

陈航,吴哲,翁智峰. SAV方法求解 Allen-Cahn 方程的数值比较[J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2022, 46(2): 203-209.
CHEN Hang, WU Zhe, WENG Zhifeng. The numerical comparison of SAV methods for the Allen-Cahn equation[J]. Journal of Jiangxi Normal University(Natural Science), 2022, 46(2): 203-209.

文章编号:1000-5862(2022)02-0203-07

SAV 方法求解 Allen-Cahn 方程的数值比较

陈航, 吴哲, 翁智峰*

(华侨大学数学科学学院, 福建 泉州 362021)

摘要: 该文研究基于标量辅助变量(SAV)格式下求解 Allen-Cahn 方程的数值比较. 首先给出 1 维 Allen-Cahn 方程的 SAV 格式; 然后, 对方程的时间方向采用 2 阶向后差分(BDF2)格式和 Crank-Nicolson(CN)格式离散, 对方程的空间方向采用重心 Lagrange 插值配点法和 2 阶中心差分法离散, 用离散正弦变换(DST)、快速傅里叶变换(FFT)求解差分导出的线性代数方程组; 最后, 通过数值算例验证重心 Lagrange 插值配点法是指收敛, 与差分格式比较, 配点格式用较少的点就能达到较高的精度且耗时少, 并进一步验证几种 SAV 离散格式都满足能量递减规律.

关键词: 标量辅助变量(SAV); 有限差分; 重心 Lagrange 插值配点法; 离散正弦变换; 快速傅里叶变换

中图分类号: O 241.82 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2022.02.13

0 引言

S. M. Allen 等^[1]提出反相边界运动的微观理论, 对应的 Allen-Cahn 方程在描述相场变化上有着非常广泛的应用, 如研究生物种群之间的竞争和排斥^[2]、在已知温度气压下晶体的生长^[3]、河床的迁移^[4]、在材料学中界面扩散动力学^[5]等.

本文考虑能量泛函

$$E(u) = \int_{\Omega} (|\nabla u|^2/2 + F(u)) dx, \quad (1)$$

其中 $F(u) = (u^2 - 1)^2/(4\varepsilon^2)$ 为双位势阱函数, 则可以写出式(1)对应的梯度流方程(即 Allen-Cahn 方程)

$$u_t = -M\mu, \mu = -\Delta u + F'(u), (x, t) \in \Omega \times (0, T], u_0 = u(x, 0), x \in \Omega, u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2)$$

其中 M 为迁移率系数.

近年来, 许多学者对 Allen-Cahn 方程的数值解进行了深入广泛研究, 主要包括有限差分法^[6]、有限元法^[7]、谱方法^[8]等. 如 D. J. Eyre^[9]提出了唯一解且无条件能量稳定的凸分裂方法; Chen Longqing 等^[10]构造了满足能量稳定的 1 阶精度和 2 阶精度的半隐格式; Choi Jeongwhan 等^[11]提出了一种求解

Allen-Cahn 无条件梯度稳定的数值格式, 可以满足能量耗散; Yang Xiaofeng 等^[12]提出了不变能量 2 次化(IEQ)的方法来求解分子束外延生长模型, 只要满足非线性项有下界, 就可以保证修正的能量稳定; Shen Jie 等^[13]提出了标量辅助变量(Scalar Auxiliary Variable, SAV)方法求解梯度流问题, 该方法只要非线性项 $F(u)$ 的积分项有下界条件, 就可以保证修正的能量无条件稳定. SAV 方法保留了不变能量 2 次化的优点, 也不需要每一步求解变系数方程, 只需每一步求解常系数的线性方程组, 并且在差分格式下对应的常系数方程组有快速方法进行求解, 数值格式非常高效. 由于 SAV 数值格式的诸多优点, 所以它被广泛应用于求解各类微分方程, 如 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程^[14]、研究细菌趋化性的 Keller-Segel 方程^[15]、在流体力学中的 Navier-Stokes 方程^[16]等.

众所周知, 在 Lagrange 插值公式描述经过插值点的近似函数时, 若节点过多则会产生 Runge 现象, 而 N. J. Higham 提出的重心型 Lagrange 插值^[17]解决了该问题, 并且若将节点改成 Chebyshev 节点则可以使插值达到很高的精度. 重心插值配点法^[18]作为一种新型的无网格计算方法, 能有效地避免差分

收稿日期: 2021-06-08

基金项目: 国家自然科学基金(11701197)和中央高校基本科研业务费专项资金(ZQN-702)资助项目.

通信作者: 翁智峰(1985—), 男, 福建莆田人, 副教授, 博士, 主要从事偏微分方程数值计算的研究. E-mail: zfwmath@163.com

格式带来的累积误差,使用 Chebyshev 节点有效地克服了 Runge 现象,且其具备计算格式简单、精度高、程序实施方便、节点适应性好等特点.如今,已经应用在求解各类微分方程(如分数阶 Fredholm 积分方程^[19]、平面弹性问题^[20]、Allen-Cahn 方程^[21]等)中.

本文主要利用 SAV 格式结合无网格型的重心 Lagrange 插值配点法来求解 Allen-Cahn 方程.首先,基于 SAV 数值格式的 Allen-Cahn 方程,在空间方向上采用了高精度的重心 Lagrange 插值格式,并与常见的 2 阶中心差分格式做比较,观察 2 者误差和收敛阶;然后,再利用差分矩阵的性质,运用离散正弦变换(Discrete Sine Transform, DST)求解 2 阶中心差分导出的线性方程组和快速傅里叶变换(Fast Fourier Transform, FFT)计算 Toeplitz 矩阵与向量的乘积;最后,验证重心 Lagrange 插值配点数值格式指数收敛且耗时少.

1 Allen-Cahn 方程的无条件能量稳定格式

1.1 Allen-Cahn 方程的 SAV 形式

对梯度流方程(2),令 $E_1(u) = \int_{\Omega} F(u) dx$. 由 IEQ 方法得到启发,将其中的 $q = \sqrt{F(u) + C_0}$ 替换成标量辅助 $r = \sqrt{E_1(u) + C_0}$,其中 $E_1(u) > -C_0$, C_0 是一个非负数.则可以写出等价的 SAV 形式的梯度流方程:

$$u_t = -M\mu, \quad (3)$$

$$\mu = -\Delta u + rF'(u)/\sqrt{E_1(u) + C_0}, \quad (4)$$

$$r_t = \int_{\Omega} F(u) u_t dx / (2\sqrt{E_1(u) + C_0}). \quad (5)$$

进而,只需对式(3)内积 μ ,式(4)内积 u_t ,式(5)乘以 $2r$,整理即可得到

$$d(\|\nabla u\|^2/2 + r^2)/dt = -\|\nabla \mu\|^2 \leq 0, \quad (6)$$

所以式(6)对应修正的能量泛函 $E(u) = (u, -\Delta u)/2 + r^2$ 是无条件能量稳定的.

1.2 时间方向的 2 种离散格式

对方程的时间偏导数部分,采用 2 阶向后差分(BDF2)格式和 Crank-Nicolson(CN)格式进行离散.记在 $[0, T]$ 上的离散点为 $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < x_N = T$.

1.2.1 2 阶向后差分格式 利用 BDF2 格式,取正整数 N ,记 $\tau = T/N, t_n = n\tau (0 \leq n \leq N)$,给出半离散格式:

$$(3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1})/(2\tau) = -M\mu^{n+1}, \quad (7)$$

$$\mu^{n+1} = -\Delta u^{n+1} + r^{n+1}F'(\tilde{u}^{n+1})/\sqrt{E_1(\tilde{u}^{n+1}) + C_0}, \quad (8)$$

$$(3r^{n+1} - 4r^n + r^{n-1})/(2\tau) = \int_{\Omega} F'(\tilde{u}^{n+1})(3u^{n+1} -$$

$$4u^n + u^{n-1})/(2\sqrt{E_1(\tilde{u}^{n+1}) + C_0}) \cdot (2\tau) dx, \quad (9)$$

其中 \tilde{u}^{n+1} 是利用 2 阶格式 $\tilde{u}^{n+1} = 2u^n - u^{n-1}$ 得到的,所以格式(7)~(9)的时间收敛阶是 2 阶的.文献[13]说明了对于半离散格式(7)~(9)的修正能量

$$E(u^{n+1}, u^n) = (\|\nabla u^{n+1}\|_2^2 + \|\nabla(2u^{n+1} - u^n)\|_2^2)/2 + |r^{n+1}|^2 + |2r^{n+1} - r^n|^2$$

满足 $E(u^{n+1}, u^n) \leq E(u^n, u^{n-1})$.

1.2.2 Crank-Nicolson 格式 利用 CN 格式,取正整数 N ,记 $\tau = T/N, t_n = n\tau (0 \leq n \leq N)$,给出半离散格式

$$(u^{n+1} - u^n)/\tau = -M\mu^{n+1/2}, \quad (10)$$

$$\mu^{n+1/2} = -\Delta u^{n+1/2} + r^{n+1/2}F'(\tilde{u}^{n+1/2})/\sqrt{E_1(\tilde{u}^{n+1/2}) + C_0}, \quad (11)$$

$$(r^{n+1} - r^n)/\tau = \int_{\Omega} F'(\tilde{u}^{n+1/2})(u^{n+1} - u^n)/\tau dx /$$

$$(2\sqrt{E_1(\tilde{u}^{n+1/2}) + C_0}), \quad (12)$$

其中 $\tilde{u}^{n+1/2}$ 和 $u^{n+1/2}$ 使用 2 阶格式 $\tilde{u}^{1/2} = (3u^n - u^{n-1})/2$ 和 $u^{n+1/2} = (u^{n+1} + u^n)/2$ 得到的,所以格式(10)~(12)的时间收敛阶是 2 阶的.文献[13]说明了对于半离散格式(10)~(12)的修正能量

$$E(u^{n+1}) = \|\nabla u^{n+1}\|_2^2/2 + |r^{n+1}|^2$$

满足 $E(u^{n+1}) \leq E(u^n)$.

1.3 空间方向的 2 种离散格式

对方程的空间 2 阶偏导数部分,采用 2 阶中心差分离散和重心 Lagrange 插值配点法进行离散.记在 $[a, b]$ 上 m 等分后的离散点为 $a < x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$.

1.3.1 2 阶中心差分 由 $h = (b - a)/m, \partial^2 u_i / \partial x^2 = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})/h^2 + O(h^2)$,令 $u^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_{m-1}^n)^T$,就可以写出 2 阶中心差分的微分矩阵

$$\Delta = \begin{pmatrix} -2/h^2 & 1/h^2 & & & \\ 1/h^2 & -2/h^2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -2/h^2 & 1/h^2 \\ & & & 1/h^2 & -2/h^2 \end{pmatrix},$$

从而可以得到 2 阶空间离散 Δu^n . 其中容易证明 Δ 是对称负定矩阵,且该空间离散的收敛阶是 2 阶的.由于对称负定矩阵的特殊性质,所以可以用快速算法

计算在迭代过程中的线性方程组的解和矩阵向量的乘积部分,具体步骤将在后面的计算过程中给出.

1.3.2 重心 Lagrange 插值配点法 为了得到更高收敛阶的空间离散格式,采用重心 Lagrange 插值配点法离散空间,并与 2 阶中心差分格式离散空间进行比较.对于在区间 $[a, b]$ 上的离散点,函数 $u(x)$ 在节点 x_j 处的函数值为 $u_j = u(x_j)$,则可以写出 $u(x)$ 的重心型插值函数

$$u(x) = \sum_{j=0}^m L_j(x) u_j, L_j(x) = (\omega_j / (x - x_j)) / \sum_{k=0}^m (\omega_k / (x - x_k)), \quad (13)$$

其中 $L_j(x)$ 为插值函数, ω_j 为选取的 Lagrange 插值权且 $\omega_j = 1 / \prod_{j \neq k} (x_j - x_k)$.

记重心 Lagrange 插值的微分矩阵为 D ,利用插值函数(13)可以写出在插值节点处的导数

$$u^{(p)}(x_j) = d^p u(x) / dx^p \Big|_{x=x_j} = \sum_{j=1}^m L_j^{(p)} u_j = \sum_{j=1}^m D_{ij}^{(p)} u_j,$$

通过对 $L_j(x)$ 求导,再利用数学归纳法可以得到 $D^{(p)}$ 的递推公式

$$\begin{cases} D_{ij}^{(p)} = p(D_{ij}^{(p-1)} D_{ij}^{(1)} - D_{ij}^{(p-1)} / (x_i - x_j)), i \neq j, \\ D_{ij}^{(p)} = - \sum_{j=1, j \neq i}^n D_{ij}^{(p-1)}, \end{cases}$$

从而可以得到 2 阶微分矩阵 $D^{(2)}$,即 $\Delta u = D^{(2)} u$.

由于重心 Lagrange 插值对于 Chebyshev 节点有较高的数值稳定性,所以本文将选用第 2 类 Chebyshev 节点及其重心插值权,其计算公式如下:

$$\begin{aligned} x_j &= \cos(j\pi/n), j = 0, 1, 2, \dots, m, \\ \omega_j &= (-1)^j \delta_j, \delta_j = \begin{cases} 1/2, j = 0 \text{ 或 } n, \\ 1, \text{ 其他,} \end{cases} \end{aligned}$$

从而利用 Chebyshev 节点作为 Lagrange 插值配点,对应地就可以给出下面的插值逼近性质.

定理 1^[22] 若 $u(x, t)$ 在 $[a, b] \times (0, T]$ 上连续,且边界是 Lipschitz 连续.记 $h = (b - a)/2$,则存在常数 c_0, c_1 有误差估计如下:

$$\begin{aligned} \max_{x \in (a, b)} |u - u^h| &\leq c_0 \|u^{(m+1)}\|_{\infty} (eh/(2m))^m, \\ \max_{x \in (a, b)} |d^2 u / dx^2 - d^2 u^h / dx^2| &\leq c_1 \|u^{(m+1)}\|_{\infty} \cdot \\ &\quad (eh/(2m - 2))^{m-2}. \end{aligned}$$

由定理 1 可知,重心 Lagrange 插值配点法是指收敛的.

1.4 SAV 方法计算步骤和技巧

1.4.1 迭代步骤 对于 BDF2 格式,令 $\beta^{n+1} = F'(\hat{u}^{n+1}) / \sqrt{E_1(\hat{u}^{n+1}) + C_0}$,联立离散格式(7) ~

(9) 可得

$$(I/\tau - 2M\Delta/3)u^{n+1} + M\beta^{n+1}(\beta^{n+1}, u^{n+1})/3 = (4u^n - u^{n-1})/(3\tau) - 2M\beta^{n+1}(4r^n - r^{n-1} - (\beta^{n+1}, 4u^n - u^{n-1})/2)/9 = Q^n, \quad (14)$$

令 $A = I/\tau - 2M\Delta/3$,对于中心差分格式离散空间方向,矩阵 A 显然是三对角对称可逆矩阵.则可对式(14)先左乘 A^{-1} ,再内积 β^{n+1} ,得到

$$(\beta^{n+1}, u^{n+1}) = (\beta^{n+1}, A^{-1}Q^n)/(1 + M(\beta^{n+1}, A^{-1} \cdot \beta^{n+1})/3) = \alpha.$$

最后计算

$$u^{n+1} = A^{-1}Q^n - MA^{-1}\beta^{n+1}\alpha/3, r^{n+1} = (4r^n - r^{n-1})/3 + (\beta^{n+1}, 3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1})/6,$$

就可以求出第 n 个节点的 u^n .重复这个步骤就可以求出 BDF2 格式在 $\Omega \times [0, T]$ 上的所有数值解 u_{ij}^n .

同理,对于 CN 格式,令 $\beta^{n+1/2} = F'(\hat{u}^{n+1/2}) / (2\sqrt{E_1(\hat{u}^{n+1/2}) + C_0})$,联立离散格式(10) ~ (12) 可得

$$(I/\tau - M\Delta/2)u^{n+1} + M\beta^{n+1/2}(\beta^{n+1/2}, u^{n+1}) = (I/\tau + M\Delta/2)u^n - M\beta^{n+1/2}(2r^n - (\beta^{n+1/2}, u^n)) = Q^n. \quad (15)$$

令 $A = I/\tau - M\Delta/2$,因为 A 是三对角对称可逆矩阵,所以同理可对式(15)先左乘 A^{-1} ,再内积 $\beta^{n+1/2}$,得到

$$(\beta^{n+1/2}, u^{n+1}) = (\beta^{n+1/2}, A^{-1}Q^n)/(1 + M(\beta^{n+1/2}, A^{-1}\beta^{n+1/2})) = \alpha.$$

最后计算

$$u^{n+1} = A^{-1}Q^n - MA^{-1}\beta^{n+1/2}\alpha, r^{n+1} = r^n + (\beta^{n+1/2}, u^{n+1} - u^n),$$

就可以求出第 n 个节点的 u^n .重复这个步骤就可以求出 CN 格式在 $\Omega \times [0, T]$ 上的所有数值解 u_{ij}^n .

这 2 种格式在计算的过程中都需要用到前 2 步的信息,可以先采用 1 阶格式,类似上述步骤利用 u^0 求出 u^1 ,再进行迭代.

1.4.2 离散正弦变换和快速傅里叶变换 为了用快速算法求解导出的线性方程组,先介绍特殊矩阵的性质,有如下 2 个引理.

引理 1^[23] 对于 $m \times m$ 的三对角矩阵 $T = \text{tridiag}(a, b, c)$,它的 m 个特征值为

$$\begin{aligned} \lambda_k &= b + 2c \sqrt{a/c} \cos(k\pi/(m+1)), 1 \leq k \leq m, \\ \text{则可将 } T &\text{ 分解为 } T = PAP^{-1} = P \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)P^{-1}, \text{特征值 } \lambda_k \text{ 对应的特征向量为 } P_k, \text{其中第 } j \text{ 个分量为} \end{aligned}$$

$$P_{kj} = (a/c)^{j/2} \sin(jk\pi/(m+1)) (j = 1, 2, \dots, m).$$

引理 2^[23] 对于 $m \times m$ 的循环矩阵 $C = \text{circle}(a_0, a_1, \dots, a_{m-1})$,它的 m 个特征值为

$$g(\omega_k) = a_1 + a_2\omega_k + a_3\omega_k^2 + \cdots + a_m\omega_k^{m-1},$$

$$\omega_k = \cos(2k\pi/m) + j\sin(2k\pi/m) = e^{2kj\pi/m} (0 \leq$$

$k \leq m-1)$,

则可将 C 分解为 $C = F\Lambda F^{-1} = F\text{diag}(g(\omega_0), g(\omega_1), \cdots, g(\omega_{m-1}))F^{-1}$, 特征值 $g(\omega_k)$ 对应的特征向量 F_k 为

$$F_k = (1, \omega_k, \omega_k^2, \cdots, \omega_k^{m-1})^T.$$

由于空间采用 2 阶中心差分离散, 且 A 是三对角对称 Toeplitz 可逆矩阵, 所以可以利用离散正弦变换 (DST) 快速计算 $Ab, A^{-1}b$.

先利用引理 1 计算出 A 的特征值, 令 $A = PAP^{-1}$. 由 DST 和 IDST 的性质^[23] 知

$$X(k) = f_{\text{DST}}(x(n)) = \sqrt{2/(2m+1)} \sum_{n=0}^{m-1} x(n) \cdot \sin(\pi(k+1)(n+1)/(m+1)), k = 0, 1, \cdots, m-1,$$

$$x(n) = f_{\text{IDST}}(X(k)) = \sqrt{2/(2m+1)} \sum_{k=0}^{m-1} X(k) \cdot \sin(\pi(k+1)(n+1)/(m+1)), n = 0, 1, \cdots, m-1,$$

由矩阵 A 的特征可知, $Ab, A^{-1}b$ 可以用 DST 和 IDST 快速计算, 即

$$A^{-1}b = PA^{-1}P^{-1}b = f_{\text{DST}}(A^{-1}f_{\text{IDST}}(b)),$$

$$Ab = PAP^{-1}b = f_{\text{DST}}(Af_{\text{IDST}}(b)).$$

由于 CN 格式中的 $\tilde{A} = I/\tau + M\Delta/2$ 是 Toeplitz 矩阵, 所以 Toeplitz 矩阵与向量的乘积可以用快速傅里叶变换^[24] 求解.

将 Toeplitz 矩阵 T 扩充成循环矩阵

$$W = \begin{pmatrix} T & * \\ * & T \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{2m \times 2m},$$

再利用离散傅里叶变换 (DFT) 性质知

$$X(k) = f_{\text{DFT}}[x(n)] = \sum_{n=0}^{m-1} x(n) e^{-2knj\pi/m}, k = 0, 1, \cdots, m-1,$$

$$x(n) = f_{\text{IDFT}}[X(k)] = \sum_{k=0}^{m-1} X(k) e^{2knj\pi/m}, n = 0, 1, \cdots, m-1,$$

结合引理 2 就可以计算循环矩阵与向量的乘积, 则令 $\tilde{b} = (b^T, 0)^T$ 计算 $W\tilde{b}$ 即可得到 Tb . 再利用快速傅里叶变换 (FFT) 计算 f_{DFT} , 就可以快速计算 Toeplitz 矩阵与向量相乘. 若记 $W_{1c} = (t_{11}, t_{21}, \cdots, t_{n1}, 0, t_{1n}, \cdots, t_{12})^T$ 为循环矩阵 W 的第 1 列, 则上述计算为

$$W\tilde{b} = f_{\text{IFFT}}(\text{diag}(f_{\text{FFT}}(W_{1c}))f_{\text{FFT}}(\tilde{b})),$$

最后取所得向量的前半部分即可.

2 数值实验

2.1 算例 1

选取 $u(x, 0) = u^0 = 0.5\sin(\pi x)$, $(x, t) \in [-1, 1] \times [0, 1]$, 取 $M = 1, \varepsilon = 0.1$. 由于没有准确值, 所以取 $\tau = 1 \times 10^{-5}$, 使计算出的 u^n 作为参考解 $u(t_n)$, 则计算最后时刻 T 的误差 $e = |u^n - u(t_n)|$, 收敛阶

$$o_r = \log_2(e_{i+1}/e_i)/\log_2(\tau_{i+1}/\tau_i)$$

取空间离散点数 $m = 16$, 计算时间收敛阶如表 1 所示.

表 1 在 $m = 16$ 时的 L^∞ 误差和时间收敛阶

格式	BDF2/ 差分		CN/ 差分		BDF2/ 重心插值		CN/ 重心插值	
	τ	$\ e\ _\infty$	o_r	$\ e\ _\infty$	o_r	$\ e\ _\infty$	o_r	$\ e\ _\infty$
1. 6.0×10^{-3}		2.92×10^{-5}	—	1.16×10^{-5}	—	2.45×10^{-5}	—	9.86×10^{-6}
8. 0.0×10^{-4}		7.44×10^{-6}	1.97	2.94×10^{-6}	1.98	6.25×10^{-6}	1.97	2.51×10^{-6}
4. 0.0×10^{-4}		1.88×10^{-6}	1.99	7.41×10^{-7}	1.99	1.58×10^{-6}	1.99	6.32×10^{-7}
2. 0.0×10^{-4}		4.72×10^{-7}	1.99	1.86×10^{-7}	2.00	3.96×10^{-7}	1.99	1.58×10^{-7}
1. 0.0×10^{-4}		1.17×10^{-7}	2.01	4.62×10^{-8}	2.01	9.86×10^{-8}	2.01	3.94×10^{-8}

从计算结果可以看出, BDF2 格式和 CN 格式的收敛阶都是 2 阶的 (见图 1 和图 2). 在相同空间离散格式下, CN 格式的精度比 BDF2 格式的精度高.

考虑空间离散方式不一样, 假设真解 $u(x, t) = \cos t \sin(\pi x)$, 代入 Allen-Cahn 方程中计算得到函数

$$g(x, t) = \sin(\pi x)(-\sin t + M\pi^2 \cos t + M \cos t \cdot ((\cos t \sin(\pi x))^2 - 1)/\varepsilon^2),$$

取 $\tau = 1 \times 10^{-5}, M = 1, \varepsilon^2 = 0.1$, 计算结果如表 2 所示.

由上述分析结果可以看出, 空间离散使用中心差分的收敛阶是 2 阶的. 重心 Lagrange 插值配点法可以在较小的剖分中得到较高的精度, 收敛阶是指数递减的. 在相同的时间离散格式下, 重心 Lagrange 插值配点法的精度比 2 阶中心差分格式的精度高很多, 前者只需要 6 个节点就可以达到后者 32 个节点的精度, 前者在 10 个节点时的误差就远小于后者在 128 个节点时的误差.

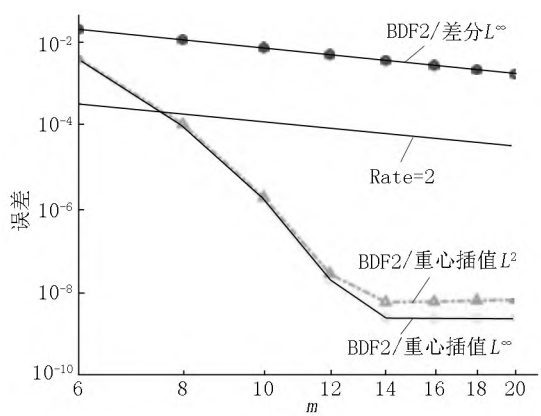


图 1 BDF2 格式收敛阶

接下来讨论 BDF2 格式和 CN 格式的运行时间,运行环境为 8G(intel)i5-7200U. 选取 $N = 10^4$, 对于差分离散, 选取空间剖分数 $m = 2^{10}$. 因为由上述实验可知, 重心 Lagrange 插值配点法的计算结果的误

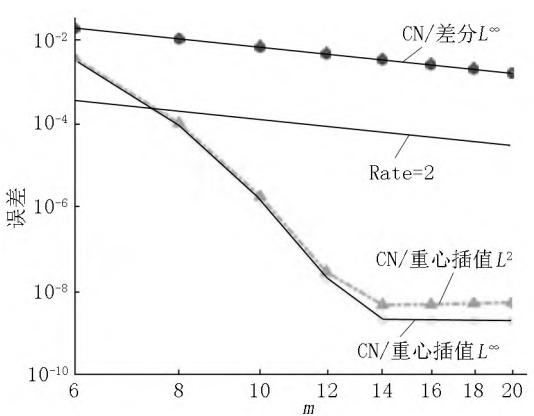


图 2 CN 格式收敛阶

差较小, 所以对于重心 Lagrange 插值配点法离散选取 $m = 10$. 由上述实验可知重心 Lagrange 插值配点法的误差较小, 下面比较常规计算和快速计算以及重心 Lagrange 插值配点法离散的运行时间 (见表 3).

表 2 在 $\tau = 1 \times 10^{-5}$ 时的 L^2 和 L^∞ 误差和空间收敛阶

N	BDF2/ 差分		CN/ 差分		N	BDF2/ 重心插值		CN/ 重心插值	
	$\ e\ _\infty$	$\ e\ _2$	$\ e\ _\infty$	$\ e\ _2$		$\ e\ _\infty$	$\ e\ _2$	$\ e\ _\infty$	$\ e\ _2$
8	3.5×10^{-2}	3.7×10^{-2}	3.5×10^{-2}	3.7×10^{-2}	6	3.1×10^{-3}	3.2×10^{-3}	3.1×10^{-3}	3.2×10^{-3}
16	9.1×10^{-3}	9.4×10^{-3}	9.1×10^{-3}	9.4×10^{-3}	8	7.3×10^{-5}	8.9×10^{-5}	7.3×10^{-5}	8.9×10^{-5}
32	2.3×10^{-3}	2.4×10^{-3}	2.3×10^{-3}	2.4×10^{-3}	10	1.3×10^{-6}	1.6×10^{-6}	1.3×10^{-6}	1.6×10^{-6}
64	5.6×10^{-4}	5.8×10^{-4}	5.6×10^{-4}	5.8×10^{-4}	12	1.8×10^{-8}	2.8×10^{-8}	1.8×10^{-8}	2.8×10^{-8}
128	1.3×10^{-4}	1.4×10^{-4}	1.3×10^{-4}	1.4×10^{-4}	14	2.0×10^{-10}	3.1×10^{-10}	2.0×10^{-10}	3.1×10^{-10}

表 3 不同格式的 CPU 计算时间

格式	BDF2	BDF/DST	BDF2/Lag	CN	CN/DST/FFT	CN/Lag
CPU 时间 /s	109.09	2.70	0.21	157.78	3.70	0.25

由表 3 可以很明显看出, 快速算法对差分格式的计算时间有较大提升, 而重心 Lagrange 插值配点法能经过很少节点就达到高精度从而缩短了计算时间.

2.2 算例 2

取 $u^0 = \sin(\pi x), (x, t) \in [-1, 1] \times [0, 1]$ 取 $M = 1, \varepsilon = 0.1, m = 2^{10}, \tau = 1 \times 10^{-4}$, 1 维等距剖分的能量离散形式为

$$E^h(u) = h \sum_{i=0}^m ((u_i^n)^2 - 1)^2 / (4\varepsilon^2) + h \sum_{i=1}^{m-1} ((u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) / (2h))^2 / 2.$$

由图 3 和图 4 可见: 在空间是 2 阶中心差分离散空间的情况下, 时间离散的 BDF2 格式和 CN 格式都满足能量耗散, 且到达稳定的时间几乎一致.

取 $u^0 = \sin(\pi x), (x, t) \in [-1, 1] \times [0, 1]$, $M = 1, \varepsilon = 0.1, m = 12, \tau = 1 \times 10^{-4}$, 在 Chebyshev 节点下的能量离散形式为

$$E(u^n) = \sum_{i=0}^m \rho(x_i) ((u_i^n)^2 - 1)^2 / (4\varepsilon^2) + \sum_{i=1}^{m-1} \rho(x_i) u_i^n \cdot \sum_{j=0}^m D_{ij}^{(2)} u_j^n / 2.$$

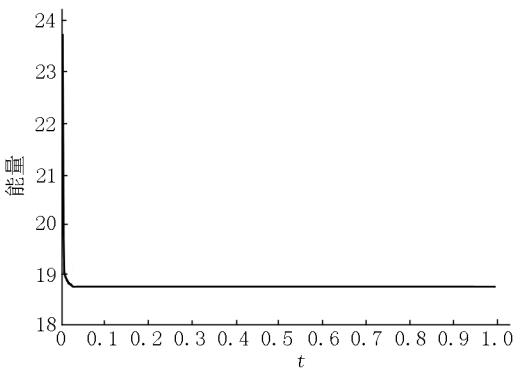


图 3 BDF2/差分格式

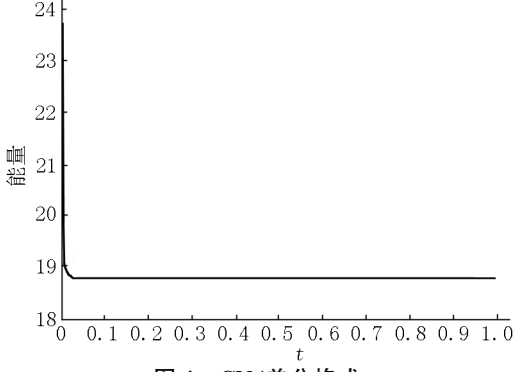


图 4 CN/差分格式

同样,对于重心 Lagrange 插值配点法空间的情况,时间离散的 BDF2 格式和 CN 格式都满足能量耗散.如图 5 和图 6 所示,BDF2 格式在 $t=0.6$ 之前达到稳定,而 CN 格式在 $t=0.6$ 后达到稳定,这说明对于同种情况下,CN 格式需要更多时间才达到能量稳定.

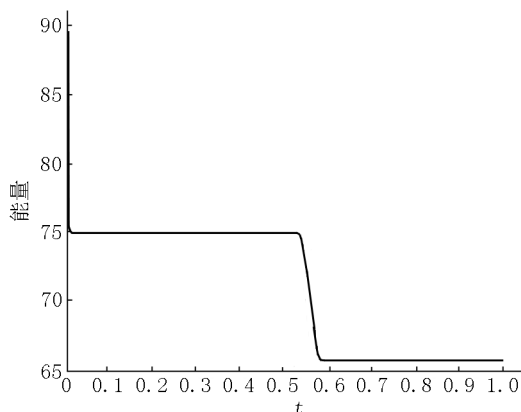


图 5 BDF2/重心插值格式

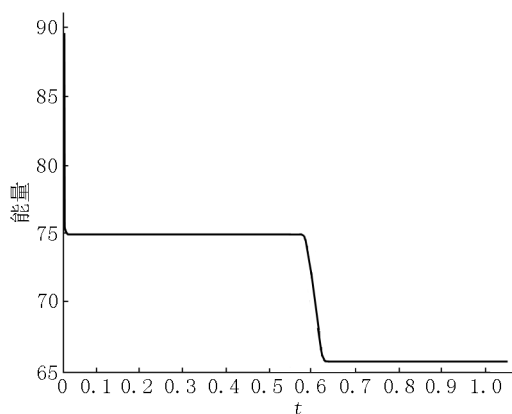


图 6 CN/重心插值格式

3 结束语

本文利用重心 Lagrange 插值配点法结合 SAV 格式来求解 Allen-Cahn 方程,对比了几种离散格式的精度和能量耗散情况.通过算例可以发现:在同种空间离散格式下,CN 格式的精度比 BDF2 格式更高;在同种时间离散格式下,重心 Lagrange 插值配点格式的精度比 2 阶中心差分的精度更高,且收敛阶是指数收敛.虽然 DST 和 FFT 快速算法结合 2 阶中心差分格式求解所用的 CPU 时间变少,但是重心 Lagrange 插值配点法求解所用的 CPU 时间仍然比快速算法的差分格式求解所用的 CPU 时间更少.进一步地,数值算例验证在 SAV 方法下的几种数值格

式都满足能量耗散规律.

4 参考文献

- [1] ALLEN S M, CAHN J W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening [J]. *Acta Metallurgica*, 1979, 27(6): 1085-1095.
- [2] COHEN D S, MURRAY J D. A generalized diffusion model for growth and dispersal in a population [J]. *Journal of Mathematical Biology*, 1981, 12(2): 237-249.
- [3] WHEELER A A, BOETTINGER W J, MCFADDEN G B. Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys [J]. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 1992, 45(10): 7424-7439.
- [4] HAZEWINCKEL M, KAASHOEK J F, LEYNSE B. Pattern formation for a one dimensional evolution equation based on Thom's River basin model [M]//KILMISTER C W. *Disequilibrium and self-organisation: mathematics and its applications*. Dordrecht: Springer, 1986: 23-46.
- [5] KIM JUNSEOK. Phase-field models for multi-component fluid flows [J]. *Communications in Computational Physics*, 2012, 12(3): 613-661.
- [6] ZHAI Shuying, FENG Xinlong, HE Yinnian. Numerical simulation of the three dimensional Allen-Cahn equation by the high-order compact ADI method [J]. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(10): 2449-2455.
- [7] LI Congying, HUANG Yunqing, YI Nianyu. An unconditionally energy stable second order finite element method for solving the Allen-Cahn equation [J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2019, 353: 38-48.
- [8] FENG Xiaobing, LI Yukun. Analysis of symmetric interior penalty discontinuous Galerkin methods for the Allen-Cahn equation and the mean curvature flow [J]. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 2015, 35(4): 1622-1651.
- [9] EYRE D J. Unconditionally gradient stable time marching the Cahn-Hilliard equation [J]. *MRS Online Proceedings Library*, 1998, 529: 39-46.
- [10] CHEN Longqing, SHEN Jie. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations [J]. *Computer Physics Communications*, 1998, 108(2/3): 147-158.
- [11] CHOI Jeongwhan, LEE Hyungeun, JEONG Darae, et al. An unconditionally gradient stable numerical method for solving the Allen-Cahn equation [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2009, 388(9): 1791-1803.
- [12] YANG Xiaofeng, ZHAO Jia, WANG Qi. Numerical approx-

- imations for the molecular beam epitaxial growth model based on the invariant energy quadratization method [J]. Journal of Computational Physics, 2017, 333: 104-127.
- [13] SHEN Jie, XU Jie, YANG Jiang. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows [J]. Journal of Computational Physics, 2018, 353: 407-416.
- [14] LI Xiaoli, SHEN Jie, RUI Hongxing. Energy stability and convergence of SAV block-centered finite difference method for gradient flows [J]. Mathematics of Computation, 2019, 88(319): 2047-2068.
- [15] SHEN Jie, XU Jie. Unconditionally bound preserving and energy dissipative schemes for a class of Keller-Segel equations [J]. SIAM Journal of Numerical Analysis, 2020, 58(3): 1674-1695.
- [16] LI Xiaoli, SHEN Jie. Error analysis of the SAV-MAC scheme for the Navier-Stokes equations [J]. SIAM Journal of Numerical Analysis, 2020, 58(5): 2465-2491.
- [17] HIGHAM N J. The numerical stability of barycentric Lagrange interpolation [J]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2004, 24(4): 547-556.
- [18] 李树忱, 王兆清. 高精度无网格重心插值配点法: 算法、程序及工程应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2012.
- [19] 虎晓燕, 韩惠丽. 重心插值配点法求解分数阶 Fredholm 积分方程 [J]. 郑州大学学报(理学版), 2017, 49(1): 17-23.
- [20] 王兆清, 徐子康. 基于平面问题的位移压力混合配点法 [J]. 计算物理, 2018, 35(1): 77-86.
- [21] 翁智峰, 姚泽丰, 赖淑琴. 重心插值配点法求解 Allen-Cahn 方程 [J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2019, 40(1): 133-140.
- [22] YI Shichao, YAO Linquan. A steady barycentric Lagrange interpolation method for the 2D higher-order time-fractional telegraph equation with nonlocal boundary condition with error analysis [J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2019, 35(5): 1694-1716.
- [23] GOLUB G H, VAN LOAN C F. Matrix computations [M]. 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.
- [24] VAN LOAN C. Computational frameworks for the fast Fourier transform [M]. Philadelphia: SIAM, 1992.

The Numerical Comparison of SAV Methods for the Allen-Cahn Equation

CHEN Hang, WU Zhe, WENG Zhifeng*

(School of Mathematics Science, Huaqiao University, Quanzhou Fujian 362021, China)

Abstract: The numerical comparison of the Allen-Cahn equation based on the SAV approach is studied in this paper. Firstly, the SAV scheme of the one-dimensional Allen-Cahn equation is given. Then, the equations are discretized by BDF2 and CN for the time direction, and in the spatial direction using the barycentric Lagrange interpolation collocation method and the second-order central difference method, and DST/FFT are used to solve linear algebraic equations which is derived by the finite difference method. Finally, numerical examples are given to verify the exponential convergence of the barycentric Lagrange interpolation collocation method. Compared with the difference scheme, the collocation scheme can achieve high accuracy with fewer points and less time consuming. Several SAV schemes satisfy the law of energy decreasing.

Key words: scalar auxiliary variables (SAV); finite difference; barycentric Lagrange interpolation collocation method; discrete sine transform; fast Fourier transform

(责任编辑: 曾剑锋)