

修正相场晶体模型的带松弛技术的ESAV方法

刘 苗*, 贾宏恩

太原理工大学数学学院, 山西 太原

收稿日期: 2026年3月21日; 录用日期: 2026年4月16日; 发布日期: 2026年4月22日

摘 要

本文首先提出了修正相场晶体(MPFC)模型的一个有效的松弛指数标量辅助变量方法(R-ESAV)。该方法通过引入松弛机制,使离散能量更接近原始自由能,同时保持线性化与无条件能量稳定性的优势。本文构造了一阶向后欧拉格式,严格证明了其无条件能量稳定性,并给出了一阶误差估计的理论分析。数值算例验证了方法的准确性与有效性。

关键词

MPFC模型, 指数标量辅助变量, 松弛技术, 能量稳定, 误差估计

ESAV Method with Relaxation Technique for the Modified Phase-Field Crystal Model

Miao Liu*, Hongen Jia

College of Mathematics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan Shanxi

Received: March 21, 2026; accepted: April 16, 2026; published: April 22, 2026

Abstract

This paper first proposes an efficient relaxed exponential scalar auxiliary variable (R-ESAV) method for the modified phase field crystal (MPFC) model. By introducing a relaxation mechanism, the proposed method enables the discrete energy to more closely approximate the original free energy, while preserving the advantages of linearization and unconditional energy stability. A first-order backward Euler scheme is constructed, and its unconditional energy stability is rigorously proved. Furthermore, a theoretical analysis of the first-order error estimate is provided. Numerical examples

*通讯作者。

validate the accuracy and effectiveness of the proposed method.

Keywords

MPFC Model, Exponential Scalar Auxiliary Variable, Relaxation Technique, Energy Stability, Error Estimate

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

MPFC 模型是一个可以描述多种晶体现象的六阶演化非线性偏微分方程组。相场晶体(PFC)模型作为一种介观材料模拟方法,有效地模拟了晶体材料中微观结构的演化,如晶体生长、相变和缺陷动力学,在材料科学、物理化学等领域显示出巨大的潜力。然而,传统的预测控制模型面临着计算效率低、稳定性差等挑战,这极大地限制了其在实际问题中的应用。Elder 和 Grant 在[1][2]中首次提出了相场晶体(PFC)模型在模拟扩散时间尺度上原子尺度晶体生长的相互作用和动力学。然而,该模型的主要缺点是它没有区分弹性松弛和扩散时间尺度[1]。为了解决这一问题,作者在[3][4]中将 PFC 模型扩展为改进的 PFC (MPFC)模型,该模型模拟了大长度尺度上弹性应变的快速松弛。当长度尺度为系统大小的数量级时,通过引入弹性相互作用,可以合理地观察到 MPFC 模型的弹性松弛和扩散时间尺度的分离[5]。此外,改进的模型能够模拟各种晶体现象,如纳米晶体材料中的边缘位错、形变和塑性[4],面心立方有序化[6]和外延生长[7]。

总的来说,我们考虑以下 MPFC 模型:

$$\phi_t + \beta \phi_t = M \Delta \left[\phi^3 - \epsilon \phi + (1 + \Delta)^2 \phi \right], \quad \text{在 } Q \times \Omega, \quad (1.1)$$

具有周期边界条件和以下初始条件:

$$\phi(0, x) = \phi_0(x), \quad \phi_t(0, x) = \psi_0(x), \quad x \in \Omega.$$

未知函数 ϕ 是原子密度场。 M 是迁移率常数, $\epsilon > 0$ 是控制漫反射界面厚度的正常数。 $\beta > 0$ 是一个松弛参数。 $Q = (0, T]$, 其中 $T > 0$ 。 Ω 是 \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$) 的域。

在数学上,六阶非线性阻尼波 MPFC 方程引入了波动算子,与经典的 PFC 模型相比,结构更加复杂。这种固有的复杂性使时间推进方案的开发复杂化,特别是由于在保持数值稳定性方面的挑战[4]。尽管有这些困难,MPFC 模型的能量稳定数值研究已经得到了积极的探索,包括凸分裂方法[5][8][9],不变能量二次化(IEQ)方法[10]-[12],指数时差(ETD)方法[13],以及标量辅助变量(SAV)方法[14]-[18]。最近,SAV 方法及其众多变体在构造梯度流的无条件能量稳定格式方面引起了极大的关注。

然而,传统 SAV 方法保留的是依赖于辅助变量的“修正能量”,而非原始自由能。为此,文献[19]提出了松弛技术,随后 Zhang 和 Shen [20]发展了松弛 GSAV (R-GSAV)方法,使修正能量更接近原始自由能。MPFC 模型是模拟晶体材料微观结构演化的重要工具,但其高阶、非线性的特性给数值求解带来了巨大挑战。开发保持能量稳定性的高效数值格式是该领域的一个核心问题。本研究首次将指数 SAV (E-SAV)方法与松弛技术相结合,并应用于求解复杂的六阶 MPFC 模型,具有明确的理论意义和应用价值。最近, Liu 和 Li [21]提出了求解一般耗散系统的指数半隐式 SAV 方法以及 Liu 等人在[22]提出了 MPFC

模型的线性、耗能和接近原始能量的耗散自由能的带松弛技术的 GSAV 型格式(R-GSAV)。据我们所知, 本文是首次将松弛技术与指数 SAV 方法相结合求解 MPFC 模型的工作。

考虑以下 Swift-Hohenberg 型自由能泛函:

$$E(\phi) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{1-\epsilon}{2} \phi^2 - |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{2} (\Delta \phi)^2 \right\} \mathbf{d}\mathbf{x}. \quad (1.2)$$

取 $E(\phi)$ 的变分导数, PFC 模型的动力学模型导出为:

$$\phi_t = M \Delta \left(\frac{\delta E}{\delta \phi} \right) = M \Delta \left[\phi^3 - \epsilon \phi + (1 + \Delta)^2 \phi \right].$$

通过引入化学势 μ , 它被定义为

$$\mu = \frac{\delta E}{\delta \phi} = \phi^3 - \epsilon \phi + (1 + \Delta)^2 \phi, \quad (1.3)$$

MPFC 模型(1.1)可以被重写如下:

$$\phi_u + \beta \phi_t = M \Delta \mu, \text{ in } Q \times \Omega. \quad (1.4)$$

由于包括了二阶时间导数项 ϕ_u , 模型的动力学偏离了由自由能梯度控制的严格的梯度流动结构。然而, 我们可以通过在初始能量 $E(\phi)$ 中加入动能项来构造修正能量。因此, MPFC 模型被称为伪梯度流, 保持了能量耗散特性[10]。

首先, 由于 ϕ_u 项的存在, 上述公式(1.4)并不完全满足质量守恒定律。根据[10], 当初始条件满足 $\int_{\Omega} \phi_t(\mathbf{x}, 0) \mathbf{d}\mathbf{x} = 0$ 时, 质量守恒性质成立。在(1.4)的上积分 μ 的周期边值条件, 得到以下方程:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi_t(\mathbf{x}, t) \mathbf{d}\mathbf{x} + \beta \int_{\Omega} \phi_t(\mathbf{x}, t) \mathbf{d}\mathbf{x} = M \int_{\partial \Omega} \nabla \mu \cdot \mathbf{n} \mathbf{d}s = 0, \quad (1.5)$$

其中 \mathbf{n} 是边界 ∂ 上的向外法线单位。(1.5)表示

$$\int_{\Omega} \phi_t(\mathbf{x}, t) \mathbf{d}\mathbf{x} = e^{-\beta t} \int_{\Omega} \phi_t(\mathbf{x}, 0) \mathbf{d}\mathbf{x} = 0,$$

接着我们得到

$$\int_{\Omega} \phi_t(x, t) \mathbf{d}\mathbf{x} = \int_{\Omega} \phi_u(x, t) \mathbf{d}\mathbf{x} = 0. \quad (1.6)$$

在推导 MPFC 模型的能量耗散定律之前, 我们首先需要定义逆拉普拉斯算子 $(-\Delta)^{-1}$ 和 H_{per}^{-1} 内积。设 $u \in L_0^2(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) | (v, 1) = 0\}$ 。将 $g_u \in H_{per}^2(\Omega) \cap L_0^2(\Omega)$ 定义为以下周期边值问题的唯一解:

$$-\Delta g_u = u \text{ 在 } \Omega.$$

基于以上, 我们定义 $g_u := (-\Delta)^{-1} u$ 。对于任意 $u, v \in L_0^2(\Omega)$, H_{per}^{-1} 的内积和范数可以被定义如下:

$$(u, v)_{-1} = (\nabla g_u, \nabla g_v), \quad \|u\|_{-1} = \sqrt{(u, u)_{-1}}.$$

要获得以下等式并不难:

$$(u, v)_{-1} = \left((-\Delta)^{-1} u, v \right) = \left(u, (-\Delta)^{-1} v \right) = (v, u)_{-1}.$$

为了展示能量耗散定律, 我们引入一个变量 $\psi = \phi_t$, 对于(1.6), 我们得到 $\psi \in L_0^2(\Omega)$ 和 $\psi_t \in L_0^2(\Omega)$ 。利用(1.4)和(1.3)中的算子 Δ^{-1} , 我们可以获得

$$\frac{1}{M} \Delta^{-1} \psi_t + \frac{\beta}{M} \Delta^{-1} \psi = \phi^3 + (1 + \Delta)^2 \phi - \epsilon \phi. \quad (1.7)$$

然后, 取(1.7)与 $\psi = \phi_t$ 的 L^2 内积, 我们可以得到以下能量耗散规律:

$$\frac{d}{dt} \hat{E}(\phi, \psi) = -\frac{\beta}{M} \|\psi\|_{-1}^2 \leq 0, \quad (1.8)$$

其中伪能量 $\hat{E}(\phi, \psi)$ 通过将动能项合并到总能量 $E(\phi)$ 中定义如下:

$$\hat{E}(\phi, \psi) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{1-\epsilon}{2} \phi^2 - |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{2} (\Delta \phi)^2 \right\} dx + \frac{1}{2M} \|\psi\|_{-1}^2 = E(\phi) + \frac{1}{2M} \|\psi\|_{-1}^2. \quad (1.9)$$

本文旨在研究一种基于带松弛技术的指数半隐式标量辅助变量法的 MPFC 模型的有效求解方法。受文献[21] [22]中介绍的指数半隐式标量辅助变量(ESI-SAV)方法和带松弛技术的广义标量辅助变量(R-GSAV)方法的部分启发, 我们基于 R-ESAV 方法提出了一阶的无条件能量稳定的线性格式, 并给出了一阶格式的严格误差估计。我们采用一阶后向欧拉格式进行时间离散, 证明了能量的无条件能量耗散律。最后通过数值实验验证了算法的无条件能量稳定性和收敛性。

本文的其余部分组织如下。在第二节中, 我们使用松弛技术来构造一阶格式, 一阶格式基于后向欧拉法。在第三节中, 我们对一阶格式的能量稳定性进行分析。在第四节中, 我们给出了一阶数值格式的严格误差估计。最后, 在第五节中, 我们提供了一些数值模拟, 以验证我们所提出的方法的准确性和效率。

2. 松弛的指数 SAV 方法

在本节中, 我们将考虑 MPFC 模型的松弛指数 SAV 方法(R-ESAV)。

首先, 我们对于 MPFC 模型先介绍一个指数标量辅助变量(E-SAV)方法, 指数函数是一种使区间保持为正的函数, 为此引入指数标量辅助变量(E-SAV):

$$r(t) = \exp\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right) = \exp\left(\frac{\int_{\Omega} F(\phi) dx}{C}\right) \quad (2.1)$$

其中 C 是一个用来调整指数函数的一般常数, 式中 E 是以等式(1.9)获得的伪自由能。经典的 SAV 方法引入一个标量辅助变量, 并将总能量的非线性项平方化, 只需要 $E_1(\phi) = \int_{\Omega} F(\phi) dx$, 而不需要 $F(\phi)$, 从而有界。很显然对任意 t , $r(t) > 0$ 。然后将非线性泛函 $F'(\phi)$ 变换为以下等价公式:

$$F'(\phi) = \frac{r}{r'} F'(\phi) = \frac{r}{\exp\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right)} F'(\phi)$$

其中, $F'(\phi) = f(\phi) = \phi^3 - \epsilon\phi$ 。因此, (1.4)可以被重构为以下等价系统:

$$\begin{cases} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} + \beta \psi^{n+1} = M \Delta \mu^{n+1}, \\ \mu^{n+1} = (1 + \Delta)^2 \phi^{n+1} + \frac{r^{n+1}}{\exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)} F'(\phi^n), \\ \psi^{n+1} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t}, \\ \frac{r^{n+1} - r^n}{\Delta t} = \frac{r^{n+1}}{C} F'\left(\phi^n, \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t}\right) = -\frac{r^{n+1} \beta}{CM} \|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2. \end{cases}$$

注意到 $\ln(r) = \ln\left(\exp\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right)\right) = \frac{E_1(\phi)}{C}$, 因此, 修正自由能可以重写如下:

$$\hat{E}(\phi, r, \psi) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \phi(1+\Delta)^2 \phi \right) dx + C \ln r + \frac{1}{2M} \|\psi\|_{-1}^2$$

接下来, 我们将提出一些基于 R-SAV 系统的数值格式, 它们是线性的无条件能量稳定格式。更重要的, 我们可以很容易地构造出具有无条件能量稳定性的一阶、二阶的数值格式。现在我们考虑以下基于 R-ESAV 方法的一阶向后欧拉格式。我们引入一个标量辅助变量 $r(t) = \exp\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right)$ 。此外, 我们定义

$\xi = \frac{r(t)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right)}$, 其中 C 为一个大于 0 的任意常数, 并且函数 $U_1(\xi) = \xi(2-\xi)$, 接着我们通过以下两步

计算 ϕ^{n+1} , ψ^{n+1} 和 r^{n+1} :

Step 1: 通过以下一阶半隐式格式计算 ϕ^{n+1} , ψ^{n+1} 和 r^{n+1} :

$$\begin{cases} \frac{\psi^{n+1} - U_1(\xi^{n+1})\psi^n}{\Delta t} + \beta\psi^{n+1} = M\Delta\mu^{n+1}, \\ \mu^{n+1} = (1+\Delta)^2\phi^{n+1} + U_1(\xi^{n+1})F'(\phi^n), \\ \xi^{n+1} = \frac{\tilde{r}^{n+1}}{\exp\left(\frac{E(\bar{\phi}^{n+1})}{C}\right)}, \\ \psi^{n+1} = \frac{\phi^{n+1} - U_1(\xi^{n+1})\phi^n}{\Delta t}, \\ \frac{\tilde{r}^{n+1} - r^n}{\Delta t} = -\frac{\tilde{r}^{n+1}\beta}{CM} \|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2. \end{cases} \quad (2.2)$$

其中第三个方程中的 $\bar{\phi}^{n+1}$ 和第五个方程中的 $\bar{\psi}^{n+1}$ 可以通过如下得到:

$$\psi^{n+1} = U_1(\xi^{n+1})\bar{\psi}^{n+1}, \bar{\psi}^{n+1} = \frac{\bar{\phi}^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} \quad (2.3)$$

Step 2: 通过松弛步骤处理更新 r^{n+1} 为

$$r^{n+1} = \lambda_0^{n+1}\tilde{r}^{n+1} + (1-\lambda_0^{n+1})\exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right), \lambda_0^{n+1} \in \mathcal{V}. \quad (2.4)$$

这里 \mathcal{V} 是一个定义如下的集合

$$\mathcal{V} = \left\{ \lambda \mid \lambda \in [0,1] \text{ s.t. } \frac{r^{n+1} - \tilde{r}^{n+1}}{\Delta t} \leq \gamma^{n+1} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \frac{\tilde{r}^{n+1}\beta}{CM} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \right\}, \quad (2.5)$$

这里 $\mathcal{V} \in [0,1]$ 是可以手动分配的人工参数。其中 $\gamma^{n+1} \geq 0$ 使集合 \mathcal{V} 是一个非空集合。

我们解释如何选择 λ_0^{n+1} 和 γ^{n+1} 。结合方程(2.3)和(2.4), 我们可以获得满足以下条件的 λ_0^{n+1} :

$$\lambda_0^{n+1} \left(\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) \right) \leq \tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) - \Delta t \gamma^{n+1} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1}\beta}{CM} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2. \quad (2.6)$$

下面注释详细总结了 λ_0^{n+1} 和 γ^{n+1} 的选择。

注 1. 松弛参数 λ_0^{n+1} 和 γ^{n+1} 的最佳选择如下:

(1) 如果 $\tilde{r}^{n+1} = \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$, 式子(2.6)可以简化为

$$0 \leq -\Delta t \gamma^{n+1} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \quad (2.7)$$

我们可以令 $\lambda_0^{n+1} = 0$ 和 $\gamma^{n+1} = \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM}$ 使得式子(2.6)成立。

(2) 如果 $\tilde{r}^{n+1} > \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 式子(2.6)左边满足如下

$$\lambda_0^{n+1} \left(\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) \right) > 0 \quad (2.8)$$

我们可以令 $\lambda_0^{n+1} = 0$, 并且式子(2.6)可以简化为

$$0 \leq \tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) - \Delta t \gamma^{n+1} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2. \quad (2.9)$$

令

$$\gamma^{n+1} = \frac{\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)}{\Delta t \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2} + \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM}, \quad (2.10)$$

使得(2.6)成立。

(3) 如果 $\tilde{r}^{n+1} < \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$, 并且 $\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2 \geq 0$, 我们令 $\lambda_0^{n+1} = 0$ 并且 γ^{n+1} 与式子(2.10)一样。

(4) 如果 $\tilde{r}^{n+1} < \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 且 $\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2 < 0$, 我们不能令 $\lambda_0^{n+1} = 0$ 因为式子(2.6)的右边小于 0 且式子(2.6)不成立。所以我们可以令 $\gamma^{n+1} = 0$, 并且

$$\lambda_0^{n+1} = 1 - \frac{\Delta t \tilde{r}^{n+1} \beta \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2}{CM \left(\exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) - \tilde{r}^{n+1} \right)}.$$

因此, 在所有情况下, 式子(2.6)都满足, $\lambda_0^{n+1} \in \mathcal{V}$ 。

注 2. 在上述松弛型数值格式(2.4)中, 参数 λ_0^{n+1} 的选取并非唯一。如注 1 所述, 在保证离散能量耗散律的前提下, 存在多种满足条件的合法选择。具体而言, 当条件 1~3 成立时, 取 λ_0^{n+1} 意味着松弛步骤将修正后的辅助变量 r^{n+1} 直接对齐至由当前数值解 ϕ^{n+1} 所定义的指数项 $\exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 。此时, 离散水平上的修正能量与原始能量完全一致, 有利于提高长时间积分过程中能量演化的保真度。反之, 在条件 4 下,

λ_0^{n+1} 取一个介于 0 与 1 之间的正值, 此时修正能量与原始能量之间存在可控的偏差, 但在某些具有较强刚性或剧烈初始条件的情形下, 此类选择可增强数值稳定性, 避免因辅助变量过度偏离而引发的数值振荡。

一般而言, λ_0^{n+1} 越接近 0, 数值解越倾向于保持原始能量结构的准确性; 越接近 1, 则更多地保留松弛前辅助变量 \tilde{r}^{n+1} 的信息。在实际计算中, 优先采用 $\lambda_0^{n+1} = 0$ 的选取策略通常能够获得良好的精度与能量守恒特性。本文后续数值算例均采用注 1 中所给出的参数选取方式, 未观察到不同合法选择对最终物理形态产生显著差异, 这也从侧面验证了所提松弛框架的鲁棒性。

注 3. 实施上述方案(2.2)的详细过程见[22]。现在我们需要简要概述一阶格式(2.2)~(2.4)中步骤 1 和步骤 2 的实现过程。

首先, 我们给出初始条件 $\phi^0 = \phi_0, \psi^0 = \psi_0$ 和 $r^0 = \exp\left(\frac{E_1(\phi_0)}{C}\right)$, 将(2.3)插入(2.2)的前两个方程中, 我们可以使用已知的 ϕ^n 和 ψ^n 导出下列线性方程来显式求解 $\bar{\psi}^{n+1}$:

$$A\bar{\psi}^{n+1} = \psi^n + M\Delta t\Delta(1+\Delta)^2\phi^n + M\Delta t\Delta F'(\phi^n), \tag{2.11}$$

其中 $A = (1 + \Delta t\beta)I - M\Delta t^2\Delta(1 + \Delta)^2$, 因为 $\bar{\psi}^{n+1}$ 已知, 我们可以从(2.3)中的第二个方程中得到

$$\|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2 = (\nabla g_{\bar{\psi}^{n+1}}, \nabla g_{\bar{\psi}^{n+1}}) \text{ 和 } \bar{\phi}^{n+1} = \phi^n + \Delta t\bar{\psi}^{n+1}.$$

从(2.2)中的第三个方程和第五个方程我们可以得到如下 ξ^{n+1} :

$$\xi^{n+1} = \frac{CMr^n}{\exp\left(\frac{E_1(\bar{\phi}^{n+1})}{C}\right) \left[CM + \Delta t\beta(\nabla g_{\bar{\psi}^{n+1}}, \nabla g_{\bar{\psi}^{n+1}}) \right]} \tag{2.12}$$

由于 ξ^{n+1} 已知, 我们有 $\tilde{r}^{n+1} = \xi^{n+1} \exp\left(\frac{E_1(\bar{\phi}^{n+1})}{C}\right)$ 。接着通过 $\bar{\psi}^{n+1}$ 和 $U_1(\xi^{n+1})$ 可以更新 ψ^{n+1} 和 ϕ^{n+1} 如下所示:

$$\psi^{n+1} = U_1(\xi^{n+1})\bar{\psi}^{n+1}, \quad \phi^{n+1} = \Delta t\psi^{n+1} + U_1(\xi^{n+1})\phi^n. \tag{2.13}$$

接下来, 我们将 $E(\phi^{n+1})$ 与 \tilde{r}^{n+1} 进行比较, 为通过注 1 中的参数 λ_0^{n+1} 和 γ^{n+1} 选择不同的值。最后, 如(2.5)

所述, 我们可以得到 $r^{n+1} = \lambda_0^{n+1} \tilde{r}^{n+1} + (1 - \lambda_0^{n+1}) \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 。

综上所述, 一阶 R-ESAV 格式(2.2)~(2.4)可以在初始条件下以如下方式实现:

- 利用(2.11)计算 $\bar{\psi}^{n+1}$;
- 计算 $\|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2$ 和 $\bar{\phi}^{n+1} = \phi^n + \Delta t\bar{\psi}^{n+1}$ 通过已知的 $\bar{\psi}^{n+1}$;
- 利用(2.12)计算 ξ^{n+1} , 接着相应地更新 $\tilde{r}^{n+1} = \xi^{n+1} \exp\left(\frac{E_1(\bar{\phi}^{n+1})}{C}\right)$;
- 利用(2.13)更新 ψ^{n+1} 和 ϕ^{n+1} ;
- 根据注 1 更新 $r^{n+1} = \lambda_0^{n+1} \tilde{r}^{n+1} + (1 - \lambda_0^{n+1}) \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 并转到下一个时间步长。

3. 能量稳定性的分析

在这一部分, 我们将对带松弛技术的指数 SAV (R-ESAV)方法的一阶向后欧拉格式进行能量稳定性

的分析。

关于能量稳定性的证明, 我们有如下结果。

定理 1. 给定 $r^n \geq 0$, 我们有 $r^{n+1} \geq 0, \xi^{n+1} \geq 0$ 。此外, 上述选择 λ_0^{n+1} 和 γ^{n+1} 的一阶 R-ESAV 格式 (2.3)~(2.5) 在以下意义下是无条件能量稳定的。

$$r^{n+1} - r^n \leq \Delta t \gamma^{n+1} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \leq 0 \quad (3.1)$$

并且我们可以得到以下能量耗散定律在大多数情况下(注 1 中的条件 1, 2, 3):

$$\hat{E}(\phi^{n+1}) \leq \hat{E}(\phi^n),$$

在 $\tilde{r}^{n+1} \geq \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 或 $\tilde{r}^{n+1} < \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 且满足 $\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2 \geq 0$ 的条件

下。这里 $E(\phi^{n+1})$ 代表原始能量泛函。如果 $\tilde{r}^{n+1} < \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 且

$$\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) + \Delta t \frac{\tilde{r}^{n+1} \beta}{CM} \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2 < 0, \text{ 则有 } r^{n+1} \leq \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)。$$

证明。给定 $r^n \geq 0$ 。因为 $\|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2 > 0$, 从(2.2)中的第五个方程可得:

$$\tilde{r}^{n+1} = \frac{r^n}{1 + \frac{\beta \Delta t}{CM} \|\bar{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2} \geq 0.$$

接着从(2.2)中的第三个方程可得 $\xi^{n+1} \geq 0$, 并且从(2.4)中可得 $r^{n+1} \geq 0$ 。结合(2.2)中的第五个方程和(2.5), 我们可以获得(3.1)。由此, 我们也有 $C \ln(r^{n+1}) \leq C \ln(r^n)$ 。

对于条件 1~3 我们有 $\lambda_0^{n+1} = 0$, 这意味着 $r^{n+1} = \exp\left(\frac{E(\phi^{n+1})}{C}\right)$ 。对于条件 4, 因为

$$\lambda_0^{n+1} = 1 - \frac{\Delta t \tilde{r}^{n+1} \beta \|\phi^{n+1}\|_{-1}^2}{CM \left(\exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) - \tilde{r}^{n+1} \right)} \in [0, 1]$$

并且 $\tilde{r}^{n+1} < \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right)$, 我们可以从(2.4)中导出

$$r^{n+1} \leq \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) \quad \forall n \geq 0. \quad (3.2)$$

并且由于(3.1)和(3.2), 我们可以在条件 $\lambda_0^{n+1} = 0$ 下获得如下能量耗散定律:

$$\begin{aligned} \hat{E}(\phi^{n+1}) &\leq \frac{1}{2} \|(1+\Delta)\phi^{n+1}\|^2 + \frac{1}{2M} \|\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + C \ln(\tilde{r}^{n+1}) \\ &\leq \frac{1}{2} \|(1+\Delta)\phi^n\|^2 - \frac{1}{2M} \|\psi^n\|_{-1}^2 - C \ln r^n \\ &= \hat{E}(\phi^n) \end{aligned}$$

因此, 在其他相同的情况下, 大多数情况下, 原始能量被证明是耗散的。

4. 误差分析

在这一部分, 我们将提出一阶 R-ESAV 格式的严格误差分析。我们将对一阶格式(2.2)~(2.5)的进行误差分析。

首先, 我们给出了 MPFC 系统(2.2)的截断形式如下:

$$\frac{\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n)}{\Delta t} + \beta \psi(t_{n+1}) = M \Delta \mu(t_{n+1}) + G_\psi^{n+1}, \quad (4.1)$$

$$\mu(t_{n+1}) = (1 + \Delta)^2 \phi(t_{n+1}) + \frac{\tilde{r}(t_{n+1})}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} f(\phi(t_n)) + G_\mu^{n+1}, \quad (4.2)$$

$$\psi(t_{n+1}) = \frac{\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)}{\Delta t} + G_\phi^{n+1}, \quad (4.3)$$

$$\tilde{r}(t_{n+1}) - r(t_n) = \frac{\tilde{r}(t_{n+1})}{C} (f(\phi(t_n)), \phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)) + \Delta t G_{\tilde{r}}^{n+1}, \quad (4.4)$$

$$r(t_{n+1}) = \lambda_0^{n+1} \tilde{r}(t_{n+1}) + (1 - \lambda_0^{n+1}) \exp\left(\frac{E_1(\phi(t_{n+1}))}{C}\right) + G_r^{n+1}, \quad (4.5)$$

其中根据泰勒展开有

$$\begin{aligned} G_\psi^{n+1} &= \frac{\psi(t_{n+1}) - \psi(t_n)}{\Delta t} - \psi_t(t_{n+1}), \\ G_\mu^{n+1} &= \tilde{r}(t_{n+1}) \left(\frac{f(\phi(t_{n+1}))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_{n+1}))}{C}\right)} - \frac{f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} \right), \\ G_\phi^{n+1} &= \phi_t(t_{n+1}) - \frac{\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)}{\Delta t}, \\ G_{\tilde{r}}^{n+1} &= \frac{\tilde{r}(t_{n+1}) - r(t_n)}{\Delta t} - \tilde{r}_t(t_{n+1}) - \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\frac{r(s)}{C} - \frac{\tilde{r}(t_{n+1})}{C} \right) (f(\phi(s)), \phi_t(s)) ds \\ &\quad + \frac{\tilde{r}(t_{n+1})}{C \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[(f(\phi(s)), \phi_t(s)) - \left(f(\phi(t_n)), \frac{\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)}{\Delta t} \right) \right] ds, \\ G_r^{n+1} &= (1 - \lambda_0^{n+1}) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{r(s)}{C} \frac{d(E_1(\phi(s)))}{ds} ds + \lambda_0^{n+1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} r_t(s) ds. \end{aligned}$$

现在我们建立了系统(2.2)的数值解 ϕ^n 在时间上的一致 H^2 界。

定理 2. 令 ϕ^n 是系统(2.2)的解, 则存在一个正常数 D 使得

$$\|\phi^n\|_{H^2} \leq D.$$

证明。用 Hölder 不等式, 我们有

$$\|\phi^n\|^2 \leq \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 + \frac{1}{4}|\Omega|, \quad \|\nabla\phi^n\|^2 \leq \frac{1}{3}\|\Delta\phi^n\|^2 + \frac{3}{4}\|\phi^n\|^2$$

其中 $|\Omega|$ 是区域 Ω 的度量值。我们取 $\eta_1 = \frac{1}{4}, \eta_2 = \frac{1}{3}$, 我们有以下估计:

$$\begin{aligned} \hat{E}(\phi^n, r^n, \psi^n) &= \frac{1}{2}\|(1+\Delta)\phi^n\|^2 + \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 - \frac{\epsilon}{2}\|\phi^n\|^2 + \frac{1}{2M}\|\psi^n\|_{-1}^2 \\ &\geq \frac{1}{2}\|\phi^n\|^2 - \|\nabla\phi^n\|^2 + \frac{1}{2}\|\Delta\phi^n\|^2 + \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 - \frac{\epsilon}{2}\|\phi^n\|^2 \\ &= \frac{1}{8}(\|\phi^n\|^2 + \|\nabla\phi^n\|^2 + \|\Delta\phi^n\|^2) + \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 + \frac{3}{8}\|\Delta\phi^n\|^2 - \frac{9}{8}\|\nabla\phi^n\|^2 + \frac{3-4\epsilon}{8}\|\phi^n\|^2 \\ &\geq \frac{1}{8}\|\phi^n\|_{H^2}^2 + \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 - \frac{15+16\epsilon}{32}\left(\frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 + |\Omega|\right) \\ &= \frac{1}{8}\|\phi^n\|_{H^2}^2 + \frac{1}{4}\|\phi^n\|_{L^4}^4 - \frac{1}{4}\cdot\frac{15+16\epsilon}{32}\|\phi^n\|_{L^4}^4 - \frac{15+16\epsilon}{32}|\Omega| \\ &\geq \frac{1}{8}\|\phi^n\|_{H^2}^2 - |\Omega|. \end{aligned}$$

对于最后一个不等式, 我们实际上利用了这样的事实:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} - \frac{1}{4}\cdot\frac{15+16\epsilon}{32} &= \frac{1}{4}\cdot\frac{27-16\epsilon}{32} > 0, \\ \frac{15+16\epsilon}{32} &< 1. \end{aligned}$$

使用**定理 1**和初始假设 $\hat{E}(\phi^0, r^0, \psi^0) = \frac{1}{2}\|(1+\Delta)\phi^0\|^2 + \frac{1}{4}\|\phi^0\|_{L^4}^4 - \frac{\epsilon}{2}\|\phi^0\|^2 + \frac{1}{2M}\|\psi^0\|_{-1}^2 < D_0$, 我们得到

$$\|\phi^n\|_{H^2}^2 \leq 8\hat{E}(\phi^n, r^n, \psi^n) + 8|\Omega| \leq 8\hat{E}(\phi^0, r^0, \psi^0) + 8|\Omega| \leq 8(D_0 + |\Omega|).$$

令 $D = \sqrt{8(D_0 + |\Omega|)}$, 我们获得了所求结果。

为了给出误差估计, 我们假设系统(2.2)的解析解满足以下正则性条件。读者可以参考文献[23]关于MPFC方程的整体光滑解,

$$\zeta \in L^\infty(0, T; H^4(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; W^{1,\infty}(\Omega)), \quad (4.6)$$

$$\zeta_t, \zeta_{tt} \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega)), \quad \zeta_{ttt} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega)), \quad (4.7)$$

其中 $\zeta = \psi, \phi, \mu, r$ 。令 $\phi \lesssim v$ 代表一个正常数 C 不依赖于 t 和 n 使得 $\phi \leq Cv$ 。通过泰勒展开, 我们可以很容易地得到截断误差的如下估计。

引理 1. 在正则性假设(4.6)和(4.7)下, 截断误差满足:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left(\|G_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \|G_\phi^{n+1}\|_1^2 + \|G_\mu^{n+1}\|_1^2 + \|G_{\tilde{r}}^{n+1}\|_1^2 + \|G_r^{n+1}\|_r^2 \right) \lesssim \Delta t^2. \quad (4.8)$$

证明。由泰勒展开及正则性假设(4.6)~(4.7), 结合文献[24]中定理 3.1 的结论, 各截断误差项均具有一阶精度, 求和后即得所需估计。

我们定义了误差方程对 $n = 0, 1, 2, \dots, N$

$$\begin{aligned} e_\phi^n &= \phi(t_n) - \phi^n, & e_\mu^n &= \mu(t_n) - \mu^n, & e_r^n &= r(t_n) - r^n, \\ e_\psi^n &= \psi(t_n) - \psi^n, & e_{\tilde{r}}^n &= \tilde{r}(t_n) - \tilde{r}^n. \end{aligned} \quad (4.9)$$

从截断误差方程(4.1)~(4.5)中减去一阶 R-ESAV 格式的离散方程, 可以得到以下误差方程, 对于 $n \geq 0$:

$$\frac{e_\psi^{n+1} - e_\psi^n}{\Delta t} + \beta e_\psi^{n+1} = M\Delta e_\mu^{n+1} + G_\mu^{n+1}, \tag{4.10}$$

$$e_\mu^{n+1} = (1 + \Delta)^2 e_\phi^{n+1} + \tilde{r}^{n+1} \left(\frac{f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} - \frac{f(\phi^n)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)} \right) + \frac{e_r^{n+1} f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} + G_\mu^{n+1}, \tag{4.11}$$

$$e_\psi^{n+1} = \frac{e_\phi^{n+1} - e_\phi^n}{\Delta t} + G_u^{n+1}, \tag{4.12}$$

$$e_r^{n+1} - e_r^n = \left(\frac{\tilde{r}(t_{n+1})f(\phi(t_n))}{C} - \frac{\tilde{r}^{n+1}f(\phi^n)}{C}, \phi(t_{n+1}) - \phi(t_n) \right) + \frac{\tilde{r}(t_{n+1})}{C} (f(\phi(t_n)), e_\phi^{n+1} - e_\phi^n) + \Delta t G_r^{n+1}, \tag{4.13}$$

$$e_r^{n+1} - \lambda_0^{n+1} e_r^{n+1} = -(1 - \lambda_0^{n+1}) \left(\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_{n+1}))}{C}\right) - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) \right) + G_r^{n+1}, \tag{4.14}$$

通过对 $\|\phi^n\|_{L^\infty}$ 应用数学归纳法, 我们得到了一阶 R-ESAV 格式的误差估计, 并利用范数来控制方程中的非线性项。

定理 3. 在正则性假设(4.6)和(4.7), 令 $\psi^n, \phi^n, \mu^n, r^n, \hat{r}^n$ 是系统(2.2)的解, 我们有以下误差估计:

$$\|e_\phi^N\| + \left(\Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \sup_{0 \leq n \leq N} \|e_r^n\| \lesssim \Delta t. \tag{4.15}$$

证明。我们对(4.10)应用 Δ^{-1} 并且与 $\Delta t e_\psi^{n+1}$ 作 L^2 的内积。利用(4.11)和(4.12), 我们可以得到

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2M} \left(\|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 - \|e_\psi^n\|_{-1}^2 + \|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_{-1}^2 \right) + \frac{\beta \Delta t}{M} \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \\ & + \frac{1}{2} \left(\|(1 + \Delta) e_\phi^{n+1}\|^2 - \|(1 + \Delta) e_\phi^n\|^2 + \|(1 + \Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 \right) \\ & = -\frac{\Delta t}{M} \left(\Delta^{-1} G_\mu^{n+1}, e_\psi^{n+1} \right) - \tilde{r}^{n+1} \Delta t \left(\frac{f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} - \frac{f(\phi^n)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)}, e_\psi^{n+1} \right) \\ & - \Delta t \left(\frac{e_r^{n+1}}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} f(\phi(t_n)), e_\psi^{n+1} \right) - \Delta t \left((1 + \Delta)^2 e_\phi^{n+1}, G_\phi^{n+1} \right) - \Delta t \left(G_\mu^{n+1}, e_\psi^{n+1} \right). \end{aligned} \tag{4.16}$$

接着将(4.13)与 e_r^{n+1} 作内积, 我们可以获得

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}|e_r^{n+1}|^2 - \frac{1}{2}|e_r^n|^2 + \frac{1}{2}|e_r^{n+1} - e_r^n|^2 \\
&= \frac{\Delta t \tilde{r}(t_{n+1}) e_r^{n+1}}{C} (f(\phi(t_n)), e_\psi^{n+1}) + e_r^{n+1} \left(\frac{\tilde{r}(t_{n+1}) f(\phi(t_n))}{C} - \frac{\tilde{r}^{n+1} f(\phi^n)}{C}, \phi^{n+1} - \phi^n \right) \\
& \quad + \Delta t e_r^{n+1} G_r^{n+1} - \frac{\Delta t e_r^{n+1}(t_{n+1})}{C} (f(\phi(t_n)), G_\phi^{n+1}).
\end{aligned} \tag{4.17}$$

结合(4.16)和(4.17), 我们得到

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2M} \left(\|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 - \|e_\psi^n\|_{-1}^2 + \|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_{-1}^2 \right) + \frac{1}{2}|e_r^{n+1}|^2 - \frac{1}{2}|e_r^n|^2 + \frac{1}{2}|e_r^{n+1} - e_r^n|^2 \\
& + \frac{\beta \Delta t}{M} \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \frac{1}{2} \left(\|(1+\Delta)e_\phi^{n+1}\|^2 - \|(1+\Delta)e_\phi^n\|^2 + \|(1+\Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 \right) \\
& := J_1 + J_2,
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
J_1 &= -\frac{\Delta t}{M} \left(\Delta^{-1} G_\psi^{n+1}, e_\psi^{n+1} \right) - \Delta t e_r^{n+1} \left(\frac{f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)}, e_\psi^{n+1} \right) \\
& \quad - \Delta t \left((1+\Delta)^2 e_\phi^{n+1}, G_\phi^{n+1} \right) - \Delta t \left(G_\mu^{n+1}, e_\psi^{n+1} \right) \\
& \quad - \frac{\Delta t \tilde{r}(t_{n+1}) e_r^{n+1}}{C} (f(\phi(t_{n+1})), e_\psi^{n+1}) \\
& \quad - \frac{\Delta t \tilde{r}(t_{n+1}) e_r^{n+1}}{C} (f(\phi(t_n)), G_\psi^{n+1}) + \Delta t e_r^{n+1} G_r^{n+1}, \\
J_2 &= -\Delta t \tilde{r}^{n+1} \left(\frac{f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} - \frac{f(\phi^n)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)}, e_\psi^{n+1} \right) \\
& \quad + e_r^{n+1} \left(\frac{\tilde{r}(t_{n+1}) f(\phi(t_n))}{C} - \frac{\tilde{r}^{n+1} f(\phi^n)}{C}, \phi^{n+1} - \phi^n \right).
\end{aligned}$$

现在我们对 J_1 和 J_2 作如下估计。首先, 我们试着证明

$$\|\phi^n\|_{L^\infty} \leq \|\phi(t)\|_{L^\infty(L^\infty)} + 1 \tag{4.18}$$

通过数学归纳法。由于 $\phi_0 = \phi(t_0)$, 方程(4.18)对 $n=0$ 时显然成立。接着, 在归纳假设(4.18)对所有 $0 \leq n \leq m$ 成立的情况下, 我们得到了数值解的误差估计, 其中 m 是一个正整数。我们将展示如果(4.18)对所有 $0 \leq n \leq m$ 成立, 那么它也一定对 $n=m+1$ 成立。

首先, 对(4.18)应用归纳假设并且注意到 $\exp\left(\frac{E_1(\cdot)}{C}\right) > 0$, 我们应用柯西-施瓦兹不等式和 Young 不等式可以获得

$$\begin{aligned}
 &-\Delta t \left((1+\Delta) e_{\phi}^{n+1}, G_{\phi}^{n+1} \right) \leq C_1 \Delta t \|e_{\phi}^{n+1}\|^2 + \Delta t \|G_{\phi}^{n+1}\|^2, \\
 &-\Delta t \frac{e_{\tilde{r}}^{n+1}}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} \left(f(\phi(t_n)), e_{\psi}^{n+1} \right) \leq C_1 \Delta t |e_{\tilde{r}}^{n+1}|^2 + \Delta t \|e_{\psi}^{n+1}\|^2, \\
 &-\Delta t \left(G_{\mu}^{n+1}, e_{\psi}^{n+1} \right) \leq C_1 \Delta t \|G_{\mu}^{n+1}\|^2 + \Delta t \|e_{\psi}^{n+1}\|^2, \\
 &e_{\tilde{r}}^{n+1} G_{\tilde{r}}^{n+1} \leq C_1 \Delta t |e_{\tilde{r}}^{n+1}|^2 + \Delta t |G_{\tilde{r}}^{n+1}|^2, \\
 &-\frac{\Delta t}{M} \left(\Delta^{-1} G_{\psi}^{n+1}, e_{\psi}^{n+1} \right) \leq C_1 \Delta t \|G_{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2 + \Delta t \|e_{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2.
 \end{aligned}$$

结合上述这些不等式, 我们有

$$J_1 \leq \Delta t \left(\|e_{\psi}^{n+1}\|^2 + |e_{\tilde{r}}^{n+1}|^2 + \|e_{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2 + \|e_{\phi}^{n+1}\|_2^2 \right) + C_1 \left(\|G_{\mu}^{n+1}\|^2 + \|G_{\phi}^{n+1}\|_2^2 + |G_{\tilde{r}}^{n+1}|^2 + \|G_{\psi}^{n+1}\|_{-1}^2 \right). \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\nabla f(\phi(t_n))}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)} - \frac{\nabla f(\phi^n)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)} &= \frac{\nabla f(\phi^n) \exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right) - \nabla f(\phi^n) \exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right) \exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)} \\
 &+ \frac{\nabla f(\phi(t_n)) - \nabla f(\phi^n) \exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right)}{\exp\left(\frac{E_1(\phi(t_n))}{C}\right) \exp\left(\frac{E_1(\phi^n)}{C}\right)} \\
 &:= H_1 + H_2.
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

因为 $f(\cdot)$ 是 Lipschitz 连续的并且 $\exp\left(\frac{E_1(\cdot)}{C}\right) > 0$, 应用(4.6), (4.7)和(4.18), 我们可以得到以下 H_1 和 H_2 的估计:

$$\|H_1\| \lesssim \|\nabla f(\phi^n)\| \|e_{\phi}^n\| \lesssim \|e_{\phi}^n\|, \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned}
 \|H_2\| &\leq \left\| \nabla \left(f(\phi(t_n)) - f(\phi^n) \right) \right\| = \left\| f'(\phi(t_n)) \nabla \phi(t_n) - f'(\phi^n) \nabla \phi^n \right\| \\
 &\lesssim \left\| \left(f'(\phi(t_n)) - f'(\phi^n) \right) \nabla \phi(t_n) \right\| + \left\| f'(\phi^n) \right\|_{L^\infty} \|\nabla e_{\phi}^n\| \\
 &\lesssim \|e_{\phi}^n\| + \|\nabla e_{\phi}^n\|.
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

结合(4.20)~(4.22), 应用 Poincaré 不等式, 我们可以获得

$$\begin{aligned}
 &\left\| \frac{\nabla f(\phi(t_n)) \tilde{r}(t_{n+1}) - \nabla f(\phi^n) \tilde{r}^{n+1}}{C} \right\| \\
 &= \left\| \frac{\nabla f(\phi^n) \tilde{r}(t_{n+1}) - \nabla f(\phi^n) \tilde{r}^{n+1}}{C} \right\| + \left\| \frac{(\nabla f(\phi(t_n)) - \nabla f(\phi^n)) \tilde{r}(t_{n+1})}{C} \right\| \\
 &\leq \|e_{\tilde{r}}^{n+1}\|^2 + \|\nabla e_{\phi}^n\|^2 + \|e_{\phi}^n\|^2.
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

再结合(4.6)和(4.7), 这意味着

$$J_2 \lesssim \Delta t \left(|e_r^{n+1}|^2 + \|e_\phi^{n+1}\|^2 + \|\nabla e_\phi^{n+1}\|^2 + \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \right). \quad (4.24)$$

结合(4.19)和(4.24), 我们可以得到

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2M} \left(\|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 - \|e_\psi^n\|_{-1}^2 + \|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_{-1}^2 \right) + \frac{1}{2} |e_r^{n+1}|^2 - \frac{1}{2} |e_r^n|^2 + \frac{1}{2} |e_r^{n+1} - e_r^n|^2 \\ & + \frac{\beta \Delta t}{M} \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \frac{1}{2} \left(\|(1+\Delta)e_\phi^{n+1}\|^2 - \|(1+\Delta)e_\phi^n\|^2 + \|(1+\Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 \right) \\ & \leq \Delta t \left(|e_r^{n+1}|^2 + \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \|e_\phi^{n+1}\|_{-1}^2 \right) + C_1 \Delta t \left(\|G_\mu^{n+1}\|^2 + \|G_\phi^{n+1}\|_{-1}^2 + \|G_\tau^{n+1}\|^2 + \|G_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

对 n 从 0 到 m 求和, 并且应用离散 Gronwall 不等式, 则存在一个数 Δt_1 使得 $\Delta t \leq \Delta t_1$, 我们有以下估计:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2M} \|e_\psi^{m+1}\|_{-1}^2 + \frac{1}{2} |e_r^{m+1}|^2 + \frac{1}{2} \|(1+\Delta)e_\phi^{m+1}\|^2 \right) \\ & + \sum_{n=0}^m \left(\|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_{-1}^2 + |e_r^{n+1} - e_r^n|^2 + \|(1+\Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 + \frac{\beta \Delta t}{M} \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 \right) \leq C_2 \Delta t^2. \end{aligned} \quad (4.26)$$

对系统(2.2)中的第二个方程应用 H^2 的椭圆正则性并且 $\|\cdot\|_2 \leq \|\cdot\|$, 存在一个不依赖于 n 的数 $C_3 > 0$ 使得

$$\begin{aligned} \|\phi^{m+1}\|_2 & \lesssim \|\mu^{m+1}\| + \|f(\phi^m)\| + \|\psi^{m+1}\| \\ & \lesssim \left\| \frac{\Delta^{-1}\psi^{m+1} - \Delta^{-1}\psi^m}{\Delta t} \right\| + \|\Delta^{-1}\psi^{m+1}\| + \|f(\phi^m)\| + \|\psi^{m+1}\| \\ & \lesssim \left\| \frac{\Delta^{-1}(\psi(t_{m+1}) - \psi(t_m))}{\Delta t} \right\| + \left\| \frac{e_\psi^{m+1} - e_\psi^m}{\Delta t} \right\|_{-1} + \|f(\phi^m)\| + \|e_\psi^{m+1}\| + \|\psi(t_{m+1})\| \lesssim C_3 \end{aligned} \quad (4.27)$$

从(4.6), (4.7)和(4.27)中, 我们知道

$$\|e_\phi^{m+1}\|_2 \leq \|\phi^{m+1}\|_2 + \|\phi(t_{m+1})\|_2 \leq C_4. \quad (4.28)$$

此外, 根据(4.26), (4.28)和 Sobolev 嵌入定理, 我们可以获得

$$\begin{aligned} \|\phi^{m+1}\|_{L^\infty} & = \|e_\phi^{m+1}\|_{L^\infty} + \|\phi(t_{m+1})\|_{L^\infty} \\ & \leq C_\Omega \|e_\phi^{m+1}\|_2^{\frac{1}{2}} \|e_\phi^{m+1}\|_2^{\frac{1}{4}} + \|\phi(t_{m+1})\|_{L^\infty}, \\ & \leq C_\Omega \sqrt[4]{C_1 \sqrt{\Delta t} \sqrt{C_4}} + \|\phi(t_{m+1})\|_{L^\infty}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

其中 C_Ω 是一个正常数依赖于 Ω 。因此, 我们可以找到一个 $\Delta t_2 > 0$ ($\Delta t_2 < \Delta t$) 使得 $\Delta t < \Delta t_2$

$$\|\phi^{m+1}\|_{L^\infty} \leq \|\phi(t)\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} + 1, \quad (4.30)$$

在 $\Delta t \geq \Delta t_2$ 的条件下, 根据能量稳定性, (4.6)和(4.7), 对某些 $C_5 > 0$, 我们有

$$\begin{aligned} & \max_{0 \leq n \leq N-1} \left(\|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + |e_r^{n+1}|^2 + \|(1+\Delta)e_\phi^{n+1}\|^2 \right) \\ & + \sum_{n=0}^{N-1} \left(\|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_{-1}^2 + |e_r^{n+1} - e_r^n|^2 + \Delta t \|e_\psi^{n+1}\|_{-1}^2 + \|(1+\Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 \right) \\ & \leq C_5 \leq C_5 \Delta t_2^{-2} \Delta t^2, \end{aligned} \quad (4.31)$$

结合(4.26)和(4.31), 我们对导出的任意 Δt 有

$$\begin{aligned} & \max_{0 \leq n \leq N-1} \left(\|e_\psi^{n+1}\|_2^2 + |e_\tau^{n+1}|^2 + \|(1+\Delta)e_\phi^{n+1}\|^2 \right) \\ & + \sum_{n=0}^{N-1} \left(\|e_\psi^{n+1} - e_\psi^n\|_2^2 + |e_\tau^{n+1} - e_\tau^n|^2 + \Delta t \|e_\psi^{n+1}\|_2^2 + \|(1+\Delta)(e_\phi^{n+1} - e_\phi^n)\|^2 \right) \\ & \leq (C_2 + C_5 \Delta t^2) \Delta t^2 \leq C \Delta t^2, \end{aligned} \tag{4.32}$$

根据指数函数的 Lipschitz 连续性以及 $E(\phi)$ 的光滑性, 利用 Sobolev 嵌入定理, 对任意正常数 C_6 , 我们有

$$\left| \exp\left(\frac{E_1(\phi(t_{n+1}))}{C}\right) - \exp\left(\frac{E_1(\phi^{n+1})}{C}\right) \right| \leq C_6 |E_1(\phi(t_{n+1})) - E_1(\phi^{n+1})| \leq C_6 \|e_\phi^{n+1}\|_{L^2} \tag{4.33}$$

将(4.31)代入到(4.14)中并取 L^∞ 范数:

$$\|e_r^{n+1}\|_{L^\infty} \leq \lambda_0^{n+1} \|e_r^{n+1}\|_{L^\infty} + (1-\lambda_0)^{n+1} C_6 \|e_\phi^{n+1}\|_{L^2} + \|G_r^{n+1}\|_{L^\infty} \tag{4.34}$$

根据定理 2 以及范数的基本性质 $\|a-b\|_{L^\infty} \geq \|a\|_{L^\infty} - \|b\|_{L^\infty}$, 则有

$$\|e_r^{n+1}\|_{L^\infty} \leq C_6 \|e_r^{n+1}\|_{L^\infty} + C_6 \|e_\phi^{n+1}\|_{L^2} + C_6 \Delta t \tag{4.35}$$

所以

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left(\|e_r^{n+1}\|^2 - \|e_r^n\|^2 \right) & \leq C_6 \|e_r^{n+1}\|_{L^\infty} \left(\|e_r^n\|_{L^\infty} + \|e_\phi^{n+1}\|^2 + \Delta t \right) \\ & \leq C_6 \left(\|e_r^{n+1}\|_{L^\infty}^2 + \|e_\phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \Delta t^2 \right) \end{aligned} \tag{4.36}$$

所以

$$\|e_r^{n+1}\|_{L^\infty}^2 \leq C_6 \Delta t^2$$

即

$$\sup_{0 \leq n \leq N} \|e_r^n\|_{L^\infty} \leq C \Delta t \tag{4.37}$$

结合(4.33)和(4.37), 这意味着(4.15)成立。

5. 数值模拟

在这一部分中, 我们提供了数值例子来验证我们的理论分析, 包括所提出的 R-ESAV 格式的能量稳定性和收敛速度。通常, 空间变量可以用各种方法离散, 如有限元方法, 谱方法, 有限差分法[5][24]等。上一节的证明还表明, 全离散近似是无条件能量稳定的。对于下面给出的数值试验, 我们使用傅里叶谱方法对空间变量进行高效计算。

精确度测试

Table 1. L2 errors and convergence orders of the first-order R-ESAV scheme (T = 1)

表 1. 一阶 R-ESAV 格式的 L2 误差和收敛阶(T = 1)

时间步长 Δt	L2 误差	收敛阶
1.00000e-02	0.00e+00	0.00
5.00000e-03	1.81e-04	1.00
2.50000e-03	1.00e-04	1.00

续表

1.25000e-03	5.30e-05	1.00
6.25000e-04	2.74e-05	1.00
3.12500e-04	1.39e-05	1.00

首先, 测试时间收敛阶, 我们使用 $\Omega = [0, 128] \times [0, 128]$ 傅里叶方法来进行空间离散使产生的误差可以被忽略。我们取 $M = 0.1, \epsilon = 0.025, \beta = 1, T = 1$, 并假设系统的精确解为:

$$\phi(x, y, t) = \sin x \cos y \cos t$$

如表 1 给出了一阶格式在 $T = 1$ 时的误差和收敛速度, 我们可以观察到我们的格式在时间上给出了期望的精度。

能量稳定性测试

我们取域 Ω 作为平方 $(0, 2\pi) \times (0, 2\pi)$ 除以 128×128 。参数设置为 $M = 0.1, \epsilon = 0.025$ 并且初始条件为

$$\phi(x, y) = \phi_0 + \eta \text{Rand}(x, y), \forall (x, y) \in \Omega$$

其中 $\text{Rand}(x, y)$ 是 $[-1, 1]$ 均值为 0 的随机数。

设 $\phi_0 = -0.05$ 和 $\eta = 0.001$ 。下面我们展示了在不同参数下的一阶格式的能量稳定测试图, 见图 1、图 2。

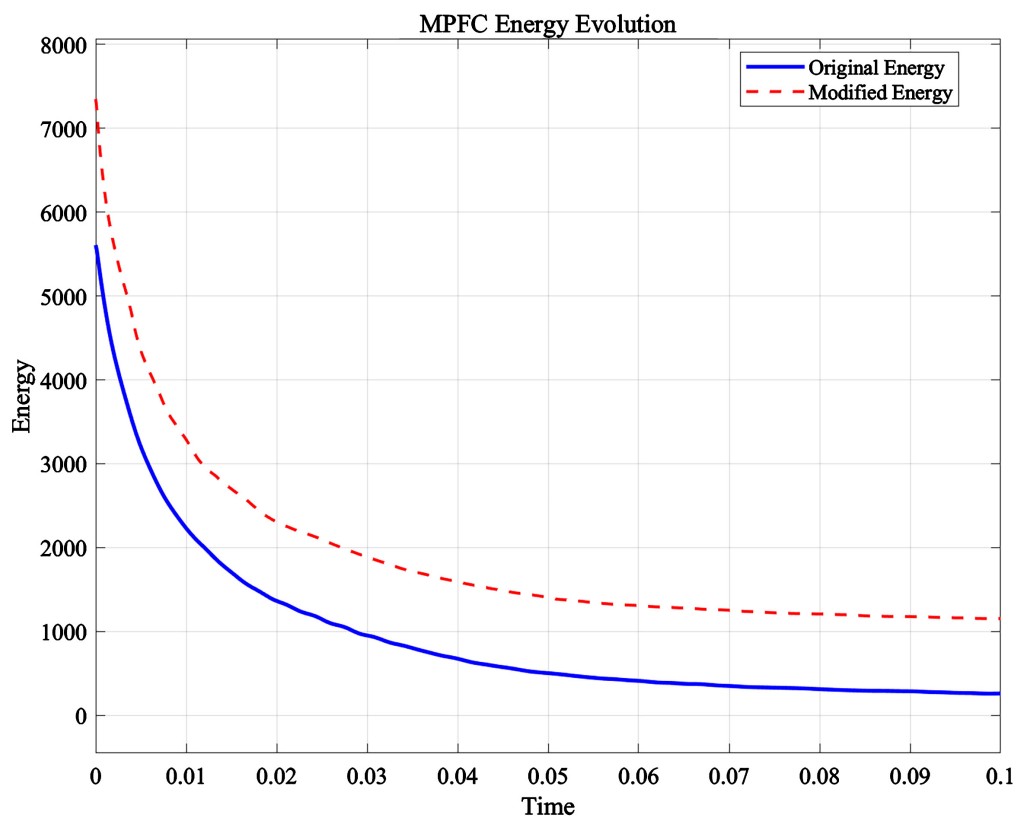


Figure 1. Energy stability diagram of the first-order RESAV scheme for $\beta = 10, T = 0.1$

图 1. 一阶 RESAV 能量稳定图 $\beta = 10, T = 0.1$

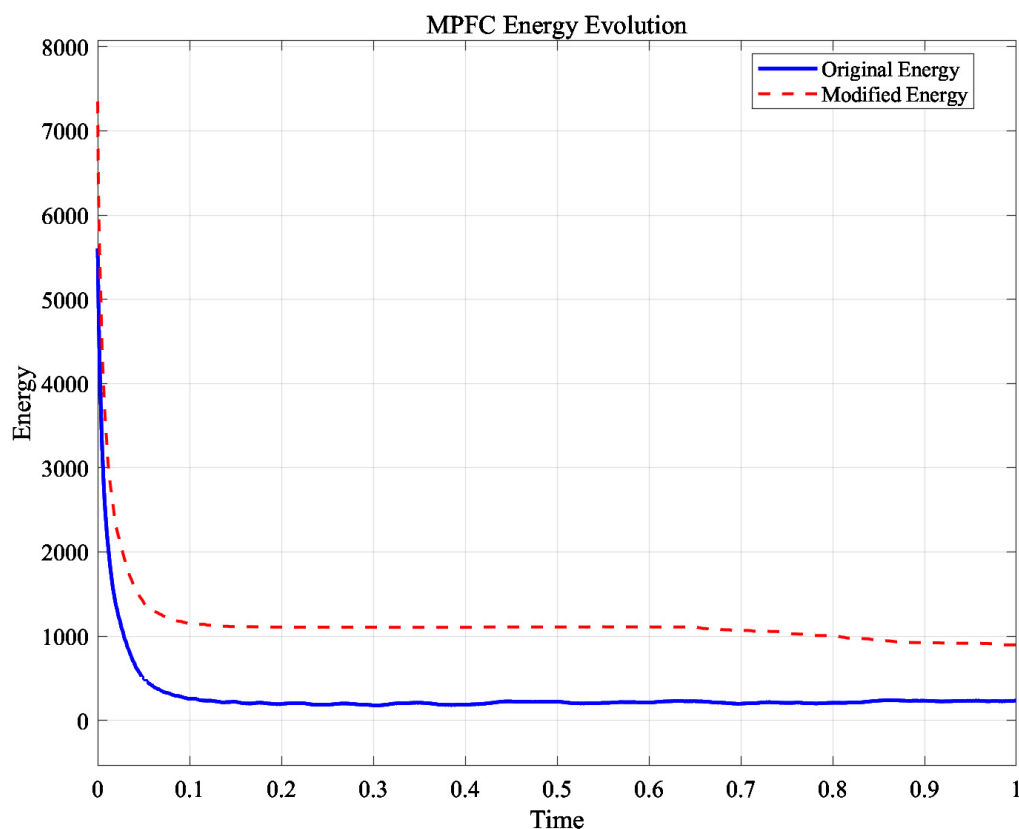


Figure 2. Energy stability diagram of the first-order RESAV scheme for $\beta = 0.05$, $T = 1$

图 2. 一阶 RESAV 能量稳定图 $\beta = 0.05$, $T = 1$

参考文献

- [1] Elder, K. and Grant, M. (2004) Modeling Elastic and Plastic Deformations in Nonequilibrium Processing Using Phase Field Crystals. *Physical Review E*, **70**, Article 051605.
- [2] Elder, K.R., Katakowski, M., Haataja, M. and Grant, M. (2002) Modeling Elasticity in Crystal Growth. *Physical Review Letters*, **88**, Article 245701. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.88.245701>
- [3] Stefanovic, P., Haataja, M. and Provatas, N. (2006) Phase-field Crystals with Elastic Interactions. *Physical Review Letters*, **96**, Article 225504. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.225504>
- [4] Stefanovic, P., Haataja, M. and Provatas, N. (2009) Phase Field Crystal Study of Deformation and Plasticity in Nanocrystalline Materials. *Physical Review E*, **80**, Article 046107. <https://doi.org/10.1103/physreve.80.046107>
- [5] Baskaran, A., Hu, Z., Lowengrub, J.S., Wang, C., Wise, S.M. and Zhou, P. (2013) Energy Stable and Efficient Finite-Difference Nonlinear Multigrid Schemes for the Modified Phase Field Crystal Equation. *Journal of Computational Physics*, **250**, 270-292. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.04.024>
- [6] Wu, K.A., Adland, A. and Karma, A. (2010) Phase-Field-Crystal Model for FCC Ordering. *Physical Review E*, **81**, Article 061601. <https://doi.org/10.1103/physreve.81.061601>
- [7] Elder, K.R., Provatas, N., Berry, J., Stefanovic, P. and Grant, M. (2007) Phase-Field Crystal Modeling and Classical Density Functional Theory of Freezing. *Physical Review B*, **75**, Article 064107. <https://doi.org/10.1103/physrevb.75.064107>
- [8] Lee, H.G., Shin, J. and Lee, J. (2017) First- and Second-Order Energy Stable Methods for the Modified Phase Field Crystal Equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **321**, 1-17. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.03.033>
- [9] Shin, J., Lee, H.G. and Lee, J. (2016) First and Second Order Numerical Methods Based on a New Convex Splitting for Phase-Field Crystal Equation. *Journal of Computational Physics*, **327**, 519-542. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.053>

-
- [10] Li, Q., Mei, L., Yang, X., *et al.* (2019) Efficient Numerical Schemes with Unconditional Energy Stabilities for the Modified Phase Field Crystal Equation. *Advances in Computational Mathematics*, **45**, 1551-1580. <https://doi.org/10.1007/s10444-019-09678-w>
- [11] Liu, Z. and Li, X. (2020) Efficient Modified Stabilized Invariant Energy Quadraticization Approaches for Phase-Field Crystal Equation. *Numerical Algorithms*, **85**, 107-132. <https://doi.org/10.1007/s11075-019-00804-9>
- [12] Yu, H. and Yang, X. (2017) Numerical Approximations for a Phase-Field Moving Contact Line Model with Variable Densities and Viscosities. *Journal of Computational Physics*, **334**, 665-686. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.01.026>
- [13] Fu, Z. and Yang, J. (2022) Energy-Decreasing Exponential Time Differencing Runge-Kutta Methods for Phase-Field Models. *Journal of Computational Physics*, **454**, Article 110943. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.110943>
- [14] Li, X. and Shen, J. (2021) Efficient Linear and Unconditionally Energy Stable Schemes for the Modified Phase Field Crystal Equation. *Science China Mathematics*, **64**, 1-18.
- [15] Shen, J., Xu, J. and Yang, J. (2018) The Scalar Auxiliary Variable (SAV) Approach for Gradient Flows. *Journal of Computational Physics*, **353**, 407-416. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.10.021>
- [16] Wang, M., Huang, Q. and Wang, C. (2021) A Second Order Accurate Scalar Auxiliary Variable (SAV) Numerical Method for the Square Phase Field Crystal Equation. *Journal of Scientific Computing*, **88**, Article No. 33. <https://doi.org/10.1007/s10915-021-01487-y>
- [17] Yang, J. and Kim, J. (2022) Energy Dissipation-Preserving Time-Dependent Auxiliary Variable Method for the Phase-Field Crystal and the Swift-Hohenberg Models. *Numerical Algorithms*, **89**, 1389-1418.
- [18] Zhang, J. and Yang, X. (2019) Efficient Second Order Unconditionally Stable Time Marching Numerical Scheme for a Modified Phase-Field Crystal Model with a Strong Nonlinear Vacancy Potential. *Computer Physics Communications*, **245**, Article 106860. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.106860>
- [19] Liu, Z. and Li, X. (2020) The Exponential Scalar Auxiliary Variable (E-SAV) Approach for Phase Field Models and Its Explicit Computing. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **42**, B630-B655. <https://doi.org/10.1137/19m1305914>
- [20] Zhang, Y. and Shen, J. (2022) A Generalized SAV Approach with Relaxation for Dissipative Systems. *Journal of Computational Physics*, **464**, Article 111311. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111311>
- [21] Liu, Z. and Li, X. (2021) A Highly Efficient and Accurate Exponential Semi-Implicit Scalar Auxiliary Variable (ESI-SAV) Approach for Dissipative System. *Journal of Computational Physics*, **447**, Article 110703. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110703>
- [22] Liu, Z., Zheng, N. and Zhou, Z. (2023) A Highly Efficient and Accurate New SAV Approach for the Modified Phase Field Crystal Model. *Numerical Algorithms*, **93**, 543-562. <https://doi.org/10.1007/s11075-022-01426-4>
- [23] Wang, C. and Wise, S.M. (2010) Global Smooth Solutions of the Three-Dimensional Modified Phase Field Crystal Equation. *Methods and Applications of Analysis*, **17**, 191-212. <https://doi.org/10.4310/maa.2010.v17.n2.a4>
- [24] Yang, X., Zhao, J. and Wang, Q. (2017) Numerical Approximations for the Molecular Beam Epitaxial Growth Model Based on the Invariant Energy Quadraticization Method. *Journal of Computational Physics*, **333**, 104-127.