Allen-Cahn 方程数值格式设计

蒋鹏

2025年10月29日

目录

 1 算法设计
 1

 1.1 法一:近似
 2

 1.2 法二: Newton
 2

 2 数值算例
 2

 2.1 算例一
 2

 3 代码经验
 2

1 算法设计

我们欲求解下述方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \varepsilon^2 \Delta u + f(u) = 0; \tag{1}$$

求解区域为 $\Omega = [-1,1]^2$ 。初值条件为 $u(x,y,0) = u_0(x,y)$ 。其中 f(u) 是非线性 $f(u) = \log \frac{u}{1-u} + \theta(1-2u) = g(u) + \theta(1-2u)$. 再定义 $F(u) = u \log u + (1-u) \log (1-u) + \theta(u-u^2)$. 利用时间向后 Euler,空间五点差分格式

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{dt} - \varepsilon^2 \Delta_h u^{n+1} + f(u^{n+1}) = 0;$$
 (2)

做一步凸分裂格式

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{dt} - \varepsilon^2 \Delta_h u^{n+1} + g(u^{n+1}) + \theta(1 - 2u^n) = 0;$$
(3)

定义泛函

$$J(u) = \frac{\|u - u^n\|^2}{2dt} + \int_{\Omega} (\frac{1}{2} (\varepsilon^2 |\nabla u|^2) + G(u)) dx + \theta < u, 1 - 2u^n >;$$
(4)

于是格式等价于

$$u^{n+1} = \arg\min_{u \in V_h} J(u); \tag{5}$$

定义

$$F_1(u) = \frac{\|u - u^n\|^2}{2dt} + \int_{\Omega} (\frac{1}{2} (\varepsilon^2 |\nabla u|^2)) dx$$
 (6)

和 $F_2(u) = \int_{\Omega} G(u) dx + \theta < u, 1 - 2u^n >$. 进而有 $J(u) = F_1(u) + F_2(u)$ 。 原格式等价于

$$\min_{u_1, u_2} F_1(u_1) + F_2(u_2), \quad s.t. \quad u_1 = u_2;$$
(7)

于是有二次罚函数

$$L(u_1, u_2; Y) = F_1(u_1) + F_2(u_2) + \langle Y, u_1 - u_2 \rangle + \frac{\rho}{2} ||u_1 - u_2||^2;$$
(8)

得到 ADMM 格式

$$\begin{cases} u_1^{k+1} = \arg\min_{u_1} L(u_1, u_2^k; Y^k) \\ u_2^{k+1} = \arg\min_{u_2} L(u_1^{k+1}, u_2; Y^k) \\ Y^{k+1} = Y^k + \tau \rho (u_1^{k+1} - u_2^{k+1}) \end{cases}$$

$$(9)$$

第一个子问题有显式解,可以用 CG 或者 FFT

$$(\frac{1}{dt} - \varepsilon^2 \Delta_h + \rho) u_1^{k+1} = \frac{1}{dt} u^n + \rho u_2^k - Y^k;$$
(10)

第二个子问题的解满足

$$\log(\frac{u_2^{k+1}}{1-u_2^{k+1}}) + \theta(1-2u^n) - Y^k - \rho(u_1^{k+1} - u_2^{k+1}) = 0; \tag{11}$$

1.1 法一: 近似

$$u_2^{k+1} \approx u_2^k,$$

$$u_2^{k+1} = 1 - \frac{1}{1 + \exp(y^k - \theta(1 - 2u^n) + \rho(u_1^{k+1} - u_2^k))}$$
(12)

1.2 法二: Newton

以 0.5 分界,找到初始迭代点保证局部凹凸性后用 Newton 迭代。

2 数值算例

2.1 算例一

取初值函数

$$u_0(x,y) = \frac{1 + \sin 2\pi x \sin 2\pi y}{3} \tag{13}$$

和参数 $\theta = 4.0$. 用上述算法求解,发现效果良好,可以得到预期结果。

3 数值问题

- 1. 当前主要问题: 能量函数不递减! 数值实验发现与 ρ 的取值有关系,但是和理论分析不一致。
- 2. 当 ρ 很大,可以加速 CG 收敛,但 U_1 在迭代中可能出现越界,严重影响 u_2 的 Newton 迭代 初值选取!
- 3. 是否可以用 Ising model 及 MC 相关方法试试看?