotone finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polygonal meshes // J. Comp. Phys. 2010. Vol. 229. Pp. 4017 – 4032.

65. Lorensen W., Cline H. Marching Cubes: A High Resolution 3D Surface Construction Algorithm // Computer Graphics. 1987. Vol. 21, no. 4. Pp. 163–169.

66. Losasso F., Gibou F., Fedkiw R. Simulating water and smoke with an octree data structure // ACM Transactions on Graphics. 2004. Vol. 23, no. 3. Pp. 457–462.

67. Manzini G., Russo A. A finite volume method for advection-diffusion problems in convection-dominated regimes // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2008. Vol. 197, no. 13-16. Pp. 1242–1261.

68. Martin J., Moyce W. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane // Philos.Trans.R.Soc.Lond.Ser.A. 1952. Vol. 244. Pp. 312–324.

69. Meagher D. Geometric modeling using octree encoding // Computer Graphics and Image Processing. 1982. Vol. 19. Pp. 129–147.

70. Min C., Gibou F. A second order accurate level set method on non-graded adaptive cartesian grids // J. Comp. Phys. 2007. Vol. 225. Pp. 300–321.

71. Nikitin K., Vassilevski Yu. Free surface flow modelling on dynamically refined hexahedral meshes // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2008. Vol. 23, no. 5. Pp. 469–485.

72. Nikitin K., Vassilevski Yu. A monotone finite folume method for advection-diffusion equations on unstructured polyhedral meshes in 3D // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2010. Vol. 25, no. 4. Pp. 335–358.

73. Nikitin K. D., Olshanskii M. A., Terekhov K. M., Vassilevski Yu. V. Preserving distance property of level set function and simulation of free surface flows on

adaptive grids // Численная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления. 2010. Pp. 25–32.

74. Olshanskii M. A. Analysis of semi-staggered finite-difference method with application to Bingham flows // Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 2009. Vol. 198. Pp. 975–985.

75. Osher S., Fedkiw R. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. Springer-Verlag, 2002.

76. Osher S., Sethian J. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi equations // J. Comp. Phys. 1988. Vol. 79. Pp. 12–49.

77. Peaceman D. W. Fundamentals of Numerical Reservoir Simulation. New York: Elsevier, 1977.

78. Peaceman D. W. Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation // SPEJ. 1978. Pp. 183–194.

79. Pilliod J. E., Puckett E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces // J. Comp. Phys. 2004. Vol. 199. Pp. 465–502.

80. Popinet S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows // J. Comp. Phys. 2009. Vol. 228. Pp. 5838–5866.

81. Quarteroni A., Valli A. Numerical Approximation of Partial Differential Equations. Heidelberg: Springer-Verlag, 1994.

82. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. SIAM, 2000.

83. Samet H. The Design and Analysis of Spatial Data Structures. New York: Addison-Wesley, 1989.

84. Samet H. Applications of Spatial Data Structures: Computer Graphics, Image Processing and GIS. New York: Addison-Wesley, 1990.

85. Sethian J. A. Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.

86. Strain J. Semi-Lagrangian methods for level set equations // J. Comput. Phys. 1999. Vol. 151, no. 2. Pp. 498–533.

87. Strain J. Tree Methods for Moving Interfaces // J. Comp. Phys. 1999. Vol. 151. Pp. 616–648.

88. Sussman M., Smereka P., Osher S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow // J. Comp. Phys. 1994. Vol. 114. Pp. 146–159.

89. Szeliski R. Rapid octree construction from image sequences // CVGIP: Image Understanding. 1993. Vol. 58. Pp. 23–32.

90. Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A. et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow // J. Comp. Phys. 2001. Vol. 169. Pp. 708–759.

91. Unverdi S. O., Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows // J. Comp. Phys. 1992. Vol. 100. Pp. 25–37.

92. van der Vorst H. A. BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1992. Vol. 13, no. 2. Pp. 631–644.

93. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // J. Comp. Phys. 1979. Vol. 32, no. 1. Pp. 101–136.

94. Varga R. S. Matrix Iterative Analysis. Englewood Cliffs, NJ, USA: Prentice-Hall, 1962.

95. Yuan A., Sheng Z. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes // J. Comp. Phys. 2008. Vol. 227, no. 12. Pp. 6288–6312.