

УДК 532.5

**КОНСЕРВАТИВНАЯ ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ
КАНА–ХИЛЛАРДА**© 2025 г. Д. Р. Галеева^{1,*}, В. Н. Киреев¹, Л. А. Ковалева¹, А. А. Мусин¹¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

*e-mail: lara_wood@mail.ru

Поступила в редакцию 01.07.2024 г.

После доработки 18.11.2024 г.

Принята к публикации 10.12.2024 г.

В данной статье представлен консервативный численный алгоритм для решения уравнения Кана–Хилларда. Предложен способ линеаризации уравнения Кана–Хилларда, построена численная схема на основе метода контрольного объема. Подробно описана реализация предложенного численного алгоритма. Консервативность предложенной дискретной схемы проверена путем численного моделирования. Проведены численные эксперименты.

Ключевые слова: уравнение Кана–Хилларда, модель фазового поля, начально-краевая задача, разностные схемы, метод контрольного объема

DOI: 10.31857/S0032823525010101, EDN: BNYENE

1. Введение. Некоторые промышленные проблемы часто связаны с многофазными потоками, поэтому численное моделирование многофазных течений является актуальной задачей. Описание таких систем значительно различается в зависимости от того, присутствует граница раздела фаз или нет. А изучение положения и топологических изменений межфазной границы является одной из важных задач при моделировании течений гетерогенных сред [1]. Из-за сложности работы с неизвестными движущимися границами раздела многофазные потоки сложно изучать с точки зрения математического моделирования и численных алгоритмов.

Подходы к моделированию многофазных потоков отличаются способом задания межфазной границы и делятся на две группы. К первой группе относятся методы, в которых на межфазной границе происходит разрыв характеристической функции, а местоположение границы рассчитывается на каждом временном шаге. К таким методам относятся, например, метод объема жидкости (volume of fluid) [2], метод маркеров [3].

Вторая группа – это так называемые методы диффузной границы [4]. В них межфазная граница моделируется как узкая область, в пределах которой физические величины (плотность, вязкость и т.д.) и межфазные силы изменяются плавно. Преимуществом такого подхода является то, что границу не нужно отслеживать явно [5]. Одним из методов второй группы является модель фазового поля [6], а ее основным уравнением – уравнение Кана–Хилларда [7].

2. Уравнение Кана–Хилларда. Рассматривается смесь двух несжимаемых жидкостей с одинаковой плотностью в ограниченной области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ с непрерывной границей $\partial\Omega$. В методе фазового поля для моделирования плавного перехода величин через границу раздела между фазами вводится вспомогательная переменная ϕ ,

называемая переменной фазового поля или параметром порядка, указывающим фазы. Динамика переменной фазового поля определяется уравнением Кана–Хилларда [7]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = M \Delta \eta(\varphi, t); \mathbf{x} \in \Omega, 0 < t \leq T$$

$$\eta(\varphi, t) = F'(\varphi) - \varepsilon^2 \Delta \varphi(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

где $\varphi(\mathbf{x}, t)$ – переменная фазового поля, ε – положительная константа (толщина границы между фазами), M – подвижность межфазной границы (функция мобильности), $\eta(\varphi, t)$ – химический потенциал, $F'(\varphi)$ – свободная энергия.

Граничные и начальные условия задаются уравнениями:

$$\nabla \varphi \cdot \mathbf{n} = \nabla \eta \cdot \mathbf{n} = 0; \mathbf{x} \in \partial \Omega, \varphi(\mathbf{x}, 0) = \varphi_0(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.2)$$

где \mathbf{n} – вектор внешней нормали к границе $\partial \Omega$.

Уравнение Кана–Хилларда возникает из функционала свободной энергии Гельмгольца:

$$\mathcal{E}(\varphi) = \int_{\Omega} \left[F(\varphi) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \varphi|^2 \right] d\mathbf{x}, \quad (2.3)$$

где $F(\varphi) = 0.25(\varphi^2 - 1)^2$ – гидрофобная объемная составляющая, которая является “классической” частью свободной энергии (принимает вид двухъямного потенциала (см. рис. 1), $\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \varphi|^2$ – гидрофильная поверхностная составляющая.

При этой форме ожидается, что φ останется в пределах физически допустимой области $[-1; 1]$, где предельные значения характеризуют чистые фазы (например, $\varphi = -1$ для фазы 1 и $\varphi = 1$ для фазы 2). В [8] показано, что при таком выборе $F(\varphi)$ уравнение Кана–Хилларда не удовлетворяет принципу максимума, а начальные данные в интервале $[-1; 1]$ могут привести к решениям, немного выходящим за пределы

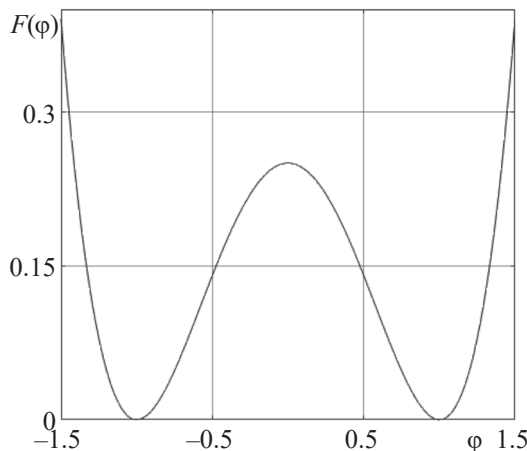


Рис. 1. Двухъямный потенциал Гинзбурга–Ландау $F(\varphi)$

этого диапазона, поэтому упрощенный двухъямный потенциал $F(\varphi)$ часто заменяют более общими формами. Однако обычно решения остаются в пределах физического диапазона, поскольку точки равновесия $\varphi = \pm 1$ асимптотически устойчивы, поэтому для разработки нашей численной схемы упрощенная форма остается практически интересной и легко реализуемой. В компьютерной реализации численной схемы при необходимости может использоваться скорректированная функция $\bar{\varphi}$ [9]:

$$\bar{\varphi} = \begin{cases} \varphi, & \text{если } |\varphi| \leq 1 \\ \text{sgn}(\varphi), & \text{если } |\varphi| > 1 \end{cases}$$

Переменная фазового поля $\varphi(\mathbf{x}, t)$ обладает следующими свойствами.

Свойство 1. Если функция $\varphi(\mathbf{x}, t)$ является решением уравнения Кана–Хилларда (2.2)–(2.3), то она удовлетворяет закону сохранения массы:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varphi d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \varphi_t d\mathbf{x} = M \int_{\Omega} \Delta \eta d\mathbf{x} = M \int_{\Omega} \frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{n}} ds = 0$$

Свойство 2. Полная свободная энергия (2.3) будет со временем уменьшаться:

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\varphi)}{\partial t} \leq 0$$

Для удобства запишем безразмерное уравнение Кана–Хилларда (2.1) с учетом $F(\varphi) = 0.25(\varphi^2 - 1)^2$ в двухмерной постановке в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \text{Fo} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} \right) \quad (2.4)$$

$$\eta = \varphi^3 - \varphi - \text{Cn} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) \quad (2.5)$$

Безразмерные физические параметры: диффузионное число Фурье – Fo, число Кана – Cn вычисляются по формулам:

$$\text{Fo} = \frac{Mt_0}{L_0^2}, \text{Cn} = \frac{\varepsilon^2}{L_0^2},$$

где L_0 и t_0 – характерные длина и время.

Уравнение Кана–Хилларда исследовалось множеством авторов, для его решения предложено большое количество численных методов (например, итерационные методы сверхрелаксации [10], обобщенный метод Ньютона [11] и т.д.). Из-за наличия нелинейности и четвертой производной такие методы достаточно сложны для реализации и в каждой конкретной задаче будут иметь свои особенности. В настоящей работе представлена численная схема на основе метода контрольного объема с учетом линеаризации для решения системы уравнений Кана–Хилларда.

3. Линеаризация уравнения Кана–Хилларда. Уравнение Кана–Хилларда трудно решить численно не только из-за значительного объема вычислений, возникающего в многомерных задачах, но и из-за бигармонического и нелинейного операторов [12]. В статье [13] приводится способ линеаризации задачи Кана–Хилларда и полунеевая численная схема. В настоящей работе мы используем подобный прием для линеаризации уравнения Кана–Хилларда на базе метода контрольного объема.

Обозначим $\eta^n = \eta(n\Delta t)$ – значение параметра η в момент времени n , шаг по времени равен $\Delta t = T/N_t$, T – итоговое время, N_t – общее число временных шагов. Тогда явно-неявная нелинейная схема для функции $\eta(\varphi)$ определяется выражением:

$$\eta^{n+1} = (\varphi^{n+1})^3 - \varphi^{n+1} - \text{Cn} \left(\frac{\partial^2 \varphi^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi^n}{\partial y^2} \right) \quad (3.1)$$

Распишем дифференциал из (2.4) в следующем виде:

$$\text{Fo} \frac{\partial^2 \eta^{n+1}}{\partial x^2} = \text{Fo} \frac{\partial}{\partial x} \left((3(\varphi^{n+1})^2 - 1) \frac{\partial \varphi^{n+1}}{\partial x} \right) + \text{Fo} \frac{\partial}{\partial x} \left(-\text{Cn} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \varphi^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi^n}{\partial y^2} \right) \right) \quad (3.2)$$

Хотя такое нелинейное расщепление является разумным и имеет наименьшую локальную ошибку усечения среди одношаговых методов, которые являются градиентно-устойчивыми, в [13] предложен способ линеаризации с последующим разделением стабилизирующих и сжимающих членов. В этой работе доказано, что такая линеаризация приводит к набору линейных уравнений, которые необходимо решать на каждом временном шаге. Для избавления от нелинейности положим, что $3\varphi^2 - 1$ будет рассчитываться на предыдущем временном слое n : $3(\varphi^n)^2 - 1$.

Для удобства известные значения на предыдущем временном слое обозначим индексом 0, неизвестные значения на текущем временном слое будем записывать без индекса: $\varphi^{n+1} \equiv \varphi$, $\varphi^n \equiv \varphi^0$.

Сделаем замену значений на текущем временном слое:

$$\Gamma = \text{Fo}(3(\varphi^0)^2 - 1), \zeta = -\text{FoCn} \left(\frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial y^2} \right) \quad (3.3)$$

Тогда

$$\text{Fo} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \quad (3.4)$$

Аналогично линеаризуем дифференциал по y из (2.4):

$$\text{Fo} \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \quad (3.5)$$

Будем использовать эти линеаризованные слагаемые в численной схеме и дальнейших расчетах.

4. Численный алгоритм для линеаризованной системы уравнений Кана–Хилларда. Численную схему для решения уравнений (2.4)–(2.5) построим на базе метода контрольного объема [14]. Основная идея метода заключается в следующем. Расчетная область разбивается на конечное множество непересекающихся контрольных объемов, в каждом из которых находится одна узловая точка. Дифференциальное уравнение интегрируется по каждому из контрольных объемов. В результате получается дискретный аналог дифференциальных уравнений, в который входят значения переменной в узловой и соседних точках. Метод контрольного объема гарантирует выполнение законов сохранения рассматриваемых величин на всей расчетной области и для любого контрольного объема. Решение удовлетворяет интегральным балансам даже на достаточно “грубых” сетках.

На рис. 2 приведена схема контрольного объема в плоскости (x, y) декартовой системы координат. Значения переменной фазового поля рассчитываются в исходных узлах P .

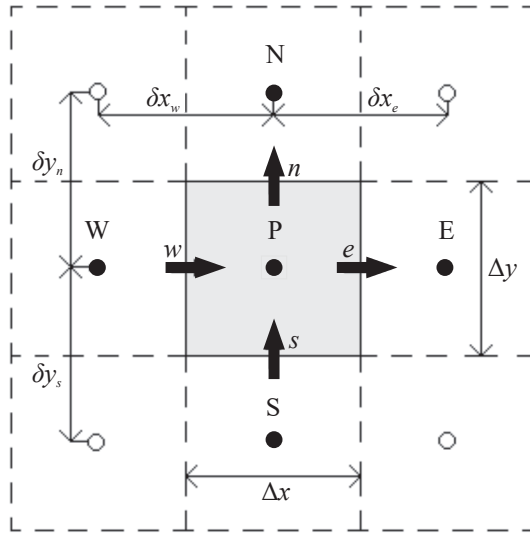


Рис. 2. Контрольный объем на плоскости (x, y)

Для расчета уравнений (2.4)–(2.5) построим дискретные аналоги с учетом линеаризованных членов. Схема будет явно-неявной, чтобы легче производить компьютерный расчет.

Проинтегрируем уравнение (2.4) по указанному контрольному объему и по временному промежутку $[t, t + \Delta t]$:

$$\int_w^e \int_s^n \left[\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dt \right] dy dx = \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\text{Fo} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \right] dy dx dt + \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\text{Fo} \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} \right] dy dx dt \quad (4.1)$$

С учетом (3.4)–(3.5) уравнение (4.1) преобразуется в:

$$\int_w^e \int_s^n \left[\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dt \right] dy dx = \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] dy dx dt + \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right] dy dx dt + \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right] dy dx dt + \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \right] dy dx dt \quad (4.2)$$

Интегрируя, получаем:

$$\begin{aligned} (\varphi_p - \varphi_p^0) \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} = & \left[\left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x + \\ & + \left[\left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_e - \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\left(\frac{\partial \zeta}{\partial y} \right)_n - \left(\frac{\partial \zeta}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x \end{aligned} \quad (4.3)$$

Заменим производные на центрально-разностные аналоги:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_e &\approx \frac{\varphi_E - \varphi_P}{\delta x_e}, & \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_w &\approx \frac{\varphi_P - \varphi_W}{\delta x_w} \\ \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)_n &\approx \frac{\varphi_N - \varphi_P}{\delta y_n}, & \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)_s &\approx \frac{\varphi_P - \varphi_S}{\delta y_s} \end{aligned} \quad (4.4)$$

И введем следующие обозначения:

$$D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y}{\delta x_e}, \quad D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y}{\delta x_w}, \quad D_n = \frac{\Gamma_n \Delta x}{\delta y_n}, \quad D_s = \frac{\Gamma_s \Delta x}{\delta y_s} \quad (4.5)$$

Тогда уравнение (4.3) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} (\varphi_P - \varphi_P^0) \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} &= [D_e (\varphi_E - \varphi_P) - D_w (\varphi_P - \varphi_W)] + \\ &+ [D_n (\varphi_N - \varphi_P) - D_s (\varphi_P - \varphi_S)] + S_{P_x} \Delta y + S_{P_y} \Delta x, \end{aligned} \quad (4.6)$$

где

$$\begin{aligned} S_{P_x} &= \left(\frac{\zeta_E - \zeta_P}{\delta x_e} - \frac{\zeta_P - \zeta_W}{\delta x_w} \right), \quad S_{P_y} = \left(\frac{\zeta_N - \zeta_P}{\delta y_n} - \frac{\zeta_P - \zeta_S}{\delta y_s} \right) \\ \zeta_P &= -Cn \left(\frac{\varphi_E^0 - \varphi_P^0}{\delta x_e} - \frac{\varphi_P^0 - \varphi_W^0}{\delta x_w} + \frac{\varphi_N^0 - \varphi_P^0}{\delta y_n} - \frac{\varphi_P^0 - \varphi_S^0}{\delta y_s} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Окончательный двумерный аналога дискретного уравнения можно записать в виде:

$$a_P \varphi_P = a_E \varphi_E + a_W \varphi_W + a_N \varphi_N + a_S \varphi_S + b, \quad (4.8)$$

где

$$\begin{aligned} a_E &= D_e; \quad a_W = D_w; \quad a_N = D_n; \quad a_S = D_s \\ a_P^0 &= \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}; \quad b = a_P^0 \varphi_P^0 + S_{P_x} \Delta y + S_{P_y} \Delta x \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

5. Численные эксперименты. В этом разделе представлены следующие численные эксперименты для предложенной схемы: тест на сходимость, тест на устойчивость, влияние числа Кана, начальных и граничных условий на энергию и эволюцию системы. Если не указано иное, в расчетной области $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ используется равномерная сетка размером 128×128 , временной шаг $\Delta t = 10^{-5}$.

5.1°. Тест на сходимость. Начнем с проверки пространственной и временной сходимости предлагаемого метода. Для получения скорости пространственной сходимости, выполнен ряд симуляций со все более мелкой равномерной сеткой $h = 1 / 2^n$ для $n = 6, 7, 8, 9$ в расчетной области. Начальное условие в области Ω принимает вид: $\varphi(x, y, 0) = f / |f|_\infty$, где $f(x, y) = \sin 10x \cos 10y$, а $|f|_\infty$ – максимальное значение f в области Ω . Для каждого расчета численное решение вычислялось до момента времени $T = 0.001$ с шагом $\Delta t = 10^{-6}$, число Фурье $Fo = 10^{-3}$, число Кана $Cn = 10^{-4}$. Поскольку для задачи не существует аналитического решения в замкнутой форме, в качестве эталонного рассматривалось численное решение φ^{ref} , которое получается с использованием очень мелких пространственных и временных сеток. Для вычисления φ^{ref} используется сетка 1024×1024 и $\Delta t = 10^{-7}$. Погрешность сетки определяется

Таблица 1. Ошибки и сходимость схемы для сеток с различным разбиением

Сетка	64 × 64	128 × 128	256 × 256	512 × 512
l_2 -ошибка	$5.68 \cdot 10^{-2}$	$1.78 \cdot 10^{-2}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$7.27 \cdot 10^{-4}$
Порядок	1.67		2.25	2.37

Таблица 2. Ошибки и сходимость схемы для сеток с различными временными шагами. Сетка размером 256 × 256

Δt	$6.25 \cdot 10^{-4}$	$3.125 \cdot 10^{-4}$	$1.563 \cdot 10^{-4}$
l_2 -ошибка	$1.54 \cdot 10^{-3}$	$8.09 \cdot 10^{-4}$	$4.03 \cdot 10^{-4}$
Порядок	0.93		1.01

как дискретная l_2 -норма разности между этой сеткой и средним значением соседних с ней ячеек эталонного решения следующим образом:

$$e_{h,ij} = \varphi_{h,ij} - \left(\varphi_{p-1,q-1}^{\text{ref}} + \varphi_{p,q-1}^{\text{ref}} + \varphi_{p-1,q}^{\text{ref}} + \varphi_{p,q}^{\text{ref}} \right) / 4$$

Здесь p и q – соответствующие индексы мелкой сетки. Скорость сходимости определяется как отношение последовательных ошибок: $\log_2 \left(|e_h| / |e_{h/2}| \right)$.

Ошибки и скорости сходимости, полученные с использованием этих определений, приведены в табл. 1. Наблюдается точность второго порядка по пространству, как и ожидалось из дискретизации.

Чтобы рассчитать скорость сходимости для временной дискретизации, зафиксируем размер пространственного шага $h=1/256$ и выберем набор уменьшающихся временных шагов $\Delta t = 6.25 \cdot 10^{-4}$, $\Delta t = 3.125 \cdot 10^{-4}$, $\Delta t = 1.563 \cdot 10^{-4}$. Численные решения вычисляются до времени $T=1$. Погрешность l_2 – нормы сетки рассчитывается как $e_{\Delta t,ij} = \varphi_{\Delta t,ij} - \varphi_{ij}^{\text{ref}}$. Здесь φ^{ref} – эталонное численное решение, полученное с небольшим шагом по времени $\Delta t = 10^{-5}$. Ошибки и скорости сходимости, полученные с использованием этих определений, приведены в табл. 2. Как и ожидалось, исходя из дискретизации, наблюдается точность первого порядка по времени.

5.2°. *Сравнение с точным решением.* В [15] можно найти семейство точных одномерных стационарных периодических решений системы Кана–Хилларда, выраженные как

$$\varphi_e(x) = \sqrt{1-\epsilon} \operatorname{sn} \left(\sqrt{\frac{\epsilon+1}{2\gamma}} (x-x_0), \sqrt{\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}} \right), \tag{5.1}$$

где $\operatorname{sn}(x,s)$ – эллиптическая синусоидальная функция Якоби, которая является периодической для $0 \leq s < 1$. Это семейство решений зависит от свободного параметра $\epsilon \in [0, 1]$, который определяет амплитуду, период и эллиптический модуль решений, и от x_0 , влияющего на фазовый сдвиг. Более подробно о точном решении можно почитать в [14].

Для этого тестового случая были установлены значения $\epsilon = 0.01$, $x_0 = 0$ и $\gamma \equiv \epsilon^2 = 0.001$, что соответствует значениям представленной численной схемы $\text{Fo} = 1, \text{Cn} = 0.001$. Рассмотрена вычислительная область, равная двум длинам волны точного решения $x \in [0; 1.32]$, разбитая на $N = 133$ ячейки, шаг по времени $\Delta t = 10^{-6}$, использовались периодические граничные условия. Конечное время моделирования составляет $T = 10$. Сравнение численного решения с соответствующими исходными данными (то есть точным решением уравнения (2.1)) представлено на рис. 3.

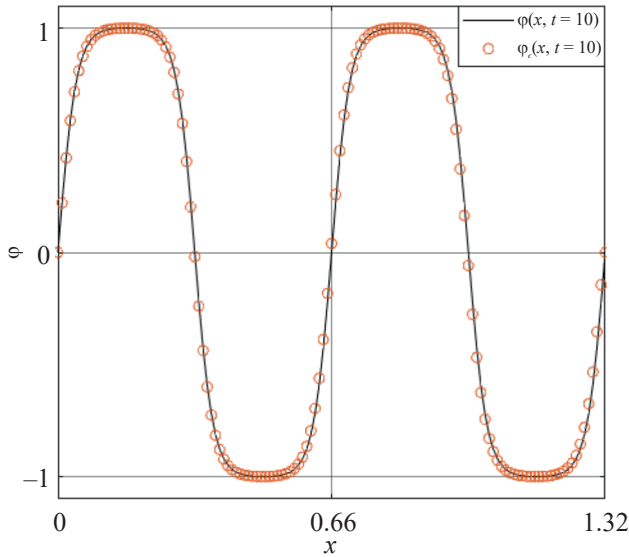


Рис. 3. Сравнение точного и приближенного решений для одномерного случая в момент времени $T = 10$

Сравнение показывает идеальное согласие между точным решением φ_e (5.1), вставленным в качестве начального условия, и численным решением φ , показанным при $T = 10$.

5.3°. *Влияние числа Кана.* Рассмотрим, как влияет число Кана на энергию и эволюцию системы. Число Кана характеризует толщину межфазной оболочки, а также химическую скорость притяжения фаз. Дискретный функционал энергии (2.1) вычисляется по формуле [16]:

$$\mathcal{E}_h(\varphi) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \left[\Delta x \Delta y F(\varphi_{ij}) + \frac{\varepsilon^2}{2} \left((\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij})^2 + (\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij})^2 \right) \right]$$

Нормализованная дискретная полная свободная энергия определяется как $\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_h(t) / \mathcal{E}_h(0)$. Дискретная общая масса равна $\Delta x \Delta y \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \varphi_{ij}$. Начальное условие задается случайным распределением $\varphi(x, y, 0) = \text{Rand}(-1, 1)$, граничные условия – Неймана, число Фурье $\text{Fo} = 10^{-3}$, шаг по времени $\Delta t = 10^{-5}$.

На рис. 4 показана эволюция разделения фаз для чисел Кана $\text{Cn} = 10^{-4}$, $3 \cdot 10^{-5}$, $2 \cdot 10^{-5}$ в моменты времени $T = 0.1, 1, 10$. Численное решение показало, что уменьшение числа Кана (коэффициента ε) приводит к снижению химической скорости притяжения фаз.

На рис. 5 представлены графики зависимости нормализованной полной свободной энергии \mathcal{E}_N от времени для разных чисел Кана. Из рис. 5 видно, что для всех случаев полная дискретная энергия не возрастает. При уменьшении числа Кана, энергия уменьшается быстрее. При числе Кана $\text{Cn} = 2 \cdot 10^{-5}$ скорость притяжения фаз стремится к нулю, и система быстро приходит в устойчивое состояние (см. рис. 4, в), таким образом, полная энергия стабилизируется. Также для каждого случая рассчитана общая масса системы, выполняется условие сохранения массы, что подтверждает консервативность численной схемы.

5.4°. *Созревание Оствальда.* Исходное состояние системы играет значительную роль на развитие расслоения. Так, если одной фазы значительно больше, чем дру-

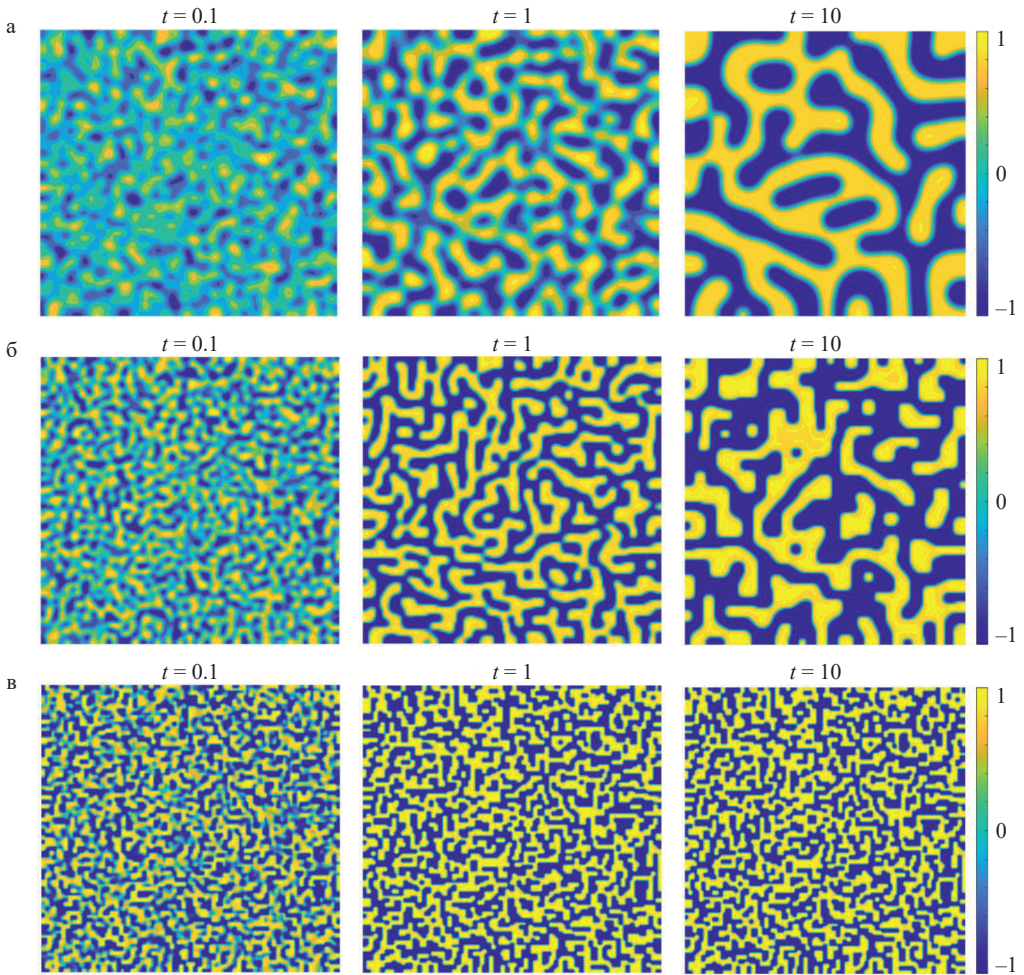


Рис. 4. Эволюция разделения фаз для чисел Кана (а–в) $Cn = 10^{-4}, 3 \cdot 10^{-5}, 2 \cdot 10^{-5}$ в моменты времени $T = 0.1, 1, 10$

гой, то уравнение Кана–Хилларда может показать явление, известное как созревание Оствальда (переконденсация), когда неосновная фаза образует сферические капли, а более мелкие капли поглощаются путем диффузии в более крупные. В реальных экспериментах наблюдается расслоение изначально смешанной жидкости на домены. Сегрегированные домены растут со временем по степенному закону. Это закон Лифшица–Слэзова [17], который был строго доказан для уравнения Кана–Хилларда и наблюдался в численном моделировании и реальных экспериментах [18].

На рис. 6 представлено сравнение развития системы при разных начальных условиях. В первом случае смесь симметрична $\varphi(x, y, 0) = \text{Rand}(-1, 1)$, то есть обе фазы имеют одинаковую долю. А во втором случае представлена несимметричная смесь $\varphi(x, y, 0) = \text{Rand}(-1, 0)$, когда элементов $\varphi = -1$ больше. Число Кана $Cn = 10^{-4}$, число Фурье $Fo = 10^{-3}$, шаг по времени $\Delta t = 10^{-5}$.

Численное моделирование наглядно показывает эффект созревания Оствальда для второго случая: $\varphi(\mathbf{x}, t)$ быстро развивается до конфигурации из множества мелких

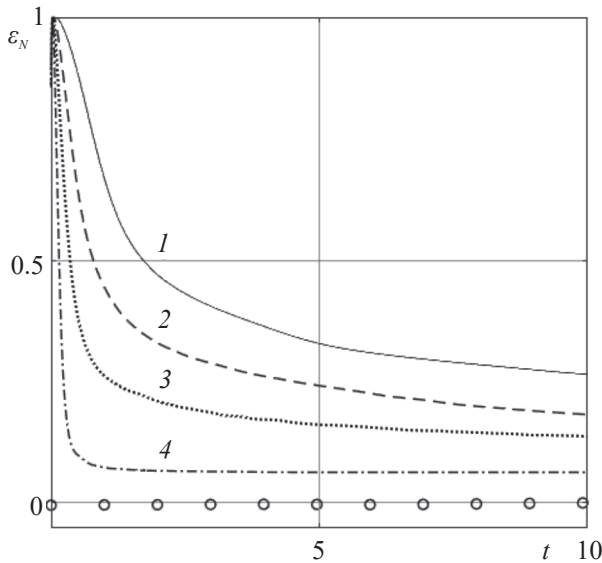


Рис. 5. Зависимость полной свободной энергии ε_N от времени для разных чисел Кана: 1–4: $Cn = 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-5}, 3 \cdot 10^{-5}, 2 \cdot 10^{-5}$

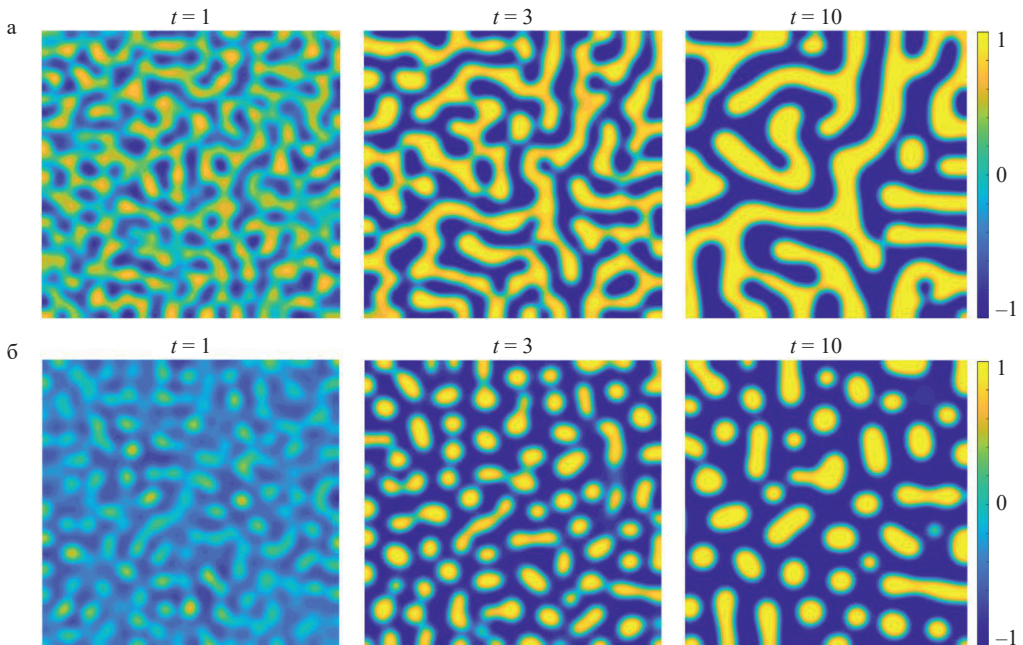


Рис. 6. Эволюция разделения фаз а) симметричной и б) несимметричной жидкостей в моменты времени $T = 1, 3, 10$

капель, которые подвергаются оствальдовскому созреванию – маленькие “капли” неосновной фазы в уравнении Кана–Хилларда исчезают только для того, чтобы ре-абсорбироваться более крупными каплями той же фазы. В результате “выживают”

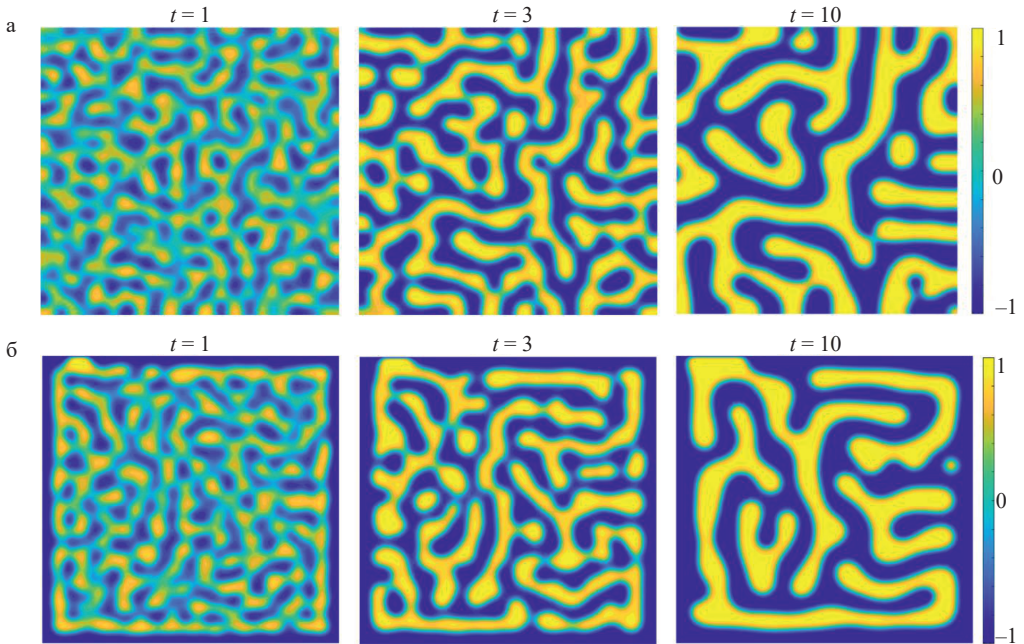


Рис. 7. Эволюция разделения фаз для граничных условий а) Неймана и б) Дирихле в моменты времени $T = 1, 3, 10$

только несколько крупных капель, в конечном итоге система будет состоять только из одной капли, что соответствует экстремальным эффектам конечного размера [18].

5.5°. *Влияние граничных условий.* Рассмотрим, как влияют на эволюцию системы граничные условия. Рассматривается симметричная двухфазная смесь, число Кана $Sp = 10^{-4}$, число Фурье $Fo = 10^{-3}$, шаг по времени $\Delta t = 10^{-3}$. В первом случае рассматривались граничные условия Неймана, во втором случае – граничные условия Дирихле $\varphi(t)|_{\partial\Omega} = -1$.

На рис. 7 показана эволюция разделения фаз с граничными условиями Дирихле и Неймана соответственно. При граничном условии Дирихле $\varphi(t)|_{\partial\Omega} = -1$ положительные фазы собираются дальше от границы. При граничном условии Неймана фазы сохраняют угол контакта на границе 90° .

Заключение. В данной статье представлен консервативный численный алгоритм и построена численная схема на основе метода контрольного объема для линеаризованной системы уравнений Кана–Хилларда.

Путем численного моделирования показана консервативность и сходимость предложенной численной схемы. Показано, что уменьшение числа Кана приводит к снижению химической скорости притяжения фаз и, следовательно, к меньшей интенсивности роста сегрегированных доменов.

Смоделировано явление созревания Оствальда, когда при неравномерном распределении фаз в начальный момент времени (одной фазы значительно больше) основная фаза образует сферические капли, а более мелкие капли поглощаются путем диффузии в более крупные.

Исследовано влияние граничных условий на эволюцию распределения фаз двухфазной жидкости. Численные результаты указывают на потенциальную полезность предложенного метода для расчета динамики дисперсных систем.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 19-11-00298.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Нигматулин Р.И.* Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.
2. *Gueyffier D., Li J., Nadim A. et al.* Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows // *J. Comput. Phys.* 1999. V. 152. P. 423–456.
3. *Glimm J., Grove J.W., Li X.L. et al.* Three-dimensional front tracking // *SIAM J. Sci. Comput.* 1998. V. 19. P. 703–727.
4. *Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A.* Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Ann. Rev. Fluid Mech.* 1998. V. 30. P. 139–165.
5. *Du Q., Feng X.-B.* The phase field method for geometric moving interfaces and their numerical approximations // in: *Handbook of Numerical Analysis*. Vol. 21. Elsevier, 2020. P. 425–508.
6. *Badalassi V.E., Cenicerros H.D., Banerjee S.* Computation of multiphase systems with phase field models // *J. Comput. Phys.* 2003. V. 190. P. 371–397.
7. *Cahn J.W., Hilliard J.E.* Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *J. of Chem. Phys.* 1958. V. 28(2). P. 258–267.
8. *Miranville A.* The Cahn–Hilliard equation: recent advances and applications // *SIAM*. 2019.
9. *Lovrić A., Dettmer W., Perić D.* Low order finite element methods for the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard equations // *arXiv preprint*. 2019. arXiv:1911.06718
10. *Choo S.M., Chung S.K.* Conservative nonlinear difference scheme for the Cahn–Hilliard equation // *Comput. Math. Appl.* 1998. V. 36. P. 31–39.
11. *Choo S.M., Chung S.K., Kim K.I.* Conservative nonlinear difference scheme for the Cahn–Hilliard equation // *II. Comput. Math. Appl.* 2000. V. 39. P. 229–243.
12. *Elliott C.M.* The Cahn–Hilliard model for the kinetics of phase separation // *Math. Models for Phase Change Problems*. 1989. P. 35–73.
13. *Eyre D.J.* An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems // *MRS Proc.* 1998.
14. *Патанкар С.В.* Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: МЭИ, 1984. 145 с.
15. *Dhaouadi F., Dumbser M., Gavriljuk S.* A first-order hyperbolic reformulation of the Cahn–Hilliard equation // *arXiv preprint*. 2024. arXiv:2408.03862
16. *Li Y., Jeong D., Shin J., Kim J.* A conservative numerical method for the Cahn–Hilliard equation with Dirichlet boundary conditions in complex domains // *Comput.&Math. with Appl.* 2013. V. 65 (1). P. 102–115.
17. *Лифшиц И.М., Слезов В.В.* Кинетика осаждения из пересыщенных твердых растворов // *ж. Физики и химии твердых тел*. 1961. Т. 19 (1–2). С. 35–50.
18. *Naraigh O.L., Gloster A.* A large-scale statistical study of the coarsening rate in models of Ostwald–Ripening // *arXiv preprint*. 2019. arXiv: 1911.03386.

A Conservative Numerical Method for Solving the Cahn–Hilliard Equation

D. R. Galeeva^{a, #}, V. N. Kireev^a, L. A. Kovaleva^a, A. A. Musin^a

^a*Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia*

[#]*e-mail: lara_wood@mail.ru*

This paper presents a conservative numerical algorithm for solving the Cahn–Hilliard equation. A method for linearizing the Cahn–Hilliard equation is proposed, and a numerical scheme is constructed based on the control volume method. The implementation of the proposed numerical algorithm is described in detail. The conservativeness of the proposed discrete scheme is verified by numerical simulation. Numerical experiments were carried out.

Keywords: Cahn–Hilliard equation, initial boundary value problem, phase field model, difference schemes, control volume method

REFERENCES

1. *Nigmatulin R.I.* Fundamentals of Mechanics of Heterogeneous Media. Moscow: Nauka, 1978. 336 p.
2. *Gueyffier D., Li J., Nadim A. et al.* Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows // *J. Comput. Phys.*, 1999, vol. 152, pp. 423–456.
3. *Glimm J., Grove J.W., Li X.L. et al.* Three-dimensional front tracking // *SIAM J. Sci. Comput.*, 1998, vol. 19, pp. 703–727.
4. *Anderson D.M., McFadden G.B., Wheeler A.A.* Diffuse-interface methods in fluid mechanics // *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1998, vol. 30, pp. 139–165.
5. *Du Q., Feng X.-B.* The phase field method for geometric moving interfaces and their numerical approximations // in: *Handbook of Numerical Analysis*. Vol. 21. Elsevier, 2020. pp. 425–508.
6. *Badalassi V.E., Cenicerio H.D., Banerjee S.* Computation of multiphase systems with phase field models // *J. Comput. Phys.*, 2003, vol. 190, pp. 371–397.
7. *Cahn J.W., Hilliard J.E.* Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // *J. of Chem. Phys.*, 1958, vol. 28(2), pp. 258–267.
8. *Miranville A.* The Cahn–Hilliard equation: recent advances and applications // *SIAM*, 2019.
9. *Lovrić A., Dettmer W., Perić D.* Low order finite element methods for the Navier–Stokes–Cahn–Hilliard Equations // *arXiv preprint*, 2019, arXiv:1911.06718
10. *Choo S.M., Chung S.K.* Conservative nonlinear difference scheme for the Cahn–Hilliard equation // *Comput. Math. Appl.*, 1998, vol. 36. pp. 31–39.
11. *Choo S.M., Chung S.K., Kim K.I.* Conservative nonlinear difference scheme for the Cahn–Hilliard equation II // *Comput. Math. Appl.*, 2000, vol. 39, pp. 229–243.
12. *Elliott C.M.* The Cahn–Hilliard model for the kinetics of phase separation // *Math. Models for Phase Change Problems*, 1989, pp. 35–73.
13. *Eyre D.J.* An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems // *MRS Proc.*, 1998.
14. *Patankar S.V.* Numerical Methods for Solving Problems of Heat Transfer and Fluid Dynamics. Moscow: MPEI, 1984. 145 p.
15. *Dhaouadi F., Dumbser M., Gavriljuk S.* A first-order hyperbolic reformulation of the Cahn–Hilliard equation // *arXiv preprint*, 2024, arXiv:2408.03862
16. *Li Y., Jeong D., Shin J., Kim J.* A conservative numerical method for the Cahn–Hilliard equation with Dirichlet boundary conditions in complex domains // *Comput. & Math. with Appl.*, 2013, vol. 65(1), pp. 102–115.
17. *Lifshitz I.M., Slezov V.V.* Kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions // *J. of Phys. & Chem. of Solids*, 1961, vol. 19(1–2), pp. 35–50.
18. *Naraigh O.L., Gloster A.* A large-scale statistical study of the coarsening rate in models of Ostwald–Ripening // *arXiv preprint*, 2019, arXiv: 1911.03386