



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

Препринты ИПМ • Препринт № 86 за 2024 г.



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

**Н.А. Семеновко, Т.Г. Еленина,
Е.Б. Савенков**

Применение метода
фазового поля для
моделирования структуры
пены

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Семеновко Н.А., Еленина Т.Г., Савенков Е.Б. Применение метода фазового поля для моделирования структуры пены // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 86. 24 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-86>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-86>

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

Н.А. Семеновко, Т.Г. Еленина, Е.Б. Савенков

**Применение метода фазового поля для моделирования
структуры пены**

Москва, 2024

Н.А. Семененко, Т.Г. Еленина, Е.Б. Савенков, Применение метода фазового поля для моделирования структуры пены

Аннотация

В настоящей работе исследуется равновесная структура пены с применением модели типа диффузной границы. Для этого задаётся начальное распределение пузырьков пены в заданной пространственной области, после чего осуществляется моделирование её эволюции до достижения системой равновесного состояния. При этом в зависимости от параметров системы процесс эволюции протекает по-разному и приводит к разным равновесным состояниям.

Ключевые слова: структура пены, фазовое поле, компьютерное моделирование

N.A. Semenenko, T.G. Elenina, E.B. Savenkov, Application of the phase field method for modeling the foam structure

Abstract

In this paper we study the equilibrium structure of the foam using diffuse interface model. For this purpose, the initial distribution of foam bubbles in the given spatial domain is specified, then its evolution is simulated until the system reaches its equilibrium state. Depending on the values of system parameters, an evolution process proceeds differently and different equilibrium states are achieved.

Key words and phrases: foam structure, phase field, computer simulation

1 Введение

Потребность в эффективном моделировании многофазных систем возникает во многих областях науки и техники, от нефтегазовой промышленности до материаловедения. Однако из-за высокой дискретизации многофазных систем их моделирование обладает большой вычислительной сложностью. Даже в случае, когда система содержит только две фазы, необходимо отдельно рассматривать каждую из фаз и границу раздела между ними, а также учитывать процессы, связанные со слиянием и разделением фаз. Это делает моделирование многофазных систем достаточно ресурсозатратным процессом, возникает необходимость его упрощения.

В ряде задач, особенно тех, где предмет исследования связан с визуализацией структуры системы или её эволюции с течением времени, для сокращения количества вычислений применяют метод фазового поля. Идея этого метода заключается в непрерывном описании всей системы с помощью одной функции, называемой параметром порядка. Через эту функцию выражается функционал свободной энергии системы, который из-за определения параметра порядка будет учитывать и фазы, и границы раздела между ними. Такой подход позволяет сократить количество вычислений и упростить моделирование. Тем не менее, он применим не во всех случаях. Подробнее про достоинства и недостатки метода фазового поля написано в статье [1].

Метод фазового поля нашёл своё применение в решении множества задач. Так, например, он эффективно используется в таких задачах, как моделирование отвердевания [2], спинодального распада вещества [3], роста дендритных кристаллов [4] и других.

В настоящей работе метод фазового поля применён для моделирования структуры пены в равновесном состоянии в одномерном и двумерном случаях. По заданной площади, занимаемой пеной в начальный момент времени, определяется начальное состояние системы. Затем проводится моделирование её эволюции до достижения системой равновесного состояния. Предметом исследования работы является структура пены в равновесном состоянии. Используемая в работе модель предложена в [5]. Для её численного решения используется явная разностная схема. Цель работы — численное исследование основных закономерностей эволюции фазового поля в зависимости от параметров модели на примере одномерных и двумерных постановок.

Пеной называется дисперсная система с газовой дисперсной фазой и жидкой или твёрдой дисперсионной средой. Для пен характерна ячеистая структура, в которой заполненные газом ячейки разделены тонкими плёнками — стенками пузырьков. Хотя все пузырьки могут быть заполнены одним газом, в рамках используемой модели каждый пузырёк пены описывается отдельной фазой.

2 Метод фазового поля

В основе метода фазового поля лежит описание распределения фаз в системе с помощью безразмерной функции параметра порядка ϕ . Она выполняет роль индикаторной функции и позволяет определить, какая фаза присутствует в той или иной точке пространства. Например, в случае двухфазной системы параметр порядка принимает значения $\phi = 1$ в области первой фазы, $\phi = 0$ в области второй фазы и изменяется в диапазоне $\phi \in [0, 1]$ в области раздела двух фаз.

Область раздела фаз в методе фазового поля описывается моделью диффузной границы. Диффузная граница — это тонкий (обычно в масштабе микрометров) слой, разделяющий разные фазы вещества. Толщина диффузной границы определяется параметрами модели и в состоянии равновесия системы принимает заранее заданное значение. То есть модель должна иметь механизмы, обеспечивающие заданную толщину диффузной границы в ходе эволюции системы [6]. В области диффузной границы параметр порядка должен изменяться достаточно быстро, но непрерывно при переходе из одной фазы в другую.

В случае многофазной системы основная идея остаётся той же. Отличие заключается в том, что параметр порядка является вектором $\vec{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_N)$, i -й элемент которого соответствует i -й фазе (рис. 1). Так, если система состоит из N фаз, параметр порядка состоит из элементов ϕ_i , где $i = \overline{1, N}$. Будем называть их i -ми параметрами порядка. Эти элементы определяют, присутствует ли в заданной точке пространства i -я фаза или нет. По аналогии с двухфазным случаем, они принимают значения $\phi_i = 1$ в области i -й фазы, $\phi_i = 0$ в области, где эта фаза отсутствует, и изменяются от 1 до 0 вдоль диффузной границы фазы при переходе из i -й фазы наружу. В многофазном случае параметры порядка должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_{i=1}^N \phi_i = 1. \quad (1)$$

Оно показывает, что в области диффузной границы сумма параметров порядка равна единице. При этом в области i -й фазы значения всех параметров порядка, кроме i -го, близки к нулю.

В настоящей работе каждая ячейка пены описывается своим элементом вектора параметра порядка. Заметим, что хотя формально ячейки пены могут состоять из одного химического компонента, каждой ячейке всё равно ставится в соответствие свой отдельный элемент вектора параметра порядка.

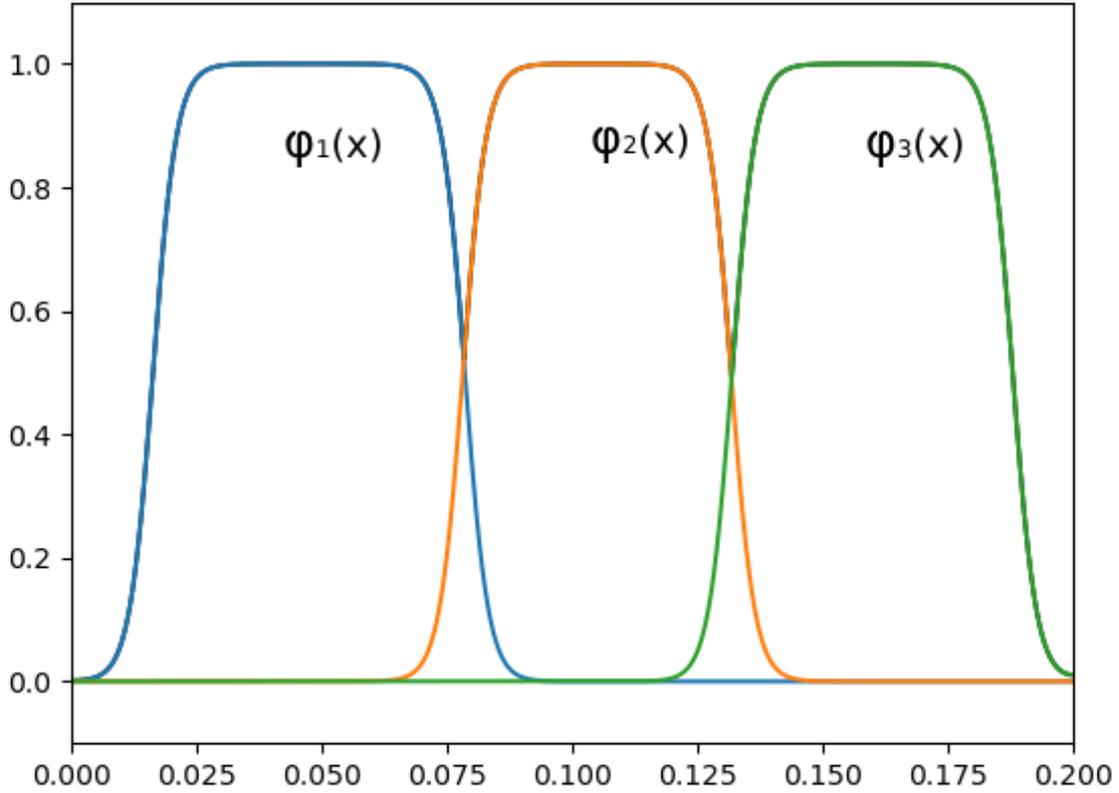


Рис. 1. Функция параметра порядка для системы из трёх фаз

2.1 Эволюционное уравнение в методе фазового поля

Один из возможных подходов к получению эволюционных уравнений системы заключается в использовании функционала свободной энергии Гиббса. Функционал свободной энергии Гиббса для описания структуры пены записывается в терминах функции параметра порядка и её градиентов [1]:

$$G = \int_V \left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \xi^2 (\nabla \phi_j)^2 + g(\vec{\phi}) \right] dV, \quad (2)$$

где ξ^2 — заданный коэффициент, $g(\vec{\phi})$ — функция равновесной объёмной плотности энергии. Эта функция является невыпуклой и имеет 2^N минимумов. Её конкретный вид будет приведён позже.

Принимается, что в состоянии равновесия системы вариация функционала свободной энергии по параметру порядка равна нулю:

$$\frac{\delta G}{\delta \phi_i(x)} = 0, \quad (3)$$

здесь и далее $i = \overline{1, N}$. В этом выражении

$$\delta G = \int_V \frac{\delta G}{\delta \phi_i} \phi_i dV.$$

Уравнения (3) выражают необходимое условие минимума свободной энергии и выполняются в состоянии равновесии системы. При отклонении состояния от равновесного постулируется его эволюция в соответствии со следующим уравнением типа Аллена-Кана:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M \frac{\delta G}{\delta \phi_i(r, t)}, \quad (4)$$

где $M > 0$ — коэффициент подвижности. Суть этого уравнения заключается в том, что при отклонении состояния системы от равновесного, параметр порядка меняется так, чтобы компенсировать это отклонение. При этом для уравнения типа Аллена-Кана справедливо условие невозрастания полной энергии

$$\frac{dG}{dt} \leq 0.$$

С учётом (2)

$$\begin{aligned} \frac{\delta G}{\delta \phi_i} &= \frac{\delta}{\delta \phi_i} \left(\frac{1}{2} \xi^2 \sum_{j=1}^N (\nabla \phi_j)^2 + g(\vec{\phi}) \right) - \nabla \cdot \frac{\delta}{\delta \nabla \phi_i} \left(\frac{1}{2} \xi^2 \sum_{j=1}^N (\nabla \phi_j)^2 + g(\vec{\phi}) \right), \\ \frac{\delta G}{\delta \phi_i} &= \frac{\partial g}{\partial \phi_i} - \operatorname{div}(\xi^2 \nabla \phi_i). \end{aligned} \quad (5)$$

Тогда из выражений (5) и (4) получаем систему эволюционных уравнений

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial g}{\partial \phi_i} - \operatorname{div}(\xi^2 \nabla \phi_i) \right). \quad (6)$$

Эта система используется в дальнейшем для моделирования эволюции пены.

Невыпуклость свободной энергии приводит к тому, что состояния с равномерным распределением в пространстве параметра порядка ϕ_i (например, $\phi_1 = \phi_2 = \dots = \phi_N = 1/N$) являются неустойчивыми. В результате типичные решения системы (6) имеют вид кусочно-постоянного распределения, см. рис. 1. Области постоянства ϕ_i отделены диффузными границами, вдоль которых ϕ_i меняется быстро, но непрерывно, от 1 до 0, переходя из области ячейки пены наружу. При этом можно показать [1], что энергетический параметр ξ связан с толщиной диффузной границы λ соотношением

$$\lambda = 2\sqrt{2\omega\xi},$$

где ω — это коэффициент, который может быть скорректирован в соответствии с желаемой энергией на границе раздела фаз. Таким образом, можно считать, что ξ имеет тот же смысл, что и толщина границы раздела фаз.

3 Моделирование структуры пены

В данной работе метод фазового поля применяется для моделирования структуры пены в равновесном состоянии системы при отсутствии потоков вещества через границу области. Задаётся начальное распределение параметров порядка в пространстве, затем моделируется эволюция системы до достижения ею равновесного состояния, после чего исследуется структура пены в равновесном состоянии.

Структура пены определяется потенциалом $g(\vec{\phi})$. С одной стороны, вид свободной энергии должен обеспечивать разделение и несмещение фаз, а с другой стороны — запрещать слияние ячеек пены и обеспечивать формирование стенок между ними. Классический вариант потенциала двойной ямы в данном случае не подходит, так как он не запрещает слияние пузырьков друг с другом. В работе [5] была предложена его модификация, при которой функциональная производная потенциала по параметру порядка имеет вид

$$\frac{\partial g}{\partial \phi_i} = f_{b,i}(\phi_i) + f_{r,i}(\vec{\phi}),$$

где $\vec{f}_b = (f_{b,1}, \dots, f_{b,N})$ и $\vec{f}_r = (f_{r,1}, \dots, f_{r,N})$ — объёмное и отталкивающее слагаемые соответственно.

Объёмное слагаемое \vec{f}_b обеспечивает устойчивость пузырьков. Его элементы задаются формулой

$$f_{b,i}(\phi_i) = 4\phi_i(\phi_i - \phi_{c,i})(\phi_i - 1), \quad (7)$$

при которой объёмная плотность энергии g будет минимальна в точках $\phi_i = 1$ и $\phi_i = 0$. В этом выражении множитель $(\phi_i - \phi_{c,i})$ отвечает за постоянство объёма пузырька. Здесь

$$\phi_{c,i} = \frac{1}{2} + \alpha \left(\frac{A_i}{A_i^0} - 1 \right), \quad (8)$$

где $\alpha > 0$ — параметр, отвечающий за скорость изменения размера пузырьков,

$$A_i = \int_{\Omega} \phi_i^2 dr \quad (9)$$

— величина, пропорциональная объёму i -го пузырька в момент времени t , A_i^0 — заранее заданный объём пузырька в равновесном состоянии. Эта корректировка обеспечивает стремление объёма пузырька к A_i^0 и его увеличение/уменьшение, если $A_i \neq A_i^0$. Заметим, что $A_i \sim V_i$, так как $\phi_i = 1$ внутри ячейки пены и $\phi_i = 0$ вне неё.

Вид зависимости объёмного слагаемого от параметра порядка изображён на рис. 2 слева. Если размер пузырька $A_i = A_i^0$, то $\phi_c = 0.5$. При этом минимумы объёмной энергии находятся в точках $\phi = 0$ и $\phi = 1$ на одном уровне (рис. 2 справа). В случае если $A_i < A_i^0$, величина $\phi_c < 0.5$. Более энергетически выгодным становится положение, где $\phi = 1$ и пузырёк начинает расти. Когда же $A_i > A_i^0$, величина $\phi_c > 0.5$. Минимум энергии смещается в сторону $\phi = 0$, и пузырёк сжимается.

Отталкивающее слагаемое препятствует слиянию пузырьков. Оно задаётся формулой

$$f_{r,i}(\vec{\phi}) = \beta \phi_i \sum_{i \neq j} \phi_j^2, \quad (10)$$

где $\beta > 0$ — параметр, отвечающий за силу отталкивания пузырьков. Отталкивающее слагаемое равняется нулю, когда пузырьки не пересекаются друг с другом, и больше нуля при их пересечении, что обеспечивает рост энергии и делает такое состояние энергетически менее выгодным.

Таким образом, производная объёмной плотности энергии по функции параметра порядка принимает вид

$$\frac{\delta g}{\delta \phi_i} = 4\phi_i (\phi_i - \phi_{c,i}) (\phi_i - 1) + \beta \phi_i \sum_{i \neq j} \phi_j^2. \quad (11)$$

Отсюда получаем объёмную плотность энергии

$$g(\vec{\phi}) = \sum_{i=1}^N \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^{N_b} \phi_j^2 \phi_i^2 - \frac{\beta}{4} \phi_i^4 + \phi_i^2 \left[\phi_i \left(\phi_i - \frac{4}{3} \right) + \phi_c \left(2 - \frac{4}{3} \phi_i \right) \right] + \\ + \frac{2}{3} \phi_i^3 \frac{\alpha}{A_i^0} \left[(\phi_i - 2) \int_V \phi_i dr - \phi_i (2\phi_i - 5) \frac{V}{10} \right], \quad (12)$$

где V — объём всей области пространства. Тогда система (6) будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M \left(f_{b,i}(\phi_i) + f_{r,i}(\vec{\phi}) - \operatorname{div} (\xi^2 \nabla \phi_i) \right). \quad (13)$$

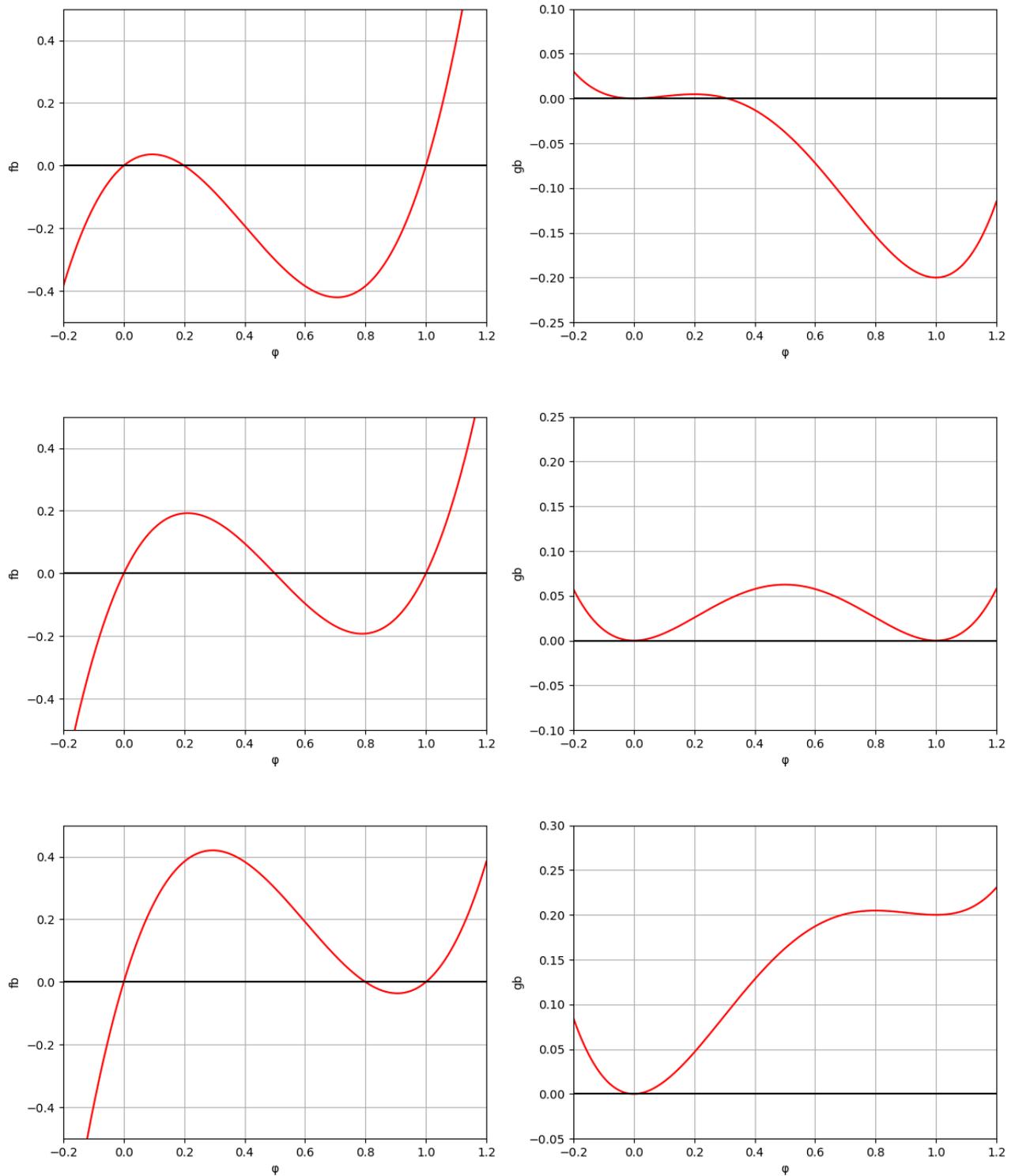


Рис. 2. Зависимости $f_{b,i}(\phi_i)$ (слева) и $g_{b,i}(\phi_i)$ (справа) при значениях величины $\phi_{c,i} < 0.5$, $\phi_{c,i} = 0.5$ и $\phi_{c,i} > 0.5$ сверху вниз соответственно

Обратим внимание, что свободная энергия системы и, как следствие, правая часть в (13), являются нелокальными — помимо производных, они содержат интеграл по объёму (12). Это является следствием наложенных ограничений на размер пузырьков (8).

4 Одномерный случай

В одномерном случае распределение параметра порядка имеет вид как на рис. 1. В этом случае эволюционное уравнение (13) принимает вид

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -M \left[f_{b,i}(\phi_i) + f_{r,i}(\vec{\phi}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\xi^2 \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right) \right]. \quad (14)$$

При этом величина $\phi_{c,i}$ из объёмного слагаемого (8) записывается как

$$\phi_{c,i} = \frac{1}{2} + \alpha \left(\frac{1}{A_i^0} \int_0^L \phi_i^2 dx - 1 \right),$$

где A_i^0 имеет размерность длины. Свободная энергия Гиббса (2), в свою очередь, примет вид

$$G = \int_0^L \left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \xi^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_j \right)^2 + g_{1D}(\vec{\phi}) \right] dx, \quad (15)$$

где плотность энергии

$$\begin{aligned} g_{1D}(\vec{\phi}) = & \sum_{i=1}^N \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^N \phi_j^2 \phi_i^2 - \frac{\beta}{4} \phi_i^4 + \phi_i^2 \left[\phi_i \left(\phi_i - \frac{4}{3} \right) + \phi_{c,i} \left(2 - \frac{4}{3} \phi_i \right) \right] + \\ & + \frac{2}{3} \phi_i^3 \frac{\alpha}{A_i^0} \left[(\phi_i - 2) \int_0^L \phi_i dx - \phi_i (2\phi_i - 5) \frac{L}{10} \right]. \quad (16) \end{aligned}$$

Перепишем это выражение в более удобном для вычислений виде

$$\begin{aligned} g_{1D}(\vec{\phi}) = & \sum_{i=1}^N \phi_i^2 \left\{ -\frac{2}{15} \frac{\alpha L}{A_i^0} \phi_i^3 + \left[1 - \frac{\beta}{4} + \frac{1}{3} \frac{\alpha}{A_i^0} \left(2 \int_0^L \phi_i dx + L \right) \right] \phi_i^2 \right. \\ & \left. - \frac{4}{3} \left(1 + \phi_{c,i} + \frac{\alpha}{A_i^0} \int_0^L \phi_i dx \right) \phi_i + 2\phi_{c,i} + \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^N \phi_j^2 \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

В этом разделе рассматривается эволюция пены в одномерной области $\Omega = [0, L]$, где L — длина отрезка. В начальный момент времени распределение параметра порядка задаётся вектор-функцией $\vec{\phi}^{(0)}(x) = (\phi_1^{(0)}, \dots, \phi_N^{(0)})$. Рассматривается случай, когда потоки параметра порядка через границу равны нулю. Тогда граничным условием для данной задачи будет

$$\left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=L} = 0.$$

С учётом начальных и граничных условий задача принимает вид

$$\begin{cases} -\frac{1}{M} \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} = \vec{f}_b + \vec{f}_r - \frac{\partial}{\partial x} \left(\xi^2 \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right), & x \in (0, L), t \in [0, T], \\ \vec{\phi}(x, t_0) = \vec{\phi}^{(0)}(x), & x \in [0, L], t = t_0, \\ \frac{\partial \vec{\phi}(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \vec{\phi}(L, t)}{\partial x} = 0, & x = 0, L, t \in [0, T]. \end{cases} \quad (18)$$

4.1 Разностная схема

Построим разностную схему для решения уравнений (18). Введём в области $\tilde{\Omega} = [0, L] \times [0, T]$ сетку с узлами $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N_x} = L$, $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N_t} = T$, где $x_n = n \cdot \Delta x$, $t_n = n \cdot \Delta t$, Δx и Δt — шаги сетки. Значения сеточной функции относятся к узлам сетки и обозначаются как $y_{i,j}^k = y_i(x_j, t_k)$. Здесь и далее $i = \overline{1, N}$ — номер компоненты фазового поля $\vec{\phi}$. В дальнейшем будем использовать обозначения

$$y_i = y_i(x_j, t_k), \quad \hat{y}_i = y_i(x_j, t_k + \Delta t) \quad y_{i,\pm 1} = y_i(x_{j\pm 1}, t_k).$$

Запишем аппроксимацию уравнений (18) для $y_i \equiv \phi_i$ в виде явной разностной схемы

$$\begin{aligned} -\frac{1}{M} \frac{\hat{y}_i - y_i}{\Delta t} = 4y_i \left[y_i - \frac{1}{2} - \alpha \left(\frac{1}{A_i^0} \cdot I_i - 1 \right) \right] (y_i - 1) + \\ + \beta y_i \sum_{n \neq i}^N \phi_n^2(x_j, t_k) - \frac{d_{i,+1} - d_i}{\Delta x} \end{aligned} \quad (19)$$

с начальными и граничными условиями

$$y_{i,j}^0 = \phi_i^{(0)}(x_j), \quad y_{i,0} = y_{i,1}, \quad y_{i,N_x+1} = y_{i,N_x}. \quad (20)$$

Здесь

$$I_i = \Delta x \sum_{n=1}^{N_x} (y_{i,n}^k)^2, \quad d_{i,j} = \xi^2 \frac{y_{i,j+1}^k - y_{i,j}^k}{\Delta x}.$$

4.2 Исследование устойчивости разностной схемы

Исследуем схему (19) на устойчивость и подберём шаги сетки. Мы имеем дело с уравнением параболического типа, схожим с уравнением теплопроводности. Перепишем явную разностную схему следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{y}_i - y_i}{\Delta t} - M\xi^2 \cdot \frac{y_{i,+1} - 2y_i + y_{i,-1}}{\Delta x^2} = \\ & = -M \left\{ 4y_i \left[y_i - \frac{1}{2} - \alpha \left(\frac{1}{A_i^0} \cdot I_i - 1 \right) \right] (y_i - 1) + \beta y_i \sum_{n \neq i}^N \phi_n^2(x_j, t_k) \right\}, \quad (21) \end{aligned}$$

начальные и граничные условия соответствуют (20).

Если бы правая часть разностной схемы была равна нулю, получилась бы разностная схема для уравнения теплопроводности. Необходимым условием её устойчивости по начальным данным в этом случае будет

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2M\xi^2}. \quad (22)$$

В действительности правая часть зависит от y достаточно сложным образом. Проверим, возможно ли ей пренебречь, чтобы оценить необходимое для устойчивости соотношение шагов по времени и координате. Для параметров $M = 1$, $\xi = 0,00056$ устойчивость должна наблюдаться при

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1,6 \cdot 10^6.$$

Проведём моделирование эволюции системы при разных значениях Δx , подбирая при этом максимальные Δt , при которых схема всё ещё устойчива (см. рис. 3). Получим, что при наличии правой части со значениями параметров $\alpha = 1$, $\beta = 2$, $M = 1$ схема устойчива при соотношении, очень близком к полученному ранее

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1,61 \cdot 10^6.$$

Поэтому далее будем подбирать шаг по времени и по пространству таким образом, чтобы они удовлетворяли условию (22).

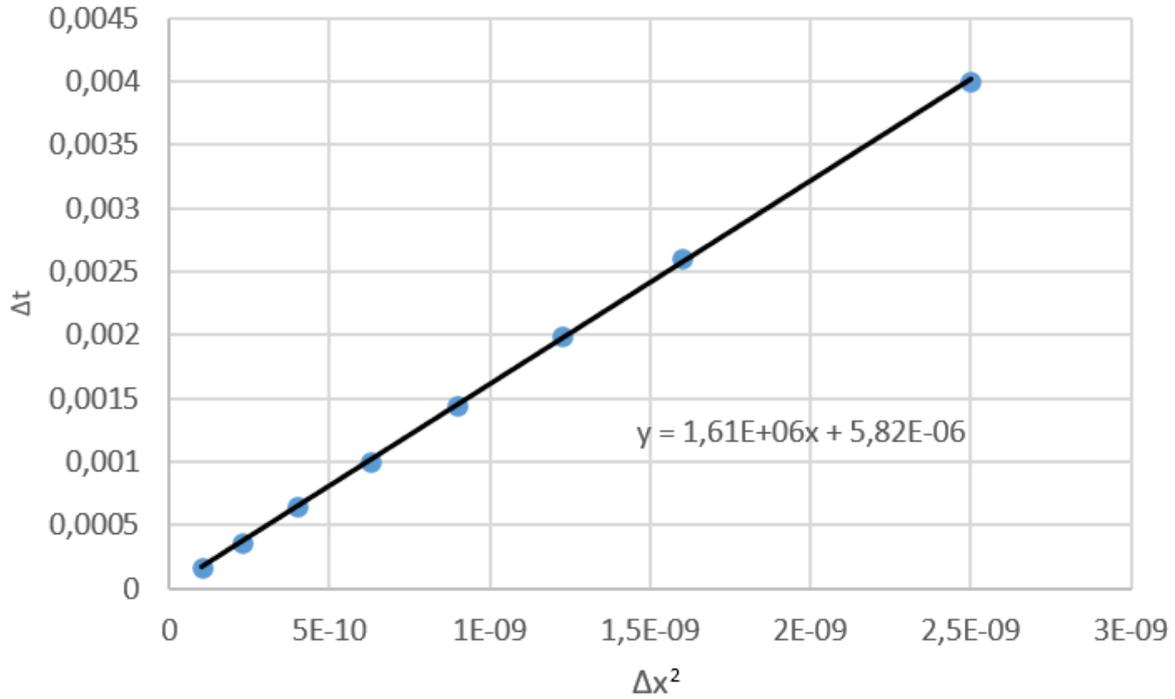


Рис. 3. Зависимость максимального шага по времени Δt от квадрата шага по координате Δx , при которых схема устойчива по начальным данным

4.3 Моделирование эволюции

Проведём моделирование эволюции одномерной пены. Зададим начальное состояние пены, разместив в области $\Omega = [0, L]$ N_b одинаковых пузырьков. Для этого разобьём Ω на N_b одинаковых непересекающихся подобластей

$$\bigcup_{n=1}^{N_b} X_n = \Omega$$

длиной $l = L/N_b$ каждая и зададим параметр $\varepsilon_{\text{init}} \in [0, 1]$, отвечающий за то, какую часть пространства в начальный момент времени занимают пузыри. Будем размещать пузырьки в эти подобласти. Радиус одного пузырька зададим как

$$r_b = \varepsilon_{\text{init}} \cdot l/2.$$

Центры пузырьков зададим следующим образом: в каждой подобласти $X_n = [x_n, x_n + l]$, где $n = \overline{1, N_b}$, выберем случайно точку a_n в промежутке $[x_n + r_b, x_n + l - r_b]$ — это будет центр n -го пузырька.

Для моделирования пены в одномерном случае достаточно ввести два фазовых поля так, чтобы соседние пузырьки задавались разными фазовыми полями. Это позволит сократить размерность вектор-функции параметра

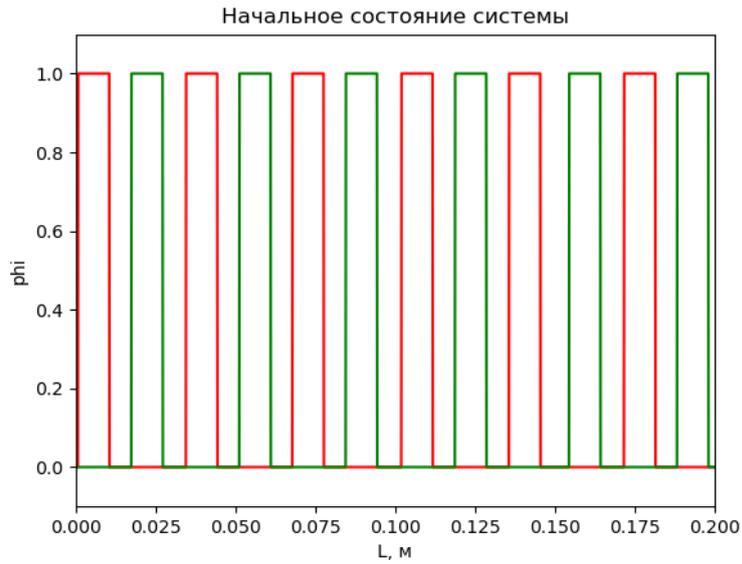
порядка $\vec{\phi}$, но всё ещё будет обеспечивать отталкивание соседних пузырьков. Зададим $\phi_1(x) = 1$ при $x \in [a_n - r_b, a_n + r_b]$, где n — нечётное, $\phi_2(x) = 1$ при $x \in [a_n - r_b, a_n + r_b]$, где n — чётное, получаем начальное распределение пузырьков пены (см. рис. 4 (а)).

Будем проводить расчёт для 12 пузырьков. Параметры системы: $L = 0.2$, $\alpha = 1$, $M = 1$, $\varepsilon_{\text{init}} = 0.5$, $A_0 = \varepsilon L$, где ε — параметр, отвечающий за то, какую часть пространства должны занимать пузыри в равновесном состоянии системы. Рассмотрим эволюцию системы при разных значениях параметра β , определяющего силу отталкивания между пузырьками, и разных значениях параметра ε .

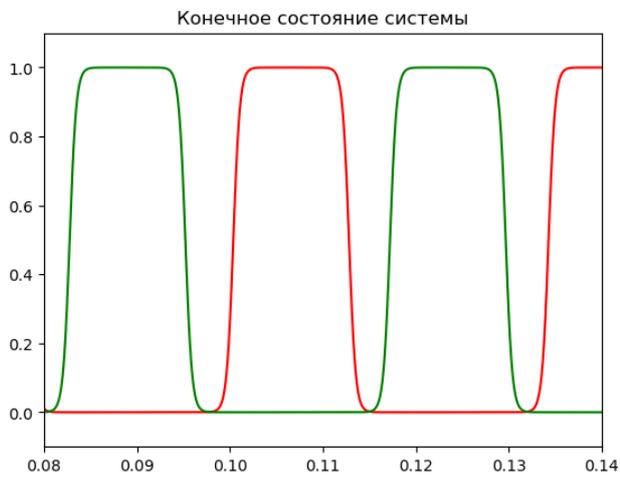
Зафиксируем значение параметра, отвечающего за силу отталкивания пузырьков, $\beta = 2$. Рассмотрим равновесное состояние системы при различных значениях параметра ε , имеющего смысл отношения суммарного размера пузырьков в равновесном состоянии к размерам области пространства. Рассмотрим эволюцию системы при $\varepsilon = 0.7, 0.85, 0.95, 0.99$ (см. рис. 4). Как видно, при увеличении ε пузырьки плотнее прижимаются друг к другу, почти слипаясь при $\varepsilon > 0.9$. Пересечение диффузных границ на графике соответствует слипанию пузырьков. Если диффузные границы пузырьков пересекаются так, что всюду в области раздела фаз выполнено условие (1), то это соответствует тому, что пузырьки имеют общую границу.

Теперь зафиксируем значение параметра, отвечающего за то, какую часть пространства должны занимать пузыри в равновесном состоянии системы, $\varepsilon = 0.9$. Исследуем влияние параметра β на отталкивание пузырьков. Рассмотрим равновесное состояние системы при $\beta = 0.02, 2, 10, 500$ (см. рис. 5). При малых значениях β диффузные границы пузырьков накладываются друг на друга, что соответствует слипанию пузырьков. При больших β , напротив, хоть пузырьки и находятся близко друг к другу, пространство между ними занято другой фазой. Пузырьки не имеют общих границ.

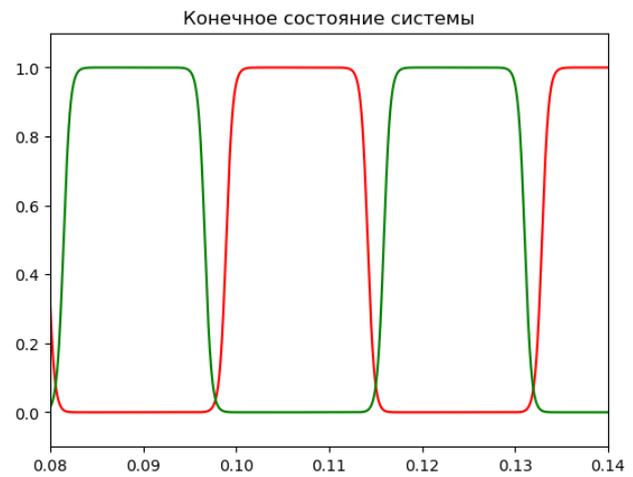
Адекватность полученных данных проверим с помощью принципа минимума полной энергии Гиббса, построив график зависимости энергии от времени (рис. 6). Как и ожидалось, полная энергия системы монотонно убывает со временем.



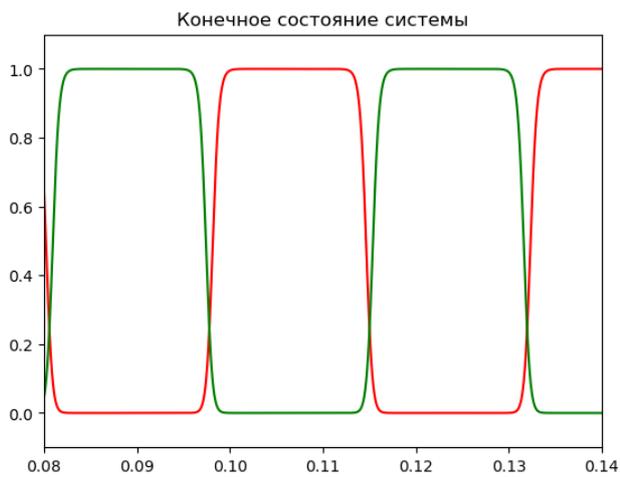
(a) Начальное состояние системы



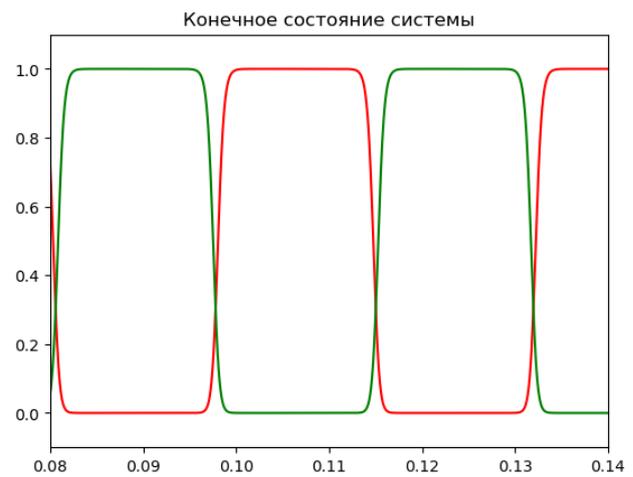
(b) $\varepsilon = 0.7, \beta = 2$



(c) $\varepsilon = 0.85, \beta = 2$



(d) $\varepsilon = 0.95, \beta = 2$



(e) $\varepsilon = 0.99, \beta = 2$

Рис. 4. Равновесное состояние системы при разных значениях параметра ε

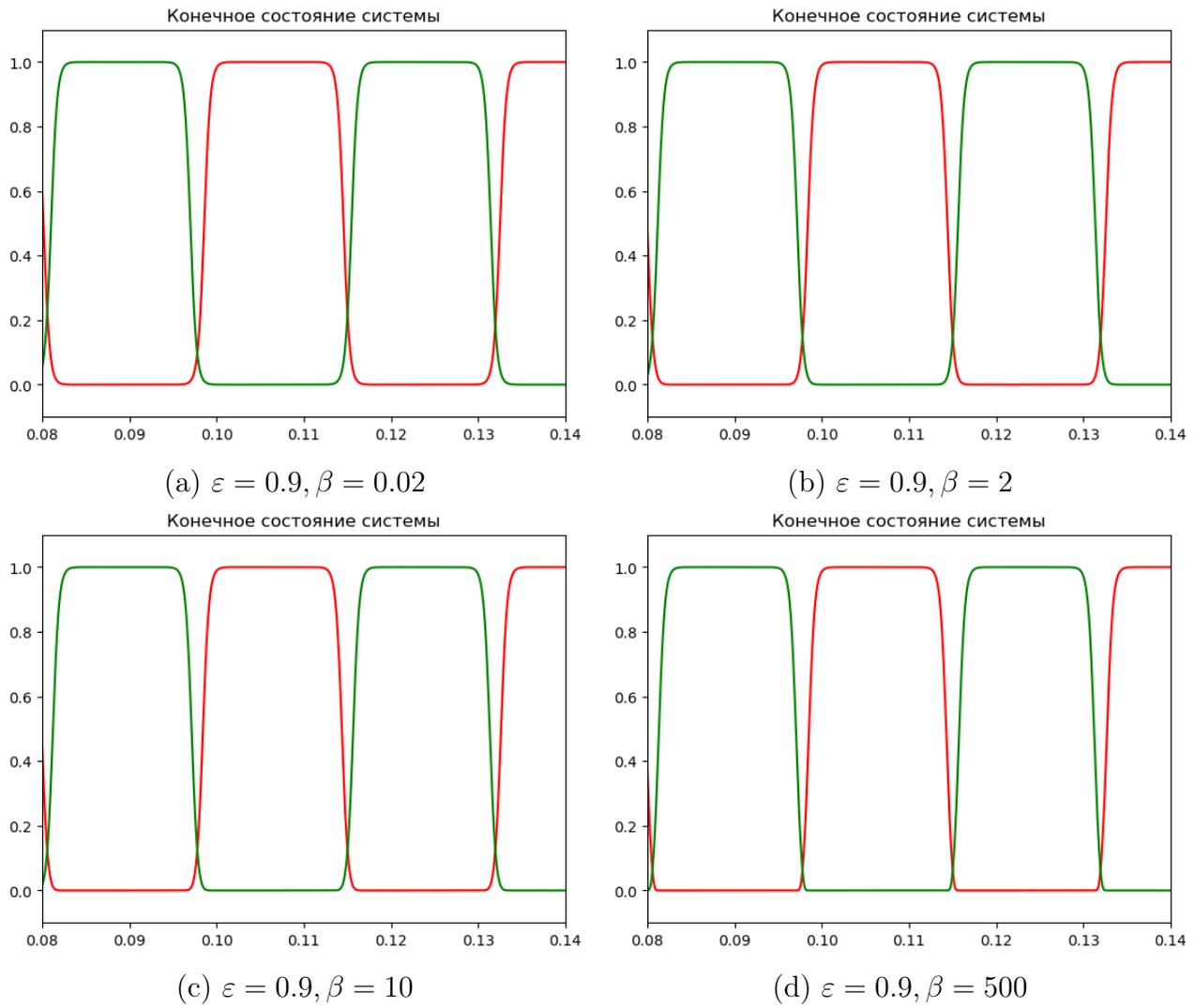


Рис. 5. Равновесное состояние системы при разных значениях параметра β

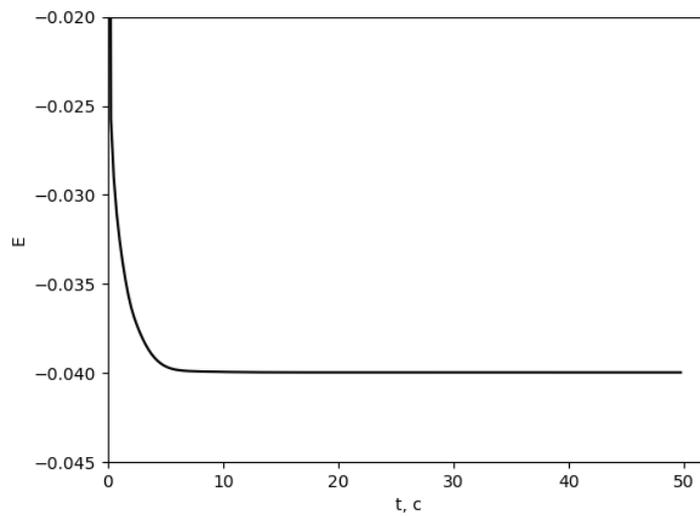


Рис. 6. Зависимости энергии системы от времени

5 Двумерный случай

В двумерном случае эволюционное уравнение (13) принимает вид

$$-\frac{1}{M} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} = f_{b,i}(\phi_i) + f_{r,i}(\vec{\phi}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\xi^2 \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\xi^2 \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right). \quad (23)$$

Также величина ϕ_c из объёмного слагаемого (8) будет записываться следующим образом:

$$\phi_{c,i} = \frac{1}{2} + \alpha \left(\frac{1}{A_i^0} \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \phi_i^2 dx dy - 1 \right),$$

где A_i^0 имеет размерность площади.

В свою очередь, свободная энергия Гиббса (2) будет иметь вид

$$G = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \left\{ \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \xi^2 \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_j \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y} \phi_j \right)^2 \right] + g_{2D}(\vec{\phi}) \right\} dx dy, \quad (24)$$

где плотность энергии

$$g_{2D}(\vec{\phi}) = \sum_{i=1}^N \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^N \phi_j^2 \phi_i^2 - \frac{\beta}{4} \phi_i^4 + \phi_i^2 \left[\phi_i \left(\phi_i - \frac{4}{3} \right) + \phi_{c,i} \left(2 - \frac{4}{3} \phi_i \right) \right] + \frac{2}{3} \phi_i^3 \frac{\alpha}{A_i^0} \left((\phi_i - 2) \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \phi_i dx dy - \phi_i (2\phi_i - 5) \frac{S}{10} \right). \quad (25)$$

Запишем это выражение в более удобном для вычислений виде

$$g_{2D}(\vec{\phi}) = \sum_{i=1}^N \phi_i^2 \left\{ -\frac{2}{15} \frac{\alpha S}{A_i^0} \phi_i^3 + \left[1 - \frac{\beta}{4} + \frac{1}{3} \frac{\alpha}{A_i^0} \left(2 \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \phi_i dx dy + S \right) \right] \phi_i^2 - \frac{4}{3} \left(1 + \phi_{c,i} + \frac{\alpha}{A_i^0} \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} \phi_i dx dy \right) \phi_i + 2\phi_{c,i} + \frac{\beta}{4} \sum_{j=1}^N \phi_j^2 \right\}. \quad (26)$$

В этом разделе рассматривается эволюция пены в двумерной области $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$, имеющей форму прямоугольника со сторонами, расположенными вдоль осей X и Y . Здесь L_x и L_y — длины этих сторон.

В начальный момент времени распределение фазового поля задаётся вектор-функцией $\vec{\phi}^{(0)}(x, y)$. Будем рассматривать случай, когда поток параметра порядка через границу области равен нулю. Тогда граничные условия для задачи будут выглядеть следующим образом:

$$\left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0.$$

С учётом начальных и граничных условий задача принимает вид

$$\begin{cases} -\frac{1}{M} \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} = f_b + f_r - \frac{\partial}{\partial x} \left(\xi^2 \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\xi^2 \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial y} \right), & x \in (0, L_x), \quad y \in (0, L_y), \\ & t \in [0, T], \\ \vec{\phi}(x, y, t_0) = \vec{\phi}^{(0)}(x, y), & x \in [0, L_x], \quad y \in [0, L_y], \quad t = t_0, \\ \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, & t \in [0, T]. \end{cases} \quad (27)$$

5.1 Разностная схема

Построим разностную схему для решения уравнений (27) аналогично тому, как это было сделано в одномерном случае.

Введём в области $\tilde{\Omega} = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, T]$ сетку с узлами $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N_x} = L_x$, $0 = y_0 < y_1 < \dots < y_{N_y} = L_y$, $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N_t} = T$, где $x_n = n \cdot \Delta x$, $y_n = n \cdot \Delta y$, $t_n = n \cdot \Delta t$. Δx , Δy и Δt — шаги сетки. Значения сеточной функции будем относить к узлам сетки и будем обозначать $\psi_{i,j,l}^k = \psi_i(x_j, y_l, t_k)$. В дальнейшем будем использовать обозначения

$$\begin{aligned} \psi_i &= \psi_i(x_j, y_l, t_k), & \hat{\psi}_i &= \psi_i(x_j, y_l, t_k + \Delta t), \\ \psi_{i,j\pm 1} &= \psi_i(x_{j\pm 1}, y_l, t_k), & \psi_{i,l\pm 1} &= \psi_i(x_j, y_{l\pm 1}, t_k). \end{aligned}$$

Запишем аппроксимацию уравнений (27) для $\psi_i \equiv \phi_i$ в виде явной разностной схемы

$$\begin{aligned} -\frac{1}{M} \frac{\hat{\psi}_i - \psi_i}{\Delta t} &= 4\psi_i \left[\psi_i - \frac{1}{2} - \alpha \left(\frac{1}{A_i^0} \cdot I_i - 1 \right) \right] (\psi_i - 1) + \\ &+ \beta \psi_i \sum_{n \neq i}^N \phi_n^2(x_j, y_l, t_k) - \frac{c_{i,+1} - c_i}{\Delta x} - \frac{d_{i,+1} - d_i}{\Delta y} \quad (28) \end{aligned}$$

с начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned}\psi_{i,j,l}^0 &= \phi_i^{(0)}(x_j, y_l), & \psi_{i,j=0} &= \psi_{i,j=1}, & \psi_{i,j=N_x+1} &= \psi_{i,j=N_x}, \\ & & \psi_{i,l=0} &= \psi_{i,l=1}, & \psi_{i,l=N_y+1} &= \psi_{i,l=N_y}.\end{aligned}$$

Здесь

$$I_i = \Delta x \Delta y \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} (\psi_{i,m,n}^k)^2, \quad c_{i,j,l} = \xi^2 \frac{\psi_{i,j+1,l}^k - \psi_{i,j,l}^k}{\Delta x}, \quad d_{i,j,l} = \xi^2 \frac{\psi_{i,j,l+1}^k - \psi_{i,j,l}^k}{\Delta y}.$$

5.2 Моделирование эволюции

Проведём моделирование эволюции двумерной пены в отсутствие потоков параметра порядка через границу области. Зададим начальное состояние системы, разместив в области $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ N_b одинаковых пузырьков. Для этого разобьём область Ω на N_b одинаковых непересекающихся подобластей

$$\bigcup_{n=1}^{N_b} X_n = \Omega,$$

имеющих форму квадрата со стороной $l = \min(L_x, L_y)/N_b$. Зададим параметр $\varepsilon_{\text{init}} \in [0, 1]$, определяющий, какая часть пространства в начальный момент будет занята пузырьками. Будем размещать пузырьки в эти подобласти. Радиус каждого пузырька зададим как

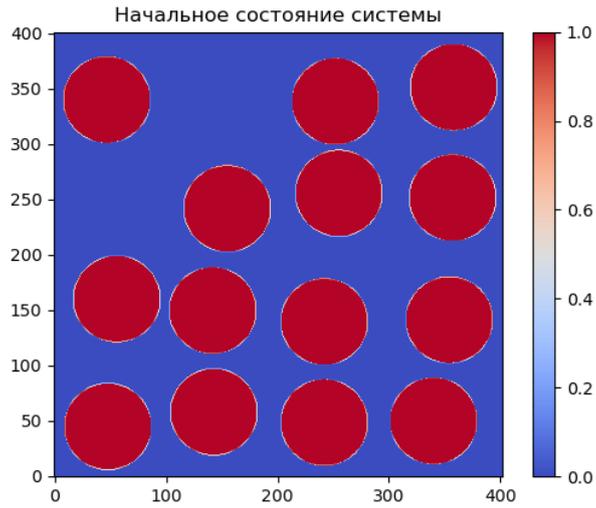
$$r_b = \frac{l}{2} \varepsilon_{\text{init}}.$$

Положение центров пузырьков задаётся следующим образом: в каждой подобласти X_n выберем случайно точку $[x_n + r_b, x_n + l - r_b] \times [y_n + r_b, y_n + l - r_b]$ — это будет центр n -го пузырька. Начальное распределение пузырьков, полученное таким образом, изображено на рис. 7(a).

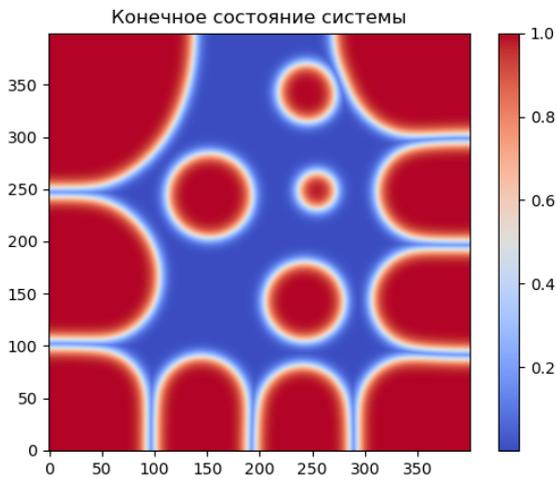
Проведём расчёт для системы из 12 пузырьков. Параметры системы: $L_x = 0.08$ м, $L_y = 0.08$ м, $\alpha = 1$, $M = 1$, $\varepsilon_{\text{init}} = 0.5$, $A_0 = \varepsilon L_x L_y$, где ε - параметр, отвечающий за то, какую часть пространства должны занимать пузыри в равновесном состоянии системы. Рассмотрим эволюцию системы при разных значениях параметра β , определяющего силу отталкивания между пузырьками, и разных значениях параметра ε .

Вначале рассмотрим влияние параметра ε на эволюцию пены и структуру равновесного состояния системы. Зафиксируем все параметры, кроме ε , при этом выберем $\beta = 10$. Рассмотрим структуру равновесного состояния при $\varepsilon = 0.6, 0.7, 0.8, 0.95$. Видно, что при увеличении ε плотность расположения пузырьков пены в равновесном состоянии увеличивается.

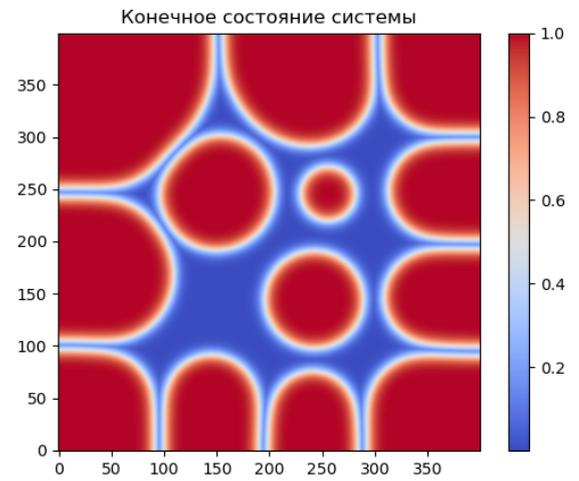
Далее зафиксируем все параметры, кроме β , при этом выберем $\varepsilon = 0.8$. Рассмотрим структуру равновесного состояния при $\beta = 10^{-2}, 10, 10^2, 10^3$. Заметим, что при малых значениях β параметры порядка, соответствующие пузырькам, накладываются друг на друга. Это соответствует сливанию пузырьков в одну структуру. Модель демонстрирует подобное поведение из-за слишком низкого параметра отталкивания β , что ведёт к тому, что пузырьки перестают влиять друг на друга. Их эволюция протекает так, будто бы других пузырьков нет. При небольших значениях β друг на друга накладываются диффузные границы пузырьков. Это соответствует тому, что два пузырька слипаются и имеют общую границу. При больших значениях параметра β хотя пузырьки и находятся близко друг к другу, пространство между ними занято другой фазой. То есть пузырьки не имеют общих границ.



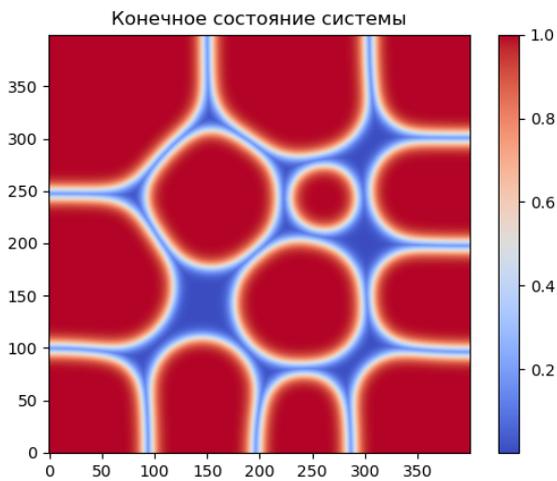
(a) Начальное состояние системы



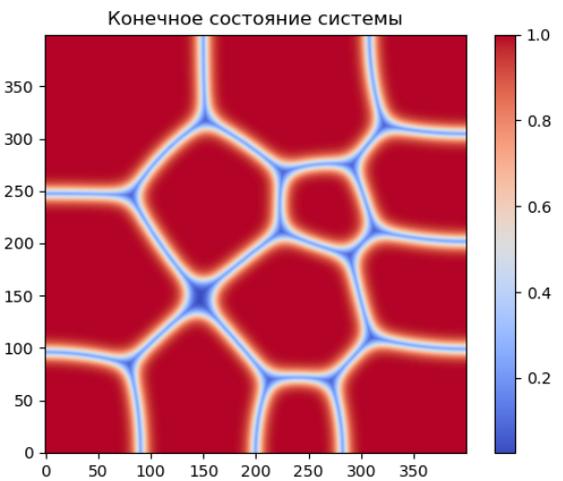
(b) $\varepsilon = 0.6, \beta = 10$



(c) $\varepsilon = 0.7, \beta = 10$



(d) $\varepsilon = 0.8, \beta = 10$



(e) $\varepsilon = 0.95, \beta = 10$

Рис. 7. Равновесное состояние системы при разных значениях параметра ε

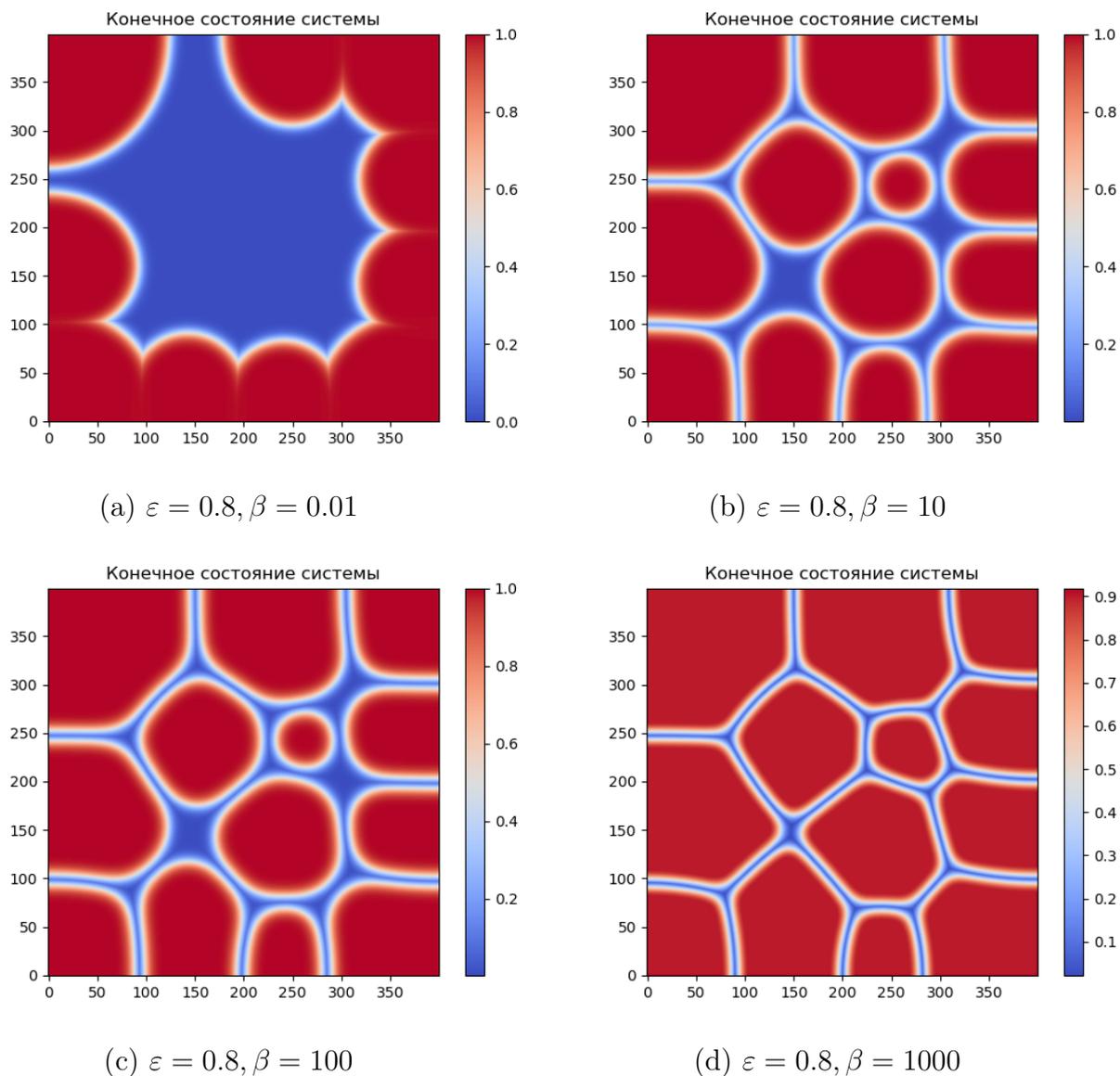


Рис. 8. Равновесное состояние системы при разных значениях параметра β

6 Заключение

В ходе настоящей работы был применён метод фазового поля для моделирования структуры пены в равновесном состоянии системы в соответствии с моделью, предложенной в [5]. При этом было исследовано воспроизводство моделью свойств пены с помощью подбора формы потенциала, построены разностные схемы для численного моделирования эволюции пены в одномерном и двумерном случаях, проведён анализ устойчивости разностных схем, выполнено моделирование эволюции пены в замкнутых областях при отсутствии потоков вещества через границу, а также проведён анализ влияния параметров системы на структуру пены в равновесном состоянии.

Список литературы

- [1] R. Qin, H. Bhadeshia. Phase field method // *Materials Science and Technology* vol. 26 (2010), pp. 803–811.
- [2] W. Boettinger и др. Phase-Field Simulation of Solidification 1 // *Annu. Rev. Mater. Res* vol. 32 (2002), pp. 163–94.
- [3] J. Lowengrub, A. Rätz, A. Voigt. Phase-field modeling of the dynamics of multicomponent vesicles: Spinodal decomposition, coarsening, budding, and fission // *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* vol. 79 (2009), pp. 031926.
- [4] R. Kobayashi. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth // *Physica D: Nonlinear Phenomena* vol. 63 (1993), pp. 410–423.
- [5] T. Lavoratti и др. A computational method to simulate mono- and poly-disperse two-dimensional foams flowing in obstructed channel // *Rheologica Acta* vol. 60 (2021).
- [6] Е. Зицунова, Е. Савенков. О моделях диффузной границы для описания динамики объектов высшей коразмерности // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша* № 122 (2020), pp. 1–34.

Содержание

1	Введение	3
2	Метод фазового поля	4
2.1	Эволюционное уравнение в методе фазового поля	5
3	Моделирование структуры пены	7
4	Одномерный случай	10
4.1	Разностная схема	11
4.2	Исследование устойчивости разностной схемы	12
4.3	Моделирование эволюции	13
5	Двумерный случай	17
5.1	Разностная схема	18
5.2	Моделирование эволюции	19
6	Заключение	22