

电荷输运相场模型二阶、线性、解耦、能量稳定的数值格式

刘思福, 潘明阳*

河北工业大学理学院, 天津

收稿日期: 2024年1月28日; 录用日期: 2024年2月22日; 发布日期: 2024年2月29日

摘要

本文对电荷输运相场模型构造了一种新的二阶精度、线性、解耦、无条件能量稳定的时间步进数值格式。首先, 通过引入一个具有零能量贡献特征的常微分方程处理非线性耦合项。其次, 结合标量辅助变量法处理 Cahn-Hilliard 方程中非线性势函数。时间离散采用二阶向后差分公式, 我们严格证明了该格式下的无条件能量稳定性, 并给出详细的解耦实现过程。最后, 通过几个数值实验验证了所提出方案的准确性和有效性。

关键词

相场模型, 标量辅助变量法, 无条件能量稳定性, 有限差分

A Second-Order, Linear, Decoupled and Energy Stable Numerical Scheme for the Phase Field Model with Charge Transport

Sifu Liu, Mingyang Pan*

School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin

Received: Jan. 28th, 2024; accepted: Feb. 22nd, 2024; published: Feb. 29th, 2024

* 通讯作者。

Abstract

In this paper, a new second-order accuracy, linear, decoupled and unconditionally energy stable time-stepping numerical scheme is constructed for the phase field model with charge transport. Firstly, an ordinary differential equation with zero energy contribution feature is introduced to handle the nonlinear coupling terms. Secondly, the scalar auxiliary variable method is used to deal with the nonlinear potential function in the Cahn-Hilliard equation. The second-order backward differentiation formula is used for temporal discretization. We strictly prove the unconditional energy stability of the proposed scheme and provide a detailed decoupling implementation process. Finally, several numerical experiments are carried out to verify the accuracy and effectiveness of the proposed scheme.

Keywords

Phase Field Model, Scalar Auxiliary Variable Method, Unconditional Energy Stability, Finite Difference

Copyright © 2024 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

电荷输运相场模型是一种描述材料中两个不同相之间的界面行为以及电荷和电场之间的相互作用的数学模型, 它在生物细胞操控 [1]、半导体 [2]、薄膜制备 [3]、以及电池和燃料电池技术 [4]等领域都发挥着十分重要的作用。本文考虑的两相电荷输运相场模型是由 Cahn-Hilliard 方程, 由电荷密度控制的电荷输运方程, 以及 Poisson 方程耦合而成的非线性系统, 控制方程如下

$$\partial_t \phi = M \Delta \mu_\phi, \quad (1a)$$

$$\mu_\phi = \gamma \left(-\delta \Delta \phi + \frac{1}{\delta} f(\phi) \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon}{\partial \phi} |\nabla V|^2, \quad (1b)$$

$$\partial_t \rho_e = K \Delta (\lambda \rho_e + V), \quad (1c)$$

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) = \rho_e. \quad (1d)$$

我们首先给出一些定义。在上述方程中, ϕ 表示相场变量, M 是迁移率参数, μ_ϕ 表示相变量 ϕ 的化学势, γ 为两相间的表面张力, δ 为界面厚度, 函数 $f(\phi) = F'(\phi) = (\phi^2 - 1)\phi$, 其中 $F(\phi)$ 是双阱势函数, 介电常数 ϵ 依赖于相变量 ϕ , 定义为 $\epsilon(\phi) = \frac{1+r_\epsilon}{2} + \frac{r_\epsilon-1}{2}\phi$, 其中 r_ϵ 表示两相间介电常数的比率, V 表示电势, ρ_e 表示电荷密度, K 表示电导率, $\lambda > 0$ 是一个正则化参数。系统 (1) 给定以下初始条件和边界条件

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0, \quad \rho_e(\mathbf{x}, 0) = \rho_e^0, \quad -\nabla \cdot (\epsilon(\phi^0)V(\mathbf{x}, 0)) = \rho_e^0,$$

以及

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = \nabla \mu_\phi \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = \nabla \rho_e \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = \nabla V \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2)$$

其中 ϕ^0 和 ρ_e^0 是给定的初始数据, \mathbf{n} 表示边界 $\partial\Omega$ 上的单位外法向量, $\Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3$ 表示一个矩形域。

电荷输运相场模型是一个高度耦合的非线性系统, 很难直接获得其解析解, 因此为其设计高效保结构 [5] 的数值格式是一项十分具有挑战性的工作。主要的困难在于 Cahn-Hilliard 方程中的非线性势项, 以及相场与电场相互耦合所产生的非线性项。针对第一个困难, 已经存在很多相关的研究方法, 如凸分裂法 [6], 稳定化半隐式法 [7], 能量不变二次化法 [8], 标量辅助变量 (SAV) 法 [9] 等。接着, 针对第二个困难, 文献 [10] 开发了具有零能量贡献特征的 Q 方法。该方法通过设计一个常微分方程来处理存在的非线性耦合项。因此, 在本文中, 我们的目标是为电荷输运相场模型构造一种二阶、线性、解耦、无条件能量稳定的方案。实现的途径是结合非线性势线性化的 SAV 方法和 Q 方法将模型改写为等价形式, 时间上采用二阶向后差分 (BDF2) 公式离散。离散后的模型是无条件能量稳定的, 并且通过引入的辅助变量可以解耦求解, 很大程度上提高了计算效率。最后, 给出了精度测试, 能量稳定性的验证以及基准问题的模拟, 验证了所提方案的准确性和稳定性。

本文其余部分安排如下。在第 2 节中, 对两相电荷输运相场模型进行无量纲化。在第 3 节中, 通过引入辅助变量将模型改写为等价形式, 发展了一个能量稳定的时间步进方案, 并严格证明该方案的无条件能量稳定性。在第 4 节中, 详细描述了其解耦的实现过程。在第 5 节中, 通过几个数值模拟验证了所提方案的有效性和准确性。最后, 在第 6 节给出一些总结。

2. 无量纲形式

首先, 我们对系统 (1) 无量纲化, 选取的无量纲变量为: $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}/\hat{l}, t^* = t\hat{t}/\hat{l}, \mu_\phi^* = \mu_\phi\hat{l}/\gamma, \delta^* = \delta/\hat{l}, \epsilon^* = \epsilon/\hat{\epsilon}, V^* = V/\hat{V}, \rho_e^* = \rho_e\lambda/\hat{V}$, 其中带有 $\hat{\cdot}$ 的变量表示特征量。为了方便我们省略上标 $*$, 无量纲化的系统如下给出

$$\partial_t \phi = M_O \Delta \mu_\phi, \quad (3a)$$

$$\mu_\phi = -\delta \Delta \phi + \frac{1}{\delta} f(\phi) - \frac{B_O}{2} \frac{\partial \epsilon}{\partial \phi} |\nabla V|^2, \quad (3b)$$

$$\partial_t \rho_e = K_O \Delta (\rho_e + V), \quad (3c)$$

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) = C_H \rho_e, \quad (3d)$$

其中, 无量纲参数定义如下

$$M_O = \frac{M\gamma}{\hat{u}\hat{l}^2}, \quad B_O = \frac{\hat{\epsilon}\hat{V}^2}{\gamma\hat{l}}, \quad K_O = \frac{K\lambda}{\hat{u}\hat{l}}, \quad C_H = \frac{\hat{l}^2}{\lambda\hat{\epsilon}},$$

其中 M_O 是无量纲迁移系数, B_O 是邦德数, K_O 是电导率系数, C_H 是电荷系数。无量纲化后的边界条件 (2) 保持不变, 初始条件改变为

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0, \quad \rho_e(\mathbf{x}, 0) = \rho_e^0, \quad -\nabla \cdot (\epsilon(\phi^0)V(\mathbf{x}, 0)) = C_H\rho_e^0.$$

无量纲系统 (3) 的自由能定义为

$$E(\phi, \rho_e, V) = \int_{\Omega} \left(\frac{\delta}{2} |\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\delta} F(\phi) + \frac{B_O C_H}{2} \|\rho_e\|^2 + \frac{B_O}{2} |\sqrt{\epsilon}\nabla V|^2 \right) d\mathbf{x}. \quad (4)$$

对式 (4) 关于时间 t 求导, 并利用边界条件 (2) 和式 (3), 我们有

$$\frac{dE}{dt} = -M_O \|\nabla\mu_\phi\|^2 - B_O C_H K_O \|\nabla\mu_{\rho_e}\|^2.$$

3. 数值格式

在本节中, 我们为电荷输运相场模型开发了一种新的时间步进格式, 该格式是二阶时间精度、线性、解耦和无条件能量稳定的。为了便于数值算法的设计, 我们将系统 (3) 转换为等价的形式, 具体处理如下

首先, 引入一个非局部辅助变量 $Q(t)$ 及其相关的常微分方程, 定义为

$$\begin{cases} Q_t = \int_{\Omega} \left(-\frac{B_O}{2} \partial_\phi \epsilon |\nabla V|^2 \cdot \partial_t \phi - \frac{B_O}{2} \nabla \cdot (\partial_t \epsilon \cdot \nabla V) \cdot V \right) d\mathbf{x}, \\ Q(0) = 1. \end{cases} \quad (5)$$

通过对上式使用分部积分, 容易得到式 (5) 的解为: $Q(t) = 1$ 。

接着, 基于标量辅助变量法, 引入另一个辅助变量 $U(t)$ 处理 Cahn-Hilliard 方程中的非线性势函数, 定义为

$$U(t) = \sqrt{\int_{\Omega} \frac{1}{\delta} F(\phi) d\mathbf{x} + C},$$

式中, C 是一个正数以保正 $\int_{\Omega} \frac{1}{\delta} F(\phi) d\mathbf{x} + C > 0$ 。

将式 (3d) 对时间 t 求导并使用分部积分, 式 (3d) 整理为如下形式

$$-\nabla \cdot \left(\sqrt{\epsilon} \partial_t (\sqrt{\epsilon} \nabla V) + \frac{1}{2} \partial_t \epsilon \cdot \nabla V \right) = C_H \partial_t \rho_e. \quad (6)$$

结合两个辅助变量 Q 和 U 和式 (6), 系统 (3) 等价的改写为

$$\partial_t \phi = M_O \Delta \mu_\phi, \quad (7a)$$

$$\mu_\phi = -\delta \Delta \phi + HU - \frac{Bo}{2} Q \partial_\phi \epsilon |\nabla V|^2, \quad (7b)$$

$$\partial_t \rho_e = K_O \Delta (\rho_e + V), \quad (7c)$$

$$-\nabla \cdot \left(\sqrt{\epsilon} \partial_t (\sqrt{\epsilon} \nabla V) + \frac{Q}{2} \partial_t \epsilon \cdot \nabla V \right) = C_H \partial_t \rho_e, \quad (7d)$$

$$U_t = \frac{1}{2} \int_{\Omega} H \partial_t \phi d\mathbf{x}, \quad (7e)$$

$$Q_t = \int_{\Omega} \left(-\frac{Bo}{2} \partial_\phi \epsilon |\nabla V|^2 \cdot \partial_t \phi - \frac{Bo}{2} \nabla \cdot (\partial_t \epsilon \cdot \nabla V) \cdot V \right) d\mathbf{x}, \quad (7f)$$

其中

$$H(\phi) = \frac{\frac{1}{\delta} f(\phi)}{\sqrt{\int_{\Omega} \frac{1}{\delta} F(\phi) d\mathbf{x} + C}}.$$

等价系统 (7) 的初始条件为

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, 0) &= \phi^0, \quad \rho_e(\mathbf{x}, 0) = \rho_e^0, \quad -\nabla \cdot (\epsilon(\phi^0) \nabla V(\mathbf{x}, 0)) = C_H \rho_e^0, \\ U(0) &= \sqrt{\int_{\Omega} \frac{1}{\delta} F(\phi^0) d\mathbf{x} + C}, \quad Q(0) = 1. \end{aligned}$$

定理1. 系统 (7) 具有如下能量耗散律

$$\frac{dE}{dt} = -M_O \|\nabla \mu_\phi\|^2 - Bo C_H K_O \|\nabla \mu_{\rho_e}\|^2,$$

其中, 总能量 E 定义为

$$E(\phi, \rho_e, V, U, Q) = \int_{\Omega} \left(\frac{\delta}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{Bo C_H}{2} \|\rho_e\|^2 + \frac{Bo}{2} |\sqrt{\epsilon} \nabla V|^2 \right) d\mathbf{x} + |U|^2 + \frac{1}{2} |Q|^2 - C.$$

证明. 将 μ_ϕ 和式 (7a) 作 L^2 内积, 得到

$$(\partial_t \phi, \mu_\phi) = -M_O \|\nabla \mu_\phi\|^2. \quad (8)$$

将 $-\partial_t \phi$ 和式 (7b) 作 L^2 内积, 得到

$$-(\mu_\phi, \partial_t \phi) = -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \frac{\delta}{2} |\nabla \phi|^2 dx - U \int_{\Omega} H \partial_t \phi dx + Q \int_{\Omega} \frac{Bo}{2} \partial_\phi \epsilon |\nabla V|^2 \cdot \partial_t \phi dx. \quad (9)$$

接着, 我们令

$$\mu_{\rho_e} = \rho_e + V. \quad (10)$$

将 $BoC_H \cdot \mu_{\rho_e}$ 和式 (7c) 作 L^2 内积, 得到

$$BoC_H(\partial_t \rho_e, \mu_{\rho_e}) = -BoC_H K_O \|\nabla \mu_{\rho_e}\|^2. \quad (11)$$

将 $-BoC_H \cdot \partial_t \rho_e$ 和式 (10) 作 L^2 内积, 得到

$$-BoC_H(\mu_{\rho_e}, \partial_t \rho_e) = -\frac{BoC_H}{2} \frac{d}{dt} \|\rho_e\|^2 - BoC_H(V, \partial_t \rho_e). \quad (12)$$

将 $Bo \cdot V$ 和式 (7d) 作 L^2 内积, 得到

$$-\frac{Bo}{2} Q(\nabla \cdot (\partial_t \epsilon \cdot \nabla V), V) + \frac{d}{dt} \frac{Bo}{2} \|\sqrt{\epsilon} \nabla V\|^2 = Bo(C_H \partial_t \rho_e, V). \quad (13)$$

在式 (7e) 中, 等式两边同时乘以 $2U$, 我们有

$$\frac{d}{dt} |U|^2 = U \int_{\Omega} H \partial_t \phi dx. \quad (14)$$

在式 (7f) 中, 等式两边同时乘以 Q , 得到

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} |Q|^2 \right) = -\frac{Bo}{2} Q \int_{\Omega} \partial_\phi \epsilon |\nabla V|^2 \cdot \partial_t \phi dx - \frac{Bo}{2} Q \int_{\Omega} \nabla \cdot (\partial_t \epsilon \cdot \nabla V) \cdot V dx. \quad (15)$$

结合式 (8)-(15), 得到能量耗散律如下

$$\frac{d}{dt} E(\phi, \rho_e, V, U, Q) = -M_O \|\nabla \mu_\phi\|^2 - BoC_H K_O \|\nabla \mu_{\rho_e}\|^2, \quad (16)$$

其中

$$E(\phi, \rho_e, V, U, Q) = \int_{\Omega} \left(\frac{\delta}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{BoC_H}{2} \|\rho_e\|^2 + \frac{Bo}{2} |\sqrt{\epsilon} \nabla V|^2 \right) dx + |U|^2 + \frac{1}{2} |Q|^2 - C.$$

定理证毕. \square

接下来, 我们将 BDF2 时间步进格式应用于等价系统 (7)。令时间步长 $\Delta t > 0$, 第 n 步

$t_n = n\Delta t$, 其中 $0 \leq n \leq N$, 则终端时间 $T = N\Delta t$. 可以得到如下的时间离散方案

$$\frac{a\phi^{n+1} - b\phi^n + c\phi^{n-1}}{2\Delta t} = M_O\Delta\mu_\phi^{n+1}, \tag{17a}$$

$$\mu_\phi^{n+1} = -\delta\Delta\phi^{n+1} + \frac{S}{\delta}(\phi^{n+1} - \tilde{\phi}^{n+1}) + \tilde{H}^{n+1}U^{n+1} - \frac{Bo}{2}Q^{n+1}\partial_\phi\epsilon|\nabla\tilde{V}^{n+1}|^2, \tag{17b}$$

$$aU^{n+1} - bU^n + cU^{n-1} = \frac{1}{2}\int_\Omega \tilde{H}^{n+1}(a\phi^{n+1} - b\phi^n + c\phi^{n-1})d\mathbf{x}, \tag{17c}$$

$$\frac{a\rho_e^{n+1} - b\rho_e^n + c\rho_e^{n-1}}{2\Delta t} = K_O\Delta(\rho_e^{n+1} + V^{n+1}), \tag{17d}$$

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot (\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}}(a\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}}\nabla V^{n+1} - b\sqrt{\tilde{\epsilon}^n}\nabla V^n + c\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}}\nabla V^{n-1})) \\ & -\frac{Q^{n+1}}{2}\nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla\tilde{V}^{n+1}) = C_H(a\rho_e^{n+1} - b\rho_e^n + c\rho_e^{n-1}), \end{aligned} \tag{17e}$$

$$\begin{aligned} aQ^{n+1} - bQ^n + cQ^{n-1} = & -\frac{Bo}{2}\int_\Omega [\partial_\phi\epsilon|\nabla\tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot (a\phi^{n+1} - b\phi^n + c\phi^{n-1}) \\ & +\nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla\tilde{V}^{n+1}) \cdot V^{n+1}] d\mathbf{x}, \end{aligned} \tag{17f}$$

式中, $a = 3, b = 4, c = 1$ 和 $S > 0$ 是预先指定的稳定性参数. 此外, 对于任意变量 ψ , 有

$$\tilde{\psi}^{n+1} = \begin{cases} \psi^0 & \text{if } n = 0, \\ 2\psi^n - \psi^{n-1} & \text{if } n \geq 1. \end{cases}$$

方案 (17) 中, 未知量 $(\phi, \mu_\phi, \rho_e, V)^{n+1}$ 满足以下边界条件

$$\partial_n\phi^{n+1}|_{\partial\Omega} = \partial_n\mu_\phi^{n+1}|_{\partial\Omega} = \partial_n\rho_e^{n+1}|_{\partial\Omega} = \partial_nV^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \tag{18}$$

下面证明所提出的方案 (17) 是无条件能量稳定的.

定理2. 时间半离散格式 (17) 具有如下能量耗散律

$$\frac{1}{\Delta t}(E^{n+1} - E^n) \leq -M_O\|\nabla\mu_\phi^{n+1}\|^2 - C_HBoK_O\|\nabla\mu_{\rho_e}^{n+1}\|^2 \leq 0, \tag{19}$$

其中

$$\begin{aligned} E^{n+1} = & \frac{1}{2}\left(\frac{\delta}{2}\|\nabla\phi^{n+1}\|^2 + \frac{\delta}{2}\|2\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n\|^2 + \frac{C_HBo}{2}\|\rho_e^{n+1}\|^2 + \frac{C_HBo}{2}\|2\rho_e^{n+1} - \rho_e^n\|^2 \right. \\ & [.3cm] + \frac{Bo}{2}\|\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}}\nabla V^{n+1}\|^2 + \frac{Bo}{2}\|2\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}}\nabla V^{n+1} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^n}\nabla V^n\|^2 \\ & \left. [.3cm] + |U^{n+1}|^2 + |2U^{n+1} - U^n|^2 + \frac{1}{2}|Q^{n+1}|^2 + \frac{1}{2}|2Q^{n+1} - Q^n|^2 + \frac{S}{\delta}\|\phi^{n+1} - \phi^n\|^2\right) - C. \end{aligned} \tag{20}$$

Proof. 式 (17a) 与 $2\Delta t \cdot \mu_\phi^{n+1}$ 作 L^2 内积并应用分部积分, 我们可以得到

$$(3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}, \mu_\phi^{n+1}) + 2M_O\Delta t \|\nabla \mu_\phi^{n+1}\|^2 = 0. \quad (21)$$

式 (17b) 与 $-(3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1})$ 作 L^2 内积并应用分部积分, 得到

$$\begin{aligned} & -(\mu_\phi^{n+1}, 3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) + \delta(\nabla \phi^{n+1}, \nabla(3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1})) \\ [.35cm] & + \frac{S}{\delta}(\phi^{n+1} - \tilde{\phi}^{n+1}, 3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) + U^{n+1} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \cdot (3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) d\mathbf{x} \quad (22) \\ [.35cm] & - \frac{Bo}{2} Q^{n+1} \int_{\Omega} \partial_\phi \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot (3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) = 0. \end{aligned}$$

接着, 令

$$\mu_{\rho_e}^{n+1} = \rho_e^{n+1} + V^{n+1}. \quad (23)$$

式 (17d) 与 $2C_H Bo \Delta t \cdot \mu_{\rho_e}^{n+1}$ 作 L^2 内积并应用分部积分, 可得

$$C_H Bo(3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1}, \mu_{\rho_e}^{n+1}) + 2C_H Bo K_O \Delta t \|\nabla \mu_{\rho_e}^{n+1}\|^2 = 0. \quad (24)$$

式 (23) 与 $-C_H Bo \cdot (3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1})$ 作 L^2 内积, 可得

$$\begin{aligned} & -C_H Bo(\mu_{\rho_e}^{n+1}, 3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1}) \\ [.35cm] & = -C_H Bo(\rho_e^{n+1}, 3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1}) - C_H Bo(V^{n+1}, 3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1}). \quad (25) \end{aligned}$$

式 (17e) 与 $Bo \cdot V^{n+1}$ 作 L^2 内积并应用分部积分, 可得

$$\begin{aligned} & Bo \left(3\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V^{n+1} - 4\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n + \sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}} \nabla V^{n-1}, \sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V^{n+1} \right) \\ & - \frac{Bo}{2} Q^{n+1} \left(\nabla \cdot \left((3\epsilon^{n+1} - 4\epsilon^n + \epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1} \right), V^{n+1} \right) \quad (26) \\ & = Bo C_H (3\rho_e^{n+1} - 4\rho_e^n + \rho_e^{n-1}, V^{n+1}). \end{aligned}$$

将式 (17c) 乘以 $2U^{n+1}$, 得到

$$\begin{aligned} & |U^{n+1}|^2 + |2U^{n+1} - U^n|^2 - |U^n|^2 - |2U^n - U^{n-1}|^2 + |U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}|^2 \\ [.35cm] & = U^{n+1} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \cdot (3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) d\mathbf{x}, \quad (27) \end{aligned}$$

其中, 我们利用了如下的等式:

$$(3a - 4b + c, 2a) = a^2 + (2a - b)^2 - b^2 - (2b - c)^2 + (a - 2b + c)^2. \quad (28)$$

将式 (17f) 乘以 Q^{n+1} 并利用式 (28), 我们有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (|Q^{n+1}|^2 + |2Q^{n+1} - Q^n|^2 - |Q^n|^2 - |2Q^n - Q^{n-1}|^2 + |Q^{n+1} - 2Q^n + Q^{n-1}|^2) \\ &= -\frac{Bo}{2} Q^{n+1} \int_{\Omega} \partial_{\phi} \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot (3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}) d\mathbf{x} \\ & \quad - \frac{Bo}{2} Q^{n+1} \int_{\Omega} \nabla \cdot ((3\epsilon^{n+1} - 4\epsilon^n + \epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1}) \cdot V^{n+1} d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{29}$$

因此, 结合式 (21)-(29) 并利用式 (28), 我们可以推导出

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{2} (\|\nabla \phi^{n+1}\|^2 + \|2\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n\|^2 - \|\nabla \phi^n\|^2 - \|2\nabla \phi^n - \nabla \phi^{n-1}\|^2) \\ & + \frac{C_H Bo}{2} (\|\rho_e^{n+1}\|^2 + \|2\rho_e^{n+1} - \rho_e^n\|^2 - \|\rho_e^n\|^2 - \|2\rho_e^n - \rho_e^{n-1}\|^2) \\ & + \frac{Bo}{2} (\|\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V^{n+1}\|^2 + \|2\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V^{n+1} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n\|^2 \\ & - \|\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n\|^2 - \|2\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n - \sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}} \nabla V^{n-1}\|^2) + \frac{S}{\delta} (\|\phi^{n+1} - \phi^n\|^2 - \|\phi^n - \phi^{n-1}\|^2) \\ & + |U^{n+1}|^2 + |2U^{n+1} - U^n|^2 - |U^n|^2 - |2U^n - U^{n-1}|^2 \\ & + \frac{1}{2} (|Q^{n+1}|^2 + |2Q^{n+1} - Q^n|^2 - |Q^n|^2 - |2Q^n - Q^{n-1}|^2) \\ & + \left\{ \frac{\delta}{2} \|\nabla \phi^{n+1} - 2\nabla \phi^n + \nabla \phi^{n-1}\|^2 + \frac{C_H Bo}{2} \|\rho_e^{n+1} - 2\rho_e^n + \rho_e^{n-1}\|^2 \right. \\ & + \frac{Bo}{2} \|\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V^{n+1} - 2\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n + \sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}} \nabla V^{n-1}\|^2 + \frac{2S}{\delta} \|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|^2 \\ & \left. + |U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}|^2 + \frac{1}{2} |Q^{n+1} - 2Q^n + Q^{n-1}|^2 \right\} \\ & = -2M_O \Delta t \|\nabla \mu_{\phi}^{n+1}\|^2 - 2C_H Bo K_O \Delta t \|\nabla \mu_{\rho_e}^{n+1}\|^2, \end{aligned} \tag{30}$$

其中, 我们用到了等式: $(a - 2b + c)(3a - 4b + c) = (a - b)^2 - (b - c)^2 + 2(a - 2b + c)^2$.

最后, 从式 (30) 中去掉大括号 $\{\}$ 中的正项, 得到式 (19)。定理证毕。 \square

4. 实施过程

注意到方案 (17) 中的未知量仍是非局部耦合的, 需要继续使用 Q 和 U 两个辅助变量将方案 (17) 分解为若干个线性子系统, 从而达到完全解耦的目的。具体的步骤如下:

第一步, 利用辅助变量 Q^{n+1} 将未知量 $(\phi, \mu_{\phi}, U)^{n+1}$ 分解为线性组合的形式, 即

$$\begin{cases} \phi^{n+1} = \phi_1^{n+1} + Q^{n+1} \phi_2^{n+1}, \\ \mu_{\phi}^{n+1} = \mu_{\phi,1}^{n+1} + Q^{n+1} \mu_{\phi,2}^{n+1}, \\ U^{n+1} = U_1^{n+1} + Q^{n+1} U_2^{n+1}. \end{cases} \tag{31}$$

将这些线性组合代入方程 (17a)-(17b), 得到

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t}(\phi_1^{n+1} + Q^{n+1}\phi_2^{n+1}) = M_O\Delta(\mu_{\phi,1}^{n+1} + Q^{n+1}\mu_{\phi,2}^{n+1}) + \frac{1}{2\Delta t}(b\phi^n - c\phi^{n-1}), \\ \mu_{\phi,1}^{n+1} + Q^{n+1}\mu_{\phi,2}^{n+1} = (-\delta\Delta + \frac{S}{\delta})(\phi_1^{n+1} + Q^{n+1}\phi_2^{n+1}) \\ + \tilde{H}^{n+1}(U_1^{n+1} + Q^{n+1}U_2^{n+1}) - \frac{S}{\epsilon}\tilde{\phi}^{n+1} - \frac{Bo}{2}Q^{n+1}\partial_{\phi\epsilon}|\nabla\tilde{V}^{n+1}|^2. \end{cases} \quad (32)$$

上述格式 (32) 可以通过 Q^{n+1} 分解为两个子系统, 即

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t}\phi_1^{n+1} = M_O\Delta\mu_{\phi,1}^{n+1} + A_1, \\ \mu_{\phi,1}^{n+1} = (-\delta\Delta + \frac{S}{\delta})\phi_1^{n+1} + \tilde{H}^{n+1}U_1^{n+1} + B_1, \end{cases} \quad (33)$$

和

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t}\phi_2^{n+1} = M_O\Delta\mu_{\phi,2}^{n+1} + A_2, \\ \mu_{\phi,2}^{n+1} = (-\delta\Delta + \frac{S}{\delta})\phi_2^{n+1} + \tilde{H}^{n+1}U_2^{n+1} + B_2, \end{cases} \quad (34)$$

其中 A_1, A_2, B_1 和 B_2 是显式项, 记为

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{2\Delta t}(b\phi^n - c\phi^{n-1}), B_1 = -\frac{S}{\delta}\tilde{\phi}^{n+1}, \\ A_2 &= 0, B_2 = -\frac{Bo}{2}\partial_{\phi\epsilon}|\nabla\tilde{V}^{n+1}|^2. \end{aligned}$$

接着, 为了求解格式 (33), 应处理变量 U_1^{n+1} 。因此, 利用变量 U_1^{n+1} 再次将变量 $(\phi_1, \mu_{\phi,1})^{n+1}$ 分解为如下的线性组合

$$\begin{cases} \phi_1^{n+1} = \phi_{11}^{n+1} + U_1^{n+1}\phi_{12}^{n+1}, \\ \mu_{\phi,1}^{n+1} = \mu_{\phi,11}^{n+1} + U_1^{n+1}\mu_{\phi,12}^{n+1}. \end{cases} \quad (35)$$

将式 (35) 代入式 (33), 并用变量 U_1^{n+1} 对系统进行分解后得到 2 个子系统, 即

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t}\phi_{11}^{n+1} = M_O\Delta\mu_{\phi,11}^{n+1} + A_1, \\ \mu_{\phi,11}^{n+1} = (-\delta\Delta + \frac{S}{\delta})\phi_{11}^{n+1} + B_1, \end{cases} \quad (36)$$

和

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t}\phi_{12}^{n+1} = M_O\Delta\mu_{\phi,12}^{n+1}, \\ \mu_{\phi,12}^{n+1} = (-\delta\Delta + \frac{S}{\delta})\phi_{12}^{n+1} + \tilde{H}^{n+1}, \end{cases} \quad (37)$$

其中, 格式 (36) 和 (37) 的边界条件如下

$$\partial_n\phi_{11}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n\mu_{\phi,11}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n\phi_{12}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n\mu_{\phi,12}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \quad (38)$$

因此, 未知量 $(\phi_{11}, \phi_{12}, \mu_{\phi,11}, \mu_{\phi,12})^{n+1}$ 可以很容易地从格式 (36) 和 (37) 中求解。

我们用类似的方法求解方程 (34), 利用变量 U_2^{n+1} 分裂 $(\phi_2, \mu_{\phi,2})^{n+1}$ 为如下的线性组合

$$\begin{cases} \phi_2^{n+1} = \phi_{21}^{n+1} + U_2^{n+1} \phi_{22}^{n+1}, \\ \mu_{\phi,2}^{n+1} = \mu_{\phi,21}^{n+1} + U_2^{n+1} \mu_{\phi,22}^{n+1}. \end{cases} \quad (39)$$

我们可以容易的得到

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t} \phi_{21}^{n+1} = M_O \Delta \mu_{\phi,21}^{n+1}, \\ \mu_{\phi,21}^{n+1} = (-\delta \Delta + \frac{S}{\delta}) \phi_{21}^{n+1} + B_2, \end{cases} \quad (40)$$

和

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t} \phi_{22}^{n+1} = M_O \Delta \mu_{\phi,22}^{n+1}, \\ \mu_{\phi,22}^{n+1} = (-\delta \Delta + \frac{S}{\delta}) \phi_{22}^{n+1} + \tilde{H}^{n+1}. \end{cases} \quad (41)$$

系统 (40) 和 (41) 边界条件如下

$$\partial_n \phi_{21}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n \mu_{\phi,21}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n \phi_{22}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial_n \mu_{\phi,22}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \quad (42)$$

通过求解上述子系统 (40) 和 (41), 即可得到未知量 $(\phi_{21}, \phi_{22}, \mu_{\phi,21}, \mu_{\phi,22})^{n+1}$ 的解。需要注意到, 由于方程 (37) 和 (41) 是相同的, 我们可以得出: $\phi_{12}^{n+1} = \phi_{22}^{n+1}, \mu_{\phi,12}^{n+1} = \mu_{\phi,22}^{n+1}$

第二步, 更新变量 $(U_1, U_2)^{n+1}$ 。将式 (17c) 改写为如下形式

$$U^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi^{n+1} d\mathbf{x} + d^n, \quad (43)$$

其中 $d^n = \frac{1}{a}(bU^n - cU^{n-1}) - \frac{1}{2a} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} (b\phi^n - c\phi^{n-1}) d\mathbf{x}$ 是显式项。

将式 (31) 中的线性形式代入式 (43), 我们得到

$$U_1^{n+1} + Q^{n+1} U_2^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \cdot (\phi_1^{n+1} + Q^{n+1} \phi_2^{n+1}) d\mathbf{x} + d^n. \quad (44)$$

进一步, 根据变量 Q^{n+1} 对上述方程进行拆分, 得到

$$\begin{cases} U_1^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_1^{n+1} d\mathbf{x} + d^n, \\ U_2^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_2^{n+1} d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (45)$$

接着, 将式 (45) 中的 $(\phi_1, \phi_2)^{n+1}$ 替换为式 (35) 中的线性形式, 我们得到

$$\begin{cases} U_1^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} (\phi_{11}^{n+1} + U_1^{n+1} \phi_{12}^{n+1}) d\mathbf{x} + d^n, \\ U_2^{n+1} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} (\phi_{21}^{n+1} + U_2^{n+1} \phi_{22}^{n+1}) d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (46)$$

将方程 (46) 中的未知量整理到左端, 得到

$$U_1^{n+1} = \frac{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{11}^{n+1} d\mathbf{x} + d^n}{1 - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{12}^{n+1} d\mathbf{x}}, \quad (47)$$

$$U_2^{n+1} = \frac{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{21}^{n+1} d\mathbf{x}}{1 - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{22}^{n+1} d\mathbf{x}}. \quad (48)$$

接下来, 我们证明了 U_1^{n+1} 和 U_2^{n+1} 的可解性。将式 (37) 中第一个方程与 $-\mu_{\phi,12}^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$-\frac{a}{2\Delta t} (\phi_{12}^{n+1}, \mu_{\phi,12}^{n+1}) = M_O \|\nabla \mu_{\phi,12}^{n+1}\|^2. \quad (49)$$

将式 (37) 中第二个方程与 $a/2\Delta t \cdot \phi_{12}^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$\frac{a}{2\Delta t} (\mu_{\phi,12}^{n+1}, \phi_{12}^{n+1}) = \frac{a\delta}{2\Delta t} \|\nabla \phi_{12}^{n+1}\|^2 + \frac{aS}{2\delta\Delta t} \|\phi_{12}^{n+1}\|^2 + \frac{a}{2\Delta t} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{12}^{n+1} d\mathbf{x}. \quad (50)$$

结合式 (49) 和 (50), 我们有

$$-\frac{a}{2\Delta t} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_{12}^{n+1} d\mathbf{x} = M_O \|\nabla \mu_{\phi,12}^{n+1}\|^2 + \frac{a\delta}{2\Delta t} \|\nabla \phi_{12}^{n+1}\|^2 + \frac{aS}{2\delta\Delta t} \|\phi_{12}^{n+1}\|^2 \geq 0. \quad (51)$$

由上式可知, 方程 (47) 中的分母是非零的, 即 U_1^{n+1} 总是可解的。 U_2^{n+1} 也可遵循类似的过程被证明是可解的。经过计算 U_1^{n+1} 和 U_2^{n+1} , 我们可以从式 (35) 中得到 $(\phi_1, \mu_{\phi,1})^{n+1}$, 从式 (39) 中得到 $(\phi_2, \mu_{\phi,2})^{n+1}$ 。

第三步, 我们处理格式 (17d)-(17e)。再次利用 Q^{n+1} 将未知量 $(\rho_e, V)^{n+1}$ 分解为如下的线性组合

$$\begin{cases} \rho_e^{n+1} = \rho_{e,1}^{n+1} + Q^{n+1} \rho_{e,2}^{n+1}, \\ V^{n+1} = V_1^{n+1} + Q^{n+1} V_2^{n+1}. \end{cases} \quad (52)$$

将上式的线性组合代入方程 (17d)-(17e), 我们有

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t} (\rho_{e,1}^{n+1} + Q^{n+1} \rho_{e,2}^{n+1}) \\ = K_O \Delta ((\rho_{e,1}^{n+1} + Q^{n+1} \rho_{e,2}^{n+1}) + (V_1^{n+1} + Q^{n+1} V_2^{n+1})) + \frac{1}{2\Delta t} (b\rho_e^n - c\rho_e^{n-1}), \\ -\nabla \cdot (a\tilde{\epsilon}^{n+1} \nabla (V_1^{n+1} + Q^{n+1} V_2^{n+1})) - C_H a (\rho_{e,1}^{n+1} + Q^{n+1} \rho_{e,2}^{n+1}) \\ = -\nabla \cdot (\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \cdot (b\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n - c\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}} \nabla V^{n-1})) - C_H (b\rho_e^n - c\rho_e^{n-1}) \\ + \frac{Q^{n+1}}{2} \nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1}). \end{cases} \quad (53)$$

上述系统 (53) 可以通过 Q^{n+1} 分解为两个子系统, 即

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t} \rho_{e,1}^{n+1} = K_O \Delta (\rho_{e,1}^{n+1} + V_1^{n+1}) + C_1, \\ -\nabla \cdot (a\tilde{\epsilon}^{n+1} \nabla V_1^{n+1}) - aC_H \rho_{e,1}^{n+1} = D_1, \end{cases} \quad (54)$$

和

$$\begin{cases} \frac{a}{2\Delta t} \rho_{e,2}^{n+1} = K_O \Delta (\rho_{e,2}^{n+1} + V_2^{n+1}) + C_2, \\ -\nabla \cdot (a\tilde{\epsilon}^{n+1} \nabla V_2^{n+1}) - aC_H \rho_{e,2}^{n+1} = D_2, \end{cases} \quad (55)$$

其中

$$C_1 = \frac{1}{2\Delta t} (b\rho_e^n - c\rho_e^{n-1}), D_1 = -\nabla \cdot (\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \cdot (b\sqrt{\tilde{\epsilon}^n} \nabla V^n - c\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n-1}} \nabla V^{n-1})) - C_H (b\rho_e^n - \rho_e^{n-1}),$$

$$C_2 = 0, D_2 = \frac{1}{2} \nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1}).$$

接着, 求解系统 (54) 和 (55) 来更新变量 $(\rho_{e,1}, \rho_{e,2}, V_1, V_2)^{n+1}$ 。

第四步, 求解辅助变量 Q^{n+1} 。利用变量 ϕ^{n+1}, V^{n+1} 在式 (31) 和 (52) 的拆分形式, 将式 (17f) 改写为

$$(a - \vartheta_2)Q^{n+1} = (bQ^n - cQ^{n-1}) + \vartheta_1, \quad (56)$$

其中 ϑ_1, ϑ_2 是由前面步骤中所有的已知项构成, 定义为

$$\vartheta_1 = -\frac{Bo}{2} \int_{\Omega} \left(\partial_{\phi} \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot (a\phi_1^{n+1} - b\phi^n + c\phi^{n-1}) + \nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1}) \cdot V_1^{n+1} \right) dx,$$

$$\vartheta_2 = -\frac{Bo}{2} \int_{\Omega} \left(\partial_{\phi} \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot a\phi_2^{n+1} + \nabla \cdot ((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1}) \cdot V_2^{n+1} \right) dx.$$

下面通过验证 $a - \vartheta_2 \neq 0$ 来证明方程 (56) 的可解性。将式 (34) 中第一个方程与 $\mu_{\phi,2}^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$\frac{a}{2\Delta t} (\phi_2^{n+1}, \mu_{\phi,2}^{n+1}) = -M_O \|\nabla \mu_{\phi,2}^{n+1}\|^2. \quad (57)$$

将式 (34) 中第二个方程与 $-a/(2\Delta t) \cdot \phi_2^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$-\frac{a}{2\Delta t} (\mu_{\phi,2}^{n+1}, \phi_2^{n+1}) = -\frac{a\delta}{2\Delta t} \|\nabla \phi_2^{n+1}\|^2 - \frac{aS}{2\delta\Delta t} \|\phi_2^{n+1}\|^2$$

$$- \frac{aU_2^{n+1}}{2\Delta t} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_2^{n+1} dx + \frac{aBo}{4\Delta t} \int_{\Omega} \partial_{\phi} \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot \phi_2^{n+1} dx. \quad (58)$$

接着, 令

$$\mu_{\rho_e,2}^{n+1} = \rho_{e,2}^{n+1} + V_2^{n+1}. \quad (59)$$

将式 (55) 中第一个方程与 $BoC_H \cdot \mu_{\rho_e,2}^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$\frac{aBoC_H}{\Delta t} (\rho_{e,2}^{n+1}, \mu_{\rho_e,2}^{n+1}) = -BoC_H K_O \|\nabla \mu_{\rho_e,2}^{n+1}\|^2. \quad (60)$$

将式 (59) 与 $-aBoC_H/2\Delta t \cdot \rho_{e,2}^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$-\frac{aBoC_H}{2\Delta t} (\mu_{\rho_e,2}^{n+1}, \rho_{e,2}^{n+1}) = -\frac{aBoC_H}{2\Delta t} \|\rho_{e,2}^{n+1}\|^2 - \frac{aBoC_H}{2\Delta t} (V_2^{n+1}, \rho_{e,2}^{n+1}). \quad (61)$$

将式 (55) 中第二个方程与 $Bo/2\Delta t \cdot V_2^{n+1}$ 作 L^2 内积, 得到

$$\begin{aligned} & \frac{aBo}{2\Delta t} \|\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V_2^{n+1}\|^2 - \frac{aBoC_H}{2\Delta t} (\rho_{e,2}^{n+1}, V_2^{n+1}) \\ &= \frac{Bo}{4\Delta t} \left(\nabla \cdot \left((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1} \right), V_2^{n+1} \right). \end{aligned} \tag{62}$$

结合式 (57)-(62), 我们有

$$\begin{aligned} & \frac{aBo}{4\Delta t} \int_{\Omega} \partial_{\phi} \epsilon |\nabla \tilde{V}^{n+1}|^2 \cdot \phi_2^{n+1} d\mathbf{x} + \frac{Bo}{4\Delta t} \int_{\Omega} \nabla \cdot \left((a\epsilon^{n+1} - b\epsilon^n + c\epsilon^{n-1}) \cdot \nabla \tilde{V}^{n+1} \right) \cdot V_2^{n+1} d\mathbf{x} \\ &= M_O \|\nabla \mu_{\phi,2}^{n+1}\|^2 + \frac{a\delta}{2\Delta t} \|\nabla \phi_2^{n+1}\|^2 + \frac{aS}{2\delta\Delta t} \|\phi_2^{n+1}\|^2 + C_H Bo K_O \|\nabla \mu_{\rho_e,2}^{n+1}\|^2 + \frac{aBoC_H}{2\Delta t} \|\rho_{e,2}^{n+1}\|^2 \tag{63} \\ &+ \frac{aBo}{2\Delta t} \|\sqrt{\tilde{\epsilon}^{n+1}} \nabla V_2^{n+1}\|^2 + \frac{aU_2^{n+1}}{2\Delta t} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_2^{n+1} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

从式 (45) 中的最后一个等式, 我们推导出 $U_2^{n+1} \int_{\Omega} \tilde{H}^{n+1} \phi_2^{n+1} d\mathbf{x} = 2(U_2^{n+1})^2 \geq 0$. 因此, 我们得到 $-\vartheta_2 \geq 0$, 即, 方程 (56) 是可解的.

最后, 由式 (31) 更新 $(\phi, \mu_{\phi})^{n+1}$, 由式 (52) 更新 $(\rho_e, V)^{n+1}$.

Table 1. Temporal errors and convergence rates ($h_x = h_y = 2.5 \times 10^{-3}$)

表 1. 时间误差和收敛阶 ($h_x = h_y = 2.5 \times 10^{-3}$)

Δt	$\ e_{\phi}\ _2$	EOC	$\ e_{\rho_e}\ _2$	EOC	$\ e_V\ _2$	EOC
1/8	3.53e-04	-	3.15e-04	-	3.14e-04	-
1/12	1.57e-04	2.007	1.40e-04	2.007	1.38e-04	2.019
1/16	8.80e-05	2.005	7.84e-05	2.005	7.72e-05	2.030
1/32	2.20e-05	2.004	1.96e-05	2.004	1.83e-05	2.075

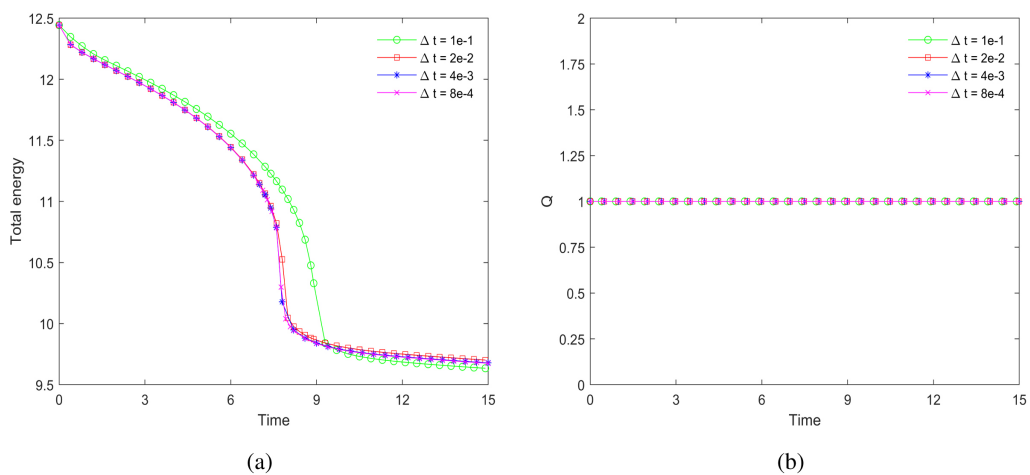


Figure 1. (a) The evolution of the discrete total energy for different time steps (b) The evolution of the variable Q for different time steps

图 1. (a)不同时间步长的离散总能量的演化(b)不同时间步长下变量 Q 的演化

5. 数值模拟

在本节中, 我们通过几个数值模拟以验证所提出格式 (17) 的准确性和有效性。首先, 我们测试了所有未知量在时间上的误差和实验收敛阶。接着, 验证了不同的时间步长下的无条件能量稳定性。最后, 我们进行了二维失稳分解的基准仿真实验。空间上采用有限差分离散。所有的稀疏线性系统采用共轭梯度法或广义最小残差法求解, 其迭代误差为 10^{-10} 。

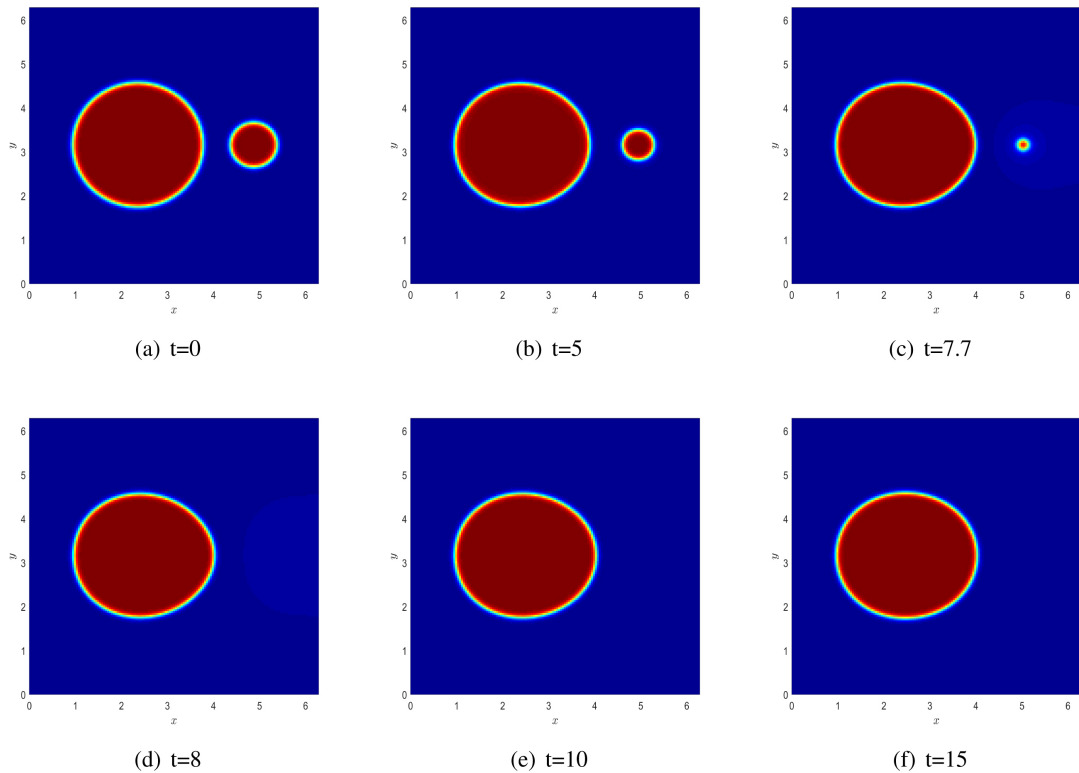


Figure 2. Snapshots of phase function ϕ at different times t

图 2. 相函数 ϕ 在不同时刻 t 的快照图

5.1. 精度测试

首先, 我们执行收敛阶测试来验证所提出的数值格式 (17) 的准确性。通过对系统 (3) 添加一些源项, 使得系统有如下的精确解

$$\phi(x, y, t) = \rho_e(x, y, t) = V(x, y, t) = \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin t.$$

计算域设置为 $\Omega = [0, 1]^2$, 终端时间设置为 $T = 0.5$ 。所有参数选取如下

$$\begin{aligned} M_O &= 5 \times 10^{-5}, & \delta &= 0.08, & S &= 0.1, & Bo &= 1, \\ K_O &= 5 \times 10^{-5}, & C_H &= 1, & r_\epsilon &= 1, & C &= 50. \end{aligned}$$

表 1 展示了相变量 ϕ 、电荷密度 ρ_e 和电势 V 的 L^2 - 范数误差和时间收敛阶。为了测试时间收敛阶, 空间分辨率固定为 $N_x = N_y = 400$, 我们注意到所有的变量都是具有二阶时间精度的。

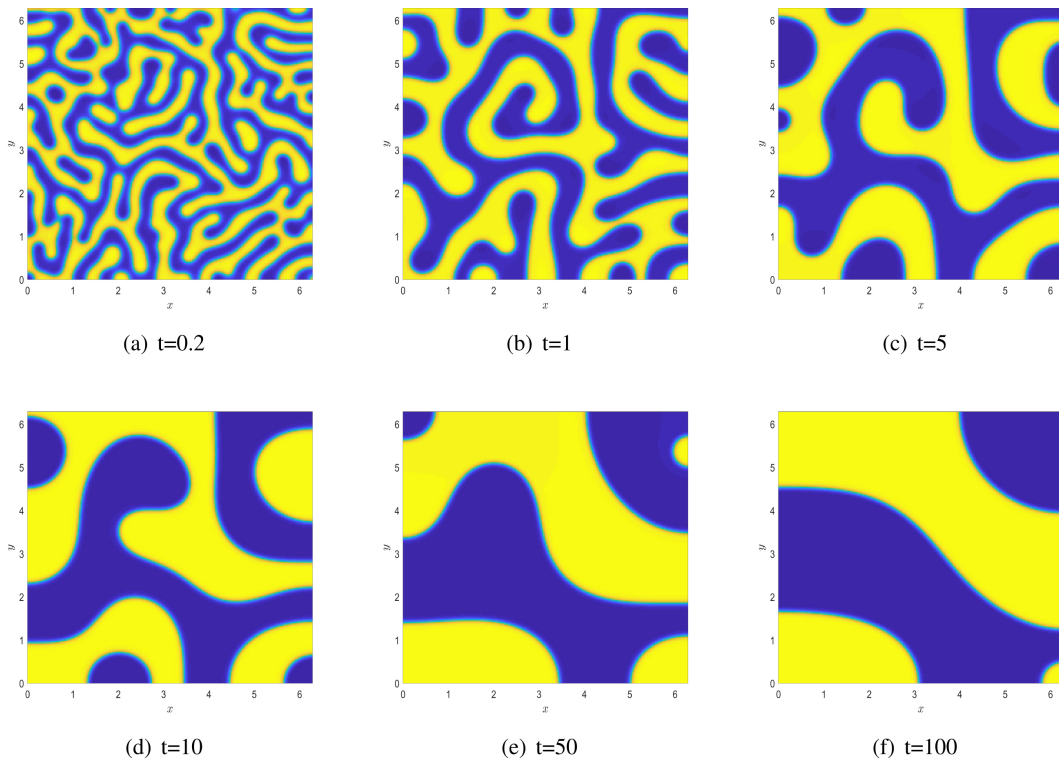


Figure 3. Snapshots of phase function ϕ at different times t with $\phi_c = 0$

图 3. 当 $\phi_c = 0$ 时, 相函数 ϕ 在不同时刻 t 的快照图

5.2. 稳定性测试

接着, 我们检验所提出格式 (17) 在二维区域 $\Omega = [0, 2\pi]^2$ 上的无条件能量稳定性。空间网格选取为 $h_x = h_y = 2\pi/150$, 终端时间设置为 $T = 15$ 。所有变量的初始条件设置为

$$\begin{cases} \phi^0 = 1 + \sum_i^2 \tanh\left(\frac{r_i - \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}}{1.5\delta}\right), \\ \rho_e^0 = \frac{1}{\pi} \cos(x) \cos(y), \end{cases}$$

其中 $r_1 = 1.4, r_2 = 0.5, x_1 = \pi - 0.8, x_2 = \pi + 1.7, y_1 = y_2 = \pi$ 。参数选取如下

$$\begin{aligned} M_O &= 5 \times 10^{-2}, & \delta &= 0.05, & S &= 2, & B_O &= 1, \\ K_O &= 5 \times 10^{-3}, & C_H &= 1, & r_\epsilon &= 1, & C &= 100. \end{aligned}$$

在图 1 中, 我们计算了不同时间步长下离散总能量和 Q 的数值解。由图 1(a) 可以观察到不同时间步长下总能量都呈现递减的趋势, 即离散的总能量满足能量稳定性。此外, 由图 1(b) 可以看

出, 变量 Q 的数值解与精确解近似相等, 即 $Q \approx 1$ 。最后, 我们采用时间步长为 $\Delta t = 8 \times 10^{-4}$ 使相变量 ϕ 演化到稳态。 ϕ 在不同时刻的分布如图 2 所示。可以看出, 在粗化作用下, 小圆逐渐被大圆吸收。

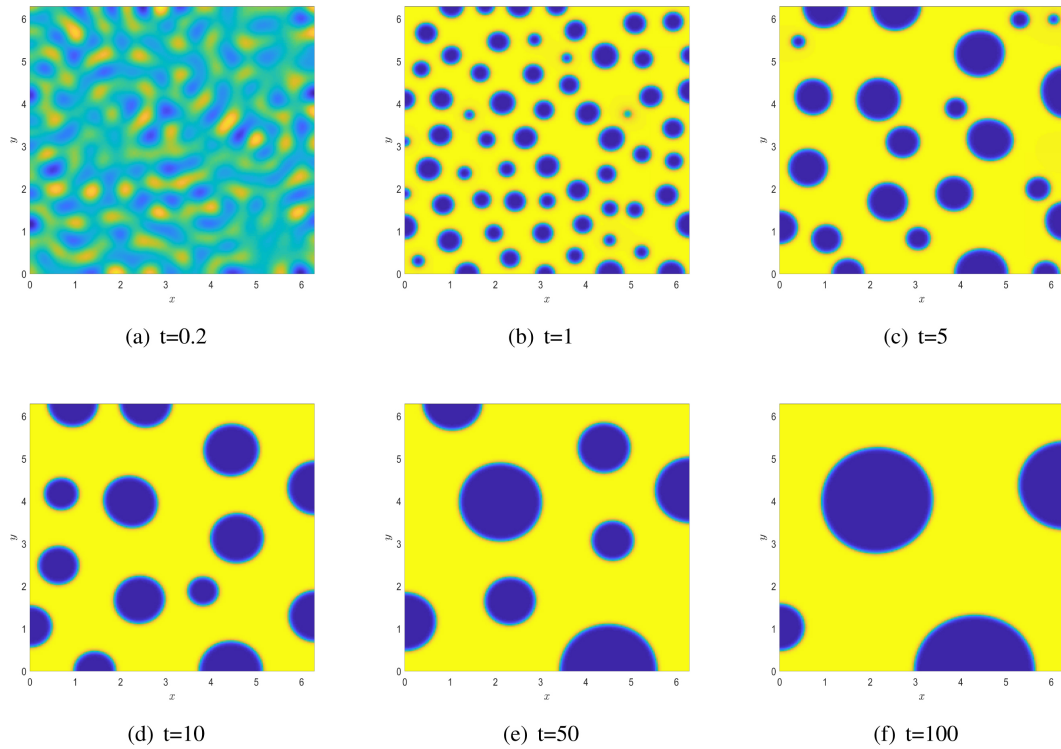


Figure 4. Snapshots of phase function ϕ at different times t with $\phi_c = 0.5$

图 4. 当 $\phi_c = 0.5$ 时, 相函数 ϕ 在不同时刻 t 的快照图

5.3. 失稳分解

最后, 我们研究了失稳分解的基准仿真实验(见 [11, 12])。考虑二维空间区域 $\Omega = [0, 2\pi]^2$, 终端时间为 $T = 150$, 空间网格尺寸为 $h_x = h_y = 2\pi/200$ 。初始条件的设置如下

$$\begin{cases} \phi^0 = \phi_c + 10^{-3}\text{rand}(\mathbf{x}), \\ \rho_e^0 = \cos(x) \cos(y), \end{cases}$$

式中, ϕ_c 是一个常数, 表示初始平均值, $\text{rand}(\mathbf{x})$ 表示 $[-1, 1]$ 范围内服从正态分布的随机函数。参数设置为

$$M_O = 5 \times 10^{-2}, \quad \delta = 0.04, \quad S = 10, \quad B_O = 1, \\ K_O = 5 \times 10^{-4}, \quad C_H = 1, \quad r_\epsilon = 1, \quad C = 100.$$

在图 3 和图 4 中, 我们进行了初始平均值分别为 $\phi_c = 0$ 和 $\phi_c = 0.5$ 的两次模拟。图 3 和图 4 给出了 ϕ 在不同时刻的快照图。我们观察到, 两次模拟在逐渐趋于平衡解的过程中分别呈现出带状相和圆形相。接着, 在图 5 中, 我们给出了两次模拟的总能量和变量 Q 数值解的时间演化图。可以观察到

能量曲线随时间递减, 这证实了所提出的数值格式是无条件稳定的。此外, 数值解都保持 $Q \approx 1$, 这与理论分析是一致的。

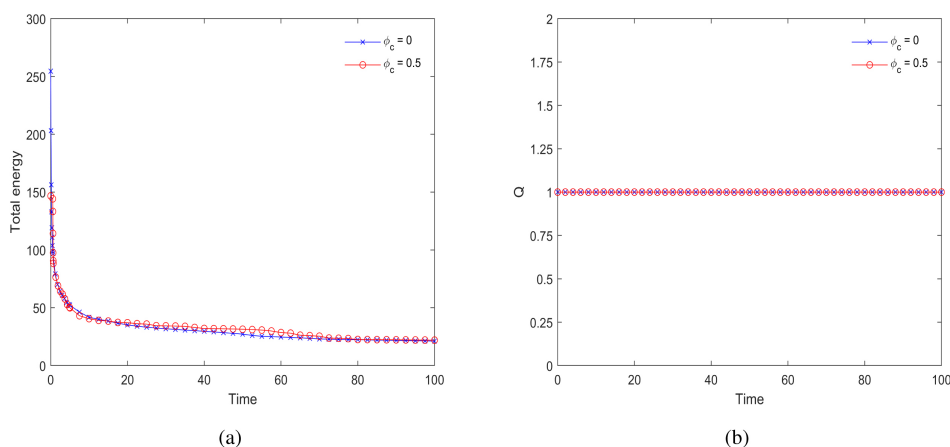


Figure 5. (a) The evolution of total energy with different initial values (b) The evolution of the variable Q with different initial values

图 5. (a)不同初值下离散总能量的演化(b) 不同初值下变量 Q 的演化

6. 结论

本文对电荷输运相场模型提出一种具有二阶时间精度、线性、解耦和能量稳定的时间步进数值方案。我们严格证明了该方案的无条件能量稳定性, 并给出了具体的解耦实施过程。在每个时间步, 我们只要求解若干个常系数线性方程, 这在很大程度上减少了计算成本。最后, 通过一些数值算例的实现, 验证了数值格式的准确性和有效性。

致 谢

在此感谢国家自然科学基金项目(12101177), 河北省自然科学基金项目(A2021202001)的支持。

基金项目

国家自然科学基金项目(12101177), 河北省自然科学基金项目(A2021202001)的支持。

参考文献

- [1] Pethig, R. (1996) Dielectrophoresis: Using Inhomogeneous AC Electrical Fields to Separate and Manipulate Cells. *Critical Reviews in Biotechnology*, **16**, 331-348.
<https://doi.org/10.3109/07388559609147425>
- [2] Bank, R.E., Rose, D.J. and Fichtner, W. (1983) Numerical Methods for Semiconductor Device Simulation. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, **4**, 416-435.
<https://doi.org/10.1137/0904032>
- [3] Papageorgiou, D.T. (2019) Film Flows in the Presence of Electric Fields. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **51**, 155-187. <https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122316-044531>
- [4] Nielsen, C.P. and Bruus, H. (2015) Sharp-Interface Model of Electrodeposition and Ramified Growth. *Physical Review E*, **92**, Article 042302.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.042302>
- [5] Christiansen, S.H., Munthe-Kaas, H.Z. and Owren, B. (2011) Topics in Structure-Preserving Discretization. *Acta Numerica*, **20**, 1-119. <https://doi.org/10.1017/S096249291100002X>
- [6] Hu, Z., Wise, S.M., Wang, C. and Lowengrub, J.S. (2009) Stable and Efficient Finite-Difference Nonlinear-Multigrid Schemes for the Phase Field Crystal Equation. *Journal of Computational Physics*, **228**, 5323-5339. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.04.020>
- [7] Liu, C., Shen, J. and Yang, X. (2007) Dynamics of Defect Motion in Nematic Liquid Crystal Flow: Modeling and Numerical Simulation. *Communications in Computational Physics*, **2**, 1184-1198.
- [8] Yang, X. (2016) Linear, First and Second-Order, Unconditionally Energy Stable Numerical Schemes for the Phase Field Model of Homopolymer Blends. *Journal of Computational Physics*, **327**, 294-316. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.029>
- [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] Yang, X. (2021) On a Novel Fully Decoupled, Second-Order Accurate Energy Stable Numerical Scheme for a Binary Fluid-Surfactant Phase-Field Model. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **43**, B479-B507. <https://doi.org/10.1137/20M1336734>
- [11] Chen, Y. and Shen, J. (2016) Efficient, Adaptive Energy Stable Schemes for the Incompressible Cahn-Hilliard Navier-Stokes Phase-Field Models. *Journal of Computational Physics*, **308**, 40-56. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.12.006>
- [12] Yang, X. (2021) On a Novel Fully-Decoupled, Linear and Second-Order Accurate Numerical Scheme for the Cahn-Hilliard-Darcy System of Two-Phase Hele-Shaw Flow. *Computer Physics Communications*, **263**, Article 107868. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.107868>