

文章编号: 1008-1542(2011)02-0110-05

Allen-Cahn 型相场模型的移动网格方法

成 彬¹, 刘 波², 王冬艳³, 刘晓慧¹

(1. 河北省科学院应用数学研究所, 河北石家庄 050081; 2. 河北省科学院科技处, 河北石家庄 050081; 3. 河北华烨冀科信息技术公司, 河北石家庄 050081)

摘要: 针对 2 种流体的 Allen-Cahn 型相场模型提出了 1 种自适应移动网格方法。移动网格方法包括网格重分布和偏微分方程求解 2 个相对独立的部分。通过求解 1 个类似于 Poisson 方程的偏微分方程组获得网格重分布, 大量的网格点聚集在 2 种流体的界面附近从而提高了分辨率, 而在其他的区域则仅有比较稀疏的网格点。Allen-Cahn 模型用有限差分方法求解, 其中的大型稀疏线性方程组使用代数多重网格快速算法求解。数值实验表明移动网格算法在提高分辨率和计算效率方面非常有效。

关键词: Allen-Cahn 型相场模型; 移动网格方法; 有限差分方法

中图分类号: O242.1 **文献标志码:** A

Moving mesh method for solving Allen-Cahn phase-field model

CHENG Bin¹, LIU Bo², WANG Dong-yan³, LIU Xiao-hui¹

(1. Institute of Applied Mathematics, Hebei Academy of Sciences, Shijiazhuang Hebei 050081, China; 2. Department of Science and Technology, Hebei Academy of Sciences, Shijiazhuang Hebei 050081, China; 3. Hebei Huaye Jike Information Technology Company Limited, Shijiazhuang Hebei 050081, China)

Abstract: In this paper, an adaptive moving mesh method is proposed and applied for solving Allen-Cahn phase-field model. The mesh redistribution is obtained by solving a Poisson like partial differential equation system. A plenty of grid points are clustered within the region with large solution variations, while less grid points are located in the regions with smooth solutions. The Allen-Cahn model is discretized by a semi-implicit finite difference scheme, which will lead to a large sparse linear algebra system. The algebra multigrid method is used to solve the linear system. Numerical experiments show that the proposed adaptive approach is effective in improving resolution and computational efficiency.

Key words: Allen-Cahn phase-field model; moving mesh method; finite difference scheme

本文研究下面的 Allen-Cahn 型相场模型^[1]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \gamma (\nabla^2 \phi - f(\phi) + \zeta(t)). \quad (1)$$

式中: ∇^2 表示 Laplacian 算子; $\zeta(t)$ 是拉格朗日乘子, 其目的是为了保持系统的总质量守恒; $f(\phi) = F'(\phi)$, 其中 $F(\phi) = \frac{(\phi^2 - 1)^2}{4}$ 是常见的双势阱函数, 表示界面的宽度。模型(1)由弹性混合能的变分公式导出,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\gamma \frac{\delta W}{\delta \phi} = \gamma (\nabla^2 \phi - f(\phi)), \quad (2)$$

收稿日期: 2010-11-01; 修回日期: 2011-01-05; 责任编辑: 张 军

基金项目: 河北省自然科学基金资助项目(F2008001166)

作者简介: 成 彬(1973-), 男, 河北定州人, 副研究员, 硕士, 主要从事信息技术和偏微分方程方面的研究。

式中: 弹性混合能定义为 $W(\phi, \dot{\gamma}, \phi) = \int_{\Omega_p} [\frac{1}{2} |\dot{\gamma}, \phi|^2 + F(\phi)] dx dy$; $\frac{\delta W}{\delta \phi}$ 是能量泛函关于 ϕ 的一阶变分导数。初始和边界条件为

$$\phi|_{t=0} = \phi_0(x, y), \quad (x, y) \in \Omega_p, \tag{3}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\partial \Omega_p} = 0. \tag{4}$$

根据以上的边界条件和模型(2), 为了保持总质量守恒, 有 $\zeta(t) = \frac{1}{|\Omega_p|} \int_{\Omega_p} f(\phi(x, y, t)) dx dy$, 其中 $|\Omega_p|$ 表示求解区域 Ω_p 的面积。

相场模型(1)可以描述两相流体的连续变化, 有个宽度为 η 的界面层也可以被刻画出来, 这和用间断的方法来描述界面是完全不同的。相场模型的一个显著优点就是不必确定界面的位置形状, 只需要求解出变量函数 ϕ 。现在已经有人用不同的数值方法进行了模拟, 如 Fourier 谱方法^[1]、间断 Galerkin 方法^[2]等。移动网格方法可以根据当前解的情况来分布网格, 在变化比较剧烈的地方分布比较多的网格点, 而在变化比较平滑的区域则分布比较稀疏的网格点。这样整体上可以节省大量的网格, 同时还可以在解的变化比较剧烈的地方保持较高的分辨率。笔者就是采用文献[3]中提出的移动网格方法求解场模型。

1 移动网格方法

用 (x, y) 和 (ξ, η) 分别表示物理平面和计算平面上的变量, 下面这个一一对应的映射可以将计算区域 Ω 映射到物理区域 Ω_p , $x = x(\xi, \eta)$, $y = y(\xi, \eta)$, $(\xi, \eta) \in \Omega_c$ 。类似的, 反过来可以表示为 $\xi = \xi(x, y)$, $\eta = \eta(x, y)$, $(x, y) \in \Omega_p$ 。

网格映射在变分形式下就是要找下面这个网格泛函的极小,

$$E(\xi, \eta) = \frac{1}{2} \int_{\Omega_p} (\dot{\gamma}, \xi_k^T G_1^{-1} \dot{\gamma}, \xi + \dot{\gamma}, \eta_k^T G_2^{-1} \dot{\gamma}, \eta) dx dy, \tag{5}$$

式中: $\dot{\gamma} = (\partial_x, \partial_y)^T$; G_1, G_2 为控制函数时给定的对称正定的矩阵。一般来说, 控制函数依赖于当前方程的解及其高阶导数, 更多的项可以加到这个网格泛函中以控制网格的方向性、正交性等。

可以发现这个网格泛函直接定义在物理区域 Ω_p 上, 因此当 Ω_p 有非常复杂的几何结构的时候直接求解式(5) 就很不方便, 文献[4] 提出了下面的定义在计算区域上的网格泛函。

$$E(x, y) = \frac{1}{2} \int_{\Omega_c} (\tilde{\gamma}, x_k^T G_1 \tilde{\gamma}, x + \tilde{\gamma}, y_k^T G_2 \tilde{\gamma}, y) d\xi d\eta \tag{6}$$

其中 $\tilde{\gamma} = (\partial_\xi, \partial_\eta)^T$ 。与此泛函对应的 Euler-Lagrange 方程为

$$(G_1 x \xi)_{\xi} + (G_1 x \eta)_{\eta} = 0, \quad (G_2 y \xi)_{\xi} + (G_2 y \eta)_{\eta} = 0. \tag{7}$$

在下面的计算中取控制函数为最简单的情形 $G_1 = G_2 = \omega I$, 方程组(7) 简化为

$$\tilde{\gamma} \cdot (\omega \tilde{\gamma}, x) = 0, \quad \tilde{\gamma} \cdot (\omega \tilde{\gamma}, y) = 0, \tag{8}$$

采用 Gauss-Seidel (GS) 迭代法近似求解上面的网格方程组:

$$\omega_{j+\frac{1}{2}, k} \left(x_{j+1, k}^{[v]} - x_{j, k}^{[v+1]} \right) - \omega_{j-\frac{1}{2}, k} \left(x_{j, k}^{[v+1]} - x_{j-1, k}^{[v+1]} \right) + \omega_{j, k+\frac{1}{2}} \left(x_{j, k+1}^{[v]} - x_{j, k}^{[v+1]} \right) - \omega_{j, k-\frac{1}{2}} \left(x_{j, k}^{[v+1]} - x_{j, k-1}^{[v+1]} \right) = 0. \tag{9}$$

式中: $x = (x, y)$; $\omega_{j+\frac{1}{2}, k} = \frac{\omega_{j+1, k} + \omega_{j, k}}{2}$; $\omega_{j, k+\frac{1}{2}} = \frac{\omega_{j, k+1} + \omega_{j, k}}{2}$ 。GS 迭代一直持续要相邻 2 次迭代产生的网格之间的距离足够小, 也就是 $\|x^{[v]} - x^{[v+1]}\| < \delta$ 或者迭代达到事先给定的次数。在实际计算中, 通常在每个时间层上仅仅需要少数几步迭代, 所以求解网格方程组(8) 的代价并不高, 为了得到比较光滑的高质量的网格分布, 需要对控制函数进行几次磨光处理, 具体如下。

$$\omega_{j, k} \leftarrow \frac{4}{16} \omega_{j, k} + \frac{2}{16} (\omega_{j+1, k} + \omega_{j-1, k} + \omega_{j, k+1} + \omega_{j, k-1}) + \frac{1}{16} (\omega_{j-1, k-1} + \omega_{j-1, k+1} + \omega_{j+1, k-1} + \omega_{j+1, k+1}).$$

一般在每个 GS 迭代步上进行 3~5 次上述的磨光处理就足够了。在每个 GS 迭代步结束后, 需要将解得信息从旧网格 $(x_{j, k}, y_{j, k})$ 上映射到新生成的新网格 $(x_{j, k}, y_{j, k})$ 上。这可以通过很多的方法实现, 比如用通常的分片低次插值方法, 由于本文的相场模型具有总质量守恒的特点, 因此使用文献[3] 提出的守恒型插值方法,

$$| \tilde{A}_{j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} | \phi_{j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} = | A_{j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} | \phi_{j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - [(c^x \phi)_{j+1, k+\frac{1}{2}} - (c^x \phi)_{j, k+\frac{1}{2}}] - [(c^y \phi)_{j+\frac{1}{2}, k+1} - (c^y \phi)_{j+\frac{1}{2}, k}].$$

式中: $\tilde{C}_{j,k}^x = x_{j,k} - \tilde{x}_{j,k}$; $\tilde{C}_{j,k}^y = y_{j,k} - \tilde{y}_{j,k}$ 。上述插值公式是由摄动理论推导而得, 具体可以参看文献[3]。很显然离散形式式(10) 在下面的离散意义下满足总质量守恒,

$$\sum_{j,k} | \tilde{A}_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} | \Phi_{+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} = \sum_{j,k} | A_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} | \Phi_{+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}},$$

其中 $| A_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} |$ 和 $| \tilde{A}_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} |$ 表示相应控制体的体积。

2 数值算法

先给定物理区域 Ω_ϕ 的一个网格剖分, 记作 $\{A_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}} | j, k \in \mathbf{Z}\}$, 然后计算平面给定一个固定的均匀剖分, 记 $\Delta x = \Delta y = 1$, 四边形控制单元 $A_{j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}$ 的4个顶点分别为 $(x_{j,k}, y_{j,k}), (x_{j+1,k}, y_{j+1,k}), (x_{j,k+1}, y_{j,k+1})$ 和 $(x_{j+1,k+1}, y_{j+1,k+1})$, 用 I_o 表示所有的内点, 用 I_b 表示所有的边界点。用半隐差分格式^[5] 求解相场模型(1),

$$\frac{\Phi_{j,k}^{n+1} - \Phi_{j,k}^n}{\hat{y}^2 t} - \forall \Delta_\phi \Phi_{j,k}^{n+1} = - \forall f(\Phi_{j,k}) + \forall \zeta(t^n) \text{ on } I_o, \tag{11}$$

其中 Δ_ϕ 表示对 Laplacian 算子 \hat{y}^2 的近似。需要指出的是, 所有的计算都是在计算平面上进行的, 其中所有的微分算子都要通过坐标变换转化到计算平面上, 例如:

$$\Delta \phi = \frac{1}{J} ((J^{-1} y_{\eta}^2 \phi_{\xi})_{\xi} - (J^{-1} y_{\xi} y_{\eta} \phi_{\xi})_{\xi} - (J^{-1} y_{\xi} y_{\eta} \phi_{\xi})_{\eta} + (J^{-1} y_{\xi}^2 \phi_{\eta})_{\eta} + (J^{-1} x_{\eta}^2 \phi_{\xi})_{\xi} - (J^{-1} x_{\xi} x_{\eta} \phi_{\eta})_{\xi} - (J^{-1} x_{\xi} x_{\eta} \phi_{\xi})_{\eta} + (J^{-1} x_{\xi}^2 \phi_{\eta})_{\eta}), \tag{12}$$

其中 $J = x_{\xi} y_{\eta} - x_{\eta} y_{\xi}$ 是坐标变换的 Jacobian 行列式。在式(11)和式(12)中出现的微分算子都使用中心差分格式。现在给出移动网格差分方法完整的算法步骤如下。

- 1) 根据初始条件给出初始的网格分布。
- 2) 根据稳定性条件确定时间步长 $\Delta t, t^{n+1} = t^n + \Delta t$ 。
- 3) 根据数值格式式(11)求解, 即向前走一个时间步求出 ϕ^{n+1} 。
- 4) 进行网格重分布。
 - a) 用 Gauss-Seidel 迭代法解网格方程得 $x^{(k),n}$ 。
 - b) 利用插值公式(10)将当前解的信息映射到新生成的网格 $x^{(k),n}$ 上。
 - c) 计算网格点上的控制函数并且进行磨光处理。
 - d) 迭代执行步骤 a) - c), 进行网格生成和插值, 直到相邻 2 次生成的网格分布充分接近。

3 数值实验

在本节将移动网格差分方法用于求解 Allen-Cahn 型相场模型的计算, 式(1)中的参数设置为 $\gamma = 0.02, \nu = 0.1$, 求解区域为 $\Omega_\phi = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ 。式(8)中控制函数取为常用的梯度型的 $\omega = \sqrt{1 + \alpha | \hat{y} \phi |^2}$, 其中 α 为任意取定的正的小参数, 在本文的算例中取 $\alpha = 5$ 。半隐差分格式(11)将会产生一个大型的稀疏线性方程组, 对此使用快速算法代数多重网格来求解, 误差限设定为 10^{-8} 。在以下的计算中网格点数为 64×64 , 时间步长为 $\Delta t = 0.02$ 。

例 1 考虑在初始的时刻, 在正方形内 $\phi = 1$, 在正方形以外的地方 $\phi = -1$, 图 1 给出了在某些时刻相场的分布图以及相应的自适应网格分布, 可以看出有大量的网格点聚集在界面附近, 而其他区域上相场函数几乎为常数, 有少量的网格点就足够了。从相场的发展来看其形状由正方形逐渐发展到圆形, 这是由于在圆形的情形下能够使能量泛函达到极小, 这一点和参考文献是一致的^[1]。

例 2 初始状态为 2 个相切的球, 在球内区域 $\phi = 1$, 球外区域部分 $\phi = -1$, 图 2 给出了相场等高线图以及对应的网格分布, 2 个相切的球逐渐合并在一起并逐步趋向于圆形。在交界面处, 有大量的网格点聚集, 这是由于相场在这些区域有非常大的梯度值, 从而导致网格方程(8)中控制函数较大, 所以网格点就会密集, 而在其他区域仅有少量的网格点分布, 因为这些区域解的梯度变化不太明显。可见移动网格方法的引入节省了网格点, 同时在界面附近能够保持较高的分辨率。

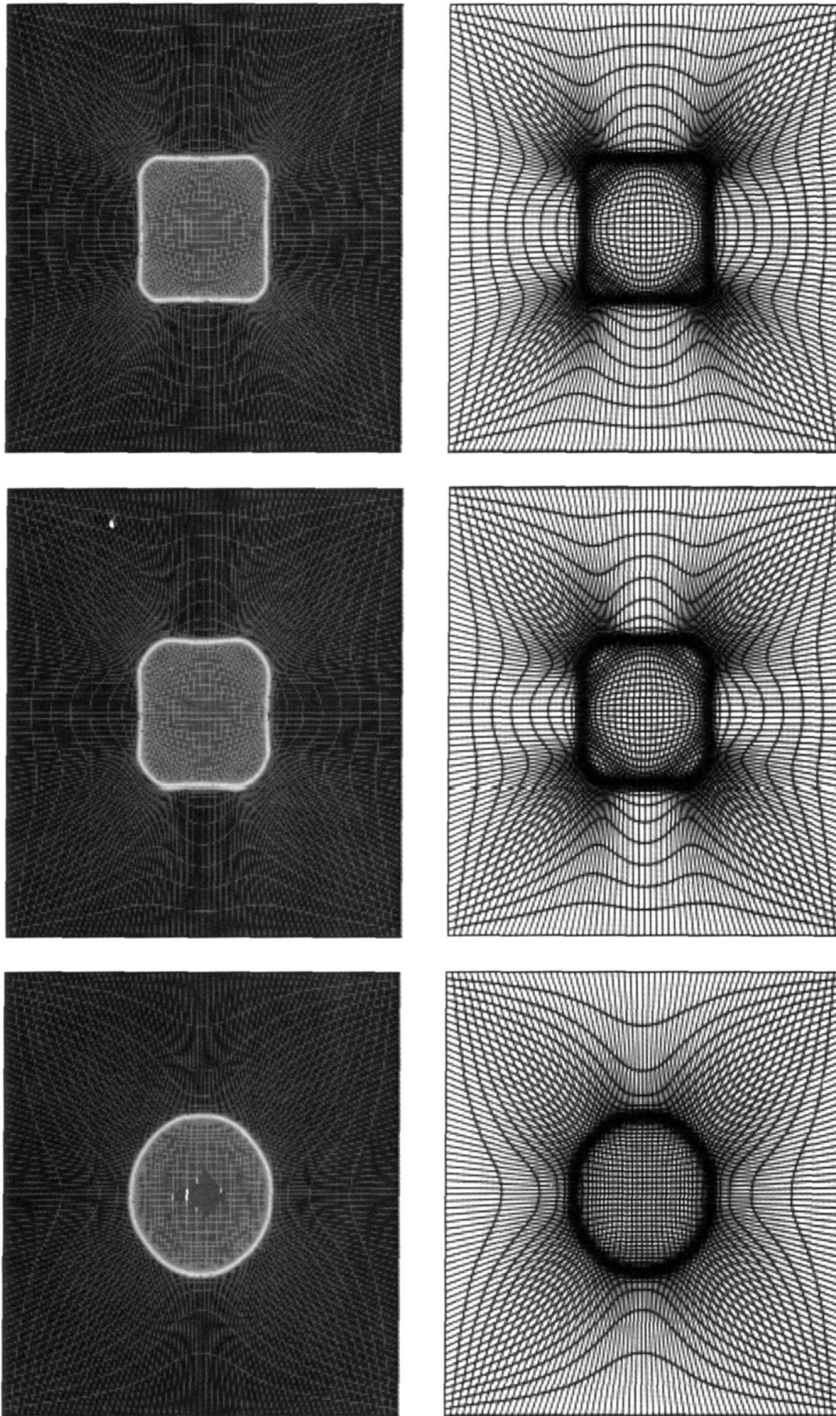


图 1 相场等高线图 and 相应的自适应网格分布(从上至下依次为 $t = 0.1, 0.2, 0.4$)

Fig. 1 Contour lines and the adaptive mesh distribution of the phase field model($t = 0.1, 0.2, 0.4$, from top to bottom)

4 结 语

研究了一种快速有效的自适应移动网格差分方法,并且成功地应用到 Allen-Cahn 型相场模型数值求解中。该算法将大量的网格点聚集在界面附近,整体上节省了数值计算的存储量,大大提高了计算效率,同时还保持了高分辨率。

参考文献:

- [1] LIU C, SHEN J. A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a Fourier-spectral method
© 1994-2012 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

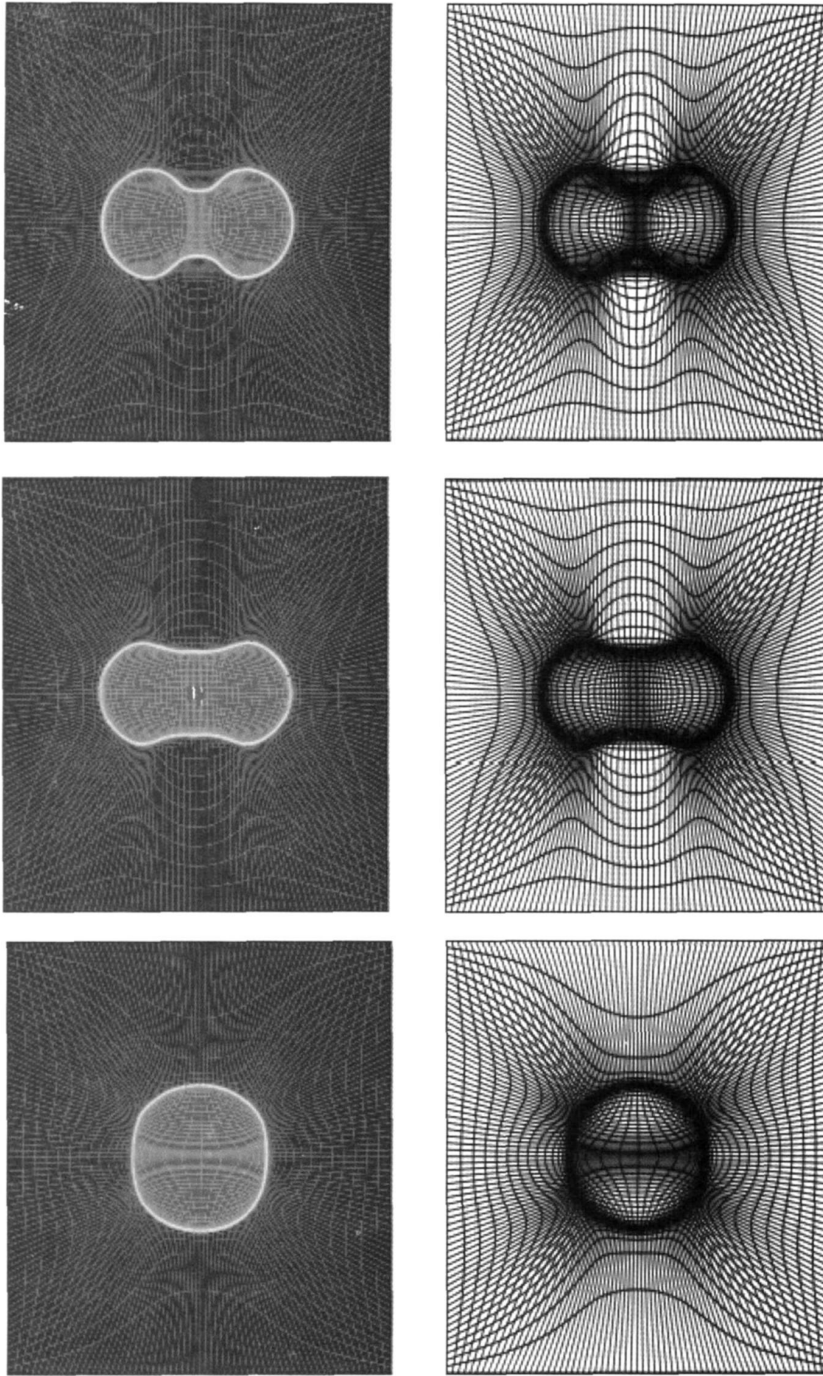


图2 相场等高线图 and 相应的自适应网格分布(从上至下依次为 $t = 0.1, 0.2, 0.8$)

Fig. 2 Contour lines and the adaptive mesh distribution of the phase-field model($t = 0.1, 0.2, 0.8$, from top to bottom)

[J]. Physica, 2003, 179: 214-228.

[2] XING Y, SHU C W. High order well balanced finite volume WENO schemes and discontinuous Galerkin methods for a class of hyperbolic systems with source terms[J]. J Comput Phys, 2006, 214: 567-598.

[3] TANG H Z, TANG T. Moving mesh methods for one and two dimensional hyperbolic conservation laws[J]. SIAM J Numer Anal, 2001, 41: 487-515.

[4] CENICEROS H D, HOU T Y. An efficient dynamically adaptive mesh for potentially singular solutions[J]. J Comput Phys, 2001, 172: 609-639.

[5] 李荣华. 偏微分方程数值解法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2004.