

Научная статья

Трехфазная гидродинамическая модель фазового поля со стабилизацией уравнения Кана–Хилларда

С.А. Прокопьев

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация

Представлена численная реализация трехфазной гидродинамической модели фазового поля, которая сочетает уравнения Навье–Стокса для несжимаемой жидкости и уравнение Кана–Хилларда, являющееся обобщенным уравнением диффузии и описывающее эволюцию консервативного параметра порядка (например, концентрации). Модель фазового поля обладает большими возможностями для изучения многофазных сред, однако при численной реализации метода фазового поля возникает ряд вычислительных сложностей, связанных с устойчивостью численных схем и, как следствие, с необходимостью выбирать малый по времени шаг, что повышает трудоемкость расчетов. В работе предлагается стабилизировать численный алгоритм путем добавления фиктивной релаксационной производной химического потенциала. За счет этого снижается спектральный радиус итерационной матрицы уравнения Кана–Хилларда и появляется возможность существенного увеличения шага по времени без потери устойчивости. При реализации используются полуявная дискретизация и проекционный метод для расчета скорости и давления. Выполнены верификационные расчеты в квадратной области с твердыми стенками на примере модельной жидкости, состоящей из трех фаз. В статических тестах для различных значений коэффициентов поверхностного натяжения получены равновесные конфигурации, согласующиеся с ожидаемыми контактными углами на стыке трех фаз. Динамические тесты показали, что модель корректно воспроизводит падение капли через границу двухфазной системы, а также столкновение двух частиц разных фаз, движущихся в третьей фазе.

Ключевые слова: метод фазового поля, уравнение Кана–Хилларда, трехфазная среда

Получение: 12.08.25 / *Публикация онлайн:* 10.12.2025

УДК 519.6

1. Введение

Моделирование динамики многофазных сред является важным и актуальным направлением в области механики сплошных сред. Встречающиеся в природе и технике многофазные структуры могут представлять из себя разнообразные физические и биологические системы, например, многокомпонентные смеси углеводородов, суспензии, аэрозоли, композитные материалы, кровь, легочная ткань, лавовые потоки, пищевые смеси и многое другое. Такие среды характеризуются сложными межфазными взаимодействиями, различиями в физических свойствах фаз и наличием границ раздела, что требует применения специальных численных методов.

Среди распространенных в литературе подходов, позволяющих моделировать сложные многофазные (преимущественно двухфазные) среды, можно выделить те, которые базируются на методах: объема жидкости (Volume of fluid, VOF), сглаженных частиц (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH), сквозного счета (level-set) и фазового поля (phase field). Идея метода VOF [1] заключается в явном отслеживании контрольных объемов межфазной поверхности, реконструкция межфазной границы при этом, в особенности при сложных топологических изменениях поверхности, является ресурсоемкой задачей. Метод сглаженных частиц [2] представляет собой бессеточный лагранжьевый метод, в котором жидкость разбивается на дискретные частицы. Их поведение описывается подобно классической задаче N тел, а свойства исходной сплошной среды восстанавливаются с помощью сглаживающих функций. К недостаткам метода можно, прежде всего, отнести низкую численную точность, а также сильную зависимость от параметров модели и выбора сглаживающих функций. Метод сквозного счета [3] для нахождения межфазной границы использует некоторую маркерную (дистанционную) функцию, поле которой определяется с помощью уравнения адвекции, что позволяет естественным образом отслеживать сложную топологию границы раздела. Однако данному методу свойственна проблема устойчивости границы раздела, что служит причиной расхождения численной процедуры, для устранения которого требуются существенные вычислительные затраты.

Метод фазового поля, основанный на теории Кана–Хилларда [4, 5], из вышеописанных подходов наиболее близок к методу сквозного счета. Идея метода фазового поля заключается в том, что для моделирования распределения фаз используется непосредственно уравнение, которое описывает динамику изменения состава вещества — уравнение диффузии. Однако в этом случае требуется обобщенное уравнение диффузии, в котором в качестве движущей силы выступает не градиент концентрации, как в модели диффузии Фика, а градиент химического потенциала:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{j} = -\operatorname{div}(-M \nabla \mu) = M \nabla^2 \mu.$$

Здесь C — концентрация; \mathbf{j} — поток диффузии; M — коэффициент мобильности; μ — химический потенциал определяется через функцию свободной энергии E :

$$\mu = \frac{\delta E}{\delta C}, \quad E = \int_{\Omega} f(C, \nabla C) dV,$$

где f — плотность функции свободной энергии. При этом делается важное допущение, что, в отличие от классической термодинамики [6], свободная энергия зависит не только от состава вещества (концентрации), но также и от градиентов концентрации. Безградиентная часть представляется в виде двухъямного потенциала, минимумы которого соответствуют равновесию двух разных фаз; градиентное же слагаемое отвечает за межфазные эффекты. Чистые фазы вещества задаются величиной концентрации $C = 0$ и 1 (либо другими ее значениями, в зависимости от нормировки модели), а граница раздела определяется резким (тонким, но имеющим конечную толщину) переходным слоем. Другое встречающееся в литературе название моделей фазового поля — модели с диффузной границей раздела, что подразумевает некоторое противопоставление моделям сквозного счета, которые преимущественно используются для моделирования строго несмешивающихся сред с границей раздела, стремящейся к нулю (sharp interface models). Напротив, фазово-полевые модели обладают гибкостью и позволяют моделировать динамику как несмешивающихся, так и смешивающихся систем (в том числе частично смешивающихся). Это достигается путем выбора функции свободной энергии и значений ее параметров.

Классические модели фазового поля учитывают только процесс диффузии, что, в частности, дает возможность теоретически описывать такие процессы при фазовом расслоении, как спиноподобный распад (spinodal decomposition [7]) и зародышеобразование (nucleation [8]). Встраивание в гидродинамические модели (в систему уравнений Навье–Стокса) происходит за счет добавления в уравнение движения напряжения Кортвега [9], определяемого через дивергенцию векторного произведения градиентов концентрации. В рамках гидродинамических фазово-полевых моделей возможен, например, учет неустойчивости Рэлея–Тейлора [10], динамики вытеснения в капилляре [11] и другого. Теория фазового поля также позволяет принимать во внимание различную смачиваемость твердой поверхности [12] и другие эффекты [13].

К недостаткам метода фазового поля можно отнести сложности в численной реализации [14]. Несмотря на ослабленные требования малости толщины переходного слоя по сравнению с другими моделями, для корректного моделирования физических процессов в большинстве случаев необходимо задавать границу раздела с конечным, но малым по толщине переходным слоем, что накладывает существенные ограничения на размер вычислительной сетки. Для устойчивости численного счета, с одной стороны, необходимо, чтобы сетка по толщине переходного слоя содержала приблизительно 4–5 узлов, однако для обеспечения достоверности получаемых результатов число узлов обычно оказывается в несколько раз больше. С другой стороны, уравнение диффузии Кана–Хилларда является уравнением в частных производных четвертого порядка, в котором присутствует бигармонический оператор. Реализация явной по времени схемы приводит к ограничению величины шага по времени: $\tau \sim h^4$. Вследствие этого реализация явных схем становится неэффективной, но тем не менее, в силу своей простоты, подходы на основе этих схем весьма популярны. Неявные схемы дискретизации уравнения Кана–Хилларда порождают системы уравнений с плохо обусловленными матрицами, и фактически шаг по времени приходится выбирать сопоставимым с применяемым при явной схеме. Другим подводным камнем при численной реализации метода фазового поля является необходимость соблюдения энергетической устойчивости алгоритма [15], то есть неувеличения со временем функции свободной энергии:

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

Однако за последнее десятилетие наблюдается значительный прогресс в усовершенствовании неявных численных методов расчета с использованием уравнения Кана–Хилларда, среди которых можно выделить метод расщепления [15] (splitting technique), улучшающий энергетическую устойчивость алгоритма путем представления свободной энергии в виде двух частей: одна вычисляется явно (на предыдущем временном шаге), другая — неявно (на новом шаге). Схемы с добавлением фиктивного стабилизирующего слагаемого [14] позволяют уменьшить спектральный радиус матрицы СЛАУ для итерационных алгоритмов.

Все вышеописанные подходы применяются преимущественно в случаях двухфазных систем. Безусловно, модели существенно усложняются при обобщении на многофазные структуры. Теория фазового поля в силу своей гибкости и универсальности — один из наиболее перспективных подходов для симуляции многофазных явлений. Несмотря на имеющийся прогресс в разработке подобного рода моделей [16], по-прежнему остается множество сложностей и нюансов при их численной реализации. В текущей работе излагается собственная оригинальная реализация комбинированной модели Навье–Стокса и многофазного метода фазового поля, в которой система уравнений Кана–Хилларда модифицируется с помощью добавления фиктивной производной химического потенциала, что позволяет увеличить временной шаг интегрирования и повысить эффективность численного интегрирования.

2. Модель трехфазной среды

В основу разрабатываемой многофазной модели фазового поля положены идеи, опубликованные в работах [17, 18]. Основные положения модели состоят в следующем. Полную функцию свободной энергии записываем как

$$E = \int_{\Omega} \left[12F(c_1, c_2, c_3) + \frac{3}{8}\varepsilon \Sigma_1 |\nabla c_1|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon \Sigma_2 |\nabla c_2|^2 + \frac{3}{8}\varepsilon \Sigma_3 |\nabla c_3|^2 \right] dV. \quad (1)$$

В уравнении (1) $F(c_1, c_2, c_3)$ представляет собой трехъямный потенциал (аналог классического двухъямного потенциала для двухфазной среды); ε — параметр, отвечающий за толщину межфазной границы; Σ_i — так называемые коэффициенты распространения (spreading coefficients). Числовые коэффициенты (12 и 3/8) подобраны удобными для использования модели. Система уравнений Кана–Хилларда принимает следующий вид:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = M_i \nabla^2 \mu_i,$$

$$\mu_i = \frac{\delta E}{\delta C_i} + \beta = 12 \frac{\partial F}{\partial C_i} - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla^2 C_i + \beta \quad (i = 1, 2, 3);$$

здесь β — множитель Лагранжа

$$\beta = - \sum_{i=1}^3 \frac{4 \Sigma_T}{\Sigma_i} \frac{\partial F}{\partial C_i},$$

где $\Sigma_T = 3(1/\Sigma_1 + 1/\Sigma_2 + 1/\Sigma_3)^{-1}$. Он необходим для удовлетворения условия, налагаемого на концентрацию трехфазной системы: $C_1 + C_2 + C_3 = 1$. Кроме этого, вводим дополнительные ограничения на коэффициенты мобильности: $M_0 = M_1 \Sigma_1 = M_2 \Sigma_2 = M_3 \Sigma_3$, и на сумму химических потенциалов: $\mu_1/\Sigma_1 + \mu_2/\Sigma_2 + \mu_3/\Sigma_3 = 0$. Тогда одно из уравнений для концентрации становится зависимым. После его исключения получаем следующую систему уравнений Кана–Хилларда:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla^2 \mu_i, \quad (2)$$

$$\mu_i = 4 \Sigma_T \sum_{j \neq i} \frac{1}{\Sigma_j} \left(\frac{\partial F}{\partial C_i} - \frac{\partial F}{\partial C_j} \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla^2 C_i \quad (i = 1, 2). \quad (3)$$

Коэффициенты Σ_i при этом оказываются связанными с попарными коэффициентами поверхностного натяжения:

$$\frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2} = \sigma_{12}, \quad \frac{\Sigma_1 + \Sigma_3}{2} = \sigma_{13}, \quad \frac{\Sigma_2 + \Sigma_3}{2} = \sigma_{23}.$$

Дополняем систему уравнений Кана–Хилларда (2), (3) моделью Навье–Стокса [19, 20] для несжимаемой жидкости. В результате имеем:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\text{Fr}} \sum_i \phi_i C_i - \frac{1}{\text{We}} \sum_i C_i \nabla \mu_i \quad (4)$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) C_i = \frac{M_0}{\Sigma_i} \nabla^2 \mu_i, \quad (6)$$

$$\mu_i = 4 \Sigma_T \sum_{j \neq i} \frac{1}{\Sigma_j} \left(\frac{\partial F}{\partial C_i} - \frac{\partial F}{\partial C_j} \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla^2 C_i. \quad (7)$$

Уравнения (4), (5), (6), (7) записаны в безразмерной форме. В качестве единиц длины, скорости, времени, плотности, вязкости, давления и энергии выбраны, соответственно, фигурирующие в задаче характерные величины:

$$L, U, L/U, \rho^*, \eta^*, U^2 \rho^*, L^2 \sigma^*,$$

где $L, U, \rho^*, \eta^*, \sigma^*$ — линейный размер, скорость, плотность, вязкость и коэффициент поверхностного натяжения. В систему уравнений введены также безразмерные числа:

$$\text{Re} = \frac{\rho^* U L}{\eta^*}, \quad \text{Fr} = \frac{U^2}{g l}, \quad \text{We} = \frac{\rho^* L U^2}{\sigma^*}, \quad \phi_i = \frac{\rho_i - \rho^*}{\rho^*},$$

Re — число Рейнольдса (вязкость фаз одинаковая); Fr — число Фруда; We — число Вебера; ϕ_i — контраст плотности. Для удобства формально оставляем уравнение Кана–Хилларда в первоначальном виде, для чего переопределяем параметры в новых единицах измерения: коэффициент мобильности $L/U \cdot M_0 \rightarrow M_0$, параметр $\varepsilon \cdot L \rightarrow \varepsilon$, коэффициенты $\Sigma_i \sigma^* \rightarrow \Sigma_i$. Заметим, что химический потенциал (с размерностью энергии) в теории фазового поля, строго говоря, является не совсем таковым; здесь это удельный химический потенциал — энергия в единице объема. Обезразмериваем его так: $\mu \cdot \sigma^* / L \rightarrow \mu$.

На твердых стенках систему уравнений (4)–(7) дополняем граничными условиями:

$$\mathbf{v} = 0, \quad \frac{\partial \mu}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0.$$

Здесь n — координата, нормальная к твердой стенке. Условие для скорости — стандартное условие прилипания на твердой стенке. Условие для химического потенциала является следствием выражения $j_n = 0$ (считаем, что нормальная компонента потока вещества равна нулю). Условие для концентрации на твердой границе задает смачиваемость последней, в данном случае $\partial C/\partial n = 0$ соответствует нейтральному углу смачивания, который равен $\pi/2$.

Уравнение Навье–Стокса решаем с помощью проекционного метода. На первом шаге алгоритма вычисляем промежуточное значение скорости без учета градиента давления — квазискорость \mathbf{u}^* :

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{v} + \tau \left(-(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\text{Fr}} \sum_i \phi_i C_i - \frac{1}{\text{We}} \sum_i C_i \nabla \mu_i \right),$$

где значения в правой части берем с временного шага $(n - 1)$. На втором этапе алгоритма решаем уравнение Пуассона для давления:

$$\nabla^2 p = \frac{\text{div } \mathbf{u}^*}{\tau}.$$

На третьем, последнем, шаге алгоритма по рассчитанным значениям квазискорости и давления находим поле истинной скорости:

$$\mathbf{v} = \mathbf{u}^* - \tau \nabla p.$$

Как написано во Введении, при численном решении уравнения Кана–Хилларда возникает ряд технических сложностей, одной из которых является значительная величина спектрального радиуса (то есть максимальное собственное число матрицы λ_{max}) при большом шаге по времени (τ). Для устойчивости традиционных итерационных алгоритмов, таких как методы Якоби и Гаусса–Зейделя, необходимо выполнение неравенства $\lambda_{max} < 1$, что фактически достигается лишь при весьма малых, сопоставимых с явной схемой значениях τ .

В текущей работе предлагается представленный в статье [14] метод обобщить на многофазные системы. Опишем кратко основные идеи данного подхода в одномерном случае.

При дискретизации на основе неявной схемы Эйлера 1-го порядка по времени (Backward Euler method) получаем матрицу СЛАУ следующего вида:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & \dots \\ \dots & A_2 \end{pmatrix}, \quad A_i = \begin{pmatrix} I & A_{\alpha,i} \\ A_{\beta,i} & I \end{pmatrix} \quad (i=1,2). \quad (8)$$

В выражении (8) матрица всей системы уравнений Кана–Хилларда A состоит из блоков A_1 и A_2 , каждый из которых в свою очередь включает блоки $I, A_{\alpha,i}, A_{\beta,i}$; I — единичная матрица; $A_{\alpha,i}, A_{\beta,i}$ — трехдиагональные (в двумерном случае пятидиагональные) матрицы:

$$A_{\alpha,i} = \begin{pmatrix} 2\alpha_i & -\alpha_i & \dots & 0 \\ -\alpha_i & 2\alpha_i & -\alpha_i & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -\alpha_i & 2\alpha_i \end{pmatrix}, \quad A_{\beta,i} = \begin{pmatrix} -2\beta_i & \beta_i & \dots & 0 \\ \beta_i & -2\beta_i & \beta_i & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \beta_i & -2\beta_i \end{pmatrix}.$$

Значения α_i и β_i определяются через параметры дискретизации и коэффициенты модели:

$$\alpha_i = \frac{M_0 \tau}{\Sigma_i h^2}, \quad \beta_i = \frac{3 \varepsilon \Sigma_i}{4 h^2},$$

где h — пространственный шаг сетки, τ — временной шаг интегрирования. При этом фактически реализуется полунеевая схема, в которой на новом временном шаге (n) дискретизируются только линейные слагаемые с оператором Лапласа, нелинейные слагаемые рассчитываются явно на временном шаге $(n - 1)$ и записываются в правой части СЛАУ. В работе [14] показано, что спектральный радиус равен $\lambda_{max} = 4\sqrt{\alpha\beta}$ и $\lambda_{max} = 16\alpha\beta$, соответственно, для методов Якоби и Гаусса–Зейделя. Границы устойчивости методов совпадают: $\alpha\beta < 1/16$. В двумерном случае граница устойчивости определяется условием: $\alpha\beta < 1/64$.

В случае блочной матрицы A данный критерий применим для каждой подматрицы A_i , устойчивость же системы в целом будет определяться максимальным собственным числом подматриц A_i . Однако, как легко видеть, произведение $\alpha_i\beta_i$ не зависит от коэффициентов Σ_i , следовательно, на устойчивость численного метода выбор Σ_i также не влияет. Фактически остается лишь один механизм регулирования спектрального радиуса — уменьшение шага по времени τ .

Модифицируем химический потенциал путем добавления в его исходное выражение фиктивной релаксационной производной по времени:

$$\mu_i + k\tau \frac{\partial \mu_i}{\partial t} = 4\Sigma_T \sum_{i \neq j} \frac{1}{\Sigma_j} \left(\frac{\partial F}{\partial C_i} - \frac{\partial F}{\partial C_j} \right) - \frac{3}{4} \varepsilon \Sigma_i \nabla^2 C_i \quad (i=1,2).$$

После дискретизации временной производной

$$k\tau \frac{\partial \mu}{\partial t} = k\tau \frac{\mu^n - \mu^{n-1}}{\tau} = k(\mu^n - \mu^{n-1})$$

перепишем выражение для химического потенциала:

$$\left(\mu_i + \frac{3 \varepsilon \Sigma_i \nabla^2 C_i}{4(1+k)} \right)^n = \left(\frac{4\Sigma_T}{(1+k)} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\Sigma_j} \left(\frac{\partial F}{\partial C_i} - \frac{\partial F}{\partial C_j} \right) + \frac{k}{(1+k)} \mu_i \right)^{n-1} \quad (i=1,2).$$

Таким образом, с помощью данной процедуры можно в k раз уменьшать значение параметра β , что дает возможность в k раз увеличивать временной шаг τ и соблюдать ограничение для спектрального радиуса $\lambda_{max} < 1$. Предпринятые действия, безусловно, вносят дополнительную ошибку в численное решение уравнения Кана–Хилларда, в особенности, при больших значениях k , так как нарушается принцип неувеличения полной свободной энергии: $dE/dt \leq 0$. Однако при сохранении релаксационного параметра таким, что $k\tau \rightarrow 0$, результаты расчетов полностью соответствуют немодифицированной модели Кана–Хилларда; как показано в работе [14] (для двухфазной среды), в зависимости от конфигурации задачи возможно выбирать параметр из диапазона $k \sim 20 \dots 100$ без существенного снижения точности моделирования.

Отдельного рассмотрения требует также выбор безградиентной части функции свободной энергии: $F(C_1, C_2, C_3)$, где $C_3 = 1 - C_1 - C_2$. Даже для двухфазной среды в ряде задач возникает необходимость замены стандартной функции $C^2(1 - C)^2$ (см. Рис. 1а). При реализации метода фазового поля возможно появление артефактов, например, превышения (overshooting) значений поля концентраций, имеющих физического смысла. Для преодоления этой проблемы можно, в частности, использовать кусочную функцию и в интервале $C < 0$ и $C > 1$ применять функции с более крутым наклоном, что, однако, может привести к новым артефактам численного счета. Следовательно, выбор функции свободной энергии является одной из важнейших задач данной модели. Это особенно актуально для многофазных систем, поскольку число потенциальных артефактов в этом случае

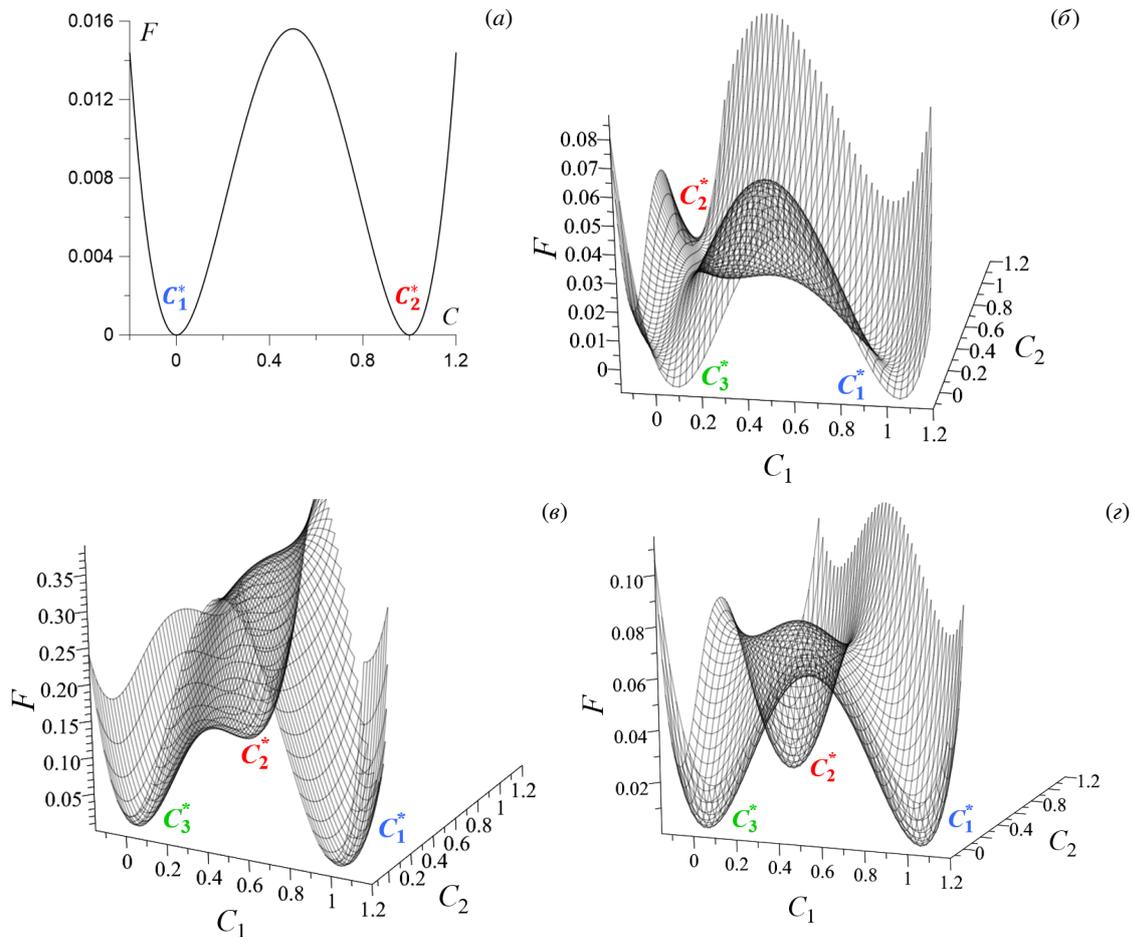


Рис. 1. Представление функции свободной энергии F (9): безградиентная часть – двухфазный двухъямный потенциал (а); при $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (б); при $\Sigma_1 = 10, \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (в); при $\Sigma_1 = 1, \Sigma_2 = -0.7, \Sigma_3 = 1$ (г); значения C_1^*, C_2^*, C_3^* вблизи минимумов функции F соответствуют концентрациям чистых фаз

значительно увеличивается. Как минимум, ожидаем, что в случае полного отсутствия одной из фаз трехфазная модель будет воспроизводить динамику двухфазной системы.

Анализ литературы и тестовые расчеты показали, что функция вида

$$\begin{aligned} F(C_1, C_2, C_3) &= \Delta \cdot (\sigma_{12} C_1^2 C_2^2 + \sigma_{13} C_1^2 C_3^2 + \sigma_{23} C_2^2 C_3^2 + C_1 C_2 C_3 (\Sigma_1 C_1 + \Sigma_2 C_2 + \Sigma_3 C_3)) = \\ &= \Delta \cdot \left(\frac{\Sigma_1}{2} C_1^2 (1 - C_1)^2 + \frac{\Sigma_2}{2} C_2^2 (1 - C_2)^2 + \frac{\Sigma_3}{2} C_3^2 (1 - C_3)^2 \right), \end{aligned} \quad (9)$$

предложенная в работе [17], удовлетворяет заданным критериям. В выражении (9) Δ — масштабный фактор, который в работе полагаем следующим: $\Delta = 1$. Функция (9) представлена на рисунке 1 для трех характерных случаев: на фрагменте 1б — это симметричный трехъямный потенциал, в котором все коэффициенты Σ_i равны, то есть поверхностное натяжение на межфазных границах одинаково. На фрагменте 1в можно видеть большой потенциальный барьер между 1-й и другими фазами, тогда как между фазами с концентрациями C_2 и C_3 барьер значительно ниже, что соответствует ситуации $\Sigma_1 \gg \Sigma_2, \Sigma_3$. Таким образом, моделируется случай больших поверхностных натяжений σ_{12} и σ_{13} и малого поверхностного натяжения σ_{23} . В случае на рисунке 1г $\Sigma_1 = 1$, $\Sigma_2 = -0.7$, $\Sigma_3 = 1$, то есть имеет место потенциальный барьер между фазами C_1 и C_3 , что отвечает большому поверхностному натяжению между этими фазами и сравнительно малым натяжениям σ_{23}, σ_{12} .

3. Численная реализация

Численный алгоритм определения динамики многофазных сред реализуем на языке программирования C++ совместно с процедурой визуализации полей концентрации при помощи библиотеки компьютерной графики OpenGL 4.6. Рассматриваем квадратную область $(x, y \in [0, 1])$. Для дискретизации прибегаем к методу конечных разностей при условии построения однородной сетки: $x_i = i \cdot h_x$, $y_j = j \cdot h_y$, $i = 0 \dots N_x$, $j = 0 \dots N_y$, где i, j — пространственные индексы сетки, $N = N_x = N_y$ — число узлов, $h = h_x = h_y = 1/N_x = 1/N_y$ — шаг сетки. Полагаем, что время $t = n \cdot \tau$, где n — временной индекс, τ — шаг по времени. Тогда дискретный аналог произвольной функции $\varphi(x, y, t)$ на шаге по времени n станет следующим: $\varphi_{i,j}^n$. Сделаем оговорку: поскольку в данном разделе используются общепринятые обозначения пространственных индексов i, j , то далее, во избежание путаницы, номер компонента фазы будем обозначать верхним индексом в круглых скобках: $C_{i,j}^{(1),n}$, $C_{i,j}^{(2),n}$, $C_{i,j}^{(3),n}$.

Производные по времени аппроксимируем так:

$$\frac{\partial \varphi_{i,j}^n}{\partial t} = \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j}^{n-1}}{\tau}.$$

Дискретные аналоги пространственных производных принимают вид:

– производных 1-го и 2-го порядков во внутренних узлах

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_{i,j}^n}{\partial x} &= \frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n}{2h}, & \frac{\partial \varphi_{i,j}^n}{\partial y} &= \frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j-1}^n}{2h}, \\ \frac{\partial^2 \varphi_{i,j}^n}{\partial x^2} &= \frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n - 2\varphi_{i,j}^n}{h^2}, & \frac{\partial^2 \varphi_{i,j}^n}{\partial y^2} &= \frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j-1}^n - 2\varphi_{i,j}^n}{h^2}, \end{aligned}$$

– первых производных на границе области

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_{0,j}^n}{\partial x} &= \frac{-3\varphi_{0,j}^n + 4\varphi_{1,j}^n - \varphi_{2,j}^n}{2h}, & \frac{\partial \varphi_{N_x,j}^n}{\partial x} &= \frac{3\varphi_{N_x,j}^n - 4\varphi_{N_x-1,j}^n + \varphi_{N_x-2,j}^n}{2h}, \\ \frac{\partial \varphi_{i,0}^n}{\partial y} &= \frac{-3\varphi_{i,0}^n + 4\varphi_{i,1}^n - \varphi_{i,2}^n}{2h}, & \frac{\partial \varphi_{i,N_y}^n}{\partial y} &= \frac{-3\varphi_{i,N_y}^n + 4\varphi_{i,N_y-1}^n - \varphi_{i,N_y-2}^n}{2h}, \end{aligned}$$

– вторых производных на границе области

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_{0,j}^n}{\partial x^2} &= \frac{2\varphi_{0,j}^n - 5\varphi_{1,j}^n + 4\varphi_{2,j}^n - \varphi_{3,j}^n}{h^2}, & \frac{\partial^2 \varphi_{N_x,j}^n}{\partial x^2} &= \frac{2\varphi_{N_x,j}^n - 5\varphi_{N_x-1,j}^n + 4\varphi_{N_x-2,j}^n - \varphi_{N_x-3,j}^n}{h^2}, \\ \frac{\partial^2 \varphi_{i,0}^n}{\partial y^2} &= \frac{2\varphi_{i,0}^n - 5\varphi_{i,1}^n + 4\varphi_{i,2}^n - \varphi_{i,3}^n}{h^2}, & \frac{\partial^2 \varphi_{i,N_y}^n}{\partial y^2} &= \frac{2\varphi_{i,N_y}^n - 5\varphi_{i,N_y-1}^n + 4\varphi_{i,N_y-2}^n - \varphi_{i,N_y-3}^n}{h^2}. \end{aligned}$$

Конвективные производные аппроксимируем центральными разностями:

$$(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \varphi_{i,j}^n = v_{x,i,j}^n \cdot \frac{\partial \varphi_{i,j}^n}{\partial x} + v_{y,i,j}^n \cdot \frac{\partial \varphi_{i,j}^n}{\partial y}.$$

Системы уравнений Навье–Стокса и Кана–Хилларда решаем независимо друг от друга. К уравнениям Навье–Стокса (4), (5) применяем проекционный метод. На первом шаге алгоритма вычисляем поле квазискорости (поле скорости без учета давления):

$$\mathbf{u}_{i,j}^n = \mathbf{v}_{i,j}^n + \tau \left(-(\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v}_{i,j}^n + \frac{1}{\text{Fr}} (\phi^{(1)} C_{i,j}^{(1),n} + \phi^{(2)} C_{i,j}^{(2),n} + \phi^{(3)} C_{i,j}^{(3),n}) - \frac{1}{\text{We}} (C_{i,j}^{(1),n} \nabla \mu_{i,j}^{(1),n} + C_{i,j}^{(2),n} \nabla \mu_{i,j}^{(2),n} + C_{i,j}^{(3),n} \nabla \mu_{i,j}^{(3),n}) \right).$$

Поле давления получаем из решения уравнения Пуассона

$$\nabla^2 p_{i,j}^n = \frac{1}{\tau} \text{div } \mathbf{u}_{i,j}^n$$

с помощью итерационного метода Гаусса–Зейделя. На заключительном шаге алгоритма находим истинное значение скорости на новом шаге

$$\mathbf{v}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{u}_{i,j}^n - \tau \nabla p_{i,j}^n$$

с учетом граничного условия прилипания: $\mathbf{v} = 0$. Условие для давления на твердой границе получаем путем проецирования уравнения Навье–Стокса на нормаль к границе:

$$\frac{\partial p_{i,j}^n}{\partial \mathbf{n}} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 \mathbf{v}_{i,j}^n}{\partial \mathbf{n}^2} + \frac{1}{\text{Fr}} (\phi^{(1)} C_{i,j}^{(1),n} + \phi^{(2)} C_{i,j}^{(2),n} + \phi^{(3)} C_{i,j}^{(3),n}).$$

Систему уравнений Кана–Хилларда аппроксимируем на основе полунейной эйлеровой схемы, в соответствии с которой конвективные и нелинейные слагаемые записываются на предыдущем временном шаге:

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{(1),n} + \alpha^{(1)} (-\mu_{i+1,j}^{(1),n} + 2\mu_{i,j}^{(1),n} - \mu_{i-1,j}^{(1),n}) &= C_{i,j}^{(1),n-1} - \tau (\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) C_{i,j}^{(1),n-1}, \\ \mu_{i,j}^{(1),n} + \frac{\beta^{(1)}}{k+1} (C_{i+1,j}^{(1),n} - 2C_{i,j}^{(1),n} + C_{i-1,j}^{(1),n}) &= \frac{1}{k+1} (k\mu_{i,j}^{(1),n-1} + f_{i,j}^{(1),n-1}), \\ C_{i,j}^{(2),n} + \alpha^{(2)} (-\mu_{i+1,j}^{(2),n} + 2\mu_{i,j}^{(2),n} - \mu_{i-1,j}^{(2),n}) &= C_{i,j}^{(2),n-1} - \tau (\mathbf{v}_{i,j}^n \cdot \nabla) C_{i,j}^{(2),n-1}, \\ \mu_{i,j}^{(2),n} + \frac{\beta^{(2)}}{k+1} (C_{i+1,j}^{(2),n} - 2C_{i,j}^{(2),n} + C_{i-1,j}^{(2),n}) &= \frac{1}{k+1} (k\mu_{i,j}^{(2),n-1} + f_{i,j}^{(2),n-1}), \end{aligned} \quad (10)$$

и решаем при граничных условиях:

$$\frac{\partial C_{i,j}^{(1),n}}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial C_{i,j}^{(2),n}}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \mu_{i,j}^{(1),n}}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \mu_{i,j}^{(2),n}}{\partial \mathbf{n}} = 0.$$

Концентрацию третьей фазы находим из условий:

$$C_{i,j}^{(3),n} = 1 - C_{i,j}^{(1),n} - C_{i,j}^{(2),n}, \quad \mu_{i,j}^{(3),n} = -\Sigma^{(3)} (\mu_{i,j}^{(1),n} / \Sigma^{(1)} + \mu_{i,j}^{(2),n} / \Sigma^{(2)}).$$

Нелинейные функции $f_{i,j}^{(1),n-1}$ и $f_{i,j}^{(2),n-1}$ определяем следующим образом:

$$\begin{aligned} f_{i,j}^{(1),n-1} &= 12 \left(\Sigma^{(1)} (C_{i,j}^{(1),n-1} (1 - C_{i,j}^{(1),n-1}) (1 - 2C_{i,j}^{(1),n-1})) - \Sigma_D C_{i,j}^{(1),n-1} C_{i,j}^{(2),n-1} C_{i,j}^{(3),n-1} \right), \\ f_{i,j}^{(2),n-1} &= 12 \left(\Sigma^{(2)} (C_{i,j}^{(2),n-1} (1 - C_{i,j}^{(2),n-1}) (1 - 2C_{i,j}^{(2),n-1})) - \Sigma_D C_{i,j}^{(1),n-1} C_{i,j}^{(2),n-1} C_{i,j}^{(3),n-1} \right). \end{aligned}$$

Здесь

$$\Sigma_D = \frac{6 \Sigma^{(1)} \Sigma^{(2)} \Sigma^{(3)}}{\Sigma^{(1)} \Sigma^{(2)} + \Sigma^{(1)} \Sigma^{(3)} + \Sigma^{(2)} \Sigma^{(3)}}.$$

Коэффициенты $\alpha^{(1)}$, $\alpha^{(2)}$, $\beta^{(1)}$, $\beta^{(2)}$, входящие в уравнения (10), вычисляем по формулам:

$$\alpha^{(1)} = \frac{M_0 \tau}{\Sigma^{(1)} h^2}, \quad \beta^{(1)} = \frac{3 \varepsilon \Sigma^{(1)}}{4 h^2}, \quad \alpha^{(2)} = \frac{M_0 \tau}{\Sigma^{(2)} h^2}, \quad \beta^{(2)} = \frac{3 \varepsilon \Sigma^{(2)}}{4 h^2}.$$

Систему уравнений Кана–Хилларда, приведенных к дискретному виду, разрешаем с помощью итерационного метода Гаусса–Зейделя.

4. Тестирование алгоритма расчета

Во всех расчетах считаем, что числа Рейнольдса, Вебера и Фруда равны единице: $Re = 1$, $We = 1$, $Fr = 1$, а параметр, отвечающий за толщину межфазной границы, составляет: $\varepsilon = 0.00025$. Расчеты проводим на равномерной сетке $h = 1/128$. Полагаем, что параметр стабилизации уравнений Кана–Хилларда $k = 100$.

В качестве первого теста задаем конфигурацию, в которой $C_2 = 1$, $y < 0.5$ и $C_3 = 1$, $y > 0.5$, а в центре области находится круглая капля ($C_1 = 1$) радиусом $R = 0.15$. Рассматриваем задачу в отсутствие гравитации: $1/Fr = 0$. На рисунке 2 представлены случаи для различных характерных значений коэффициентов Σ_i . На фрагменте 2а показан случай для $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$. В такой системе контактные углы на стыке трех фаз стремятся к значениям $\alpha_{12} = \alpha_{13} = \alpha_{23} = 2\pi/3$ (α_{ij} обозначает угол напротив пары фаз i и j). Отклонение от ожидаемых значений, возможно, вызвано действием сторонних сил и начальным распределением фаз в системе. На фрагменте 2б приведен случай $\Sigma_1 \gg \Sigma_2 = \Sigma_3$; при такой конфигурации $\alpha_{23} \rightarrow \pi$, $\alpha_{12} = \alpha_{13} \rightarrow \pi/2$.

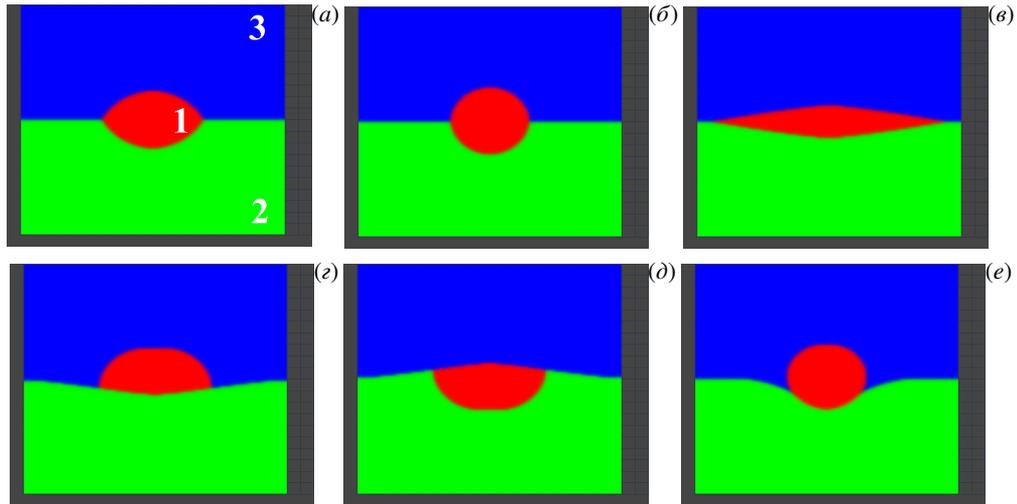


Рис. 2. Модель трехфазной среды при различных значениях коэффициентов Σ_i : $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (а), $\Sigma_1 = 100$, $\Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (б), $\Sigma_1 = 0.01$, $\Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (в), $\Sigma_1 = 1$, $\Sigma_2 = 100$, $\Sigma_3 = 1$ (г), $\Sigma_1 = 1$, $\Sigma_2 = 1$, $\Sigma_3 = 100$ (д), $\Sigma_1 = 100$, $\Sigma_2 = 20$, $\Sigma_3 = 1$ (е); цифры на фрагменте (а) обозначают порядковые номера фаз; во всех случаях показана установившаяся равновесная система в момент времени $t = 0.5$

Похожая ситуация реализуется для значений $\Sigma_1 = 100$, $\Sigma_2 = 20$, $\Sigma_3 = 1$ (см. фрагмент 2е). Также наблюдается круглая капля фазы 1; форма капли обусловлена ее большим поверхностным натяжением, однако имеется нарушение симметрии между фазами 2 и 3 из-за разницы Σ_2 и Σ_3 . Фрагмент 2в демонстрирует случай малого Σ_1 ; видно, что капля стремится растечься на границе раздела фаз 2 и 3. Отметим, что в литературе на русском языке для коэффициентов Σ_i можно встретить название «коэффициенты растекания» (что отражено в результатах на фрагментах (а), (б) и (в)), однако, вероятнее всего, в более сложных системах такая интерпретация не всегда очевидна.

Фрагменты 2г и 2д содержат два симметричных случая: $\Sigma_2 \gg \Sigma_1 = \Sigma_3$ и $\Sigma_3 \gg \Sigma_1 = \Sigma_2$. Для данных конфигураций, соответственно, должны выполняться условия для углов: $\alpha_{13} \rightarrow \pi$ и $\alpha_{12} \rightarrow \pi$, что и наблюдается.

На рисунках 3 и 4 изображена динамика падающей капли в двухслойной системе. На рисунке 3 падает капля, обладающая большим поверхностным натяжением: $\Sigma_1 = 100$. Можно заметить, что, как и в статическом случае, в отсутствие гравитации контактные углы на границе трех фаз стремятся к значениям $\alpha_{23} \rightarrow \pi$, $\alpha_{12} = \alpha_{13} \rightarrow \pi/2$. После того как капля проходит границу двухслойной системы, ее падение продолжается, что не происходит при $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$ (см. Рис. 4). Контактные углы также стремятся к конфигурации, аналогичной статической ситуации: $\alpha_{12} = \alpha_{13} = \alpha_{23} = 2\pi/3$, однако баланс капиллярных сил в итоге не приводит к отрыву капли, она остается в положении, представленном на последнем кадре рисунка 4.

С помощью численной модели, используемой в работе, также можно исследовать динамику взаимодействия

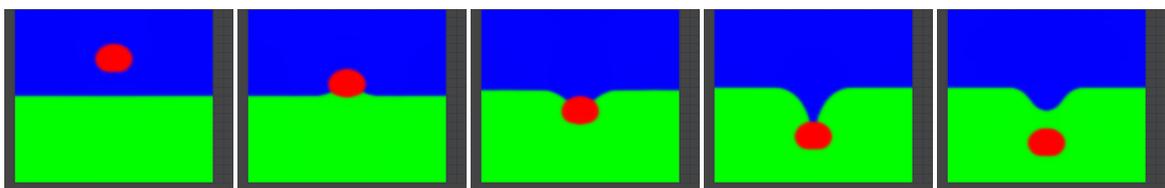


Рис. 3. Падение капли в двухслойной системе при $\Sigma_1 = 100$, $\Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$, $\phi_1 = -1000$, $\phi_2 = \phi_3 = 0$ в моменты времени $t = 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.43$

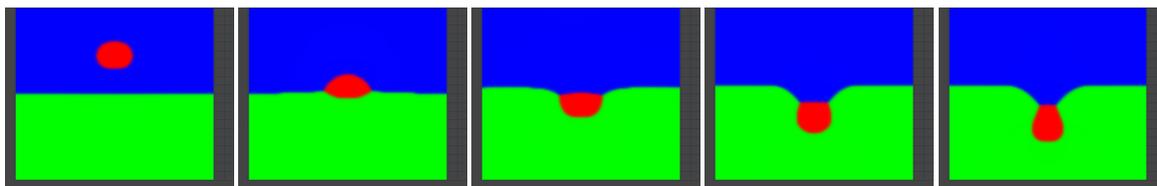


Рис. 4. Падение капли в двухслойной системе при $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$, $\phi_1 = -1000$, $\phi_2 = \phi_3 = 0$ в моменты времени $t = 0.10, 0.23, 0.36, 0.55, 0.80$

двух активно движущихся фаз. На рисунках 5 и 6 демонстрируется столкновение двух частиц. Одна из них погружается на дно области (фаза 1), другая всплывает ей навстречу (фаза 2), обе частицы при этом совершают движение внутри фазы 3. На рисунке 5 изображены капли со слабым поверхностным натяжением, в результате обе капли на время сцепляются между собой. Это не происходит при сильном поверхностном натяжении, поскольку капиллярные силы стремятся удержать у капель круглую форму даже при их столкновении (см. Рис. 6). Отметим, что в этом случае поведение капель близко к упругому взаимодействию.

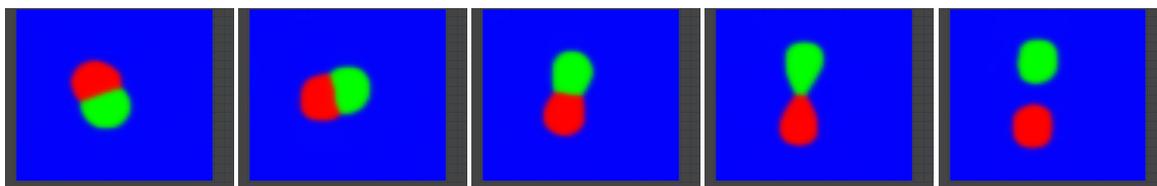


Рис. 5. Столкновение двух различных капель при $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma_3 = 1$, $\phi_1 = -1000$, $\phi_2 = 1000$, $\phi_3 = 0$ в моменты времени $t = 0.17, 0.25, 0.33, 0.60, 0.65$

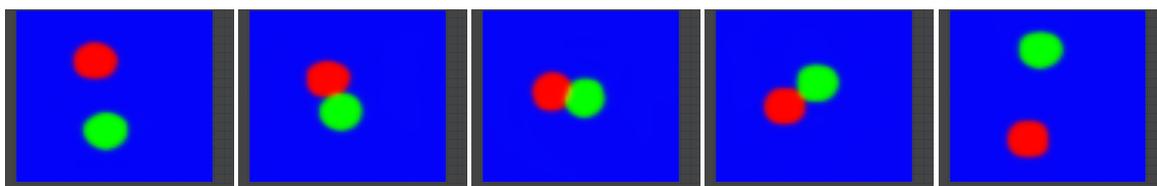


Рис. 6. Столкновение двух различных капель: $\Sigma_1 = 100$, $\Sigma_2 = 100$, $\Sigma_3 = 1$, $\phi_1 = -1000$, $\phi_2 = 1000$, $\phi_3 = 0$ в моменты времени $t = 0.10, 0.18, 0.26, 0.30, 0.42$

В качестве примера показываем поле скорости для капель с большим поверхностным натяжением (Рис. 7), что соответствует полям концентрации рисунка 6. На крайнем слева фрагменте видно, что капли движутся по направлению друг к другу и формируют в зоне движения вихревое течение. В момент столкновения наблюдается один вихрь в центре области, что соответствует общей закрутке капель после соударения. На крайнем справа фрагменте реализуется поле скорости, аналогичное полю левого фрагмента: капли движутся независимо и формируют в зоне движения вихревое течение.

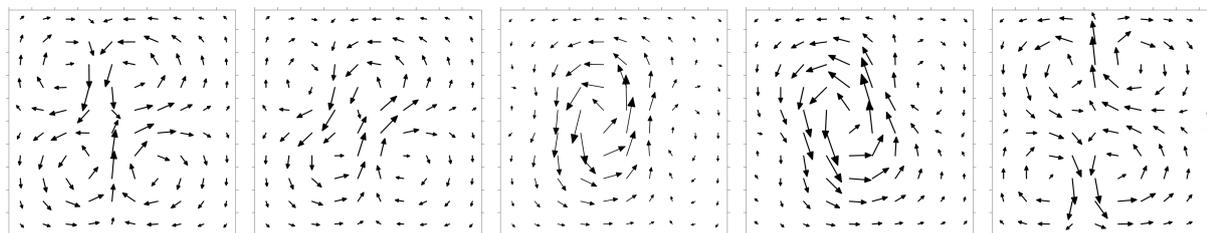


Рис. 7. Поля скорости при столкновении двух различных капель, представленном на рисунке 6

5. Заключение

Предложена и реализована численная трехфазная гидродинамическая модель фазового поля на основе системы уравнений Навье–Стокса и Кана–Хилларда с модификацией химического потенциала путем добавления фиктивной релаксационной производной. Такая стабилизация уменьшает эффективный спектральный радиус итерационной матрицы СЛАУ и позволяет увеличивать шаг по времени примерно в k раз без потери устойчивости полуявной схемы с сохранением точности при условии $k\tau \rightarrow 0$.

Проведенные численные эксперименты подтвердили корректность и универсальность предложенного подхода. В статических тестах для различных комбинаций коэффициентов Σ_i модель воспроизводит ожидаемые

контактные углы на стыке трех фаз. Динамические тесты показали, что модель адекватно отображает типичные сценарии: падение капли через границу двухслойной системы (с прохождением или «прилипанием» в зависимости от соотношения коэффициентов поверхностного натяжения) и столкновение двух капель (временная коалесценция при малых Σ_i и почти упругое отталкивание при больших Σ_i).

Ограничениями текущей реализации являются: возможное нарушение монотонного убывания свободной энергии при слишком больших k ; требование достаточного разрешения межфазных границ; трудности с обеспечением сходимости решения уравнения Пуассона в условиях сложной динамики на стыке трех фаз.

Полученные в статье результаты продемонстрировали, что разработанный подход обладает хорошим сочетанием устойчивости, точности и вычислительной эффективности в широком диапазоне параметров, в том числе при существенных контрастах плотности ϕ_i и поверхностного натяжения, заданных через Σ_i . Построенная модель трехфазной среды допускает дальнейшие модификации, такие как внедрение переменной вязкости и произвольные условия смачиваемости на внешних твердых границах, что позволит представить один из компонентов системы в качестве твердой фазы.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 24-11-00269.

Литература

1. Борзенко Е.И., Хегай Е.И. Численное исследование заполнения ёмкости ньютоновской жидкостью с применением VoF-метода // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2019. № 60. С. 73–86. DOI: 10.17223/19988621/60/6
2. Цепелев И.А., Стародубцев И.С. Численное моделирование эволюции лавового купола на вулкане Колима VOF и SPH методами // Вычислительная механика сплошных сред. 2022. Т. 15, № 3. С. 263–273. DOI: 10.7242/1999-6691/2022.15.3.20
3. Любимова Т.П., Иванцов А.О., Хлыбов О.А. Применение метода сквозного счета для моделирования несмешивающихся жидкостей с большим поверхностным натяжением // Вычислительная механика сплошных сред. 2025. Т. 17, № 4. С. 509–518. DOI: 10.7242/1999-6691/2024.17.4.41
4. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // The Journal of Chemical Physics. 1958. Vol. 28, no. 2. P. 258–267. DOI: 10.1063/1.1744102. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/28/2/258/18813541/258_1_online.pdf
5. Cahn J.W. On spinodal decomposition // Acta Metallurgica. 1961. Vol. 9, no. 9. P. 795–801. DOI: 10.1016/0001-6160(61)90182-1
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика. Ч. I. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 616 с.
7. Cahn J.W. On spinodal decomposition // Acta Metallurgica. 1961. Vol. 9, no. 9. P. 795–801. DOI: 10.1016/0001-6160(61)90182-1
8. Cahn J.W. Coherent fluctuations and nucleation in isotropic solids // Acta Metallurgica. 1962. Vol. 10, no. 10. P. 907–913. DOI: 10.1016/0001-6160(62)90140-2
9. Korteweg D.J. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité // Archives Néerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles. 1901. Vol. 6, no. 2. P. 1–24.
10. Lyubimova T., Vorobev A., Prokopen S. Rayleigh-Taylor instability of a miscible interface in a confined domain // Physics of Fluids. 2019. Vol. 31, no. 1. 014104. DOI: 10.1063/1.5064547
11. Vorobev A., Prokopen S., Lyubimova T. Liquid/liquid displacement in a vibrating capillary // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2023. Vol. 381, no. 2245. 20220090. DOI: 10.1098/rsta.2022.0090
12. Груздь С.А., Самсонов Д.С., Кривилев М.Д. Математическая модель течения припоя в вертикальной трубке при различных уровнях гравитации с учетом процессов смачивания и плавления // Вычислительная механика сплошных сред. 2024. Т. 17, № 4. С. 442–451. DOI: 10.7242/1999-6691/2024.17.4.36
13. Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A. Phase-Field Simulation of Solidification // Annual Review of Materials Research. 2002. Vol. 32. P. 163–194. DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803
14. Prokopen S., Nepomnyashchy A., Lyubimova T. The spectral radius of iterative methods for the Cahn–Hilliard equation and its relation to the splitting technique // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2025. Vol. 470. 116673. DOI: 10.1016/j.cam.2025.116673
15. Eyre D.J. Unconditionally Gradient Stable Time Marching the Cahn–Hilliard Equation // MRS Proceedings. 1998. Vol. 529. P. 39. DOI: 10.1557/PROC-529-39
16. Kim J. Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows // Communications in Computational Physics. 2012. Vol. 12, no. 3. P. 613–661. DOI: 10.4208/cicp.301110.040811a
17. Boyer F., Lapuerta C. Study of a three component Cahn–Hilliard flow model // ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis. 2006. Vol. 40, no. 4. P. 653–687. DOI: 10.1051/m2an:2006028
18. Kim J. Phase field computations for ternary fluid flows // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2007. Vol. 196, no. 45–48. P. 4779–4788. DOI: 10.1016/j.cma.2007.06.016

19. Vorobeв A. Boussinesq approximation of the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equations // Physical Review E. 2010. Vol. 82, issue 5. 056312. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.056312
20. Jacqmin D. Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling // Journal of Computational Physics. 1999. Vol. 155, no. 1. P. 96–127. DOI: 10.1006/j.cph.1999.6332

Сведения об авторах:

Проккопьев Сергей Анатольевич (корр.), кфмн, нс, ИМСС УрО РАН, 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: prokopyev.s@icmm.ru; ORCID: 0000-0001-8750-6773

Research article

A three-phase hydrodynamic phase field model with stabilization of the Cahn-Hilliard equation

S.A. Prokopyev

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation

A numerical implementation of a three-phase hydrodynamic phase-field model is presented, which combines the Navier–Stokes equations for incompressible fluid and the Cahn–Hilliard equation. The phase field model is highly capable for modeling multiphase media, but the numerical implementation of the phase field method has a number of computational difficulties associated with the stability of numerical schemes and, as a consequence, the need to choose a small time step, which complicates the calculations. The paper proposes a method for stabilizing the numerical algorithm by adding a fictitious relaxation derivative of the chemical potential, which reduces the spectral radius of the iteration matrix for the Cahn–Hilliard equation and allows a significant increase in the time step without losing stability. The implementation uses semi-implicit discretization and the projection method to calculate the velocity and pressure. Verification calculations are performed in a square domain with solid walls for a model fluid consisting of three phases. In static tests for different values of surface tension coefficients, equilibrium configurations were obtained in accordance with the expected contact angles at the junction of the three phases. In dynamic tests, it was shown that the model correctly reproduces the fall of a drop through the boundary of a two-layer system, as well as the collision of two particles of different phases moving in the third phase.

Keywords: phase field method, Cahn–Hilliard equation, three-phase media

Received: 12.08.25 / **Published online:** 10.12.2025

References

1. Borzenko E.I., Hegaj E.I. Numerical investigation of the reservoir filling with a Newtonian fluid using the VoF-method. Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. 2019. No. 60. P. 73–86. DOI: 10.17223/19988621/60/6
2. Tsepelev I.A., Starodubtsev I.S. The numerical modeling of lava dome evolution at volcán de Colima using VOF and SPH methods. Computational Continuum Mechanics. 2022. Vol. 15, no. 3. P. 263–273. DOI: 10.7242/1999-6691/2022.15.3.20
3. Lyubimova T.P., Ivantsov A.O., Khlybov O.A. Application of level set method for modeling of immiscible liquids with large surface tension. Computational Continuum Mechanics. 2025. Vol. 17, no. 4. P. 509–518. DOI: 10.7242/1999-6691/2024.17.4.41
4. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. The Journal of Chemical Physics. 1958. Vol. 28, no. 2. P. 258–267. DOI: 10.1063/1.1744102. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/28/2/258/18813541/258\1_online.pdf
5. Cahn J.W. On spinodal decomposition. Acta Metallurgica. 1961. Vol. 9, no. 9. P. 795–801. DOI: 10.1016/0001-6160(61)90182-1
6. Landau L.D., Lifshitz E.M. Course of Theoretical Physics. Vol. 5. Statistical Physics. Elsevier, 2013. 544 p.
7. Cahn J.W. On spinodal decomposition. Acta Metallurgica. 1961. Vol. 9, no. 9. P. 795–801. DOI: 10.1016/0001-6160(61)90182-1
8. Cahn J.W. Coherent fluctuations and nucleation in isotropic solids. Acta Metallurgica. 1962. Vol. 10, no. 10. P. 907–913. DOI: 10.1016/0001-6160(62)90140-2
9. Korteweg D.J. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. Archives Néerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles. 1901. Vol. 6, no. 2. P. 1–24.
10. Lyubimova T., Vorobeв A., Prokopyev S. Rayleigh-Taylor instability of a miscible interface in a confined domain. Physics of Fluids. 2019. Vol. 31, no. 1. 014104. DOI: 10.1063/1.5064547
11. Vorobeв A., Prokopyev S., Lyubimova T. Liquid/liquid displacement in a vibrating capillary. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2023. Vol. 381, no. 2245. 20220090. DOI: 10.1098/rsta.2022.0090

12. *Gruzd S.A., Samsonov D.S., Krivilyov M.D.* Mathematical model of solder flow in a vertical tube at different gravity levels taking into account the wetting and melting processes. *Computational Continuum Mechanics*. 2024. Vol. 17, no. 4. P. 442–451. DOI: 10.7242/1999-6691/2024.17.4.36
13. *Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A.* Phase-Field Simulation of Solidification. *Annual Review of Materials Research*. 2002. Vol. 32. P. 163–194. DOI: 10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803
14. *Prokopen S., Nepomnyashchy A., Lyubimova T.* The spectral radius of iterative methods for the Cahn–Hilliard equation and its relation to the splitting technique. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2025. Vol. 470. 116673. DOI: 10.1016/j.cam.2025.116673
15. *Eyre D.J.* Unconditionally Gradient Stable Time Marching the Cahn-Hilliard Equation. *MRS Proceedings*. 1998. Vol. 529. P. 39. DOI: 10.1557/PROC-529-39
16. *Kim J.* Phase-Field Models for Multi-Component Fluid Flows. *Communications in Computational Physics*. 2012. Vol. 12, no. 3. P. 613–661. DOI: 10.4208/cicp.301110.040811a
17. *Boyer F., Lapuerta C.* Study of a three component Cahn-Hilliard flow model. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*. 2006. Vol. 40, no. 4. P. 653–687. DOI: 10.1051/m2an:2006028
18. *Kim J.* Phase field computations for ternary fluid flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2007. Vol. 196, no. 45–48. P. 4779–4788. DOI: 10.1016/j.cma.2007.06.016
19. *Vorobev A.* Boussinesq approximation of the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equations. *Physical Review E*. 2010. Vol. 82, issue 5. 056312. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.056312
20. *Jacqmin D.* Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling. *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 155, no. 1. P. 96–127. DOI: 10.1006/jcph.1999.6332