



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 91 за 2017 г.](#)



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

**[Балашов В.А.](#), [Злотник А.А.](#),
[Савенков Е.Б.](#)**

Численный алгоритм для
расчета трехмерных
двухфазных течений с
поверхностными эффектами
в областях с воксельной
геометрией

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: 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. doi:[10.20948/prepr-2017-91](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-91)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-91>

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

Балашов В.А., Злотник А.А., Савенков Е.Б.

**Численный алгоритм для расчета трехмерных
двухфазных течений с поверхностными эффектами
в областях с воксельной геометрией**

Москва, 2017

В.А. Балашов¹, А.А. Злотник², Е.Б. Савенков¹ . Численный алгоритм для расчета трехмерных двухфазных течений с поверхностными эффектами в областях с воксельной геометрией

Аннотация В работе представлен численный алгоритм для расчета трехмерных вязких сжимаемых изотермических двухфазных двухкомпонентных течений с поверхностными эффектами в областях сложной формы с воксельной геометрией, основанный на квазигидродинамической регуляризации модели с диффузной границей. Построена новая усовершенствованная разностная схема. Подробно описан способ ее реализации на границе области. Приведены результаты моделирования растекания капли на подложке и вытеснения одной жидкости другой в канале сложной формы.

Ключевые слова: квазигидродинамическая система уравнений, разностная схема, многофазные течения, диффузная граница, регуляризованные уравнения Навье-Стокса-Кана-Хилларда, воксельная геометрия

Balashov V.A., Zlotnik A.A., Savenkov E.B. Numerical algorithm for simulation of three-dimensional two-phase flows with surface effects within domains with voxel geometry.

Abstract The paper presents a numerical algorithm for computing three-dimensional viscous compressible isothermal two-phase two-component flows with surface effects in domains of complex shape with voxel geometry. The algorithm is based on quasi-hydrodynamic regularization of the diffuse-interface model. A new improved finite-difference scheme is constructed. The method of its implementing on the domain boundary is described in detail. The simulation results are given for spreading of a drop on a substrate and displacement of a fluid by another one in a channel of complex shape.

Key words and phrases: quasi-hydrodynamic system of equations, finite-difference scheme, multiphase flows, diffuse interface, regularized Navier-Stokes-Cahn-Hilliard equations, voxel geometry

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 17-71-30014.

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

²НИУ Высшая школа экономики, 101000 Москва, ул. Мясницкая, 20

1 Введение

Квазигидродинамическая (КГиД) система уравнений является специальной модификацией уравнений Навье-Стокса вязкого сжимаемого газа с дополнительными малыми слагаемыми диссипативного характера [1–3]. Эти дополнительные КГиД-добавки могут рассматриваться как физически обоснованные регуляризаторы, позволяющие использовать сравнительно простые разностные алгоритмы для расчета течений. В работах авторов [4–7] предложена КГиД система уравнений, описывающая динамику многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов, а также начато ее исследование. В основе модели лежит метод «диффузной границы», который предполагает, что фазы разделены слоем малой, но конечной ширины, в пределах которого параметры течения изменяются непрерывно [8, 9]. При этом пространственное распределение фаз описывается некоторым непрерывным скалярным полем, так называемым «параметром порядка». В качестве последнего в настоящей работе выступает массовая концентрация компонентов. Здесь следует отметить, что в используемой модели не вводится понятие фазы. Однако благодаря специальному виду свободной энергии и слагаемым, содержащим градиенты параметров порядка, в области течения образуются подобласти, занятые смесью с практически однородным по пространству составом. Это позволяет считать, что указанные области пространства заняты отдельной фазой, которая и определяется соответствующим компонентным составом.

Настоящая работа посвящена построению и валидации алгоритма расчета двухфазных вязких сжимаемых изотермических течений с возможностью расчета в трехмерных областях сложной формы, геометрия которых задана в «воксельном» представлении.

Актуальность такой постановки связана с тем, что для некоторых техногенных или природных материалов геометрия расчетной области не может быть охарактеризована точно. К таким материалам можно отнести, например, образцы горных пород или пенометаллов (metal foams). Для построения геометрической модели таких сред часто используют компьютерную микротомографию. На основе ее результатов строят бинарное трехмерное («воксельное») изображение образца исследуемого материала: как и в случае двумерного «пиксельного» изображения, каждой ячейке приписывается значение 0 или 1 в зависимости от того, есть ли материал в соответствующей точке или нет [10, 11]. Часто для таких задач геометрию расчетной области выбирают фактически совпадающей с построенным воксельным изображением.

Отдельно отметим, что задачи определения различных свойств (в том числе фильтрационных) образцов горных пород методами численного эксперимента на основе их микротомографического изображения обычно объединяются под названием «цифровой керн» («digital rock physics») и в последнее время приобретают все большую популярность.

2 КГиД система уравнений изотермической двухкомпонентной смеси

В соответствии с [4, 5] КГиД система уравнений баротропной двухкомпонентной смеси с учетом поверхностных эффектов и без внешних сил включает уравнения баланса массы, импульса и массы компонента

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

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

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

где $\rho > 0$, \mathbf{u} , $0 < C < 1$ — полная плотность, скорость, массовая концентрация одного из компонентов жидкости, зависящие от (\mathbf{x}, t) , а $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z) \in \bar{\Omega}$ и Ω — ограниченная область в \mathbb{R}^3 с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$, $t \geq 0$. Здесь и ниже дивергенция тензора берется по его первому индексу, символы « \otimes » и « \cdot » означают тензорное и скалярное произведение векторов соответственно.

Свободную энергию Гельмгольца смеси возьмем в следующем виде [8, 9]

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

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

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

где $c_{is} = \sqrt{\mathcal{R}_i T} > 0$ — скорость звука, $\bar{\rho}_i = \operatorname{const} > 0$, $i = 1, 2$. Здесь $\Psi^{(1)}$, $\Psi^{(2)}$ — свободные энергии компонентов, а $\lambda_1 > 0$, $A_\psi > 0$ — параметры. При этом давление задается формулой $p(\rho, C) = \rho^2 \Psi'_{0\rho}(\rho, C)$. Как следствие $p(\rho, C) = (c_{1s}^2 C + c_{2s}^2(1 - C))\rho$. Для простоты будем рассматривать смесь двух изотермических жидкостей с одинаковыми уравнениями состояния. Тогда $\Psi^{(1)} = \Psi^{(2)} = \Psi$, $c_{1s} = c_{2s} = c_s$, а для давления имеем $p = c_s^2 \rho$.

Регуляризованный поток массы \mathbf{j}_m задается формулами

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}), \quad \mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} [\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p + \operatorname{div} \mathbf{Q}], \quad (2.4)$$

где \mathbf{w} — регуляризирующая скорость, существенная в КГиД подходе, а $\tau > 0$ — релаксационный параметр, имеющий размерность времени.

Тензор $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{NS} - \mathbf{Q} + \mathbf{\Pi}^\tau$ является суммой тензоров вязких напряжений Навье-Стокса $\mathbf{\Pi}^{NS}$, капиллярных напряжений \mathbf{Q} и регуляризирующего $\mathbf{\Pi}^\tau$:

$$\mathbf{\Pi}^{NS} = 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}) + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad \mathbf{D}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T),$$

$$\mathbf{Q} = \lambda_1 \rho \nabla C \otimes \nabla C, \quad \mathbf{\Pi}^\tau = \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}.$$

Здесь $\eta > 0$ и $\zeta \geq 0$ — постоянные коэффициенты динамической и объемной вязкости соответственно, \mathbf{I} — единичный тензор, $\nabla \mathbf{u} = \{\partial_i u_j\}_{i,j=1}^3$ с частными производными $(\partial_1, \partial_2, \partial_3) \equiv (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$.

В (2.3) $M = M(C) > 0$ — коэффициент подвижности, а обобщенный химический потенциал задается выражением

$$\mu(\rho, C) = \Psi'_{0C}(\rho, C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C). \quad (2.5)$$

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

$$\rho|_{t=0} = \rho_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad C|_{t=0} = C_0(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

и краевыми условиями на границе с твердой поверхностью (твердой стенке):

$$\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \partial_n \mu = 0, \quad \partial_n C = 0, \quad (2.7)$$

где \mathbf{n} — внутренняя нормаль к $\partial\Omega$. Первое из условий (2.7) обеспечивает отсутствие потока полной массы, а третье — массы компонента через твердую стенку. Второе условие — это условие прилипания, а последнее означает, что угол между любой поверхностью уровня функции C (в том числе и $C = 1/2$, которая обычно условно считается границей раздела фаз) и твердой стенкой равен $\pi/2$ на ней. Первое краевое условие с учетом второго принимает вид $\partial_n p = -\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}$. Заметим, что

$$\mathbf{n} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q} = (\partial_n C) \operatorname{div}(\lambda_1 \rho \nabla C) + \frac{\lambda_1}{2} \rho \partial_n (|\nabla C|^2) = \frac{\lambda_1}{2} \rho \partial_n (|\nabla C|^2)$$

с учетом последнего краевого условия. Отбросим оставшееся слагаемое (отметим, что оно обращается в нуль на плоском участке границы) и перейдем к более простым краевым условиям на твердой стенке

$$\partial_n p = 0, \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \partial_n \mu = 0, \quad \partial_n C = 0. \quad (2.8)$$

3 Разностная схема

Построим для КГиД системы уравнений (2.1)–(2.5) при $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ явную двухслойную разностную схему. Будем использовать обозначения из работы [12].

Пусть $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ — 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 $h_x = h$. Узлы x_i с индексами $0, -1, \dots, N_x + 1, N_x + 2, \dots$ 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 $x_{m+1/2} = (x_m + x_{m+1})/2$, $0 \leq m \leq N_x$ и ее внутреннюю часть ω_{xh}^* с узлами $x_{m+1/2}$, $1 \leq m \leq N_x - 1$. Аналогично вводятся сетки с шагами $h_y = h_z = h$ (для простоты) на $[0, L_y]$ и $[0, L_z]$ соответственно.

Введем трехмерные сетки $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh} \times \bar{\omega}_{zh}$ и $\bar{\omega}_h^* = \bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^* \times \bar{\omega}_{zh}^*$. 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 $l \in \{x, y, z\}$.

Будем считать, что сетка $\bar{\omega}_h$ содержит центры расчетных ячеек. Тогда центры граней лежат на сетках $\bar{\omega}_{x*,h}$, $\bar{\omega}_{y*,h}$, $\bar{\omega}_{z*,h}$, центры ребер на $\bar{\omega}_{x*,h}^*$, $\bar{\omega}_{y*,h}^*$, $\bar{\omega}_{z*,h}^*$, 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 $H(\omega)$ — множество функций, определенных на некоторой сетке ω . Для функций $v \in H(\bar{\omega}_{lh})$ и $u \in H(\bar{\omega}_{lh}^*)$ 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 $\delta_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh}^*)$, $\overset{\circ}{\delta}_l : H(\bar{\omega}_{lh}) \rightarrow H(\omega_{lh})$, $\delta_l^* : H(\bar{\omega}_{lh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{lh})$ по следующим формулам:

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

$$(\delta_l v)_{m-1/2} = \frac{v_m - v_{m-1}}{h}, \quad (\delta_l^* u)_m = \frac{u_{m+1/2} - u_{m-1/2}}{h}.$$

Отметим, что $\overset{\circ}{\delta}_l = \delta_l^* s_l$.

Введем разностное отношение вперед с шагом $\Delta t > 0$ по времени

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

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

сетке ω_h :

$$\delta_t \rho + \delta_x^* j_{mx} + \delta_y^* j_{my} + \delta_z^* j_{mz} = 0, \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \delta_t(\rho u_x) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_x) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_x) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_x) + \overset{\circ}{\delta}_x p = \\ = \delta_x^* \Pi_{xx} + \delta_y^* \Pi_{yx} + \delta_z^* \Pi_{zx}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \delta_t(\rho u_y) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_y) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_y) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_y) + \overset{\circ}{\delta}_y p = \\ = \delta_x^* \Pi_{xy} + \delta_y^* \Pi_{yy} + \delta_z^* \Pi_{zy}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \delta_t(\rho u_z) + \delta_x^*(j_{mx} s_x u_z) + \delta_y^*(j_{my} s_y u_z) + \delta_z^*(j_{mz} s_z u_z) + \overset{\circ}{\delta}_z p = \\ = \delta_x^* \Pi_{xz} + \delta_y^* \Pi_{yz} + \delta_z^* \Pi_{zz}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \widehat{\rho} \delta_t C + \rho s_x^* [(s_x u_x - w_x^{(x)}) \delta_x C] + \rho s_y^* [(s_y u_y - w_y^{(y)}) \delta_y C] + \rho s_z^* [(s_z u_z - w_z^{(z)}) \delta_z C] = \\ = \delta_x^* (M \delta_x \mu) + \delta_y^* (M \delta_y \mu) + \delta_z^* (M \delta_z \mu). \end{aligned} \quad (3.5)$$

В отличие от наших предыдущих работ, слагаемые левой части последнего уравнения берутся в недивергентном виде, причем с использованием $\widehat{\rho}^n = \rho^{n+1}$. Теоретический анализ показывает, что это позволяет уменьшить сеточный дисбаланс в дискретном уравнении полной энергии. Подробности анализа будут представлены в последующих публикациях.

Аппроксимация компонент \mathbf{j}_m , \mathbf{w} имеет вид:

$$j_{ml} = (s_l \rho) (s_l u_l - w_l^{(l)}), \quad l \in \{x, y, z\}, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} w_x^{(x)} = \frac{s_x \mathcal{T}}{s_x \rho} \left[(s_x \rho) (s_x u_x) \delta_x u_x + s_x \{ \rho s_y^* [(s_y u_y) \delta_y u_x] \} + s_x \{ \rho s_z^* [(s_z u_z) \delta_z u_x] \} + \right. \\ \left. + (s_x \rho) \delta_x h(\rho) + \delta_x Q_{xx}^w + \delta_y^* Q_{yx}^w + \delta_z^* Q_{zx}^w \right], \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} w_y^{(y)} = \frac{s_y \mathcal{T}}{s_y \rho} \left[s_y \{ \rho s_x^* [(s_x u_x) \delta_x u_y] \} + (s_y \rho) (s_y u_y) \delta_y u_y + s_y \{ \rho s_z^* [(s_z u_z) \delta_z u_y] \} + \right. \\ \left. + (s_y \rho) \delta_y h(\rho) + \delta_x^* Q_{xy}^w + \delta_y Q_{yy}^w + \delta_z^* Q_{zy}^w \right], \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} w_z^{(z)} = \frac{s_z \mathcal{T}}{s_z \rho} \left[s_z \{ \rho s_y^* [(s_y u_y) \delta_y u_z] \} + s_z \{ \rho s_x^* [(s_x u_x) \delta_x u_z] \} + (s_z \rho) (s_z u_z) \delta_z u_z + \right. \\ \left. + (s_z \rho) \delta_z h(\rho) + \delta_x^* Q_{xz}^w + \delta_y^* Q_{yz}^w + \delta_z Q_{zz}^w \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Здесь используются новые аппроксимации слагаемых $u_k \partial_l u_l$ и нестандартная аппроксимация градиента давления с энтальпией $h(\rho) = c_s^2 \ln \rho$ из [12, 13] и

$$Q_{kk}^w = \lambda_1 (s_k^* [(s_k \rho) \delta_k C]) \overset{\circ}{\delta}_k C, \quad Q_{lk}^w = \lambda_1 (s_k [(s_l \rho) \delta_l C]) s_l \delta_k C, \quad (3.10)$$

где $k, l \in \{x, y, z\}$, $k \neq l$. Последние аппроксимации компонент \mathbf{Q} также отличаются от использованных нами ранее.

Величины j_{ml} , $w_l^{(l)}$ определены на $\omega_{l^*,h}$, $l \in \{x, y, z\}$, а параметр τ — на основной сетке. Компоненты $\Pi_{kl} = \Pi_{kl}^{NS} - Q_{kl}^{(k)} + \Pi_{kl}^\tau$ тензора $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{NS} - \mathbf{Q} + \mathbf{\Pi}^\tau$ определены на $\omega_{*k,h}$. При $k, l \in \{x, y, z\}$ для компонент тензора вязких напряжений Навье–Стокса используем аппроксимацию

$$\Pi_{kk}^{NS} = \frac{4}{3}\eta\delta_k u_k - \frac{2}{3}\eta(1 - \delta^{kj})s_j^*(\delta_j s_k u_j), \quad \Pi_{kl}^{NS} = \eta\delta_k u_l + \eta s_l^*(\delta_l s_k u_k), \quad k \neq l,$$

где δ^{ij} — символ Кронекера, для простоты $\zeta = 0$ и в первой из формул по индексу j осуществляется суммирование по $\{x, y, z\}$; тензора капиллярных напряжений —

$$Q_{kk} \equiv \lambda_1 s_k \{s_k^* [(s_k \rho) \delta_k C] \cdot \overset{\circ}{\delta}_k C\} = s_k Q_{kk}^w, \quad (3.11)$$

$$Q_{kl} \equiv \lambda_1 s_l^* \{s_l [(s_k \rho) \delta_k C] \cdot s_k \delta_l C\} = s_l^* Q_{kl}^w, \quad k \neq l, \quad (3.12)$$

где символ « \cdot » означает умножение; регуляризующего тензора (согласно [13]) —

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

причем в дополнение к (3.7)–(3.9) используются формулы

$$w_k^{(l)} = \frac{s_l \tau}{s_l \rho} \left[(s_l \rho)(s_l u_l) \delta_l u_k + s_l \{ \rho s_k^* [(s_k u_k) \delta_k u_k] \} + s_l \{ \rho s_m^* [(s_m u_m) \delta_m u_k] \} + \right. \\ \left. + s_l \left\{ \rho s_k^* \left[\delta_k h(\rho) + \frac{1}{s_k \rho} (\delta_x^a Q_{xk}^w + \delta_y^a Q_{yk}^w + \delta_z^a Q_{zk}^w) \right] \right\} \right], \quad (3.13)$$

где $\{k, l, m\}$ — некоторая перестановка $\{x, y, z\}$ и

$$\delta_k^a Q_{kk}^w = \delta_k Q_{kk}^w, \quad \delta_l^a Q_{lk}^w = \delta_l^* Q_{lk}^w, \quad k \neq l.$$

Обобщенный химический потенциал μ аппроксимируем на сетке ω_h :

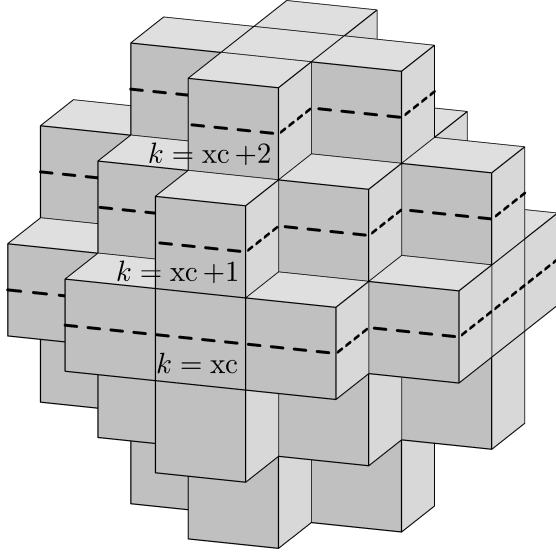
$$\mu = \Psi'_{0C}(\rho, C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \{ \delta_x^* [(s_x \rho) \delta_x C] + \delta_y^* [(s_y \rho) \delta_y C] + \delta_z^* [(s_z \rho) \delta_z C] \}. \quad (3.14)$$

Анализ построенной разностной схемы показывает, что для расчета значений основных параметров течения в рассматриваемой ячейке на новом слое по времени, достаточно знать их значения в ячейках, представленных на рис. 1а. Их число равно $3^3 + 6 \cdot 4 = 51$.

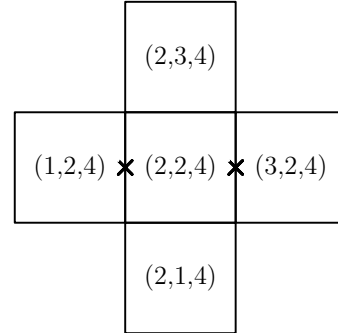
Если грань какой-либо ячейки является инцидентной как активной, так и неактивной ячейкам, то будем говорить, что она является граничной. Рассматриваемую ячейку также будем называть основной.

4 Алгоритм реализации граничных условий

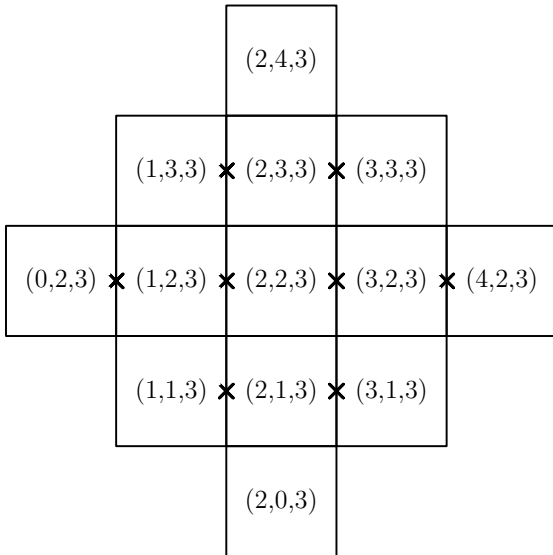
Рассмотрим *основную* ячейку. Пусть ее грань с центром (i, j, k) , лежащим на сетке $\omega_{h,*x}$, является граничной. Для определенности будем считать, что ее нормаль — это $(\pm 1, 0, 0)$, так что индекс i — полуцелый. Запишем разностные соотношения для центра рассматриваемой грани, соответствующие крайевым



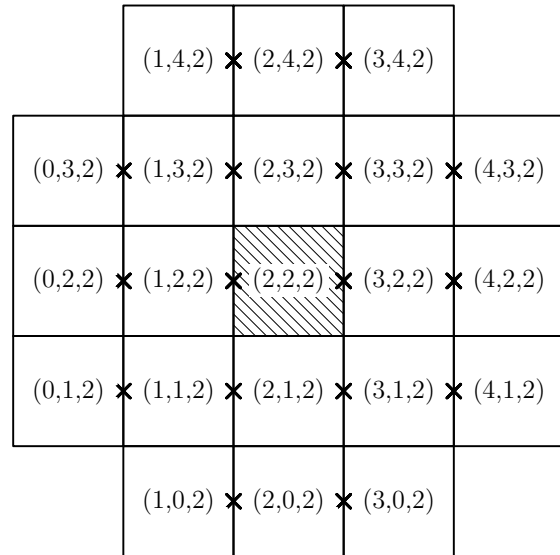
(a) Шаблон разностной схемы.



(b) Сечение $k = xc + 2$.



(c) Сечение $k = xc + 1$.



(d) Сечение $k = xc$.

Рис. 1. Шаблон разностной схемы и его сечения плоскостями $k = xc$, $k = xc + 1$, $k = xc + 2$ при $xc \equiv 2$. Сечения $k = xc - 1$, $k = xc - 2$ симметричны сечениям $k = xc + 1$, $k = xc + 2$ относительно плоскости $k = xc$. Рассматриваемая ячейка заштрихована.

условиям (2.8):

$$\rho = \rho_{\pm 1/2}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \delta_x \mu = 0, \quad \delta_x C = 0, \quad (4.15)$$

где использовано обозначение $(v_{\pm 1/2})_{i,j,k} = v_{i\pm 1/2,j,k}$, v — некоторая сеточная функция. Здесь первое условие соответствует аппроксимации с первым порядком первого условия (2.8). Остальные три условия соответствуют оставшимся трем в (2.8). Как следствие из (4.15) выпишем следующие сеточные формулы для того же узла:

$$\begin{aligned} j_{mx} = 0, \quad \delta_x^b u_l &\equiv \pm \frac{(u_l)_{\pm 1/2}}{h/2}, \quad Q_{xl} = 0, \quad \Pi_{xx}^{NS} = \frac{4}{3} \eta \delta_x^b u_x, \\ \Pi_{xy}^{NS} = \eta \delta_x^b u_y, \quad \Pi_{xz}^{NS} &= \eta \delta_x^b u_z, \quad \Pi_{xl}^\tau = 0, \quad l \in \{x, y, z\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Подчеркнем, что представленная схема используется только в центре *граничной* грани основной ячейки и перпендикулярной оси Ox . Чтобы записать схему для граничных граней основной ячейки, перпендикулярных оси Oz нужно в разностных соотношениях (4.15), (4.16) формально x заменить на z , а z — на x , с заменой сдвига на $\pm 1/2$ индекса i на k . Аналогично для граней, перпендикулярных оси Oy .

Также отметим, что выписанные формулы используются непосредственно в разностной схеме (3.1)–(3.5), то есть, например, равенство $j_{mx} = 0$ непосредственно подставляется во второе слагаемое в (3.1) или $\delta_x \mu = 0$ — в первое слагаемое в правой части уравнения (3.5).

Введем локальные координаты для каждой ячейки так, чтобы ее геометрическому центру соответствовали координаты $(2, 2, 2)$. Каждой ячейке также сопоставим тройку чисел, совпадающую с (локальными) координатами ее геометрического центра. Иногда для наглядности будем использовать обозначение $xs = 2$.

Для каждой ячейки на основе активности соседних ячеек введем набор чисел (*куб активности*) a_{ijk} размером $5 \times 5 \times 5$, где $i, j, k \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$, по следующему правилу: если ячейка с индексами (i, j, k) относится к твердой стенке (т.е. является неактивной), то $a_{ijk} = 0$; в противном случае $a_{ijk} = 1$. Заметим, что для всех ячеек, участвующих в расчете, $a_{222} = 1$.

Для иллюстрации основной идеи реализации соотношений (3.1)–(3.14) ниже подробно описаны алгоритмы расчета некоторых параметров течения.

В алгоритме 1 описан расчет значений основных параметров течения в центре какой либо грани, с координатами (i, j, k) , где только один из индексов является полуцелым. Если обе ячейки, инцидентные грани, являются активными, то искоемые значения вычисляются усреднением. Если только одна ячейка является неактивной (то есть рассматриваемая грань является граничной), то значения в ее центре вычисляются согласно граничным условиям с первым порядком точности. Здесь и далее выражение $(a \bmod b)$ означает

Алгоритм 1 Расчет значений \mathbf{u} , ρ , C в центре грани с координатами (i, j, k) .

```
1: procedure CALC_PROC( $\mathbf{u}$ ,  $\rho$ ,  $C$ ,  $i$ ,  $j$ ,  $k$ )
2:    $bi = (2i \bmod 2)$ ,  $bj = (2j \bmod 2)$ ,  $bk = (2k \bmod 2)$ 
3:    $u_x = 0$ ,  $u_y = 0$ ,  $u_z = 0$ ,  $\rho = 0$ ,  $C = 0$ 
4:    $n_x = 0$ ,  $n_y = 0$ ,  $n_z = 0$ ,  $sum = 0$ 
5:   for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
6:     for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
7:       for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
8:          $actv = a_{i+ri, j+rj, k+rk}$ 
9:          $sum = sum + actv$ 
10:         $n_x = n_x + 2 \cdot ri \cdot actv$ ,  $n_y = n_y + 2 \cdot rj \cdot actv$ ,  $n_z = n_z + 2 \cdot rk \cdot actv$ 
11:      end for
12:    end for
13:  end for
14:  if  $sum = 0$  then ▷ обе соседние ячейки неактивны
15:    Выход из процедуры
16:  end if
17:  if  $n_x = 0$  и  $n_y = 0$  и  $n_z = 0$  then ▷ обе соседние ячейки активны
18:     $\tilde{u}_l = 0$ ,  $\tilde{\rho} = 0$ ,  $\tilde{C} = 0$ , где  $l \in \{x, y, z\}$ 
19:    for  $ri = -bi/2$  to  $bi/2$  do
20:      for  $rj = -bj/2$  to  $bj/2$  do
21:        for  $rk = -bk/2$  to  $bk/2$  do
22:           $\tilde{u}_l = \tilde{u}_l + (u_l)_{i+ri, j+rj, k+rk}$ , где  $l \in \{x, y, z\}$ 
23:           $\tilde{\rho} = \tilde{\rho} + \rho_{i+ri, j+rj, k+rk}$ ,  $\tilde{C} = \tilde{C} + C_{i+ri, j+rj, k+rk}$ 
24:        end for
25:      end for
26:    end for
27:     $\rho_{ijk} = \tilde{\rho}/2$ ,  $C_{ijk} = \tilde{C}/2$ ,  $(u_l)_{ijk} = \tilde{u}_l/2$ , где  $l \in \{x, y, z\}$ 
28:  else ▷ грань оказалась граничной
29:     $u_x = u_y = u_z = 0$ 
30:     $\rho_{i,j,k} = \rho_{i+n_x/2, j+n_y/2, k+n_z/2}$ ,  $C_{i,j,k} = C_{i+n_x/2, j+n_y/2, k+n_z/2}$ 
31:  end if
32: end procedure
```

остаток от деления a на b ($a, b \neq 0$ — целые числа), а sign — знаковая функция.

Совершенно аналогично вычисляются значения скорости в центрах ребер основной ячейки: если хотя бы одна из четырех ячеек, инцидентных рассматриваемому ребру, оказалась неактивной, то значение скорости в центре этого ребра, согласно граничным условиям, задается как $\mathbf{u}_{i,j,k} = \mathbf{0}$. Если все четыре

ячейки активны, то значение скорости вычисляется усреднением с помощью цикла, аналогичного представленному в строках 19–26 алгоритма 1. Отметим, что так устроенный цикл позволяет рассчитывать значения параметров единообразно для различным образом ориентированных граней и ребер.

Алгоритм 2 Расчет значений разностных отношений $\delta_x C$ на гранях. Алгоритмы расчета $\delta_y C$, $\delta_z C$ аналогичны.

```

1: for  $l = 1$  to  $36$  do
2:    $(i, j, k) = dcdxIdx[l]$ 
3:    $a^+ = a_{i+1/2,j,k}$ ,  $a^- = a_{i-1/2,j,k}$ 
4:   if  $a^+ + a^- = 0$  then                                 $\triangleright$  Обе инцидентные ячейки неактивны
5:     Переход к следующей итерации цикла
6:   end if
7:    $(\delta_x C)_{i,j,k} = a^+ \cdot a^- \cdot (C_{i+1/2,j,k} - C_{i-1/2,j,k})/h$ 
8: end for

```

Анализ описанной в разделе 3 разностной схемы показывает, что значения $\delta_x C$ достаточно определить в центрах не всех граней расчетного шаблона. Пусть список $dcdxIdx$ содержит тройки индексов (i, j, k) (только i является полуцелым), соответствующих центрам этих граней. На рис. 1 представлена часть этих узлов (они обозначены как «**X**»), лежащая в плоскостях $k = xc$, $k = xc + 1$, $k = xc + 2$. В алгоритме 2 описана процедура вычисления значений разностного отношения $\delta_x C$ в узлах из списка $dcdxIdx$.

В строке 4 осуществляется проверка активности обеих ячеек, инцидентных рассматриваемой грани. Если обе они оказались неактивны, то значение в соответствующем узле для последующего расчета не нужно и осуществляется переход к следующей итерации цикла. Если по крайней мере одна из ячеек активна, то $a^+ + a^- > 0$ и происходит переход к строке 7. Используемое выражение для $(\delta_x C)_{i,j,k}$ позволяет объединить два оставшихся возможных случая: когда обе ячейки активны ($a^+ \cdot a^- = 1$) и когда только одна из ячеек неактивна ($a^+ \cdot a^- = 0$). В первом случае $\delta_x C$ вычисляется стандартным способом, так как рассматриваемая грань активна, а во втором — в соответствии с граничным условием, поскольку грань оказалась неактивной.

Для расчета параметров течения в основной ячейке значения компонент тензора капиллярных напряжений Q_{xy} , входящих непосредственно в (2.2), достаточно знать только в центрах ее граней, перпендикулярных оси Ox и имеющих локальные координаты $(i, j, k) = (xc \pm 1/2, xc, xc)$. В алгоритме 3 описан способ расчета значений Q_{xy} в этих узлах. На рис. 2 они обозначены символами «**O**». На рис. 2 для одной из возможных конфигураций неактивных ячеек представлена часть расчетного шаблона в сечении $k = xc$, содержащая ячейки, необходимые для расчета Q_{xy} в узле с индексами $(i, j, k) = (xc - 1/2, xc, xc)$. Серым цветом обозначены *неактивные* ячейки.

Алгоритм 3 Расчет значения Q_{xy} в узле (i, j, k)

- 1: **for** $m = -1/2$ to $1/2$ **do**
 - 2: $jm = j + m$
 - 3: $a^+ = \text{sign}(a_{i+1/2, jm+1/2, k} + a_{i-1/2, jm+1/2, k})$
 - 4: $a^- = \text{sign}(a_{i+1/2, jm-1/2, k} + a_{i-1/2, jm-1/2, k})$
 - 5: $s_m = [a^+ \rho_{i, jm+1/2, k} (\delta_x C)_{i, jm+1/2, k} + a^- \rho_{i, jm-1/2, k} (\delta_x C)_{i, jm-1/2, k}] / (a^+ + a^-)$
 - 6: $dc_m = [(\delta_y C)_{i+1/2, jm, k} + (\delta_y C)_{i-1/2, jm, k}] / 2$
 - 7: **end for**
 - 8: $(Q_{xy})_{i, j, k} = \lambda_1 (s_{-1/2} dc_{-1/2} + s_{1/2} dc_{1/2}) / 2$
-

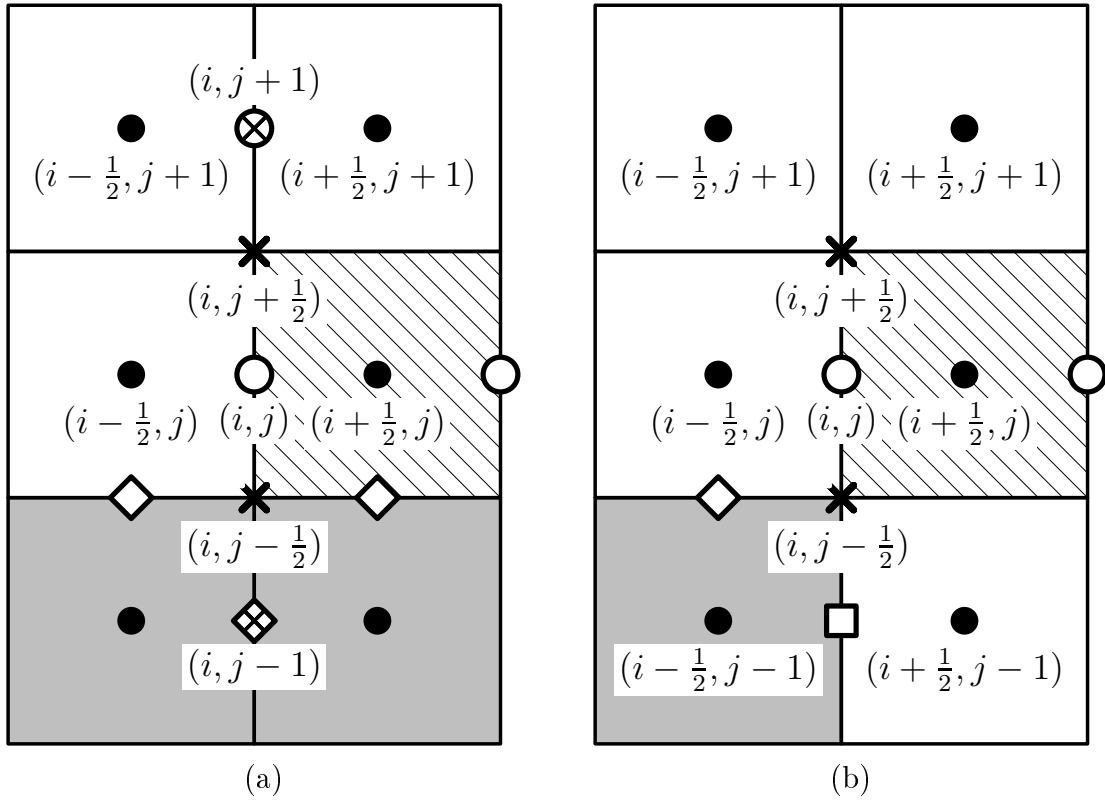


Рис. 2. Часть сечения $k = \text{xc}$ расчетного шаблона с узлами, необходимыми для вычисления значения Q_{xy} в узле $(i, j, k) = (\text{xc} - 1/2, \text{xc}, \text{xc})$. В подписях к узлам для краткости третий индекс $k = \text{xc}$ опущен. Штриховкой выделена основная ячейка. Серым цветом обозначены *неактивные* ячейки.

Предполагается, что значения $\delta_x C$ и $\delta_y C$ во всех необходимых узлах предварительно найдены в алгоритме 2, а значения плотности $s_x \rho$ — в алгоритме 1.

Как видно из (3.12), значения $s_y [(s_x \rho) \delta_x C] \cdot s_x \delta_y C$ необходимо рассчитать в узлах $(i, j \pm 1/2, k)$ (на рис. 2 они обозначены символами « \times »). Рассмотрим узел $(i, j + 1/2, k)$ (случай $m = 1/2$). Для вычисления $s_y [(s_x \rho) \delta_x C]$ в этом узле нужны значения $s_x \rho$, $\delta_x C$ в (i, j, k) и $(i, j + 1, k)$, если они там опреде-

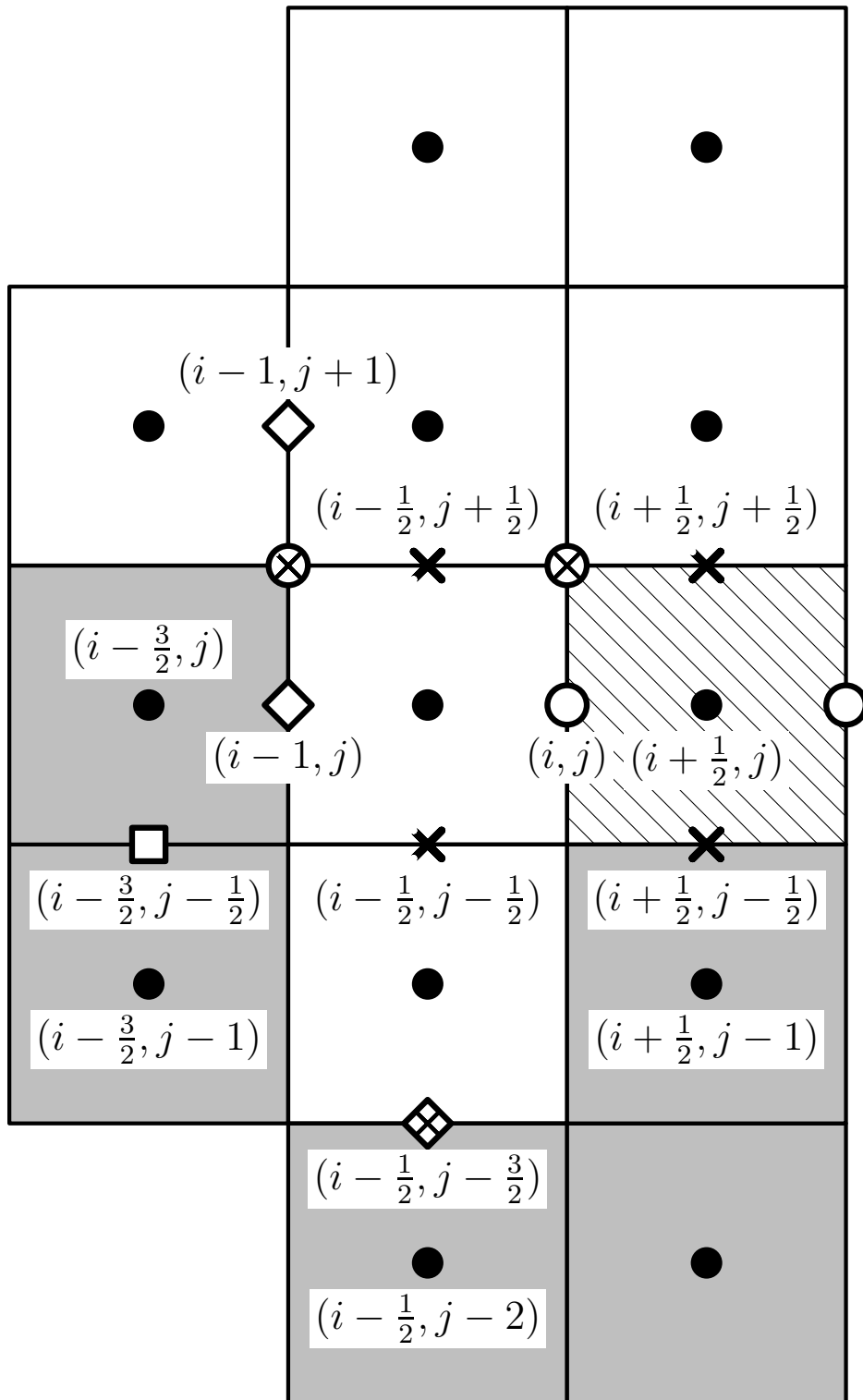


Рис. 3. Часть сечения $k = \text{xc}$ расчетного шаблона, с узлами необходимыми для расчета значения $w_y^{(x)}$ в узле $(i, j, k) = (\text{xc} - 1/2, \text{xc}, \text{xc})$. В подписях к узлам для краткости третий индекс $k = \text{xc}$ опущен. Штриховкой выделена основная ячейка. Серым цветом обозначены *неактивные* ячейки.

лены. Это так, если в парах ячеек $(i \pm 1/2, j, k)$ и $(i \pm 1/2, j + 1, k)$ хотя бы одна является активной. В противном случае соответствующий узел оказывается «внутри» стенки, а значения $s_x \rho$ и $\delta_x C$ в нем не определены. Проверка этого осуществляется в строках 3 и 4. Если по крайней мере одна из ячеек с индексами $(i \pm 1/2, j + 1, k)$ является активной, то $a^+ = 1$. В свою очередь, это означает, что в узле $(i, j + 1, k)$ определены значения $s_x \rho$ и $\delta_x C$. Аналогично для a^- и узла (i, j, k) . При расчете в узле $(i, j + 1/2, k)$ для конфигурации, представленной на рис. 2а, имеем $a^+ = a^- = 1$. В результате $s_{1/2} = [\rho_{i,j,k}(\delta_x C)_{i,j,k} + \rho_{i,j+1,k}(\delta_x C)_{i,j+1,k}]/2$. Вычисление величины $s_x(\delta_y C)$ на данном этапе не требует проверок: ячейки $(i \pm 1/2, j, k)$ заведомо являются активными, а значит величина $\delta_y C$ в узлах $(i \pm 1/2, j + 1/2, k)$ определена.

Теперь рассмотрим узел $(i, j - 1/2, k)$ (случай $m = -1/2$). В случае, представленном на рис. 2а, имеем $a^- = 0$, поскольку ячейки $(i \pm 1/2, j - 1, k)$ неактивны. Это означает, что узел $(i, j - 1, k)$ оказался «внутри» стенки. На рис. 2а он обозначен символом « \blacklozenge ». Тогда выражение в строке 5 принимает вид $s_{-1/2} = \rho_{i,j,k}(\delta_x C)_{i,j,k}$, что соответствует выполнению граничного условия $\delta_y C = 0$ в узлах $(i \pm 1/2, j - 1/2, k)$ (на рис. 2а они изображены символами « \blacklozenge ») с первым порядком точности. Вычисление величины $s_x(\delta_y C)$ здесь такое же как в случае $m = 1/2$.

Рассмотрим конфигурацию неактивных ячеек, представленную на рис. 2б. В узле $(i, j + 1/2, k)$ все необходимые значения вычисляются точно так же, как для конфигурации, представленной на рис. 2а. При вычислении значений в узле $(i, j - 1/2, k)$ имеем $a^+ = a^- = 1$. Это соответствует тому, что необходимые величины в узле $(i, j - 1, k)$ определены. Поэтому имеем $s_{-1/2} = [\rho_{i,j,k}(\delta_x C)_{i,j,k} + \rho_{i,j-1,k}(\delta_x C)_{i,j-1,k}]/2$. Разностные отношения $\delta_x C$ в узле $(i, j - 1, k)$ (на рис. 2б обозначен как « \blacklozenge ») и $\delta_y C$ в узле $(i - 1/2, j - 1/2, k)$ (на рис. 2б обозначен как « \blacklozenge ») были вычислены в алгоритме 2. Процедуры для вычисления остальных компонент тензора \mathbf{Q} аналогичны.

Теперь рассмотрим более сложный алгоритм 4 вычисления компоненты $w_y^{(x)}$ в узлах $(i, j, k) = (x_s \pm 1/2, x_s, x_s)$, которые соответствует центрам граней основной ячейки, перпендикулярных направлению Ox . На рис. 3 они обозначены символами « \circ ». Рассмотрим узел $(i, j, k) = (x_s - 1/2, x_s, x_s)$. Напомним, что ячейка $(i + 1/2, j, k)$ является заведомо активной, поскольку она является основной, а $(i - 1/2, j, k)$ является активной, поскольку в противном случае грань с центром (i, j, k) являлась бы граничной. Тогда согласно условию прилипания в узле (i, j, k) 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 обозначения

$$b^y = (s_y u_y) \delta_y u_y + \delta_y h(\rho) + (\delta_x^* Q_{xy}^w + \delta_y Q_{yy}^w + \delta_z^* Q_{zy}^w) \frac{1}{s_y \rho}, \quad b^z = (s_z u_z) \delta_z u_y.$$

Алгоритм 4 Процедура для расчета значения $w_y^{(x)}$ в узле с индексами (i, j, k) , соответствующими 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  $a_{im,jn+1/2,k} \cdot a_{im,jn-1/2,k} = 0$  then
5:        $b_{m,n}^y = 0$ 
6:     else
7:       for  $l = -1/2$  to  $1/2$  do
8:          $il = im + l, jl = jn + l, kl = k + l$ 
9:          $a^+ = \text{sign}(a_{il+1/2,jn+1/2,k} + a_{il+1/2,jn-1/2,k})$ 
10:         $a^- = \text{sign}(a_{il-1/2,jn+1/2,k} + a_{il-1/2,jn-1/2,k})$ 
11:         $dcdy_{avr,1} = \{a^+ \cdot (\delta_y C)_{il+1/2,jn,k} + a^- \cdot (\delta_y C)_{il-1/2,jn,k}\} / (a^+ + a^-)$ 
12:         $a^+ = \text{sign}(a_{im,jn+1/2,kl+1/2} + a_{im,jn-1/2,kl+1/2})$ 
13:         $a^- = \text{sign}(a_{im,jn+1/2,kl-1/2} + a_{im,jn-1/2,kl-1/2})$ 
14:         $dcdy_{avr,2} = \{a^+ \cdot (\delta_y C)_{im,jn,kl+1/2} + a^- \cdot (\delta_y C)_{im,jn,kl-1/2}\} / (a^+ + a^-)$ 
15:         $(Q_{xy}^w)_{il,jn,k} = \lambda_1 \{s_y[(s_x \rho) \delta_x C]\}_{il,jn,k} \cdot dcdy_{avr,1}$ 
16:         $(Q_{yy}^w)_{im,jl,k} = \lambda_1 \{s_y^*[(s_y \rho) \delta_y C]\}_{im,jl,k} \cdot \{s_y^*(\delta_y C)\}_{im,jl,k}$ 
17:         $(Q_{zy}^w)_{im,jn,kl} = \lambda_1 \{s_y[(s_z \rho) \delta_z C]\}_{im,jn,kl} \cdot dcdy_{avr,2}$ 
18:      end for
19:       $(\delta_x Q_{xy}^w)_{im,jn,k} = [(Q_{xy}^w)_{im+1/2,jn,k} - (Q_{xy}^w)_{im-1/2,jn,k}] / h$ 
20:       $(\delta_y Q_{yy}^w)_{im,jn,k} = [(Q_{yy}^w)_{im,jn+1/2,k} - (Q_{yy}^w)_{im,jn-1/2,k}] / h$ 
21:       $(\delta_z Q_{zy}^w)_{im,jn,k} = [(Q_{zy}^w)_{im,jn,k+1/2} - (Q_{zy}^w)_{im,jn,k-1/2}] / h$ 
22:       $b_{m,n}^y = (u_y)_{im,jn,k} (\delta_y u_y)_{im,jn,k} + (\delta_y h(\rho))_{im,jn,k} +$ 
                 $+ (\delta_x Q_{xy}^w + \delta_y Q_{yy}^w + \delta_z Q_{zy}^w)_{im,jn,k} / \rho_{im,jn,k}$ 
23:    end if
24:     $kn = k + n, b_{m,n}^z = 0$ 
25:    if  $a_{im,j,kn+1/2} \cdot a_{im,j,kn-1/2} \neq 0$  then
26:       $b_{m,n}^z = (u_z)_{im,j,kn} (\delta_z u_y)_{im,j,kn}$ 
27:    end if
28:     $b_{m,n} = b_{m,n}^y + b_{m,n}^z$ 
29:  end for
30: end for
31:  $(w_y^{(x)})_{i,j,k} = \frac{\tau}{\rho_{i,j,k}} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \rho_{i+1/2,j,k} \frac{1}{2} (b_{1/2,1/2} + b_{1/2,-1/2}) + \right. \right.$ 
                 $\left. \left. + \rho_{i-1/2,j,k} \frac{1}{2} (b_{-1/2,1/2} + b_{-1/2,-1/2}) \right] + \rho_{i,j,k} (u_x)_{i,j,k} (\delta_x u_y)_{i,j,k} \right\}$ 

```

Тогда выражение (3.13) примет вид:

$$w_y^{(x)} = \frac{s_x \tau}{s_x \rho} [(s_x \rho)(s_x u_x) \delta_x u_y + s_x \{ \rho s_y^* b^y \} + s_x \{ \rho s_z^* b^z \}]. \quad (4.17)$$

Величина b^y вычисляется в узлах $(i \pm 1/2, j \pm 1/2, k)$. На рис. 3 они обозначены символами «**X**». Рассмотрим узел $(i + 1/2, j - 1/2, k)$, 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 рис. 3, данный узел является центром неактивной грани, поскольку ячейка $(i + 1/2, j - 1, k)$ неактивна. Поэтому $a_{i+1/2, j-1, k} \cdot a_{i+1/2, j, k} = 0$ и $b_{1/2, -1/2}^y = 0$ (строка 5). Это соответствует первым двум граничным условиям (2.8), обеспечивающим условие непротекания.

Теперь рассмотрим узел $(i - 1/2, j + 1/2, k)$, который принадлежит *активной* грани. Первые два слагаемых в выражении для b^y вычисляются непосредственно (строка 22) и трудностей это не вызывает.

Чтобы найти разностное отношение $\delta_x^* Q_{xy}^w$ в $(i - 1/2, j + 1/2, k)$, необходимо вычислить $Q_{xy}^w = \lambda_1(s_y[(s_x \rho) \delta_x C] \cdot s_x \delta_y C)$ в $(i - 1, j + 1/2, k)$ и $(i, j + 1/2, k)$, которые на рис. 3 отмечены как «**⊗**» (им соответствуют значения параметра цикла (строка 7) $l = \pm 1/2$). Рассмотрим узел $(i - 1, j + 1/2, k)$, лежащий на ребре, инцидентном неактивной ячейке $(i - 3/2, j, k)$. Величины $s_x \rho$ и $\delta_x C$ в узлах $(i - 1, j + 1, k)$ и $(i - 1, j, k)$ (на рис. 3 они обозначены как «**◇**») предварительно вычислены в алгоритмах 1 и 2. Узел $(i - 1, j + 1, k)$ заведомо не попадает «внутри» стенки, так как ячейка $(i - 1/2, j + 1, k)$ заведомо активна (иначе алгоритм попадет на строку 5).

Для вычисления $s_x \delta_y C$ предварительно необходимо убедиться, что значения $\delta_y C$ в нужных узлах определены. Соответствующая проверка, аналогичная проверке в алгоритме 2, осуществляется в строках 9, 10. Для случая конфигурации, изображенной на рис. 3, для узла $(i - 1, j + 1/2, k)$ имеем $a^+ = a^- = 1$, а значит $dcdy_{avr,1} = \{(\delta_y C)_{i-3/2, j+1/2, k} + (\delta_y C)_{i-1/2, j+1/2, k}\}/2$. Вычисление $s_x \delta_y C$ в узле $(i, j + 1/2, k)$ проводится так же.

Теперь рассмотрим вычисление Q_{xy}^w в узле $(i - 1/2, j - 1/2, k)$. Опишем лишь вычисление $s_x \delta_y C$. В данном случае узел $(i - 3/2, j - 1/2, k)$ (на рис. 3 отмечен символом «**□**») оказывается «внутри» стенки, и поэтому значение $\delta_y C$ в нем не определено. Поэтому в строках 9, 10 получаем $a^- = 0, a^+ = 1$ и $dcdy_{avr,1} = (\delta_y C)_{i-1/2, j-1/2, k}$, что соответствует выполнению граничного условия $\partial_x C = 0$ с первым порядком точности в узлах $(i - 1, j - 1, k)$ и $(i - 1, j, k)$.

Принцип вычисления производной $\delta_z Q_{zy}^w$ абсолютно такой же как и для $\delta_x Q_{xy}^w$, поэтому подробно на нем останавливаться не будем.

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

Для этого необходимо вычислить значения $Q_{yy}^w = \lambda_1(s_y^*[(s_y \rho) \delta_y C]) \delta_y C$ в узлах $(i - 1/2, j, k)$ и $(i - 1/2, j - 1, k)$. Это осуществляется непосредственно,

поскольку значения $s_y \rho$ и $\delta_y C$ в узлах $(i - 1/2, j \pm 1/2, k)$, $(i - 1/2, j - 3/2, k)$ были вычислены в алгоритмах 1 и 2. Здесь учтено, что $\delta_y C \equiv s_y^* \delta_y C$.

Отметим, что из описанных алгоритмов видно, что для рассматриваемой ячейки они в точности реализуют разностную схему (3.1)–(3.14), если в ее расчетном шаблоне все ячейки являются активными.

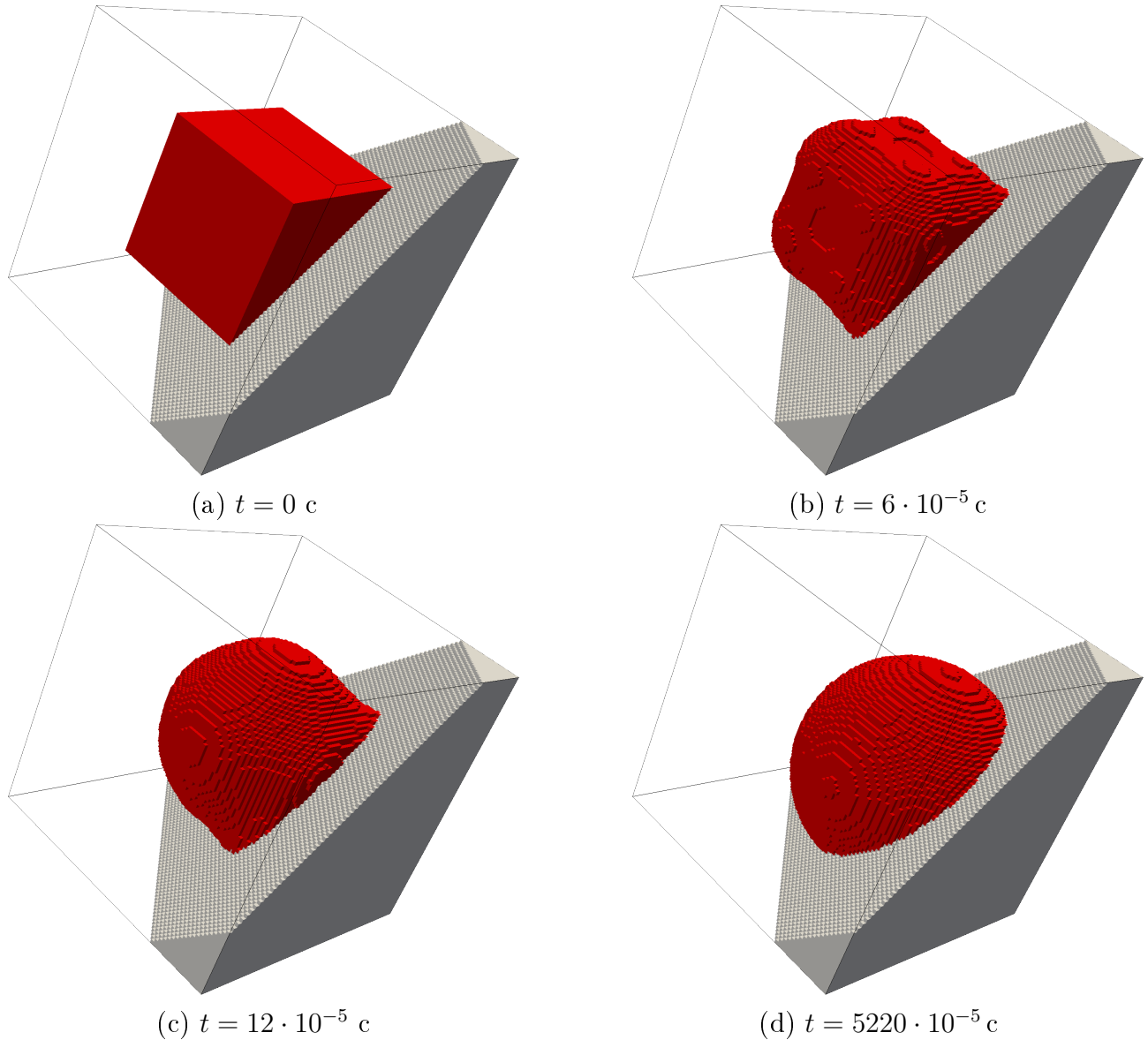
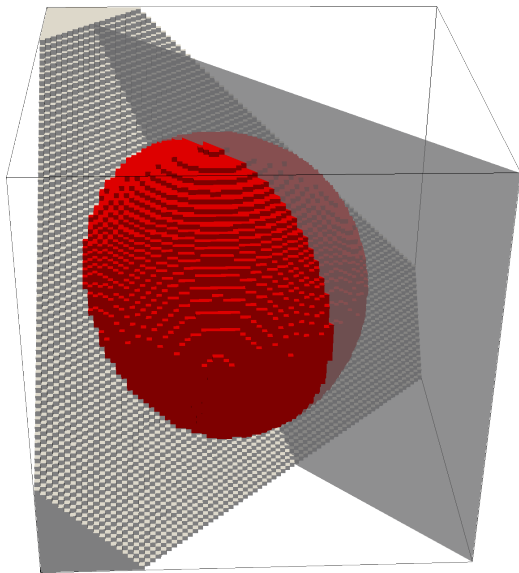
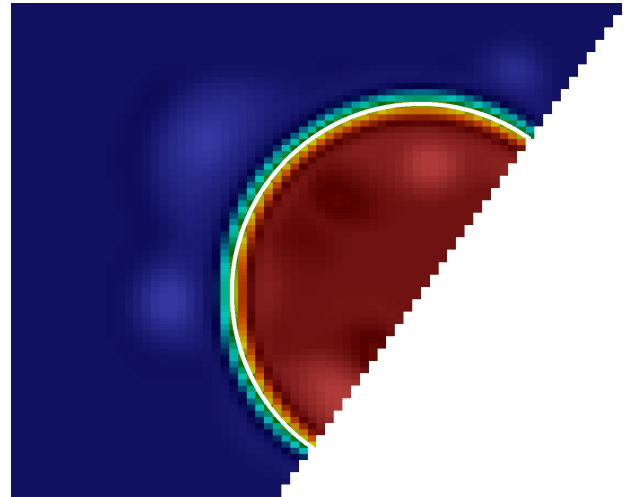


Рис. 4. Последовательные этапы растекания капли на подложке. Красный цвет соответствует $C > 0.5$, ячейки с $C < 0.5$ не показаны. Серым цветом помечена твердая стенка.

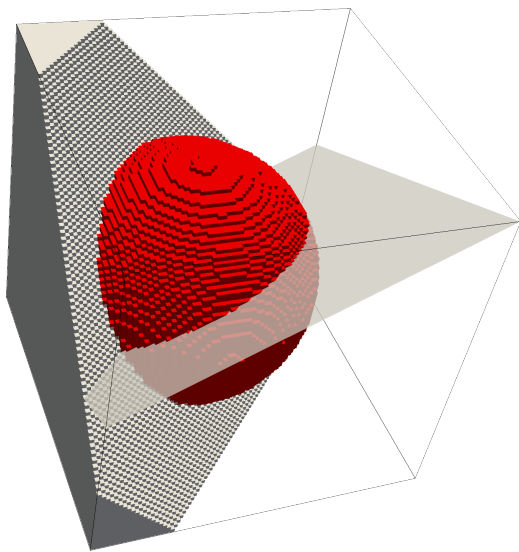


(a) Расположение сечения

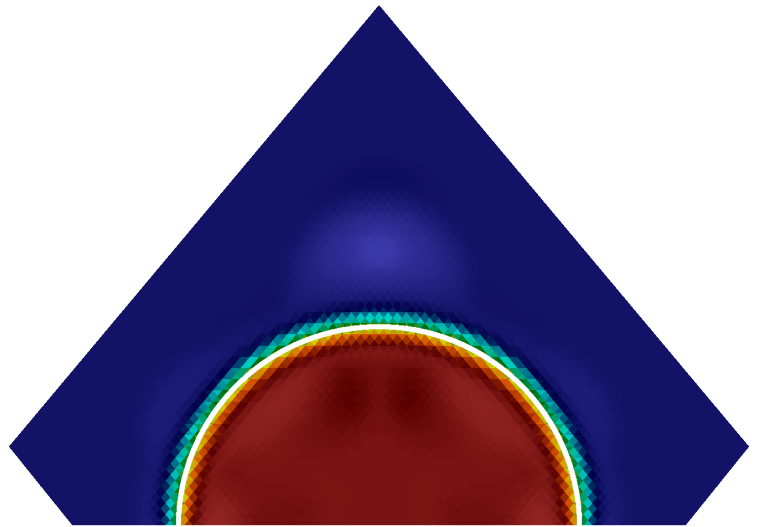


(b) Распределение C . Белым цветом помечена изолиния $C = 0.5$. Соответствие цвета значению C представлено на рис. 7

Рис. 5. Сечение расчетной области плоскостью с нормалью $(-1, 1, 0)$ и проходящей через начало координат и распределение концентрации C в нем



(a) Расположение сечения



(b) Распределение C . Белым цветом помечена изолиния $C = 0.5$. Соответствие цвета значению C представлено на рис. 7

Рис. 6. Сечение расчетной области плоскостью с нормалью $(-1/2, -1/2, 1)$ и проходящей через начало координат и распределение концентрации C в нем

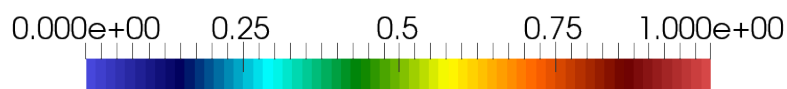


Рис. 7. Соответствие между цветом и значением концентрации C (легенда)

5 Растекание капли по подложке

Рассмотрим задачу о растекании капли по подложке. Пусть расчетная область имеет форму куба с ребрами длиной $L_x = L_y = L_z = L = 0.016$ м. Будем считать, что подложка является «плоской» и может быть описана уравнением $x + y + z = 1.25L$ (в рамках воксельной геометрии). Таким образом, она «отсекает» часть расчетной области.

На всех границах расчетной области заданы условия (2.8). В начальный момент времени во всей расчетной области параметры течения задаются следующим образом: скорость $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$, плотность $\rho_0 = 1$ кг/м³, концентрация

$$C_0 = \begin{cases} 0.9, & \text{если } \max\{x - L/2, y - L/2, z - L/2\} < L/4; \\ 0.1, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

На рис. 4а представлена начальная форма капли. Здесь и далее серым цветом помечены ячейки, относящиеся к твердой стенке, красным — к ячейкам с $C \geq 0.5$, синим — к ячейкам с $C < 0.5$.

В расчете взяты следующие значения физических параметров: $\zeta = 0$, $\eta = 0.005$ Па·с, $\lambda_1 = 10^{-3}$ Дж·м⁵/кг², $A_\psi = 5 \cdot 10^3$ Дж/кг, $M = M_0 C(1 - C)$, $M_0 = 10^{-9}$ кг·с/м³, $c_s = 1000$ м/с.

Будем использовать равномерную декартову пространственную сетку размером $80 \times 80 \times 80$ ячеек с шагом $h = L/80 = 2 \cdot 10^{-4}$ м. Шаг по времени выберем как $\Delta t = 6 \cdot 10^{-8}$ с.

Здесь и далее в работе параметр τ задан в виде $\tau = \alpha^* h / c_s$ с $\alpha^* = 0.5$.

На рис. 4 представлены последовательные этапы эволюции формы капли. Углы и ребра куба постепенно округляются, причем раньше всего это происходит с углами, что объясняется большими поверхностными силами и, в свою очередь, связано с большими значениями кривизны именно в окрестности ребер. Видно, что капля постепенно растекается и в итоге становится полусферой (см. рис. 4d), а диаметр основания капли увеличивается. Также на рис. 5, 6 даны распределения концентрации в плоскостях, проходящих через начало координат и имеющих нормали $(-1, 1, 0)$ и $(-1/2, -1/2, 0)$. На рис. 7 представлено соответствие между цветом и значением концентрации. Видно, что углы между межфазной границей и твердой границей в граничных точках близки к $\pi/2$, что соответствует использованным граничным условиям.

Данный расчет иллюстрирует совместное влияние на эволюцию формы капли сил поверхностного натяжения и граничных условий, определяющих значение контактного угла.

6 Вытеснение одной жидкости другой в канале сложной формы

В качестве второй задачи возьмем расчет вытеснения одной жидкости другой в канале сложной формы, имеющем форму круглой трубки длиной $L_y = 2.4 \cdot 10^{-2}$ м, радиус сечения которой зависит от координаты y по правилу $R(y) = R_0[A_r \sin(\alpha_r y) + 1]$, где $R_0 = 2L_y/15$, $A_r = 0.7$ и $\alpha_r = 5\pi/L_y$ (см. рис. 8). Рассмотрим минимальный параллелепипед со сторонами, параллельными координатным плоскостям, в который можно вписать эту трубку. Пусть L_x, L_y, L_z — длины его ребер вдоль Ox, Oy, Oz . Величина L_y — это длина трубки.

Пусть на левом торце трубки ($y = 0$) фиксированы значения скорости $\mathbf{u} = (0, 1, 0)$ м/с и концентрации $C = 0.9$, а для плотности $\partial\rho/\partial y = 0$; на правом торце ($y = L_y$) фиксированы значения плотности $\rho = 1$ кг/м³, а для скорости и концентрации выполнены условия $\partial_y \mathbf{u} = \mathbf{0}$, $\partial_y C = 0$.

В начальный момент времени во всей области заданы $\mathbf{u} = (0, 1, 0)$ м/с, $\rho = 1$ кг/м³. Начальное распределение концентрации имеет вид

$$C = \begin{cases} 0.1, & y < 0.07L_y, \\ 0.9, & y \geq 0.07L_y. \end{cases}$$

Будем использовать равномерную сетку с шагом $h = L_y/N_y = 2 \cdot 10^{-4}$ м, где $N_y = 120$ — число ячеек вдоль направления Oy . Тогда в самом узком сечении трубки на диаметр приходится 10 ячеек, а в самом широком — 54.

Шаг по времени выберем как $\Delta t = 6 \cdot 10^{-8}$ с. Значения физических параметров такие же как в разделе 5.

Будем говорить, что расчетная ячейка заполнена «синей» жидкостью, если значение концентрации в ней $C < 0.5$ и «красной» — если $C > 0.5$.

На рис. 10а–12d представлены последовательные этапы эволюции течения. При этом на рисунках слева представлено объемное распределение концентрации: серым полупрозрачным цветом обозначены стенки канала и представлена только красная жидкость; на рисунках справа представлено распределение концентрации в сечении $x = L_x/2$. Соответствие цвета значению концентрации показано на рис. 7. Белым цветом отмечена изолиния $C = 0.5$; она условно принимается в качестве межфазной границы.

Начальные этапы вытеснения изображены на рис. 10а–10d: красная жидкость накапливается в первом расширении и постепенно начинает протекать через первое «горлышко» во второе расширение канала, где также начинает накапливаться. Видно, как струйка утончается, а ее кончик увеличивается, причем стремится принять шарообразную форму. Затем шейка «рвется», а кончик выносится течением через второе горлышко в третье расширение.

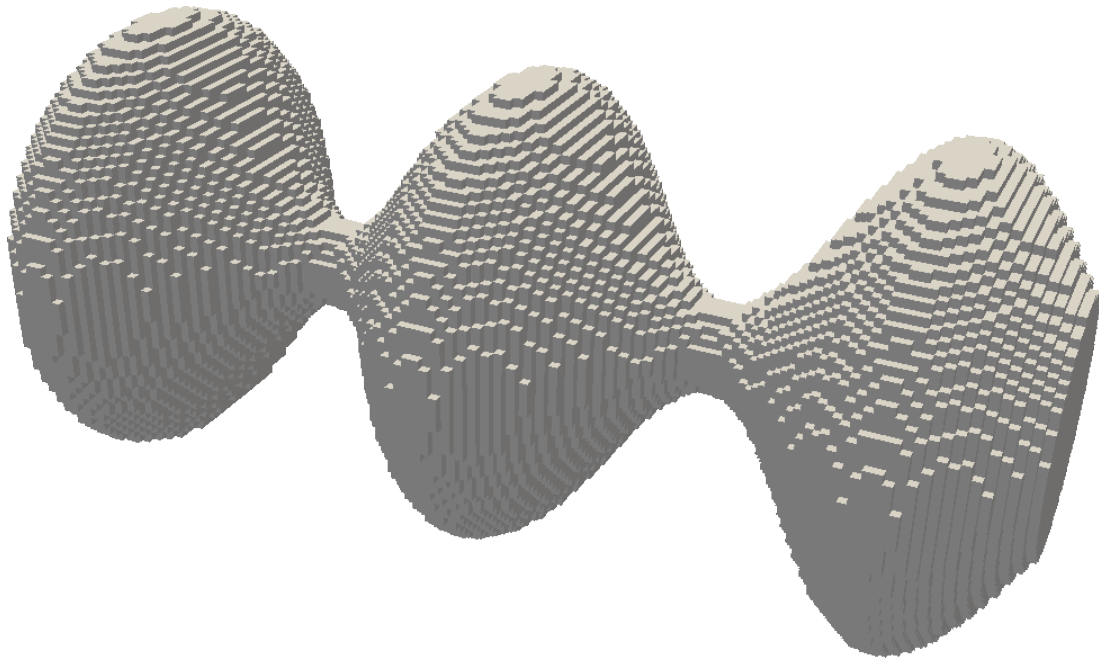


Рис. 8. Область расчета в виде трубки с сечением переменного радиуса $R(y) = R_0[A_r \sin(\alpha_r y) + 1]$, где $A_r = 0.7$ и $\alpha_r = 5\pi/L_y$. Стенки трубки имеют «ступенчатую» форму ввиду воксельной геометрии.

При этом на рис. 10d заметно отклонение угла между межфазной границей и стенкой канала от $\pi/2$; оно объясняется недостаточным разрешением расчетной сетки. Также обратим внимание на «шлейф», который начинает тянуться от кончика капли в центре канала. Его наличие объясняется присутствием диффузионных эффектов в модели и большого градиента скорости вблизи центральной оси канала. Последнее хорошо видно на рис. 9, где изображено распределение модуля скорости на момент времени $t = 5.4 \cdot 10^{-3}$ с в сечении $x = L_x/2$.

На рис. 11a–11b видно, что струйка после отрыва «догоняет» каплю и отрывает ее от другой, которая находится в третьем расширении. Затем последняя уносится течением на пределы расчетной области (см. рис. 11c). На рис. 11d видно, что течение во втором горлышке качественно такое же как и течение в первом на момент времени $t = 12 \cdot 10^{-3}$ с (см. рис. 10d).

На рис. 12a–12d изображены заключительные этапы развития течения: красная жидкость накапливается в кончике струйки в третьем расширении, затем она рвется, а капля уносится течением за пределы расчетной области. Жидкость снова начинает накапливаться в третьем расширении и течение принимает вид, представленный на рис. 12d. При этом синяя жидкость полностью не вытеснена красной, что качественно отличает течение в третьем расширении от первых двух. Это объясняется тем, что третье расширение в отличие от первых двух обрезано выходной границей.

На рис. 10c и 12a заметно сильное отклонение межфазного фронта от

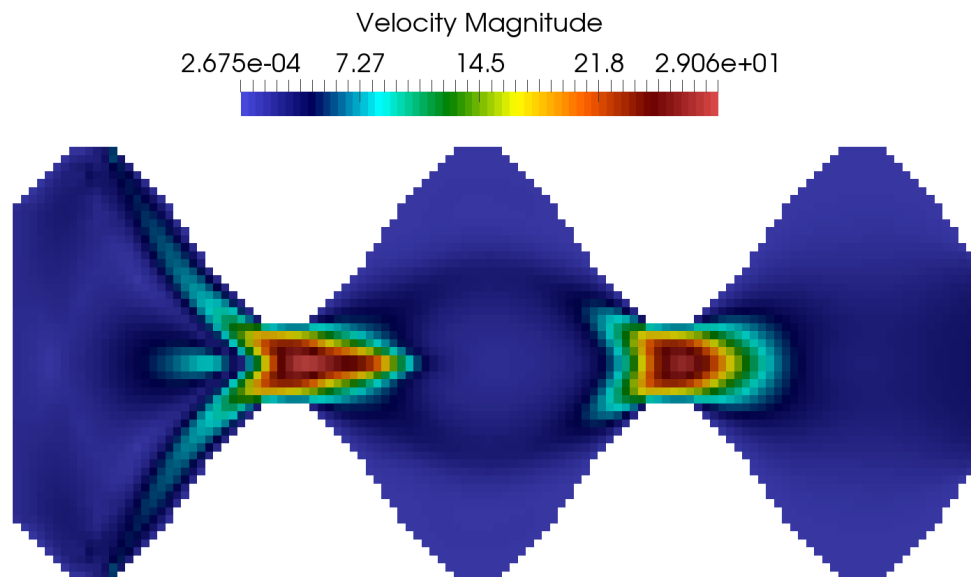


Рис. 9. Распределение модуля скорости в сечении $x = L_x/2$ на момент времени $t = 5.4 \cdot 10^{-3}$ с

осесимметричной формы. Его можно объяснить с одной стороны тем, что форма канала, строго говоря, не является осесимметричной, а с другой — сама расчетная сетка не обладает осевой симметрией.

7 Заключение

В представленной работе на основе квазигидродинамической регуляризации модели диффузной границы построен численный алгоритм для расчета изотермических течений двухфазной двухкомпонентной вязкой сжимаемой жидкости с поверхностными эффектами в областях сложной формы, геометрия которых имеет воксельное представление. Рассмотрены граничные условия, соответствующие углу смачивания $\pi/2$. Приведено подробное описание реализации указанного алгоритма. На ряде тестовых расчетов продемонстрирована его корректность. В дальнейших работах планируется применить алгоритм для расчета двухфазных течений в реальных образцах горных пород.

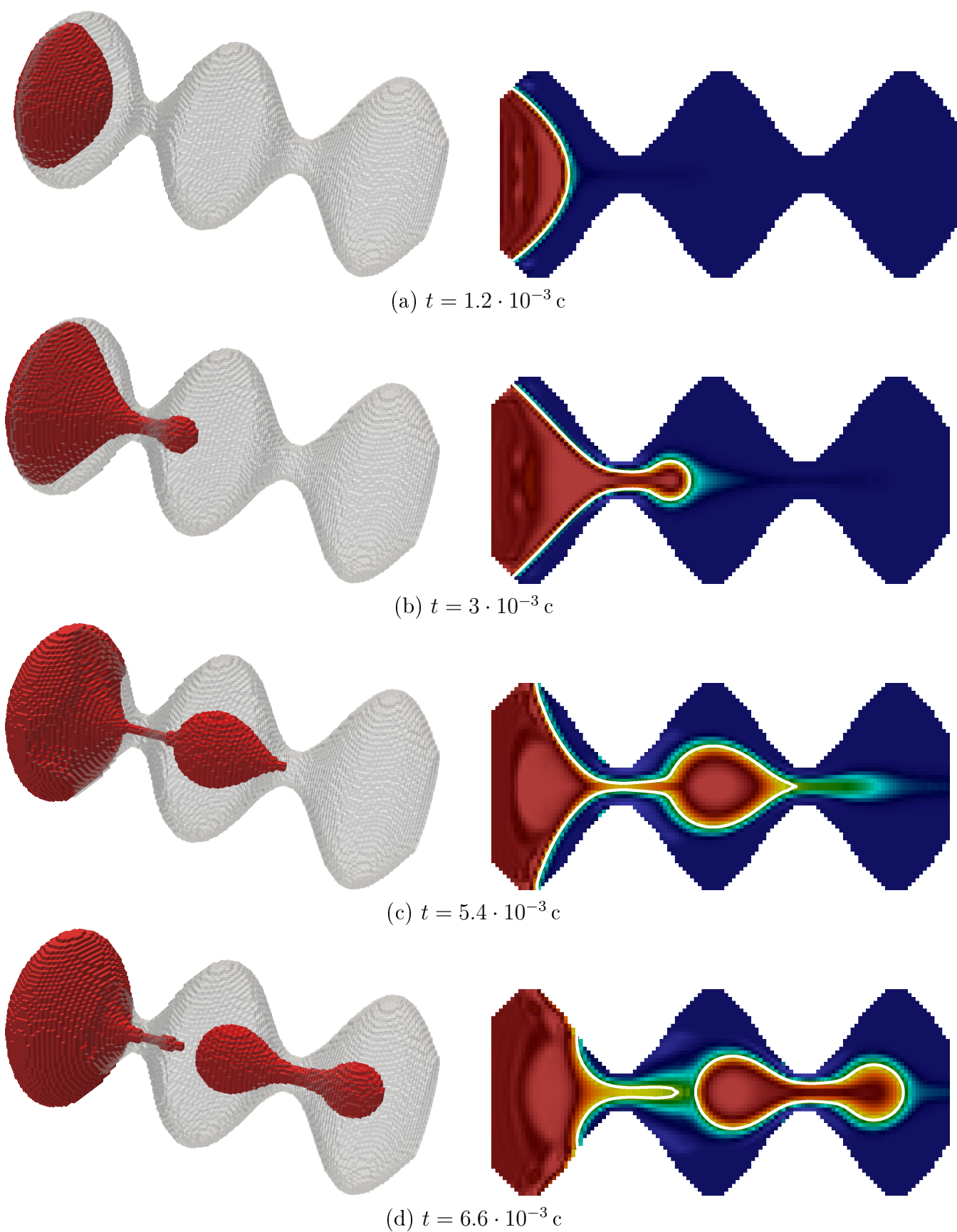


Рис. 10. Распределение концентрации C для моментов времени с $t = 1.2 \cdot 10^{-3} \text{ c}$ по $t = 6.6 \cdot 10^{-3} \text{ c}$: слева — объемное, справа — в сечении $x = L_x/2$

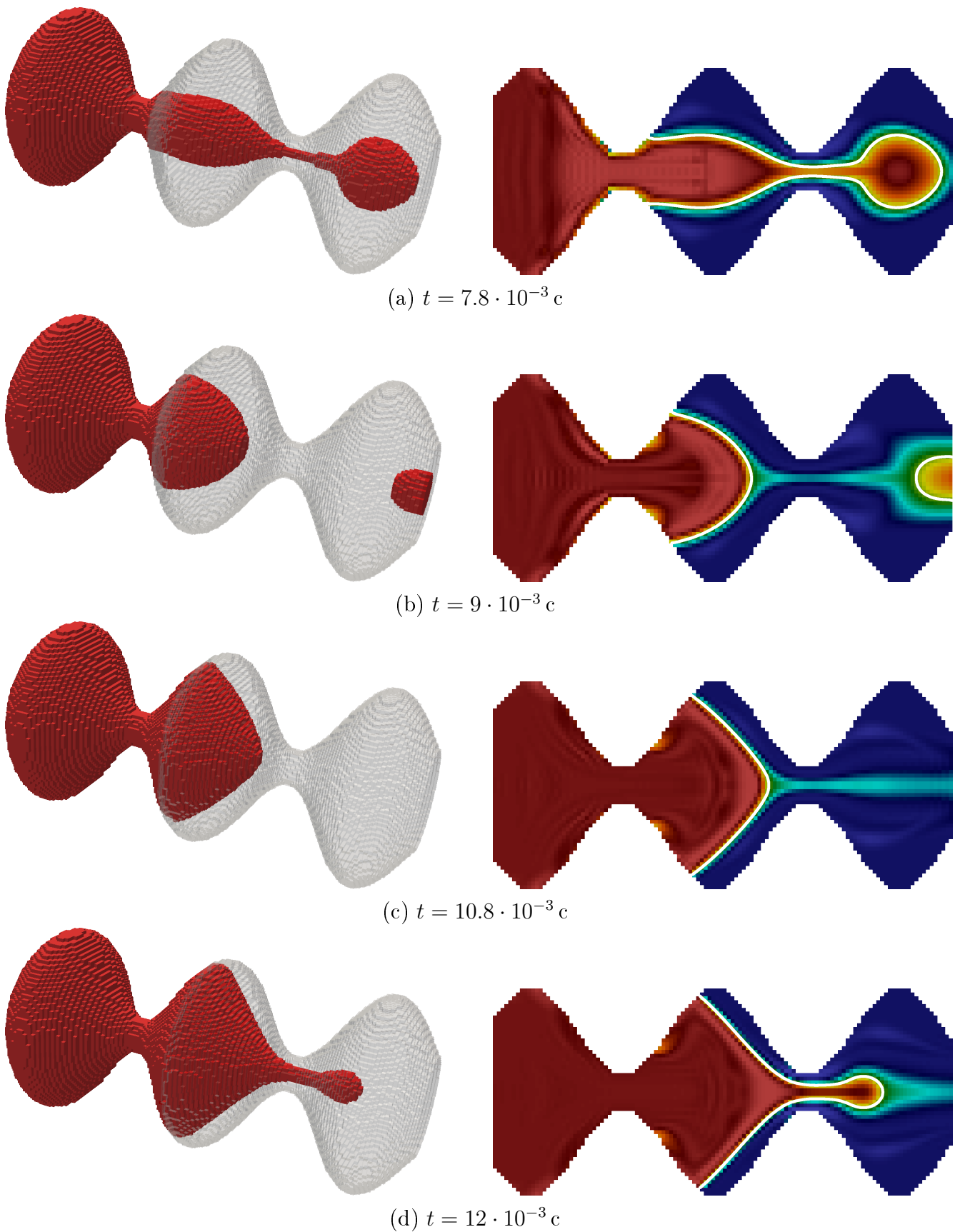


Рис. 11. Распределение концентрации C для моментов времени с $t = 7.8 \cdot 10^{-3} c$ по $t = 12 \cdot 10^{-3} c$: слева — объемное, справа — в сечении $x = L_x/2$

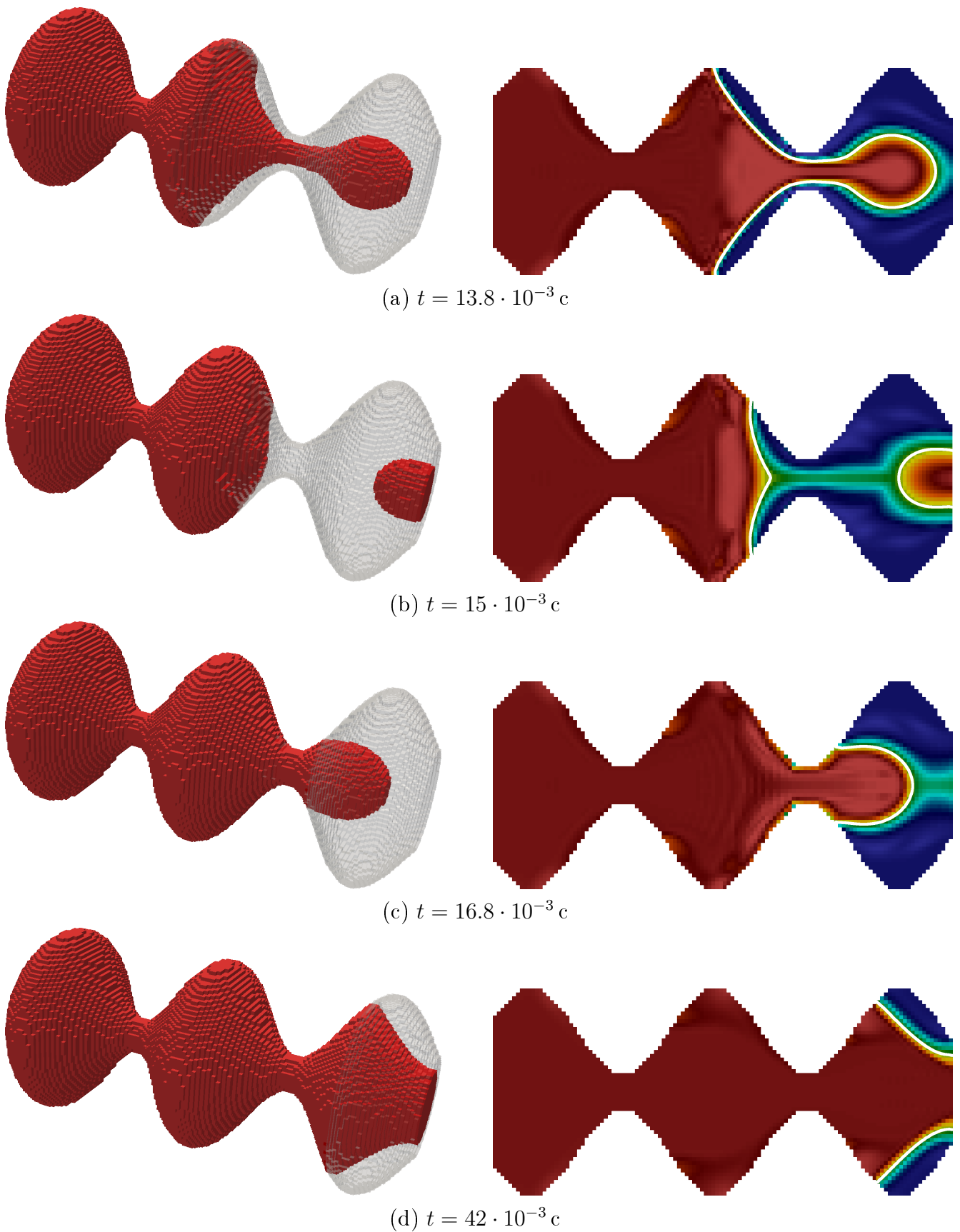


Рис. 12. Распределение концентрации C для моментов времени с $t = 13.8 \cdot 10^{-3} c$ по $t = 42 \cdot 10^{-3} c$: слева — объемное, справа — в сечении $x = L_x/2$

Список литературы

- [1] *Четверушкин Б.Н.* Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
- [2] *Елизарова Т. Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Научный мир, 2007.
- [3] *Шеретов Ю. В.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
- [4] *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. 37 с. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>
- [5] *Балашов В.А., Савенков Е.Б.* Численное исследование двумерной квазигидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 13. 20 с. doi:10.20948/prepr-2016-13, URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-13>
- [6] *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. 25 с. doi:10.20948/prepr-2016-89 URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-89>
- [7] *Balashov V., Zlotnik A., Savenkov E.* Analysis of a regularized model for the isothermal two-component mixture with the diffuse interface // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2017. Vol. 32. № 6 (принято к печати).
- [8] *Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A.* Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Ann. Rev. Fluid Mech. 1998. V. 30. P. 139–165.
- [9] *Lowengrub J., Truskinovsky L.* Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // Proc. Royal Soc. London A. 1998. V. 454. P. 2617–2654.
- [10] *Blunt M. J., Bijeljic B., Dong H., Gharbi O., Iglauer S., Mostaghimi P., Paluszny A., Pentland C.* Pore-scale imaging and modelling // Advances in Water Resources. 2013. V. 51. P. 197–216.
- [11] *Dvorkin J., Derzhi N., Diaz E., Fang Q.* Relevance of computational rock physics // Geophysics. 2011. Vol. 76. № 5. P. E141–E153.
- [12] *Злотник А. А.* О консервативных пространственных дискретизациях баротропной квазигазодинамической системы уравнений с потенциальной массовой силой // Ж. вычисл. матем. матем. физ. 2016. Т. 56. № 2. С. 301–317.
- [13] *Злотник А. А.* Энтропийно консервативная пространственная дискретизация многомерной квазигазодинамической системы уравнений // Ж. вычисл. матем. матем. физ. 2017. Т. 57. № 4. С. 710–729.

Содержание

1	Введение	3
2	КГид система уравнений изотермической двухкомпонентной смеси	4
3	Разностная схема	5
4	Алгоритм реализации граничных условий	9
5	Растекание капли по подложке	20
6	Вытеснение одной жидкости другой в канале сложной формы	21
7	Заключение	23