

基于超收敛集群恢复的Cahn-Hilliard方程自适应有限元法

田文艳¹, 陈尧尧², 孟朝霞³, 贾宏恩^{1*}

¹太原理工大学数学学院, 山西 太原

²安徽师范大学数学与统计学院, 安徽 芜湖

³山西能源学院能源与动力工程系, 山西 晋中

收稿日期: 2022年10月28日; 录用日期: 2022年11月23日; 发布日期: 2022年11月30日

摘要

Cahn-Hilliard方程为四阶非线性的偏微分方程, 在物理, 生物, 化学等各个领域都有广泛的应用, 因此研究其数值方法具有实际的应用价值。本文通过分析Cahn-Hilliard方程的一种二阶数值格式, 证明了其误差估计和无条件能量稳定性, 并且提出了一个基于后验误差估计的空间和时间自适应策略, 即超收敛集群恢复 (superconvergent cluster recovery, 简称为SCR) 方法, 用于数值求解Cahn-Hilliard方程, 该策略的主要思想是基于误差估计的结果来控制网格大小, 从而可以有效的降低计算成本, 最后通过算例证明了SCR 算法的高效性和稳定性。

关键词

误差估计, Cahn-Hilliard方程, 自适应, SCR, 有限元法

The SCR-Based Adaptive Finite Element Method for the Cahn-Hilliard Equation

Wenyan Tian¹, Yaoyao Chen², Zhaoxia Meng³, Hong'en Jia^{1*}

¹College of Mathematics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan Shanxi

²School of Mathematics and Statistics, Anhui Normal University, Wuhu Anhui

³Department of Energy and Power Engineering, Shanxi Institute of Energy, Jinzhong Shanxi

* 通讯作者

Abstract

The Cahn-Hilliard equation is a fourth-order nonlinear partial differential equation with a wide range of applications in various fields such as physics, biology, and chemistry, so it is of practical application to study its numerical methods. In this study, we analyzed the Cahn-Hilliard equation in a second-order numerical format, demonstrated its error estimate and unconditional energy stability, and suggested a spatial and temporal adaptive strategy based on the posterior error estimate, namely the superconvergent cluster recovery (SCR) method, for numerical solutions.

Keywords

Error Estimate, The Cahn-Hilliard Equation, Adaptive, SCR, Finite Element Method

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



1. 引言

本文研究的Cahn-Hilliard方程能被表述如下:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t = -\varepsilon \Delta^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\varepsilon} \Delta f(u) & (x, t) \in \Omega \times (0, T], \\ \partial_n \mathbf{u} = \partial_n (-\varepsilon \Delta \mathbf{u} + \frac{1}{\varepsilon} f(u)) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T], \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0 & x \in \Omega. \end{cases} \quad (1.1)$$

在上述方程中, Ω 表示 R^d ($d = 2, 3$) 中具有Lipschitz边界 $\partial\Omega$ 的有界域; \mathbf{n} 表示 Ω 的单位外法向量; \mathbf{u} 表示相位场变量; $f(u)$ 是一个非线性函数; ε 是一个常数; t 是最终时间。

Cahn-Hilliard方程起源于1958年Cahn和Hilliard的开创性论文 [1], 描述了热力学中的两种物质的相互扩散现象, 可以用来模拟固体中复杂的相分离和粗化现象 [2-5] (如: 材料科学和流体动力学中)。

迄今为止, 许多作者对Cahn-Hilliard方程的相关理论及其数值方法进行研究。Barrett和Elliott提出用协调和非协调有限元方法来研究Cahn-Hilliard方程 [6-8]。Shen和Xu提出Cahn-Hilliard方程的标量辅助变量(SAV)方法 [9]。Zhao和Xiao将表面有限元法(SFEM)与稳定的半隐式方法相结合 [10], 其中采用了自适应方法进行了研究。在 [11] 中自适应方法对特征值问题进行了研究。在 [12] 中, 将基于SCR的后验误差估计算子用于相场变量和速度函数的空间离散。在 [13] 中, 采

用了自适应时间步长法对Cahn-Hilliard 方程进行了研究。

在本文的研究模型中, 由于小参数 ε 产生的界面层是需要比其它部分采用更精细的网格划分, 以及数值模拟需要很长时间才能达到稳定状态, 因而采用了自适应策略。本文所使用的SCR 法最初是由Huang 和Yi [14]提出的, 并且将其应用于Allen-Cahn方程 [15]。本文结构如下: 在第2 节中, 提出了Cahn-Hilliard方程的二阶全离散格式 [16], 分析了无条件能量稳定性和误差估计。在第3节中, 介绍了SCR算子时间和空间离散化的误差估计子。在第4节中, 通过几个数值算例说明自适应程序的有效性。

2. 能量稳定的离散模型

为了避免在每个时间步长上求解四阶方程, 引入一个新的变量 $\mu =: -\varepsilon\Delta\mathbf{u} + \frac{1}{\varepsilon}f(u)$ 并将(1.1)表示为:

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t = \Delta\mu & (x, t) \in \Omega \times (0, T], \\ \mu = -\varepsilon\Delta\mathbf{u} + \frac{1}{\varepsilon}f(u) & (x, t) \in \Omega \times (0, T], \\ \partial_n\mathbf{u} = \partial_n\mu = 0 & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T], \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0 & x \in \Omega, \end{cases} \quad (2.1)$$

其中 $\varepsilon > 0$ 是一个小参数, 代表材料之间过渡界面的厚度, \mathbf{u} 表示相场变量, $\mathbf{u}_0 \in H^1(\Omega)(t = 0)$ 是初始条件, 非线性项 $f(u) = F'(u)$, 其中 $F(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$ 是一个双阱势函数。实际上, Cahn-Hilliard方程可以被看作是自由能函数 $E(u)$ 的 H^{-1} -梯度流: $E(u) = \int_{\Omega}(\frac{1}{\varepsilon}F(u) + \frac{\varepsilon}{2}|\nabla u|^2)dx$, 并可以推导出Cahn-Hilliard方程满足以下能量规律:

$$\frac{d}{dt}E(u) = - \int_{\Omega} |\nabla(-\varepsilon\Delta u + \frac{1}{\varepsilon}f(u))|^2 dx \leq 0, \quad (2.2)$$

这意味着自由能 $E(u)$ 在时间上满足能量衰退的特性 $E(u)(t^{n+1}) \leq E(u)(t^n)$, $\forall n \in \mathbb{N}$ 。

在本小节中, 为了方便叙述介绍一些将在本文中使用的符号。标准的Sobolev空间将用 $H^m = W^{m,2}(\Omega)$ 来表示, H^m 对应的范数可以用 $\|\cdot\|_m$ 来表示, 而 L^2 的范数和内积分别用 $\|\cdot\|$ 和 (\cdot, \cdot) 表示。此外, 用 $\|\cdot\|_{\infty}$ 表示 L^{∞} 的范数。

设 $\mathcal{T}_h = \{e_h\}$ 是域 Ω 中形状规则的三角形, h 是所有 e_h 元素中最大的直径。令 V_h 为分段线性连续函数相对应的有限维空间, 空间 V_h 的基函数是标准的Lagrange 基函数 $\phi_z(z \in \mathcal{N}_h)$, 其中 \mathcal{N}_h 代表三角形顶点的集合: $V_h = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{e_h} \in P_1(e_h), \forall e_h \in \mathcal{T}_h\}$, 同时, 定义 $V_h^0 = V_h \cap H_0^1(\Omega)$ 。此外, 对于实数 $p \geq 0$ 和满足条件的所有 $v(t)$, 定义以下范数: $\|v\|_{L^p(0,T;X)} = (\int_0^T \|v(t)\|_X^p dt)^{\frac{1}{p}}$ 。

(2.1)的弱形式为: 求解 $\mathbf{u} \in L^{\infty}(0, T; H^1(\Omega))$, $w \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$,

$$\begin{cases} (\mathbf{u}_t, w) + (\nabla\mu, \nabla w) = 0 & \forall w \in H^1(\Omega), \\ (\mu, v) = \varepsilon(\nabla\mathbf{u}, \nabla v) + \frac{1}{\varepsilon}(f(u), v) & \forall v \in H^1(\Omega). \end{cases} \quad (2.3)$$

(2.3)的半离散格式为: 求解 $\mathbf{u}_h \in C^1(0, T; V_h)$ 中, 使得

$$\begin{cases} (\mathbf{u}_{h,t}, w_h) + (\nabla\mu_h, \nabla w_h) = 0 & \forall w_h \in V_h, \\ (\mu_h, v_h) = \varepsilon(\nabla\mathbf{u}_h, \nabla v_h) + \frac{1}{\varepsilon}(f(u_h), v_h) & \forall v_h \in V_h. \end{cases} \quad (2.4)$$

将 $[0, T]$ 均匀分割为 $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = T$ 为 N 等分, 即 $I_n := (t^{n-1}, t^n]$. Δt 表示时间步长, 并且有 $T = N\Delta t, n = 1, \dots, N$. 在此基础上全离散的格式为: 求解 $u_h^n \in V_h^n, n = 1, 2, \dots, N$,

$$\begin{cases} \left(\frac{\mathbf{u}_h^n - \Pi_n \mathbf{u}_h^{n-1}}{\Delta t}, w_h \right) + (\nabla \mu_h^{n-\frac{1}{2}}, \nabla w_h) = 0 & \forall w_h \in V_h^n, \\ (\mu_h^{n-\frac{1}{2}}, v_h) = \varepsilon (\nabla \widehat{\mathbf{u}}_h^n, \nabla v_h) + \frac{1}{\varepsilon} (f(u_h^n, u_h^{n-1}), v_h) & \forall v_h \in V_h^n, \end{cases} \quad (2.5)$$

其中 \widehat{u}_h^n , 和 $f(u_h^n, u_h^{n-1})$ 分别定义为:

$$\begin{aligned} \widehat{u}_h^n &= \frac{u_h^n + \Pi_n u_h^{n-1}}{2}, \\ f(u_h^n, u_h^{n-1}) &= \frac{(u_h^n)^3 + (u_h^n)^2 \Pi_n u_h^{n-1} + u_h^n (\Pi_n u_h^{n-1})^2 + (\Pi_n u_h^{n-1})^3}{4} - \frac{u_h^n + \Pi_n u_h^{n-1}}{2}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

$\mu^{n-\frac{1}{2}}$ 是中点 $t^{n-\frac{1}{2}} = (t^{n-1} + t^n)/2$ 的近似值, 而 Π_n 代表插值到有限元空间 V_h .

定理2.1. 全离散格式(2.5)-(2.6)是无条件能量稳定的, 其解满足

$$E(u_h^n) \leq E(u_h^{n-1}), \quad \forall n \geq 1.$$

证明. 令 $w_h = \Delta t \mu^{n-\frac{1}{2}}$ 和 $v_h = u^n - u^{n-1}$ 在(2.5)中得到

$$\Delta t \|\nabla \mu_h^{n-\frac{1}{2}}\|^2 + E(u_h^n) - E(u_h^{n-1}) = 0,$$

这意味着所提出的全离散格式(2.5)-(2.6)保持了能量的衰减性。□

为了得出误差估计, 将椭圆投影算子定义为 $P_h : H^1 \rightarrow V_h$, 它满足以下条件

$$(\nabla(P_h v - v), \nabla \alpha_h) = 0, \quad \forall \alpha_h \in V_h. \quad (2.7)$$

从文献 [17]中, 得到以下两个不等式成立,

$$\|v - P_h v\| \leq Ch^2 \|v\|_2, \quad \|(v - P_h v)_t\| \leq Ch^2 \|v_t\|_2. \quad (2.8)$$

为了方便计算, 定义了以下误差函数,

$$\begin{aligned} \tilde{e}^n &= P_h u(t^n) - u_h^n, \quad \hat{e}^n = u(t^n) - P_h u(t^n), \\ \tilde{e}^{n-\frac{1}{2}} &= P_h \mu(t^{n-\frac{1}{2}}) - \mu_h^{n-\frac{1}{2}}, \quad \check{e}^{n-\frac{1}{2}} = \mu(t^{n-\frac{1}{2}}) - P_h \mu(t^{n-\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

通过带积分余项的泰勒展开式与Young's不等式, 容易得到 [18]

$$\|R_1^n\|^2 \leq \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{ttt}(t)\|^2 dt, \quad \|R_2^n\|^2 \leq \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|_2^2 dt, \quad (2.9)$$

其中

$$R_1^n = \frac{u(t^n) - u(t^{n-1})}{\Delta t} - u_t(t^{n-\frac{1}{2}}), \quad R_2^n = -\Delta \left(\frac{u(t^n) + u(t^{n-1})}{2} - u(t^{n-\frac{1}{2}}) \right).$$

定理2.2. 令 u_h^n 与 $u(t^n)$ 分别是(2.5)-(2.6)和(2.1)的解。那么, 对于 $u \in C^2(0, T; H^2(\Omega))$, 有

$$\|u_h^k - u(t^k)\| + \left(\frac{\Delta t}{\varepsilon} \sum_{n=0}^k \|\mu_h^{n-\frac{1}{2}} - \mu(t^{n-\frac{1}{2}})\|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\varepsilon, T)(K_1(\varepsilon, u)\Delta t^2 + K_2(\varepsilon, u)h^2),$$

其中

$$C(\varepsilon, T) \sim \exp(T \setminus \varepsilon),$$

$$K_1(\varepsilon, u) = \sqrt{\varepsilon}(\|u_{ttt}\|_{L^2(0, T; L^2)} + \|u_{tt}\|_{L^2(0, T; H^2)}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}(\|u_{tt}\|_{L^2(0, T; L^2)} + \|u_t^2\|_{L^2(0, T; L^2)}),$$

$$K_2(\varepsilon, u) = \|u_0\|_2 + \sqrt{\varepsilon}\|u_t\|_{L^2(0, T; H^2)} + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\|\mu\|_{C(0, T; H^2)} + \|u\|_{C(0, T; H^2)}.$$

证明. 将 $t^{n-\frac{1}{2}}$ 处的弱形式(2.3)减去(2.5), 得到

$$\frac{1}{\Delta t}(\tilde{e}^n - \tilde{e}^{n-1}, w_h) + (\nabla \tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}, \nabla w_h) = (R_1^n - \frac{1}{\Delta t}(I - P_h)(u(t^n) - u(t^{n-1})), w_h),$$

$$(\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}} + \check{e}^{n-\frac{1}{2}}, v_h) = \frac{\varepsilon}{2}(\nabla \tilde{e}^n + \nabla \tilde{e}^{n-1}, v_h) + \varepsilon(\Delta R_2^n, v_h) + \frac{1}{\varepsilon}(f(u(t^{n-\frac{1}{2}})) - f(u_h^n, u_h^{n-1}), v_h),$$

然后分别取 $w_h = \frac{1}{2}\varepsilon\Delta t(\tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1})$ 和 $v_h = \Delta t\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}$, 并将上述两个等式相加

$$\begin{aligned} & \|\tilde{e}^n\|^2 - \|\tilde{e}^{n-1}\|^2 + \frac{2\Delta t}{\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2 \\ &= \Delta t(R_1^n, \tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1}) - (I - P_h)(u(t^n) - u(t^{n-1}), \tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1}) - 2\Delta t(R_2^n, \tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}) \\ & \quad + \frac{2\Delta t}{\varepsilon^2}(f(u(t^{n-\frac{1}{2}})) - f(u_h^n, u_h^{n-1}), \tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}) - \frac{2\Delta t}{\varepsilon}(\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}, \tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}) \\ & := \mathbf{I} + \mathbf{II} + \mathbf{III} + \mathbf{IV} + \mathbf{V}, \end{aligned}$$

使用带有 ε 的Cauchy不等式和Young's不等式, 来估计 \mathbf{I} , \mathbf{II} , \mathbf{III} 和 \mathbf{V} :

$$\mathbf{I} \leq \Delta t\|R_1^n\|\|\tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1}\| \leq \frac{\varepsilon\Delta t^4}{2} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{ttt}(t)\|^2 dt + \frac{\Delta t}{2\varepsilon}\|\tilde{e}^n\|^2 + \frac{\Delta t}{2\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-1}\|^2,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{II} &\leq \|(I - P_h)(u(t^n) - u(t^{n-1}))\|\|\tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1}\| \\ &\leq \frac{\varepsilon}{2} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|(I - P_h)u_t(t)\|^2 dt + \frac{1}{2\varepsilon}\|\tilde{e}^n\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-1}\|^2, \end{aligned}$$

$$\mathbf{III} \leq 3\Delta t\varepsilon\|R_2^n\|^2 + \frac{\Delta t}{3\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2 \leq 3\varepsilon\Delta t^4 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|_2^2 dt + \frac{\Delta t}{3\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2,$$

$$\mathbf{V} \leq \frac{2\Delta t}{\varepsilon}(\sqrt{3}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|)(\frac{1}{\sqrt{3}}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|) \leq \frac{3\Delta t}{\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2 + \frac{\Delta t}{3\varepsilon}\|\tilde{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2.$$

为简单起见，简写为 $u(t^n) = u_n$ 和 $u(t^{n-\frac{1}{2}}) = u_{n-\frac{1}{2}}$ ，分析第四项 \mathbf{IV} ：

$$\begin{aligned} \mathbf{IV} &= \frac{2\Delta t}{\varepsilon^2} \left(\frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{2} - u_{n-\frac{1}{2}} + (u_{n-\frac{1}{2}})^3 - \frac{(u_h^n)^3 + (u_h^n)^2 u_h^{n-1} + u_h^n (u_h^{n-1})^2 + (u_h^{n-1})^3}{4} \right) \\ &= \frac{2\Delta t}{\varepsilon^2} \left[\left(\frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{2} - u_{n-\frac{1}{2}} \right) + \left((u_{n-\frac{1}{2}})^3 - \left(\frac{u_n - u_{n-1}}{2} \right)^3 \right) + \left(\left(\frac{u_n - u_{n-1}}{2} \right)^3 - g^n \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(g^n - \frac{(u_h^n)^3 + (u_h^n)^2 u_h^{n-1} + u_h^n (u_h^{n-1})^2 + (u_h^{n-1})^3}{4}, \bar{e}^{n-\frac{1}{2}} \right) \right] \\ &:= \frac{2\Delta t}{\varepsilon^2} (\mathbf{IV}_1 + \mathbf{IV}_2 + \mathbf{IV}_3 + \mathbf{IV}_4, \bar{e}^{n-\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

其中

$$g^n = \frac{(u_n)^3 + (u_n)^2 u_{n-1} + u_n (u_{n-1})^2 + (u_{n-1})^3}{4}.$$

继续用带积分余项的泰勒展开，Cauchy-Schwarz不等式和(2.9)对以上四项进行分析，得出：

$$\begin{aligned} \|\mathbf{IV}_1\| &= \left\| \frac{-\tilde{e}^n - \hat{e}^n - \tilde{e}^{n-1} - \hat{e}^{n-1} + u_n + u_{n-1}}{2} - u_{n-\frac{1}{2}} \right\| \\ &\leq \left\| \frac{\tilde{e}^n + \tilde{e}^{n-1}}{2} \right\| + \left\| \frac{\hat{e}^n + \hat{e}^{n-1}}{2} \right\| + \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|^2 dt, \\ \|\mathbf{IV}_2\| &\leq \|3\xi_1^2 \left(\frac{u_n + u_{n-1}}{2} - u_{n-\frac{1}{2}} \right)\| \leq 3\xi_1^2 \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|^2 dt, \\ \|\mathbf{IV}_3\| &= \left\| \frac{(u_n)^3 - (u_n)^2 u_{n-1} - u_n (u_{n-1})^2 + (u_{n-1})^3}{8} \right\| \\ &= \left\| \frac{((u_n)^2 - (u_{n-1})^2)(u_n - u_{n-1})}{8} \right\| \leq \left\| \frac{\xi_2}{4} (u_n - u_{n-1})^2 \right\| \leq \frac{\xi_2}{4} \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_t^2(t)\|^2 dt, \end{aligned}$$

其中 ξ_1 位于 $(u_n + u_{n-1})/2$ 和 $u_{n-\frac{1}{2}}$ 之间， ξ_2 位于 u_n 和 u_{n-1} 之间， ζ_1 和 ζ_2 位于 u_{n-1} 和 u_n 之间，

$$\begin{aligned} \|\mathbf{IV}_4\| &= \frac{1}{4} \left\| \frac{2}{3} (u_n)^3 + \frac{1}{3} (u_n + u_{n-1})^3 + \frac{2}{3} (u_{n-1})^3 - \frac{2}{3} (u_h^n)^3 + \frac{1}{3} (u_h^n + u_h^{n-1})^3 + \frac{2}{3} (u_h^{n-1})^3 \right\| \\ &= \left\| \frac{1}{6} ((u_n)^3 - (u_h^n)^3) + \frac{1}{6} ((u_{n-1})^3 - (u_h^{n-1})^3) + \frac{1}{12} ((u_n + u_{n-1})^3 - (u_h^n + u_h^{n-1})^3) \right\| \\ &\leq \frac{1}{2} \|\xi_3^2 (u_n - u_h^n)\| + \frac{1}{2} \|\xi_4^2 (u_{n-1} - u_h^{n-1})\| + \frac{1}{4} \|\xi_5^2 (u_n - u_h^n + u_{n-1} - u_h^{n-1})\| \\ &\leq C (\|u_{n-1} - u_h^{n-1}\| + \|u_n - u_h^n\|) \leq C (\|\hat{e}^{n-1}\| + \|\tilde{e}^{n-1}\| + \|\hat{e}^n\| + \|\tilde{e}^n\|), \end{aligned}$$

其中 ξ_3 位于 u_n 和 u_{n-1} 之间， ξ_4 位于 u_{n-1} 和 u_h^{n-1} 之间，而 ξ_5 位于 $u_n + u_{n-1}$ 和 $u_h^n + u_h^{n-1}$ 之间。为了保证 ξ_3, ξ_4, ξ_5 的存在，需要满足条件 $\|u_h^n\|_\infty \leq C, \forall 1 \leq n \leq N$ [19]。

接下来, 将不等式 $\mathbf{IV}_i, i = 1, 2, 3, 4$ 合并为 \mathbf{IV} , 得出

$$\begin{aligned} \mathbf{IV} &\leq \frac{2\Delta t}{\varepsilon^2} (\|\mathbf{IV}_1\| + \|\mathbf{IV}_2\| + \|\mathbf{IV}_3\| + \|\mathbf{IV}_4\|) \|\bar{e}^{n-\frac{1}{2}}\| \\ &\leq \frac{3\Delta t}{\varepsilon} (\|\frac{\bar{e}^n + \bar{e}^{n-1}}{2}\| + \|\frac{\hat{e}^n + \hat{e}^{n-1}}{2}\| + \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|^2 dt + 3\xi_1^2 \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|^2 dt \\ &\quad + \frac{\xi_2}{4} \Delta t^3 \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_t^2(t)\|^2 dt + C(\|\hat{e}^{n-1}\| + \|\bar{e}^{n-1}\| + \|\hat{e}^n\| + \|\bar{e}^n\|)^2 + \frac{\Delta t}{3\varepsilon} \|\bar{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2) \\ &\leq \frac{C\Delta t^4}{\varepsilon} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_{tt}(t)\|^2 dt + \frac{C\Delta t^4}{\varepsilon} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \|u_t^2(t)\|^2 dt \\ &\quad + C(\|\hat{e}^{n-1}\|^2 + \|\bar{e}^{n-1}\|^2 + \|\hat{e}^n\|^2 + \|\bar{e}^n\|^2) + \frac{\Delta t}{3\varepsilon} \|\bar{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2. \end{aligned}$$

通过合并这些项 $\mathbf{I}, \mathbf{II}, \mathbf{III}, \mathbf{IV}, \mathbf{V}$, 并从 $n = 1, \dots, k$ ($k \leq T/\Delta t$)进行求和, 结合(2.8)得到

$$\begin{aligned} &\|\bar{e}^k\|^2 - \|\bar{e}^0\|^2 + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \sum_{n=1}^k \|\bar{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2 \\ &\leq \frac{1}{2} \Delta t^4 \varepsilon \|u_{ttt}(t)\|_{L^2(0,T;L^2)}^2 + \frac{\varepsilon}{2} Ch^4 \|u_t(t)\|_{L^2(0,T;H^2)}^2 + \frac{3\Delta t}{\varepsilon} \sum_{n=1}^k \|\bar{e}^{n-\frac{1}{2}}\|^2 \\ &\quad + \frac{C\Delta t^4}{\varepsilon} \|u_{tt}(t)\|_{L^2(0,T;L^2)}^2 + C \frac{\Delta t^4}{\varepsilon} \|u_t^2(t)\|_{L^2(0,T;L^2)} + 3\varepsilon \Delta t^4 \|u_{tt}(t)\|_{L^2(0,T;H^2)}^2 \\ &\quad + C \sum_{n=1}^k (\|\hat{e}^{n-1}\|^2 + \|\bar{e}^{n-1}\|^2 + \|\hat{e}^n\|^2 + \|\bar{e}^n\|^2). \end{aligned}$$

最后, 应用离散Gronwall引理和三角不等式来完成证明。□

3. 基于后验的误差估计的SCR

SCR方法是对采样点群中的解值进行线性多项式拟合, 然后进行求导, 最后得到恢复点上的恢复梯度。时间离散化误差估计算子是由两个时间步长之间的数值近似值之差定义的, 而空间离散化误差估计算子是由梯度定义的, 即数值梯度与恢复梯度之差 [14]。在下文中将简要介绍如何获得恢复梯度, 分为两个步骤。

步骤1: 对于一个内部顶点 $z = z_0 \in \mathcal{N}_h \cap \Omega$ 得到它的恢复梯度, 尽可能选择对称分布于 z 周围的点 $z_i = (x_i, y_i)$, $1 \leq i \leq n$ (至少4个), 一般来说选择网状节点表现最为良好。

定义SCR算子 $G_h : V_h \rightarrow V_h \times V_h$ 为:

$$(G_h u_h)(z) = \nabla p_z(x, y).$$

让 K_z 代表凸多边形的样本点, 找到一个线性多项式 $p_z(x, y)$, 满足以下条件

$$p_z(x, y) = \arg \min_{p_1 \in P_1} \sum_{i=0}^n (p_1(z_i) - u_h(z_i))^2,$$

为了避免小 h 引起的计算不稳定, F 定义如下

$$F : (x, y) \rightarrow (\xi, \eta) = \frac{(x, y) - (x_0, y_0)}{h},$$

其中 $h = \max\{|x_i - x_0|, |y_i - y_0| : 1 \leq i \leq n\}$, 那么拟合的多项式可以写为

$$p_z(x, y) = \mathbf{P}^T \mathbf{a} = \hat{\mathbf{P}}^T \hat{\mathbf{a}},$$

并且

$$\mathbf{P}^T = (1, x, y), \quad \hat{\mathbf{P}}^T = (2, \xi, \eta),$$

$$\mathbf{a}^T = (a_1, a_2, a_3), \quad \hat{\mathbf{a}}^T = (\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3).$$

系数向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 可以通过线性方程确定 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \hat{\mathbf{a}} = \mathbf{A}^T \mathbf{u}$, 其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & \xi_0 & \eta_0 \\ 1 & \xi_1 & \eta_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \xi_n & \eta_n \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u(z_0) \\ u(z_1) \\ \vdots \\ u(z_n) \end{pmatrix}.$$

最后, 通过上述分析得到恢复梯度

$$G_h u = \nabla p_z = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \end{pmatrix}$$

步骤2: 通过在 Ω 上插值得到 $G_h u$ 的恢复梯度

$$G_h u = \sum_{z \in \mathcal{N}_h} G_h u(z) \phi_z.$$

用 η_t^n 和 η_{h, e_h} 分别作为时间和空间的离散化误差指标, 然后在算法中调整时间步长和网格适应性,

$$\eta_t^n := \|u_h^n - \Pi_n u_h^{n-1}\|, \quad \eta_{h, e_h} := \|G_h u_h - \nabla u_h\|_{0, e_h}, \quad \eta_h^2 = \sum_{e_h \in \mathcal{T}_h} \eta_{h, e_h}^2$$

在SCR离散化过程中, 时间步长随着误差估计的变化而变化, 网格大小也根据时间步长而变化, 所以每更新一个 t_n 就会构建一个新的网格, 并在该网格上继续构建一个新的空间 V_h , 其中 Π_n 代表插值到有限元空间 V_h 。

4. 数值实验

本节中, 通过数值算例对格式(2.5)-(2.6)在不同初值条件下进行模拟。

算例4.1. 对于Cahn-Hilliard方程(2.1), 令 $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, $\varepsilon = 0.01$, 初值如下:

$$\begin{aligned}
 u_0(x, y) = & \tanh\left(\frac{(x^2 + y^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{((x - 0.31)^2 + y^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \tanh\left(\frac{((x + 0.31)^2 + y^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{(x^2 + (y - 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \tanh\left(\frac{(x^2 + (y + 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{((x - 0.31)^2 + (y - 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{((x - 0.31)^2 + (y + 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{((x + 0.31)^2 + (y - 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right) \times \\
 & \tanh\left(\frac{((x + 0.31)^2 + (y + 0.31)^2 - 0.15^2)}{\varepsilon}\right)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

图1展示了在六个不同时间步长下的一系列网格自适应结果及其数值解, 可以看出网格细化是符合零水平集规则, 节点数量越来越少。从图2中得到能量随时间的变化而减少, 节点数以及时间步长也会随时间的变化而变化。另外在能量的快速演化阶段, 小的时间步长可以捕捉数值解的变化, 而当达到稳定状态时, 时间步长会变大。

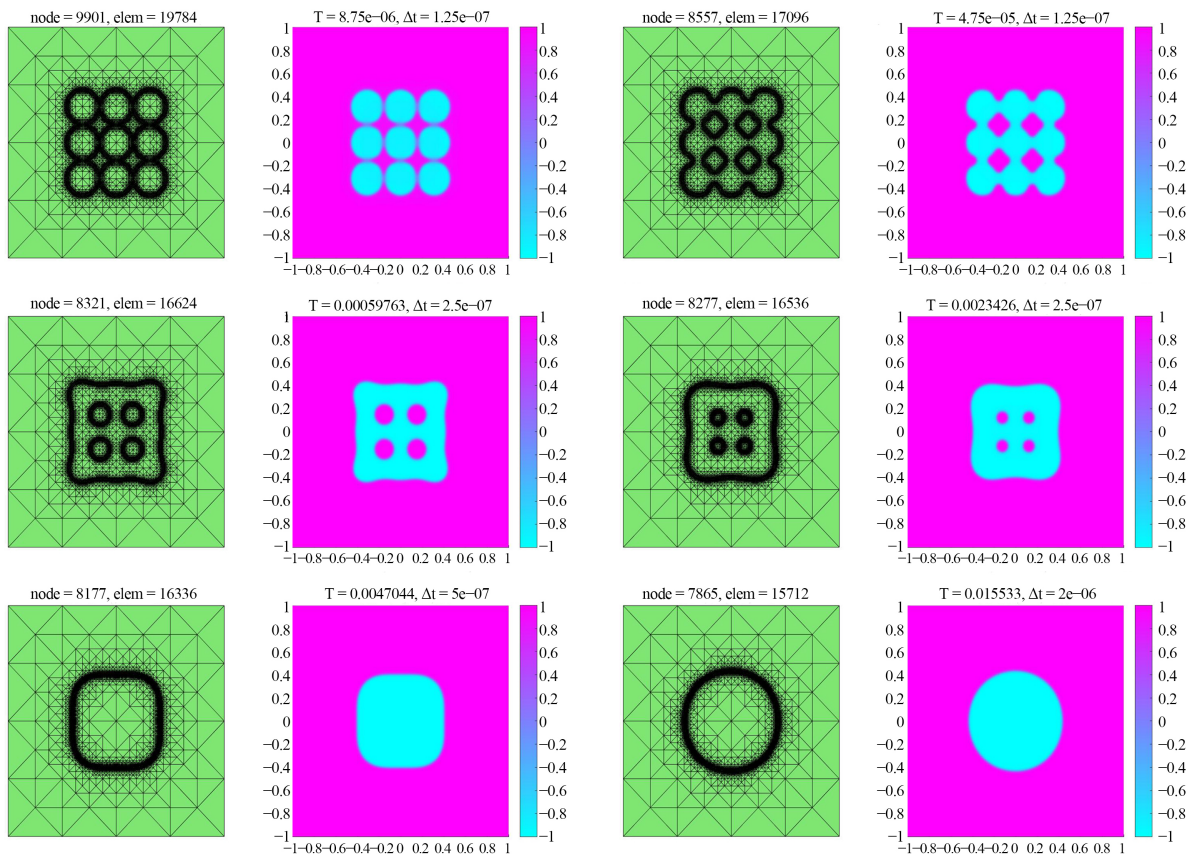


Figure 1. Results of grid adaptive and numerical solutions

图 1. 算例 4.1 (CH), 网格自适应和数值解的结果

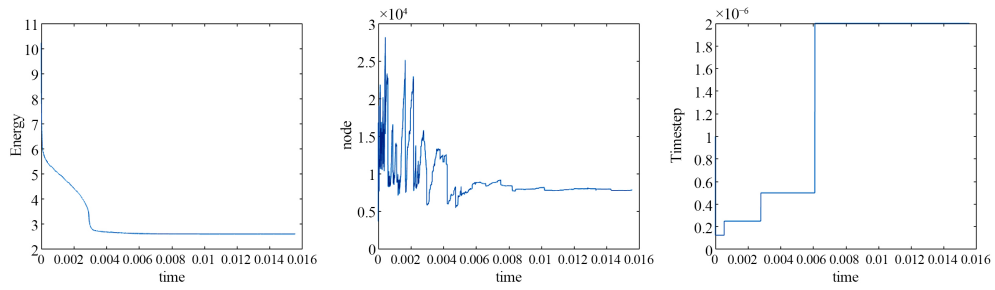


Figure 2. From left to right: Distribution of energy, nodes and time steps

图 2. 算例 4.1 (CH), 从左到右: 能量、节点和时间步长的分布情况

算例4.2. 在参数为 $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, $\varepsilon = 0.01$, 将以下的初值应用在(2.1)

$$u_0(x, y) = \tanh \left(\frac{((x - 0.3)^2 + y^2 - 0.25^2)}{\varepsilon} \right) \tanh \left(\frac{((x + 0.3)^2 + y^2 - 0.3^2)}{\varepsilon} \right), \quad (4.2)$$

在图 3 中, 显示了不同时间步长下的的自适应网格和相应的数值解。明显看出网格变换适应零水平集的规则。此外在图 4 中可以观察到离散时间变化的过程, 这表明能量随时间而衰减。图 4 展示了时间与节点数/时间步长之间的关系。在数值模拟的早期阶段, 数值解的变化是由较小的时间步长来捕捉的, 当系统达到稳定时时间步长会变得比原来更大。

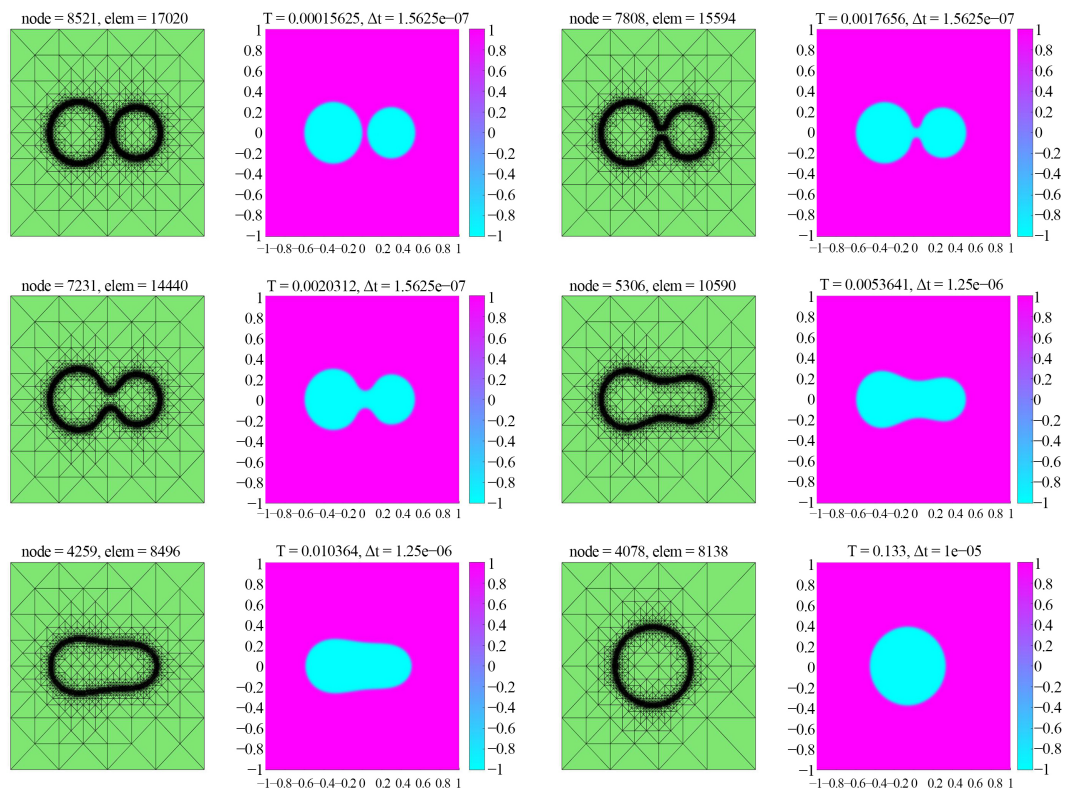


Figure 3. Results of grid adaptive and numerical solutions

图 3. 算例 4.2 (CH), 网格自适应和数值解的结果

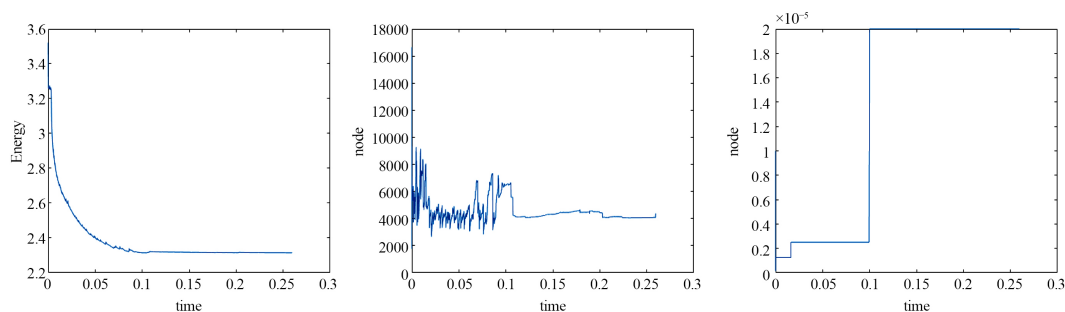


Figure 4. From left to right: Distribution of energy, nodes and time steps

图 4. 算例 4.2 (CH), 从左到右: 能量、节点和时间步长的分布情况

5. 结论

本文对于Cahn-Hilliard方程的二阶全离散格式, 证明了其是无条件能量稳定并且时间和空间上均具有二阶精度。然后定义了时间和空间离散算子, 利用基于SCR 的自适应方法进行时空离散, 最后通过数值实验来证明该方法的有效性。

致 谢

在此感谢山西省归国留学基金项目(No.2021-029)与山西省科技合作交流专项项目(No.202104041101019)的支持, 以及陈的研究得到国家自然科学基金项目(No.12201010)的部分支持。

基金项目

山西省归国留学基金项目(No.2021-029); 山西省科技合作交流专项项目(No.202104041101019); 国家自然科学基金项目(No.12201010)。

参考文献

- [1] Cahn, J. and Hilliard, J. (1958) Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *The Journal of Chemical Physics*, **28**, 258-267. <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
- [2] Karma, A. and Rappel, W.J. (1998) Quantitative Phase-Field Modeling of Dendritic Growth in Two and Three Dimensions. *Physical Review E*, **57**, 4323-4349. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.4323>
- [3] Allen, S. and Cahn, J. (1979) A Microscopic Theory for Antiphase Boundary Motion and Its Application to Antiphase Domain Coarsening. *Acta Materialia*, **27**, 1085-1095. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(79\)90196-2](https://doi.org/10.1016/0001-6160(79)90196-2)
- [4] Kobayashi, R. (1993) Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **63**, 410-423. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(93\)90120-P](https://doi.org/10.1016/0167-2789(93)90120-P)

-
- [5] Gurtin, M., Polignone, D. and Vinals, J. (1996) Two-Phase Binary Fluids and Immiscible Fluids Described by an Order Parameter. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, **6**, 815-831. <https://doi.org/10.1142/S0218202596000341>
- [6] Barret, J., Blowey, J. and Garcke, H. (1999) Finite Element Approximation of the Cahn-Hilliard Equation with Degenerate Mobility. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **37**, 286-318. <https://doi.org/10.1137/S0036142997331669>
- [7] Elliott, C. and French, D. (1989) A Nonconforming Finite-Element Method for the Two-Dimensional Cahn-Hilliard Equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **26**, 884-903. <https://doi.org/10.1137/0726049>
- [8] Elliott, C. and French, D. (1987) Numerical Studies of the Cahn-Hilliard Equation for Phase Separation. *IMA Journal of Applied Mathematics*, **38**, 97-128. <https://doi.org/10.1093/imamat/38.2.97>
- [9] Shen, J., Xu, J. and Yang, J. (2018) The Scalar Auxiliary Variable (SAV) Approach for Gradient Flows. *Journal of Computational Physics*, **353**, 407-416. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.10.021>
- [10] Zhao, S., Xiao, X. and Feng, X. (2020) An Efficient Time Adaptivity Based on Chemical Potential for Surface Cahn-Hilliard Equation Using Finite Element Approximation. *Applied Mathematics and Computation*, **369**, Article ID: 124901. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2019.124901>
- [11] Mao, D., Shen, L. and Zhou, A. (2006) Adaptive Finite Element Algorithms for Eigenvalue Problems Based on Local Averaging Type a Posteriori Error Estimates. *Advances in Computational Mathematics*, **25**, 135-160. <https://doi.org/10.1007/s10444-004-7617-0>
- [12] Chen, Y., Huang, Y. and Yi, N. (2021) A Decoupled Energy Stable Adaptive Finite Element Method for Cahn-Hilliard-Navier-Stokes Equations. *Communications in Computational Physics*, **29**, 1186-1212. <https://doi.org/10.4208/cicp.OA-2020-0032>
- [13] Zhang, Z. and Qiao, Z. (2012) An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn-Hilliard Equation. *Communications in Computational Physics*, **11**, 1261-1278. <https://doi.org/10.4208/cicp.300810.140411s>
- [14] Huang, Y. and Yi, N. (2010) The Superconvergent Cluster Recovery Method. *Journal of Scientific Computing*, **44**, 301-322. <https://doi.org/10.1007/s10915-010-9379-9>
- [15] Chen, Y., Huang, Y. and Yi, N. (2019) A SCR-Based Error Estimation and Adaptive Finite Element Method for the Allen-Cahn Equation. *Computers and Mathematics with Applications*, **78**, 204-223. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2019.02.022>
- [16] Guillen-Gonzalez, F. and Tierra, G. (2014) Second Order Schemes and Time-Step Adaptivity for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard Models. *Computers and Mathematics with Applications*, **68**, 821-846. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2014.07.014>
- [17] Feng, X. and Prohl, A. (2004) Error Analysis of a Mixed Finite Element Method for the Cahn-Hilliard Equation. *Numerische Mathematik*, **99**, 47-84. <https://doi.org/10.1007/s00211-004-0546-5>

-
- [18] Shen, J. and Yang, X. (2010) Numerical Approximations of Allen-Cahn and Cahn-Hilliard Equations. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, **28**, 1669-1691. <https://doi.org/10.3934/dcds.2010.28.1669>
- [19] Li, C., Huang, Y. and Yi, N. (2019) An Unconditionally Energy Stable Second Order Finite Element Method for Solving the Allen-Cahn Equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **353**, 38-48. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2018.12.024>