

相场方程的高效数值算法

汤涛^{1,2*}, 乔中华³

1. 北京师范大学 - 香港浸会大学联合国际学院, 珠海 519087;
 2. 南方科技大学杰曼诺夫数学中心, 深圳 518055;
 3. 香港理工大学应用数学系, 香港
- E-mail: ttang@uic.edu.hk, tangt@sustech.edu.cn, zqiao@polyu.edu.hk

收稿日期: 2020-02-18; 接受日期: 2020-05-08; 网络出版日期: 2020-05-20; * 通信作者
国家重点研发计划“高性能计算”重点专项(批准号: 2016YFB0200604)、国家自然科学基金重点项目(批准号: 11731006)、科学挑战项目基金(批准号: TZ2018001)、香港研究资助局优配研究基金(批准号: 15325816, 15300417 和 15302919)和中国科学院数学与系统科学研究院 - 香港理工大学应用数学联合实验室研究基金(批准号: 1-ZVA8)资助项目

摘要 本文回顾求解相场方程数值方法的一些最新进展. 数值求解相场方程的主要难点在于非线性项和高阶微分项对时间步长有严格限制, 而相场方程的数值模拟通常需要很长的计算时间才能达到稳定状态. 众所周知, 相场模型满足一种称为能量稳定的非线性稳定关系, 通常表示为自由能泛函随时间递减. 如何设计满足离散能量稳定的数值格式, 使得可以进行大时间步长同时又准确地模拟, 近来越来越受到重视. 本文将针对一些常见的相场方程阐述几类广泛使用的高效数值格式, 以及基于能量随时间的变化率而设计的一种时间自适应算法, 使得数值解的准确性和算法稳定性得到保证的前提下, 计算效率大大提高.

关键词 相场方程 能量稳定性 半隐格式 最大模上界原理 时间步长自适应

MSC (2010) 主题分类 35Q99, 47A56, 65M12, 65M70

1 引言

相场模型(有时也被称为“扩散界面问题”)的主要特征是可以用来描述两相界面的扩散性质. 在这个模型中, 两相的界面是由两相间变化迅速但是连续的相场变量所描述的. 相场模型的主要思想可以追溯到 van der Waals^[1] 的研究. 从一般的热力学为基础来考虑, 他认为用连续的扩散界面来描述稳定态下的两相关系比用锐界面 (sharp interface) 来描述更自然. 相场模型的第二个特征是可以刻画非平衡状态下的一些相变. 在已知的温度和压力等物理量下, 相场变量可以用来区分材料的不同相态. Ginzburg 和 Landau 利用这个发现扩展了热力学状态方程, 他们把这些量和他们的梯度量称为序参数 (参见文献 [2]). Hillert^[3] 把时间和空间在离散的情形下作为序参数, 建立了第一个亚稳极限分解

英文引用格式: Tang T, Qiao Z H. Efficient numerical methods for phase-field equations (in Chinese). Sci Sin Math, 2020, 50: 775-794, doi: 10.1360/SSM-2020-0042

(spinodal decomposition) 模型. 之后, Cahn 和 Hilliard^[4,5] 在连续的意义下, 利用摩尔密度作为序参数建立了相应的相场模型. 一些常见的相场模型有

(1) Allen-Cahn 方程

$$u_t = \varepsilon^2 \Delta u - f(u); \quad (1.1)$$

(2) Cahn-Hilliard 方程

$$u_t = -\varepsilon^2 \Delta^2 u + \Delta f(u); \quad (1.2)$$

(3) 分子束外延增长 (molecular beam epitaxy, MBE) 方程

$$u_t = -\varepsilon^2 \Delta^2 u + \nabla \cdot f(\nabla u), \quad (1.3)$$

其中 f 是给定的非线性函数, 满足 $f(u) = F'(u)$. 这几个方程的一个重要特征是它们可以被看成是以下能量泛函的梯度流形式:

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + F(u) \right) dx. \quad (1.4)$$

因此, 这些相场方程存在固有的能量稳定关系:

$$E(u(t)) \leq E(u(s)), \quad \forall t \geq s. \quad (1.5)$$

在能量泛函 (1.4) 中, $F(u) = \frac{1}{4}(u^2 - 1)^2$ 是一种常见的双阱势函数. 本文关于相场方程算法的讨论主要基于此种能量势函数. 针对其他势函数的算法和分析有时需要做出相应的调整.

相场方程的数值模拟在实际应用中有广泛的应用, 然而如何设计高效稳定的数值算法一直以来都是十分困难的, 主要体现在以下几方面. 第一, 构造出的数值算法需要准确捕捉相变的动态信息, 同时在长时间数值模拟中保证系统的稳定性. 第二, 相场模型满足一些特有的物理性质, 如质量守恒性质和能量递减性质 (1.5), 构造出的算法需要满足方程固有的物理性质. 第三, 由于相场问题中存在很强的非线性性, 如何构造出高效的高阶算法是一个难题. 针对相场方程的空间离散, 长久以来发展和应用了一系列成熟的数值方法. 例如, 有限差分方法^[6-9]、有限元方法^[10-12]、谱方法^[13-15] 和间断有限元方法^[16-18] 等针对相场问题都有大量的研究.

本文将会基于一些常见的相场方程, 回顾针对相场问题近来发展的一些高效稳定的数值算法, 并且基于能量随时间的变化率给出一种时间自适应算法, 使得数值解的准确性和算法稳定性得到保证的前提下, 计算效率大大提高.

2 基于能量分裂的数值格式

全显格式和全隐格式在早期对相场方程的数值模拟研究中占据主导地位. 全显格式虽然简单, 但是对时间步长的取值有非常严格的要求. 全隐格式通常需要较少的时间才能保证数值解的存在唯一性, 并且因为对非线性项的隐式处理, 计算的时候需要进行非线性迭代. 这些存在的问题, 使得全显格式和全隐格式在解决实际问题, 尤其是长时间演化问题时的效率很低. 针对相场方程, 为了能高效地进行长时间数值模拟, 半隐格式通常是个不错的选择, 即对方程中的一些项用隐式处理, 另一些项用显式处理, 而显隐各项的选取通常与能量泛函的形式有关. 本节介绍基于能量分裂的数值格式, 从传统凸分裂格式出发, 进一步引出稳定化半隐式格式和指数时间差分格式的讨论.

2.1 凸分裂格式

凸分裂 (convex splitting) 方法是构造无条件唯一可解且能量稳定数值格式的常用方法之一, 它最初由 Eyre^[19] 在研究 Cahn-Hilliard 方程的无条件能量稳定格式时提出. 之后此方法得到推广并成功应用到其他多种相场模型上^[6, 20-22]. 凸分裂方法的基本思想是, 将能量泛函分解成凸和凹两部分的和, 对方程中相应于凸部的项作隐式处理, 凹部作显式处理, 由此得到的半隐格式称为凸分裂格式.

对于 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程, 相应的能量泛函 (1.4) 有如下分解式:

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + F_+(u) \right) dx - \int_{\Omega} F_-(u) dx =: E_+(u) - E_-(u), \quad (2.1)$$

其中 $F_+(u) = \frac{1}{4}(u^4 + 1)$ 和 $F_-(u) = \frac{1}{2}u^2$ 满足 $F(u) = F_+(u) - F_-(u)$. Allen-Cahn 方程的一阶凸分裂格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + (f_+(u^{n+1}) - f_-(u^n)) = 0, \quad (2.2)$$

Cahn-Hilliard 方程的一阶凸分裂格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \Delta w^{n+1}, \quad (2.3a)$$

$$w^{n+1} = -\varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + (f_+(u^{n+1}) - f_-(u^n)), \quad (2.3b)$$

其中 $f_+(u) = F'_+(u) = u^3$, $f_-(u) = F'_-(u) = u$, u^n 是 $u(t_n)$ 的数值逼近. 可以证明, 凸分裂格式 (2.2) 和 (2.3) 都是无条件唯一可解且能量稳定的, 即对任意 $\Delta t > 0$, 格式 (2.2) 和 (2.3) 的解 u^{n+1} 存在唯一且满足 $E(u^{n+1}) \leq E(u^n)$ (参见文献 [23]).

Allen-Cahn 方程的一阶凸分裂格式 (2.2) 实质是对全隐格式在时间方向上作了一个伸缩变换后所得, 而这个变换系数恒小于 1, 所以, 凸分裂格式的解相比全隐格式的解始终存在一个时间延迟. 具体推导不再详述, 读者可以参见文献 [24] 中的论述. 但是针对 Cahn-Hilliard 方程的一阶凸分裂格式, 不存在此种等价论述.

基于同样的能量凸分裂 (2.1), 可对 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程构造二阶凸分裂格式, 对凸部的隐式处理通常使用 Crank-Nicolson 或其改进形式, 而对凹部的显式处理则采用 Adams-Bashforth 公式. 于是, Allen-Cahn 方程的二阶凸分裂格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta(u^{n+1} + u^n) + \left(\tilde{f}_+(u^{n+1}, u^n) - \left(\frac{3}{2}u^n - \frac{1}{2}u^{n-1} \right) \right) = 0; \quad (2.4)$$

Cahn-Hilliard 方程的二阶凸分裂格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \Delta w^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.5a)$$

$$w^{n+\frac{1}{2}} = -\frac{\varepsilon^2}{2} \Delta(u^{n+1} + u^n) + \left(\tilde{f}_+(u^{n+1}, u^n) - \left(\frac{3}{2}u^n - \frac{1}{2}u^{n-1} \right) \right), \quad (2.5b)$$

其中 $\tilde{f}_+(u^{n+1}, u^n) = \frac{F_+(u^{n+1}) - F_+(u^n)}{u^{n+1} - u^n}$. 由于 (2.4) 和 (2.5) 都是 3 层格式, 要计算 u^{n+1} , 需要知道 u^{n-1} 和 u^n 的值. 因此, 给定初值 u_0 , 可先由一阶格式 (2.2) 和 (2.3) 计算出 u_1 , 再使用 (2.4) 和 (2.5) 进行后面的计算. 文献 [25] 用此方法首先构造了针对分子束外延增长方程的二阶凸分裂格式, 并证明了无条件唯一可解性和能量稳定性. 运用文献 [25] 中的证明技巧, 可以得到二阶凸分裂格式 (2.4) 和 (2.5)

都是无条件唯一可解且能量稳定的. 但是由于理论分析上的困难, 无法得到 $E(u^{n+1}) \leq E(u^n)$, 而这里能量稳定性的意义是 $\tilde{E}_{n+1} \leq \tilde{E}_n$, 其中

$$\tilde{E}_n = E(u^n) + \frac{1}{4} \|u^n - u^{n-1}\|^2. \quad (2.6)$$

也就是说, 这里的“能量”递减不是基于原始能量 $E(u)$, 而是带修正的能量 (2.6), 修正项是关于 Δt 的二阶小量项, 与格式本身的截断误差同阶.

凸分裂格式的优点是显而易见的. 对于给定的方程, 只要能对相应的能量泛函作一个凸分裂, 就可以很容易地构造凸分裂格式. 相比于全隐格式来说, 一阶凸分裂格式是无条件唯一可解且能量稳定的, 其证明过程很简单, 不依赖于方程的具体形式. 但是, 凸分裂格式在构造中会引入更多的截断误差, 且多数情形下仍然是非线性格式, 需要迭代求解. 虽然上面给出了二阶凸分裂格式的能量稳定性结论, 但这是基于 $f_-(u) = u$ 这种特定简单形式得到的. 一般来说, 高阶凸分裂格式的能量稳定性证明会比较困难.

2.2 稳定化半隐格式

Chen 和 Shen^[13] 在 1998 年对 Cahn-Hilliard 方程给出了基于 Fourier 谱方法的线性半隐格式, 即对方程中的线性项作隐式处理, 对非线性项作显式处理, 从而得到线性格式以避免非线性性导致的迭代求解. 但这个半隐格式的稳定性不是很好, 在使用时往往需要很小的时间步长. 为了解决这个问题, 人们提出了一些可以使用大时间步长的方法 (参见文献 [26–29]). 这些方法的基本思想是在原有的线性半隐格式中加入与格式本身截断误差同阶的一个稳定项来保证能量稳定性, 这样得到的格式统称为稳定化半隐 (stabilized semi-implicit, SSI) 格式.

2.2.1 一阶稳定化半隐格式

在线性半隐格式上添加截断误差阶为 $\mathcal{O}(\Delta t)$ 的稳定项可以得到一阶 SSI 格式. Allen-Cahn 方程的一阶 SSI 格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + f(u^n) + S(u^{n+1} - u^n) = 0, \quad (2.7)$$

其中 $S(u^{n+1} - u^n)$ 是稳定项, 引入了新的截断误差 $S\Delta t u_t(\xi_n)$, $\xi_n \in (u^n, u^{n+1})$, 常数 $S \geq 0$ 称为稳定因子. 将一阶 SSI 格式 (2.7) 改写, 可以得到

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + S - \varepsilon^2 \Delta\right) u^{n+1} = \left(\frac{1}{\Delta t} + S\right) u^n - f(u^n). \quad (2.8)$$

这是关于 u^{n+1} 的线性方程, 且系数算子是自伴正定的, 因此, 这个格式是无条件唯一可解的. Cahn-Hilliard 方程的一阶 SSI 格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \Delta w^{n+1}, \quad (2.9a)$$

$$w^{n+1} = -\varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + f(u^n) + S(u^{n+1} - u^n). \quad (2.9b)$$

这里的稳定项是 $S\Delta(u^{n+1} - u^n)$, 引入了截断误差 $S\Delta t \Delta u_t(\xi_n)$, $\xi_n \in (u^n, u^{n+1})$. 将 (2.9b) 代入 (2.9a), 整理可得

$$\left(\frac{1}{\Delta t} - S\Delta + \varepsilon^2 \Delta^2\right) u^{n+1} = \left(\frac{1}{\Delta t} - S\Delta\right) u^n + \Delta f(u^n). \quad (2.10)$$

这个线性方程的系数算子自伴正定, 因此, u^{n+1} 存在且唯一.

文献 [27] 证明了当 S 满足以下条件时,

$$S \geq \max_{x \in \Omega} \left\{ \frac{1}{2} |u^n(x)|^2 + \frac{1}{4} |u^{n+1}(x) + u^n(x)|^2 \right\} - \frac{1}{2}, \quad \forall n \geq 0, \quad (2.11)$$

(2.9) 是能量稳定的. 这里需要注意的是, (2.11) 中的 S 对数值解是非线性依赖的, 这隐含地要求了数值解的最大模的上界是存在的. 文献 [27] 的证明思想来源于文献 [29] 中对带斜率选择的 MBE 方程 SSI 格式的能量稳定性证明. 文献 [29] 还针对带斜率选择的 MBE 方程构造了高阶 SSI 格式, 并且证明了修正后的能量稳定性, 在此不再赘述.

如果采用能量凸分裂的观点来看 SSI 格式, 我们会发现, 一阶 SSI 格式 (2.7) 和 (2.9) 本质上也是一种凸分裂格式, 相应的能量泛函 $E(u)$ 的分裂形式为

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + Su^2 \right) dx - \int_{\Omega} (Su^2 - F(u)) dx =: \hat{E}_+(u) - \hat{E}_-(u), \quad (2.12)$$

这是能量泛函不同于 (2.1) 的另一种分裂形式. 根据凸分裂格式的基本原理, 如果 \hat{E}_+ 和 \hat{E}_- 都是凸泛函, 那么相应的凸分裂格式就是无条件能量稳定的. 这里 \hat{E}_+ 显然是凸的. 对 \hat{E}_- 的被积函数求二阶导数, 可以得到, 当 $S \geq \max_{u \in R} |f'(u)|$ 时, \hat{E}_- 是凸泛函, 从而相应的一阶凸分裂格式 (即 (2.7) 和 (2.9)) 无条件能量稳定. 注意到这里要求 S 满足的条件需要 f 的 Lipschitz 连续性假设 [28]:

$$\max_{u \in R} |f'(u)| \leq L_f < \infty, \quad (2.13)$$

这等价于假设数值解的最大模有上界.

事实上, Allen-Cahn 方程本身满足所谓的最大模上界原理 (maximum bound principle, MBP) [30], 即如果初值满足 $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$, 那么在任一时刻 t , 都有 $\|u(t)\|_{L^\infty} \leq 1$. 对 Allen-Cahn 方程采用一阶 SSI 格式 (2.7) 进行时间离散, 并对空间采用二阶中心差分方法离散, 可以证明, 当 $S \geq 2$ 时, 数值解满足离散 MBP, 即只要 $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$, 对任意 $\Delta t > 0$, 数值解总满足 $\|u^{n+1}\|_{L^\infty} \leq 1$ (参见文献 [31]). 数值格式保持 MBP 的性质是一种与能量稳定性不同的稳定性, 目前相关的研究工作也有很多, 我们将数值格式能否保持 MBP 性质的问题放在第 2.4 小节中详细讨论, 这里不再赘述.

对于具有能量泛函 (1.4) 的 Cahn-Hilliard 方程, 其本身不再满足像 Allen-Cahn 方程那样的 MBP 性质, 因此自然不能期待数值解保持这种最大模意义下的稳定性. 证明 (2.9) 能量稳定性通常的做法就是假设 f 是 Lipschitz 连续的 [28] 或者是假设数值解的最大模是有上界的 [27, 32]. 然而, 这样强的假设使得数值格式在理论上与实际应用中有了局限性, 去掉这些强假设条件来建立一套新的能量稳定性理论是十分必要的. 文献 [15] 基于二维 Cahn-Hilliard 方程的一阶 SSI 格式 (2.9) 对空间考虑谱 Galerkin 离散, 给出了稳定因子 S 的一种更精确的描述方法. 主要结果由以下定理给出:

定理 2.1 [15] 假设初值 $u_0 \in H^2(\Omega)$ 且均值为 0, 那么存在只与初始能量 $E(u_0)$ 有关的常数 $\beta_c > 0$, 当

$$S \geq \beta_c (\|u_0\|_{H^2}^2 + \varepsilon^{-2} |\log \varepsilon^2| + 1) \quad (2.14)$$

时, 格式 (2.9) 是无条件能量稳定的.

此处对稳定因子 S 给出的条件与数值解无关. 利用类似的方法, 文献 [33] 对 3 维情形做出了分析.

2.2.2 二阶稳定化半隐格式

类似于一阶 SSI 格式的构造思想, 在二阶线性半隐格式上添加截断误差阶为 $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ 的稳定项可以得到二阶 SSI 格式. 根据所采用的二阶逼近形式的不同, 通常有两种常用的二阶 SSI 格式, 一种基于时间积分的向后微分公式 (backward differentiation formula, BDF), 另一种基于 Crank-Nicolson 与 Adams-Bashforth (CN-AB) 逼近.

Allen-Cahn 方程的二阶 BDF 型 SSI 格式为

$$\frac{3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}}{2\Delta t} - \varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + (2f(u^n) - f(u^{n-1})) + S(u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}) = 0, \quad (2.15)$$

其中稳定项 $S(u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1})$ 引入截断误差 $S\Delta t^2 u_{tt}(\xi_n)$, $\xi_n \in (u^{n-1}, u^{n+1})$. Cahn-Hilliard 方程的二阶 BDF 型 SSI 格式为

$$\frac{3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}}{2\Delta t} = \Delta w^{n+1}, \quad (2.16a)$$

$$w^{n+1} = -\varepsilon^2 \Delta u^{n+1} + (2f(u^n) - f(u^{n-1})) + S(u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}), \quad (2.16b)$$

其中稳定项 $S\Delta(u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1})$ 引入截断误差 $S\Delta t^2 \Delta u_{tt}(\xi_n)$, $\xi_n \in (u^{n-1}, u^{n+1})$. 容易看到, 格式 (2.15) 和 (2.16) 都是唯一可解的线性格式. 文献 [28] 证明了 Allen-Cahn 方程的二阶 BDF 型 SSI 格式 (2.15) 是条件能量稳定的, 而对于 Cahn-Hilliard 方程的二阶 BDF 型 SSI 格式 (2.16) 的能量稳定性没有给出结论.

命题 2.1 [28] 假设 $L_f = \max_{u \in \mathbb{R}} |f'(u)| < \infty$. 当 $S \geq 0$ 和 $\Delta t \leq \frac{2\varepsilon^2}{3L_f}$ 时, Allen-Cahn 方程的二阶 BDF 型 SSI 格式 (2.15) 在如下意义下能量稳定: $\tilde{E}_{n+1} \leq \tilde{E}_n$, 其中

$$\tilde{E}_n = E(u^n) + \left(\frac{1}{4\Delta t} + \frac{S + L_f}{2\varepsilon^2} \right) \|u^n - u^{n-1}\|^2. \quad (2.17)$$

这个结果表明, 对于 Allen-Cahn 方程的二阶 BDF 型半隐格式, 添加稳定项并不能改善格式的稳定性, 稳定项在这个格式中失效了. 但是添加稳定项的方式不是唯一的, 对不同的格式选取不同形式的稳定项, 依然可以获得无条件能量稳定性.

文献 [26] 通过添加不同形式的稳定项, 研究了 Allen-Cahn 方程的 CN-AB 型 SSI 格式的能量稳定性. Allen-Cahn 方程的第一种 CN-AB 型 SSI 格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta(u^{n+1} + u^n) + \left(\frac{3}{2}f(u^n) - \frac{1}{2}f(u^{n-1}) \right) + S(u^{n+1} - 2u^n + u^{n-1}) = 0, \quad (2.18)$$

第二种 CN-AB 型 SSI 格式为

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta(u^{n+1} + u^n) + \left(\frac{3}{2}f(u^n) - \frac{1}{2}f(u^{n-1}) \right) + S\Delta t(u^{n+1} - u^n) = 0. \quad (2.19)$$

这两个格式稳定项的形式不同, 额外引入的截断误差都是 $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ 阶的, 分别为 $S\Delta t^2 \Delta u_{tt}(\xi_n)$ ($\xi_n \in (u^{n-1}, u^{n+1})$) 和 $S\Delta t^2 \Delta u_t(\xi_n)$ ($\xi_n \in (u^n, u^{n+1})$). 可以证明, 第一种格式 (2.18) 的稳定项失效, 无论稳定因子 S 如何取值, 只有 $\Delta t \leq \frac{\varepsilon^2}{L_f}$ 时, 才能保证能量稳定; 而对于第二种格式 (2.19), 当 $S \geq \frac{L_f^2}{4\varepsilon^2}$ 时可以保证无条件能量稳定性 (参见文献 [26]). 同样地, 这里假设了 $L_f = \max_{u \in \mathbb{R}} |f'(u)| < \infty$.

类似于前面提到的关于一阶格式的工作 [15], 文献 [34] 针对 Cahn-Hilliard 方程二阶稳定化半隐 BDF 格式给出了仅依赖于初值和方程扩散系数 ε^2 的能量稳定性结果, 其中对非线性项考虑了两种不

同的逼近方式 $f(2u^n - u^{n-1})$ 和 $2f(u^n) - f(u^{n-1})$, 添加了不同于 (2.16) 中的稳定项 $S\Delta t\Delta(u^{n+1} - u^n)$, 空间离散采用了谱 Galerkin 格式. 基于这个工作, 文献 [35] 对 Cahn-Hilliard 方程应用局部间断 Galerkin 方法, 构造了一个无条件能量稳定的二阶格式, 并且进行了详细的能量稳定性分析. Li 等 [36] 把此类二阶 BDF 格式运用到了无梯度选择的 MBE 方程, 得到了很好的结果. 文献 [37] 进一步设计了 3 阶的 BDF 格式.

稳定化半隐格式的一个优点是它便于构造, 只需要在线性半隐格式上添加一个人工稳定项即可. 前面提到, 稳定化半隐格式可以看作一类特殊的凸分裂格式, 即能量凸分裂中的凸部 \hat{E}_+ 是一个二次型, 由此得到的凸分裂格式是一个线性格式, 因此, 稳定化半隐格式求解方便且具有凸分裂格式的优点, 即无条件唯一可解且能量稳定. 此外, 稳定化半隐格式不仅是线性的, 还是常系数的, 在求解时可以利用一些诸如快速 Fourier 变换 (fast Fourier transform, FFT) 的快速算法高效求解. 然而, 与凸分裂格式类似, 稳定化半隐格式中的人工稳定项也引入了额外的截断误差, 且高阶格式的能量稳定性证明较困难. 理论上 $\max_{u \in \mathbb{R}} |f'(u)| < \infty$ 这个条件并不是在所有情形下都满足的, 对于没有 MBP 性质或不能证明 $\|u\|_{L^\infty} \leq C$ 的数值格式, 通常只能根据经验来进行一些特殊处理, 并没有严格的理论支撑.

2.3 指数时间差分格式

指数时间差分 (exponential time differencing, ETD) 格式是一种基于指数积分因子的时间积分逼近格式, 最早在 1998 年研究微分方程的时间离散方法时提出 [38]. 之后由 Cox 和 Matthews [39] 进一步发展推广, 包含多步法和 Runge-Kutta (RK) 法两种形式. 关于 ETD 格式的较完整的讨论与分析可参见综述文献 [40, 41], 这里只给出常用 ETD 格式的表达式, 并介绍在相场模型数值计算中的应用.

考虑半线性的偏微分方程

$$u_t = \mathcal{L}u + \mathcal{N}(u), \quad (2.20)$$

其中 \mathcal{L} 是线性算子, $\mathcal{N}(u)$ 是非线性项. 对方程 (2.20) 进行某种空间离散后, 可以得到常微分方程组

$$u_t + Lu = N(u), \quad (2.21)$$

其中 L 和 N 分别对应 $-\mathcal{L}$ 和 \mathcal{N} 的离散形式. 当 \mathcal{L} 是自伴负定算子时, 矩阵 L 是对称正定的. 利用指数积分因子 e^{-tL} 或常数变易公式, 可以得到 (2.21) 的等价积分形式

$$u(t) = e^{-tL}u(0) + \int_0^t e^{-(t-s)L}N(u(s))ds.$$

给定均匀时间步长 $\Delta t > 0$ 和时间离散点 $t_n = n\Delta t$, 则 (2.21) 的解在 $[t_n, t_{n+1}]$ 上满足

$$u(t_{n+1}) = e^{-\Delta t L}u(t_n) + \int_0^{\Delta t} e^{-(\Delta t-s)L}N(u(t_n+s))ds. \quad (2.22)$$

ETD 方法的基本思想是对 (2.22) 中积分项里的非线性部分 $N(u(t_n+s))$ 作插值逼近, 再精确计算所得到的积分. 由此看到, 在 ETD 这种时间离散方法中, 线性部分被完全精确地积出来, 线性算子或其离散矩阵的作用被完整保留, 这是前面介绍的几类方法都不具备的优点, 对于线性部分刚性很强的问题 (2.21), 可以大大减小离散造成的误差.

若对 $N(u(t_n+s))$ 采用常数逼近, 即 $N(u(t_n+s)) \approx N(u(t_n))$, 则得到一阶 ETD 格式

$$u^{n+1} = e^{-\Delta t L}u^n + \int_0^{\Delta t} e^{-(\Delta t-s)L}N(u^n)ds$$

$$= e^{-\Delta t L} u^n + \Delta t \phi_0(\Delta t L) N(u^n), \quad (2.23)$$

其中 $\phi_0(a) = \frac{1-e^{-a}}{a}$, $a \neq 0$, 即

$$\phi_0(\Delta t L) = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{-(\Delta t-s)L} ds = (\Delta t L)^{-1} (I - e^{-\Delta t L}).$$

若对 $N(u(t_n + s))$ 采用线性插值逼近, 则可得到二阶 ETD 格式. 一种做法是利用 $u(t_n)$ 和 $u(t_{n-1})$ 作线性外插, 相应得到二阶 ETD 多步格式

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= e^{-\Delta t L} u^n + \Delta t [(\phi_0(\Delta t L) + \phi_1(\Delta t L))N(u^n) - \phi_1(\Delta t L)N(u^{n-1})] \\ &= e^{-\Delta t L} u^n + \Delta t [\phi_0(\Delta t L)N(u^n) + \phi_1(\Delta t L)(N(u^n) - N(u^{n-1}))], \end{aligned} \quad (2.24)$$

其中 $\phi_1(a) = \frac{e^{-a}-1+a}{a^2}$, $a \neq 0$. 另一种做法是利用 $u(t_n)$ 和 $u(t_{n+1})$ 作线性内插, 相应得到二阶 ETD-RK 格式

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= e^{-\Delta t L} u^n + \Delta t [(\phi_0(\Delta t L) - \phi_1(\Delta t L))N(u^n) + \phi_1(\Delta t L)N(\tilde{u}_{n+1})] \\ &= e^{-\Delta t L} u^n + \Delta t [\phi_0(\Delta t L)N(u^n) + \phi_1(\Delta t L)(N(\tilde{u}_{n+1}) - N(u^n))], \end{aligned} \quad (2.25)$$

其中 \tilde{u}_{n+1} 是 $u(t_{n+1})$ 的逼近, 可由一阶 ETD 格式 (2.23) 给出. 注意到, 以上 3 个格式 (2.23)–(2.25) 都以显式形式给出, 因此, 格式的唯一可解性是显然的.

对于 Allen-Cahn 方程, 设 Δ_h 是 Δ 的某种离散逼近, 则其空间离散格式为

$$u_t = \varepsilon^2 \Delta_h u - f(u). \quad (2.26)$$

为了保证建立的 ETD 格式保持能量稳定性, 在对 (2.26) 作时间积分之前, 引入稳定因子 $S > 0$, 并定义

$$L = SI - \varepsilon^2 \Delta_h, \quad N(u) = Su - f(u).$$

由 (2.26) 可得常微分方程组 (2.21), 从而可建立相应的 ETD 格式^[42, 43]. 类似于文献 [44] 对非局部 Allen-Cahn 方程 ETD 格式的数值分析, 可以证明, 若 $L_f = \max_{u \in \mathbb{R}} |f'(u)| < \infty$, 当 $S \geq \frac{L_f}{2}$ 时, Allen-Cahn 方程的一阶 ETD 格式是无条件能量稳定的. 但无法得到二阶 ETD 格式能量递减的结果. 只能得到, 当时间网格和空间网格足够小时, 能量是有上界的. 高阶 ETD 格式与大量数值实验结果参见文献 [42, 43].

Cahn-Hilliard 方程的空间离散格式为

$$u_t = -\varepsilon^2 \Delta_h^2 u + \Delta_h f(u),$$

定义

$$L = -S\Delta_h + \varepsilon^2 \Delta_h^2, \quad N(u) = -S\Delta_h u + \Delta_h f(u),$$

得到常微分方程组 (2.21), 从而建立 ETD 格式^[45]. 类似于 Allen-Cahn 方程的情形, 可以证明, 若 $L_f = \max_{u \in \mathbb{R}} |f'(u)| < \infty$, 当 $S \geq \frac{L_f}{2}$ 时, Cahn-Hilliard 方程的一阶 ETD 格式是无条件能量稳定的 (参见文献 [46]). 高阶 ETD 格式与相应的数值结果参见文献 [45].

ETD 格式的计算效率通常依赖于格式中的 ϕ -函数 (即 $e^{-\Delta t L}$ 、 $\phi_0(\Delta t L)$ 和 $\phi_1(\Delta t L)$ 等) 与向量乘积的计算效率. 对于规则区域和具有特殊结构的矩阵 L , 如 Toeplitz 矩阵或循环矩阵, ϕ -函数与向

量的乘积可以通过 FFT 及其相关的快速算法来高效实现, 具体细节参见文献 [42, 44, 45] 中的讨论. 而对于一般的区域和矩阵 L , 计算 ϕ - 函数与向量乘积的常用算法有 Laplace 逆变换法、Taylor 级数法和 Krylov 子空间法等, 更多的算法以及对各个算法计算效果的评述可参见文献 [47, 48], 这里不再赘述.

ETD 格式是基于指数积分因子的时间离散格式, 容易构造, 只要将方程写成线性项与非线性项的和的形式, 就可以建立 ETD 格式. 针对相场方程, 在划分线性项和非线性项时, 需要引入稳定项来保证格式的能量稳定性, 引入稳定项的方法与 SSI 格式类似. ETD 格式相比于 SSI 格式的显著优点在于线性算子部分被精确积分出来. 可以证明, 在一阶 ETD 格式 (2.23) 中作近似 $e^{\Delta t L} \approx I + \Delta t L$, 则可得到一阶 SSI 格式, 这说明 SSI 格式是 ETD 格式的一种近似, 其中线性算子的指数性质被截断处理. 另外, ETD 格式的计算量与 SSI 格式相当. 而 ETD 格式的缺点与 SSI 格式类似, 引入稳定项同时引入额外的截断误差, 且高阶格式不易证明能量稳定性. 此外, $L_f < \infty$ 的条件是一个较强假设, 对于满足 MBP 的 Allen-Cahn 方程, 可以分析数值格式是否能够保持离散的 MBP, 从而保证 $L_f < \infty$, 详细讨论见下一小节. 而对于像 Cahn-Hilliard 方程这样的不满足 MBP 的方程, 相关分析比较复杂, 可以仿照文献 [15] 中的方法进行分析, 还可以通过证明格式的收敛性, 利用原方程本身的解的有界性, 来分析数值解当时空网格足够小时的一致有界性, 从而保证 $L_f < \infty$, 详细分析参见文献 [46].

2.4 保持最大模上界原理的数值格式

前面提到, Allen-Cahn 方程满足 MBP, 即如果初值条件满足 $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$, 那么在任一时刻 t , 都有 $\|u(t)\|_{L^\infty} \leq 1$. 对于 Allen-Cahn 方程及其他满足 MBP 的相场方程, 我们不仅希望数值格式保持能量稳定性, 还希望能够保持离散 MBP. 数值解满足离散 MBP, 可以避免非物理解的出现, 特别是对于方程中含有对数函数等特殊非线性项的情形, 离散 MBP 能保证计算过程中数值解不会超出对数函数的定义域, 从而保证计算可以持续进行下去. 此外, 从数值分析的角度来看, MBP 是一种比能量稳定性更强的 L^∞ 意义下的稳定性, 利用这种 L^∞ 稳定性, 可以更容易地分析能量稳定性和收敛性.

对于 Allen-Cahn 方程, 离散 MBP 可以表述为: 如果 $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$, 那么数值解总满足 $\|u^n\|_\infty \leq 1$. 前面提到, 若对空间采用二阶中心差分方法离散, 可以证明, 当 $S \geq 2$ 时, 对任意 $\Delta t > 0$, 一阶 SSI 格式 (2.7) 的数值解满足离散 MBP (参见文献 [31]). 证明的关键是 Δ 的中心差分离散 Δ_h 的对角占优性和 $f(u) - Su$ 在 $u \in [-1, 1]$ 上的有界性. 文献 [49] 将文献 [31] 的结果推广到更一般的情形, 其中非线性项 $f(u)$ 只需满足 $f(-\beta) = f(\beta) = 0$, $f(u) < 0, \forall u < -\beta$ 且 $f(u) > 0, \forall u > \beta$, 这包含了带对数项的重要特例, 即 $f(u) = F'(u)$, 其中 $F(u)$ 是 Flory-Huggins 自由能

$$F(u) = \frac{\theta}{2} [(1-u) \ln(1-u) + (1+u) \ln(1+u)] - \frac{\theta_c}{2} u^2,$$

其中 θ 和 θ_c 是正常数. 离散 MBP 在这个带对数项的 Allen-Cahn 方程的数值计算中保证数值解不会跑到区间 $(-1, 1)$ 之外.

文献 [50] 研究了分数阶 Allen-Cahn 方程的保持 MBP 的 Crank-Nicolson 格式. 根据该文献中结果, 可以很容易地类比得到经典 Allen-Cahn 方程的 Crank-Nicolson 格式, 并且可以证明, 若对空间采用二阶中心差分 Δ_h 离散, 当 $\Delta t \leq \frac{1}{2} \{\varepsilon^2, h^2\}$ 时, Crank-Nicolson 格式满足离散 MBP. 证明的关键同样是 Δ_h 的对角占优性及 $f(u) - Su$ 在 $u \in [-1, 1]$ 上的有界性. 这里的 Crank-Nicolson 格式是二阶非线性格式, 且较难通过添加人工稳定项的方式得到无条件保持 MBP 的结论.

文献 [44] 研究了非局部 Allen-Cahn 方程的 ETD 格式, 并证明了一阶 ETD 和二阶 ETD-RK 格式可以无条件地保持 MBP. 根据该文献中结果, 容易证明, 若对空间采用二阶有限差分方法离散, 当

$S \geq 2$ 时, 经典 Allen-Cahn 方程的一阶 ETD 格式 (2.23) 和二阶 ETD-RK 格式 (2.25) 无条件地保持 MBP. 一阶 ETD 格式的证明关键是 Δ_h 的对角占优性及 $N(u)$ 在 $u \in [-1, 1]$ 上的有界性, 而对于二阶 ETD-RK 格式, 还需注意到对非线性部分 $N(u)$ 的线性内插是两端点函数值 $N(u^n)$ 和 $N(u^{n+1})$ 的凸组合. 文献 [30] 指出, 由于 ETD 多步格式利用了非线性项的外插逼近, 因此, 不可能保持 MBP, 而对于高阶 ETD-RK 格式, 若对非线性项采用经典的基于等距节点的线性内插逼近, 也无法保持 MBP. 是否存在其他形式的高阶 ETD-RK 格式能够保持 MBP, 目前还是一个开放问题. 关于 ETD-RK 之外的算法, 文献 [30] 通过对积分因子 Runge-Kutta (integrating factor Runge-Kutta, IFRK) 方法的分析, 提出了一种设计高阶保持 MBP 数值算法的思路.

3 基于能量二次化的数值格式

对于一些复杂的相场模型, 如关于高分子聚合物的相变模型, 构造线性化稳定性格式是比较复杂的. 近来, Yang^[51] 和 Shen 等^[52] 给出了一类基于能量二次化的数值格式, 基本思想是通过引入适当的辅助变量, 将能量泛函写成一个二次型, 得到与原方程等价的新方程组, 对新方程组的各项进行适当的隐显处理, 建立线性的无条件能量稳定的数值格式. 本节针对较一般形式的梯度流方程, 简要介绍两种基于能量二次化的数值格式.

考虑能量泛函

$$E(u) = \frac{1}{2}(u, Lu) + E_1(u), \quad (3.1)$$

其中 L 是自伴非负定线性算子, E_1 是有下界的非线性泛函. 相应于能量 (3.1) 的梯度流方程可表示为

$$u_t = G\mu, \quad \mu = Lu + N(u), \quad (3.2)$$

其中 G 是自伴负定线性算子且与 L 乘积可交换, $N(u)$ 是 $E_1(u)$ 关于 u 的变分导数. 由 G 的负定性, 容易证明, $E(u(t))$ 关于 t 是单调不增的. 当 $G = -I$ 时, 方程 (3.2) 是关于能量 (3.1) 的 L^2 梯度流, 如 Allen-Cahn 方程. 当 $G = \Delta$ 时, 方程 (3.2) 是关于能量 (3.1) 的 H^{-1} 梯度流, 如 Cahn-Hilliard 方程.

3.1 不变能量二次化格式

假设 (3.1) 的非线性部分 E_1 形如 $E_1(u) = \int_{\Omega} F(u) dx$, 其中 F 有下界, 即存在常数 $C_0 \geq 0$ 使得 $F(u) > -C_0$. 不失一般性, 设 $C_0 = 0$. 引入辅助变量 $q(x, t) = \sqrt{F(u(x, t))}$, 则梯度流方程 (3.2) 可以等价地表示为

$$\begin{aligned} u_t &= G\mu, \\ \mu &= Lu + \frac{q}{\sqrt{F(u)}}N(u), \\ q_t &= \frac{N(u)}{2\sqrt{F(u)}}u_t. \end{aligned} \quad (3.3)$$

相应地, 定义与 $E(u)$ 等价的能量泛函

$$\tilde{E}(u, q) = \frac{1}{2}(u, Lu) + \|q\|^2, \quad (3.4)$$

从而, $\tilde{E}(u, q)$ 关于 t 是单调不增的. 注意到, 等价能量泛函 $\tilde{E}(u, q)$ 是关于 u 和 q 的二次型. 从等价方程组 (3.3) 出发, 可以构造一系列关于 $\tilde{E}(u, q)$ 能量稳定的线性格式, 这些格式通常称为不变能量二次化 (invariant energy quadratization, IEQ) 格式.

一阶 IEQ 格式可表示为

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} &= G\mu^{n+1}, \\ \mu^{n+1} &= Lu^{n+1} + \frac{q^{n+1}}{\sqrt{F(u^n)}}N(u^n), \\ \frac{q^{n+1} - q^n}{\Delta t} &= \frac{N(u^n)}{2\sqrt{F(u^n)}} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}. \end{aligned} \tag{3.5}$$

在方程组 (3.5) 中消去 q^{n+1} 和 μ^{n+1} , 整理可得

$$\left(\frac{1}{\Delta t}G^{-1} - L - \frac{N^2(u^n)}{2F(u^n)}I \right) u^{n+1} = g^n, \tag{3.6}$$

其中右端项 g^n 依赖于 u^n 和 q^n . 这表明一阶 IEQ 格式是线性格式, 由于算子 $\frac{1}{\Delta t}G^{-1} - L - \frac{N^2(u^n)}{2F(u^n)}I$ 是自伴负定的, 因此, 格式无条件唯一可解. 可以证明, 一阶 IEQ 格式 (3.5) 关于 $\tilde{E}(u, q)$ 是无条件能量稳定的, 即对任意的 $\Delta t > 0$, 都有 $E_{n+1} \leq E_n$, 其中 $E_n = \tilde{E}(u^n, q^n)$ (参见文献 [53]). 注意到, 在连续情形 (3.3) 中, $q = \sqrt{F(u)}$; 但在离散格式 (3.5) 中, 一般 $q^n \neq \sqrt{F(u^n)}$, 于是 $E_n \neq E(u^n)$, 因此, 这里的能量稳定性指的是修正能量 E_n 单调不增, 而原始能量 $E(u^n)$ 未必不增. 若对算子 G 和 L 采用适当的空间离散化, 则得到全离散格式. 当 $G = -I$ 时, 全离散方程组 (3.6) 的系数矩阵是对称负定的, 可用共轭梯度法或相关算法进行求解. 当 G 等于 Δ 或其他微分算子时, 在 (3.6) 两端同时作用算子 G , 所得全离散方程组的系数矩阵未必是对称的, 此时可用广义极小残量法 (generalized minimal residual method, GMRES) 或其他 Krylov 子空间方法进行求解.

与 SSI 格式类似, 二阶 IEQ 格式分为 CN-AB 和 BDF 两种类型. 二阶 CN-AB 型 IEQ 格式为

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} &= G\mu^{n+\frac{1}{2}}, \\ \mu^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}L(u^{n+1} + u^n) + \frac{q^{n+1} + q^n}{2}\bar{b}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{q^{n+1} - q^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\bar{b}^{n+\frac{1}{2}} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}, \end{aligned} \tag{3.7}$$

其中 $\bar{b}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}b^n - \frac{1}{2}b^{n-1}$, 而 $b^n = \frac{N(u^n)}{\sqrt{F(u^n)}}$. 与一阶 IEQ 格式类似, 二阶格式 (3.7) 是无条件唯一可解的线性格式, 且关于 $E_n = \tilde{E}(u^n, q^n)$ 是无条件能量稳定的. 二阶 BDF 型 IEQ 格式为

$$\begin{aligned} \frac{3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}}{2\Delta t} &= G\mu^{n+1}, \\ \mu^{n+1} &= Lu^{n+1} + q^{n+1}\bar{b}^{n+1}, \\ \frac{3q^{n+1} - 4q^n + q^{n-1}}{2\Delta t} &= \frac{1}{2}\bar{b}^{n+1} \frac{3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}}{2\Delta t}, \end{aligned} \tag{3.8}$$

其中 $\bar{b}^{n+1} = 2b^n - b^{n-1}$. 同样地, 二阶 IEQ 格式 (3.8) 是无条件唯一可解的线性格式, 且关于以下修正能量 E_n 是无条件能量稳定的:

$$E_n = \frac{1}{4}((u^n, Lu^n) + (2u^n - u^{n-1}, L(2u^n - u^{n-1}))) + \frac{1}{2}(\|q^n\|^2 + \|2q^n - q^{n-1}\|^2).$$

与一阶情形相同, 求解全离散的二阶 IEQ 格式 (3.7) 和 (3.8) 的常用算法是共轭梯度法等 Krylov 子空间方法.

从以上讨论中可以看出, 构造 IEQ 格式时并不需要对非线性项进行分解, 而是直接将其写成某个新变量的平方, 再对关于新变量的等价方程组进行隐显逼近处理即可, 因此, IEQ 格式的构造是非常方便的, 尤其是对于较复杂的模型方程. IEQ 格式的另一个优点在于, 它是无条件唯一可解和能量稳定的线性格式, 且能量稳定性的证明很简单. 此外, 利用 IEQ 格式可以容易地构造高阶能量稳定格式 (如文献 [54]), 这是上一节介绍的所有方法都不具有的优点. 目前 IEQ 格式已经成功应用于很多相场模型 (参见文献 [51, 55–58]). 然而, IEQ 格式的能量稳定是指对修正后的能量定义下的能量不增. 如前所述, 对原始系统能量在 IEQ 离散下, 并不能保证不增. 另外, IEQ 格式虽然是线性的, 但 u^{n+1} 前面的算子中通常包含 u^n 等变量, 这导致相应的全离散格式无法使用诸如 FFT 这样的快速算法进行求解. 对于一些特殊问题, 非线性势函数 $F(u)$ 可能没有下界, 使得 IEQ 格式在使用上会出现问题. 针对后面这两个不足之处, 文献 [52, 59] 提出了第 3.2 小节中的改进算法. 在收敛性分析方面, 目前仅有关于 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程 IEQ 格式的误差估计结果 (参见文献 [53]), 对其他一般相场模型的 IEQ 格式, 其收敛性分析还是比较困难的.

3.2 标量辅助变量格式

本节开头假设了能量泛函中的非线性部分 E_1 有下界, 即存在常数 $C_0 \geq 0$ 使得 $E_1(u) > -C_0$. 不失一般性, 假设 $C_0 = 0$. 标量辅助变量格式不需要 $F(u)$ 有下界, 因此, 适用范围比 IEQ 格式更大. 引入辅助变量 $r(t) = \sqrt{E_1(u(t))}$, 则梯度流方程 (3.2) 可以等价表示为

$$\begin{aligned} u_t &= G\mu, \\ \mu &= Lu + \frac{r}{\sqrt{E_1(u)}}N(u), \\ r_t &= \frac{1}{2\sqrt{E_1(u)}} \int_{\Omega} N(u)u_t dx. \end{aligned} \tag{3.9}$$

相应地, 定义与 (3.1) 等价的能量泛函

$$\bar{E}(u, r) = \frac{1}{2}(u, Lu) + r^2.$$

$\bar{E}(u, r)$ 是关于 u 和 r 的二次型, 且关于 t 单调不增. 从 (3.9) 出发可以构造一系列关于 $\bar{E}(u, r)$ 能量稳定的数值格式. 不同于 IEQ 格式中引入的辅助函数 $q(x, t)$, 这里引入的辅助变量 $r(t)$ 不依赖于空间变量, 在得到的全离散格式中是一个标量, 因此, 这样得到的格式常称为标量辅助变量 (scalar auxiliary variable, SAV) 格式. 文献 [59] 综述了 SAV 格式的基本理论分析与应用, 下面仅就一阶格式给出简单介绍.

一阶 SAV 格式可表示为

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} &= G\mu^{n+1}, \\ \mu^{n+1} &= Lu^{n+1} + \frac{r^{n+1}}{\sqrt{E_1(u^n)}}N(u^n), \\ \frac{r^{n+1} - r^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2\sqrt{E_1(u^n)}} \int_{\Omega} N(u^n) \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} dx. \end{aligned} \tag{3.10}$$

可以证明, 格式 (3.10) 是无条件唯一可解的线性格式, 且关于修正能量 $E_n = \bar{E}(u^n, r^n)$ 是无条件能量稳定的. 对算子 G 和 L 采用适当的空间离散化, 则得到全离散格式, 求解全离散格式需要一定的技巧. 文献 [59] 给出的算法中, 主要计算量来自于求解两个形如 $(I - \Delta t GL)\theta = b$ 的线性方程组. 由于这个方程组是常系数的, 因此, 可以使用 FFT 快速求解. 与 IEQ 格式存在的问题类似, 在连续情形 (3.9) 中, $r = \sqrt{E_1(u)}$; 在离散格式 (3.10) 中, 一般 $r^n \neq \sqrt{E_1(u^n)}$, 因此, 这里的能量稳定性也是关于修正能量 E_n 而非原始能量 $E(u^n)$. 类似地, 可以构造基于 CN-AB 和 BDF 型的无条件能量稳定的二阶 SAV 格式.

SAV 格式作为对 IEQ 格式的改进, 一方面, 不需要非线性势函数 $F(u)$ 有下界, 扩大了格式的适用范围; 另一方面, 引入不依赖于空间变量的辅助变量, 使得最终得到的全离散格式只涉及常系数线性方程组, 从而为编写程序带来方便, 且可以使用诸如 FFT 的快速算法进行求解. 同样地, 高阶 SAV 格式也很容易构造, 参见文献 [60, 61]. 与 IEQ 格式类似, SAV 格式的不足之处在于数值解只能保证修正能量单调不减, 而不能得到关于原始能量的稳定性. 另外, 当能量泛函的非线性部分 $E_1(u)$ 不能保证有下界时, SAV 格式同样会失效.

4 其他常用方法

前两节介绍了常见的几种保持能量稳定的数值格式, 并讨论了一些特殊格式保持 MBP 的性质. 除此之外, 还有一些数值方法也可以用于相场模型的高效求解, 这些方法往往很难从理论上证明数值格式的能量稳定性及其他性质. 这里介绍两类用得较多的高效数值方法.

4.1 谱延迟校正方法

如前所述, 一阶凸分裂格式可以很好地保持能量稳定性, 但通常精度不高. 这里介绍一种谱延迟校正 (spectral deferred correction, SDC) 方法, 将其应用到凸分裂格式上, 可以获得较高精度. 这里仅对 Allen-Cahn 方程的情形进行讨论, Cahn-Hilliard 方程的情形是类似的. 为了形式简单, 将格式 (2.2) 写成

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t(\delta_u E_+(u^{n+1}) - \delta_u E_-(u^n)), \quad (4.1)$$

其中 $\delta_u E_+(u) = -\varepsilon^2 \Delta u + f_+(u)$, $\delta_u E_-(u) = f_-(u)$.

SDC 方法是一个单步多阶段方法, 在区间 $[t_n, t_{n+1}]$ 上的 SDC 计算过程如下. 将区间 $[-1, 1]$ 上的 $p+1$ 个 Legendre-Gauss-Radau IIa 点^[62] 记为 $-1 = r_0 < r_1 < \dots < r_{p-1} < r_p = 1$, 并令

$$t_{n,i} = \frac{t_{n+1} - t_n}{2} r_i + \frac{t_{n+1} + t_n}{2}, \quad i = 0, 1, \dots, p,$$

从而, 得到区间 $[t_n, t_{n+1}]$ 上的谱点 $t_n = t_{n,0} < t_{n,1} < \dots < t_{n,p-1} < t_{n,p} = t_{n+1}$, 这些点将区间 $[t_n, t_{n+1}]$ 分成 p 个子区间, 记 $\Delta t_m = t_{n,m+1} - t_{n,m}$, 并记 $u_{n,m}^k$ 是 $u(t_{n,m})$ 的 k 阶逼近.

首先, 令 $u_{n,0}^1 = u^n$, 并按以下格式一阶逼近 $\{u_{n,m}^1\}_{m=1}^p$:

$$u_{n,m+1}^1 = u_{n,m}^1 - \Delta t_m(\delta_u E_+(u_{n,m+1}^1) - \delta_u E_-(u_{n,m}^1)). \quad (4.2)$$

之后, 对 $1 \leq k \leq K$, 令 $u_{n,0}^{k+1} = u^n$, 并按以下格式 $k+1$ 阶逼近 $\{u_{n,m}^{k+1}\}_{m=1}^p$:

$$u_{n,m+1}^{k+1} = u_{n,m}^{k+1} - \Delta t_m[(\delta_u E_+(u_{n,m+1}^{k+1}) - \delta_u E_-(u_{n,m}^{k+1})) - (\delta_u E_+(u_{n,m+1}^k) - \delta_u E_-(u_{n,m}^k))]$$

$$-I_m^{m+1}(\delta_u E_+(u^k) - \delta_u E_-(u^k)), \tag{4.3}$$

其中最后一项是子区间 $[t_{n,m}, t_{n,m+1}]$ 中 $p+1$ 个点 $\{(t_{n,m}, \delta_u E_+(u_{n,m}^k) - \delta_u E_-(u_{n,m}^k))\}_{m=0}^p$ 上的 p 次插值多项式在 $[t_{n,m}, t_{n,m+1}]$ 上的积分, 它是 $\int_{t_{n,m}}^{t_{n,m+1}} (\delta_u E_+(u(\tau)) - \delta_u E_-(u(\tau))) d\tau$ 的数值逼近. 最后, 令 $u^{n+1} = u_{n,p}^{K+1}$ 得到 $u(t_{n+1})$ 的 $K+1$ 阶逼近解.

SDC 格式 (4.2)、(4.3) 和凸分裂格式 (4.1) 一样都是非线性格式, 需要迭代求解, 但可以获得 (任意) 高阶的精度. 为了避免非线性迭代, 可以考虑基于凸分裂的线性格式, 如 SSI 格式 [63]. 更多的关于 SDC 方法的细节可以参见文献 [16, 64–66].

4.2 算子分裂方法

文献 [67] 基于算子分裂方法给出了 Cahn-Hilliard 方程和带斜率选择的 MBE 方程的二阶显式数值格式, 下面以 2 维带斜率选择的 MBE 方程为例来介绍这个格式.

算子分裂方法的主要思想是将原方程分成两个或多个子问题, 根据每个子问题的性质利用不同的数值方法高效求解, 再利用算子分裂格式将子问题结合起来得到原问题的解. 对于带斜率选择的 MBE 方程, 将它分成非线性部分

$$u_t = \nabla \cdot (|\nabla u|^2 \nabla u) \tag{4.4}$$

和线性部分

$$u_t = -\Delta u - \varepsilon^2 \Delta^2 u \tag{4.5}$$

两个子问题, 并分别用 \mathcal{S}_N 和 \mathcal{S}_L 表示这两个子问题的精确解算子. 引入时间步长 Δt , 根据 Strang 分裂方法 [68], 原方程的精确解 $u(x, y, t)$ 满足

$$u(x, y, t + \Delta t) = \mathcal{S}_L\left(\frac{\Delta t}{2}\right)\mathcal{S}_N(\Delta t)\mathcal{S}_L\left(\frac{\Delta t}{2}\right)u(x, y, t) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \tag{4.6}$$

为了实现算子分裂算法, 需要考虑两个子问题的数值方法, 即算子 \mathcal{S}_L 和 \mathcal{S}_N 的数值逼近. 对于非线性子问题 (4.4), 对空间采用差分方法进行离散, 再对所得常微分方程组采用 RK 方法高效求解. 对于线性子问题 (4.5), 可对空间采用拟谱方法 [62] 离散, 并关于时间精确求解.

具体来说, 设空间区域为 $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$, 且 (x_i, y_j) 是均匀网格点, $x_{i+1} - x_i = \Delta x$, $y_{j+1} - y_j = \Delta y$. 对于非线性子问题 (4.4) 中的一阶导数, 采用 4 阶精度的中心差商逼近, 即

$$\frac{-\psi_{i+2} + 8\psi_{i+1} - 8\psi_{i-1} + \psi_{i-2}}{12\Delta x} = \psi_x(x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^4).$$

对于一维情形, 即 $u_t = (u_x^3)_x$, 空间导数采用上述 4 阶差商进行离散, 可得一个 9 点差分空间离散格式. 对于二维情形 (4.4), 关于 x 和 y 的每个偏导数都采用 4 阶差商进行离散, 得到一个 33 点差分空间离散格式. 由于空间离散格式是关于 t 的常微分方程组, 可以利用常微分方程组的各类数值方法进行时间离散求解, 如大稳定区域的显式 3 阶 RK 方法 [69] 或保持强稳定性的显式 RK 方法 [70]. 对于线性子问题 (4.5), 直接进行离散 Fourier 变换可得 $\hat{u}'_{kl}(t) = (\lambda_{kl} - \varepsilon^2 \lambda_{kl}^2) \hat{u}_{kl}(t)$, 其中 $\lambda_{kl} = (\frac{2\pi k}{L_x})^2 + (\frac{2\pi l}{L_y})^2$. 于是, $\hat{u}_{kl}(t + \Delta t) = e^{(\lambda_{kl} - \varepsilon^2 \lambda_{kl}^2) \Delta t} \hat{u}_{kl}(t)$. 再进行离散 Fourier 逆变换, 即可由 t 时刻的空间离散解得到 $t + \Delta t$ 时刻的空间离散解. 文献 [67] 中的数值实验表明, 当时间步长 $\Delta t = \varepsilon^2/100$ 时, 上述算子分裂方法是高效可行的.

文献 [71] 对带斜率选择的 MBE 方程的上述算子分裂格式进行了改进, 并对改进后的算法给出了严格的收敛性分析. 对于非线性子问题 (4.4), 文献 [71] 将 4 阶精度的中心差分与偏心差分结合使用, 得到的空间离散格式是一个 25 点差分格式, 比上述方法使用了较少节点. 对线性子问题的处理与上述相同. 数值实验表明, 当时间步长 $\Delta t = \varepsilon^2/10$ 时, 算法可行, 即改进后的算子分裂方法可以使用更大的时间步长, 从而更高效地进行数值模拟.

算子分裂方法还被成功用在了晶体相场模型上 (参见文献 [72]), 以及其他反应扩散或对流扩散等方程中 (参见文献 [73, 74]). 此外, 现有的算子分裂算法常常与一些自适应时间步长方法结合使用来加速数值计算 (参见文献 [67, 75, 76]).

5 应用

以上以 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程为例介绍了求解相场模型的几类常用的高效数值方法, 并给出了相应的一些理论结果, 包括数值格式的唯一可解性和能量稳定性, 以及保持最大模上界原理的性质. 这些方法同样可以类似地应用于其他相场模型上.

描述薄膜外延生长的 MBE 方程通常包括两种形式. 一种是相应于能量泛函

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\Delta u|^2 + \frac{1}{4} (1 - |\nabla u|^2)^2 \right) dx$$

的带斜率选择的 MBE 方程 (1.3), 其中 $f(\mathbf{y}) = |\mathbf{y}|^2 \mathbf{y}$. 另一种是相应于能量泛函

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\Delta u|^2 - \frac{1}{2} \ln(1 + |\nabla u|^2) \right) dx \quad (5.1)$$

的不带斜率选择的 MBE 方程 (1.3), 其中 $f(\mathbf{y}) = -\frac{\mathbf{y}}{1+|\mathbf{y}|^2}$. 对于这两个 MBE 方程的偏微分方程理论, 文献 [77] 分析了解的存在性和正则性, 文献 [78] 分析了解的梯度的有界性. 在数值方法方面, 文献 [79] 和 [25] 分别给出了两种 MBE 方程的一阶和二阶非线性凸分裂格式, 文献 [20] 利用能量 (5.1) 中的对数函数的特殊性, 给出了不带斜率选择 MBE 方程的一阶线性凸分裂格式, 即一阶 SSI 格式, 其中的稳定因子为 $S = 1$. 文献 [80] 改进了文献 [20] 中的能量分裂形式, 证明了当且仅当 $S \geq \frac{1}{8}$ 时, 相应的能量分裂就是凸分裂, 并以此构造了一阶和二阶 ETD 格式, 给出了能量稳定性与收敛性的理论分析; 文献 [81] 进一步给出了 3 阶 ETD 格式及其能量稳定性分析. 此外, Crank-Nicolson 格式及其线性化格式, 以及 IEQ 和 SAV 等格式都在 MBE 方程上得到应用, 参见文献 [58, 76, 82-84] 及其中的参考文献.

Swift-Hohenberg 方程和晶体相场 (phase field crystal, PFC) 方程分别是关于能量泛函

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\Delta u|^2 - |\nabla u|^2 + \frac{1}{4} u^4 + \frac{1-\varepsilon}{2} u^2 \right) dx$$

的 L^2 梯度流和 H^{-1} 梯度流. 文献 [7, 9] 给出了这两个方程的一阶凸分裂格式, 并分析了格式的能量稳定性和数值解的一致有界性. 文献 [55] 和 [59] 分别考虑了 PFC 方程的 IEQ 格式和 SAV 格式, 并分析了相应数值格式的能量稳定性. 文献 [72] 给出了 PFC 方程的一阶和二阶的算子分裂格式. 除了标准形式外, PFC 方程还有一些相关的变形, 如修正 PFC 方程和方形 PFC 方程, 上述数值方法在这些变形 PFC 方程上也有相应的应用, 参见文献 [8, 85-87] 等.

除以上几类经典模型之外, 近些年来, 人们又建立了一些新的较复杂的相场模型. Peng-Robinson 状态方程是石油工业中用于刻画石油管道中多种混合物相变的数学模型 [88], 凸分裂方法 [89]、IEQ 方

法^[90]和 SAV 方法^[91]都成功应用在这个模型上, 所得数值模拟结果与物理实验结果吻合度较高. 对于多组分的 Peng-Robinson 状态方程, 文献^[92]利用凸分裂方法构造了能量稳定格式, 在数值模拟多组分多相流问题中取得了很好的结果, 而 IEQ 和 SAV 方法也成功应用于多组分 Peng-Robinson 状态方程^[91,93]. 为了更准确地刻画系统内部的大范围相互作用, 文献^[94,95]引入了非局部扩散算子, 将经典相场方程中的 Laplace 算子替换成非局部扩散算子, 可得一系列非局部相场方程. 在非局部 Cahn-Hilliard 方程的数值计算中, 非线性凸分裂格式^[96,97]、SSI 格式^[14]和 IEQ 格式^[98]都给出很好的计算结果. 非局部 Allen-Cahn 方程满足类似于经典 Allen-Cahn 方程的最大模上界原理, 文献^[44]给出了保持最大模上界原理的一阶和二阶 ETD 格式, 并证明了能量稳定性和收敛性.

为了减少相场模型大时间数值计算中的时间开销, 通常可以采用自适应方法来加速计算过程. 对于能量稳定的数值格式, 文献^[76]提出了一种基于能量导数的时间自适应方法, 即时间步长 Δt 根据以下公式来确定:

$$\Delta t = \max \left\{ \Delta t_{\min}, \frac{\Delta t_{\max}}{\sqrt{1 + \alpha |E'(t)|^2}} \right\},$$

其中 $\alpha > 0$ 是常数, Δt_{\min} 和 Δt_{\max} 是 Δt 的下界和上界. 从公式中看出, 当能量变换较快, 即能量导数较大时, Δt 较小以便准确抓住相变过程, 而当能量变换缓慢时, 则使用大步长来加快数值计算. 这个自适应步长公式在很多模型上都有很好的应用, 参见文献^[99-102].

6 结语

相场模型在材料科学、复杂流体和图像处理等领域有着广泛的应用, 相场方程的高效数值模拟近年来越来越受到重视. 本文以常见的几类相场方程为例, 回顾了求解相场方程数值方法的一些最新进展, 详细介绍了几种构造能量稳定性格式的数值算法, 分析了一些主要的稳定性结果, 并且给出了一种基于能量随时间的变化率的时间自适应算法, 在保证计算精度和算法稳定性的前提下, 大大地提高了计算效率. 现有算法在实际问题计算中已经有了很广泛的应用, 对各种复杂系统, 需要适当调整本文介绍的高效算法. 限于篇幅, 文中没有详细探讨, 有兴趣的读者可以阅读文后的参考文献. 相场方程的收敛性分析是一个十分困难的课题, 本文并没有展开讨论. 在求解相场方程数值方法的稳定性和收敛性分析中还存在很多开放的课题, 还需要深入地进一步研究.

参考文献

- 1 van der Waals J D. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. *J Stat Phys*, 1979, 20: 200-244
- 2 Landau L D, Ter Haar D. *Collected Papers of L.D. Landau*. Oxford: Pergamon, 1965
- 3 Hillert M. A solid-solution model for inhomogeneous systems. *Acta Metall*, 1961, 9: 525-535
- 4 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *J Chem Phys*, 1958, 28: 258-267
- 5 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system. III. Nucleation in a two-component incompressible fluid. *J Chem Phys*, 1959, 31: 688-699
- 6 Furihata D. A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation. *Numer Math*, 2001, 87: 675-699
- 7 Hu Z, Wise S M, Wang C, et al. Stable and efficient finite-difference nonlinear-multigrid schemes for the phase field crystal equation. *J Comput Phys*, 2009, 228: 5323-5339
- 8 Wang C, Wise S M. An energy stable and convergent finite-difference scheme for the modified phase field crystal equation. *SIAM J Numer Anal*, 2011, 49: 945-969

- 9 Wise S M, Wang C, Lowengrub J S. An energy-stable and convergent finite-difference scheme for the phase field crystal equation. *SIAM J Numer Anal*, 2009, 47: 2269–2288
- 10 Barrett J W, Nürnberg R, Styles V. Finite element approximation of a phase field model for void electromigration. *SIAM J Numer Anal*, 2004, 42: 738–772
- 11 Elliott C M, Larsson S. Error estimates with smooth and nonsmooth data for a finite element method for the Cahn-Hilliard equation. *Math Comp*, 1992, 58: 603–630
- 12 Feng X B, He Y N, Liu C. Analysis of finite element approximations of a phase field model for two-phase fluids. *Math Comp*, 2007, 76: 539–571
- 13 Chen L Q, Shen J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations. *Comput Phys Commun*, 1998, 108: 147–158
- 14 Du Q, Ju L, Li X, et al. Stabilized linear semi-implicit schemes for the nonlocal Cahn-Hilliard equation. *J Comput Phys*, 2018, 363: 39–54
- 15 Li D, Qiao Z, Tang T. Characterizing the stabilization size for semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations. *SIAM J Numer Anal*, 2016, 54: 1653–1681
- 16 Guo R, Xu Y. Local discontinuous Galerkin method and high order semi-implicit scheme for the phase field crystal equation. *SIAM J Sci Comput*, 2016, 38: A105–A127
- 17 Kay D, Styles V, Süli E. Discontinuous Galerkin finite element approximation of the Cahn-Hilliard equation with convection. *SIAM J Numer Anal*, 2009, 47: 2660–2685
- 18 Xia Y, Xu Y, Shu C W. Local discontinuous Galerkin methods for the Cahn-Hilliard type equations. *J Comput Phys*, 2007, 227: 472–491
- 19 Eyre D J. Unconditionally gradient stable time marching the Cahn-Hilliard equation. *MRS Proc*, 1998, 529: 39
- 20 Chen W, Conde S, Wang C, et al. A linear energy stable scheme for a thin film model without slope selection. *J Sci Comput*, 2012, 52: 546–562
- 21 Gomez H, Hughes T J. Provably unconditionally stable, second-order time-accurate, mixed variational methods for phase-field models. *J Comput Phys*, 2011, 230: 5310–5327
- 22 Guillén-González F, Tierra G. On linear schemes for a Cahn-Hilliard diffuse interface model. *J Comput Phys*, 2013, 234: 140–171
- 23 Du Q, Feng X B. The phase field method for geometric moving interfaces and their numerical approximations. *Handb Numer Anal*, 2020, 21: 425–508
- 24 Xu J, Li Y, Wu S, et al. On the stability and accuracy of partially and fully implicit schemes for phase field modeling. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2019, 345: 826–853
- 25 Shen J, Wang C, Wang X, et al. Second-order convex splitting schemes for gradient flows with Ehrlich-Schwoebel type energy: Application to thin film epitaxy. *SIAM J Numer Anal*, 2012, 50: 105–125
- 26 Feng X L, Tang T, Yang J. Stabilized Crank-Nicolson/Adams-Bashforth schemes for phase field models. *East Asian J Appl Math*, 2013, 3: 59–80
- 27 He Y, Liu Y, Tang T. On large time-stepping methods for the Cahn-Hilliard equation. *Appl Numer Math*, 2007, 57: 616–628
- 28 Shen J, Yang X. Numerical approximations of Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. *Discrete Contin Dyn Syst*, 2010, 28: 1669–1691
- 29 Xu C, Tang T. Stability analysis of large time-stepping methods for epitaxial growth models. *SIAM J Numer Anal*, 2006, 44: 1759–1779
- 30 Du Q, Ju L, Li X, et al. Maximum bound principles for a class of semilinear parabolic equations and exponential time differencing schemes. 2019, submitted
- 31 Tang T, Yang J. Implicit-explicit scheme for the Allen-Cahn equation preserves the maximum principle. *J Comput Math*, 2016, 34: 451–461
- 32 Bertozzi A L, Ju N, Lu H W. A biharmonic-modified forward time stepping method for fourth order nonlinear diffusion equations. *Discrete Contin Dyn Syst*, 2011, 29: 1367–1391
- 33 Li D, Qiao Z. On the stabilization size of semi-implicit Fourier-spectral methods for 3D Cahn-Hilliard equations. *Commun Math Sci*, 2017, 15: 1489–1506
- 34 Li D, Qiao Z. On second order semi-implicit Fourier spectral methods for 2D Cahn-Hilliard equations. *J Sci Comput*, 2017, 70: 301–341
- 35 Song H, Shu C W. Unconditional energy stability analysis of a second order implicit-explicit local discontinuous

- Galerkin method for the Cahn-Hilliard equation. *J Sci Comput*, 2017, 73: 1178–1203
- 36 Li W, Chen W, Wang C, et al. A second order energy stable linear scheme for a thin film model without slope selection. *J Sci Comput*, 2018, 76: 1905–1937
- 37 Hao Y, Huang Q, Wang C. A third order BDF energy stable linear scheme for the no-slope-selection thin film model. *Commun Comput Phys*, 2020, submitted
- 38 Beylkin G, Keiser J M, Vozovoi L. A new class of time discretization schemes for the solution of nonlinear PDEs. *J Comput Phys*, 1998, 147: 362–387
- 39 Cox S M, Matthews P C. Exponential time differencing for stiff systems. *J Comput Phys*, 2002, 176: 430–455
- 40 Hochbruck M, Ostermann A. Explicit exponential Runge-Kutta methods for semilinear parabolic problems. *SIAM J Numer Anal*, 2005, 43: 1069–1090
- 41 Hochbruck M, Ostermann A. Exponential integrators. *Acta Numer*, 2010, 19: 209–286
- 42 Ju L, Zhang J, Zhu L, et al. Fast explicit integration factor methods for semilinear parabolic equations. *J Sci Comput*, 2015, 62: 431–455
- 43 Zhu L, Ju L, Zhao W. Fast high-order compact exponential time differencing Runge-Kutta methods for second-order semilinear parabolic equations. *J Sci Comput*, 2016, 67: 1043–1065
- 44 Du Q, Ju L, Li X, et al. Maximum principle preserving exponential time differencing schemes for the nonlocal Allen-Cahn equation. *SIAM J Numer Anal*, 2019, 57: 875–898
- 45 Ju L, Zhang J, Du Q. Fast and accurate algorithms for simulating coarsening dynamics of Cahn-Hilliard equations. *Comput Mater Sci*, 2015, 108: 272–282
- 46 Li X, Ju L, Meng X. Convergence analysis of exponential time differencing schemes for the Cahn-Hilliard equation. *Commun Comput Phys*, 2019, 26: 1510–1529
- 47 Moler C, Van Loan C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. *SIAM Rev*, 1978, 20: 801–836
- 48 Moler C, Van Loan C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later. *SIAM Rev*, 2003, 45: 3–49
- 49 Shen J, Tang T, Yang J. On the maximum principle preserving schemes for the generalized Allen-Cahn equation. *Commun Math Sci*, 2016, 14: 1517–1534
- 50 Hou T, Tang T, Yang J. Numerical analysis of fully discretized Crank-Nicolson scheme for fractional-in-space Allen-Cahn equations. *J Sci Comput*, 2017, 72: 1214–1231
- 51 Yang X. Linear, first and second-order, unconditionally energy stable numerical schemes for the phase field model of homopolymer blends. *J Comput Phys*, 2016, 327: 294–316
- 52 Shen J, Xu J, Yang J. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows. *J Comput Phys*, 2018, 353: 407–416
- 53 Yang X, Zhang G. Convergence analysis for the invariant energy quadratization (IEQ) schemes for solving the Cahn-Hilliard and Allen-Cahn equations with general nonlinear potential. *J Sci Comput*, 2020, 82: 55
- 54 Gong Y, Zhao J. Energy-stable Runge-Kutta schemes for gradient flow models using the energy quadratization approach. *Appl Math Lett*, 2019, 94: 224–231
- 55 Yang X, Han D. Linearly first- and second-order, unconditionally energy stable schemes for the phase field crystal model. *J Comput Phys*, 2017, 330: 1116–1134
- 56 Yang X, Ju L. Efficient linear schemes with unconditional energy stability for the phase field elastic bending energy model. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2017, 315: 691–712
- 57 Yang X, Ju L. Linear and unconditionally energy stable schemes for the binary fluid-surfactant phase field model. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2017, 318: 1005–1029
- 58 Yang X, Zhao J, Wang Q. Numerical approximations for the molecular beam epitaxial growth model based on the invariant energy quadratization method. *J Comput Phys*, 2017, 333: 104–127
- 59 Shen J, Xu J, Yang J. A new class of efficient and robust energy stable schemes for gradient flows. *SIAM Rev*, 2019, 61: 474–506
- 60 Akrivis G, Li B, Li D. Energy-decaying extrapolated RK-SAV methods for the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. *SIAM J Sci Comput*, 2019, 41: A3703–A3727
- 61 Gong Y, Zhao J, Wang Q. Arbitrarily high-order unconditionally energy stable SAV schemes for gradient flow models. *Comput Phys Comm*, 2020, 249: 107033
- 62 Shen J, Tang T, Wang L L. *Spectral Methods: Algorithms, Analysis and Applications*, vol. 41. New York: Springer, 2011

- 63 Feng X L, Tang T, Yang J. Long time numerical simulations for phase-field problems using p -adaptive spectral deferred correction methods. *SIAM J Sci Comput*, 2015, 37: A271–A294
- 64 Dutt A, Greengard L, Rokhlin V. Spectral deferred correction methods for ordinary differential equations. *Bit Numer Math*, 2000, 40: 241–266
- 65 Minion M L. Semi-implicit spectral deferred correction methods for ordinary differential equations. *Commun Math Sci*, 2003, 1: 471–500
- 66 Tang T, Xie H, Yin X. High-order convergence of spectral deferred correction methods on general quadrature nodes. *J Sci Comput*, 2013, 56: 1–13
- 67 Cheng Y, Kurganov A, Qu Z, et al. Fast and stable explicit operator splitting methods for phase-field models. *J Comput Phys*, 2015, 303: 45–65
- 68 Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J Numer Anal*, 1968, 5: 506–517
- 69 Medovikov A A. High order explicit methods for parabolic equations. *Bit Numer Math*, 1998, 38: 372–390
- 70 Gottlieb S, Shu C W, Tadmor E. Strong stability-preserving high-order time discretization methods. *SIAM Rev*, 2001, 43: 89–112
- 71 Li X, Qiao Z, Zhang H. Convergence of a fast explicit operator splitting method for the epitaxial growth model with slope selection. *SIAM J Numer Anal*, 2017, 55: 265–285
- 72 Lee H G, Shin J, Lee J Y. First and second order operator splitting methods for the phase field crystal equation. *J Comput Phys*, 2015, 299: 82–91
- 73 Chertock A, Kurganov A, Petrova G. Fast explicit operator splitting method for convection-diffusion equations. *Internat J Numer Methods Fluids*, 2009, 59: 309–332
- 74 Kao C Y, Kurganov A, Qu Z, et al. A fast explicit operator splitting method for modified Buckley-Leverett equations. *J Sci Comput*, 2015, 64: 837–857
- 75 Luo F, Tang T, Xie H. Parameter-free time adaptivity based on energy evolution for the Cahn-Hilliard equation. *Commun Comput Phys*, 2016, 19: 1542–1563
- 76 Qiao Z, Zhang Z, Tang T. An adaptive time-stepping strategy for the molecular beam epitaxy models. *SIAM J Sci Comput*, 2011, 33: 1395–1414
- 77 Li B, Liu J G. Thin film epitaxy with or without slope selection. *European J Appl Math*, 2003, 14: 713–743
- 78 Li D, Qiao Z, Tang T. Gradient bounds for a thin film epitaxy equation. *J Differential Equations*, 2017, 262: 1720–1746
- 79 Wang C, Wang X, Wise S M. Unconditionally stable schemes for equations of thin film epitaxy. *Discrete Contin Dyn Syst*, 2010, 28: 405–423
- 80 Ju L, Li X, Qiao Z, et al. Energy stability and error estimates of exponential time differencing schemes for the epitaxial growth model without slope selection. *Math Comp*, 2018, 87: 1859–1885
- 81 Cheng K, Qiao Z, Wang C. A third order exponential time differencing numerical scheme for no-slope-selection epitaxial thin film model with energy stability. *J Sci Comput*, 2019, 81: 154–185
- 82 Cheng Q, Shen J, Yang X. Highly efficient and accurate numerical schemes for the epitaxial thin film growth models by using the SAV approach. *J Sci Comput*, 2019, 78: 1467–1487
- 83 Qiao Z, Sun Z, Zhang Z. The stability and convergence of two linearized finite difference schemes for the nonlinear epitaxial growth model. *Numer Methods Partial Differential Equations*, 2012, 28: 1893–1915
- 84 Qiao Z, Sun Z, Zhang Z. Stability and convergence of second-order schemes for the nonlinear epitaxial growth model without slope selection. *Math Comp*, 2015, 84: 653–674
- 85 Baskaran A, Hu Z, Lowengrub J S, et al. Energy stable and efficient finite-difference nonlinear multigrid schemes for the modified phase field crystal equation. *J Comput Phys*, 2013, 250: 270–292
- 86 Cheng K, Wang C, Wise S M. An energy stable BDF2 Fourier pseudo-spectral numerical scheme for the square phase field crystal equation. *Commun Comput Phys*, 2019, 26: 1335–1364
- 87 Lee H G, Shin J, Lee J Y. First- and second-order energy stable methods for the modified phase field crystal equation. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2017, 321: 1–17
- 88 Peng D Y, Robinson D B. A new two-constant equation of state. *Ind Eng Chem Fund*, 1976, 15: 59–64
- 89 Qiao Z, Sun S. Two-phase fluid simulation using a diffuse interface model with Peng-Robinson equation of state. *SIAM J Sci Comput*, 2014, 36: B708–B728
- 90 Li H, Ju L, Zhang C, et al. Unconditionally energy stable linear schemes for the diffuse interface model with Peng-Robinson equation of state. *J Sci Comput*, 2018, 75: 993–1015

- 91 Qiao Z, Sun S, Zhang T, et al. A new multi-component diffuse interface model with Peng-Robinson equation of state and its scalar auxiliary variable (SAV) approach. *Commun Comput Phys*, 2019, 26: 1597–1616
- 92 Fan X, Kou J, Qiao Z, et al. A componentwise convex splitting scheme for diffuse interface models with Van der Waals and Peng-Robinson equations of state. *SIAM J Sci Comput*, 2017, 39: B1–B28
- 93 Zhang C, Li H, Zhang X, et al. Linear and unconditionally energy stable schemes for the multi-component two-phase diffuse interface model with Peng-Robinson equation of state. *Commun Comput Phys*, 2019, 26: 1071–1097
- 94 Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R B, et al. Analysis and approximation of nonlocal diffusion problems with volume constraints. *SIAM Rev*, 2012, 54: 667–696
- 95 Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R B, et al. A nonlocal vector calculus, nonlocal volume-constrained problems, and nonlocal balance laws. *Math Models Methods Appl Sci*, 2013, 23: 493–540
- 96 Guan Z, Lowengrub J S, Wang C, et al. Second order convex splitting schemes for periodic nonlocal Cahn-Hilliard and Allen-Cahn equations. *J Comput Phys*, 2014, 277: 48–71
- 97 Guan Z, Wang C, Wise S M. A convergent convex splitting scheme for the periodic nonlocal Cahn-Hilliard equation. *Numer Math*, 2014, 128: 377–406
- 98 Yang X, Zhao J. Efficient linear schemes for the nonlocal Cahn-Hilliard equation of phase field models. *Comput Phys Commun*, 2019, 235: 234–245
- 99 Li X, Qiao Z, Zhang H. An unconditionally energy stable finite difference scheme for a stochastic Cahn-Hilliard equation. *Sci China Math*, 2016, 59: 1815–1834
- 100 Tang T. On effective numerical methods for phase-field models. *Proc Int Cong Math*, 2018, 8: 3653–3676
- 101 Zhang Z, Ma Y, Qiao Z. An adaptive time-stepping strategy for solving the phase field crystal model. *J Comput Phys*, 2013, 249: 204–215
- 102 Zhang Z, Qiao Z. An adaptive time-stepping strategy for the Cahn-Hilliard equation. *Commun Comput Phys*, 2012, 11: 1261–1278

Efficient numerical methods for phase-field equations

Tao Tang & Zhonghua Qiao

Abstract In this article, we overview recent developments of numerical methods for phase-field equations. The main difficulty for numerically solving phase-field equations is about a severe restriction on the time step due to nonlinearity and high order differential terms, while it usually requires a very long time simulation to reach the steady state. It is known that phase-field models satisfy a nonlinear stability relationship, called energy stability, which means that the free energy functional decays in time. It has attracted more and more attention to design numerical schemes inheriting the energy stability so that the numerical simulation may use large time steps and keep the accuracy. For some popularly studied phase-field equations, this article will present several widely used highly efficient numerical schemes and show an adaptive time-stepping strategy based on the changing rate in time of the energy functional, which could guarantee the accuracy and stability of the numerical solution and improves the computational efficiency significantly.

Keywords phase-field equation, energy stability, semi-implicit, maximum bound principle, adaptive time-stepping

MSC(2010) 35Q99, 47A56, 65M12, 65M70

doi: 10.1360/SSM-2020-0042