

Д. Б. ЖАКЕБАЕВ^{1,2}, А. С. ЖУМАЛИ^{1,2*}

¹Национальная инженерная академия Республики Казахстан, Алматы, Казахстан

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Алматы, Казахстан

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ МЕТОДАМИ ФАЗОВОГО ПОЛЯ И LB

Рассмотрено математическое и компьютерное моделирование процесса разделения четырехкомпонентной смеси жидкостей методами решеточных уравнений Больцмана (LB) и фазового поля. Исследуемый процесс рассматривается на ограниченной области, имеющей форму прямоугольника. Построенная математическая модель основана на уравнении Навье-Стокса для несжимаемой жидкости и уравнении Кана-Хилларда. Численная модель построена на основе метода LB с использованием схемы D2Q9. Численные эксперименты проводились для двух сценариев: (1) – исследование модели без учета силы тяжести для определения закономерности влияния поверхностного натяжения и (2) – исследование модели под действием силы тяжести. Численные результаты определяют адекватность построенной модели для четырехкомпонентной жидкости.

Ключевые слова: *четырекомпонентная жидкость, разделение смесей, уравнение Кана-Хилларда, свободная энергия, метод решеточных уравнений Больцмана.*

Введение. Исследование динамики многокомпонентных жидкостей представляет значительный научный и технологический интерес. Многокомпонентные жидкости встречаются во многих природных и промышленных процессах, таких как производство нефти и газа, химическая переработка сырья, течения жидких смесей в котлах и конденсаторах и т.д.

Для исследования течений многокомпонентных жидкостей используются различные модели [1-4]. В зависимости от толщины переходного слоя между фазами можно выделить два основных подхода: модели резкого интерфейса (переходный слой между фазами имеет нулевую толщину) и модели диффузного интерфейса (переходный слой между фазами имеет конечную толщину). В нашей статье мы используем второй подход. Ван-дер-Ваальс был первым, кто рассмотрел переходный слой между фазами как слой конечной толщины [5]. В настоящее время для описания моделей диффузного интерфейса широко используется подход Кана-Хилларда [6].

Данная работа является продолжением работы, написанной нами статьи [7], в которой описывается процесс разделения трехкомпонентной смеси жидкостей. В настоящей работе представлена математическая модель течения четырехкомпонентной несжимаемой жидкости с использованием метода фазового поля, основанного на решении полного уравнения Навье-Стокса и конвективного уравнения Кана-Хилларда. Численная модель основана на схеме D2Q9 метода LB со свободной энергией. Точность и эффективность существующего метода проверены на основе решения ряда задач. Полученные результаты определяют корректность построенной модели для четырехкомпонентной жидкости.

* E-mail корреспондирующего автора: ainura.z89@gmail.com

Постановка задачи. Исследуемый процесс рассматривается в ограниченной области, имеющей форму прямоугольника размерами $[0, L] \times [0, L]$ (рисунок 1). В этой области находятся четыре компонента жидкости с плотностями $\rho_1, \rho_2, \rho_3,$ и ρ_4 , соотношение которых: $\rho_1 > \rho_2 > \rho_3 > \rho_4$. Жидкость с плотностью ρ_4 обозначена синим цветом, ρ_3 – зеленым, ρ_2 – желтым, а более плотная жидкость с плотностью ρ_1 – красным.

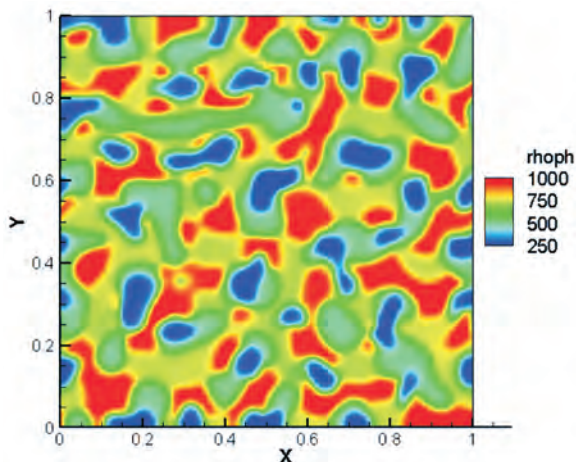


Рисунок 1 – Расчетная область.

Математическая модель процесса включает уравнение неразрывности, уравнение движения смеси и конвективное уравнение Кана-Хилларда:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{u} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u} \vec{u}) &= -\nabla p + \nabla[\eta(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \vec{F}_s + \vec{F}_b, \\ \frac{\partial(c_i)}{\partial t} + \nabla(c_i \vec{u}) &= \nabla(M_i \nabla \mu_i), i = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \tag{1}$$

где \vec{u} – компоненты скорости, p – давление, ρ – плотность, η – динамическая вязкость, c_i – фазовое поле для компонентов жидкости: $c_1 + c_2 + c_3 + c_4 = 1$, \vec{g} – ускорение свободного падения, M_i – коэффициент подвижности, μ_i – химический потенциал, $\vec{F} = \vec{F}_s + \vec{F}_b = \sum_{i=1}^4 \mu_i \nabla c_i + \rho \vec{g}$ – сумма сил поверхностного натяжения и тяжести.

Для системы многокомпонентной среды функционал свободной энергии Ландау можно определить исходя из концентраций жидкостей следующим образом [8]:

$$F(c, \nabla c) = \int \left[F_0(c) - \sum_{i,j=1}^4 \frac{3D}{8} \sigma_{ij} \nabla c_i c_j \right] d\Omega$$

где $F_0(c) = \sum_{i,j=1}^4 \frac{3}{D} \sigma_{ij} [g(c_i) - g(c_j) - g(c_i + c_j)]$ – объемная свободная энергия, $c = (c_1, c_2, c_3, c_4)$ – фазовая переменная компонентов жидкости, $g(c) = c^2(1-c)^2$, σ_{ij} –

поверхностное натяжение между жидкостями, $\sigma_{ij} = 0, i, j = \overline{1,4}$, а D – толщина переходного слоя между жидкостями.

Изменение функции свободной энергии F в зависимости от концентраций жидкостей дает химический потенциал μ_i для компонента i :

$$\mu_1 = \frac{12}{D} [\lambda_1 c_1 (1 - c_1) (1 - 2c_1) - 2\lambda_T c_1 c_2 (1 - c_1 - c_2) - 2\lambda_T c_1 c_3 (1 - c_1 - c_3) - 2\lambda_T c_1 c_4 (1 - c_1 - c_4)] - \frac{3}{4} D \lambda_1 \Delta c_1,$$

$$\mu_2 = \frac{12}{D} [\lambda_2 c_2 (1 - c_2) (1 - 2c_2) - 2\lambda_T c_1 c_2 (1 - c_1 - c_2) - 2\lambda_T c_2 c_3 (1 - c_2 - c_3) - 2\lambda_T c_2 c_4 (1 - c_2 - c_4)] - \frac{3}{4} D \lambda_2 \Delta c_2,$$

$$\mu_3 = \frac{12}{D} [\lambda_3 c_3 (1 - c_3) (1 - 2c_3) - 2\lambda_T c_1 c_3 (1 - c_1 - c_3) - 2\lambda_T c_2 c_3 (1 - c_2 - c_3) - 2\lambda_T c_3 c_4 (1 - c_3 - c_4)] - \frac{3}{4} D \lambda_3 \Delta c_3,$$

$$\mu_4 = \frac{12}{D} [\lambda_4 c_4 (1 - c_4) (1 - 2c_4) - 2\lambda_T c_1 c_4 (1 - c_1 - c_4) - 2\lambda_T c_2 c_4 (1 - c_2 - c_4) - 2\lambda_T c_3 c_4 (1 - c_3 - c_4)] - \frac{3}{4} D \lambda_4 \Delta c_4.$$

Вышеполученное μ_i подставим в уравнение (1), в результате чего система будет полной. Система уравнений (1) имеет следующие начальные условия:

$$\begin{aligned} u &= v = 0, \\ c_1(\bar{x}, 0) &= \bar{c}_1 + \alpha \times rand(\bar{x}) \\ c_2(\bar{x}, 0) &= \bar{c}_2 + \alpha \times rand(\bar{x}) \\ c_3(\bar{x}, 0) &= \bar{c}_3 + \alpha \times rand(\bar{x}) \\ c_4(\bar{x}, 0) &= 1 - c_1(\bar{x}, 0) - c_2(\bar{x}, 0) - c_3(\bar{x}, 0) \end{aligned}$$

Граничные условия:

На нижней стенке при $y = 0$:

$$u = v = 0, \frac{\partial c_1}{\partial y} = \frac{\partial c_2}{\partial y} = \frac{\partial c_3}{\partial y} = \frac{\partial c_4}{\partial y} = 0.$$

На боковых стенках при $x = 0, L$:

для u, v, c_1, c_2, c_3, c_4 – периодические граничные условия.

На верхней стенке при $y = L$:

$$u = v = 0, \frac{\partial c_1}{\partial y} = \frac{\partial c_2}{\partial y} = \frac{\partial c_3}{\partial y} = \frac{\partial c_4}{\partial y} = 0.$$

Численный метод. Численное решение данной модели строится на D2Q9 модели решеточного метода Больцмана. Решеточное уравнение Больцмана в аппроксимации Батнагара-Гросса-Крука (BGK) записывается следующим образом:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Delta t \left[-\frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{x}, t)}{\tau_f} + F_i \right]$$

$$g_i^m(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i^m(\vec{x}, t) = \frac{\Delta t}{\tau_m} [g_i^m(\vec{x}, t) - g_i^{m,eq}(\vec{x}, t)]$$

где $m = 1, 2, 3, 4$ – компоненты жидкости, f_i, g_i^m – функции распределения скорости и фазового поля, e_i – дискретная решеточная скорость, $\tau_f = \frac{1}{2} + c_1 \left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) + c_2 \left(\tau_2 - \frac{1}{2} \right) + (1 - c_1 - c_2) \left(\tau_3 - \frac{1}{2} \right)$, $\tau_m = 0, 8$ – времени релаксации, F_i – компонент внешней силы, Δt – решеточный шаг по времени, $f_i^{eq}, g_i^{m,eq}$ – равновесная функция распределения скорости и фазового поля.

Равновесные функции определяются следующим образом [9]:

$$f_i^{eq} = \begin{cases} \rho - \sum_{i \neq 0} f_i^{eq}, t = 0 \\ \omega_i \rho \left(1 + \sum_{m=1}^3 \frac{c_m \mu_m}{\rho c_s^2} + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta (e_{i\alpha} e_{i\beta} - c_s^2 \sigma_{\alpha\beta})}{c_s^2} \right), i \neq 0 \end{cases}$$

$$g_i^{m,eq} = \begin{cases} c_m - \sum_{i \neq 0} g_i^{m,eq}, t = 0 \\ \omega_i \left(\frac{\Gamma_m \mu_m}{c_s^2} + \frac{c_m e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{c_m u_\alpha u_\beta (e_{i\alpha} e_{i\beta} - c_s^2 \sigma_{\alpha\beta})}{2c_s^2} \right), i \neq 0 \end{cases}$$

где $c_s = c / \sqrt{3}$ – решеточная скорость звука, $c = \Delta x / \Delta t$, Δx и Δt – решеточные шаги по пространству и времени, равны единице.

Для модели D2Q9 дискретные скорости вычисляются следующим образом:

$$e_{ix} = (0, 1, 1, 0, -1, -1, -1, 0, 1)c$$

$$e_{iy} = (0, 0, 1, 1, 1, 0, -1, -1, -1)c$$

Значения весовых параметров по всем направлениям определяются как:

$$\omega_i = \begin{cases} \frac{4}{9}, i = 0, \\ \frac{1}{9}, i = 1-4, \\ \frac{1}{36}, i = 5-8 \end{cases}$$

В данной работе для аппроксимации внешней силы $\vec{F} = F_s + \vec{F}_b = \sum_{i=1}^3 \mu_i \nabla c_i + \rho \vec{g}$ в LBM используется схема, предложенная Гуо и др. [10]:

$$F_i = \omega_i \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_f} \right) \left[\frac{\vec{e}_i \cdot \vec{u}}{c_s^2} + \frac{\vec{e}_i (\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{c_s^4} \right] \cdot \vec{F}$$

Уравнения для функций распределения делятся на два шага как столкновение и распространение:

$$f_i^* (\vec{x}, t) = f_i (\vec{x}, t) + \Delta t \left(-\frac{f_i (\vec{x}, t) - f_i^{eq} (\vec{x}, t)}{\tau_f} - F_i \right)$$

$$g_i^{m,*} (\vec{x}, t) = g_i^m (\vec{x}, t) + \Delta t \left(-\frac{g_i^m (\vec{x}, t) - g_i^{m,eq} (\vec{x}, t)}{\tau_c} \right)$$

$$f_i (\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^* (\vec{x}, t)$$

$$g_i^m (\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i^{m,*} (\vec{x}, t)$$

После второго шага необходимо обновить макропараметры (плотность, скорость и фазовое поле) по формулам:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \rho \vec{u} = \sum_{i=0}^8 f_i \vec{e}_i + \frac{\Delta t}{2} \vec{F}, c_m = \sum_{i=0}^8 g_i^m$$

Производные макроскопических переменных вычисляются с использованием следующих изотропных разностей второго порядка [8]:

$$\nabla^2 c_m (\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^8 \frac{2\omega_i [c_m (\vec{x} + \vec{e}_i \Delta t, t) - c_m (\vec{x}, t)]}{c_s^2 \Delta t^2}.$$

Для поля скоростей в качестве граничного условия прилипания в неподвижных стенках (\vec{x}_w) используется схема обратного отскока (bounce back scheme) [11]:

$$f_i (\vec{x}_w, t + \Delta t) = f_{-i} (\vec{x}_w, t + \Delta t), \vec{e}_i \cdot \vec{n} > 0,$$

где фаза постоянна, а граничные условия для функций распределения концентрации выбраны следующим образом:

$$g_i^m(\bar{x}_w, t + \Delta t) = g_{-i}^m(\bar{x}_w, t + \Delta t) + 2\omega_i c_w, \quad \bar{e}_i \cdot \bar{n} > 0,$$

где c_w – пристеночная фаза.

Условие Неймана для фазы на всех остальных стенках:

$$g_i^m(\bar{x}_w, t + \Delta t) = g_{-i}^m(\bar{x}_w, t + \Delta t), \quad \bar{e}_i \cdot \bar{n} > 0,$$

Результаты моделирования. Рассматривается динамика четырехкомпонентной смеси в прямоугольной расчетной области, имеющей размеры: $N_x \times N_y$, $N_x = 80$, $N_y = 80$. Физический размер длины равен $L = 0,01$ м. Шаг по пространству и по времени определяются как $\Delta x = \frac{L}{N_x} = 0,000125$, $\Delta t = 0,000117188$.

Физические величины: плотность – $\rho_1 = 1000$ кг/м³, $\rho_2 = 750$ кг/м³, $\rho_3 = 500$ кг/м³, $\rho_4 = 250$ кг/м³ и вязкость – $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu_4 = 0,01$ Па · с, ускорение свободного падения – $g = 9,8$ м/с² Безразмерные величины: число Рейнольдса – $Re = 234,787$, число капиллярности – $Ca = 0,00010435$ и число Атвуда $A = 0,142857$.

Компьютерное моделирование методом решеточных уравнений Больцмана проводится в решеточных единицах, т.е. физические параметры модели заменяются их решеточными аналогами с использованием коэффициентов преобразования $Cu = 1,06667$, $Cg = 9102,22$. Параметры LBM: плотность – $\rho_1 = 1,33$, $\rho_2 = 1$, $\rho_3 = 0,67$, $\rho_4 = 0,33$, времена релаксации – $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = 0,8$, поверхностное натяжение – $\sigma_{ij} = \{0,02, 0,04\}$, $i, j = \overline{1,4}$, $i \neq j$, толщина поверхности – $D = 2$, ускорение свободного падения – $g = 0,00107666$ и $U_{ibm} = 0,293484$.

Результаты моделирования (контуры плотностей компонентов смеси) показывают разделение смеси несмешивающихся жидкостей в зависимости от времени (рис. 2, 3). Средние значения концентраций компонентов приняты равными $(\bar{c}_1, \bar{c}_2, \bar{c}_3, \bar{c}_4) = (0,25, 0,25, 0,25, 0,25)$. В первом сценарии (рис. 2), не учитывающем ускорение свободного падения, наблюдается спиновальное разделение смеси во времени, возникающее в результате влияния поверхностного натяжения между компонентами смеси.

Во втором сценарии (рис. 3), учитывающем ускорение свободного падения, на ранней стадии ($T < 1$ с) менее плотная жидкость $\rho_4 = 250$ кг/м³ начинает подниматься вверх, а более плотная $\rho_1 = 1000$ кг/м³ начинает свое движение вниз. В итоге формируются стабильные четыре слоя компонентов жидкости: более плотная жидкость внизу и менее плотная жидкость сверху.

По полученным результатам можно сделать вывод, что чем выше значение поверхностного натяжения, тем быстрее происходит процесс разделения компонентов, что определяет адекватность построенной модели четырехкомпонентной жидкости.

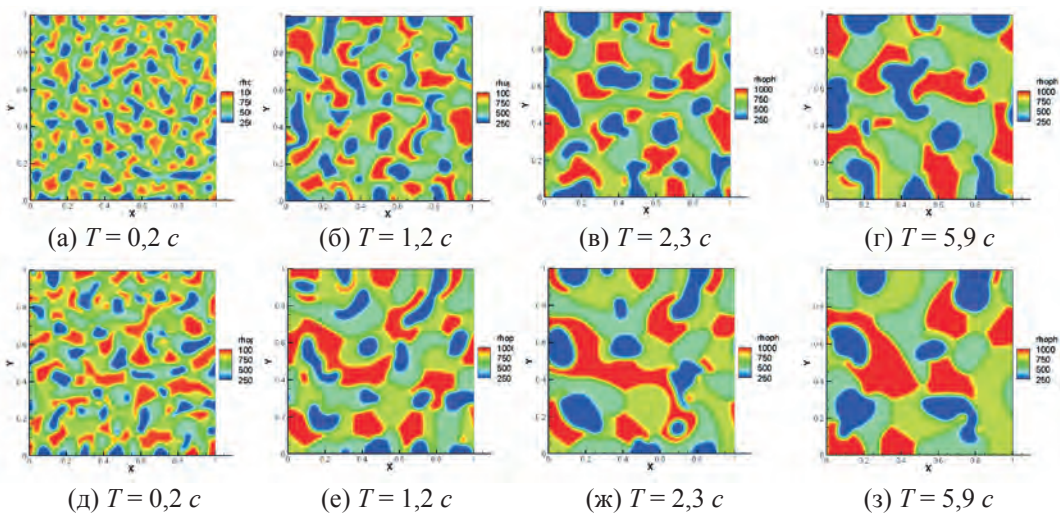


Рисунок 2 – Процесс разделения компонентов смеси в зависимости от времени при: (а)-(г) – $\sigma = 0,02$, (д)-(з) – $\sigma = 0,04$.

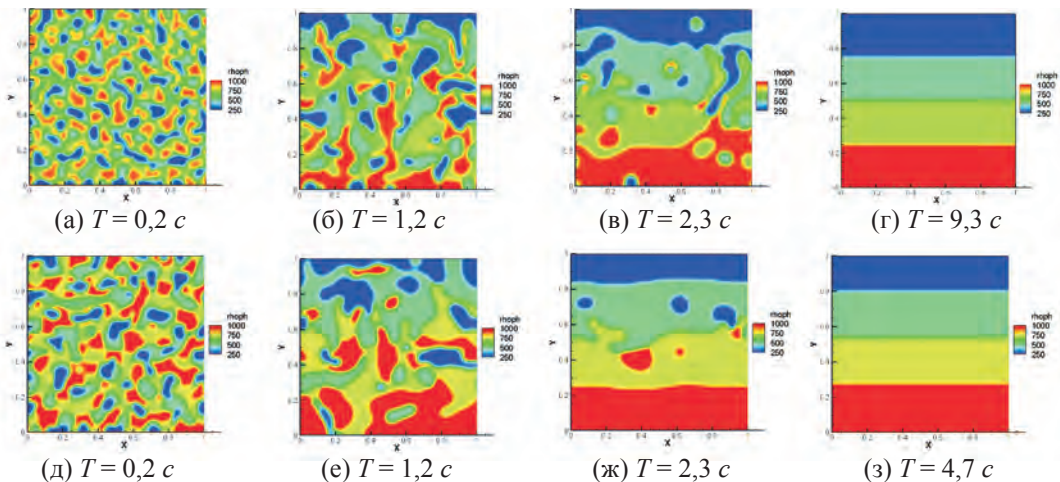


Рисунок 3 – Влияние силы тяжести на процесс разделения компонентов смеси в зависимости от времени при: (а)-(г) – $\sigma = 0,02$, (д)-(з) – $\sigma = 0,04$.

Заключение. В статье предложена математическая и численная модель для исследования процесса разделения четырехкомпонентной жидкости. Для реализации этой модели разработан двумерный численный алгоритм на основе схемы D2Q9 метода решеточных уравнений Больцмана в ограниченной полости в форме прямоугольника. Численное моделирование проводилось с учетом и без учета силы тяжести. Результаты численного моделирования показали, что в зависимости от поверхностного натяжения спинодальное разделение компонентов происходит по-разному, т.е. чем больше значение поверхностного натяжения, тем выше скорость притяжения частиц компонентов одинаковой плотности. Под действием силы тяжести с течением

времени жидкости начинают выстраиваться по порядку, от более плотных до менее плотных, снизу вверх соответственно. Стабильность процесса наступает, когда более плотная компонента полностью опускается вниз. При большем значении поверхностного натяжения с учетом силы тяжести время для устойчивого состояния системы получается вдвое меньше. Результаты работы доказывают применимость использованных в статье методов.

Работа выполнена при поддержке грантового финансирования проектов Министерством образования и науки Республики Казахстан (грант №AP08053154).

ЛИТЕРАТУРА

1 Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E* 47 (1993): 1815-1839.

2 He X., Chen S., Zhang R. A Lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability. *J. Comput. Phys.* 152 (1999): 642-663.

3 Rothman D.H., Keller J.M. Immiscible cellular-automaton fluids. *J. Stat. Phys.* 52 (1988): 1119-1127.

4 Kim J. Phase fluid models for multi-component fluid flows. *Commun. Comput. Phys.* 12, No 3 (2012): 613-661.

5 Waals J. van der. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. *Journal of Statistical Physics* 20 (1979): 200-244.

6 Cahn J. W., Hilliard J. E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *J. Chem. Phys.* 28 (1958): 258-267.

7 Zhakebayev D.B., Zhumali A.S. Simulation of Ternary Fluid Mixtures Separation by Phase-Field Free Energy LBM. *International Journal of Mathematics and Physics* 13, No 1 (2022): 48-54. DOI: <https://doi.org/10.26577/ijmph.2022.v13.i1.05>

8 Zheng L., Zheng S., and Zhai Q. Multiphase flows of Nimmiscible incompressible fluids: Conservative Allen-Cahn equation and lattice Boltzmann equation method” *Physical review E* 101 (2020).

9 Kruger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O. and Silva G., Viggien E.M. *The Lattice Boltzmann-Method.*: Springer International Publishing 258, 2017.

10 Guo Z., Zheng C., Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E.* 65 (2002): 1-6.

11 Wang P., Zhang Y., Guo Z. Numerical study of three-dimensional natural convection in a cubicalcavity at high Rayleigh numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 113 (2017): 217-228.

Д. Б. ЖӘКЕБАЕВ^{1,2}, А. С. ЖҰМӘЛІ^{1,2}

¹Қазақстан Республикасының Ұлттық инженерлік академиясы, Алматы, Қазақстан

²Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан
e-mail: Ainura.z89@gmail.com

ФАЗАЛЫҚ ӨРІС ЖӘНЕ LB ӘДІСТЕРІМЕН ТӨРТ КОМПОНЕНТТІ ҚОСПАНЫҢ БӨЛІНУІН ПІШІНДЕУ

Бұл мақалада төрт компонентті сұйықтық қоспасының бөліну үрдісін Больцманның торлы теңдеулері (LB) әдісі мен фазалық өріс әдісі арқылы математикалық және компьютерлік пішіндеу қарастырылған. Зерттеліп отырған үрдіс тіктөртбұрыш пішінді шектелген облыста жүзеге асырылған. Құрылған математикалық модель сығылмайтын сұйыққа арналған Навье-Стокс теңдеулеріне және Кан-Хиллард теңдеулеріне негізделген. Сандық әдіс LB әдісінің D2Q9 схемасын қолданумен тұрғызылған. Сандық эксперименттер екі сценарий үшін жүргізілді: (1) – беттік керілу әсерінің жүйелілігін анықтау үшін модельді ауырлық күшін ескермей зерттеу және (2) – модельді ауырлық күшін ескере отырып зерттеу. Сандық нәтижелер төрт компонентті сұйықтық үшін құрылған модельдің адекваттығын көрсетеді.

Түйін сөздер: төрт компонентті сұйықтық, қоспаның бөлінуі, Кан-Хиллард теңдеулері, еркін энергия, Больцманның торлы теңдеулері әдісі.

D. B. ZHAKEBAYEV^{1,2}, A. S. ZHUMALI^{1,2}

¹ National Engineering Academy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

² Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

e-mail: Ainura.z89@gmail.com

SIMULATION OF FOUR-COMPONENT MIXTURES SEPARATION BY PHASE FIELD AND LB METHODS

This article reviews the mathematical and computer modeling of the process of four-component fluid mixture separation by Lattice Boltzmann equations (LB) method and phase field method. The process under study is considered in a limited area having the shape of a rectangle. The mathematical model constructed to describe this process is based on the Navier-Stokes equation for an incompressible fluid and the Cahn-Hilliard equation. The numerical model is built on the basis of D2Q9 scheme of LB method. Numerical experiments were performed for two scenarios: (1) – investigate the model without body force, in order to determine the patterns of the surface tension effect and (2) - investigate the model with body force. The results obtained determine the adequacy of the constructed model for the four-component fluid.

Key words: four-component fluid, mixtures separation, Cahn-Hilliard equation, free energy, lattice Boltzmann equations method.