

Cahn-Hilliard方程多重网格求解器收敛性分析

郭靖, 齐德昱

引用本文

郭靖, 齐德昱. Cahn-Hilliard方程多重网格求解器收敛性分析[J]. 计算机科学, 2023, 50(11): 23-31.

GUO Jing, QI Deyu. Convergence Analysis of Multigrid Solver for Cahn-Hilliard Equation[J]. Computer Science, 2023, 50(11): 23-31.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

[基于分层抽样优化的面向异构客户端的联邦学习](#)

Federated Learning Based on Stratified Sampling Optimization for Heterogeneous Clients

计算机科学, 2022, 49(9): 183-193. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.220500263>

[一种采用免疫原理的恶意软件检测方法](#)

Immune-based Method for Malware Detection

计算机科学, 2010, 37(9): 161-163.

[GMRES算法求解烟雾仿真N-S方程](#)

GMRES Algorithm to Solve Navier-Stokes Equation of Smoke Simulation

计算机科学, 2016, 43(Z11): 190-192. <https://doi.org/10.11896/j.issn.1002-137X.2016.11A.042>

[CSC模型的协议与语言](#)

计算机科学, 2002, 29(3): 112-114.

[CLS : 一种支持状态图复用的攻击场景描述语言](#)

计算机科学, 2006, 33(11): 69-73.

Cahn-Hilliard 方程多重网格求解器收敛性分析

郭靖¹ 齐德昱²

1 华南理工大学软件学院 广州 510006

2 广东外语外贸大学南国商学院数字化科学技术研究院 广州 510006

(z7198185@gmail.com)

摘要 Cahn-Hilliard(CH)方程是相场模型中的一个基本的非线性方程,通常使用数值方法进行分析。在对CH方程进行数值离散后会得到一个非线性的方程组,全逼近格式(Full Approximation Storage,FAS)是求解这类非线性方程组的一个高效多重网格迭代格式。目前众多的求解CH方程主要关注数值格式的收敛性,而没有论证求解器的可靠性。文中给出了求解CH方程离散得到的非线性方程组的多重网格算法的收敛性证明,从理论上保证了计算过程的可靠性。针对CH方程的时间二阶全离散差分数值格式,利用快速子空间下降(Fast Subspace Descent,FASD)框架给出其FAS格式多重网格求解器的收敛常数估计。为了完成这一目标,首先将原本的差分问题转化为完全等价的有限元问题,再论证有限元问题来自一个凸函数能量形式的极小化,然后验证能量形式及空间分解满足FASD框架假设,最终得到原多重网格算法的收敛系数估计。结果显示,在非线性的情形下,CH方程中的参数 ϵ 对网格尺度添加了限制,太小的参数会导致数值计算过程不收敛。最后通过数值实验验证了收敛系数与方程参数及网格尺度的依赖关系。

关键词:非线性多重网格;收敛性分析;Cahn-Hilliard方程;全逼近格式;非线性问题

中图法分类号 TP301

Convergence Analysis of Multigrid Solver for Cahn-Hilliard Equation

GUO Jing¹ and QI Deyu²

1 School of Software Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510006, China

2 South China Business College, Guang Dong University of Foreign Studies, Guangzhou 510006, China

Abstract The Cahn-Hilliard(CH) equation is a fundamental nonlinear equation in the phase field model and is usually analyzed using numerical methods. Following a numerical discretization, we get a nonlinear equations system. The full approximation scheme(FAS) is an efficient multigrid iterative scheme for solving such nonlinear equations. In the numerous articles on solving the CH equation, the main focus is on the convergence of the numerical format, without mentioning the stability of the solver. In this paper, the convergence property of the multigrid algorithm is established, which is from the nonlinear equation system obtained by solving the discrete CH equation, and the reliability of the calculation process is guaranteed theoretically. For the difference discrete numerical scheme of the CH equation, which is both second-order in spatial and time, we use the fast subspace descent method(FASD) framework to give the estimation of the convergence constant of its FAS scheme multigrid solver. First, we transform the original difference problem into a fully equivalent finite element problem. It demonstrates that the finite element problem comes from the minimization of convex functional energy. Then it is verified that the energy functional and the spatial decomposition satisfy the FASD framework assumption. Finally, the convergence coefficient estimate of the original multigrid algorithm is obtained. The results show that in the case of nonlinearity, the parameter ϵ in the CH equation imposes restrictions on the grid size, which will cause the numerical calculation process not to converge when it is too small. Finally, the spatial and temporal accuracy of the numerical format is verified by numerical experiment, and the dependence of the convergence coefficient on the equation parameters and grid-scale is analyzed.

到稿日期:2022-08-02 返修日期:2022-11-25

基金项目:国家自然科学基金(61070015);广东省前沿与关键技术创新专项资金(重大科技专项)(2014B010110004);广东省普通高校工程技术研究中心项目(2022GCZX013)

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China(61070015), Guangdong Frontier and Key Technological Innovation Special Funds(Grant Scientific and Technological Project)(2014B010110004) and Funds of the University Engineering and Technology Research Center of Guangdong(2022GCZX013).

通信作者:齐德昱(qideyu@gmail.com)

Keywords Nonlinear multigrid, Convergence analysis, Cahn-Hilliard equation, Full approximation scheme, Nonlinear problem

1 引言

本文给出了求解 Cahn-Hilliard(CH)方程的差分格式的多重网格算法的收敛性分析。CH 方程是相场模型中的一种,具有守恒的性质。相场模型是对相变问题进行建模的一种方法。Cahn-Hilliard 方程最初于 1958 年被提出,用于模拟二元金属混合物的相分离现象^[1-2]。作为一个基础模型,它可以广泛用于模拟界面分离现象、从纳米尺度的化学沉淀^[3]、肿瘤生长^[4]、界面移动^[5]以及图像分割^[6]。此外,CH 方程也可以和别的方程联合起来模拟更复杂的物理现象^[7]。

作为椭圆问题的高效求解器,多重网格也被用来求解 CH 方程及其变形问题得到的数值格式。文献[8-11]用全逼近格式的 V 循环多重网格法(FAS-V)对数值格式进行求解,并通过数值实验验证了求解器的有效性,但并没有从理论分析角度给出相应的求解器算法的收敛性分析。实际上非线性多重网格算法的收敛性分析一直是一个难点。对于非线性多重网格收敛性的结果非常少,特别是关于 V 循环全逼近格式(FAS-V)的。收敛性研究的主要参考文献来自文献[12-18],主要方法有两种:1)非线性多水平校正方法;2)子空间校正方法。非线性多水平校正方法是 FAS 格式的一种扩展。在这个领域中比较完整的结果来自 Reusken 和 Hackbusch^[12,14,17],它们证明了一类非线性出现在零次项上的非线性椭圆问题的收敛性问题。Hackbusch^[18]提出了针对一类非线性问题的多重网格算法,通过对非线性算子及其导数添加约束,结合标准的光顺和逼近性质,证明了 FAS 在足够细的网格上在解充分小的邻域内收敛,但是光顺次数必须足够大,需要使用 W 循环。在后续的研究中,Reusken^[12,17]研究了一类具有中等非线性的二阶半线性椭圆方程边值问题。在这类比较简单的非线性问题中,他证明了对非线性算子更弱的假设下 FAS 的收敛性。在他们的工作中使用的证明是基于对 FAS 迭代做线性化处理,而且得到的收敛性在某种意义上是局部的。例如,Reusken^[12]证明了 V 循环的 FAS 格式在一个从粗网格到细网格上半径缩小的球内局部收敛。Xie 等^[19]基于多水平校正方法提出了一种针对半线性椭圆问题的完全多重网格方法,可以达到渐近最优的计算复杂度。

另一方面,Tai 等^[20-21]在子空间校正框架^[22]下研究了一类凸优化问题的多重网格方法。Tai 等^[20]考虑了一些无约束凸优化问题,并对一类子空间迭代算法得到了全局一致收敛估计。他们的方法是建立在一个满足稳定分解性质和加强 Cauchy Schwarz 不等式的抽象空间上,在每一个子空间中,都使用了原始的目标函数,严格来说,是自然地定义在细网格上的。且每一个局部问题需要精确求解,这样产生的代价远比 FAS 格式要求的更高。在子空间校正框架的基础上,Chen 等^[23]对凸优化问题提出了快速子空间下降算法(FASD)分析框架,放松了对局部问题精确求解的限制,可以将 FAS 格式多重网格算法看作是一种线搜索步长系数为 1 的 FASD 算法。但对于一般求解 CH 方程的差分方法而言,由于并无函数子空间的概念,因此无法直接应用 FASD 框架进行分析。

本文对求解 CH 方程的差分数值格式^[8]所使用的多重网格求解器给出了收敛性分析,本质上是利用差分法与有限元方法在特定情形下的完全等价性,利用 FASD 框架^[23]得到等价的有限元问题的多重网格算法的收敛性,进而得到原始差分格式求解算法收敛。首先我们给出连续情形下的 CH 问题及其弱形式,再对二维平面区域进行剖分,定义相应的差分格式和多重网格算法;然后给出与差分格式等价的有限元问题,给出它在离散的 Hilbert 空间严格凸的能量泛函,并基于 FASD 框架证明了有限元问题的多重网格算法的收敛性。

2 Cahn-Hilliard 问题及离散

假设 $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$, 令 $\phi \in H_{per}^1(\Omega)$ 。对于任意 $\phi \in H_{per}^1(\Omega)$, 定义如下形式的能量:

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

其中,界面宽度参数 $\varepsilon > 0$ 是一个小的常数, E 的详细推导参见文献[1]。 Ω 上的梯度守恒形式为:

$$\partial_t \phi = \nabla \cdot (\mathcal{M}(\phi) \nabla \mu) \quad (2)$$

其中, $\mathcal{M}(\phi) > 0$ 为迁移率, μ 是化学势, 定义为:

$$\mu := \delta_{\phi} E = \phi^3 - \phi - \varepsilon^2 \Delta \phi \quad (3)$$

其中, $\delta_{\phi} E$ 表示关于 ϕ 的变分导数。相场序参量 ϕ 和化学势 μ 都满足周期边界条件。

可以看出式(2)是质量守恒的。由于演化方程是梯度形式的,因此能量(1)在解(2)的轨迹上随时间不增加。

离散时间相关问题的求解方法有 3 种,显式格式有严格的时间步长限制;隐式格式每一步要求解一个非线性问题,计算量大;而半隐式格式可以放宽时间步长约束,相比隐式格式又降低了计算量。这里使用半隐式格式,其中凸分解格式源自 Eyre^[24]的开创性工作。为简单起见,假设 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ 。令 $M \in \mathbb{Z}^+$, $s := T/M$ 为时间步长,其中 T 是结束时间。对 $\partial_t \phi$ 做差分近似, $\partial_t \phi(t_{n+1}) \approx (\phi^{n+1} - \phi^n)/s$, 其中 $0 \leq m \leq M-1$ 。对 μ 的凸项进行隐式处理,对凹项进行显式处理,得到:

$$\phi^{m+1} - \phi^m = s \Delta \mu^{m+1} \quad (4)$$

$$\mu^{m+1} := (\phi^{m+1})^3 - \phi^m - \varepsilon^2 \Delta \phi^{m+1}$$

为简单起见,这里取 $\mathcal{M}(\phi) = 1$ 。

2.1 基本定义

这里使用文献[8,25]中关于离散函数和算子的定义及结果。首先定义二维空间中需要用到的网格函数和差分算子。考虑区域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, 假设 N 为正整数,将 $h = 1/N$ 定义为空间步长。对于任意正整数 N , 考虑如下集合:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_N &:= \{i \cdot h \mid i = 0, \dots, N\} \\ \mathcal{C}_N &:= \left\{ \left(i - \frac{1}{2} \right) \cdot h \mid i = 1, \dots, N \right\} \\ \mathcal{C}_N &:= \left\{ \left(i - \frac{1}{2} \right) \cdot h \mid i = 0, \dots, N+1 \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

属于集合 $\mathcal{C}_N \setminus \mathcal{C}_N$ 的两个点称为虚拟点。定义如下函数空间:

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_\Omega &:= \{\phi: \mathcal{C}_N \times \mathcal{C}_N \rightarrow \mathbb{R}\} \\
\mathcal{E}_\Omega^\sigma &:= \{\phi: \mathcal{E}_N \times \mathcal{C}_N \rightarrow \mathbb{R}\} \\
\mathcal{E}_{y_\Omega} &:= \{\phi: \mathcal{C}_N \times \mathcal{E}_N \rightarrow \mathbb{R}\} \\
\vec{\mathcal{E}}_\Omega &:= \mathcal{E}_\Omega^\sigma \times \mathcal{E}_\Omega^\sigma
\end{aligned} \tag{6}$$

\mathcal{E}_Ω 中的函数称为单元中心函数。单元中心函数的分量写为 $\phi_{i,j} := \phi(\xi_i, \xi_j)$, 其中 $\xi_i := (i-1/2) \cdot h$ 。类似地, $\mathcal{E}_\Omega^\sigma$ 中的函数称为边中心函数。边中心函数的分量写为 $f_{i+1/2,j} := f(\xi_{i+1/2}, \xi_j)$ 。

一个离散函数 $\phi \in \mathcal{E}_\Omega$ 满足周期边界条件, 如果在虚拟点上 ϕ 满足:

$$\begin{aligned}
\phi_{N,j} &= \phi_{0,j}, \phi_{N+1,j} = \phi_{1,j} \\
\phi_{i,N} &= \phi_{i,0}, \phi_{i,N+1} = \phi_{i,1}
\end{aligned} \tag{7}$$

2.2 离散算子、内积和范数

引入边到中心差分算子 $d_x: \mathcal{E}_\Omega^\sigma \rightarrow \mathcal{E}_\Omega$, 通过分量定义为:

$$d_x f_{i,j} := \frac{1}{h} (f_{i+1/2,j} - f_{i-1/2,j})$$

$d_y: \mathcal{E}_\Omega^\sigma \rightarrow \mathcal{E}_\Omega$ 的定义类似。定义 $\nabla_h \cdot: \vec{\mathcal{E}}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega$:

$$\nabla_h \cdot \mathbf{f} := d_x f^x + d_y f^y$$

其中, $\mathbf{f} = (f^x, f^y)^\top$ 。定义 $A_x: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega^\sigma$ 的分量形式为:

$$A_x \phi_{i+1/2,j} := \frac{1}{2} (\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j})$$

$A_y: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega^\sigma$ 类似。定义 $A_h: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \vec{\mathcal{E}}_\Omega$:

$$A_h \phi := (A_x \phi, A_y \phi)^\top$$

定义 $D_x: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega^\sigma$ 分量形式为:

$$D_x \phi_{i+1/2,j} := \frac{1}{h} (\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j})$$

$D_y: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega^\sigma$ 类似。定义 $\nabla_h: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \vec{\mathcal{E}}_\Omega$:

$$\nabla_h \phi := (D_x \phi, D_y \phi)^\top$$

标准的离散 Laplace 算子 $\Delta_h: \mathcal{E}_\Omega \rightarrow \mathcal{E}_\Omega$ 为:

$$\Delta_h \phi := \nabla_h \cdot \nabla_h \phi$$

定义如下内积:

$$(\phi, \psi)_h := h^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \phi_{i,j} \psi_{i,j}, \forall \phi, \psi \in \mathcal{E}_\Omega$$

$$[f, g]_x := \frac{1}{2} h^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (f_{i+1/2,j} g_{i+1/2,j} + f_{i-1/2,j} g_{i-1/2,j}),$$

$$\forall f, g \in \mathcal{E}_\Omega^\sigma$$

$[\cdot, \cdot]_y$ 的定义类似。对于 $\phi, \psi \in \mathcal{E}_\Omega$, 其梯度的自然内积定义形式为:

$$(\nabla_h \phi, \nabla_h \psi)_h := [D_x \phi, D_x \psi]_x + [D_y \phi, D_y \psi]_y \tag{8}$$

对单元中心函数 $\phi \in \mathcal{E}_\Omega$ 引入如下范数:

$$\|\phi\|_{\infty,h} := \max_{i,j,k} |\phi_{i,j}| \tag{9}$$

$$\|\phi\|_{p,h} := (\|\phi\|^p, 1)_h^{\frac{1}{p}}, 1 \leq p < \infty$$

此外, 定义:

$$\|\nabla_h \phi\|_{p,h} := ([D_x \phi]^p, 1)_x + [D_y \phi]^p, 1)_y^{\frac{1}{p}}$$

当 $p=2$ 时, $(\nabla_h \phi, \nabla_h \psi)_h = \|\nabla_h \phi\|_{2,h}^2$ 。离散 $\|\cdot\|_{H_h^1}$,

$\|\cdot\|_{H_h^2}$ 和 $\|\cdot\|_{H_h^4}$ 范数定义为:

$$\begin{aligned}
\|\phi\|_{H_h^2}^2 &:= \|\phi\|_{2,h}^2 + \|\nabla_h \phi\|_{2,h}^2 \\
\|\phi\|_{H_h^4}^2 &:= \|\phi\|_{H_h^2}^2 + \|\Delta_h \phi\|_{2,h}^2 \\
\|\phi\|_{H_h^4}^2 &:= \|\phi\|_{H_h^2}^2 + \|\nabla_h \Delta_h \phi\|_{2,h}^2 + \|\Delta_h^2 \phi\|_{2,h}^2
\end{aligned} \tag{10}$$

2.3 分部求和公式

对满足周期边界条件的 $\phi, \psi \in \mathcal{E}_\Omega$, 有如下分部求和公式:

$$(\phi, \Delta_h \psi)_h = -(\nabla_h \phi, \nabla_h \psi)_h \tag{11}$$

$$(\phi, \Delta_h^2 \psi)_h = (\Delta_h \phi, \Delta_h \psi)_h$$

2.4 离散的 Cahn-Hilliard 问题

对于 $1 \leq m \leq M-1$, 给定 $\phi^m, \phi^{m-1} \in \mathcal{E}_\Omega$, 寻找 $\phi^{m+1}, \mu^{m+1/2} \in \mathcal{E}_\Omega$ 满足周期边界条件, 使得:

$$\begin{cases} \phi^{m+1} - \phi^m - s \Delta_h \mu^{m+1/2} = 0 \\ (\chi(\phi^{m+1}, \phi^m) - \tilde{\phi}^{m+1/2}) - \epsilon^2 \Delta_h \hat{\phi}^{m+1/2} - \mu^{m+1/2} = 0 \end{cases} \tag{12}$$

其中,

$$\begin{cases} \chi(\phi^{m+1}, \phi^m) := \frac{1}{4} (\phi^{m+1} + \phi^m) ((\phi^{m+1})^2 + (\phi^m)^2) \\ \tilde{\phi}^{m+1/2} := \frac{3}{2} \phi^m - \frac{1}{2} \phi^{m-1} \\ \hat{\phi}^{m+1/2} := \frac{3}{4} \phi^{m+1} + \frac{1}{4} \phi^{m-1} \end{cases} \tag{13}$$

这个数值格式是质量守恒的:

$$(\phi^m, 1)_h = (\phi^0, 1)_h = \beta_0, \forall m \geq 0 \tag{14}$$

3 非线性多重网格求解器

首先给出递归的全逼近格式 V 循环多重网格算法, 计算过程如图 1 所示。

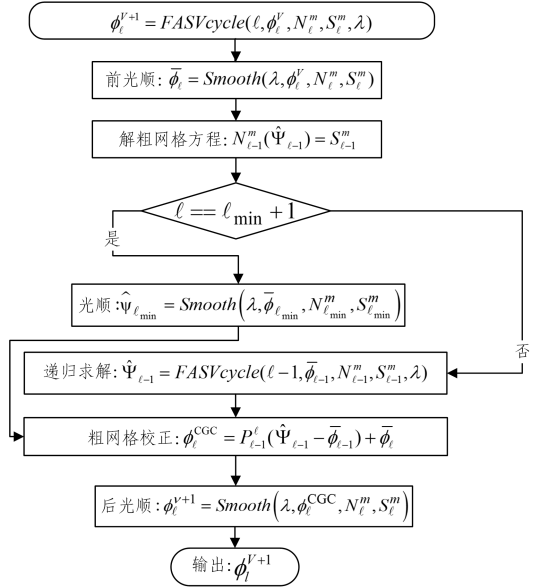


图 1 递归 FAS V-循环算子

Fig. 1 Recursive FAS V-cycle operator

接下来使用非线性 FAS 多重网格方法来求解方程组 (12)–(13), 完成这一过程需要定义算子 (Operator) 和源 (Source) 项以及光顺算子 (Smooth) 的计算过程。更多细节请参考 Trottenberg^[26]。首先对数值格式 (12)–(13) 进行重写: 给定 $\phi^{m-1}, \phi^m \in \mathcal{E}_\Omega$, 求解周期函数 $\phi^{m+1}, \mu^{m+1} \in \mathcal{E}_\Omega$, 满足方程:

$$\begin{aligned} \phi_{i,j}^{m+1} - s \Delta_h \mu_{i,j}^{m+1/2} &= \phi_{i,j}^m \\ \mu_{i,j}^{m+1} - \chi(\phi_{i,j}^{m+1}, \phi_{i,j}^m) + \frac{3\epsilon^2}{4} \Delta_h \phi_{i,j}^{m+1} &= -\tilde{\phi}_{i,j}^{m+1/2} - \frac{\epsilon^2}{4} \Delta_h \phi_{i,j}^{m-1} \end{aligned} \tag{15}$$

为了后续演示方便,这里将化学势的记号由 $\mu^{m+1/2}$ 变为 μ^{m+1} . 令 $\phi^{m+1} = (\phi^{m+1}, \mu^{m+1})^T$, 任意 ϕ 的上标将单独赋给 ϕ 和 μ . 定义形状为 $2 \times N \times N$, 非线性算子 $N = (N^1, N^2)^T$ 的分量形式为:

$$N_{i,j}^1(\phi^{m+1}, \phi^m) = \phi_{i,j}^{m+1} - sd_x (D_x \mu^{m+1})_{i,j} - sd_y (D_y \mu^{m+1})_{i,j}$$

$$N_{i,j}^2(\phi^{m+1}, \phi^m) = \mu_{i,j}^{m+1} - \chi(\phi_{i,j}^{m+1}, \phi_{i,j}^m) + \epsilon^2 \Delta_h \phi_{i,j}^{m+1}$$

定义形状为 $2 \times N \times N$ 的源 $S^m = (S^{(1,m)}, S^{(2,m)})^T$ 的分量形式为:

$$S_{i,j}^{(1,m)} = \phi_{i,j}^m, S_{i,j}^{(2,m)} = -\tilde{\phi}_{i,j}^{m+1/2} - \frac{\epsilon^2}{4} \Delta_h \phi_{i,j}^{m-1} \quad (16)$$

方程组(15)等价于 $N(\phi^{m+1}) = S^m$. 注意到算子 N 和源 S^m 在每个时间步都会变化.

接下来给出产生 $N(\phi) = S^m$ 近似解的光顺算子. 这个算子的操作定义为:

$$\bar{\phi} = \text{Smooth}(\lambda, \phi, N, S^m) \quad (17)$$

其中, ϕ 为光顺前的近似解, $\bar{\phi}$ 为光顺后的近似解, λ 为光顺次数. 光顺使用非线性的 Gauss-Seidel 方法及 Red-Black 序遍历节点. 为了方便展示,下文给出使用更简单的字典序进行光顺的细节. 同时,这里并没有使用对称的光顺步骤,即使这很容易实现^[26]. 令 n 为字典序 Gauss-Seidel 迭代的序数(注意不要混淆光顺序数 n 和时间步序数 m). 为了简化记号,令:

$$\tilde{\chi}(\phi, \psi) := \frac{1}{4}(\phi^2 + \psi^2)$$

则有,

$$\chi(\psi_{i,j}, \phi_{i,j}^m) = \tilde{\chi}(\psi_{i,j}, \phi_{i,j}^m)(\psi_{i,j} + \phi_{i,j}^m)$$

其中, ψ 为任意取值在单元中心的网格函数.

Gauss-Seidel 光顺如下:对于每个 (i, j) , 以字典序从 $(1, 1)$ 遍历到 (N, N) , 给定前一个光顺步得到的 ϕ^m 和 μ^m , 求解 $\phi_{i,j}^{m+1}$ 和 $\mu_{i,j}^{m+1}$ 满足:

$$\begin{aligned} & \phi_{i,j}^{m+1} + \frac{s}{h^2} 4\mu_{i,j}^{m+1} \\ &= S_{i,j}^{(1,m)} + \frac{s}{h^2} [\mu_{i+1,j}^m + \mu_{i-1,j}^{m+1} + \mu_{i,j+1}^m + \mu_{i,j-1}^{m+1}] \\ & \quad \left[-\tilde{\chi}(\phi_{i,j}^{m+1}, \phi_{i,j}^m) - \frac{9\epsilon^2}{2h^2} \right] \phi_{i,j}^{m+1} + \mu_{i,j}^{m+1} \\ &= S_{i,j}^{(2,m)} + \tilde{\chi}(\phi_{i,j}^{m+1}, \phi_{i,j}^m) \phi_{i,j}^m - \frac{3\epsilon^2}{4h^2} [\phi_{i+1,j}^m + \phi_{i-1,j}^{m+1} + \\ & \quad \phi_{i,j+1}^m + \phi_{i,j-1}^{m+1}] \end{aligned} \quad (18)$$

除去对立方项的线性化,这个光顺过程实现了标准的 Gauss-Seidel 块迭代. 由式(18)定义的 2×2 线性方程组是无条件可解的(这里系数矩阵的行列式始终为正). 使用 Cramer 法则来求解 $\phi_{i,j}^{m+1}$ 和 $\mu_{i,j}^{m+1}$, 注意到 Gauss-Seidel 迭代过程的不动点为这个格式的唯一解.

一个完整的 Gauss-Seidel 块循环结束后,从 $(1, 1)$ 到 (N, N) 以字典序遍历了所有网格节点. λ 个光顺循环结束后,如方程(17)所示,向量结果记为 $\bar{\phi}$, 光顺算子的操作同时结束.

多重网格在具有层次的网格上工作. 使用序数 n 来标记网格层次,其中 $\ell_{\min} \leq \ell \leq \ell_{\max}, \ell_{\max}$ 为最细的网格对应的序数,

ℓ_{\min} 为最粗的网格对应的序数. 上面描述的光顺过程只应用在最细的网格上,但它可以很容易地抽象到粗网格上,只要在粗网格上定义出非线性算子 N_H 即可. 这可以使用经典的方式来实现,例如标准的 9 点格式在粗网格上也成立. 从每个点的角度来看,非线性算子和网格层次序数 ℓ 相关,可以将非线性算子记为 N_ℓ^m . 同时,这里需要一个算子来将粗网格的信息传递到细网格上以及相反的过程. 使用 R_ℓ^{-1} 来表示限制算子,将 ℓ 层细网格上的函数转化为 $\ell-1$ 层粗网格上的函数,用 $P_{\ell-1}$ 来表示延拓算子,将 $\ell-1$ 层粗网格上的函数转换为 ℓ 层细网格上的函数,这里都是指单元中心函数. 限制算子定义为单元均值;延拓算子使用分段常数插值^[26].

这样就完成了 FAS V-循环算子中所有相关符号的定义. 最后,使用 FAS V-循环多重网格格式来迭代求解每个时间步上的值,具体算法如图 2 所示.

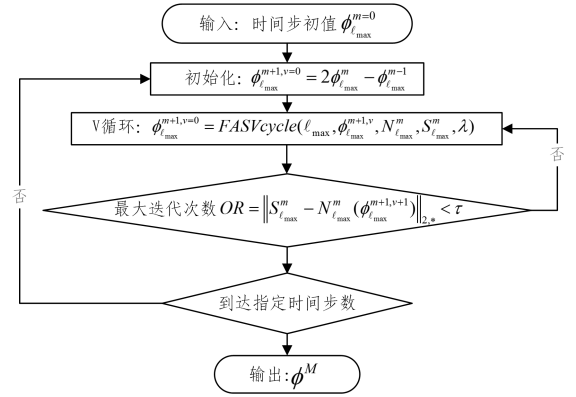


图 2 加入时间步的 FAS V-循环迭代算法

Fig. 2 FAS V-cycle iteration algorithm with time step

图 2 中,参数 $\tau > 0$ 为停止阈值. 算法中放缩后的 2-范数为:

$$\|r\|_{2,*} = \sqrt{\frac{h^2}{2} \sum_{\sigma=1}^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (r_{i,j}^{(\sigma)})^2} \quad (19)$$

其中, r 为任意 $2 \times N \times N$ 张量, $r_{i,j}^{(\sigma)}$ 为其元素.

4 FASD 算法框架

以下内容引自参考文献[23], 给定一个 Hilbert 空间 V , 有内积 $(\cdot, \cdot)_V$ 和范数 $\|\cdot\|_V$. 考虑一个泛函极小化问题:

$$u = \arg \min_{v \in V} E(v)$$

假设 1(强凸性质) 存在常数 $\mu > 0$, 使得:

$$\mu \|w - v\|_V^2 \leq \langle E'(w) - E'(v), w - v \rangle$$

对于任意 $w, v \in V$ 成立, 其中 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 为空间 V' 和 V 之间的对偶.

假设 2(一阶泛函导数的 Lipschitz 连续性) 对于给定的 $\mu_0 \in V$, 存在常数 L , 使得对任意 $w, v \in \mathcal{B} := \{v \in V | E(v) \leq E(\mu_0)\}$ 满足:

$$\|E'(w) - E'(v)\|_{V'} \leq L \|w - v\|_V$$

其中,

$$\|f\|_{V'} := \sup_{v \in V, \|v\|_V=1} \langle f, v \rangle = \sup_{v \in V \setminus \{0\}} \frac{\langle f, v \rangle}{\|v\|_V}$$

假设 3 假设 E 和 E' 都两阶 Frechet 可导, 并且存在常

数 $0 < \varepsilon < \mu/2$ 使得对任意 $w \in B$, $\eta_i \in V_i$, 以及所有 $u_i, v_i \in V_i$ 满足:

$$|\langle E''(w + \eta_i)u_i, v_i \rangle - \langle E_i''(Q_i w + \eta_i)u_i, v_i \rangle| \leq \varepsilon \|u_i\|_V \|v_i\|_V$$

假设 4(空间分解稳定) 存在常数 $C_A > 0$, 使得对任意 $v \in V$, 存在 $v_i \in V_i, i=1, \dots, N$ 成立。

$$v = \sum_{i=1}^N v_i, \sum_{i=1}^N \|v_i\|_V^2 \leq C_A^2 \|v\|_V^2$$

假设 5(强 Cauchy Schwartz 不等式) 存在常数 $C_S > 0$, 对任意 $w_{i,j} \in B, u_i \in V_i, v_i \in V_i, w_{i,j} + u_i \in B$, 下式成立:

$$\sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N \langle E'(w_{i,j} + u_i) - E'(w_{i,j}), v_j \rangle \leq C_S \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

子空间校正算法伪代码如算法 1 所示。

算法 1 子空间校正算法

Input: $v_0 := u^k$

Output: $u^{k+1} := v_N$

1. For $i=1 : N$ do
2. 计算子空间扰动, 令 $\xi_i = Q_i v_{i-1}$, 计算
3. $\tau_i = E_i'(\xi_i) - R_i E'(v_{i-1}) \in V_i'$
4. 求解子空间残差方程, 求 $\eta_i \in V_i$, 使得 $\langle E_i'(\eta_i), w \rangle = \langle \tau_i, w \rangle, \forall w \in V_i$
5. 计算校正值 $s_i = \eta_i - \xi_i \in V_i$
6. 应用子空间校正 $v_i := v_{i-1} + s_i$
7. End for
8. Return

定理 1 假设 $\{d_k\}_{k=0}^\infty, \{\delta_k\}_{k=0}^\infty, \{\eta_k\}_{k=0}^\infty$ 为非负实数序列, 前两项间存在关系: $\delta_k = d_k - d_{k+1}, k=0, 1, 2, \dots$, 假设存在两个与 k 无关的常数 $C_U, C_L > 0$, 满足 $C_L \eta_k \leq \delta_k, d_{k+1} \leq C_U \eta_k$, 则有:

$$d_{k+1} \leq \frac{C_U}{C_L + C_U} d_k, k=0, 1, 2, \dots$$

最终 $\{d_k\}$ 单调地趋于 0。

令:

$$d_{k+1} := E(u^{k+1}) - E(u)$$

$$\delta_k := E(u^k) - E(u^{k+1})$$

$$\eta_k := \sum_{j=0}^N \|e_j\|_V^2$$

则可以得到如下收敛定理。

定理 2(收敛性定理) 假设 u^k 为 FAS 算第 k 步迭代的解, 且 $u^{k+1} = FAS(u^k)$ 。如果空间分解满足假设 (SS1) 和 (SS2), 能量 E 满足假设 (E1) 和 (E2), 子空间上能量 E_i 满足假设 (AP), 且 $\varepsilon < \mu/2$, 则有:

$$E(u^{k+1}) - E(u) \leq \rho (E(u^k) - E(u))$$

成立, 且有:

$$\rho = \frac{(C_S + \varepsilon)^2 C_A^2 + \varepsilon}{(C_S + \varepsilon)^2 C_A^2 + \mu(\mu - 2\varepsilon)}$$

5 等价的有限元问题

令 T_H 为 Ω 的均匀三角形剖分, 如图 3 所示, T_h 为对 T_H

各边二等分后得到的三角形剖分。如果 $K_i \in T_h (i=1, \dots, 4)$ 为对通过连接单元 $K \in T_H$ 各边中点后得到的 4 个子单元, 则有 $h_{K_i} = H_K/2, i=1, \dots, 4$ 。通过这种方式构建的网格是全局均匀的。

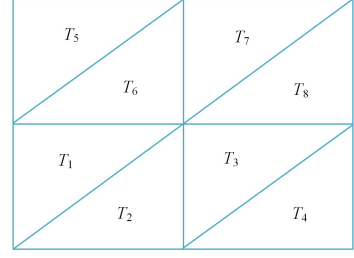


图 3 有限元均匀三角剖分

Fig. 3 Uniform triangulation of finite element

定义有限元空间如下:

$$S_h := \{v \in C(\Omega) \cap H_{per}(\Omega) \mid v|_K \in p_1(K) \forall K \in T_h\}$$

定义双线性形式为:

$$a; S_h \times S_h \rightarrow R \text{ 为 } a(\phi, \psi) := s(\nabla \phi, \nabla \psi)$$

则 $a(\cdot, \cdot)$ 构成 \dot{S}_h 上的内积。

对于差分格式 (12) - (13), 定义相应的弱形式问题如下: 对 $1 \leq m \leq M-1$, 给定 $\phi_h^m, \phi_h^{m-1} \in S_h$, 寻找 $(\phi_h^{m+1}, \mu_h^{m+1/2}) \in S_h \times S_h$ 满足周期边界条件, 使得:

$$\begin{aligned} (\phi_h^{m+1} - \phi_h^m, \nu_h) + s(\nabla \mu_h^{m+1/2}, \nabla \nu_h) &= 0, \forall \nu_h \in S_h \\ (\chi(\phi_h^{m+1}, \phi_h^m) - \tilde{\phi}_h^{m+1/2}, \psi_h) + \varepsilon^2 (\nabla \hat{\phi}_h^{m+1/2}, \nabla \psi_h) - \\ (\mu_h^{m+1/2}, \psi_h) &= 0, \forall \psi_h \in S_h \end{aligned} \quad (20)$$

其中:

$$\begin{cases} \chi(\phi_h^{m+1}, \phi_h^m) := \frac{1}{4} (\phi_h^{m+1} + \phi_h^m) ((\phi_h^{m+1})^2 + (\phi_h^m)^2) \\ \tilde{\phi}_h^{m+1/2} := \frac{3}{2} \phi_h^m - \frac{1}{2} \phi_h^{m-1} \\ \hat{\phi}_h^{m+1/2} := \frac{3}{4} \phi_h^{m+1} + \frac{1}{4} \phi_h^{m-1} \end{cases} \quad (21)$$

涉及到的积分使用集中质量法求解, 即以单元顶点为数值积分节点, 每个节点具有相同的权重。这个格式是质量守恒的, 有:

$$(\phi_h^m, 1) = (\phi_h^0, 1) = \beta_0, \forall m \geq 0 \quad (22)$$

定义均值为零的有限元空间为:

$$L_0^2(\Omega) := \{v \in L^2(\Omega) \mid (v, 1) = 0\}, \dot{S}_h := S_h \cap L_0^2(\Omega)$$

考虑下面的可逆算子 $T_h: \dot{S}_h \rightarrow \dot{S}_h$ 。由下面的变分问题定义, 给定 $\phi \in \dot{S}_h$, 求 $T_h(\phi) \in \dot{S}_h$ 满足:

$$a(T_h(\phi), \psi) = -(\phi, \psi), \forall \psi \in \dot{S}_h$$

由 Riesz 表示定理, T_h 被唯一决定。

引理 1 令 $v, w \in \dot{S}_h$, 对于这些函数取:

$$(v, w)_{-1} := a(T_h(v), T_h(w)) \quad (23)$$

然后 $(\cdot, \cdot)_{-1}$ 定义了一个 \dot{S}_h 上的内积, 且其导出的范数等价于算子范数:

$$\|v\|_{-1} := \sqrt{(v, v)_{-1}} \quad (24)$$

最后对所有 $v \in \dot{S}_h$ 及所有 $w \in \dot{S}_h, |(v, w)_{-1}| \leq \|v\|_{-1} \|w\|_{-1}$ 成立。进一步对所有 $v \in L_0^2(\Omega)$, 有 Poincare 类型的

不等式:存在某个 $C > 0$, 使得 $\|v\|_{-1} \leq C \|v\|$ 。

接下来定义离散的 Laplace 算子。 $\Delta_h: \dot{S}_h \rightarrow \dot{S}_h$ 定义为, 对任意 $v_h \in \dot{S}_h$, $\Delta_h v_h \in \dot{S}_h$ 为如下问题的唯一解:

$$(\Delta_h v_h, w_h) := -(\nabla v_h, \nabla w_h), \forall w_h \in \dot{S}_h$$

则 $T_h(\phi)$ 可记为 $\frac{1}{S} \Delta_h^{-1}(\phi)$ 。定义:

$$f := \left(\frac{3}{2} I + \frac{\varepsilon^2}{4} \Delta_h \right) \phi_h^m - \frac{1}{4} (\phi_h^m)^3 - \frac{1}{2} \phi_h^{m-1}$$

定理 3 假设 $\Omega \subset R^2$, 令 $\beta_0 := (\phi_h^m, 1)$, 定义 $\phi_*^m := \phi_h^m - \beta_0 \in \dot{S}_h$ 。对任意 $\phi \in \dot{S}_h \subset \dot{H}_{per}^1(\Omega)$, 定义能量为:

$$E_h(\phi) = \frac{1}{2} \|\phi - \phi_*^m\|_{-1}^2 + \frac{1}{16} ((\phi + \beta_0)^3 + \frac{4}{3} (\phi + \beta_0)^2 \phi_h^m + 2(\phi + \beta_0)(\phi_h^m)^2 + (\phi_h^m)^3) + \frac{3\varepsilon^2}{8} (\nabla \phi, \nabla \phi) - (f, \phi + \beta_0) \quad (25)$$

则式(25)定义的能量 E 二阶 Frechet 可导, 而且在空间 \dot{S}_h 上定义范数为 $\|\nabla \phi\|$ 时满足假设(E1)和(E2)。进而 E 在空间 \dot{S}_h 上存在唯一的全局极小值点。进一步地, $\phi_*^{m+1} \in \dot{S}_h \subset \dot{H}_{per}^1(\Omega)$ 是式(25)的极小值点当且仅当它是下列方程的解。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} ((\phi + \beta_0)^3 + (\phi + \beta_0)^2 \phi_h^m + (\phi + \beta_0)(\phi_h^m)^2 + (\phi_h^m)^3), \\ & \phi + \frac{3\varepsilon^2}{4} (\nabla \phi, \nabla \phi) + (\mu_*^{m+1/2}, \phi) = (f, \phi), \forall \phi \in \dot{S}_h \end{aligned} \quad (26)$$

其中 $\mu_*^{m+1/2} \in \dot{S}_h$ 是如下方程的解:

$$a(\mu, \nu) = -(\phi_*^{m+1} - \phi_*^m, \nu), \forall \nu \in \dot{S}_h \quad (27)$$

证明:对第一项做一次变分, 有:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \|\phi + t\psi - \phi_*^m\|_{-1}^2 \right] \Big|_{t=0} \\ & = [(\phi + t\psi - \phi_*^m, T_h(\psi))_{-1}] \Big|_{t=0} \\ & = (\phi - \phi_*^m, T_h(\psi))_{-1} \\ & = -(\mu, \psi) \end{aligned}$$

其中, $\mu \in \dot{S}_h$ 是 $a(\mu, \nu) = -(\phi - \phi_*^m, \nu) \forall \nu \in \dot{S}_h$ 的解。二次变

分为 $\frac{d^2}{dt^2} \left[\frac{1}{2} \|\phi + t\psi - \phi_*^m\|_{-1}^2 \right] \Big|_{t=0} = (\psi, \psi) > 0, \forall \psi \neq 0$ 。

对第二项的一阶变分为:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{16} ((\phi + t\psi + \beta_0)^3 + \frac{4}{3} (\phi + t\psi + \beta_0)^2 \phi_h^m + 2(\phi + t\psi + \beta_0) \phi_h^m (\phi_h^m)^2 + 4(\phi_h^m)^3 + \phi + t\psi + \beta_0) \right] \Big|_{t=0} \\ & = \frac{1}{4} ((\phi + \beta_0)^3 + (\phi + \beta_0)^2 \phi_h^m + (\phi + \beta_0)(\phi_h^m)^2 + (\phi_h^m)^3, \psi) \end{aligned}$$

对第二项的二阶变分为:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dt^2} \left[\frac{1}{16} ((\phi + t\psi + \beta_0)^3 + \frac{4}{3} (\phi + t\psi + \beta_0)^2 \phi_h^m + 2(\phi + t\psi + \beta_0) \phi_h^m (\phi_h^m)^2 + 4(\phi_h^m)^3 + \phi + t\psi + \beta_0) \right] \Big|_{t=0} \\ & = \left(\frac{1}{4} ((\phi + \beta_0 + \phi_h^m)^2 + 2(\phi_h^m)^2) \psi, \psi \right) > 0, \forall \psi \neq 0 \end{aligned}$$

进而得到能量泛函的一阶 Frechet 导数为:

$$\begin{aligned} \langle E'_h(\phi), \psi \rangle & = (\mu, \psi) + \frac{1}{4} ((\phi + \beta_0)^3 + (\phi + \beta_0)^2 \phi_h^m + (\phi + \beta_0)(\phi_h^m)^2 + (\phi_h^m)^3, \psi) + \frac{3\varepsilon^2}{4} (\nabla \phi, \nabla \psi) - (f, \psi) \end{aligned}$$

其中, $\mu = T_h(\phi - \phi_*^m)$ 。泛函的二阶 Frechet 导数为:

$$\begin{aligned} \langle E''_h(\phi) \omega, \psi \rangle & = (\omega, \psi)_{-1} + \frac{1}{4} ((|\phi + \beta_0 + \phi_h^m|^2 + 2|\phi_h^m|^2) \omega, \psi) + \frac{3\varepsilon^2}{4} (\nabla \omega, \nabla \psi) \end{aligned}$$

这里选择 $u_0 = 0$, 进而 $E(u_0) = 0$ 。 $\mathcal{B} := \{v \in \dot{S}_h \mid E(v) \leq E(\mu_0)\}$, 由 E 的凸性可以得到集合 B 的凸性。对 $\phi \in B$, 有 $E(\phi) \leq 0$ 。定义:

$$F(\phi) = \frac{1}{4} \|\phi\|_{L^4}^4 - \frac{1}{2} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\phi\|_{L^2}^2$$

$$\tilde{F}(\phi, \psi) = F(\phi) + \frac{1}{4} \|\phi - \psi\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{8} \|\nabla \phi - \nabla \psi\|_{L^2}^2$$

则经过计算可以得到:

$$\begin{aligned} E_h(\phi) & = \|\phi - \phi_*^m\|_{-1}^2 + \tilde{F}(\phi, \phi^m) - \tilde{F}(\phi_*^m, \phi^{m-1}) + \frac{1}{4} \|\phi - 2\phi_*^m + \phi^{m-1}\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{8} \|\nabla \phi - 2\nabla \phi_*^m + \nabla \phi^{m-1}\|_{L^2}^2 \leq 0 \end{aligned}$$

这里定义 $\phi^{-1} = \phi^0$, 进而有:

$$F(\phi^m) \leq \tilde{F}(\phi, \phi_*^m) \leq \tilde{F}(\phi^0, \phi^{-1}) = F(\phi^0) = C_0(\varepsilon, C_p)$$

直接计算可知, 对任意 $\phi \in \dot{S}_h$ 有:

$$\frac{1}{2} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 - |\Omega| \leq F(\phi)$$

可以对 $\phi \in \dot{S}_h$ 得到如下有界性:

$$\begin{aligned} \|\nabla \phi\|_{L^\infty(0, T; L^2)}^2 & := \max_{0 \leq m \leq M} \|\nabla \phi^m\| \leq C_1(u_0, \varepsilon, C_p) \\ \|\phi\|_{L^\infty(0, T; L^4)}^2 & := \max_{0 \leq m \leq M} \|\phi^m\|_{L^4}^2 \leq C_2(u_0, \varepsilon, C_p) \end{aligned} \quad (28)$$

其中, $C_p = C_p(\Omega) > 0$ 为 Poincare 不等式中的常数:

$$\|\phi\| \leq C_p(\Omega) \|\nabla \phi\|, \forall \phi \in \dot{S}_h$$

由 Taylor 展开式有, $\zeta = t\phi + (1-t)\psi$, 对某个 $t \in [0, 1]$ 成立, 对能量的一阶变分有:

$$\langle E'_h(\phi), \omega \rangle - \langle E'_h(\psi), \omega \rangle = \langle E'_h(\zeta), \phi - \psi \rangle, \forall \omega \in \dot{S}_h$$

而对能量的二阶变分有估计式:

$$\begin{aligned} |\langle E''_h(\zeta) \omega, \eta \rangle| & \leq s \|\nabla T_h(\omega)\| \|\nabla T_h(\eta)\| + \frac{1}{2} \|\zeta + \beta_0\|_{L^4}^2 \|\omega\|_{L^4} \|\eta\|_{L^4} + \|\phi_h^m\|_{L^4}^2 \|\omega\|_{L^4} \|\eta\|_{L^4} + 3\varepsilon^2 \|\nabla \omega\| \cdot \|\nabla \eta\| \\ & \leq s \|\nabla T_h(\omega)\| \|\nabla T_h(\eta)\| + \frac{1}{2} \|\zeta + \beta_0\|_{L^4}^2 \|\omega\|_{L^4} \|\eta\|_{L^4} + \|\phi_h^m\|_{L^4}^2 \|\omega\|_{L^4} \|\eta\|_{L^4} + 3\varepsilon^2 \|\nabla \omega\| \cdot \|\nabla \eta\| \\ & \leq [sC + (C_p^2 \|\zeta + \beta_0\|_{L^4}^2 + C_p^2 \|\phi_h^m\|_{L^4}^2 + \varepsilon^2)] \|\nabla \omega\| \cdot \|\nabla \eta\| \end{aligned}$$

进而可以得到对能量一阶变分的上界为:

$$\begin{aligned} |\langle E'_h(\phi), \omega \rangle - \langle E'_h(\psi), \omega \rangle| & = |E'_h(\zeta) \omega, \phi - \psi| \\ & \leq [sC + (C_p^2 \|\zeta\|_{L^4}^2 + C_p^2 \|\phi_h^m\|_{L^4}^2 + \varepsilon^2)] \|\nabla \omega\| \cdot \|\nabla(\phi - \psi)\| \end{aligned}$$

对能量一阶变分的下界为:

$$\begin{aligned} \langle E'_h(\phi), \phi \rangle - \langle E'_h(\psi), \psi \rangle & = \langle E''_h(\zeta)(\phi - \psi), \phi - \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= s(\nabla T_h(\phi - \psi), \nabla T_h(\phi - \psi)) + \frac{3}{4}(\zeta^2(\phi - \psi), \phi - \psi) + \frac{1}{2} \\
&\quad (|\zeta \phi^m|(\phi - \psi), \phi - \psi) + \frac{1}{4}(|\phi^m|^2(\phi - \psi), \phi - \psi) + \varepsilon^2 \\
&\quad (\nabla(\phi - \psi), \nabla(\phi - \psi)) \\
&\geq \varepsilon^2 \|\nabla(\phi - \psi)\|^2
\end{aligned}$$

这样就验证假设(E1)(E2)成立。

令 $(\mu_*^{m+1}, \phi_*^{m+1}) \in \hat{S}_h \times \hat{S}_h$ 为方程(26)–(27)的解。定义

$$\phi_h^{m+1} := \phi_*^{m+1} + \beta_0 / |\Omega|。令：$$

$$\begin{aligned}
K_2 := & \left(\frac{1}{16} (\phi_h^{m+1})^3 + \frac{4}{3} (\phi_h^{m+1})^2 \phi_*^m + \right. \\
& \left. 2(\phi_h^{m+1})(\phi_*^m)^2, 1 \right) - \beta_0
\end{aligned}$$

令 $\mu_h^{m+1} := \mu_*^{m+1} + K_2 / |\Omega|$, 则有 $(\mu_h^{m+1}, \phi_h^{m+1}) \in S_h \times S_h$

是方程(20)–(21)的解。

接下来给出有限元空间 S_h 的一个分解,并验证这个分解及 S_h 上的能量(25)满足假设。现在构造空间 V 的两层分解。令 $N = \{x_i\}_{i=1}^N \subset R^2$ 为 T_h 的内点集合,定义 Lagrange 节点基函数为:

$$\begin{aligned}
B_h &= \{\psi_i \in S_h, 1 \leq i \leq N \mid \psi_i(x_j) = \delta_{i,j}, 1 \leq i, j \leq N\} \\
B_h &\text{ 为 } S_h \text{ 的基,构造如下空间分解:} \\
V &= \sum_{i=0}^N \mathcal{V}_i = S_h \tag{29}
\end{aligned}$$

其中, $\mathcal{V}_0 = S_H$, 使用与 S_h 同样的方式构造产生。 $\mathcal{V}_i = \text{span}\{\psi_i\}, 1 \leq i \leq N$ 。

定理 4 有限元空间 S_h 的分解式(29)满足假设(SS1)。

证明:令 $Q_H: L^2(\Omega) \rightarrow S_H$ 为到 S_H 的 L^2 投影。

$$(Q_H v, w) = (v, w), \forall w \in S_H$$

对于任意 $v \in S_h$, 用 $\tilde{v} = (I - Q_H)v \in S_h$ 表示误差,并假设

$\tilde{v} = \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i$ 为误差在 S_h 中的分解。由 Q_H 在准均匀网格上的标准逼近性质、逆不等式和节点分解在 L^2 模下的稳定性,有:

$$\sum_{i=1}^N |\tilde{v}_i|_1^2 \leq C \sum_{i=1}^N h^{-2} \|\tilde{v}_i\|^2 \leq C \sum_{i=1}^N h^{-2} \|v_i\|^2 \leq C \|v\|_1^2$$

由 Q_H 在准均匀网格上的 H^1 稳定性,有 $|Q_H v|_1 \leq |v|_1$ 。

这样使用如下分解时,假设(SS1)成立。

$$v = Q_H v + (v - Q_H v) = Q_H v + \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i$$

定理 5(SS2) 令能量 E 如式(25)所示,对空间 $V = S_h$ 做式(30)所示的分解,则假设(SS2)成立。

证明:假设 $w_{i,j} \in B, u_i \in V_i, v_j \in V_j$, 且 $w_{i,j} + u_i \in B$ 。由 Taylor 定理:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N \langle E'(w_{i,j} + u_i) - E'(w_{i,j}), v_j \rangle \\
&= \sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N \langle E''(\zeta_{i,j}) v_j, u_i \rangle \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N (|\nabla T_h u_i, \nabla T_h v_j| + \frac{s}{4} (3|\zeta_{i,j}|^2 + 2|\zeta_{i,j} w_{i,j}| + \\
&\quad |w_{i,j}|^2) u_i, v_j) + \varepsilon^2 s (\nabla u_i, \nabla v_j)
\end{aligned}$$

对某个 $\zeta_{i,j} \in B$ 成立,取值介于 $w_{i,j} \in B$ 和 $w_{i,j} + u_i \in B$ 之间,且满足有界性(28)。将 $v_i, 1 \leq i \leq N$ 的支撑集记为 S_i , 它与节点为 x_i 的小三角形相同。定义:

$$N(i) := \{j > i \mid S_j \cap S_i \neq \emptyset\}$$

则 $N(i)$ 的基数为一个远小于 N 的正整数。利用 Cauchy

Schwartz 不等式有:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N (\nabla u_i, \nabla v_j) \\
&= \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} (\nabla u_i, \nabla v_j)_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|\nabla u_i\|_{S_i \cap S_j} \|\nabla v_j\|_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|\nabla u_i\|_{S_i \cap S_j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|\nabla v_j\|_{S_i \cap S_j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq (C_T \sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2)^{\frac{1}{2}} (C_T \sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_T \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

其中 $C_T > 0$ 是一个和网格结构相关的常数。这里假设网格是标准而且准均匀的,故 C_T 与 N 和 h 无关。

类似地有:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N (\nabla T_h u_i, \nabla T_h v_j) \\
&= \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} (\nabla T_h u_i, \nabla T_h v_j)_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|\nabla T_h u_i\|_{S_i \cap S_j} \|\nabla T_h v_j\|_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} C^2 \|\nabla u_i\|_{S_i \cap S_j} \|\nabla v_j\|_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} C^2 \|\nabla u_i\|_{S_i \cap S_j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} C^2 \|\nabla v_j\|_{S_i \cap S_j}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq (C_T C^2 \sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2)^{\frac{1}{2}} (C_T C^2 \sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_T C^2 \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} ((3|\zeta_{i,j}|^2 + 2|\zeta_{i,j} w_{i,j}| + |w_{i,j}|^2) u_i, v_j) \\
&= \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} ((3|\zeta_{i,j}|^2 + 2|\zeta_{i,j} w_{i,j}| + |w_{i,j}|^2) u_i, v_j)_{S_i \cap S_j} \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} (3 \|\zeta_{i,j}\|_{L^1(\omega)}^2 + 2 \|\zeta_{i,j}\|_{L^1(\omega)} \|w_{i,j}\|_{L^1(\omega)} + \\
&\quad \|w_{i,j}\|_{L^1(\omega)}) \|u_i\|_{L^1(S_i \cap S_j)} \|v_j\|_{L^1(S_i \cap S_j)} \\
&\leq \sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} C_1^2 \|u_i\|_{L^1(S_i \cap S_j)} \|v_j\|_{L^1(S_i \cap S_j)} \\
&\leq C_1^2 \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|u_i\|_{L^1(S_i \cap S_j)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j \in N(i)} \|v_j\|_{L^1(S_i \cap S_j)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_1^2 (C_T \sum_{i=0}^N \|u_i\|_{L^1}^2)^{\frac{1}{2}} (C_T \sum_{i=0}^N \|v_i\|_{L^1}^2)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_1^2 C_T \left(\sum_{i=0}^N C_P^2 \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^N C_P^2 \|\nabla v_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_1^2 C_T C_P^2 \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla v_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

因此存在一个常数 $C_S > 0$, 使得不等式:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^N \sum_{j=i+1}^N \langle E'(w_{i,j} + u_i) - E'(w_{i,j}), v_j \rangle \\
&\leq C_S \left(\sum_{i=0}^N \|\nabla u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j=0}^N \|\nabla v_j\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

成立,特别地, $C_S = LC_T = (C_1^2 C_P^2 + C^2 + 1) C_T$ 时,假设(SS2)成立。

对于假设(AP),在细网格的子空间上定义 $E_i(\eta) = E(v_{i-1} + Q_i v_{i-1} + \eta)$,在粗网格上定义 $E_H = E|_{V_H}$ 。由泛函二阶导数的连续性以及投影算子 Q_H 的逼近性质可得假设(AP)成立, $\|w - Q_H w\| \leq CH \|w\|_1$ 。这里取常数 $\varepsilon =$

$$CH \leq \mu/2 = \varepsilon^2/2.$$

定理 6 由前面的收敛性定理 2, 对二层格式的多重网格算法 1 有:

$$E(u^{k+1}) - E(u) \leq \rho(E(u^k) - E(u))$$

成立, 且:

$$\rho = \frac{(C_S + CH)^2 C_A^2}{(C_S + CH)^2 C_A^2 + \varepsilon^2 (\varepsilon^2 - 2CH)}$$

6 数值实验

本节主要验证收敛速率 ρ 对参数 ε, h, s 的依赖关系。首先通过增加右端项来设置一个精确解为 $\phi = \cos(2\pi x) \cos(t)$ 的 Cahn-Hilliard 方程。特别地, 这里在大小为 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ 的区域上求解方程, 取初值为 $\phi_{i,j}^0 = \cos(2\pi x)$, 多重网格迭代终止的条件为 $\|r\|_{2,h} \leq \tau := 1 \times 10^{-10}$ 。

图 4—图 6 中, 对残差 $\|r\|_{2,h}$ 取对数坐标, 横轴为迭代次数。图 4 中, 取 $s=0.01, \varepsilon=0.03$; 图 5 中, 取 $s=0.01, h=6.25 \times 10^{-3}$; 图 6 中, 取 $h=6.25 \times 10^{-3}, \varepsilon=0.03$ 。从图 4 中可以看到, 网格步长较大时收敛速度反而更快。从图 6 中可以看到, ε 越小, 需要的迭代次数越多。从图 5 中可以看到, 时间步长越小, 收敛速度越快; 当时间步长太大时, 数值格式会不收敛。

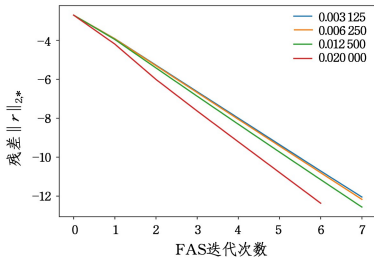


图 4 空间步长 h 和迭代次数的相关性

Fig. 4 Relevance of space step h and iterations

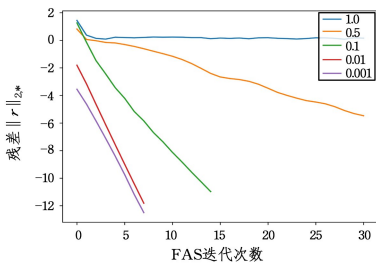


图 5 时间步长 s 和迭代次数的相关性

Fig. 5 Relevance of time step s and iterations

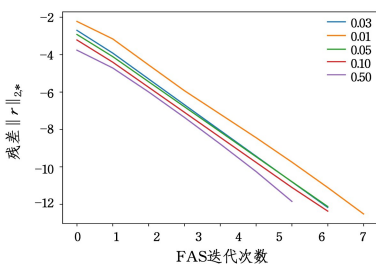


图 6 方程参数 ε 和迭代次数的相关性

Fig. 6 Relevance of ε and iterations

从收敛率 ρ 的表达式来看, ε 越小, 收敛速度越慢。而且由 $\varepsilon^2 - 2CH > 0, H=2h$ 可得:

$$h < \varepsilon^2/4C \quad (30)$$

即 ε 越小, 网格 h 越细。另一方面, ε 和界面宽度 δ 的关系为 $\delta = 4\sqrt{\varepsilon^2}$, 要使网格有足够的分辨率也需要 h 比 ε 小。但明显前面一个条件更为严格。对于二阶格式而言, 若要保证数值格式的精度, 则需要 s 足够小。式(30)也增加了对空间步长 h 的限制。

结束语 本文给出了求解 Cahn-Hilliard 方程的差分格式的多重网格算法的收敛性分析, 从理论上保证了求解过程的可靠性, 并通过数值实验验证了收敛系数与方程参数及网格尺度的依赖关系。理论分析中用到了差分格式和有限元格式的等价性, 但这种等价性只在极特殊的情况下成立。从收敛性分析中已经看到方程参数 ε 对收敛率的影响, 在未来的研究中将尝试改进这种影响, 同时尝试恢复多重网格收敛系数与网格尺度无关的性质。

参考文献

- [1] CAHN J W, HILLIARD J E. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy [J]. The Journal of Chemical Physics, 1958, 28(2): 258-267.
- [2] CAHN J W. Free Energy of a Nonuniform System. II. Thermodynamic Basis [J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 30(5): 1121-1124.
- [3] ZHOU B, POWELL A C. Phase Field Simulations of Early Stage Structure Formation During Immersion Precipitation of Polymeric Membranes in 2D and 3D [J]. Journal of Membrane Science, 2006, 268(2): 150-164.
- [4] GARCKE H, LAM K F, SITKA E, et al. A Cahn-Hilliard-Darcy Model for Tumour Growth with Chemotaxis and Active Transport [J]. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 2016, 26(6): 1095-1148.
- [5] QIAN T, WANG X P, SHENG P. A Variational Approach to Moving Contact Line Hydrodynamics [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2006, 564: 333-360.
- [6] BERTOZZI A L, ESEDOGLU S, GILLETTE A. Inpainting of Binary Images Using the Cahn-Hilliard Equation [J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2006, 16(1): 285-291.
- [7] LAM K F, WU H. Thermodynamically Consistent Navier-Stokes-Cahn-Hilliard Models with Mass Transfer and Chemotaxis [J]. European Journal of Applied Mathematics, 2018, 29(4): 595-644.
- [8] GUO J, WANG C, WISE S M, et al. An H^2 Convergence of a Second-Order Convex-Splitting, Finite Difference Scheme for the Three-Dimensional Cahn-Hilliard Equation [J]. Communications in Mathematical Sciences, 2016, 14: 489-515.
- [9] HU Z, WISE S, WANG C, et al. Stable and Efficient Finite-Difference Nonlinear-Multigrid Schemes for the Phase-Field Crystal Equation [J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228: 5323-5339.
- [10] WISE S M. Unconditionally Stable Finite Difference, Nonlinear

- Multigrid Simulation of the Cahn-Hilliard-Hele-Shaw System of Equations[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2010, 44: 38-68.
- [11] LEE C, JEONG D, YANG J, et al. Nonlinear Multigrid Implementation for the Two-Dimensional Cahn Equation[J]. *Mathematics*, 2020, 8(1): 97.
- [12] REUSKEN A. Convergence of the Multilevel Full Approximation Scheme Including the V-cycle[J]. *Numerische Mathematik*, 1988, 53(6): 663-686.
- [13] HACKBUSCH W, REUSKEN A. On Global Multigrid Convergence for Nonlinear Problems[J]. Vieweg + Teubner Verlag, 1989, 23: 105-113.
- [14] HACKBUSCH W, REUSKEN A. Analysis of a Damped Nonlinear Multilevel Method [J]. *Numerische Mathematik*, 1989, 55(2): 225-246.
- [15] XIE D. New Parallel Iteration Methods, New Nonlinear Multigrid Analysis, and Application in Computational Chemistry[D]. Houston: University of Houston, 1995.
- [16] SHAJDUROV V V. Multigrid Methods for Finite Elements [M]. Netherlands: Springer, 1996: 542-543.
- [17] REUSKEN A. Convergence of the Multigrid Full Approximation Scheme for a Class of Elliptic Mildly Nonlinear Boundary Value Problems[J]. *Numerische Mathematik*, 1987, 52(3): 251-277.
- [18] HACKBUSCH W. Multi-grid Methods and Applications [M]. Berlin: Springer-Verlag 1985.
- [19] XIE H H, XIE M T, ZHANG N. An Efficient Multigrid Method for Semilinear Elliptic Equation[J]. *Journal on Numerical methods and computer applications*, 2019, 40(2): 143-160.
- [20] TAI X C, XU J C. Global and Uniform Convergence of Subspace Correction Methods for some Convex Optimization Problems [J]. *Mathematics of Computation*, 2002(71): 105-124.
- [21] TAI X C, XU J. Subspace Correction Methods for Convex Optimization Problems [C]// Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods, 1998.
- [22] XU J. Iterative Methods by Space Decomposition and Subspace Correction[J]. *Siam Review*, 1992, 34: 581-613.
- [23] CHEN L, HU X, WISE S M. Convergence Analysis of the Fast Subspace Descent Method for Convex Optimization Problems [J]. *Mathematics of Computation*, 2020, 89(325): 2249-2282.
- [24] EYRE D. Unconditionally Gradient Stable Time Marching the Cahn-Hilliard Equation[C]// Computational and Mathematical Models of Microstructural Evolution. Materials Research Society, 1998: 1686-1712.
- [25] WISE S M, WANG C, LOWENGRUB J S. An Energy Stable and Convergent Finite-Difference Scheme for the Phase Field Crystal Equation[J]. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 2009, 47: 2269-2288.
- [26] TROTTEBERG U, OOSTERLEE C W, SCHÜLLER A. Multigrid[M]. New York: Academic Press, 2005.



GUO Jing, born in 1986, Ph. D candidate. His main research interests include software development, high-performance computing and analysis.



QI Deyu, born in 1959, Ph. D, professor, doctoral supervisor. His main research interests include the new generation of computer system structure, software development methods and software architecture, big data technology, CASE and software development environment, and tools, intelligent enhancement, intelligent control, computer system security, etc.

(责任编辑:何杨)