

ИЗУЧЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ В СФЕРИЧЕСКИ- СИММЕТРИЧНОЙ ОДНОМЕРНОЙ ПОСТАНОВКЕ ДЛЯ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО ПОЛЯ НА ОСНОВЕ ГРАДИЕНТА ПЛОТНОСТИ

В.А. Балашов¹, Е.А. Павлишина², Е.Б. Савенков¹

¹*Институт прикладной математики имени М. В. Келдыша РАН, г. Москва*

²*Московский физико-технический институт (НИУ), г. Москва*

*vladislav.balashov@gmail.com, pavlishina.ea@phystech.edu,
e.savenkov@gmail.com*

Работа посвящена исследованию динамики межфазной границы в сферически симметричной постановке для модели фазового поля на основе градиента плотности [1–3]. Модели типа фазового поля часто применяются для описания многофазных (в частности, двухфазных) микротечений в естественных средах и инженерных приложениях.

Для моделирования многофазных микротечений, в которых важен учет капиллярных эффектов (поверхностное натяжение, динамика межфазной границы), часто используют модели, основанные на теории фазового поля – например, модели типа Навье–Стокса–Кана–Хилларда или модели градиента плотности. Все модели типа фазового поля характеризуются явлением «сжимания капли» (droplet shrinkage effect) [4]: в зависимости от радиуса капли, толщины межфазной границы и объема окружающей фазы одиночная капля может уменьшаться в размерах при стремлении системы к равновесию. Если начальный радиус меньше некоторого критического значения, то она может «исчезнуть» (раствориться) вовсе. Условия «исчезновения» определяются взаимным влиянием вида и параметров свободной энергии системы и коэффициентов диффузионной подвижности. Прямой анализ условий устойчивого существования капли не представляется возможным из-за математической сложности системы. Однако такой анализ может быть выполнен с помощью вычислительного эксперимента.

В рамках данной работы разработан инструмент для моделирования данного процесса в рамках модели, основанной на градиенте плотности в сферически-симметричной постановке. Его цель состоит в оценке скорости изменения объема фазы и подборе параметров модели и/или вида определяющих соотношений для диффузионной подвижности, чтобы минимизировать эффект сжимания капли. С помощью разработанного инструмента были изучены различные варианты определяющих соотношений для диффузионной подвижности на предмет влияния на динамику межфазной границы в рамках модели градиента плотности.

Основополагающим элементом рассматриваемой модели является свободная энергия Гельмгольца, заданная в следующем виде:

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}, \nabla \boldsymbol{\rho}) := \int_{\Omega} \psi_0(\boldsymbol{\rho}) + \frac{1}{2} \lambda_{\alpha\beta} \nabla \rho_{\alpha} \cdot \nabla \rho_{\beta} \, d\Omega,$$

где Ω — ограниченная область в \mathbb{R}^3 , ρ_{α} — плотность компонента смеси с номером α , $\psi_0(\boldsymbol{\rho})$ — объемная плотность локальной части свободной энергии, $\lambda_{\alpha\beta}$ — параметры влияния, которые образуют положительно определенную симметричную матрицу. Здесь для краткости введено обозначение $\boldsymbol{\rho} := (\rho_1, \rho_2)$ и по повторяющимся индексам α и β подразумевается суммирование.

Рассматриваемая модель типа фазового поля, описывающая эволюцию двухфазной смеси, представлена в сферически-симметричной постановке:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{\alpha} &= -\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 b_{\alpha}), \\ b_{\alpha} &= -M_{\alpha\beta} \partial_r \hat{\mu}_{\alpha}, \end{aligned}$$

где $\alpha = 1, 2$; векторы b_{α} описывают диффузионные потоки компонентов; $M_{\alpha\beta}$ — коэффициенты диффузионной подвижности компонентов, которые образуют положительно полуопределенную симметричную матрицу; $\hat{\mu}_{\alpha}$ — обобщенный химический потенциал, по определению равный вариационной производной Ψ :

$$\hat{\mu}_{\alpha} := \frac{\delta \Psi}{\delta \rho_{\alpha}} = \mu_{\alpha} - \lambda_{\alpha\beta} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \rho),$$

где $\mu_{\alpha} = \partial \psi_0 / \partial \rho_{\alpha}$ — классический химический потенциал.

В работе построен полудискретный (непрерывный по времени и дискретный по пространству) метод, наследующий свойство диссипативности (невозрастания полной энергии) исходной (непрерывной) модели. Применяя явный метод Эйлера для дискретизации по времени, проведена серия расчетов с различными вариантами задания диффузионной подвижности и их влиянием на эффект сжатия капли в рассматриваемой постановке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-11-00203.

Список литературы:

1. Rehner P., Gross J. Predictive density gradient theory based on nonlocal density functional theory // Physical Review E. 2018. V. 98. No. 6. P. 063312.
2. 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.
3. Miqueu C., Mendiboure B., Graciaa C., Lachaise J. Modelling of the surface tension of binary and ternary mixtures with the gradient theory of fluid interfaces // Fluid Phase Equilibria. 2004. V. 218. No. 2. P. 189–203.
4. Yue P. [et al.]. Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations // Journal of Computational Physics. 2007. V. 223. No. 1.