



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 82 за 2021 г.



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

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

Регуляризованная модель
типа фазового поля для
описания системы
«жидкость–твердое тело» с
учетом химических реакций

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Балашов В.А., Савенков Е.Б. Регуляризованная модель типа фазового поля для описания системы «жидкость–твердое тело» с учетом химических реакций // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 82. 20 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2021-82>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-82>

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

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

**Регуляризованная модель типа фазового поля
для описания системы «жидкость–твердое тело»
с учетом химических реакций**

Москва, 2021

*В.А. Балашов, Е.Б. Савенков*¹, Регуляризованная модель типа фазового поля для описания системы «жидкость–твердое тело» с учетом химических реакций

Аннотация

В настоящей работе представлена математическая модель типа фазового поля для описания трехфазной системы типа «жидкость–жидкость–твердое тело», где твердое тело обладает упругой реологией. При этом предполагается, что одна из жидких фаз химически взаимодействует с твердой. В качестве соответствующих уравнений химической кинетики рассмотрены простые модельные уравнения, описывающие бимолекулярную одностороннюю реакцию. Особенностью рассматриваемой модели является ее предварительная регуляризация согласно квазигидродинамической методике. Приведена полностью явная разностная аппроксимация данной модели. Приведены результаты расчета модельной двумерной задачи.

Ключевые слова: квазигидродинамическая регуляризация, фазовое поле, трехфазная система

V.A. Balashov, E.B. Savenkov, A regularized phase field model for «solid–fluid» system accounting for chemical reactions.

Abstract

We present regularized phase field model for description of threephase «fluid–fluid–solid» system, where solid body obeys elastic rheology. It is assumed that one of the liquid phases chemically interacts with the solid one. As the corresponding equations of chemical kinetics, simple model equations describing a bimolecular reaction are considered. A feature of the model under consideration is its preliminary regularization according to quasi-hydrodynamic technique. A fully explicit finite difference approximation of this model is presented. Results of a simulation in two-dimensional setting are presented.

Key words and phrases: quasi-hydrodynamic equations, phase field, three-phase flow

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19–11–00169).

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

1 Введение

Многофазные микротечения, включающие подвижные твердые частицы, широко распространены в природе и технике. Примерами таких систем являются суспензии [1, 2], биологические жидкости вместе с клетками в них [3]. Отдельный интерес для промышленности представляют микротечения, в которых твердая фаза (в том числе подвижные твердые частицы) участвует в химических превращениях. Так, например, в нефтегазовой отрасли используют кислотную обработку призабойной зоны скважины как один из методов увеличения нефтеотдачи. Поэтому учет химических реакций в течениях с подвижной твердой фазой является актуальной задачей.

Как правило, в задачах, связанных с динамикой деформируемого твердого тела, используют либо лагранжево, либо смешанное эйлерово–лагранжево описание среды. Такие модели являются удовлетворительными до тех пор, пока число твердых тел в системе невелико. В противном случае возникают значительные технические сложности, связанные с необходимостью отслеживания положения межфазных границ, перестроением сеток, переинтерполяцией между сетками и др. (например, процедура “remesh/remap” [4]). Эти трудности усугубляются при больших деформациях и перемещениях, а также топологических изменениях (например, дробление или растворение твердой частицы, выпадение твердого осадка). Отдельную сложность представляет задача эффективной реализации таких алгоритмов для использования на высокопроизводительных вычислительных системах [5]. В связи с этим в последнее время набирают популярность модели, которые описывают взаимодействие жидкости и твердого тела единым («сквозным») образом, используя эйлерово описание движения среды [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]. Одной из моделей такого типа и посвящена настоящая работа.

Рассматриваемая модель является моделью типа фазового поля (часто относимая к моделям с диффузной границей). В моделях типа фазового поля предполагается наличие одного или нескольких параметров порядка, которые позволяют отличить одну фазу от другой. При этом параметры порядка могут быть введены искусственно, а могут быть характеристиками среды (например, плотность или концентрация). Предполагается, что свободная энергия Гельмгольца (или другой термодинамический потенциал) зависит как от самих параметров порядка, так и от их градиентов (поэтому такие модели также известны как «слабо-нелокальные» или «градиентные»). Кроме того, важная особенность таких моделей состоит в невыпуклой зависимости свободной энергии от параметров порядка. Подробнее о методах фазового поля см., например, [13, 14, 15]. В работах [16, 17, 18] использованы модели типа фазового поля, в которых учтены химические реакции.

Отметим, что формально в математической модели типа фазового поля

понятие фазы не вводится. Однако, описанные выше особенности функциональной зависимости свободной энергии от своих аргументов обеспечивают существование пространственных подобластей, занятых смесью практически однородного состава. Эти области и интерпретируются в настоящей работе как отдельные фазы. Для задания реологии фазы коэффициенты в соответствующих определяющих соотношениях взвешены по параметрам порядка. Например, при использовании закона Гука упругие коэффициенты Ламе зависят от концентрации так, что в твердой фазе они имеют некоторое конечное заданное значение, а в жидкой — равны нулю.

Для описания напряженно-деформированного состояния твердой фазы будем предполагать, что свободная энергия зависит от тензора деформации Альманси \mathbf{E} (отметим, что такой подход применен, например, в [10, 11, 19]). При этом тензор \mathbf{E} определяется как решение соответствующего эволюционного уравнения, которое, в свою очередь, является следствием уравнения для поля дисторсии [20]. Следуя [10, 11, 19], в настоящей работе данное уравнение рассматривается не как следствие закона движения среды, а как самостоятельный (первичный) закон, описывающий эволюцию \mathbf{E} . При таком подходе к определению напряженно-деформированного состояния тензор деформации Альманси является одной из *первичных* и независимых переменных модели.

В настоящей работе рассмотрена модель, описывающая изотермическое течение трехфазной трехкомпонентной смеси типа «твердое тело – жидкость – жидкость» в области с периодическими граничными условиями. При этом предполагается наличие химической реакции, за счет которой твердая фаза вступает в реакцию с одной из жидких фаз. В результате твердая фаза постепенно «растворяется», а на ее поверхности образуется пленка жидкости третьей фазы. Предполагается, что твердая фаза имеет упругую реологию, которая описывается обобщенным законом Гука (ср. [10, 19]). Модель является трехкомпонентной. В качестве параметров порядка выступают массовые плотности компонентов (похожие модели представлены в работах [21, 22, 10, 11]).

Особенностью рассматриваемой модели является ее предварительная регуляризация, согласно квазигидродинамической (КГиД) методике: предполагается, что массовая плотность потока смеси \mathbf{j}^m в общем случае отличается от среднего импульса единицы объема $\rho \mathbf{u}$. Другими словами, $\mathbf{j}^m = \rho \mathbf{u} - \rho \mathbf{w}$, где \mathbf{u} — скорость жидкости, ρ — ее плотность, \mathbf{w} — регуляризирующая скорость, которая пропорциональна малому параметру $\tau > 0$, имеющему размерность времени. Это предположение приводит к возникновению дополнительных малых слагаемых в исходных законах сохранения. Данные слагаемые носят диссипативный характер и в некоторых случаях позволяют увеличить используемый шаг по времени в явных центрально-разностных схемах. Такая регуляризация успешно применяется для различных моделей сплошной среды: модели

динамики вязкой жидкости, магнитной гидродинамики, мелкой воды, многофазных течений с поверхностными эффектами и др. [23, 24, 25, 26, 27, 28]. Похожие модели регуляризации предлагались также в работах [29].

Ранее КГиД-регуляризованные модели исследовались в работах [30, 31, 32, 33]. В [34] была рассмотрена модель, описывающая двухфазную двухкомпонентную смесь, где одна из фаз имеет упругую реологию.

Представленная работа устроена следующим образом. В разделе 2 для удобства введены используемые обозначения. В разделе 3 описано уравнение эволюции тензора деформации. Раздел 4 посвящен описанию регуляризованной модели типа фазового поля. Дискретизация уравнений модели представлена в разделе 5. Заключительный раздел 6 посвящен численному исследованию построенного метода.

2 Обозначения

Будем рассматривать динамику среды в пространственной области $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$. Зададим декартову систему координат $Ox_1x_2x_3$, $\mathbf{x} := (x_1, x_2, x_3)$ с базисными векторами $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$.

Векторы обозначаются строчными буквами жирным шрифтом: $\mathbf{u}, \mathbf{a}, \dots$; тензоры второго ранга — прописными буквами жирным прямым шрифтом: $\mathbf{F}, \mathbf{P}, \dots$; скалярные величины — стандартным шрифтом: $F_{ij}, A, u_k, \varphi, \dots$. Здесь и далее, если не сказано противное, по индексам i, j, r и q (и только по ним) подразумевается суммирование от 1 до 3; по индексам α, β (и только по ним) подразумевается суммирование от 1 до 2. Символ « \otimes » соответствует тензорному (диадному) произведению. Равенство по определению обозначается символом « $:=$ ». В дальнейшем будем считать, что по определению:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &:= a_i b_i, & \nabla \varphi &:= (\partial_i \varphi) \mathbf{e}_i, & \mathbf{A} \cdot \mathbf{u} &\equiv \mathbf{A} \mathbf{u} := A_{ij} u_j \mathbf{e}_i, \\ \mathbf{A} : \mathbf{B} &:= A_{ij} B_{ij}, & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &:= A_{ik} B_{kj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, & \mathbf{u} \cdot \mathbf{A} &:= u_i A_{ij} \mathbf{e}_j, \\ |\mathbf{a}|^2 &:= \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}, & \text{tr } \mathbf{A} &:= \mathbf{A} : \mathbf{I} \equiv A_{ii}, & \nabla \otimes \mathbf{u} &:= (\partial_i u_j) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{A}^T &:= A_{ji} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, & \tilde{\mathbf{E}} : \mathbf{A} &:= \tilde{E}_{ijk} A_{jk} \mathbf{e}_i, & \text{div } \mathbf{A} &\equiv \nabla \cdot \mathbf{A} := (\partial_i A_{ij}) \mathbf{e}_j, \\ |\mathbf{A}|^2 &:= \mathbf{A} : \mathbf{A}, & \nabla \otimes \mathbf{A} &:= (\partial_i A_{jk}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k. \end{aligned}$$

Здесь $\mathbf{I} := \delta^{(ij)} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ — единичный тензор второго ранга, $\delta^{(ij)}$ — символ Кронекера, $\partial_i(\cdot) := \partial(\cdot)/\partial x_i$ — частная производная по x_i , $\tilde{\mathbf{E}} := \tilde{E}_{ijk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$ — некоторый тензор третьего ранга. Обратим внимание, что дивергенция тензора берется по первому индексу. Первый и второй *главные* инварианты произвольного тензора \mathbf{A} второго ранга обозначаются как $I_1(\mathbf{A}), I_2(\mathbf{A})$:

$$I_1(\mathbf{A}) := \text{tr } \mathbf{A}, \quad I_2(\mathbf{A}) := \frac{1}{2} [I_1^2(\mathbf{A}) - I_1(\mathbf{A}^2)].$$

Полная (субстанциональная, лагранжева, материальная) производная по времени t величины f , которая может быть тензором любого ранга, обозначается df/dt либо точкой: \dot{f} , $(f)^\cdot$; частная производная по времени t обозначается $\partial f/\partial t$ или $\partial_t f$.

3 Уравнение эволюции тензора деформации

Пусть $\mathring{\mathbf{x}}$ — координаты материальной частицы среды в отсчетной конфигурации относительно некоторой (лабораторной) неподвижной системы координат; \mathbf{x} — координаты частицы в актуальной конфигурации. Движение среды задается отображением $\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathring{\mathbf{x}}, t)$, которое предполагается непрерывным, обратное к которому также непрерывно. Введем массовую скорость \mathbf{u}^m материальной частицы $\mathring{\mathbf{x}}$:

$$\mathbf{u}^m := \left. \frac{\partial \mathbf{x}(\mathring{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} \right|_{\mathring{\mathbf{x}}},$$

где $\partial(\cdot)/\partial t|_{\mathring{\mathbf{x}}} \equiv d(\cdot)/dt \equiv (\cdot)^\cdot$ — полная производная по времени t . Таким образом, материальная (лагранжева) частица среды движется вдоль интегральной линии уравнения $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{u}^m$ с начальным условием $\mathbf{x}(0) = \mathring{\mathbf{x}}$. Материальная производная связана с частной $\partial(\cdot)/\partial t|_{\mathbf{x}} \equiv \partial(\cdot)/\partial t$ по формуле

$$\frac{d(\cdot)}{dt} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + (\mathbf{u}^m \cdot \nabla)(\cdot). \quad (1)$$

Следуя [20], введем (эйлеров) тензор дисторсии \mathbf{A} с компонентами A_{ij}

$$\mathbf{A} := (\nabla \otimes \mathring{\mathbf{x}})^\top, \quad A_{ij} = \frac{\partial \mathring{x}_i}{\partial x_j}. \quad (2)$$

Из равенства $d\mathring{\mathbf{x}}/dt = 0$ несложно получить следующее уравнение для тензора дисторсии [20]

$$\dot{\mathbf{A}} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{0}, \quad (3)$$

которое описывает эволюцию поля дисторсии. Здесь $\mathbf{L} := (\nabla \otimes \mathbf{u}^m)^\top$ — тензор градиента массовой скорости. В настоящей работе вместо \mathbf{A} удобнее использовать тензор деформации Альманси $\mathbf{E} := \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{A}^\top \cdot \mathbf{A})$. Из (3) легко получить уравнение

$$\dot{\mathbf{E}} - \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^\top) + \mathbf{L}^\top \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{0}. \quad (4)$$

Важно отметить следующее. Уравнение (4) является *следствием* определения дисторсии (2). Однако в дальнейшем мы не будем пользоваться этим

определением. Напротив, уравнение (4) мы будем постулировать, а тензор деформации Альманси будем *определять* как решение этого уравнения (дополненного соответствующими начальными и граничными условиями). Такой подход использован в [10, 11, 19]. Подчеркнем, что в этом случае тензор \mathbf{E} является одной из первичных переменных (как плотность, скорость и пр.), которые определяют состояние системы.

Замечание 1. Также отметим, что уравнение (3) также можно было бы использовать в качестве базового. Тогда первичной переменной являлся бы тензор дисторсии (см., например, [35, 19]).

4 Модель трехкомпонентной смеси

Регуляризованная система уравнений, описывающая трехфазную трехкомпонентную изотермическую смесь типа «жидкость–жидкость–твердое тело», представлена следующими законами сохранения массы обоих компонентов, импульса и уравнением эволюции тензора деформации:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_1 + \operatorname{div}(\rho_1 \mathbf{u}^m) = & \operatorname{div}(M \nabla[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)]) \\ & + \operatorname{div}(M \nabla[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_3)]) + \dot{r}_1, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\partial_t \rho_2 + \operatorname{div}(\rho_2 \mathbf{u}^m) = -\operatorname{div}(M \nabla[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)]) + \dot{r}_2, \quad (6)$$

$$\partial_t \rho_3 + \operatorname{div}(\rho_3 \mathbf{u}^m) = -\operatorname{div}(M \nabla[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_3)]) + \dot{r}_3, \quad (7)$$

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}^m \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \operatorname{div} \mathbf{\Pi} + \operatorname{div} \mathbf{\Pi}^\lambda, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{E} + \mathbf{u}^m \cdot (\nabla \otimes \mathbf{E}) - \frac{1}{2} (\nabla \otimes \mathbf{u}^m + (\nabla \otimes \mathbf{u}^m)^\top) \\ = -\mathbf{E} \cdot (\nabla \otimes \mathbf{u}^m)^\top - (\nabla \otimes \mathbf{u}^m) \cdot \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\rho_\alpha(\mathbf{x}, t) > 0$ — массовая плотность компонента $\alpha = 1, 2, 3$, $\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3$ — полная плотность смеси, $\mathbf{u}^m = \mathbf{u} - \mathbf{w}$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ — среднемассовая скорость жидкости, $\theta > 0$ — температура смеси, которая в рассматриваемой работе является постоянным параметром. Подвижность компонентов характеризуется коэффициентом $M(\bar{\rho}) > 0$. Здесь и далее для краткости использовано обозначение $\bar{\rho} := (\rho_1, \rho_2, \rho_3)$. В уравнениях (5), (6) и (7) присутствуют источники массы $\dot{r}_\alpha(\bar{\rho})$, которые учитывают приток массы за счет химических реакций между компонентами. Для выполнения баланса полной массы смеси потребуем

$$\dot{r}_1 + \dot{r}_2 + \dot{r}_3 = 0.$$

Далее, уравнение (9) следует из (4) с использованием формулы (1) для полной производной по времени и описывает эволюцию тензорного поля $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$.

Для большей ясности выпишем (9) в покомпонентной форме:

$$\partial_t E_{kl} + u_i^m \partial_i E_{kl} - \frac{1}{2}(\partial_k u_l^m + \partial_l u_k^m) = -E_{ki} \partial_l u_i^m - E_{il} \partial_k u_i^m.$$

Напряжения в смеси определяются тензорами $\mathbf{\Pi} := \mathbf{\Pi}^{\text{NS}} + \mathbf{\Pi}^{\text{el}} + \mathbf{\Pi}^\tau$ и $\mathbf{\Pi}^\lambda$, где $\mathbf{\Pi}^{\text{NS}} := \mathbf{\Pi}^{\text{NS}}(\mathbf{u})$ — тензор вязких напряжений Навье–Стокса, $\mathbf{\Pi}^{\text{el}}$ — тензор упругих напряжений, $\mathbf{\Pi}^\tau := \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}$ — тензор регуляризующих напряжений, $\mathbf{\Pi}^\lambda$ — тензор межфазных (поверхностных, «капиллярных») напряжений:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}^{\text{NS}}(\mathbf{u}) &:= 2\eta \mathbf{D} + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad \mathbf{D} := \frac{1}{2}(\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^\text{T}), \\ \mathbf{\Pi}^{\text{el}} &:= \partial_{\mathbf{E}}\psi - 2\mathbf{E} \cdot \partial_{\mathbf{E}}\psi, \\ \mathbf{\Pi}^\lambda &:= (\rho_\alpha \lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta)\mathbf{I} - \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \otimes \nabla \rho_\beta, \end{aligned}$$

где $\eta = \eta(\bar{\rho}) > 0$ и $\zeta = \zeta(\bar{\rho}) \geq 0$ — коэффициенты динамической и объемной вязкости соответственно; постоянные коэффициенты $\lambda_{\alpha\beta}$, $(\alpha, \beta = 1, 2, 3)$ образуют симметричную положительно определенную матрицу.

Для определения остальных величин введем объемную плотность свободной энергии Гельмгольца ψ :

$$\psi(\bar{\rho}, \mathbf{E}, \nabla \bar{\rho}) := \psi_0(\bar{\rho}, \mathbf{E}) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta, \quad (10)$$

где слагаемое $\psi_0(\bar{\rho}, \mathbf{E})$ — *объемная* плотность *однородной* части свободной энергии Гельмгольца смеси, а слагаемое, зависящее от $\nabla \bar{\rho}$, представляет собой межфазную энергию.

В правой части уравнений (5) и (6) величина $\hat{\mu}_\alpha$ — обобщенный химический потенциал компонента $\alpha = 1, 2, 3$:

$$\hat{\mu}_\alpha(\bar{\rho}, \mathbf{E}, \Delta \bar{\rho}) = \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta, \quad \mu_\alpha(\bar{\rho}, \mathbf{E}) = \partial_{\rho_\alpha} \psi_0,$$

где μ_α — классический химический потенциал, Δ — оператор Лапласа.

Давление связано с плотностями компонентов соотношением

$$p(\bar{\rho}, \mathbf{E}) = \rho_1 \mu_1 + \rho_2 \mu_2 + \rho_3 \mu_3 - \psi_0.$$

Определяющее соотношение для регуляризующей составляющей скорости имеет вид

$$\mathbf{w} = \rho^{-1} \tau \{ (\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \text{div } \mathbf{\Pi}^{\text{el}} - \text{div } \mathbf{\Pi}^\lambda \}. \quad (11)$$

Здесь $\tau = \tau(\bar{\rho}) \geq 0$ — релаксационный параметр, имеющий размерность времени. Слагаемые порядка $O(\tau)$ можно рассматривать как физически мотивированные регуляризаторы, которые в некоторых случаях позволяют увеличить шаг по времени при использовании явных центрально-разностных аппроксимаций.

Складывая (5) и (6), получим уравнения для баланса полной массы смеси

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}^m) = 0. \quad (12)$$

В дальнейшем при построении дискретизации мы будем использовать следующее недивергентное представление для капиллярных напряжений

$$\operatorname{div} \mathbf{\Pi}^\lambda = \rho_\alpha \nabla(\lambda_{\alpha\beta} \Delta \rho_\beta), \quad (13)$$

справедливое в силу симметричности $\lambda_{\alpha\beta}$ (подробнее см., например, [36]). Аналогичные равенства также использованы, например, в [22, 37, 32].

С учетом (13) и формулы

$$\nabla \psi_0 = (\partial_{\rho_\alpha} \psi_0) \nabla \rho_\alpha + (\nabla \otimes \mathbf{E}) : \partial_{\mathbf{E}} \psi_0$$

имеем

$$\nabla p - \operatorname{div} \mathbf{\Pi}^\lambda = \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha - (\nabla \otimes \mathbf{E}) : \partial_{\mathbf{E}} \psi_0, \quad (14)$$

где последнее слагаемое в правой части является вектором $(\partial_i E_{kl})(\partial_{\mathbf{E}} \psi_0)_{kl} \mathbf{e}_i$.

Подставляя (14) в (8) и (11), перепишем уравнение баланса импульса и регуляризующую скорость в виде

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_m \otimes \mathbf{u}) + \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha - (\nabla \otimes \mathbf{E}) : \partial_{\mathbf{E}} \psi_0 = \operatorname{div} \mathbf{\Pi}, \quad (15)$$

$$\mathbf{w} = \rho^{-1} \tau [\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \rho_\alpha \nabla \hat{\mu}_\alpha - (\nabla \otimes \mathbf{E}) : \partial_{\mathbf{E}} \psi_0 - \operatorname{div} \mathbf{\Pi}^{\text{el}}]. \quad (16)$$

Далее предположим, что решение системы (5)–(9) является X -периодическими функциями относительно (x_1, x_2, x_3) , где $X = (X_1, X_2, X_3)$, $X_i > 0$, $i = 1, 2, 3$. В этом случае $\Omega = \Omega_X := (0, X_1) \times (0, X_2) \times (0, X_3)$.

5 Дискретизация

Данный раздел посвящен построению пространственной дискретизации системы уравнений (5)–(9) в трехмерной пространственной области Ω_X . Как и в [31], вдоль направления x_k введем одномерные равномерные сетки $\omega_{kh} := \{x_{kn} = nh\}$ и $\omega_{kh}^* := \{x_{k(n+1/2)} = (n + 0.5)h\}$, где $n \in \mathbb{Z}$, $h = X_k/N_k$ — шаг по пространству, одинаковый для всех сеток, и $k = 1, 2, 3$. Пусть $H_{X_k}(\omega_{hk})$ и $H_{X_k}(\omega_{hk}^*)$ — пространства X_k -периодических функций, определенных на введенных сетках.

Для произвольных $v \in H_{X_k}(\omega_{kh})$ и $y \in H_{X_k}(\omega_{kh}^*)$ введем разностные усреднения и отношения

$$\begin{aligned} (s_k v)_{m-1/2} &= \frac{1}{2}(v_m + v_{m-1}), & (s_k^* y)_m &= \frac{1}{2}(y_{m+1/2} + y_{m-1/2}), \\ (\delta_k v)_{m-1/2} &= \frac{1}{h}(v_m - v_{m-1}), & (\delta_k^* y)_m &= \frac{1}{h}(y_{m+1/2} - y_{m-1/2}). \end{aligned}$$

Ясно, что $\delta_k, s_k : H_{X_k}(\omega_{hk}) \rightarrow H_{X_k}(\omega_{hk}^*)$ и $\delta_k^*, s_k^* : H_{X_k}(\omega_{hk}^*) \rightarrow H_{X_k}(\omega_{hk})$.

Производная по времени заменяется разностным отношением

$$\delta_t v = \frac{\hat{v} - v}{\Delta t},$$

где символом $\langle\langle \hat{\cdot} \rangle\rangle$ обозначено значение соответствующей величины на новом временном слое, Δt — шаг по времени.

С помощью введенных одномерных сеток, следуя [30], определим набор трехмерных сеток

$$\omega_{h\tilde{1},\tilde{2},\tilde{3}} := \omega_{h\tilde{1}} \times \omega_{h\tilde{2}} \times \omega_{h\tilde{3}},$$

где $\omega_{h\tilde{k}} = \omega_{hk}$ для $\tilde{k} = k$ и $\omega_{h\tilde{k}} = \omega_{hk}^*$ для $\tilde{k} = k^*$. Обозначим

$$\omega_h \equiv \omega_{h1,2,3} := \omega_{h1} \times \omega_{h2} \times \omega_{h3}, \quad \omega_h^* \equiv \omega_{h1^*,2^*,3^*} := \omega_{h1}^* \times \omega_{h2}^* \times \omega_{h3}^*.$$

Также введем пространства $H_X(\omega_{h\tilde{1},\tilde{2},\tilde{3}})$ X -периодических функций, где $X = (X_1, X_2, X_3)$.

Теперь с помощью введенных сеток и операторов запишем аппроксимацию системы уравнений (5)–(7), (8), (9).

$$\begin{aligned} \delta_t \rho_1 + \delta_i[(s_i^* \rho_1) u_i^m] = & \delta_i((s_i^* M) \delta_i^*[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)]) \\ & + \delta_i((s_i^* M) \delta_i^*[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_3)]) + \dot{r}_1 \quad \text{на } \omega_h^*, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\delta_t \rho_2 + \delta_i[(s_i^* \rho_2) u_i^m] = -\delta_i((s_i^* M) \delta_i^*[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_2)]) + \dot{r}_2 \quad \text{на } \omega_h^*, \quad (18)$$

$$\delta_t \rho_3 + \delta_i[(s_i^* \rho_3) u_i^m] = -\delta_i((s_i^* M) \delta_i^*[\theta^{-1}(\hat{\mu}_1 - \hat{\mu}_3)]) + \dot{r}_3 \quad \text{на } \omega_h^*, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \delta_t((s_k^* \rho) u_k) + \delta_k^*((s_k J_k) s_k u_k) + (1 - \delta^{(kj)}) \delta_j((s_k^* J_j) s_j^* u_k) \\ + (s_k^* \rho_\alpha) \delta_k^* \hat{\mu}_\alpha - (\delta_k^* E_{rq}) s_k^* K_{rq} \\ = \delta_k^* \Pi_{kk} + (1 - \delta^{(kj)}) \delta_j \Pi_{jk} \quad \text{на } \omega_{hk,j^*,n^*}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \delta_t E_{kk} + s_i(u_i^m \delta_i^* E_{kk}) - \delta_k u_k^m \\ = -2E_{kk} \delta_k u_k^m - 2(1 - \delta^{(ik)}) E_{ik} \delta_k s_k^* s_i u_i^m \quad \text{на } \omega_h^*, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \delta_t E_{kl} + s_i(u_i^m \delta_i^* E_{kl}) - \frac{1}{2}(\delta_k s_k^* s_l u_l^m + \delta_l s_l^* s_k u_k^m) \\ = -E_{kl} \delta_l u_l^m - (1 - \delta^{(il)}) E_{ki} \delta_l s_l^* s_i u_i^m \\ - E_{kl} \delta_k u_k^m - (1 - \delta^{(ik)}) E_{il} \delta_k s_k^* s_i u_i^m \quad \text{на } \omega_h^*, \quad (k \neq l). \end{aligned} \quad (22)$$

Отметим, что, как и в [30], в суммах вида $(1 - \delta^{(ki)}) a_{ki}$, величина a_{kk} может

быть вообще не определена, поскольку $(1 - \delta^{(kk)}) \equiv 0$. Далее,

$$\begin{aligned}
J_k &= (s_k^* \rho) u_k^m, \quad u_k^m = u_k - w_k, \\
\Pi_{lk} &= \Pi_{lk}^{\text{NS}} + \Pi_{lk}^\tau + s_l^* s_k^* \Pi_{lk}^{\text{el}} \quad (k \neq l), \quad \Pi_{kk} = \Pi_{kk}^{\text{NS}} + \Pi_{kk}^\tau + \Pi_{kk}^{\text{el}}, \\
\Pi_{kk}^{\text{NS}} &\equiv \Pi_{kk}^{\text{NS}}(\mathbf{u}) = 2\eta \delta_k u_k + (\zeta - \frac{2}{3}\eta) \operatorname{div}_h \mathbf{u}, \quad \operatorname{div}_h \mathbf{u} = \delta_i u_i, \\
\Pi_{lk}^{\text{NS}} &\equiv \Pi_{lk}^{\text{NS}}(\mathbf{u}) = (s_l^* s_k^* \eta) (\delta_l^* u_k + \delta_k^* u_l) \quad (k \neq l), \\
\Pi_{kk}^\tau &= s_k [(s_k^* \rho) u_k w_k], \quad \Pi_{kl}^\tau = (s_l^* u_k) s_k^* [(s_l^* \rho) w_l] \quad (k \neq l), \\
\Pi_{ij}^{\text{el}} &= K_{ij} - 2E_{ir} K_{rj}, \quad K_{ij} = \partial_{E_{ij}} \psi_0, \\
\hat{\mu}_\alpha &= \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta} \delta_i \delta_i^* \rho_\beta, \\
w_k &= \frac{\tau_k}{s_k^* \rho} \left\{ -(\delta_k^* E_{ri}) s_k^* K_{ri} - (1 - \delta^{(kj)}) \delta_j s_k^* s_j^* \Pi_{jk}^{\text{el}} - \delta_k^* \Pi_{kk}^{\text{el}} + (s_k^* \rho_\alpha) \delta_k^* \hat{\mu}_\alpha \right. \\
&\quad \left. + (s_k^* \rho) u_k s_k^* \delta_k u_k + (1 - \delta^{(ki)}) (s_k^* \rho) s_i [(s_k^* u_i) \delta_i^* u_k] \right\}.
\end{aligned}$$

Основными искомыми величинами являются $\rho_1, \rho_2, \rho_3, E_{ij} \in H_X(\omega_h^*)$ и $u_k \in H_X(\omega_{hk,l^*,n^*})$. Таким образом, плотности ρ_α и компоненты скорости u_k определены на разнесенных сетках. Также отметим, что $\hat{\mu}_\alpha, \dot{r}_\alpha(\bar{\rho}), \Pi_{kk} \in H_X(\omega_h^*), \Pi_{lk} \in H_X(\omega_{hl,k,n^*})$ ($l \neq k$), $\Pi_{ij}^{\text{el}} \in H_X(\omega_h^*), w_k \in H_X(\omega_{hk,l^*,n^*})$. Кроме того, $\eta(\bar{\rho}), \zeta(\bar{\rho}), M(\bar{\rho}) \in H_X(\omega_h^*); \tau_k(s_k \bar{\rho}) \in H_X(\omega_{hk,l^*,n^*})$.

Напомним, что если не сказано противное, то по повторяющимся индексам i, j и r подразумевается суммирование от 1 до 3 (и только по ним); по повторяющимся индексам α и β подразумевается суммирование от 1 до 3 (и только по ним).

Заметим, что, складывая (17)–(19) и учитывая $\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3$, а также $\dot{r}_1 + \dot{r}_2 + \dot{r}_3 = 0$, получаем дискретный аналог закона сохранения полной массы смеси (12):

$$\partial_t \rho + \delta_i [(s_i^* \rho) u_i^m] = 0.$$

6 Основные определяющие соотношения

В настоящем разделе введем определяющие соотношения для изотермической трехфазной трехкомпонентной смеси.

Для определенности обозначим фазы как A, B и C . Будем считать, что фаза A — твердая, то есть обладает упругой реологией, а остальные две — жидкие.

Одним из ключевых элементов модели является однородная часть свободной энергии Гельмгольца ψ_0 . Зададим ее в виде суммы однородной свободной энергии смеси в целом ψ_0^{m} и дополнительной упругой энергии твердой фазы ψ_{el} :

$$\psi_0(\bar{\rho}, \mathbf{E}) = \psi_{\text{el}}(\bar{\rho}, \mathbf{E}) + \psi_0^{\text{m}}(\bar{\rho}).$$

Энергию упругих деформаций зададим с помощью следующего обобщенного закона Гука [10, 19]

$$\psi_{\text{el}}(\mathbf{E}, \rho_1, \rho_2) = \mu_{\text{el}} \mathbf{E} : \mathbf{E} + \frac{1}{2} \lambda_{\text{el}} (\text{tr } \mathbf{E})^2 = (\mu_{\text{el}} + \frac{1}{2} \lambda_{\text{el}}) I_1^2(\mathbf{E}) - 2\mu_{\text{el}} I_2(\mathbf{E}),$$

где $\lambda_{\text{el}}(\bar{\rho}) \geq 0$ — первый коэффициент Ламе, $\mu_{\text{el}}(\bar{\rho}) \geq 0$ — второй коэффициент Ламе (модуль сдвига). Далее, применяя формулы

$$\partial_{\mathbf{E}} I_1(\mathbf{E}) = \mathbf{I}, \quad \partial_{\mathbf{E}} I_2(\mathbf{E}) = I_1(\mathbf{E}) \mathbf{I} - \mathbf{E},$$

получим явное выражение для тензора упругих напряжений:

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{E}} \psi_{\text{el}} &= \lambda_{\text{el}} I_1(\mathbf{E}) \mathbf{I} + 2\mu_{\text{el}} \mathbf{E}, \\ \mathbf{\Pi}^{\text{el}} &= \partial_{\mathbf{E}} \psi_{\text{el}} - 2\mathbf{E} \cdot \partial_{\mathbf{E}} \psi_{\text{el}}. \end{aligned}$$

В жидкой фазе упругая часть свободной энергии ψ_{el} должна быть близкой к нулю. Для этого коэффициенты упругости зададим зависящими от концентрации первого компонента $c := \rho_1 / (\rho_1 + \rho_2 + \rho_3)$:

$$\lambda_{\text{el}}(c) = \tilde{\lambda}_{\text{el}} H(c), \quad \mu_{\text{el}}(c) = \tilde{\mu}_{\text{el}} H(c), \quad H(c) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(30 \left(c - \frac{1}{2} \right) \right).$$

Таким образом, в жидкой фазе (преимущественно состоящей из второго компонента) данные компоненты будут практически равны нулю.

Перейдем к заданию однородной части ψ_0^{m} . В общем случае ее вид определяется уравнениями состояния компонентов в каждой фазе. В настоящей работе мы ограничимся модельным случаем, следуя [11, 10]. Рассмотрим смесь в фазе A . Тогда при малых отклонениях ρ_1 , ρ_2 и ρ_3 от их равновесных значений ρ_1^A , ρ_2^A и ρ_3^A свободную энергию можно разложить в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \psi^A &= \psi^A(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A) + (\rho_\alpha - \rho_\alpha^A) \partial_{\rho_\alpha} \psi^A(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\rho_\alpha - \rho_\alpha^A) (\rho_\beta - \rho_\beta^A) \partial_{\rho_\beta} \partial_{\rho_\alpha} \psi^A(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A) + \dots \end{aligned}$$

Напомним, что по повторяющимся индексам α и β осуществляется суммирование от 1 до 3 (по числу компонентов). Заменяя A на B , получим аналогичное представление для свободной энергии смеси ψ^B в фазе B , которое выполняется в окрестности равновесных значений ρ_1^B , ρ_2^B и ρ_3^B . Совершенно аналогично для фазы C .

Теперь свободную энергию двухфазной смеси для *всех* значений ρ_1 , ρ_2 и ρ_3 определим в следующем виде [10]

$$\psi_0^{\text{m}}(\bar{\rho}) = \psi^A \psi^B \psi^C.$$

Далее оставим только квадратичные слагаемые в разложении для ψ^A , ψ^B и ψ^C . Для простоты положим

$$\partial_{\rho_\alpha} \partial_{\rho_\alpha} \psi^A(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A) = 2A_\psi > 0, \quad \partial_{\rho_\alpha} \partial_{\rho_\beta} \psi^A(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A) = 0, \quad \alpha \neq \beta;$$

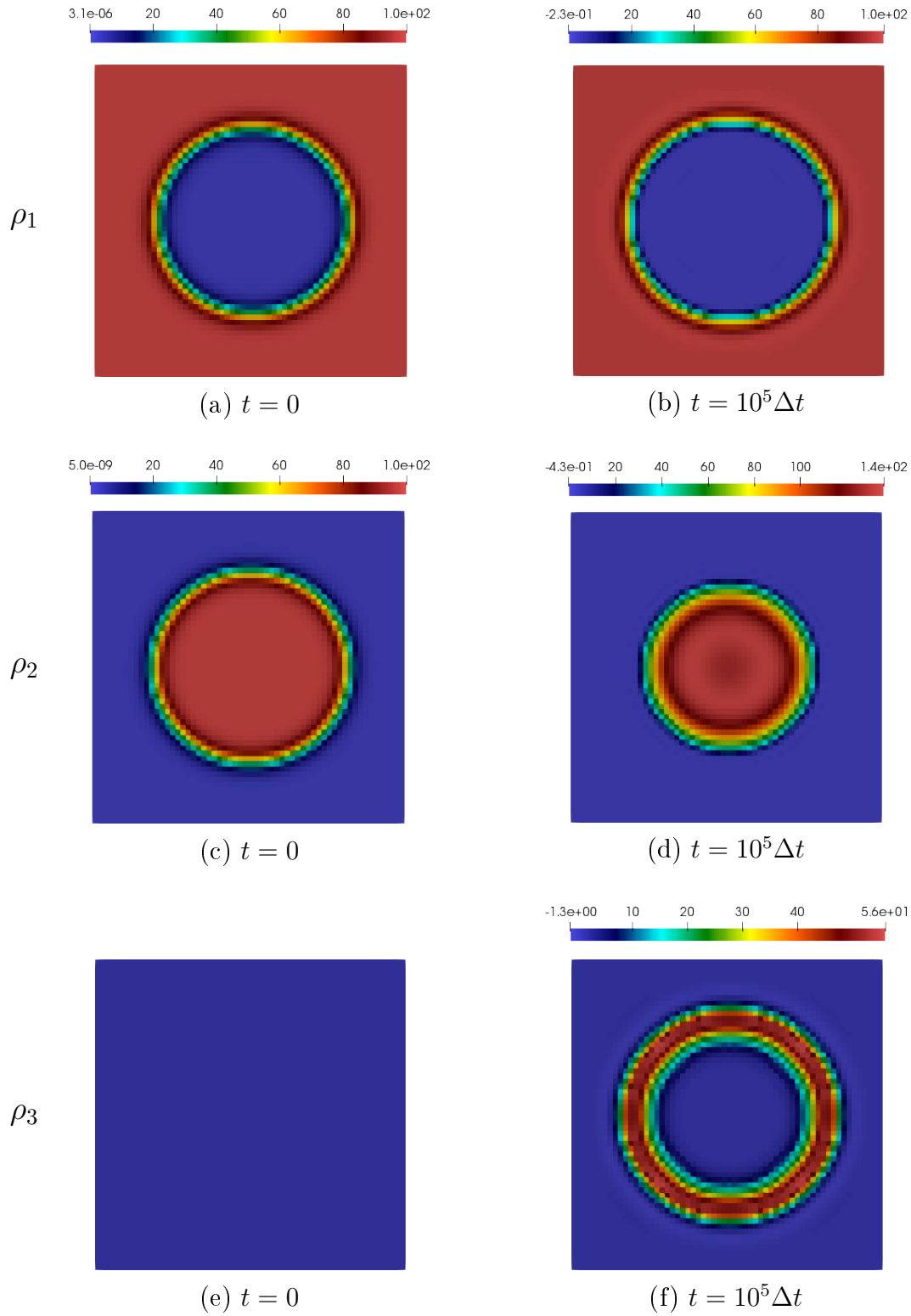
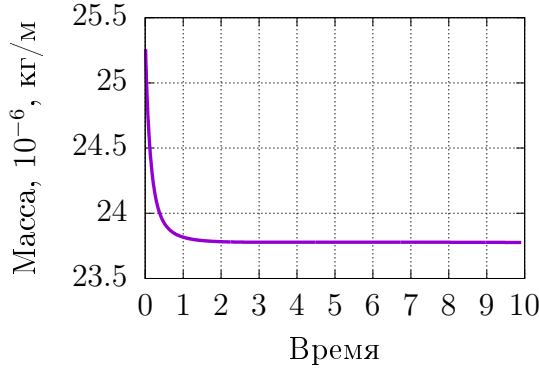


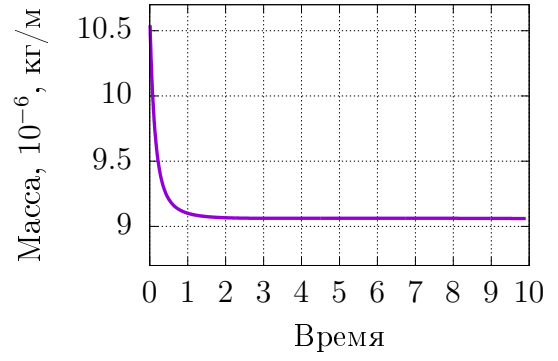
Рис. 1. Распределение ρ_α , в различные моменты времени, $\alpha = 1, 2, 3$.

и аналогично для фаз B и C . Получим

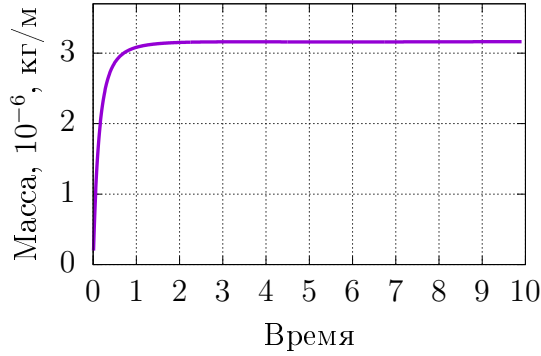
$$\begin{aligned} \psi^A(\rho_1, \rho_2) &= A_\psi [(\rho_1 - \rho_1^A)^2 + (\rho_2 - \rho_2^A)^2 + (\rho_3 - \rho_3^A)^2], \\ \psi^B(\rho_1, \rho_2) &= B_\psi [(\rho_1 - \rho_1^B)^2 + (\rho_2 - \rho_2^B)^2 + (\rho_3 - \rho_3^B)^2], \\ \psi^C(\rho_1, \rho_2) &= C_\psi [(\rho_1 - \rho_1^C)^2 + (\rho_2 - \rho_2^C)^2 + (\rho_3 - \rho_3^C)^2]. \end{aligned}$$



(a) Компонент $\alpha = 1$;



(b) Компонент $\alpha = 2$;



(c) Компонент $\alpha = 3$;

Рис. 2. Зависимость от времени t массы (на единицу длины, так как задача двумерная) каждого компонента.

Точки $(\rho_1^A, \rho_2^A, \rho_3^A)$, $(\rho_1^B, \rho_2^B, \rho_3^B)$ и $(\rho_1^C, \rho_2^C, \rho_3^C)$ являются локальными минимумами функции ψ_0^m .

7 Пример численного расчета

В данном разделе приведены результаты численного моделирования с использованием дискретизации (17)–(22) и определяющих соотношений из предыдущего раздела. Программная реализация выполнена с использованием языка C++ и библиотеки `gridmath` [38, 39].

Рассмотрена изотермическая трехфазная трехкомпонентная смесь в двумерной периодической области $\Omega = [0, X_1] \times [0, X_2]$.

Далее в выражении для ψ (см. (10)) для простоты везде положим $\lambda_{\alpha\beta} = 0$ при $\alpha \neq \beta$, $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \lambda_{33}$; кроме того, зададим $A_\psi = B_\psi = C_\psi$. Регуляризирующий параметр будем вычислять по формуле

$$\tau = \alpha^* h / \sqrt{A_\psi \rho}.$$

Положим параметр $\alpha^* = 0.2$. Зададим шаг по пространству $h = 10^{-2}$ мм, шаг

по времени $\Delta t = 9 \cdot 10^{-5}$ мс.

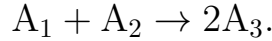
Зададим параметры смеси:

$$\begin{aligned}\rho_1^A &= 100 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_2^A &= 0 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_3^A &= 0 \text{ мкг/мм}^3, \\ \rho_1^B &= 0 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_2^B &= 100 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_3^B &= 0 \text{ мкг/мм}^3, \\ \rho_1^C &= 0 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_2^C &= 0 \text{ мкг/мм}^3, & \rho_3^C &= 100 \text{ мкг/мм}^3,\end{aligned}$$

$\lambda_{11} = 4 \cdot 10^{-9} \text{ мм}^7/(\text{мкг} \cdot \text{мс}^2)$, $A_\psi = 8 \cdot 10^{-4} \text{ мм}^5/(\text{мс}^2 \cdot \text{мкг})$, $\theta = 1 \text{ К}$, $\zeta = 0$, $M = 0.1 \text{ мс} \cdot \text{мкг} \cdot \text{К}/\text{мм}^3$, $\eta = 1 \text{ Па} \cdot \text{мс}$, $\tilde{\lambda}_{\text{el}} = \tilde{\mu}_{\text{el}} = 20 \text{ Па}$. Здесь $1 \text{ мм} = 10^{-3} \text{ м}$, $1 \text{ мкг} = 10^{-9} \text{ кг}$, $1 \text{ мс} = 10^{-3} \text{ с}$. Таким образом, фаза А преимущественно состоит из компонента ρ_1 , фаза В — из компонента ρ_2 , фаза С — из компонента ρ_3 .

Для начальных значений скорости и тензора деформации положим $\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$ и $\mathbf{E}_0 = \mathbf{0}$.

Источники $\dot{r}_{1,2,3}$ в уравнениях (17)–(19) учитывают модельную химическую реакцию, в которой молекула компонента с номером $\alpha = 1$ (символ A_1) реагирует с молекулой компонента с номером $\alpha = 2$ (символ A_2); продуктом реакции является молекула компонента с номером $\alpha = 3$ (символ A_3):



Здесь для простоты считается, что молекулярные массы всех трех компонентов равны 1. Уравнения кинетики химической реакции имеют вид

$$\dot{r}_1 = -k\rho_1\rho_2, \quad \dot{r}_2 = -k\rho_1\rho_2, \quad \dot{r}_3 = 2k\rho_1\rho_2.$$

Здесь $k = 0.1$ — константа химической реакции.

В начальный момент времени присутствует только две фазы: А и В. При этом фаза В обладает упругой реологией и имеет форму круга.

На рисунках 1(а)–1(ф) показана эволюция каждой из трех фаз. Видно, что круглая частица фазы В уменьшается (см. рисунки 1(с)–(д)). Также уменьшается объем фазы А (см. рисунки 1(а)–1(б)). При этом на поверхности твердой частицы образуется тонкий слой фазы С (см. рисунки 1(е)–1(ф)). Данное поведение согласуется с графиками зависимости полной массы компонентов, которые представлены на рисунках 2(а)–2(с). Видно, что начиная с момента $t \approx 2 \text{ мс}$ полные массы компонентов практически не меняются. Это свидетельствует о том, что химическая реакция прекратилась. В свою очередь, это связано с тем, что тонкий слой фазы С препятствует контакту фаз А и В.

Список литературы

- [1] Seager R.J., Acevedo A.J., Spill F., Zaman M.H. Solid dissolution in a fluid solvent is characterized by the interplay of surface area-dependent

- diffusion and physical fragmentation // *Sci. Rep.* 2018. V. 8 № 1. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-25821-x>
- [2] Bałdyga J. Mixing and Fluid Dynamics Effects in Particle Precipitation Processes // *Kona Powder Part. J.* 2016. V. 33. P. 127–149. <https://doi.org/10.14356/kona.2016021>
- [3] Villone M.M., Maffettone P.L. Dynamics, rheology, and applications of elastic deformable particle suspensions: a review // *Rheol. Acta.* 2019. V. 58. P. 109–130. <https://doi.org/10.1007/s00397-019-01134-2>
- [4] Anderson R.W., Dobrev V.A., Kolev T.V., Rieben R.N., Tomov V.Z. High order multi-material ALE hydrodynamics // *SIAM J. Sci. Comput.* 2018. V. 40. P. B32–B58. <https://doi.org/10.1137/17M1116453>
- [5] Sugiyama K., Ii S., Shimizu K., Noda S., Takagi S. A full Eulerian method for fluid-structure interaction problems // *Procedia IUTAM.* 2017. V. 20. P. 159–166. <https://doi.org/10.1016/j.piutam.2017.03.022>
- [6] Sugiyama K., Ii S., Takeuchi S., Takagi S., Matsumoto Y. A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems // *J. Comput. Phys.* 2011. V. 230. P. 596–627.
- [7] Favrie N., Gavriluk S.L., Saurel R. Solid-fluid diffuse interface model in cases of extreme deformations // *J. Comput. Phys.* 2009. V. 228. No. 16. P. 6037–6077. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.05.015>
- [8] Liu C., Walkington N. An Eulerian description of fluids containing visco-elastic particles // *Arch. Rational Mech. Anal.* 2001. V. 159. No. 3. P. 229–252. <https://doi.org/10.1007/s002050100158>
- [9] Mokbel D., Abels H., Aland S. A phase-field model for fluid-structure interaction // *J. Comput. Phys.* 2018. V. 372. P. 823–840. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.06.063>
- [10] Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Описание течений вязкой жидкости с подвижной твердой фазой в теории функционала плотности // *Инженерно-физический журнал.* 2007. Т. 80. № 5. С. 70–77.
- [11] Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. М.: Физматлит, 2009. 312 с.
- [12] Wick T., Fully Eulerian fluid-structure interaction for time-dependent problems // *Comput. Methods. Appl. Mech. Eng.* 2013. V. 255. P. 14–26. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.11.009>

- [13] Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. V. 30. P. 139–165. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.139>
- [14] Lowengrub J., Truskinovsky L., Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions // *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A.* 1998. V. 454. P. 2617–2654. <https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0273>
- [15] Provatas N., Elde K. Phase-field methods in material science and engineering. Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [16] Beletskaya A., Ivanov E., Stukan M., Safonov S., Dinariev O. Reactive Flow Modeling at Pore Scale // SPE Russian Petroleum Technology Conference, Moscow, Russia, October 2017. Paper Number: SPE-187805-MS, <https://doi.org/10.2118/187805-MS>
- [17] Rohde C., Wolff L. A ternary Cahn–Hilliard–Navier–Stokes model for two-phase flow with precipitation and dissolution // *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences.* 2021. V. 31. No. 1. P. 1–35. <https://doi.org/10.1142/S0218202521500019>
- [18] Clavijo S.P., Sarmiento A.F., Espath L.F.R., Dalcin L., Cortes A.M.A., Calo V.M. Reactive n-species Cahn–Hilliard system: A thermodynamically-consistent model for reversible chemical reactions // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* 2019. V. 350. P. 143–154. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2018.10.007>.
- [19] Роменский Е.И., Лысь Е.В., Чеверда В.А., Эпов М.И. Динамика деформирования упругой среды с начальными напряжениями // *Прикладная механика и техническая физика.* 2017. № 5. С. 178–189. <https://doi.org/10.15372/PMTF20170518>
- [20] Годунов С.К., Роменский Е.И. Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. Научная книга. 1998, С. 280.
- [21] Liu J., Amberg G., Do-Quang M. Diffuse interface method for a compressible binary fluid // *Phys. Rev. E.* 2016. V. 93, No. 1, 013121. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.013121>
- [22] Zhao X., Wang Q. A second order fully-discrete linear energy stable scheme for a binary compressible viscous fluid model // *J. Comput. Phys.* 2019. V. 395. P. 382–409. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.06.030>
- [23] Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004. 332 с.

- [24] Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М., 2007.
- [25] Шеретов Ю. В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.-Ижевск, 2009.
- [26] Балашов В.А., Савенков Е.Б. Многокомпонентная квазигидродинамическая модель для описания течений многофазной жидкости с учетом межфазного взаимодействия. // Прикл. мех. техн. физ. 2018. Т. 59. № 3. С. 57–68. <https://doi.org/10.15372/PMTF20180306>
- [27] 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. V. 32. P. 347–358. <https://doi.org/10.1515/rnam-2017-0033>
- [28] Balashov V., Savenkov E., Zlotnik A. Numerical method for 3D two-component isothermal compressible flows with application to digital rock physics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2019. V. 34, P. 1–13. <https://doi.org/10.1515/rnam-2019-0001>
- [29] Guermond J.-L., Popov B., Viscous regularization of the Euler equations and entropy principles // SIAM J. Appl. Math. 2014. V. 74. P. 284–305. <https://doi.org/10.1137/120903312>
- [30] Balashov V., Zlotnik A. An energy dissipative semi-discrete finite-difference method on staggered meshes for the 3D compressible isothermal Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations // J. Comput. Dyn. 2020. V. 7. No. 2. P. 291–312. <https://doi.org/10.3934/jcd.2020012>
- [31] Balashov V., Zlotnik A. An energy dissipative spatial discretization for the regularized compressible Navier–Stokes–Cahn–Hilliard system of equations // Math. Model. Anal. 2020 V. 25. No. 1. P. 110–129. <https://doi.org/10.3846/mma.2020.10577>
- [32] Balashov V.A., Savenkov E.B. Thermodynamically consistent spatial discretization of the one-dimensional regularized system of the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations // J. Comput. Appl. Math. 2020. V. 372. 112743. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2020.112743>
- [33] Balashov V., Zlotnik A. On a New Spatial Discretization for a Regularized 3D Compressible Isothermal Navier–Stokes–Cahn–Hilliard System of Equations with Boundary Conditions // J. Sci. Comput. 2021. V. 86. No. 3. <https://doi.org/10.1007/s10915-020-01388-6>

- [34] Balashov V. A regularized isothermal phase-field model of two-phase solid-fluid mixture and its spatial dissipative discretization // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2021. V. 36. No. 4. P. 197–217. <https://doi.org/10.1515/rnam-2021-0017>
- [35] Boscheri W., Dumbser M., Ioriatti M., Peshkov I., Romenski E. A structure-preserving staggered semi-implicit finite volume scheme for continuum mechanics // J. Comput. Phys. 2021. V. 424. 109866. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109866>.
- [36] Балашов В.А., Савенков Е.Б. Регуляризованная изотермическая модель типа фазового поля двухкомпонентной двухфазной сжимаемой жидкости и её одномерная пространственная дискретизация // Дифференциальные уравнения. 2020. Т. 56. № 7. С. 887–900. <https://doi.org/10.1134/S0374064120070055>
- [37] 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 // J. Comput. Phys. 2002. V. 182. P. 262–276. <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7165>
- [38] Краснов М.М. Операторная библиотека для решения многомерных задач математической физики на CUDA // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. №3. С. 109–120. <http://mi.mathnet.ru/mm3585>
- [39] Краснов М.М., Кучугов П.А., Ладонкина М.Е., Тишкин В. Ф. Разрывный метод Галёркина на трёхмерных тетраэдральных сетках. Использование операторного метода программирования // Матем. моделирование. 2017. Т. 29. № 2. С. 3–22. <http://mi.mathnet.ru/mm3811>

Содержание

1	Введение	3
2	Обозначения	5
3	Уравнение эволюции тензора деформации	6
4	Модель трехкомпонентной смеси	7
5	Дискретизация	9
6	Основные определяющие соотношения	11
7	Пример численного расчета	14