相场模型与复杂流体移动接触线模型的能量稳定格式

王琳

摘　要

基于 Ginzburg-Landau 自由能相变理论导出的相场模型, 是用来模拟界面问题的有力工具. 相场模型起源于二十世纪中期, 近年来, 无论理论上还是数值模拟上都取得了了较大的突破, 目前已经成为研究材料科学与多相流的重要工具. 根据耗散的不同可分为 Allen-Cahn 方程与 Cahn-Hilliard 方程. 用相场模型来追踪复杂流体界面, 不需要实时确定是否满足显式界面条件, 并且整个控制系统满足能量耗散性, 容易进行数学分析与数值实现.

对 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程, 我们分别提出了两个二阶能量稳定的线性半隐格式: 分别是二阶稳定的线性向后差分格式 (SL-BDF2 格式) 与二阶稳定的线性 Crank-Nicolson 格式 (SL-CN 格式). 在这两个格式中, 显格式处理非线性项, 为了使得格式无条件稳定, 增加了两个人工稳定项: 对于 Allen-Cahn 方程用两个稳定项 $-A\tau\delta_t\phi^{n+1}$ 与 $-B\delta_{tt}\phi^{n+1}$; 对于 Cahn-Hilliard 方程用稳定项 $-A\tau\Delta\delta_t\phi^{n+1}$ 与 $B\delta_{tt}\phi^{n+1}$. 通过引入 H^{-1} 范数, 来证明对于 Cahn-Hilliard 方程的格式离散能量是无条件稳定的. 值得指出的是, 为了使得数值离散能量满足耗散性, 我们需要假设能量势函数 $F(\phi)$ 的二次增长是一致有界的. 每一时间步, 只需要求解一个常系数线性系统, 并且不需要限定时间步长, 大大提高了数值求解效率. 此外, 我们给出了 SL-BDF2 格式与 SL-CN 格式严格的最优误差分析. 在这个误差分析中, 我们改善了传统的误差估计中指数依赖于 $1/\varepsilon$ 的问题, 通过应用谱估计, 使其误差增长仅多项式依赖于 $1/\varepsilon$. 特别地, 对于 SL-BDF2 格式与求解 Allen-Cahn 方程的 SL-CN 格式, 最优误差估计在 $A = 0$ 或/且 $B = 0$ 同样成立, 但是求解 Cahn-Hilliard 方程的 SL-CN 格式, 需要稳定性常数 $B \geq L/2\varepsilon$ 来保证格式的收敛性, 为了解决这个问题, 我们又提出了一个修正的二阶线性稳定的半隐 Crank-Nicolson 格式 (SL-MCN 格式), 使得该误差估计对于 $B = 0$ 也同样成立. 通过数值结果可以验证 SL-BDF2 格式与 SL-CN 格式的能量稳定性与二阶收敛性.

基于相场模型的两相复杂流体问题近年来得到了广泛的研究. 在文章的后半部分, 我们介绍了复杂流体移动接触线 (MCL) 模型的 Onsager 变分原理的导出, 故其自然满足能量耗散性. 在整个系统中, 一相是向列相液晶相, 一相是牛顿

粘性流, 界面采用 Cahn-Hilliard 相场方程来追踪. 该模型中分别给出向列相液晶指向矢的锚定边界条件, Cahn-Hilliard 方程的动态接触线条件, 以及 Navier-Stokes 方程的广义的 Navier 边界条件 (GNBC) 来精确地描述 MCL 问题的边界条件. 我们提出了一阶线性稳定解耦格式求解该控制方程, 格式满足如下优点: 1) 无条件稳定的, 允许较大的时间步长; 2) 离散能量是耗散的; 3) 每一时间步只需要求解常系数椭圆形方程. 我们在空间上用 Fourier-Legendre Galerkin 方法进行空间离散, BiCGSTAB 方法进行预处理, 数值算例中进一步验证了该格式的有效性与准确性.

关键词： 能量稳定半隐格式, 二阶时间推进, 相场方程, 复杂流体, 移动接触线