

УДК 532.546

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МНОГОФАЗНЫХ СМЕСЕЙ

А. Ю. Демьянов, О. Ю. Динариев\*

Московский физико-технический институт, 141700 Москва

\* Объединенный институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта, 123810 Москва

E-mail: dinariev@mail.ru

Приведены численные примеры применения функционала плотности для описания изотермических течений двухфазных двухкомпонентных смесей. В двумерной постановке рассчитаны следующие течения: удар капли о слой жидкости, разрыв капли в поле скоростей течения Куэтта, формирование угла смачивания капли на твердой поверхности, развитие неустойчивости Рэлея — Тейлора и Кельвина — Гельмгольца на границе газ — жидкость.

Ключевые слова: двухфазное течение, метод функционала плотности, деформация капли.

**Введение.** Метод функционала плотности позволяет описывать многокомпонентную многофазную смесь непрерывным образом, не вводя скачков плотности и границ раздела фаз. Это достигается введением в выражение для свободной энергии смеси (или в выражение для энтропии) квадратов градиентов плотностей компонентов [1–5]. Основное преимущество такого подхода состоит в том, что распределение фаз в пространстве может быть найдено как один из результатов решения единой непрерывной задачи. При этом не нужно априорно задавать геометрию межфазных поверхностей, решать уравнения гидродинамики для каждой фазы в отдельности и использовать условия на скачках. Существенной особенностью метода функционала плотности является учет структуры межфазной области. Это приводит к наблюдаемым эффектам для течения жидкости в капилляре с поверхностно-активными стенками [6] и для спектра капиллярно-гравитационных волн [7]. Кроме того, метод позволяет описать течение газоконденсатной смеси в капилляре [8].

В настоящей работе рассмотрено применение метода функционала плотности в численном моделировании многофазных течений. В п. 1 изложены основные уравнения теории. В п. 2 описаны алгоритмы численной реализации этих уравнений и приведены примеры расчета ряда типичных изотермических двухфазных течений: слияния капли со слоем жидкости, разрыва капли в поле скоростей сдвигового течения, растекания капли на твердой поверхности, развития неустойчивости Рэлея — Тейлора и Кельвина — Гельмгольца на границе газ — жидкость. В заключении обсуждаются полученные результаты и дальнейшие возможности метода.

**1. Основные уравнения теории функционала плотности.** В настоящей работе рассматриваются только изотермические течения. Ниже кратко изложены основные положения теории для этого случая [3]. Теория для неизотермических течений изложена в работе [4].

Пусть  $M$ -компонентная смесь (газ или жидкость) заполняет область  $D$  с кусочно-гладкой границей  $\partial D$ , соответствующей контакту с неподвижной твердой фазой. Будем использовать следующие обозначения:  $n_i$  — мольная плотность компонента с номером  $i$ ;

предполагается, что индексы  $i, j, k$  пробегает значения  $1, \dots, M$ , соответствуя номерам компонентов смеси, а индексы  $a, b, c$  — значения  $1, 2, 3$ , соответствуя декартовым координатам  $x^a$ . Если не оговорено противное, по повторяющимся индексам производится суммирование. Будут использоваться сокращенные обозначения для производных:  $g_{,i} = \partial g / \partial n_i$ ,  $\partial_a g = \partial g / \partial x^a$ .

*Статика.* Функционал свободной энергии смеси задается выражением

$$F = \int_D \omega dV + \int_{\partial D} f_* dA, \quad (1.1)$$

где  $\omega = f + (1/2)\nu_{ij} \partial_a n_i \partial_a n_j + \rho\varphi$ ;  $f = f(n_i)$  — свободная энергия единицы объема гомогенной смеси;  $f_* = f_*(n_i)$  — свободная энергия единицы поверхности;  $\nu_{ij} = \nu_{ij}(n_k)$  — коэффициенты положительной симметричной матрицы;  $dV$  и  $dA$  — элементы объема и поверхности;  $\varphi = \varphi(x^a)$  — гравитационный потенциал;  $\rho = m_i n_i$  — массовая плотность смеси;  $m_i$  — масса моля  $i$ -го компонента.

Равновесные состояния смеси являются критическими точками функционала (1.1) при фиксированном количестве частиц компонентов смеси

$$N_i = \int_D n_i dV. \quad (1.2)$$

Вычисляя вариацию функционала (1.1), получаем выражение

$$\delta F = \int_D \Phi_i \delta n_i dV + \int_{\partial D} \Phi_{i*} \delta n_i dA. \quad (1.3)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Phi_i &= f_{,i} + m_i \varphi + (1/2)\nu_{jk,i} \partial_a n_j \partial_a n_k - \nu_{ij,k} \partial_a n_j \partial_a n_k - \nu_{ij} \Delta n_j; \\ \Phi_{i*} &= f_{*,i} - \nu_{ij} l_a \partial_a n_j, \end{aligned}$$

где  $l_a$  — внутренняя нормаль к поверхности  $\partial D$ ;  $\Delta = \partial_a \partial_a$ .

Используя выражение (1.3), можно выписать вариационное уравнение для равновесных состояний с множителями Лагранжа  $\Lambda_i$

$$\delta F - \Lambda_i \delta N_i = 0,$$

которое приводит к системе эллиптических уравнений

$$\Phi_i - \Lambda_i = 0 \quad (1.4)$$

и граничных условий

$$\Phi_{i*} = 0. \quad (1.5)$$

Множители Лагранжа  $\Lambda_i$  должны определяться в результате решения задачи (1.4), (1.5) относительно неизвестных полей плотностей компонентов  $n_i$  из дополнительных интегральных условий (1.2).

*Динамика.* В качестве определяющих гидродинамических уравнений для изотермических течений принимаются обычные уравнения для плотностей и импульса [9]

$$\partial_t n_i + \partial_a I_{ia} = 0; \quad (1.6)$$

$$\rho(\partial_t v_a + v_b \partial_b v_a) = \partial_b p_{ab} - \rho \partial_a \varphi, \quad (1.7)$$

где  $I_{ia}$  — вектор потока  $i$ -го компонента;  $v_a = \rho^{-1} m_i I_{ia}$  — среднемассовая скорость;  $p_{ab}$  — тензор напряжений в смеси.

Введем вспомогательные величины:  $Q_{ia} = (I_{ia} - n_i v_a)$  — вектор диффузионного потока  $i$ -го компонента,  $\tau_{ab} = p_{ab} - \sigma_{ab}$ ,

$$\sigma_{ab} = (\omega - \Phi_i n_i) \delta_{ab} - \nu_{ij} \partial_a n_i \partial_b n_j. \quad (1.8)$$

При гидродинамическом описании используются обычные граничные условия на динамические переменные: условие прилипания

$$v_a|_{\partial D} = 0 \quad (1.9)$$

и условие непротекания для диффузионных потоков

$$l_a Q_{ia}|_{\partial D} = 0. \quad (1.10)$$

Кроме того, принимается, что в динамике, как и в статике, выполняются граничные условия (1.5).

Определим функционал полной энергии системы, включающей свободную энергию (1.1) и кинетическую энергию смеси:

$$E = F + \frac{1}{2} \int_D \rho v_a v_a dV. \quad (1.11)$$

Непосредственное вычисление производной по времени от функционала (1.11) с учетом выражения (1.3) и уравнений (1.5)–(1.10) приводит к соотношению

$$\frac{dE}{dt} = \int_D \Sigma dV, \quad (1.12)$$

где

$$\Sigma = -\tau_{ab} \partial_a v_b + Q_{ia} \partial_a \Phi_i. \quad (1.13)$$

Гидродинамическая модель должна быть диссипативной, т. е. должно выполняться следующее неравенство, являющееся аналогом условия неотрицательности производства энтропии:

$$\frac{dE}{dt} \leq 0. \quad (1.14)$$

Вследствие соотношений (1.12), (1.13) для выполнения неравенства (1.14) достаточно выполнения неравенства

$$\Sigma \leq 0. \quad (1.15)$$

Отметим, что соотношения (1.12), (1.13) позволяют интерпретировать  $\tau_{ab}$  как тензор вязких напряжений, так как именно эта составляющая полного тензора напряжений  $p_{ab}$  вносит вклад в диссипацию. Соответственно,  $\sigma_{ab}$  следует интерпретировать как тензор статических напряжений в смеси, поскольку он не зависит от скорости и определяется только распределением плотностей компонентов смеси.

Для замыкания гидродинамической задачи (1.6)–(1.10), (1.5) требуются материальные соотношения, т. е. выражения для величин  $\tau_{ab}$ ,  $Q_{ia}$ . Эти выражения должны быть совместны с неравенством (1.15). Наибольший интерес представляет модель, являющаяся минимальным обобщением модели вязкой многокомпонентной смеси [9, 10]. Так, для тензора вязких напряжений принимается линейно-вязкая модель Навье — Стокса

$$\tau_{ab} = (\mu_v - (2/3)\mu_s) \partial_c v_c \delta_{ab} + \mu_s (\partial_a v_b + \partial_b v_a), \quad (1.16)$$

где  $\mu_v$ ,  $\mu_s$  — положительные коэффициенты объемной и сдвиговой вязкости.

Для диффузионных потоков принимаются соотношения, обобщающие закон Фика:

$$Q_{ia} = -D_{ij} \partial_a \Phi_j, \quad (1.17)$$

где  $D_{ij}$  — симметричная неотрицательная матрица, удовлетворяющая дополнительному условию

$$D_{ij} m_j = 0. \quad (1.18)$$

Обсудим физический смысл тензора статических напряжений  $\sigma_{ab}$ . В случае гомогенной смеси этот тензор сводится к обычному тензору напряжений в идеальной жидкости  $\sigma_{ab} = -p \delta_{ab}$ , где  $p = (n_i f_{,i} - f)$  — гидростатическое давление.

Тензор  $\sigma_{ab}$  может отличаться от тензора напряжений идеальной жидкости в области, где градиенты плотностей компонентов достигают значительной величины. Чтобы выявить роль этих градиентов в тензоре напряжений, удобно рассмотреть равновесное двухфазное состояние с зависимостью только от одной координаты  $x^1$ . В этом случае  $n_i = n_i(x^1)$ ,  $v_a = 0$ . При  $x^1 \rightarrow \pm\infty$  плотности компонентов и напряжения сходятся к плотностям и напряжениям в фазах  $A$  и  $B$ :  $x^1 \rightarrow -\infty$ ,  $n_i \rightarrow n_{iA}$ ,  $\sigma_{ab} \rightarrow -p_A \delta_{ab}$ ;  $x^1 \rightarrow +\infty$ ,  $n_i \rightarrow n_{iB}$ ,  $\sigma_{ab} \rightarrow -p_B \delta_{ab}$ .

Как известно [3], из условий термодинамического равновесия рассматриваемого состояния следует условие механического равновесия:  $\partial_1 \sigma_{11} = 0$ . Отсюда и из изложенного выше вытекают соотношения  $\sigma_{11} = -p_A = -p_B$ ,  $\sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{11} + \nu_{ij} \partial_1 n_i \partial_1 n_j = -p_A + \nu_{ij} \partial_1 n_i \partial_1 n_j$ .

Таким образом, градиенты плотностей дают вклад в поперечные составляющие тензора напряжений. При этом они обеспечивают появление натяжения в межфазной области. Интеграл по продольной координате от этого распределенного натяжения следует отождествить с коэффициентом межфазного поверхностного натяжения [3]

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \nu_{ij} \partial_1 n_i \partial_1 n_j dx^1. \quad (1.19)$$

Нужно отметить, что выражение для тензора статических напряжений  $\sigma_{ab}$  выводится из выражения для свободной энергии (1.1) достаточно стандартным образом. В работах [11, 12] представлен вывод выражения для тензора напряжений в случае более сложных моделей сплошных сред. Для модели однокомпонентной жидкости с квадратом градиента плотности в свободной энергии тензор напряжений рассматривался в работе [13].

**2. Примеры численного моделирования двухфазных течений.** В настоящее время исследование возможностей метода функционала плотности для численного моделирования многофазных течений находится в начальной стадии. В этом направлении получены положительные результаты для ряда типичных задач, часть которых изложены ниже для случая плоских изотермических течений вязких двухфазных двухкомпонентных сред.

В качестве определяющей системы уравнений берутся уравнения сохранения компонентов (1.6) и уравнение количества движения (1.7). Для тензора статических напряжений  $\sigma_{ab}$  используется выражение (1.8), для тензора вязких напряжений  $\tau_{ab}$  — выражение (1.16) и для диффузионных потоков  $Q_{ia}$  — выражения (1.17).

При применении метода функционала плотности для двухфазных сред, таких как жидкость — жидкость или газ — жидкость, необходимо задать конкретный вид функции свободной энергии, значения коэффициентов вязкости, диффузии, поверхностного натяжения на контакте смеси с твердой фазой, а также коэффициентов  $\nu_{ij}$ .

Если отклонения плотностей от некоторых фиксированных равновесных значений малы, то свободную энергию одной фазы (фазы  $A$ ) можно представить квадратичным полиномом

$$f_A(n_i) = f_{A0} + f_{Ai}(n_i - n_{iA}) + (1/2)f_{Aij}(n_i - n_{iA})(n_j - n_{jA}). \quad (2.1)$$

Здесь  $n_{iA}$  — невозмущенное значение мольной плотности для фазы  $A$ .

Коэффициенты  $f_{A0}$ ,  $f_{Ai}$  не входят в уравнения гидродинамики, они используются только для вычисления начальных невозмущенных давления и химических потенциалов. Эти коэффициенты могут быть приняты равными нулю. Для гидродинамического моделирования важны только коэффициенты  $f_{Aij}$ , которые подбираются в соответствии с данными по объемному модулю упругости для фазы  $A$ :

$$E_A = f_{Aij}n_{iA}n_{jA}. \quad (2.2)$$

В случае двухфазного течения (фазы  $A$  и  $B$ ) свободная энергия  $f$  определяется через выражения для  $f_A(n_i)$ ,  $f_B(n_i)$  следующим образом:

$$f = f_A f_B / (f_A + f_B). \quad (2.3)$$

Предполагается, что сдвиговая и объемная вязкости каждой фазы известны. Вязкость для произвольной плотности компонентов вычисляется по эмпирическим формулам, позволяющим вычислить вязкость смеси по известной вязкости компонентов (см. формулу (VIII-54) в работе [14]):

$$\mu_s = (c_A \mu_{sA}^{1/3} + c_B \mu_{sB}^{1/3})^3, \quad \mu_v = (c_A \mu_{vA}^{1/3} + c_B \mu_{vB}^{1/3})^3. \quad (2.4)$$

Здесь

$$c_A = z_B / (z_A + z_B); \quad c_B = z_A / (z_A + z_B);$$

$$z_A = \left( \sum_{i=1}^2 (n_i - n_{iA})^2 \right)^{1/2}; \quad z_B = \left( \sum_{i=1}^2 (n_i - n_{iB})^2 \right)^{1/2}.$$

Для расчета матрицы  $D_{ij}$  заметим, что при  $\nu_{ij} = 0$  из (1.17) следует выражение для потока концентрации компонентов

$$q_{ia} = n^{-1} Q_{ia} = -n^{-1} D_{ij} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial c} \right)_n \partial_a c - n^{-1} D_{ij} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial n} \right)_c \partial_a n,$$

где  $n = \sum_{i=1}^2 n_i$  — полная плотность;  $c = n_1/n$  — концентрация компонента 1;  $\varepsilon_i = f_i$  — химический потенциал.

Таким образом, табличный коэффициент диффузии  $d$  компонента 1 в смеси связан с матрицей  $D_{ij}$  соотношением

$$d = n^{-1} D_{1j} \left( \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial c} \right)_n. \quad (2.5)$$

Коэффициент диффузии  $d$  вычисляется по известным значениям в фазах  $d_A$ ,  $d_B$ :  $d = c_A d_A + c_B d_B$ . Если свободная энергия задана (см. (2.1)–(2.3)), то по коэффициенту  $d$  уравнение (2.5) с учетом (1.18) однозначно определяет матрицу  $D_{ij}$ . Поверхностное натяжение на контакте смесь — твердое тело принимается в виде линейной функции плотностей компонентов

$$f_* = \xi_{1i} n_i + \xi_0. \quad (2.6)$$

Параметры  $\xi_0, \xi_{1i}$  вычисляются по известным значениям поверхностного натяжения на контакте с твердым телом для фаз  $A$  и  $B$ :

$$\theta_A = \xi_{1i}n_{iA} + \xi_0, \quad \theta_B = \xi_{1i}n_{iB} + \xi_0. \quad (2.7)$$

Система линейных уравнений (2.7) всегда имеет решение, но это решение неединственно. Произвол в выборе зависимости (2.6) влияет на распределение компонентов вблизи твердой стенки, но не влияет на угол смачивания.

Матрица коэффициентов  $\nu_{ij}$  предполагается постоянной и пропорциональной единичной. Неизвестный коэффициент фиксируется из формулы для поверхностного натяжения между фазами  $A$  и  $B$  [3], аналогичной соотношению (1.19):

$$\gamma = \int_0^{+\infty} \nu_{ij} \partial_r n_i \partial_r n_j dr. \quad (2.8)$$

Интеграл в формуле (2.8) вычисляется для статического решения задачи о капле фазы  $A$ , помещенной в фазу  $B$ , или, наоборот, о капле фазы  $B$ , помещенной в фазу  $A$ .

Итак, соотношения (2.1)–(2.8) позволяют фиксировать параметры модели. Для всех рассмотренных задач принималось  $\gamma = 0,1$  (здесь и далее все размерные величины даются в системе СИ).

Система уравнений (1.6)–(1.10), (1.5), (1.16), (1.17) решалась численно с помощью явной консервативной разностной схемы, в основу которой положена идея метода крупных частиц [15]. При этом “лагранжев” этап полностью совпадает с [15], а “эйлеров” этап конструируется исходя из отсутствия в уравнениях сохранения функции давления (члены с градиентом давления определяются через производные от свободной энергии  $f: p = n_i f_{,i} - f$ ).

Для изучения возможностей метода функционала плотности численно анализировались следующие модельные задачи:

- 1) взаимодействие капли жидкости (фаза  $A$ ), окруженной другой жидкостью (фаза  $B$ ), с плоским слоем жидкости (фаза  $A$ );
- 2) дробление капли жидкости (фаза  $B$ ) потоком жидкости (фаза  $A$ );
- 3) взаимодействие капли жидкости (фаза  $A$ ), окруженной другой жидкостью (фаза  $B$ ), с плоской твердой стенкой;
- 4) развитие неустойчивости Рэлея — Тейлора и Кельвина — Гельмгольца на межфазной границе двух сред.

На рис. 1–4 градиентами серого цвета в расчетных ячейках показано распределение концентрации одного из присутствующих компонентов, что практически соответствует пространственному распределению соответствующей фазы.

**ЗАДАЧА 1.** В начальный момент времени в верхней полуплоскости находится покоящийся слой жидкости фазы  $B$ , в нижней полуплоскости — слой жидкости фазы  $A$ . Из верхней области в нижнюю под углом в  $30^\circ$  к горизонтали движется капля жидкости фазы  $A$  (см. рис. 1, *a*). Начальная скорость капли равна  $10,0$ . Поле массовых сил направлено вертикально вниз. На верхней и нижней границах задаются условия (1.13) и условия отсутствия диффузионных потоков компонентов (1.14). На левой и правой границах ставятся периодические условия. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле  $60 \times 50$ ; ячейки разностной сетки квадратные, их размер  $0,001$  м;  $m_1 = 18, m_2 = 200, \mu_{sA} = 10^{-3}, \mu_{sB} = 10^{-2}, \mu_v = 10\mu_s$ , массовые плотности фаз  $\rho_A = 1000, \rho_B = 800, E_A = E_B = 10^9, d_A = d_B = 10^{-9}$ .

На рис. 1, *b–g* представлена динамика процесса в последовательные моменты времени. Видно, что процесс взаимодействия приводит к образованию структуры с тонкой ножкой

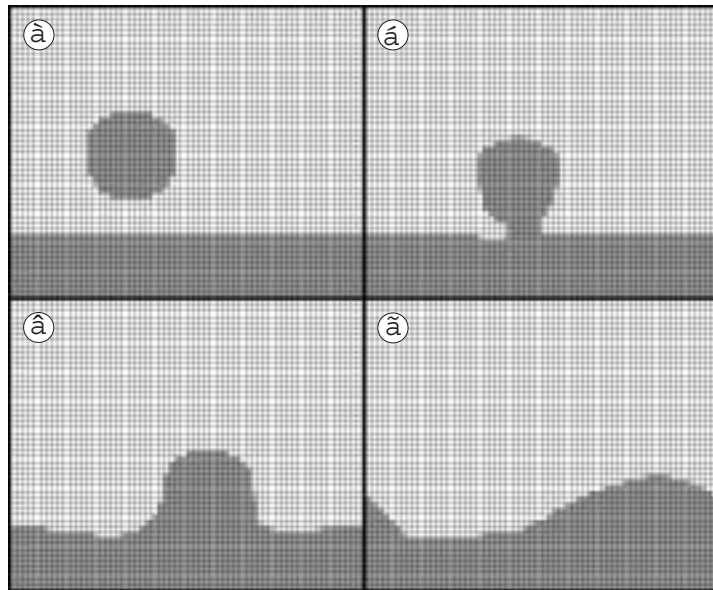


Рис. 1

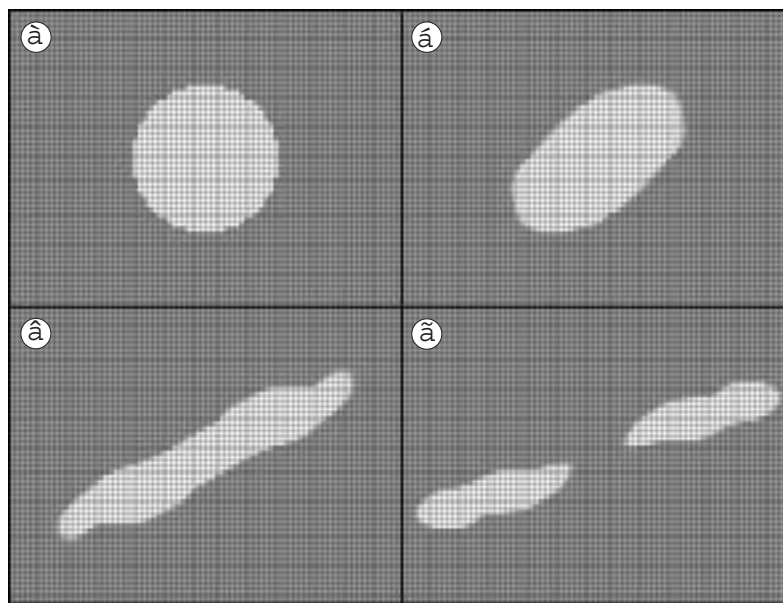


Рис. 2

фазы  $A$  (рис. 1,  $b$ ) с последующим “вытеканием” жидкости из капли в слой (рис. 1,  $в$ ), по которому проходят возмущения в виде гравитационно-капиллярных волн (рис. 1,  $г$ ).

**ЗАДАЧА 2.** В начальный момент времени капля жидкости (фаза  $B$ ) помещается в неоднородный поток другой жидкости (фаза  $A$ ). Он представляет собой течение Куэтта, образованное движущимися с одинаковыми скоростями  $v_0 = 10$  (в своих плоскостях) в разных направлениях верхней и нижней границами (верхняя граница движется слева направо, нижняя — в противоположную сторону), на которых ставятся условия (1.13), (1.14) (рис. 2,  $a$ ). Массовая сила отсутствует. На левой и правой границах ставятся периодические условия. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле  $80 \times 60$ ;  $\mu_s = 10^{-2}$  для двух фаз; все остальные параметры аналогичны параметрам задачи 1.

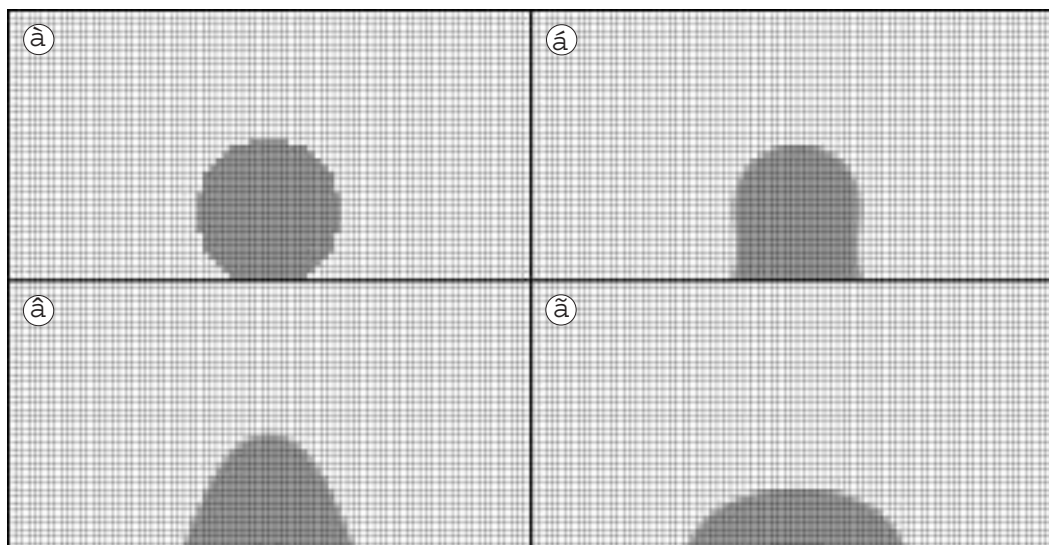


Рис. 3

Вследствие работы сил вязкости капля начинает деформироваться (рис. 2,б), вытягиваясь по потоку. На рис. 2,в видно характерное утончение капли в ее центральной части. Далее происходит разрыв этой части с образованием двух капель (рис. 2,г).

**ЗАДАЧА 3.** В начальный момент времени покоящаяся сферическая капля жидкости фазы  $A$ , находящаяся в окружении жидкой фазы  $B$ , касается нижней границы расчетной области (рис. 3,а), которая моделирует твердую поверхность. Для скорости и диффузионных потоков на нижней границе задаются условия (1.9), (1.10), для мольных плотностей фаз — условие (1.5). Функция поверхностного натяжения на границе смесь — твердое тело строится по формулам (2.6), (2.7), причем  $\theta_B - \theta_A = 0,06$ . На всех остальных границах расчетной области задаются условия свободной границы. Массовая сила отсутствует. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле  $80 \times 40$ ; размер квадратных ячеек разностной сетки  $10^{-4}$ ;  $\mu_s = 10^{-3}$  для фаз  $A$  и  $B$ ; все остальные параметры аналогичны параметрам задачи 1.

На рис. 3,б–г видна динамика процесса установления формы капли на твердой поверхности с образованием острого угла смачивания.

**ЗАДАЧА 4.** В начальный момент времени (рис. 4,а) в верхней полуплоскости находится газовая фаза  $A$ , движущаяся справа налево со скоростью  $v_0$ , в нижней полуплоскости — жидкая фаза  $B$ , движущаяся в противоположную сторону с той же скоростью. Массовая сила направлена перпендикулярно границе раздела в сторону более легкой газовой фазы. Это случай неустойчивости Рэлея — Тейлора [16]. В окрестности межфазной границы задаются начальные возмущения скоростей в виде

$$v_x = \text{sign}(y)A \sin(kx) e^{-k|y|}, \quad v_y = A \cos(kx) e^{-k|y|}.$$

Здесь  $k$  — волновое число;  $A$  — амплитуда возмущений;  $x$  — продольная координата;  $y$  — поперечная координата, отсчитываемая от межфазной границы. На левой границе при  $y < 0$  задаются граничные условия  $v_x = v_0$ ,  $v_y = 0$ , на правой границе при  $y \geq 0$  — условия  $v_x = -v_0$ ,  $v_y = 0$ , на всех остальных границах расчетной области — условия свободной границы. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле  $200 \times 50$ ; размер квадратных ячеек разностной сетки  $4 \cdot 10^{-4}$ ,  $m_1 = 2$ ,  $m_2 = 200$ ,  $\mu_s = 10^{-5}$  для фазы  $A$  и  $\mu_s = 10^{-3}$  для фазы  $B$ ,  $\mu_v = 10\mu_s$ ,  $\rho_A = 2$ ,  $\rho_B = 800$ ,  $E_A = 10^7$ ,  $E_B = 10^9$ ,  $d_A = 10^{-6}$ ,  $d_B = 10^{-9}$ ,  $v_0 = 5$ ,  $A = 1$ ,  $k = 314$ .



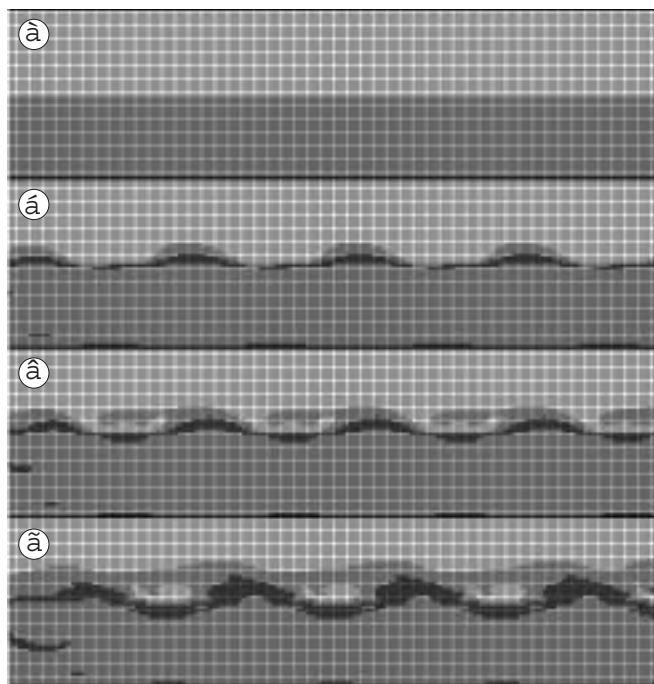


Рис. 4

Из анализа дисперсионного уравнения для выбранных параметров следует [16], что в окрестности межфазной границы будут развиваться неустойчивости Рэля — Тейлора и Кельвина — Гельмгольца, которые сначала приводят к незначительному искривлению межфазной границы (рис. 4, б). Затем этот процесс переходит в нелинейную стадию с образованием сильной деформации межфазной границы (рис. 4, в) и далее — к формированию отдельных газовых пузырьков (рис. 4, г).

**Заключение.** Найденные численные решения соответствуют современным теоретическим представлениям и экспериментальным данным по динамике капель, явлениям смачиваемости и волновым процессам на границе жидких фаз [17–20]. Поэтому можно утверждать, что метод функционала плотности достаточно эффективно позволяет моделировать динамику двухфазных смесей в изотермическом случае. Предлагаемая численная схема сквозного расчета экономична и без труда обобщается на смеси с большим числом компонентов или большим числом фаз, а также на пространственные задачи.

Что касается точности метода, то следует различать точность расчета в однофазной области и точность расчета в межфазной области. В однофазной области вклад высших производных в гидродинамические уравнения пренебрежимо мал, и модель, по существу, сводится к обычной модели многокомпонентной вязкой жидкости или газа. Соответственно, точность расчета мало отличается от точности коммерческих пакетов программ для однофазных вязких смесей. Что касается межфазной области, то здесь точность существенно зависит от размеров ячеек численной сетки. При численном моделировании поперечный размер области фазового перехода обычно составляет 3–5 ячеек. Таким образом, точность прогноза пространственной эволюции границы фаз пропорциональна характерному размеру ячейки. На момент написания настоящей работы созданная численная программа при средней мощности современного персонального компьютера позволяет вести расчеты модели с количеством ячеек порядка  $10^5$ . На наш взгляд, это дает достаточную точность описания для динамики мелких капель или многофазных многокомпонентных смесей в ка-

пиллярах и пористых материалах, т. е. в задачах микрогидродинамики с характерными размерами  $1 \text{ мкм} \div 1 \text{ мм}$ .

Что же касается таких задач гидродинамики, как многофазные потоки в трубах или других технических устройствах, то для адекватной точности требуется значительно большее количество ячеек сетки. Эта проблема может быть решена в случае удачного усовершенствования численной схемы или чисто технически вследствие роста мощности компьютеров.

Для неизотермических задач имеется достаточно хорошо разработанная теория [4], однако численная реализация соответствующей системы уравнений требует дополнительных исследований.

Визуализация результатов выполнена с помощью пакета программ VR-Geo (ООО “Сервис-Нафта”).

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Sahn J. W., Hilliard J. E.** Free energy of a nonuniform system. 1. Interfacial free energy // J. Chem. Phys. 1958. V. 28. P. 258–267.
2. **Трускиновский Л. М.** Равновесные межфазные границы // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265, № 2. С. 306–310.
3. **Динариев О. Ю.** О гидродинамическом описании многокомпонентной многофазной смеси в узких порах и тонких слоях // Прикл. математика и механика. 1995. Т. 59, вып. 5. С. 776–783.
4. **Динариев О. Ю.** Температурные эффекты при описании многокомпонентной смеси методом функционала плотности // Прикл. математика и механика. 1998. Т. 62, вып. 3. С. 433–442.
5. **Динариев О. Ю.** Описание многокомпонентной смеси методом функционала плотности при наличии поверхностных фаз // Прикл. математика и механика. 2001. Т. 65, вып. 3. С. 486–494.
6. **Динариев О. Ю.** Течение в капилляре с поверхностно-активными стенками. Метод функционала плотности // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1997. Вып. 2. С. 141–148.
7. **Динариев О. Ю.** Описание капиллярно-гравитационных волн в теории функционала плотности // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1999. Вып. 5. С. 145–151.
8. **Динариев О. Ю.** Описание течения газоконденсатной смеси в осесимметричном капилляре методом функционала плотности // ПМТФ. 2003. Т. 44, № 1. С. 101–107.
9. **Седов Л. И.** Механика сплошной среды. М.: Наука, 1973. Т. 1.
10. **Де Гроот С., Мазур П.** Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.
11. **Sedov L. I.** A thermodynamic approach to the basic variational equation for building models of continuous media // Macroscopic theories of matter and fields: A thermodynamic approach. Moscow: MIR Publ., 1983. P. 19–42.
12. **Sedov L. I.** Applying the basic variational equation for building models of matter and fields // Ibid. P. 43–97.
13. **Эглит М. Э.** Одно обобщение модели идеальной сжимаемой жидкости // Прикл. математика и механика. 1965. Т. 29, вып. 2. С. 351–354.
14. **Бретшнайдер В.** Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета. М.: Химия, 1966.
15. **Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М.** Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982.
16. **Иногамов Н. А., Демьянов А. Ю., Сон Э. Е.** Гидродинамика перемешивания. М.: Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1999.

17. **Гонор А. Л., Ривкинд В. Я.** Динамика капли // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа. М.: ВИНТИ, 1982. С. 86–159.
18. **Де Жен П. Ж.** Смачивание: статика и динамика // Успехи физ. наук. 1987. Т. 151, вып. 4. С. 619–681.
19. **Charru F., Fabre J.** Theoretical and experimental investigation of periodic interfacial waves between two viscous fluid layers // Instabilities in multiphase flows. N. Y.: Plenum Press, 1993. P. 205–217.
20. **Danho E., Bonthier M.** Kelvin — Helmholtz two-phase flow instability // Ibid. P. 231–239.

*Поступила в редакцию 20/V 2003 г.,  
в окончательном варианте — 19/I 2004 г.*

---