

ЭФФЕКТИВНОЕ УСТОЙЧИВОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ВРЕМЕНИ УРАВНЕНИЙ КАНА–ХИЛЛАРДА: ЯВНЫЕ, НЕЯВНЫЕ И ЯВНО-ИТЕРАЦИОННЫЕ СХЕМЫ¹⁾

© 2024 г. М. А. Бочев^{1,*}, И. А. Фахурдинов^{1,2,**}, Е. Б. Савенков^{1,***}

¹125047 Москва, Миусская пл., 4, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Россия

²115409 Москва, Каширское ш., 31, НИЯУ МИФИ, Россия

*e-mail: botchev@kiam.ru

**e-mail: mv1451003@gmail.com

***e-mail: savenkov@keldysh.ru

Поступила в редакцию 02.04.2024 г.

Переработанный вариант 02.04.2024 г.

Принята к публикации 02.05.2024 г.

Предлагается новый алгоритм численного интегрирования по времени уравнения Кана–Хилларда, основанный на совместном применении метода расщепления Эйра и схемы локальных итераций (ЛИМ) для решения конечномерной задачи на каждом временном шаге. Предложенный метод является градиентно-устойчивым, допускает расчет с большими шагами по времени и имеет явный характер вычислений. Приведены результаты численных расчетов, демонстрирующие возможности предложенного метода и его сравнение с распространенными способами интегрирования по времени уравнения Кана–Хилларда. Библ. 65. Фиг. 5. Табл. 10.

Ключевые слова: уравнение Кана–Хилларда, градиентно-устойчивые схемы, расщепление Эйра, схема локальных итераций, ЛИМ.

DOI: 10.31857/S0044466924080034, EDN: YBFTGQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Уравнение Кана–Хилларда было предложено в 1958 г. в оригинальной работе [1] для описания процесса разделения фаз в двухкомпонентных сплавах. В настоящее время оно имеет многочисленные приложения в самых разных областях науки, являясь одной из базовых моделей так называемой градиентной, или слабонелокальной, термомеханики сплошных сред (см. [2]). Как составная часть более сложных моделей, уравнение применяется в многофазной гидродинамике, материаловедении, задачах солидификации и теории фазовых переходов и многих других областях (см. [3], [4]). С теоретической точки зрения уравнение Кана–Хилларда является основой феноменологической теории спиноподобного распада (см. [5]) и имеет многочисленные применения в теоретической физике (см. [6]–[8] и ссылки там). Математической теории уравнения Кана–Хилларда посвящена обширная литература (см., например, [9]).

До недавнего времени уравнение Кана–Хилларда рассматривалось прежде всего как теоретическая модель соответствующих процессов. Однако в последние десятилетия оно стало активно применяться, независимо, либо как часть более сложных моделей, в качестве прикладного инструмента математического моделирования. Это привело к необходимости разработки эффективных вычислительных алгоритмов для его численного решения.

Возникающие при этом сложности связаны, прежде всего, с двумя основными факторами. Во-первых, уравнение Кана–Хилларда является нелинейным уравнением в частных производных, содержащим четвертые пространственные производные. Наличие нелинейностей приводит к тому, решения уравнения Кана–Хилларда эволюционируют на широком диапазоне пространственных и временных масштабов. Так, типичное решение задачи практически постоянно в пределах некоторых пространственных областей однородности, соответствующих «чистым» фазам системы. Эти области однородности, имеющие характерный диаметр d , отделены друг от друга тонкими слоями конечной толщины $\sim \epsilon \ll d$ («диффузными границами»), в пределах которых решение задачи является гладким, но меняется от своего минимального до своего максимального значения. Одновременно с этим, в начальный момент развития спиноподобного распада из случайного начального возмущения

¹⁾ Исследование Е. Б. Савенкова выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 2-11-00203).

(когда толщина ϵ диффузной границы сравнима с диаметром зон однородности, $\epsilon \sim d$), характерные времена эволюции решения имеют порядок ϵ^2 — в то время как в процессе дальнейшей эволюции, когда толщина диффузной границы становится существенно меньше диаметра областей однородности, $\epsilon \ll d$, характерные времена эволюции $\sim 1/\epsilon$ (см. [10], [11]).

В совокупности это приводит к тому, что чисто явные алгоритмы интегрирования уравнения Кана–Хилларда по времени являются устойчивыми при временных шагах $\tau \sim h^4$, где h — шаг по пространству. Это ограничение хотя и отвечает физике задачи, в ряде случаев неприемлемо с точки зрения эффективного решения содержательных задач. Одновременно с этим, чисто неявные разностные схемы не гарантируют однозначную разрешимость уравнений конечномерной задачи при достаточно больших шагах по времени (см. [12], [13]). По этой причине построение разностных схем, которые были бы (а) однозначно разрешимы при произвольных шагах по времени; (б) устойчивыми и (в) консервативными — является сложной задачей. Базовые алгоритмы, удовлетворяющие этим критериям, были построены сравнительно недавно в цикле работ (см. [14], [15]). Они основаны на выпуклом расщеплении энергии системы, см. разд. 3. Отметим, что под «устойчивостью» в контексте численного решения уравнения Кана–Хилларда понимается так называемая «градиентная» или, что то же, «энергетическая» устойчивость, гарантирующая выполнение условие невозрастания конечномерного аналога свободной энергии системы (см. ниже разд. 2, 3). Это условие является сильным (выражение для свободной энергии системы включает в себя первые производные решения), но необходимо для обеспечения термодинамической согласованности конечномерных аппроксимаций решения уравнений Кана–Хилларда.

В настоящее время среди основных направлений исследований в области построения эффективных вычислительных алгоритмов интегрирования по времени для уравнения Кана–Хилларда можно выделить построение адаптивных алгоритмов (они необходимы в силу широкого диапазона характерных времен эволюции решения, см. выше), разработку энергетически–устойчивых схем интегрирования по времени (обеспечивающих термодинамическую корректность численного решения) и построение алгоритмов, с одной стороны, обеспечивающих приемлемый асимптотический запас устойчивости, а с другой — однозначную разрешимость конечномерной задачи и вычислительную эффективность.

Сколь-либо полный обзор работ по способам построения и исследования временных аппроксимаций уравнения Кана–Хилларда существенно выходит за рамки настоящей работы. Общее представление об основных направлениях разработки временных аппроксимаций для уравнения Кана–Хилларда дает обзор [16]. В качестве примера других работ отметим [17]–[23] (адаптивные алгоритмы и методы высокого порядка), [24]–[26] (схемы, допускающие «большие» шаги по времени), [14], [15], [27]–[33] (энергетически–устойчивые схемы).

Для построения пространственных аппроксимаций уравнений Кана–Хилларда могут быть использованы различные методы, среди которых классические методы конечных разностей, конечных объемов, спектральные методы, аппроксимации на основе классического и изогометрического метода конечных элементов (см. [34]–[47]).

Целью настоящей работы является численное исследование нового класса методов интегрирования по времени для решения уравнения Кана–Хилларда. Новые алгоритмы основаны на двух основных идеях: (а) использование явно–неявной аппроксимации по времени на основе выпуклого расщепления энергии системы в соответствии с работами [14], [15], обеспечивающего энергетическую устойчивость схемы, и (б) применение модифицированной схемы локальных итераций (ЛИМ), позволяющей сочетать явный характер вычислений с устойчивостью неявных схем. Метод расщепления Эйра (см. [14], [15]) в настоящее время является основой построения большинства аппроксимаций уравнения Кана–Хилларда, с одной стороны, обладающих свойством энергетической устойчивости, а с другой стороны — гарантирующих существование и единственность решения конечномерной задачи.

Методы локальных итераций (ЛИ) представляют собой явные схемы интегрирования по времени, где устойчивость достигается за счет применения многочленов Чебышёва. Итерации с многочленами Чебышёва используются в схемах интегрирования по времени по крайней мере с 50-х годов прошлого века (см. [48], [49]). Отметим, что в схемах ЛИ чебышёвские итерации применяются не для приближенного решения систем, возникающих в неявных схемах — в этом случае, как показано в 1952 г. Гельфандом и Локуциевским (см. [50] и [51, гл. 10, § 4.12]), существенного выигрыша в вычислительной работе по сравнению с явной схемой получить невозможно. Принципиальной особенностью схем ЛИ является то, что итерации Чебышёва выбираются из соображений устойчивости и точности интегрирования по времени, а не из соображений скорейшей сходимости итераций к решению неявной схемы. Схемы ЛИ была предложены в работах [52]–[55] и получили развитие в статьях [56]–[58], см. также ссылки в [58]. Применение специальных чебышёвских итераций в схемах ЛИ позволяет использовать существенно большие шаги по времени, чем требуемые для устойчивого применения двухслойной явной схемы, сохраняя при этом число явный характер вычислений.

Первая схема ЛИ, представленная в [52]–[54], не обладает свойством монотонности (не сохраняет неотрицательности численного решения) и не является асимптотически устойчивым при больших временах $t \rightarrow \infty$.

Поэтому в данной работе нами используется модифицированная схема локальных итераций ЛИМ, разработанная в [55], которая обладает этими свойствами. Подробное описание и сравнение вариантов схем ЛИ можно найти в [58]. В настоящее время известен целый ряд примеров успешного применения ЛИМ для решения достаточно сложных задач (см., например, [59]–[61]). В работе [62] схема ЛИМ была применена для решения уравнений Кана–Хилларда в рамках численной реализации полной математической модели процессов кристаллизации металлов. В этой работе уравнение Кана–Хилларда линеаризовывалось на каждом временном слое, и метод ЛИМ применялся для решения линеаризованной задачи. Сравнение предложенного алгоритма с другими известными современными схемами интегрирования по времени не выполнялось, равно как не исследовались такие его свойства как энергетическая устойчивость.

В настоящей работе на примере модельного пространственно–одномерного уравнения Кана–Хилларда предложены новые варианты построения временных аппроксимаций, основываясь на методе ЛИМ и явно–неявных аппроксимациях по Эйру. Приводятся результаты численного исследования предложенного метода и его сравнение с рядом других разностных аппроксимаций.

В разд. 2 приведено краткое описание модели. В разд. 3 сначала приведено краткое описание известных алгоритмов, далее подробно рассматриваются новые методы. В разд. 4 представлены результаты численных расчетов. В разд. 5 дается обсуждение основных полученных результатов работы.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В рассматриваемом одномерном случае уравнение Кана–Хилларда имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(M \frac{\partial \mu}{\partial x} \right), \quad \mu(c) = F'(c) - \epsilon^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad F(c) = c^2(1-c)^2, \quad (2.1)$$

где $c = c(x, t)$ — искомая функция, $M = M(c) > 0$ — коэффициент подвижности (далее в расчетах считаем $M \equiv 1$), $\mu = \mu(c, \partial c / \partial x)$ — химический потенциал, $\epsilon > 0$, $\epsilon = \text{const}$ — параметр, определяющий толщину диффузной границы, t — время, x — пространственная переменная.

Уравнение (2.1) решается в одномерной области $\Omega = (0, 1)$ при $t \in (0, T]$. На границе области заданы граничные условия

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial \mu}{\partial x} = 0, \quad (2.2)$$

а при $t = 0$ — начальное условие

$$c(x, 0) = c^0(x). \quad (2.3)$$

С физической точки зрения уравнение (2.1) может быть получено следующим способом (см. [63]). Рассмотрим двухкомпонентную систему с концентрациями компонент $c_{1,2}$, $c_1 + c_2 = 1$. Будем считать, что свободная энергия такой системы имеет вид

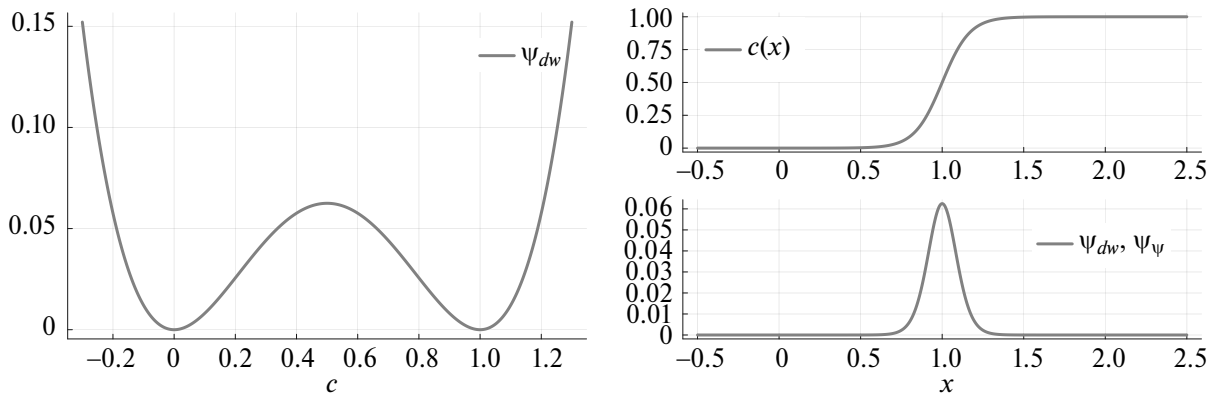
$$\Psi[c, \nabla c] = \int_{\Omega} \psi(c, \nabla c) dx, \quad (2.4)$$

где $c = c_1$,

$$\psi(c, \nabla c) = F(c) + \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla c|^2, \quad F(c) = c^2(1-c)^2, \quad (2.5)$$

где ψ — плотность свободной энергии системы, F — там называемый двухъямный потенциал, $\epsilon > 0$ — малый параметр. Первое слагаемое в (2.5) описывает «разделяющую» часть свободной энергии и обеспечивает несмешение фаз (и, как следствие, областей постоянных значений концентраций $c_{1,2}$). Второе слагаемое в (2.5) позволяет отнести к диффузной границе раздела фаз заданную энергию. Входящий в него параметр ϵ определяет толщину диффузной границы, разделяющей «чистые» фазы. Учет градиентных членов позволяет учесть зависимость энергии системы не только от количества каждого компонента, но и от формы областей, которые они занимают. Такой вид свободной энергии является типичным и возникает во многих моделях слабонелокальной (или градиентной) термомеханики.

Отметим, что потенциал $F(c)$ в (2.5) является эмпирическим. Его характеристическим свойством является наличие двух минимумов при значениях $c = 0, 1$, которые отвечают «чистым» фазам. Состоянию $c = 1/2$ соответствует максимуму $F(c)$; это состояние неустойчиво и препятствует образованию смеси фаз. Более точной и физически обоснованной моделью является так называемый логарифмический потенциал (см. [63]), удовлетворяющий тем же характеристическим условиям (указанный выше вид энергии может быть обоснованно получен как его аппроксимация).



Фиг. 1. Слева: вид разделяющей части Ψ_{dw} свободной энергии. Справа: типичное решение задачи и распределение энергии.

Приведенное обсуждение иллюстрируется на фиг. 1. Слева на нем показан вид разделяющей части $\Psi_{dw} \equiv F$ свободной энергии. Видно, что соответствующая зависимость имеет два минимума, соответствующие «чистым» фазам, то есть состояниям $c = c_1 = 0, c_2 = 1$ и $c = c_1 = 1, c_2 = 0$. Состояние системы в окрестности точки $c = 1/2$ является неустойчивым. На этом же рисунке справа показано типичное стационарное решение системы и графики различных членов свободной энергии ψ . Видно, что градиентная часть свободной энергии отлична от нуля лишь в пределах диффузной границы. Одновременно с этим, «разделяющая» часть свободной энергии равна нулю вне области, занятой диффузной границей.

Далее можно показать, что в случае, когда c является консервативной величиной (как в рассматриваемом здесь случае), кинетическое уравнение, описывающее эволюцию поля $c = c(x, t)$, имеет вид (см. [6], [63])

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (-M \nabla \mu), \quad \mu = \frac{\delta \Psi[c, \nabla c]}{\delta c}, \quad (2.6)$$

где $\delta(\cdot)/\delta c$ — функциональная производная (производная Гато). При постоянном M в силу (2.5) последнее уравнение принимает вид

$$\frac{1}{M} \frac{\partial c}{\partial t} = \Delta \mu, \quad \mu = -\epsilon^2 \Delta c + F'(c),$$

где Δ — лапласиан, что в рассматриваемом одномерном случае в точности совпадает с (2.1).

Можно показать (см. [12], [63]), что решения уравнения (2.1) обладают следующими фундаментальными свойствами: на решениях $c = c(x, t)$ справедливо

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} c = 0, \quad \frac{d}{dt} \Psi[c, \nabla c] \leq 0.$$

Другими словами, c является консервативной величиной, а свободная энергия невозрастающей функцией на решениях уравнений (2.1) или (2.6) с однородными граничными условиями (2.2).

Это сразу же накладывает соответствующие ограничения на численный алгоритм решения уравнения (2.1) — он должен быть консервативным (добиться этого достаточно легко) и энергетически — устойчивым в смысле выполнения дискретного эквивалента последнего неравенства (это более сложная задача). Помимо этого, конечномерная задача должна быть однозначна разрешима при заданном шаге по времени — как показала практика, добиться этого не так просто (это связано с тем, потенциал $F(c)$ не является выпуклым и, как следствие, конечномерное решение может «оказаться» в локальном минимуме, не являющимся глобальным и не достижимым из начального состояния).

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ

В настоящем разделе описаны вычислительные алгоритмы, применяемые далее для решения уравнения Кана-Хилларда. В первом разделе рассмотрены классические алгоритмы различной степени неясности для интегрирования уравнения Кана-Хилларда по времени. По этой причине рассмотрены только полудискретные аппроксимации. Второй раздел посвящен описанию полностью дискретных алгоритмов, с учетом конкретного способа аппроксимации по пространству. Наконец, в третьем разделе приводится описание новых алгоритмов на основе метода ЛИМ, предлагаемых в настоящей работе.

3.1. Классические алгоритмы

Рассмотрим ряд алгоритмов, которые далее будут принимать участие в сравнительном тестировании методов. Все они хорошо известны и описаны в многочисленной литературе. Для конкретики рассмотрим те из них, которые представлены в работе [64]. Все приведенные в настоящем разделе схемы аппроксимируют уравнение (2.1) и являются консервативными.

Всюду далее пространственные производные аппроксимируются методом конечных разностей. Будем считать, что для аппроксимации уравнения в области Ω используется равномерная сетка с шагом $h = 1/N$ и узлами $x_i = (i - 1/2)h$, где $i = \overline{0, N+1}$, а N — число ячеек сетки. Границы $x = 0$ и $x = 1$ области соответствуют полуцелым узлам $x_{1/2} = (x_0 + x_1)/2 = 0$ и $x_{N+1/2} = (x_N + x_{N+1})/2 = Nh$. Узлы x_1, x_2, \dots, x_N являются внутренними узлами области. Для аппроксимаций по времени используется равномерная сетка с шагом τ с узлами $t_n = n\tau$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Таким образом, решение конечномерной задачи определено в точках (x_i, t_j) , $i = \overline{1, N}$, $j = 0, 1, \dots$. Соответствующие значения сеточных функций c_h будем обозначать как $c_i^n = c(x_i, t_n)$.

Всюду далее Δ_h обозначает стандартную трехточечную конечно-разностную аппроксимацию оператора Лапласа. В рассматриваемом пространственно-одномерном случае его значение в узлах $i = \overline{1, N-1}$ пространственной сетки определено как

$$\Delta_h c_i = \frac{1}{h^2} (c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}).$$

К «граничным» узлам $i = 0, N$ отнесены уравнения, аппроксимирующее однородное граничное условие Неймана (2.2) для аргумента оператора Лапласа,

$$c_0 - c_1 = 0, \quad c_N - c_{N-1} = 0. \quad (3.1)$$

Результирующий сеточный оператор, учитывающий дискретные граничные условия, далее будем также обозначать символом Δ_h .

Явная схема (explicit Euler) представляет собой аппроксимации уравнения (2.1) простейшего типа и имеет вид

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^n, \quad \mu_i^n = F'(c_i^n) - \epsilon^2 \Delta_h c_i^n.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени, второй — по пространству, является линейной и устойчивой при $\tau \sim h^4$, не обладает свойством энергетической устойчивости.

Неявная схема (implicit Euler) имеет вид

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^{n+1}, \quad \mu_i^{n+1} = F'(c_i^{n+1}) - \epsilon^2 \Delta_h c_i^{n+1}.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени, второй — по пространству, является нелинейной, однозначно разрешима и градиентно-устойчива только при достаточно маленьких шагах по времени, см. табл. 1.

Схема Кранка-Николсон (КН) имеет вид

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^{n+1/2}, \quad \mu_i^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\mu_i^n + \mu_i^{n+1}),$$

где μ_i^n, μ_i^{n+1} были определены выше. Схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству, является нелинейной, градиентно-устойчива и однозначно разрешима при достаточно маленьких шагах по времени, см. табл. 1.

Полунеявная схема (semi-implicit Euler) имеет вид

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^{n+1}, \quad \mu_i^{n+1} = F'(c_i^n) - \epsilon^2 \Delta_h c_i^{n+1}.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени, второй — по пространству, является линейной, однозначно разрешима, не обладает свойством энергетической устойчивости.

3.2. Расщепление Эйра

Приведенные выше схемы не обладают свойством энергетической устойчивости и/или не являются однозначно разрешимыми при достаточно больших шагах по времени (см. [12], [13]). Известный в настоящее время эффективный и общий способ построения разностных схем, как однозначно разрешимых при любых шагах по времени, так и энергетически устойчивых, был предложен в основополагающих работах Дэвида Эйра

Таблица 1. Свойства разностных схем по [12–15, 40] (* — при надлежащем выборе параметров расщепления, см. [40]).

Схема	Линейность	Град.-устойчивость	Разрешимость
Явная	Да	Нет	Да
Неявная	Нет	Условная, $\tau \leq \frac{1}{4}h^2$	$\tau \leq \frac{1}{18}h^2$
Кранка-Николсон	Нет	Условная	$\tau \leq \frac{1}{9}h^2$
Полунеявная	Да	Нет	Да
Нелин.-стаб.	Нет	Безусловная	Да
Линейно-стаб.	Да	Безусловная*	Да

(David J. Eyre) (см. [14], [15]). В силу того, что далее соответствующие математический аппарат будет использован при построении новых схем, рассмотрим этот вопрос подробнее.

Суть подхода Эйра заключается в следующем. Плотность свободной энергии ψ системы, см. (2.4), не является выпуклым функционалом. Это связано с тем, что разделяющая часть свободной энергии является «двухмяным» потенциалом и невыпукла. Предположим, тем не менее, что ψ можно представить в виде суммы двух функционалов так, что

$$\psi = \psi_c + \psi_e, \tag{3.2}$$

где ψ_c и $-\psi_e$ — выпуклые функции. Индексы «с» («contraction») и «е» («expansion») отражают физическую суть отдельных слагаемых. Здесь «выпуклость» функции f означает положительную определенность соответствующего гессиана, см. [13]; конкретно в рассматриваемом случае функция $f(x)$ выпукла, если $f''(x) \equiv d^2f/dx^2 \geq 0$. Тогда полудискретные (только по времени) аппроксимации вида

$$\frac{1}{M} \frac{c^{n+1} - c^n}{\tau} = \Delta [\mu_c(c^{n+1}) + \mu_e(c^n)], \tag{3.3}$$

где

$$\mu_{c,e} = \frac{\delta\psi_{c,e}}{\delta c}, \quad \mu = \mu_c + \mu_e,$$

обеспечивают выполнение следующего неравенства (означающего градиентную устойчивость схемы):

$$\psi(c^{n+1}) \leq \psi(c^n)$$

для любых шагов по времени $\tau > 0$. При этом выпуклость части ψ_c энергии, учитываемой в схеме неявно, гарантирует однозначную разрешимость (3.3).

Рассмотрим конкретный вид функционала энергии (2.4). С учетом того, что градиентное слагаемое в (2.4) относится к выпуклой части свободной энергии, расщепление ψ можно представить в виде

$$\psi_c = \frac{1}{2}|\nabla c|^2 + F_c, \quad \psi_e = F_e, \quad F_c + F_e = F.$$

Таким образом, построение расщепления энергии сводится к построению расщепления ее «разделяющей» части F так, чтобы выполнялось

$$F = F_c + F_e, \quad F_c'' \geq 0, \quad -F_e'' \geq 0. \tag{3.4}$$

Выражение для химического потенциала в этом случае принимает вид

$$\mu = \mu_c + \mu_e, \quad \mu_c = -\epsilon^2 \Delta c + F_c', \quad \mu_e = F_e',$$

а полудискретную схему (3.3) можно записать так:

$$\frac{1}{M} \frac{c^{n+1} - c^n}{\tau} = -\epsilon^2 \Delta^2 c + \Delta F_c'(c^{n+1}) + \Delta F_e'(c^n). \tag{3.5}$$

Расщепление вида (3.4) может быть построено разными способами. Один из них основан непосредственно на представлении разделяющей части F свободной энергии в виде двух слагаемых, удовлетворяющих соответствующим свойствам (градиентная часть свободной энергии (см. (2.5)) всегда относится к выпуклой части ψ

свободной энергии). Другой способ заключается в том, что выбирается некоторая регуляризирующая функция F_r , так что

$$F_c = F + F_r, \quad F_e = F - F_r.$$

Содержательно оба способа совпадают, однако технически, имея ввиду возможные обобщения, их удобнее различать.

Рассмотрим конкретное выражение для F , определяемое в настоящей работе в соответствии с (2.5). Для него справедливо

$$F(c) = c^2(1 - c^2), \quad F'(c) = 2c(2c^2 - 3c + 1), \quad F''(c) = 2(6c^2 - 6c + 1).$$

Корнями уравнения $F''(c) = 0$ являются $c_{1,2} = (3 \pm \sqrt{3})/6$, и, таким образом, $F''(c) < 0$ при $(3 - \sqrt{3})/6 < c < (3 + \sqrt{3})/6$; $F''(c) \geq 0$ при $c \leq (3 - \sqrt{3})/6$ и $c \geq (3 + \sqrt{3})/6$. Минимальное значение $F''(c)$ достигается в точке $c = 1/2$ и равняется -1 . Максимальное значение $F''(c)$ достигается при $c = 0$ и $c = 1$ и равняется 2. Таким образом, чтобы обеспечить выпуклость F_c и $-F_e$, достаточно положить

$$F_c = F(c) + \frac{1}{2}c^2, \quad F_e = -\frac{1}{2}c^2.$$

В этом случае приходим к схеме *нелинейно-стабилизированного расщепления* (НЛСР или non-linearly stabilized splitting, NLSS) вида:

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^{n+1}, \quad \mu_i^{n+1} = [F'(c_i^{n+1}) + c_i^{n+1}] - c_i^n - \epsilon^2 \Delta_h c_i^{n+1}. \quad (3.6)$$

Ее также можно записать в виде

$$\frac{1}{M\tau} (c_i^{n+1} - c_i^n) = (\Delta_h - \epsilon^2 \Delta_h^2) c_i^{n+1} + \Delta_h F'(c_i^{n+1}) - \Delta_h c_i^n.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени, второй — по пространству, является неявной, нелинейной, энергетически устойчива при произвольных шагах по времени.

Если же положить

$$F_c = c^2, \quad F_e = -c^2 + F(c),$$

то приходим к схеме *линейно-стабилизированного расщепления* (ЛСР или linearly stabilized splitting, LSS), которая имеет вид

$$\frac{1}{M} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} = \Delta_h \mu_i^{n+1}, \quad \mu_i^{n+1} = 2c_i^{n+1} + [F'(c_i^n) - 2c_i^n] - \epsilon^2 \Delta_h c_i^{n+1}.$$

Для дальнейшего использования ее удобно записать в виде

$$\frac{1}{M\tau} (c_i^{n+1} - c_i^n) = (2\Delta_h - \epsilon^2 \Delta_h^2) c_i^{n+1} + \Delta_h F'(c_i^n) - 2\Delta_h c_i^n.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени, второй — по пространству, является неявной, энергетически устойчива при произвольных шагах по времени при правильно выбранных параметрах расщепления (в общем случае, зависящих от решения задачи, см. [40]). В отличие от нелинейно-стабилизированной схемы (3.6) она является *линейной* относительно неизвестных на верхнем временном слое. Отметим, что в работе [13] анализируется целое трехпараметрическое семейство схем указанного вида.

Свойства приведенных выше схем в компактном виде приведены в табл. 1.

В полностью дискретном случае градиентная устойчивость схемы предполагает аппроксимацию функционала свободной энергии (2.4). В настоящей работе она согласована с используемой аппроксимацией уравнения и имеет вид

$$\Psi_h(\mathbf{c}) = h \sum_{i=1}^N F'(c_i) + \frac{1}{2} \epsilon^2 h \sum_{i=1}^N \frac{(c_{i+1} - c_i)^2}{h^2}. \quad (3.7)$$

Пусть далее матрица \mathbf{A} размерности $N \times N$ соответствует указанной выше аппроксимации $-\Delta_h$ оператора $-\Delta$ с учетом однородных граничных условий Неймана (3.1). Дискретизация по пространству сводит исходную начально-краевую задачу (2.1)–(2.3) к задаче Коши

$$\frac{1}{M} \mathbf{c}' = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}), \quad \mathbf{c}(0) = \mathbf{c}^0, \quad (3.8)$$

где компоненты вектор–функции $\mathbf{c}(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ — это значения искомого решения на пространственной сетке, а вектор \mathbf{c}^0 содержит значения на сетке заданной функции $c^0(x)$.

Пусть \mathbf{c}^n — вектор решения длины N на временном слое n . Тогда приведенные выше схемы могут быть компактно записаны следующим образом:

- явная (explicit Euler):

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^n) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^n); \quad (3.9)$$

- неявная (implicit Euler):

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^{n+1}) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1}); \quad (3.10)$$

- Кранка–Николсон (КН):

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\frac{1}{2} \mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^{n+1}) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1} + F'(\mathbf{c}^n) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^n); \quad (3.11)$$

- полунявная:

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^n) + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1}); \quad (3.12)$$

- линейно-стабилизированное расщепление (ЛСР):

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^n) - 2\mathbf{c}^n + 2\mathbf{c}^{n+1} + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1}); \quad (3.13)$$

- нелинейно-стабилизированное расщепление (НЛСР):

$$\frac{\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n}{\tau} = -\mathbf{A} (F'(\mathbf{c}^{n+1}) + \mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n + \epsilon^2 \mathbf{A} \mathbf{c}^{n+1}). \quad (3.14)$$

Описанные выше схемы имеют различную вычислительную сложность. Неявные нелинейные схемы (полностью неявная схема, схема типа Кранка–Николсон, нелинейно-стабилизированная схема) требуют решения на каждом временном слое системы нелинейных алгебраических уравнений, например, методом Ньютона; в свою очередь, на каждой ньютоновской итерации необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений. Неявные, но линейные схемы (полунявная схема, линейно-стабилизированная схема) требуют решения только одной системы линейных алгебраических уравнений для определения решения на каждом временном слое. Наконец, явные схемы не требуют ни того, ни другого и имеют минимальную «стоимость» расчета решения на шаг по времени. Вместе с тем, неявные схемы, как правило, позволяют использовать существенно большие шаги по времени, чем явные. С другой стороны, решение системы линейных алгебраических уравнений в методе Ньютона, или независимо, является сложной и вычислительно затратной процедурой в том случае, если рассматриваются постановки с высокими сеточными размерностями. Это связано с тем, что итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений, обеспечивающие высокую скорость сходимости итераций, обычно не допускают эффективную параллельную реализацию, особенно с использованием гибридных вычислительных систем с графическими ускорителями. Одновременно с этим, простые методы типа метода простой итерации или последовательной верхней релаксации, допускают эффективную параллельную реализацию, но сходятся слишком медленно для практического применения.

Целью настоящей работы является разработка эффективного вычислительного алгоритма, с одной стороны — градиентно-устойчивого и допускающего существенно большие временные шаги, чем чисто явная схема, а с другой — допускающего эффективную вычислительную реализацию в том числе с применением высокопроизводительных вычислительных систем с графическими ускорителями. Основной идеей алгоритма является использование линейно-стабилизированной схемы Эйра и использование модифицированной схемы локальных итераций ЛИМ для решения уравнений на временном слое. При этом расщепление Эйра позволяет использовать большие шаги по времени при сохранении градиентной устойчивости, а применение ЛИМ — обеспечивает вычислительную эффективность.

3.3. ЛИМ, модифицированная схема локальных итераций

Схему ЛИМ можно рассматривать как специальную явную схему, где используется многочлен Чебышёва такого порядка p , чтобы схема была устойчива для выбранного шага по времени τ и обладала свойством монотонности (неотрицательности решения). Сформулируем схему ЛИМ на основе схемы линейно-стабилизированного расщепления ЛСР (3.13), которую запишем в виде

$$\mathbf{c}^{n+1} = [\mathbf{I} + \tau \widehat{\mathbf{A}}]^{-1} \widehat{\mathbf{f}}^n, \quad \widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(2\mathbf{I} + \epsilon^2 \mathbf{A}), \quad \widehat{\mathbf{f}}^n = \mathbf{c}^n + \tau \mathbf{A}(2\mathbf{c}^n - F'(\mathbf{c}^n)), \quad (3.15)$$

где \mathbf{I} — единичная матрица $N \times N$. Подчеркнем, что обратная матрица здесь, разумеется, не вычисляется, а решается линейная система. В схеме ЛИМ обратная матрицы заменяется специально выбранным матричным многочленом Чебышёва. Пусть λ_∞ — оценка наибольшего собственного значения $\widehat{\mathbf{A}}$ (на практике можно положить $\lambda_\infty = \|\widehat{\mathbf{A}}\|_1 = \max_j \sum_i |\widehat{a}_{ij}|$). Определим порядок p многочлена Чебышёва, для которого будет выполняться устойчивость, так:

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_\infty + 1} \right\rceil, \quad (3.16)$$

где, для $x \in \mathbb{R}$, $\lceil x \rceil$ обозначает наименьшее целое число, большее или равное x . Вычислим корни β_m многочлена Чебышёва степени p ,

$$\{\beta_m, m = 1, \dots, p\} = \left\{ \cos \pi \frac{2i-1}{2p}, i = 1, \dots, p \right\},$$

и упорядочим их в порядке, гарантирующем устойчивость, и так, что корень $\beta_1 = \cos(\pi/2p)$ является первым по порядку. Положим $z_1 = \beta_1$ и определим параметры чебышёвских итераций

$$a_m = \frac{\lambda_\infty}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad m = 1, \dots, p.$$

Обозначим $\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{c}^n$ и получим решение \mathbf{c}^{n+1} схемы ЛИМ на следующем слое, выполняя $2p - 1$ итераций Чебышёва следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{(m)} &= \frac{1}{1 + \tau a_m} \left(\mathbf{c}^n + \tau a_m \mathbf{y}^{(m-1)} + \tau (\widehat{\mathbf{f}}^n - \widehat{\mathbf{A}} \mathbf{y}^{(m-1)}) \right), \quad m = 1, \dots, p, \\ \mathbf{y}^{(p+m-1)} &= \frac{1}{1 + \tau a_m} \left(\mathbf{c}^n + \tau a_m \mathbf{y}^{(m-1)} + \tau (\widehat{\mathbf{f}}^n - \widehat{\mathbf{A}} \mathbf{y}^{(m-1)}) \right), \quad m = 2, \dots, p, \\ \mathbf{c}^{n+1} &= \mathbf{y}^{(2p-1)}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Заметим, что $a_1 = 0$ и, как нетрудно увидеть, решение $\mathbf{y}^{(1)}$ на первой итерации совпадает с решением на следующем шаге по времени явной схемы, сами же чебышёвские итерации начинаются с вычисления $\mathbf{y}^{(2)}$. Если в (3.17) ограничиться первой группой итераций, где вычисляются $\mathbf{y}^{(1)}, \dots, \mathbf{y}^{(p)}$, то, положив $\mathbf{c}^{n+1} = \mathbf{y}^{(p)}$, получим обычную, немодифицированную схему локальных итераций (схему ЛИ). Как отмечалось выше, в этой, обычной, схеме ЛИ гарантируется устойчивость (при решении параболических задач), но свойство монотонности решения не гарантируется. Как видим, в схеме ЛИМ (3.17) при выполнении второй группы итераций, где вычисляются $\mathbf{y}^{(p+1)}, \dots, \mathbf{y}^{(2p-1)}$, чебышёвские итерации повторяются (с теми же параметрами a_m), но первый итерационный шаг с $a_1 = 0$ (дающий явную схему) не делается. Можно показать (см. [58]), что формулы (3.17) представляются в операторном виде

$$\mathbf{c}^{n+1} = (\mathbf{I} - \mathbf{F}_p^2) [\mathbf{I} + \tau \widehat{\mathbf{A}}]^{-1} \widehat{\mathbf{f}}^n, \quad (3.18)$$

где $\widehat{\mathbf{A}}$ и $\widehat{\mathbf{f}}^n$ определены в (3.15), а \mathbf{F}_p — оператор многочлена Чебышёва,

$$\mathbf{F}_p = \prod_{m=p}^{m=1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{1 + \tau a_m} (\mathbf{I} + \tau \widehat{\mathbf{A}}) \right).$$

Если в формуле (3.18) заменить \mathbf{F}_p^2 на \mathbf{F}_p , то получаем операторное представление обычной схемы ЛИ. Таким образом, как видим, в схеме ЛИМ вместо многочлена Чебышёва (как в обычной схеме ЛИ), используется квадрат этого многочлена, что и приводит к монотонности схемы.

Поскольку рассматриваемая схема ЛИМ (3.17) получена нами на основе линейно—стабилизированного расщепления (3.13), будем называть ее схемой ЛИМ–ЛСР. Чтобы отследить эффект применения расщепления Эйра в этой схеме, в представленные ниже численные тесты включим еще одну модификацию схемы ЛИМ, получаемую из линеаризации чисто неявной схемы (3.10). Проведем такую линеаризацию, аппроксимируя нелинейный неявный член в (3.10) следующим образом:

$$F'(\mathbf{c}^{n+1}) \approx F'(\mathbf{c}^n) + J_n(\mathbf{c}^{n+1} - \mathbf{c}^n), \quad (3.19)$$

где J_n — матрица Якоби отображения F' , вычисленная в \mathbf{c}^n . Подставка приближения (3.19) в (3.10) приводит к линеаризованной неявной (ЛН) схеме

$$\mathbf{c}^{n+1} = [\mathbf{I} + \tau \tilde{\mathbf{A}}_n]^{-1} \tilde{\mathbf{f}}^n, \quad \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(J_n + \epsilon^2 \mathbf{A}), \quad \tilde{\mathbf{f}}^n = \mathbf{c}^n + \tau \mathbf{A}(J_n \mathbf{c}^n - F'(\mathbf{c}^n)), \quad (3.20)$$

где, так же как и в схеме (3.15), подразумевается решение линейной системы, так что обратная матрица не вычисляется. Сравнивая схемы (3.15) и (3.20), можно заметить, что заменяя J_n в (3.20) на $2\mathbf{I}$, получим схему (3.15).

Схема ЛИМ на основе схемы (3.20) формулируется в точности так же, как и на основе (3.15). Для этого достаточно повторить приведенные выше выкладки, заменяя $\tilde{\mathbf{A}}$ и $\tilde{\mathbf{f}}_n$ на, соответственно, $\tilde{\mathbf{A}}_n$ и $\tilde{\mathbf{f}}_n$. Назовём такую схему ЛИМ–ЛН (схема ЛИМ линеаризованная неявная).

Вычислительная эффективность схем ЛИМ следует из формулы числа итераций (3.16) и следующих соображений (см. [54], [58]). Если в решаемой задаче интервал по времени, на котором требуется просчитать задачу, увеличивается в s раз, то так же в s раз увеличиваются затраты при расчете явной схемой (в s раз возрастает требуемое число шагов во времени). Такое же увеличение затрат наблюдается и при увеличении в s раз верхней спектральной границы λ_∞ (поскольку шаг явной схемы ограничен условием устойчивости, обычно имеющего вид $\tau \leq 2/\lambda_\infty$). Напомним, что для уравнения Кана–Хилларда, вообще говоря, имеем $\lambda_\infty \sim h^{-4}$. Для схем ЛИМ вычислительные затраты растут медленнее: увеличение временного интервала или верхней спектральной границы λ_∞ в s раз означает увеличение затрат примерно в \sqrt{s} раз (поскольку число чебышёвских итераций $p \sim (\tau \lambda_\infty)^{1/2}$, см. (3.16)). Из приведенных оценок ясно, что выигрыш по вычислительным затратам, достигаемый схемами ЛИМ, будет расти с ростом размерности задачи $N = 1/h$ (см. [54], [58]). Тем не менее, следует учитывать, что на практике потенциальный выигрыш может быть ограничен другими факторами, например, условиями точности расчета.

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

4.1. Тесты на градиентную устойчивость

В представленных здесь тестах решается начально—краевая задача (2.1)–(2.3) для одномерного уравнения Кана–Хилларда. Для дискретизации по пространству используются стандартные конечные разности второго порядка точности на равномерной сетке, описанные в начале п. 3.1. В результате дискретизации по пространству из исходной начально—краевой задачи получаем задачу Коши (3.8). Ее численное интегрирование проводим схемами (3.9)–(3.14) и новыми схемами локальных итераций (3.17) на основе схем (3.13) и (3.20) (ЛИМ–ЛСР и ЛИМ–ЛН). Значения ϵ будем задавать следующими двумя способами:

$$\epsilon = \epsilon_4(h), \quad \epsilon_m(h) \equiv \frac{hm}{2\sqrt{2} \operatorname{arth}(9/10)}, \quad (4.1)$$

$$\epsilon = \epsilon_4(1/64), \quad (4.2)$$

т.е. ϵ задается либо в зависимости от шага пространственной сетки h (способ (4.1), либо используется фиксированное значение $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$ с сетки $N = 64$ (способ (4.2)). Заметим, что $m = 4$ в формуле (4.1) определяет характерное число ячеек пространственной сетки, на которых стационарное решение меняется от минимального до максимального значения.

В табл. 2 для тестируемых схем представлены величины максимальных шагов по времени, при которых наблюдается градиентная устойчивость. При этом используем сеточно—зависимые значения ϵ (4.1) и считаем, что схема градиентно устойчива, если наблюдается пошаговое возрастание дискретной энергии (3.7) не более, чем на 1%, т.е. на каждом шаге по времени n выполняется условие

$$\Psi_h(\mathbf{c}^{n+1}) \leq 1.01 \Psi_h(\mathbf{c}^n). \quad (4.3)$$

Градиентная устойчивость тестировалась на нескольких векторах начальных значений \mathbf{c}^0 , где каждая компонента вектора \mathbf{c}^0 бралась независимой одинаково распределенной случайной величиной на отрезке $[0, 1]$, округленной с точностью до сотых. В табл. 2 также включена линеаризованная неявная схема (3.20).

Таблица 2. Максимальные значения шагов по времени τ , при которых схемы градиентно устойчивы (т.е. выполняется условие (4.3)), для $\epsilon = \epsilon_4(h)$

h	1/32	1/64	1/128	1/256
Явная	8.8×10^{-5}	2.1×10^{-5}	5.4×10^{-6}	1.3×10^{-6}
Неявная	5.1×10^{-3}	1.3×10^{-3}	3.0×10^{-4}	8.1×10^{-5}
КН	2.4×10^{-3}	6.8×10^{-4}	1.7×10^{-4}	3.8×10^{-5}
Полунеявная	2.2×10^{-3}	5.7×10^{-4}	1.9×10^{-4}	4.0×10^{-5}
ЛСР	∞	∞	∞	∞
НЛСР	∞	∞	∞	∞
ЛИМ-ЛСР	∞	∞	∞	∞
ЛИМ-ЛН	9.9×10^{-3}	2.8×10^{-3}	5.8×10^{-4}	1.2×10^{-4}
ЛН	5.8×10^{-3}	1.6×10^{-3}	3.2×10^{-4}	8.3×10^{-5}

Как видим из таблицы, только схемы, основанные на расщеплении Эйра, являются безусловно градиентно устойчивыми. В тестах схема считалась безусловно устойчивой, если устойчивость выполнялась для $\tau \leq 500$. Далее отметим, что максимальный шаг для неявной схемы превосходит максимальный шаг явной схемы примерно в одно и то же число раз (≈ 60) для всех h . Сравнение схемы ЛН и неявной схемы говорит о том, что линеаризация не ухудшает градиентную устойчивость неявной схемы. Схема ЛИМ-ЛСР сохраняет безусловную градиентную устойчивость схемы ЛСР, а схема ЛИМ-ЛН — условную градиентную устойчивость схемы ЛН. Учитывая, что одна из целей данной работы — показать возможность замены неявных схем на явные устойчивые схемы типа ЛИМ, важно отметить, что обе схемы ЛИМ, как видно из табл. 2, работают успешно. При этом увеличение шага τ как в схеме ЛИМ-ЛСР, так в ЛИМ-ЛН, разумеется, означает увеличение числа чебышёвских итераций на шаг по времени. Заметим также, что представленные нами в табл. 2 значения близки к значениям в табл. 1 из работы [64].

4.2. Тесты на точность и эффективность

Цель обсуждаемых здесь тестов — проверить точность и эффективность рассмотренных схем и, в частности, выяснить, позволяют ли схемы ЛИМ получить выигрыш по вычислительным затратам по сравнению с явной схемой. Очевидно, что поскольку затраты на шаг по времени в явной схеме минимальны, повышение эффективности другими схемами возможно только при увеличении в них шага по времени. Однако увеличение шага по времени возможно, разумеется, лишь так, чтобы точность вычислений оставалась в допустимых пределах. Будем оценивать точность схем в конечный момент времени $t = T$ по референтному решению $\mathbf{c}_{\text{ref}}(T)$, которое на каждой пространственной сетке вычислялось явной схемой с очень маленьким шагом по времени ($\tau = 10^{-9}$). При этом вектор начального значения выбираем случайным образом так же, как и в предыдущей серии тестов, и затем используем на данной пространственной сетке для всех схем. Для каждой из схем достигнутой точности оцениваем по относительной норме ошибки

$$\frac{\|\mathbf{c}^n - \mathbf{c}_{\text{ref}}(T)\|}{\|\mathbf{c}_{\text{ref}}(T)\|}, \quad n = n_{\text{final}} = T/\tau, \quad (4.4)$$

где $\|\mathbf{c}\| = \sqrt{\mathbf{c}^T \mathbf{c}}$ — евклидова векторная норма.

Во всех тестах конечное время T выбираем равным $T = 0.2$. При таком T решение уже прошло начальную фазу формирования однородных областей на временах $t \approx \epsilon^2$, всем схемам требуется достаточно большое количество шагов по времени, но решение еще далеко от стационарного состояния.

Значения верхних границ спектра λ_∞ в зависимости от шага сетки h и соответствующие максимальные значения шага по времени τ явной схемы, при котором явная схема устойчива, приведены в табл. 3. В таблице максимальные значения τ определяются двумя способами:

(а) максимальный шаг τ , обеспечивающий градиентную устойчивость (невозрастание энергии (4.3)); (б) максимальный шаг τ , при котором схемы ЛИМ-ЛН и ЛИМ-ЛСР работают в режиме явной схемы, т.е. в соотношении (3.16) получаем $p = 1$, что означает, что нет необходимости выполнять чебышёвские итерации. Последнее условие означает устойчивость явной схемы в операторной евклидовой норме, что видно из следу-

Таблица 3. Верхняя граница спектра $\lambda_\infty = \|\hat{A}\|_1$ схемы ЛИМ-ЛСР и максимально возможные значения шага по времени τ_{\max} , дающие градиентную устойчивость (строка 3 таблицы) и режим явной схемы в схеме ЛИМ-ЛСР (строки 4 и 6), в зависимости от h . Как видно из таблицы, $\lambda_\infty = \mathcal{O}(h^{-2})$ для $\epsilon = \epsilon_4(h)$, $\lambda_\infty = \mathcal{O}(h^{-4})$ для $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$ и во всех случаях $\tau_{\max} = \mathcal{O}(\lambda_\infty^{-1})$

h	1/32	1/64	1/128	1/256	1/512
$\epsilon = \epsilon_4(h)$					
$\lambda_\infty = \ \hat{A}\ _1$	2.3×10^4	9.3×10^4	3.7×10^5	1.5×10^6	6.0×10^6
Градиентная устойчивость	8.8×10^{-5}	2.1×10^{-5}	5.4×10^{-6}	1.3×10^{-6}	3.3×10^{-7}
Режим явной схемы	2.6×10^{-5}	6.6×10^{-6}	1.6×10^{-6}	4.1×10^{-7}	1.0×10^{-7}
$\epsilon = \epsilon_4(1/64)$					
$\lambda_\infty = \ \hat{A}\ _1$	1.2×10^4	9.3×10^4	1.1×10^6	1.6×10^7	2.5×10^8
Режим явной схемы	5.1×10^{-5}	6.6×10^{-6}	5.6×10^{-7}	3.8×10^{-8}	2.4×10^{-9}

ющих соображений. Если в соотношении (3.16) для схемы ЛИМ-ЛН выполняется $p = 1$, то

$$\tau\lambda_\infty \leq \left(\frac{4}{\pi}\right)^2 - 1, \tag{4.5}$$

где $\lambda_\infty = \|\tilde{A}\|_1$, а \tilde{A} определена в (3.20). Если $J_n = \partial F'(c^n)/\partial c$, то, учитывая приближение $F'(c^n) \approx F'(\mathbf{0}) + J_n(c^n - \mathbf{0}) = J_n c_n$, для решения явной схемы c^{n+1} получаем

$$\|c^{n+1}\| = \|c^n - \tau A(F'(c^n) + \epsilon^2 A c^n)\| \approx \|(I - \tau \tilde{A})c^n\| \leq \|I - \tau \tilde{A}\| \|c^n\|.$$

Поскольку \tilde{A} — симметричная неотрицательно определенная матрица, для евклидовой операторной нормы условие $\|I - \tau \tilde{A}\|_2 \leq 1$ равносильно условию $\tau \|\tilde{A}\|_2 \leq 2$, которое следует из (4.5) (заметим, что $\|\tilde{A}\|_2 \leq \|\tilde{A}\|_1 = \lambda_\infty$).

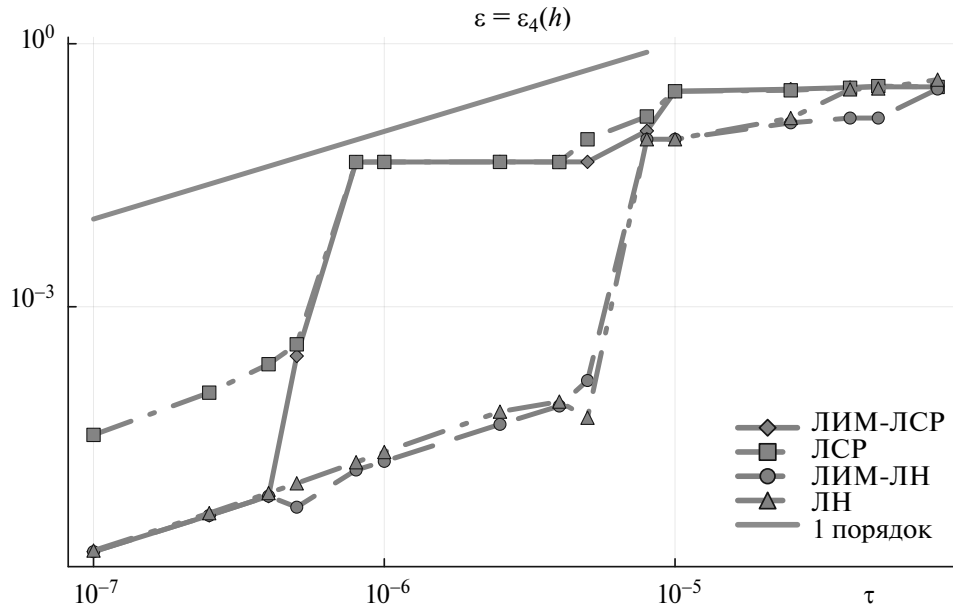
В табл. 3 зависимость верхней границы спектра λ_∞ от h дана для схемы ЛИМ-ЛСР, то есть $\lambda_\infty = \|\hat{A}\|_1$. В представленных здесь тестах во всех случаях значения $\|\hat{A}\|_1$ и $\|\tilde{A}\|_1$ оказываются настолько близкими, что число чебышёвских итераций в схемах ЛИМ-ЛСР и ЛИМ-ЛН практически во всех случаях одинаково. Значения в табл. 3 приведены для обоих способов задания ϵ , см. (4.1), (4.2). По данным таблицы легко проверить, что при выборе $\epsilon = \epsilon_4(h)$ матрица $\epsilon^2 A$ не зависит от h , так что, учитывая (3.15), получаем зависимость $\|\hat{A}\|_1 = \mathcal{O}(h^{-2})$. При втором способе задания ϵ (по формуле (4.2)) имеем $\|\hat{A}\|_1 = \mathcal{O}(h^{-4})$.

Первый порядок сходимости $\mathcal{O}(\tau)$ схем ЛИМ-ЛСР, ЛСР, ЛИМ-ЛН и ЛН подтверждается графиком на фиг. 2. Как видим из рисунка, обе схемы ЛИМ сохраняют свойства точности схем, на которых они основаны. Кроме того отметим, что схемы расщепления Эйра ЛСР и ЛИМ-ЛСР оказываются менее точными, чем схемы ЛИМ-ЛН и ЛН. В этих схемах градиентная устойчивость достигается за счет расщепления, приводящего к дополнительной ошибке.

В табл. 4–7 для явной схемы и схем ЛСР, ЛИМ-ЛСР, ЛИМ-ЛН представлены, для различных шагов по времени τ , вычислительные затраты этих схем и достигаемая ими точность. Как видим из таблиц, точность схем ЛСР и ЛИМ-ЛСР оказывается слишком низкой (будем считать значения ошибки (4.4) более 10^{-2} неприемлемо большими). Увеличение шага по времени по отношению к явной схеме, необходимое для компенсации увеличенных на шаг по времени затрат, приводит к недопустимо низкой точности. Схема ЛИМ-ЛН более точна и дает выигрыш по отношению к явной схеме на мелких сетках (в два раза на сетке $N = 512$). То, что низкая точность схем ЛСР и ЛИМ-ЛСР вызвана ошибкой расщепления Эйра, видно при переходе на схемы ЛН и ЛИМ-ЛН (значения ошибки для схемы ЛН в таблицах не показаны, они близки к значениям ошибки для схем ЛИМ-ЛН, см. фиг. 2).

Графики зависимости достигаемой точности от вычислительных затрат представлены на фиг. 3. Как видим из рисунка, ситуация для схем ЛИМ улучшается при переходе от сетки $N = 256$ к $N = 512$: на последней сетке возможно снижение затрат примерно в три раза.

В представленных тестах наблюдается довольно низкая точность всех схем кроме явной, и это обусловлено не только расщеплением Эйра. В наших тестах вектор начального решения представлял собой негладкую сеточную функцию, где каждая компонента вектора выбиралась случайным образом. Как обсуждалось выше



Фиг. 2. Сходимость (достигаемая точность в зависимости от шага по времени τ) для схем ЛИМ-ЛСР, ЛСР, ЛИМ-ЛН и ЛН на сетке $N = 256$, $\epsilon = \epsilon_4(h)$.

Таблица 4. Число матрично–векторных умножений (матвеков) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(h)$, сетка по пространству $N = 64$

τ	Схема	Число матвеков / решений лин. систем $\times 10^3$	Ошибка (4.4)
5.0×10^{-5}	ЛИМ-ЛСР	12 / —	5.24×10^{-2}
	ЛСР	4 / 4	1.18×10^{-1}
	ЛИМ-ЛН	12 / —	8.34×10^{-3}
1.0×10^{-5}	явная	20 / —	1.04×10^{-4}
	ЛИМ-ЛСР	60 / —	2.52×10^{-2}
	ЛСР	20 / 20	2.92×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	60 / —	3.96×10^{-4}
1.0×10^{-6}	явная	200 / —	2.27×10^{-5}
	ЛИМ-ЛСР	200 / —	2.27×10^{-5}
	ЛСР	200 / 200	2.93×10^{-3}
	ЛИМ-ЛН	200 / —	2.27×10^{-5}

во введении, для таких решений наблюдается быстрое формирование областей однородности с характерными временами эволюции порядка ϵ^2 . Следовательно, для правильного отслеживания этого процесса шаг по времени должен выбираться так, чтобы $\tau \sim \mathcal{O}(\epsilon^2) = \mathcal{O}(h^2)$. Отсюда, учитывая, что $\epsilon^2 \|A\| \sim \epsilon^2 h^{-2} = \mathcal{O}(1)$, видим, что на начальной фазе интегрирования по времени шаг τ не может существенно превосходить шаг явной схемы. Он, в свою очередь, в данном случае определяется не условием устойчивости — а условием фактической точности расчета.

Чтобы протестировать устойчивость и точность рассматриваемых схем интегрирования при больших шагах по времени, проведем тесты с более гладким начальным условием. Будем задавать его интерполяцией на используемую сетку по пространству исходного негладкого начального решения с сетки $N = 64$ (на сетке $N = 64$ начальный вектор не меняется). При этом будет использоваться кусочно–кубическая эрмитова интерполяция,

Таблица 5. Число матрично–векторных умножений (матвектов) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(h)$, сетка по пространству $N = 128$

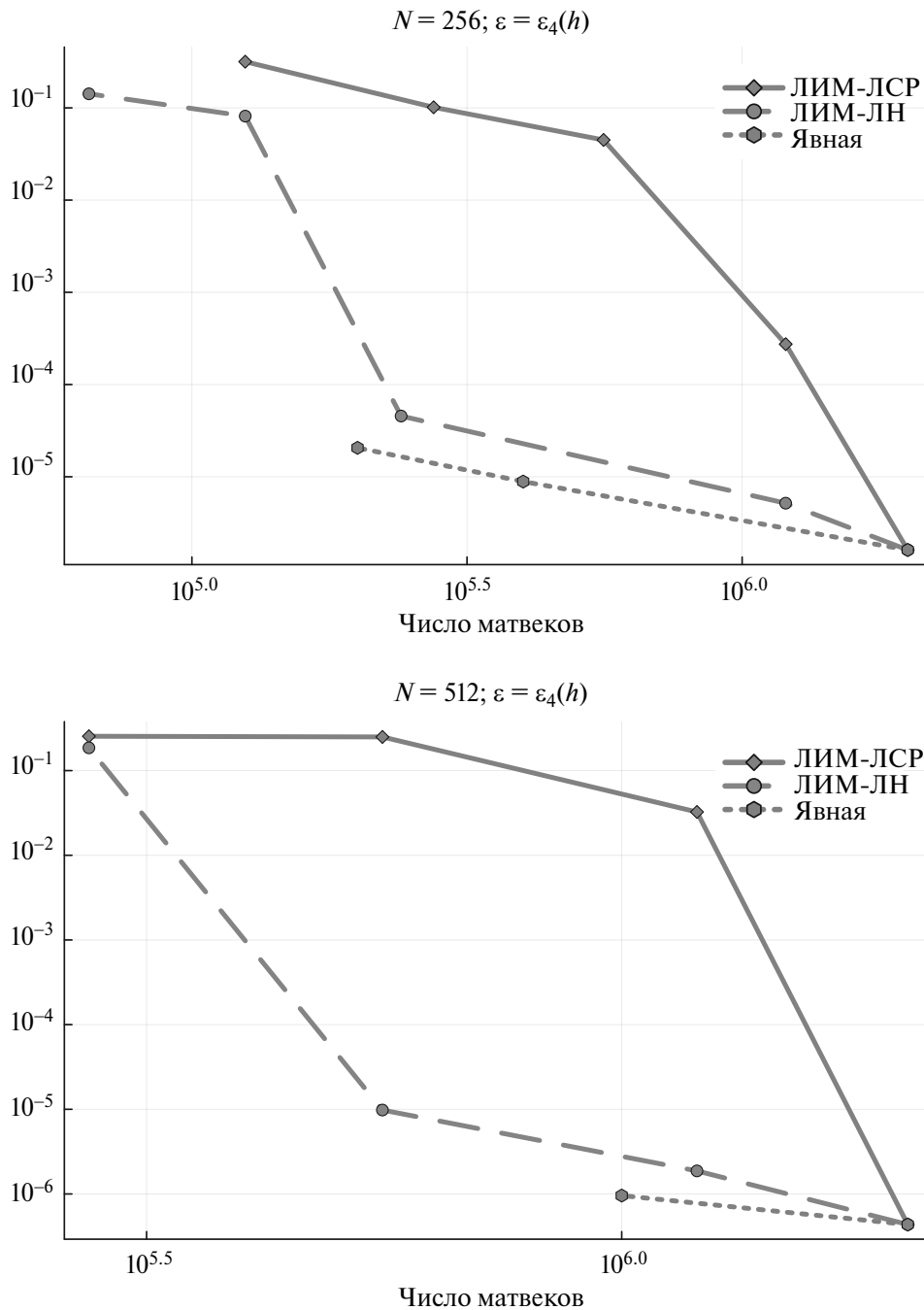
τ	Схема	Число матвектов / решений лин. систем $\times 10^3$	Ошибка (4.4)
2.5×10^{-5}	ЛИМ-ЛСР	40 / —	1.71×10^{-1}
	ЛСР	8 / 8	1.66×10^{-1}
	ЛИМ-ЛН	40 / —	9.06×10^{-2}
5.0×10^{-6}	явная	40 / —	3.37×10^{-4}
	ЛИМ-ЛСР	120 / —	3.60×10^{-2}
	ЛСР	40 / 40	1.19×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	120 / —	7.91×10^{-4}

Таблица 6. Число матрично–векторных умножений (матвектов) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), $\epsilon = \epsilon_4(h)$, сетка по пространству $N = 256$

τ	Схема	Число матвектов / решений лин. систем $\times 10^3$	Ошибка (4.4)
1.0×10^{-5}	ЛИМ-ЛН	140 / —	8.14×10^{-2}
5.0×10^{-6}	ЛИМ-ЛСР	200 / —	4.49×10^{-2}
	ЛСР	40 / 40	8.12×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	200 / —	1.44×10^{-4}
1.0×10^{-6}	явная	200 / —	2.06×10^{-5}
	ЛИМ-ЛСР	600 / —	4.48×10^{-2}
	ЛСР	200 / 200	4.48×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	600 / —	1.72×10^{-5}

Таблица 7. Число матрично–векторных умножений (матвектов) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(h)$, сетка по пространству $N = 512$

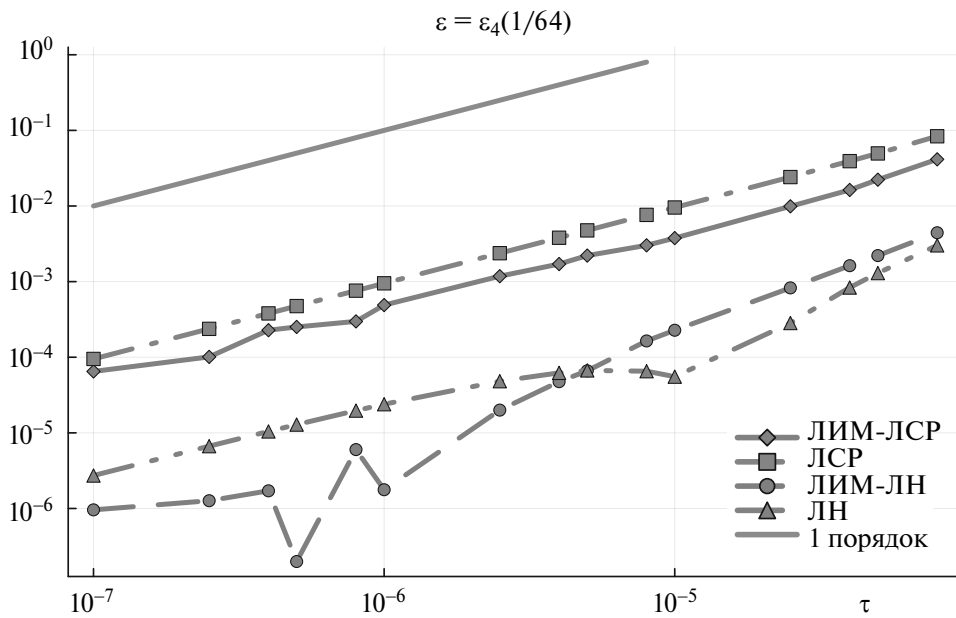
τ	Схема	Число матвектов / решений лин. систем $\times 10^6$	Ошибка (4.4)
2.0×10^{-6}	ЛИМ-ЛН	0.5 / —	8.25×10^{-6}
1.0×10^{-6}	ЛИМ-ЛСР	1 / —	3.25×10^{-2}
	ЛСР	0.2 / 0.2	3.25×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	1 / —	4.61×10^{-6}
2.0×10^{-7}	явная	1 / —	9.57×10^{-7}
	ЛИМ-ЛСР	3 / —	3.25×10^{-2}
	ЛСР	1 / 1	3.25×10^{-2}
	ЛИМ-ЛН	3 / —	7.35×10^{-7}



Фиг. 3. Зависимость достигаемой точности от числа матрично–векторных умножений (матвекгов) для явной схемы и схем ЛИМ, сетка $N = 256$ (верхний график) и $N = 512$ (нижний график), $\epsilon = \epsilon_4(h)$. Увеличение τ для явной схемы невозможно из-за ограничений устойчивости.

исключающая появление новых экстремумов и дающая непрерывно–дифференцируемую функцию (в пакете *octave* такой метод интерполяции называется *rchip*). Кроме того, в тестах со сглаженными начальными условиями будем выбирать ϵ вторым способом (4.2), что позволит протестировать наши схемы в ситуации, когда норма оператора правой части растет как $\mathcal{O}(h^{-4})$, см. табл. 3.

Начнем с проверки первого порядка сходимости $\mathcal{O}(\tau)$ по графику на фиг. 4. Сравнивая его с графиком на фиг. 2, видим, что все схемы достигают гораздо более высокой точности, однако схемы расщепления Эйра ЛСР и ЛИМ–ЛСР по-прежнему менее точны, чем схемы ЛН и ЛИМ–ЛН. Небольшие осцилляции ошибки схемы ЛИМ–ЛН для $\tau \approx 10^{-6}$ вызваны изменением числа чебышёвских итераций на шаг по времени при данных τ .



Фиг. 4. Сходимость (достигаемая точность в зависимости от шага по времени τ) для схем ЛИМ-ЛСР, ЛСР, ЛИМ-ЛН и ЛН на сетке $N = 256$, $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$

Таблица 8. Число матрично–векторных умножений (матвеков) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$, сглаженное начальное решение c^0 , сетка по пространству $N = 128$

τ	Схема	Число матвеков / решений лин. систем $\times 10^3$	Ошибка (4.4)
1.0×10^{-4}	ЛИМ-ЛСР	34 / —	7.46×10^{-2}
	ЛСР	2 / 2	1.37×10^{-1}
	ЛИМ-ЛН	34 / —	6.06×10^{-3}
5.0×10^{-6}	ЛИМ-ЛСР	200 / —	3.42×10^{-3}
	ЛСР	40 / 40	5.25×10^{-3}
	ЛИМ-ЛН	185 / —	1.09×10^{-4}
1.0×10^{-6}	явная	200 / —	3.02×10^{-5}
	ЛИМ-ЛСР	600 / —	8.14×10^{-4}
	ЛСР	200 / 200	1.04×10^{-3}
	ЛИМ-ЛН	600 / —	1.50×10^{-5}

Результаты тестов для сглаженных начальных условий и фиксированного $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$ представлены в табл. 8–10 и на фиг. 5. Как видим, теперь обе схемы ЛИМ позволяют достичь существенного выигрыша по эффективности по сравнению с явной схемой. На сетке $N = 512$ достигается выигрыш примерно в 10 раз (см. нижний график на фиг. 5).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Предложенные схемы (3.17) локальных итераций ЛИМ-ЛСР и ЛИМ-ЛН на основе схем неявных схем ЛСР (3.13) и ЛН (3.20) показали себя надежными в работе. Они сочетают в себе структурную простоту и параллелизуемость явных схем с устойчивостью неявных схем. Теоретические оценки эффективности для схем

Таблица 9. Число матрично–векторных умножений (матвеков) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$, сглаженное начальное решение \mathbf{e}^0 , сетка по пространству $N = 256$

τ	Схема	Число матвеков / решений лин. систем $\times 10^6$	Ошибка (4.4)
1.0×10^{-5}	ЛИМ-ЛСР	0.38 / —	3.76×10^{-3}
	ЛСР	0.02 / 0.02	9.55×10^{-3}
	ЛИМ-ЛН	0.38 / —	2.27×10^{-4}
5.0×10^{-7}	ЛИМ-ЛСР	2 / —	2.51×10^{-4}
	ЛСР	0.4 / 0.4	4.75×10^{-4}
	ЛИМ-ЛН	2 / —	1.99×10^{-7}
1.0×10^{-7}	явная	2 / —	2.76×10^{-6}
	ЛИМ-ЛСР	6 / —	6.49×10^{-5}
	ЛСР	2 / 2	9.49×10^{-5}
	ЛИМ-ЛН	6 / —	9.59×10^{-7}

Таблица 10. Число матрично–векторных умножений (матвеков) и решений линейных систем (для неявных схем ЛСР и ЛН), достигнутая точность в зависимости от τ , $\epsilon = \epsilon_4(1/64)$, сглаженное начальное решение \mathbf{e}^0 , сетка по пространству $N = 512$

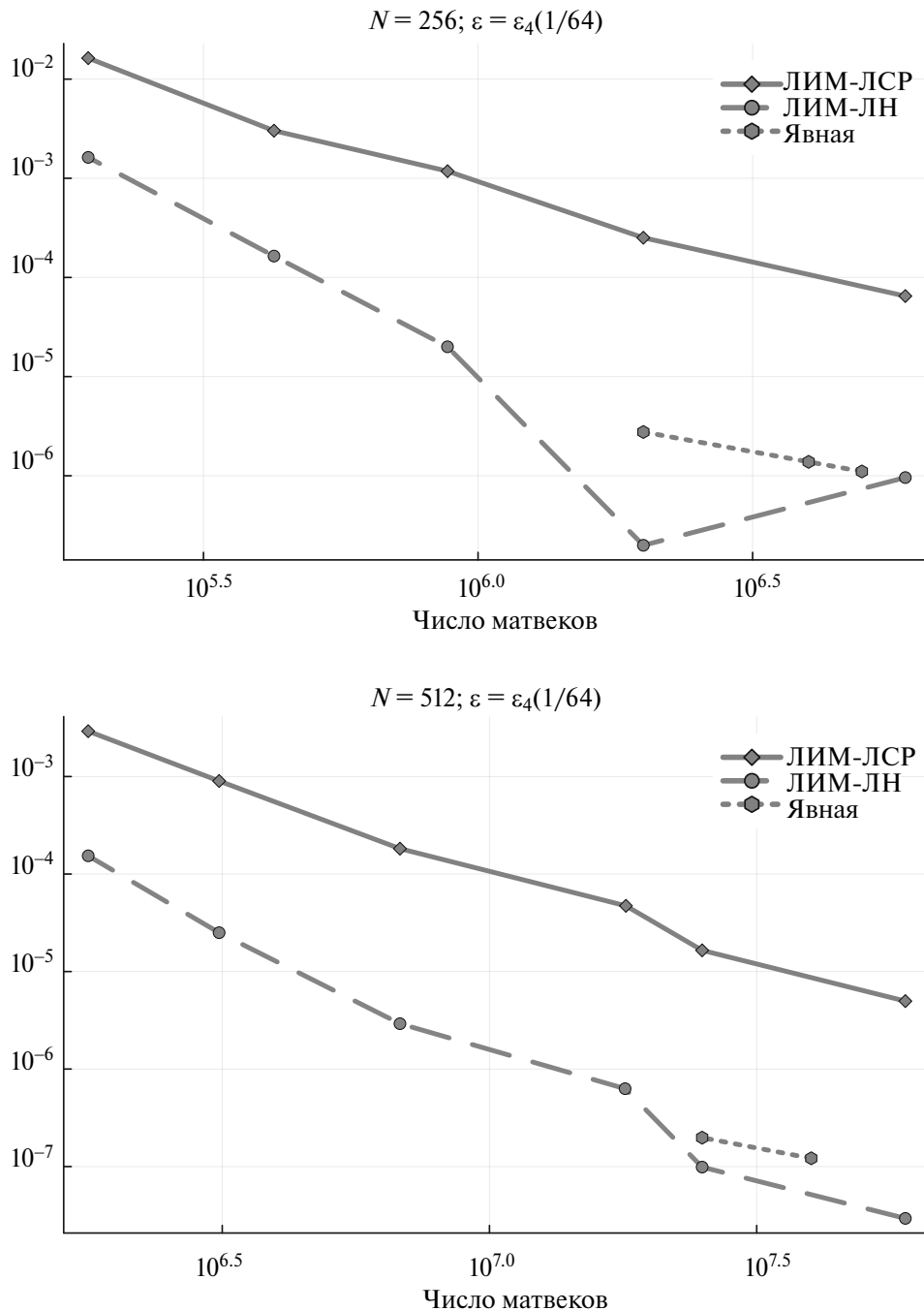
τ	Схема	Число матвеков / решений лин. систем $\times 10^6$	Ошибка (4.4)
8.0×10^{-7}	ЛИМ-ЛСР	5.75 / —	3.14×10^{-4}
	ЛСР	0.25 / 0.25	7.13×10^{-4}
	ЛИМ-ЛН	5.75 / —	3.83×10^{-6}
4.0×10^{-8}	ЛИМ-ЛСР	25 / —	1.65×10^{-5}
	ЛСР	5 / 5	3.56×10^{-5}
	ЛИМ-ЛН	25 / —	9.87×10^{-8}
8.0×10^{-9}	явная	25 / —	1.98×10^{-7}
	ЛИМ-ЛСР	75 / —	4.44×10^{-6}
	ЛСР	25 / 25	7.13×10^{-6}
	ЛИМ-ЛН	75 / —	5.14×10^{-8}

ЛИМ подтверждаются в тестах: схемы ЛИМ дают выигрыш по эффективности до 10 раз по сравнению с явной схемой. Выигрыш растет при сгущении сетки.

2. В рассмотренных численных тестах градиентно устойчивые схемы на основе расщепления Эйра оказываются менее точными, чем обычные линеаризованные схемы. В частности, обычная линеаризованная неявная схема ЛН (3.20) и основанная на ней схема локальных итераций ЛИМ-ЛН превосходят по точности схему линейно–стабилизированного расщепления ЛСР (3.13) и схему локальных итераций ЛИМ-ЛСР. В этих схемах градиентная устойчивость достигается за счет расщепления, приводящего к дополнительной ошибке.

3. В случае, если толщина диффузионной границы ϵ выбирается пропорционально размеру сетки, т.е. $\epsilon = \mathcal{O}(h)$, шаг по времени в явной схеме ограничен как $\tau = \mathcal{O}(h^2)$. Следовательно, можно ожидать, что потенциал схем локальных итераций для решения уравнений Кана–Хилларда сравним с потенциалом таких схем для параболических задач.

4. Для негладких начальных данных, например, если вектор начальных значений выбирается случайным образом, возникают дополнительные ограничения по точности на шаг по времени τ на временах $t \leq \mathcal{O}(\epsilon^2)$. По-



Фиг. 5. Зависимость достигаемой точности от числа матрично–векторных умножений (матвектов) для явной схемы и схем ЛИМ, сглаженное начальное решение \mathbf{c}^0 , сетка $N = 256$ (верхний график) и $N = 512$ (нижний график), $\varepsilon = \varepsilon_4(1/64)$. Увеличение τ для явной схемы невозможно из-за ограничений устойчивости.

сколькx уменьшение шага в неявных схемах обычно означает снижение их эффективности, схемы локальных итераций оказываются особенно привлекательными (для них снижение шага приводит к уменьшению вычислительных затрат). В таких задачах разумно применение схем локальных итераций с адаптивным выбором шага по времени (см. [65]).

Авторы благодарят В.Т. Жукова (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) за полезные обсуждения и консультации по схемам локальных итераций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cahn J.W., Hilliard J.E.* Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 28. № 2. P. 258–267. <https://doi.org/10.1063/1.1744102>
2. *Gurtin M.E.* Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance // *Physica D: Nonlinear Phenomena.* 1996. V. 92. Iss. 3–4. P. 178–192. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(95\)00173-5](https://doi.org/10.1016/0167-2789(95)00173-5)
3. *Provatas N., Elder K.* Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. First published: 7 October 2010 <https://doi.org/10.1002/9783527631520> 2010 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
4. *Steinbach I., Salama H.* Lectures on Phase Field. Springer Cham, 2023. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-21171-3>
5. *Скрянов В.П., Скрянов А.В.* Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) // *УФН.* 1979. Т. 128. Вып. 2. С. 193–231. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0128.197906a.0193>
6. *Hohenberg P.C., Halperin B.I.* Theory of dynamic critical phenomena // *Rev. Mod. Phys.* 1977. V. 49. Iss. 3. P. 435. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.49.435>
7. *Penrose O., Fife P.C.* Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetic of phase transitions // *Physica D: Nonlinear Phenomena.* 1990. V. 43. Iss. 1. P. 44–62. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(90\)90015-H](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90015-H)
8. *Bray A.J.* Theory of phase-ordering kinetics // *Adv. Phys.* 2002. V. 51. № 2. P. 481–587. <https://doi.org/10.1080/00018730110117433>
9. *Miranville A.* The Cahn–Hilliard Equation: Recent Advances and Applications // *Soc. Indust. Appl. Math.* 2019. <https://doi.org/10.1137/1.9781611975925>
10. *Pego R.L.* Front Migration in the Nonlinear Cahn-Hilliard Equation // *Proceed. Royal Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci.* 1989. V. 422. № 863. P. 261–278. www.jstor.org/stable/2398477
11. *Bates P.W., Fife P.C.* The Dynamics of Nucleation for the Cahn-Hilliard Equation // *SIAM J. Appl. Math.* 1993. V. 53. № 4. P. 990–1008. www.jstor.org/stable/2102259
12. *de Mello E.V.L., Otton Teixeira da Silveira Filho* Numerical study of the Cahn–Hilliard equation in one, two and three dimensions // *Physica A: Statistic. Mech. Appl.* 2005. V. 347. P. 429–443. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2004.08.076>
13. *Vollmayr-Lee B.P., Rutenberg A.D.* Fast and accurate coarsening simulation with an unconditionally stable time step // *Phys. Rev. E.* 2003. V. 68. Iss. 6. P. 066703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.066703>
14. *Eyre D.J.* An unconditionally stable one-step scheme for gradient systems // *Tech. Rep. Department of Mathematics, University of Utah.* 1997. unpublished. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:117273508>
15. *Eyre D.J.* Unconditionally gradient stable time marching the Cahn-Hilliard equation // *Comput. Math. Model. Microstructur. Evolut. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Ed. V. 529.* Bullard J.W., Chen L.-Q., Kalia R.K., Stoneham A.M., 1998. P. 39–46.
16. *Tierra G., Guillen-Gonzalez F.* Numerical methods for solving the Cahn-Hilliard equation and its applicability to related Energy-based models // *Necas Center for Math. Model. Preprint №* 2013–035.
17. *Cueto-Felgueroso L., Peirraire J.* A time-adaptive finite volume method for the Cahn–Hilliard and Kuramoto–Sivashinsky equations // *J. Comput. Phys.* 2008. V. 227. Iss. 4. P. 9985–10017. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.07.024>
18. *Li Y., Choi Y., Kim J.* Computationally efficient adaptive time step method for the Cahn–Hilliard equation // *Comput. Math. Appl.* 2017. V. 73. Iss. 8. P. 1855–1864. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.02.021>
19. *Zhang Z., Qiao Z.* An Adaptive Time-Stepping Strategy for the Cahn-Hilliard Equation // *Comm. Computat. Phys.* 2012. V. 11. Iss. 4. P. 1261–1278. <https://doi.org/10.4208/cicp.300810.140411s>
20. *Minkoff S.E., Kridler N.M.* A comparison of adaptive time stepping methods for coupled flow and deformation modeling // *Appl. Math. Model.* 2006. V. 30. Iss. 9. P. 993–1009. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2005.08.002>

21. Luo F., Tang T., Xie H. Parameter-Free Time Adaptivity Based on Energy Evolution for the Cahn-Hilliard Equation // *Comm. Computa. Phys.* 2016. V. 19. Iss. 5. P. 1542–1563. <https://doi.org/10.4208/cicp.scpde14.45s>
22. Guillen-Gonzalez F., Tierra G. Second order schemes and time-step adaptivity for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard models // *Computers and Mathematics with Applications*. 2014. V. 68. Iss. 8. P. 821–846. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2014.07.014>
23. Kassam A., Trefethen L., Fourth-order time-stepping for stiff PDEs // *SIAM J. Sci. Comput.* 2005. V. 26. Iss. 4. P. 1214–1233. <https://doi.org/10.1137/S1064827502410633>
24. He Y., Liu Y., Tang T. On large time-stepping methods for the Cahn–Hilliard equation // *Appl. Numeric. Math.* 2007. V. 57. Iss. 5–7. P. 616–628. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2006.07.026>
25. Song H. Energy stable and large time-stepping methods for the Cahn–Hilliard equation // *Inter. J. Comput. Math.* 2015. V. 92. Iss. 10. P. 2091–2108. <https://doi.org/10.1080/00207160.2014.964694>
26. Li D. Why large time-stepping methods for the Cahn-Hilliard equation is stable // *Math. Comp.* 2022. V. 91. № 238. P. 2501–2515. <https://doi.org/10.1090/mcom/3768>
27. Chen W., Wang C., Wang X., Wise S.M. Positivity-preserving, energy stable numerical schemes for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential // *J. Comput. Phys.: X*. 2009. V. 3. P. 100031. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.x.2019.100031>
28. Chen W., Wang X., Yan Y., Zhang Z. A Second Order BDF Numerical Scheme with Variable Steps for the Cahn-Hilliard Equation // *SIAM J. Numeric. Anal.* 2019. V. 57. Iss. 1. P. 495–525. <https://doi.org/10.1137/18M1206084>
29. Zhang J., Jiang M., Gong Y., Zhao J. Energy-stable predictor-corrector schemes for the Cahn-Hilliard equation // *J. Comput. Appl. Math.* 2020. V. 376. P. 112832. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2020.112832>
30. Zhou Q., Sun Y. Energy stability of exponential time differencing schemes for the nonlocal Cahn-Hilliard equation // *Numer. Meth. Partial Differ. Eq.* 2023. V. 39. Iss. 5. P. 4030–4058. <https://doi.org/10.1002/num.23035>
31. Lee S. Unconditionally strong energy stable scheme for Cahn–Hilliard equation with second-order temporal accuracy // *Math. Meth. Appl. Sci.* 2023. V. 46. Iss. 6. P. 6463–6469. <https://doi.org/10.1002/mma.8917>
32. Boyer F., Minjeaud S. Numerical schemes for a three component Cahn-Hilliard model // *ESAIM: Math. Model. Numeric. Anal.* 2011. V. 45. No. 4. P. 697–738. <https://doi.org/10.1051/m2an/2010072>
33. Brachet M., Chehab J.-P. Fast and Stable Schemes for Phase Fields Models // *Comput. Math. Appl.* 2020. V. 80. Iss. 6. P. 1683–1713. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2020.07.015>
34. Elliott C., French D.A. A nonconforming finite element method for the two- dimensional Cahn–Hilliard equation // *SIAM J. Numer. Anal.* 1989. V. 26. № 4. P. 884–903. www.jstor.org/stable/2157884
35. Barrett J.B. An error bound for the finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation with logarithmic free energy // *Numer. Math.* 1995. V. 72. P. 1–20. <https://doi.org/10.1007/s002110050157>
36. Chen L.-Q., Shen J., Applications of semi-implicit fourier-spectral method to phase field equations // *Comput. Phys. Commun.* 1996. V. 108. Iss. 2–3. P. 147–158. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(97\)00115-X](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(97)00115-X)
37. Furihata D. A stable and conservative finite difference scheme for the Cahn– Hilliard equation // *Numer. Math.* 2001. V. 87. Iss. 4. P. 675–699. <https://doi.org/10.1007/PL00005429>
38. Feng X., Prohl A. Error analysis of a mixed finite element method for the Cahn– Hilliard equation // *Numer. Math.* 2004. V. 99. Iss. 1. P. 47–84. <https://doi.org/10.1007/s00211-004-0546-5>
39. Wells E., Kuhl K., Garikipati S. A discontinuous Galerkin method for the Cahn– Hilliard equation // *J. Comput. Phys.* 2006. V. 218. Iss. 2. P. 860–877. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.03.010>
40. Wise S.M., Wang C., Lowengrub J.S. An Energy-Stable and Convergent Finite-Difference Scheme for the Phase Field Crystal Equation // *SIAM J. Numer. Anal.* 2009. V. 47. Iss. 3. P. 2269–2288. <https://doi.org/10.1137/0807381>
41. Du Q., Ju L., Tian L. Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation on surfaces // *Comput. Meth. Appl. Mech. Engineer.* 2011. V. 200. Iss. 29–32. P. 458–2470. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.04.018>

42. *Xia Y., Xu Y., Shu C.-W.* Local discontinuous Galerkin methods for the Cahn–Hilliard type equations // *J. Comput. Phys.* 2007. V. 227. Iss. 1. P. 472–491. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.08.001>
43. *Brenner S.C., Diegel A.E., Sung L.-Y.* A robust solver for a second order mixed finite element method for the Cahn–Hilliard equation // *J. Comput. Appl. Math.* 2020. V. 364. P. 112322. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.038>
44. *Gomez H., Calo V.M., Bazilevs Y., Hughes T.J.R.* Isogeometric analysis of the Cahn–Hilliard phase-field model // *Comput. Meth. Appl. Mech. Engineer.* 2008. V. 197. Iss. 49–50. P. 4333–4352. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.05.003>
45. *Zhang R., Qian X.* Triangulation-based isogeometric analysis of the Cahn–Hilliard phase-field model // *Comput. Meth. Appl. Mech. Engineer.* 2019. V. 357. P. 112569. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112569>
46. *Kastner M., Metsch P., de Borst R.* Isogeometric analysis of the Cahn–Hilliard equation — a convergence study // *J. Comput. Phys.* 2016. V. 305. P. 360–371. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.10.047>
47. *Goudenège L., Martin D., Vial G.* High Order Finite Element Calculations for the Cahn–Hilliard Equation // *J. Sci. Comput.* 2012. V. 52. P. 294–321. <https://doi.org/10.1007/s10915-011-9546-7>
48. *Чжао-дин Ю.* Об устойчивости разностных схем для решения дифференциальных уравнений параболического типа // *Докл. АН.* 1957. Т. 117. № 4. С. 578–581. www.mathnet.ru/rus/dan22546
49. *Чжао-дин Ю.* Некоторые разностные схемы численного решения дифференциального уравнения параболического типа // *Матем. сб.* 1960. Т. 50(92). № 4. С. 391–422. www.mathnet.ru/rus/sm4800
50. *Гельфанд И.М., Локуцкий О.В.* О разностных схемах для решения уравнения теплопроводности. В кн.: Годунов С.К., Рябенский В.С. Введение в теорию разностных схем. М.: Физматгиз. 1962. 340 С.
51. *Бабенко К.И.* Основы численного анализа. М.; Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика. 2002. 848 С.
52. *Локуцкий В.О., Локуцкий О.В.* Применение чебышевских параметров для численного решения некоторых эволюционных задач // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*, 1984. № 99. 30 С. <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1984-99>
53. *Жуков В.Т.* Численные эксперименты по решению уравнения теплопроводности методом локальных итераций // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*, 1984. № 97. 22 С. <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1984-97>
54. *Локуцкий В.О., Локуцкий О.В.* О численном решении краевых задач для уравнений параболического типа // *Докл. АН СССР.* 1986. Т. 291./ № 3. С. 540–544. www.mathnet.ru/rus/dan47741
55. *Жуков В.Т.* Разностные схемы локальных итераций для параболических уравнений // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 1986. № 173. 31 С. <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1986-173>
56. *Жуков В.Т.* Явно-итерационные схемы для параболических уравнений // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Матем. моделирование физ. процессов*, 1993. № 4. С. 40–46.
57. *Shvedov A.S., Zhukov V.T.* Explicit iterative difference schemes for parabolic equations // *Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling.* 1998. V. 13. № 2. P. 133–148.
58. *Жуков В.Т.* О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // *Матем. моделирование.* 2010. Т. 22. № 10. С. 127–158; *Math. Models Comput. Simul.* 2011. V. 3. №3. P. 311–332.
59. *Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.* О применении многосеточного и явно-итерационного методов к решению параболических уравнений с анизотропными разрывными коэффициентами // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша.* 2014. № 085. 24 С.
60. *Жуков В.Т., Феодоритова О.Б., Дубень А.П., Новикова Н.Д.* Явное интегрирование по времени уравнений Навье–Стокса с помощью метода локальных итераций // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша.* 2019. № 012. 32 С.

61. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. О развитии параллельных алгоритмов решения параболических и эллиптических уравнений // Матем. анализ, Итоги науки и техн. Сер. Современ. мат. и ее прил. Темат. обз., 155, ВИНТИ РАН, М., 2018, 20–37; J. Math. Sci. (N.Y.), 254:5 (2021), 606–624.
62. Жуков В.Т., Зайцев Н.А., Лысов В.Г., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Численный анализ модели процессов кристаллизации металлов, двумерный случай // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 1. С. 109–128; Math. Models Comput. Simul. 2012. V. 4. № 4. P. 440–453.
63. Lee D., Huh J.-Y., Jeong D., Shin J., Yun A., Kim J. Physical, mathematical, and numerical derivations of the Cahn–Hilliard equation // Comput. Materials Sci. 2014. V. 81. P. 216–225. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.08.027>
64. Lee S., Lee C., Lee H., Kim J. Comparison of different numerical schemes for the Cahn–Hilliard equation // Journal of the Korea Society for Industrial and Applied Mathematics. 2013. V. 17. Iss. 3. P. 197–207. <https://doi.org/10.12941/jksiam.2013.17.197>
65. Botchev M.A., Zhukov V.T. Adaptive iterative explicit time integration for nonlinear heat conduction problems // Lobachevskii J. Math. 2024. V. 44. (To appear.)

EFFICIENT AND STABLE TIME INTEGRATION OF THE CAHN-HILLIARD EQUATIONS: EXPLICIT, IMPLICIT, AND EXPLICIT-ITERATIVE SCHEMES

M. A. Botchev^{a,*}, I. A. Fakhurdinov^{a,b,**}, E. B. Savenkov^{a,***}

^a*Keldysh Institute of Applied Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Miusskaya sq., 4, Moscow, 125047 Russia*

^b*National Research Nuclear University “Moscow Engineering Physics Institute”, Kashirskoe shosse, 31, Moscow, 115409 Russia*

**e-mail: botchev@kiam.ru*

***e-mail: mv1451003@gmail.com*

****e-mail: savenkov@keldysh.ru*

Received 02 April, 2024

Revised 02 April, 2024

Accepted 02 May, 2024

Abstract. The article proposes a new algorithm for numerical integration over time of the Cahn–Hilliard equation, based on the combined application of the Eyre splitting method and the local iteration modified (LIM) scheme for solving a finite-dimensional problem at each time step. The proposed method is gradient-stable and allows calculations with large time steps and has an explicit nature of calculations. The results of numerical calculations are presented, demonstrating the capabilities of the proposed method and its comparison with common methods of time integration of the Cahn–Hilliard equation.

Keywords: Cahn–Hilliard equation, gradient-stable schemes, Ayre splitting, local iteration scheme, LIM.