

高阶平均向量场方法在 Allen-Cahn 方程中的应用*

何雪璐, 赵鑫, 孙建强

(海南大学 信息科学技术学院数学系, 海口 570228)

摘要: Allen-Cahn 方程是材料科学中描述流体动力学问题和反应扩散问题中的一类重要方程。Allen-Cahn 方程的能量具有散逸性, 即能量会随着时间的增长会逐渐降低。在数值模拟中, 设计精确地保持 Allen-Cahn 方程能量散逸性的格式对模拟方程的演化具有显著的优点。目前, 保 Allen-Cahn 方程能量散逸性的数值格式都是低阶的。最近有人构造了保持常微分方程能量散逸性的高阶平均向量场方法, 是一种有效的离散梯度法。国内外还少有人把保能量散逸性的高阶离散梯度方法应用于能量散逸性的偏微分方程。利用高阶离散梯度方法构造了 Allen-Cahn 方程的高阶格式。新的高阶格式能很好地长时间模拟 Allen-Cahn 方程数值解的演化, 并长时间保持 Allen-Cahn 方程的内在特性。

关键词: 高阶离散梯度方法; 能量散逸性; Allen-Cahn 方程

中图分类号: Q175

文献标志码: A

文章编号: 1672-6693(2016)01-0086-06

能量散逸性在许多偏微分方程的一类重要特性, 如常见的扩散方程、Allen-Cahn 方程、Cahn-Hilliard 方程等都具有能量散逸性^[1,2]。能精确地计算这些偏微分方程数值解的行为且很好地保持这些微分方程的能量散逸特性的数值计算格式对正确地模拟这些微分方程具有显著的优点。这一思想归结于我国早期著名计算数学家冯康院士提出的辛几何算法^[3]。国内外许多学者基于辛几何算法的思想发展了具有多辛结构偏微分方程的多辛方法^[4-5]。近年来提出了哈密顿系统的平均向量场方法, 是一种有效的离散梯度法, 能很好地保持哈密顿系统的能量^[6]。离散梯度方法同样可应用于能量散逸性微分方程, 可以保持能量散逸性微分方程的能量散逸性。国外许多学者发展了这一有效的离散梯度方法, 提出了高阶离散梯度方法并应用于常微分方程中^[7,9-10]。高阶离散梯度方法应用于能量散逸性偏微分方程中, 国内外还少有研究。已有文献把高阶离散梯度方法应用于能量散逸性的 Cahn-Hilliard 方程。在利用高阶离散梯度方法计算 Cahn-Hilliard 方程时, 需要的时间步长非常少和只能计算很短的时间^[11]。高阶离散梯度方法能否采取较大时间步长并且长时间精确地数值模拟和长时间保持微分方程的能量散逸性需要计算新的微分方程才能得以验证。这里利用高阶离散梯度方法求解能量散逸性的 Allen-Cahn 方程。

Allen-Cahn 方程是材料科学中描述计算流体动力学问题和反应扩散问题的对流扩散方程, 方程的能量具有散逸性。Allen-Cahn 方程的一般形式为:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 u_{xx} + u - u^3 \quad (1)$$

设初值条件为 $u(x, 0) = u_0(x)$, $x \in \mathbf{R}$, ϵ 为常数, 方程(1)的能量函数为:

$$H(u) = \int_0^1 H(u, u_x) dx, \\ H(u, u_x) = \frac{1}{2} \epsilon^2 (u_x)^2 - \frac{u^2}{2} + \frac{u^4}{4},$$

根据:

$$\frac{d}{dt} H(u) = \int_0^1 \frac{\delta H}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx + \left[\frac{\partial H}{\partial u_x} \frac{\partial u}{\partial t} \right]_0^L = \\ - \int_0^1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta H}{\delta u} \right)^2 dx + \left[\left(\frac{\delta H}{\delta u} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta H}{\delta u} \right) \right]_0^L \leq 0,$$

* 收稿日期: 2015-03-30 修回日期: 2015-10-20 网络出版时间: 2015-12-02 13:27

资助项目: 国家自然科学基金(No. 11161017; No. 11561018); 海南省自然科学基金(No. 114003); 海南省研究主创新科研课题(No. Hys2015-40)

作者简介: 何雪璐, 女, 研究方向为偏微分方程数值解法; 通信作者: 孙建强, 教授, E-mail: sunjq123@qq.com

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/50.1165.n.20151202.1327.034.html>

因此 Allen-Cahn 方程(1)的能量有散逸特性。

本文结构如下:在第 1 节,对能量散逸性方程及高阶离散梯度方法的理论和计算格式进行了介绍。在第 2 节,利用离散梯度法构造了 Allen-Cahn 方程的高阶精度格式。在第 3 节,利用构造的高阶精度格式长时间模拟 Allen-Cahn 方程解的行为,并分析构造的高精度格式的优越性。

1 高阶平均向量场方法

许多能量散逸性偏微分方程可表示成如下方程:

$$\frac{du}{dt} = D \frac{\delta H}{\delta u}, \quad (2)$$

$u = u(x, t) \in \mathbf{R}^m$, D 是一个算子,哈密尔顿函数为:

$$H[u] = \int_{\Omega} H(x; v^n) dx$$

Ω 为 $\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}$ 的区间, $dx = dx_1 dx_2 \cdots dx_d$, $\frac{\delta H}{\delta u}$ 表示函数 H 的变分导数。

当(2)式中的 D 是负定(或半负定)算子时,可得到:

$$\int_{\Omega} u^T D u dx \leq 0, \forall u \in B.$$

这时可用 N 取代替 D , H 称为李亚普诺夫函数,方程(2)可转化为:

$$\dot{u} = N \frac{\delta H}{\delta u}, \quad (3)$$

根据 $\frac{dH}{dt} = \int_{\Omega} \frac{\partial H}{\partial u} N \frac{\partial H}{\partial u} \leq 0$, 方程(3)具有能量散逸性,方程(3)即为能量散逸性方程。方程(3)在空间方向采取不同的方式离散后,可转化为如下有限维常微分方程:

$$\frac{du}{dt} = f(u) = \bar{N} \nabla \bar{H}(u), \quad (4)$$

\bar{N} 是一个负定(半负定)矩阵, $u = (u_0, u_1, \dots, u_i, \dots, u_{N-1})^T$, u_i 为 $u(x, t)$ 在点 x_i 的近似值, \bar{H} 是函数 H 的近似离散。

定理 1 二阶平均向量场方法应用于常微分方程(4),可得到:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{h} = \int_0^1 f((1 - \xi)u^n + \xi u^{n+1}) d\xi = \bar{N} \int_0^1 \nabla \bar{H}((1 - \xi)u^n + \xi u^{n+1}) d\xi \quad (5)$$

这里 h 是时间步长,则函数 \bar{H} 具有能量散逸性^[11],即:

$$\bar{H}(u^{n+1}) \leq \bar{H}(u^n).$$

(5)式保持了散逸性方程(4)的能量散逸性。

最近,高阶平均向量场方法被提出,是一种高阶离散梯度法^[7-8]。高阶平均向量场方法应用于常微分方程(4),即:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h} = (\delta_i^j + \alpha h^2 f_k^i(\hat{u}) f_j^k(\hat{u})) \int_0^1 f^j((1 - \xi)u^n + \xi u^{n+1}) d\xi \quad (6)$$

在 $\alpha = 0$ 时,(6)式即为(5)式,为二阶计算精度。在 $\alpha = -\frac{1}{12}$, $\hat{u} = u^n$ 时,(6)式为三阶计算精度。在 $\alpha = -\frac{1}{12}$, $\hat{u} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$ 时,(6)式为四阶计算精度。

定理 2 高阶平均向量场方法应用于常微分方程(4),则函数 \bar{H} 具有能量散逸性^[11],有:

$$\bar{H}(u^{n+1}) \leq \bar{H}(u^n).$$

2 Allen-Cahn 方程的高阶精度格式

Allen-Cahn 方程(1)等价于如下无限维方程:

$$\frac{du}{dt} = N \frac{\delta H}{\delta u} \quad (7)$$

这里 $N = -1$, $\frac{\delta H}{\delta u} = -\xi^2 u_{xx} + u^3 - u$. 用拟谱方法数值离散方程(7)^[8,12-14]. 设 $x_i (i=1, 2, \dots, N_1), t_k (k=1, 2, \dots, N_2)$ 为区间 $[x_0, x_{N_1}] \times [t_0, t_{N_2}]$ 的正规网格点. 设 h 时间步长, s 为空间步长. 设区间 $\Omega = [a, b], L = b - a$. 将 Ω 区间 N 等分 (N 为偶数), 那么空间网格点可以表示为 $x_i = a + si, s = \frac{b-a}{N}, i=0, 1, 2, \dots, N-1$.

定义 $S_N = \left\{ g_i(x); -\frac{N}{2} \leq i \leq \frac{N}{2} - 1 \right\}$, $g_i(x)$ 是区间 Ω 上的 $N/2$ 阶三角多项式函数, 设函数 $g_i(x)$ 为:

$$g_i(x) = \frac{1}{N} \sum_{l=-N/2}^{N/2} \frac{1}{c_l} e^{jl\mu(x-x_i)},$$

j 是虚数, $c_l = (|l| \neq N/2), c_{-N/2} = c_{N/2} = 2, \mu = \frac{2\pi}{L}$. 在区间 Ω 上, 设 I_N 为区间 Ω 的插值逼近算子, $u(x, t) \in C^0(\Omega)$, 有:

$$I_N u(x, t) |_{x=x_i} = u(x_i, t), i=0, \dots, N-1.$$

$I_N u(x, t)$ 可表示为:

$$I_N u(x, t) = \sum_{i=0}^{N-1} u_i g_i(x) = \frac{1}{Nc_l} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{l=-N/2}^{N/2} u_i e^{jl\mu(x-x_i)} = \sum_{l=-N/2}^{N/2} e^{jl\mu x} \frac{1}{Nc_l} \sum_{i=0}^{N-1} u_i e^{-jl\mu x_i}. \quad (8)$$

取

$$\tilde{u}_i = \frac{1}{Nc_1} \sum_{i=0}^{N-1} u_i e^{-jl\mu x_i},$$

(8)式等价于:

$$I_N u(x, t) = \sum_{l=-N/2}^{N/2} \tilde{u}_i e^{jl\mu x}.$$

利用基函数正交性原理:

$$I_N u(x, t) = \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{u}_i e^{jl\mu x} \begin{cases} 1, p = nN, \\ 0, p \neq nN. \end{cases}$$

$\frac{d}{dx} I_N u(x, t)$ 与 $\frac{d^2}{dx^2} I_N u(x, t)$ 在 x_i 可表示为:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_N u(x, t) |_{x=x_i} &= \sum_{k=0}^{N-1} u_k \frac{dg_k(k)}{dx} |_{x=x_i} = (\mathbf{D}_1 u)_i, \\ \frac{d^2}{dx^2} I_N u(x, t) |_{x=x_i} &= \sum_{k=0}^{N-1} u_k \frac{d^2 g_k(k)}{dx^2} |_{x=x_i} = (\mathbf{D}_2 u)_i, \end{aligned}$$

矩阵 \mathbf{D}_1 与 \mathbf{D}_2 的元素是:

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}_1)_{k,l} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \mu (-1)^{k+1} \cot\left(\mu \frac{x_k - x_l}{2}\right), k \neq l \\ 0, k = l \end{cases} \\ (\mathbf{D}_2)_{k,l} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \mu^2 (-1)^{k+1+1} \frac{1}{\sin^2\left(\mu \frac{x_k - x_l}{2}\right)}, k \neq l \\ -\mu^2 \frac{N^2 + 2}{12}, k = l \end{cases} \end{aligned}$$

可知 $I_N u(x, t)$ 是 $u(x, t)$ 的插值逼近. 这样可得到方程(1)的拟谱离散格式:

$$\{ [I_N u(x, t)]_i - \epsilon^2 [I_N u(x, t)]_{xx} + [u(x, t)]^3 - I_N u(x, t) \} |_{x=x_i} = 0 \quad (9)$$

利用矩阵 \mathbf{D}_1 和 \mathbf{D}_2 , 方程(9)等价于:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \epsilon^2 (\mathbf{D}_2 u)_i + u_i - F_i, \quad (10)$$

设 $u = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1})^T, F = (u_0^3, u_1^3, \dots, u_{N-1}^3)^T, i=1, 2, \dots, N$. 方程(7)可以写成:

$$\frac{du}{dt} = f(u) = N \nabla_u H(u).$$

其中 $N = -I_n$, 方程(7)的离散能量函数为:

$$H = -\frac{\epsilon^2}{2} u' \mathbf{D}_2 u + \sum_{i=0}^{N-1} \left(-\frac{u_i^2}{2} + \frac{u_i^4}{4} \right).$$

在时间方向用高阶平均向量场方法离散,(10)式可转化为

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h} = \left(\delta_i^j - \frac{h^2}{12} f_k^i \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) f_j^k \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) \right) \int_0^1 f^l ((1 - \xi) u^n + \xi u^{n+1}) d\xi \tag{11}$$

(11)式等价于:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{h} = \left\{ I - \frac{h^2}{12} \left[\frac{\partial f}{\partial u} \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) \right]^2 \right\} \int_0^1 f((1 - \xi) u^n + \xi u^{n+1}) d\xi \tag{12}$$

这里:

$$\frac{\partial f}{\partial u} \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) = \epsilon^2 \mathbf{D}_2 + \mathbf{E} - \mathbf{A},$$

$$A_{ik} = \begin{cases} 3 \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} + u_{i-1}^n}{2} \right)^2, & i=k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

$i, k=1, 2, \dots, N$. \mathbf{E} 为单位矩阵。(12)式化简为:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{h} = \left\{ I - \frac{h^2}{12} \left[\frac{\partial f}{\partial u} \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) \right]^2 \right\} \left(\epsilon^2 \mathbf{D}_2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \frac{u^{n+1} + u^n}{2} - \mathbf{X} \right), \tag{13}$$

$$\mathbf{X} = (\bar{x}_0, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_{N-1})^T,$$

$$\bar{x}_i = (u_i^n)^3 + \frac{3}{2} (u_i^n)^2 (u_i^{n+1} - u_i^n) + u_i^n (u_i^{n+1} - u_i^n)^2 + \frac{1}{4} (u_i^{n+1} - u_i^n)^3.$$

(13)式能保持 Allen-Cahn 方程的能量散逸性。下面利用(13)式求解 Allen-Cahn 方程。

3 数值模拟

3.1 数值模拟 1

设 Allen-Cahn 方程(1)的初值条件: $u(x, 0) = \cos \pi x$, 设 $u(-1, t) = u(1, t)$, 取 $dx = 0.01, h = 0.001, \epsilon^2 = 0.001$ 。

图 1. a 是 Allen-Cahn 方程(1)在 $t \in [0, 10]$ 的数值解。从图 1. a 可知,数值解光滑,且能很好的向前传播,(13)式很好地长时间模拟了 Allen-Cahn 方程(1)数值解的演化。图 1. b 表示 Allen-Cahn 方程(1)数值解的能量的演化,能量在不断下降,与 Allen-Cahn 方程的能量散逸特性一致,可见(13)式能很好地长时间保持 Allen-Cahn 方程(1)的这一特性。

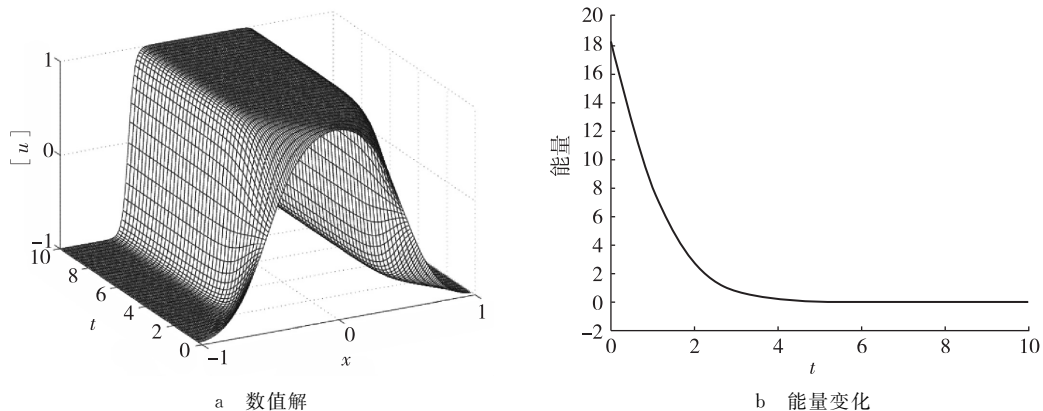


图 1 Allen-Cahn 方程在 $t \in [0, 10]$ 的数值解及其能量变化图

3.2 数值模拟 2

设 Allen-Cahn 方程(1)的初值条件为

$$u(x, 0) = 0.53x + 0.47 \sin(-1.5\pi x), u_x(-1, t), u_x(1, t) = 0.$$

设 $dx = 0.01, h = 0.01, \epsilon = 0.1$ 。

图 2. a 是 Allen-Cahn 方程(1)在 $t \in [0, 70]$ 的数值解。数值解的图像非常光滑。(13)式能很好地长时间模拟了 Allen-Cahn 方程数值解的演化。图 2. b 表示非线性 Allen-Cahn 方程(1)数值解的能量演化图,能量也在不

断地下降,能量在中间变化显著,与 Allen-Cahn 方程的能量散逸特性一致,(13)式同样能很好地长时间保持 Allen-Cahn 方程这一特性。

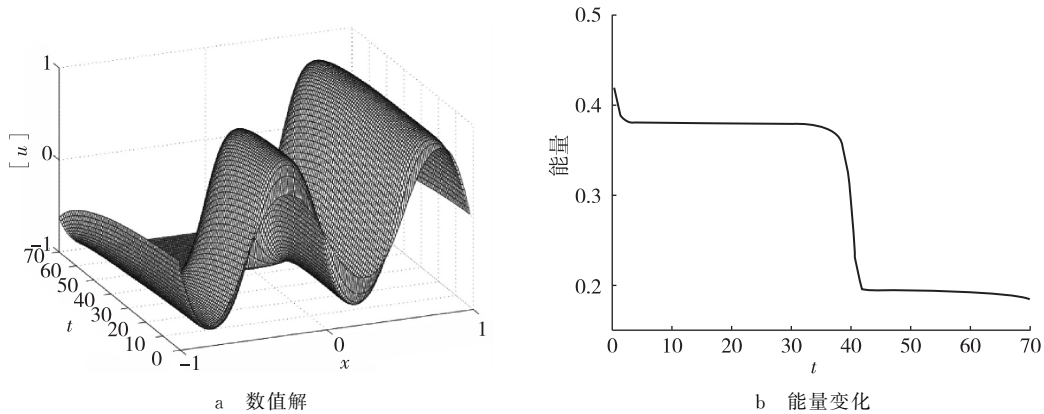


图 2 Allen-Cahn 方程在 $t \in [0, 70]$ 的数值解及其能量变化图

3.3 数值模拟 3

设 Allen-Cahn 方程的初值条件: $u(x, 0) = 0.8 + \sin x, u(-2\pi, t) = u(2\pi, t)$ 。设 $dx = \pi/50, h = 0.01$, 常量 $\epsilon = 0.12$ 。

图 3. a 是方程(1)在 $t \in [0, 400]$ 的数值解。同样可以看到 Allen-Cahn 方程的数值解非常光滑,(13)式同样很好地长时间模拟了 Allen-Cahn 方程数值解的演化。图 3. b 表示 Allen-Cahn 方程(1)的数值解的能量演化,能量不断下降,并在开始下降显著,与 Allen-Cahn 方程的能量散逸特性一致。(13)式同样很好地长时间保持了 Allen-Cahn 方程的这一特性。

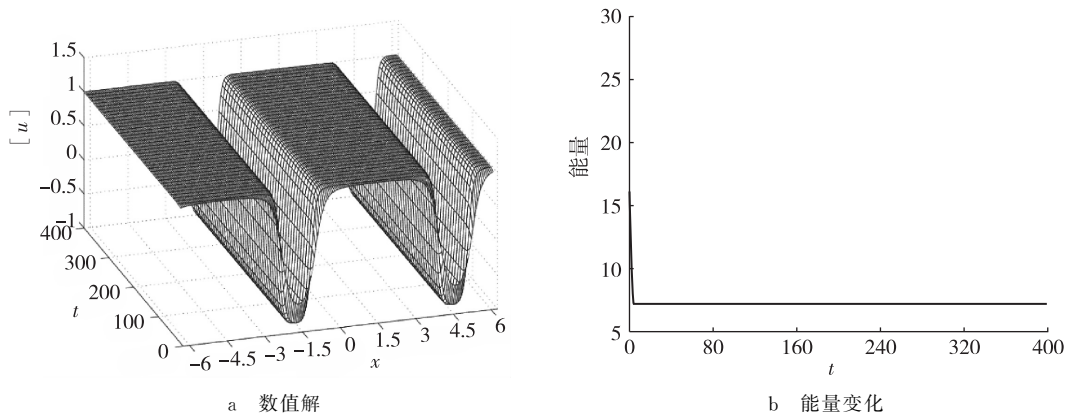


图 3 Allen-Cahn 方程在 $t \in [0, 400]$ 的数值解及其能量变化图

4 结论

本文把具有能量散逸特性的 Allen-Cahn 方程转化成无限维的能量散逸性系统,在空间方向用拟谱方法离散,在时间方向用高阶离散梯度法离散得到了 Allen-Cahn 方程的一个新的高阶精度格式。利用新的高阶精度格式数值模拟 Allen-Cahn 方程。新的高阶精度格式具有在较大时间步长下长时间的计算能力,并长时间地保持了 Allen-Cahn 方程内在的能量散逸特性。可见,这种新的高阶计算方法在计算能量散逸性偏微分方程具有显著的优势。

参考文献:

[1] Furihata D. A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation[J]. Numer Math, 2001, 87: 675-699.

[2] Jaemin S, Seong-Kwan P, Junseok K. A hybrid FEM for solving the Allen-Cahn equation[J]. Applied Mathematics and Computation, 2014, 244: 606-612.

- [3] 冯康, 秦孟兆. 哈密顿系统的辛几何法[M]. 杭州: 浙江科学技术出版社, 2003.
Feng K, Qin M Z. Symplectic geometric algorithm for Hamiltonian systems [M]. Hangzhou: Zhejiang Science Technology Press, 2003.
- [4] Bridges T J, Reich S. Numerical methods for Hamiltonian PDEs[J]. Phys A: Math Gen, 2006, 39: 5287-5320.
- [5] Cai J X, Wang Y S. Local structure preserving algorithms for the "good" Boussinesq equation[J]. Journal of Comput Phys, 2013, 239: 72-89.
- [6] Celledoni E, Grimm V, McLachlan R I, et al. Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs using the average vector field method[J]. Journal of Comput Phys, 2012, 231 (20): 6770-6789.
- [7] Quispel G R W, McLaren D I. A new class of energy-preserving numerical integration method[J]. Phys A: Math Theor, 2008, 41: 045206.
- [8] McLachlan R I, Quispel N R W, Robidoux N. Geometric integration using discrete gradients[J]. Phil Trans Roy Soc A, 1999, 357: 32-56.
- [9] Celledoni E, McLachlan R I, Owren B, et al. Energy-preserving integrators and the structure of B-series[M]. NTNU Report No. 5, 2009.
- [10] McLachlan R I, Quispel G R W. Discrete gradient methods have an energy conservation law[J]. Discrete and Continuous Dynamical Systems, 2014, 34(3): 1099-1104.
- [11] 赵鑫, 孙建强, 何雪珺. Cahn-Hilliard 方程的高阶保能量散逸性方法[J]. 计算数学, 37(2): 137-147.
Zhao X, Sun J Q, He X J. High order preserving energy-dissipating method of the Cahn-Hilliard equation, 2015, 37 (2): 137-147.
- [12] Chen J B, Qin M Z. Multi-symplectic Fourier pseudospectral method for the nonlinear schrödinger equation[J]. Electronic Transactions on Numerical Anal, 2001, 12: 193-204.
- [13] Briggs W L, Henson V E. The DFT: an owner's manual for the discrete Fourier transform[M]. Philadelphia: SIAM, 1995.
- [14] 鞠端亮, 马和平, 张中强. MKDV 方程的多辛 Fourier 拟谱方法[J]. 应用数学与计算数学学报 2009, 23(1): 81-86.
Ju R L, Ma H P, Zhang Z Q. Multi-symplectic Fourier pseudo method of MKDV equation[J]. Journal of Applied Math and Comput Math, 2009, 23(1): 81-86.

High Order Average Vector Field Method of the Allen-Cahn Equation

HE Xuejun, ZHAO Xin, SUN Jianqiang

(College of Information Science and Technology, Hainan University, Haikou 570228, China)

Abstract: Allen-Cahn equation is a class of important equation describing fluid dynamics and reaction diffusion problems in material science. The energy of the Allen-Cahn equation has the dissipation property. That is to say, the energy of the Allen-Cahn equation will gradually diminish with time. In numerical simulations, it is significant to design a numerical format which can accurately preserve the energy dissipation property of the Allen-Cahn equation in simulating evolution of the equation. The current numerical formats which can preserve the energy dissipation property of the Allen-Cahn equation are low-order. Recently, the high-order average vector field method which can preserve the energy dissipative property of the differential equations is constructed, which is a kind of efficient discrete gradient method. However, few people apply the high-order discrete gradient method to solve the energy-dissipative partial differential equation at home and abroad. In this paper, a high order scheme of the Allen-Cahn equation is proposed by the high-order discrete gradient method and Fourier pseudospectral method. The new high-order scheme can well simulate the evolution behaviors of numerical solutions of the Allen-Cahn equation with long time. Moreover, the new scheme can also well preserve the intrinsic property of the Allen-Cahn equation with long time.

Key words: high order discrete gradient method; energy-dissipation property; Allen-Cahn equation

(责任编辑 许 甲)