АВТОМАТИЗИРОВАННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ ТИПА ГРАДИЕНТА ПЛОТНОСТИ

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва

vladislav.balashov@imamod.ru, savenkov@keldysh.ru

Математическое моделирование многофазных микротечений, в которых существенную роль играют капиллярные эффекты, представляет большой интерес для исследования и оптимизации промышленных и природных процессов. В контексте нефтегазовой отрасли моделирование данных процессов находит применение в так называемой технологии «цифровой керн», которая ориентирована на дополнение традиционных лабораторных исследований.

Существует большое количество моделей, которые применяются для описания многофазных микротечений. Все их можно разделить на два больших класса: модели с четкой границей (например, жидкого объема и метод множеств уровня) и модели типа диффузной границы, которые в большинстве своем основаны на использовании концепции фазового поля. В первой группе межфазная граница представляет собой поверхность «нулевой толщины», на которой тем или иным образом задаются условия, связывающие уравнения движения жидкости по разные стороны от межфазной границы, а также учитывающие поверхностное натяжение. В моделях с диффузной границей, к которым относятся модели типа фазового поля, межфазная граница, напротив, представляет собой слой малой, но конечной толщины, в пределах которого действуют поверхностные силы. Модели типа фазового поля являются наиболее сложными (они как правило включают пространственные производные высоких порядков и являются сильно нелинейными), но в то же время наиболее физически обоснованными. Популярными примерами моделей данной класса служат модели, основанные на уравнениях Кана–Хилларда [1, 2], и Аллена–Кана [3].

Основным элементом моделей типа фазового поля является специальный вид функционала свободной энергии Гельмгольца Ψ (или другого термодинамического потенциала). С одной стороны он содержит невыпуклое слагаемое, которое зависит от локальных значений параметров порядка (в качестве которых могут выступать концентрации, плотности компонентов ρ_α или искусственно введенные величины) невыпуклым образом, а с другой – слагаемое, зависящее от пространственных градиентов параметров порядка. Благодаря двум этим особенностям модель обеспечивает конечную толщину межфазной границы, а также дает возможность учесть энергию, сосредоточенную в межфазном слое (другими словами, межфазное натяжение).

Важным подмножеством моделей типа фазового поля являются модели, основанные на теории градиента плотности (density gradient theory, DGT). В них в качестве параметров порядка выступают массовые (или мольные) плотности компонентов ρ_α. Функционал свободной энергии Гельмгольца в них задается в виде

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

где $\psi_0(\boldsymbol{\rho})$ – *локальная* объемная плотность свободной энергии (которая является невыпуклой функцией), $\lambda_{\alpha\beta}$ – параметры влияния (градиентные параметры), которые образуют положительно определенную симметричную матрицу размера $K \times K$ (по количеству компонентов).

В соотношении (1) слагаемое, зависящее от $\nabla\rho_\alpha$, представляет собой градиентную энергию. Это градиентное слагаемое существенно отличается от нуля только в межфазном слое. Вместе с невыпуклостью ψ_0 оно позволяет учесть такие эффекты, как поверхностное натяжение и смачивание, а также обеспечить конечную толщину межфазного слоя.

Здесь стоит подчеркнуть, что в моделях типа фазового поля (в моделях DGT, в частности) понятие фазы явно не вводится. Однако, благодаря специальному виду свободной энергии в области образуются устойчивые подобласти с практически однородным распределением параметра порядка. Эти подобласти интерпретируются как фазы.

Модели DGT широко применяются для детального исследования структуры и свойств межфазной границы. Одной из задач, которая часто решается с их помощью, является определение значения коэффициента поверхностного натяжения σ по заданным значениям параметров влияния $\lambda_{\alpha\beta}$ и выражению для ψ_0. В этих задачах как правило рассматривается реалистичное уравнение состояния для ψ_0, что приводит к очень тонкой (порядка нанометров) толщине межфазной границы. Поэтому в задачах, связанных с моделированием динамики многофазной жидкости в б*о*льших масштабах, реалистичное уравнение состояния может требовать очень сильного измельчения расчетной сетки. Кроме того, во многих постановках достаточно учитывать только капиллярные эффекты и можно пренебречь реалистичной термодинамикой. По этим причинам реалистичные уравнения состояния иногда могут оказаться избыточными, и целесообразной является их замена некими модельными альтернативами. Так, например, поступают в работах [4, 5] (где также рассматривается модель типа DGT), а также во многих работах, посвященных моделям, основанным на уравнении Кана–Хилларда (вид локальной части свободной энергии заменяют на многочлен 4го порядка $\psi_0(c) = c^2(1-c)^2$, где c — концентрация, играющая роль параметра порядка).

Особенностью моделей типа фазового поля является принципиальное отсутствие прямой связи между параметрами свободной энергии и целевыми значениями коэффициента поверхностного натяжения и толщины межфазной границы. В наиболее простых случаях моделей Кана–Хилларда с

полиномиальной локальной свободной энергией $\psi_0(c) = c^2(1-c)^2$ в плоскопараллельной одномерной постановке эту связь удается получить (более того, можно получить и аналитическое выражение для распределения параметра порядка в окрестности межфазной границы). Однако в более сложных ситуациях (например, для DGT) это сильно сложнее (если вообще возможно). Поэтому при подборе параметров модели таких, которые обеспечивают необходимые значения коэффициентов поверхностного натяжения и толщины межфазной границы (или по крайней мере, близкие к ним) обычно используют ручную «калибровку»: например, используя уже готовый солвер для задачи о равновесии круглой или шарообразной капли, и, применяя, накопленный опыт, знания об устройстве модели и закон Юнга–Лапласа постепенно в ходе многократных вычислительных экспериментов подбирают параметры. Такая методика является затратной и трудоемкой для двухфазного случая, но еще более сложна (если вообще реализуема) для трехфазных трехкомпонентных задач.

Настоящая работа посвящена разработке инструмента, который принципиально облегчает задачу подбора («калибровки») параметров для двух- и трехфазных моделей DGT с модельными $\psi_0(\boldsymbol{\rho})$.

Список литературы:

1. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // The Journal of Chemical Physics. 1958. Vol. 28. Pp. 258–267. https://doi.org/10.1063/1.1744102
2. Lowengrub J., Truskinovsky L. Quasi–incompressible Cahn–Hilliard fluids and topological transitions // Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1998. Vol. 454. Pp. 2617–2654. https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0273
3. Allen S.M., Cahn J.W. Coherent and incoherent equilibria in iron-rich iron-aluminum alloys // Acta Metallurgica. 1975. Vol. 23. Pp. 1017–1026. https://doi.org/10.1016/0001-6160(75)90106-6
4. Dinariev O.Y., Evseev N.V. Application of density-functional theory to calculation of flows of three-phase mixtures with phase transitions // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2007. Vol. 80. Pp. 1247–1255. https://doi.org/10.1007/s10891-007-0161-2
5. Dinariev O.Y., Evseev N.V. Modeling of nanoscale liquid mixture transport by density functional hydrodynamics // Physical Review E. 2017. Vol. 95. P. 063307. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.063307