



含对数位势的 Cahn-Hilliard 方程的 3 阶保正保能量稳定数值格式

李雨桓¹, 景剑宇¹, 刘倩倩¹, 王成², 陈文斌^{1,3*}

1. 复旦大学数学科学学院, 上海 200433;

2. Mathematics Department, University of Massachusetts, North Dartmouth, MA 02747, USA;

3. 上海市现代应用数学重点实验室, 上海 200433

E-mail: liyuhuan@fudan.edu.cn, jyjing20@fudan.edu.cn, qianqianliu21@m.fudan.edu.cn, cwang1@umassd.edu, wbchen@fudan.edu.cn

收稿日期: 2023-01-15; 接受日期: 2023-11-29; 网络出版日期: 2024-02-05; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 12241101 和 12071090) 和美国国家科学基金 (批准号: DMS-2012669) 资助项目

摘要 本文提出对数位势 Cahn-Hilliard 方程基于有限差分的 BDF3 (third-order backward differentiation formula) 数值格式. 在空间方向, 本文同时引入 2 阶和 4 阶两种离散方法, 并证明数值解的存在唯一性和保正性. 本文通过引入一个新的正则项 $A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$, 证明格式的无条件能量稳定性. 利用离散正交卷积 (discrete orthogonal convolution, DOC) 核和粗估细估的思想, 本文证明离散 $L^\infty(0, T; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ 的误差估计, 利用这个估计得到数值解在线性 CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件 $c_1h \leq \tau \leq c_2h$ 下的严格分离性, 并最终得到离散 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega))$ 的误差估计. 最后, 本文通过几个数值例子来验证格式的有效性.

关键词 Cahn-Hilliard 方程 对数位势 BDF3 数值格式 无条件能量稳定性 收敛性分析

MSC (2020) 主题分类 35K35, 35K55, 65K10, 65M06, 65M12

1 引言

Cahn 和 Hilliard [6, 7] 在 1958 年基于统计热力学理论首次提出了扩散界面模型. 假定交界面有一个 $O(\varepsilon)$ 厚度的薄层, 使得材料的分布能够连续光滑地过渡, 从而能够刻画一些非平衡态下的相变过程. Cahn-Hilliard (CH) 模型等相场模型是常用来研究物质相变的重要方法, 它在囊泡动力学 [8, 32, 33] 和凝固力学 [5] 等问题中有重要的应用. 给定一个有界区域 Ω , CH 相场模型可以表示成如下的关于序参数 ϕ 的能量密度泛函:

$$E(\phi(x, t)) = \int_{\Omega} \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) dx, \quad (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \quad (1.1)$$

英文引用格式: Li Y H, Jing J Y, Liu Q Q, et al. A third-order positivity-preserving and energy stable numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential (in Chinese). Sci Sin Math, 2024, 54: 1–30, doi: 10.1360/SSM-20223-0014

其中 F 是一个带有双阱结构的奇异势能函数, 也称为 Flory-Huggins 位势:

$$F(\phi) = (1 + \phi) \ln(1 + \phi) + (1 - \phi) \ln(1 - \phi) - \frac{\alpha}{2} \phi^2, \quad (1.2)$$

这里 $\alpha > 2$. 对数位势的方程最早在文献 [7] 中被提出, 之后也出现在了 Flory-Huggins 的聚合物的溶液理论中 (参见文献 [26]).

能量 (1.1) 在 H^{-1} 意义下的梯度流对应了如下的 CH 方程:

$$\phi_t = \mathcal{L}\mu, \quad \text{这里 } \mathcal{L} = \Delta, \quad (1.3)$$

$$\mu := \frac{\delta E}{\delta \phi} = -\varepsilon^2 \Delta \phi + f(\phi), \quad (1.4)$$

其中

$$f(\phi) = F'(\phi) = \ln(1 + \phi) - \ln(1 - \phi) - \alpha \phi.$$

梯度流方程有一类重要的能量下降性质, 即在特定的边界条件下 (如齐次的 Neumann 条件或者周期边界条件), 有下面的等式成立:

$$\frac{d}{dt} E(\phi) = - \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 dx \leq 0. \quad (1.5)$$

当 $\mathcal{L} = -I$ 时, 方程 (1.3) 和 (1.4) 对应能量 (1.1) 的 L^2 梯度流, 被称为 Allen-Cahn (AC) 方程. AC 方程 [4] 是用来研究二元合金中粗化过程的模型, 而 CH 方程 [7] 则是用来研究二嵌段共聚物分离过程中的相变和演化的模型. 这两种方程在相场动力学的研究中都有重要的应用, 因此, 近年来学界对于这类方程的理论研究和数值求解都高度关注. AC 方程保留着线性抛物方程的极值原理, 近年来学者们对这个问题展开了深入的研究, 读者可以参考 Du 等 [30, 31] 的重要工作. 本文关注 CH 方程的数值格式的构造与分析. 与 AC 方程不同, CH 方程不满足极值原理, 而具有质量守恒性质

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi dx = 0,$$

即 ϕ 在区域 Ω 上的平均值为常数.

另外, 奇异位势的形式 (1.2) 给方程的分析带来许多困难. 由于对数函数 $\ln(1 + \phi)$ 和 $\ln(1 - \phi)$ 的出现, 方程的解 ϕ 需要严格地介于 -1 和 1 之间, 这也称为解的保正性 (或者更严格地说, 有界性). 然而, 在 ϕ 靠近 ± 1 时, $f(\phi)$ 会趋向于 $\pm \infty$, 这样的奇性也给这类方程的研究带来很大困难. 学者们通过引入如下近似多项式来克服这个困难 [24, 67]:

$$F(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2, \quad f(\phi) = \phi^3 - \phi. \quad (1.6)$$

有关的适定性分析可参见文献 [1, 24, 34, 37, 38, 44], 也可参见文献 [2, 22, 67] 中对全局解长时间行为的分析.

特别地, 当空间的维数小于等于 2 时, 解会存在严格分离性, 即若初值 ϕ_0 和 ± 1 之间有一个严格的正距离, 则存在一个一致的不依赖于时间的 $\delta \in (0, 1)$, 使得对于任意 $t \in [0, T]$, $\phi(t)$ 都满足 $\|\phi(t)\|_{\infty} \leq 1 - \delta$. 这个结论对于适定性分析中得到高阶光滑性尤其重要. 这些性质的分析可参见文献 [37, 38, 57].

对于这类梯度流形式的无条件能量下降的方程, 近年来已经有许多的工作利用不同的数值方法来处理这类问题, 如凸分裂方法 [39, 60, 64, 66]、半隐稳定化方法 [36, 64, 68]、指数时间差分 (exponential

time differencing, ETD) 方法 [30, 42, 43] 以及最近由 Yang 等提出的不变能量方形化 (invariant energy quadratization, IEQ) 方法 [69, 71, 72] 和 Shen 等提出的基于 IEQ 改进的标量辅助变量 (scalar auxiliary variable, SAV) 方法 [3, 61–63].

基于以上的性质, 自然地数值离散的角度出发, 考虑能否构造一个数值格式, 使得它能很好地继承连续情形下的性质, 同时又能通过数值求解反应物理学或者生物学中的一些现象. 事实上, 关于多项式位势的数值研究, 近年来已经有很多的工作, 如对于 CH 方程的数值设计和分析 [16, 19, 43, 49, 70, 72]、对于流相耦合系统的数值格式设计 [9, 13, 25, 40, 46, 47, 56, 65]、对于三相流的数值格式分析 [14] 和对于泛函型 CH 方程的数值格式分析 [35, 41, 58, 75]. 这里不再赘述.

对数位势的数值格式研究, 最早由 Copetti 和 Elliott [23] 提出. 他们在文献 [23] 中给出了一个全隐的数值格式分析, 并提出了数值解需要满足保正性这一问题. 不过, 在这个格式下, 只有当时间 τ 满足 $\tau \leq \frac{4\epsilon^2}{\alpha^2}$ 时, 解的存在性才得以证明. 这是对能量当中的凹项进行了隐式处理造成的. Chen 等 [15] 利用凹凸分离的技巧, 首次提出了对数位势 CH 方程的无条件能量稳定的 BDF1 (first-order backward differentiation formula) 格式和 BDF2 格式. 利用凸泛函在有界闭区域内存在极小值的性质, 本文克服了解的存在性需要依赖步长的条件, 并给出了解的离散 $L^\infty(0, T; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ 收敛性的证明. 在此基础上, Yuan 等 [74] 又完成了基于质量集中有限元方法的 BDF2 数值格式分析, 而 Chen 等 [10] 则引入了一个非线性的修正项来给出一个改进的 Crank-Nicolson 格式, 并将误差分析改进到了离散 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$, 但仍然不是最优的. 之后, Liu 等 [55] 基于 Liao 和 Zhang [52] 提出的离散正交卷积 (discrete orthogonal convolution, DOC) 核技巧, 给出了变步长的 BDF2 数值格式的最优的离散 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ 误差分析. 另外, Cheng 和 Shen [20, 21] 基于优化中 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件的思想, 提出了用 Lagrange 乘子来约束解的数值方法. 这种方法便于植入已有的程序, 也可以推广到高阶的格式, 不过难以保留方程的能量下降性. 该方法也不仅适用于奇异位势的 CH 方程, 而且对一类带有约束的方程也是适用的.

关于奇异位势的工作也不仅仅停留在 CH 方程中, 许多其他的问题也引入了奇异位势的讨论和分析, 如带有 Flory-Huggins-de Gennes 位势的三相流 CH 方程的分析 [27–29, 73]、Poisson-Nernst-Planck 方程的分析 [54, 59]、对流扩散方程的分析 [53]、液膜液滴模型的分析 [76]、流相耦合系统的分析 [17] 和 FCH (functionalized Cahn-Hilliard) 方程的分析 [11] 等.

然而, 对于奇异位势的 CH 方程的时间高阶数值格式的构造及分析一直是一个难点. 部分文献对于多项式位势的方程讨论了高阶格式的构造, 包括基于谱方法的 BDF3 格式的分析 [19]、基于 DOC 核的变步长 BDF3-5 格式的分析 [49] 和基于代数显隐 Runge-Kutta 格式的分析 [45]. 尽管这些文献中做了关于格式能量稳定和收敛性的分析, 但在对数位势情形下, 对数的奇性会给高阶格式的收敛性带来很大的困难. 本文首次提出了基于对数位势的 CH 方程的 BDF3 有限差分的数值格式 (2.46). 为了匹配高阶的时间格式, 除了标准的二阶空间差分以外, 本文还引入高阶的 4 阶精度的空间差分网格, 并通过凸泛函在有界闭区域中存在唯一极小值的方法, 证明两种网格下的解的存在性和保正性. 通过引入一个新的高阶修正项 $A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$, 本文证明当稳定化系数 $A \geq \frac{27\alpha^4}{32}\epsilon^{-2}$ 时, 格式在两种空间网格下的无条件能量稳定性. 利用 DOC 核技巧, 首先给出误差的离散 $L^\infty(0, T; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ 估计, 通过这个估计得到误差的离散 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ 粗估计和解的严格分离性, 并最终得到误差的离散 $L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega))$ 估计. 最后, 通过几个数值例子来验证数值格式的收敛阶, 以及通过粗化过程来反映格式的能量下降和严格分离性.

本文余下内容的结构如下. 第 2 节介绍一些预备知识, 包括 2 阶和 4 阶的有限差分网格以及 DOC 核的定义及其一些性质. 第 3 节给出解的保正性和存在唯一性的证明. 第 4 节给出格式的无条件能

量稳定性的证明. 第 5 节给出收敛性的分析. 第 6 节展示一些数值例子, 包括精度测试和相分离演化. 第 7 节给出本文结论.

2 预备知识

2.1 离散周期函数空间

本小节给出 3 维情形下的空间网格的定义, 二维的情形是类似的. 给定周期边界条件和区域 $\Omega = (0, 1)^3$, 定义 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = h = \frac{1}{N}$, 其中 N 在本文中表示空间网格的划分个数. 首先定义与网格有关的函数: $p_i = p(i) = (i - \frac{1}{2})h$. 接着对 $h > 0$, 定义如下对两个与 p_i 相关的网格点的集合:

$$G := \{p_{i+\frac{1}{2}} \mid i \geq 0\}, \quad M := \{p_i \mid i \geq 1\}. \quad (2.1)$$

考虑下面的由 N^3 个点构成的 N^3 周期函数空间:

$$\mathbf{M}_{\text{per}} = \{v : M \times M \times M \rightarrow \mathbb{R} \mid v_{i,j,k} = v_{i+\alpha N, j+\beta N, k+\gamma N}, \forall i, j, k, \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{K}_{\text{per}}^x = \{v : G \times M \times M \rightarrow \mathbb{R} \mid v_{i+\frac{1}{2}, j, k} = v_{i+\frac{1}{2}+\alpha N, j+\beta N, k+\gamma N}, \forall i, j, k, \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.3)$$

其中 $v_{i,j,k} = v(p_i, p_j, p_k)$. 空间 $\mathbf{K}_{\text{per}}^y$ 和 $\mathbf{K}_{\text{per}}^z$ 可以类似定义. 下面定义均值为 0 的周期函数空间:

$$\mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}} = \left\{ v \in \mathbf{M}_{\text{per}} \mid \bar{v} := \frac{h^3}{|\Omega|} \sum_{i,j,k=1}^m v_{i,j,k} = 0 \right\}. \quad (2.4)$$

最后, 向量函数空间定义为 $\vec{\mathbf{K}}_{\text{per}} = \mathbf{K}_{\text{per}}^x \times \mathbf{K}_{\text{per}}^y \times \mathbf{K}_{\text{per}}^z$.

2.2 二阶精度离散空间网格

定义上述空间上的 2 阶精度的差分 and 均值算子如下:

$$D_{x,(2)} v_{i+\frac{1}{2}, j, k} = \frac{1}{h} (v_{i+1, j, k} - v_{i, j, k}), \quad A_x v_{i+\frac{1}{2}, j, k} = \frac{1}{2} (v_{i+1, j, k} + v_{i, j, k}), \quad (2.5)$$

$$D_{y,(2)} v_{i, j+\frac{1}{2}, k} = \frac{1}{h} (v_{i, j+1, k} - v_{i, j, k}), \quad A_y v_{i, j+\frac{1}{2}, k} = \frac{1}{2} (v_{i, j+1, k} + v_{i, j, k}), \quad (2.6)$$

$$D_{z,(2)} v_{i, j, k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h} (v_{i, j, k+1} - v_{i, j, k}), \quad A_z v_{i, j, k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (v_{i, j, k+1} + v_{i, j, k}), \quad (2.7)$$

其中, $D_{x,(2)}, A_x : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{K}_{\text{per}}^x$, $D_{y,(2)}, A_y : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{K}_{\text{per}}^y$, $D_{z,(2)}, A_z : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{K}_{\text{per}}^z$. 类似地,

$$d_x v_{i, j, k} = \frac{1}{h} (v_{i+\frac{1}{2}, j, k} - v_{i-\frac{1}{2}, j, k}), \quad a_x v_{i, j, k} = \frac{1}{2} (v_{i+\frac{1}{2}, j, k} + v_{i-\frac{1}{2}, j, k}), \quad (2.8)$$

$$d_y v_{i, j, k} = \frac{1}{h} (v_{i, j+\frac{1}{2}, k} - v_{i, j-\frac{1}{2}, k}), \quad a_y v_{i, j, k} = \frac{1}{2} (v_{i, j+\frac{1}{2}, k} + v_{i, j-\frac{1}{2}, k}), \quad (2.9)$$

$$d_z v_{i, j, k} = \frac{1}{h} (v_{i, j, k+\frac{1}{2}} - v_{i, j, k-\frac{1}{2}}), \quad a_z v_{i, j, k} = \frac{1}{2} (v_{i, j, k+\frac{1}{2}} + v_{i, j, k-\frac{1}{2}}), \quad (2.10)$$

其中, $d_x, a_x : \mathbf{K}_{\text{per}}^x \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$, $d_y, a_y : \mathbf{K}_{\text{per}}^y \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$, $d_z, a_z : \mathbf{K}_{\text{per}}^z \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$. 离散梯度算子 $\nabla_{h,(2)} : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \vec{\mathbf{K}}_{\text{per}}$ 定义为 $\nabla_{h,(2)} v = (D_{x,(2)} v, D_{y,(2)} v, D_{z,(2)} v)$, 而离散散度 $\nabla_{h,(2)} \cdot : \vec{\mathbf{K}}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$ 定义为

$$(\nabla_{h,(2)} \cdot \vec{f})_{i,j,k} = d_x f_{i,j,k}^x + d_y f_{i,j,k}^y + d_z f_{i,j,k}^z, \quad (2.11)$$

其中 $\vec{f} = (f^x, f^y, f^z) \in \vec{\mathbf{K}}_{\text{per}}$. 则标准的 3 维离散 Laplace 算子 $\Delta_{h,(2)} : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$ 定义为

$$\begin{aligned}\Delta_{h,(2)} v_{i,j,k} &:= \nabla_{h,(2)} \cdot (\nabla_{h,(2)} v)_{i,j,k} \\ &= d_x(D_{x,(2)} v)_{i,j,k} + d_y(D_{y,(2)} v)_{i,j,k} + d_z(D_{z,(2)} v)_{i,j,k} \\ &= \frac{1}{h^2} (v_{i+1,j,k} + v_{i-1,j,k} + v_{i,j+1,k} + v_{i,j-1,k} + v_{i,j,k+1} + v_{i,j,k-1} - 6v_{i,j,k}).\end{aligned}\quad (2.12)$$

定义格点内积:

$$\langle v, u \rangle_{\Omega} = h^3 \sum_{i,j,k=1}^N v_{i,j,k} u_{i,j,k}, \quad v, u \in \mathbf{M}_{\text{per}}, \quad [v, u]_x = \langle a_x(vu), 1 \rangle_{\Omega}, \quad v, u \in \mathbf{K}_{\text{per}}^x, \quad (2.13)$$

$$[v, u]_y = \langle a_y(vu), 1 \rangle_{\Omega}, \quad v, u \in \mathbf{K}_{\text{per}}^y, \quad [v, u]_z = \langle a_z(vu), 1 \rangle_{\Omega}, \quad v, u \in \mathbf{K}_{\text{per}}^z, \quad (2.14)$$

$$[\vec{f}_1, \vec{f}_2]_{\Omega} = [f_1^x, f_2^x]_x + [f_1^y, f_2^y]_y + [f_1^z, f_2^z]_z, \quad \vec{f}_i = (f_s^x, f_s^y, f_s^z) \in \vec{\mathbf{K}}_{\text{per}}, \quad s = 1, 2. \quad (2.15)$$

定义中心格点函数的范数: 对于 $1 \leq p < \infty$, 当 $v \in \mathbf{M}_{\text{per}}$ 时,

$$\|v\|_p^p := \langle |v|^p, 1 \rangle_{\Omega}, \quad \|v\|_{\infty} := \max_{1 \leq i,j,k \leq N} |v_{i,j,k}|.$$

定义离散梯度范数

$$\begin{aligned}\|\nabla_{h,(2)} v\|_2^2 &:= [\nabla_{h,(2)} v, \nabla_{h,(2)} v]_{\Omega} \\ &= [D_{x,(2)} v, D_{x,(2)} v]_x + [D_{y,(2)} v, D_{y,(2)} v]_y + [D_{z,(2)} v, D_{z,(2)} v]_z.\end{aligned}\quad (2.16)$$

下面可以定义 v 在 H_h^1 和 H_h^2 空间上的范数:

$$\|v\|_{H_h^1}^2 := \|v\|_2^2 + \|\nabla_{h,(2)} v\|_2^2, \quad \|v\|_{H_h^2}^2 := \|v\|_{H_h^1}^2 + \|\Delta_{h,(2)} v\|_2^2. \quad (2.17)$$

根据文献 [15, 引理 2.1], 对于任意 $u, v \in \mathbf{M}_{\text{per}}$ 和任意 $\vec{f} \in \vec{\mathbf{K}}_{\text{per}}$, 有如下性质:

$$\langle u, \nabla_{h,(2)} \cdot \vec{f} \rangle_{\Omega} = -[\nabla_{h,(2)} u, \vec{f}]_{\Omega}, \quad \langle u, \nabla_{h,(2)} \cdot (\nabla_{h,(2)} v) \rangle_{\Omega} = -[\nabla_{h,(2)} u, \nabla_{h,(2)} v]_{\Omega}. \quad (2.18)$$

定义 $\mathcal{L}_{h,(2)}(\varphi) := -\nabla_{h,(2)} \cdot (\nabla_{h,(2)} \varphi)$. 对于任意 $\phi \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 存在唯一 $\varphi \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$ 满足

$$\mathcal{L}_{h,(2)}(\varphi) = \phi - \bar{\phi}, \quad (2.19)$$

其中 $\bar{\phi} = |\Omega|^{-1} \langle \phi, 1 \rangle_{\Omega}$. 对于任意 $\phi_1, \phi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 定义

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(2)}^{-1}} := [\nabla_{h,(2)} \varphi_1, \nabla_{h,(2)} \varphi_2]_{\Omega}, \quad (2.20)$$

其中 $\varphi_s \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$ 是下面方程的唯一解:

$$-\nabla_{h,(2)} \cdot (\nabla_{h,(2)} \varphi_s) = \phi_s, \quad s = 1, 2. \quad (2.21)$$

根据 (2.18), 下面的等式成立:

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(2)}^{-1}} = \langle \mathcal{L}_{h,(2)}^{-1} \phi_1, \phi_2 \rangle_{\Omega} = \langle \phi_1, \mathcal{L}_{h,(2)}^{-1} \phi_2 \rangle_{\Omega}, \quad (2.22)$$

特别地, 记 $\|\varphi\|_{-1,(2),h}^2 := \langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{L}_{h,(2)}^{-1}}$. 对于如上的定义, 还有如下的估计:

引理 2.1 (参见文献 [15, 引理 3.1]) 设 $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且 $\varphi_1 - \varphi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$. 若 $\|\varphi_1\|_{\infty} < 1$, $\|\varphi_2\|_{\infty} \leq M$, 则有如下的估计成立:

$$\|\mathcal{L}_{h,(2)}^{-1}(\varphi_1 - \varphi_2)\|_{\infty} \leq \hat{C}_0^{(2)}, \quad (2.23)$$

其中 $\hat{C}_0^{(2)}$ 是仅依赖于 M 和 Ω 而不依赖于 h 的常数.

2.3 4 阶精度离散空间网格

参见文献 [18] 中的定义, 给出如下 4 阶精度的空间差分算子:

$$D_{x,(4)} v_{i,j,k} = \frac{1}{12h} (-v_{i+2,j,k} + 8v_{i+1,j,k} - 8v_{i-1,j,k} + v_{i-2,j,k}), \quad (2.24)$$

$$D_{y,(4)} v_{i,j,k} = \frac{1}{12h} (-v_{i,j+2,k} + 8v_{i,j+1,k} - 8v_{i,j-1,k} + v_{i,j-2,k}), \quad (2.25)$$

$$D_{z,(4)} v_{i,j,k} = \frac{1}{12h} (-v_{i,j,k+2} + 8v_{i,j,k+1} - 8v_{i,j,k-1} + v_{i,j,k-2}), \quad (2.26)$$

其中 $D_{x,(4)}, D_{y,(4)}, D_{z,(4)} : \mathbf{M}_{\text{per}} \rightarrow \mathbf{M}_{\text{per}}$. 4 阶精度的 3 维 Laplace 算子定义为 $\Delta_{h,(4)} := D_{x,(4)}^2 + D_{y,(4)}^2 + D_{z,(4)}^2$, 其中,

$$D_{x,(4)}^2 v_{i,j,k} = \frac{-v_{i-2,j,k} + 16v_{i-1,j,k} - 30v_{i,j,k} + 16v_{i+1,j,k} - v_{i+2,j,k}}{12h^2}, \quad (2.27)$$

$$D_{y,(4)}^2 v_{i,j,k} = \frac{-v_{i,j-2,k} + 16v_{i,j-1,k} - 30v_{i,j,k} + 16v_{i,j+1,k} - v_{i,j+2,k}}{12h^2}, \quad (2.28)$$

$$D_{z,(4)}^2 v_{i,j,k} = \frac{-v_{i,j,k-2} + 16v_{i,j,k-1} - 30v_{i,j,k} + 16v_{i,j,k+1} - v_{i,j,k+2}}{12h^2}. \quad (2.29)$$

对于 $\phi_1, \phi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 有

$$-\langle \phi_1, \Delta_{h,(4)} \phi_2 \rangle_{\Omega} = -\langle \Delta_{h,(4)} \phi_1, \phi_2 \rangle_{\Omega} = \langle \nabla_{h,(2)} \phi_1, \nabla_{h,(2)} \phi_2 \rangle_{\Omega} + \frac{h^2}{12} \langle \Delta_{h,(2)} \phi_1, \Delta_{h,(2)} \phi_2 \rangle_{\Omega}. \quad (2.30)$$

定义 4 阶精度的梯度范数为

$$\|\nabla_{h,(4)} f\|_2^2 := \|\nabla_{h,(2)} f\|_2^2 + \frac{h^2}{12} \|\Delta_{h,(2)} f\|_2^2. \quad (2.31)$$

因此, 在上述定义下, 有

$$-\langle f, \Delta_{h,(4)} f \rangle_{\Omega} = \|\nabla_{h,(4)} f\|_2^2. \quad (2.32)$$

对于任意 $\phi \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 存在唯一 $\varphi \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 满足

$$\mathcal{L}_{h,(4)}(\varphi) := -\Delta_{h,(4)} \varphi = \phi - \bar{\phi}, \quad (2.33)$$

其中 $\bar{\phi} = |\Omega|^{-1} \langle \phi, 1 \rangle_{\Omega}$. 对于任意 $\phi_1, \phi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 定义 $\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}} := \langle \Delta_{h,(4)} \phi_1, \Delta_{h,(4)} \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}}$, 则有

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}} = \langle \Delta_{h,(4)} \phi_1, -\phi_2 \rangle_{\Omega} = \langle \nabla_{h,(2)} \phi_1, \nabla_{h,(2)} \phi_2 \rangle_{\Omega} + \frac{h^2}{12} \langle \Delta_{h,(2)} \phi_1, \Delta_{h,(2)} \phi_2 \rangle_{\Omega}, \quad (2.34)$$

其中 $\varphi_s \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$ 是如下方程的唯一解:

$$-\Delta_{h,(4)} \varphi_s = \phi_s, \quad s = 1, 2. \quad (2.35)$$

类似 2 阶格式 (2.22), 对于 4 阶格式, 有

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}} = \langle \mathcal{L}_{h,(4)}^{-1} \phi_1, \phi_2 \rangle_{\Omega} = \langle \phi_1, \mathcal{L}_{h,(4)}^{-1} \phi_2 \rangle_{\Omega}, \quad (2.36)$$

特别地, 记 $\|\varphi\|_{-1,(4),h}^2 := \langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}}$. 类似文献 [15, 引理 3.1] 的证明, 同样可以得到如下引理:

引理 2.2 设 $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且 $\varphi_1 - \varphi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$. 若 $\|\varphi_1\|_{\infty} < 1$, $\|\varphi_2\|_{\infty} \leq M$, 则有如下的估计成立:

$$\|\mathcal{L}_{h,(4)}^{-1}(\varphi_1 - \varphi_2)\|_{\infty} \leq \hat{C}_0^{(4)}, \quad (2.37)$$

其中 $\hat{C}_0^{(4)}$ 是仅依赖于 M 和 Ω 而不依赖于 h 的常数.

2.4 离散正交卷积核方法

对于离散时间序列 $\{v^n\}_{n=0}^N$, 定义 $\nabla_\tau v^n = v^n - v^{n-1}$ 和 $\partial_\tau v^n = \nabla_\tau v^n / \tau$. 下面使用文献 [50] 中的记号, 用 BDF- k 格式来表示 $D_k v^n$:

$$D_k v^n = \frac{1}{\tau} \sum_{j=1}^n b_{n-j}^{(k)} \nabla_\tau v^j, \quad \forall n \geq k. \quad (2.38)$$

这里采用 BDF-3 阶格式, $b_0^{(3)} = \frac{11}{6}$, $b_1^{(3)} = -\frac{7}{6}$, $b_2^{(3)} = \frac{1}{3}$, 对于所有 $j \geq 4$, 有 $b_j^{(3)} = 0$. 后面为了叙述简单起见, $b_j^{(3)}$ 简记为 b_j . 根据文献 [51], 离散 BDF 核 b_j 对应的 DOC 核 θ_j 定义为

$$\theta_0 = \frac{1}{b_0}, \quad \theta_{n-j} = -\frac{1}{b_0} \sum_{\ell=j+1}^n \theta_{n-\ell} b_{\ell-j}, \quad \forall j = n-1, n-2, \dots, 4, 3. \quad (2.39)$$

根据定义, b_j 和 θ_j 满足

$$\sum_{\ell=j}^n \theta_{n-\ell} b_{\ell-j} = \delta_{nj}, \quad \forall 3 \leq j \leq n, \quad (2.40)$$

其中 δ_{nj} 是 Kronecker 函数, 当 $n = j$ 时为 1, 其余为 0. 由文献 [50], 将 DOC 核 θ_j 应用到 BDF-3 格式上, 得到

$$\sum_{n=3}^{\ell} \theta_{\ell-n} D_3 \phi^j = \frac{1}{\tau} \phi_I^{(\ell)} + \partial_\tau \phi^n, \quad (2.41)$$

其中 $\phi_I^{(\ell)}$ 表示数值解在时间 t_n 时前两项的影响:

$$\phi_I^{(\ell)} = \sum_{k=1}^2 \nabla_\tau \phi^k \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} b_{j-k}, \quad \forall \ell \geq 3. \quad (2.42)$$

定义矩阵

$$B = \begin{pmatrix} b_0 & & & \\ b_1 & b_0 & & \\ b_2 & b_1 & b_0 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & b_2 & b_1 & b_0 \end{pmatrix}_{(n-2) \times (n-2)}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} \theta_0 & & & \\ \theta_1 & \theta_0 & & \\ \theta_2 & \theta_1 & \theta_0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \theta_{n-3} & \theta_{n-4} & \theta_{n-5} & \cdots & \theta_0 \end{pmatrix}_{(n-2) \times (n-2)}, \quad (2.43)$$

以及 $B_3 := B + B^T$, $\Theta_3 := \Theta + \Theta^T$. 根据文献 [49, 引理 3.7]、[50, 引理 3.2、3.4 和 3.5] 和 [51, 引理 2.1], 有下面关于 DOC 核的引理.

引理 2.3 B 正定当且仅当离散正交卷积核 Θ 正定. 若设矩阵 Θ_3 的最大、最小特征值分别为 $\lambda_{\max}(\Theta_3)$ 和 $\lambda_{\min}(\Theta_3)$, 则存在常数 $m_1, m_2 > 0$, 使得 $\lambda_{\min}(\Theta_3) \geq m_1$ 和 $\lambda_{\max}(\Theta_3) \leq m_2$. 并且对于 θ_j ($j \geq 0$), 有如下的估计:

$$|\theta_j| \leq \frac{5}{6} \left(\frac{3}{7} \right)^j. \quad (2.44)$$

引理 2.4 对于任意实序列 $\{v^\ell\}_{\ell=0}^n$ 和 $\{\omega^\ell\}_{\ell=0}^n$, 存在一个只与 m_1 和 m_2 有关的常数 $\tilde{C}_1$, 对于任意 $\eta > 0$, 都有

$$\sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \langle v^j, \omega^\ell \rangle \leq \eta \sum_{\ell=3}^n \|v^\ell\|^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta} \sum_{\ell=3}^n \|\omega^\ell\|^2. \quad (2.45)$$

2.5 Cahn-Hilliard 方程的全离散 BDF3 格式

对于 $n \geq 2$, 给定 $\phi^n, \phi^{n-1}, \phi^{n-2} \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且 $\bar{\phi}^n = \bar{\phi}^{n-1} = \bar{\phi}^{n-2}$, 求 ϕ^{n+1} 使得

$$\frac{\frac{11}{6}\phi^{n+1} - 3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2}}{\tau} = \Delta_{h,(p)}\mu^{n+1}, \quad p = 2, 4, \quad (2.46)$$

$$\mu^{n+1} = \ln(1 + \phi^{n+1}) - \ln(1 - \phi^{n+1}) - \alpha\check{\phi}^{n+1} - \varepsilon^2 \Delta_{h,(p)}\phi^{n+1} - A\tau^3 \Delta_{h,(p)}D_3\phi^{n+1}, \quad (2.47)$$

其中 $\check{\phi}^{n+1} = 3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2}$. 若数值解 ϕ^{n+1} 存在, 则显然 $\phi^{n+1} \in \mathbf{M}_{\text{per}}$.

注 2.1 (2.46) 和 (2.47) 并没有给出 ϕ^1 和 ϕ^2 的计算方式. 这里指出, ϕ^1 和 ϕ^2 可以用一些单步的 3 阶精度的质量守恒格式来计算.

3 解的保正性和存在唯一性证明

首先给出本节的主要定理.

定理 3.1 给定 $\phi^n, \phi^{n-1}, \phi^{n-2} \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且存在 $M > 0$, 使得

$$\|\phi^k\|_\infty \leq M, \quad k = n, n-1, n-2. \quad (3.1)$$

并且满足 $|\bar{\phi}^n| = |\bar{\phi}^{n-1}| = |\bar{\phi}^{n-2}| < 1$, 则方程 (2.46) 和 (2.47) 存在唯一解 $\phi^{n+1} \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且 $\phi^{n+1} - \bar{\phi}^n \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, $\|\phi^{n+1}\|_\infty < 1$.

证明 对 (2.46) 两边同时和 1 作离散内积, 即可以得到 ϕ^{n+1} 的质量守恒性. 下面着重证明解 ϕ^{n+1} 的保正性和存在唯一性. 将定理 3.1 的证明分成如下几个步骤.

步骤 1 定义离散能量函数

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^n(\phi) := & \frac{3}{11\tau} \left\| \frac{11}{6}\phi - 3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right\|_{-1,(p),h}^2 \\ & + \langle 1 + \phi, \ln(1 + \phi) \rangle_\Omega + \langle 1 - \phi, \ln(1 - \phi) \rangle_\Omega + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\nabla_{h,(p)}\phi\|_2^2 \\ & - \alpha \langle \phi, 3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2} \rangle_\Omega + \frac{3A\tau^4}{11} \|\nabla_{h,(p)}D_3\phi\|_2^2. \end{aligned} \quad (3.2)$$

引入

$$A_h := \{\phi \in \mathbf{M}_{\text{per}} \mid \|\phi\|_\infty \leq 1, \langle \phi - \bar{\phi}_0, 1 \rangle = 0\} \subset \mathbb{R}^{N^3}. \quad (3.3)$$

因此, 求离散系统 (2.46) 和 (2.47) 的数值解等价于求离散能量函数 (3.2) 在 A_h 上的最小值. 显然, $\mathcal{T}^n$ 在上述给定区域上是一个严格凸的函数. 为了表达方便, 且因为 ϕ^n 的质量守恒性质, 引入一个积分为 0 的新变量 $\varphi = \phi - \bar{\phi}_0$, 并将 $\mathcal{T}^n$ 改写为下面的等价形式:

$$\mathcal{F}^n(\varphi) := \mathcal{T}^n(\varphi + \bar{\phi}_0)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{11\tau} \left\| \frac{11}{6}(\varphi + \bar{\phi}_0) - 3\phi^{n+1} + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right\|_{-1,(p),h}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\nabla_{h,(p)}\varphi\|_2^2 \\
&\quad + \langle 1 + \varphi + \bar{\phi}_0, \ln(1 + \varphi + \bar{\phi}_0) \rangle_\Omega + \langle 1 - \varphi - \bar{\phi}_0, \ln(1 - \varphi - \bar{\phi}_0) \rangle_\Omega \\
&\quad - \alpha \langle \varphi + \bar{\phi}_0, 3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2} \rangle_\Omega + \frac{3A\tau^4}{11} \|\nabla_{h,(p)} D_3 \varphi\|_2^2.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$\mathcal{F}^n$ 是定义在

$$\dot{A}_h := \{\varphi \in \dot{\mathbf{M}}_{\text{per}} \mid -1 - \bar{\phi}_0 \leq \varphi \leq 1 - \bar{\phi}_0\} \subset \mathbb{R}^{N^3} \tag{3.5}$$

上的函数. 显然, 当 $\varphi \in \dot{A}_h$ 是 $\mathcal{F}^n$ 的最小值时, $\phi := \varphi + \bar{\phi}_0 \in A_h$ 是 $\mathcal{T}^n$ 的最小值.

步骤 2 证明 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_h$ 最小值的存在性.

对于 $\delta \in (0, \frac{1}{2})$, 考虑闭区间

$$\dot{A}_{h,\delta} := \{\varphi \in \dot{\mathbf{M}}_{\text{per}} \mid \delta - 1 - \bar{\phi}_0 \leq \varphi \leq 1 - \delta - \bar{\phi}_0\} \subset \mathbb{R}^{N^3}. \tag{3.6}$$

因为 $\dot{A}_{h,\delta}$ 是 $\dot{\mathbf{M}}_{\text{per}}$ 的一个有界闭的凸子集, 则 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 上一定存在一个最小值.

步骤 3 下面证明, 当 δ 足够小时, 最小值点不可能在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 的边界上取到, 即最小值点 $\psi \in \dot{A}_{h,\delta}$ 不满足 $\|\psi + \bar{\phi}_0\|_\infty = 1 - \delta$.

采用反证法. 假设 $\mathcal{F}^n$ 的最小值点在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 边界取到, 此时记最小值点为 φ^* , 则此时至少存在一个格点, 不妨设为 $\vec{\alpha}_0 = (i_0, j_0, k_0)$, 满足 $|\varphi_{\vec{\alpha}_0}^* + \bar{\phi}_0| = 1 - \delta$. 首先假设 $\varphi_{\vec{\alpha}_0}^* + \bar{\phi}_0 = \delta - 1$, 使得 φ^* 在 $\vec{\alpha}_0$ 处有全局最小值. 假设 φ^* 在格点 $\vec{\alpha}_1 = (i_1, j_1, k_1)$ 处达到最大值. 因为 $\varphi^* \in \dot{A}_{h,\delta}$, 所以 $\bar{\varphi}^* = 0$. 显然有

$$\bar{\phi}_0 \leq \varphi_{\vec{\alpha}_1}^* + \bar{\phi}_0 \leq 1 - \delta. \tag{3.7}$$

因为 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 上光滑, 对于所有 $\psi \in \dot{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 计算 $\mathcal{F}^n$ 沿着 ψ 的方向导数:

$$\begin{aligned}
d_s \mathcal{F}^n(\varphi^* + s\psi)|_{s=0} &= \frac{1}{\tau} \left\langle (-\Delta_{h,(p)})^{-1} \left(\frac{11}{6}(\varphi^* + \bar{\phi}_0) - 3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right), \psi \right\rangle_\Omega \\
&\quad + \langle \ln(1 + \varphi^* + \bar{\phi}_0) - \ln(1 - \varphi^* - \bar{\phi}_0), \psi \rangle_\Omega \\
&\quad - \langle \alpha(3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2}), \psi \rangle_\Omega - \langle \varepsilon^2 \Delta_{h,(p)} \varphi^*, \psi \rangle_\Omega \\
&\quad - \left\langle A\tau^2 \Delta_{h,(p)} \left(\frac{11}{6}\varphi^* - 3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right), \psi \right\rangle.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

选取方向 $\psi \in \dot{\mathbf{M}}_{\text{per}}$ 满足 $\psi_{i,j,k} = \delta_{i,i_0} \delta_{j,j_0} \delta_{k,k_0} - \delta_{i,i_1} \delta_{j,j_1} \delta_{k,k_1}$, 则方向导数 (3.8) 可以表示为

$$\frac{1}{h^3} d_s \mathcal{F}^n(\varphi^* + s\psi) \Big|_{s=0} := \mathcal{G}(\varphi^*)_{\vec{\alpha}_0} - \mathcal{G}(\varphi^*)_{\vec{\alpha}_1}, \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\varphi^*)_{\vec{\alpha}} &:= \frac{1}{\tau} (-\Delta_{h,(p)})^{-1} \left(\frac{11}{6}(\varphi^* + \bar{\phi}_0) - 3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right)_{\vec{\alpha}} \\
&\quad + \ln(1 + \varphi_{\vec{\alpha}_0}^* + \bar{\phi}_0) - \ln(1 - \varphi_{\vec{\alpha}_0}^* - \bar{\phi}_0) - \left(\varepsilon^2 + \frac{11}{6} A\tau^2 \right) \Delta_{h,(p)} \varphi_{\vec{\alpha}}^* \\
&\quad - A\tau^2 \Delta_{h,(p)} \left(-3\phi^n + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2} \right)_{\vec{\alpha}}.
\end{aligned} \tag{3.10}$$

为了简化表示, 令 $\phi^* = \varphi^* + \bar{\phi}_0$. 因为 $\phi_{\vec{\alpha}_0}^* = -1 + \delta$ 且 $\phi_{\vec{\alpha}_1}^* \geq \bar{\phi}_0$, 所以可以得到不等式

$$\ln(1 + \phi_{\vec{\alpha}_0}^*) - \ln(1 - \phi_{\vec{\alpha}_0}^*) - \ln(1 + \phi_{\vec{\alpha}_1}^*) + \ln(1 - \phi_{\vec{\alpha}_1}^*) \leq \ln \frac{\delta}{2 - \delta} - \ln \frac{1 + \bar{\phi}_0}{1 - \bar{\phi}_0}, \tag{3.11}$$

$$-1 + \delta = \phi_{\alpha_0}^* \leq \phi_{i,j,k}^* \leq \phi_{\alpha_1}^*, \quad \forall (i, j, k). \quad (3.12)$$

由最值点的性质可得

$$\Delta_{h,(2)}\phi_{\alpha_0}^* \geq 0, \quad \Delta_{h,(2)}\phi_{\alpha_1}^* \leq 0, \quad (3.13)$$

$$\Delta_{h,(4)}\phi_{\alpha_0}^* \geq -\frac{4}{h^2}, \quad \Delta_{h,(4)}\phi_{\alpha_1}^* \leq \frac{4}{h^2}. \quad (3.14)$$

记 $\check{\phi}^{n+1} := 3\phi^n - \frac{3}{2}\phi^{n-1} + \frac{1}{3}\phi^{n-2}$. 根据先验假设 (3.1), 有

$$-\Delta_{h,(p)}\check{\phi}_{\alpha_0}^{n+1} \geq -\frac{232M}{3h^2}, \quad -\Delta_{h,(p)}\check{\phi}_{\alpha_1}^{n+1} \leq \frac{232M}{3h^2}, \quad (3.15)$$

$$-14M \leq \check{\phi}_{\alpha_0}^{n+1} - \check{\phi}_{\alpha_1}^{n+1} \leq 14M, \quad \|\check{\phi}^{n+1}\|_\infty \leq \frac{29}{6}M. \quad (3.16)$$

根据引理 2.1 和 2.2 可得

$$-\hat{C}_0^{(p)} \leq (-\Delta_{h,(p)})^{-1} \left(\frac{11}{6}\phi^* - \check{\phi}^{n+1} \right)_{\alpha_0} - (-\Delta_{h,(p)})^{-1} \left(\frac{11}{6}\phi^* - \check{\phi}^{n+1} \right)_{\alpha_1} \leq \hat{C}_0^{(p)}, \quad (3.17)$$

其中 $\hat{C}_0^{(p)}$ 为引理 2.1 和 2.2 中的上界. 因此, 结合 (3.11)–(3.17) 和 (3.9), 有

$$\frac{1}{h^3} d_s \mathcal{F}^n(\varphi^* + s\psi) \Big|_{s=0} \leq \ln \frac{\delta}{2-\delta} - \ln \frac{1+\bar{\phi}_0}{1-\bar{\phi}_0} + 14M\alpha + \hat{C}_0^{(p)}\tau^{-1} + \frac{48\varepsilon^2 + 48A\tau^2 + 464MA\tau^2}{3h^2}. \quad (3.18)$$

对于固定的 τ , $\hat{C}_1 = 14M\alpha + \hat{C}_0^{(p)}\tau^{-1} + \frac{48\varepsilon^2 + 48A\tau^2 + 464MA\tau^2}{3h^2}$ 是常数. 所以当 τ 给定时, 可以取足够小的 $\delta \in (0, \frac{1}{2})$, 使其满足

$$\ln \frac{\delta}{2-\delta} - \ln \frac{1+\bar{\phi}_0}{1-\bar{\phi}_0} + \hat{C}_1 \leq 0. \quad (3.19)$$

因此, 当 δ 满足 (3.19) 时, 有

$$\frac{1}{h^3} d_s \mathcal{F}^n(\varphi^* + s\psi) \Big|_{s=0} < 0. \quad (3.20)$$

方向导数在 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 内部为负, 这显然与 $\mathcal{F}^n$ 在 φ^* 处取到最小值矛盾.

同理, 类似上面的证明, 可以证明当 δ 足够小时, $\mathcal{F}^n$ 的最小值点不可能在 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 的边界点 φ^* 处取到, 其中 φ^* 满足 $\varphi^* + \bar{\phi}_0 = 1 - \delta$.

综上, $\mathcal{F}^n$ 的全局最小值点只能够在 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 的内部取到, 也就是有

$$\varphi \in (\mathring{A}_{h,\delta})^\circ \subset (\mathring{A}_h)^\circ. \quad (3.21)$$

因此, 存在一个 $\delta_0 \in (0, \frac{1}{2})$, 使得对于任意 $\delta \in (0, \delta_0]$, $\mathcal{F}^n$ 在 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 的最小值存在, 且最小值点 $\phi^* \in \mathring{A}_{h,\delta}$ 是 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 的内点.

步骤 4 参见文献 [11], 令 φ^* 是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\mathring{A}_{h,\delta_0}$ 上的最小值点, 其中 δ_0 是上一步给定的参数. 下面证明 ϕ^* 一定是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\mathring{A}_h$ 上的唯一最小值点. 换言之, $\phi^* = \varphi^* + \bar{\phi}_0$ 是 $\mathcal{T}^n$ 在 A_h 上的唯一最小值点.

首先, 因为 $\mathcal{F}^n$ 是严格凸函数, 所以对于任意 $\delta \in (0, \delta_0]$, 当 φ^* 是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\mathring{A}_{h,\delta}$ 上的最小值点时, φ^* 是唯一的. 因为 $\mathcal{T}^n$ 也是严格凸函数, 这等价于 $\phi^* = \varphi^* + \bar{\phi}_0$ 是 $\mathcal{T}^n$ 在 $A_{h,\delta}$ 上的唯一最小值点.

接下来, 对于任意 $\delta \in (0, \delta_0]$, 用 φ^δ 表示 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 上的唯一最小值点. 因为 $\dot{A}_{h,\delta_0} \subset \dot{A}_{h,\delta}$, 所以有 $\mathcal{F}^n(\varphi^\delta) \leq \mathcal{F}^n(\varphi^*)$. 下面考虑两种情形.

情形 1 对于所有 $\delta \in (0, \delta_0]$, 有 $\mathcal{F}^n(\varphi^\delta) = \mathcal{F}^n(\varphi^*)$. 此时, φ^* 是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\delta}$ 上的最小值点. 由于 φ^* 的唯一性, 对于任意 $\delta \in (0, \delta_0]$, 有 $\varphi^\delta = \varphi^*$. 因此 φ^* 是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_h$ 上的最小值点.

情形 2 存在 $\tilde{\delta} \in (0, \delta_0]$, 使得 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\tilde{\delta}}$ 上的最小值点, 记作 φ^{**} , 使得 $\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) < \mathcal{F}^n(\varphi^*)$. 此时, 根据步骤 3, 因为 φ^{**} 不可能在边界取到, 所以能够找到一个常数 $\delta^{**} > \tilde{\delta}$, 使得 $\|\varphi^{**} + \bar{\phi}_0\|_\infty = 1 - \delta^{**}$. 另外, 因为 $\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) < \mathcal{F}^n(\varphi^*)$, 所以有 $\delta^{**} < \delta_0$. 下面用 φ^q 表示 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\delta^{**}}$ 上的最小值点. 由步骤 3 可知 $\|\varphi^q + \bar{\phi}_0\|_\infty < 1 - \delta^{**}$, 因此 $\varphi^q \neq \varphi^{**}$. 一方面, 因为 $\varphi^{**} \in \dot{A}_{h,\delta^{**}}$, 所以 $\mathcal{F}^n(\varphi^q) \leq \mathcal{F}^n(\varphi^{**})$. 另一方面, 因为 $\dot{A}_{h,\delta^{**}} \subset \dot{A}_{h,\tilde{\delta}}$, 所以 $\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) \leq \mathcal{F}^n(\varphi^q)$. 因此 $\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) = \mathcal{F}^n(\varphi^q)$, 所以 φ^q 也是 $\mathcal{F}^n$ 在 $\dot{A}_{h,\tilde{\delta}}$ 上的最小值点. 由于 $\dot{A}_{h,\tilde{\delta}}$ 最小值点的唯一性, 所以 $\varphi^q = \varphi^{**}$, 这导致矛盾. 所以情形 2 不存在. 因此, 唯一性证毕.

综上, 定理 3.1 证毕. $\square$

4 能量稳定性证明

离散能量定义为

$$E_h(\phi) = \langle 1 + \phi, \ln(1 + \phi) \rangle_\Omega + \langle 1 - \phi, \ln(1 - \phi) \rangle_\Omega - \frac{\alpha}{2} \|\phi\|_2^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\nabla_{h,(p)} \phi\|_2^2. \quad (4.1)$$

对于能量稳定性有如下定理:

定理 4.1 当 $A \geq \frac{27\alpha^4}{32}\varepsilon^{-2}$ 且 $n \geq 2$ 时, (2.46) 和 (2.47) 的数值解满足

$$\check{E}_h(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \leq \check{E}_h(\phi^n, \phi^{n-1}, \phi^{n-2}), \quad (4.2)$$

并且对于任意 $n \geq 2$, 都有

$$\begin{aligned} \check{E}_h(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) &= E_h(\phi^{n+1}) + \frac{3}{4\tau} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,(p),h}^2 + \frac{1}{6\tau} \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_{-1,(p),h}^2 \\ &\quad + \frac{3A\tau^2}{4} \|\nabla_{h,(p)}(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 + \frac{A\tau^2}{6} \|\nabla_{h,(p)}(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2 \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 + \frac{\alpha}{2} \|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|_2^2. \end{aligned} \quad (4.3)$$

证明 为简便起见, 在下面的能量稳定性证明中, 省略掉 $\nabla_{h,(p)}$ 、 $\Delta_{h,(p)}$ 和 $\|\cdot\|_{-1,(p),h}$ 中的 (p) , 统一记为 ∇_h 、 Δ_h 和 $\|\cdot\|_{-1,h}$. 为了证明能量稳定性, 取 (2.46) 和 $(-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n)$ 的离散内积. 对于时间离散项, 有如下估计:

$$\begin{aligned} &\left\langle \frac{11}{6} \phi^{n+1} - 3\phi^n + \frac{3}{2} \phi^{n-1} - \frac{1}{3} \phi^{n-2}, (-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n) \right\rangle_\Omega \\ &= \frac{2}{3} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 + \frac{7}{6} \langle \phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}, \phi^{n+1} - \phi^n \rangle_{\mathcal{L}_h^{-1}} + \frac{1}{3} \langle \phi^{n-1} - \phi^{n-2}, \phi^{n+1} - \phi^n \rangle_{\mathcal{L}_h^{-1}} \\ &\geq \frac{13}{12} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 - \frac{7}{12} \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_{-1,h}^2 - \frac{1}{6} \|\phi^{n-1} - \phi^{n-2}\|_{-1,h}^2 \\ &\quad + \frac{7}{12} \|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|_{-1,h}^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

而对于正则项 $A\tau^3 \Delta_h D_3 \phi^{n+1}$, 类似时间项的分解和估计, 有

$$\langle \tau \Delta_h^2 D_3 \phi^{n+1}, (-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n) \rangle_\Omega$$

$$\begin{aligned}
 &\geq \frac{13}{12} \|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 - \frac{7}{12} \|\nabla_h(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2 - \frac{1}{6} \|\nabla_h(\phi^{n-1} - \phi^{n-2})\|_2^2 \\
 &\quad + \frac{7}{12} \|\nabla_h(\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1})\|_2^2 \\
 &= \frac{1}{3} \|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 + \frac{7}{12} \|\nabla_h(\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1})\|_2^2 \\
 &\quad + \frac{3}{4} (\|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 - \|\nabla_h(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2) \\
 &\quad + \frac{1}{6} (\|\nabla_h(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2 - \|\nabla_h(\phi^{n-1} - \phi^{n-2})\|_2^2). \tag{4.5}
 \end{aligned}$$

对于非线性部分, 利用函数 $\ln(1+x)$ 和 $\ln(1-x)$ 的单调性, 有

$$\begin{aligned}
 &\langle -\Delta_h(\ln(1 + \phi^{n+1})), (-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n) \rangle_\Omega \\
 &= \langle \ln(1 + \phi^{n+1}), \phi^{n+1} - \phi^n \rangle_\Omega \\
 &\geq \langle \ln(1 + \phi^{n+1}), 1 + \phi^{n+1} \rangle_\Omega - \langle \ln(1 + \phi^n), 1 + \phi^n \rangle_\Omega, \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\langle \Delta_h(\ln(1 + \phi^{n+1})), (-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n) \rangle_\Omega \\
 &= -\langle \ln(1 - \phi^{n+1}), \phi^{n+1} - \phi^n \rangle_\Omega \\
 &\geq -\langle \ln(1 - \phi^{n+1}), 1 - \phi^{n+1} \rangle_\Omega + \langle \ln(1 - \phi^n), 1 - \phi^n \rangle_\Omega. \tag{4.7}
 \end{aligned}$$

对于 3 阶外推项, 有如下分解:

$$-3\phi^n + 3\phi^{n-1} - \phi^{n-2} = -\phi^{n+1} + (\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}) - (\phi^n - 2\phi^{n-1} + \phi^{n-2}). \tag{4.8}$$

因而

$$\begin{aligned}
 &\langle \Delta_h(3\phi^n - 3\phi^{n-1} + \phi^{n-2}), (-\Delta_h)^{-1}(\phi^{n+1} - \phi^n) \rangle_\Omega \\
 &= \langle \phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}, \phi^{n+1} - \phi^n \rangle - \langle \phi^n - 2\phi^{n-1} + \phi^{n-2}, \phi^{n+1} - \phi^n \rangle - \langle \phi^{n+1}, \phi^{n+1} - \phi^n \rangle \\
 &\geq -\frac{1}{2} (\|\phi^{n+1}\|_2^2 - \|\phi^n\|_2^2 + \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2) + \frac{1}{2} (\|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 - \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_2^2 \\
 &\quad + \|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|_2^2) - \frac{1}{2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 - \frac{1}{2} \|\phi^n - 2\phi^{n-1} + \phi^{n-2}\|_2^2 \\
 &= -\frac{1}{2} (\|\phi^{n+1}\|_2^2 - \|\phi^n\|_2^2 + \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 + \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_2^2) \\
 &\quad + \frac{1}{2} (\|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|_2^2 - \|\phi^n - 2\phi^{n-1} + \phi^{n-2}\|_2^2). \tag{4.9}
 \end{aligned}$$

结合估计 (4.4)–(4.9), 有如下不等式成立:

$$\begin{aligned}
 0 &\geq E_h(\phi^{n+1}) - E_h(\phi^n) + \frac{\varepsilon^2}{2} (\|\phi^{n+1} - 2\phi^n + \phi^{n-1}\|_2^2 - \|\phi^n - 2\phi^{n-1} + \phi^{n-2}\|_2^2) \\
 &\quad + \frac{1}{\tau} \left(\frac{3}{4} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 - \frac{7}{12} \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_{-1,h}^2 - \frac{1}{6} \|\phi^{n-1} - \phi^{n-2}\|_{-1,h}^2 \right) \\
 &\quad - \frac{\alpha}{2} (\|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 + \|\phi^n - \phi^{n-1}\|_2^2) + \left(\frac{\varepsilon^2}{2} + \frac{A\tau^2}{3} \right) \|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 \\
 &\quad + \frac{1}{3\tau} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 + \frac{3A\tau^2}{4} (\|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 - \|\nabla_h(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2) \\
 &\quad + \frac{A\tau^2}{6} (\|\nabla_h(\phi^n - \phi^{n-1})\|_2^2 - \|\nabla_h(\phi^{n-1} - \phi^{n-2})\|_2^2). \tag{4.10}
 \end{aligned}$$

当 $A \geq \frac{27\alpha^4}{32}\varepsilon^{-2}$ 时, 有 $\frac{\varepsilon^2}{2} + \frac{A\tau^2}{3} \geq 2\sqrt{\frac{9\alpha^4}{64}}\tau = \frac{3\alpha^2}{4}\tau$. 因此得到

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\varepsilon^2}{2} + \frac{A\tau^2}{3}\right) \|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 - \frac{\alpha}{2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 + \frac{1}{3\tau} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 \\ & \geq \frac{3\alpha^2}{4}\tau \|\nabla_h(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_2^2 + \frac{1}{3\tau} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{-1,h}^2 - \frac{\alpha}{2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2 \\ & \geq \frac{\alpha}{2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_2^2. \end{aligned} \quad (4.11)$$

定理证毕. $\square$

推论 4.1 当 $A \geq \frac{27\alpha^4}{32}\varepsilon^{-2}$ 且 $n \geq 2$ 时, (2.46) 和 (2.47) 的数值解满足

$$\|\nabla_{h,(p)}\phi^{n+1}\|_2 \leq \hat{C}_3, \quad (4.12)$$

其中 $\hat{C}_3$ 是只依赖于 ε 、 α 、 $|\Omega|$ 、 ϕ^0 、 ϕ^1 和 ϕ^2 的常数.

5 收敛性证明

本节主要给出空间 2 阶格式的定理证明. 4 阶格式的收敛性的定理证明与 2 阶格式类似, 这里不再重复过程, 只在定理 5.4 中给出结论. 在下面的记号中, ∇_h 和 Δ_h 等符号均表示 2 阶空间差分对应的算子.

设 Φ 是方程 (1.3) 和 (1.4) 的解. 假设真解 Φ 具有足够的光滑性:

$$\Phi(x, t) \in H^4(0, T; H^7(\Omega)). \quad (5.1)$$

假设真解 Φ 和 ± 1 有严格分离性, 即存在 $\delta > 0$, 使得

$$\|\Phi\|_\infty \leq 1 - 4\delta. \quad (5.2)$$

参见文献 [15] 中的内容, 定义 $\Phi_N := \mathcal{P}_N \Phi$ 表示精确解 Φ 在空间上的 Fourier 投影. 对上述 Fourier 投影, 当 $\Phi \in L^\infty(0, T; H^\ell(\Omega))$ 时, 有估计

$$\|\Phi_N - \Phi\|_{L^\infty(0, T; H^k)} \leq Ch^{\ell-k} \|\Phi\|_{L^\infty(0, T; H^\ell)}, \quad \forall 0 \leq k \leq \ell. \quad (5.3)$$

由 (5.3) 可以得到, 当 h 足够小时, Fourier 投影满足

$$\|\Phi_N\|_\infty \leq 1 - 2\delta. \quad (5.4)$$

接着定义空间 Fourier 投影 Φ_N 在网格点上的值 $\Phi_h^n := \mathcal{P}_h \Phi_N(\cdot, n\tau)$ (后续为简单起见, 记 Φ_h^n 为 Φ^n). 对于这样的 Fourier 投影, 质量守恒性质仍然成立:

$$\bar{\Phi}^n = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Phi(\cdot, n\tau) dx = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Phi(\cdot, (n-1)\tau) dx = \bar{\Phi}^{n-1}, \quad \forall n \geq 1. \quad (5.5)$$

此外, (2.46) 和 (2.47) 给出的数值解也是质量守恒的, 因而有如下等式:

$$\langle \phi^n, 1 \rangle_\Omega = \cdots = \langle \phi^1, 1 \rangle_\Omega = \int_{\Omega} \Phi_N(\cdot, 0) dx = \int_{\Omega} \Phi(\cdot, 0) dx = \cdots = \int_{\Omega} \Phi(\cdot, n\tau) dx. \quad (5.6)$$

定义误差 $e^n := \Phi^n - \phi^n$. 由以上的质量守恒性质, 有 $\langle e^n, 1 \rangle_\Omega = 0$, 因此, $\|e^n\|_{-1,(2),h}$ 是良定义的. 将定理的证明分为下面 3 个小节.

5.1 误差粗估

本小节的主要定理如下:

定理 5.1 给定初值 $\Phi^0 \in H^7(\Omega)$, 假设方程 (1.3) 和 (1.4) 的解满足 $\Phi \in H^4(0, T; H^7(\Omega))$. 对于任意正整数 n , 使得 $t_n \in T$, 当时间步长 τ 足够小时, 误差有下面的收敛性估计:

$$\|e^n\|_{-1,(2),h} + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^2), \quad (5.7)$$

其中 $C > 0$ 是与 τ 、 h 和 N 无关的常数.

证明 将 Φ^{n+1} 、 Φ^n 、 Φ^{n-1} 和 Φ^{n-2} 代入方程 (2.46), 有下面的误差估计:

$$\begin{aligned} \frac{\frac{11}{6}\Phi^{n+1} - 3\Phi^n + \frac{3}{2}\Phi^{n-1} - \frac{1}{3}\Phi^{n-2}}{\tau} &= \Delta_h(\ln(1 + \Phi^{n+1}) - \ln(1 - \Phi^{n+1}) - \alpha(3\Phi^n - 3\Phi^{n-1} + \Phi^{n-2}) \\ &\quad - \varepsilon^2 \Delta_h \Phi^{n+1} - A\tau^3 \Delta_h D_3 \Phi^{n+1}) + R^{n+1}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

其中 $\|R^{n+1}\|_{-1,h} \leq C(\tau^3 + h^2)$. 由于 ϕ^n 是数值格式 (2.46) 的解, 所以将 (5.8) 减去 (2.46) 得到

$$\begin{aligned} \frac{\frac{11}{6}e^{n+1} - 3e^n + \frac{3}{2}e^{n-1} - \frac{1}{3}e^{n-2}}{\tau} &= \Delta_h(\ln(1 + \Phi^{n+1}) - \ln(1 + \phi^{n+1}) - \ln(1 - \Phi^{n+1}) + \ln(1 - \phi^{n+1}) \\ &\quad - \alpha(3e^n - 3e_h^{n-1} + e^{n-2}) - \varepsilon^2 \Delta_h e^{n+1} - A\tau^3 \Delta_h D_3 e^{n+1}) + R^{n+1}, \quad \forall n \geq 2. \end{aligned} \quad (5.9)$$

为后续证明清晰, 将等式 (5.9) 中 e^n 、 Φ^n 和 ϕ^n 中的上标 n 全部由正整数 $j-1$ ($j \geq 3$) 代替. 运用 (2.41), $\forall \ell \geq j$, 等式 (5.9) 两边同乘以 $\tau\theta_{\ell-j}$, 可得

$$\begin{aligned} \theta_{\ell-j} \left(\frac{11}{6}e^j - 3e^{j-1} + \frac{3}{2}e^{j-2} - \frac{1}{3}e^{j-3} \right) &= \tau\theta_{\ell-j}(\Delta_h(\ln(1 + \Phi^j) - \ln(1 + \phi^j) - (\ln(1 - \Phi^j) - \ln(1 - \phi^j)) \\ &\quad - \alpha(3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3}) - \varepsilon^2 \Delta_h e^j - A\tau^3 \Delta_h D_3 e^j)) + \tau\theta_{\ell-j}R^j, \end{aligned} \quad (5.10)$$

并将 j 从 3 到 ℓ 求和, 沿用等式 (2.41) 中的记号, 可以得到

$$\tau\partial_\tau e^\ell + e_I^{(\ell)} = \tau \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j}(\mathcal{J}^j + R^j), \quad (5.11)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^j &= \Delta_h(\ln(1 + \Phi^j) - \ln(1 + \phi^j) - (\ln(1 - \Phi^j) - \ln(1 - \phi^j)) \\ &\quad - \alpha(3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3}) - \varepsilon^2 \Delta_h e^j - A\tau^3 \Delta_h D_3 e^j). \end{aligned} \quad (5.12)$$

将等式 (5.10) 和 $2(-\Delta_h)^{-1}e^\ell$ 作离散内积, 得到

$$2\langle \nabla_\tau e^\ell, (-\Delta_h)^{-1}e^\ell \rangle_\Omega + 2\langle e_I^{(\ell)}, (-\Delta_h)^{-1}e^\ell \rangle_\Omega = 2\tau \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j}(\mathcal{J}^j + R^j), (-\Delta_h)^{-1}e^\ell \rangle_\Omega. \quad (5.13)$$

上式两边同时对 ℓ 从 3 到 n 求和, 得到

$$\begin{aligned} 2 \sum_{\ell=3}^n \langle e^\ell - e^{\ell-1}, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega &= -2 \sum_{\ell=3}^n \langle e_I^{(\ell)}, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega + 2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \mathcal{J}^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega \\ &\quad + 2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} R^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (5.14)$$

对上式左边使用极化恒等式, 可得

$$2 \sum_{\ell=3}^n \langle e^\ell - e^{\ell-1}, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega \geq \|e^n\|_{-1, (2), h}^2 - \|e^2\|_{-1, (2), h}^2. \quad (5.15)$$

为了后续分析指代方便, 用 I_1 、 I_2 、 I_3 、 I_4 和 I_5 来表示 $\sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \mathcal{J}^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega$ 中的各项:

$$2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \mathcal{J}^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega =: 2\tau(I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5), \quad (5.16)$$

其中,

$$I_1 = \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (\ln(1 + \Phi^j) - \ln(1 + \phi^j)), (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.17)$$

$$I_2 = - \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (\ln(1 - \Phi^j) - \ln(1 - \phi^j)), (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.18)$$

$$I_3 = -\alpha \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3}), (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.19)$$

$$I_4 = -\varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h^2 e^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.20)$$

$$I_5 = -A\tau^3 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h^2 D_3 e^j, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega. \quad (5.21)$$

对于 I_1 , 由于函数 $f(\phi) = \ln(1 + \phi)$ 在 $(-1, 1)$ 上的导数满足 $f'(\phi) = \frac{1}{1+\phi} \geq 0$, 所以由 Lagrange 中值定理可知, 存在 $\xi \in (-1, 1)$, 使得

$$I_1 = - \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \left(\frac{1}{1+\xi} (\Phi^j - \phi^j) \right), e^\ell \right\rangle_\Omega. \quad (5.22)$$

由文献 [51, 定理 3.1] 的证明, 当 $\beta = \beta(x) \leq 0$ 时, DOC 核 θ_j 有不等式 $\sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \langle \beta v^j, v^\ell \rangle_\Omega \leq 0$. 因此

$$I_1 = \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \left(-\frac{1}{1+\xi} e^j \right), e^\ell \right\rangle_\Omega \leq 0. \quad (5.23)$$

同理, 对于 I_2 , 函数 $f(\phi) = \ln(1 - \phi)$ 在 $(-1, 1)$ 上导数 $f'(\phi) = -\frac{1}{1-\phi} \leq 0$, 由 Lagrange 中值定理可知, 存在 $\xi_1 \in (-1, 1)$, 使得

$$I_2 = - \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \left(\frac{1}{1-\xi_1} (\Phi^j - \phi^j) \right), e^\ell \right\rangle_\Omega = \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \frac{-1}{1-\xi_1} e^j, e^\ell \right\rangle_\Omega \leq 0. \quad (5.24)$$

对于 I_3 , 有

$$\begin{aligned}
 I_3 &\leq \alpha \left(\eta_0 \sum_{\ell=3}^n \|3e^{\ell-1} - 3e^{\ell-2} + e^{\ell-3}\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_0} \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 \right) \\
 &\leq \alpha \left(49\eta_0 \sum_{\ell=3}^n \|e^{\ell-1}\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_0} \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 \right. \\
 &\quad \left. + 49\eta_0 (3\|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + 2\|e^1\|_{-1,(2),h}^2 + \|e^0\|_{-1,(2),h}^2) \right), \tag{5.25}
 \end{aligned}$$

其中 η_0 和 $\tilde{C}_1$ 都是常数. 上述证明中第一个不等式使用了引理 2.4. 常数 $\tilde{C}_1$ 是引理 2.4 中的固定常数, 而 η_0 的数值将在接下来的证明中确定. 对于 I_4 , 利用引理 2.3, 有

$$I_4 = \varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h e^j, e^\ell \rangle_\Omega \leq -\varepsilon^2 C_1 \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2, \tag{5.26}$$

其中 C_1 仅与矩阵 Θ_3 的最小特征值 $\lambda_{\min}$ 有关. 类似 (5.25) 的证明, 对于 I_5 , 有

$$\begin{aligned}
 I_5 &= -A\tau^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \nabla_h \left(\frac{11}{6} e^j - 3e^{j-1} + \frac{3}{2} e^{j-2} - \frac{1}{3} e^{j-3} \right), \nabla_h e^\ell \right\rangle_\Omega \\
 &\leq A\tau^2 \left(\eta_1 \sum_{\ell=3}^n \|\tau \nabla_h D_3 e^\ell\|^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 \right) \\
 &\leq A\tau^2 \left(36\eta_1 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=0}^3 \|\nabla_h e^{\ell-j}\|^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 \right) \\
 &\leq A\tau^2 \left(\left(144\eta_1 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \right) \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 + 36\eta_1 (3\|\nabla_h e^2\|^2 + 2\|\nabla_h e^1\|^2 + \|\nabla_h e^0\|^2) \right), \tag{5.27}
 \end{aligned}$$

其中, η_1 是后续证明中确定的常数, 常数 $\tilde{C}_1$ 是引理 2.4 中的固定常数. 对于误差项 $e_I^{(\ell)}$, 有

$$\begin{aligned}
 -2 \sum_{\ell=3}^n \langle e_I^{(\ell)}, (-\Delta_h)^{-1} e^\ell \rangle_\Omega &\leq \left(\eta_2 \sum_{\ell=3}^n \|e_I^{(\ell)}\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{1}{\eta_2} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_{-1,(2),h}^2 \right) \\
 &= \eta_2 \sum_{\ell=3}^n \left\| \sum_{k=1}^2 \nabla_\tau e^k \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} b_{j-k} \right\|^2 + \frac{1}{\eta_2} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_{-1,(2),h}^2 \\
 &\leq C_2 \eta_2 (\|\nabla_\tau e^1\|_{-1,(2),h}^2 + \|\nabla_\tau e^2\|_{-1,(2),h}^2) + \frac{1}{\eta_2} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_{-1,(2),h}^2 \\
 &\leq C_2 \eta_2 (2\|e^1\|_{-1,(2),h}^2 + \|e^2\|_{-1,(2),h}^2) + \frac{1}{\eta_2} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_{-1,(2),h}^2, \tag{5.28}
 \end{aligned}$$

其中倒数第二个不等式利用当 $j \geq 4$ 时 $b_j = 0$ 的性质. 由 (2.40) 可得

$$\begin{aligned}
 C_2 &= 2 \left(\sum_{\ell=3}^n \left| \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} b_{j-1} \right|^2 + \sum_{\ell=3}^n \left| \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} b_{j-2} \right|^2 \right) \\
 &= 2 \left(\sum_{\ell=3}^n \|\delta_{\ell 1} - \theta_{\ell-2} b_1 + \theta_{\ell-1} b_0\|^2 + \sum_{\ell=3}^n \|\delta_{\ell 2} - \theta_{\ell-2} b_0\|^2 \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \left(\sum_{\ell=3}^n |-\theta_{\ell-2}b_1 + \theta_{\ell-1}b_0|^2 + b_0^2 \sum_{\ell=3}^n \|\theta_{\ell-2}\|^2 \right) \\
&\leq 40 \sum_{\ell=2}^n |\theta_{\ell-1}|^2 \\
&\leq 60.
\end{aligned} \tag{5.29}$$

最后一个不等式运用了引理 2.3. 对于截断误差项 R^j , 有

$$2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} R^j, (-\Delta_h)^{-1} e^{\ell} \rangle_{\Omega} \leq \tau \left(\eta_3 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_3} \sum_{\ell=3}^n \|e^{\ell}\|_{-1,(2),h}^2 \right), \tag{5.30}$$

其中, η_3 是后续证明中确定的常数, $\tilde{C}_1$ 是由引理 2.4 确定的常数. 将 (5.15) 和 (5.22)–(5.30) 代入 (5.14), 可得

$$\begin{aligned}
&\|e^n\|_{-1,(2),h}^2 - \|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + 2\varepsilon^2 \tau C_1 \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 \\
&\leq \tau \left(\eta_3 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_3} \sum_{\ell=3}^n \|e^{\ell}\|_{-1,(2),h}^2 \right) + C_2 \eta_2 (2\|e^1\|_{-1,(2),h}^2 + \|e^2\|_{-1,(2),h}^2) \\
&\quad + 2\alpha\tau \left(49\eta_0 \sum_{\ell=3}^n \|e^{\ell-1}\|_{-1,(2),h}^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_0} \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 + 49\eta_0 (3\|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + 2\|e^1\|_{-1,(2),h}^2) \right) \\
&\quad + 2A\tau^3 \left(\left(144\eta_1 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \right) \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 + 36\eta_1 (3\|\nabla_h e^2\|^2 + 2\|\nabla_h e^1\|^2) \right) + \frac{1}{\eta_2} \sum_{\ell=3}^n \|e^{\ell}\|_{-1,(2),h}^2 \\
&= \tau\eta_3 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_{-1,(2),h}^2 + \left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3} + 49\eta_0\tau + \frac{1}{\eta_2} \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^{\ell}\|_{-1,(2),h}^2 \\
&\quad + \left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3} + \frac{1}{\eta_2} \right) \|e^n\|_{-1,(2),h}^2 + \left(\frac{2\alpha\tau\tilde{C}_1}{\eta_0} + 2A\tau^3 \left(144\eta_1 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \right) \right) \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 + \bar{C}_1,
\end{aligned} \tag{5.31}$$

其中常数 $\bar{C}_1$ 满足

$$\bar{C}_1 = (294\alpha\tau\eta_0 + 2C_2\eta_2)(3\|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + 2\|e^1\|_{-1,(2),h}^2) + 72A\tau^3\eta_1(3\|\nabla_h e^2\|^2 + 2\|\nabla_h e^1\|^2). \tag{5.32}$$

合并同类项可得

$$\begin{aligned}
&\left(1 - \frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3} - \frac{1}{\eta_2} \right) \|e^n\|_{-1,(2),h}^2 + 2 \left(\varepsilon^2 \tau C_1 - \frac{\alpha\tau\tilde{C}_1}{\eta_0} - A\tau^3 \left(144\eta_1 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_1} \right) \right) \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 \\
&\leq \|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + \tau\eta_3 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_{-1,(2),h}^2 + \left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3} + 49\eta_0\tau + \frac{1}{\eta_2} \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^{\ell}\|_{-1,(2),h}^2 + \bar{C}_1.
\end{aligned} \tag{5.33}$$

选取 $\eta_0 = \frac{3\alpha\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}$ 、 $\eta_1 = \sqrt{\frac{\tilde{C}_1}{144}}$ 、 $\eta_2 = 3$ 和 $\eta_3 = 3\tilde{C}_1$, 当 $\tau \leq \sqrt{\frac{C_1\varepsilon^2}{72A\sqrt{\tilde{C}_1}}}$ 时, 有

$$\|e^n\|_{-1,(2),h}^2 + 2\varepsilon^2 \tau C_1 \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^{\ell}\|^2 \leq 3\|e^2\|_{-1,(2),h}^2 + 3\tau\eta_3 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_{-1,(2),h}^2$$

$$+ 3 \left(\frac{\tilde{C}_1 \tau}{\eta_3} + 49\eta_0 \tau + \frac{1}{\eta_2} \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^\ell\|_{-1,(2),h}^2 + 3\tilde{C}_1. \quad (5.34)$$

结合初始项的误差估计, 并利用 Gronwall 不等式, 可以得到收敛结果

$$\|e^n\|_{-1,(2),h} + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^2), \quad (5.35)$$

其中 $C > 0$ 是与 τ 、 h 和 N 无关的常数. 定理证毕. $\square$

5.2 数值解下一步的严格分离性

本小节的主要定理如下:

定理 5.2 给定初值 $\Phi^0 \in H^7(\Omega)$, 假设方程 (1.3) 和 (1.4) 的解满足 $\Phi \in H^4(0, T; H^7(\Omega))$, 当时间步长 τ 足够小且满足 $c_1 h \leq \tau \leq c_2 h$ 时, 有收敛性估计

$$\|e^n\|_2 \leq C(\tau^{\frac{11}{4}} + h^{\frac{7}{4}}), \quad (5.36)$$

其中 C 、 c_1 和 c_2 是与 τ 、 h 和 N 无关的正常数; 并且存在一个不依赖于 τ 、 h 和 N 的 δ , 使得

$$\|\phi^n\|_\infty \leq 1 - \delta. \quad (5.37)$$

证明 由定理 5.2 的证明可得

$$\|e^n\|_{-1,(2),h} \leq C(\tau^3 + h^2), \quad \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|_2^2 \leq C(\tau^6 + h^4). \quad (5.38)$$

因为 $\tau \geq c_1 h$, 所以

$$\|\nabla_h e^n\|_2 \leq C(\tau^{\frac{5}{2}} + h^{\frac{3}{2}}). \quad (5.39)$$

根据离散的插值不等式可得

$$\|e^n\| \leq \|e^n\|_{-1,(2),h}^{\frac{1}{2}} \|\nabla_h e^n\|_2^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^{\frac{3}{2}} + h^1)(\tau^{\frac{5}{4}} + h^{\frac{3}{4}}) \leq C(\tau^{\frac{11}{4}} + h^{\frac{7}{4}}). \quad (5.40)$$

又因为 $\tau \leq c_2 h$, 且 $h < 1$, 由逆不等式可得

$$\|e^n\|_\infty \leq Ch^{-\frac{3}{2}} \|e^n\|_2 \leq Ch^{-\frac{3}{2}} (\tau^{\frac{11}{4}} + h^{\frac{7}{4}}) \leq C(\tau^{\frac{5}{4}} + h^{\frac{1}{4}}) \leq Ch^{\frac{1}{4}}, \quad (5.41)$$

所以当 $h \rightarrow 0$ 时, $\|e^n\|_\infty \rightarrow 0$. 取 h 足够小, 使得 $\|e^n\|_\infty \leq \delta$, 则

$$\|\phi^n\|_\infty \leq \|\Phi^n - \phi^n\|_\infty + \|\Phi^n\|_\infty = \|e^n\|_\infty + \|\Phi^n\|_\infty \leq 1 - \delta. \quad (5.42)$$

定理证毕. $\square$

注 5.1 类似于定理 5.2 的证明, 在 4 阶格式下, 可以得到

$$\|e^n\|_{-1,(4),h} + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\nabla_h e^\ell\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^4). \quad (5.43)$$

参照本小节的定理, 利用 (5.43), 仍然可以得到在 τ 足够小时, 数值解的严格分离性以及误差的一个粗估计:

$$\|e^n\|_2 \leq C(\tau^{\frac{11}{4}} + h^{\frac{15}{4}}). \quad (5.44)$$

注 5.2 注意到, 网比条件 $c_1 h \leq \tau \leq c_2 h$ 中的 $c_1 h \leq \tau$ 可以通过使用高阶渐近展开的方法 [11, 54, 55] 去掉, 具体的进展参见文献 [48].

5.3 误差细估

定理 5.3 给定初值 $\Phi^0 \in H^7(\Omega)$, 假设方程 (1.3) 和 (1.4) 的解满足 $\Phi \in H^4(0, T; H^7(\Omega))$, 当时间和空间步长 τ 和 h 满足 $c_1 h \leq \tau \leq c_2 h$ 且 τ 充分小时, 数值解有收敛性估计

$$\|e^n\|_2 + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^2), \quad (5.45)$$

其中 C 、 c_1 和 c_2 是与 τ 、 h 和 N 无关的正的常数.

证明 将等式 (5.10) 和 $2e^\ell$ 作离散内积, 再两边同时对 ℓ 从 3 到 n 求和, 得到

$$2 \sum_{\ell=3}^n \langle e^\ell - e^{\ell-1}, e^\ell \rangle_\Omega = -2 \sum_{\ell=3}^n \langle e_I^{(\ell)}, e^\ell \rangle_\Omega + 2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \mathcal{J}^j, e^\ell \rangle_\Omega + 2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} R^j, e^\ell \rangle_\Omega. \quad (5.46)$$

上式右边第二项为

$$2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \mathcal{J}^j, e^\ell \rangle_\Omega =: 2\tau(J_1 + J_2 + J_3 + J_4 + J_5), \quad (5.47)$$

其中,

$$J_1 = \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (\ln(1 + \Phi^j) - \ln(1 + \phi^j)), e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.48)$$

$$J_2 = - \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (\ln(1 - \Phi^j) - \ln(1 - \phi^j)), e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.49)$$

$$J_3 = -\alpha \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h (3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3}), e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.50)$$

$$J_4 = -\varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h^2 e^j, e^\ell \rangle_\Omega, \quad (5.51)$$

$$J_5 = -A\tau^3 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h^2 D_3 e^j, e^\ell \rangle_\Omega. \quad (5.52)$$

对于 J_1 , 函数 $f = \ln(1 + \Phi^n) - \ln(1 + \phi^n) = \frac{1}{1+\xi}(\Phi^j - \phi^j)$ 在 $[-1 + \delta, 1 - \delta]$ 上成立, 且 $\xi \in [-1 + \delta, 1 - \delta]$. 由引理 2.4, 有

$$\begin{aligned} J_1 &= \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \left(\frac{1}{1+\xi} (\Phi^j - \phi^j) \right), \Delta_h e^\ell \right\rangle_\Omega \\ &\leq \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \left\| \frac{1}{1+\xi} \right\|_\infty \|e^j\|_2 \|\Delta_h e^\ell\|_2 \\ &\leq \eta_4 \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_4} \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2. \end{aligned} \quad (5.53)$$

这里及接下来的常数 η_i ($i = 4, \dots, 9$) 将在后面的证明中确定. 同理可得

$$J_2 \leq \eta_5 \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_5} \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2. \quad (5.54)$$

对于 J_3 , 结合引理 2.4 有

$$\begin{aligned} J_3 &\leq \alpha \left(\eta_6 \sum_{\ell=3}^n \|(3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3})\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_6} \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \right) \\ &\leq \alpha \left(49\eta_6 \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_6} \|\Delta_h e^n\|_2^2 + 49\eta_6 (3\|e^2\|_2^2 + 2\|e^1\|_2^2) \right). \end{aligned} \quad (5.55)$$

对于 J_4 , 同理利用引理 2.3 有

$$J_4 = -\varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h^2 e^j, e^\ell \rangle_\Omega = \varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} \Delta_h e^j, \Delta_h e^\ell \rangle_\Omega \leq \varepsilon^2 C_1 \left(\sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \right). \quad (5.56)$$

对于 J_5 , 类似上面的分析, 并运用引理 2.4, 有

$$\begin{aligned} J_5 &= -A\tau^2 \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} \Delta_h \left(\frac{11}{6} e^j - 3e^{j-1} + \frac{3}{2} e^{j-2} - \frac{1}{3} e^{j-3} \right), \Delta_h e^\ell \right\rangle_\Omega \\ &\leq A\tau^2 \left(\eta_7 \sum_{\ell=3}^n \|\tau \Delta_h D_3 e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_7} \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \right) \\ &\leq A\tau^2 \left(\left(\eta_7 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_7} \right) \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 + C_3 \eta_7 (3\|\Delta_h e^2\|_2^2 + 2\|\Delta_h e^1\|_2^2) \right). \end{aligned} \quad (5.57)$$

对于误差项 $e_I^{(\ell)}$, 有

$$\begin{aligned} -2 \sum_{\ell=3}^n \langle e_I^{(\ell)}, e^\ell \rangle_\Omega &\leq \eta_8 \sum_{\ell=3}^n \left\| \sum_{k=1}^2 \nabla_\tau e^k \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} b_{j-k} \right\|^2 + \frac{1}{\eta_8} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2 \\ &\leq C_2 \eta_8 (\|\nabla_\tau e^1\|_2^2 + \|\nabla_\tau e^2\|_2^2) + \frac{1}{\eta_8} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2 \\ &\leq C_2 \eta_8 (\|e^1\|_2^2 + 2\|e^2\|_2^2) + \frac{1}{\eta_8} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2. \end{aligned} \quad (5.58)$$

对于截断误差项 R^j , 结合引理 2.4 有

$$2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \langle \theta_{\ell-j} R^j, e^\ell \rangle_\Omega \leq 2\tau \sum_{\ell=3}^n \sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \|R^j\|_2 \|e^\ell\|_2 \leq \tau \left(\eta_9 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_9} \sum_{\ell=3}^n \|e^\ell\|_2^2 \right). \quad (5.59)$$

将 (5.53)–(5.59) 代入 (5.46), 并利用极化恒等式, 有

$$\begin{aligned} &\left(2\alpha\tau \frac{\tilde{C}_1}{\eta_6} + 2A\tau^3 \left(\eta_7 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_7} \right) + 2\tau\tilde{C}_1 \left(\frac{1}{\eta_4} + \frac{1}{\eta_5} \right) \right) \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \\ &+ \tau\eta_9 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_2^2 + \left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_9} + 98\alpha\tau\eta_6 + \frac{1}{\eta_8} + 2\tau(\eta_4 + \eta_5) \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^\ell\|_2^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{\tilde{C}_1 \tau}{\eta_9} + \frac{1}{\eta_8} + 2\tau(\eta_4 + \eta_5) \right) \|e^n\|_2^2 + \bar{C}_2 \\
& \geq \|e^n\|_2^2 - \|e^2\|_2^2 + \varepsilon^2 \tau C_1 \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2,
\end{aligned} \tag{5.60}$$

其中常数 $\bar{C}_2$ 满足

$$\bar{C}_2 = (98\tau\alpha\eta_6 + C_2\eta_8)(3\|e^2\|_2^2 + 2\|e^1\|_2^2) + 2A\tau^3 C_3 \eta_7 \tau (3\|\Delta_h e^1\|_2^2 + 2\|\Delta_h e^2\|_2^2).$$

合并同类项可得

$$\begin{aligned}
& \left(1 - \frac{\tilde{C}_1 \tau}{\eta_9} - \frac{1}{\eta_8} - 2\tau(\eta_4 + \eta_5) \right) \|e^n\|_2^2 \\
& + \left(\varepsilon^2 \tau C_1 - 2\alpha\tau \frac{\tilde{C}_1}{\eta_6} - 2A\tau^3 \left(\eta_7 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_7} \right) - 2\tau\tilde{C}_1 \left(\frac{1}{\eta_4} + \frac{1}{\eta_5} \right) \right) \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \\
& \leq \|e^2\|_2^2 + \tau\eta_9 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_2^2 + \left(\frac{\tilde{C}_1 \tau}{\eta_9} + 98\alpha\tau\eta_6 + \frac{1}{\eta_8} + 2\tau(\eta_4 + \eta_5) \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^\ell\|_2^2 + \bar{C}_2.
\end{aligned} \tag{5.61}$$

选取

$$\eta_4 = \eta_5 = \frac{16\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}, \quad \eta_6 = \frac{8\alpha\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}, \quad \eta_7 = \sqrt{\tilde{C}_1}, \quad \eta_8 = 2, \quad \eta_9 = \frac{1}{64}\varepsilon^2\tilde{C}_1.$$

当 τ 满足 $\tau \leq \min(\sqrt{\frac{\varepsilon^2 C_1}{8A\sqrt{\tilde{C}_1}}}, \frac{C_1\varepsilon^2}{256\tilde{C}_1})$ 时,

$$\begin{aligned}
\|e^n\|_2^2 + \varepsilon^2 \tau C_1 \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 & \leq 4\|e^2\|_2^2 + 4\tau\eta_9 \sum_{\ell=3}^n \|R^j\|_2^2 + 4\bar{C}_2 \\
& + 4 \left(\frac{\tilde{C}_1 \tau}{\eta_9} + 98\alpha\tau\eta_6 + \frac{1}{\eta_8} + 2\tau(\eta_4 + \eta_5) \right) \sum_{\ell=3}^{n-1} \|e^\ell\|_2^2.
\end{aligned} \tag{5.62}$$

结合初始项的误差估计, 并利用 Gronwall 不等式可以得到收敛结果

$$\|e^n\|_2 + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_h e^\ell\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^2), \tag{5.63}$$

其中 $C > 0$ 是与 τ 、 h 和 N 无关的常数. 定理证毕. $\square$

注 5.3 仿照上面的证明方法, 对于 4 阶格式, 也可以得到相应的结论. 感兴趣的读者可参见文献 [48].

定理 5.4 给定初值 $\Phi^0 \in H^7(\Omega)$, 假设方程 (1.3) 和 (1.4) 的解满足 $\Phi \in H^4(0, T; H^7(\Omega))$, 对于任意正整数 n , 使得 $t_n \in T$, 当时间和空间步长 τ 和 h 满足 $c_1 h \leq \tau \leq c_2 h$, 且 τ 充分小时, 对于 4 阶格式, 数值解有收敛性估计

$$\|e^n\|_2 + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^n \|\Delta_{h,(4)} e^\ell\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(\tau^3 + h^4), \tag{5.64}$$

其中 C 、 c_1 和 c_2 是与 τ 、 h 和 N 无关的正的常数.

6 数值算例

6.1 收敛阶测试

本节展示上述提及的 3 阶精度的 BDF 格式的数值算例. 取计算区间是 $\Omega = (0, 1)^2$, 设置精确的相位变量为

$$\phi(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(t). \quad (6.1)$$

为了使 ϕ 满足原始的方程 (1.3) 和 (1.4), 我们增加一个时间依赖的修正项. 接着, 用上述提出的 3 阶 BDF 格式求解 (2.46) 和 (2.47). 时间网格取为 N_T , 为了证明时间方向的精确性, 取与时间网格数相关的空间网格 N , 并设置最终时间 $T = 1$. 扩散界面系数 $\varepsilon = 0.5$, 参数 $\alpha = 3$, 正则化参数 $A = 1$. 因为预期的数值精确度 $e = C(\tau^3 + h^2)$ 满足

$$\ln |e| = \ln(CT^3) - k \ln N_T,$$

因此本节的图都分别以 $\ln N_T$ 和 $\ln |e|$ 为横坐标和纵坐标来表现时间方向的收敛阶.

6.1.1 空间 2 阶精度

对于空间网格二阶精度格式, 取时间方向步长为 $\tau = \frac{1}{(k+1)^2}$, 空间网格数为 $h = \frac{1}{(k+1)^3}$ ($k = 1, 2, \dots, 7$). 表 1 是验证时间精度的结果. 接着, 固定时间步长 $\tau = \frac{1}{1000}$, 空间步长取 $h = \frac{1}{2^{k+2}}$ ($k = 1, 2, \dots, 7$). 表 2 是验证空间精度的结果.

表 1 空间 2 阶、时间 3 阶格式测试时间收敛阶结果

时间网格数	ℓ^2 时间收敛阶	$\ e^n\ _2$	ℓ^∞ 时间收敛阶	$\ e^n\ _\infty$
4		1.968E-1		1.968E-1
9	2.941	1.812E-2	2.941	1.812E-2
16	3.018	3.193E-3	3.018	3.192E-3
25	3.002	8.361E-4	3.002	8.361E-4
36	3.001	2.799E-4	3.001	2.800E-4
49	3.000	1.110E-4	3.000	1.111E-4
64	3.000	4.982E-5	3.000	4.981E-5

表 2 空间 2 阶、时间 3 阶格式测试空间收敛阶结果

空间网格数	ℓ^2 空间收敛阶	$\ e^n\ _2$	ℓ^∞ 空间收敛阶	$\ e^n\ _\infty$
8		1.119E-1		1.120E-1
16	2.157	2.678E-2	2.159	2.677E-2
32	2.016	6.600E-3	2.016	6.620E-3
64	2.004	1.700E-3	2.004	1.650E-3
128	2.001	4.122E-4	2.001	4.122E-4
256	2.000	1.030E-4	2.003	1.030E-4
512	2.000	2.576E-5	2.000	2.576E-5

从表 1 和 2 中可以看出, 随着网格的加细, 时间方向的收敛阶一直维持在 3 左右, 空间方向的收敛阶一直维持在 2 左右, 且在 ℓ^2 范数和 ℓ^∞ 范数意义下测试的收敛阶结果非常相近.

6.1.2 空间 4 阶精度

对于空间网格 4 阶精度, 取时间方向步长为 $\tau = \frac{1}{(k+1)^4}$, 空间网格数为 $h = \frac{1}{(k+1)^3}$ ($k = 1, \dots, 7$). 表 3 是验证时间精度的结果. 接着, 固定时间步长 $\tau = \frac{1}{10000}$, 空间步长取 $h = \frac{1}{2^{k+2}}$ ($k = 1, \dots, 7$). 表 4 是验证空间精度的结果.

从表 3 和 4 中可以看出, 随着网格的加细, 时间方向的收敛阶一直维持在 3 左右, 空间方向的收敛阶一直维持在 4 左右, 且在 ℓ^2 范数和 ℓ^∞ 范数意义下测试的收敛阶结果非常相近.

6.2 粗化过程

6.2.1 2 阶和 4 阶空间格式对比

取 $A = 10,000$, $\alpha = 3.4$, $\tau = 10^{-4}$, $\varepsilon = 0.01$ 和 $T = 10$ s, 对于 2 阶空间网格, 相场随时间的变化如图 1 所示. 从图 1 中可以看出, 2 阶和 4 阶格式的相场变化基本没有差别.

接着画出上述 2 阶和 4 阶格式相场能量的拟合图. 为了图示展示清晰, 图中的能量为原始能量加上一个正的常数, 使得能量为正, 如图 2 所示. 实线代表空间 2 阶格式, 圈代表空间 4 阶格式. 两者能量始终都在下降, 并且在开始时刻缓慢下降; 在时间 $t = 0.001$ 秒时, 开始迅速下降; 在 $t = 0.01$ 秒时, 下降速度减缓; 在 $t = 1$ 秒后趋于稳定. 在一定时间范围内, 能量的下降曲线接近 $O(t^{-\frac{1}{3}})$ 的下降速率.

表 3 空间 4 阶、时间 3 阶格式测试时间收敛阶结果

时间网格数	ℓ^2 时间收敛阶	$\ e^n\ _2$	ℓ^∞ 时间收敛阶	$\ e^n\ _\infty$
16		9.813E-3		9.821E-3
81	2.978	7.842E-5	2.977	7.859E-5
256	2.997	2.492E-6	2.997	2.498E-6
625	2.999	1.714E-7	2.999	1.718E-7
1296	3.000	1.922E-8	3.000	1.927E-8
2401	2.994	3.034E-9	2.994	3.041E-9
4096	2.976	6.189E-10	2.976	6.204E-10

表 4 空间 4 阶、时间 3 阶格式测试空间收敛阶结果

空间网格数	ℓ^2 空间收敛阶	$\ e^n\ _2$	ℓ^∞ 空间收敛阶	$\ e^n\ _\infty$
8		8.263E-3		8.272E-3
16	3.949	5.351E-4	3.947	5.363E-4
32	3.986	3.378E-5	3.985	3.387E-5
64	3.996	2.117E-6	3.996	2.123E-6
128	3.999	1.324E-7	3.999	1.328E-7
256	3.999	8.281E-8	3.999	8.304E-8
512	3.984	5.235E-8	3.983	5.250E-8

6.2.2 不同 α 对比

本小节主要考虑不同的参数 α 中解的最大值和最小值的变化情形, 以观察数值解是否具有严格分离性. 其他的参数分别选取 $\varepsilon = 0.01$, $h = 1/256$, $A = 10,000$. 这里选取 $\alpha = 3.4, 3.6, 3.8, 4.0$, 并在同一个随机初值下进行模拟. 在时间方向, 给出一个逐渐递增的时间策略, 即在 $T = [0, 0.1]$ 的范围内使用 $\tau = 10^{-5}$ 的时间步长进行模拟, 在 $T = [0.1, 0.3]$ 的范围内使用 $\tau = 2 \times 10^{-5}$ 的步长进行模拟, 以此

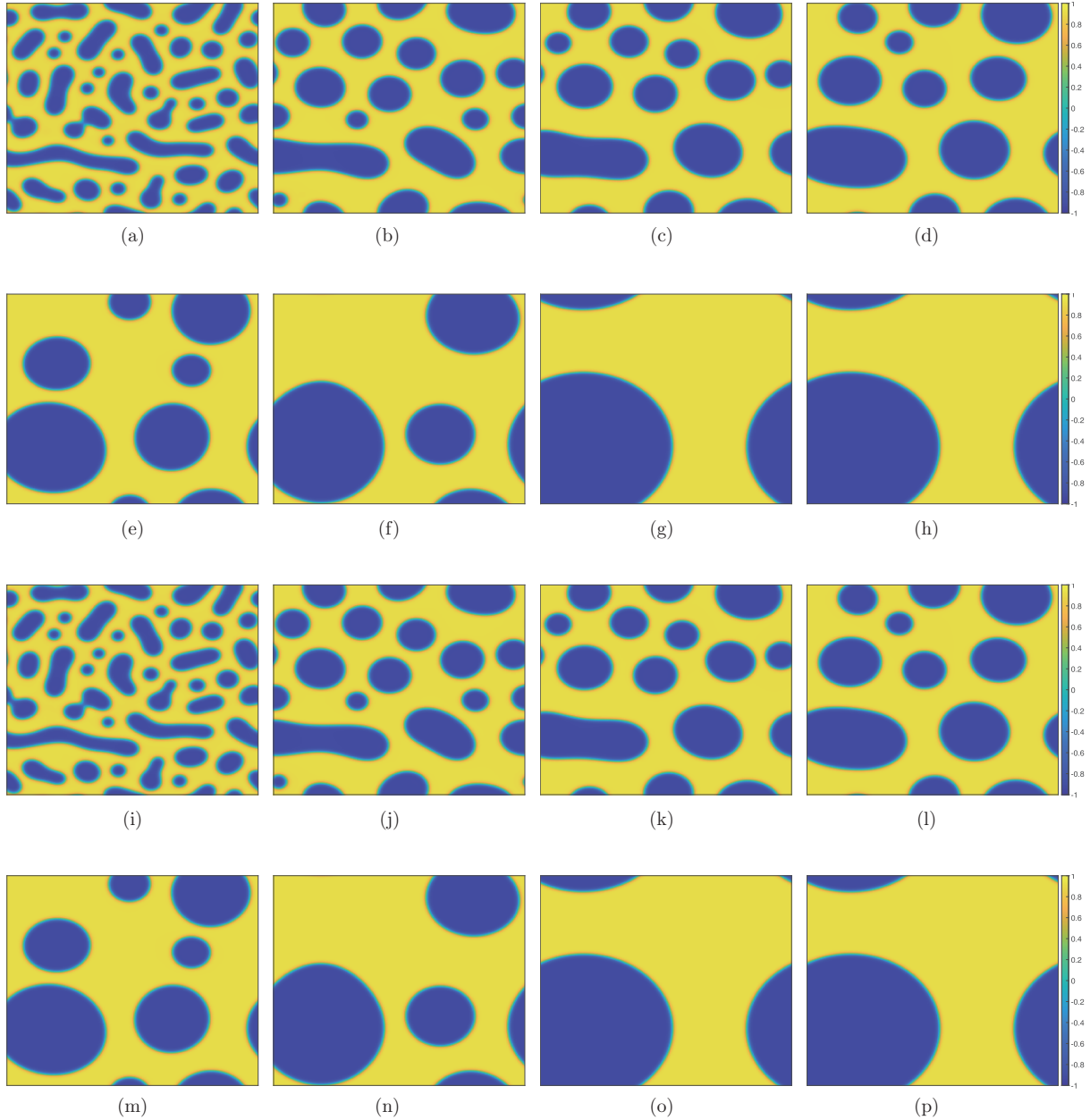


图 1 (网络版彩图) 2 阶和 4 阶格式相场随时间的演化图. 其中前两行是 2 阶格式的相场演化图, 后两行是 4 阶格式的相场演化图. (a) $t = 0.01$; (b) $t = 0.05$; (c) $t = 0.1$; (d) $t = 0.2$; (e) $t = 0.5$; (f) $t = 1$; (g) $t = 5$; (h) $t = 10$; (i) $t = 0.01$; (j) $t = 0.05$; (k) $t = 0.1$; (l) $t = 0.2$; (m) $t = 0.5$; (n) $t = 1$; (o) $t = 5$; (p) $t = 10$

类推, 每计算 10,000 个时间步后使时间步长增大两倍, 并最终计算到 $T = 25.5$ s 和 $\tau = 1.28 \times 10^{-3}$.

图 3 反映了不同的 α 下相参数的最大最小值随时间变化的关系. 在 $\alpha = 3.4$ 和 $\alpha = 3.6$ 时, 数值解分别位于 -0.9342 和 0.9220 之间以及 -0.9508 和 0.9411 之间, 其严格分离性较好. 但当 $\alpha = 3.8$ 和 $\alpha = 4$ 时, 数值解在某些时刻会突然出现最大值的跳跃. 以 $\alpha = 4$ 为例, 在 $T = 12.22$ s 附近数值解的最大值出现了明显增大, 此时对应的时间步长为 $\tau = 6.4 \times 10^{-4}$. 截取这段时间的相图如图 4 所示, 可以发现在这段时间内发生了相变过程. 若将 τ 缩小为 10^{-5} , 并从 $T = 10.9$ s 开始对这段时间重新进行模拟, 结果如图 5 所示. 相变过程仍然产生, 但是解的最大值没有发生明显的跳跃, 并且相变过程较大步长情形发生更早, 这反映了在相场方程的数值模拟中相位延迟的现象, 也与收敛性分析中需要 τ 足够小的结论相吻合.

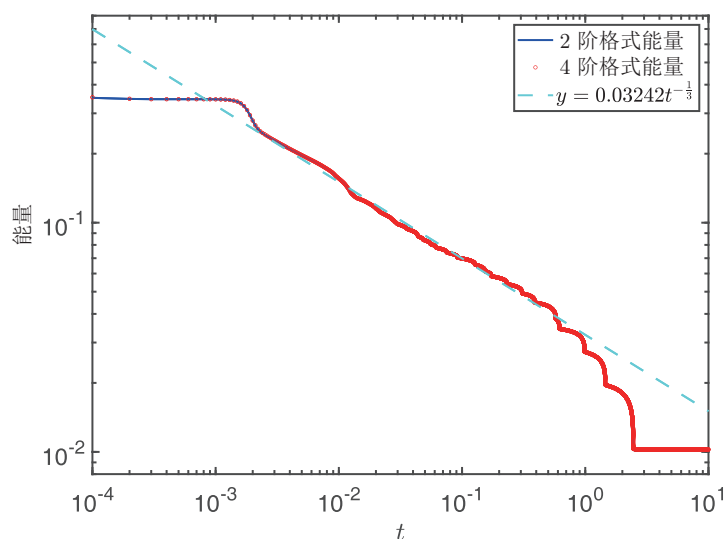


图 2 (网络版彩图) 空间 2 阶和 4 阶格式下, 能量随时间的变化图. 表面扩散系数 $\varepsilon = 0.01$, $\alpha = 3.4$, 稳定化系数 $A = 10,000$

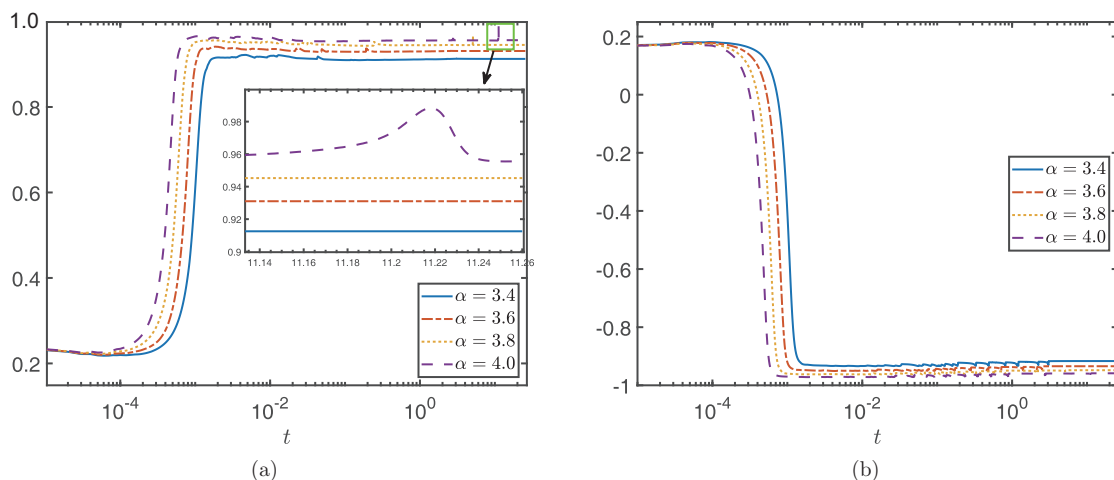


图 3 (网络版彩图) 不同的 α 下相参数的最大值 (a) 和最小值 (b) 随时间的变化关系. (a) ϕ 最大值的变化图; (b) ϕ 最小值的变化图

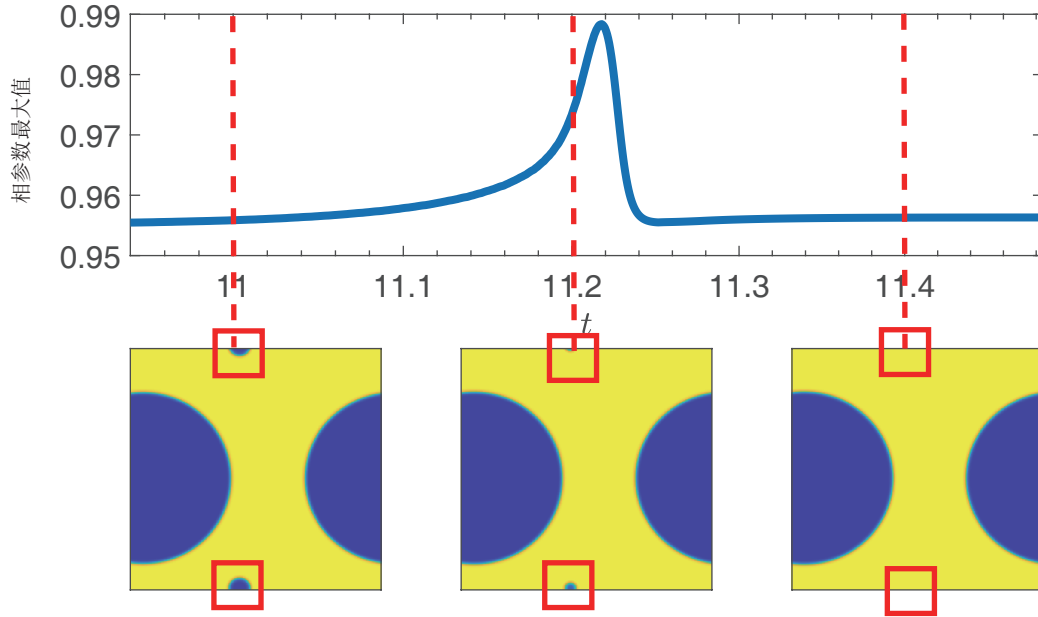


图 4 (网络版彩图) $\alpha = 4$ 时相参数最大值在 $T = 11.2$ s 附近的变化图, 步长 $\tau = 6.4 \times 10^{-4}$. 图中分别给出了 $T = 11$ s、 $T = 11.2$ s 以及 $T = 11.4$ s 这 3 个时刻的相图. 相变在这个时间段发生, 并且相参数最大值显著增大, 相变结束后又迅速下降回到正常值

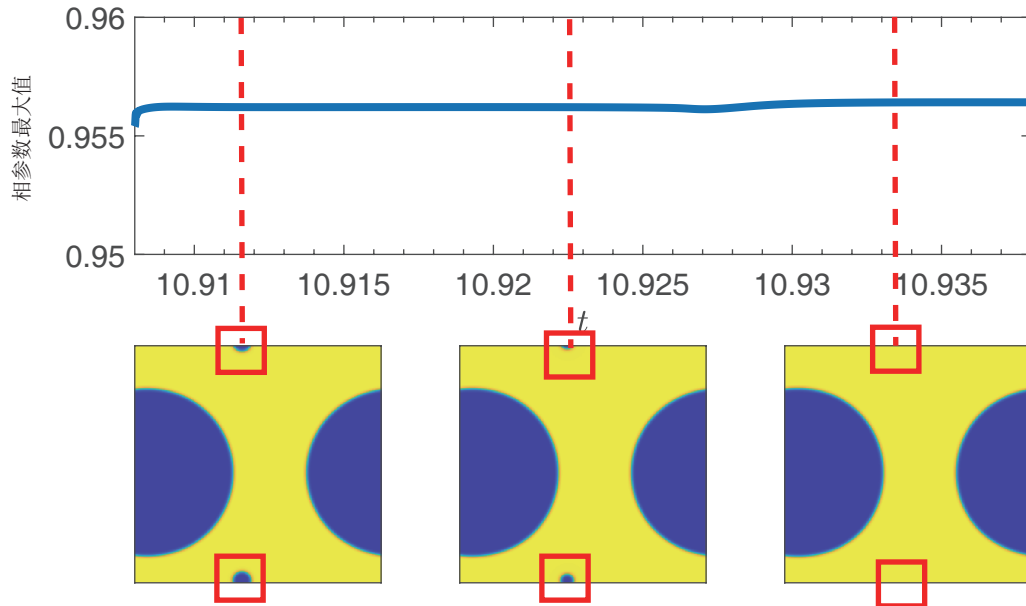


图 5 (网络版彩图) $\alpha = 4$ 时相参数最大值在 $T = 10.923$ s 附近的变化图, 步长 $\tau = 10^{-5}$. 图中分别给出了 $T = 10.911$ s、 $T = 10.923$ s 以及 $T = 10.933$ s 这 3 个时刻的相图. 相变在这个时间段发生, 并且相参数最大值并没有显著增大

基于以上的结论, CH 方程的相分离模拟在发生相变时仍然使用大步长会造成数值不稳定的现象, 尤其是当解本身比较靠近 -1 和 1 时. 对于这类方程, 设计高阶的变步长格式有助于解决这个难题. 这将留在以后的工作中进行分析.

7 结论

本文给出了对数位式 CH 方程的 BDF3 有限差分格式. 在空间方向, 分别引入 2 阶和 4 阶两种差分网格, 并给出了它们的存在唯一性和保正性的证明. 通过引入一个改进的正则项 $A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$, 本文证明了格式的无条件能量稳定性. 通过 DOC 核方法, 以及粗估细估技巧, 本文给出了误差的收敛性最优估计. 最后, 本文通过收敛阶测试和粗化过程等数值例子反映了格式的数值稳定性和准确性.

致谢 王成非常感谢复旦大学非线性数学模型与方法教育部重点实验室的帮助.

参考文献

- 1 Abels H. On a diffuse interface model for two-phase flows of viscous, incompressible fluids with matched densities. *Arch Ration Mech Anal*, 2009, 194: 463–506
- 2 Abels H, Wilke M. Convergence to equilibrium for the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. *Non-linear Anal*, 2007, 67: 3176–3193
- 3 Akrivis G, Li B Y, Li D. Energy-decaying extrapolated RK-SAV methods for the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. *SIAM J Sci Comput*, 2019, 41: A3703–A3727
- 4 Allen S M, Cahn J W. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metall*, 1979, 27: 1085–1095
- 5 Bourdin B, Francfort G A, Marigo J J. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *J Mech Phys Solids*, 2000, 48: 797–826
- 6 Cahn J W. Free energy of a nonuniform system. II. Thermodynamic basis. *J Chem Phys*, 1959, 30: 1121–1124
- 7 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *J Chem Phys*, 1958, 28: 258–267
- 8 Chen R, Ji G H, Yang X F, et al. Decoupled energy stable schemes for phase-field vesicle membrane model. *J Comput Phys*, 2015, 302: 509–523
- 9 Chen W B, Han D Z, Wang X M, et al. Conservative unconditionally stable decoupled numerical schemes for the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes-Darcy-Boussinesq system. *Numer Methods Partial Differential Equations*, 2022, 38: 1823–1842
- 10 Chen W B, Jing J Y, Wang C, et al. A modified Crank-Nicolson numerical scheme for the Flory-Huggins Cahn-Hilliard model. *Commun Comput Phys*, 2022, 31: 60–93
- 11 Chen W B, Jing J Y, Wu H. A uniquely solvable, positivity-preserving and unconditionally energy stable numerical scheme for the functionalized Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential. *J Sci Comput*, 2023, 96: 75–119
- 12 Chen W B, Li W J, Wang C, et al. Energy stable higher-order linear ETD multi-step methods for gradient flows: Application to thin film epitaxy. *Res Math Sci*, 2020, 7: 13
- 13 Chen W B, Liu Y, Wang C, et al. Convergence analysis of a fully discrete finite difference scheme for the Cahn-Hilliard-Hele-Shaw equation. *Math Comp*, 2016, 85: 2231–2257
- 14 Chen W B, Wang C, Wang S F, et al. Energy stable numerical schemes for ternary Cahn-Hilliard system. *J Sci Comput*, 2020, 84: 27
- 15 Chen W B, Wang C, Wang X M, et al. Positivity-preserving, energy stable numerical schemes for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential. *J Comput Phys X*, 2019, 3: 100031
- 16 Chen W B, Wang X M, Yan Y, et al. A second order BDF numerical scheme with variable steps for the Cahn-Hilliard equation. *SIAM J Numer Anal*, 2019, 57: 495–525
- 17 Chen X J, Li Z X, Zhou J X. An improved local-min-orthogonal method for finding multiple solutions to nonlinear elliptic PDEs. *J Sci Comput*, 2022, 92: 1–24
- 18 Cheng K L, Feng W Q, Wang C, et al. An energy stable fourth order finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation. *J Comput Appl Math*, 2019, 362: 574–595
- 19 Cheng K L, Wang C, Wise S M, et al. A third order accurate in time, BDF-type energy stable scheme for the Cahn-Hilliard equation. *Numer Math Theory Methods Appl*, 2022, 15: 279–303
- 20 Cheng Q, Shen J. A new Lagrange multiplier approach for constructing structure preserving schemes, I. Positivity preserving. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2022, 391: 114585
- 21 Cheng Q, Shen J. A new lagrange multiplier approach for constructing structure preserving schemes, II. Bound preserving. *SIAM J Numer Anal*, 2022, 60: 970–998
- 22 Cherfils L, Miranville A, Zelik S. The Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials. *Milan J Math*, 2011, 79:

- 561–596
- 23 Copetti M I M, Elliott C M. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. [Numer Math](#), 1992, 63: 39–65
- 24 Debussche A, Dettori L. On the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. [Nonlinear Anal](#), 1995, 24: 1491–1514
- 25 Diegel A E, Wang C, Wang X M, et al. Convergence analysis and error estimates for a second order accurate finite element method for the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes system. [Numer Math](#), 2017, 137: 495–534
- 26 Doi M. *Soft Matter Physics*. Oxford: Oxford Univ Press, 2013
- 27 Dong L X, Wang C, Wise S M, et al. A positivity-preserving, energy stable scheme for a ternary Cahn-Hilliard system with the singular interfacial parameters. [J Comput Phys](#), 2021, 442: 110451
- 28 Dong L X, Wang C, Zhang H, et al. A positivity-preserving, energy stable and convergent numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation with a Flory-Huggins-DeGennes energy. [Commun Math Sci](#), 2019, 17: 921–939
- 29 Dong L X, Wang C, Zhang H, et al. A positivity-preserving second-order BDF scheme for the Cahn-Hilliard equation with variable interfacial parameters. [Commun Comput Phys](#), 2020, 28: 967–998
- 30 Du Q, Ju L L, Li X, et al. Maximum principle preserving exponential time differencing schemes for the nonlocal Allen-Cahn equation. [SIAM J Numer Anal](#), 2019, 57: 875–898
- 31 Du Q, Ju L L, Li X, et al. Maximum bound principles for a class of semilinear parabolic equations and exponential time-differencing schemes. [SIAM Rev](#), 2021, 63: 317–359
- 32 Du Q, Liu C, Ryham R, et al. Modeling the spontaneous curvature effects in static cell membrane deformations by a phase field formulation. [Commun Pure Appl Anal](#), 2005, 4: 537–548
- 33 Du Q, Liu C, Wang X Q. A phase field approach in the numerical study of the elastic bending energy for vesicle membranes. [J Comput Phys](#), 2004, 198: 450–468
- 34 Elliott C M, Garcke H. On the Cahn-Hilliard equation with degenerate mobility. [SIAM J Math Anal](#), 1996, 27: 404–423
- 35 Feng W Q, Guan Z, Lowengrub J, et al. A uniquely solvable, energy stable numerical scheme for the functionalized Cahn-Hilliard equation and its convergence analysis. [J Sci Comput](#), 2018, 76: 1938–1967
- 36 Feng X L, Tang T, Yang J. Stabilized Crank-Nicolson/Adams-Bashforth schemes for phase field models. [East Asian J Appl Math](#), 2013, 3: 59–80
- 37 Giorgini A, Grasselli M, Miranville A. The Cahn-Hilliard-Oono equation with singular potential. [Math Models Methods Appl Sci](#), 2017, 27: 2485–2510
- 38 Giorgini A, Grasselli M, Wu H. The Cahn-Hilliard-Hele-Shaw system with singular potential. [Ann Inst H Poincaré Anal Non Linéaire](#), 2018, 35: 1079–1118
- 39 Guan Z, Wang C, Wise S M. A convergent convex splitting scheme for the periodic nonlocal Cahn-Hilliard equation. [Numer Math](#), 2014, 128: 377–406
- 40 Han D Z, Wang X M. A second order in time, uniquely solvable, unconditionally stable numerical scheme for Cahn-Hilliard-Navier-Stokes equation. [J Comput Phys](#), 2015, 290: 139–156
- 41 Jones J S. Development of a fast and accurate time stepping scheme for the functionalized Cahn-Hilliard equation and application to a graphics processing unit. PhD Thesis. Lansing: Michigan State University, 2013
- 42 Ju L L, Li X, Qiao Z H, et al. Energy stability and error estimates of exponential time differencing schemes for the epitaxial growth model without slope selection. [Math Comp](#), 2018, 87: 1859–1885
- 43 Ju L L, Zhang J, Du Q. Fast and accurate algorithms for simulating coarsening dynamics of Cahn-Hilliard equations. [Comput Mater Sci](#), 2015, 108: 272–282
- 44 Li D. A regularization-free approach to the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials. [Discrete Contin Dyn Syst](#), 2022, 42: 2453–2460
- 45 Li D F, Li X X, Zhang Z M. Implicit-explicit relaxation Runge-Kutta methods: Construction, analysis and applications to PDEs. [Math Comp](#), 2023, 92: 117–146
- 46 Li X L, Shen J. On a SAV-MAC scheme for the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes phase-field model and its error analysis for the corresponding Cahn-Hilliard-Stokes case. [Math Models Methods Appl Sci](#), 2020, 30: 2263–2297
- 47 Li X L, Shen J. On fully decoupled MSAV schemes for the Cahn-Hilliard-Navier-Stokes model of two-phase incompressible flows. [Math Models Methods Appl Sci](#), 2022, 32: 457–495
- 48 Li Y H. A third order BDF numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential. Master Thesis. Shanghai: Fudan University, 2023
- 49 Liao H L, Ji B Q, Wang L, et al. Mesh-robustness of an energy stable BDF2 scheme with variable steps for the Cahn-Hilliard model. [J Sci Comput](#), 2022, 92: 52
- 50 Liao H L, Kang Y Y, Han W Z. Discrete gradient structures of BDF methods up to fifth-order for the phase field

- crystal model. [arXiv:2201.00609](#), 2022
- 51 Liao H L, Tang T, Zhou T. A new discrete energy technique for multi-step backward difference formulas. [arXiv:2102.04644](#), 2021
 - 52 Liao H L, Zhang Z M. Analysis of adaptive BDF2 scheme for diffusion equations. [Math Comp](#), 2020, 90: 1207–1226
 - 53 Liu C, Wang C, Wang Y. A structure-preserving, operator splitting scheme for reaction-diffusion equations with detailed balance. [J Comput Phys](#), 2021, 436: 110253
 - 54 Liu C, Wang C, Wise S M, et al. A positivity-preserving, energy stable and convergent numerical scheme for the Poisson-Nernst-Planck system. [Math Comp](#), 2021, 90: 2071–2106
 - 55 Liu Q Q, Jing J Y, Yuan M Q, et al. A positivity-preserving, energy stable BDF2 scheme with variable steps for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential. [J Sci Comput](#), 2023, 95: 37–75
 - 56 Liu Y, Chen W B, Wang C, et al. Error analysis of a mixed finite element method for a Cahn-Hilliard-Hele-Shaw system. [Numer Math](#), 2017, 135: 679–709
 - 57 Miranville A, Zelik S. Robust exponential attractors for Cahn-Hilliard type equations with singular potentials. [Math Methods Appl Sci](#), 2004, 27: 545–582
 - 58 Park J H, Salgado A, Wise S M. Benchmark computations of the phase field crystal and functionalized Cahn-Hilliard equations via fully implicit, Nesterov accelerated schemes. [arXiv:2204.07247](#), 2022
 - 59 Qian Y E, Wang C, Zhou S G. A positive and energy stable numerical scheme for the Poisson-Nernst-Planck-Cahn-Hilliard equations with steric interactions. [J Comput Phys](#), 2021, 426: 109908
 - 60 Shen J, Wang C, Wang X M, et al. Second-order convex splitting schemes for gradient flows with Ehrlich-Schwoebel type energy: Application to thin film epitaxy. [SIAM J Numer Anal](#), 2012, 50: 105–125
 - 61 Shen J, Xu J. Convergence and error analysis for the scalar auxiliary variable (SAV) schemes to gradient flows. [SIAM J Numer Anal](#), 2018, 56: 2895–2912
 - 62 Shen J, Xu J, Yang J. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows. [J Comput Phys](#), 2018, 353: 407–416
 - 63 Shen J, Xu J, Yang J. A new class of efficient and robust energy stable schemes for gradient flows. [SIAM Rev](#), 2019, 61: 474–506
 - 64 Shen J, Yang X F. Numerical approximations of Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. [Discrete Contin Dyn Syst](#), 2010, 28: 1669–1691
 - 65 Shen J, Yang X F. Decoupled, energy stable schemes for phase-field models of two-phase incompressible flows. [SIAM J Numer Anal](#), 2015, 53: 279–296
 - 66 Wise S M, Wang C, Lowengrub J S. An energy-stable and convergent finite-difference scheme for the phase field crystal equation. [SIAM J Numer Anal](#), 2009, 47: 2269–2288
 - 67 Wu H. A review on the Cahn-Hilliard equation: Classical results and recent advances in dynamic boundary conditions. [Electron Res Arch](#), 2022, 30: 2788–2832
 - 68 Xu C J, Tang T. Stability analysis of large time-stepping methods for epitaxial growth models. [SIAM J Numer Anal](#), 2006, 44: 1759–1779
 - 69 Xu Z, Yang X F, Zhang H, et al. Efficient and linear schemes for anisotropic Cahn-Hilliard model using the stabilized-invariant energy quadratization (S-IEQ) approach. [Comput Phys Commun](#), 2019, 238: 36–49
 - 70 Yan Y, Chen W B, Wang C, et al. A second-order energy stable BDF numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation. [Commun Comput Phys](#), 2018, 23: 572–602
 - 71 Yang X F. Linear, first and second-order, unconditionally energy stable numerical schemes for the phase field model of homopolymer blends. [J Comput Phys](#), 2016, 327: 294–316
 - 72 Yang X F, Zhang G D. Convergence analysis for the invariant energy quadratization (IEQ) schemes for solving the Cahn-Hilliard and Allen-Cahn equations with general nonlinear potential. [J Sci Comput](#), 2020, 82: 55
 - 73 Yuan M Q, Chen W B, Wang C, et al. An energy stable finite element scheme for the three-component Cahn-Hilliard-type model for macromolecular microsphere composite hydrogels. [J Sci Comput](#), 2021, 87: 78
 - 74 Yuan M Q, Chen W B, Wang C, et al. A second order accurate in time, energy stable finite element scheme for the Flory-Huggins-Cahn-Hilliard equation. [Adv Appl Math Mech](#), 2022, 14: 1477–1508
 - 75 Zhang C H, Ouyang J, Wang C, et al. Numerical comparison of modified-energy stable SAV-type schemes and classical BDF methods on benchmark problems for the functionalized Cahn-Hilliard equation. [J Comput Phys](#), 2020, 423: 109772
 - 76 Zhang J, Wang C, Wise S M, et al. Structure-preserving, energy stable numerical schemes for a liquid thin film coarsening model. [SIAM J Sci Comput](#), 2021, 43: A1248–A1272

A third-order positivity-preserving and energy stable numerical scheme for the Cahn-Hilliard equation with logarithmic potential

Yuhuan Li, Jianyu Jing, Qianqian Liu, Cheng Wang & Wenbin Chen

Abstract In this paper, we propose and analyze a finite difference BDF3 (third-order backward differentiation formula) scheme of the Cahn-Hilliard equation with logarithmic Flory-Huggins potential. The second-order and fourth-order spatial grids are introduced at the same time and the existence, uniqueness as well as the positivity-preserving property are proved for both of the two spatial spaces. Unconditional energy stability is given via a new type of regularization term $A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$. For the convergence analysis, we use the technique of discrete orthogonal convolution (DOC) kernels to get the estimate of the discrete $L^\infty(0, T; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$, and furthermore obtain the strict separation property of the numerical solution, under the linear CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) condition $c_1h \leq \tau \leq c_2h$. Then we derive the error analysis in the space of discrete $L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega))$. Finally, we demonstrate some numerical examples to indicate the accuracy and effectiveness of our numerical scheme.

Keywords Cahn-Hilliard equation, logarithmic potential, BDF3 scheme, unconditional energy stability, convergence analysis

MSC(2020) 35K35, 35K55, 65K10, 65M06, 65M12

doi: 10.1360/SSM-20223-0014