

上海交通大学博士学位论文

外蕴各向异性几何流的结构保持参数化有限元方法

姓　　名：张郁林

学　　号：021071910051

导　　师：应文俊教授

院　　系：数学科学学院

学 科/专 业：数学

申 请 学 位：理学博士

2026 年 10 月 11 日

A Dissertation Submitted to

Shanghai Jiao Tong University for the Degree of Doctor

STRUCTURE-PRESERVING PARAMETRIC FINITE ELEMENT METHODS FOR EXTRINSIC ANISOTROPIC GEOMETRIC FLOWS.

Author: YULIN ZHANG

Supervisor: Prof. WENJUN YING

School of Mathematical Sciences

Shanghai Jiao Tong University

Shanghai, P.R. China

October 11^{th}, 2026

摘 要

各向异性几何流（如各向异性表面扩散、各向异性曲率流等）在晶体生长、薄膜形态演化、固态脱湿以及相关界面运动建模中起着核心作用。此类问题通常由依赖法向方向的表面能密度所驱动，其演化既要遵循几何约束，又应体现物理上基本的结构性质，例如质量（面积/体积）守恒、能量耗散与接触线动力学。然而，几何流方程的**强非线性**与各向异性表面能量往往会诱发尖角、颈缩拓扑变化，导致数值不稳定性，使得在离散层面同时满足严格**面积/体积守恒**、**能量单调耗散**与**网格质量**可控极具挑战。因此，构造在离散意义下可验证地保持守恒律与能量耗散律的数值方法，不仅是揭示各向异性界面演化机制与不稳定性的必要基础，也为可靠模拟固态晶体薄膜相关复杂现象提供了相应方法。

本文旨在面向二维曲线与三维曲面上的各向异性几何流问题，系统设计一类具有结构保持性的*参数化有限元方法*，并围绕其能量稳定性条件、统一表述与应用模拟开展理论分析与数值验证。整体而言，本文以“表面能矩阵—保守弱形式—局部能量估计—全离散能量稳定性证明”为主线，分别针对二维各向异性表面扩散、二维一般各向异性曲率流、三维各向异性表面扩散以及三维固态脱湿等问题，建立了一套自然的结构保持算法设计范式，并揭示了若干算法的*最优*能量稳定条件。

本文的主要创新点可概括为三方面：

- **最优能量稳定条件的刻画：**对各向异性几何流，建立局部能量估计框架下无条件能量稳定性的充分必要条件，并据此构造满足该条件时同时保持面积守恒与能量耗散的参数化有限元离散格式，从而给出“最优条件—最优格式”的闭环结论。
- **统一的表面能矩阵框架与唯一性结论：**针对更一般的各向异性曲率流与三维问题，通过引入带超参数的表面能矩阵，将多种离散表述统一到同一结构中，并证明实现最优能量稳定条件对应的参数取值具有唯一性；该统一框架也使得不同模型的能量稳定性证明获得一致化处理。
- **面向复杂应用的结构保持模拟能力：**将上述方法应用于晶体薄膜形态演化与固态脱湿（含移动接触线）等材料科学中的典型问题，通过在弱形式中引入合适机制（如松弛接触角）实现界面与接触线的同步演化，并在计算中保持体积/面积守恒与无条件能量耗散，从而能够稳定捕捉强各向异性诱导的颈缩、多平衡

态等关键现象。

此外，本文将三维闭曲面的能量密度扩展为同时依赖法向量与平均曲率的 $f(\boldsymbol{n}, H)$。通过曲率能导数的质量集中投影，将对称表面能矩阵与曲率演化方程相结合，构造一般耦合能量的参数有限元格式，并在曲率凸性及局部能量估计条件下证明离散解的能量耗散。结合时间平均面积法向量，相应的守恒型梯度流格式还保持离散体积。依据文献 [146] 补充的数值实验展示了流形距离误差的约二阶收敛性、能量耗散与求解精度下的体积守恒，并通过方向依赖 Helfrich 型能量等算例考察曲面形态松弛。该推广的可解性、严格误差分析及曲率一致性仍有待进一步研究。

综上，本文围绕各向异性几何流的结构保持数值格式这一核心目标，建立了从二维到三维、从表面扩散到曲率流、从闭曲线到含接触线开曲面问题的系统方法，并进一步讨论含曲率依赖能量的闭曲面演化。在离散层面严格保持关键几何/物理结构，给出方向依赖表面能问题的最优能量稳定条件及其充分必要性，并通过晶体薄膜与固态脱湿等典型应用验证相关算法的有效性与稳定性。

关键词： 几何流，参数化有限元方法，各向异性表面能量，结构保持，体积守恒，能量稳定

Abstract

Anisotropic geometric flows (such as anisotropic surface diffusion and anisotropic curvature flows) play a central role in crystal growth, thin-film morphological evolution, solid-state dewetting, and related modeling of interfacial motion. Such problems are typically driven by a surface energy density that depends on the normal direction; their evolution must respect geometric constraints while also reflecting fundamental physical structures, including mass (area/volume) conservation, energy dissipation, and contact-line dynamics. However, the **strong nonlinearity** of geometric-flow equations and anisotropic surface energies often induce cusps, necking, and topological changes, leading to numerical instabilities. This makes it highly challenging, at the discrete level, to simultaneously enforce strict **area/volume conservation**, **monotone energy dissipation**, and controllable **mesh quality**. Therefore, constructing numerical methods that can be *verifiably* conservative and energy-dissipative in the discrete sense is not only a necessary foundation for uncovering mechanisms and instabilities in anisotropic interfacial evolution, but also provides reliable tools for simulating complex phenomena in solid crystalline thin films.

This thesis aims at anisotropic geometric flows on planar curves and three-dimensional surfaces. We systematically design a class of *structure-preserving parametric finite element methods* and carry out theoretical analysis and numerical validation with emphasis on energy-stability conditions, unified formulations, and application-oriented simulations. Overall, the thesis follows the main thread of "surface-energy matrix — conservative weak formulation — local energy estimate — fully discrete energy-stability proof". Along this line, for two-dimensional anisotropic surface diffusion, two-dimensional general anisotropic curvature flows, three-dimensional anisotropic surface diffusion, and three-dimensional solid-state dewetting, we establish a natural algorithmic paradigm for structure-preserving discretization and identify *optimal* energy-stability conditions for several schemes.

The main innovations of this thesis can be summarized in three aspects:

- **Characterization of optimal energy-stability conditions:** For anisotropic geometric flows, we establish the necessary and sufficient conditions for unconditional energy stability within a local-energy-estimate framework. Based on this characterization, we

construct parametric finite element discretizations that, whenever the condition holds, preserve both area conservation and energy dissipation, thereby closing the loop from "optimal condition" to "optimal scheme".

- **A unified surface-energy-matrix framework and uniqueness results:** For more general anisotropic curvature flows and three-dimensional problems, we introduce a surface-energy matrix with a hyper-parameter to unify multiple discrete formulations within a single structural framework. We further prove that the parameter value realizing the optimal energy-stability condition is unique. This unified framework also enables a consistent treatment of energy-stability proofs across different models.
- **Structure-preserving simulation for complex applications:** We apply the proposed methods to representative problems in materials science, including crystalline thin-film evolution and solid-state dewetting with moving contact lines. By incorporating appropriate mechanisms in the weak formulation (e.g., relaxed contact angle conditions), we achieve coupled evolution of the interface and the contact line while maintaining area/volume conservation and unconditional energy dissipation in computations, thereby stably capturing key phenomena induced by strong anisotropy, such as necking and multiple equilibria.

Furthermore, a mass-lumped projection couples the surface energy matrix with curvature evolution for energies $f(\boldsymbol{n}, H)$. Under curvature convexity and a local energy estimate, the resulting scheme dissipates energy and its conservative variants preserve volume. Numerical results taken from [146] exhibit approximately second-order convergence in the manifold distance, confirm energy dissipation and volume conservation to nonlinear-solver accuracy, and illustrate orientation-dependent Helfrich-type shape relaxation. Nonlinear solvability, rigorous error analysis, and curvature consistency remain open.

The thesis thus develops structure-preserving methods spanning planar curves, surfaces, and moving contact lines, with an extension to curvature-dependent energies. It characterizes optimal energy-stability conditions for direction-dependent energies and validates the crystalline-film and solid-state dewetting methods through numerical experiments.

Key words: geometric flows, parametric finite element method, anisotropic surface energy, structure-preserving, volume conservation, energy stable

目 录

第 1 章 绪论 1
1.1 物理背景 1
1.2 表面能与各向异性效应 2
1.2.1 Frank 图 4
1.2.2 加权曲率与 Cahn-Hoffman 向量 5
1.3 典型各向异性几何流 7
1.3.1 各向异性曲率流 8
1.3.2 各向异性表面扩散 8
1.4 守恒型几何流的平衡态 9
1.5 文献综述 10
1.6 本文工作 16
第 2 章 曲线演化的稳定化参数有限元方法 19
2.1 一些常用各向异性表面能量 20
2.2 二维表面扩散流的保守形式 21
2.3 表面扩散流的稳定化参数有限元方法 23
2.3.1 弱形式 23
2.3.2 空间半离散 27
2.3.3 保结构稳定化参数有限元离散 28
2.3.4 结构保持 29
2.4 无条件能量稳定性之证明 31
2.4.1 最小稳定函数及其性质 31
2.4.2 局部能量估计 33
2.4.3 无条件能量稳定性 34
2.4.4 最小稳定函数的存在性 35
2.5 数值实验 38
2.5.1 收敛阶与结构保持性 39
2.5.2 二维表面扩散流的形态演化 42

2.6 本章总结 45

第 3 章 具最优能量稳定条件的保结构参数有限元方法 47

3.1 对称表面能量矩阵与对称化保守形式 48

3.2 对称化保结构参数有限元离散 49

3.2.1 弱形式 49

3.2.2 全离散格式 50

3.2.3 结构保持 50

3.3 无条件能量稳定性之证明 50

3.3.1 再论局部能量估计 51

3.3.2 无条件能量稳定性 52

3.3.3 最小稳定函数的全局估计 53

3.4 数值实验 56

3.4.1 收敛阶与结构保持性 56

3.4.2 二维表面扩散流的形态演化 60

3.5 本章总结 61

第 4 章 应用：二维晶体薄膜演化与固态脱湿问题 63

4.1 二维晶体薄膜之演化 63

4.2 二维固态脱湿问题 67

4.2.1 尖锐界面模型与稳定化形式 67

4.2.2 弱形式 68

4.2.3 稳定化参数有限元离散及其性质 69

4.2.4 收敛阶与结构保持 71

4.2.5 二维固态脱湿的形态演化 74

4.2.6 固态脱湿中开曲线的多重平衡态 74

第 5 章 基于 α-表面能矩阵的保结构参数化近似：曲线各向异性演化 81

5.1 统一 α-表面能矩阵 82

5.2 基于 α-表面能矩阵的保结构参数有限元离散 84

5.2.1 弱形式 84

5.2.2 全离散格式 86

5.2.3 结构保持 87

5.3 无条件能量稳定性之证明 88
5.4 最小稳定函数之存在性 90
5.4.1 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 之有界性 91
5.4.2 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 的全局上界估计 92
5.5 推广至其它几何流 94
5.5.1 面积守恒各向异性曲率流 94
5.5.2 各向异性表面扩散 95
5.5.3 广义法向速度律 96
5.6 数值实验 98
5.6.1 数值误差与收敛阶 98
5.6.2 迭代次数与 CPU 时间 101
5.6.3 最小稳定函数与网格质量 101
5.6.4 面积递减率与能量耗散 104
5.6.5 各向异性曲率流的形态演化 105
5.6.6 其它各向异性几何流的数值结果 106
5.7 本章总结 112

第 6 章 基于 α-表面能矩阵的保结构参数化近似：曲面各向异性演化 115
6.1 几何演化方程 115
6.2 α-表面能矩阵与保守形式 117
6.3 保结构参数有限元离散 119
6.3.1 弱形式及其性质 119
6.3.2 全离散格式 120
6.3.3 结构保持 122
6.4 无条件能量稳定性之证明 123
6.4.1 最小稳定函数 123
6.4.2 局部能量估计 124
6.4.3 无条件能量稳定性 126
6.5 最小稳定函数之存在性 127
6.5.1 预备引理与证明概要 127
6.5.2 M_3 的正定性 129
6.5.3 非临界情形 131

6.5.4 临界情形之分析 131
6.6 数值实验 136
6.6.1 收敛阶 136
6.6.2 体积守恒与能量稳定 138
6.6.3 闭曲面在各向异性表面扩散作用下的形态演化 139
6.7 本章总结 145

第 7 章 应用：三维空间中的固态脱湿问题 147
7.1 尖锐界面模型 147
7.2 结构保持参数有限元离散 149
7.2.1 弱形式 149
7.2.2 全离散格式 150
7.2.3 结构保持 151
7.3 固态脱湿中开曲面的形态演化 152

第 8 章 含曲率依赖表面能的几何梯度流及其保结构参数有限元方法 159
8.1 表面能与基本几何恒等式 159
8.1.1 能量泛函及符号约定 159
8.1.2 法向量、曲率和面积元的演化 160
8.2 第一变分与梯度流的保守弱形式 161
8.2.1 化学势的标量与张量表述 161
8.2.2 统一弱形式及连续结构 162
8.3 固定曲率的对称表面能矩阵 163
8.3.1 矩阵构造及其作用 163
8.3.2 局部能量估计与参数依赖 163
8.4 含辅助投影的全离散参数有限元格式 164
8.4.1 离散几何与非线性项的求积 164
8.4.2 辅助标量与完整离散系统 165
8.5 全离散能量耗散 165
8.6 保持体积的梯度流离散 167
8.6.1 离散体积增量 167
8.6.2 表面扩散与体积约束的曲率型运动 167

8.7 数值实验 168
8.7.1 初始化与稳定化参数 168
8.7.2 误差与收敛阶 169
8.7.3 体积变化与能量耗散 170
8.7.4 曲面的形态演化 172
8.8 本章总结 177

第 9 章 总结及未来工作 179
9.1 主要工作总结 179
9.2 未来工作方向 181

参考文献 183

附录 A 非线性格式求解器 193
A.1 曲线演化的迭代求解器 193
A.1.1 Picard 迭代法 193
A.1.2 Newton 迭代法 193
A.2 曲面演化的迭代求解器 194
A.2.1 Picard 迭代法 194
A.2.2 Newton 迭代法 195

附录 B 若干三维各向异性表面能量 197

符号索引 199

名词索引暨英译 201

插 图

图 1.1 固态薄膜在表面扩散驱动下脱湿形成多个孤立半球形岛，图取自 [134]。 2
图 1.2 一些由各向异性导致的不稳定性：颈缩（上），手指不稳定性（下左），晶面不稳定性（下右）。图取自 [100,144,150]。 3
图 1.3 若干二维各向异性的 Frank 图。从左至右，从上至下：三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{9}$；三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{3}$；分段各向异性；分段 BGN 型各向异性；l^1-范数各向异性；$\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{4}(n_1^4 + n_2^4)$；$\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{2}(n_1^6 + n_2^6)$。 .4
图 1.4 若干三维各向异性的 Frank 图。从左至右，从上至下：三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{3}$；[001] 定向各向异性且 $\beta = 1/2$；分段 BGN 型各向异性；l^4-范数各向异性；[111] 定向各向异性且 $\beta = 1/2$。 5
图 1.5 若干三维各向异性的 $\boldsymbol{\xi}$-图。从左至右，从上至下：各向同性；椭球各向异性；分段 BGN 型各向异性；三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性 $\beta = 1$。 7
图 1.6 对应于图 1.4 中 Frank 图的若干各向异性的 Wulff 形。 10
图 1.7 若干三维各向异性的 γ-图，Frank 图，$\boldsymbol{\xi}$-图以及 Wulff 形。从上至下：l^1-范数各向异性；分段 BGN 型各向异性；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = 1$。 11
图 1.8 纺锤形曲面在 Dziuk 方法模拟下的平均曲率流演化，图取自 [151]。..... 13
图 1.9 纺锤形曲面在 BGN 方法模拟下的平均曲率流演化，图取自 [151]。..... 13
图 1.10 本文内容结构图 17
图 2.1 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时，格式 (2.52) 的收敛阶：(a) $t = 0.5$ 时，不同 β 的例 I 各向异性；(b) $t = 0.125, 0.25, 0.5$ 时，取 $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。..... 40
图 2.2 $t = 0.5$ 时，格式 (2.52) 在例 I 各向异性下关于不同 $k(\theta)$ 的收敛阶：(a) $\beta = 0$; (b) $\beta = 1/9$。 40
图 2.3 数值格式 (2.52) 的加权网格比：(a) $\beta = 1/9$ 的例 I 各向异性；以及 (b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。 41
图 2.4 规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代步数（红线）：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。网格取为 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$。 41
图 2.5 规范化能量：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。 42

图 2.6 长轴 4、短轴 1 的椭圆在不同表面能的各向异性表面扩散流下的形态演化：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性；(c) $\hat{\gamma}(\theta) = 1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$；(d) $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。红线与蓝线分别代表初始曲线和数值平衡态，黑色虚线则表示中间演化曲线。空间网格和时间步长取为 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$。..... 43

图 2.7 四重星形曲线与倾斜椭圆在不同表面能的各向异性表面扩散流下的形态演化：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性；(c) $\hat{\gamma}(\theta) = 1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$；(d) $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。红线与蓝线分别代表初始曲线和数值平衡态，黑色虚线则表示中间演化曲线。空间网格和时间步长取为 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$。..... 44

图 3.1 例 I 在 $\beta = \frac{1}{2}$ 下的最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 及其在式 (3.17) 中给出的上界 $K(\theta)$。..... 56

图 3.2 例 I 在 $\beta = 1/9$ 下 SP-PFEM (3.12) 的收敛阶：(a) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时在不同时刻的结果；(b) 在 $t = 0.5$ 时取不同 $k(\theta)$ 的结果；以及例 II 下的对应结果：(c) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时在不同时刻的结果；(d) 在 $t = 0.5$ 时取不同 $k(\theta)$ 的结果。..... 57

图 3.3 在 $k(\theta) = k_0(\theta)$、$h = 2^{-6}$、$\tau = 2^{-12}$ 的条件下，格式 (3.12) 的规范化面积损失（蓝色虚线）及迭代次数（红色实线）：(a) 例 I，其中 $\beta = 1/2$；(b) 例 II。..... 58

图 3.4 在 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 下，格式 (3.12) 的规范化能量：(a) 例 I，其中 $\beta = 1/2$；(b) 例 II。..... 58

图 3.5 例 I 在 $\beta = 1/9$ 下，格式 (3.12) 的加权网格比：(a) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$，在不同 h 下的结果；(b) 取 $h = 2^{-6}$，在不同 $k(\theta)$ 下的结果。例 II 的对应结果见 (c) 与 (d)：(c) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$，在不同 h 下的结果；(d) 取 $h = 2^{-6}$，在不同 $k(\theta)$ 下的结果。..... 59

图 3.6 在不同表面能函数下，各向异性表面扩散作用中一条长轴为 4、短轴为 1 的椭圆的形态演化过程：(a) 例 I，其中 $\beta = 1/2$；(b) 例 II；(c) 四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{10}\cos 4\theta$；(d) 正则化晶体型各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \sqrt{\varepsilon^2 + (1-\varepsilon^2)\sin^2\frac{m}{2}\theta}$，其中 $\varepsilon = 0.1, m = 7$。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。..... 60

图 4.1 在四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$ 表面扩散作用下（纵横比为 50 的长薄膜）之规范化面积与规范化能量。 64
图 4.2 考察尺寸为 $2L \times 1$ 的长薄膜在颈缩后所形成岛屿数目随 L 及各向异性强度 β 的变化关系。左图对应二重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 2\theta$；右图对应三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 3\theta$。图中实线分别表示形成 $1-2$ 个岛与 $2-3$ 个岛之间的分界线。 64
图 4.3 尺寸为 $2L \times 1$ 的长薄膜在发生颈缩后所形成岛屿数目关于 L 与各向异性强度 β 的函数关系：左图对应四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 4\theta$；右图对应六重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 4\theta$。图中实线分别表示形成 $1-2$ 个岛与 $2-3$ 个岛之间的分界线。 65
图 4.4 尺寸为 140×1 的薄膜在三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$ 作用下，由各向异性表面扩散所驱动的演化过程在不同时刻的形态快照。 66
图 4.5 纵横比为 80 的长薄膜在各向异性表面扩散作用下的形态演化：左图为各向同性表面能密度情形，右图为六重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{35.1}\cos 6\theta$。 . 66
图 4.6 二维情形下薄膜在平坦刚性基底上的固态脱湿示意图。其中，$\gamma_{FV} = \hat{\gamma}(\theta), \gamma_{VS}, \gamma_{FS}$ 分别表示薄膜/气相、气相/基底及薄膜/基底界面的表面能密度，x_c^l, x_c^r 为左右接触点。 67
图 4.7 格式 (4.14) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 及 $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ 时的收敛阶：(a) 例 I 各向异性在 $t = 0.5$ 时、不同 β 取值下的结果：(b) 例 II 各向异性 (取 $b = 2$) 在不同时刻 $t = 0.125, 0.25, 0.5$ 的结果。 72
图 4.8 格式 (4.14) (取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 及 $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$) 的加权网格比: (a) 例 I 各向异性，取 $\beta = \frac{1}{9}$; (b) 例 II 各向异性，取 $b = 2$。 72
图 4.9 格式 (4.14) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$、$\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ 以及 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$ 时的规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta = \frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b = 2$。 73
图 4.10 格式 (4.14) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 及 $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ 时的规范化能量：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta = \frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b = 2$. 73

图 4.11 开 4×1 矩形在不同表面能条件下、由各向异性表面扩散所驱动的形态演化：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta=\frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b=2$；(c) $\hat\gamma(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos4\theta$；(d) $\hat\gamma(\theta)=\sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$ with $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。参数取 $\sigma=-\frac{\sqrt2}{2}$, $h=2^{-7}$, $\tau=2^{-10}$. 75

图 4.12 表面能 $\hat\gamma(\theta)=1+0.4\cos4\theta$ 且 $\sigma=\cos\frac{5\pi}{6}$ 下的广义 Winterbottom 构造。绿色阴影区域与蓝色阴影区域为稳定平衡态。 76

图 4.13 不同初始曲线（红色虚线）下在四重对称性表面能控制下的多重平衡态。黑色虚线对应 Wulff 包络；其余参数设置为 $\beta=0.4,\sigma=\cos\frac{5\pi}{6}$ 以及 $\eta=100$。 77

图 4.14 广义 Winterbottom 构造示意图 (a)，以及在四重对称表面能 $\hat\gamma(\theta)=1+0.3\cos4(\theta+\frac{\pi}{6})$ 及 $\sigma=0.2$ 条件下，从不同初始曲线出发所得的数值平衡形态 (b)–(c)。 77

图 4.15 不同初始形状在四重对称各向异性 $\hat\gamma(\theta)=1+0.3\cos4\left(\theta+\frac{\pi}{6}\right),\sigma=0.2$ 条件下的形态演化：(a) 单位正方形；(b) 直角梯形。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡形态，黑色虚线表示中间演化曲线。 78

图 4.16 广义 Winterbottom 构造示意图 (a)，以及在三重对称表面能 $\hat\gamma(\theta)=1+0.3\cos3(\theta+\frac{\pi}{6})$ 及 $\sigma=-0.2$ 条件下，从不同初始曲线出发所得的数值平衡形态 (b)–(c)。 78

图 4.17 不同初始形状在三重对称各向异性 $\hat\gamma(\theta)=1+0.3\cos3\left(\theta+\frac{\pi}{6}\right),\sigma=-0.2$ 条件下的形态演化：(a) 单位正方形；(b) 直角梯形。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡形态，黑色虚线表示中间演化曲线。 79

图 5.1 格式 (5.30) 在 $t=0.25$ 处、不同 α 取值下之收敛阶：(A)–(B) 例 I 且 $\beta=1/9$；(C) 例 II。 100

图 5.2 格式 (5.30) 在 $t=0.25$ 处之误差比较：(A) 例 I 且 $\beta=1/7$，取 $\alpha=0,\pm0.5,\pm0.9,\pm1,\pm1.1$；(B) 例 II，取 $\alpha=0,\pm1,\pm3,\pm6,\pm10$。 100

图 5.3 例 I 中最小稳定函数及其 L^∞ 范数与各向异性函数的 L^∞ 范数之比值。 102

图 5.4 例 I 且 $\beta=1/9$ 时，不同 α 取值下之最小稳定化函数。 102

图 5.5 各向异性表面扩散下，长轴 4、短轴 1 的椭圆在格式 (5.78) 下的加权网格比随 α 取值的变化；所用各向异性为 $\hat\gamma(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos4\theta$。网格尺度取为 $(h,\tau)=(2^{-6},4^{-6})$。 103

图 5.6 长轴 4、短轴 1 的椭圆在 $\alpha = 0$ 时由格式 (5.30) 所计算的各向异性曲率流下的面积及其递减率。……104
图 5.7 长轴 4、短轴 1 的椭圆在格式 (5.30) 下的形态演化：(A) 例 I 且 $\beta = 1/7$；(B) 例 II。红色实线表示初始形状，蓝色实线分别表示 (A) $t = 0.45$ 与 (B) $t = 0.35$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。参数取为 $\alpha = 0, (h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。……104
图 5.8 格式 (5.30) 的规范化能量：(A) 例 I 且 $\beta = 1/7, \alpha = 0$；(B) 例 II 并取不同 α。图 (B) 中网格尺度取为 $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。……105
图 5.9 具有较大曲率变化的非凸初始曲线在 $\alpha = 2$ 时由格式 (5.30) 所模拟之各向异性曲率流形态演化。红色曲线表示初始形状，蓝色曲线表示 $t = 0.32$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。……106
图 5.10 C^0 光滑初始曲线在 $\alpha = -2$ 时由格式 (5.30) 所模拟之各向异性曲率流形态演化。红色曲线表示初始形状，蓝色曲线表示 $t = 0.24$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。……107
图 5.11 自相交初始曲线在各向异性演化下于 $t = 0, 0.028, 0.056, 0.084, 0.112, 0.2, 0.3, 0.4, 0.42$ 时刻的形态变化。表面能密度取三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$。其余参数设为 $\alpha = -1$, $h = 2^{-7}$, $\tau = 0.005$。……108
图 5.12 长轴 8、短轴 1 的椭圆在面积守恒各向异性曲率流下由格式 (5.74) 所模拟之形态演化，其中各向异性取 l^4-范数度量 $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt[4]{n_1^4 + n_2^4}$，且 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。参数设为 $\alpha = 2.5, (h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$。……109
图 5.13 图 5.12 所对应的时间演化：(A) 规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）；(B) 规范化能量。……109
图 5.14 蝴蝶结形初始曲线在面积守恒各向异性曲率流下之形态演化，其中各向异性分别取为：(A) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{28}\cos 2\theta$；(B) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{30}\cos 6\theta$。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。其余参数设为 $\alpha = 0.5, (h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$。……110
图 5.15 花形初始曲线在面积保持的各向异性曲率流下于 $t = 0, 0.05, 0.15, 0.25, 0.4, 2.5$ 时刻之演化快照。各向异性取例 II，其余参数设为 $\alpha = -0.5$, $h = 2^{-7}$, $\tau = 0.005$。……110

图 5.16 长轴 8、短轴 1 的椭圆在各向异性表面扩散作用下之形态演化。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。各向异性取为例 I 并置 $\beta = 1/9$，网格尺度取为 $(h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$。 .111
图 5.17 图 5.16 中各向异性表面扩散对应的时间演化：(A) 规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）；(B) 规范化能量。 111
图 5.18 四叶形曲线在各向异性表面扩散作用下于 $t = 0, 0.15, 0.5, 0.9$ 时刻的形态演化。各向异性取为例 I，参数设为 $\alpha = 0.5$, $\beta = 1/5$, $h = 2^{-7}$, $\tau = 0.001$。 112
图 5.19 近似裂隙区域在各向异性表面扩散于 $t = 0, 5 \times 10^{-6}, 7 \times 10^{-5}, 2.5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}, 7.5 \times 10^{-4}, 0.002, 0.02, 0.1$ 时刻的形态演化。表面能取作四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$，参数设为 $\alpha = 1$, $h = 1/288$, $\tau = 1 \times 10^{-6}$。 113
图 5.20 Bernoulli 双纽线在各向异性表面扩散作用下的形态演化，其中 $t = 0$, 0.008, 0.015, 0.025, 0.035, 0.04, 0.0425。各向异性取为例 I，参数取 $\beta = 1/9$, $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。 114
图 6.1 $\mathbb{R}^3$ 中的闭且可定向曲面 $\Gamma(t)$ 在各向异性表面能 $\hat{\gamma}(\theta, \phi)$ 作用下的各向异性表面扩散（左），以及局部正交归一标架 $\{\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2\}$ 的球坐标表示（右）；其中 $\boldsymbol{\xi}(\theta, \phi)$ 表示 Cahn–Hoffman 的 $\boldsymbol{\xi}$-向量。 116
图 6.2 局部能量估计 124
图 6.3 规范化体积损失：(a) 例 I；(b) 情形 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$。超参数分别取 $\alpha = 0, 1, -1$。 138
图 6.4 迭代次数：(a) 例 I；(b) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$。超参数分别取 $\alpha = 0, 1, -1$。 139
图 6.5 规范化能量：(a) 例 I，$\alpha = 0$；(b) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$ 且 $\alpha = -1$；(d) 例 I。 140
图 6.6 各向异性表面扩散下 $3 \times 3 \times 2$ 长方体于不同时刻的形态演化：各向异性取例 I，超参数 $\alpha = 0$。 141
图 6.7 各向异性表面扩散下 $3 \times 3 \times 2$ 长方体于不同时刻的形态演化：各向异性取例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$，超参数 $\alpha = -1$。 141

图 6.8 $8\times1\times1$ 长方体在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩的若干时刻快照：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，超参数 $\alpha=-0.5$。 142
图 6.9 $16\times1\times1$ 长方体在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta=\frac{1}{8}$，超参数 $\alpha=-0.5$。 143
图 6.10 $(1,0.25)$-环面在各向异性表面扩散作用下的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta=1/4$，超参数 $\alpha=0.5$。 143
图 6.11 $(1,0.2)$-环面在各向异性表面扩散作用下的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta=1/4$，超参数 $\alpha=0.5$。 144
图 6.12 正交十字梁在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$。 144
图 6.13 正交十字梁在各向异性表面扩散作用下的演化：(a) 迭代步数；(b) 规范化体积损失；(c) 规范化能量。 145
图 6.14 球形格架在各向异性表面扩散作用下的演化：各向异性取例 II 且 $\beta=\frac{1}{4}$. . 145
图 7.1 刚性平坦基底上薄膜的固态脱湿过程示意图。左图：Γ 表示薄膜/气相界面，S 表示薄膜/基底界面，C 为接触线；$\boldsymbol{n}_C$ 为 C 在 S 上的单位外法向量。右图：接触角 $\theta_C=\arccos(\boldsymbol{n}_C\cdot\boldsymbol{\nu}_C)$ 的几何构型，其中 $\boldsymbol{\nu}_C$ 为 C 的余法向量。 147
图 7.2 固态脱湿过程中 3×3×2 长方体的演化，其中各向异性取例 II 且 $\beta=1/4$，超参数 $\alpha=0$，$\theta_Y=2\pi/3$。 153
图 7.3 固态脱湿过程中 $3.2\times3.2\times0.2$ 长方体的演化，其中各向异性取例 I，超参数 $\alpha=-1$，$\theta_Y=3\pi/4$。 153
图 7.4 固态脱湿中 $16\times1\times1$ 长方体的演化至颈缩的过程：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y=5\pi/6$。 154
图 7.5 由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $2\times2\times1$ 长方体所得初始“宽”方环的固态脱湿过程及其在平面 $x=y$ 上的截线：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y=3\pi/4$。 155
图 7.6 固态脱湿过程中初始“窄”方环演化至颈缩的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta=\frac{1}{4}$，$\theta_Y=3\pi/4$。 155
图 7.7 固态脱湿过程中初始“窄”方环演化至颈缩的若干时刻快照：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y=3\pi/4$。 . 156

图 7.8 由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $6\times6\times1$ 长方体所得初始“超窄”方环在固态脱湿过程中的演化：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y = 3\pi/4$。 157
图 7.9 各向异性强度 $\beta=\frac{1}{4}$ 时，不同材料常数 θ_Y 下岛状薄膜的平衡态及其与平面 $x=y$ 上的截线。 157
图 7.10 固定 Young 角 $\theta_Y = 7\pi/12$ 时，不同各向异性强度 β 下岛状薄膜的平衡态及其与平面 $x=y$ 上的截线。 158
图 8.1 $h=2^{-3}$ 时的体积变化与 Newton 迭代次数：左图为 L^2 流的 $V^h(t)/V^h(0)$；右图为表面扩散的 $\Delta V^h(t)/V^h(0)$。 171
图 8.2 归一化能量：(a) L^2 流；(b) 表面扩散。 171
图 8.3 椭球在 L^2 流作用下的演化。 173
图 8.4 椭球在表面扩散作用下的演化。 173
图 8.5 六叶曲面在 L^2 流作用下的演化。 174
图 8.6 六叶曲面在表面扩散作用下的演化。 175
图 8.7 采用 896 个顶点与 $\tau=0.005$ 时，环面在 L^2 流作用下的演化。 176
图 8.8 能量 (8.63) 驱动下双凹盘的表面扩散演化。 177

表 格

表 5.1 全离散格式 (5.30) 在 $\alpha = 0, \pm 1$ 时的数值误差 $e^h(t)$ 与收敛阶。各向异性能量密度如例 I 所示，并置 $\beta = 1/9$。其余参数取为 $h_0 = 2^{-4}, \tau_0 = h_0^2$。 99
表 5.2 格式 (5.30) 在例 I 且 $\beta = 1/7$ 时、于 $t = 0.1$ 处之总迭代次数与平均 CPU 时间。 101
表 6.1 例 I 的数值误差及收敛阶。 137
表 6.2 例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$ 的数值误差及收敛阶。 137
表 8.1 曲面 L^2 流的误差与收敛阶。 170
表 8.2 表面扩散的误差与收敛阶。 170
表 8.3 每步实际耗时与 Newton 迭代次数。 172

符号对照表

$d\ (d=2,3)$	维数
$\mathbb{R}^d$	d 维 Euclid 空间
$\mathbb{R}_{\geq 0}$	非负实数
t	时间
$\Gamma, \Gamma(t)$	二维曲线或三维曲面
$\boldsymbol{X}$	位置向量
$\boldsymbol{n}$	单位外法向量
$\boldsymbol{\tau}$	曲线上的切向量
$\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2$	曲面切空间的正交基
$\boldsymbol{\nu}$	余法向量
V_n	法向速度
$\gamma(\boldsymbol{n})$	各向异性函数
$\gamma(\boldsymbol{p})$	函数 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 一次齐次延拓
$\boldsymbol{I}_d$	d 维单位矩阵
$\boldsymbol{v}^\perp$	逆时针旋转 $\frac{\pi}{2}$
$\boldsymbol{v}^T, \boldsymbol{V}^T$	向量 $\boldsymbol{v}$ 或矩阵 $\boldsymbol{V}$ 之转置
θ	二维空间中法向量与 y-轴夹角
$\hat{\gamma}(\theta)$	二维极坐标下的各向异性函数
$\hat{\gamma}(\theta, \phi)$	三维极坐标下的各向异性函数
$\tilde{\gamma}(\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)$	表面刚度
$W(\Gamma)$	总表面能
μ	加权曲率
κ	二维曲线曲率
H	超曲面平均曲率
$\boldsymbol{\xi}$	Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量
s	弧长参数
∂_s	对弧长参数的导数

∇_Γ	曲面 Γ 的表面梯度
$\nabla_\Gamma\cdot$	曲面 Γ 的表面散度
$\underline{D}_i$	算子 ∇_Γ 的第 i 个分量
$\Delta_\Gamma \coloneqq \nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma$	曲面 Γ 上的 Laplace-Beltrami 算子
$\mathcal{F}$	Frank 图
$\mathcal{W}$	Wulff 形
$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$	稳定化表面能矩阵
$\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$	对称表面能矩阵
$\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta),\ \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)$	α-表面能矩阵
$k(\theta),\ k(\theta,\phi)$	稳定函数
$k_0(\theta),\ k_{\min}(\theta)$	二维最小稳定函数
$k_{\min}(\theta,\phi)$	三维最小稳定函数
$M(\Gamma_1,\Gamma_2)$	Γ_1 与 Γ_2 之间的流形距离

第 1 章 绪论

本章我们首先阐述研究外蕴各向异性几何流的动机。随后引入表面能以刻画各向异性效应，通过对表面能泛函作第一变分我们得到外蕴各向异性几何流的基本形式，并介绍了两种可被视作梯度流的特殊各向异性几何流。之后我们对相关理论结果与数值方法作些简单回顾。最后，我们介绍一下本文工作所涵范围。

1.1 物理背景

受曲率驱动的界面演化广泛存在于诸多科学领域，尤其在材料科学与固体物理中占据重要地位。研究曲率驱动问题 (curvature-driven problem) 对于理解并模拟固态材料中界面的演化具有关键作用。自 1956 年 Mullins 首度引入平均曲率流与表面扩散流作为描述材料晶界演化及界面上原子或分子在毛细效应驱动下的迁移运动的数学模型开始 [112-113]，曲率驱动的几何偏微分方程便逐渐发展为刻画界面演化动力学的核心理论框架之一。此后，大量研究围绕其物理合理性、变分结构与适定性展开：在几何分析与偏微分方程领域，对曲率流的研究推动了关于解的存在唯一性 [66,75,109]、正则性 [75,86]、奇点形成 [43,87,138] 及长时间行为 [88-89] 等问题的系统研究；在材料科学与固体物理中，相关模型被用于解释外延生长 [64,79]、表面相形成 [30,40,74]、多相催化 [121,127]、多相流体力学 [5,32] 以及固态脱湿 [90,131,134,137]。如图 1.1 所示，表面扩散结合移动接触线被用于解释固态薄膜在刚性基底的脱湿过程 [93-94,134,143]。

在晶体材料科学中，材料的内禀晶格结构往往自然诱导出具有**方向依赖**的表面能分布。此类**各向异性效应**在研究晶体形状与薄膜演化时尤为关键，其界面动力学常受材料内部对称性所深刻制约。具体而言，当表面能密度随界面法向取向而变化时，界面演化会表现出显著的方向选择性：不同取向对应不同的能量代价与迁移动力，从而在演化过程中形成取向的偏好与竞争。由晶体对称性主导的这种选择机制，往往使原本相对平滑的形貌演化呈现更为复杂的动力学行为，并在特定几何与边界条件下诱发多种不稳定性与形态转变。

在薄膜回缩、细长结构的形态演化或存在强取向偏好时，界面可能相继呈现多种复杂的不稳定性 (见图 1.2)，如 Rayleigh-Plateau 不稳定性 [77,119]、晶面化不稳定性 [34,73,80,100]、手指不稳定性 [95-96,115]、角点不稳定性 [143] 乃至颈缩断裂

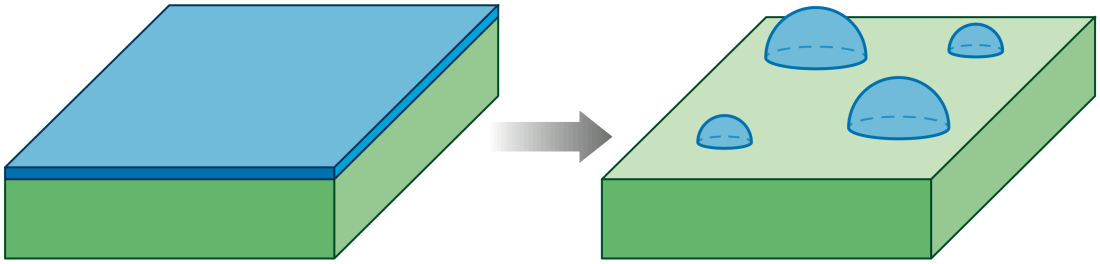


图 1.1　固态薄膜在表面扩散驱动下脱湿形成多个孤立半球形岛，图取自 [134]。
Figure 1.1　Under surface-diffusion-driven dewetting, a solid thin film breaks up into multiple isolated hemispherical islands; the image is adapted from [134].

[130,144] 等现象。更重要的是，这些过程往往并非孤立发生，而是相互耦合、层层递进：例如，边缘处微小扰动的放大可先导致指状结构的形成；随后细长的指状区域又可能进一步发生颈缩并断裂，生成多个孤立岛状体，从而伴随显著的多尺度结构演化与拓扑变化。此类形貌特征在实验中屡见不鲜，也正是各向异性效应在动力学层面的直接体现。

上述复杂性亦解释了为何各向异性曲率流的精确数值模拟更具挑战，即数值格式需要精确而可靠的捕捉其背后的物理机制。鉴于各向异性几何流在诸多领域中的广泛而深刻的应用，建立一套系统的结构保持型数值格式框架，遂显得尤为重要。

1.2　表面能与各向异性效应

界面演化动力学的各向异性效应常由各向异性表面能量所主导，我们遵从文献惯例以 γ 记之。在现实中，γ 可能受多种因素影响，如温度、位置、电磁场、曲率等 [82,123,128]。在此我们先将注意力集中到一类简化情形，即 $\gamma = \gamma(\boldsymbol{n}) > 0$，其中 $\boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^{d-1}$ 为曲面的单位外法向量。

当 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 对所有方向分布均匀时，即 $\gamma(\boldsymbol{n}) \equiv$ 常数，曲面的各向异性消失，表面能退化为**各向同性**能量。反之，若其不为常数，可按照各向异性强弱分为两类：**弱各向异性**以及**强各向异性**。各向异性的强弱深刻影响了几何流的适定性 [3,42,129]、平衡态的稳定性 [37,77,92] 以及对其数值方法的分析 [11,46,57,137,151]。

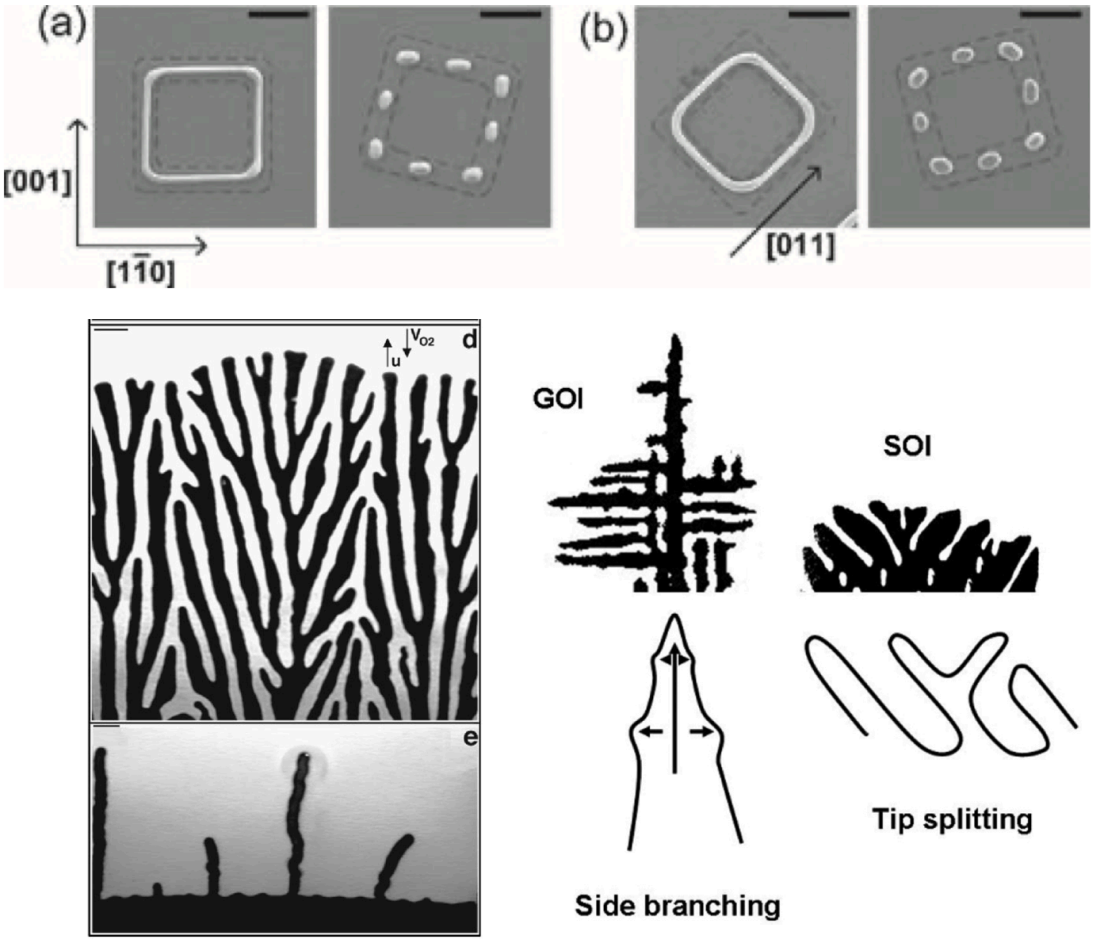


图 1.2 一些由各向异性导致的不稳定性：颈缩（上），手指不稳定性（下左），晶面不稳定性（下右）。图取自 [100,144,150]。

Figure 1.2 Instabilities induced by anisotropy: pinch-off (top), fingering instability (bottom left), and faceting instability (bottom right). The figure is adapted from [100,144,150].

1.2.1　Frank 图

为便于理解，我们先从较简单的二维情形开始：考虑法向量 $\boldsymbol{n} = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$，则将 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 改写为等价的 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述，即 $\hat{\gamma}(\theta)\hat{\gamma}(\theta) \coloneqq \gamma(\boldsymbol{n}(\theta))$。此时便可通过检验所谓*表面刚度* (surface stiffness) $\tilde{\gamma}(\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)$ 对各向异性强弱进行分类 [78,114]。若表面刚度 $\tilde{\gamma}(\theta)$ 恒正，则称其为*弱各向异*的；反之则称为*强各向异*的。对于一般的各向异性表面能 $\gamma(\boldsymbol{n})$，则可通过 Frank 图 (Frank diagram) 予以分类 [65]：

$$\mathcal{F} \coloneqq \left\{ \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^d \mid \gamma(\boldsymbol{p}/|\boldsymbol{p}|) \leq 1 \right\}, \tag{1.1}$$

对给定方向 $\boldsymbol{n}$，Frank 图的半径为 $\frac{1}{\gamma(\boldsymbol{n})}$，因此也被称为 $\frac{1}{\gamma}$-图。图 1.3 和图 1.3 展示了若干各向异性函数的 Frank 图，关于其表达式请见 2.1 节以及附录 B。

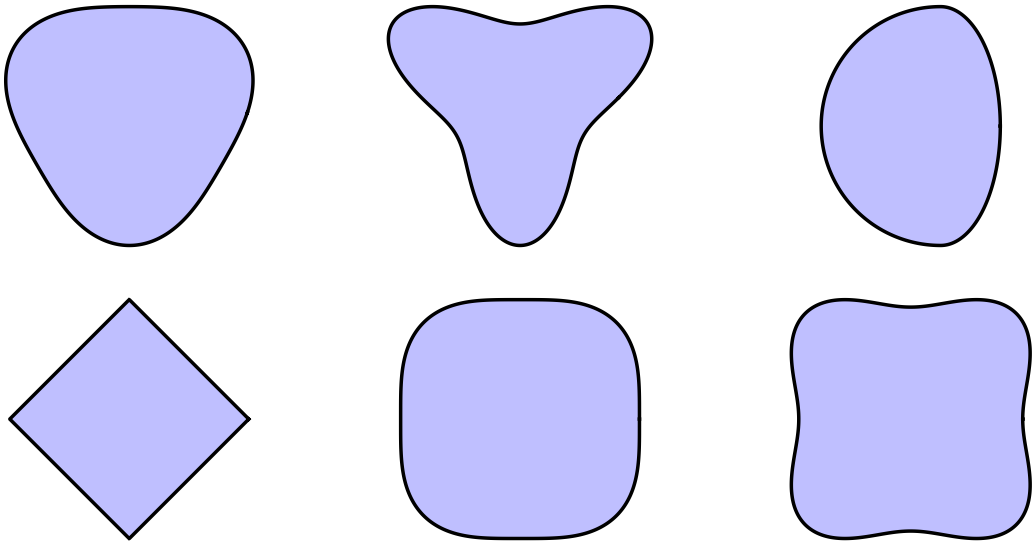


图 1.3　若干二维各向异性的 Frank 图。从左至右，从上至下：三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{9}$；三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{3}$；分段各向异性；分段 BGN 型各向异性；l^1-范数各向异性；$\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{4}(n_1^4 + n_2^4)$；$\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{2}(n_1^6 + n_2^6)$。

Figure 1.3　Several Frank diagrams of two-dimensional anisotropies. From left to right, top to bottom: threefold-symmetric anisotropy with $\beta = \frac{1}{9}$; threefold-symmetric anisotropy with $\beta = \frac{1}{3}$; piecewise anisotropy; piecewise BGN-type anisotropy; l^1-norm anisotropy; $\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{4}(n_1^4 + n_2^4)$; $\gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{2}(n_1^6 + n_2^6)$.

各向异性函数 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 所对应的 Frank 图的凸性可用于判断其强弱。具体地讲，若 Frank 图是**凸**的，则其为弱各向异性；若 Frank 图**非凸**，则其为强各向异性 [135]。

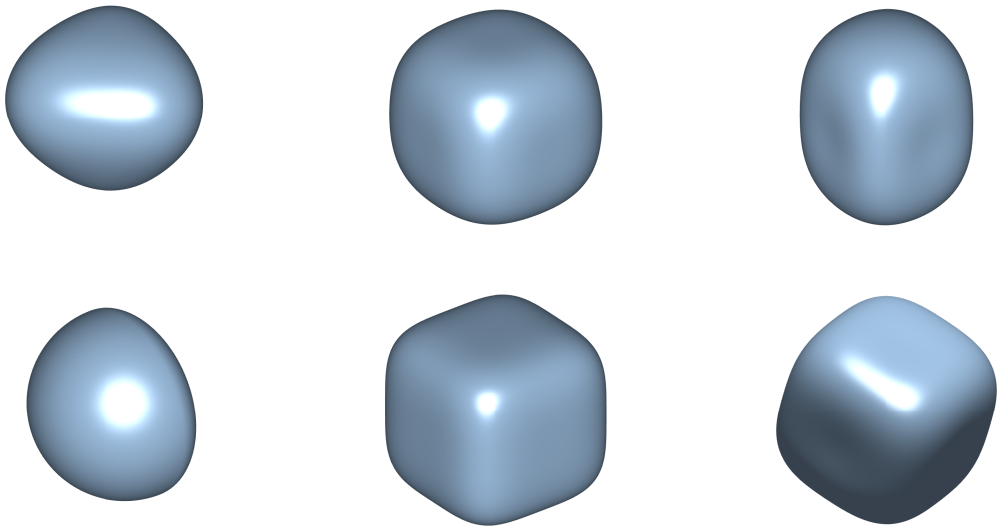


图 1.4 若干三维各向异性的 Frank 图。从左至右，从上至下：三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{3}$；[001] 定向各向异性且 $\beta = 1/2$；分段 BGN 型各向异性；l^4-范数各向异性；[111] 定向各向异性且 $\beta = 1/2$。

Figure 1.4 Several Frank diagrams of three-dimensional anisotropies. From left to right, top to bottom: threefold-symmetric anisotropy with $\beta = \frac{1}{4}$; cubic anisotropy with $\beta = \frac{1}{3}$; [001]-oriented anisotropy with $\beta = \frac{1}{2}$; piecewise BGN-type anisotropy; l^4-norm anisotropy; [111]-oriented anisotropy with $\beta = \frac{1}{2}$.

1.2.2 加权曲率与 Cahn-Hoffman 向量

从热力学第二定律的观点上讲，总能量的下降是系统演化的驱动力。对于 $\mathbb{R}^d$ 一给定曲面 Γ 及给定各向异性 $\gamma(\boldsymbol{n})$，考虑其上的总表面能是非常自然的：

$$W(\Gamma) \coloneqq \int_{\Gamma} \gamma(\boldsymbol{n}) \, \mathrm{d}A, \tag{1.2}$$

其中 $\mathrm{d}A$ 为 Γ 上的面积元。设 Γ^ε 为 Γ 的一个小扰动，则我们定义系统的化学势 (chemical potential) 为能量泛函 $W(\Gamma)$ 的第一变分：

$$\mu \coloneqq \frac{\delta W(\Gamma)}{\delta \Gamma} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{W(\Gamma^\varepsilon) - W(\Gamma)}{\varepsilon}. \tag{1.3}$$

在二维情形，若采用 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述，我们可以显式计算出**化学势**

$$\mu = \tilde{\gamma}(\theta)\kappa = [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\kappa, \tag{1.4}$$

其中 $\tilde{\gamma}(\theta)$ 为表面刚度，$\kappa = -(\partial_{ss}\boldsymbol{X}) \cdot \boldsymbol{n}$ 为曲率，故而有时 μ 亦被称为**加权曲率**。特别地，在无各向异性效应时，μ 将**退化**为经典曲率 κ。在得到驱动力 μ 后，还需根据不

同的物理机制将 μ 转化为界面的法向速度。例如，非守恒情形通常对应曲率型运动，而当演化由沿面扩散主导时则导出表面扩散型运动。由此便可得到若干不同的几何流模型。

1972 年，Cahn 与 Hoffman 提出用如今被称为 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量的工具研究晶体材料中的各向异性 [37,84]。其数学定义如下：首先对定义在 $\mathbb{S}^{d-1}$ 上对各向异性函数 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 作一次**齐次**延拓：

$$\gamma(\boldsymbol{p}) \coloneqq \begin{cases} |\boldsymbol{p}|\,\gamma(\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}), & \forall \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^d \backslash \{\boldsymbol{0}\} \\ 0, & \boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}. \end{cases} \tag{1.5}$$

那么 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量被定义为：

$$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n}) = (\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_d)^T \coloneqq \nabla\gamma(\boldsymbol{p})\Big|_{\boldsymbol{p}=\boldsymbol{n}}, \qquad \forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^{d-1}, \tag{1.6}$$

其中 ∇ 为 $\mathbb{R}^d$ 中的梯度算子。由齐次性，易见 $\boldsymbol{\xi}$ 满足

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{n} = \gamma(\boldsymbol{n}). \tag{1.7}$$

图 1.5 中展示了几种各向异性函数的 $\boldsymbol{\xi}$-图。值得一提的是，当各向异性函数为弱各向异性时，其 $\boldsymbol{\xi}$-图构成一简单闭曲面；当其为强各向异性时，则会出现“耳状”区域，如图 1.5 最后所示。

利用极坐标，我们可以**显式**表达 Cahn-Hoffman 向量。具体地讲，在二维 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述下，有

$$\boldsymbol{\xi}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta)\boldsymbol{n} - \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{\tau}, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{1.8}$$

其中 $\boldsymbol{n} = (-\sin\theta, \cos\theta)^T, \boldsymbol{\tau} = (\cos\theta, \sin\theta)^T$ 分别为曲线的法向量与切向量；在三维 $\hat{\gamma}(\theta, \phi)$ 表述下，其可作如下分解：

$$\boldsymbol{\xi}(\theta, \phi) = \hat{\gamma}(\theta, \phi)\boldsymbol{n} + \frac{\partial\hat{\gamma}(\theta, \phi)}{\partial\theta}\boldsymbol{\tau}_1 + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\hat{\gamma}(\theta, \phi)}{\partial\phi}\boldsymbol{\tau}_2, \tag{1.9}$$

其中 $\{\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2\}$ 为如下形式的正交标架：

$$\boldsymbol{n}(\theta, \phi) = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)^T, \tag{1.10a}$$
$$\boldsymbol{\tau}_1(\theta, \phi) = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta)^T, \tag{1.10b}$$
$$\boldsymbol{\tau}_2(\theta, \phi) = (-\sin\phi, \cos\phi, 0)^T. \tag{1.10c}$$

对 $\mathbb{R}^d$ 中的超曲面 Γ，加权曲率 μ 与 Cahn-Hoffman 向量满足如下关系 [37]：

$$\mu \coloneqq \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{\xi}, \tag{1.11}$$

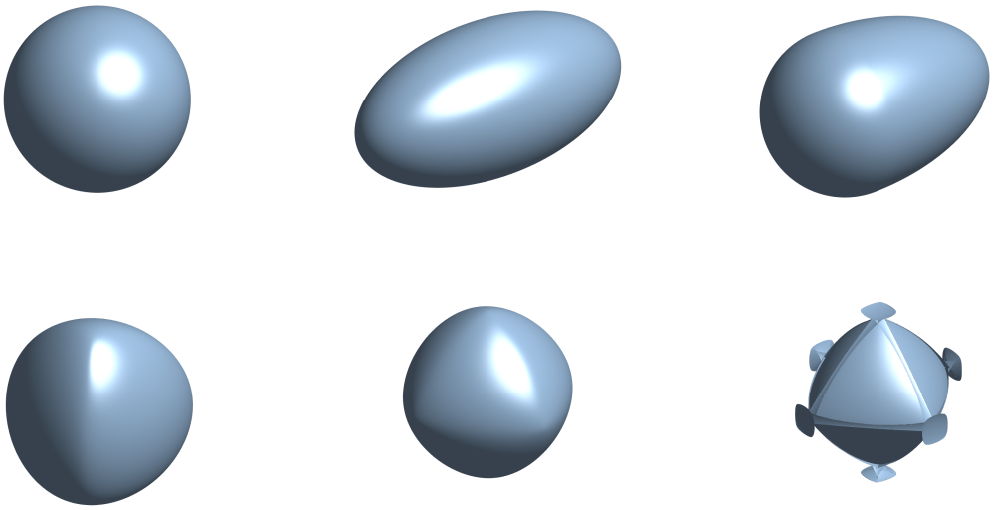


图 1.5 若干三维各向异性的 ξ-图。从左至右，从上至下：各向同性；椭球各向异性；分段 BGN 型各向异性；三重对称各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性 $\beta = 1$。

Figure 1.5 Several ξ-plots of three-dimensional anisotropies. From left to right, top to bottom: isotropic; ellipsoidal anisotropy; piecewise BGN-type anisotropy; threefold-symmetric anisotropy with $\beta = \frac{1}{4}$; cubic anisotropy with $\beta = \frac{1}{4}$; cubic anisotropy with $\beta = 1$.

其中 $\nabla_\Gamma \cdot$ 为 Γ 上的曲面散度算子。特别地，在二维情形下，若用弧长参数 s 参数化曲线，则 μ 可表为

$$\mu = -\partial_s \left(\boldsymbol{\xi}^\perp\right) \cdot \boldsymbol{n}, \tag{1.12}$$

其符号 $\perp$ 表示逆时针旋转 $\frac{\pi}{2}$。

在无各向异性效应时，$\boldsymbol{\xi}$ 将退化为法向量 $\boldsymbol{n}$，同时由于 $H = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{n}$，加权曲率 μ 将等同于曲面的平均曲率 H。

1.3 典型各向异性几何流

几何流是一类刻画曲线/曲面演化的偏微分方程，其由曲率等几何量所驱动。与各向异性表面能 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 相关的几何流演化可以通过**法向速度** V_n 定义。在不同应用中被广泛使用的各向异性几何流包括但不限于：各向异性曲率流、面积守恒各向异性曲率流以及各向异性表面扩散。其对应的法向速度如下

$$V_n = \begin{cases} -\mu, & \text{各向异性曲率流,} \\ -\mu + \lambda, & \text{体积守恒各向异性曲率流,} \\ \Delta_\Gamma \mu, & \text{各向异性表面扩散,} \end{cases} \tag{1.13}$$

其中 $\lambda \coloneqq \int_\Gamma \mu \,\mathrm{d}s/|\Gamma|$ 为 Lagrange 乘子，其使得曲面所围体积在演化过程中保持恒定，Δ_Γ 为 Laplace-Beltrami 算子。除此之外，诸如幂几何流 $V_n = \mu^k$ $(k \geq 2)$ 乃至更一般的非线性几何流 $V_n = f(\mu)$ 等在相关问题及研究中亦十分常见 [2,29]。以下我们选取各向异性曲率流与各向异性表面扩散略作介绍。

1.3.1　各向异性曲率流

各向异性曲率流 (anisotropic curvature flow) 是一类特定几何流，其法向速度满足 $V_n = -\mu$。各向异性曲率流广泛出现于晶体生长、薄膜形态演化与晶界迁移等问题中，是多种多相物理模型里界面演化分析的基本几何模型之一。

进一步地，从变分观点各向异性曲率流可看作表面能泛函 $W(\Gamma)$ 的 *L^2-梯度流*：界面沿负化学势的方向演化，从而保证能量**递减**。具体而言，闭曲面 Γ 在各向异性曲率流的作用下满足如下耗散律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} W(\Gamma) = \int_\Gamma V_n \mu \,\mathrm{d}A = -\int_\Gamma \mu^2 \,\mathrm{d}A \leq 0. \tag{1.14}$$

与此同时，曲面所围体积 Ω 则满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\Omega| = \int_\Gamma V_n \,\mathrm{d}A = -\int_\Gamma \mu \,\mathrm{d}A. \tag{1.15}$$

因此该流一般并不保持体积不变；若希望在演化过程中维持体积（或面积）守恒，则可在速度中加入 Lagrange 乘子修正，以抵消净体积通量，便得到了体积守恒各向异性曲率流 (volume-conserved anisotropic curvature flow)。

1.3.2　各向异性表面扩散

各向异性表面扩散 (anisotropic surface diffusion) 是另一类重要的几何流，其界面演化主要由物质在曲面切向上的扩散所主导。与各向异性曲率流中 “法向速度直接由驱动力给出” 不同，表面扩散的基本机制是：化学势 μ 的不均匀性在曲面上诱导切向通量

$$\boldsymbol{J} = -\nabla_\Gamma \mu, \tag{1.16}$$

并由质量守恒给出法向速度

$$V_n = -\nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{J} = \Delta_\Gamma \mu. \tag{1.17}$$

因此该模型可以看作表面能泛函 $W(\Gamma)$ 在守恒约束下的 *H^{-1}-梯度流*。由于 μ 已包含曲率信息，各向异性表面扩散是一类**四阶**几何演化方程。与曲率流类似，表面扩散同

样具有清晰的能量**耗散**结构。对闭曲面可形式推出能量耗散律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(\Gamma) = \int_{\Gamma} \mu \Delta_{\Gamma} \mu \,\mathrm{d}A = -\int_{\Gamma} (\nabla_{\Gamma}\mu)^2 \,\mathrm{d}A \leq 0. \tag{1.18}$$

同时曲面所围体积满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Omega| = \int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma}\mu \,\mathrm{d}A = 0. \tag{1.19}$$

即表面扩散在自然条件下保持体积**守恒**。对于二维曲线的演化，若采用弧长参数对曲线作参数化，则只需将曲面微分算子替换为对弧长的导数，即 $V_n = \partial_{ss}\mu$。相比各向异性曲率流，表面扩散的高阶性使得其理论分析与数值计算更具挑战。

1.4 守恒型几何流的平衡态

守恒型几何流的平衡态 (equilibrium) 可表述为保持所围体积**不变**的情况下，**极小化**其总表面能。换言之，等价于以下带体积约束的优化问题

$$\min_{\Omega}\left(\int_{\Gamma} \gamma(\boldsymbol{n}) \,\mathrm{d}A\right), \qquad |\Omega| = \text{常数}. \tag{1.20}$$

Gibbs 首先提出并系统描述了这一问题；随后 Wulff 给出了关键的解答，从而建立了如今熟知的 Gibbs–Wulff 定理 [139]。Wulff 指出，晶体形状的中心到某一晶面的距离，应与该晶面的表面能密度成正比，即问题 (1.20) 极小化解应由下述方式确定的：

$$\mathcal{W} \coloneqq \left\{\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^d \mid \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{n} \leq \gamma(\boldsymbol{n})\right\}. \tag{1.21}$$

该几何体现今被人称之为 Wulff 形 (Wulff shape) [33,71,132]。尽管 Wulff 当时并未给出其断言的证明，后续大量研究已提供了严格的数学论证，充分体现了该构造的深刻性与普适性，亦奠定了其在晶体平衡形状理论中的基础地位 [36,47,82-83,99,108]。图 1.6 中展示了若干常用各向异性表面能所对应 Wulff 形。

由 (1.7) 知，Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量法向分量之模长为 $\gamma(\boldsymbol{n})$，结合定义 (1.21) 便可知所谓的 $\boldsymbol{\xi}$-图应当与 Wulff 形在形态上颇为相似。实际上，$\boldsymbol{\xi}$-图在不出现“耳状”区域时，即弱各向异性，恰好构成了 Wulff 形的边界；若 $\boldsymbol{\xi}$-图出现“耳状”区域时，即强各向异性，则需将其去除以获得 Wulff 形的边界。图 1.7 展示了几种各向异性的 γ-图、Frank 图，$\boldsymbol{\xi}$-图以及 Wulff 形。

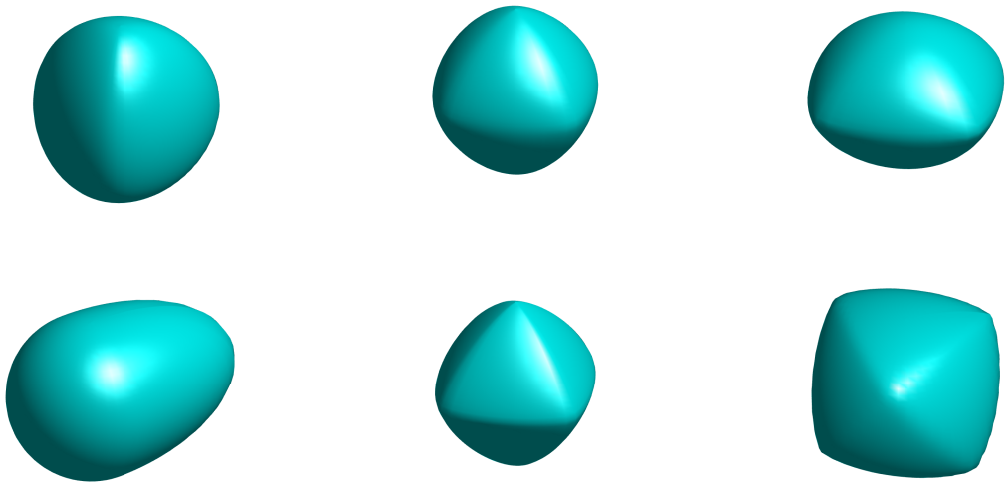


图 1.6　对应于图 1.4 中 Frank 图的若干各向异性的 Wulff 形。
Figure 1.6　Wulff shapes of several anisotropies corresponding to the Frank diagrams in Figure 1.4.

1.5　文献综述

数学上，对几何流问题的研究早已汗牛充栋。例如，Elliott 与 Garcke 对 C^4 初始曲线建立了其局部存在性与正则性 [58]；Escher，Mayer 与 Simonett 证明了高维表面扩散流的局部适定性，并对近球面的初始曲面给出了全局存在与指数收敛的证明 [61]，构成了四阶流长时间理论的基石范式；同时 Escher 等人也对其可能出现的颈缩等奇性行为进行了讨论 [62]；Chambolle 等首次对各向异性平均曲率流证明了其存在唯一性 [39]；对于体积守恒各向异性平均曲率流，Andrews 证明了其在凸初值下的长时间存在并指数收敛到给定各向异性的 Wulff 形 [1]；对于各向异性几何流的更多讨论，参阅 Giga 与 Požár 的专著 [72]。

过去数十年间，围绕曲率驱动问题的数值方法已得到广泛研究。例如，水平集方法 [35,110,116]、相场法 [31,51,120]、标记粒子法 [50,136]、θ–L 法、有限元法 [44-45]、间断 Galerkin 有限元法 [140]、演化曲面有限元方法 [85,97-98]，以及参数化有限元方法 [11,22,53-54,107]。*水平集方法* (level set method) 将曲面隐式表达为高一维函数的零水平集以捕捉复杂的几何与拓扑变化，相关工作参见。*标记粒子法* (marker-particle method) 以离散粒子来表征曲面并追踪其运动。该方法往往需要较为严苛的数值稳定性限制，同时粒子亦需频繁地重新分布。*演化曲面有限元法* (evolving surface finite element method) 是一类特别的有限元技术，其在固定空间上参数化位置向量 X

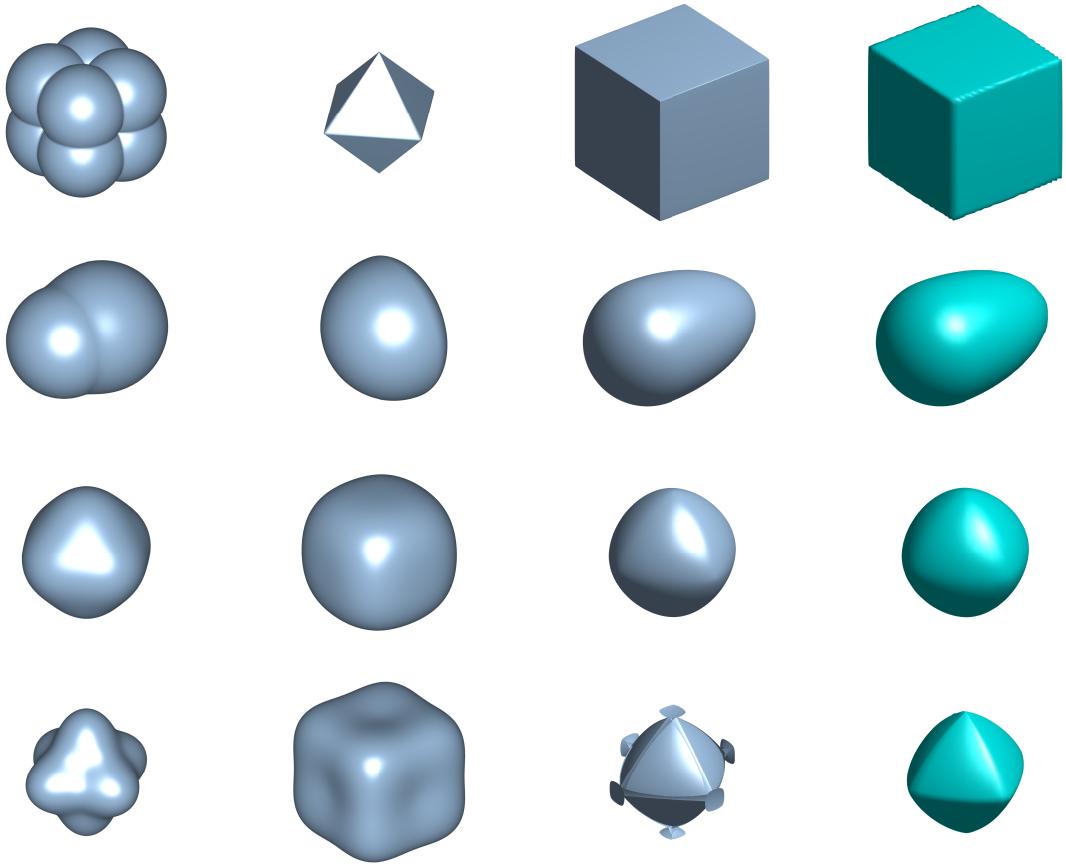


图 1.7 若干三维各向异性的 γ-图，Frank 图，ξ-图以及 Wulff 形。从上至下：l^1-范数各向异性；分段 BGN 型各向异性；立方各向异性且 $\beta = \frac{1}{4}$；立方各向异性且 $\beta = 1$。

Figure 1.7 The γ-plots, Frank diagrams, ξ-plots, and Wulff shapes for several three-dimensional anisotropies. From top to bottom: l^1-norm anisotropy; piecewise BGN-type anisotropy; cubic anisotropy with $\beta = \frac{1}{4}$; cubic anisotropy with $\beta = 1$.

并在演化空间中参数化法向量 $\boldsymbol{n}$、曲率 H 等其他变量并追踪其演化。在容许高次有限元（多项式次数 ≥ 2）的情况下，可证明演化有限元方法的收敛性，相关工作请参阅 [56,85,97-98]。然而，因为各向异性曲率流的高度非线性的特点和演化各向异性效应，上述数值格式往往需要引入人为的切向速度，或施行网格正则化以避免网格扭曲和挤碰。另须指出的是，其中多数方法在全离散层面不具有结构保持性，难以同时保持能量耗散与质量守恒/递减率。

与前述方法相比，*参数化有限元方法* (parametric finite element method) 在实际计算中，由于其在网格质量、精度、效率以及结构保持性上得天独厚的优势，日渐受到研究者的关注。参数化有限元法起始于 Gziuk 的开创性工作，其思想为先在流形上变分然后离散，最后再做局部参数化，其方法在于寻求曲面 $\Gamma(t_{m+1})$ 在上一时刻曲面 $\Gamma(t_m)$ 的参数化表示之近似。Dziku 提出应用几何恒等式 $H\boldsymbol{n} = -\Delta_\Gamma \boldsymbol{X}$，将平均曲率流方程 $\partial_t \boldsymbol{X} = -H\boldsymbol{n}$ 改写为类似热方程的形式：

$$\partial_t \boldsymbol{X} = \Delta_\Gamma \boldsymbol{X}. \tag{1.22}$$

进而在以下弱形式的基础上作有限元离散：

$$\int_{\Gamma(t)} \partial_t \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A + \int_{\Gamma(t)} \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega} \in [H^1(\Gamma(t))]^d. \tag{1.23}$$

与演化曲面有限元方法相比，参数化有限元方法要求包含位置向量 $\boldsymbol{X}$ 在内的所有变量均在演化的空间中进行参数化。与前述其他方法不同，可以证明 Dziuk 的方法具有无条件能量稳定性，即离散曲面在演化过程中总是保持面积递减：

$$|\Gamma^{m+1}| \leq |\Gamma^m|, \qquad \forall m \geq 0. \tag{1.24}$$

但由于其方法在演化过程中格点缺乏切向移动，在实际计算中该方法往往会产生网格碰撞和集中，导致计算结果失真（见图 1.8），故而对于曲率流的长时间模拟，经常需要对网格作重新分布。自参数化有限元方法于 1991 年提出后，其已经在几何流的数值计算领域产生了深远且重大的影响，研究者们将其推广到表面扩散流、Willmore 流、Gauss 曲率流以及若干曲率驱动问题，对其收敛性的研究也极大促进了几何流方法的数值分析技术之发展，关于这方面的详尽介绍与讨论，请参阅综述性文章 [29,44,151]。

在参数化有限元方法的诸多应用中，由 Barrett、Garcke 与 Nürnberg 所提出的*能量稳定参数化有限元方法* [22,25]，亦即今人之所谓 BGN 方法，因其无条件能量稳定性及较优的网格质量而备受关注。为克服过往数值方法较差网格的瓶颈，BGN 方法

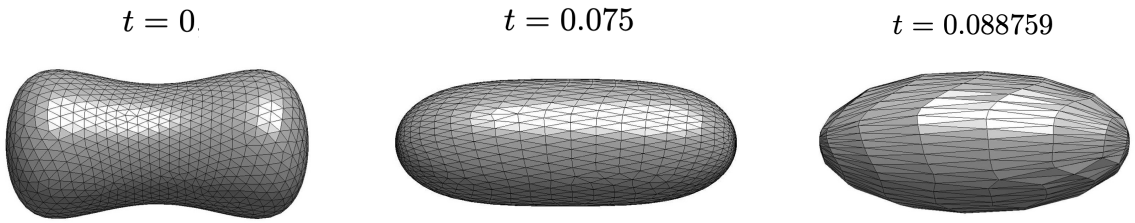


图 1.8 纺锤形曲面在 Dziuk 方法模拟下的平均曲率流演化，图取自 [151]。
Figure 1.8 Evolution of a spindle-shaped surface under mean curvature flow simulated by the Dziuk's method; the figure is adapted from [151].

允许格点作一定的切向移动，仅要求其在法向速度 $V_n = \boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X}$ 上等于平均曲率。具体而言，BGN 方法建立在如下平均曲率流的弱形式上：

$$\int_{\Gamma(t)} \boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X}\, \varphi \,\mathrm{d}A + \int_{\Gamma(t)} H\varphi \,\mathrm{d}A = 0, \qquad \forall \varphi \in H^1((\Gamma(t))), \tag{1.25a}$$

$$\int_{\Gamma(t)} H\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A - \int_{\Gamma(t)} \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega} \in [H^1(\Gamma(t))]^d. \tag{1.25b}$$

由此所推导出参数化有限元离散，在保留 Dziuk 方法无条件能量稳定性的基础上，也具有良好的网格性质（见图 1.9）。更进一步地，Bao 和 Zhao 通过巧妙设计法向量 $\boldsymbol{n}$ 的离散，提出了一种*结构保持参数化有限元法* 在维持无条件能量稳定的同时保证了体积递减率/守恒 [7-8,19]。

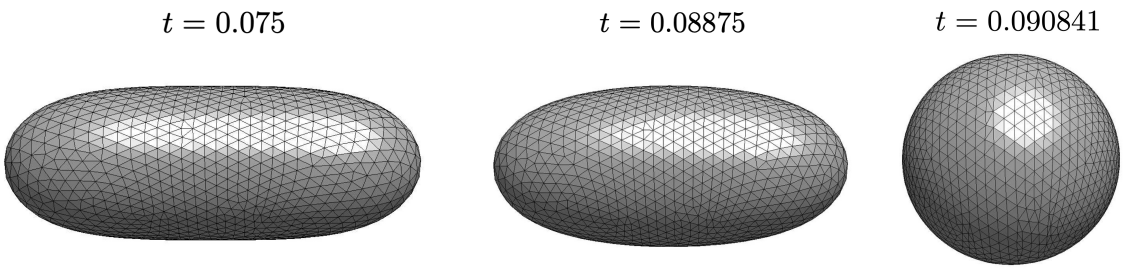


图 1.9 纺锤形曲面在 BGN 方法模拟下的平均曲率流演化，图取自 [151]。
Figure 1.9 Evolution of a spindle-shaped surface under mean curvature flow simulated by the BGN method; the figure is adapted from [151].

BGN 方法已成功应用于多种各向同性的曲率驱动问题，包括表面扩散 [21]、Willmore 流与 Gauss 曲率流 [15-16,68]、多相流 [67,69]、生物膜 [26]、Stefan 问题 [63]、Mullins–Sekerka 问题 [27]，以及固态脱湿中开曲面（线）的演化 [20,149]；数值实验

普遍表明其计算表现稳健以及在长时间模拟时具有独特优势。BGN 型方法之所以卓有成效，一个关键原因在于：它们在近似位置向量 $\boldsymbol{X}$ 之外，借助几何恒等式

$$H\boldsymbol{n} = -\Delta_\Gamma \boldsymbol{X} = -\nabla_\Gamma \cdot (\boldsymbol{I}_d \nabla_\Gamma \boldsymbol{X}), \tag{1.26}$$

来处理**曲率向量**以对曲率 H 作离散，其中 $\boldsymbol{I}_d$ 为 d 维单位矩阵。此一处理为各向同性曲率驱动问题中实现能量稳定性提供了自然而便利的框架。关于 BGN 型方法的更多讨论及其在曲率驱动型问题中的应用，可参见 Barrett 等人所作的综述 [29]。

近年来，人们已作出诸多尝试，试图将用于各向同性几何流的 BGN 能量稳定参数化有限元法推广至各向异性情形。例如，在二维情形下，借助加权曲率 μ 的显式表达 $\mu = [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\kappa$，Bao 等人提出一种模拟各向异性表面扩散的参数化有限元方法 [11]。与此同时，Zhao 与 Jiang 等人引入 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量及弱形式

$$\int_{\Gamma(t)} \mu\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\omega}\, \mathrm{d}s - \int_{\Gamma(t)} \partial_s \boldsymbol{\xi}^\perp \cdot \partial_s \boldsymbol{\omega}\, \mathrm{d}s, \qquad \forall \omega \in [H^1(\Gamma(t))]^2, \tag{1.27}$$

提出一种适用于任意各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的参数有限元法 [93]，并将其用于二维固态脱湿问题中开曲线的演化，取得了较好的计算效果。随后他们又通过

$$\int_{\Gamma(t)} \mu\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\omega}\, \mathrm{d}A = \int_{\Gamma(t)} \gamma(\boldsymbol{n}) \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}\, \mathrm{d}A + \sum_{1 \le i,j \le 3} \int_{\Gamma(t)} \xi_i n_j \nabla_\Gamma x_i \cdot \nabla_\Gamma \omega_j\, \mathrm{d}A, \tag{1.28}$$

将其推广到三维空间中的开曲面 [148] 并观测到了数值意义下的能量递减性。尽管其方法在各向异性几何流的计算上均取得了不俗表现，但却难以从理论上严格证明这些数值格式具有能量稳定性。

转机出现在 2008 年，Barrett 等人发表了一系列工作，通过引入表面能矩阵 $\frac{1}{\gamma(\boldsymbol{n})}\det(G)G^{-1}$ 首次对特殊的类 Riemann 度量型各向异性 $\gamma(\boldsymbol{n}) = \sqrt{\boldsymbol{n} \cdot G\boldsymbol{n}}$ 提出了一种具有无条件能量稳定性的参数化有限元法，后续大量研究将其应用到了多种各向异性曲率驱动问题的数值模拟。随后，Li 与 Bao 在二维情形下构造了一个全新的表面能量矩阵 [107]

$$\hat{\boldsymbol{G}}(\theta) = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}(\theta) & -\hat{\gamma}'(\theta) \\ -\hat{\gamma}'(\theta) & \hat{\gamma}(\theta) \end{pmatrix}, \qquad \hat{\gamma}(\theta) \in C^2(2\pi\mathbb{T}), \tag{1.29}$$

并证明了加权曲率 μ 满足以下恒等式

$$\mu\boldsymbol{n} = -\partial_s \left(\hat{\boldsymbol{G}}(\theta) \partial_s \boldsymbol{X} \right). \tag{1.30}$$

他们的工作首次实现了 BGN 型能量稳定方法到一般各向异性表面能的推广，但其能量稳定性的成立仍需对 $\hat{\gamma}(\theta)$ 施加较为严格的条件。在 2023 年，Bao，Jiang 和 Li 等人创造性地引入了稳定函数技巧并构造了一种全新的对称化表面能量矩阵 [9,12]：

$$\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}) = \gamma(\boldsymbol{n})\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n})^T - \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}^T + k(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T, \tag{1.31}$$

其中 $k(\boldsymbol{n})\colon \mathbb{S}^{d-1} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 为一预先指定的稳定函数，$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n})$ 为 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量。基于该对称表面能矩阵，他们提出了一种对称化结构保持参数有限元法 (symmetrized SP-PFEM)，实现了在对称型各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n}) = \gamma(-\boldsymbol{n}), \qquad \forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^{d-1}, \tag{1.32}$$

控制下曲面/曲线演化的保结构数值模拟，使得对材料科学诸多各向异性问题的进行高效计算成为可能 [18,52,102-105]。然而，仍存在不少各向异性表面能 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 并非对称分布，或不满足上述特定条件；例如三重对称的各向异性表面能 [11,134]。最近，Bao 与 Li 引入了一种新的非对称的表面能矩阵

$$\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{n}) = \gamma(\boldsymbol{n})\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n}) + \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}^T + k(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T. \tag{1.33}$$

基于此构造，Bao 与 Li 建立了一套用于证明参数化有限元方法能量稳定性的分析框架 [13-14]，他们指出：数值格式的能量稳定性可由某种局部能量估计的成立所推出，其中稳定函数 $k(\boldsymbol{n})$ 需满足大于等于某个有界的最小稳定函数 $k_0(\boldsymbol{n})$。在该框架之下，他们成功将对各向异性的要求降低为

$$(5-d)\gamma(\boldsymbol{n}) > \gamma(-\boldsymbol{n}), \qquad \forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^{d-1},\ d = 2, 3. \tag{1.34}$$

事实上，所有已存在的结构保持/能量稳定参数化有限元都能被此框架吸收并改进。例如 [18] 中，作者使用局部能量估计改进了对称矩阵 $\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n})$ 的对称化保结构参数有限元的能量稳定条件，将其从对称条件 (1.32) 放宽到了 $3\gamma(\boldsymbol{n}) > \gamma(\boldsymbol{n})$。

尽管局部能量估计极大改进了各向异性几何流的参数化有限元逼近的能量稳定性条件，但仍存在许多开放问题亟待解决。正如 [14] 中所指出，对于表面能矩阵 $\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{n})$，局部能量估计的一个必要条件为

$$(5-d)\gamma(\boldsymbol{n}) \geq \gamma(-\boldsymbol{n}), \qquad d = 2, 3. \tag{1.35}$$

因此对于他们的方法，条件 (1.34) 已接近最优。然而，对于临界情形 $(5-d)\gamma(\boldsymbol{n}^*) = \gamma(-\boldsymbol{n}^*)$，现有研究均未予以作细致讨论。另一方面，受其启发，我们发现条件 (1.35)

实际上并不依赖表面能量矩阵的具体构造，见注 3.5 与注 6.6。这自然引出了另一问题：该条件是否也是能量稳定性的充分条件；如果是，选取何种表面能矩阵可以达到这一最优条件。除此之外，过去的研究表明，不同形式的表面能矩阵所诱导的数值格式也不同，因而所需的分析路径大多迥然有异。因此，对适用于各类表面能矩阵构造的参数有限元格式给出一套统一的分析，显得必要且急迫：一方面可据此推导不同表面能矩阵形式下的最优能量稳定条件，另一方面亦便于对各类方案的计算性能作系统比较。

不同曲率驱动型问题往往需要我们根据问题对离散格式进行特殊设计，尤其需要在离散层面审慎选择变量的离散以兼顾关键结构的保持性与计算效率；随着模型的不同扩展与耦合，仅靠逐个问题定制的策略会迅速变得笨重。鉴于各向异性曲率驱动型在诸多科学领域的广泛应用，建立一套系统且自然的结构保持数值格式设计框架便显得尤为重要。

1.6　本文工作

本文旨在为二维曲线和三维曲面上的*各向异性几何流问题*，设计一种具有*结构保持性的参数化有限元方法*。首先，我们对平面曲线的各向异性演化问题提出一种稳定化的参数有限元方法，并对其临界情形进行了详细分析，在引入恰当附加约束后证明了算法的无条件能量稳定性。随后，我们提出一种具有最优能量稳定条件的结构保持参数有限元方法，证明了条件 (1.35) 亦是充分条件，得到了局部能量估计框架内最优的结果。我们也将这两种方法应用于二维晶体薄膜演化与固态脱湿问题的数值模拟，发现了一些新的现象。在此之后，针对二维各向异性曲率流，我们通过引入超参数构造出涵盖所有可能形式的统一表面能矩阵，建立起一套适用于其所对应的全离散格式的能量稳定性分析框架；同时，我们提出了一种全新的观点，为各向异性曲率驱动问题的结构保持数值算法设计给出了系统且自然的解决方案。这项工作随后也被我们推广到三维空间中曲面的各向异性演化问题中，并被应用于三维各向异性固态脱湿问题的数值模拟。

在第 2 章中，我们考虑平面闭曲线在各向异性表面扩散下的演化。基于各向异性函数的 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表示，我们给出了各向异性表面扩散的一种新的稳定化保守型弱形式，并据此给出相应的稳定化参数有限元离散格式。进一步，我们建立了一套较为完备的分析框架，在对 $\hat{\gamma}(\theta)$ 施加很温和条件的前提下，分析并证明该方法具有无条件能量稳定性，其中亦涵盖临界情形 $3\hat{\gamma}(\theta^*) = \hat{\gamma}(\theta^* - \pi)$。最后通过多类各向异性表面能

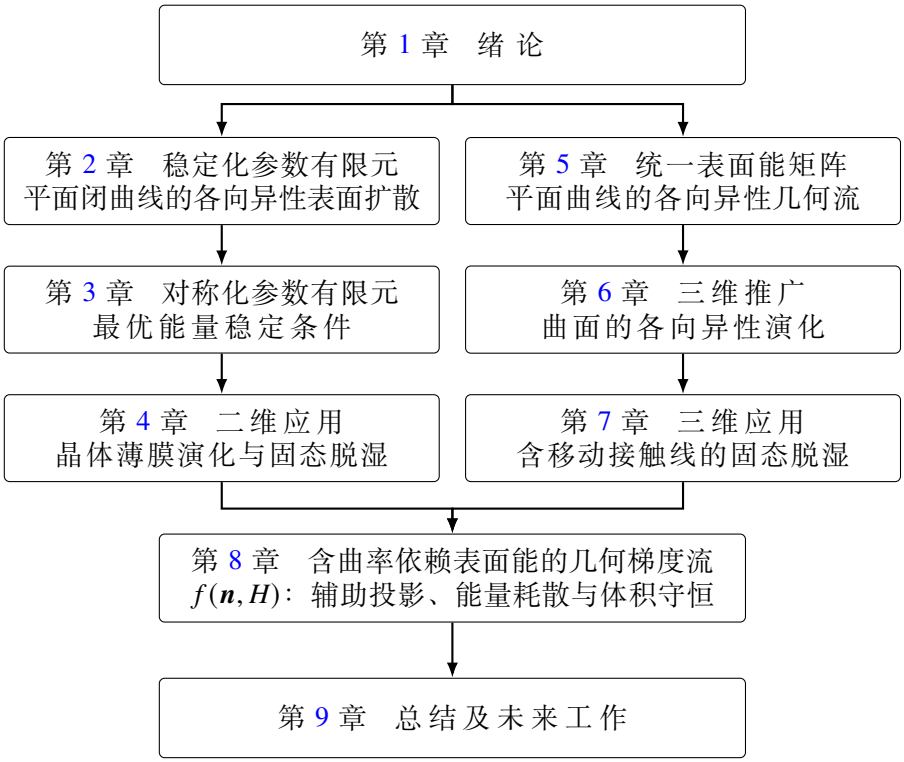


图 1.10 本文内容结构图

Figure 1.10 Dissertation structure overview

$\hat{\gamma}(\theta)$ 下的数值实验，验证所提方法的效率、精度及结构保持性。

在第 3 章中，我们提出并分析了一种具有最优能量稳定条件的结构保持参数化有限元方法，用于描述具有表面能密度 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的各向异性表面扩散下闭曲线的演化。本文在理论上的主要贡献在于：在局部能量估计的框架内，我们证明条件 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\geq 0$ 对无条件能量稳定性而言既是必要的，也是充分的。为此，我们引入带稳定化函数 $k(\theta)$ 的对称表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$，从而得到一种对称化的保守型弱形式。基于该弱形式的参数有限元全离散格式在上述能量稳定条件下可严格保持两类几何结构：所围面积守恒与无条件能量稳定。最后我们给出数值实验结果，以展示所提方法的效率与精度，并验证其面积守恒性与能量耗散性。

在第 4 章中，我们应用上述方法对二维晶体薄膜的在表面扩散作用下的演化及二维固态脱湿问题进行了数值模拟。对二维晶体薄膜，我们探索了初始形状的纵横比对颈缩断裂现象的影响；对于二维固态脱湿中的开曲线演化，我们提出了一种精确且具有结构保持性的参数有限元方法，并使用该方法模拟了强各向异性效应下不同初始曲线到多重稳态的演变过程。

在第 5 章中，我们面向一般各向异性效应的曲率流提出了一种结构保持型参数

化逼近方法。通过引入超参数 α，我们构造了表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)$，从而将现有以及可能的各种表述统一纳入同一形式之下。在此统一构造的基础上，我们给出一种用于各向异性曲率流的全离散参数化逼近格式，并能精确保持面积衰减率。为对各类全离散方案的能量稳定性给出统一论证，我们采用基于局部能量估计的分析框架，进而证明：$\alpha = -1$ 是实现最优能量稳定条件 $3\hat{\gamma}(\theta) \geq \hat{\gamma}(\theta - \pi)$ 的唯一取值。另一方面，我们提出一种理解一般各向异性曲率流的新视角，即将法向速度解释为一个同时依赖几何量与背景曲线本身的映射。由此观点自然导出一套统一的离散化框架，并能在其中一致地保证能量稳定性。

在第 6 章中，我们将基于 α-表面能矩阵的结构保持参数有限元方法推广到三维。通过将 α-表面能矩阵推广到三维，我们提出了一种三维各向异性表面扩散的一般性的保守弱形式。随后我们在时间上采用显隐 Euler 方法、空间上采取参数化有限元方法对该弱形式进行全离散。我们证明了，在某个较温和的条件下，该格式具有无条件能量稳定性；并进一步得到了与二维情形相同的结论，即 $\alpha = -1$ 仍是实现最优能量稳定条件的唯一构造。文中给出了大量数值实验结果，以展示该格式在求解曲面各向异性演化时的效率、精度及结构保持性。

在第 7 章中，我们提出了用于求解三维空间中各向异性固态脱湿问题的一种具有结构保持性的参数化有限元方法。我们在弱形式中引入松弛接触角以保证其具有能量稳定性；随后我使用显隐 Euler 方法及参数有限元方法对其进行离散。该格式使得界面与接触线同步演化，同时在计算过程中的体积（质量）守恒与无条件能量稳定。文中进行了大量数值实验，对复杂初始曲面下的形态演变、各向异性对移动接触线的影响及固态薄膜的颈缩现象做了探索。

在第 8 章中，我们将表面能密度扩展为同时依赖法向量和平均曲率的 $f(\boldsymbol{n}, H)$，研究三维闭曲面上的几何梯度流。通过将固定曲率时的对称表面能矩阵与曲率演化方程相结合，并对曲率能导数引入质量集中投影，我们构造一般耦合能量的参数有限元格式。在关于曲率的凸性及相应局部能量估计成立的条件下，证明离散解的能量耗散；结合时间平均面积法向量，进一步给出保持体积的梯度流离散。依据文献 [146] 补充收敛性、能量与体积变化、计算开销及曲面形态松弛的数值实验。

最后，在第 9 章中，我们总结本文的主要结果，并展望未来可能的研究方向与改进空间。

第 2 章　曲线演化的稳定化参数有限元方法

本章我们介绍一种用于求解二维各向异性表面扩散的稳定化参数有限元方法。在过往的研究中，表面能矩阵的引入使得针对各向异性几何流的保结构数值方法领域的一个重要突破，其中最早期工作来自于 Barrett 等人针对特殊的类 Riemann 度量型表面能所作的推广。随后基于 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述，Li 与 Bao 引入了表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)$，并将 BGN 能量稳定参数有限元方法由各向同性情形推广至一般各向异性情形 [107]。由于其欠缺稳定项，因此须附加某种较为严格的条件方可确保能量稳定性。其后，Bao、Jiang 与 Li 转而在 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述中通过引入稳定函数，构造了对称的表面能矩阵 $\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n})$，并在 [9,12] 中提出了对称化保结构参数有限元方法，用于求解对称型 $\gamma(\boldsymbol{n}) = \gamma(-\boldsymbol{n})$ 各向异性下的各向异性表面扩散。然而，实际应用中仍存在若干表面能并非对称分布、或不满足之前的特定条件；例如 3-重各向异性表面能 (2.1)，可参见 [11,137]。近期，基于 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述，Bao 与 Li 引入一新的非对称表面能矩阵 $\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{n})$，并建立一套较为完备的分析框架，用以证明其所提方法的无条件能量稳定性 [13-14]。循此框架，他们将算法对各向异性的要求成功削弱为 $3\gamma(\boldsymbol{n}) > \gamma(-\boldsymbol{n})$, $\forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^1$。

然而，临界情形 $3\gamma(\boldsymbol{n}^*) = \gamma(-\boldsymbol{n}^*)$, $\boldsymbol{n}^* \in \mathbb{S}^1$ 却并未在其分析框架中得到处理。这是因为该框架依赖于对 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 的梯度估计；困难在于 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 作为定义在单位圆 $\mathbb{S}^1$ 上的函数，对其梯度的分析往往较为棘手。相较之下，定义在 $2\pi\mathbb{T}$ 上的 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述具有更为简单的导数结构，从而更有利于分析临界情形 $3\hat{\gamma}(\theta^*) = \hat{\gamma}(\theta^* - \pi)$, $\theta^* \in 2\pi\mathbb{T}$。因此，受其分析框架启发，本文改用 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述，以进一步探讨上述临界情形。

本章的主要目标，是在极为温和的条件下：

(i) $3\hat{\gamma}(\theta) \geq \hat{\gamma}(\theta - \pi)$,　　$\forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}$,

(ii) 每当 $3\hat{\gamma}(\theta^*) = \hat{\gamma}(\theta^* - \pi)$, $\theta^* \in 2\pi\mathbb{T}$，必有 $\hat{\gamma}'(\theta^*) = 0$,

针对具有表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的表面扩散方程 (2.6)，提出一种结构保持的稳定化参数有限元方法。

与 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述相比，$\hat{\gamma}(\theta)$ 表述具有如下优点：

(i) 在实际应用中更为直观，且形式更为简洁；

(ii) 可将对各向异性的正则性要求由 C^2 降至整体 C^1 且分段 C^2；

(iii) 在二维情形下，便于讨论存在 $\theta^* \in 2\pi\mathbb{T}$ 使得 $3\hat{\gamma}(\theta^*) = \hat{\gamma}(\theta^* - \pi)$ 的临界状况。

本章余下部分安排如下：首先在 2.1 节中，我们列举一些材料科学中广泛采用的

各向异性表面能函数。在第 2.2 节中，我们引入稳定化的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$，并提出用于各向异性表面扩散的一种新的保守型强形式表述。在 2.3 节中，我们基于该保守形式给出一类新的弱形式，进而给出其空间半离散，并由此提出一种稳定化参数有限元全离散格式。在第 2.4 节中，我们分析所提格式的结构保持性质，即面积守恒与无条件能量稳定性，并建立一套较为系统的能量稳定性分析方法：其出发点是定义一个极小稳定化函数 $k_0(\theta)$；在假设 $k_0(\theta)$ 良定的前提下，我们通过局部能量估计得到主要结论。关于 $k_0(\theta)$ 的存在性，将在第 2.4.4 节中进一步论证。最后，第 2.5 节给出大量数值算例，以展示所提算法的效率、精度及其结构保持性质。

2.1　一些常用各向异性表面能量

此处列举在材料科学中广泛采用的各向异性表面能函数如下：

1. m-重对称各向异性 [11]

$$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta \cos m(\theta - \theta_0), \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{2.1}$$

其中 $m = 2, 3, 4, 6$, $|\beta| < 1$ 为无量纲强度参数，$\theta_0 \in 2\pi\mathbb{T}$ 为常数。需注意，当 $|\beta| < \frac{1}{m^2-1}$ 时，$\hat{\gamma}(\theta)$ 为**弱各向异性**；否则为**强各向异性**。

2. 椭圆型各向异性表面能 [133]

$$\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{a + b\cos^2\theta}, \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{2.2}$$

其中 a, b 为无量纲常数，满足 $a > 0$ 且 $a + b > 0$。

3. 类 Rieamann 度量各向异性（也被称为 Barrett-Garcke-Nüberg 型或 BGN 型）[23-24]

$$\hat{\gamma}(\theta) = \sum_{l=1}^{L} \sqrt{\boldsymbol{n}(\theta)^T G_l \boldsymbol{n}(\theta)}, \qquad \boldsymbol{n} = (-\sin\theta, \cos\theta)^T, \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{2.3}$$

其中 $L \geq 1$, 且对任意 $1 \leq l \leq L$, 矩阵 $G_l \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 正定。当 $L = 1, G_1 = \mathrm{diag}(a, a+b)$ 时，式 (2.3) 退化为椭圆型各向异性 (2.2)。

4. 分段 BGN 型各向异性 [44]

$$\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}, \tag{2.4}$$

其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T := (-\sin\theta, \cos\theta)^T$, $\theta \in 2\pi\mathbb{T}$。

5. l^r-范数各向异性

$$\hat{\gamma}(\theta) = (|n_1|^r + |n_2|^r)^{\frac{1}{r}}, \qquad r \geq 2, \tag{2.5}$$

其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T := (-\sin\theta, \cos\theta)^T$, $\theta \in 2\pi\mathbb{T}$。

2.2　二维表面扩散流的保守形式

首先回顾二维各向异性表面扩散流的演化方程：

$$V_n = \partial_{ss}\mu, \tag{2.6}$$

其中

$$\mu := [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\,\kappa, \tag{2.7}$$

此处 $\kappa := -(\partial_{ss}\boldsymbol{X})\cdot\boldsymbol{n}$ 为曲率。在本节中，我们对式 (2.6) 给出一种带稳定化的新表述，并引入稳定化的表面能量矩阵，从而得到其保守形式。

利用几何恒等式 $\kappa\boldsymbol{n} = -\partial_{ss}\boldsymbol{X}$ [109]，各向异性表面扩散方程 (2.6)–(2.7) 可以改写为

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X} - \partial_{ss}\mu = 0, \qquad 0 < s < L(t), \qquad t > 0, \tag{2.8a}$$

$$\mu\boldsymbol{n} + [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\,\partial_{ss}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{0}, \tag{2.8b}$$

其中 $L(t) := \int_{\Gamma(t)} \mathrm{d}s$ 为 $\Gamma(t)$ 长度。

定理 2.1　对于由式 (2.7) 定义的加权曲率 μ，有如下恒等式：

$$\mu\boldsymbol{n} = -\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right), \tag{2.9}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta) := \begin{pmatrix} \hat{\gamma}(\theta) & -\hat{\gamma}'(\theta) \\ \hat{\gamma}'(\theta) & \hat{\gamma}(\theta) \end{pmatrix} + k(\theta)\begin{pmatrix} \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix}, \qquad \forall\theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{2.10}$$

且 $k(\theta) : 2\pi\mathbb{T} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 为非负的稳定函数。

证明　注意到

$$\boldsymbol{n} = -\partial_s\boldsymbol{X}^{\perp} = (-\partial_s y, \partial_s x)^T, \qquad \partial_s x = \cos\theta, \qquad \partial_s y = \sin\theta, \tag{2.11}$$

故

$$\partial_{ss}x = -\sin\theta\partial_s\theta, \qquad \partial_{ss}y = \cos\theta\partial_s\theta, \tag{2.12}$$

从而推得

$$\kappa = -(\partial_{ss}\boldsymbol{X})\cdot\boldsymbol{n} = \partial_{ss}x\partial_s y - \partial_{ss}y\partial_s x = -(\sin^2\theta+\cos^2\theta)\partial_s\theta = -\partial_s\theta. \tag{2.13}$$

由几何恒等式 $\kappa\boldsymbol{n} = -\partial_{ss}\boldsymbol{X}$ 以及 $\partial_s\boldsymbol{X} = \tau = \boldsymbol{n}^\perp$，可得

$$\kappa\partial_s\boldsymbol{X} = \kappa\boldsymbol{n}^\perp = -\partial_{ss}\boldsymbol{X}^\perp, \qquad \kappa\partial_s\boldsymbol{X}^\perp = -\kappa\boldsymbol{n} = \partial_{ss}\boldsymbol{X}. \tag{2.14}$$

于是由 (2.13) 与 (2.14) 知

$$\begin{aligned}\partial_s\Big(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\Big) &= \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\theta\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}\\ &= -\kappa\hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}\\ &= \hat{\gamma}''(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}^\perp + \hat{\gamma}(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X},\end{aligned} \tag{2.15}$$

以及

$$\begin{aligned}\partial_s\Big(\hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp\Big) &= \hat{\gamma}''(\theta)\partial_s\theta\partial_s\boldsymbol{X}^\perp + \hat{\gamma}'(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}^\perp\\ &= -\kappa\hat{\gamma}''(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp + \hat{\gamma}'(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}^\perp\\ &= -\hat{\gamma}''(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\partial_{ss}\boldsymbol{X}^\perp.\end{aligned} \tag{2.16}$$

注意到 $\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\tau} \equiv 0$，因此 $\partial_s\left(k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\right)$ 恒为零。结合 (2.8b)，(2.15) 与 (2.16)，我们有

$$\begin{aligned}\mu\boldsymbol{n} &= -[\hat{\gamma}(\theta)+\hat{\gamma}''(\theta)]\partial_{ss}\boldsymbol{X} - \partial_s\left(k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\right)\\ &= -\partial_s\Big(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\Big) + \partial_s\Big(\hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp\Big) - \partial_s\left(k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\right)\\ &= -\partial_s\Big(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} - \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\Big).\end{aligned} \tag{2.17}$$

又由 (2.11) 知有

$$\begin{pmatrix}\sin^2\theta & -\sin\theta\cos\theta\\ -\sin\theta\cos\theta & \cos^2\theta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\sin\theta\\ \cos\theta\end{pmatrix}(-\sin\theta,\cos\theta) = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T, \tag{2.18}$$

故

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} &= \left[\begin{pmatrix}\hat{\gamma}(\theta) & -\hat{\gamma}'(\theta)\\ \hat{\gamma}'(\theta) & \hat{\gamma}(\theta)\end{pmatrix} + k(\theta)\begin{pmatrix}\sin^2\theta & -\sin\theta\cos\theta\\ -\sin\theta\cos\theta & \cos^2\theta\end{pmatrix}\right]\partial_s\boldsymbol{X}\\ &= \left[\hat{\gamma}(\theta)I_2 + \hat{\gamma}'(\theta)J + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\right]\partial_s\boldsymbol{X}\\ &= \hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} - \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X},\end{aligned} \tag{2.19}$$

其中 I_2 为 2×2 单位矩阵。将式 (2.19) 代入 (2.17)，即可得到所需的恒等式 (2.9)。 ■

利用恒等式 (2.9)，各向异性表面扩散的控制几何偏微分方程 (2.8) 可改写为如下的**保守型形式** (conservative form)：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X} - \partial_{ss}\mu = 0, \qquad 0 < s < L(t), \qquad t > 0, \tag{2.20a}$$

$$\mu\boldsymbol{n} + \partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right) = \boldsymbol{0}. \tag{2.20b}$$

注 2.1 在各向同性情形下，曲率向量满足 $\kappa\boldsymbol{n} = -\partial_{ss}\boldsymbol{X} = -\partial_s\left(\boldsymbol{I}_2\partial_s\boldsymbol{X}\right)$ 这一形式启发我们在各向异性情形下构造适当的稳定化保守型形式 $\mu\boldsymbol{n} = -\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)$。稳定化项的构造基于以下两点思想：*i)* 稳定化项在连续层面应当不产生贡献，即切向量 $\partial_s\boldsymbol{X}$ 落在稳定项的核中；*ii)* 稳定化项应当是正定的，从而带来显著的数值优势。因此，稳定化项取为 $k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T = k(\theta)\begin{pmatrix} \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix}$。

注 2.2 若在式 (2.10) 中取稳定函数 $k(\theta) \equiv 0$，则 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta) = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}(\theta) & -\hat{\gamma}'(\theta) \\ \hat{\gamma}'(\theta) & \hat{\gamma}(\theta) \end{pmatrix}$ 退化为文献 *[107]* 中提出的表面能量矩阵 $G(\theta)$。此外，在采用 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述后，可通过一一对应关系 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(\theta) = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$ 将稳定化函数定义为 $k(\boldsymbol{n}) := k(\boldsymbol{n}(\theta)) = k(\theta)$，从而稳定化项简化为 $k(\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T$。于是，$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$ 便转化为文献 *[13]* 中的表面能量矩阵 $\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{n})$。

注 2.3 在连续层面，由于 $\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X} = 0$，稳定函数 $k(\theta)$ 并不产生任何贡献；因此，保守型形式 (2.20) 与原始形式 (2.8) 是等价的。然而在离散层面，$k(\theta)$ 则作为稳定化项发挥作用，从而放宽对各向异性项 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的能量稳定性要求。例如，文献 *[107]* 中的表面矩阵 $G(\theta)$（未包含稳定化项）仅在弱各向异性表面能的某些特定情形下才能保证能量稳定性；相比之下，加入该稳定化项后，该形式能够适用于更一般的各向异性情形，参见条件 (2.56)。

2.3　表面扩散流的稳定化参数有限元方法

在本节中，我们首先基于保守形式 (2.20) 构造新的弱形式，并给出该弱形式的空间半离散化。随后，通过在时间方向采用显隐 Euler 方法，对此弱形式提出一种结构保持的稳定化参数有限元方法，使其在离散层面同时保持面积守恒与能量耗散性质。

2.3.1　弱形式

为推导方程 (2.20) 之**弱形式** (weak form)，我们引入固定区间 $\mathbb{I} := [0,1]$ 上一个时间无关的参数变量 ρ 以参数化曲线 $\Gamma(t)$ 如下

$$\Gamma(t) := \boldsymbol{X}(\rho,t) = (x(\rho,t), y(\rho,t))^T : \mathbb{I}\times\mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}^2. \tag{2.21}$$

弧长参数 s 可由下式计算 $s = \int_0^\rho |\partial_\rho\boldsymbol{X}(q,t)|\,\mathrm{d}q$。（在不致混淆的情形下，我们不区分 $\boldsymbol{X}(\rho,t)$ 与 $\boldsymbol{X}(s,t)$。）

引入如下关于演化曲线 $\Gamma(t)$ 之函数空间

$$L^2(\mathbb{I}) := \left\{ u : \mathbb{I} \to \mathbb{R} \mid \int_{\Gamma(t)} |u(s)|^2 \,\mathrm{d}s = \int_{\mathbb{I}} |u(s(\rho,t))|^2 \partial_\rho s \,\mathrm{d}s < +\infty \right\}, \tag{2.22}$$

并配有 L^2-内积

$$\left(u, v\right)_{\Gamma(t)} := \int_{\Gamma(t)} u(s)v(s) \,\mathrm{d}s = \int_{\mathbb{I}} u(s(\rho,t))v(s(\rho,t))\partial_\rho s \,\mathrm{d}\rho, \tag{2.23}$$

其中 u, v 为任意标量函数或向量函数。定义其上之 Sobolev 空间如下

$$H^1(\mathbb{I}) := \left\{ u : \mathbb{I} \to \mathbb{R} \mid u \in L^2(\mathbb{I}), \text{ and } \partial_\rho u \in L^2(\mathbb{I}) \right\}, \tag{2.24a}$$

$$H^1_p(\mathbb{I}) := \left\{ u \in H^1(\mathbb{I}) \mid u(0) = u(1) \right\}. \tag{2.24b}$$

上述定义可直接推广至向量函数空间 $[L^2(\mathbb{I})]^2, [H^1(\mathbb{I})]^2$ 以及 $[H^1_p(\mathbb{I})]^2$。

将方程 (2.20a) 与测试函数 $\varphi \in H^1_p(\mathbb{I})$ 相乘并沿 $\Gamma(t)$ 积分，应用分部积分可得

$$\left(\boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X}, \varphi\right)_{\Gamma(t)} + \left(\partial_s \mu, \partial_s \varphi\right)_{\Gamma(t)} = 0. \tag{2.25}$$

类似地，将方程 (2.20b) 与测试函数 $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2)^T \in [H^1_p(\mathbb{I})]^2$ 作点积，并对其进行分部积分，可得

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\mu \boldsymbol{n} + \partial_s \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}\right), \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} \\ &= \left(\mu \boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} + \left(\partial_s(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}), \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} \\ &= \left(\mu \boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}, \partial_s \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} \end{aligned} \tag{2.26}$$

结合 (2.25) 与 (2.26)，可对方程 (2.20) 给出如下弱形式：给定初始闭曲线 $\Gamma(0) := \boldsymbol{X}(\cdot, 0) = \boldsymbol{X}_0 \in [H^1_p(\mathbb{I})]^2$，求解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t) = (x(\cdot,t), y(\cdot,t))^T, \mu(\cdot,t)) \in [H^1_p(\mathbb{I})]^2 \times H^1_p(\mathbb{I})$ 使其满足

$$\left(\boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X}, \varphi\right)_{\Gamma(t)} + \left(\partial_s \mu, \partial_s \varphi\right)_{\Gamma(t)} = 0, \qquad \forall \varphi \in H^1_p(\mathbb{I}), \tag{2.27a}$$

$$\left(\mu \boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}, \partial_s \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega} \in [H^1_p(\mathbb{I})]^2. \tag{2.27b}$$

可以证明弱形式 (2.27) 保持两项几何性质，即**面积守恒**与**能量耗散**。

命题 2.1 (面积守恒与能量耗散)　设 $\Gamma(t)$ 由弱形式 (2.27) 的解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t), \mu(\cdot,t))$ 确定。记其围成的面积与总自由能为

$$A(t) := \int_{\Gamma(t)} y(s,t)\partial_s x(s,t) \,\mathrm{d}s, \qquad W(t) := \int_{\Gamma(t)} \hat{\gamma}(\theta) \,\mathrm{d}s. \tag{2.28}$$

则有

$$A(t) \equiv A(0), \qquad W(t) \le W(t_1) \le W(0), \qquad \forall t \ge t_1 \ge 0. \tag{2.29}$$

更具体地，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t) = 0, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) = -\int_{\Gamma(t)} |\partial_s \mu|^2 \,\mathrm{d}s \le 0, \qquad t \ge 0. \tag{2.30}$$

欲证上述定理，我们引入如下**传输引理** (transport lemma)：

引理 2.1 (传输引理) 设 $\Gamma(t)$ 为由 $\boldsymbol{X}(\rho, t)$ 参数化的二维逐段 C^1 曲线，且 $f : \Gamma(t) \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ 为一可微函数，则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Gamma(t)} f \,\mathrm{d}s = \int_{\Gamma(t)} \partial_t f + f\partial_s(\partial_t \boldsymbol{X}) \cdot \partial_s \boldsymbol{X} \,\mathrm{d}s. \tag{2.31}$$

证明 由 $|\partial_\rho \boldsymbol{X}| = \sqrt{(\partial_\rho x)^2 + (\partial_\rho y)^2}$ 知

$$\begin{aligned} \partial_t |\partial_\rho \boldsymbol{X}| &= \frac{\partial_\rho x \partial_t(\partial_\rho x) + \partial_\rho y \partial_t(\partial_\rho y)}{\sqrt{(\partial_\rho x)^2 + (\partial_\rho y)^2}} \\ &= \frac{\partial_\rho \boldsymbol{X}}{|\partial_\rho \boldsymbol{X}|} \cdot \frac{\partial_\rho(\partial_t \boldsymbol{X})}{|\partial_\rho \boldsymbol{X}|} |\partial_\rho \boldsymbol{X}| \\ &= \partial_s \boldsymbol{X} \cdot \partial_s(\partial_t \boldsymbol{X}) |\partial_\rho \boldsymbol{X}|, \end{aligned} \tag{2.32}$$

从而

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Gamma(t)} f \,\mathrm{d}s &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^1 f|\partial_\rho \boldsymbol{X}| \,\mathrm{d}\rho \\ &= \int_0^1 \partial_t f \,|\partial_\rho \boldsymbol{X}| + f\partial_t |\partial_\rho \boldsymbol{X}| \,\mathrm{d}\rho \\ &= \int_0^1 \partial_t f \,|\partial_\rho \boldsymbol{X}| + f\partial_s(\partial_t \boldsymbol{X}) \cdot \partial_s \boldsymbol{X} |\partial_\rho \boldsymbol{X}| \,\mathrm{d}\rho \\ &= \int_{\Gamma(t)} \partial_t f + f\partial_s(\partial_t \boldsymbol{X}) \cdot \partial_s \boldsymbol{X} \,\mathrm{d}s. \end{aligned} \tag{2.33}$$

■

现在我们给出命题 2.1 的证明：

证明　记 $\Omega(t)$ 为 $\Gamma(t)$ 所围区域。对面积守恒，由 Reynolds 传输定理 [122] 并在 (2.27a) 取 $\varphi \equiv 1$，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega(t)} 1\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_{\Gamma(t)} \boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}\,\mathrm{d}s \\ &= \Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}, 1\Big)_{\Gamma(t)} = -\Big(\partial_s\mu, \partial_s 1\Big)_{\Gamma(t)} = 0.\end{aligned} \tag{2.34}$$

对能量耗散，由引理 2.1，我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) &= \int_{\Gamma(t)} \partial_t\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}(\theta)\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\cdot\partial_s\boldsymbol{X}\,\mathrm{d}s \\ &= \int_{\Gamma(t)} \hat{\gamma}'(\theta)\partial_t\theta + \hat{\gamma}(\theta)\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\cdot\partial_s\boldsymbol{X}\,\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{2.35}$$

另一方面，使用 (2.32) 可将 $\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})$ 转写为

$$\begin{aligned}\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X}) &= \frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\partial_\rho(\partial_t\boldsymbol{X}) \\ &= \frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\partial_t\left(|\partial_\rho\boldsymbol{X}|(\cos\theta,\sin\theta)^T\right) \\ &= \frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\left(\partial_s\boldsymbol{X}\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})|\partial_\rho\boldsymbol{X}|(\cos\theta,\sin\theta)^T + |\partial_\rho\boldsymbol{X}|(-\sin\theta,\cos\theta)^T\partial_t\theta\right)\end{aligned} \tag{2.36}$$

由此结合 $\partial_s\boldsymbol{X}^\perp = (\sin\theta, -\cos\theta)^T$ 可得

$$\partial_t\theta = -\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\cdot\partial_s\boldsymbol{X}^\perp. \tag{2.37}$$

因此，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) = \int_{\Gamma(t)} \left[\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} - \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp\right]\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\,\mathrm{d}s. \tag{2.38}$$

又 $\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X} \equiv 0$，故

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} - \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp &= \hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} - \hat{\gamma}'(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}^\perp + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X} \\ &= \hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X},\end{aligned} \tag{2.39}$$

从而有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) = \int_{\Gamma(t)} \hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\,\mathrm{d}s. \tag{2.40}$$

因此，在式 (2.27a) 与 (2.27b) 中分别取 $\varphi = \mu$ and $\boldsymbol{\omega} = \partial_t\boldsymbol{X}$，可得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) &= \Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}, \partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\Big)_{\Gamma(t)} \\ &= \Big(\mu\boldsymbol{n}, \partial_t\boldsymbol{X}\Big)_{\Gamma(t)} = -\Big(\partial_s\mu, \partial_s\mu\Big)_{\Gamma(t)} \le 0.\end{aligned} \tag{2.41}$$

■

2.3.2 空间半离散

为得空间离散，取正整数 $N > 2$，命 $h = 1/N$ 为网格尺寸，$\rho_j = jh$ 为网格节点，并令 $I_j = [\rho_{j-1}, \rho_j]$，其中 $j = 1, 2, \cdots, N$。由此得到对区间 $\mathbb{I} = [0,1]$ 的一致剖分 $\mathbb{I} = \cup_{j=1}^{N} I_j$。闭曲线 $\Gamma(t) = \boldsymbol{X}(\cdot, t)$ 以多边形折线 $\Gamma^h(t) = \boldsymbol{X}^h(\cdot,t) = \big(x^h(\cdot,t), y^h(\cdot,t)\big)^T$ 近似，并满足初始条件 $\boldsymbol{X}^h(\rho_j, 0) = \boldsymbol{X}(\rho_j, 0)$。

折线 $\Gamma^h(t)$ 由有序线段 $\{\boldsymbol{h}_j(t)\}_{j=1}^N$ 构成，即

$$\Gamma^h(t) = \bigcup_{j=1}^{N} \boldsymbol{h}_j(t) \qquad \text{其中} \quad \boldsymbol{h}_j(t) = (h_{j,x}, h_{j,y})^T := \boldsymbol{X}^h(\rho_j, t) - \boldsymbol{X}^h(\rho_{j-1}, t). \tag{2.42}$$

并且我们假设对所有 $t > 0$ 恒有 $h_{\min}(t) = \min\limits_{1\le j\le N} |\boldsymbol{h}_j(t)| > 0$。

利用线段 $\boldsymbol{h}_j$，可在每个区间上计算离散的几何量，如单位切向量 $\boldsymbol{\tau}^h$、单位外法向量 $\boldsymbol{n}^h$ 与倾角 θ^h。具体地，

$$\boldsymbol{\tau}^h|_{I_j} = \frac{\boldsymbol{h}_j}{|\boldsymbol{h}_j|} := \boldsymbol{\tau}_j^h, \qquad \boldsymbol{n}^h|_{I_i} = -(\boldsymbol{\tau}_j^h)^\perp = -\frac{(\boldsymbol{h}_j)^\perp}{|\boldsymbol{h}_j|} := \boldsymbol{n}_j^h; \tag{2.43}$$

以及

$$\theta^h|_{I_j} := \theta_j^h, \qquad \text{满足} \quad \cos\theta_j^h = \frac{h_{j,x}}{|\boldsymbol{h}_j|}, \quad \sin\theta_j^h = \frac{h_{j,y}}{|\boldsymbol{h}_j|}. \tag{2.44}$$

引入有限元子空间

$$\mathbb{K}^h := \big\{u^h \in C(\mathbb{I}) \mid u^h|_{I_j} \in \mathcal{P}^1(I_j),\ \forall j = 1, 2, \cdots, N\big\} \subseteq H^1(\mathbb{I}), \tag{2.45a}$$

$$\mathbb{K}_p^h := \{u^h \in \mathbb{K}^h \mid u^h(0) = u^h(1)\}, \tag{2.45b}$$

其中 $\mathcal{P}^1(I_j)$ 为定义在 I_j 上且次数 ≤ 1 的多项式构成之集合。

对 $u, v \in \mathbb{K}^h$，定义其关于 $\Gamma^h(t)$ 的**质量集中内积** (mass-lumped inner product) $\Big(\cdot,\cdot\Big)^h_{\Gamma^h(t)}$ 如下：

$$\Big(u, v\Big)^h_{\Gamma^h(t)} := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N} |\boldsymbol{h}_j(t)| \ \Big((u\cdot v)(\rho_{j-1}^+) + (u\cdot v)(\rho_j^-)\Big), \tag{2.46}$$

其中 $u(\rho_j^\pm) = \lim\limits_{\rho\to\rho_j^\pm} u(\rho)$。对 $f \in \mathbb{K}^h$，离散微分算子 ∂_s 定义为

$$\partial_s f|_{I_j} := \frac{f(\rho_j) - f(\rho_{j-1})}{|\boldsymbol{h}_j|}. \tag{2.47}$$

上述定义同样适用于向量值函数。

现在弱形式 (2.27) 的**空间半离散化**可叙述如下：设 $\Gamma_0^h := \boldsymbol{X}^h(\cdot,0) \in [\mathbb{K}_p^h]^2, \mu(\cdot) \in \mathbb{K}_p^h$ 分别为 $\Gamma_0 := \boldsymbol{X}_0(\cdot), \mu_0(\cdot)$ 之近似。对 $t>0$，求解 $\left(\boldsymbol{X}^h(\cdot,t), \mu^h(\cdot)\right) \in [\mathbb{K}_p^h]^2 \times \mathbb{K}_p^h$ 使得

$$\left(\boldsymbol{n}^h \cdot \partial_t \boldsymbol{X}^h, \varphi^h\right)_{\Gamma^h(t)}^h + \left(\partial_s \mu^h, \partial_s \varphi^h\right)_{\Gamma^h(t)}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}_p^h, \tag{2.48a}$$

$$\left(\mu^h \boldsymbol{n}^h, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^h(t)}^h - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^h)\partial_s \boldsymbol{X}^h, \partial_s \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^h(t)}^h = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}_p^h]^2, \tag{2.48b}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^h) = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}(\theta^h) & -\hat{\gamma}'(\theta^h) \\ \hat{\gamma}'(\theta^h) & \hat{\gamma}(\theta^h) \end{pmatrix} + k(\theta^h) \begin{pmatrix} \sin^2\theta^h & -\cos\theta^h \sin\theta^h \\ -\cos\theta^h \sin\theta^h & \cos^2\theta^h \end{pmatrix}. \tag{2.49}$$

记多边形曲线 $\Gamma^h(t)$ 所围**面积**及曲线**总自由能**分别为 $A^h(t), W^h(t)$，其定义如下：

$$A^h(t) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N} (x_j^h(t) - x_{j-1}^h(t))(y_j^h(t) + y_{j-1}^h(t)), \tag{2.50a}$$

$$W^h(t) = \sum_{j=1}^{N} |\boldsymbol{h}_j(t)| \hat{\gamma}(\theta_j^h), \tag{2.50b}$$

其中 $x_j^h(t) := x^h(\rho_j, t), y_j^h(t) := y^h(\rho_j, t), \ \forall 0 \le j \le N$。

采取与命题 2.1 相似的论证，可证明半离散 (2.48) 仍保持两项几何性质：

命题 2.2 (面积守恒与能量耗散)　设 $\Gamma^h(t)$ 由 (2.48) 之解 $(\boldsymbol{X}^h(\cdot,t), \mu^h(\cdot,t))$ 所确定，则有

$$A^h(t) \equiv A^h(0), \qquad W^h(t) \le W^h(t_1) \le W^h(0), \qquad \forall t \ge t_1 \ge 0. \tag{2.51}$$

2.3.3　保结构稳定化参数有限元离散

设 τ 为一致时间步长。记 $\Gamma(t) = \boldsymbol{X}(\cdot,t)$ 在 $t_m = m\tau$ $(m = 0, 1, \cdots)$ 处之近似为 $\Gamma^m = \boldsymbol{X}^m(\cdot) = \cup_{j=1}^N \boldsymbol{h}_j^m$，其中 $\boldsymbol{h}_j^m := \boldsymbol{X}^m(\rho_j) - \boldsymbol{X}^m(\rho_{j-1})$。相应地，曲线 Γ^m 上的质量集中内积 $(\cdot,\cdot)_{\Gamma^m}^h$，单位切向量 $\boldsymbol{\tau}^m$，单位外法向量 $\boldsymbol{n}^m$ 以及倾角 θ^m 均可类似定义。

受 [8-9,19,91] 中为各向同性表面扩散流构造保结构算法的技巧所启发，我们在时间方向采用**显隐 Euler 方法** (explicit-implicit Euler method)。由此得到的各向异性表面扩散方程 (2.8) 的全隐结构保持离散格式如下：

设初始近似 $\Gamma^0(\cdot) \in [\mathbb{K}_p^h]^2$ 由 $\boldsymbol{X}^0(\rho_j) = \boldsymbol{X}_0(\rho_j), \forall 0 \le j \le N$ 给出。对 $m = 0, 1, 2, \ldots,$

求解 $(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot)=(x^{m+1}(\cdot),y^{m+1}(\cdot))^T,\mu^{m+1}(\cdot))\in[\mathbb{K}_p^h]^2\times\mathbb{K}_p^h$ 使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}_p^h,\tag{2.52a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}_p^h]^2,\tag{2.52b}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)=\begin{pmatrix}\hat{\gamma}(\theta^m)&-\hat{\gamma}'(\theta^m)\\\hat{\gamma}'(\theta^m)&\hat{\gamma}(\theta^m)\end{pmatrix}+k(\theta^m)\begin{pmatrix}\sin^2\theta^m&-\cos\theta^m\sin\theta^m\\-\cos\theta^m\sin\theta^m&\cos^2\theta^m\end{pmatrix},\tag{2.53}$$

以及

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}:=-\frac{1}{2}\frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}^m|}(\partial_\rho\boldsymbol{X}^m+\partial_\rho\boldsymbol{X}^{m+1})^\perp.\tag{2.54}$$

注 2.4 上述格式是弱隐式的，因为积分区域显式给定，且每个方程仅含一个非线性项。该非线性项相对于 $\boldsymbol{X}^{m+1}$ 与 μ^{m+1} 的分量至多为二次多项式，因此可借助 *Newton* 迭代高效且精确地求解，详情参见附录 *A.1.2* 或 *[19]*。

注 2.5 法向量 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$ 的选取对于保持面积守恒至关重要。若以 $\boldsymbol{n}^m$ 替代 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$ 格式将退化为半隐式形式，此时仅能保持能量耗散性质。

2.3.4　结构保持

记折线 Γ^m 的围成**面积**及其**总能量**分别为 A^m 与 W^m，其表达式为

$$A^m=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(x^m(\rho_j)-x^m(\rho_{j-1})\right)\left(y^m(\rho_j)+y^m(\rho_{j-1})\right),\tag{2.55a}$$

$$W^m=\sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m).\tag{2.55b}$$

在实际应用中，$\hat{\gamma}(\theta)$ 往往不具备较高的正则性。下文将始终假设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 在 $2\pi\mathbb{T}$ 为全局 C^1 且分段 C^2 。

为方便计，引入如下**能量稳定条件**：

定义 2.1 (能量稳定条件)　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 为全局 C^1 且分段 C^2，则其能量稳定条件定义如下：

$$3\hat{\gamma}(\theta)\geq\hat{\gamma}(\theta-\pi),\qquad\forall\theta\in2\pi\mathbb{T},\tag{2.56a}$$

$$\hat{\gamma}'(\theta^*)=0,\qquad\text{当 }3\hat{\gamma}(\theta^*)=\hat{\gamma}(\theta^*-\pi),\qquad\theta^*\in2\pi\mathbb{T}.\tag{2.56b}$$

本章主定理为离散格式 (2.52) 的**结构保持性**：

定理 2.2 (结构保持)　对满足条件 (2.56) 的任意表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$，格式 (2.52) **面积守恒**，且对充分大之 $k(\theta)$ 无条件**能量耗散**，即

$$A^{m+1} = A^m = \cdots = A^0, \qquad W^{m+1} \le W^m \le \cdots \le W^0, \qquad \forall m \ge 0. \tag{2.57}$$

我们在此处仅先证明面积守恒性，能量耗散将在下一节中作详细讨论。

证明　令 $\Gamma^h(\alpha) = \boldsymbol{X}^h(\rho,\alpha)$ 为 $\boldsymbol{X}^{m+1}$ 与 $\boldsymbol{X}^m$ 的线性插值：

$$\boldsymbol{X}^h(\rho,\alpha) \coloneqq (1-\alpha)\boldsymbol{X}^m(\rho) + \alpha\boldsymbol{X}^{m+1}(\rho), \qquad 0 \le \alpha,\rho \le 1. \tag{2.58}$$

记 $\boldsymbol{n}^h$ 为 $\Gamma^h(\alpha)$ 的单位外法向量，$A(\alpha)$ 为 $\Gamma^h(\alpha)$ 所围面积。应用 Reynolds 传输定理 [122] 至 $A(\alpha)$ 有

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}A(\alpha) &= \int_{\Gamma^h(\alpha)} \partial_\alpha \boldsymbol{X}^h \cdot \boldsymbol{n}^h \,\mathrm{d}s \\ &= \int_{\mathbb{I}} \left[\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m\right] \cdot \left[-(1-\alpha)\partial_\rho \boldsymbol{X}^m - \alpha\partial_\rho \boldsymbol{X}^{m+1}\right]^\perp \mathrm{d}\rho, \end{aligned} \tag{2.59}$$

此处利用了 (2.58) 与事实

$$\partial_\alpha \boldsymbol{X}^h = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m, \qquad \boldsymbol{n}^h = -|\partial_\rho \boldsymbol{X}^h|^{-1}(\partial_\rho \boldsymbol{X}^h)^\perp. \tag{2.60}$$

对 (2.59) 由 0 至 1 积分，结合 (2.54) 中 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$ 之定义可得：

$$\begin{aligned} A(1) - A(0) &= \int_{\mathbb{I}} \left[\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m\right] \cdot \left[-\frac{1}{2}\left(\partial_\rho \boldsymbol{X}^m + \partial_\rho \boldsymbol{X}^{m+1}\right)\right]^\perp \mathrm{d}\rho \\ &= \left((\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m)\cdot \boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, 1\right)_{\Gamma^m}^h. \end{aligned} \tag{2.61}$$

置 $\varphi^h \equiv 1$ 于式 (2.52a) 立得 $A(1) = A(0)$，此即 $A^{m+1} = A^m$。明欲所证。 ■

注 2.6　离散格式 (2.52) 是针对尖锐界面模型构造的数值方法。相应地，针对相场模型的稳定化技术——如凸分裂格式 *[76,152]*、稳定化半隐式格式 *[41,51]* 等——并不适用于此处。与这些相场方法中的经典稳定化策略不同，格式 (2.52) 在无需额外校正项的情况下即可保持原有的能量稳定性。

注 2.7　对 m-重各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos m\theta$：当 m 为偶数时，条件 (2.56) 在 $|\beta| < 1$ 成立；当 m 为奇数时，则其在 $|\beta| \le \frac{1}{2}$ 下成立。相比 *[107]* 中的能量稳定条件 $|\beta| \le \frac{1}{m^2+1}$，上述结果显著放宽了各向异性强度的限制。

注 2.8 对椭圆各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)=\sqrt{a+b\cos^2\theta}$：文献 *[107]* 中的能量稳定性条件要求 $-\frac{a}{2}\le b\le a$；而条件 (2.56) 在任意 $a>0, a+b>0$ 均成立。

注 2.9 值得指出的是，对任意满足 $\hat{\gamma}(\theta)=\hat{\gamma}(\theta-\pi)$, $\forall\theta\in 2\pi\mathbb{T}$ 的**对称**各向异性，如类 *Riemannian* 度量各向异性，条件 (2.56) 自然成立。由此可保证离散格式 (2.52) 的无条件能量稳定性。

2.4　无条件能量稳定性之证明

欲证离散格式 (2.52) 之能量耗散性，关键在于建立如下形式的能量估计：

$$\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\ge W^{m+1}-W^m,\tag{2.62}$$

以控制相邻时间层间的能量差。为得所需不等式，须先建立其局部版本，具体由以下引理阐述：

引理 2.2 (局部能量估计) 设 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}$ 为 $\mathbb{R}^2$ 中两非零向量，命 $\boldsymbol{p}=|\boldsymbol{p}|(\cos\varphi,\sin\varphi)^T, \boldsymbol{q}=|\boldsymbol{q}|(\cos\theta,\sin\theta)^T$。对充分大之 $k(\theta)$，以下不等式成立：

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})\ge|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\varphi)-|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta).\tag{2.63}$$

注 2.10 值得注意的是，条件 (2.56) 对局部能量估计来说是**几乎必要**的。取 $\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{q}$，则 $\varphi=\theta-\pi$。此时不等式 (2.63) 便化为 $2|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)\ge|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta-\pi)-|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)$。因此条件 (2.56) 对建立局部能量估计几乎是必需的。

2.4.1　最小稳定函数及其性质

为证局部能量估计 (2.63)，引入以下二辅助函数：

$$P_\alpha(\phi,\theta):=2\sqrt{\hat{\gamma}^2(\theta)+\alpha\hat{\gamma}(\theta)\sin^2\phi},\qquad\forall\phi\in2\pi\mathbb{T},\tag{2.64a}$$

$$Q(\phi,\theta):=\hat{\gamma}(\theta-\phi)+\hat{\gamma}(\theta)\cos\phi+\hat{\gamma}'(\theta)\sin\phi,\qquad\forall\phi\in2\pi\mathbb{T}.\tag{2.64b}$$

借助辅助函数 P_α, Q，我们定义**最小稳定函数**：

$$k_0(\theta):=\inf\left\{\alpha\ge0\mid P_\alpha(\phi,\theta)-Q(\phi,\theta)\ge0,\ \forall\phi\in2\pi\mathbb{T}\right\}.\tag{2.65}$$

从定义可知，$k_0(\theta)$ 由表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 确定，因此是**时间无关**的。

下述定理保证了 $k_0(\theta)$ 的存在性：

定理 2.3　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足条件 (2.56)，则如 (2.65) 定义之最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 是**良定**的。

定理 2.3 的证明将在节 2.4.4 中给出，此处暂时按下不表。

一旦 $\hat{\gamma}(\theta)$ 给定，即可确定最小稳定函数 $k_0(\theta)$。这表明二者之间的对应关系将诱导出一个由 $\hat{\gamma}(\theta)$ 到 $k_0(\theta)$ 的映射。更进一步的，可以证明该映射是**次线性**的，即具有**正齐次性**与**次可加性**。

引理 2.3 (正齐次性与次可加性)　令 $\hat{\gamma}_i(\theta)$ $(i = 1, 2, 3)$ 为满足 (2.56) 的各向异性表面能函数，$k_i(\theta)$ 为其对应的最小稳定函数。

(i) 若 $\hat{\gamma}_2(\theta) = c\hat{\gamma}_1(\theta)$，其中 $c > 0$ 为给定正实数，则 $k_2(\theta) = ck_1(\theta)$；

(ii) 若 $\hat{\gamma}_3(\theta) = \hat{\gamma}_1(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)$，则 $k_3(\theta) \le k_1(\theta) + k_2(\theta)$。

证明　分别记 $\hat{\gamma}_i(\theta)$ 对应的辅助函数为 $P_{\alpha,i}, Q_i$。

(i) 若 $\hat{\gamma}_2(\theta) = c\hat{\gamma}_1(\theta)$，则

$$\begin{aligned} P_{ck_1,2}(\phi,\theta) - Q_2(\phi,\theta) &= 2\sqrt{c^2\hat{\gamma}_1^2(\theta) + c^2k_1(\theta)\hat{\gamma}_1(\theta)\sin^2\phi} \\ &\quad - \left(c\hat{\gamma}_1(\theta-\phi) + c\hat{\gamma}_1(\theta)\cos\phi + c\hat{\gamma}_1'(\theta)\sin\phi\right) \\ &= c\left(P_{k_1,1}(\phi,\theta) - Q(\phi,\theta)\right) \ge 0. \end{aligned} \tag{2.66}$$

从而由最小稳定函数定义，$k_2(\theta) \le ck_1(\theta)$。又注意到 $\hat{\gamma}_1(\theta) = \frac{1}{c}\hat{\gamma}_2(\theta)$，同理可得 $k_1(\theta) \le \frac{1}{c}k_2(\theta)$，故 $k_2(\theta) = ck_1(\theta)$。

(ii) 若 $\hat{\gamma}_3(\theta) = \hat{\gamma}_1(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)$。注意到

$$\begin{aligned} P_{k_1+k_2,3}^2(\phi,\theta) &= 4\left(\hat{\gamma}_1(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)\right)^2 + 4\left(\hat{\gamma}_1(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)\right)\left(k_1(\theta) + k_2(\theta)\right)\sin^2\phi \\ &= 4\left(\hat{\gamma}_1^2(\theta) + \hat{\gamma}_2^2(\theta) + \hat{\gamma}_1(\theta)k_1(\theta)\sin^2\phi + \hat{\gamma}_2(\theta)k_2(\theta)\sin^2\phi\right) \\ &\quad + 4\left[\hat{\gamma}_1(\theta)\left(\hat{\gamma}_2(\theta) + k_2(\theta)\sin^2\phi\right) + \hat{\gamma}_2(\theta)\left(\hat{\gamma}_1(\theta) + k_1(\theta)\sin^2\phi\right)\right] \\ &\ge 4\left(\hat{\gamma}_1^2(\theta) + \hat{\gamma}_1(\theta)k_1(\theta)\sin^2\phi + \hat{\gamma}_2^2(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)k_2(\theta)\sin^2\phi\right) \\ &\quad + 8\sqrt{\left(\hat{\gamma}_1^2(\theta) + \hat{\gamma}_1(\theta)k_1(\theta)\sin^2\phi\right)\left(\hat{\gamma}_2^2(\theta) + \hat{\gamma}_2(\theta)k_2(\theta)\sin^2\phi\right)} \\ &= \left(P_{k_1,1}(\phi,\theta) + P_{k_2,2}(\phi,\theta)\right)^2, \end{aligned} \tag{2.67}$$

即 $P_{k_1+k_2,3}(\phi,\theta) \ge P_{k_1,1}(\phi,\theta) + P_{k_2,2}(\phi,\theta)$。

结合 $Q_3(\phi,\theta) = Q_1(\phi,\theta) + Q_2(\phi,\theta)$，我们有

$$\begin{aligned} P_{k_1+k_2,3}(\phi,\theta) - Q_3(\phi,\theta) &\ge P_{k_1,1}(\phi,\theta) - Q_1(\phi,\theta) + P_{k_2,2}(\phi,\theta) - Q_2(\phi,\theta) \\ &\ge 0, \end{aligned} \tag{2.68}$$

故由最小稳定函数定义，$k_3(\theta) \le k_1(\theta) + k_2(\theta)$。

■

2.4.2　局部能量估计

此节在假设定理 2.3 成立的前提下，给出局部能量估计 (2.63) 的证明。

证明　由式 (2.10) 中 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$ 的定义，注意到

$$\begin{pmatrix} \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} (-\sin\theta, \cos\theta) = \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T, \tag{2.69}$$

其中 $\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{q}^\perp/|\boldsymbol{q}|$ 为对应单位法向量。从而

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{p} &= \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left[\hat{\gamma}(\theta)I_2 + \hat{\gamma}'(\theta)J + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\right]\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{p}|^2 + \frac{1}{|\boldsymbol{h}|}\hat{\gamma}'(\theta)J\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{1}{|\boldsymbol{h}|}k(\theta)(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{h}})^2 \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{p}|^2 + \frac{1}{|\boldsymbol{h}|}k(\theta)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{p})^2 \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{h}|}\left[\hat{\gamma}(\theta) + k(\theta)\sin^2(\theta-\varphi)\right]|\boldsymbol{p}|^2, \end{aligned} \tag{2.70}$$

以及

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{q} &= \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left[\hat{\gamma}(\theta)I_2 + \hat{\gamma}'(\theta)J + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\right]\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q} \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\hat{\gamma}(\theta)(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{p}) + \frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\hat{\gamma}'(\theta)J\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q} + \frac{1}{|\boldsymbol{h}|}k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q} \\ &= |\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\theta)\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix} + |\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}'(\theta)\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix} \\ &\quad + |\boldsymbol{p}|k(\theta)\begin{pmatrix}\sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta\\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix} \\ &= |\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\theta)\cos(\theta-\varphi) + |\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}'(\theta)(-\sin\varphi,\cos\varphi)\cdot(\cos\theta,\sin\theta) \\ &= |\boldsymbol{p}|\left[\hat{\gamma}(\theta)\cos(\theta-\varphi) + \hat{\gamma}'(\theta)\sin(\theta-\varphi)\right]. \end{aligned} \tag{2.71}$$

回忆 (2.64) 中 $P_\alpha(\phi,\theta), Q(\phi,\theta)$ 的定义，立知有

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{p} = \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{4|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)}P^2_{k(\theta)}(\phi,\theta), \tag{2.72a}$$

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{q} = |\boldsymbol{p}|(Q(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\phi)), \tag{2.72b}$$

其中 $\phi = \theta - \varphi$。

将 (2.72a)，(2.72b) 代入局部能量估计 (2.63)，可得

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})-(|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\varphi)-|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta))\\
&\quad=\frac{|\boldsymbol{p}|^2}{4|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)}P_{k(\theta)}^2(\phi,\theta)-|\boldsymbol{p}|(Q(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\phi))\\
&\qquad-|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\theta-\phi)+|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)\\
&\quad=\frac{1}{4|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\theta)}\left[|\boldsymbol{p}|^2P_{k(\theta)}^2(\phi,\theta)-4|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)Q(\phi,\theta)+4|\boldsymbol{q}|^2\hat{\gamma}^2(\theta)\right],
\end{aligned}\tag{2.73}$$

从而局部能量估计 (2.63) 等价于证明

$$|\boldsymbol{p}|^2P_{k(\theta)}^2(\phi,\theta)-4|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)Q(\phi,\theta)+4|\boldsymbol{q}|^2\hat{\gamma}^2(\theta)\geq 0,\tag{2.74}$$

即

$$\left(|\boldsymbol{p}|P_{k(\theta)}-2|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)\right)^2+4|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta)\left(P_{k(\theta)}(\phi,\theta)-Q(\phi,\theta)\right)\geq 0\tag{2.75}$$

由式 (2.65) 知：对任意 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$，均有 $P_{k(\theta)}(\phi,\theta)-Q(\phi,\theta)\geq 0$，$\forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}$，故式 (2.75) 成立。由定理 2.3 知最小稳定函数 $k_0(\theta)<+\infty$ 良定，故可取充分大的 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$ 使得欲证之不等式 (2.63) 成立。 ■

2.4.3　无条件能量稳定性

利用引理 2.2 中给出的局部能量估计 (2.63)，即可证明定理 2.2 中所叙述的能量耗散性。

证明　设 $k(\theta)$ 充分大使得 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$。在局部能量估计 (2.63) 中取 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{h}_j^m$, $\boldsymbol{p}=\boldsymbol{h}_j^{m+1}$：

$$\frac{1}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta_j^m)\boldsymbol{h}_j^{m+1}\right)\cdot(\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m)\geq|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m).\tag{2.76}$$

因此，对任意 $m\geq 0$，

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h&=\sum_{j=1}^N\left[|\boldsymbol{h}_j^m|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta_j^m)\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right)\cdot\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right]\\
&=\sum_{j=1}^N\left[\frac{1}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta_j^m)\boldsymbol{h}_j^{m+1}\right)\cdot(\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m)\right]\\
&\geq\sum_{j=1}^N\left[|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)\right]\\
&=\sum_{j=1}^N|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-\sum_{j=1}^N|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)\\
&=W^{m+1}-W^m.
\end{aligned}\tag{2.77}$$

在式 (2.52) 中取 $\varphi^h = \mu^{m+1}, \boldsymbol{\omega}^h = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$，可得

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m)\right)^h_{\Gamma^m} &= \left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m\right)^h_{\Gamma^m} \\ &= -\tau\left(\partial_s\mu^{m+1}, \partial_s\mu^{m+1}\right)^h_{\Gamma^m}.\end{aligned} \tag{2.78}$$

结合 (2.77) 便有

$$\begin{aligned}W^{m+1} - W^m &\le \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m)\right)^h_{\Gamma^m} \\ &\le -\tau\left(\partial_s\mu^{m+1}, \partial_s\mu^{m+1}\right)^h_{\Gamma^m} \\ &\le 0, \qquad \forall m \ge 0.\end{aligned} \tag{2.79}$$

■

2.4.4　最小稳定函数的存在性

此节我们在 (2.56) 的条件下证明最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 的存在性。

回忆式 (2.64) 中 P_α, Q 之定义，记

$$\begin{aligned}F_\alpha(\phi,\theta) &:= P_\alpha^2(\phi,\theta) - Q^2(\phi,\theta) \\ &= 4\hat{\gamma}(\theta)\left(\hat{\gamma}(\theta) + \alpha\sin^2\phi\right) \\ &\quad - \left(\hat{\gamma}(\theta-\phi) + \hat{\gamma}(\theta)\cos\phi + \hat{\gamma}'(\theta)\sin\phi\right)^2.\end{aligned} \tag{2.80}$$

设 $C > 0$ 为一常数，使得 $\frac{1}{C} \le \hat{\gamma}(\theta) \le C$ 且 $|\hat{\gamma}'(\theta)|, |\hat{\gamma}''(\theta)| \le C$，$\forall\theta \in 2\pi\mathbb{T}$。

引理 2.4　对全局 C^1 且分段 C^2 的函数 $\hat{\gamma}(\theta)$，存在一含 0 开邻域 U_0 及一正常数 $k_{U_0} > 0$，使得对于任意 $\alpha > k_{U_0}$，均有 $F_\alpha(\phi,\theta) \ge 0, \forall\phi \in U_0$。

证明　由正则性条件，存在 $0 < \varepsilon < \frac{\pi}{2}$ 使 $\hat{\gamma}(\theta)$ 在区间 $[\theta-\varepsilon,\theta]$ 与 $[\theta,\theta+\varepsilon]$ 均 2 阶连续可微。

在 $[\theta-\varepsilon,\theta]$ 与 $[\theta,\theta+\varepsilon]$ 分别应用中值定理，可得：对 $\phi \in U_0 := \{\phi \mid |\phi| < \varepsilon\}$，存在 $\theta, \theta-\phi$ 之间一 ξ，使得

$$\hat{\gamma}(\theta-\phi) = \hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}'(\theta)\phi + \frac{\hat{\gamma}''(\xi)}{2}\phi^2. \tag{2.81}$$

又易知存在 $0, \phi$ 之间的 ξ_1, ξ_2，使得

$$\cos\phi = 1 - \frac{1}{2}\phi^2 + \frac{\sin\xi_1}{6}\phi^3 \tag{2.82a}$$

$$\sin\phi = \phi - \frac{\cos\xi_2}{6}\phi^3. \tag{2.82b}$$

代入 (2.81)，(2.82) 至 $2\hat{\gamma}(\theta)-Q(\phi,\theta)$，有

$$\begin{aligned}2\hat{\gamma}(\theta)-Q(\phi,\theta)&=2\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta)+\hat{\gamma}'(\theta)\phi-\frac{1}{2}\hat{\gamma}''(\xi)\phi^2\\&\quad-\hat{\gamma}(\theta)+\frac{1}{2}\hat{\gamma}(\theta)\phi^2-\frac{1}{6}\hat{\gamma}(\theta)\sin\xi_1\phi^3\\&\quad-\hat{\gamma}'(\theta)\phi+\frac{1}{6}\hat{\gamma}'(\theta)\cos\xi_2\phi^3\\&=\frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}''(\xi)\right)\phi^2-\frac{1}{6}\left(\hat{\gamma}(\theta)\sin\xi_1-\hat{\gamma}'(\theta)\cos\xi_2\right)\phi^3.\end{aligned}\tag{2.83}$$

从而，

$$\begin{aligned}|2\hat{\gamma}(\theta)-Q(\phi,\theta)|&\le\frac{1}{2}\left(|\hat{\gamma}(\theta)|+|\hat{\gamma}''(\xi)|\right)|\phi|^2\\&\quad+\frac{1}{6}\left(|\hat{\gamma}(\theta)\sin\xi_1|+|\hat{\gamma}'(\theta)\cos\xi_2|\right)|\phi|^3\\&\le C|\phi|^2+\frac{C}{3}|\phi|^3.\end{aligned}\tag{2.84}$$

又因为 $|2\hat{\gamma}(\theta)+Q(\phi,\theta)|\le 2|\hat{\gamma}(\theta)|+|Q(\phi,\theta)|\le 5C$，所以对任意 $\phi\in U_0$，

$$\begin{aligned}|4\hat{\gamma}^2(\theta)-Q^2(\phi,\theta)|&\le|2\hat{\gamma}(\theta)+Q(\phi,\theta)||2\hat{\gamma}(\theta)-Q(\phi,\theta)|\\&\le 5C\left(C|\phi|^2+\frac{C}{3}|\phi|^3\right)=\frac{5C^2}{3}\left(3+|\phi|\right)|\phi|^2\\&\le\frac{5(6+\pi)C^2}{6}|\phi|^2.\end{aligned}\tag{2.85}$$

注意到对任意 $\phi\in U_0$，成立不等式 $|\sin\phi|>\frac{2}{\pi}|\phi|$。因此，

$$\begin{aligned}F_\alpha(\phi,\theta)&=4\hat{\gamma}(\theta)\alpha\sin^2\phi+4\hat{\gamma}^2(\theta)-Q^2(\phi,\theta)\\&\ge\frac{16}{C\pi^2}\alpha|\phi|^2-\frac{5(6+\pi)C^2}{6}|\phi|^2\\&\ge\left[\frac{16}{C\pi^2}\alpha-\frac{5(6+\pi)C^2}{6}\right]|\phi|^2,\ \forall\phi\in U_0.\end{aligned}\tag{2.86}$$

取 $k_{U_0}:=\frac{5\pi^2(6+\pi)C^3}{96}$，立得：对任意 $\alpha>k_{U_0}$，有 $F_\alpha(\phi,\theta)\ge 0,\forall\phi\in U_0$。 ■

引理 2.5　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足 (2.56)。存在一含 π 开邻域 U_π 及一正常数 $k_{U_\pi}>0$，使得对于任意 $\alpha>k_{U_\pi}$，均有 $F_\alpha(\phi,\theta)\ge 0,\forall\phi\in U_\pi$。

证明　(i) 若 $3\hat{\gamma}(\theta)>\hat{\gamma}(\theta-\pi),\ \forall\theta\in 2\pi\mathbb{T}$，则

$$F_\alpha(\pi,\theta)=\left(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\right)\left(\hat{\gamma}(\theta)+\hat{\gamma}(\theta-\pi)\right)>0.\tag{2.87}$$

由 $F_\alpha(\phi,\theta)$ 连续性知：存在 π 的开邻域 U_π，使 $F_\alpha(\pi,\theta)\ge 0,\forall\phi\in U_\pi$。

(ii) 若存在一 $\theta^* \in 2\pi\mathbb{T}$ 使 $3\hat{\gamma}(\theta^*) = \hat{\gamma}(\theta^* - \pi)$ 且满足 $\hat{\gamma}'(\theta^*) = 0$。由于 $\gamma(\theta-\pi)/\gamma(\theta) \leq 3$，故其在 θ^* 处取最大值，从而

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hat{\gamma}(\theta-\pi)}{\hat{\gamma}(\theta)}\right)'\Big|_{\theta=\theta^*} &= \frac{\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi)\hat{\gamma}(\theta^*) - \hat{\gamma}(\theta^*-\pi)\hat{\gamma}'(\theta^*)}{\hat{\gamma}^2(\theta^*)} \\ &= \frac{\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi) - 3\hat{\gamma}'(\theta^*)}{\hat{\gamma}(\theta^*)} \\ &= \frac{\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi)}{\hat{\gamma}(\theta^*)} = 0,\end{aligned} \tag{2.88}$$

即 $\hat{\gamma}'(\theta^* - \pi) = 0$。

与 (2.81) 式推导类似，由中值定理可知：存在正常数 $0 < \varepsilon < \frac{\pi}{2}$ 及一开邻域 $U_\pi = \{\phi \mid |\phi - \pi| < \varepsilon\}$，使得对任意 $\phi \in U_\pi$，有 $\theta^* - \phi, \theta^* - \pi$ 之间一常数 ξ 满足

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}(\theta^* - \phi) &= \hat{\gamma}(\theta^* - \pi) - \hat{\gamma}'(\theta^* - \pi)(\phi - \pi) + \frac{\hat{\gamma}''(\xi)}{2}(\phi - \pi)^2 \\ &= \hat{\gamma}(\theta^* - \pi) + \frac{\hat{\gamma}''(\xi)}{2}(\phi - \pi)^2.\end{aligned} \tag{2.89}$$

又易知有 π, ϕ 之间一常数 ξ，满足

$$\cos\phi = -1 - \frac{\cos\xi_1}{6}(\phi - \pi)^2. \tag{2.90}$$

代入 (2.89)，(2.90) 至 $2\hat{\gamma}(\theta^*) - Q(\phi, \theta^*)$，可得

$$\begin{aligned}2\hat{\gamma}(\theta^*) - Q(\phi, \theta^*) &= 2\hat{\gamma}(\theta^*) - \hat{\gamma}'(\theta^* - \pi) - \frac{\hat{\gamma}''(\xi)}{2}(\phi - \pi)^2 \\ &\quad + \hat{\gamma}(\theta^*) + \frac{\cos\xi_1}{6}\hat{\gamma}(\theta)(\phi - \pi)^2 + \hat{\gamma}(\theta^*)\sin\phi \\ &= \frac{1}{6}\left(\hat{\gamma}(\theta^*)\cos\xi_1 - 3\hat{\gamma}''(\xi)\right)(\phi - \pi)^2.\end{aligned} \tag{2.91}$$

从而，

$$\begin{aligned}|2\hat{\gamma}(\theta^*) - Q(\phi, \theta^*)| &\leq \frac{1}{6}\left(|\hat{\gamma}(\theta^*)\cos\xi_1| + 3|\hat{\gamma}''(\xi)|\right)|\phi - \pi|^2 \\ &\leq \frac{2C}{3}|\phi - \pi|^2.\end{aligned} \tag{2.92}$$

由 $|2\hat{\gamma}(\theta^*) + Q(\phi, \theta^*)| \leq 5C$，可知

$$\begin{aligned}|4\hat{\gamma}^2(\theta^*) - Q^2(\phi, \theta^*)| &\leq |2\hat{\gamma}(\theta^*) + Q(\phi, \theta^*)||2\hat{\gamma}(\theta^*) - Q(\phi, \theta^*)| \\ &\leq \frac{10C^2}{3}|\phi - \pi|^2.\end{aligned} \tag{2.93}$$

注意到 $|\sin\phi| > \frac{2}{\pi}|\phi-\pi|,\ \forall\phi\in U_\pi$，故

$$\begin{aligned} F_\alpha(\phi,\theta^*) &= 4\hat{\gamma}(\theta^*)\alpha\sin^2\phi + 4\hat{\gamma}^2(\theta^*) - Q^2(\phi,\theta^*) \\ &\geq \frac{16}{C\pi^2}\alpha|\phi-\pi|^2 - \frac{10C^2}{3}|\phi-\pi|^2 \\ &\geq \left[\frac{16}{C\pi^2}\alpha - \frac{10C^2}{3}\right]|\phi-\pi|^2,\ \forall\phi\in U_\pi. \end{aligned} \tag{2.94}$$

因此，存在正常数 $k_{U_\pi} := \frac{5\pi^2C^3}{24}$，使得 $F_\alpha(\phi,\theta)\geq 0, \forall\phi\in U_\pi$ 对任意 $\alpha > k_{U_\pi}$ 恒成立。

■

藉由以上引理，我们现在来证明定理 2.3：

证明　(最小稳定函数的存在性)

(i) 对 $\phi_0\neq 0,\pi$，易知存在一开邻域 U_{ϕ_0} 使得 $\sin^2\phi$ 在 U_{ϕ_0} 有严格正下界，即存在一常数 $c>0$，满足 $\sin^2\phi\geq c>0, \forall\phi\in U_{\phi_0}$。从而在该邻域上，我们有

$$\begin{aligned} F_\alpha(\phi,\theta) &= 4\hat{\gamma}(\theta)\alpha\sin^2\phi + O(1) \\ &\geq 4c\hat{\gamma}(\theta)\alpha + O(1). \end{aligned} \tag{2.95}$$

故存在常数 $k_{U_{\phi_0}} < +\infty$，对任意 $\alpha > k_{U_{\phi_0}}$，恒有 $F_\alpha(\phi,\theta)\geq 0, \forall\phi\in U_{\phi_0}$。

(ii) 对 $\phi_0 = 0$ 或 π。由引理 2.4 与引理 2.5 可知：存在一 ϕ_0 的邻域 U_{ϕ_0} 及常数 $k_{U_{\phi_0}} < +\infty$ 使得对任意 $\alpha > k_{U_{\phi_0}}$，恒有 $F_\alpha(\phi,\theta)\geq 0, \forall\phi\in U_{\phi_0}$。

注意到 $2\pi\mathbb{T}$ 紧且 $\{U_{\phi_0} : \phi_0\in 2\pi\mathbb{T}\}$ 构作其开覆盖，故由开覆盖定理知：存在一有限子覆盖 $\{U_i\}_{i=1}^M \subset \{U_{\phi_0} : \phi_0\in 2\pi\mathbb{T}\}$。从而对任意 $\alpha > \max\limits_{1\leq i\leq M} k_{U_i}$，有

$$F_\alpha(\phi,\theta)\geq 0, \qquad \forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}. \tag{2.96}$$

这表明 $k_0(\theta) = \inf\{\alpha\geq 0 \mid P_\alpha(\phi,\theta) - Q(\phi,\theta)\geq 0,\ \forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}\} < +\infty$。证毕。　■

2.5　数值实验

在本节中，我们展示格式 (2.52) 的数值实验结果。通过大量测试，验证其效率、精度、面积守恒性以及无条件能量稳定性。

在数值测试中，主要考虑以下两种各向异性表面能量：

- 例 I：$\hat{\gamma}(\theta) = 1+\beta\cos 3\theta$，其中 $|\beta|<1$。当 $|\beta|<\frac{1}{8}$ 时，该表面能为**弱各向异**的；反之，则为**强各向异**的。
- 例 II: $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{1+b\cos^2\theta}$，其中 $b>-1$。

为计算最小稳定函数 $k_0(\theta)$，我们采取以下策略：在区间 $[-\pi,\pi]$ 上取 20 个均匀分布的节点 $\theta_j=-\pi+\frac{j\pi}{10}$，$\forall 1\le j\le 20$，逐点求解优化问题 (2.65) 以获得对应的 $k_0(\theta_j)$。随后，对区间 $(\frac{j\pi}{10},\frac{(j+1)\pi}{10})$ 内的中间点采用线性插值，即 $k_0(\theta)=(1-\lambda)k_0(\theta_j)+\lambda k_0(\theta_{j+1})$，其中 $\lambda=\frac{10}{\pi}(\theta-\frac{j\pi}{10})$。

我们引入**流形距离** (manifold distance) [107,149]

$$M(\Gamma_1,\Gamma_2):=2|\Omega_1\cup\Omega_2|-|\Omega_1|-|\Omega_2|, \tag{2.97}$$

以度量两条闭曲线 Γ_1,Γ_2 的距离，其中 Ω_i $(i=1,2)$ 为 Γ_i 所围区域，$|\Omega_i|$ 则表示其面积。设 Γ^m 为 $\Gamma^h(t=t_m:=m\tau)$ 的数值近似，则**数值误差**定义为

$$e^h(t)\Big|_{t=t_m}:=M(\Gamma^m,\Gamma(t=t_m)). \tag{2.98}$$

为数值检验网格性质、面积守恒性与能量稳定性，我们引入以下指标：**加权网格比**

$$R_\gamma^h(t):=\frac{\max\limits_{1\le j\le N}\hat\gamma(\theta_j)|\boldsymbol{h}_j|}{\min\limits_{1\le j\le N}\hat\gamma(\theta_j)|\boldsymbol{h}_j|}, \tag{2.99}$$

规范化面积损失及**规范化能量**

$$\frac{\Delta A^h(t)}{A^h(0)}\Big|_{t=t_m}:=\frac{A^m-A^0}{A^0},\qquad \frac{W^h(t)}{W^h(0)}\Big|_{t=t_m}:=\frac{W^m}{W^0},\qquad \forall m\ge 0. \tag{2.100}$$

数值格式 (2.52) 形式上具有**二阶空间精度**和**一阶时间精度**。因此若不特别声明，时间步长 τ 总是设置为 $\tau=O(h^2)$。例如在本章中，我们取 $\tau=16h^2$。在 Newton 迭代中，其**容差** (tolerance) 被设置为 $\mathrm{tol}=10^{-12}$。

2.5.1　收敛阶与结构保持性

在以下数值测试中，初始曲线取为长轴为 4、短轴为 1 的椭圆。由于无法解析获得**精确解**，我们采用细网格 $h=h_e,\tau=\tau_e$ 对 $\Gamma(t=t_m)$ 进行数值近似。在本章中，$(h_e,\tau_e)=(2^{-8},2^{-12})$。

图 2.1 展示了数值格式 (2.52) 的收敛阶，其中：(a) 固定时刻 $t=0.5$，考虑不同各向异性强度 β 的 3-重各向异性 $\hat\gamma(\theta)=1+\beta\cos 3\theta$；(b) 不同时刻的椭圆各向异性 $\hat\gamma(\theta)=\sqrt{1-0.8\cos^2\theta}$。结果清楚表明，无论各向异性类型或计算时间如何变化，格式均保持**二阶**空间收敛，显示出其具有较高**鲁棒性** (robustness)。

图 2.2 给出了格式 (2.52) 在例 I 各向异性 $\hat\gamma(\theta)=1+\beta\cos 3\theta$ 下，取不同 $k(\theta)$ 时的收敛阶，其中：(a) $\beta=0$；(b) $\beta=1/9$。可以观察到，稳定函数 $k(\theta)$ 的选取与**时间无关**，且对收敛性无影响。

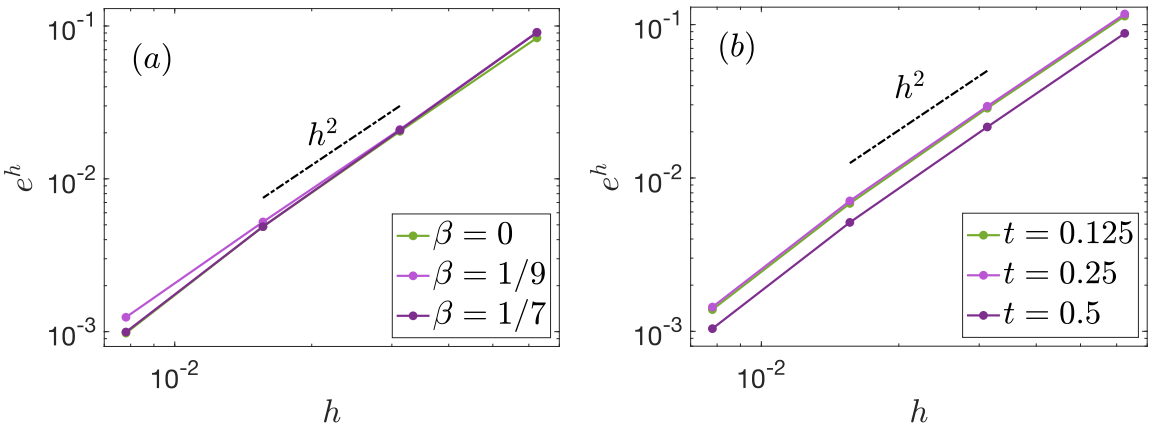


图 2.1　取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时，格式 (2.52) 的收敛阶：(a) $t = 0.5$ 时，不同 β 的例 I 各向异性；(b) $t = 0.125, 0.25, 0.5$ 时，取 $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。

Figure 2.1　Convergence rates of the SPFEM (2.52) with $k(\theta) = k_0(\theta)$ for: (a) anisotropy in Case I at $t = 0.5$ with different β; and (b) anisotropy in Case II with $b = -0.8$ at different times $t = 0.125, 0.25, 0.5$.

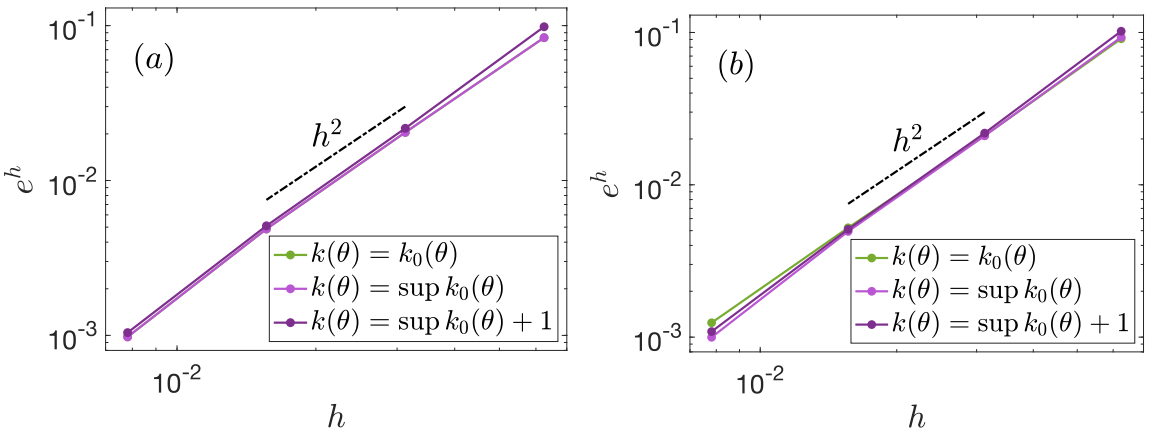


图 2.2　$t = 0.5$ 时，格式 (2.52) 在例 I 各向异性下关于不同 $k(\theta)$ 的收敛阶：(a) $\beta = 0$; (b) $\beta = 1/9$。

Figure 2.2　Convergence rates of the SPFEM (2.52) for Case I at $t = 0.5$ with different $k(\theta)$: (a) $\beta = 0$; and (b) $\beta = 1/9$.

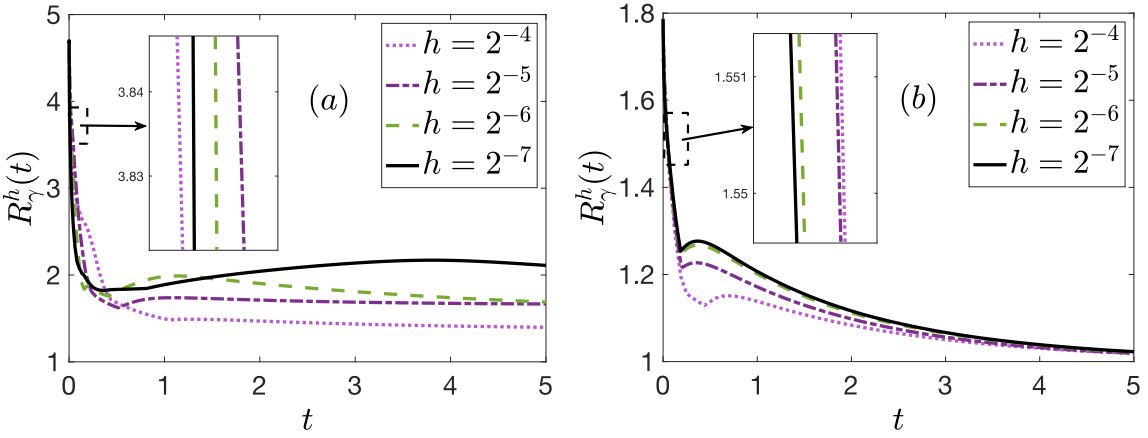


图 2.3　数值格式 (2.52) 的加权网格比：(a) $\beta = 1/9$ 的例 I 各向异性；以及 (b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。

Figure 2.3　Weighted mesh ratio of the SPFEM (2.52) with $k(\theta) = k_0(\theta)$ for: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{9}$; and (b) anisotropy in Case II with $b = -0.8$.

图 2.3 显示，加权网格比 R^h_γ 随着 $t \to +\infty$ 收敛到常数。该现象表明数值格式 (2.52) 具有**渐近准均匀** (asymptotic quasi-uniform) 的网格分布特性。

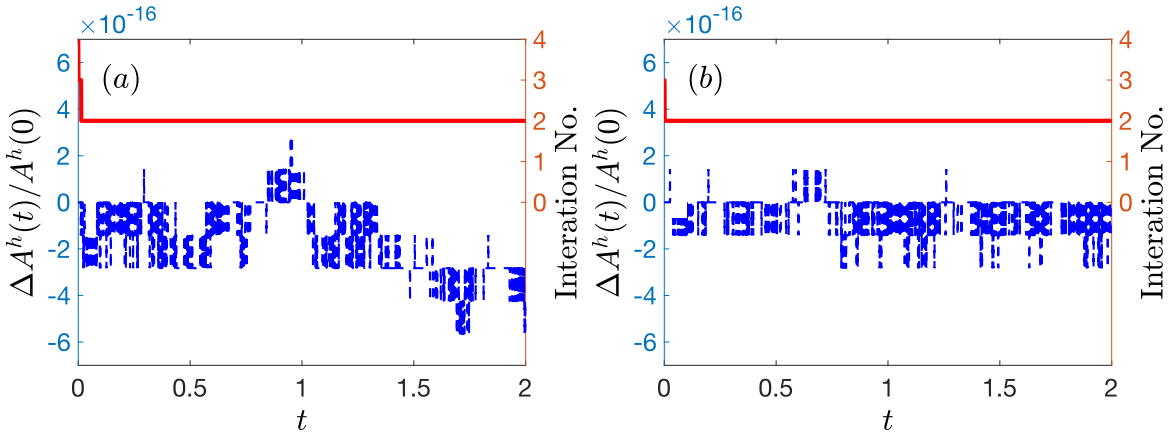


图 2.4　规范化面积损失 (蓝色虚线) 与迭代步数 (红线): (a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性; (b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。网格取为 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$。

Figure 2.4　Normalized area loss (blue dashed line) and iteration number (red line) of the SPFEM (2.52) with $k(\theta) = k_0(\theta)$ and $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$ for: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{2}$; and (b) anisotropy in Case II with $b = -0.8$.

图 2.4 给出了规范化面积损失 $\Delta A^h(t)/A^h(0)$ 以及 Newton 迭代步数在网格 $(h, \tau) = (2^{-7}, 2^{-10})$ 下随时间的变化。不同网格 h 下的规范化能量 $W^h(t)/W^h(t)$ 的时间演化则汇总在图 2.5 中。

图 2.4 – 图 2.5 中的结果表明：

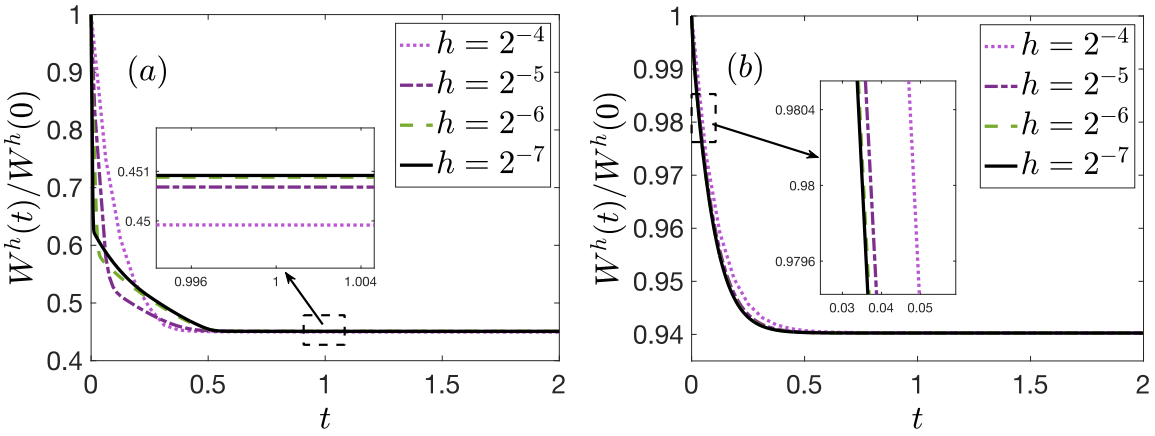


图 2.5　规范化能量：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性。

Figure 2.5　Normalized energy for: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{2}$; and (b) anisotropy in Case II with $b = -0.8$.

1. 规范化面积损失为 10^{-16} 量级，非常接近**舍入误差** (round-off error)（见图 2.4），在机器精度下验证了算法的面积守恒性。
2. Newton 迭代步数初始为 3 或 4，随后迅速下降到 2（见图 2.4)。这一结果表明，数值格式 (2.52) 可以被**高效**求解，仅需少量迭代。
3. 当表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足能量稳定条件 (2.56) 时，规范化能量是**单调递减**的（见图 2.5)。图 2.5 (a) 中结果显示，算法 (2.52) 在各向异性强度 β 取注 2.7 所言**最大值** 1/2 时，仍保持了良好的能量稳定性。同时，如图 2.5 (b) 所示，不同于 [107] 中的能量稳定参数有限元方法，数值格式 (2.52) 如注 2.8 所言，在 $b < -1/2$ 时依然无条件能量稳定。

2.5.2　二维表面扩散流的形态演化

本节中我们应用格式 (2.52) 来模拟闭曲线在各向异性表面扩散流下的形态演化。由初始形状至数值平衡态形态演化过程，请见图 2.6 – 图 2.7。

图 2.6 展示了长轴为 4、短轴为 1 的椭圆在四类不同表面能的表面扩散流的控制下的形态演化：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性，其取值达到注 2.7 中的**最大值**；(b) 取 $b = -0.8$ 的例 II 各向异性；(c) 4-重各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$ [11]；以及 $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$，这里 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$ [44]。

图 2.6 (a) – (c) 的结果表明，与 [107] 中的能量稳定参数有限元方法相比，格式 (2.52) 在更**广泛**的参数范围内表现更佳。图 2.6 (d) 则显示出格式 (2.52) 同样适用于具有**较低正则性**的全局 C^1、分段 C^2 的各向异性。

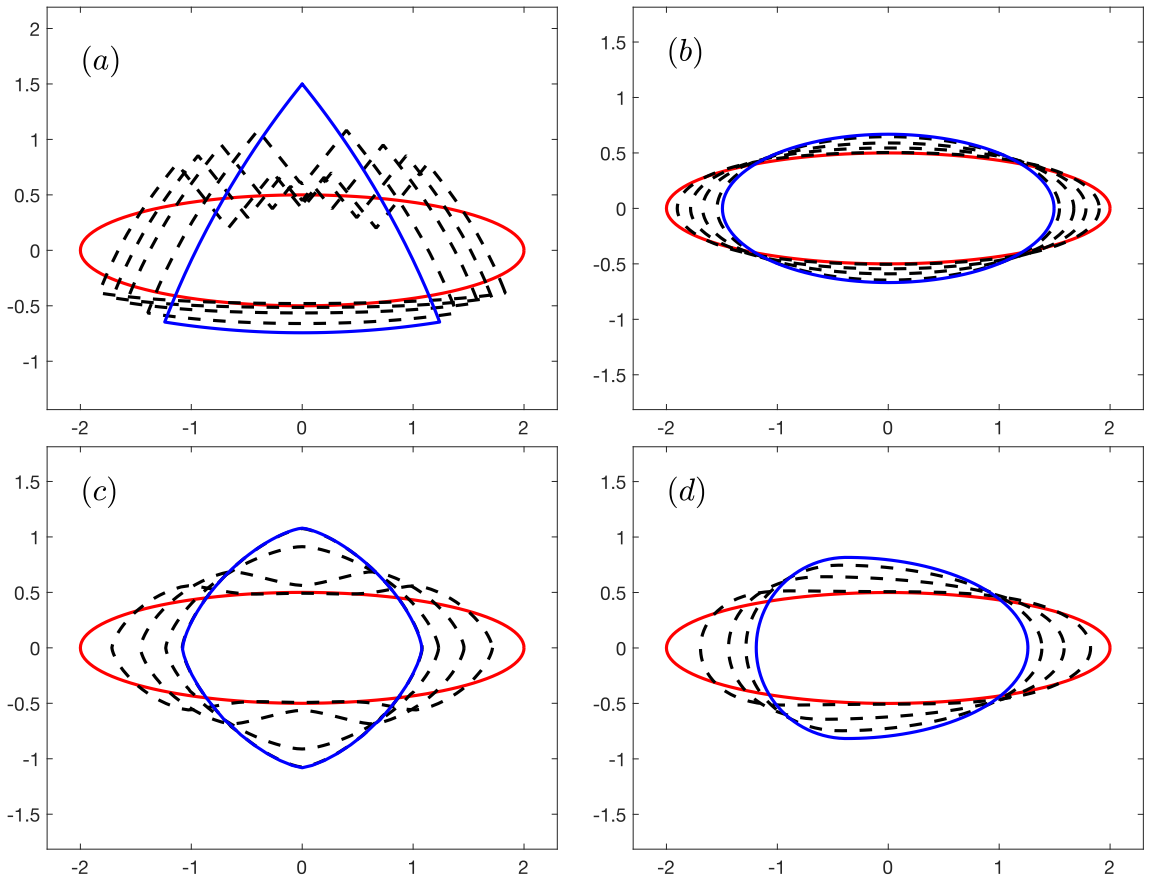


图 2.6 长轴 4、短轴 1 的椭圆在不同表面能的各向异性表面扩散流下的形态演化：(a) $\beta = 1/2$ 的例 I 各向异性；(b) $b = -0.8$ 的例 II 各向异性；(c) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$；(d) $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。红线与蓝线分别代表初始曲线和数值平衡态，黑色虚线则表示中间演化曲线。空间网格和时间步长取为 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$。

Figure 2.6 Morphological evolutions of an ellipse with major axis 4 and minor axis 1 under anisotropic surface diffusion with different surface energies: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{2}$; (b) anisotropy in Case II with $b = -0.8$; (c) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$; (d) $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$ with $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dashed lines represent the intermediate curves. The mesh size and the time step are taken as $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$.

图 2.7 还展示了四重星形曲线

$$\begin{cases} x = (1 + 0.5\cos 4\theta)\cos\theta, \\ y = (1 + 0.5\cos 4\theta)\sin\theta, \end{cases} \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{2.101}$$

以及一条逆时针旋转 $\frac{\pi}{10}$ 的椭圆在上述四类表面能下的形态演化。

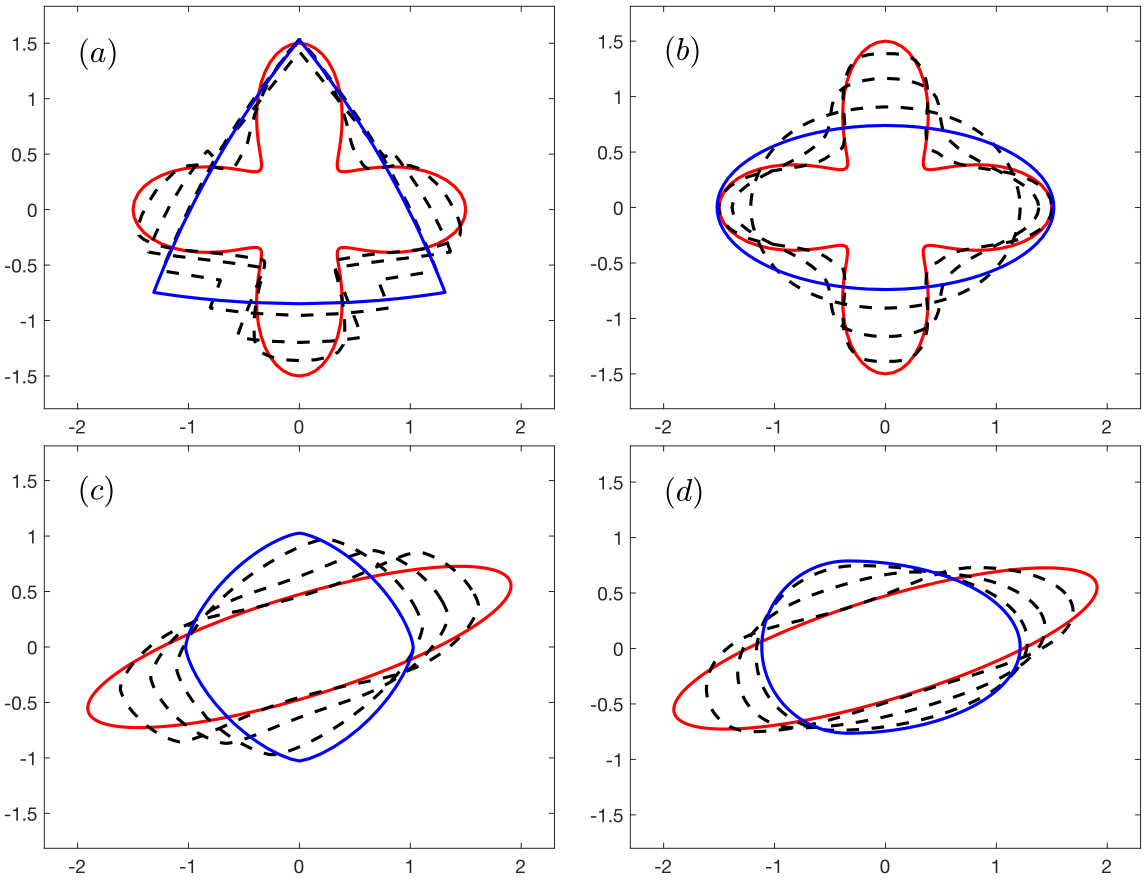


图 2.7　四重星形曲线与倾斜椭圆在不同表面能的各向异性表面扩散流下的形态演化：(a) $\beta = 1/2$ **的例 I 各向异性；(b)** $b = -0.8$ **的例 II 各向异性；(c)** $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$**；(d)** $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$**，其中** $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$**。红线与蓝线分别代表初始曲线和数值平衡态，黑色虚线则表示中间演化曲线。空间网格和时间步长取为** $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$**。**

Figure 2.7　Morphological evolutions of a four-fold star shape curve and a rotated ellipse under anisotropic surface diffusion with different surface energies: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{2}$**; (b) anisotropy in Case II with** $b = -0.8$**; (c)** $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$**; (d)** $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$ **with** $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$**. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dashed lines represent the intermediate curves. The mesh size and the time step are taken as** $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$**.**

2.6 本章总结

在本章中，我们提出了一种用于各向异性表面扩散的结构保持型稳定化参数有限元方法。该方法仅需对 $\hat{\gamma}(\theta)$ 施加温和条件 (2.56)，并可有效适用于闭曲线的各向异性演化。通过引入一种新的稳定化表面能矩阵，我们得到各向异性表面扩散的守恒形式及其弱形式。基于该弱形式，结合参数化有限元方法的空间离散与显隐 Euler 方法的时间离散，构造了一类新的稳定化参数有限元格式。为分析无条件能量稳定性，我们将 Bao 与 Li 提出的分析框架推广至 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述。该框架首先定义最小稳定化函数并证明其存在性，进而导出局部能量估计，并最终建立无条件能量稳定性。由于对表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的要求极为温和并涵盖了临界情形，该方法能够模拟更广泛的各向异性范围。此外，所提出的数值格式亦适用于整体 C^1 且分段 C^2 的各向异性，这一能力为其他参数有限元方法所不具备。

第 3 章　具最优能量稳定条件的保结构参数有限元方法

各向异几何流保结构算法的一个重要进展是在表面能矩阵中引入稳定化函数 $k(\theta)$。在此基础上，文献 [13] 建立了一个统一的分析框架，指出能量稳定性可由局部能量估计的成立所推出，其中稳定化函数 $k(\theta)$ 需大于某一有界的最小稳定化函数 $k_0(\theta)$。事实上，现有所有*结构保持 / 能量稳定参数有限元方法* [14,18,106-107,147] 以及第 2 章所述之能量稳定性证明，均可纳入该框架之中加以重述。由此可见，不同的表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 所对应的能量稳定条件，源于所选取的表面能矩阵形式及建立局部能量估计时所采用的分析技巧。

例如，在*对称化保结构参数有限元法* [9,12] 中，作者引入**对称**表面能矩阵 $\boldsymbol{Z}_k$ 并借助 Cauchy 不等式证明了稳定性条件 $\hat{\gamma}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta - \pi)$。同时，对若干 $\hat{\gamma}(\theta)$ 给出了最小稳定化函数 $k_0(\theta)$ 的估计。随后，通过引入另一类**非对称**表面能矩阵 $\boldsymbol{G}_k$，文献[13-14,18,106] 采用更为精细的分析方法，将稳定性条件改进为 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi) > 0$。在第 2 章中，我们进一步将能量稳定条件改进为 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi) \geq 0$ 且当 $3\hat{\gamma}(\theta^*)-\hat{\gamma}(\theta^*-\pi) = 0$ 要求 $\hat{\gamma}'(\theta^*) = 0$。然而，在该情形下，最小稳定化函数 $k_0(\theta)$ 的显式表达仍未得到刻画。

另一方面，文献 [14] 在针对表面能矩阵 $\boldsymbol{G}_k$ 的分析中首先证明

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) \geq 0, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T} \tag{3.1}$$

是局部能量估计成立的一个**必要**条件。受其证明思路的启发，我们在注 3.5 中进一步指出，该条件与表面能矩阵 $\boldsymbol{G}_k$ 或 $\boldsymbol{Z}_k$ 的具体构造**无关**。因此，第 2 章所给出的能量稳定性条件，除附加条件 $\hat{\gamma}'(\theta^*) = 0$ 外，已近于最优。这自然引出三个基本问题：

(i) 该必要条件是否同时也是能量稳定性的**充分**条件；

(ii) 若答案为肯定，则应选取何种表面能矩阵并配合何种分析技巧，方可达到这一**最优**能量稳定条件；

(iii) 如何给出最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 的**显式**估计。

在本章中，我们的主要目标是提出并分析了一种用于模拟二维各向异性表面扩散的*结构保持参数有限元方法*，其在满足能量稳定条件 (3.1) 的前提下，无需**任何**附加约束，即可保持**面积守恒**并同时实现无条件**能量稳定**。由此证明了必要条件 (3.1) 同时也是**充分条件**，从而在局部能量估计框架下确立了该条件的**最优性**。

本章结构如下：在第 3.1 节中，我们通过引入对称的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$，提出一类守恒形式，并据此推导各向异性表面扩散的弱形式。在第 3.2 节中，我们针对该弱形式给出参数化有限元全离散格式，并同时陈述该方法的结构保持性质。在第 3.3 节中，我们定义极小稳定化函数 $k_0(\theta)$；在假设其存在的前提下，建立局部能量估计，从而证明所提格式的能量稳定性。第 3.3.3 节给出 $k_0(\theta)$ 存在性的详细证明；此外，我们提出一条紧致估计引理，并据此导出 $k_0(\theta)$ 的全局上界。第 3.4 节包含大量数值结果，用以验证算法的精度、效率及其结构保持性质。

3.1　对称表面能量矩阵与对称化保守形式

引入以下**对称**表面能量矩阵：

定义 3.1 (对称表面能量矩阵)

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta) \coloneqq &\begin{pmatrix} \hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\theta & \hat{\gamma}'(\theta)\cos 2\theta \\ \hat{\gamma}'(\theta)\cos 2\theta & \hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\theta \end{pmatrix} \\ &+ k(\theta)\begin{pmatrix} \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix}, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}.\end{aligned} \tag{3.2}$$

此处，$k\colon 2\pi\mathbb{T} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 为可预先指定的稳定函数。

定理 3.1　利用表面能量矩阵 (3.2)，以下几何恒等式成立：

$$\mu\boldsymbol{n} + \partial_s\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right) = \boldsymbol{0}. \tag{3.3}$$

证明　注意到 $\boldsymbol{n} = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$ 与 $\boldsymbol{\tau} \coloneqq \partial_s\boldsymbol{X} = (\cos\theta, \sin\theta)^T$。类似 (2.17) 式，不难证得

$$\mu\boldsymbol{n} = -\partial_s\left(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n}\right). \tag{3.4}$$

又注意到 $\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\tau} \equiv 0$，故 $\partial_s\left(k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\right)$ 恒为零。因此，我们可将 (3.4) 写作

$$\mu\boldsymbol{n} = -\partial_s\left(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n} + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X}\right). \tag{3.5}$$

记

$$L_\theta \coloneqq \begin{pmatrix} -\sin 2\theta & \cos 2\theta \\ \cos 2\theta & \sin 2\theta \end{pmatrix}, \tag{3.6}$$

并将其作用到切向量 $\partial_s\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\tau}$ 得

$$L_\theta\partial_s\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} -\sin 2\theta & \cos 2\theta \\ \cos 2\theta & \sin 2\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix} = \boldsymbol{n}. \tag{3.7}$$

从而，

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} &= \Big(\hat{\gamma}(\theta)I_2 + \hat{\gamma}'(\theta)L_\theta + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\Big)\partial_s\boldsymbol{X} \\ &= \hat{\gamma}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n} + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\partial_s\boldsymbol{X},\end{aligned} \tag{3.8}$$

将 (3.8) 代入 (3.5) 即得所需恒等式。 ■

借助几何恒等式 (3.3)，二维各向异性表面扩散流 (2.8) 可改写为以下**对称化**保守形式：

$$\partial_t\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{n} - \partial_{ss}\mu = 0, \qquad 0 < s < L(t), \qquad t > 0, \tag{3.9a}$$

$$\mu\boldsymbol{n} + \partial_s\Big(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\Big) = \boldsymbol{0}, \tag{3.9b}$$

其中 $L(t) = \int_{\Gamma(t)} \mathrm{d}s$ 为 $\Gamma(t)$ 长度。

3.2　对称化保结构参数有限元离散

本节我们介绍一种基于保守形式 (3.9) 的参数有限元离散格式，并详细阐述其结构保持性质。

3.2.1　弱形式

与弱形式 (2.27) 推导类似，对 (3.9) 两边同时乘以测试函数 $\varphi \in H_p^1(\mathbb{I}), \boldsymbol{\omega} \in [H_p^1(\mathbb{I}]^2$ 并作分部积分，可得保守形式 (3.9) 对应的**弱形式**如下：给定初始闭曲线 $\Gamma(0) = \boldsymbol{X}(\cdot,0) = \boldsymbol{X}_0 \in [H_p^1(\mathbb{I})]^2$，求解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t), \mu(\cdot,t)) \in [H_p^1(\mathbb{I})]^2 \times H_p^1(\mathbb{I})$ 满足

$$\Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}, \varphi\Big)_{\Gamma(t)} + \Big(\partial_s\mu, \partial_s\varphi\Big)_{\Gamma(t)} = 0, \qquad \forall\varphi \in H_p^1(\mathbb{I}), \tag{3.10a}$$

$$\Big(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)} - \Big(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}, \partial_s\boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)} = 0, \qquad \forall\boldsymbol{\omega} \in [H_p^1(\mathbb{I})]^2. \tag{3.10b}$$

注 3.1 表面能量矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$ 可通过一一对应 $\boldsymbol{n} \coloneqq \boldsymbol{n}(\theta) = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$ 转化为 *[9]* 中的矩阵 $\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n})$。

命题 3.1 (面积守恒与能量耗散) 设 $\Gamma(t)$ 由弱形式 (3.10) 的解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t), \mu(\cdot,t))$ 确定，则其所围面积 $A(t)$ 是**守恒**的且总自由能 $W(t)$ 是**耗散**的，即

$$A(t) \equiv A(0), \qquad W(t) \le W(t_1) \le W(0), \qquad \forall t \ge t_1 \ge 0. \tag{3.11}$$

这里 $A(t), W(t)$ 定义请见 (2.28)。

命题 3.1 的证明与命题 2.1 类似，此处略去相关细节。

3.2.2　全离散格式

设 τ 为一致时间步长，记 $\Gamma^m = \boldsymbol{X}^m(\cdot)$ 为 $\Gamma(t_m = m\tau)$ 之近似。基于弱形式 (3.10)，各向异性表面扩散流 (2.8) 的**对称化**保结构参数有限元全离散格式可叙之如下：对给定初始曲线 $\Gamma^0 = \boldsymbol{X}^0(\cdot) \in [\mathbb{K}_p^h]^2$，求解 $\left(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot), \mu^{m+1}(\cdot)\right) \in [\mathbb{K}_p^h]^2 \times \mathbb{K}_p^h$，$m = 0, 1, 2, \ldots$ 使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\partial_s \mu^{m+1}, \partial_s \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}_p^h, \tag{3.12a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}_p^h]^2, \tag{3.12b}$$

其中

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\left(\partial_s \boldsymbol{X}^m + \partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}\right)^\perp = -\frac{1}{2|\partial_\rho \boldsymbol{X}^m|}\left(\partial_\rho \boldsymbol{X}^m + \partial_\rho \boldsymbol{X}^{m+1}\right)^\perp. \tag{3.13}$$

相关离散几何量及算子的定义参见 (2.43) – (2.47)。

注 3.2 弱形式 (3.9) 的空间半离散与 (2.48) 类似，只需修改对应的表面能矩阵即可。同样地，其具有面积守恒和能量耗散性质。

3.2.3　结构保持

记 A^m, W^m 分别为离散曲线 Γ^m 所围面积和总自由能，其定义参见 (2.55)。

定理 3.2 (结构保持)　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足**最优能量稳定条件** (3.1)。格式 (3.12) **面积守恒**，且对充分大之 $k(\theta)$ 无条件**能量耗散**，即

$$A^{m+1} = A^m = \cdots = A^0, \qquad W^{m+1} \le W^m \le \cdots \le W^0, \qquad \forall m \ge 0. \tag{3.14}$$

面积守恒的证明与定理 2.2 相同，能量耗散的详细证明将在下一节给出。

注 3.3 若采用 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述，格式 (3.12) 可转化为 *[9]* 中的保结构参数有限元方法。与 *[9]* 中结果相比，定理 *3.2* 显著改进了原有的能量稳定条件 $\gamma(\boldsymbol{n}) = \gamma(-\boldsymbol{n})$ 或 $\hat{\gamma}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta - \pi)$。基于 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述的分析表明，对称化保结构参数有限元格式所需的对称条件 $\hat{\gamma}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta - \pi)$ 可在无需附加任何假设的情况下改进到最优条件 (3.1)。

3.3　无条件能量稳定性之证明

引入以下辅助函数

$$P_\alpha(\phi, \theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\phi + \alpha \sin^2 \phi, \tag{3.15a}$$

$$Q(\phi, \theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta - \phi) + \hat{\gamma}(\theta)\cos\phi - \hat{\gamma}'(\theta)\sin\phi, \tag{3.15b}$$

则**最小稳定函数**定义为

$$k_0(\theta) \coloneqq \inf\left\{\alpha \geq 0 \mid 4\hat{\gamma}(\theta)P_\alpha(\phi,\theta) \geq Q^2(\phi,\theta),\ \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}\right\}. \tag{3.16}$$

下述定理保证了 $k_0(\theta)$ 的存在性，并给出了一个**全局**上界估计：

定理 3.3　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足条件 (3.1)，则如 (3.16) 定义之最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 是**良定**的。更进一步地，有如下估计：

$$k_0(\theta) \leq \frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)}\left[A^2(\theta) + 4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta) + 4|\hat{\gamma}'(\theta)|^2\right] < \infty, \tag{3.17}$$

其中

$$A(\theta) \coloneqq \frac{\pi^2}{8}\left(5\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''| + 5|\hat{\gamma}'(\theta)| + \hat{\gamma}(\theta)\right). \tag{3.18}$$

定理 3.3 的证明详见 3.3.3 节，此处暂按下不表。

注 3.4 *在以往研究中，最小稳定函数的存在性通常依赖于开覆盖定理 [13-14,147]，故而缺乏全局估计。其结果是，在数值计算中往往需要先求解一个优化问题以获得 $k_0(\theta)$ 的近似值。定理 3.3 首次给出了 $k_0(\theta)$ 的全局估计，从而在实际应用中无需再提前计算其近似值。*

3.3.1　再论局部能量估计

引理 3.1 (局部能量估计)　对任意 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^2\backslash\{\boldsymbol{0}\}$，命 $\boldsymbol{p} = |\boldsymbol{p}|(\cos\varphi,\sin\varphi)^T, \boldsymbol{q} = |\boldsymbol{q}|(\cos\theta,\sin\theta)^T$，则对充分大之 $k(\theta)$，

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}) \geq \hat{\gamma}(\varphi)|\boldsymbol{p}| - \hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{q}|. \tag{3.19}$$

证明　回顾 (3.2) 中 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$ 之定义，

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{p} &= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\\ &= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}'(\theta)\sin 2(\theta-\varphi) + k(\theta)\sin^2(\theta-\varphi)\right)\\ &= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}P_k(\theta-\varphi,\theta).\end{aligned} \tag{3.20}$$

以及

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{q} &= |\boldsymbol{p}|\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}\\ &= |\boldsymbol{p}|\left(\hat{\gamma}(\theta)\cos(\theta-\varphi) - \hat{\gamma}'(\theta)\sin(\theta-\varphi)\right)\\ &= |\boldsymbol{p}|\left(Q(\theta-\varphi,\theta) - \hat{\gamma}(\varphi)\right).\end{aligned} \tag{3.21}$$

由定理 3.3 可知：对任意 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$，有 $4\hat{\gamma}(\theta)P_k(\theta-\varphi,\theta)\geq Q^2(\theta-\varphi,\theta)$。因此，

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})&\geq\frac{|\boldsymbol{p}|^2}{4\hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{q}|}Q^2(\theta-\varphi,\theta)-|\boldsymbol{p}|Q(\theta-\varphi,\theta)+|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\varphi)\\&\geq|\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\varphi)-|\boldsymbol{q}|\hat{\gamma}(\theta).\end{aligned}\tag{3.22}$$

最后的不等式来自于 $\frac{1}{4a}t^2-t\geq -a,\ \forall t\in\mathbb{R},a>0$。 ■

注 3.5 在 (3.19) 中置 $\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{q}$，即 $\theta=\varphi+\pi,|\boldsymbol{p}|=|\boldsymbol{q}|$。由局部能量估计 (3.19) 可得 $2\hat{\gamma}(\theta)\geq\hat{\gamma}(\theta-\pi)-\hat{\gamma}(\theta)$。这恰好是条件 (3.1)。这个断言可以推广至任意满足 $\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\end{pmatrix}\hat{\boldsymbol{Z}}(\theta)\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}=\hat{\gamma}(\theta)$ 的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}(\theta)$，如注 2.10 中所言 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$。因此在基于局部能量估计的框架下，能量稳定条件 (3.1) 已是最优，无法进一步改进。

3.3.2　无条件能量稳定性

证明　取充分大之 $k(\theta)$ 使得 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$。

对任意 $m\geq 0$，我们有

$$\begin{aligned}&\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\\&=\sum_{j=1}^N\left[|\boldsymbol{h}_j^m|\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta_j^m)\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right)\cdot\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right]\\&=\sum_{j=1}^N\left[\frac{1}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta_j^m)\boldsymbol{h}_j^{m+1}\right)\cdot(\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m)\right].\end{aligned}\tag{3.23}$$

结合局部能量估计 (3.19) 与 (3.23) 可得

$$\begin{aligned}&\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\\&\geq\sum_{j=1}^N\left[|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)\right]\\&=\sum_{j=1}^N|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-\sum_{j=1}^N|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)=W^{m+1}-W^m.\end{aligned}\tag{3.24}$$

在 (3.12) 中取 $\varphi^h=\mu^{m+1},\boldsymbol{\omega}^h=\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m$，

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h&=\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}},\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m\right)_{\Gamma^m}^h\\&=-\tau\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h.\end{aligned}\tag{3.25}$$

将上式与 (3.24) 联立可得

$$W^{m+1}-W^m\leq-\tau\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h\leq 0,\qquad\forall m\geq 0.\tag{3.26}$$

明欲所证。 ■

3.3.3 最小稳定函数的全局估计

为在最优条件 (3.1) 下证明 $k_0(\theta)$ 存在性，需要对 $Q(\phi,\theta)$ 做一个非常精细的估计。与过往研究 [13,147] 中的其他估计相比，此估计显式利用了 $P_\alpha(\phi,\theta)$ 和 $\hat{\gamma}(\theta)$。引理 3.2 给出了这一关键估计，是我们建立存在性结果的核心步骤。

注 3.6 在 *[147]* 与 *2.4.4* 节中，$Q(\phi,\theta)$ 仅被 $\hat{\gamma}(\theta)$ 所控制；而在 *[13]* 中，作者将 $P_\alpha(\phi,\theta)$ 分别与 $Q(\phi,\theta),\hat{\gamma}(\theta)$ 耦合来建立所需估计。因此，其结果均相对不够精细。我们在此将 $P_\alpha(\phi,\theta),\hat{\gamma}(\theta)$ 与 $Q(\phi,\theta)$ 显式结合，从而获得更为细致的估计。

引理 3.2 设 f 是 $2\pi\mathbb{T}$ 上一 C^2 函数。对任意正常数 $C \geq \sup_{2\pi\mathbb{T}} |f''|$，

$$|f'(x)y| \leq f(x) + \frac{1}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}}|f''|\,y^2 \leq f(x) + \frac{C}{2}y^2, \qquad \forall x, y \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{3.27}$$

证明 由中值定理及 f 的非负性得：对于任意 $C \geq \sup_{2\pi\mathbb{T}} |f''|$，

$$0 \leq f(x+y) \leq f(x) + f'(x)y + \frac{C}{2}y^2, \qquad \forall x, y \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{3.28}$$

即 $-f'(x)y \leq f(x) + \frac{C}{2}y^2$。将 y 替换为 $-y$，同理可得：$f'(x)y \leq f(x) + \frac{C}{2}y^2$。 ■

注 3.7 引理 *3.2* 在控制 $Q(\phi,\theta)$ 以及分析 $\phi = \pi$ 时的临界情形起到了关键作用。在 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述下，获得类似不等式相当困难。

注 3.8 若试图在 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述下建立类似引理 *3.2* 的不等式，将会出现许多棘手困难。假设对 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 在某点 $\boldsymbol{n}_0$ 作展开，由于其 *Hessian* 矩阵 $\boldsymbol{H}_\gamma$ 在 $\mathbf{0}$ 处无定义，故当连接 $\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}_0$ 的直线经过原点时，$\boldsymbol{H}_\gamma$ 将趋于无界。这一现象将使得其梯度 $\nabla\gamma(\boldsymbol{n})$ 无法得到有效控制。即便能够获得类似估计，其系数也将依赖于 $\boldsymbol{n}_0$，而不像 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述中可以取作绝对常数。

引理 3.3 ($Q(\phi,\theta)$ **之估计**) 设最优能量稳定条件 (3.1) 成立。对如 (3.15b) 定义之 $Q(\phi,\theta)$，有

$$|Q(\phi,\theta)| \leq |P_{A(\theta)}(\phi,\theta) + \hat{\gamma}(\theta)|, \qquad \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{3.29}$$

其中 $A(\theta)$ 定义请见 (3.18) 。

证明　首先，我们注意到 $Q(\phi,\theta)$ 的下界估计可以如下得到：

$$\begin{aligned} Q(\phi,\theta)+P_0(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta) &= \hat{\gamma}(\theta-\phi)+\hat{\gamma}(\theta)(2+\cos\phi)-\hat{\gamma}'(\theta)(\sin\phi+\sin 2\phi) \\ &\geq \hat{\gamma}(\theta-\phi)+\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}'(\theta)(1+2\cos\phi)\sin\phi \\ &\geq \hat{\gamma}(\theta)-3|\hat{\gamma}'(\theta)||\sin\phi| \\ &\geq -\frac{9}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|\,\sin^2\phi, \end{aligned} \tag{3.30}$$

其中最后一个不等式来自 (3.28)。更进一步，利用 $A(\theta)\geq\frac{9}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|$ 与 $P_{A(\theta)}(\phi,\theta)=P_0(\phi,\theta)+A(\theta)\sin^2\phi$，可得

$$Q(\phi,\theta)\geq -P_{A(\theta)}(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta),\qquad \forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}. \tag{3.31}$$

对不等式另一方向，首先注意到 $Q(0,\theta)-P_0(0,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)=0$ 以及 $Q(\pi,\theta)-P_0(\pi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)=-(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi))\leq 0$。因此，我们将分为如下两种情形：

情形 1：$|\phi|\leq\frac{\pi}{2}$。在 $[\phi,0]$ 上对 $Q(\cdot,\theta)-P_0(\cdot,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)$ 应用中值定理可知：存在 $\xi\in[\phi,0],|\xi|\leq\frac{\pi}{2}$ 使得

$$\begin{aligned} &Q(\phi,\theta)-P_0(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta) \\ &=\frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}''(\theta-\xi)-\hat{\gamma}(\theta)\cos\xi+\hat{\gamma}'(\theta)\sin\xi-4\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\xi\right)\phi^2 \\ &\leq\frac{1}{2}\left(\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|+5|\hat{\gamma}'(\theta)|+\hat{\gamma}(\theta)\right)\left(\frac{\pi^2}{4}\sin^2\phi\right) \\ &\leq A(\theta)\sin^2\phi. \end{aligned} \tag{3.32}$$

情形 2：$|\phi-\pi|<\frac{\pi}{2}$。由条件 (3.1) 知 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)$ 为一非负 C^2 函数，从而对其应用引理 3.2 可得：

$$\begin{aligned} &|(3\hat{\gamma}'(\theta)-\hat{\gamma}'(\theta-\pi))(\phi-\pi)| \\ &\leq(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi))+\frac{\sup_{\theta\in 2\pi\mathbb{T}}|3\hat{\gamma}''(\theta)-\hat{\gamma}''(\theta-\pi)|}{2}(\phi-\pi)^2 \\ &\leq(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi))+2\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|(\phi-\pi)^2,\quad \forall|\phi-\pi|<\frac{\pi}{2}. \end{aligned} \tag{3.33}$$

在 $[\phi,\pi]$ 上对 $Q(\cdot,\theta)-P_0(\cdot,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)$ 应用中值定理可知：存在 $\xi\in[\phi,\pi],|\xi-\pi|<\frac{\pi}{2}$

使得

$$\begin{aligned}
&Q(\phi,\theta)-P_0(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)\\
&=-\left(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\right)+\left(3\hat{\gamma}'(\theta)-\hat{\gamma}'(\theta-\pi)\right)(\phi-\pi)\\
&\quad+\frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}''(\theta-\xi)-\hat{\gamma}(\theta)\cos\xi+\hat{\gamma}'(\theta)\sin\xi-4\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\xi\right)(\phi-\pi)^2\\
&\le-\left(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\right)+\left(3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\right)\\
&\quad+\frac{1}{2}\left(\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|+5|\hat{\gamma}'(\theta)|+\hat{\gamma}(\theta)+4\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|\right)(\phi-\pi)^2\\
&\le\frac{\pi^2}{8}\left(5\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|+5|\hat{\gamma}'(\theta)|+\hat{\gamma}(\theta)\right)\sin^2(\phi-\pi)=A(\theta)\sin^2\phi.
\end{aligned}\tag{3.34}$$

结合 (3.32) 与 (3.34) 立得

$$Q(\phi,\theta)\le P_0(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta)+A(\theta)\sin^2\phi=P_{A(\theta)}(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta),\quad\forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}.\tag{3.35}$$

证毕。 ■

有了引理 3.3 中的精细估计相助，我们现在来证明定理 3.3。

证明　(最小稳定函数的存在性)

由引理 3.3，

$$Q^2(\phi,\theta)\le\left(P_{A(\theta)}(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta)\right)^2.\tag{3.36}$$

回顾 (3.15a) 中 $P_\alpha(\phi,\theta)$ 定义，我们有 $P_\alpha(\phi,\theta)=P_0(\phi,\theta)+\alpha\sin^2\phi$，从而

$$\begin{aligned}
&4\hat{\gamma}(\theta)P_\alpha(\phi,\theta)-Q^2(\phi,\theta)\\
&\ge4\hat{\gamma}(\theta)P_{A(\theta)}(\phi,\theta)-\left(P_{A(\theta)}(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta)\right)^2+4\hat{\gamma}(\theta)\left(\alpha-A(\theta)\right)\sin^2\phi\\
&=-\left(P_{A(\theta)}(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)\right)^2+4\hat{\gamma}(\theta)\left(\alpha-A(\theta)\right)\sin^2\phi\\
&=\left(-\left(-2\hat{\gamma}'(\theta)\cos\phi+A(\theta)\sin\phi\right)^2+4\hat{\gamma}(\theta)\left(\alpha-A(\theta)\right)\right)\sin^2\phi\\
&\ge\left[4\hat{\gamma}(\theta)\alpha-A^2(\theta)-4|\hat{\gamma}'(\theta)|^2-4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta)\right]\sin^2\phi.
\end{aligned}\tag{3.37}$$

最后的不等式来自于事实 $|a\cos\phi+b\sin\phi|\le\sqrt{a^2+b^2}$。

因此，对任意 $\alpha\ge\frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)}\left[A^2(\theta)+4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta)+4|\hat{\gamma}'(\theta)|^2\right]$，我们有

$$4\hat{\gamma}(\theta)P_\alpha(\phi,\theta)-Q^2(\phi,\theta)\ge0,\qquad\forall\phi\in2\pi\mathbb{T}.\tag{3.38}$$

由此可得

$$k_0(\theta)\le\frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)}\left[A^2(\theta)+4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta)+4|\hat{\gamma}'(\theta)|^2\right]<\infty.\tag{3.39}$$

■

3.4　数值实验

在本节中，我们通过数值实验来展示格式 (3.12) 的优越性能。具体而言，我们首先通过**收敛性**测试说明该方法在效率与精度方面的表现；随后验证该方法的结构保持性，即**面积守恒**与**无条件能量稳定**。

在数值测试中，主要考虑以下两种各向异性表面能量：

- 例 I：$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 3\theta$，其中 $|\beta| < 1$。当 $|\beta| < \frac{1}{8}$ 时，该表面能为**弱各向异**的；反之，则为**强各向异**的。
- 例 II: $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\,\mathrm{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。

由于格式 (3.12) 形式上具有**空间二阶**、**时间一阶**的收敛阶。因此，在无特别说明的情况下，本节统一选取时间步长 $\tau = h^2$。**数值误差** e^h、**加权网格比** R_γ^h、**规范化面积损失及能量**定义，请见 (2.97)–(2.100)。由于精确解无法解析获得，我们采用格式 (3.12) 在精细网格 $h_e = 2^{-8}, \tau_e = 2^{-16}$ 下对 $\Gamma(t = t_m)$ 进行数值近似。

非线性格式 (3.12) 使用类似附录 A 中的 Newton 法求解，其容差设置为 tol $= 10^{-12}$。

我们首先验证定理 3.3 中给出的 $k_0(\theta)$ 的上界，参见图 3.1。其中，$K(\theta)$ 记式 (3.17) 所给出的上界。

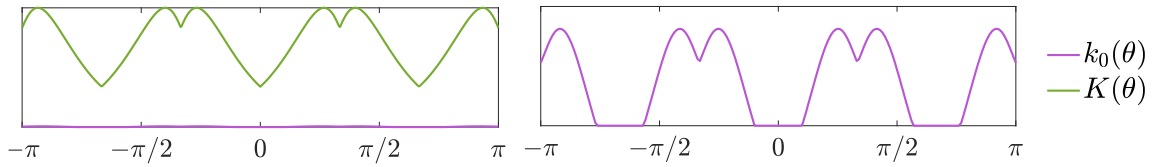


图 3.1　例 I 在 $\beta = \frac{1}{2}$ 下的最小稳定函数 $k_0(\theta)$ 及其在式 (3.17) 中给出的上界 $K(\theta)$。
Figure 3.1　Minimal stabilizing function $k_0(\theta)$ and upper bound $K(\theta)$ in (3.17) for Case I with $\beta = \frac{1}{2}$.

3.4.1　收敛阶与结构保持性

由图 3.2–图 3.5 可以观察到以下结论：

- 格式 (3.12) 在空间上具有**二阶**精度、在时间上具有**一阶**精度，见图 3.2。
- 规范化面积损失约为 10^{-15}，与**舍入误差**量级一致，见图 3.3。因此，面积可认为在**机器精度**范围内得到保持。
- Newton 迭代次数在极短时间内下降至 2，并最终降至 1。这一现象表明，该全隐格式在计算上具有**较高**的求解效率，见图 3.3。

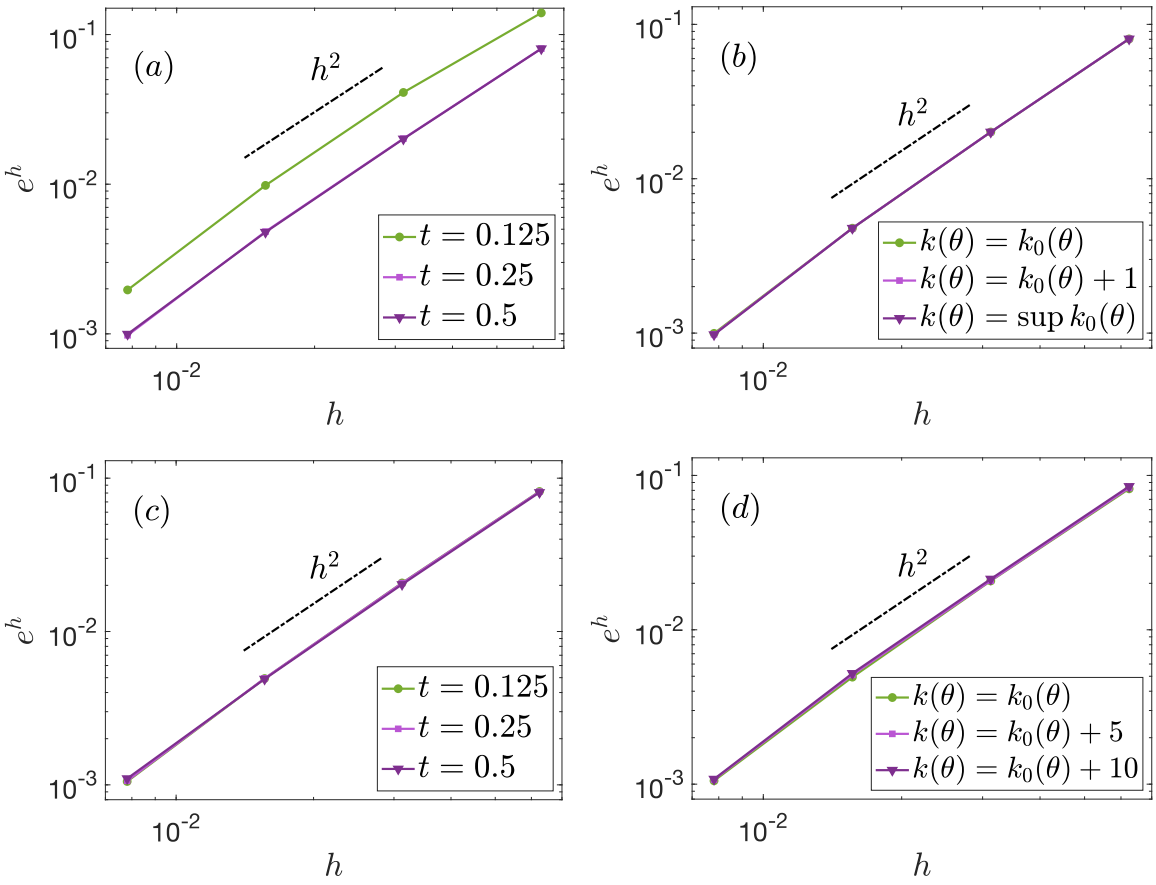


图 3.2　例 I 在 $\beta = 1/9$ 下 SP-PFEM (3.12) 的收敛阶：(a) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时在不同时刻的结果；(b) 在 $t = 0.5$ 时取不同 $k(\theta)$ 的结果；以及例 II 下的对应结果：(c) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 时在不同时刻的结果；(d) 在 $t = 0.5$ 时取不同 $k(\theta)$ 的结果。

Figure 3.2　Convergence rates of the SP-PFEM (3.12) for Case I with $\beta = 1/9$ (a) at different times with $k(\theta) = k_0(\theta)$, and (b) at $t = 0.5$ with different $k(\theta)$; and for Case II (c) at different times with $k(\theta) = k_0(\theta)$, and (d) at $t = 0.5$ with different $k(\theta)$.

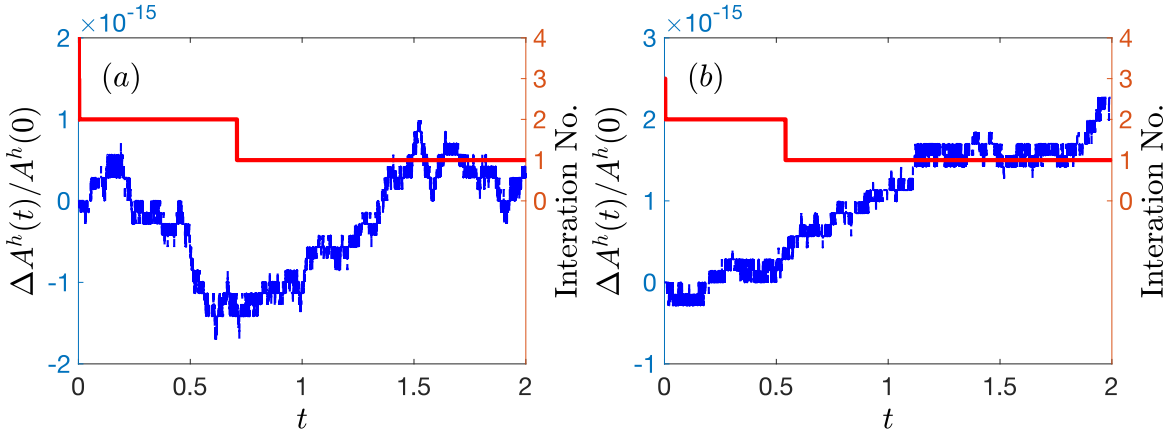


图 3.3　在 $k(\theta)=k_0(\theta)$、$h=2^{-6}$、$\tau=2^{-12}$ 的条件下，格式 (3.12) 的规范化面积损失（蓝色虚线）及迭代次数（红色实线）：(a) 例 I，其中 $\beta=1/2$；(b) 例 II。

Figure 3.3　Normalized area loss (blue dash line) and iteration number (red line) of the SP-PFEM (3.12) with $k(\theta)=k_0(\theta)$ and $h=2^{-6}, \tau=2^{-12}$ for (a) Case I with $\beta=1/2$; and for (b) Case II.

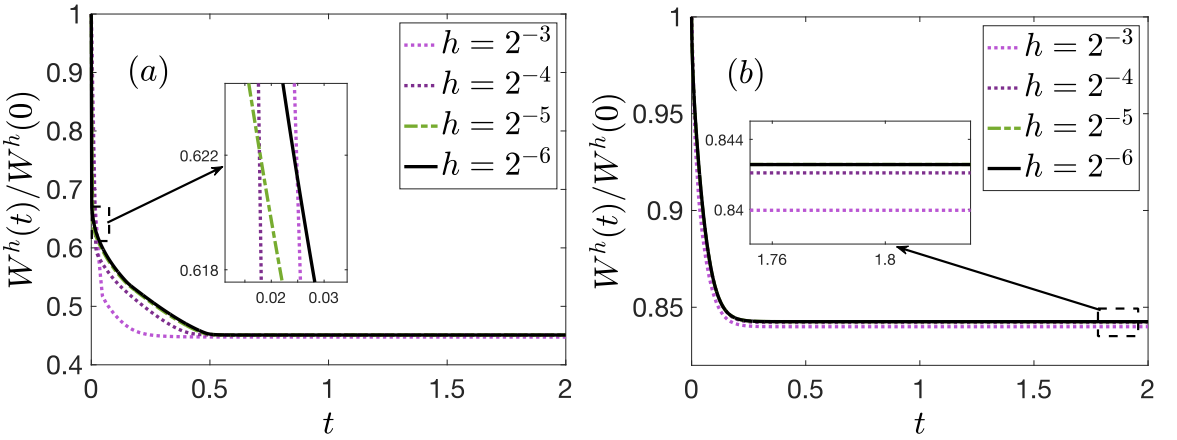


图 3.4　在 $k(\theta)=k_0(\theta)$ 下，格式 (3.12) 的规范化能量：(a) 例 I，其中 $\beta=1/2$；(b) 例 II。

Figure 3.4　Normalized energy of the SP-PFEM (3.12) with $k(\theta)=k_0(\theta)$ for (a) Case I with $\beta=1/2$; and for (b) Case II.

- 当 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足条件 (3.1) 时，规范化能量呈**单调递减**，见图 3.4。对于例 I，条件 (3.1) 要求 $0 < \beta \le \frac{1}{2}$，图 3.4 (a) 表明，当 β 取其**最大值**时，格式 (3.12) 仍能保证能量耗散，从而验证了定理 3.2 的结论。不同于文献 [9] 中的结果，格式 (3.12) 在**非对称**表面能情形下同样表现出无条件能量稳定性。
- 加权网格比 $R_\gamma^h(t)$ 在 $t \to +\infty$ 时趋于**常数**，这表明格式 (3.12) 的网格分布在**渐近**意义下呈现**准均匀性**，见图 3.5。

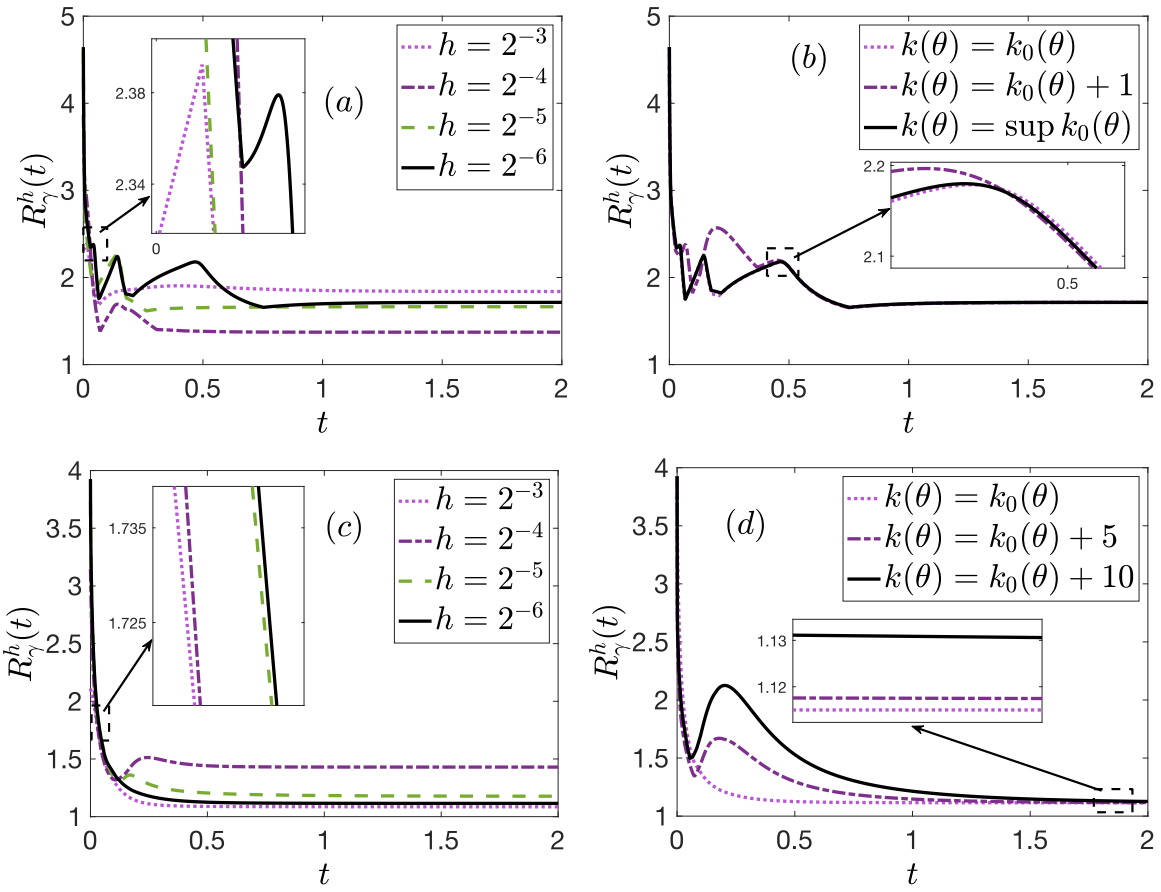


图 3.5　例 I 在 $\beta = 1/9$ 下，格式 (3.12) 的加权网格比：(a) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$，在不同 h 下的结果；(b) 取 $h = 2^{-6}$，在不同 $k(\theta)$ 下的结果。例 II 的对应结果见 (c) 与 (d)：(c) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$，在不同 h 下的结果；(d) 取 $h = 2^{-6}$，在不同 $k(\theta)$ 下的结果。

Figure 3.5　Weighted mesh ratio of the SP-PFEM (3.12) for Case I with $\beta = 1/9$ is illustrated in (a) for $k(\theta) = k_0(\theta)$ with different h, and in (b) for different $k(\theta)$ with $h = 2^{-6}$; and for Case II is presented in (c) for $k(\theta) = k_0(\theta)$ with different h, and in (d) for different $k(\theta)$ with $h = 2^{-6}$.

3.4.2　二维表面扩散流的形态演化

下面我们将格式 (3.12) 应用于各向异性表面扩散作用下闭曲线形态演化的数值模拟。计算中取网格尺寸 $h = 2^{-6}$，并选用时间步长 $\tau = h^2$。

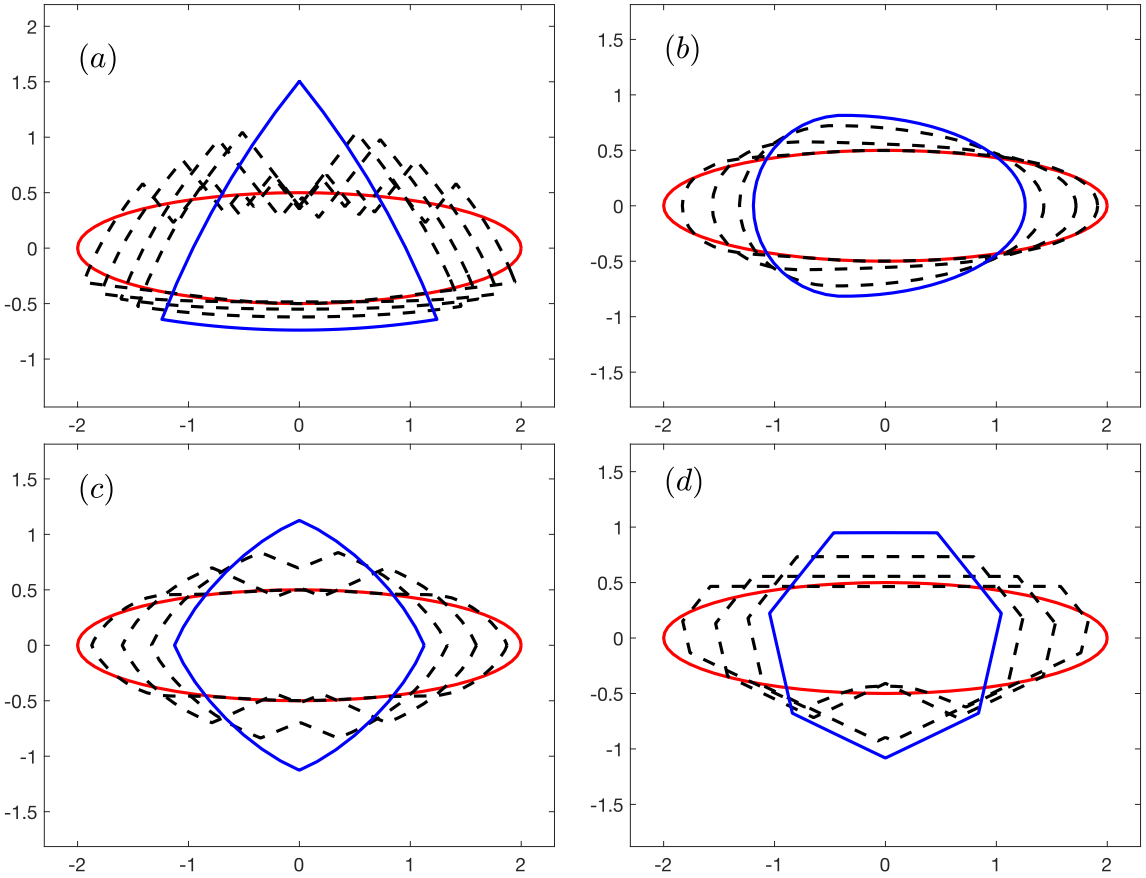


图 3.6　在不同表面能函数下，各向异性表面扩散作用中一条长轴为 4、短轴为 1 的椭圆的形态演化过程：(a) 例 I，其中 $\beta = 1/2$；(b) 例 II；(c) 四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{10}\cos 4\theta$；(d) 正则化晶体型各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \sqrt{\varepsilon^2 + (1-\varepsilon^2)\sin^2\frac{m}{2}\theta}$，其中 $\varepsilon = 0.1, m = 7$。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。

Figure 3.6　Morphological evolutions of an ellipse with major axis 4 and minor axis 1 under anisotropic surface diffusion with different surface energies: (a) Case I with $\beta = 1/2$; (b) Case II; (c) the 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{10}\cos 4\theta$; (d) the regularized crystalline anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \sqrt{\varepsilon^2 + (1-\varepsilon^2)\sin^2\frac{m}{2}\theta}$, with $\varepsilon = 0.1, m = 7$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves

图 3.6 展示了一条长轴为 4、短轴为 1 的椭圆在各向异性表面扩散作用下、对应四种不同表面能函数时的形态演化过程：

(a) 三重对称各向异性 [11]：$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{2}\cos 3\theta$；

(b) 分段椭圆各向异性 [44]：$\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\operatorname{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T \coloneqq (-\sin\theta, \cos\theta)^T$；

(c) 四重对称各向异性 [11,145]：$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{10}\cos 4\theta$；

(d) 正则化晶体型各向异性 [118]：$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \sqrt{\varepsilon^2 + (1-\varepsilon^2)\sin^2\frac{m}{2}\theta}$，其中 $\varepsilon = 0.1, m = 7$。

在上述表面能函数中，各向异性 (c) 是**对称**的，而其余情形均为**非对称**。由图 3.6 可见，与文献 [9] 中的*对称化保结构参数有限元方法*相比，格式 (3.12) 不仅适用于**对称**表面能，同样适用于**非对称**表面能。此外，图 3.6 (b) 表明，该方法在表面能函数 $\hat{\gamma}(\theta)$ **正则性较低**（即整体为 C^1、分段为 C^2）的情况下亦能有效工作，显示出其在更广泛表面能类型下的优越适用性与稳健性能。

3.5　本章总结

我们提出了一种用于二维各向异性表面扩散的结构保持型参数有限元方法，其能量稳定性的最优条件为 $3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\pi) \geq 0$。通过引入对称的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$，将各向异性表面扩散的控制方程改写为保守型弱形式。针对该弱形式，我们采用以分段线性函数进行空间离散的参数化有限元方法，并使用显隐 Euler 方法进行时间离散。所提出的数值格式在空间上为二阶精度、在时间上为一阶精度，并在全离散层面可证明地满足面积守恒。借助一条紧致估计引理，我们在条件 $3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\pi) \geq 0$ 下建立了最小稳定化函数 $k_0(\theta)$ 的一个全局上界，从而在不附加任何额外条件的情况下，显式刻画并证明最小稳定化函数 $k_0(\theta)$ 的存在性。随后，我们建立了所需的局部能量估计，从而表明当 $k(\theta) \geq k_0(\theta)$ 取值充分大时，该方法具有无条件能量稳定性。由于该条件同时也是局部能量估计成立的必要条件，因此我们的方法在该意义下是最优的，无法进一步改进。我们给出了大量数值算例以验证所提方法的效率、精度与结构保持性质。此外，在 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述下，所提方法可转化为文献 [9,102] 中的对称化参数有限元格式。我们的分析进一步表明，[9,102] 中的对称性条件亦可改进为 $3\gamma(\boldsymbol{n}) - \gamma(-\boldsymbol{n}) \geq 0$。

第 4 章　应用：二维晶体薄膜演化与固态脱湿问题

本章讨论二维晶体薄膜/晶体岛在固态条件下的形态演化。我们采用尖锐界面模型，即将薄膜边界视为随时间运动的曲线；界面运动的驱动力来自界面能的降低，而物质输运主要由沿自由表面的表面扩散承担。由于晶体表面能通常具有明显的各向异性，演化过程会常常会出现晶面化以及颈缩断裂等现象；同时，表面扩散的守恒型输运会使体系在降低能量的过程中伴随显著的几何重排与拓扑转变。

在 4.1 节中，我们通过前述方法对固态晶体薄膜在各向异性表面扩散下的演化进行数值模拟，以探索薄膜稳定性、颈缩与岛屿生成等过程，并系统考察几何尺度与各向异性强度对拓扑转变行为的影响。在 4.2 节中，我们将*结构保持参数化有限元方法*推广到材料科学中固态脱湿中开曲线的演化，对固态薄膜在强各向异性下的多重平衡态及其演化过程进行讨论。

4.1　二维晶体薄膜之演化

在各向异性表面扩散机制驱动下，晶体生长薄膜的形态学演化问题长期以来为材料科学与固态物理领域所关注 [134]。其理论与实验研究不仅深化了对界面动力学的理解，而且在异相催化 [121]、量子点制备 [64] 以及固态脱湿 [134,141] 等方向具有重要应用价值。既有研究表明 [49,90]，当岛状结构的纵横比超过某一临界阈值时，体系将失去稳定性并发生**颈缩** (pinch-off) 过程，最终裂解为若干彼此分离的子岛。

本节中，我们采用数值格式 (3.12) 对长条形薄膜在各向异性表面扩散作用下的颈缩现象进行数值模拟，以考察其演化过程及相应的拓扑转变机制。

首先，我们在四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$ 条件下，对纵横比为 50 的长薄膜的演化过程进行数值模拟。图 4.1 展示了规范化面积与规范化能量的演化过程。在该情形下，颈缩发生于 $t = 140.5$。可以观察到，当颈缩发生时，能量出现骤然**下降**，而面积仍保持**守恒**。

除薄膜的**纵横比**之外，表面能的**各向异性强度**亦在岛屿形成过程中起关键作用。为考察两者对岛屿生成行为的影响，我们在不同纵横比与不同各向异性强度参数下进行了数值实验。相应结果汇总于图 4.2–图 4.3，其中采用常见的 m-重对称各向异性形式 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos m\theta,\ m = 2, 3, 4, 6$。

对于**对称**各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos m\theta,\ m = 2, 4, 6$，1-2 个岛屿区域与 2-3 个岛屿

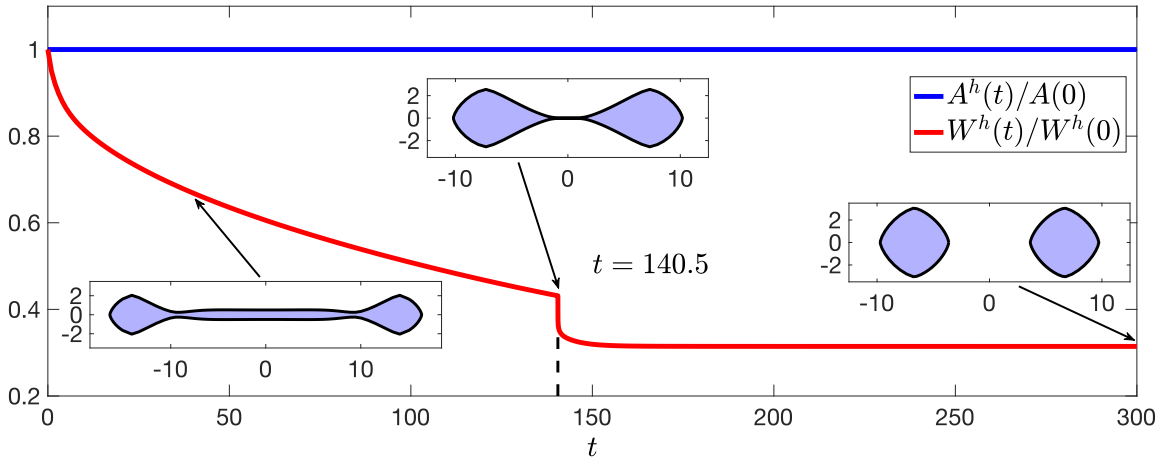


图 4.1　在四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$ 表面扩散作用下（纵横比为 50 的长薄膜）之规范化面积与规范化能量。

Figure 4.1　Normalized area and energy of a long thin film (aspect ratio of 50) governed by anisotropic surface diffusion with the 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$.

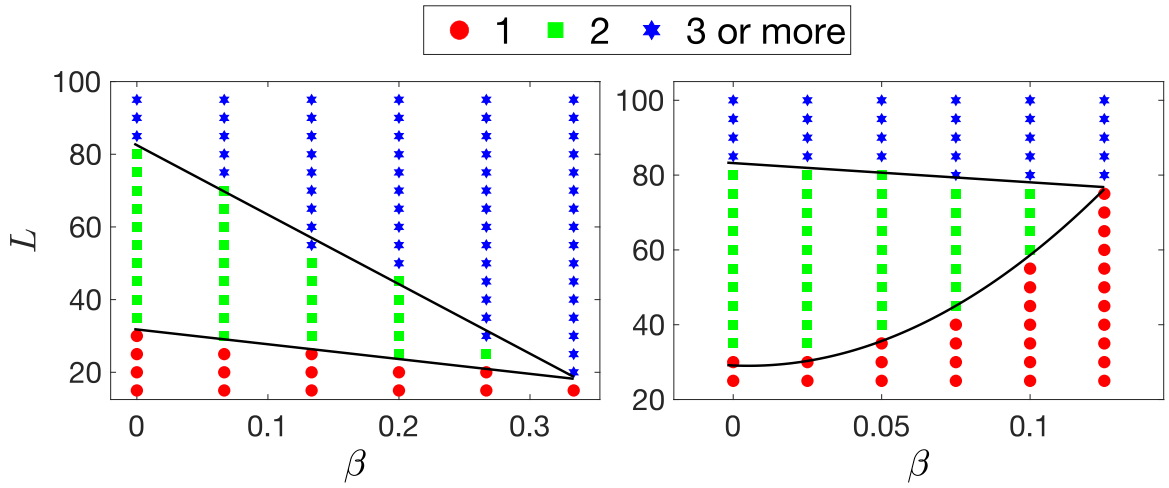


图 4.2　考察尺寸为 $2L \times 1$ 的长薄膜在颈缩后所形成岛屿数目随 L 及各向异性强度 β 的变化关系。左图对应二重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 2\theta$；右图对应三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 3\theta$。图中实线分别表示形成 $1-2$ 个岛与 $2-3$ 个岛之间的分界线。

Figure 4.2　The number of islands formed from the pinch-off of a $2L \times 1$ long thin film as a function of L and anisotropy strength β for: (left) the 2-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 2\theta$; (right) the 3-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 4\theta$. The solid lines represent the 1-2 islands and 2-3 islands boundaries.

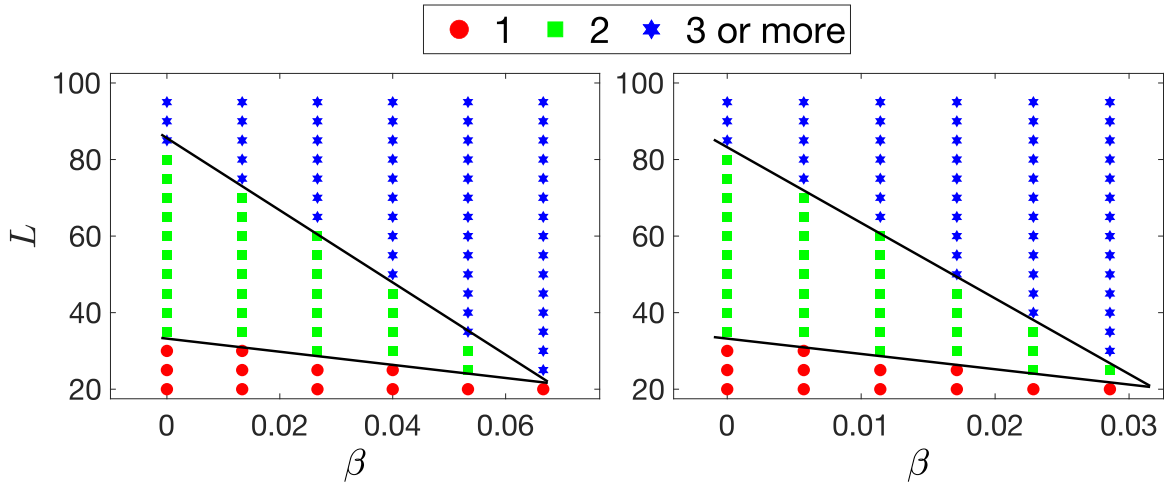


图 4.3　尺寸为 $2L\times 1$ 的长薄膜在发生颈缩后所形成岛屿数目关于 L 与各向异性强度 β 的函数关系：左图对应四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 4\theta$；右图对应六重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 4\theta$。图中实线分别表示形成 $1-2$ 个岛与 $2-3$ 个岛之间的分界线。

Figure 4.3　The number of islands formed from the pinch-off of a $2L\times 1$ long thin film as a function of L and anisotropy strength β for: (left) the 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 4\theta$; (right) the 6-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 6\theta$. The solid lines represent the 1-2 islands and 2-3 islands boundaries.

区域之间的分界曲线可由如下**线性**拟合关系 $L=p(m)\beta+q(m)$ 近似刻画:

- 1-2 个岛屿分界：$p(m)=-12.23m^2+8.04m-7.86,\ q(m)=0.36m+31.31$;
- 2-3 个岛屿分界：$p(m)=-35.07m^2-165.40m+279.82,\ q(m)=0.18m+83.06$.

数值结果表明，在给定纵横比的条件下，**增大**对称表面能的各向异性强度将促进**更多**岛屿的形成。

对于**非对称**各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 3\theta$，我们采用二次曲线拟合 $L=3285.70\beta^2-33.57\beta+29.11$ 来刻画 1–2 个岛屿区域的分界，并采用线性拟合 $L=-51.43\beta+83.21$ 来确定 2–3 个岛屿区域的分界。数值结果表明，在小纵横比情形下，随着各向异性强度的**增加**，体系反而趋于形成**较少**的岛屿。此种行为可归因于表面能的**非对称性**。对比两组模拟结果可见，在长条薄膜的演化过程中，对称与非对称各向异性可能导致显著**不同**的形态演化特征。

最后，我们在图 4.4 与图 4.5 中给出了超细薄膜的形态演化过程。如图 4.4 所示，由于表面能的**非对称性**，薄膜上下两侧呈现出明显不同的演化行为：上表面形成显著的**峰谷**结构，而下表面则相对平滑且近于**平坦**。图 4.5 表明，在相同纵横比条件下，相较于**各向同性**情形，**对称**各向异性表面能更有利于形成**更多**的岛屿。

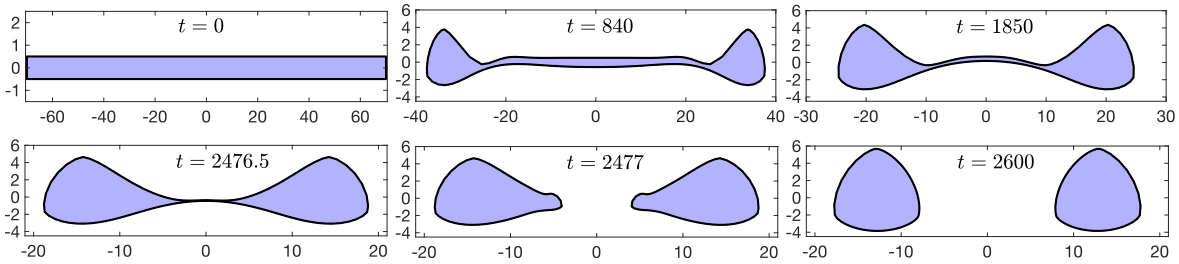


图 4.4　尺寸为 140×1 的薄膜在三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$ 作用下，由各向异性表面扩散所驱动的演化过程在不同时刻的形态快照。

Figure 4.4　Snapshots of evolutions of a 140×1 thin film under the anisotropic surface diffusion with 3-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$.

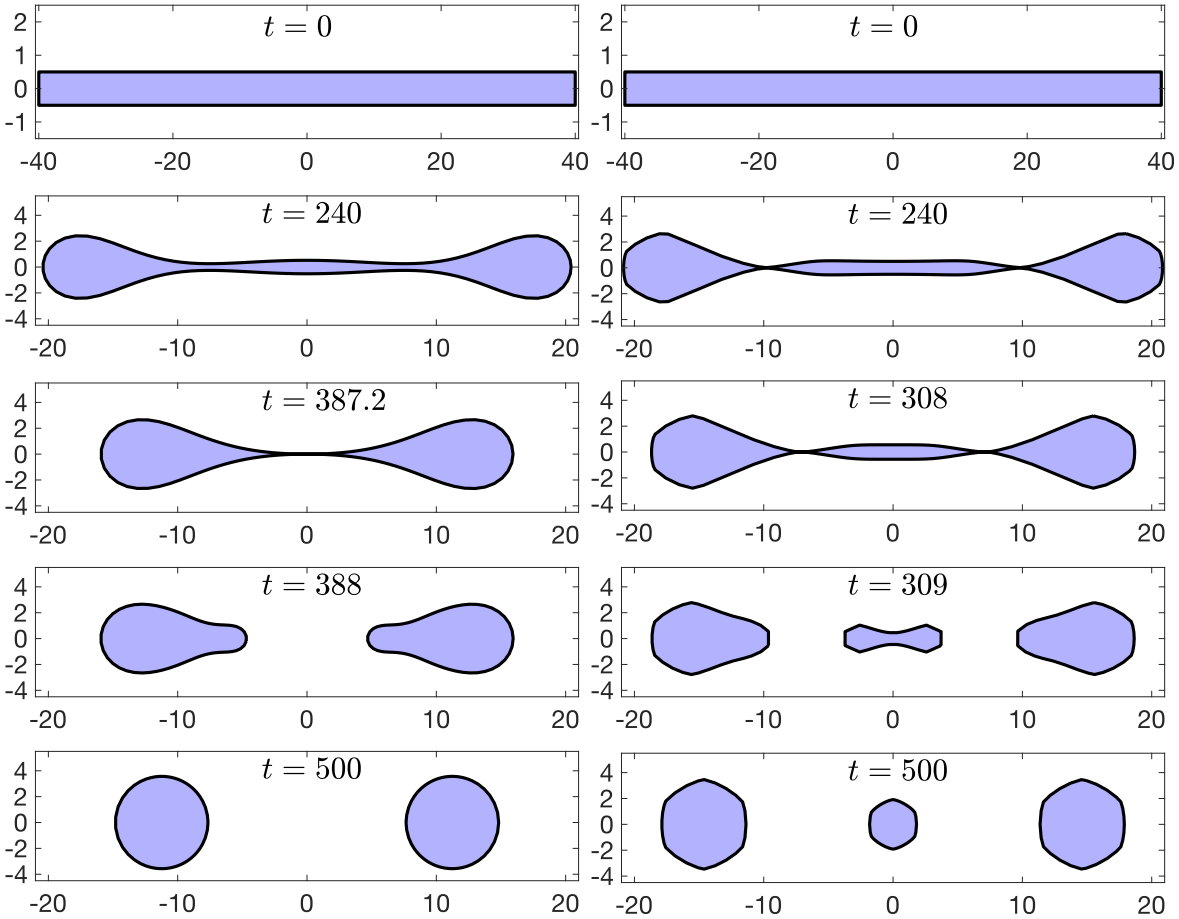


图 4.5　纵横比为 80 的长薄膜在各向异性表面扩散作用下的形态演化：左图为各向同性表面能密度情形，右图为六重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{35.1}\cos 6\theta$。

Figure 4.5　Morphological evolutions of thin film with aspect ration 80 under the surface diffusion: (left) isotropic; (right) 6-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{35.1}\cos 6\theta$.

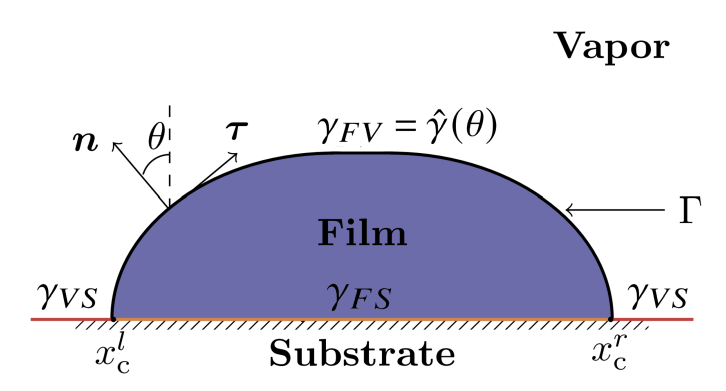


图 4.6　二维情形下薄膜在平坦刚性基底上的固态脱湿示意图。其中，$\gamma_{FV}=\hat{\gamma}(\theta),\gamma_{VS},\gamma_{FS}$ 分别表示薄膜/气相、气相/基底及薄膜/基底界面的表面能密度，x_c^l,x_c^r 为左右接触点。

Figure 4.6　An illustration of solid-state dewetting of a thin film on a flat rigid substrate in 2D, where $\gamma_{FV}=\hat{\gamma}(\theta),\gamma_{VS},\gamma_{FS}$ represent surface energy densities of film/vapor, vapor/substrate and film/substrate interface, respectively, x_c^l,x_c^r are the left and right contact points.

4.2　二维固态脱湿问题

在材料科学中，当固体薄膜被加热到一定临界温度时，即使该温度仍低于熔点，薄膜也可能表现出复杂的形态变化，这种现象被称为**固态脱湿问题** (solid-state dewetting) [92,134,137]。固态脱湿在薄膜技术领域有广泛的应用，如用作半导体纳米线生长的催化剂 [124]、光学与磁性器件等 [4,111]。一般而言，二维固态脱湿可视为开曲线在表面扩散及移动接触线控制下的曲线演化问题，如图 4.6 所示。本节中，我们将闭曲线在各向异性表面扩散作用下的守恒形式 (2.20) 及其保结构参数有限元离散格式 (2.52) 推广至材料科学中的二维固态脱湿问题[11,92,137]。

4.2.1　尖锐界面模型与稳定化形式

如图 4.6 所示，二维固态脱湿问题可描述为一条开曲线

$$\Gamma(t) \coloneqq \boldsymbol{X}(s,t) = (x(s,t), y(s,t))^T, \qquad 0 \le s \le L, \tag{4.1}$$

在各向异性表面扩散与接触线迁移作用下的演化过程。其中，s 与 t 分别表示弧长参数与时间，$L \coloneqq L(t) = |\Gamma(t)|$ 表示曲线 $\Gamma(t)$ 的总长度。正如文献 [11,92,137] 所推导，对于具有弱各向异性表面能的薄膜，其固态脱湿过程可由如下无量纲尖锐界面模型 (sharp-interface model) 加以刻画：

开曲线 $\boldsymbol{X}(s,t)$ 满足各向异性表面扩散方程 (2.6)–(2.7)，并配以如下边界条件：

(i) 接触点条件

$$y(0,t) = 0, \qquad y(L,t) = 0, \qquad t \ge 0; \tag{4.2}$$

(ii) 松弛接触角条件

$$\frac{\mathrm{d}x_c^l(t)}{\mathrm{d}t} = \eta f(\theta_d^l;\sigma), \qquad \frac{\mathrm{d}x_c^r(t)}{\mathrm{d}t} = -\eta f(\theta_d^r;\sigma), \qquad t \geq 0; \tag{4.3}$$

(iii) 零质量通量条件

$$\partial_s \mu(0,t) = 0, \qquad \partial_s \mu(L,t) = 0, \qquad t \geq 0; \tag{4.4}$$

其中，$x_c^l(t) = x(0,t) \leq x_c^r(t) = x(L,t)$ 分别为左、右接触点；$\theta_d^l \coloneqq \theta_d^l(t), \theta_d^r \coloneqq \theta_d^r(t)$ 分别为两接触点处的接触角。函数 $f(\theta;\sigma)$ 定义为

$$f(\theta;\sigma) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta)\cos\theta - \hat{\gamma}'(\theta)\sin\theta - \sigma, \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{4.5}$$

其中，$\sigma \coloneqq \cos\theta_Y = \frac{\gamma_{VS}-\gamma_{FS}}{\gamma_{FV}}$，$\theta_Y$ 为各向同性 Young 接触角；$0 < \eta < +\infty$ 表示接触线迁移率 (contact mobility) [11,92,137]。

类似于 (2.20)，固态脱湿问题的稳定化保守形式可推导如下：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t \boldsymbol{X} - \partial_{ss}\mu = 0, \qquad 0 < s < L(t), \qquad t > 0, \tag{4.6a}$$

$$\mu\boldsymbol{n} + \partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}\right) = \boldsymbol{0}, \tag{4.6b}$$

并配以边界条件 (4.2)–(4.4)，其中 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$ 为稳定化表面能矩阵，见 (2.10)。

4.2.2　弱形式

设 $\Gamma(t)$ 由定义在固定区间 $\rho \in \mathbb{I} = [0,1]$ 上的、与时间无关的参数 ρ 进行参数化，即

$$\Gamma(t) \coloneqq \boldsymbol{X}(\rho,t) = (x(\rho,t), y(\rho,t))^T : \mathbb{I}\times\mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}^2, \tag{4.7}$$

则弧长参数 s 可表示为 $s = \int_0^\rho |\partial_q \boldsymbol{X}(q,t)|\,\mathrm{d}q$。(同样地，我们不区分 $\boldsymbol{X}(s,t)$ 与 $\boldsymbol{X}(\rho,t)$。)

引入如下函数空间：

$$H_0^1(\mathbb{I}) \coloneqq \left\{u \in H^1(\mathbb{I}) \mid u(0) = u(1) = 0\right\}, \qquad \mathbb{X} \coloneqq H^1(\mathbb{I})\times H_0^1(\mathbb{I}). \tag{4.8}$$

仿照第 2.3 节中的推导，我们给出方程(4.6) 并满足边界条件 (4.2)–(4.4) 的弱形式如下：给定初始开曲线 $\Gamma(0) = \boldsymbol{X}(\cdot,0) = \boldsymbol{X}_0 \in \mathbb{X}$，求解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t), \mu(\cdot,t)) \in \mathbb{X}\times H^1(\mathbb{I})$ 使得

$$\left(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t \boldsymbol{X}, \varphi\right)_{\Gamma(t)} + \left(\partial_s\mu, \partial_s\varphi\right)_{\Gamma(t)} = 0, \qquad \forall\varphi \in H^1(\mathbb{I}), \tag{4.9a}$$

$$\begin{aligned}\left(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}, \partial_s\boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \frac{1}{\eta}\left[\frac{\mathrm{d}x_c^l(t)}{\mathrm{d}t}\omega_1(0) + \frac{\mathrm{d}x_c^r(t)}{\mathrm{d}t}\omega_1(1)\right] \\ + \sigma\left[\omega_1(1) - \omega_1(0)\right] = 0, \qquad \forall\boldsymbol{\omega} = (\omega_1,\omega_2)^T \in \mathbb{X}.\end{aligned} \tag{4.9b}$$

由 $\Gamma(t)$ 与基底所围成的面积 $A_o(t)$ 以及总能量 $W_o(t)$ 定义为

$$A_o(t) \coloneqq \int_{\Gamma(t)} y(s,t)\partial_s x(s,t)\,\mathrm{d}s, \quad W_o(t) \coloneqq \int_{\Gamma(t)} \hat{\gamma}(\theta)\,\mathrm{d}s - \sigma\left(x_c^r(t) - x_c^l(t)\right). \tag{4.10}$$

类似于闭曲线情形，弱形式 (4.9) 仍保持**面积守恒**与**能量耗散**性质。

命题 4.1 (面积守恒与能量耗散) 设 $\Gamma(t)$ 由弱形式 (4.9) 的解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t),\mu(\cdot,t))$ 所给出，则有

$$A_o(t) \equiv A_o(0), \qquad W_o(t) \le W_o(t_1) \le W_o(0), \qquad \forall t \ge t_1 \ge 0. \tag{4.11}$$

更精确地说，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_o(t) = 0, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W_o(t) = -\int_{\Gamma(t)} |\partial_s\mu|^2\,\mathrm{d}s - \frac{1}{\eta}\left[\left(\frac{\mathrm{d}x_c^r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}x_c^l}{\mathrm{d}t}\right)^2\right] \le 0, \quad t \ge 0. \tag{4.12}$$

其证明与命题 2.1 类似，细节从略。

4.2.3 稳定化参数有限元离散及其性质

引入如下有限元空间

$$\mathbb{K}_0^h \coloneqq \left\{u^h \in \mathbb{K}^h \mid u^h(0) = u^h(1) = 0\right\}, \qquad \mathbb{X}^h \coloneqq \mathbb{K}^h \times \mathbb{K}_0^h. \tag{4.13}$$

方程 (4.9) 的空间半离散形式，以及其面积守恒与能量耗散性质的证明过程，与第 2.3 节情形类似，此处不再赘述。

设 τ 为一致时间步长，将 $\Gamma(t) = \boldsymbol{X}(\cdot,t)$ 在时刻 $t_m = m\tau, m = 0,1,\ldots$ 的近似记为 $\Gamma^m = \boldsymbol{X}^m(\cdot) = \cup_{j=1}^N \boldsymbol{h}_j^m$，其中 $\boldsymbol{h}_j^m \coloneqq \boldsymbol{X}^m(\rho_j) - \boldsymbol{X}^m(\rho_{j-1})$。固态脱湿问题 (4.6) 的结构保持稳定化参数有限元离散格式可表述如下：设初始近似 $\Gamma^0(\cdot) \in \mathbb{X}^h$ 由 $\boldsymbol{X}^0(\rho_j) = \boldsymbol{X}_0(\rho_j), \forall 0 \le j \le N$ 给定。对任意 $m = 0,1,2,\ldots$，求解 $(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot) = (x^{m+1}(\cdot), y^{m+1}(\cdot))^T, \mu^{m+1}(\cdot)) \in \mathbb{X}^h \times \mathbb{K}^h$ 满足

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\partial_s\mu^{m+1}, \partial_s\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}^h, \tag{4.14a}$$

$$\begin{aligned}\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^m, \partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \frac{1}{\eta}\left[\frac{x_l^{m+1} - x_l^m}{\tau}\omega_1^h(0) + \frac{x_r^{m+1} - x_r^m}{\tau}\omega_1^h(1)\right] \\ + \sigma\left[\omega_1^h(1) - \omega_1^h(0)\right] = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h = (\omega_1^h, \omega_2^h) \in \mathbb{X}^h,\end{aligned} \tag{4.14b}$$

且有 $x_l^{m+1} = x^{m+1}(0) \le x_r^{m+1} = x^{m+1}(1)$. 矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)$ 之定义类似 (2.54)。

记开多边形曲线 $\Gamma(t)$ 与基底所围成的面积为 A_o^m，总表面能为 W_o^m，其定义如下：

$$A_o^m \coloneqq \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(x^m(\rho_j)-x^m(\rho_{j-1})\right)\left(y^m(\rho_j)+y^m(\rho_{j-1})\right), \tag{4.15a}$$

$$W_o^m \coloneqq \sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)-\sigma\left(x_r^m-x_l^m\right). \tag{4.15b}$$

那么，对离散格式 (4.14)，有如下关于其结构保持性结果。

定理 4.1 (结构保持)　对于任意满足条件 (2.56) 的 $\hat{\gamma}(\theta)$，对充分大的 $k(\theta)$，格式 (4.14) 面积守恒且无条件能量递减，即

$$A_o^{m+1}=A_o^m=\cdots=A_o^0,\qquad W_o^{m+1}\le W_o^m\le\cdots\le W_o^0,\qquad \forall m\ge 0. \tag{4.16}$$

证明　面积守恒部分的证明与定理 2.2 类似，细节从略。

对于能量递减部分，在 (4.14) 中置 $\varphi^h=\mu^{m+1},\boldsymbol{\omega}^h=\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m$，则

$$\begin{aligned}&\tau\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\\&\quad+\frac{1}{\eta}\left[\frac{(x_l^{m+1}-x_l^m)^2}{\tau}+\frac{(x_r^{m+1}-x_r^m)^2}{\tau}\right]-\sigma\left[(x_r^{m+1}-x_r^m)-(x_l^{m+1}-x_l^m)\right]=0.\end{aligned} \tag{4.17}$$

注意到在 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足条件 (2.56) 时，引理 2.2 对开多边形曲线仍然成立。由此，仿照 (2.77) 的推导，可得：

$$\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\ge\sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-\sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m). \tag{4.18}$$

因此，由 (4.17) 及 (4.18)，

$$\begin{aligned}W_o^{m+1}-W_o^m&=\sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^{m+1}|\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})-\sum_{j=1}^{N}|\boldsymbol{h}_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m)\\&\quad-\sigma\left[\left(x_r^{m+1}-x_r^m\right)-\left(x_l^{m+1}-x_l^m\right)\right]\\&\le\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h\\&\quad-\sigma\left[\left(x_r^{m+1}-x_r^m\right)-\left(x_l^{m+1}-x_l^m\right)\right]\\&\le-\tau\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h\\&\quad-\frac{1}{\eta}\left[\frac{(x_l^{m+1}-x_l^m)^2}{\tau}+\frac{(x_r^{m+1}-x_r^m)^2}{\tau}\right]\\&\le 0,\qquad\forall m\ge 0,\end{aligned} \tag{4.19}$$

从而可得 (4.16) 所言之能量递减。　■

注 4.1 由于局部能量估计 (2.63) 仅依赖于 $\hat{\gamma}(\theta)$，因此关于闭曲线演化中格式 (2.52) 的能量耗散结果，均可推广至固态脱湿中开曲线演化的格式 (4.14)，包括注 *2.7–2.9* 在内的相关结论。

注 4.2 容易看出，只要局部能量估计成立，我们便可推导出离散格式的能量递减性。因此，若用第 *3* 章中的对称表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$ 代替 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$，便可将原本的能量稳定条件改进到 $3\hat{\gamma}(\theta) \geq \hat{\gamma}(\theta-\pi)$，不再需要任何额外条件。

4.2.4 收敛阶与结构保持

本节中，我们对固态脱湿问题中的开曲线的时间演化，给出格式 (4.14) 的一些数值实验结果。

在数值测试中，主要考虑以下两种各向异性表面能量：

- 例 I：$\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 3\theta$，其中 $|\beta| < 1$。当 $|\beta| < \frac{1}{8}$ 时，该表面能为**弱各向异**的；反之，则为**强各向异**的。
- 例 II: $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{1 + b\cos^2\theta}$，其中 $b > -1$。

我们引入以下指标以检验网格性质、面积守恒性与能量稳定性：加权网格比

$$R_\gamma^h(t) := \frac{\max\limits_{1\leq j\leq N} \hat{\gamma}(\theta_j)|\boldsymbol{h}_j|}{\min\limits_{1\leq j\leq N} \hat{\gamma}(\theta_j)|\boldsymbol{h}_j|}, \tag{4.20}$$

规范化面积损失与规范化能量

$$\left.\frac{\Delta A_o^h(t)}{A_o^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{A_o^m - A_o^0}{A_o^0}, \qquad \left.\frac{W_o^h(t)}{W_o^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{W_o^m}{W_o^0}. \tag{4.21}$$

数值格式 (4.14) 形式上具有**二阶空间精度**和**一阶时间精度**，因此在本章中，我们取 $\tau = 16h^2$。在 Newton 迭代中，其容差被设置为 $\mathrm{tol} = 10^{-12}$。除非另有说明，初始形状取为长轴为 4、短轴为 1 的半椭圆。精确解 $\Gamma(t)$ 通过在 (4.14) 中选取 $k(\theta) = k_0(\theta)$，并采用较小网格尺寸 $h_e = 2^{-8}$ 与时间布长 $\tau_e = 2^{-12}$ 进行近似。接触线迁移率统一取 $\eta = 100$。

图 4.7 给出了格式 (4.14) 的计算误差结果：(a) 三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 3\theta$ 在固定时刻 $t = 0.5$、不同各向异性强度 β 的情形；(b) 椭圆型各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{1 + 2\cos^2\theta}$ 在不同时刻的情形。数值结果验证了格式 (4.14) 具有**二阶**收敛。

如图 4.8 所示，加权网格比 R_γ^h 在 $t \to +\infty$ 时趋于常数，表明数值格式 (4.14) 仍具有**渐近准均匀**分布性质。

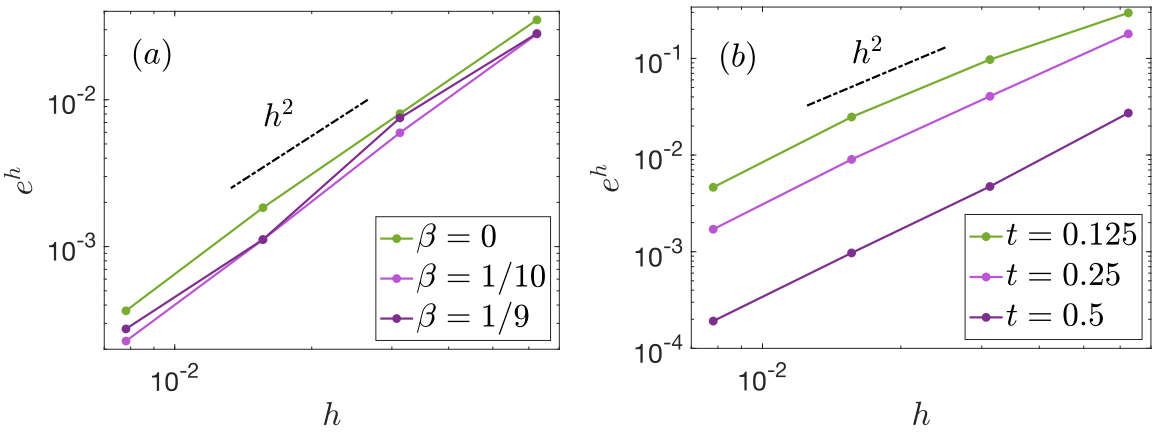


图 4.7　格式 (4.14) 取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 及 $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ 时的收敛阶：(a) 例 I 各向异性在 $t = 0.5$ 时、不同 β 取值下的结果；(b) 例 II 各向异性 (取 $b = 2$) 在不同时刻 $t = 0.125, 0.25, 0.5$ 的结果。

Figure 4.7　Convergence rates of the SPFEM (4.14) with $k(\theta) = k_0(\theta)$ and $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ for: (a) anisotropy in Case I at $t = 0.5$ with different β; and (b) anisotropy in Case II with $b = 2$ at different times $t = 0.125, 0.25, 0.5$.

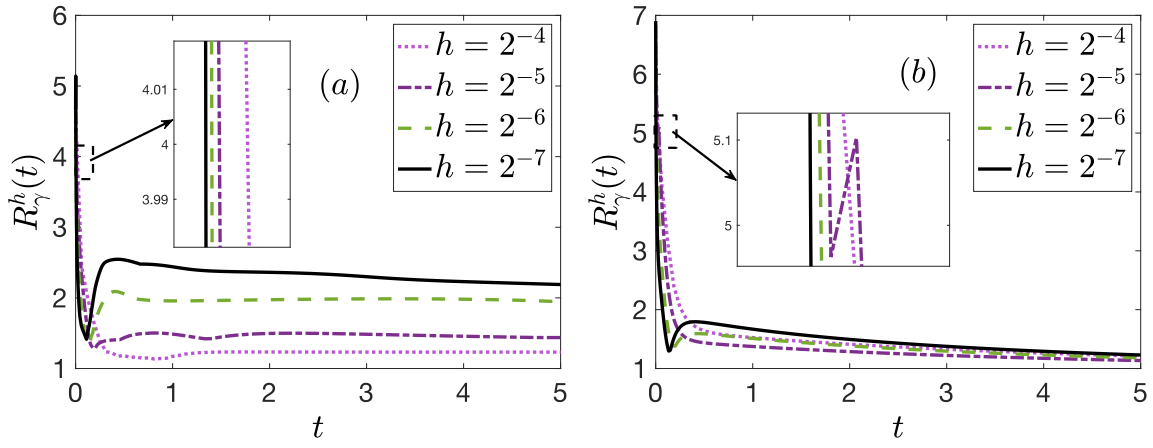


图 4.8　格式 (4.14) (取 $k(\theta) = k_0(\theta)$ 及 $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$) 的加权网格比：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta = \frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b = 2$。

Figure 4.8　Weighted mesh ratio of the SPFEM (4.14) with $k(\theta) = k_0(\theta)$ and $\sigma = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ for: (a) anisotropy in Case I with $\beta = \frac{1}{9}$; (b) anisotropy in Case II with $b = 2$.

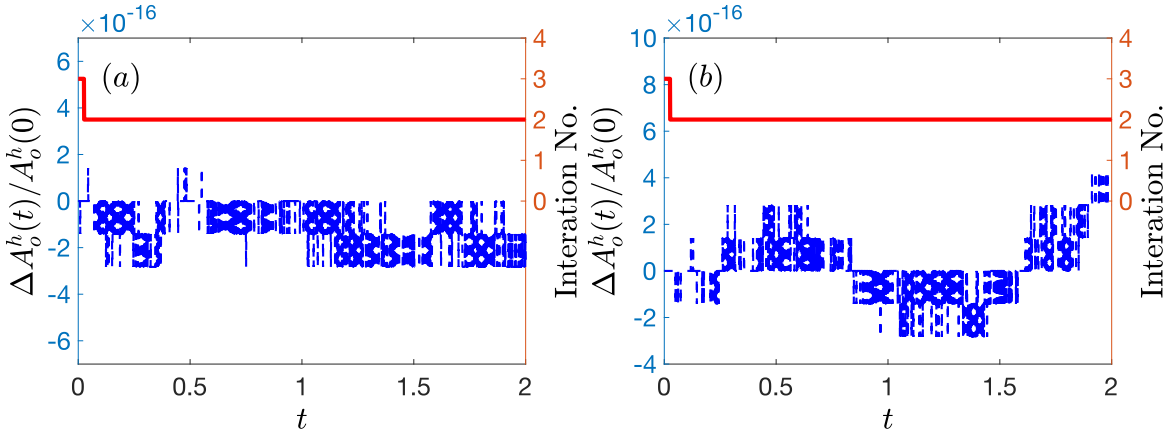


图 4.9　格式 (4.14) 取 $k(\theta)=k_0(\theta)$、$\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}$ 以及 $h=2^{-7},\tau=2^{-10}$ 时的规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta=\frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b=2$。

Figure 4.9　Normalized area loss (blue dashed line) and iteration number (red line) of the SPFEM (4.14) with $k(\theta)=k_0(\theta)$, $\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}$ and $h=2^{-7},\tau=2^{-10}$ for: (a) anisotropy in Case I with $\beta=\frac{1}{9}$; and (b) anisotropy in Case II with $b=2$.

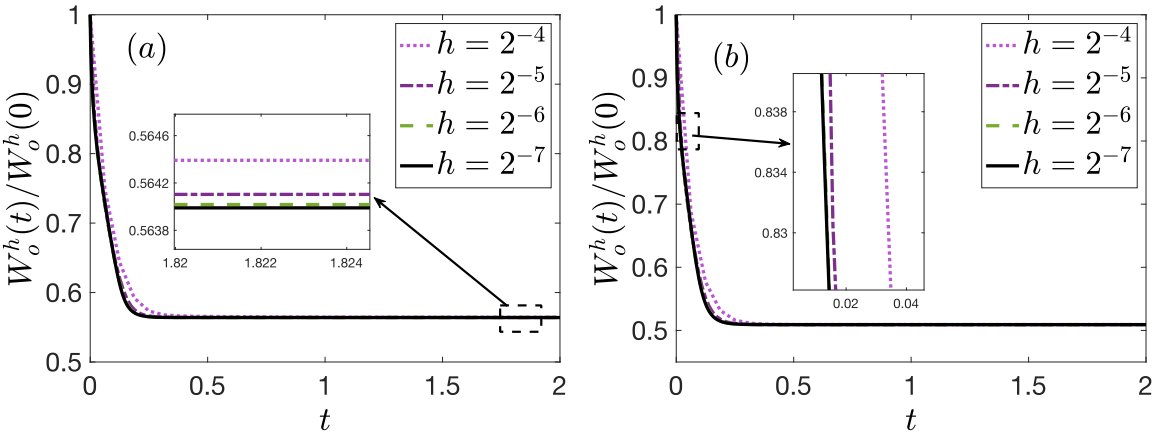


图 4.10　格式 (4.14) 取 $k(\theta)=k_0(\theta)$ 及 $\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}$ 时的规范化能量：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta=\frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b=2$.

Figure 4.10　Normalized energy of the SPFEM (4.14) with $k(\theta)=k_0(\theta)$ and $\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}$ for: (a) anisotropy in Case I with $\beta=\frac{1}{9}$; and (b) anisotropy in Case II with $b=2$.

规范化面积损失 $\frac{\Delta A_o^h(t)}{A_o^h(0)}$ 在 $h = 2^{-7}, \tau = 2^{-10}$ 条件下的 Newton 迭代次数随时间的演化，见图 4.9。不同网格尺寸 h 下的规范化能量 $\frac{W_o^h(t)}{W_o^h(t)}$ 则示于图 4.10。

由图 4.9–图 4.10 可观察到：

1. 规范化面积损失约为 10^{-16}，与舍入误差处于同一数量级（参见图 4.9），验证了面积在机器精度范围内保持**守恒**。
2. Newton 迭代次数初始为 3，最终为 2，参见图 4.9。该结果表明，尽管格式 (4.14) 为**全隐式**，其求解仍具有**较高**效率。
3. 当 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足条件 (2.56) 时，规范化能量单调**递减**，参见图 4.10。不同于 [107] 中的能量稳定参数有限元法，本章中所提出之离散格式 (4.14) 在例 I 各向异性当 $\beta < \frac{1}{10}$ 时和例 II 各向异性当 $b > 1$ 时仍能保证能量稳定，这与注 2.7 与注 2.8 的结论一致。

4.2.5　二维固态脱湿的形态演化

下面我们应用数值格式 (4.14) 模拟二维各向异性固态脱湿问题的形态演化。

图 4.11 展示了其由初始形状至其数值平衡态的形貌演化过程。在该图中，我们给出了开 4×1 矩形曲线如下四种不同表面能下的结果：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta = \frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b = 2$；(c) 四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$；(d) $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt{\left(\frac{5}{2} + \frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right) n_1^2 + n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$。

类似于闭曲线情形，格式 (4.14) 在固态脱湿的数值模拟中拓展了表面能函数的选取范围，参见图 4.11 (a)–图 4.11 (c)。此外，图 4.11 (d) 表明，对于正则性**较低**的 $\hat{\gamma}(\theta)$，该方法亦能有效工作。

4.2.6　固态脱湿中开曲线的多重平衡态

仿照 [102,107,147] 以及 4.2.3 节中的推导，对称化格式 (3.12) 亦可推广用于固态脱湿中开曲线形态演化的数值模拟。其数值格式类似于 (4.14)，具体细节从略。与定理 3.2 相同，该方法保持**面积守恒**，并在条件 (3.1) 下可证明为无条件**能量稳定**。

正如 [10] 所言，二维固态脱湿在各向异性表面能作用下的稳定平衡形态，可通过所谓的**广义** Winterbottom **构造** (generalized Winterbottom construction) 方法加以预测。若表面能呈**强各向异性**，则可能存在**多个**稳定的平衡岛形。

(i) 绘制 *Wulff* 包络：对给定的各向异性函数 $\hat{\gamma}(\theta)$，首先绘制其 γ–图，见图 4.12 (a) 中的蓝线。由 γ-图通过如下公式 [10,118] 构造 Wulff 包络，见图 4.12 (a) 中的黑

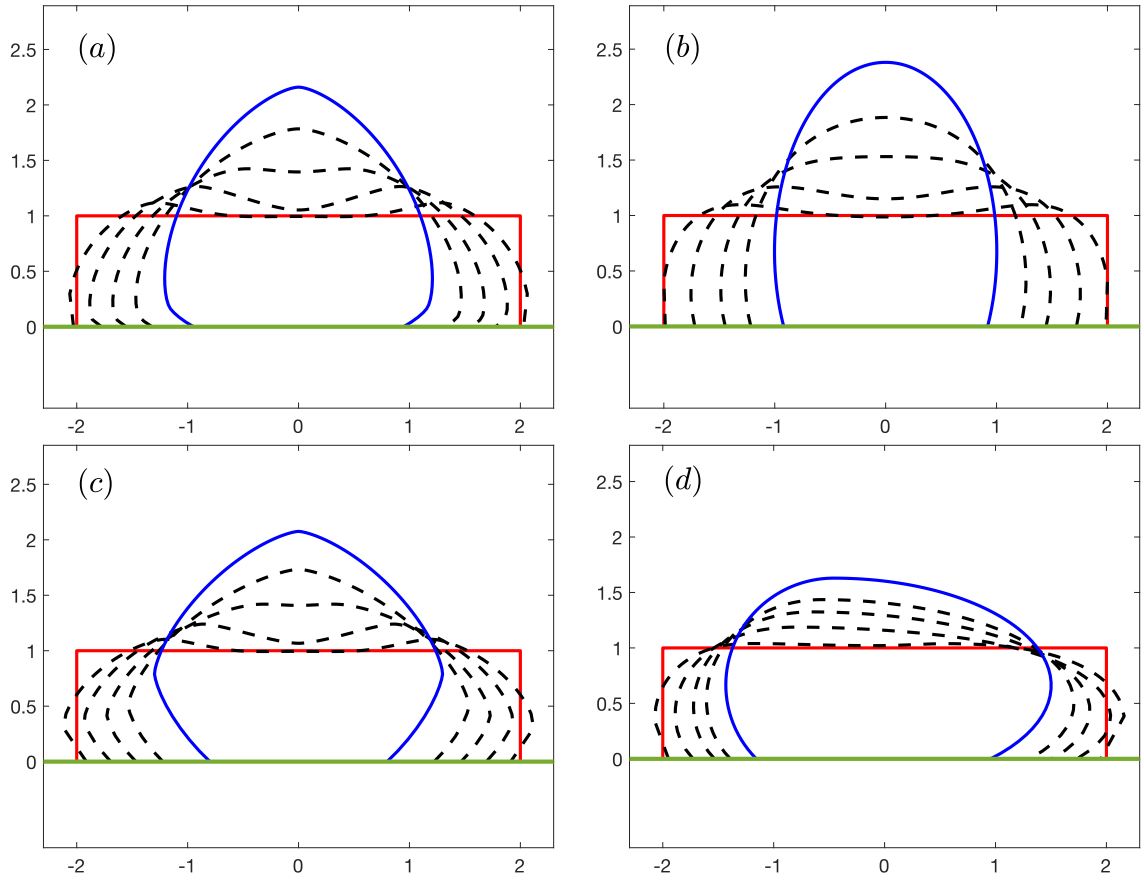


图 4.11　开 4×1 矩形在不同表面能条件下、由各向异性表面扩散所驱动的形态演化：(a) 例 I 各向异性，取 $\beta=\frac{1}{9}$；(b) 例 II 各向异性，取 $b=2$；(c) $\hat{\gamma}(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$；(d) $\hat{\gamma}(\theta)=\sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$ with $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。参数取 $\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}, h=2^{-7}, \tau=2^{-10}$.

Figure 4.11　Morphological evolutions of an open 4×1 rectangle under anisotropic surface diffusion with different surface energies: (a) anisotropy in Case I with $\beta=\frac{1}{9}$; (b) anisotropy in Case II with $b=2$; (c) $\hat{\gamma}(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$; (d) $\hat{\gamma}(\theta)=\sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathbf{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$ with $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dashed lines represent the intermediate curves. The parameters are choosen as $\sigma=-\frac{\sqrt{2}}{2}, h=2^{-7}, \tau=2^{-10}$.

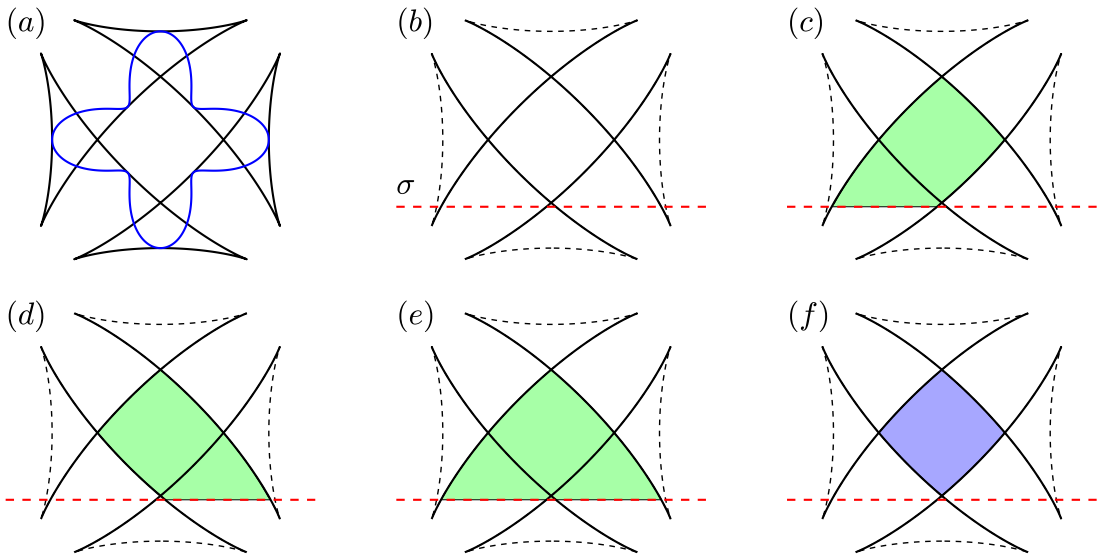


图 4.12　表面能 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.4\cos 4\theta$ 且 $\sigma = \cos\frac{5\pi}{6}$ 下的广义 Winterbottom 构造。绿色阴影区域与蓝色阴影区域为稳定平衡态。

Figure 4.12　Generalized Winterbottom construction for surface energy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.4\cos 4\theta$ and $\sigma = \cos\frac{5\pi}{6}$. Green shaded and blue shaded regions are the stable equilibrium shapes.

线：

$$\begin{cases} x(\theta) = -\hat{\gamma}(\theta)\sin\theta - \hat{\gamma}'(\theta)\cos\theta, \\ y(\theta) = \hat{\gamma}(\theta)\cos\theta - \hat{\gamma}'(\theta)\sin\theta, \end{cases} \qquad \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{4.22}$$

(ii) 去除所有不稳定取向：从 Wulff 包络中剔除满足 $\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta) < 0$ 的不稳定取向，见图 4.12 (b) 中的黑色虚线部分。Wulff 包络中的“耳状”部分即为不稳定区域，如图 4.12 所示。

(iii) 截断 *Wulff* 包络：用平坦基底直线 $y = \sigma$ （图 4.12 (b)–图 4.12 (f) 中的红色虚线）对 Wulff 包络进行截断。此时，由 Wulff 包络与基底直线所围成的区域即为稳定平衡形态，见图 4.12 (c)–图 4.12 (e) 中的绿色阴影区域，以及图 4.12 (f) 中的蓝色阴影区域。

我们将所提出的方法用于模拟不同初始薄膜在固态脱湿中的平衡形态，所取表面能为 m-重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos m(\theta - \theta_0)$。时，该表面能为**强各向异性**。数值结果见图 4.13–图 4.17。

在图 4.13 中，计算参数取为 $\beta = 0.4, \theta_0 = 0$ 且 $\sigma = \cos\frac{5\pi}{6}$。数值模拟给出了四种可能的稳定平衡态。可以看出，计算所得的数值结果（参见图 4.13）与广义 Winterbottom 构造给出的理论预测（参见图 4.12 或图 4.13 中的黑色虚线）高度一致。

图 4.14 与图 4.16 给出了两种不同各向异性下数值平衡态的演化与广义 Winter-

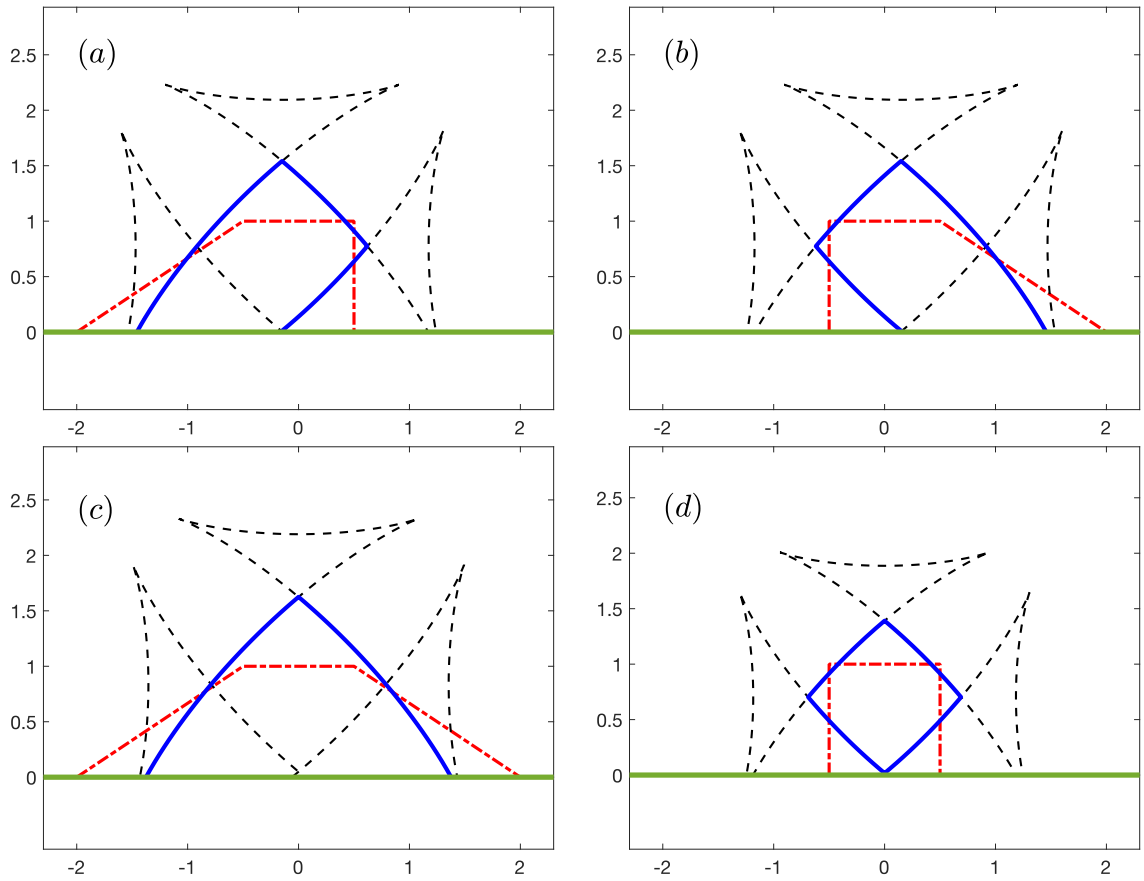


图 4.13　不同初始曲线（红色虚线）下在四重对称性表面能控制下的多重平衡态。黑色虚线对应 Wulff 包络；其余参数设置为 $\beta = 0.4, \sigma = \cos\frac{5\pi}{6}$ 以及 $\eta = 100$。

Figure 4.13　Multiple equilibrium shapes for the 4-fold surface energy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \beta\cos 4\theta$ starting with different initial curves (shown in red dash-dot line). The corresponding Wulff envelope is shown in black dash line. Parameters are choosen as $\beta = 0.4, \sigma = \cos\frac{5\pi}{6}$ and $\eta = 100$.

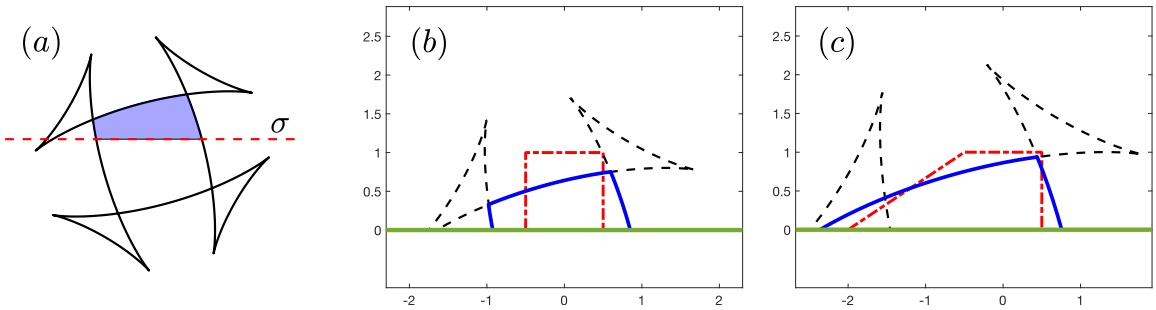


图 4.14　广义 Winterbottom 构造示意图 (a)，以及在四重对称表面能 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 4(\theta + \frac{\pi}{6})$ 及 $\sigma = 0.2$ 条件下，从不同初始曲线出发所得的数值平衡形态 (b)–(c)。

Figure 4.14　Illustration of the generalized Winterbottom construction (a) and numerical equilibrium shapes (b)–(c) starting with different initial curves for the 4-fold surface energy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 4(\theta + \frac{\pi}{6})$ and $\sigma = 0.2$.

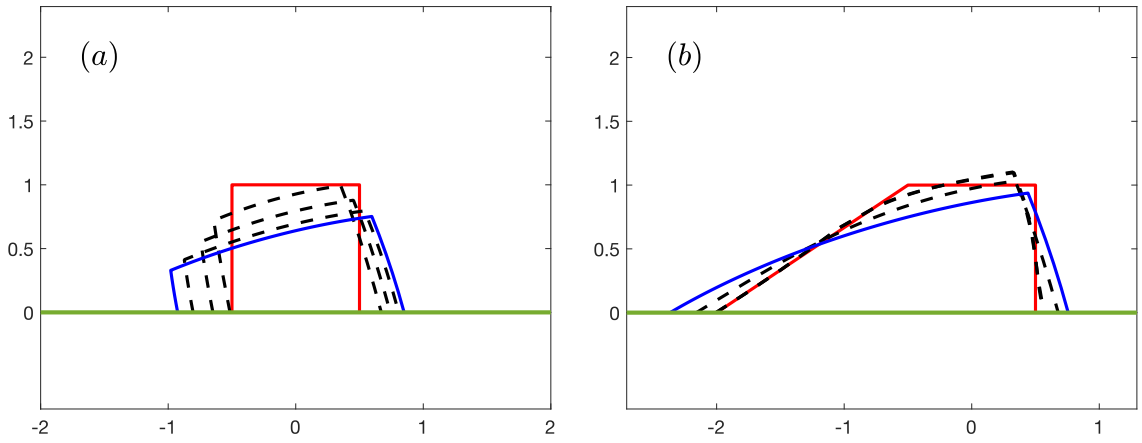


图 4.15　不同初始形状在四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 4\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right), \sigma = 0.2$ 条件下的形态演化：(a) 单位正方形；(b) 直角梯形。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡形态，黑色虚线表示中间演化曲线。

Figure 4.15　Morphological evolutions of different initial shapes with the 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1+0.3\cos 4\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right), \sigma = 0.2$: (a) a unit square; (b) a right trapezoid. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves.

bottom 构造所预测的稳定平衡态之间的比较。数值平衡形态以蓝色实线表示，初始曲线以红色实线表示，相应的 Wulff 包络以黑色虚线表示。可以观察到，数值结果与理论预测十分**吻合**。不同于 [102] 中的对称化结构保持参数有限元方法，本文方法在**对称**与**非对称**表面能情形下均表现出良好的适用性与稳定性。

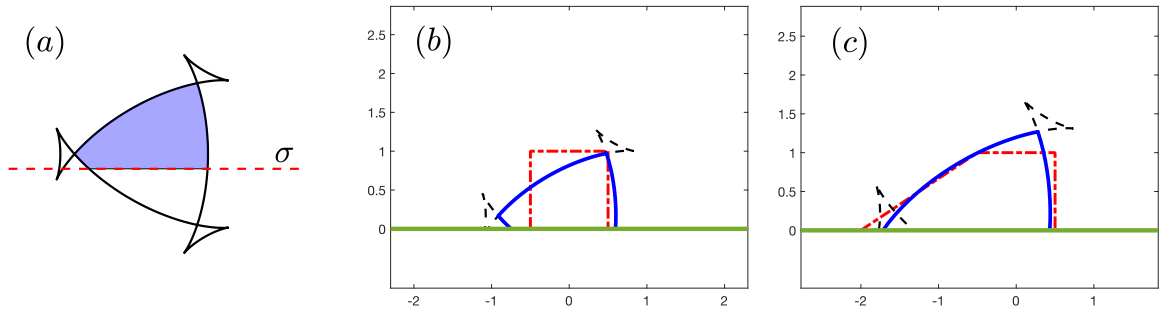


图 4.16　广义 Winterbottom 构造示意图 (a)，以及在三重对称表面能 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 3(\theta + \frac{\pi}{6})$ 及 $\sigma = -0.2$ 条件下，从不同初始曲线出发所得的数值平衡形态 (b)–(c)。

Figure 4.16　Illustration of the generalized Winterbottom construction (a) and numerical equilibrium shapes (b)–(c) starting with different initial curves for the 3-fold surface energy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 3(\theta + \frac{\pi}{6})$ and $\sigma = -0.2$.

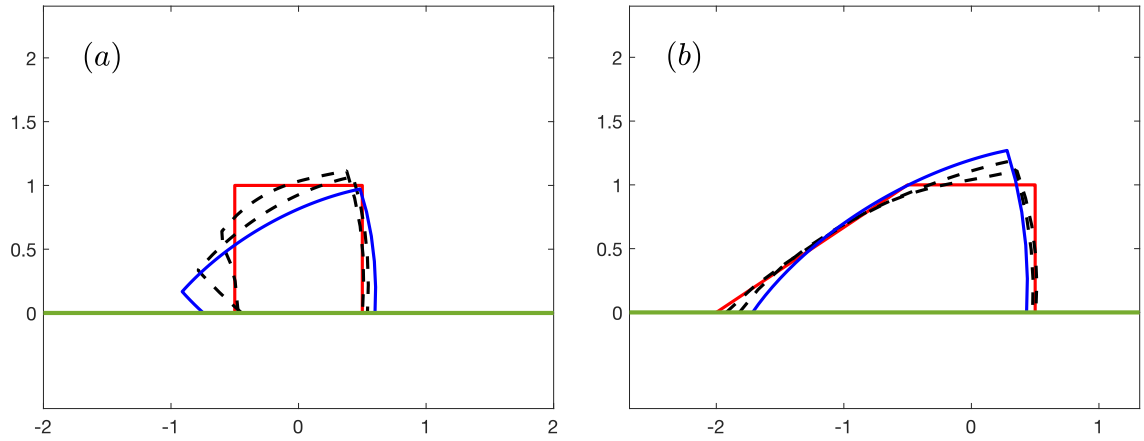


图 4.17 不同初始形状在三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 3\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right), \sigma = -0.2$ 条件下的形态演化：(a) 单位正方形；(b) 直角梯形。红线与蓝线分别表示初始形状与数值平衡形态，黑色虚线表示中间演化曲线。

Figure 4.17 Morphological evolutions of different initial shapes with the 3-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + 0.3\cos 3\left(\theta + \frac{\pi}{6}\right), \sigma = -0.2$: (a) a unit square; (b) a right trapezoid. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves

第 5 章　基于 α-表面能矩阵的保结构参数化近似：曲线各向异性演化

在几何流的保结构算法研究中，由 Barrett、Garcke 与 Nürnberg 提出的能量稳定参数有限元方法 (energy-stable PFEM) [22,25]，亦即通常所谓之 BGN 方法，因其具备无条件**能量稳定性**以及优良之**网格质量**，而受到广泛关注。其已成功应用于多类各向同性曲率驱动问题之数值模拟，包括平均曲率流 [25,151]、表面扩散 [21]、多相流问题 [67,69]、Stefan 问题 [63]、Mullins–Sekerka 问题 [27]，以及固态脱湿过程中的开曲线/开曲面演化 [20,149]。在上述各类模型之计算中，该类方法均展现出稳健且高效的数值性能。

BGN 型方法之成功，关键在于其并非直接近似曲率 κ 本身，而是借助如下几何恒等式，对**曲率向量** $\kappa\boldsymbol{n}$ 进行处理：

$$\kappa\boldsymbol{n} = -\partial_{ss}\boldsymbol{X} = -\partial_s\Big(\boldsymbol{I}_d\partial_s\boldsymbol{X}\Big), \tag{5.1}$$

其中 $\boldsymbol{I}_d$ 表示 d 维单位矩阵。该处理方式为各向同性曲率驱动问题中实现能量稳定性提供了自然且结构一致的理论框架。关于 BGN 型方法之更为详尽的理论分析与数值讨论，可参见 Barrett 等所撰之综述专著 [29]。

已有诸多工作尝试将 BGN 方法其推广至各向异性情形。这类方法的一个共同特征在于：在 (5.1) 中，以适当构造之表面能矩阵取代 $\boldsymbol{I}_d$，从而得到关于**加权曲率向量** $\mu\boldsymbol{n}$ 的对应恒等式。Barrett 等人首先针对类 Riemann 度量型表面能 $\hat{\gamma}(\theta) = (\boldsymbol{n}(\theta)\cdot G\boldsymbol{n}(\theta))^{1/2}$，通过引入矩阵 $\frac{1}{\hat{\gamma}(\theta)}\det(G)\,G^{-1}$，实现了上述推广 [24,28]。在 [107] 中，作者基于 Cahn–Hoffman $\boldsymbol{\xi}$ 向量构造了表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta)I_2 - \boldsymbol{n}(\theta)\boldsymbol{\xi}(\theta)^T + \boldsymbol{\xi}(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)^T$，首次将该框架推广至一般表面能情形，但对 $\hat{\gamma}(\theta)$ 仍需施加一定限制条件。随后，在 [9] 中，作者通过引入稳定函数 $k(\theta)$，并构造了对称的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta) = \hat{\gamma}(\theta)I_2 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T - \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T$，在满足对称性条件 $\hat{\gamma}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta-\pi)$ 的前提下，证明了格式的无条件能量稳定性。

在第 2–3 章中，通过精细的分析，我们显著改进了所提出方法的能量稳定条件，并在**局部能量估计**的框架内达到了**最优**的结果，尽管我们采用的分析技术因为格式的不同而略有**差异**。上述研究表明，表面能矩阵之不同构造形式将导致不同的理论分析技巧；与此同时，由此得到之离散格式在能量稳定性方面所需满足之条件亦存在**显著差异**，且仍有进一步**精细化**与**统一化**之必要。

本章的主要目标在于建立一套**统一**的能量稳定性分析框架，以适用于**所有**可能形式之表面能矩阵所对应的结构保持参数有限元离散格式；在此基础上，推导出**最优**之能量稳定性条件，并对不同构造下对应数值格式的**计算性能**进行系统比较。本章之主要贡献概括如下：

- **统一的表面能矩阵构造.** 我们引入超参数 $\alpha \in \mathbb{R}$，构造统一的 α-表面能矩阵

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) I_2 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T + \alpha \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T + k(\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T, \tag{5.2}$$

  该构造涵盖现有文献中的**所有**形式 [9,14,106,147] 以及第 3–2 章的构造作为特例，并在结构上穷尽了所有可能的构造，参见注 5.3。

- **最优能量稳定性条件.** 我们证明，对称情形 $\alpha = -1$ 是**唯一**在下述**充要条件**下实现无条件能量稳定性的构造（参见注 5.5）：

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) \geq 0, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.3}$$

  对于其他取值，除非额外施加约束，例如 $\hat{\gamma}'(\theta^*) = 0$，否则均需满足更严格的条件 $3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) > 0$。

- **统一的速度离散框架.** 我们将结构保持参数有限元方法推广至一般各向异性曲率驱动问题，其法向速度取如下形式：

$$V_n = \mathfrak{F}(\mu), \tag{5.4}$$

  其中 $\mathfrak{F}$ 为依赖于加权曲率 μ 的映射。该表述自然涵盖 (1.13) 中的所有速度形式，并给出一套保证能量稳定性的**统一离散框架**。

本章结构安排如下：在第 5.1 节中，我们引入超参数 α，以建立对所有可能表面能矩阵的一种统一构造，并由此导出各向异性曲率流的保守型变分形式。第 5.2 节提出相应结构保持参数有限元的全离散格式，并同时陈述该方法的结构保持性质。第 5.3 节给出该格式能量稳定性的证明。第 5.5 节讨论将该方法推广到其他各向异性曲率驱动问题的可能性。第 5.6 节汇报大量数值实验，用以验证方法的精度、效率、结构保持性质及其鲁棒性。

5.1　统一 α-表面能矩阵

由于我们旨在研究一般各向异性曲率驱动问题，为方便讨论，我们不妨先将研究对象从前几章的各向异性表面扩散转到更简单的各向异性曲率流：

$$V_n = \mu, \tag{5.5}$$

其中 $\mu = [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\,\kappa$ 为加权曲率。或者等价的，

$$\partial_t \boldsymbol{X} = -\mu \boldsymbol{n}, \qquad 0 < s < L(t), \qquad 0 \le t \le T, \tag{5.6a}$$
$$\mu = [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\,\kappa. \tag{5.6b}$$

其中，$L(t) = |\Gamma(t)|$ 表示曲线 $\Gamma(t)$ 于时刻 t 的长度，T 表示解之最大存在时间。

在曲线演化过程中，由于切向方向上的速度分量仅影响曲线的参数化方式，而不改变其几何形状。因此，仅需规定法向方向上的速度 $V_n = \boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X}$ 即可刻画其几何演化。基于上述观察，通过允许适当的切向运动，可将 (5.6) 中所给之各向异性曲率流等价地改写为如下几何 PDE：

$$\boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X} = -\mu, \qquad 0 < s < L(t) \qquad 0 \le t \le T, \tag{5.7a}$$
$$\mu = [\hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}''(\theta)]\,\kappa. \tag{5.7b}$$

正如我们在第 2–3 章对表面扩散所做的那样。

为推导各向异性曲率流 (5.7) 的保守形式，引入如下统一 α-表面能量矩阵

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) I_2 - \boldsymbol{n}(\theta)\boldsymbol{\xi}(\theta)^T + \alpha \boldsymbol{\xi}(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)^T + k(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)^T, \tag{5.8}$$

其中 $\boldsymbol{\xi}(\theta) = \hat{\gamma}(\theta)\boldsymbol{n}(\theta) - \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{\tau}(\theta)$ 为 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量，$\alpha \in \mathbb{R}$ 并且 $k\colon 2\pi\mathbb{T} \to \mathbb{R}$ 为预先给定的稳定函数。

引理 5.1　对于 (5.7b) 中定义的加权曲率 μ, 有如下几何恒等式成立：

$$\mu \boldsymbol{n} + \partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\partial_s \boldsymbol{X}\right) = \boldsymbol{0}, \qquad \forall \alpha \in \mathbb{R}. \tag{5.9}$$

证明　由 [93] 或 (3.4)，可知

$$\mu \boldsymbol{n} = -\partial_s\left(\hat{\gamma}(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n}\right). \tag{5.10}$$

因此，只需证明

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} = \hat{\gamma}(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n}. \tag{5.11}$$

注意到 $\boldsymbol{n} = (-\sin\theta, \cos\theta)^T, \boldsymbol{\tau} = (\cos\theta, \sin\theta)^T$，我们有

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta) = \hat{\gamma}(\theta) I_2 + \hat{\gamma}'(\theta)(\boldsymbol{n}\boldsymbol{\tau}^T - \alpha\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{n}^T) + (k(\theta) + (\alpha - 1)\hat{\gamma}(\theta))\,\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T. \tag{5.12}$$

结合 (5.12) 以及 $\partial_s \boldsymbol{X} = \boldsymbol{\tau}$ 与 $\boldsymbol{n}^T \partial_s \boldsymbol{X} \equiv 0$，可得

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} &= \hat{\gamma}(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n} + \left(-\alpha\hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{n}^T + (k(\theta) + (\alpha - 1)\hat{\gamma}(\theta))\,\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\right)\partial_s \boldsymbol{X} \\ &= \hat{\gamma}(\theta)\partial_s \boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\boldsymbol{n}.\end{aligned} \tag{5.13}$$

引理得证。 ■

应用恒等式 (5.9)，几何 PDE (5.7a)–(5.7b) 的**强形式**可表述为：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}+\mu=0,\qquad 0<s<L(t),\qquad \forall 0\le t\le T, \tag{5.14a}$$

$$\mu\boldsymbol{n}+\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)=\boldsymbol{0}, \tag{5.14b}$$

其中 $L(t)$ 为演化曲线 $\Gamma(t)$ 的长度。

注 5.1 当 $\gamma(\theta)\equiv 1$ 时，加权曲率 μ 退化为经典曲率 κ。此时若取 $k(\theta)\equiv 1-\alpha$，则表面能矩阵满足 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\equiv I_2$。因此，(5.14) 将退化为 *BGN* 方法下平均曲率流的标准形式 *[22]*。

注 5.2 通过选取不同的参数 α，强形式 (5.14) 将给出不同的加权曲率向量 $\mu\boldsymbol{n}$ 表述形式。例如，当 $\alpha=-1$ 时，可得到 *[9,106]* 以及第 *3* 章中的对称化形式；当取 $\alpha=0, k(\theta)\equiv 0$ 时，得到 *[23]* 所提出的形式；而当 $\alpha=1$ 时，则可导出 *[13,107,147]* 以及第 *2* 章中的相关形式。

注 5.3 任意满足 $\mu\boldsymbol{n}=-\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)$ 的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)$，均可由 (5.8) 中的 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)$ 表示。为此，考虑 $K(\boldsymbol{\tau}):=\left\{\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{2\times 2}\mid \boldsymbol{A}\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{0}\right\}$，其中 $\dim K(\boldsymbol{\tau})=2$ 且 $\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T,\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\in K(\boldsymbol{\tau})$。在各向异性情形下，由于 $\boldsymbol{\xi}\nparallel\boldsymbol{n}$，可知 $K(\boldsymbol{\tau})=\{\alpha\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T+k\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\mid\alpha,k\in\mathbb{R}\}$。又因为 $\mu\boldsymbol{n}=-\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)=-\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_0^0(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)$，从而有 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)-\hat{\boldsymbol{G}}_0^0(\theta)\in K(\boldsymbol{\tau})$，故推得 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)\in\hat{\boldsymbol{G}}_0^0(\theta)+K(\boldsymbol{\tau})=\{\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\mid\alpha,k\in\mathbb{R}\}$。由此说明，所有可能的表面能矩阵均可表示为 (5.8) 的形式。

5.2　基于 α-表面能矩阵的保结构参数有限元离散

5.2.1　弱形式

为基于强形式 (5.14) 导出相应的弱形式，设演化曲线 $\Gamma(t)$ 由固定区域 $\mathbb{I}:=[0,1]$ 上与时间无关的参数 ρ 作参数化，即

$$\Gamma(t):\ \boldsymbol{X}(\rho,t)=(x(\rho,t),y(\rho,t))^T,\qquad \forall\rho\in\mathbb{I},\ t\in[0,T]. \tag{5.15}$$

于是弧长参数可由 $s(\rho,t)=\int_0^{\rho}|\partial_r\boldsymbol{X}(r,t)|\,\mathrm{d}r$ 给出。我们不区分 $\boldsymbol{X}(s,t)$ 与 $\boldsymbol{X}(\rho,t)$，并假定 ρ-参数化始终**正则**，即存在常数 $C>1$ 使得 $\frac{1}{C}\le|\partial_r s(\rho,t)|\le C,\ \forall\rho\in\mathbb{I}$。

对演化曲线 $\Gamma(t)$，定义其上的 L^2-空间为

$$L^2(\mathbb{I}):=\left\{u:\mathbb{I}\to\mathbb{R}\mid\int_{\Gamma(t)}|u(s)|^2\,\mathrm{d}s=\int_{\mathbb{I}}|u(s(\rho,t))|^2\partial_\rho s\,\mathrm{d}\rho<+\infty\right\}, \tag{5.16}$$

并配以内积

$$\Big(u,v\Big)_{\Gamma(t)} \coloneqq \int_{\Gamma(t)} u(s)v(s)\,\mathrm{d}s = \int_{\mathbb{I}} u(s(\rho,t))v(s(\rho,t))\partial_\rho s\,\mathrm{d}\rho, \qquad \forall u,v\in L^2(\mathbb{I}). \tag{5.17}$$

相应的 Sobolev 空间取为

$$H^1(\mathbb{I}) \coloneqq \left\{u\in L^2(\mathbb{I}) \mid \partial_\rho u\in L^2(\mathbb{I})\right\}, \qquad H^1_p(\mathbb{I}) \coloneqq \left\{u\in H^1(\mathbb{I}) \mid u(0)=u(1)\right\}. \tag{5.18a}$$

类似 (3.10) 与 (2.27) 式之推导，分别取检验函数 $\varphi\in H^1_p(\mathbb{I})$ 乘于式 (5.14a)，并取 $\boldsymbol{\omega}=(\omega_1,\omega_2)^T\in[H^1_p(\mathbb{I})]^2$ 乘于式 (5.14b)。继而在 $\Gamma(t)$ 上积分，并施行分部积分，可得基于强形式 (5.14) 的**弱形式**如下：设初始闭曲线 $\Gamma(0)\coloneqq \boldsymbol{X}(\cdot,0)=(x(\cdot,0),y(\cdot,0))^T\in[H^1_p(\mathbb{I})]^2$ 以及初始加权曲率 $\mu(\cdot,0)\coloneqq\mu_0(\cdot)\in H^1_p(\mathbb{I})$，则对任意 $t>0$，求解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t),\mu(\cdot,t))\in[H^1_p(\mathbb{I})]^2\times H^1_p(\mathbb{I})$ 满足

$$\Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X},\varphi\Big)_{\Gamma(t)}+\Big(\mu,\varphi\Big)_{\Gamma(t)}=0, \qquad \forall\varphi\in H^1_p(\mathbb{I}), \tag{5.19a}$$

$$\Big(\mu\boldsymbol{n},\boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)}-\Big(\hat{\boldsymbol{G}}^\alpha_k(\theta)\partial_s\boldsymbol{X},\partial_s\boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)}=0, \qquad \forall\boldsymbol{\omega}\in[H^1_p(\mathbb{I})]^2. \tag{5.19b}$$

记 $A(t)$ 为随时间演化的曲线 $\Gamma(t)$ 所围成的总面积，$W(t)$ 为总能量，定义见 (2.28)。

为导出面积递减率与能量耗散，尚需用到倾角的时间导数 $\partial_t\theta$ 以及传输引理 (2.31)。

引理 5.2　倾角 θ 的时间导数满足如下恒等式：

$$\partial_t\theta=\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\cdot\boldsymbol{n}. \tag{5.20}$$

证明　先考察 $|\partial_\rho\boldsymbol{X}|=\sqrt{(\partial_\rho x)^2+(\partial_\rho y)^2}$ 对时间的导数，则有

$$\partial_t|\partial_\rho\boldsymbol{X}|=\frac{\partial_\rho x\partial_t(\partial_\rho x)+\partial_\rho y\partial_t(\partial_\rho y)}{\sqrt{(\partial_\rho x)^2+(\partial_\rho y)^2}}=\frac{\partial_\rho\boldsymbol{X}}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\cdot\frac{\partial_\rho(\partial_t\boldsymbol{X})}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}|\partial_\rho\boldsymbol{X}|=\partial_s\boldsymbol{X}\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})|\partial_\rho\boldsymbol{X}|. \tag{5.21}$$

因此，由 (5.21)，

$$\begin{aligned}\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})&=\frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\partial_\rho(\partial_t\boldsymbol{X})=\frac{1}{|\partial_\rho\boldsymbol{X}|}\partial_t\left(|\partial_\rho\boldsymbol{X}|(\cos\theta,\sin\theta)^T\right)\\&=\partial_s\boldsymbol{X}\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})(\cos\theta,\sin\theta)^T+(-\sin\theta,\cos\theta)^T\partial_t\theta.\end{aligned} \tag{5.22}$$

结合事实 $\boldsymbol{n}=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$ 即得所求结论。 ■

命题 5.1 (面积递减率与能量耗散)　设 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t),\mu(\cdot,t))$ 为弱形式 (5.19) 的解。则总面积 $A(t)$ 满足如下**递减率**，且总界面能 $W(t)$ 随时间**耗散**；亦即

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = -\Big(\mu,1\Big)_{\Gamma(t)}, \qquad W(t) \le W(t') \le W(0), \qquad \forall\, t \ge t' \ge 0. \tag{5.23}$$

证明　记 $\Omega(t)$ 为 $\Gamma(t)$ 所围成的区域。由 Reynolds 传输定理 [122]，并在 (5.19a) 中取 $\varphi = 1$，可得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega(t)} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \int_{\Gamma(t)} \boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}\,\mathrm{d}s \\ &= \Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X},1\Big)_{\Gamma(t)} = -\Big(\mu,1\Big)_{\Gamma(t)}.\end{aligned} \tag{5.24}$$

对能量耗散，由引理 2.1 对 $W(t)$ 关于 t 求导，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) = \int_{\Gamma(t)} \Big[\hat{\gamma}'(\theta)\,\partial_t\theta + \hat{\gamma}(\theta)\,\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\cdot\partial_s\boldsymbol{X}\Big]\,\mathrm{d}s. \tag{5.25}$$

再结合 θ 的几何恒等式 (5.20)，遂得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) &= \int_{\Gamma(t)} \Big[\hat{\gamma}(\theta)\,\partial_s\boldsymbol{X} + \hat{\gamma}'(\theta)\,\boldsymbol{n}\Big]\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\,\mathrm{d}s \\ &= \int_{\Gamma(t)} \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\,\partial_s\boldsymbol{X}\cdot\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\,\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{5.26}$$

在 (5.19a) 中取 $\varphi = \mu$，并在 (5.19b) 中取 $\boldsymbol{\omega} = \partial_t\boldsymbol{X}$，再结合 (5.26)，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t) &= \Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\,\partial_s\boldsymbol{X},\,\partial_s(\partial_t\boldsymbol{X})\Big)_{\Gamma(t)} = \Big(\mu\,\boldsymbol{n},\,\partial_t\boldsymbol{X}\Big)_{\Gamma(t)} \\ &= -\Big(\mu,\mu\Big)_{\Gamma(t)} \le 0.\end{aligned} \tag{5.27}$$

■

5.2.2　全离散格式

本节基于弱形式 (5.19) 提出一类参数化有限元全离散格式，其同时保持**面积递减率**与**能量耗散**性质。

取正整数 $N > 2$，并令网格尺寸 $h = 1/N$。考虑区间的均匀剖分 $\mathbb{I} = [0,1] \coloneqq \cup_{j=1}^{N} I_j$，其中 $I_j = [\rho_{j-1},\rho_j]$，$\rho_j \coloneqq jh$，$j = 0,1,\ldots,N$。分片线性有限元空间定义为

$$\mathbb{K}^h \coloneqq \Big\{u^h \in C(\mathbb{I}) \mid u^h|_{I_j} \in \mathcal{P}^1(I_j),\ \forall j = 1,2,\ldots,N\Big\} \subseteq H^1(\mathbb{I}), \tag{5.28a}$$

$$\mathbb{K}_p^h \coloneqq \Big\{u^h \in \mathbb{K}^h \mid u^h(0) = u^h(1)\Big\} \subseteq H_p^1(\mathbb{I}), \tag{5.28b}$$

其中 $\mathcal{P}^1(I_j)$ 表示区间 I_j 上次数不超过 1 的全体多项式所成空间。此外，取 $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_M = T$ 为 $[0,T]$ 的均匀剖分，时间步为 $t_m = m\tau$，$\tau \coloneqq T/M$。

设 $\Gamma^m \coloneqq \boldsymbol{X}^m(\cdot) \in [\mathbb{K}_p^h]^2$ 为 $\Gamma(t_m) = \boldsymbol{X}(\cdot, t_m = m\tau)$ 的一个近似，并满足如下非退化条件：

$$\min_{1\le j\le N} |\boldsymbol{h}_j^m| > 0, \qquad \forall m = 0,1,\ldots,M, \tag{5.29}$$

其中 $\boldsymbol{h}_j^m \coloneqq \boldsymbol{X}^m(\rho_j) - \boldsymbol{X}^m(\rho_{j-1})$。同理，$\mu^m \in \mathbb{K}_p^h$ 表示 $\mu(\cdot,t_m)$ 的一个近似。质量集中内积 $(\cdot,\cdot)_{\Gamma^m}^h$，离散微分算子 ∂_s 及相应离散几何量的定义请见 (2.43)–(2.47)。

现可给出各向异性曲率流 (5.7a)–(5.7b) 的一类保持结构的参数化有限元近似：设 $\Gamma^0 \in [\mathbb{K}_p^h]^2$ 为初始近似，并由插值给定 $\boldsymbol{X}^0(\rho_j) = \boldsymbol{X}(\rho_j, 0)$，$j = 1,2,\cdots,N$。对 $m = 0,1,\cdots,M-1$，求 $\left(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot), \mu^{m+1}(\cdot)\right) \in [\mathbb{K}_p^h]^2 \times \mathbb{K}_p^h$ 满足

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac12} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\mu^{m+1}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}_p^h, \tag{5.30a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac12}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}_p^h]^2, \tag{5.30b}$$

其中

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac12} \coloneqq -\frac{1}{2}\left(\partial_s \boldsymbol{X}^m + \partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}\right)^{\perp} = -\frac{1}{2|\partial_\rho \boldsymbol{X}^m|}\left(\partial_\rho \boldsymbol{X}^m + \partial_\rho \boldsymbol{X}^{m+1}\right)^{\perp}. \tag{5.31}$$

注 5.4 $\boldsymbol{n}^{m+\frac12}$ 的选取动机源于 *[19]* 中针对表面扩散流提出的面积保持参数有限元法，在第 *2* 章、第 *3* 章也已得到了应用。该构造可严格刻画演化的多边形曲线在相邻两个离散时间层之间的面积差，因而对维持面积递减率至关重要。

5.2.3　结构保持

记 A^m 为多边形曲线 Γ^m 所围成的面积，W^m 为总界面能，其定义见 (2.55)。本章主要结果叙述如下：

定理 5.1 (结构保持)　数值格式 (5.30) 保持**面积递减率**，即

$$\frac{A^{m+1} - A^m}{\tau} = -\left(\mu^{m+1}, 1\right)_{\Gamma^m}^h, \qquad \forall 0 \le m \le M-1. \tag{5.32}$$

此外，若 $\alpha = -1$ 且 $\hat{\gamma}(\theta) \in C^2(2\pi\mathbb{T})$ 满足

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) \ge 0, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{5.33}$$

则当 $k(\theta)$ 充分大时，数值格式 (3.12) 在无条件**能量稳定**，即

$$W^{m+1} \le W^m \le \cdots \le W^0, \qquad \forall 0 \le m \le M-1. \tag{5.34}$$

否则，当 $\alpha \neq -1$ 时，需将能量稳定性条件 (5.33) 加强为

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) > 0, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.35}$$

此处仅证明其保持面积递减率的性质；关于能量耗散部分，将留待下一节讨论。

证明　类似于定理 2.2 之推导，可得

$$A^{m+1} - A^m = \left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot (\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m), 1\right)_{\Gamma^m}^h. \tag{5.36}$$

因而在 (5.30a) 中取 $\varphi^h \equiv 1$，得到

$$A^{m+1} - A^m = -\tau\left(\mu^{m+1}, 1\right)_{\Gamma^m}^h. \tag{5.37}$$

这就给出了面积递减率公式。 ■

5.3　无条件能量稳定性之证明

为证明全离散格式 (5.30) 的无条件能量稳定性，先引入一个**最小稳定化函数** $k_{\min}^{\alpha}(\theta)$，其定义为

$$k_{\min}^{\alpha}(\theta) \coloneqq k_0^{\alpha}(\theta) - (\alpha - 1)\hat{\gamma}(\theta), \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{5.38}$$

其中 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 定义为

$$k_0^{\alpha}(\theta) \coloneqq \inf\left\{a \geq 0 \mid 4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,a}(\phi,\theta) \geq Q_{\alpha}^2(\phi,\theta),\ \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}\right\}. \tag{5.39}$$

此处 $P_{\alpha,a}$ 与 Q_{α} 为辅助函数，定义为

$$P_{\alpha,a}(\phi,\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta) + \frac{\alpha - 1}{2}\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\phi + a\sin^2\phi, \tag{5.40a}$$

$$Q_{\alpha}(\phi,\theta) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta - \phi) + \hat{\gamma}(\theta)\cos\phi + \alpha\hat{\gamma}'(\theta)\sin\phi. \tag{5.40b}$$

假设 5.1　设对给定的 $\hat{\gamma}(\theta) \in C^2(2\pi\mathbb{T})$ 与 $\alpha \in \mathbb{R}$，最小稳定化函数 $k_{\min}^{\alpha}(\theta)$ 存在，即

$$k_{\min}^{\alpha}(\theta) < +\infty, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.41}$$

在假设 5.1 下，可建立如下**局部能量估计**：

引理 5.3 (局部能量估计)　假设 (5.41) 成立。对任意 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^2\backslash\{\boldsymbol{0}\}$，令 $\boldsymbol{p} = |\boldsymbol{p}|(\cos\varphi, \sin\varphi)^T, \boldsymbol{q} = |\boldsymbol{q}|(\cos\theta, \sin\theta)^T$。则当 $k(\theta)$ 充分大时，有

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\boldsymbol{p}\right) \cdot (\boldsymbol{p} - \boldsymbol{q}) \geq \hat{\gamma}(\varphi)|\boldsymbol{p}| - \hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{q}|. \tag{5.42}$$

证明　回顾 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)$ 之定义 (5.8)，则

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{p} &= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\right)\cdot\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\\
&= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\gamma}(\theta)+(\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta)\sin(\theta-\varphi)\cos(\theta-\varphi)+(k(\theta)+(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta))\sin^2(\theta-\varphi)\right)\\
&= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\gamma}(\theta)+\frac{\alpha-1}{2}\hat{\gamma}'(\theta)\sin\left(2(\theta-\varphi)\right)+(k(\theta)+(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta))\sin^2(\theta-\varphi)\right)\\
&= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}P_{\alpha,k+(\alpha-1)\hat{\gamma}}(\theta-\varphi,\theta),
\end{aligned}\tag{5.43}$$

以及

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot\boldsymbol{q} &= |\boldsymbol{p}|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \sin\varphi\end{pmatrix}\right)\cdot\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}\\
&= |\boldsymbol{p}|\left(\hat{\gamma}(\theta)\cos(\theta-\varphi)+\alpha\hat{\gamma}'(\theta)\sin(\theta-\varphi)\right)\\
&= |\boldsymbol{p}|\left(Q_\alpha(\theta-\varphi,\theta)-\hat{\gamma}(\varphi)\right).
\end{aligned}\tag{5.44}$$

设 (5.41) 成立。则当 $k(\theta)$ 充分大且满足 $k(\theta)\geq k_{\min}^\alpha(\theta)$ 时，有 $k(\theta)+(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta)\geq k_{\min}^\alpha(\theta)+(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta)=k_0^\alpha(\theta)$。因此，由 (5.39)，我们有

$$\begin{aligned}
4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,k+(\alpha-1)\hat{\gamma}}(\theta-\varphi,\theta) &= 4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,k_0^\alpha}(\theta-\varphi,\theta)+4\hat{\gamma}(\theta)\left(k(\theta)-k_{\min}^\alpha(\theta)\right)\sin^2(\theta-\varphi)\\
&\geq 4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,k_0^\alpha}(\theta-\varphi,\theta)\geq Q_\alpha^2(\theta-\varphi,\theta),\qquad\forall\varphi\in 2\pi\mathbb{T}.
\end{aligned}\tag{5.45}$$

再结合 $\frac{1}{4c}x^2-x\geq -c$，$\forall x\in\mathbb{R}$，$c>0$，可得

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\boldsymbol{q}|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)\boldsymbol{p}\right)\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}) &= \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{q}|}P_{\alpha,k+(\alpha-1)\hat{\gamma}}(\theta-\varphi,\theta)-|\boldsymbol{p}|\left(Q_\alpha(\theta-\varphi,\theta)-\hat{\gamma}(\varphi)\right)\\
&\geq \hat{\gamma}(\varphi)|\boldsymbol{p}|+\left(\frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{q}|}\left(|\boldsymbol{p}|Q_\alpha(\theta-\varphi,\theta)\right)^2-|\boldsymbol{p}|Q_\alpha(\theta-\varphi,\theta)\right)\\
&\geq \hat{\gamma}(\varphi)|\boldsymbol{p}|-\hat{\gamma}(\theta)|\boldsymbol{q}|,
\end{aligned}\tag{5.46}$$

明欲所证。 ■

注 5.5　依照注 *2.10* 或注 *3.5* 之分析，在 (5.42) 中置 $\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{q}$（即 $\varphi=\theta-\pi$），可得局部能量估计成立所必需的条件为 $3\hat{\gamma}(\theta)\geq\hat{\gamma}(\theta-\pi)$。将其与 $\alpha=-1$ 时的条件 (5.33) 对照可知，当 $\alpha=-1$ 时，(5.33) 对局部能量估计而言既是必要条件亦是充分条件，因而是最优的，正如第 *3* 章所言。

注 5.6　对各向同性情形，即 $\hat{\gamma}(\theta)\equiv 1$，不难看出对任意 $\alpha\in\mathbb{R}$ 都有 $k_0^\alpha(\theta)\equiv 0$。这表明最小稳定化函数满足 $k_{min}^\alpha(\theta)\equiv 1-\alpha$。

借助局部能量估计 (5.42)，在假设 5.1 下即可证明全离散格式 (5.30) 的无条件能量稳定性：

证明　设 $k(\theta)$ 充分大，并满足 $k(\theta) \geq k_{\min}^{\alpha}(\theta)$。对 $\forall 0 \leq m \leq M-1$，

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h &= \sum_{j=1}^{N}\left[|\boldsymbol{h}_j^m|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right)\cdot\frac{\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\right] \\ &= \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{1}{|\boldsymbol{h}_j^m|}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\boldsymbol{h}_j^{m+1}\right)\cdot(\boldsymbol{h}_j^{m+1}-\boldsymbol{h}_j^m)\right]. \end{aligned} \tag{5.47}$$

在局部能量估计 (5.42) 中取 $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{h}_j^{m+1} = |\boldsymbol{h}_j^{m+1}|(\cos\theta_j^{m+1}, \sin\theta_j^{m+1})^T$，$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{h}_j^m = |\boldsymbol{h}_j^m|(\cos\theta_j^m, \sin\theta_j^m)^T$，有

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h &\geq \sum_{j=1}^{N}\left[\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})|\boldsymbol{h}_j^{m+1}| - \hat{\gamma}(\theta_j^m)|\boldsymbol{h}_j^m|\right] \\ &= \sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1})|\boldsymbol{h}_j^{m+1}| - \sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}(\theta_j^m)|\boldsymbol{h}_j^m| \\ &= W^{m+1} - W^m. \end{aligned} \tag{5.48}$$

因此，在 (5.30) 中置 $\varphi^h = \mu^{m+1}$ 及 $\boldsymbol{\omega}^h = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$，可得

$$\begin{aligned} W^{m+1} - W^m &\leq \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1}, \partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right)_{\Gamma^m}^h \\ &= \left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m\right)_{\Gamma^m}^h = -\tau\left(\mu^{m+1}, \mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h \leq 0. \end{aligned} \tag{5.49}$$

由此即得全离散格式 (5.30) 的无条件能量稳定性，结论得证。 ■

5.4　最小稳定函数之存在性

本节将分析最小稳定化函数 $k_{\min}^{\alpha}(\theta)$ 的存在性。

设 $\hat{\gamma}(\theta) \in C^2(2\pi\mathbb{T})$ 满足

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\pi) \geq 0, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{5.50}$$

并令 $c \coloneqq \inf\limits_{\theta\in 2\pi\mathbb{T}}\left[3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\pi)\right]$。由于 $k_{\min}^{\alpha}(\theta) = k_0^{\alpha}(\theta) - (\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta)$，故 $k_{\min}^{\alpha}(\theta)$ 的存在性等价于 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 的**有界性**。因而以下将着重讨论后者。具体而言，在临界情形 $c = 0$ 时，我们建立 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 有界性的**充要条件**；而在 $c > 0$ 的情形下，则给出 $k_0^{\alpha}(\theta)$ 的一个**上界估计**。

5.4.1　$k_0^\alpha(\theta)$ 之有界性

定理 5.2　若 $c=0$，则 $k_0^\alpha(\theta)$ 存在**当且仅当**满足下列条件之一：

(1) $\alpha=-1$；

(2) 每当 $3\hat{\gamma}(\theta^*)=\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)$ 时，必有 $\hat{\gamma}'(\theta^*)=0$。

证明　(充分性) 条件 (1) 与 (2) 的证明分别可参见 3.3.3 节与 2.4.4 节中的类似论证，此处从略。

(必要性) 设存在 $\theta^*\in 2\pi\mathbb{T}$ 使得 $3\hat{\gamma}(\theta^*)=\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)$。则函数 $\hat{\gamma}(\theta-\pi)/\hat{\gamma}(\theta)$ 在 $\theta=\theta^*$ 处取得其最大值，从而

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\theta}\left(\frac{\hat{\gamma}(\theta-\pi)}{\hat{\gamma}(\theta)}\right)\Big|_{\theta=\theta^*} &= \frac{\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi)\hat{\gamma}(\theta^*)-\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)\hat{\gamma}'(\theta^*)}{\hat{\gamma}^2(\theta^*)}\\ &= \frac{\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi)-3\hat{\gamma}'(\theta^*)}{\hat{\gamma}(\theta^*)}=0.\end{aligned}\tag{5.51}$$

因此，

$$3\hat{\gamma}'(\theta^*)=\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi),\quad \text{当 } 3\hat{\gamma}(\theta^*)=\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)\text{ 时}.\tag{5.52}$$

定义 $F_\alpha(\phi,\theta)\coloneqq 4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,k_{\min}^\alpha}(\phi,\theta)-Q_\alpha^2(\phi,\theta)$，则有

$$F_\alpha(\phi,\theta)\geq 0,\qquad \forall\phi,\theta\in 2\pi\mathbb{T}.\tag{5.53}$$

在 $\phi=\pi$ 处对 $F_\alpha(\phi,\theta^*)$ 应用中值定理，可得

$$\begin{aligned}F_\alpha(\phi,\theta^*) &= \left(3\hat{\gamma}(\theta^*)-\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)\right)\left(\hat{\gamma}(\theta^*)+\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)\right)\\ &\quad+\left[4(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta^*)\hat{\gamma}'(\theta^*)+2\left(\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)-\hat{\gamma}(\theta^*)\right)\left(\hat{\gamma}'(\theta^*-\pi)+\alpha\hat{\gamma}'(\theta^*)\right)\right](\phi-\pi)\\ &\quad+O((\phi-\pi)^2).\end{aligned}\tag{5.54}$$

将 $3\hat{\gamma}(\theta^*)=\hat{\gamma}(\theta^*-\pi)$ 及 (5.52) 代入 (5.54) 有

$$\begin{aligned}F_\alpha(\phi,\theta^*) &= \left[4(\alpha-1)\hat{\gamma}(\theta^*)\hat{\gamma}'(\theta^*)+2\left(3\hat{\gamma}(\theta^*)-\hat{\gamma}(\theta^*)\right)\left(3\hat{\gamma}'(\theta^*)+\alpha\hat{\gamma}'(\theta^*)\right)\right](\phi-\pi)\\ &\quad+O((\phi-\pi)^2)\\ &= 8(\alpha+1)\hat{\gamma}(\theta^*)\hat{\gamma}'(\theta^*)(\phi-\pi)+O((\phi-\pi)^2).\end{aligned}\tag{5.55}$$

因此，$(\alpha+1)\hat{\gamma}'(\theta^*)=0$，从而或有 $\alpha=-1$，或有 $\hat{\gamma}'(\theta^*)=0$。 ■

注 5.7　定理 5.2 统一了第 2 与第 3 中的主要结果，并揭示在所有表面能矩阵的选择中，$\alpha=-1$ 为最优取值。事实上，如注 5.5 所述，当 $\alpha=-1$ 时，条件 (5.33) $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\geq 0$ 对局部能量估计而言既是必要条件亦是充分条件。相比之下，当 $\alpha\neq -1$ 时，在仅满足条件 (5.33) 的情况下，要保证数值格式的能量稳定性，则需附加类似 $\hat{\gamma}'(\theta^*)=0$ 的额外条件，或将该条件加强为 (5.35) $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)>0$。

5.4.2　$k_0^\alpha(\theta)$ 的全局上界估计

为建立 $k_0^\alpha(\theta)$ 的全局上界，先给出如下若干引理：

引理 5.4　设 f 为定义在 $2\pi\mathbb{T}$ 上的非负 C^2 函数。则对任意常数 $C \geq \sup_{2\pi\mathbb{T}} |f''|$，有

$$-f(x) \leq f'(x)y + \frac{C}{2}y^2, \qquad \forall x, y \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.56}$$

此即引理 3.2，证明请见前文。

引理 5.5 (对 $Q_\alpha(\phi,\theta)$ 的估计)　设 $c > 0$。则对 (5.40b) 中定义的 $Q_\alpha(\phi,\theta)$，有

$$|Q_\alpha(\phi,\theta)| \leq |P_{\alpha,A}(\phi,\theta) + \hat{\gamma}(\theta)|, \qquad \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}, \tag{5.57}$$

其中 $A(\theta)$ 定义为

$$A(\theta) \coloneqq \frac{\pi^2}{8}\left(C_\alpha \sup_{2\pi\mathbb{T}} |\hat{\gamma}''| + (3|\alpha|+2)|\hat{\gamma}'(\theta)| + \hat{\gamma}(\theta) + B(\theta)\right), \tag{5.58a}$$

$$B(\theta) \coloneqq \frac{2}{c}(\alpha+1)^2|\hat{\gamma}'(\theta)|^2, \qquad C_\alpha = \max\{5, \frac{4}{\pi^2}(2|\alpha|+1)^2\}. \tag{5.58b}$$

证明　先证明 $Q_\alpha(\phi,\theta)$ 的下界。由引理 5.4，可得

$$\begin{aligned}
&Q_\alpha(\phi,\theta) + P_{\alpha,0}(\phi,\theta) + \hat{\gamma}(\theta) \\
&\quad = \hat{\gamma}(\theta-\phi) + \hat{\gamma}(\theta)(2+\cos\phi) + \hat{\gamma}'(\theta)(\alpha\sin\phi + \frac{\alpha-1}{2}\sin 2\phi) \\
&\quad \geq \hat{\gamma}(\theta) + \hat{\gamma}'(\theta)(\alpha + (\alpha-1)\cos\phi)\sin\phi \\
&\quad \geq \hat{\gamma}(\theta) - (2|\alpha|+1)|\hat{\gamma}'(\theta)||\sin\phi| \\
&\quad \geq -\frac{(2|\alpha|+1)^2}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|\sin^2\phi.
\end{aligned} \tag{5.59}$$

结合 $A(\theta) \geq \frac{(2|\alpha|+1)^2}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''|$，并注意到 $P_{\alpha,A}(\phi,\theta) = P_{\alpha,0}(\phi,\theta) + A(\theta)\sin^2\phi$，可推得

$$Q_\alpha(\phi,\theta) \geq -P_{\alpha,0}(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta) - A(\theta)\sin^2\phi = -P_{\alpha,A}(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta), \qquad \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.60}$$

余下只需估计 $Q_\alpha(\phi,\theta)$ 的上界。证明分两种情形讨论：

情形 1：对 $|\phi| \leq \frac{\pi}{2}$。对区间 $[0,\phi]$ 上的函数 $Q_\alpha(\cdot,\theta) - P_{\alpha,0}(\cdot,\theta) - \hat{\gamma}(\theta)$ 应用中值定理，则存在 $\xi \in [0,\phi]$ 使得

$$\begin{aligned}
&Q_\alpha(\phi,\theta) - P_{\alpha,0}(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta) \\
&\quad = \frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}''(\theta-\xi) - \hat{\gamma}(\theta)\cos\xi - \alpha\hat{\gamma}'(\theta)\sin\xi + 2(\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\xi\right)\phi^2 \\
&\quad \leq \frac{1}{2}\left(\sup_{2\pi\mathbb{T}}|\hat{\gamma}''| + (3|\alpha|+2)|\hat{\gamma}'(\theta)| + \hat{\gamma}(\theta)\right)\left(\frac{\pi^2}{4}\sin^2\phi\right) \\
&\quad \leq A(\theta)\sin^2\phi.
\end{aligned} \tag{5.61}$$

倒数第二个不等式源于如下事实：当 $|\phi| \le \frac{\pi}{2}$ 时，总有 $|\phi| \le \frac{\pi}{2}|\sin\phi|$。

情形 2：对 $|\phi-\pi| < \frac{\pi}{2}$。同样地，对区间 $[\phi,\pi]$ 上的函数 $Q_\alpha(\cdot,\theta)-P_{\alpha,0}(\cdot,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)$ 应用中值定理，则存在 $\xi \in [\phi,\pi]$ 使得

$$\begin{aligned} &Q_\alpha(\phi,\theta) - P_{\alpha,0}(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta) \\ &\quad = (\hat{\gamma}(\theta-\pi) - 3\hat{\gamma}(\theta)) - (\hat{\gamma}'(\theta-\pi) + (2\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta))\,(\phi-\pi) \\ &\qquad + \frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}''(\theta-\xi) - \hat{\gamma}(\theta)\cos\xi - \alpha\hat{\gamma}'(\theta)\sin\xi + 2(\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\xi\right)(\phi-\pi)^2. \end{aligned} \tag{5.62}$$

由 c 的定义可知 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi) \ge c$。将引理 5.4 应用于函数 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)-c$，得

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}(\theta-\pi) - 3\hat{\gamma}(\theta) &= -c - (3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta-\pi) - c) \\ &\le -c + (\hat{\gamma}'(\theta-\pi) - 3\hat{\gamma}'(\theta))\,(\phi-\pi) + \frac{1}{2}\sup_{2\pi\mathbb{T}} |3\hat{\gamma}''(\theta) - \hat{\gamma}''(\theta-\pi)|(\phi-\pi)^2 \\ &\le -c + (\hat{\gamma}'(\theta-\pi) - 3\hat{\gamma}'(\theta))\,(\phi-\pi) + 2\sup_{2\pi\mathbb{T}} |\hat{\gamma}''|(\phi-\pi)^2. \end{aligned} \tag{5.63}$$

因此，

$$\begin{aligned} &Q_\alpha(\phi,\theta) - P_{\alpha,0}(\phi,\theta) - \hat{\gamma}(\theta) \\ &\quad \le -c + (\hat{\gamma}'(\theta-\pi) - 3\hat{\gamma}'(\theta))\,(\phi-\pi) + 2\sup_{2\pi\mathbb{T}} |\hat{\gamma}''|(\phi-\pi)^2 \\ &\qquad - (\hat{\gamma}'(\theta-\pi) + (2\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta))\,(\phi-\pi) \\ &\qquad + \frac{1}{2}\left(\hat{\gamma}''(\theta-\xi) - \hat{\gamma}(\theta)\cos\xi - \alpha\hat{\gamma}'(\theta)\sin\xi + 2(\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta)\sin 2\xi\right)(\phi-\pi)^2 \\ &\le -c - 2(\alpha+1)\hat{\gamma}'(\theta)(\phi-\pi) + \frac{1}{2}\left(5\sup_{2\pi\mathbb{T}} |\hat{\gamma}''| + (3|\alpha|+2)|\hat{\gamma}'(\theta)| + \hat{\gamma}(\theta)\right)(\phi-\pi)^2. \end{aligned} \tag{5.64}$$

由于 $c > 0$，故 (5.64) 右端的低次项可由二次项控制，即

$$-c - 2(\alpha+1)\hat{\gamma}'(\theta)(\phi-\pi) \le \frac{1}{c}(\alpha+1)^2|\hat{\gamma}'(\theta)|^2(\phi-\pi)^2. \tag{5.65}$$

再结合如下事实：当 $|\phi-\pi| \le \frac{\pi}{2}$ 时，总有 $|\phi-\pi| \le \frac{\pi}{2}|\sin\phi|$，立得所需不等式

$$Q_\alpha(\phi,\theta) \le P_{\alpha,A}(\phi,\theta) + \hat{\gamma}(\theta), \qquad \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.66}$$

■

定理 5.3　若 $c > 0$。则对任意 $\alpha \in \mathbb{R}$，(5.39) 中所给 $k_0^\alpha(\theta)$ 满足如下**上界估计**：

$$k_0^\alpha(\theta) \le \frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)}\left[A^2(\theta) + 4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta) + (\alpha-1)^2|\hat{\gamma}'(\theta)|^2\right] < +\infty, \qquad \forall \theta \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.67}$$

证明　由引理 5.5 可得

$$Q_\alpha^2(\phi,\theta) \le \big(P_{\alpha,A}(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta)\big)^2, \qquad \forall \phi \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.68}$$

回顾 (5.40a) 中 $P_{\alpha,a}(\phi,\theta)$ 的定义，可知 $P_{\alpha,a}(\phi,\theta) = P_{\alpha,0}(\phi,\theta) + a(\theta)\sin^2\phi$。故有

$$\begin{aligned}
&4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,a}(\phi,\theta) - Q_\alpha^2(\phi,\theta)\\
&\quad\ge 4\hat{\gamma}(\theta)(a(\theta)-A(\theta))\sin^2\phi + 4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,A}(\phi,\theta) - \big(P_{\alpha,A}(\phi,\theta)+\hat{\gamma}(\theta)\big)^2\\
&\quad= 4\hat{\gamma}(\theta)(a(\theta)-A(\theta))\sin^2\phi - \big(P_{\alpha,A}(\phi,\theta)-\hat{\gamma}(\theta)\big)^2\\
&\quad= \big(4\hat{\gamma}(\theta)(a(\theta)-A(\theta)) - ((\alpha-1)\hat{\gamma}'(\theta)\cos\phi + A(\theta)\sin\phi)^2\big)\sin^2\phi\\
&\quad\ge \big(4\hat{\gamma}(\theta)a(\theta) - A^2(\theta) - (\alpha-1)^2|\hat{\gamma}'(\theta)|^2 - 4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta)\big)\sin^2\phi.
\end{aligned} \tag{5.69}$$

最后的不等式直接来自于估计 $|a\cos\phi + b\sin\phi| \le \sqrt{a^2+b^2}$, $\forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}$。

因此，对任意满足

$$a(\theta) \ge \frac{1}{4\hat{\gamma}(\theta)}\left[A^2(\theta) + 4\hat{\gamma}(\theta)A(\theta) + (\alpha-1)^2|\hat{\gamma}'(\theta)|^2\right]$$

的 $a(\theta)$，均有

$$4\hat{\gamma}(\theta)P_{\alpha,a}(\phi,\theta) - Q_\alpha^2(\phi,\theta) \ge 0, \qquad \forall\phi\in 2\pi\mathbb{T}. \tag{5.70}$$

由 (5.39) 中 $k_0^\alpha(\theta)$ 的定义，即得 (5.67) 式，证毕。 ■

5.5　推广至其它几何流

本节中，我们考察两类特定的几何演化方程，即面积守恒各向异性曲率流以及各向异性表面扩散流，并分别构造其对应的结构保持参数有限元方法。在本节末尾，基于前述所建立的分析框架，我们将进一步讨论如何针对广义的**法向速度律** (normal velocity law) 设计**结构保持**数值算法。

5.5.1　面积守恒各向异性曲率流

如 (1.13) 中所述，面积守恒各向异性曲率流的演化方程为

$$V_n = -\mu + \lambda, \tag{5.71}$$

其中 $\lambda \coloneqq \int_\Gamma \mu\,\mathrm{d}s/|\Gamma|$ 为 Lagrange 乘子，用以确保由 Γ 所围成之区域面积在演化过程中保持不变。

类似于 (5.14)，对于面积守恒各向异性曲率流 (5.71)，可得如下**保守型强形式**：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}+\mu-\lambda(t)=0, \tag{5.72a}$$

$$\mu\boldsymbol{n}+\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)=\boldsymbol{0}, \tag{5.72b}$$

其中 $\lambda(t)\coloneqq\int_{\Gamma(t)}\mu\,\mathrm{d}s/|\Gamma(t)|$ 为 Lagrange 乘子。

设初始闭曲线 $\Gamma(0)=\boldsymbol{X}(\cdot,0)\in[H_p^1(\mathbb{I})]^2$，且初始加权曲率 $\mu(\cdot,0)=\mu_0(\cdot)\in H_p^1(\mathbb{I})$ 已知。则基于 (5.72) 可得如下**弱形式**表述：对任意 $t>0$，求解 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t),\mu(\cdot,t))\in[H_p^1(\mathbb{I})]^2\times H_p^1(\mathbb{I})$，使得

$$\left(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X},\varphi\right)_{\Gamma(t)}+\left(\mu-\lambda(t),\varphi\right)_{\Gamma(t)}=0,\qquad\forall\varphi\in[H_p^1(\mathbb{I})]^2, \tag{5.73a}$$

$$\left(\mu\boldsymbol{n},\boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)}-\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X},\partial_s\boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)}=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}\in[H_p^1(\mathbb{I})]^2. \tag{5.73b}$$

于是，针对面积各向异性曲率流 (5.71)，其结构保持参数有限元方法可表述如下：设初始曲线 Γ^0 由 $\boldsymbol{X}^0(\rho_j)=\boldsymbol{X}(\rho_j,0)$，$j=1,2,\cdots,N$ 所给定。对任意 $m\geq0$，求解 $\left(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot),\mu^{m+1}(\cdot)\right)\in[\mathbb{K}_p^h]^2\times\mathbb{K}_p^h$，使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\mu^{m+1}-\lambda^{m,*},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}_p^h, \tag{5.74a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}_p^h]^2, \tag{5.74b}$$

其中 $\lambda^{m,*}\coloneqq\left(\mu^{m+1},1\right)_{\Gamma^m}^h/|\Gamma^m|$。

对格式 (5.74)，我们有如下结构保持性质：

定理 5.4　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足 (5.35)，或在 $\alpha=-1$ 时满足 (5.33)。则当 $k(\theta)$ 充分大时，全离散格式 (5.74) 具有**结构保持性**，即

$$A^{m+1}=A^m=\cdots=A^0,\qquad W^{m+1}\leq W^m\leq\cdots\leq W^0,\qquad\forall m\geq0. \tag{5.75}$$

其证明可参见 [106]，为行文简洁起见，此处从略其细节。

5.5.2　各向异性表面扩散

类似地，对于各向异性表面扩散流的演化方程

$$V_n=\partial_{ss}\mu, \tag{5.76}$$

其**保守型强形式**表述为

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}-\partial_{ss}\mu=0, \tag{5.77a}$$

$$\mu\boldsymbol{n}+\partial_s\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\right)=\boldsymbol{0}. \tag{5.77b}$$

其对应的弱形式可由类似推导过程得到。

设初始闭曲线 Γ^0 由 $\boldsymbol{X}^0(\rho_j)=\boldsymbol{X}(\rho_j,0)$，$j=1,2,\cdots,N$ 所给定。则针对各向异性表面扩散 (5.76)，其保结构参数有限元格式可述之如下：对任意 $m\geq 0$，求解 $\left(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot),\mu^{m+1}(\cdot)\right)\in[\mathbb{K}_p^h]^2\times\mathbb{K}_p^h$，使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\partial_s\mu^{m+1},\partial_s\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}_p^h,\tag{5.78a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}_p^h]^2.\tag{5.78b}$$

对格式 (5.78)，成立如下结构保持性质：

定理 5.5　设 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足 (5.35)，或在 $\alpha=-1$ 时满足 (5.33)。则当 $k(\theta)$ 充分大时，格式 (5.78) 具有**结构保持性**，即

$$A^{m+1}=A^m=\cdots=A^0,\qquad W^{m+1}\leq W^m\leq\cdots\leq W^0,\qquad\forall m\geq 0.\tag{5.79}$$

其证明与定理 2.2 和定理 5.1 之论证类似，故不再赘述。

5.5.3　广义法向速度律

引入表面能矩阵之后，我们得以在**各向异性**情形下采用与 Barrett-Garcke-Nürnberg 型方法 [27,29] 处理中**各向同性**问题相类似的框架与策略。

此处我们考虑如下形式的演化方程

$$V_n=\mathfrak{F}(\mu),\qquad\text{于 }\Gamma(t),\tag{5.80}$$

其中 $\mathfrak{F}(\cdot)$ 为一映射，将闭合演化曲线 $\Gamma(t)$ 上的函数映至 $\Gamma(t)$ 上的函数。

若 $\mathfrak{F}$ 满足

$$\left(\mathfrak{F}(\mu),\mu\right)_{\Gamma(t)}\leq 0,\tag{5.81}$$

则演化方程 (5.80) 满足**面积递减率**与**能量耗散**，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t)=\left(\mathfrak{F}(\mu),1\right)_{\Gamma(t)},\qquad\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t)=\left(V_n,\mu\right)_{\Gamma(t)}=\left(\mathfrak{F}(\mu),\mu\right)_{\Gamma(t)}\leq 0.\tag{5.82}$$

前述各类演化律皆可纳入该方程之框架中。举例而言，对于各向异性表面扩散 $V_n=\partial_{ss}\mu$，经分部积分可得

$$\left(\mathfrak{F}(\mu),\mu\right)_{\Gamma(t)}=\left(\partial_{ss}\mu,\mu\right)_{\Gamma(t)}=-\left(\partial_s\mu,\partial_s\mu\right)_{\Gamma(t)}\leq 0.\tag{5.83}$$

如前所述，为构造演化方程 (5.80) 的结构保持数值格式，形式上应考虑如下**强形式**：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X}-\mathfrak{F}(\mu)=0, \tag{5.84a}$$

$$\mu\boldsymbol{n}+\partial_s\Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta)\partial_s\boldsymbol{X}\Big)=\boldsymbol{0}. \tag{5.84b}$$

尽管记号 $\mathfrak{F}(\mu)$ 属于惯常写法，然欲构造其结构保持的全离散格式，则须审慎处理其所依赖之背景曲线 $\Gamma(t)$。为使此种依赖关系明了，我们采用记号 $\mathfrak{F}(\mu,\Gamma)=\mathfrak{F}(\mu)$。在此观点之下，自然导出一种半隐式离散策略：对 μ 采取第 $m+1$ 时间层**隐式**处理，而对 Γ 则作第 m 时间层**显式**处理。如下所示，此策略可在统一框架下导出结构保持的全离散格式：

设初始数据 Γ^0 已知。对任意 $m\geq 0$，求解 $\big(\boldsymbol{X}^{m+1}(\cdot),\mu^{m+1}(\cdot)\big)\in[\mathbb{K}_p^h]^2\times\mathbb{K}_p^h$，使得

$$\Big(\boldsymbol{n}^{m+\frac12}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\Big)_{\Gamma^m}^h-\Big(\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m),\varphi^h\Big)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}_p^h, \tag{5.85a}$$

$$\Big(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac12},\boldsymbol{\omega}^h\Big)_{\Gamma^m}^h-\Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\Big)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}_p^h]^2. \tag{5.85b}$$

对格式 (5.85)，成立如下结构保持性质：

定理 5.6　设 $\hat\gamma(\theta)$ 满足 (5.35)，或在 $\alpha=-1$ 时满足 (5.33)。则当 $k(\theta)$ 充分大时，格式 (5.85) 是**结构保持**的，即

$$\frac{A^{m+1}-A^m}{\tau}=-\Big(\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m),1\Big)_{\Gamma^m}^h,\qquad W^{m+1}\leq W^m\leq\cdots\leq W^0,\qquad\forall m\geq 0. \tag{5.86}$$

证明　对面积递减率，类似于 (5.36)，有

$$A^{m+1}-A^m=\Big(\boldsymbol{n}^{m+\frac12}\cdot(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m),1\Big)_{\Gamma^m}^h=-\tau\Big(\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m),1\Big)_{\Gamma^m}^h. \tag{5.87}$$

对能量耗散，容易看出 (5.48) 式仍然成立。由此可得

$$\begin{aligned}W^{m+1}-W^m&\leq\Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1},\partial_s(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\Big)_{\Gamma^m}^h\\&=\Big(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac12},\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m\Big)_{\Gamma^m}^h=-\tau\Big(\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m),\mu^{m+1}\Big)_{\Gamma^m}^h\leq 0.\end{aligned} \tag{5.88}$$

最后的不等式由假设 (5.81) 给出。 ■

此处我们给出三个例子以阐明上述思想。至于更多示例及数值方面的讨论，可参见 Barrett 等人所著综述 [29]，以及其中所引文献。

例 5.1　取 $\mathfrak{F}(f,\Gamma) = -f + \int_\Gamma f\,\mathrm{d}s/|\Gamma|$，其中 f 为定义在 Γ 上之函数，则有 $\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m) = -\mu^{m+1} + \int_{\Gamma^m} \mu^{m+1}\,\mathrm{d}s/|\Gamma^m|$。由此即导出面积守恒各向异性曲率流的保结构参数有限元离散，如 (5.74) 所示。

例 5.2　对于表面扩散，取 $\mathfrak{F}(f,\Gamma) = -\partial_{ss} f$，其中 ∂_s 表示沿 Γ 的弧长导数。经分部积分可得 $(\mathfrak{F}(\mu,\Gamma),\mu)_\Gamma = -(\partial_s\mu,\partial_s\mu)_\Gamma \le 0$，从而恢复出各向异性表面扩散的保结构格式 (5.78) 以及定理 5.5。

例 5.3　介于面积守恒各向异性曲率流与表面扩散之间的一类中间型演化律为

$$V_n = \partial_{ss}\eta, \qquad \text{其中 } \left(-\frac{1}{\xi}\partial_{ss} + \frac{1}{\nu}\right)\eta = \mu, \tag{5.89}$$

这里 $\xi,\nu \in \mathbb{R}^+$ 为常数。我们通过

$$\Big(\mathfrak{F}(f,\Gamma^m),\varphi^h\Big)^h_{\Gamma^m} = \Big(\partial_s\eta(f),\partial_s\varphi^h\Big)^h_{\Gamma^m}, \qquad \forall\varphi^h \in \mathbb{K}^h_p, \tag{5.90}$$

来定义映射 $\mathfrak{F}(\cdot,\Gamma^m)$，其中 $\eta(f)$ 表示如下问题之解

$$\frac{1}{\xi}\Big(\partial_s\eta(f),\partial_s\psi^h\Big)^h_{\Gamma^m} + \frac{1}{\nu}\Big(\eta(f),\psi^h\Big)^h_{\Gamma^m} = \Big(f,\psi^h\Big)^h_{\Gamma^m}, \qquad \forall\psi^h \in \mathbb{K}^h_p. \tag{5.91}$$

取 $f = \varphi^h = \mu^{m+1}, \psi^h = \mu^{m+1} - \frac{1}{\nu}\eta(\mu^{m+1})$，可得

$$\Big(\mathfrak{F}(\mu^{m+1},\Gamma^m),\mu^{m+1}\Big)^h_{\Gamma^m} = -\frac{1}{\nu}\Big(\eta,\eta\Big)^h_{\Gamma^m} - \xi\Big(\mu^{m+1} - \frac{1}{\nu}\eta,\mu^{m+1} - \frac{1}{\nu}\eta\Big)^h_{\Gamma^m} \le 0. \tag{5.92}$$

因此，在条件 (5.35) 或 (5.33) 之下，我们可构造中间型演化 (5.89) 的结构保持离散格式。关于该中间型演化的相关理论，可参见 [59-60,133]；其数值方法则可参阅 [7,22]。

5.6　数值实验

本节将汇报大量数值实验结果，以展示所提出之保结构参数有限元格式的高效性能。

5.6.1　数值误差与收敛阶

为度量两条闭曲线 Γ_1 与 Γ_2 之间的距离，我们引入**流形距离** $M(\Gamma_1,\Gamma_2)$，定义如下 [107,149]：

$$M(\Gamma_1,\Gamma_2) \coloneqq |(\Omega_1\backslash\Omega_2)\cup(\Omega_2\backslash\Omega_1)| = 2|\Omega_1\cup\Omega_2| - |\Omega_1| - |\Omega_2|, \tag{5.93}$$

其中 Ω_i $(i=1,2)$ 表示由 Γ_i 所围成之内部区域，$|\Omega|$ 表示区域 Ω 的面积。

定义介于 Γ^m 与 Γ^{m+1} 之间的中间曲线 $\Gamma_{h,\tau}(t)$ 为

$$\Gamma_{h,\tau}(t) \coloneqq \frac{t_{m+1}-t}{\tau}\Gamma^m + \frac{t-t_m}{\tau}\Gamma^{m+1}, \qquad t\in[t_m,t_{m+1}],\ m\geq 0. \tag{5.94}$$

数值误差 $e^h(t)$ 形式上定义为

$$e^h(t) \coloneqq M(\Gamma_{h,\tau}(t),\Gamma(t)). \tag{5.95}$$

我们采用细网格 $h_e=2^{-8},\tau_e=h_e^2$ 下所得之 $\Gamma_{h_e,\tau_e}(t)$ 作为精确解 $\Gamma(t)$ 的近似。

α	(h,τ)	$e^h(t=0.1)$	order	$e^h(t=0.2)$	order	$e^h(t=0.3)$	order
-1	(h_0,τ_0)	1.30e-1	-	1.63e-1	-	1.84e-1	-
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	3.12e-2	2.06	4.03e-2	2.01	4.64e-2	1.98
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	8.02e-3	1.96	1.05e-2	1.94	1.21e-2	1.94
0	(h_0,τ_0)	1.30e-1	-	1.56e-1	-	1.73e-1	-
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	3.14e-2	2.05	4.04e-2	1.95	4.65e-2	1.90
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	8.00e-3	1.97	1.04e-2	1.95	1.20e-2	1.94
1	(h_0,τ_0)	1.31e-1	-	1.58e-1	-	1.76e-1	-
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	3.15e-2	2.05	4.05e-2	1.97	4.66e-2	1.92
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	7.98e-3	1.98	1.04e-2	1.97	1.20e-2	1.96

表 5.1　全离散格式 (5.30) 在 $\alpha=0,\pm1$ 时的数值误差 $e^h(t)$ 与收敛阶。各向异性能量密度如例 I 所示，并置 $\beta=1/9$。其余参数取为 $h_0=2^{-4},\tau_0=h_0^2$。

Table 5.1　Error $e^h(t)$ and the convergence rates of SP-PFEM (5.30) with $\alpha=0,\pm1$. The anisotropy is chosen from the energy density in Case I, with β set to $1/9$. Other parameters are chosen as $h_0=2^{-4},\tau_0=h_0^2$.

在收敛性测试中，我们主要考虑如下两类表面能：

- 例 I: $\hat\gamma(\theta)=1+\beta\cos 3\theta$，其中 $|\beta|<1$。
- 例 II: $\hat\gamma(\theta)=\sqrt{\left(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1)\right)n_1^2+n_2^2}$，其中 $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$。

最小稳定函数 $k^\alpha_{\min}(\theta)$ 的计算过程如下：给定 $\hat\gamma(\theta)$ 及 $\alpha\in\mathbb{R}$，在节点 $\theta_j=-\pi+\frac{j\pi}{10}$，$\forall 0\leq j\leq 20$ 处求解优化问题 (5.39)，以计算 $k_0^\alpha(\theta_j)$；继而通过**线性插值**近似中间点处的 $k_0^\alpha(\theta)$，并由 (5.38) 得到 $k^\alpha_{\min}(\theta)$。在下述收敛性测试中，如无特别说明，稳定函数一律取为 $k(\theta)=k^\alpha_{\min}(\theta)$。

鉴于该数值格式在形式上具有**二阶空间精度**与**一阶时间精度**，除非另有说明，时间步长一律取为 $\tau=h^2$。本节中，初始曲线选为一条长轴为 4、短轴为 1 的椭圆，Newton 迭代的容差设为 $\mathrm{tol}=10^{-11}$。

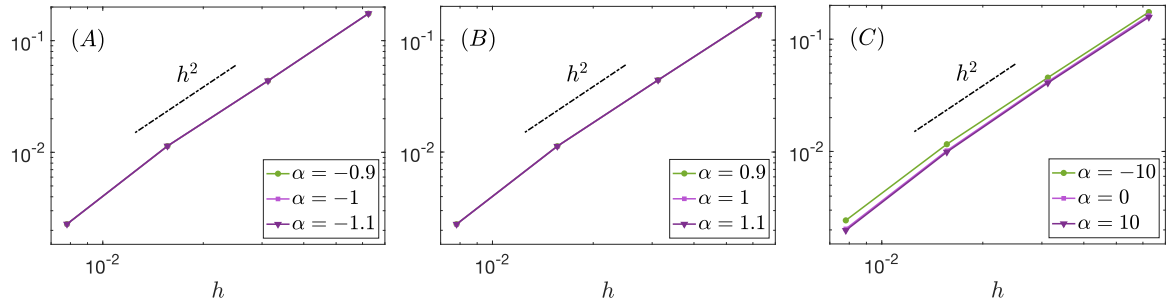


图 5.1　格式 (5.30) 在 $t = 0.25$ 处、不同 α 取值下之收敛阶：(A)–(B) 例 I 且 $\beta = 1/9$；(C) 例 II。
Figure 5.1　Convergence rates of SP-PFEM (5.30) with different α at $t = 0.25$: (A)–(B) Case I with $\beta = 1/9$; and (C) Case II.

数值误差列于表 5.1 与图 5.1。由此可见，格式 (5.30) 在空间上呈现**二阶**精度，而在时间上呈现**一阶**精度。

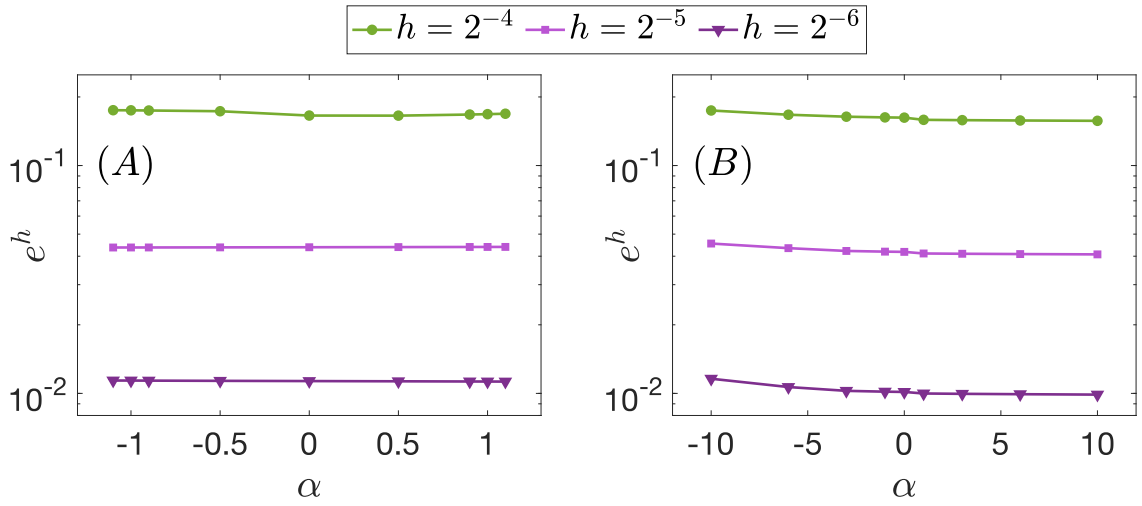


图 5.2　格式 (5.30) 在 $t = 0.25$ 处之误差比较：(A) 例 I 且 $\beta = 1/7$，取 $\alpha = 0, \pm 0.5, \pm 0.9, \pm 1, \pm 1.1$；(B) 例 II，取 $\alpha = 0, \pm 1, \pm 3, \pm 6, \pm 10$。
Figure 5.2　Error comparison of SP-PFEM (5.30) at $t = 0.25$: (A) Case I with $\alpha = 0, \pm 0.5, \pm 0.9, \pm 1, \pm 1.1$; and (B) Case II with $\alpha = 0, \pm 1, \pm 3, \pm 6, \pm 10$.

我们在相同时间 $t = 0.25$ 下，对例 I 与例 II 中的各向异性分别比较了多组不同 α 取值所对应之误差，见图 5.2。具体而言，测试包括基准值 $\alpha = 0, \pm 1$，邻近基准值 $\alpha = \pm 0.9, \pm 1.1$，分数值 $\alpha = \pm 0.5$，以及具有较大绝对值的取值 $\alpha = \pm 3, \pm 6, \pm 10$。数值结果表明，格式 (5.30) 的精度对 α 的选取具有良好的**鲁棒性**。值得指出的是，在绝大多数情形下，各组误差之间的相对差异均控制在 5% 以内。

5.6.2　迭代次数与 CPU 时间

	$(h,\tau)=(2^{-7},4^{-7})$		$(h,\tau)=(2^{-8},4^{-8})$	
α	Iteration count	CPU time (s)	Iteration count	CPU time (s)
-10	3278	17.9999	15856	162.2915
-5	3278	18.0083	13265	148.6691
-1	3278	18.5907	13294	151.7395
0	3278	18.6436	13304	152.5232
1	3278	18.3653	13313	151.2127
5	3278	18.6596	13496	151.3283
10	3278	17.1996	18070	166.7016

表 5.2　格式 (5.30) 在例 I 且 $\beta=1/7$ 时、于 $t=0.1$ 处之总迭代次数与平均 CPU 时间。
Table 5.2　The total number of iterations and average CPU time of SP-PFEM (5.30) for Case I with $\beta=1/7$ at $t=0.1$.

表 5.2 列出了在固定时间 $t=0.1$ 下，格式 (5.30) 在不同 α 取值下的**总迭代次数**与**平均** CPU **时间**。所报告的 CPU 时间取五次独立运行结果之算术平均值。全部计算均在一台配备 Apple M1 Pro 芯片与 16GB 内存、运行 macOS Sequoia 15.3.2 的个人笔记本电脑上完成。由表 5.2 所示数据可见，每一时间步更新所需之平均迭代次数约为 2，表明该格式可借助 Newton 方法以**较高**效率求解。对网格 $(h,\tau)=(2^{-7},4^{-7})$，平均 CPU 时间约为 18 秒；而在更细网格 $(h_e,\tau_e)=(2^{-8},4^{-8})$ 下，平均 CPU 时间约为 150 秒。上述结果表明，数值格式 (5.30) 在不同 α 取值下均保持**一致**的计算效率。

5.6.3　最小稳定函数与网格质量

5.6.3.1　最小稳定函数

图 5.3 展示了三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\beta\cos 3\theta$ 所对应之最小稳定函数，以及其 L^∞ 范数与 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的 L^∞ 范数之比随参数 α 的变化情况。右图给出了在 $\alpha=-1$ 时 k_0^α 的分布曲线。由图可见，随着各向异性强度 β 的**增大**，$k_{\min}^\alpha(\theta)$ 的取值亦随之**增大**。此外，在满足条件 (5.35) 或 (5.33) 的**临界情形** $\beta=\frac{1}{2}$ 下，$k_{\min}^\alpha(\theta)$ 仍保持**有界**，这与定理 5.2 的结论一致。由左图可见，当 $|\alpha|$ **增大**时，$k_{\min}^\alpha$ 的上确界迅速**增长**。在 $-1\le\alpha\le 1$ 的范围内，其增长尚属温和；一旦 $|\alpha|>1$，则表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta)$ 中的稳定化项 $k_{\min}^\alpha(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)\boldsymbol{n}(\theta)^T$ 在量级上**显著**大于其余分量。

图 5.4 给出了不同 α 取值下 $k_{\min}^\alpha(\theta)$ 及 $k_{\min}^\alpha(\theta)+\alpha$ 的曲线。左图显示，当 α **较小**

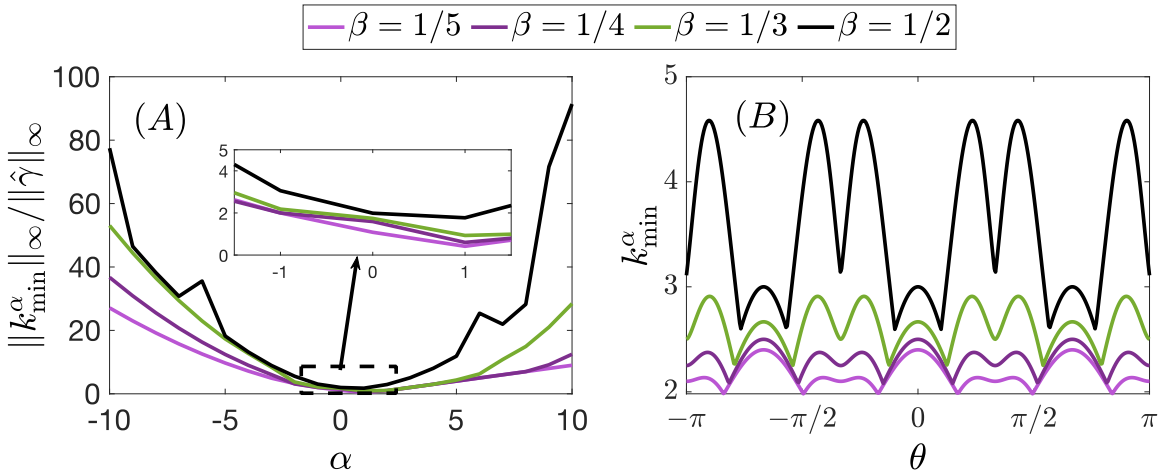


图 5.3　例 I 中最小稳定函数及其 L^{∞} 范数与各向异性函数的 L^{∞} 范数之比值。

Figure 5.3　Minimal stabilizing functions and the ratios of their L^{∞}-norms to the L^{∞}-norm of the anisotropy in Case I.

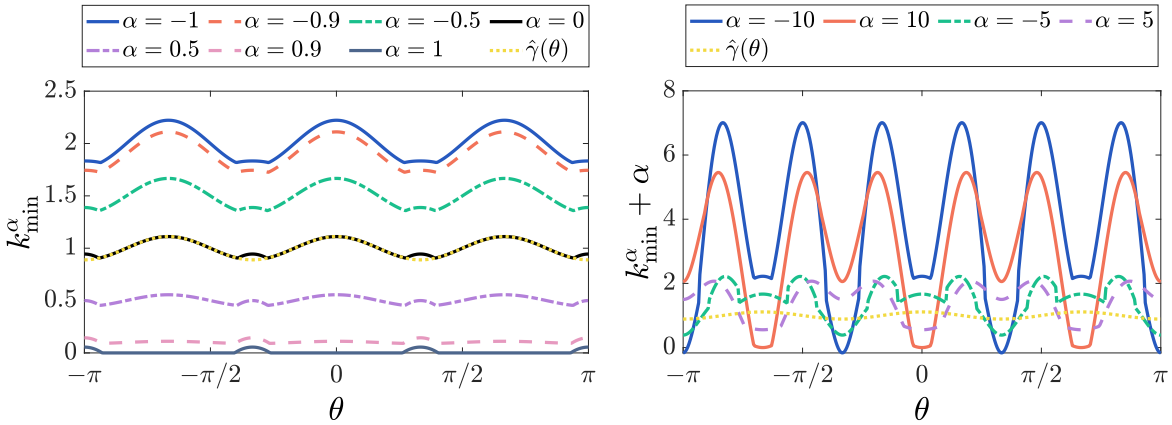


图 5.4　例 I 且 $\beta = 1/9$ 时，不同 α 取值下之最小稳定化函数。

Figure 5.4　Minimal stabilizing functions for different values of α in Case I with $\beta = 1/9$.

时，$k^{\alpha}_{\min}(\theta)$ 近似呈现对 α 的**线性**依赖关系。对于**较大**的 $|\alpha|$，我们以 $k^{\alpha}_{\min}+\alpha$ 作为衡量 $\hat{\boldsymbol{G}}^{\alpha}_{k}(\theta)$ 中正则化项量级的指标。如图 5.4 右所示，该正则化项在数值上**显著**大于 $\hat{\gamma}(\theta)$，这一现象与图 5.3 所得结论一致。

5.6.3.2　加权网格比

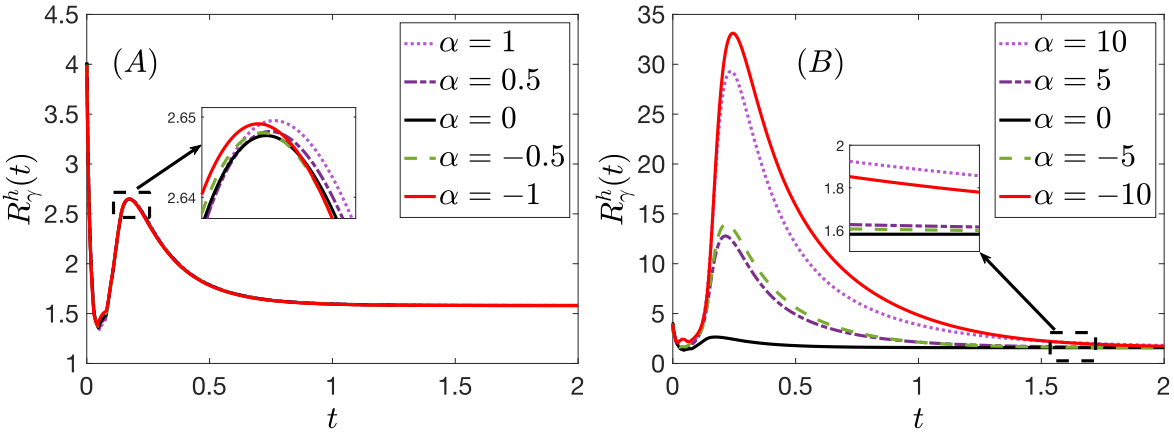


图 5.5　各向异性表面扩散下，长轴 4、短轴 1 的椭圆在格式 (5.78) 下的加权网格比随 α 取值的变化；所用各向异性为 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$。网格尺度取为 $(h,\tau)=(2^{-6},4^{-6})$。

Figure 5.5　Weighted mesh ratio of the SP-PFEM (5.78) of an ellipse with major axis 4 and minor axis 1 under anisotropic surface diffusion with anisotropy $\hat{\gamma}(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$ for different values of α. The mesh sizes are chosen as $(h,\tau)=(2^{-6},4^{-6})$.

为检验网格质量，我们引入加权网格比 $R^h_\gamma(t)$，其定义为

$$R^h_\gamma(t)\Big|_{t=t_m} := \frac{\max\limits_{1\le j\le N}\hat{\gamma}(\theta_j)|\boldsymbol{h}^m_j|}{\min\limits_{1\le j\le N}\hat{\gamma}(\theta_j)|\boldsymbol{h}^m_j|}, \qquad m\ge 0. \tag{5.96}$$

鉴于各向异性曲率流会使曲线**收缩**并最终形成**奇点**，我们选取各向异性表面扩散进行数值实验，以考察所提出方法在**长时间**演化下之网格性质。

图 5.5 展示了在各向异性表面扩散下，长轴 4、短轴 1 的椭圆在全离散格式 (5.78) 下的加权网格比 $R^h_\gamma(t)$，其中各向异性取为 $\hat{\gamma}(\theta)=1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$。数值结果表明，当 $t\to\infty$ 时，加权网格比 R^h_γ 收敛于一**常数**，说明格式 (5.78) 具有**渐近准均匀**的网格分布。进一步地，当 $|\alpha|$ 取值较小时，R^h_γ 的演化行为几乎**一致**；然而当 $|\alpha|$ 较大时，在演化初期 R^h_γ 可能显著**增大**。因此，在实际计算中，为获得更优的网格质量，建议选取**较小**的 $|\alpha|$。

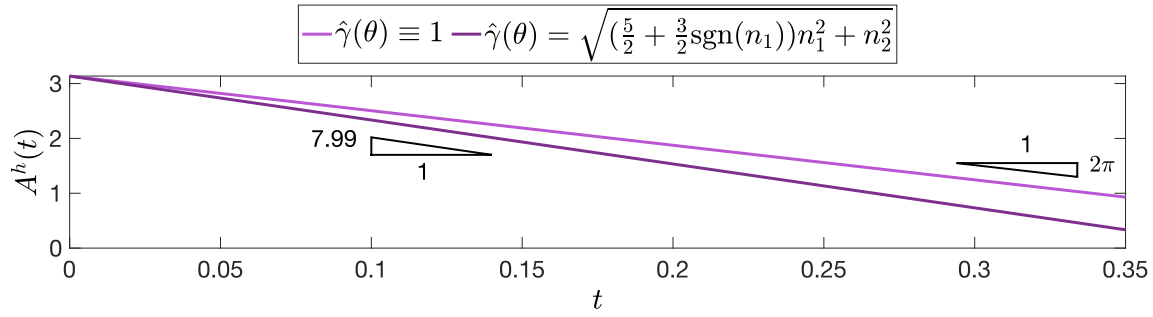


图 5.6　长轴 4、短轴 1 的椭圆在 $\alpha = 0$ 时由格式 (5.30) 所计算的各向异性曲率流下的面积及其递减率。

Figure 5.6　Area and area decay rate of an ellipse with major axis 4 and minor axis 1 under anisotropic curvature flow by SP-PFEM (5.30) with $\alpha = 0$.

5.6.4　面积递减率与能量耗散

图 5.6 展示了长轴为 4、短轴为 1 的椭圆在格式 (3.12) 下的各向异性曲率流演化过程中面积的变化情况，其中考虑两类表面能密度：(i) 各向同性表面能 $\hat{\gamma}(\theta) \equiv 1$；(ii) 例 II 中所示表面能。由图可见，面积随时间近似呈**线性**衰减。

对于在各向同性曲率流下演化的简单闭曲线，其面积递减率满足 $\frac{\mathrm{d}A(t)}{\mathrm{d}t} = \int_\Gamma \kappa \,\mathrm{d}s = -2\pi$，并保持为**常数**。对于各向异性表面能情形，面积递减率趋近于常数 $-\int_\Gamma \mu \,\mathrm{d}s$。此处 Γ 表示由各向异性 $\hat{\gamma}(\theta)$ 所确定的 Wulff 形状 [117]，并按比例缩放使其所围面积与初始曲线一致。特别地，对于例 II 所示之表面能密度，有 $-\int_\Gamma \mu \,\mathrm{d}s \approx -7.9858$ [13]。

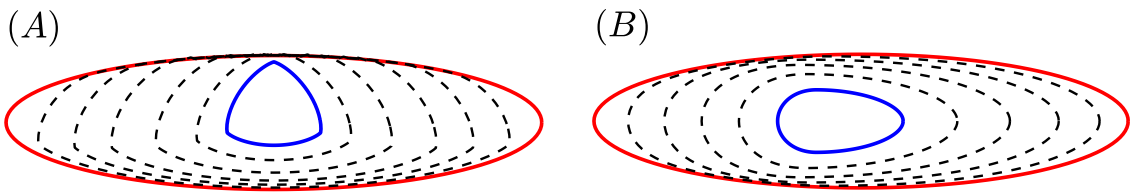


图 5.7　长轴 4、短轴 1 的椭圆在格式 (5.30) 下的形态演化：(A) 例 I 且 $\beta = 1/7$；(B) 例 II。红色实线表示初始形状，蓝色实线分别表示 (A) $t = 0.45$ 与 (B) $t = 0.35$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。参数取为 $\alpha = 0, (h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。

Figure 5.7　Morphological evolution of an ellipse with major axis 4 and minor axis 1 under anisotropic curvature flow by SP-PFEM (5.2) for: (A) Case I with $\beta = 1/7$; and (B) Case II. The red lines represent the initial shapes. The blue lines represent the numerical curves at (A) $t = 0.45$ and (B) $t = 0.35$. The black dashed lines represent the intermediate curves. Parameters are chosen as $\alpha = 0, (h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$.

图 5.7–图 5.8 给出了长轴为 4、短轴为 1 的椭圆在格式 (5.30) 下模拟各向异性曲率流的形态变化及其规范化能量演化曲线。选取的各向异性分别为 (A) 例 I 且置

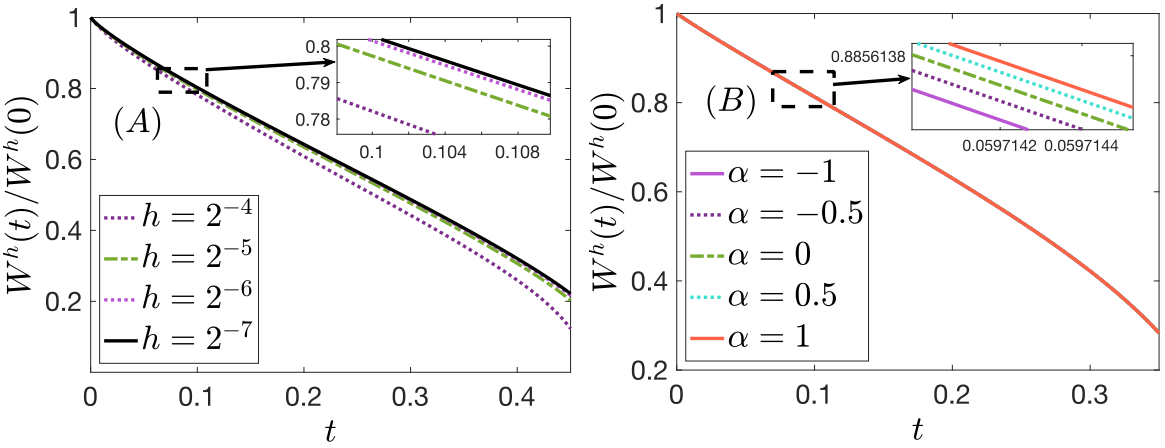


图 5.8　格式 (5.30) 的规范化能量：(A) 例 I 且 $\beta = 1/7, \alpha = 0$；(B) 例 II 并取不同 α。图 (B) 中网格尺度取为 $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。

Figure 5.8　Normalized energy of SP-PFEM (5.30) for (A) Case I with $\beta = 1/7$ and $\alpha = 0$; and (B) Case II with different values of α. The mesh sizes for figure (B) are chosen as $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$.

$\beta = 1/7$，以及 (B) 例 II。由图 5.7–图 5.8 观察可得：

- 当 $\hat{\gamma}(\theta)$ 满足能量稳定条件 (5.35) 时，规范化能量呈**单调递减**。
- 对于不同 α 取值，格式 (5.30) 的能量衰减曲线形态极为相似，表明该方法对参数 α 具有良好的**鲁棒性**。

5.6.5　各向异性曲率流的形态演化

下文中，我们采用格式 (5.30) 模拟闭曲线在各向异性曲率流所驱动下的形态演化。若非另有说明，网格尺度统一取为 $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。

我们首先考虑如下具有**较大曲率变化**的非凸初始曲线 [126]：

$$\begin{cases} x = \cos(2\pi\rho), & \rho \in [0, 1], \\ y = \frac{1}{2}\sin(2\pi\rho) + \sin(\cos(2\pi\rho)) + \sin(2\pi\rho)\left(\frac{1}{5} + \sin(2\pi\rho)\sin^2(6\pi\rho)\right), \end{cases} \tag{5.97}$$

以及一条仅具C^0 **光滑性**、具有**尖角**与**凹陷**结构的初始曲线。对应数值结果分别见图 5.9 与图 5.10。

在图 5.9–图 5.10 中，我们分别采用两类表面能量密度进行数值模拟：(A) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{7}\cos 3\theta$；(B) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{12}\cos 4(\theta + \frac{\pi}{6})$。由图可见，在各向异性曲率流作用下，曲线将逐渐**收缩**，其形态则趋向于由相同各向异性所决定之**同一**极限形状。更具体地说，由 $\hat{\gamma}(\theta)$ 所确定的 Wulff 形状 [117]。

理论上广泛所知，自相交曲线在**曲率驱动**的演化过程中往往会产生**奇性**，其局部几何结构在这些点附近变得极为**复杂**，从而给数值模拟带来显著挑战。图 5.11 展示

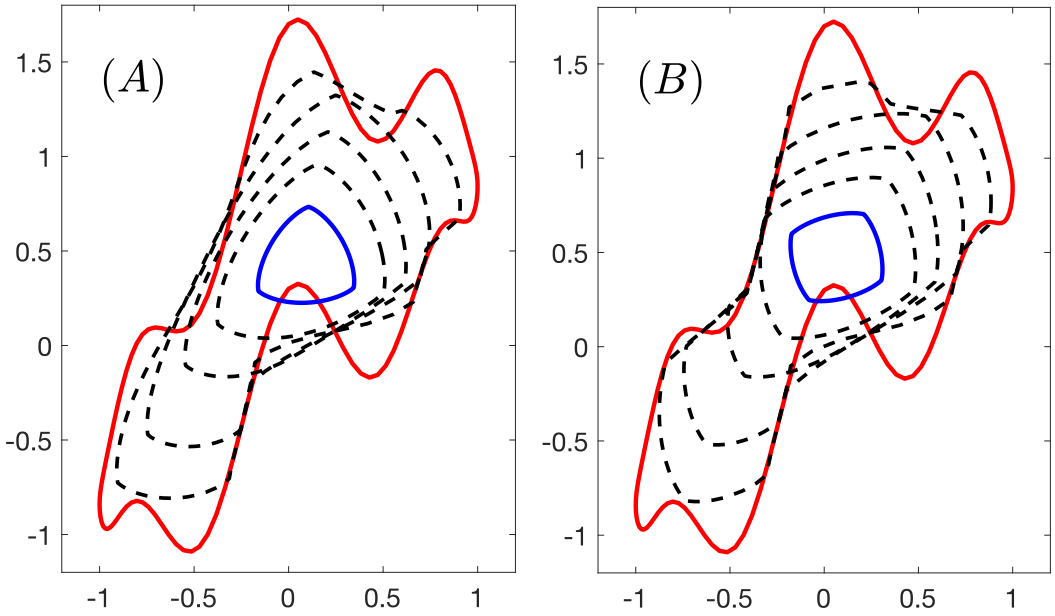


图 5.9　具有较大曲率变化的非凸初始曲线在 $\alpha = 2$ 时由格式 (5.30) 所模拟之各向异性曲率流形态演化。红色曲线表示初始形状，蓝色曲线表示 $t = 0.32$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。

Figure 5.9　Morphological evolution of a non-convex initial curve with large curvature variations under anisotropic curvature flow by SP-PFEM (5.30) with $\alpha = 2$. The red lines represent the initial shapes. The blue lines represent the numerical curves at $t = 0.32$. The black dashed lines represent the intermediate curves.

了一条具有三重自交点的初始曲线在各向异性曲率流作用下的演化过程。类似的各向同性算例可参见 [55] 中的图 7.2。数值结果表明，即便在各向异性情形下，我们的方法仍能有效捕捉**尖点型奇性**之形成与发展。

5.6.6　其它各向异性几何流的数值结果

本部分中，我们针对两类保持面积的各向异性几何流进行数值实验：面积守恒各向异性曲率流与各向异性表面扩散。为在数值层面验证面积守恒性质，我们引入如下**规范化面积损失**作为衡量指标：

$$\left.\frac{\Delta A^h(t)}{A^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{A^{m+1} - A^0}{A^0}, \qquad \forall m \geq 0. \tag{5.98}$$

5.6.6.1　面积守恒各向异性曲率流

图 5.12 展示了长轴为 8、短轴为 1 的椭圆在面积守恒各向异性曲率流下的形态演化。表面能密度取所谓l^4-范数度量各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = \sqrt[4]{n_1^4 + n_2^4}$，其中 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2)^T = (-\sin\theta, \cos\theta)^T$ [9]。规范化面积损失与 Newton 迭代次数绘于图 5.13 (A)。可见规范化

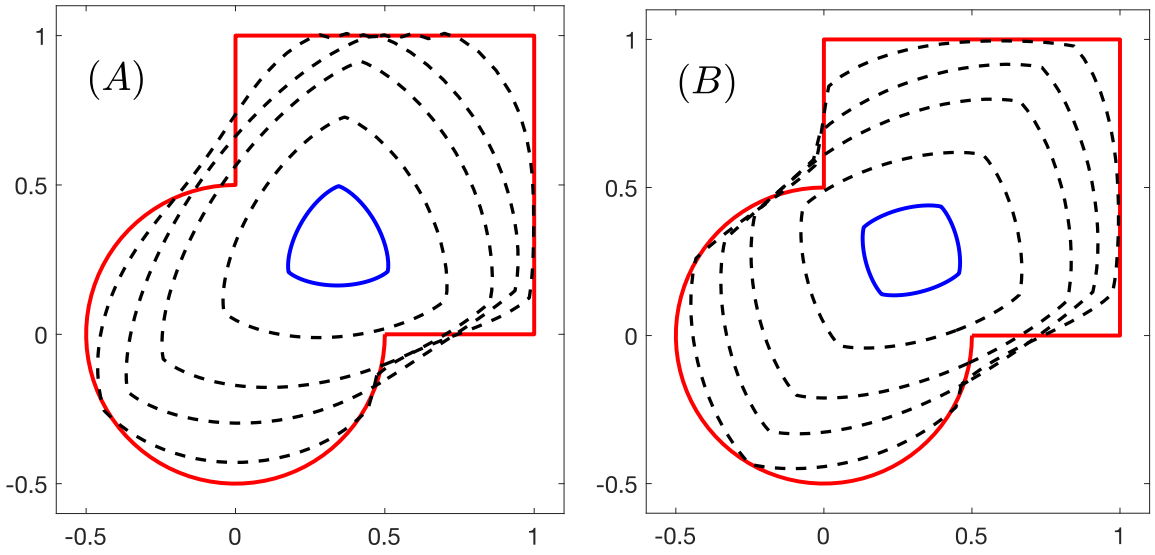


图 5.10　C^0 光滑初始曲线在 $\alpha = -2$ 时由格式 (5.30) 所模拟之各向异性曲率流形态演化。红色曲线表示初始形状，蓝色曲线表示 $t = 0.24$ 时刻之数值曲线，黑色虚线表示中间演化曲线。

Figure 5.10　Morphological evolution of an initial curve with C^0-smoothness under anisotropic curvature flow by SP-PFEM (5.30) with $\alpha = -2$. The red lines represent the initial shapes. The blue lines represent the numerical curves at $t = 0.24$. The black dashed lines represent the intermediate curves.

面积损失约为 10^{-15} 量级，已接近**舍入误差**，表明面积在机器精度意义下得以**守恒**。Newton 迭代次数由初始阶段的 4 次迅速下降至 3 次。与此同时，如图 5.13 (B) 所示，规范化能量呈单调**递减**。

我们亦采用格式 (5.74) 模拟若干复杂初始曲线在面积守恒各向异性曲率流作用下之形态演化。对应数值结果见图 5.14–图 5.15。主要考虑了以下两种曲线：

- 蝴蝶结形曲线：

$$\begin{cases} x = \cos(2\pi\rho), \\ y = 2\sin(2\pi\rho) - 1.9\sin^3(2\pi\rho), \end{cases} \qquad \rho \in [0,1]; \tag{5.99}$$

- 花形曲线：

$$\begin{cases} x = (2+\cos(12\pi\rho))\cos(2\pi\rho), \\ y = (2+\cos(12\pi\rho))\sin(2\pi\rho), \end{cases} \qquad \rho \in [0,1]. \tag{5.100}$$

由图可见，与理论预期一致，两条曲线均逐渐演化至与所给各向异性相对应之 Wulff 形状 [142]。

5.6.6.2　各向异性表面扩散

图 5.16–图 5.17 展示了长轴与短轴之比为 8 : 1 的椭圆在各向异性表面扩散作用下的演化过程，以及规范化面积损失、迭代次数与规范化能量的变化情况。表面能密

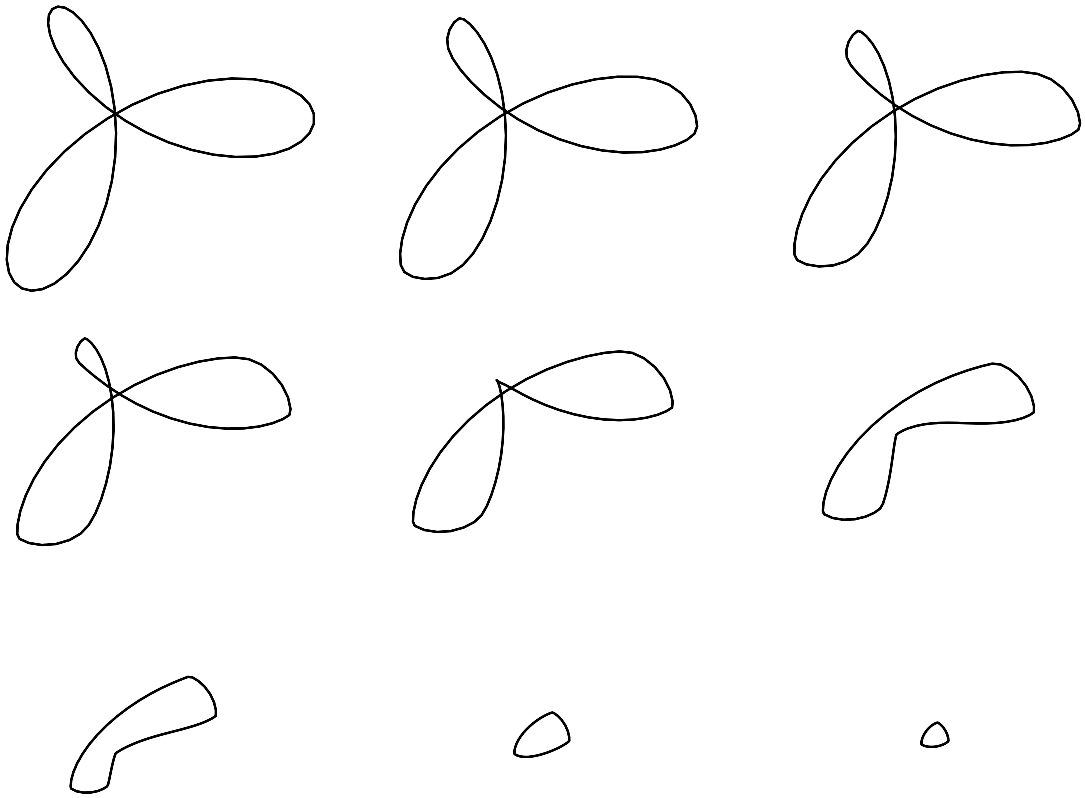


图 5.11　自相交初始曲线在各向异性演化下于 $t = 0$, 0.028, 0.056, 0.084, 0.112, 0.2, 0.3, 0.4, 0.42 时刻的形态变化。表面能密度取三重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$。其余参数设为 $\alpha = -1,\ h = 2^{-7},\ \tau = 0.005$。

Figure 5.11　Plots of the anisotropic evolution of a self-intersecting initial curve at times $t = 0, 0.028, 0.056, 0.084, 0.112, 0.2, 0.3, 0.4, 0.42$. A 3-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{9}\cos 3\theta$ is used for the surface energy density. Other parameters are set as $\alpha = -1, h = 2^{-7}, \tau = 0.005$.

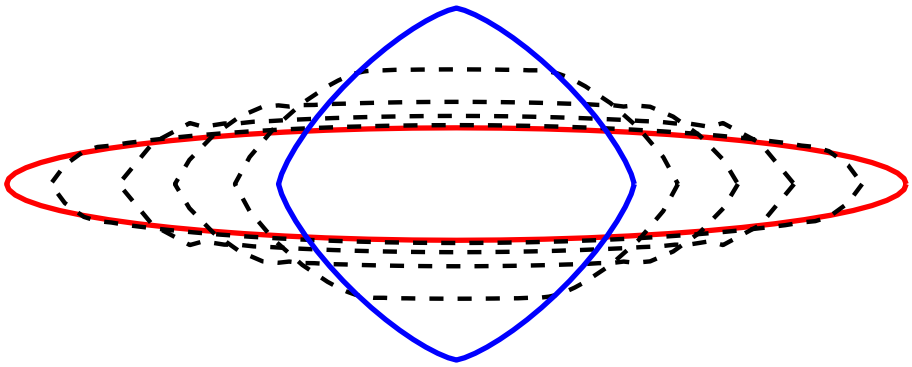


图 5.12　长轴 8、短轴 1 的椭圆在面积守恒各向异性曲率流下由格式 (5.74) 所模拟之形态演化，其中各向异性取 l^4-范数度量 $\hat{\gamma}(\theta)=\sqrt[4]{n_1^4+n_2^4}$，且 $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。参数设为 $\alpha=2.5,(h,\tau)=(2^{-6},4^{-6})$。

Figure 5.12　Morphological evolution of an ellipse with major axis 8 and minor axis 1 under area-conserved anisotropic curvature flow by SP-PFEM (5.74) with the l^4-norm metric anisotropy $\hat{\gamma}(\theta)=\sqrt[4]{n_1^4+n_2^4}$, where $\boldsymbol{n}=(n_1,n_2)^T=(-\sin\theta,\cos\theta)^T$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves. Parameters are set to $\alpha=2.5,(h,\tau)=(2^{-6},4^{-6})$.

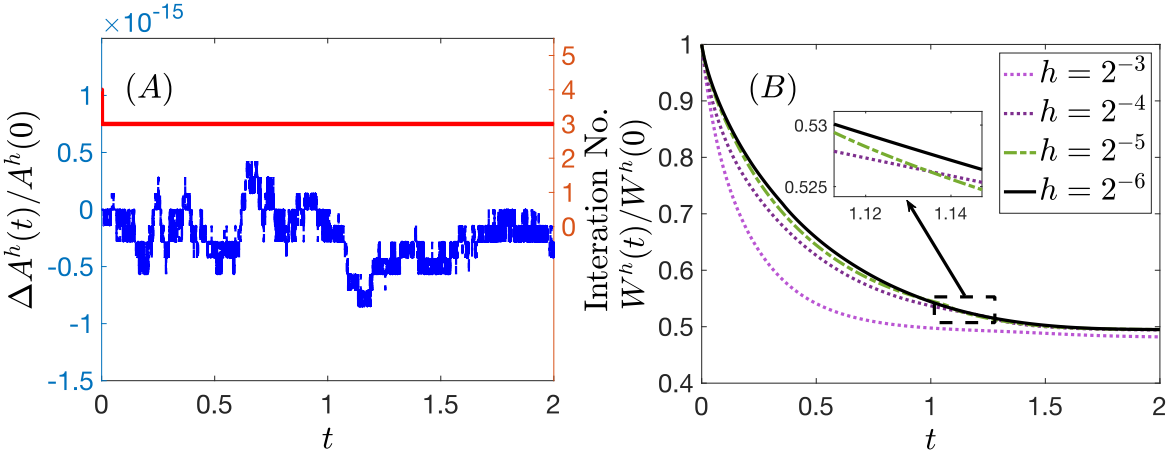


图 5.13　图 5.12 所对应的时间演化：(A) 规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）；(B) 规范化能量。

Figure 5.13　Temporal evolution of (A) normalized area loss (blue dash line) and iteration number (red line); and (B) normalized energy of SP-PFEM (5.74) for the anisotropic curvature flow in Figure 5.12.

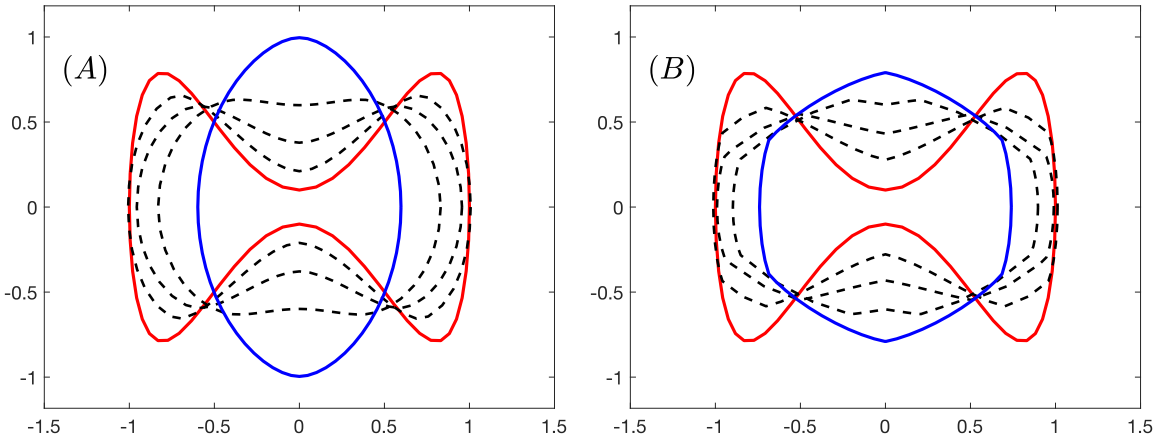


图 5.14　蝴蝶结形初始曲线在面积守恒各向异性曲率流下之形态演化，其中各向异性分别取为：(A) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{28}\cos 2\theta$；(B) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{30}\cos 6\theta$。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。其余参数设为 $\alpha = 0.5, (h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$。

Figure 5.14　Morphological evolution of a bowtie-shaped curve under area-conserved anisotropic curvature flow with anisotropy (A) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{28}\cos 2\theta$; and (B) $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{30}\cos 6\theta$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves. Other parameter are set as $\alpha = 0.5, (h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$.

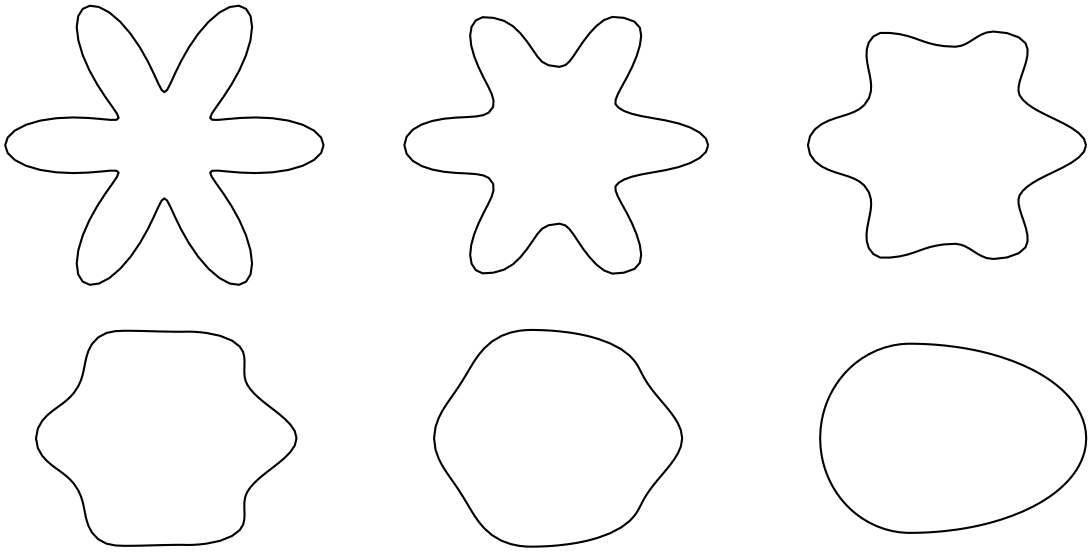


图 5.15　花形初始曲线在面积保持的各向异性曲率流下于 $t = 0, 0.05, 0.15, 0.25, 0.4, 2.5$ 时刻之演化快照。各向异性取例 II，其余参数设为 $\alpha = -0.5,\ h = 2^{-7},\ \tau = 0.005$。

Figure 5.15　Snapshots of a flower initial curve under area-conserved anisotropic curvature flow with anisotropy Case II at times $t = 0, 0.05, 0.15, 0.25, 0.4, 2.5$. Other parameter are set as $\alpha = -0.5, h = 2^{-7}, \tau = 0.005$.

度取例 I 并置 $\beta = 1/9$。图 5.17 结果表明，当条件 (5.35) 得以满足时，该方法在数值上保持**面积守恒**并具有**能量耗散**性质。

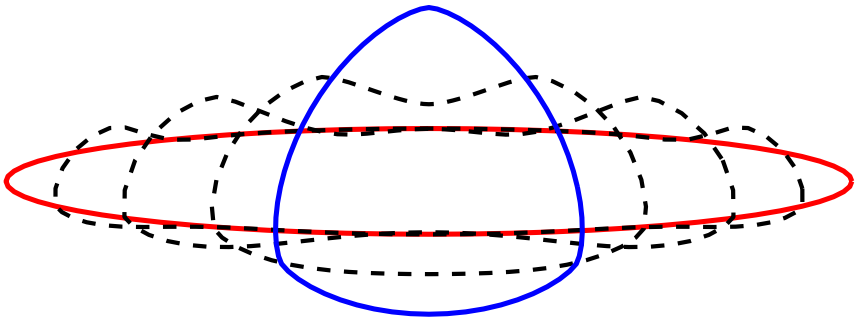


图 5.16　长轴 8、短轴 1 的椭圆在各向异性表面扩散作用下之形态演化。红色与蓝色曲线分别表示初始形状与数值平衡态，黑色虚线表示中间演化曲线。各向异性取为例 I 并置 $\beta = 1/9$，网格尺度取为 $(h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$。

Figure 5.16　Morphological evolution of an ellipse with major axis 8 and minor axis 1 governed by anisotropic surface diffusion for Case I with $\beta = 1/9$. The red and blue lines represent the initial shape and the numerical equilibrium, respectively; and the black dash lines represent the intermediate curves. Mesh sizes are set to $(h, \tau) = (2^{-6}, 4^{-6})$.

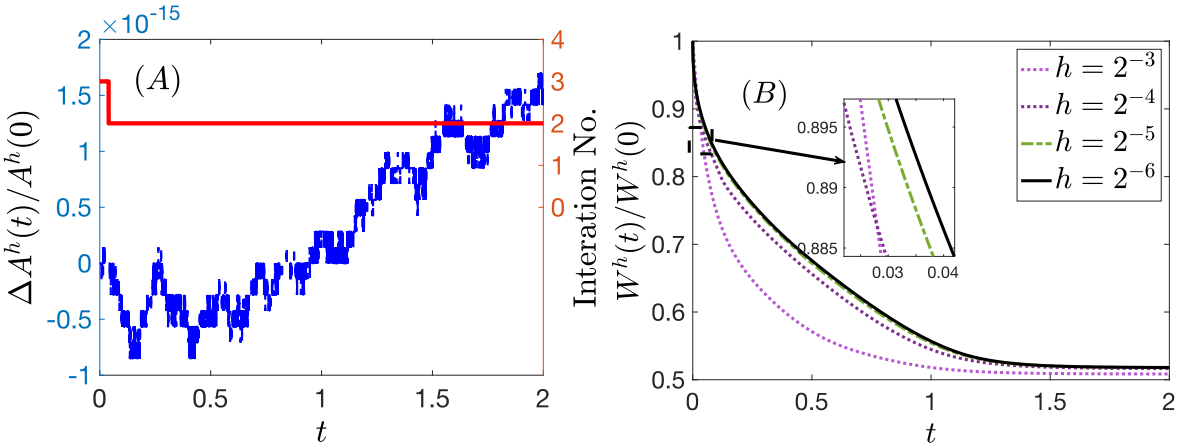


图 5.17　图 5.16 中各向异性表面扩散对应的时间演化：(A) 规范化面积损失（蓝色虚线）与迭代次数（红线）；(B) 规范化能量。

Figure 5.17　Temporal evolution of (A) normalized area loss (blue dash line) and iteration number (red line); and (B) normalized energy of SP-PFEM (5.78) for the anisotropic surface diffusion in Figure 5.16.

图 5.18 给出了四叶形曲线在表面扩散下演化的数值实验结果。Escher 等 [61] 与 Barrett 等 [21] 曾在**各向同性**表面扩散情形下模拟该曲线之演化，并指出其极限形状为**三重覆盖之圆**。我们的结果表明，在**各向异性**表面扩散下，其行为在定性上保持相

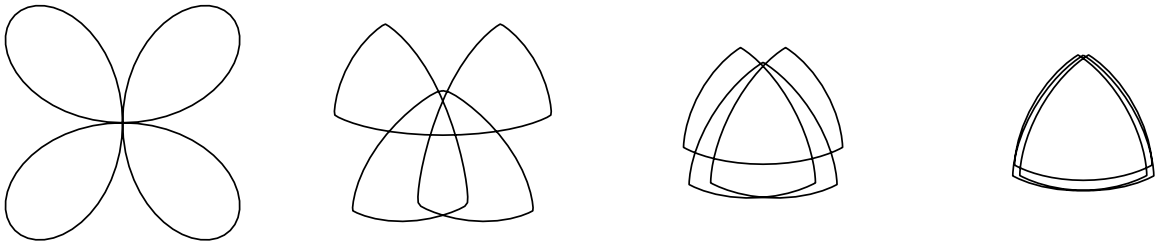


图 5.18　四叶形曲线在各向异性表面扩散作用下于 $t = 0, 0.15, 0.5, 0.9$ 时刻的形态演化。各向异性取为例 I，参数设为 $\alpha = 0.5$, $\beta = 1/5$, $h = 2^{-7}$, $\tau = 0.001$。
Figure 5.18　Anisotropic surface diffusion of a quadrifolium with anisotropy Case I at times $t = 0, 0.15, 0.5, 0.9$. Parameters are set as $\alpha = 0.5, \beta = 1/5, h = 2^{-7}, \tau = 0.001$.

似：对于正时间，曲线相对于原点之绕数保持**不变**，而其极限形状则趋于与所给各向异性相对应之**三重覆盖** Wulff **形状**，参见图 5.18。

图 5.19 中之初始曲线由一边长为 2 的正方形去除一条细长矩形区域（0.02×1.8）构成。Bänsch [6] 将此类形状称为近似裂隙区域 (almost slit domain)。既有研究 [6,21] 表明，在各向同性表面扩散作用下，该曲线因发生交叉而产生**颈缩断裂**现象。我们的数值结果显示，在各向异性表面扩散情形下，此类行为同样**存在**。尤为重要的是，相较于 [6,21] 所采用的方法，我们的算法在整个演化过程中保证面积的精确**守恒**。

我们亦对 Bernoulli 双纽线进行了数值实验，其结果见图 5.20。众所周知，Bernoulli 双纽线所围之**带号面积** (signed area) 恒为零。鉴于各向异性表面扩散在**保持**面积的同时**降低**总能量（即加权周长），因此合理预期该曲线将收缩至**一点**。数值结果验证了这一推测：在整个模拟过程中，所观测之围成面积始终保持在 10^{-16} 量级，在**机器精度**意义下可视为**零**。与此同时，曲线的两个瓣状部分在最终塌缩为单点之前，分别逐渐趋近于与给定各向异性相对应之 Wulff **形状**。值得注意的是，由于各向异性效应的存在，曲线在演化过程中呈现缓慢的整体**旋转**运动。此类现象在各向同性情形下并不存在，在该情形中曲线仅在**原位**收缩而不发生取向变化，参见 [61]。

5.7　本章总结

我们对用于各向异性几何流的结构保持型参数有限元方法进行了细致的分析与比较。通过引入超参数 α，我们能够以统一形式表述所有可能的表面能矩阵，从而将各类参数化有限元格式格式纳入同一分析框架。我们证明了 $3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) > 0$ 是适用于所有表面能矩阵的共同能量稳定性条件。在表面能矩阵为对称的特殊情形下，该条件可改进为 $3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) \geq 0$，且该条件对能量稳定性而言是充分必要的。除

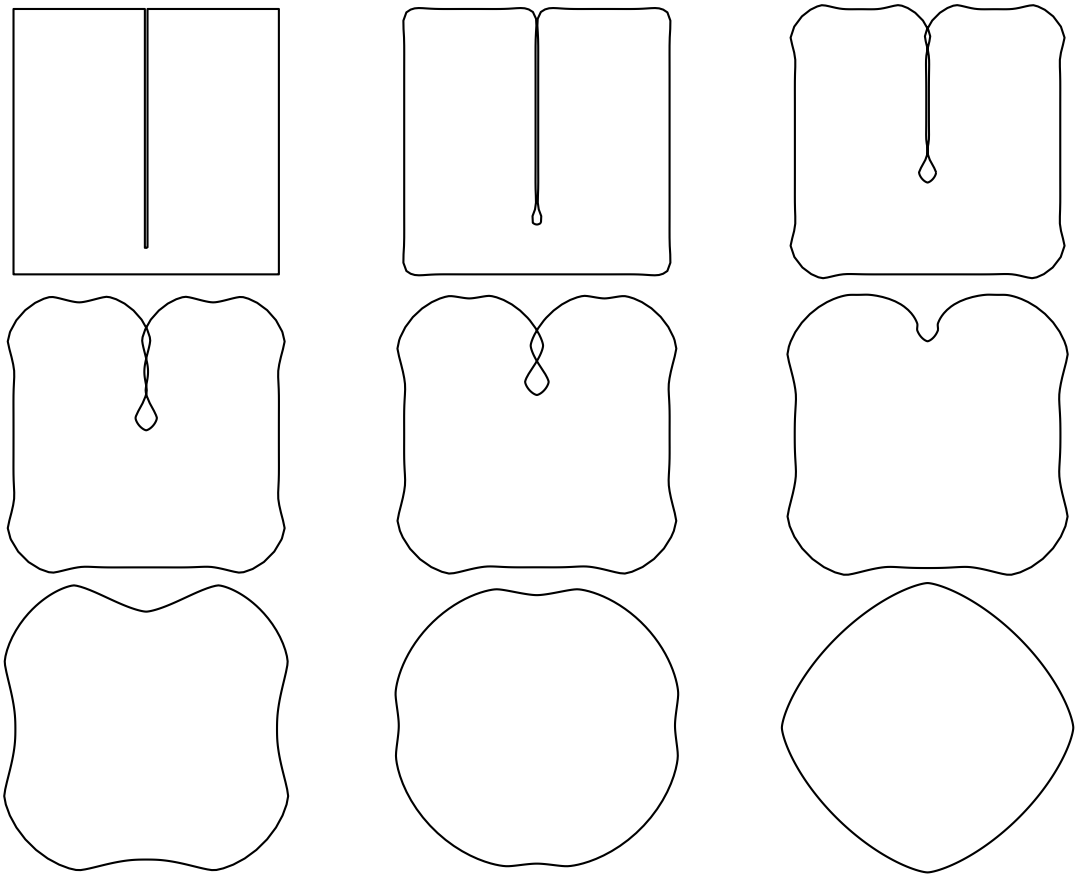


图 5.19　近似裂隙区域在各向异性表面扩散于 $t = 0, 5\times10^{-6}, 7\times10^{-5}, 2.5\times10^{-4}, 5\times10^{-4}, 7.5\times10^{-4}, 0.002, 0.02, 0.1$ 时刻的形态演化。表面能取作四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta) = 1 + \frac{1}{16}\cos 4\theta$，参数设为 $\alpha = 1,\ h = 1/288,\ \tau = 1\times10^{-6}$。

Figure 5.19　Anisotropic surface diffusion of an almost slit domain with 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta) = 1+\frac{1}{16}\cos 4\theta$ at times $t = 0, 5\times10^{-6}, 7\times10^{-5}, 2.5\times10^{-4}, 5\times10^{-4}, 7.5\times10^{-4}, 0.002, 0.02, 0.1$. Parameters are set as $a = 1, h = 1/288, \tau = 1\times10^{-6}$.

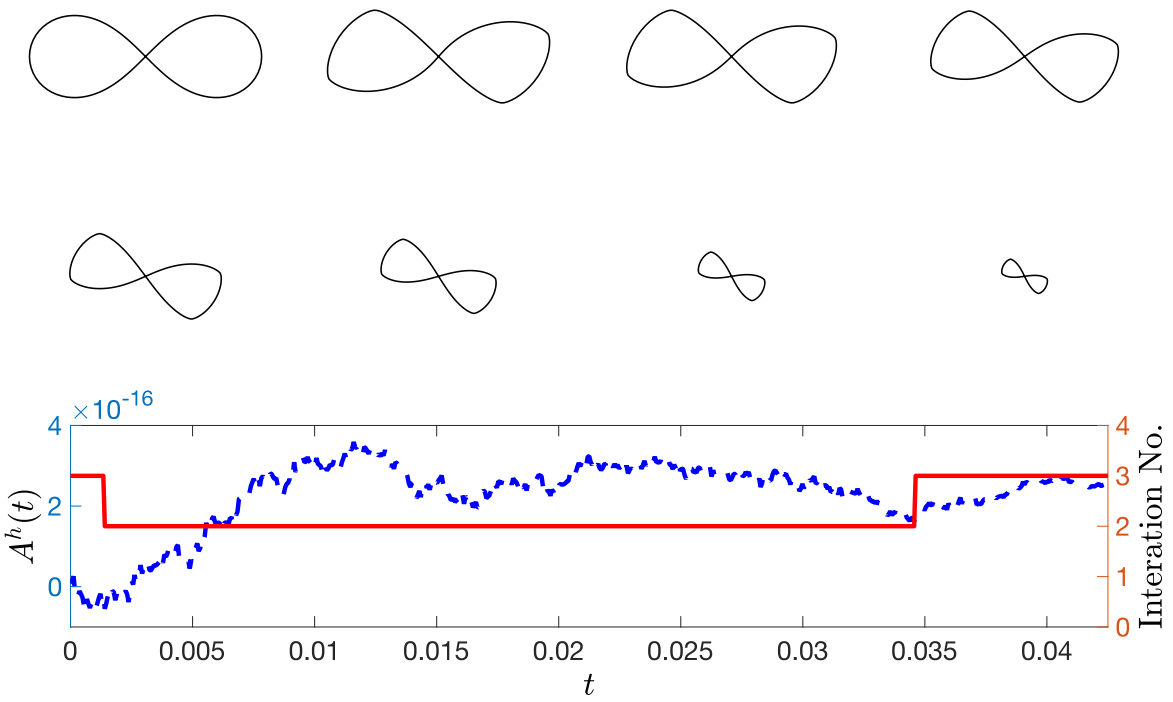


图 5.20　Bernoulli 双纽线在各向异性表面扩散作用下的形态演化，其中 $t = 0, 0.008, 0.015, 0.025, 0.035, 0.04, 0.0425$**。各向异性取为例 I，参数取** $\beta = 1/9$, $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$。

Figure 5.20　Evolution of the Bernoulli's lemniscate governed by anisotropic surface diffusion with anisotropy Case I at times $t = 0, 0.008, 0.015, 0.025, 0.035, 0.04, 0.0425$**. Parameters are chosen as** $\beta = 1/9$, $(h, \tau) = (2^{-7}, 4^{-7})$**.**

网格质量外，所提出的方法在不同 α 取值下于精度、计算效率与结构保持性方面表现一致，表明其具有一定的鲁棒性。本文方法可自然地推广至一般各向异性几何流，包括面积守恒各向异性曲率流与各向异性表面扩散，并为构造一般各向异性曲率驱动问题的结构保持型数值算法提供了一种有效离散框架。

第 6 章　基于 α-表面能矩阵的保结构参数化近似：曲面各向异性演化

本章我们的主要目标是将对平面曲线演化的基于 α-表面能矩阵的保结构参数有限元格式 (5.30) 推广到三维空间中的曲面演化。类似前文中二维的情形，我们将考虑形如 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 的**各向异性**表面能量密度，其中 (θ,ϕ) 为曲面单位外法向量 $\boldsymbol{n}$ 的球坐标。在本章中，我们的主要贡献是对曲面演化的各向异性表面扩散流提出并分析了一种保结构参数有限元方法，其保持**质量守恒**，并在 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 满足非常温和的条件下具有无条件**能量稳定性**。尽管通过 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量将矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}$ 推广至三维是简单，但仍存许多技术困难亟待克服。

首先我们需用曲面梯度 ∇_Γ 替换弧长微分 ∂_s，后者数学性质上要更为**复杂**。其二则是前文中关于加权曲率向量的 $\mu\boldsymbol{n}$ 保守形式俱依赖于 ∂_s，因此需要对 ∇_Γ 建立一个**推广**版本。最后也是最关键者，二维情形下最小稳定函数可表示为法向量幅角 θ 的函数，但此表示仅在二维成立，故我们需在三维给出其恰当**推广**并分析**存在性**，而这将迫使我们引入**全新**的证明技术。

本章的结构如下：我们首先给出三维空间中曲面演化的各向异性表面扩散流的演化方程；之后我们将定义推广后的 α-表面能矩阵并用其建立三维空间中 $\mu\boldsymbol{n}$ 的**保守强形式**；基于此，我们将给出其对应的**弱形式**及**参数有限元全离散格式**，我们将对数值格式的能量稳定性作详尽分析；最后我们将展示大量的数值算例以证明方法的**高效性**与**结构保持性**。

6.1　几何演化方程

设 $\Gamma(t)$ 为 $\mathbb{R}^3$ 中一闭的、可定向的、随时间演化的 C^2-曲面，其由位置向量 $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\rho},t)$ 参数化如下：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}(\cdot,t)\colon \Gamma_0 &\to \mathbb{R}^3, \qquad \forall t>0,\\ \boldsymbol{\rho} &\mapsto \boldsymbol{X}(\boldsymbol{\rho},t) \coloneqq (X_1(\boldsymbol{\rho},t),X_2(\boldsymbol{\rho},t),X_3(\boldsymbol{\rho},t))^T,\end{aligned} \tag{6.1}$$

其中 $\boldsymbol{\rho}\in\Gamma_0\subset\mathbb{R}^3$，而 Γ_0 表示初始的闭且可定向曲面。

设 f 为定义在 $\Gamma(t)$ 上的可微函数，则表面梯度算子 ∇_Γ 定义为

$$\nabla_\Gamma f = \nabla_{\Gamma(t)} f \coloneqq \nabla \bar{f} - (\nabla \bar{f}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}, \tag{6.2}$$

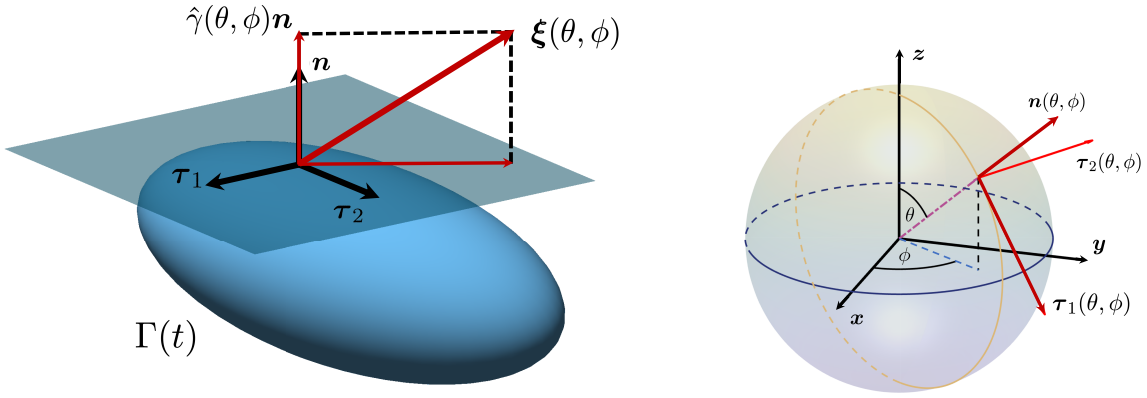


图 6.1　$\mathbb{R}^3$ 中的闭且可定向曲面 $\Gamma(t)$ 在各向异性表面能 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 作用下的各向异性表面扩散（左），以及局部正交归一标架 $\{\boldsymbol{n},\tau_1,\tau_2\}$ 的球坐标表示（右）；其中 $\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)$ 表示 Cahn–Hoffman 的 $\boldsymbol{\xi}$-向量。

Figure 6.1　A schematic illustration of a closed and orientable surface $\Gamma(t)$ in $\mathbb{R}^3$ under anisotropic surface diffusion with an anisotropic surface energy $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ (left) and the spherical coordinates of the lcoal orthonormal frames $\{\boldsymbol{n},\tau_1,\tau_2\}$ (right), where $\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)$ represents the Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-vector.

其中 $\bar{f}$ 是 f 在 $\mathbb{R}^3$ 中 $\Gamma(t)$ 的某一邻域内的一个光滑延拓，$\boldsymbol{n}$ 是 $\Gamma(t)$ 的单位外法向量，而 ∇ 表示 $\mathbb{R}^3$ 中的经典梯度算子 [29,94].

为行文方便，引入记号 $\nabla_\Gamma f = (\underline{D}_1 f, \underline{D}_2 f, \underline{D}_3 f)^T$。于是，对可微向量值函数 $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, f_3)^T$，其曲面 Jacob 矩阵与曲面散度算子定义为

$$\nabla_\Gamma \boldsymbol{f} = \nabla_{\Gamma(t)} \boldsymbol{f} \coloneqq \begin{bmatrix} (\nabla_\Gamma f_1)^T \\ (\nabla_\Gamma f_2)^T \\ (\nabla_\Gamma f_3)^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{D}_1 f_1 & \underline{D}_2 f_1 & \underline{D}_3 f_1 \\ \underline{D}_1 f_2 & \underline{D}_2 f_2 & \underline{D}_3 f_2 \\ \underline{D}_1 f_3 & \underline{D}_2 f_3 & \underline{D}_3 f_3 \end{bmatrix}, \tag{6.3a}$$

$$\nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{f} = \nabla_{\Gamma(t)} \cdot \boldsymbol{f} \coloneqq \underline{D}_1 f_1 + \underline{D}_2 f_2 + \underline{D}_3 f_3. \tag{6.3b}$$

此外，对定义在 $\Gamma(t)$ 上的标量函数 f，Laplace–Beltrami 算子 Δ_Γ 为

$$\Delta_\Gamma f = \Delta_{\Gamma(t)} f \coloneqq \nabla_\Gamma \cdot (\nabla_\Gamma f) = \underline{D}_1(\underline{D}_1 f) + \underline{D}_2(\underline{D}_2 f) + \underline{D}_3(\underline{D}_3 f). \tag{6.4}$$

如图 6.1 所示，现在我们考察曲面 $\Gamma(t)$ 在各向异性表面扩散作用下的控制方程

$$V_n = \Delta_\Gamma \mu, \tag{6.5}$$

其中 μ 为加权曲率。为刻画加权曲率 μ，我们引入与各向异性表面能密度 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 相关的 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量。为此，先将 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 作一次齐次延拓，定义

$$\gamma(\boldsymbol{p}) \coloneqq \begin{cases} |\boldsymbol{p}|\hat{\gamma}(\theta,\phi), & \forall \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^3 \backslash \{\boldsymbol{0}\}, \\ 0, & \boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}, \end{cases} \tag{6.6}$$

其中 $(|\boldsymbol{p}|,\theta,\phi)$ 表示 $\boldsymbol{p}$ 的球坐标。于是，Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量定义为

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1,\xi_2,\xi_3)^T = \boldsymbol{\xi}(\theta,\phi) \coloneqq \nabla\gamma(\boldsymbol{p})\Big|_{|\boldsymbol{p}|=1}, \qquad (\theta,\phi)\in[0,\pi]\times 2\pi\mathbb{T}. \tag{6.7}$$

为获得 $\boldsymbol{\xi}$ 的显式表示，我们引入如下局部正交归一标架 $\{\boldsymbol{n},\boldsymbol{\tau}_1,\boldsymbol{\tau}_2\}$（参见图 6.1 右）：

$$\boldsymbol{n}(\theta,\phi) = (\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)^T, \tag{6.8a}$$
$$\boldsymbol{\tau}_1(\theta,\phi) = (\cos\theta\cos\phi,\cos\theta\sin\phi,-\sin\theta)^T, \tag{6.8b}$$
$$\boldsymbol{\tau}_2(\theta,\phi) = (-\sin\phi,\cos\phi,0)^T, \tag{6.8c}$$

其中 $(\theta,\phi)\in[0,\pi]\times 2\pi\mathbb{T}$，且 $\{\boldsymbol{\tau}_1,\boldsymbol{\tau}_2\}$ 构成切空间的一组正交归一基。在此标架下，Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量可作如下分解 [94]：

$$\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta,\phi)\boldsymbol{n}(\theta,\phi) + \frac{\partial\hat{\gamma}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\boldsymbol{\tau}_1(\theta,\phi) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\hat{\gamma}(\theta,\phi)}{\partial\phi}\boldsymbol{\tau}_2(\theta,\phi). \tag{6.9}$$

由 [84]，加权曲率 μ 可由 $\boldsymbol{\xi}$ 表为

$$\mu = \nabla_\Gamma\cdot\boldsymbol{\xi}, \tag{6.10}$$

其中 $\nabla_\Gamma\cdot$ 表示 Γ 上的表面散度算子。从而各向异性表面扩散方程 (6.5) 可改写为如下几何偏微分方程：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X} = \Delta_\Gamma\mu, \qquad \forall t>0, \tag{6.11a}$$
$$\mu = \nabla_\Gamma\cdot\boldsymbol{\xi}, \tag{6.11b}$$

其中 $\boldsymbol{\xi}$ 为如 (6.9) 所表示之 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量。

6.2　α-表面能矩阵与保守形式

为导出各向异性表面扩散 (6.11) 的保守形式，我们引入如下 α-表面能矩阵：

$$\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi) = \hat{\gamma}(\theta,\phi)I_3 - \boldsymbol{n}(\theta,\phi)\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)^T + \alpha\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)\boldsymbol{n}(\theta,\phi)^T + k(\theta,\phi)\boldsymbol{n}(\theta,\phi)\boldsymbol{n}(\theta,\phi)^T, \tag{6.12}$$

其中 $\alpha\in\mathbb{R}$，$k(\theta,\phi)\colon[0,\pi]\times 2\pi\mathbb{T}\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ 为预先给定的非负稳定函数，而 $\boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)$ 为 (6.9) 式所表示之 Cahn-Hoffman $\boldsymbol{\xi}$-向量。

引理 6.1 (**乘积法则**，[29])　设 $\Gamma\subset\mathbb{R}^d$ $(d\geq 2)$ 为余一维的闭可定向 C^2-流形。设 $\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}\colon\Gamma\to\mathbb{R}^d, \boldsymbol{F}\colon\Gamma\to\mathbb{R}^{d\times d}$ 为 C^1 函数。则有如下乘积法则成立：

$$\nabla_\Gamma(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}) = (\nabla_\Gamma\boldsymbol{f})^T\boldsymbol{g} + (\nabla_\Gamma\boldsymbol{g})^T\boldsymbol{f}, \tag{6.13a}$$
$$\nabla_\Gamma\cdot(\boldsymbol{F}\boldsymbol{g}) = (\nabla_\Gamma\cdot\boldsymbol{F})\cdot\boldsymbol{g} + \mathrm{Tr}(\boldsymbol{F}\nabla_\Gamma\boldsymbol{g}). \tag{6.13b}$$

定理 6.1　对加权曲率 μ，有如下几何恒等式成立：

$$\mu \boldsymbol{n} = -\nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi) \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} \right), \qquad \forall \alpha \in \mathbb{R}. \tag{6.14}$$

证明　结合恒等式 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{n}$ 以及如下几何恒等式

$$\nabla_\Gamma \boldsymbol{X} = I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T, \tag{6.15}$$

我们有

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi) \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} &= \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T + \alpha \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T + k(\theta,\phi)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T \right) \left(I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T \right) \\ &= \hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T - \hat{\gamma}(\theta,\phi)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T + (\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T \\ &= \hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T. \end{aligned} \tag{6.16}$$

因此，只需证

$$\mu \boldsymbol{n} = -\nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T \right). \tag{6.17}$$

应用乘积法则 (6.13) 可得

$$\begin{aligned} \nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 \right) &= \nabla_\Gamma \hat{\gamma}(\theta,\phi) = \nabla_\Gamma (\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n}) \\ &= (\nabla_\Gamma \boldsymbol{\xi})^T \boldsymbol{n} + (\nabla_\Gamma \boldsymbol{n})^T \boldsymbol{\xi} \\ &= (\nabla_\Gamma \boldsymbol{n})^T \boldsymbol{\xi} \end{aligned} \tag{6.18}$$

从而，

$$\begin{aligned} \nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T \right) &= \nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) I_3 \right) - \nabla_\Gamma \cdot \left(\boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T \right) \\ &= (\nabla_\Gamma \boldsymbol{n})^T \boldsymbol{\xi} - (\nabla_\Gamma \boldsymbol{n})\boldsymbol{\xi} - (\nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{\xi})\boldsymbol{n} \\ &= -\mu \boldsymbol{n}. \end{aligned} \tag{6.19}$$

最后的等式来自于恒等式 $\mu = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{\xi}$ 以及 $\nabla_\Gamma \boldsymbol{n}$ 的对称性。 ■

借助上述几何恒等式 (6.14)，几何演化方程 (6.11) 的**保守型强形式**可表述如下：

$$\boldsymbol{n} \cdot \partial_t \boldsymbol{X} - \Delta_\Gamma \mu = 0, \qquad \forall t > 0, \tag{6.20a}$$

$$\mu \boldsymbol{n} + \nabla_\Gamma \cdot \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi) \nabla_\Gamma \boldsymbol{X} \right) = \boldsymbol{0}. \tag{6.20b}$$

注 6.1　在各向同性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) \equiv 1$ 的情形下，加权曲率 μ 退化为经典的平均曲率 H。与二维情形类似，取 $k(\theta,\phi) \equiv 1-\alpha$，则表面能矩阵化为 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi) \equiv I_3$，从而得到经典的 *BGN* 表面扩散流表述 *[22]*。

注 6.2　在二维情形中，任一满足 $\mu \boldsymbol{n} = -\nabla_\Gamma \cdot (\boldsymbol{G} \nabla_\Gamma \boldsymbol{X})$ 的表面能矩阵 $\boldsymbol{G}$，皆可写成 $\boldsymbol{G}_k^\alpha$ 的形式 *(见第 5 章注 5.3)*。然而，该结论在三维中不再成立。因此，除上文所提出的表述之外，尚可能存在其他潜在的表述方式。

6.3　保结构参数有限元离散

6.3.1　弱形式及其性质

为导出 (6.20) 的弱形式，我们对时间演化曲面 $\Gamma(t)$ 引入如下 L^2 空间：

$$L^2(\Gamma(t)) \coloneqq \left\{ u\colon \Gamma(t) \to \mathbb{R} \;\middle|\; \int_{\Gamma(t)} |u|^2 \,\mathrm{d}A < +\infty \right\}, \tag{6.21}$$

并赋以内积

$$\Big(u, v\Big)_{\Gamma(t)} \coloneqq \int_{\Gamma(t)} uv \,\mathrm{d}A, \qquad \forall u, v \in L^2(\Gamma(t)). \tag{6.22}$$

对取值于向量或矩阵的函数，其在 $[L^2(\Gamma(t))]^3$ 或 $[L^2(\Gamma(t))]^{3\times 3}$ 中的相应推广是直接的。特别地，对矩阵值函数 $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V} \in [L^2(\Gamma(t))]^{3\times 3}$，其内积定义为

$$\Big\langle \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V} \Big\rangle_{\Gamma(t)} \coloneqq \int_{\Gamma(t)} \boldsymbol{U} : \boldsymbol{V} \,\mathrm{d}A, \tag{6.23}$$

其中 $\boldsymbol{U} : \boldsymbol{V} = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{U})$ 为 Frobenius 内积。定义 $\Gamma(t)$ 上的 Sobolev 空间为

$$H^1(\Gamma(t)) \coloneqq \left\{ u \in L^2(\Gamma(t)) \;\middle|\; \nabla_\Gamma u \in [L^2(\Gamma(t))]^3 \right\}, \tag{6.24a}$$

$$[H^1(\Gamma(t))]^3 \coloneqq \left\{ \boldsymbol{u} \in [L^2(\Gamma(t))]^3 \;\middle|\; \nabla_\Gamma \boldsymbol{u} \in [L^2(\Gamma(t))]^{3\times 3} \right\}. \tag{6.24b}$$

引理 6.2 (矩阵值函数的散度定理)　设 $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ $(d \geq 2)$ 为余一维的紧致可定向 C^2-流形。设 $\boldsymbol{F}\colon \Gamma \to \mathbb{R}^{d\times d}$ 为 C^1 的矩阵值函数，$\boldsymbol{n}$ 表示 Γ 的法向量。若 $\boldsymbol{F}\boldsymbol{n} \equiv \boldsymbol{0}$，则对任意 $\boldsymbol{\omega} \in [C^1(\Gamma)]^d$，有

$$\int_\Gamma (\nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{F}) \cdot \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A = -\int_\Gamma \boldsymbol{F} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A + \int_{\partial\Gamma} (\boldsymbol{F}\boldsymbol{\nu}) \cdot \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}s, \tag{6.25}$$

其中 $\boldsymbol{\nu}$ 为 $\partial\Gamma$ 的单位余法向量。

证明　将引理 6.1 应用于 $\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\omega}$，并在 Γ 上积分，可得

$$\int_\Gamma (\nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{F}) \cdot \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A = -\int_\Gamma \boldsymbol{F} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega} \,\mathrm{d}A + \int_\Gamma \nabla_\Gamma \cdot \left(\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\omega}\right) \,\mathrm{d}A. \tag{6.26}$$

由流形上的散度定理，有

$$\int_\Gamma \nabla_\Gamma \cdot \left(\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\omega}\right) = -\int_\Gamma (\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\omega}) \cdot H\boldsymbol{n} \,\mathrm{d}A + \int_{\partial\Gamma} (\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\omega}) \cdot \boldsymbol{\nu} \,\mathrm{d}s, \tag{6.27}$$

从而，

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma}(\nabla_{\Gamma}\cdot\boldsymbol{F})\cdot\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}A &= -\int_{\Gamma}\boldsymbol{F}:\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}A-\int_{\Gamma}(\boldsymbol{F}^{T}\boldsymbol{\omega})\cdot H\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}A+\int_{\partial\Gamma}(\boldsymbol{F}^{T}\boldsymbol{\omega})\cdot\boldsymbol{\nu}\,\mathrm{d}s\\ &= -\int_{\Gamma}\boldsymbol{F}:\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}A-\int_{\Gamma}H(\boldsymbol{F}\boldsymbol{n})^{T}\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}A+\int_{\partial\Gamma}\boldsymbol{\nu}^{T}\boldsymbol{F}^{T}\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}s\\ &= -\int_{\Gamma}\boldsymbol{F}:\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}A+\int_{\partial\Gamma}(\boldsymbol{F}\boldsymbol{\nu})\cdot\boldsymbol{\omega}\,\mathrm{d}s.\end{aligned}\tag{6.28}$$

■

分别取 $\varphi\in H^{1}(\Gamma(t))$ 与 $\boldsymbol{\omega}\in[H^{1}(\Gamma(t))]^{3}$ 作为检验函数乘于式 (6.20a) 与 (6.20b)，并在曲面 $\Gamma(t)$ 上积分。经由分部积分并结合引理 6.2，可得如下**弱形式**：设初始曲面 Γ_{0} 为闭且可定向，并由 $\boldsymbol{X}(\cdot,0)\coloneqq\boldsymbol{X}_{0}(\boldsymbol{\rho})=\boldsymbol{\rho}$，$\forall\boldsymbol{\rho}\in\Gamma_{0}$ 给定。求 $(\boldsymbol{X}(\cdot,t),\mu(\cdot,t))\in[H^{1}(\Gamma(t))]^{3}\times[H^{1}(\Gamma(t))]$，使得

$$\Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_{t}\boldsymbol{X},\varphi\Big)_{\Gamma(t)}+\Big(\nabla_{\Gamma}\mu,\nabla_{\Gamma}\varphi\Big)_{\Gamma(t)}=0,\qquad\forall\varphi\in H^{1}(\Gamma(t)),\tag{6.29a}$$

$$\Big(\mu\boldsymbol{n},\boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)}-\Big\langle\hat{\boldsymbol{G}}_{k}^{\alpha}(\theta,\phi)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X},\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}\Big\rangle_{\Gamma(t)}=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}\in[H^{1}(\Gamma(t))]^{3}.\tag{6.29b}$$

命题 6.1　设 $\Gamma(t)$ 为弱形式 (6.29) 的解。记 $V(t)$ 为 $\Gamma(t)$ 所包围的体积，$W(t)$ 为总自由表面能，形式上定义为

$$V(t)\coloneqq\frac{1}{3}\int_{\Gamma(t)}\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}A,\qquad W(t)\coloneqq\int_{\Gamma(t)}\hat{\gamma}(\theta,\phi)\,\mathrm{d}A.\tag{6.30}$$

则所包围的体积**守恒**，而总自由能量为**递减**的，即

$$V(t)\equiv V(0),\qquad W(t)\le W(t')\le W(0),\qquad\forall t\ge t'\ge 0.\tag{6.31}$$

6.3.2　全离散格式

设 $\tau>0$ 为一致时间步长，并记 Γ^{m} 为 $\Gamma(t)=\boldsymbol{X}(\cdot,t)$ 在第 m 时间层 $t_{m}=m\tau$，$m\ge 0$ 处的近似。设多面体曲面 Γ^{m} 由一族两两不交的三角形单元 $\{\sigma_{j}^{m}\}_{j=1}^{J}$ 组成，即

$$\Gamma^{m}\coloneqq\bigcup_{j=1}^{J}\overline{\sigma_{j}^{m}},\qquad\sigma_{i}^{m}\cap\sigma_{j}^{m}=\emptyset,\qquad\forall i\ne j,\tag{6.32}$$

其中每个三角形 $\sigma_{j}^{m}=[\boldsymbol{q}_{j_{1}}^{m},\boldsymbol{q}_{j_{2}}^{m},\boldsymbol{q}_{j_{3}}^{m}]$ 由按逆时针顺序排列的三个顶点所确定，并以 $\{\boldsymbol{q}_{k}^{m}\}_{k=1}^{K}$ 表示网格顶点集合。

多面体曲面 Γ^m 上的单位外法向量 $\boldsymbol{n}^m$ 为一分片常值的向量值函数，其定义为

$$\boldsymbol{n}^m|_{\sigma_j^m} = \frac{\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}}{|\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}|} \coloneqq \boldsymbol{n}_j^m, \qquad \forall 1 \le j \le J, \tag{6.33}$$

其中 $\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}$ 为与 σ_j^m 相关联的方向向量，由

$$\mathcal{J}\{\sigma_j^m\} \coloneqq \left(\boldsymbol{q}_{j_2}^m - \boldsymbol{q}_{j_1}^m\right) \times \left(\boldsymbol{q}_{j_3}^m - \boldsymbol{q}_{j_1}^m\right) \tag{6.34}$$

给出，而 $\boldsymbol{n}^m$ 的倾角 θ^m 与方位角 ϕ^m 则由 (6.8a) 所确定。

我们引入 Γ^m 上的**分片线性有限元空间**如下：

$$\mathbb{K}^m = \mathbb{K}(\Gamma^m) \coloneqq \left\{ u \in C(\Gamma^m) \,\middle|\, u|_{\sigma_j^m} \in \mathcal{P}^1(\sigma_j^m),\ \forall 1 \le j \le J \right\}, \tag{6.35}$$

其中 $\mathcal{P}^1(\sigma_j^m)$ 表示定义在 σ_j^m 上且次数 ≤ 1 的多项式所组成的空间。

对 $\mathbb{K}^m/[\mathbb{K}^m]^3$ 中的标量/向量值函数，其**质量集中内积** (mass-lumped inner product) $(\cdot,\cdot)_{\Gamma^m}^h$ 定义为

$$\left(u, v\right)_{\Gamma^m}^h \coloneqq \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{J}\sum_{i=1}^{3} |\sigma_j^m| u((\boldsymbol{q}_{j_i}^m)^-) v((\boldsymbol{q}_{j_i}^m)^-), \tag{6.36}$$

其中 $u((\boldsymbol{q}_{j_i}^m)^-) \coloneqq \lim\limits_{\substack{\boldsymbol{q}\to\boldsymbol{q}_{j_i}^m \\ \boldsymbol{q}\in\sigma_j^m}} u(\boldsymbol{q})$，$|\sigma_j^m| = \frac{1}{2}|\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}|$ 表示单元 σ_j^m 之面积。对矩阵值函数，可类似连续情形来定义其内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\Gamma^m}^h$：

$$\left\langle \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V} \right\rangle_{\Gamma^m}^h \coloneqq \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{J}\sum_{i=1}^{3} |\sigma_j^m| \boldsymbol{U}((\boldsymbol{q}_{j_i}^m)^-) : \boldsymbol{V}((\boldsymbol{q}_{j_i}^m)^-), \qquad \forall \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V} \in [\mathbb{K}^m]^{3\times 3}. \tag{6.37}$$

最后，对任意单元 $\sigma = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]$，**离散曲面梯度算子** ∇_Γ 可按如下方式计算：

$$\nabla_\Gamma f|_\sigma \coloneqq f(\boldsymbol{q}_1)\frac{(\boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{q}_3)\times \boldsymbol{n}}{|\mathcal{J}\{\sigma\}|} + f(\boldsymbol{q}_2)\frac{(\boldsymbol{q}_3 - \boldsymbol{q}_1)\times \boldsymbol{n}}{|\mathcal{J}\{\sigma\}|} + f(\boldsymbol{q}_3)\frac{(\boldsymbol{q}_1 - \boldsymbol{q}_2)\times \boldsymbol{n}}{|\mathcal{J}\{\sigma\}|}, \tag{6.38}$$

其中 $\boldsymbol{n} = \mathcal{J}\{\sigma\}/|\mathcal{J}\{\sigma\}|$ 为 σ 的法向量。对向量值函数 $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, f_3)^T$，其**离散曲面 Jacob 矩阵** 定义为

$$\nabla_\Gamma \boldsymbol{f}|_\sigma \coloneqq \begin{bmatrix} (\nabla_\Gamma f_1)^T \\ (\nabla_\Gamma f_2)^T \\ (\nabla_\Gamma f_3)^T \end{bmatrix}, \qquad \forall \boldsymbol{f} \in [\mathcal{P}^1(\sigma)]^3. \tag{6.39}$$

我们现阐述各向异性表面扩散 (6.11) 的保结构参数有限元离散如下：

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\nabla_\Gamma \mu^{m+1}, \nabla_\Gamma \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}^m, \tag{6.40a}$$

$$\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta^m, \phi^m)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}^h \right\rangle_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}^m]^3. \tag{6.40b}$$

此处向量 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$ 定义为

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}} \coloneqq \frac{\mathcal{J}\{\sigma_j^m\} + 4\mathcal{J}\{\sigma_j^{m+\frac{1}{2}}\} + \mathcal{J}\{\sigma_j^{m+1}\}}{6|\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}|}, \tag{6.41}$$

其中 $\sigma_j^{m+\frac{1}{2}} \coloneqq \frac{1}{2}(\sigma_j^m + \sigma_j^{m+1}) = \left[\frac{\boldsymbol{q}_{j_1}^m+\boldsymbol{q}_{j_1}^{m+1}}{2}, \frac{\boldsymbol{q}_{j_2}^m+\boldsymbol{q}_{j_2}^{m+1}}{2}, \frac{\boldsymbol{q}_{j_3}^m+\boldsymbol{q}_{j_3}^{m+1}}{2}\right]$。

注 6.3 非线性系统 (6.40) 是弱隐式的，其积分区域显式确定，非线性项至多为关于 $\boldsymbol{X}^{m+1}, \mu^{m+1}$ 的二次多项式，因此可借助 *Newton* 法进行高效求解，具体迭代格式请见附录 A.2.2。

6.3.3　结构保持

分别记 V^m 为多面体曲面 Γ^m 所围区域的体积，W^m 为总自由能，其定义为

$$V^m \coloneqq \frac{1}{3}\left(\boldsymbol{X}^m, \boldsymbol{n}^m\right)_{\Gamma^m}^h = \frac{1}{9}\sum_{j=1}^{J}\sum_{i=1}^{3}|\sigma_j^m|\boldsymbol{q}_{j_i}^m \cdot \boldsymbol{n}_j^m, \tag{6.42a}$$

$$W^m \coloneqq \left(\hat{\gamma}(\theta^m, \phi^m), 1\right)_{\Gamma^m}^h = \sum_{j=1}^{J}|\sigma_j^m|\hat{\gamma}(\theta_j^m, \phi_j^m). \tag{6.42b}$$

全离散格式 (6.40) 满足如下结构保持性质：

定理 6.2 (体积守恒与能量耗散)　格式 (6.40) **体积守恒**，即

$$V^{m+1} = V^m = \cdots = V^0, \qquad \forall m \geq 0. \tag{6.43}$$

此外，若 $\alpha = -1$ 且各向异性 $\hat{\gamma}(\theta, \phi)$ 满足

$$2\hat{\gamma}(\theta, \phi) - \hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi) \geq 0, \qquad \forall(\theta, \phi) \in [0, \pi] \times 2\pi\mathbb{T}, \tag{6.44}$$

则当 $k(\theta, \phi)$ 充分大时，格式 (6.40) 无条件**能量稳定**，即

$$W^{m+1} \leq W^m \leq \cdots \leq W^0, \qquad \forall m \geq 0. \tag{6.45}$$

反之，当 $\alpha \neq -1$ 时，需将能量稳定条件 (6.44) 加强为

$$2\hat{\gamma}(\theta, \phi) - \hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi) > 0, \qquad \forall(\theta, \phi) \in [0, \pi] \times 2\pi\mathbb{T}. \tag{6.46}$$

由于体积守恒性的证明与 [19] 中定理 3.1 之证明完全相同，故为简洁起见从略其细节。能量耗散性的详尽证明则将于下一节给出。

注 6.4 若采用 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 之表述并取 $\alpha=-1$，即可得到 *[12]* 中的对称化保结构参数有限元方法。与 *[12]* 所要求的对称条件 $\gamma(\boldsymbol{n})=\gamma(-\boldsymbol{n})$ 或 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)$ 相比，条件 (6.44) 极大放宽，因而构成一项实质性的改进。

注 6.5 如我们在 *5.5* 节所论，将格式 (6.40) 推广到一般的法向速度律 $V_n=\mathfrak{F}(\mu)$ 也是直截了当的。仅需形式上考虑 $V_n=\mathfrak{F}(\mu,\Gamma)$，并分别对背景曲线 Γ、加权曲率 μ 作隐式、显式处理即可。个中思想已然明了，故不再赘言。

6.4 无条件能量稳定性之证明

6.4.1 最小稳定函数

对给定的法向量 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}(\theta,\phi)\in\mathbb{S}^2$，命 $\boldsymbol{\tau}_1,\boldsymbol{\tau}_2$ 为由 (6.8) 所定义并与之关联的切向量。对任意 $U\in SO(3)$ 与 $\lambda\in\mathbb{R}_{\geq 0}$，我们引入如下对称辅助矩阵：

$$M^{\alpha}(U,\lambda;\boldsymbol{n})=\begin{bmatrix}\hat{\gamma}(\theta,\phi) & * & * & *\\ M_{21} & M_{22} & * & *\\ M_{31} & 0 & M_{33} & *\\ M_{41} & M_{42} & -\frac{1}{2}\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi}) & M_{44}\end{bmatrix},\tag{6.47}$$

其中 $(\bar{\theta},\bar{\phi})$ 为 $U\boldsymbol{n}$ 的球坐标，而矩阵元 M_{ij} 定义如下：

$$M_{22}:=\hat{\gamma}(\theta,\phi)+(\alpha-1)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})+\lambda(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})^2,\tag{6.48a}$$
$$M_{33}:=\hat{\gamma}(\theta,\phi)+(\alpha-1)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})+\lambda(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})^2,\tag{6.48b}$$
$$M_{44}:=\hat{\gamma}(\theta,\phi)+(\alpha-1)(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})+\lambda(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})^2,\tag{6.48c}$$

以及

$$M_{21}:=-\frac{1}{2}\Big[\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_1)+\alpha(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})\Big],\tag{6.49a}$$
$$M_{31}:=-\frac{1}{2}\Big[\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_2)+\alpha(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})\Big],\tag{6.49b}$$
$$M_{41}:=-\frac{1}{2}\Big[\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\tau}_1)+\alpha(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})\Big],\tag{6.49c}$$
$$M_{42}:=\frac{\alpha-1}{2}\Big[(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})+(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})\Big]+\lambda(U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n}).\tag{6.49d}$$

为简化记号，在不致混淆时，记 $U\boldsymbol{\tau}_i\cdot\boldsymbol{v}:=(U\boldsymbol{\tau}_i)\cdot\boldsymbol{v}$。此外，由于 $M^{\alpha}(U,\lambda;\boldsymbol{n})$ 的对称性，主对角线以上的矩阵元以星号 $*$ 略记。

借助该辅助矩阵，我们如下定义**最小稳定函数**：

$$k^{\alpha}_{\min}(\theta,\phi)=\inf\Big\{\lambda\geq 0\ \Big|\ M^{\alpha}(U,\lambda;\boldsymbol{n})\ \text{半正定},\ \forall U\in SO(3)\Big\}.\tag{6.50}$$

最小稳定函数 $k^{\alpha}_{\min}(\theta,\phi)$ 的存在性由下述定理所保证：

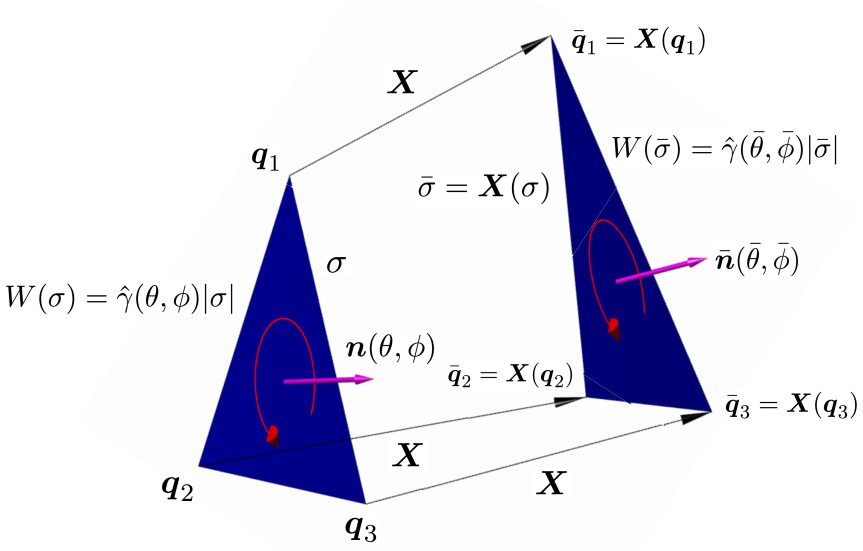


图 6.2　局部能量估计

Figure 6.2　A schematic illustration of the local energy estimate in Lemma 6.4.

定理 6.3　设 $\hat{\gamma}(\theta, \phi)$ 满足条件 (6.44)。则 $k^{\alpha}_{\min}(\theta, \phi)$ 良定**当且仅当**下列条件之一成立：

(1) $\alpha = -1$;

(2) 若 $2\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)$，则必有 $\nabla\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \mathbf{0}$。

定理 6.3 的详尽证明将于第 6.5 节给出。此处暂且假定 $k^{\alpha}_{\min}(\theta, \phi)$ 是良定的，即 $k^{\alpha}_{\min}(\theta, \phi) < +\infty$。

6.4.2　局部能量估计

引理 6.3　[14] 设 $\sigma = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]$ 与 $\bar{\sigma} = [\bar{\boldsymbol{q}}_1, \bar{\boldsymbol{q}}_2, \bar{\boldsymbol{q}}_3]$ 为两非退化三角形单元。对任意连续可微映射 $\boldsymbol{X}\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$，若其满足

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{q}_i) = \bar{\boldsymbol{q}}_i,\ \forall 1 \le i \le 3, \qquad \boldsymbol{X}|_{\sigma} \in [\mathcal{P}^1(\sigma)]^3, \tag{6.51}$$

则存在正交矩阵 $U \in SO(3)$ 与下三角矩阵 $L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 \\ l_{21} & l_{22} \end{pmatrix}$，其中 $l_{11}, l_{22} > 0$，使得

$$\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}|_{\sigma} = l_{11}(U\boldsymbol{\tau}_1)\boldsymbol{\tau}_1^T + l_{21}(U\boldsymbol{\tau}_2)\boldsymbol{\tau}_1^T + l_{22}(U\boldsymbol{\tau}_2)\boldsymbol{\tau}_2^T, \qquad \bar{\boldsymbol{n}} = U\boldsymbol{n}, \qquad |\bar{\sigma}| = |\sigma| l_{11} l_{22}, \tag{6.52}$$

其中 $\bar{\boldsymbol{n}}, \boldsymbol{n}$ 分别为 $\bar{\sigma}$ 与 σ 的单位法向量，而 $\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2$ 为 σ 的切向量，且它们与 $\boldsymbol{n}$ 一同构成 $\mathbb{R}^3$ 的一组正交归一基。

引理 6.4（局部能量估计） 设 $\sigma = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]$ 与 $\bar{\sigma} = [\bar{\boldsymbol{q}}_1, \bar{\boldsymbol{q}}_2, \bar{\boldsymbol{q}}_3]$ 为两非退化三角形单元。设 $\boldsymbol{X}\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ 为连续可微函数，且满足

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{q}_i) = \bar{\boldsymbol{q}}_i,\ \forall 1 \le i \le 3, \qquad \boldsymbol{X}|_\sigma \in [\mathcal{P}^1(\sigma)]^3. \tag{6.53}$$

则当 $k(\theta,\phi)$ 充分大时，有

$$|\sigma|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma\right) : \left(\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma - \nabla_\Gamma \mathbf{id}|_\sigma\right) \ge \hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})|\bar{\sigma}| - \hat{\gamma}(\theta,\phi)|\sigma|, \tag{6.54}$$

其中 $(\bar{\theta},\bar{\phi})$ 与 (θ,ϕ) 分别为 $\bar{\boldsymbol{n}}$ 与 $\boldsymbol{n}$ 的球坐标。

证明 由引理 6.3，我们有

$$\begin{aligned}
&|\sigma|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma\right) : \nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma \\
&= \mathrm{Tr}\left[\left(\sum_{1\le j\le i\le 2} l_{ij}\boldsymbol{\tau}_j(U\boldsymbol{\tau}_i)^T\right)\left(\hat{\gamma}(\theta,\phi)I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T + \alpha\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T + k(\theta,\phi)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T\right)\left(\sum_{1\le j\le i\le 2} l_{ij}(U\boldsymbol{\tau}_i)\boldsymbol{\tau}_j^T\right)\right] \\
&= |\sigma|\left[\hat{\gamma}(\theta,\phi)\sum_{1\le j\le i\le 2} l_{ij}^2 + (\alpha-1)\sum_{1\le j\le i,p\le 2} l_{ij}l_{pj}(U\boldsymbol{\tau}_p\cdot\boldsymbol{\xi})(U\boldsymbol{\tau}_i\cdot\boldsymbol{n})\right. \\
&\qquad \left. + k(\theta,\phi)\sum_{1\le j\le i,p\le 2} l_{ij}l_{pj}(U\boldsymbol{\tau}_p\cdot\boldsymbol{n})(U\boldsymbol{\tau}_i\cdot\boldsymbol{n})\right].
\end{aligned} \tag{6.55}$$

注意到 $\nabla_\Gamma \mathbf{id} = \boldsymbol{\tau}_1\boldsymbol{\tau}_1^T + \boldsymbol{\tau}_2\boldsymbol{\tau}_2^T$，故

$$\begin{aligned}
&|\sigma|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma\right) : \nabla_\Gamma \mathbf{id}|_\sigma \\
&\quad = \mathrm{Tr}\left[\left(\sum_{i=1}^{2}\boldsymbol{\tau}_i\boldsymbol{\tau}_i^T\right)\left(\hat{\gamma}(\theta,\phi)I_3 + \alpha\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{n}^T\right)\left(\sum_{1\le j\le i\le 2} l_{ij}(U\boldsymbol{\tau}_i)\boldsymbol{\tau}_j^T\right)\right] \\
&\quad = |\sigma|\left[\sum_{1\le j\le i\le 2}\hat{\gamma}(\theta,\phi)l_{ij}(U\boldsymbol{\tau}_i\cdot\boldsymbol{\tau}_j) + \alpha\sum_{1\le i\le j\le 2} l_{ij}(U\boldsymbol{\tau}_i\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\tau}_j\cdot\boldsymbol{\xi})\right].
\end{aligned} \tag{6.56}$$

由式 (6.52) 可知 $|\bar{\sigma}| = |\sigma|l_{11}l_{22}$。因此，依定理 6.3，当 $k(\theta,\phi)$ 充分大且满足 $k(\theta,\phi) \ge k_{\min}^\alpha(\theta,\phi)$ 时，有

$$\begin{aligned}
&|\sigma|\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma\right) : \left(\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}|_\sigma - \nabla_\Gamma \mathbf{id}|_\sigma\right) - \left(\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})|\bar{\sigma}| - \hat{\gamma}(\theta,\phi)|\sigma|\right) \\
&\quad = |\sigma|[1, l_{21}, l_{22}, l_{11}]M^\alpha(U,k;\boldsymbol{n})[1, l_{21}, l_{22}, l_{11}]^T \ge 0.
\end{aligned} \tag{6.57}$$

最后的不等式源于 $M^\alpha(U,k;\boldsymbol{n})$ 的半正定性。 ■

注 6.6 与注 3.5 中的推导相仿，在 (6.54) 中取 $\boldsymbol{X} = -p\mathbf{id}$（其中 $p > 0$），则 $\bar{\theta} = \pi - \theta, \bar{\phi} = \pi + \phi$ 且 $|\bar{\sigma}| = p^2|\sigma|$。于是，由局部能量估计 (6.54) 得

$$2p(p+1)\hat{\gamma}(\theta,\phi) \geq p^2\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi) - \hat{\gamma}(\theta,\phi). \tag{6.58}$$

令 $p \to +\infty$，由 (6.58) 推得 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi) \geq \hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)$。此结论对一切满足如下条件的表面矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}(\theta,\phi)$ 亦成立：

$$\left(\hat{\boldsymbol{G}}(\theta,\phi)\boldsymbol{P}(\theta,\phi)\right) : \boldsymbol{P}(\theta,\phi) = 2\hat{\gamma}(\theta,\phi), \tag{6.59}$$

其中 $\boldsymbol{P}(\theta,\phi) \coloneqq I_3 - \boldsymbol{n}(\theta,\phi)\boldsymbol{n}(\theta,\phi)^T$ 为曲面投影矩阵。因此，能量稳定性条件 (6.44) 为局部能量估计 (6.54) 成立的必要条件。于是，在局部能量估计的框架内，条件 (6.44) 已达最优，不能再作实质性的改进。

注 6.7 当 $\alpha = -1$ 时，若采用 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 之表述，*[13,17,106]* 中的分析已表明：若各向异性满足 $3\gamma(\boldsymbol{n}) \geq \gamma(-\boldsymbol{n})$，则相应的结构保持参数有限元法具有能量稳定性。结合上述诸定理以及 *[14]* 的结果，自然可猜想：在 $\mathbb{R}^d$ 中，其对应参数有限元法的能量稳定性条件应取 $(5-d)\gamma(\boldsymbol{n}) \geq \gamma(-\boldsymbol{n})$ 之形。特别地，对 $\mathbb{R}^4$ 中的超曲面而言，这在形式上将导出条件 $\gamma(\boldsymbol{n}) = \gamma(-\boldsymbol{n})$。然而需强调的是，现有方法难以径直推广至更高维：因为分析中所用的局部能量估计仅在 $\mathbb{R}^2$ 与 $\mathbb{R}^3$ 中有效。

6.4.3　无条件能量稳定性

我们现证明格式 (6.40) 的无条件能量稳定性：

证明　对每个 $1 \leq j \leq J$，在引理 6.4 中取 $\sigma = [\boldsymbol{q}^m_{j_1}, \boldsymbol{q}^m_{j_2}, \boldsymbol{q}^m_{j_3}]$、$\bar{\sigma} = [\boldsymbol{q}^{m+1}_{j_1}, \boldsymbol{q}^{m+1}_{j_2}, \boldsymbol{q}^{m+1}_{j_3}]$，并令 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{m+1}$，则有

$$\begin{aligned} &|\sigma^m_j|\left(\hat{\boldsymbol{G}}^\alpha_k(\theta^m_j,\phi^m_j)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}|_{\sigma^m_j}\right) : \left(\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}|_{\sigma^m_j} - \nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^m|_{\sigma^m_j}\right) \\ &\quad \geq \hat{\gamma}(\theta^{m+1}_j,\phi^{m+1}_j)|\sigma^{m+1}_j| - \hat{\gamma}(\theta^m_j,\phi^m_j)|\sigma^m_j|. \end{aligned} \tag{6.60}$$

继而对 $j = 1$ 至 J 求和，并用定义 (6.42b)，可得

$$\begin{aligned} &\left\langle \hat{\boldsymbol{G}}^\alpha_k(\theta^m,\phi^m)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_\Gamma(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m)\right\rangle^h_{\Gamma^m} \\ &= \sum_{j=1}^J |\sigma^m_j|\left(\hat{\boldsymbol{G}}^\alpha_k(\theta^m_j,\phi^m_j)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}|_{\sigma^m_j}\right) : \left(\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^{m+1}|_{\sigma^m_j} - \nabla_\Gamma \boldsymbol{X}^m|_{\sigma^m_j}\right) \\ &\geq \sum_{j=1}^J \hat{\gamma}(\theta^{m+1}_j,\phi^{m+1}_j)|\sigma^{m+1}_j| - \sum_{j=1}^J \hat{\gamma}(\theta^m_j,\phi^m_j)|\sigma^m_J| \\ &= W^{m+1} - W^m. \end{aligned} \tag{6.61}$$

在式 (6.40) 中取 $\varphi^h = \mu^{m+1}$、$\boldsymbol{\omega}^h = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$，立有

$$\begin{aligned}&\left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m, \phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_{\Gamma}(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m)\right\rangle_{\Gamma^m}^h \\ &\quad = \left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m\right)_{\Gamma^m}^h = -\tau\left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}, \nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h.\end{aligned} \tag{6.62}$$

综上两式，即得能量稳定性结论：

$$W^{m+1} - W^m \leq -\tau\left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}, \nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h \leq 0. \tag{6.63}$$

■

6.5　最小稳定函数之存在性

6.5.1　预备引理与证明概要

引理 6.5 (Sylvester **判别**)　设 $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 为对称矩阵，则 A 正定当且仅当其所有顺序主子式的行列式皆为正。

引理 6.6 ([14])　设 $A\colon SO(3)\times\mathbb{R} \to \mathbb{R}^{m\times m}$ 与 $D\colon SO(3) \to \mathbb{R}^{m\times m}$ 为 $m\times m$ 的连续对称矩阵，并满足下列条件：

1. 关于 λ 的线性，即

$$A(U,\lambda) = A(U,0) + \lambda D(U), \qquad D(U) \text{ 为半正定。} \tag{6.64}$$

2. 存在常数 $k_{m-1} \geq 0$，使得

$$A_{m-1}(U,\lambda) \text{ 正定}, \qquad \forall U \in SO(3),\ \forall \alpha \geq k_{m-1}, \tag{6.65}$$

其中 A_{m-1} 表示 A 的第 $m-1$ 个顺序主子式。

3. 对任意 $U \in SO(3)$，存在常数 $k_{m,U} \geq k_{m-1}$ 以及 U 的某一开邻域 $\mathcal{U}_U$，使得

$$\det(A(U', k_{m,U})) \geq 0, \qquad \forall U' \in \mathcal{U}_U. \tag{6.66}$$

则存在有限常数 $k_m \geq k_{m-1}$，使得对任意 $\alpha \geq k_m$，皆有

$$A(U,\lambda) \text{ 半正定}, \qquad \forall U \in SO(3). \tag{6.67}$$

引理 6.7 (Jacobi **公式**)　设 $A = (a_{i,j})_{m\times m}$ 为函数矩阵，则有

$$\frac{\partial \det(A)}{\partial \beta} = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{adj}(A)\,\frac{\partial A}{\partial \beta}\right), \tag{6.68a}$$

$$\frac{\partial^2 \det(A)}{\partial \beta \partial \varphi} = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{adj}(A)\,\frac{\partial^2 A}{\partial \beta \partial \varphi}\right) + \sum_{i\neq j} \det \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial a_{i,1}}{\partial \beta} & \frac{\partial a_{i,2}}{\partial \beta} & \cdots & \frac{\partial a_{i,m}}{\partial \beta} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial a_{j,1}}{\partial \varphi} & \frac{\partial a_{j,2}}{\partial \varphi} & \cdots & \frac{\partial a_{j,m}}{\partial \varphi} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,m} \end{bmatrix}. \tag{6.68b}$$

引理 6.8 ($SO(3)$ **的群表示**)　对任意 $U \in SO(3)$，存在 $\boldsymbol{\Phi} = (\varphi, \vartheta, \psi) \in (2\pi\mathbb{T})^3$，使得

$$U[\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2, \boldsymbol{n}] = [\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2, \boldsymbol{n}]U(\boldsymbol{\Phi}), \tag{6.69}$$

其中 U 可表为

$$U(\boldsymbol{\Phi}) = R_z(\psi)R_y(\vartheta)R_x(\varphi), \tag{6.70}$$

此处

$$R_x(\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}, \tag{6.71a}$$

$$R_y(\vartheta) = \begin{bmatrix} \cos\vartheta & 0 & \sin\vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\vartheta & 0 & \cos\vartheta \end{bmatrix}, \tag{6.71b}$$

$$R_z(\psi) = \begin{bmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{6.71c}$$

我们将通过证明矩阵 $M^\alpha(U, \lambda; \boldsymbol{n})$ 在 λ 充分大时的半正定性来确立最小稳定化函数的存在性。

记 M_{m-1} 为 $M^\alpha(U, \lambda; \boldsymbol{n})$ 的第 $m-1$ 个顺序主子式。证明概要如下：

(i) 首先，依 Sylvester 判别法，我们通过验证 $\det(M_1), \det(M_2), \det(M_3) > 0$ 说明 M_3 正定.

(ii) 其次，我们将 $\det(M^\alpha)$ 的非负性分析分作两种情形：

- 非临界情形：$2\hat{\gamma}(\theta, \phi) > \hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi)$；
- 临界情形：存在某个 $\boldsymbol{n}^* = \boldsymbol{n}(\theta^*, \phi^*) \in \mathbb{S}^2$ 使得 $2\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)$。

非临界情形的证明与 [14] 的论证大体相同，故为简洁起见略去细节。至于临界情形，我们借助 $SO(3)$ 的群表示，通过验证 $\det(M^\alpha)$ 在 U 处梯度为零且 Hessian 矩阵半正定，从而证明 U 为其局部极小点。

(iii) 最后，应用引理 6.6，可得 $M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})$ 的半正定性，从而完成定理 6.3 的证明。

6.5.2 M_3 的正定性

引理 6.9 存在常数 $k_2>0$，使得对任意 $\lambda\geq k_2$，皆有

$$\det(M_2(U,\lambda;\boldsymbol{n}))>0,\qquad \forall U\in SO(3). \tag{6.72}$$

证明 为简化讨论，记 $Y\coloneqq U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n}$，$E\coloneqq(\alpha-1)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})$。那么，

$$\begin{aligned}\det(M_2)&=\hat{\gamma}(\theta,\phi)M_{22}-M_{21}^2\\&=\hat{\gamma}(\theta,\phi)\left[\hat{\gamma}(\theta,\phi)+EY+\lambda Y^2\right]\\&\quad-\frac{1}{4}\left[\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_1)+\alpha(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})Y\right]^2\\&\geq\hat{\gamma}^2(\theta,\phi)\left[1-\frac{1}{2}(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_1)^2\right]+\hat{\gamma}(\theta,\phi)EY\\&\quad+\left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})^2\right]Y^2.\end{aligned} \tag{6.73}$$

从而，

$$\begin{aligned}\det(M_2)&\geq\frac{1}{2}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi)+\hat{\gamma}(\theta,\phi)EY+\left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})^2\right]Y^2\\&\geq\frac{1}{4}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi)+\left[\frac{1}{2}\hat{\gamma}(\theta,\phi)+EY\right]^2+\left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})^2-E^2\right]Y^2.\end{aligned} \tag{6.74}$$

因此，对任意 $\lambda\geq\frac{1}{\hat{\gamma}(\theta,\phi)}\left[\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})^2+E^2\right]$，我们有 $\det(M_2)\geq\frac{1}{4}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi)>0$。 ■

定理 6.4 存在常数 $k_3>0$，使得对任意 $\lambda\geq k_3$，皆有

$$M_3(U,\lambda;\boldsymbol{n})\text{ 正定},\qquad \forall U\in SO(3). \tag{6.75}$$

证明 记

$$A\coloneqq\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_1),\qquad B\coloneqq(\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi})\alpha, \tag{6.76a}$$

$$C\coloneqq\hat{\gamma}(\theta,\phi)(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\tau}_2),\qquad D\coloneqq(\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi})\alpha. \tag{6.76b}$$

于是我们有

$$\begin{aligned}\det(M_3) &= \hat{\gamma}(\theta,\phi)M_{22}M_{33} - M_{21}^2M_{33} - M_{31}^2M_{22}\\ &= \hat{\gamma}(\theta,\phi)\left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) + EY + \lambda Y^2\right)^2\\ &\quad - \frac{1}{4}\left[(A+BY)^2 + (C+DY)^2\right]\left(\hat{\gamma}(\theta,\phi) + EY + \lambda Y^2\right)\\ &\coloneqq P(Y)Q(Y),\end{aligned} \tag{6.77}$$

其中

$$P(Y) \coloneqq \hat{\gamma}(\theta,\phi) + EY + \lambda Y^2, \tag{6.78a}$$

$$\begin{aligned}Q(Y) \coloneqq{}& \hat{\gamma}^2(\theta,\phi) - \frac{1}{4}(A^2+C^2) - \left[\hat{\gamma}(\theta,\phi)E - \frac{1}{2}(AB+CD)\right]Y\\ &+ \left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \frac{1}{4}(B^2+D^2)\right]Y^2.\end{aligned} \tag{6.78b}$$

另一方面，由于

$$P(Y) = \frac{3}{4}\hat{\gamma}(\theta,\phi) + \left[\frac{1}{2}\hat{\gamma}(\theta,\phi) + \frac{E}{\hat{\gamma}(\theta,\phi)}Y\right]^2 + \left[\lambda - \frac{E^2}{\hat{\gamma}^2(\theta,\phi)}\right]Y^2, \tag{6.79}$$

以及

$$\begin{aligned}Q(Y) &\geq \frac{1}{2}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi) - \left[\hat{\gamma}(\theta,\phi)E - \frac{1}{2}(AB+CD)\right]Y + \left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \frac{1}{4}(B^2+D^2)\right]Y^2\\ &\geq \frac{1}{4}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi) + \left[\frac{1}{2}\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \frac{2\hat{\gamma}(\theta,\phi)E - (AB+CD)}{2\hat{\gamma}(\theta,\phi)}Y\right]^2\\ &\quad + \left[\lambda\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \frac{1}{4}(B^2+D^2) - \left(\frac{2\hat{\gamma}(\theta,\phi)E - (AB+CD)}{2\hat{\gamma}(\theta,\phi)}\right)^2\right]Y^2\end{aligned} \tag{6.80}$$

因此对充分大的 λ，

$$P(Y) \geq \frac{3}{4}\hat{\gamma}(\theta,\phi) > 0, \qquad Q(Y) \geq \frac{1}{4}\hat{\gamma}^2(\theta,\phi) > 0. \tag{6.81}$$

从而，我们有

$$\det(M_3) \geq \frac{3}{16}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi) > 0. \tag{6.82}$$

综上，结合 $\det(M_1) = \hat{\gamma}(\theta,\phi) > 0$、引理 6.9 及 (6.82)，由 Sylvester 判别可知：当 λ 充分大时，$M_3(U,\lambda;\boldsymbol{n})$ 为正定。 ■

6.5.3　非临界情形

引理 6.10　若 $U\boldsymbol{n} \neq -\boldsymbol{n}$，则存在常数 $k_{m,U} > 0$ 及 U 的某一开邻域 $\mathcal{U}_U$，使得

$$\det(M^\alpha(U', k_{m,U}; \boldsymbol{n})) \geq 0, \qquad \forall U' \in \mathcal{U}_U. \tag{6.83}$$

引理 6.11　设 $U\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{n}$。若 $2\hat{\gamma}(\theta, \phi) > \hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi)$，则存在常数 $k_{m,U} > 0$ 及 U 的某一开邻域 $\mathcal{U}_U$，使得

$$\det(M^\alpha(U', k_{m,U}; \boldsymbol{n})) \geq 0, \qquad \forall U' \in \mathcal{U}_U. \tag{6.84}$$

上述两引理的证明与 [14] 中的论证大体相同，故为简洁起见略去细节。

6.5.4　临界情形之分析

本节分析临界情形 $2\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)$，并给出在此情形下 $\det(M^\alpha)$ 梯度为零的充要条件。

引理 6.12　给定 $\boldsymbol{n}^* \in \mathbb{S}^2$，并设其满足 $2\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)$。则有

$$2\partial_\theta \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) + \partial_\theta \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*) = 0, \tag{6.85a}$$
$$2\partial_\phi \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) - \partial_\phi \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*) = 0. \tag{6.85b}$$

证明　考察函数

$$f(\theta, \phi) \coloneqq \frac{\hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi)}{\hat{\gamma}(\theta, \phi)}, \qquad \forall (\theta, \phi) \in [0, \pi] \times 2\pi\mathbb{T}. \tag{6.86}$$

已知 $f(\theta, \phi) \leq 2$，并在 (θ^*, ϕ^*) 处取到最大值 2。因此，

$$\begin{aligned} \partial_\theta f(\theta^*, \phi^*) &= \frac{-\partial_\theta \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) - \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)\partial_\theta \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*)}{\hat{\gamma}^2(\theta^*, \phi^*)} \\ &= -\frac{\partial_\theta \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*) + 2\partial_\theta \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*)}{\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*)} = 0, \end{aligned} \tag{6.87}$$

即

$$2\partial_\theta \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) + \partial_\theta \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*) = 0. \tag{6.88}$$

同理可得

$$2\partial_\phi \hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) - \partial_\phi \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*) = 0. \tag{6.89}$$

■

引理 6.13　设对给定 $\boldsymbol{n}^* \coloneqq \boldsymbol{n}(\theta^*, \phi^*) \in \mathbb{S}^2$ 有 $(U|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0})\boldsymbol{n}^* = -\boldsymbol{n}^*$。若 $2\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \hat{\gamma}(\pi - \theta^*, \pi + \phi^*)$，则

$$\nabla_{\boldsymbol{\Phi}} \det(M^{\alpha}(U, \lambda; \boldsymbol{n}^*))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} = \boldsymbol{0}, \tag{6.90}$$

当且仅当

$$\alpha = -1 \quad \text{或} \quad \nabla\hat{\gamma}(\theta^*, \phi^*) = \boldsymbol{0}. \tag{6.91}$$

证明　设 $U\boldsymbol{n} \coloneqq \bar{\boldsymbol{n}} = (\sin\bar{\theta}\cos\bar{\phi}, \sin\bar{\theta}\sin\bar{\phi}, \cos\bar{\theta})^T$，并命 $\bar{\boldsymbol{\tau}}_1, \bar{\boldsymbol{\tau}}_2$ 为 (6.8) 所定义之切向量，则

$$\partial_{\varphi} U\boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_1 \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial\varphi} + \sin\bar{\theta}\,\bar{\boldsymbol{\tau}}_2 \frac{\partial\bar{\phi}}{\partial\varphi}, \tag{6.92a}$$

$$\partial_{\vartheta} U\boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_1 \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial\vartheta} + \sin\bar{\theta}\,\bar{\boldsymbol{\tau}}_2 \frac{\partial\bar{\phi}}{\partial\vartheta}, \tag{6.92b}$$

$$\partial_{\psi} U\boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_1 \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial\psi} + \sin\bar{\theta}\,\bar{\boldsymbol{\tau}}_2 \frac{\partial\bar{\phi}}{\partial\psi}. \tag{6.92c}$$

不失一般性，由引理 6.8，不妨设 $U = U(\pi, 0, \psi)$。则在 $\boldsymbol{\Phi}_0(\psi) = (\pi, 0, \psi)$ 处，有

$$\bar{\boldsymbol{n}} = -\boldsymbol{n}, \qquad \bar{\boldsymbol{\tau}}_1 = \boldsymbol{\tau}_1, \qquad \bar{\boldsymbol{\tau}}_2 = -\boldsymbol{\tau}_2. \tag{6.93}$$

依引理 6.8，我们有

$$\partial_{\varphi} U\boldsymbol{n} = -\sin\psi\,\boldsymbol{\tau}_1 + \cos\psi\,\boldsymbol{\tau}_2, \tag{6.94a}$$

$$\partial_{\vartheta} U\boldsymbol{n} = -\cos\psi\,\boldsymbol{\tau}_1 - \sin\psi\,\boldsymbol{\tau}_2, \tag{6.94b}$$

$$\partial_{\psi} U\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}. \tag{6.94c}$$

将 (6.93) 代入 (6.94)，并与 (6.92) 对照，遂得

$$\begin{aligned} &\partial_{\varphi}\bar{\theta} = -\sin\psi, && \partial_{\varphi}\bar{\phi} = -\cos\psi/\sin\bar{\theta}, \\ &\partial_{\vartheta}\bar{\theta} = -\cos\psi, && \partial_{\vartheta}\bar{\phi} = \sin\psi/\sin\bar{\theta}, \\ &\partial_{\psi}\bar{\theta} = 0, && \partial_{\psi}\bar{\phi} = 0. \end{aligned} \tag{6.95}$$

由 (6.95)，在 $(\bar{\theta}, \bar{\phi}) = (\pi - \theta, \pi + \phi)$ 处有

$$\begin{aligned} \partial_{\varphi}\hat{\gamma}(\bar{\theta}, \bar{\phi}) &= \partial_{\theta}\hat{\gamma}(\bar{\theta}, \bar{\phi})\partial_{\varphi}\bar{\theta} + \partial_{\phi}\hat{\gamma}(\bar{\theta}, \bar{\phi})\partial_{\varphi}\bar{\phi} \\ &= -\sin\psi\,\partial_{\theta}\hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi) - \frac{\cos\psi}{\sin\theta}\,\partial_{\phi}\hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi). \end{aligned} \tag{6.96}$$

类似地，

$$\partial_{\vartheta}\hat{\gamma}(\bar{\theta}, \bar{\phi}) = -\cos\psi\,\partial_{\theta}\hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi) + \frac{\sin\psi}{\sin\theta}\,\partial_{\phi}\hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi), \tag{6.97a}$$

$$\partial_{\psi}\hat{\gamma}(\bar{\theta}, \bar{\phi}) = 0. \tag{6.97b}$$

由 M^α 与伴随矩阵之定义，有

$$\operatorname{adj}\Big(M^\alpha(U(\boldsymbol{\Phi}_0),\lambda;\boldsymbol{n})\Big)=\frac{3}{4}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)\begin{bmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&\mathbf{1}\end{bmatrix},\qquad \mathbf{1}\coloneqq\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix},\tag{6.98}$$

以及

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=\begin{bmatrix}\cdots&\cdots&\cdots\\ \vdots&-(\alpha-1)F&-\frac{1}{2}\partial_\varphi\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})\\ \vdots&-\frac{1}{2}\partial_\varphi\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})&0\end{bmatrix},\tag{6.99a}$$

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta}M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=\begin{bmatrix}\cdots&\cdots&\cdots\\ \vdots&0&-\frac{1}{2}\partial_\vartheta\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})\\ \vdots&-\frac{1}{2}\partial_\vartheta\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})&-(\alpha-1)G\end{bmatrix},\tag{6.99b}$$

$$\frac{\partial}{\partial\psi}M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=\begin{bmatrix}\cdots&\cdots&\cdots\\ \vdots&0&0\\ \vdots&0&0\end{bmatrix},\tag{6.99c}$$

其中

$$F\coloneqq U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{\xi}=\sin\psi\,\partial_\theta\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\frac{\cos\psi}{\sin\theta}\,\partial_\phi\hat{\gamma}(\theta,\phi),\tag{6.100a}$$

$$G\coloneqq U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{\xi}=\cos\psi\,\partial_\theta\hat{\gamma}(\theta,\phi)+\frac{\sin\psi}{\sin\theta}\partial_\phi\hat{\gamma}(\theta,\phi).\tag{6.100b}$$

因此，结合引理 6.7 及 (6.96)，

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\frac{3}{4}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=-\partial_\varphi\hat{\gamma}(\bar{\theta},\bar{\phi})-(\alpha-1)F\\ &\quad=-\sin\psi\Big[(\alpha-1)\partial_\theta\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\partial_\theta\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)\Big]\\ &\qquad+\frac{\cos\psi}{\sin\theta}\Big[(\alpha-1)\partial_\phi\hat{\gamma}(\theta,\phi)+\partial_\phi\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)\Big].\end{aligned}\tag{6.101}$$

同理，

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\frac{3}{4}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=-\partial_\vartheta\hat{\gamma}((\bar{\theta},\bar{\phi}))-(\alpha-1)G\\ &\quad=-\cos\psi\Big[(\alpha-1)\partial_\theta\gamma(\theta,\phi)-\partial_\theta\gamma(\pi-\theta,\pi+\phi)\Big]\\ &\qquad-\frac{\sin\psi}{\sin\theta}\Big[(\alpha-1)\partial_\phi\gamma(\theta,\phi)+\partial_\phi\gamma(\pi-\theta,\pi+\phi)\Big],\end{aligned}\tag{6.102}$$

以及

$$\frac{\partial}{\partial\psi}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=0.\tag{6.103}$$

由引理 6.12，对满足 $2\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)=\hat{\gamma}(\pi-\theta^*,\pi+\phi^*)$ 的 $\boldsymbol{n}^*\in\mathbb{S}^2$，我们有

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}^*)\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=\frac{3(\alpha+1)\hat{\gamma}^3(\theta^*,\phi^*)}{4}\left[-\sin\psi\,\partial_\theta\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)+\frac{\cos\psi}{\sin\theta^*}\,\partial_\phi\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)\right], \tag{6.104a}$$

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}^*)\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=\frac{3(\alpha+1)\hat{\gamma}^3(\theta^*,\phi^*)}{4}\left[-\cos\psi\,\partial_\theta\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)-\frac{\sin\psi}{\sin\theta^*}\,\partial_\phi\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)\right], \tag{6.104b}$$

$$\frac{\partial}{\partial\psi}\det\Big(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}^*)\Big)\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0}=0. \tag{6.104c}$$

因此，行列式的梯度为零当且仅当

$$(\alpha+1)\begin{bmatrix}-\sin\psi & \cos\psi/\sin\theta^*\\ -\cos\psi & -\sin\psi/\sin\theta^*\end{bmatrix}\nabla\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)=\boldsymbol{0}, \tag{6.105}$$

此即

$$\alpha=-1\quad\text{或}\quad\nabla\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)=\boldsymbol{0}. \tag{6.106}$$

■

引理 6.14　给定 $\boldsymbol{n}^*\in\mathbb{S}^2$，并设其满足 $2\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*)=\hat{\gamma}(\pi-\theta^*,\pi+\phi^*)$。若 $U\boldsymbol{n}^*=-\boldsymbol{n}^*$，且 $\boldsymbol{n}^*$ 满足条件 (6.91)，则存在常数 $k_{m,U}>0$ 及 U 的某一开邻域 $\mathcal{U}_U$，使得

$$\det(M^\alpha(U',k_{m,U};\boldsymbol{n}))\geq 0,\qquad\forall U'\in\mathcal{U}_U. \tag{6.107}$$

证明　由 M^α 定义知

$$M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n})=M^\alpha(U,0;\boldsymbol{n})+\lambda D(U), \tag{6.108}$$

其中

$$D(U)\coloneqq\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & (U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})^2 & 0 & (U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})\\ 0 & 0 & (U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n})^2 & 0\\ 0 & (U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})(U\boldsymbol{\tau}_2\cdot\boldsymbol{n}) & 0 & (U\boldsymbol{\tau}_1\cdot\boldsymbol{n})^2\end{bmatrix}. \tag{6.109}$$

由引理 6.8，可将 D 改写为

$$D(\varphi,\vartheta,\psi)\coloneqq D(U)=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \sin^2\varphi\cos^2\vartheta & 0 & \sin\varphi\cos\vartheta\sin\vartheta\\ 0 & 0 & \sin^2\varphi\cos^2\vartheta & 0\\ 0 & \sin\varphi\cos\vartheta\sin\vartheta & 0 & \sin^2\vartheta\end{bmatrix}. \tag{6.110}$$

从而在 $\boldsymbol{\Phi}_0 = (\pi, 0, \psi)$ 处，我们有

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}D = \mathrm{diag}(0,2,2,0), \qquad \frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}D = \mathrm{diag}(0,0,0,2), \qquad \frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\vartheta}D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{6.111}$$

以及

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial\psi}D = \mathbf{0}, \qquad \rho \in \{\varphi, \vartheta, \psi\}. \tag{6.112}$$

于是，由引理 6.7 及 (6.98) 可得: 对 $\rho, \beta \in \{\varphi, \vartheta, \psi\}$，

$$\frac{\partial^2}{\partial\rho\partial\beta}\det(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} = C^1_{\rho,\beta} + C^2_{\rho,\beta} + \frac{3\lambda}{4}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)\left(2\delta_{\rho\varphi}\delta_{\varphi\beta} + 2\delta_{\rho\vartheta}\delta_{\vartheta\beta}\right), \tag{6.113}$$

此处常数 $C^1_{\rho,\beta}, C^2_{\rho,\beta}$ 的定义为

$$C^1_{\rho,\beta} = \frac{3}{4}\hat{\gamma}(\theta,\phi)\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}^T \frac{\partial^2 M^\alpha(U,0;\boldsymbol{n})}{\partial\rho\partial\beta}\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{6.114a}$$

$$C^2_{\rho,\beta} = \sum_{i\neq j}\det\begin{bmatrix} M^\alpha_{1,1} & M^\alpha_{1,2} & M^\alpha_{1,3} & M^\alpha_{1,4} \\ \partial_\rho M^\alpha_{i,1} & \partial_\rho M^\alpha_{i,2} & \partial_\rho M^\alpha_{i,3} & \partial_\rho M^\alpha_{i,4} \\ \partial_\beta M^\alpha_{i,1} & \partial_\beta M^\alpha_{i,2} & \partial_\beta M^\alpha_{i,3} & \partial_\beta M^\alpha_{i,4} \\ M^\alpha_{4,1} & M^\alpha_{4,2} & M^\alpha_{4,3} & M^\alpha_{4,4} \end{bmatrix}. \tag{6.114b}$$

因此，$\det(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}))$ 在 $\boldsymbol{\Phi}_0 = (\pi, 0, \psi)$ 处的 Hessian 矩阵可表示为

$$\mathbf{H}_{\det(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}))}\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} = \left(C^1_{\rho,\beta} + C^2_{\rho,\beta}\right)_{\rho,\beta\in\{\varphi,\vartheta,\psi\}} + \frac{3\lambda}{2}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)\,\mathrm{diag}(1,1,0). \tag{6.115}$$

现考虑满足 $2\hat{\gamma}(\theta^*,\phi^*) = \hat{\gamma}(\pi-\theta^*,\pi+\phi^*)$ 的 $\boldsymbol{n}^*$。易见在 $\boldsymbol{\Phi_0} = (\pi, 0, \psi)$ 处，有

$$\det(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}^*))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} \equiv 0, \qquad \forall\psi \in 2\pi\mathbb{T}. \tag{6.116}$$

因此，结合 (6.115)，在该 $\boldsymbol{n}^*$ 处 Hessian 矩阵 $\mathbf{H}$ 具有如下形式：

$$\mathbf{H}_{\det(M^\alpha(U,\lambda;\boldsymbol{n}^*))}\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{H}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \tag{6.117}$$

其中

$$\hat{\mathbf{H}} \coloneqq \left(C^1_{\rho,\beta} + C^2_{\rho,\beta}\right)_{\rho,\beta\in\{\varphi,\vartheta\}} + \frac{3\lambda}{2}\hat{\gamma}^3(\theta,\phi)I_2 \tag{6.118}$$

从而当 λ 充分大时，矩阵 $\hat{\mathbf{H}}$ 正定。由行列式的连续性，存在常数 $k_{m,U} > 0$ 及 $U(\boldsymbol{\Phi}_0)$ 的某一开邻域 $\mathcal{U}_U$，使得对任意 $U' \in \mathcal{U}_U$，$\mathbf{H}$ 皆为半正定。

因此，由 Taylor 展开并结合引理 6.13，可知

$$\det(M^{\alpha}(U', k_{m,U}; \boldsymbol{n}^*)) \geq 0, \qquad \forall U' \in \mathcal{U}_U. \tag{6.119}$$

■

现在，我们给出定理 6.3 的证明。

证明　(最小稳定函数的存在性) 充分性可由引理 6.6、定理 6.4、引理 6.10、引理 6.11 以及引理 6.14 直接推出。

对于必要性。取 $\lambda_0 = k^{\alpha}_{\min}(\theta, \phi)$，则对任意 $U \in SO(3)$，$M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n})$ 皆半正定。

取 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}^*$，并在 $\boldsymbol{\Phi}_0(\psi) = (\pi, 0, \psi)$ 处作 Taylor 展开，得

$$\det(M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n}^*)) = \nabla_{\boldsymbol{\Phi}} \det(M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n}^*))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} \cdot (\boldsymbol{\Phi} - \boldsymbol{\Phi}_0) + O(\|\boldsymbol{\Phi} - \boldsymbol{\Phi}_0\|^2). \tag{6.120}$$

若 $\nabla_{\boldsymbol{\Phi}} \det(M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n}^*))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} \neq \mathbf{0}$，则由 (6.120) 可知，该行列式在 $\boldsymbol{\Phi}_0$ 的某一邻域内变号。这与 $M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n})$ 半正定矛盾，故必有

$$\nabla_{\boldsymbol{\Phi}} \det(M^{\alpha}(U, \lambda_0; \boldsymbol{n}^*))\Big|_{\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}_0} = \mathbf{0}. \tag{6.121}$$

再由引理 6.13 即得条件 (6.91)。　■

6.6　数值实验

本节给出数值算例，以检验所提保结构参数有限元格式 (6.40) 在三维曲面时间演化问题中的表现。

在实际计算中，我们按如下方式计算最小稳定函数的数值近似：先在插值节点 $\boldsymbol{n}_{ij} = (\sin\theta_i \cos\phi_j, \sin\theta_i \sin\phi_j, \cos\theta_i)^T$ 上求解优化问题 (6.50)，其中 $\theta_i = \frac{i\pi}{20}$、$\phi_j = -\pi + \frac{j\pi}{10}$，$0 \leq i, j \leq 20$；继而对其余点通过**双线性插值**给出 $k^{\alpha}_{\min}(\theta, \phi)$ 的近似值。

在空间离散方面，我们借助 `Gmsh` [70] 将初始曲面 Γ_0 按网格尺度 h 作三角剖分近似为 $\Gamma_{h,\tau}(0) = \Gamma_0 = \cup_{j=1}^{J} \sigma_j^0$。与 Γ_0 相应的时间步长取为 $\tau = \frac{2}{25}h^2$。

6.6.1　收敛阶

为测试收敛阶，取初始曲面 Γ_0 为 $2 \times 2 \times 1$ 的长方体。我们以流形距离 $M(\Gamma_1, \Gamma_2)$ 度量两曲面 Γ_1 与 Γ_2 间距离，其定义为

$$M(\Gamma_1, \Gamma_2) := |(\Omega_1 \backslash \Omega_2) \cup (\Omega_2 \backslash \Omega_1)| = 2|\Omega_1 \cup \Omega_2| - |\Omega_1| - |\Omega_2|, \tag{6.122}$$

其中 Ω_i 表示由 Γ_i 所围区域，$i = 1, 2$ [12,20]。数值解 $\Gamma_{h,\tau}(t)$ 与精确解 $\Gamma(t)$ 在时刻 t 的数值误差 $e^h(t)$ 定义为

$$e^h(t) \coloneqq M(\Gamma_{h,\tau}(t), \Gamma(t)). \tag{6.123}$$

其中，中间曲面 $\Gamma_{h,\tau}(t)$ 定义为

$$\Gamma_{h,\tau}(t) \coloneqq \frac{t - t_m}{\tau}\,\Gamma_{h,\tau}(t^{m+1}) + \frac{t_{m+1} - t}{\tau}\,\Gamma_{h,\tau}(t^m), \qquad t \in [t_m, t_{m+1}]. \tag{6.124}$$

精确解则以细网格上所得 $\Gamma_{h_e,\tau_e}(t)$ 近似，其中 $h_e = 2^{-4}$、$\tau_e = \frac{2}{25}h_e^2$。为求解隐式格式 (6.40)，我们采用附录 A 中所言 Newton 迭代 [19]，并取停机准则 $\mathrm{tol} = 10^{-12}$。

收敛性测试中，我们考虑如下两种各向异性表面能：

- 例 I: $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \frac{3}{2}\,(1 + \mathrm{sgn}(\sin\theta\cos\phi))\,\sin^2\theta\cos^2\phi$;
- 例 II: $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \beta\left(\cos^3\theta + \sin^3\theta\cos^3\phi + \sin^3\theta\sin^3\phi\right)$.

(h, τ)	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order
(h_0, τ_0)	1.03e-1	-	9.64e-2	-	9.95e-2	-	1.02e-1	-	9.77e-1	-
$(\frac{h_0}{2}, \frac{\tau_0}{4})$	2.51e-2	2.03	2.41e-2	2.00	2.49e-2	2.00	2.52e-2	2.02	2.45e-2	1.99
$(\frac{h_0}{2^2}, \frac{\tau_0}{4^2})$	6.28e-3	2.00	5.91e-3	2.03	6.19e-3	2.01	6.36e-3	1.99	6.06e-3	2.02
α	1		−1		0		0.5		−0.5	

表 6.1　例 I 的数值误差及收敛阶。
Table 6.1　Numerical errors and convergence rates for Case I.

(h, τ)	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order	$e^h(1)$	order
(h_0, τ_0)	1.55e-1	-	1.11e-1	-	9.47e-2	-	1.08e-1	-	9.76e-2	-
$(\frac{h_0}{2}, \frac{\tau_0}{4})$	3.29e-2	2.23	2.86e-2	1.95	2.37e-2	1.99	2.49e-2	2.11	2.42e-2	2.01
$(\frac{h_0}{2^2}, \frac{\tau_0}{4^2})$	8.48e-3	1.96	6.71e-3	2.09	6.10e-3	1.96	6.91e-3	1.85	5.94e-3	2.03
α	10		−10		0		5		−5	

表 6.2　例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$ 的数值误差及收敛阶。
Table 6.2　Numerical errors and convergence rates for Case II with $\beta = \frac{1}{8}$.

不同 α 下的数值误差与收敛阶分别列于表 6.1 与表 6.2。数值结果显示，关于网格尺度 h 近似**二阶**收敛；这表明格式 (6.40) 具有空间**二阶**、时间**一阶**精度。此外，就不同 α 而言，数值误差并无显著差异，显示出一定的**鲁棒性**。

6.6.2　体积守恒与能量稳定

为检验体积守恒与能量耗散性，我们引入如下**规范化体积损失**与**规范化能量**：

$$\left.\frac{\Delta V^h(t)}{V^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{V^{m+1}-V^0}{V^0}, \qquad \left.\frac{W^h(t)}{W^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{W^{m+1}}{W^0}. \tag{6.125}$$

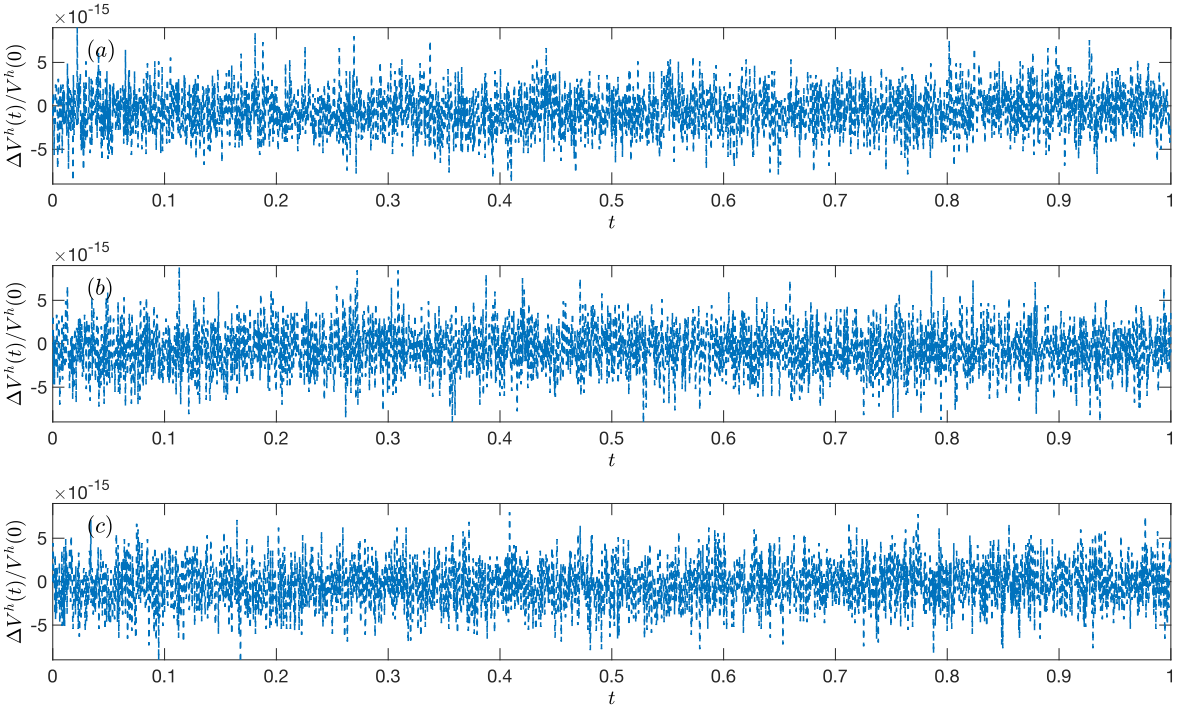


图 6.3　规范化体积损失：(a) 例 I；(b) 情形 II 且 $\beta=\frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta=\frac{1}{4}$。超参数分别取 $\alpha=0,1,-1$。
Figure 6.3　Normalized volume loss for: (a) Case I; (b) Case II with $\beta=\frac{1}{8}$; and (c) Case II with $\beta=\frac{1}{4}$. The hyperparameters are set as $\alpha=0,1,-1$, respectively.

我们针对基准值 $\alpha=0,1,-1$ 以及三种各向异性表面能进行数值实验，即例 I、例 II 且 $\beta=\frac{1}{8}$、以及例 II 且 $\beta=\frac{1}{4}$。初始曲面取为 $3\times3\times2$ 的长方体。网格尺度与时间步长分别取 $h=2^{-4}$ 与 $\tau=\frac{2}{25}h^2$。

规范化体积损失 $\frac{\Delta V^h(t)}{V(0)}$ 及 Newton 迭代步数随时间的演化，分别汇总于图 6.3 与图 6.4。从图中可见体积**守恒性**良好，即体积损失始终维持在 10^{-15} 量级，几乎等同于**舍入误差**。另一方面，Newton 迭代步数在短时间内由 4 降至 2，显示出数值格式 (6.40) 在计算上的**高效性**。

图 6.5 给出了不同各向异性表面能及超参数 α 下，规范化能量 $\frac{W^h(t)}{W^h(0)}$ 随时间的演化。在数值实验中，总能量随时间单调**下降**，从而印证了数值格式 (6.40) 的**能量耗散性**。并且，如图 6.5(b) 与 (d) 所示，不同超参数 α 所对应的能量衰减曲线形状几乎**一致**，表明该方法对 α 具有较强的**一致性**。

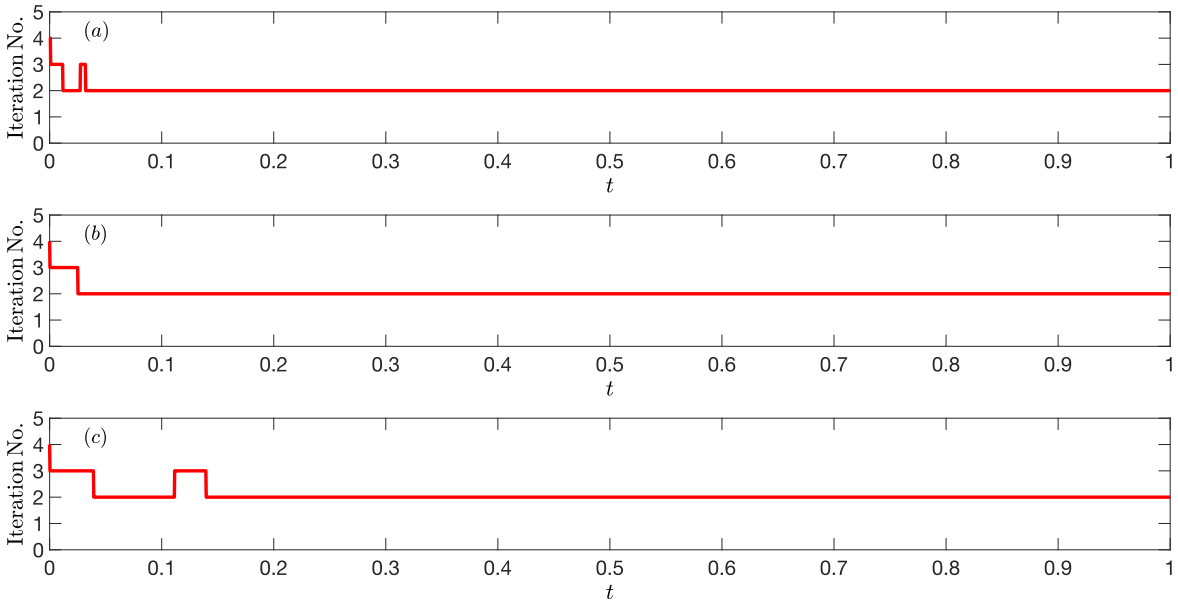


图 6.4　迭代次数：(a) 例 I；(b) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$。超参数分别取 $\alpha = 0, 1, -1$。
Figure 6.4　Iteration numbers for: (a) Case I; (b) Case II with $\beta = \frac{1}{8}$; and (c) Case II with $\beta = \frac{1}{4}$. The hyperparameters are set as $\alpha = 0, 1, -1$, respectively.

6.6.3　闭曲面在各向异性表面扩散作用下的形态演化

本节将应用数值格式 (6.40) 数值模拟曲面在各向异性表面扩散所驱动下的形态演化。

下文考察细长长方体在各向异性表面扩散作用下的**颈缩** (pinch-off)现象。图 6.8 与图 6.9 分别展示了格式 (6.40) 对 $8 \times 1 \times 1$ 与 $16 \times 1 \times 1$ 长方体的形态演化所作的数值模拟，其中网格尺度与时间步长设置为 $h = 2^{-4}, \tau = 1 \times 10^{-4}$。

数值结果表明，与文献 [19,25] 所示的各向同性演化相仿：长方体两端首先出现**峰形**，尖角随之开始**钝化**；继而两峰向中心**迁移**，并最终导致**颈缩奇点**的形成。此外，与图 6.8 相比，图 6.9 中产生了**更多**奇点，且曲面两端的演化形态也并**不相同**。此观察揭示了两点现象：

1. 对更为细长的初始曲面，表面扩散流在演化过程中往往倾向于分裂为**更多段**；
2. 在**非对称**表面能下，各向异性表面扩散的行为与**对称**表面能下的显著**不同**。

亏格 (genus) 大于一的曲面（如环面）在表面扩散作用下的演化过程中往往会发生**拓扑转变**。为验证此现象，我们在固定三重对称各向异性

$$\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \beta \left(\cos^3\theta + \sin^3\theta \cos^3\phi + \sin^3\theta \sin^3\phi \right) \tag{6.126}$$

及超参数 $\alpha = 0.5$ 下，对两组半径为 R 与 r 的环面进行数值实验。相应结果见图 6.10

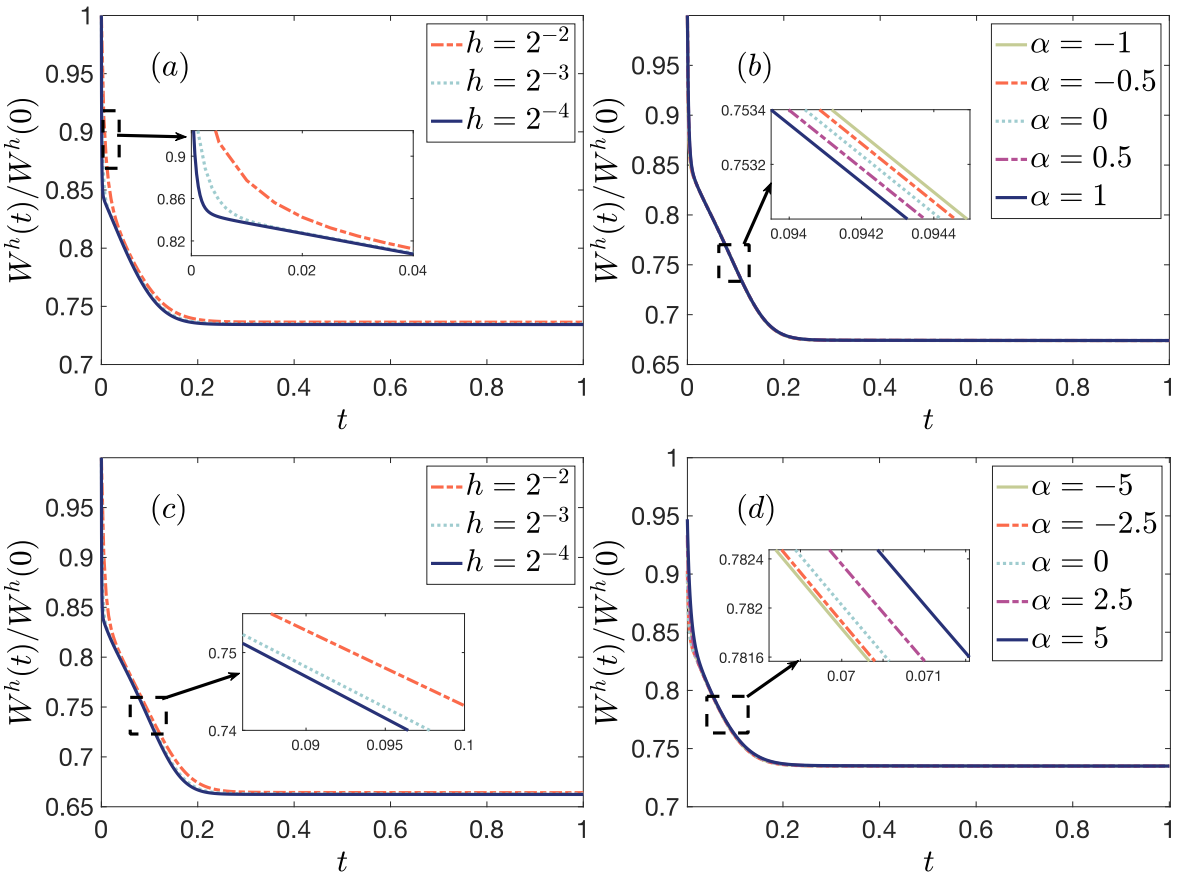


图 6.5　规范化能量：(a) 例 I，$\alpha = 0$；(b) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$；(c) 例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$ 且 $\alpha = -1$；(d) 例 I。
Figure 6.5　Normalized energy for: (a) Case I where $\alpha = 0$; (b) Case II with $\beta = \frac{1}{8}$; (c) Case II with $\beta = \frac{1}{4}$ where $\alpha = -1$; and (d) Case I.

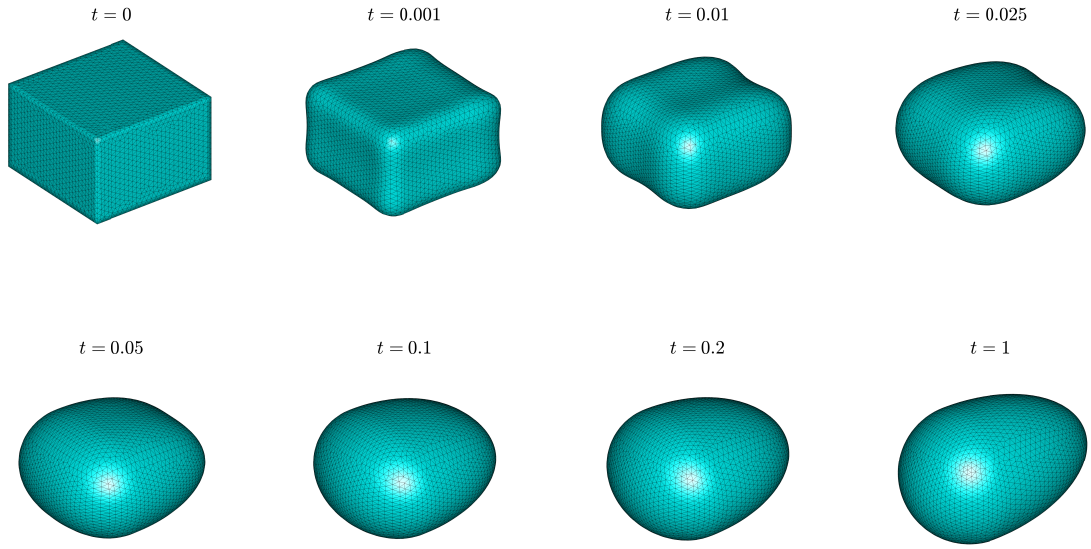


图 6.6　各向异性表面扩散下 $3 \times 3 \times 2$ 长方体于不同时刻的形态演化：各向异性取例 I，超参数 $\alpha = 0$。

Figure 6.6　Evolution of a $3 \times 3 \times 2$ cuboid by anisotropic surface diffusion for anisotropy Case I with $\alpha = 0$ at different times.

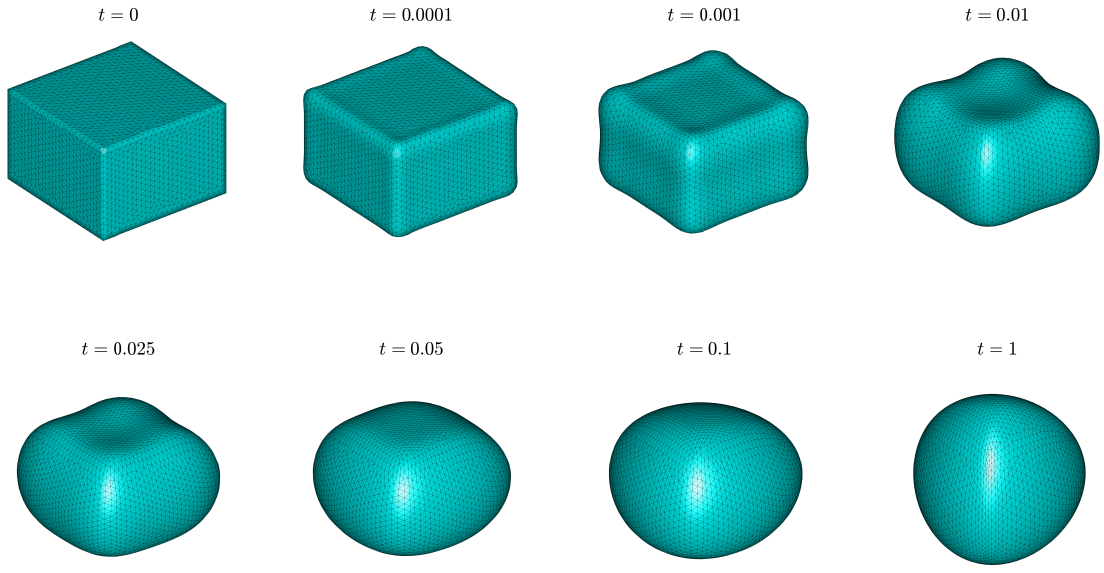


图 6.7　各向异性表面扩散下 $3 \times 3 \times 2$ 长方体于不同时刻的形态演化：各向异性取例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$，超参数 $\alpha = -1$。

Figure 6.7　Evolution of a $3 \times 3 \times 2$ cuboid by anisotropic surface diffusion for anisotropy Case II with $\beta = \frac{1}{4}$ and $\alpha = -1$ at different times.

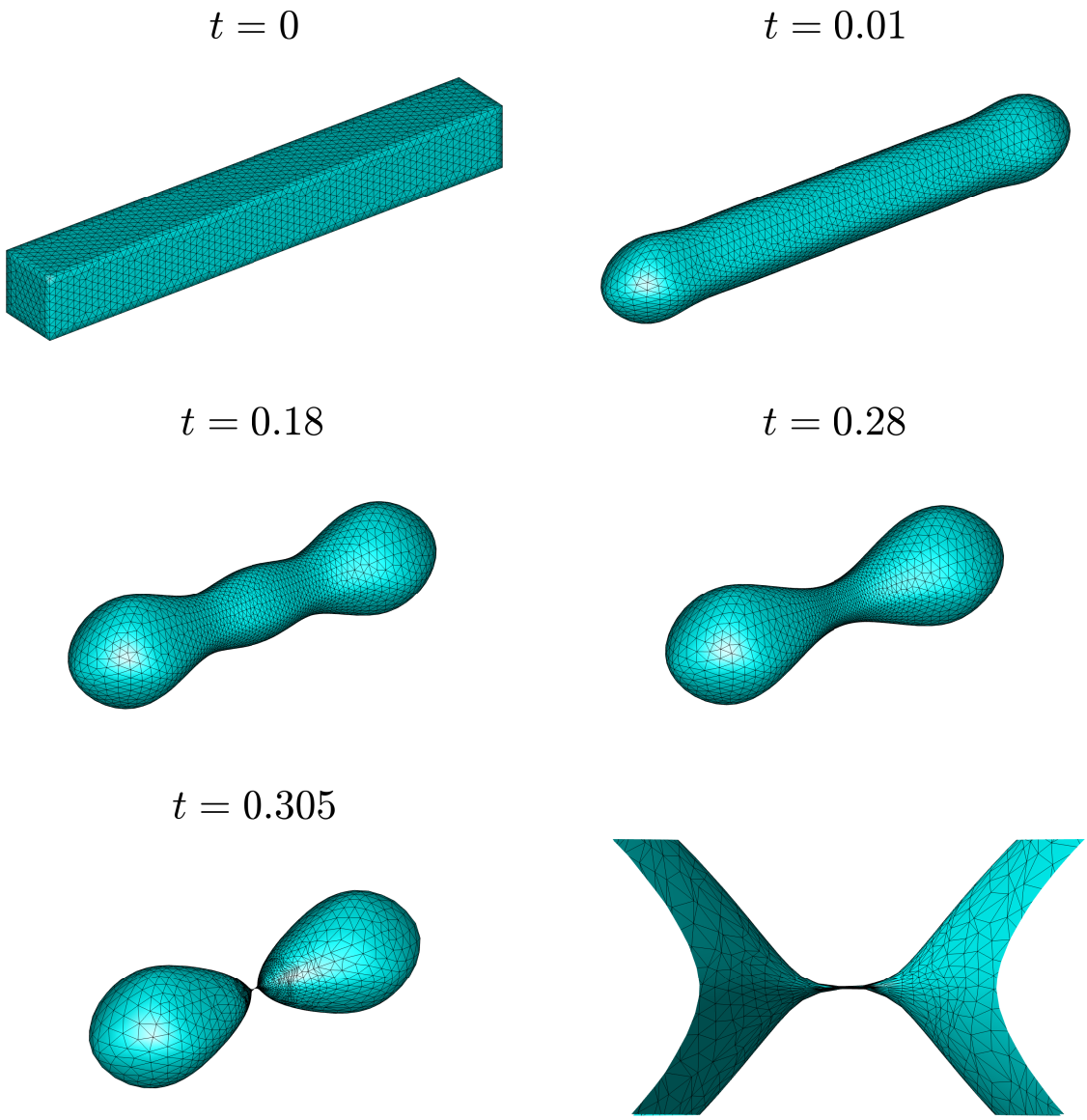


图 6.8　$8 \times 1 \times 1$ **长方体在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩的若干时刻快照：四重对称各向异性** $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$**，超参数** $\alpha = -0.5$。

Figure 6.8　**Snapshots in the evolution of a** $8 \times 1 \times 1$ **cuboid under anisotropic surface diffusion for 4-fold anisotropy** $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ **with** $\alpha = -0.5$ **until its pinch-off.**

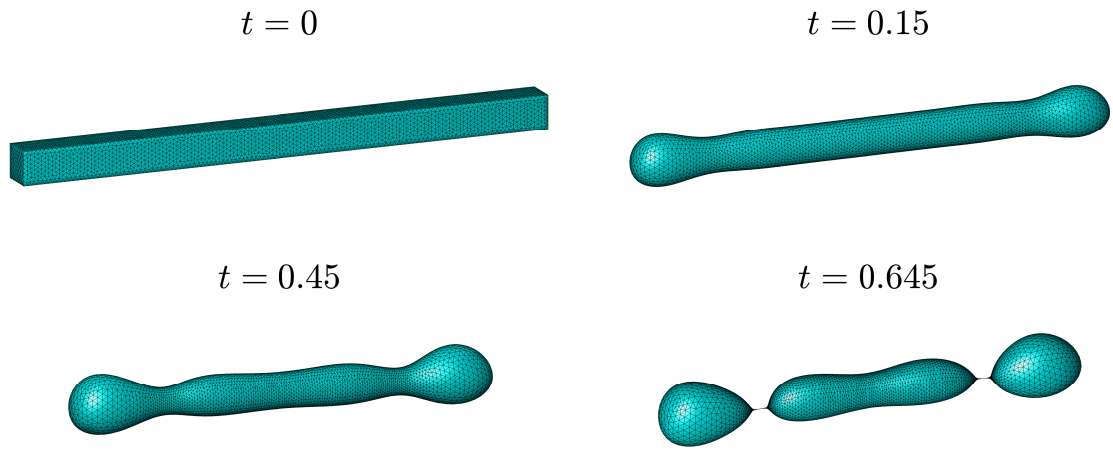


图 6.9　$16\times1\times1$ 长方体在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta = \frac{1}{8}$，超参数 $\alpha = -0.5$。

Figure 6.9　Snapshots in the evolution of a $16\times1\times1$ cuboid under anisotropic surface diffusion for anisotropy Case II with $\beta = \frac{1}{8}$ and $\alpha = -0.5$ until its pinch-off.

与图 6.11。

在图 6.10 中，环面半径取 $R = 1$、$r = 0.25$。随时间推进，可见曲面中心孔洞逐渐**收缩**并最终**消失**，从而使曲面的拓扑由亏格**一**变为亏格**零**。尽管本文方法无法在拓扑改变发生之后继续计算其演化，但可以预期：曲面终将趋于由表面能所决定的**单连通形态**，其形状当与图 6.7 所示者相近。

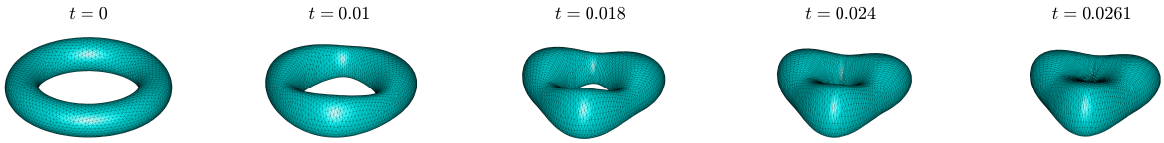


图 6.10　$(1, 0.25)$-环面在各向异性表面扩散作用下的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta = 1/4$，超参数 $\alpha = 0.5$。

Figure 6.10　Snapshots in the evolution of a $(1, 0.25)$-torus under anisotropic surface diffusion for anisotropy Case II with $\beta = 1/4$ and $\alpha = 0.5$.

在图 6.11 中，我们取 $R = 1$、$r = 0.2$ 以增大环面的半径比。演化过程中可见曲面上生成**三处**彼此分离的颈缩区；随时间推进，这些颈缩区愈发明显，最终导致**颈缩奇点**的出现。由此环面**分裂**为若干互不连通的分段，展示了各向异性表面扩散下另一类拓扑改变。另需指出的是，由于表面能的**非对称性**，各奇点发生的时刻亦**不相同**。

下一算例考察一正交十字梁的演化，见图 6.12 与图 6.13。初始曲面由两相交长方体构成，其尺寸分别为 $12\times1\times1$ 与 $8\times1\times1$。数值模拟显示：随时间推进，十字

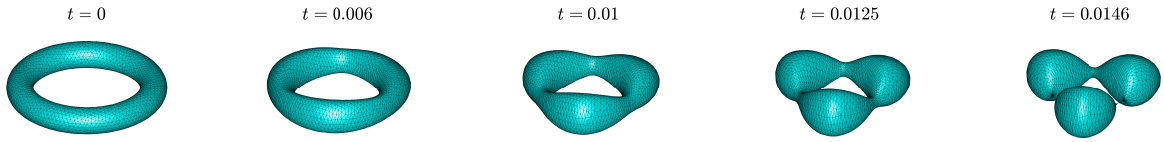


图 6.11　$(1, 0.2)$-环面在各向异性表面扩散作用下的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta = 1/4$，超参数 $\alpha = 0.5$。

Figure 6.11　Snapshots in the evolution of a $(1, 0.2)$-torus under anisotropic surface diffusion for anisotropy Case II with $\beta = 1/4$ and $\alpha = 0.5$ until its pinch-off.

梁四条臂上均生成**颈缩区**，且在 $t = 0.151$ 时两条较长臂**先行**发生颈缩。图 6.13 亦给出了演化过程中的迭代步数、规范化体积损失与规范化能量。结果表明，数值格式 (6.40) 在整个模拟过程中能有效**保持体积**并**递减**其**能量**。

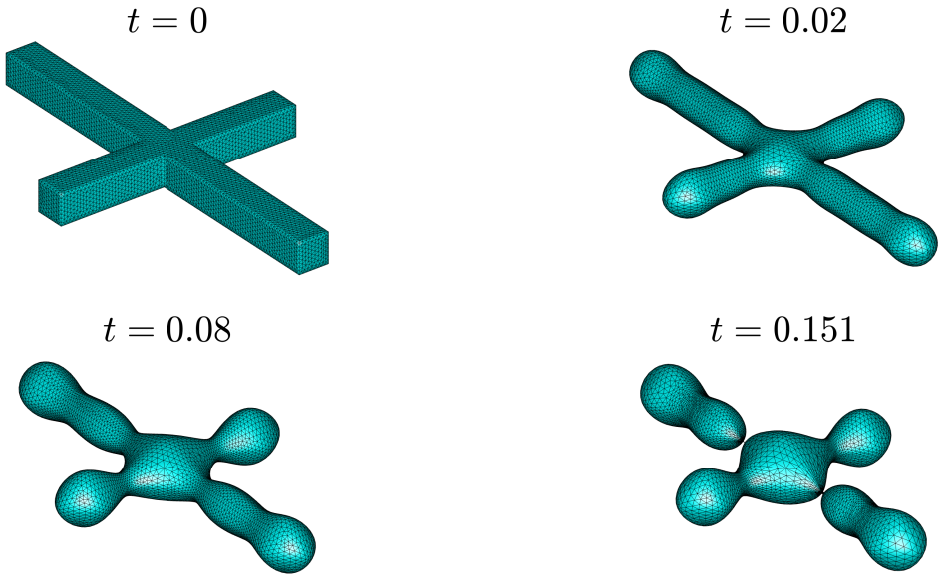


图 6.12　正交十字梁在各向异性表面扩散作用下演化至颈缩：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$。

Figure 6.12　Evolution of an orthogonal cross-beam by anisotropic surface diffusion for 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta, \phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ until its pinch-off.

最后一例中，我们应用数值方法 (6.40) 模拟各向异性取例 II（$\beta = \frac{1}{4}$）时球形格架在各向异性表面扩散作用下的演化，其结果参见图 6.14。在此例中，曲面上的六个孔洞逐渐**扩张**，并最终诱发拓扑改变，使曲面**分裂**为若干互不连通的部分。与图 6.11 类似，表面能的**非对称性**亦导致了奇异性发生时刻的**差异**。该算例展示出所提数值格式 (6.40) 处理**复杂**初始几何并捕捉各向异性表面扩散细致动力学的能力。

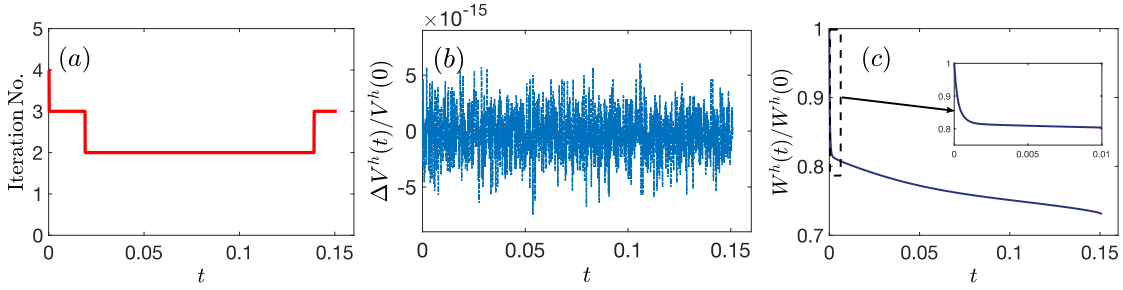


图 6.13　正交十字梁在各向异性表面扩散作用下的演化：(a) 迭代步数；(b) 规范化体积损失；(c) 规范化能量。

Figure 6.13　Evolution of an orthogonal cross-beam by anisotropic surface diffusion: (a) iteration numbers; (b) normalized volume loss; and (c) normalized energy.

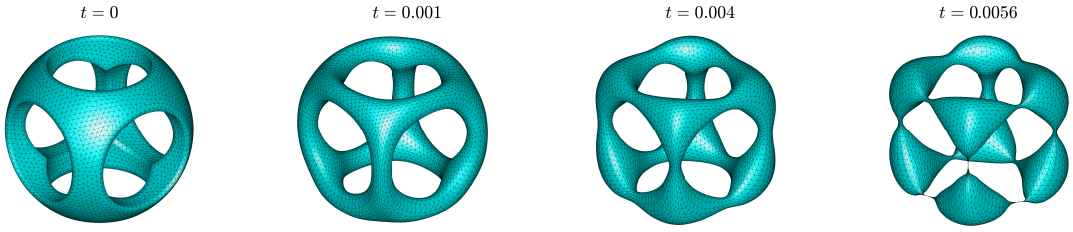


图 6.14　球形格架在各向异性表面扩散作用下的演化：各向异性取例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$.

Figure 6.14　Evolution of a spherical lattice by anisotropic surface diffusion for anisotropy Case II with $\beta = \frac{1}{4}$.

6.7　本章总结

本章将基于 α-表面能矩阵的结构保持参数化有限元方法推广到三维空间中的各向异性表面扩散流。该格式在离散层面上严格保持体积守恒，并在条件 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi) > 0$ 下对任意超参数 α 均具有无条件能量稳定性。与二维结论一致，当表面能对称时，该条件可改进为 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi) \geq 0$。该条件构成了能量稳定性的充要条件，因此在此情形下，能量稳定条件在局部能量估计的框架下已达到最优，无法再改进。我们提供了大量数值实验展示了该方法在复杂曲面演化中的效率、精度与结构保持性，特别是在强各向异性与复杂几何背景下仍能保持稳定计算与良好网格质量。

第 7 章　应用：三维空间中的固态脱湿问题

一般而言，三维空间中的固态脱湿问题可被视为有表面扩散方程及移动接触线共同控制的开曲面演化问题。固体薄膜在沿平直基底移动时，在三相交界处形成一条移动接触线并由此带来全新的动力学过程。与二维情况相比，三维固态脱湿不仅界面由曲线推广为开曲面，而且移动接触线由点推广为一条空间曲线，其表面能各向异性、接触线几何约束与拓扑变化会强烈耦合，使得形态演化呈现更丰富的多尺度动力学特征。

因此，针对三维固态脱湿问题的保结构数值方法不仅是高精度长期模拟的必要前提，也是实现与实验可比对、可预测的关键：它能够可靠捕捉表面能各向异性、岛状形态选择及其对材料参数的敏感依赖，从而为传感、光学/磁学器件与催化模板等应用中的“可控图案化”提供可计算的设计依据 [101,121,134]。

7.1　尖锐界面模型

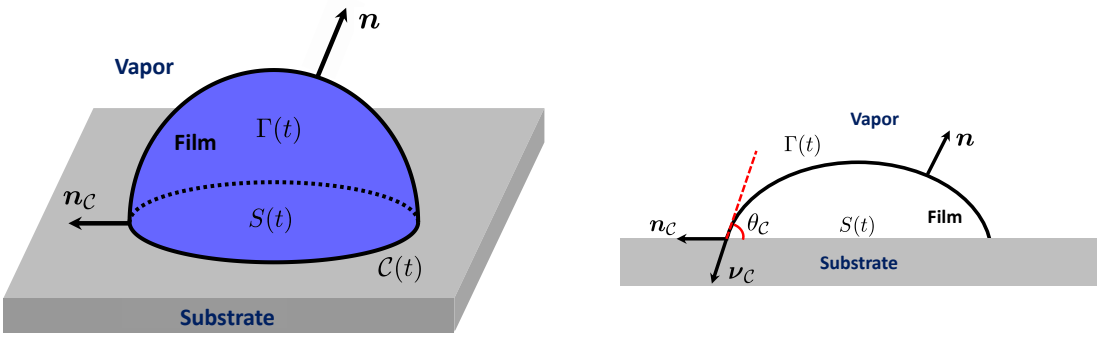


图 7.1　刚性平坦基底上薄膜的固态脱湿过程示意图。左图：Γ 表示薄膜/气相界面，S 表示薄膜/基底界面，C 为接触线；$\boldsymbol{n}_C$ 为 C 在 S 上的单位外法向量。右图：接触角 $\theta_C = \arccos(\boldsymbol{n}_C \cdot \boldsymbol{\nu}_C)$ 的几何构型，其中 $\boldsymbol{\nu}_C$ 为 C 的余法向量。

Figure 7.1　A schematic illustration of the solid-state dewetting process of a solid thim film on a rigid flat substrate. Left panel: Γ denotes the film/vapor interface, S represents the film/substrate interface, and C is the contact line, $\boldsymbol{n}_C$ is the unit outer normal vector of C on S. Right panel: configuration of the contact angle $\theta_C = \arccos(\boldsymbol{n}_C \cdot \boldsymbol{\nu}_C)$, where $\boldsymbol{\nu}_C$ is the conormal vector of C.

与二维情形类似，三维空间中的固态脱湿问题 (solid-state dewetting) 的尖锐界面

模型可描述为一个开曲面：

$$\Gamma(t) \coloneqq \boldsymbol{X}(\cdot, t), \qquad \forall t > 0, \tag{7.1}$$

在各向异性表面扩散与接触线迁移作用下的演化过程。

如图 7.1 所示，三维空间中薄膜固态脱湿问题的尖锐界面模型 (sharp-interface model) 可表述如下 [94]：开曲面 $\Gamma(t)$ 满足演化方程

$$\partial_t \boldsymbol{X} = (\Delta_\Gamma \mu)\, \boldsymbol{n}, \qquad \forall t > 0, \tag{7.2a}$$

$$\mu = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{\xi}, \tag{7.2b}$$

并在接触线 $C \coloneqq \boldsymbol{X}_C = (x_C, y_C, z_C)^T$ 处配以下列边界条件：

(i) 接触线条件：

$$z_C(\cdot, t) = 0, \qquad \forall t > 0; \tag{7.3}$$

(ii) 松弛接触角条件：

$$\partial_t \boldsymbol{X}_C = -\eta\Big(\boldsymbol{\nu}_C^\gamma \cdot \boldsymbol{n}_C - \cos\theta_Y\Big)\boldsymbol{n}_C, \qquad \forall t > 0; \tag{7.4}$$

(iii) 零质量通量条件：

$$\Big(\boldsymbol{\nu}_C \cdot \nabla_\Gamma \mu\Big)\Big|_C = 0, \qquad \forall t > 0. \tag{7.5}$$

此处 $\boldsymbol{n}_C = (n_{C,1}, n_{C,2}, 0)^T$ 为接触线 C 在基底平面上的单位外法向量，$\boldsymbol{\nu}_C^\gamma \coloneqq (\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{\nu}_C - (\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\nu}_C)\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{\nu}_C$ 表示余法向量 (conormal vector)，$\eta > 0$ 为接触线迁移率，而 θ_Y 表示 Young 角。

体系的总自由能定义为

$$W(t) \coloneqq \int_{\Gamma(t)} \hat{\gamma}(\theta, \phi)\, \mathrm{d}A - \cos\theta_Y\, |S(t)|, \tag{7.6}$$

其中 $|S(t)|$ 表示接触线 C 在基底平面所围区域 $S(t)$ 的面积。设 $\Omega(t)$ 为由 $\Gamma(t)$ 与基底平面 $S(t)$ 所围成的区域，并以 $V(t)$ 表示 $\Omega(t)$ 的体积，则该系统保持**总体积（质量）守恒**，并相对于总表面自由能呈现**能量耗散**性：

$$V(t) \equiv V(0), \qquad W(t) \le W(t') \le W(0), \qquad \forall t \ge t' \ge 0. \tag{7.7}$$

与 6.1 节的推导相仿，我们可将尖锐界面模型 (7.2)–(7.5) 改写为如下形式：

$$\boldsymbol{n}\cdot\partial_t \boldsymbol{X} - \Delta_\Gamma \mu = 0, \qquad \forall t > 0, \tag{7.8a}$$

$$\mu\boldsymbol{n} + \nabla_\Gamma \cdot \Big(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta, \phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}\Big) = \boldsymbol{0}, \tag{7.8b}$$

并在接触线 C 处满足边界条件 (7.3)–(7.5)，其中表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha$ 如 (6.12) 所定义。

7.2 结构保持参数有限元离散

7.2.1 弱形式

引入 Sobolev 空间

$$H_0^1(\Gamma(t)) \coloneqq \left\{u \in H^1(\Gamma(t)) : u|_{C(t)} = 0\right\}. \tag{7.9}$$

以检验函数 $\varphi \in H^1(\Gamma(t))$ 乘于 (7.8a)，并在 $\Gamma(t)$ 上积分；再作分部积分并利用零质量通量条件 (7.5)，得到

$$\left(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t \boldsymbol{X}, \varphi\right)_{\Gamma(t)} + \left(\nabla_\Gamma \mu, \nabla_\Gamma \varphi\right)_{\Gamma(t)} = 0. \tag{7.10}$$

注意到

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}\right)\boldsymbol{\nu}_C &= \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi)I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T\right)(I-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T)\boldsymbol{\nu}_C \\ &= \left(\hat{\gamma}(\theta,\phi)I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}^T\right)\boldsymbol{\nu}_C \\ &= \hat{\gamma}(\theta,\phi)\boldsymbol{\nu}_C - (\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\nu}_C)\boldsymbol{n},\end{aligned} \tag{7.11}$$

则由 $\boldsymbol{\nu}_C^\gamma$ 之定义及恒等式 $\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{n} = \hat{\gamma}(\theta,\phi)$，我们有

$$\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}\right)\boldsymbol{\nu}_C = \boldsymbol{\nu}_C^\gamma. \tag{7.12}$$

易验证有下列两式成立：

$$\boldsymbol{\nu}_C^\gamma \cdot \boldsymbol{n}_C = \cos\theta_Y - \frac{1}{\eta}\left(\partial_t \boldsymbol{X}_C \cdot \boldsymbol{n}_C\right), \tag{7.13a}$$

$$\boldsymbol{\nu}_C^\gamma = (\boldsymbol{\nu}^\gamma\cdot\boldsymbol{e}_z)\boldsymbol{e}_z + (\boldsymbol{\nu}^\gamma\cdot\boldsymbol{n}_C)\boldsymbol{n}_C, \tag{7.13b}$$

其中 (7.13a) 为松弛接触角条件 (7.4) 的改写，而 (7.13b) 则为 $\boldsymbol{\nu}_{C^\gamma}$ 关于 $\boldsymbol{e}_z = (0,0,1)^T, \boldsymbol{n}_C$ 的分解。

将 $\boldsymbol{\omega} \in [H^1(\Gamma(t))]^2 \times H_0^1(\Gamma(t))$ 乘于 (7.8b)，并作分部积分，可得

$$\begin{aligned}0 &= \left(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}\right\rangle_{\Gamma(t)} + \left(\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}\right)\boldsymbol{\nu}_C, \boldsymbol{\omega}\right)_{C(t)} \\ &= \left(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}\right\rangle_{\Gamma(t)} + \left(\boldsymbol{\nu}_C^\gamma, \boldsymbol{\omega}\right)_{C(t)} \\ &= \left(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}\right\rangle_{\Gamma(t)} + \left(\boldsymbol{\nu}_C^\gamma\cdot\boldsymbol{n}_C, \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{n}_C\right)_{C(t)}.\end{aligned} \tag{7.14}$$

代入 (7.13b) 至 (7.14)，立有

$$\begin{aligned}0 = &\left(\mu\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\omega}\right)_{\Gamma(t)} - \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta,\phi)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{\omega}\right\rangle_{\Gamma(t)} + \cos\theta_Y\left(\boldsymbol{n}_C, \boldsymbol{\omega}\right)_{C(t)} \\ &- \frac{1}{\eta}\left(\partial_t \boldsymbol{X}_C\cdot\boldsymbol{n}_C,\ \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{n}_C\right)_{C(t)}\end{aligned} \tag{7.15}$$

综上，三维空间中固态脱湿问题的尖锐界面模型之**弱形式**可表述为：给定初始曲面 $\Gamma(0)$，对任意 $t>0$，求 $\Gamma(t)$ 使得

$$\Big(\boldsymbol{n}\cdot\partial_t\boldsymbol{X},\varphi\Big)_{\Gamma(t)}+\Big(\nabla_\Gamma\mu,\nabla_\Gamma\varphi\Big)_{\Gamma(t)}=0,\qquad\forall\varphi\in H^1(\Gamma(t)),\tag{7.16a}$$

$$\begin{aligned}&\Big(\mu\boldsymbol{n},\boldsymbol{\omega}\Big)_{\Gamma(t)}-\Big\langle\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta,\phi)\nabla_\Gamma\boldsymbol{X},\nabla_\Gamma\boldsymbol{\omega}\Big\rangle_{\Gamma(t)}+\cos\theta_Y\Big(\boldsymbol{n}_C,\boldsymbol{\omega}\Big)_{C(t)}\\&\quad-\frac{1}{\eta}\Big(\partial_t\boldsymbol{X}_C\cdot\boldsymbol{n}_C,\ \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{n}_C\Big)_{C(t)}=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}\in[H^1(\Gamma(t))]^2\times H_0^1(\Gamma(t)).\end{aligned}\tag{7.16b}$$

对任意 $\varphi\in H^1(\Gamma(t))$ 与 $\boldsymbol{\omega}\in[H^1(\Gamma(t))]^2\times H_0^1(\Gamma(t))$ 皆成立。

定理 7.1 (体积守恒与能量耗散)　设 $(\boldsymbol{X},\mu)$ 为弱形式 (7.16) 之解，则薄膜总体积**守恒**，而总自由能**耗散**的，即

$$V(t)\equiv V(0),\qquad W(t)\le W(t')\le W(0),\qquad\forall t\ge t'\ge 0.\tag{7.17}$$

7.2.2　全离散格式

设多面体 Γ^m 的边界由 N_C 条相连**定向**线段组成，记为

$$C^m:=\bigcup_{j=1}^{N_C}l_j^m.\qquad m\ge 0.\tag{7.18}$$

定义如下有限元空间：

$$\mathbb{K}^m:=\left\{u\in C(\Gamma^m)\,\middle|\,u|_{\sigma_j^m}\in\mathcal{P}^1(\sigma_j^m),\ \forall 1\le j\le J\right\},\tag{7.19a}$$

$$\mathbb{K}_0^m:=\left\{\varphi^h\in\mathbb{K}^m\,\middle|\,\varphi|_{l_j^m}=0,\ \forall 1\le j\le N_C\right\},\tag{7.19b}$$

其中 $\mathcal{P}^1(\sigma_j^m)$ 表示定义在 σ_j^m 上且次数 ≤ 1 的多项式空间。在边界 C^m 上，我们采用如下**质量集中内积**：

$$\Big(u,v\Big)_{C^m}^h:=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N_C}|l_j^m|\Big((u\cdot v)(\boldsymbol{p}_{j_1}^m)^-+(u\cdot v)(\boldsymbol{p}_{j_2}^m)^-\Big),\tag{7.20}$$

其中 $\boldsymbol{p}_{j_1}^m$ 与 $\boldsymbol{p}_{j_2}^m$ 为线段 l_j^m 的两个端点，并按曲线 C^m 的定向排列。边界上的**离散微分算子** ∂_s 则定义为

$$\partial_s u|_{l_j^m}:=\frac{u(\boldsymbol{p}_{j_2}^m)-u(\boldsymbol{p}_{j_1}^m)}{|l_j^m|}.\tag{7.21}$$

上述定义对向量值函数的推广是直接的。记 $\boldsymbol{n}_C^m$ 为 C^m 在基底平面上的单位外法向量。对每条线段 $l_j^m=[\boldsymbol{p}_{j_1}^m,\boldsymbol{p}_{j_2}^m]$，其取值为

$$\boldsymbol{n}_{C,j}^m:=\boldsymbol{n}_C^m|_{l_j^m}=\frac{(\boldsymbol{p}_{j_2}^m-\boldsymbol{p}_{j_1}^m)\times\boldsymbol{e}_z}{\|(\boldsymbol{p}_{j_2}^m-\boldsymbol{p}_{j_1}^m)\times\boldsymbol{e}_z\|}.\tag{7.22}$$

现可阐述固态脱湿问题的结构保持参数有限元方法如下：给定初始三角剖分曲面 Γ^0，对 $m=0,1,2,\cdots$，求更新曲面 Γ^{m+1} 使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\nabla_\Gamma\mu^{m+1},\nabla_\Gamma\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}^m, \tag{7.23a}$$

$$\begin{aligned}&\left(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left\langle\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta^m,\phi^m)\nabla_\Gamma\boldsymbol{X}^{m+1},\nabla_\Gamma\boldsymbol{\omega}^h\right\rangle_{\Gamma^m}^h+\cos\theta_Y\left(\boldsymbol{n}_C^{m,*},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{C^m}^h\\&\quad-\frac{1}{\eta\tau}\left((\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m)\cdot\boldsymbol{n}_C^m,\ \boldsymbol{\omega}^h\cdot\boldsymbol{n}_C^m\right)_{C^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}^m]^2\times\mathbb{K}_0^m,\end{aligned} \tag{7.23b}$$

其中 $\boldsymbol{n}_C^{m,*}\coloneqq\frac{1}{2}(\partial_s\boldsymbol{X}_C^{m+1}+\partial_s\boldsymbol{X}_C^m)\times\boldsymbol{e}_z$。

7.2.3　结构保持

记 V^m 为由 Γ^m 与基底所围区域的体积，其定义见 (6.42a)。此外，令 W^m 表示离散时刻 t^m 处的总自由能，形式上定义为

$$W^m\coloneqq\left(\hat{\gamma}(\theta^m,\phi^m),1\right)_{\Gamma^m}^h-\cos\theta_Y|S^m|. \tag{7.24}$$

与闭曲面情形类似，可证明上述固态脱湿问题的保结构参数有限元格式在离散层面同样保持体积守恒与能量耗散性质。

引理 7.1 ([20])　对基底区域 S^m，有

$$|S^{m+1}|-|S^m|=\left(\boldsymbol{n}_C^{m,*},\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m\right)_{C^m}^h,\qquad\forall m\geq0. \tag{7.25}$$

定理 7.2 (结构保持)　设 $(\boldsymbol{X}^{m+1},\mu^{m+1})$ 为数值格式 (7.23) 之解，则其**总体积守恒**，即

$$V^{m+1}=V^m=\cdots=V^0,\qquad\forall m\geq0. \tag{7.26}$$

若 $\alpha=-1$ 且各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 满足条件

$$2\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)\geq0,\qquad\forall(\theta,\phi)\in[0,\pi]\times2\pi\mathbb{T}, \tag{7.27}$$

则其无条件**能量稳定**，即

$$W^{m+1}\leq W^m\leq\cdots\leq W^0,\qquad\forall m\geq0. \tag{7.28}$$

反之，当 $\alpha\neq-1$ 时，需将能量稳定条件加强为 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi)-\hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi)>0$。

证明　体积守恒性的证明与 [19] 类似，故我们略去其细节。我们先将注意力集中到能量稳定性的证明。

在 (7.23a) 中置 $\varphi^h = \mu^{m+1}$，并在 (7.23b) 中置 $\boldsymbol{\omega}^h = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$；将所得两式相加，我们有

$$\begin{aligned}&\left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m,\phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_{\Gamma}(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right\rangle_{\Gamma^m}^h - \cos\theta_Y\left(\boldsymbol{n}_C^{m,*}, \boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m\right)_{C^m}^h \\ &\quad = -\tau\left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}, \nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h - \frac{1}{\eta\tau}\left((\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m)\cdot\boldsymbol{n}_C^m,\ (\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m)\cdot\boldsymbol{n}_C^m\right)_{C^m}^h.\end{aligned} \tag{7.29}$$

注意到局部能量估计 (6.54) 对开曲面仍然成立，故可仿照 (6.61) 的推导，得到

$$\begin{aligned}&\left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m,\phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_{\Gamma}(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right\rangle_{\Gamma^m}^h \\ &\qquad \geq \sum_{j=1}^{J}\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1},\phi_j^{m+1})|\sigma_j^{m+1}| - \sum_{j=1}^{J}\hat{\gamma}(\theta_j^m,\phi_j^m)|\sigma_J^m|.\end{aligned} \tag{7.30}$$

因此，将上述结果与引理 7.1 相结合，得

$$\begin{aligned}W^{m+1}-W^m &= \sum_{j=1}^{J}\hat{\gamma}(\theta_j^{m+1},\phi_j^{m+1})|\sigma_j^{m+1}| - \sum_{j=1}^{J}\hat{\gamma}(\theta_j^m,\phi_j^m)|\sigma_J^m| \\ &\quad - \cos\theta_Y(|S^{m+1}|-|S^m|) \\ &\leq \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m,\phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{m+1}, \nabla_{\Gamma}(\boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m)\right\rangle_{\Gamma^m}^h \\ &\quad - \cos\theta_Y\left(\boldsymbol{n}_C^{m,*}, \boldsymbol{X}^{m+1}-\boldsymbol{X}^m\right)_{C^m}^h \\ &= -\tau\left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}, \nabla_{\Gamma}\mu^{m+1}\right)_{\Gamma^m}^h \\ &\quad - \frac{1}{\eta\tau}\left((\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m)\cdot\boldsymbol{n}_C^m,\ (\boldsymbol{X}_C^{m+1}-\boldsymbol{X}_C^m)\cdot\boldsymbol{n}_C^m\right)_{C^m}^h \\ &\leq 0.\end{aligned} \tag{7.31}$$

明欲所证。 ■

7.3　固态脱湿中开曲面的形态演化

本节中，我们应用数值格式 (7.23) 来模拟开曲面在各向异性固态脱湿问题中的形态演化。

数值实验中，我们主要采用如下两种各向异性表面能：

- 例 I: $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = \sqrt{1+\frac{3}{2}\left(1+\operatorname{sgn}(\sin\theta\cos\phi)\right)\sin^2\theta\cos^2\phi}$;

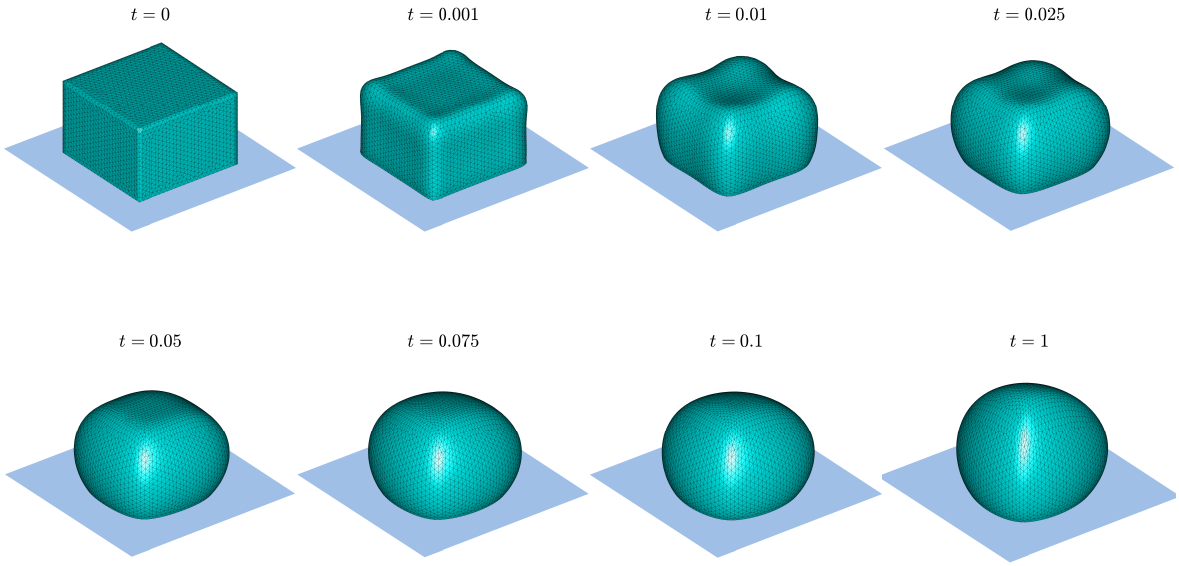


图 7.2 固态脱湿过程中 $3 \times 3 \times 2$ 长方体的演化，其中各向异性取例 II 且 $\beta = 1/4$，超参数 $\alpha = 0$，$\theta_Y = 2\pi/3$。

Figure 7.2 Evolution of a $3 \times 3 \times 2$ cuboid in solid-state dewetting for anisotropy Case I with $\beta = 1/4, \alpha = 0$ and $\theta_Y = 2\pi/3$.

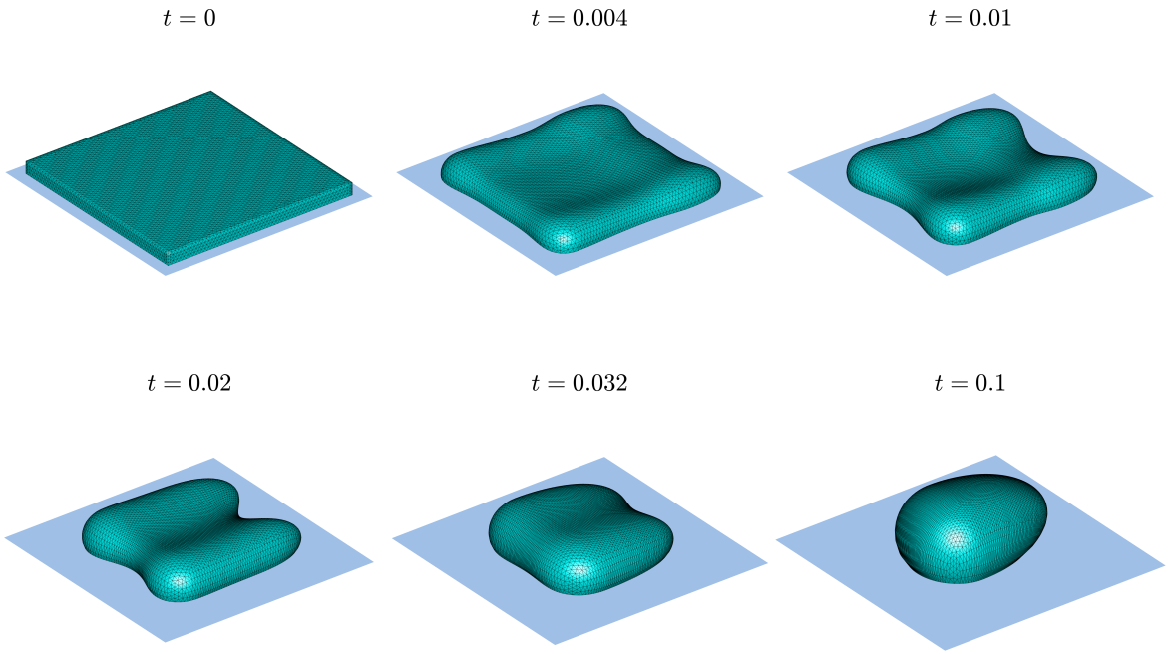


图 7.3 固态脱湿过程中 $3.2 \times 3.2 \times 0.2$ 长方体的演化，其中各向异性取例 I，超参数 $\alpha = -1$，$\theta_Y = 3\pi/4$。

Figure 7.3 Evolution of a $3.2 \times 3.2 \times 0.2$ cuboid in solid-state dewetting for anisotropy Case I with $\alpha = -1$ and $\theta_Y = 3\pi/4$.

- 例 II: $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \beta\left(\cos^3\theta + \sin^3\theta\cos^3\phi + \sin^3\theta\sin^3\phi\right)$.

图 7.2 展示了各向异性固态脱湿过程中 $3\times3\times2$ 长方体在各向异性取例 II 且 $\beta = \frac{1}{4}$，超参数 $\alpha = 0$ 时的形态演化；可以从图例中看出，演化过程中曲面网格质量保持**良好**。图 7.3 则给出了 $3.2\times3.2\times0.2$ 长方体在各向异性取例 I、超参数 $\alpha = -1$ 时的脱湿过程。从图例中可见，在初始阶段，方形岛的四个角点回缩显著**慢于**四条边；随着演化推进，该岛逐步向平衡态接近，并最终达到一稳态构型。该平衡态形状与第 6 章图 6.6 所示在**同一**各向异性下闭曲面所达到平衡形状的**一部分**相一致。

我们接下来考察细长长方体薄膜在脱湿过程可能发生的**颈缩** (pinch-off)现象。图 7.4–图 7.7 分别给出了采用格式 (7.23) 对 $16\times1\times1$ 长方体与方形环岛的形态演化数值结果，其中网格尺度取 $h = 2^{-3}$、时间步长设置为 $\tau = 1\times10^{-4}$。

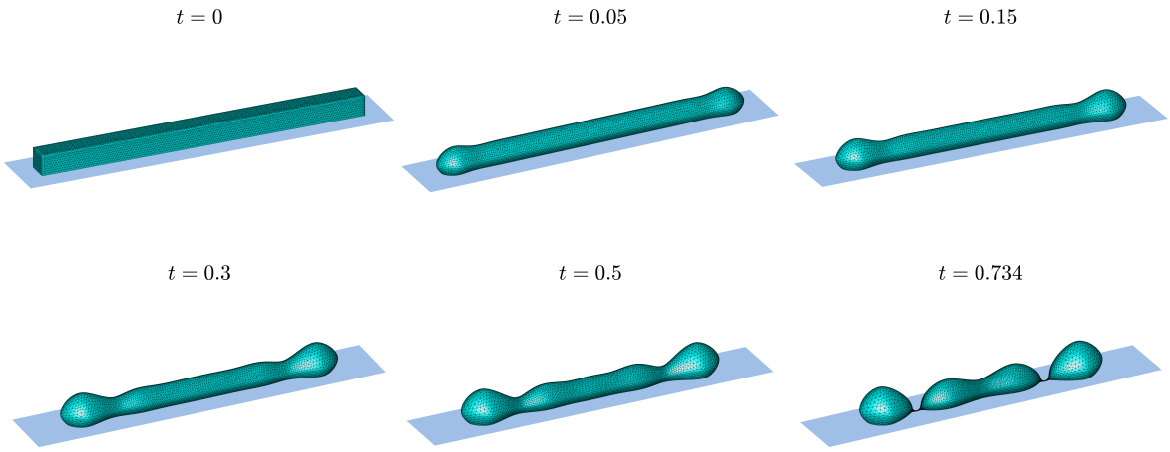


图 7.4　固态脱湿中 $16\times1\times1$ 长方体的演化至颈缩的过程：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y = 5\pi/6$。

Figure 7.4　Evolution of a $16\times1\times1$ cuboid in solid-state dewetting for 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ with $\theta_Y = 5\pi/6$ until its pinch-off.

从图 7.4 中可见：对于细长形薄膜，在初始阶段，薄膜两端出现**类晶面** (facet-like)的凸起；随后物质逐步向端部聚集，并最终发生**颈缩**，从而形成多处的孤立岛。

现在我们转向考察初始为方形环岛状薄膜的演化。图 7.5 给出了由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $2\times2\times1$ 长方体所得“宽”方环的形态演化。由图例可见：演化初期，原本尖锐的方形环岛薄膜迅速被**光滑化**；继而内孔逐渐**收缩**，材料以**各向异性**的方式重新分布。至于较晚时刻，曲面相对两侧发生**接触**，预示**拓扑转变**即将发生；薄膜的环状构型遂转化为**单连通结构**。

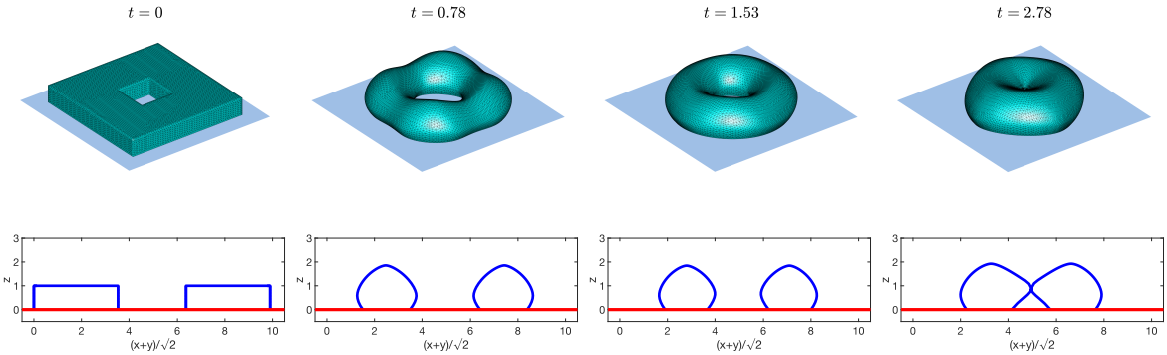


图 7.5　由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $2\times2\times1$ 长方体所得初始“宽”方环的固态脱湿过程及其在平面 $x=y$ 上的截线：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y=3\pi/4$。

Figure 7.5　Evolution of a initial “fat” square-ring obtained from $7\times7\times1$ cuboid by cutting out a $2\times2\times1$ cuboid from the center, together with their cross-sections in the plane $x=y$, under 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta,\phi)=1+\frac{1}{4}\left(\cos^4\theta+\sin^4\theta\cos^4\phi+\sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ with $\theta_Y=3\pi/4$.

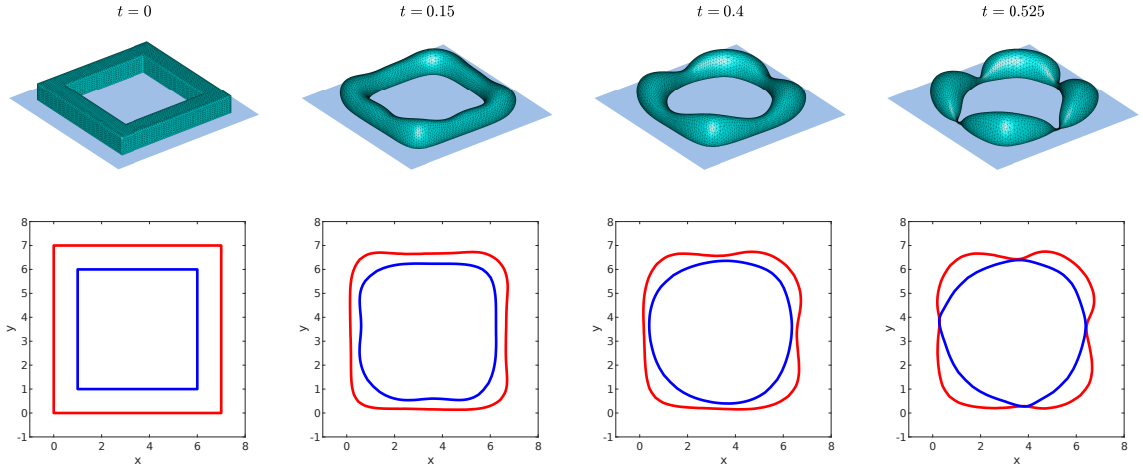


图 7.6　固态脱湿过程中初始“窄”方环演化至颈缩的若干时刻快照：各向异性取例 II 且 $\beta=\frac{1}{4}$，$\theta_Y=3\pi/4$。

Figure 7.6　Snapshots in the evolution of a initial square-ring in solid-state dewetting for anisotropy Case II with $\beta=\frac{1}{4}$ and $\theta_Y=3\pi/4$ until its pinch-off.

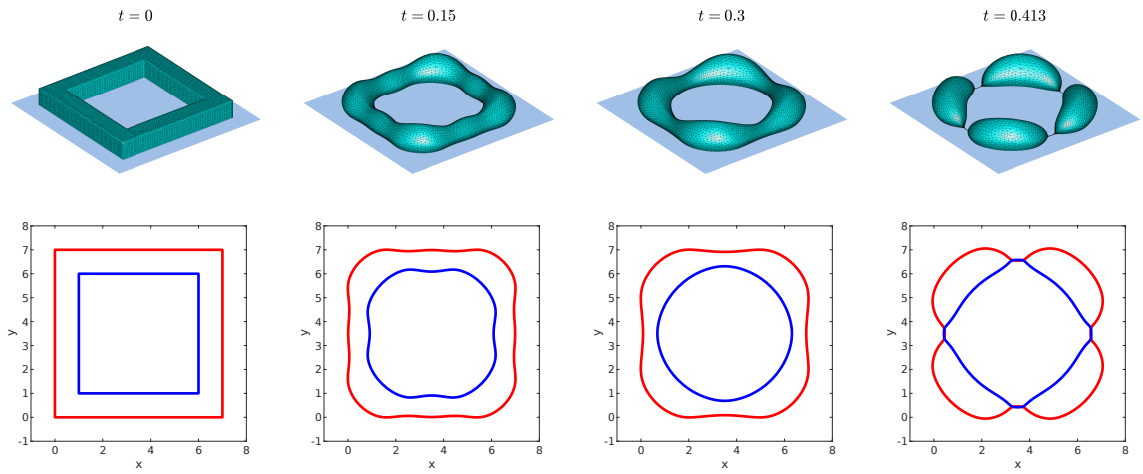


图 7.7　固态脱湿过程中初始“窄”方环演化至颈缩的若干时刻快照：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y = 3\pi/4$。

Figure 7.7　Snapshots in the evolution of a initial square-ring in solid-state dewetting for 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ **with** $\theta_Y = 3\pi/4$ **until its pinch-off.**

接下来，我们再考虑一“窄”方形环岛状薄膜：其由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $5\times5\times1$ 长方体得到。三重与四重对称各向异性两种情形下的形貌演化及其在 xOy 平面上的边界，分别见图 7.6 与图 7.7。在两种情形中，均可观察到曲面上如预期般生成四处**颈缩区**，此乃 Rayleigh **不稳定性** (Rayleigh-like instability) 所致。

从图上可见：在演化初期，曲面呈现**波状起伏**；随时间推进，四个角区逐渐**增厚**，而沿边的中部区域则不断**变窄**。最终，当薄区宽度趋近于零时，曲面发生**断裂**，从而形成四个彼此分离的孤立颗粒。此外，不同各向异性下曲面**边界**的行为亦呈现明显**差异**：对**非对称**的三重对称各向异性，边界近似呈关于直线 $x = y$ 的**镜面对称**；而对于**对称**的四重对称各向异性，边界则表现出更高的对称性，即显著的C_4 **旋转对称**。

值得指出的是，方环愈窄，其不稳定性愈被**放大**，从而更易分裂生成**更多**孤立岛。例如，如图 7.8 所示，该“超窄”方环最终分裂形成八个孤立岛屿。

最后，我们研究固体薄膜在固态脱湿过程中最终形成的平衡态。我们将各向异性设置为

$$\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \beta\left(\cos^3\theta + \sin^3\theta\cos^3\phi + \sin^3\theta\sin^3\phi\right). \tag{7.32}$$

不同 Young 角 θ_Y 与不同各向异性强度 β 对平衡态的影响分别示于图 7.9 与图 7.10。

从图 7.9 中可清楚看出：不同 θ_Y 对应的平衡构型差异**显著**。随着 θ_Y 增大，开曲面的平衡形状受基底截断的程度逐渐**减弱**，相应的接触半径亦随之减小；在保持与基

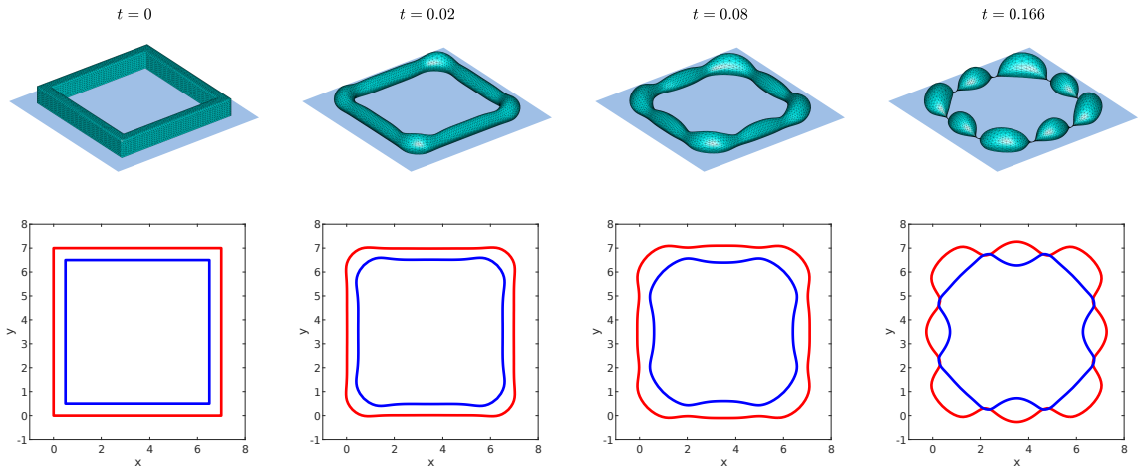


图 7.8　由 $7\times7\times1$ 长方体中心挖去一 $6\times6\times1$ 长方体所得初始“超窄”方环在固态脱湿过程中的演化：四重对称各向异性 $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$，$\theta_Y = 3\pi/4$。

Figure 7.8　Evolution of a initial “thin” square-ring obtained from $7\times7\times1$ cuboid by cutting out a $6\times6\times1$ cuboid from the center for 4-fold anisotropy $\hat{\gamma}(\theta,\phi) = 1 + \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta + \sin^4\theta\cos^4\phi + \sin^4\theta\sin^4\phi\right)$ with $\theta_Y = 3\pi/4$.

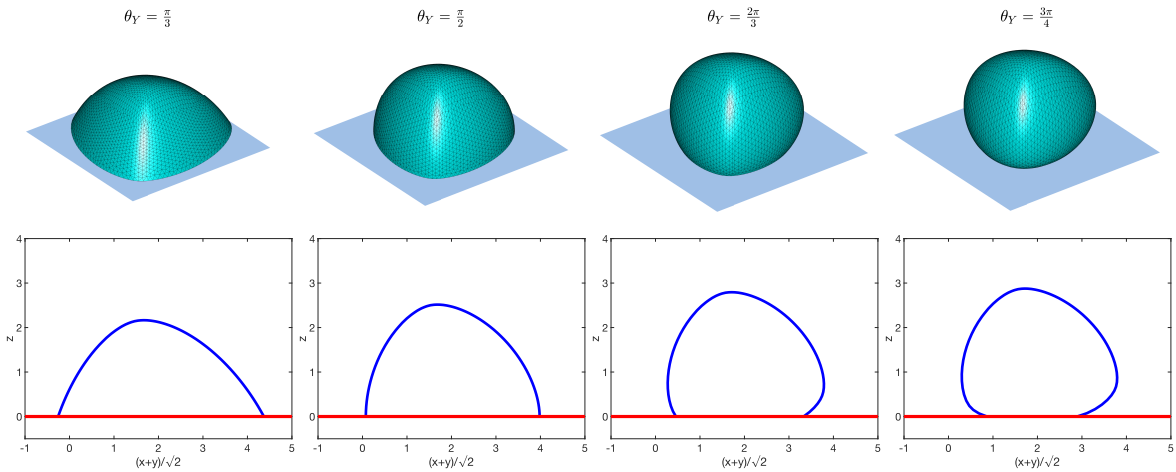


图 7.9　各向异性强度 $\beta = \frac{1}{4}$ 时，不同材料常数 θ_Y 下岛状薄膜的平衡态及其与平面 $x = y$ 上的截线。

Figure 7.9　The equilibrium geometry of islands, together with their cross-sections in the plane $x = y$, under anisotropy Case II with $\beta = \frac{1}{4}$ for different material constants θ_Y.

底相围**体积不变**的前提下，构型由**浅帽状**逐步过渡至近乎**闭曲面**之平衡形态。

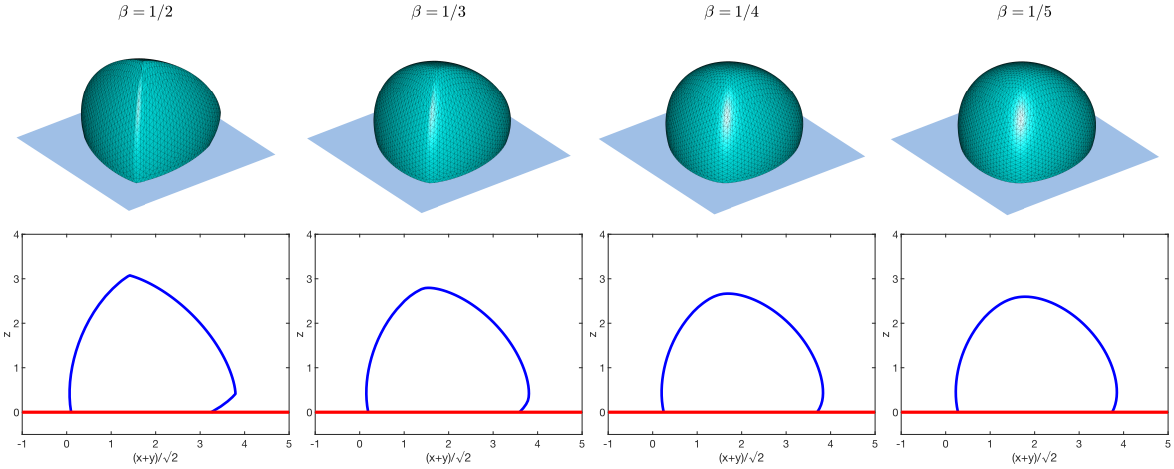


图 7.10　固定 Young 角 $\theta_Y = 7\pi/12$ 时，不同各向异性强度 β 下岛状薄膜的平衡态及其与平面 $x = y$ 上的截线。

Figure 7.10　The equilibrium geometry of islands, together with their cross-sections in the plane $x = y$, under anisotropy Case II with $\theta_Y = 7\pi/12$ for different anisotropy strength β.

我们进一步考察各向异性强度 β 对平衡态的影响，数值结果参见图 7.10。随着各向异性 β 增大，平衡构型的边界愈发**尖锐**、平衡态的各面愈趋**平坦**，显示出**晶面化** (faceting) 效应；同时各向异性特征亦随之**增强**，平衡态的构型呈现清晰的**方向依赖性**。从图中也可看出，即便在**强各向异性**下，数值解仍能保持**良好**的网格质量，表明数值格式 (7.23) 具有较好的**鲁棒性**与**稳定性**。

第 8 章　含曲率依赖表面能的几何梯度流及其保结构参数有限元方法

前述各章所考虑的表面能密度主要依赖于界面的法向方向。对于具有弯曲刚度的界面，仅由法向方向决定的表面能不足以描述曲率对能量的影响；在强各向异性界面模型中，曲率能亦可作为高阶正则化的一种来源。本章进一步考虑三维空间中的闭曲面，将表面能密度统一写为 $f(\boldsymbol{n}, H)$，其中 $\boldsymbol{n}$ 为单位外法向量，H 为平均曲率。由此，前文的各向异性表面能、Willmore 弯曲能，以及法向方向与平均曲率相互耦合的能量，均可纳入同一表述。

一般曲率依赖表面能的第一变分及其弱形式已有系统研究，参见 [48]。对于仅依赖平均曲率的能量，文献 [16] 利用曲率演化方程构造了能量稳定的参数有限元离散；各向异性表面能与 Willmore 正则化相结合的固态脱湿模型则可参见 [104]。本章以这些变分与几何恒等式为基础，将第 6 章的对称表面能矩阵用于固定曲率时的方向依赖能量，并引入曲率能导数的质量集中投影，使一般耦合能量的离散处理具有合法的有限元检验函数。

本章的数值实验依据文献 [146] 补充，原始图表与数据取自该论文，并非本次修订重新计算。

本章首先推导 $f(\boldsymbol{n}, H)$ 对应的化学势和保守弱形式，再给出包含位置、化学势、平均曲率和辅助标量的全离散格式。在关于曲率的凸性和固定曲率时的局部能量估计条件下，证明离散能量耗散；进一步结合时间平均面积法向量，得到同时保持体积的表面扩散格式。这里的结构保持结论针对所定义的离散能量与离散体积，不预先假定非线性代数系统的可解性，也不将能量估计等同于几何误差估计。

8.1　表面能与基本几何恒等式

8.1.1　能量泛函及符号约定

设 $\Gamma(t) \subset \mathbb{R}^3$ 为光滑、闭、可定向曲面，由 $\boldsymbol{X}(\cdot, t)\colon \Gamma_0 \to \Gamma(t)$ 参数化。记速度为 $\boldsymbol{v} = \partial_t \boldsymbol{X}$，法向速度为 $V_n = \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n}$，并采用如下约定：

$$\boldsymbol{P} = I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T = \nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \qquad \boldsymbol{A} = \nabla_\Gamma \boldsymbol{n}, \qquad H = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{n} = \operatorname{Tr} \boldsymbol{A}. \tag{8.1}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 为 Weingarten 矩阵，满足 $\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$。这里的 H 是两个主曲率之和，因而半径为 R 的球面满足 $H = 2/R$。向量场的曲面梯度沿用第 6 章的行梯度约定，矩阵内积为 $\boldsymbol{U} : \boldsymbol{V} = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{V})$。

考虑能量

$$W(\Gamma) = \int_{\Gamma} f(\boldsymbol{n}, H)\,\mathrm{d}A, \qquad f : \mathbb{S}^2 \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}. \tag{8.2}$$

连续推导中假设曲面与能量密度具有使下列导数、分部积分成立的充分光滑性。记 f_H 为第二个变量的偏导数，记

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{n}, H) = \nabla_{\mathbb{S}^2} f(\boldsymbol{n}, H) = \boldsymbol{P}\nabla_{\boldsymbol{p}} \widetilde{f}(\boldsymbol{n}, H), \qquad r = f_H(\boldsymbol{n}, H), \tag{8.3}$$

其中 $\widetilde{f}$ 为 f 关于第一个变量的任意光滑邻域延拓，求方向导数时保持 H 固定。球面梯度 $\boldsymbol{a}$ 与该延拓的选择无关，并满足 $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{n} = 0$。除非另作说明，下文省略 f、$\boldsymbol{a}$ 和 r 的自变量。

本章的曲率依赖专指对平均曲率 H 的依赖。能量若独立依赖高斯曲率或整个第二基本形式，则还需要相应的变分变量与几何演化关系，不直接包含在式 (8.2) 中。

8.1.2　法向量、曲率和面积元的演化

下文中的 ∂_t 均表示沿参数化 $\boldsymbol{X}$ 的物质导数，因而允许速度含有切向分量。单位法向量满足

$$\partial_t \boldsymbol{n} = -(\nabla_\Gamma \boldsymbol{v})^T \boldsymbol{n}. \tag{8.4}$$

该式可由 $\boldsymbol{n}$ 与两个参数切向量正交以及 $|\boldsymbol{n}| = 1$ 对时间求导得到。面积元的输运公式为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\Gamma(t)} u\,\mathrm{d}A = \int_{\Gamma(t)} \left(\partial_t u + u\boldsymbol{P} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{v}\right) \mathrm{d}A. \tag{8.5}$$

引理 8.1 (平均曲率的弱演化恒等式)　对于上述光滑曲面演化及任意标量检验函数 ψ，有

$$(\partial_t H, \psi)_{\Gamma(t)} = \left\langle \boldsymbol{n}(\nabla_\Gamma \psi)^T - \psi \boldsymbol{A}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{v} \right\rangle_{\Gamma(t)}. \tag{8.6}$$

证明　对 $H = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{n}$ 作物质微分，利用式 (8.4) 和曲面微分算子的输运关系，得到

$$\partial_t H = -\nabla_\Gamma \cdot \left((\nabla_\Gamma \boldsymbol{v})^T \boldsymbol{n}\right) - \boldsymbol{A} : \nabla_\Gamma \boldsymbol{v}. \tag{8.7}$$

这里 $(\nabla_\Gamma \boldsymbol{v})^T \boldsymbol{n}$ 是切向向量场。在闭曲面上乘以 ψ 并分部积分，即得式 (8.6)。这一弱恒等式亦见 [16]。 ■

特别地，当 $\boldsymbol{v} = V_n \boldsymbol{n}$ 时，式 (8.7) 化为

$$\partial_t H = -\Delta_\Gamma V_n - |\boldsymbol{A}|^2 V_n. \tag{8.8}$$

式 (8.6) 只对位置速度和检验函数求一次空间导数，因而适于建立分片线性参数有限元格式。

8.2　第一变分与梯度流的保守弱形式

8.2.1　化学势的标量与张量表述

由链式法则、式 (8.4) 及输运公式，能量的时间导数满足

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} &= (r, \partial_t H)_{\Gamma(t)} + \left\langle f\boldsymbol{P} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{a}^T, \nabla_\Gamma \boldsymbol{v} \right\rangle_{\Gamma(t)} \\ &= \left\langle \boldsymbol{S}, \nabla_\Gamma \boldsymbol{v} \right\rangle_{\Gamma(t)}, \end{aligned} \tag{8.9}$$

其中

$$\boldsymbol{S} = f\boldsymbol{P} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{a}^T - r\boldsymbol{A} + \boldsymbol{n}(\nabla_\Gamma r)^T. \tag{8.10}$$

注意到 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{0}$，该张量在微分方向上是切向的。

命题 8.1 (能量的第一变分)　定义化学势 μ 使得 $\delta W[\omega] = (\mu \boldsymbol{n}, \omega)_\Gamma$。则有

$$\mu = \nabla_\Gamma \cdot \boldsymbol{a} - \Delta_\Gamma f_H + f H - f_H |\boldsymbol{A}|^2, \tag{8.11}$$

以及等价的向量弱形式

$$(\mu \boldsymbol{n}, \omega)_\Gamma = \langle \boldsymbol{S}, \nabla_\Gamma \omega \rangle_\Gamma. \tag{8.12}$$

证明　先考虑法向扰动 $\omega = \eta \boldsymbol{n}$。由 $\nabla_\Gamma(\eta \boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n}(\nabla_\Gamma \eta)^T + \eta \boldsymbol{A}$，式 (8.9) 给出

$$\delta W[\eta \boldsymbol{n}] = \int_\Gamma \left[-\boldsymbol{a} \cdot \nabla_\Gamma \eta + \nabla_\Gamma r \cdot \nabla_\Gamma \eta + (fH - r|\boldsymbol{A}|^2)\eta \right] \mathrm{d}A. \tag{8.13}$$

在闭曲面上分部积分，即得式 (8.11)。切向扰动仅对应曲面重新参数化，其第一变分为零。因此对任意向量扰动，式 (8.9) 导出的第一变分均等于 $(\mu \boldsymbol{n}, \omega)_\Gamma$，得到式 (8.12)。 ■

用邻域延拓的导数表示，式 (8.11) 等价于

$$\mu = \nabla_\Gamma \cdot \nabla_{\boldsymbol{p}} \widetilde{f} - \Delta_\Gamma f_H + \left(f - \nabla_{\boldsymbol{p}} \widetilde{f} \cdot \boldsymbol{n} \right) H - f_H |\boldsymbol{A}|^2. \tag{8.14}$$

方向导数的法向延拓分量在上式中相互抵消，故化学势不依赖延拓的选择。特别地，$f = \gamma(\boldsymbol{n})$ 时恢复各向异性加权曲率；$f = H^2/2$ 时则得到

$$\mu = -\Delta_\Gamma H + \frac{1}{2} H^3 - H|\boldsymbol{A}|^2. \tag{8.15}$$

8.2.2　统一弱形式及连续结构

为突出曲率项的配对关系，定义

$$\mathcal{B}_\Gamma(\boldsymbol{w},\psi)=\left\langle \boldsymbol{n}(\nabla_\Gamma\psi)^T-\psi\boldsymbol{A},\nabla_\Gamma\boldsymbol{w}\right\rangle_\Gamma. \tag{8.16}$$

对于 L^2 梯度流 $V_n=-\mu$，寻求 $(\boldsymbol{X},\mu,H,r)$ 使得

$$(\partial_t\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{n},\varphi)_\Gamma=-(\mu,\varphi)_\Gamma, \tag{8.17a}$$
$$(\mu\boldsymbol{n},\boldsymbol{\omega})_\Gamma=\langle f\boldsymbol{P}-\boldsymbol{n}\boldsymbol{a}^T,\nabla_\Gamma\boldsymbol{\omega}\rangle_\Gamma+\mathcal{B}_\Gamma(\boldsymbol{\omega},r), \tag{8.17b}$$
$$(\partial_t H,\psi)_\Gamma=\mathcal{B}_\Gamma(\partial_t\boldsymbol{X},\psi), \tag{8.17c}$$
$$(r,\zeta)_\Gamma=(f_H(\boldsymbol{n},H),\zeta)_\Gamma. \tag{8.17d}$$

检验函数取于使各项有意义的 H^1 空间，向量检验函数取于其三维乘积空间；解还需具有式中各非线性项所要求的正则性。初始条件满足

$$\boldsymbol{X}(\cdot,0)=\boldsymbol{X}_0,\qquad H(\cdot,0)=-\boldsymbol{n}_0\cdot\Delta_{\Gamma_0}\boldsymbol{X}_0. \tag{8.18}$$

在连续层面，式 (8.17d) 即为 $r=f_H$；保留这一辅助未知量，旨在为后续非线性项的有限元投影提供对应的弱关系。

命题 8.2 (连续能量耗散)　式 (8.17) 的光滑几何解满足

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=-\|\mu\|^2_{L^2(\Gamma)}\le 0. \tag{8.19}$$

证明　在式 (8.17b)、(8.17c) 中分别取 $\boldsymbol{\omega}=\partial_t\boldsymbol{X}$、$\psi=r$，利用式 (8.9)，得到 $\mathrm{d}W/\mathrm{d}t=(\mu\boldsymbol{n},\partial_t\boldsymbol{X})_\Gamma$。再在式 (8.17a) 中取 $\varphi=\mu$，即得结论。 ■

若采用表面扩散速度律 $V_n=\Delta_\Gamma\mu$，只需将式 (8.17a) 替换为

$$(\partial_t\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{n},\varphi)_\Gamma=-(\nabla_\Gamma\mu,\nabla_\Gamma\varphi)_\Gamma. \tag{8.20}$$

分别取 $\varphi=\mu$ 和 $\varphi=1$，可得

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=-\|\nabla_\Gamma\mu\|^2_{L^2(\Gamma)},\qquad \frac{\mathrm{d}\mathcal{V}}{\mathrm{d}t}=\int_\Gamma V_n\,\mathrm{d}A=0, \tag{8.21}$$

其中 $\mathcal{V}$ 为曲面包围的体积。一般非退化的曲率依赖使 L^2 梯度流成为四阶方程，相应的表面扩散流则为六阶方程。

8.3　固定曲率的对称表面能矩阵

8.3.1　矩阵构造及其作用

对固定实数 s，将 $\boldsymbol{n} \mapsto f(\boldsymbol{n}, s)$ 看作方向依赖的表面能密度。定义其一次齐次延拓及 Cahn–Hoffman 向量为

$$F(\boldsymbol{p}, s) = |\boldsymbol{p}| f\left(\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}, s\right), \qquad \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n}, s) = \nabla_{\boldsymbol{p}} F(\boldsymbol{n}, s) = f(\boldsymbol{n}, s)\boldsymbol{n} + \boldsymbol{a}(\boldsymbol{n}, s). \tag{8.22}$$

这里 $\boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}$，$s$ 仅作为参数。沿用第 6 章 $\alpha = -1$ 的构造，令

$$\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}, s) = f(\boldsymbol{n}, s) I_3 - \boldsymbol{n}\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n}, s)^T - \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n}, s)\boldsymbol{n}^T + k(\boldsymbol{n}, s)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T. \tag{8.23}$$

该矩阵对称，并且

$$\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}, H)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X} = f\boldsymbol{P} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{a}^T. \tag{8.24}$$

因此，式 (8.17b) 中的第一项可写为 $\langle \boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}, H)\nabla_\Gamma \boldsymbol{X}, \nabla_\Gamma \omega\rangle_\Gamma$。稳定化项在连续层面不改变几何方程，而在离散层面用于控制法向方向和单元面积的变化。

8.3.2　局部能量估计与参数依赖

引理 8.2 (固定曲率的局部能量估计)　设 σ、$\bar{\sigma}$ 是非退化的有向三角形，$\boldsymbol{X}$ 将 σ 的顶点仿射映射至 $\bar{\sigma}$ 的对应顶点。记两者单位法向量分别为 $\boldsymbol{n}$、$\bar{\boldsymbol{n}}$。对于固定 s，假设 $f(\cdot, s) > 0$、$f(\cdot, s) \in C^2(\mathbb{S}^2)$，且

$$2f(\boldsymbol{n}, s) - f(-\boldsymbol{n}, s) \geq 0, \qquad \forall \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^2. \tag{8.25}$$

则可选取有限的稳定化阈值 $k_0(\boldsymbol{n}, s)$，使当 $k(\boldsymbol{n}, s) \geq k_0(\boldsymbol{n}, s)$ 时，

$$|\sigma|\big(\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}, s)\nabla_\sigma \boldsymbol{X}\big) : \big(\nabla_\sigma \boldsymbol{X} - \nabla_\sigma \mathbf{id}\big) \geq |\bar{\sigma}| f(\bar{\boldsymbol{n}}, s) - |\sigma| f(\boldsymbol{n}, s). \tag{8.26}$$

证明　固定 s 后，令第 6 章中的方向能量为 $\hat{\gamma}_s(\theta, \phi) = f(\boldsymbol{n}(\theta, \phi), s)$，并取 $\alpha = -1$。式 (8.23) 即为对应的对称表面能矩阵。由该章关于最小稳定函数的存在性结论及局部能量估计 (6.54)，得到式 (8.26)。 ■

这里的阈值允许依赖曲率参数 s。对每个固定 s 存在有限阈值，并不意味着它在整个 $\mathbb{R}$ 上一致有界。因而下文在新曲率的求积节点值处要求局部能量估计成立，不将稳定化参数预先限制为仅依赖法向量的函数。

若密度在某些参数值处为零，则需单独核对局部能量估计，不能直接套用上述严格正能量的结论。例如 $f(\boldsymbol{n}, s) = s^2/2$ 与方向无关，取 $k = 2f$ 得到 $\boldsymbol{Z}_k = fI_3$；此时由各向同性三角形面积估计可知，式 (8.26) 对 $s = 0$ 亦成立。

8.4　含辅助投影的全离散参数有限元格式

8.4.1　离散几何与非线性项的求积

设 $\Gamma^m = \bigcup_{j=1}^{J} \overline{\sigma_j^m}$ 是第 m 时间层的三角剖分，具有 K 个顶点 $\boldsymbol{q}_i^m$。各时间层保持相同的连通关系，$\boldsymbol{X}^m = \mathbf{id}$ 表示旧曲面上的恒等映射，$\boldsymbol{X}^{m+1} \in [\mathbb{K}^m]^3$ 将旧顶点映射到新顶点。记

$$\mathbb{K}^m = \{u \in C(\Gamma^m) : u|_{\sigma_j^m} \in \mathcal{P}^1(\sigma_j^m)\}, \quad \nabla_m = \nabla_{\Gamma^m}. \tag{8.27}$$

法向量 $\boldsymbol{n}^m$ 取实际三角形的逐面单位法向量，$\boldsymbol{P}^m = I_3 - \boldsymbol{n}^m(\boldsymbol{n}^m)^T$。标量 H^{m+1} 等均先定义在旧网格上，其节点值随后随顶点输运到新网格；以下用 H_i^{m+1} 表示这一共同的节点系数。

记 $u_{j\ell}$ 为函数 u 在单元 σ_j^m 第 ℓ 个顶点处的单元内迹。定义质量集中内积

$$(u,v)_m^h = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{J} |\sigma_j^m| \sum_{\ell=1}^{3} u_{j\ell} v_{j\ell}, \qquad \langle \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}\rangle_m^h = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{J} |\sigma_j^m| \sum_{\ell=1}^{3} \boldsymbol{U}_{j\ell} : \boldsymbol{V}_{j\ell}. \tag{8.28}$$

向量内积作相应推广。非线性密度和矩阵系数均在这些单元顶点迹处求值，例如 $f(\boldsymbol{n}^m, H^{m+1})_{j\ell} = f(\boldsymbol{n}_j^m, H_{j\ell}^{m+1})$。同一全局顶点从相邻单元取得的法向量可以不同，故该非线性函数一般不是连续有限元函数。

为定义离散 Weingarten 矩阵，可先计算连续节点法向量 $\boldsymbol{N}^m \in [\mathbb{K}^m]^3$：

$$\boldsymbol{N}_i^m = \frac{\sum_{j:\, i\in\sigma_j^m} |\sigma_j^m| \boldsymbol{n}_j^m}{\left|\sum_{j:\, i\in\sigma_j^m} |\sigma_j^m| \boldsymbol{n}_j^m\right|}, \tag{8.29}$$

其中假设分母非零。一个可计算的恢复矩阵为

$$\boldsymbol{A}^m = \boldsymbol{P}^m \frac{\nabla_m \boldsymbol{N}^m + (\nabla_m \boldsymbol{N}^m)^T}{2} \boldsymbol{P}^m. \tag{8.30}$$

此处 $\boldsymbol{A}^m$ 是逐面矩阵近似，而非逐面常值法向量的单元内导数。也可使用其他离散曲率矩阵；下述能量证明只要求在两个配对方程中使用同一个 $\boldsymbol{A}^m$。恢复矩阵的逼近精度是另一个需要随网格分析与验证的问题。

定义离散双线性型

$$\mathcal{B}_m(\boldsymbol{w}, \psi) = \left\langle \boldsymbol{n}^m(\nabla_m \psi)^T - \psi \boldsymbol{A}^m, \nabla_m \boldsymbol{w} \right\rangle_m^h. \tag{8.31}$$

相应的离散能量取为

$$W^m = (f(\boldsymbol{n}^m, H^m), 1)_m^h = \frac{1}{3}\sum_{j=1}^{J} |\sigma_j^m| \sum_{\ell=1}^{3} f(\boldsymbol{n}_j^m, H_{j\ell}^m). \tag{8.32}$$

8.4.2　辅助标量与完整离散系统

给定 $\boldsymbol{X}^m$、H^m 及时间步长 $\tau_m > 0$，求

$$(\boldsymbol{X}^{m+1}, \mu^{m+1}, H^{m+1}, r^{m+1}) \in [\mathbb{K}^m]^3 \times (\mathbb{K}^m)^3, \tag{8.33}$$

使得对任意 $\varphi, \psi, \zeta \in \mathbb{K}^m$ 和 $\boldsymbol{\omega} \in [\mathbb{K}^m]^3$，有

$$\left(\frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau_m} \cdot \boldsymbol{n}^m, \varphi \right)_m^h = -(\mu^{m+1}, \varphi)_m^h, \tag{8.34a}$$

$$(\mu^{m+1} \boldsymbol{n}^m, \boldsymbol{\omega})_m^h = \mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{\omega}) + \mathcal{B}_m(\boldsymbol{\omega}, r^{m+1}), \tag{8.34b}$$

$$(H^{m+1} - H^m, \psi)_m^h = \mathcal{B}_m(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m, \psi), \tag{8.34c}$$

$$(r^{m+1}, \zeta)_m^h = (f_H(\boldsymbol{n}^m, H^{m+1}), \zeta)_m^h, \tag{8.34d}$$

其中，对于本时间步已给定的 H^{m+1}，记

$$\mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\omega}) = \left\langle \boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n}^m, H^{m+1}) \nabla_m \boldsymbol{X}, \nabla_m \boldsymbol{\omega} \right\rangle_m^h. \tag{8.35}$$

这里 $\mathcal{D}_m$ 的系数依赖未知曲率，故整个系统一般是非线性的。曲率增量方程中不再除以 τ_m，因为右端已使用位置增量。

式 (8.34d) 给出 f_H 的质量集中投影，而不是要求 r^{m+1} 与它逐单元逐点相等。具体地，设 $M_i^m = \frac{1}{3} \sum_{j: i \in \sigma_j^m} |\sigma_j^m| > 0$，则

$$r_i^{m+1} = \frac{1}{3 M_i^m} \sum_{j: i \in \sigma_j^m} |\sigma_j^m| f_H(\boldsymbol{n}_j^m, H_i^{m+1}). \tag{8.36}$$

因而 r^{m+1} 是合法的连续分片线性检验函数，且可由曲率节点值直接消去，无需另解一个全局投影系统。

这一投影还保留了证明所需的精确配对：取 $\zeta = H^{m+1} - H^m$，有

$$(r^{m+1}, H^{m+1} - H^m)_m^h = (f_H(\boldsymbol{n}^m, H^{m+1}), H^{m+1} - H^m)_m^h. \tag{8.37}$$

因此，不必把一般不连续的 $f_H(\boldsymbol{n}^m, H^{m+1})$ 直接作为检验函数，也不必对该不连续函数直接取曲面梯度；力方程和曲率方程统一使用 r^{m+1} 及 $\nabla_m r^{m+1}$。

8.5　全离散能量耗散

定理 8.1 (全离散能量稳定性)　假设对每个 $\boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^2$，函数 $s \mapsto f(\boldsymbol{n}, s)$ 可微且凸；固定曲率时，式 (8.26) 在每个单元求积节点的新曲率值处成立。设式 (8.34) 存在解，且旧、

新曲面的所有三角形均非退化。则对任意 $\tau_m > 0$，

$$W^{m+1} + \tau_m \|\mu^{m+1}\|_{m,h}^2 \le W^m, \qquad \|u\|_{m,h}^2 = (u,u)_m^h. \tag{8.38}$$

特别地，若引理 8.2 的光滑性、正性和方向条件对所有相关曲率值成立，并在相应节点选取足够大的 $k(\boldsymbol{n}, s)$，则上述局部能量估计假设成立。

证明　分别在式 (8.34a)、(8.34b) 和 (8.34c) 中取 $\varphi = \mu^{m+1}$、$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$、$\psi = r^{m+1}$。三个检验函数均属于相应有限元空间，因此

$$\begin{aligned} -\tau_m \|\mu^{m+1}\|_{m,h}^2 &= \mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m) + \mathcal{B}_m(\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m, r^{m+1}) \\ &= \mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m) + (H^{m+1} - H^m, r^{m+1})_m^h. \end{aligned} \tag{8.39}$$

引入定义在旧几何上的中间能量

$$\widehat{W}^{m+1|m} = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^{J} |\sigma_j^m| \sum_{\ell=1}^{3} f(\boldsymbol{n}_j^m, H_{j_\ell}^{m+1}). \tag{8.40}$$

固定单元 j 及顶点 j_ℓ，在局部能量估计中取参数 $s = H_{j_\ell}^{m+1}$，再对所有单元顶点求和，得到

$$\mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m) \ge W^{m+1} - \widehat{W}^{m+1|m}. \tag{8.41}$$

另一方面，曲率凸性意味着

$$f_H(\boldsymbol{n}, b)(b - a) \ge f(\boldsymbol{n}, b) - f(\boldsymbol{n}, a). \tag{8.42}$$

在每个旧单元顶点处应用此式，结合投影配对关系 (8.37)，可得

$$(H^{m+1} - H^m, r^{m+1})_m^h \ge \widehat{W}^{m+1|m} - W^m. \tag{8.43}$$

将式 (8.41) 和 (8.43) 代入式 (8.39)，中间能量相消，即得式 (8.38)。 ■

该证明将几何变化与曲率变化分开估计：局部表面能矩阵处理前者，凸性与辅助投影处理后者。它不要求 f 对法向量和曲率联合凸，也不要求 $f - Hf_H$ 为非负。对于任何满足相同局部估计的稳定化矩阵，上述配对证明均成立。

注 8.1 无条件能量稳定性表示上述估计不需要时间步长限制。它不保证任意时间步下非线性方程必有解，不保证新网格不退化，也不提供 H^m 与曲面几何曲率之差的误差界。这些问题应与式 (8.38) 区分。

8.6　保持体积的梯度流离散

8.6.1　离散体积增量

沿用第 7 章中的时间平均法向量 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$，位置增量与离散体积变化满足如下关系。

引理 8.3 (离散体积增量)　对于具有一致外向定向和相同连通关系的闭三角网格，其有向体积

$$\mathcal{V}^m = \frac{1}{6}\sum_{j=1}^{J} \boldsymbol{q}_{j_1}^m \cdot (\boldsymbol{q}_{j_2}^m \times \boldsymbol{q}_{j_3}^m) \tag{8.44}$$

满足

$$\mathcal{V}^{m+1} - \mathcal{V}^m = (\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m, \boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}})_m^h. \tag{8.45}$$

证明　对相邻时间层间线性插值得到的闭曲面应用体积输运公式，并将积分拉回旧曲面。利用 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}$ 的定义，以及质量集中求积对单元上线性函数的精确性，即得式 (8.45)。 ■

8.6.2　表面扩散与体积约束的曲率型运动

表面扩散格式沿用式 (8.34c)、(8.34d)，并将前两个方程改为

$$\left(\frac{\boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau_m} \cdot \boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \varphi\right)_m^h = -(\nabla_m \mu^{m+1}, \nabla_m \varphi)_m, \tag{8.46a}$$

$$(\mu^{m+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{\omega})_m^h = \mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{\omega}) + \mathcal{B}_m(\boldsymbol{\omega}, r^{m+1}). \tag{8.46b}$$

其中梯度内积为旧曲面上的精确积分；对分片线性函数的梯度乘积，它与相应的质量集中求积一致。注意两个方程必须同时使用同一个时间平均法向量。$\mathcal{B}_m$ 中的几何系数仍取旧时间层，两处曲率配对使用同一双线性型。

定理 8.2 (离散体积守恒与能量耗散)　在定理 8.1 的假设下，式 (8.46) 与式 (8.34c)、(8.34d) 所组成系统的解满足

$$\mathcal{V}^{m+1} = \mathcal{V}^m, \qquad W^{m+1} + \tau_m \|\nabla_m \mu^{m+1}\|_{L^2(\Gamma^m)}^2 \le W^m. \tag{8.47}$$

证明　在式 (8.46a) 中取 $\varphi = 1$，右端为零。结合引理 8.3 即得体积守恒。再取 $\varphi = \mu^{m+1}$、$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m$，并在曲率方程中取 $\psi = r^{m+1}$，得到

$$\mathcal{D}_m(\boldsymbol{X}^{m+1}, \boldsymbol{X}^{m+1} - \boldsymbol{X}^m) + (H^{m+1} - H^m, r^{m+1})_m^h = -\tau_m \|\nabla_m \mu^{m+1}\|_{L^2(\Gamma^m)}^2. \tag{8.48}$$

此后的几何估计、曲率凸性估计与定理 8.1 的证明相同，因而得到能量不等式。 ■

对于体积约束的 L^2 梯度流，可将式 (8.46a) 的右端替换为 $-(\mu^{m+1}-\lambda^{m+1},\varphi)_m^h$，其中

$$\lambda^{m+1}=\frac{(\mu^{m+1},1)_m^h}{(1,1)_m^h}. \tag{8.49}$$

其余方程保持相同。取 $\varphi=1$ 和 $\varphi=\mu^{m+1}$，分别得到体积守恒及

$$W^{m+1}+\tau_m\|\mu^{m+1}-\lambda^{m+1}\|_{m,h}^2\le W^m. \tag{8.50}$$

8.7　数值实验

本节数值实验取自文献 [146]，针对前述三维格式进行验证。所用能量密度满足能量估计要求的正性、方向条件与关于曲率的凸性。初始节点曲率由给定光滑曲面的解析曲率求得；此后将曲率作为独立未知量进行演化。

8.7.1　初始化与稳定化参数

初始曲率由网格顶点处的解析曲率给出，此后通过离散曲率演化方程更新，而非在每个时间步重新计算。力方程与曲率方程使用同一恢复 Weingarten 矩阵 (8.30)。非线性系统采用 Newton 迭代求解；下述耦合椭球实验的容差为 10^{-11}。

对于对称正定矩阵 Q 所定义的椭球型密度 $\gamma_Q(\boldsymbol{n})=\sqrt{\boldsymbol{n}^TQ\boldsymbol{n}}$，可采用如下适用于对称表面能矩阵的稳定化函数：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}_Q(\boldsymbol{n})&=(I_3-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T)Q\boldsymbol{n}/\gamma_Q(\boldsymbol{n}),\\ k_Q(\boldsymbol{n})&=\gamma_Q(\boldsymbol{n})+\frac{\lambda_{\max}(Q)+|\boldsymbol{a}_Q(\boldsymbol{n})|^2}{\gamma_Q(\boldsymbol{n})}.\end{aligned} \tag{8.51}$$

对耦合密度 (8.53)，数值实现取

$$k(\boldsymbol{n},H)=k_{G_0}(\boldsymbol{n})+0.025H^2k_{G_1}(\boldsymbol{n})+0.001H^4. \tag{8.52}$$

该显式构造见文献 [146] 的源文件附录，用于该密度对应的收敛性、能量与体积以及耗时实验。

多项式各向异性的形态实验取 $k=2f+4$；方向依赖 Helfrich 型实验取 $k=2f+4+0.4(H-2)^2$。这些值来自配套数值实现。所观测到的能量下降和逐步局部能量差检查，本身并不构成对这些常数在所有可能构型下均大于全局最小稳定函数的证明；前述无条件稳定性定理仍以所述局部能量估计为假设。

8.7.2　误差与收敛阶

考虑如下方向–曲率耦合能量密度

$$f(\boldsymbol{n}, H) = \sqrt{\boldsymbol{n}^T \boldsymbol{G}_0 \boldsymbol{n}} + \frac{0.05}{2}\sqrt{\boldsymbol{n}^T \boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{n}}\, H^2 + \frac{0.002}{4} H^4, \qquad \boldsymbol{n} \in \mathbb{S}^2, \tag{8.53}$$

其中

$$\boldsymbol{G}_0 = \mathrm{diag}(1, 1.3, 1.6), \qquad \boldsymbol{G}_1 = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.15 & 0 \\ 0.15 & 1 & 0.1 \\ 0 & 0.1 & 0.8 \end{pmatrix}.$$

初始曲面取为椭球

$$\frac{x_1^2}{1.4^2} + x_2^2 + \frac{x_3^2}{0.8^2} = 1. \tag{8.54}$$

将二十面体逐次细分，并将其顶点投影到该椭球上，得到顶点数为 $N = 42, 162, 642, 2562$ 的四级网格。以 $h_\ell = h_0/2^\ell$ 记细分参数，其中 $h_0 = 1/2$、$\ell = 0, 1, 2, 3$。取时间步长 $\tau_\ell = Ch_\ell^2$，分别使用 $C = 0.08$ 和 0.04，在 $t = 0.1, 0.2, 0.3$ 比较数值解。

采用流形距离度量几何误差。在曲面情形，该距离为两个所围区域的对称差体积：

$$e^{h_\ell}(t) \coloneqq M\big(\Gamma_{h_\ell,\tau_\ell}(t), \Gamma_{h_{\ell+1},\tau_{\ell+1}}(t)\big) = \big|\Omega_{h_\ell,\tau_\ell}(t) \triangle \Omega_{h_{\ell+1},\tau_{\ell+1}}(t)\big|, \qquad \ell = 0, 1, 2. \tag{8.55}$$

其中 $\Omega_{h_\ell,\tau_\ell}(t)$ 为对应数值曲面所围区域；最细一级网格用于构造最后一组相邻网格距离。表中 h 为细分参数，而收敛阶由初始最大边长 $h_{\max,\ell}$ 计算：

$$p_{h_{\max}} = \frac{\log\big(e^{h_{\ell-1}}(t)/e^{h_\ell}(t)\big)}{\log\big(h_{\max,\ell-1}/h_{\max,\ell}\big)}, \qquad \ell = 1, 2. \tag{8.56}$$

所有收敛阶均使用未经舍入的距离计算。非线性求解容差为 10^{-11}，曲率在整个计算过程中始终作为独立未知量演化。

表 8.1 和表 8.2 显示，在较细网格上，流形距离误差呈现约二阶收敛。L^2 流的收敛阶随观测时间和 C 的变化较大，而表面扩散在细网格上的收敛阶保持在 1.997 至 2.003 之间。

每个表面扩散计算均保持其自身初始多面体网格的体积。因此，在非线性求解容差范围内，相邻网格的流形距离满足 $M(\Gamma_{h_\ell}, \Gamma_{h_{\ell+1}}) \geq |V_{h_\ell}(0) - V_{h_{\ell+1}}(0)|$。上述收敛阶反映耦合时空加密下、包含初始体积离散误差的几何收敛性，不能单独用来确定时间精度、曲率精度或动态演化误差。

表 8.1　曲面 L^2 流的误差与收敛阶。

C	(h,τ)	$e^h(t=0.1)$	阶	$e^h(t=0.2)$	阶	$e^h(t=0.3)$	阶
0.08	(h_0,τ_0)	2.58e-1	–	2.69e-2	–	1.20e-2	–
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	7.38e-2	1.946	6.70e-3	2.161	3.65e-3	1.848
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	1.90e-2	1.994	1.59e-3	2.119	9.70e-4	1.951
0.04	(h_0,τ_0)	3.16e-1	–	8.40e-2	–	1.15e-2	–
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	8.98e-2	1.955	2.90e-2	1.655	3.16e-3	2.003
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	2.31e-2	1.997	7.80e-3	1.931	8.21e-4	1.982

表 8.2　表面扩散的误差与收敛阶。

C	(h,τ)	$e^h(t=0.1)$	阶	$e^h(t=0.2)$	阶	$e^h(t=0.3)$	阶
0.08	(h_0,τ_0)	4.57e-1	–	4.35e-1	–	4.35e-1	–
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	1.23e-1	2.037	1.18e-1	2.024	1.18e-1	2.023
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	3.17e-2	1.999	3.04e-2	2.002	3.04e-2	2.003
0.04	(h_0,τ_0)	4.37e-1	–	4.35e-1	–	4.35e-1	–
	$(\frac{h_0}{2},\frac{\tau_0}{4})$	1.19e-1	2.024	1.18e-1	2.023	1.18e-1	2.023
	$(\frac{h_0}{2^2},\frac{\tau_0}{4^2})$	3.06e-2	1.997	3.03e-2	2.003	3.03e-2	2.003

8.7.3　体积变化与能量耗散

为验证格式的结构保持性质，定义归一化体积变化与归一化能量：

$$\left.\frac{\Delta V^h(t)}{V^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{V^m - V^0}{V^0}, \qquad \left.\frac{W^h(t)}{W^h(0)}\right|_{t=t_m} := \frac{W^m}{W^0}. \tag{8.57}$$

采用椭球 (8.54) 与耦合能量 (8.53)，在 $h = 2^{-1}, 2^{-2}, 2^{-3}$ 时取 $\tau = 0.08h^2$。体积变化和归一化能量分别见图 8.1 与图 8.2。

L^2 流与表面扩散的归一化能量均单调下降。表面扩散的相对体积变化保持在 10^{-13} 量级，与机器精度接近。图 8.1 同时给出 Newton 迭代次数：L^2 流和表面扩散的迭代次数逐渐稳定在约 2 次和 3 次，展示了该算例下非线性求解器的效率。

平均曲率流会将光滑闭凸曲面收缩至一点，而本节 L^2 流的体积趋于一个正的平台值。这可由能量 (8.53) 中各项的竞争解释。在统一缩放 $\Gamma \mapsto \lambda\Gamma$ 下，表面能、二次曲率能和四次曲率能分别满足

$$W(\lambda\Gamma) = \lambda^2 W_{\mathrm{surf}}(\Gamma) + W_{H^2}(\Gamma) + \lambda^{-2} W_{H^4}(\Gamma). \tag{8.58}$$

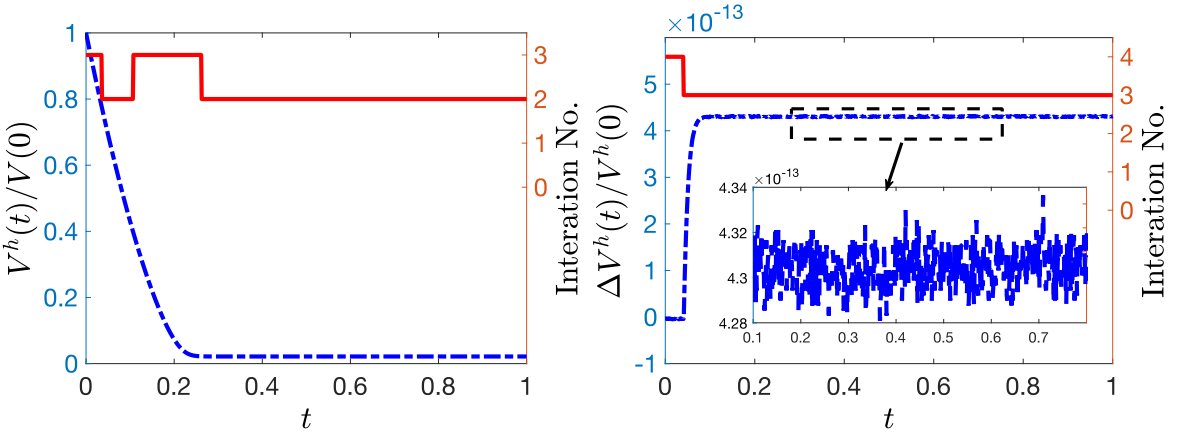


图 8.1　$h = 2^{-3}$ 时的体积变化与 Newton 迭代次数：左图为 L^2 流的 $V^h(t)/V^h(0)$；右图为表面扩散的 $\Delta V^h(t)/V^h(0)$。

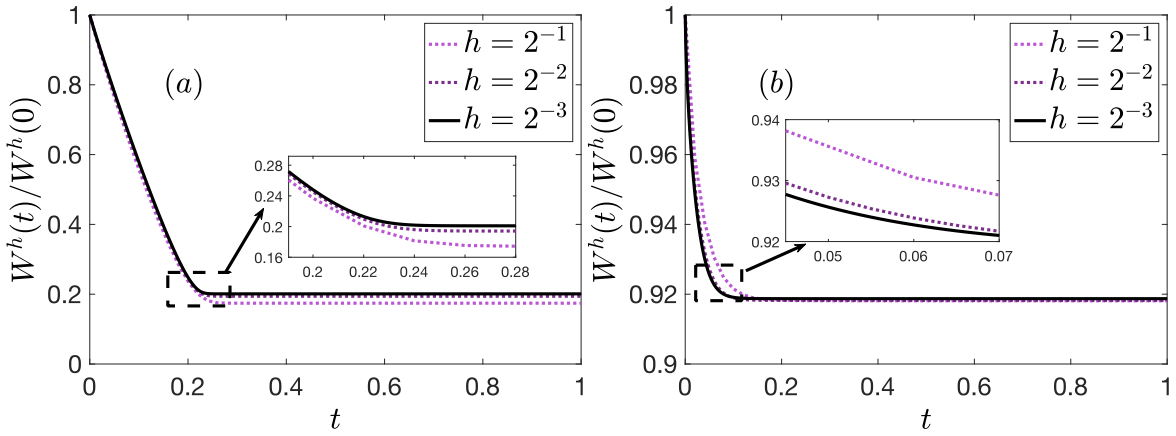


图 8.2　归一化能量：(a) L^2 流；(b) 表面扩散。

表面能倾向于使曲面收缩，而四次曲率项在曲面变小时愈加惩罚进一步收缩。二者的竞争形成有限的偏好尺度，与曲面接近平衡时能量和所围体积同时趋于稳定的观测相符。

为考察计算开销，取相同的椭球和耦合能量密度，并令 $\tau = 0.00125$、$T = 0.02$。表 8.3 引用原论文的性能测量：使用配备 16 GB 内存的 Apple M1 Pro、Python 3.14 和 SciPy 1.18.1，限制为一个 BLAS 线程，对三次串行运行的每步耗时取中位数。计时包含组装、Newton 迭代和时间步诊断，不包含初始化和文件输出。非线性容差为 10^{-11}；$\bar{I}$ 与 $I_{\max}$ 分别表示时间步上的平均和最大 Newton 迭代次数。

表 8.3　每步实际耗时与 Newton 迭代次数。

	L^2 flow			表面扩散		
N	耗时 (s)	$\bar{I}$	$I_{\max}$	耗时 (s)	$\bar{I}$	$I_{\max}$
162	0.0203	2.81	3	0.0447	4.00	4
642	0.102	3.00	3	0.214	4.00	4
2562	0.859	3.00	3	1.57	4.00	4

8.7.4　曲面的形态演化

以下考察 L^2 流和表面扩散产生的形态，图中颜色表示离散曲率 H^m。前三个算例采用可分离的表面能与弯曲能，最后一个算例引入方向依赖的弯曲刚度，使法向方向与曲率相耦合。椭球和六叶曲面均使用 642 个顶点，取 $\tau = 0.00125$。以如下三角形质量指标监测网格：

$$q_\sigma = \frac{4\sqrt{3}|\sigma|}{\ell_1^2 + \ell_2^2 + \ell_3^2}, \qquad q_{\min} = \min_{\sigma \subset \Gamma^m} q_\sigma, \tag{8.59}$$

其中 ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 为三角形 σ 的边长。等边三角形的指标为 1，而当三角形退化时趋于 0。采用 $q_{\min} < 0.05$ 作为停机条件。

首先考虑椭球 (8.54)，其正则化各向异性能量密度取为

$$f(\boldsymbol{n}, H) = \gamma(\boldsymbol{n}) + \frac{\epsilon^2}{2} H^2, \qquad \gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{4}(n_1^3 + n_2^3 + n_3^3), \qquad \epsilon^2 = 0.05. \tag{8.60}$$

图 8.3 和图 8.4 分别展示 L^2 流和表面扩散作用下的演化。椭球在 L^2 流作用下收缩，而在表面扩散作用下逐渐接近一个近于静止的各向异性形态。

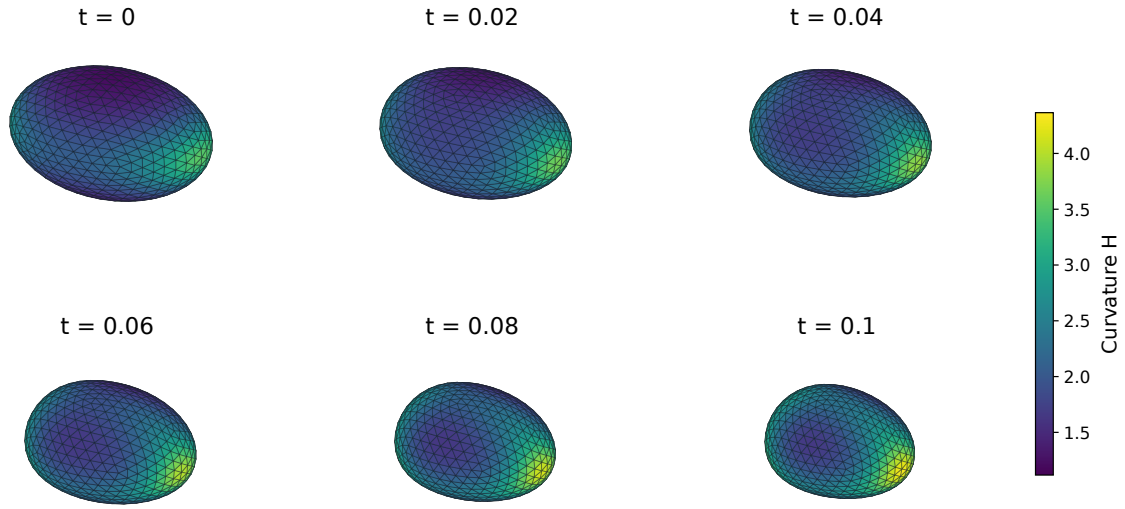


图 8.3　椭球在 L^2 流作用下的演化。

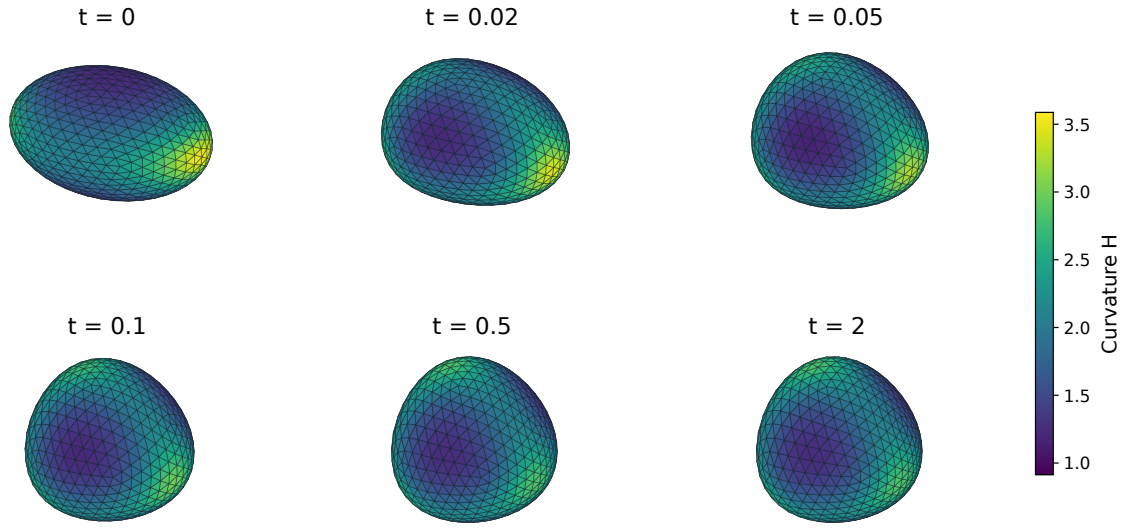


图 8.4　椭球在表面扩散作用下的演化。

其次考虑六叶曲面，采用具有立方对称性的正则化各向异性能量

$$f(\boldsymbol{n}, H) = \gamma(\boldsymbol{n}) + \frac{\epsilon^2}{2} H^2, \qquad \gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{4}(n_1^4 + n_2^4 + n_3^4), \qquad \epsilon^2 = 0.05. \tag{8.61}$$

图 8.5 和图 8.6 分别给出其在 L^2 流和表面扩散作用下的演化。两种流均使初始叶瓣和凹陷逐渐平滑。与椭球算例相似，L^2 流使曲面持续收缩；表面扩散则在保持所围体积的同时向各向异性平衡形态松弛。

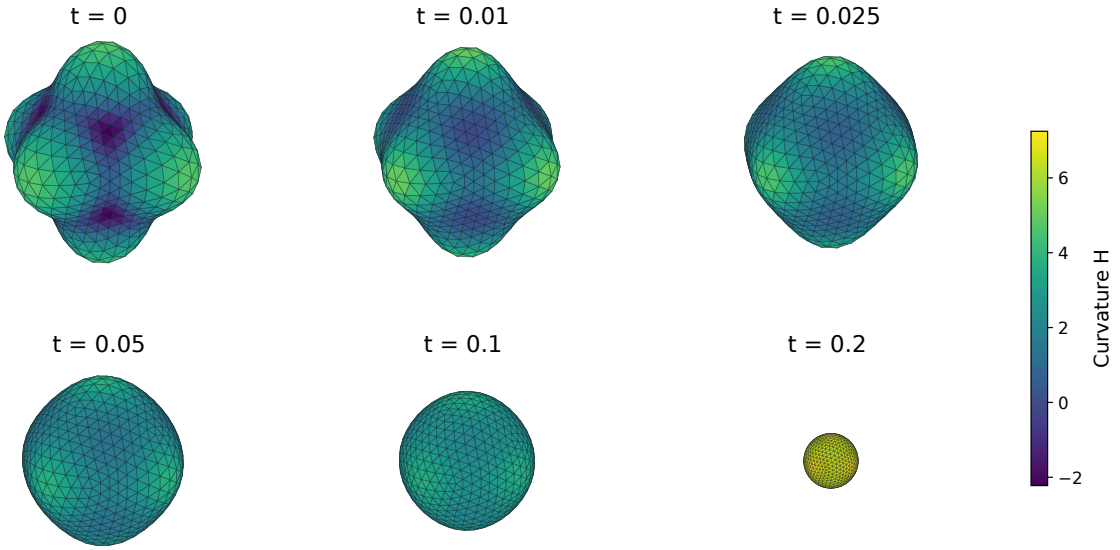


图 8.5　六叶曲面在 L^2 流作用下的演化。

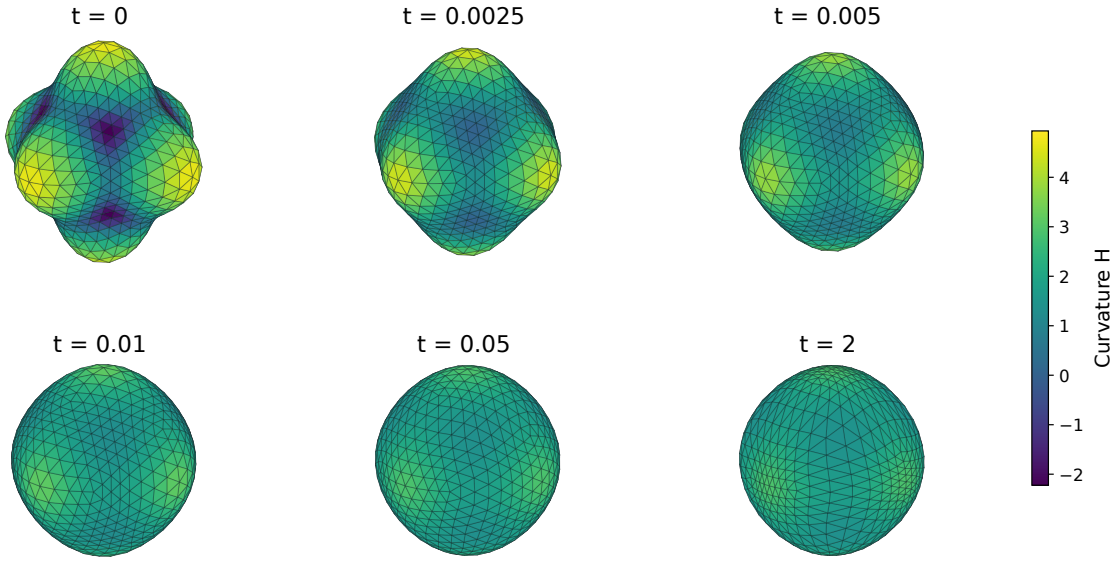


图 8.6　六叶曲面在表面扩散作用下的演化。

为考察非平凡拓扑曲面的演化，取大半径 $R = 1$、小半径 $r = 0.6$ 的环面作为初始曲面，能量密度为

$$f(\boldsymbol{n}, H) = \gamma(\boldsymbol{n}) + \frac{\epsilon^2}{2}H^2, \qquad \gamma(\boldsymbol{n}) = 1 + \frac{1}{8}(n_1^3 + n_2^3 + n_3^3), \qquad \epsilon^2 = 0.05. \tag{8.62}$$

如图 8.7 所示，环面收缩，其中心孔洞逐渐变窄。所围体积与能量在所示演化区间内均单调下降。

最后考察方向依赖 Helfrich 型能量驱动下双凹盘的表面扩散。经典 Helfrich 脂质双层膜模型惩罚曲率偏离自发曲率的程度 [81]，其中自发曲率可反映双层膜两侧的不对称性 [125]。双凹初始形态的选择源于弯曲能与红细胞形态之间的联系 [38]。取

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{n}, H) &= \gamma(\boldsymbol{n}) + \frac{\epsilon^2}{2}a(\boldsymbol{n})(H - H_*)^2, \\ \gamma(\boldsymbol{n}) &= 1 + \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{3} n_i^4, \qquad a(\boldsymbol{n}) = 1 + 2n_3^2, \end{aligned} \tag{8.63}$$

其中 $\epsilon^2 = 0.05$，$H_* = 2$。

该密度不可分离，且关于 H 严格凸。在相同曲率偏差下，法向量 $\boldsymbol{n}$ 平行于 $\boldsymbol{e}_3$ 时的弯曲惩罚为垂直时的三倍。这里的方向依赖和系数为该算例所选，并未拟合某种特定膜材料；计算也未施加膜面积约束。

采用 2562 个顶点和时间步长 $\tau = 0.005$。图 8.8 展示了中心凹陷逐渐消失、盘形逐渐圆化的过程。能量先快速下降，随后下降变缓，在 $t = 0.4$ 时达到 $W^h(0.4)/W^h(0) \approx$

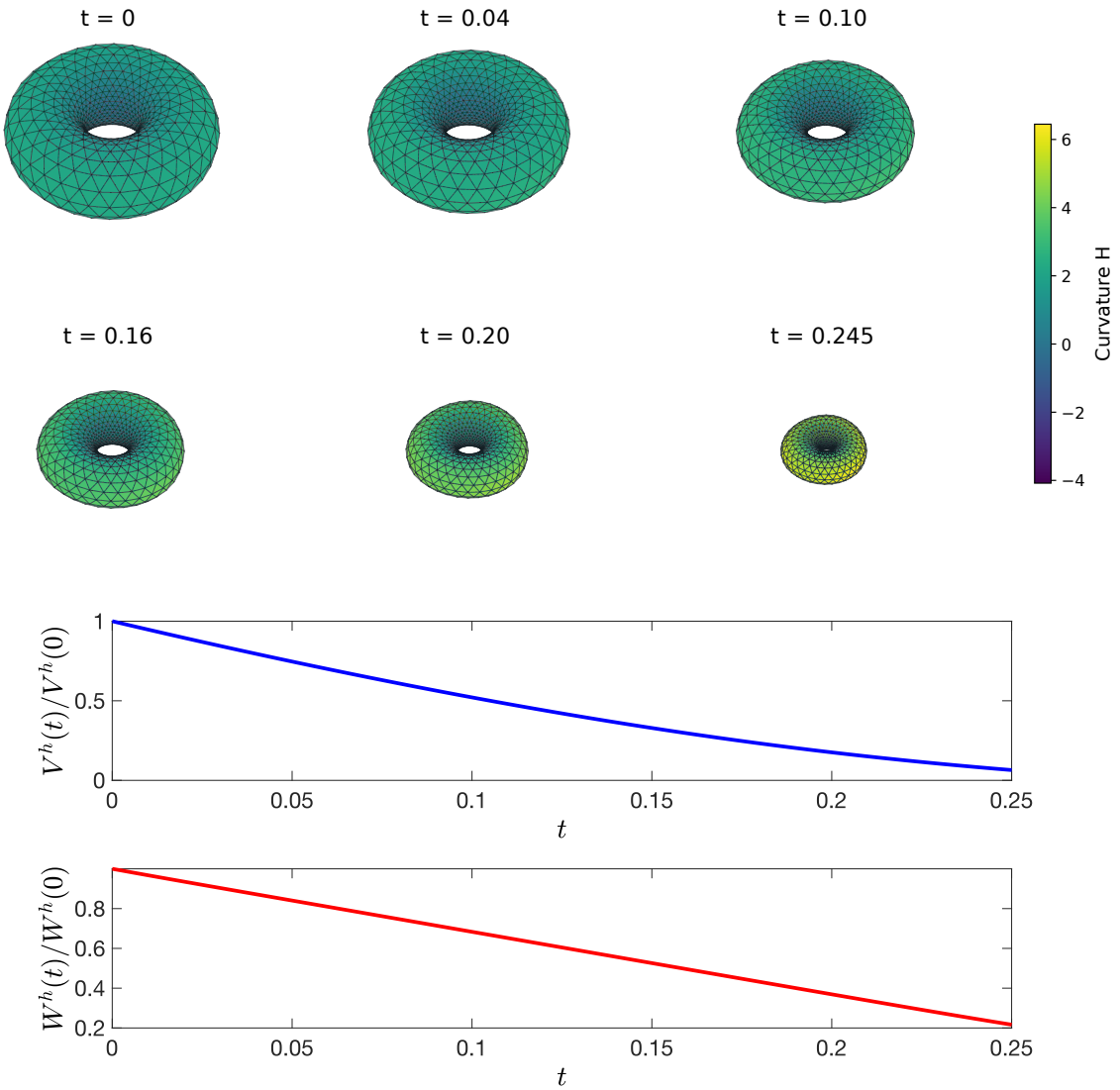


图 8.7　采用 896 个顶点与 $\tau = 0.005$ 时，环面在 L^2 流作用下的演化。

0.6748；相对体积变化的绝对值始终低于 1.5×10^{-13}。计算在 $t=0.4$ 达到网格质量阈值时停止。

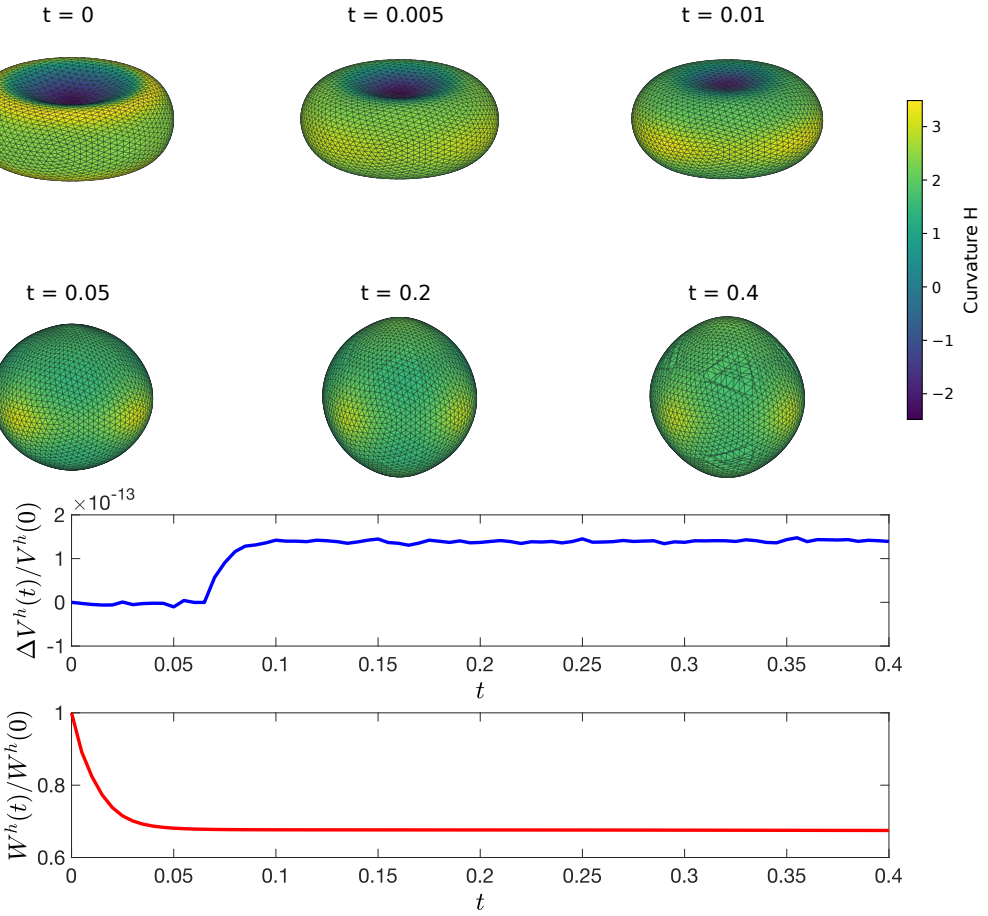


图 8.8　能量 (8.63) 驱动下双凹盘的表面扩散演化。

8.8　本章总结

本章围绕三维闭曲面上的能量 $W=\int_\Gamma f(\boldsymbol{n},H)\,\mathrm{d}A$，建立了第一变分、曲率演化和几何梯度流的统一弱形式。通过固定曲率时的对称表面能矩阵，将前文的局部能量估计用于法向方向与单元面积的变化；通过曲率能导数的质量集中投影，将一般耦合非线性项纳入连续分片线性检验空间。在曲率凸性及相应局部能量估计成立的条件下，所构造全离散格式的解满足无条件能量耗散。进一步采用时间平均面积法向量，可在表面扩散和体积约束的曲率型运动中同时保持离散体积。

补充的数值实验在耦合能量下展示了约二阶的几何收敛性，验证了能量单调耗散以及非线性求解精度下的体积守恒，并给出每步计算开销。椭球、六叶曲面、环面

和方向依赖 Helfrich 型能量驱动下的双凹盘实验，进一步展示了表面张力、弯曲刚度与几何形态之间的竞争。非线性系统的可解性、严格误差分析及演化曲率与几何曲率的一致性仍需进一步研究。

第 9 章 总结及未来工作

9.1 主要工作总结

本文围绕二维曲线与三维曲面上的各向异性几何流问题，旨在设计一类具有结构保持性的参数化有限元方法，用以处理由任意各向异性表面能驱动的界面演化，并在离散层面严格实现面积/体积（质量）守恒与能量耗散等基本几何性质。对于二维各向异性几何流问题，本文提出并分析了一种覆盖所有可能表述的参数化有限元全离散格式，其严格保持离散层面的面积守恒，并在条件

$$3\hat{\gamma}(\theta) - \hat{\gamma}(\theta - \pi) \geq 0, \qquad \hat{\gamma}(\theta) \in C^2(2\pi\mathbb{T}),$$

下具有无条件能量稳定性。本文在局部能量估计的框架内分析了各形式数值格式能量稳定性的充分必要条件，从而获得了该框架下的最优结果。同时，本文提出一种新的理解视角，将法向速度解释为一个同时依赖几何量与背景曲线本身的映射，从而为各向异性曲率驱动问题的结构保持离散化提供系统且自然的方案。在应用层面，本文将上述方法用于二维晶体薄膜演化与固态脱湿的数值模拟，揭示了若干由强各向异性与初始几何形态共同诱导的动力学现象。本文将上述统一构造与分析思想推广到三维曲面上的各向异性演化问题，并将其应用于三维各向异性固态脱湿模型的数值模拟。通过建立三维情形下的一般性保守弱形式并构造相应的全离散参数化有限元格式，其保持严格的体积守恒，并在温和条件

$$2\hat{\gamma}(\theta, \phi) - \hat{\gamma}(\pi - \theta, \pi + \phi) \geq 0, \qquad \hat{\gamma}(\theta, \phi) \in C^2(\mathbb{S}^2),$$

具有无条件能量稳定性。同时本文亦对数值格式能量稳定性的充分必要条件做出了详尽讨论，得到了与二维一致的结果。数值实验表明，该方法在复杂曲面与强各向异性作用下仍具有良好的精度、结构保持性与数值鲁棒性。

在第 2 章中，本文提出了一种适用于闭曲线的各向异性表面扩散的稳定化参数有限元方法。该方法仅需对表面能函数 $\hat{\gamma}(\theta)$ 施加较弱的条件，通过引入一种新的稳定化表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$，我们得到各向异性表面扩散的守恒形式及其相应的弱形式。在该弱形式基础上，采用参数有限元方法进行空间离散，并结合显隐 Euler 方法进行时间离散，构造出一种新的稳定化参数有限元方法。为分析无条件能量稳定性，本文将局部能量估计分析框架推广到 $\hat{\gamma}(\theta)$ 表述：首先定义最小稳定化函数并证明其存在

性，从而导出局部能量估计，进而建立无条件能量稳定性。由于对表面能 $\hat{\gamma}(\theta)$ 的要求极为宽松，并涵盖了对临界情形的要求，该方法能够在闭曲线各向异性演化问题中模拟更广泛范围的各向异性。此外，该方法亦适用于全局 C^1 且分段 C^2 的各向异性情形，而这是其他数值格式所不具备的能力。

在第 3 章中，本文提出了一种用于二维各向异性表面扩散的结构保持型参数有限元方法，其能量稳定性的最优条件为 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\geq 0$。通过引入对称的表面能矩阵 $\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$，将各向异性表面扩散的控制方程改写为保守型弱形式。针对该弱形式，本文采用以分片线性函数为参数化有限元进行空间离散，并使用显隐 Euler 方法进行时间离散。所提出的结构保持参数化有限元方法在空间上具有二阶精度、在时间上具有一阶精度，并在全离散层面可证明地保持面积守恒。借助一个紧致估计引理，在不施加任何额外假设的前提下，我们在条件 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\geq 0$ 下建立了一个全局上界，从而显式刻画了最小稳定化函数 $k_0(\theta)$ 的存在性。随后，我们进一步建立所需的局部能量估计，证明当 $k(\theta)\geq k_0(\theta)$ 且足够大时，该方法具有无条件能量稳定性。由于上述条件同时也是获得局部能量估计的必要条件，因此该方法可视为最优，无法进一步改进。本文给出了大量数值算例以验证所提方法的效率、精度及结构保持性质。此外，在 $\gamma(\boldsymbol{n})$ 表述下，所提出的方法可转化为文献 [9,102] 中的对称化参数有限元方法。本文的分析进一步表明，[9,102] 中所要求的对称性条件亦可改进为 $3\gamma(\boldsymbol{n})-\gamma(-\boldsymbol{n})\geq 0$。

在第 4 章中，本文将上述方法应用到二维晶体薄膜的在表面扩散作用下的演化及二维固态脱湿问题的数值模拟。对二维晶体薄膜，本文探索了初始形状的纵横比对颈缩断裂现象的影响，发现了表面能对称性对拓扑转变的影响；对于二维固态脱湿中的开曲线演化，本文提出了一种具有结构保持性的参数有限元方法，并使用该方法模拟了强各向异性效应下不同初始曲线到多重平衡态的演变过程，实验结果与理论预测精确吻合。

在第 5 章中，本文对用于各向异性几何流的结构保持参数化有限元方法进行了较为系统的分析与比较。通过引入超参数 α，本文能够将所有可能的表面能矩阵统一表示为一种形式，从而把不同的参数化有限元格式格式纳入同一分析框架之中。我们证明了 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)>0$ 是所有表面能矩阵共有的能量稳定性条件。在表面能矩阵为对称的特殊情形下，该条件可进一步改进为 $3\hat{\gamma}(\theta)-\hat{\gamma}(\theta-\pi)\geq 0$，且该条件对能量稳定性而言既是必要的也是充分的。除网格质量差异外，所提出方法在不同 α 取值下在精度、计算效率与结构保持等方面表现一致，体现出一定的鲁棒性。本文方法可自然推广至一般的各向异性几何流，包括面积守恒的各向异性曲率流与各向异性

表面扩散，并为构造一般各向异性曲率驱动问题的结构保持数值算法提供了一套有效框架。

在第 6 章中，本文将上述工作推广到三维空间中曲面的各向异性演化。利用 α-表面能矩阵，我们证明了数值格式在条件 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi) > 0$ 下具有无条件能量稳定性。与二维结论一致，当表面能矩阵对称时，该条件可被改进为 $2\hat{\gamma}(\theta,\phi) - \hat{\gamma}(\pi-\theta,\pi+\phi) \geq 0$，且其构成能量稳定性的充要条件，大量三维数值实验展示了所提方法在复杂曲面演化中的效率、精度与结构保持性，特别是在强各向异性与复杂几何背景下仍能保持稳定计算与良好网格质量。

本文在第 7 章中将其推广到固态脱湿问题中的开曲面各向异性演化。通过在弱形式中引入松弛接触角，并使用显隐 Euler 方法、参数化有限元方法分别对其进行时间、空间离散，我们实现了离散层面严格的体积守恒与能量耗散。数值实验进一步探索了复杂初始曲面下的形态演变、各向异性对移动接触线动力学的影响以及固态薄膜的颈缩现象，表明所提方法能够稳定捕捉各向异性诱导的不稳定性。

最后，在第 8 章中，本文研究了由 $W = \int_\Gamma f(\boldsymbol{n}, H)\,\mathrm{d}A$ 驱动的三维闭曲面演化。通过引入曲率能导数的质量集中投影，将固定曲率时的对称表面能矩阵与平均曲率演化方程配对，得到包含一般方向–曲率耦合能量的全离散参数有限元格式。在曲率凸性和局部能量估计成立的条件下，该格式的离散解满足无条件能量耗散；结合时间平均面积法向量，还可在表面扩散及体积约束的曲率型运动中保持离散体积。根据文献 [146] 补充的数值实验展示了约二阶的流形距离收敛性，并验证能量耗散与非线性求解精度下的体积守恒；椭球、六叶曲面、环面和双凹盘算例展示了方向依赖表面张力与弯曲刚度的竞争。这些结果针对所定义的离散结构和报告的实验，非线性系统的可解性、严格误差分析及曲率一致性仍需进一步研究。

9.2 未来工作方向

我们总结未来值得注意的一些工作方向，具体如下：

- 前述方向依赖表面能问题中的主要数值格式具有时间一阶精度、空间二阶精度，发展相应的高阶方法，特别是时间高阶方法，在理论与应用方面均具有重大价值。含曲率依赖能量格式在耦合时空加密中观测到的约二阶几何收敛性，还需通过独立的时间、空间误差分析加以解释。
- 数值实验结果表明，文中方法具有稳定的收敛阶。然而，由于格点的切向移动是隐式给出的，因此其收敛性的严格分析仍是公开问题。

- 参数化数值方法依赖于整体参数化 $\boldsymbol{X}$ 为初始曲面的微分同胚，因此难以处理曲面演化过程中出现的拓扑转变。使用相场方法或水平集方法或许可以有效捕捉拓扑变化及其发生后的形态变化；也可以将几何分析中处理奇点的“手术”操作引入各向异性几何流的数值算法中。
- 对第 8 章的曲率依赖能量格式，应进一步研究非线性系统的可解性、曲率恢复矩阵的逼近性质以及演化曲率与几何曲率的一致性，并在已有三维耦合能量实验的基础上，系统研究网格质量、参数敏感性与长期演化。在此基础上，引入边界变分与接触线耗散，将其推广到含曲率正则化的固态脱湿问题。
- 各向异性曲率驱动问题在材料科学、物理学中广泛存在，发展 AI 及数据驱动方法通过实验数据求解反问题以指导现实实验非常值得关注。

参考文献

[1] ANDREWS B. Volume-preserving anisotropic mean curvature flow[J]. Indiana University Mathematics Journal, 2001: 783-827.

[2] ANDREWS B, CHOW B, GUENTHER C, et al. Extrinsic geometric flows: vol. 206[M]. American Mathematical Society, 2022.

[3] ANGENENT S. Parabolic equations for curves on surfaces Part I. Curves with p-integrable curvature[J]. Annals of Mathematics, 1990: 451-483.

[4] ARMELAO L, BARRECA D, BOTTARO G, et al. Recent trends on nanocomposites based on Cu, Ag and Au clusters: A closer look[J]. Coordination Chemistry Reviews, 2006, 250(11-12): 1294-1314.

[5] BALACHANDAR S, EATON J K. Turbulent dispersed multiphase flow[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2010, 42(1): 111-133.

[6] BÄNSCH E, MORIN P, NOCHETTO R H. A finite element method for surface diffusion: the parametric case[J]. Journal of Computational Physics, 2005, 203(1): 321-343.

[7] BAO W, GARCKE H, NÜRNBERG R, et al. Volume-preserving parametric finite element methods for axisymmetric geometric evolution equations[J]. Journal of Computational Physics, 2022, 460: 111180.

[8] BAO W, GARCKE H, NÜRNBERG R, et al. A structure-preserving finite element approximation of surface diffusion for curve networks and surface clusters[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2023, 39(1): 759-794.

[9] BAO W, JIANG W, LI Y. A symmetrized parametric finite element method for anisotropic surface diffusion of closed curves[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2023, 61(2): 617-641.

[10] BAO W, JIANG W, SROLOVITZ D J, et al. Stable equilibria of anisotropic particles on substrates: a generalized Winterbottom construction[J]. SIAM Journal on Applied Mathematics, 2017, 77(6): 2093-2118.

[11] BAO W, JIANG W, WANG Y, et al. A parametric finite element method for solid-state dewetting problems with anisotropic surface energies[J]. Journal of Computational Physics, 2017, 330: 380-400.

[12] BAO W, LI Y. A symmetrized parametric finite element method for anisotropic surface diffusion in three dimensions[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2023, 45(4): A1438-A1461.

[13] BAO W, LI Y. A structure-preserving parametric finite element method for geometric flows with anisotropic surface energy[J]. Numerische Mathematik, 2024, 156(2): 609-639.

[14] BAO W, LI Y. A unified structure-preserving parametric finite element method for anisotropic surface diffusion[J]. Mathematics of Computation, 2025, 94(355): 2113-2149.

[15] BAO W, LI Y. An energy-stable parametric finite element method for the planar Willmore flow [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2025, 63(1): 103-121.

[16] BAO W, LI Y, WANG D. An energy-stable parametric finite element method for the Willmore flow in three dimensions[J]. arXiv preprint arXiv:2506.21025, 2025.

[17] BAO W, LI Y, YING W, et al. A structure-preserving parametric approximation for anisotropic geometric flows via an α-surface energy matrix[J]. Journal of Computational Physics, 2026, 561: 114976. DOI: 10.1016/j.jcp.2026.114976.

[18] BAO W, LI Y, ZHAO Q. A structure-preserving parametric finite element method for solid-state dewetting on curved substrates[J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2025, 146: 108767.

[19] BAO W, ZHAO Q. A structure-preserving parametric finite element method for surface diffusion [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2021, 59(5): 2775-2799.

[20] BAO W, ZHAO Q. An energy-stable parametric finite element method for simulating solid-state dewetting problems in three dimensions[J]. Journal of Computational Mathematics, 2023, 41(4): 771-796.

[21] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. A parametric finite element method for fourth order geometric evolution equations[J]. Journal of Computational Physics, 2007, 222(1): 441-467.

[22] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. On the variational approximation of combined second and fourth order geometric evolution equations[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2007, 29(3): 1006-1041.

[23] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. A variational formulation of anisotropic geometric evolution equations in higher dimensions[J]. Numerische Mathematik, 2008, 109(1): 1-44.

[24] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. Numerical approximation of anisotropic geometric evolution equations in the plane[J]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2008, 28(2): 292-330.

[25] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. On the parametric finite element approximation of evolving hypersurfaces in R3[J]. Journal of Computational Physics, 2008, 227(9): 4281-4307.

[26] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. Parametric approximation of Willmore flow and related geometric evolution equations[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2008, 31(1): 225-253.

[27] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. On stable parametric finite element methods for the Stefan problem and the Mullins–Sekerka problem with applications to dendritic growth[J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(18): 6270-6299.

[28] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. Parametric approximation of surface clusters driven by isotropic and anisotropic surface energies[J]. Interfaces and Free Boundaries, 2010, 12(2): 187-234.

[29] BARRETT J W, GARCKE H, NÜRNBERG R. Parametric finite element approximations of

curvature-driven interface evolutions[J]. Handbook of Numerical Analysis, 2020, 21: 275-423.

[30] BEKHTEREVA O, GAVRILYUK Y, LIFSHITS V, et al. Indium Surface Phase Formation on Si (111) Surface and their Role in Diffusion and Desorption. Poverkhnost' [J]. Physika, Khimiia i Mekhanika, 1988, 8: 54.

[31] BRASSEL M, BRETIN E. A modified phase field approximation for mean curvature flow with conservation of the volume[J]. Mathematical Methods in the Applied Sciences, 2011, 34(10): 1157-1180.

[32] BRENNEN C E. Fundamentals of multiphase flow[M]. Cambridge University Press, 2005.

[33] BROTHERS J E, MORGAN F. The isoperimetric theorem for general integrands.[J]. Michigan Mathematical Journal, 1994, 41(3): 419-431.

[34] BUATIER DE MONGEOT F, ZHU W, MOLLE A, et al. Nanocrystal formation and faceting instability in Al (110) homoepitaxy: True upward adatom diffusion at step edges and island corners [J]. Physical Review Letters, 2003, 91(1): 016102.

[35] BURGER M, HAUSSER F, STÖCKER C, et al. A level set approach to anisotropic flows with curvature regularization[J]. Journal of Computational Physics, 2007, 225(1): 183-205.

[36] BURTON W, CABRERA N, FRANK F. The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1951, 243(866): 299-358.

[37] CAHN J, HOFFMAN D. A vector thermodynamics for anisotropic surfaces—II. Curved and faceted surfaces[J]. Acta Metallurgica, 1974, 22(10): 1205-1214.

[38] CANHAM P B. The minimum energy of bending as a possible explanation of the biconcave shape of the human red blood cell[J]. Journal of Theoretical Biology, 1970, 26(1): 61-81. DOI: 10.1016/S0022-5193(70)80032-7.

[39] CHAMBOLLE A, MORINI M, NOVAGA M, et al. Existence and uniqueness for anisotropic and crystalline mean curvature flows[J]. Journal of the American Mathematical Society, 2019, 32(3): 779-824.

[40] CHANG L S, RABKIN E, STRAUMAL B, et al. Thermodynamic aspects of the grain boundary segregation in Cu (Bi) alloys[J]. Acta Materialia, 1999, 47(15-16): 4041-4046.

[41] CHEN L Q, SHEN J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations[J]. Computer Physics Communications, 1998, 108(2-3): 147-158.

[42] CHEN Y G, GIGA Y, GOTO S. Uniqueness and existence of viscosity solutions of generalized mean curvature flow equations[G]//Fundamental Contributions to the Continuum Theory of Evolving Phase Interfaces in Solids: A Collection of Reprints of 14 Seminal Papers. Springer, 1999: 375-412.

[43] COLDING T H, MINICOZZI W P. Generic mean curvature flow I; generic singularities[J]. Annals of mathematics, 2012: 755-833.

[44] DECKELNICK K, DZIUK G, ELLIOTT C M. Computation of geometric partial differential equations and mean curvature flow[J]. Acta Numerica, 2005, 14: 139-232.

[45] DECKELNICK K, DZIUK G, ELLIOTT C M. Fully discrete finite element approximation for anisotropic surface diffusion of graphs[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 2005, 43(3): 1112-1138.

[46] DECKELNICK K, GARCKE H, KOVÁCS B. Error estimates for a surface finite element method for anisotropic mean curvature flow[J]. arXiv preprint arXiv:2508.01078, 2025.

[47] DINGHAS A. Über einen geometrischen Satz von Wulff für die Gleichgewichtsform von Kristallen[J]. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1943, 105(1-6): 304-314.

[48] DOĞAN G, NOCHETTO R H. First variation of the general curvature-dependent surface energy [J]. ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 2012, 46(1): 59-79. DOI: 10.1051/m2an/2011019.

[49] DORNEL E, BARBE J C, DE CRÉCY F, et al. Surface diffusion dewetting of thin solid films: Numerical method and application to Si/ SiO 2[J]. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 2006, 73(11): 115427.

[50] DU P, KHENNER M, WONG H. A tangent-plane marker-particle method for the computation of three-dimensional solid surfaces evolving by surface diffusion on a substrate[J]. Journal of Computational Physics, 2010, 229(3): 813-827.

[51] DU Q, FENG X. The phase field method for geometric moving interfaces and their numerical approximations[J]. Handbook of Numerical Analysis, 2020, 21: 425-508.

[52] DUAN Z, LI M, ZHOU C. Solid-state dewetting of axisymmetric thin film on axisymmetric curved-surface substrates: modeling and simulation[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 2025: 134871.

[53] DZIUK G. An algorithm for evolutionary surfaces[J]. Numerische Mathematik, 1990, 58(1): 603-611.

[54] DZIUK G. Convergence of a semi-discrete scheme for the curve shortening flow[J]. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 1994, 4(04): 589-606.

[55] DZIUK G. Discrete anisotropic curve shortening flow[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1999, 36(6): 1808-1830.

[56] DZIUK G, ELLIOTT C. L^2-estimates for the evolving surface finite element method[J]. Mathematics of Computation, 2013, 82(281): 1-24.

[57] EGGLESTON J J, MCFADDEN G B, VOORHEES P W. A phase-field model for highly anisotropic interfacial energy[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 2001, 150(1-2): 91-103.

[58] ELLIOTT C M, GARCKE H. Existence results for diffusive surface motion laws[M]. Sonderforschungsbereich 256, 1994.

[59] ELLIOTT C M, GARCKE H. Diffusional phase transitions in multicomponent systems with a

concentration dependent mobility matrix[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 1997, 109(3-4): 242-256.

[60] ESCHER J, GIGA Y, ITO K. On a limiting motion and self-intersections of curves moved by the intermediate surface diffusion flow[J]. Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications, 2001, 47(6): 3717-3728.

[61] ESCHER J, MAYER U F, SIMONETT G. The surface diffusion flow for immersed hypersurfaces [J]. SIAM Journal on Mathematical Analysis, 1998, 29(6): 1419-1433.

[62] ESCHER J, MUCHA P B. The surface diffusion flow on rough phase spaces[J]. Discrete and Continuous Dynamical Systems, 2010, 26(2): 431-453.

[63] ETO T, GARCKE H, NÜRNBERG R. A parametric finite element method for a degenerate multi-phase Stefan problem with triple junctions[J]. Computational Methods in Applied Mathematics, 2026, 26(1): 43-67.

[64] FONSECA I, PRATELLI A, ZWICKNAGL B. Shapes of epitaxially grown quantum dots[J]. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 2014, 214(2): 359-401.

[65] FRANK F. Metal surfaces[J]. ASM, Cleveland, OH, 1963.

[66] GAGE M, HAMILTON R S. The heat equation shrinking convex plane curves[J]. Journal of Differential Geometry, 1986, 23(1): 69-96.

[67] GARCKE H, NÜRNBERG R, ZHAO Q. Structure-preserving discretizations of two-phase Navier–Stokes flow using fitted and unfitted approaches[J]. Journal of Computational Physics, 2023, 489: 112276.

[68] GARCKE H, NÜRNBERG R, ZHAO Q. An energy-stable parametric finite element method for Willmore flow with normal-tangential velocity splitting[J]. arXiv preprint arXiv:2507.00193, 2025.

[69] GARCKE H, NÜRNBERG R, ZHAO Q. A variational front-tracking method for multiphase flow with triple junctions[J]. Mathematics of Computation, 2026, 95(358): 647-682.

[70] GEUZAINE C, REMACLE J F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2009, 79(11): 1309-1331.

[71] GIBBS J W. The collected works of J. Willard Gibbs[J]. 1961.

[72] GIGA Y, POŽÁR N. Motion by crystalline-like mean curvature: a survey[J]. Bulletin of Mathematical Sciences, 2022, 12(02): 2230004.

[73] GOLOVIN A, DAVIS S, NEPOMNYASHCHY A. Model for faceting in a kinetically controlled crystal growth[J]. Physical Review E, 1999, 59(1): 803.

[74] GOLOVIN A, LEVINE M, SAVINA T, et al. Faceting instability in the presence of wetting interactions: A mechanism for the formation of quantum dots[J]. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 2004, 70(23): 235342.

[75] GRAYSON M A. The heat equation shrinks embedded plane curves to round points[J]. Journal of Differential geometry, 1987, 26(2): 285-314.

[76] GUILLÉN-GONZÁLEZ F, TIERRA G. On linear schemes for a Cahn–Hilliard diffuse interface model[J]. Journal of Computational Physics, 2013, 234: 140-171.

[77] GURSKI K F, MCFADDEN G B. The effect of anisotropic surface energy on the Rayleigh instability[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2003, 459(2038): 2575-2598.

[78] GURTIN M E. Thermomechanics of evolving phase boundaries in the plane[M]. 1993.

[79] GURTIN M E, JABBOUR M E. Interface Evolution in Three Dimensions with Curvature-Dependent Energy and Surface Diffusion: Interface-Controlled Evolution, Phase Transitions, Epitaxial Growth of Elastic Films[J]. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 2002, 163(3): 171-208.

[80] HAN Y, UNAL B, QIN F, et al. Kinetics of facile bilayer island formation at low temperature: Ag/NiAl (110)[J]. Physical review letters, 2008, 100(11): 116105.

[81] HELFRICH W. Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments[J]. Zeitschrift für Naturforschung C, 1973, 28(11–12): 693-703. DOI: 10.1515/znc-1973-11-1209.

[82] HERRING C. Some theorems on the free energies of crystal surfaces[J]. Physical Review, 1951, 82(1): 87.

[83] HILTON H. Mathematical Crystallography and the Theory of Groups of Movements, Clarendon [Z]. 1903.

[84] HOFFMAN D W, CAHN J W. A vector thermodynamics for anisotropic surfaces: I. Fundamentals and application to plane surface junctions[J]. Surface Science, 1972, 31: 368-388.

[85] HU J, LI B. Evolving finite element methods with an artificial tangential velocity for mean curvature flow and Willmore flow[J]. Numerische Mathematik, 2022, 152(1): 127-181.

[86] HUISKEN G. Flow by mean curvature of convex surfaces into spheres[J]. Journal of Differential Geometry, 1984, 20(1): 237-266.

[87] HUISKEN G. Asymptotic behavior for singularities of the mean curvature flow[J]. Journal of Differential Geometry, 1990, 31(1): 285-299.

[88] HUISKEN G, SINESTRARI C. Convexity estimates for mean curvature flow and singularities of mean convex surfaces[J]. Acta Mathematica, 1999, 183(1): 45-70.

[89] HUISKEN G, SINESTRARI C. Mean curvature flow singularities for mean convex surfaces[J]. Calculus of Variations and Partial Differential Equations, 1999, 8(1): 1-14.

[90] JIANG W, BAO W, THOMPSON C V, et al. Phase field approach for simulating solid-state dewetting problems[J]. Acta Materialia, 2012, 60(15): 5578-5592.

[91] JIANG W, LI B. A perimeter-decreasing and area-conserving algorithm for surface diffusion flow of curves[J]. Journal of Computational Physics, 2021, 443: 110531.

[92] JIANG W, WANG Y, ZHAO Q, et al. Solid-state dewetting and island morphologies in strongly anisotropic materials[J]. Scripta Materialia, 2016, 115: 123-127.

[93] JIANG W, ZHAO Q. Sharp-interface approach for simulating solid-state dewetting in two dimensions: a Cahn–Hoffman ξ-vector formulation[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 2019, 390: 69-83.

[94] JIANG W, ZHAO Q, BAO W. Sharp-interface model for simulating solid-state dewetting in three dimensions[J]. SIAM Journal on Applied Mathematics, 2020, 80(4): 1654-1677.

[95] JIRAN E, THOMPSON C. Capillary instabilities in thin films[J]. Journal of Electronic Materials, 1990, 19(11): 1153-1160.

[96] JIRAN E, THOMPSON C. Capillary instabilities in thin, continuous films[J]. Thin Solid Films, 1992, 208(1): 23-28.

[97] KOVÁCS B, LI B, LUBICH C. A convergent evolving finite element algorithm for mean curvature flow of closed surfaces[J]. Numerische Mathematik, 2019, 143(4): 797-853.

[98] KOVÁCS B, LI B, LUBICH C. A convergent evolving finite element algorithm for Willmore flow of closed surfaces[J]. Numerische Mathematik, 2021, 149(3): 595-643.

[99] LAUE M V. Der Wulffsche Satz für die Gleichgewichtsform von Kristallen[J]. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1943, 105(1-6): 124-133.

[100] LEROY F, CHEYNIS F, PASSANANTE T, et al. Influence of facets on solid state dewetting mechanisms: Comparison between Ge and Si on SiO 2[J]. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 2013, 88(3): 035306.

[101] LEROY F, CHEYNIS F, ALMADORI Y, et al. How to control solid state dewetting: A short review[J]. Surface Science Reports, 2016, 71(2): 391-409.

[102] LI M, LI Y, PEI L. A symmetrized parametric finite element method for simulating solid-state dewetting problems[J]. Applied Mathematical Modelling, 2023, 121: 731-750.

[103] LI M, ZHAO Q. Parametric finite element approximations for anisotropic surface diffusion with axisymmetric geometry[J]. Journal of Computational Physics, 2024, 497: 112632.

[104] LI M, ZHOU C. Energy-stable parametric finite element approximations for regularized solid-state dewetting problems in strongly anisotropic materials[J]. Journal of Nonlinear Science, 2025, 35(3): 52.

[105] LI M, ZHOU C. Structure-preserving parametric finite element methods for simulating axisymmetric solid-state dewetting problems with anisotropic surface energies[J]. Journal of Computational Physics, 2025, 531: 113944.

[106] LI M, ZHOU C. Structure-preserving parametric finite element methods for simulating axisymmetric solid-state dewetting problems with anisotropic surface energies[J]. Journal of Computational Physics, 2025, 531: 113944.

[107] LI Y, BAO W. An energy-stable parametric finite element method for anisotropic surface diffusion

[J]. Journal of Computational Physics, 2021, 446: 110658.

[108] LIEBMANN H. IX. Der Curie-Wulff'sche Satz über Combinationsformen von Krystallen[J]. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 1914, 53(1-6): 171-177.

[109] MANTEGAZZA C. Lecture notes on mean curvature flow: vol. 290[M]. Springer Science & Business Media, 2011.

[110] MAXWELL A, THOMPSON C V, CARTER W C. A level-set method for simulating solid-state dewetting in systems with strong crystalline anisotropy[J]. Acta Materialia, 2025, 282: 120368.

[111] MIZSEI J. How can sensitive and selective semiconductor gas sensors be made?[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 1995, 23(2-3): 173-176.

[112] MULLINS W W. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries[J]. Journal of Applied Physics, 1956, 27(8): 900-904.

[113] MULLINS W W. Theory of thermal grooving[J]. Journal of Applied Physics, 1957, 28(3): 333-339.

[114] MULLINS W W. Proof that the Two-Dimensional Shape of Minimum Surface Free Energy is Convex[J]. Journal of Mathematical Physics, 1962, 3(4): 754-759.

[115] NURYADI R, ISHIKAWA Y, TABE M. Formation and ordering of self-assembled Si islands by ultrahigh vacuum annealing of ultrathin bonded silicon-on-insulator structure[J]. Applied surface science, 2000, 159: 121-126.

[116] OSHER S, FEDKIW R P. Level set methods: an overview and some recent results[J]. Journal of Computational physics, 2001, 169(2): 463-502.

[117] PALMER B. Stability of the Wulff shape[J]. Proceedings of the American Mathematical Society, 1998, 126(12): 3661-3667.

[118] PENG D, OSHER S, MERRIMAN B, et al. The geometry of Wulff crystal shapes and its relations with Riemann problems[J]. Nonlinear Partial Differential Equations, 1999, 238: 251-303.

[119] PLATEAU M. XXXVII. On the recent theories of the constitution of jets of liquid issuing from circular orifices[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1856, 12(79): 286-297.

[120] RADICE E, SALVALAGLIO M, BERGAMASCHINI R. Phase-field modelling of anisotropic solid-state dewetting on patterned substrates[J]. Acta Materialia, 2025, 292: 120992.

[121] RANDOLPH S, FOWLKES J, MELECHKO A, et al. Controlling thin film structure for the dewetting of catalyst nanoparticle arrays for subsequent carbon nanofiber growth[J]. Nanotechnology, 2007, 18(46): 465304.

[122] REYNOLDS O. Papers on mechanical and physical subjects[M]. CUP Archive, 1983.

[123] SAVINA T V, GOLOVIN A A, DAVIS S H, et al. Faceting of a growing crystal surface by surface diffusion[J]. Physical Review E, 2003, 67(2): 021606.

[124] SCHMIDT V, WITTEMANN J V, SENZ S, et al. Silicon nanowires: a review on aspects of their

growth and their electrical properties[J]. Advanced Materials, 2009, 21(25-26): 2681-2702.

[125] SEGUIN B, FRIED E. Microphysical derivation of the Canham–Helfrich free-energy density[J]. Journal of Mathematical Biology, 2014, 68(3): 647-665. DOI: 10.1007/s00285-013-0647-9.

[126] SEVCOVIC D, MIKULA K. Evolution of plane curves driven by a nonlinear function of curvature and anisotropy[J]. SIAM Journal on Applied Mathematics, 2001, 61(5): 1473-1501.

[127] SHUSTOROVICH E. Metal-surface reaction energetics. Theory and application to heterogeneous catalysis, chemisorption, and surface diffusion[M]. New York, NY (United States); VCH Publishers Inc., 1990.

[128] SIEGEL M, MIKSIS M, VOORHEES P. Evolution of material voids for highly anisotropic surface energy[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004, 52(6): 1319-1353.

[129] SONER H M. Motion of a set by the curvature of its boundary[J]. Journal of Differential Equations, 1993, 101(2): 313-372.

[130] SROLOVITZ D J. On the stability of surfaces of stressed solids[J]. Acta Metallurgica, 1989, 37(2): 621-625.

[131] SROLOVITZ D J, SAFRAN S A. Capillary instabilities in thin films. I. Energetics[J]. Journal of Applied Physics, 1986, 60(1): 247-254.

[132] TAYLOR J. Existence and structure of solutions to a class of nonelliptic variational problems[C]//Symposia Mathematica: vol. 14. 1974: 499-508.

[133] TAYLOR J E, CAHN J W. Linking anisotropic sharp and diffuse surface motion laws via gradient flows[J]. Journal of Statistical Physics, 1994, 77(1): 183-197.

[134] THOMPSON C V. Solid-state dewetting of thin films[J]. Annual Review of Materials Research, 2012, 42(1): 399-434.

[135] VOORHEES P, CORIELL S, MCFADDEN G, et al. The effect of anisotropic crystal-melt surface tension on grain boundary groove morphology[J]. Journal of Crystal Growth, 1984, 67(3): 425-440.

[136] WANG Y. Modeling and Simulations for Solid-state Dewetting Problems in Two Dimension[D]. National University of Singapore, 2016.

[137] WANG Y, JIANG W, BAO W, et al. Sharp interface model for solid-state dewetting problems with weakly anisotropic surface energies[J]. Physical Review B, 2015, 91(4): 045303.

[138] WHITE B. The size of the singular set in mean curvature flow of mean-convex sets[J]. Journal of the American Mathematical Society, 2000, 13(3): 665-695.

[139] WULFF G. Zur Frage der Geschwindigkeit des Wachstums und der Auflösung der Kristall achen [J]. Z. Kristallogr, 1901, 34: 449-530.

[140] XU Y, SHU C W. Local discontinuous Galerkin method for surface diffusion and Willmore flow of graphs[J]. Journal of Scientific Computing, 2009, 40(1): 375-390.

[141] XUE L, HAN Y. Pattern formation by dewetting of polymer thin film[J]. Progress in Polymer

Science, 2011, 36(2): 269-293.

[142] YAZAKI S. On an area-preserving crystalline motion[J]. Calculus of Variations and Partial Differential Equations, 2002, 14(1): 85-105.

[143] YE J, THOMPSON C V. Mechanisms of complex morphological evolution during solid-state dewetting of single-crystal nickel thin films[J]. Applied Physics Letters, 2010, 97(7).

[144] YE J, THOMPSON C V. Templated Solid-State Dewetting to Controllably Produce Complex Patterns[J]. Advanced Materials, 2011, 23(13): 1567-1571.

[145] ZHANG W, GLADWELL I. Evolution of two-dimensional crystal morphologies by surface diffusion with anisotropic surface free energies[J]. Computational Materials Science, 2003, 27(4): 461-470.

[146] ZHANG Y. A unified structure-preserving framework for geometric flows with coupled orientation and curvature dependence[EB/OL]. (2026-09-29). https://arxiv.org/abs/2609.36419v1. arXiv: 2609.36419 [math.NA].

[147] ZHANG Y, LI Y, YING W. A stabilized parametric finite element method for surface diffusion with an arbitrary surface energy[J]. Journal of Computational Physics, 2025, 523: 113605. DOI: 10.1016/j.jcp.2024.113605.

[148] ZHAO Q, JIANG W, BAO W. A parametric finite element method for solid-state dewetting problems in three dimensions[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2020, 42(1): B327-B352.

[149] ZHAO Q, JIANG W, BAO W. An energy-stable parametric finite element method for simulating solid-state dewetting[J]. IMA Journal of Numerical Analysis, 2021, 41(3): 2026-2055.

[150] ZIK O, MOSES E. Fingering instability in combustion: An extended view[J]. Physical Review E, 1999, 60(1): 518.

[151] 李步扬. 曲率流的参数化有限元逼近[J]. 计算数学, 2022, 44(2): 145-162.

[152] 汤涛, 乔中华. 相场方程的高效数值算法[J]. 中国科学：数学, 2020, 50(6): 775.

附录 A 非线性格式求解器

由于本文中所有数值格式均为非线性格式，因此适当的非线性求解器是必需的。在此，仅以第 5 章中的格式 (5.30) 与第 6 章中的格式 (6.40) 为例分别介绍求解曲线和曲面演化的迭代法。

A.1 曲线演化的迭代求解器

A.1.1 Picard 迭代法

对于非线性系统 (5.30)，我们有如下 Picard 型迭代：在第 i 次迭代，求解 $(\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}, \mu^{m+1,i+1}) \in [\mathbb{K}_p^h]^2 \times \mathbb{K}_p^h$，使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i+1} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\mu^{m+1,i+1}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}_p^h, \tag{A.1a}$$

$$\left(\mu^{m+1,i+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^\alpha(\theta^m)\partial_s \boldsymbol{X}^{m+1,i+1}, \partial_s \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h = 0, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}_p^h]^2, \tag{A.1b}$$

其中

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i} \coloneqq -\frac{1}{2}\left(\partial_s \boldsymbol{X}^m + \partial_s \boldsymbol{X}^{m+1,i}\right)^\perp = -\frac{1}{2|\partial_\rho \boldsymbol{X}^m|}\left(\partial_\rho \boldsymbol{X}^m + \partial_\rho \boldsymbol{X}^{m+1,i}\right)^\perp. \tag{A.2}$$

对于 $m \geq 0$，常选取初始猜测 $\boldsymbol{X}^{m+1,0} = \boldsymbol{X}^m, \mu^{m+1,0} = \mu^m$，然后启动循环直到如下停机条件满足：

$$\|\boldsymbol{X}^{m+1,i+1} - \boldsymbol{X}^{m+1,i}\|_\infty = \max_{1\leq j\leq N} |\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}(\rho_j) - \mu^{m+1,i}(\rho_j)| \leq \mathrm{tol}, \tag{A.3a}$$

$$\|\mu^{m+1,i+1} - \mu^{m+1,i}\|_\infty = \max_{1\leq j\leq N} |\mu^{m+1,i+1}(\rho_j) - \mu(\rho_j)| \leq \mathrm{tol}, \tag{A.3b}$$

其中 tol 为给定容差。

注 A.1 上述线性方程组在对 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}$ 施加一些较弱假设后具有唯一可解性，对此的细致讨论请参阅 *[21]*。

A.1.2 Newton 迭代法

与 Picard 型迭代相比，Newton 型迭代往往具有更高的效率和收敛速度，特别是在非线性较弱的情形。对于非线性系统 (5.30)，我们应用如下 Newton 型迭代计算

$(\boldsymbol{X}^{m+1},\mu^{m+1})$：在第 i 次迭代，计算 Newton 方向 $(\boldsymbol{X}^{\delta},\mu^{\delta})\in[\mathbb{K}_p^h]^2\times\mathbb{K}_p^h$，使得

$$\begin{aligned}&\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{\delta}}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i}-\boldsymbol{X}^m}{\tau}\cdot\frac{(-\partial_\rho\boldsymbol{X}^{\delta})^{\perp}}{2|\partial_\rho\boldsymbol{X}^m|},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\mu^{m+1,i+1},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h\\&\quad=-\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left(\mu^{m+1,i},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}_p^h,\end{aligned}\tag{A.4a}$$

$$\begin{aligned}&\left(\mu^{\delta}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\mu^{m+1},\frac{(-\partial_\rho\boldsymbol{X}^{\delta})^{\perp}}{2|\partial_\rho\boldsymbol{X}^m|}\cdot\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{\delta},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h\\&\quad=-\left(\mu^{m+1,i+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m)\partial_s\boldsymbol{X}^{m+1,i+1},\partial_s\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}_p^h]^2,\end{aligned}\tag{A.4b}$$

并置

$$\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}:=\boldsymbol{X}^{m+1,i}+\boldsymbol{X}^{\delta},\qquad\mu^{m+1,i+1}:=\mu^{m+1,i}+\mu^{\delta}.\tag{A.5}$$

在本文所涉及的计算中，我们取初始猜测 $\boldsymbol{X}^{m+1,0}=\boldsymbol{X}^m,\mu^{m+1,0}=\mu^m$ 并置如下停机准则

$$\|\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}-\boldsymbol{X}^{m+1,i}\|_\infty+\|\mu^{m+1,i+1}-\mu^{m+1,i}\|_\infty\le\mathrm{tol},\tag{A.6}$$

其中 tol 为给定容差。

注 A.2 迭代格式 (A.4) 是通过对非线性系统 (5.30) 于点 $(\boldsymbol{X}^{m+1,i},\mu^{i+1,i})$ 处作一阶 *Taylor* 展开并取 $\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}=\boldsymbol{X}^{m+1,i}+\boldsymbol{X}^{\delta},\mu^{m+1,i+1}=\mu^{m+1,i}+\mu^{\delta}$ 所得，详细讨论请参阅 *[91]*。

A.2　曲面演化的迭代求解器

A.2.1　Picard 迭代法

对于非线性系统 (6.40)，可采用如下 Picard 型迭代求解：在第 i 次迭代，求解 $(\boldsymbol{X}^{m+1,i+1},\mu^{m+1,i+1})\in[\mathbb{K}^m]^2\times\mathbb{K}^m$，使得

$$\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}\cdot\frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}-\boldsymbol{X}^m}{\tau},\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h+\left(\nabla_\Gamma\mu^{m+1,i+1},\nabla_\Gamma\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\varphi^h\in\mathbb{K}^m,\tag{A.7a}$$

$$\left(\mu^{m+1,i+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i},\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h-\left\langle\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m,\phi^m)\nabla_\Gamma\boldsymbol{X}^{m+1,i+1},\nabla_\Gamma\boldsymbol{\omega}^h\right\rangle_{\Gamma^m}^h=0,\qquad\forall\boldsymbol{\omega}^h\in[\mathbb{K}^m]^3.\tag{A.7b}$$

此处向量 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}$ 定义为

$$\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}\Big|_{\sigma_j^m}:=\frac{\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}+4\mathcal{J}\{\sigma_j^{m+\frac{1}{2},i}\}+\mathcal{J}\{\sigma_j^{m+1}\}}{6|\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}|},\qquad\sigma_j^{m+\frac{1}{2},i}:=\frac{1}{2}(\sigma_j^m+\sigma_j^{m+1,i}).\tag{A.8}$$

初始猜测及停机条件与曲线情形相同。

注 A.3 与曲线情形类似，上述线性系统在对 $\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}$ 施加一些较弱假设后具有唯一可解性，详见 *[21]*。

A.2.2 Newton 迭代法

对非线性系统 (6.40)，我们采用如下 Newton 型迭代：在第 i 次迭代，计算 Newton 方向 $(\boldsymbol{X}^{\delta}, \mu^{\delta}) \in [\mathbb{K}^m]^2 \times \mathbb{K}^m$，使得

$$\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{\delta}}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i} - \boldsymbol{X}^m}{\tau} \cdot \mathcal{G}_{\boldsymbol{X}^{\delta}}^{m+\frac{1}{2},i}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1,i+1}, \nabla_{\Gamma}\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h \\
&\quad = -\left(\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i} \cdot \frac{\boldsymbol{X}^{m+1,i} - \boldsymbol{X}^m}{\tau}, \varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\nabla_{\Gamma}\mu^{m+1,i}, \nabla_{\Gamma}\varphi^h\right)_{\Gamma^m}^h, \qquad \forall \varphi^h \in \mathbb{K}^m,
\end{aligned} \tag{A.9a}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\mu^{\delta}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left(\mu^{m+1}, \mathcal{G}_{\boldsymbol{X}^{\delta}}^{m+\frac{1}{2},i} \cdot \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h - \left(\hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m, \phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{\delta}, \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h \\
&\quad = -\left(\mu^{m+1,i+1}\boldsymbol{n}^{m+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\omega}^h\right)_{\Gamma^m}^h + \left\langle \hat{\boldsymbol{G}}_k^{\alpha}(\theta^m, \phi^m)\nabla_{\Gamma}\boldsymbol{X}^{m+1,i+1}, \nabla_{\Gamma}\boldsymbol{\omega}^h\right\rangle_{\Gamma^m}^h, \qquad \forall \boldsymbol{\omega}^h \in [\mathbb{K}^m]^2,
\end{aligned} \tag{A.9b}$$

此处

$$\mathcal{G}_{\boldsymbol{X}^{\delta}}^{m+\frac{1}{2},i}\Big|_{\sigma_j^m} := \frac{\mathbf{g}^{23} \times \boldsymbol{X}^{\delta}(\boldsymbol{q}_{j_1}^m) + \mathbf{g}^{31} \times \boldsymbol{X}^{\delta}(\boldsymbol{q}_{j_2}^m) + \mathbf{g}^{12} \times \boldsymbol{X}^{\delta}(\boldsymbol{q}_{j_3}^m)}{6|\mathcal{J}\{\sigma_j^m\}|}, \tag{A.10}$$

其中

$$\mathbf{g}^{lk} := 2\boldsymbol{X}^{m+1,i}(\boldsymbol{q}_{j_k}^m) + \boldsymbol{X}^m(\boldsymbol{q}_{j_k}^m) - 2\boldsymbol{X}^{m+1,i}(\boldsymbol{q}_{j_l}^m) - \boldsymbol{X}^m(\boldsymbol{q}_{j_l}^m), \qquad 1 \le l, k \le 3. \tag{A.11}$$

其他设置与 A.1.2 节同。

附录 B 若干三维各向异性表面能量

此处我们列举一些常用三维各向异性 $\gamma(\boldsymbol{n})$，其可以通过一一映射

$$\boldsymbol{n}(\theta,\phi)=(n_1,n_2,n_3)^T\coloneqq(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)^T, \tag{B.1}$$

转换为 $\hat{\gamma}(\theta,\phi)$ 表示。

- 类 Riemann 度量各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=\sum_{l=1}^{k}\sqrt{\boldsymbol{n}^T\boldsymbol{G}_l\boldsymbol{n}},\qquad\forall\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2, \tag{B.2}$$

  其中 $\boldsymbol{G}_l\in\mathbb{R}^{3\times3}$ 对称正定。

- l^r-度量各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=(|n_1|^r+|n_2|^r+|n_3|^r)^{\frac{1}{r}},\qquad r\geq2,\qquad\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2. \tag{B.3}$$

- 立方各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=1+\beta(n_1^4+n_2^4+n_3^4),\qquad\forall\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2. \tag{B.4}$$

- 三重对称各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=1+\beta(n_1^3+n_2^3+n_3^3),\qquad\forall\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2. \tag{B.5}$$

- [001], [011], [111] 定向各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=1+\beta(n_1^4+n_2^4),\qquad[001]\text{ 定向}, \tag{B.6a}$$

$$\gamma(\boldsymbol{n})=1+\beta(n_1^4+\frac{n_2^4+n_3^4}{2}+3n_2^2n_3^2),\qquad[011]\text{ 定向}, \tag{B.6b}$$

$$\gamma(\boldsymbol{n})=1+\beta\left(\frac{n_1^4+n_2^4}{2}+\frac{n_3^4}{3}+n_1^2n_2^2+2n_3^2(n_1^2+n_2^2)\right.$$
$$\left.\frac{2\sqrt{2}}{3}n_1^3n_3-2\sqrt{2}n_1n_2^2n_3\right),\qquad[111]\text{ 定向}, \tag{B.6c}$$

- 分段 BGN 各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=\sqrt{(\frac{5}{2}+\frac{3}{2}\mathrm{sgn}(n_1))n_1^2+n_2^2+n_3^2},\qquad\forall\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2. \tag{B.7}$$

- 椭球型各向异性

$$\gamma(\boldsymbol{n})=\sqrt{a_1n_1^2+a_2n_2^2+a_3n_3^2},\qquad\forall\boldsymbol{n}\in\mathbb{S}^2. \tag{B.8}$$

符号索引

数学符号按外观（字母）顺序排序。

$(\cdot,\cdot)_{\Gamma}$, 24
$(\cdot,\cdot)^h_{\Gamma^h}$, 27
$\langle\cdot,\cdot\rangle^h_{\Gamma^h}$, 121

$A(t)$, 24
$A^h(t)$, 28
A^m, 29
$A_o(t)$, 69
A^m_o, 70

C, 148

$e^h(t)$, 39

$\hat{\boldsymbol{G}}(\theta)$, 14
$\gamma(\boldsymbol{n})$, 2
$\hat{\gamma}(\theta)$, 4
$\hat{\gamma}(\theta,\phi)$, 6
$\boldsymbol{G}_k(\boldsymbol{n})$, 15
$\hat{\boldsymbol{G}}_k(\theta)$, 21
$\hat{\boldsymbol{G}}^{\alpha}_k(\theta,\phi)$, 117
$\nabla_{\Gamma} f, \nabla_{\Gamma}\cdot\boldsymbol{f}$, 115

$H^1(\mathbb{I}), H^1_p(\mathbb{I})$, 24
$H^1_0(\Gamma)$, 149
$H^1(\Gamma), [H^1(\Gamma)]^3$, 119

$\mathcal{J}\{\sigma\}$, 121

$k(\theta,\phi)$, 117
$\mathbb{K}^h_0$, 69
$k_0(\theta)$, 31
κ, 5
$\mathbb{K}(\Gamma^m), \mathbb{K}^m$, 121
$\mathbb{K}^h, \mathbb{K}^h_p$, 27
$k^{\alpha}_{\min}(\theta), k^{\alpha}_0(\theta)$, 88
$k^{\alpha}_{\min}(\theta,\phi)$, 123

$L^2(\mathbb{I})$, 24
$L^2(\Gamma)$, 119

$M^{\alpha}(U,\lambda;\boldsymbol{n})$, 123
$M(\Gamma_1,\Gamma_2)$, 39
μ, 5

$\partial_s f$, 27
$\mathcal{P}^k$, 27

R^h_{γ}, 39

$\mathbb{S}^{d-1}$, 2

θ_Y, 148

$\boldsymbol{U}:\boldsymbol{V}$, 119

$V(t)$, 120
V^m, 122
V_n, 7

$W(\Gamma)$, 5
$W(t)$, 24
$W^h(t)$, 28
W^m, 29
$W_o(t)$, 69
W^m_o, 70

$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{n})$, 6
$\boldsymbol{\xi}(\theta), \boldsymbol{\xi}(\theta,\phi)$, 6

$\boldsymbol{Z}_k(\boldsymbol{n})$, 15
$\hat{\boldsymbol{Z}}_k(\theta)$, 48

名词索引暨英译

中文术语按汉语拼音排序。

B

保守型形式 (conservative form), 22

标记粒子法 (marker-particle method), 10

表面刚度 (surface stiffness), 4

C

Cahn-Hoffman, 6

参数化有限元方法 (parametric finite element method), 12

传输引理 (transport lemma), 25

次可加性, 32

次线性, 32

D

带号面积 (signed area), 112

第一变分, 5

对称化结构保持参数有限元法 (symmetrized SP-PFEM), 15

F

法向速度, 7

法向速度律 (normal velocity law), 94

Frank 图 (Frank diagram), 4

Frobenius 内积, 119

辅助函数, 31, 50

G

各向异性, 1

各向异性表面扩散 (anisotropic surface diffusion), 8

各向异性曲率流 (anisotropic curvature flow), 8

广义 Winterbottom 构造 (generalized Winterbottom construction), 74

规范化面积损失, 39

规范化能量, 39, 138

规范化体积损失, 138

固态脱湿问题 (solid-state dewetting), 67, 147

H

化学势 (chemical potential), 5

J

渐近准均匀 (asymptotic quasi-uniform), 41

尖锐界面模型 (sharp-interface model), 67, 148

加权曲率, 21

加权网格比, 39

接触线迁移率 (contact mobility), 68

晶面化 (faceting), 158

颈缩 (pinch-off), 63, 139, 154

近似裂隙区域 (almost slit domain), 112

局部能量估计, 31, 51

K

开覆盖定理, 38

亏格 (genus), 139

L

类晶面 (facet-like), 154

离散曲面 Jacob 矩阵, 121

离散曲面梯度算子, 121

流形距离 (manifold distance), 39

鲁棒性 (robustness), 39

N

能量稳定参数有限元方法 (energy-stable PFEM), 81

P

平衡态 (equilibrium), 9

Q

曲率驱动问题 (curvature-driven problem), 1

曲面 Jacob 矩阵, 116

曲面散度算子, 116

R

Rayleigh 不稳定性 (Rayleigh-like instability), 156

容差 (tolerance), 39

弱形式 (weak form), 23

S

散度定理, 119

舍入误差 (round-off error), 42

水平集方法 (level set method), 10

数值误差, 39

Sobolev 空间, 24, 85, 119, 149

T

体积守恒各向异性曲率流 (volume-conserved anisotropic curvature flow), 8

W

稳定函数, 21, 48, 83, 117

Wulff 形 (Wulff shape), 9

X

显隐 Euler 方法 (explicit-implicit Euler method), 28

Y

演化曲面有限元法 (evolving surface finite element method), 10

余法向量 (conormal vector), 148

Z

正齐次性, 32

质量集中内积 (mass-lumped inner product), 27, 121

中值定理, 35

最小稳定函数, 31, 51, 123