

УДК 532.5

КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТЕЧЕНИЙ МНОГОФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ МЕЖФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В. А. Балашов, Е. Б. Савенков

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Россия
E-mails: vladislav.balashov@gmail.com, e.savenkov@gmail.com

Построена квазигидродинамическая система уравнений для описания течений вязкой сжимаемой теплопроводной многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов. Способ получения системы обобщает способы получения однофазной квазигидродинамической системы и многокомпонентной модели течения, учитывающей поверхностные эффекты, на основе концепции микросил и микронапряжений. При выводе уравнений используется процедура Колмана — Нолла. Приведенные результаты расчетов показывают, что построенная модель применима для моделирования многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов на межфазных границах.

Ключевые слова: квазигидродинамическая система уравнений, многофазная гидродинамика, диффузная граница.

DOI: 10.15372/PMTF20180306

Введение. Квазигазодинамическая и квазигидродинамическая системы уравнений являются модификациями системы уравнений Навье — Стокса, в которые включены малые физически обоснованные диссипативные слагаемые [1–3]. При построении разностных аппроксимаций эти слагаемые играют роль регуляризаторов и позволяют использовать для построения соответствующих разностных схем простые центральные разностные аппроксимации.

Квазигазодинамическая система впервые построена в 80-х гг. XX в. в качестве первого дифференциального приближения кинетически согласованных разностных схем для решения уравнений газовой динамики [1]. Данный подход развит в работах [2, 3]. Позднее был предложен альтернативный способ построения квазигазодинамических уравнений, основанный на осреднении классических уравнений гидродинамики по малому временному интервалу. Квазигидродинамическая система предложена и детально исследована в работе [3]. От квазигазодинамической системы ее отличают допущения, в рамках которых она получена.

Целью настоящей работы является построение в рамках квазигидродинамического подхода математической модели течений многофазной многокомпонентной жидкости с учетом поверхностных свойств фаз и фазовых переходов. Модели рассматриваемого типа описывают динамику межфазных границ в пространстве и времени и физические явления,

обусловленные их наличием (учет поверхностного натяжения, смачиваемости, разделения фаз и т. д.).

В настоящей работе построена модель типа модели диффузной границы [4–6]. В моделях этого типа предполагается, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в котором действуют силы межфазного взаимодействия, определяющие динамику контактной границы. Толщина “границы” определяется действующими в жидкости силами молекулярного притяжения и отталкивания. Подобные модели находят широкое применение, например, при прямом моделировании многофазных микротечений в образцах горных пород.

В данной работе соответствующие уравнения модели феноменологически выведены в рамках квазигидродинамического подхода. В основе вывода лежат две идеи. Во-первых, фазовый состав жидкости в области пространства (распределение фаз) описывается заданным непрерывным полем “параметра порядка”, в качестве которого используются плотность жидкости и (или) концентрации образующих это поле фаз. В соответствии с работами [7, 8] предполагается, что в жидкости действуют микросилы и микронапряжения, определяющие эволюцию “параметров порядка” (например, разделение фаз — образование связанных областей (“капель”), занятых одной фазой). Во-вторых, выражения для микросил и дополнительных квазигидродинамических слагаемых выводятся термодинамически согласованным способом с учетом второго закона термодинамики и с использованием процедуры Колмана — Нолла. Таким образом, безотносительно конкретного физического смысла микросил и микронапряжений математическая модель не противоречит основным физическим законам (законам сохранения массы, импульса, энергии и момента импульса) и положениям феноменологической термодинамики.

Процедура построения модели аналогична процедуре, описанной в работах [7, 8]. Отличие заключается в том, что в соответствии с квазигидродинамическим подходом в общем случае плотность потока массы не совпадает с импульсом единицы объема среды.

Следует отметить, что в рассматриваемой модели понятие фазы явно не вводится. Однако вследствие особого вида свободной энергии и наличия слагаемых, содержащих градиенты “параметров порядка”, в области течения образуются подобласти, занятые смесью с практически однородным по пространству составом. Это позволяет полагать, что указанные области пространства заняты отдельной фазой, которая и определяется соответствующим составом (практически однородным).

На основе построенной системы уравнений для двухкомпонентного двухфазного изотермического течения разработан соответствующий явный численный алгоритм. Проведен ряд вычислительных экспериментов, результаты которых свидетельствуют о корректности разработанной модели.

1. Основные идеи концепции микросил. В традиционной механике и термодинамике сплошной среды рассматриваются макроскопические силы, под которыми понимаются силы, связанные с относительным макроскопическим движением точек среды или изменением ее состояния. Макроскопические силы определяют поведение среды в целом и не учитывают структуру среды на микроуровне, а также механизмы ее изменения.

Однако при решении ряда задач возникает необходимость описания на макроскопическом уровне процессов и соответствующих механизмов, связанных с эволюцией микроструктуры среды и не связанных с макроскопическим относительным движением материальных точек, составляющих тело. В данной работе такими процессами являются разделение фаз в смеси жидкостей с различными свойствами или слияние капель одной фазы в более крупные, процессы, обусловленные наличием сил поверхностного натяжения на границе раздела фаз и др. В этом случае возникающие в среде напряжения или термодинамические силы, вызывающие, например, разделение фаз, не связаны с макро-

скопическими силами. Эти напряжения и силы обусловлены характером взаимодействия частиц среды на микроуровне и проявляются даже в том случае, если на тело не действуют внешние нагрузки.

В рассматриваемых моделях микроструктура среды задается некоторой функцией (скалярной, векторной или тензорной), называемой “параметром порядка” или “фазовым полем”. Аналогично тому как динамика макроскопического движения описывается системой действующих в среде внешних и внутренних макроскопических сил и напряжений, динамика “параметра порядка” описывается системой микросил и микронапряжений. Более детально способ получения математических моделей с использованием концепции микросил и микронапряжений и его приложения для построения математических моделей в других областях физики описаны в [7–10].

2. Законы сохранения в дифференциальной форме. Будем полагать, что жидкость состоит из N компонентов, причем в произвольном физически бесконечно малом объеме может присутствовать любой из них. Пусть в объеме пространства dV содержится жидкость массой dm , причем отдельные компоненты массой dm_α занимают объем dV_α , $\alpha = 1, \dots, N$. При этом

$$dV = \sum_{\alpha=1}^N dV_\alpha, \quad dm = \sum_{\alpha=1}^N dm_\alpha.$$

Плотность жидкости определим по формуле $\rho = dm/dV$. Введем также плотность компонента, отнесенную к объему dV жидкости в целом: $\rho_\alpha = dm_\alpha/dV$. Величину $C_\alpha = \rho_\alpha/\rho$ будем называть массовой концентрацией (массовой долей) компонента α . Тогда

$$\sum_{\alpha=1}^N C_\alpha = 1, \quad \rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha.$$

В соответствии с квазигидродинамическим подходом полагаем, что в общем случае плотность потока массы \mathbf{j}_m отличается от среднего импульса единицы объема $\rho\mathbf{u}$: $\rho\mathbf{u} - \mathbf{j}_m = \rho\mathbf{w}$. Это выражение является определением вектора \mathbf{w} , определяющее соотношение для которого получено ниже. Таким образом, для вектора плотности потока массы имеем

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}). \quad (1)$$

Введем обозначение $\mathbf{u}_m = \mathbf{j}_m/\rho = \mathbf{u} - \mathbf{w}$. Далее будем считать, что частица жидкости движется вдоль интегральной линии дифференциального уравнения $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{u}_m$, $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$. Здесь d/dt — полная производная по времени. Тогда формула дифференцирования по времени интеграла по подвижному объему $V = V(t)$ для скалярного или векторного поля φ принимает вид

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \varphi dV = \int_{V(t)} \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{j}_m}{\rho} \otimes \varphi \right) \right] dV. \quad (2)$$

Соответствующее выражение для полной производной по времени имеет вид

$$\frac{d}{dt} (\cdot) = \frac{\partial}{\partial t} (\cdot) + \mathbf{u}_m \cdot \nabla (\cdot). \quad (3)$$

Вывод уравнений модели является стандартным: сначала рассматриваются законы сохранения в интегральной форме, затем с использованием (2) выполняется переход к их дифференциальным аналогам. Подробно эта процедура описана в [11].

Закон сохранения массы компонента α имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_\alpha) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) = \tilde{m}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{h}_α , \tilde{m}_α — вектор плотности потока массы компонента α и объемная плотность источников массы компонента α , возникающих, например, за счет химических реакций. Будем полагать, что внешние потоки и источники массы отсутствуют:

$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{h}_\alpha = \mathbf{0}, \quad \sum_{\alpha=1}^N \tilde{m}_\alpha = 0.$$

Тогда, суммируя уравнения (4), получаем закон сохранения массы смеси

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

Считая, что величина силы, действующей на границе $\partial V(t)$ области $V(t)$, определяется тензором напряжений P , имеем $\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{n} \cdot P$, где \mathbf{n} — внешняя единичная нормаль к ∂V . Следовательно,

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

где \mathbf{f} — плотность внешних массовых сил. С учетом предположения о выполнении закона сохранения момента импульса выражение для тензора напряжений имеет вид

$$P = P^s + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w}, \quad (5)$$

где P^s — симметричный тензор второго ранга [12], который можно представить в виде суммы девиатора и шаровой части: $P^s = P^d + \bar{p}I$; $\bar{p} = (\operatorname{tr} P^s)/3$.

Будем считать, что в среде действуют векторное поле внутренних микронапряжений $\boldsymbol{\xi}$, скалярное поле внутренних микросил π , скалярное поле внешних микросил γ [7, 10]. Термин “внутренний” означает, что значения соответствующих величин определяются внутренними процессами в среде (набором определяющих соотношений, связывающих микросилы и микронапряжения с параметром порядка и макроскопическими термодинамическими полями), термин “внешний” означает, что поле описывает внешнее воздействие (его величина и природа не связаны с происходящими в среде процессами и определяющими соотношениями, это поле может быть задано произвольно).

Для указанной системы микросил и микронапряжений постулируется выполнение соотношений, справедливых для произвольного материального объема и выражающих условия баланса микросил и микронапряжений, а также соотношения для их работ в дифференциальной форме [7, 10]:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\xi} + \pi + \gamma = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\xi}_\alpha + \pi_\alpha + \gamma_\alpha = 0. \quad (6)$$

Здесь и далее (за исключением случаев, оговоренных особо) полагается $\alpha = 1, \dots, N - 1$.

С учетом (6) закон сохранения энергии имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m E) = & \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \tilde{m}_\alpha - \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha \right) + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\operatorname{div} \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \boldsymbol{\xi}_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha \right] + \operatorname{div} \left(\frac{d\rho}{dt} \boldsymbol{\xi} \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma + \rho r, \quad (7) \end{aligned}$$

где $E = \varepsilon + \mathbf{u}^2/2$ — массовая плотность полной энергии; r — массовая плотность источников энергии; \mathbf{q} — плотность теплового потока; ε — массовая плотность внутренней энергии; \mathbf{a} — вектор плотности потока энергии, зависящий от работы внутренних напряжений; μ_α — обобщенный химический потенциал. Слагаемые с множителями $\xi_\alpha, \gamma_\alpha, \xi, \gamma$ в правой части (7) описывают скорость изменения энергии за счет работы микронапряжений и внешних микросил в единицу времени [7, 10, 11].

Второй закон термодинамики имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho s) + \operatorname{div} \left(s \mathbf{u}_m + \frac{1}{T} \mathbf{q} \right) - \frac{\rho r}{T} \geq 0,$$

где s — энтропия единицы массы; T — температура.

3. Вывод определяющих соотношений. Для того чтобы получить диссипативное неравенство для свободной энергии единицы массы $\Psi = \varepsilon - Ts$, все балансовые соотношения целесообразно записать в лагранжевой форме. Далее, умножая уравнения закона сохранения импульса на \mathbf{u} , получаем уравнение баланса кинетической энергии. Затем выражение для закона сохранения массы компонента нужно умножить на μ_α , первое соотношение (6) — на $d\rho/dt$, второе — на dC_α/dt . Подставляя полученные равенства в уравнение энергии, находим уравнение баланса внутренней энергии. Используя это уравнение, второй закон термодинамики и соотношение

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{d\varepsilon}{dt} + T \frac{ds}{dt} + s \frac{dT}{dt},$$

получаем следующее диссипативное неравенство для плотности свободной энергии:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\Psi}{dt} \leq & -\rho s \frac{dT}{dt} - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} P - \rho \mathbf{w} \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\xi_\alpha \cdot \nabla \left(\frac{dC_\alpha}{dt} \right) - \pi_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \right] + \left[\xi \cdot \nabla \left(\frac{d\rho}{dt} \right) - \pi \frac{d\rho}{dt} \right] + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \rho \frac{dC_\alpha}{dt}. \quad (8) \end{aligned}$$

Подробный вывод (8) приведен в работах [8, 11].

Далее неравенство (8) используется для получения определяющих соотношений, замыкающих модель. Данная процедура, называемая процедурой Колмана — Нолла [13, 14], позволяет выбрать такие определяющие соотношения, которые сделают допустимым любой процесс, описываемый с их помощью.

В соответствии с принципом равноприсутствия [15–17] массовая плотность свободной энергии $\Psi = \Psi(\mathcal{X})$ зависит от вектора параметров

$$\mathcal{X} = \left\{ \rho, \nabla \rho, \frac{d\rho}{dt}, C_\alpha, \nabla C_\alpha, \frac{dC_\alpha}{dt}, T, \nabla T, \mu_\alpha, \nabla \otimes \mathbf{u} \right\}.$$

Используя законы сохранения в лагранжевой форме, неравенство (8) можно записать в виде

$$\begin{aligned} 0 \leq & \frac{dT}{dt} \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial T} - \rho s \right) + \frac{d\rho}{dt} \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \bar{p} - \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{3} \operatorname{tr} Q \right) - \pi \right) + \\ & + \frac{d}{dt} (\nabla \rho) \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \rho)} + \xi \right) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{dC_\alpha}{dt} \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_\alpha} - \pi_\alpha + \rho \mu_\alpha \right) + \\ & + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{d}{dt} (\nabla C_\alpha) \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla C_\alpha)} + \xi_\alpha \right) - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \mathbf{h}_\alpha \cdot \nabla \mu_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \nabla T + \\ & + (P^d + Q^d) : L_u^d + Q : S_{u_m} + \Delta_2 + \Delta_3, \quad (9) \end{aligned}$$

где

$$Q = \sum_{\alpha=1}^N \nabla C \otimes \nabla \xi_{\alpha} + \nabla \rho \otimes \xi, \quad Q^d = Q - \frac{1}{3} \operatorname{tr} Q; \quad (10)$$

$$L_u^d = \frac{1}{2} [(\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T] - \frac{1}{3} (\operatorname{div} \mathbf{u}) I, \quad S_u = \frac{1}{2} [(\nabla \otimes \mathbf{u}) - (\nabla \otimes \mathbf{u})^T],$$

$$\Delta_2 = \operatorname{div} (\mathbf{a} - P^d \cdot \mathbf{u} - \bar{p} \mathbf{u}_m - \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) - Q^d \cdot \mathbf{w}) + \\ + \mathbf{w} \cdot (-\rho \mathbf{f} - \nabla \bar{p} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \operatorname{div} Q^d),$$

$$\Delta_3 = \frac{\partial \Psi}{\partial (d\rho/dt)} \frac{d^2 \rho}{dt^2} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial (dC_{\alpha}/dt)} \frac{d^2 C_{\alpha}}{dt^2} + \frac{\partial \Psi}{\partial (dT/dt)} \frac{d^2 T}{dt^2} + \\ + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \mu_{\alpha}} \frac{d\mu_{\alpha}}{dt} + \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \otimes \mathbf{u})} : \frac{d(\nabla \otimes \mathbf{u})}{dt}.$$

Нетрудно показать, что представленные ниже условия позволяют сделать неотрицательными соответствующие слагаемые в (9). Будем полагать, что выражение для свободной энергии имеет вид $\Psi = \Psi(\rho, \nabla \rho, C_{\alpha}, \nabla C_{\alpha}, T)$. Тогда $\Delta_3 = 0$. Далее, пусть тензор Q является симметричным, энтропия определяется по формуле $s = -\partial \Psi / \partial T$, а выражения для микронапряжений имеют вид

$$\xi = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla \rho)}, \quad \xi_{\alpha} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial (\nabla C_{\alpha})}. \quad (11)$$

Соотношения для π_{α} и \bar{p} задаются следующим образом:

$$\bar{p} = -\rho^2 \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \rho \pi - \frac{1}{3} \operatorname{tr} Q - \zeta \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad \pi_{\alpha} = -\rho \frac{\partial \Psi}{\partial C_{\alpha}} + \rho \mu_{\alpha} - B_{\alpha} \frac{dC_{\alpha}}{dt} \quad (12)$$

(ζ , B_{α} — неотрицательные величины; \mathbf{v} — вектор, выражение для которого приведено ниже). Определяющие соотношения для векторов плотности потока массы компонентов и теплового потока запишем в виде $\mathbf{h}_{\alpha} = -M_{\alpha} \cdot \nabla \mu_{\alpha}$ и $\mathbf{q} = -K \cdot \nabla T$ (M_{α} , K — симметричные неотрицательно определенные тензоры второго ранга). Девиатор тензора P^s задается соотношением

$$P^d = G : L_u^d - \frac{1}{3} \operatorname{tr} (G : L_u^d) I - Q^d, \quad (13)$$

где $Q^d = Q - (1/3) \operatorname{tr} Q$ — девиатор тензора Q ; G — неотрицательно определенный тензор четвертого ранга, задающий линейное отображение пространства симметричных тензоров второго ранга в себя.

Подставляя приведенные выше соотношения в неравенство для свободной энергии (9), с использованием равенства $d\rho/dt = -\rho \operatorname{div} \mathbf{u}_m$ получаем

$$0 \leq L_u^d : G : L_u^d + \sum_{\alpha=1}^{N-1} B_{\alpha} \left(\frac{dC_{\alpha}}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \nabla \mu_{\alpha} \cdot M_{\alpha} \cdot \nabla \mu_{\alpha} + \nabla T \cdot K \cdot \nabla T + \Theta, \quad (14)$$

где $\Theta = \Delta_2 - \zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m \operatorname{div} \mathbf{v}$.

В правой части (14) все слагаемые, кроме Θ , являются неотрицательными. Поэтому для выполнения неравенства (14) достаточно обеспечить выполнение условия $\Theta \geq 0$, выбирая вид определяющих соотношений. Введем следующие обозначения:

$$\mathbf{a}^* = P\mathbf{u} - p_0\mathbf{u}_m + \rho\mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + Q^d\mathbf{w}, \quad \mathbf{w}^* = -\rho\mathbf{f} + \nabla p_0 + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \operatorname{div} Q^d$$

($p_0 = -\bar{p} - \zeta \operatorname{div} \mathbf{v}$). Тогда

$$\Theta = \operatorname{div}(\mathbf{a} - \mathbf{a}^* + \zeta\mathbf{u}_m \operatorname{div} \mathbf{v}) + \mathbf{w} \cdot [\mathbf{w}^* + \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{v})] - \zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m \operatorname{div} \mathbf{v}. \quad (15)$$

Выражение (15) эквивалентно выражению

$$\Theta = \operatorname{div}(\mathbf{a} - \mathbf{a}^* + \zeta\mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v}) + \mathbf{w} \cdot \mathbf{w}^* - \zeta \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v}. \quad (16)$$

Возможны следующие варианты замыкания системы, обеспечивающие выполнение условия $\Theta \geq 0$.

Вариант 1:

$$\mathbf{v} = -\mathbf{u}_m, \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}^* + \zeta\mathbf{u}_m \operatorname{div} \mathbf{u}_m, \quad \mathbf{w} = [\mathbf{w}^* - \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m)]\tau/\rho \quad (17)$$

($\tau > 0$ — малый параметр, имеющий размерность времени). Из (15) следует, что $\Theta = |\mathbf{w}^* - \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{u}_m)|^2\tau/\rho + \zeta(\operatorname{div} \mathbf{u}_m)^2$.

Вариант 2:

$$\mathbf{v} = -\mathbf{u}, \quad \mathbf{w} = \mathbf{w}^*\tau/\rho, \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}^* + \zeta\mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{u}.$$

В этом случае из (16) получаем $\Theta = \Theta^{(2)} = |\mathbf{w}^*|^2\tau/\rho + \zeta(\operatorname{div} \mathbf{u})^2$.

Вариант 3:

$$\mathbf{v} = -\mathbf{u}_m, \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}^* + \zeta\mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{u}_m + \zeta\mathbf{w} \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad \mathbf{w} = [\mathbf{w}^* + \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{u})]\tau/\rho.$$

Тогда из (16) находим $\Theta = \Theta^{(3)} = (\mathbf{w}^* + \nabla(\zeta \operatorname{div} \mathbf{u}))^2\tau/\rho + \zeta(\operatorname{div} \mathbf{u})^2$.

Следует отметить, что выражения (17) являются неявными относительно \mathbf{w} .

На основе вариантов замыкания 2, 3 можно построить семейство определяющих соотношений для \mathbf{w} . Для этого введем параметр $\beta \in [0, 1]$. Обозначим

$$\mathbf{a}_\beta = \beta\mathbf{a}^{(2)} + (1 - \beta)\mathbf{a}^{(3)}, \quad \mathbf{w}_\beta = \beta\mathbf{w}^{(2)} + (1 - \beta)\mathbf{w}^{(3)}, \quad \mathbf{v}_\beta = \beta\mathbf{v}^{(2)} + (1 - \beta)\mathbf{v}^{(3)}. \quad (18)$$

Здесь верхние индексы соответствуют номеру замыкания. Подставляя (18) в (16), получаем

$$\Theta = \beta\Theta^{(2)} + (1 - \beta)\Theta^{(3)} \geq 0.$$

4. Определяющие соотношения. Запишем выражение для свободной энергии в виде

$$\Psi(\rho, \nabla\rho, C_\alpha, \nabla C_\alpha, T) = \Psi_0(\rho, C_\alpha, T) + \frac{\lambda}{2\rho} |\nabla\rho|^2 + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{\lambda_\alpha}{2} |\nabla C_\alpha|^2, \quad (19)$$

где $\lambda = \lambda(C_\alpha) \geq 0$, $\lambda_\alpha = \operatorname{const} \geq 0$ — заданные величины. Такой вид выражения для свободной энергии характерен для моделей рассматриваемого типа [4–6, 18] и удовлетворяет достаточным условиям выполнения неравенства (9).

Локальную часть Ψ_0 свободной энергии Гельмгольца представим в виде

$$\Psi_0 = \Psi_{sep} + \Psi_{mix}, \quad \Psi_{mix}(\rho, T) = \sum_{\alpha=1}^N C_\alpha \Psi_\alpha(\rho, T),$$

где Ψ_{mix} — свободная энергия Гельмгольца, соответствующая однородной смеси двух не взаимодействующих компонентов. Слагаемое Ψ_{sep} описывает разделение фаз и задается в различном виде. В ряде работ (см., например, [19]) при $N = 2$ принимается

$$\Psi_{sep} = A_\psi C_1^2 C_2^2 = A_\psi C^2 (1 - C)^2. \quad (20)$$

При $N \geq 3$ можно использовать выражение [19]

$$\Psi_{sep} = A_{\psi}^{\alpha,\beta} C_{\alpha}^2 C_{\beta}^2 + \sum_{\alpha=1}^N l_{\alpha}(T) C_{\alpha}^2 (3 - 2C_{\alpha}), \quad (21)$$

где $A_{\psi}^{\alpha,\beta}$ — некоторые положительные константы; $l_{\alpha}(T)$ — линейные функции температуры.

В случае (20) нетрудно показать, что Ψ_{sep} имеет два локальных минимума в точках $C = 0$ и $C = 1$ и один локальный максимум в точке $C = 1/2$. Поскольку свободная энергия Гельмгольца жидкой частицы с течением времени уменьшается, состояние, соответствующее $C = 1/2$, неустойчиво, а состояния, соответствующие $C = 0$ и $C = 1$, устойчивы. Вследствие этого в системе происходит разделение фаз. В ходе эволюции системы устойчивым становится распределение фаз, при котором одна из них (дисперсная фаза) собирается в “капли”, расположенные внутри второй (дисперсионной) фазы.

С учетом общих определяющих соотношений для микронапряжений (11) из (19) получаем

$$\xi = \lambda \nabla \rho, \quad \xi_{\alpha} = \lambda_{\alpha} \rho \nabla C_{\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, N - 1. \quad (22)$$

Из (22) и определения (10) следует

$$Q = \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} \nabla C_{\alpha} \otimes \nabla C_{\alpha}, \quad \text{tr } Q = \lambda |\nabla \rho|^2 + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} |\nabla C_{\alpha}|^2.$$

Выражая μ_{α} из соотношений (12) и используя уравнение баланса микросил и микронапряжений (6), а также выражения (22), (19), получаем

$$\mu_{\alpha} = \frac{\partial \Psi_0}{\partial C_{\alpha}} - \frac{1}{\rho} \text{div} (\lambda_{\alpha} \rho \nabla C_{\alpha}) + \frac{1}{2\rho} \frac{\partial \lambda}{\partial C_{\alpha}} |\nabla \rho|^2 - \frac{\gamma_{\alpha}}{\rho} + B_{\alpha} \frac{1}{\rho} \frac{dC_{\alpha}}{dt}. \quad (23)$$

Далее будем полагать $B_{\alpha} = 0$, $\gamma_{\alpha} = 0$, $\alpha = 1, \dots, N - 1$.

Рассмотрим тензор P^d , определяемый соотношением (13). Полагая в этом выражении $[G]_{ijkl} = G_{ijkl} = 2\eta \delta_{ik} \delta_{jl}$, где $\eta \geq 0$ — динамическая вязкость; δ_{ij} — компоненты единичного тензора второго ранга, можно показать, что $P^d = 2\eta L_u^d - Q^d$. Наконец, подставляя полученные соотношения в выражение (5) с учетом (22), (19), после перегруппировки слагаемых имеем

$$P = P_{NS} - pI + Q_K + Q_c + P_{QHD}, \quad (24)$$

где $P_{NS} = 2\eta L_u^d + \zeta(\text{div } \mathbf{u})I$ — тензор вязких напряжений Навье — Стокса; $p = \rho^2 \partial \Psi_0 / \partial \rho$ — термодинамическое давление; Q_K , Q_c — тензор напряжений Кортвега, который может быть связан с капиллярными силами на диффузной границе раздела двух фаз одного компонента, и тензор капиллярных напряжений, который может быть связан с капиллярными силами на диффузной границе раздела фаз различных компонентов:

$$Q_K = -\lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho + \left(\rho \text{div} (\lambda \nabla \rho) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \rho|^2 + \rho \gamma \right) I, \quad Q_c = -\rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \lambda_{\alpha} \nabla C_{\alpha} \otimes \nabla C_{\alpha},$$

P_{QHD} — дополнительное слагаемое в выражении для тензора напряжений, обусловленное отличием вектора потока массы от вектора импульса:

$$P_{QHD} = \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \zeta(\text{div } \mathbf{w})I.$$

5. Основные уравнения модели. Таким образом, полученная система уравнений имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_m &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_\alpha) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m C_\alpha + \mathbf{h}_\alpha) &= \tilde{m}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N-1, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - P) &= \rho \mathbf{f}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \operatorname{div} (\mathbf{j}_m E) &= \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{f} + \operatorname{div} \mathbf{a} - \operatorname{div} \mathbf{q} - \operatorname{div} \left(\sum_{\alpha=1}^{N-1} \mu_\alpha \mathbf{h}_\alpha \right) + \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left[\operatorname{div} \left(\lambda_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} \rho \nabla C_\alpha \right) + \frac{dC_\alpha}{dt} \gamma_\alpha + \mu_\alpha \tilde{m}_\alpha \right] + \left[\operatorname{div} \left(\lambda \frac{d\rho}{dt} \nabla \rho \right) + \frac{d\rho}{dt} \gamma \right] + \rho r. \end{aligned}$$

Тензор напряжений определяется соотношением (24), химический потенциал μ_α — выражением (23), плотность потока массы — $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$, векторы \mathbf{w} , \mathbf{a} — выражением (17) или (18). Значения γ , γ_α , B_α обычно принимаются равными нулю. На основе данных о поверхностном натяжении и толщине диффузной границы подбираются значения λ , λ_α и коэффициенты в выражениях для свободной энергии (20), (21).

6. Расчет процесса слияния двух капель. Ниже приведены результаты расчета двухкомпонентного ($N = 2$, $\alpha = 1$) двухфазного течения, описывающие слияние двух достаточно близко расположенных капель. Течение считается изотермическим, т. е. выполнено условие $p = c_s^2 \rho$, где c_s — скорость звука. Уравнение энергии не рассматривается. Используется явная разностная схема, в которой аппроксимация тензора капиллярных напряжений Q аналогична примененной в [20].

В начальный момент времени диффузные границы капель начинают размываться и их толщина стремится к равновесной (определяемой моделью) толщине. В момент соприкосновения границ силы поверхностного натяжения в точке касания увеличиваются (поскольку в этой точке велика кривизна), что приводит к слиянию капель. Таким образом, капли сливаются, с одной стороны, за счет размывания границ, с другой — за счет сил межфазного взаимодействия, действующих в пределах диффузной границы и описываемых в модели нелинейными слагаемыми, содержащими множитель ∇C .

Граничные условия заданы периодическими, в начальный момент времени в расчетных ячейках, соответствующих каплям, задано значение концентрации $C = 0,9$, в остальных ячейках — $C = 0,1$. Во всех ячейках заданы нулевая скорость и единичная плотность. Параметры модели имеют следующие значения: $\lambda_1 = 0,0025$ Дж · м²/кг, $A_\psi = 2 \cdot 10^5$ Дж/кг, $M = M_0 C(1 - C)$, $M_0 = 10^{-6}$ кг · с/м³, $\eta = 0,08$ Па · с, $\alpha^* = 0,5$, $c_s = 10^3$ м/с ($\tau = \alpha^* h / c_s$).

Для расчета выбрана расчетная сетка размером $100 \times 100 \times 100$. Размер расчетной области равен $L_x = L_y = L_z = 0,01$ м, шаг по времени $\Delta t = 2 \cdot 10^{-9}$ с, шаг по пространству $h = L_x / 100$.

На рис. 1 представлены этапы процесса слияния двух капель. Границей раздела фаз считается поверхность уровня $C = 1/2$. Показаны ячейки, в которых значения концентрации $C \in [1/2, 1]$. Видно, что по окончании процесса слияния капля принимает форму шара. Из представленных результатов расчета следует, что разработанная модель и соответствующий численный алгоритм качественно описывают поверхностные эффекты.

7. Расчет самопроизвольного “распада” однородной смеси. Ниже приведены результаты моделирования самопроизвольного “распада” однородной возмущенной бинарной смеси. В начальный момент времени в каждой расчетной ячейке задавались нулевая

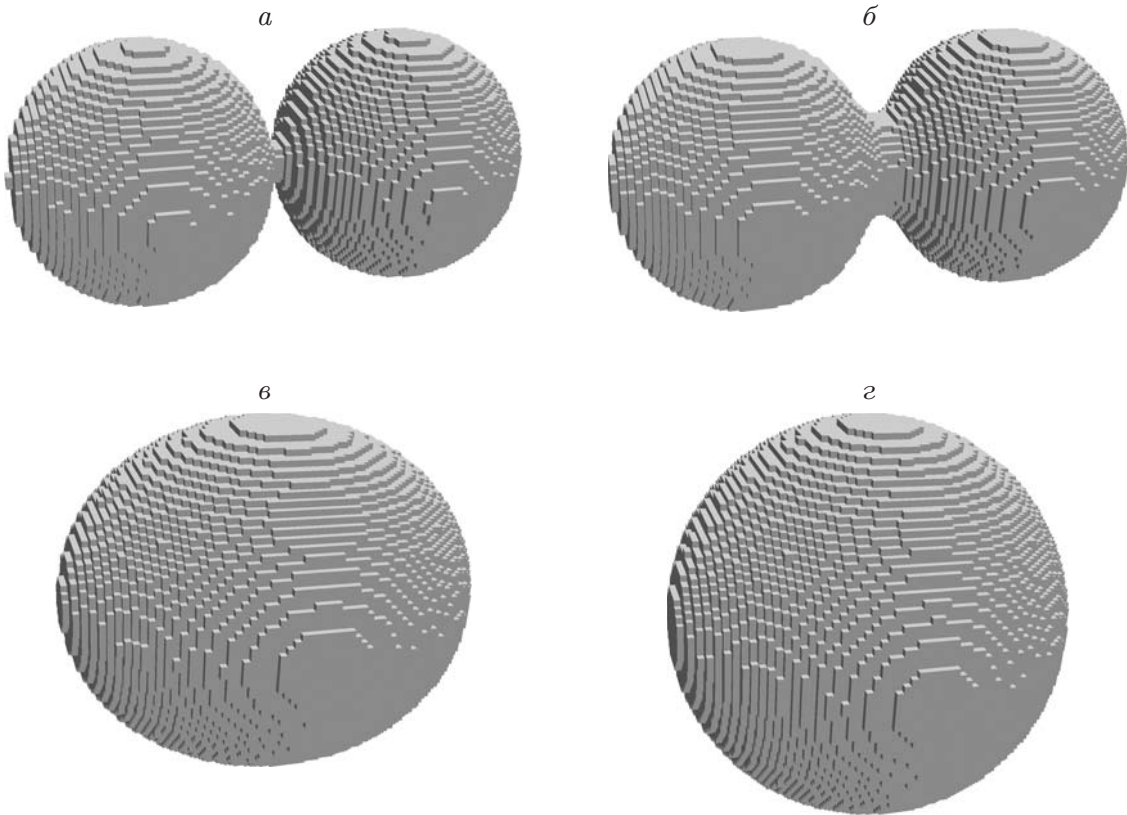


Рис. 1. Этапы процесса слияния двух шарообразных капель:
 $a - t = 0,2 \cdot 10^{-5}$ с, $б - t = 2,4 \cdot 10^{-5}$ с, $в - t = 40,0 \cdot 10^{-5}$ с, $г - t = 178,0 \cdot 10^{-5}$ с

скорость и единичная плотность, значение концентрации C выбиралось случайным образом в интервале $[0,45, 0,55]$. Для расчета выбрана сетка размером $125 \times 125 \times 125$. Шаг по времени равен $\Delta t = 8 \cdot 10^{-10}$ с, шаг по пространству — $h = L_x/125$. Значения остальных параметров те же, что и в п. 6. Заметим, что результаты подобного расчета для двумерного случая представлены в работе [20].

В ходе эволюции смеси сначала распределение C “сглаживается”, затем постепенно происходит разделение компонентов на две фазы (поскольку минимумы разделяющей свободной энергии достигаются при $C = 0$ и $C = 1$, а сама свободная энергия в процессе эволюции системы уменьшается). По мере разделения смеси влияние слагаемых, содержащих множитель ∇C , увеличивается, что в свою очередь обуславливает действие сил поверхностного натяжения.

На рис. 2 показаны этапы эволюции изоповерхности $C = 1/2$, представляющей собой условную межфазную границу.

Заключение. В работе выведена квазигидродинамическая система уравнений, описывающая многофазные многокомпонентные течения с учетом поверхностных эффектов. Применение процедуры Колмана — Нолла позволило использовать несколько вариантов замыкания этой системы. Для всех вариантов замыкания выполнены закон неубывания энтропии и неравенство для свободной энергии.

Полагая в построенных уравнениях и определяющих соотношениях $\tau = 0$, получаем $\mathbf{w} = 0$. В этом случае построенная модель совпадает с известными моделями типа модели диффузной границы, в частности с моделью Навье — Стокса — Кортвега (в случае одного компонента) и моделью Навье — Стокса — Кана — Хилларда.

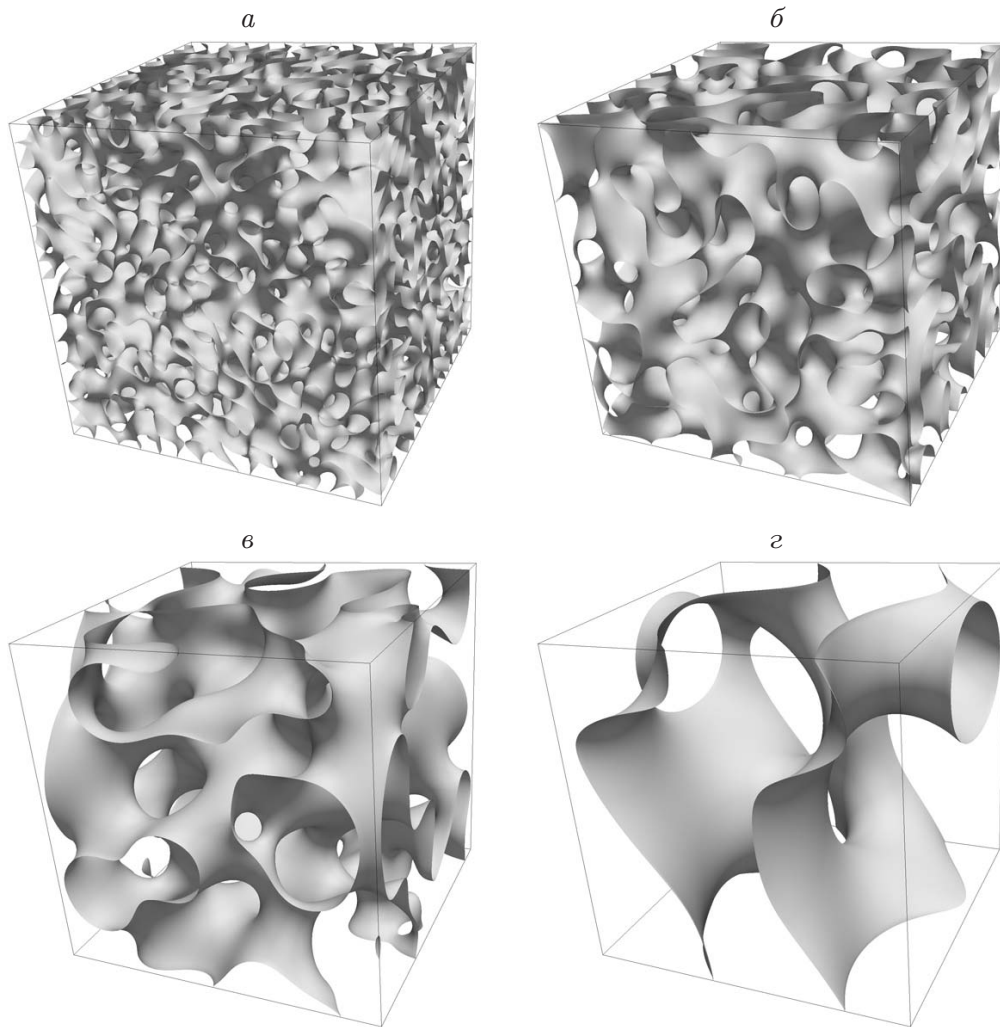


Рис. 2. Этапы эволюции изоповерхности $C = 1/2$ при самопроизвольном “распаде” однородной возмущенной бинарной смеси:

$a - t = 0,8 \cdot 10^{-5}$ с, $б - t = 8,0 \cdot 10^{-5}$ с, $в - t = 40,0 \cdot 10^{-5}$ с, $г - t = 109,2 \cdot 10^{-5}$ с

Полагая число компонентов $N = 1$, объемную вязкость $\zeta = 0$ и исключая из модели межфазное взаимодействие ($\lambda = \lambda_\alpha = 0$), получаем известную систему квазигидродинамических уравнений с нулевой объемной вязкостью.

Приведенные результаты расчетов показывают, что построенная модель может быть использована для моделирования многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов на межфазных границах.

Авторы выражают благодарность А. А. Злотнику за внимание к данной работе.

ЛИТЕРАТУРА

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. М.: Науч. мир, 2007.
3. Шеретов Ю. В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М.; Ижевск: Регуляр. и хаотич. динамика, 2009.

4. **Старовойтов В. Н.** Модель движения двухкомпонентной жидкости с учетом капиллярных сил // ПМТФ. 1994. Т. 35, № 6. С. 85–92.
5. **Anderson D., McFadden G., Wheeler A.** Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Annual Rev. Fluid Mech. 1998. V. 30. P. 139–165.
6. **Демьянов А. Ю.** Основы метода функционала плотности в гидродинамике / А. Ю. Демьянов, О. Ю. Динариев, Н. В. Евсеев. М.: Физматлит, 2009.
7. **Gurtin M. E.** Generalized Ginzburg — Landau and Cahn — Hilliard equations based on a microforce balance // Physica D. Nonlinear Phenomena. 1996. V. 92, N 3/4. P. 178–192.
8. **Liu J.** Thermodynamically consistent modeling and simulation of multiphase flows: diss. Austin, 2014.
9. **Fried E., Gurtin M. E.** Continuum theory of thermally induced phase transitions based on an order parameter // Physica D. Nonlinear Phenomena. 1993. V. 68, N 3/4. P. 326–343.
10. **Gurtin M. E., Polignone D., Vinals J.** Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter // Math. Models Methods Appl. Sci. 1996. V. 6, N 6. P. 815–831.
11. **Балашов В. А., Савенков Е. Б.** Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов. М., 2015. (Препр. / Ин-т прикл. математики им. М. В. Келдыша РАН; № 75).
12. **Балашов В. А., Савенков Е. Б.** Феноменологический вывод квазигидродинамической системы уравнений с учетом объемной вязкости. М., 2015. (Препр. / Ин-т прикл. математики им. М. В. Келдыша РАН; № 68).
13. **Coleman B. D., Noll W.** The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity // Arch. Rational Mech. Anal. 1963. V. 13, N 1. P. 167–178.
14. **Кондауров В. И.** Механика и термодинамика насыщенной пористой среды. М.: Моск. физ.-техн. ин-т, 2007.
15. **Трусделл К.** Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975.
16. **Gurtin M. E.** The mechanics and thermodynamics of continua / M. E. Gurtin, E. Fried, L. Anand. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010.
17. **Truesdell C.** The non-linear field theories of mechanics / C. Truesdell, W. Noll. Berlin: Springer-Verlag, 2004.
18. **Cahn J. W., Hilliard J. E.** Free energy of a nonuniform system. 1. Interfacial free energy // J. Chem. Phys. 1958. V. 28, N 2. P. 258–267.
19. **Garcke H., Nestler D., Stoth B.** On anisotropic order parameter models for multi-phase systems and their sharp interface limits // Physica D. Nonlinear Phenomena. 1998. V. 115, N 1/2. P. 87–108.
20. **Балашов В. А., Злотник А. А., Савенков Е. Б.** Исследование баротропной квазигидродинамической модели двухфазной смеси с учетом поверхностных эффектов. М., 2016. (Препр. / Ин-т прикл. математики им. М. В. Келдыша РАН; № 89).

*Поступила в редакцию 11/IV 2017 г.,
в окончательном варианте — 6/VII 2017 г.*
