

AMS subject classification: 65M06, 65M15, 41A05, 41A25

Линейная конечно-разностная схема второго порядка для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности*

Ц. Ду, Т. Хоу

School of Mathematics and Statistics, Beihua University, Jilin 132013, Jilin, China

E-mails: dzrdmailbox@foxmail.com (Du Z.), 270854140@qq.com (Hou T.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 17, 2024.

Ду Ц., Хоу Т. Линейная конечно-разностная схема второго порядка для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2024. — Т. 27, № 4. — С. 379–391.

В данной работе предлагается линейная конечно-разностная схема второго порядка для уравнения Аллена–Кана с общей положительной мобильностью. Для временной дискретизации используется схема Кранка–Николсона (КН) и формула Тейлора, а для пространственной аппроксимации — метод центральных конечных разностей. Обсуждаются дискретный принцип максимума (ПМ), дискретная энергетическая устойчивость и оценка ошибки в L^∞ -норме. Представлены некоторые численные примеры для проверки теоретических результатов.

DOI: 10.15372/SJNM20240402

EDN: JKLXIO

Ключевые слова: уравнение Аллена–Кана, коэффициент мобильности, принцип максимума, энергетическая устойчивость, оценка ошибки.

Du Z., Hou T. A linear second-order finite difference scheme for the Allen–Cahn equation with a general mobility // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci.—Novosibirsk, 2024. — Vol. 27, № 4. — P. 379–391.

In this paper, a linear second-order finite difference scheme is proposed for the Allen–Cahn equation with a general positive mobility. The Crank–Nicolson scheme and Taylor’s formula are used for temporal discretization, and the central finite difference method is used for spatial approximation. The discrete maximum bound principle (MBP), the discrete energy stability and L^∞ -norm error estimation are discussed, respectively. Finally, some numerical examples are presented to verify our theoretical results.

Keywords: Allen–Cahn equation, general mobility, maximum bound principle, energy stability, error estimate.

1. Введение

В этой статье интерес для нас представляет следующее уравнение Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности $M(\phi) \geq M_0 > 0$:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -M(\phi) (-\varepsilon^2 \Delta \phi + F'(\phi)), & (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T], \\ \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \quad (1)$$

*Работа поддержана Фондом естественных наук провинции Цзилинь (проект № 20230101279JC).

Здесь Ω — ограниченная по Липшицу область в \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$). Параметр $T > 0$ обозначает конечное время, $\phi(\mathbf{x}, t)$ — неизвестная функция и ε — положительный параметр, называемый параметром ширины диффузного интерфейса. $F(\phi) = \frac{1}{4}(1 - \phi^2)^2$ — функция двухъямного потенциала, $F'(\phi) = \phi^3 - \phi$ и $F''(\phi) = 3\phi^2 - 1$. Обычно считается, что задача (1) подчиняется однородному граничному условию Неймана, периодическому или однородному граничному условию Дирихле. Уравнение Аллена–Кана (1) сохраняет два присущих ему свойства. Одно из них — ПМ, т. е. если $|\phi(\mathbf{x}, 0)| \leq 1$ для всех $\mathbf{x} \in \Omega$, то $|\phi(\mathbf{x}, t)| \leq 1$ для всех $\mathbf{x} \in \Omega$ и $t > 0$. Для уравнения Аллена–Кана (1) очень важно разработать численные схемы, сохраняющие ПМ на дискретном уровне. Поскольку численные схемы, не имеющие этого физического свойства, приведут к отрицательному коэффициенту мобильности $M(\phi)$ (например, $M(\phi) = 1 - \phi^2$) и численное моделирование не будет успешным. Другое свойство — диссипация энергии, а именно

$$\frac{d}{dt}E(\phi) = - \int_{\Omega} M(\phi)\mu^2 d\mathbf{x} \leq 0,$$

где свободная энергия определяется следующим образом:

$$E(\phi) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) \right) d\mathbf{x}.$$

В последние десять лет много работ [1, 6, 7, 9–13] было посвящено разработке пошагового расчета с сохранением ПМ для уравнения Аллена–Кана, особенно для случаев с постоянным коэффициентом мобильности. Среди существующих работ Тан с соавторами предложили линейные стабилизированные полунеявные схемы первого порядка для уравнения Аллена–Кана (1) в [11] и для обобщенного случая с членом адвекции в [10]. Эти схемы безусловно сохраняют дискретный ПМ в обоих случаях и энергетическую устойчивость в случае с постоянным коэффициентом мобильности. Хоу с соавторами [2] разработали нелинейную схему Кранка–Николсона второго порядка для дробного по пространству уравнения Аллена–Кана и обсудили дискретный ПМ и энергетическую устойчивость. Ляо с соавторами [8] предложили нелинейную полностью неявную двухшаговую схему BDF (“backward differentiation formula” или формула обратного дифференцирования) второго порядка с переменным шагом по времени, и было доказано сохранение дискретного ПМ и энергетической устойчивости при некоторых ограничениях на размер временного шага и соотношение двух последовательных временных шагов. Хоу с соавторами [3] исследовали конечно-разностную схему второго порядка с двумя параметрами для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности. Эта схема будет линейной или безусловно энергетически устойчивой за счет выбора различных параметров. Совсем недавно Хоу с соавторами [5] предложили линейную устойчивую схему BDF2 с переменным размером временного шага для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности и доказали дискретный ПМ при некоторых ограничениях на размеры временного шага и соответствующие отношения временных шагов. Хоу с соавторами [4] разработали линейную схему Кранка–Николсона с двойной устойчивостью для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности и доказали, что она безусловно сохраняет ПМ. Однако энергетическая устойчивость схем, предлагаемых в [4, 5], получена только в том смысле, что дискретная свободная энергия равномерно ограничена энергией в начальный момент времени плюс постоянная величина.

Основываясь на предыдущих работах [3, 4], в данной статье предложена и проанализирована линеаризованная конечно-разностная схема второго порядка для уравнения

Аллена–Кана (1) для общего случая коэффициента мобильности. Обсуждаются дискретный ПМ, дискретная энергетическая устойчивость и оценка ошибки в L^∞ -норме. С помощью численных результатов показано, что предлагаемая схема очень эффективна (на каждом временном уровне необходимо решить только два уравнения Пуассона).

Статья построена следующим образом. В пункте 2 путем явной трактовки коэффициента мобильности $M(\phi)$ мы представляем полностью дискретную линейную конечно-разностную схему для уравнения (1) на основе схемы Кранка–Николсона и формулы Тейлора. В этом пункте рассматриваются также дискретный ПМ и энергетическая устойчивость. В п. 3 получена оценка дискретной ошибки в L^∞ -норме на основе установленного дискретного ПМ. В п. 4 приводятся несколько численных экспериментов для проверки теоретических результатов. В последнем пункте мы подводим итоги полученных результатов и обсуждаем некоторые их возможные будущие расширения.

2. Полностью дискретная конечно-разностная схема

Без потери общности рассмотрим двумерную задачу (1) только с периодическим граничным условием. Пусть $\Omega = (0, L) \times (0, L)$ и $h = L/K$.

2.1. Линеаризованная схема Кранка–Николсон

Пусть $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = T$ — равномерное разбиение временного интервала $[0, T]$ с размером временного шага $\tau = T/N$, $t_{n+\frac{1}{2}} = (t_{n+1} + t_n)/2$. Сначала представим стабилизированную схему BDF первого порядка для решения уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности (1), называемую схемой BDF1, и обозначим ее $\Phi^{n+1} = \text{BDF1}(\Phi^n, \tau)$ (см. [10, 11]):

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\tau} - \varepsilon^2 \Lambda_M^n D_h \Phi^{n+1} + \Lambda_M^n F'(\Phi^n) + S_1(\Phi^{n+1} - \Phi^n) = 0, \quad (2)$$

где $\Phi^n = (\Phi_1^n, \dots, \Phi_K^n; \dots; \Phi_{K^2-K+1}^n, \dots, \Phi_{K^2}^n)^\top$, $D_h = I \otimes G_h + G_h \otimes I \in \mathbb{R}^{K^2 \times K^2}$, G_h — трехдиагональная матрица с диагональным преобладанием, задаваемая как

$$G_h := \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & & & 1 & -2 \end{pmatrix}_{K \times K},$$

$\Lambda_M^n = \text{diag}(M(\Phi^n))$ и $S_1 \geq 0$ — стабилизирующий параметр. Определим $\|\Phi\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq K^2} |\Phi_i|$.

В соответствии с теоремой 3.2 из [10] и теоремой 3 из [11] полностью дискретная схема BDF1 (2) является безусловно сохраняющей ПМ.

Лемма 2.1 [10, 11]. *Предположим, что $\|\Phi^0\|_\infty \leq 1$ и стабилизирующий параметр S_1 удовлетворяет соотношению*

$$S_1 \geq \max_{\rho \in [-1, 1]} (M'(\rho)F'(\rho) + M(\rho)F''(\rho)). \quad (3)$$

Тогда схема BDF1 (2) безусловно сохраняет дискретный ПМ.

Теперь представим следующую полностью дискретную линейную схему Кранка–Николсона второго порядка для уравнения Аллена–Кана (1) для общего случая коэффициента мобильности

$$\begin{cases} \Phi^{n+\frac{1}{2}} = \text{BDF1}(\Phi^n, \tau/2), \\ \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\tau} - \varepsilon^2 \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} D_h \frac{\Phi^{n+1} + \Phi^n}{2} + \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \left(F'(\Phi^n) + \frac{1}{2} F''(\Phi^n)(\Phi^{n+1} - \Phi^n) \right) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

2.2. Дискретный принцип максимума

В данном подпункте докажем, что наша схема сохраняет дискретный ПМ.

Теорема 2.1. *Предположим, что стабилизирующий параметр S_1 удовлетворяет условию (3) и $|\phi_0(\mathbf{x})| \leq 1$. Предлагаемая схема (4) является условно сохраняющей ПМ в том смысле, что если*

$$\tau \leq \frac{1}{8L} \min \left\{ 1, \frac{h^2}{\varepsilon^2} \right\}, \quad (5)$$

то $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$ для всех $n = 1, 2, \dots, N$.

Доказательство. Будем действовать по индукции. Во-первых, мы имеем $\|\Phi^0\|_\infty \leq \max_{\mathbf{x} \in \Omega} |\phi_0(\mathbf{x})| \leq 1$. Предположим, что этот результат верен для $k = n$, т. е. $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$. Теперь проверим, что $\|\Phi^{n+1}\|_\infty \leq 1$. Используя $\Phi^{n+\frac{1}{2}} = \text{BDF1}(\Phi^n, \tau/2)$, $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$ и лемму 2.1, получим $\|\Phi^{n+\frac{1}{2}}\|_\infty \leq 1$. Перепишем (4) следующим образом:

$$\left(I - \frac{\tau}{2} \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} (\varepsilon^2 D_h - \Lambda_{F''}^n) \right) \Phi^{n+1} = \left(I + \frac{\tau}{2} \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} (\Lambda_{F''}^n + \varepsilon^2 D_h) \right) \Phi^n - \tau \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} F'(\Phi^n),$$

где $\Lambda_{F''}^n = \text{diag}(F''(\Phi^n))$. Пусть p — положительное целое число такое, что $|\Phi_p^{n+1}| = \|\Phi^{n+1}\|_\infty$. Тогда

$$\begin{aligned} & \left[1 + \frac{\tau}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F''(\Phi_p^n) \right] \Phi_p^{n+1} - \frac{\tau \varepsilon^2}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) \frac{1}{h^2} \sum_{j=1}^{K^2} d_{pj} \Phi_j^{n+1} \\ &= \underbrace{\frac{1}{4} \Phi_p^n + \frac{\tau \varepsilon^2}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) \frac{1}{h^2} \sum_{j=1}^{K^2} d_{pj} \Phi_j^n}_{\frac{1}{4} \Phi_p^n - \tau M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F'(\Phi_p^n)} + \underbrace{\frac{1}{2} \left(1 + \tau M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F''(\Phi_p^n) \right) \Phi_p^n}_{\frac{1}{4} \Phi_p^n - \tau M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F'(\Phi_p^n)} \\ & \quad \underbrace{\frac{1}{4} \Phi_p^n - \tau M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F'(\Phi_p^n)}_{\frac{1}{4} \Phi_p^n - \tau M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F'(\Phi_p^n)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Возьмем абсолютное значение в обеих частях уравнения (6). Поскольку $1 + \frac{\tau}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) \times F''(\Phi_p^n) \geq 0$ для $0 < \tau \leq \frac{2}{L}$ и D_h является диагонально преобладающей, мы находим, что $\left[1 + \frac{\tau}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F''(\Phi_p^n) \right] \Phi_p^{n+1}$ и $-\frac{\tau \varepsilon^2}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) \frac{1}{h^2} \sum_{j=1}^{K^2} d_{pj} \Phi_j^{n+1}$ одновременно неположительны или неотрицательны. Поэтому

$$|\text{Левая часть}| \geq \left[1 + \frac{\tau}{2} M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) F''(\Phi_p^n) \right] |\Phi_p^{n+1}|. \quad (7)$$

Кроме того, используя $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$ и $M_0 \leq M(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}}) \leq L$, можем заключить, что

$$\left| \frac{1}{4} \Phi_p^n + \frac{\tau \varepsilon^2}{2} M \left(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}} \right) \frac{1}{h^2} \sum_{j=1}^{K^2} d_{pj} \Phi_j^n \right| \leq \frac{1}{4}, \quad \tau \leq \frac{h^2}{8L\varepsilon^2}, \quad (8)$$

$$\left| \frac{1}{2} \left(1 + \tau M \left(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}} \right) F''(\Phi_p^n) \right) \Phi_p^n \right| \leq \frac{1}{2} \left(1 + \tau M \left(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}} \right) F''(\Phi_p^n) \right), \quad \tau \leq \frac{1}{L}, \quad (9)$$

$$\left| \frac{1}{4} \Phi_p^n - \tau M \left(\Phi_p^{n+\frac{1}{2}} \right) F'(\Phi_p^n) \right| \leq \frac{1}{4}, \quad \tau \leq \frac{1}{8L}. \quad (10)$$

Объединив (7)–(10), получим $\|\Phi^{n+1}\|_\infty = |\Phi_p^{n+1}| \leq 1$. Доказательство завершено. \square

2.3. Устойчивость дискретной энергии

Рассмотрим устойчивость дискретной энергии схемы (4). Определим дискретную энергию $E_h(\cdot)$ следующим образом:

$$E_h(\Phi^n) = -\frac{h^2 \varepsilon^2}{2} (\Phi^n)^\top D_h \Phi^n + h^2 \sum_{i=1}^{K^2} F(\Phi_i^n).$$

Теорема 2.2. *Предположим, что $|\phi_0(\mathbf{x})| \leq 1$. Тогда при условии (5) дискретная энергия $E_h(\cdot)$ приближенной последовательности $\{\Phi^n\}$, генерируемая путем (4), удовлетворяет следующему соотношению устойчивости дискретной энергии:*

$$E_h(\Phi^{n+1}) \leq E_h(\Phi^n), \quad 0 \leq n \leq N-1.$$

Доказательство. Из теоремы 2.1 мы знаем, что $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$ для $1 \leq n \leq N$. Посредством неравенства

$$\frac{1}{4} \left[(a^2 - 1)^2 - (b^2 - 1)^2 \right] \leq [b(b^2 - 1) + a - b] (a - b) \quad \forall a, b \in [-1, 1]$$

мы можем получить

$$\begin{aligned} E_h(\Phi^{n+1}) - E_h(\Phi^n) &= \frac{h^2}{4} \sum_{i=1}^{K^2} \left[((\Phi_i^{n+1})^2 - 1)^2 - ((\Phi_i^n)^2 - 1)^2 \right] - \\ &\quad \frac{\varepsilon^2 h^2}{2} \left((\Phi^{n+1})^\top D_h \Phi^{n+1} - (\Phi^n)^\top D_h \Phi^n \right) \\ &\leq h^2 \sum_{i=1}^{K^2} \left[\Phi_i^n ((\Phi_i^n)^2 - 1) + (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n) \right] (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n) - \\ &\quad \frac{\varepsilon^2 h^2}{2} \left((\Phi^{n+1})^\top D_h \Phi^{n+1} - (\Phi^n)^\top D_h \Phi^n \right). \end{aligned} \quad (11)$$

С другой стороны, используя L^2 -скалярное произведение схемы (4) с $\left(\Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \right)^{-1} \times (\Phi^{n+1} - \Phi^n)$, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{K^2} \left[\frac{1}{\tau M \left(\Phi_i^{n+\frac{1}{2}} \right)} (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n)^2 + \frac{1}{2} F''(\Phi_i^n) (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n)^2 + \Phi_i^n ((\Phi_i^n)^2 - 1) (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n) \right] \\ = \frac{\varepsilon^2}{2} \left((\Phi^{n+1})^\top D_h \Phi^{n+1} - \Phi^n D_h \Phi^n \right). \end{aligned} \quad (12)$$

С использованием (11), (12), $\|\Phi^n\|_\infty \leq 1$ и $M_0 \leq M(\Phi_i^{n+\frac{1}{2}}) \leq L$, если $\tau \leq \frac{2}{3L}$, получим

$$\begin{aligned} E_h(\Phi^{n+1}) - E_h(\Phi^n) &= h^2 \sum_{i=1}^{K^2} \left(1 - \frac{1}{\tau M(\Phi_i^{n+\frac{1}{2}})} - \frac{1}{2} F''(\Phi_i^n) \right) (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n)^2 \\ &= h^2 \sum_{i=1}^{K^2} \left(\frac{3}{2} (1 - (\Phi_i^n)^2) - \frac{1}{\tau M(\Phi_i^{n+\frac{1}{2}})} \right) (\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n)^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Доказательство завершено. \square

3. Анализ ошибок

В данном пункте L^∞ -дискретную оценку ошибки получим с использованием дискретного ПМ. Пусть $e^n = \Phi(t_n) - \Phi^n$ и $e^{n+\frac{1}{2}} = \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) - \Phi^{n+\frac{1}{2}}$, где $\Phi(t_n)$ и $\Phi(t_{n+\frac{1}{2}})$ — векторы точного решения при t_n и $t_{n+\frac{1}{2}}$ соответственно.

Теорема 3.1. *Предположим, что $M(\cdot) \in C^1(\mathbb{R})$, S_1 удовлетворяет (3) и*

$$\phi \in C^3(0, T; L^\infty(\Omega)) \cap W^{3,\infty}(0, T; L^\infty(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; W^{4,\infty}(\Omega)).$$

Тогда при условии (5)

$$\|e^n\|_\infty \leq C_1 \exp(C_2 T) (\tau^2 + h^2), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (13)$$

Доказательство. Для любого $1 \leq n \leq N-1$ векторы точного решения $\Phi(t_{n+1})$ и $\Phi(t_n)$ удовлетворяют соотношению

$$\begin{aligned} \frac{\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)}{\tau} + \Lambda_M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}})) \times \\ \left(-\varepsilon^2 D_h \frac{\Phi(t_{n+1}) + \Phi(t_n)}{2} + \left[F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) (\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)) \right] \right) + \\ R_1^n + \Lambda_M(\Phi_{n+\frac{1}{2}}) (R_2^n + R_3^n) = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}})) &:= \text{diag}(M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}}))), \\ R_1^n &= \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)}{\tau}, \quad R_2^n = -\varepsilon^2 \left(\Delta \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) - D_h \frac{\Phi(t_{n+1}) + \Phi(t_n)}{2} \right), \\ R_3^n &= F'(\Phi_{n+\frac{1}{2}}) - \left[F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) (\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)) \right]. \end{aligned}$$

Для R_1^n и R_2^n мы имеем следующие оценки:

$$\|R_1^n\|_\infty \leq \frac{1}{24}\tau^2\|\phi\|_{W^{3,\infty}(0,T;L^\infty(\Omega))}, \quad (15)$$

$$\|R_2^n\| \leq \varepsilon^2 \left[\frac{\tau^2}{8}\|\phi\|_{W^{3,\infty}(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))} + \frac{h^2}{6}\|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} \right]. \quad (16)$$

Что касается R_3^n , то с использованием формулы Тейлора и теоремы о среднем значении получим

$$\|R_3^n\|_\infty \leq C_4\tau^2, \quad (17)$$

где C_4 — положительная постоянная.

Вычитая (4) из (14), легко можно получить следующее уравнение для ошибки:

$$\begin{aligned} & \frac{e^{n+1} - e^n}{\tau} - \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \left(\varepsilon^2 D_h \frac{e^{n+1} + e^n}{2} - \frac{1}{2} F''(\Phi^n) \Phi^{n+1} + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) \Phi(t_{n+1}) \right) \\ &= -\Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \left[F'(\Phi^n) - \frac{1}{2} F''(\Phi^n) \Phi^n - F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) \Phi(t_n) \right] - \\ & \quad \left[\Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} - \Lambda_M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}})) \right] \times \\ & \quad \left[-\varepsilon^2 D_h \frac{\Phi(t_{n+1}) + \Phi(t_n)}{2} + \left(F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) (\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)) \right) \right] + \\ & \quad R_1^n + \Lambda_M(\Phi_{n+\frac{1}{2}}) (R_2^n + R_3^n) := \hat{R}^n. \end{aligned} \quad (18)$$

Переместив члены, содержащие e^n , в правую часть (18), мы видим, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} e^{n+1} - \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} D_h e^{n+1} - \frac{1}{2} \Lambda_{F''}^n e^{n+1} \right) &= \hat{R}^n + \frac{1}{\tau} e^n + \frac{\varepsilon^2}{2} \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} D_h e^n - \\ & \quad \frac{1}{2} \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \Phi(t_{n+1}) (F''(\Phi^n) - F''(\Phi(t_n))). \end{aligned} \quad (19)$$

Используя определения D_h , $\Lambda_M^{n+\frac{1}{2}}$ и $\Lambda_{F''}^n$, получим следующие оценки:

$$\begin{aligned} & \left\| \frac{1}{\tau} e^{n+1} - \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varepsilon^2}{2} D_h e^{n+1} - \frac{1}{2} \Lambda_{F''}^n e^{n+1} \right) \right\|_\infty \\ & \geq \min_{1 \leq i \leq K^2} \left[\frac{1}{\tau} + \frac{M(\Phi_i^{n+\frac{1}{2}})}{2} (3(\Phi_i^n)^2 - 1) \right] \|e^{n+1}\|_\infty \geq \left(\frac{1}{\tau} - \frac{L}{2} \right) \|e^{n+1}\|_\infty \end{aligned} \quad (20)$$

и

$$\left\| \frac{1}{\tau} e^n + \frac{\varepsilon^2}{2} \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} D_h e^n \right\|_\infty \leq \frac{1}{\tau} \|e^n\|_\infty. \quad (21)$$

Заметим, что $F(\phi) = \frac{1}{4}(1 - \phi^2)^2$. Тогда

$$\left\| F'(\Phi^n) - \frac{1}{2} F''(\Phi^n) \Phi^n - F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n)) \Phi(t_n) \right\|_\infty \leq 10 \|e^n\|_\infty. \quad (22)$$

Кроме того, мы имеем

$$\begin{aligned}
& \left\| -\varepsilon^2 D_h \frac{\Phi(t_{n+1}) + \Phi(t_n)}{2} + F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n))(\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)) \right\|_{\infty} \\
&= \left\| -\varepsilon^2 \Delta \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) - R_2^n + F'(\Phi(t_n)) + \frac{1}{2} F''(\Phi(t_n))(\Phi(t_{n+1}) - \Phi(t_n)) \right\|_{\infty} \\
&\leq \varepsilon^2 \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))} + \frac{2}{3\sqrt{3}} + 2 + \\
&\quad \varepsilon^2 \left(\frac{\tau^2}{8} \|\phi\|_{W^{3,\infty}(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))} + \frac{h^2}{6} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} \right) := C_5.
\end{aligned} \tag{23}$$

Аналогичным образом можно заключить, что

$$\left\| \frac{1}{2} \Phi(t_{n+1}) (F''(\Phi^n) - F''(\Phi(t_n))) \right\|_{\infty} \leq 3 \|e^n\|_{\infty}. \tag{24}$$

Используя определения $\Lambda_M^{n+\frac{1}{2}}$ и $\Lambda_M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}}))$, получим

$$\left\| \Lambda_M^{n+\frac{1}{2}} - \Lambda_M(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}})) \right\|_{\infty} \leq \max_{x \in [-1,1]} |M'(x)| \|e^{n+\frac{1}{2}}\|_{\infty}. \tag{25}$$

Умножив (19) на τ , а затем объединив оценки (20)–(25) и (15)–(17), получим

$$\begin{aligned}
& \left(1 - \frac{\tau L}{2}\right) \|e^{n+1}\|_{\infty} \leq \|e^n\|_{\infty} + \\
& \quad \tau \left[13L \|e^n\|_{\infty} + C_5 \max_{\rho \in [-1,1]} |M'(\rho)| \|e^{n+\frac{1}{2}}\|_{\infty} + \|R_1^n\|_{\infty} + L \|R_2^n\|_{\infty} \right].
\end{aligned} \tag{26}$$

Пусть $C_6 = \frac{1}{1 - \tau L/2}$ и $C_7 = C_5 \max_{\rho \in [-1,1]} |M'(\rho)|$. Мы видим, что

$$\begin{aligned}
\|e^{n+1}\|_{\infty} &\leq C_6 \|e^n\|_{\infty} + C_6 \tau \left[13L \|e^n\|_{\infty} + C_7 \|e^{n+\frac{1}{2}}\|_{\infty} + \|R_1^n\|_{\infty} + L \|R_2^n\|_{\infty} \right] \\
&\leq C_6 \|e^n\|_{\infty} + \\
&\quad C_6 \tau \left[13L \|e^n\|_{\infty} + C_7 \|e^{n+\frac{1}{2}}\|_{\infty} + C_8 \tau^2 + \frac{\varepsilon^2 L h^2}{6} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} \right],
\end{aligned} \tag{27}$$

где $C_8 = LC_4 + \frac{\|\phi\|_{W^{3,\infty}(0,T;L^\infty(\Omega))}}{24} + \frac{\varepsilon^2 L}{8} \|\phi\|_{W^{3,\infty}(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))}$. Аналогично (18) и (27) мы также можем получить оценку для $e^{n+\frac{1}{2}}$:

$$\|e^{n+\frac{1}{2}}\|_{\infty} \leq C_9 \|e^n\|_{\infty} + C_{10} \tau^2 + \tau \frac{\varepsilon^2 L h^2}{12} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))}, \tag{28}$$

где $C_9 = 1 + \frac{C_7 + 2L}{2}\tau$ и

$$C_{10} = \frac{S_1 + 2L + C_7}{4} \|\phi\|_{W^{1,\infty}(0,T;L^\infty(\Omega))} + \frac{1}{8} \|\phi\|_{W^{2,\infty}(0,T;L^\infty(\Omega))}.$$

Подставив оценку (28) в (27), получим

$$\begin{aligned} \|e^{n+1}\|_\infty &\leq C_6 \|e^n\|_\infty + C_6 \tau \left[(13L + C_7 C_9) \|e^n\|_\infty + (C_7 C_{10} + C_8) \tau^2 \times \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\varepsilon^2 L}{6} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} + \tau \frac{\varepsilon^2 L}{12} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} \right) h^2 \right] \\ &\leq \|e^n\|_\infty + \tau (C_2 \|e^n\|_\infty + C_1 (\tau^2 + h^2)), \end{aligned} \quad (29)$$

где $C_2 = C_6(13L + C_7 C_9) + \frac{L}{2 - \tau L}$ и

$$C_1 = \max \left\{ C_6(C_7 C_{10} + C_8), C_6 \left(\frac{\varepsilon^2 L}{6} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} + \tau \frac{\varepsilon^2 L}{12} \|\phi\|_{L^\infty(0,T;W^{4,\infty}(\Omega))} \right) \right\}.$$

Суммируя (29) от 0 до n и используя дискретную лемму Гронуолла, получим искомую оценку (13), которая завершает доказательство. \square

4. Численные эксперименты

В данном пункте мы представим несколько численных экспериментов для проверки наших теоретических результатов по предложенной схеме (4) с точки зрения точности, сохранения дискретного ПМ и устойчивости энергии.

4.1. Сходимость по времени в двумерных случаях

Рассмотрим уравнение Аллена–Кана (1) с параметром $\varepsilon = 0.01$ и начальным условием

$$\phi_0(x, y) = 0.1 \times (\cos 3x \cos 2y + \cos 5x \cos 5y).$$

Мы рассмотрели два случая коэффициента мобильности: $M(\phi) \equiv 1$ и $M(\phi) = 1 - \phi^2$. Физическая область $\Omega = [0, 2\pi]^2$, конечное время $T = 1$. Зафиксируем размер однородной физической сетки $h = 1/1000$, чтобы убедиться в том, что ошибка пространственной дискретизации достаточно мала по сравнению с ошибкой временной дискретизации. Стабилизирующий параметр $S_1 = 2$ в BDF1. Ввиду отсутствия аналитического решения для этого численного эксперимента мы определяем ошибки численного решения в дискретной L^∞ -норме в виде $e_\infty^T(N) = \|\Phi^N - \Phi^{2N}\|_\infty$, где N — число подинтервалов и Φ^N — соответствующее численное решение в конечный момент времени $T = 1$.

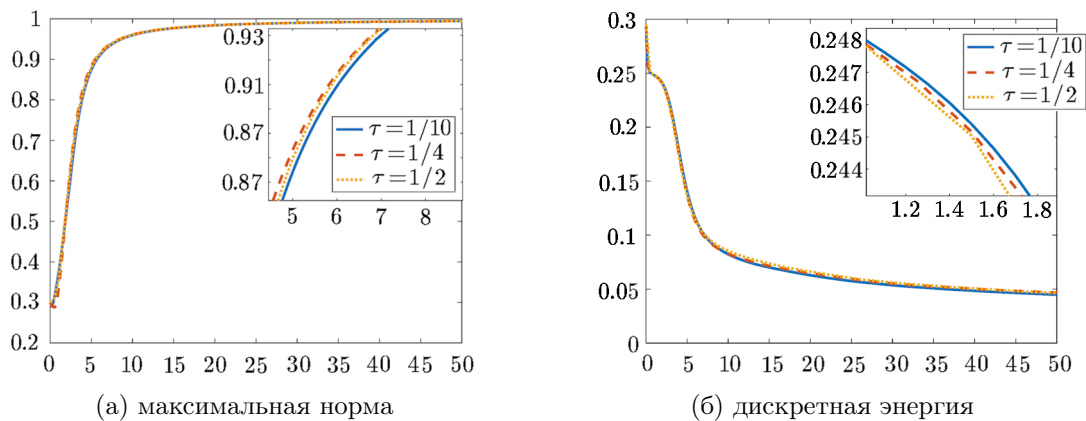
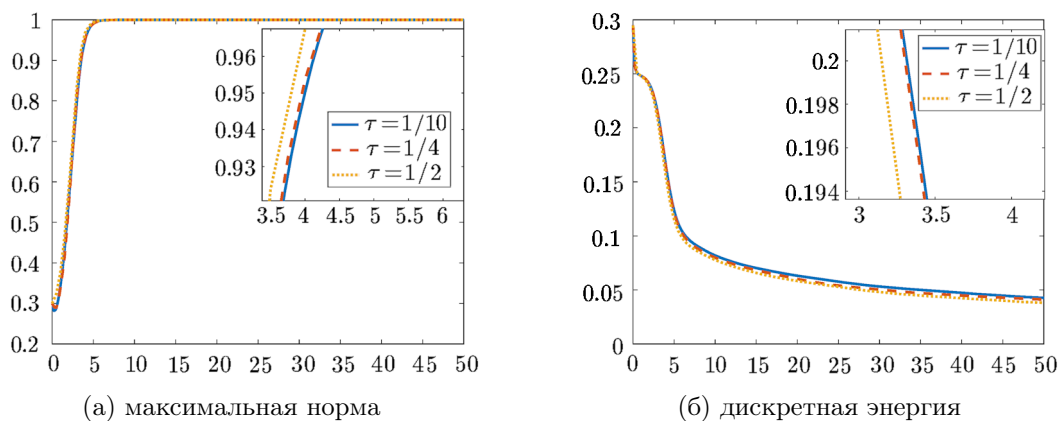
Результаты проверки скорости сходимости схемы (4) на временных сетках с размером временного шага τ от $1/5$ до $1/320$ представлены в таблице 1.

Таблица 1. Ошибки численного решения и скорости сходимости двумерной схемы (4)

Временные шаги		$M(\phi) = 1$		$M(\phi) = 1 - \phi^2$	
N	τ	e_{∞}^T	Порядок	e_{∞}^T	Порядок
5	1/5	1.47 e-3	—	1.67 e-3	—
10	1/10	3.70 e-4	1.9901	4.32 e-4	1.9519
20	1/20	9.31 e-5	1.9911	1.10 e-4	1.9694
40	1/40	2.34 e-5	1.9948	2.79 e-5	1.9832
80	1/80	5.85 e-6	1.9984	7.02 e-6	1.9923
160	1/160	1.47 e-6	1.9898	1.77 e-6	1.9879
320	1/320	3.70 e-7	1.9939	4.44 e-7	1.9945

4.2. Сохранение ПМ и устойчивость энергии

В этом численном эксперименте мы исследуем динамику укрупнения фракции, определяемую уравнением Аллена–Кана (1) с нелинейным коэффициентом мобильности $M(\phi) = 1 - \phi^2$ и случайными начальными значениями от -0.3 до 0.3 . Взята область $\Omega = (0, 1)^2$ с параметром ширины $\varepsilon = 1/256$ и размером однородной пространственной сетки $h = 1/256$. В этом случае сохранение дискретного ПМ имеет решающее значение, чтобы избежать нефизических решений или некорректности (см. рисунки 1 и 2). На рис. 3 также показано несколько снимков смоделированных фазовых структур при $t = 500, 1000, 1500$ и 3000 .

Рис. 1. Эволюция во времени максимальной нормы и дискретной энергии при $M(\phi) = 1 - \phi^2$ Рис. 2. Эволюция во времени максимальной нормы и дискретной энергии при $M(\phi) \equiv 1$

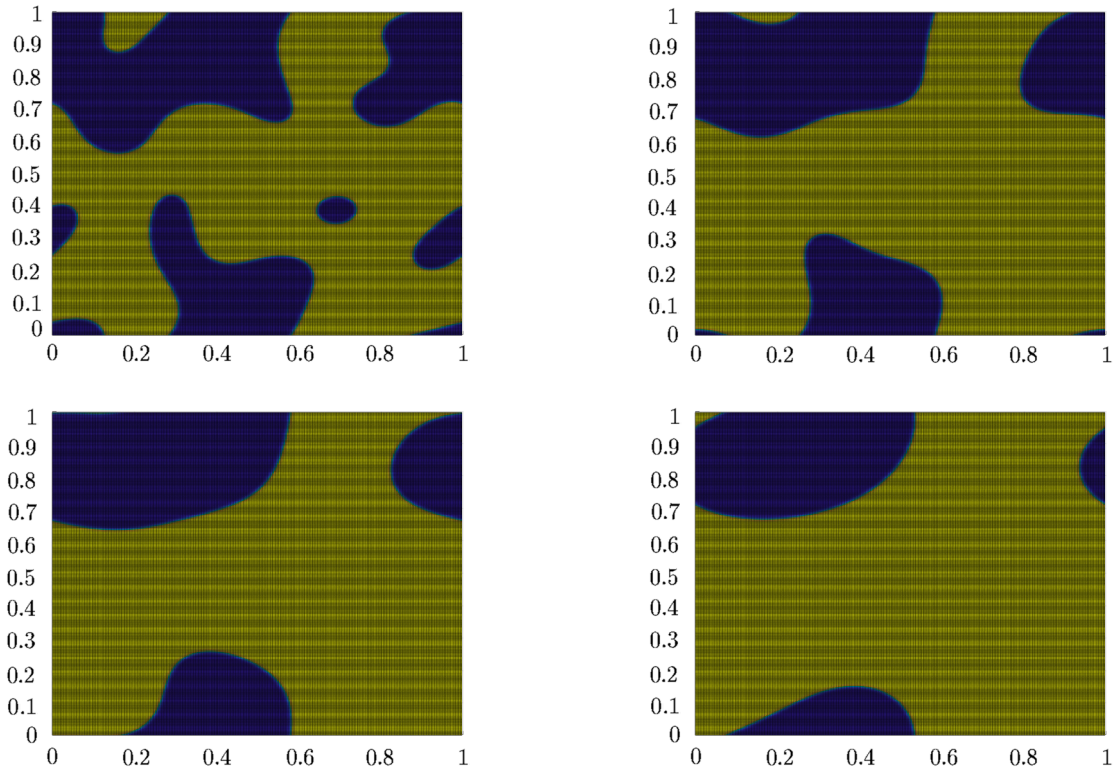


Рис. 3. Снимки смоделированных фазовых структур при $t = 500, 1000, 1500$ и 3000 , вычисленные с использованием (4) для задачи укрупнения фракции с $M(\phi) = 1 - \phi^2$

4.3. Сходимость по времени в 3D-случаях

В данном подпункте рассмотрим трехмерное уравнение Аллена–Кана (1) с нелинейным коэффициентом мобильности $M(\phi) = 1 - \phi^2$, параметром $\varepsilon = 0.01$ и начальным условием

$$\phi_0(x, y, z) = 0.1 \times (\cos 4x \cos 3y \cos 2z + \cos 5x \cos 5y \cos 5z).$$

Вычислительная область $\Omega = (0, 2\pi)^2$, конечное время $T = 1$. Размер шага пространственной сетки $h = 1/256$. Численные ошибки представлены в табл. 2.

Таблица 2. Ошибки численного решения и скорости сходимости трехмерной схемы КН

N	τ	e_∞^T	Порядок
5	1/5	1.67 e-3	–
10	1/10	4.30 e-4	1.9519
20	1/20	1.10 e-4	1.9700
40	1/40	2.78 e-5	1.9850
80	1/80	7.08 e-6	1.9716
160	1/160	1.77 e-6	1.9954

Теперь выполним 3D-моделирование для уравнения Аллена–Кана (1) с нелинейным коэффициентом мобильности $M(\phi) = 1 - \phi^2$ и случайными начальными данными в диапазоне от -0.9 до 0.9 с параметром $\varepsilon = 0.01$. Вычислительная область $\Omega = (0, 1)^3$. Временной шаг $\tau = 0.1$ и размер шага пространственной сетки $h = 1/128$. Рис. 4 показывает

фазовые структуры численных решений при $t = 4, 10, 40$ и 56 соответственно. Временные изменения максимальной нормы и энергии численных решений представлены на рис. 5.

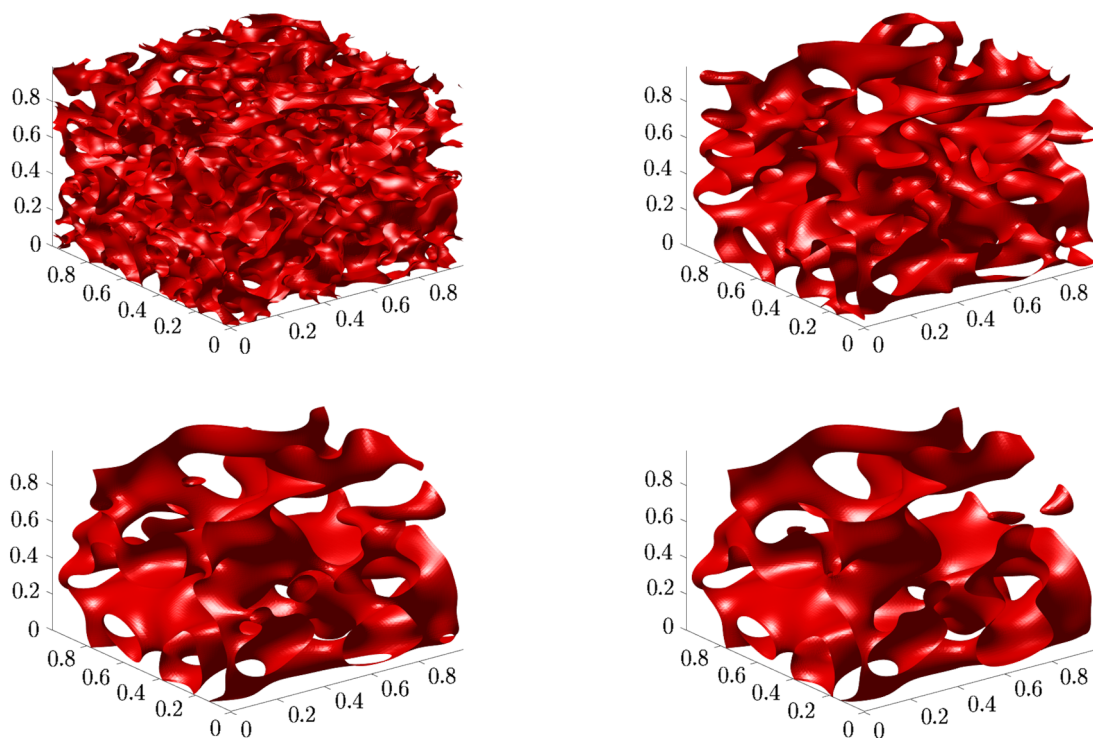


Рис. 4. Смоделированные фазовые структуры при $t = 4, 10, 40$ и 56 (сверху вниз и слева направо)

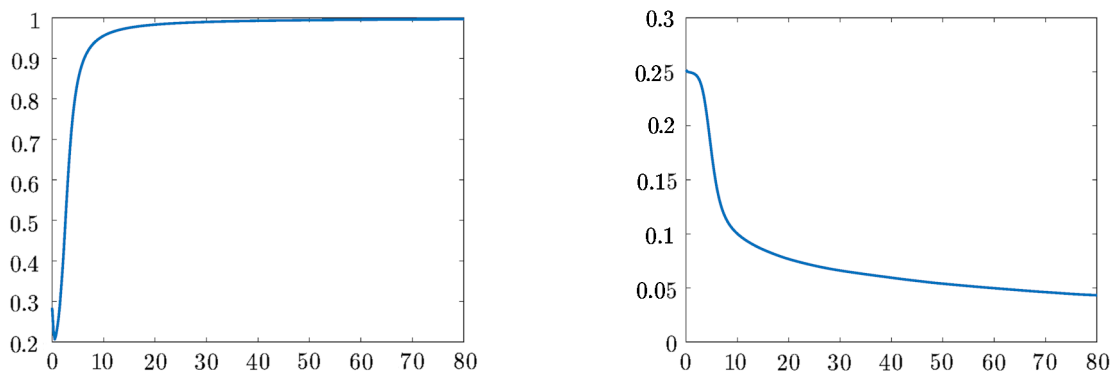


Рис. 5. Эволюция максимальной нормы (слева) и энергии (справа) численных решений трехмерного уравнения Аллена–Кана (1)

5. Заключительные замечания

В данной работе построена линеаризованная схема КН для уравнения Аллена–Кана для общего случая коэффициента мобильности. Полностью дискретная система получается путем использования метода центральных конечных разностей для пространствен-

ной дискретизации и требует решения двух уравнений типа Пуассона на каждом временном шаге. Доказано, что схема сохраняет дискретный ПМ и устойчивость энергии при слабых ограничениях на размер временного шага. Дискретные L^∞ -оценки ошибки строго получены для общего случая коэффициента мобильности. Наконец, для проверки теоретических результатов было проведено несколько численных экспериментов.

Литература

1. **Du Q., Ju L., Li X., Qiao Z.** Maximum principle preserving exponential time differencing schemes for the nonlocal Allen–Cahn equation // *SIAM J. Numerical Analysis*. — 2019. — Vol. 57, № 2. — P. 875–898.
2. **Hou T., Tang T., Yang J.** Numerical analysis of fully discretized Crank–Nicolson scheme for fractional-in-space Allen–Cahn equations // *J. Scientific Computing*. — 2017. — Vol. 72. — P. 1214–1231. — DOI: 10.1007/s10915-017-0396-9.
3. **Hou T., Xiu D., Jiang W.** A new second-order maximum-principle preserving finite difference scheme for Allen–Cahn equations with periodic boundary conditions // *Applied Mathematics Letters*. — 2020. — Vol. 104. — P. 106265.
4. **Hou D., Qiao Z., Ju L.** A linear doubly stabilized Crank–Nicolson scheme for the Allen–Cahn equation with a general mobility // *Numerical Analysis*. — 2023. — (arXiv:2310.19663v1).
5. **Hou D., Ju L., Qiao Z.** A linear second-order maximum bound principle-preserving BDF scheme for the Allen–Cahn equation with a general mobility // *Numerical Analysis*. — 2023. — (arXiv:2211.00852v2).
6. **Ju L., Li X., Qiao Z., Yang J.** Maximum bound principle preserving integrating factor Runge–Kutta methods for semilinear parabolic equations // *J. Computational Physics*. — 2021. — Vol. 439. — Article № 110405.
7. **Ju L., Li X., Qiao Z.** Generalized SAV-exponential integrator schemes for Allen–Cahn type gradient flows // *SIAM J. Numerical Analysis*. — 2022. — Vol. 60, iss. 4. — P. 1905–1931.
8. **Liao H., Tang T., Zhou T.** On energy stable, maximum-principle preserving, second order BDF scheme with variable steps for the Allen–Cahn equation // *SIAM J. Numerical Analysis*. — 2020. — Vol. 58, iss. 4. — P. 2294–2314.
9. **Li J., Li X., Ju L., Feng X.** Stabilized integrating factor Runge–Kutta method and unconditional preservation of maximum bound principle // *SIAM J. Scientific Computing*. — 2021. — Vol. 43, iss. 3. — P. A1780–A1802.
10. **Shen J., Tang T., Yang J.** On the maximum principle preserving schemes for the generalized Allen–Cahn equation // *Communications in Mathematical Sciences*. — 2016. — Vol. 14, № 6. — P. 1517–1534.
11. **Tang T., Yang J.** Implicit-explicit scheme for the Allen–Cahn equation preserves the maximum principle // *J. Computational Mathematics*. — 2016. — Vol. 34, iss. 5. — P. 451–461.
12. **Yang J., Yuan Z., Zhou Z.** Arbitrarily high-order maximum bound preserving schemes with cut-off postprocessing for Allen–Cahn equations // *J. Scientific Computing*. — 2022. — Vol. 90. — Article № 76.
13. **Zhang H., Yan J., Qian X., Chen X., Song S.** Explicit third-order unconditionally structure-preserving schemes for conservative Allen–Cahn equations // *J. Scientific Computing*. — 2022. — Vol. 90. — Article № 8. — DOI: 10.1007/s10915-021-01691-w.

Поступила в редакцию 17 января 2024 г.

После исправления 2 мая 2024 г.

Принята к печати 26 августа 2024 г.

