学校编码：10384　　分类号________ 密级______

学号：200423030　　UDC______

厦门大学

硕　士　学　位　论　文

Cahn-Hilliard方程的大时间步长方法的数值模拟

Numerical simulations of the Cahn-Hilliard equation by large time-stepping methods

曾　亮

指导教师姓名：许　传　炬　教授

专 业 名 称：计　算　数　学

论文提交日期：2007　年　5　月

论文答辩日期：2007　年　　月

学位授予日期：2007　年　　月

答辩委员会主席：__________

评　　阅　　人：__________

二〇〇七年六月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密 （ ），在 年解密后适用本授权书。

2、不保密（ ）

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名： 日期： 年 月 日

目 录

Contents

中文摘要

Cahn-Hilliard方程最初用来模拟二元合金在淬火到一种不稳定状态时所发生的相分离现象, 随着理论的发展，它在其它领域也得到广泛应用。例如Spinodal分解问题，Fickian扩散问题，二相流问题以及相排序动力学等问题均可用Cahn-Hilliard方程来建模。由于该方程具有很强的非线性性质，构造高效的数值方法具有一定的难度。本文旨在考察最近由多位作者引入的所谓大时间步长方法，进一步研究附加的稳定项（被称为“A-项”)对计算结果的影响。我们获得的主要结果如下：首先，针对Cahn-Hilliard方程的周期性问题，通过能量估计对其进行稳定性分析，证明了解的存在唯一性；其次，利用大时间步长离散方法，结合Fourier空间谱离散，考察了稳定项中常数A对数值解的影响。我们的数值试验发现，虽然A-项确实起到了增加时间步长的作用，但不恰当的使用A值将导致数值解的发散，即当计算时间充分长时，大时间步长方法可能得到与无稳定化方法完全不同的解。我们还发现，导致发散的A值随扩散系数的不同而不同。最后，为了从理论上解释上述现象，我们针对一阶格式详细推导了数值解的误差与A值和扩散系数的依赖关系，并显式提供了大时间步长方法收敛的一个充分条件。

关键词：Cahn-Hilliard方程; 大时间步长方法; 稳定性; 收敛性

英文摘要

The Cahn-Hilliard equation was originally introduced to describe phase separation of the molten binary alloy which is rapidly quenched to lower temperature, and then extensively applied to other fields such as Spinodal decomposition, Fickian diffusion, and two-phase flow. Both the fourth and the nonlinear terms make the Cahn-Hilliard equation stiff and difficult to solve numerically. In this paper, we study a so-called "large time-stepping method", recently proposed and investigated by several authors. Specially, we focus on the impact of the stabilization term (called "A-term") on the numerical solutions. The main results of this work are as follow: Firstly, by using a energy estimation method, we establish the well-posedness of the Cahn-Hilliard equation with periodic boundary conditions. This is a generalization of an existing result for the Neumann boundary conditions. Secondly, by combining the large time-stepping finite-difference in time and Fourier spectral method in space, a series of numerical experiments is carried out to investigate the influence of the A-term on the simulation results. Our numerical simulation show that the A-term, although stabilize the calculations, has profound impact on the long term behavior of the numerical solutions. Moreover, it is found that this influence depends on the diffusion coefficient. Finally, in order to make evident of the influence of the A-term, an error estimate for the first-order scheme is derived. A sufficient condition for convergence is provided.

Key words: Cahn-Hilliard equation; large time-stepping scheme; Stability; Convergence

第一节 引言

Cahn-Hilliard方程，简称CH方程，最早由Cahn和Hilliard[1,2]提出，最初用来模拟二元合金在淬火到一种不稳定状态时所发生的相分离现象。随着理论的发展，它在其它领域也得到广泛应用。例如Spinodal分解问题[3]，Fickian扩散问题[4]，二相流问题以及相排序动力学等问题均可用CH方程来建模。

在不同的问题中，CH方程的形式有所不同。设$\Omega=(0,L_1)\times(0,L_2),(L_1,L_2>0)$是$\boldsymbol{R}^2$中的一个矩形区域，$\Omega$中的任意点用字母$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2)$表示，时间变量用$t$表示，$T$是一个正的常数。本文要研究的CH方程的形式如下：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}=\Delta(-\kappa\Delta u+f(u)), & (\boldsymbol{x},t)\in\Omega\times(0,T], \\ u(\cdot,t)\text{是以}L\text{为周期的函数}, & \forall t\in(0,T], \\ u(\boldsymbol{x},0)=u_0(\boldsymbol{x}), & \boldsymbol{x}\in\Omega, \end{cases} \tag{1-1}$$

其中

$$f(u)=u(u^2-1), \tag{1-2}$$

u_0表示一个适当的初始值。

注意到在(1-2) 中所给出的f 是一个光滑函数的微分，该函数在$u=\pm1$ 处取得整体极小值0, 即

$$f(u)=F^{'}(u),\ \text{这里}\quad F(u)=\frac{1}{4}(u^2-1)^2. \tag{1-3}$$

方程(1-1)第一个等式是流量J的质量守恒方程，其中流量J定义为：

$$J=\nabla(\kappa\Delta u-f(u)).$$

CH方程具有如下重要性质：

(1) 能量非增，即：$\frac{d}{dt}E(t)\le 0$，其中：

$$E(t)=\int_{\Omega}[\frac{\kappa}{2}|\nabla u|^2+F(u)]d\boldsymbol{x} \tag{1-4}$$

称为广义Ginzberg-Landau自由能量泛函。在1893年, Vander Waals首次提出这个函数，准确地描述了二元混合物的自由能量。

(2) 质量守恒，即

$$\int_\Omega u(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x}=\int_\Omega u_0 d\boldsymbol{x}=M,\quad \forall\, t\in(0,T].$$

事实上，利用周期边条件，我们有

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_\Omega u(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x}&=\int_\Omega \frac{\partial u}{\partial t}d\boldsymbol{x}=\int_\Omega \Delta(-\kappa\Delta u+f(u))d\boldsymbol{x}\\&=\int_{\partial\Omega}\frac{\partial}{\partial n}(-\kappa\Delta u+f(u))d\boldsymbol{x}=0,\quad \forall\, t\in(0,T].\end{aligned}$$

方程(1-1)最初用来描述包含二种物质的混合物质(比如合金、玻璃、聚合物等)在淬火到一种不稳定状态时所发生的相分离。其中u是指混合物中两种物质之一的浓度。CH方程性质(1)和(2)的物理意义是：在周期性条件下，物质与容器壁之间不存在相互作用，质量保持不变。同时，由热力学原理可知，混合物的自由能量随着时间呈衰减趋势。一般而言，反应过程会不断发展，最终将达到一个稳定的状态，此时与之相联系的能量泛函极小。

CH方程具有很强的非线性性质，构造高效的数值方法具有一定的难度。该方程的数值方法已见许多文献[5–14]，从这些文献来看，建立保持Lyapunov泛函(一种能量非增泛函)及质量不变的离散格式是数值方法的关键。例如Elliott等[8,12]应用协调有限元方法和隐式时间离散格式进行数值计算，在其全离散格式中，由于不存在Lyapunov泛函，其数值解的点值有界性估计不能建立。Elliott等[10]利用方程的混合形式，给出了一个半离散格式，此格式保持方程所具有的能量非增及质量不变性质，并对有限元的质量集中法进行了分析。Du等[7]讨论了一维CH方程的Dirichlet问题，利用混合形式，建立了半离散和全离散格式，此格式保持能量非增性质。Furihata[15,16]建立了一个保持能量耗散性质和质量不变的差分格式。叶、程等[17,18]利用Fourier谱方法、Fourier配点法对一维CH方程的周期问题进行了研究，叶、程等[19]利用Legendre谱方法对一维CH方程的Neumann问题进行了研究。Feng等[20,21]应用混合有限元法研究高维CH方程。

本文目的在于考虑CH方程的时间高稳定空间高精度数值解法。Zhu等[22] 提出了一种稳定化的大时间步长半隐差分/Fourier谱方法来求解CH方程。其主要思想是：对时间离散采用半隐式格式，即对于方程(1-1) 中的四阶项采用隐式处理，非线性二阶项则采用显式处理，并增加一项稳定项用以增加格式的稳定性。随后，Xu等[23]将该思想推广到Molecular beam epitaxy(简称MBE)模型中，称稳定项为“A-项”，详细分析了该项对格式稳定性的影响。接着，Ai[24]和He等[25]将Xu等[23]的稳定性分析方法应用到CH方程中，确认了“A-项”对求解CH方程的稳定性的作用。

本文旨在进一步考查CH方程的大时间步长方法，研究增加的“A-项”对计算结果

的影响。本文所做的工作如下：

-针对CH方程的周期性问题，通过能量估计对其进行稳定性分析，证明了解的存在唯一性。这一结果推广了文[12]关于Neumann边界条件的一个结论。

- 考察了大时间步长离散/Fourier空间谱方法[22,26–28]的收敛性与A值的依赖关系，推导了一阶格式的误差估计。

- 数值试验显示，虽然从形式上看，添加的"A-项"与格式的整体阶数一致，但是，稳定化的大时间步长方法对解的长时间行为的影响是显著的。特别是，当扩散系数较小时，稳定化的解可能收敛到一个与真实解完全不同的定常解。我们认为这是一个重要的发现：这意味着，虽然"A-项"确实起到了增加时间步长的作用，但不恰当的使用A值将导致数值解的发散，即当计算时间充分长时，大时间步长方法得到的解可能不是真实解。我们给出了格式收敛的一个充分条件。

第 二 节　连续问题及稳定性性质

本节讨论方程(1-1)的稳定性和解的存在唯一性。

为引入问题(1-1)的变分形式，我们先定义一些函数空间。令$L^2(\Omega)$为Ω上的平方Lebesgue可积的函数空间，$L^2(\Omega)$上的内积定义为：

$$(u,v)=\int_\Omega uv\mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

相应的范数：

$$\|v\|=\sqrt{(v,v)}.$$

$H^s(\Omega)$为通常的Soblev空间，其上的范数、半范分别用$\|.\|_s$、$|\cdot|_s$表示。记$C^\infty_{per}(\Omega)$为Ω上以L为周期无穷次可微的实函数空间，$H^q_{per}(\Omega)$定义为$C^\infty_{per}(\Omega)$在范数$\|.\|_q$下的闭包，H^{-q}_{per}是H^q_{per}的对偶空间。令$Q_T=\Omega\times(0,T)$，$L^r(0,T;H^q_{per}(\Omega))=\{u\in H^q_{per}(\Omega),\int_0^T\|u\|^r_q\mathrm{d}t<\infty\}$。

问题(1-1)的变分形式为：寻找$u:\Omega\times R^+\rightarrow R$，且$u\in L^\infty(R^+;L^2(\Omega))\bigcap L^2(0,T);H^2_{per}(\Omega))$，满足

$$\begin{cases}(\partial_t u,v)+(\nabla f(u),\nabla v)+\kappa(\Delta u,\Delta v)=0, & \forall v\in H^2_{per}(\Omega),\forall t\in(0,T).\\ u(x,0)=u_0\end{cases}\tag{2-1}$$

引理 2.1： [29] 如果$u(\boldsymbol{x},t)$ 是方程(1-1)的一个解，则有如下的能量不等式成立

$$E(t)\le E(0),\qquad\qquad \forall t\ge 0\tag{2-2}$$

其中, $E(t)$ 由下式给出：

$$E(t)=\int_\Omega[\frac{\kappa}{2}|\nabla u|^2+F(u)]d\boldsymbol{x}.\tag{2-3}$$

$F(u)$ 由(1-3) 式定义。

证明: 由方程(1-1)可知，对于任意属于$L^2(\Omega)$ 的函数φ，有如下等式成立

$$(\frac{\partial}{\partial t}u(x,t),\varphi)=(\Delta(-\kappa\Delta u+f(u)),\varphi).\tag{2-4}$$

其中$(\cdot,\cdot)$ 表示L^2 空间中的标准内积。

在(2-4) 式中取$\varphi = -\kappa\Delta u + f(u)$，即得：

$$(\frac{\partial}{\partial t}u(x,t), -\kappa\Delta u + f(u)) = (\Delta(-\kappa\Delta u + f(u)), -\kappa\Delta u + f(u)).$$

接下来进行分部积分，由u 的周期性，我们有：

$$\kappa(\nabla\frac{\partial}{\partial t}u(x,t), \nabla u) + (\frac{\partial}{\partial t}u(x,t), f(u)) = -(\nabla(-\kappa\Delta u + f(u)), \nabla(-\kappa\Delta u + f(u))).$$

利用(1-3) 式，我们推得：

$$\frac{\kappa}{2}\frac{d}{dt}\int_{\Omega}|\nabla u|^2 d\boldsymbol{x} + \frac{d}{dt}\int_{\Omega}F(u)d\boldsymbol{x} = -\int_{\Omega}|\nabla(-\kappa\Delta u + f(u))|^2 d\boldsymbol{x} \le 0,$$

由(2-3) 式中$E(t)$ 的定义，我们可以得到

$$\frac{d}{dt}E(t) \le 0.$$

定理证毕。 ■

引理2.1说明了能量随着时间的发展而衰减。

引理 2.2： 如果$u(\boldsymbol{x},t)$ 是方程(1-1)的一个解，则有如下的能量不等式成立

$$(u(x,t),1) = (u_0,1), \quad \forall\, t \ge 0. \tag{2-5}$$

其证明在(2-4) 式中取$\varphi = 1$即可得到。

引理(2.2)说明了质量随着时间的发展而不变。

在讨论方程(1-1)解的存在唯一性之前，先引入以下不等式。

Friedrichs不等式

$$\|v\| \le \ C(\Omega)|v|, \qquad \forall v \in H^1_{per}(\Omega). \tag{2-6}$$

Poincare不等式

$$\|v\| \le C(\Omega)\{|v|_1^2 + \big(\int_{\Omega}v(x)dx\big)^2\}, \quad \forall v \in H^1(\Omega). \tag{2-7}$$

Nirenberg不等式

$$\|D^j v\|_{L^p} \le C_1\|D^m v\|_{L^r}^a \|v\|_{L^q}^{1-a} + C_2\|v\|_{L^q}, \tag{2-8}$$

$$\frac{j}{m} \le a \le 1,\ \frac{1}{p} = \frac{j}{n} + a\big(\frac{1}{r} - \frac{m}{n}\big) + (1-a)\frac{1}{q}. \tag{2-9}$$

$$|v|_1^2 \le \|v\|\|\Delta v\|, \qquad \forall v \in H^2_{per}(\Omega). \tag{2-10}$$

参考[12]，我们有如下定理：

定理 2.1： Ω是R^2的有界区域，如果$u_0 \in H^2_{per}(\Omega)$，则方程(1-1)存在唯其一解，且$u \in L^2(0,T;H^4_{per}(\Omega))$。

证明：在方程(1-1)两边乘以u，对变量x积分，

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|u\|^2+\kappa\|\Delta u\|^2+\int_\Omega f'(u)\nabla u^2 dx=0.$$

由$f(u)$定义可知：

$$f'(u)=3u^2-1\geq -1,$$

由上二式，容易得到：

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|u\|^2+\kappa\|\Delta u\|^2 &\leq \|\nabla u\|^2\\ &\leq \|\Delta u\|\|u\|\\ &\leq \frac{\kappa}{2}+\frac{1}{\kappa}\|u\|^2.\end{aligned}$$

利用不等式(2-10)、Gronwall不等式以及引理(2.1)，我们就有：

$$\|u(t)\|_1+\int_0^t |u|_2^2 dt \leq C_T,\ \ \forall t\in(0,T]. \tag{2-11}$$

根据方程(1-1)质量守恒性质可知：

$$\int_\Omega u_0(x)dx=0=\int_\Omega u(x,t)dt\ \forall t\in(0,T]. \tag{2-12}$$

由Sobolev's 嵌入定理，可知：

$$\|u\|_{L^q}\leq C_T,\quad \forall q<\infty\ . \tag{2-13}$$

由Nirenberg不等式(2-8)，我们有：

$$\|u\|_\infty \ \leq\ C\|\Delta^2 u\|^a\|u\|_{L^q}^{1-a},\ \text{其中}\ \ a=(1+3q/2)^{-1}, \tag{2-14}$$

$$\|\nabla u\|_{L^4}\leq C\|\Delta^2 u\|^{\frac{1}{6}}\|\nabla u\|^{\frac{5}{6}}\ , \tag{2-15}$$

$$\|\Delta u\|\leq C\|\Delta^2 u\|^{\frac{1}{3}}\|\nabla u\|^{\frac{2}{3}}\ , \tag{2-16}$$

$$\|u^2\Delta u\|\ \leq\ \|u\|_\infty^2\|\Delta u\|\leq C_T\|\Delta^2 u\|^{\frac{1}{3}+2a}\ , \tag{2-17}$$

$$\|u|\nabla u|^2\| \quad \leq \quad \|u\|_\infty \|\nabla u\|_{L^4}^2 \leq C_T \|\Delta^2 u\|^{a+\frac{1}{3}} \quad . \tag{2-18}$$

由

$$\Delta f(u) = f'(u)\Delta u + f''(u)|\nabla u|^2, \tag{2-19}$$

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\Delta u\|^2 + \gamma\|\Delta^2 u\|^2 = \int_u \Delta f(u)\Delta^2 u dx. \tag{2-20}$$

对上式右边利用Young's不等式，我们推得：

$$\|\Delta u(t)\|^2 + \int_0^t \|\Delta^2 u\|^2 d\tau \leq C_T,\ \ \forall t \in [0,T]. \tag{2-21}$$

由(2-11)、(2-17)、(2-21)可以得到，方程(1-1)存在唯一解，且$u \in L^2(0,T;H_{per}^4(\Omega))$。定理证毕。 ■

第 三 节　大时间步长离散方法

3.1　稳定性讨论

在CH方程的实际应用中需要在较大的区域和较长的时间上进行计算，对于这类问题，必须有高稳定性和高精度的数值方法来进行数值模拟。

首先考虑经典的一阶半隐格式，这一格式对u_t 使用一阶向后差分(BD1)，对非线性项使用一阶外插法(EP1)。

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1}-u^n}{\Delta t} = -\kappa\Delta^2 u^{n+1} + \Delta f(u^n), \quad n \geq 0, \\ u^0 = u_0, \end{cases} \tag{3-1}$$

其中$u^n = u^n(\boldsymbol{x},t)$ 是$u(\boldsymbol{x},t_n)$在$t = t^n$ 处的逼近。

在上式中，对四阶项隐式处理可以增大时间步长，同时因为四阶项是完全线性的，在Fourier 谱方法中，对于该四阶项的隐式处理绝对不会增加计算的复杂程度。然而在数值模拟中发现当κ取值较小时，对于格式(3-1)不能使用较大的时间步长。

为了克服这一不足，在格式(3-1) 中加上一项$O(\Delta t)$，得到一个新的格式：**(BD1/EP1)**

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1}-u^n}{\Delta t} = A\Delta(u^{n+1}-u^n) - \kappa\Delta^2 u^{n+1} + \Delta f(u^n), \quad n \geq 0, \\ u^0 = u_0. \end{cases} \tag{3-2}$$

其中，A是一个待定的正常数。通过适当选择正常数A，可以改进原问题的稳定性，可以采用较大的时间步长进行数值计算。在这一小节中从理论角度证明这个结论，而数据结果的验证放在最后一节。

He等人[25]与Ai等人[24]使用能量估计的方法分析了格式(3-2)的稳定性。他们给出了离散形式的能量不等式，并证明在适当选择A的值时，对于格式(3-2) 的半离散解，能量仍然保持随时间衰减的性质。与连续情况相似，有如下结论：

定理 3.1： [24,25] 若(3-2) 中的常数A满足

$$A \geq \frac{1}{2}((u^n)^2-1) + \frac{1}{4}(u^{n+1}+u^n)^2 \quad a.e.\ \ in\ \Omega. \tag{3-3}$$

则有如下能量不等式成立

$$E^{n+1} \le E^n, \quad \forall\, n \ge 0, \tag{3-4}$$

其中

$$E^n = \frac{\kappa}{2}\|\nabla u^n\|^2 + \frac{1}{4}\|(u^n)^2 - 1\|^2. \tag{3-5}$$

u^n 是(3-2) 的一个解，$\|\cdot\|$ 表示标准的L^2 范数.

注释 3.1： 由上述定理可知，在(3-3) 式中A 的选择的条件取决于时间在第$(n+1)$ 步时方程的解，但是从本质上，这并不会给选择适当的A 带来困难。事实上，A可以通过满足

$$A \ge \max_{x\in\Omega}\left|\frac{1}{2}((u^n)^2-1) + \frac{1}{4}(2u^n+\Delta t)^2\right|.$$

来近似地确定A。

3.2 误差估计

在这小节讨论一阶时间离散格式的误差估计。

首先，给出以下引理，将在下面的证明将会用到。

引理 3.1： 如果初值u_0 满足$u_0 \in H^4_{per}(\Omega)$，则方程(2-1)的$u(x)$满足：

$$\|u(t)\|_4^2 \le c_0(\kappa,u_0), \qquad \int_0^t \|\partial_t u\|_2^2 ds \le c_0(\kappa,u_0) + tc(\kappa,u_0), \quad \forall t \ge 0, \tag{3-6}$$

其中$c(\kappa,u_0)$、$c_0(\kappa,u_0)$ 是与κ、u_0、Ω有关的正常数。

引理 3.2：

$$\begin{aligned} &\|v\|_{L^4}^4 \le c_0\|v\|_0^2\|v\|_1^2, && \forall v \in H^1_{per}(\Omega),\\ &\|v\|_{L^\infty}^4 \le c_1\|v\|_0^2(\|v\|_0^2 + \|\Delta v\|_0^2, && \forall v \in H^2_{per}(\Omega), \end{aligned} \tag{3-7}$$

其中c_0 and c_1与Ω有关的正常数。

引理 3.3： 令y_n、d_n、h_n 、Δt 是非负数，并满足：

$$y_{n+1} - y_n \le d_n y_n \Delta t + h_n \Delta t, \quad \forall n \ge 0, \tag{3-8}$$