

Д. И. Прохоров^{1}, Я. В. Базайкин², В. В. Лисица²*

Применение метода фазового поля для оценки изменения геометрических свойств пористых сред в процессе высокотемпературных воздействий

¹ Институт математики СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

² Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

* e-mail: prokhorovdi@ipgg.sbras.ru

Аннотация. Для решения многофазных задач со свободной границей широкое распространение получил метод фазового поля. Одна из возможных моделей, используемых вместе с методом фазового поля - это система уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана. В случае большого числа фаз необходимо модифицировать численные методы решения системы, чтобы иметь возможность проводить моделирование за приемлемое время. Однако модификация может влиять на решение, поэтому требуется детальная оценка качества. В статье представлено исследование разработанной модификации конечно-разностной схемы для системы уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана, основанной на сужении расчетных областей для уравнений Аллена-Кана. Проводятся сравнительные тесты между решениями, полученными с помощью разработанного алгоритма, и решениями, полученными путем решения системы во всей расчетной области. Выбор параметров алгоритма обоснован балансом между точностью и эффективностью.

Ключевые слова: метод фазового поля, многофазные системы, спекание

D. I. Prokhorov^{1}, Ya. V. Bazaikin², V. V. Lisitsa²*

Application of the phase field method to the estimation of the changes in the geometric properties of porous media during high-temperature effects

¹ Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

² Institute of Petroleum Geology and Geophysics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

* e-mail: prokhorovdi@ipgg.sbras.ru

Abstract. To solve multiphase problems with a free boundary, the phase-field method has become widely used. One of the possible models used together with the phase field method is the system of Cahn-Hilliard and Allen-Cahn equations. In the case of a large number of phases, it is necessary to modify the numerical methods solving the system in order to be able to conduct modeling in an acceptable time. However, modification may affect the decision, so a detailed quality assessment is required. The article presents a study of the developed modification of the finite-difference scheme for the system of Cahn-Hilliard and Allen-Cahn equations based on narrowing the computational domains for the Allen-Cahn equations. Comparative tests are conducted between the solutions obtained using the developed algorithm and the solutions obtained by solving the system in the entire computational domain. The choice of algorithm parameters is justified by the balance between accuracy and efficiency.

Keywords: phase-field method, multiphase system, sintering

Введение

Метод фазового поля становится все более распространенным выбором для моделирования движения многофазных жидкостей [1]. Основная идея состоит в том, чтобы ввести консервативный параметр порядка (такой как массовая доля), который непрерывно изменяется в тонких межфазных слоях и остается однородным в объемных фазах. В модели фазового поля резкие границы раздела жидкостей заменяются переходными областями заданной толщины, где межфазные силы изменяются плавно.

В случае большого количества фаз вычислительные затраты значительно возрастают. Наиболее часто данная проблема встречается в задачах моделирования микроструктурной эволюции в таких процессах как спекание [2], затверждение [3], рост зерен [4]. Модель спекания зернистых материалов состоит из одного консервативного уравнением Кана-Хиллиарда [5] и I уравнений Аллена-Кана [6], где I - количество зерен. Использование методов конечных разностей для решения этой системы требует сохранения значений параметров порядка для каждого зерна. Поэтому, увеличение количества зерен при заданном размере сетки приводит к увеличению затрачиваемых вычислительных ресурсов. С другой стороны, параметры порядка в большей части расчетной области принимают нулевое значение. С использованием этого предположения в работе [7] была предложена оптимизация. Ее принцип заключается в том, что в каждом узле сетки хранятся значения I_c наибольших параметров порядка, (I_c - заданная константа). В работе [5] проведено подробное исследование влияния этой оптимизации на процесс роста зерен и определено наилучшее значения параметра I_c .

Аналогично работе [5], проведена качественная оценка нового подхода [8], в котором вычисление решений уравнений Аллена-Кана происходит лишь в окрестности, соответствующих зерен. Наибольший интерес представляют изменения геометрии и топологии порового пространства зернистых материалов под воздействием высокой температуры, поскольку они связаны с хемосорбционными и прочностными свойствами. Поэтому, для оценки используются геометрические и топологические методы (расстояние Хаусдорфа [9]).

Методы и материалы

Рассмотрим прямоугольную область
 $\Omega = [X_1^{min}, X_1^{max}] \times [X_2^{min}, X_2^{max}] \times [X_3^{min}, X_3^{max}]$. Часть области Ω заполнена зернами. Часть области Ω не занятая зернами называется порами. Параметры порядка $\eta_i(\mathbf{x}, t), 1 \leq i \leq I$ описывают кристаллографическую ориентацию зерен. Параметр $\rho(\mathbf{x}, t)$ описывает распределение массовой плотности. Область значений для всех параметров – отрезок $[0, 1]$.

Эволюция параметров порядка описывается системой уравнений Кана-Хиллиарда [5] и Аллена-Кана [6]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla \cdot D \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial \rho} - \beta_\rho \Delta \rho \right), \\ \frac{\partial \eta_i}{\partial t} &= -L \left(\frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \beta_\eta \Delta \eta_i \right) \quad 1 \leq i \leq I,\end{aligned}\tag{1}$$

где D - коэффициент диффузии, L - коэффициент диффузии частиц сквозь границу зерен, β_ρ, β_η - константы связанные поверхностной энергией и энергией на границе зерен. Функция f - плотность свободной энергии однородной системы. I - число зерен.

На границе области Ω задаются периодические граничные условия. Начальные условия задаются характеристическими функциями зерен:

$$\begin{aligned}\eta_i(\mathbf{x}, 0) &= \chi_i(\mathbf{x}), \forall i, \\ \rho(\mathbf{x}, 0) &= \max_i(\chi_1(\mathbf{x}), \dots, \chi_I(\mathbf{x})).\end{aligned}$$

Для численного решения уравнений (1) используется явная схема Эйлера с шагом τ . Пространственные производные аппроксимируются центральными разностями с шагом сетки h для всех направлений.

Если I велико, то для всех параметров порядка вводятся области $\Omega_i = [X_{i1}^{min}, X_{i1}^{max}] \times [X_{i2}^{min}, X_{i2}^{max}] \times [X_{i3}^{min}, X_{i3}^{max}]$, такие что $supp(\eta_i) \subseteq \Omega_i \subseteq \Omega$. На границе Ω_i задается условие Дирихле $\eta_i = 0$. Пусть $mindist_i$ - минимальное из шести расстояний между границей i -го зерна и плоскостями, образующими $\partial\Omega_i$. $maxdist_i$ - максимальное из шести расстояний. В начале вычислений Ω_i выбираются так, чтобы $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$. Затем, каждые T_r шагов модельного времени для всех зерен проверяется условие $mindist_i > F_{min}$. Если условие не выполнено для какой-либо из областей, то эта область увеличивается так, чтобы $mindist_i = F_{start}$. Каждые T_{fr} единиц модельного времени все области изменяются так, чтобы снова выполнялось $mindist_i = maxdist_i = F_{start}$.

Сужение областей вносит погрешность в решения. Для того, чтобы оценить вносимые изменения для различных параметров алгоритма сравниваются решения, полученные с использованием сужения областей (величины с индексом T), с решениями, полученными при вычислении параметров порядка во всей расчетной области Ω (величины с индексом S).

Проводится сравнение динамики роста перешейка между двумя сферическими частицами:

$$E_X(t) = \frac{|X_S(t) - X_T(t)|}{X_S(t)}.$$

Сравниваются значения параметра ρ :

$$E_{\rho}(t) = \max_{x \in G} |\rho_S(x, t) - \rho_T(x, t)|,$$

где G - множество узлов вычислительной сетки.

Сравниваются площади поверхностей [10] $\rho = 0.5$:

$$E_A(t) = \frac{|A_S(t) - A_T(t)|}{|A_S(t)|}.$$

С использованием метрики Хаусдорфа [9] исследуется смещение интерфейса $\rho = 0.5$:

$$d_H(A, B) = \max(\sup_{x \in A} \inf_{y \in B} |x - y|, \sup_{y \in B} \inf_{x \in A} |x - y|),$$

$$\text{diam}(I) = \sup_{x, y \in A} |x - y|,$$

$$I_S(t) = \{x \in G_u \mid \rho_S(x, t) \geq 0.5\},$$

$$I_T(t) = \{x \in G_u \mid \rho_T(x, t) \geq 0.5\},$$

$$E_H(t) = \frac{d_H(I_S(t), I_T(t))}{\text{diam}(I_S(t))}.$$

Результаты

Выполнено численное моделирование спекания двух частиц оксида алюминия [11] с радиусом 1.25 мкм в течении 4.5 часов при температуре 1435°C. Значения параметров:

$$F_{min} = 5h, T_r = 100\tau,$$

$$F_{start} = 10h, T_{fr} = 1000\tau.$$

Получены значения диаметра перешейка (рис. 1).

Выполнено численное моделирование спекания 10 случайных упаковок из 50 частиц оксида алюминия с радиусом 250 нм. в течении 17.5 минут при температуре 1435°C. Значения параметров те же, что и в (формула параметров). Получены значения абсолютных ошибок, площадей поверхностей и расстояний Хаусдорфа (рис. 2).

Для упаковки 6 (рис. 3) тот же эксперимент выполнен с различными значениями параметров (табл. 1). Измерено время вычислений (табл. 1). Найдены значения абсолютных ошибок, площадей поверхностей (рис. 4) и расстояний Хаусдорфа (рис. 5).

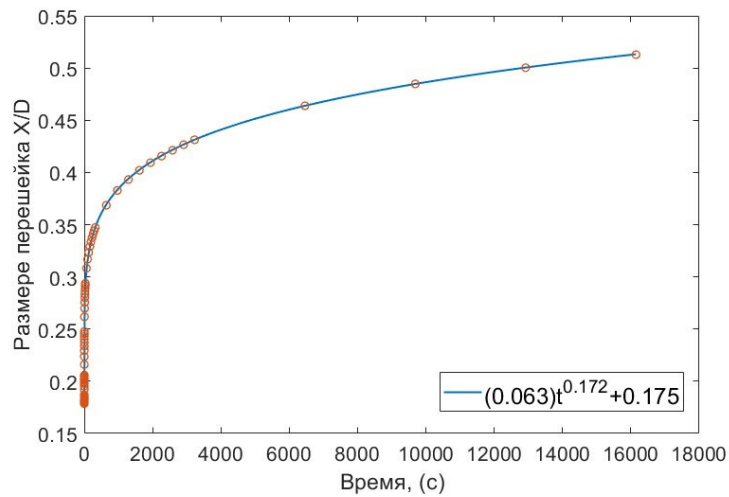


Рис. 1. Зависимость диаметра перешейка от времени (D - диаметра зерна).

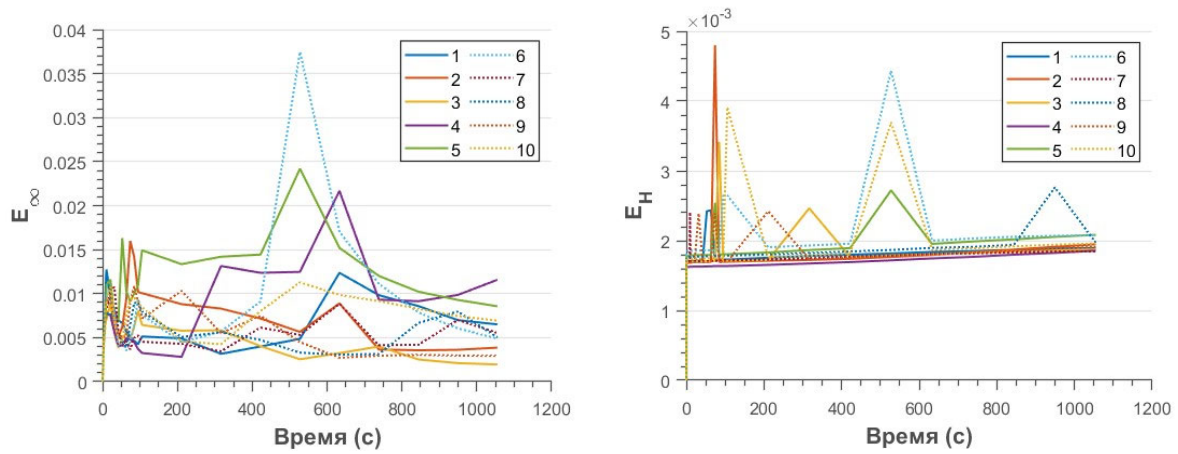


Рис. 2. Зависимость E_{∞} (слева) и E_H (справа) от времени для 10 экспериментов

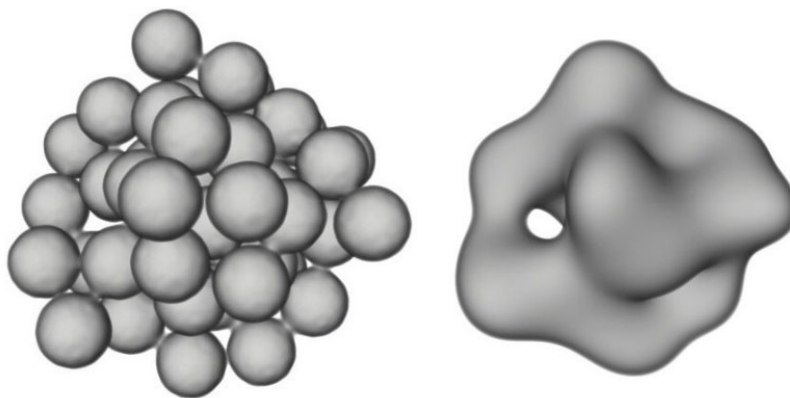


Рис. 3. Спекание образца 6

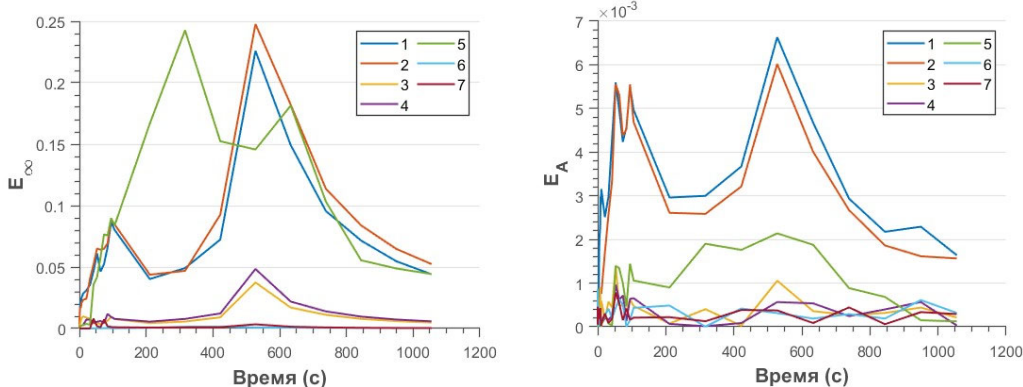


Рис. 4. Зависимость E_{∞} (слева) и E_A (справа) от времени для различных параметров алгоритма.

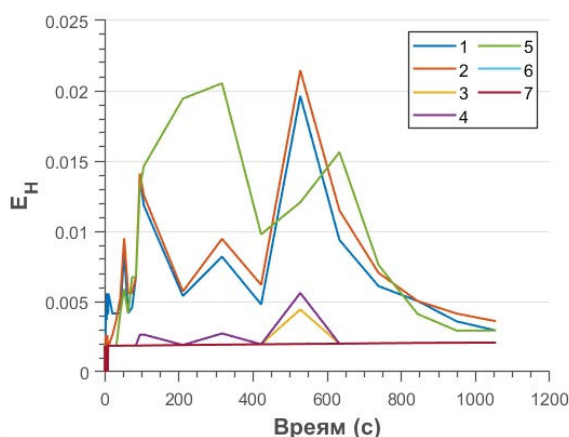


Рис. 5. Зависимость E_H от времени для различных параметров алгоритма.

Таблица 1

Параметры алгоритма

№	$T_r (\tau)$	$T_{fr} (\tau)$	$F_{min} (h)$	$F_{start} (h)$	Время (мин)
1	3	6	100	1000	126
2	3	6	1000	10000	120
3	5	10	100	1000	133
4	5	10	1000	10000	124
5	5	10	10000	100000	146
6	10	20	1000	10000	220
7	10	20	10000	100000	160

Обсуждение

В случае двух частиц (рис. 1) значение $E_X(t)$ меньше 10^{-5} , E_ρ меньше 10^{-3} . Две одинаковые частицы находятся в состоянии равновесия. Следовательно, граница между зерен не перемещается, а размеры изменяются незначи-

тельно. Таким образом, единственным значимым параметром алгоритма является F_{start} . Полученные ошибки позволяют сделать вывод, что значение $F_{start} = 10h_1$ обеспечивает хорошую точность в данном эксперименте.

В большей части экспериментов по спеканию упаковок значение E_∞ меньше 0.01. Максимальное значение $E_\infty = 0.037$ достигается для шестого образца (рис. 2). Этот пик также отображается на графике E_H (рис. 2). Максимальное смещение интерфейса составляет менее 0.5 процентов от диаметра образца. Полученные значения E_A меньше 10^{-3} .

Исследования влияния различных параметров на качество решения для упаковки 6 (табл. 1) показывают, что эксперименты 1, 2 и 5 имеют гораздо большие значения ошибок, чем остальные. E_∞ достигает значения 0.25. E_A не превосходит 1% (рис. 4). Значение E_H соответствует сдвигу интерфейса примерно на два пространственных шага (рис. 5). Это означает, что в экспериментах 1 и 2 границы Ω_i находятся слишком близко к интерфейсу, что существенно влияет на решения. В эксперименте 5 изменение размеров Ω_i происходит слишком редко, поэтому интерфейс приближается близко к границе.

Следовательно, параметры 1, 2 и 5 не подходят для данного эксперимента. Четыре оставшихся набора параметров разделены на две группы. Внутри каждого из них погрешности измерений очень близки. Таким образом, мы можем выбрать наилучшие параметры по соображениям производительности. Между параметрами 3 и 4 предпочтительным является четвертый, так как моделирование выполняется быстрее и решение показывает меньшие значения ошибок (табл. 1). Аналогично, среди параметров 6 и 7, параметры 7 - предпочтительнее. Однако, при выборе параметров следует также учитывать ограничения на количество используемой памяти. Такое ограничение может существенно изменить оптимальный выбор параметров.

Заключение

В работе представлено исследование качественных свойств алгоритма численного моделирования процесса спекания, основанного на системе уравнений Кана-Хиллиарда и Аллена-Кана. Алгоритм значительно сокращает время вычислений за счет сужения расчетных областей параметров порядка. Однако, такое сужение изменяет полученные решения. Помимо общепринятых подходов, для оценки изменений используются расстояние Хаусдорфа. Численные эксперименты показывают, что решение имеет хорошее качество при выборе соответствующих параметров. Параметры 3 (таблица 1) дают лучшее соотношение между качеством решения и производительностью. Анализ выполнен для единственного набора параметров модели для упаковки, состоящей из 50 сферических зерен. Однако, результаты могут быть обобщены для произвольного числа и размера зерен. Если форма зерна отличается от сферической [12], то поверхность имеет большую кривизну и дви-

жется быстрее, чем поверхность сферического зерна. Следовательно, области следует изменять быстрее, однако исследование данного случая пока не проводилось.

Благодарности

Д. И. Прохоров разработал алгоритмы для вычисления характеристик цифрового представления упаковки зерен, и Я. В. Базайкин выполнил анализ результатов при поддержке программы фундаментальных исследований РАН контракт №. FWZZ-2022-0022. В. В. Лисица провел вычислительные эксперименты с использованием вычислительных ресурсов Суперкомпьютерного Центра "Политехнический" (СПБГТУ, Россия) при поддержке РФФ (грант №. 21-71-20003).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Anderson D. M., McFadden G. B., Wheeler A. A. Diffuse-interface methods in fluidmechanics // *Ann. Rev. Fluid Mech.* – 1998. – Vol. 30. – P. 139–165.
2. Wang Y. U. Computer modeling and simulation of solid-state sintering: A phase field approach // *Acta Materialia.* — 2006. — Vol. 54, №. 4. — P. 953—961.
3. Hötzer J., et. al. Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification // *Acta Materialia.* — 2015. — Vol. 93. — P. 194—204.
4. Moelans, N., Wendler F., Nestler B. Comparative study of two phase-field models for grain growth // *Computational Materials Science.* — 2009. — Aug. — Vol. 46. — P. 479—490.
5. Cahn, J. W., Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // *The Journal of Chemical Physics.* — 1958. — Vol. 28. — №2. — P. 258—267.
6. Allen, S., Cahn J. Ground state structures in ordered binary alloys with second neighbor interactions // *Acta Metallurgica.* — 1972. — Vol. 20. — №. 3. — P. 423—433.
7. Kim S. G. et al. Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Dec. — Vol. 74. — Issue 6. — P. 061605.
8. Прохоров, Д. И., Базайкин Я.В., Лисица В.В. Эффективный алгоритм решения системы уравнений Аллена-Кана и Кана-Хиллиарда: моделирование процесса спекания // *Вычислительные методы и программирование.* — 2022. — апр. — Т. 23, № 72. — С. 75—94.
9. Aspert, N. Mesh: measuring errors between surfaces using the hausdorff distance / Aspert, N., Santa-Cruz, D., Ebrahimi, T. // In: *Proceedings. IEEE International Conference on Multimedia and Expo.* – 2002. – Vol. 1. – Pages 705-708.
10. Liu Y.-S. et al. Surface area estimation of digitized 3D objects using quasi-Monte Carlo methods // *Pattern Recognition.* — 2010. — Nov. — Vol. 43. — P. 3900—3909.
11. Hötzer J. et al. Phase-field simulation of solid state sintering // *Acta Materialia.* — 2018. — Oct. — Vol. 164.
12. Derevschikov V. et al. Phenomenology and modeling of Y2O3 porous grain sintering // *Ceramics International.* — 2023. — Vol. 49. — №6. — P. 9452—9464.

© Д. И. Прохоров, Я. В. Базайкин, В. В. Лисица, 2023