

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА  
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

*На правах рукописи*



**Уткин Иван Сергеевич**

**Математическое моделирование течений магмы и вулканических газов**

Специальность 01.02.05 — Механика жидкости, газа и плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ  
на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научные руководители:  
доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН Мельник Олег Эдуардович  
доктор физико-математических наук  
Афанасьев Андрей Александрович

Москва — 2021

# Оглавление

|                                                            |           |
|------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Введение</b>                                            | <b>5</b>  |
| 1 Актуальность темы исследования . . . . .                 | 6         |
| 2 Степень разработанности темы исследования . . . . .      | 7         |
| 3 Цели и задачи работы . . . . .                           | 8         |
| 4 Научная новизна работы . . . . .                         | 8         |
| 5 Теоретическая и практическая значимость работы . . . . . | 10        |
| 6 Методология и методы исследования . . . . .              | 10        |
| 7 Положения, выносимые на защиту . . . . .                 | 11        |
| 8 Достоверность и апробация результатов . . . . .          | 12        |
| 9 Личный вклад . . . . .                                   | 13        |
| 10 Структура диссертации . . . . .                         | 13        |
| <br>                                                       |           |
| <b>1 Динамика взрывной дегазации вулкана</b>               | <b>14</b> |
| 1.1 Введение . . . . .                                     | 14        |
| 1.2 Обзор литературы . . . . .                             | 16        |
| 1.3 Математическая модель . . . . .                        | 17        |
| 1.3.1 Свойства газа и магмы . . . . .                      | 17        |
| 1.3.2 Определение объемной доли газа в магме . . . . .     | 18        |
| 1.3.3 Связь проницаемости и объемной доли газа . . . . .   | 20        |
| 1.3.4 Динамика движения пробки . . . . .                   | 20        |
| 1.3.5 Начальные и граничные условия . . . . .              | 22        |
| 1.3.6 Приведение уравнений к безразмерному виду . . . . .  | 23        |
| 1.4 Результаты . . . . .                                   | 24        |
| 1.5 Заключение к главе . . . . .                           | 27        |
| <br>                                                       |           |
| <b>2 Моделирование формирования медного месторождения</b>  | <b>28</b> |
| 2.1 Введение . . . . .                                     | 29        |
| 2.2 Обзор литературы . . . . .                             | 30        |

|          |                                                                                              |           |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.3      | Математическая модель . . . . .                                                              | 32        |
| 2.4      | Постановка задачи . . . . .                                                                  | 33        |
| 2.5      | Численные методы . . . . .                                                                   | 36        |
| 2.5.1    | Расчет переноса примесей . . . . .                                                           | 36        |
| 2.5.2    | Расчет химического равновесия серы и осаждения<br>халькопирита . . . . .                     | 38        |
| 2.6      | Результаты . . . . .                                                                         | 39        |
| 2.6.1    | Случай неограниченного количества серы . . . . .                                             | 40        |
| 2.6.2    | Учет влияния серы . . . . .                                                                  | 42        |
| 2.6.3    | Сравнение случаев . . . . .                                                                  | 44        |
| 2.7      | О влиянии осаждения кварца на динамику дегазации<br>магматического очага . . . . .           | 45        |
| 2.7.1    | Модель динамической пористости и проницаемости . . . . .                                     | 47        |
| 2.7.2    | Результаты . . . . .                                                                         | 48        |
| 2.8      | Заключение к главе . . . . .                                                                 | 50        |
| <b>3</b> | <b>Численное моделирование лавовых потоков</b>                                               | <b>51</b> |
| 3.1      | Введение . . . . .                                                                           | 51        |
| 3.2      | Обзор литературы . . . . .                                                                   | 53        |
| 3.2.1    | Гидродинамика сглаженных частиц . . . . .                                                    | 53        |
| 3.2.2    | Теория тонкого слоя . . . . .                                                                | 58        |
| 3.3      | Численное моделирование лавовых потоков методом<br>гидродинамики сглаженных частиц . . . . . | 61        |
| 3.3.1    | Математическая модель . . . . .                                                              | 61        |
| 3.3.2    | Постановка задачи . . . . .                                                                  | 61        |
| 3.3.3    | Численные методы . . . . .                                                                   | 63        |
| 3.3.4    | Тестирование численного метода . . . . .                                                     | 72        |
| 3.3.5    | Растекание остывающего потока лавы по горизонтальной и<br>наклонной поверхности . . . . .    | 76        |
| 3.4      | Оценка толщины температурного слоя у поверхности остывающего<br>лавового потока . . . . .    | 82        |
| 3.4.1    | Постановка задачи . . . . .                                                                  | 82        |
| 3.4.2    | Обезразмеривание уравнений . . . . .                                                         | 84        |
| 3.4.3    | Результаты . . . . .                                                                         | 85        |
| 3.5      | Заключение . . . . .                                                                         | 89        |

|                                                          |            |
|----------------------------------------------------------|------------|
| <b>Заключение</b>                                        | <b>90</b>  |
| <b>А Геохимия порфировых месторождений</b>               | <b>91</b>  |
| 1.1 Растворимость халькопирита . . . . .                 | 91         |
| 1.2 Растворимость кварца . . . . .                       | 92         |
| 1.3 Диспропорционирование диоксида серы . . . . .        | 93         |
| <b>В Обзор метода SPH</b>                                | <b>95</b>  |
| 2.1 Непрерывное приближение . . . . .                    | 95         |
| 2.2 Ядро интерполяции . . . . .                          | 97         |
| 2.3 Дискретное приближение . . . . .                     | 99         |
| 2.4 Дифференциальные операторы второго порядка . . . . . | 101        |
| 2.5 Граничные условия в SPH . . . . .                    | 104        |
| 2.5.1 Условия на непроницаемых границах . . . . .        | 104        |
| 2.5.2 Условия на свободной поверхности . . . . .         | 110        |
| 2.6 Коррекция операторов SPH . . . . .                   | 111        |
| <b>Список литературы</b>                                 | <b>113</b> |



## Введение

В диссертации методами механики сплошных сред исследуются задачи, связанные с моделированием вулкано-магматических систем. Магма представляет собой сложную многокомпонентную, многофазную среду, состоящую из силикатного расплава, кристаллов и растворенных в магме газов. Фазовый и компонентный состав магмы зависит как от температуры и давления, так и от истории изменения этих параметров. Вулкано-магматические системы состоят из очагов, в которых содержится магма с различной степенью плавления, каналов, по которым она перемещается между очагами и земной поверхностью, и вмещающих пород, с которыми происходит тепло-массообмен.

Исследование вулкано-магматических систем вызвано необходимостью понимания их эволюции, прогноза вулканической опасности, рационального планирования освоения территорий, соседствующих с вулканами. Отсутствие прямых методов наблюдения за процессами, происходящими в земной коре, делает необходимым построение математических моделей для интерпретации данных косвенных наблюдений и оценки параметров вулкано-магматических систем. Данное направление начало активно развиваться в 80-х годах XX века и в настоящее время гидро-геомеханические модели широко применяются как для теоретического описания процессов, так и в некоторых случаях для выработки практических рекомендаций.

В данной работе рассмотрены следующие процессы, связанные с движением магмы и летучих компонент: взрывная (дегазация) магмы в канале вулкана, закупоренном лавовой пробкой; формирование медного месторождения, вызванное миграцией газа из магматического очага в проницаемые вмещающие породы; растекание остывающего потока лавы. Построены математические модели этих процессов, основанные на уравнениях механики сплошных сред. Создано программное обеспечение и проведено численное исследование указанных процессов.

## **1 Актуальность темы исследования**

Математическое и численное моделирование широко используется для исследования вулканических извержений. Понимание физических процессов, происходящих в канале вулкана и под ним, позволяет более точно прогнозировать не только вероятность извержения, но и его последствия. Результаты моделирования могут использоваться для оценки рисков, связанных с извержениями, при планировании строительства в зонах активного вулканизма [71; 97].

Необходимость исследования вулканов обосновывается не только их опасностью. С процессом дегазации магматических очагов связано формирование рудных месторождений. При дегазации очага вулканический газ поднимается по проницаемым породам к поверхности Земли. В этом газе содержится в растворенном виде значительное количество ценных минералов, в том числе содержащих цветные металлы. Падение температуры и давления в процессе подъема вулканического газа к поверхности приводит к выпадению примесей в виде твердой фазы. Это обуславливает один из механизмов формирования рудных месторождений [96].

Рудные месторождения порфирового типа содержат большую часть мировых запасов меди и молибдена, существенную долю запасов золота, а также другие металлы, такие как железо, цинк, серебро и свинец [75]. Несмотря на низкое содержание металлов в породах (меньше 1% для меди), их большие размеры — десятки кубических километров — делают порфировые месторождения экономически выгодным источником ценных металлов.

Кроме того, поскольку натурные измерения лишь косвенно свидетельствуют о процессах, реально протекающих в магматических и гидротермальных системах, результаты математического моделирования могут использоваться при проверке гипотез о механизмах рудообразования в порфировых месторождениях. Например, в работах [47; 115] с помощью численного моделирования была показана возможность существования в течение десятков тысяч лет областей высококонцентрированного раствора соли над магматическими очагами; наличие таких областей может играть ключевую роль при формировании порфировых месторождений [48].

## 2 Степень разработанности темы исследования

Методы гидромеханики активно применяются для моделирования магматических процессов как в недрах Земли, так и на ее поверхности. Например, для исследования мантийной конвекции используют численные модели, основанные на уравнении Стокса с учетом зависимости вязкости от температуры [25]. Эти модели позволяют описать процесс дрейфа континентов [127], а для точного расчета распределения напряжений в мантии Земли применяются модели с более сложной неньютоновской реологией [19]. Аналогичные модели используются для моделирования субдукции, то есть погружения края океанической литосферной плиты в мантию, и сопутствующего плавления мантии [1].

Для моделирования течений лавовых потоков используются как простые модели, допускающие точное решение уравнений движения в приближении тонкого слоя [62; 80], так и сложные численные двумерные и трехмерные модели, в которых решается сопряженная задача тепломассопереноса с учетом переменной вязкости [16; 79].

Разработаны модели течения магмы в канале вулкана для различных типов вулканических извержений [119; 126]. При подъеме магмы по каналу вулкана происходит дегазация столба магмы через пузырьки, растущие в расплаве. В то же время магма остывает и частично кристаллизуется, что приводит к росту вязкости магмы и росту давления под куполом. Наличием этих процессов объясняется наблюдаемая периодичность роста лавовых куполов. Данный механизм извержения был предложен О.Э. Мельником и С. Спарксом в работе [70]. С помощью разработанной авторами математической модели оказалось возможным воспроизвести динамику извержения вулканов Сент-Хеленс и Сантьягито [15]. В этой модели предполагается, что течение магмы в канале вулкана описывается решением Пуазейля. В работе [134] исследовано влияние неньютоновских свойств магмы на динамику течения.

В главах диссертации рассматриваются различные процессы, и хотя все они имеют единую природу, для решения задач применяются принципиально различные методы. Поэтому в каждой главе приводится отдельный обзор литературы, целиком посвященный рассматриваемому классу задач.

### **3 Цели и задачи работы**

Целями данной работы являются:

1. Исследование взрывной дегазации вулкана для объяснения механизмов циклических газовых выбросов и выявления связи между параметрами магмы в канале и наблюдаемыми потоками газа в атмосферу;
2. Развитие существующих моделей дегазации магматических очагов для учета транспорта меди и сернистого газа и описания процесса формирования медных порфировых месторождений;
3. Оценка возможных размеров и глубины залегания рудных тел в зависимости от состава магматического флюида, его температуры, глубины очага и свойств вмещающих пород;
4. Исследование влияния транспорта и отложения кварца на динамику формирования месторождения;
5. Изучение распространения лавовых потоков с учетом теплообмена лавы с атмосферой и зависимости вязкости лавы от температуры;
6. Развитие методов гидродинамики сглаженных частиц для решения сопряженной задачи гидродинамики и теплообмена применительно к изучению течения лавы по склону вулкана.

### **4 Научная новизна работы**

В работе получены следующие новые результаты:

1. Построена математическая модель взрывной дегазации вулкана, канал которого закрыт подвижной лавовой пробкой, а извержение состоит из периодических выбросов большого количества газа в атмосферу. Найдена связь периода и интенсивности выбросов с параметрами магмы в канале вулкана;
2. Построена математическая модель процесса формирования порфирового медного месторождения при фильтрации магматических газов из очага через пористые породы с учетом переноса металлов и сернистого газа и отложения минералов на скелет породы;

3. Предложена модель динамической пористости и проницаемости для учета процессов, вызванных активным осаждением кварца в проницаемых породах;
4. Разработан набор программных модулей, работающих совместно с термoгидродинамическим симулятором MUFITS, для моделирования переноса и осаждения меди, кварца и серосодержащих газов с учетом химических реакций и отложения минералов;
5. С использованием разработанного набора программ проведено численное исследование процесса формирования медного месторождения. Выявлено определяющее влияние серосодержащих газов на динамику формирования медного месторождения, его объем и концентрации полезных элементов;
6. Проведено численное исследование процесса дегазации магматического очага с учетом осаждения кварца. Показано, что при выполнении определенных условий возможен циклический режим дегазации, в котором закупорка проницаемого канала кварцем чередуется с образованием трещин из-за того, что поровое давление превышает предел прочности пород;
7. В рамках метода гидродинамики сглаженных частиц разработана уникальная модель для описания течения со свободной поверхностью с учетом нелинейного теплообмена с атмосферой и нелинейной зависимости вязкости от температуры;
8. Проведен параметрический анализ длины растекания лавового потока в зависимости от расхода лавы и угла наклона подстилающей поверхности. Показано, что в течение первых десятков минут растекания формируется тонкий слой остывшей высоковязкой лавы, который увлекается набегающим потоком и тормозит течение;
9. Исследована задача об остывании лавового потока, растекающегося по плоской подстилающей поверхности. В рамках модели, в которой течение описывается теорией тонкого слоя, а теплопроводность и перенос тепла моделируются неосредненным по глубине законом сохранения энергии, проведен анализ толщины температурного слоя остывшей лавы у поверхности потока в зависимости от безразмерных параметров, определяющих течение.

## **5 Теоретическая и практическая значимость работы**

Полученные в работе результаты моделирования динамики взрывной дегазации вулкана могут использоваться для интерпретации данных наблюдений за реальными вулканическими системами и уточнения параметров этих систем путем адаптации математической модели.

Для оценки геологического строения, глубины залегания, формы и размеров, а также минерального состава рудных месторождений необходим широкий спектр геологоразведочных работ, включающий в себя спутниковую и аэрофотосъемку [87], бурение скважин [96], акустическое и магнитотеллурическое зондирование [88]. Использование методов математического и численного моделирования, основанных на механике сплошных сред, в частности, теории фильтрации, может, наряду с геологической разведкой, послужить дополнительным инструментом при поиске полезных ископаемых, позволит упростить процесс поисково-оценочных работ, а также уточнить оценки параметров известных месторождений. Существующие аналогичные методы имеют большую практическую значимость для задач рационального недропользования и активно применяются, например, в нефтяной промышленности [6; 43].

Построенная в работе модель неизотермического течения вязкой жидкости может быть использована для исследования свойств лавовых потоков, например, длины растекания потока при заданном расходе и зависимости вязкости от температуры. Эти свойства важно учитывать при оценке рисков, связанных с вулканической активностью.

## **6 Методология и методы исследования**

Исследование вулкано-магматических процессов проводится в рамках построенных нелинейных математических моделей этих процессов на основе подходов, использующихся в механике многофазных сред. Модели применяются в разработанных комплексах программ, в которых проводятся численные расчеты исследуемых процессов.

## 7 Положения, выносимые на защиту

1. При постоянном притоке газа из магмы в канале вулкана, закупоренном лавовой пробкой, реализуется режим циклической взрывной дегазации. При этом определяющее значение имеет наличие полости под пробкой, в которую вулканический газ фильтруется из канала вулкана;
2. При формировании сульфидного медного месторождения определяющее влияние на размеры, положение и запасы меди имеет содержание в поступающем из магматического очага газе серосодержащих компонент. Поскольку термодинамика процесса допускает прекращение выпадения меди в твердый осадок вследствие замещения сернистого газа сероводородом, для корректного математического моделирования процессов рудообразования необходим полностью сопряженный термо-хемо-гидромеханический подход;
3. Выпадение в осадок кварца, растворенного в магматических газах, приводит к циклической дегазации магматического очага. Закупоривание порового пространства сопровождается ростом давления и гидроразрывом горных пород. Дегазация приводит к образованию линзы высококонцентрированного соляного раствора, расположенной над очагом. Размер линзы и концентрация соли в растворе меньше, чем для аналогичной системы без учета осаждения кварца;
4. При растекании лавы по плоской поверхности от линейного источника в течение первых десятков минут формируется тонкий слой остывшей высоковязкой лавы, который увлекается набегаящим потоком и тормозит течение. При этом скорость распространения фронта потока уменьшается на  $\sim 6\%$  по сравнению со скоростью фронта в изотермическом приближении. Толщина температурного пограничного слоя у поверхности лавового потока определяется отношением толщины потока к его длине и слабо зависит от числа Нуссельта. Температурный слой формируется при отношении толщины потока к его длине порядка  $10^{-5} - 10^{-4}$ , при этом толщина этого слоя достигает 1–20% от толщины потока.

## 8 Достоверность и апробация результатов

Достоверность полученных результатов обуславливается применением классических моделей гидромеханики, использованием тщательно протестированных пакетов программ, контролем сходимости и сеточной независимости используемых численных методов. Для тестирования программ проводится сравнение результатов расчетов с известными аналитическими решениями или результатами расчетов в широко используемых пакетах программ, проверяется сеточная сходимость.

Основные результаты, полученные в работе, докладывались на следующих конференциях: генеральная ассамблея международной ассоциации вулканологии и геохимии земных недр (IAVCEI) (Портленд, США, 2017); конференция-конкурс молодых ученых НИИ механики МГУ (Москва, 2017, 2018); международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов» (Москва, 2017, 2018, 2019); научная конференция «Ломоносовские чтения» (Москва, 2018); международная конференция «Goldschmit 2018» (Бостон, США, 2018); XII всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (Уфа, 2019).

Полученные результаты были отмечены дипломом 3-й степени конференции-конкурса молодых ученых НИИ механики МГУ (2018), дипломом конференции «Ломоносов» (2018), дипломом за лучший доклад, сделанный молодым ученым на симпозиуме по механике природных процессов XII съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (2019).

Результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинаре НИИ механики МГУ под руководством А.Г. Куликовского, В.П. Карликова, О.Э. Мельника и А.Н. Осипцова. По теме диссертации автором защищена научно-квалификационная работа при окончании аспирантуры, а также дипломная и курсовые работы.

По материалам диссертации опубликовано 9 научных работ общим объемом 3 п.л., в том числе 3 статьи объемом 2 п.л. в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы» и индексируемых в международных базах цитирования Web of Science и/или Scopus.



## **9 Личный вклад**

Представленные в диссертации результаты получены лично соискателем и в соавторстве с научными руководителями. Автор участвовал в формулировке постановки задач, интерпретации результатов и написании статей. Создание программ для численного моделирования, проведение расчетов и подготовка результатов к публикации осуществлялись лично автором диссертации. Вклад автора в работах [128], [123], [121] составляет 2/3.

## **10 Структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и двух приложений.

В работе содержится 26 рисунков, 1 таблица и 137 библиографических ссылок. Общий объем работы составляет 130 страниц.

# Глава 1

## Динамика взрывной дегазации вулкана<sup>\*</sup>

В этой главе описывается одномерная нестационарная модель взрывной дегазации вулкана с каналом, запертым подвижной лавовой пробкой. Считается, что движение пробки обусловлено наличием полости под ней, в которую фильтруется газ из нижележащей магмы, вызывая рост давления. Показано, что в системе возникают периодические выбросы газа, разделенные длительными периодами покоя, что соответствует данным полевых наблюдений.

### 1.1 Введение

Обычно вулканические извержения проявляются в виде выбросов газо-пепловых струй (взрывной, эксплозивный тип извержения), или в виде истечения из жерла вулкана лавовых потоков или роста лавовых куполов (эффузивный тип извержения) [125]. Однако существуют режимы извержения, кардинально отличающиеся от вышеперечисленных. Вулканическая активность проявляется в виде циклов коротких взрывных извержений, сопровождающихся выбросом газа и небольшого количества пепла в атмосферу; в промежутках между извержениями активности практически не наблюдается. При этом канал вулкана запечатан лавовой пробкой, образованной застывшей, дегазированной лавой. В процессе выброса пробка смещается, открывая каналы для прохождения газа, а после выброса возвращается в исходное положение. Анализ видеонаблюдений таких извержений показывает, что геометрия пробки практически не меняется от выброса к выбросу [20]. Такой режим извержения называется *взрывной дегазацией*.

Примером такого типа активности может служить вулкан Сантьягито в Гватемале или вулкан Карымский на Камчатке [23; 35; 60]. По этим вулканам собран

---

<sup>\*</sup>При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно «Положению о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [128; 131]

большой объем инструментальных данных, однако адекватной модели, позволяющей объяснить динамику взрывной дегазации, предложено не было.

Магма представляет собой смесь магматического расплава, кристаллов различных минералов и пузырьков газа. Для вулканов, на которых происходит взрывная дегазация, характерны газонасыщенные магмы, в которых в глубине растворено большое количество магматических газов, прежде всего паров воды. При падении давления растворенный газ выделяется в свободную фазу — пузырьки, они объединяются и образуют подвижную пористую среду, через которую возможна фильтрация газа к поверхности [70].

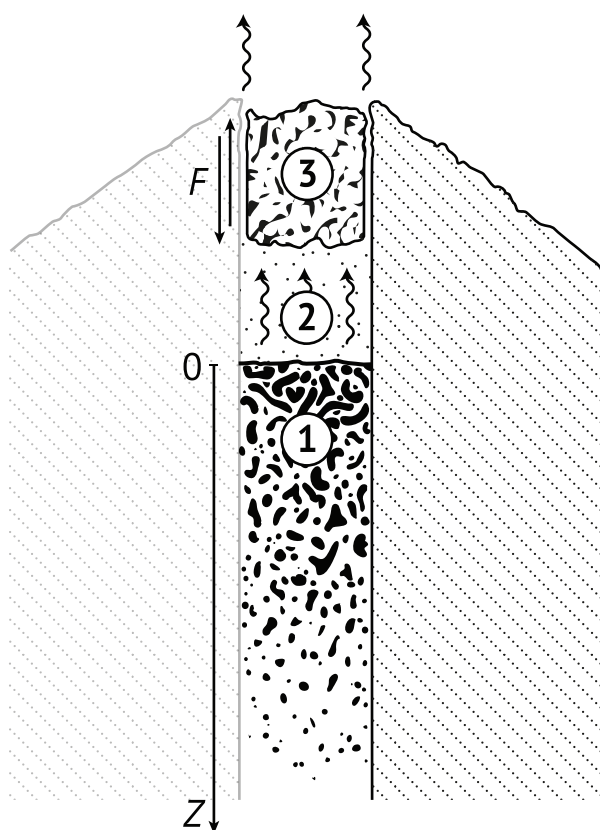


Рис. 1.1: Схематичное изображение рассматриваемой системы, состоящей из магматического канала (1), полости (2), заполненной газом, и подвижной лавовой пробки (3)

В настоящей работе предлагается модель, позволяющая объяснить циклический характер извержений. Считается, что под пробкой находится газовая полость, в которую газ фильтруется из магмы (Рис. 1.1). Давление под пробкой растёт до некоторого критического значения, при котором преодолевается сила трения пробки о стенки канала. Тогда пробка начинает подниматься вверх, освобождая каналы для движения газа. За короткое время в атмосферу выбрасывается большое количество газа, давление под пробкой падает. Если пробка не закрывает канал,

то давление будет падать, пока не опустится до такого значения, при котором возможно будет обратное движение пробки: она опускается вниз, и на этом цикл завершается.

Для описания динамики взрывной дегазации в данной работе построена одномерная нестационарная модель фильтрации газа в канале вулкана, закрытом подвижной пробкой. Движение пробки описывается законом Ньютона с учетом нелинейного закона трения пробки о стенки магматического канала.

## 1.2 Обзор литературы

Одномерные модели вулканических извержений, основанные на уравнениях движения многофазных сред, развиваются в течение последних 30 лет [89]. В подобных моделях обычно предполагается наличие вертикального цилиндрического канала вулкана, в котором происходит течение магмы, а также диффузия растворенного в магме газа в пузырьки, через которые может происходить фильтрация газа к поверхности [29; 68—70; 102; 117; 124]. Также существуют двумерные и квазидвумерные модели течения магмы в канале вулкана, уточняющие замыкающие соотношения, используемые в более простых моделях [39; 134].

В работе [40] предлагается механизм, связывающий наблюдаемую циклическую сейсмическую активность на вулкане Сент-Хеленс с ростом лавового купола. Учитывается нелинейная зависимость коэффициента трения магмы о стенки канала вулкана от скорости экструзии. Более сложная модель, объясняющая циклическую взрывных извержений на вулкане Карымский, описывается в работе [81]. Учитывается вязкоупругая реология магмы, а также плавление стенок за счет локализации деформаций при сдвиге. При этом не учитывается наличие газовой фазы в магме.

Впервые модель с наличием газовой полости под лавовой пробкой предложена в [91], выписаны балансовые соотношения и задача сведена к обыкновенному уравнению второго порядка осциллятора с затуханием. В модели не учитывается приток газа из магмы и его отток в атмосферу.

В работе [51] накоплением газа в полость под проницаемой лавовой пробкой объясняется наблюдаемая на вулканах сейсмическая активность. Построена одномерная модель фильтрации газа через пробку, учитывающая приток газа из магмы в виде серии точечных импульсов с заданной интенсивностью. Получе-

но приближенное аналитическое решение уравнений фильтрации, записанное в рядах.

### 1.3 Математическая модель

Постановка задачи представлена на Рис. 1.1. Рассматривается одномерная вертикальная в поле сил тяжести область  $z \in [0; Z]$ , интерпретируемая в работе как участок канала вулкана, заполненный магматическим расплавом. Через магму осуществляется фильтрация газа в полость, расположенную под подвижной лавовой пробкой. Процесс фильтрации газа через магму описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial \rho_g \alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g \alpha v_g}{\partial z} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho_m (1 - \alpha)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m (1 - \alpha) v_m}{\partial z} = 0 \quad (1.2)$$

$$\alpha (v_g - v_m) = -\frac{k(\alpha)}{\mu_g} \left( \frac{\partial p}{\partial z} - \rho_g g \right) \quad (1.3)$$

Здесь  $\alpha$  — объемная доля газа (пористость);  $\rho$  — плотность;  $v$  — скорость;  $k(\alpha)$  — проницаемость;  $\mu$  — вязкость;  $p$  — давление газа;  $g$  — ускорение свободного падения; нижние индексы «g» и «m» обозначают параметры газа и магмы, соответственно.

Уравнения (1.1) и (1.2) — законы сохранения массы для газа и магмы, соответственно. Уравнение (1.3) — закон Дарси для скорости фильтрации газа через магму.

В уравнениях (1.1) и (1.2) не учитывается массообмен между фазами. Это допустимо, если характерное время, на котором происходит взрывная дегазация, значительно меньше времени установления химического равновесия между магмой и газом в пузырьках.

#### 1.3.1 Свойства газа и магмы

Для каждой вулкано-магматической системы характерен свой состав вулканического газа, однако, как правило, основными компонентами газа являются водяной пар, сернистый и углекислый газы, причем доля водяного пара может составлять до 80% [35]. В данной модели свойства реального вулканического газа

аппроксимируются с помощью уравнения состояния совершенного газа с параметрами, соответствующими водяному пару [70]. Плотность магматического расплава считается постоянной:

$$\rho_g = \frac{p}{RT}, \quad \rho_m = \text{const} \quad (1.4)$$

Здесь  $R$  — газовая постоянная;  $T$  — температура газа. В работе рассматривается изотермический процесс, т.е.  $T = \text{const}$ .

### 1.3.2 Определение объемной доли газа в магме

Поскольку количество газа, истекающего в атмосферу в течении одного выброса, существенно меньше количества газа в столбе магмы, движением магматического расплава во время одного цикла дегазации можно пренебречь. Путем подстановки  $v_m = 0$  в уравнение (1.2) с учетом соотношения (1.4) получаем:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = 0$$

Таким образом, с учетом сделанных предположений объемная доля пузырьков  $\alpha$  не зависит от времени и является только функцией глубины  $z$ .

Предполагается, что до начала рассматриваемого процесса магматический расплав поднялся по каналу из нижележащего магматического очага. При этом в магме в растворенном виде содержалось некоторое количество воды. Обозначим массовую долю воды в расплаве в этот момент за  $c_0$ . Затем в течение достаточно долгого времени происходила дегазация магмы без массообмена с окружающей средой, то есть в закрытой системе. За это время установилось химическое равновесие между водяным паром в пузырьках и растворенной водой в магматическом расплаве, а также механическое гидростатическое равновесие. В таком случае можно определить объемную долю газа в отдельной фазе из условий равновесия.

Введем среднюю плотность двухфазной среды:

$$\rho = \rho_g \alpha + \rho_m (1 - \alpha) \quad (1.5)$$

Условие гидростатического равновесия в предположении, что среднее давление двухфазной среды равно давлению газа в пузырьках, выглядит следующим образом:

$$\frac{dp}{dz} = \rho g \quad (1.6)$$

Уравнение (1.6) должно быть дополнено соответствующим граничным условием, например, заданным значением давления при  $z = Z$ .

Обозначим концентрацию воды в газовой фазе и в расплаве как  $c_g$  и  $c_m$ , соответственно. Поскольку дегазация по предположению происходит в закрытой системе, то справедлив закон сохранения массы для воды в следующей форме:

$$\rho c_0 = \rho_g \alpha c_g + \rho_m (1 - \alpha) c_m \quad (1.7)$$

Поскольку считается, что газ целиком состоит из водяного пара, как описано в подразделе 1.3.1, то  $c_g = 1$ . В состоянии химического равновесия в двухкомпонентной двухфазной системе, состоящей из магматического расплава и воды, концентрация воды в расплаве  $c_m$  полностью определяется давлением и температурой. В петрологических приложениях и задачах математического моделирования для определения равновесных концентраций часто применяется закон Генри [69; 70; 100]:

$$c_m = K \sqrt{p} \quad (1.8)$$

где  $K$  — коэффициент растворимости, зависящий от температуры. Поскольку рассматривается изотермический процесс,  $K = \text{const}$ . Закон Генри справедлив для небольших концентраций растворенного вещества [100]. Содержание воды в магматическом расплаве при рассматриваемых в работе условиях обычно не превышает нескольких процентов на глубине 1 км [42].

Исключая из уравнений (1.5) и (1.7) среднюю плотность  $\rho$  и с учетом  $c_g = 1$ , получаем выражение для  $\alpha$ :

$$\alpha = \left( 1 - \frac{\rho_g}{\rho_m} \frac{1 - c_0}{c_m - c_0} \right)^{-1} \quad (1.9)$$

Уравнения (1.4), (1.5), (1.6), (1.8) и (1.9) составляют замкнутую систему уравнений для переменных  $\rho_g$ ,  $\rho$ ,  $p$ ,  $c_m$  и  $\alpha$ . Эта система сводится к обыкновенному нелинейному дифференциальному уравнению на давление  $p$ . Пример численного решения этой системы при значениях параметров, характерных для реальных вулканов, приведен на Рис. 1.2.

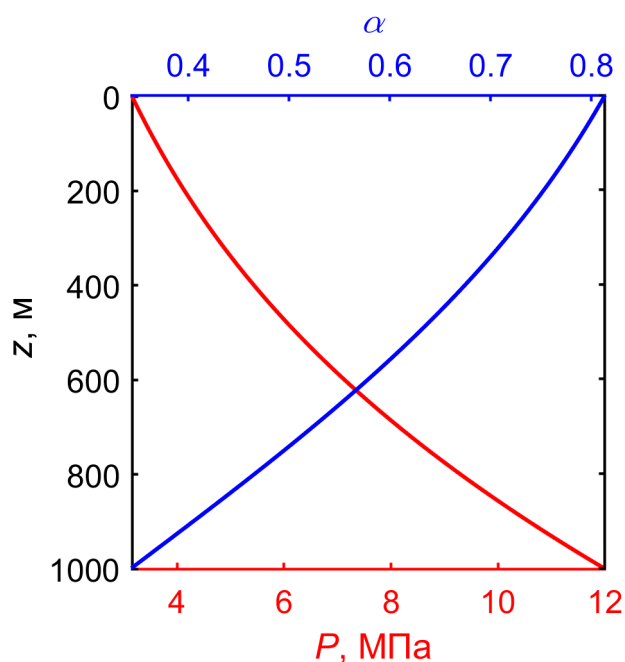


Рис. 1.2: Пример расчета распределений давления  $p$  и доли пузырьков  $\alpha$  в начальный момент времени.

### 1.3.3 Связь проницаемости и объемной доли газа

Проницаемость горных пород существенно варьируется в зависимости от объемной доли пор и геометрии порового пространства. В настоящей работе используется теоретическая модель Козени–Кармана, описывающая проницаемость через степенную зависимость от объемной доли пор [22]:

$$k(\alpha) = k_0 \alpha^n \quad (1.10)$$

где  $k_0$  и  $n$  — экспериментально определяемые коэффициент и показатель степени, соответственно. В работе [83] получены диапазоны значений, характерные для вулканических пород:  $k_0 \sim 10^{-17} - 10^{-14} \text{ м}^2$ ,  $n \sim 3 - 4$ . В данной работе используется значение  $n = 3,5$ .

### 1.3.4 Динамика движения пробки

Положение пробки определяется высотой газовой полости  $l$  и может меняться за счет сил, действующих на пробку. Считается, что эти силы ограничиваются перепадом давления между полостью и атмосферой (атмосферным давлением можно пренебречь, поскольку характерное давление в магме достигает значений порядка нескольких МПа), силой тяжести и силой сопротивления канала вулкана.



Запишем второй закон Ньютона для движущейся пробки:

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{p}{\rho_m h} - g + F \quad (1.11)$$

Здесь  $v_p$  — скорость пробки;  $h$  — высота пробки;  $F$  — проекция плотности силы сопротивления канала на ось  $z$ .

Плотность силы сопротивления  $F$  предполагается пропорциональной перепаду давления между пробкой и атмосферой:

$$F = -\text{sign}(v_p)\eta(v_p)\frac{p}{\rho_m h} \quad (1.12)$$

где  $\eta(v_p)$  — динамический коэффициент трения, зависящий от скорости пробки. Такой вид закона сопротивления обусловлен проницаемостью пробки и наличием фонового потока газа через трещиноватую пробку. При повышении давления газа под пробкой растет давление газа в самой пробке, что ведет к росту силы нормальной реакции между пробкой и стенками канала.

В работе [2] на основе экспериментальных данных предлагается экспоненциальная зависимость силы сопротивления частично раздробленного вулканического материала от скорости. В данной работе используется обобщенная модель из [2] со свободными параметрами:

$$\eta = \eta_0 e^{-|v_p/v_{\text{ref}}|} \quad (1.13)$$

где  $\eta_0$  — коэффициент трения,  $v_{\text{ref}}$  — характерная скорость движения пробки. При  $v_p \gg v_{\text{ref}}$  коэффициент  $\eta$  стремится к нулю, а при  $v_p \ll v_{\text{ref}}$  уравнение (1.12) сводится к обычному закону трения скольжения:  $\eta \approx \eta_0$ .

Отметим, что уравнение баланса сил для пробки (1.11) справедливо для уже движущейся пробки. Для того, чтобы пробка начала движение вверх или вниз по каналу, необходимо, чтобы результирующая внешних сил, действующих на пробку, превышала силу трения покоя. Поскольку трение покоя существенно зависит от геометрии пробки, состава пород и внешних условий, в данной работе предлагается простая параметризация: неподвижная пробка начинает двигаться только при значениях давления под пробкой больше критического значения  $p_1$  или меньше  $p_2$  для случая поднимающейся и опускающейся пробки, соответственно. Значения критических давлений выбираются в результате подстановки  $v_p = 0$  в

закон Ньютона (1.11):

$$p_1 = \frac{\rho_m g h}{1 - \eta_0}, \quad p_2 = \frac{\rho_m g h}{1 + \eta_0}$$

Движение пробки вызывает изменение размера газовой полости  $l$  с течением времени:

$$\frac{dl}{dt} = v_p \quad (1.14)$$

### 1.3.5 Начальные и граничные условия

Предполагается, что до начального момента времени не происходило никакой вулканической активности, поэтому в качестве начального условия в момент времени  $t = 0$  берется гидростатическое распределение давления вдоль оси канала, определяемое из уравнения (1.6) вместе с начальным распределением пористости  $\alpha$ , как описано в разделе 1.3.2.

На нижней границе магматического столба  $z = Z$  задается фиксированное значение давления:

$$p = p_0 \quad \text{при} \quad z = Z \quad (1.15)$$

Это условие моделирует приток газа из нижележащей магмы. Считается, что в магматическом очаге присутствует избыточное давление  $p_0$ , которое вызывает поток газа в канал.

На верхней границе  $z = 0$ , т. е. в газовой полости, давление определяется притоком газа из магматического расплава, потоком газа в атмосферу, а также изменением объема самой полости за счет движения пробки:

$$\frac{d\rho_g l}{dt} = -\rho_g v_g - q_{\text{out}} \quad \text{при} \quad z = 0 \quad (1.16)$$

где  $q_{\text{out}}$  — поток газа в атмосферу в процессе взрывной дегазации. Предполагается, что в процессе движения пробки в ней открываются трещины — проницаемые каналы, по которым газ быстро устремляется в атмосферу. В состоянии покоя трещины быстро запечатываются, поскольку породы, составляющие лавовую пробку, после взрывной дегазации разогреты достаточно для возникновения вязкопластических деформаций [115].

В работе не ставится цель воспроизвести все описанные эффекты. Для демонстрации динамики процесса дегазации предлагается простая зависимость потока

газа от смещения пробки относительно изначального положения:

$$q_{\text{out}} = \rho_g v_{\text{out}} \frac{l - l_0}{l_0} \quad (1.17)$$

где  $l_0$  — положение пробки в неподвижном состоянии;  $v_{\text{out}}$  — характерная скорость истечения газа в атмосферу.

### 1.3.6 Приведение уравнений к безразмерному виду

Параметры вулкано-магматических систем меняются в широком диапазоне значений. Для общей оценки динамики процесса проводится обезразмеривание уравнений, составляющих математическую модель.

В качестве масштаба длины выбирается высота пробки  $h$ ; масштаба давления — давление пробки на единицу площади канала:

$$\begin{aligned} z &= h z', \quad l = h l', \quad l_0 = h l'_0 \\ p &= P p', \quad P = \rho_m g h, \\ \rho_g &= \Omega \rho'_g, \quad \rho_m = \Omega \rho'_m, \quad \rho = \Omega \rho', \quad \Omega = \frac{P}{RT}, \\ v_g &= V v'_g, \quad v_p = V v'_p, \quad V = \frac{k_0 \rho_m g}{\mu_g}, \\ t &= \Psi t', \quad \Psi = \frac{h}{V}. \end{aligned}$$

В безразмерном виде уравнения (1.6), (1.15), (1.16) и (1.11) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dp'}{dz'} &= \frac{gh}{RT} \rho' \quad \text{при} \quad t = 0, \\ p' &= \frac{p_0}{P} \quad \text{при} \quad z' = \frac{Z}{h}, \\ \frac{dp' l'}{dt'} &= -p' \left[ v'_g + \frac{v_{\text{out}}}{V} \frac{l' - l'_0}{l'_0} \right] \quad \text{при} \quad z' = 0, \\ Fr \frac{dv'}{dt'} &= \left( 1 - \text{sign}(v'_p) \eta_0 e^{-|v'_p| \frac{V}{v_{\text{ref}}}} \right), \end{aligned}$$

где  $Fr = V^2/(gh)$  — число Фруда, характеризующее инерционность пробки.

В результате обезразмеривания динамика процесса описывается следующим набором из восьми безразмерных параметров:  $\eta_0$ ,  $gh/(RT)$ ,  $p_0/P$ ,  $K\sqrt{P}$ ,  $v_{\text{out}}/V$ ,  $Z/h$ ,  $Fr$ ,  $V/v_{\text{ref}}$ .

## 1.4 Результаты

Уравнения, составляющие математическую модель, решаются численно. Дискретизация расчетной области по пространству проводится методом контрольного объема [82]; интегрирование по времени — явным методом Эйлера. Путем подстановки закона Дарси (1.3) в закон сохранения массы газовой фазы (1.1) получено нелинейное параболическое уравнение, описывающее изменение давления в столбе магмы. Оно решается совместно с граничными условиями на нижней и верхней границах расчетной области (1.15) и (1.16). Газовая полость не дискретизируется как часть расчетной области, а входит в решение только через граничное условие на верхней границе (1.16), а также уравнения (1.11) и (1.14), описывающие движение пробки.

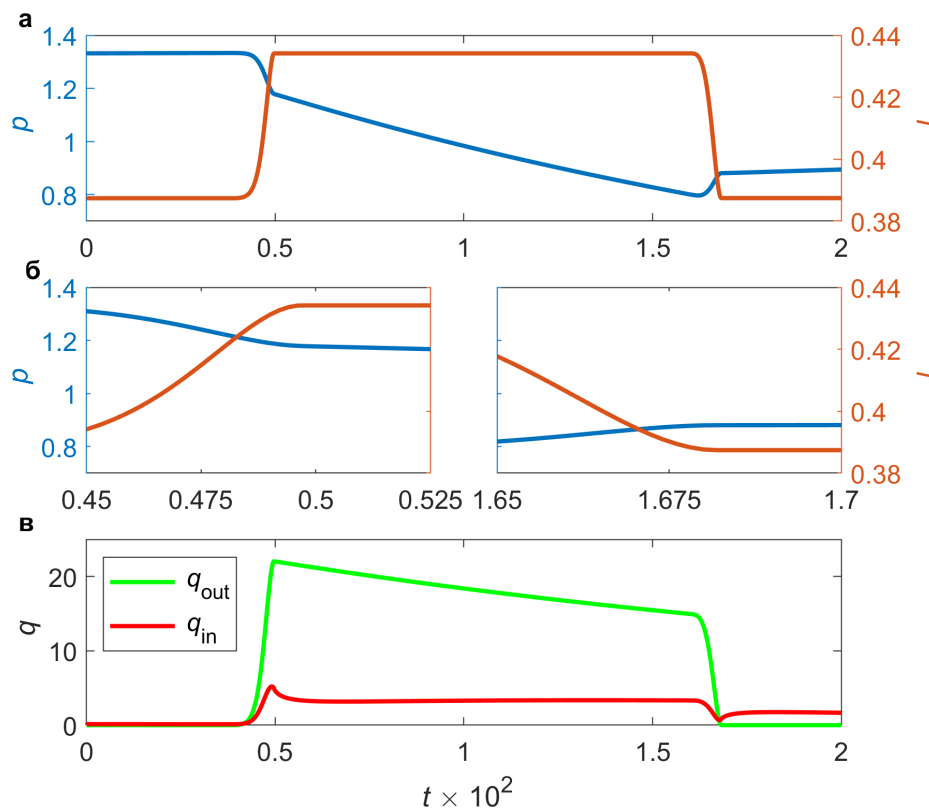


Рис. 1.3: а) Изменение безразмерного давления под пробкой  $p$  и высоты полости  $l$  на протяжении всего времени извержения; б) во время подъема и опускания пробки; в) изменение потока газа, истекающего в атмосферу  $q_{\text{out}}$  и втекающего из магмы с течением времени во время взрывной дегазации  $q_{\text{in}}$ .

На Рис. 1.3 показаны давление в газовой полости, высота газовой полости и расход газа как функции времени в пределах одного цикла дегазации. Расчеты проведены при значениях безразмерных параметров, приведенных в Таблице 1.1. В начале цикла давление под пробкой достигает критического значения и пробка с ускорением начинает движение вверх. Давление начинает резко уменьшаться за счет роста объема газовой полости, пробка останавливается в верхнем положении и скорость падения давления замедляется. Теперь оно определяется скоростью истечения газа в атмосферу по образовавшемуся каналу. Когда давление в полости уменьшается существенно, так что перепад давлений уже не способен удерживать лавовую пробку (равнодействующая сил превышает силу трения покоя) пробка опускается за счет своего веса. Давление растет за счет уменьшения размера полости, поток газа из полости в атмосферу уменьшается до нуля, начинается новый цикл набора давления (не показан на фигуре, поскольку длительность периода покоя существенно превышает длительность взрывной дегазации).

| Параметр           | Значение           |
|--------------------|--------------------|
| $\eta_0$           | 0,25               |
| $gh/(RT)$          | 0,002              |
| $p_0/P$            | 9                  |
| $K\sqrt{P}$        | 0,005              |
| $V_{\text{out}}/V$ | 3000               |
| $Z/h$              | 20                 |
| $Fr$               | $7 \times 10^{-8}$ |
| $V/v_{\text{ref}}$ | 0,0025             |

Таблица 1.1: Значения безразмерных параметров, использующихся в базовом численном расчете.

Расход газа, поступающего в полость из столба магмы (красная линия на Рис. 1.3в), определяется во многом давлением в газовой полости и скоростью его изменения. При резких колебаниях давления, связанных с движением пробки происходит быстрое изменение расхода втекающего в полость газа.

На Рис. 1.4 представлены зависимости продолжительности выброса  $\tau$  и периода извержения  $\omega$  от различных безразмерных параметров. Параметры меняются относительно базового набора значений, указанных в Таблице 1.1. Эти значения в размерных переменных соответствуют параметрам, подобранным для вулкана Сантьягито в Гватемале [20; 35]. Продолжительность и периодичность извержений

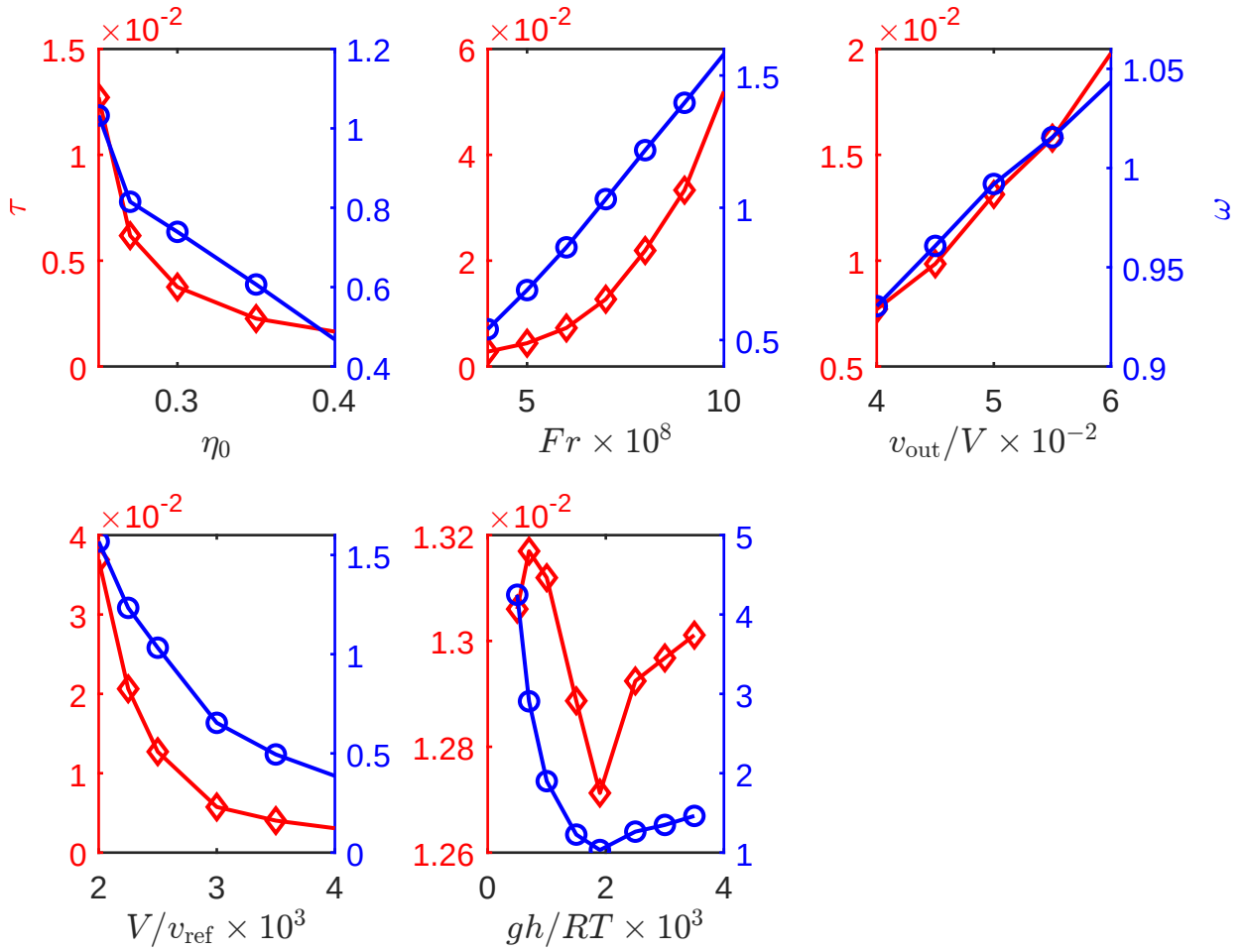


Рис. 1.4: Зависимость продолжительности  $\tau$  и периодичности  $\omega$  извержений от безразмерных параметров.

в этом случае равны 2 минутам и 3 часам, соответственно, что хорошо коррелирует с данными натурных наблюдений [91].

Во всех случаях продолжительность выбросов не превосходит 7% от периода извержения. Расчеты показывают, что увеличение параметра  $v_{out}/V$ , отвечающего за степень раскрытия каналов при подъеме пробки более чем в 2 раза увеличивает продолжительность выброса и слабо влияет на период извержений. Увеличение коэффициента трения покоя  $\eta_0$  приводит к более коротким и менее интенсивным выбросам, период между которыми также сокращается. С увеличением числа Фруда инерционность лавовой пробки растет. При этом длительность выбросов и периодов покоя существенно увеличивается. Параметр  $gh/(RT)$ , характеризующий начальное распределение давления оказывает малое влияние на продолжительность выбросов и немонотонное влияние на период извержения.

## **1.5 Заключение к главе**

Построена модель взрывной дегазации вулкана, канал которого перекрыт лавовой пробкой. Модель позволяет объяснить периодичность и продолжительность газовых выбросов. Рассчитанные значения периода и продолжительности выбросов хорошо коррелируют с данными полевых наблюдений. Проведено параметрическое исследование зависимости наблюдаемых характеристик процесса от безразмерных параметров задачи.

## Глава 2

### Моделирование формирования медного месторождения\*

В данной главе исследуется процесс формирования порфирового медного месторождения, основным минералом которого является халькопирит ( $\text{CuFeS}_2$ ), в результате дегазации магматического очага, переноса меди и серы магматическим флюидом и отложения минералов меди на скелет вмещающей породы. Рассматриваются два случая рудообразования: с учетом ограниченного содержания серосодержащих газов в поступающем из очага магматическом флюиде и в предположении, что содержание серы не является лимитирующим фактором для реакции осаждения. Для случая ограниченной концентрации серы предлагается эффективный метод численного моделирования химических превращений во флюидной фазе. Производится сравнение данных случаев с точки зрения размеров получающегося месторождения и его продуктивности.

Для адекватного описания процесса осаждения халькопирита необходимо учитывать химические реакции взаимодействия меди и серы в растворе. Для минерализации халькопирита необходимо наличие в растворе достаточного количества меди в виде ионного комплекса  $\text{CuCl}_2^-$ , железа  $\text{FeCl}_2^-$ , диоксида серы  $\text{SO}_2$  и сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$ . В ходе реакции диспропорционирования диоксид серы может превращаться в сероводород, а в качестве побочного продукта реакции образуется сульфат ион  $\text{HSO}_4^-$ . Описание моделируемых химических реакций приведено в Приложении А. В этой главе рассмотрены только уравнения фильтрации, описывающие течение магматического флюида при формировании порфирового месторождения.

---

\*При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно «Положению о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [107; 123; 132; 136]



## 2.1 Введение

Медно-порфировые месторождения представляют собой рудные тела объемом до  $100 \text{ км}^3$ , залегающие на небольшой глубине порядка 1–3 км. Эти рудные тела обычно имеют четко очерченную куполообразную или цилиндрическую форму [96]. Чаще всего порфировые месторождения образуются над магматическими очагами, располагающимися на глубинах от 5 до 15 км. Исследования существующих месторождений указывают на ключевую роль магмы в формировании рудных минералов [52]. Магма содержит в растворенном виде летучие компоненты, в основном воду  $\text{H}_2\text{O}$ , углекислый газ  $\text{CO}_2$ , диоксид серы  $\text{SO}_2$  и другие газы, а также примеси различных минералов, например, каменную соль  $\text{NaCl}$  и кварц  $\text{SiO}_2$ , и металлы, такие как медь, молибден, железо и цинк.

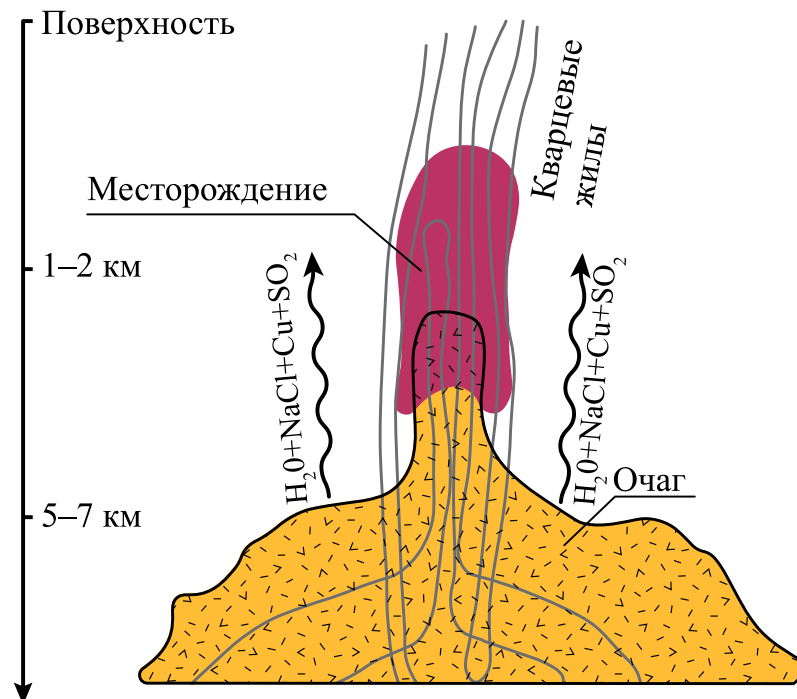


Рис. 2.1: Схематичное изображение порфирового месторождения

На Рис. 2.1 изображена упрощенная схема месторождения *Yerington*, США [36]. При остывании очага летучие компоненты отделяются от магмы и поднимаются к поверхности Земли через проницаемые вмещающие породы, перенося с собой газы и металлы в примесном количестве. Термодинамические условия в очаге таковы, что смесь, состоящая из воды и растворенных в ней примесей, находится в сверхкритическом состоянии: давление порядка 100 МПа и температура около  $700^\circ\text{C}$ . По мере того как смесь поднимается к поверхности давление и температура падают, что приводит к расслоению смеси на газовую и жидкую фазы [47].

Более легкий пар устремляется к поверхности, а жидкая фаза обогащается солью и другими минералами. При определенных термодинамических условиях и высоких концентрациях компонентов возможно выпадение металлосодержащих минералов в твердом виде на скелет породы, т.е. при таких условиях формируются рудные месторождения.

Породы в зонах минерализации пронизаны жилами — трещинами, заполненными кварцем. Такие породы называются порфировыми. Трещиноватая структура пород, а именно наличие кварцевых жил свидетельствует о том, что в процессе дегазации давление жидкости в зонах минерализации в отдельные моменты времени превышало прочность пород. Это привело к гидроразрыву и образованию жил [115].

Представленная работа посвящена исследованию природных процессов, связанных с дегазацией магматических очагов, в частности, процессу формирования рудных месторождений. В качестве основы для исследования используются математические модели, описанные в работах [47; 118]. В настоящей работе построена более развитая модель, позволяющая учесть химические реакции, сопровождающие формирование рудных месторождений. Это делает возможным более точные оценки размеров и компонентного состава месторождений за счет применения реалистичных моделей растворимости минералов, которые основываются на экспериментальных данных. Также исследуется влияние осаждения кварца на динамику формирования месторождения. Показано, что осаждение кварца в трещинах может приводить к периодическому гидроразрыву горных пород и установлению циклического режима дегазации.

## 2.2 Обзор литературы

Моделированию гидротермальных систем посвящена обширная литература. В этом обзоре в основном приведены результаты исследований, относящихся к моделированию рудных месторождений.

В одной из ранних работ [53] построено аналитическое решение задачи стационарной неизотермической многофазной фильтрации в упрощенной квазиодномерной постановке. С помощью данного решения исследованы процессы разделения магматического флюида на паровую и жидкую фазы, а также химические реакции между жидкостью и вмещающими породами. В работах [122; 135] иссле-

дованы процессы выпадения соли в осадок при испарении высокотемпературных растворов в низкопроницаемых породах в рамках одномерного автомодельного решения и одномерного численного моделирования с помощью программного пакета TOUGH2-EWASG.

В работах [114; 115] на основе программного интерфейса CSMP++ разработан набор программ, с помощью которых исследован процесс остывания магматического очага с подъемом раствора соли по проницаемым породам. Определен возможный механизм захвата жидкости в приповерхностной области, где имеется развитая гидротермальная конвекция. Этот механизм связан с динамическим взаимодействием между потоком жидкости и проницаемостью вмещающих пород. На основе данных о растворимости меди, но без учета химических реакций в жидкости, даны оценки насыщенности пород медью при формировании месторождения. Для моделирования свойств смеси  $\text{H}_2\text{O}-\text{NaCl}$  в широком диапазоне давлений и температур используется уравнение состояния, разработанное в [37; 38]. Параметры жидкости определяются давлением, температурой и концентрацией соли.

В рамках осесимметричной постановки в работе [118] проведено моделирование формирования области высококонцентрированного раствора соли в процессе остывания магматического очага. Считается, что в породах существует область повышенной проницаемости, образовавшаяся за счет магматических извержений (высокопроницаемый канал). В отличие от предыдущих работ, в качестве определяющих параметров используются давление, энтальпия и компонентный состав смеси, а термодинамическое равновесие рассчитывается путем определения максимума энтропии. Такой подход, изначально предложенный в [7], позволяет эффективно моделировать многофазные равновесия в широком диапазоне давлений и температур. На основе этой модели в работе [47] проведено параметрическое исследование процесса формирования области высококонцентрированного раствора соли для различных магматических систем. Результаты моделирования сравнивались с результатами магнитотеллурического зондирования вулканических систем. Показано сходство форм областей высокой электрической проводимости и совпадение порядков измеренного в результате зондирования удельного электрического сопротивления, что косвенно подтверждает гипотезу о существовании таких областей в активных вулканических системах. Установлено, что при опреде-

ленных условиях область с высокой концентрацией соли может существовать без притока магматического флюида в течении более 250 тыс. лет.

Также численное моделирование используется в задачах, не связанных напрямую с формированием месторождений, например, в работе [8] в пакете MUFITS проведено численное моделирование гидротермальной конвекции в вулканической кальдере Campi Flegrei в Италии. В работе [32] с использованием симулятора TOUGH2 смоделировано извлечение суперкритического флюида из гидротермальной системы, залегающей на глубине 3 км, с целью оценки экономической целесообразности использования геотермальной энергии.

## 2.3 Математическая модель

Дегазация магматического очага описывается в рамках модели неизотермической многофазной фильтрации смеси  $H_2O-NaCl$  и растворенных в ней примесей.

Неизотермическая многофазная фильтрация смеси  $H_2O-NaCl$  описывается системой уравнений, сформулированной в работе [118]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi \sum_p \rho_p S_p c_p^{(i)} + \nabla \cdot \sum_p \rho_p \mathbf{w}_p c_p^{(i)} = 0, \quad p = \{l, g, s\} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \varphi \sum_p \rho_p S_p e_p + (1 - \varphi) \rho_r e_r \right) + \nabla \cdot \left( \sum_p \rho_p \mathbf{w}_p h_p - \kappa \nabla T \right) = 0 \quad (2.2)$$

$$\mathbf{w}_p = -k \frac{f_p}{\mu_p} (\nabla P - \rho_p \mathbf{g}), \quad f_p = S_p, \quad p = \{l, g\}, \quad \mathbf{w}_s = 0 \quad (2.3)$$

Здесь  $\varphi$  — пористость породы;  $\rho_p$ ,  $S_p$ ,  $\mathbf{w}_p$ ,  $e_p$  и  $h_p$  — плотность, насыщенность, скорость фильтрации, удельная внутренняя энергия и удельная энтальпия фазы с индексом  $p$ , соответственно;  $c_p^{(i)}$  — массовая концентрация компоненты  $i$  в фазе  $p$ ; индексы  $\{l, g, s\}$  соответствуют параметрам жидкой, газовой и твердой фазы, соответственно; индекс  $i$  может принимать одно из значений  $\{H_2O, NaCl\}$ , соответствующих воде и соли; индекс  $r$  обозначает параметры вмещающих пород;  $\kappa = (1 - \varphi) \kappa_r$  — эффективная теплопроводность насыщенной пористой среды ( $\kappa_r$  — теплопроводность породы);  $k$  — проницаемость пористой среды,  $f_p$  и  $\mu_p$  — относительная фазовая проницаемость и вязкость фазы  $p$ ;  $P$  — давление;  $\mathbf{g}$  — вектор силы тяжести.

Уравнения (2.1–2.3) соответствуют законам сохранения массы и энергии и закону Дарси для скорости фильтрации.

Для учета переноса и осаждения примесей, а именно меди  $\text{CuCl}_2^-$ , диоксида серы  $\text{SO}_2$ , сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$ , и сульфат иона  $\text{HSO}_4^-$  система (2.1–2.3) дополняется следующими уравнениями:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi \sum_p \rho_p S_p c_p^{(i)} + \nabla \cdot \sum_p \rho_p \mathbf{w}_p c_p^{(i)} = \sum_j J^{(i,j)} - \frac{\partial}{\partial t} (1 - \varphi) \rho_r c_r^{(i)} \quad (2.4)$$

$$\lg \frac{c_g^{(i)}}{c_l^{(i)}} = d^{(i)} \lg \frac{\rho_g}{\rho_l}, \quad c_s^{(i)} = 0 \quad (2.5)$$

Здесь  $c_r^{(i)}$  — степень обогащения пород (масса вещества на единицу массы пород) компонентой  $(i)$ ;  $J^{(i,j)}$  — интенсивность перехода массы между компонентами  $i$  и  $j$ ,  $J^{(i,i)} = 0$ . Для меди  $J^{(\text{Cu},j)} = 0$ , для серосодержащих компонент  $J^{(i,j)}$  определяется согласно закону действующих масс (А.5), описанному в разделе 1.3 Приложения А.

Уравнение (2.4) — уравнение неразрывности для примесей. Примеси могут находиться как в газовой, так и в жидкой фазе. Также в результате осаждения они могут формировать отдельную твердую фазу, в которой концентрации примесей определяются химическим составом минерала. В случае халькопирита ( $\text{CuFeS}_2$ ) отношение количества меди к количеству серы в молях составляет 1:2. Количество осажденного вещества  $c_r^{(i)}$  рассчитывается на основе реакции (А.1) и растворимости меди (А.2).

Экспериментальные исследования растворимости веществ в высококонцентрированных водных растворах соли, проведенные в работе [58], показывают, что отношение массовой доли меди в газовой фазе к массовой доле меди в жидкой фазе определяется отношением плотностей и насыщенных фаз и эта зависимость хорошо аппроксимируется соотношением (2.5). Коэффициент пропорциональности  $d^{(i)}$  определяется эмпирическим образом. Для меди коэффициент  $d^{(\text{Cu})}$  определен в работе [58] и равен  $d^{(\text{Cu})} = 3,87$ .

## 2.4 Постановка задачи

Рассматривается осесимметричная задача фильтрации, описывающая подъём магматического флюида к поверхности и формирование месторождения. Использование осесимметричной постановки оправдано, так как данное теоретическое

исследование направлено только на создание новой модели и демонстрацию ее возможностей для качественного и отчасти количественного прогнозирования параметров медных месторождений. В дальнейшем модель может калиброваться под данные наблюдений, полученные на реальных месторождениях и активных гидротермальных системах.

Постановка задачи в основном соответствует постановке, описанной в работе [118]. Рассматривается цилиндрическая область  $r \in [0; R]$ ,  $z \in [0; Z]$ , где  $r$  — радиальная координата, а  $z$  — глубина. В этой области задается начальная пористость, линейно убывающая с глубиной, а также начальная проницаемость, экспоненциально убывающая с глубиной:

$$\varphi_0(z) = \max \{ \alpha + \beta z, \varphi_{\min} \}; \quad (2.6)$$

$$k_0(z) = \min \{ \max \{ e^{a+bz}, k_{\min} \}, k_{\max} \}, \quad (2.7)$$

где  $\alpha = 0,27$ ;  $\beta = -0,044 \text{ км}^{-1}$ ;  $\varphi_{\min} = 0,05$ ;  $a = 3$ ;  $b = -1,5 \text{ км}^{-1}$ ;  $k_{\min} = 10^{-7} \text{ мД}$ ;  $k_{\max} = 10 \text{ мД}$  — константы. Соотношения (2.6–2.7) качественно согласуются с данными измерений свойств породы в геотермальных системах [67]. Геометрия расчетной области изображена на Рис. 2.2.

Предполагается, что в результате предыдущей вулканической активности в узком канале  $r \in [0; R_0]$  образовался высокопроницаемый канал, по которому осуществляется подъем вулканического газа к поверхности. В канале  $r \in [0; R_0]$  задается  $k_{\min} = 2 \text{ мД}$ .

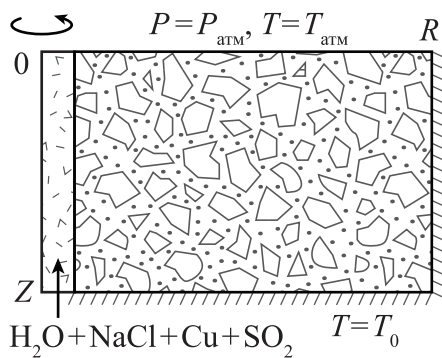


Рис. 2.2: Постановка задачи

Свойства породы полагаются постоянными: плотность  $\rho_r = 2700 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ ; теплопроводность  $\kappa_r = 2,8 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ ; удельная теплоемкость  $C_r = 1000 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ .

В начальный момент времени  $t = 0$  породы насыщены пресной водой, т.е.  $c_l^{(\text{NaCl})} = 0$ . Давление распределено в соответствии с литостатическим градиентом давления  $\Delta P = 27 \text{ МПа} \cdot \text{км}^{-1}$ , а температура — в соответствии с геотермальным градиентом  $\Delta T = 85 \text{ }^\circ\text{С} \cdot \text{км}^{-1}$ :

$$t = 0: \quad P_0(z) = P_{\text{атм}} + \Delta P z, \quad T_0(z) = T_{\text{атм}} + \Delta T z. \quad (2.8)$$

Здесь  $P_{\text{атм}} = 1$  атм, а  $T_{\text{атм}} = 20$  °С.

Условия (2.8) не являются условиями равновесия. Действительно, высокие значения градиента температуры приводят к развитию гидротермальной конвекции. Поэтому моделирование процесса формирования месторождения происходит в два этапа. На первом этапе определяется квазистационарное распределение давления и температуры, притока магматического флюида из очага при этом нет. Затем полученные на первом этапе распределения давления и температуры используются в качестве начальных условий для второго этапа. На втором этапе начинается закачка флюида в породы через участок нижней границы  $r \in [0; R_0]$ .

Верхняя граница ( $z = 0$ ) моделирует поверхность Земли, на ней поддерживаются постоянные температура и давление, соответствующие атмосферным значениям, также соленость воды полагается равной нулю:  $P = P_{\text{атм}}$ ,  $T = T_{\text{атм}}$ ,  $c_p^{(\text{NaCl})} = 0$ . На нижней границе ( $z = Z$ ) на первом этапе расчета ставится условие непроницаемости и поддерживается постоянная температура, которая равна начальной температуре, определяемой из начального условия (2.8):

$$z = Z: \quad \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad T = T_0, \quad (2.9)$$

Здесь  $\mathbf{n}$  — вектор нормали к поверхности границы. Условие постоянства температуры в (2.9) моделирует приток тепла от магматического очага и ставится в предположении, что размеры очага значительно превосходят размеры расчетной области, и очаг не успевает остыть за время дегазации. Реконструкции магматических систем для существующих месторождений с характерными для рассматриваемой задачи параметрами показывают, что горизонтальные размеры очагов могут составлять десятки километров [66].

Боковая граница  $r = R$  считается непроницаемой и теплоизолированной:  $\mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0$ ,  $-\kappa_r(\partial T / \partial \mathbf{n}) = 0$ . Боковая граница находится достаточно далеко от области формирования месторождения, что позволяет избежать влияния ее наличия на динамику процесса.

На втором этапе предполагается, что произошло мгновенное внедрение магмы на глубине  $z > Z$ , и началась закачка флюида в расчетную область. Начало дегазации моделируется изменением граничных условий: часть нижней границы  $r \in [0; R_0]$  становится проницаемой и в дальнейшем на ней поддерживаются постоянные значения давления и температуры, соответствующие параметрам

магматического флюида:

$$r \in [0; R_0]: \quad P = P_{\text{inj}} = P_0 + \Delta P_{\text{inj}}, \quad T = T_{\text{inj}}, \quad c^{(\text{NaCl})} = c_{\text{inj}}^{(\text{NaCl})}, \quad c^{(\text{Cu})} = c_{\text{inj}}^{(\text{Cu})}, \\ c^{(\text{SO}_2)} = c_{\text{inj}}^{(\text{SO}_2)}, \quad c^{(\text{H}_2\text{S})} = 0, \quad c^{(\text{HSO}_4^-)} = 0.$$

Здесь  $\Delta P_{\text{inj}} = 10$  МПа;  $T_{\text{inj}} = 877$  °С;  $c_{\text{inj}}^{(\text{NaCl})} = 0,035$ ;  $c_{\text{inj}}^{(\text{Cu})} = 1,4 \times 10^{-3}$  — константы;  $c_{\text{inj}}^{(\text{SO}_2)}$  варьируется от 1% до 2%.

## 2.5 Численные методы

Численное моделирование формирования рудного месторождения производится с помощью расщепления по физическим процессам на каждом шаге по времени и состоит из трех этапов:

1. Расчет неизотермической многофазной фильтрации смеси  $\text{H}_2\text{O}$ – $\text{NaCl}$  через породы;
2. Расчет переноса примесей, а именно  $\text{Cu}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{HSO}_4^-$ , на фоне распределения скоростей, плотностей и насыщенностей фаз жидкости, полученных на шаге 1.
3. Расчет диспропорционирования диоксида серы и образования халькопирита.

Схема расчета изображена на Рис. 2.3. Расчет многофазной фильтрации смеси  $\text{H}_2\text{O}$ – $\text{NaCl}$  по уравнениям (2.1–2.3) (этап 1), производится в пакете MUFITS [7]. Для остальных этапов был создан набор программных модулей, сопрягаемых с MUFITS.

### 2.5.1 Расчет переноса примесей

На этапе 2 по уравнениям (2.4–2.5) производится расчет переноса различных примесей, участвующих в рудообразовании. В качестве метода дискретизации уравнений используется метод контрольного объема [82].

Для упрощения численного моделирования уравнение неразрывности (2.4) модифицируется. Введем полную плотность смеси  $\rho_t = \rho_g S_g + \rho_l S_l$  и полную концентрацию примеси в жидкости  $c_t = (\rho_g S_g c_g + \rho_l S_l c_l) / \rho_t$ . Обозначим отношение



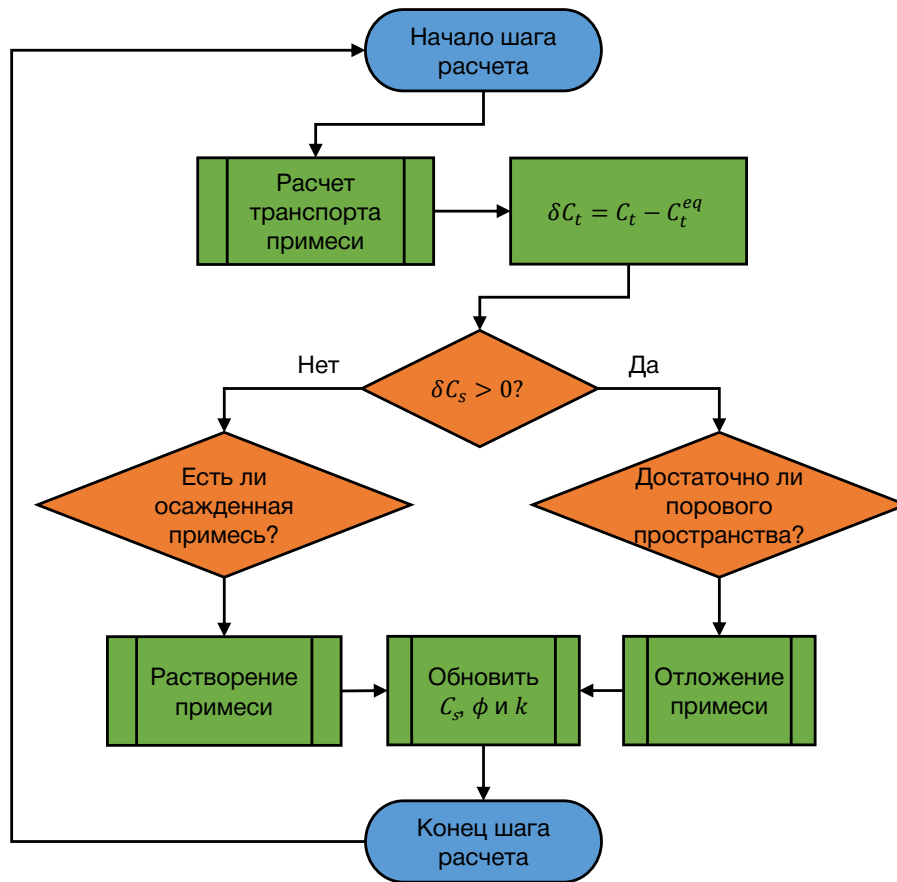


Рис. 2.3: Схема расчета переноса примесей сопряженного с расчетом химических равновесий

концентрации примеси в газовой фазе к концентрации примеси в жидкой фазе, определяемое соотношением (2.5), за  $\alpha = c_g/c_l = (\rho_g/\rho_l)^d$ . Также введем параметр  $\beta = \rho_t/(\rho_l S_l + \rho_g S_g \alpha)$ . Тогда можно выразить  $c_g$  и  $c_l$  через полную концентрацию  $c_t$ :  $c_l = \beta c_t$ ,  $c_g = \alpha c_l = \alpha \beta c_t$ . С учетом этого уравнение (2.4) принимает следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi \rho_t c_t^{(i)} + \nabla \cdot \alpha (\rho_g \mathbf{w}_g \beta + \rho_l \mathbf{w}_l) c_t^{(i)} = \sum_j J^{(i,j)} - \frac{\partial}{\partial t} (1 - \varphi) \rho_r c_r^{(i)}. \quad (2.10)$$

Уравнение (2.10) представляет собой уравнение переноса для полной концентрации  $c_t^{(i)}$  и используется для численных расчетов переноса примесей в двухфазном состоянии жидкости. Это уравнение вырождается при  $S_l = 0$  или  $S_g = 0$ . Оба этих случая соответствуют однофазным состояниям смеси. В этих случаях  $c_t$  равняется  $c_l$  или  $c_g$ , соответственно, а во второе слагаемое (2.4) входит скорость только одной фазы. Таким образом, в случаях однофазной фильтрации получается аналогичное (2.10) уравнение переноса.

В дискретном виде каждой расчетной ячейке соответствует конечно-разностная аппроксимация уравнения (2.10). Для численного интегрирования используется полностью неявная схема с разностями против потока [82]. Полученная в результате дискретизации система линейных уравнений для всех ячеек решается с помощью библиотеки UMFPACK [34].

### 2.5.2 Расчет химического равновесия серы и осаждения халькопирита

Расчет геохимических реакций (этап 3) в свою очередь состоит из двух подэтапов:

1. Определение равновесных концентраций  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$  и  $\text{HSO}_4^-$  согласно реакции (A.4) по закону действующих масс (A.5);
2. Определение концентрации меди в равновесии с твердой фазой по формуле растворимости (A.2) и расчет количества осажденной меди в соответствии с реакцией (A.1).

На первом подэтапе входными параметрами являются давление, температура и концентрации  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{HSO}_4^-$  и  $\text{H}^+$  в каждой расчетной ячейке. Обозначим мольные доли примесей в начале первого подэтапа за  $x_0^{(\text{SO}_2)}$ ,  $x_0^{(\text{H}_2\text{S})}$ ,  $x_0^{(\text{HSO}_4^-)}$  и  $x_0^{(\text{H}^+)}$ . Изменение мольной доли сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$  в результате реакции диспропорционирования (A.4) обозначим за  $\delta x$ . Из закона действующих масс (A.5) следует, что в результате протекания реакций концентрации реагентов удовлетворяют соотношению

$$\frac{(x_0^{(\text{HSO}_4^-)} + 3\delta x)^3 (x_0^{(\text{H}_2\text{S})} + \delta x) (x_0^{(\text{H}^+)})^3}{(x_0^{(\text{SO}_2)} - 4\delta x)^4} = K_{\text{eq}}(P, T) \quad (2.11)$$

В настоящей работе предполагается, что концентрация водорода  $x^{(\text{H}^+)}$  постоянна, что соответствует постоянной кислотности смеси. Получившееся уравнение (2.11) решается численно относительно  $\delta x$  и затем концентрациям серосодержащих газов присваиваются новые значения. Так как законы сохранения записываются для массовых концентраций, осуществляется перевод из массовых концентраций в мольные и обратно по следующим формулам:

$$x^{(i)} = \frac{c^{(i)} / M^{(i)}}{\sum_j c^{(j)} / M^{(j)}}, \quad c^{(i)} = \frac{x^{(i)} M^{(i)}}{\sum_j x^{(j)} M^{(j)}}$$

где  $M^{(i)}$  — молярная масса компоненты ( $i$ ), а суммирование проводится по всем компонентам в смеси.

На втором подэтапе входными параметрами являются: вычисленные на предыдущем подэтапе концентрации  $\text{SO}_2$  и  $\text{H}_2\text{S}$ ; температура  $T$ ; концентрация меди в жидкости  $c^{(\text{Cu})}$ , вычисленная на этапе 2; концентрация соли в смеси  $c^{(\text{NaCl})}$ ; масса осажденного халькопирита  $M^{(\text{CuFeS}_2)}$ .

Сначала по известным солёности и температуре вычисляется растворимость халькопирита  $c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}$ . Если  $c^{(\text{Cu})} > c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}$ , возможно осаждение халькопирита. Согласно стехиометрическому уравнению (А.1), 11 молей  $\text{H}_2\text{S}$ , 1 моль  $\text{SO}_2$  и 6 молей  $\text{Cu}$  в результате реакции образуют 6 молей  $\text{CuFeS}_2$ . Если концентрация какого-либо из реагентов будет равна нулю, реакция не произойдет. Масса осажденного на текущем шаге халькопирита  $\delta m^{(\text{CuFeS}_2)}$  определяется из условия

$$\delta m^{(\text{CuFeS}_2)} = \min \left\{ \frac{6}{11} x^{(\text{H}_2\text{S})}, 6x^{(\text{SO}_2)}, x^{(\text{Cu})} \right\} m^{(\text{H}_2\text{O}+\text{NaCl})} M^{(\text{CuFeS}_2)}.$$

Здесь  $m^{(\text{H}_2\text{O}+\text{NaCl})}$  — масса соленой жидкости в ячейке сетки;  $M^{(\text{CuFeS}_2)} = 183,521 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$  — молярная масса халькопирита.

Если, наоборот,  $c^{(\text{Cu})} < c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}$ , то жидкость недонасыщена. Если в расчетной ячейке есть отложенный халькопирит, то некоторая его доля растворяется так, что либо достигается положение равновесия с жидкой фазой, либо халькопирит растворяется полностью. Концентрация серы в жидкости возрастает в соответствии с уравнением (А.1).

Наконец, если  $c^{(\text{Cu})} = c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}$ , то система находится в равновесии, халькопирит не растворяется и не осаждается.

## 2.6 Результаты

Рассмотрено два различных случая формирования медного месторождения. Первый случай соответствует сценарию, в котором осаждение халькопирита не ограничено концентрацией серы в жидкости — реакция протекает всегда, когда концентрация меди в жидкости превосходит равновесную, то есть  $c^{(\text{Cu})} > c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}$ . Этот случай позволяет получить верхнюю оценку размера месторождения, подобно тому, как это делалось в [115]. Ниже показано, что эта оценка существенно завышена

по сравнению с другим случаем, учитывающим натурные и экспериментальные данные по геохимии месторождений.

Во втором случае учитывается, что осаждение халькопирита может быть ограничено концентрацией серосодержащих газов, как диоксида серы  $\text{SO}_2$ , так и сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$ . Проведены расчеты для концентрации диоксида серы  $c_{\text{inj}}^{(\text{SO}_2)}$  1% и 2%. Эти значения соответствуют характерному составу островодужных базальтовых магм [113].

Во всех представленных расчетах размеры области равны  $R = 10$  км,  $R_0 = 0,3$  км и  $Z = 5$  км.

В обоих случаях перед началом дегазации в течении 250 тыс. лет рассчитывается квазистационарное распределение давления и температуры в результате развития гидротермальной конвекции, как описано в разделе 2.3. Затем в течении 20 тыс. лет длится закачка флюида в расчетную область с постоянным расходом  $q_{\text{inj}} = 1000$  т·день<sup>-1</sup>. За это время формируется область с высокой концентрацией соли в жидкости и характерная для порфировых месторождений куполообразная область минерализации меди (Рис. 2.4). Затем закачка флюида прекращается и эволюция системы рассчитывается в течении следующих 30 тыс. лет. При этом жидкость и породы успевают остыть, за счет чего еще некоторая часть меди выпадает в осадок в виде халькопирита.

### 2.6.1 Случай неограниченного количества серы

На Рис. 2.4а и б изображены соленость, температура, концентрация меди в жидкости и в породах в последовательные моменты времени. Через 20 тыс. лет после начала дегазации магмы (Рис. 2.4а) на глубине 2 км формируется область концентрированного раствора соли, в верхней части которой за счет выпадения соли в твердый осадок образуется слой низкопроницаемых пород. На периферии области с высокой концентрацией соли температура и соленость в жидкости опускаются до значений, допускающих осаждение халькопирита. Рассчитанная куполообразная форма области минерализации халькопирита, а также низкая концентрация меди в породах (до 0,2% по массе) согласуются с представлениями о строении порфировых месторождений [96].

Ближе к оси симметрии, где жидкость меньше взаимодействует с окружающими холодными породами, температура выше и за счет этого медь остается в растворенном виде. Концентрация меди в жидкости достигает 7000 ppm. Анализ

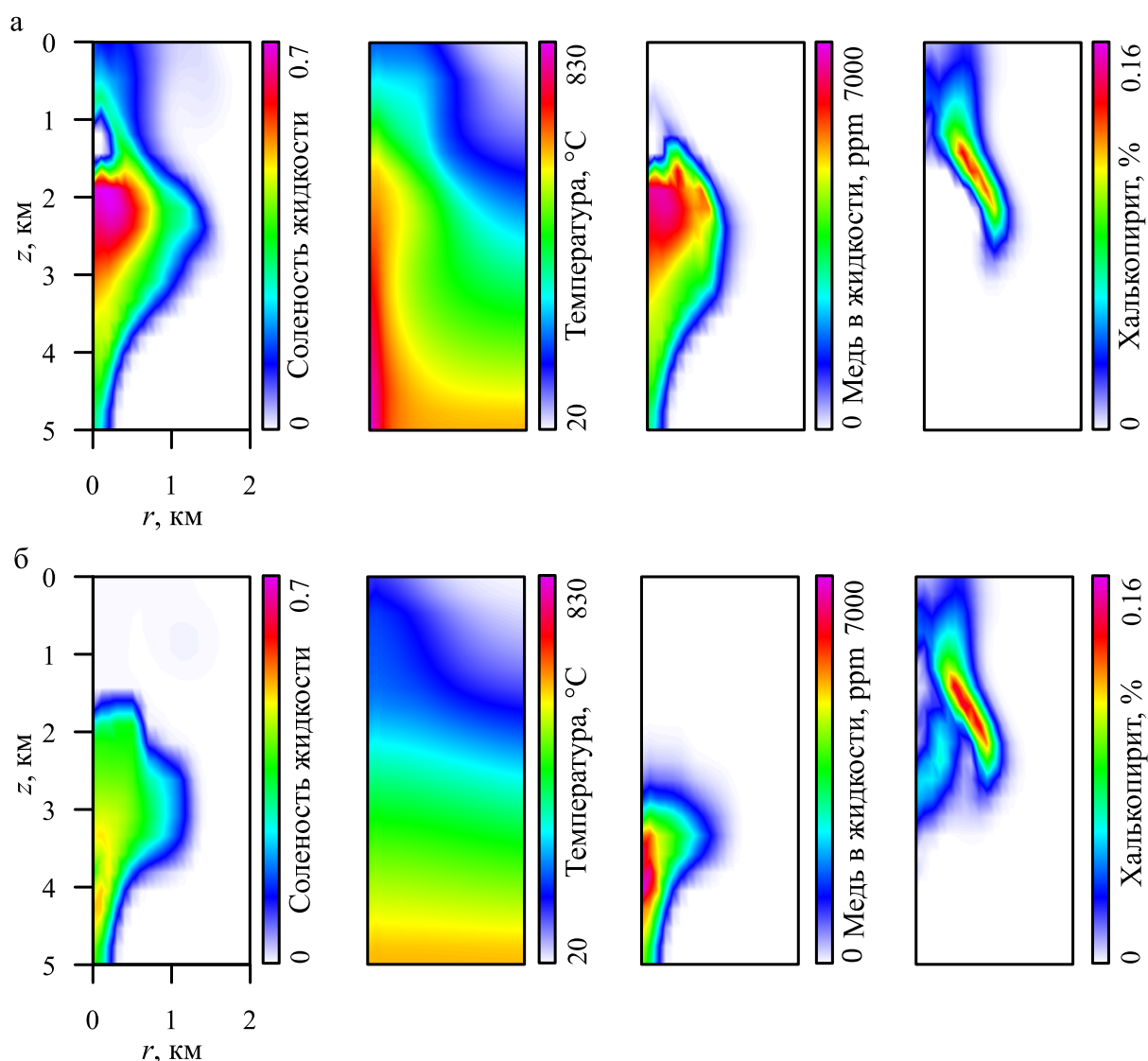


Рис. 2.4: Слева направо: соленость, температура, концентрация меди в жидкости и в породах в момент времени а)  $t = 20$  тыс. лет и б)  $t = 50$  тыс. лет

флюидных включений в гидротермальных системах дает оценку концентрации меди в жидкости в пластовых условиях до 30000 ppm [58].

Поскольку предполагается, что реакция образования халькопирита не ограничена концентрацией серы, вся медь за пределами области с высокой концентрацией соли выпадает в осадок на скелет пород. В реальности на активных гидротермальных системах часто наблюдается поток меди в атмосферу, например, на вулкане White Island в Новой Зеландии натурные измерения показывают наличие потока меди порядка  $100 \text{ кг} \cdot \text{день}^{-1}$  [52].

Через 30 тыс. лет после мгновенного прекращения дегазации магмы (Рис. 2.4б) соленая жидкость остыла и под действием сил тяжести опустилась примерно на 2 км. Остывание жидкости приводит к уменьшению растворимости меди и, сле-

довательно, к осаждению халькопирита в высокопроницаемом канале, где до этого медь оставалась в растворенном виде. Наличие разновозрастных вложенных друг в друга зон минерализации меди также характерно для порфировых месторождений [96].

Рассмотренный случай соответствует осаждению халькопирита, ограниченному только растворимостью меди, но не концентрацией серы в жидкости. Полученные в результате моделирования контуры рудных тел имеют сходство с наблюдаемыми на существующих месторождениях, однако полное осаждение меди противоречит наличию наблюдаемого потока меди в атмосферу. Кроме того, проинтегрированная масса меди по всему объему после окончания расчета равняется примерно 10 Мт, в то время как у схожего с рассматриваемой в работе моделью по размерам и условиям формирования месторождения Yerington в США суммарные запасы оцениваются всего в примерно 2 Мт [36]. Аналогичная оценка, полученная в более грубом приближении без учета возможного обратного растворения халькопирита и вторичного осаждения халькопирита при остановке закачки, делалась ранее в работе [115].

Одной из причин завышенной оценки может являться отсутствие ограничения реакции образования халькопирита содержанием серы в поступающем из магматического очага флюиде. В следующем разделе исследуется процесс формирования месторождения в рамках расширенной модели, учитывающей ограниченное содержание серосодержащих компонент во флюиде.

### 2.6.2 Учет влияния серы

Во втором случае рассмотрено два варианта, с концентрацией серы 1% и 2% в магматическом флюиде. Отличия между случаями в основном количественные, а не качественные, поэтому в дальнейшем в этом разделе рассматривается только концентрация  $c_{inj}^{(SO_2)} = 1\%$ .

На Рис. 2.5а и б показаны концентрации  $SO_2$ ,  $H_2S$ , а также меди в жидкости и в породах в те же моменты времени, что и в предыдущем разделе. Распределения температуры и солености одинаковые для всех сценариев, так как не учитывается обратное влияние примесей на гидродинамику жидкости.

Концентрация  $SO_2$  в жидкости выше нуля только в областях с достаточно высокой температурой (выше  $400\text{ }^{\circ}C$ ), то есть на глубинах больше 3 км и близко к области закачки флюида. На периферии области с высокой концентрацией соли

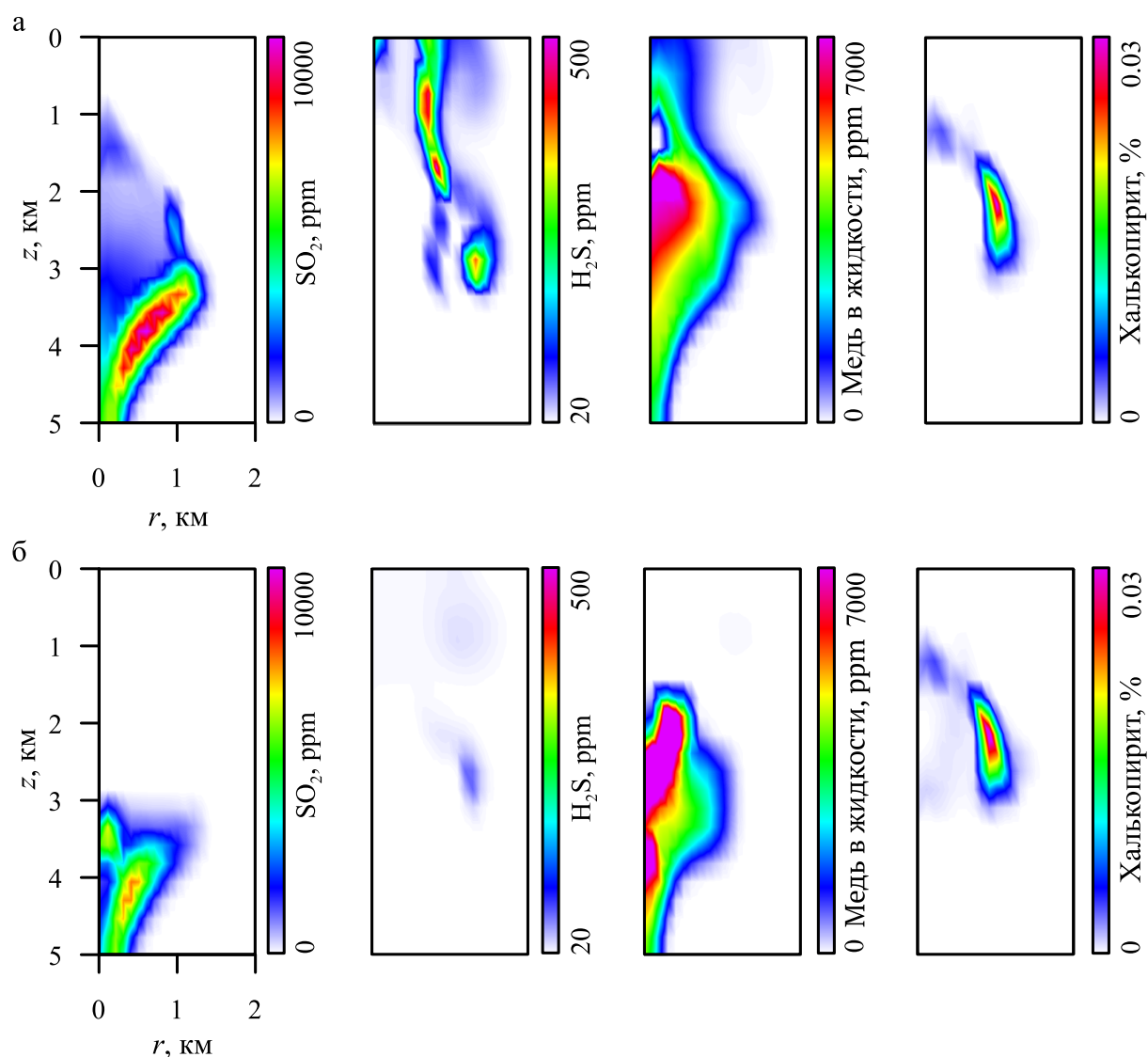


Рис. 2.5: Слева направо: концентрация диоксида серы  $\text{SO}_2$ , сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$ , меди в жидкости и в породах в момент времени а)  $t = 20$  тыс. лет и б)  $t = 50$  тыс. лет

жидкость быстро остывает за счет контакта с холодными породами, насыщенными метеорной (пресной, попавшей в породы из атмосферы) водой и диоксид серы целиком диспропорционирует с образованием сероводорода и серной кислоты. Образуется достаточно узкая область, в которой существуют одновременно и  $\text{SO}_2$  и  $\text{H}_2\text{S}$ , необходимые для формирования халькопирита. Только в этой области и происходит минерализация меди. Рядом с осью симметрии  $r = 0$  на глубине порядка 1 км температурная граница области с высокой концентрацией соли наиболее резкая из-за разделения жидкости на фазы и закупорки пор твердой солью. В результате зоны, в которых присутствуют  $\text{SO}_2$  и  $\text{H}_2\text{S}$ , не пересекаются. Кроме того, вдоль канала происходит активное испарение воды — пар оттесняет жидкую фазу, содержащую серу, вследствие чего в верхней части канала интенсивность

минерализации значительно ниже, чем на глубине 3 км. В итоге возникает поток неотложившейся меди на поверхность, часто наблюдаемый на активных вулканах, как описано в предыдущем разделе.

После прекращения закачки флюида так же, как и в предыдущем случае, халькопирит дополнительно откладывается в центральной части расчетной области, однако, в значительно меньших количествах из-за нехватки  $H_2S$  в горячей жидкости. Рассчитанное в случае 2 рудное тело по-прежнему имеет сходство формы, размеров и пространственного расположения с реальными порфировыми месторождениями, однако концентрация меди в породах и сам размер области минерализации существенно меньше, чем в случае достаточного количества серы. С другой стороны, концентрация меди в жидкости значительно возрастает, поскольку медь остается в жидкости. Таким образом, высокая концентрация меди может свидетельствовать о низком содержании серы во флюиде. Это наблюдение может использоваться при анализе флюидных включений в реальных гидротермальных системах.

### 2.6.3 Сравнение случаев

На Рис. 2.6 изображены графики проинтегрированной по всей расчетной области массы отложенной меди в зависимости от времени. Пунктирной линией отмечен момент прекращения закачки флюида  $t = 20$  тыс. лет. Видно, что после окончания дегазации суммарный запас меди быстро перестает расти и выходит на постоянное значение; в случае неограниченной серы этот процесс занимает больше времени из-за более активного осаждения в высокопроницаемом канале.

Запасы меди в случае неограниченного серой осаждения практически в 10 раз превосходят таковые в случае концентрации  $c_{inj}^{(SO_2)} = 1\%$ , и в 5 раз в случае  $c_{inj}^{(SO_2)} = 2\%$ . Зависимость массы отложенного халькопирита от концентрации  $SO_2$  в типичном для исследуемых гидротермаль-

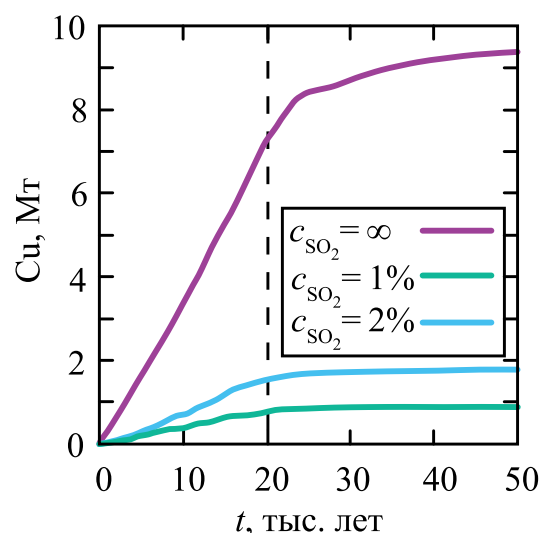


Рис. 2.6: Суммарная масса осажденной меди в области для случая неограниченной серы, а также случаев с ограниченной концентрацией серы в источнике  $c_{inj}^{(SO_2)} = 1\%$  и  $2\%$



ных систем диапазоне 1–2% имеет практически линейный характер. В сценарии 2 при концентрации серы в 2% запасы меди после окончания дегазации 1,85 Мт наиболее близко среди всех рассмотренных случаев соответствуют оценке запасов месторождения *Yerington* (2 Мт) .

Таким образом, показано, что учет ограниченной концентрации серы в отделяющемся от остывающей магмы флюиде существенно влияет на процесс формирования порфирового медного месторождения. Полученные в результате численного моделирования величины запасов меди более адекватно соответствуют данным натурных измерений на активных гидротермальных системах и оценкам запасов существующих месторождений.

## **2.7 О влиянии осаждения кварца на динамику дегазации магматического очага**

В данном разделе приведены результаты численного моделирования процесса дегазации магматического очага с учетом осаждения кварца на скелет породы. Это осаждение приводит к закупорке кварцем порового пространства, росту флюидного давления и образованию трещин во вмещающих породах.

Кроме серосодержащих газов и солей металлов магматический флюид содержит большое количество кремнезема, или кварца (химическая формула  $\text{SiO}_2$ ). Растворимость кварца существенно ниже растворимости меди при одинаковой температуре и давлении, что приводит к активному осаждению кварца на глубинах, превышающих глубину отложения соли и меди. Если при длительном отложении кварц займет значительную часть порового пространства, то проницаемость пород уменьшится до нуля, приток магматического газа в приповерхностные области уменьшится, а месторождение не сформируется.

Снижение проницаемости пород и закупорка высокопроницаемого канала сопровождаются значительным возрастанием давления под кварцевой пробкой. Если давление превосходит литостатическое, происходит гидроразрыв пород [96; 115].

Для моделирования растрескивания пород в этом разделе, как и в работе [114], предложена модель динамической проницаемости. Однако, применяемые в данной работе уравнения модели динамической проницаемости отличаются от уравнений, использовавшихся в [114].

Дегазация очага описывается в рамках модели неизотермической многофазной фильтрации смеси  $H_2O-NaCl$  (уравнения (2.1–2.3)). Поскольку количество осажженного халькопирита достаточно мало, чтобы не оказывать существенного влияния на пористость и проницаемость вмещающих пород, в этом разделе концентрация меди и серосодержащих газов полагается равной нулю. Перенос кварца моделируется уравнением неразрывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi \sum_p \rho_p S_p c_p^{(i)} + \nabla \cdot \sum_p \rho_p \mathbf{w}_p c_p^{(i)} = - \frac{\partial}{\partial t} (1 - \varphi) \rho_r c_r^{(SiO_2)} \quad (2.12)$$

где  $c_r^{(SiO_2)}$  — концентрация осажженного кварца в породах. Как и в задаче о формировании очага, описанной в разделе 2.3, распределение кварца между газовой и жидкой фазами определяется из уравнения (2.5). Для кварца коэффициент  $d^{(SiO_2)} = 2,03$  [58].

Осаждение кварца контролируется только его растворимостью: если концентрация  $SiO_2$  в жидкости превосходит равновесную, кварц выпадает в виде твердой фазы на скелет породы. Скорость реакции растворения кварца значительно меньше скорости осаждения, поэтому обратная реакция растворения кварца не учитывается, т.е. концентрация кварца в породах не убывает со временем. Растворимость кварца  $c_{eq}^{(SiO_2)}$  в растворе соли рассчитывается по формуле (А.3).

Численное моделирование процесса дегазации проводится в два этапа. На первом этапе вычислений в комплексе программ MUFITS рассчитывается течение бинарной смеси  $NaCl-H_2O$  в интервале одного шага по времени. При этом пористость  $\varphi$  и проницаемость  $k$  не изменяются. В результате в заданный момент времени определяются поля скорости, плотности и насыщенных газовой и жидкой фаз. На втором этапе на фоне распределений  $\mathbf{w}_p$ ,  $\rho_p$  и  $S_p$  в соответствии с (2.12) рассчитывается перенос примеси кварца и определяется распределение его полной концентрации.

Если рассчитанная концентрация кремния  $c_t^{(SiO_2)}$  выше равновесной концентрации  $c_{eq}^{(SiO_2)}$ , то избыток примеси осаждается на скелет. На основании объёма осажженной примеси на втором этапе вычисляются новые значения пористости  $\varphi$  и проницаемости  $k$ . Далее вычислительный алгоритм повторяется с первого этапа.

### 2.7.1 Модель динамической пористости и проницаемости

Для моделирования гидроразрыва пород на втором этапе дополнительно вводится добавочная пористость  $\varphi_f$ , равная нулю в начальный момент времени, когда давление в жидкости существенно не превышает литостатическое давление. Величина  $\varphi_f$  возрастает с течением времени пропорционально  $(\Delta P - P_*)$ , где  $\Delta P$  — избыточное над литостатическим давление в жидкости;  $P_* = 5$  МПа — критическое избыточное давление, определяемое прочностью горных пород:

$$\varphi = \varphi_0 - \varphi_s + \varphi_f$$
$$\frac{\partial \varphi_f}{\partial t} = \begin{cases} \frac{\Delta P - P_*}{\tau}, & \Delta P - P_* > 0 \\ 0, & \Delta P - P_* \leq 0 \end{cases}$$

где  $\varphi_0$  — начальная пористость;  $\varphi_s$  — доля объема пород, занимаемая осажженным кварцем;  $\tau$  — свободный параметр, характеризующий скорость накопления добавочной пористости. Значение  $\tau$  выбирается таким образом, чтобы характерное время разрушения пород было значительно меньше времени осаждения кремния. Выбор величины  $\tau$  в диапазоне 1–100 Па·с не оказывает существенного влияния на результаты моделирования. В дальнейшем  $\tau$  полагается равным 50 Па·с.

Заметим также, что добавочная пористость ограничена сверху некоторой долей от начальной пористости (во всех представленных результатах эта доля равна 0,5), для того чтобы исключить неограниченный рост пористости. В начальный момент времени породы находятся в неразрушенном состоянии:  $\varphi_f|_{t=0} = 0$ .

Проницаемость пропорциональна кубу доли свободного объема пор, не занятого осажженным оксидом кремния:

$$k = \begin{cases} k_0 \left( \frac{\varphi}{\varphi_0 + \varphi_f} \right)^3, & \frac{\varphi}{\varphi_0 + \varphi_f} \geq \beta \\ 0, & \frac{\varphi}{\varphi_0 + \varphi_f} < \beta \end{cases} \quad (2.13)$$

где  $k_0$  — начальная проницаемость неразрушенных пород, а  $\beta = 0,8$ . Согласно (2.13), если осажженный кварц занимает более 20% порового пространства, то происходит полная закупорка пор и проницаемость снижается до нуля [118]. Значение критической доли пор, при котором происходит закупорка пород (20%), слабо влияет на результаты расчетов.

## 2.7.2 Результаты

Расчеты показывают, что в первые 1,4 тыс. лет отложение кварца не оказывает существенного влияния на процесс дегазации очага, описанный в работе [118]. На глубине порядка 2 км формируется область концентрированного раствора соли. Выпадение кварца в осадок происходит на значительно больших ( $\sim 4$  км) глубинах. Постепенно количество осажденного кварца в порах достигает критического значения, проницаемость пород уменьшается практически до нуля, перекрывая поток магматического флюида из очага, а область с высокой концентрацией соли начинает размываться конвекцией пресной воды, насыщающей породы в области 1–3 км. Давление жидкости в высокопроводящем канале существенно превышает литостатическое. Такое распределение давления приведет к гидроразрыву пород и образованию трещин, по которым будет осуществляться фильтрация.

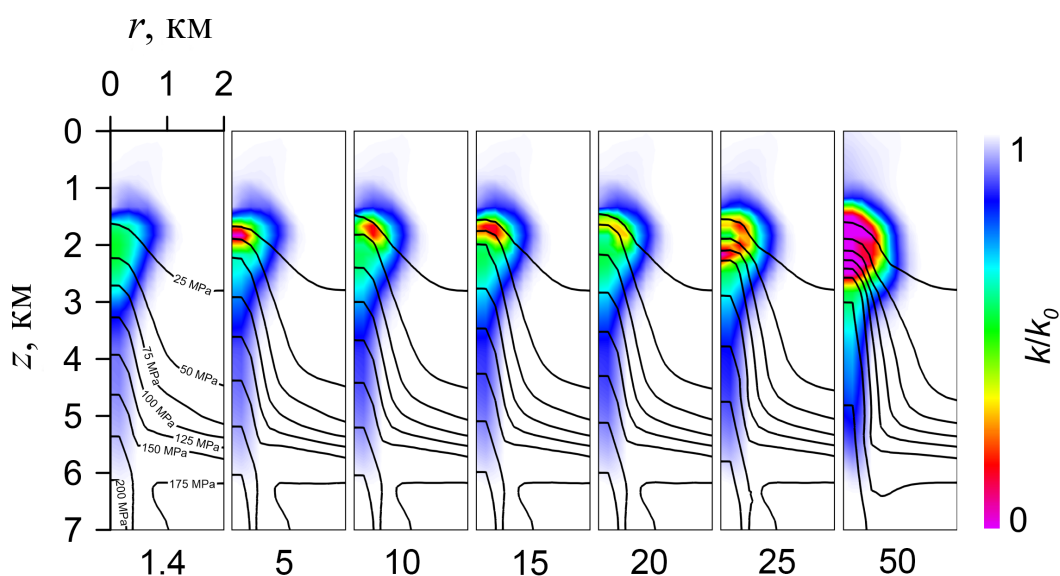


Рис. 2.7: Отношение проницаемости породы к проницаемости в начальный момент времени ( $k/k_0$ ) и изолинии давления в различные моменты времени

Развитие процесса с учетом эволюции пористости и проницаемости в рамках модели, описанной в главе 2.3 представлено на Рис. 2.7. Через 1,4 тыс. лет после начала дегазации наблюдается существенное накопление кварца, рост давления в канале и уменьшение потока магматического газа. Потом происходит прорыв пробки, связанный с тем, что давление превышает предел прочности пород ( $\Delta P > P_*$ ). Образование трещин приводит к возрастанию пористости и проницаемости, а летучие компоненты распространяются вверх по каналу. Далее, кварц начинает выпадать выше, чем на предыдущем цикле, и течение снова замедляется. После череды закупорок и прорывов практически весь канал оказывается заполненным

кварцем, его проницаемость уменьшается и становится более однородной. Далее происходит медленная фильтрация магматического раствора во всем канале.

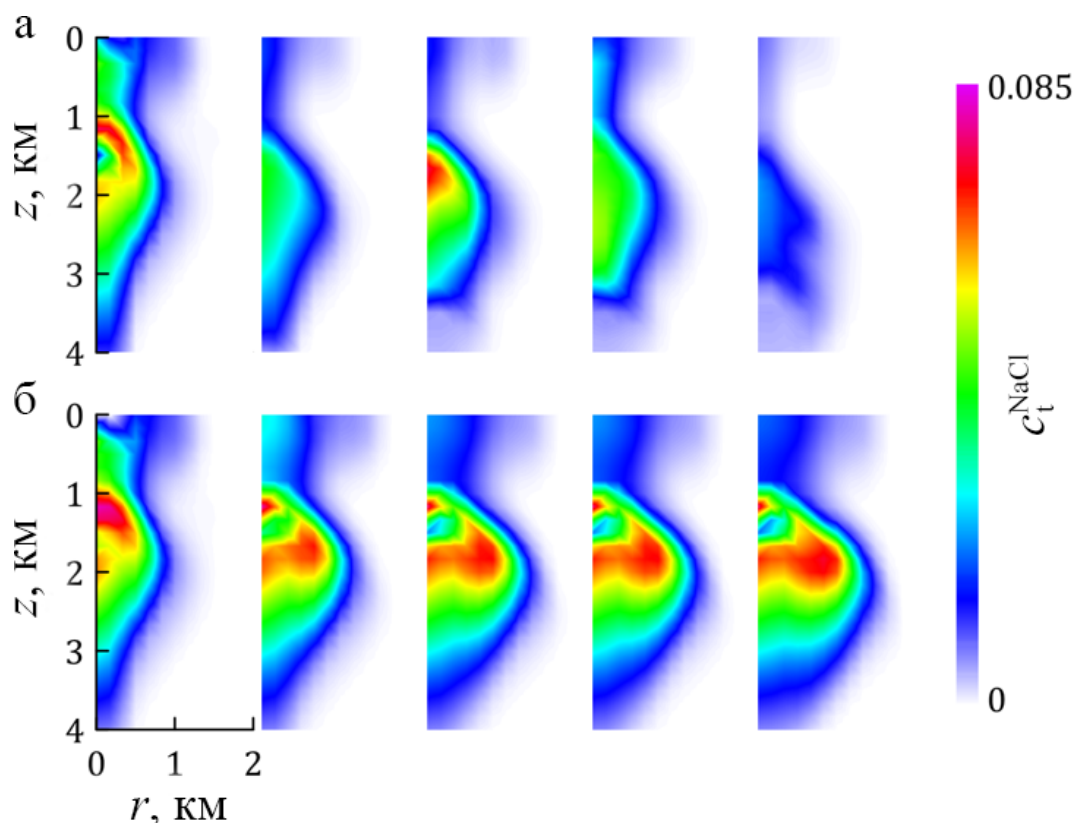


Рис. 2.8: Сравнение концентрации соли в жидкости  $c^{(\text{NaCl})}$  в породах в моменты времени  $t = 1, 4; 5; 10; 15$  и  $50$  тыс. лет с момента начала дегазации магмы: а) результаты расчета без учета осаждения оксида кремния; б) с учетом осаждения

При прорыве кварцевых пробок горячая жидкость устремляется вверх по высокопроницаемому каналу. Это сопровождается интенсивным испарением и ростом размера области концентрированного раствора соли. Когда канал перекрывается новой пробкой, приток жидкости ослабевает, соленая жидкость остывает и под действием силы тяжести опускается вниз и размывается за счет гидротермальной конвекции в приповерхностной области. Сравнение концентрации соли в смеси без учета и с учетом осаждения кварца представлено на Рис. 2.8а и б, соответственно. Когда весь высокопроницаемый канал закупоривается кварцем, область концентрированного раствора соли размывается за счет конвекции пресной воды и соленость значительно уменьшается.

Таким образом, в результате эволюции системы возникает область с большим объемом кварцевой минерализации, состоящая из иерархии разновозрастных трещин, заполненных кварцем. Подобные системы кварцевых жил часто наблю-

даются при разработке медных месторождений геотермального происхождения [96].

## 2.8 Заключение к главе

В данной главе представлена математическая модель формирования медного порфирового месторождения, учитывающая реальные зависимости растворимости меди и кварца от термодинамических параметров и состава магматического флюида, зависимости констант равновесия химических реакций от давления и температуры и коэффициентов распределения компонент между жидкой и газовой фазами. Показано, что сера и ее концентрация в поступающем из магматического очага флюиде играет ключевую роль в образовании месторождения. Получившиеся в результате численного моделирования формы, размеры и глубины залегания месторождений качественно соответствуют геологическим реконструкциям строения реальных месторождений и натурным данным.

Предложена модель динамической проницаемости, описывающая гидроразрыв вмещающих пород, вызванный закупоркой порового пространства выпадающим в виде твердой фазы кремнием. Продемонстрирован циклический режим дегазации, при котором гидроразрыв пород сопровождается осаждением кремнезема, перекрывающим поток жидкости. Существование таких режимов подтверждается геологическими данными. При этом интенсивность дегазации очага снижается, а объем образующегося медного месторождения будет меньшим по сравнению со случаем неучета осаждения кремнезема.

## Глава 3

### Численное моделирование лавовых потоков<sup>\*</sup>

В данной главе описывается модель лавового потока, состоящая из неосредненных по вертикали уравнений Навье-Стокса и закона сохранения энергии. Описывается численный метод, основанный на гидродинамике сглаженных частиц, а также тестирование этого метода на модельных задачах. Приводятся результаты численных расчетов течений лавы. Исследуется зависимость длины растекания потока в зависимости от расхода лавы, температуры лавы на входе, угла наклона подстилающей поверхности. Также в рамках упрощенного подхода, в котором гидродинамика течения описывается известным автомодельным решением, исследуется зависимость толщины температурного слоя у поверхности лавы от безразмерных параметров течения.

#### 3.1 Введение

Для вулканических извержений с небольшим количеством растворенных летучих (вода, углекислый газ и др.) характерно формирование лавовых потоков, которые могут распространяться на десятки километров, причиняя существенный вред инфраструктуре. С целью прогнозирования распространения лавового потока в настоящее время активно применяется математическое моделирование, основанное на методах гидромеханики.

Обзор современного состояния проблемы приведен в работах [28; 30]. Выделяются три класса моделей течений лавы: модели, основанные на методе клеточных автоматов [46; 65; 103], модели, основанные на приближении мелкой воды [30] и, наконец, полностью двух- и трехмерные модели [79].

В первом классе моделей используются приближенные решения уравнений течения вязкой жидкости по наклонной плоскости. Вся область разделяется на

---

<sup>\*</sup>При подготовке данного раздела диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно «Положению о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», отражены основные результаты, положения и выводы исследования: [121; 129; 130]

отдельные клетки, состояние и перетоки массы в которых определяются только параметрами в ближайших клетках. С помощью этих моделей можно быстро оценить направление распространения потока и с некоторой достоверностью его толщину. В моделях второго класса производится осреднение уравнений Навье–Стокса и энергии по толщине потока, которая считается малой по сравнению с другими линейными размерами. Данный подход не позволяет учесть распределение температуры и вязкости магмы по толщине, что может иногда приводить к существенным ошибкам при описании течения.

В последнее время появляются полностью трехмерные модели, основанные на совместном решении уравнений Навье–Стокса и энергии с учетом нелинейных граничных условий для температуры на свободной поверхности. Эти модели пока не получили распространения ввиду больших вычислительных затрат и необходимости всестороннего тестирования на модельных задачах.

Для численного моделирования течений лавы традиционно используются сеточные методы, такие как метод конечных объемов и метод конечных элементов. Однако использование этих методов может быть сопряжено с существенными трудностями из-за специфики моделируемой среды. В частности, известно, что лава быстро остывает на границе с атмосферой. При снижении температуры в лаве начинается активный рост кристаллов, что ведет к значительному увеличению вязкости вплоть до  $10^{12}$  Па·с. Если в численном методе используется явное отслеживание свободной поверхности, например, с помощью метода объема жидкости, на свободной границе возникает скачок вязкости такой величины, которая может приводить к неустойчивости метода из-за ограничений машинной точности вычислений. Также для моделирования остывания поверхности лавы необходимо задавать граничные условия на свободной поверхности, форма которой заранее неизвестна, что также может выражаться в погрешностях моделирования динамики течения.

Сеточные методы, в которых используется лагранжев подход к описанию среды, лишены части этих проблем, но в то же время имеют ряд недостатков, к которым относятся высокая сложность реализации и необходимость частого пересчета сетки из-за больших деформаций среды, которые могут привести к вырождению этой сетки. Пересчет сетки требует интерполяции параметров среды со старой сетки на новую, что ведет к существенной численной диффузии параметров, например, вязкости.



В последние годы активно развиваются бессеточные методы, способные решить описанные проблемы. В бессеточных методах моделируемая среда чаще всего представляется в виде частиц, которые переносят все необходимые параметры, такие как масса, объем и температура. Одним из самых популярных и развитых бессеточных методов является метод гидродинамики сглаженных частиц. В данной главе строится численная модель, основанная на методе гидродинамики сглаженных частиц, в которой учитываются важные для корректного описания лавы физические процессы, а именно остывание свободной поверхности потока за счет теплообмена с атмосферой и нелинейная зависимость вязкости лавы от температуры.

Расчеты растекания остывающего лавового потока, приведенные в главе, позволяют сделать вывод, что при небольших временах растекания и высоком расходе втекающей лавы влияние остывания на длину распространения и форму потока несущественно. При таких предположениях возможно построение упрощенной модели для определения поля температуры в лаве, растекающейся по плоской поверхности. В данной главе приводится пример такой модели, гидродинамика в которой описывается известным решением уравнений движения в приближении тонкого слоя [80], а распределение температуры вычисляется из решения неосредненного уравнения энергии. Проведено исследование зависимости толщины температурного слоя у поверхности лавового потока от безразмерных параметров задачи.

## 3.2 Обзор литературы

### 3.2.1 Гидродинамика сглаженных частиц

Метод гидродинамики сглаженных частиц (*SPH, smoothed particle hydrodynamics*) — бессеточный численный метод, в котором моделируемая среда дискретизируется множеством частиц, каждая из которых представляет индивидуальный объем этой среды и переносит с собой его массу, а также осредненные, или сглаженные, по этому объему параметры, такие как давление, температура, концентрация примесей и другие параметры, специфичные для конкретной модели среды. Гидродинамика сглаженных частиц позволяет моделировать эволюцию систем, поведение которых описывается дифференциальными уравнениями в

частных производных. Таким образом, SPH является достаточно универсальным численным методом.

Метод SPH изначально был разработан для численного решения задач астрофизики в конце 70-х годов [49; 64], и впоследствии модифицирован для решения широкого спектра задач механики сплошных сред. В работе [72] SPH был впервые применен для моделирования течений идеальной жидкости со свободной поверхностью. В работе [74] описан метод SPH для моделирования течений вязкой жидкости с числами Рейнольдса  $\leq 1$ , приведено сравнение численных расчетов течений Пуазейля и Куэтта с точными решениями, а также сравнение с методом конечных элементов для обтекания регулярной решетки цилиндров. Предложенная в [74] формула для аппроксимации сил вязкого трения впоследствии часто применялась для расчетов течений вязкой жидкости, например в [79; 99; 104]. Другая формула для моделирования вязкого трения была предложена в работе [10]. Похожая формула использовалась в [72] в качестве численной вязкости для стабилизации расчетов течения идеальной жидкости. Преимущество формулы из [10] заключается в том, что для нее сохраняется принцип относительности Галилея, то есть выполняется закон сохранения импульса и углового момента. Это позволило с высокой точностью рассчитывать течения с числами Рейнольдса от 10 до 2400. В работе [108] показано, что существующие ранее формулы для учета вязкости работают только в случае постоянной вязкости, и предложена формула для аппроксимации методом SPH произвольных дифференциальных операторов второго порядка.

Метод гидродинамики сглаженных частиц применяется для моделирования неньютоновских [79; 95], упругих [21], вязкоупругих [41], а также упругопластичных [86; 94] сред. В работе [99] предложен метод SPH для моделирования течений с очень низкими числами Рейнольдса, в приближении Стокса, то есть в предположении, что инерционными слагаемыми в уравнениях движения можно пренебречь.

Традиционно SPH применялся для моделирования сжимаемых сред с уравнением состояния, связывающим плотность, давление и температуру в каждой точке среды. Для расчетов несжимаемых течений чаще всего использовалась слабосжимаемая постановка, или WCSPH (*weakly-compressible SPH*). В WCSPH среда считается слабо сжимаемой с уравнением состояния для давления. Часто применяется следующее уравнение состояния для воды:

$$p_a = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \left[ \left( \frac{\rho_a}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right]. \quad (3.1)$$

Здесь  $p_a, \rho_a$  — давление и плотность жидкости в частице с индексом  $a$ ;  $\rho_0$  — плотность жидкости в покое,  $c_0$  — скорость звука в среде,  $\gamma$  — параметр среды, для воды  $\gamma = 7$ .

Учитывая, что интегрирование уравнений движения в WCSPH обычно происходит в рамках явной схемы, использование физической скорости звука для параметра  $c_0$  приводит к сильному ограничению максимального шага по времени в численном расчете. Поэтому обычно в качестве  $c_0$  берут так называемую *численную* скорость звука. Она выбирается таким образом, чтобы колебания плотности относительно  $\rho_0$  не превышали 1%. Для этого, как показано в [72],  $c_0$  должна как минимум в 10 раз превосходить максимальную скорость движения жидкости.

Несмотря на успешное применение WCSPH в вычислительной гидродинамике, слабосжимаемый подход имеет ряд проблем. В первую очередь, небольшие колебания плотности приводят к большим скачкам давления согласно уравнению состояния (3.1). На практике это выражается в нефизических осцилляциях давления и может приводить к ошибкам в задачах, где требуется корректное поле давлений, например, для определения количества растворенного газа в расплавленной породе [100], или для двухстороннего взаимодействия жидкости с плавающими твердыми телами.

Для решения указанных проблем в работе [33] был предложен алгоритм, основанный на методе, описанном в статье [24]. В дальнейшем этот и похожие на него алгоритмы в литературе часто обозначают общим термином ISPH (*incompressible SPH*). В этих алгоритмах несжимаемость среды обеспечивается решением уравнения Пуассона для давления, что гарантирует равенство дискретной дивергенции поля скорости нулю. В [33] показано, что использование ISPH приводит к значительно более точному расчету распределению давления в жидкости. Кроме того, в формулировке ISPH допустимо использовать для расчета шаги по времени, в 5 и более раз превышающие таковые для WCSPH [110].

Изначально в методе SPH не была предусмотрена возможность моделирования твердых непроницаемых стенок и открытых границ, и, соответственно, задания граничных условий на таких границах. Основной проблемой наличия границ в SPH является отсутствие частиц за пределами объема моделируемой среды, что приводит к погрешностям аппроксимации, которая базируется на предположе-

нии сплошности среды. По мере развития метода гидродинамики сглаженных частиц сформировалось множество подходов к моделированию граничных условий. Для твердых стенок эти подходы в целом можно разделить на три категории: «фиктивные частицы», «отталкивающие силы» и «поверхностные интегралы».

Подход «фиктивных частиц», предложенный в [101], подразумевает дискретизацию твердой стенки частицами, которые участвуют в решении уравнений движения, однако значения различных величин, таких, как скорость, плотность или давление, вычисляется таким образом, чтобы удовлетворить заданному граничному условию. Сами частицы могут быть как жестко связанными с положением твердой стенки, так и генерироваться «на лету», адаптируясь к расположению частиц жидкости. Во втором случае фиктивные частицы чаще всего являются зеркальным отражением частиц жидкости относительно поверхности стенки.

Метод «фиктивных частиц» часто применяется в задачах, связанных с моделированием вязкой жидкости, например, в работах [10; 74] с использованием этого подхода была рассчитана динамика вязкой жидкости при низких (порядка 1) и средних (до 2400) числах Рейнольдса для течений Пуазейля и Куэтта, а также для обтекания потоком решетки цилиндров. Была получена приемлемая точность численного решения в сравнении с аналитическими решениями и результатами конечно-элементных расчетов. В работе [4] «фиктивные частицы» использовались при построении полностью несжимаемого метода SPH второго порядка аппроксимации.

Основное преимущество подхода «фиктивных частиц» заключается в том, что у каждой частицы жидкости, граничащей с твердой стенкой, будет достаточно соседних частиц, чтобы избежать погрешностей аппроксимации или минимизировать их. К недостаткам подхода относятся высокое потребление вычислительных ресурсов, а также сложность реализации, в частности, поиска подходящей конфигурации расположения частиц для сложной геометрии расчетной области.

Второй способ моделирования твердых стенок — метод «отталкивающих сил», который в литературе чаще всего упоминается под названием «repulsive forces». Исторически это первый опубликованный в литературе подход: в статье [72] было предложено разместить на поверхности твердой стенки ряд частиц, которые отталкивают от себя частицы жидкости. Силы, с которыми твердые частицы воздействуют на частицы жидкости, выбраны таким образом, чтобы имитировать взаимодействие молекул вещества. Единственным преимуществом данного мето-

да является простота реализации. Наличие фиктивных массовых сил приводит к нарушению закона сохранения импульса, а всего один слой фиктивных частиц не решает проблему недостатка соседних частиц около границы. Кроме того, открытым остается вопрос о возможности задания граничных условий второго рода на границах такого типа.

В последнее время появляется новый подход к моделированию твердых границ. Изначально предложенный в статье [5] метод, полученный из вариационных принципов, предполагает вычисление корректирующего множителя, компенсирующего недостаток массы около границы. В [5] этот множитель был вычислен аналитически для простой геометрии области, состоящей из отрезков прямых и их пересечений, причем длина отрезков должна существенно превосходить пространственное разрешение расчета.

В последующих работах [3; 104; 105] авторами был разработан ряд модификаций, позволяющий рассчитывать контакт жидкости с твердой стенкой для произвольной геометрии, состоящей из отрезков прямых, называемых сегментами, и соединяющих эти сегменты частиц, называемых вершинами, в двумерном случае. В трехмерном случае сегментами будут являться треугольники. Также в отличие от [5], в модифицированном методе производится вычисление поверхностного интеграла для дифференциальных операторов, которым в традиционной постановке обычно пренебрегают, так как на достаточном расстоянии от границы этот интеграл равен нулю. Кроме повышенной точности аппроксимации, это позволяет корректно задавать граничные условия на стенках.

Также в этих работах описывается применение аналогичного подхода для моделирования открытых границ, через которые жидкости может втекать в расчетную область и вытекать из нее. Свой метод авторы указанных работ называли «unified semi-analytical wall boundary conditions», или USAW-BC. Этот метод применим как для слабо-сжимаемой постановки WCSPH, так и для ISPH.

К преимуществам USAW-BC можно отнести высокую точность аппроксимации SPH около стенок, возможность задания граничных условий смешанного типа на границе, существенно меньшее, чем для «фиктивных частиц», потребление памяти. С другой стороны, USAW-BC значительно сложнее в реализации, поскольку все формулы SPH для аппроксимации операторов будут содержать дополнительные слагаемые, учитывающие наличие сегментов и вершин. Таким образом, реализа-

ция USAW-BC требует значительной переработки практически всех алгоритмов, реализующих численный метод.

В SPH существуют различные схемы для аппроксимации дифференциальных операторов первого и второго порядка [109], обладающие различными свойствами, в частности, различной погрешностью аппроксимации. В статье [45] была произведена оценка погрешности для различных схем, основанная на разложении в ряд Тейлора, показано, что погрешность аппроксимации существенно зависит от неравномерности расположения частиц в пространстве. Также было показано, что наиболее распространенные схемы для производных первого и второго порядка не обладают первым порядком аппроксимации. В этой же работе были предложены скорректированные схемы первого порядка аппроксимации. Для применения скорректированных схем необходимо вычисление компонент тензора второго ранга для каждой частицы жидкости. Применение скорректированных дискретных операторов существенно для точного расчета течений с низкими числами Рейнольдса [4] и для тепловых задач, в которых важно учитывать теплообмен с атмосферой [92].

Метод SPH достаточно подробно описан в литературе, например, в книгах [63; 109]. Однако к настоящему моменту не сформировался стандартный подход в обозначениях и нотации, кроме того, метод активно развивается в настоящее время, поэтому в Приложении В дан краткий обзор современного состояния SPH. Особое внимание в обзоре уделено конкретной постановке, которая используется в данной работе для моделирования лавовых потоков.

### 3.2.2 Теория тонкого слоя

Горизонтальные масштабы реальных лавовых потоков обычно значительно превышают их толщину. Это позволяет использовать для моделирования течений лавы приближение тонкого слоя. В теории тонкого слоя предполагается, что форма потока описывается функциональной зависимостью от времени и пространственной координаты  $h(x, t)$  и длина потока  $x_N$  значительно превосходит  $h(x, t)$ . В работе [80] построены автомодельные решения в рамках теории тонкого слоя для изотермического растекания тонкого слоя высоковязкой жидкости по плоской горизонтальной подстилающей поверхности. Далее эти результаты были обобщены для наклонной поверхности в работе [62]. Предполагается, что силы инерции и поверхностного натяжения пренебрежимо малы. В таком случае

распределения давления и скорости описываются следующими соотношениями:

$$p = \rho g [(h - z) \cos \theta - x \sin \theta] \quad (3.2)$$

$$u_x = -\frac{1}{2\mu} z(2h - z) \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.3)$$

Здесь  $x$  — координата вдоль склона;  $z$  — координата, перпендикулярная подстилающей поверхности;  $\theta$  — угол наклона поверхности;  $\rho$  — плотность жидкости;  $\mu$  — вязкость жидкости. После подстановки уравнений (3.2–3.3) в уравнение неразрывности, осредненное по глубине, получается уравнение на форму поверхности  $h(x, t)$ :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{3} \frac{\rho g}{\mu} \left[ \cos \theta \frac{\partial}{\partial x} \left( h^3 \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \sin \theta \frac{\partial h^3}{\partial x} \right] \quad (3.4)$$

Предполагается, что общий объем жидкости зависит от времени согласно степенному закону:

$$\int_0^{x_N} h(x, t) dx = q t^\alpha. \quad (3.5)$$

В дальнейшем в диссертации рассматривается случай  $\alpha = 1$ , соответствующий постоянному значению расхода лавы, равному  $q$ .

В частном случае горизонтальной подстилающей поверхности, то есть при  $\theta = 0$ , в работе [80] получено автомодельное решение уравнения (3.4). Показано, что форма потока  $h(x, t)$  определяется следующей формулой:

$$h(x, t) = \eta_N^{2/3} \left( 3 \frac{\mu}{\rho g} q^2 \right)^{1/5} t^{1/5} \varphi(\eta/\eta_N), \quad (3.6)$$

где  $\eta = \left( \frac{1}{3} \frac{\rho g}{\mu} q^3 \right)^{-1/5} x t^{-4/5}$  — автомодельная переменная. Функция  $\varphi(y)$ , где  $y = \eta/\eta_N$  находится из обыкновенного дифференциального уравнения:

$$(\varphi^3 \varphi')' + \frac{4}{5} y \varphi' - \frac{1}{5} \varphi = 0, \quad (3.7)$$

а константа  $\eta_N$  находится путем подстановки (3.6) в уравнение неразрывности (3.5):

$$\eta_N = \left( \int_0^1 \varphi(y) dy \right)^{-3/5}.$$

Координата фронта потока  $x_N(t)$  является степенной функцией времени:

$$x_N(t) = \eta_N \left( \frac{1}{3} \frac{\rho g}{\mu} q^3 \right)^{1/5} t^{4/5}. \quad (3.8)$$

Для случая, когда угол наклона подстилающей поверхности  $\theta$  не равен нулю, в работе [62] показано, что на начальных этапах растекания динамика течения соответствует случаю горизонтальной подстилающей поверхности при малых значениях  $\theta$ . При больших временах существует асимптотическое решение для закона распространения фронта, а толщина потока в случае фиксированного расхода ( $\alpha = 1$ ) постоянна:

$$x_N(t) = \left( \frac{1}{3} \frac{\rho g}{\mu} \sin \theta \right)^{1/3} t, \quad h = \left( 3 \frac{\mu}{\rho g \sin \theta} \right)^{1/3} \quad (3.9)$$

Приведенные решения справедливы для изотермических течений жидкости с ньютоновской линейно-вязкой реологией. В работах [14; 111] рассматриваются изотермические течения вязкоупругой жидкости по горизонтальной и наклонной поверхности, получены решения для формы поверхности и установлены законы эволюции положения фронта потока во времени. Для неизотермических течений в работах [17; 18] получены уравнения, осредненные по вертикали, и проведено численное исследование растекания жидкости с вязкостью, зависящей от температуры. Теория тонкого слоя обобщена для неизотермического течения вязкоупругой жидкости в работах [12; 13]. Течения с фазовыми переходами рассмотрены в работах [76; 98], при этом предполагается, что фронт солидификации распространяется от подстилающей поверхности внутрь тонкого слоя жидкости.

В работах [112; 120] теория тонкого слоя, разработанная в [80], обобщена для течений линейно-вязкой и степенной жидкости с условием частичного проскальзывания на подстилающей поверхности, показано, что частичное проскальзывание может приводить к значительно более быстрому продвижению фронта потока.



### 3.3 Численное моделирование лавовых потоков методом гидродинамики сглаженных частиц

#### 3.3.1 Математическая модель

Течение лавы описывается системой уравнений, состоящей из уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости и закона сохранения энергии:

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}, \quad \boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.11)$$

$$\rho C_v \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \boldsymbol{\tau} : \nabla\mathbf{u}^T. \quad (3.12)$$

Здесь  $\mathbf{u}$  — скорость жидкости;  $p$  — давление;  $\rho$  — плотность;  $\mu$  — вязкость;  $\mathbf{g}$  — вектор силы тяжести;  $T$  — температура;  $C_v$  — удельная теплоемкость лавы;  $\kappa$  — теплопроводность.

Уравнения (3.10–3.11) соответствуют закону сохранения импульса и массы для несжимаемой жидкости. Уравнение (3.12) представляет собой закон сохранения энергии с учетом вязкой диссипации,  $\mathbf{A} : \mathbf{B} \equiv A_{ij}B_{ji}$ .

Нелинейная зависимость вязкости лавы от температуры определяется из соотношения, полученного в [50] для базальтовой лавы:

$$\log_{10} \mu = -4,643 + \frac{5812,44 - 427,04c^{(\text{H}_2\text{O})}}{T(\text{K}) - 499,31 + 28,74 \ln(c^{(\text{H}_2\text{O})})}. \quad (3.13)$$

Здесь вязкость задается в Па·с;  $T$  — температура в кельвинах;  $c^{(\text{H}_2\text{O})}$  — массовая доля воды, в данной работе принято  $c^{(\text{H}_2\text{O})} = 0,005$ , что соответствует измеренным значениям концентрации воды в изверженных лавах.

#### 3.3.2 Постановка задачи

Задача решается в плоской постановке. Рассматривается область, состоящая из плоской щели шириной  $H$ , через которую осуществляется приток лавы в область, и подстилающей поверхности, наклоненной под углом  $\theta$ . На Рис. 3.1 изображена конфигурация расчетной области. В момент времени  $t = 0$  из щели начинает

вытекать лава с объемным расходом  $q$  и температурой  $T_0$ . Растекание длится до момента времени  $t = t_e$ .

На подстилающей поверхности  $z = 0$  задается условие прилипания для скорости:  $\mathbf{u}|_{z=0} = 0$  и адиабатическое граничное условие для температуры  $\partial T / \partial \mathbf{n}|_{z=0} = 0$ . Теплообменом с подстилающей поверхностью в этой задаче можно пренебречь, поскольку поток тепла в породы значительно меньше потока тепла в атмосферу.

В случае горизонтальной подстилающей поверхности на левой границе  $x = 0$  ставятся условия симметрии для скорости и температуры:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{при} \quad x = 0$$

На свободной поверхности должны выполняться кинематическое и динамическое условия. Кинематическое условие состоит в том, что частицы жидкости, находящиеся на свободной поверхности, остаются на свободной поверхности. В лагранжевом методе, каким является SPH, это условие обычно выполняется автоматически. Динамическое условие означает отсутствие нормальных и касательных напряжений:  $\boldsymbol{\tau} \mathbf{n} - p \mathbf{n} = 0$ .

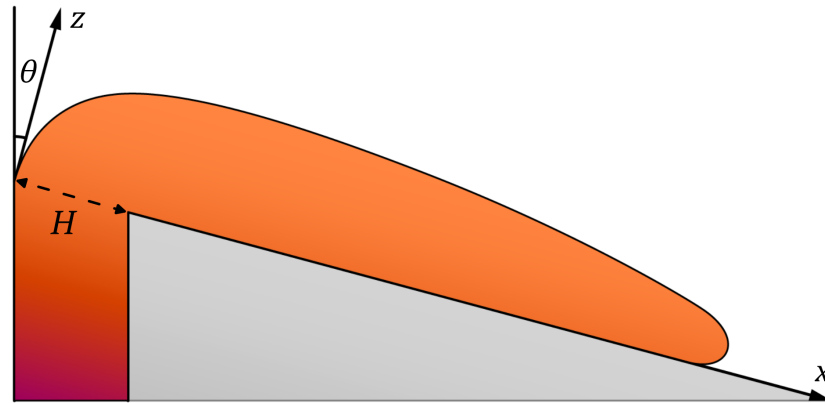


Рис. 3.1: Вычислительная область в задаче о растекании лавы по наклонной поверхности

Поверхность лавы остывает главным образом за счет теплового излучения, а также за счет конвективного теплообмена с атмосферой [77]. Чтобы учесть эти эффекты, на свободной поверхности лавы задается тепловой поток, состоящий из двух слагаемых:

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \sigma \varepsilon (T^4 - T_{\text{atm}}^4) + \lambda (T - T_{\text{atm}})^{\frac{4}{3}}. \quad (3.14)$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (3.14) описывает поток тепла в атмосферу за счет теплового излучения согласно закону Стефана-Больцмана. Коэффициент  $\sigma = 5,670367 \times 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$  — постоянная Стефана-Больцмана;  $\varepsilon$  — излучательная способность среды.

Второе слагаемое представляет собой закон Ньютона-Рихмана для теплообмена между телами разной температуры. Разность температур обусловлена наличием температурной конвекции, как естественной, то есть вызванной неравномерным нагреванием воздуха лавой, так и вынужденной, связанной с внешними процессами, например ветром или атмосферными осадками. Параметр  $\lambda$  — коэффициент теплоотдачи: выбор значений  $\lambda$  позволяет моделировать различные режимы конвекции.

В щели, из которой вытекает лава, задан параболический профиль скорости таким образом, чтобы расход жидкости через щель был равен  $q$ :

$$u_z = 6q \frac{x(h-x)}{h^3}, \quad u_x = 0.$$

### 3.3.3 Численные методы

Уравнения, определяющие течение лавы, дискретизируются в пространстве с помощью метода SPH. Используется «истинно несжимаемая» постановка ISPH. Для учета твердых стенок и открытых границ используется полуаналитический подход USAW-BC (см. раздел 2.5.1 приложения В).

Для численного решения уравнений (3.10–3.12) используется метод расщепления по физическим процессам: на первом шаге интегрируются законы сохранения импульса и массы (3.10) и (3.11), а уравнение энергии интегрируется на втором шаге. Такое расщепление обусловлено тем, что процесс теплопроводности в этой задаче значительно медленнее конвективного переноса — число Пекле имеет порядок  $10^6$ . Это позволяет использовать явную по времени схему для уравнения (3.12).

Предложенный в работе численный метод реализован автором в программном коде, написанном на языке C++.

## Определение свободной поверхности жидкости

В описываемой постановке SPH необходимо на каждом шаге расчета определять частицы, лежащие на свободной поверхности. Эти частицы используются для задания граничных условий на давление и температуру.

Чаще всего в литературе применяется способ определения свободной поверхности, основанный на вычислении дивергенции вектора координат частиц. Теоретически в двумерной постановке  $\nabla \cdot \mathbf{r} = 2$ , однако рядом со свободной поверхностью количество частиц уменьшается, и значение дискретной дивергенции стремится к нулю. Обычно в качестве критического значения, ниже которого частица считается лежащей на свободной поверхности, берется 1,5.

Однако численные тесты показали, что этот способ недостаточно точно определяет свободную поверхность для течений лавы. Ошибки, связанные с тем, что частица, лежащая на свободной поверхности, но для которой  $\nabla \cdot \mathbf{r} \geq 1,5$ , могут быть незаметны в низковязких турбулентных течениях, но лавовые потоки обычно ламинарны и их поверхность контакта с атмосферой остается достаточно гладкой и связной в течение всего времени растекания, поэтому любые ошибки при определении свободной поверхности сильно влияют на рассчитанное течение.

В данном исследовании используется метод, описанный в работе [44]. В этом методе частицы, лежащие на свободной поверхности, определяются в два этапа.

На первом этапе отбираются частицы, лежащие внутри потока. «Одиночные» частицы, у которых слишком мало соседей, сразу определяются как часть свободной поверхности. «Промежуточные» частицы-кандидаты проверяются более точным тестом на втором этапе.

В качестве критерия, определяющего, в какую из категорий попадет та или иная частица, согласно [44], служит минимальное собственное значение матрицы  $(B_a^\gamma)^{-1}$ , обратной матрице ренормализации (В.41), приведенной в разделе 2.6 приложения В. Обозначим минимальное собственное значение матрицы  $(B_a^\gamma)^{-1}$  за  $\lambda$ . Обозначим также множество «одиночных» частиц за  $\mathbb{E}$ , множество частиц-«кандидатов» за  $\mathbb{B}$ , и множество внутренних частиц за  $\mathbb{I}$ . Для частицы с индексом  $i$  граничные значения  $\lambda$  следующие:

$$\begin{cases} i \in \mathbb{E} \iff \lambda \leq 0,20 \\ i \in \mathbb{B} \iff 0,20 < \lambda \leq 0,75 \\ i \in \mathbb{I} \iff 0,75 < \lambda \end{cases}$$

Первый этап лишь приблизительно позволяет определить, какие частицы точно лежат на свободной поверхности, а какие точно внутри жидкости. Частицы из множества  $\mathbb{B}$  переходят на второй этап для более детальной проверки.

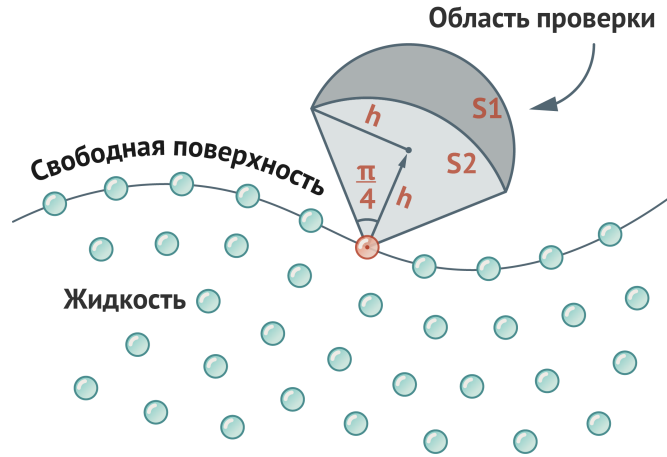


Рис. 3.2: Схема области, которая сканируется для определения принадлежности частицы свободной поверхности

На втором этапе каждая из частиц-кандидатов проходит тест, по итогу которого она либо помечается как частица на свободной поверхности, либо как внутренняя частица жидкости. Тест заключается в проверке наличия соседних частиц в определенной области вокруг тестируемой частицы. Эта область показана на Рис. 3.2. Если хотя бы одна частица обнаружена в этой области, частица  $i$  помечается как внутренняя частица жидкости. В противном случае частица считается лежащей на свободной поверхности.

Для определения области, изображенной на Рис. 3.2, необходимо вычислить вектор нормали к свободной поверхности. В работе [44] этот вектор аппроксимируется скорректированным градиентом концентрации частиц:

$$\mathbf{n}_a = \frac{\mathbf{v}_a}{|\mathbf{v}_a|}, \quad \mathbf{v}_a = B_a^\gamma \left( -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \nabla \gamma_{as} \right). \quad (3.15)$$

Заметим, что для вычисления нормали используется скорректированный с помощью процедуры ренормализации оператор градиента. Это позволяет вычислять нормаль к свободной поверхности более точно.

### Моделирование притока массы

В гидродинамике сглаженных частиц поступление новой жидкости в расчетную область должно сопровождаться созданием новых частиц. В работе [3] предла-

гается модификация USAW-BC, позволяющая моделировать приток жидкости с минимальными модификациями оригинального метода.

В USAW-BC стенки состоят из сегментов и вершин, вершины имеют постоянную массу, скорость вершин и сегментов равняется скорости стенки. Модификация из работы [3] заключается в том, чтобы дискретизировать открытые границы таким же образом, но допустить изменение массы вершин согласно расходу жидкости через открытую границу. Эти вершины затем используются для создания новых частиц жидкости. Обозначим множество вершин, принадлежащих открытой границе за  $V_{i/o}$ , а множество вершин, лежащих на непроницаемой стенке за  $V_{wall}$ . Аналогично введем множества сегментов  $S_{i/o}$  и  $S_{wall}$ .

Изменение массы вершины  $v \in V_{i/o}$  определяется ее эйлеровой скоростью  $\mathbf{u}_s$ , заданной на открытой границе:

$$\dot{m}_v^n = \frac{1}{2} \sum_{s \in N_{sv}} \rho S_s (\mathbf{u}_s - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n}_s, \quad (3.16)$$

где  $N_{sv}$  — множество сегментов, соединенных с вершиной  $v$ ;  $S_s$  — длина сегмента  $s$ ;  $\mathbf{v}_s$  — скорость открытой границы. Важно, что скорость  $\mathbf{u}_s$  это эйлерова скорость, то есть локальная скорость жидкости в точке, совпадающей с координатой вершины  $v$ , а  $\mathbf{v}_s$  это скорость самой границы в неподвижной системе координат.

После каждого шага по времени масса вершин на открытой границе обновляется в соответствии с ОДУ (3.16):

$$m_v^{n+1} = m_v^n + \delta t \dot{m}_v^n.$$

Если масса вершины после обновления превосходит заданное значение  $0,5m_{ref}$ , где  $m_{ref}$  — масса жидкой частицы, то в том же месте, где находится вершина, создается новая частица жидкости с массой  $m_{ref}$ . Параметры этой частицы, то есть давление, температура, скорость, копируются из вершины. Из массы вершины при этом вычитается  $m_{ref}$ , чтобы выполнить закон сохранения массы, то есть масса вершины становится равна  $-0,5m_{ref}$ .

## Гидродинамика

Для моделирования течения несжимаемой жидкости используется метод проекции [24; 33]. На первом шаге алгоритма вычисляется промежуточное поле ско-

рости  $\mathbf{u}^*$ , в котором учитываются слагаемые, связанные с вязкостью жидкости и массовыми силами. На втором шаге ищется поправка к полю скорости для удовлетворения условия несжимаемости, то есть равенства нулю дивергенции поля скорости исходя из поправки давления, которая рассчитывается из уравнения Пуассона:

$$\frac{\mathbf{u}_a^* - \mathbf{u}_a^n}{\delta t} = -\frac{1}{\rho} \mathbf{G}_a^{\gamma,+} \{p_b^n\} + \frac{1}{\rho} \mathbf{S}_a^{\gamma} \{\mu_b^n, \mathbf{u}_b^*\} + \mathbf{g}, \quad \mathbf{u}_a^*|_{\partial\Omega} = \mathbf{u}_a^{\text{wall}}, \quad (3.17)$$

$$L_a^{\gamma} \{p_b^{n+1} - p_b^n\} = \frac{\rho}{\delta t} D_a^{\gamma,-} \{\mathbf{u}_b^*\}, \quad \nabla(p_a^{n+1} - p_a^n) \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \quad (3.18)$$

$$\frac{\mathbf{u}_a^{n+1} - \mathbf{u}_a^*}{\delta t} = -\frac{1}{\rho} \mathbf{G}_a^{\gamma,+} \{p_b^{n+1} - p_b^n\}, \quad (3.19)$$

$$\frac{\tilde{\mathbf{r}}_a^{n+1} - \mathbf{r}_a^n}{\delta t} = \mathbf{u}^{n+1}. \quad (3.20)$$

Здесь используются дискретные операторы SPH, вид которых приведен в разделе 2.5.1 приложения В.

На границе промежуточное поле скорости  $\mathbf{u}^*$  равняется  $\mathbf{u}_a^{\text{wall}}$ . Для непроницаемых стенок  $\mathbf{u}_a^{\text{wall}} = \mathbf{v}_a$ , а на открытых границах  $\mathbf{u}_a^{\text{wall}} = \mathbf{u}_a - \mathbf{v}_a$ .

В уравнении (3.17) промежуточное поле скорости  $\mathbf{u}^*$  вычисляется неявно, что приводит к решению системы линейных уравнений. В правой части (3.17) фигурирует слагаемое  $-\frac{1}{\rho} \mathbf{G}_a^{\gamma,+} \{p_b^n\}$ , включающее в себя градиент давления с предыдущего шага по времени. Затем решается уравнение Пуассона (3.18) для приращения давления, с помощью которого на третьем этапе (3.19) вычисляется конечное бездивергентное поле скоростей на новом шаге. Новые координаты частиц  $\tilde{\mathbf{r}}_a^{n+1}$  определяются по методу Эйлера согласно уравнению (3.20). Эти координаты не окончательные, поскольку в дальнейшем положение частиц будет скорректировано.

Описанная численная схема называется *инкрементальной проекцией*, поскольку в ней вычисляется не само поле давлений, а его приращение. В литературе, посвященной SPH, более распространенной является схема, в которой при вычислении промежуточной скорости не учитывается давление с предыдущего шага. Такую схему называют *полной проекцией*.

Поскольку числа Рейнольдса в течениях лавы могут быть очень низкими, порядка  $10^{-2}$ , вклад инерциальных членов становится пренебрежимо малым, динамику потока при этом определяет взаимодействие сил давления и вязкости. Расщепле-

ние в схеме (3.17–3.20) происходит именно через ускорение жидкости, поэтому если не учитывать силы давления при расчете промежуточного поля скорости  $\mathbf{u}^*$ , эти скорости получаются сильно завышенными. При решении уравнения Пуассона для давления (3.18) ошибка может оказаться существенной. Это проявляется в наблюдаемой сжимаемости жидкости. Поэтому выбрана именно инкрементальная схема, использование которой позволило значительно уменьшить погрешность расщепления.

Для решения эллиптического уравнения Пуассона необходимо задать граничные условия для вычисления давления на стенках. Чтобы после шага коррекции скорости (3.19) выполнялось условие прилипания, должно выполняться однородное условие второго рода:  $\nabla(p_a^{n+1} - p_a^n) \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0$ . Это условие не является физически корректным: например, при наплывании потока на стенку, которая до этого находилась в контакте с атмосферой, градиент давления изменится.

Для задач, в которых важно корректно вычислять давление на стенке, например, для определения подъемной силы, использование однородных граничных условий может приводить к существенным ошибкам анализа. В рассматриваемых в диссертации задачах основной целью исследования является определение длины распространения потока, поэтому использование такого условия оправдано. Существуют способы задания корректного неоднородного условия для давления, [54], однако эти способы работают только в предположении постоянной вязкости. Поиск эффективной методики расчета несжимаемого течения в общем случае переменной вязкости остается перспективным направлением исследований.

### Дискретное уравнение Пуассона и давление на границе

Перепишем уравнение Пуассона (3.18) с учетом вида дискретного оператора (В.36). Для этого обозначим приращение давления  $p^{n+1} - p^n$  за  $\delta p$ :

$$\frac{2}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{\delta p_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} - \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} (\nabla \delta p_a + \nabla \delta p_s) \cdot \nabla \gamma_{as} = \frac{\rho}{\delta t} D_a^{\gamma, -} \{\mathbf{u}_b^*\}.$$

Следуя работе [104], предположим, что  $\nabla \delta p_a \approx \nabla \delta p_s$ , поскольку градиент давления не меняется существенно около границы. С учетом того, что  $\nabla \gamma_{as}$  совпадает по направлению с внутренней нормалью к границе  $\mathbf{n}$ , второе слагаемое в левой части уравнения принимает вид  $\frac{2}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \nabla \delta p_s \cdot \mathbf{n} |\nabla \gamma_{as}|$ . Таким образом, слагаемые, связанные с границей, включают в себя только нормальную составляющую гра-



диента приращения давления непосредственно на границе. Из условия (3.18) эти слагаемые равны нулю. Уравнение Пуассона с учетом этого выглядит следующим образом:

$$\frac{2}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{\delta p_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} = \frac{\rho}{\delta t} D_a^{\gamma, -} \{\mathbf{u}_b^*\}.$$

Кроме сегментов, границы дискретизируются еще и вершинами, в которых необходимо задать значение давления, совместное с граничным условием. В данной работе, как и в [104], используется следующее приближение первого порядка:

$$\delta p_v = \frac{1}{\alpha_v} \sum_{b \in F} V_b \delta p_b w_{vb}.$$

Здесь суммирование производится только по частицам жидкости. Это условие означает, что приращение давления в вершине равно усредненному приращению давления в жидкости в окрестности вершины. Множитель  $\alpha_v$  корректирует сумму для компенсации недостатка частиц вблизи стенки:

$$\alpha_v = \sum_{b \in F} V_b w_{vb}.$$

### Искусственное перемешивание частиц

После вычисления нового положения частиц из (3.20) координаты частиц немного сдвигаются таким образом, чтобы обеспечить равномерность распределения частиц по объему жидкости. Этот распространенный в ISPH прием позволяет минимизировать погрешность аппроксимации, связанную с анизотропией частиц (см. раздел 2.6). Самой простой мерой неравномерности распределения частиц является концентрация частиц на единицу плотности  $C$ :

$$C_a = \frac{1}{\gamma_a} \sum_{p \in P} V_p w_{ap}.$$

Регуляризация частиц производится согласно закону Фика по градиенту концентрации  $\nabla C_a$ , как предлагается в работе [55]:

$$\delta \mathbf{r}_a = -D \nabla C_a.$$

Здесь  $D$  — коэффициент диффузии. Градиент концентрации вычисляется по скорректированным около стенки операторам USAW-SPH, чтобы избежать проникновения частиц через непроницаемые границы:  $\nabla C_a = \mathbf{G}_a^Y \{C_b\}$ .

Около свободной поверхности такой метод вычисления сдвига  $\delta \mathbf{r}_a$  приводит к неустойчивости: поскольку градиент концентрации направлен приблизительно по нормали к свободной поверхности, частицы начинают «разбегаться» от поверхности. Чтобы этого избежать, для частиц на свободной поверхности и соседних с ними частиц из градиента вычитается нормальная составляющая, как предложено в работе [57]:

$$\delta \mathbf{r}_a = -D (\nabla C_a - (\mathbf{n}_a \cdot \nabla C_a) \mathbf{n}_a).$$

Важно, чтобы при этом нормаль вычислялась по скорректированным формулам (3.15), чтобы ее направление не совпадало с направлением самого градиента концентрации. Частица считается соседней с частицей на свободной поверхности, если на расстоянии  $h$  от нее находится хотя бы одна частица, лежащая на свободной поверхности.

Величина коэффициента диффузии  $D$  в работах [55] и [57] принималась равной  $0,5h^2$  из условия устойчивости численной схемы. Кроме того, на величину модуля вектора сдвига ставится условие, чтобы эта величина не превосходила  $0,2h$ , иначе в областях активного перемешивания частиц искусственное перемешивание частиц начинает доминировать над физическим перемещением частиц по линиям тока согласно уравнениям движения.

Для течений с низкими значениями числа Рейнольдса значение  $D = 0,5h^2$  оказывается слишком большим около свободной поверхности, на участках с высокой кривизной свободной поверхности сдвиг частиц приводит к образованию нефизичных «пальцев». Поэтому в данной работе для частиц на свободной поверхности берется величина  $D$ , пропорциональная модулю скорости самой частицы. Похожий способ предложен в [31]. Для частиц внутри жидкости такая величина коэффициента оказывается недостаточной, поэтому внутри жидкости значение  $D$  остается равным  $0,5h^2$ .

Обозначим множество частиц, лежащих на свободной поверхности, за  $\partial\Omega_{\text{free}}$ , а множество частиц, соседних со свободной поверхностью, за  $\partial\Omega_{\text{vicinity}}$ . В результате частицы после каждого шага по времени сдвигаются на вектор  $\delta \mathbf{r}_a$ , определяемый

следующим образом:

$$\delta \mathbf{r}_a = \begin{cases} -4|\mathbf{u}_a|\delta t h (\mathbf{G}_a^\gamma \{C_b\} - (\mathbf{n}_a \cdot \nabla C_a) \mathbf{n}_a), & a \in \partial\Omega_{\text{free}} \\ -0,5h^2 (\mathbf{G}_a^\gamma \{C_b\} - (\mathbf{n}_a \cdot \nabla C_a) \mathbf{n}_a), & a \in \partial\Omega_{\text{vicinity}} \\ -0,5h^2 \mathbf{G}_a^\gamma \{C_b\}, & a \notin \partial\Omega_{\text{free}} \text{ и } a \notin \partial\Omega_{\text{vicinity}} \end{cases}$$

Конечные координаты частиц на новом шаге по времени складываются из промежуточных координат  $\tilde{\mathbf{r}}_a^{n+1}$  и сдвига  $\delta \mathbf{r}_a$ :

$$\mathbf{r}_a^{n+1} = \tilde{\mathbf{r}}_a^{n+1} + \delta \mathbf{r}_a.$$

После сдвига частицы  $a$  на  $\delta \mathbf{r}_a$  те её параметры, значения которых потребуются на следующем шаге по времени, корректируются, чтобы компенсировать этот сдвиг:

$$\varphi_a^{n+1} = \tilde{\varphi}_a^{n+1} + \nabla \varphi_a^{n+1} \cdot \delta \mathbf{r}_a + o(\delta r_a^2).$$

Таким образом корректируются давление, скорость и температура жидкости.

### Уравнение энергии

Интегрирование уравнения энергии (3.12) производится после того, как вычислены новые координаты частиц с учетом перемешивания. Используется явная по времени схема, поскольку процесс теплопроводности значительно медленнее конвекции за счет движения жидкости:

$$\rho C_v \frac{T_a^{n+1} - T_a^n}{\delta t} = L_a^\gamma \{\kappa, T_b^n\}. \quad (3.21)$$

Частица, находящаяся на свободной поверхности, согласно граничному условию (3.14) за время  $\delta t$  излучает в атмосферу количество теплоты  $\delta Q_a$ , равное

$$\delta Q_a = \left[ -\sigma \varepsilon (T_a^4 - T_{\text{atm}}^4) - \lambda (T - T_{\text{atm}})^{\frac{4}{3}} \right] \delta S_a \delta t,$$

где  $\delta S_a$  — площадь поверхности частицы, находящаяся в контакте с атмосферой, считается, что  $\delta S_a \equiv \delta r$  в 2D. Это соответствует изменению температуры на величину  $\delta T_a$ :

$$\delta T_a = -\frac{\delta Q}{C_v m_a}.$$

Здесь  $m_a$  — масса частицы.

Запишем лапласиан температуры согласно (В.36):

$$L_a^\gamma\{\kappa, T_b^n\} = \frac{2\kappa}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{T_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} - \frac{2\kappa}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \nabla T_s \cdot \mathbf{n}_s |\nabla \gamma_{as}|. \quad (3.22)$$

Здесь, также как и для давления, предполагается, что градиент температуры не меняется существенно вблизи границ.

Поскольку  $\nabla T_s \cdot \mathbf{n}_s = 0$  на стенке, то в лапласиан температуры не войдут слагаемые, связанные с сегментами на непроницаемых стенках. При этом слагаемые, связанные с потоком тепла на открытых границах, остаются.

Для вершин на стенках задается совместное условие равенства температуры в точке на стенке средней температуре течения вокруг этой точки:

$$T_v = \frac{1}{\alpha_v} \sum_{b \in F} V_b T_b w_{vb}, \quad v \in V_{\text{wall}}.$$

На границе, через которую жидкость втекает в расчетную область, температура частицы равняется температуре втекающей лавы:

$$T_v = T_0, \quad v \in V_{i/o}.$$

На сегментах должен быть задан поток тепла, совместный с условиями на вершинах:

$$\nabla T \cdot \mathbf{n}_s \approx \frac{T_a - T_s}{\delta r_{as}}. \quad (3.23)$$

Здесь используется конечно-разностная аппроксимация градиента возле стенки.

С учетом (3.23) лапласиан температуры выглядит следующим образом:

$$L_a^\gamma\{\kappa, T_b^n\} = \frac{2\kappa}{\gamma_a} \sum_b V_b \frac{T_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} - \frac{2\kappa}{\gamma_a} \sum_{s \in S_{i/o}} \frac{T_a - T_s}{\delta r_{as}} |\nabla \gamma_{as}|.$$

### 3.3.4 Тестирование численного метода

Численный метод и реализующее его программное обеспечение были протестированы на ряде задач, демонстрирующих способность метода корректно воспроизводить исследуемые физические процессы.

Всего рассмотрено три тестовых сценария:

1. Покоящаяся жидкость. Проверяется, что поле давлений установится согласно гидростатическому распределению. В исследуемых потоках лавы распределение давления часто близко к гидростатическому;
2. Изотермическое растекание лавы по плоской поверхности. Для этого сценария существует асимптотическое решение, описывающие форму и длину распространения потока около фронта в зависимости от времени (см. §3.2.2). В диссертации проводится исследование влияния остывания потока на длину растекания — этот сценарий проверяет, что метод адекватно описывает течение без остывания;
3. Остывание неподвижной среды со свободной поверхностью. Для этого сценария проводится сравнение с результатами расчетов, сделанных классическими численными методами. Сценарий проверяет, что SPH корректно воспроизводит формирование температурного слоя около поверхности без учета динамики жидкости.

В первом тестовом сценарии рассматривается расчетная область  $1 \times 1.3$  м, заполненная до уровня 1 м жидкостью с плотностью  $\rho = 2650 \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$  и динамической вязкостью  $\mu = 100 \text{ Па}\cdot\text{с}$ . Рассматривается изотермический случай, т.е. температура жидкости считается постоянной. Со всех сторон область ограничена непроницаемыми неподвижными стенками, на которых выполняется условие прилипания. На Рис. 3.3а изображена конфигурация расчетной области и объема жидкости.

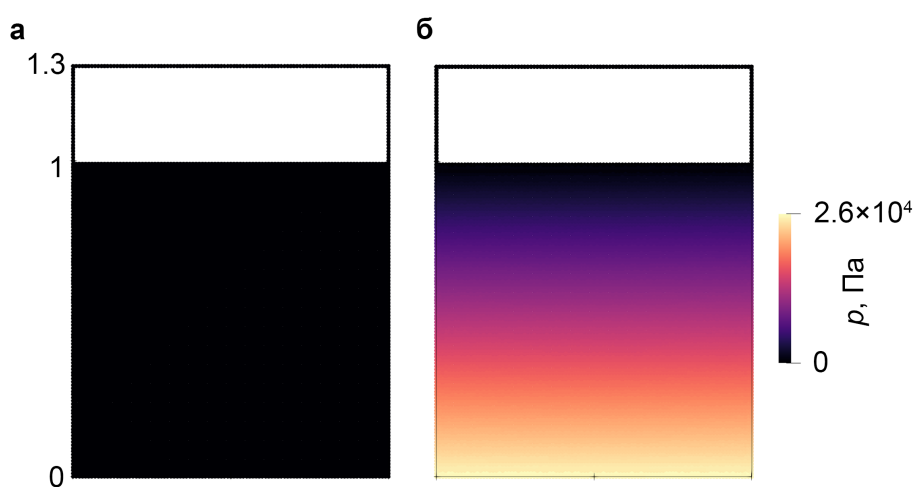


Рис. 3.3: а) Расчетная область в первом тестовом сценарии и начальное расположение объема жидкости; б) положение частиц после установления распределения давления, цветом показано давление в жидкости

В начальный момент времени  $t = 0$  давление в жидкости  $p$  считается равным нулю. Расстояние между частицами при  $t = 0$  составляет  $\delta r = 0,05$  м. Расчет проводился с шагом по времени  $\delta t = 0,001$  с до тех пор, пока распределение давления не перестало изменяться с точностью вплоть до машинной.

На Рис. 3.3б показано распределение давления в жидкости в момент времени  $t = 0,01$  с. Видно, что расположение частиц практически не изменилось, а давление зависит только от глубины, а не от расстояния до стенок. На Рис. 3.4а показано давление в зависимости от координаты  $y$  в сравнении с гидростатическим распределением. Из рисунка видно, что ожидаемое распределение давления воспроизводится с хорошей точностью.

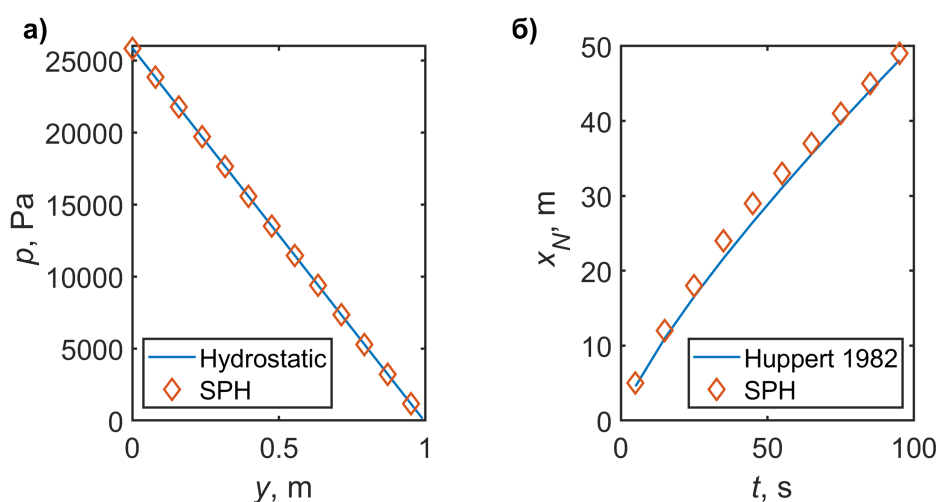


Рис. 3.4: а) распределение давления по глубине в первом тестовом сценарии в сравнении с гидростатическим и б) сравнение длины растекания потока для SPH и аналитического решения во втором тестовом сценарии

Во втором тестовом сценарии постановка практически эквивалентна постановке основной задачи, описанной в разделе 3.3.2: область состоит из горизонтальной подстилающей поверхности, плоской щели шириной  $H$ , находящейся слева от подстилающей поверхности, и вертикальной стенки слева от щели. В щели задан параболический профиль скорости таким, чтобы расход через щель был равен  $q$ . Из щели истекает жидкость с постоянной динамической вязкостью  $\mu = 2650$  Па·с. Наблюдается эволюция формы потока и длина распространения фронта в течение 100 с.

Расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $H = 2.5$  м,  $q = 1$  м<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>. На Рис. 3.5 изображена форма потока в момент времени  $t = 100$  с. Черный контур соответствует автомодельному решению из работы [80]. Несмотря на то, что автомодельное решение неверно в окрестности источника, так как решение

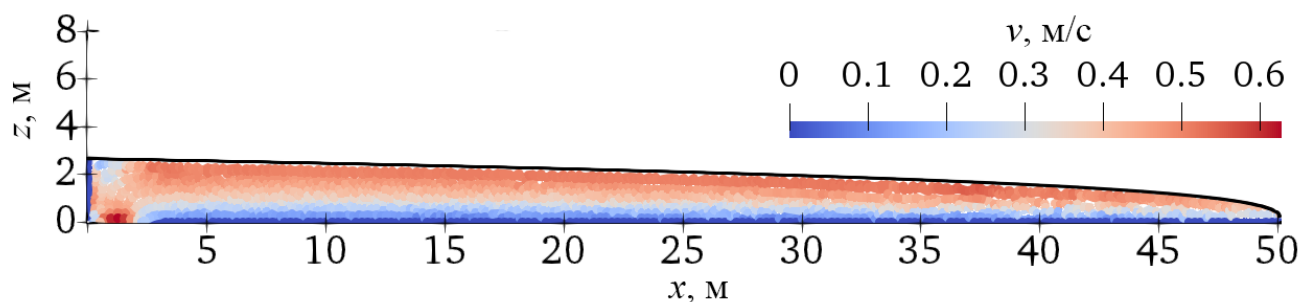


Рис. 3.5: Форма потока после 100 с растекания; черный контур обозначает асимптотическое решение из [80]; цветом показан модуль вектора скорости

строится в предположении, что жидкость поступает из точечного источника, а не щели конечной ширины, форма потока, рассчитанная методом SPH, хорошо соответствует автомодельному решению при условии, что длина потока много больше его толщины и размеров щели.

Сравнение длины распространения фронта для численного и аналитического решений построено на Рис. 3.4 б). Результаты расчетов в целом соответствуют точному решению, однако в начале растекания при  $t < 50$  с радиус растекания примерно на 5% выше аналитического значения. Это может быть связано с тем, что, во-первых, на начальных этапах растекания не выполняются предположения теории тонкого слоя, а во-вторых, наличие щели конечного размера может вносить существенный вклад в форму потока. Кроме того, в аналогичных расчетах, проведенных другими численными методами, также наблюдается подобное несоответствие [16]. На более поздних стадиях растекания отличие от автомодельного решения уменьшается до 1%. Рассмотренный сценарий позволяет сделать вывод, что выбранная методика расчета позволяет корректно рассчитывать динамику течения.

В третьем тестовом сценарии рассматривается квазиодномерная задача об остывании поверхности неподвижной среды. Высота столба — 2 м, а ширина выбирается таким образом, чтобы минимизировать влияние стенок на распределение температуры в центре столба — эта ширина пропорциональна длине сглаживания  $h$ . На Рис. 3.6 изображена конфигурация частиц, дискретизирующих среду.

Область ограничена снизу, слева и справа теплоизолированными стенками, а сверху среда находится в контакте с атмосферой. Теплофизические параметры среды соответствуют параметрам, характерным для базальтовой лавы: плотность  $\rho = 2650 \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$ ; коэффициент теплопроводности  $\kappa = 2,0 \text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$ ; удельная теп-

лостность  $C_v = 1250 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ . На свободной поверхности задан поток тепла в атмосферу в соответствии с уравнением (3.14). Температура окружающей среды  $T_{\text{atm}} = 300 \text{ К}$ ; температура среды в начальный момент времени  $T_0 = 1123 \text{ К}$ ; коэффициент теплоотдачи  $\lambda = 5,0 \text{ Вт м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$

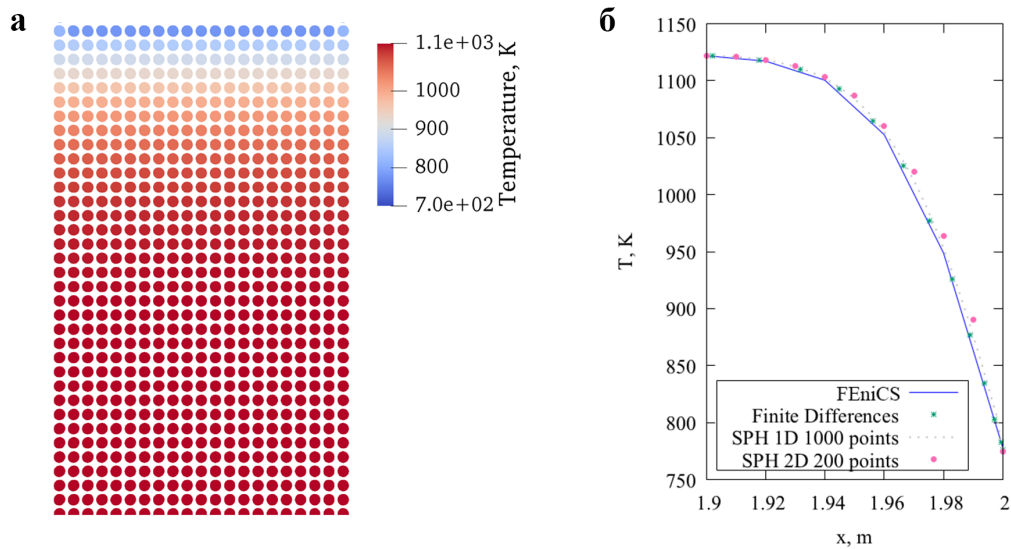


Рис. 3.6: а) Температура в столбе в момент времени  $t = 1000 \text{ с}$ ; б) Распределение температуры в столбе рядом со свободной поверхностью: сравнение различных численных методов

Поскольку у задачи в такой постановке не существует точного решения, для тестирования аналогичный расчет проводится с использованием традиционных сеточных методов. Рассматриваются следующие методы: одномерный метод конечных разностей, программа написана автором; двумерный метод конечных элементов, использован пакет программ FEniCS. Дополнительно реализован одномерный метод SPH для проверки вклада наличия стенок в погрешность вычислений. Сравнение температуры около поверхности, где формируется тонкий слой холодного материала, приведено на Рис. 3.6. Сравнение проводится в момент времени  $t = 1000 \text{ с}$ . Профили температуры, рассчитанные различными численными методами, хорошо согласуются друг с другом.

### 3.3.5 Растекание остывающего потока лавы по горизонтальной и наклонной поверхности

Рассматривается задача о растекании потока лавы с заданным расходом  $q$  по подстилающей поверхности, наклоненной под углом  $\theta$  к оси  $x$ . Лава вытекает из щели шириной  $H$ , расположенной в начале координат. Растекание длится до



момента времени  $t = t_{\text{end}}$ , которое соответствует моменту, при котором общий объем истекшей лавы равен  $Q_{\text{end}} = 120 \text{ м}^2$  на единицу длины щели. Параметры лавы: плотность  $\rho = 2650 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$ ; коэффициент теплопроводности  $\kappa = 2,0 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ ; удельная теплоемкость  $C_v = 1250 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ . Температура окружающей среды  $T_{\text{atm}} = 300 \text{ К}$ ; температура лавы в начальный момент времени  $T_0 = 1250 \text{ К}$ ; коэффициент теплоотдачи  $\lambda = 5,0 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$ .

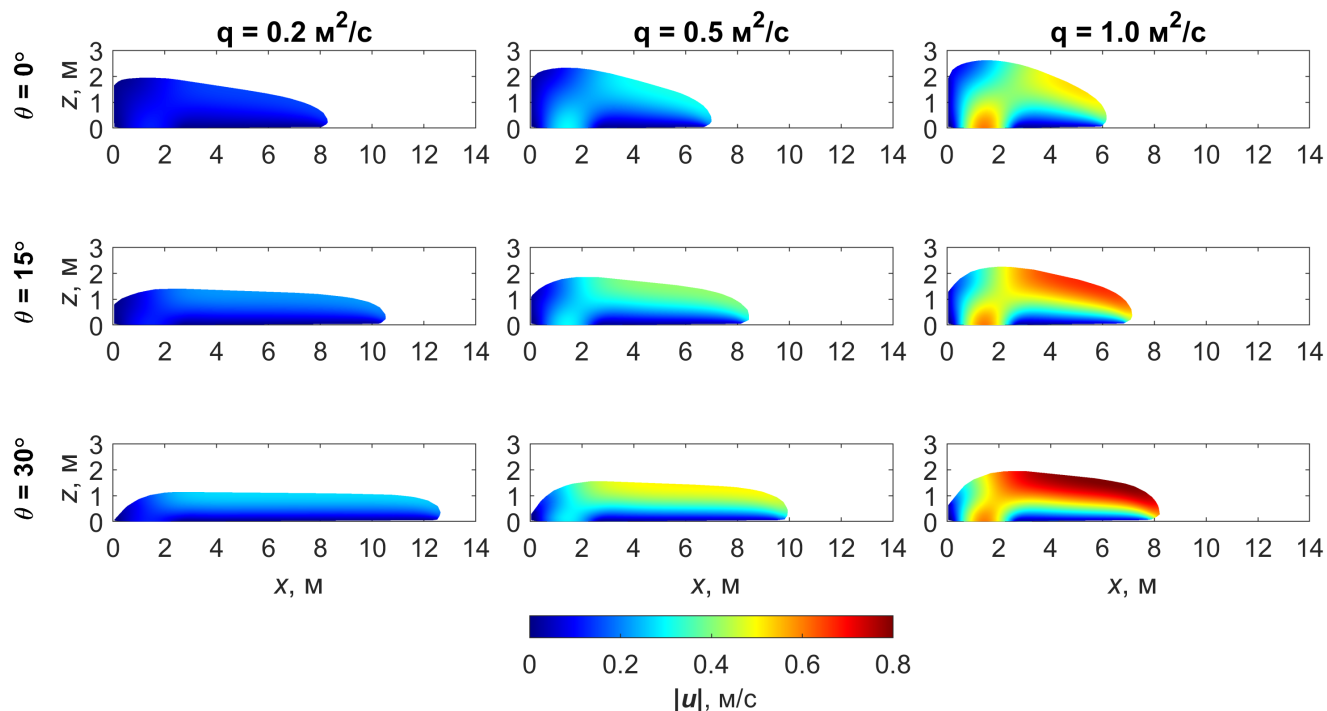


Рис. 3.7: Форма потока для различных значений расхода  $q$  и угла наклона подстилающей поверхности  $\theta$  в момент времени  $t$ , соответствующий полному объему истекшей лавы в  $12 \text{ м}^2$  на единицу длины канала; цветом обозначена величина модуля скорости жидкости

Для анализа влияния остывания лавы на динамику течения проводится параметрическое исследование для различных комбинаций расхода  $q$  и угла наклона подстилающей поверхности  $\theta$ . Расчеты проводились для  $q = 0,2, 0,5$  и  $1 \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ ; для  $\theta = 0, \pi/12$  и  $\pi/6$ . На Рис. 3.7 изображена форма лавового потока, рассчитанная методом SPH, на начальных временах растекания, когда общий объем истекшей лавы равен  $12 \text{ м}^2$  на единицу длины щели.

На более поздних временах температура поверхности потока опускается настолько, что вязкость возрастает на несколько порядков по сравнению с вязкостью втекающей лавы. Распространяясь, поток накатывается на остывший лавовый фронт, увлекая высоковязкую лаву на дно течения. Участок потока, на котором можно наблюдать остывшие блоки лавы, показан на Рис. 3.8. На таких участках

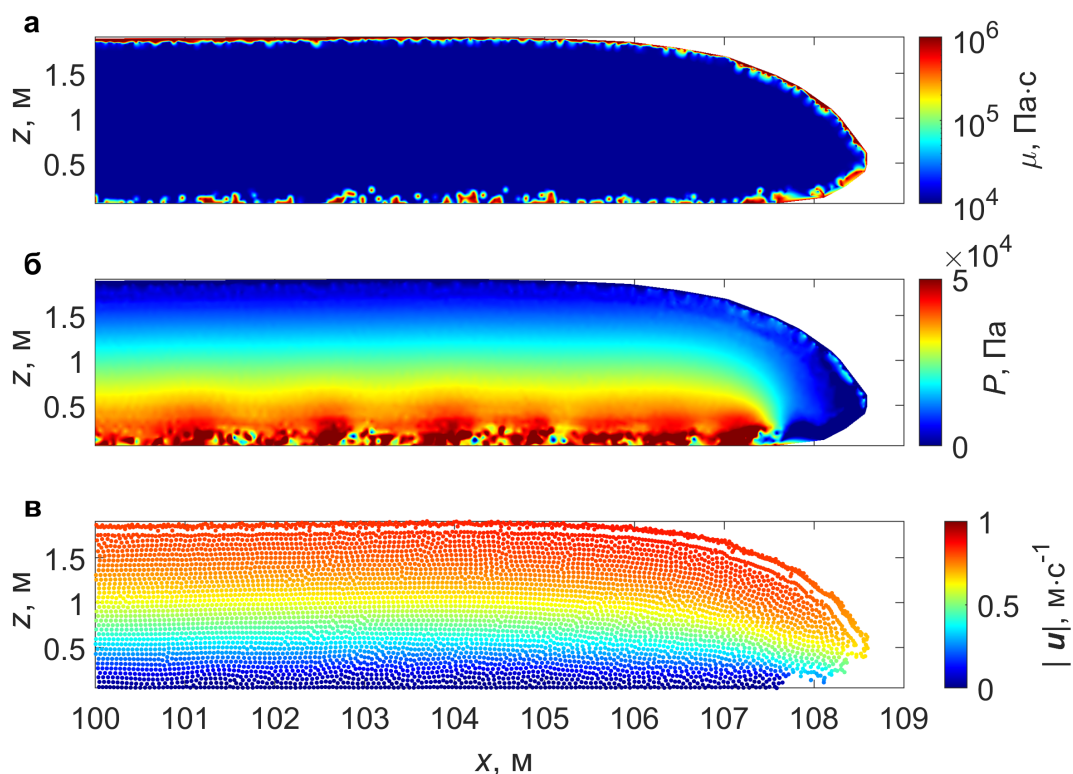


Рис. 3.8: Участок лавового потока, рассчитанного методом SPH, в окрестности фронта крупным планом: а) логарифм вязкости; б) давление; в) модуль скорости и положение частиц

давление существенно отличается от гидростатического, так как поток вынужден огибать слой высоковязкой лавы.

Оценка влияния остывания поверхности на динамику распространения лавового потока проводилась путем сравнения положения фронта потока в различные моменты времени и формы свободной поверхности потока в момент времени  $t = t_{\text{end}}$ , рассчитанных методом гидродинамики сглаженных частиц с учетом остывания лавы и зависимости вязкости от температуры, с автомодельными решениями для изотермического растекания, полученными в рамках теории тонкого слоя, описанной в разделе 3.2.2. Для случая горизонтальной поверхности течение описывается уравнениями (3.6–3.8), а для наклонной поверхности — уравнениями (3.9).

На Рис. 3.9 представлены результаты сравнения положения фронта потока для различных значений угла  $\theta$  и расхода  $q$ . Координата фронта из автомодельного решения обозначена как  $x_N$ , а координата фронта из численного расчета методом SPH как  $x_N^{\text{sph}}$ . По оси абсцисс отложено время, нормированное по моменту времени  $t_{\text{end}}$ , соответствующему концу расчета. По оси ординат отложено относительное отклонение величины  $x_N^{\text{sph}}$  от  $x_N$  в процентах.

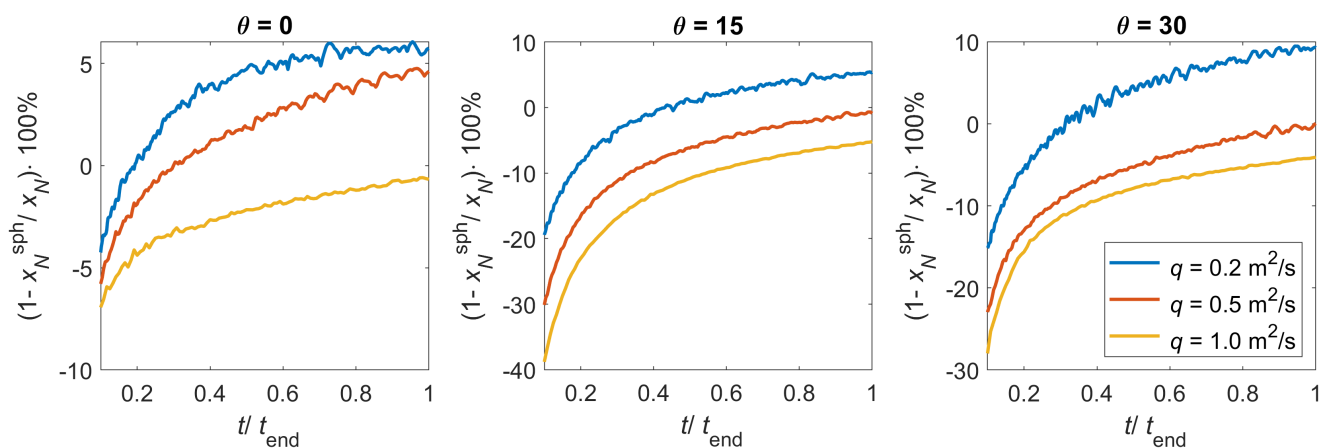


Рис. 3.9: Сравнение положения фронта лавового потока, рассчитанного методом SPH, и автомодельного решения в рамках теории тонкого слоя, для различных значений угла наклона подстилающей поверхности  $\theta$  и расхода втекающей лавы  $q$

На начальных этапах растекания поток, рассчитанный методом SPH, значительно опережает автомодельное решение, поскольку в начале расчета длина потока сопоставима с его толщиной, что противоречит предположениям теории тонкого слоя. Аналогичное несоответствие наблюдается и в тестовом изотермическом расчете, показанном на Рис. 3.4б. Для наклонной поверхности, то есть при значениях  $\theta$ , равным  $15^\circ$  и  $30^\circ$ , несовпадение более существенно и достигает 40%, поскольку асимптотическое решение из работы [62] получено в пределе больших времен растекания.

На более поздних временах численное решение начинает приближаться к автомодельному. Однако для более низких значений расхода  $q = 0,2 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $q = 0,5 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  течение с учетом остывания замедляется по сравнению с изотермическим случаем. Для самого низкого значения  $q = 0,2 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  поток замедляется на 5% по сравнению с асимптотическими решениями для углов наклона  $\theta = 0^\circ$  и  $\theta = 15^\circ$ , и до 10% для  $\theta = 30^\circ$  к концу расчета. Для значения  $q = 0,5 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  наблюдается похожая динамика развития течения, однако влияние остывания уменьшается. Наконец, для  $q = 1 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  частицы, лежащие на поверхности, быстро уносятся к фронту и увлекаются внутрь потока, при этом не успевая остыть достаточно, чтобы влияние остывания на течение стало существенным.

На Рис. 3.9 наблюдаются осцилляции на линиях графиков, соответствующих значениям расхода  $q = 0,2 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $q = 0,5 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$ . Это связано с тем, что по мере остывания потока вязкий слой остывшей лавы около фронта начинает двигаться медленнее, тем горячее ядро потока. Когда около фронта накапливается достаточно большое количества вязкой жидкости, она начинает блокировать течение,

и поток временно замедляется, но затем набегающее течение горячей лавы перекатывается через остывший блок. Пример таких блоков изображен на Рис. 3.8. При более высоких значениях расхода такие блоки не успевают формироваться, поэтому для  $q = 1 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  осцилляции на графике практически не наблюдаются.

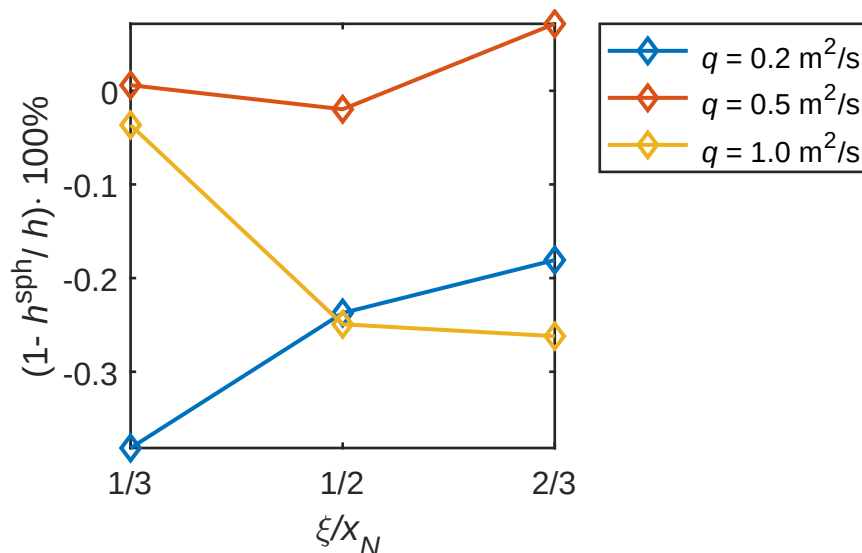


Рис. 3.10: Сравнение толщины потока  $h$  на различном удалении от фронта потока в момент времени  $t = t_{\text{end}}$

На Рис. 3.10 изображено сравнение толщины потока  $h(x, t)$  на различном расстоянии от фронта для случая горизонтальной подстилающей поверхности при разных значениях расхода  $q$  в момент времени  $t_{\text{end}}$ , соответствующий концу расчета. Координата, значение которой равно 0 на фронте и растет в направлении внутрь потока, обозначена за  $\xi$ . Толщина потока, рассчитанного методом SPH, обозначена как  $h^{\text{sph}}$ , а толщина потока из автомодельного решения обозначена за  $h$ . Из рисунка видно, что форма потока в неизотермическом случае слабо отличается от автомодельного решения, несмотря на разницу в длине распространения. В случае наклонной подстилающей поверхности автомодельное решение предсказывает постоянную толщину потока вдоль склона согласно формуле (3.9). Численное решение совпадает с автомодельным для всех значений расхода и угла наклона с точностью до 1%, как и в случае  $\theta = 0$ .

Результаты расчетов позволяют сделать вывод, что для высоких значений расхода втекающей лавы динамика распространения лавового потока хорошо описывается теорией тонкого слоя, а влияние остывания поверхности на форму и длину распространения потока несущественно. Однако существуют такие комбинации параметров, при которых зависимость вязкости лавы от температуры вносит существенный вклад в гидродинамику, и в таких случаях метод гидродинамики

сглаженных частиц может быть применен для более корректного моделирования процесса.

### Течение лавового потока с переменным расходом

В процессе вулканических извержений, сопровождающихся формированием лавовых потоков, обычно высокий расход поддерживается в течение первых нескольких дней [61]. За это время на поверхность поступает большая часть расплавленного материала. Затем расход магмы резко уменьшается.

В рамках существующих автомодельных решений невозможно оценить длину растекания лавового потока после окончания извержения. Для демонстрации возможности моделирования более сложных течений методом SPH в этом разделе приводится пример расчета неизотермического лавового потока с остановкой притока лавы.

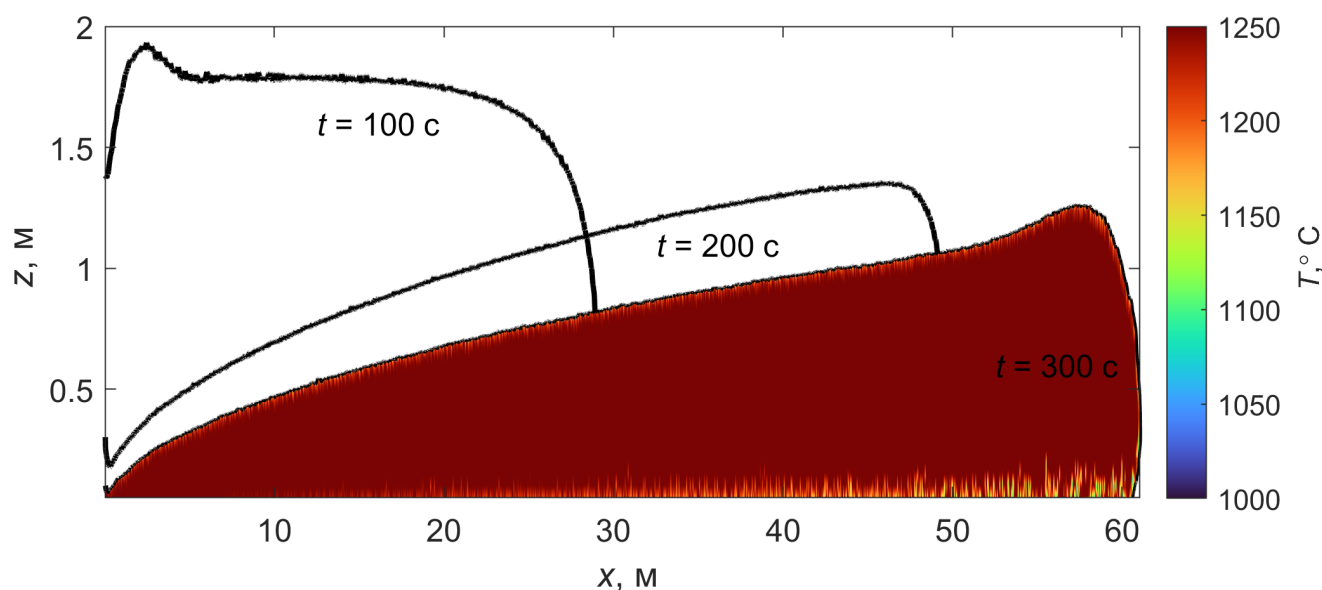


Рис. 3.11: Профили поверхности потока в различные моменты времени. Цветом показаны значения температуры

Постановка задачи в первые 100 с расчета соответствует случаю  $q = 0,5 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $\theta = 15^\circ$ . В момент времени  $t = 100 \text{ с}$  значение расхода лавы становится равным нулю. На Рис. 3.11 представлены результаты расчета. К моменту времени  $t = 300 \text{ с}$  поток существенно замедляется в результате растекания. При этом остывание поверхности ведет к дополнительному торможению фронта. Менее вязкая горячая жидкость из центра потока набегаёт быстрее, чем продвигается остывший фронт, что проявляется в виде утолщения потока в окрестности фронта, наблюдаемого на Рис. 3.11.

Таким образом, использование бессеточных методов в неосредненной по глубине постановке позволяет моделировать нелинейные эффекты, вызванные зависимостью вязкости жидкости от температуры.

### **3.4 Оценка толщины температурного слоя у поверхности остывающего лавового потока**

В данном разделе рассматривается задача об охлаждении потока лавы, моделируемой вязкой несжимаемой жидкостью, растекающейся по плоской поверхности. Для моделирования поля скоростей и положения свободной поверхности используется известное аналитическое решение в приближении тонкого слоя. Получены оценки для толщины температурного слоя у поверхности потока, исследована эволюция температурных полей в лаве.

#### **3.4.1 Постановка задачи**

Для определения формы свободной поверхности и поля скоростей в потоке используется известное аналитическое решение о растекании жидкости по горизонтальной плоскости в асимптотическом приближении, описанном в [80] (также см. §3.2.2). Затем внутри области, ограниченной свободной поверхностью, решается тепловая задача об охлаждении потока с учетом конвективного и радиационного теплообмена с атмосферой.

Гидродинамика течения описывается уравнениями Стокса и неразрывности в приближении тонкого слоя: производные в горизонтальном направлении пренебрежимо малы в сравнении с производными по вертикали, так как длина потока значительно превосходит его толщину. Задача рассматривается в плоской постановке. Поверхность раздела лава–воздух задана линией  $z = h(x, t)$ . В случае постоянного расхода магмы, истекающей из линейного источника в [80] получено автомодельное решение, описываемое уравнением (3.6). Значения функции  $\varphi(y)$  находятся численным интегрированием обыкновенного дифференциального уравнения (3.7). Выражение для горизонтальной компоненты скорости  $u_x$  получается путем подстановки выражения для давления (3.2) при  $\theta = 0$  в (3.3):

$$u_x = -\frac{1}{2} \frac{\rho g}{\mu} \frac{\partial h}{\partial x} z(2h - z).$$

Промежуточное значение вертикальной составляющей скорости  $\tilde{u}_z$  рассчитывается из уравнения неразрывности:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}_z}{\partial z} = 0. \quad (3.24)$$

В окрестности фронта потока нарушается предположение незначительности производных в горизонтальном направлении по сравнению с вертикальным, поэтому использование для расчета адвекции поля температуры значений скорости  $u_z$ , полученных из уравнения неразрывности (3.24), приводит к некорректным результатам. В частности, нарушается кинематическое граничное условие равенства скорости на поверхности скорости движения самой поверхности. Поэтому в расчетах в качестве вертикальной составляющей скорости  $u_z$  используется линейная комбинация из скорости на поверхности  $u_s$ , рассчитанной как полная производная функции  $h(x, t)$  и скорости  $\tilde{u}_z$ , полученной из уравнения неразрывности (3.24):

$$u_z = \tilde{u}_z \left(1 - \frac{z}{h}\right) + u_s \frac{z}{h}.$$

Так как приведенная коррекция влияет на распределение скорости только в небольшой окрестности фронта потока, она вносит малый вклад в изменение температуры в потоке.

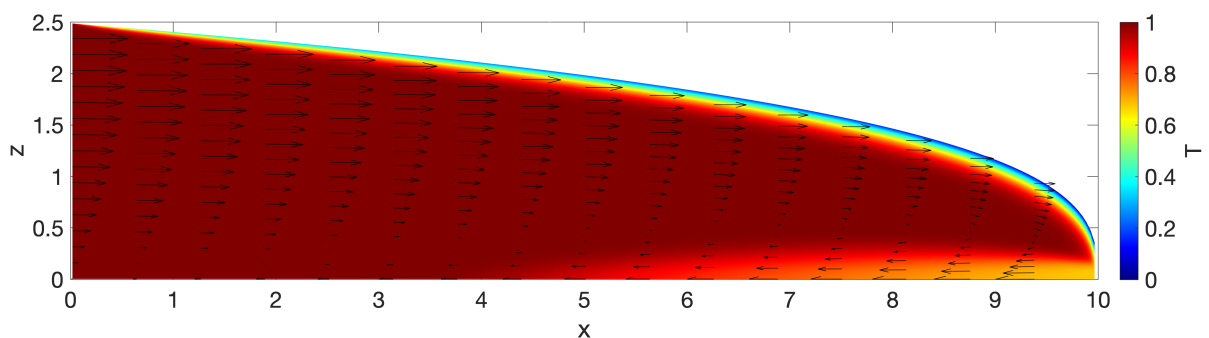


Рис. 3.12: Конфигурация расчетной области в задаче об охлаждении лавового потока. Цветом показан пример численного расчета поля температур в растекающемся лавовом потоке.

Внутри области, ограниченной поверхностью  $h(x, t)$ , ставится задача об охлаждении потока (см. Рис. 3.12):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (3.25)$$

где  $T$  — температура;  $\chi = \kappa / (\rho C_v)$  — коэффициент температуропроводности. В приближении тонкого слоя вторая производная от температуры в горизонтальном направлении отброшена, так как она мала по сравнению со второй производной по вертикали и адвективным членом. Вязкой диссипацией вблизи свободной поверхности можно пренебречь в связи с нулевыми градиентами скоростей, а в основной части потока из-за малости вязкости по сравнению с вязкостью около поверхности.

На левой границе  $x = 0$  ставится условие равенства температуры температуре втекающей лавы:  $T|_{x=0} = T_0$ . Отток тепла к подстилающей поверхности незначителен по сравнению с оттоком с поверхности лавы, поэтому на подстилающей поверхности, то есть при  $z = 0$  задается условие теплоизолированности:  $\partial T / \partial z|_{z=0} = 0$ .

На свободной поверхности потока, при  $z = h(x, t)$  задается условие остывания (3.14), используемое в разделе 3.3.2.

Для удобства численного решения область отображается на квадрат  $[0; 1] \times [0; 1]$  с помощью преобразования координат

$$\xi = \frac{x}{x_N(t)}, \quad \theta = \frac{z}{h(x, t)}.$$

Поскольку на переднем фронте потока его толщина равна нулю, отображение производится только при  $0 < x < 0,999x_N$ . В новых координатах уравнение (3.25) переписывается следующим образом:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{u_x - \xi x'_N}{x_N} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{u_z - \theta \left( u_x \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial t} \right)}{h} \frac{\partial T}{\partial \theta} = \frac{\chi}{h^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2}.$$

Здесь  $x'_N = dx_N / dt$ .

### 3.4.2 Обезразмеривание уравнений

Уравнения приводятся к безразмерному виду путем масштабирования переменных:

$$\begin{aligned} z = Hz', \quad x = Lx', \quad H = \sqrt[3]{3 \frac{\mu}{\rho g} \frac{q^2}{\chi}}, \quad L = H \frac{q}{\chi} \\ t = At', \quad A = H^2 / \chi \end{aligned} \quad (3.26)$$



$$T = ST' + T_a, \quad S = T_0 - T_a$$

Здесь  $H$  и  $L$  — характерные толщина и длина потока;  $A$  — масштаб времени;  $S$  — масштаб температуры, равный разности температуры втекающей лавы  $T_0$  и температуры атмосферы  $T_a$ . В дальнейшем предполагается анализ безразмерных уравнений, поэтому ниже в тексте апострофы в обозначении переменных опущены.

Введем безразмерный параметр  $\varepsilon$ , равный отношению толщины потока к его длине:

$$\varepsilon = \frac{H}{L}, \quad (3.27)$$

а также параметр  $w = T_a/S$ , равный отношению температуры атмосферы к перепаду температур между втекающей лавой и атмосферой. Путем подстановки значений  $H$  и  $L$  из (3.26) в выражение для  $\varepsilon$  (3.27) получаем, что  $\varepsilon = \chi/q$ . Таким образом, параметр  $\varepsilon$  также эквивалентен числу Пекле в том смысле, что  $\varepsilon$  характеризует отношение потоков тепла за счет теплопроводности и адвективного переноса. В безразмерных переменных уравнение энергии (3.25) и граничное условие на температуру на свободной поверхности (3.14) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} &= \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \\ \frac{\partial T}{\partial z} &= Rf(T) + NuT^{4/3}, \\ f(T) &= T^4 + 4T^3w + 6T^2w^2 + 4Tw^3, \end{aligned}$$

где  $R = H\varepsilon\sigma S^3/\kappa$  — радиационное число, характеризующее отношение радиационного потока тепла к теплопроводности;  $Nu = \lambda HS^{1/3}/\kappa$  — число Нуссельта. Таким образом, динамика процесса определяется четырьмя безразмерными числами  $\varepsilon$ ,  $w$ ,  $R$  и  $Nu$ . В данной работе исследуется зависимость толщины температурного слоя остывшей лавы у поверхности потока от этих параметров.

### 3.4.3 Результаты

Задача решается с помощью метода контрольного объема с использованием неявной схемы для интегрирования по времени [82]. Так как градиент температуры велик только вблизи поверхности, выбирается вычислительная сетка,

сгущающаяся к поверхности, а также к левой и правой границам:

$$x_i = \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos \left( \pi \frac{i}{N_x} \right) \right], \quad i = 0, \dots, N_x$$

$$z_j = \cos \left( \frac{\pi}{2} \left( 1 - \frac{j}{N_z} \right) \right), \quad j = 0, \dots, N_z$$

где  $x_i, z_j$  — координаты узлов сетки в системе координат, в которой расчетная область отображена на квадрат  $[0; 1] \times [0; 1]$ ;  $N_x$  и  $N_z$  — число узлов сетки в горизонтальном и вертикальном направлениях, соответственно.

На каждом шаге по времени граничное условие (3.14) линеаризуется, и организуется итерационный процесс для приращений температуры. На первом полушаге по времени в вертикальном направлении после дискретизации получается система уравнений с трехдиагональной матрицей, которая решается методом прогонки. На втором полушаге решается уравнение переноса по горизонтальной координате. Путем измельчения сетки проверяется независимость решения от разрешения сетки. Схема обладает первым порядком точности по времени и пространственным координатам.

На Рис. 3.12 представлен пример численного расчета: цветом обозначено распределение поля температуры в лавовом потоке после его растекания до значения  $x_N = 10$ . За счет оттока тепла на поверхности потока происходит нарастание температурного слоя, в котором температура резко меняется от значений, близких к атмосферным, до температуры втекающей лавы.

Температура поверхности лавы существенно ниже температуры солидуса (полного затвердевания), поэтому предположение о постоянной вязкости в пределах лавового потока неприменимо в области температурного слоя у поверхности. На реальных потоках образуется затвердевшая корка, которая существенно уменьшает теплоотдачу и, в зависимости от условий на поверхности потока, может свободно транспортироваться жидкой лавой или образовывать твердую неподвижную стенку. В последнем случае образуются лавовые трубы, способствующие распространению лавовых потоков на большие расстояния [90].

Оценим приблизительную толщину пограничного слоя. Для этого воспользуемся зависимостью вязкости лавы от температуры (3.13), представленной в разделе 3.3.2. Координата границы температурного слоя определяется значением

температуры, при которой вязкость, рассчитанная по формуле (3.13) на порядок превосходит вязкость лавы при безразмерной температуре  $T = 1$ , в размерных переменных соответствующей температуре втекающей лавы. Перевод в размерные величины осуществляется путем выбора величин вязкости  $\mu$ , расхода  $q$  и перепада температуры  $S$ , характерных для лавовых потоков.

Вязкость лавы может меняться в зависимости от температуры и химического состава лавы на несколько порядков, например, согласно формуле (3.13) вязкость варьируется в диапазоне от  $10^0$  до  $10^{11}$  Па·с. При этом величина расхода втекающей лавы не является независимой от вязкости величиной: для более вязкой лавы характерны меньшие значения расхода, а для менее вязкой более высокие значения. В данной работе предполагается постоянной величина  $\Psi$ , равная произведению вязкости жидкости на расход:  $\Psi = q\mu$ . Во всех представленных расчетах  $\Psi$  полагается равным  $10^5$  Па·м<sup>2</sup>, что соответствует порядку величин расхода и вязкости некоторых реальных лавовых потоков [59; 84].

В диссертации рассматриваются значения безразмерных параметров, характерные для течений лавы. Так, радиационное число  $R$  может меняться в очень узком диапазоне значений, поскольку физические параметры, входящие в его определение, приблизительно постоянны для лавы различного состава. Поэтому во всех расчетах значение  $R$  принимается равным 200, что соответствует величине коэффициента теплопроводности  $\kappa = 2$  Вт·м<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>, перепаду температур между втекающей лавой и атмосферой  $S = 1000$  К, характерной толщине потока  $H = 10$  м, и излучательной способности лавы  $\varepsilon = 0,7$ .

Параметр  $w$ , как и  $R$ , меняется в узком диапазоне значений: температура лавы в источнике меняется от  $\sim 1300$  К до  $\sim 1500$  К в зависимости от состава и условий извержения [11; 84]. Во всех расчетах значение  $w$  принимается равным 0,3.

Число Нуссельта  $Nu$  в зависимости от коэффициента теплоотдачи  $\lambda$  может меняться в диапазоне от 50 до 4000 [77]. При этом расчеты показали, что конкретное значение  $Nu$  слабо влияет на распределение поля температуры со временем, то есть вклад конвективного теплообмена с атмосферой мал по сравнению с теплообменом за счет излучения. Поэтому влияние числа Нуссельта на толщину температурного слоя не отражено в результатах.

На Рис. 3.13 представлена зависимость относительной толщины температурного слоя от времени в середине потока для различных значений параметра  $\varepsilon$ . Расчеты проводились в диапазоне времени  $t \in [t_0; t_{\text{end}}]$ , где  $t_0 = 100$ , а  $t_{\text{end}}$  соответствует

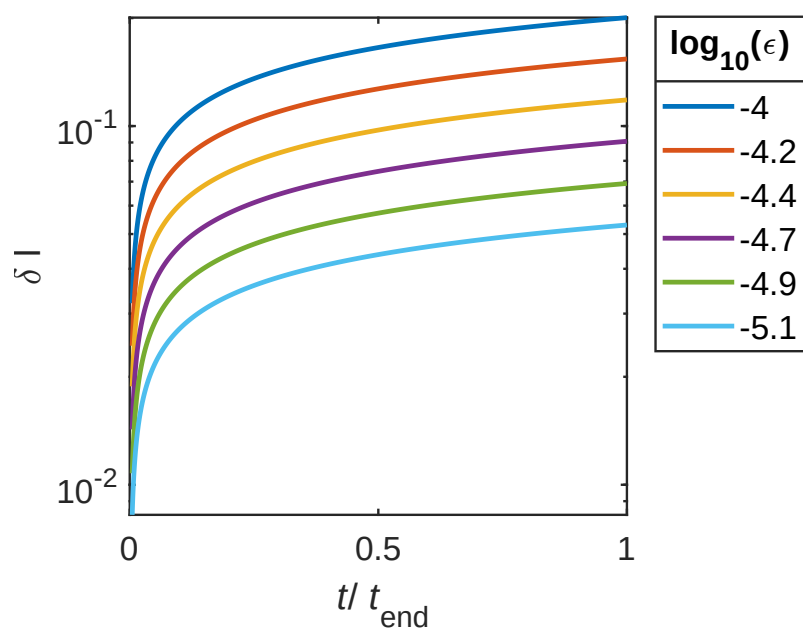


Рис. 3.13: Относительная толщина температурного слоя у поверхности лавы в зависимости от числа  $\epsilon$

моменту, когда общий объем истекшей лавы равен  $q_{\text{end}} = 5 \times 10^3$  (все значения безразмерные). Из результатов видно, что на начальных этапах растекания толщина температурного слоя резко растет, затем скорость роста уменьшается, что соответствует падению потока тепла при остывании поверхности до практически атмосферных значений. Для низких значений числа  $\epsilon < 10^{-5}$  температурный слой практически не формируется, поскольку адвективный перенос тепла полностью доминирует над теплопроводностью, и остывшая лава быстро уносится течением к фронту потока. Для значений числа  $\epsilon$  порядка  $10^{-5}$  формируется температурный слой, толщина которого достигает 1%–5% от толщины потока. Наличие слоя остывшей лавы при этом не будет существенно влиять на динамику течения, как показано в разделе 3.3, в котором значения чисел  $Pe$  и  $q$  соответствует описываемому случаю. Для числа  $\epsilon$  порядка  $10^{-4}$  толщина температурного слоя достигает 10–20% от толщины потока. При этом вязкость лавы в слое будет на несколько порядков превосходить вязкость втекающей лавы, что будет оказывать существенное влияние на течение. Таким образом, при значениях числа  $\epsilon$ , значительно превышающих  $10^{-4}$ , использование решения, полученного для изотермического течения, становится нецелесообразным и необходимо привлечение более сложных моделей, для адекватного описания процесса. Пример такой модели предложен в диссертации в разделе 3.3.

### 3.5 Заключение

Построена численная модель на основе метода гидродинамики сглаженных частиц, позволяющая рассчитывать неизотермические течения жидкости с вязкостью, зависящей от температуры. Метод протестирован на ряде задач с известным решением. Проведено численное исследование растекания остывающего потока лавы по горизонтальной и наклонной поверхности. Показано, что при высоких значениях расхода втекающей лавы влияние остывания поверхности потока на длину распространения потока и его форму несущественно.

В рамках упрощенной модели остывающего лавового потока, в которой гидромеханика описывается автомодельным решением в рамках теории тонкого слоя, а распределение поля температуры в потоке определяется из решения неосредненного закона сохранения энергии, проведено исследование зависимости толщины слоя остывшей лавы у поверхности потока от безразмерных параметров задачи. Показано, что величина числа  $\epsilon$ , равного отношению толщины потока к его длине распространения, также характеризует отношение потока тепла за счет теплопроводности к адвективному переносу тепла, то есть имеет смысл числа Пекле. Показано, что при значениях числа  $\epsilon$  порядка  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  толщина этого слоя может достигать 1–20% от толщины потока.

## Заключение

В диссертации методами механики сплошных сред исследованы различные процессы динамики вулкано-магматических систем.

Создана новая модель периодической дегазации вулкана, канал которого заперт подвижной лавовой пробкой. Показано, что наличие под пробкой полости, заполняемой газом из нижележащей магмы, может объяснить как периодичность извержений, так и наблюдаемые потоки газа в атмосферу. Проведен анализ чувствительности решения к значениям входных параметров.

Исследована динамика формирования медных месторождений при дегазации магматических очагов. С применением модели многокомпонентной многофазной неизотермической фильтрации изучен транспорт, химические реакции и отложение минералов в системе вода-соль-сернистый газ-медь-кварц. Новая модель использует реальные диаграммы растворимости минералов, в том числе меди и кварца, и позволяет оценить размеры, форму и расположение медного месторождения. Показано, что размер медного месторождения существенно зависит от количества сернистых газов в магматическом флюиде. Учет осаждения кварца приводит периодическим режимам дегазации магмы, в которых закупоривание пор осажденным кварцем чередуется с гидроразрывом пород из-за повышенного давления под пробкой.

Разработана новая модель распространения лавового потока, основанная на решении сопряженного уравнения Навье-Стокса и закона сохранения энергии, учитывающая зависимость вязкости от температуры и теплообмен лавы с атмосферой. Создан программный код, реализующий эту модель с использованием бессеточного метода гидродинамики сглаженных частиц. Показано, что при относительно больших расходах магмы охлаждение потока слабо влияет на скорость его распространения и толщину. В рамках автомодельного решения о растекании вязкой жидкости по плоской подстилающей поверхности в приближении тонкого слоя оценена толщина пограничного слоя у поверхности потока.

# Приложение А

## Геохимия порфировых месторождений

Порфировые месторождения возникают в результате сульфидной минерализации — взаимодействия растворенных в водном растворе соли комплексных соединений меди и железа с серосодержащими газами [48]. Таким образом, для образования руд необходимо наличие в растворе достаточного количества этих компонент.

Металлы, такие как медь и железо, способны образовывать в растворе устойчивые соединения с хлорид ионом  $\text{Cl}^-$ , источником которого может являться каменная соль [58]. Благодаря этому становится возможен транспорт металлов с помощью магматического флюида.

Процессы, происходящие в геотермальных системах, характеризуются наличием большого количества одновременно протекающих химических реакций в широком диапазоне давлений и температур. Необходимо учитывать как взаимодействие растворенных в жидкости примесей, так и реакцию с вмещающими породами. Ниже приводится краткое описание основных реакций, приводящих к минерализации меди.

### 1.1 Растворимость халькопирита

Самым распространенным содержащим медь минералом в порфировых месторождениях является халькопирит (химическая формула —  $\text{CuFeS}_2$ ) [96]. Халькопирит образуется в результате реакции растворенных в жидкости меди, железа и серы при определенных температуре, давлении и концентрации соли.

В водном растворе медь существует в виде ионных комплексов, одним из самых устойчивых является хлорид меди (II)  $\text{CuCl}_2^-$ . При наличии в жидкости достаточного количества серы в виде сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$  и диоксида серы  $\text{SO}_2$ , а также хлорида железа (II)  $\text{FeCl}_2$  образуется халькопирит ( $\text{CuFeS}_2$ ):



Способность вещества образовывать раствор, в котором это вещество существует в виде отдельных ионов, называется растворимостью. Если концентрация вещества превышает его растворимость при данных температуре и давлении, вещество может выпасть в осадок в виде твердой фазы. Допустим и обратный процесс — твердое вещество может раствориться, если жидкость недонасыщена. Если концентрация вещества равна его растворимости, то вещество находится в равновесии с твердой фазой.

Поскольку характерные времена формирования месторождений значительно превышают время протекания описанных реакций, в настоящем исследовании не учитывается химическая кинетика, то есть считается, что система находится в химическом равновесии в каждый момент времени.

Растворимость может существенно зависеть как от термодинамических условий, так и от концентрации других веществ. В работе [58] на основе экспериментальных данных и термодинамического моделирования были получены диаграммы растворимости халькопирита для различных температур и концентраций соли. В настоящей работе используется формула растворимости халькопирита, аппроксимированная по этим диаграммам:

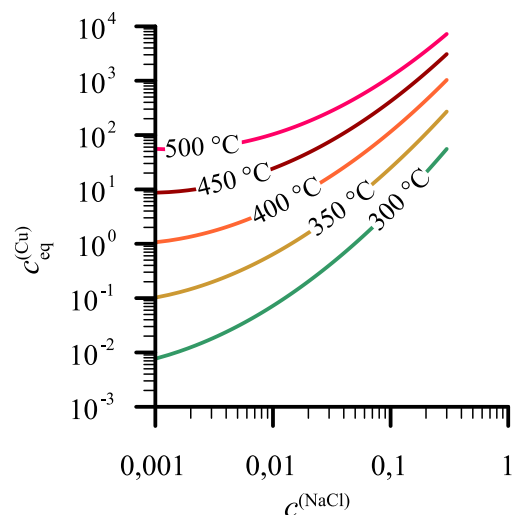


Рис. А.1: Растворимость халькопирита в зависимости от температуры и солёности жидкости

$$\lg(c_{\text{eq}}^{(\text{Cu})}(T, c^{(\text{NaCl})})) = a_{00} + a_{10}T + a_{20}\ln^2(c^{(\text{NaCl})}) + a_{11}\ln(c^{(\text{NaCl})})T + a_{02}T^2 \quad (\text{A.2})$$

где  $T$  — температура в  $^{\circ}\text{C}$ ;  $c^{(\text{NaCl})}$  — массовая доля NaCl в смеси;  $a_{00} = -2,616$ ;  $a_{10} = 1,741$ ;  $a_{01} = 0,02567$ ;  $a_{20} = 0,07463$ ;  $a_{11} = -2,117 \times 10^{-5}$ ;  $a_{02} = -0,00153$ .

## 1.2 Растворимость кварца

В поступающем из магматического очага флюиде растворено большое количество — до нескольких процентов — кварца, или кремнезема (химическая формула



SiO<sub>2</sub>). Растворимость кварца существенно ниже, чем, например, у меди, поэтому он выпадает на больших глубинах, чем медь, и ближе к источнику флюида.

В этой работе растворимость кварца как функции от давления  $P$  и температуры  $T$  рассчитывается по формуле, приведенной в работе [9]:

$$\log b_{\text{eq}}^{(\text{SiO}_2)} = A(T) + B(T) \cdot \log \frac{18,0152}{V^{(\text{H}_2\text{O})}} + 2 \log x^{(\text{H}_2\text{O})} \quad (\text{A.3})$$

где  $b_{\text{eq}}^{(\text{SiO}_2)}$  — равновесная моляльность кварца в жидкой фазе раствора соли (моль · (кг H<sub>2</sub>O)<sup>-1</sup>);  $A(T)$  и  $B(T)$  — заданные многочлены от температуры;  $x^{(\text{H}_2\text{O})}$  и  $V^{(\text{H}_2\text{O})}$  — молярная доля и эффективный парциальный молярный объем H<sub>2</sub>O в смеси (параметры и их значения подробно описаны в работе [9]). Равновесная массовая концентрация кварца  $c_{\text{eq}}^{(\text{SiO}_2)}$  рассчитывается по формуле

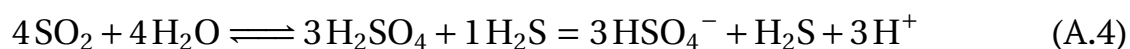
$$c_{\text{eq}}^{(\text{SiO}_2)} = \left( 1 + \frac{1}{b_{\text{eq}}^{(\text{SiO}_2)} M} \right)^{-1}$$

где  $M$  — молярная масса жидкой фазы (кг · моль<sup>-1</sup>).

### 1.3 Диспропорционирование диоксида серы

Исследования химического состава магм показывают, что в магме растворено или заключено в пузырьках большое количество диоксида серы — массовая доля SO<sub>2</sub> может достигать нескольких весовых процентов [113]. Концентрация сероводорода H<sub>2</sub>S в магме обычно значительно меньше. Для проведения реакции осаждения халькопирита (А.1) необходима сера как в окисленном (SO<sub>2</sub>), так и восстановленном (H<sub>2</sub>S) виде.

При подъеме магматического флюида к поверхности Земли температура и давление в жидкости падают, а диоксид серы превращается в сероводород H<sub>2</sub>S и серную кислоту H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Этот процесс называется *диспропорционированием* и описывается следующим уравнением реакции:



Реакция (А.4), как и (А.1), описывает химическое равновесие, но реакция (А.4) происходит в растворе и не сопровождается фазовыми превращениями. Поэтому для описания реакции диспропорционирования используется закон действующих

щих масс, или LMA (law of mass action) [133]. Этот закон связывает эффективные концентрации исходных веществ и продуктов реакции в химическом равновесии. Для реакции (А.4) закон действующих масс записывается следующим образом:

$$\frac{(m^{(\text{HSO}_4^-)})^3 (m^{(\text{H}_2\text{S})}) (m^{(\text{H}^+)})^3}{(m^{(\text{SO}_2)})^4} = K_{\text{eq}}(P, T). \quad (\text{A.5})$$

Здесь  $m^{(j)}$  — моляльность (число моль примеси на единицу массы растворителя) компоненты « $j$ ». Положение равновесия определяется константой равновесия  $K_{\text{eq}}$ , которая зависит от давления и температуры. В этой работе зависимость  $K_{\text{eq}}$  от давления  $P$  и температуры  $T$  аппроксимируется по данным из термодинамической базы HCh [137].

Таким образом, при определенных  $P$ – $T$  условиях в жидкости могут одновременно существовать оба вида серы, необходимых для образования халькопирита. Если при этих условиях растворимость халькопирита будет ниже концентрации меди в растворе, медь выпадет в виде халькопирита на скелет пород.

# Приложение В

## Обзор метода SPH

Метод гидродинамики сглаженных частиц, или SPH, строится на основе двух последовательных этапов, называемых обычно непрерывной и дискретной интерполяцией. На первом этапе вводится понятие ядра и способы аппроксимации дифференциальных операторов, а на втором полученные операторы аппроксимируются с помощью конечного числа частиц для численного интегрирования уравнений движения.

### 2.1 Непрерывное приближение

Пусть  $f$  — гладкое скалярное поле, заданное на некоторой области  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ;  $\Omega$  — область, занятая сплошной средой;  $n$  — размерность пространства. Значение этого поля в произвольной точке  $\mathbf{r} \in \Omega$  можно записать в виде свертки  $f$  с некоторым ядром  $w_h$ :

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' + o(h^2), \quad (\text{B.1})$$

Ядро свертки  $w_h$  — дифференцируемая функция с параметром  $h$ , называемым *длиной сглаживания*. Вид зависимости  $w_h$  от длины сглаживания изложен в разделе 2.2.

Функция  $w_h$  должна удовлетворять ряду свойств. Первое из этих свойств состоит в том, что  $w_h$  должна приближать дельта-функцию Дирака:

$$\lim_{h \rightarrow 0} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{B.2})$$

под пределом в этом равенстве подразумевается предел в слабом смысле.

Следующие два свойства обеспечивают второй порядок аппроксимации поля  $f$  в выражении (B.1):

$$\int_{\Omega} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' = 1, \quad (\text{B.3})$$

$$\int_{\Omega} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{r}' d^n \mathbf{r}' = 0. \quad (\text{B.4})$$

Обозначим первое слагаемое правой части уравнения (B.1) за  $[f]_c(\mathbf{r})$ :

$$[f]_c(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}'. \quad (\text{B.5})$$

Функция  $[f]_c(\mathbf{r})$ , определенная по формуле (B.5), называется *непрерывным приближением* скалярного поля  $f$  в точке  $\mathbf{r}$ .

Запишем результат применения непрерывного приближения (B.5) к градиенту поля  $f$ :

$$\begin{aligned} [\nabla f]_c(\mathbf{r}) &= \int_{\Omega} \nabla f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') \frac{\partial w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} d^n \mathbf{r}' \\ &\quad - \oint_{\partial \Omega} f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{n}(\mathbf{r}') d^{n-1} \mathbf{r}', \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

где  $\mathbf{n}$  — внутренняя нормаль к границе области  $\partial \Omega$ . Вывод этого равенства, полностью приведенный в книге [109], опирается на интегрирование по частям, формулу Остроградского-Гаусса и тот факт, что

$$\frac{\partial w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'} = - \frac{\partial w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}}.$$

В уравнении (B.6) фигурирует интеграл по поверхности сплошной среды  $\partial \Omega$ . В общем случае этот интеграл не равен нулю, однако при определенных условиях этим интегралом можно пренебречь. Например, если область  $\Omega$  неограниченная и совпадает со всем пространством  $\mathbb{R}^n$ , то этот интеграл будет равен нулю благодаря свойству ядра (B.3). В задачах астрофизики, для нужд которой был разработан SPH, часто можно считать условие неограниченности  $\Omega$  выполненным. Однако в задачах гидромеханики практически всегда необходимо учитывать наличие непроницаемых границ, например, для моделирования обтекания твердых тел, поэтому такое предположение нельзя считать верным.

Несмотря на то, что область  $\Omega$  в большинстве практических задач ограничена, поверхностный интеграл в уравнении (B.6) часто можно считать равным нулю. В качестве ядра интерполяции  $w_h$  чаще всего берется финитная функция, то есть функция, имеющая компактный носитель. Характерный размер этого носителя пропорционален параметру  $h$ . В таком случае, значения функций и их производных в точке  $\mathbf{r}$  будут зависеть от значений этих функций только в некоторой

окрестности точки  $\mathbf{r}$ , а не от значений во всей области  $\Omega$ , что существенно для эффективной численной реализации метода.

Если обозначить область вокруг точки  $\mathbf{r}$ , в которой ядро  $w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  будет принимать ненулевые значения за  $\Omega_r$ , то выражение для непрерывного приближения градиента (B.5) будет выглядеть следующим образом:

$$[\nabla f]_c(\mathbf{r}) = \int_{\Omega \cap \Omega_r} f(\mathbf{r}) \frac{\partial w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} d^n \mathbf{r}' - \oint_{\partial \Omega \cap \Omega_r} f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{n}(\mathbf{r}') d^{n-1} \mathbf{r}'. \quad (\text{B.7})$$

Поверхностный интеграл в правой части равенства (B.7) будет равен нулю на некотором расстоянии от границы области  $\Omega$ , так как множество  $\Omega_r$  не будет пересекаться с границей. Это расстояние пропорционально параметру  $h$ , который характеризует пространственный масштаб носителя ядра. Итоговая формула для непрерывного приближения градиента поля  $f$  вдали от границ среды:

$$[\nabla f]_c(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_r} f(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}'. \quad (\text{B.8})$$

Здесь  $\nabla_{\mathbf{r}} w_h$  обозначает градиент по отношению к переменной  $\mathbf{r}$ . Получается, что приближение градиента функции является сверткой самой функции с градиентом ядра, что является ключом к построению конечно-разностной схемы в дальнейшем.

Аналогичным образом можно определить непрерывное приближение других дифференциальных операторов первого порядка, например, дивергенции векторного поля:

$$[\nabla \cdot \mathbf{f}]_c(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_r} \mathbf{f}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}'. \quad (\text{B.9})$$

Дифференциальные операторы (B.8) и (B.9) корректны только на удалении от границ среды. Для того, чтобы учесть наличие твердых стенок и свободных границ, существует множество способов, некоторые из которых будут рассмотрены в последующих разделах этого приложения.

## 2.2 Ядро интерполяции

Функция  $w_h$  является непрерывным аналогом коэффициентов конечно-разностных схем. Для того, чтобы обеспечивать второй порядок аппроксимации непрерывного приближения,  $w_h$  должна удовлетворять свойствам (B.2–B.4). Что-

бы удовлетворить последнему из этих свойств, в качестве ядра  $w_h$  обычно используют четные функции:  $w_h(-\tilde{\mathbf{r}}) = w_h(\tilde{\mathbf{r}})$ ,  $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ . В таком случае градиент ядра будет нечетной функцией:  $\nabla w_h(-\tilde{\mathbf{r}}) = -\nabla w_h(\tilde{\mathbf{r}})$ . В литературе наиболее подробно представлен отдельный класс таких функций, в этом классе ядро зависит только от расстояния между точками:  $w_h(\tilde{\mathbf{r}}) = w_h(\|\tilde{\mathbf{r}}\|) = w_h(\tilde{r})$ . Удобно записывать конкретный вид  $w_h$  в виде функции от безразмерной переменной

$$q = \frac{\tilde{r}}{h}.$$

Учитывая, что  $w_h$  имеет размерность  $L^{-n}$ , можно записать ядро в следующем виде:

$$w_h(\tilde{r}) = \frac{\alpha_{w,n}}{h^n} f(q), \quad (\text{B.10})$$

где  $f$  — функция, определенная на положительной полуоси  $\mathbb{R}^+$  и принимающая неотрицательные значения;  $\alpha_{w,n}$  — безразмерная константа, обеспечивающая выполнение условия (B.3).

Для ядра вида (B.10) можно вычислить градиент:

$$\nabla w_h(\tilde{r}) = w'_h(\tilde{r}) \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{\tilde{r}} = \frac{\alpha_{w,n}}{h^{n-1}} f'(q) \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{\tilde{r}}. \quad (\text{B.11})$$

В качестве функции  $f$  часто используются В-сплайны третьего, четвертого или пятого порядка. Также распространенный выбор для функции ядра — функции Вендланда [116], из которых чаще всего используется полином пятого порядка:

$$f_W(q) = \begin{cases} \left(1 - \frac{q}{2}\right)^4 (1 + 2q), & 0 \leq q \leq 2 \\ 0, & 2 < q \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

Преимуществом функции (B.12) являются простота вычисления, а также небольшой по сравнению с другими функциями диапазон  $q$ , в котором  $f_W(q)$  принимает ненулевые значения.

Производная (B.12) будет равна

$$f'_W(q) = \begin{cases} -5q \left(1 - \frac{q}{2}\right)^3, & 0 \leq q \leq 2 \\ 0, & 2 < q \end{cases}$$

Константы  $\alpha_{w,n}$  для (B.12):

$$\alpha_{w,1} = \frac{3}{4}, \quad \alpha_{w,2} = \frac{7}{4\pi}, \quad \alpha_{w,3} = \frac{21}{16\pi}.$$

## 2.3 Дискретное приближение

Чтобы перейти от непрерывного приближения к конечномерной аппроксимации, интегралы заменяются конечными суммами Римана:

$$\int_{\Omega_{\mathbf{r}}} A(\mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' \approx \sum_b A(\mathbf{r}_b) V_b. \quad (\text{B.13})$$

Здесь область  $\Omega$ , заполненная сплошной средой, аппроксимируется конечным набором непересекающихся объемов, обозначенных  $V_b$ . Суммирование происходит по точкам  $\mathbf{r}_b$ , принадлежащим этим объемам. Можно рассматривать эти точки как координаты частиц, с которыми ассоциирован объем  $V_b$ , масса, давление, температура и другие макроскопические параметры среды.

В начальный момент времени обычно частицы располагаются в пространстве равномерно, с характерным расстоянием между частицами  $\delta r$ . Если частицы расположены в вершинах равномерной сетки,  $\delta r$  будет разрешением этой сетки, то есть расстоянием между соседними узлами. В таком случае объем каждой из частиц можно вычислить по формуле  $V_b = (\delta r)^n$ . Если известна плотность  $\rho_b$  каждой точки среды в начальный момент времени, то масса частицы  $m_b$  в начальный момент времени будет равна  $\rho_b V_b$ . Чтобы обеспечить выполнение закона сохранения массы, масса частиц обычно не меняется в процессе численного расчета. В несжимаемой среде и плотность, и объем частицы остаются постоянными в течение всего времени расчета, а расстояние между соседними частицами приблизительно будет равно  $\delta r$ .

Запишем дискретное приближение для значения скалярного поля  $f$  в точке  $\mathbf{r}$ , заменив интеграл (B.5) согласно (B.13), обозначив это приближение  $[f]_d(\mathbf{r})$ :

$$[f]_d(\mathbf{r}) = \sum_b V_b f(\mathbf{r}_b) w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b).$$

Если используется ядро с компактным носителем, то суммирование будет происходить по частицам, находящимся в радиусе, пропорциональном  $h$ . Например,

для ядра (В.12) этот радиус равен  $2h$ . Количество частиц, которые войдут в сумму, зависит от отношения  $h/\delta r$ , которое обычно варьируется от 1,0 до 2,0 [109].

Для численного решения уравнений движения чаще всего необходимо вычислять значения дискретных операторов в точках, координаты которых совпадают с положением частиц в пространстве. Введем следующие обозначения:

$$P_a = P(\mathbf{r}_a), \quad P_{ab} = P_a - P_b, \quad \mathbf{Q}_a = \mathbf{Q}(\mathbf{r}_a), \quad \mathbf{Q}_{ab} = \mathbf{Q}_a - \mathbf{Q}_b$$

для произвольной скалярной величины  $P$  и векторной величины  $\mathbf{Q}$ . Также

$$w_{ab} = w_h(r_{ab}), \quad \nabla w_{ab} = w'_h(r_{ab})\mathbf{e}_{ab},$$

где  $\mathbf{e}_{ab} = \mathbf{r}_{ab}/r_{ab}$ ;  $r_{ab} = |\mathbf{r}_{ab}|$ .

Теперь выпишем ряд операторов, являющихся дискретизацией непрерывных приближений (В.5), (В.8) и (В.9):

$$J_a\{A_b\} = \sum_b V_b A_b w_{ab}, \quad (\text{В.14})$$

$$\mathbf{J}_a\{\mathbf{A}_b\} = \sum_b V_b \mathbf{A}_b w_{ab}, \quad (\text{В.15})$$

$$\mathbf{G}_a\{A_b\} = \sum_b V_b A_b \nabla w_{ab}, \quad (\text{В.16})$$

$$D_a\{\mathbf{A}_b\} = \sum_b V_b \mathbf{A}_b \cdot \nabla w_{ab}. \quad (\text{В.17})$$

Уравнения (В.14) и (В.15) соответствуют тождественному оператору (В.5) для скалярных и векторных величин, а (В.16) и (В.17) дискретным градиенту и дивергенции.

Кроме перечисленных формул (В.14–В.17), часто используются и другие операторы. Например, используя тождества  $1\nabla A = \nabla(1A) - A\nabla 1$  и  $1\nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot (1\mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot \nabla 1$  можно получить следующие операторы:

$$\mathbf{G}_a^-\{A_b\} = -\sum_b V_b A_{ab} \nabla w_{ab}, \quad (\text{В.18})$$

$$D_a^-\{\mathbf{A}_b\} = -\sum_b V_b \mathbf{A}_{ab} \cdot \nabla w_{ab}. \quad (\text{В.19})$$

Эти операторы обозначены верхним индексом « $-$ » и называются *симметричными*, поскольку вклад частицы с индексом  $b$  в сумму для частицы с индексом  $a$  сов-



падает с вкладом частицы с индексом  $a$  в сумму для частицы с индексом  $b$ , если объемы этих частиц равны.

Преимущество симметричных операторов перед (В.16–В.17) заключается в том, что они обращаются в ноль для констант, то есть  $\mathbf{G}_a^-\{\mathbf{1}\} = 0$  и  $D_a^-\{\mathbf{1}\} = 0$ , что неверно для несимметричных операторов. Таким образом, симметричные операторы обладают свойством совместности 0-го порядка.

У симметричного оператора градиента (В.16) есть существенный недостаток: будучи примененным к полю давлений при дискретизации уравнений движения жидкости, две частицы будут действовать друг на друга с силой, равной по величине и направлению, что нарушает второй закон Ньютона. Из этого следует, что схема, основанная на симметричном операторе градиента для поля давлений, неконсервативна, то есть для нее не выполняются законы сохранения импульса и углового момента. Впрочем, некоторые авторы отмечают, что часто свойство совместности симметричных операторов оказывается важнее локального выполнения законов сохранения, в особенности для течений с низкими числами Рейнольдса [4; 45].

Воспользовавшись другим тождеством  $\nabla(A) = \mathbf{1}\nabla(A/\mathbf{1}) + A/\mathbf{1}\nabla\mathbf{1}$ , можно получить *антисимметричный* оператор градиента:

$$\mathbf{G}_a^+\{A_b\} = \sum_b V_b(A_a + A_b)\nabla w_{ab}. \quad (\text{В.20})$$

При использовании этого оператора для вычисления сил давления законы сохранения импульса и углового момента будут локально сохраняться, поскольку силы взаимодействия пар частиц друг на друга будут взаимно сокращаться. Оператор (В.20) часто используется для построения схем SPH для интегрирования уравнений движения несжимаемой жидкости.

## 2.4 Дифференциальные операторы второго порядка

Для численного моделирования диффузионных процессов необходима дискретизация дифференциальных операторов второго порядка, в частности, оператора лапласиана  $\Delta$ . В литературе описано множество подходов для построения такой дискретизации.

Самый простой вариант дискретизации лапласиана — повторить процедуру, описанную в разделе 2.1 для получения следующего оператора:

$$L_a\{A_b\} = \sum_b V_b A_b \nabla^2 w_{ab}. \quad (\text{B.21})$$

Также возможно построить антисимметричную версию (B.21). Эта форма лапласиана использовалась, например, в работе [101]. Однако такая схема обладает рядом существенных недостатков. Самый главный из них заключается в том, что в сумме участвует вторая производная ядра. Некоторые авторы отмечают, что это приводит к неустойчивости при недостаточно равномерной конфигурации частиц [73]. Также вторые производные распространенных ядер меняют знак в пределах радиуса взаимодействия частиц. Это может приводить к тому, что тепло будет передаваться от менее нагретой частицы к более нагретой.

Другой подход к дискретизации лапласиана заключается в комбинировании операторов первого порядка, в частности, дивергенции градиента. Этот подход был предложен в работе [33]. Для более общего оператора второго порядка  $\nabla \cdot B \nabla A$  запишем

$$L_a\{B_b, A_b\} = \sum_b V_b (B_a \nabla A_a + B_b \nabla A_b) \cdot \nabla w_{ab}. \quad (\text{B.22})$$

Здесь для дискретизации дивергенции используется антисимметричная форма оператора, не приведенная в тексте, поскольку далее она нигде не используется. Для определения градиента поля  $A$  можно использовать симметричный оператор (B.18). Такая форма лапласиана лишена недостатков предыдущей формулы (B.21), так как в ней участвуют только первые производные ядра  $w_h$ . Кроме того, в операторе (B.22) фигурируют потоки диффузии  $B_b \nabla A_b$ , что позволяет задавать граничные условия второго рода. Несмотря на это, схема (B.22) также обладает рядом недостатков. В частности, для вычисления лапласиана требуется произвести суммирование по частицам дважды, один раз для вычисления градиентов и один раз для дивергенции. Это гораздо более затратно с точки зрения вычислительных ресурсов. Кроме этого, получается, что для частицы с индексом  $a$  значение лапласиана в этой частице будет зависеть от частиц, находящихся от  $a$  в радиусе, вдвое превышающем радиус взаимодействия для операторов более низкого порядка. Это может приводить к нефизичным осцилляциям искомых полей при расчете [45].

Одна из самых широко используемых схем для оператора второго порядка была предложена в работе [26] для моделирования теплопроводности. Эту схему можно получить, скомбинировав (B.22) с конечно-разностной аппроксимацией

$$\nabla A_a \cdot \mathbf{e}_{ab} \approx \frac{A_{ab}}{r_{ab}} \approx \nabla A_b \cdot \mathbf{e}_{ab}. \quad (\text{B.23})$$

Подстановка (B.23) в (B.22) дает следующую формулу:

$$L_a\{B_b, A_b\} = 2 \sum_b V_b \bar{B}_{ab} \frac{A_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab}. \quad (\text{B.24})$$

Здесь  $\bar{B}_{ab}$  — средний коэффициент диффузии между частицами  $a$  и  $b$ . В качестве  $\bar{B}_{ab}$  можно использовать среднее арифметическое  $B_a$  и  $B_b$ , но в работе [26] предлагается использовать вместо этого среднее гармоническое:  $\bar{B}_{ab} = \frac{2B_a B_b}{B_a + B_b}$ . Это гарантирует непрерывность потока диффузии между частицами.

Оператор второго порядка в форме (B.24) был применен для дискретизации сил вязкого трения в уравнениях Навье-Стокса в работе [74]. В этой работе формула для лапласиана  $\mathbf{L}_a\{\mu_b, \mathbf{u}_b\}$  дана для переменной вязкости, хотя все расчеты проводились для вязкости  $\mu = \text{const}$ . Тем не менее, в ряде работ эта же формула использовалась для расчетов с переменной вязкостью, в частности, для моделирования течений лавы с вязкостью, зависящей от температуры [79; 85; 93].

Корректный подход к моделированию вязких сил в случае переменной вязкости заключается в дискретизации дивергенции тензора вязких напряжений  $\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ . В работе [108] в рамках конечно-разностной аппроксимации (B.23) автором был сформулирован оператор для более корректной дискретизации вязких сил в уравнениях Навье-Стокса:

$$\mathbf{S}_a\{\mu_b, \mathbf{u}_b\} = \sum_b V_b \frac{\bar{\mu}_{ab}}{r_{ab}^2} [(n+2)(\mathbf{u}_{ab} \cdot \mathbf{r}_{ab}) \nabla w_{ab} + \mathbf{u}_{ab}(\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab})]. \quad (\text{B.25})$$

Здесь  $n$  — размерность пространства. Можно заметить, что если опустить в формуле (B.25) первое слагаемое в скобках, получится оператор (B.24), поделенный пополам.

## 2.5 Граничные условия в SPH

Дискретные операторы SPH базируются на непрерывном приближении, например, дискретный градиент (В.16) выводится из формулы (В.8), которая верна только для точек, находящегося на достаточном удалении от границ сплошной среды. Величина этого расстояния пропорциональна параметру ядра  $h$ . Если в задаче сплошная среда бесконечна и заполняет все пространство, либо если пространство представляет собой поверхность тора, то возможно использовать в неизменном виде операторы SPH. Такие задачи могут возникать, например, в астрофизике, для нужд которой изначально создавался SPH. Однако в большинстве задач гидромеханики присутствуют хотя бы непроницаемые стенки, обтекаемые жидкостью, также возникает необходимость учитывать свободную поверхность раздела между средами, наличием одной из которых можно пренебречь. В частности, при рассмотрении течений вязкой жидкости часто можно исключить из модели воздух, ограничившись заданием граничных условий на поверхности жидкости. Наконец, если в задаче присутствует приток вещества в расчетную область или, наоборот, вещество утекает из области, необходимо корректно задавать значения параметров на притоке или истоке. Во всех перечисленных случаях невозможно обойтись стандартными операторами SPH. В этом разделе описаны различные подходы к заданию граничных условий.

### 2.5.1 Условия на непроницаемых границах

Множество задач гидромеханики требуют учета наличия твердых стенок, на которых должны выполняться различные граничные условия, например, условие прилипания вязкой жидкости к стенке или условие равенства потока тепла заданному значению на границе теплопроводной среды. В таких случаях необходимо корректно вычислять значения полей, их градиентов и других дифференциальных операторов вблизи стенки и непосредственно на ней. Это означает, что нельзя пренебрегать поверхностным интегралом в формуле для сглаженного градиента (В.7) для непрерывной интерполяции, а также необходимо учитывать отсутствие частиц за пределами области  $\Omega$ , заполненной моделируемой сплошной средой для дискретного приближения.

### Метод «отталкивающих сил»

В ранней работе по применению SPH для моделирования течений идеальной жидкости со свободной поверхностью [72] проблема недостатка частиц в носителе ядра игнорировалась, а отсутствие поверхностного интеграла компенсировалось наличием слоя особых частиц, выстилающих поверхность непроницаемых границ. Эти частицы отталкивают частицы жидкости, находящиеся вблизи стенки. Частица на поверхности, находящаяся от жидкой частицы на расстоянии  $\mathbf{r}$ , будет действовать на жидкую частицу с силой  $f(\mathbf{r})$  согласно формуле:

$$f(\mathbf{r}) = D \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{p_1} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^{p_2} \right] \frac{\mathbf{r}}{r^2}, \quad (\text{B.26})$$

где  $r_0$  — расстояние между частицами в начальный момент времени;  $p_1$  и  $p_2$  — константы, обычно  $p_1 = 4$ ,  $p_2 = 2$ ; коэффициент  $D$  зависит от конкретной задачи и пропорционален силе тяжести и характерной глубине жидкости. Вид зависимости основан на потенциале межмолекулярного взаимодействия Леннард-Джонса [56].

Эти силы могут адекватно моделировать поведение вещества на микроуровне, однако в SPH частицы описывают большой набор молекул среды и характеризуются макропараметрами этой среды, например, температурой и давлением. Таким образом, уравнение (B.26) является лишь грубой аппроксимацией реальных сил, действующих на жидкость со стороны стенки. Кроме того, поскольку расчет этих сил не основан на законах сохранения, задавать аналогичным образом граничные условия второго рода для других величин, например, температуры, становится невозможным.

### Метод «фиктивных частиц»

Одним из самых широко распространенных методов моделирования непроницаемых твердых границ является метод «фиктивных» частиц, предложенный Такедой в работе [101]. В этом методе непроницаемая граница выстилается сразу несколькими слоями частиц, чтобы уменьшить ошибки дискретизации, связанные с недостатком частиц в окрестности стенки. Обычно используется как минимум 3 дополнительных слоя частиц. Поверхностный интеграл в (B.7) игнорируется, так как предполагается, что фиктивные частицы также участвуют в суммировании, однако значения различных величин в твердых частицах, расположенных

в различных слоях, вычисляются таким образом, чтобы обеспечить выполнение граничных условий.

Метод «фиктивных частиц» требователен к памяти, поскольку необходимо хранить большое количество частиц для стенок, однако в современных вычислительных системах это редко является проблемой. Более существенным недостатком является отсутствие универсальной схемы расположения «фиктивных» частиц для сложной геометрии, включающей острые углы и тонкие структуры с характерной толщиной меньше 4 частиц. Также не существует общепринятого способа вычисления параметров среды в фиктивных частицах, чтобы обеспечить выполнение граничных условий первого и второго рода.

Существует аналогичный подход к моделированию граничных условий на твердых границах, в литературе часто называемый методом «зеркальных частиц». В этом методе стенка дискретизируется одним слоем фиктивных частиц, однако для каждой частицы жидкости вблизи стенки создается дополнительная частица, расположенная симметрично жидкой частице относительно стенки. В «зеркальных» частицах значения различных величин задаются исходя из граничных условий, например, для условия прилипания скорость зеркальной частицы полагается равной по величине и противоположной по направлению скорости соответствующей частице жидкости.

Метод «зеркальных частиц» применялся в работах [27; 78]. Недостатки этого подхода аналогичны таковым в обычном методе «фиктивных частиц» — отсутствие надежного способа вычисления параметров на твердой стенке, неоднозначность расположения частиц в случае сложной геометрии. Кроме того, создание «зеркальных частиц» не гарантирует наличия достаточного количества частиц в окрестности частиц жидкости, что может негативно влиять на расчет динамики потока вблизи стенок.

### **Полуаналитические граничные условия**

Все вышеперечисленные методы не учитывают поверхностный интеграл в выражении для градиента (В.7) и аналогичных формулах для других дифференциальных операторов. Существует относительно новый подход к моделированию твердых стенок в SPH, который учитывает дополнительные слагаемые явным образом, что позволяет корректно задавать граничные условия первого и второго рода. Этот подход носит название «универсальные полуаналитические граничные

условия» (*USAW-BC, universal semi-analytic wall boundary conditions*). Этот метод был предложен Феррандом в его диссертации и затем в работе [105].

В методе USAW-BC аппроксимация SPH меняется таким образом, чтобы обеспечить выполнение свойства нормализации (B.3) в окрестности границы:

$$[f]_c^\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\gamma} \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}'. \quad (\text{B.27})$$

Множитель  $\gamma$  называется *фактором ренормализации* и определяется таким образом, чтобы равенство  $[1]_c^\gamma = 1$  выполнялось не только внутри жидкости, но и возле стенки:

$$\gamma(\mathbf{r}) = \int_{\Omega \cap \Omega_r} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' \quad (\text{B.28})$$

Непрерывное приближение антисимметричного оператора градиента с учетом ренормализации будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} [\nabla f]_c^{\gamma,+}(\mathbf{r}) &= \left[ 1 \nabla \frac{f}{1} + \frac{f}{1} \nabla 1 \right]_c^{\gamma,+} \\ &= \frac{1}{\gamma} \int_{\Omega \cap \Omega_r} [f(\mathbf{r}') + f(\mathbf{r})] \nabla_{\mathbf{r}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^n \mathbf{r}' \\ &\quad - \frac{1}{\gamma} \int_{\partial \Omega \cap \Omega_r} [f(\mathbf{r}') + f(\mathbf{r})] w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{n} d^{n-1} \mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Здесь  $\mathbf{n}$  — внутренняя нормаль к границе поверхности в точке  $\mathbf{r}'$ . В формуле (B.29) в правой части фигурирует интеграл по поверхности, ограниченной областью ненулевых значений ядра. Чтобы вычислить значение этого интеграла в дискретной аппроксимации, необходимо иметь представление формы границы в дискретном виде. В работе ([105]) предлагается в плоском случае аппроксимировать границу набором отрезков прямых, называемых *сегментами*. Каждый сегмент ограничен парой частиц, называемых *вершинами*. Вершины жестко связаны с положением стенки, однако для них вычисляются все те же параметры, что и для частиц жидкости. В пространственных задачах роль сегментов могут выполнять треугольники [106].

Таким образом, в каждый момент времени в вершинах хранится мгновенное распределение параметров жидкости, таких как давление, скорость и температура, что может быть полезным, например, для вычисления сил, действующих на твердую границу. Значения полей в вершинах участвуют в дискретных суммах, с их помощью возможно задавать граничные условия первого рода на стенках.

Характерный размер сегментов должен быть приблизительно равен расстоянию между частицами  $\delta r$ .

Поскольку вершины расположены прямо на стенке, их объем не равен полному объему жидкой частицы, часть, занятая стенкой, не учитывается:  $V_v = \frac{\theta}{2\pi} V_a$ , где  $\theta$  — угол между сегментами, соединенными вершиной  $v$ , а  $V_a$  — полный объем жидкой частицы  $a$ , в несжимаемой жидкости считается, что этот объем одинаков для всех  $a$ .

Обозначим множество частиц жидкости за  $F$ , множество вершин за  $V$  и множество сегментов за  $S$ . Поскольку вершины участвуют в суммировании, обозначим множество всех частиц как  $P = F \cup V$ . Дискретная аппроксимация значения поля  $f$  выглядит следующим образом:

$$[f]_d^\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\gamma(\mathbf{r})} \sum_{b \in P} V_b f(\mathbf{r}) w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b).$$

Антисимметричная дискретная аппроксимация градиента (B.29) в USAW-BC:

$$\begin{aligned} [\nabla f]_d^{\gamma,+}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\gamma(\mathbf{r})} \sum_{b \in P} V_b [f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r}_b)] \nabla_{\mathbf{r}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \\ &\quad - \frac{1}{\gamma(\mathbf{r})} \sum_{s \in S} [f(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r}_s)] \oint_{\partial\Omega_s \cap \Omega_{\mathbf{r}}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{n}_s d^{n-1} \mathbf{r}', \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

где  $\partial\Omega_s$  — поверхность сегмента  $s$ ,  $\mathbf{n}_s$  — внутренняя нормаль сегмента, а  $\mathbf{r}_s$  — координата середины сегмента. Используется обобщенная теорема о среднем: предполагается, что поле  $f$  принимает свое среднее значение на сегменте  $s$  в точке  $\mathbf{r}_s$ , поэтому  $f(\mathbf{r}_s)$  выносится за пределы интеграла. Аналогичные вычисления можно проделать также и для симметричных операторов градиента и дивергенции.

Интеграл по поверхности сегмента из (B.30), также как и  $\gamma(\mathbf{r})$ , можно вычислить аналитически для известного ядра  $w_h$ , поэтому метод реализации граничных условий USAW и называется полуаналитическим. Этот интеграл равен вкладу сегмента  $s$  в градиент величины  $\gamma$  в точке  $\mathbf{r}$ .

Введем дискретные операторы, аналогичные (B.18–B.20), но с учетом коррекции USAW возле стенок. Для этого будет использоваться следующее обозначение:

$$\nabla \gamma_{as} = \oint_{\partial\Omega_s \cap \Omega_{\mathbf{r}}} w_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{n}_s d^{n-1} \mathbf{r}'. \quad (\text{B.31})$$



С учетом принятых ранее обозначений получаются следующие формулы для симметричных дискретных операторов SPH:

$$\mathbf{G}_a^{\gamma,-}\{A_b\} = -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b A_{ab} \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} A_{as} \nabla \gamma_{as}, \quad (\text{B.32})$$

$$D_a^{\gamma,-}\{\mathbf{A}_b\} = -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \mathbf{A}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \mathbf{A}_{as} \cdot \nabla \gamma_{as}. \quad (\text{B.33})$$

Путем подстановки (B.31) в (B.30) получается антисимметричный оператор градиента:

$$\mathbf{G}_a^{\gamma,+}\{A_b\} = \frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b (A_a + A_b) \nabla w_{ab} - \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} (A_a + A_s) \nabla \gamma_{as}. \quad (\text{B.34})$$

Часто необходимо вычислять градиент векторных величин, например, градиент скорости в уравнениях Навье-Стокса. Для этого можно определить тензорный оператор градиента:

$$\mathbf{G}_a^{\gamma,-}\{\mathbf{A}_b\} = -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \mathbf{A}_{ab} \otimes \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \mathbf{A}_{as} \otimes \nabla \gamma_{as}. \quad (\text{B.35})$$

Скорректированные операторы (B.32–B.35) позволяют более точно вычислять производные около стенок. В то же время в точках вдали от стенок, где носитель ядра не пересекается с границей сплошной среды, а значит не пересекается ни с одним из сегментов или вершин, значение коэффициента ренормализации  $\gamma_a$  равно единице, а значение его градиента  $\nabla \gamma_a = \sum_{s \in S} \nabla \gamma_{as}$  равно нулю, поэтому внутри сплошной среды скорректированные операторы эквивалентны классическим операторам (B.18–B.20).

Приведем скорректированные около границ версии операторов второго порядка (B.24) и (B.25):

$$L_a^{\gamma}\{B_b, A_b\} = \frac{2}{\gamma_a} \sum_b V_b \bar{B}_{ab} \frac{A_{ab}}{r_{ab}^2} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab} - \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} (B_a \nabla A_a + B_s \nabla A_s) \cdot \nabla \gamma_{as}, \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_a^{\gamma}\{\mu_b, \mathbf{u}_b\} = & \frac{1}{\gamma} \sum_b V_b \frac{\bar{\mu}_{ab}}{r_{ab}^2} [(n+2) \mathbf{u}_{ab} \cdot \mathbf{r}_{ab} \nabla w_{ab} + \mathbf{u}_{ab} \mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla w_{ab}] \\ & - \frac{2}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \frac{\mathbf{u}_{as}^R \cdot \mathbf{t}_{as}}{\delta r_{as}} \mathbf{t}_{as} |\nabla \gamma_{as}|. \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Оператор (В.36) получен в результате применения коррекции USAW к (В.22) и последующей подстановки (В.23) в первое слагаемое получившейся суммы. Градиенты во втором слагаемом не аппроксимируются с помощью конечной разности, потому что это позволяет накладывать условия второго рода путем прямой подстановки значений градиентов на стенке. В формуле (В.37) второе слагаемое получено в [104] следующей аппроксимацией:

$$\bar{\mu}_{as} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \approx \bar{\mu}_{as} \frac{\mathbf{u}_{as} \cdot \mathbf{t}_{as}}{\delta r_{as}} \mathbf{t}_{as},$$

где

$$\mathbf{t}_{as} = \frac{\mathbf{u}_{as}^R - (\mathbf{u}_{as}^R \cdot \mathbf{n}_s) \mathbf{n}_s}{|\mathbf{u}_{as}^R - (\mathbf{u}_{as}^R \cdot \mathbf{n}_s) \mathbf{n}_s|}, \quad \delta r_{as} = \max(\mathbf{r}_{as} \cdot \mathbf{n}_s, \delta r),$$

$\mathbf{u}_{as}^R$  — скорость частицы по отношению к сегменту  $s$ . Также используется тот факт, что  $\nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{n} = 0$  из-за условия непротекания, поэтому коррекция применяется только к слагаемому, относящемуся к  $\nabla \mathbf{u}$ .

### 2.5.2 Условия на свободной поверхности

На свободной поверхности для течений вязкой жидкости должны выполняться кинематическое и динамическое условия. Кинематическое условие состоит в том, что частицы жидкости, находящиеся на свободной поверхности, должны оставаться на свободной поверхности:

$$\left( \frac{\partial z}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \right)_{\partial \Omega_{\text{free}}} = 0.$$

В лагранжевых методах, к которым относится SPH, это условие выполняется автоматически.

Динамическое условие в предположении, что силами поверхностного натяжения можно пренебречь, сводится к равенству нулю напряжений, действующих на единицу площади свободной поверхности с нормалью  $\mathbf{n}$ :

$$p|_{\partial \Omega_{\text{free}}} = 0, \tag{В.38}$$

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} = 0|_{\partial \Omega_{\text{free}}}. \tag{В.39}$$

Условие (В.39) также автоматически выполняется в SPH: поскольку вне среды нет частиц, в дифференциальных операторах, например, в (В.32), поток диффузии ско-

рости через поверхность будет равен нулю. Это справедливо для любых величин: для уравнения теплопроводности, например, «автоматически» будет выполняться условие отсутствия потока тепла через свободную поверхность и твердые стенки.

В слабо-сжимаемой постановке WCSPH граничное условие первого рода (В.38) выполняется автоматически: по мере приближения к свободной поверхности число частиц убывает, следовательно, плотность частиц будет стремиться к нулю, также как и давление, зависящее от плотности согласно уравнению состояния.

В истинно несжимаемой постановке ISPH это условие должно быть учтено явным образом при решении уравнения Пуассона, для чего необходимо определять принадлежащие свободной поверхности частицы на каждом шаге расчета.

## 2.6 Коррекция операторов SPH

Дискретные операторы SPH, например градиент (В.32) и дивергенция (В.33), обладают погрешностью аппроксимации, в дальнейшей обозначаемой  $e_{\text{interp}}$ . Эта погрешность имеет несколько источников: погрешность сглаживания SPH, которую будем обозначать  $e_{\text{smooth}}$ , квадратурная погрешность за счет дискретизации интеграла  $e_{\text{quad}}$ , и погрешность, связанная с неравномерным распределением частиц в среде  $e_{\text{anis}}$ :

$$\|e_{\text{interp}}\| \leq \|e_{\text{smooth}}\| + \|e_{\text{quad}}\| + \|e_{\text{anis}}\|.$$

В работах [4; 45] дана оценка этих погрешностей:

$$\begin{aligned} \|e_{\text{smooth}}\| &\sim Ch^2, \\ \|e_{\text{quad}}\| &\sim C \left( \frac{h}{\delta r} \right)^{-\beta_1}, \\ \|e_{\text{anis}}\| &\sim C \frac{\chi}{h^p} \left( \frac{h}{\delta r} \right)^{-\beta_2}. \end{aligned} \tag{B.40}$$

Здесь  $\beta_1$  и  $\beta_2$  — положительные константы;  $p \equiv 1$  для операторов первого порядка и  $p \equiv 2$  для лапласиана;  $\chi$  — характерная длина отклонения частиц от равномерной конфигурации.

Из оценок (В.40) следует, что для сходимости SPH необходимо, чтобы при  $h \rightarrow 0$  одновременно  $\frac{h}{\delta r} \rightarrow \infty$ , причем  $\frac{h}{\delta r}$  должен расти быстрее, чем убывает  $h$ , иначе ошибка  $e_{\text{anis}}$  будет доминировать, в особенности для операторов второго

порядка. Это значит, что количество частиц в радиусе взаимодействия ядра должно расти при увеличении разрешения расчета, что приводит к росту вычислительной сложности.

Для того, чтобы снизить погрешность операторов SPH, применяются различные корректировки операторов. Для операторов первого порядка самый простой способ обеспечить большую точность метода — скорректировать градиент ядра с помощью некоторой матрицы, обозначаемой  $B_a^\gamma$  таким образом, чтобы оператор градиента, примененный к координатам частиц, давал единичный тензор:

$$-\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \mathbf{r}_{ab} \otimes B_a^\gamma \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \mathbf{r}_{as} \otimes B_a^\gamma \nabla \gamma_{as} = \mathbf{I}.$$

Здесь приведен оператор USAW-SPH, дополнительно скорректированный около твердой стенки. Путем алгебраических преобразований можно получить, что матрица ренормализации будет равна

$$B_a^\gamma = \left[ \left( -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \mathbf{r}_{ab} \otimes \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \mathbf{r}_{as} \otimes \nabla \gamma_{as} \right)^T \right]^{-1}. \quad (\text{B.41})$$

Размер этой матрицы равен размерности пространства, так что значения элементов матрицы легко вычислить аналитически, зная только координаты частиц.

Скорректированный оператор дивергенции (B.33) будет выглядеть следующим образом:

$$D_a^{\gamma, -1} \{\mathbf{A}_b\} = -\frac{1}{\gamma_a} \sum_{b \in P} V_b \mathbf{A}_{ab} \cdot B_a^\gamma \nabla w_{ab} + \frac{1}{\gamma_a} \sum_{s \in S} \mathbf{A}_{as} \cdot B_a^\gamma \nabla \gamma_{as}.$$

Оператор градиента получается аналогичными преобразованиями. Скорректированные операторы обладают первым порядком аппроксимации, то есть первые производные линейного поля будут вычислены точно.

Эту коррекцию можно применять только для симметричных версий операторов первого порядка. Для лапласиана существуют аналогичные процедуры ренормализации, однако их вид значительно сложнее, кроме того, пока что получены выражения только для классического SPH, что делает ренормализацию лапласиана некорректной для USAW-SPH. Получение скорректированных операторов второго порядка для USAW-SPH является пока не решенной задачей.

## Список литературы

1. A benchmark comparison of spontaneous subduction models-Towards a free surface / H. Schmeling [и др.] // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. — 2008. — Дек. — Т. 171, № 1–4. — С. 198–223. — ISSN 00319201. — DOI: 10.1016/j.pepi.2008.06.028. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0031920108001568>.
2. A frictional law for volcanic ash gouge / Y. Lavallée [и др.] // *Earth and Planetary Science Letters*. — 2014. — Авг. — Т. 400. — С. 177–183. — ISSN 0012821X. — DOI: 10.1016/j.epsl.2014.05.023.
3. A new open boundary formulation for incompressible SPH / A. Leroy [и др.] // *Computers and Mathematics with Applications*. — 2016. — Нояб. — Т. 72, № 9. — С. 2417–2432. — ISSN 08981221. — DOI: 10.1016/j.camwa.2016.09.008. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122116305107>.
4. A scalable consistent second-order SPH solver for unsteady low Reynolds number flows / N. Trask [и др.] // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2015. — Июнь. — Т. 289. — С. 155–178. — ISSN 00457825. — DOI: 10.1016/j.cma.2014.12.027. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782514005064>.
5. A variational formulation based contact algorithm for rigid boundaries in two-dimensional SPH applications / S. Kulasegaram [и др.] // *Computational Mechanics*. — 2004. — Т. 33, № 4. — С. 316–325. — ISSN 01787675. — DOI: 10.1007/s00466-003-0534-0.
6. *Afanasyev A. Hydrodynamic Modelling of Petroleum Reservoirs using Simulator MUFITS* // *Energy Procedia*. Т. 76. — Elsevier Ltd, 2015. — С. 427–435. — DOI: 10.1016/j.egypro.2015.07.861.
7. *Afanasyev A. MUFITS Reservoir Simulation Software*. — 2013. — URL: <http://www.mufits.imec.msu.ru/>.

8. *Afanasyev A., Costa A., Chiodini G.* Investigation of hydrothermal activity at Campi Flegrei caldera using 3D numerical simulations: Extension to high temperature processes // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2015. — Т. 299. — С. 68—77. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2015.04.004.
9. *Akinfiyev N. N., Diamond L. W.* A simple predictive model of quartz solubility in water-salt-CO<sub>2</sub> systems at temperatures up to 1000 °C and pressures up to 1000 MPa // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. — 2009. — Март. — Т. 73, № 6. — С. 1597—1608. — ISSN 00167037. — DOI: 10.1016/j.gca.2008.12.011.
10. An accurate SPH modeling of viscous flows around bodies at low and moderate Reynolds numbers / S. Marrone [и др.] // *Journal of Computational Physics*. — 2013. — Июль. — Т. 245. — С. 456—475. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2013.03.011. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113001885>.
11. *Archambault C., Tanguy J. C.* Comparative temperature measurements on mount etna lavas: problems and techniques // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 1976. — Сент. — Т. 1, № 2. — С. 113—125. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/0377-0273(76)90002-0.
12. *Balmforth N. J., Craster R. V.* Dynamics of cooling domes of viscoplastic fluid // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2000. — Ноябрь. — Т. 422. — С. 225—248. — ISSN 00221120. — DOI: 10.1017/S002211200000166X. — URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/dynamics-of-cooling-domes-of-viscoplastic-fluid/C9691826095D0038FDE6160678761457>.
13. *Balmforth N. J., Craster R. V., Sassi R.* Dynamics of cooling viscoplastic domes // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2004. — Янв. — Т. 499, № 499. — С. 149—182. — ISSN 00221120. — DOI: 10.1017/S0022112003006840. — URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/dynamics-of-cooling-viscoplastic-domes/A2ACAAF4528CD1F85EF79D0739B65827>.
14. *Balmforth N. J., Craster R. V., Sassi R.* Shallow viscoplastic flow on an inclined plane // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2002. — Ноябрь. — Т. 470. — С. 1—29. — ISSN 00221120. — DOI: 10.1017/S0022112002001660. — URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/>

- article/abs/shallow-viscoplastic-flow-on-an-inclined-plane/4BE73B2CEA7026DBDF38F2F046BDF7E2.
15. *Barmin A., Melnik O., Sparks R. S.* Periodic behavior in lava dome eruptions // *Earth and Planetary Science Letters*. — 2002. — Май. — Т. 199, № 1/2. — С. 173–184. — ISSN 0012821X. — DOI: 10.1016/S0012-821X(02)00557-5. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X02005575>.
  16. Benchmarking computational fluid dynamics models of lava flow simulation for hazard assessment, forecasting, and risk management / H. R. Dietterich [и др.] // *Journal of Applied Volcanology*. — 2017. — Дек. — Т. 6, № 1. — ISSN 21915040. — DOI: 10.1186/s13617-017-0061-x.
  17. *Bercovici D.* A theoretical model of cooling viscous gravity currents with temperature-dependent viscosity // *Geophysical Research Letters*. — 1994. — ИЮНЬ. — Т. 21, № 12. — С. 1177–1180. — ISSN 19448007. — DOI: 10.1029/94GL01124. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1029/94GL01124>.
  18. *Bercovici D., Lin J.* A gravity current model of cooling mantle plume heads with temperature-dependent buoyancy and viscosity // *Journal of Geophysical Research B: Solid Earth*. — 1996. — Февр. — Т. 101, № 2. — С. 3291–3309. — ISSN 21699356. — DOI: 10.1029/95jb03538. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1029/95JB03538> %20https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/95JB03538 %20https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1029/95JB03538.
  19. *Beuchert M. J., Podladchikov Y. Y.* Viscoelastic mantle convection and lithospheric stresses // *Geophysical Journal International*. — 2010. — Окт. — Т. 183, № 1. — С. 35–63. — ISSN 0956540X. — DOI: 10.1111/j.1365-246X.2010.04708.x.
  20. *Bluth G. J., Rose W. I.* Observations of eruptive activity at Santiaguito volcano, Guatemala // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2004. — Сент. — Т. 136, № 3/4. — С. 297–302. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.06.001.
  21. *Campbell J., Vignjevic R., Libersky L.* A contact algorithm for smoothed particle hydrodynamics // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2000. — Март. — Т. 184, № 1. — С. 49–65. — ISSN 00457825. — DOI: 10.1016/

- S0045-7825(99)00442-9. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782599004429>.
22. *Carman P.* Permeability of saturated sands, soils and clays // *The Journal of Agricultural Science*. — 1939. — Т. 29, № 2. — С. 262—273. — ISSN 14695146. — DOI: 10.1017/S0021859600051789. — URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-agricultural-science/article/abs/permeability-of-saturated-sands-soils-and-clays/3AB48F6933810876B5AF8623585357DF>.
23. Characterization and interpretation of volcanic activity at Karymsky Volcano, Kamchatka, Russia, using observations of infrasound, volcanic emissions, and thermal imagery / T. Lopez [и др.] // *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. — 2013. — Дек. — Т. 14, № 12. — С. 5106—5127. — ISSN 15252027. — DOI: 10.1002/2013GC004817. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/2013GC004817>.
24. *Chorin A. J.* A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // *Journal of Computational Physics*. — 1967. — Абр. — Т. 2, № 1. — С. 12—26. — ISSN 0021-9991. — DOI: 10.1016/0021-9991(67)90037-X. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199916790037X>.
25. *Christensen U.* Convection with pressure- and temperature-dependent non-Newtonian rheology // *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*. — 1984. — Май. — Т. 77, № 2. — С. 343—384. — ISSN 1365246X. — DOI: 10.1111/j.1365-246X.1984.tb01939.x. — URL: <https://academic.oup.com/gji/article-lookup/doi/10.1111/j.1365-246X.1984.tb01939.x>.
26. *Cleary P. W., Monaghan J. J.* Conduction Modelling Using Smoothed Particle Hydrodynamics // *Journal of Computational Physics*. — 1999. — ЯНВ. — Т. 148, № 1. — С. 227—264. — ISSN 00219991. — DOI: 10.1006/jcph.1998.6118.
27. *Colagrossi A., Landrini M.* Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics // *Journal of Computational Physics*. — 2003. — Т. 191, № 2. — С. 448—475. — ISSN 00219991. — DOI: 10.1016/S0021-9991(03)00324-3.



28. *Cordonnier B., Lev E., Garel F.* Benchmarking lava-flow models // Geological Society Special Publication. — 2016. — Т. 426, № 1. — С. 425—445. — ISSN 03058719. — DOI: 10.1144/SP426.7.
29. *Costa A., Wadge G., Melnik O.* Cyclic extrusion of a lava dome based on a stick-slip mechanism // Earth and Planetary Science Letters. — 2012. — Июль. — Т. 337/338. — С. 39—46. — ISSN 0012821X. — DOI: 10.1016/j.epsl.2012.05.011.
30. *Costa A., Macedonio G.* Numerical simulation of lava flows based on depth-averaged equations // Geophysical Research Letters. — 2005. — Т. 32, № 5. — С. 1—5. — ISSN 00948276. — DOI: 10.1029/2004GL021817. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1029/2004GL021817>.
31. Coupled finite particle method with a modified particle shifting technology / C. Huang [и др.] // International Journal for Numerical Methods in Engineering. — 2018. — ЯНВ. — Т. 113, № 2. — С. 179—207. — ISSN 10970207. — DOI: 10.1002/nme.5608. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/nme.5608>.
32. *Croucher A. E., O'Sullivan M. J.* Application of the computer code TOUGH2 to the simulation of supercritical conditions in geothermal systems // Geothermics. — 2008. — Т. 37, № 6. — С. 622—634. — ISSN 03756505. — DOI: 10.1016/j.geothermics.2008.03.005.
33. *Cummins S. J., Rudman M.* An SPH Projection Method // Journal of Computational Physics. — 1999. — Июль. — Т. 152, № 2. — С. 584—607. — ISSN 00219991. — DOI: 10.1006/jcph.1999.6246. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999199962460>.
34. *Davis T. A.* Algorithm 832: UMFPACK V4.3 - An unsymmetric-pattern multifrontal method // ACM Transactions on Mathematical Software. — 2004. — ИЮНЬ. — Т. 30, № 2. — С. 196—199. — ISSN 00983500. — DOI: 10.1145/992200.992206.
35. Degassing processes during lava dome growth: Insights from Santiaguito lava dome, Guatemala / A. S. Holland [и др.] // Journal of Volcanology and Geothermal Research. — 2011. — АПР. — Т. 202, № 1/2. — С. 153—166. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2011.02.004.
36. *Dilles J. H.* Petrology of the Yerington Batholith, Nevada: Evidence for evolution of porphyry copper ore fluids // Economic Geology. — 1987. — НОЯБ. — Т. 82, № 7. — С. 1750—1789. — ISSN 03610128. — DOI: 10.2113/gsecongeo.82.7.1750.

37. *Driesner T.* The system H<sub>2</sub>O–NaCl. Part II: Correlations for molar volume, enthalpy, and isobaric heat capacity from 0 to 1000°C, 1 to 5000bar, and 0 to 1 XNaCl // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. — 2007. — Окт. — Т. 71, № 20. — С. 4902–4919. — ISSN 00167037. — DOI: 10.1016/j.gca.2007.05.026. — URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016703707002955>.
38. *Driesner T., Heinrich C. A.* The system H<sub>2</sub>O–NaCl. Part I: Correlation formulae for phase relations in temperature–pressure–composition space from 0 to 1000°C, 0 to 5000bar, and 0 to 1 XNaCl // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. — 2007. — Окт. — Т. 71, № 20. — С. 4880–4901. — ISSN 00167037. — DOI: 10.1016/j.gca.2006.01.033. — URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016703707002943>.
39. *Dufek J., Bergantz G.* Transient two-dimensional dynamics in the upper conduit of a rhyolitic eruption: A comparison of closure models for the granular stress // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2005. — Май. — Т. 143, № 1–3. — С. 113–132. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.09.013. — URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0377027305000387>.
40. Dynamics of seismogenic volcanic extrusion at Mount St Helens in 2004-05 / R. M. Iverson [и др.] // *Nature*. — 2006. — Нояб. — Т. 444, № 7118. — С. 439–443. — ISSN 14764687. — DOI: 10.1038/nature05322.
41. *Ellero M., Tanner R. I.* SPH simulations of transient viscoelastic flows at low Reynolds number // *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. — 2005. — Дек. — Т. 132, № 1–3. — С. 61–72. — ISSN 03770257. — DOI: 10.1016/j.jnnfm.2005.08.012. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025705001990>.
42. Experimental phase equilibria constraints on preemptive storage conditions of the Soufriere Hills magma / J. Barclay [и др.] // *Geophysical Research Letters*. — 1998. — Сент. — Т. 25, № 18. — С. 3437–3440. — ISSN 00948276. — DOI: 10.1029/98GL00856. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1029/98GL00856> % 20 <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/98GL00856> % 20 <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1029/98GL00856>.

43. *Fanchi J. R.* Principles of Applied Reservoir Simulation. — Elsevier, 2006. — ISBN 9780750679336. — DOI: 10.1016/B978-0-7506-7933-6.X5000-4. — URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780750679336X50004>.
44. Fast free-surface detection and level-set function definition in SPH solvers / S. Marrone [и др.] // Journal of Computational Physics. — 2010. — Май. — Т. 229, № 10. — С. 3652—3663. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2010.01.019. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110000343>.
45. *Fatehi R., Manzari M. T.* Error estimation in smoothed particle hydrodynamics and a new scheme for second derivatives // Computers and Mathematics with Applications. — 2011. — ЯНВ. — Т. 61, № 2. — С. 482—498. — ISSN 08981221. — DOI: 10.1016/j.camwa.2010.11.028. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122110009004>.
46. Forecasting lava flow paths by a stochastic approach / M. Favalli [и др.] // Geophysical Research Letters. — 2005. — Т. 32, № 3. — С. 1—4. — ISSN 00948276. — DOI: 10.1029/2004GL021718. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1029/2004GL021718>.
47. Formation of magmatic brine lenses via focussed fluid-flow beneath volcanoes / A. Afanasyev [и др.] // Earth and Planetary Science Letters. — 2018. — Март. — Т. 486. — С. 119—128. — ISSN 0012821X. — DOI: 10.1016/j.epsl.2018.01.013.
48. Generation of porphyry copper deposits by gas-brine reaction in volcanic arcs / J. Blundy [и др.] // Nature Geoscience. — 2015. — Март. — Т. 8, № 3. — С. 235—240. — ISSN 17520908. — DOI: 10.1038/ngeo2351.
49. *Gingold R. A., Monaghan J. J.* Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 1977. — Дек. — Т. 181, № 3. — С. 375—389. — ISSN 0035-8711. — DOI: 10.1093/mnras/181.3.375. — URL: <https://academic.oup.com/mnras/article-lookup/doi/10.1093/mnras/181.3.375>.
50. *Giordano D., Dingwell D. B.* Viscosity of hydrous Etna basalt: Implications for Plinian-style basaltic eruptions // Bulletin of Volcanology. — 2003. — ЯНВ. — Т. 65, № 1. — С. 8—14. — ISSN 02588900. — DOI: 10.1007/s00445-002-0233-2.

51. *Girona T., Caudron C., Huber C.* Origin of Shallow Volcanic Tremor: The Dynamics of Gas Pockets Trapped Beneath Thin Permeable Media // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. — 2019. — Май. — Т. 124, № 5. — С. 4831—4861. — ISSN 21699356. — DOI: 10.1029/2019JB017482. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2019JB017482>.
52. *Hedenquist J. W., Lowenstern J. B.* The role of magmas in the formation of hydrothermal ore deposits // *Nature*. — 1994. — Т. 370, № 6490. — С. 519—527. — ISSN 00280836. — DOI: 10.1038/370519a0.
53. *Henley R. W., McNabb A.* Magmatic vapor plumes and ground-water interaction in porphyry copper emplacement // *Economic Geology*. — 1978. — Февр. — Т. 73, № 1. — С. 1—20. — ISSN 1554-0774. — DOI: 10.2113/gsecongeo.73.1.1. — URL: <http://pubs.geoscienceworld.org/economicgeology/article/73/1/1/18978/Magmatic-vapor-plumes-and-groundwater-interaction>.
54. *Hosseini S. M., Feng J. J.* Pressure boundary conditions for computing incompressible flows with SPH // *Journal of Computational Physics*. — 2011. — Авг. — Т. 230, № 19. — С. 7473—7487. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2011.06.013. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111003779>.
55. Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows: A generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves / S. J. Lind [и др.] // *Journal of Computational Physics*. — 2012. — Февр. — Т. 231, № 4. — С. 1499—1523. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2011.10.027. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111006279>.
56. *Jones J. E.* On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 1924. — Окт. — Т. 106, № 738. — С. 463—477. — ISSN 1364-5021. — DOI: 10.1098/rspa.1924.0082.
57. *Khayyer A., Gotoh H., Shimizu Y.* Comparative study on accuracy and conservation properties of two particle regularization schemes and proposal of an optimized particle shifting scheme in ISPH context // *Journal of Computational Physics*. — 2017. — Март. — Т. 332. — С. 236—256. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/

- j.jcp.2016.12.005. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999116306465>.
58. *Kouzmanov K., Pokrovski G. S.* Hydrothermal Controls on Metal Distribution in Porphyry Cu ( -Mo-Au ) Systems // SEG Special Publication. — 2012. — С. 573—618.
59. Lava field evolution and emplacement dynamics of the 2014–2015 basaltic fissure eruption at Holuhraun, Iceland / G. B. Pedersen [и др.] // Journal of Volcanology and Geothermal Research. — 2017. — Июнь. — Т. 340. — С. 155—169. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2017.02.027.
60. *Lees J. M., Gordeev E. I., Ripepe M.* Explosions and periodic tremor at Karymsky volcano, Kamchatka, Russia // Geophysical Journal International. — 2004. — Сент. — Т. 158, № 3. — С. 1151—1167. — ISSN 0956540X. — DOI: 10.1111/j.1365-246X.2004.02239.x. — URL: <https://academic.oup.com/gji/article/158/3/1151/2061944>.
61. Lengths of Lava Flows [and Discussion] / G. P. L. Walker [и др.] // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. — 1973. — Февр. — Т. 274, № 1238. — С. 107—118. — ISSN 00804614. — URL: <http://www.jstor.org/stable/74335>.
62. *Lister J. R.* Viscous flows down an inclined plane from point and line sources // Journal of Fluid Mechanics. — 1992. — Т. 242. — С. 631—653. — ISSN 14697645. — DOI: 10.1017/S0022112092002520.
63. *Liu G. R., Liu M. B.* Smoothed Particle Hydrodynamics. — WORLD SCIENTIFIC, 10.2003. — С. 472. — ISBN 978-981-238-456-0. — DOI: 10.1142/5340. — URL: <http://www.worldscientific.com/worldscibooks/10.1142/5340>.
64. *Lucy L. B.* A numerical approach to the testing of the fission hypothesis // The Astronomical Journal. — 1977. — Дек. — Т. 82. — С. 1013. — ISSN 00046256. — DOI: 10.1086/112164.
65. MAGFLOW: A physics-based model for the dynamics of lava-flow emplacement / A. Cappello [и др.] // Geological Society Special Publication. — 2016. — Т. 426, № 1. — С. 357—373. — ISSN 03058719. — DOI: 10.1144/SP426.16.

66. Magma emplacement rates and porphyry copper deposits: Thermal modeling of the yerington batholith, Nevada / A. Schöpa [и др.] // *Economic Geology*. — 2017. — Ноябрь. — Т. 112, № 7. — С. 1653—1672. — ISSN 15540774. — DOI: 10.5382/econgeo.2017.4525.
67. *Manning C. E., Ingebritsen S. E.* Permeability of the continental crust: Implications of geothermal data and metamorphic systems // *Reviews of Geophysics*. — 1999. — Февр. — Т. 37, № 1. — С. 127—150. — ISSN 87551209. — DOI: 10.1029/1998RG900002.
68. *Melnik O.* Dynamics of two-phase conduit flow of high-viscosity gas-saturated magma: Large variations of sustained explosive eruption intensity // *Bulletin of Volcanology*. — 2000. — Т. 62, № 3. — С. 153—170. — ISSN 02588900. — DOI: 10.1007/s004450000072. — URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s004450000072>.
69. *Melnik O., Sparks R. S.* Dynamics of magma ascent and lava extrusion at Soufrière Hills Volcano, Montserrat // *Geological Society Memoir*. — 2002. — Т. 21, № 1. — С. 153—171. — ISSN 04354052. — DOI: 10.1144/GSL.MEM.2002.021.01.07.
70. *Melnik O., Sparks R. S.* Nonlinear dynamics of lava dome extrusion // *Nature*. — 1999. — Ноябрь. — Т. 402, № 6757. — С. 37—41. — ISSN 00280836. — DOI: 10.1038/46950.
71. Mitigation of lava flow invasion hazard through optimized barrier configuration aided by numerical simulation: The case of the 2001 Etna eruption / S. Scifoni [и др.] // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2010. — Апр. — Т. 192, № 1/2. — С. 16—26. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2010.02.002. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0377027310000363?via%3Dihub>.
72. *Monaghan J. J.* Simulating free surface flows with SPH // *Journal of Computational Physics*. — 1994. — Февр. — Т. 110, № 2. — С. 399—406. — ISSN 00219991. — DOI: 10.1006/jcph.1994.1034. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184710345>.
73. *Monaghan J. J.* Smoothed particle hydrodynamics. — 08.2005. — DOI: 10.1088/0034-4885/68/8/R01. — URL: <http://stacks.iop.org/0034-4885/68/i=8/a=R01?key=crossref.c562820df517a049ca7f11d0aefe49b4>.

74. *Morris J. P., Fox P. J., Zhu Y.* Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH // *Journal of Computational Physics*. — 1997. — Сент. — Т. 136, № 1. — С. 214—226. — ISSN 00219991. — DOI: 10.1006/jcph.1997.5776. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999197957764>.
75. *Mudd G. M., Weng Z., Jowitt S. M.* A Detailed Assessment of Global Cu Resource Trends and Endowments // *Economic Geology*. — 2013. — Абр. — Т. 108, № 5. — С. 1163—1183. — ISSN 0361-0128. — DOI: 10.2113/econgeo.108.5.1163. — URL: <https://pubs.geoscienceworld.org/economicgeology/article/108/5/1163-1183/7>.
76. *Myers T. G., Charpin J. P., Chapman S. J.* The flow and solidification of a thin fluid film on an arbitrary three-dimensional surface // *Physics of Fluids*. — 2002. — Абр. — Т. 14, № 8. — С. 2788—2803. — ISSN 10706631. — DOI: 10.1063/1.1488599. — URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1488599>.
77. *Neri A.* A local heat transfer analysis of lava cooling in the atmosphere: application to thermal diffusion-dominated lava flows // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 1998. — Май. — Т. 81, № 3/4. — С. 215—243. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/S0377-0273(98)00010-9.
78. New massively parallel scheme for Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics (ISPH) for highly nonlinear and distorted flow / X. Guo [и др.] // *Computer Physics Communications*. — 2018. — Т. 233. — С. 16—28. — ISSN 00104655. — DOI: 10.1016/j.cpc.2018.06.006.
79. Numerical simulation of lava flow using a GPU SPH model / A. Hérault [и др.] // *Annals of Geophysics*. — 2011. — Дек. — Т. 54, № 5. — С. 600—620. — ISSN 1593-5213. — DOI: 10.4401/ag-5343. — URL: <https://www.annalsofgeophysics.eu/index.php/annals/article/view/5343>.
80. On lava dome growth, with application to the 1979 lava extrusion of the soufrière of St. Vincent / H. E. Huppert [и др.] // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 1982. — Дек. — Т. 14, № 3/4. — С. 199—222. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/0377-0273(82)90062-2.
81. *Ozerov A., Ispolatov I., Lees J.* Modeling Strombolian eruptions of Karymsky volcano, Kamchatka, Russia // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. —

2003. — Апр. — Т. 122, № 3/4. — С. 265—280. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/S0377-0273(02)00506-1.
82. *Patankar S. V.* Numerical heat transfer and fluid flow. — Hemisphere Publishing Corp, 1980. — ISBN 0070487405.
  83. Permeability and degassing of dome lavas undergoing rapid decompression: An experimental determination / S. Mueller [и др.] // *Bulletin of Volcanology*. — 2005. — Июль. — Т. 67, № 6. — С. 526—538. — ISSN 02588900. — DOI: 10.1007/s00445-004-0392-4. — URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s00445-004-0392-4>.
  84. *Pinkerton H., James M., Jones A.* Surface temperature measurements of active lava flows on Kilauea volcano, Hawai'i // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2002. — Март. — Т. 113, № 1/2. — С. 159—176. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/S0377-0273(01)00257-8.
  85. *Prakash M., Cleary P. W.* Three dimensional modelling of lava flow using Smoothed Particle Hydrodynamics // *Applied Mathematical Modelling*. — 2011. — Июнь. — Т. 35, № 6. — С. 3021—3035. — ISSN 0307904X. — DOI: 10.1016/j.apm.2010.12.023. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X10005226>.
  86. *Ray R., Deb K., Shaw A.* Pseudo-Spring smoothed particle hydrodynamics (SPH) based computational model for slope failure // *Engineering Analysis with Boundary Elements*. — 2019. — Апр. — Т. 101. — С. 139—148. — ISSN 09557997. — DOI: 10.1016/j.enganabound.2019.01.005. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0955799718303011>.
  87. Remote sensing for porphyry copper deposits in southern Arizona / M. J. Abrams [и др.] // *Economic Geology*. — 1983. — Т. 78, № 4. — С. 591—604. — ISSN 03610128. — DOI: 10.2113/gsecongeo.78.4.591.
  88. *Rodriguez B., Samson J.* Magnetotelluric survey to characterize the Sunnyside Porphyry Copper System in the Patagonia Mountains, Arizona : тех. отч. — 2010. — DOI: 10.3133/ofr20101171.
  89. *Sahagian D.* Volcanic eruption mechanisms: Insights from intercomparison of models of conduit processes // *Journal of Volcanology and Geothermal*



- Research. — 2005. — Май. — Т. 143, № 1—3. — С. 1—15. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.12.006.
90. *Sakimoto S. E. H., Zuber M. T.* Flow and convective cooling in lava tubes // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. — 1998. — Ноябрь. — Т. 103, B11. — С. 27465—27487. — ISSN 0148-0227. — DOI: 10.1029/97jb03108.
  91. *Scharff L., Hort M., Gerst A.* The dynamics of the dome at Santiaguito volcano, Guatemala // *Geophysical Journal International*. — 2014. — Т. 197, № 2. — С. 926—942. — ISSN 1365246X. — DOI: 10.1093/gji/ggu069.
  92. *Schwaiger H. F.* An implicit corrected SPH formulation for thermal diffusion with linear free surface boundary conditions // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. — 2008. — Август. — Т. 75, № 6. — С. 647—671. — ISSN 00295981. — DOI: 10.1002/nme.2266. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/nme.2266>.
  93. Semi-implicit 3D SPH on GPU for lava flows / V. Zago [и др.] // *Journal of Computational Physics*. — 2018. — Декабрь. — Т. 375. — С. 854—870. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2018.07.060. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199911830593X>.
  94. *Seo S., Min O.* Axisymmetric SPH simulation of elasto-plastic contact in the low velocity impact // *Computer Physics Communications*. — 2006. — Ноябрь. — Т. 175, № 9. — С. 583—603. — ISSN 0010-4655. — DOI: 10.1016/J.CPC.2006.06.015. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465506002700>.
  95. *Shao S., Lo E. Y.* Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface // *Advances in Water Resources*. — 2003. — Июль. — Т. 26, № 7. — С. 787—800. — ISSN 0309-1708. — DOI: 10.1016/S0309-1708(03)00030-7. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0309170803000307>.
  96. *Sillitoe R. H.* Porphyry Copper Systems // *Economic Geology*. — 2010. — Январь. — Т. 105, № 1. — С. 3—41. — ISSN 0361-0128. — DOI: 10.2113/gsecongeo.105.1.3. — URL: <https://pubs.geoscienceworld.org/economicgeology/article/105/1/3-41/128151>.

97. Simulations of measures to control lava flows / E. Fujita [и др.] // *Bulletin of Volcanology*. — 2009. — Т. 71, № 4. — С. 401—408. — ISSN 02588900. — DOI: 10.1007/s00445-008-0229-7.
98. *Smith W. R.* The propagation and basal solidification of two-dimensional and axisymmetric viscous gravity currents // *Journal of Engineering Mathematics*. — 2004. — Дек. — Т. 50, № 4. — С. 359—378. — ISSN 0022-0833. — DOI: 10.1007/s10665-004-1245-z. — URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10665-004-1245-z>.
99. Solving microscopic flow problems using Stokes equations in SPH / P. Van Liedekerke [и др.] // *Computer Physics Communications*. — 2013. — Июль. — Т. 184, № 7. — С. 1686—1696. — ISSN 00104655. — DOI: 10.1016/j.cpc.2013.02.013. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465513000702>.
100. *Stolper E.* The speciation of water in silicate melts // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. — 1982. — Т. 46, № 12. — С. 2609—2620. — ISSN 00167037. — DOI: 10.1016/0016-7037(82)90381-7.
101. *Takeda H., Miyama S. M., Sekiya M.* Numerical Simulation of Viscous Flow by Smoothed Particle Hydrodynamics // *Progress of Theoretical Physics*. — 1994. — Ноябрь. — Т. 92, № 5. — С. 939—960. — ISSN 0033-068X. — DOI: 10.1143/ptp/92.5.939. — URL: <https://academic.oup.com/ptp/article-lookup/doi/10.1143/ptp/92.5.939>.
102. Temporal evolution of flow conditions in sustained magmatic explosive eruptions / G. Macedonio [и др.] // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2005. — Май. — Т. 143, № 1—3. — С. 153—172. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.09.015.
103. The simulation model SCIARA: The 1991 and 2001 lava flows at Mount Etna / G. M. Crisci [и др.] // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2004. — Апрель. — Т. 132, № 2/3. — С. 253—267. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/S0377-0273(03)00349-4.
104. Unified semi-analytical wall boundary conditions applied to 2-D incompressible SPH / A. Leroy [и др.] // *Journal of Computational Physics*. — 2014. — Март. — Т. 261. — С. 106—129. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2013.12.035.

105. Unified semi-analytical wall boundary conditions for inviscid, laminar or turbulent flows in the meshless SPH method / M. Ferrand [и др.] // International Journal for Numerical Methods in Fluids. — 2013. — Февр. — Т. 71, № 4. — С. 446—472. — ISSN 02712091. — DOI: 10.1002/flid.3666. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/flid.3666>.
106. Unified semi-analytical wall boundary conditions in SPH: analytical extension to 3-D / A. Mayrhofer [и др.] // Numerical Algorithms. — 2015. — Т. 68, № 1. — С. 15—34. — ISSN 15729265. — DOI: 10.1007/s11075-014-9835-y.
107. *Utkin I., Afanasyev A., Melnik O.* Numerical simulation of magma chamber degassing // Goldshmidt Abstracts. — 2018. — С. 2604—2604.
108. *Violeau D.* Dissipative forces for Lagrangian models in computational fluid dynamics and application to smoothed-particle hydrodynamics // Physical Review E. — 2009. — Сент. — Т. 80, № 3. — С. 036705. — ISSN 1539-3755. — DOI: 10.1103/PhysRevE.80.036705. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.036705>.
109. *Violeau D.* Fluid Mechanics and the SPH Method. Т. 97801996555. — Oxford University Press, 05.2012. — С. 1—616. — ISBN 9780199655526. — DOI: 10.1093/acprof:oso/9780199655526.001.0001. — URL: <https://oxford.universitypressscholarship.com/view/10.1093/acprof:oso/9780199655526.001.0001/acprof-9780199655526>.
110. *Violeau D., Leroy A.* Optimal time step for incompressible SPH // Journal of Computational Physics. — 2015. — Май. — Т. 288. — С. 119—130. — ISSN 10902716. — DOI: 10.1016/j.jcp.2015.02.015. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115000856>.
111. Visco-plastic models of isothermal lava domes / N. J. Balmforth [и др.] // Journal of Fluid Mechanics. — 2000. — Янв. — Т. 403. — С. 37—65. — ISSN 00221120. — DOI: 10.1017/S0022112099006916. — URL: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/viscoplastic-models-of-isothermal-lava-domes/9DCCF4FAE1F9CED67184415DD74BDC49>.
112. Viscous dissipation in explosive volcanic flows / E. A. Vedeneva [и др.] // Geophysical Research Letters. — 2005. — Т. 32, № 5. — С. 1—5. — ISSN

00948276. — DOI: 10.1029/2004GL020954. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1029/2004GL020954>.
113. *Wallace P. J.* Volatiles in subduction zone magmas: Concentrations and fluxes based on melt inclusion and volcanic gas data // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. — 2005. — Т. 140, № 1–3. — С. 217–240. — ISSN 03770273. — DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.07.023.
114. *Weis P.* The dynamic interplay between saline fluid flow and rock permeability in magmatic-hydrothermal systems // *Geofluids*. — 2015. — Февр. — Т. 15, № 1/2. — С. 350–371. — ISSN 14688115. — DOI: 10.1111/gfl.12100. — URL: <http://doi.wiley.com/10.1111/gfl.12100>.
115. *Weis P., Driesner T., Heinrich C. A.* Porphyry-copper ore shells form at stable pressure-temperature fronts within dynamic fluid plumes // *Science*. — 2012. — Дек. — Т. 338, № 6114. — С. 1613–1616. — ISSN 10959203. — DOI: 10.1126/science.1225009.
116. *Wendland H.* Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree // *Advances in Computational Mathematics*. — 1995. — Дек. — Т. 4, № 1. — С. 389–396. — ISSN 10197168. — DOI: 10.1007/BF02123482.
117. *Woods A. W., Koyaguchi T.* Transitions between explosive and effusive eruptions of silicic magmas // *Nature*. — 1994. — Т. 370, № 6491. — С. 641–644. — ISSN 00280836. — DOI: 10.1038/370641a0. — URL: <https://www.nature.com/articles/370641a0>.
118. *Афанасьев А., Мельник О.* Численное моделирование формирования линзы концентрированного рассола при дегазации магматического очага // *Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа*. — 2017. — № 3. — С. 88–95. — ISSN 0568-5281. — DOI: 10.7868/s0568528117030100.
119. *Бармин А. А., Мельник О. Э.* Течение загазованной магмы в канале вулкана. // *Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа*. — 1990. — № 5. — С. 35–43.
120. *Веденеева Е. А.* Растекание лавы как неньютоновской жидкости при условии частичного проскальзывания на подстилающей поверхности // *Известия*

- Российской академии наук. Механика жидкости и газа. — 2021. — № 1. — С. 1—14.
121. *Веденеева Е. А., Мельник О. Э., Уткин И. С.* Охлаждение потока лавы, растекающейся по плоской поверхности // Вестник Московского Университета. Серия 1: Математика. Механика. — 2017. — № 4. — С. 36—40.
122. *Калоре К., Цыпкин Г. Г.* Численное моделирование образования осадка при кипении раствора соли в геотермальном резервуаре // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. — 2015. — № 4. — С. 110—118.
123. О влиянии осаждения кварца на динамику дегазации магматического очага / И. Уткин [и др.] // Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. — 2018. — № 6. — С. 59—64.
124. *Слезин Ю.* Динамика дисперсионного режима вулканических извержений: 2. Условие неустойчивости расхода и природа катастрофических эксплозивных извержений // Вулканология и сейсмология. — 1984. — № 1. — С. 23—35.
125. *Слезин Ю.* Основные режимы вулканических извержений // Вулканология и сейсмология. — 1995. — № 2. — С. 72—82.
126. *Слезин Ю., Мельник О. Э.* Динамика газопирокластического извержения с высоковязкой магмой // Вулканология и сейсмология. — 1994. — № 1. — С. 3—12.
127. *Трубицын В. П.* Основы тектоники плавающих континентов // Физика Земли. — 2000. — № 9. — С. 3—40.
128. *Уткин И. С., Мельник О. Э.* Динамика взрывной дегазации вулкана // Труды математического института им. Стеклова. — 2018. — Март. — Т. 300, № 01. — С. 190—196. — ISSN 0371-9685. — DOI: 10.1134/s0371968518010156.
129. *Уткин И. С.* Исследование возможности применения бессеточных методов к численному моделированию лавовых потоков // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ Механики МГУ. — 2017. — С. 179—186.
130. *Уткин И. С.* Исследование возможности применения метода гидродинамики сглаженных частиц к численному моделированию лавовых потоков // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. — 2018. — С. 186—186.

131. *Уткин И. С.* Исследование дегазации вулкана в канале, запертом лавовой пробкой // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ Механики МГУ. — 2015. — С. 223—231.
132. *Уткин И. С.* Численное моделирование формирования медного месторождения // Труды конференции-конкурса молодых ученых НИИ Механики МГУ. — 2018. — С. 138—145.
133. Физическая химия. В 2 кн. Кн. 1. Строение вещества. Термодинамика / К. Краснов [и др.]. — 1995.
134. *Цветкова Ю., Мельник О. Э.* О влиянии неньютоновских свойств магмы на течение в канале вулкана // Доклады Академии Наук. — 2018. — Т. 63, № 11. — С. 485—488.
135. *Цыпкин Г. Г.* О выпадении солей в осадок при испарении раствора в низкопроницаемых породах // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. — 2009. — № 5. — С. 121—128.
136. Численное моделирование формирования медного месторождения с учетом диспропорционирования диоксида серы / И. С. Уткин [и др.] // Сборник трудов XII всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. — 2019. — С. 94—96.
137. *Шваров Ю. В.* HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows // Геохимия. — 2008. — № 8. — С. 898—903.