

МОДЕЛЬ ГРАДИЕНТА ПЛОТНОСТИ В СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНОЙ ПОСТАНОВКЕ И ЕЕ ЯВНО-НЕЯВНАЯ ДИССИПАТИВНАЯ ДИСКРЕТИЗАЦИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ

© 2024 г. В. А. Балашов^{1,*}, Е. А. Павлишина^{2,**}, Е. Б. Савенков^{1,***}

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

² 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, НИУ МФТИ, Россия

*e-mail: vladislav.balashov@gmail.com

**e-mail: pavlishina.ea@phystech.edu

***e-mail: savenkov@keldysh.ru

Поступила в редакцию 02.04.2024 г.

Переработанный вариант 02.04.2024 г.

Принята к публикации 02.05.2024 г.

Работа посвящена разработке безусловно градиентно-устойчивого (диссипативного) численного метода для решения консервативной модели градиента плотности в сферически-симметричной постановке. Для построения алгоритма использован метод Эйра на основе выпуклого расщепления свободной энергии системы. Доказывается градиентная устойчивость построенного алгоритма в полудискретном и полностью дискретном случаях. Теоретические результаты подтверждены рядом тестовых расчетов. Предложенный численный метод применен для анализа влияния способа задания диффузионной подвижности на характер эволюции межфазной границы. Библ. 23. Фиг. 12. Табл. 2.

Ключевые слова: теория градиента плотности, диссипативный метод, явно-неявная аппроксимация, выпуклое расщепление, сферически-симметричная постановка.

DOI: 10.31857/S0044466924080148, EDN: XZXYEB

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача математического моделирования двухфазных микротечений часто возникает при анализе целого ряда естественных и техногенных систем, например, в рамках разработки технологий «lab-on-a-chip» («лаборатория на чипе») или описании микротечений в поровых пространствах образцов горных пород. Поэтому создание новых и совершенствование существующих математических моделей, равно как и разработка вычислительных методов для их анализа, являются важными задачами, решение которых дает возможность исследования и оптимизации соответствующих гидродинамических процессов.

Содержательные постановки целого ряда задач из указанного выше класса предполагают прямое и явное разрешение границ раздела фаз и их эволюции, а также учета капиллярных эффектов. В настоящее время известно несколько классов математических моделей, допускающих такое описание.

Первая широко распространенная группа моделей — так называемые модели с четкой границей — предполагает, что межфазная граница является математической поверхностью «нулевой толщины». В рамках этого допущения известны такие методы, как метод «жидкого объема» («volume-of-fluid») (см. [1]) (в отечественной литературе более известный как метод концентраций, см. [2]), метод множеств уровня («level set») (см. [3]), метод решеточных уравнений Больцмана (впрочем в работе [4] показано, что данный подход эквивалентен некоторому многошаговому конечно-разностному методу).

Ко второму часто применяемому классу моделей относятся модели типа фазового поля (их также называют моделями с «диффузной» границей) (см. [5]). В отличие от моделей с четкой границей в них предполагается, что межфазная граница представляет собой тонкий слой конечной толщины, в пределах которого действуют

¹) Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-11-00203).

силы межфазного натяжения. Примерами таких моделей являются модель Кана–Хилларда (см. [6]), Кортвега (см. [7]), Алена–Кана (см. [8]) и модели, основанные на теории градиента плотности (Density Gradient Theory, DGT) (см. [9]–[12]).

Основным элементом моделей типа фазового поля является предположение о том, что (а) свободная энергия Гельмгольца системы (или другой термодинамический потенциал) зависит не только от фазового поля (в качестве которого может выступать какая-либо искусственная величина, концентрация или, в случае DGT, плотности компонентов смеси), но также от их пространственных производных, и (б) зависимость описывающего состояние системы термодинамического потенциала от параметров порядка является *невыпуклой* функцией. В комбинации эти два фактора позволяют учесть как поверхностное натяжение (энергию межфазной границы), так и обеспечить конечную толщину межфазного слоя, в том числе, в случае сложной геометрической и топологической эволюции границы раздела фаз. Модели типа фазового поля являются наиболее физически обоснованными, но в то же время и наиболее «тяжелыми» с вычислительной точки зрения: они включают в себя пространственные производные высоких порядков (например, баланс массы в модели Кана–Хилларда является уравнением 4-го порядка) и являются сильно нелинейными.

В настоящей работе рассматривается консервативная эволюционная модель, основанная на теории градиента плотности (см. [9]–[11]), в пространственно-одномерной сферически-симметричной постановке. Для модели разработан полудискретный (непрерывный по времени и дискретный по пространству) диссипативный («энергетически-устойчивый») метод. С использованием метода выпуклого расщепления (convex-splitting method) полной энергии Гельмгольца, предложенного в работе [13], построен *полностью* дискретный *безусловно* диссипативный метод.

Суть метода выпуклого расщепления заключается в представлении исходного функционала свободной энергии Ψ в виде суммы выпуклого и вогнутого:

$$\Psi = \Psi^c + (-\Psi^e) \equiv \Psi^c - \Psi^e.$$

При построении дискретизации по времени выпуклая часть Ψ^c аппроксимируется неявным образом, а вогнутая $-\Psi^e$ — явным. Верхние индексы «с» и «е» являются сокращениями от «contraction» (сжатие) и «expansion» (расширение) соответственно. Такая терминология связана с тем, что модели типа фазового поля тесно связаны с моделями «градиентных течений» (gradient flow models, см., например, [14]) вида

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla\mathcal{F}(\mathbf{u}(t)),$$

и если \mathcal{F} является выпуклым, то пучок кривых $\mathbf{u}(t)$ сходится, а если вогнутым, то расходится.

По всей видимости, метод выпуклого расщепления является единственным из известных в настоящее время, который позволяет добиться безусловной градиентной устойчивости (диссипативности) при дискретизации по времени в случае, если пространственная дискретизация, т.е. соответствующий полудискретный метод, обладает этим свойством.

Здесь под диссипативностью численного метода подразумевается наследование разностной схемой свойства невозрастания полной энергии Гельмгольца, выполненного для исходной («непрерывной») модели. Часто это свойство также называют градиентной (или энергетической) устойчивостью численного метода. Градиентная устойчивость метода гарантирует термодинамическую корректность результатов моделирования, отсутствие таких численных артефактов, как «паразитные токи» (см., например, [15]), и обеспечивает численную устойчивость метода в классическом понимании этого термина.

В настоящей работе дискретизация по пространству выполнена аналогично более ранним работам авторов [16]–[18], где рассматривались многофазные гидродинамические регуляризованные (согласно квазигидродинамической методике) модели типа фазового поля. Рассмотренные в этих работах вычислительные алгоритмы используют чисто явные эйлеровы аппроксимации по времени. Это накладывает серьезные ограничения на величину временного шага. Поэтому в рамках настоящей работы разработан *полностью* дискретный *безусловно* диссипативный метод (т.е. метод, являющийся диссипативным при любой величине шага по времени).

Рассматриваемая в настоящей работе математическая модель является упрощенным одномерным сферически-симметричным вариантом DGT-моделей из [16]–[18], однако отражает многие их характерные особенности, основные из которых — наличие высоких производных по пространству и невыпуклость энергии Гельмгольца системы. Отметим, что обычно в литературе рассматриваются одномерные DGT-модели, соответствующие плоско-параллельному случаю. При построении аппроксимаций чаще всего рассматривается их запись в неконсервативной форме. Сферически-симметричная постановка рассмотрена в [10], но и в этой работе используется неконсервативная форма записи уравнений. Новизна настоящей работы, с одной стороны, состоит в выбранной постановке: рассматривается сферически-симметричная *консервативная* модель DGT. С другой — в использовании невыпуклой части свободной энергии полиномиального

вида. Обычно в рамках DGT-моделей рассматриваются более сложные реалистичные уравнения состояния, которые часто оказываются избыточно сложными в рамках постановок, рассматриваемых при моделировании нестационарных гидродинамических течений с капиллярными эффектами.

Модели типа диффузной границы в целом и DGT-модели в частности являются феноменологическими и требуют для своего замыкания ряд зависимостей, вид которых, с одной стороны, не может быть получен априори, а с другой — существенно влияет на характер эволюции системы. Типичным примером является влияние способа задания диффузионной подвижности на так называемый эффект сжатия капли («droplet shrinkage effect») (см. [19]). Это явление характерно для всех моделей типа фазового поля и состоит в следующем: в зависимости от радиуса капли, толщины межфазной границы и объема окружающей (объемлющей) фазы при стремлении к равновесию одиночная капля может уменьшаться в размерах вплоть до своего полного растворения во вмещающей фазе или сохранять свой объем на больших временах. В настоящей работе этот эффект исследуется численно с применением разработанных вычислительных алгоритмов. При этом сферическая симметрия постановки задачи необходима для аккуратного представления формы капли, а градиентная устойчивость схемы, помимо увеличения шага по времени, позволяет считать, что наблюдаемые в расчетах эффекты связаны с термодинамикой двухфазного равновесия, а не с численными артефактами.

2. ОБОЗНАЧЕНИЯ

В настоящей работе использованы следующие обозначения: Ω — ограниченная область с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$; t и r — временная и радиальная координаты; $\alpha, \beta = 1, 2$ — индексы, используемые для обозначения номера компонента смеси; $\partial_r := \partial/\partial r$ и $\partial_t := \partial/\partial t$ — частные производные по радиальной координате и времени соответственно; δ_r, δ_r^* — разностные отношения (аппроксимации производной ∂_r). Жирный шрифт используется для обозначения векторов или наборов переменных (например, $\boldsymbol{\rho} := (\rho_1, \rho_2)$).

Для произвольных гладких скалярных функций f и g , произвольных гладких векторных полей \mathbf{u} и \mathbf{v} : ∇f — градиент f , $\partial_g f := \partial f/\partial g$ — частная производная по g (если $f = f(g, \cdot)$), $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ — скалярное произведение. Для некоторого функционала $\mathcal{F} = \mathcal{F}[f, \cdot]$: $\delta\mathcal{F}$ — его первая вариация, $\delta\mathcal{F}/\delta f$ — вариационная производная функционала.

По повторяющимся индексам α и β предполагается суммирование от 1 до 2.

3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВУХФАЗНОЙ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ

3.1. Общее описание модели

Для описания двухфазной двухкомпонентной смеси будем использовать модель, основанную на теории градиента плотности (см. [9]–[12]). В рамках нее предполагается, что полная свободная энергия Гельмгольца смеси Ψ зависит не только от пространственных распределений плотностей компонентов $\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x}) := (\rho_1(\mathbf{x}), \rho_2(\mathbf{x}))$, но также от распределений их градиентов $\nabla\rho_\alpha(\mathbf{x})$, $\alpha = 1, 2$. Функционал Ψ имеет следующий вид:

$$\Psi[\boldsymbol{\rho}] := \int_{\Omega} \left\{ \psi_0(\boldsymbol{\rho}) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla\rho_\alpha \cdot \nabla\rho_\beta \right\} d\Omega. \quad (3.1)$$

Здесь ψ_0 — объемная плотность локальной (так как зависит только от ρ_α) части свободной энергии Гельмгольца. Поскольку смесь предполагается двухфазной (далее фазы будем обозначать буквами A и B), функцию $\psi_0(\boldsymbol{\rho})$ полагают невыпуклой и обладающей двумя (по числу фаз) минимумами. В настоящей работе зададим ее в виде

$$\psi_0(\rho_1, \rho_2) = A_\psi \psi^A \psi^B, \quad (3.2)$$

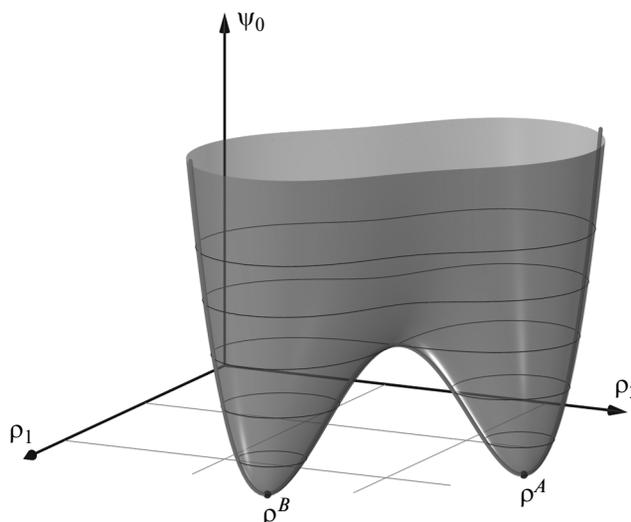
$$\psi^A(\rho_1, \rho_2) = (\rho_1 - \rho_1^A)^2 + (\rho_2 - \rho_2^A)^2, \quad (3.3)$$

$$\psi^B(\rho_1, \rho_2) = (\rho_1 - \rho_1^B)^2 + (\rho_2 - \rho_2^B)^2, \quad (3.4)$$

где $A_\psi > 0$ — некоторая константа, $\rho_\alpha^A, \rho_\alpha^B$ — значения плотностей компонентов в равновесном состоянии. На фиг. 1 приведен характерный вид соответствующей поверхности.

В соотношении (3.1) слагаемое, зависящее от $\nabla\rho_\alpha$, представляет собой градиентную энергию. Она существенно отличается от нуля только в межфазном слое. Вместе с невыпуклостью ψ_0 оно позволяет учесть поверхностное натяжение и обеспечить конечную толщину межфазного слоя. Параметры влияния (градиентные параметры) $\lambda_{\alpha\beta}$ образуют положительно-определенную симметричную матрицу 2×2 (по количеству компонентов). В настоящей работе будем считать, что $\lambda_{\alpha\beta}$ являются постоянными.

Параметры $A_\psi, \rho_\alpha^A, \rho_\alpha^B$ и $\lambda_{\alpha\beta}$ полностью определяют структуру межфазного слоя и, в частности, поверхностное (межфазное) натяжение и толщину межфазной границы (слоя).



Фиг. 1. График поверхности свободной энергии, заданной соотношениями (3.2) – (3.4). Красной линией отмечено сечение поверхности плоскостью, проходящей через точки ρ^A и ρ^B и перпендикулярной плоскости $\rho_1\rho_2$.

Равновесные распределения ρ_α таковы, что на них функционал (3.1) достигает минимума. Необходимым условием для этого, как известно, является выполнение уравнений Эйлера–Лагранжа, которые следуют из равенства нулю первой вариации $\delta\Psi$ и имеют вид

$$\frac{\delta\Psi}{\delta\rho_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2. \tag{3.5}$$

Здесь в левой части стоит вариационная производная функционала Ψ по функции ρ_α . Напомним, что вариационная производная определяется из равенства (см., например, [20, гл. 2, разд. 35], [21, разд. II, гл. 3, § 3], [22, гл. 1, § 6])

$$\delta\Psi[\rho, \mathbf{u}] := \int_{\Omega} \frac{\delta\Psi}{\delta\rho_\alpha} u_\alpha d\Omega, \tag{3.6}$$

если оно выполнено для произвольных функций приращений $\mathbf{u} := (u_1, u_2)$, таких что $u_\alpha = 0$ на $\partial\Omega$. В свою очередь первая вариация определяется как (см. [20]–[22])

$$\delta\Psi[\rho, \mathbf{u}] := \left. \frac{d}{d\varepsilon} \Psi[\rho + \varepsilon\mathbf{u}] \right|_{\varepsilon=0}.$$

Поскольку на границе области $u_\alpha = 0$, имеем

$$\frac{\delta\Psi}{\delta\rho_\alpha} = \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta} \Delta\rho_\beta, \quad \mu_\alpha = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0, \tag{3.7}$$

где μ_α — (классический) химический потенциал компонента с номером α .

Далее будем предполагать, что эволюция состояния смеси описывается уравнениями баланса массы компонентов

$$\partial_t \rho_\alpha = -\operatorname{div} \mathbf{b}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \tag{3.8}$$

где векторы \mathbf{b}_α — диффузионные потоки компонентов:

$$\mathbf{b}_\alpha = -M_{\alpha\beta} \nabla \hat{\mu}_\beta, \quad \alpha = 1, 2. \tag{3.9}$$

Здесь $M_{\alpha\beta}(\rho_1, \rho_2)$ — коэффициенты диффузионной подвижности, которые образуют положительно-полуопределенную симметричную матрицу и, вообще говоря, зависят от плотностей компонентов ρ_α . Символом $\hat{\mu}_\alpha$ обозначен обобщенный химический потенциал, по определению, равный вариационной производной Ψ :

$$\hat{\mu}_\alpha := \frac{\delta\Psi}{\delta\rho_\alpha} = \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta} \Delta\rho_\beta, \quad \mu_\alpha = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0. \tag{3.10}$$

Из (3.5) и (3.10) следует, что в равновесии $\hat{\mu}_1 = \hat{\mu}_2 = 0$. Обратим внимание, что из (3.5) и (3.7) видно, что параметры диффузионной подвижности $M_{\alpha\beta}$ не влияют на равновесное состояние. Однако, поскольку $M_{\alpha\beta}$ входят в эволюционное уравнение (3.8), они определяют *как* и с какой скоростью смесь стремится к равновесному состоянию. Это хорошо видно из следующего соотношения, справедливого для рассматриваемой модели:

$$\frac{d\Psi}{dt} = - \int_{\Omega} M_{\alpha\beta} \nabla \hat{\mu}_\alpha \cdot \nabla \hat{\mu}_\beta d\Omega \leq 0. \quad (3.11)$$

Неравенство (3.11) выражает свойство диссипативности рассматриваемой модели: при стремлении к равновесию полная энергия Гельмгольца является невозрастающей функцией времени. Применительно к решениям уравнений модели, (3.11) выражает свойство их градиентной (или, что то же, энергетической) устойчивости.

Важной характеристикой межфазной границы является поверхностное (межфазное) натяжение, величина которого описывается коэффициентом σ . Если межфазная граница является плоской и перпендикулярна оси Ox , то σ определяется следующим образом:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_{\alpha\beta} (\partial_x \rho_\alpha) (\partial_x \rho_\beta) dx. \quad (3.12)$$

3.2. Сферически-симметричная одномерная постановка

В настоящей работе рассмотрен случай одномерной сферически-симметричной постановки в области $\Omega = (R_0, R)$, где $R_0 \geq 0$, $R > R_0$. Радиальная координата обозначается буквой r . В данном случае полная энергия Гельмгольца (3.1) и уравнения модели (3.8)–(3.10) примут соответственно вид

$$\Psi[\rho] = \int_{R_0}^R \left\{ \Psi_0(\rho) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_\alpha \cdot \nabla \rho_\beta \right\} r^2 dr \quad (3.13)$$

и

$$\partial_t \rho_\alpha = - \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 b_\alpha), \quad (3.14)$$

$$b_\alpha = - M_{\alpha\beta} \partial_r \hat{\mu}_\beta, \quad (3.15)$$

$$\hat{\mu}_\alpha = \mu_\alpha - \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \rho_\beta), \quad \mu_\alpha = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0. \quad (3.16)$$

На границах области зададим следующие условия:

$$\partial_r \rho_\alpha|_{r=R_0} = \partial_r \rho_\alpha|_{r=R} = 0, \quad (3.17)$$

$$b_\alpha|_{r=R_0} = b_\alpha|_{r=R} = 0. \quad (3.18)$$

Если же $R_0 = 0$, то при $r = 0$ дополнительно наложим условия симметрии

$$\partial_r b_\alpha = 0, \quad \partial_{rr}^2 \rho_\alpha = 0.$$

Отметим, что в этом случае при $r \rightarrow 0$ в уравнении (3.14) не возникает неустранимой особенности. Действительно,

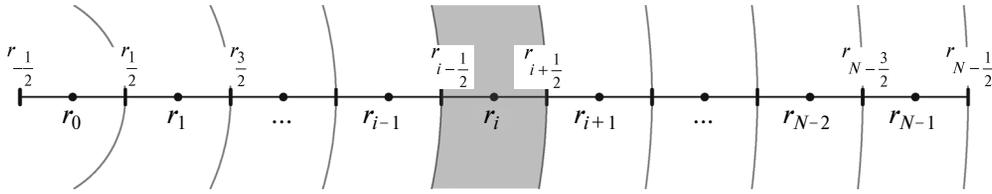
$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 b_\alpha) = \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{2b_\alpha}{r} + \partial_r b_\alpha \right) = 2 \lim_{r \rightarrow 0} \frac{b_\alpha}{r} = 2 \lim_{r \rightarrow 0} \partial_r b_\alpha = 0,$$

где в предпоследнем равенстве применено правило Лопиталья. Аналогично показывается корректность для соотношений (3.16).

В рассматриваемом случае сферической симметрии коэффициент поверхностного натяжения σ будем вычислять по формуле (вместо (3.12))

$$\sigma = \int_{R_0}^R \lambda_{\alpha\beta} (\partial_r \rho_\alpha) (\partial_r \rho_\beta) dr. \quad (3.19)$$

Напомним, по повторяющимся индексам α и β подразумевается суммирование от 1 до 2.



Фиг. 2. Иллюстрация используемых пространственных сеток вдоль радиального направления r . Каждая ячейка представляет собой сферический слой.

4. ДИСКРЕТИЗАЦИЯ

В настоящем разделе приведен полудискретный (непрерывный по времени и дискретный по пространству) конечно-разностный метод для аппроксимации системы (3.14) – (3.16) в области $\bar{\Omega} = [R_0, R]$. Показано, что данная дискретизация наследует свойство диссипативности исходной («непрерывной») математической модели (см. (3.11)).

Разобьем отрезок $[R_0, R]$ на N ячеек (см. фиг. 2). Введем одномерные пространственные внутренние сетки ω_h и ω_h^* , а также соответствующие расширенные сетки $\bar{\omega}_h$ и $\bar{\omega}_h^*$:

$$\begin{aligned} \omega_h^* &:= \{r_i\}_{i=0}^{N-1}, & \omega_h &:= \{r_{i-\frac{1}{2}}\}_{i=1}^{N-1}, \\ \bar{\omega}_h^* &:= \{r_{-1}\} \cup \omega_h \cup \{r_N\}, & \bar{\omega}_h &:= \{r_{-\frac{1}{2}}\} \cup \omega_h \cup \{r_{N-\frac{1}{2}}\}, \end{aligned}$$

где $r_i := h(i + 1/2)$, $r_{i-1/2} := hi$, $h = (R - R_0)/N$ — шаг по пространству. Таким образом, элементами сетки ω_h^* являются центры ячеек, а ω_h — их грани (для расширенных сеток аналогично).

Пусть $H(\omega)$ — пространство функций, определенных на сетке ω . Для функций $v \in H(\bar{\omega}_h)$ и $f \in H(\bar{\omega}_h^*)$ определим операторы усреднений и разностных отношений:

$$\begin{aligned} (s_r^* f)_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(f_i + f_{i-1}), & (s_r v)_i &= \frac{1}{2}(v_{i+\frac{1}{2}} + v_{i-\frac{1}{2}}), \\ (\delta_r^* f)_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{h}(f_i - f_{i-1}), & (\delta_r v)_i &= \frac{1}{h}(v_{i+\frac{1}{2}} - v_{i-\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Ясно, что $\delta_r^*, s^* : H(\bar{\omega}_h^*) \rightarrow H(\bar{\omega}_h)$ и $\delta_r, s : H(\bar{\omega}_h) \rightarrow H(\bar{\omega}_h^*)$.

Пусть $u \in H(\bar{\omega}_h)$, $g \in H(\bar{\omega}_h^*)$. На сетках ω_h и $\bar{\omega}_h^*$ введем скалярные произведения сеточных функций:

$$(u, v) := h \sum_{i=0}^N u_{i-\frac{1}{2}} v_{i-\frac{1}{2}} r_{i-\frac{1}{2}}^2, \quad (f, g)_* := h \sum_{i=0}^{N-1} f_i g_i \tilde{r}_i^2, \tag{4.1}$$

где используется обозначение

$$\tilde{r}_i^2 := \frac{1}{3} \left(r_{i+\frac{1}{2}}^2 + r_{i+\frac{1}{2}} r_{i-\frac{1}{2}} + r_{i-\frac{1}{2}}^2 \right) = r_i^2 + \frac{1}{12} h^2. \tag{4.2}$$

Таким образом, \tilde{r}_i^2 можно рассматривать как аппроксимацию величины r_i^2 .

Для введенных скалярных произведений несложно доказать тождество, являющееся дискретным аналогом формулы интегрирования по частям:

$$\left(\frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r(r^2 u), f \right)_* = f_{N+1} r_{N-\frac{1}{2}}^2 u_{N-\frac{1}{2}} - f_{-1} r_{-\frac{1}{2}}^2 u_{-\frac{1}{2}} - (u, \delta_r^* f),$$

которое в частном случае $u_{N-1/2} = u_{-1/2} = 0$ принимает вид

$$\left(\frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r(r^2 u), f \right)_* = -(u, \delta_r^* f). \tag{4.3}$$

Используя введенные выше обозначения, определим дискретный аналог полной энергии Гельмгольца (3.13) следующим образом:

$$\Psi_h[\mathbf{p}(t)] := (\psi_0, 1)_* + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* \rho_\alpha, \delta_r^* \rho_\beta). \tag{4.4}$$

Вычислим первую вариацию функционала $\Psi_h[\rho]$:

$$\begin{aligned} \delta\Psi_h[\rho, \mathbf{u}] &:= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Psi_h[\rho + \varepsilon \mathbf{u}] - \Psi_h[\rho]}{\varepsilon} \\ &= (\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0, u_\alpha)_* + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* \rho_\alpha, \delta_r^* u_\beta) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* u_\alpha, \delta_r^* \rho_\beta) = \\ &= (\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0, u_\alpha)_* + \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* \rho_\beta, \delta_r^* u_\alpha) = \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} &= (\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0, u_\alpha)_* - \lambda_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r (r^2 \delta_r^* \rho_\beta), u_\alpha \right)_* = \\ &= \left(\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0 - \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r (r^2 \delta_r^* \rho_\beta), u_\alpha \right)_* \equiv \left(\frac{\delta\Psi_h}{\delta\rho_\alpha}, u_\alpha \right)_*, \end{aligned} \quad (4.6)$$

где при переходе к равенству (4.5) использована симметричность $\lambda_{\alpha\beta}$, в равенстве (4.6) — тождество (4.3). Отсюда видно, что вариационная производная, а значит, и дискретизация обобщенного химического потенциала $\hat{\mu}_\alpha$ имеют вид

$$\hat{\mu}_\alpha := \frac{\delta\Psi_h}{\delta\rho_\alpha} = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0 - \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r (r^2 \delta_r^* \rho_\beta). \quad (4.7)$$

4.1. Полудискретный метод

В данном пункте рассмотрим полудискретный (непрерывный по времени и дискретный по пространству) метод для решения уравнений модели (3.14) — (3.16). Воспользуемся методом конечных объемов (следуя, например, [23, гл. XI, § 1, разд. 7]). При этом конечный объем в силу специфики рассматриваемой постановки представляет собой сферический слой. Предполагая, что плотность компонентов в пределах сферического слоя не зависит от r , запишем балансовые соотношения для i -го слоя (см. фиг. 2, где этот слой выделен цветом):

$$\frac{4\pi}{3} \left(r_{i+\frac{1}{2}}^3 - r_{i-\frac{1}{2}}^3 \right) \partial_t \rho_\alpha = -4\pi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^2 b_{\alpha, i+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}}^2 b_{\alpha, i-\frac{1}{2}} \right). \quad (4.8)$$

Деля обе части равенства на 4π и на $r_{i+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}} \equiv h$, а также учитывая равенство (4.2), окончательно получаем

$$\partial_t \rho_\alpha = -\frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r (r^2 b_\alpha), \quad (4.9)$$

$$b_\alpha = -M_{\alpha\beta} \delta_r^* \hat{\mu}_\beta. \quad (4.10)$$

Отсюда, в частности, видно, что аппроксимация (4.2) для r_i^2 возникает естественным образом.

Дискретизация для обобщенного химического потенциала имеет вид (4.7).

Дополним (4.7), (4.9) и (4.10) следующими граничными условиями:

$$b_{\alpha, -\frac{1}{2}} = 0, \quad b_{\alpha, N-\frac{1}{2}} = 0, \quad (4.11)$$

$$(\delta_r \rho_\alpha)_{-\frac{1}{2}} = (\delta_r \rho_\alpha)_{N-\frac{1}{2}} = 0. \quad (4.12)$$

Заметим, что в данной дискретной постановке (поскольку в ее основе лежит метод конечных объемов) не возникает необходимости дополнительно вводить условия, обеспечивающие регулярность задачи при $R_0 = 0$: в этом случае $r_{-1/2} = 0$ и $\tilde{r}_0^2 = \frac{1}{3} h^2 > 0$.

Также система дополняется начальными условиями

$$\rho_{\alpha, i} = \rho_{\alpha, i}^0 := \rho_\alpha^0(r_i), \quad t = 0.$$

Для корректного использования введенных конечно-разностных операторов продолжим функции ρ_α и $\hat{\mu}_\alpha$ на расширенную сетку $\bar{\omega}_h^*$ симметрично:

$$\rho_{\alpha, -1} = \rho_{\alpha, 0}, \quad \rho_{\alpha, N} = \rho_{\alpha, N-1}, \quad (4.13)$$

$$\hat{\mu}_{\alpha, -1} = \hat{\mu}_{\alpha, 0}, \quad \hat{\mu}_{\alpha, N} = \hat{\mu}_{\alpha, N-1}. \quad (4.14)$$

При таком способе продолжения выполнены условия (4.11) и (4.12).

Дискретный аналог интегрального баланса массы компонента имеет вид

$$(\rho_\alpha, 1)_* = (\rho_\alpha^0, 1)_*, \quad t \geq 0.$$

Для рассматриваемой полудискретной постановки выполнено свойство диссипативности по полной энергии (полудискретный аналог неравенства (3.11)):

Теорема 4.1. Полудискретный метод (4.7), (4.9), (4.10), дополненный условиями (4.11) и (4.12), наследует свойство диссипативности исходной (непрерывной) модели. Именно,

$$\frac{d\Psi_h[\boldsymbol{\rho}(t)]}{dt} = -(M_{\alpha\beta}\delta_r^*\hat{\mu}_\beta, \delta_r^*\hat{\mu}_\alpha) \leq 0. \quad (4.15)$$

Доказательство. Скалярно умножим (4.9) на (4.7) и просуммируем по α :

$$(\hat{\mu}_\alpha, \partial_t \rho_\alpha)_* = - \left(\hat{\mu}_\alpha, \frac{1}{r} \delta_r^*(r^2 b_\alpha) \right)_*. \quad (4.16)$$

Рассмотрим левую часть равенства (4.16):

$$\begin{aligned} (\hat{\mu}_\alpha, \partial_t \rho_\alpha)_* &= (\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0, \partial_t \rho_\alpha)_* - \lambda_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{r^2} \delta_r(r^2 \delta_r^* \rho_\beta), \partial_t \rho_\alpha \right)_* = \\ &= (\partial_t \Psi_0, 1)_* + \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* \rho_\beta, \delta_r^* \partial_t \rho_\alpha) = \\ &= (\partial_t \Psi_0, 1)_* + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \partial_t (\delta_r^* \rho_\alpha, \delta_r^* \rho_\beta) = \frac{d\Psi_h}{dt}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Здесь использованы формула (4.3), равенства $\delta_r^* \partial_t = \partial_t \delta_r^*$, а также симметричность постоянных коэффициентов $\lambda_{\alpha\beta}$ по индексам.

Преобразуем правую часть равенства (4.16) с помощью тождества (4.3):

$$- \left(\hat{\mu}_\alpha, \frac{1}{r} \delta_r^*(r^2 b_\alpha) \right)_* = (\delta_r^* \hat{\mu}_\alpha, b_\alpha) = -(M_{\alpha\beta} \delta_r^* \hat{\mu}_\beta, \delta_r^* \hat{\mu}_\alpha). \quad (4.18)$$

Подставим (4.17) и (4.18) в (4.16), учтем, что матрица $M_{\alpha\beta}$ является положительно-полуопределенной, и окончательно получим (4.15).

4.2. Полностью дискретный метод

Для построения полностью дискретного метода, обладающего свойством диссипативности, воспользуемся методом выпуклого расщепления (convex-splitting method) свободной энергии (расщепление Эйра), предложенным в работе [13].

Его суть заключается в представлении исходного функционала свободной энергии Ψ в виде суммы выпуклого и вогнутого функционалов:

$$\Psi = \Psi^c + (-\Psi^e) \equiv \Psi^c - \Psi^e.$$

При построении дискретизации по времени выпуклая часть Ψ^c аппроксимируется неявным образом, а вогнутая $-\Psi^e$ — явным.

Представим объемную плотность однородной части свободной энергии в виде

$$\Psi_0(\rho_1, \rho_2) = \Psi^c(\rho_1, \rho_2) - \Psi^e(\rho_1, \rho_2), \quad (4.19)$$

$$\Psi^c(\rho_1, \rho_2) := A_\Psi [(\rho_1 - \rho_1^S)^2 + (\rho_2 - \rho_2^S)^2 + \frac{1}{4} l_{AB}^2]^2, \quad (4.20)$$

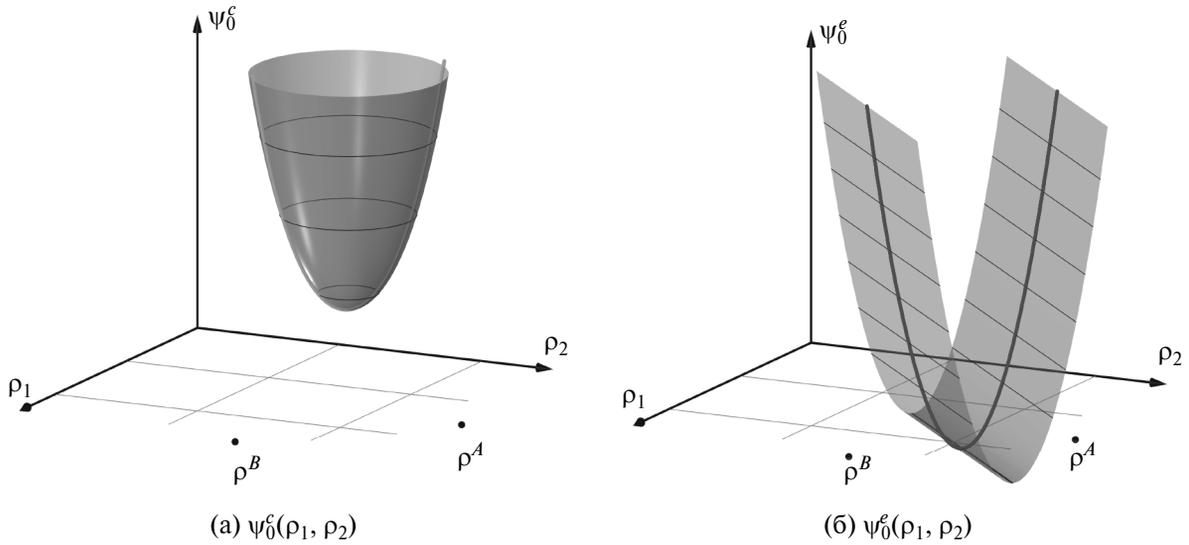
$$\Psi^e(\rho_1, \rho_2) := 4A_\Psi [(\rho_1 - \rho_1^S)k_1 + (\rho_2 - \rho_2^S)k_2]^2, \quad (4.21)$$

где введены обозначения

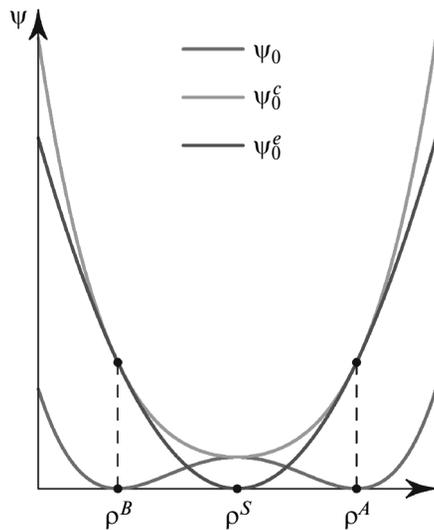
$$\rho_\alpha^S := \frac{1}{2}(\rho_\alpha^A + \rho_\alpha^B), \quad k_\alpha := \frac{1}{2}(\rho_\alpha^B - \rho_\alpha^A), \quad l_{AB}^2 := (\rho_1^B - \rho_1^A)^2 + (\rho_2^B - \rho_2^A)^2. \quad (4.22)$$

На фиг. 3а и фиг. 3б приведены поверхности (4.20) и (4.21), соответствующие ψ_0 , представленной на фиг. 1. Для наглядности на фиг. 4 приведены графики сечений поверхностей в плоскости, проходящей через точки $\boldsymbol{\rho}^A$ и $\boldsymbol{\rho}^B$ и перпендикулярной плоскости $\rho_1 \rho_2$. Видно, что поверхности ψ_0^c и ψ_0^e касаются в точках $(\rho_1^A, \rho_2^A, \psi_0^{ce})$ и $(\rho_1^B, \rho_2^B, \psi_0^{ce})$, где

$$\begin{aligned} \psi_0^{ce} &= \psi_0^c(\boldsymbol{\rho}^A) = \psi_0^c(\boldsymbol{\rho}^B) = \\ &= \psi_0^e(\boldsymbol{\rho}^A) = \psi_0^e(\boldsymbol{\rho}^B). \end{aligned}$$



Фиг. 3. Выпуклое расщепление функции ψ_0 , график которой представлен на фиг. 1. Зеленой и синей линиями отмечено сечение поверхности плоскостью, проходящей через точки ρ^A и ρ^B и перпендикулярной плоскости $\rho_1\rho_2$.



Фиг. 4. Графики сечений поверхностей плоскостью, проходящей через точки ρ^A и ρ^B и перпендикулярной плоскости $\rho_1\rho_2$. Цвета совпадают с цветами сечений на фиг. 1, 3а и 3б.

Таким образом, с учетом формулы (4.4) имеем

$$\Psi_h^c[\rho] = (\psi_0^c, 1)_* + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} (\delta_r^* \rho_\alpha, \delta_r^* \rho_\beta), \tag{4.23}$$

$$\Psi_h^e[\rho] = (\psi_0^e, 1)_*. \tag{4.24}$$

Функционал Ψ_h^c является выпуклым (строго): первое слагаемое в (4.23) представляет собой выпуклый функционал, поскольку ψ_0^c — строго выпуклая функция, а второе слагаемое является выпуклым функционалом, так как коэффициенты влияния $\lambda_{\alpha\beta}$ образуют симметричную положительно-определенную матрицу. Функционал Ψ_h^e является выпуклым (в нестрогом смысле), так как ψ_0^e выпукла (нестрого).

Аппроксимация по времени обобщенного химического потенциала имеет вид

$$\hat{\mu}_\alpha := \hat{\mu}_\alpha^{c,n+1} - \hat{\mu}_\alpha^{e,n}, \quad (4.25)$$

$$\hat{\mu}_\alpha^{c,n+1} := \frac{\delta \Psi^c}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^{n+1}] = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1}) - \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r \left(r^2 \delta_r^* \rho_\beta^{n+1} \right), \quad (4.26)$$

$$\hat{\mu}_\alpha^{e,n} := \frac{\delta \Psi^e}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^n] = \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^e(\mathbf{\rho}^n). \quad (4.27)$$

Обратим внимание, что градиентные слагаемые учитываются на верхнем временном слое (неявным образом). Это гарантирует, что функционал Ψ_h^c является выпуклым.

Аппроксимируя в (4.9) производную по времени разностью вперед (с шагом Δt), с учетом соотношений (4.25) – (4.27), приходим к следующей конечномерной задаче:

$$\frac{\rho_\alpha^{n+1} - \rho_\alpha^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\tilde{r}^2} \delta_r(r^2 b_\alpha), \quad (4.28)$$

$$b_\alpha = -M_{\alpha\beta}(s_r^* \mathbf{\rho}^n) \delta_r^* \hat{\mu}_\beta \equiv -M_{\alpha\beta}(s_r^* \mathbf{\rho}^n) \delta_r^* \left(\hat{\mu}_\beta^{c,n+1} - \hat{\mu}_\beta^{e,n} \right). \quad (4.29)$$

Опираясь на работу [14] и теорему 4.1, докажем справедливость следующего утверждения.

Теорема 4.2. *Полностью дискретный метод (4.25) – (4.27), (4.28), (4.29), дополненный условиями (4.11) и (4.12), является безусловно градиентно устойчивым (диссипативным). А именно, при любом $\Delta t > 0$ выполнено следующее неравенство:*

$$\frac{1}{\Delta t} (\Psi_h[\mathbf{\rho}^{n+1}] - \Psi_h[\mathbf{\rho}^n]) \leq -(M_{\alpha\beta} \delta_r^* \hat{\mu}_\beta, \delta_r^* \hat{\mu}_\alpha) \leq 0. \quad (4.30)$$

Доказательство. Поскольку Ψ_h^c и Ψ_h^e – выпуклые, верны следующие неравенства (легко получаемые из определений выпуклого функционала и вариационной производной):

$$\left(\frac{\delta \Psi^c}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^{n+1}], (\rho_\alpha^{n+1} - \rho_\alpha^n) \right)_* \geq \Psi_h^c[\mathbf{\rho}^{n+1}] - \Psi_h^c[\mathbf{\rho}^n], \quad (4.31)$$

$$-\left(\frac{\delta \Psi^e}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^n], (\rho_\alpha^{n+1} - \rho_\alpha^n) \right)_* \geq -\Psi_h^e[\mathbf{\rho}^{n+1}] + \Psi_h^e[\mathbf{\rho}^n], \quad (4.32)$$

напомним, что по повторяющимся индексам $\hat{\mu}_\alpha$ подразумевается суммирование от 1 до 2.

Скалярно умножим левую часть (4.28) на $\hat{\mu}_\alpha$ и воспользуемся неравенствами (4.31) и (4.32):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho_\alpha^{n+1} - \rho_\alpha^n}{\Delta t}, \hat{\mu}_\alpha \right)_* &= \frac{1}{\Delta t} \left(\rho_\alpha^{n+1} - \rho_\alpha^n, \left\{ \frac{\delta \Psi^c}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^{n+1}] - \frac{\delta \Psi^e}{\delta \rho_\alpha}[\mathbf{\rho}^n] \right\} \right)_* \geq \\ &\geq \frac{1}{\Delta t} (\Psi_h[\mathbf{\rho}^{n+1}] - \Psi_h[\mathbf{\rho}^n]). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Скалярно умножая правую часть (4.28) на $\hat{\mu}_\alpha$ и пользуясь (4.18) (см. выкладки из доказательства теоремы 4.1) и (4.33), получаем (4.30), что и завершает доказательство.

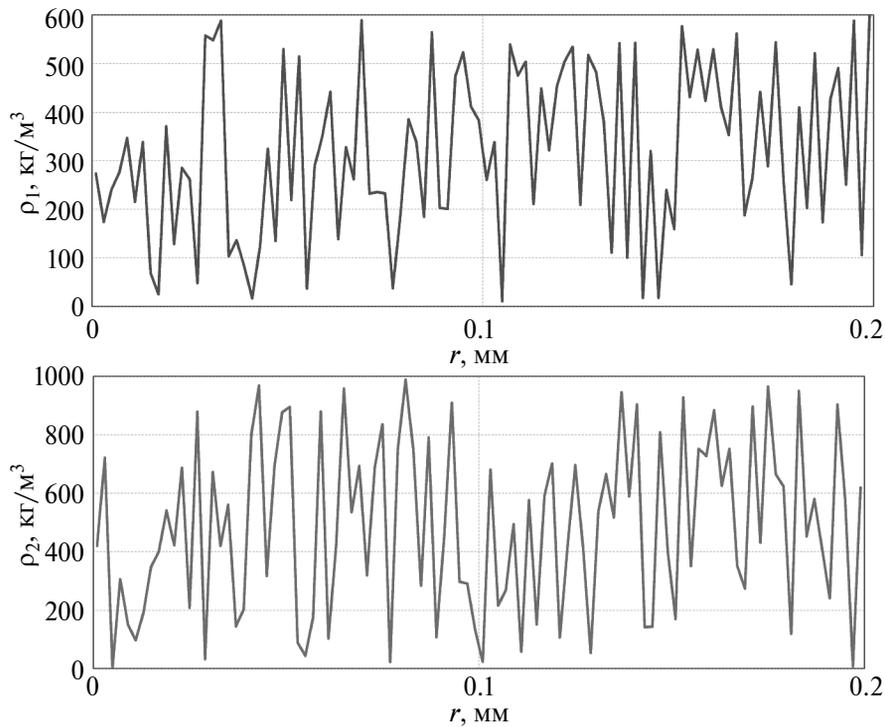
Метод (4.25) – (4.27), (4.28), (4.29) является нелинейным относительно ρ_α^{n+1} . Поэтому для решения соответствующей системы уравнений относительно ρ_α^{n+1} используется метод Ньютона. Для этого линеаризуем слабое $\partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1})$, разлагая его в ряд Тейлора в окрестности ρ_α^n . Добавим к верхнему индексу $n + 1$ индекс s , обозначающий ньютоновские итерации. В результате получим

$$\begin{aligned} \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1,s+1}) &= \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1,s}) + \partial_{\rho_1} \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1,s})(\rho_1^{n+1,s+1} - \rho_1^{n+1,s}) + \\ &+ \partial_{\rho_2} \partial_{\rho_\alpha} \Psi_0^c(\mathbf{\rho}^{n+1,s})(\rho_2^{n+1,s+1} - \rho_2^{n+1,s}). \end{aligned} \quad (4.34)$$

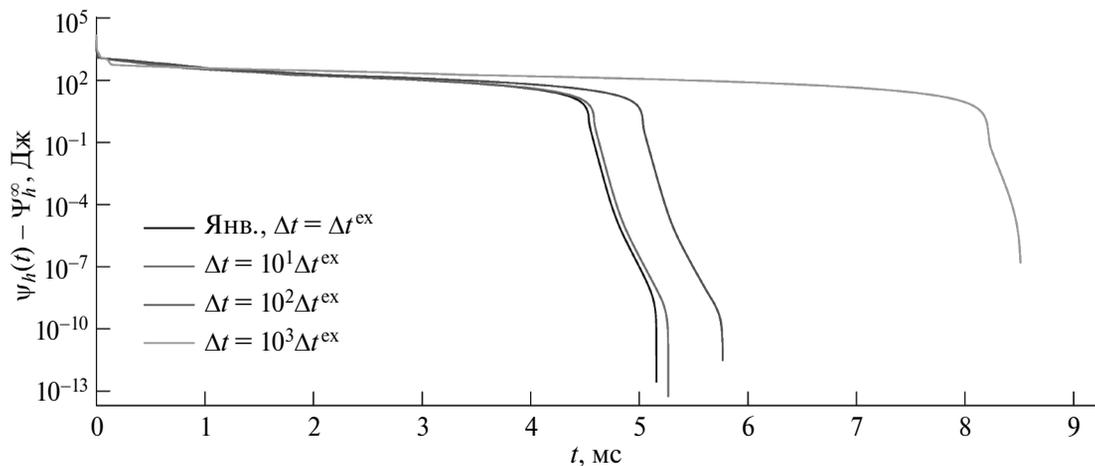
Заменяя $\mathbf{\rho}^{n+1}$ в (4.25) – (4.27), (4.28), (4.29) на $\mathbf{\rho}^{n+1,s+1}$ и используя (4.34), получаем линейную задачу. Критерий остановки зададим в виде

$$\max_{\alpha=1,2} \frac{\|\rho_\alpha^{n+1,s+1} - \rho_\alpha^{n+1,s}\|_2}{\|\rho_\alpha^{n+1,s}\|_2} < 10^{-10}.$$

При выполнении последнего неравенства полагаем, что решение для очередного временного слоя получено, т.е. $\mathbf{\rho}^{n+1} := \mathbf{\rho}^{n+1,s+1}$. Начальное приближение на каждом временном слое имеет вид $\mathbf{\rho}^{n+1,0} = \mathbf{\rho}^n$. Система линейных алгебраических уравнений на каждой итерации метода Ньютона решается методом Гаусса с использованием функция `gesv` из пакета LAPACK.



Фиг. 5. Начальные распределения плотностей компонентов, заданных согласно (5.1).



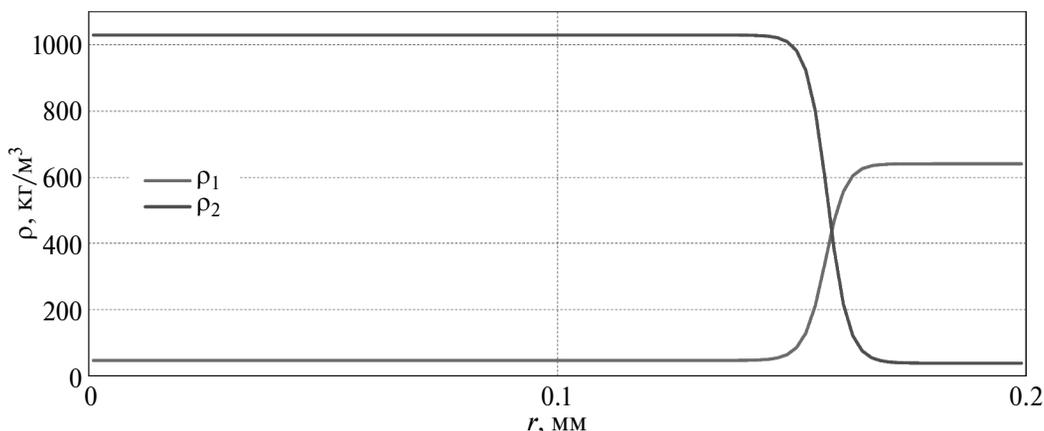
Фиг. 6. Зависимость полной энергии $\Psi_h(t)$ от времени, $\Psi_h^\infty := \Psi_h(t^\infty)$ — опорное (референсное) значение полной энергии, соответствующее равновесному состоянию.

5. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОСТРОЕННЫХ МЕТОДОВ

В данном разделе представлено численное исследование разработанных методов на примере задачи о «расслоении» двухкомпонентной смеси: начальные распределения плотностей компонентов задаются случайным образом, а затем в смеси самопроизвольно постепенно начинают образовываться подобласти с практически однородным компонентным составом (фазы).

Таблица 1. Равновесные значения полной энергии Гельмгольца Ψ_h^∞ , полученные в задаче со случайными начальными данными для явной схемы и неявных при различных Δt

Δt	Ψ_h^∞	t^∞	n_t^∞
Явная, Δt^{ex}	452.4495827684581855	5.15799	1031598
$10^1 \Delta t^{\text{ex}}$	452.4495827386461428	5.26695	105339
$10^2 \Delta t^{\text{ex}}$	452.4495827430440045	5.768	11536
$10^3 \Delta t^{\text{ex}}$	452.4495637673383044	8.515	1703
$10^4 \Delta t^{\text{ex}}$	452.4495187180730227	45.05	901



Фиг. 7. Равновесные распределения плотностей компонентов ρ_a^∞ , полученные в расчете явным методом. Распределения компонентов, полученные с помощью явно-неявного метода при различных шагах по времени визуально неотличимы от представленного.

Зададим разностную сетку на области $\Omega = (R_0, R)$ с $R_0 = 0$, $R = Nh = 0.2$ мм с числом расчетных ячеек $N = 100$ и шагом по пространству $h = 0.002$ мм. Параметры смеси выберем следующими:

$$\begin{aligned} \rho_1^A &= 600 \text{ кг/м}^3, & \rho_2^A &= 5 \text{ кг/м}^3, \\ \rho_1^B &= 4 \text{ кг/м}^3, & \rho_2^B &= 1000 \text{ кг/м}^3, \\ \lambda_{11} &= \lambda_{22} = 2.8 \times 10^{-7} \text{ мм}^7/(\text{мс}^2 \cdot \text{мкг}), & \lambda_{12} &= \lambda_{21} = 0, \\ M_{11} &= M_{22} = M(\rho), & M_{12} &= M_{21} = 0, \end{aligned}$$

$A_\psi = 2.1 \times 10^{-8} \text{ мм}^5/(\text{мс}^2 \cdot \text{мкг})$. Зададим $M(\rho) = M_0 = 1 \text{ мкг} \cdot \text{мс}/\text{мм}^3$. Начальные условия имеют вид

$$\rho_{\alpha,i}^0 = \rho_\alpha^A + \zeta_{\alpha,i}(\rho_\alpha^B - \rho_\alpha^A), \tag{5.1}$$

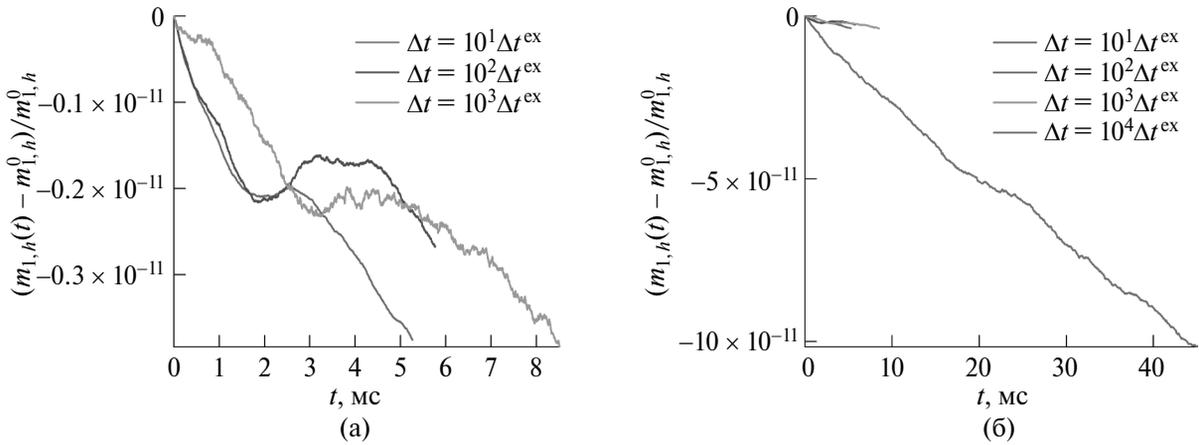
где $\zeta_{\alpha,i} \in H(\omega^*)$ — равномерно распределенная на интервале $(0, 1)$ случайная величина, $\alpha = 1, 2$. На фиг. 5 приведены соответствующие распределения плотностей компонентов для одной из реализаций $\zeta_{\alpha,i}$.

Эмпирически установлено, что при выбранных значениях параметров для явной схемы максимальный шаг по времени, при котором энергия Ψ_h является невозрастающей функцией (см. фиг. 6) равен $\Delta t = \Delta t^{\text{ex}} = 5 \times 10^{-6}$ мс (при $\Delta t = 6 \times 10^{-6}$ мс энергия Ψ_h возрастает). Момент времени $t^\infty = 1031600 \cdot \Delta t^{\text{ex}} = 5.158$ мс здесь принят за момент, при котором достигнуто равновесное состояние. Такой выбор максимального времени расчета обусловлен тем, что при $t > t^\infty$ энергия начинает расти в 11–12 знаках после запятой, причем рост энергии при $t > t^\infty$ связан не со свойствами схемы, а с накоплением ошибок округлений в арифметических операциях в ЭВМ (аналогичный эффект наблюдался, например, в [16]).

Использование явно-неявного метода, как было отмечено выше, позволяет использовать любое значение шага по времени Δt . На фиг. 6 приведено сравнение эволюции полной энергии для различных Δt (приведены значения относительно опорных, которые представлены в табл. 1). Во всех рассмотренных случаях полная энергия является невозрастающей функцией времени. В табл. 1 приведены равновесные значения полной энергии Гельмгольца и соответствующие момент времени t^∞ и номер временного слоя n_t^∞ (начальные распределения задаются на временном слое с номером 0). Видно, что при увеличении Δt финальное значение полной энергии практически не изменяется. Также проверено, что практически одинаковы и равновесные распреде-

Таблица 2. Наблюдаемые значения относительных дисбалансов Δm_α , соответствующие порядки чисел обусловленности в явно- неявном методе при различных Δt

Δt	$\kappa(A)$	Дисбаланс Δm_1	Дисбаланс Δm_2
$10^1 \Delta t^{\text{ex}}$	10^1	-3.76×10^{-12}	-1.90×10^{-11}
$10^2 \Delta t^{\text{ex}}$	10^2	-2.67×10^{-12}	-1.61×10^{-11}
$10^3 \Delta t^{\text{ex}}$	10^3	-3.83×10^{-12}	-2.26×10^{-11}
$10^4 \Delta t^{\text{ex}}$	10^4	-1.01×10^{-10}	-9.36×10^{-11}
$10^5 \Delta t^{\text{ex}}$	10^5	-2.31×10^{-10}	-5.87×10^{-10}
$10^6 \Delta t^{\text{ex}}$	10^6	-3.11×10^{-9}	-4.12×10^{-9}



Фиг. 8. Зависимость относительного отклонения наблюдаемой полной массы $m_{1,h}$ в расчетах с помощью явно- неявного метода.

ления ρ_α . На фиг. 7 представлены равновесные распределения плотностей компонентов, полученных с использованием явной схемы. Видно, что в результате осталась только одна капля (точнее один сферический слой) фазы B .

Приведенные результаты показывают, что время установления t^∞ увеличивается с увеличением Δt , что объясняется ошибкой аппроксимации по времени. Отметим, что из табл. 1 также видно, что

$$\frac{(t^\infty)_{10^4 \Delta t^{\text{ex}}} - (t^\infty)_{10^3 \Delta t^{\text{ex}}}}{(t^\infty)_{10^3 \Delta t^{\text{ex}}} - (t^\infty)_{10^2 \Delta t^{\text{ex}}}} = 11.2 \approx 10.$$

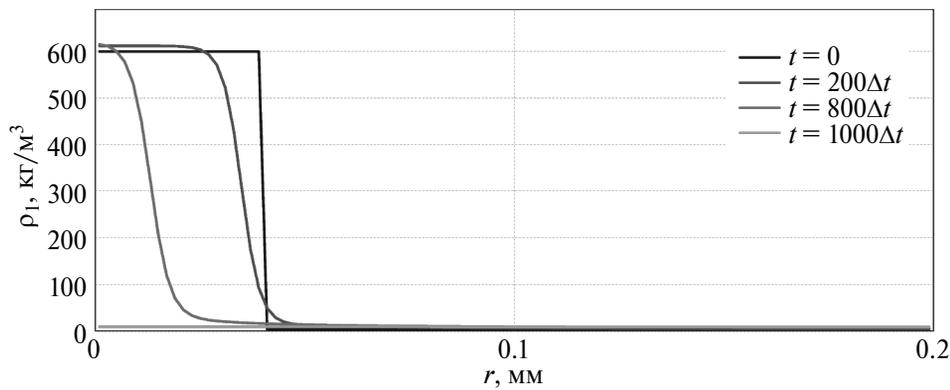
С учетом увеличения Δt в каждом последующем вычислительном эксперименте в 10 раз, это согласуется с первым порядком точности используемой аппроксимации по времени.

Отдельно обсудим консервативность по массе. Как для явного, так и для неявного методов это свойство выполняется теоретически (в смысле точной арифметики). В программной реализации явного метода это свойство выполняется с машинной точностью. Однако в программной реализации явно- неявного метода это свойство в некоторых случаях заметно нарушается при увеличении шага по времени. В табл. 2 для различных Δt приведены наблюдаемые в расчетах дисбалансы массы, рассчитанные по формуле

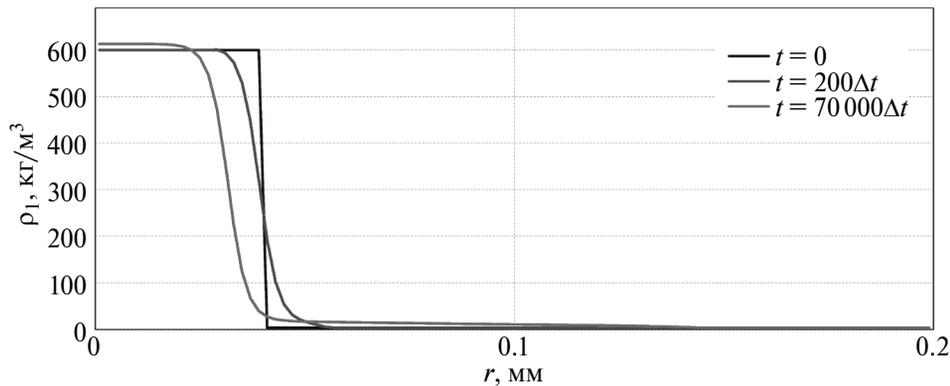
$$\Delta m_\alpha = \frac{m_{\alpha,h}^\infty - m_{\alpha,h}^0}{m_{\alpha,h}^0},$$

где $m_{\alpha,h}^0 := (\rho_\alpha^0, 1)_*$, $m_{\alpha,h}^\infty := (\rho_\alpha^\infty, 1)_*$ — полные массы компонентов с номером α на моменты времени $t = 0$ и $t = t^\infty$ соответственно (равновесное состояние).

Наличие дисбалансов связано с конечной точностью решения системы нелинейных уравнений методом Ньютона и ненулевой ошибкой решения системы линейных уравнений на каждой его итерации. Последняя может быть существенно больше машинного нуля при больших шагах по времени — как показывают представленные результаты, число обусловленности $\kappa(A) := \|A^{-1}\| \cdot \|A\|$ системы линейных алгебраических уравнений линейно растет по порядку величины при увеличении шага по времени. В результате можно наблюдать, что чем больше шаг по времени, тем больше среднее число обусловленности и тем сильнее дисбаланс по массе.

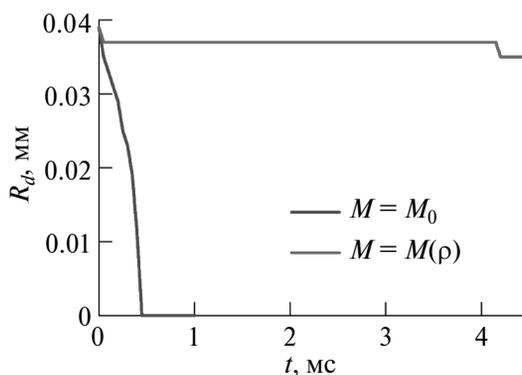


(а) Постоянная $M = M_0$. При стремлении смеси к равновесию капля фазы A полностью «растворяется» и смесь становится однородной.

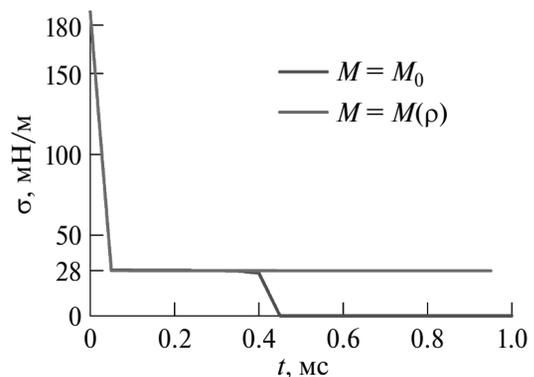


(б) $M = M(\rho)$, заданная выражением (6.1). Уменьшение радиуса капли происходит значительно медленнее. Капля существует при $t \gg t_s$.

Фиг. 9. Эволюция межфазной границы капли с $R_d^0 = 0.2R$ при различных способах задания диффузионной подвижности.



Фиг. 10. Радиус $R_d(t)$ при различных видах M .

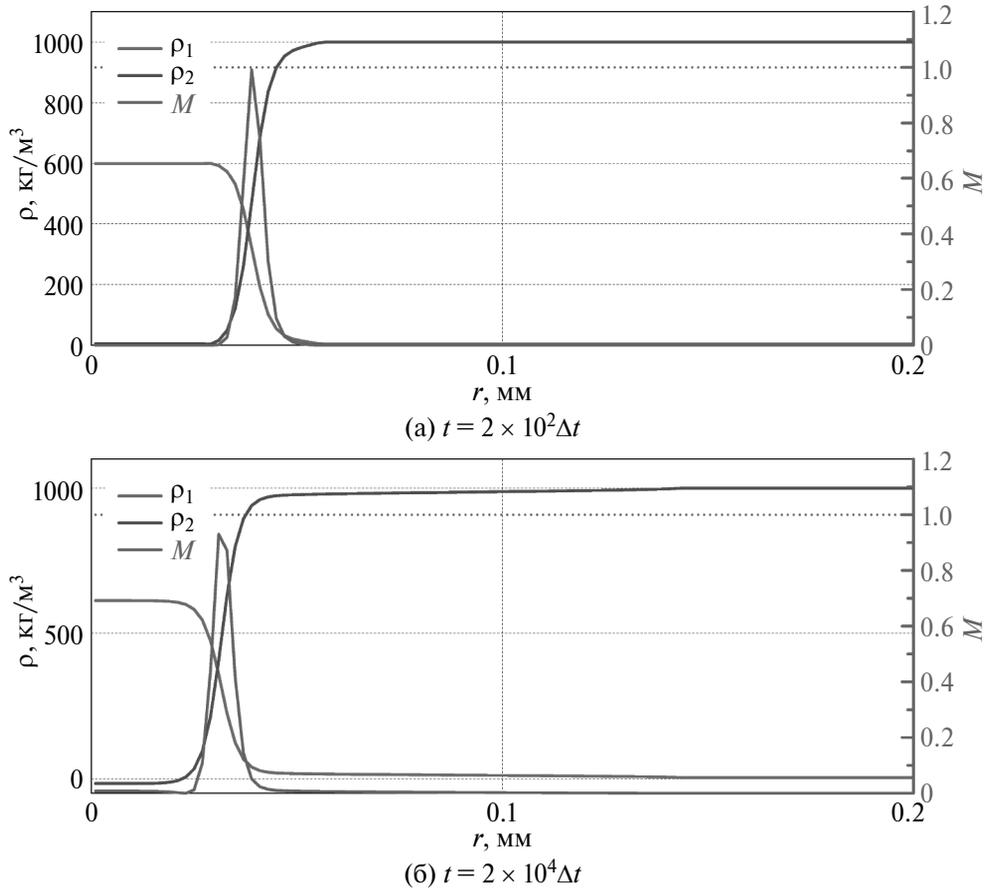


Фиг. 11. Поверхностное натяжение $\sigma(t)$ при различных видах M .

В дополнение на фиг. 8 представлена зависимость полной массы компонента $\alpha = 1$ от времени. Видно, что при небольших шагах относительное отклонение составляет величину порядка 10^{-12} (см. фиг. 8а), при шаге $\Delta t = 10^4 \Delta t^{ex}$ дисбаланс массы более значительный (см. фиг. 8б). Аналогичная ситуация имеет место и для компонента с номером $\alpha = 2$.

6. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИДА ДИФФУЗИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ

В данном разделе приведен пример применения разработанного выше явно-неявного метода для численного исследования влияния способа задания диффузионной подвижности $M(\rho)$ на динамику и свойства межфазной границы. Параметры смеси возьмем из предыдущего раздела. Шаг по времени выберем как $\Delta t = 10^2 \Delta t^{ex}$.



Фиг. 12. Пространственные распределения ρ_α (левая ось) и $M(\rho)$ (правая ось) в различные моменты времени

В начальный момент времени зададим одну каплю фазы A , окруженную фазой B :

$$\rho_{\alpha,i} = \rho_\alpha^A + \theta(r_i) (\rho_\alpha^B - \rho_\alpha^A), \quad \theta(r_i) = \begin{cases} 1, & r_i < R_d^0, \\ 0, & r_i \geq R_d^0, \end{cases}$$

где R_d^0 — начальное значение радиуса капли. Далее везде положим $R_d^0 = 0.2R$.

На фиг. 9а приведены распределения ρ_1 , полученные при $M(\rho) = M_0 = 1 \text{ мкг} \cdot \text{мс}/\text{мм}^3$. При стремлении к равновесию капля фазы A полностью растворяется: в момент времени $t = t_s \approx 0.5 \text{ мс}$ смесь становится гомогенной (состоит из фазы B).

На фиг. 9б приведены распределения ρ_1 для различных моментов времени t , полученные с диффузионной подвижностью, заданной в виде (параметр l_{AB}^2 определен в (4.22))

$$M(\rho) = M_0 16 \frac{l_A^2(\rho) l_B^2(\rho)}{l_{AB}^4}, \quad M_0 = 1 \text{ мкг} \cdot \text{мс}/\text{мм}^3, \tag{6.1}$$

$$l_A^2(\rho) = (\rho_1 - \rho_1^A)^2 + (\rho_2 - \rho_2^A)^2,$$

$$l_B^2(\rho) = (\rho_1 - \rho_1^B)^2 + (\rho_2 - \rho_2^B)^2.$$

На фиг. 10 и 11 приведены зависимости наблюдаемых радиуса R_d и поверхностного натяжения σ от времени t . При этом $R_d = r_i$ для такого i , что $(\rho_{1,i} - \rho_{2,i})(\rho_{1,i+1} - \rho_{2,i+1}) < 0$; σ вычисляется с помощью дискретного аналога выражения (3.19).

Видно, что в случае диффузионной подвижности, заданной с помощью (6.1), капля фазы A продолжает существовать значительно дольше, чем для постоянной $M = M_0$.

Важно отметить, что поверхностное натяжение устанавливается в обоих случаях одинаково быстро (см. фиг. 11). При растворении капли поверхностное натяжение σ естественно обращается в нуль.

Дополнительно для наглядности на фиг. 12а и 12б приведены распределения диффузионной подвижности M вместе с распределением плотностей компонентов в различные моменты времени. Видно, что M велико

в межфазном слое и практически равно нулю вне его. При этом в «сердине» межфазного слоя его значение близко к 1, которое и использовано в случае постоянной $M = M_0$ (поэтому значения σ устанавливаются одинаково быстро для рассмотренных видов M).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hirt C., Nichols B.* Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *J. Comput. Phys.* 1981. V. 39. № 1. P. 201–225.
2. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций / С.М. Бахрах, Ю.П. Глаголева, М.С. Самигулин, В.Д. Фролов, Н.Н. Яненко, Ю.В. Янилкин // *Докл. АН СССР.* 1981. Т. 257. № 3. С. 566–569.
3. *Gibou F., Fedkiw R., Osher S.* A review of level-set methods and some recent applications // *J. Comput. Phys.* 2018. V. 353. P. 82–109.
4. *Bellotti T., Graille B., Massot M.* Finite Difference formulation of any lattice Boltzmann scheme // *Numerische Mathematik.* 2022. V. 152. № 1. P. 1–40.
5. *Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A.* Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Ann. Rev. Fluid Mech.* 1998. V. 30. № 1. P. 139–165.
6. *Cahn J.W., Hilliard J.E.* Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 28. № 2. P. 258–267.
7. Isogeometric analysis of the isothermal Navier–Stokes–Korteweg equations / H. Gomez, T.J. Hughes, X. Nogueira, V.M. Calo // *Comput. Meth. Appl. Mech. Engineer.* 2010. V. 199. № 25–28. P. 1828–1840.
8. *Aihara S., Takada N., Takaki T.* Highly conservative Allen–Cahn-type multi-phase-field model and evaluation of its accuracy // *Theoretic. and Comput. Fluid Dynamic.* 2023.
9. Modelling of the surface tension of binary and ternary mixtures with the gradient theory of fluid interfaces / C. Miqueu, B. Mendiboure, C. Graciaa, J. Lachaise // *Fluid Phase Equilibria.* 2004. V. 218. № 2. P. 189–203.
10. *Celny D., Vins V., Hruby J.* Modelling of planar and spherical phase interfaces for multicomponent systems using density gradient theory // *Fluid Phase Equilibria.* 2019. V. 483. P. 70–83.
11. *Rehner P., Gross J.* Predictive density gradient theory based on nonlocal density functional theory // *Phys. Rev. E.* 2018. V. 98. № 6. P. 063312.
12. *Демьянов А., Динариев О., Евсеев Н.* Основы метода функционала плотности в гидродинамике. Физматлит, 2009.
13. *Eyre D.J.* An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems, 1997. preprint.
14. *Shen J., Xu J., Yang J.* A new class of efficient and robust energy stable schemes for gradient flows // *SIAM Rev.* 2019. V. 61. № 3. P. 474–506.
15. *Jamet D., Torres D., Brackbill J.* On the theory and computation of surface tension: the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method // *J. Comput. Phys.* 2002. V. 182. № 1. P. 262–276.
16. *Balashov V., Savenkov E.* Thermodynamically consistent spatial discretization of the one-dimensional regularized system of the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations // *J. Comput. Appl. Math.* 2020. V. 372. P. 112743.
17. *Балашов В.А., Савенков Е.Б.* Регуляризованная изотермическая модель типа фазового поля двухкомпонентной двухфазной сжимаемой жидкости и ее одномерная пространственная дискретизация // *Дифференц. уравнения.* 2020. Т. 56. № 7. С. 887–900.
18. *Balashov V.* Dissipative spatial discretization of a phase field model of multiphase multicomponent isothermal fluid flow // *Comput. Math. Appl.* 2021. V. 90. P. 112–124.
19. *Yue P., Zhou C., Feng J.J.* Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations // *J. Comput. Phys.* 2007. V. 223. № 1. P. 1–9.

20. Буслаев В.С. Вариационное исчисление. Изд-во Ленинградского ун-та, 1980. С. 288.
21. Михлин С.Г. Курс математической физики. М.: Наука, 1968. С. 576.
22. Гельфанд И.М., Фомин С.В. Вариационное исчисление. Гос. изд-во физ.-матем. лит-ры, 1961. С. 228.
23. Калиткин Н. Численные методы. БХВ-Петербург, 2011. С. 592.

DENSITY GRADIENT MODEL IN A SPHERICALLY SYMMETRIC FORMULATION AND ITS EXPLICIT-IMPLICIT DISSIPATIVE DISCRETIZATION FOR STUDYING INTERFACE DYNAMICS

V. A. Balashov^{a,*}, E. A. Pavlishina^{b,**}, E. B. Savenkov^{a,***}

^a*Keldysh Institute of Applied Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Miusskaya sq., 4, Moscow, 125047 Russia*

^b*National Research University Moscow Institute of Physics and Technology, Institutsky Pereulok, Dolgoprudny, 141701 Russia*

**e-mail: vladislav.balashov@gmail.com*

***e-mail: pavlishina.ea@phystech.edu*

****e-mail: savenkov@keldysh.ru*

Received 02 April, 2024

Revised 02 April, 2024

Accepted 02 May, 2024

Abstract. This work is dedicated to the development of an unconditionally gradient-stable (dissipative) numerical method for solving a conservative density gradient model in a spherically symmetric formulation. The algorithm is constructed using the Eyre method based on convex splitting of the system's free energy. The gradient stability of the algorithm is proven in both semi-discrete and fully discrete cases. Theoretical results are validated through several test calculations. The proposed numerical method is applied to analyze the impact of the specified diffusion mobility on the nature of interface evolution.

Keywords: density gradient theory, dissipative method, explicit-implicit approximation, convex splitting, spherically symmetric formulation.