arXiv:2303.00222v1 [math.NA] 1 Mar 2023

带松弛的高效且精确的耗散系统指数SAV算法 *

YANRONG ZHANG† 和 XIAOLI LI‡

摘要。 本文针对耗散系统构造了两类带松弛的指数SAV方法（R-ESAV）。所构造的格式是线性的，并且无条件能量稳定。与R-SAV和R-GSAV方法相比，这些格式无需任何假设即可保证标量辅助变量的正性；它们保留了指数SAV方法的所有优点，并且满足关于修正能量的耗散律，该修正能量与原始自由能直接相关。此外，第二类R-ESAV方法易于构造高阶BDFk 格式。特别地，针对Navier-Stokes 方程，我们基于R-ESAV方法构造了两类新型格式。最后，通过大量数值算例展示了所提出方法的准确性和有效性。

Key 关键词。 耗散系统；能量稳定性；指数标量辅助变量（ESAV）；松弛

AMS主题分类。 35Q40; 65M12;35Q55; 65M70

1. 引言。 许多重要的科学与工程问题，例如复杂流体、新型复合材料、非凸函数优化等，都可以用耗散系统建模。从数值角度来看，维持离散能量耗散律至关重要，这样可以避免不符合物理规律的数值解。在过去几十年里，人们投入了大量精力，致力于为耗散系统构造高效且能量稳定的时间离散格式。现有的主流方法可以分为几类：稳定化线性隐式方法 [35, 26], 指数时间差分（ETD）方法 [28, 7, 8], 凸分裂方法 [9, 10, 22, 1], 不变能量二次化（IEQ）方法 [30, 32, 33, 27], 标量辅助变量（SAV）方法 [24, 23, 25] 等等。

在这些方法中，SAV 方法已成为构造能量稳定格式的一种高效且广受欢迎的工具，并已成功应用于梯度流 [24, 25, 6, 18, 27]和一般耗散系统 [19, 16, 17]。SAV 方法具有许多优点，但仍存在一些有待改进之处。例如：（i）每个时间步长都需要求解两个线性系统；（ii）要求自由能的非线性部分有下界；（iii）其无条件能量稳定性是针对修正能量而非原始能量而言的。近期，针对这些不足，已有一些相应的改进。Huang等人 [13, 12]提出了一种广义 SAV 方法，只需求解一个常系数线性方程。Cheng等人 [2, 5]提出了一种新颖的拉格朗日乘子方法，该方法能够耗散原始能量，且不要求自由能的非线性部分有下界。所构造的格式需要求解一个非线性代数方程，这会带来额外的计算开销和理论分析难度；当时间步长不够小时，还可能不存在合适的解。此外，文献 [20, 21, 3]中还提出了一些更一般形式的 SAV 方法，以拓展其适用范围。所构造的格式，尤其是指数SAV方法，不要求自由能的非线性部分有下界，并且无需任何假设即可保证 SAV 的正性。近期，文献 [14, 34]将松弛技术应用于 SAV 方法，以提高数值解的精度。该方法的核心思想是通过更新辅助变量，使修正能量与原始能量紧密联系起来。

*本研究得到国家自然科学基金项目（12271302、12131014 和 11971407）的资助。

† 香港理工大学应用数学系，香港红磡。电子邮箱：yanrongzhang math@163.com。

‡通讯作者。山东大学数学学院，中国济南，250100。电子邮箱：xiaoli- math@sdu.edu.cn。

本文旨在针对耗散系统提出两类松弛指数SAV（R-ESAV）方法。通过引入松弛技术，所构造的格式将 SAV 与自由能直接联系起来，并具有以下显著优点:

- R-ESAV 格式关于一种更接近原始自由能且与之直接关联的修正能量无条件满足能量稳定性，并且与原始 ESAV 方法相比，能够显著提高解的精度;
- 只需求解一个常系数线性系统;
- 所构造的格式不需要对自由能的非线性部分施加有界下限限制;
- 无需任何假设即可保证标量辅助变量的正性。

此外，我们的数值结果表明，R-ESAV 格式能够提高 SAVξ^{n+1} 的精度；在我们测试的大量数值模拟中，R-ESAV 格式的修正能量几乎始终等于原始自由能。此外，针对 Navier-Stokes 方程，我们基于两种不同的解耦方法构造了两类 BDFk ($1 \leq k \leq 4$) 数值格式。据作者所知，这是首次将松弛技术应用于一般耗散系统。

本文其余部分安排如下。在第2节中，我们介绍用于梯度流的松弛指数SAV方法的第一个版本。随后，我们将 R-ESAV-1方法推广到具有多组分或多个非线性势的梯度系统。在第3节中，我们介绍适用于一般耗散系统的松弛指数SAV方法的第二个版本，并为纳维-斯托克斯方程构造两个 BDFk 格式。在第4节中，我们采用新方法进行若干数值实验，并提供大量数值模拟，以验证其通用性和效率。在第5节中，我们给出一些总结性意见。

2. 松弛指数SAV方法的第一个版本。本节中，我们考虑通过引入松弛因子来改进 ESAV方法 [20] ，以修正标量辅助变量（SAV）；为方便起见，将其简称为 R-ESAV-1方法。

2.1. 用于梯度流的 R-ESAV-1方法。在不失一般性的前提下，我们考虑如下给定的自由能

$$E(\phi) = \frac{1}{2}(\mathcal{L}\phi, \phi) + \int_\Omega F(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{2.1}$$

其中， $\mathcal{L}$ 是一个自伴线性椭圆算子， $F(\phi)$是一个非线性能量密度函数。根据能量变分原理，由上述自由能推导出的梯度流可写为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \dfrac{\delta E(\phi)}{\delta \phi} = \mathcal{L}\phi + F'(\phi), \end{cases} \tag{2.2}$$

其中， $\mathcal{G}$ 是一个正定算子，表示系统的耗散机制，例如，对于 L^2 梯度流为$\mathcal{G} = I$ ，对于 H^{-1} 梯度流为 $\mathcal{G} = -\Delta$ 。

我们引入一种指数SAV

$$r(t) = \exp(E_1(\phi)) = \exp(\int_\Omega F(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x}), \tag{2.3}$$

并对2.3式关于 t求导，可得

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = r\int_\Omega F'(\phi)\phi_t \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \frac{r^2}{\exp\left(E_1(\phi)\right)}\int_\Omega F'(\phi)\phi_t \mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{2.4}$$

记 $U(r,\ \phi) =\ \ \frac{r}{\text{指数函数}(E_1(\phi))} F'(\phi)$，并注意到方程（2.4）可等价地改写为

$$\frac{\mathrm{d}\ln(r)}{\mathrm{d}t} = (U(r,\phi),\phi_t)\,, \tag{2.5}$$

然后我们将系统（2.2）重写如下

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \mathcal{L}\phi + U(r,\phi), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln(r)}{\mathrm{d}t} = (U(r,\phi),\phi_t)\,. \end{cases} \tag{2.6}$$

分别对（2.6）中的前两个方程与 μ 和 $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ 取内积，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{1}{2}(\mathcal{L}\phi,\phi) + \ln(r)\right] = -(\mathcal{G}\mu,\mu) \le 0. \tag{2.7}$$

受 [14, 34]，中松弛因子思想的启发，我们可以构造 R-ESAV-1/BDFk ($1 \le k \le 6$) 格式：

给定 r^{n-k}、.....、r^n、ϕ^{n-k}、.....、ϕ^n，我们通过以下两个步骤确定 r^{n+1}、ϕ^{n+1}：

步骤 1： 利用 ESAV方法计算中间解（$\tilde{r}^{n+1},\ \phi^{n+1}$）：

$$\frac{\alpha_k \phi^{n+1} - A_k\left(\phi^n\right)}{\delta t} = -\mathcal{G}\mu^{n+1}, \tag{2.8}$$

$$\mu^{n+1} = \mathcal{L}\phi^{n+1} + U\left(B_k\left(r^n\right), B_k\left(\phi^n\right)\right), \tag{2.9}$$

$$\frac{\alpha_k \ln(\tilde{r}^{n+1}) - A_k\left(\ln(r^n)\right)}{\delta t} = \left(U\left(B_k\left(r^n\right), B_k\left(\phi^n\right)\right), \frac{\alpha_k \phi^{n+1} - A_k\left(\phi^n\right)}{\delta t}\right), \tag{2.10}$$

其中，α_k、A_k 和 B_k 是 BDFk 格式中的相关参数和算子，可通过泰勒展开获得。为方便读者，下面给出 $k = 1$、2、3、4 的形式：

一阶：

$$\alpha_1 = 1, \quad A_1\left(\phi^n\right) = \phi^n, \quad B_1\left(\phi^n\right) = \phi^n; \tag{2.11}$$

二阶：

$$\alpha_2 = \frac{3}{2}, \quad A_2\left(\phi^n\right) = 2\phi^n - \frac{1}{2}\phi^{n-1}, \quad B_2\left(\phi^n\right) = 2\phi^n - \phi^{n-1}; \tag{2.12}$$

三阶：

$$\alpha_3 = \frac{11}{6}, \quad A_3\left(\phi^n\right) = 3\phi^n - \frac{3}{2}\phi^{n-1} + \frac{1}{3}\phi^{n-2}, \quad B_3\left(\phi^n\right) = 3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2}; \tag{2.13}$$

四阶：

$$\begin{aligned} &\alpha_4 = \frac{25}{12}, \quad A_4\left(\phi^n\right) = 4\phi^n - 3\phi^{n-1} + \frac{4}{3}\phi^{n-2} - \frac{1}{4}\phi^{n-3}, \\ &B_4\left(\phi^n\right) = 4\phi^n - 6\phi^{n-1} + 4\phi^{n-2} - \phi^{n-3}. \end{aligned} \tag{2.14}$$

步骤 2： 通过松弛因子按如下方式更新 r^{n+1}：

$$r^{n+1} = \theta_0^{n+1}\tilde{r}^{n+1} + (1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right), \quad \theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}, \tag{2.15}$$

其中， $\mathcal{W}$ 是按如下方式定义的一组：一阶：

$$\mathcal{W}=\left\{\theta\in[0,1]\ s.t.\ \ln(r^{n+1})-\ln(\tilde{r}^{n+1})\leq\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)\right\};\tag{2.16}$$

二阶：

$$\mathcal{W}=\left\{\theta\in[0,1]\ s.t.\ \frac{3}{2}\ln(r^{n+1})-\frac{3}{2}\ln(\tilde{r}^{n+1})\leq\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)\right\};\tag{2.17}$$

with $\gamma\in[0,$是一个无j条件 p参数。

下面我们说明如何选择 θ_0^{n+1}。对于 BDF1 格式，将 (2.15) 代入 (2.16)，可推导出，若选择 θ_0^{n+1}使得

$$\left(\tilde{r}^{n+1}-\exp\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)\right)\theta_0^{n+1}\leq\exp\left(\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)+\ln(\tilde{r}^{n+1})\right)-\exp(E_1\left(\phi^{n+1}\right)),\tag{2.18}$$

则 $\theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}$。与 BDF2 格式类似，我们需要选择 θ_0^{n+1}，使其满足以下不等式 (2.19)

$$\left(\tilde{r}^{n+1}-\exp\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)\right)\theta_0^{n+1}\leq\exp\left(\frac{2}{3}\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)+\ln(\tilde{r}^{n+1})\right)-\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right).$$

对于 BDF1 格式，记 $S=$指数函数 $\left(\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)+\ln(\tilde{r}^{n+1})\right)$；对于 BDF2 格式，记 $S=$指数函数 $\left(\frac{2}{3}\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)+\ln(\tilde{r}^{n+1})\right)$。下一个定理总结了 θ_0^{n+1} 的选择。

THEOREM 2.1. 我们选择 θ_0^{n+1}于 (2.15) 如下：

1. 如果 $\tilde{r}^{n+1}=$指数函数 $\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)$，则设 $\theta_0^{n+1}=0$。*2.* 如果 $\tilde{r}^{n+1}>$指数函数 $\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)$，则设 $\theta_0^{n+1}=0$。*3.* 如果 $\tilde{r}^{n+1}<$指数函数 $\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)$ 且 $S-$指数函数 $(E_1(\phi))\geq 0$，则设 $\theta_0^{n+1}=0$。*4.* 如果 $\tilde{r}^{n+1}<$指数函数 $\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)$ 且 $S-$指数函数 $(E_1(\phi))<0$，则设 $\theta_0^{n+1}=$ $\frac{S-\text{指数函数}(E_1(\phi^{n+1}))}{\tilde{r}^{n+1}-\text{指数函数}(E_1(\phi^{n+1}))}$。

那么，(2.18)（分别是 (2.19)）对于 *BDF*1 （分别是 *BDF*2）格式在上述所有情况下均成立，并且$\theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}$。此外，我们有 $r^{n+1}>0$，且采用上述 (2.8)-(2.15) 的选择后，该格式θ_0^{n+1}满足无条件能量稳定性，具体而言：一阶：

$$R^{n+1}_{R-ESAV-BDF1}-R^{n}_{R-ESAV-BDF1}\leq-\delta t(1-\gamma)\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)\leq 0,\tag{2.20}$$

其中 $R^{n+1}_{R-ESAV-BDF1}=\frac{1}{2}\left(\mathcal{L}\phi^{n+1},\phi^{n+1}\right)+\ln(r^{n+1})$;

二阶：

$$R^{n+1}_{R-ESAV-BDF2}-R^{n}_{R-ESAV-BDF2}\leq-\delta t(1-\gamma)\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)\leq 0,\tag{2.21}$$

其中 $R^{n+1}_{R-ESAV-BDF2}=\frac{1}{4}\left(\left(\mathcal{L}\phi^{n+1},\phi^{n+1}\right)+\left(\mathcal{L}\left(2\phi^{n+1}-\phi^{n}\right),2\phi^{n+1}-\phi^{n}\right)\right)+\frac{1}{2}\left(3\ln(r^{n+1})-\ln(r^{n})\right)$。此外，我们有

$$r^{n+1}\leq\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right),\quad\forall n\geq 0.\tag{2.22}$$

证明。容易验证，上述对 θ_0^{n+1}的选择满足（2.18）（对于 BDF1 格式）或（2.19）（对于 BDF2 格式），且适用于所有满足 $\theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}$的情形。

我们可以得到 $\tilde{r}^{n+1}>0$ 由（2.10）可知，并利用指数函数 $\left(E_1(\phi^{n+1})\right)>0$，我们有 $r^{n+1}>0$.

分别将 (2.8)-(2.9)与 μ^{n+1} 和 $\frac{\phi^{n+1}-\phi^{n}}{\delta t}$ （分别与 $\frac{3\phi^{n+1}-4\phi^{n}+\phi^{n-1}}{2\delta t}$）作内积，并将所得结果分别与方程 (2.10) 和 (2.16)（分别与 (2.17)）结合，可推导出 BDF1（分别为 BDF2）格式的离散能量耗散律 (2.20)（分别为 (2.21)）。

对于情形 1–3，我们有 $\theta_0^{n+1}=0$，因此 $r^{n+1}=E_1(\phi^{n+1})$。对于情形 4，由于

$$\theta_0^{n+1}=\frac{S-\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right)}{\tilde{r}^{n+1}-\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right)}\in[0,1]$$

并且 $\tilde{r}^{n+1}<$指数函数 $\left(E_1(\phi^{n+1})\right)$，我们可以由 $r^{n+1}\leq$指数函数 $\left(E_1(\phi^{n+1})\right)$（2.15）得到上述结论。证明完毕。 □

注2.1. 为防止解因指数函数的快速增长而"爆炸"，我们可以添加一个正数 C，重新定义指数 *SAV* $r(t)=$指数函数 $\left(\frac{E_1(\phi)}{C}\right)$，这与 *[20]* 类似。

2.2. R-ESAV-1方法在多个函数梯度流中的应用。下面通过考虑以下能量泛函，给出多个函数梯度流的R-ESAV-1方法

$$E(\Phi)=\sum_{i,j=1}^{m}\frac{1}{2}d_{ij}(\phi_i,\mathcal{L}\phi_j)+E_1(\Phi), \tag{2.23}$$

其中 $\Phi=[\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_m]^T$, $\mathcal{L}$ 是自伴正定线性算子，常数矩阵 (d_{ij}) $i,\ j=1,\ \cdots,\ m$ 是对称正定的。令 $W_i(\Phi)=\frac{\delta E_1(\Phi)}{\delta\phi_i}$，则相应的梯度流为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\phi_i}{\partial t}=-\mathcal{G}\mu_i,\\ \mu_i=\dfrac{\delta E}{\delta\phi_i}=\displaystyle\sum_{j=1}^{m}d_{ij}\mathcal{L}\phi_j+Q_i(\Phi),\end{cases} \tag{2.24}$$

其中 $\mathcal{G}$ 是一个非负算子。分别对（2.24）与 μ_i 和 $\frac{\partial\phi_i}{\partial t}$取内积，对 i求和，并利用 $\mathcal{L}$ 和 $d_{ij}=d_{ji}$的自伴性，可得如下能量耗散律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E(\Phi)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{m}d_{ij}(\phi_i,\mathcal{L}\phi_j)+E_1(\Phi)\right\}=-\sum_{i=1}^{m}(\mathcal{G}\mu_i,\mu_i)\leq 0. \tag{2.25}$$

我们采用 R-ESAV-1方法构造多个函数梯度流的数值格式。引入一个指数SAV

$$r(t)=\exp\left(E_1(\Phi)\right), \tag{2.26}$$

则（2.24）可改写为

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\phi_i}{\partial t}=\mathcal{G}\mu_i,\\ \mu_i=\displaystyle\sum_{j=1}^{m}d_{ij}\mathcal{L}\phi_j+\frac{r}{\exp\left(E_1(\Phi)\right)}Q_i(\Phi),\\ \dfrac{\mathrm{d}\ln(r)}{\mathrm{d}t}=\dfrac{r}{\exp\left(E_1(\Phi)\right)}\displaystyle\sum_{i=1}^{m}\left(Q_i(\Phi),\frac{\partial\phi_i}{\partial t}\right).\end{cases} \tag{2.27}$$

记

$$U_i(r,\Phi)=\frac{r}{\exp\left(E_1(\Phi)\right)}Q_i(\Phi),$$

则系统（2.27）可简化为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi_i}{\partial t} = \mathcal{G}\mu_i, \\ \mu_i = \displaystyle\sum_{j=1}^{m} d_{ij}\mathcal{L}\phi_j + U_i(r,\Phi), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln(r)}{\mathrm{d}t} = \displaystyle\sum_{i=1}^{m}\left(U_i(r,\Phi), \dfrac{\partial \phi_i}{\partial t}\right). \end{cases} \tag{2.28}$$

分别对（2.28）中的前两个方程取与 μ_i 和 $\frac{\partial \phi_i}{\partial t}$的内积，并将所得结果与（2.28）中的第三个方程结合，再对 i求和，可得到等价的能量耗散律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{m} d_{ij}\left(\phi_i, \mathcal{L}\phi_j\right) + \ln(r)\right\} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E\left(\Phi\right) = -\sum_{i=1}^{m}\left(\mathcal{G}\mu_i, \mu_i\right) \le 0. \tag{2.29}$$

接下来，我们基于第一版 R-ESAV方法和克兰克-尼科尔森公式构造如下数值格式（R-ESAV-1/CN）。

给定 r^{n-1}、r^n、Φ^{n-1}、Φ^n，我们通过以下两个步骤确定 r^{n+1}、Φ^{n+1}：

St步骤 1： 采用 ESAV-1方法计算中间解（$\tilde{r}^{n+1}$、Φ^{n+1}）：

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\delta t} = -\mathcal{G}\mu_i^{n+\frac{1}{2}}, \tag{2.30}$$

$$\mu_i^{n+\frac{1}{2}} = \sum_{j=1}^{m} d_{ij}\mathcal{L}\phi_j^{n+\frac{1}{2}} + U_i\left(r^{*,n+\frac{1}{2}}, \Phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right), \tag{2.31}$$

$$\frac{\ln(\tilde{r}^{n+1}) - \ln(r^n)}{\delta t} = \sum_{i=1}^{m}\left(U_i\left(r^{*,n+\frac{1}{2}}, \Phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right), \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\delta t}\right), \tag{2.32}$$

其中，$g^{n+\frac{1}{2}} = \frac{g^{n+1}+g^n}{2}$ 和 $g^{*,n+\frac{1}{2}}$ 可以是 $g(t^{n+1/2})$ 的任意二阶显式近似，例如 $g^{*,n+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2}g^n - \frac{1}{2}g^{n-1}$。

步骤 2： 按以下方式通过松弛因子更新 r^{n+1}：

$$r^{n+1} = \theta_0^{n+1}\tilde{r}^{n+1} + (1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E_1(\Phi^{n+1})\right), \quad \theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}, \tag{2.33}$$

其中，$\mathcal{W}$ 是按以下方式定义的集合：

$$\mathcal{W} = \left\{\theta \in [0,1]\ s.t.\ \ln(r^{n+1}) - \ln(\tilde{r}^{n+1}) \le \delta t\gamma\sum_{i=1}^{m}\left(\mathcal{G}\mu_i^{n+\frac{1}{2}}, \mu_i^{n+\frac{1}{2}}\right)\right\}, \tag{2.34}$$

其中，$\gamma \in [0,1]$ 是一个可调参数。

将（2.33）代入（2.34）中的不等式，我们发现，如果选择 θ_0^{n+1}满足以下条件

$$\left(\tilde{r}^{n+1} - \exp\left(E_1\left(\Phi^{n+1}\right)\right)\right)\theta_0^{n+1} \le \exp\left(\delta t\gamma\sum_{i=1}^{m}\left(\mathcal{G}\mu_i^{n+\frac{1}{2}}, \mu_i^{n+\frac{1}{2}}\right) + \ln(\tilde{r}^{n+1})\right) - \exp(E_1\left(\Phi^{n+1}\right)), \tag{2.35}$$

则 $\theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}$。记 S = 指数函数 $\left(\delta t\gamma\sum_{i=1}^{m}\left(\mathcal{G}\mu_i^{n+\frac{1}{2}}, \mu_i^{n+\frac{1}{2}}\right) + \ln(\tilde{r}^{n+1})\right)$，则根据定理 θ_0^{n+1}可以选择2.1 ，且格式（2.30）-（2.33）满足无条件能量稳定性

其含义是

$$R_{R-ESAV-CN}^{n+1} - R_{R-ESAV-CN}^{n} \leq -\delta t(1-\gamma)\sum_{i=1}^{m}\left(\mathcal{G}\mu_i^{n+\frac{1}{2}}, \mu_i^{n+\frac{1}{2}}\right) \leq 0, \tag{2.36}$$

其中 $R_{R-ESAV-CN}^{n+1} = \frac{1}{2}\sum_{i,\ j=1}^{m} d_{ij}\left(\phi_i^{n+1},\ \mathcal{L}\phi_j^{n+1}\right) + \ln(r^{n+1})$。

2.3. 推广到多重 ESAV-1 方法。本小节介绍如何为梯度流构造松弛多重 ESAV-1（R-MESAV-1）格式，其中模型可能包含不同的项，因此，原有的仅含一个标量辅助变量的格式在描述不同的演化过程时存在局限，并且可能需要过小的时间步长才能获得准确的数值解 [4]。

不失一般性，我们研究如下含有两个不同非线性项的梯度流，并且该方法可以很容易地推广到含有两个以上不同非线性项的情形

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \mathcal{L}\phi + F_1'(\phi) + F_2'(\phi), \end{cases} \tag{2.37}$$

其中 $\mathcal{L}$ 是自伴线性椭圆算子，$F_1(\phi)$ $F_2(\phi)$ 是非线性势函数，$\mathcal{G}$ 是线性正定算子。系统（2.37）满足以下能量耗散律

$$\frac{\mathrm{d}E(\phi)}{\mathrm{d}t} = -\left(\mathcal{G}\mu, \mu\right), \tag{2.38}$$

其中总能量为

$$E(\phi) = \frac{1}{2}(\mathcal{L}\phi, \phi) + \int_\Omega F_1(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \int_\Omega F_2(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{2.39}$$

我们首先考虑基于第一种 ESAV 方法的松弛 MESAV 方法。令 $E_1(\phi) = \int_\Omega F_1(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x}$, $E_2(\phi) = \int_\Omega F_2(\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{x}$，并引入两个 SAV变量 $r_1(t)$ = 指数函数($E_1(\phi)$) $r_2(t)$ = 指数函数($E_2(\phi)$)，我们可以将系统 (2.37) 改写为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \mathcal{L}\phi + \dfrac{r_1(t)}{\exp\left(E_1(\phi)\right)}F_1'(\phi) + \dfrac{r_2(t)}{\exp\left(E_2(\phi)\right)}F_2'(\phi), \\ \dfrac{\mathrm{d}r_1(t)}{\mathrm{d}t} = \dfrac{r_1^2}{\exp\left(E_1(\phi)\right)}\left(F_1'(\phi), \phi_t\right), \\ \dfrac{\mathrm{d}r_2(t)}{\mathrm{d}t} = \dfrac{r_2^2}{\exp\left(E_2(\phi)\right)}\left(F_2'(\phi), \phi_t\right). \end{cases} \tag{2.40}$$

记 $U_1(r_1, \phi) = \frac{r_1}{\text{指数函数}(E_1(\phi))}F_1'(\phi)$ 以及 $U_2(r_2, \phi) = \frac{r_2}{\text{指数函数}(E_2(\phi))}F_2'(\phi)$，则（2.40）可变换为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \mathcal{L}\phi + U_1(r_1, \phi) + U_2(r_2, \phi), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln(r_1)}{\mathrm{d}t} = \left(U_1(r_1, \phi), \phi_t\right), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln(r_2)}{\mathrm{d}t} = \left(U_2(r_2, \phi), \phi_t\right). \end{cases} \tag{2.41}$$

随后，受松弛因子思想的启发，我们可以构造 R-MESAV-1/CN 格式。给定 ϕ^{n-1}，ϕ^n，r_1^{n-1}，r_1^n，r_2^{n-1}，r_2^n，我们通过以下两个步骤确定 ϕ^{n+1}，r_1^{n+1}，r_2^{n+1}：**步骤 1：** 使用 MESAV方法计算中间解 $(\phi^{n+1}$，$\tilde{r}_1^{n+1}$，$\tilde{r}_2^{n+1})$ ：

$$\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\delta t}=-\mathcal{G}\mu^{n+\frac{1}{2}}, \tag{2.42}$$

$$\mu^{n+\frac{1}{2}}=\mathcal{L}\phi^{n+\frac{1}{2}}+U_1\left(r_1^{*,n+\frac{1}{2}},\phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right)+U_2\left(r_2^{*,n+\frac{1}{2}},\phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right), \tag{2.43}$$

$$\frac{\ln(\tilde{r}_1^{n+1})-\ln(r_1^n)}{\delta t}=\left(U_1\left(r_1^{*,n+\frac{1}{2}},\phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right),\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\delta t}\right), \tag{2.44}$$

$$\frac{\ln(\tilde{r}_2^{n+1})-\ln(r_2^n)}{\delta t}=\left(U_2\left(r_2^{*,n+\frac{1}{2}},\phi^{*,n+\frac{1}{2}}\right),\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\delta t}\right). \tag{2.45}$$

步骤 2： 按如下松弛因子更新标量辅助变量 r_1^{n+1}，r_2^{n+1}:

$$\begin{aligned} r_1^{n+1}&=\theta_0^{n+1}\tilde{r}_1^{n+1}+(1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right),\quad \theta_0^{n+1}\in\mathcal{W},\\ r_2^{n+1}&=\theta_0^{n+1}\tilde{r}_2^{n+1}+(1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E_2(\phi^{n+1})\right),\quad \theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}, \end{aligned} \tag{2.46}$$

其中，$\mathcal{W}$ 是按如下方式定义的集合:

$$\mathcal{W}=\left\{\theta\in[0,1]\ s.t.\ \ln(r_1^{n+1})+\ln(r_2^{n+1})-\ln(\tilde{r}_1^{n+1})-\ln(\tilde{r}_2^{n+1})\le\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+\frac{1}{2}},\mu^{n+\frac{1}{2}}\right)\right\} \tag{2.47}$$

其中，$\gamma\in[0,1]$ 是一个可调参数。

下面说明如何选择 θ_0^{n+1}。将（2.46）代入（2.47），可推导出，如果选择 θ_0^{n+1}使得

$$\begin{aligned} &\left[\left(\tilde{r}_1^{n+1}-\exp\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)\right)\theta_0^{n+1}+\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right)\right]\left[\left(\tilde{r}_2^{n+1}-\exp\left(E_2\left(\phi^{n+1}\right)\right)\right)\theta_0^{n+1}+\exp\left(E_2(\phi^{n+1})\right)\right]\\ &\le\exp\left(\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+\frac{1}{2}},\mu^{n+\frac{1}{2}}\right)+\ln(\tilde{r}_1^{n+1})+\ln(\tilde{r}_2^{n+1})\right), \end{aligned} \tag{2.48}$$

则 $\theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}$。并且，$\theta_0^{n+1}$可以视为如下优化问题的一个解

$$\theta_0^{n+1}=\min_{\theta\in[0,1]}\theta,\quad \text{s.t. } f(\theta)=a_1a_2\theta^2+(a_1b_2+a_2b_1)\theta+b_1b_2-c\le 0, \tag{2.49}$$

其中系数为

$$\begin{aligned} a_1&=\tilde{r}_1^{n+1}-\exp\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right),\quad b_1=\exp\left(E_1(\phi^{n+1})\right),\\ a_2&=\tilde{r}_2^{n+1}-\exp\left(E_2\left(\phi^{n+1}\right)\right),\quad b_2=\exp\left(E_2(\phi^{n+1})\right),\\ c&=\exp\left(\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+\frac{1}{2}},\mu^{n+\frac{1}{2}}\right)+\ln(\tilde{r}_1^{n+1})+\ln(\tilde{r}_2^{n+1})\right). \end{aligned}$$

记

$$\begin{aligned} \theta_1&=\frac{-(a_1b_2+a_2b_1)-\sqrt{(a_1b_2+a_2b_1)^2-4a_1a_2(b_1b_2-c)}}{2a_1a_2},\\ \theta_2&=\frac{-(a_1b_2+a_2b_1)+\sqrt{(a_1b_2+a_2b_1)^2-4a_1a_2(b_1b_2-c)}}{2a_1a_2}, \end{aligned}$$

下一个定理总结了 θ_0^{n+1} 的选取。

THEOREM 2.2. 我们选取 θ_0^{n+1}使得 (2.46) 如下：

1. 若 $a_1=0$ 且 $a_2=0$，则令 $\theta_0^{n+1}=0$。 2.

若 $a_1>0$ 且 $a_2>0$，则令 $\theta_0^{n+1}=0$。

3. 若 $a_1<0$ 且 $a_2<0$，则令 $\theta_0^{n+1}=\max\{0,\theta_1\}$。 4. 若 $a_1a_2<0$ 且 $b_1b_2-c\le 0$，则令 $\theta_0^{n+1}=0$。 5. 若 $a_1a_2<0$ 且 $b_1b_2-c>0$，则令 $\theta_0^{n+1}=\theta_1$。 6. 若 $a_1a_2=0$ 且 $a_1b_2+a_2b_1>0$，则令 $\theta_0^{n+1}=0$。7. 若 $a_1a_2=0$ 且 $a_1b_2+a_2b_1<0$，则令 $\theta_0^{n+1}=\max\left\{0,\frac{c-b_1b_2}{a_1b_2+a_2b_1}\right\}$。

然后，(2.48) 对于格式 (2.42)-(2.46) 在上述所有情况下均成立，并且$\theta_0^{n+1}\in\mathcal{W}$。此外，我们有 $r_1^{n+1}>0$，$r_2^{n+1}>0$，且格式 (2.42)-(2.46) 在采用上述θ_0^{n+1}的情况下是无条件能量稳定的，即：

$$R_{R-MESAV-CN}^{n+1}-R_{R-MESAV-CN}^{n}\le-\delta t(1-\gamma)\left(\mathcal{G}\mu^{n+1},\mu^{n+1}\right)\le 0, \tag{2.50}$$

其中 $R_{R-MESAV-CN}^{n+1}=\frac{1}{2}\left(\mathcal{L}\phi^{n+1},\ \phi^{n+1}\right)+\ln(r_1^{n+1})+\ln(r_2^{n+1})$。

*Pr*证明。 通过逐一讨论（2.49）情形的系数，我们得到最优松弛θ_0^{n+1}。 e.

- 若 $a_1=0$ 且 $a_2=0$，显然有 $\theta_0^{n+1}=0$。
- 若 $a_1a_2\neq 0$，注意到

$$f(1)=\tilde{r}_1^{n+1}\tilde{r}_2^{n+1}-\exp\left(\delta t\gamma\left(\mathcal{G}\mu^{n+\frac{1}{2}},\mu^{n+\frac{1}{2}}\right)+\ln(\tilde{r}_1^{n+1})+\ln(\tilde{r}_2^{n+1})\right)\le 0,$$

我们有 $1\in\mathcal{W}$，这意味着 $\mathcal{W}\neq\emptyset$.

−若 $a_1a_2>0$，且根据 $f(1)\le 0$，我们有 $\theta_0^{n+1}=\max\{0,\theta_1\}$，那么可以很容易地推出情形 2、3。−若 $a_1a_2<0$，且 $f(0)=b_1b_2-c\le 0$，则有 $\theta_0^{n+1}=0$。 −若 $a_1a_2<0$，且 $f(0)=b_1b_2-c>0$，$f(1)\le 0$，我们有 $\theta_0^{n+1}=\max\{\theta_1,\theta_2\}$。又由于 $\theta_1\ge\theta_2$，因此 $\theta_0^{n+1}=\theta_1$。

- 若 $a_1a_2=0$，且 $a_1b_2+a_2b_1>0$，根据 $f(1)\le 0$，我们有 $\theta_0^{n+1}=0$。
- If $a_1a_2=0$，且 $a_1b_2+a_2b_1<0$，由于 $f(1)\le 0$，因此我们有 $\theta_0^{n+1}=\max\left\{0,\frac{c-b_1b_2}{a_1b_2+a_2b_1}\right\}$.

由（2.44）-（2.45）可得 $\tilde{r}_1^{n+1}>0$，$\tilde{r}_2^{n+1}>0$，并由于 指数函数 $\left(E_1\left(\phi^{n+1}\right)\right)>0$，指数函数 $\left(E_2\left(\phi^{n+1}\right)\right)>0$，因此有 $r_1^{n+1}>0$，$r_2^{n+1}>0$。

分别对（2.42）-（2.43）与 μ^{n+1} 和 $\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\delta t}$ 取内积，并将其与方程（2.44）-（2.45）及（2.47）结合，可得到所需结果（2.50）。 □

3. 松弛指数SAV方法的第二个版本。 基于 [21], 中指数SAV方法的总能量，我们在本节为耗散系统构造松弛指数SAV方法的第二个版本（R-ESAV-2）。

3.1. 耗散系统的 R-ESAV-2方法。更一般地，我们考虑耗散系统

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\mathcal{A}\phi+g(\phi)=0, \tag{3.1}$$

其中 $\mathcal{A}$ 是一个正算子，$g(\phi)$ 是一个半线性或拟线性算子。假设它满足以下能量耗散律

$$\frac{\mathrm{d}E(\phi)}{\mathrm{d}t}=-\mathcal{K}(\phi), \tag{3.2}$$

其中 $E(\phi) > -C_0$ 是自由能，且 $\mathcal{K}(\phi) > 0$ 对所有 ϕ。引入一个标量辅助变量 $R(t) =$ 指数函数 (E(ϕ))，我们将方程 (3.1) 转换为如下等价系统

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} + \mathcal{A}(\phi) + V(\xi) g(\phi) = 0, \\ \dfrac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t} = -R(t)\mathcal{K}(\phi), \\ \xi = \dfrac{R(t)}{\exp\left(E(\phi)\right)}, \end{cases} \tag{3.3}$$

其中， $V(\xi)$ 是一个与 ξ 和 $V(\xi) \equiv 1$ 在连续层面相关的函数。

随后，我们可以受松弛因子这一思想启发，构造 R-ESAV-2/BDFk ($1 \le k \le 6$) 格式。

给定 R^{n-k}, ..., R^n, ϕ^{n-k}, ..., ϕ^n，我们通过以下两个步骤确定 R^{n+1}, ϕ^{n+1}：

步骤 1： 使用 ESAV 方法计算中间解（$\tilde{R}^{n+1}$, ϕ^{n+1}）：

$$\frac{\alpha_k \phi^{n+1} - A_k\left(\phi^n\right)}{\delta t} + \mathcal{A}\phi^{n+1} + V_k(\xi^{n+1}) g\left(B_k\left(\phi^n\right)\right) = 0, \tag{3.4}$$

$$\frac{1}{\delta t}\left(\tilde{R}^{n+1} - R^n\right) = -\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}\left(B_k\left(\phi^n\right)\right), \tag{3.5}$$

$$\xi^{n+1} = \frac{\tilde{R}^{n+1}}{\exp\left(E\left(B_k\left(\phi^n\right)\right)\right)}, \tag{3.6}$$

其中， α_k、 A_k 和 B_k 的定义如上，对于 k 阶（$1 \le k \le 4$）格式， $V_k(\xi^{n+1})$ 如下：

一阶： $V_1(\xi^{n+1}) = \xi^{n+1}$；二阶： $V_2(\xi^{n+1}) = \xi^{n+1}(2 - \xi^{n+1})$；三阶： $V_3\left(\xi^{n+1}\right) = \xi^{n+1}\left(3 - 3\xi^{n+1} + \left(\xi^{n+1}\right)^2\right)$；四阶： $V_4\left(\xi^{n+1}\right) = \xi^{n+1}\left(2 - \xi^{n+1}\right)\left(2 - 2\xi^{n+1} + \left(\xi^{n+1}\right)^2\right)$。

步骤2： 通过松弛因子按如下方式更新标量辅助变量 R^{n+1}：

$$R^{n+1} = \theta_0^{n+1}\tilde{R}^{n+1} + (1 - \theta_0^{n+1})\exp\left(E\left(\phi^{n+1}\right)\right), \quad \theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}, \tag{3.7}$$

其中

$$\mathcal{W} = \left\{ \theta \in [0,1] \; s.t. \; \frac{R^{n+1} - \tilde{R}^{n+1}}{\delta t} = -\gamma^{n+1}\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(\phi^{n+1}) + \tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}\left(B_k\left(\phi^n\right)\right) \right\}, \tag{3.8}$$

并且需确定 $\gamma^{n+1} \ge 0$ ，使得集合 $\mathcal{W}$ 非空。

接下来，我们说明如何选择 θ_0^{n+1}和 γ^{n+1}。将（3.7）代入集合（3.8）的等式中，可得若选择 θ_0^{n+1}和 γ^{n+1} 使得

$$\left(\tilde{R}^{n+1} - \exp\left(E(\phi^{n+1})\right)\right)\theta_0^{n+1} = \tilde{R}^{n+1} - \exp\left(E(\phi^{n+1})\right) - \delta t\gamma^{n+1}\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(\phi^{n+1}) + \delta t\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}\left(B_k(\phi^n)\right), \tag{3.9}$$

则， $\theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}$。关于 θ_0^{n+1}和 γ^{n+1} 的选择总结将在下一个定理中给出。

THEOREM 3.1. 在 θ_0^{n+1} ((3.7)) 和 γ^{n+1} ((3.8) 中的取值如下所示：

1. 若 $\tilde{R}^{n+1} =$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$，则设定 $\theta_0^{n+1} = 0$ 和 $\gamma^{n+1} = \frac{\mathcal{K}(B_k(\phi^n))}{\mathcal{K}(\phi^{n+1})}$。2. 若 $\tilde{R}^{n+1} >$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$，则设定 $\theta_0^{n+1} = 0$ 和

$$\gamma^{n+1} = \frac{\tilde{R}^{n+1} - \exp\left(E(\phi^{n+1})\right)}{\delta t\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(\phi^{n+1})} + \frac{\mathcal{K}\left(B_k(\phi^n)\right)}{\mathcal{K}(\phi^{n+1})}. \tag{3.10}$$

3. 若 $\tilde{R}^{n+1} <$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$ 且 $\tilde{R}^{n+1} -$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right) + \delta t \tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}\left(B_k(\phi^n)\right) \geq 0$, 则设定$\theta_0^{n+1} = 0$和 γ^{n+1}，与式（*3.10*）相同。*4.* 若 $\tilde{R}^{n+1} <$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$ 且 $\tilde{R}^{n+1} -$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right) + \delta t \tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}\left(B_k(\phi^n)\right) < 0$，则设定$\theta_0^{n+1} = 1 - \frac{\delta t \tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(B_k(\phi^n))}{\text{指数函数}(E(\phi^{n+1}))-\tilde{R}^{n+1}}$和 $\gamma^{n+1} = 0$。

那么，（3.9）在上述所有情况下均成立，并且$\theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}$。此外，我们有 $R^{n+1} > 0$， $\xi_k^{n+1} > 0$, 并且采用上述θ_0^{n+1}和 γ^{n+1} 的格式（3.4）-（3.7）满足无条件能量稳定性，即

$$R^{n+1} - R^n = -\delta t \gamma^{n+1}\tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(\phi^{n+1}) \leq 0, \tag{3.11}$$

更重要的是，我们有

$$ln\left(R^{n+1}\right) - \ln\left(R^n\right) \leq 0. \tag{3.12}$$

此外，我们有

$$R^{n+1} \leq \exp\left(E(\phi^{n+1})\right), \quad \forall n \geq 0. \tag{3.13}$$

证明。容易验证，上述 θ_0^{n+1}和 γ^{n+1} 在满足 $\theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}$的所有情况下均满足（3.9）。

由于 $R^0 > 0$。由（3.5）可得

$$\tilde{R}^1 = \frac{R^0}{1 + \delta t \mathcal{K}\left(B_k(\phi^0)\right)} > 0. \tag{3.14}$$

由（3.6）可得 $\xi_k^1 > 0$，由（3.7）可得 $R^1 > 0$。因此，通过归纳法很容易得到 $\xi_k^{n+1} > 0$ 和 $R^{n+1} > 0$ 。

然后结合（3.11）和（3.5）以及（3.8），即可得到（

对于情形 1–3，可以得到 $\theta_0^{n+1} = 0$，于是有 $R^{n+1} =$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$。对于情形 4，由于 $\theta_0^{n+1} = 1 - \frac{\delta t \tilde{R}^{n+1}\mathcal{K}(B_k(\phi^n))}{\text{指数函数}(E(\phi^{n+1}))-\tilde{R}^{n+1}} \in (0, 1]$和 $\tilde{R}^{n+1} <$指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$, 由（3.7）可推出$R^{n+1} \leq$ 指数函数 $\left(E(\phi^{n+1})\right)$ 。 □

注 *3.1.* 作为进一步的推广，首先，我们还可以采用 *R-ESAV-2*方法，为多个函数的梯度流（*2.24*）构造数值格式，并且 $\theta_0^{n+1}, \gamma^{n+1}$ 可以根据定理 *3.1* 以类似方式选取。其次，*R-ESAV-2*方法还可以推广到基于具有两个不同非线性项的梯度流（*2.37*）的多个 *ESAV*形式。令 $E_1(\phi) = \frac{1}{2}(\mathcal{L}\phi, \phi) + \int_\Omega F_1(\phi)dx$, $E_2(\phi) = \int_\Omega F_2(\phi)dx$, 并引入两个标量辅助变量 $R_1(t) =$指数函数 $(E_1(\phi))$ $R_2(t) =$指数函数$(E_2(\phi))$，我们可以将方程（*2.37*）重写为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\mathcal{G}\mu, \\ \mu = \mathcal{L}\phi + V(\xi_1)F_1'(\phi) + V(\xi_2)F_2'(\phi), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln\left(R_1(t)\right)}{\mathrm{d}t} = -\left(\mathcal{G}\dfrac{\delta E_1}{\delta \phi}, \mu\right), \\ \dfrac{\mathrm{d}\ln\left(R_2(t)\right)}{\mathrm{d}t} = -\left(\mathcal{G}\dfrac{\delta E_2}{\delta \phi}, \mu\right), \\ \xi_1 = \dfrac{R_1(t)}{\exp\left(E_1(\Phi)\right)}, \xi_2 = \dfrac{R_2(t)}{\exp\left(E_2(\Phi)\right)}. \end{cases} \tag{3.15}$$

第三和第四个能量方程的形式与(3.15) 中的不同。因此，我们可以为上述系统构造*BDFk* 数值格式。若设 $0 \leq \gamma \leq (\mathcal{G}\mu(B_k(\phi^n))\ \mu(B_k(\phi^n)))\ (\mathcal{G}\mu^{n+1}, \mu^{n+1})$ ，则可根据定理*2.2* 选择θ_0^{n+1}。

3.2. 纳维-斯托克斯方程的全解耦R-ESAV-2方法。 本小节中，我们考虑以下不可压缩纳维-斯托克斯方程的全解耦R-ESAV-2方法。该方程是一个经典的耗散系统

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu\Delta\mathbf{u} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} & \text{in } \Omega\times\mathcal{T}, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0 & \text{in } \Omega\times\mathcal{T}, \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} & \text{on } \partial\Omega\times\mathcal{T}, \end{cases} \tag{3.16}$$

其中，Ω 是 $\mathbb{R}^d(d=2,3)$ 中具有足够光滑边界 $\partial\Omega$ $\mathcal{T}=(0,T]$， $\mathbf{u}$ p 分别表示未知的速度和压力，$\mathbf{f}$表示外部体力，$\nu>0$ 是黏度系数，$\mathbf{n}$ 是区域 Ω 的单位外法向量。系统 (3.16) 满足以下定律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E(\mathbf{u}) = -\nu\|\nabla\mathbf{u}\|^2 + (\mathbf{f},\mathbf{u}), \tag{3.17}$$

其中 $E(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{u}\|^2$ 是总能量。

接下来，我们考虑纳维-斯托克斯方程 (3.16) 的 R-ESAV-2方法。

引入指数SAV $R(t) = \exp(E(\mathbf{u}))$，则可将控制方程组 (3.16) 改写为如下等价形式

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + V(\xi)(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} - \nu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0, \\ \dfrac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t} = -\nu R(t)\|\nabla\mathbf{u}\|^2 + R(t)(\mathbf{f},\mathbf{u}), \\ \xi = \dfrac{R(t)}{\exp(E(\mathbf{u}))}. \end{cases} \tag{3.18}$$

接下来，我们为 (3.18) 构造两个 BDF 格式。第一个基于压力修正方法。

方案 I： 给定 $\mathbf{u}^{n-k}$， $\cdots$， $\mathbf{u}^n$， p^{n-k}， $\cdots$， p^n， r^{n-k}， $\cdots r^n$，我们通过以下四个步骤求解 $\mathbf{u}^{n+1}$， p^{n+1}，r^{n+1}：

步骤 1： 确定解 $\tilde{R}^{n+1}$ 并计算 ξ^{n+1}:

$$\frac{\tilde{R}^{n+1}-R^n}{\delta t} = -\nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla B_k(\mathbf{u}^n)\|^2 + \tilde{R}^{n+1}(\mathbf{f}^{n+1}, B_k(\mathbf{u}^n)), \tag{3.19}$$

$$\xi^{n+1} = \frac{\tilde{R}^{n+1}}{\exp(E(B_k(\mathbf{u}^n)))}. \tag{3.20}$$

步骤 2： 计算中间解 $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$:

$$\frac{\alpha_k\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - A_k(\mathbf{u}^n)}{\delta t} + V(\xi^{n+1})(B_k(\mathbf{u}^n)\cdot\nabla)B_k(\mathbf{u}^n) - \nu\Delta\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \nabla\hat{B}_k(p^n) = \mathbf{f}^{n+1}, \tag{3.21}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}|_{\partial\Omega} = 0. \tag{3.22}$$

步骤 3： 求解解 $\left(\mathbf{u}^{n+1},\ p^{n+1}\right)$:

$$\frac{\alpha_k\mathbf{u}^{n+1} - \alpha_k\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\delta t} + \nabla\left(p^{n+1} - \hat{B}_k(p^n)\right) = 0, \tag{3.23}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u}^{n+1} = 0, \tag{3.24}$$

$$\mathbf{u}^{n+1}\cdot\mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \tag{3.25}$$

其中，算子 $\hat{} B_1 = B_1$ 用于 BDF1 格式，$\hat{} B_k = B_{k-1}$ 用于 BDFk ($k \geq 2$) 格式 .

步骤 4： 通过松弛因子更新标量辅助变量 R^{n+1}，如下所示:

$$R^{n+1} = \theta_0^{n+1}\tilde{R}^{n+1} + (1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E(\mathbf{u}^{n+1})\right), \quad \theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}, \tag{3.26}$$

其中， $\mathcal{W}$ 是如下定义的集合:

$$\mathcal{W} = \left\{ \theta \in [0,1] \; s.t. \; \frac{R^{n+1}-\tilde{R}^{n+1}}{\delta t} = -\gamma^{n+1}\nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla \mathbf{u}^{n+1}\|^2 + \nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\|^2 \right\}, \tag{3.27}$$

其中，需确定 $\gamma^{n+1} \geq 0$，使得 $\mathcal{W}$ 非空。

受 [29, 11], 中的投影方法启发，我们可以构造如下完全解耦的 R-ESAV-2格式:

方案 II： 给定 $\mathbf{u}^{n-k}, \cdots, \mathbf{u}^n, \; p^{n-k}, \cdots, \; p^n, \; r^{n-k}, \cdots r^n$，通过以下两个步骤确定 $\mathbf{u}^{n+1}, \; p^{n+1}, \; r^{n+1}$:

步骤 1： 求解解 $\left(\mathbf{u}^{n+1}, \; p^{n+1}, \; \tilde{R}^{n+1}\right)$:

$$\frac{\alpha_k\mathbf{u}^{n+1} - A_k\left(\mathbf{u}^n\right)}{\delta t} - \nu\Delta\mathbf{u}^{n+1} + V(\xi^{n+1})(B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\cdot\nabla)B_k\left(\mathbf{u}^n\right) + \nabla B_k\left(p^n\right) = \mathbf{f}^{n+1}, \tag{3.28}$$

$$\frac{\tilde{R}^{n+1}-R^n}{\delta t} = -\nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\|^2 + \tilde{R}^{n+1}(\mathbf{f}^{n+1}, B_k\left(\mathbf{u}^n\right)), \tag{3.29}$$

$$\xi^{n+1} = \frac{\tilde{R}^{n+1}}{\exp\left(E\left(B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\right)\right)}, \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned}\left(\nabla p^{n+1}, \nabla q\right) &= \left(\mathbf{f}^{n+1} - (\mathbf{u}^{n+1}\cdot\nabla)\mathbf{u}^{n+1} - \nu\nabla\times\nabla\times\mathbf{u}^{n+1}, \nabla q\right) \\ &= \left(\mathbf{f}^{n+1} - (\mathbf{u}^{n+1}\cdot\nabla)\mathbf{u}^{n+1}, \nabla q\right) - \nu\int_{\partial\Omega}\left(\left(\nabla\times\mathbf{u}^{n+1}\right)\times\nabla q\right)\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}s,\end{aligned} \tag{3.31}$$

其中，$\mathbf{n}$ 是 $\partial\Omega$的外法向量。

步骤 2： 使用松弛因子按如下方式更新标量辅助变量 R^{n+1}：

$$R^{n+1} = \theta_0^{n+1}\tilde{R}^{n+1} + (1-\theta_0^{n+1})\exp\left(E(\mathbf{u}^{n+1})\right), \quad \theta_0^{n+1} \in \mathcal{W}, \tag{3.32}$$

其中， $\mathcal{W}$ 是按如下方式定义的集合:

$$\mathcal{W} = \left\{ \theta \in [0,1] \; s.t. \; \frac{R^{n+1}-\tilde{R}^{n+1}}{\delta t} = -\gamma^{n+1}\nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla \mathbf{u}^{n+1}\|^2 + \nu\tilde{R}^{n+1}\|\nabla B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\|^2 \right\}, \tag{3.33}$$

并且， $\gamma^{n+1} \geq 0$ 需要满足集合 $\mathcal{W}$ 非空。

注 3.2. 对于周期边界条件，通过在傅里叶空间中定义算子 ∇、$\nabla\cdot$ 和 Δ^{-1}，它们可以彼此交换。在不存在 f的情况下，对(3.16)的第一个方程两边取散度，得到

$$-\Delta p = \nabla\cdot(\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}), \tag{3.34}$$

于是，(3.16) 的第一个方程可改写为

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} - \nu\Delta\boldsymbol{u} - \mathbf{J}(\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}) = \mathbf{0}, \tag{3.35}$$

其中 $\mathbf{J}$ 定义为

$$\mathbf{J}\mathbf{v} := \nabla\times\nabla\times\Delta^{-1}\mathbf{v} \quad \forall\mathbf{v} \in \mathbf{L}_0^2(\Omega). \tag{3.36}$$

*Mor*此外，除 (3.17)外，系统 (3.16) 还满足如下能量耗散律 s

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla \mathbf{u}\|^2 = -\nu\|\Delta \mathbf{u}\|^2. \tag{3.37}$$

因此，(3.28)-(3.31) 可以替换为

$$\frac{\alpha_k \mathbf{u}^{n+1} - A_k\left(\mathbf{u}^n\right)}{\delta t} - \nu\Delta \mathbf{u}^{n+1} - V(\xi^{n+1})\mathbf{J}\left(B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\cdot\nabla B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\right) = \mathbf{0}, \tag{3.38}$$

$$\frac{\tilde{R}^{n+1} - R^n}{\delta t} = -\nu\tilde{R}^{n+1}\|\Delta B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\|^2, \tag{3.39}$$

$$\xi^{n+1} = \frac{\tilde{R}^{n+1}}{\text{指数函数}\left(E\left(B_k\left(\mathbf{u}^n\right)\right)\right)}, \tag{3.40}$$

$$\Delta p^{n+1} = -\nabla\cdot\left(\mathbf{u}^{n+1}\cdot\nabla\mathbf{u}^{n+1}\right). \tag{3.41}$$

令 $K(\mathbf{u}) = \nu\|\nabla\mathbf{u}\|^2$ 或 $K(\mathbf{u}) = \nu\|\Delta\mathbf{u}\|^2$，根据定理 和 γ^{n+1} ，在方案 I 和方案 II 中可分别选择 3.1。类似地，上述格式满足能量耗散律 (3.11) 和 (3.12)。

4. 数值模拟。本节给出大量数值结果，以验证所构造的 R-ESAV-1 和 R-ESAV-2 方法准确且高效。此外，我们还详细比较了原始 ESAV 格式与所构造的 R-ESAV 格式。除非另有明确说明，以下数值算例均采用周期边界条件，并使用傅里叶谱方法进行空间离散；对于 R-ESAV-1 格式，耗散率参数 γ 默认设为 1。

例1. 我们首先考虑 Allen-Cahn方程

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \sigma_0\Delta\phi + \left(1-\phi^2\right)\phi. \tag{4.1}$$

(i) 我们给出一个精确解

$$\phi(x,y,t) = \exp(\sin(\pi x)\sin(\pi y))\sin(t), \tag{4.2}$$

且 f 是满足（4.1）的外力。我们设计算区域 $\Omega = [0,2]^2$ ，模型参数为 $\sigma_0 = 0.01^2$。对于空间离散，我们使用傅里叶模态 $N^2 = 64^2$，因此与时间离散误差相比，空间离散误差可以忽略不计。

各种格式在 L^2 处的误差 $T = 1$ 的收敛阶如图1所示，其中我们可以观察到

(a) 数值结果均与预期的收敛阶一致；(b) 对于 BDF1 格式，R-ESAV-1（分别为 R-ESAV-2）格式的误差明显小于 ESAV-1（分别为 ESAV-2）格式的误差；

(c) 对于高阶格式，带松弛的 ESAV 格式在精度方面的改进不如一阶格式明显。

我们还展示了松弛因子的演化 θ_0^{n+1}，该因子由时间步长为 $\delta t = 1e-3$ 的 R-ESAV-1/BDF2 和 R-ESAV-2/BDF2 格式得到，见图2。显然可以看出，θ_0^{n+1}对于 R-ESAV-2/BDF2 格式，除了初始时间区间外，该因子始终为零。

(ii) 我们选择初始条件为

$$\begin{aligned}
&\phi(x,y) = \tanh\frac{1.5 + 1.2\cos(6\lambda) - 2\pi\rho}{\sqrt{2\alpha}},\\
&\lambda = \arctan\frac{y-0.5}{x-0.5}, \quad \rho = \sqrt{\left(x-\frac{1}{2}\right)^2 + \left(y-\frac{1}{2}\right)^2},
\end{aligned} \tag{4.3}$$

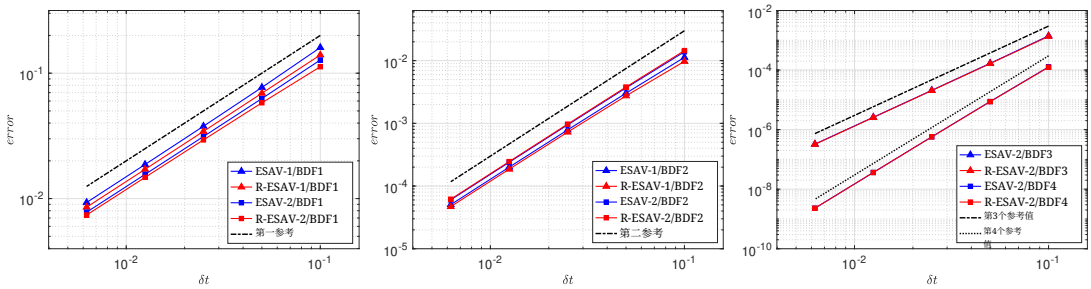


FIG. 1. *Example 1 (i). Convergence test for Allen-Cahn equation obtained by ESAV-1/BDFk, R-ESAV-1/BDFk ($k = 1, 2$), ESAV-2/BDFk and R-ESAV-2/BDFk ($k = 1, 2, 3, 4$) schemes.*

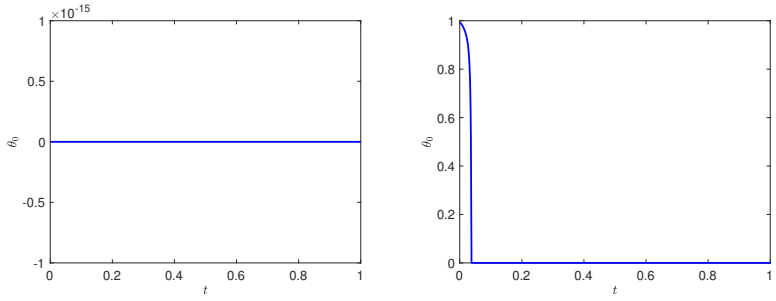


FIG. 2。 *Example 1 (i). The evolution of relaxation factor θ_0^{n+1} with $\delta t = 1e-3$. Left: R-ESAV-1/BDF2 scheme; right: R-ESAV-2/BDF2 scheme.*

其中 (λ, ρ) 是 (x, y) 的极坐标。我们设计算区域为 $\Omega = [0, 1]^2$，其余参数为 $\sigma_0 = 0.01^2$，傅里叶模态为 $N^2 = 128^2$。将时间步长为 $\delta t = 1e-5$ 的半隐式/BDF2格式所得的计算解视为参考解。表 1 展示了上述四种数值格式在不同时间步长下 L^2-范数误差在 $T = 200$ 时的情况。可以看出，与 ESAV-1（分别为 ESAV-2）格式相比，R-ESAV-1（分别为 R-ESAV-2）格式能够显著减小解的误差。当 ESAV-2 格式的时间步长不够小时，解的误差较大，而 R-ESAV-2 格式则能明显提高精度。图 3 还展示了所构造格式的能量（第一幅）、能量误差（第二幅）以及不同时间步长下能量误差的演化（第三幅）。此外，图 4 展示了 ξ^{n+1} 误差的演化，表明与 ESAV-1（分别为 ESAV-2）格式相比，R-ESAV-1（分别为 R-ESAV-2）格式能够提高精度；并且模拟达到稳态后，R-ESAV-2 格式的 ξ^{n+1} 误差将达到机器精度。

例2. Cahn-Hilliard方程

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M\Delta\left(\sigma_0\Delta\phi + \frac{1}{\epsilon^2}\left(1-\phi^2\right)\phi\right). \tag{4.4}$$

（i）我们还将（4.2）选作精确解，并将模型参数设为 $\sigma_0 = 0.04$， M =0.005， $\epsilon = 1$。图5展示了不同格式的收敛阶。我们可以观察到与Allen-Cahn方程相似的结果。

TABLE 1

Example 1 (ii). A comparison of L^2-error obtained by four approaches based on BDF2 scheme for Allen-Cahn equation at $T = 200$ with various time steps.

	ESAV-1	R-ESAV-1	ESAV-2	R-ESAV-2
1E-1	9.49E-04	2.76E-04	0.98	1.01E-04
5E-2	8.43E-04	7.22E-05	1.07E-03	2.74E-05
1E-2	1.18E-04	2.94E-06	4.55E-05	1.01E-06
5E-3	3.53E-05	7.36E-07	2.29E-05	2.49E-07
1E-3	1.63E-06	2.96E-08	1.47E-06	9.88E-09

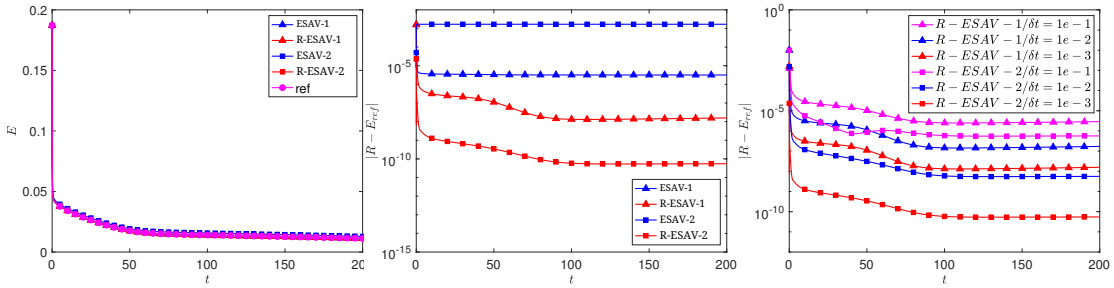


FIG. 3。 *Example 1 (ii). Allen-Cahn equation: a comparison of energy (first) and errors of energy (second) of four approaches based on BDF2 scheme; and a comparison of errors of energy of R-ESAV-1/BDF2 and R-ESAV-2/BDF2 schemes with various time steps (third).*

（ii）我们考虑以由 9×9 个圆组成的矩形阵列作为初始条件

$$\phi_0(\boldsymbol{x}, t) = 80 - \sum_{m=1}^{9}\sum_{n=1}^{9} \tanh\left(\frac{\sqrt{(x-x_m)^2 + (y-y_n)^2} - r_0}{\sqrt{2}\epsilon}\right), \tag{4.5}$$

其中 $r_0 = 0.085$, $x_m = 0.2 \times m$, $y_n = 0.2 \times n$ 对于 m, $n = 1$, 2, $\cdots$, 9。我们将计算区域设为 $[0, 2]^2$, 其他参数为 $M = 1e-6$, $\sigma_0 = 1$, $\epsilon = 0.01$ 仿真中的傅里叶模态为 $N^2 = 512^2$。采用 R-ESAV-2/BDF2 格式求解 Cahn-Hilliard方程所描述的圆阵列演化过程，其中 $\delta t = 1e-3$ 如图6所示。

例3. 在本例中，我们考虑相场晶体模型

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = M\Delta\mu, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega, t > 0, \\ \mu = (\Delta + \zeta)^2\phi + \phi^3 - \epsilon\phi, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega, t > 0, \\ \phi(\boldsymbol{x}, 0) = \phi_0(\boldsymbol{x}), \end{cases} \tag{4.6}$$

它是与以下总自由能相关联的 H^{-1}-梯度流

$$E(\phi) = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}\phi(\Delta + \zeta)^2\phi + \frac{1}{4}\phi^4 - \frac{\epsilon}{2}\phi^2\right) \mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{4.7}$$

其中 $M > 0$ 是迁移率系数。在以下模拟中，我们设定 $M = 1, \zeta = 1$ 。

(i) 我们首先模拟 $2D$ 中过冷液体的晶体生长。采用以下初始条件

$$\phi\left(x_j, y_j, 0\right) = \bar{\phi} + \alpha_1\left(\cos\left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{3}}y_j\right)\cos\left(\alpha_2 x_j\right) - 0.5\cos\left(\frac{2\alpha_2}{\sqrt{3}}y_j\right)\right), \quad j = 1, 2, \cdots 5, \tag{4.8}$$

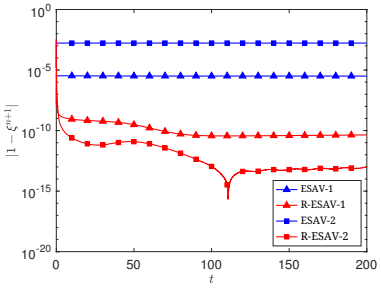


FIG. 4. *Example 1 (ii). A comparison of the evolution of errors of ξ^{n+1} obtained by four approaches based on BDF2 scheme for Allen-Cahn equation.*

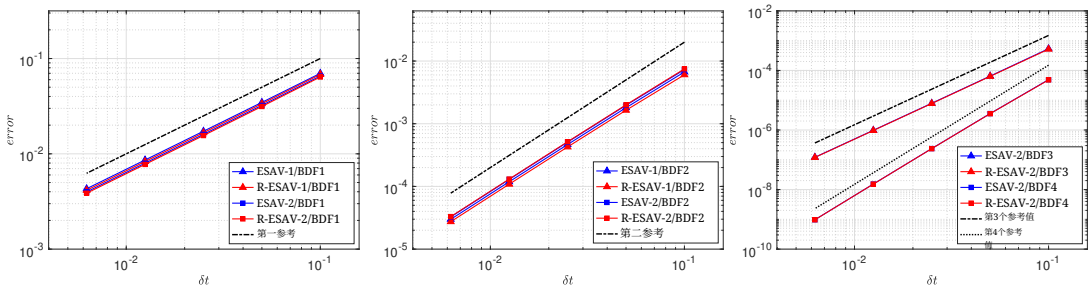


FIG. 5. *Example 2 (i). Convergence test for Cahn-Hilliard equation obtained by ESAV-1/BDFk, R-ESAV-1/BDFk ($k = 1, 2$), ESAV-2/BDFk and R-ESAV-2/BDFk ($k = 1, 2, 3, 4$) schemes.*

其中， x_j 和 y_j 定义了一个与微晶晶格取向一致的局部笛卡尔坐标系。我们选择常数参数为 $\phi = 0.285$， $\alpha_1 = 0.446$， $\alpha_2 = 0.66$。然后，我们在五个小方形区域中分别定义五个微晶，每个区域的边长为 40，位置分别为 (200，200)、(150，600)、(350，400)、(600，300) 和 (550，700)。为了生成取向不同的微晶，我们使用以下仿射变换，分别按五个不同角度 $\rho = -\frac{3\pi}{4}$， $-\frac{\pi}{4}$， 0， $\frac{\pi}{4}$， $\frac{3\pi}{4}$ 进行旋转— – – —

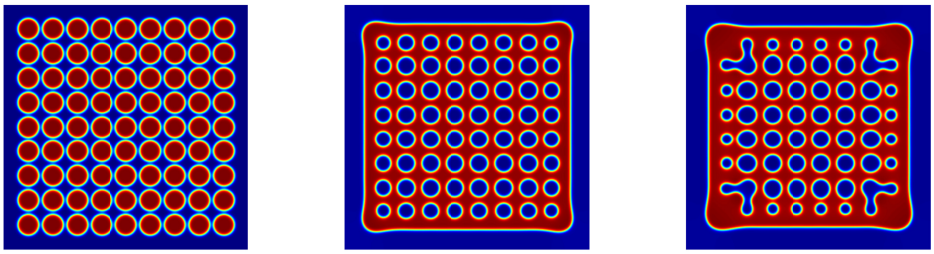
$$x_j(x, y) = x\sin(\rho) + y\cos(\rho), \quad y_j(x, y) = -x\cos(\rho) + y\sin(\rho). \tag{4.9}$$

我们选择傅里叶模态 $N^2 = 1024^2$ 进行空间离散，并选择 $\delta t = 0.02$ 进行时间离散。其他参数设置为 $\epsilon = 0.25$， $T = 800$。本例中的松弛参数 θ_0^{n+1}也始终为零。图中展示了使用 R-ESAV-1/BDF2 格式求解相场晶体方程时过冷液体中的晶体生长过程。7，这表明微晶的不同排列方式会导致缺陷和位错，与 [31, 18]中的情况非常相似。

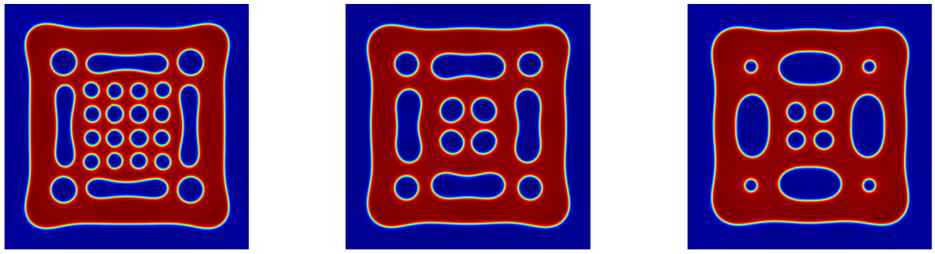
（ii）初始条件设为

$$\phi(x, y, 0) = 0.07 + 0.07\delta, \tag{4.10}$$

其中 $\delta = rand(x, y)$ 是 $[-1, 1]$ 中均匀分布的随机数，均值为零。将计算区域设为 $\Omega = [0, 128]^2$。模型参数选为 $\epsilon = 0.025$，时间步长为 $\delta t = 0.1$ ，并使用 $N^2 = 256^2$ 傅里叶模态对空间进行离散化。图8 展示了构型演化过程，可以观察到最终形成了均匀的相分离。在 [20, 21] 中也可以找到类似的计算结果。

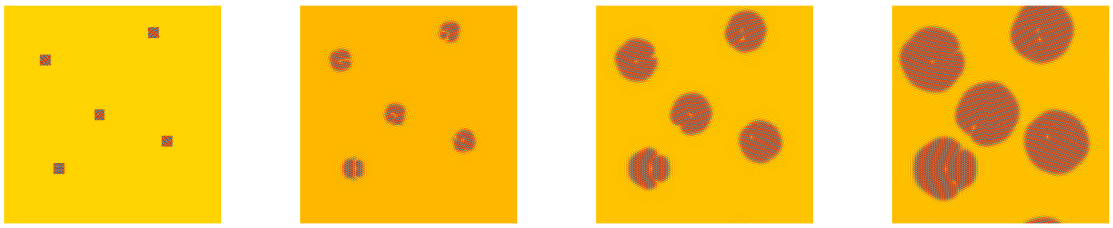


(a) $\phi = 0$ 在 $T = 0$,5,10 时的剖面

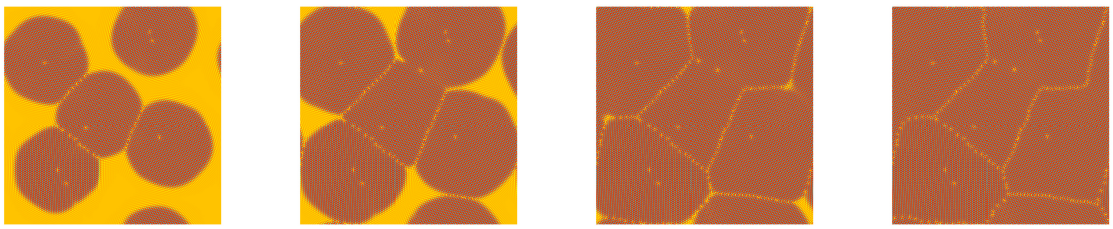


(b) $\phi = 0$ 在 $T = 20$,30,50 时的剖面

FIG. 6. *Example 2 (ii). The dynamic evolution of an array of circles governed by Cahn-Hilliard equation obtained by R-ESAV-2/BDF2 scheme.*



(a) ϕ 在 $T = 0$,100, 200, 300 时的剖面



(b) ϕ 在 $T = 400$, 500, 600,800 时的剖面

FIG. 7。 *Example 3 (i). The 2D dynamic evolution of crystal growth in a supercooled liquid driven by the PFC equation obtained by R-ESAV-1/BDF2 scheme. Snapshots of the numerical solution ϕ at $T = 0$,* 100, 200, 300, 400, 500, 600, 800, *respectively.*

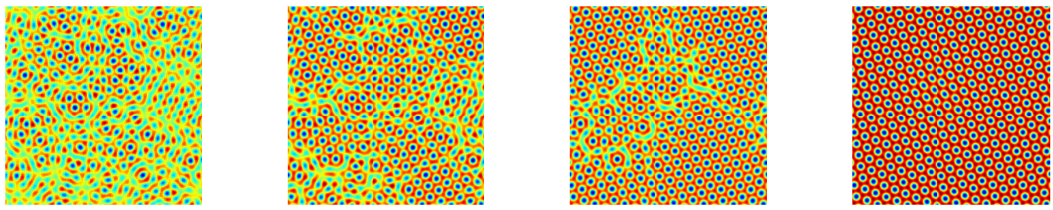
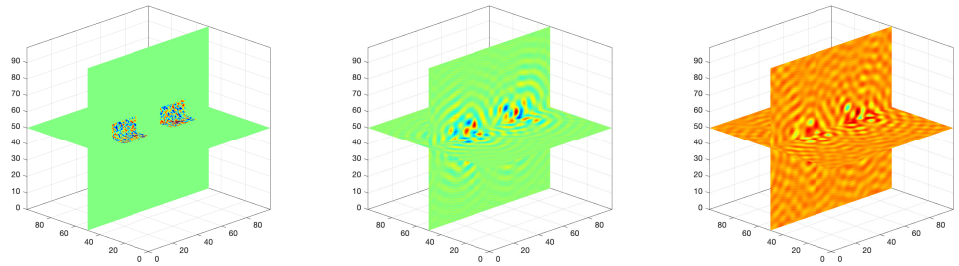


FIG. 8. *Example 3 (ii). The 2D configuration evolution driven by the PFC equation obtained by R-ESAV-1/BDF2 scheme. Snapshots of the numerical solution ϕ at $T = 400$, 600, 1000, 2500, respectively.*

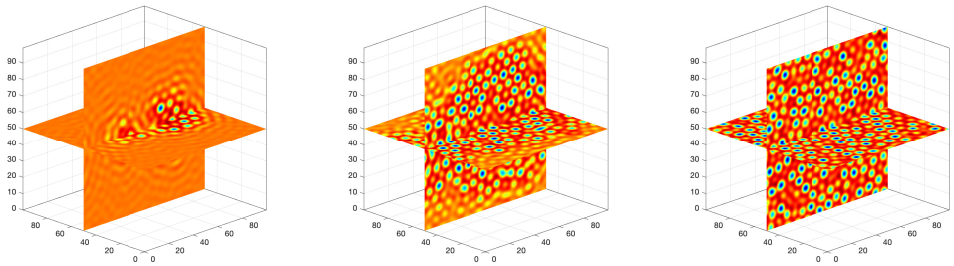
(iii) 随后，我们模拟过冷液体中的晶体生长，如 $3D$所示。我们选择计算区域 $[0, 100]^3$ ，初始条件为由.....生成的两个微晶

$$\phi(x, y, t = 0) = 0.285 + 0.01\delta.$$

其他参数选取为 $\epsilon = 0.25$、$\delta t = 0.02$、$T = 2000$。我们采用傅里叶模态$N^3 = 128^3$ 对空间进行离散化。由图9可观察到，不同微晶排列方式对晶相生长以及晶体-液体界面运动的影响；这些结果也与 [15]中的结果一致。



(a) $\phi = 0$ 在 $T = 0$, 60, 900时的分布



(b) $\phi = 0$ 在 $T = 1000$, 1100, 2000时的分布

FIG. 9. *Example 3 (iii). The 3D dynamic evolution of crystal growth in a supercooled liquid driven by the PFC equation obtained by R-ESAV-1/BDF2 scheme. Snapshots of the numerical solution ϕ at $T = 0$,* 60, 900, 1000, 1100, 2000, *respectively.*

（iv）最后，我们研究 $3D$中的相变行为。初始数据选取为

$$\phi(x,y,t=0)=\bar{\phi}+0.01\delta,$$

并设置计算区域 $[0,50]^3$。其他参数取为 $\epsilon=0.56$，$\delta t=0.02$，T =3000，傅里叶模态 $N^3=64^3$。图¯中展示了相场 $\phi=0.20$，0。35 和 0。43 的相变行为稳态微观结构，分别见图 $N^3=64^3$10。

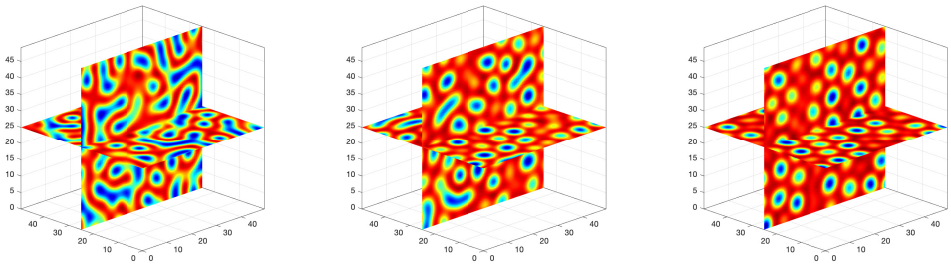


FIG. 10 *Example 3 (iv). Evolution of ϕ in 3D driven by the PFC equation obtained by R-ESAV-1/BDF2 。scheme with different $\bar{\phi}$ at $T=3000$. First: $\bar{\phi}=0.2$; Second: $\bar{\phi}=0.35$; Third: $\bar{\phi}=0.43$.*

示例 4。在本示例中，我们模拟相场囊泡膜（PFVM）模型[4, 5] ，以展示松弛MESAV格式的有效性。我们考虑以下惩罚自由能，以保持囊泡膜的面积和体积，

$$E(\phi)=E_b(\phi)+\frac{1}{2\sigma_1}(V(\phi)-v_0)^2+\frac{1}{2\sigma_2}(S(\phi)-s_0)^2, \tag{4.11}$$

其中， σ_1,σ_2 是两个小参数，而 v_0,s_0 分别为初始体积和初始表面积。囊泡的弯曲能 $E_b(\phi)$、体积 $V(\phi)$ 和表面积 $S(\phi)$ 的定义如下

$$E_b(\phi)=\frac{\epsilon}{2}\int_\Omega\left(-\Delta\phi+\frac{1}{\epsilon^2}G(\phi)\right)^2\mathrm{d}\boldsymbol{x}=\frac{\epsilon}{2}\int_\Omega H^2\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{4.12}$$

$$V(\phi)=\int_\Omega(\phi+1)\mathrm{d}\boldsymbol{x}\quad\text{and}\quad S(\phi)=\int_\Omega\left(\frac{\epsilon}{2}|\nabla\phi|^2+\frac{1}{\epsilon}F(\phi)\right)\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{4.13}$$

其中

$$H:=-\Delta\phi+\frac{1}{\epsilon^2}G(\phi),\quad F(\phi)=\frac{1}{4}\left(\phi^2-1\right)^2,\quad G(\phi):=F'(\phi).$$

那么，基于上述总能量的动力学方程可描述为

$$\begin{cases}\phi_t=-M\mu,\\ \mu=-\epsilon\Delta H+\frac{1}{\epsilon}G'(\phi)H+\frac{1}{\sigma_1}(V(\phi)-v_0)+\frac{1}{\sigma_2}(S(\phi)-s_0)\left(-\epsilon\Delta\phi+\frac{1}{\epsilon}F'(\phi)\right),\\ H=-\Delta\phi+\frac{1}{\epsilon^2}G(\phi),\end{cases} \tag{4.14}$$

采用周期边界条件，且 M 为迁移率常数。于是很容易得到，系统（4.14）满足如下能量定律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E(\phi)=-M\|\mu\|^2. \tag{4.15}$$

可以看出，系统（4.14包含与两个小参数 ϵ 和 σ_2 分别相关的两个非线性项。因此，需要引入两个SAV变量来处理不同的非线性项。在以下模拟中，我们将计算区域设为 $\Omega = (-\pi, \pi)^3$，，模型参数为 $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.01, \epsilon = \frac{6\pi}{128}, M = 1$。我们采用时间步长为 $\delta t = 1e-4$、包含 $N^3 = 128^3$ 个傅里叶模态的R-MESAV-1/BDF2格式计算结果。

(i) 我们首先考虑四个相近球体的相互作用，其初始条件为

$$\phi(x,y,z,0) = \sum_{j=1}^{4} \tanh\left(\frac{R_j - \sqrt{(x-x_j)^2 + (y-y_j)^2 + (z-z_j)^2}}{\sqrt{2}\epsilon}\right) + 3, \tag{4.16}$$

其中 $R_j = \frac{\pi}{6}$，$x_j = 0$，$(y_1, y_2, y_3, y_4) = (-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}, -\frac{3\pi}{4}, \frac{3\pi}{4})$，且 $z_j = 0$ 对于 $j = 1, 2, 3, 4$

图 11 展示了 $\phi = 0$ 在 $t = 0$、0。02、1 时的等值面快照，这表明四个小球体逐渐连接成“冰糖葫芦”形状，最终合并成圆柱形。该结果与 [5]中展示的结果一致。我们还在图 12 中绘制了松弛因子 θ_0^{n+1} 的演化过程，并观察到，除最初几个步长外，θ_0^{n+1} 始终取零值。

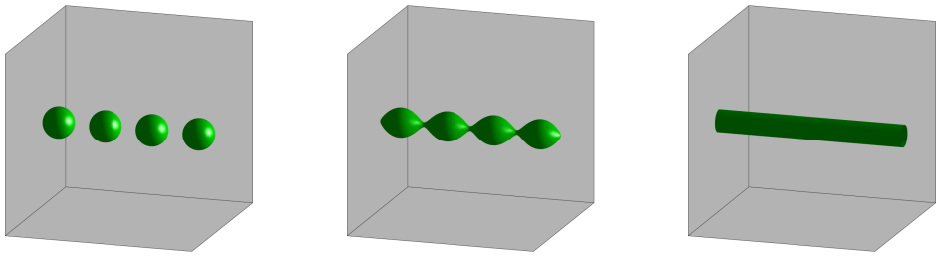


FIG. 11. *Example 4 (i). The evolution of four close-by spherical vesicles. Snapshots of iso-surfaces of* $\phi = 0$ *driven by the PFVM equation at* $t = 0$，0。02，1。

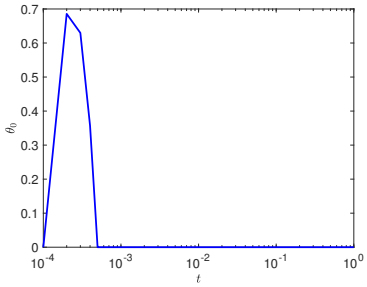


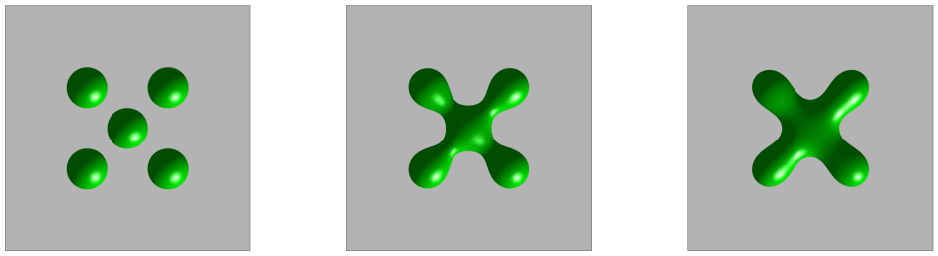
FIG. 12. *Example 4 (i). The evolution of relaxation factor* θ_0^{n+1}.

(ii) 我们通过选取初始条件，模拟五个彼此靠近的球形囊泡的演化

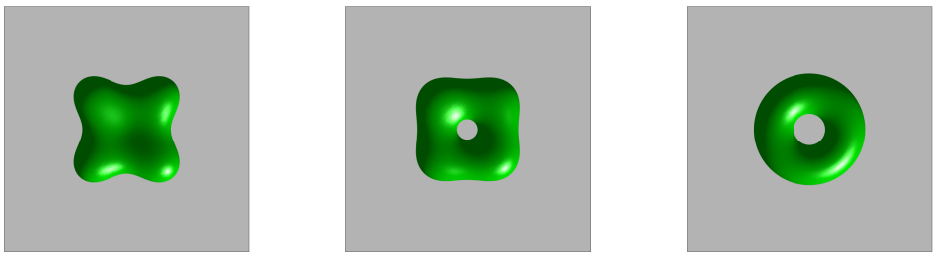
$$\phi(x,y,z,0) = \sum_{j=1}^{5} \tanh\left(\frac{R_j - \sqrt{(x-x_j)^2 + (y-y_j)^2 + (z-z_j)^2}}{\sqrt{2}\epsilon}\right) + 4, \tag{4.17}$$

其中 $R_j = \frac{\pi}{6}, z_j = 0$ 对于 $j = 1, 2, \ldots, 5, (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (-\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}, 0, -\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3})$，以及 $(y_1, y_2, y_3, y_4, y_5) = (-\frac{\pi}{3}, -\frac{\pi}{3}, 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3})$。

我们在图 13 中展示了演化过程。可以观察到，五个球体在很短的时间间隔内连接起来，并逐渐形成甜甜圈形状，这就是最终状态。



(a) $\phi = 0$ 在 $T = 0$，0。02，0。05 的剖面



(b) $\phi = 0$ 在 $T = 0.2$，0。3，1 的剖面

FIG. 13。 *Example 4 (ii). The evolution of five close-by spherical vesicles. Snapshots of iso-surfaces of* $\phi = 0$ *driven by the PFVM equation at* $T = 0$，0。02，0。05，0。2，0。3，1。

(iii) 接下来，我们考虑一个更复杂的初始条件，它由九个彼此相邻的球形囊泡组成，定义如下

$$\phi(x, y, z, 0) = \sum_{j=1}^{9} \tanh\left(\frac{R_j - \sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2 + (z - z_j)^2}}{\sqrt{2}\epsilon}\right) + 8, \tag{4.18}$$

其中 $R_j = \frac{\pi}{6}$、$z_j = 0$ 对于 $j = 1$、2、. . . 、9，$(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9) = (\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2})$，以及 $(y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6, y_7, y_8, y_9) = (-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, 0, 0, 0, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$。

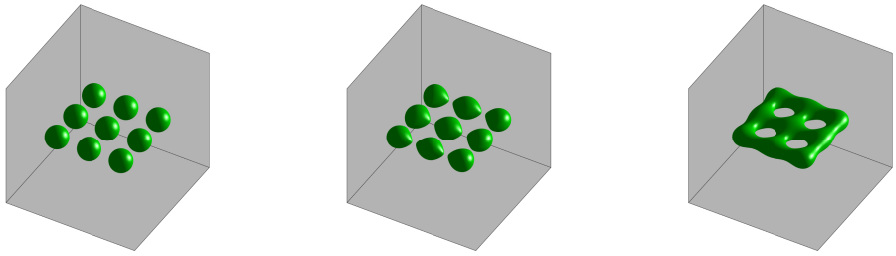
图中展示了九个彼此靠近的球形囊泡的演化过程。14这表明，最初的九个球体逐渐彼此连接，最终形成一个大囊泡。

例 5. 在此数值模拟中，我们测试纳维-斯托克斯方程。

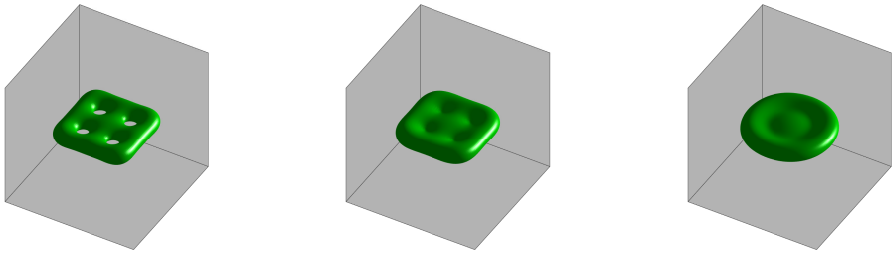
(i) 我们首先进行精度测试。右端项根据以下解析解计算

$$\begin{cases} p(x, y, t) = \exp(t)\sin(\pi y), \\ u_1(x, y, t) = \exp(t)\sin^2(\pi x)\sin(2\pi y), \\ u_2(x, y, t) = -\exp(t)\sin(2\pi x)\sin^2(\pi y), \end{cases} \tag{4.19}$$

计算区域为 $\Omega = (-1, 1)^2$，其他参数取为 $\nu = 0.1$，$T = 1$。我们采用勒让德谱方法进行空间离散，并使用 $N^2 = 64^2$。格式I和II的 BDF1 和 BDF2 数值结果分别列于表 2-5 中。可以看出，使用松弛因子可显著降低解的误差。



(a) $\phi = 0$ 在 $T = 0$，0.02，0.05 时的剖面



(b) $\phi = 0$ 在 $T = 0.1$，0.2，1 时的剖面

FIG. 14。 *Example 4 (iii). The evolution of nine close-by spherical vesicles. Snapshots of iso-surfaces of* $\phi = 0$ *driven by the PFVM equation at* $T = 0$，0.02，0.05，0.1，0.2，1。

(ii) 接下来，我们模拟双剪切层问题。考虑带有周期边界条件的纳维-斯托克斯方程，其初始条件为

$$u_1(x, y, 0) = \begin{cases} \tanh(\sigma(y - 0.25)), y \le 0.5, \\ \tanh(\sigma(0.75 - y)), y > 0.5, \end{cases} \quad u_2(x, y, 0) = \epsilon \sin(2\pi x), \tag{4.20}$$

其中， σ 是剪切层宽度的参数， ϵ 是扰动的大小。在接下来的模拟中，我们选择$\sigma = 30$、$\epsilon = 0.05$ 和计算区域 $\Omega = (0, 2)^2$。我们使用傅里叶模态 $N^2 = 128^2$，并设置 $\delta t = 6.7e - 4$，以测试带有 $\nu = 5e - 5$ 的纳维-斯托克斯方程。在 $T = 1.2$ 时，使用 BDFk ($k = 1, 2, 3, 4$) 格式得到的速度场 u 的涡量等值线如图 15 所示。可以看出，BDF3 和 BDF4 格式给出了正确的解，而 BDF1 格式导致了完全错误的结果，BDF2 格式的结果也不准确。这一数值现象表明高阶格式具有优越性。通过 BDF2 格式得到的 $\nu = 1e - 4$ 和 $\delta t = 6e - 4$ 下涡量等值线的演化如图 16 所示。从结果可以看出，涡旋逐渐增大。

5. 结论。本文构造了两类 R-ESAV/BDFk 格式，通过引入松弛因子改进经典 SAV 方法的精度。这些格式是线性的，且无条件能量稳定。与 R-SAV 和 R-GSAV 方法相比，它们无需任何假设即可保证 SAV 的正性。此外，所构造的 R-ESAV-2 方法易于构造高阶 BDFk 格式，并可应用于一般耗散系统。最后，我们通过大量数值算例证明，所构造的带松弛 RESAV 格式精度更高，且计算得到的能量更接近原始能量。

TABLE 2
Example 5 (i). Convergence test for Navier-Stokes equation using Scheme I/BDF1 with and without relaxation.

	ESAV-2				R-ESAV-2			
δt	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate
2.50E-2	4.29E-02	–	1.40	–	1.08E-02	–	2.62E-01	–
1.25E-2	1.96E-02	1.13	6.46E-01	1.11	4.85E-03	1.15	1.15E-01	1.19
6.25E-3	9.40E-03	1.06	3.10E-01	1.06	2.32E-03	1.06	5.35E-02	1.10
3.13E-3	4.61E-03	1.03	1.52E-01	1.03	1.14E-03	1.03	2.58E-02	1.05
1.56E-3	2.28E-03	1.01	7.52E-02	1.01	5.63E-04	1.01	1.26E-02	1.03

TABLE 3
Example 5 (i). Convergence test for Navier-Stokes equation using Scheme I/BDF2 with and without relaxation.

	ESAV-2				R-ESAV-2			
δt	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate
2.50E-2	1.94E-03	–	4.47E-02	–	1.54E-03	–	9.25E-03	–
1.25E-2	4.64E-04	2.06	9.96E-03	2.17	3.88E-04	1.99	2.77E-03	1.74
6.25E-3	1.14E-04	2.02	2.40E-03	2.05	9.73E-05	1.99	8.79E-04	1.66
3.13E-3	2.84E-05	2.00	6.19E-04	1.96	2.46E-05	1.99	3.03E-04	1.54
1.56E-3	7.28E-06	1.97	1.70E-04	1.86	6.37E-06	1.95	1.07E-04	1.50

TABLE 4
Example 5 (i). Convergence test for Navier-Stokes equation using Scheme II/BDF1 with and without relaxation.

	ESAV-2				R-ESAV-2			
δt	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate
2.50E-2	4.86E-01	–	9.34E-01	–	1.99E-01	–	2.89E-01	–
1.25E-2	3.12E-01	0.64	6.03E-01	0.63	9.51E-02	1.07	1.34E-01	1.11
6.25E-3	1.86E-01	0.75	3.58E-01	0.75	4.60E-02	1.05	6.37E-02	1.07
3.13E-3	1.03E-01	0.85	1.99E-01	0.85	2.26E-02	1.03	3.09E-02	1.04
1.56E-3	5.47E-02	0.91	1.05E-01	0.92	1.15E-02	1.02	1.52E-02	1.02

TABLE 5
Example 5 (i). Convergence test for Navier-Stokes equation using Scheme II/BDF2 with and without relaxation.

	ESAV-2				R-ESAV-2			
δt	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate	$\|e_{\mathbf{u}}\|_{L^2}$	Rate	$\|e_p\|_{L^2}$	Rate
2.50E-2	3.83E-02	–	6.23E-02	–	8.25E-03	–	1.59E-02	–
1.25E-2	7.60E-03	2.33	1.30E-02	2.26	2.05E-03	2.01	3.96E-03	2.00
6.25E-3	1.73E-03	2.14	2.98E-03	2.12	5.15E-04	2.00	9.93E-04	1.99
3.13E-3	4.13E-04	2.06	7.17E-04	2.06	1.29E-04	2.00	2.49E-04	2.00
1.56E-3	1.01E-04	2.03	1.76E-04	2.03	2.23E-05	2.00	6.24E-05	2.00

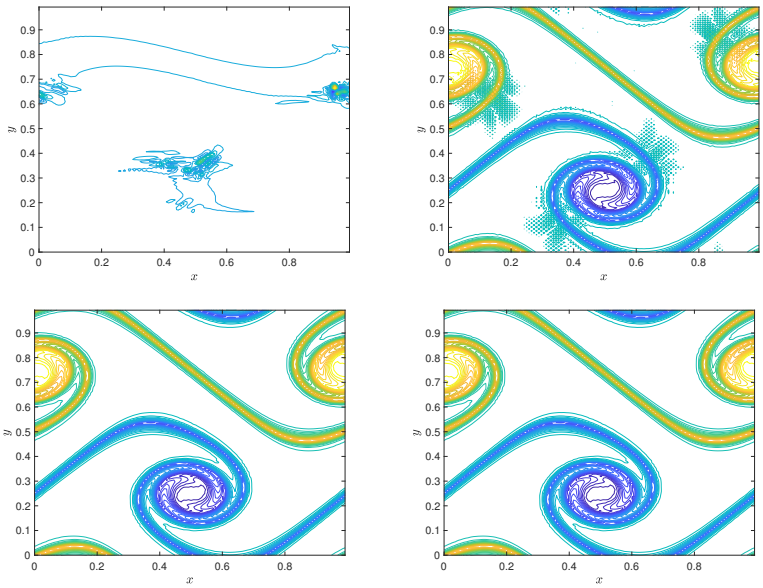
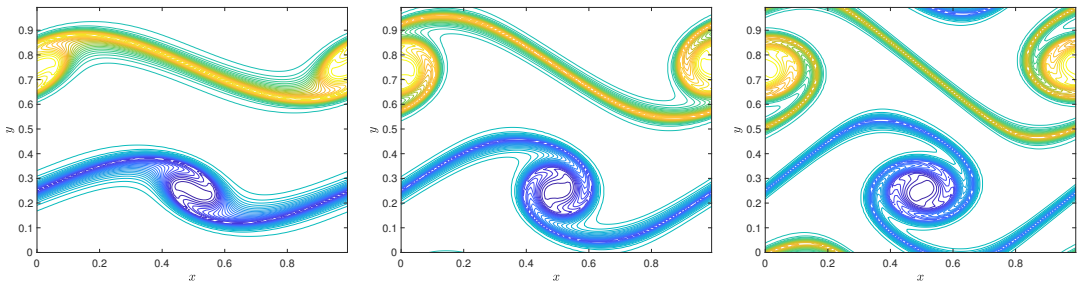
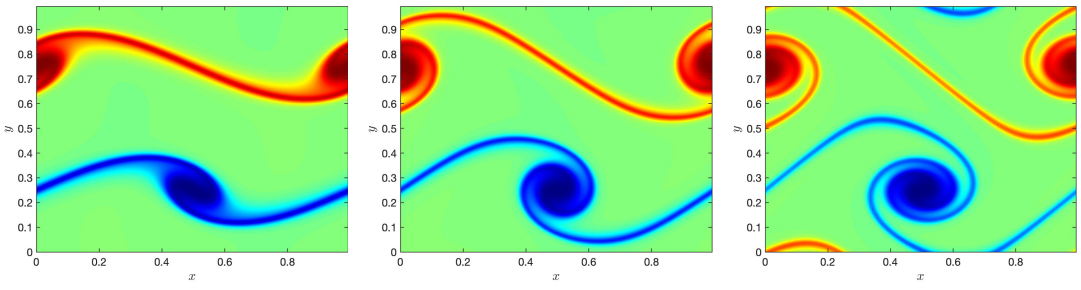


FIG. 15. *Example 5 (ii). The vorticity contours at* $T = 1.2$ *with* $\nu = 5e-5$, *and* $\delta t = 6.7e-4$ *obtained by Scheme II/BDFk* ($k = 1, 2, 3, 4$).



（a） $T = 0.8$处的涡量等值线，1，1。2



（b） $T = 0.8$处的涡量填色等值线，1，1。2

FIG. 16。 *Example 5 (ii). The evolution of vorticity with* $\nu = 1e-4$, *and* $\delta t = 6e-4$ *obtained by Scheme*$^{II/BDF}$2.

参考文献

[1] Arvind Baskaran、John S Lowengrub、Cheng Wang 和 Steven M Wise。修正相场晶体方程二阶凸分裂格式的收敛性分析。 *SIAM Journal on NumericalAnalysis*，51(5):2851–2873，2013。[2] Qing Cheng、Chun Liu 和 Jie Shen。梯度流的一种新型拉格朗日乘子方法。 *ComputerMethods in Applied Mechanics and Engineering*，367:113070，2020。[3] Qing Cheng、Chun Liu 和 Jie Shen。梯度系统的广义 SAV 方法。 *Journal of Computational and Applied Mathematics*，394:113532，2021。[4] Qing Cheng 和 Jie Shen。多标量辅助变量（MSAV）方法及其在相场囊泡膜模型中的应用。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，40(6):A3982–A4006，2018。[5] Qing Cheng 和 Jie Shen。梯度流的全局约束保持型标量辅助变量格式。*SIAM Journal on Scientific Computing*，42(4):A2489–A2513，2020。[6] Qing Cheng、Jie Shen 和 Xiaofeng Yang。利用 SAV 方法，为外延薄膜生长模型构造高效且精确的数值格式。 *Journal of Scientific Computing*，78(3):1467–1487，2019。[7] Qiang Du、Lili Ju、Xiao Li 和 Zhonghua Qiao。非局部 Allen–Cahn 方程的最大值原理保持型指数时间差分格式。 *SIAM Journal on Numerical Analysis*，57(2):875–898，2019。[8] Qiang Du、Lili Ju、Xiao Li 和 Zhonghua Qiao。一类半线性抛物方程的最大界原理及指数时间差分格式。 *SIAM Review*，63(2):317–359，2021。[9] Charles M Elliott 和 AM Stuart。离散半线性抛物方程的整体动力学。 *SIAMJournal on Numerical Analysis*，30(6):1622–1663，1993。[10] David J Eyre。Cahn-Hilliard 方程的无条件梯度稳定时间推进。 *MRS Online Proceedings Library (OPL)*，529，1998。[11] Fukeng Huang 和 Jie Shen。具有周期边界条件的 Navier–Stokes 方程一类高阶 IMEX 格式的稳定性与误差分析。 *SIAM Journal on Numerical Analysis*，59(6):2926–2954，2021。[12] Fukeng Huang 和 Jie Shen。一类适用于一般耗散系统的新型隐式–显式 BDFk SAV 格式及其误差分析。 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，392:114718，2022。[13] Fukeng Huang、Jie Shen 和 Zhiguo Yang。一种高效且精确的梯度流新型标量辅助变量方法。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，42(4):A2514–A2536，2020。[14] Maosheng Jiang、Zengyan Zhang 和 Jia Zhao。通过松弛提高标量辅助变量（SAV）方法的精度与一致性。 *Journal of Computational Physics*，第110954页，2022。[15] Qi Li、Liquan Mei、Xiaofeng Yang 和 Yibao Li。修正相场晶体方程的高效无条件能量稳定数值格式。 *Advances in Computational Mathematics*，45(3):1551–1580，2019。[16] Xiaoli Li 和 Jie Shen。Navier–Stokes 方程 SAV-MAC 格式的误差分析。 *SIAMJournal on Numerical Analysis*，58(5):2465–2491，2020。[17] Xiaoli Li 和 Jie Shen。关于 Cahn–Hilliard–Navier–Stokes 相场模型的 SAV-MAC 格式及其在相应 Cahn–Hilliard–Stokes 情形下的误差分析。 *Mathematical Models and Methods inApplied Sciences*，30(12):2263–2297，2020。[18] Xiaoli Li 和 Jie Shen。相场晶体方程的 SAV 傅里叶谱方法的稳定性与误差估计。 *Advances in Computational Mathematics*，46:1–20，2020。[19] Lianlei Lin、Zhiguo Yang 和 Suchuan Dong。基于辅助能量变量的不可压缩 Navier-Stokes 方程数值近似。 *Journal of Computational Physics*，388:1–22，2019。[20] Zhengguang Liu 和 Xiaoli Li。用于相场模型的指数标量辅助变量（E-SAV）方法及其显式计算。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，42(3):B630–B655，2020。[21] Zhengguang Liu 和 Xiaoli Li。一种用于耗散系统的高效且精确的指数半隐式标量辅助变量（ESI-SAV）方法。 *Journal of Computational Physics*，447:110703，2021。[22] Jie Shen、Cheng Wang、Xiaoming Wang 和 Steven M Wise。具有 Ehrlich–Schwoebel 型能量的梯度流二阶凸分裂格式：在薄膜外延中的应用。 *SIAM Journal on*

Numerical Analysis，50(1):105–125，2012。[23] Jie Shen 和 Jie Xu。梯度流标量辅助变量（SAV）格式的收敛性与误差分析。 *SIAM Journal on Numerical Analysis*，56(5):2895–2912，2018。[24] Jie Shen、Jie Xu 和 Jiang Yang。梯度流的标量辅助变量（SAV）方法。 *Journalof Computational Physics*，353:407–416，2018。[25] Jie Shen、Jie Xu 和 Jiang Yang。一类新型高效稳健的梯度流能量稳定格式。*SIAM Review*，61(3):474–506，2019。[26] Jie Shen 和 Xiaofeng Yang。Allen-Cahn 方程与 Cahn-Hilliard方程的数值近似。 *Discrete & Continuous Dynamical Systems*，28(4):1669，2010。[27] Jie Shen 和 Xiaofeng Yang。一类高度非线性梯度流系统的不变能量二次化（IEQ）和 SAV 方法及其推广。 *Contemp. Math.*，754:217–245，2020。[28] Xiaoqiang Wang、Lili Ju 和 Qiang Du。相场弹性弯曲能模型的高效稳定指数时间差分 Runge–Kutta 方法。 *Journal of Computational Physics*，316:21–38，2016。[29] Ke Wu、Fukeng Huang 和 Jie Shen。一类用于不可压 Navier–Stokes 方程及旋转动力学应用的新型高阶解耦格式。 *Journal of Computational Physics*，458:111097，2022。[30] Xiaofeng Yang。均聚物共混物相场模型的线性一阶和二阶无条件能量稳定数值格式。 *Journal of Computational Physics*，327:294–316，2016。[31] Xiaofeng Yang 和 Daozhi Han。相场晶体模型的线性一阶和二阶无条件能量稳定格式。 *Journal of Computational Physics*，330:1116–1134，2017。[32] Xiaofeng Yang 和 Lili Ju。相场弹性弯曲能模型的高效线性无条件能量稳定格式。 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，315:691–712，2017。[33] Xiaofeng Yang 和 Haijun Yu。利用不变能量二次化方法，为相场移动接触线模型构造高效二阶无条件稳定格式。 *SIAM Journal on ScientificComputing*，40(3):B889–B914，2018。[34] Yanrong Zhang 和 Jie Shen。耗散系统的一种带松弛的广义 SAV 方法。 *Journalof Computational Physics*，第111311页，2022。[35] Jingzhi Zhu、Long-Qing Chen、Jie Shen 和 Veena Tikare。可变迁移率 Cahn-Hilliard 方程的粗化动力学：半隐式傅里叶谱方法的应用。 *Physical Review E*，60(4):3564，1999。