arXiv:2602.01497v1 [math.NA] 2 Feb 2026

Cahn–Hilliard 模型中的三阶几何体积守恒

Josef Musil†

2026年2月3日

摘要

退化 Cahn–Hilliard 相场模型无需显式前沿追踪，即可稳健地近似表面扩散驱动的界面运动。然而，在计算中，界面所包围的几何体积——例如序参量$\phi \in [-1,+1]$ 为正的区域——可能会在有限界面厚度下发生漂移，即使在锐界面极限下体积守恒，也会产生非物理的收缩或增长。除了基于界面位置的网格细化（以增加计算成本为代价减少漂移）之外，常见的补救方法还包括通过全局（非局部）约束强制实现体积守恒（通常借助拉格朗日乘子修正），以及重新设计动力学以提高尖锐界面保真度；后者涵盖了从双重退化表面扩散模型（非变分和耗散能量的变体）到具有退化迁移率的加权度量梯度流形式。我们重新审视并拓展 Zhou 等人的改进守恒理念：以精确守恒经过设计的单调映射 $Q(\phi)$取代经典质量守恒，该映射能够更准确地近似阶跃函数，从而提高几何体积的收敛性。基于这一框架，我们（i）在未缩放的（物理）时间形式下进行匹配渐近分析；（ii）推导出界面剖面一阶内层修正的简化且可计算的表示，并展示其结构；（iii）确定一种积分矩抵消条件，用于控制主要的几何体积缺陷。这一机制可转化为实用的设计规则：我们在参数化族中选择正则化核——包括指数型和 Pad´e 型核——以实现有效的高阶行为，并在适中的参数值下满足该抵消条件。因此，所提出的核在几何体积守恒方面相对于界面厚度可达到形式上的三阶精度。最后，我们介绍一种无条件耗散能量的数值离散方案，该方案能够精确保守离散守恒量，并通过对守恒映射进行完全一致的更新来提高稳健性。

关键词。 表面扩散；退化 Cahn–Hilliard；体积守恒；锐界面极限；逆向设计；匹配渐近展开。

1 引言

退化 Cahn–Hilliard 相场模型 [1, 2, 3] 为表面扩散驱动的界面运动提供了一种稳健的弥散界面近似，无需显式进行前沿追踪。在尖锐界面框架下，表面扩散使嵌入界面 $\Gamma(t)$ 按照四阶几何定律演化（法向速度与平均曲率的曲面拉普拉斯算子成正比），同时保持

†热力学研究所，捷克科学院，Dolej˘skova 1402/5，捷克共和国布拉格 8，182 00

所围成的几何体积 $\Gamma(t)$。这一经典图景可追溯至 Mullins 热沟槽理论，以及后续的弥散界面公式和尖锐界面分析 [4, 5, 6, 7, 8]。

相场公式用序参量取代移动的尖锐界面 $\phi = \phi_\varepsilon \in [-1, 1]$，其过渡层厚度为 $\mathcal{O}(\varepsilon)$。通常，$\phi \approx +1$ 在“内部”相中取值，而 $\phi \approx -1$ 在“外部”相中取值，弥散界面位于零水平集附近。这种弥散描述能够自然地处理拓扑变化以及与其他物理过程的耦合，但在界面厚度有限时，会带来一个实际问题：与阈值化场相关的几何相体积（1）可能随时间漂移，即使极限情况下的尖锐界面动力学守恒体积，也会产生人为的收缩或增长。

$$\Omega_\varepsilon^+(t) := \{x \in \Omega : \ \phi(x,t) > 0\}, \qquad \Omega_\varepsilon^-(t) := \{x \in \Omega : \ \phi(x,t) < 0\}. \tag{1}$$

将弥散界面记为 $\Gamma_\varepsilon(t) := \{x \in \Omega : \ \phi(x,t) = 0\}$，则有 $\Omega = \Omega_\varepsilon^+(t) \cup \Gamma_\varepsilon(t) \cup \Omega_\varepsilon^-(t)$，特别是 $|\Omega_\varepsilon^+(t)| + |\Omega_\varepsilon^-(t)| = |\Omega|$（除去一个测度为零的集合）。

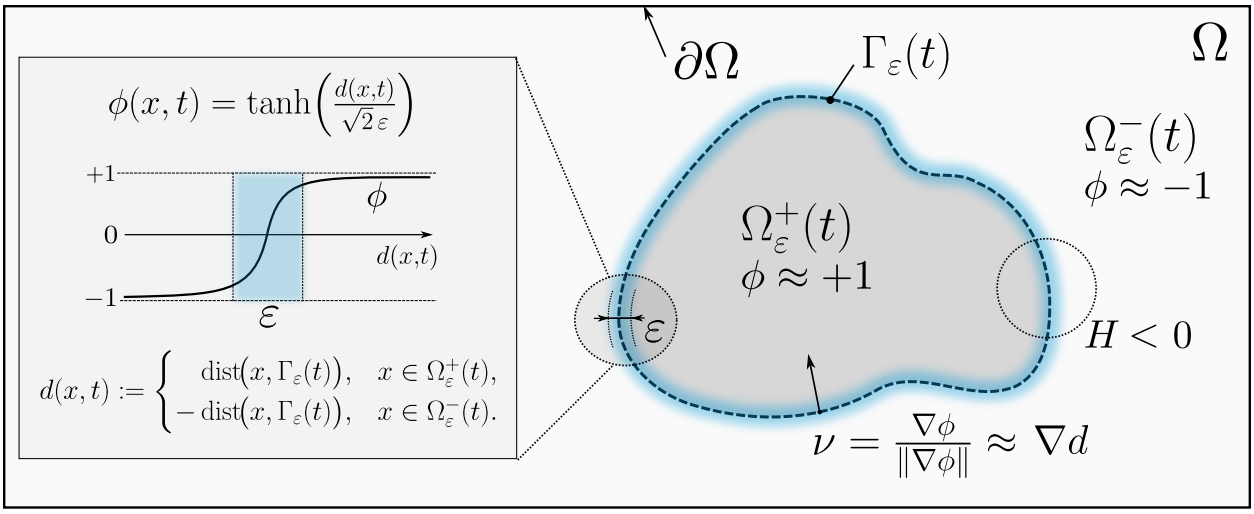


图 1：尖锐界面极限的几何与记号。

这种漂移的来源既有建模方面的，也有数值方面的。经典 Cahn–Hilliard 动力学守恒的是一种弥散“质量”（例如 $\int_\Omega \phi \, d\Omega$），对于典型的内层剖面，它仅以关于 ε 的一阶精度近似尖锐体积；此外，当界面未得到充分分辨时，体扩散和离散误差会在长时间尺度上累积，导致小液滴的虚假消失以及粗化动力学的畸变 [5, 6, 9]。基于界面位置的网格细化可以减小这些误差，但会增加计算成本。

因此，除了网格加密之外，文献中还提出了两大类补救方法。第一类通过全局（非局部）约束实现体积守恒，通常采用拉格朗日乘子修正，并根据区域积分调整化学势（或反应项），使目标体积代理量保持（近似）恒定；这类方法广泛用于各种相场模型，包括守恒型 Allen–Cahn 类公式，以及弥散界面流体模型中相关的质量／体积修正策略 [10, 11, 12]。第二类则重新设计局部模型结构，在保持能量耗散原理的同时提高尖锐界面保真度。在表面扩散情形下，双重退化 Cahn–Hilliard 模型引入额外的退化以抑制体扩散；一种广泛使用的非变分版本在计算上表现良好，但缺乏相应的能量，而变分（能量耗散）版本则恢复了梯度流结构 [7]。基于变分观点，加权度量梯度流

已提出采用（双重）退化迁移率的公式，以在表面扩散的尖锐界面近似中实现二阶精度，同时保留经典的 Cahn–Hilliard 能量 [8]。

近期，Zhou 等人提出了一种具有改进守恒的各向异性 *Cahn–Hilliard* 方程（ACH–IC），其由 Onsager 变分原理在修正守恒律下导出；在该守恒律中，经典质量守恒被替换为所设计单调映射 $Q(\phi)$ [13] 的精确守恒。映射 Q 被选作尖锐相指示函数的光滑替代：它是奇函数，满足 $Q(\pm 1) = \pm 1$，且在 $\phi = 0$ 附近比 ϕ 本身更陡。因此，所守恒的 “Q- 体积 ”

$$\mathcal{V}_Q(t) := \frac{1}{2}\int_\Omega (1 + Q(\phi(x,t)))\, \mathrm{d}\Omega \tag{2}$$

为几何体积提供了更高保真度的弥散近似，并在 ε [13] 的实际取值下减小虚假收缩。在 Zhou 的基准族中，Q' 与 $(1-\phi^2)^k$ 成正比；这会随着 k 的增大而改进尖锐指示函数近似，但可能限制设计空间。

本文从分析与数值实践两方面重新审视并扩展 Zhou 的改进守恒框架。首先，我们在未缩放（物理）时间表述下进行匹配渐近分析（ $\partial_t\phi$ 中不含依赖于 ε 的前置因子），这对多物理场耦合（例如 Cahn–Hilliard–Navier–Stokes）是自然的，但会将物理运动移至第一修正阶 [14, 15]。其次，我们继续内层展开以提取曲率驱动的第一剖面修正（记为 Φ_1），推导简化的一维积分表示，并据此识别控制主导几何体积缺陷的积分矩抵消条件。由此得到一条实用的逆向设计规则：通过在参数化族中选取核函数 Q——包括指数型与 Pad´e 型增强，它们无需极高多项式幂次即可“达到”高有效简并度——我们可在适中的参数值下强制实现该抵消。再结合 Q' 足够的端点退化，这使几何体积守恒相对于界面厚度达到形式上的三阶精度。

本文其余部分安排如下。第2 节介绍 CH–IC 模型类和容许核 Q。第3 节概述未缩放的匹配渐近层级，确定第一内修正，并利用修正后的矩层级推导几何体积误差展开。第4 节介绍核族和逆向设计流程。数值方法和实验将在第5 节介绍（本稿中的占位内容）。附录汇集了详细的渐近推导和修正后的矩公式。

2 守恒改进的 Cahn–Hilliard（CH–IC）模型与守恒的 Q-映射

我们考虑有界 Lipschitz 区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d (d = 2, 3$ 上的守恒标量序参量 $\phi = \phi_\varepsilon(x,t) \in [-1,1]$（该分析对 $d = 1$ 也成立），其时间区间为 $t \in [0,T]$。相场 ϕ 可表示例如二元混合物中经重标度的浓度差，并假设对每个 t， $\phi(\cdot,t) \in H^1(\Omega)$。我们使用式（1）中定义的阈值相区 $\Omega_\varepsilon^{\pm}(t)$ 和中间曲面 $\Gamma_\varepsilon(t)$。在尖锐界面区间 $\varepsilon \ll 1$ 中， ϕ 在体相内接近 ± 1 ，并在 $\mathcal{O}(\varepsilon)$ 薄的界面层内、靠近 $\Gamma_\varepsilon(t)$ 处发生过渡。

其热力学由恒温下各向同性二元混合物的标准金兹堡-朗道自由能所支配，

$$E_\varepsilon[\phi] = \int_\Omega \gamma\Big(\frac{1}{\varepsilon}W(\phi) + \frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2\Big)\, \mathrm{d}\Omega, \qquad W(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2-1)^2, \tag{3}$$

其中 $\gamma > 0$ 为（常数）表面张力系数。为简化记号，我们通过对能量进行重新标度令 $\gamma = 1$ 。相应的化学势为

$$\mu = \frac{\delta E_\varepsilon}{\delta \phi} = \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) - \varepsilon \Delta \phi. \tag{4}$$

改进守恒。 经典 Cahn–Hilliard 动力学守恒“质量” $\int_\Omega \phi \, \mathrm{d}\Omega$。遵循 Zhou 等人 [13], 的做法，我们转而施加对一个特意设计的单调映射的精确守恒$Q(\phi)$,

$$\frac{d}{dt} \int_\Omega Q(\phi) \, \mathrm{d}\Omega = \int_\Omega Q'(\phi) \, \partial_t \phi \, \mathrm{d}\Omega = 0, \tag{5}$$

其中 $Q:\ [-1,1] \to [-1,1]$ 是奇函数、严格递增，并满足

$$Q(\pm 1) = \pm 1, \qquad Q(-\phi) = -Q(\phi), \qquad Q'(\phi) > 0 \text{ for } |\phi| < 1. \tag{6}$$

CH–IC 动力学。 利用 Onsager 变分原理并施加约束（5）（见 [13] 以及 [8, 7]中的讨论），可得到改进守恒的 Cahn–Hilliard（CH–IC）演化方程

$$\partial_t \phi = N(\phi) \, \nabla \cdot \Big(M(\phi) \, \nabla \big(N(\phi) \mu \big) \Big), \qquad N(\phi) := \frac{1}{Q'(\phi)}. \tag{7}$$

这里 μ 由（4）给出，而 $M(\phi) \geq 0$ 是一个（可能退化的）迁移率。我们将其参数化为

$$M(\phi) = M_* \, (1 - \phi^2)^\ell, \qquad \ell \in \mathbb{N}, \tag{8}$$

其中 ℓ 控制端点退化的强度，而 $M_* > 0$ 是一个常数迁移率幅值。在表面扩散区间，常见的选择是四次退化 $\ell = 2$，它会抑制体扩散，并在锐界面极限下产生表面扩散运动[6, 7, 8]。

备注 1（迁移率大小与有效时间尺度）。 在整个分析中，我们令 $M_* = \mathcal{O}(1)$，以便分离锐界面极限的几何结构。由于界面速度定律与 M_* 呈线性关系，取满足 $M = \mathcal{O}(1)$ 的标度 $M_* = \varepsilon^a M$，只会重新标定界面时间尺度：若

$$V_n = \varepsilon \, c_{\mathrm{SD}} \, M_* \, \Delta_\Gamma H + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

（其中 $c_{\mathrm{SD}} > 0$ 是依赖于剖面的表面扩散常数；参见附录 A，且 $c_{\mathrm{SD}} = \frac{4}{9}$ 对于 $W(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$ 和 $M(\phi) = (1 - \phi^2)^2$），则

$$V_n = \varepsilon^{a+1} c_{\mathrm{SD}} \, \overline{M} \, \Delta_\Gamma H + \mathcal{O}(\varepsilon^{a+2}),$$

等价地，在慢时间 $\tau = \varepsilon^{a+1} t$ 下得到一个 $\mathcal{O}(1)$ 定律。在流体动力学 *NSCH* 模型中，还存在对流主阶运动学 $V_n = u \cdot \nu + \cdots$，因此迁移率标度决定了 *Cahn–Hilliard* 驱动的弛豫是作为高阶修正项还是在主阶出现；例如参见 *[14, 17, 18, 19]*。

此后，我们令 $M_* = 1$，不失一般性（这相当于对时间进行常数重标度），并记 $M(\phi) = (1 - \phi^2)^\ell$。

守恒的弥散“体积”代理量为

$$\mathcal{V}_Q(t) := \frac{1}{2} \int_\Omega \big(1 + Q(\phi(x,t)) \big) \, \mathrm{d}\Omega, \tag{9}$$

在无通量边界条件下，其在 (7) 中恰好保持恒定。目标是选取 Q使得 $\mathcal{V}_Q(t)$ 能以更高的渐近精度逼近几何体积 $|\Omega^+(t)|$。

Zhou 多项式族。Zhou 等人提出的基准族 [13]定义为

$$Q_k'(\phi) = \frac{(1-\phi^2)^k}{B_k}, \qquad B_k := \int_0^1 (1-s^2)^k \, ds, \qquad Q_k(\phi) := \int_0^\phi Q_k'(s)\, ds, \tag{10}$$

其中， $k \geq 0$ 控制 Q_k' 在 $\phi = \pm 1$ 处的端点退化，而归一化 B_k 确保$Q_k(1) = 1$。当 $k = 0$ 时，可恢复经典质量映射 $Q_0(\phi) = \phi$。一个尤为重要的特例是 $k = 1$，此时 $Q_1'(\phi) = \frac{3}{2}(1-\phi^2)$且 $N(\phi) = \frac{2}{3}(1-\phi^2)^{-1}$。在这种情况下，(7) 与 Bretin 等人 [8]，提出的二阶变分表面扩散模型所依据的加权度量 H^{-1} 梯度流一致，其中度量权重同时出现在时间导数和通量中。这将 Zhou 的改进守恒映射与加权度量表面扩散公式 [8, 7]联系起来。NMN（$k = 1$）情形的一个显著特征是内层剖面对曲率具有一阶结构稳定性：曲率诱导的ε 阶修正恒等于零， $\Phi_1 \equiv 0$ （第 3 节）。

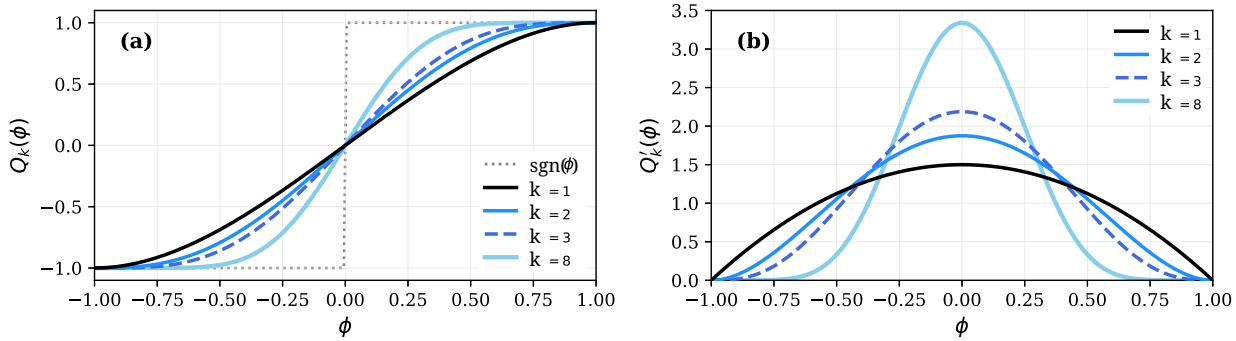


图2：守恒映射 $Q_k(\phi)$ 及其导数 $Q_k'(\phi)$ 对 Zhou 多项式族（10）在退化阶 $k = 1$、2、3、8 下的表现。(a) 随着 Q_k 增大，映射 ϕ逐渐逼近尖锐的符号函数 sgn(ϕ)（灰色虚线）。(b) 导数 Q_k' 集中在 $\phi = 0$ 附近，并在 $\phi = \pm 1$ 处以 k阶消失，从而控制端点退化。情形 $k = 1$ 对应于 Bretin 等人的 NMN 模型。 [8]。

多项式族（10）已能改善 $\mathcal{V}_Q(t)$ 向 $|\Omega^+(t)|$ 的收敛速度，且 k 越大，改善越明显。然而，本文分析上的关键在于，主导几何体积误差取决于两个矩，并且可以通过矩平衡条件将其消除；下文将概述这一机制及由此得到的设计规则。随后，我们将利用 Q' 的自由度，在低维族中设计满足矩平衡条件的核函数（第4节）。

3 未缩放渐近分析、几何体积误差与矩平衡

我们总结未缩放的匹配渐近结构，并分离出有限界面厚度下导致几何体积漂移的机制。相对于标准的退化 Cahn–Hilliard渐近分析，关键的新要素是 $\mathcal{O}(\varepsilon)$由改进守恒映射触发的曲率诱导的内层修正 Q。详细推导见附录A–B。

内层坐标与主导剖面。 令 $d(x,\ t)$ 表示到 $\Gamma(t)$ 的有符号距离（在 $\Omega^+(t)$ 中为正），并引入拉伸法向坐标 $z = d(x,\ t)/\varepsilon$。主导内层剖面

是满足下式的异宿轨道 σ

$$\sigma'' - W'(\sigma) = 0, \qquad \sigma(\pm\infty) = \pm 1, \qquad \sigma(0) = 0, \tag{11}$$

从而，对于四次势（3），

$$\sigma(z) = \tanh\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right). \tag{12}$$

在未缩放的（物理）时间表述（7）中，界面运动比经典的 ε-重标度时间设定晚出现一个阶。更精确地说，法向速度具有如下展开

$$V_n \;=\; \varepsilon\, V_1 \;+\; \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{13}$$

且首项系数 V_1 由表面扩散支配，

$$V_1 \;=\; -\,\nabla_\Gamma\!\cdot\!\big(\mathcal{M}_\Gamma \nabla_\Gamma H\big), \tag{14}$$

其中有效表面迁移率 $\mathcal{M}_\Gamma$ 取决于 M（ϕ）与 Q的选取。在采用标准四次势及本文所用基线归一化的各向同性情形中，（14）退化为常迁移率定律$V_1 = \frac{4}{9}\,\Delta_\Gamma H$。匹配渐近推导以及 $\mathcal{M}_\Gamma$ 的表达式总结于附录A；另见 [6, 7, 8, 13]。

一阶曲率修正 Φ_1 与简化公式。我们展开

$$\phi(x,t) = \sigma(z) + \varepsilon\, H(x,t)\, \Phi_1(z) + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

在 ε阶，修正项 Φ_1 满足

$$\mathcal{L}\Phi_1 = \frac{\sqrt{2}}{3}\, Q'(\sigma(z)) - \sigma'(z), \qquad \mathcal{L} := \partial_{zz} - W''(\sigma(z)), \tag{15}$$

并满足有界性条件 $z \to \pm\infty$ 及规范条件 $\Phi_1(0) = 0$。算子 $\mathcal{L}$ 是自伴算子，其核为$\mathcal{L}$ =span$\{\sigma'\}$，且由弗雷德霍姆择一定理可知其可解性（附录B）。

Zhou 等人用二重积分（常数变易法）公式表示该解：

$$\Phi_1(z) = \sigma'(z) \int_0^z \frac{1}{\sigma'(\eta)^2} \left(\int_0^\eta \Big(\frac{\sqrt{2}}{3}\, Q'(\sigma(\xi)) - \sigma'(\xi) \Big) \sigma'(\xi)\, d\xi \right) d\eta, \tag{16}$$

该公式是正确的，但不利于分析或核函数设计。本文的一项主要简化是将（16）化为相位变量 $u = \sigma(z) \in (-1,\ 1)$ 上的单次求积。引入 NMN 参考核

$$Q_1(u) := \frac{3}{2}\left(u - \frac{u^3}{3}\right), \qquad \text{(corresponding to } k = 1,\ S \equiv 1)$$

并定义

$$F(u) := \int_0^u \Big(\frac{\sqrt{2}}{3} Q'(w) - \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - w^2) \Big)\, dw = \frac{\sqrt{2}}{3} \Big(Q(u) - Q_1(u) \Big). \tag{17}$$

接着（见附录 B）

$$\Phi_1(z) = \sigma'(z)\, 2\sqrt{2} \int_0^{\sigma(z)} \frac{F(u)}{(1-u^2)^3}\, du = \frac{4}{3}\, \sigma'(z) \int_0^{\sigma(z)} \frac{Q(u) - Q_1(u)}{(1-u^2)^3}\, du. \tag{18}$$

这种表示使结构一目了然： $\Phi_1 \equiv 0$ 当且仅当 $Q \equiv Q_1$，即 NMN 情形在阶数 ε下结构稳定。

几何体积缺陷与矩层级。 虽然 $\int_\Omega Q(\phi)\,\mathrm{d}\Omega$ 得以精确守恒，但几何体积 $|\Omega^+(t)|$ 在有限 ε下可能发生漂移。因此，我们将 $|\Omega^+(t)|$ 与守恒的弥散 Q体积代理量 $\mathcal{V}_Q(t)$（定义见（2））进行比较，并引入几何体积误差

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t) := \mathcal{V}_Q(t) - |\Omega^+(t)| = \frac{1}{2}\int_\Omega \big(1 + Q(\phi(x,t))\big)\,\mathrm{d}\Omega - \int_\Omega \Theta(d(x,t))\,\mathrm{d}\Omega, \tag{19}$$

其中， Θ 表示 Heaviside阶跃函数（等价地， $\Theta(d(\cdot,\ t))$ 是 $\Omega^+(t)$ 的示性函数，但在界面处除外）。管状邻域展开给出如下分解

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t) = \underbrace{\varepsilon\int_{\Gamma(t)} C_0[Q]\,dA + \frac{\varepsilon^2}{2}\int_{\Gamma(t)} H\,\mathcal{C}_1[Q]\,dA}_{=:\ \mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{int}}(t)} + \mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{bulk}}(t) \ + \ \mathcal{O}(\varepsilon^3). \tag{20}$$

对于满足（ Q 6）的奇数6， $\mathcal{O}(\varepsilon)$ 系数

$$C_0[Q] := \int_{-\infty}^{\infty}\Big(\tfrac{1}{2}\big(1 + Q(\sigma(z))\big) - \Theta(z)\Big)\,dz \tag{21}$$

消失，因此主导的界面贡献为 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$。此外，对于形式为（26）、退化阶为 k的核函数，$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{bulk}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon^{k+1})$（附录B）。

The $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 界面缺陷由组合矩决定

$$\mathcal{C}_1[Q] := \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q]. \tag{22}$$

几何矩仅取决于 Q',

$$\mathcal{M}_1[Q] = -2\int_0^1 Q'(u)\ \mathrm{arctanh}^2(u)\,du, \tag{23}$$

而th e动态矩刻画了来自曲率修正的贡献 Φ_1 :

$$\mathcal{J}_1[Q] = \frac{8}{3}\int_0^1 \frac{\big(Q(u) - Q_1(u)\big)\big(1 - Q(u)\big)}{(1-u^2)^3}\,du, \qquad Q_1(u) = \frac{3}{2}\left(u - \frac{u^3}{3}\right). \tag{24}$$

两个公式均由（18）经变量替换和Fubini定理得到；见附录B。（15）–（24）中的符号约定与 Zhou [13] 一致，并得到 $\mathcal{J}_1 > 0$ 于矩平衡区间。

引理1. 对任意严格递增的奇核 Q 满足（6），则有 $\mathcal{M}_1[Q] < 0$。

$\mathcal{M}_1$ 的负性反映了如下事实： $Q(\sigma(z))$在整个弥散层上总是“下垂”于理想阶跃函数之下。因此，抵消 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$体积误差需要来自 $\mathcal{J}_1$的正贡献。

设计规则（mo 矩平衡）。 只要满足以下条件，即可获得三阶几何体积精度 :

$$\begin{aligned} &\text{(i) } Q'(\phi) \text{ vanishes at least to second order at } \phi = \pm 1,\\ &\text{(ii) } \mathcal{C}_1[Q] = \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q] = 0. \end{aligned} \tag{25}$$

在 (i)–(ii) 条件下， $\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{bulk}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon^3)$，且主导的界面贡献相互抵消，因此 $\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon^3)$。

4 核族与逆向设计

第 3 节中的矩公式提供了一种逆向设计视角：在低维核族中，我们调整参数，使组合矩 $\mathcal{C}_1[Q] = \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q]$ 消失，同时确保 Q' 在端点充分消失，以保留三阶内部行为。

我们通过非负偶整形函数 $S(\phi;\theta)$ 和基准指数 $k \geq 1$ 对核函数进行参数化：

$$Q'(\phi) = \frac{(1-\phi^2)^k\, S(\phi;\theta)}{B_{k,S}(\theta)}, \qquad B_{k,S}(\theta) = \int_0^1 (1-s^2)^k\, S(s;\theta)\, ds, \qquad Q(\phi) = \int_0^\phi Q'(s)\, ds. \quad (26)$$

这种构造保证 $Q(\pm 1) = \pm 1$, Q 为奇函数，且在 $(-1,1)$ 上 $Q' > 0$。因子 $(1-\phi^2)^k$确保在 $\phi = \pm 1$ 处具有 k 阶基准消失。此外，若 $S(\pm 1;\theta) = 0$，且在端点附近 $S(\phi) \sim c(1-\phi^2)$，则 $(1-\phi^2)^k S(\phi)$ 按 $(1-\phi^2)^{k+1}$ 的规律消失；也就是说，整形会额外增加一个端点幂次。这对 $k = 1$很有用：端点消失整形在保留 NMN 基线解析优势的同时，可实现有效的内部退化二阶。

对于任意固定的 (k, S)，矩平衡可化为一维求根问题，

$$\mathcal{C}_1(\theta) := \mathcal{M}_1[Q_\theta] + \mathcal{J}_1[Q_\theta] = 0, \quad (27)$$

与 $\mathcal{M}_1$ 和 $\mathcal{J}_1$ 使用求积根据（23）–（24）进行计算。图 3（d）表明，$\mathcal{C}_1(\theta)$ 对于整形族变化平滑，并且能够稳健地穿过零点，因此 $\theta^\star$ 可通过标准夹逼求得。

4.1 核族

Zhou 多项式族（$S \equiv 1$）。令 $S \equiv 1$ 即可恢复 Zhou基准核 $Q'_k(\phi) \propto (1-\phi^2)^k$。组合矩 $\mathcal{C}_1$ 随 k 减小，并在 $k = 8$附近穿过零点。$k = 1$（NMN）这一情形较为特殊：$\Phi_1 \equiv 0$ 恒等成立，但 $\mathcal{C}_1 \approx -0.645$。

指数整形。对于 $k \geq 2$，我们使用 $S(\phi) = \exp(\beta_2\phi^2)$，其中 $\beta_2 < 0$。对于端点消失设计，当 $k = 1$时，我们使用

$$S(\phi) = \exp(\beta_2\phi^2) - \exp(\beta_2), \qquad \beta_2 < 0, \quad (28)$$

该函数为偶函数，在 $[-1,1]$ 上非负，并满足 $S(\pm 1) = 0$。

简单有理函数（端点消失）。

$$S(\phi) = \frac{1}{1+q\phi^2} - \frac{1}{1+q}, \qquad q > 0. \quad (29)$$

Pad´e 型（端点消失）。

$$S(\phi) = \frac{1+p\,\phi^4}{1+q\,\phi^2} - \frac{1+p}{1+q}, \qquad q > 0. \quad (30)$$

表 1 汇总了调优后的参数和矩值。图3展示了映射、核函数和内层修正。

数值计算实用说明。调优所需的所有归一化因子和矩均为一维积分，并针对每个核函数计算一次。在求解器中，未成形情形采用闭式表达，而形状核则在 $[-1,1]$ 上制成表格，并在运行时进行插值（第 5节）。

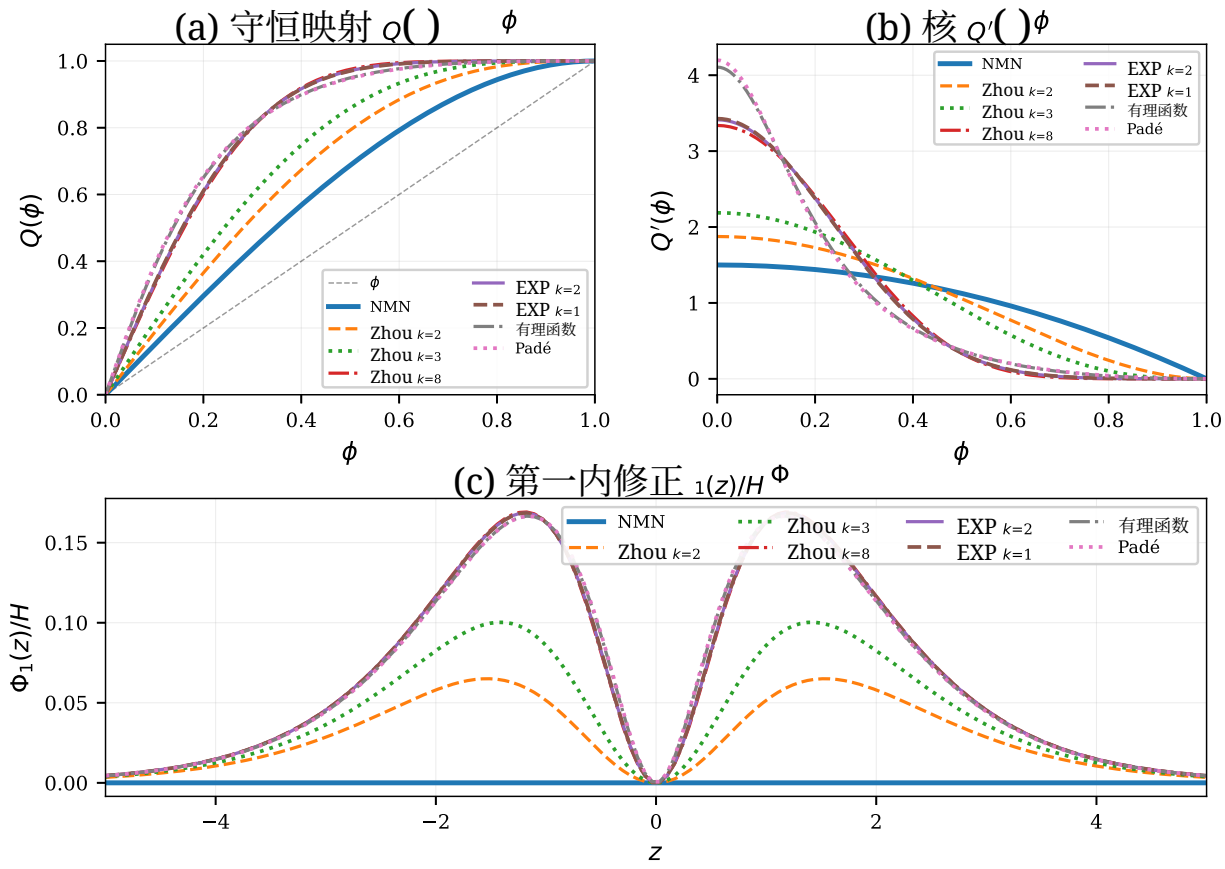


图3：核族对比。(a) 守恒映射 $Q(\phi)$。(b) 核 $Q'(\phi)$：矩平衡设计集中在 $\phi = 0$ 附近。(c) 第一内修正 $\Phi_1(z)/H$：NMN（实线）具有$\Phi_1 \equiv 0$；其他核则产生曲率诱导畸变。(d) 组合矩 $\mathcal{C}_1$：五种平衡设计达到 $\mathcal{C}_1 \approx 0$。

表1：核族概述。NMN 独有 $\Phi_1 \equiv 0$。端点消失的 k=1 核族有效简并度为 2。

	模型	k	整形 $S(\phi)$	参数	$\mathcal{M}_1$	$\mathcal{J}_1$	$\mathcal{C}_1$	$\|\Phi_1/H\|_\infty$
1	NMN	1	1	—	-0.645	0	-0.645	0
2	Zhou k=2	2	1	—	-0.395	0.090	-0.305	0.065
3	Zhou k=3	3	1	—	-0.284	0.113	-0.171	0.100
4	Zhou k=8	8	1	—	-0.118	0.118	≈ 0	0.169
5	EXP k=2	2	$e^{\beta_2\phi^2}$	β_2=-6.95	-0.121	0.121	≈ 0	0.169
6	EXP k=1	1	$e^{\beta_2\phi^2}-e^{\beta_2}$	β_2=-8.12	-0.121	0.121	≈ 0	0.169
7	有理函数	1	$\frac{1}{1+q\phi^2}-\frac{1}{1+q}$	q=20.9	-0.139	0.139	≈ 0	0.167
8	Padé	1	$\frac{1+p\phi^4}{1+q\phi^2}-\frac{1+p}{1+q}$	p=-0.30, q=23.4	-0.140	0.140	≈ 0	0.167

5 数值方法

我们采用单元中心有限体积法，在一般多面体网格上、于 foam-extend / OpenFOAM 风格的场算子框架中离散 CH–IC 系统；参见 [20]。体积分由单元平均值近似，所有扩散算子均借助高斯定理写成守恒（面通量）形式，并采用标准非正交修正。全文对所有扩散通量施加无通量边界条件，即 $\mathbf{n}\cdot\nabla\phi = 0$ 与 $\mathbf{n}\cdot\nabla\psi = 0$ 在 $\partial\Omega$ 上。

混合 CH–IC 形式与重标度化学势。 我们以混合形式求解守恒性改进的 Cahn–Hilliard 动力学

$$\partial_t Q(\phi) = \nabla\cdot\Big(M(\phi)\,\nabla\psi\Big), \tag{31a}$$

$$Q'(\phi)\,\psi = \mu = \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) \;-\; \varepsilon\,\Delta\phi \;+\; R(\phi,\nabla\phi). \tag{31b}$$

此处 Q 为所设计的单调相指示函数替代量，而 $\psi := \mu/Q'(\phi)$ 为重标度化学势。混合形式在有限体积法中具有优势：它避免在通量中反复对 Q 求导，并自然导向对 (ϕ,ψ) 的稳健块耦合求解。本文聚焦于 Q-守恒的 CH–IC 族，因此在下文中取 $R(\phi,\nabla\phi) \equiv 0$。（实现亦支持来自 [21] 的 V 模型类型附加变分项；此处予以省略。）

精确离散守恒更新。 令 $\delta t = t^{n+1} - t^n$。该格式的定义性特征是，守恒映射通过其真实离散增量进行推进

$$\frac{Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n)}{\delta t}, \tag{32}$$

而非通过替代量 $Q'(\phi)\,\partial_t\phi$ 进行推进。由于空间离散具有守恒性，全局离散不变量

$$\sum_{i=1}^{N} Q(\phi_i^{n+1})\,|\Omega_i| = \sum_{i=1}^{N} Q(\phi_i^{n})\,|\Omega_i|$$

在非线性迭代收敛后，将在求解器容差范围内保持不变，其中 $|\Omega_i|$ 表示第 i 个有限体积单元的体积。

实际计算。对于 Zhou 多项式族，Q_k $Q(\phi)$ 可表示为精确多项式形式：$Q(\phi) = Q(\phi)\,\phi$，其中 Q 是次数为 $2k$的偶多项式。例如，$Q_1(\phi) = (3-\phi^2)/2$ 适用于 NMN，而 $Q_2(\phi) = \frac{15}{8} - \frac{5}{4}\phi^2 + \frac{3}{8}\phi^4$ 适用于 Zhou $k = 2$。这些结果通过精确多项式运算求得（运行时不进行数值积分）。对于形状核，在均匀网格上预先计算 $Q(\phi)$，该网格在 $[0,1]$, 上包含 $N_{\text{tab}} = 256$ 个节点，并利用奇对称性重构 Q 在 $[-1,1]$上的值。每个条目均通过 16 点高斯–勒让德求积计算（相对精度为 $\sim 10^{-14}$）；运行时采用三次 Hermite 插值（逐点误差为 $< 10^{-10}$）。随后，我们计算 $Q(\phi) = Q(\phi)/\phi$，其中 $|\phi| > \phi_{\text{tol}}$；对于 $|\phi| \le \phi_{\text{tol}}$，则使用洛必达极限 $Q(0) = Q'(0)$（我们取 $\phi_{\text{tol}} \sim 10^{-10}$）。即使对于强退化核，这也避免了在 (31a) 中引入任何稳定化偏移量。如有需要，仅在 (31b) 中通过对纯相附近的 Q' 设置局部下限来进行正则化；详见下文。

非线性求解、Eyre 型稳定化与局部正则化。在每个时间步内，我们采用 Picard（不动点）迭代 $k = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$（此处 k 是迭代索引，不同于¯中的核索引 Q_k）。系数场，例如 $M(\phi)$、 $Q(\phi)$ 和 $Q'(\phi)$，均在当前迭代值 ϕ^k 处求值。为提高刚性界面动力学下的稳健性，我们采用 Eyre 型稳定化 [22] ，写作

$$W(\phi) = \underbrace{\Big(W(\phi) + \frac{\beta}{2}\phi^2\Big)}_{=:W_c(\phi)} \; - \; \underbrace{\Big(\frac{\beta}{2}\phi^2\Big)}_{=:W_e(\phi)},$$

使得 W_c 和 W_e 在 $\mathbb{R}$ 上均为凸函数（对于四次势， $\beta \geq 1$ 确保对所有 ϕ， $W_c''(\phi)$ $=W''(\phi)$ $+\beta \geq 0$ ）。因此，

$$W'(\phi) = W_c'(\phi) - W_e'(\phi), \qquad W_c'(\phi) = W'(\phi) + \beta\phi, \qquad W_e'(\phi) = \beta\phi.$$

为了获得稳健的 Picard 循环中的半隐式更新，我们采用稳定化线性化

$$W'(\phi^{n+1}) = \underbrace{\big(W''(\phi^k) + \beta\big)\,\phi^{n+1}}_{\text{implicit (stabilized) part}} \; - \; \underbrace{\Big(\big(W''(\phi^k) + \beta\big)\phi^k - W'(\phi^k)\Big)}_{\text{explicit remainder (previous iterate)}}, \tag{33}$$

通过加上并减去 $(W''(\phi^k) + \beta)\phi^k$得到。系数 $W''(\phi^k) + \beta$按构造为非负，从而确保隐式项具有强制性。在此报告的所有计算中，我们固定 $\beta = 1.02$。

在重标度势方程（31b）中， $Q'(\phi)$ 对于设计的核函数在 $\phi = \pm 1$ 处退化。数值上，我们通过一个局部下限来处理，该下限仅在 Q' 低于预设阈值时启用：

$$Q'(\phi) \;\mapsto\; Q'_\alpha(\phi) := \max\big(Q'(\phi), \alpha_{Q'}\big),$$

其中 $\alpha_{Q'} \ll 1$。这改善了条件数，同时使界面区域基本保持不变。（我们在结果部分测试对 $\alpha_{Q'}$ 的敏感性。）

显式算子记法下的分块耦合线性系统。 在每次 Picard 迭代 k中，我们求解关于 (ϕ^{n+1}, ψ^{n+1}) 的耦合线性系统。定义作用于 ψ 的扩散算子，

$$\mathcal{D}_k(\,\cdot\,) := -\nabla\cdot\Big(M(\phi^k)\,\nabla(\,\cdot\,)\Big),$$

以及作用于 ϕ 的线性化“Allen–Cahn”算子，

$$\mathcal{K}_k(\,\cdot\,) := -\varepsilon\,\Delta(\,\cdot\,) + \frac{1}{\varepsilon}\,\big(W''(\phi^k) + \beta\big)\,(\,\cdot\,).$$

对 精确 Q 增量采用隐式欧拉步，并在 ϕ^k处冻结非线性系数后，Picard 步可写为分块系统

$$\begin{bmatrix} \frac{\bar{Q}(\phi^k)}{\delta t}\,I & \mathcal{D}_k \\ \mathcal{K}_k & -\,Q'_\alpha(\phi^k)\,I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi^{n+1} \\ \psi^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\delta t}\,Q(\phi^n) \\ b_\psi(\phi^k) \end{bmatrix}, \tag{34}$$

¯其中 $Q(\phi) := Q(\phi)/\phi$ ， 且 $Q(0) = Q'(0)$，势方程的右端项为

$$b_\psi(\phi^k) = \frac{1}{\varepsilon}\Big(W'(\phi^k) - \big(W''(\phi^k) + \beta\big)\phi^k\Big). \tag{35}$$

备注 2 （平流与耦合输运）。 如果存在平流，则将其以标准有限体积形式纳入 （31a），表示为守恒面通量散度，并可选择拆分为隐式/显式部分。有关对流–扩散耦合及相关实现细节，请参见 *[21]* 。

算法 1 分块耦合 CH–IC 求解器（每个时间步） **1：给定：** ϕ^n, ψ^n **（或** μ^n**），** δt**，容差 tol。 2：对每个时间步** $t^n \to t^{n+1}$ **执行 3：设置** $k = 0$, $\phi^k \leftarrow \phi^n$, $\psi^k \leftarrow \psi^n$。 **4：重复 5：更新系数：** $M(\phi^k)$, $Q(\phi^k)$, $\bar{Q}(\phi^k)$, $Q'_\alpha(\phi^k)$。 **6：组装分块系统 (34)–(35)。 7：使用广义最小残量法 + ILUC0 求解分块矩阵上的** (ϕ^{n+1}, ψ^{n+1})**。 8：（可选）强制满足界限：** $\phi^{n+1} \leftarrow \mathbf{max(min(}\phi^{n+1}\mathbf{, 1)} -1\mathbf{)}$。 **9：计算残差** $r = \|\phi^{n+1} - \phi^k\|_{L^1(\Omega)}/|\Omega|$。 **10：更新** $(\phi^k, \psi^k) \leftarrow (\phi^{n+1}, \psi^{n+1})$, $k \leftarrow k + 1$。 **11：直到** $r <$**tol 12：接受** (ϕ^{n+1}, ψ^{n+1})。 **13：如果启用了自适应网格细化，则 14：对界面附近进行细化，并守恒映射** (ϕ^{n+1}, ψ^{n+1})。 **15：结束 if 16：结束 for**

线性求解器与预条件。 我们使用重启广义最小残量法求解（34） [23]，将其应用于组装后的块系统，并采用 ILUC0 预条件器 [24, 25]。在后文报告的所有实验中，块求解通常在每个 Picard 步中经过 2–3 次 GMRES 迭代后收敛，表明对于所考虑的网格和参数范围，其表现接近最优。

耦合与分离求解策略。 以完全耦合方式求解混合 CH 系统，比采用分离方式（外层 ϕ/内层 ψ）更加稳健，尤其适用于刚性的界面区域。这与能量稳定的 CH 时间步进[22] 中的观察结果，以及我们此前针对二阶 CH 公式 [21]开展的比较研究一致。对于四阶算子的部分显式处理或松散分裂处理，通常会观察到对 δt的严格稳定性限制；参见例如 [26]中的讨论。

自适应网格细化（可选）。 启用自适应网格细化后，我们会定期细化界面周围的窄带区域（例如 $|\phi| < \phi_{\mathrm{ref}}$），并在继续执行下一个时间步之前，将 ϕ 和 ψ 守恒地映射到新网格上。

6 数值实验

所有实验均采用四次双阱势 $W(\phi) = \frac{1}{4}(1-\phi^2)^2$ 和四次退化迁移率 $M(\phi) = (1-\phi^2)^2$（即 $l = 2$）。对于 ZHOU 模型（$k = 2,\ 8$），我们将迁移率的退化阶数提高至 $M(\phi) = (1-\phi^2)^3$，以更好地满足来自 [13] 的相容条件 $1 \le k < l \le 2k + 1$；请注意，对于 $k = 8$，这仍未达到严格要求 $l \ge 8$，但我们通过实验证实，$l = 3$ 已能显著改善效果。我们对 $Q'(\phi)$ 应用一个较小的正则化偏移量 $\alpha_Q \approx 10^{-6}$，以防止在 $\phi = \pm 1$ 处出现数值奇异性，同时保留守恒性质。

6.1 实验 A：多尺度液滴粗化与共存 ce

本研究考察一个多尺度种群动力学问题，其中涉及反复出现的高曲率事件、液滴间相互作用以及尺寸依赖的收缩。该设置往往会放大系统性的守恒缺陷——最明显的表现是最小液滴发生有偏（过早）消亡——因此能够敏锐地区分二阶 NMN 公式与所提出的三阶设计。

问题设置。我们考虑一个二维区域 $\Omega = [0,4]\times[0,1]$，并用均匀的笛卡尔网格划分为 400×100 个单元，得到 $\Delta x = \Delta y = 10^{-2}$。初始条件由沿中线 $y = 0.5$ 排列的四个圆形液滴组成，半径依次减小$R \in \{0.15, 0.10, 0.06, 0.03\}$（图 4）。相场由有符号距离函数初始化，并采用截断线性剖面，$\phi(\mathrm{x}, 0) = \mathrm{clip}(d(\mathrm{x})/\varepsilon, -1, 1)$，以施加厚度为 $\mathcal{O}(\varepsilon)$ 的受控弥散层。我们报告了界面厚度为 $\varepsilon \in \{2\Delta x, 4\Delta x\}$ 时的结果。时间积分采用基于非线性迭代次数的自适应时间步进，其中 $\Delta t \in [10^{-10}, 5\cdot 10^{-3}]$s，并将每步 Picard 迭代次数设为 ≈ 20。我们采用严格的非线性收敛容差 $tol = 10^{-9}$，以有效地将 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ 几何体积误差与求解器残差区分开来。

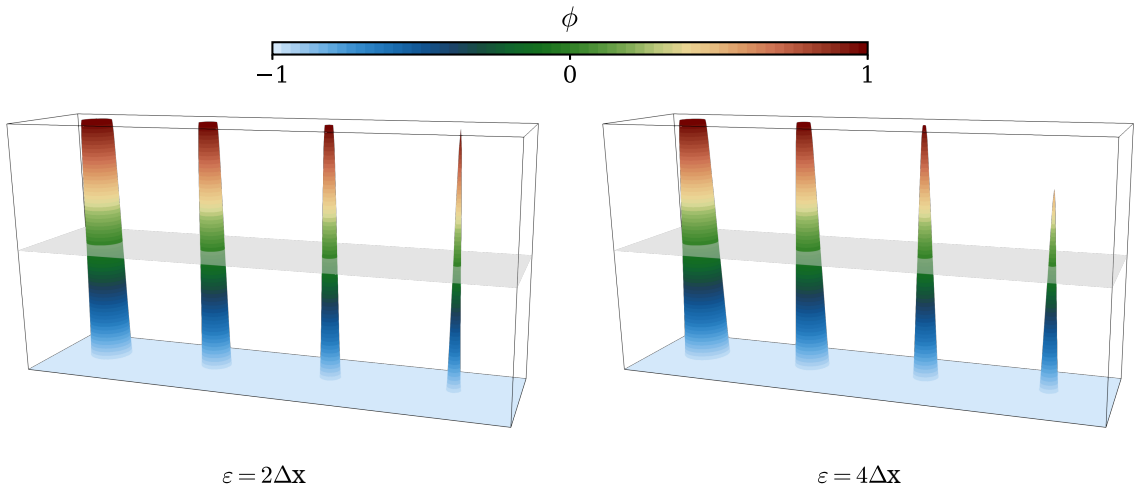


图 4：多尺度粗化研究的初始条件：在 4×1 定义域上，四个半径为 $R \in \{0.15, 0.10, 0.06, 0.03\}$ 的液滴。

结果与讨论。 系统通过奥斯特瓦尔德熟化演化，其驱动力是曲率各异的液滴之间的化学势差。尽管物理规律表明，最小的液滴（D_4）应当收缩，但数值误差往往会加速这一过程，从而区分出稳健格式与耗散格式。当液滴半径 R 接近界面厚度 ε 时，所提出的 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ 精度的重要性尤为明显。对于二维中的小液滴，总相体积按 $V \sim R^2$ 缩放。如果 $R \sim \mathcal{O}(\varepsilon)$，则物理体积为 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 量级。因此，任何 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 量级的数值体积缺陷——这是标准格式或不平衡 NMN 模型的典型特征——其大小都与液滴的全部质量相当。这种寄生损失充当人工汇，导致过早消亡。相比之下，矩平衡设计（EXP、PAD´E）将缺陷降低至 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$，相对于即使是临界液滴的物理体积而言，这一缺陷仍可忽略不计。

图5 证实了这一标度关系。基线M模型（红色）表现出由以下因素导致的急剧体积损失：

零阶体泄漏，而NMN（蓝色）虽减小了幅度，但因非零 $\mathcal{C}_1$而仍存在持续漂移。相比之下，三阶指数格式EXP和PAD´E变体（橙色/绿色）的误差分布基本平坦，在拓扑变化期间将体积跳变降至最低。能量单调衰减（图6）证实，这种精度保留了梯度流结构；“延迟”的消亡是对正确时间尺度的物理恢复，而非稳定化伪象。

扭曲可视化（图7–8）揭示了其机制：M模型会出现体相“下陷”（$\phi < 1$），而 EXP 和 PAD´E 则保持均匀饱和 $\phi \approx \pm 1$。这种高阶端点简并（$k \geq 2$）将误差限制在界面处，矩消除机制（$\mathcal{C}_1 \approx 0$）在那里消除了漂移。

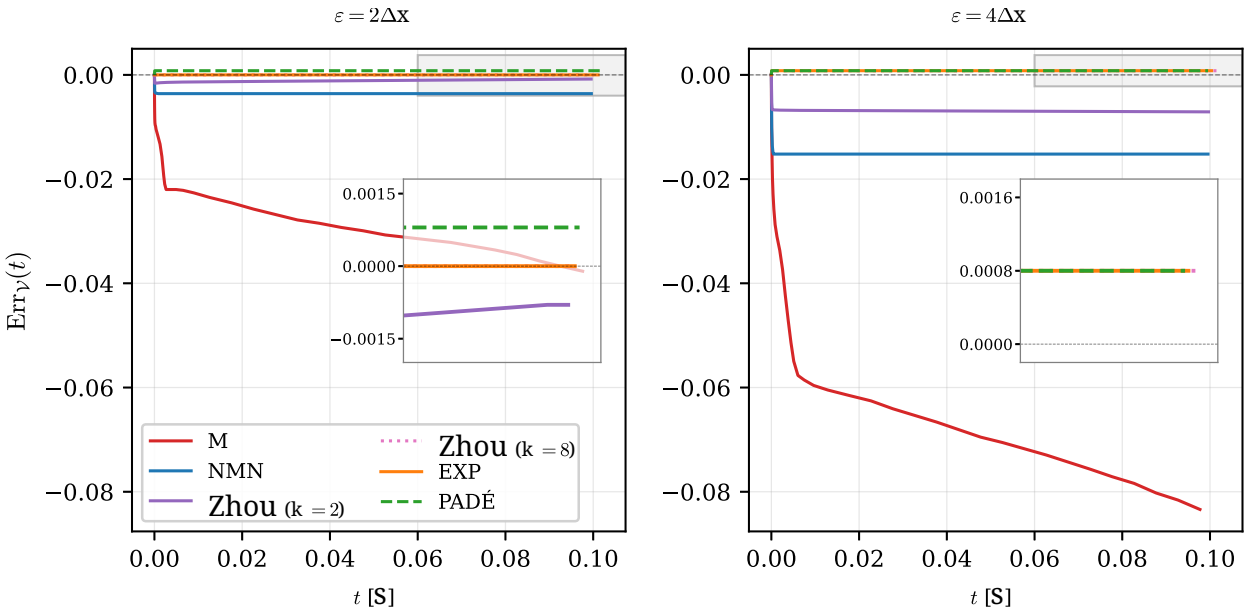


图5：粗化过程中的体积守恒误差 $\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t)$。

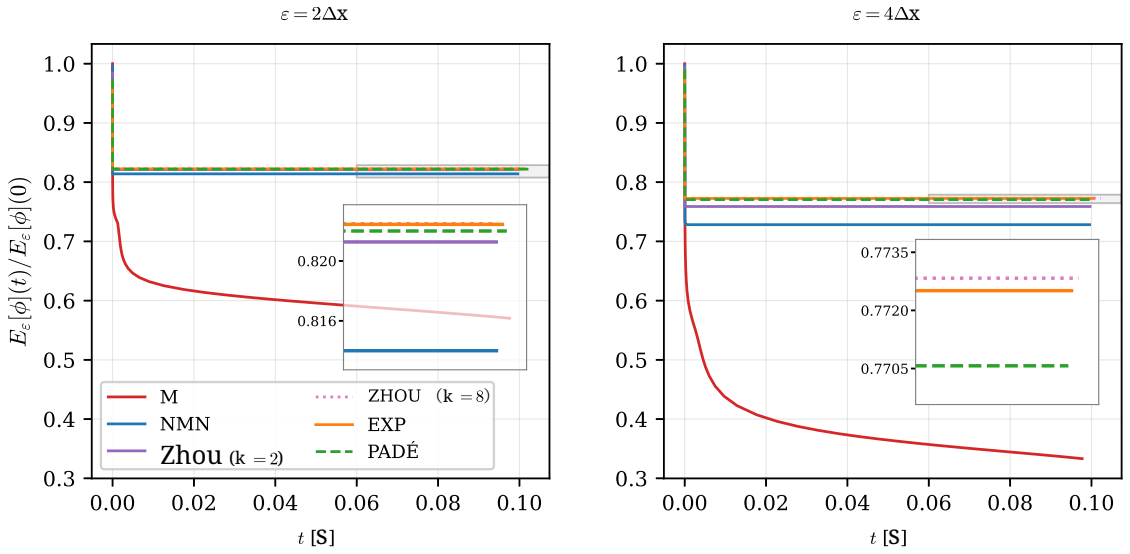


图6：不同守恒机制下的自由能衰减。

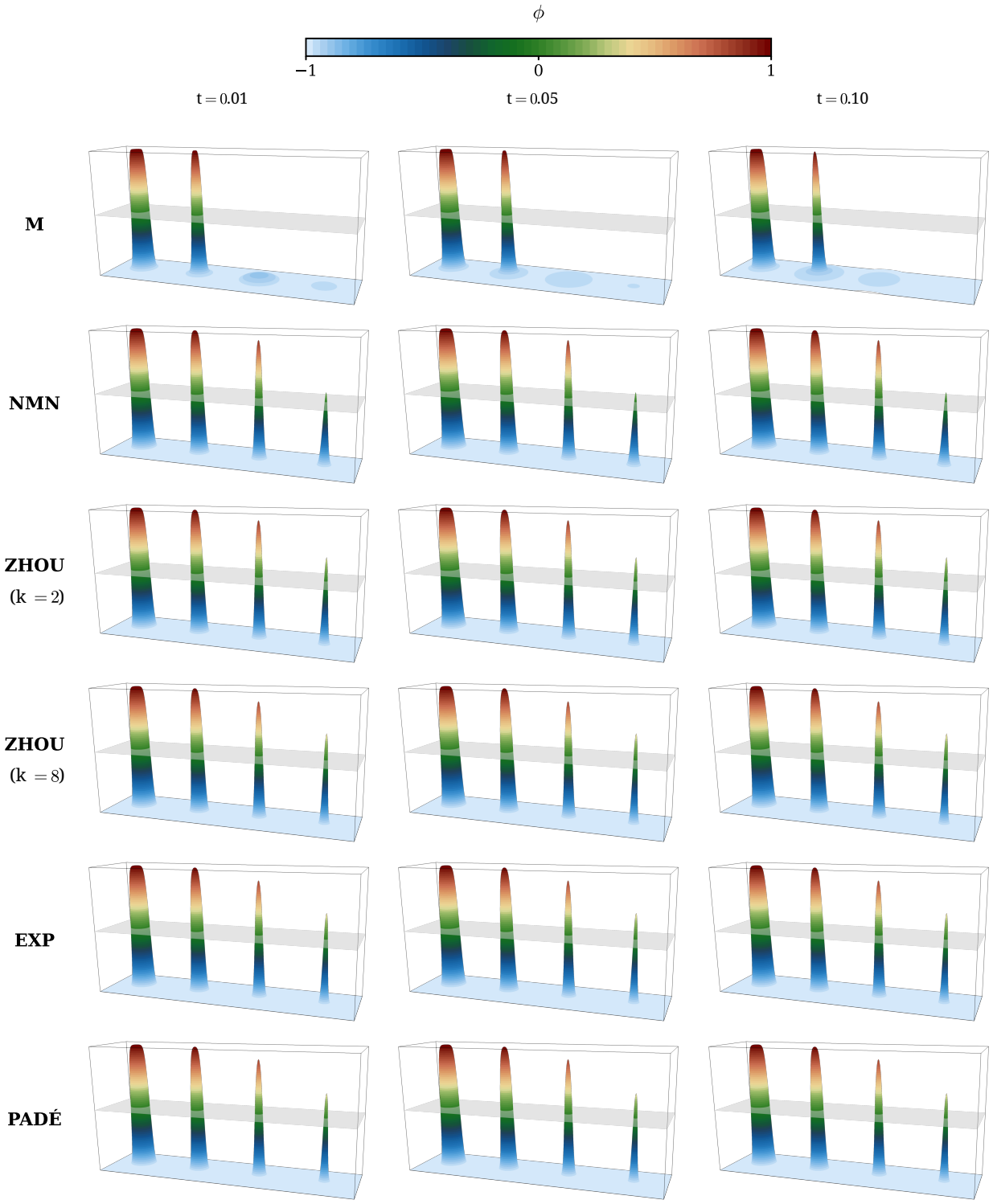


图7： $\varepsilon = 2\Delta x$下四液滴系统的演化。相场 ϕ 采用标量扭曲进行可视化， $z = 0$ 平面标示界面。M模型表现出体内下垂（圆化平台），而EXP与Pad´e变体则保持更平坦、饱和的体相（$\phi \approx \pm 1$）以及更清晰的界面过渡。

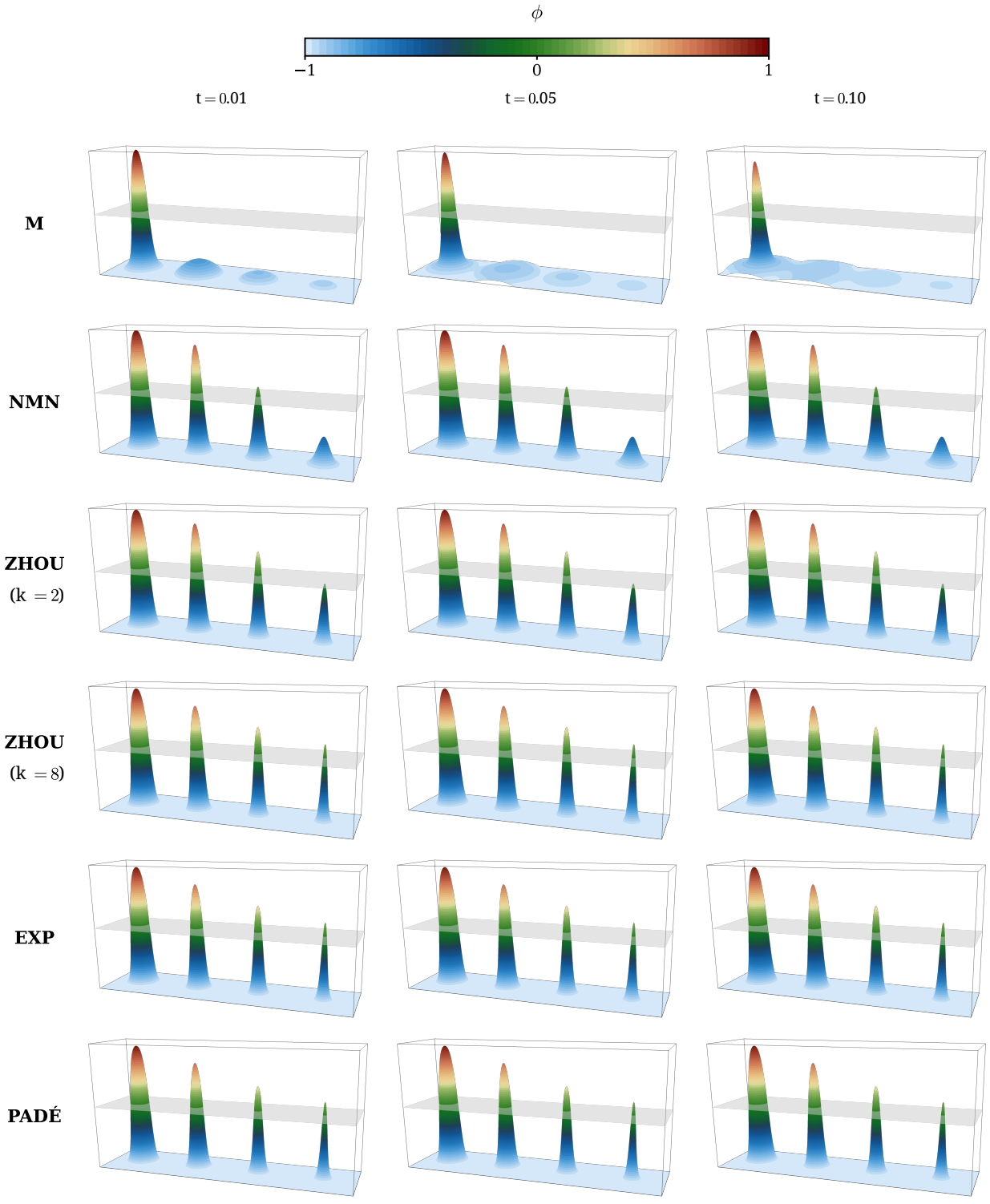


图 8：四液滴系统的演化，$\varepsilon = 4\Delta x$。可视化采用相对于零水平面的标量翘曲。即使界面较厚，三阶模型仍比基线M模型更能保持主体完整性。

6.2 实验 B：高曲率“花形”形态的弛豫 y

本实验考察非凸高曲率“花形”几何结构的弛豫过程。该形状会产生丰富的瞬态动力学：尖端处的高正曲率驱动快速回缩，而凹谷处的负曲率则减缓平滑过程。这些局部通量为体相饱和与体积精度提供了严格的检验。

问题设置。我们在单位正方形 Ω 上求解演化过程 $=[0,1]^2$，采用 200×200 网格（$\Delta x=5\cdot10^{-3}$）。初始条件为六瓣花形（图9），由截断符号距离函数初始化。我们针对不同界面宽度 $\varepsilon\in\{2,3,4\}\Delta x$进行敏感性研究。所有变体均使用相同的四次双阱势 $W(\phi)=\frac{1}{4}(\phi^2-1)^2$,、四次退化迁移率 $M(\phi)=(1-\phi^2)^2$,，并采用相同的半隐式稳定参数（与第5节相同）；唯一变化的是守恒核 $Q(\phi)$（M、NMN、EXP、PAD´）。

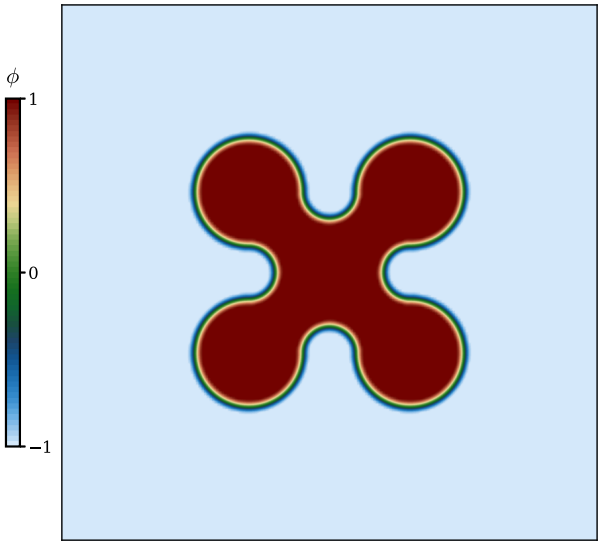


图9：Ω $=[0,1]^2$，上的初始“花”形几何，包含高正曲率与负曲率区域。

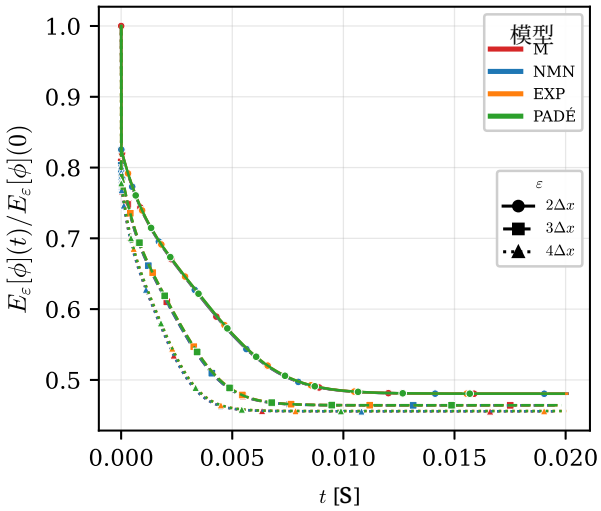


图10：弛豫过程中的能量衰减 $E(t)$。初始的快速下降对应于花瓣尖端的平滑。

结果与讨论。“花”形的弛豫将误差动力学分为两个截然不同的阶段：快速的高曲率初始瞬态（$t<0.01$）以及缓慢的准圆形漂移（$t>0.01$）。这种分离使我们能够单独考察动态矩 $\mathcal{J}_1$的影响。早期演化由较大的平均曲率 H区域主导，其中尖端回缩、凹谷隆起。根据误差展开 Err $\nu\propto\varepsilon^2\int_\Gamma H\,\mathcal{C}_1$，界面缺陷在此处达到最大。图 11 清楚地展示了矩平衡的有效性。M模型（红色）在最初几个时间步内因体泄漏驱动而出现体积的即时大幅下降。NMN模型（蓝色）修正了体泄漏，但仍表现出可见的初始“跳跃”和振荡，对应于非零界面系数 $\mathcal{C}_1\approx-0.645$。与之形成鲜明对比的是，EXP 与 PAD´E 模型（橙色/绿色）对这一高曲率瞬态几乎不敏感。即使在最剧烈的形状变化期间，误差曲线仍接近于零，证明条件 $\mathcal{M}_1+\mathcal{J}_1\approx0$ 成功抵消了主导的几何相关误差。

比较图中 $\varepsilon=2\Delta x$ 至 $\varepsilon=4\Delta x$ 的各面板11，低阶模型对分辨率表现出很强的敏感性。随着界面

变厚，M模型中的体积漂移大致增加一倍。三阶设计非常稳健：其误差曲线在所有三种分辨率下几乎完全一致。这与理论预测一致，即误差被推至$\mathcal{O}(\varepsilon^3)$；即使在粗分辨率下（$\varepsilon = 4\Delta x$），三阶项仍足够小，不会造成显著漂移。

表2：flower 松弛的计算成本和求解器统计数据（$T = 0.02$s）。与 NMN 相比，三阶模型（EXP、Pad´e）仅增加了微不足道的开销，同时具有更优的守恒性。

$\varepsilon/\Delta x$	模型	运行时间 [s]	平均值 Δt [μs]	平均 Picard 迭代次数	平均广义最小残量法迭代次数
2	M	1084.3	164.16	19.21	8.39
2	NMN ($k = 1$)	1094.0	141.20	20.14	9.44
2	EXP ($k = 1$)	1175.7	122.80	20.11	9.03
2	PADÉ ($k = 1$)	1245.9	107.14	19.59	8.18
3	M	600.2	290.31	17.41	9.91
3	NMN ($k = 1$)	885.8	132.30	19.88	9.23
3	EXP ($k = 1$)	832.6	187.91	18.85	6.34
3	PADÉ ($k = 1$)	941.0	165.25	18.58	6.96
4	M	412.2	396.54	15.08	8.95
4	NMN ($k = 1$)	970.5	100.98	19.57	8.79
4	EXP ($k = 1$)	783.8	247.44	17.84	6.82
4	PADÉ ($k = 1$)	924.1	176.42	18.53	6.09

´表3 量化了晚期误差的累积情况。与基线M模型相比，EXP核和PADE核实现了 $\sim 10\times$的误差降低，并且比NMN有 $\sim 2\times$ 的提升。至关重要的是，NMN的体积损失随时间线性累积（斜率为恒定负值），而平衡核几乎没有变化趋势。关于计算成本，表2显示，三阶核仅带来少量开销。需要指出的是，所报告的运行时间并非确定性的基准测试结果，因为它们很大程度上取决于自适应时间步进策略的具体设置（例如，此处设定的Picard迭代目标次数 ≈ 20）、非线性容差，以及用于生成初始猜测的预测器 ϕ^0。然而，在求解器配置相同的情况下，EXP´和PADE模型的表现与标准NMN模型相似，这证实了改进守恒性质并不需要从根本上增加求解过程的成本。

表3：flower 松弛的后期体积守恒误差 $|\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}|$ 。高阶模型（EXP、Pad´e）实现了几乎与 ε 无关的误差，并相对于 M 取得了 $\sim 10\times$ 的改进。

模型	$\varepsilon = 2\Delta x$	$\varepsilon = 3\Delta x$	$\varepsilon = 4\Delta x$	平均改进
M	1.92×10^{-3}	3.29×10^{-3}	5.22×10^{-3}	(基线)
NMN ($k = 1$)	5.96×10^{-4}	7.76×10^{-4}	9.89×10^{-4}	$4.3\times$
EXP ($k = 1$)	3.88×10^{-4}	3.49×10^{-4}	3.53×10^{-4}	$9.7\times$
PADÉ ($k = 1$)	3.62×10^{-4}	3.77×10^{-4}	3.82×10^{-4}	$9.2\times$

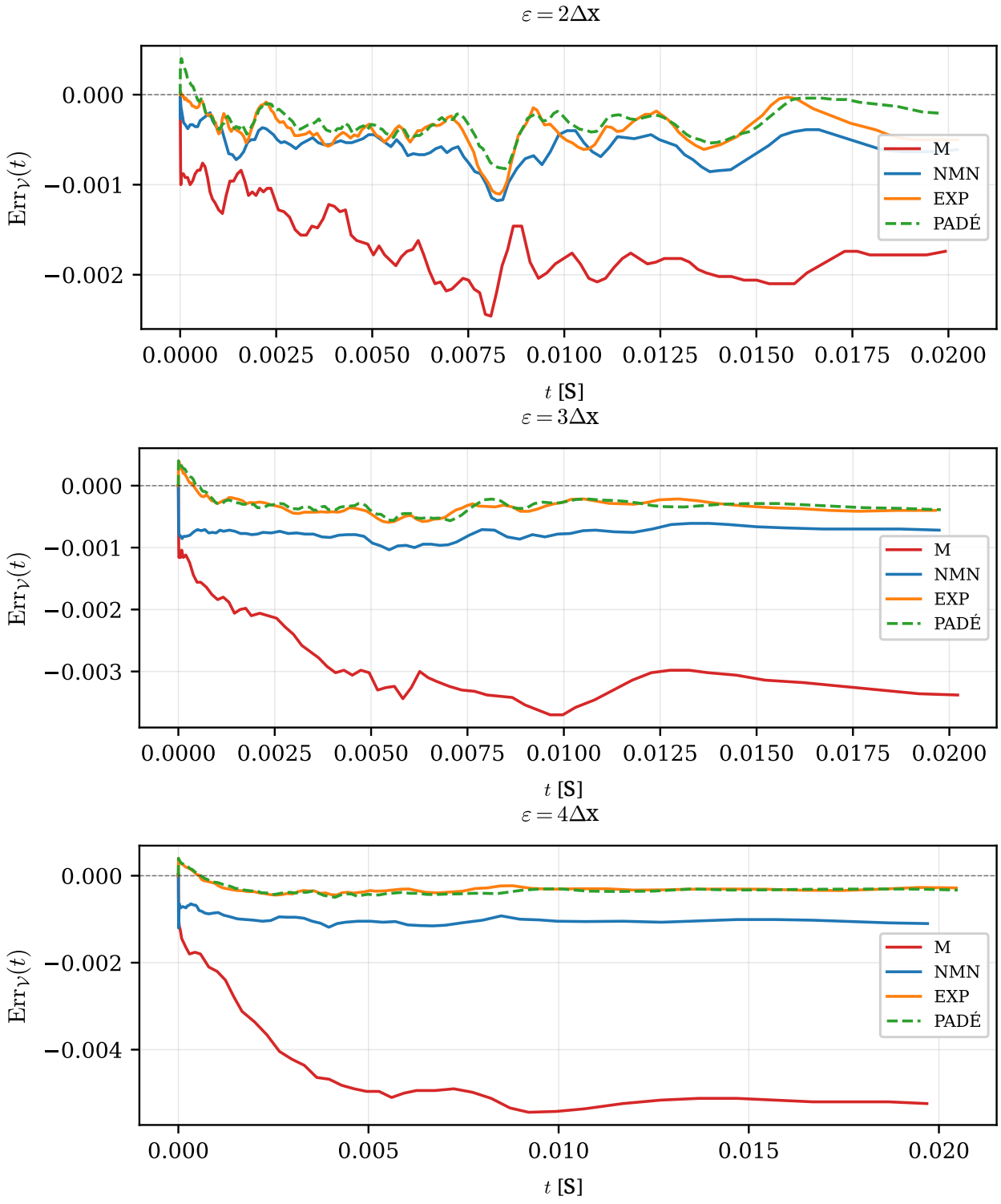


图 11：三种界面宽度（$\varepsilon/\Delta x \in \{2,3,4\}$）下，flower 松弛的体积守恒误差 $\mathrm{Err}_\nu(t)$。守恒质量呈现出明显的系统性层级：M ＜NMN ＜EXP/Pad´e。

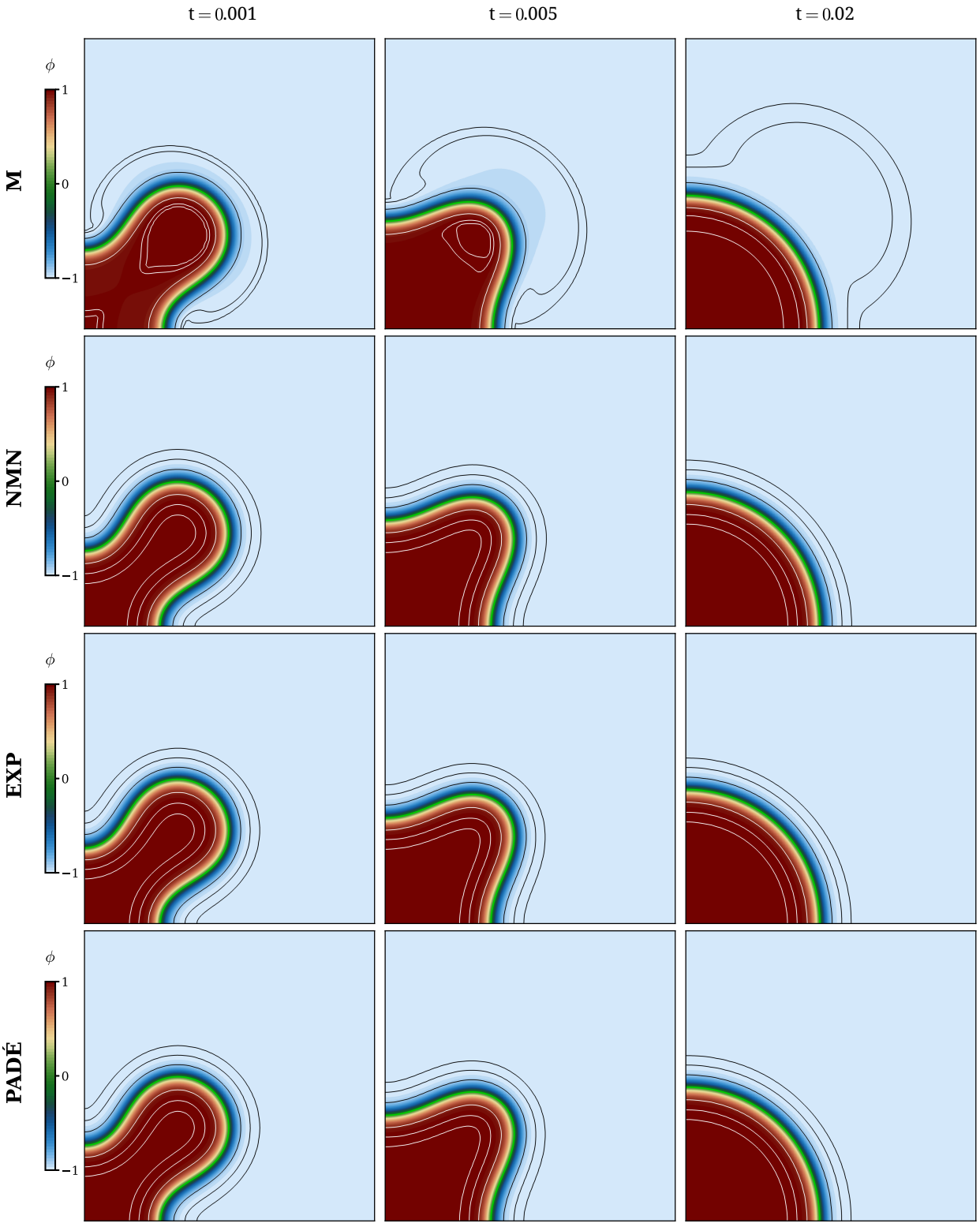


图12： $\varepsilon = 2\Delta x$ 的花形弛豫快照。**视觉叠加图：**白色等值线表示体相饱和度 $\phi \in \{0.9, 0.99, 0.999\}$；黑色等值线表示 $\phi \in \{-0.9, -0.99, -0.999\}$。与 M模型中出现的弥散泄漏相比，EXP/Pad´e 的结果中等值线紧密聚集，表明其具有更优异的体相保持能力。

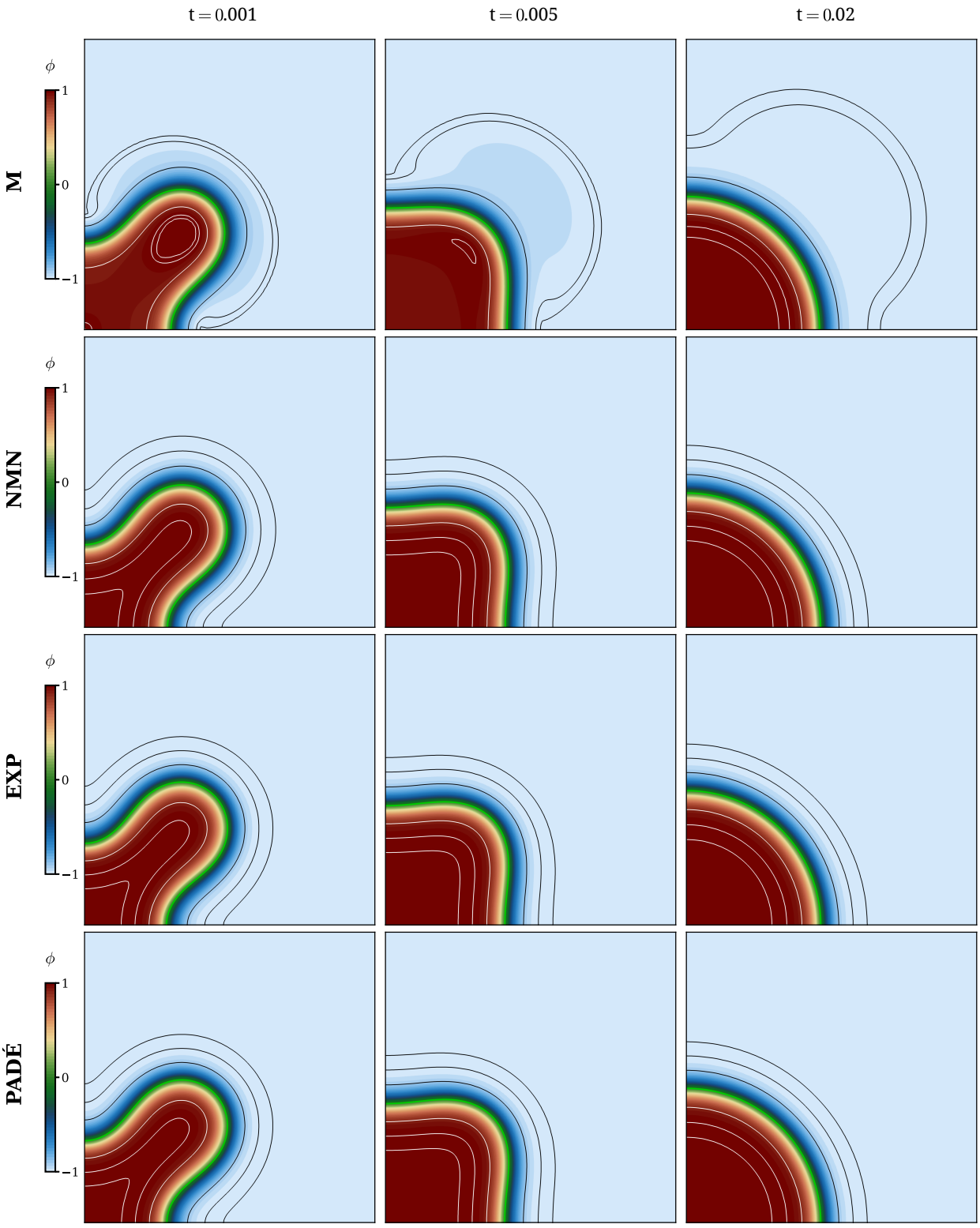


图13： $\varepsilon = 3\Delta x$的花形弛豫快照。等值线：白色=$\phi \in \{0.9, 0.99, 0.999\}$，黑色 =$\phi \in \{-0.9, -0.99, -0.999\}$。随着界面宽度增大，三阶模型保持更尖锐的饱和度剖面。

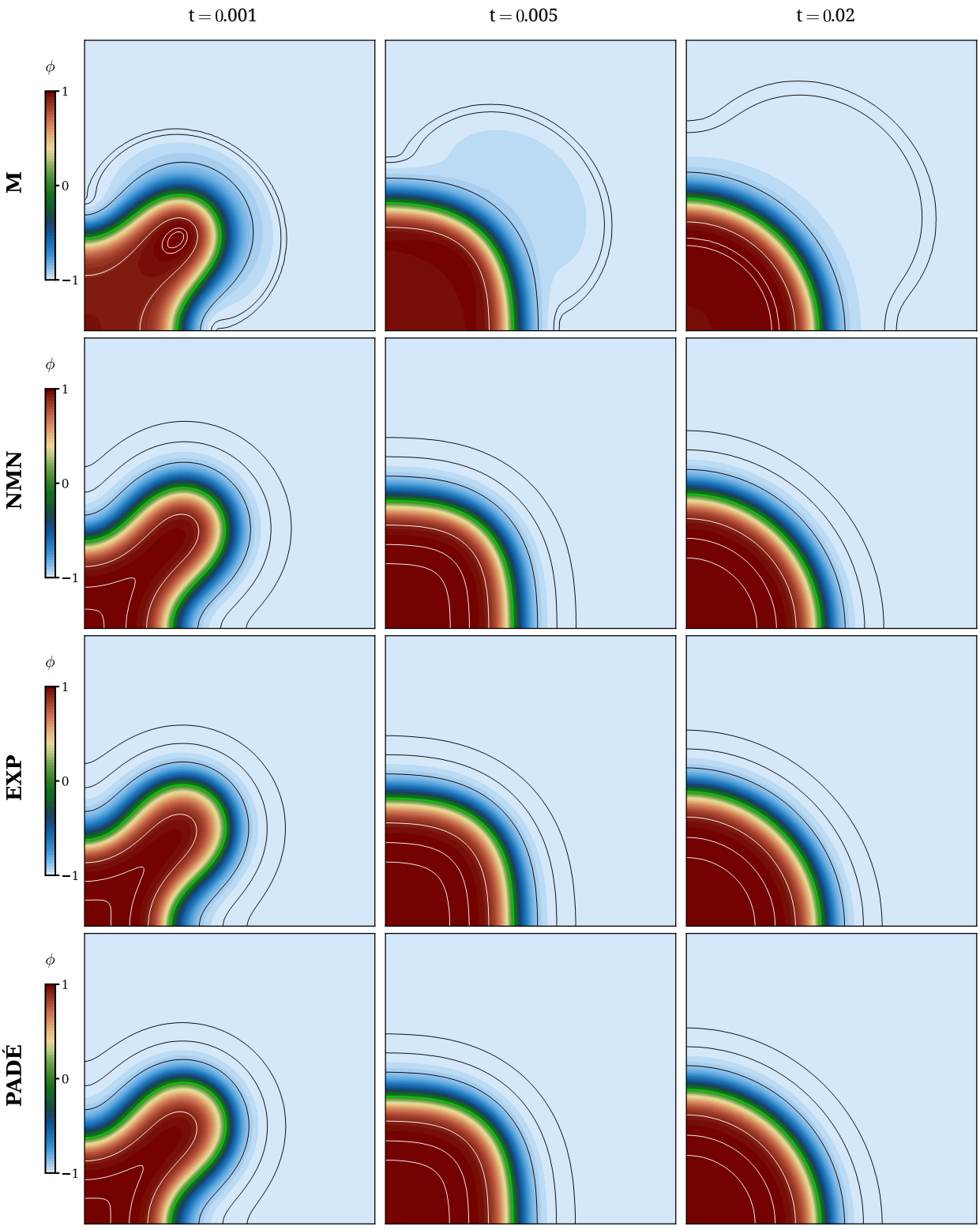


图14： $\varepsilon = 4\Delta x$的 flower 松弛快照。等值线：白色=$\phi \in \{0.9, 0.99, 0.999\}$，黑色 =$\phi \in \{-0.9, -0.99, -0.999\}$。尽管界面较粗糙，Pad´e 和 EXP 核仍避免了 M模型中观察到的伪体相梯度。

7 结论与展望

我们阐明了守恒改进的 Cahn–Hilliard（CH–IC）模型中控制几何体积漂移的机制，将两种常被混为一谈的贡献分离开来：(i) 由守恒映射 Q的端点退化所控制的体相通道，以及 (ii) 由雅可比行列式修正与曲率诱导的剖面畸变 Φ_1所产生的显式组合矩 $\mathcal{C}_1[Q] = \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q]$ 所控制的界面通道。对于奇数 Q， $\mathcal{O}(\varepsilon)$界面贡献因对称性而抵消，因此主导界面缺陷为 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$，并对 $\mathcal{M}_1$ 和 $\mathcal{J}_1$给出封闭的一维求积公式，从而实现实用的逆向设计流程。

由此得到的设计逻辑十分清晰：(a) 对 Q' 施加足够的端点退化，使体相贡献至多为 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$；(b) 调节核函数形状，使界面系数 $\mathcal{C}_1[Q]$ 消失，从而在模型层面将几何体积精度提升至 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$。在数值基准测试中，矩平衡整形核（EXP 与 PAD´E）给出几乎与ε无关的晚期几何体积误差，并相对于基准质量守恒模型实现了一个数量级的改进，同时保持稳健的能量耗散，且额外计算开销可忽略不计。

展望。 以下几个方向尤其值得探索：

- **改进基线 Picard 之外的非线性求解器**。 尽管当前的分块耦合 Picard 迭代具有稳健性，但更严重的核函数退化以及刚性的高曲率瞬态，促使我们探索更优的不动点策略（例如 Anderson 加速 Picard、拟牛顿更新或物理信息分块预条件器），同时保留离散的 $Q^{n+1} - Q^n$守恒更新和具有强制性的 Eyre 型稳定化。

- **在同一矩框架内采用受限能量（V 模型）**。 Salvalaglio 的双重退化受限能量表述等 [7] 自然适用于当前的体相/界面分解。使用

$$E_\varepsilon^V[\phi] \;=\; \int_\Omega g_0(\phi)\left(\frac{1}{\varepsilon}F(\phi) + \frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2\right)\,dx, \qquad g_0(\phi) = \frac{1}{\gamma(1-\phi^2)^p},$$

  可以发现，主导内层剖面仍是标准的双曲正切异宿轨道，而曲率修正 Φ_1 则通过加权 Sturm–Liouville 算子发生变化。对于质量代理量 $Q(\phi) = \phi$，我们的分析得到了一个唯一的“最佳点” $p^\star \approx 1.5$ ，在此处主导的界面 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 缺陷恰好抵消。接下来的一项关键工作是将受限能量思想与 Q约束（Onsager 形式）相结合，例如采用 $Q'(\phi) \propto (1-\phi^2)^k$ （包括采用端点消失整形的 $k = 1$ ），从而通过联合调优 $(p,\ Q)$，同时抑制体相和界面误差通道。

- **Onsager CH–IC 动力学的斜对称（交换子）通量形式**。 一个有前景的方向是将 Onsager CH–IC 动力学重新表述为斜对称/交换子 通量形式，从而避免将缩放化学势 $\mu/Q'(\phi)$ 放入梯度中。在变分表述中，有守恒律 $\partial_t Q(\phi) + \nabla\cdot J = 0$ ，其中 $J = -M(\phi)\nabla(\mu/Q'(\phi))$。若迁移率选择为相容形式 $M(\phi) = (Q'(\phi))^2\widetilde{M}(\phi)$，则通量满足精确恒等式

$$J = -\widetilde{M}(\phi)\Big(Q'(\phi)\nabla\mu - \mu\nabla Q'(\phi)\Big),$$

  从而空间导数内部不会出现除以 Q' 的情况。这种纯代数改写可能有利于守恒型 CH–NS 耦合和全隐式离散，

并促使我们研究在同一矩框架下，哪些迁移率–核函数对能够保持所需的耗散和高阶几何体积性质。

致谢

作者衷心感谢捷克科学院热力学研究所的支持（RVO:61388998）。他还感谢布拉格捷克理工大学提供的机构支持（SGS25/123/OHK2/3T/12）。

匹配渐近分析

本附录对未缩放的 CH–IC 模型的 $\varepsilon \to 0$ 极限给出详细的匹配渐近推导，从而得到相应的尖锐界面演化定律。该分析遵循 Cahn 等人 [5], Pego [27], 以及 Bretin 等人 [8], 的框架，但保留物理时间变量，而不进行慢时间重标度。因此，内层展开给出主导的准稳态约束 $V_0 = 0$，故界面运动在 $V = \mathcal{O}(\varepsilon)$ 阶进入；第一个可解性条件随后导出表面扩散定律。这种“物理时间”选择对于完整的流体动力学 NSCH 系统是自然的，其中 Navier–Stokes 对流与惯性在有限 ε下置于同一时间变量中。此外，正如正文中关于迁移率前因子缩放的评注所指出的，选取前因子 $M_* \sim \varepsilon^a$ 会有效地重标度 CH 弛豫的时间尺度，并可能改变表观速度层级（例如，在耦合情形中恢复 $\mathcal{O}(1)$ 阶界面速度，而不改变匹配渐近结构）。

A.1 控制方程

我们考虑 有界区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2,3\}$ 上的广义 Cahn–Hilliard 动力学 ：

$$\partial_t \phi = N(\phi)\, \nabla \cdot \Big(M(\phi)\, \nabla \big(N(\phi)\, \mu \big) \Big), \tag{36}$$

$$\mu = \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) - \varepsilon\, \Delta \phi, \tag{37}$$

其中， $\varepsilon \ll 1$ 为界面厚度。我们采用标准的双阱 $W(\phi) = \frac{1}{4}(1-\phi^2)^2$, 退化迁移率 $M(\phi) = (1-\phi^2)^2$（因此 $M(\pm 1) = 0$），以及度量因子 $N(\phi) = 1/Q'(\phi)$，其中 Q 为奇函数、严格递增，并满足 $Q(\pm 1) = \pm 1$。

A.2 几何、内变量与算子恒等式

设 $\Gamma(t)$ 为分隔 $\Omega^+(t)$ 与 $\Omega^-(t)$ 的界面，其中 $\Omega = \Omega^+(t) \cup \Omega^-(t)$, 且 $\Gamma(t) = \overline{\Omega}^+(t) \cap \overline{\Omega}^-(t)$。假设 $\Gamma(t)$ 是一个光滑闭合的（$d-1$）维超曲面，且随时间平滑演化。令 $d(x,t)$ 表示到 $\Gamma(t)$ 的有符号距离（在 $\Omega^+(t)$ 内为正），并定义指向 $\Omega^+(t)$ 的单位法向量$\nu = \nabla d$。存在 $\delta_0 > 0$ 使得 d 在管状邻域$\mathcal{T}_{\delta_0}(t) = \{x$ 内光滑： $|d(x,t)| < \delta_0\}$，并且每个 $x \in \mathcal{T}_{\delta_0}(t)$ 都有唯一投影 $\pi(x,t) \in \Gamma(t)$，满足

$$x = \pi(x,t) + d(x,t)\, \nu(\pi(x,t), t).$$

我们定义拉伸法向坐标 $z = d(x,\ t)/\varepsilon$，并在 $\Gamma(t)$ 上使用局部表面坐标 s。在内区，各场表示为

$$\Phi(z,s,t) := \phi(x,t), \qquad \Upsilon(z,s,t) := \mu(x,t).$$

符号约定。 在 Onsager 形式中，物理通量可定义为 $J_{\mathrm{Ons}} = -M(\phi)\nabla\big(N(\phi)\mu\big)$。下文使用不带符号的量 $J := M(\phi)\nabla\big(N(\phi)\mu\big)$，因为只有 $\nabla\cdot J$ 会出现在（36）中，而且所有匹配关系都是在相同约定下比较内区和外区的表达式。

有符号距离恒等式。 我们按照 [8, 28] 汇总推导中使用的有符号距离函数的微分几何恒等式；为便于阅读，我们在 $d=2$ 中写出显式公式，而将其推广至 $d=3$ 时，只需将 $(\partial_s, \partial_{ss})$ 替换为曲面导数。程函关系 $|\nabla d| = 1$ 意味着 $\nabla d = \nu$。此外，

$$\Delta d(x,t) = \sum_{k=1}^{d-1} \frac{\kappa_k(\pi(x,t),t)}{1 + d(x,t)\,\kappa_k(\pi(x,t),t)}, \tag{38}$$

其中，κ_k 是主曲率，$H = \sum_{k=1}^{d-1}\kappa_k$ 是 $\Gamma(t)$ 上的平均曲率。在 $d=2$ 中，以 $\Gamma(t)$ 上的弧长参数 s 表示，

$$\Delta d = \frac{H}{1+\varepsilon z H}, \qquad \nabla S = \frac{\tau}{1+\varepsilon z H}, \qquad \Delta S = -\frac{\varepsilon z\,\partial_s H}{(1+\varepsilon z H)^3}, \tag{39}$$

其中，τ 是单位切向量，$S(x,t)$ 是提升弧长坐标。

算子变换（在 $d=2$ 中）。 利用 $\Phi(z,s,t) = \phi(x,t)$，其中 $z = d/\varepsilon$ 且 $s = S(x,t)$，可得

$$\nabla\phi = \frac{1}{\varepsilon}\,\nu\,\partial_z\Phi + \frac{\tau}{1+\varepsilon z H}\,\partial_s\Phi, \tag{40}$$

$$\Delta\phi = \frac{1}{\varepsilon^2}\partial_{zz}\Phi + \frac{H}{\varepsilon(1+\varepsilon z H)}\,\partial_z\Phi + \frac{1}{(1+\varepsilon z H)^2}\partial_{ss}\Phi - \frac{\varepsilon z\,\partial_s H}{(1+\varepsilon z H)^3}\,\partial_s\Phi, \tag{41}$$

对于法向速度 $V(s,t) = \partial_t X_0(s,t)\cdot\nu(s,t)$，则有

$$\partial_t\phi = -\frac{V}{\varepsilon}\,\partial_z\Phi + \partial_t^{\Gamma}\Phi + (\partial_t S)\,\partial_s\Phi, \tag{42}$$

其中 ∂_t^{Γ} 表示在固定 (z,s) 处的时间导数。对于上文引入的无符号量 $J = M(\phi)\nabla(N(\phi)\mu)$，其散度写为

$$\nabla\cdot J = \frac{1}{\varepsilon^2}\partial_z\Big(M(\Phi)\,\partial_z\big(N(\Phi)\Upsilon\big)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}\frac{H}{1+\varepsilon z H}\,M(\Phi)\,\partial_z\big(N(\Phi)\Upsilon\big) + \mathcal{T}_1, \tag{43}$$

以及切向余项

$$\mathcal{T}_1 = \frac{1}{(1+\varepsilon z H)^2}\partial_s\Big(M(\Phi)\,\partial_s\big(N(\Phi)\Upsilon\big)\Big) - \frac{\varepsilon z\,\partial_s H}{(1+\varepsilon z H)^3}\,M(\Phi)\,\partial_s\big(N(\Phi)\Upsilon\big). \tag{44}$$

渐近展开与匹配。我们假定外层展开

$$\phi(x,t) = \phi_0(x,t) + \varepsilon\phi_1(x,t) + \varepsilon^2\phi_2(x,t) + \cdots, \tag{45}$$

$$\mu(x,t) = \varepsilon^{-1}\mu_{-1}(x,t) + \mu_0(x,t) + \varepsilon\mu_1(x,t) + \cdots, \tag{46}$$

以及内层展开

$$\Phi(z,s,t) = \Phi_0(z) + \varepsilon\Phi_1(z,s,t) + \varepsilon^2\Phi_2(z,s,t) + \cdots, \tag{47}$$

$$\Upsilon(z,s,t) = \varepsilon^{-1}\Upsilon_{-1}(z,s,t) + \Upsilon_0(z,s,t) + \varepsilon\Upsilon_1(z,s,t) + \cdots, \tag{48}$$

连同 $V = V_0 + \varepsilon V_1 + \varepsilon^2 V_2 + \cdots$。通过 Van Dyke 原理在重叠区域施加匹配：

$$\lim_{z\to\pm\infty} \Phi(z,s,t) = \lim_{d\to 0^{\pm}} \phi(x,t), \qquad \lim_{z\to\pm\infty} \Upsilon(z,s,t) = \lim_{d\to 0^{\pm}} \mu(x,t), \tag{49}$$

通量分量也同理。

A.3 完整内层系统（精确曲率因子）

将 (42)–(43) 代入 (36)–(37) 得到完整的内层问题：

$$\Big(-\frac{V}{\varepsilon}\partial_z + \partial_t^{\Gamma} + (\partial_t S)\partial_s\Big)\Phi = N(\Phi)\Big[\frac{1}{\varepsilon^2}\partial_z\Big(M(\Phi)\,\partial_z\big(N(\Phi)\Upsilon\big)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}\frac{H}{1+\varepsilon z H}\,M(\Phi)\,\partial_z\big(N(\Phi)\Upsilon\big) + \mathcal{T}_1\Big], \tag{50}$$

$$\Upsilon = \frac{1}{\varepsilon}W'(\Phi) - \frac{1}{\varepsilon}\partial_{zz}\Phi - \frac{H}{1+\varepsilon z H}\partial_z\Phi - \varepsilon\,\mathcal{T}_2, \tag{51}$$

其中 $\mathcal{T}_1$ 由 (44) 给出，且

$$\mathcal{T}_2 = \frac{1}{(1+\varepsilon z H)^2}\partial_{ss}\Phi - \frac{\varepsilon z\,\partial_s H}{(1+\varepsilon z H)^3}\partial_s\Phi. \tag{52}$$

对 (50)–(51) 进行后续逐阶展开，可得到决定界面动力学的可解性条件。

A.4 逐阶推导

现在，我们将完整内层系统（50）–（51）按 ε 的幂展开，并逐阶收集各项。下文始终使用内层展开

$$\Phi(z,s,t) = \Phi_0(z) + \varepsilon\Phi_1(z,s,t) + \varepsilon^2\Phi_2(z,s,t) + \cdots, \tag{53}$$

$$\Upsilon(z,s,t) = \varepsilon^{-1}\Upsilon_{-1}(z,s,t) + \Upsilon_0(z,s,t) + \varepsilon\Upsilon_1(z,s,t) + \cdots, \tag{54}$$

和 $V = V_0 + \varepsilon V_1 + \varepsilon^2 V_2 + \cdots$。

非线性复　　合。对于任意光滑函数，在 处进行泰勒展开可得

$$F(\Phi) = F(\Phi_0) + \varepsilon\,F'(\Phi_0)\,\Phi_1 + \varepsilon^2\left(F'(\Phi_0)\,\Phi_2 + \frac{1}{2}F''(\Phi_0)\,\Phi_1^2\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \tag{55}$$

特别地，我们记为

$$M(\Phi) = M_0 + \varepsilon M_1 + \varepsilon^2 M_2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \tag{56}$$

$$N(\Phi) = N_0 + \varepsilon N_1 + \varepsilon^2 N_2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \tag{57}$$

带有系数

$$M_0 = M(\Phi_0), \qquad M_1 = M'(\Phi_0)\ \Phi_1, \qquad M_2 = M'(\Phi_0)\ \Phi_2 + \frac{1}{2}M''(\Phi_0)\ \Phi_1^2, \tag{58}$$

$$N_0 = N(\Phi_0), \qquad N_1 = N'(\Phi_0)\ \Phi_1, \qquad N_2 = N'(\Phi_0)\ \Phi_2 + \frac{1}{2}N''(\Phi_0)\ \Phi_1^2. \tag{59}$$

对于势能项，我们采用

$$W'(\Phi) = W'(\Phi_0) + \varepsilon\, W''(\Phi_0)\,\Phi_1 + \varepsilon^2\Big(W''(\Phi_0)\,\Phi_2 + \frac{1}{2}W^{(3)}(\Phi_0)\,\Phi_1^2\Big) + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \tag{60}$$

最后，几何因子展开为

$$(1+\varepsilon z H)^{-1} = 1 - \varepsilon z H + \varepsilon^2 z^2 H^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \tag{61}$$

$$(1+\varepsilon z H)^{-2} = 1 - 2\varepsilon z H + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \qquad (1+\varepsilon z H)^{-3} = 1 - 3\varepsilon z H + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{62}$$

A.4.1 领先内层剖面与消失的 Υ_{-1}

在 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-3})$ 处的演化方程。 由 (50) 可知，最高阶贡献来自 $\partial_z\big(M(\Phi)\partial_z(N(\Phi)\Upsilon)\big)$ 的法向部分，得到

$$0 = N_0\,\partial_z\Big(M_0\,\partial_z\big(N_0\,\Upsilon_{-1}\big)\Big). \tag{63}$$

对 z 积分一次后，量 $M_0\,\partial_z(N_0\Upsilon_{-1})$ 在整个界面层中为常数。将法向通量与外部区域匹配，并利用 $M(\pm1) = 0$，可知该常数为零，因此 $\partial_z(N_0\Upsilon_{-1}) = 0$。与外部展开匹配（其中 $\mu_{-1} = 0$）可得

$$\Upsilon_{-1} \equiv 0. \tag{64}$$

在 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$ 处的化学势方程。 利用 (51)， $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$ 平衡式为

$$0 = W'(\Phi_0) - \partial_{zz}\Phi_0. \tag{65}$$

结合匹配条件 $\Phi_0(\pm\infty) = \pm1$ 和规范条件 $\Phi_0(0) = 0$，得到经典异宿剖面

$$\Phi_0(z) = \sigma(z) := \tanh\Big(\frac{z}{\sqrt{2}}\Big), \qquad \sigma' = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1-\sigma^2). \tag{66}$$

记录这些常数（将在下文使用）

$$c_W := \int_{-\infty}^{\infty}(\sigma')^2\,dz = \frac{2\sqrt{2}}{3}, \qquad c_M := \int_{-\infty}^{\infty} M(\sigma)\,dz = \int_{-\infty}^{\infty}(1-\sigma^2)^2\,dz = \frac{4\sqrt{2}}{3}. \tag{67}$$

A.4.2 第一修正及加权化学势

在 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$ 处的演化方程。 下一阶给出

$$0 = N_0\,\partial_z\Big(M_0\,\partial_z\big(N_0\,\Upsilon_0\big)\Big), \tag{68}$$

因此，由同样的通量匹配论证可得，

$$N(\sigma)\,\Upsilon_0 =: B_1(s,t), \tag{69}$$

即在此阶下，加权化学势在整个界面层中为常数。

化学势方程在 $\mathcal{O}(1)$。将（51）展开至 $\mathcal{O}(1)$ 并利用 $\Phi_0 = \sigma$ 可得

$$\Upsilon_0 = W''(\sigma)\,\Phi_1 - \partial_{zz}\Phi_1 - H\,\sigma'. \tag{70}$$

由（69），可写成 $\Upsilon_0 = B_1/N(\sigma) = B_1\,Q'(\sigma)$，因此

$$\mathcal{L}\Phi_1 := \big(\partial_{zz} - W''(\sigma)\big)\Phi_1 = -\frac{B_1}{N(\sigma)} - H\,\sigma'. \tag{71}$$

求导（65）得 $\mathcal{L}\sigma' = 0$，因此 $\ker(\mathcal{L}) =$ 张成$\{\sigma'\}$，且 $\mathcal{L}$ 在 $L^2(\mathbb{R})$ 上自伴).

可解性条件与 B_1 **的确定（弗雷德霍姆择一定理）**。定义内线性化算子

$$\mathcal{L} := \partial_{zz} - W''(\sigma), \tag{72}$$

使得（71）变为

$$\mathcal{L}\Phi_1 = -\frac{B_1}{N(\sigma)} - H\sigma'. \tag{73}$$

算子 $\mathcal{L}$ 在 $L^2(\mathbb{R})$ 上自伴，其定义域为 $H^2(\mathbb{R})$。对（65）求导，得到 $\mathcal{L}\sigma' = 0$，因此 $\ker(\mathcal{L}) =$ 张成$\{\sigma'\}$。根据弗雷德霍姆择一定理，有界解 $\Phi_1 \in L^\infty(\mathbb{R})$ 存在当且仅当（73）的右端项与 L^2正交 σ'：

$$\left\langle -\frac{B_1}{N(\sigma)} - H\sigma',\, \sigma' \right\rangle_{L^2(\mathbb{R})} = 0, \tag{74}$$

等价地，

$$-B_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma'}{N(\sigma)}\,dz \;-\; H\int_{-\infty}^{\infty} (\sigma')^2\,dz = 0. \tag{75}$$

第二个积分为 $c_W = \int_{-\infty}^{\infty}(\sigma')^2\,dz$。对于第一个积分，我们使用 $N(\phi) = 1/Q'(\phi)$ 以及代换 $\xi = \sigma(z)$（从而 $d\xi = \sigma'(z)\,dz$）：

$$c_N := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma'}{N(\sigma)}\,dz = \int_{-\infty}^{\infty} Q'(\sigma)\sigma'\,dz = \int_{-1}^{1} Q'(\xi)\,d\xi = Q(1) - Q(-1) = 2. \tag{76}$$

因此（75）给出

$$B_1(s,t) = -\frac{c_W}{c_N}\,H(s,t) = -\frac{\sqrt{2}}{3}\,H(s,t). \tag{77}$$

关于 Φ_1 **的结构**。结合（77）以及 $N(\sigma) = 1/Q'(\sigma)$，（73）中的强迫项分解为关于 z 的函数乘以曲率 $H(s,\ t)$。因此，

$$\Phi_1(z,s,t) = H(s,t)\,\Phi_1(z), \tag{78}$$

其中约 化剖面 $\Phi_1(z)$ 是唯一的有界解（规范条件为 $\Phi_1(0) = 0$） of

$$\mathcal{L}\Phi_1 = \frac{\sqrt{2}}{3}\,Q'(\sigma(z)) - \sigma'(z), \qquad \Phi_1(0) = 0, \qquad \Phi_1 \text{ bounded}. \tag{79}$$

对于 NMN 核 $Q'(\phi) = \frac{3}{2}(1-\phi^2)$，有 $Q'(\sigma) = \frac{3\sqrt{2}}{2}\sigma'$，因此 (79) 的右端项消失；于是 $\Phi_1 \equiv 0$。(79) 有界解的一种方便的积分表示（降阶法／常数变易法）可追溯至 Bretin 对内层剖面的分析等人 [8]（参见其引理 4.1 和公式 (4.14)），之后 Zhou 在 ACH–IC 框架中对其进行了简化并加以复用等人 [13]。的显式积分表示及化简公式Φ_1 （以及相应的矩 $\mathcal{J}_1[Q]$）见附录B，第 B.5节。

A.4.3 界面速度： $V_0 = 0$ **和** $V_1 = \frac{4}{9}\Delta_\Gamma H$ –

主导速度消失。 在 $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$ 中的 (50)，时间导数首次通过$-(V_0/\varepsilon)\partial_z\Phi_0$产生贡献。这一阶的其余项涉及 $\partial_z(N_0\Upsilon_0)$ 和 Υ_{-1}；根据 (64) 和 (69)，它们恒等于零。因此 $-V_0\,\sigma' = 0$ ，从而

$$V_0 = 0. \tag{80}$$

在 $\mathcal{O}(1)$ 处的可解性。 在 $\mathcal{O}(1)$ 处，取 $V_0 = 0$ 和 $\Phi_0 = \sigma(z)$，演化方程可化为

$$-V_1\,\sigma' = N_0\,\partial_z\Big(M_0\,\partial_z(\cdots)\Big) \;+\; N_0\,\nabla_\Gamma\cdot\Big(M_0\,\nabla_\Gamma\big(N_0\Upsilon_0\big)\Big), \tag{81}$$

其中（$\cdots$）汇集了 $\mathcal{O}(1)$ 阶法向通量修正（其具体形式在对 z 积分后无关紧要）。我们将（81）乘以 $1/N_0 = Q'(\sigma)$，并在 $z \in \mathbb{R}$ 上积分。右侧第一项变为边界项，并因 $M(\pm 1) = 0$ 而消失。利用 $N_0\Upsilon_0 = B_1(s,t)$，切向部分给出

$$-V_1\int_{-\infty}^{\infty} Q'(\sigma)\sigma'\,dz = \int_{-\infty}^{\infty}\nabla_\Gamma\cdot\big(M(\sigma)\,\nabla_\Gamma B_1\big)\,dz = \nabla_\Gamma\cdot\left(\left[\int_{-\infty}^{\infty} M(\sigma)\,dz\right]\nabla_\Gamma B_1\right) = c_M\,\Delta_\Gamma B_1.$$

由（76），$\int Q'(\sigma)\sigma'\,dz = c_N = 2$，因此 (82)

$$V_1 = -\frac{c_M}{c_N}\,\Delta_\Gamma B_1. \tag{83}$$

代入（77）以及常数（67），得到

$$V_1 = \frac{c_M\,c_W}{c_N^2}\,\Delta_\Gamma H = \frac{4}{9}\,\Delta_\Gamma H. \tag{84}$$

（对于 $d = 2$，$\Delta_\Gamma = \partial_{ss}$。）

由此得到的界面演化定律。 回顾 $V = V_0 + \varepsilon V_1 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 和 (80)–(84)，我们得到

$$V = \varepsilon\,\frac{4}{9}\,\Delta_\Gamma H + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{85}$$

即物理时间尺度下的表面扩散动力学（通过慢时间重标度，可恢复通常的 $\mathcal{O}(1)$表面扩散速度）。

B 体积守恒与矩条件

本附录推导 CH–IC模型中与守恒量$\int_\Omega Q(\phi_\varepsilon)\,d\Omega$ 相关的 ε展开及其体积误差。我们的目标有两个：（i）获得显式且易于计算的首要误差系数公式；（ii）确定核函数设计条件，以确保对尖锐相体积的 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$或更高阶近似。

匹配渐近框架和第一内修正问题已在附录 A中建立。此处我们重点关注：

(i) $\mathrm{Err}_\mathcal{V}$ 的体相-界面分解及其逐阶展开，

(ii) 几何矩 $\mathcal{M}_1[Q]$ 和动力学矩$\mathcal{J}_1[Q]$的封闭一维公式，

(iii) 矩平衡条件 $\mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q] = 0$ 消除界面 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$误差。

Φ_1 和 $\mathcal{J}_1$ 的详细推导是改进守恒机制的核心分析要素。

B.1 Q的预备知识与设计类

B.1.1 尖锐相与弥散相体积及体积误差

设 $\Omega^{\pm}(t)$ 为由 $\Gamma(t)$分隔的尖锐相。尖锐相体积为

$$|\Omega^+(t)| = \int_\Omega \Theta(d(x,t))\ \mathrm{d}\Omega, \tag{86}$$

其中 $d(x,\ t)$ 是到 $\Gamma(t)$ 的有符号距离，在 $\Omega^+(t)$ 中为正（附录 A），且 Θ 是 Heaviside阶跃函数。

在 CH–IC模型中，我们守恒广义质量

$$\mathcal{Q}[\phi_\varepsilon] := \int_\Omega Q(\phi_\varepsilon)\ \mathrm{d}\Omega, \qquad Q(\pm 1) = \pm 1, \qquad Q \text{ odd and strictly increasing.} \tag{87}$$

因此，我们定义守恒的弥散 Q体积代理量（参见正文中的（2））

$$\mathcal{V}_Q(t) := \frac{1}{2}\int_\Omega \big(1 + Q(\phi_\varepsilon)\big)\ \mathrm{d}\Omega, \qquad \frac{d}{dt}\mathcal{V}_Q(t) = 0, \tag{88}$$

以及几何体积误差（参见（19））

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t) := \mathcal{V}_Q(t) - |\Omega^+(t)| = \frac{1}{2}\int_\Omega \big(1 + Q(\phi_\varepsilon)\big)\ \mathrm{d}\Omega - \int_\Omega \Theta(d(x,t))\ \mathrm{d}\Omega. \tag{89}$$

B.1.2 核族与归一化

一种方便的设计类（正文中使用）为

$$Q'(\phi) = \frac{(1-\phi^2)^k\, S(\phi)}{B_k[S]}, \qquad B_k[S] := \int_0^1 (1-\xi^2)^k\, S(\xi)\, d\xi, \tag{90}$$

其中，$k \geq 1$ 是端点退化阶，$S(\phi) > 0$ 是偶整形函数。归一化条件保证

$$\int_{-1}^{1} Q'(\phi)\, d\phi = 2, \qquad \text{equivalently} \qquad Q(1) - Q(-1) = 2, \tag{91}$$

且 Q 为奇函数意味着 $Q(1) = 1$。

注 3 （形状核的归一化很重要）。当 $S \not\equiv 1$ 时，常数 $B_k[S]$ 取决于成形参数。特别是，

$$Q(u) = \int_0^u Q'(t)\, dt = \frac{\int_0^u (1-t^2)^k S(t)\, dt}{\int_0^1 (1-t^2)^k S(t)\, dt}, \qquad u \in [-1,1],$$

保证 $Q(1) = 1$的是比值，而不仅仅是分子。

B.2 体相–界面分解与 ε展开

令 $d(x,t)$为到 $\Gamma(t)$的有符号距离，在 $\Omega^+(t)$ 中为正。我们采用带有 $\delta = C\varepsilon|\ln\,\varepsilon|$的标准分解，

$$\Omega = \Omega_\delta^+(t) \cup \Gamma_\delta(t) \cup \Omega_\delta^-(t), \qquad \Gamma_\delta(t) := \{x : |d(x,t)| \le \delta\}.$$

在界面管中引入拉伸坐标 $z = d/\varepsilon$ 和曲面变量$s \in \Gamma(t)$，使得 $x = X(s,\ t) + \varepsilon z\,\nu(s,\ t)$。雅可比行列式具有如下曲率展开

$$\mathrm{d}\Omega = \varepsilon\,\mathcal{J}(\varepsilon z, s)\,dz\,dA(s), \qquad \mathcal{J}(\varepsilon z, s) = 1 + \varepsilon z H(s) + \varepsilon^2 z^2 G(s) + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \tag{92}$$

此处 $H = \sum_{i=1}^{d-1} \kappa_i$ 和 $G = \sum_{i<j} \kappa_i\kappa_j$ （对于 $d = 3$, G 为高斯曲率）。

在内区中，附录A给出了剖面展开

$$\phi_\varepsilon(x,t) = \Phi(z,s,t) = \sigma(z) + \varepsilon\,H(s,t)\,\Phi_1(z) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \qquad \sigma(z) = \tanh(z/\sqrt{2}), \tag{93}$$

其中因子分解为 Φ_1（z, s, t）$= H$（s, t）Φ_1（z）以及 Φ_1（z），它们满足约化常微分方程（79）。

B.2.1 首阶抵消

将 (93) 代入 (89) 中，限定在 $\Gamma_\delta(t)$ 内并展开

$$Q(\Phi) = Q(\sigma) + \varepsilon\,H\,\Phi_1\,Q'(\sigma) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \qquad \mathcal{J} = 1 + \varepsilon z H + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

界面贡献变为

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{int}} = \frac{1}{2}\int_\Gamma \int_{-\infty}^{\infty} \Big(Q(\sigma(z)) - (2\Theta(z) - 1)\Big)\,\varepsilon\,dz\,dA + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

由于奇偶对称性，该项在 ε 阶消失（因为 Q 和 σ 为奇函数，而 $\Theta(z) - \frac{1}{2}$ 为奇函数）。因此，主导界面误差为 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$。

B.3 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$阶界面误差与两个矩

将上述展开再向前推进一阶，得到

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{(2)} = \frac{\varepsilon^2}{2}\int_{\Gamma(t)} H(s)\,\Big(\mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q]\Big)\,dA(s), \tag{94}$$

其中，几何矩和动态矩定义为

$$\mathcal{M}_1[Q] := \int_{-\infty}^{\infty} z\,\Big(1 + Q(\sigma(z)) - 2\Theta(z)\Big)\,dz, \tag{95}$$

$$\mathcal{J}_1[Q] := \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1(z)\,Q'(\sigma(z))\,dz. \tag{96}$$

两个矩都仅取决于核 Q （通过 Q 和 Q'），而几何因素仅通过因子94进入（ H（s）。

注 4 （解释）。 $\mathcal{M}_1$ 源自雅可比修正 $\varepsilon z H$ （弥散管与锐界面管之间纯粹的几何失配），而 $\mathcal{J}_1$ 源自曲率引起的剖面修正 $\varepsilon H\Phi_1$。关键的设计自由度在于调整 Q，使这两种效应相互抵消。

B.4 几何矩 $\mathcal{M}_1[Q]$ 的高效公式与符号

定理 1（$\mathcal{M}_1$的单积分公式）。对于任意奇函数、递增函数 Q 满足 $Q(1) = 1$,

$$\mathcal{M}_1[Q] = -2\int_0^1 Q'(u)\ \operatorname{arctanh}^2(u)\,du. \tag{97}$$

特别地，对于 (90),

$$\mathcal{M}_1[Q] = -\frac{2}{B_k[S]}\int_0^1 (1-u^2)^k S(u)\ \operatorname{arctanh}^2(u)\,du.$$

证明。将 (95) 在 $z=0$ 处分开，并对 $\Theta(z)=1$ 用于 $z>0$, $\Theta(z)=0$ 用于 $z<0$:

$$\mathcal{M}_1 = \int_{-\infty}^0 z\,(1+Q(\sigma(z)))\,dz + \int_0^\infty z\,(Q(\sigma(z))-1)\,dz.$$

在第一项中使用 $z=-\eta$，并利用 Q 和 σ 的奇性,

$$\int_{-\infty}^0 z\,(1+Q(\sigma(z)))\,dz = -\int_0^\infty \eta\,(1-Q(\sigma(\eta)))\,d\eta, \qquad \int_0^\infty z\,(Q(\sigma(z))-1)\,dz = -\int_0^\infty z\,(1-Q(\sigma(z)))\,dz,$$

因此 $\mathcal{M}_1 = -2\int_0^\infty z\,(1-Q(\sigma(z)))\,dz$。现在代入 $u=\sigma(z)=$双曲正切$(z/\sqrt{2})$，于是 $z=\sqrt{2}$反双曲正切(u) 且 $dz = \frac{\sqrt{2}}{1-u^2}\,du$，从而得到

$$\mathcal{M}_1 = -4\int_0^1 \frac{(1-Q(u))\ \operatorname{arctanh}(u)}{1-u^2}\,du.$$

写出 $1-Q(u) = \int_u^1 Q'(\zeta)\,d\zeta$ 并应用富比尼定理:

$$\mathcal{M}_1 = -4\int_0^1 Q'(\zeta)\left(\int_0^\zeta \frac{\operatorname{arctanh}(u)}{1-u^2}\,du\right)d\zeta.$$

由于 $\frac{d}{du}\left(\frac{1}{2}\text{反双曲正切}^2(u)\right) = \frac{\text{反双曲正切}(u)}{1-u^2}$，内层积分为 $\frac{1}{2}$反双曲正切$^2(\zeta)$，从而得到 (97)。 □

引理 2 (严格负性 $\mathcal{M}_1$)。如果 Q 在$(-1,1)$上严格递增，则 $\mathcal{M}_1[Q]<0$。

*P*证明。在 (97) 中，被积函数 $Q'(u)$ 双曲正切$^2(u)$ 在 $u\in(0,1$). □

注5 (关于 $S\equiv 1$ 的闭式表达式以及形状核为何不同)。对于 $S\equiv 1$ 定义 e

$$I_k := \int_0^1 (1-u^2)^k\ \operatorname{arctanh}^2(u)\,du.$$

令 $x=$反双曲正切(u)（因此 $u=$双曲正切$\,x$, $du=$双曲正割$^2(x)\,dx$，且 $1-u^2=$双曲正割$^2(x)$），可得

$$I_k = \int_0^\infty x^2\ \operatorname{sech}^{2k+2}(x)\,dx.$$

通过经典计算（例如结合贝塔/伽马恒等式与分部积分递推），可得对所有整数 $k\ge 0$,

$$\int_0^\infty x^2\ \operatorname{sech}^{2k+2}(x)\,dx = \frac{2^{\,2k-1}(k!)^2}{(2k+1)!}\left(\frac{\pi^2}{6} - \sum_{j=1}^{k}\frac{1}{j^2}\right), \tag{98}$$

（约定 $\sum_{j=1}^{0}(\cdot)=0$，因此 $k=0$ 情形给出 $\pi^2/12$。）

对于未整形的归一化核

$$Q_k'(u)=\frac{(1-u^2)^k}{\int_0^1(1-\xi^2)^k\,d\xi},\qquad \int_0^1(1-\xi^2)^k\,d\xi=\frac{2^{2k}(k!)^2}{(2k+1)!},$$

几何矩(97) 可简化为闭式

$$\mathcal{M}_1[Q_k]=\sum_{j=1}^{k}\frac{1}{j^2}-\frac{\pi^2}{6}.$$

特别地，

$$\mathcal{M}_1[Q_1]=1-\frac{\pi^2}{6},\qquad \mathcal{M}_1[Q_2]=\frac{5}{4}-\frac{\pi^2}{6},\qquad \mathcal{M}_1[Q_3]=\frac{49}{36}-\frac{\pi^2}{6}.$$

对于一般整形 $S(u)$，相同的代换会得到如下形式的加权积分

$$\int_0^\infty x^2\,\operatorname{sech}^{2k+2}(x)\,S(\tanh x)\,dx\,,$$

通常无法得到可与之相比的闭式；不过，单重积分表示(97) 仍然稳健且计算成本低。

B.5 Φ1 的简化公式及动态矩 J1[Q]

现在我们推导动态矩（96）的封闭一维公式。主要的分析依据是附录 A 中的一阶内层问题。令 σ（z）= 双曲正切（$z/\sqrt{2}$）以及 $\mathcal{L}=\partial_{zz}-W''$（$\sigma$），则约化剖面 Φ_1（z）满足

$$\mathcal{L}\Phi_1=\frac{\sqrt{2}}{3}Q'(\sigma(z))-\sigma'(z),\qquad \Phi_1(0)=0,\qquad \Phi_1\ \text{bounded}. \tag{99}$$

等价地，$\mathcal{L}\Phi_1=A_1$（z）σ'（z），其中

$$A_1(z)=\frac{\sqrt{2}Q'(\sigma(z))}{3\sigma'(z)}-1.$$

B.5.1 积分表示（Bretin；Zhou）

对（99）的有界解进行降阶法／常数变易表示，早已见于 Bretin 等人 [8]（见引理 4.1 和公式（4.14））；随后 Zhou等人 [13]在 ACH–IC 框架下对其进行了重新研究和简化。

定理 2（常数变易公式）。若 Φ_1 满足（99），且为有界解，并满足 Φ_1（0）= 0，则

$$\Phi_1(z)=\sigma'(z)\int_0^z\frac{1}{\sigma'(\eta)^2}\left(\int_0^\eta A_1(\xi)\,\sigma'(\xi)^2\,d\xi\right)d\eta. \tag{100}$$

证明。这是自伴算子 $\mathcal{L}$ 的标准降阶法构造，利用 $\sigma'\in\ker(\mathcal{L})$，并通过规范条件 $\Phi_1(0)=0$ 固定齐次分量。 □

B.5.2 Φ_1 的单求积约化

二重 i　　积分（100）可化为相位变量中的单一积分 $u=\sigma(z)$　　.

定理 3（Φ_1 的约化公式）。定义 *NMN* 参考核

$$Q_1(u)=\frac{3}{2}\left(u-\frac{u^3}{3}\right),\qquad Q_1'(u)=\frac{3}{2}(1-u^2).$$

则（99）的有界解为

$$\Phi_1(z)=\frac{4}{3}\,\sigma'(z)\int_0^{\sigma(z)}\frac{Q(u)-Q_1(u)}{(1-u^2)^3}\,du. \tag{101}$$

证明。从（100）出发，代入 $u=\sigma(\xi)$，并利用 $\sigma'=\sqrt{2}^{\,1-\sigma^2}$ 与 $d\xi=\frac{\sqrt{2}}{1-u^2}\,du$。直接计算可得

$$\int_0^{\eta}A_1(\xi)\sigma'(\xi)^2\,d\xi=\frac{\sqrt{2}}{3}\big(Q(\sigma(\eta))-Q_1(\sigma(\eta))\big).$$

将此表达式代回（100），并再次把变量从 η 换为 $u=\sigma(\eta)$，即得（101）。

□

B.5.3 $\mathcal{J}_1[Q]$的封闭一维公式

定理 4（动态矩的单积分公式）。假设 $Q(\pm1)=\pm1$ 且 Q为奇函数且严格递增。则

$$\mathcal{J}_1[Q]=\frac{8}{3}\int_0^1\frac{\big(Q(u)-Q_1(u)\big)\,\big(1-Q(u)\big)}{(1-u^2)^3}\,du. \tag{102}$$

证明。将（101）代入（96并使用 $u=\sigma(z)$：

$$\mathcal{J}_1[Q]=2\int_0^{\infty}Q'(\sigma(z))\Phi_1(z)\,dz=\frac{8}{3}\int_0^1Q'(u)\left(\int_0^u\frac{Q(v)-Q_1(v)}{(1-v^2)^3}\,dv\right)du.$$

交换积分次序（富比尼）可得

$$\mathcal{J}_1[Q]=\frac{8}{3}\int_0^1\frac{Q(v)-Q_1(v)}{(1-v^2)^3}\left(\int_v^1Q'(u)\,du\right)dv=\frac{8}{3}\int_0^1\frac{\big(Q(v)-Q_1(v)\big)\,\big(1-Q(v)\big)}{(1-v^2)^3}\,dv,$$

因为 $\int_v^1Q'(u)\,du=Q(1)-Q(v)=1-Q(v)$。

□

备注6（可积性以及 $k\geq2$的作用）。在 $u=1$附近，有 $1-Q(u)\sim C(1-u^2)^{k+1}$，对于族（90）。（102）中的被积函数的行为类似于 $(1-u^2)^{k-1}$，当且仅当$k\geq2$时可积。因此 $k\geq2$ 是有限 $\mathcal{J}_1$ 以及$\varepsilon^{k+1}\geq\varepsilon^3$阶整体误差抑制的自然阈值。

B.6 矩平衡与 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$体积精度

定义组合界面系数

$$\mathcal{C}_1[Q] := \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q]. \tag{103}$$

根据（94），主导界面体积误差与 $\mathcal{C}_1[Q]$成正比。

定理5 （矩平衡条件）。假设 $k \geq 2$ （因此体相贡献为 $\mathcal{O}(\varepsilon^{k+1})$ $=\mathcal{O}(\varepsilon^3)$且 $\mathcal{J}_1$ 有限）。若

$$\mathcal{C}_1[Q] = \mathcal{M}_1[Q] + \mathcal{J}_1[Q] = 0, \tag{104}$$

则总体积误差满足 $\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}(t)$ $= \mathcal{O}(\varepsilon^3)$。

备注7 （符号机制）。根据引理 2，容许核满足 $\mathcal{M}_1[Q] < 0$。对于许多满足 $k \geq 2$ 的核，可以发现 $\mathcal{J}_1[Q] > 0$，因此可以在严格正类 (104) 内通过抵消实现 $S > 0$。

备注8 （示例：指数整形）。对于单参数族 $S(u)$ $= \exp(-b_2 u^2)$，其中 k $= 2$，平衡方程 (104)在（采用我们的归一化约定时）约 $b_2 \approx 6.95$处有一个根。此值仅作为示例；正文报告了数值优化结果。

B.7 体相贡献与退化阶

上述界面分析确定了主导的 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 项。体相贡献由 Q 的端点退化决定。

定理6 (体相误差标度)。 若 $Q'(\pm 1)$ $= Q''(\pm 1)$ $= \cdots = Q^{(k)}(\pm 1)$ $= 0$ (退化阶k)，则体相贡献满足

$$\mathrm{Err}_{\mathcal{V}}^{\mathrm{bulk}}(t) = \mathcal{O}(\varepsilon^{k+1}).$$

对于 $k = 1$ (NMN型核)，体相误差与界面误差均为 $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 阶。对于 $k \geq 2$，体相贡献至少为 $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ 阶，主导误差完全来自界面，由 $\mathcal{C}_1[Q]$ 控制。

C 离散守恒与能量稳定性

本附录记录所提出的离散化的两项结构性质：(i) 设计不变量 $\int_\Omega Q(\phi)\,\mathrm{d}\Omega$ 的离散守恒；以及 (ii) 对变分 CH–IC 子类（即 $R \equiv 0$），弥散界面能的无条件耗散。论证遵循 Cahn–Hilliard 格式的标准凸分裂证明，但我们着重强调实现精确 $Q^{n+1} - Q^n$ 更新所需的离散链式法则。常数迁移率前因子可吸收到时间尺度中，因此不失一般性地将其设为 1。

C.1 离散 Q-守恒

考虑 方程（31a）的采用隐式欧拉时间步进的全离散有限体积形式 ng,

$$\frac{Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n)}{\delta t} = \nabla_h \cdot \Big(M(\phi^\star)\, \nabla_h \psi^{n+1} \Big), \tag{105}$$

其中， $\nabla_h \cdot (\cdot)$ 表示守恒有限体积散度， $\phi^\star$ 是任意选定的求值状态（例如， ϕ^n或 Picard 迭代）。将（105）对所有控制体求和，并利用无通量边界条件可得

$$\sum_{i=1}^{N} Q(\phi_i^{n+1})\,|\Omega_i| = \sum_{i=1}^{N} Q(\phi_i^{n})\,|\Omega_i|,$$

达到线性求解器容差。因此，非线性求解收敛后，离散不变量得以保持。

C.2 Un变分 CH–IC 子类的条件能量耗散 s

我们将范围限定在变分 CH–IC 情形 $R(\phi,\ \nabla\phi)\ \equiv 0$ （见31b）。在正文采用的无量纲化中，我们将表面张力前因子设为 1，因此标准的弥散界面能为

$$E_\varepsilon[\phi] = \int_\Omega \Big(\frac{1}{\varepsilon}W(\phi) + \frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2\Big)\ \mathrm{d}\Omega. \tag{106}$$

L且 $W = W_c - W_e$ 是一个凸分裂，其中 W_c 为凸函数， W_e 为凹函数 [22]。

离散链式法则。 定义逐点差商

$$\widehat{Q}'(\phi^{n+1},\phi^n) := \begin{cases} \dfrac{Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n)}{\phi^{n+1}-\phi^n}, & \phi^{n+1} \neq \phi^n, \\ Q'(\phi^n), & \phi^{n+1} = \phi^n, \end{cases} \tag{107}$$

当且仅当 Q单调递增时，该量非负。根据构造，

$$Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n) = \widehat{Q}'(\phi^{n+1},\phi^n)\,(\phi^{n+1}-\phi^n) \qquad \text{pointwise in } \Omega. \tag{108}$$

能量稳定的全离散格式。 考虑混合格式（Picard 线性化实现的非线性“理想”对应形式）

$$\frac{Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n)}{\delta t} = \nabla\cdot\Big(M(\phi^n)\,\nabla\psi^{n+1}\Big), \tag{109a}$$

$$\widehat{Q}'(\phi^{n+1},\phi^n)\,\psi^{n+1} = \frac{1}{\varepsilon}\Big(W_c'(\phi^{n+1}) - W_e'(\phi^n)\Big)\ -\ \varepsilon\,\Delta\phi^{n+1}. \tag{109b}$$

定理 7 （无条件能量耗散）。 设 $W = W_c - W_e$ 其中 W_c 为凸函数，且 W_e 为凹函数，并假设满足无通量边界条件。那么 (109) 满足离散能量不等式

$$E_\varepsilon[\phi^{n+1}] - E_\varepsilon[\phi^n]\ \le\ -\delta t\int_\Omega M(\phi^n)\,|\nabla\psi^{n+1}|^2\ \mathrm{d}\Omega\ -\ \frac{\varepsilon}{2}\int_\Omega |\nabla(\phi^{n+1}-\phi^n)|^2\ \mathrm{d}\Omega, \tag{110}$$

对任意 $\delta t > 0$ 均成立。特别地， $E_\varepsilon[\phi^{n+1}] \le E_\varepsilon[\phi^n]$。

证明。步骤 *1*： Q方程。 将（109a）乘以 ψ^{n+1} 并在 Ω 上积分。利用分部积分和无通量条件可得

$$\int_\Omega \psi^{n+1}\big(Q(\phi^{n+1}) - Q(\phi^n)\big)\ \mathrm{d}\Omega = -\delta t\int_\Omega M(\phi^n)\,|\nabla\psi^{n+1}|^2\ \mathrm{d}\Omega. \tag{111}$$

步骤 *2*：离散链式法则。 将（109b）乘以（$\phi^{n+1}-\phi^n$）并积分。根据（108），左端恰好为

$$\int_\Omega \widehat{Q}'(\phi^{n+1},\phi^n)\,\psi^{n+1}(\phi^{n+1}-\phi^n)\,\mathrm{d}\Omega=\int_\Omega \psi^{n+1}\big(Q(\phi^{n+1})-Q(\phi^n)\big)\,\mathrm{d}\Omega.$$

因此，

$$\begin{aligned}\int_\Omega \psi^{n+1}\big(Q(\phi^{n+1})-Q(\phi^n)\big)\,\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{\varepsilon}\int_\Omega \big(W_c'(\phi^{n+1})-W_e'(\phi^n)\big)(\phi^{n+1}-\phi^n)\,\mathrm{d}\Omega\\ -\varepsilon\int_\Omega \Delta\phi^{n+1}(\phi^{n+1}-\phi^n)\,\mathrm{d}\Omega.\end{aligned}\tag{112}$$

步骤 *3*：凸性/凹性不等式。由 W_c 的凸性和 W_e的凹性可得，

$$W_c(\phi^{n+1})-W_c(\phi^n)\le W_c'(\phi^{n+1})(\phi^{n+1}-\phi^n),\qquad W_e(\phi^{n+1})-W_e(\phi^n)\ge W_e'(\phi^n)(\phi^{n+1}-\phi^n).$$

相减可得

$$W(\phi^{n+1})-W(\phi^n)\le\big(W_c'(\phi^{n+1})-W_e'(\phi^n)\big)(\phi^{n+1}-\phi^n).\tag{113}$$

步骤 *4*：梯度项。对拉普拉斯项分部积分可得

$$-\int_\Omega \Delta\phi^{n+1}(\phi^{n+1}-\phi^n)\,\mathrm{d}\Omega=\int_\Omega \nabla\phi^{n+1}\cdot\nabla(\phi^{n+1}-\phi^n)\,\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{2}\Big(\|\nabla\phi^{n+1}\|_2^2-\|\nabla\phi^n\|_2^2+\|\nabla(\phi^{n+1}-\phi^n)\|_2^2\Big).$$

将 (111)–(112) 与 (113) 结合，并利用梯度恒等式，可得 (110)。 □

备注 9 （与实际采用的 Picard/分块求解以及先前一般性证明的关系）。上述证明针对全离散非线性格式 (109)。实际计算中，我们通过 *Picard* 线性化和预条件分块耦合广义最小残量法（或双共轭梯度稳定法）求解相应的方程组；非线性迭代收敛后，离散守恒恒等式 (105) 在求解器容差范围内成立，并且实际观测到能量衰减 (110)。加权度量变体的更一般能量稳定性结果（包括 (31b) 中的额外变分项和广义系数）见 *[21]*；同样的离散差商思路 (107) 提供了闭合耗散估计所需的精确链式法则。

参考文献

[1] John W Cahn 和 John E Hilliard. 非均匀系统的自由能。一、界面自由能。《化学物理学杂志》，28(2):258–267，1958年。[2] John W Cahn. 关于旋节线分解。《金属学报》，9(9):795–801，1961年。[3] Charles M Elliott 和 Harald Garcke. 关于具有退化迁移率的 Cahn–Hilliard方程。《*SIAM*数学分析杂志》，27(2):404–423，1996年。[4] W. W. Mullins. 热沟槽理论。《应用物理学杂志》，28(3):333–339，1957年。[5] John W Cahn、Charles M Elliott 和 Amy Novick-Cohen. 具有浓度依赖迁移率的 Cahn–Hilliard方程：由平均曲率的负拉普拉斯算子驱动的运动。《欧洲应用数学杂志》，7(3):287–301，1996年。

[6] Alpha Albert Lee、Andreas Munch 和 Endre Suli. 具有退化迁移率的 Cahn–Hilliard 方程的锐界面极限。*SIAM*应用数学杂志，76(2):433–456，2016年。[7] Marco Salvalaglio、Axel Voigt 和 Steven M Wise. 表面扩散的双重退化弥散界面模型。应用科学中的数学方法，44(7):5385–5405，2021年。[8] Elie Bretin、Simon Masnou、Arnaud Sengers 和 Garry Terii. 表面扩散流的近似：一种具有退化迁移率的二阶变分 Cahn–Hilliard 模型。应用科学中的数学模型与方法，32(04):793–829，2022年。[9] Josef Musil 和 Ji˘r´ı F¨urst. 二阶 Cahn–Hilliard 模型中的增强界面动力学：结合对流扩散应用的比较分析。*Computers & Structures*，319:108009，2025年。[10] Junseok Kim、Seunggyu Lee 和 Yongho Choi. 具有时空依赖拉格朗日乘子的守恒 Allen–Cahn 方程。国际工程科学杂志，84:11–17，2014年。[11] Jie Shen、Xiaofeng Yang 和 Qi Wang. 二元流体相场模型中的质量与体积守恒。计算物理通讯，13(4):1045–1065，2013年。[12] Hao Wu. Cahn–Hilliard方程综述：动态边界条件中的经典结果与近期进展。*arXiv* 预印本 *arXiv:2112.13812*，2021年。[13]Zeyu Zhou、Wei Jiang、Tiezheng Qian 和 Zhen Zhang. 一种新的各向异性表面扩散相场模型：具有改进守恒性的各向异性 Cahn–Hilliard 方程。英国皇家学会会刊 *A* 辑：数学、物理与工程科学，481(2326):20250649，2025年。arXiv:2507.18048。[14] F. Magaletti、F. Picano、M. Chinappi、L. Marino 和 C. M. Casciola. 二元流体 Cahn–Hilliard/Navier–Stokes 模型的锐界面极限。流体力学杂志，714:95–126，2013年。[15] Marco FP ten Eikelder 和 Dominik Schillinger. 一致的 Navier–Stokes Cahn–Hilliard 模型的无散速度形式：非匹配密度、散度相容离散化与基准测试。计算物理杂志，第113148页，2024年。[16] F. Magaletti、F. Picano、M. Chinappi、L. Marino 和 C. M. Casciola. 二元流体 Cahn–Hilliard/Navier–Stokes 模型的锐界面极限。流体力学杂志，714:95–126，2013年。[17] David Jacqmin. 使用相场建模计算两相 Navier–Stokes 流。计算物理杂志，155:96–127，1999年。[18] T. H. B. Demont、S. K. F. Stoter 和 E. H. van Brummelen. Navier–Stokes–Cahn–Hilliard 方程锐界面极限的数值研究。流体力学杂志，970:A24，2023年。[19] Helmut Abels 和 Daniel Lengeler. 两相流弥散界面模型的锐界面极限。界面与自由边界，16(3):395–418，2014年。

[20] H. G. Weller、G. Tabor、H. Jasak 和 C. Fureby。使用面向对象技术的计算连续介质力学张量方法。*Computers in Physics*，12(6)：620–631，1998年。[21] Josef Musil 和 Jiˇr´ı F¨urst。二阶 Cahn–Hilliard 模型中的增强界面动力学：结合对流扩散的比较分析。*Computers & Structures*，319：108009，2025年。[22] David J. Eyre。无条件梯度稳定的 Cahn–Hilliard方程时间推进。在*Materials Research Society Symposium Proceedings*中，第 529 卷，第 39–46 页，1998年。[23] Youcef Saad 和 Martin H. Schultz。GMRES：求解非对称线性系统的广义最小残量算法。*SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*，7(3)：856–869，1986年。[24] J. A. Meijerink 和 H. A. van der Vorst。关于系数矩阵为对称 M 矩阵的线性系统的迭代求解方法。*Mathematics of Computation*，31(137)：148–162，1977年。[25] Youcef Saad。稀疏线性系统迭代方法。SIAM，第 2 版，2003年。[26] Nikolaos Pavlidis 和 Athanasios Dosiopoulos。二维 Cahn–Hilliard 方程的非线性多重网格实现。*Mathematics*，8(1)：97，2020 年。[27] Robert L Pego。非线性 Cahn–Hilliard 方程中的前沿迁移。*Proceedings of theRoyal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*，422(1863)：261–278，1989年。[28] Luigi A mbrosio、Nicola Fusco 和 Diego Pallara。有界变差函数与自由间断问题。牛津大学出版社，牛津，2000年。