

УДК 532.529.5:532.69

© 2004 г. А. Ю. ДЕМЬЯНОВ, О. Ю. ДИНАРИЕВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МНОГОФАЗНЫХ СМЕСЕЙ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

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

Ключевые слова: функционал плотности, двухфазное течение, численное моделирование.

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 задачи; 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].

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 типовых задач, часть которых изложена ниже для случая плоских изотермических течений вязких двухфазных двухкомпонентных сред.

В работе даны основные уравнения теории, описаны алгоритмы численной реализации этих уравнений и приведены примеры расчета ряда типовых изотермических двухфазных течений. Обсуждаются полученные результаты и дальнейшие возможности метода.

1. Основные уравнения теории функционала плотности. Напомним основные положения теории для неизотермических и изотермических течений [3, 4].

Пусть M – компонентная смесь (газ или жидкость) заполняет область D с кусочно-гладкой границей ∂D , соответствующей контакту с неподвижной твердой фазой. Будем использовать обозначения: T – абсолютная температура, n_i – мольная плотность компонента с номером i . Предполагается, что индексы i, j, k пробегает значения $1, \dots, M$, соответствуя номерам компонентов смеси, индексы a, b, c пробегает значения $1, 2, 3$, соответствуя декартовым координатам x^a . Если не оговорено противное, по повторяющимся индексам проводится суммирование. Используются сокращенные обозначения для производных: $g_T = \partial g / \partial T$, $g_i = \partial g / \partial n_i$, $\partial_a g = \partial g / \partial x^a$

Неизотермический случай, статика. В соответствии с [4] энтропия смеси задается функционалом

$$S = \int_D \theta dV + \int_{\partial D} s_* dA \quad (1.1)$$

$$\theta = s - \frac{1}{2} \alpha \partial_a T \partial_a T - \frac{1}{2} \alpha_{ij} \partial_a n_i \partial_a n_j$$

где $s = s(T, n_i)$, – энтропия гомогенной смеси на единицу объема, $s_* = s_*(T, n_i)$ – энтропия на единицу поверхности, $\alpha = \alpha(T, n_i) > 0$, $\alpha_{ij} = \alpha_{ij}(n_k)$ – коэффициенты положительной симметричной матрицы, dV и dA – элементы объема и поверхности.

Энергия смеси с учетом внешнего гравитационного поля задается функционалом

$$U = \int_D (u + \rho \varphi) dV + \int_{\partial D} u_* dA \quad (1.2)$$

где $u = u(T, n_i)$ – внутренняя энергия гомогенной смеси на единицу объема, $u_* = u_*(T, n_i)$ – энергия на единицу поверхности, $\varphi = \varphi(x^a)$ – гравитационный потенциал, $\rho = m_i n_i$ – массовая плотность смеси, m_i – масса моля i -го компонента.

Полное число частиц i -го компонента дается выражением

$$N_i = \int_D n_i dV \quad (1.3)$$

Равновесные состояния смеси являются критическими точками функционала энтропии (1.1) при заданном значении энергии (1.2) и заданных величинах (1.3). Локально термодинамически устойчивые состояния являются точками локального условного максимума функционала энтропии. Глобально термодинамически устойчивое состояние смеси – точка абсолютного условного максимума функционала энтропии.

Таким образом, равновесные состояния смеси должны удовлетворять вариационному принципу

$$\delta S - \lambda_0 \delta U + \lambda_i \delta N_i = 0 \quad (1.4)$$

где λ_0, λ_i – множители Лагранжа.

Непосредственное вычисление вариации функционала (1.1) приводит к выражению

$$\delta S = \int_D (\phi_0 \delta T + \phi_i \delta n_i) dV + \int_{\partial D} (\phi_{0*} \delta T + \phi_{i*} \delta n_i) dA \quad (1.5)$$

$$\phi_0 = s_{,T} + 1/2 \alpha_{,T} \partial_a T \partial_a T + \alpha \Delta T$$

$$\phi_i = s_{,i} - 1/2 \alpha_{,i} \partial_a T \partial_a T - 1/2 \alpha_{jk,i} \partial_a n_j \partial_a n_k + \alpha_{ij,k} \partial_a n_j \partial_a n_k + \alpha_{ij} \Delta n_j$$

$$\phi_{0*} = s_{*,T} + \alpha l_a \partial_a T, \quad \phi_{i*} = s_{*,i} + \alpha_{ij} l_a \partial_a n_j$$

где l_a – внутренняя нормаль к поверхности ∂D , $\Delta = \partial_a \partial_a$.

Подставляя выражение (1.5) в вариационное уравнение (1.4) и используя произвольность вариаций температуры и плотностей компонентов, получаем условия равновесия состояния смеси в виде системы эллиптических уравнений и граничных условий

$$\phi_0 - \lambda_0 u_{,T} = 0 \quad (1.6)$$

$$\phi_i - \lambda_0 (u_{,i} + m_i \varphi) + \lambda_i = 0 \quad (1.7)$$

$$\phi_{0*} - \lambda_0 u_{*,T} = 0 \quad (1.8)$$

$$\phi_{i*} - \lambda_0 u_{*,i} = 0 \quad (1.9)$$

Значения $(M + 1)$ множителей Лагранжа λ_0, λ_i должны определяться при решении задачи (1.6)–(1.9) из заданных значений (1.2), (1.3). Анализ уравнения (1.6) при $T = \text{const}$ показывает, что $\lambda_0 = T^{-1}$. Чтобы состояние с постоянной температурой удовлетворяло граничному условию (1.8), необходимо наложить дополнительное условие [4], которое будет в дальнейшем предполагаться выполненным: $u_{*,T} = Ts_{*,T}$.

Неизотермический случай, динамика. В качестве определяющих гидродинамических уравнений принимаются обычные уравнения для плотностей, импульса и энергии [8]

$$\partial_t n_i + \partial_a I_{ia} = 0 \quad (1.10)$$

$$\rho(\partial_t v_a + v_b \partial_b v_a) = \partial_b p_{ab} - \rho \partial_a \phi \quad (1.11)$$

$$\partial_t u + \partial_a (v_a u) = p_{ab} \partial_a v_b - \partial_a q_a \quad (1.12)$$

где I_{ia} – вектор потока i -го компонента, $v_a = \rho^{-1} m_i I_{ia}$ – среднemasсовая скорость, p_{ab} – тензор напряжений в смеси, q_a – вектор потока тепла.

Введем вспомогательные величины: $Q_{ia} = (I_{ia} - n_i v_a)$ – вектор диффузионного потока i -го компонента, q_a^{ex} – поток тепла в твердой фазе, окружающей рассматриваемую многокомпонентную смесь, $\Sigma_{ab} = (\phi_i n_i - \theta) \delta_{ab} - \alpha \partial_a T \partial_b T - \alpha_{ij} \partial_a n_i \partial_b n_j$, $\Psi_0 = \phi_0 u_{*,T}^{-1}$, $\Psi_i = \phi_i - \phi_0 u_{*,T}^{-1} u_{*,i}$. Величина Ψ_0 имеет размерность обратной температуры. Она точно равна T^{-1} , если $T = \text{const}$ или $\alpha = 0$. Это дает основание ввести температуру $T_e = \Psi_0^{-1}$ [4], которая, вообще говоря, отличается от температуры T .

При гидродинамическом описании используются граничные условия на динамические переменные: условие прилипания, условие непротекания для диффузионных потоков и условие баланса для поверхностной энергии

$$v_a|_{\partial D} = 0 \quad (1.13)$$

$$l_a Q_{ia}|_{\partial D} = 0 \quad (1.14)$$

$$\partial_t u_* = (q_a^{\text{ex}} - q_a) l_a \quad (1.15)$$

Кроме того, в динамике вместо граничных условий (1.8), (1.9) используются другие условия [4], не содержащие множителей Лагранжа,

$$\phi_{0*} - T_e^{-1} u_{*,T} = 0 \quad (1.16)$$

$$\phi_{i*} - T_e^{-1} u_{*,i} = 0 \quad (1.17)$$

Используя соотношения (1.5), (1.10)–(1.17) и выполняя интегрирование по частям, несложно получить выражение производной от функционала энтропии (1.1)

$$\frac{dS}{dt} = \int_{\partial D} T_e^{-1} q_a^{\text{ex}} l_a dA + \int_D \sigma dV \quad (1.18)$$

$$\sigma = \Psi_0 \tau_{ab} \partial_a v_b + q_a \partial_a \Psi_0 + Q_{ia} \partial_a \Psi_i \quad (1.19)$$

$$\tau_{ab} = p_{ab} - \sigma_{ab} \quad (1.20)$$

$$\sigma_{ab} = \Psi_0^{-1} \Sigma_{ab} + (u - u_{,i} n_i) \delta_{ab} \quad (1.21)$$

Выражение для изменения энтропии (1.20) имеет стандартную форму [9], включающую два слагаемых: поток через границу и производство энтропии. Рассматриваемая гидродинамическая модель совместна со вторым законом термодинамики, если производство энтропии неотрицательно:

$$\sigma \geq 0 \quad (1.22)$$

Отметим, что выражение для производства энтропии (1.18) содержит тензор τ_{ab} (1.20), получающийся из тензора напряжений p_{ab} вычитанием тензора σ_{ab} (1.21). Тензор σ_{ab} не дает вклад в производство энтропии и интерпретируется как тензор статических напряжений. В случае равновесной гомогенной смеси этот тензор сводится к обычному тензору напряжений в идеальной жидкости

$$\begin{aligned} \sigma_{ab} &= -p \delta_{ab} \\ p &= (Ts - u + (u_{,i} - Ts_{,i}) n_i) \end{aligned} \quad (1.23)$$

где p – гидростатическое давление.

Для замыкания гидродинамической задачи (1.10)–(1.17) требуются материальные соотношения, т.е. выражения для величин τ_{ab} , q_a , $Q_{\alpha a}$. Они должны быть совместны с неравенством (1.22). Наибольший интерес представляет модель, являющаяся минимальным обобщением модели вязкой теплопроводной смеси [8, 9]. Так, для тензора вязких напряжений можно использовать линейно-вязкую модель Навье–Стокса

$$\tau_{ab} = \left(\mu_v - \frac{2}{3} \mu_s \right) \partial_c v_c \delta_{ab} + \mu_s (\partial_a v_b + \partial_b v_a) \quad (1.24)$$

где μ_v , μ_s – положительные коэффициенты объемной и сдвиговой вязкости. Для формулировки выражений для теплового и диффузионного потоков удобно обозначить $Q_{0a} = q_a$. Тогда величины $Q_{\alpha a}$ ($\alpha = 0, 1, \dots, M$), по определению, включают потоки q_a , Q_{ia} . Как легко видеть, если выполнены соотношения

$$Q_{\alpha a} = \mu_{\alpha\beta} \partial_a \Psi_{\beta} \quad (\alpha, \beta = 0, 1, \dots, M) \quad (1.25)$$

где $\mu_{\alpha\beta}$ – симметричная неотрицательная матрица, то справедливо неравенство

$$q_a \partial_a \Psi_0 + Q_{ia} \partial_a \Psi_i \geq 0$$

Чтобы не было противоречия между (1.25) и определением диффузионных потоков, матрица коэффициентов переноса $\mu_{\alpha\beta}$ должна удовлетворять дополнительному условию $\mu_{\alpha\beta} a_{\beta} = 0$, где $a_0 = 0$, $a_i = m_i$.

Соотношения (1.24), (1.25) замыкают гидродинамическую задачу. Можно показать [4], что гидродинамические уравнения совместны со статическими уравнениями (1.6)–(1.9), а именно: решение в статике автоматически удовлетворяет уравнениям гидродинамики, и наоборот, решение гидродинамической задачи с нулевыми потоками компонентов и тепла удовлетворяет уравнениям статики.

Изотермический случай, статика. В ряде случаев при описании многофазной многокомпонентной среды допустима изотермическая постановка. Например, приближение $T = \text{const}$ может быть оправданным в случае высокой теплопроводности среды или в случае высокой теплоемкости среды. Определяющие уравнения в изотермической постановке могут быть получены переходом к пределу $T = \text{const}$ в неизотермических уравнениях. В то же время изотермическое описание может быть построено независимо на основе принципа минимизации свободной энергии смеси. При этом подходы, осно-

ванные на функционале энтропии и функционале свободной энергии, являются взаимосвязанными.

Функционал свободной энергии строится из функционалов энтропии (1.1) и энергии (1.2)

$$F = U - TS = \int_D \omega dV + \int_{\partial D} f_* dA \quad (1.26)$$

$$\omega = f + \frac{1}{2} v_{ij} \partial_a n_i \partial_a n_j + \rho \phi$$

где $f = f(T, n_i) = (u - Ts)$ – свободная энергия гомогенной смеси на единицу объема, $f_* = f_*(T, n_i) = (u_* - Ts_*)$ – свободная энергия на единицу поверхности, $v_{ij} = T\alpha_{ij}(n_k)$.

Равновесные состояния смеси являются критическими точками функционала (1.26) при фиксированных величинах (1.3).

Вычисляя вариацию функционала (1.26), получаем выражение

$$\delta F = \int_D \Phi_i \delta n_i dV + \int_{\partial D} \Phi_{i*} \delta n_i dA \quad (1.27)$$

$$\Phi_i = f_{,i} + m_i \phi + \frac{1}{2} v_{jk,i} \partial_a n_j \partial_a n_k - v_{ij,k} \partial_a n_j \partial_a n_k - v_{ij} \Delta n_j$$

$$\Phi_{i*} = f_{*,i} - v_{ij} l_a \partial_a n_j$$

Вариационное уравнение для равновесных состояний с множителями Лагранжа Λ_i

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

приводит к системе эллиптических уравнений (1.28) и граничных условий (1.29)

$$\Phi_i - \Lambda_i = 0 \quad (1.28)$$

$$\Phi_{i*} = 0 \quad (1.29)$$

Уравнения (1.28) соответствуют уравнениям (1.7), причем $\Lambda_i = T\lambda_i$. Граничные условия (1.29) соответствуют граничным условиям (1.9).

Изотермический случай, динамика. В изотермической постановке гидродинамика смеси описывается уравнениями (1.10), (1.11). Будем использовать граничные условия (1.13), (1.14) и (1.29). Последняя группа условий соответствует условиям (1.17).

Определим функционал полной энергии системы, включающей свободную энергию (1.26) и кинетическую энергию смеси

$$E = F + \frac{1}{2} \int_D \rho v_a v_a dV \quad (1.30)$$

Непосредственное вычисление производной по времени от функционала (1.30) с учетом выражения (1.27) и уравнений (1.10), (1.11) приводит к соотношению

$$\frac{dE}{dt} = \int_D \Sigma dV \quad (1.31)$$

$$\Sigma = -\tau_{ab} \partial_a v_b + Q_{ia} \partial_a \Phi_i \quad (1.32)$$

Тензор вязких напряжений τ_{ab} и тензор статических напряжений σ_{ab} определяются, как и в неизотермическом случае, соотношениями (1.20), (1.21). Следует отметить, что в изотермическом случае выражение для статических напряжений упрощается

$$\sigma_{ab} = (\omega - \Phi_i n_i) \delta_{ab} - v_{ij} \partial_a n_i \partial_b n_j \quad (1.33)$$

Для замыкания гидродинамической задачи необходимо задать выражения для величин τ_{ab} , Q_{ia} таким образом, чтобы выполнялось условие диссипативности системы

$$\Sigma \leq 0 \quad (1.34)$$

Легко проверить, что если принять материальные соотношения (1.24), (1.25), то неравенство (1.34) удовлетворяется. При этом нужно использовать следующую связь между величинами Φ_i и Ψ_i , справедливую в изотермическом случае:

$$\Psi_i = -T^{-1}(\Phi_i - m_i \varphi)$$

Таким образом, изотермическая теория на основе функционала (1.26) – это частный случай теории на основе функционала (1.1). Интересно, что из взаимосвязи функционалов (1.1), (1.26) следует линейная зависимость коэффициентов v_{ij} от температуры.

2. Примеры численного моделирования двухфазных течений. В качестве определяющей системы уравнений берутся уравнения сохранения компонентов (1.10) и уравнение количества движения (1.11). Тензор вязких напряжений задается выражением (1.24), тензор статических напряжений – (1.33); диффузионный поток берется по формуле (1.25).

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 v_{ij} .

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

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

где 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 давлений и химических потенциалов. В связи с этим их можно положить равными нулю. Для гидродинамического моделирования важны только коэффициенты f_{Aij} . Эти коэффициенты подбираются в соответствии с данными по объёмному 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:

$$f = \frac{f_A f_B}{f_A + f_B} \quad (2.3)$$

Предполагается, что значения сдвиговой и объёмной вязкости для каждой фазы известны. Значения вязкости для произвольных значений плотностей компонентов вычисляются по формулам

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

$$c_A = \frac{z_B}{z_A + z_B}, \quad c_B = \frac{z_A}{z_A + z_B}$$

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

В изотермическом случае соотношения (1.25) приводят к следующему выражению для диффузионных потоков:

$$Q_{ia} = -D_{ij} \partial_a \Phi_j \tag{2.5}$$

где матрица D_{ij} – симметричная, неотрицательная и удовлетворяет условию

$$D_{ij} m_j = 0 \tag{2.6}$$

При $v_{ij} = 0$ из (2.5) следует выражение для потока концентрации компонентов

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

$$n = \sum_{i=1}^2 n_i, \quad c = \frac{n_1}{n}, \quad \kappa_i = f_i$$

где n – полная плотность, c – концентрация компонента 1, κ_i – химический потенциал.

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

$$d = n^{-1} D_{1j} \left(\frac{\partial \kappa_j}{\partial c} \right)_n \tag{2.7}$$

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 (2.7) с учетом (2.6) однозначно определяет матрицу D_{ij} .

Поверхностное натяжение на контакте смесь–твердое тело принимается в виде линейной функции плотностей компонентов

$$f_* = \xi_{1i} n_i + \xi_0 \tag{2.8}$$

Параметры ξ_0, ξ_{1i} вычисляются по известным значениям поверхностного натяжения на контакте с твердым телом для фаз A и B :

$$\theta_A = \xi_{1i} n_{iA} + \xi_0, \quad \theta_B = \xi_{1i} n_{iB} + \xi_0 \tag{2.9}$$

Система линейных уравнений (2.9) всегда имеет решение, но это решение неединственное. Произвол в выборе зависимости (2.8) влияет на распределение компонентов вблизи твердой стенки, но не влияет на угол смачивания.

Матрица коэффициентов v_{ij} предполагается пропорциональной единичной. Незвестный коэффициент фиксируется из формулы для поверхностного натяжения между фазами A и B [3]

$$\gamma = \int_0^{+\infty} v_{ij} \partial_r n_i \partial_r n_j dr \tag{2.10}$$

Интеграл в формуле (2.10) 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)–(2.10) позволяют фиксировать размерные параметры модели. Для всех рассмотренных задач полагалось $\gamma = 0.1$ Н/м.

Система уравнений (1.10), (1.11), (1.24), (1.33), (2.5) решалась численно с помощью явной консервативной разностной схемы, в основу которой положена идея метода крупных частиц [10]. При этом лагранжев этап полностью совпадает с [10], 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 рассчитывались 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 Релея–Тейлора и Кельвина–Гельмгольца на межфазной границе двух сред.

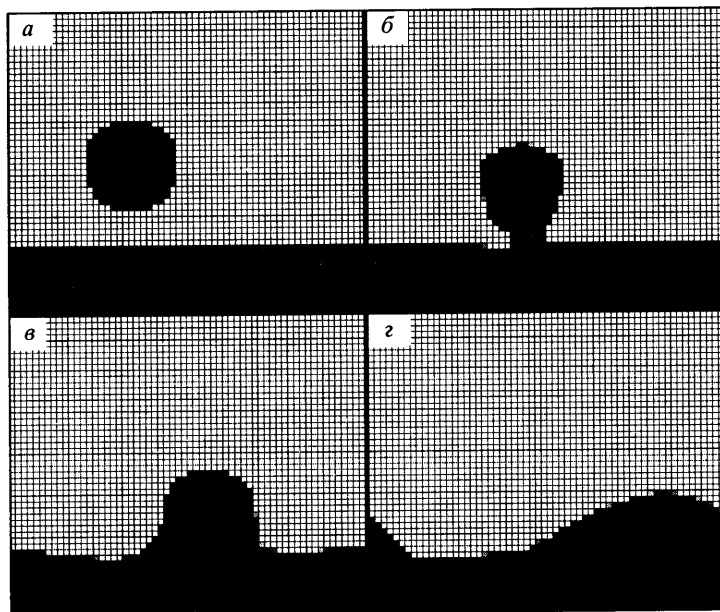
Рассмотренные задачи можно решать и другими численными методами [11–20]. Тем не менее метод функционала плотности обладает преимуществом, заключающимся в выполнении трех условий: расчет многофазных состояний осуществляется сквозным образом без выделения межфазных границ; многофазные состояния устойчивы, т.е. численные шаги по времени не приводят к “расплыванию” фаз; все коэффициенты, используемые в программе, вычисляются на основе хорошо изученных экспериментальных данных. Другие подходы к описанию многофазных течений [11–20] не удовлетворяют по крайней мере одному из этих условий.

Следует остановиться на выборе конкретного класса численных схем [10]. Поскольку сейчас практически отсутствуют как опыт численного решения вышеуказанной системы уравнений, так и информация о поведении полученных решений, в качестве первого этапа в разработке численных алгоритмов для сквозного расчета многофазных течений целесообразно применение простых разностных схем, к которым относится и метод [10]. Он, во-первых, легко реализуем и экономичен, во-вторых, хорошо зарекомендовал себя при расчётах таких сложных нестационарных течений, как, например, неустойчивости Рэлея–Тейлора и Рихтмайера–Мешкова даже на стадии турбулентного перемешивания [11–17]. При этом проведённые расчёты этих задач и более сложными методами высокого порядка точности (метод искусственной сжимаемости [13, 17, 19] и метод [18, 20]) показали хорошее качество решения методом [10].

На представленных фиг. 1–4 градациями серого цвета в расчетных ячейках отражено 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° к горизонтали движется капля жидкости фазы A (см. фиг. 1,а). Начальная скорость капли равна 10 м/с. Поле массовых сил направлено вертикально вниз. На верхней и нижней границах задаются условия (1.13) и условия отсутствия диффузионных потоков компонент (1.14). На левой и правой границах ставятся периодические условия. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле 60×50 ; ячейки разностной сетки квадратные, их размер 0.001 м; $m_1 = 18$ кг/кмоль, $m_2 = 200$ кг/кмоль, $\mu_{sA} = 10^{-3}$ Па · с, $\mu_{sB} = 10^{-2}$ Па · с, $\mu_v = 10\mu_s$, массовые плотности фаз $\rho_A = 1000$ кг/м³, $\rho_B = 800$ кг/м³, $E_A = E_B = 10^9$ Па, $d_A = d_B = 10^{-9}$ м²/с.

На фиг. 1,а–г представлена динамика процесса в последовательные моменты времени. Видно, что процесс взаимодействия приводит к образованию структуры с тон-



Фиг. 1. Падение капли на слой жидкости

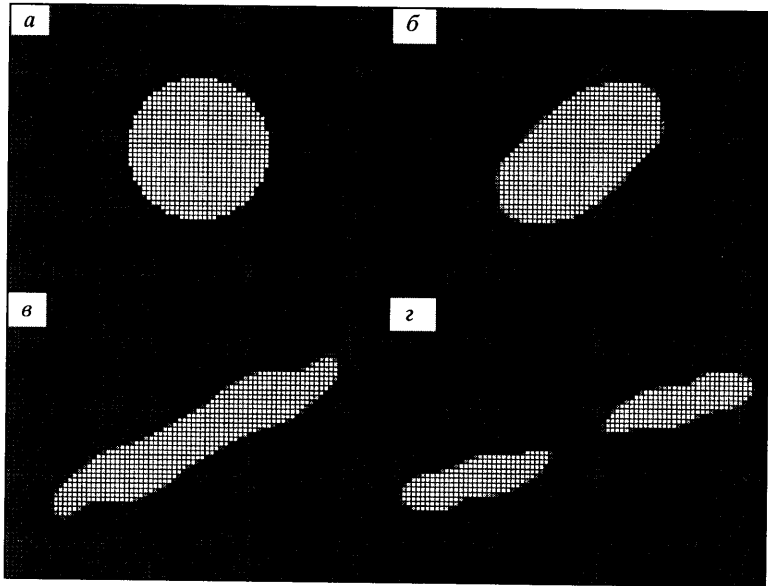
кой ножкой фазы А (фиг. 1,б) с последующим “вытеканием” жидкости из капли в слой (фиг. 1,в), по которому проходят возмущения в виде гравитационно-капиллярных волн (фиг. 1,г).

Задачи соударения, подобные рассмотренной выше, исследовались в связи с необходимостью прогноза параметров струй и брызг, образующихся при взаимодействии различных устройств с жидкостью [21]. При моделировании часто используется приближение больших скоростей соударения, когда влияние вязкости и поверхностного натяжения несущественно. Задача, рассмотренная в настоящей работе, соответствует слабо изученным гидродинамическим явлениям, когда приближение больших скоростей некорректно.

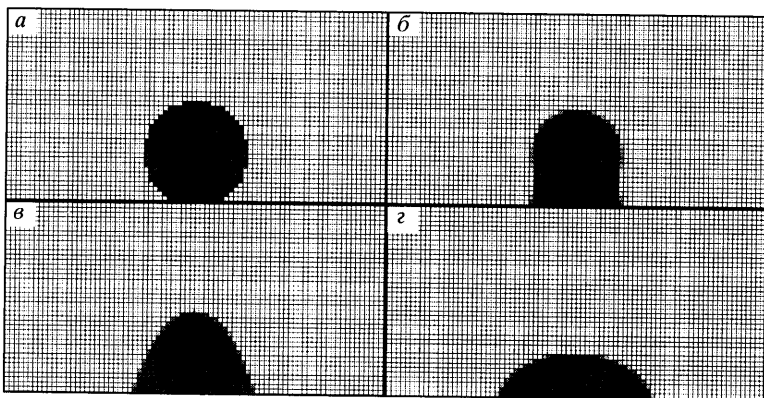
Задача 2. В начальный момент времени капля жидкости (фаза В) помещается в неоднородный поток другой жидкости (фаза А). Он представляет собой течение Куэтта, образованное движущимися с одинаковыми скоростями $U = 10$ м/с (в своих плоскостях) в разных направлениях верхней и нижней границами (верхняя граница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

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

Явления разрыва капли в потоке жидкости исследовались экспериментально и теоретически [22–26]. Из-за значительного разнообразия наблюдаемых при этом явлений оказалось удобным объединить их в определенные классы. В настоящее время принято выделять шесть основных механизмов дробления [25, 26]. Задача, рассмотренная



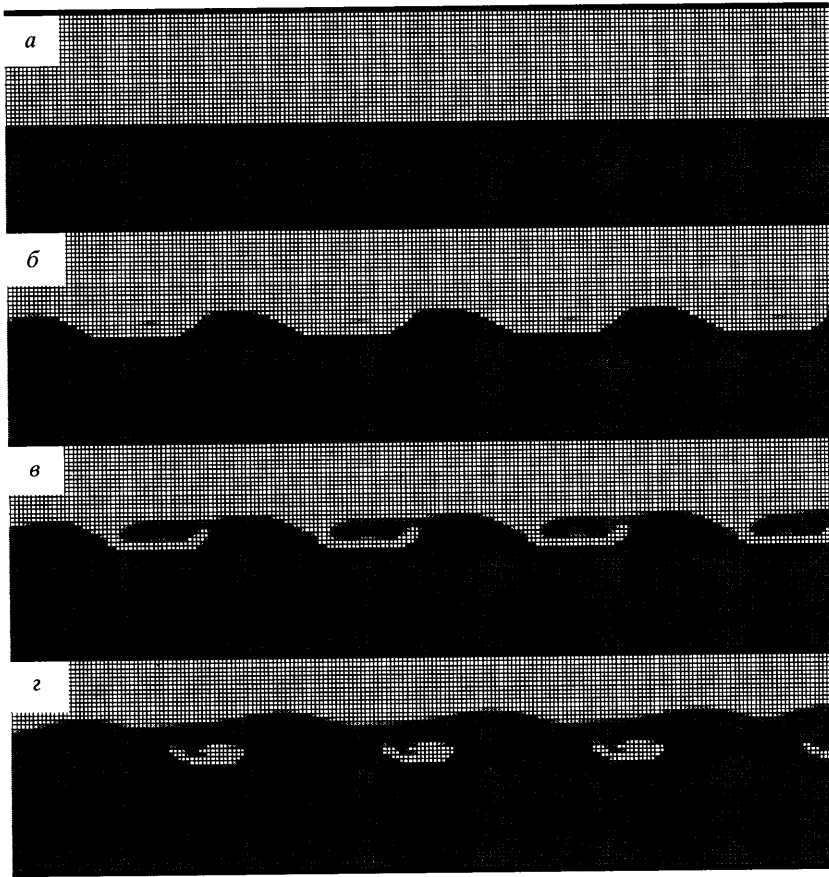
Фиг. 2. Разрыв капли жидкости в сдвиговом течении



Фиг. 3. Растекание капли жидкости на твердой стенке

выше, соответствует первому механизму дробления (так называемой вибрационной моде дробления). В этом случае капля, помещенная в поток, деформируется, приобретает форму вытянутого эллипсоида, а затем распадается на две и большее количество капель. При численном моделировании этого процесса обычно используется модель Навье–Стокса, позволяющая достаточно хорошо воспроизвести динамику капли до момента дробления. Преимущество подхода, предлагаемого в настоящей работе, состоит в возможности единого описания двухфазной системы на всех стадиях эволюции капли.

Задача 3. В начальный момент времени покоящаяся капля жидкости фазы *A*, находящаяся в окружении жидкой фазы *B*, имеет сферическую форму и касается нижней



Фиг. 4. Развитие неустойчивых возмущений на границе раздела движущихся фаз

границы расчетной области (фиг. 3,а), которая моделирует твёрдую поверхность. Для скорости и диффузионных потоков на нижней границе задаются условия (1.13), (1.14) для мольных плотностей фаз – условие (1.29). Функция поверхностного натяжения на границе смесь–твёрдое тело строится по формуле (2.9), причем $(\theta_B - \theta_A) = 0.06$ Н/м. На всех остальных границах расчетной области задаются условия “свободной границы”. Массовая сила отсутствует. Исходные параметры задачи следующие: расчетное поле 80×40 , размер квадратных ячеек разностной сетки 10^{-4} ; $\mu_s = 10^{-3}$ Па с для фаз А и В; все остальные параметры аналогичны параметрам задачи 1.

На фиг. 3,б–г видна динамика процесса установления формы капли на твёрдой поверхности с образованием острого угла смачивания. Результаты расчетов демонстрируют возможность использования функционала плотности для описания статических и динамических эффектов смачивания. С точки зрения современного состояния эксперимента и теории в этой области (см. обзор [27]), следует отметить два преимущества предлагаемого подхода: а) метод функционала плотности является естественным обобщением статической теории Кана [28] на случай течений многокомпонентных многофазных вязких смесей, б) он позволяет преодолеть известное ограничение модели Навье–Стокса, что, поскольку скорость частиц жидкости на границе с твердой фазой равна нулю (условие прилипания), не допускается перемещение линии трехфазного контакта.

Задача 4. В начальный момент времени (фиг. 4,а) в верхней полуплоскости находится газовая фаза *A*, движущаяся справа налево со скоростью *U*, в нижней полуплоскости – жидкая фаза *B*, движущаяся в противоположную сторону с той же скоростью. Массовая сила направлена перпендикулярно границе раздела в сторону более лёгкой газовой фазы. Этот случай неустойчивости Рэлея–Тейлора [11]. В окрестности межфазной границы задаются начальные возмущения скоростей в виде

$$v_x = \text{sign}(y)A \sin(kx)e^{-k|y|}$$

$$v_y = A \cos(kx)e^{-k|y|}$$

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 $v_x = U$, $v_y = 0$. На правой границе при *y* ≥ 0 – условия $v_x = -U$, $v_y = 0$, на всех остальных границах расчетной области – условия “свободной границы”.

Исходные параметры задачи следующие: расчётное поле 200 × 50, размер квадратных ячеек разностной сетки $4 \cdot 10^{-4}$ м; $m_1 = 2$ кг/кмоль, $m_2 = 200$ кг/кмоль, $\mu_3 = 10^{-5}$ Па · с для фазы *A* и $\mu_s = 10^{-3}$ Па · с для фазы *B*, $\mu_v = 10\mu_s$, $\rho_A = 2$ кг/м³, $\rho_B = 800$ кг/м³, $E_A = 10^7$ Па, $E_B = 10^9$ Па, $d_A = 10^{-6}$ м²/с, $d_B = 10^{-9}$ м²/с, $U = 5$ м/с, $A = 1$ м/с, $k = 314$ 1/м.

Из анализа дисперсионного уравнения для выбранных параметров следует [17], что в окрестности межфазной границы будут развиваться неустойчивости Рэлея–Тейлора и Кельвина–Гельмгольца, которые сначала приводят к незначительному искривлению межфазной границы (фиг. 4,б). Далее этот процесс переходит в нелинейную стадию с образованием сильной деформации межфазной границы (фиг. 4,в) и далее – к формированию отдельных газовых пузырьков (фиг. 4,г).

Гидродинамическую неустойчивость рассмотренного типа исследовали экспериментально и теоретически [29, 30], однако в основном на линейной стадии процесса. В рамках теории линейных возмущений расчеты на основе метода функционала плотности соответствуют известным результатам [29, 30]. Поведение возмущений на нелинейной стадии в настоящий момент изучено недостаточно полно.

Заключение. Метод функционала плотности адекватно моделирует сложные течения многофазных сред без специальных дополнительных приемов выделения межфазных границ (расчет производится сквозным образом), что делает весь алгоритм расчета простым и легко перестраиваемым на разные классы задач. Для увеличения эффективности расчетов в дальнейшем целесообразно использовать неявные разностные схемы.

Рассмотренные численные примеры показывают, что метод функционала плотности достаточно эффективно позволяет моделировать динамику двухфазных смесей в изотермическом случае. Предлагаемый метод сквозного расчета является экономичным и без труда обобщается на смеси с большим числом компонентов или большим числом фаз, а также на пространственные задачи.

Для неизоэнтальпических задач имеется достаточно хорошо разработанная теория, однако численная реализация соответствующей системы уравнений требует дополнительных исследований.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system.1. Interfacial free Energy // J. Chem. Phys. 1958. V. 28. № 2. 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 // ПММ. 1995. Т. 59. Вып. 5. С. 776–783.
4. Динариев О.Ю. Температурные эффекты при описании многокомпонентной смеси методом функционала плотности // ПММ. 1998. Т. 62. Вып. 3. С. 433–442.
5. Динариев О.Ю. Описание многокомпонентной смеси методом функционала плотности при наличии поверхностных фаз // ПММ. 2001. Т. 65. Вып. 3. С. 486–494.
6. Динариев О.Ю. Течение в капилляре с поверхностно-активными стенками. Метод функционала плотности // Изв. РАН. МЖГ. 1997. Вып. 2. С. 141–148.
7. Динариев О.Ю. Описание капиллярно-гравитационных волн в теории функционала плотности // Изв. АН. МЖГ. 1999. Вып. 5. С. 145–151.
8. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. М.: Наука, 1973. 536 с.
9. де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.
10. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 391 с.
11. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М., Демьянов А.Ю. Взаимодействие мод возмущений при неустойчивости Рэлея–Тейлора // Докл. АН СССР. 1986. Т. 288. Вып. 5. С. 1071–1074.
12. Давыдов Ю.М., Демьянов А.Ю., Цветков Г.А. Численное моделирование стабилизации и объединения гармоник при рэлей-тейлоровской неустойчивости методом крупных частиц. М.: ВЦ АН СССР, 1987. 51 с.
13. Демьянов А.Ю., Иногамов Н.А., Чехлов А.В. Сравнительный анализ метода искусственной сжимаемости и метода крупных частиц в задаче о неустойчивости Рэлея–Тейлора // Тез. Докл. всес. конф. “Современные проблемы физики и ее приложений” М.: ВДНХ СССР, 1990. С. 79.
14. Inogamov N.A., Anisimov S.I., Chekhlov A.V. et al. Analytical and numerical studies of Rayleigh–Taylor instability // 3rd Intern. Workshop on the physics of compressible turbulent mixing & Royaumont, 1991. P. 409–422.
15. Anisimov S.I., Chekhlov A.V., Dem'yanov A.Yu., Inogamov N.A. The theory of Rayleigh–Taylor instability: modulation perturbations and mushroom-flow dynamics // Russ. j. Com. Put. Mech. 1993. V. 1. № 2. P. 5–32.
16. Иногамов Н.А., Демьянов А.Ю. Эволюция точек сингулярности и контактных поверхностей, отделяющих область пребывания этих точек от жидкости // ПМТФ. 1996. Т. 37. Вып. 5. С. 93–105.
17. Иногамов Н.А., Демьянов А.Ю., Сон Э.Е. Гидродинамика перемешивания. М.: Изд-во МФТИ, 1999. 464 с.
18. Иногамов Н.А., Опарин А.М., Демьянов А.Ю. и др. О стохастическом перемешивании, вызванном неустойчивостью Рэлея–Тейлора // ЖЭТФ. 2001. Т. 119. Вып. 4. С. 822–852.
19. Темам Р. Уравнения Навье–Стокса. Теория и численный анализ. М.: Мир, 1981. 408 с.
20. Белоцерковский О.М., Гуцин В.А., Коньшин В.Н. Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости со свободной поверхностью // Журн. вычислит. математики и мат. физики. 1987. Т. 27. Вып. 4. С. 594–609.
21. Коробкин А.А. Соударение жидких и твердых масс. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1997. 200 с.
22. Taylor G.I. The formation of emulsions in definable fields of flow // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1934. V. 146. № 858. P. 501–523.
23. Barthes-Biesel D., Acrivos A. Deformation and burst of liquid droplet suspended in a linear shear field // J. Fluid Mech. 1973. V. 61. Pt 1. P. 1–21.
24. Rallison J.M. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in general shear flows // J. Fluid Mech. 1981. V. 109. P. 465–482.
25. Гонор А.Л., Ривкин В.Я. Динамика капли // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа. М.: ВИНТИ, 1982. Вып. 17. С. 86–159.
26. Нугматуллин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.

27. *de Жен П.Ж.* Смачивание: статика и динамика // Успехи физ. наук. 1987. Т. 151. Вып. 4. С. 619–681.
28. *Cahn J.W.* Critical point wetting // J. Chem. Phys. 1977. V. 66. № 8. P. 3667–3672.
29. *Charru F., Fabre J.* Theoretical and experimental investigations of periodic interfacial waves between two viscous fluid layers // Instabilities in Multiphase Flows. New York: Plenum Press, 1993. P. 205–217.
30. *Danho E., Bonthier M.* Kelvin-Helmholtz two-phase flow instability // Instabilities in Multiphase Flows. New York: Plenum Press, 1993. P. 231–239.

Москва

Поступила в редакцию
19.VIII.2002