



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

Балашов В.А., Савенков Е.Б.

О численном алгоритме для
расчета двумерных
двухфазных течений с
учетом эффекта смачивания
на основе
квазигидродинамической
регуляризации

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: 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](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-62)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-62>

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

Балашов В.А., Савенков Е.Б.

**О численном алгоритме для расчета двумерных
двухфазных течений с учетом эффекта смачивания
на основе квазигидродинамической регуляризации**

Москва, 2018

В.А. Балашов¹, Е.Б. Савенков¹. О численном алгоритме для расчета двумерных двухфазных течений с учетом эффекта смачивания на основе квазигидродинамической регуляризации

Аннотация. Работа посвящена разработке численного алгоритма для расчета двумерных двухфазных изотермических вязких течений с поверхностными эффектами и нетривиальным углом смачивания на границе с твердой стенкой в областях с воксельной геометрией. В качестве математической модели использована квазигидродинамическая регуляризация уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда. Приведены результаты расчетов растекания капли на подложке. Затронуты вопросы интерпретации воксельной геометрии. Показано, что два способа ее интерпретации – как точной и как аппроксимации некоторой (неизвестной) «гладкой» геометрии, могут приводить к существенно различным результатам моделирования.

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

V.A. Balashov, E.B. Savenkov. About numerical algorithm for simulation of two-dimensional two-phase flows with wetting effect based on quasi-hydrodynamic regularization

Abstract. The paper is devoted to the development of numerical algorithm for simulation of two-dimensional two-phase two-component viscous flows with surface effects and non-trivial contact angle at the boundary of solid wall in domains with voxel geometry. Quasi-hydrodynamic regularization of Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations is used. Simulation results for drop spreading over solid surface are presented. Issues of interpretation of are discussed. It is demonstrated that two ways of voxel geometry interpretation – as exact and as an approximation of some (unknown) «smooth» geometry, can lead to essentially different simulation results.

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

¹ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Миусская пл., 4

1 Введение

Представленная работа посвящена разработке численного алгоритма для прямого моделирования двумерных двухфазных двухкомпонентных изотермических течений с учетом поверхностных эффектов и угла смачивания, отличного от 90° , в областях, имеющих сложную геометрию. В основе численного алгоритма лежит система уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда, к которой применена квазигидродинамическая регуляризация [1–3]. Суть этой регуляризации состоит в физически мотивированном добавлении диссипативных слагаемых, пропорциональных малому параметру $\tau > 0$, имеющему размерность времени. Такая регуляризация 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 (μ 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 предыдущих работах авторов [3–5] была построена явная разностная схема и соответствующие численные алгоритмы в предположении о фиксированном угле смачивания, имеющем «нейтральное» значение $\theta = 90^\circ$. Для моделирования реальных двухфазных течений этого, как правило, недостаточно. Поэтому возникает необходимость в алгоритмах, позволяющих использовать граничные условия, соответствующие углу смачивания $0^\circ < \theta < 180^\circ$.

Показано, что два способа интерпретации воксельной геометрии — как точной (случай 1) и как аппроксимации некоторой (неизвестной) «гладкой» геометрии (случай 2), могут приводить к существенно различным результатам моделирования. В работе рассмотрены оба случая, причем алгоритм для случая 2 построен как модификация алгоритма для случая 1.

2 Система квазигидродинамических уравнений двухкомпонентной изотермической смеси

В соответствии с [1–3] квазигидродинамическая (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: $C = C_1$, $C_2 = 1 - C_1$, $C_i = \rho_i/\rho$, ρ_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 Ω — 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 [6, 7]:

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

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

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

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, Ψ_{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 регуляризации, а $\tau > 0$ — релаксационный параметр, имеющий размерность времени. Слагаемые, имеющие порядок $O(\tau)$, могут рассматриваться как физически мотивированные регуляризаторы, обеспечивающие устойчивость явных центрально-разностных аппроксимаций уравнений.

Тензор вязких 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:

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

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

В (2.3) параметр $M(C) > 0$ называют подвижностью, а 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 эта система переходит в систему уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда вязкой сжимаемой изотермической двухкомпонентной смеси.

Систему (2.1)–(2.3) дополним начальными условиями

$$\rho|_{t=0} = \rho_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad C|_{t=0} = C_0(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

3 Межфазное натяжение

В рамках используемой модели Навье–Стокса–Кана–Хилларда предполагается, что межфазная граница имеет малую конечную толщину, то есть представляет собой некоторый поверхностный слой, в котором происходит «резкое», но непрерывное изменение свойств (например плотности и/или концентрации компонентов) от значений, характерных для одной фазы, к значениям, характерным для другой. Кратко опишем механическую (гидростатическую) точку зрения на определение межфазного (поверхностного) натяжения между двумя жидкими фазами согласно работам [8–14], [15, стр. 66]. Рассмотрим систему двух однородных (почти) несмешивающихся жидкостей (фаз), находящихся в гидростатическом равновесии (а значит, в состоянии покоя) и разделенных плоским межфазным слоем, перпендикулярным оси Ox . Пусть $\mathbf{P} = -p\mathbf{I} + \mathbf{\Pi}$ — тензор напряжений. Из соображений симметрии ясно, что вектор $\mathbf{P} \cdot \mathbf{n}_x$ перпендикулярен любой площадке с нормалью

$\mathbf{n}_x = (1, 0, 0)$. Поэтому $P_{zx} = P_{yx} = 0$. Поскольку тензор напряжений симметричен, имеем $P_{xz} = P_{xy} = 0$, а также $P_{zy} = P_{yz} = 0$, а $P_{yy} = P_{zz}$ (в том числе в межфазном слое). Таким образом, из (2.4) и (2.5) имеем

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_n & 0 & 0 \\ 0 & P_t & 0 \\ 0 & 0 & P_t \end{bmatrix}, \quad P_n = -p - \lambda_1 \rho (\partial_x C)^2, \quad P_t = -p. \quad (3.8)$$

Здесь $P_n = P_{xx}$, $P_t = P_{yy} = P_{zz}$ — нормальное и тангенциальное к межфазной границе напряжения соответственно. В силу предположения о гидростатическом равновесии нормальное напряжение постоянно $P_n = \text{const}$, а значит,

$$p = -P_n - \lambda_1 \rho (\partial_x C)^2.$$

Таким образом, увеличение $\partial_x C$ в межфазном слое компенсируется уменьшением p , что, в свою очередь, приводит к увеличению P_t . Поэтому в поверхностном слое действует избыточное тангенциальное напряжение, которое определяется по формуле Беккера [8–17]:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} (P_t - P_n) dx, \quad (3.9)$$

которое принимается за механическое *определение* поверхностного (межфазного) натяжения. Учитывая выражения (3.8), из (3.9) получаем

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_1 \rho \left(\frac{dC}{dx} \right)^2 dx. \quad (3.10)$$

Заметим, что эти же рассуждения использованы в [18] для определения межфазного натяжения в аналогичной модели двухфазной гидродинамики.

С термодинамической точки зрения поверхностное натяжение представляет собой избыточную свободную энергию, сосредоточенную в поверхностном слое [14, 16, 19, 20]:

$$\begin{aligned} \sigma &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi + \frac{\lambda_1}{2} \left(\frac{dC}{dx} \right)^2 - C\Psi^{(1)} - (1-C)\Psi^{(2)} \right\} \rho dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Psi_{sep}(C) + \frac{\lambda_1}{2} \left(\frac{dC}{dx} \right)^2 \right\} \rho dx. \end{aligned}$$

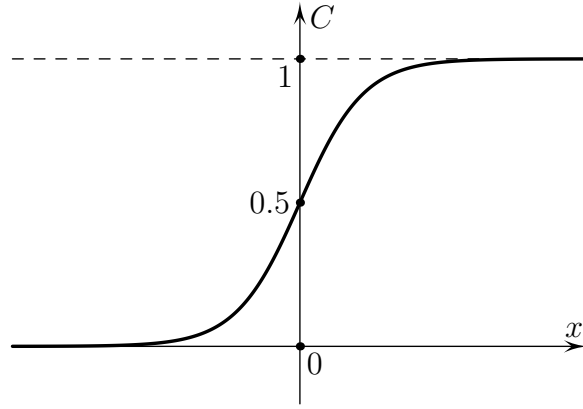


Рис. 1. Одномерное распределение концентрации (3.14) для некоторого β .

Пусть теперь плотность ρ постоянна. Поскольку в состоянии равновесия полная свободная энергия принимает минимальное значение, то задачу определения $C(x)$ можно рассматривать как вариационную задачу на нахождение минимума функционала σ , зависящего от $C(x)$. Следуя стандартной процедуре [21], запишем соответствующее уравнение Эйлера:

$$\lambda_1 \frac{d^2 C}{dx^2} = \frac{d\Psi_{sep}}{dC}. \quad (3.11)$$

К этому же уравнению можно прийти, заметив, что в равновесии для химического потенциала справедливо $\mu = 0$. Поскольку правая часть в (3.11) явно от x не зависит, удобно сделать замену переменной $q(C) = dC/dx$. Тогда $d^2 C/dx^2 = q'q = (q^2)'/2$ и

$$\frac{\lambda_1}{2} (q^2)' = \frac{d\Psi_{sep}}{dC},$$

где $q' \equiv dq/dC$. Проинтегрируем полученное соотношение по C от 0 до 1:

$$\frac{\lambda_1}{2} \left(\frac{dC}{dx} \right)^2 = \Psi_{sep}(C). \quad (3.12)$$

Здесь учтено, что $dC/dx|_{C=0} = dC/dx|_{C=1} = 0$ и $\Psi_{sep}(0) = \Psi_{sep}(1) = 0$. Поэтому для поверхностного натяжения получаем

$$\sigma = \rho \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_1 \left(\frac{dC}{dx} \right)^2 dx = \frac{\rho \lambda_1 \beta}{6} = \rho \sqrt{\frac{A_\psi \lambda_1}{18}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2A_\psi}{\lambda_1}}. \quad (3.13)$$

Полученное выражение совпадает с (3.10).

Дополнительно потребуем, чтобы $C(x_0) = 1/2$. Это соответствует требованию на положение *условной* межфазной границы в точке $x = x_0$. Таким образом, интегрируя (3.12), имеем:

$$C(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta(x - x_0)}{2}. \quad (3.14)$$

График $C(x)$ для некоторого β и $x_0 = 0$ представлен на рисунке 1. Определим межфазный слой как область пространства $\{x : \varepsilon_c \leq C \leq 1 - \varepsilon_c\}$. Тогда для толщины межфазного слоя ε справедливо

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

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

4 Граничные условия смачивания

Для задания угла смачивания в рамках моделей диффузной границы могут использоваться различные подходы к выбору (или реализации) граничных условий. Это множество подходов можно условно разделить на два класса: геометрические и физические. Геометрические методы задания значения угла смачивания следует рассматривать скорее как технические приемы (реализацию) в том смысле, что они позволяют задать конкретное значение контактного угла, не учитывая какие-либо физические механизмы, обеспечивающие его равенство заданному значению [22–24]. Физические методы учета смачивания основаны на введении свободной энергии поверхности [25–31]. Именно такой подход в настоящей работе и используется. При этом мы будем следовать работам [25, 26].

Рассмотрим двухфазную систему в области Ω , граница которой $\partial\Omega$ соответствует твердой стенке, которую можно рассматривать как границу некоторой твердой фазы, объемлющей область течения. Далее область пространства, где $C \approx 1$, будем называть «красной» фазой (жидкостью), а область с $C \approx 0$ — «синей». Поскольку каждая из поверхностей раздела фаз обладает определенной свободной энергией [27], мы можем ввести поверхностную плотность свободной энергии на границах «синяя жидкость–стенка» и «красная жидкость–стенка» (отметим, что в рассматриваемой модели границы раздела твердой и жидких фаз являются «четкими»). Обозначим их соответственно как σ_{bw} и σ_{rw} . Граница «синяя жидкость–красная жидкость» обладает *объемной* плотностью свободной энергии, которая, как было отмечено выше, совпадает с поверхностным натяжением σ и играет роль соответствующей поверхностной энергии. Линия, по которой соприкасаются все три фазы, называется линией трехфазного контакта. В рассматриваемом случае линией трехфазного контакта будем считать линию пересечения поверхности уровня $C = 0.5$ и твердой стенки.

Определим угол θ в некоторой точке O линии трехфазного контакта так, что одна его грань касается границы «твердая стенка–синяя жидкость» (если

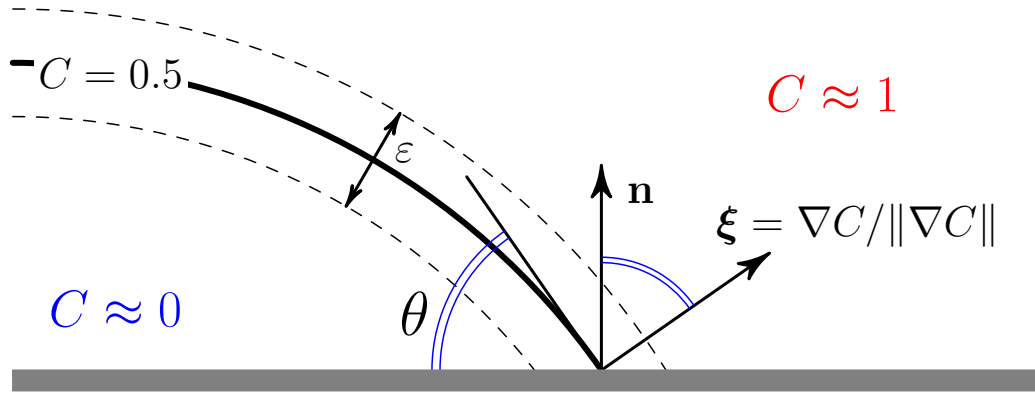


Рис. 2. К выводу граничных условий на твердой стенке.

стенка плоская, то эта грань с ней совпадает), а другая касается поверхности $C = 0.5$. На рисунке 2 угол θ отмечен двумя синими дугами.

Согласно закону Юнга все три энергии σ_{rw} , σ_{bw} и σ связаны с углом смачивания θ соотношением [16, 27]:

$$\sigma_{rw} - \sigma_{bw} - \sigma \cos \theta = 0. \quad (4.15)$$

Введем функцию $\Psi_w(C)$, описывающую поверхностную плотность свободной энергии твердой границы:

$$\Psi_w(C) = [1 - g(C)]\sigma_{bw} + \sigma_{rw}g(C) = \sigma_{bw} + (\sigma_{rw} - \sigma_{bw})g(C) = \sigma_{bw} + \sigma \cos \theta g(C).$$

Здесь $g(C)$ — некоторая неотрицательная функция, интерполирующая значения между 0 и 1, причем $g(0) = 0$, $g(1) = 1$. Конкретный вид $g(C)$ определен ниже. Таким образом, функция $\Psi_w(C)$ интерполирует значения поверхностной энергии между σ_{rw} и σ_{bw} .

Теперь *полную* энергию системы можно представить как

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega} \rho e dV + \int_{\partial\Omega} \Psi_w ds. \quad (4.16)$$

Рассмотрим скорость изменения полной энергии:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \int_{\Omega} \partial_t(\rho e) dV + \int_{\partial\Omega} \partial_t C \partial_C \Psi_w ds.$$

В работах [3, 4] показано, что для КГиД системы уравнений (2.1)–(2.3) справедливо уравнение энергетического баланса

$$\partial_t(\rho e) + B + \operatorname{div} \mathbf{a} = 0, \quad (4.17)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} B &= 2\eta|\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta\right) (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + M|\nabla\mu|^2 + \frac{\rho}{\tau}|\mathbf{w}|^2, \\ \mathbf{a} &= \left(e + \rho\Psi'_{0\rho}\right)\mathbf{j}_m - (\mathbf{\Pi}^{NS} + \mathbf{\Pi}^\tau)\mathbf{u} - (\partial_t C)\lambda_1\rho\nabla C - M(C)\mu\nabla\mu, \\ e &= \frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2 + \Psi_0 + \frac{1}{2}\lambda_1|\nabla C|^2, \quad |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 = \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{u}). \end{aligned}$$

Пусть на границе выполнены условия непротекания $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0$, прилипания $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ и отсутствия потока компонентов $\partial_n \mu = 0$. Тогда на границе имеем $\mathbf{a} \cdot \mathbf{n} = -(\partial_t C)\lambda_1\rho\partial_n C$. Напомним, что \mathbf{n} — внутренняя нормаль к $\partial\Omega$, поэтому при использовании теоремы Гаусса–Остроградского имеем:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{a} dV = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} ds.$$

Для скорости изменения полной энергии получаем

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = - \int_{\Omega} B dV - \int_{\partial\Omega} \partial_t C \left[\lambda_1\rho\partial_n C - \partial_C \Psi_w \right] ds.$$

Поэтому, если на границе дополнительно потребовать выполнение условия

$$\lambda_1\rho\partial_n C - \Psi'_w(C) = D^*\partial_t C, \quad D^* \geq 0, \quad (4.18)$$

то $d\mathcal{E}/dt \leq 0$, то есть полная энергия рассматриваемой системы со временем не будет возрастать. Соотношение (4.18) представляет собой динамическую форму граничных условий для задания угла смачивания. Рассмотрим случай $D^* = 0$, а именно положим:

$$\lambda_1\rho\partial_n C = \sigma \cos \theta g'(C). \quad (4.19)$$

Определим конкретный вид функции $g(C)$, следуя [25, 26]. Для этого пренебрежем кривизной поверхности капли вблизи твердой стенки. Тогда вдоль нормали к линиям уровня концентрации (а значит, к условной поверхности капли) можно пользоваться соотношениями (3.12), (3.14). Введем вектор $\boldsymbol{\xi} = \nabla C / \|\nabla C\|$, совпадающий с единичной нормалью к межфазной поверхности и направленный из «синей» фазы в «красную», то есть в сторону увеличения C (см. рисунок 2). Тогда

$$\partial_n C = \nabla C \cdot \mathbf{n} = \|\nabla C\| \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n} = \|\nabla C\| \cos \theta = \partial_{\boldsymbol{\xi}} C \cos \theta = \cos \theta \sqrt{\frac{2\Psi_{sep}}{\lambda_1}}.$$

Здесь в последнем равенстве мы воспользовались соотношением (3.12), которое верно в силу того, что ранее мы пренебрегли кривизной границы. Далее подставим полученное выражение для $\partial_n C$ в (4.19). Получим:

$$\lambda_1\rho \cos \theta \sqrt{\frac{2\Psi_{sep}}{\lambda_1}} = \sigma \cos \theta g'(C).$$

Условие $\cos \theta = 0$ соответствует равенству $\sigma_{bw} = \sigma_{rw}$, поэтому необходимость в определении интерполирующей функции отпадает. Предположим, что $\cos \theta \neq 0$. Тогда

$$g'(C) = \frac{\lambda_1 \rho}{\sigma} \sqrt{\frac{2\Psi_{sep}}{\lambda_1}} = 6C(1 - C).$$

Отсюда с учетом условий $g(0) = 0$ и $g(1) = 1$ окончательно получаем вид интерполирующей функции:

$$g(C) = 3C^2 - 2C^3.$$

Окончательно граничное условие для C , учитывающее нетривиальный контактный угол, примет 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:

$$\partial_n \mu = 0, \quad \partial_n C = \frac{6\sigma \cos \theta}{\rho \lambda_1} C(1 - C), \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \partial_n p = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (4.20)$$

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 (4.20) с учетом уравнения состояния $p = c_s^2 \rho$ можно переписать в виде

$$c_s^2 \partial_n \rho = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}. \quad (4.21)$$

5 Разностная схема

В данном разделе приведена разностная схема, аппроксимирующая уравнения (2.1)–(2.3) и описание алгоритмов, реализующих эту разностную схему в приграничных узлах и учитывающих краевые условия на граничных границах и узлах.

5.1 Аппроксимация основных уравнений

Для численного решения системы уравнений (2.1)–(2.3) применим явную двухслойную симметричную разностную схему из [3, 5].

Пусть $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ — область расчета. На $[0, L_x]$ введем равномерную сетку $\bar{\omega}_{xh}$ с узлами $x_m = (m-1/2)h_x$, $1 \leq m \leq N_x$ и шагом $h_x = h$. Дополнительные узлы x_m с $m = 0, -1, \dots$ и $N_x + 1, N_x + 2, \dots$ являются фиктивными, то есть такими, что они либо заведомо относятся к неактивным ячейкам, либо используются для постановки краевых условий (втекания, вытекания, периодичности и т.п.). Пусть ω_{xh} состоит из узлов x_m , $2 \leq m \leq N_x - 1$, являющихся внутренними для $\bar{\omega}_{xh}$. Введем вспомогательную *двойственную* сетку $\bar{\omega}_{xh}^*$ с узлами $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2 = mh$, $0 \leq m \leq N_x$ и ее внутреннюю часть ω_{xh}^* с узлами $x_{m+1/2}$, $1 \leq m \leq N_x - 1$. Аналогично вводятся сетки с шагами $h_y = h$ на $[0, L_y]$.

Введем двумерные сетки $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh}$ и $\bar{\omega}_h^* = \bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^*$. Аналогично для ω_h , ω_h^* . Пусть сетка $\bar{\omega}_{l*,h}$ получается из $\bar{\omega}_h$ в результате замены сомножителя $\bar{\omega}_{lh}$ на $\bar{\omega}_{lh}^*$, а сетка $\bar{\omega}_{l^*,h}^*$ — из $\bar{\omega}_h^*$ в результате замены сомножителя $\bar{\omega}_{lh}^*$ на $\bar{\omega}_{lh}$. Аналогично вводятся сетки $\omega_{l*,h}$, $\omega_{l^*,h}^*$. Здесь $l \in \{x, y\}$.

Будем считать, что сетка $\bar{\omega}_h$ содержит центры расчетных ячеек. Тогда центры ребер лежат на сетках $\bar{\omega}_{x*,h}$, $\bar{\omega}_{y*,h}$, а угловые узлы — на сетке $\bar{\omega}_h^*$. Основные параметры течения — скорость \mathbf{u} , плотность ρ , концентрацию C — определим в узлах основной сетки $\bar{\omega}_h$.

Пусть $H(\omega)$ — пространство функций, определенных на некоторой сетке ω . Введем операторы сеточных усреднений $s_l: H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*)$, $s_l^*: H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ и разностных отношений $\overset{\circ}{\delta}_l: H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh})$, $\delta_l: H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*)$, $\delta_l^*: H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ по формулам:

$$\begin{aligned} (s_l v)_{m-1/2} &= \frac{v_m + v_{m-1}}{2}, & (s_l^* u)_m &= \frac{u_{m+1/2} + u_{m-1/2}}{2}, & (\overset{\circ}{\delta}_l v)_m &= \frac{v_{m+1} - v_{m-1}}{2h}, \\ (\delta_l v)_{m-1/2} &= \frac{v_m - v_{m-1}}{h}, & (\delta_l^* u)_m &= \frac{u_{m+1/2} - u_{m-1/2}}{h}, \end{aligned}$$

где $v \in H(\bar{\omega}_{lh})$ и $u \in H(\bar{\omega}_{lh}^*)$. Отметим, что $\overset{\circ}{\delta}_l = \delta_l^* s_l = s_l^* \delta_l$.

Введем сетку по времени с узлами $t_n = n\Delta t$, $n = 0, 1, \dots$, с шагом $\Delta t > 0$ и разностную производную по времени

$$\delta_t v = \frac{\hat{v} - v}{\Delta t}, \quad \hat{v}^n = v^{n+1}.$$

Пусть сначала рассматриваемая ячейка находится достаточно далеко от границ. Разностную схему для (2.1)–(2.3) запишем на основной сетке ω_h :

$$\delta_t \rho + \delta_x^* j_{mx} + \delta_y^* j_{my} = 0, \quad (5.22)$$

$$\delta_t(\rho u_l) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_l) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_l) + \overset{\circ}{\delta}_l p = \delta_x^* \Pi_{xl} + \delta_y^* \Pi_{yl}, \quad l \in \{x, y\}, \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho} \delta_t C + \rho s_x^* [(s_x u_x - w_x^{(x)}) \delta_x C] + \rho s_y^* [(s_y u_y - w_y^{(y)}) \delta_y C] = \\ = \delta_x^*(M \delta_x \mu) + \delta_y^*(M \delta_y \mu). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Аппроксимации компонент векторов \mathbf{j}_m и \mathbf{w} имеют вид:

$$j_{ml} = (s_l \rho)(s_l u_l - w_l^{(l)}), \quad l \in \{x, y\}, \quad (5.25)$$

$$w_l^{(l)} = \frac{s_l \tau}{s_l \rho} \left\{ (s_l \rho)(s_l u_l) \delta_l u_l + s_l \left\{ \rho s_m^* [(s_m u_m) \delta_m u_l] \right\} + \right. \\ \left. + (s_l \rho) \delta_l \mathcal{H}(\rho) + \delta_x^{(l)} Q_{xl}^w + \delta_y^{(l)} Q_{yl}^w \right\}, \quad (5.26)$$

где $\{l, m\}$ — перестановка $\{x, y\}$, $\delta_k^{(k)} = \delta_k$, $\delta_k^{(l)} = \delta_k^*$ при $k \neq l$, $\mathcal{H}(\rho) = c_s^2 \ln \rho$,

$$Q_{kk}^w = \lambda_1 \left\{ s_k^* [(s_k \rho) \delta_k C] \right\} \delta_k C, \quad Q_{kl}^w = \lambda_1 \left\{ s_l [(s_k \rho) \delta_k C] \right\} s_k \delta_l C, \quad k \neq l. \quad (5.27)$$

Величины j_{ml} , $w_l^{(l)}$ определены на $\omega_{l^*, h}$, а параметр τ — на $\bar{\omega}_h$. Компоненты $\Pi_{kl} = \Pi_{kl}^{NS} - Q_{kl} + \Pi_{kl}^\tau$ тензора $\mathbf{\Pi}$ определены на $\omega_{k^*, h}$. Для компонент тензора вязких напряжений Навье–Стокса используем аппроксимацию

$$\Pi_{kk}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_k u_k - \frac{2}{3} \eta [s_l^* (\delta_l s_k u_l)], \quad \Pi_{kl}^{NS} = \eta \delta_k u_l + \eta s_l^* (\delta_l s_k u_k), \quad k \neq l, \quad (5.28)$$

где $\{k, l\}$ — перестановка $\{x, y\}$; тензора капиллярных напряжений —

$$Q_{kk} = s_k Q_{kk}^w, \quad Q_{kl} = s_l^* Q_{kl}^w, \quad k \neq l; \quad (5.29)$$

регуляризирующего тензора —

$$\Pi_{kk}^\tau = (s_k u_k)(s_k \rho) w_k^{(k)}, \quad \Pi_{kl}^\tau = (s_k u_k)(s_k \rho) w_l^{(k)}, \quad k \neq l, \quad (5.30)$$

причем в дополнение к (5.26) используются формулы

$$w_l^{(k)} = \frac{s_k \tau}{s_k \rho} \left\{ (s_k \rho)(s_k u_k) \delta_k u_l + s_k \left\{ \rho s_l^* [(s_l u_l) \delta_l u_l] \right\} + \right. \\ \left. + s_k \left\{ \rho s_l^* \left[\delta_l \mathcal{H}(\rho) + \frac{1}{s_l \rho} \left(\delta_x^{(l)} Q_{xl}^w + \delta_y^{(l)} Q_{yl}^w \right) \right] \right\} \right\}, \quad (5.31)$$

где $\{k, l\}$ — перестановка $\{x, y\}$, $k \neq l$.

Обобщенный химический потенциал μ аппроксимируем на сетке ω_h :

$$\mu = \Psi'_{0C}(\rho, C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \left\{ \delta_x^* [(s_x \rho) \delta_x C] + \delta_y^* [(s_y \rho) \delta_y C] \right\}. \quad (5.32)$$

5.2 Аппроксимация граничных условий

Перейдем к описанию разностной аппроксимации граничных условий. Ребро какой-либо ячейки будем называть *граничным*, если оно инцидентно активной и неактивной ячейкам, и *активным*, если оно инцидентно двум активным ячейкам. Рассматриваемую ячейку также будем называть основной.

При описании и реализации алгоритмов для учета краевых условий иногда удобно определять значения параметров течения на граничных ребрах рассматриваемых ячеек. Поэтому в настоящем разделе мы иногда будем относить величины C и ρ не только к узлам основной сетки, но и к узлам вспомогательных сеток.

Выпишем используемые в граничных ребрах разностные соотношения для случая *плоской* границы с *внутренней* нормалью $(1, 0)$. Рассмотрим граничное ребро с центром в узле (i^*, j) , лежащим на сетке $\omega_{x^*, h}$ (i^* — полуцелый индекс). Запишем разностные соотношения в (i^*, j) , соответствующие краевым условиям (4.20):

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \delta_x \mu = 0, \quad (5.33)$$

$$\delta_x C = \frac{6\sigma \cos \theta}{\lambda_1 \rho_{+1/2}} C(1 - C), \quad (5.34)$$

$$c_s^2 \delta_x \rho = -\lambda_1 \rho \left[2 \left\{ (\delta_x^* C)_{+1/2}^2 - (\delta_x C)^2 \right\} / h + \delta_y \{ \delta_y^* C \cdot s_y(\delta_x C) \} \right]. \quad (5.35)$$

Здесь и ниже для некоторой сеточной функции v введено обозначение $(v_{+1/2})_{i,j} = v_{i+1/2,j}$. Будем считать, что разностные производные $\delta_x \rho$ и $\delta_x C$ на границе связаны со значениями ρ и C на границе с помощью *односторонних* разностных производных:

$$\delta_x C = \frac{C_{+1/2} - C}{h/2}, \quad \delta_x \rho = \frac{\rho_{+1/2} - \rho}{h/2}.$$

Обратим внимание, что в (5.34), аппроксимирующем второе условие в (4.20), плотность ρ приближается значением $\rho_{+1/2}$. Запись условия (5.35) в случае границы более сложной конфигурации изменится (см. алгоритм 3 ниже).

Выпишем для того же узла сеточные формулы, аппроксимирующие некоторые следствия из (4.20):

$$j_{mx} = 0, \quad \Pi_{xy}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x^b u_y, \quad \Pi_{xx}^{NS} = \eta \delta_x^b u_x, \quad \Pi_{xl}^\tau = 0, \quad l \in \{x, y\}, \quad (5.36)$$

$$Q_{xy} = \lambda_1 \rho \delta_x C \delta_y^* C, \quad Q_{xx} = \lambda_1 \rho (\delta_x C)^2, \quad (5.37)$$

где введено обозначение $\delta_x^b v = 2v_{+1/2}/h$, для $v \in \{u_x, u_y\}$.

Отметим, что выписанные формулы используются непосредственно в разностной схеме (5.22)–(5.24), то есть, например, равенство $j_{mx} = 0$ непосредственно подставляется во второе слагаемое слева в (5.22) или $\delta_x \mu = 0$ — в первое слагаемое справа в (5.24).

Условие (5.34) представляет собой квадратное уравнение,

$$\frac{C_{+1/2} - C}{h/2} = \frac{6\sigma \cos \theta}{\lambda_1 \rho_{+1/2}} C(1 - C),$$

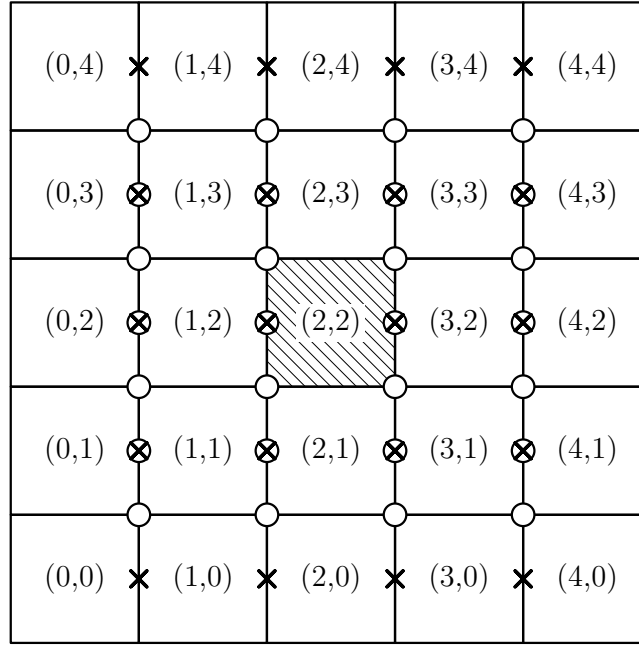


Рис. 3. Шаблон (5×5 ячеек) используемой разностной схемы. Символами отмечены узлы, необходимые для вычисления C , $\delta_x C$, \mathbf{u} (подробнее см. ниже). Рассматриваемая (основная) ячейка заштрихована.

решение которого может быть представлено в виде

$$C = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\gamma} + \text{sign}(\gamma) \sqrt{D} \right), & \gamma \neq 0, \\ C_{+1/2}, & \gamma = 0. \end{cases} \quad (5.38)$$

Здесь $\gamma = (6h\sigma \cos \theta)/(2\lambda_1 \rho_{+1/2})$ и $D = (1 + 1/\gamma)^2 - 4C_{+1/2}/\gamma$. Поскольку $C_{+1/2} \in [0, 1]$, то $D \geq 0$, и концентрация, рассчитанная по формуле (5.38), также будет иметь область значений отрезок $[0, 1]$.

Аналогичным образом схема выписывается для плоских границ с внутренними нормальными $(-1, 0)$ и $(0, \pm 1)$.

6 Алгоритмы реализации разностной схемы

Разностная схема (5.22)–(5.32) применяется для расчета течений в областях весьма сложной формы, имеющих воксельное представление. При этом шаблон этой схемы является довольно широким и ввиду сложной геометрии может состоять из произвольным образом распределенных активных и неактивных ячеек. Поэтому возникает необходимость в алгоритмах, реализующих описанную разностную схему в приграничных ячейках (то есть ячейках, шаблон которых содержит по крайней мере одну неактивную ячейку) и учитывающих краевые условия на граничных ребрах.

Алгоритм 1. Расчет значений C , $\delta_x C$ и \mathbf{u} в центре ребра с координатами (i^*, j) , перпендикулярного оси Ox (аналогично для Oy).

```

1:  $s = a_{i^*+1/2,j} + a_{i^*-1/2,j}$ 
2: if  $s = 0$  then
3:   Узел  $(i^*, j)$  попал «внутри» стенки. Выход.
4: else if  $s = 1$  then
5:    $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ 
6:   Значения  $C_{i^*,j}$  и  $(\delta_x C)_{i^*,j}$  вычисляются согласно (5.38) и (5.34)
7: else  $\triangleright$  обе ячейки активны
8:    $\mathbf{u}_{i^*,j} = (s_x \mathbf{u})_{i^*,j}$ ,  $C_{i^*,j} = (s_x C)_{i^*,j}$ ,  $\rho_{i^*,j} = (s_x \rho)_{i^*,j}$ 
9:    $(\delta_x C)_{i^*,j} = (C_{i^*+1/2,j} - C_{i^*-1/2,j})/h$ 
10: end if

```

Данный раздел посвящен разработке таких алгоритмов. Они обобщают алгоритмы из работы [5], где угол смачивания задавался нейтральным ($\theta = 90^\circ$), и позволяют использовать $\theta \in (0^\circ, 180^\circ)$.

Для построения таких алгоритмов удобно ввести бинарный набор чисел (*матрица активности*) a_{ij} размером 5×5 , где $i, j \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$, по следующему правилу: если ячейка с индексами (i, j) является неактивной (относится к породе), то $a_{ij} = 0$; в противном случае $a_{ij} = 1$. Для всех ячеек, участвующих в расчете, $a_{22} = 1$. Здесь используются локальные координаты (индексы) для каждой ячейки так, чтобы ее геометрическому центру соответствовали координаты $(2, 2)$.

На рисунке 3 приведен шаблон используемой разностной схемы. Рассматриваемая ячейка заштрихована.

Рассмотрим алгоритм 1 (см. его схему на стр. 16), в котором вычисляются значения разностной производной $\delta_x C$, концентрации C , скорости \mathbf{u} и плотности ρ в узлах (i^*, j) , являющихся центрами ребер, перпендикулярных оси Ox (i^* — полуцелый индекс). На рисунке 3 эти узлы обозначены символами (« \times » и « \otimes »). Если обе ячейки, инцидентные ребру, являются активными, то искомые значения вычисляются непосредственно. Если только одна ячейка является неактивной (а значит, их общее ребро — граничное), то искомые значения в его центре вычисляются согласно условию прилипания и граничным условиям (5.34) и (5.38). Если обе ячейки неактивны, то узел (i^*, j) расположен «внутри» стенки (породы) и искомые величины в нем не определены. Заметим, что здесь плотность вычисляется, только если обе инцидентные ячейки являются активными. На граничном ребре плотность вычисляется другим способом (см. ниже алгоритм 3). Для расчета значений разностной производной $\delta_y C$, концентрации C , скорости \mathbf{u} и плотности ρ в узлах (i, j^*) , являющихся центрами ребер, перпендикулярных оси Oy (j^* — полуцелый индекс), алгоритм выписывается аналогично.

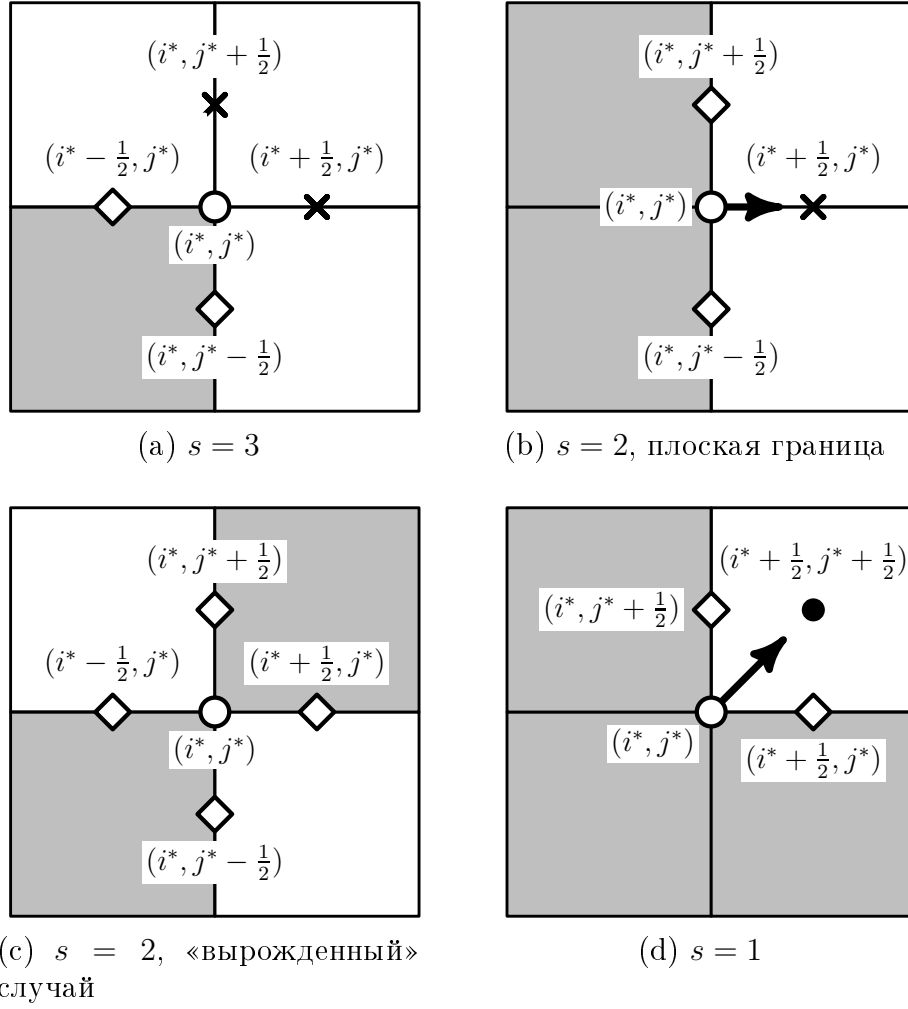


Рис. 4. К описанию алгоритма 2. Здесь и далее серый цвет соответствует неактивным ячейкам.

В алгоритме 2 (см. его схему на стр. 18) вычисляются значения C и \mathbf{u} в «угловых» узлах (i^*, j^*) , где $\{i^*, j^*\} \in \{x_s \pm 3/2, x_s \pm 1/2\}$, где $x_s \equiv 2$. На рисунке 3 они обозначены символами « \circ ». В строке 1 вычисляется s — число активных ячеек, которые содержат узел (i^*, j^*) . Если $s = 4$, то вычисление осуществляется усреднением значений параметров всех четырех ячеек. В этом случае мы также вычисляем ρ . Рассмотрим случаи, когда узел (i^*, j^*) расположен на границе (см. рисунок 4). Им соответствует $0 < s < 4$. Для значений скорости имеем $\mathbf{u} = \mathbf{0}$. Если $s = 3$, то узел (i^*, j^*) является «угловым» (см. рисунок 4а). Тогда C в нем вычисляется усреднением значений C в узлах $(i^*, j^* \pm 1/2)$ и $(i^* \pm 1/2, j^*)$, которые были вычислены в алгоритме 1. В случае двух активных соседей ($s = 2$) в строке 15 вычисляется нормаль $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$. Для этого введем матрицу B и вектор-столбец $\mathbf{a}^{nb}(i^*, j^*)$, описывающий все

Алгоритм 2. Расчет значений C и \mathbf{u} в «угловых» узлах (i^*, j^*) .

```

1:  $s = a_{i^*-1/2, j^*-1/2} + a_{i^*+1/2, j^*-1/2} + a_{i^*-1/2, j^*+1/2} + a_{i^*+1/2, j^*+1/2}$ 
2: if  $s = 0$  then
3:   Узел  $(i^*, j^*)$  расположен «внутри» стенки. Выход.
4: else if  $s = 4$  then
5:    $\rho_{i^*, j^*} = (s_x s_y \rho)_{i^*, j^*}$ ,  $C_{i^*, j^*} = (s_x s_y C)_{i^*, j^*}$ ,  $\mathbf{u}_{i^*, j^*} = (s_x s_y \mathbf{u})_{i^*, j^*}$ 
6: else if  $s = 3$  then
7:    $C_{i^*, j^*} = \frac{1}{4}(C_{i^*-1/2, j^*} + C_{i^*+1/2, j^*} + C_{i^*, j^*-1/2} + C_{i^*, j^*+1/2})$ 
8:    $\mathbf{u}_{i^*, j^*} = 0$ 
9: else if  $s = 1$  then
10:   $\mathbf{u}_{i^*, j^*} = 0$ 
11:   $\mathbf{n}_{i^*, j^*} = B \mathbf{a}^{nb}(i^*, j^*)$ ,  $n_x = \text{sign}((n_x)_{i^*, j^*})$ ,  $n_y = \text{sign}((n_y)_{i^*, j^*})$ 
12:   $C_{i^*, j^*}$  вычисляется согласно (5.38), где  $C_{+1/2}$  заменяется
    на  $C_{i^*+n_x/2, j^*+n_y/2}$ ,  $\rho_{+1/2}$  — на  $\rho_{i^*+n_x/2, j^*+n_y/2}$ ,  $h$  — на  $h\sqrt{2}$ 
13: else
14:   $\mathbf{u}_{i^*, j^*} = 0$ 
15:   $\mathbf{n}_{i^*, j^*} = B \mathbf{a}^{nb}(i^*, j^*)$ ,  $n_x = \text{sign}((n_x)_{i^*, j^*})$ ,  $n_y = \text{sign}((n_y)_{i^*, j^*})$ 
16:  if  $n_x = n_y = 0$  then ▷ вырожденный случай
17:     $C_{i^*, j^*} = \frac{1}{4}(C_{i^*-1/2, j^*} + C_{i^*+1/2, j^*} + C_{i^*, j^*-1/2} + C_{i^*, j^*+1/2})$ 
18:  else ▷ узел расположен на плоском участке границы
19:     $C_{i^*, j^*}$  вычисляется согласно (5.38), где  $C_{+1/2}$  заменяется на
     $C_{i^*+n_x/2, j^*+n_y/2}$ ,  $\rho_{+1/2}$  — на  $\rho_{i^*+n_x/2, j^*+n_y/2}$ 
20:  end if
21: end if

```

четыре ячейки, инцидентные данному узлу:

$$B = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{a}^{nb}(i^*, j^*) = \left[a_{i^*+\frac{1}{2}, j^*+\frac{1}{2}} \quad a_{i^*-\frac{1}{2}, j^*+\frac{1}{2}} \quad a_{i^*-\frac{1}{2}, j^*-\frac{1}{2}} \quad a_{i^*+\frac{1}{2}, j^*-\frac{1}{2}} \right]^T,$$

где индексы i^* и j^* — полуцелые. Тогда $\mathbf{n}_{i^*, j^*} = B \mathbf{a}^{nb}(i^*, j^*)$. Напомним, что здесь рассматривается *внутренняя* нормаль.

Ситуация, при которой $s = 2$ и $n_x = n_y = 0$ (см. рисунок 4с) в настоящей работе считается вырожденной. В этом случае положим $\mathbf{u}_{i^*, j^*} = 0$, а значение концентрации C будем вычислять усреднением (как для $s = 3$). Если $|n_x| + |n_y| \neq 0$, то узел (i^*, j^*) расположен на плоской границе (см. рисунок 4б). Значение C в нем вычисляется согласно (5.38).

Пример конфигурации ячеек, при которой $s = 1$, изображен на рисунке 4д. В этом случае мы считаем, что нормаль \mathbf{n} в (i^*, j^*) направлена как показано на рисунке 4д. Значение C вычисляется согласно условию (5.38),

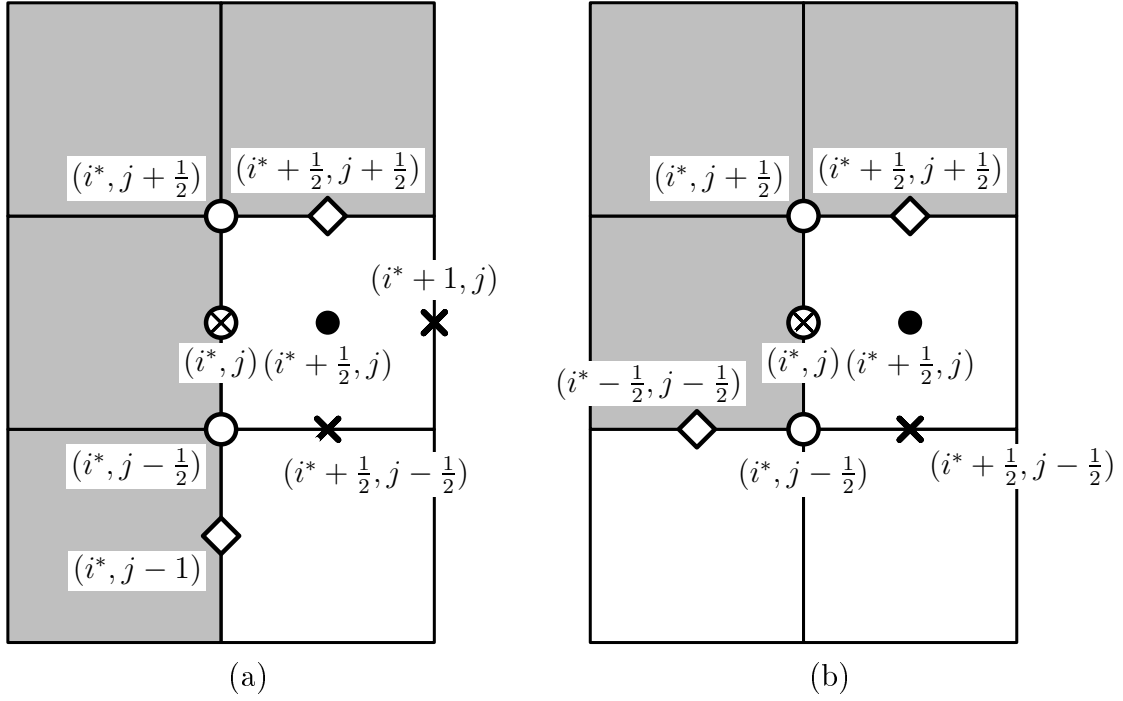


Рис. 5. К описанию алгоритма 3.

где $C_{+1/2}$ надо заменить на $C_{i^*+nx/2, j^*+ny/2}$, $\rho_{+1/2}$ — на $\rho_{i^*+nx/2, j^*+ny/2}$, h — на $h\sqrt{2}$.

Перейдем к описанию алгоритма 3 (см. его схему на стр. 20), с помощью которого вычисляется плотность ρ в центрах ребер, перпендикулярных Ox . При этом рассматриваются узлы (i^*, j) с $i^* \in \{xc \pm 1/2, xc \pm 3/2\}$, $j \in \{xc, xc \pm 1\}$. На рисунке 3 они обозначены как « \otimes ». Рассмотрим конфигурацию, изображенную на рисунке 5а, где (i^*, j) также обозначен символом « \otimes ». В строке 1 вычисляется число *активных* ячеек s , которым инцидентно ребро с центром в узле (i^*, j) . Поскольку это ребро граничное, получаем $s = 1$. В цикле в строке 8 рассчитываются производные $\partial_x C$, $\partial_y C$ в узлах $(i^*, j \pm 1/2)$ (на рисунке 5а обозначены как « \circ »). В строке 9 определяется число активных ячеек sj , инцидентных ребру с центром в $(i^*, j + 2rj)$, $rj = \pm 1/2$. В рассматриваемом случае для $rj = 1/2$ обе ячейки $(i^* \pm 1/2, j + 1)$ неактивны и поэтому $sj = 0$. Производные $\partial_x C$, $\partial_y C$ аппроксимируются в $(i^*, j + 1/2)$ с помощью односторонних разностей с использованием значений C в $(i^*, j + 1/2)$, $(i^* + 1/2, j + 1/2)$ и (i^*, j) , которые вычислены в алгоритмах 1 и 2:

$$\begin{aligned} (\partial_x C)_{i^*, j+1/2} &\approx (\delta_x^b C)_{i^*, j+1/2} = (C_{i^*+1/2, j+1/2} - C_{i^*, j+1/2}) / (0.5h), \\ (\partial_y C)_{i^*, j+1/2} &\approx (\delta_y^b C)_{i^*, j+1/2} = (C_{i^*, j+1/2} - C_{i^*, j}) / (0.5h). \end{aligned}$$

При $rj = -1/2$ в паре ячеек $(i^* \pm 1/2, j - 1)$ одна активна ($sj = 1$) и поэтому в узле $(i^*, j - 1)$ определены параметры течения. В этом случае производная $\partial_x C$ аппроксимируется в узле $(i^*, j - 1/2)$ усреднением значений разностных

Алгоритм 3. Расчет значений плотности ρ в узлах (i^*, j) , являющихся центрами ребер, перпендикулярных оси Ox (для Oy аналогично).

```

1:  $s = a_{i^*+1/2,j} + a_{i^*-1/2,j}$ 
2: if  $s = 2$  then ▷ обе ячейки активны
3:   Значение уже было рассчитано в алгоритме 1. Выход.
4: else if  $s = 0$  then
5:   Узел расположен «внутри» стенки. Выход.
6: else ▷ узел расположен на границе
7:    $nx = a_{i^*+1/2,j} - a_{i^*-1/2,j}$  ▷ направление внутренней нормали
8:   for  $rj = -1/2$  to  $1/2$  do
9:      $sj = a_{i^*+1/2,j+2rj} + a_{i^*-1/2,j+2rj}$ 
10:    if  $sj = 0$  then
11:       $(\delta_y^b C)_{i^*,j+rj} = \frac{C_{i^*,j+rj} - C_{i^*,j}}{h/2} \text{sign}(rj)$ 
12:       $(\delta_x^b C)_{i^*,j+rj} = \frac{C_{i^*+nx/2,j+rj} - C_{i^*,j+rj}}{h/2} nx$ 
13:    else
14:       $(\delta_y^b C)_{i^*,j+rj} = \frac{C_{i^*,j+2rj} - C_{i^*,j}}{h} \text{sign}(rj)$ 
15:       $(\delta_x^b C)_{i^*,j+rj} = s_y(\delta_x C) \equiv \frac{1}{2} [(\delta_x C)_{i^*,j} + (\delta_x C)_{i^*,j+2rj}]$ 
16:    end if
17:  end for
18:   $B_{i^*,j} = \lambda_1 \left\{ \delta_y^* [\delta_x^b C \cdot \delta_y^b C] + nx \cdot \left[ (\delta_x^* C)_{i^*+nx/2,j}^2 - (\delta_x C)_{i^*,j}^2 \right] / (0.5h) \right\}$ 
19:   $\rho_{i^*,j} = \frac{\rho_{i^*+nx/2,j}}{1 - nx \cdot (h/2) \cdot B_{i^*,j} c_s^{-2}}$ 
20: end if

```

производных $\delta_x C$ в узлах $(i^*, j - 1)$ и (i^*, j) (найжены в алгоритме 1). Производная $\partial_y C$ в $(i^*, j - 1/2)$ аппроксимируется непосредственно выражением $\delta_y C$, поскольку значения концентрации C в $(i^*, j - 1)$ и (i^*, j) определены и рассчитаны в алгоритме 1. Если обе ячейки $(i^* \pm 1/2, j - 1)$ активны (см. рисунок 5b), производную $\partial_x C$ в узле $(i^*, j - 1/2)$ аппроксимируем непосредственно как $\delta_x C$, поскольку значения C в $(i^* \pm 1/2, j - 1/2)$ определены и рассчитаны в алгоритме 1. Строки 18 и 19 соответствуют (5.35). Для вычисления ρ в центрах ребер, перпендикулярных оси Oy , алгоритм аналогичен.

Для расчета параметров течения в основной ячейке значения компонент тензора капиллярных напряжений Q_{xy} , входящих непосредственно в (2.2), достаточно знать только в узлах $(x_s \pm 1/2, x_s)$ — центрах ее двух ребер, перпендикулярных оси Ox . В алгоритме 4 (см. его схему на стр. 21) описан способ расчета значений Q_{xy} в этих узлах. При этом рассмотрен только случай

Алгоритм 4. Расчет значения Q_{xy} в узле (i^*, j) , являющемся центром ребра *основной* ячейки, перпендикулярной оси Ox .

```

1: for  $m = -1/2$  to  $1/2$  do
2:    $jm = j + m$ 
3:    $s_m = 0$ 
4:   for  $k = -1/2$  to  $1/2$  do
5:     if  $a_{i^*-1/2, jm+k} = a_{i^*+1/2, jm+k} = 0$  then
6:        $s_m = \frac{1}{2}(\rho_{i^*+1/2, jm} + \rho_{i^*-1/2, jm}) \cdot (C_{i^*+1/2, jm} - C_{i^*-1/2, jm})/h$ 
7:       break
8:     else
9:        $s_m = s_m + \frac{1}{2}\rho_{i^*, jm+k}(\delta_x C)_{i^*, jm+k}$ 
10:    end if
11:  end for
12:   $dc_m = \frac{1}{2} [(\delta_y C)_{i^*+1/2, jm} + (\delta_y C)_{i^*-1/2, jm}]$ 
13: end for
14:  $(Q_{xy})_{i^*, j} = \lambda_1 \frac{1}{2}(s_{-1/2}dc_{-1/2} + s_{1/2}dc_{1/2})$ 

```

когда соседняя ячейка является активной. Для случая неактивной ячейки аппроксимация представлена в (5.37). На рисунке 6а для одной из возможных конфигураций неактивных ячеек представлена часть расчетного шаблона, содержащая ячейки, необходимые для расчета Q_{xy} в узле с индексом $(i^*, j) = (xc - 1/2, xc)$ (обозначен символом « \bigcirc »).

Как видно из (5.27) и (5.29), значения $s_y[(s_x\rho)\delta_x C] \cdot s_x\delta_y C$ необходимо рассчитать в узлах $(i^*, j \pm 1/2)$ (обозначены символами « \times »). Для вычисления $s_y[(s_x\rho)\delta_x C]$ в узле $(i^*, j - 1/2)$ нужны значения ρ , $\delta_x C$ в $(i^*, j - 1)$ и (i^*, j) , если они там определены. Это так, если обе пары ячеек $(i^* \pm 1/2, j - 1)$ и $(i^* \pm 1/2, j)$ содержат по крайней мере по одной активной ячейке. Если хотя бы одна из этих пар содержит только неактивные ячейки, то величина $(s_y[(s_x\rho)\delta_x C])_{i^*, j-1/2}$ заменяется на $(s_x\rho)_{i^*, jm}(\delta_x C)_{i^*, j-1/2}$ (строка 6). Для конфигурации, изображенной на рисунке 6а, обе ячейки $(i^* \pm 1/2, j - 1)$ являются неактивными. Значения $C_{i^* \pm 1/2, j-1/2}$ и $\rho_{i^* \pm 1/2, j-1/2}$ вычислены в алгоритмах 1 и 3. В случае конфигурации, изображенной на рисунке 6б, ячейка $(i^* + 1/2, j - 1)$ является активной, а значит, определено значение $(s_x\rho)\delta_x C$ в центре граничного ребра $(i^*, j - 1)$ (обозначено как « \square »). Поэтому может быть вычислена $(s_y[(s_x\rho)\delta_x C])_{i^*, j-1/2}$.

При вычислении в узле $(i^*, j + 1/2)$ обе пары $(i^* \pm 1/2, j + 1)$ и $(i^* \pm 1/2, j)$ состоят из активных ячеек и в цикле в строке 4 вычисляется $(s_y[(s_x\rho)\delta_x C])_{i^*, j+1/2}$.

Вычисление величины $s_x(\delta_y C)$ в узле (i^*, j) (строка 12) здесь не требует проверок: ячейки $(i^* \pm 1/2, j)$ заведомо являются активными, а значит, величина $\delta_y C$ в узлах $(i^* \pm 1/2, j + 1/2)$ и $(i^* \pm 1/2, j - 1/2)$ определена.

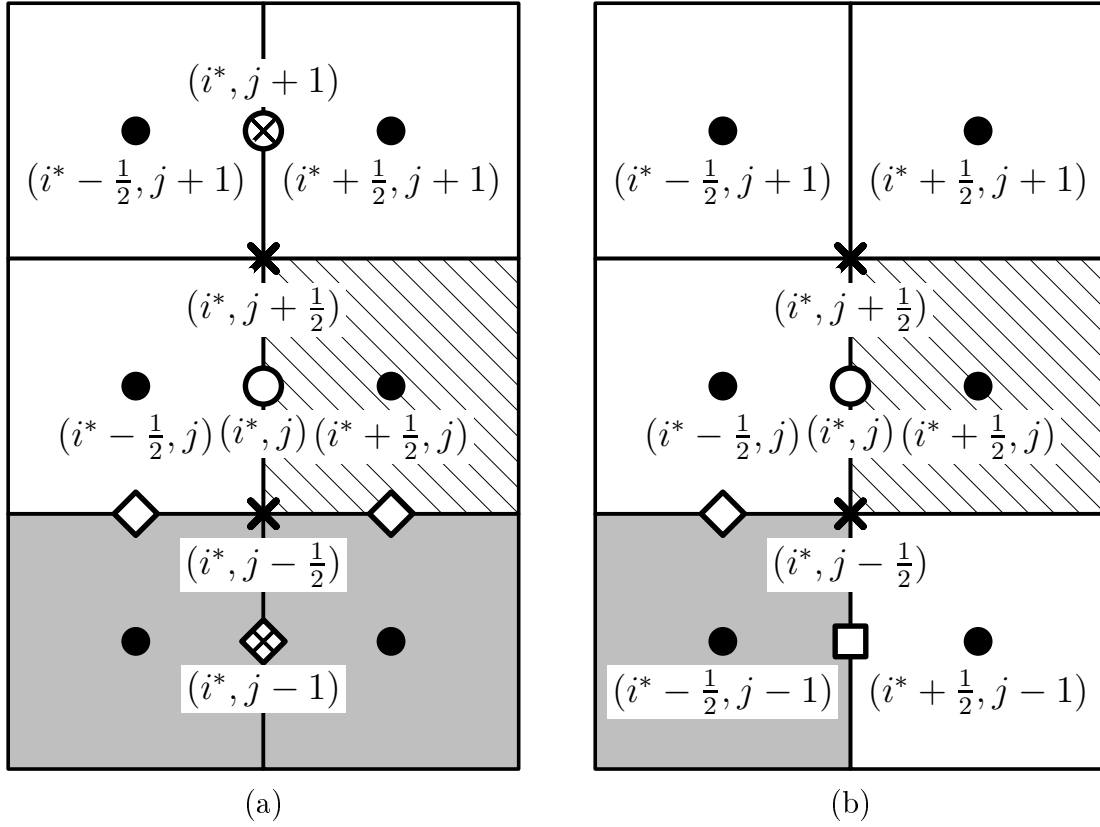


Рис. 6. Часть расчетного шаблона с узлами, необходимыми для вычисления значения Q_{xy} в $(i^*, j) = (xс - 1/2, xс)$. Штриховкой выделена основная ячейка. Серым цветом обозначены *неактивные* ячейки.

Вычисление компонент Q_{yx} в узлах $(xс, xс \pm 1/2)$ проводится аналогично.

Теперь рассмотрим алгоритм 5 (см. его схему на стр. 23) вычисления компоненты $w_y^{(x)}$ в узлах $(xс \pm 1/2, xс)$, которые соответствуют центрам ребер основной ячейки, перпендикулярных направлению Ox . Рассмотрим узел $(i^*, j) = (xс - 1/2, xс)$. На рисунке 7 он обозначен символом «○». Напомним, что ячейка $(i^* + 1/2, j)$ является заведомо активной, поскольку она является основной, а $(i^* - 1/2, j)$ является активной, поскольку в противном случае ребро с центром (i^*, j) являлось бы граничным: согласно условию прилипания в узле (i^*, j) имеем $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, а значит, заведомо $\Pi_{xy}^\tau = \rho u_x w_y^{(x)} = 0$ и величину $w_y^{(x)}$ даже не нужно вычислять.

Введем обозначение

$$b = (s_y u_y) \delta_y u_y + \delta_y \mathcal{H}(\rho) + (\delta_x^* Q_{xy}^w + \delta_y Q_{yy}^w) \frac{1}{s_y \rho}.$$

Тогда выражение (5.31) при $(k, l) = (x, y)$ примет более компактный вид:

$$w_y^{(x)} = \frac{s_x \tau}{s_x \rho} [(s_x \rho) (s_x u_x) \delta_x u_y + s_x \{ \rho s_y^* b \}].$$

Алгоритм 5. Вычисление значения $w_y^{(x)}$ в узле (i^*, j) , соответствующему центру грани основной ячейки, которая перпендикулярна направлению Ox .

```

1: for  $m = -1/2$  to  $1/2$  do
2:   for  $n = -1/2$  to  $1/2$  do
3:      $im = i^* + m, jn = j + n$ 
4:     if  $a_{im,jn+1/2} \cdot a_{im,jn-1/2} = 0$  then
5:        $b_{m,n} = 0$ 
6:     else
7:       for  $l = -1/2$  to  $1/2$  do
8:          $il = im + l, jl = jn + l$ 
9:          $(Q_{yy}^w)_{im,jl} = \lambda_1 \{s_y^*[(s_y \rho) \delta_y C]\}_{im,jl} \cdot \{s_y^*(\delta_y C)\}_{im,jl}$ 
10:         $dcdy_{avr} = (C_{il,jn+1/2} - C_{il,jn-1/2})/h$ 
11:         $G_{avr,y} = \frac{1}{2} [\rho_{il,jn+1/2}(\delta_x C)_{il,jn+1/2} + \rho_{il,jn-1/2}(\delta_x C)_{il,jn-1/2}]$ 
12:         $(Q_{xy}^w)_{il,jn} = G_{avr,y} \cdot dcdy_{avr}$ 
13:      end for
14:       $(\delta_x^* Q_{xy}^w)_{im,jn} = [(Q_{xy}^w)_{im+1/2,jn} - (Q_{xy}^w)_{im-1/2,jn}] / h$ 
15:       $(\delta_y Q_{yy}^w)_{im,jn} = [(Q_{yy}^w)_{im,jn+1/2} - (Q_{yy}^w)_{im,jn-1/2}] / h$ 
16:       $b_{m,n} = (u_y)_{im,jn}(\delta_y u_y)_{im,jn} + (\delta_y \mathcal{H}(\rho))_{im,jn} +$ 
            $+(\delta_x^* Q_{xy}^w + \delta_y Q_{yy}^w)_{im,jn} / \rho_{im,jn}$ 
17:    end if
18:  end for
19: end for
20:  $(w_y^{(x)})_{i^*,j} = \frac{\tau}{\rho_{i^*,j}} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \rho_{i^*+1/2,j} \frac{1}{2} (b_{1/2,1/2} + b_{1/2,-1/2}) + \right. \right.$ 
            $\left. \left. + \rho_{i^*-1/2,j} \frac{1}{2} (b_{-1/2,1/2} + b_{-1/2,-1/2}) \right] + \rho_{i^*,j} (u_x)_{i^*,j} (\delta_x u_y)_{i^*,j} \right\}$ 

```

Величина b вычисляется в узлах $(i^* \pm 1/2, j \pm 1/2)$. На рисунке 7 они обозначены символами «**X**». Рассмотрим узел $(i^* + 1/2, j - 1/2)$, которому соответствуют значения переменных цикла (строки 1, 2) $m = 1/2, n = -1/2$ и, значит, $im = i^* + 1/2, jn = j - 1/2$. Согласно конфигурации, изображенной на рисунке 7, данный узел является центром неактивного ребра, поскольку ячейка $(i^* + 1/2, j - 1)$ неактивна. Поэтому $a_{i^*+1/2,j-1} \cdot a_{i^*+1/2,j} = 0$ и $b_{1/2,-1/2} = 0$ (строка 5). Это соответствует последним двум граничным условиям (4.20), обеспечивающим условие непротекания.

Рассмотрим узел $(i^* - 1/2, j + 1/2)$, который принадлежит *активному* ребру. Первые два слагаемых в выражении для b вычисляются непосредственно (строка 16), и трудностей это не вызывает. Для нахождения разностного отношения $(\delta_x^* Q_{xy}^w)_{i^*-1/2,j+1/2}$ необходимо вычислить $Q_{xy}^w = \lambda_1 (s_y [(s_x \rho) \delta_x C] \cdot s_x \delta_y C)$ в узлах $(i^* - 1, j + 1/2)$ и $(i^*, j + 1/2)$, которые на рисунке 7 отмечены как «**⊗**»

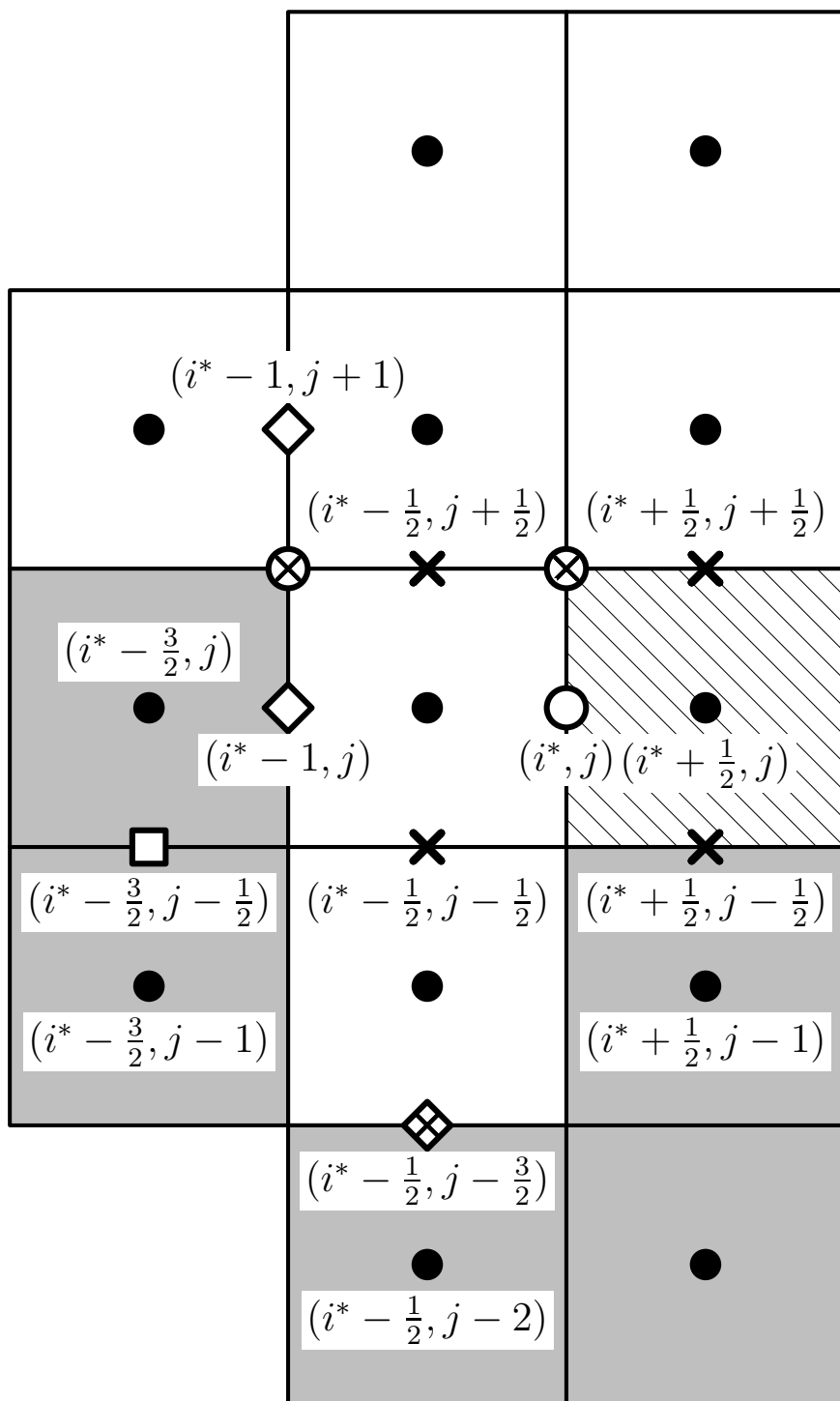


Рис. 7. Часть расчетного шаблона с узлами, необходимыми для вычисления $w_y^{(x)}$ в $(i^*, j) = (x_c - 1/2, x_c)$. Штриховкой выделена основная ячейка.

(им соответствуют значения параметра цикла (строка 7) $l = \pm 1/2$). Рассмотрим узел $(im - 1/2, jn) \equiv (i^* - 1, j + 1/2)$. Величины ρ , C и $\delta_x C$ в узлах $(i^* - 1, j + 1)$ и $(i^* - 1, j)$ (на рисунке 7 они обозначены как « \diamond ») предварительно вычислены в алгоритмах 3 и 1. Узел $(i^* - 1, j + 1)$ заведомо не попадает

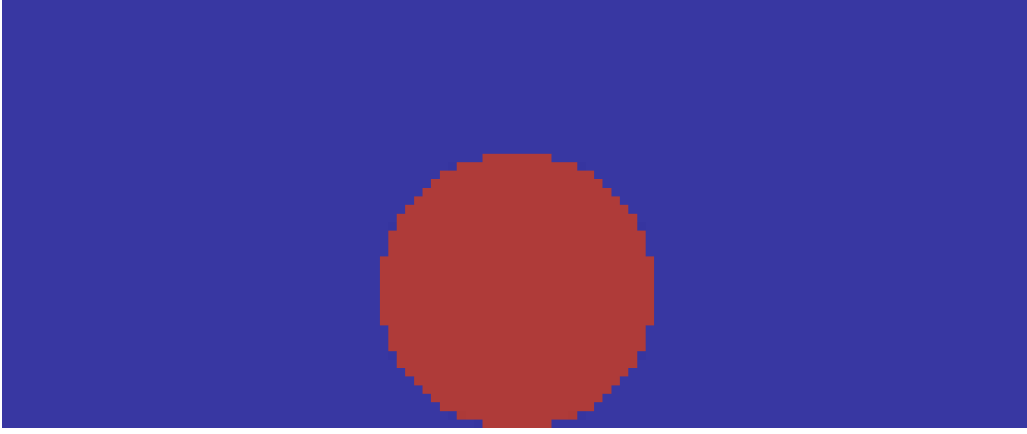


Рис. 8. Начальное распределение C на сетке размером 120×50 ячеек.

«внутри» стенки (породы), так как ячейка $(i^* - 1/2, j + 1)$ заведомо активна (иначе алгоритм попадет на строку 5).

Аппроксимация производной $\partial_y C$ в узлах $(i^* - 1, j + 1/2)$ и $(i^*, j + 1/2)$ вычисляется в строке 10. Узел $(i^*, j + 1/2)$ инцидентен только активным ячейкам, поэтому $(C_{i^*, j+1} - C_{i^*, j})/h \equiv (s_x \delta_y C)_{i^*, j+1/2}$. Однако это тождество неверно для узла $(i^* - 1, j + 1/2)$, поскольку он инцидентен неактивной ячейке $(i^* - 3/2, j)$.

Рассмотрим вычисление разностного отношения $\delta_y Q_{yy}^w$ в $(i^* - 1/2, j - 1/2)$.

Для этого необходимо вычислить значения $Q_{yy}^w = \lambda_1 (s_y^* [(s_y \rho) \delta_y C]) \overset{\circ}{\delta}_y C$ в узлах $(i^* - 1/2, j)$ и $(i^* - 1/2, j - 1)$. Это осуществляется непосредственно, поскольку значения ρ и $\delta_y C$ в узлах $(i^* - 1/2, j \pm 1/2)$, $(i^* - 1/2, j - 3/2)$ были вычислены в алгоритмах 3 и 1. Здесь учтено, что $\overset{\circ}{\delta}_y C \equiv s_y^* \delta_y C$.

Алгоритм для вычисления $w_x^{(y)}$ в узлах $(x, x \pm 1/2)$ строится аналогично.

7 Тестовые расчеты

7.1 Капля на плоской подложке

В качестве первого теста рассмотрим задачу о расчете равновесной формы капли, расположенной на плоской подложке, перпендикулярной оси Oy , для различных значений угла смачивания θ . Параметры расчета выберем следующими: $A_\psi = 1.8 \cdot 10^4$ Дж/кг, $\lambda_1 = 2 \cdot 10^{-4}$ Дж \cdot м²/кг, $M_0 = 5 \cdot 10^{-10}$ кг \cdot с/м³, $c_s = 10^3$ м/с, $\eta = 5 \cdot 10^{-3}$ Па \cdot с. На всех сторонах расчетной области зададим граничные условия (4.20), соответствующие твердой стенке.

Длину и высоту расчетной области положим $L_x = 0.01$ м, $L_y = 5L_x/12$ соответственно. Шаг по пространству будем выбирать как $h = L_x/N_x$, где N_x — число расчетных ячеек вдоль Ox .

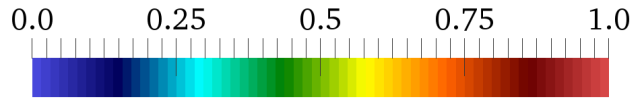
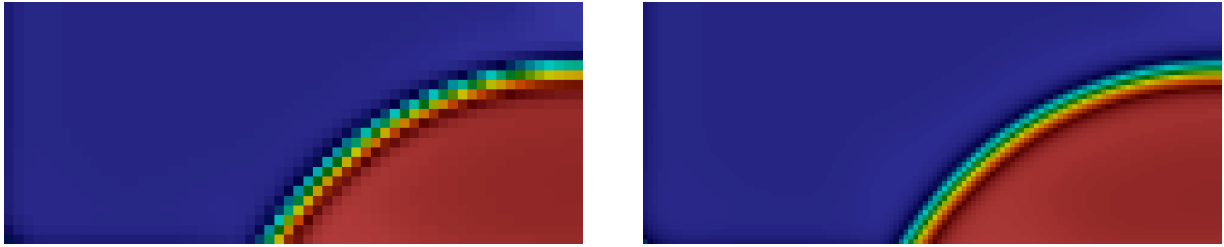


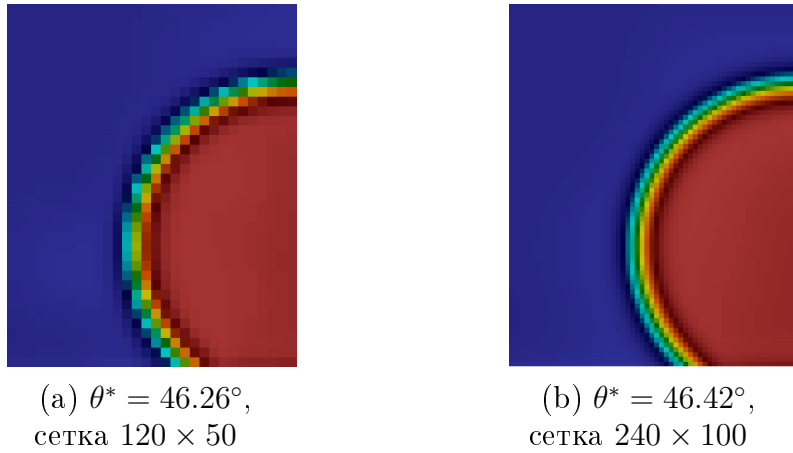
Рис. 9. Соответствие между значениями концентрации C и цветом.



(a) $\theta^* = 123.61^\circ$, сетка 120×50

(b) $\theta^* = 122.65^\circ$, сетка 240×100

Рис. 10. Распределения C , полученные на момент времени $t = 0.08$ с при угле смачивания $\theta = 120^\circ$.



(a) $\theta^* = 46.26^\circ$,
сетка 120×50

(b) $\theta^* = 46.42^\circ$,
сетка 240×100

Рис. 11. Распределения C , полученные на момент времени $t = 0.08$ с при угле смачивания $\theta = 45^\circ$.

В начальный момент времени зададим распределение концентрации кусочно-постоянным и таким, что капля «красной» жидкости имеет радиус $R = 0.32L_y$ и касается твердой стенки $y = 0$ в точке $(L_x/2, 0)$:

$$C_0 = \begin{cases} 0.95, & \text{если } (x - L_x/2)^2 + (y - R)^2 < R^2; \\ 0.05, & \text{иначе.} \end{cases}$$

На рисунке 8 представлено начальное распределение концентрации C на сетке размером 120×50 ячеек. Здесь и далее начальные скорости и плотность во всех расчетных ячейках положим $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$, $\rho_0 = 1 \text{ кг/м}^3$.

На рисунке 9 представлено соответствие между значениями концентрации C и цветом (легенда). На рисунках 10а, 10б и 11а, 11б представлены распределения C , полученные на сетках 120×50 (с шагом $\Delta t = 4 \cdot 10^{-8}$ с) и

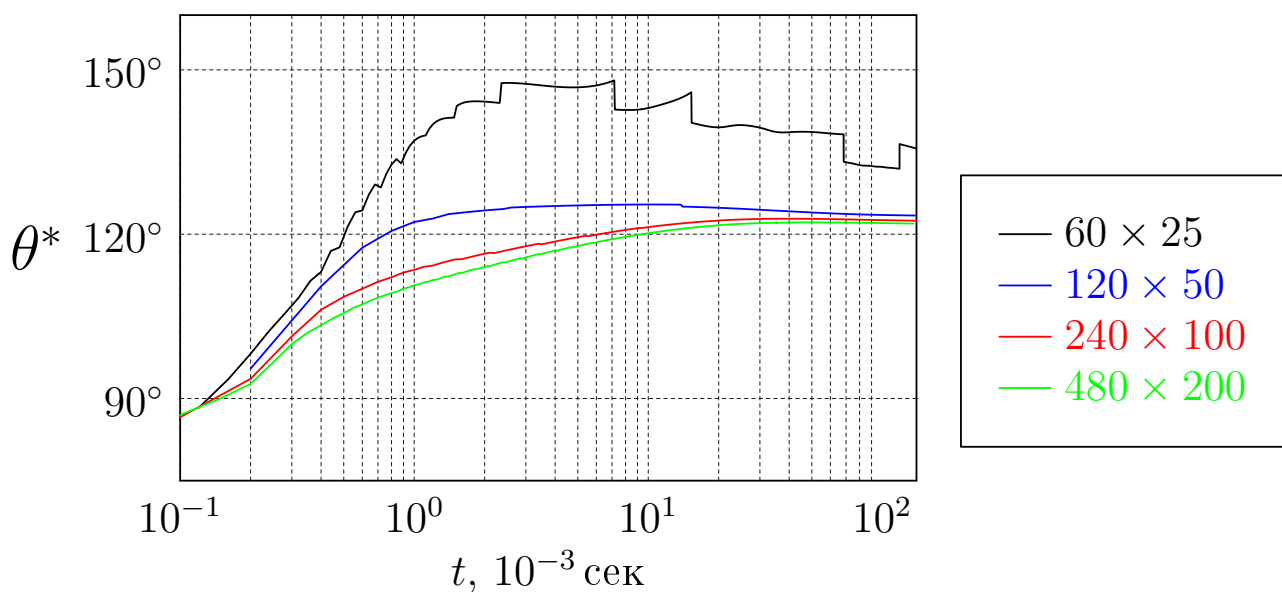


Рис. 12. Зависимость наблюдаемого угла смачивания θ^* от времени t при расчете на различных сетках для $\theta = 120^\circ$.

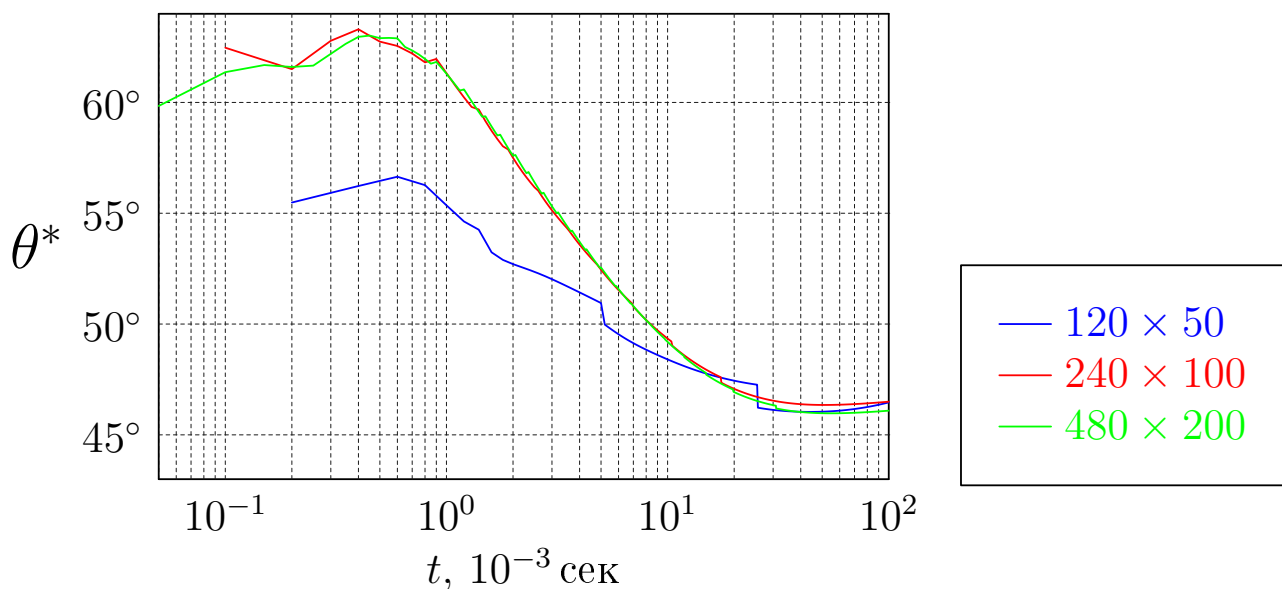


Рис. 13. Зависимость наблюдаемого угла смачивания θ^* от времени t при расчете на различных сетках для $\theta = 45^\circ$.

240×100 (с шагом $\Delta t = 2 \cdot 10^{-8}$ с) ячеек на момент времени $t = 0.08$ с при задании $\theta = 120^\circ$ и $\theta = 45^\circ$. В подписях указаны соответствующие значения *наблюдаемого* угла смачивания θ^* , который вычисляется в некотором узле $(i^*, 3/2)$ сетки ω_h^* ($i^* \in \{1/2, 1 + 1/2, \dots, N_x - 1/2\}$) согласно выражению

$$\theta^* = \frac{180^\circ}{\pi} \arccos \left(\frac{\partial_y C}{\|\nabla C\|} \right) \approx \frac{180^\circ}{\pi} \arccos \left(\frac{\delta_y s_x C}{\sqrt{(\delta_x s_y C)^2 + (\delta_y s_x C)^2}} \right).$$

При этом узел $(i^*, 3/2)$ выбирается так, что $C_{i^*-1/2,1} < 0.5$ и $C_{i^*+1/2,1} \geq 0.5$. Поэтому можно утверждать, что поверхность уровня $C = 0.5$ (то есть условная межфазная граница) проходит где-то между геометрическими центрами расчетных ячеек $C_{i^*\pm 1/2,1}$. Напомним, что все ребра нижней твердой стенки имеют центры в узлах с индексами $(i, 1/2)$, для $i = 1, \dots, N_x$.

На рисунках 12 и 13 изображена полученная в расчетах на различных сетках зависимость угла θ^* от времени t для $\theta = 120^\circ$ и $\theta = 45^\circ$ соответственно. Отметим, что скачкообразные изменения угла связаны исключительно со способом его вычисления: скачки происходят при изменении выбора соответствующей пары ячеек расчетной сетки.

С измельчением расчетной сетки наблюдаемый краевой угол θ^* визуально сходится к некоторому значению, которое близко к заданному θ , но немного отличается от него ($\sim 5\%$). Отличие можно объяснить тем, что при выводе соответствующих граничных условий использованы предположения о нулевой кривизне межфазного слоя и точном выполнении соотношений (3.12), (3.14) в нормальном направлении. Первое предположение будет тем лучше выполняться, чем меньше отношение $Sp = \varepsilon/R$, называемое числом Кана (напомним, что ε — ширина межфазной границы, R — характерный размер задачи, который в данном случае принимается равным радиусу капли). Второе предположение может несколько нарушаться, поскольку, с одной стороны, межфазная граница может быть недостаточно хорошо разрешена, а с другой — в модели присутствуют так называемые «паразитные токи» (вихреобразные возмущения поля скорости на межфазной границе) [32, 33], которые могут быть еще одной причиной небольших отклонений от «правильного» распределения концентрации в межфазном слое. На крупномасштабную динамику капли существенного влияния они не оказывают, но вполне могут быть причиной небольших отклонений θ^* от θ . Отметим, что влияние описанных факторов в рамках используемой модели требует отдельного исследования.

7.2 Капля на плоской «ступенчатой» подложке

В данном разделе также рассмотрим задачу о растекании капли на плоской подложке, но, в отличие от предыдущего раздела, будем считать, что

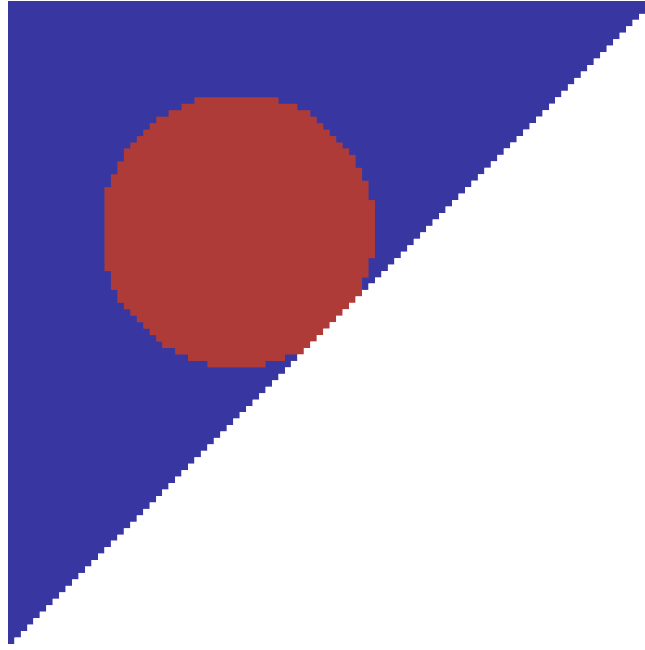


Рис. 14. Начальное распределение C . Сетка 100×100 ячеек.

подложка задается уравнением $x = y$. Поскольку в работе рассматривается воксельная геометрия, то таким образом заданная подложка будет иметь «ступенчатую» форму. Активные ячейки расположены в части области $x < y$. На всех границах мы также будем задавать условия (4.20). Параметры течения задаются такими же, как и в предыдущем разделе. Зададим геометрические размеры $L_x = L_y = 0.01$ м, число ячеек $N_x = N_y = 100$, шаг по времени $\Delta t = 5 \cdot 10^{-8}$ с. Выберем начальное распределение концентрации в виде

$$C_0 = \begin{cases} 0.999, & \text{если } \left[x - \left(\frac{L_x}{2} - 0.95 \frac{R}{\sqrt{2}} \right) \right]^2 + \left[y - \left(\frac{L_y}{2} + 0.95 \frac{R}{\sqrt{2}} \right) \right]^2 < R^2; \\ 0.001, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Здесь $R = 0.3L_y/\sqrt{2}$ — радиус капли. На рисунке 14 представлено начальное кусочно-постоянное распределение концентрации.

Так же как в предыдущем разделе, будем рассматривать значения *наблюдаемых* углов смачивания θ_1^* и θ_2^* , которые вычисляются в некотором узле (i^*, j^*) вспомогательной сетки ω_h^* согласно соотношению

$$\theta^* = \frac{180^\circ}{\pi} \arccos \left(\frac{\partial_n C}{\|\nabla C\|} \right) \approx \frac{180^\circ}{\pi} \arccos \left(\frac{\delta_n C}{\sqrt{(\delta_\tau C)^2 + (\delta_n C)^2}} \right),$$

где введены обозначения

$$\delta_\tau C = \frac{C_{i^*+1/2, j^*+1/2} - C_{i^*-1/2, j^*-1/2}}{h\sqrt{2}}, \quad \delta_n C = \frac{C_{i^*-1/2, j^*+1/2} - C_{i^*+1/2, j^*-1/2}}{h\sqrt{2}}.$$

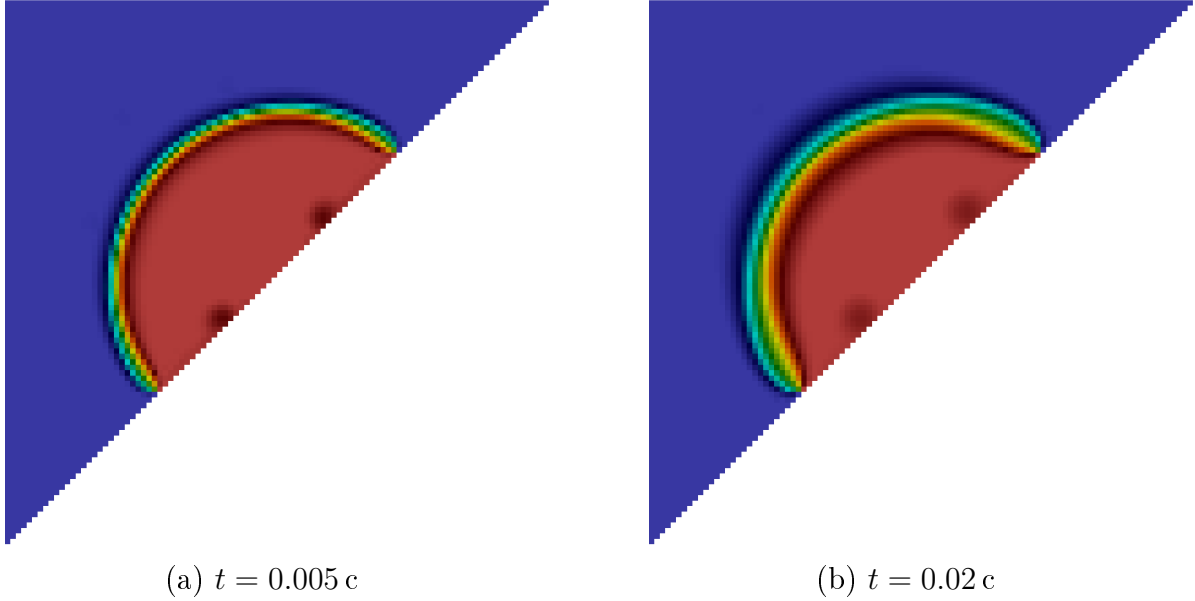


Рис. 15. Распределения концентрации C , полученные в расчете формы капли на «ступенчатой» подложке. Угол смачивания $\theta = 120^\circ$.

При вычислении θ_1^* мы полагаем $i^* = i - 1/2$, $j^* = i + 1/2$ при $i \in \{2, \dots, N_x\}$. Здесь напомним, что ячейки (i, j) , где $i \leq j$, являются активными, остальные — неактивные. Таким образом, мы рассчитываем угол θ_1^* в узлах вспомогательной сетки, которые лежат на прямой $y = x + h$. Конкретное значение i выбирается из условия $C_{i^*+1/2, j^*+1/2} < 0.5$ и $C_{i^*-1/2, j^*-1/2} \geq 0.5$.

Угол θ_2^* вычисляется аналогично, но в узлах с $i^* = i - 1/2$, $j^* = i + 1/2 + 3$, лежащих на прямой $y = x + 4h$.

На рисунках 15а и 15б представлены распределения C на моменты времени $t = 10^5 \Delta t = 0.005$ с и $t = 4 \cdot 10^5 \Delta t = 0.02$ с соответственно. На обоих рисунках распределения отличаются только толщиной межфазной границы. При этом визуально контактный угол не меняется и сильно отличается от заданного. Это же наблюдается и на графиках зависимости наблюдаемых углов смачивания θ_1^* и θ_2^* (см. рисунок 16). Причем θ_1^* меньше отличается от $\theta = 120^\circ$, чем θ_2^* . При этом на рисунках 15а и 15б наблюдается именно θ_2^* . Форма капли и сильно «расплывшаяся» межфазная граница существенно отличаются от результатов, полученных в разделе 7.1.

Описанные здесь и в предыдущих работах авторов [5, 34, 35] алгоритмы строились на основании требования выполнения граничных условий на ребрах (в трехмерном случае — гранях) расчетных ячеек. С учетом этого рассматриваемая в настоящем разделе «ступенчатая» плоская подложка, строго говоря, является не плоской, а ломаной, каждое звено которой является плоским, параллельным одной из координатных осей и имеющим длину, совпадающую с шагом сетки. Как было отмечено в разделе 7.1, для контактного угла необходимо хорошее разрешение сеткой контактной границы вблизи стенки.

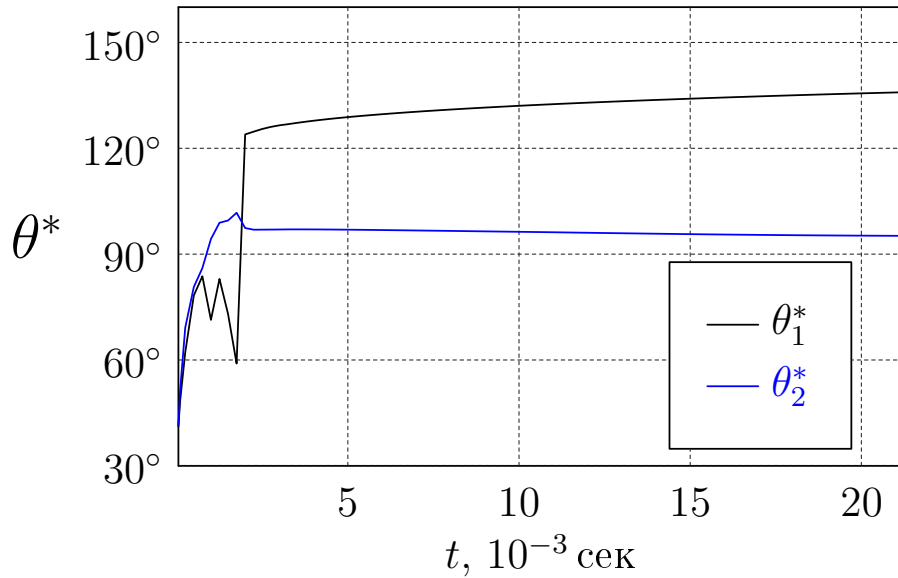


Рис. 16. Зависимость наблюдаемых углов смачивания $\theta_{1,2}^*$ от времени t .

В рассмотренном в настоящем разделе случае на каждый участок приходится только одна ячейка, чего не достаточно. Именно этим можно объяснить особенности полученных результатов.

Как было отмечено во введении, воксельная геометрия часто строится на основе результатов предварительного анализа некоторого материала. В случае с образцами горных пород для этого применяют компьютерную микрофотографию, которая обладает ограниченной точностью. Поэтому соответствующую воксельную геометрию следует рассматривать как аппроксимацию истинной геометрии порового пространства (которая, вообще говоря, не известна). Поэтому появляется некоторая «свобода» в интерпретации и модификации построенной геометрии для согласования результатов моделирования с опытом и/или вычислительных потребностей. Эта свобода успешно используется в некоторых работах [36].

Описанную выше ломанную, которая составляет «ступенчатую» подложку, можно рассматривать как аппроксимацию некоторой гладкой линии, например прямой $y = x - h/\sqrt{2}$ (см. рисунок 17). С учетом новой интерпретации рассматриваемой геометрии необходимо модифицировать построенные в предыдущем разделе алгоритмы.

Одной из возможных и не требующих существенных изменений уже построенного алгоритма является коррекция направления нормали при расчете значения концентрации в центре граничного ребра. Поясним суть этой коррекции на примере конфигурации, изображенной на рисунке 17 и соответствующей части «ступенчатой» плоской подложки. Ячейки $(i+1, j)$ и $(i, j-1)$ являются неактивными, а ячейка $(i-1, j)$ — активной. В этом случае при расчете значения C в узле $(i, j - 1/2)$ (обозначен « \boxplus ») мы будем использо-

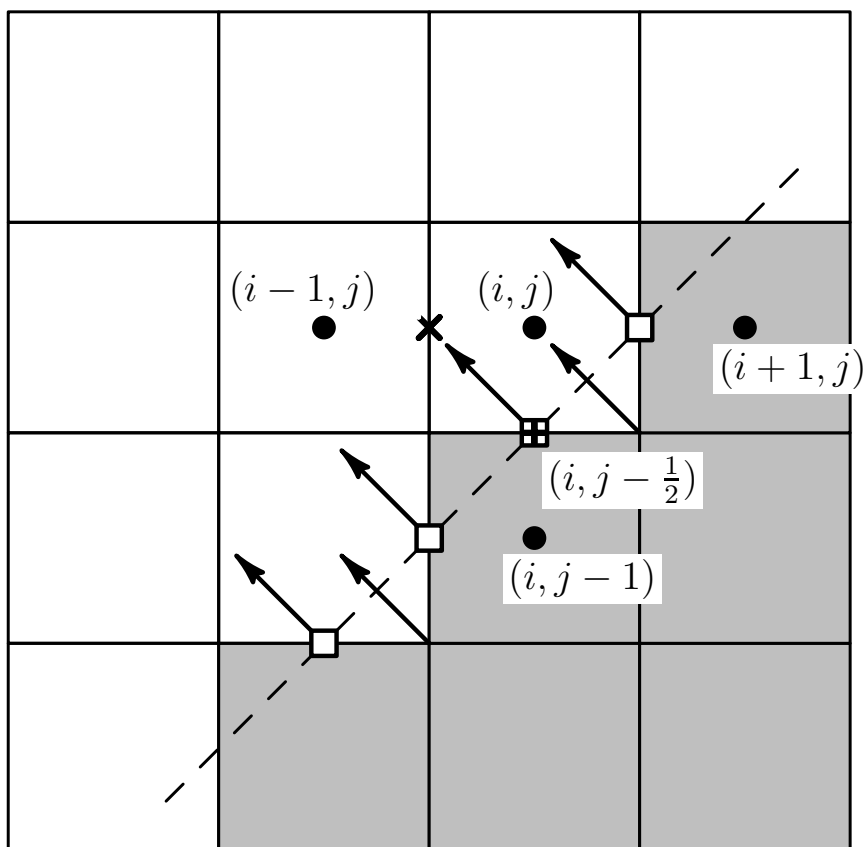


Рис. 17. Часть «ступенчатой» подложки и направления нормалей в угловых узлах и узлах, соответствующих центрам угловых ячеек.

вать не значение C из центра (i, j) , а из узла $(i - 1/2, j)$ (обозначен «**X**»), что соответствует тому, что нормаль в этом узле перпендикулярна прямой, изображенной пунктиром на рисунке 17. Следуя такой интерпретации, угловые узлы, инцидентные только одной неактивной ячейке, будем считать лежащими в активной области. Тогда в узле $(i - 1/2, j - 1/2)$ скорость не равна нулю и вычисляется аналогично концентрации в строке 7 алгоритма 2.

Отметим, что, вообще говоря, данная коррекция требует увеличения расчетного шаблона, поскольку производные и концентрации необходимо аппроксимировать и в крайних точках используемого шаблона (см. рисунок 3). Здесь при расчете в подобном узле используется старый подход. В последующих работах алгоритм будет соответствующим образом модифицирован.

На рисунках 19а и 19b представлено распределение концентрации на моменты времени $t = 0.005$ с и $t = 0.02$ с, полученное в расчете задачи, описанной в начале настоящего раздела. Видно, что результаты, полученные с помощью скорректированного алгоритма, заметно лучше соответствуют заданному значению угла смачивания, чем результаты, изображенные на рисунках 15а и 15b. На рисунке 18 представлены зависимости от времени наблюдаемых углов смачивания $\theta_{1,2}^*$. Видно, что их значения близки и на больших временах составляют $\approx 125^\circ$.

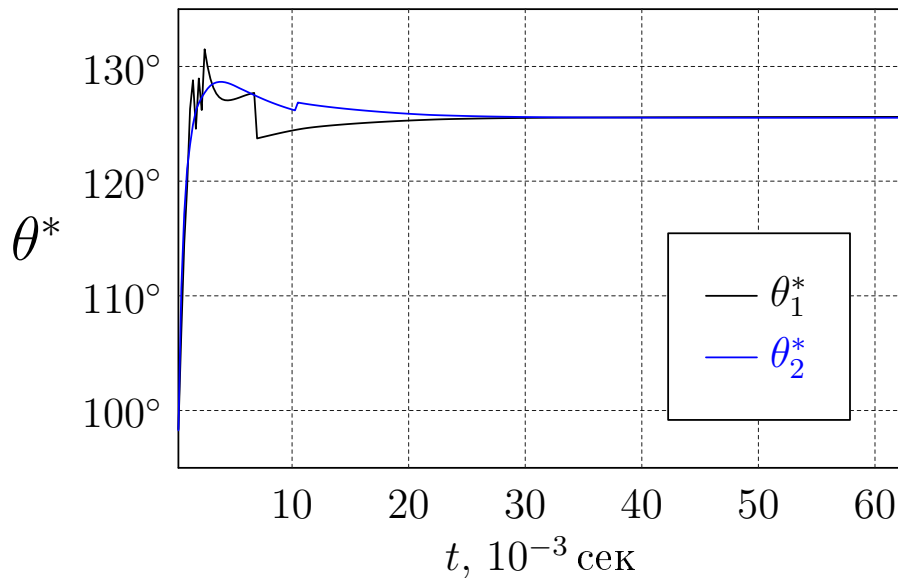


Рис. 18. Зависимость наблюдаемых углов смачивания $\theta_{1,2}^*$ от времени t , полученная в расчетах с использованием модифицированного алгоритма.

8 Заключение

Работа посвящена разработке численного алгоритма 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). Алгоритм позволяет проводить расчеты в областях сложной формы, имеющих воксельное представление.

Алгоритм основан на квазигидродинамической регуляризации уравнений Навье–Стокса–Кана–Хилларда и обобщает ранее разработанные авторами методы на случай задания нетривиального угла смачивания $0^\circ < \theta < 180^\circ$.

Приведены результаты расчетов о растекании капли на плоской подложке. При этом рассмотрено два варианта задания подложки. В первом случае она выбиралась перпендикулярной одной из координатных осей, а во втором — под углом 45° , из-за чего подложка имеет «ступенчатую» поверхность. Результаты, полученные в первом случае, показывают работоспособность построенного алгоритма для простой «плоской» геометрии. В результатах второго расчета наблюдаются существенные артефакты. Если рассматриваемую геометрию считать точной, то их можно объяснить плохим разрешением каждого звена ломаной, которая представляет «ступенчатую» подложку. Если же геометрию считать аппроксимацией некоторой гладкой линии, то, как оказывается, артефакты связаны как раз с тем, что в реализованных алгоритмах граница считается точной. Заметим, что ранее в работах авторов при рассмотрении однофазных течений и двухфазных течений с тривиальным углом смачивания $\theta = 90^\circ$ такой подход вполне оправдывал себя.

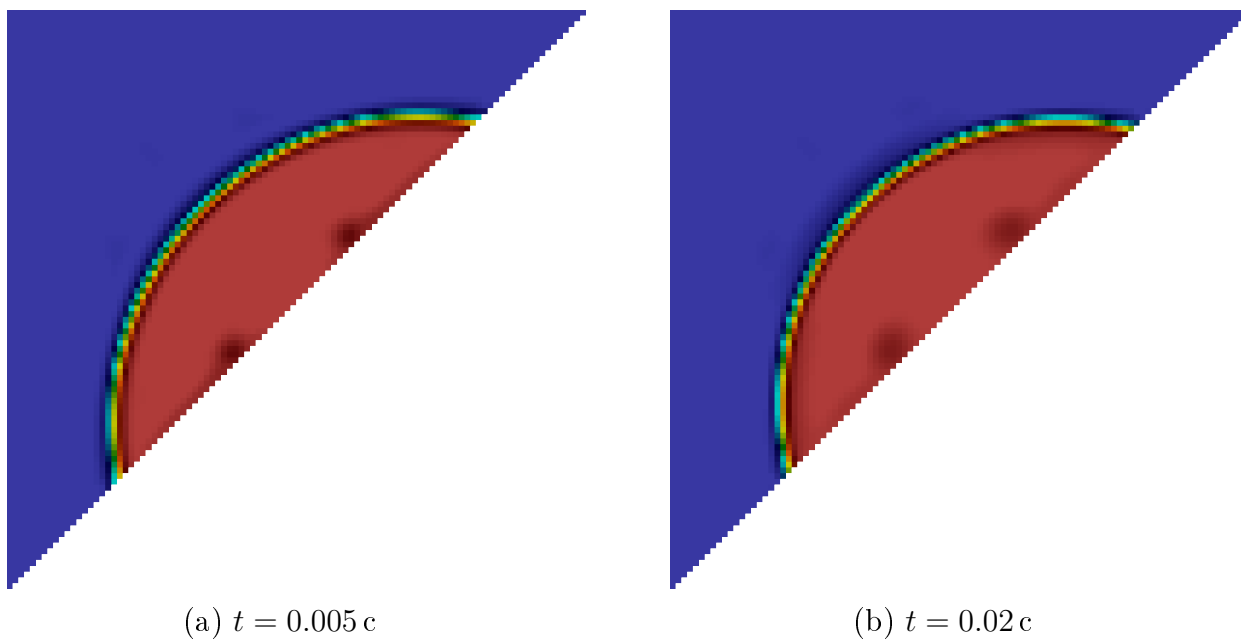


Рис. 19. Распределения концентрации C , полученные в расчете формы капли на «ступенчатой» подложке. Угол смачивания $\theta = 120^\circ$.

В работе предложены модификации построенных алгоритмов, корректирующие влияние воксельного представления геометрии на результаты расчетов согласно ее интерпретации как аппроксимации некоторой прямой линии. Представлены результаты расчетов, из которых видна качественная корректность работы модифицированных алгоритмов. В дальнейших работах эти алгоритмы будут совершенствоваться и дополняться.

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 (принята к печати).
- [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., Злотник А.А., Савенков Е.Б. Исследование баротропной квазигидродинамической модели двухфазной смеси с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. № 89. 25 с. doi:10.20948/prepr-2016-89 URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-89>
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] Оно С., Кондо С. Молекулярная теория поверхностного натяжения в жидкостях. М.: Издательство иностранной литературы, 1963. 292 с.
- [9] Русанов А.И. Лекции по термодинамике поверхностей. СПб.: Лань, 2013. 240 с.
- [10] Krotov V.V., Rusanov A.I. Physicochemical Hydrodynamics of Capillary Systems. Imperial College Press, 1999. 475 p.
- [11] Croxton C.A. Liquid State Physics – A Statistical Mechanical Introduction. Cambridge University Press, 1974. 421 p.
- [12] Davis H.T., Scriven L.E. Stress and structure in fluid interfaces // Adv. Chem. Phys. 1981. Vol. 49. pp. 357–454.
- [13] Lyklema J. Fundamentals of interface and colloid science, V. III, Liquid-Fluid interfaces. Academic Press, 2000. 751 p.
- [14] Роулинсон Дж., Уидом Б. Молекулярная теория капиллярности. М.: Мир, 1986. 376 с.
- [15] Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979. 568 с.
- [16] Шукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия, изд. 3-е. М.: Высшая школа, 2004. 445 с.
- [17] Berg J.C. An Introduction to Interfaces and Colloids. The Bridge to Nanoscience. World Scientific, 2009. 804 p.
- [18] Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю. Применение метода функционала плотности для численного моделирования течений многокомпонентных многофазных смесей // Прикл. мех. техн. физ. 2004. т. 45. № 5. с.68–78.
- [19] 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.

- [20] Liu J. Thermodynamically Consistent Modeling and Simulation of Multiphase Flows, PhD dissertation, the university of Texas at Austin, 2014.
- [21] Эльсгольц Л.Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. М.: Наука, 1969. 424 с.
- [22] Lee H.G., Kim J. Accurate contact angle boundary conditions for the Cahn-Hilliard equations // *Computers and Fluids*. 2011. Vol. 44. No. 1. pp. 178–186.
- [23] Ding H., Spelt P.D.M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion // *Phys. Rev. E*. 2007. Vol. 75. No. 4. pp. 046708.
- [24] Huang J.-J., Huang H., Wang X. Numerical study of drop motion on a surface with stepwise wettability gradient and contact angle hysteresis // *Physics of Fluids*. 2014. Vol. 26, No. 6, pp. 062101.
- [25] Carlson A., Do-Quang M., Amberg G. Modelling of dynamic wetting far from equilibrium // *Physics of fluids*. 2009. Vol. 21, No. 12, pp. 121701.
- [26] Carlson A. Capillarity and dynamic wetting. Doctoral Thesis. Stockholm, 2012, Sweden.
- [27] де Жен П.Ж. Смачивание: статика и динамика // *Успехи физических наук*. т. 151. № 4. С. 619–681.
- [28] Cahn J.W. Critical point wetting // *J. Chem. Phys.* 1997. Vol. 66, No. 8, pp. 3667-3672.
- [29] Jacqmin D. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface // *Journal of Fluid Mechanics*. 2000. Vol. 402. pp. 57-88.
- [30] Khatavkar V., Anderson P., Meijer H. Capillary spreading of a droplet in the partially wetting regime using a diffuse-interface model // *Journal of Fluid Mechanics*. 2007. Vol. 572. pp. 367–387.
- [31] Huang J.-J., Huang H., Wang X. Wetting boundary conditions in numerical simulation of binary fluids by using phase-field method: some comparative studies and new development // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. 2015. Vol. 77. No. 3. pp. 123–158.
- [32] Jamet D., Torres D., Brackbill J.U. On the Theory and Computation of Surface Tension: The Elimination of Parasitic Currents through Energy Conservation in the Second-Gradient Method // *Journal of Computational Physics*. 2002. Vol. 182. No. 1. pp. 262–276.
- [33] Magnini M., Pulvirenti B., Thome J.R. Characterization of the velocity fields generated by flow initialization in the CFD simulation of multiphase flows // *Applied Mathematical Modelling*. 2016. Vol. 40. No. 15-16. pp. 6811–6830.
- [34] Балашов В.А. Прямое моделирование течений умеренно-разреженного газа в двумерных модельных пористых средах // *Математическое моделирование*. 2018. Т. 30. № 1. С. 3-16.
- [35] Балашов В.А., Борисов В.Е. Алгоритм расчета трехмерных течений умеренно-разреженного газа в областях с воксельной геометрией // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2017. № 99. 24 с. doi:10.20948/prepr-2017-99 URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-99>.
- [36] Frank F., Liu C., Scanziani A., Alpak F.O., Riviere B. An energy-based equilibrium contact angle boundary condition on jagged surfaces for phase-field methods // *arXiv:1711.05815*. 2017. p. 11.