



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Балашов В.А., Савенков Е.Б.**

Численное исследование  
двумерной  
квазигидродинамической  
модели течения двухфазной  
изотермической жидкости с  
учетом поверхностных  
эффектов

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численное исследование двумерной квазигидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 13. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2016-13](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-13)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-13>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ОРДЕНА ЛЕНИНА  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М. В. КЕЛДЫША

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

**Численное исследование двумерной  
квазигидродинамической модели течения  
двухфазной изотермической жидкости  
с учетом поверхностных эффектов**

Москва, 2016

*В.А. Балашов, Е.Б. Савенков*, Численное исследование двумерной квази-гидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов

### **Аннотация**

В работе представлены результаты численного исследования ряда двумерных двухфазных изотермических задач. В качестве математической модели используется ранее предложенная модификация квазигидродинамической системы уравнений для описания течений многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов. Результаты расчетов показывают, что рассматриваемая модель качественно верно описывает характер эволюции межфазной границы.

**Ключевые слова:** Квазигидродинамическая система уравнений, многофазная гидродинамика

*V.A. Balashov, E.B. Savenkov*, Numerical study of two-dimensional quasi-hydrodynamical model of two-phase isothermal fluid flow with surface effects

### **Abstract**

The numerical simulation results of several two-dimensional two-phase isothermal flows are presented in the paper. The mathematical model is based on earlier proposed modification of quasi-hydrodynamical equations for description of multicomponent multiphase model with surface effects. Simulation results show that description of interphase boundary evolution by aforementioned model is qualitatively correct.

**Key words and phrases:** Quasi-hydrodynamic equations, multiphase flows

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-11-0059)

# 1 Введение

Система квазигидродинамических (КГиД) уравнений является модификацией системы уравнений Навье–Стокса, в которую включены малые физически обоснованные слагаемые диссипативного характера [1, 2]. Их малость гарантирует, что модифицированные модели можно использовать для анализа течений, описываемых классическими моделями гидродинамики.

В работе авторов [3] предложен вариант КГиД уравнений для описания многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов. Предложенная модель является моделью типа «диффузной границы».

Среди множества используемых в настоящее время вычислительных подходов для моделирования движения многофазной жидкости с прямым разрешением контактных границ известно два подхода для физико-математической формализации описания процессов, происходящих на границе раздела жидкостей (например, двух фаз с одним компонентным составом, но в разных агрегатных состояниях). Эти подходы носят названия моделей «четкой границы» («sharp interface») и «диффузной границы» («diffuse interface»). В рамках каждого из подходов в настоящее время предложен целый ряд моделей для описания течений многофазной жидкости, которые отличаются от других моделей своего класса скорее техническими деталями: конкретным видом тех или иных определяющих соотношений, техническими особенностями способа описания границы раздела фаз и т.д.

Модель «четкой границы» предполагает, что граница раздела фаз является математической поверхностью (геометрическим объектом нулевой «толщины»). Значения описывающих течение параметров, отнесенных к различным сторонам границы раздела (рис. 1a), могут иметь разрыв и связаны между собой дополнительными условиями.

Модели типа «диффузной границы» предполагают, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы (рис. 1b). Ширина «границы» определяется действующими в жидкости силами межмолекулярного притяжения и отталкивания.

Отметим, что для многих моделей типа «диффузной границы» показано, что в пределе исчезающе малой толщины переходного слоя они вырождаются в классические модели «четкой границы».

При использовании моделей «четкой границы» в ряде вычислительных алгоритмов «размазывание» границы между фазами также происходит, однако является лишь удобным вычислительным приемом или дефектом разностной схемы, связанным с ее диссипативными свойствами. В моделях типа «диффузной границы» конечная ширина границы является физическим, а не численным эффектом.

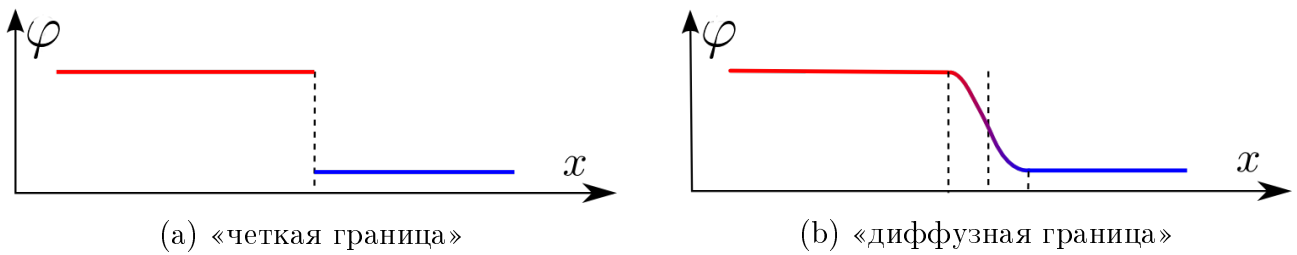


Рис. 1. Представление межфазной границы в моделях «четкой границы» и «диффузной границы». Параметр  $\varphi(x)$  описывает, например, концентрацию одной из фаз в пространстве.

Для описания распределения фаз в моделях типа «диффузной границы» используется вспомогательное поле, которое называют «фазовым полем» или «параметром порядка». Это поле может иметь физический смысл или описывать распределение некоторого формального признака, описывающего «микроструктуру» среды в заданной точке пространства и времени.

Например, в случае описания однокомпонентной жидкости с фазовыми переходами («жидкость–пар») в качестве параметра порядка может выступать плотность среды, а для двухкомпонентных несмешивающихся двухфазных сред (например, смесь «вода–масло») — объемная или массовая концентрация одной из фаз.

Для создания математической модели, описывающей подобные процессы, в работе [3] использован подход, предложенный в работах [4–6]. Он основан на том соображении, что фундаментальные физические законы, определяющие эволюцию энергии жидкости, должны учитывать работу, связанную с каждым кинематическим процессом (который в рассматриваемом случае связан с изменением параметра порядка). Таким образом, в рамках изложенной в работах [4–6] теории, весьма правдоподобно наличие некоторых «микросил», работа которых сопровождает изменения параметра порядка (по сути, микроструктуры среды).

Более детально формализм математических моделей с использованием концепции микросил и микронапряжений и его приложения для построения математических моделей в различных областях физики описаны в работах [4–8].

В предыдущей работе авторов [3] указанный формализм был применен для построения математической модели течения многокомпонентной многофазной жидкости в рамках квазигидродинамического подхода.

В настоящей работе представлены результаты расчетов ряда задач с использованием частного случая предложенной в [3] модели. Целью моделирования являлась проверка способности предложенной модели описывать ряд особенностей, специфичных для течений многофазных жидкостей с учетом поверхностных эффектов.

## 2 Математическая модель

В настоящем разделе приведены основные уравнения используемой математической модели. Детальный вывод этих уравнений представлен в [3].

Будем считать, что жидкость состоит из  $N$  компонентов, причем в произвольном физически бесконечно малом объеме могут присутствовать все из них. Пусть в объеме пространства  $dV$  содержится жидкость массы  $dm$ , и отдельные компоненты занимают объем  $dV_\alpha$  и имеют массу  $dm_\alpha$ ,  $\alpha = \overline{1, N}$ :

$$dm = \sum_{\alpha=1}^N dm_\alpha.$$

Плотность жидкости и («натуральную») плотность составляющих ее компонентов определим как:

$$\rho = \frac{dm}{dV}, \quad \hat{\rho}_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha}, \quad \alpha = \overline{1, N},$$

при этом выполняется соотношение:

$$\rho dV = \sum_{\alpha=1}^N \hat{\rho}_\alpha dV_\alpha.$$

Введем также плотность компонента, отнесенную к объему  $dV$  жидкости в целом:

$$\rho_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV} = \frac{dm_\alpha}{dV_\alpha} \cdot \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Тогда

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha, \quad \rho_\alpha = \hat{\rho}_\alpha \frac{dV_\alpha}{dV}.$$

Величину  $C_\alpha = \rho_\alpha/\rho$  будем называть массовой концентрацией (массовой долей) компонента  $\alpha$ . Тогда  $\rho_\alpha = C_\alpha \rho$  и  $\sum_{i=1}^N C_\alpha = 1$ .

Законы сохранения массы, импульса и энергии для течения многокомпонентной многофазной вязкой теплопроводной сжимаемой жидкости имеют следующий вид [3]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0,$$

$$\frac{\partial \rho C_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m C_\alpha) = \operatorname{div} (M \nabla \mu_\alpha), \quad \alpha = \overline{1, N-1}.$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) = \operatorname{div} \mathbf{P} + \rho \mathbf{f},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m E) &= \\ &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho r + \left[ \operatorname{div} \left( \frac{d\rho}{dt} \lambda \nabla \rho \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[ \mu_\alpha m_\alpha + \operatorname{div}(\mu_\alpha M_\alpha \nabla \mu_\alpha) + \operatorname{div} \left( \frac{dC_\alpha}{dt} \lambda_\alpha \rho \nabla C_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right], \end{aligned}$$

где  $E = \varepsilon + \mathbf{u}^2/2$  — массовая плотность полной энергии,  $\varepsilon$  — массовая плотность внутренней энергии,  $\mathbf{u}$  — вектор скорости,  $\mathbf{f}$  — вектор массовой плотности внешних сил,  $\mathbf{q}$  — вектор плотности потока тепла,  $r$  — массовая плотность внешних источников энергии,  $\gamma_\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\lambda_\alpha$ ,  $\lambda$  — внешние микросилы и соответствующие коэффициенты [3, 4, 7].

Выписанные выше уравнения необходимо дополнить определяющими соотношениями, которые приведены ниже.

### Свободная энергия Гельмгольца

$$\Psi(\rho, \nabla \rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T) = \Psi_0(\rho, C_\alpha, T) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla \rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2, \quad (1)$$

где  $\lambda = \lambda(C_\alpha) \geq 0$ ,  $\lambda_\alpha = \text{const} \geq 0$ .

«Локальная часть»  $\Psi_0$  может быть представлена в виде

$$\Psi_0(\rho, C_\alpha, T) = \Psi_{sep}(C_\alpha, T) + \sum_{i=1}^N C_i \Psi_i(\rho, T).$$

Во многих работах [9–11] используется полиномиальное выражение для «разделяющей» части  $\Psi_{sep}$ . Например, для случая  $N = 2$ :

$$\Psi_{sep} = A_\psi C_1^2 C_2^2 = A_\psi C^2 (1 - C)^2. \quad (2)$$

Из рисунка 2 явно видно, что  $\Psi_{sep}$  имеет два локальных минимума в точках  $C = 0$  и  $C = 1$ , и один локальный максимум при  $C = 1/2$ . Поскольку свободная энергия Гельмгольца убывает по мере приближения системы к состоянию равновесия, то положение является  $C = 1/2$  неустойчивым, а  $C = 0$  и  $C = 1$  — устойчивыми.

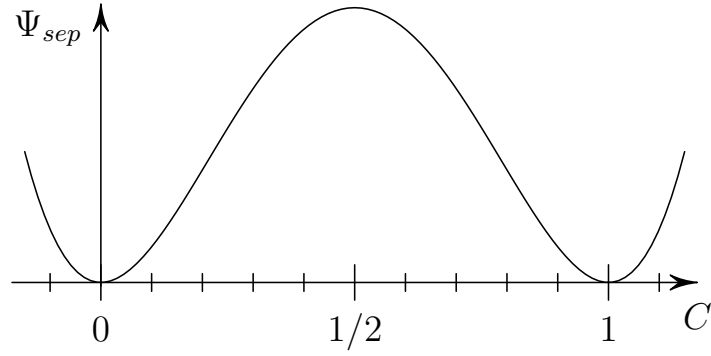


Рис. 2. Вид свободной энергии разделения  $\Psi_{sep}$  как функции концентрации.

Для  $N \geq 3$  можно положить [12]:

$$\Psi_{sep} = \sum_{\beta < \alpha} A_{\psi}^{\alpha, \beta} C_{\alpha}^2 C_{\beta}^2 + \sum_{\alpha=1}^N l_{\alpha}(T) C_{\alpha}^2 (3 - 2C_{\alpha}),$$

где  $A_{\psi}^{\alpha, \beta}$  — некоторые положительные константы, а  $l_{\alpha}(T)$  — линейные функции температуры. Другие примеры задания вида свободной энергии можно найти, например, в работах [7, 9, 10, 12, 13].

### Плотность потока массы

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}).$$

Для вектора  $\mathbf{w}$  может быть выбрано, по крайней мере, два определяющих соотношения [3]:

$$\mathbf{w}_1 = \frac{\tau}{\rho} \left[ \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \rho \mathbf{f} + \nabla p - \nabla \left( \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 \right) - \right. \\ \left. - \nabla(\rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho)) + \operatorname{div} \mathbf{Q} - \nabla(\rho \gamma) - \nabla(\zeta \operatorname{div}(\mathbf{u} - \mathbf{w}_1)) \right], \quad (3)$$

$$\mathbf{w}_2 = \frac{\tau}{\rho} \left[ \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \rho \mathbf{f} + \nabla p - \nabla \left( \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 \right) - \right. \\ \left. - \nabla(\rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho)) + \operatorname{div} \mathbf{Q} - \nabla(\rho \gamma) + \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{u}) \right]. \quad (4)$$



В случае (3) вектор  $\mathbf{w}_1$  задан «неявно», тогда как в случае (4) вектор  $\mathbf{w}_2$  может быть вычислен явно как функция от параметров задачи. Соответственно для вектора  $\mathbf{a}$  имеем:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - p(\mathbf{u} - \mathbf{w}_1) + \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}_1) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}_1 + \\ &\quad + (\mathbf{u} - \mathbf{w}_1) \left[ \rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + \zeta \operatorname{div}(\mathbf{u} - \mathbf{w}_1) \right], \\ \mathbf{a}_2 &= \mathbf{P}^d \cdot \mathbf{u} - p(\mathbf{u} - \mathbf{w}_2) + \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}_2) + \mathbf{Q}^d \cdot \mathbf{w}_2 - \zeta \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{w}_2 + 2\zeta \mathbf{w}_2 \operatorname{div} \mathbf{u} + \\ &\quad + (\mathbf{u} - \mathbf{w}_2) \left[ \rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} + \rho \gamma + \zeta \operatorname{div} \mathbf{u} \right].\end{aligned}$$

При условии  $\zeta = 0$  оба замыкания совпадают:  $\mathbf{w}_1 \equiv \mathbf{w}_2$ ,  $\mathbf{a}_1 \equiv \mathbf{a}_2$ .

### Тензоры $\mathbf{P}$ и $\mathbf{Q}$

Выражения для тензора  $\mathbf{Q}$ , учитывающего поверхностные эффекты, его девиатора и шаровой части имеют вид:

$$\mathbf{Q} = \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} \nabla C_{\alpha} \otimes \nabla C_{\alpha},$$

$$\mathbf{Q}^d = \mathbf{Q} - \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \mathbf{Q})\mathbf{I}, \quad \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{Q} = \lambda |\nabla|^2 + \rho \sum_{\alpha}^{N-1} \lambda_{\alpha} |\nabla C|^2.$$

Выражения для тензора напряжений  $\mathbf{P}$  и его девиатора:

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \eta \left[ \nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T \right] - \eta \frac{2}{3} \mathbf{I} \operatorname{div} \mathbf{u} - p \mathbf{I} + \\ &\quad + \left( \rho \operatorname{div}(\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{I} - \mathbf{Q} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \quad (5) \\ \mathbf{P}^d &= \eta \left[ (\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T \right] - \eta \frac{2}{3} (\operatorname{div} \mathbf{u}) \mathbf{I} - \mathbf{Q}^d.\end{aligned}$$

Здесь  $\eta$  — динамическая вязкость,  $p$  — термодинамическое давление:

$$p = \rho^2 \frac{\partial \Psi_0}{\partial \rho} = \rho^2 \sum_{i=1}^N C_i \frac{\partial \Psi_i}{\partial \rho}.$$

### Обобщенный химический потенциал

$$\mu_{\alpha} = \frac{\partial \Psi_0}{\partial C_{\alpha}} - \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\lambda_{\alpha} \rho \nabla C_{\alpha}) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial \lambda}{\partial C_{\alpha}} |\nabla \rho|^2 - \frac{\gamma_{\alpha}}{\rho} + B_{\alpha} \frac{1}{\rho} \frac{dC_{\alpha}}{dt}. \quad (6)$$

Для коэффициента подвижности примем  $M = M_0 C(1 - C)$  (degenerate mobility). Здесь  $M_0 > 0$  — константа. Такое задание значительно уменьшает диффузию вне межфазной границы.

### 3 Двухфазная изотермическая модель

В настоящем разделе приведен более простой вариант описанной выше модели, который в дальнейшем использован для численного исследования.

А именно, будем рассматривать пространственно-двумерный случай, и будем считать, что присутствует всего два компонента  $N = 2$ , течение изотермическое, массовые силы и объемная вязкость отсутствуют:  $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ ,  $\zeta = 0$ . Коэффициент  $\lambda_1$  считаем постоянным. Положим  $\lambda = 0$ ,  $\gamma_\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $B_\alpha = 0$ .

Расчетная область имеет форму квадрата, на границах которого заданы периодические граничные условия.

Положим  $\Psi_1(\rho) = \Psi_2(\rho) = c_s^2 \ln(\rho/\rho_0)$ , где  $c_s$  — постоянная скорость звука,  $\rho_0$  — некоторая постоянная отсчетная плотность.

Для энергии  $\Psi_{sep}$  выберем выражение (2). Тогда

$$\Psi_0 = C\Psi_1(\rho) + (1 - C)\Psi_2(\rho) + A_\psi C^2(1 - C)^2, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial C} = 2A_\psi C(1 - C)(1 - 2C), \quad (8)$$

так как в рассматриваемом случае имеем  $\Psi_1(\rho) - \Psi_2(\rho) = 0$ .

Обобщенный химический потенциал принимает вид

$$\mu = 2A_\psi C(1 - C)(1 - 2C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C).$$

Уравнения для двумерного случая в декартовой ортогональной системе координат имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx}}{\partial x} + \frac{\partial j_{my}}{\partial y} = 0, \quad (9a)$$

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} u_x}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} u_x}{\partial y} = \frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yx}}{\partial y}, \quad (9b)$$

$$\frac{\partial \rho u_y}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} u_y}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} u_y}{\partial y} = \frac{\partial P_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y}, \quad (9c)$$

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial j_{mx} C}{\partial x} + \frac{\partial j_{my} C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( M \frac{\partial \mu}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( M \frac{\partial \mu}{\partial y} \right). \quad (9d)$$

Компоненты тензора напряжений:

$$P_{xx} = 2\eta \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2\eta}{3} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - p - Q_{xx} + \rho u_x w_x, \quad (10a)$$

$$P_{xy} = \eta \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) - Q_{xy} + \rho u_x w_y, \quad (10b)$$

$$P_{yx} = \eta \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) - Q_{yx} + \rho u_y w_x, \quad (10c)$$

$$P_{yy} = 2\eta \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{2\eta}{3} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) - p - Q_{yy} + \rho u_y w_y. \quad (10d)$$

Компоненты вектора  $\mathbf{w}$ :

$$w_x = \frac{\tau}{\rho} \left( \rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial Q_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial Q_{yx}}{\partial y} \right), \quad (11a)$$

$$w_y = \frac{\tau}{\rho} \left( \rho u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + \rho u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial Q_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial Q_{yy}}{\partial y} \right). \quad (11b)$$

Компоненты тензора  $\mathbf{Q}$ :

$$Q_{xx} = \rho \lambda_1 \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)^2, \quad (12a)$$

$$Q_{yx} = Q_{xy} = \rho \lambda_1 \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (12b)$$

$$Q_{yy} = \rho \lambda_1 \left( \frac{\partial C}{\partial y} \right)^2. \quad (12c)$$

Обобщенный химический потенциал:

$$\mu = 2A_\psi C(1-C)(1-2C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]. \quad (13)$$

### 3.1 Разностная схема

Для аппроксимации по времени системы уравнений (9) использована явная схема по времени с первым порядком точности. Производные по пространству аппроксимированы центральными разностями.

Расчетная сетка является декартовой ортогональной с равными шагами по пространству  $h_x = h_y = h$ . Шаг по времени —  $\Delta t$ . Во всех приведенных ниже расчетах  $\tau = \alpha^* h / c_s$ . Устойчивость используемых аппроксимаций

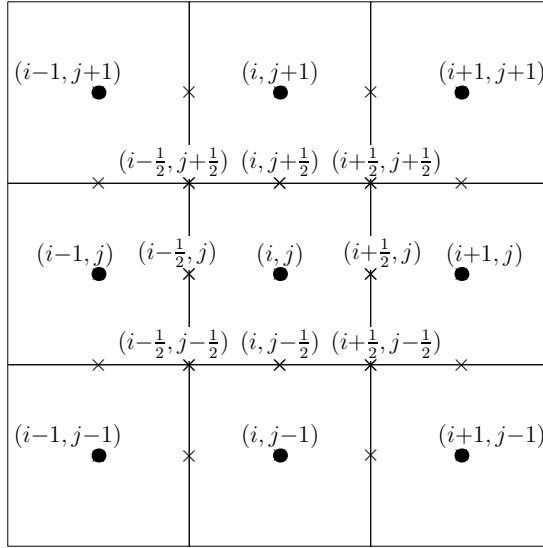


Рис. 3. Ячейки и узлы расчетной сетки.

обеспечивается дополнительными физически обоснованными квазигидродинамическими добавками, пропорциональными  $\tau$ .

Расчетный узел с целыми индексами  $(i, j)$  соответствует геометрическому центру ячейки разностной сетки. Координаты геометрического центра ячейки с номером  $(i, j)$  имеют вид:  $(x_i, y_j) = (ih, jh)$ . Узел с одним полуцелым индексом соответствует грани ячейки, а с двумя — углу (см. рисунок 3). Неизвестные величины отнесены к центрам ячеек.

Для краткости введем обозначения для пространственных производных в узле с индексами  $(i, j)$ :

$$D_x^h(\xi)_{i,j} = \frac{(\xi)_{i+\frac{1}{2},j} - (\xi)_{i-\frac{1}{2},j}}{h}, \quad D_y^h(\xi)_{i,j} = \frac{(\xi)_{i,j+\frac{1}{2}} - (\xi)_{i,j-\frac{1}{2}}}{h}.$$

Также обозначим  $\widehat{\xi}_{i,j} = \xi_{i,j}^{n+1}$ ,  $\xi_{i,j} = \xi_{i,j}^n$ . Всюду нижние индексы соответствуют узлам по пространству, а верхние — временным слоям.

Значение переменной  $\xi \in \{\rho, u_x, u_y, p, C\}$  в полуцелых узлах вычисляется по формулам:

$$\xi_{i\pm\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2}(\xi_{i\pm 1,j} + \xi_{i,j}), \quad (14a)$$

$$\xi_{i,j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\xi_{i,j\pm 1} + \xi_{i,j}), \quad (14b)$$

$$\xi_{i\pm\frac{1}{2},j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}(\xi_{i\pm 1,j\pm 1} + \xi_{i\pm 1,j} + \xi_{i,j\pm 1} + \xi_{i,j}). \quad (14c)$$

Значение некоторой функции  $f$  от переменной  $\xi$  в узле  $(i, j)$ , в том числе и в полуцелых точках, вычисляется как:  $f_{i,j}(\xi) = f(\xi_{i,j})$ .

В приведенных ниже разностных соотношениях индексы  $i, j$  могут принимать только целые значения. В результате разностная аппроксимация уравнений (9)–(13) примет вид:

$$\frac{\widehat{\rho}_{i,j} - \rho_{i,j}}{\Delta t} + D_x^h(j_{mx})_{i,j} + D_y^h(j_{my})_{i,j} = 0, \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\widehat{\rho u_x})_{i,j} - (\rho u_x)_{i,j}}{\Delta t} + D_x^h(j_{mx}u_x)_{i,j} + D_y^h(j_{my}u_x)_{i,j} = \\ = D_x^h(P_{xx})_{i,j} + D_y^h(P_{yx})_{i,j}, \end{aligned} \quad (15b)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\widehat{\rho u_y})_{i,j} - (\rho u_y)_{i,j}}{\Delta t} + D_x^h(j_{mx}u_y)_{i,j} + D_y^h(j_{my}u_y)_{i,j} = \\ = D_x^h(P_{xy})_{i,j} + D_y^h(P_{yy})_{i,j}, \end{aligned} \quad (15c)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\widehat{\rho C})_{i,j} - (\rho C)_{i,j}}{\Delta t} + D_x^h(j_{mx}C)_{i,j} + D_y^h(j_{my}C)_{i,j} = \\ = \frac{1}{h} \left[ M_{i+\frac{1}{2},j} \left( \frac{\mu_{i+1,j} - \mu_{i,j}}{h} \right) - M_{i-\frac{1}{2},j} \left( \frac{\mu_{i,j} - \mu_{i-1,j}}{h} \right) \right] + \\ + \frac{1}{h} \left[ M_{i,j+\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu_{i,j+1} - \mu_{i,j}}{h} \right) - M_{i,j-\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu_{i,j} - \mu_{i,j-1}}{h} \right) \right]. \end{aligned} \quad (15d)$$

В приведенных ниже соотношениях индексы  $i, j$  могут принимать как целые так и полуцелые значения.

$$\begin{aligned} (P_{xx})_{i,j} = 2\eta D_x^h(u_x)_{i,j} - \frac{2\eta}{3} \left( D_x^h(u_x)_{i,j} + D_x^h(u_y)_{i,j} \right) - \\ - p_{i,j} - (Q_{xx})_{i,j} + (\rho)_{i,j}(u_x)_{i,j}(w_x)_{i,j}, \end{aligned} \quad (16a)$$

$$(P_{xy})_{i,j} = \eta \left( D_y^h(u_x)_{i,j} + D_x^h(u_y)_{i,j} \right) - (Q_{xy})_{i,j} + \rho_{i,j}(u_x)_{i,j}(w_y)_{i,j}, \quad (16b)$$

$$(P_{yx})_{i,j} = \eta \left( D_x^h(u_y)_{i,j} + D_y^h(u_x)_{i,j} \right) - (Q_{yx})_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j}(w_x)_{i,j}, \quad (16c)$$

$$\begin{aligned} (P_{yy})_{i,j} = 2\eta D_y^h(u_y)_{i,j} - \frac{2\eta}{3} \left( D_x^h(u_x)_{i,j} + D_x^h(u_y)_{i,j} \right) - \\ - p_{i,j} - (Q_{yy})_{i,j} + (\rho)_{i,j}(u_y)_{i,j}(w_y)_{i,j}. \end{aligned} \quad (16d)$$

$$\begin{aligned} (w_x)_{i,j} = \frac{\tau_{i,j}}{\rho_{i,j}} \left[ \rho_{i,j}(u_x)_{i,j} D_x^h(u_x)_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j} D_y^h(u_x)_{i,j} + \right. \\ \left. + D_x^h p_{i,j} + D_x^h(Q_{xx})_{i,j} + D_y^h(Q_{yx})_{i,j} \right], \end{aligned} \quad (17a)$$

$$(w_y)_{i,j} = \frac{\tau_{i,j}}{\rho_{i,j}} \left[ \rho_{i,j}(u_x)_{i,j} D_x^h(u_y)_{i,j} + \rho_{i,j}(u_y)_{i,j} D_y^h(u_y)_{i,j} + \right. \\ \left. + D_y^h p_{i,j} + D_x^h(Q_{xy})_{i,j} + D_y^h(Q_{yy})_{i,j} \right]. \quad (17b)$$

$$(Q_{xx})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_x^h C_{i,j})^2, \quad (18a)$$

$$(Q_{xy})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_x^h C_{i,j}) (D_y^h C_{i,j}), \quad (18b)$$

$$(Q_{yx})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_y^h C_{i,j}) (D_x^h C_{i,j}), \quad (18c)$$

$$(Q_{yy})_{i,j} = \rho_{i,j} \lambda_1 (D_y^h C_{i,j})^2. \quad (18d)$$

$$\mu_{i,j} = 2A_\psi C_{i,j}(1 - C_{i,j})(1 - 2C_{i,j}) - \\ - \frac{\lambda_1}{h} \left[ \rho_{i+\frac{1}{2},j} \left( \frac{C_{i+1,j} - C_{i,j}}{h} \right) - \rho_{i-\frac{1}{2},j} \left( \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{h} \right) \right] - \\ - \frac{\lambda_1}{h} \left[ \rho_{i,j+\frac{1}{2}} \left( \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{h} \right) - \rho_{i,j-\frac{1}{2}} \left( \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{h} \right) \right]. \quad (19)$$

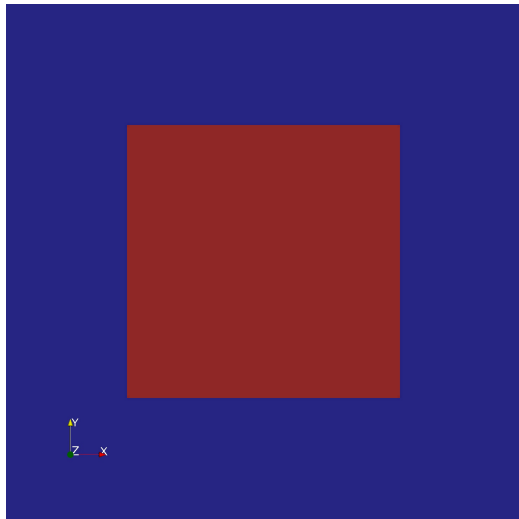
## 4 Примеры расчетов

В данном разделе представлены примеры расчетов по описанной выше схеме с целью численного исследования описанной модели двумерного изотермического двухфазного течения с учетом поверхностных эффектов.

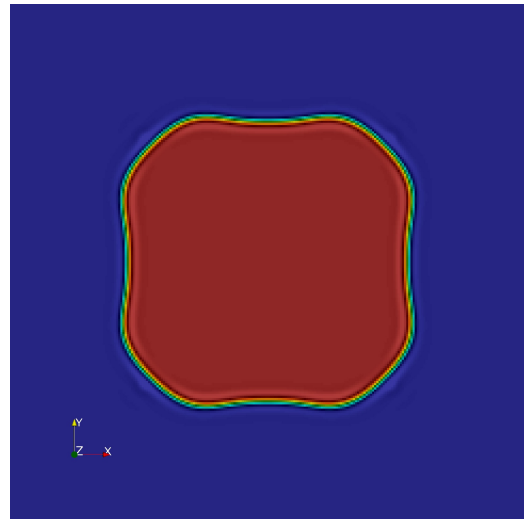
Значения параметров:  $M_0 = 10^{-6}$ ,  $\lambda_1 = 0.25$ ,  $A_\psi = 0.25$ ,  $\eta = 0.08$ ,  $\alpha^* = 0.5$ , шаг по времени  $\Delta t = 10^{-6}$ ,  $\tau = \alpha^* h / c_s$ , скорость звука  $c_s = 1400$ . Здесь и далее размерные переменные приведены в системе СИ, см. раздел 6.

### 4.1 «Квадратная» капля

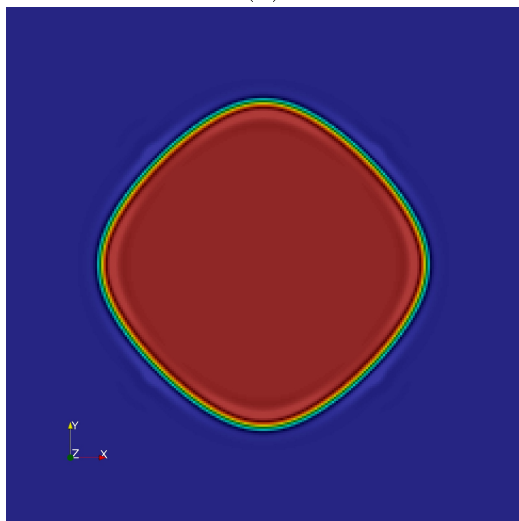
Рассмотрим теперь результаты расчета эволюции капли, изначально имеющей квадратную форму (см. рисунок 4а). Красным цветом помечена область с концентрацией  $C = 0.85$ , а синим — с концентрацией  $1 - C = 0.15$ . Постепенно граница капли начинает размываться, что естественно для моделей рассматриваемого типа. Первыми начинают округляться углы, поскольку в них кривизна границы самая большая, и, как следствие, большая величина поверхностных сил. Через некоторое время капля приобретает круглую форму (см. рисунок 4). Для расчетов выбрана сетка  $250 \times 250$  с шагом  $h = 1/250$ .



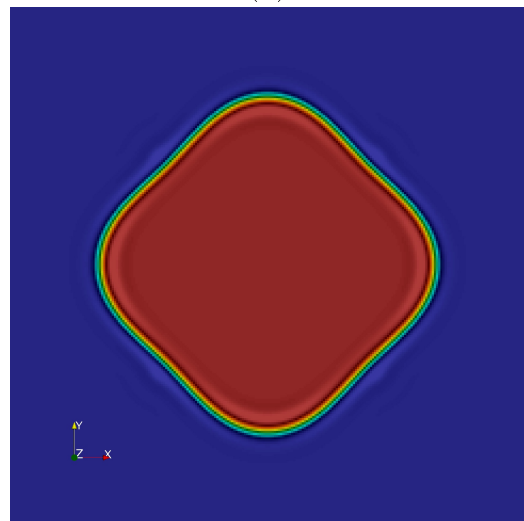
(a)



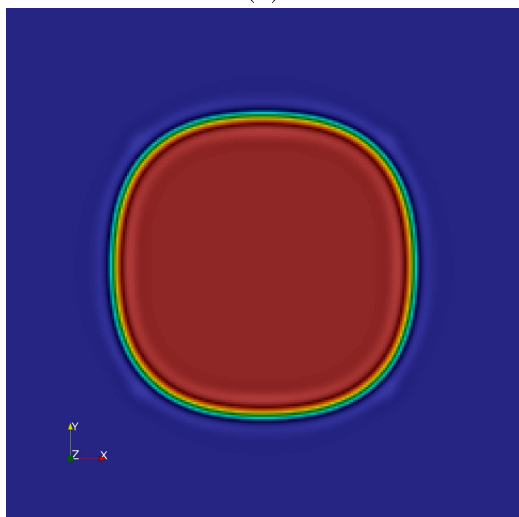
(b)



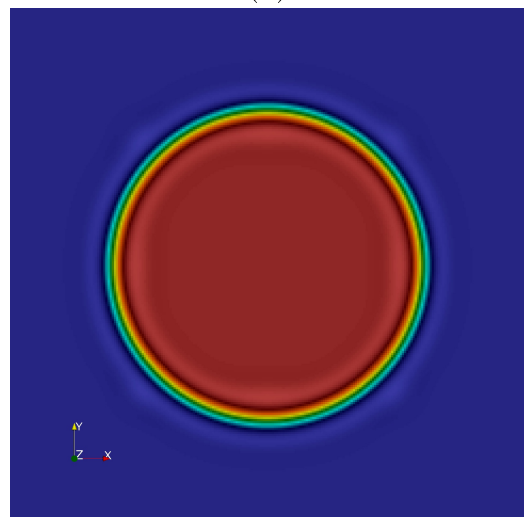
(c)



(d)



(e)



(f)

Рис. 4. Последовательные этапы эволюции капли квадратной формы.

## 4.2 Слияние двух капель

В разделе рассмотрены результаты расчета слияния двух близко расположенных капель. На рисунке 5а показано начальное распределение поля концентрации. Красным цветом помечена область с концентрацией  $C = 0.9$ , а синим — с концентрацией  $1 - C = 0.1$ . Как и в предыдущем случае, граница постепенно начинает размываться. Границы капель соприкасаются друг с другом, образуется «шейка», и довольно быстро капли сливаются. Затем новообразованная капля, постепенно, принимает круглую форму. Для расчета выбрана сетка  $250 \times 250$  ячеек с шагом  $h = 1/250$ .

## 4.3 Спинодальный распад

Ниже представлены результаты расчета спинодального распада — спонтанного разделения однородной среды на две фазы [14–16].

В начальный момент времени значение в каждой расчетной ячейке выбрано случайным образом из промежутка  $[0.45, 0.55]$ . Смесь начинает «распадаться» на отдельные фазы, поскольку значение  $C = 0.5$  неустойчиво по отношению к малым возмущениям. По мере распада образуется множество капель, которые начинают сливаться. Сначала процесс происходит довольно быстро, затем постепенно начинает замедляться. На рисунках 6 показаны последовательные этапы разделения смеси.

В данном расчете использовано  $A_\psi = 10^4$ , расчетная сетка  $200 \times 200$  ячеек с шагом  $h = 1/200$ .

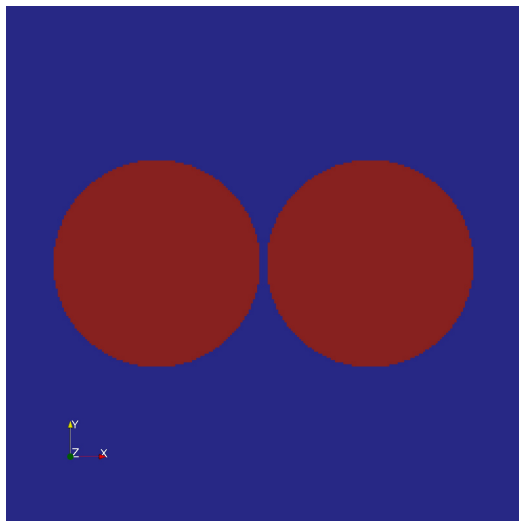
## 5 Заключение

В работе рассмотрено применение разработанной ранее математической модели, учитывающей поверхностные эффекты [3], для расчета двухфазных изотермических двумерных модельных течений на примерах эволюции капли квадратной формы, слияния двух капель и спинодального распада (спонтанного разделения однородной смеси на две фазы). Результаты расчетов показывают, что использованная модель и алгоритм качественно верно описывают эволюцию межфазной границы.

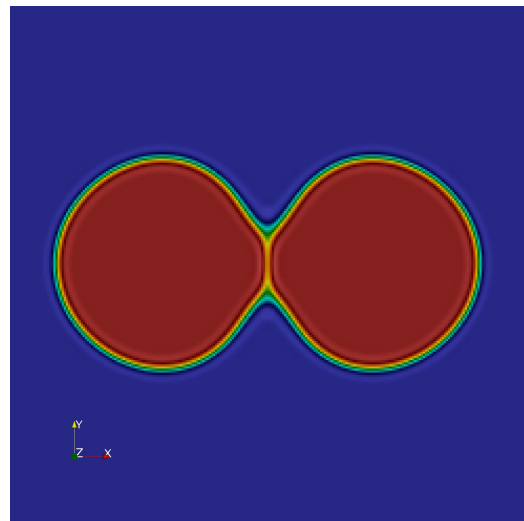
## 6 Размерности основных величин

В данном разделе для удобства выпишем размерности основных величин. Координата  $[x] = \text{м}$ ; скорость  $[u] = \text{м/с}$ ; время  $[t] = \text{с}$ ; динамическая вязкость  $[\eta] = \text{Па} \cdot \text{с}$ ; массовая плотность свободной энергии  $[\Psi] = \text{Дж/кг}$ ; плот-

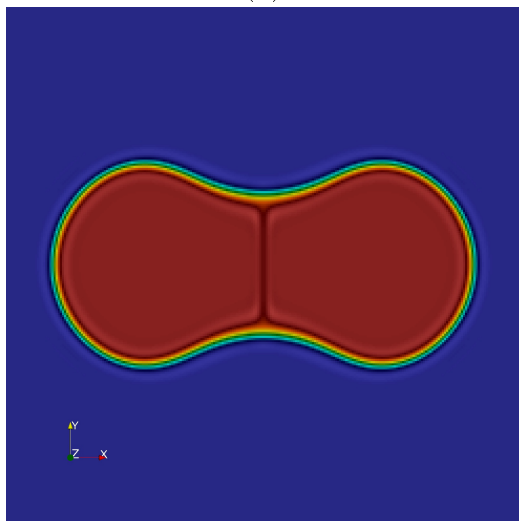




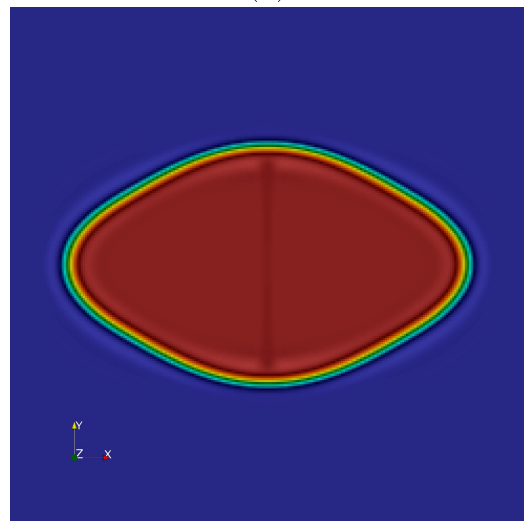
(a)



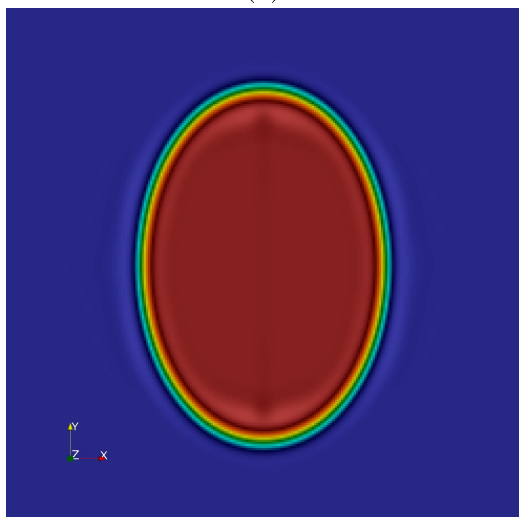
(b)



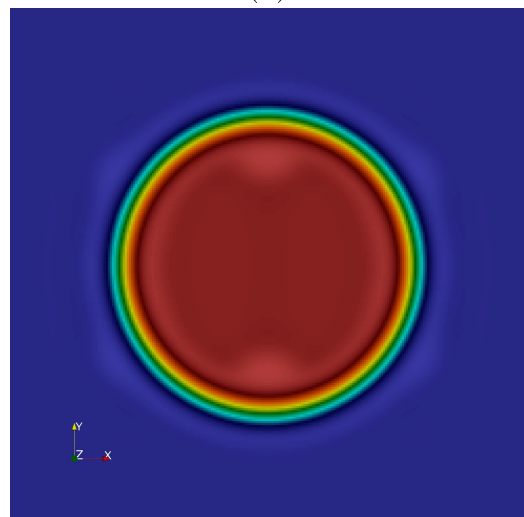
(c)



(d)



(e)



(f)

Рис. 5. Последовательные этапы слияния двух капель

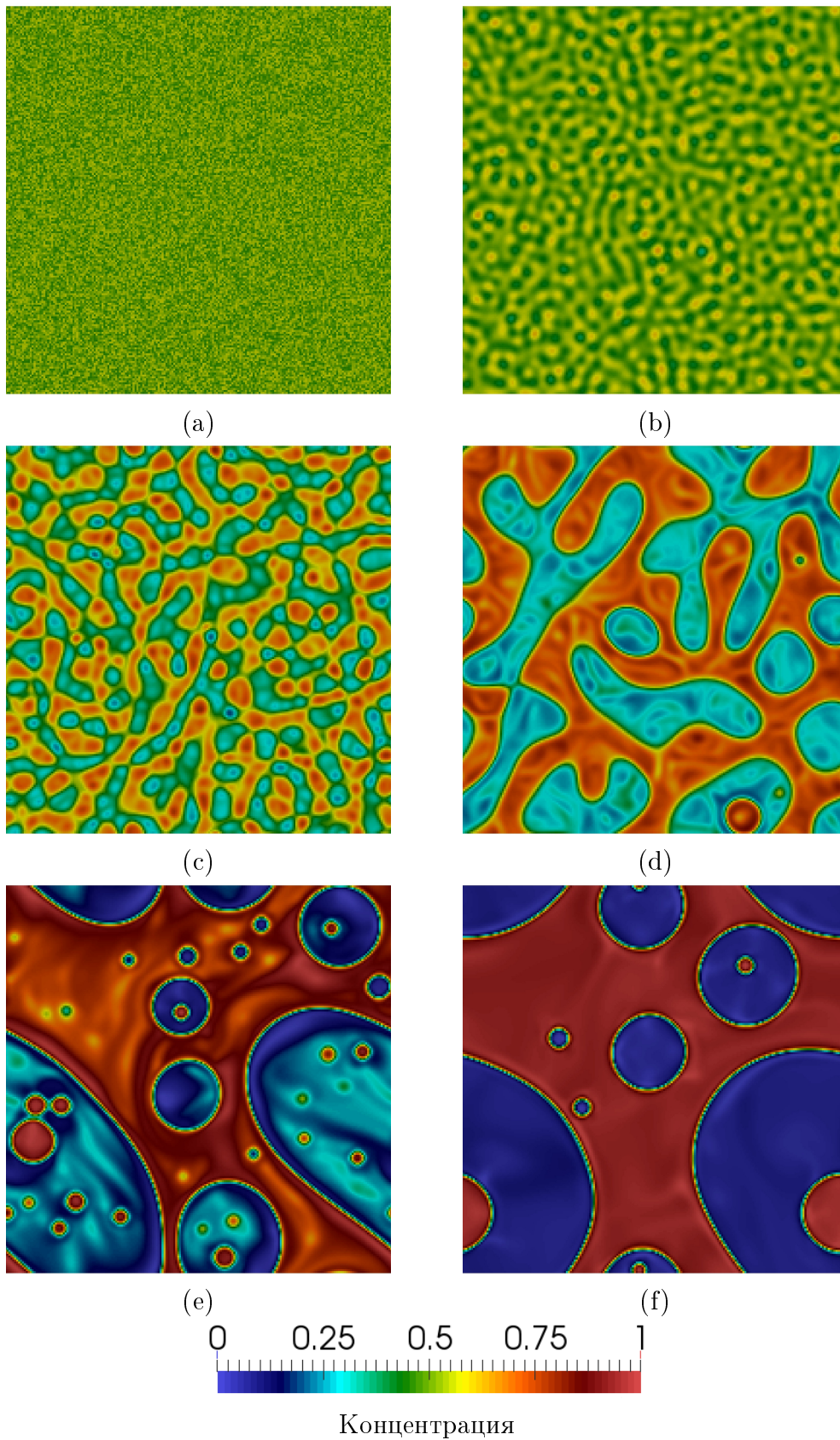


Рис. 6. Последовательные этапы развития спиnodального распада

ность  $[\rho] = \text{кг}/\text{м}^3$ ; универсальная газовая постоянная  $[\mathcal{R}] = \text{Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$ ; температура  $[T] = \text{К}$ ; постоянная «разделения»  $[A_\psi] = \text{Дж}/\text{кг}$ ; коэффициенты микросил  $[\lambda_\alpha] = \text{Дж} \cdot \text{м}^2/\text{кг}$ ,  $[\lambda] = \text{Дж} \cdot \text{м}^5/\text{кг}^2$ ; коэффициент подвижности  $[M] = \text{кг} \cdot \text{с}/\text{м}^3$ ; шаг разностной сетки  $[h] = \text{м}$ ; обобщенный химический потенциал  $[\mu_\alpha] = \text{Дж}/\text{кг}$ .

## Список литературы

- [1] Ю. В. Шеретов. *Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении*. М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
- [2] Т. Г. Елизарова. *Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений*. Москва: Научный мир, 2007.
- [3] В. А. Балашов, Е. Б. Савенков. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов. // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша., 2015. № 75, с. 37. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>.
- [4] M. E. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. // *Physica D: Nonlinear Phenomena.*, 92, 1996. No. 3–4, pp. 178–192.
- [5] E. Fried, M. E. Gurtin. Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter. // *Physica D: Nonlinear Phenomena.*, 3–4, 1993. No. 68, pp. 326–343.
- [6] M. E. Gurtin, D. Polignone, J. Vinals. *Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter*. Tech. rep. 95-NA-001. Carnegie Mellon University, 1995, pp. 178–192. URL: <http://repository.cmu.edu/math/552>.
- [7] J. Liu. “Thermodynamically Consistent Modeling and Simulation of Multiphase Flows”. PhD thesis. The University of Texas at Austin, 2014.
- [8] A. Miranville, G. Schimperna. Nonisothermal phase separation based on a microforce balance. // *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B.*, 5, 2005. No. 3, pp. 753–768. URL: <http://aimsciences.org/journals/displayArticlesnew.jsp?paperID=976>.
- [9] F. Boyer et al. Cahn–Hilliard/Navier–Stokes Model for the Simulation of Three-Phase Flows. // *Transport in Porous Media.*, 82, 2010. No. 3, pp. 463–483.
- [10] J. Kim. Phase field computations for ternary fluid flows. // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.*, 2007, pp. 4779–4788.
- [11] F. Guillén-González, G. Tierra. On linear schemes for a Cahn–Hilliard diffuse interface model. // *Journal of Computational Physics.*, 234, 2013, pp. 140–171. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112005517>.

- [12] H. Garcke, B. Nestler, B. Stoth. On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits. // *Physica D.*, 115, 1998, pp. 87–108.
- [13] L. Cherfils, A. Miranville, S. Zelik. The Cahn-Hilliard Equation with Logarithmic Potentials. // *Milan Journal of Mathematics.*, 79, 2011. No. 2, pp. 561–596.
- [14] J. W. Cahn. On spinodal decomposition. // *Acta Metallurgica.*, 9, 1961. No. 9, pp. 795–801. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001616061901821>.
- [15] Ю. С. Липатов, В. В. Шилов. Спинодальный распад в полимерных системах. // *Успехи химии.*, 53, 1984. № 7, с. 1197–1221.
- [16] В. П. Скрипов, А. В. Скрипов. Спинодальный распад. // *Успехи физических наук.*, 128, 1979. № 2, с. 193–231.

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Математическая модель</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>Двухфазная изотермическая модель</b>	<b>9</b>
3.1	Разностная схема . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Примеры расчетов</b>	<b>13</b>
4.1	«Квадратная» капля . . . . .	13
4.2	Слияние двух капель . . . . .	15
4.3	Спинодальный распад . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>15</b>
<b>6</b>	<b>Размерности основных величин</b>	<b>15</b>