



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

**Балашов В.А., Савенков Е.Б.**

Численный расчет  
двумерных течений  
двухфазной жидкости с  
учетом смачиваемости с  
помощью  
квазигидродинамических  
уравнений

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численный расчет двумерных течений двухфазной жидкости с учетом смачиваемости с помощью квазигидродинамических уравнений // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 131. 18 с. doi:[10.20948/prepr-2018-131](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-131)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-131>

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

Балашов В.А., Савенков Е.Б.

**Численный расчет  
двумерных течений двухфазной жидкости  
с учетом смачиваемости  
с помощью квазигидродинамических уравнений**

Москва, 2018

*В.А. Балашов<sup>1</sup>, Е.Б. Савенков<sup>1</sup>.* Численный расчет двумерных течений двухфазной жидкости с учетом смачиваемости с помощью квазигидродинамических уравнений.

**Аннотация.** Настоящая работа посвящена продолжению разработки численного алгоритма для расчета двумерных двухфазных изотермических вязких течений с поверхностными эффектами с учетом смачиваемости на границе с твердой стенкой в областях с воксельной геометрией. В качестве математической модели использована квазигидродинамическая регуляризация уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда. При этом воксельная геометрия границы расчетной области интерпретируется как аппроксимация некоторой (неизвестной) кусочно-гладкой границы. Приведены результаты расчета формы капли, касающейся двух плоских стенок, для различных углов смачивания, а также вытеснения в двумерном поровом дублете.

**Ключевые слова:** уравнения Навье–Стокса–Кана–Хилларда, квазигидродинамическая регуляризация, угол смачивания, многофазные течения, диффузная граница

*V.A. Balashov, E.B. Savenkov.* Numerical simulation of two-dimensional two-phase fluid flows accounting for wettability with quasi-hydrodynamic equations.

**Abstract.** The present paper is devoted to further development of numerical algorithm for simulation of two-dimensional two-phase isothermal viscous flows with surface effects accounting for wettability on solid boundaries in voxel domains. Quasi-hydrodynamic regularization of Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations is used. Voxel boundary is interpreted as approximation of some (unknown) piecewise-smooth surface. Simulation results of stationary droplet touching two plane walls with different wetting angles are presented. Also two-phase flow simulations in pore doublet geometry model are performed.

**Key words and phrases:** Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations, quasi-hydrodynamic regularization, wetting angle, multiphase flows, diffuse interface

---

<sup>1</sup>ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Миусская пл., 4

# 1 Введение

Представленная работа посвящена разработке численного алгоритма для расчета двумерных двухфазных вязких изотермических течений с учетом поверхностного натяжения на межфазной границе и угла смачивания на границе с твердой стенкой. Используемая математическая модель течения является квазигидродинамической (КГиД) регуляризацией системы уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда (НСКХ) [1–3]. Суть этой регуляризации состоит в физически мотивированном добавлении диссипативных слагаемых, пропорциональных малому параметру  $\tau > 0$ , имеющему размерность времени. Это позволяет использовать явные симметричные разностные схемы, сравнительно простые в реализации.

В настоящей работе мы считаем, что геометрия расчетной области имеет «воксельное» представление (в рассматриваемом двумерном случае — «пиксельное»): расчетная область покрывается декартовой равномерной сеткой, и каждой ячейке приписывается значение 0 или 1 в зависимости от того, есть ли материал в соответствующей точке или нет. Если в ячейке возможно течение жидкости, то будем ее называть *активной*, если нет — *неактивной*.

Выбор «воксельного» представления обусловлен тем, что во многих практически важных задачах, связанных с исследованиями свойств различных материалов, геометрия расчетной области не может быть охарактеризована точно и является результатом предварительного анализа материала. Например, это имеет место в рамках технологии «цифровой керн», набирающей все большую популярность при проведении геофизических исследований. Для определения геометрии порового пространства некоторого образца горной породы (керн) используют компьютерную микротомографию ( $\mu$ СТ). Ее результаты обрабатывают специальными алгоритмами сегментации и получают бинарное «воксельное» представление порового пространства, которое используют, например, для численного моделирования течения жидкости в нем с целью определения коэффициента проницаемости.

В работе [4] показано, что два способа интерпретации границы расчетной области — как точной и как аппроксимации некоторой кусочно-гладкой (вообще говоря неизвестной) поверхности, могут приводить к существенно различным результатам. В настоящей работе алгоритм из [4], использующий второй подход, модифицирован и доработан в части аппроксимации краевых условий на «ступенчатом» участке твердой границы. Представлены результаты моделирования равновесной формы капли, расположенной между двумя плоскими «ступенчатыми» стенками и вытеснения одной жидкости другой в геометрии порового дублета. Полученные результаты демонстрируют корректность разработанного метода.

## 2 КГиД регуляризация уравнений НСКХ

В соответствии с [1–3] КГиД система уравнений изотермической двухкомпонентной смеси с учетом поверхностных эффектов и без учета внешней силы имеет вид:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div} \mathbf{j}_m = 0, \quad (2.1)$$

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \mathbf{\Pi}, \quad (2.2)$$

$$\partial_t(\rho C) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m C) = \operatorname{div}(M \nabla \mu), \quad (2.3)$$

где  $\rho > 0$ ,  $\mathbf{u}$ ,  $0 < C < 1$  — полная плотность (плотность смеси) и скорость жидкости;  $C$  — массовая концентрация одного из компонентов жидкости:  $C = C_1$ ,  $C_2 = 1 - C_1$ ,  $C_i = \rho_i / \rho$ ,  $\rho_i$  — массовая плотность  $i$ -го компонента,  $i = 1, 2$  — номер компонента. Указанные параметры зависят от  $(\mathbf{x}, t)$ , а  $\mathbf{x} = (x, y) = (x_1, x_2) \in \bar{\Omega}$  и  $\Omega$  — ограниченная область в  $\mathbb{R}^2$  с кусочно-гладкой границей  $\partial\Omega$ ,  $t \geq 0$ . Здесь и ниже дивергенция тензора берется по его первому индексу, символ  $\otimes$  означает тензорное произведение векторов.

Массовая плотность свободной энергии Гельмгольца имеет вид [5, 6]:

$$\Psi(\rho, C, \nabla C) = \Psi_0(\rho, C) + \frac{\lambda_1}{2} |\nabla C|^2,$$

$$\Psi_0(\rho, C) = C\Psi^{(1)}(\rho) + (1 - C)\Psi^{(2)}(\rho) + \Psi_{sep}(C), \quad \Psi^{(i)}(\rho) = c_{si}^2 \ln \frac{\rho}{\rho_i},$$

$$\Psi_{sep}(C) = A_\psi C^2(1 - C)^2,$$

где  $c_{si} > 0$  — скорость звука в компоненте с номером  $i$ ,  $\bar{\rho}_i = \operatorname{const} > 0$ ,  $i = 1, 2$ . Здесь  $\Psi^{(1)}$ ,  $\Psi^{(2)}$  — свободные энергии компонентов,  $\Psi_{sep}$  — «разделяющая» свободная энергия, а  $\lambda_1 > 0$  и  $A_\psi > 0$  — параметры. При этом давление задается формулой  $p(\rho, C) = \rho^2 \Psi'_{0\rho}(\rho, C) = (c_{s1}^2 C + c_{s2}^2(1 - C))\rho$ . Здесь и ниже  $(\cdot)'_\rho = \partial/\partial\rho$  и  $(\cdot)'_C = \partial/\partial C$ .

Для простоты будем рассматривать смесь двух жидкостей с одинаковыми уравнениями состояния. Тогда  $\Psi^{(1)} = \Psi^{(2)}$ ,  $c_{s1} = c_{s2} = c_s$ ,  $p = c_s^2 \rho$ .

Регуляризованный поток массы  $\mathbf{j}_m$  задается формулами

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}), \quad \mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} [\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p + \operatorname{div} \mathbf{Q}].$$

Здесь  $\mathbf{w}$  — регуляризирующая скорость, наличие которой является особенностью КГиД подхода,  $\tau > 0$  — релаксационный параметр, имеющий размерность времени. Слагаемые, имеющие порядок  $O(\tau)$ , могут рассматриваться как физически мотивированные регуляризаторы, обеспечивающие устойчивость явных центрально-разностных аппроксимаций уравнений (2.1)–(2.3).

Тензор напряжений имеет вид

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{NS} - \mathbf{Q} + \mathbf{\Pi}^\tau, \quad (2.4)$$

где  $\mathbf{\Pi}^{NS}$  — тензор вязких напряжений Навье–Стокса,  $\mathbf{Q}$  — тензор капиллярных напряжений,  $\mathbf{\Pi}^\tau$  — регуляризирующий тензор:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}^{NS} &= 2\eta\mathbf{D}(\mathbf{u}) + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta\right)(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad \mathbf{D}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T), \\ \mathbf{Q} &= \lambda_1\rho\nabla C \otimes \nabla C, \quad \mathbf{\Pi}^\tau = \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь  $\nabla\mathbf{u} = \{\partial_i u_j\}_{i,j=1}^2$ ,  $\eta > 0$  и  $\zeta \geq 0$  — коэффициенты динамической и объемной вязкости соответственно,  $\mathbf{I}$  — единичный тензор. В настоящей работе положим  $\zeta = 0$ .

В (2.3) параметр  $M(C) > 0$  называют подвижностью. Обобщенный химический потенциал задается выражением

$$\mu(\rho, C) = \Psi'_{0C}(\rho, C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho\nabla C). \quad (2.6)$$

При  $\tau = 0$  имеем  $\mathbf{w} = 0$ , и система (2.1)–(2.3) переходит в систему уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда вязкой сжимаемой изотермической двухкомпонентной смеси.

Межфазное (поверхностное) натяжение  $\sigma$  с механической точки зрения представляет собой избыточное тангенциальное (по отношению к межфазной границе) напряжение, которое определяется по формуле Беккера [7–16]. С термодинамической точки зрения поверхностное натяжение является избыточной свободной энергией, сосредоточенной в поверхностном слое [13, 15, 17, 18]. В случае плоской межфазной границы  $\sigma$  связано с параметрами модели согласно выражению

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_1\rho \left(\frac{dC}{dx}\right)^2 dx. \quad (2.7)$$

Пренебрегая изменением плотности для профиля концентрации в случае плоской межфазной границы, имеем:

$$C(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta(x - x_0)}{2}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2A_\psi}{\lambda_1}}. \quad (2.8)$$

Здесь  $x_0$  соответствует положению *условной* межфазной границы. Для поверхностного натяжения в этом случае получаем  $\sigma = \rho\sqrt{A_\psi\lambda_1}/18$ .

Определим межфазный слой как область пространства, такую, что  $\{x : C_\varepsilon \leq C \leq 1 - C_\varepsilon\}$ . Тогда для толщины межфазного слоя  $\varepsilon$  справедливо

$$\varepsilon = \frac{2}{\beta} \ln \frac{1 - C_\varepsilon}{C_\varepsilon} = \sqrt{\frac{2\lambda_1}{A_\psi}} \ln \frac{1 - C_\varepsilon}{C_\varepsilon}.$$

Если  $C_\varepsilon = 0.05$ , то  $\varepsilon \approx 4.164\sqrt{\lambda_1/A_\psi}$ .

Система уравнений (2.1) – (2.6) дополняется граничными условиями, задающими нетривиальный угол смачивания на границе с твердой стенкой. При выборе таких условий мы следуем работам [19–22].

Будем считать, что *полная* энергия системы имеет вид

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega} \rho e dV + \int_{\partial\Omega} \Psi_w ds,$$

где функция  $\Psi_w(C)$  описывает поверхностную плотность свободной энергии твердой границы и задается следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi_w(C) &= [1 - g(C)]\sigma_{bw} + \sigma_{rw}g(C) = \\ &= \sigma_{bw} + (\sigma_{rw} - \sigma_{bw})g(C) = \sigma_{bw} + \sigma \cos \theta g(C), \end{aligned} \quad (2.9)$$

где,  $g(C) = 3C^2 - 2C^3$ ,  $\sigma_{bw}$  и  $\sigma_{rw}$  обозначают поверхностную плотность свободной энергии на границе «синяя жидкость–стенка» и «красная жидкость–стенка» соответственно. Здесь и далее «красной» фазой (жидкостью) мы называем область пространства, где  $C \approx 1$ , а «синей» — область с  $C \approx 0$ . В (2.9) использовано соотношение Юнга [15, 23], связывающее величины  $\sigma_{rw}$ ,  $\sigma_{bw}$  и  $\sigma$  с углом смачивания  $\theta$  выражением  $\sigma_{rw} - \sigma_{bw} - \sigma \cos \theta = 0$ . При этом угол  $\theta$  определен в некоторой точке линии трехфазного контакта (линии пересечения поверхности уровня  $C = 0.5$  и твердой стенки) так, что одна его грань касается границы «твердая стенка–синяя жидкость» (если стенка плоская, то эта грань с ней совпадает), а другая касается поверхности  $C = 0.5$ . Граничное условие, задающее контактный угол  $\theta$ , имеет вид:

$$\partial_n C = \frac{6\sigma \cos \theta}{\rho\lambda_1} C(1 - C).$$

Приведем полный набор краевых условий на твердой стенке, который используется в настоящей работе:

$$\partial_n \mu = 0, \quad \partial_n C = \frac{6\sigma \cos \theta}{\rho\lambda_1} C(1 - C), \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \partial_n p = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (2.10)$$

Последнее условие необходимо, поскольку оно, в совокупности с условием прилипания, обеспечивает равенство  $\mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0$ , а значит, и условие непротекания  $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0$ . Последнее условие в (2.10) с учетом уравнения состояния  $p = c_s^2 \rho$  можно переписать в виде

$$c_s^2 \partial_n \rho = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (2.11)$$

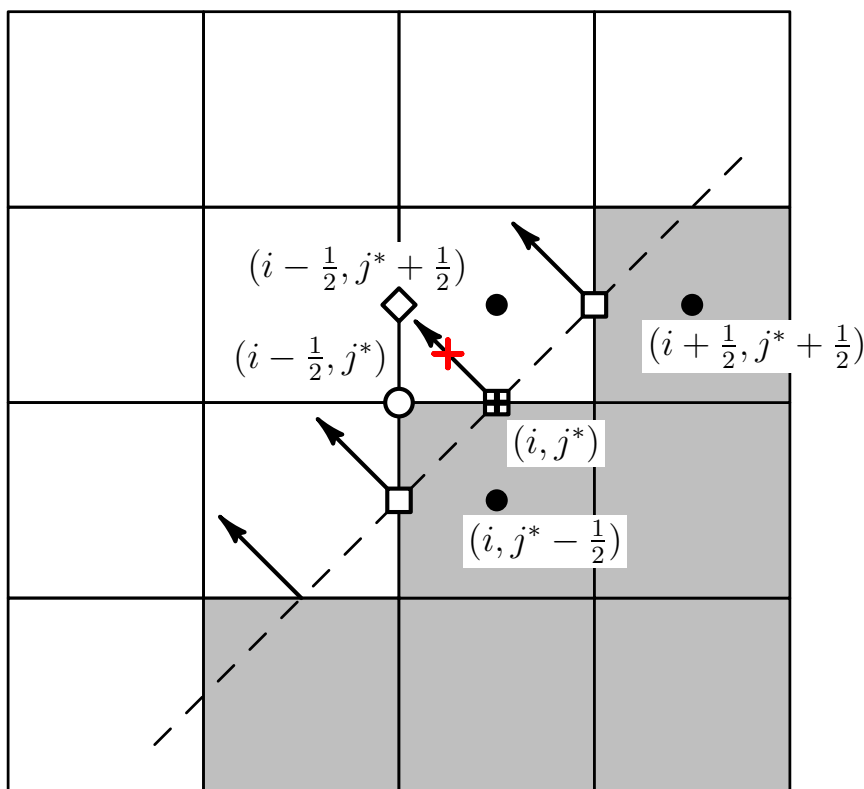


Рис. 1. Часть «ступенчатой» подложки и направления нормалей в центрах граничных ребер.

### 3 Аппроксимация граничных условий

Для аппроксимации уравнений (2.1) – (2.3) в настоящей работе использована разностная схема из [4, 24]. Ребро какой-либо ячейки будем называть *граничным*, если оно инцидентно активной и неактивной ячейкам, и *активным*, если оно инцидентно двум активным ячейкам.

При описании и реализации алгоритмов для учета краевых условий в некоторых случаях удобно определять значения параметров течения в центрах граничных ребер рассматриваемых ячеек. Поэтому в настоящем разделе мы иногда будем относить величины  $C$  и  $\rho$  не только к узлам основной сетки, но и к узлам вспомогательных сеток.

Аппроксимация граничных условий и соответствующие численные алгоритмы для *плоской* границы, перпендикулярной одной из координатных осей, рассмотрены в работе [4].

Приведем описание разностной схемы, аппроксимирующей граничные условия (2.10), и соответствующих численных алгоритмов, доработанных и модифицированных по сравнению с алгоритмами из [4].

Рассмотрим плоскую *ступенчатую* границу, которая интерпретируется как аппроксимация некоторой плоскости (в двумерном случае — прямой линии) (см. рисунок 1). Выпишем используемые разностные соотношения, соот-



ветствующие первым трем краевым условиям в (2.10), для граничного узла  $(i, j^*)$  с внутренней нормалью  $\mathbf{n}$  (на рисунке 1 этот узел обозначен символом  $\boxplus$ , символом «\*» отмечены полуцелые индексы):

$$\frac{\mu_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} - \mu}{h/\sqrt{2}} = 0, \quad \frac{C_{-\frac{1}{4},+\frac{1}{4}} - C}{h/\sqrt{8}} = \frac{6\sigma \cos \theta}{\lambda_1 \rho_{-\frac{1}{4},+\frac{1}{4}}} C(1 - C), \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (3.12)$$

Здесь для некоторой сеточной функции  $v$  введены обозначения  $v = v_{i,j^*}$ ,  $(v_{\pm k, \pm l})_{i,j^*} = v_{i \pm k, j^* \pm l}$ , для некоторых чисел  $k$  и  $l$ . В выражениях (3.12) нормальные производные аппроксимируются односторонними разностными производными. При этом для концентрации  $C$  используется значение в узле  $(i - 1/4, j^* + 1/4)$  (на рисунке 1 обозначен красным плюсом «+»), а для химического потенциала  $\mu$  — значение в узле  $(i - 1/2, j^* + 1/2)$  (обозначен символом « $\diamond$ »).

Значения концентрации  $C$  (а также скорости  $\mathbf{u}$  и плотности  $\rho$ ) в узле  $(i - 1/4, j^* + 1/4)$  вычисляются как полусумма значений  $C$  в узлах  $(i, j^* + 1/2)$  и  $(i - 1/2, j^*)$ . Значение в первом узле находится непосредственно, поскольку это центр расчетной ячейки. Во втором узле (на рисунке 1 обозначен как « $\circ$ ») значения  $C$  вычисляются как среднее арифметическое значений в узлах  $(i - 1, j^* - 1/2)$  и  $(i, j^* + 1/2)$ . Подчеркнем, что в работе [4] предлагался другой подход к их вычислению.

При аппроксимации условия (2.11) в узле  $(i, j^*)$  удобно воспользоваться «повернутой» системой координат  $\tilde{x}\tilde{O}\tilde{y}$  так, что ее центр совпадает с рассматриваемым узлом, ось  $\tilde{O}\tilde{y}$  сонаправлена с вектором нормали (направление оси  $\tilde{O}\tilde{x}$  определяется из условия совпадения ориентации  $\tilde{x}\tilde{O}\tilde{y}$  с ориентацией  $xOy$ ). В указанной системе координат условие (2.11) примет вид

$$c_s^2 \partial_{\tilde{y}} \rho = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q} = -(\partial_{\tilde{x}} Q_{\tilde{x}\tilde{y}} + \partial_{\tilde{y}} Q_{\tilde{y}\tilde{y}}).$$

Выпишем его аппроксимацию в узле  $(i, j^*)$ :

$$c_s^2 \frac{\rho_{-\frac{1}{4},+\frac{1}{4}} - \rho}{h/\sqrt{8}} = -\frac{\rho}{h\sqrt{2}} \left\{ (\delta_{\tilde{y}} C)_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} \frac{C_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} - C}{h/\sqrt{2}} - (\delta_{\tilde{y}} C)_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \frac{C - C_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}}{h/\sqrt{2}} \right\} - \frac{\rho}{h/\sqrt{8}} \left\{ \left( \frac{C_{-\frac{1}{4},+\frac{1}{4}} - C}{h/\sqrt{8}} \right)^2 - (\delta_{\tilde{y}} C)^2 \right\}. \quad (3.13)$$

Здесь введено обозначение для односторонней производной вдоль нормали  $\delta_{\tilde{y}} C = (C_{-1/4,+1/4} - C)/(h/\sqrt{8})$ . Выпишем для того же узла сеточные форму-

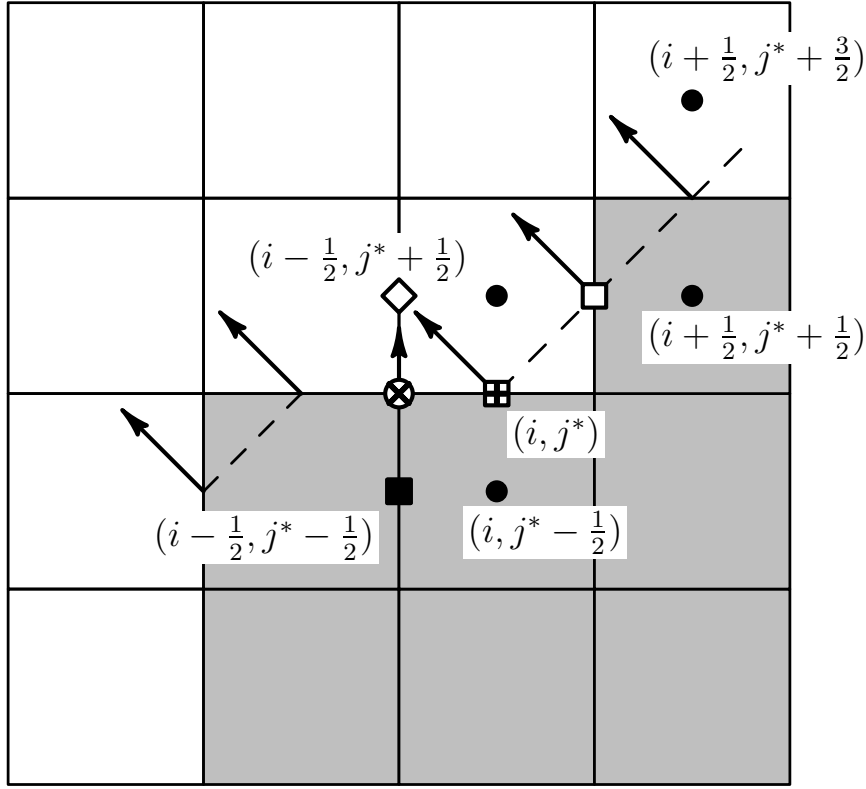


Рис. 2. Часть «ступенчатой» подложки и направления нормалей в угловых узлах и центрах граничных ребер.

лы, аппроксимирующие некоторые следствия из (2.10):

$$j_{mx} = 0, \quad j_{my} = 0, \quad \Pi_{xl}^r = 0, \quad l \in \{x, y\},$$

$$\Pi_{xx}^{NS} = -\frac{4}{3}\eta \frac{(u_x)_{i-\frac{1}{2}, j^*}}{h/2}, \quad \Pi_{xy}^{NS} = \eta \left\{ -\frac{(u_y)_{i-\frac{1}{2}, j^*}}{h/2} + \frac{(u_x)_{i, j^* + \frac{1}{2}}}{h/2} \right\},$$

$$Q_{xy} = \lambda_1 \rho_{i, j^*} \frac{C_{i, j^*} - C_{i-\frac{1}{2}, j^*}}{h/2} \cdot \frac{C_{i, j^* + \frac{1}{2}} - C_{i, j^*}}{h/2}, \quad Q_{xx} = \lambda_1 \rho_{i, j^*} \left( \frac{C_{i, j^*} - C_{i-\frac{1}{2}, j^*}}{h/2} \right)^2.$$

Второе условие в (3.12) представляет собой квадратное уравнение, решение которого может быть представлено в виде

$$C = \begin{cases} \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{1}{\gamma} - \text{sign}(\gamma) \sqrt{D} \right), & \gamma \neq 0, \\ C_{-\frac{1}{4}, +\frac{1}{4}}, & \gamma = 0. \end{cases} \quad (3.14)$$

Здесь  $\gamma = (6h\sigma \cos \theta) / (\sqrt{8}\lambda_1 \rho_{-1/4, +1/4})$  и  $D = (1 + 1/\gamma)^2 - 4C_{-1/4, +1/4}/\gamma$ . Поскольку  $C_{-1/4, +1/4} \in [0, 1]$ , то  $D \geq 0$ , и концентрация, рассчитанная по формуле (3.14), также будет иметь область значений отрезок  $[0, 1]$ . Функция  $\text{sign}$  — стандартная знаковая функция со значениями  $-1, 0$  и  $1$ .

Теперь для полноты рассмотрим случай конфигурации, представленной на рисунке 2, которая отличается от конфигурации на рисунке 1 тем, что

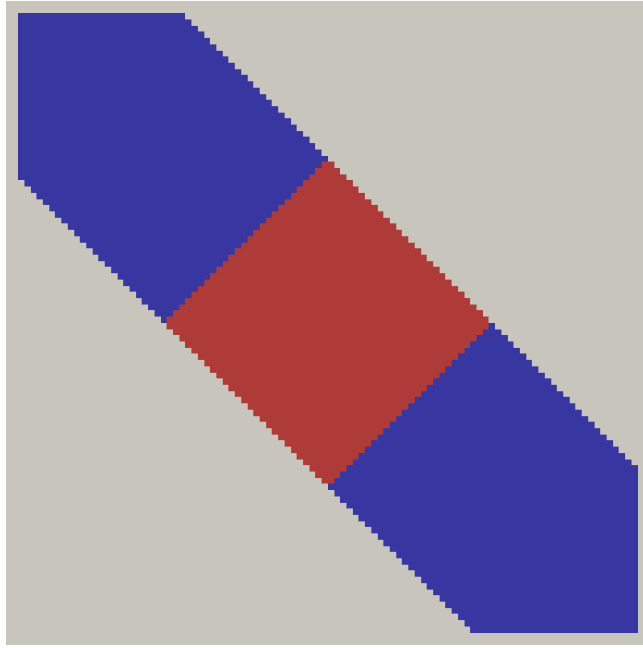


Рис. 3. Начальное распределение концентрации на сетке  $100 \times 100$  ячеек. Серым цветом обозначена стенка.

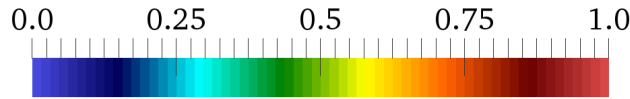


Рис. 4. Соответствие между значениями концентрации  $C$  и цветом.

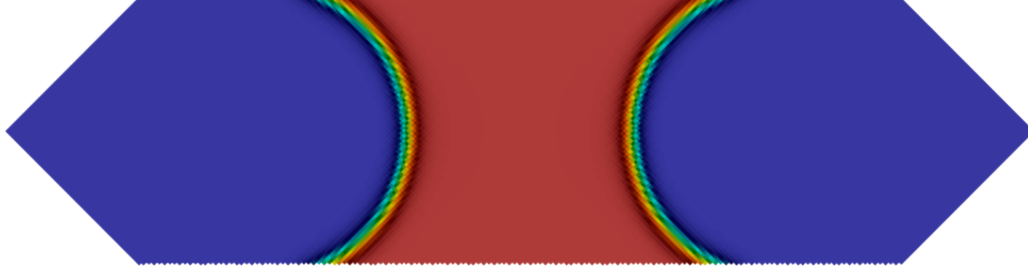
ячейка с центром  $(i - 1, j^* - 1/2)$  является неактивной, а значит, значение концентрации  $C$  в узле  $(i - 1/2, j^* - 1/2)$  (на рисунке 2 обозначен как «■») не определено. В этом случае при аппроксимации граничного условия (2.11) в узле  $(i, j^*)$  мы пользуемся соотношением

$$c_s^2 \frac{\rho_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} - \rho}{h/\sqrt{2}} = -\frac{\rho}{h\sqrt{2}} \left\{ (\delta_{\bar{y}} C)_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \frac{C_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} - C}{h/\sqrt{2}} - (\delta_{\bar{y}} C)_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \frac{C - C_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}}{h/\sqrt{2}} \right\} - \frac{\rho}{h/\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{C_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} - C}{h/\sqrt{2}} \right)^2 - (\delta_{\bar{y}} C)^2 \right\}. \quad (3.15)$$

Значение  $C_{-1/2, -1/2}$  не определено. Узел  $(i - 1/2, j^* - 1/2)$  мы считаем *фиктивным* и определяем в нем значение  $C$  линейной экстраполяцией так, что  $(C_{-1/2, -1/2} + C_{-1/2, +1/2})/2 = C_{-1/2, 0}$ .



(a)  $\theta^* = 154.57^\circ$ , сетка  $100 \times 100$ .



(b)  $\theta^* = 149.40^\circ$ , сетка  $200 \times 200$ .

Рис. 5. Распределения  $C$ , полученные на момент времени  $t = 0.06$  с при угле смачивания  $\theta = 150^\circ$ . Для наглядности рисунки повернуты на  $45^\circ$ .

## 4 Результаты расчетов

### 4.1 Капля между плоскими «ступенчатыми» стенками

В качестве первого теста рассмотрим задачу о расчете равновесной формы капли, расположенной между двумя плоскими «ступенчатыми» (в виду воксельного представления геометрии расчетной области) стенками, задаваемыми уравнениями  $y = -x + 5L_x/4$  и  $y = -x + 3L_x/4$ . При этом будем рассматривать различные значения угла смачивания  $\theta$ .

На всех сторонах расчетной области зададим условия (2.10) и следующий набор параметров:  $A_\psi = 10^4$  Дж/кг,  $\lambda_1 = 1.25 \cdot 10^{-4}$  Дж · м<sup>2</sup>/кг,  $c_s = 500$  м/с,  $M_0 = 5 \cdot 10^{-10}$  кг · с/м<sup>2</sup>,  $\eta = 5 \cdot 10^{-3}$  Па · с.

Длину и высоту расчетной области положим  $L_x = L_y = 0.01$  м. Шаг по пространству выберем как  $h = L_x/N_x$ , где  $N_x$  — число расчетных ячеек вдоль  $Ox$ . Шаг по времени для сетки с  $N_x = 100$  зададим  $\Delta t = 8 \cdot 10^{-8}$  с. Здесь и далее начальные скорость и плотность во всех расчетных ячейках положим  $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ ,  $\rho_0 = 1$  кг/м<sup>3</sup>. Начальное распределение концентрации  $C$  задается таким образом, что капля имеет форму прямоугольника (см. рисунок 3), стороны которого перпендикулярны указанным стенкам. На рисунке 4 представлено соответствие между значениями концентрации  $C$  и цветом (легенда).

На рисунках 5а и 5б представлены полученные распределения концентрации  $C$  для  $\theta = 150^\circ$  на момент времени  $t = 0.06$  с на сетках  $100 \times 100$  и  $200 \times 200$  ячеек соответственно. В подписях к рисункам указано значение

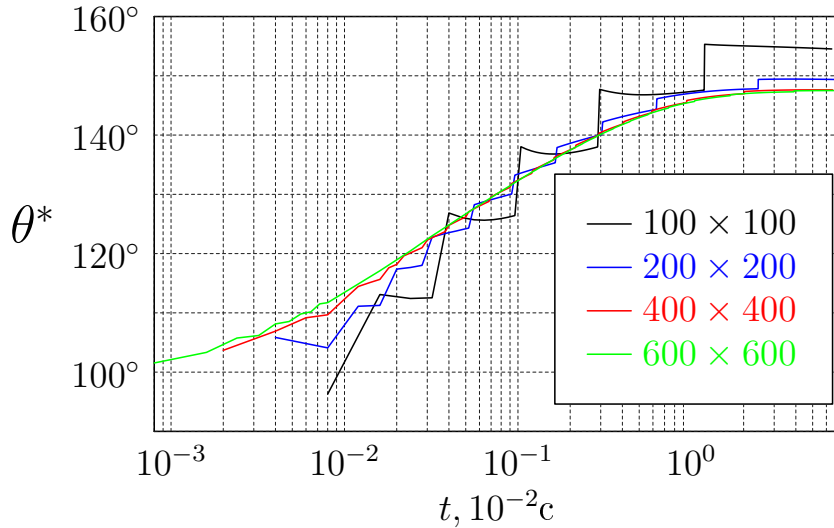


Рис. 6. Зависимость  $\theta^*$  от времени  $t$  при  $\theta = 150^\circ$ .

наблюдаемого угла смачивания  $\theta^*$ , который вычисляется согласно [4]. Также был проведен расчет на сетках  $400 \times 400$  и  $600 \times 600$  ячеек. На указанный момент времени значения наблюдаемого угла составляли  $147.62^\circ$  и  $147.51^\circ$  соответственно. На рисунке 6 представлена зависимость наблюдаемого  $\theta^*$  от времени, полученная при расчете на различных сетках. Аналогичные расчеты проведены для  $\theta = 110^\circ$  при тех же параметрах. Результаты представлены на рисунках 7а, 7б и 8.

Видно, что полученные значения  $\theta^*$  близки к  $\theta$ , но при измельчении сетки сходятся к числу, меньшему заданного  $\theta$ . Это можно объяснить тем, что предположения, использованные при выводе граничных условий смачивания [19], здесь, строго говоря, не выполнены: жидкость является сжимаемой, а межфазная граница, вообще говоря, не является плоской. Также свой вклад в отклонение  $\theta^*$  от  $\theta$  могут вносить паразитные токи на межфазной границе.

## 4.2 Вытеснение жидкости в поровом дублете

В данном разделе рассматривается вытеснение жидкости в системе двух параллельно соединенных каналов различного сечения. Иногда такую модельную область называют поровым дублетом (pore doublet model) [25, 26]. Зададим параметры течения как в предыдущем разделе, размеры области  $L_x = 0.02$  м,  $L_y = L_x/2$ , число ячеек вдоль оси  $Ox$   $N_x = 200$ , шаг по пространству  $h = L_x/N_x$ , шаг по времени  $\Delta t = 8 \cdot 10^{-8}$  с. На входной границе ( $x = 0$ ) зададим условия  $\mathbf{u} = (1, 0)$  м/с,  $\partial_x \rho = 0$ ,  $C = 1$ ; на выходной ( $x = L_x$ ):  $\partial_x \mathbf{u} = 0$ ,  $\partial_x C = 0$ ,  $\rho = 1$  кг/м<sup>3</sup>. В начальный момент времени во всех ячейках для плотности и скорости положим  $\rho = 1$  кг/м<sup>3</sup>,  $\mathbf{u} = (1, 0)$  м/с, а для концентрации  $C = 1$ , если  $x < L_x/10$ , и  $C = 0$  в противном случае.



(a)  $\theta^* = 109.49^\circ$ , сетка  $100 \times 100$ .



(b)  $\theta^* = 112.14^\circ$ , сетка  $200 \times 200$ .

Рис. 7. Распределения  $C$ , полученные на момент времени  $t = 0.06$  с при угле смачивания  $\theta = 110^\circ$ . Для наглядности рисунки повернуты на  $45^\circ$ .

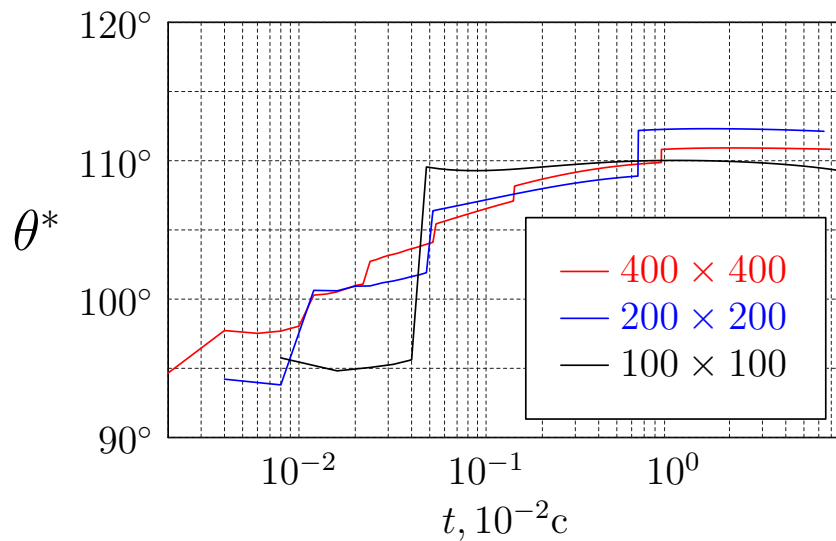


Рис. 8. Зависимость  $\theta^*$  от времени  $t$  при  $\theta = 110^\circ$ .

На рисунках 9а–9д представлено распределение концентрации, полученное в расчетах на различные моменты времени при задании  $\theta = 150^\circ$ . Отметим, что ширина верхнего канала составляет  $18h$ , а нижнего —  $36h$ . На рисунках 10а–10д для тех же моментов времени представлено распределение  $C$  при  $\theta = 30^\circ$ . Видна качественная разница между двумя рассмотренными случаями: при  $\theta = 150^\circ$  красная жидкость полностью вытеснила синюю, а при  $\theta = 30^\circ$  значительная часть синей жидкости осталась в поре.



(a)  $t = 40 \Delta t$ .



(b)  $t = 160 \Delta t$ .



(c)  $t = 330 \Delta t$ .

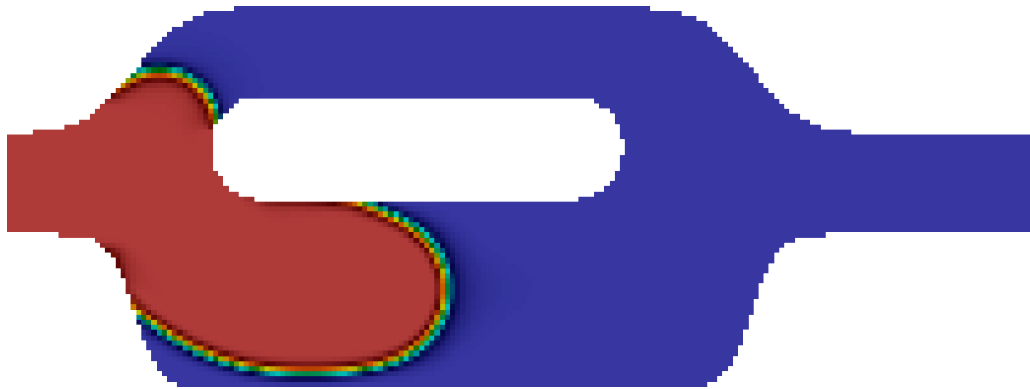


(d)  $t = 530 \Delta t$ .

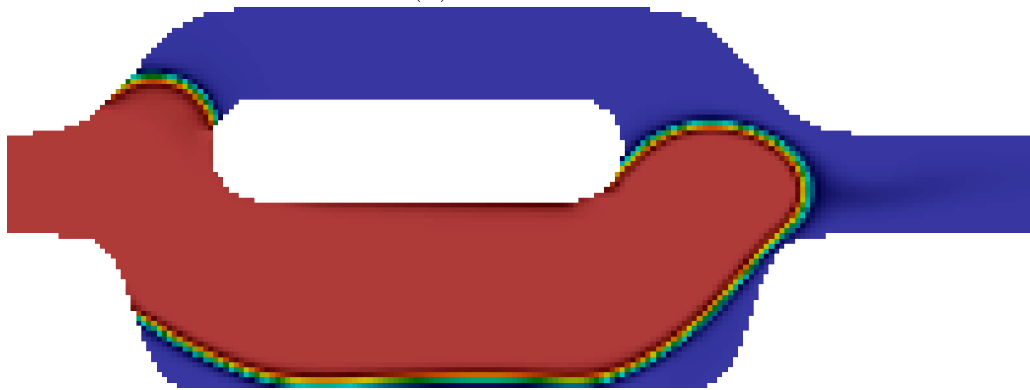
Рис. 9. Распределения  $C$  для различных моментов времени при  $\theta = 150^\circ$ .



(a)  $t = 40 \Delta t$ .



(b)  $t = 160 \Delta t$ .



(c)  $t = 330 \Delta t$ .



(d)  $t = 530 \Delta t$ .

Рис. 10. Распределения  $C$  для различных моментов времени при  $\theta = 30^\circ$ .



## 5 Заключение

В представленной работе на основе квазгидродинамической регуляризации уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда разработан численный алгоритм для расчета двумерных двухфазных двухкомпонентных изотермических течений вязкой жидкости с поверхностными эффектами на границах между жидкими фазами (например поверхностное натяжение) и на границе с твердой стенкой (контактный угол  $0^\circ < \theta < 180^\circ$ ). При этом рассматривается воксельная геометрия, граница которой, в свою очередь, интерпретируется как аппроксимация некоторой (вообще говоря, неизвестной) кусочно гладкой поверхности. Представленный алгоритм является непосредственным развитием алгоритма, предложенного в [4]. Его основное отличие заключается в модификации и доработке аппроксимации краевых условий на «ступенчатых» участках твердой границы.

Приведены результаты расчетов равновесного состояния капли, расположенной между двумя плоскими «ступенчатыми» (ввиду воксельного представления) стенками при задании различных значений угла смачивания  $\theta$ . Показано, что наблюдаемый угол смачивания  $\theta^*$  близок к  $\theta$ . Отметим, что с измельчением расчетной сетки угол  $\theta^*$  не сходится к  $\theta$  (однако близок к нему), что может быть связано с невыполнением условий, при которых получены граничные условия смачивания. Такое же поведение  $\theta^*$  наблюдалось и в более простом случае плоской стенки, перпендикулярной оси  $Oy$  [4].

Проведено моделирование вытеснения одной жидкости другой в геометрической модели порового дублета, которая представляет собой два параллельно соединенных канала различного сечения. Отмечена качественная разница между результатами, полученными при задании различных  $\theta$ : если вытесняющая фаза хорошо смачивает твердую стенку, то первичная фаза полностью вытесняется; если же вытесняющая фаза плохо смачивает твердую стенку, то первичная фаза частично продолжает заполнять поровое пространство.

Полученные в настоящей работе результаты демонстрируют корректность разработанного метода. В дальнейшем планируется обобщение построенного алгоритма на трехмерный случай и его применение к расчетам двухфазных течений в областях, соответствующих геометрии порового пространства реальных образцов горных пород.

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

# Список литературы

- [1] Балашов В.А., Савенков Е.Б. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 75. С. 1–37. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>.
- [2] Балашов В.А., Савенков Е.Б. Многокомпонентная квазигидродинамическая модель для описания течений многофазной жидкости с учетом межфазного взаимодействия. // Прикл. мех. техн. физ. 2018. Т. 59. № 3. С. 57–68.
- [3] Balashov V., Savenkov E., Zlotnik A. Analysis of a regularized model for the isothermal two-component mixture with the diffuse interface // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2017. Vol. 32. No. 6. pp. 347–358.
- [4] Балашов В.А., Савенков Е.Б. О численном алгоритме для расчета двумерных двухфазных течений с учетом эффекта смачивания на основе квазигидродинамической регуляризации // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 62. 36 с. doi:10.20948/prepr-2018-62 URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-62>
- [5] Lowengrub J., Truskinovsky L. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. Proc. Royal Soc. London A. 1998. Vol. 454. No. 1978. pp. 2617–2654.
- [6] Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. Ann. Rev. Fluid Mech. 1998. Vol. 30. pp. 139–165.
- [7] Оно С., Кондо С. Молекулярная теория поверхностного натяжения в жидкостях. М.: Издательство иностранной литературы, 1963. 292 с.
- [8] Русанов А.И. Лекции по термодинамике поверхностей. СПб.: Лань, 2013. 240 с.
- [9] Krotov V.V., Rusanov A.I. Physicochemical Hydrodynamics of Capillary Systems. Imperial College Press, 1999. 475 p.
- [10] Croxton C.A. Liquid State Physics – A Statistical Mechanical Introduction. Cambridge University Press, 1974. 421 p.
- [11] Davis H.T., Scriven L.E. Stress and structure in fluid interfaces // Adv. Chem. Phys. 1981. Vol. 49. pp. 357–454.
- [12] Lyklema J. Fundamentals of interface and colloid science, V. III, Liquid-Fluid interfaces. Academic Press, 2000. 751 p.
- [13] Роулинсон Дж., Уидом Б. Молекулярная теория капиллярности. М.: Мир, 1986. 376 с.
- [14] Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979. 568 с.
- [15] Шукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия, изд. 3-е. М.: Высшая школа, 2004. 445 с.
- [16] Berg J.C. An Introduction to Interfaces and Colloids. The Bridge to Nanoscience. World Scientific, 2009. 804 p.
- [17] Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a non-uniform system. I. Interfacial free energy. The Journal of Chemical Physics. 1958. Vol. 28. No. 2, pp. 258–267.
- [18] Liu J. Thermodynamically Consistent Modeling and Simulation of Multiphase Flows, PhD dissertation, the university of Texas at Austin, 2014.
- [19] Carlson A., Do-Quang M., Amberg G. Modelling of dynamic wetting far from equilibrium // Physics of fluids. 2009. Vol. 21, No. 12, pp. 121701.
- [20] Carlson A. Capillarity and dynamic wetting. Doctoral Thesis. Stockholm, 2012, Sweden.

- [21] Cahn J.W. Critical point wetting // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 66, No. 8, pp. 3667-3672.
- [22] Jacqmin D. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface // Journal of Fluid Mechanics. 2000. Vol. 402. pp. 57-88.
- [23] де Жен П.Ж. Смачивание: статика и динамика // Успехи физических наук. т. 151. № 4. С. 619–681.
- [24] Балашов В.А., Злотник А.А., Савенков Е.Б. Численный алгоритм для расчета трехмерных двухфазных течений с поверхностными эффектами в областях с воксельной геометрией // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2017. № 91. 28 с.
- [25] Chatzis I., Dullien F.A.L. Dynamic immiscible displacement mechanisms in pore doublets: Theory versus experiment // Journal of Colloid and Interface Science. 1983. Vol. 91. No. 1. P. 199–222.
- [26] Шабаров А.Б., Шаталов А. В. Потери давления при течении водонефтяной смеси в поровых каналах // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2016. Т. 2. № 2. С. 50–72.

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>КГиД регуляризация уравнений НСКХ</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Аппроксимация граничных условий</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>Результаты расчетов</b>	<b>11</b>
4.1	Капля между плоскими «ступенчатыми» стенками . . . . .	11
4.2	Вытеснение жидкости в поровом дублете . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Заключение</b>	<b>16</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>17</b>