



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

Зайцев Н. А., Критский Б.В.

Расчет течений жидкости
Ван дер Ваальса в модели
диффузного интерфейса
локальным разрывным
методом Галеркина

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зайцев Н. А., Критский Б.В. Расчет течений жидкости Ван дер Ваальса в модели диффузного интерфейса локальным разрывным методом Галеркина // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 165. 18 с. doi:[10.20948/prepr-2018-165](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-165)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-165>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский

**Расчет течений жидкости Ван дер Ваальса
в модели диффузного интерфейса
локальным разрывным методом
Галеркина**

Москва — 2018

Н. А. Зайцев, Б. В. Критский. *Расчет течений жидкости Ван дер Ваальса в модели диффузного интерфейса локальным разрывным методом Галеркина.*

Аннотация. В препринте описывается математическая постановка задачи двухфазного однокомпонентного течения с фазовой границей. Приведены уравнения движения среды и определяющие соотношения. Приведено описание численного метода. В заключение представлен ряд численных расчетов.

Ключевые слова: двухфазные течения, прямое численное моделирование, термодинамическая модель, диффузный интерфейс.

N. A. Zaitsev, B. V. Kritskii. *Calculation of van der Waals fluid flows in the diffuse interface model by the Galerkin local discontinuous method.*

Abstract. The preprint presents mathematical model of two-phase one-component flow with phase interface. Equations of model and constitutive relations are described. Numerical method for solving of above equations is reviewed. Results of numerical simulations for test problems are presented.

Key words: two-phase flows, direct numerical simulation, thermodynamic model, diffuse interface

Оглавление

Введение.....	3
§1. Уравнения движения.....	4
§2. Уравнение состояния.....	5
§3. Численный метод.....	11
§4. Численные эксперименты.....	14
Задача 1. Колебание эллиптической капли.....	14
Задача 2. Слияние двух капель.....	16
Список литературы.....	18

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда (проект № 14-21-00025).

Введение

В данной работе рассматривается моделирование течений с фазовыми переходами. Фазовые переходы встречаются как в повседневной жизни (кипение воды), так и при эксплуатации различных механизмов. Примерами могут служить генерация и последующая конденсация пара в установках тепловой и атомной энергетики, процессы дистилляции, ректификации, выпарки, используемые в химической технологии, холодильной и криогенной технике, пищевых производствах. Двухфазные течения возникают в задачах нефтедобычи как при фильтрации флюидов в пласте, так и при их течении внутри ствола скважины. В промышленности фазовые переходы происходят в парогенераторах, теплообменниках и различных трубопроводах.

Фазовые переходы характеризуются резким изменением свойств среды при переходе через границу раздела фаз. При вращении корабельного винта, например, возникает явление кавитации, когда давление локально опускается ниже давления кипения жидкости и осуществляется фазовый переход. При переходе пузырька в зону нормального давления происходит его быстрое схлопывание, сопровождаемое образованием волн давления, приводящих к разрушению лопастей винта.

Для моделирования указанных выше процессов используются самые различные методы, которые можно разделить на две большие группы. Методы первой группы основывались на концепции многоскоростного континуума и определении взаимопроникающего движения фаз (см., например, [1]). Уравнения для этих моделей получаются при помощи различных процессов усреднения. При решении задач не производится рассмотрение каждого пузырька в отдельности, вместо этого производится усреднение, "размазывание" каждой фазы по всему объему. Многоскоростной континуум в случае двухфазных однокомпонентных сред представляет собой совокупность двух континуумов, каждый из которых относится к своей фазе и имеет свою плотность, свою скорость и т.д. Взаимодействие пара с жидкостью описывается с помощью относительных фазовых проницаемостей, считается, что в каждой точке двухфазная среда находится в термодинамическом равновесии. Более подробные модели, образующие вторую группу методов, выделяют границу между различными фазами. Модели второй группы, в свою очередь, можно разделить на две подгруппы: модели с четкой границей и модели с диффузной границей [4,5]. В данной работе рассмотрена модель, принадлежащая ко второй подгруппе.

В настоящем препринте рассказывается об опыте решения уравнений Навье-Стокса-Кортевега, описывающих движение двухфазной среды в рамках модели диффузного интерфейса, локальным разрывным методом Галеркина для среды Ван-дер-Ваальса — многие вычислительные трудности для реальных двухфазных сред и среды Ван-дер-Ваальса совпадают, т.к. определяются

наличием так называемой области эллиптичности в пространстве определяющих термодинамических параметров.

§1. Уравнения движения

В отсутствие источников импульса и энергии уравнения Навье-Стокса-Кортевега в неизотермическом случае имеют вид (см., например, [8, 9]):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} + \mathbf{T}), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E \mathbf{u}) = \nabla \cdot ((\boldsymbol{\tau} + \mathbf{T}) \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{j}_E, \quad (3)$$

где ρ — плотность, \mathbf{u} — вектор скорости, тензор вязких напряжений

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (4)$$

η и μ — коэффициенты вязкости, поток тепла

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (5)$$

T — температура, k — коэффициент теплопроводности, поток энергии, связанный с капиллярными эффектами,

$$\mathbf{j}_E = K(\rho \nabla \cdot \mathbf{u}) \nabla \rho, \quad (6)$$

тензор статических напряжений

$$\mathbf{T} = \left(-P + \rho K \Delta \rho + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{I} - \nabla \rho \otimes \nabla \rho \quad (7)$$

является такой составляющей полного тензора напряжений, которая не зависит от скорости и не дает вклада в производство энтропии, состоит из тензора капиллярных сил, называемого также тензором Кортевега, и тензора напряжений, связанного с градиентом термодинамического давления P . Полная энергия единицы объема

$$E = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{2} K |\nabla \rho|^2, \quad (8)$$

где K — пропорциональный коэффициенту поверхностного натяжения коэффициент капиллярной (градиентной) энергии, ε — внутренняя энергия единицы массы.

Для замыкания системы уравнений (1) – (8) необходимы функции $T(\rho, \varepsilon)$ и $P(\rho, \varepsilon)$.

§2. Уравнение состояния

Уравнения (1) – (8), выражающие законы сохранения массы, импульса и энергии сплошной среды, должны быть дополнены функциями $P(\rho, \varepsilon)$ и $T(\rho, \varepsilon)$. Двухфазные жидкости (т.е. жидкости, допускающие наличие двух фаз) описываются уравнением состояния $P = P(\rho, T)$, у которых изотермы $P = P(\rho)$ являются немонотонными функциями, что и обеспечивает наличие нескольких фаз. Чтобы жидкость была именно двухфазной, а не многофазной, изотермы должны обладать одним локальным максимумом и одним локальным минимумом. Кроме того, у всех реальных жидкостей немонотонность указанных изотерм имеет место не при всех T , а только при T меньше некоторой температуры T_{crit} , которая называется критической.

Всеми этими свойствами обладает аналитическое уравнение Ван-дер-Ваальса, которое и использовалось в настоящей работе, так как требует меньше вычислительных ресурсов, чем экспериментально полученные уравнения состояния, но создает ту же вычислительную трудность, которой посвящен этот параграф.

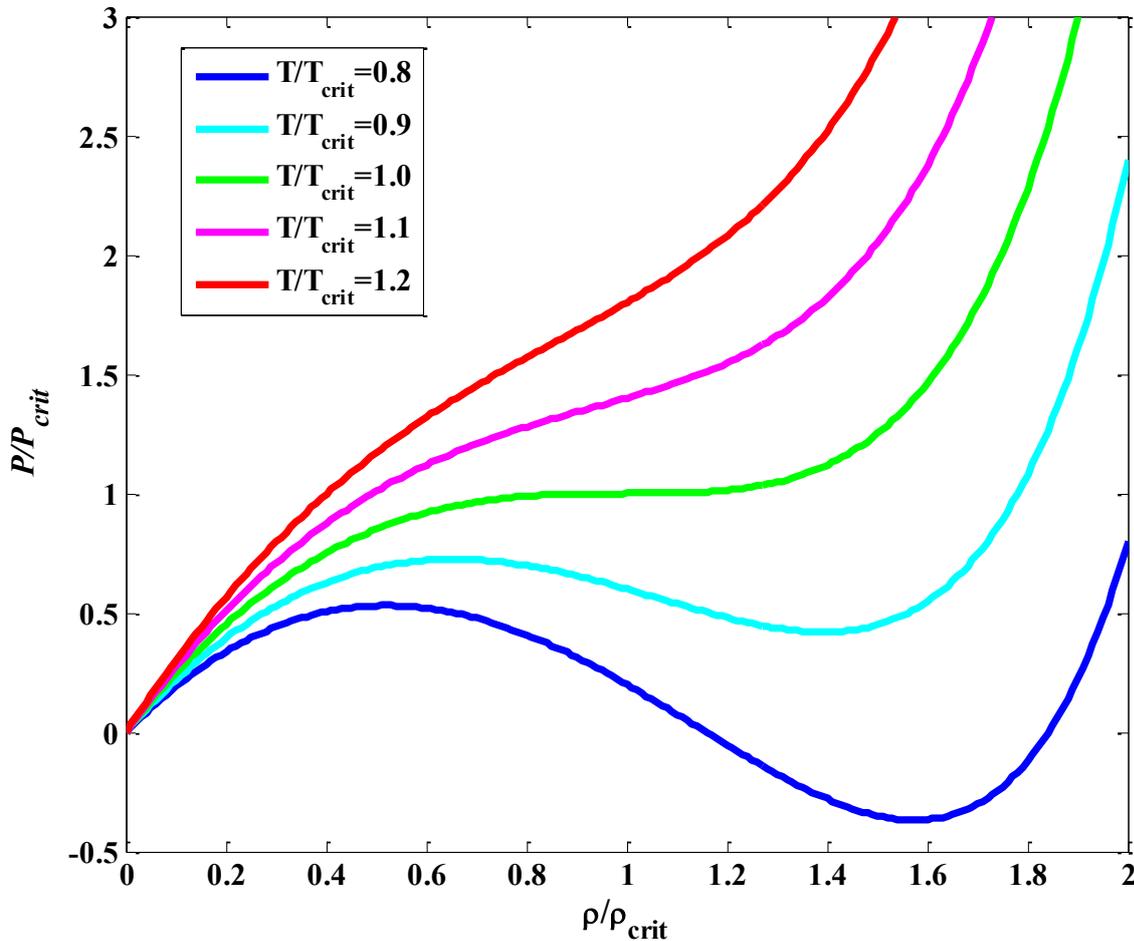


Рис. 1. Зависимость давления от плотности при различных значениях температуры T жидкости Ван-дер-Ваальса.

Для жидкости Ван-дер-Ваальса давление, температура, плотность и внутренняя энергия связаны следующими соотношениями:

$$T(\varepsilon, \rho) = \frac{1}{c_v}(\varepsilon + a\rho), \quad (9)$$

$$P(\varepsilon, \rho) = \frac{\rho b R T(\varepsilon, \rho)}{b - \rho} - a\rho^2, \quad (10)$$

где c_v — теплоемкость при постоянном объеме, R — универсальная газовая постоянная, параметры a и b связаны с параметрами вещества в критической точке следующим образом:

$$P_{crit} = \frac{ab^2}{27}, \quad \rho_{crit} = \frac{b}{3}, \quad T_{crit} = \frac{8ab}{27R}.$$

На Рис. 1 показаны графики зависимости давления от температуры при различных значениях температуры T . При $T > T_{crit}$ функции $P(\rho)$ являются монотонно возрастающими и нет двух различных фаз. При $T < T_{crit}$ функция $P(\rho)$ имеет два локальных экстремума, и при некоторых значениях давления обратная функция является трехзначной. В области трехзначности функции $\rho(P)$ минимальное значение соответствует газообразной фазе вещества, максимальное — жидкой фазе.

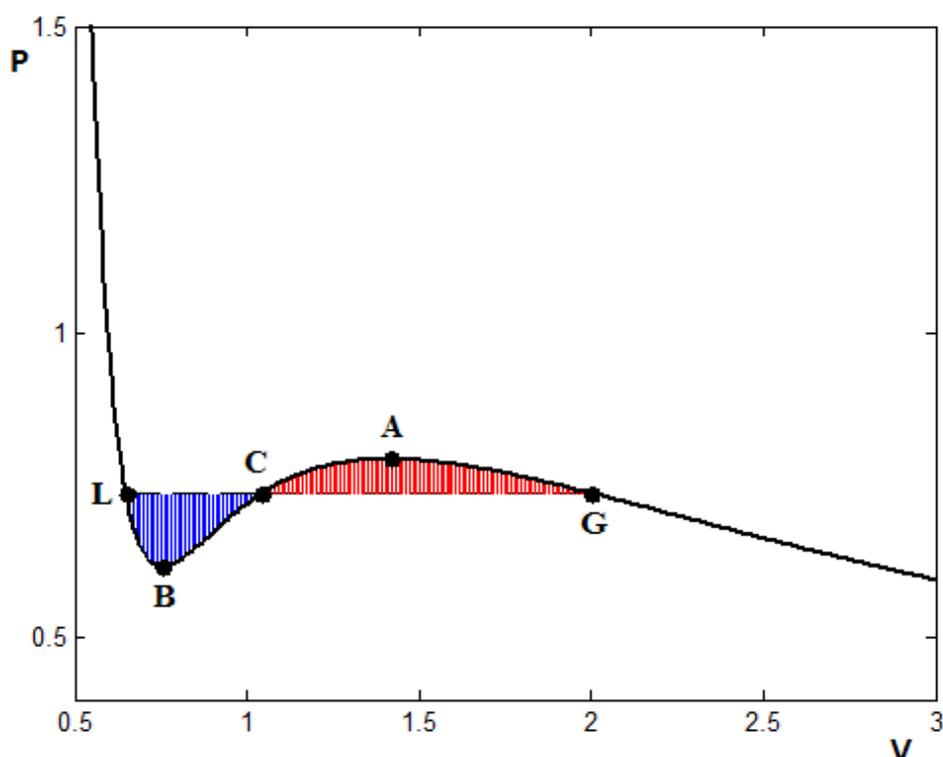


Рис. 2. Схематическое изображение зависимости давления от удельного объема при температуре $T < T_{crit}$.

Таким образом, при некоторых значениях температуры и давления жидкости Ван-дер-Ваальса могут сосуществовать две фазы. Для этого должны быть равны также химические потенциалы фаз. Это требование эквивалентно следующему правилу Максвелла.

Рассмотрим график зависимости давления в жидкости Ван-дер-Ваальса от удельного объема $V = 1/\rho$ при заданной температуре $T < T_{crit}$, схематически изображенной на Рис. 2. Равновесие газообразной и жидкой фаз реализуется при таком положении горизонтальной линии LG, соответствующей давлению

насыщения P_S , что площади заштрихованных фигур LBC и CAG равны. Давление насыщения $P_S(T)$ является функцией температуры, при котором фазы находятся в равновесии.

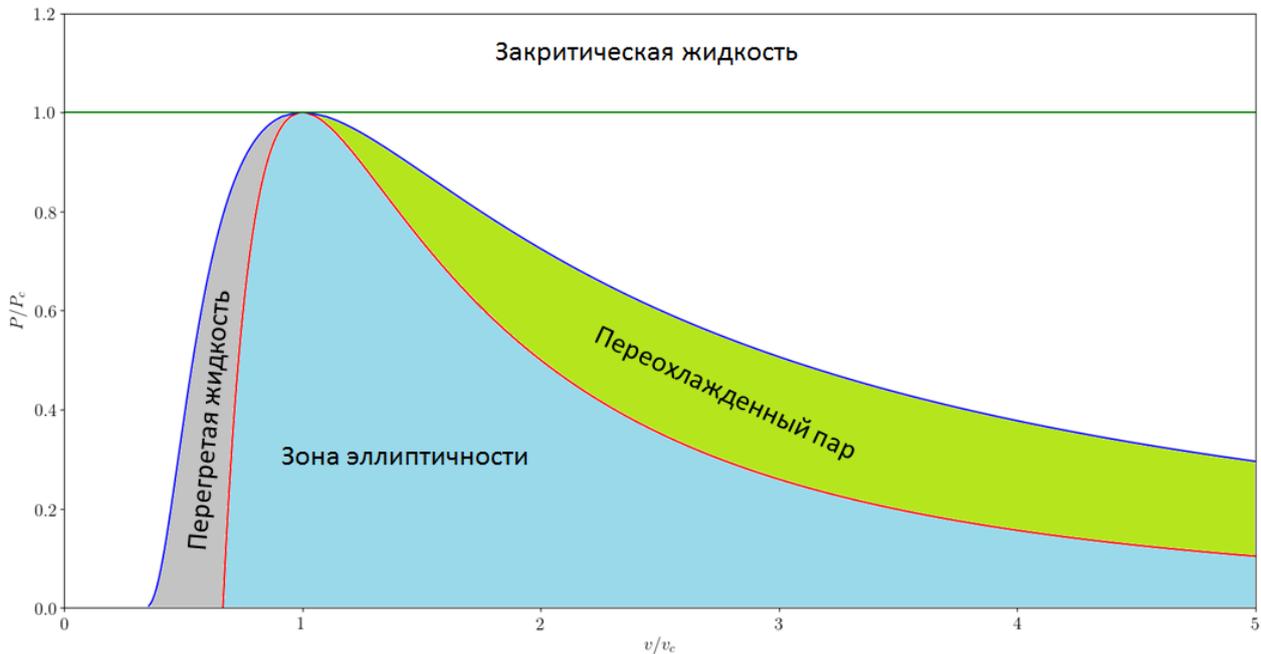


Рис. 3. Схематическое разбиение плоскости (ρ, T) для жидкости Ван-дер-Ваальса на зоны суперкритической жидкости, метастабильного пара, метастабильной жидкости, зоны эллиптичности и термодинамически устойчивых зон.

Точки L и G Рис. 2 соответствуют состояниям Максвелла (точки равновесного сосуществования жидкой и газообразной фаз). Множество этих точек для разных температур образуют в плоскости (ρ, T) бинодаль (бинодальную кривую), которая изображена на Рис. 3 сплошной черной линией. Точки A и B Рис. 2 образуют в плоскости (ρ, T) спинодаль (спинодальную кривую), показанную на Рис. 3 штриховой линией.

В областях между спинодальной кривой и бинодальной кривой вещество находится в метастабильном состоянии: перегретая жидкость и переохлажденный пар. Область над бинодальной кривой является зоной термодинамически устойчивых состояний. Область под спинодальной кривой называется областью эллиптичности. Дело в том, что при формальном использовании уравнений состояния (9) – (10) в этой области параметров "гиперболическая" часть системы определяющих уравнений (1) – (8), которая получается пренебрежением в ней вязкими, теплопроводными и капиллярными явлениями, теряет свою гиперболичность: собственные числа, которые

определяют наклон звуковых характеристик, становятся мнимыми, и система уравнений становится неэволюционной.

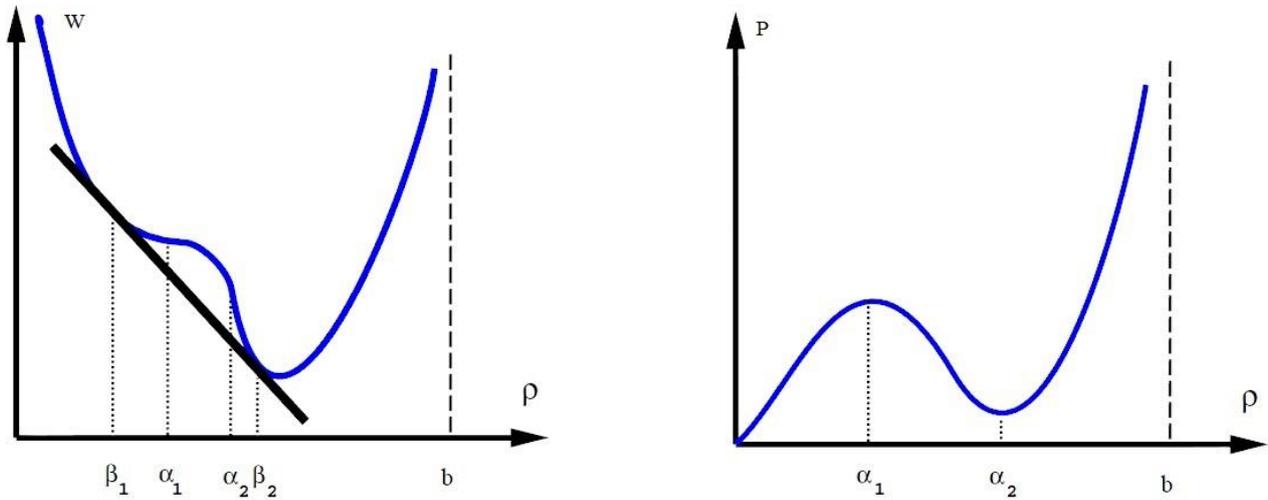


Рис. 4. Слева: схематическое изображение функции свободной энергии единицы объема (11) жидкости Ван-дер-Ваальса при фиксированной температуре $T < T_{crit}$, наклонная прямая — дважды касательная в точках β_1 и β_2 ; справа: схематическое изображения соответствующей функции давления (10).

Спинодальные и бинодальные кривые можно получить также другим способом. Уравнению состояния Ван-дер-Ваальса (9) – (10) соответствует следующая функция свободной энергии единицы объема:

$$W(\rho, T) = RT\rho \ln\left(\frac{\rho}{b-\rho}\right) - a\rho^2 + C_v f(T). \quad (11)$$

На Рис. 4 слева схематически показана изотерма свободной энергии $W(\rho)$ (11) жидкости Ван-дер-Ваальса для $T < T_{crit}$. На том же рисунке справа показана соответствующая функции (11) изотерма давления $P(\rho)$ (10). Точки $\rho = \alpha_1$ и $\rho = \alpha_2$ являются точками локальных экстремумов (максимума и минимума соответственно) функции $P(\rho)$ и точками нулевой кривизны функции $W(\rho)$ (точки В и А на Рис.2). Слева на Рис. 4 показана дважды касательная прямая к кривой $W(\rho)$. Точки касания $\rho = \beta_1$ и $\rho = \beta_2$ совпадают с состояниями Максвелла (точки L и G на Рис. 2). Таким свойством обладают не только жидкости Ван-дер-Ваальса, но и все жидкости, подчиняющиеся законам термодинамики. Таким образом, точки бинодалей можно определить как точки касания прямой "снизу" изотерм $W(\rho)$. Следовательно, область параметров, в которой система уравнений теряет гиперболичность, есть у всех жидкостей с невыпуклой функцией свободной энергии.

Такое свойство уравнений состояния не является критичным для классического описания взаимодействия фаз, в котором интерфейс является поверхностью нулевой толщины, на которой ставятся условия непрерывности температуры и нормальной компоненты скорости, а также перепад давления в фазах (формула Лапласа):

$$\Delta P = K \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right),$$

где R_1 и R_2 — радиусы главных кривизн в точке интерфейса. Если учитываются эффекты теплопроводности, то ставится также условия непрерывности нормального потока тепла. В вязкой жидкости дополнительно ставится непрерывность касательных скоростей. Плотность жидкости при таком моделировании двухфазных жидкостей никогда не оказывается в области эллиптичности: если при заданной температуре попытаться сжать паровую фазу так, чтобы плотность стала больше α_1 , то вещество перейдет в жидкую фазу. Аналогично, при уменьшении плотности жидкой фазы левее точки $\rho = \alpha_2$ вещество перейдет в паровую фазу. Плотность никогда не оказывается в интервале $(\alpha_1(T), \alpha_2(T))$.

Иначе обстоит дело у модели диффузного интерфейса: плотность в области между чистыми фазами проходит все промежуточные значения, включая те, при которых "гиперболическая" часть задачи, как отмечалось выше, теряет гиперболичность, приобретает мнимую скорость звука, а система уравнений — неэволюционность: задача Коши для эллиптической системы некорректна, так как возмущения в начальных данных растут неограниченно быстро.

Диссипация делает задачу параболической, эволюционной, но диссипативные слагаемые начинают играть заметную роль только когда возмущения разовьются достаточно сильно, т.е. решение такой задачи должно иметь осцилляционный характер.

Если двухфазная среда попадает в область "эллиптичности", то происходит спиноподобный распад — расслоение однородного вещества на различные фазы. При спиноподобном распаде расслоение происходит однородно по всему объему вещества, в этом отличие от зародышеобразования (нуклеации) для метастабильных состояний. Спиноподобный распад происходит в случае достаточно быстрого фазового перехода. Его используют для получения материалов с различными функциональными свойствами. Пример — образование неоднородной смеси, имеющей мелкозернистую структуру, при резком охлаждении некоторых твердых растворов. Спиноподобный распад в присутствии нанопор может использоваться для синтеза нанотрубок и наностержней. Однако, если предметом исследования является не результат спиноподобного распада и если сам распад происходит не в значительной части занимаемого веществом объема, а в тонкой зоне межфазного интерфейса и

является переходным процессом превращения одной фазы в другую, то в процессе численного моделирования естественно стараться избежать возникновения осцилляционных решений.

Таким образом, во многих, если не в большинстве, практически интересных случаях необходимо регуляризовать задачу, сделать ее решение более гладким, что позволит использовать более крупную сетку, уменьшить размерность дискретной модели и уменьшить время расчета. Регуляризацию задачи можно производить как на континуальном уровне, так и на дискретном. В настоящей работе применена регуляризация на дискретном уровне: применен численный метод, при использовании которого не происходит возникновения спинодального распада на интерфейсе.

§3. Численный метод

Для решения системы уравнений (1) – (8) использовался локальный разрывный метод Галеркина предложенный в [11]. Для технической реализации метода удобно сделать следующие преобразования.

Введем дополнительные переменные для учета производных порядка выше первого:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \tilde{\rho} \\ \tilde{\rho} \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{K} \nabla \rho \\ \sqrt{K} \nabla \cdot \tilde{\rho} \\ -k \nabla T \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Тогда в новых переменных уравнения (1) – (3) после подстановки в них (4) – (7) можно записать как:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I}) - \\ & \nabla \cdot \mu (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{A}} + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{A}}^T) - \nabla \cdot \eta (\text{tr}(\tilde{\mathbf{A}}) \mathbf{I}) - \\ & \nabla \cdot \left(\left(\rho \tilde{\rho} + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho} \right) \mathbf{I} \right) + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \otimes \tilde{\rho}) = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) - \\
& \nabla \cdot (\eta (\text{tr}(\tilde{A})) \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mu (\tilde{A} + \tilde{A}^T) \cdot \mathbf{u}) - \\
& \nabla \cdot \left(\left(\rho \tilde{\rho} + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho} \right) \mathbf{I} \cdot \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot ((\tilde{\rho} \otimes \tilde{\rho}) \cdot \mathbf{u}) - \\
& \nabla \cdot \sqrt{K} (\rho \text{tr}(\tilde{A})) \tilde{\rho} - \nabla \cdot \mathbf{q} = 0.
\end{aligned} \tag{16}$$

Уравнение (8) примет вид:

$$E = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{2} \tilde{\rho} \cdot \tilde{\rho}. \tag{17}$$

Введем обозначения:

$$\tilde{C} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E), \quad \tilde{D} = (\tilde{A}, \tilde{B}). \tag{18}$$

Перепишем (12) – (13) в форме:

$$\tilde{D} - \nabla \cdot F_{\tilde{D}} = 0, \quad . \tag{19}$$

где

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{D}} = \\
& = \left(\begin{array}{cccccccccccccccc}
u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & 0 & \sqrt{K} \rho & 0 & 0 & \sqrt{K} \tilde{\rho} & -kT & 0 & 0 \\
0 & u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & 0 & \sqrt{K} \rho & 0 & \sqrt{K} \tilde{\rho} & 0 & -kT & 0 \\
0 & 0 & u & 0 & 0 & v & 0 & 0 & w & 0 & 0 & \sqrt{K} \rho & \sqrt{K} \tilde{\rho} & 0 & 0 & -kT
\end{array} \right)^T,
\end{aligned}$$

которая вместе с системой

$$\tilde{C}_i + \nabla \cdot F_{\tilde{C}} = 0, \tag{20}$$

где $F_{\tilde{C}}$ обозначает часть уравнений (14) – (16), дифференцируемую по пространству, и определяющими соотношениями (9) – (10) образует полную систему уравнений.

В слабой постановке в области Δ_E с границей $\partial \Delta_E$ система (19) – (20) запишется как

$$\int_{\Delta_E} \Psi_{\tilde{C}} \tilde{C}_t - \int_{\Delta_E} \nabla \Psi_{\tilde{C}} \cdot F_{\tilde{C}} + \int_{\partial \Delta_E} \Psi_{\tilde{C}} F_{\tilde{C}} \cdot n = 0, \quad (21)$$

$$\int_{\Delta_E} \Psi_{\tilde{D}} \tilde{D} - \int_{\Delta_E} \nabla \Psi_{\tilde{D}} \cdot F_{\tilde{D}} + \int_{\partial \Delta_E} \Psi_{\tilde{D}} F_{\tilde{D}} \cdot n = 0, \quad (22)$$

где $\Psi_{\tilde{C}}, \Psi_{\tilde{D}}$ — элементы пространства пробных функций.

Система (21) – (22) решается с помощью разрывного метода Галеркина. Нормальные потоки на гранях, относящиеся к конвективной части, соответствующей задаче

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I}) = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla \cdot (P \mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) = 0,$$

вычисляются по схеме Лакса-Фридрикса [9]:

$$g_{\tilde{C}}^{euler}(\tilde{C}^L, \tilde{C}^R, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{C}}^{euler,L} + F_{\tilde{C}}^{euler,R} \right) \cdot n + \frac{1}{2} |\alpha| \left(\tilde{C}^L - \tilde{C}^R \right),$$

где за α обозначено максимальное по модулю собственное число матриц $\partial(F_{\tilde{C}}^L \cdot n) / \partial \tilde{C}^L$ и $\partial(F_{\tilde{C}}^R \cdot n) / \partial \tilde{C}^R$. Остальные граничные потоки берутся как полусумма потоков слева и справа от границы [9]:

$$g_{\tilde{C}}^{add}(\tilde{C}^L, \tilde{D}^L, \tilde{C}^R, \tilde{D}^L, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{C}}^{add,L} + F_{\tilde{C}}^{add,R} \right) \cdot n,$$

$$g_{\tilde{D}}(\tilde{C}^L, \tilde{D}^L, \tilde{C}^R, \tilde{D}^L, n) = \frac{1}{2} \left(F_{\tilde{D}}^L + F_{\tilde{D}}^R \right) \cdot n.$$

После подстановки разложения по полиномиальным базисам искомым функций в (21) – (22) для коэффициентов разложения получается система обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений. Для интегрирования полученной системы уравнений по времени использовался диагонально неявный метод Рунге-Кутты различных порядков. Система линейных уравнений решалась методом GMRES с предобуславливателем

LU(0). Такая схема имеет теоретически произвольный порядок точности и обеспечивает строгую консервативность. Шаг по времени выбирался из соображений точности. Для схемы Рунге-Кутты второго порядка точности использовалась величина шага $\tau=1.5h$, где h — минимальный размер расчетной ячейки. Для схемы третьего порядка точности использовался шаг $\tau=0.8h$.

§4. Численные эксперименты

Правильность работы кода была проверена на одномерных тестах и сравнением с результатами расчетов двумерного кода. В качестве примеров ниже приведены результаты расчетов двух задач. С целью сокращения времени счета расчет проводился в двумерной постановке. Напомним, что библиотека deal.ii позволяет переключаться между одномерным, двумерным и трехмерным случаями.

Задача 1. Колебание эллиптической капли

В начальный момент времени в области задается эллиптическая капля жидкости с диффузным интерфейсом. Далее пузырек из-за наличия сил поверхностного натяжения совершает колебания в окрестности равновесного сферического состояния. Расчет проводился на сетке 16×16 с помощью разрывного метода Галеркина четвертого порядка, при этом на границу фазового раздела фактически приходится одна ячейка расчетной сетки. Размер расчетной области 0.0004×0.0004 м. Начальная плотность внутри пузырька равна 587.514 кг/м^2 , окружающей среды — 99.5394 кг/м^2 , что соответствует равновесным плотностям для уравнения Ван дер Ваальса при температуре 546 К . Параметры уравнения Ван дер Ваальса брались следующие: $a = 1.0435e+3$, $b = 0.0010345$, $C_v = 3046 \text{ Дж/кг К}$, $m_w = 0.018 \text{ кг/моль}$, где C_v — теплоемкость при постоянном объеме, m_w — масса моля. Внутренняя энергия рассчитывалась по формуле (9):

$$\varepsilon = c_v T - a\rho.$$

В начальном состоянии скорости брались равными нулю. Используемый метод решения требует задания гладких начальных условий, поэтому плотность задавалась по формуле:

$$\rho = \frac{587.514 - 99.5394}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{(1.3e-5 - 4x^2 - y^2)}{4.5e-6}\right) \right] + 99.5394.$$

Вязкость бралась равной $3.0e-8 \text{ Па}\cdot\text{с}$, коэффициент поверхностного натяжения равен $5.6e-8 \text{ кг м}^2/\text{с}^2$.

Результаты расчета представлены на рисунке 5(а, б, в). На рисунке 5а показано распределение плотности при $t=0$. На рисунках 5б и 5в показаны распределения плотности в моменты времени $t=36.6e-8$ сек и $t=67.6e-8$ сек соответственно. Видно, что эллиптическая в начальный момент времени капля (вытянутая вдоль оси Y), сначала приобретает круглую форму при $t=36.6e-8$ сек, потом в результате действия сил инерции снова приобретает эллиптическую форму, только уже вытянутую вдоль оси X.

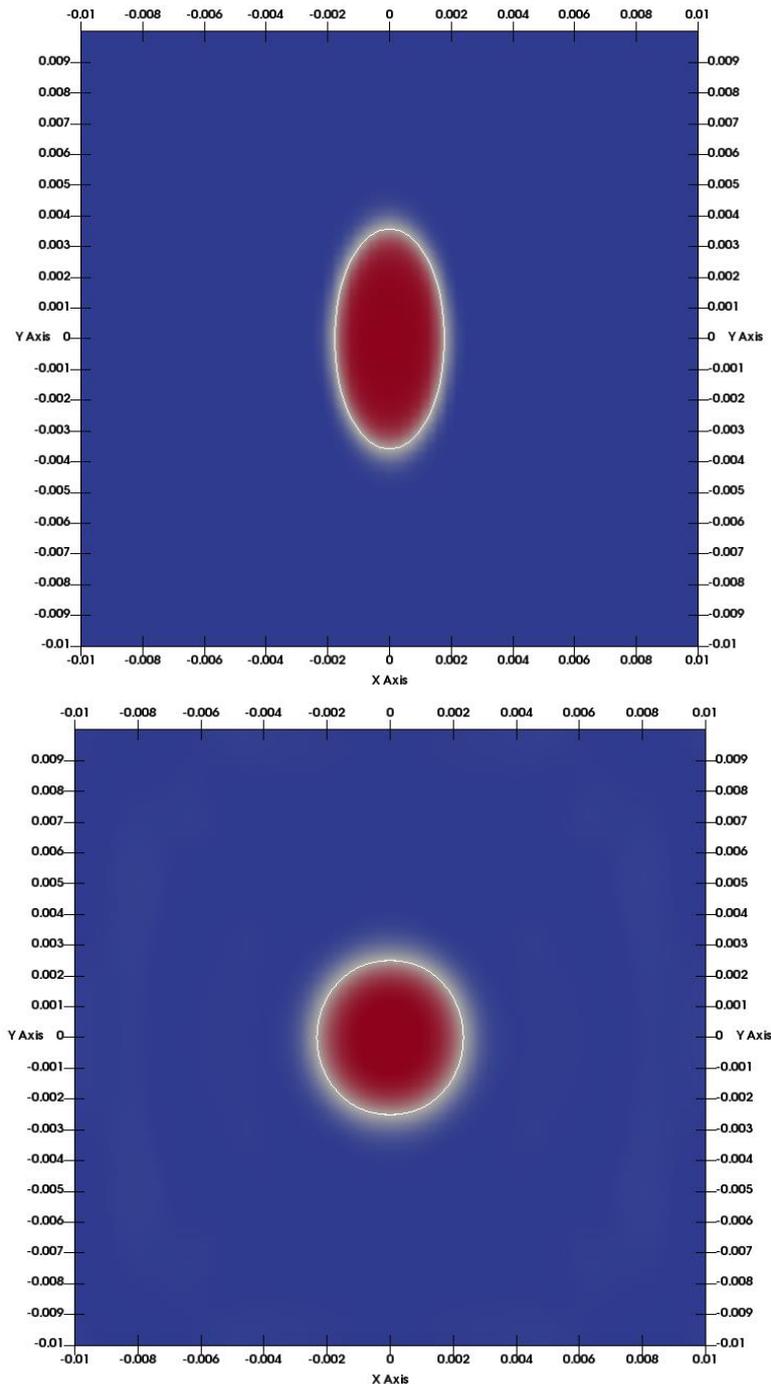


Рис. 5а и 5б. Эволюция эллиптической капли: распределение плотности при $t=0$ и $t=36.6e-8$ сек.

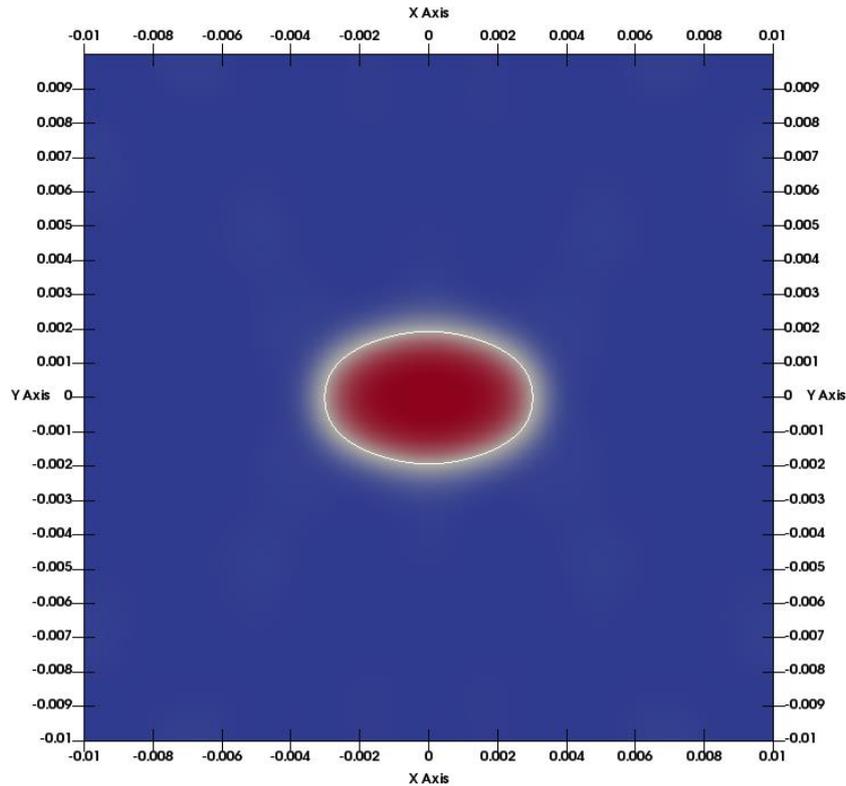


Рис. 5в. Эволюция эллиптической капли:
распределение плотности при $t=67.6e-8$ сек.

Очевидно, что при стремлении t к бесконечности капелька остановится в равновесной круглой форме (в настоящем расчете теплопроводность полагалось равной нулю и сила тяжести отсутствовала).

Задача 2. Слияние двух капель

Задача 2 отличается от задачи 1 начальным распределением плотности, которое определяется формулой

$$\rho = \frac{587.514 - 99.5394}{2} \left\{ 1 + \tanh \left[\frac{(1.3e-5 - (x \pm 0.0036)^2 - y^2)}{4.5e-6} \right] \right\} + 99.5394$$

и показано на Рис. 6а. На Рис. 6б показано распределение плотности при $t=140e-8$ сек. С увеличением времени движение капли продолжается под действием сил инерции, поверхностного натяжения и вязкости, пока под действием диссипации не остановится в равновесной круглой форме.

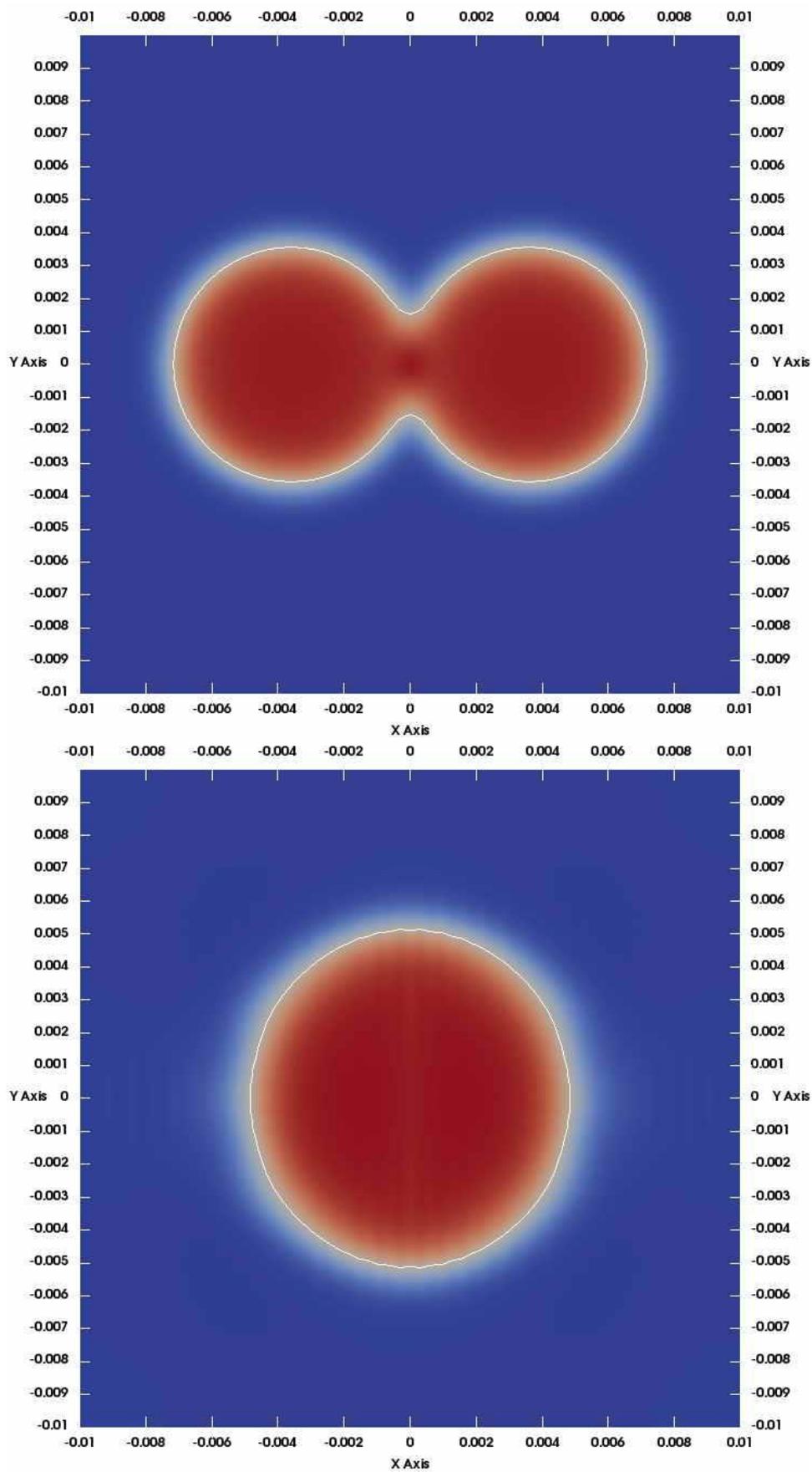


Рис. 6а и 6б. Слияние двух капель: распределение плотности при $t = 0$ и $t = 140e - 8$ сек.

Список литературы

1. Нигматуллин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. - Главная редакция физико-математической литературы издательства "Наука", М., 1978, 336 стр.
2. Lord Rayleigh. 1892. On the theory of surface forces — II. Compressible fluids. *Philosophical Magazine*, XXXIII, pp. 209–220, 1892.
3. Van der Waals J.D. 1893. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation. Transl. JS Rowlinson, 1979, in *J. Stat. Phys.* 20:197–244 (From Dutch, German, French).
4. Korteweg D.J. 1901. Sur la forme que prennent es équations du mouvements des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. *Arch. Néerl. Sci. Exactes Nat. Ser. II* 6:1–24.
5. Cahn J. W. and Hilliard J. E., Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.*, **28**, 258 (1958).
6. Труды ИБРАЭ РАН. Вып. 14: Методы прямого численного моделирования в двухфазных средах / Ред. Л.А. Большов. – М.: Наука, 2013, 197 с.
7. Davis H. T. and Scriven L. E. Stress and Structure in Fluid Interfaces, in *Advances in Chemical Physics*, Volume 49, pp. 357–454 (eds I. Prigogine and S. A. Rice), 1982.
8. Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998) 139–165.
9. Tian L., Xu Ya., Kuerten J.G.M., van der Vegt J.J.W., A Local Discontinuous Galerkin Method For the (Non)-Isothermal Navier-Stokes-Korteweg Equations, *J. Comput. Phys.*, 295 (2015), 685–714.
10. Liu Ju & Landis Chad & Gomez Hector & J.R. Hughes Thomas. Liquid-Vapor Phase Transition: Thermomechanical Theory, Entropy Stable Numerical Formulation, and Boiling Simulations. ICES REPORT 15-14, May 2015.
11. Cockburn B. and Shu C.-W., The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems, *SIAM J. Numer.Anal.*, 35 (1998), pp. 2440–2463.
12. MPI Documents (<http://www.mpi-forum.org/docs/docs.html>).
13. Paraview — Open Source Scientific Visualization (<http://www.paraview.org>).