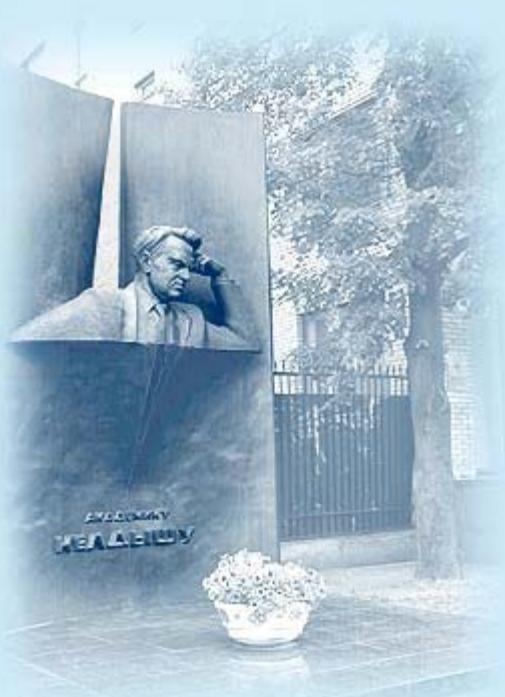




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 89 за 2016 г.



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

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

Исследование баротропной
квазигидродинамической
модели двухфазной смеси с
учетом поверхностных
эффектов

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Балашов В.А., Злотник А.А., Савенков Е.Б. Исследование баротропной квазигидродинамической модели двухфазной смеси с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 89. 25 с.
doi:[10.20948/prepr-2016-89](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-89)

URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-89>

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

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

**Исследование баротропной квазигидродинамической
модели двухфазной смеси с учетом
поверхностных эффектов**

Москва, 2016

B.A. Балашов¹, А.А. Злотник², Е.Б. Савенков¹. Исследование баротропной квазигидродинамической модели двухфазной смеси с учетом поверхностных эффектов

Аннотация

Выполнено исследование баротропной квазигидродинамической системы уравнений для двухфазной двухкомпонентной смеси с учетом поверхностных эффектов на межфазных границах и потенциальной массовой силы. При достаточно общих предположениях о свободной энергии Гельмгольца смеси выведены уравнение энергетического баланса с неположительным производством энергии и его следствие — закон невозрастания полной энергии; в том числе охвачены как изотермический, так и изэнтропический случаи. При дополнительных предположениях получены необходимые и достаточные условия линеаризованной устойчивости постоянных решений (она имеет место отнюдь не всегда).

Построена разностная аппроксимация задачи в двумерном периодическом случае на неравномерной прямоугольной сетке. Усовершенствована аппроксимация тензора капиллярных напряжений в уравнении импульса, что повысило качество численных решений.

Представлены результаты численных экспериментов. Они демонстрируют способность модели обеспечивать качественно верное описание динамики поверхностных эффектов, а также применимость критерия линеаризованной устойчивости в исходной нелинейной постановке.

Ключевые слова: квазигидродинамическая система уравнений, многофазные течения, диффузная граница, уравнение баланса полной энергии, линеаризованная устойчивость, разностная схема, численные эксперименты

Balashov V.A., Zlotnik A.A., Savenkov E.B. A study of the barotropic quasi-hydrodynamic model for the two-phase mixture involving surface effects

Abstract

A study of the barotropic quasi-hydrodynamic system of equations for the two-phase two-component mixture involving the surface tension and stationary potential force is accomplished. Under fairly general assumptions on the Helmholtz free energy of the mixture, the energy balance equation with non-positive energy production together with its corollary, the law of non-increasing total energy, are derived; in particular, both the isothermal and isentropic cases are covered. Under additional assumptions, the necessary and sufficient conditions for the linearized stability of constant solutions are derived (it does not take place always).

A finite-difference approximation of the problem is constructed in the 2D periodic case for a non-uniform rectangular mesh. Approximation of the capillary stress tensor is improved in the momentum balance equation thus increasing the quality of numerical solutions.

The results of numerical experiments are presented. They demonstrate the ability of the model to ensure the qualitatively correct description for the dynamics of surface effects as well as applicability of the linearized stability criterion in the original nonlinear statement.

Key words and phrases: quasi-hydrodynamic system of equations, multiphase flows, diffuse interface, the energy balance equation, linearized stability, finite-difference scheme, numerical experiments

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 14-11-00549.

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

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

1 Введение

Квазигазодинамические (КГД) и квазигидродинамические (КГДД, КГиД) системы уравнений [1–3] можно рассматривать как модификации системы уравнений Навье–Стокса вязкой сжимаемой жидкости с добавлением физически мотивированных диссипативных (релаксационных) слагаемых.

Указанные подходы активно развиваются в последние годы. В том числе предложены варианты КГД и/или КГДД систем для задач теории мелкой воды [4, 5], уравнений движения реального газа [6], магнитной газовой динамики [7] и др. Ведется теоретическое исследование свойств этих систем [8–16].

В работе [17] предложен вариант КГДД уравнений для описания многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов. Разработанная модель является моделью типа «диффузной границы»: предполагается, что фазы разделены тонким слоем конечной ширины, в пределах которого они существуют одновременно. Ширина «границы» и ее динамика определяются действующими в жидкости силами межмолекулярного притяжения и отталкивания [18–22]. Указанный подход считается перспективным для эффективного прямого моделирования ряда таких важных задач как описание многофазных течений на микроуровне, в том числе в поровом пространстве образцов горных пород.

Основное отличие предложенной модели от уже существующих заключается в присутствии, согласно КГДД подходу, дополнительных физически мотивированных слагаемых диссипативного характера, что позволяет использовать логически простые явные разностные схемы. Это делает указанную модель практически пригодной для математического моделирования сложных многофазных многокомпонентных течений с учетом поверхностных эффектов и возможности разделения фаз и фазовых переходов, с использованием сравнительно простых явных разностных схем.

В данной работе рассматривается многомерная баротропная КГДД система уравнений движения двухфазной двухкомпонентной жидкости с учетом поверхностных эффектов, которая в основном является упрощением разработанной в работе [17] модели с учетом уравнения энергии. Для стандартного случая однофазной однокомпонентной среды подобная система изучалась в [9, 10, 13, 16]. Использовано достаточно общее выражение для свободной энергии Гельмгольца смеси в баротропном приближении; изотермический и изэнтропический случаи являются его частными случаями. В уравнениях учтена стационарная потенциальная массовая сила.

Выведено уравнение энергетического баланса с неположительным производством энергии. Его следствием является закон невозрастания полной энергии при подходящих краевых условиях или в периодическом случае.

При дополнительных предположениях проанализирована линеаризован-

ная устойчивость постоянных решений системы уравнений: выведены глобальные по времени оценки возмущений и установлен критерий (необходимое и достаточное условие) их равномерной ограниченности по времени в норме L_2 . В отличие от стандартного случая указанные решения могут быть как устойчивыми, так и неустойчивыми.

Для двумерного периодического случая выписана разностная схема на неравномерной прямоугольной сетке, являющаяся обобщением построенной в [23], в которой рассмотрен изотермический случай в отсутствие массовой силы и для равномерной сетки. Важным элементом является новая аппроксимация тензора капиллярных напряжений в уравнении баланса импульса, которая позволила в расчетах уменьшить сеточный дисбаланс в полной энергии, обеспечить невозрастание дискретной полной энергии и улучшить качество численных решений. Помимо этого использованы аппроксимации тензора напряжений Навье–Стокса и регуляризующего тензора, предложенные в работе [24]. Для записи схемы применена компактная операторная форма, аналогичная данной в [24].

Приведены примеры численных расчетов с помощью указанной схемы, демонстрирующие качественную корректность рассматриваемой математической модели и предложенного вычислительного алгоритма. В том числе представлены результаты, подтверждающие эффективность полученного критерия линеаризованной устойчивости и в исходной нелинейной постановке.

Ниже используются следующие обозначения и соглашения (если не указано противное): Ω — ограниченная область в \mathbb{R}^n ($n = 1, 2, 3$) с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ — точка в $\bar{\Omega}$. Операторы div и $\nabla = (\partial_1, \dots, \partial_n)$ берутся по \mathbf{x} . Через ∂_i и ∂_t обозначены частные производные по x_i и $t \geq 0$. Дивергенция тензора берется по его первому индексу, знаки \otimes и \cdot означают тензорное и скалярное произведение векторов соответственно, и для краткости $\mathbf{u}\nabla = \mathbf{u} \cdot \nabla$. Скалярное произведение тензоров обозначено символом $:$. Также \mathbf{I} — единичный тензор (порядка n).

2 Баротропная КГДД система уравнений двухфазной двухкомпонентной смеси и баланс полной энергии

В соответствии с [17, 23] баротропная КГДД система уравнений двухфазной двухкомпонентной смеси состоит из уравнений баланса массы, импульса и массы компонента:

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

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

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

где $\rho > 0$, $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n)$ — плотность и скорость газа, зависящие от (\mathbf{x}, t) .

Термодинамические свойства смеси задаются «локальной» частью свободной энергии Гельмгольца

$$\Psi_0(\rho, C) = C\Psi_1(\rho) + (1 - C)\Psi_2(\rho) + \Psi_{sep}(C), \quad (2.4)$$

где $\Psi_1(\rho)$, $\Psi_2(\rho)$ — собственные свободные энергии компонент, в баротропном случае зависящие только от ρ , а слагаемое $\Psi_{sep}(C)$ отвечает за разделение фаз. Последняя функция может быть задана по-разному [19, 25, 26], в том числе как

$$\Psi_{sep}(C) = A_\psi C^2(1 - C)^2, \quad \text{где } A_\psi > 0. \quad (2.5)$$

При этом термодинамическое давление выражается формулой

$$p(\rho, C) = \rho^2 \Psi'_{0\rho}(\rho, C) = C\rho^2 \Psi'_{1\rho}(\rho) + (1 - C)\rho^2 \Psi'_{2\rho}(\rho). \quad (2.6)$$

Здесь и ниже $(\cdot)'_\rho$ и $(\cdot)'_C$ обозначают частные производные по ρ и C . Предполагается, что $\Psi_1, \Psi_2 \in C^2(0, \infty)$, а $\Psi_{sep} \in C^k(0, 1)$ с $k = 1$ в данном разделе либо $k = 2$ в разделе 3. Положим $\delta\Psi := \Psi_1 - \Psi_2$.

Регуляризованный поток массы $\mathbf{j}_m = (j_{m1}, \dots, j_{mn})$ задается формулами

$$\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}), \quad \mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} [\rho(\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} + \nabla p - \rho\nabla\Phi + \operatorname{div} \mathbf{Q}]. \quad (2.7)$$

Здесь и ниже $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n)$ — «дополнительная» скорость, наличие которой является особенностью КГДД подхода, а $\tau = \tau(\rho, \mathbf{u}, C) > 0$ — параметр, имеющий размерность времени. При описании течений плотных газов и жидкостей слагаемые с τ следует рассматривать как физически мотивированные регуляризаторы. В дальнейшем они обеспечивают устойчивость центральных разностных аппроксимаций дифференциальных операторов в уравнениях. Термин «физически мотивированные» здесь отражает как способ получения определяющих соотношений для КГДД системы, так и факт наличия у нее таких необходимых для математических моделей гидродинамики свойств, как выполнение второго начала термодинамики и правильность баланса полной энергии.

Тензор $\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^{NS} - \mathbf{Q} + \mathbf{\Pi}^\tau$ состоит из тензоров вязких напряжений Навье-Стокса $\mathbf{\Pi}^{NS}$ и капиллярных напряжений \mathbf{Q} , а также регуляризующего тензора $\mathbf{\Pi}^\tau$:

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

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

где $\nabla\mathbf{u} = \{\partial_i u_j\}_{i,j=1}^n$, а $\eta = \eta(\rho, \mathbf{u}, C) \geq 0$ и $\zeta = \zeta(\rho, \mathbf{u}, C) \geq 0$ — коэффициенты динамической и объемной вязкости соответственно.

Также в (2.3) обобщенный химический потенциал задается выражением

$$\mu(\rho, C) = \Psi'_{0C}(\rho, C) - \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C), \quad (2.8)$$

а величина $M(C) > 0$.

При $\tau = 0$ имеем $\mathbf{w} = 0$, и данная система уравнений переходит в систему уравнений Навье–Стокса вязкой сжимаемой баротропной двухфазной двухкомпонентной смеси.

В уравнениях (2.2), (2.7) вектор–функция $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \nabla \Phi(\mathbf{x})$ — стационарная потенциальная массовая сила. Как и в [10, 13], можно рассмотреть более общий случай $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \nabla \Phi(\mathbf{x}) + \tilde{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t)$, где $\tilde{\mathbf{f}}$ — произвольное возмущение потенциальной силы, но это не делается во избежание излишней громоздкости изложения.

Система (2.1)–(2.3) дополняется начальными условиями

$$\rho|_{t=0} = \rho_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad C|_{t=0} = C_0(\mathbf{x}) \quad (2.9)$$

и краевыми условиями, конкретный вид которых будет указан ниже.

Отметим, что при выполнении краевых условий $\mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0$, $\partial_{\mathbf{n}}\mu|_{\partial\Omega} = 0$, где \mathbf{n} — внешняя нормаль к $\partial\Omega$ и $\partial_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \nabla$ — производная по нормали к $\partial\Omega$, справедливы законы сохранения полной массы и массы отдельного компонента:

$$\int_{\Omega} \rho dx = \int_{\Omega} \rho_0 dx, \quad \int_{\Omega} \rho C dx = \int_{\Omega} \rho_0 C_0 dx \quad \text{при } t \geq 0. \quad (2.10)$$

Напомним, что в изотермическом (для обоих компонентов) случае

$$\Psi_i(\rho) = c_{is}^2 \ln \frac{\rho}{\bar{\rho}_i} \quad (i = 1, 2), \quad p(\rho, C) = (c_{1s}^2 C + c_{2s}^2 (1 - C))\rho, \quad (2.11)$$

где $c_{is} > 0$ — скорости звука (постоянные), $\bar{\rho}_i > 0$ — некоторые фиксированные значения ρ . В изэнтропическом (для обоих компонентов) случае

$$\Psi_i(\rho) = \frac{p_{1i}}{\gamma_i - 1} \rho^{\gamma_i - 1} + \Psi_{i0} \quad (i = 1, 2), \quad p(\rho, C) = p_{11}C\rho^{\gamma_1} + p_{12}(1 - C)\rho^{\gamma_2}, \quad (2.12)$$

где $\gamma_i > 1$ — показатели адиабат, $p_{1i} > 0$, Ψ_{i0} — постоянные.

Следующая теорема связана с обобщением утверждения 1 в [13] для стандартного случая однокомпонентной однофазной среды.

Теорема 1. Для баротропной КГДД системы уравнений двухфазной двухкомпонентной среды справедливо уравнение энергетического баланса

$$\begin{aligned} \partial_t \left[\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \Psi_0(\rho, C) + \frac{1}{2} \lambda_1 \rho |\nabla C|^2 - \rho \Phi \right] + \\ + 2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta \right) (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + M(C) |\nabla \mu|^2 + \frac{\rho}{\tau} |\mathbf{w}|^2 + \operatorname{div} \mathbf{a} = 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

в котором $|\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 = \mathbf{D}(\mathbf{u}) : \mathbf{D}(\mathbf{u})$

$$\begin{aligned} \mathbf{a} := & [\tfrac{1}{2}|\mathbf{u}|^2 + C(\rho\Psi_1)'_\rho + (1-C)(\rho\Psi_2)'_\rho + \Psi_{sep}(C) + \tfrac{1}{2}\lambda_1|\nabla C|^2 - \Phi] \mathbf{j}_m - \\ & - (\mathbf{\Pi}^{NS} + \mathbf{\Pi}^\tau) \mathbf{u} - (\partial_t C)\lambda_1\rho\nabla C - M(C)\mu\nabla\mu. \quad (2.14) \end{aligned}$$

Здесь $2\eta|\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + (\zeta - \tfrac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{u})^2 \geq 0$, и поэтому производство энергии — взята со знаком минус сумма 2-го, 3-го, 4-го и 5-го слагаемых в левой части (2.13) — неположительно.

Доказательство. 1. Уравнение (2.1) умножим на $\sigma - \Phi$, где $\sigma := C(\rho\Psi_1)'_\rho + (1-C)(\rho\Psi_2)'_\rho$, и получим

$$C\partial_t(\rho\Psi_1) + (1-C)\partial_t(\rho\Psi_2) - \partial_t(\rho\Phi) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m(\sigma - \Phi)) - \mathbf{j}_m \cdot \nabla(\sigma - \Phi) = 0.$$

Выполним следующие преобразования

$$\begin{aligned} \nabla\sigma &= (\nabla C)(\rho\delta\Psi)'_\rho + [C(\rho\Psi_1)''_{\rho\rho} + (1-C)(\rho\Psi_2)''_{\rho\rho}] \nabla\rho = \\ &= (\nabla C)\delta\Psi + (\nabla C)\rho\delta\Psi'_\rho + \frac{1}{\rho}[C(\rho^2\Psi'_{1\rho})'_\rho + (1-C)(\rho^2\Psi'_{2\rho})'_\rho] \nabla\rho = \\ &= (\nabla C)\delta\Psi + \frac{1}{\rho}\nabla p, \quad (2.15) \end{aligned}$$

где в заключение использована формула (2.6). Поскольку $\mathbf{j}_m = \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})$, то тем самым

$$\begin{aligned} C\partial_t(\rho\Psi_1) + (1-C)\partial_t(\rho\Psi_2) - \partial_t(\rho\Phi) - \mathbf{j}_m \cdot (\nabla C)\delta\Psi + \\ + (\rho\nabla p - \rho\Phi) \cdot (\mathbf{w} - \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m(\sigma - \Phi)) = 0. \quad (2.16) \end{aligned}$$

3. Уравнение (2.2) умножим на \mathbf{u} . С помощью формул

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho\mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= \tfrac{1}{2}\partial_t(\rho|\mathbf{u}|^2) + \tfrac{1}{2}(\partial_t\rho)|\mathbf{u}|^2, \\ [\operatorname{div}(\mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u})] \cdot \mathbf{u} &= \tfrac{1}{2}\operatorname{div}(|\mathbf{u}|^2\mathbf{j}_m) + \tfrac{1}{2}(\operatorname{div}\mathbf{j}_m)|\mathbf{u}|^2, \\ (\operatorname{div}\mathbf{\Pi}) \cdot \mathbf{u} &= \operatorname{div}(\mathbf{\Pi}\mathbf{u}) - \mathbf{\Pi} : \nabla\mathbf{u} \end{aligned}$$

и уравнения (2.1) после перегруппировки слагаемых выведем

$$\tfrac{1}{2}\partial_t(\rho|\mathbf{u}|^2) + (\nabla p - \rho\nabla\Phi) \cdot \mathbf{u} + \mathbf{\Pi} : \nabla\mathbf{u} + \operatorname{div}(\tfrac{1}{2}|\mathbf{u}|^2\mathbf{j}_m - \mathbf{\Pi}\mathbf{u}) = 0. \quad (2.17)$$

Далее выполним следующие преобразования

$$\begin{aligned}
(\nabla p - \rho \nabla \Phi) \cdot \mathbf{w} + \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{u} &= [2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}) + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}] : \nabla \mathbf{u} - \\
&\quad - \mathbf{Q} : \nabla \mathbf{u} + \rho(\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}) : \nabla \mathbf{u} + (\nabla p - \rho \nabla \Phi) \cdot \mathbf{w} = \\
&= 2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \\
&+ \mathbf{w} \cdot (\rho(\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \rho \nabla \Phi + \operatorname{div} \mathbf{Q}) - \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q} - \mathbf{Q} : \nabla \mathbf{u} = \\
&= 2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)(\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \frac{\rho}{\tau} |\mathbf{w}|^2 - \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q} - \mathbf{Q} : \nabla \mathbf{u}, \quad (2.18)
\end{aligned}$$

где учтена вторая формула (2.7).

2. Уравнение (2.3) перепишем с учетом уравнения (2.1) в виде

$$\rho \partial_t C + \mathbf{j}_m \cdot \nabla C - \operatorname{div}(M \nabla \mu) = 0 \quad (2.19)$$

и умножим результат на μ . Тогда, во-первых, снова с помощью уравнения (2.1) имеем

$$\begin{aligned}
(\rho \partial_t C + \mathbf{j}_m \cdot \nabla C) \Psi'_{0C} &= \rho(\partial_t C) \Psi'_{0C} + \mathbf{j}_m \cdot [(\nabla C) \delta \Psi + \nabla \Psi_{sep}] = \\
&= \rho(\partial_t C) \Psi'_{0C} + \mathbf{j}_m \cdot (\nabla C) \delta \Psi + (\partial_t \rho + \operatorname{div} \mathbf{j}_m) \Psi_{sep} + \mathbf{j}_m \cdot \nabla \Psi_{sep} = \\
&= (\partial_t \rho) \Psi_{sep} + \rho(\partial_t C) \Psi'_{0C} + \mathbf{j}_m \cdot (\nabla C) \delta \Psi + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m \Psi_{sep}).
\end{aligned}$$

Во-вторых, используя обозначение $\mathbf{u}_m = \mathbf{u} - \mathbf{w}$, имеем

$$\begin{aligned}
&- (\rho \partial_t C + \mathbf{j}_m \cdot \nabla C) \frac{\lambda_1}{\rho} \operatorname{div}(\rho \nabla C) = \\
&= - \operatorname{div} \{ [\partial_t C + \mathbf{u}_m \cdot \nabla C] \lambda_1 \rho \nabla C \} + \lambda_1 \rho \nabla C \cdot \nabla [\partial_t C + \mathbf{u}_m \cdot \nabla C],
\end{aligned}$$

и далее

$$\lambda_1 \rho \nabla C \cdot \nabla \partial_t C = \frac{1}{2} \lambda_1 \rho \partial_t (|\nabla C|^2) = \frac{1}{2} \partial_t (\lambda_1 \rho |\nabla C|^2) - \frac{1}{2} \lambda_1 (\partial_t \rho) |\nabla C|^2,$$

$$\begin{aligned}
\lambda_1 \rho \nabla C \cdot \nabla [\mathbf{u}_m \cdot \nabla C] &= \lambda_1 \rho \nabla C \cdot \{ [\nabla(\nabla C)] \cdot \mathbf{u}_m + [\nabla \mathbf{u}_m] \cdot \nabla C \} = \\
&= \frac{1}{2} \lambda_1 \nabla(|\nabla C|^2) \cdot \mathbf{j}_m + (\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{w}) : \mathbf{Q} = \frac{1}{2} \lambda_1 \operatorname{div}(\mathbf{j}_m |\nabla C|^2) - \\
&\quad - \frac{1}{2} \lambda_1 |\nabla C|^2 \operatorname{div} \mathbf{j}_m + \nabla \mathbf{u} : \mathbf{Q} - \operatorname{div}(\mathbf{Q} \mathbf{w}) + \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q}.
\end{aligned}$$

В-третьих, можно записать

$$-\mu \operatorname{div}(M \nabla \mu) = -\operatorname{div}(M \mu \nabla \mu) + M |\nabla \mu|^2.$$

В итоге с учетом уравнения (2.1) справедливо равенство

$$\begin{aligned}
&(\partial_t \rho) \Psi_{sep} + \rho(\partial_t C) \Psi'_{0C} + \mathbf{j}_m \cdot [(\nabla C) \delta \Psi] + \partial_t \left[\frac{1}{2} \lambda_1 \rho |\nabla C|^2 \right] + \\
&\quad + M |\nabla \mu|^2 + \nabla \mathbf{u} : \mathbf{Q} + \mathbf{w} \cdot \operatorname{div} \mathbf{Q} + \operatorname{div} \mathbf{b} = 0, \quad (2.20)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{b} &:= \left(\Psi_{sep} + \frac{1}{2} \lambda_1 |\nabla C|^2 \right) \mathbf{j}_m - (\partial_t C + \mathbf{u}_m \cdot \nabla C) \lambda_1 \rho \nabla C - \mathbf{Q} \mathbf{w} - M \mu \nabla \mu = \\ &= \left(\Psi_{sep} + \frac{1}{2} \lambda_1 |\nabla C|^2 \right) \mathbf{j}_m - (\partial_t C) \lambda_1 \rho \nabla C - \mathbf{Q} \mathbf{u} - M \mu \nabla \mu.\end{aligned}$$

4. Сложим равенства (2.16), (2.17), (2.20), а затем воспользуемся формулами (2.18) и

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho\Psi_0) &= (\partial_t\rho)(\rho\Psi_0)'_\rho + (\partial_t C)\rho\Psi'_{0C} = \\ &= C\partial_t(\rho\Psi_1) + (1-C)\partial_t(\rho\Psi_2) + (\partial_t\rho)\Psi_{sep} + \rho(\partial_t C)\Psi'_{0C}.\end{aligned}$$

Приведя подобные (при этом четвертое слагаемое в левой части (2.16), последние два слагаемых в правой части (2.18) и слагаемое $-\mathbf{Q}\mathbf{u}$ в \mathbf{b} сократятся), получим уравнение энергетического баланса (2.13) с дивергентным слагаемым \mathbf{a} вида (2.14).

Введем полную энергию

$$\mathcal{E} := \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \Psi_0 + \frac{1}{2} \lambda_1 \rho |\nabla C|^2 - \rho \Phi \right) dx.$$

Следствие 1. 1. Пусть выполнены краевые условия

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \quad [(\partial_t C) \lambda_1 \rho \partial_n C + M \mu \partial_n \mu]|_{\partial\Omega} = 0. \quad (2.21)$$

Тогда при $t \geq 0$ справедливо уравнение баланса полной энергии

$$\partial_t \mathcal{E} + \int_{\Omega} \left[2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + \left(\zeta - \frac{2}{3} \eta \right) (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + M |\nabla \mu|^2 + \frac{\rho}{\tau} |\mathbf{w}|^2 \right] dx = 0. \quad (2.22)$$

В частности, из него следует невозрастание полной энергии

$$\partial_t \mathcal{E} \leq 0 \text{ при } t \geq 0. \quad (2.23)$$

2. Пусть уравнения системы выполнены во всем пространстве \mathbb{R}^n и вместе с краевыми условиями (2.21) выполнено условие $\mathbf{X} := (X_1, \dots, X_n)$ – периодичности решения, функций \mathbf{j}_m , $\nabla \mu$, \mathbf{a} и Φ , ρ_0 , C_0 по (x_1, \dots, x_n) , где $X_1 > 0, \dots, X_n > 0$. Тогда предыдущие результаты, включая законы сохранения (2.10), справедливы с $\Omega = \Omega_{\mathbf{X}} := (0, X_1) \times \dots \times (0, X_n)$.

3. Если выполнены краевые условия

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \mathbf{j}_m \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n \mu|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2.24)$$

то уравнение баланса полной энергии принимает вид

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{E} + \int_{\Omega} \left[2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{u})|^2 + (\zeta - \frac{2}{3}\eta) (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + M |\nabla \mu|^2 + \frac{\rho}{\tau} |\mathbf{w}|^2 \right] dx + \\ + \int_{\partial\Omega} [\mathbf{j}_m \cdot \nabla C - \operatorname{div}(M \nabla \mu)] \lambda_1 \partial_n C dx = 0 \text{ при } t \geq 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Оно легко получается с применением уравнения (2.19).

При $\tau = 0$ в теореме и следствии слагаемые $(\rho/\tau)|\mathbf{w}|^2$ исчезают, и они становятся справедливыми для уравнений Навье-Стокса вязкой сжимаемой баротропной двухфазной двухкомпонентной жидкости.

3 Анализ линеаризованной устойчивости постоянных решений

Рассмотрим уравнения (2.1)–(2.8) с $\Phi = 0$. Постоянные $\bar{\rho} > 0$, $\bar{\mathbf{u}}$, $0 < \bar{C} < 1$ удовлетворяют им в качестве ρ , \mathbf{u} , C . Проанализируем вопрос об устойчивости таких постоянных решений в линеаризованной постановке. Для этого запишем решения в виде $\rho = \bar{\rho} + \delta\rho$, $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \delta\mathbf{u}$, $C = \bar{C} + \delta\bar{C}$. Подставим их в уравнения (2.1)–(2.8), воспользуемся постоянством $\bar{\rho}$, $\bar{\mathbf{u}}$, \bar{C} и, отбросив слагаемые второго порядка малости относительно возмущений $\delta\rho$, $\delta\mathbf{u}$, δC (и их производных), выведем для возмущений линеаризованную КГДД систему уравнений

$$\partial_t \delta\rho + \operatorname{div} [\bar{\mathbf{u}} \delta\rho + \bar{\rho}(\delta u - \delta w)] = 0, \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \partial_t \delta\mathbf{u} + \bar{\rho}(\bar{\mathbf{u}} \nabla) \delta\mathbf{u} + p'_\rho(\bar{\rho}, \bar{C}) \nabla \delta\rho + \bar{\rho}^2 \delta\Psi'_\rho(\bar{\rho}) \nabla \delta C = \\ = \operatorname{div} [2\bar{\eta} \mathbf{D}(\delta\mathbf{u}) + (\bar{\zeta} - \frac{2}{3}\bar{\eta})(\operatorname{div} \delta\mathbf{u}) \mathbf{I} + \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \otimes \delta\mathbf{w}], \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\delta\mathbf{w} = \bar{\tau} \left[(\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \delta\mathbf{u} + \frac{1}{\bar{\rho}} \left(p'_\rho(\bar{\rho}, \bar{C}) \nabla \delta\rho + \bar{\rho}^2 \delta\Psi'_\rho(\bar{\rho}) \nabla \delta C \right) \right], \quad (3.3)$$

$$\bar{\rho} \partial_t \delta C + \bar{\rho}(\bar{\mathbf{u}} \nabla) \delta C = M(\bar{C}) [\delta\Psi'_\rho(\bar{\rho}) \Delta \delta\rho + \Psi''_{sep}(\bar{C}) \Delta \delta C - \lambda_1 \Delta^2 \delta C], \quad (3.4)$$

где $\bar{\tau} = \tau(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{u}}, \bar{C})$, $\bar{\eta} = \eta(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{u}}, \bar{C})$, $\bar{\zeta} = \zeta(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{u}}, \bar{C})$, а $\Delta = \operatorname{div} \nabla$ — оператор Лапласа и Ψ''_{sep} — вторая производная Ψ_{sep} . При выводе уравнения (3.2) удобно предварительно воспользоваться формулой

$$\partial_t(\rho v) + \operatorname{div}(\mathbf{j}_m v) = \rho \partial_t v + \mathbf{j}_m \cdot \nabla v,$$

а при выводе уравнения (3.4) — формой (2.19) уравнения для концентрации. Учтено, что $p'_C(\rho, C) = \rho^2 \delta\Psi'_\rho(\rho)$.

При условии $\delta\Psi'_\rho(\bar{\rho}) = 0$: указанная система уравнений существенно упрощается: тогда в уравнениях (3.2) и (3.3) исчезают слагаемые с $\nabla\delta C$, а в уравнении (3.4) — слагаемое с $\Delta\delta\rho$, и она распадается на систему уравнений (3.1)–(3.3) для $\delta\rho$, $\delta\mathbf{u}$ и отдельное уравнение (3.4) для δC . Ниже ограничимся случаем, когда это условие выполнено вместе с естественным условием $p'_\rho(\bar{\rho}, \bar{C}) > 0$.

При указанных условиях система (3.1)–(3.3) была ранее изучена в [9], где для ее решения при краевых условиях $\delta\rho|_{\partial\Omega} = 0$, $\delta\mathbf{u}|_{\partial\Omega} = 0$, а также в периодическом случае, были установлены равномерные по $t \geq 0$ оценки решения в $L_2(\Omega)$ и $H^1(\Omega)$ (это сделано при $\zeta = 0$, что на самом деле несущественно).

Проанализируем уравнение (3.4). Оказывается, что для него ситуация резко отличается от установленной для системы (3.1)–(3.3) и устойчивость решений имеет место отнюдь не всегда. Для формулировки первой части результата введем вспомогательную задачу на собственные значения для самосопряженного эллиптического оператора 4-го порядка

$$\lambda_1 \Delta^2 v - \Psi''_{sep}(\bar{C}) \Delta v = \lambda v \quad \text{в } \Omega, \quad v|_{\partial\Omega} = \partial_{\mathbf{n}} v|_{\partial\Omega} = 0.$$

Обозначим через $\{\lambda^{(k)}, v^{(k)}\}_{k=1}^\infty$ ее (обобщенные) собственные пары. Пусть при этом $\lambda^{(1)} \leq \lambda^{(2)} \leq \dots$ (собственные значения могут быть конечнократными), а $\{v^{(k)}\}_{k=1}^\infty$ образуют ортонормированный базис в $L_2(\Omega)$ (так что $\|v_k\|_{L_2(\Omega)} = 1$, $k \geq 1$). Известно, что $\lambda^{(k)} \rightarrow +\infty$ при $k \rightarrow \infty$. Выполнение этих свойств гарантируется теорией эллиптических задач на собственные значения подобно [27, гл. II, §4 и гл. V, §1].

Теорема 2. *Пусть $\delta\Psi'_\rho(\bar{\rho}) = 0$.*

1. Рассмотрим уравнение (3.4) с $\bar{\mathbf{u}} = 0$ для $\mathbf{x} \in \Omega$, при краевых условиях

$$\delta C|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_{\mathbf{n}} \delta C|_{\partial\Omega} = 0 \tag{3.5}$$

и начальном условии $\delta C|_{t=0} = \delta C_0 \in L_2(\Omega)$. Тогда

$$\delta C_0(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\infty} \delta C_{0,k} v_k(\mathbf{x}), \quad \text{где } \delta C_{0,k} = \int_{\Omega} \delta C_0 v_k dx,$$

а решение представимо в виде ряда

$$\delta C(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \delta C_{0,k} v_k(\mathbf{x}) e^{-\bar{\alpha}\lambda^{(k)} t} \quad \text{с } \bar{\alpha} = M(\bar{C})/\bar{\rho}.$$

Как следствие, верна оценка

$$\|\delta C(\cdot, t)\|_{L_2(\Omega)} \leq e^{-\bar{\alpha}\lambda^{(1)} t} \|\delta C_0\|_{L_2(\Omega)} \quad \text{при } t \geq 0. \tag{3.6}$$

2. Рассмотрим уравнение (3.4) для $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ и вместо краевых условий (3.5) наложим условие \mathbf{X} -периодичности решения (вместе с $\nabla \delta C$, $\Delta \delta C$, $\nabla \Delta \delta C$) и δC_0 по \mathbf{x} . Тогда

$$\delta C_0(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^n} \delta C_{0,\mathbf{k}} e^{i \xi_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}},$$

тогда

$$\delta C_{0,\mathbf{k}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \delta C_0(\mathbf{x}) e^{-i \xi_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad \xi_{\mathbf{k}} = \left(\frac{2\pi k_1}{X_1}, \dots, \frac{2\pi k_n}{X_n} \right)$$

(функцию δC_0 можно считать комплекснозначной), $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n)$ — мультииндекс, i — мнимая единица, $\Omega = \Omega_{\mathbf{X}}$, $|\Omega| = X_1 \dots X_n$, а решение представимо в виде ряда

$$\delta C(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^n} \delta C_{0,\mathbf{k}} e^{i \xi_{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{u}}t) - \bar{\alpha} \lambda^{(\mathbf{k})} t}, \quad \text{где } \lambda^{(\mathbf{k})} = |\xi_{\mathbf{k}}|^2 (\Psi''_{sep}(\bar{C}) + \lambda_1 |\xi_{\mathbf{k}}|^2).$$

Как следствие, верна оценка

$$\|(\delta C - \langle \delta C \rangle)(\cdot, t)\|_{L_2(\Omega)} \leq e^{-\bar{\alpha} \lambda^{(1)} t} \|\delta C_0 - \langle \delta C_0 \rangle\|_{L_2(\Omega)} \text{ при } t \geq 0, \quad (3.7)$$

где $\langle \varphi \rangle = \int_{\Omega} \varphi d\mathbf{x} / |\Omega|$ — среднее значение функции φ на Ω , а $\lambda^{(1)} = \min_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^n, \mathbf{k} \neq 0} \lambda^{(\mathbf{k})}$.

В частности, при $\Psi''_{sep}(\bar{C}) + 2\lambda_1(2\pi/X_{\max})^2 \geq 0$ имеем

$$\lambda^{(1)} = \left(\frac{2\pi}{X_{\max}} \right)^2 \left[\Psi''_{sep}(\bar{C}) + \lambda_1 \left(\frac{2\pi}{X_{\max}} \right)^2 \right], \quad \text{где } X_{\max} = \max\{X_1, \dots, X_n\},$$

а также верна оценка

$$\|\delta C(\cdot, t)\|_{L_2(\Omega)} \leq \|\delta C_0\|_{L_2(\Omega)} \text{ при } t \geq 0. \quad (3.8)$$

Доказательство проводится стандартным образом и реализует метод Фурье подобно [27, гл. III, §4.3 и гл. V, §2]. В частности, оценки (3.6)–(3.8) непосредственно следуют из представленных формул для решений.

Подобные оценки нетрудно вывести не только в нормах пространства Лебега $L_2(\Omega)$, но и в нормах гильбертовых пространств Соболева $W_2^k(\Omega)$.

Замечание 1. В условиях п. 2 справедлив закон сохранения

$$\langle \delta C(\cdot, t) \rangle = \langle \delta C_0 \rangle, \quad t \geq 0. \quad (3.9)$$

Именно поэтому оценка (3.7) записана в несколько ином виде, чем (3.6).

Замечание 2. Оценки (3.6)–(3.8) могут быть доказаны также энергетическим методом. Так, в пп. 1 и 2 верно энергетическое равенство

$$\frac{1}{2}\bar{\rho}\partial_t \int_{\Omega}(\delta C)^2 dx + M(\bar{C}) \int_{\Omega} [\Psi''_{sep}(\bar{C})|\nabla \delta C|^2 + \lambda_1 |\Delta \delta C|^2] dx = 0. \quad (3.10)$$

При этом в п. 1 оно, а поэтому и оценка (3.6), верны при любом $\bar{\mathbf{u}}$. В п. 2 с учетом закона сохранения (3.9) энергетическое равенство сохранит силу при замене δC на $\delta C - \langle \delta C \rangle$.

Согласно последней теореме, оценка вида (3.8), т.е. равномерная по $t \geq 0$ устойчивость в $L_2(\Omega)$ решений задач для уравнения (3.4), в пп. 1 и 2 имеет место тогда и только тогда, когда $\lambda^{(1)} \geq 0$. При нарушении этого условия происходит экспоненциальный рост $\|\delta C(\cdot, t)\|_{L_2(\Omega)}$ по t (в предположении, что отвечающий $\lambda^{(1)}$ коэффициент $\delta C_{0,k}$ или $\delta C_{0,k}$ отличен от 0).

Отметим, что в случае (2.5) имеем $\Psi''_{sep}(C) = 2A_\psi(6C^2 - 6C + 1)$ и поэтому свойство $\lambda^{(1)} \geq 0$, т.е. $\Psi''_{sep}(\bar{C}) + \lambda_1(2\pi/X_{\max})^2 \geq 0$, выполнено отнюдь не всегда, а только либо при

$$\left| \bar{C} - \frac{1}{2} \right| \geq \frac{1}{2\sqrt{3}} \quad (3.11)$$

либо при

$$\left| \bar{C} - \frac{1}{2} \right| < \frac{1}{2\sqrt{3}}, \quad \lambda_1 \left(\frac{2\pi}{X_{\max}} \right)^2 \geq A_\psi \left(1 - 12 \left| \bar{C} - \frac{1}{2} \right|^2 \right). \quad (3.12)$$

В частности, при $\bar{C} = 1/2$ это приводит к условию $\lambda_1(2\pi/X_{\max})^2 \geq A_\psi$.

4 Разностная схема

Построим разностную схему для КГДД системы уравнений (2.1)–(2.8) при $(x_1, x_2) = (x, y) \in \mathbb{R}^2$ с условием (X, Y) -периодичности решения по (x, y) . При этом за основу будет взята схема для равномерной сетки из [23], с обобщением на неравномерную сетку и $\Phi \not\equiv 0$ в духе [24]. Важным новым элементом будет иная аппроксимация тензора \mathbf{Q} в уравнении баланса импульса (2.2). Пусть $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ и $\Omega = (0, X) \times (0, Y)$.

При записи разностной схемы будем в основном следовать обозначениям из [24]. Введем на $[0, X]$ произвольную неравномерную сетку по переменной x с узлами $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N_x} = X$ и продолжим ее периодически с периодом X на всю прямую. Полученную сетку с узлами $x_i, i \in \mathbb{Z}$ обозначим через $\bar{\omega}_{xh}$. Пусть $h_{xi} = x_i - x_{i-1}$ — ее шаги.

Введем также двойственную сетку $\bar{\omega}_{xh}^*$ с узлами $x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2$ и шагами $\hat{h}_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} = (h_{xi} + h_{x(i+1)})/2$.

Обозначим через $H(\omega)$ множество функций, заданных на сетке ω . Для $v \in H(\bar{\omega}_{xh})$ и $z \in H(\bar{\omega}_{xh}^*)$ введем сеточные усреднения и разностные отношения

$$(s_x v)_{i-1/2} = \frac{v_{i-1} + v_i}{2}, \quad \delta_x v_{i-1/2} = \frac{v_i - v_{i-1}}{h_{xi}}, \quad \overset{\circ}{\delta}_x v_i = \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2\hat{h}_{xi}},$$

$$(s_x^* z)_i = \frac{h_{xi}}{2\hat{h}_{xi}} z_{i-1/2} + \frac{h_{x(i+1)}}{2\hat{h}_{xi}} z_{i+1/2}, \quad \delta_x^* z_i = \frac{z_{i+1/2} - z_{i-1/2}}{\hat{h}_{xi}}.$$

Ясно, что $s_x, \delta_x: H(\bar{\omega}_{xh}) \rightarrow H(\bar{\omega}_{xh}^*)$, а $s_x^*, \delta_x^*: H(\bar{\omega}_{xh}^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_{xh})$. Отметим, что $\delta_x^* s_x = s_x^* \delta_x = \overset{\circ}{\delta}_x: H(\bar{\omega}_{xh}) \rightarrow H(\bar{\omega}_{xh})$.

Сетки $\bar{\omega}_{yh}$ (с $N_y + 1$ узлом на $[0, Y]$), $\bar{\omega}_{yh}^*$ и операторы $s_y, \delta_y, \overset{\circ}{\delta}_y, s_y^*, \delta_y^*$ по переменной y вводятся совершенно аналогично.

Введем также неравномерную сетку $0 = t_0 < t_1 < \dots < T_{N_t} = T$ по t с шагами $\Delta t_m = t_m - t_{m-1}$ и разностное отношение

$$\delta_t \rho^m = \frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\Delta t_{m+1}}.$$

Используемая разностная аппроксимация уравнений (2.1)–(2.3) на основной сетке $\bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh}$ такова:

$$\delta_t \rho + \delta_x^* j_{mx} + \delta_y^* j_{my} = 0,$$

$$\delta_t (\rho u_x) + \delta_x^* (j_{mx} s_x u_x) + \delta_y^* (j_{my} s_y u_x) + \overset{\circ}{\delta}_x p = \delta_x^* \Pi_{xx} + \delta_y^* \Pi_{yx} + s_x^* [(s_x \rho) \delta_x \Phi],$$

$$\delta_t (\rho u_y) + \delta_x^* (j_{mx} s_x u_y) + \delta_y^* (j_{my} s_y u_y) + \overset{\circ}{\delta}_y p = \delta_x^* \Pi_{xy} + \delta_y^* \Pi_{yy} + s_y^* [(s_y \rho) \delta_y \Phi],$$

$$\delta_t (\rho C) + \delta_x^* (j_{mx} s_x C) + \delta_y^* (j_{my} s_y C) = \delta_x^* [M(s_x C) \delta_x \mu] + \delta_y^* [M(s_y C) \delta_y \mu].$$

Здесь в соответствии с [2, 3] (и в отличие от [28]) все основные искомые величины ρ, u_x, u_y, C , а также функция Φ определены на основной сетке.

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

$$j_{mx} = (s_x \rho) (s_x u_x - w_x^{(x)}), \quad j_{my} = (s_y \rho) (s_y u_y - w_y^{(y)}),$$

$$w_x^{(x)} = \frac{s_x \tau}{s_x \rho} [(s_x \rho) (s_x u_x) \delta_x u_x + (s_x \rho) (s_x u_y) \overset{\circ}{\delta}_y s_x u_x +$$

$$+ \delta_x p - (s_x \rho) \delta_x \Phi + \delta_x Q_{xx} + \delta_y^* Q_{yx}^{(x,y)}], \quad (4.1)$$

$$w_y^{(y)} = \frac{s_y \tau}{s_y \rho} \left[(s_y \rho) (s_y u_x) \overset{\circ}{\delta}_x s_y u_y + (s_y \rho) (s_y u_y) \delta_y u_y + \right. \\ \left. + \delta_y p - (s_y \rho) \delta_y \Phi + \delta_x^* Q_{xy}^{(x,y)} + \delta_y Q_{yy} \right]. \quad (4.2)$$

Компоненты j_{mx} , $w_x^{(x)}$ определены на $\bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}$, компоненты j_{my} , $w_y^{(y)}$ — на $\bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh}^*$. Параметр τ определен на основной сетке.

Аппроксимация компонент тензора $\Pi = \Pi^{NS} - \mathbf{Q} + \Pi^\tau$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Pi_{xx} &= \Pi_{xx}^{NS} - Q_{xx}^{(x)} + \Pi_{xx}^\tau, & \Pi_{yx} &= \Pi_{yx}^{NS} - Q_{yx}^{(y)} + \Pi_{yx}^\tau, \\ \Pi_{xy} &= \Pi_{xy}^{NS} - Q_{xy}^{(x)} + \Pi_{xy}^\tau, & \Pi_{yy} &= \Pi_{yy}^{NS} - Q_{yy}^{(y)} + \Pi_{yy}^\tau. \end{aligned}$$

Компоненты Π_{xx} , Π_{xy} и их слагаемые определены на $\bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}$, а Π_{yx} , Π_{yy} и их слагаемые — на $\bar{\omega}_{xh} \times \bar{\omega}_{yh}^*$. Здесь, во-первых, для тензора вязких напряжений Навье–Стокса имеем

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}^{NS} &= [s_y^* \left(\frac{4}{3} \eta + \zeta \right)] \delta_x u_x + s_y^* [(\zeta - \frac{2}{3} \eta) \delta_y s_x u_y], & \Pi_{yx}^{NS} &= (s_x^* \eta) \delta_y u_x + s_x^* (\eta \delta_x s_y u_y), \\ \Pi_{yy}^{NS} &= s_x^* [(\zeta - \frac{2}{3} \eta) \delta_x s_y u_x] + [s_x^* \left(\frac{4}{3} \eta + \zeta \right)] \delta_y u_y, & \Pi_{xy}^{NS} &= s_y^* (\eta s_x \delta_y u_x) + (s_y^* \eta) \delta_x u_y \end{aligned}$$

как в [24] (коэффициенты $\eta = \eta(s_x s_y \rho, s_x s_y \mathbf{u}, s_x s_y C)$, $\zeta = \zeta(s_x s_y \rho, s_x s_y \mathbf{u}, s_x s_y C)$ определены на $\bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^*$); во-вторых, для тензора капиллярных напряжений —

$$\begin{aligned} Q_{xx}^{(x)} &= \lambda_1 s_x \{ s_x^* [(s_x \rho) \delta_x C] \cdot \overset{\circ}{\delta}_x C \}, & Q_{yx}^{(y)} &= \lambda_1 s_x^* \{ s_x [(s_y \rho) \delta_y C] \cdot s_y \delta_x C \}, \\ Q_{xy}^{(x)} &= \lambda_1 s_y^* \{ s_y [(s_x \rho) \delta_x C] \cdot s_x \delta_y C \}, & Q_{yy}^{(y)} &= \lambda_1 s_y \{ s_y^* [(s_y \rho) \delta_y C] \cdot \overset{\circ}{\delta}_y C \}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

где символ \cdot означает умножение двух сомножителей; в-третьих, для регуляризующего тензора —

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}^\tau &= (s_x u_x) (s_x \rho) w_x^{(x)}, & \Pi_{yx}^\tau &= (s_y u_y) s_x^* s_y [(s_x \rho) w_x^{(x)}], \\ \Pi_{xy}^\tau &= (s_x u_x) s_x s_y^* [(s_y \rho) w_y^{(y)}], & \Pi_{yy}^\tau &= (s_y u_y) (s_y \rho) w_y^{(y)} \end{aligned}$$

(в соответствии с [24]), причем в дополнение к (4.1), (4.2)

$$w_x^{(y)} = \frac{s_y \tau}{s_y \rho} \left[(s_y \rho) (s_y u_x) \overset{\circ}{\delta}_x s_y u_x + (s_y \rho) (s_y u_y) \delta_y u_x + \right. \\ \left. + \overset{\circ}{\delta}_x s_y p - (s_y \rho) \overset{\circ}{\delta}_x s_y \Phi + \delta_x^* Q_{xy}^{(x,y)} + \delta_y Q_{yx} \right],$$

$$w_y^{(x)} = \frac{s_x \tau}{s_x \rho} \left[(s_x \rho) (s_x u_x) \delta_x u_y + (s_x \rho) (s_x u_y) \overset{\circ}{\delta}_y s_x u_y + \right. \\ \left. + \overset{\circ}{\delta}_y s_x p - (s_x \rho) s_x \overset{\circ}{\delta}_y \Phi + \delta_x Q_{xy} + \delta_y^* Q_{yy}^{(x,y)} \right].$$

Подчеркнем, что аппроксимация (4.3) отличается от использованной в [23]. Она построена на основе анализа слагаемых в уравнении баланса дискретной полной энергии с целью уменьшения связанных с \mathbf{Q} сеточных дисбалансов (этот анализ здесь опускается).

В формулах (4.1), (4.2) и двух последних формулах используются также следующие аппроксимации компонент тензора \mathbf{Q} на основной сетке:

$$Q_{xx} = \lambda_1 \rho (\overset{\circ}{\delta}_x C)^2, \quad Q_{yx} = \lambda_1 \rho (\overset{\circ}{\delta}_x C) \overset{\circ}{\delta}_y C = Q_{xy}, \quad Q_{yy} = \lambda_1 \rho (\overset{\circ}{\delta}_y C)^2,$$

и на двойственной сетке $\bar{\omega}_{xh}^* \times \bar{\omega}_{yh}^*$:

$$\begin{aligned} Q_{xx}^{(x,y)} &= \lambda_1 (s_x s_y \rho) (\delta_x s_y C)^2, \quad Q_{yx}^{(x,y)} = \lambda_1 (s_x s_y \rho) (\delta_x s_y C) \delta_y s_x C = Q_{xy}^{(x,y)}, \\ Q_{yy}^{(x,y)} &= \lambda_1 (s_x s_y \rho) (\delta_y s_x C)^2. \end{aligned}$$

Наконец, аппроксимация обобщенного химического потенциала μ на основной сетке имеет вид:

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

Построенная разностная схема допускает естественное обобщение на трехмерный случай.

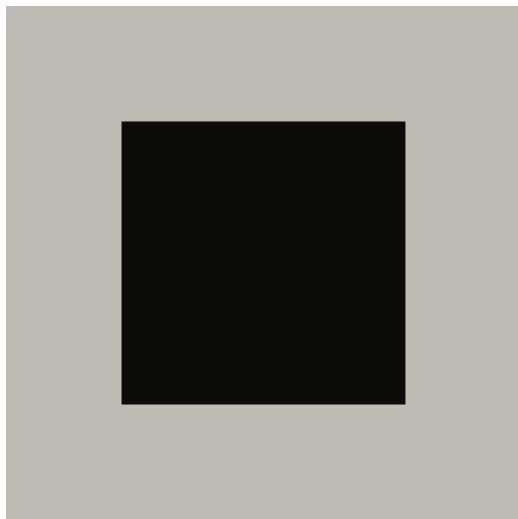
5 Численные эксперименты

Данный раздел посвящен результатам численных экспериментов в периодическом случае, выполненных по разностной схеме из раздела 4.

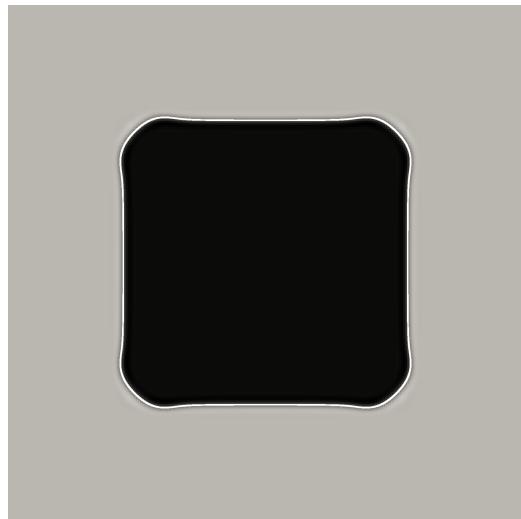
Изучен изэнтропический случай (2.12) течения двух жидкостей с одинаковыми показателями адиабаты $\gamma = 2$ и собственными свободными энергиями $\Psi_1(\rho) = \Psi_2(\rho) = p_1 \rho$, где p_1 — некоторая заданная положительная постоянная. Тогда термодинамическое давление — это $p(\rho) = p_1 \rho^2$; ему отвечает скорость звука $c_s = \sqrt{2p_1 \rho}$. Использована функция (2.5) для описания разделения фаз; массовая сила отсутствует ($\Phi = 0$).

Во всех расчетах взяты следующие значения физических параметров: коэффициенты вязкости $\eta = 0.08 \text{ Па} \cdot \text{сек}$ и $\zeta = 0$, $\lambda_1 = 0.25 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5/\text{кг}^2$, $p_1 = 1400^2 \text{ м}^5/(\text{с}^2 \cdot \text{кг})$, длины $X = Y = 1 \text{ м}$. Заданы начальные значения скорости $\mathbf{u}_0 = 0$ и плотности $\rho_0 = 1.0 \text{ кг}/\text{м}^3$, а начальные значения концентрации C_0 брались по-разному.

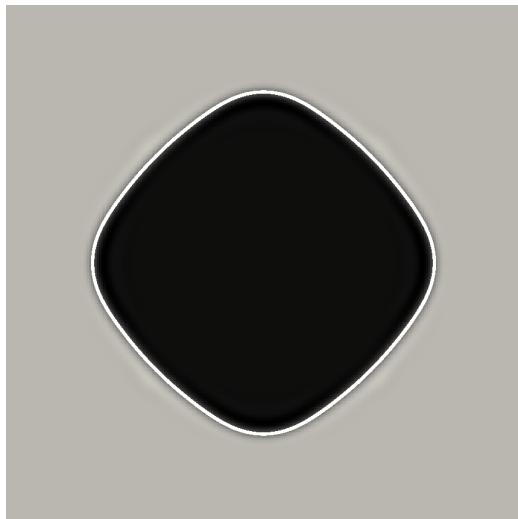
Использована равномерная квадратная сетка с шагом h по обеим координатам x, y и равномерная сетка по t с шагом Δt . Параметр τ задан в виде $\tau = \alpha^* h/c_s$ с $\alpha^* = 0.5$.



(a) $t = 0.0 \text{ c}$



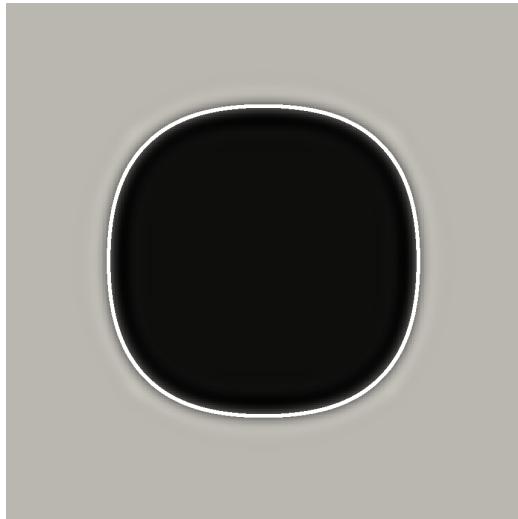
(b) $t = 0.01 \text{ c}$



(c) $t = 0.04 \text{ c}$



(d) $t = 0.06 \text{ c}$



(e) $t = 0.12 \text{ c}$



(f) $t = 0.45 \text{ c}$

Рис. 1. Последовательные этапы эволюции капли квадратной формы

Полная энергия \mathcal{E} аппроксимирована следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_h = h^2 \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \left[\frac{1}{2} \rho (u_x^2 + u_y^2) + \rho \Psi_0(C) \right]_{i,j} + \\ + \frac{1}{2} \lambda_1 \left\{ h^2 \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y-1} \left[(s_x \rho) (\delta_x C)^2 \right]_{i-1/2,j} + h^2 \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=1}^{N_y} \left[(s_y \rho) (\delta_y C)^2 \right]_{i,j-1/2} \right\}. \end{aligned}$$

5.1 Эволюция «квадратной» капли

Рассмотрим результаты расчета эволюции капли, в начальный момент времени имеющей квадратную форму. Пусть $A_\psi = 0.25$ Дж/кг и коэффициент подвижности $M(C) = 10^{-6}C(1 - C)$ кг · с/м³. Выбрана сетка из 250×250 ячеек (т.е. с шагом $h = 1/250$ м) и шаг по времени $\Delta t = 10^{-6}$ с.

Начальное распределение концентрации C_0 взято кусочно-постоянным, см. рис. 1a, где черным цветом показана область с $C_0 = 0.85$, а серым — с $C_0 = 0.15$.

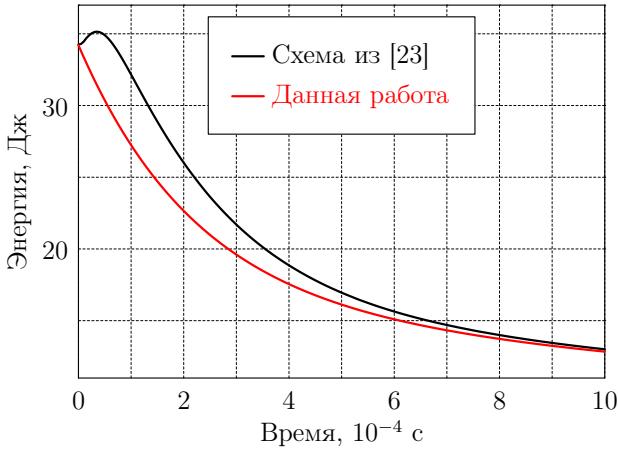
Эволюция концентрации C представлена на рис. 1b–1f; на них белая линия соответствует значению $C = 0.5$. Постепенно граница капли начинает размываться, что естественно для моделей типа «диффузной границы». Первыми начинают округляться углы графика C , поскольку в этих точках наибольшая кривизна границы и, как следствие, наибольшая величина поверхностных сил. Финально через определенное время капля приобретает круглую форму, см. рис. 1f.

Обратим внимание на то, что предложенная в настоящей работе аппроксимация (4.3) тензора \mathbf{Q} улучшила качество численных решений по сравнению с использованной в работе [23]. На рис. 2а представлены графики эволюции полной энергии. Для аппроксимации из [23] она возрастает в начале расчета, что противоречит следствию 1 и поэтому нефизично, а для новой аппроксимации этот недостаток отсутствует. На рис. 2b даны графики компоненты скорости u_x вдоль отрезка прямой $y = Y/2$ (проходящей через центр расчетной области параллельно оси Ox) на момент времени $t = 5 \cdot 10^{-4}$ с. Переход к новой аппроксимации \mathbf{Q} резко уменьшил амплитуду осцилляций u_x .

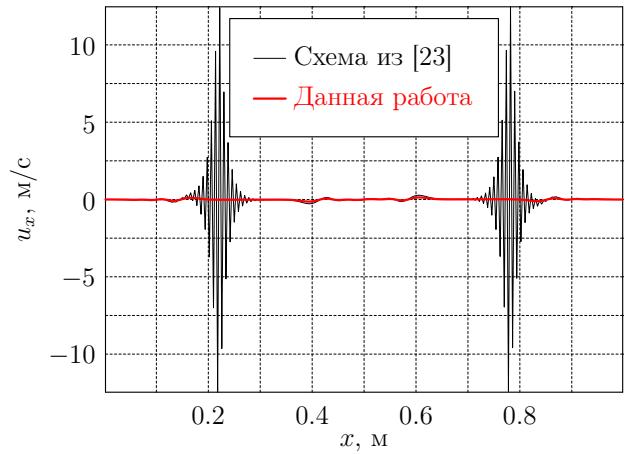
5.2 Слияние двух капель

Следующий расчет посвящен слиянию двух достаточно близко расположенных капель. Пусть $A_\psi, M(C)$, сетка по пространству и Δt прежние.

Начальное распределение концентрации C_0 снова взято кусочно-постоянным, см. рис. 3а, где черным цветом показана область с $C_0 = 0.9$, а серым — с $C_0 = 0.1$.



(а) Зависимость полной энергии \mathcal{E}_h от времени при расчете эволюции «квадратной» капли



(б) Распределение u_x вдоль отрезка прямой $y = Y/2$ в момент времени $t = 2 \cdot 10^{-4}$ с при расчете эволюции «квадратной» капли

Рис. 2. Эволюция «квадратной» капли: сравнение результатов по схемам из [23] и данной работы

Эволюция C во времени показана на последующих рис. 3b–3f; на них белая линия опять соответствует значению $C = 0.5$. Как и в предыдущем случае, границы капель постепенно начинают размываться. В определенный момент они соприкасаются друг с другом, образуется «шейка», и капли довольно быстро сливаются. Затем вновь образовавшаяся единая капля постепенно принимает круглую форму.

Проверено, что дискретная полная энергия \mathcal{E}_h не возрастает и в этом расчете, что согласуется со следствием 1.

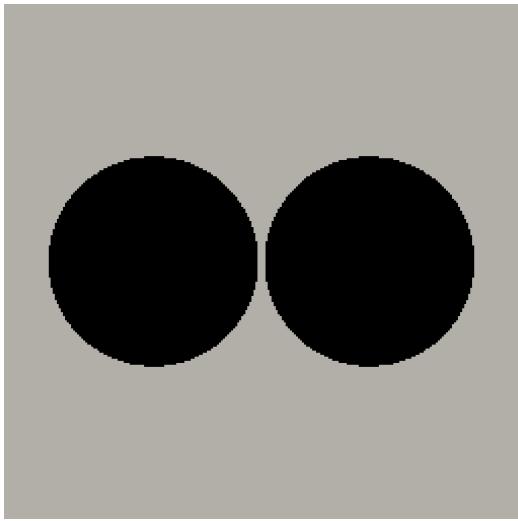
5.3 Самопроизвольный «распад» однородной смеси

Целью последней серии расчетов являлась практическая проверка критерия линеаризованной устойчивости (3.11), (3.12) в периодическом случае в исходной *нелинейной* постановке.

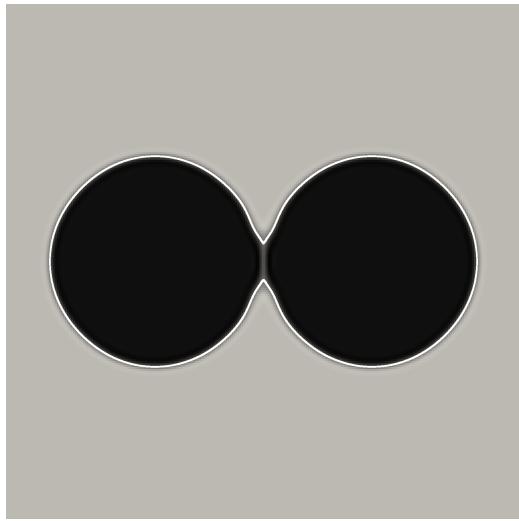
Пусть $A_\psi = 10^4$ Дж/кг, $M(C) = \text{const} = 5 \cdot 10^{-8}$ кг·с/м³. Брались сетка по пространству из 200×200 ячеек (т.е. с шагом $h = 1/200$ м) и шаг по времени $\Delta t = 1.25 \cdot 10^{-6}$ с. Как и в предыдущих расчетах, задавались начальные скорость $\mathbf{u}_0 = 0$ и плотность $\rho_0 = 1$ кг/м³; начальная же концентрация теперь бралась как

$$C_0(x, y) = \bar{C} + 0.005 \sin \frac{8\pi x}{X} \sin \frac{8\pi y}{Y},$$

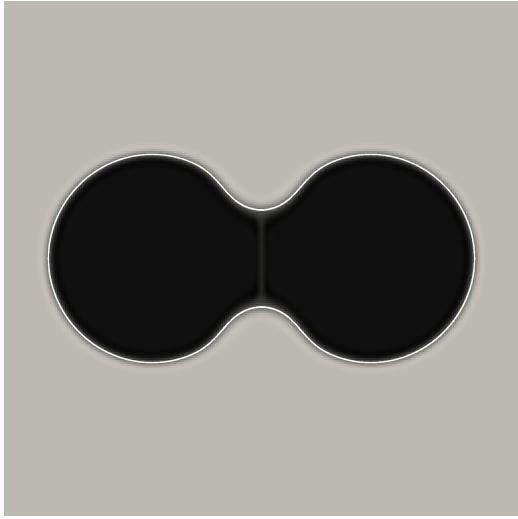
т.е. как постоянная $0 < \bar{C} < 1$ с периодическим возмущением малой амплитуды.



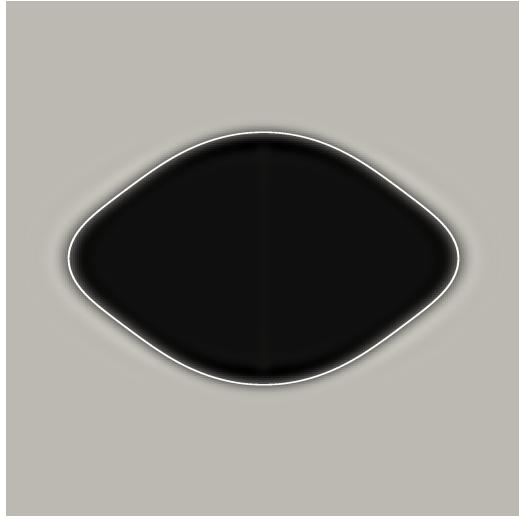
(a) $t = 0.0 \text{ c}$



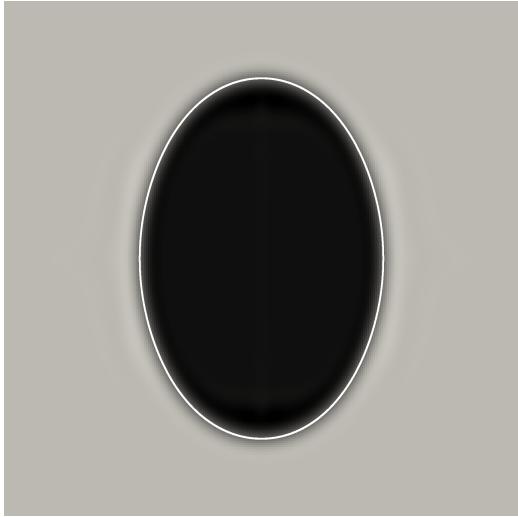
(b) $t = 0.008 \text{ c}$



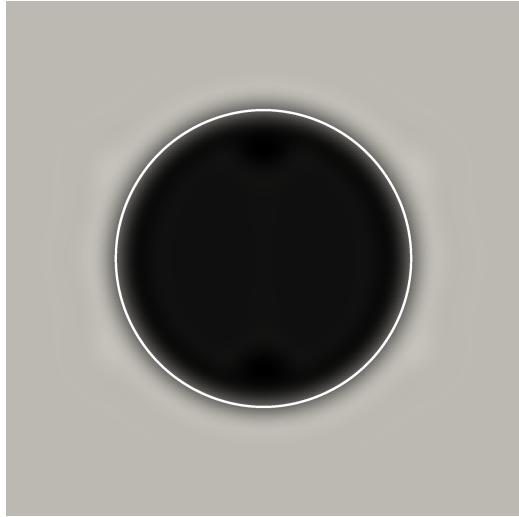
(c) $t = 0.016 \text{ c}$



(d) $t = 0.075 \text{ c}$

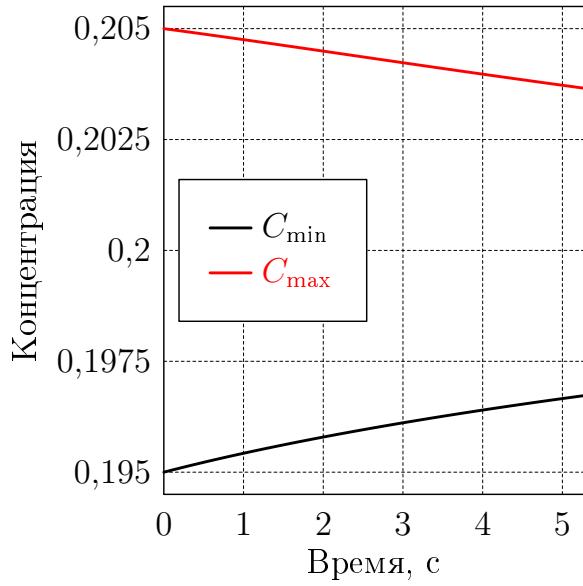


(e) $t = 0.2 \text{ c}$

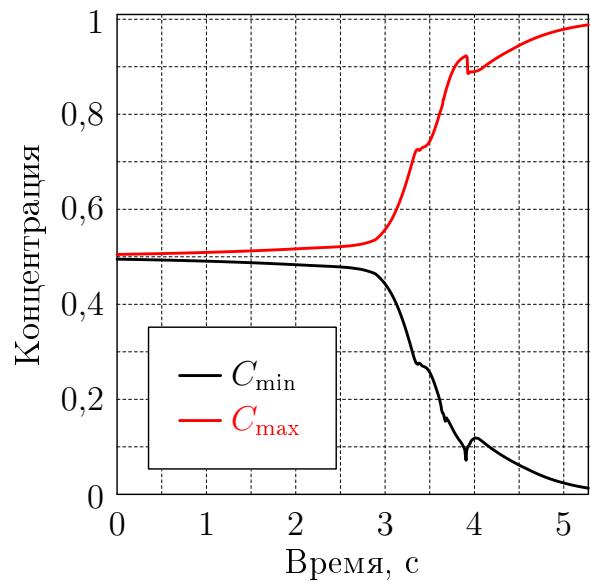


(f) $t = 1.25 \text{ c}$

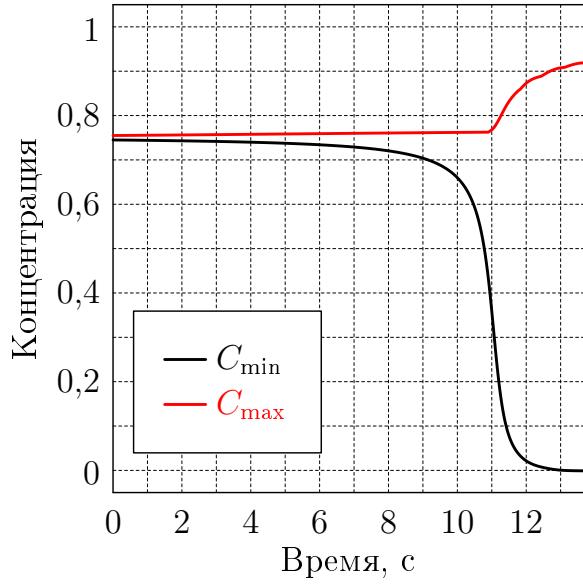
Рис. 3. Последовательные этапы эволюции слияния двух капель



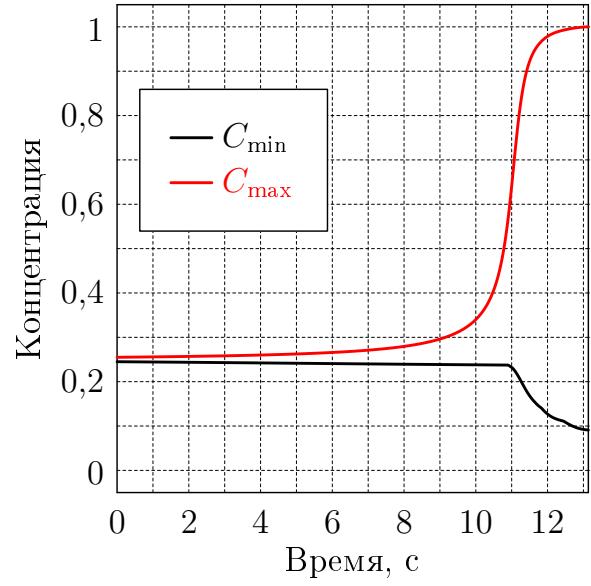
(a) $\bar{C} = 0.2$, устойчивость



(b) $\bar{C} = 0.5$, неустойчивость



(c) $\bar{C} = 0.75$, неустойчивость



(d) $\bar{C} = 0.25$, неустойчивость

Рис. 4. Самопроизвольный «распад» однородной смеси: эволюция максимального C_{\max} и минимального C_{\min} значений C для различных \bar{C} .

Результаты расчетов показали, что при $\bar{C} = 0.2, 0.8$ с ростом времени значения C во всех узлах сетки стремились к \bar{C} , т.е. начальные возмущения уменьшались и не происходило «распада» смеси на два отдельных компонента. Это свидетельствует об устойчивости таких значений \bar{C} . На рис. 4а представлены графики эволюции максимального C_{\max} и минимального C_{\min} значений C при $\bar{C} = 0.2$.

Иначе дело обстоит при $\bar{C} \in \{0.25, 0.5, 0.75\}$: с ростом времени значения концентрации C в узлах сетки стремились либо к 1, либо к 0, т.е. такие значения \bar{C} оказались неустойчивыми. На рис. 4б–4д представлены графики эволюции величин C_{\max} и C_{\min} для случаев $\bar{C} = 0.5, 0.75, 0.25$. Видно, что C_{\max} сразу начинает увеличиваться, а C_{\min} — уменьшаться. Вначале это происходит сравнительно медленно, но начиная с некоторого момента времени процесс ускоряется и в итоге смесь «распадается» на два компонента. Упомянем, что иногда в подобных расчетах наблюдался выход значений C за пределы интервала $(0, 1)$, что является нефизичным артефактом.

Таким образом, наблюдаемое в численных расчетах поведение концентрации C полностью согласуется с критерием линеаризованной устойчивости (3.11), (3.12).

Дополнительно на рис. 5 для случая $\bar{C} = 0.25$ приведено распределение C на момент времени $t = 12.75$ с, что соответствует слою с номером $1.02 \cdot 10^7$ по времени. На нем серым цветом помечены зоны со значением $C \approx 0.098$, а черным — с $C \approx 0.9973$.

Отметим, что был также выполнен ряд расчетов для меньших значений параметра A_ψ . В них при нарушении условий линеаризованной устойчивости самопроизвольный распад смеси также наблюдался, но время его наступления соответственно увеличивалось.

В целом выполненные численные эксперименты показали, что используемая КГДД система уравнений качественно верно описывает эффекты, связанные с поверхностным натяжением и разделением фаз.

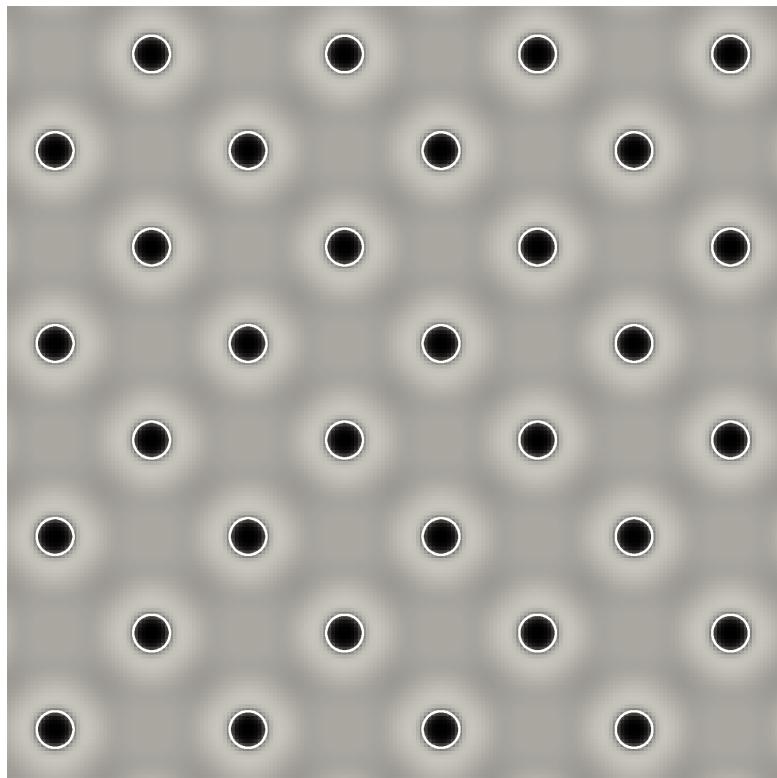


Рис. 5. Самопроизвольный «распад» однородной смеси: распределение C на момент времени $t = 12.75$ с в случае $\bar{C} = 0.25$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
2. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
3. Шеретов Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно–временном осреднении. Москва–Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
4. Елизарова Т.Г., Афанасьева М.В. Регуляризованные уравнения мелкой воды // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2010. Т. 65. С. 15–18.
5. Булатов О.В., Елизарова Т.Г. Регуляризованные уравнения мелкой воды и эффективный метод численного моделирования течений в неглубоких водоемах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. Т. 51. № 1. С. 170–184.
6. Злотник А.А. Квазигазодинамическая система уравнений с общими уравнениями состояния // Доклады АН. 2010. Т. 431. № 5. С. 605–609.

7. *Popov M.V., Elizarova T.G.* Smoothed MHD equations for numerical simulations of ideal quasi-neutral gas dynamic flows // Comput. Phys. Commun. 2015. V. 196. P. 348–361.
8. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О параболичности квазигазодинамической системы уравнений, ее гиперболической 2-го порядка модификации и устойчивости малых возмущений для них // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. № 3. С. 445-472.
9. Злотник А.А. О параболичности квазигидродинамической системы уравнений и устойчивости малых возмущений для нее // Матем. заметки. 2008. Т. 83. № 5. С. 667–682.
10. Злотник А.А. Энергетические равенства и оценки для баротропных квазигазо- и квазигидродинамических систем уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50. № 2. С. 325–337.
11. Злотник А.А. О квазигазодинамической системе уравнений с общими уравнениями состояния и источником тепла // Матем. моделирование. 2010. Т. 22. № 7. С. 53-64.
12. Злотник А.А. Линеаризованная устойчивость равновесных решений квазигазодинамической системы уравнений // Доклады АН. 2010. Т. 433. №6. С. 599-603.
13. Злотник А.А. О построении квазигазодинамических систем уравнений и баротропной системе с потенциальной массовой силой // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 4. С. 65–79.
14. Ducomet B., Zlotnik A. On a regularization of the magnetic gas dynamics system of equations // Kinetic Relat. Models. 2013. V. 6. № 3. P. 533-543.
15. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады РАН. 2014. Т. 459. № 4. С. 395–399.
16. Шеретов Ю.В. Регуляризованные уравнения гидродинамики. Тверь: Тверской ГУ, 2016.
17. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Квазигидродинамическая система уравнений для описания течений многофазной жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 75. С. 1–37. URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-75>

18. Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics // Ann. Rev. Fluid Mech. 1998. V.30. P. 139–165.
19. Lowengrub J., Truskinovsky L. Quasi-incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // Proc. Royal Soc. London A. V. 454. 1998. P. 2617–2654.
20. Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Описание течений вязкой жидкости с подвижной твердой фазой в теории функционала плотности // Инженерно-физический журнал. 2007. Т. 80. №5. С. 70–77.
21. Демьянин А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
22. Kim J. Phase-field models for multi-component fluid flows // Commun. Comput. Phys. 2012. V. 12. № 3. P. 613–661.
23. Балашов В.А., Савенков Е.Б. Численное исследование двумерной квазигидродинамической модели течения двухфазной изотермической жидкости с учетом поверхностных эффектов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 13. 20 с. doi:10.20948/prepr-2016-13, URL:<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-13>
24. Злотник А.А. О консервативных пространственных дискретизациях баротропной квазигазодинамической системы уравнений с потенциальной массовой силой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56. № 2. С. 301–317.
25. Barrett J.W., Blowey J.F., Garcke H. Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility // SIAM J. Numer. Anal. 1999. V. 37. P. 286–318.
26. Blowey J.F., Elliott C.M. The Cahn–Hilliard gradient theory for phase separation with non-smooth free energy. Part I: Mathematical analysis // European J. Appl. Math. V. 2. 1991. P. 233–280.
27. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973.
28. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.