DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.3.37
УДК 532.546, 519.688

КРИТЕРИЙ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ ДЛЯ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ РАСЧЁТА ФИЛЬТРАЦИИ

А.А. Афанасьев[1,2], О.Э. Мельник[1,2]

[1]Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[2]ЗАО «Т-Сервисы», Москва, Россия

Исследуется проблема построения конечно-разностных схем для расчёта неизотермических многофазных течений в пористой среде. Рассмотрен общий случай, когда рассчитывается фильтрация смеси, содержащей произвольное число компонент и фаз. Получен критерий неотрицательного производства энтропии для схемы с разностями против потоков. Предложены аппроксимации конвективных членов, удовлетворяющие полученному критерию. Показано, что знак производства энтропии существенно зависит от согласованности свойств смеси с законами термодинамики.

Ключевые слова: конечно-разностная схема, численное моделирование, пористая среда, фильтрация, энтропия, термодинамика

NON-NEGATIVE ENTROPY PRODUCTION CRITERIA FOR NUMERICAL SIMULATIONS OF FLOWS IN POROUS MEDIA

A.A. Afanasyev[1,2] and O.E. Melnik[1,2]

[1]Institute of Mechanics of Moscow State University, Moscow, Russia
[2]ZAO «T-Services», Moscow, Russia

The problem of constructing finite-difference schemes for non-isothermal multiphase flows in porous media is investigated. We consider the general case where the filtration of a mixture with an arbitrary number of components and phases is calculated. We derive the non-negative entropy production criteria for the upwind numerical scheme and propose the approximations of fluxes satisfying the criteria. It is shown that the sign of the entropy production is strongly affected by the consistency of mixture properties with the laws of thermodynamics.

Key words: finite-difference scheme, numerical simulation, porous media, entropy, thermodynamics

1. Введение

При численном решении задач механики сплошной среды, в частности задач фильтрации, возникает проблема построения конечно-разностных схем, которые удовлетворяют различным свойствам, следующим из дифференциальных уравнений. Часто используется условие консервативности, обеспечивающее сохранение интегральных параметров вычислительной задачи в изолированной области, например, просуммированной по всем ячейкам массы и энергии среды [1, 2]. Условие неотрицательного производства энтропии, вытекающее из второго закона термодинамики [3], также может являться дополнительным ограничением на вид конечно-разностной схемы. В соответствии с данным условием при численном решении задач механики сплошной среды в изолированной области энтропия не должна убывать.

В работе [4] предложена общая форма записи уравнений фильтрации, схожая с представлением Годунова для гиперболических систем [5]. Рассмотрен случай, когда математическая модель может использоваться для описания процессов с произвольным числом компонент и фаз. В рамках этой постановки получено уравнение для энтропии и показано, что производство энтропии будет неотрицательным [3], если в уравнении энергии учитывать работу силы тяжести. В случае пренебрежения работой силы тяжести энтропия изолированной системы убывает, что противоречит второму закону термодинамики.

В области численного моделирования течений в пористой среде распространены консервативные схемы первого порядка с разностями против потоков [6–8], которые формулируются в рамках метода конечных объёмов [9]. До настоящего времени для данных схем условие неотрицательного производства энтропии не проверялось. Более того, в разностных схемах [6–8] в уравнении энергии отбрасывался член, связанный с работой силы тяжести, поэтому для них, в соответствии с результатами для дифференциальных уравнений фильтрации [4], нет смысла проверять условие возрастания энтропии. Это обусловлено тем, что дифференциальные уравнения не согласуются со вторым законом термодинамики, если в них пренебречь работой силы тяжести.

Здесь рассмотрен класс конечно-разностных схем для расчёта фильтрации, которые содержат член, аппроксимирующий работу силы тяжести. Для указанных схем получено достаточное условие — критерий неотрицательного производства энтропии. Показано, что данный критерий тесно связан с условием выпуклости термодинамического потенциала, описывающего свойства многокомпонентной смеси. Приведены примеры схем, удовлетворяющих предложенному критерию.

2. Уравнения фильтрации

Предполагаем, что вещество скелета пористой среды не растворяется в фазах фильтрующейся смеси и образует отдельную неподвижную фазу. Также считаем, что при постоянном составе состояние газовых, жидких и твёрдых фаз, в том числе и скелета пористой среды, определяется только двумя параметрами, например, давлением и температурой. Фильтрацию рассматриваем в условиях локального термодинамического равновесия.

Уравнения неизотермической p-фазной фильтрации c-компонентной смеси в сжимаемой пористой среде представим в виде [4]:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{g}_\alpha = 0 \quad (\alpha = 1, ..., c), \tag{2}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{g}_0 = A, \quad A = \sum_{\alpha=1}^{c} \mathbf{g}_\alpha \mathbf{G}. \tag{3}$$

Здесь: f_s — объёмная плотность материала скелета пористой среды; f_α ($\alpha = 1, ..., c$) — объёмная плотность компоненты α смеси; f_0 — плотность внутренней энергии насыщенной пористой среды; $\mathbf{g}_\alpha$ ($\alpha = 1, ..., c$) — поток компоненты α; $\mathbf{g}_0$ — поток внутренней энергии; A — работа силы тяжести; $\mathbf{G}$ — ускорение свободного падения.

Уравнения (1), (2) и (3) есть, соответственно, законы сохранения массы материала скелета пористой среды, компоненты α смеси и энергии. Входящие в них плотности f и потоки $\mathbf{g}$ представим в виде [4]:

$$\begin{gathered} f_s = -(1-m) q_0 \frac{\partial P_s}{\partial q_s}, \qquad f_\alpha = -m q_0 \sum_{\beta=1}^{p} \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} s_\beta \quad (\alpha = 1, ..., c), \\ f_0 = -m \sum_{\beta=1}^{p} \frac{\partial\left(q_0 P_\beta\right)}{\partial q_0} s_\beta - (1-m) \frac{\partial\left(q_0 P_s\right)}{\partial q_0}; \end{gathered} \tag{4}$$

$$\mathbf{g}_\alpha = -q_0 \sum_{\beta=1}^{p} \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} w_\beta \quad (\alpha = 0, ..., c); \tag{5}$$

$$q_0 = \frac{1}{T}, \qquad q_\alpha = -\frac{\gamma_\alpha}{M_\alpha T} \quad (\alpha = 1, ..., c, s); \tag{6}$$

$$\mathbf{w}_\beta = -K\eta_\beta \left(\nabla P_\beta + q_0 \sum_{\alpha=1}^{c} \frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} \mathbf{G} \right), \qquad \eta_\beta = \frac{\chi_\beta}{\mu_\beta}. \tag{7}$$

Здесь: P — давление; m — пористость; s — насыщенность; T — температура; M — молярная плотность; γ — химический потенциал; $\mathbf{w}$ — скорость фильтрации; K — абсолютная проницаемость; χ — относительная фазовая проницаемость; μ — вязкость; η — подвижность; p — число фаз. Индекс $\alpha = 1, ..., c$ соответствует параметрам компоненты α смеси, $\alpha = s$ — параметрам скелета пористой среды; β — фазы смеси, $\beta = 1, ..., p$. В соответствии с правилом фаз Гиббса выполняется неравенство $p \le c+1$ [10, 11]. Уравнение (7) есть закон фильтрации Дарси [4, 6–8]. Для упрощения дальнейших рассуждений процессами теплопроводности пренебрегаем. Предполагаем, что параметры m, K, χ, μ заданы.

Многолистная функция $P(q_0, \ldots, q_c)$ имеет p ветвей, каждая из которых — P_β, отдельно описывает термодинамические свойства фазы смеси $\beta = 1, ..., p$, а функция $P_s(q_0, q_s)$ задает свойства породы. Вычисляя производные от данных функций по переменным q, получим термодинамические параметры среды [4]. В частности, величина $-q_0\, \partial P_\beta / \partial q_\alpha$ есть абсолютная плотность компоненты $\alpha = 1, ..., c$ в фазе β

или, при $\alpha = 0$, плотность энтальпии. Следовательно, параметр $\rho_\beta = -q_0 \sum_{\alpha=1}^{c} \left(\partial P_\beta / \partial q_\alpha \right)$, входящий в закон Дарси (7), есть плотность ρ_β фазы β. Функции

$$P_\beta(q_0, ..., q_c) \ \ (\beta = 1, ..., p); \ \ P_s(q_0, q_s) \tag{8}$$

являются термодинамическими потенциалами от своих аргументов [4, 10, 11]. Можно показать [4], что стабильным термодинамическим состояниям среды [11] соответствуют параметры q_α, при которых функции (8) выпуклы вниз:

$$\begin{gathered} \left(\frac{\partial^2 P_\beta}{\partial q_\alpha \partial q_\delta} \right) \geq 0 \quad (\alpha, \delta = 0, ..., c), \quad (\beta = 1, ..., p); \\ \left(\frac{\partial^2 P_s}{\partial q_\alpha \partial q_\delta} \right) \geq 0 \quad (\alpha, \delta = 0, s). \end{gathered} \tag{9}$$

В состоянии термодинамического равновесия давления P_β и P_s в различных фазах одинаковые, поэтому условия равновесия запишутся как $P = P_1 = \ldots = P_p = P_s$.

Представление уравнений фильтрации в виде (1)–(7) эквивалентно их представлению в [4] за тем исключением, что термодинамические свойства среды задаются здесь многолистной функцией P, а не отношением P/T, использовавшемся в работе [4]. Уравнения (1)–(7) могут быть получены из соответствующих уравнений в [4] путём тождественных преобразований.

Для дифференциалов плотностей f выполняется соотношение [4]

$$df_e = q_s df_s + \sum_{\alpha=0}^{c} q_\alpha df_\alpha . \tag{10}$$

Здесь f_e — объёмная плотность энтропии. Согласно (10), умножив уравнения (1), (2) и (3) на q_s, q_α ($\alpha = 1, \ldots, c$) и q_0, получим уравнение для энтропии:

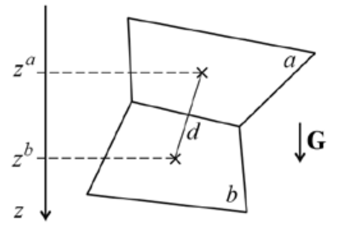
$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{g}_e = E; \qquad E = \frac{q_0}{K} \sum_{\beta=1}^{p} \frac{\mathbf{w}_\beta^2}{\eta_\beta} \geq 0 , \tag{11}$$

где $\mathbf{g}_e$ — поток энтропии, а неотрицательная величина E — количество производимой энтропии (далее — производство энтропии).

3. Расчётная схема

3.1. Конечно-разностный вид законов сохранения

Численное моделирование фильтрации рассмотрим в рамках метода конечных объёмов [6–9]. Поскольку к производству энтропии приводят потоки массы и энергии между любыми двумя связанными общей границей ячейками расчётной сетки, то для оценки количества производимой энтропии в конечно-разностных расчётах достаточно взять сетку, состоящую только из двух ячеек: a и b (см. рисунок). Общее количество энтропии, производимое в сеточной области, есть сумма вкладов от каждой пары ячеек. Следовательно, если показать, что потоки между любыми двумя ячейками вычислительной задачи приводят к неотрицательному производству энтропии, то общее производство энтропии для всей задачи также будет неотрицательным.



Схематичное изображение ячеек a и b; z^a и z^b – координаты геометрических центров ячеек

Параметры, относящиеся к ячейкам a и b, обозначим верхними индексами a и b. Согласно (1)–(3) и при условии, что шаг по времени стремится к нулю ($dt \to 0$), законы сохранения для ячейки $l = a,\ b$ представим в конечно-разностном виде:

$$V^l df_s^l = 0\,; \tag{12}$$

$$V^l df_\alpha^l + S g_\alpha^{ln} dt = 0 \quad (\alpha = 1,\ ...,\ c)\,; \tag{13}$$

$$V^l df_0^l + S g_0^{ln} dt = A^l dt \quad (l, n = a,\ b,\quad l \ne n)\,. \tag{14}$$

Здесь: V^l — геометрический объём ячейки; S — площадь грани между ячейками; g_α^{ln} — потоки из ячейки l в ячейку n ($g_\alpha^{ln} = -g_\alpha^{nl}$); A^l — конечно-разностная аппроксимация работы силы тяжести, производимой в ячейке l. Дифференциалы df_α^l ($\alpha = 0,\ ...,\ c,\ s$) в уравнениях (12)–(14) обозначают изменение плотности компоненты α смеси в ячейке l за бесконечно малый шаг по времени $dt \to 0$.

3.2. Аппроксимация потоков

Потоки g_α^{ln} рассчитаем в рамках схемы с разностями против потоков. Обозначим

$$\begin{gathered}\Delta P_\beta^l = P^n - P^l - \tilde{\rho}_\beta^l G\left(z^n - z^l\right) \\ (\beta = 1,\ ...,\ p^l),\ (l, n = a,\ b,\quad l \ne n),\end{gathered} \tag{15}$$

где $\tilde{\rho}_\beta^l$ — аппроксимация плотности фазы β из ячейки l на грани между ячейками a и b; p^l — число фаз смеси в ячейке l; z^l — вертикальная координата (глубина) центра ячейки; G — модуль вектора ускорения свободного падения $\mathbf{G}$. Предполагаем, что направление оси z совпадает с направлением вектора $\mathbf{G}$ (см. рисунок). Параметры ΔP_β^l, с точностью до умножения на константу, являются аппроксимациями величины, взятой в скобки в законе Дарси (7). Таким образом, выражения (15) задают направление течения фаз из ячейки в ячейку через их общую границу.

Согласно (5), (7), (15) обозначим через $g_{\alpha\beta}^l$ ($\alpha = 1,\ ...,\ c$) поток компоненты α в фазе β, находящейся в ячейке $l = a,b$, из ячейки l в связанную с ней ячейку $n \ne l$, $n = a,b$, а через $g_{0\beta}^l$ — соответствующий поток энергии:

$$g_{\alpha\beta}^l = \begin{cases} q_0^l \left(\dfrac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha}\right)^l \dfrac{K^*}{d} \eta_\beta^l \Delta P_\beta^l, & \Delta P_\beta^l \le 0; \\ 0, & \Delta P_\beta^l > 0. \end{cases} \tag{16}$$

Здесь: K^* — аппроксимация проницаемости на грани; d — расстояние между геометрическими центрами ячеек (см. рисунок).

В соответствии с (5), (7), (15), (16) имеем следующее выражение для потоков между ячейками: $g_\alpha^{ab} = \sum\limits_{\beta=1}^{p^a} g_{\alpha\beta}^a - \sum\limits_{\beta=1}^{p^b} g_{\alpha\beta}^b$.

3.3. Аппроксимация работы силы тяжести

Согласно (3), (13), (14) работа силы тяжести A^{ab}, производимая вследствие фильтрации между ячейками, имеет вид

$$A^{ab} = A^a + A^b = S \sum_{\alpha=1}^{c} g_\alpha^{ab} G\left(z^b - z^a\right). \tag{17}$$

В расчётах часть работы (17) может быть отнесена к ячейке a (A^a), а оставшаяся часть — к ячейке b (A^b).

Работа A_β^l, производимая в результате течения фазы β из ячейки l, равна

$$A_\beta^l = S\sum_{\alpha=1}^{c} g_{\alpha\beta}^l G\left(z^n - z^l\right) \quad (l,n = a,b,\ \ l \neq n)\,. \tag{18}$$

Обозначим через y_β^l ту часть работы A_β^l (18), которая относится, согласно закону сохранения энергии (14), к ячейке l. Тогда оставшаяся часть $1-y_\beta^l$ принадлежит ячейке $n \neq l$. Следовательно, выполняется соотношение

$$A^l = \sum_{\beta=1}^{p^l} A_\beta^l y_\beta^l + \sum_{\beta=1}^{p^n} A_\beta^n\left(1-y_\beta^n\right). \tag{19}$$

В дальнейшем величины $\tilde{\rho}_\beta^l$, y_β^l, $\beta = 1, ..., p^l$, $l = a,b$ будем считать теми параметрами конечно-разностной схемы, которые должны обеспечивать выполнение требований, предъявляемых к схеме. В частности, параметры $\tilde{\rho}_\beta^l$, y_β^l могут задаваться для обеспечения неотрицательного производства энтропии при численном моделировании фильтрации.

4. Сеточное представление производства энтропии

4.1. Разностное уравнение для энтропии

Умножим уравнения (12), (13) и (14) на q_s^l, q_α^l, ($\alpha = 1, ..., c$) и q_0^l ($l = a,b$) и сложим все ($2c+4$) получившиеся соотношения. Согласно (10) имеем следующее уравнение, описывающее баланс энтропии:

$$V^a df_e^a + V^b df_e^b = SE^{ab}dt\,; \tag{20}$$

$$E^{ab} = \sum_{\alpha=0}^{c}\left(q_\alpha^b - q_\alpha^a\right)g_\alpha^{ab} + S^{-1}\left(q_0^a A^a + q_0^b A^b\right). \tag{21}$$

Левая часть уравнения (20) есть изменение общего количества энтропии в ячейках a и b, правая часть пропорциональна, с коэффициентом Sdt, конечно-разностному производству энтропии E^{ab}. Действительно, ячейки a и b можно рассматривать как изолированную термодинамическую систему, приток энтропии через границы которой отсутствует. Таким образом, правая часть уравнения (20) не может быть ни чем иным, кроме как производством энтропии, вызванным потоками массы и энергии между ячейками.

Подставляя соотношение (19) в (21), получим следующее выражение для производства энтропии:

$$E^{ab} = \sum_{l=a,b}\sum_{\beta=1}^{p^l} E_\beta^l; \qquad E_\beta^l = \sum_{\alpha=0}^{c} g_{\alpha\beta}^l \Delta\xi_{\alpha\beta}^l \geq 0\,; \tag{22}$$

$$\Delta\xi_{0\beta}^l = q_0^n - q_0^l, \quad \Delta\xi_{\alpha\beta}^l = q_\alpha^n - q_\alpha^l + Q_\beta^l G\left(z^n - z^l\right) \quad (\alpha = 1, ..., c)\,;$$

$$Q_\beta^l = y_\beta^l q_0^l + \left(1 - y_\beta^l\right)q_0^n\,. \tag{23}$$

Здесь E_β^l — производство энтропии, обусловленное только течением фазы β, находящейся в ячейке l. В соответствии с идеями термодинамики необратимых процессов и соотношениями (22) величину $\Delta\xi_{\alpha\beta}^l$ естественно назвать конечно-разностной термодинамической силой, соответствующей потоку $g_{\alpha\beta}^l$ [3]. Для того, чтобы энтропия возрастала, должны выполняться неравенства (22). Согласно (16) при $\Delta P_\beta^l > 0$ течение фазы β из ячейки l отсутствует, а $E_\beta^l = 0$. Таким образом, неравенства (22) должны выполняться только при $\Delta P_\beta^l \leq 0$.

4.2. Критерий неотрицательного производства энтропии

Определим ограничения на параметры конечно-разностной схемы $\tilde{\rho}_\beta^l$, y_β^l, обеспечивающие неотрицательное производство энтропии $E_\beta^l \geq 0$. Так как $q_0, d > 0$, $K^*, \eta_\beta^l \geq 0$, $l = a,b$, то в соответствии с соотношениями (16), (22) производство энтропии $E^l_\beta \geq 0$ неотрицательно, если при $\Delta P^l_\beta \leq 0$ выполняется неравенство

$$\left(\sum_{\alpha=0}^{c} \left(\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} \right)^l \Delta\xi^l_{\alpha\beta} \right) \Delta P^l_\beta \geq 0 . \tag{24}$$

Так как для корректных в термодинамическом смысле фаз функция $P_\beta(q_0, ..., q_c)$ должна быть выпуклой вниз (9), то справедливо неравенство

$$Y^l_\beta = P^n_\beta - P^l_\beta - \sum_{\alpha=0}^{c} \left(\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha} \right)^l \left(q^n_\alpha - q^l_\alpha \right) \geq 0 . \tag{25}$$

Подставляя соотношения (15), (16) в неравенство (24) и выполняя тождественные преобразования, получим

$$\left(\tilde{\rho}^l_\beta - \rho^l_\beta \frac{Q^l_\beta}{q^l_0} \right) G\left(z^n - z^l \right) \Delta P^l_\beta + \left(\Delta P^l_\beta \right)^2 - Y^l_\beta \Delta P^l_\beta \geq 0 . \tag{26}$$

Согласно (16), (25) при $\Delta P^l_\beta \leq 0$ неравенство (26) сводится к следующему условию неотрицательного производства энтропии:

$$\left(\tilde{\rho}^l_\beta - \rho^l_\beta \frac{Q^l_\beta}{q^l_0} \right) \left(z^n - z^l \right) \leq 0 . \tag{27}$$

Действительно, последние два члена в левой части неравенства (26) всегда неотрицательные. Следовательно, для выполнения условия (26) достаточно потребовать, чтобы первый член в левой части (26) также был не отрицательным, что равносильно условию (27). Подставляя (6), (23) в соотношение (27), получим

$$\left(\frac{\tilde{\rho}^l_\beta - \rho^l_\beta}{\rho^l_\beta} + \left(1 - y^l_\beta \right) \frac{T^n - T^l}{T^n} \right) \left(z^n - z^l \right) \leq 0 . \tag{28}$$

В соответствии с изложенным выше неравенство (28) есть достаточное условие — критерий, неотрицательного производства энтропии. Согласно (15), (16) индекс l в критерии (28) соответствует ячейке, из которой фаза β вытекает, а индекс n — ячейке, в которую фаза β втекает.

5. Обсуждение

5.1. Случай $G(z^b - z^a) = 0$

При $G(z^b - z^a) = 0$ имеем фильтрационное течение, на которое не влияет сила тяжести. Данный случай возможен, если фильтрация происходит в горизонтальном пласте ($z^a = z^b$) или в вычислительной задаче параметр G равняется нулю. С учётом $G(z^b - z^a) = 0$ первый член в соотношении (26) тождественно обнуляется. Следовательно, неравенство (26) принимает вид

$$\left(\Delta P^l_\beta \right)^2 - Y^l_\beta \Delta P^l_\beta \geq 0 . \tag{29}$$

Так как $\Delta P^l_\beta \leq 0$ и функция $P_\beta(q_0, ..., q_c)$ является выпуклой вниз ((9), (25)), то неравенство (29) выполняется при любых значениях параметров в ячейках a и b. Таким образом, при $G(z^b - z^a) = 0$ корректность задания термодинамических свойств среды, связанная с выполнением неравенств (9), (25), гарантирует неотрицательное производство энтропии ($E^{ab} \geq 0$) для схемы с разностями против потоков.

Если в расчёте термодинамические свойства смеси заданы некорректно и неравенства (9), (25) нарушаются, то энтропия, согласно (29), может убывать.

5.2. Случай $G(z^b - z^a) \neq 0$

В общем случае, когда сила тяжести влияет на фильтрационное течение, то есть $G(z^b - z^a) \neq 0$, неравенство (28) определяет класс конечно-разностных схем, удовлетворяющих условию $E^{ab} \geq 0$ ($E^l_\beta \geq 0$). Подбирая параметры $\tilde{\rho}^l_\beta$, y^l_β таким образом, чтобы условие (28) выполнялось, можно получить различные разностные схемы, гарантирующие в расчёте неубывание общего количества энтропии.

Предположим, например, что $\tilde{\rho}^l_\beta = \rho^l_\beta$, то есть аппроксимация плотности фазы β на грани $\tilde{\rho}^l_\beta$ тождественно равна плотности в ячейке ρ^l_β. Тогда для выполнения условия (28) при любых значениях z^l, z^n, T^l, T^n достаточно положить параметр $y^l_\beta = 1$ равным единице. Таким образом, если $\tilde{\rho}^l_\beta = \rho^l_\beta$, то, для того, чтобы производство энтропии было неотрицательным $E^{ab} \geq 0$, достаточно работу силы тяжести A^{ab} полностью относить к ячейке, из которой фаза β вытекает. Если же часть работы A^{ab} отдать ячейке, в которую фаза втекает $y^l_\beta < 1$, то при $\left(T^n - T^l\right)\left(z^n - z^l\right) > 0$, согласно (28), производство энтропии $E^{ab} < 0$ ($E^l_\beta < 0$) будет отрицательным.

В вычислительных задачах фильтрации плотность на границе $\tilde{\rho}^l_\beta$ часто аппроксимируется средневзвешенным значением плотности $\overline{\rho}^l_\beta$ между ячейками ($\tilde{\rho}^l_\beta = \overline{\rho}^l_\beta$). Например, для $\overline{\rho}^l_\beta$ может использоваться одно из следующих выражений [6–8, 12]:

$$\overline{\rho}^l_\beta = \left(\rho^l_\beta + \rho^n_\beta\right)\big/2\,; \quad \overline{\rho}^l_\beta = \left(\rho^l_\beta s^l_\beta + \rho^n_\beta s^n_\beta\right)\big/\left(s^l_\beta + s^n_\beta\right).$$

Здесь индекс β соответствует фазе одного и того же типа в ячейках l и n.

При $\tilde{\rho}^l_\beta = \overline{\rho}^l_\beta$ и постоянном значении y^l_β всегда можно подобрать параметры z^l, z^n, T^l, T^n так, чтобы критерий (28) нарушался, а производство энтропии было отрицательным $E^{ab} < 0$. Для обязательного выполнения условия $E^{ab} \geq 0$ аппроксимацию $\tilde{\rho}^l_\beta = \overline{\rho}^l_\beta$ следует подправить. Для этого при $z^n \geq z^l$ необходимо положить $\tilde{\rho}^l_\beta = \min\left(\overline{\rho}^{\,l}_\beta,\, R^{\,l}_\beta\right)$, а при $z^n < z^l$ — $\tilde{\rho}^l_\beta = \max\left(\overline{\rho}^{\,l}_\beta,\, R^{\,l}_\beta\right)$, где

$$R^l_\beta = \rho^l_\beta\left(1 + \left(1 - y^l_\beta\right)\frac{T^n - T^l}{T^n}\right).$$

6. Заключение

Проведено исследование конечно-разностных схем для расчёта многокомпонентной многофазной фильтрации с учётом члена, аппроксимирующего работу силы тяжести. Получено соотношение для производства энтропии в конечно-разностном виде. Показано, что в пренебрежении силой тяжести производство энтропии не отрицательно при любых параметрах вычислительной задачи, если термодинамические свойства среды заданы корректно, то есть термодинамический потенциал, описывающий исследуемую среду, является выпуклой функцией.

Предложено достаточное условие неотрицательного производства энтропии для схем, учитывающих силу тяжести. Показано, что классические аппроксимации конвективных потоков могут приводить к отрицательному производству энтропии. Предложены аппроксимации, при которых данное несоответствие с физическими процессами отсутствует — энтропия всегда растёт.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (контракт № 07.514.11.4157).

Литература

1. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 424 с.
2. *Киреев И.В., Немировский Ю.В*. Консервативный численный метод решения линейных краевых задач статики упругих оболочек вращения // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2012. – Т. 5, № 1. – С. 85-99. DOI

3. *De Groot S.R.* Thermodynamics of irreversible processes. – Amsterdam: North-Holland, 1963. – 242 p.
4. *Афанасьев А.А.* Об одном представлении уравнений многокомпонентной многофазной фильтрации // ПММ. – 2012. – Т. 76, № 2. – С. 265-274. (*Afanas'ev A.A.* A representation of the equations of multicomponent multiphase seepage // J. Appl. Math. Mech. – 2012. – V. 76, N. 2. – P. 192-198. DOI)
5. *Годунов С.К.* Элементы механики сплошной среды. – М.: Наука, 1978. – 304 с.
6. *Aziz K., Settari A.* Petroleum reservoir simulation. – London–NY: Applied Science Publishers, 1979. – 476 p.
7. *Pruess K., Spycher N.* ECO2N – A fluid property module for the TOUGH2 code for studies of CO_2 storage in saline aquifers // Energ. Convers. Manage. – 2007. – V. 48, N. 6. – P. 1761-1767. DOI
8. TOUGH2 User's Guide, Version 2.1: Report (revised) / K. Pruess et al. – Berkeley, Calif., U.S.: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2011. – 214 p. – LBNL-43134.
9. *Randall J.L.* Finite volume methods for hyperbolic problems. – Cambridge: Cambridge University Press, 2002. – 558 p. DOI
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. – М.: Физматлит, 2005. – Т. 5. Статистическая физика. – Ч. 1. – 616 с.
11. *Брусиловский А.И.* Фазовые превращения при разработке месторождения нефти и газа. – М.: Грааль, 2002. – 575 с.
12. *Афанасьев А.А., Мельник О.Э.* О построении конечно-разностной схемы расчёта фильтрации при околокритических термодинамических условиях // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2013. – Т. 6, № 2. – С. 246-255. DOI

Поступила в редакцию 15.07.13; опубликована в электронном виде 15.10.13

Сведения об авторах

Афанасьев Андрей Александрович, кфмн, внс, Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова (МГУ ИМех), вед. инж.-расчетчик ЗАО «Т-Сервисы», 119192, Москва, Мичуринский проспект, д. 1; E-mail: afanasjev@yandex.ru

Мельник Олег Эдуардович, дфмн, член-корр. РАН, зав.лаб., МГУ ИМех, научн. рук. Центра вычислительной экспертизы ЗАО «Т-Сервисы»; E-mail: Oleg.Melnik@t-services.ru

Bibliography

1. *Samarskii A.A., Popov Yu.P.* Raznostnye metody resheniya zadach gazovoi dinamiki. – M.: Editorial URSS, 2004. – 424 s.
2. *Kireev I.V., Nemirovskii Yu.V.* Konservativnyi chislennyi metod resheniya lineinykh kraevykh zadach statiki uprugikh obolochek vrashcheniya // Vychisl. mekh. splosh. sred. – 2012. – T. 5, N. 1. – S. 85-99. DOI
3. *De Groot S.R.* Thermodynamics of irreversible processes. – Amsterdam: North-Holland, 1963. – 242 p.
4. *Afanas'ev A.A.* Ob odnom predstavlenii uravnenii mnogokomponentnoi mnogofaznoi fil'tratsii // PMM. – 2012. – T. 76, N. 2. – S. 265-274. (Afanas’ev A.A. A representation of the equations of multicomponent multiphase seepage // J. Appl. Math. Mech. – 2012. – V. 76, N. 2. – P. 192-198. DOI)
5. *Godunov S.K.* Elementy mekhaniki sploshnoi sredy. – M.: Nauka, 1978. – 304 s.
6. *Aziz K., Settari A.* Petroleum reservoir simulation. – London–NY: Applied Science Publishers, 1979. – 476 p.
7. *Pruess K., Spycher N.* ECO2N – A fluid property module for the TOUGH2 code for studies of CO2 storage in saline aquifers // Energ. Convers. Manage. – 2007. – V. 48, N. 6. – P. 1761-1767. DOI
8. TOUGH2 User's Guide, Version 2.1: Report (revised) / K. Pruess et al. – Berkeley, Calif., U.S.: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2011. – 214 r. – LBNL-43134.
9. *Randall J.L.* Finite volume methods for hyperbolic problems. – Cambridge: Cambridge University Press, 2002. – 558 p. DOI
10. *Landau L.D., Lifshits E.M.* Teoreticheskaya fizika. – M.: Fizmatlit, 2005. – T. 5. Statisticheskaya fizika. – Ch. 1. – 616 s.
11. *Brusilovskii A.I.* Fazovye prevrashcheniya pri razrabotke mestorozhdeniya nefti i gaza. – M.: Graal', 2002. – 575 s.
12. *Afanas'ev A.A., Mel'nik O.E.* O postroenii konechno-raznostnoi skhemy rascheta fil'tratsii pri okolokriticheskikh termodinamicheskikh usloviyakh // Vychisl. mekh. splosh. sred. – 2013. – T. 6, N. 2. – S. 246-255. DOI