中国科学: 数学 评审中稿件

www.springerlink.com math.scichina.com

含对数位势的Cahn-Hilliard方程的三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①③*

① 复旦大学数学科学学院, 上海 200433;

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

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

中国自然科学基金(批准号: 12241101, 12071090)和美国自然科学基金(NSF DMS-2012669)资助项目

摘要 本文提出了对数位势Cahn-Hilliard方程基于有限差分的BDF3数值格式. 在空间方向, 本文同时引入了二阶和四阶两种离散方法, 并证明了数值解的存在唯一性和保正性. 通过引入一个新的正则项$A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$, 本文证明了格式的无条件能量稳定性. 利用离散正交卷积核(DOC) 和粗估细估的思想, 本文证明了离散$L^\infty(0,T;H^{-1}(\Omega))\cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$的误差估计, 利用这个估计得到数值解在线性CFL 条件$c_1h\leqslant\tau\leqslant c_2h$ 下的严格分离性, 并最终得到了离散$L^\infty(0,T;L^2(\Omega))\cap L^2(0,T;H^2(\Omega))$ 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 奇异位势 BDF3数值格式 能量下降 收敛性分析

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

1 引言

Cahn和Hilliard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$\mathcal{O}(\varepsilon)$厚度的薄层, 使得材料的分布能够连续光滑的过渡, 从而能够刻画一些非平衡态下的相变过程 [6,7]. CH模型等相场模型常用来研究物质相变的重要方法，它在囊泡动力学 [8,30,31], 凝固力学 [5] 等问题中有着重要的应用. 当给定一个有界区域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:

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

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

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

其中$\alpha>2$. 对数位势的方程最早在 [6]被提出, 之后也出现在了Flory-Huggins的聚合物的溶液理论中 [26].

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

$$\phi_t=\mathcal{L}\mu,\quad 这里\mathcal{L}=\Delta, \tag{1.3}$$

英文引用格式: Zuo Z 1, Zuo Z 2, Zuo Z 3, Zuo Z 4. The English title of this paper (in Chinese). Sci Sin Math, 2015, 45: 1–XX, doi: 10.1360/012011-XXX

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

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(例如, 齐次的Neumann条件或者周期边界条件), 有下面的等式成立:

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

当$\mathcal{L} = -I$时, 方程(1.3)-(1.4)对应能量(1.1)的L^2 梯度流, 也被称为Allen-Cahn (AC)方程. Allen-Cahn方程是用来研究二元合金中粗化过程的模型 [4], 而Cahn-Hilliard方程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 [6]. 这两种方程在相场动力学的研究之中都有着重要的应用, 因此, 近年来学界对于这类方程的理论研究和数值求解都有着高度的关注. AC方程保留着线性抛物方程的极值原理, 近年来对这个问题展开了深入的研究, 读者可以参考Du等的重要工作 [32,33]. 本篇文章关注的主要问题则是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: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \int_\Omega \phi \mathrm{dx} = 0$, 也就是$\phi$在区域$\Omega$上的平均值为常数。

另一方面, 奇异位势的形式(1.2)给方程的分析带来了许多困难. 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, 这也被称为解的保正性. 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了很大困难. 为了克服这一个难题, 学者们也通过引入近似多项式来克服这个问题 [24,67]:

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

有关的适定性分析可以参考 [1,24,34,37,38,44], 也可以参考 [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, 解会存在一个严格分离性, 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$\delta \in (0,1)$, 使得对任意的$t \in [0,T]$, 都满足$\|\phi(t)\|_\infty \leqslant 1-\delta$. 这个结论对于适定性分析中得到高阶光滑性是尤其重要的. 这些性质的分析可以参考 [37,38,57].

对于这类梯度流形式的无条件能量下降的方程, 在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, 例如凸分裂方法 [39, 64, 66], 半隐稳定化方法 [35, 64, 68], 指数时间(ETD)方法 [32, 42, 43], 以及最近由Yang等提出的IEQ方法 [69, 71, 72]和Shen等提出的基于IEQ改进的SAV方法 [61–63].

基于以上的性质, 自然地从数值离散的角度出发, 我们会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, 例如, 对于Cahn-Hilliard 方程的数值设计和分析 [17,19,43,49,70,72], 对于流相耦合系统的数值格式设计 [9,14,25,40,46,47,56,65], 对于三相流的数值格式分析 [16], 以及对于泛函型Cahn-Hilliard方程的数值格式分析 [36,41,58,75]. 这里, 我们不再展开一一赘述.

对数位势的数值格式研究, 最早是在Copetti和Elliott的工作中 [23] 提到. 他们在这篇文章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, 这个格式下, 只有当时间满足$\tau \leqslant \frac{4\varepsilon^2}{\alpha^2}$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. 2019年, Chen等利用凹凸分离的技巧, 首次提出了对数位势Cahn-Hilliard方程的无条件能量稳定的BDF1 和BDF2 格式 [15]. 利用凸泛函在有界闭区域内存在极小值的性质, 文章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$L^\infty(0,T;H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$收敛性证明. 在此基础上, Yuan 等又完成了基

于质量集中有限元方法的BDF2 数值格式分析 [74], 而Chen等则引入了一个非线性的修正项来给出了一个改进的Crank-Nicolson格式 [10], 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等则基于Liao和Zhang 提出的离散正交卷积核(DOC) 技巧 [52], 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 [55]. 另一方面, Cheng等则基于优化中KKT 条件的思想, 提出了用拉格朗日乘子来约束解的数值方法 [20,21]. 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. 该方法也不仅仅适用于奇异位势的CH方程, 对一类带有约束的方程都是适用的.

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. 例如, 带有Flory-Huggins-deGennes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 [11], 以及FCH方程的分析 [12] 等.

然而, 对于奇异位势的Cahn-Hilliard方程的时间高阶数值格式的构造及分析一直是一个难点. 部分文章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], 基于代数显隐Runge-Kutta格式的分析 [45]. 尽管这些文章中有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. 本文则是首次提出了基于对数位势的Cahn-Hilliard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, 本文还引入了高阶的四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, 证明了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$A\tau^3\Delta_h D_3\phi^{n+1}$, 文章证明了当稳定化系数$A\geqslant\frac{27\alpha^4}{32}\varepsilon^{-2}$ 时, 格式在两种空间网格下的无条件能量稳定性. 利用离散正交卷积核(DOC) 的技巧, 文章首先给出了误差的离散$L^\infty(0,T;H^{-1}(\Omega))\cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$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, 我们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.

文章的主要结构如下: 在第二节我们介绍一些预备知识, 包括二阶和四阶的有限差分网格, 以及DOC-核的定义及其一些性质. 在第三节我们给出解的保正性和存在唯一性的证明. 在第四节我们给出格式的无条件能量稳定性的证明. 收敛性的分析则在第五节给出. 第六节我们展示一些数值例子, 包括精度测试和相分离演化. 最后, 我们对本文进行了总结.

2 预备知识

2.1 离散周期函数空间

在本节中, 我们给出三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. 首先我们定义与网格有关的函数: $p_i=p(i)=(i-\frac{1}{2})h$, 接着对$h>0$, 我们定义如下对两个与$p_i$相关的网格点的集合:

$$G:=\left\{p_{i+\frac{1}{2}}\mid i\geqslant 0\right\},\qquad M:=\{p_i\mid i\geqslant 1\}. \tag{2.1}$$

考虑下面的由N^3个点构成的N^3周期函数空间:

$$\mathbf{M}_{\rm per}=\{v:\mathrm{M}\times\mathrm{M}\times\mathrm{M}\to\mathbb{R}\mid v_{i,j,k}=v_{i+\alpha N,j+\beta N,k+\gamma N},\forall i,j,k,\alpha,\beta,\gamma\in\mathbb{Z}\}, \tag{2.2}$$

$$\mathbf{K}_{per}^{x}=\left\{v:\mathrm{G}\times\mathrm{M}\times\mathrm{M}\to\mathbb{R}\mid v_{i+\frac{1}{2},j,k}=v_{i+\frac{1}{2}+\alpha N,j+\beta N,k+\gamma N},\forall i,j,k,\alpha,\beta,\gamma\in\mathbb{Z}\right\},\tag{2.3}$$

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

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

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

2.2 二阶精度离散空间网格

下面我们定义上述空间上的二阶精度的差分和均值算子:

$$D_{x,(2)}v_{i+\frac{1}{2},j,k}=\frac{1}{h}\left(v_{i+1,j,k}-v_{i,j,k}\right),\qquad A_xv_{i+\frac{1}{2},j,k}=\frac{1}{2}\left(v_{i+1,j,k}+v_{i,j,k}\right),\tag{2.5}$$

$$D_{y,(2)}v_{i,j+\frac{1}{2},k}=\frac{1}{h}\left(v_{i,j+1,k}-v_{i,j,k}\right),\qquad A_yv_{i,j+\frac{1}{2},k}=\frac{1}{2}\left(v_{i,j+1,k}+v_{i,j,k}\right),\tag{2.6}$$

$$D_{z,(2)}v_{i,j,k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{h}\left(v_{i,j,k+1}-v_{i,j,k}\right),\qquad A_zv_{i,j,k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(v_{i,j,k+1}+v_{i,j,k}\right),\tag{2.7}$$

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

$$d_xv_{i,j,k}=\frac{1}{h}(v_{i+\frac{1}{2},j,k}-v_{i-\frac{1}{2},j,k}),\qquad a_xv_{i,j,k}=\frac{1}{2}(v_{i+\frac{1}{2},j,k}+v_{i-\frac{1}{2},j,k}),\tag{2.8}$$

$$d_yv_{i,j,k}=\frac{1}{h}(v_{i,j+\frac{1}{2},k}-v_{i,j-\frac{1}{2},k}),\qquad a_yv_{i,j,k}=\frac{1}{2}(v_{i,j+\frac{1}{2},k}+v_{i,j-\frac{1}{2},k}),\tag{2.9}$$

$$d_zv_{i,j,k}=\frac{1}{h}(v_{i,j,k+\frac{1}{2}}-v_{i,j,k-\frac{1}{2}}),\qquad a_zv_{i,j,k}=\frac{1}{2}(v_{i,j,k+\frac{1}{2}}+v_{i,j,k-\frac{1}{2}}),\tag{2.10}$$

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

$$\left(\nabla_{h,(2)}\cdot\vec{f}\right)_{i,j,k}=d_xf_{i,j,k}^{x}+d_yf_{i,j,k}^{y}+d_zf_{i,j,k}^{z},\tag{2.11}$$

其中$\vec{f}=(f^x,f^y,f^z)\in\vec{\mathbf{K}}_{\mathrm{per}}$. 则标准的三维离散拉普拉斯算子$\Delta_{h,(2)}:\mathbf{M}_{\mathrm{per}}\to\mathbf{M}_{\mathrm{per}}$定义为:

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

下面我们定义格点内积:

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

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

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

定义中心格点函数的范数: 对于$1 \leqslant p < \infty$, 当$v \in \mathbf{M}_{\text{per}}$ 时, $\|v\|_p^p := \langle |v|^p, 1\rangle_\Omega$, $\|v\|_\infty := \max\limits_{1\leqslant i,j,k\leqslant N} |v_{i,j,k}|$. 定义离散梯度范数

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

下面可以定义v在H_h^1和H_h^2空间上的范数:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$-\nabla_{h,(2)} \cdot \left(\nabla_{h,(2)} \varphi_s\right) = \phi_s, \qquad s = 1, 2. \tag{2.21}$$

由(2.18), 下面的等式成立:

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

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, 我们还有如下的估计:

引理2.1. *[[15], Lemma 3.1] 设φ_1, $\varphi_2 \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且$\varphi_1 - \varphi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$. 若$\|\varphi_1\|_\infty < 1$, $\|\varphi_2\|_\infty \leqslant M$, 则有如下的估计成立*

$$\left\|\mathcal{L}_{h,(2)}^{-1} \left(\varphi_1 - \varphi_2\right)\right\|_\infty \leqslant \hat{C}_0^{(2)}, \tag{2.23}$$

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

2.3 四阶精度离散空间网格

参考 [18]中的定义, 我们给出下面四阶精度的空间差分算子:

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

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

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

其中$D_{x,(4)}$, $D_{y,(4)}$, $D_{z,(4)}$: $\mathbf{M}_{\text{per}} \to \mathbf{M}_{\text{per}}$. 四阶精度的三维拉普拉斯算子定义为$\Delta_{h,(4)} := D^2_{x,(4)} + D^2_{y,(4)} + D^2_{z,(4)}$, 其中:

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

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

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

对于$\phi_1, \phi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$, 有下面的关系:

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

我们定义四阶精度的梯度范数为:

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

因此, 在上述定义下, 有:

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

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

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

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$\langle \phi_1, \phi_2\rangle_{\mathcal{L}^{-1}_{h,(4)}} := \left\langle \Delta_{h,(4)}\phi_1, \Delta_{h,(4)}\phi_2 \right\rangle_{\mathcal{L}^{-1}_{h,(4)}}$, 则有

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

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

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

类似二阶格式(2.22), 对四阶有:

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

特别地, 记$\|\varphi\|^2_{-1,(4),h} := \langle \varphi, \varphi\rangle_{\mathcal{L}^{-1}_{h,(4)}}$. 类似 [15]中引理 3.1 的证明, 我们同样可以得到下面的引理:

引理2.2. 设φ_1, $\varphi_2 \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且$\varphi_1 - \varphi_2 \in \mathring{\mathbf{M}}_{\text{per}}$. 若$\|\varphi_1\|_\infty < 1$, $\|\varphi_2\|_\infty \leqslant M$, 则有如下的估计成立

$$\left\|\mathcal{L}^{-1}_{h,(4)}(\varphi_1 - \varphi_2)\right\|_\infty \leqslant \hat{C}_0^{(4)}, \tag{2.37}$$

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

2.4 离散正交卷积核方法(DOC)

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$\partial_\tau v^n = \nabla_\tau v^n/\tau$. 我们使用 [50] 中的记号, 用BDF-k格式来表示$D_k v^n$:

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

这里我们采用BDF-三阶格式, $b_0^{(3)} = \frac{11}{6}, b_1^{(3)} = -\frac{7}{6}, b_2^{(3)} = \frac{1}{3}$, 对于所有$j \geqslant 4$, 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 [51], 离散BDF核b_j 对应的DOC-核θ_j 定义为:

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

根据定义, b_j和θ_j满足:

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

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

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

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

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

定义矩阵B和Θ:

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

以及$B_3 := B + B^T$, $\Theta_3 := \Theta + \Theta^T$. 参考 [49]中的引理 3.7, [50]中的引理 3.2, 引理 3.4和引理 3.5, 以及 [51]中的引理 2.1, 我们有下面关于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$\lambda_{\max}(\Theta_3)$, $\lambda_{\min}(\Theta_3)$, 则存在常数m_1, $m_2 > 0$, 使得$\lambda_{\min}(\Theta_3) \geqslant m_1$, $\lambda_{\max}(\Theta_3) \leqslant m_2$. 并且对于$\theta_j (j \geqslant 0)$, 有如下的估计:*

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

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

$$\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \left\langle v^j, \omega^\ell \right\rangle \leqslant \eta \sum_{\ell=3}^{n} \left\|v^k\right\|^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta}\sum_{\ell=3}^{n} \|\omega^\ell\|^2. \tag{2.45}$$

2.5 Cahn-Hilliard 方程的全离散BDF3数值格式

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

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

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

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

注2.1. (2.46)-(2.47)并没有给出ϕ^1, ϕ^2的计算方式. 这里, 我们指出, ϕ^1, ϕ^2可以用一些单步的三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ϕ^n, ϕ^{n-1}, $\phi^{n-2} \in \mathbf{M}_{\text{per}}$, 且存在$M > 0$, 使得

$$\left\|\phi^k\right\|_\infty \leqslant M, \quad 对\ k = n,\ n-1,\ n-2. \tag{3.1}$$

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

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

步骤1 定义离散能量函数

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

引入

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

因此, 求离散系统(2.46)-(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, 我们引入一个积分为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:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^n(\varphi) :&= \mathcal{T}^n(\varphi + \bar{\phi}_0) \\ &= \frac{3}{11\tau}\left\|\frac{11}{6}(\varphi + \bar{\phi}_0) - 3\phi^{n+1} + \frac{3}{2}\phi^{n-1} - \frac{1}{3}\phi^{n-2}\right\|_{-1,(p),h}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\left\|\nabla_{h,(p)}\varphi\right\|_2^2 \\ &\quad + \left\langle 1+\varphi+\bar{\phi}_0, \ln(1+\varphi+\bar{\phi}_0)\right\rangle_\Omega + \left\langle 1-\varphi-\bar{\phi}_0, \ln(1-\varphi-\bar{\phi}_0)\right\rangle_\Omega\end{aligned}$$

$$-\alpha\left\langle\varphi+\bar{\phi}_0, 3\phi^n-3\phi^{n-1}+\phi^{n-2}\right\rangle_\Omega+\frac{3A\tau^4}{11}\left\|\nabla_{h,(p)}D_3\varphi\right\|_2^2. \tag{3.4}$$

$\mathcal{F}^n$是定义在

$$\mathring{A}_h:=\left\{\varphi\in\mathring{\mathbf{M}}_{\mathrm{per}}\mid -1-\bar{\phi}_0\leqslant\varphi\leqslant 1-\bar{\phi}_0\right\}\subset\mathbb{R}^{N^3} \tag{3.5}$$

上的函数. 很显然当$\varphi\in\mathring{A}_h$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$\mathring{A}_h$最小值的存在性.

对于$\delta\in(0,\frac{1}{2})$, 考虑下面的闭区间:

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

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

步骤3 下面我们证明, 当δ足够小的时候, 最小值点不可能在$\mathring{A}_{h,\delta}$ 的边界上取到, 即最小值点$\psi\in\mathring{A}_{h,\delta}$ 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$\mathring{A}_{h,\delta}$ 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$\overrightarrow{\alpha_0}=(i_0,j_0,k_0)$, 满足$|\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}+\bar{\phi}_0|=1-\delta$. 首先我们假设$\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}+\bar{\phi}_0=\delta-1$, 使得$\varphi^*$在$\overrightarrow{\alpha_0}$ 处有全局最小值. 假设φ^* 在格点$\overrightarrow{\alpha_1}=(i_1,j_1,k_1)$ 处达到最大值. 因为$\varphi^*\in\mathring{A}_{h,\delta}$, 所以$\bar{\varphi}^*=0$. 显然有:

$$\bar{\phi}_0\leqslant\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}}+\bar{\phi}_0\leqslant 1-\delta. \tag{3.7}$$

因为$\mathcal{F}^n$在$\mathring{A}_{h,\delta}$上光滑, 对所有$\psi\in\mathring{\mathbf{M}}_{\mathrm{per}}$, 计算$\mathcal{F}^n$沿着$\psi$的方向导数:

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

选取方向$\psi\in\mathring{\mathbf{M}}_{\mathrm{per}}$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

$$\frac{1}{h^3}d_s\mathcal{F}^n\left(\varphi^*+s\psi\right)|_{s=0}:=\mathcal{G}(\varphi^*)_{\overrightarrow{\alpha_0}}-\mathcal{G}(\varphi^*)_{\overrightarrow{\alpha_1}}, \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\varphi^*)_{\overrightarrow{\alpha}}:=&\frac{1}{\tau}\left(-\Delta_{h,(p)}\right)^{-1}\left(\frac{11}{6}(\varphi^*+\bar{\phi}_0)-3\phi^n+\frac{3}{2}\phi^{n-1}-\frac{1}{3}\phi^{n-2}\right)_{\overrightarrow{\alpha}}\\&+\ln\left(1+\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}+\bar{\phi}_0\right)-\ln\left(1-\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}-\bar{\phi}_0\right)-(\varepsilon^2+\frac{11}{6}A\tau^2)\Delta_{h,(p)}\varphi^*_{\overrightarrow{\alpha}}\\&-A\tau^2\Delta_{h,(p)}\left(-3\phi^n+\frac{3}{2}\phi^{n-1}-\frac{1}{3}\phi^{n-2}\right)_{\overrightarrow{\alpha}}.\end{aligned} \tag{3.10}$$

为了简化表示, 我们令$\phi^*=\varphi^*+\bar{\phi}_0$. 因为$\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}=-1+\delta$ 且$\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}}\geqslant\bar{\phi}_0$, 我们可以得到不等式

$$\ln\left(1+\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}\right)-\ln\left(1-\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}\right)-\ln\left(1+\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}}\right)+\ln\left(1-\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}}\right)\leqslant\ln\frac{\delta}{2-\delta}-\ln\frac{1+\bar{\phi}_0}{1-\bar{\phi}_0}, \tag{3.11}$$

$$-1+\delta=\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}}\leqslant\phi^*_{i,j,k}\leqslant\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}},\quad\forall(i,j,k). \tag{3.12}$$

由最值点的性质可得

$$\Delta_{h,(2)}\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}} \geqslant 0, \qquad \Delta_{h,(2)}\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}} \leqslant 0, \tag{3.13}$$

$$\Delta_{h,(4)}\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_0}} \geqslant -\frac{4}{h^2}, \qquad \Delta_{h,(4)}\phi^*_{\overrightarrow{\alpha_1}} \leqslant \frac{4}{h^2}, \tag{3.14}$$

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

$$-\Delta_{h,(p)}\check{\check{\phi}}^{n+1}_{\overrightarrow{\alpha_0}} \geqslant -\frac{232M}{3h^2}, \qquad -\Delta_{h,(p)}\check{\check{\phi}}^{n+1}_{\overrightarrow{\alpha_1}} \leqslant \frac{232M}{3h^2}, \tag{3.15}$$

$$-14M \leqslant \check{\phi}^{n+1}_{\overrightarrow{\alpha_0}} - \check{\phi}^{n+1}_{\overrightarrow{\alpha_1}} \leqslant 14M, \qquad \left\|\check{\check{\phi}}^{n+1}\right\|_\infty \leqslant \frac{29}{6}M. \tag{3.16}$$

根据引理 2.1, 引理 2.2可得:

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

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

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

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$\tau$ 给定, 我们可以取足够小的$\delta \in (0, \frac{1}{2})$, 使其满足

$$\ln\frac{\delta}{2-\delta} - \ln\frac{1+\bar{\phi}_0}{1-\bar{\phi}_0} + \hat{C}_1 \leqslant 0. \tag{3.19}$$

因此, 当δ满足(3.19), 有

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

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, 我们可以证明当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:

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

因此, 存在一个$\delta_0 \in (0, \frac{1}{2})$, 使得任意$\delta \in (0, \delta_0]$ 时, $\mathcal{F}^n$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 参考 [12], 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. 下面我们证明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, 则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, 任意$\delta \in (0, \delta_0]$, 我们用φ^δ表示$\mathcal{F}^n$在$\mathring{A}_{h,\delta}$ 上的唯一最小值点. 因为$\mathring{A}_{h,\delta_0} \subset \mathring{A}_{h,\delta}$, 所以有$\mathcal{F}^n(\varphi^\delta) \leqslant \mathcal{F}^n(\varphi^*)$. 下面我们考虑两种情况.

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

情况2 $\exists \widetilde{\delta} \in (0, \delta_0]$, 使得$\mathcal{F}^n$在$\mathring{A}_{h,\widetilde{\delta}}$ 上的最小值点, 记做φ^{**}, 使得$\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) < \mathcal{F}^n(\varphi^*)$. 此时, 根据步骤3, 因为$\varphi^{**}$ 不可能在边界取到, 所以我们能找到一个常数$\delta^{**} > \widetilde{\delta}$, 使得$\|\varphi^{**} + \bar{\phi}_0\|_\infty = 1 - \delta^{**}$. 另外, 因为$\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) < \mathcal{F}^n(\varphi^*)$, 我们有$\delta^{**} < \delta_0$. 下面我们用$\varphi^q$表示$\mathcal{F}^n$在$\mathring{A}_{h,\delta^{**}}$上的最小值点. 由步骤3 可知$\|\varphi^q + \bar{\phi}_0\|_\infty < 1 - \delta^{**}$, 因此表明$\varphi^q \neq \varphi^{**}$. 一方面, 因为$\varphi^{**} \in \mathring{A}_{h,\delta^{**}}$, 则$\mathcal{F}^n(\varphi^q) \leqslant \mathcal{F}^n(\varphi^{**})$. 另一方面, 因为$\mathring{A}_{h,\delta^{**}} \subset \mathring{A}_{h,\widetilde{\delta}}$, 所以$\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) \leqslant \mathcal{F}^n(\varphi^q)$. 因此$\mathcal{F}^n(\varphi^{**}) = \mathcal{F}^n(\varphi^q)$, 所以$\varphi^q$ 也是$\mathcal{F}^n$在$\mathring{A}_{h,\widetilde{\delta}}$上的最小值点. 由于$\mathring{A}_{h,\widetilde{\delta}}$ 最小值点的唯一性, $\varphi^q = \varphi^{**}$, 这引出矛盾. 所以情况2不存在. 因此, 唯一性证毕.

综上, 定理 3.1证毕. □

4 能量稳定性证明

离散能量定义为:

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

对于能量稳定性我们有如下定理:

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

$$\check{E}_h\left(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}\right) \leqslant \check{E}_h\left(\phi^n, \phi^{n-1}, \phi^{n-2}\right), \tag{4.2}$$

对于$\forall n \geqslant 2$, 有

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

对于三阶外推项, 有如下的分解:

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

因而:

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

结合估计(4.4)-(4.9), 我们有下面的不等式:

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

当A满足$A\geqslant\frac{27\alpha^4}{32}\varepsilon^{-2}$时, 有$\frac{\varepsilon^2}{2}+\frac{A\tau^2}{3}\geqslant 2\sqrt{\frac{9\alpha^4}{64}}\tau=\frac{3\alpha^2}{4}\tau$. 因此我们得到:

$$
\left(\frac{\varepsilon^2}{2}+\frac{A\tau^2}{3}\right)\|\nabla_h(\phi^{n+1}-\phi^n)\|_2^2-\frac{\alpha}{2}\|\phi^{n+1}-\phi^n\|_2^2+\frac{1}{3\tau}\|\phi^{n+1}-\phi^n\|_{-1,h}^2
$$

$$
\begin{aligned}
&\geqslant \frac{3\alpha^2}{4}\tau\|\nabla_h(\phi^{n+1}-\phi^n)\|_2^2+\frac{1}{3\tau}\|\phi^{n+1}-\phi^n\|_{-1,h}^2-\frac{\alpha}{2}\|\phi^{n+1}-\phi^n\|_2^2\\
&\geqslant \frac{\alpha}{2}\|\phi^{n+1}-\phi^n\|_2^2. \qquad (4.11)
\end{aligned}
$$

定理证毕. □

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

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

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

在本节, 我们主要给出空间二阶格式的定理证明. 四阶格式的收敛性的定理证明与二阶格式类似, 我们不再重复过程, 只在定理5.4 中给出结论. 在下面的记号中, ∇_h, Δ_h等符号均表示二阶空间差分对应的算子.

设Φ是方程(1.3)-(1.4) 的解. 我们假设真解Φ具有足够的光滑性:

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

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

$$\|\Phi\|_\infty \leqslant 1-4\delta. \qquad (5.2)$$

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

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

由(5.3), 我们可以得到当h足够小时, Fourier投影满足

$$\|\Phi_N\|_\infty \leqslant 1-2\delta. \qquad (5.4)$$

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$\Phi_h^n$为$\Phi^n$). 对于这样的Fourier投影, 质量守恒性质是仍然成立的:

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

另一方面, (2.46)-(2.47)给出的数值解也是质量守恒的, 因而我们有如下的等式:

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

定义误差$e^n := \Phi^n - \phi^n$. 由以上的质量守恒性质, $\langle e^n,1\rangle_\Omega = 0$, 因此, $\|e^n\|_{-1,(2),h}$是良定义的. 我们将定理的证明主要分为下面三个小节来说明.

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)-(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$\tau$足够小时，误差有下面的收敛性估计:

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

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}, Φ^{n-2}代入方程(2.46), 我们有下面的误差估计:

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

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

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

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

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

并将j从3到ℓ求和, 沿用等式(2.41)中的记号, 可以得到:

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

其中,

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

将等式(5.10)和$2\left(-\Delta_h\right)^{-1}e^\ell$做离散内积:

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

两边同时对ℓ从3到n求和,

$$2\sum_{\ell=3}^{n}\left\langle e^{\ell}-e^{\ell-1},(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}=-2\sum_{\ell=3}^{n}\left\langle e_I^{(\ell)},(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}$$
$$+2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\mathcal{J}^j,(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}+2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}R^j,(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega},\tag{5.14}$$

对左边使用极化恒等式:

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

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

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

其中,

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

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

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

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

$$I_5=-A\tau^3\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\Delta_h^2D_3e^j,(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}.\tag{5.21}$$

对于I_1, 由于函数$f(\phi)=\ln(1+\phi)$在$(-1,1)$上导数$f'(\phi)=\frac{1}{1+\phi}\geqslant 0$, 由拉格朗日中值定理，存在$\xi\in(-1,1)$:

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

由 [51]中的定理 3.1的证明, 当$\beta=\beta(x)\leqslant 0$时, DOC-核$\theta_j$ 有不等式$\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}\left\langle\beta v^j,v^{\ell}\right\rangle_{\Omega}\leqslant 0$. 因此

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

同理, 对于I_2, 函数$f(\phi)=\ln(1-\phi)$ 在$(-1,1)$上导数$f'(\phi)=-\frac{1}{1-\phi}\leqslant 0$, 由拉格朗日中值定理，存在$\xi_1\in(-1,1)$因此:

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

对于I_3, 我们有:

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

其中$\eta_0, \tilde{C}_1$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:

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

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, 我们有:

$$
I_5=-A\tau^2\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\nabla_h\left(\frac{11}{6}e^j-3e^{j-1}+\frac{3}{2}e^{j-2}-\frac{1}{3}e^{j-3}\right), \nabla_h e^{\ell}\right\rangle_{\Omega} \tag{5.27}
$$

$$
\begin{aligned}
& \leqslant A\tau^2\left(\eta_1\sum_{\ell=3}^{n}\|\tau\nabla_h D_3 e^{\ell}\|^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2\right) \\
& \leqslant A\tau^2\left(36\eta_1\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=0}^{3}\|\nabla_h e^{\ell-j}\|^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2\right) \\
& \leqslant A\tau^2\left(\left(144\eta_1+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\right)\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2+36\eta_1\left(3\|\nabla_h e^2\|^2+2\|\nabla_h e^1\|^2+\|\nabla_h e^0\|^2\right)\right),
\end{aligned} \tag{5.28}
$$

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$e_I^{(\ell)}$, 我们有:

$$
\begin{aligned}
-2\sum_{\ell=3}^{n}\left\langle e_I^{(\ell)}, (-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega} & \leqslant \left(\eta_2\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e_I^{(\ell)}\right\|_{-1,(2),h}^2+\frac{1}{\eta_2}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2\right) \\
& =\eta_2\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\sum_{k=1}^{2}\nabla_\tau e^k\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}b_{j-k}\right\|_{-1,(2),h}^2+\frac{1}{\eta_2}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2 \\
& \leqslant C_2\eta_2\left(\left\|\nabla_\tau e^1\right\|_{-1,(2),h}^2+\left\|\nabla_\tau e^2\right\|_{-1,(2),h}^2\right)+\frac{1}{\eta_2}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2 \\
& \leqslant C_2\eta_2\left(2\left\|e^1\right\|_{-1,(2),h}^2+\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2\right)+\frac{1}{\eta_2}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2,
\end{aligned} \tag{5.29}
$$

其中倒数第二个不等式我们利用当$j \geqslant 4$时, $b_j=0$的性质. 由(2.40) 可得:

$$
C_2=2\left(\sum_{\ell=3}^{n}\left|\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}b_{j-1}\right|^2+\sum_{\ell=3}^{n}\left|\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}b_{j-2}\right|^2\right)
$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\left(\sum_{\ell=3}^{n}\|\delta_{\ell 1}-\theta_{\ell-2}b_1+\theta_{\ell-1}b_0\|^2+\sum_{\ell=3}^{n}|\delta_{\ell 2}-\theta_{\ell-2}b_0|^2\right)\\
&= 2\left(\sum_{\ell=3}^{n}|-\theta_{\ell-2}b_1+\theta_{\ell-1}b_0|^2+b_0^2\sum_{\ell=3}^{n}\|\theta_{\ell-2}\|^2\right)\leqslant 40\sum_{\ell=2}^{n}|\theta_{\ell-1}|^2\leqslant 60.
\end{aligned}\tag{5.30}
$$

最后一个不等式运用了引理 2.3. 对于截断误差项R^j:

$$
2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}R^j,(-\Delta_h)^{-1}e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}\leqslant\tau\Big(\eta_3\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_{-1,(2),h}^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_3}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2\Big),\tag{5.31}
$$

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)-(5.31)代入(5.14), 有:

$$
\begin{aligned}
&\|e^n\|_{-1,(2),h}^2-\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2+2\varepsilon^2\tau C_1\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2\\
\leqslant&\tau\left(\eta_3\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_{-1,(2),h}^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_3}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2\right)+C_2\eta_2\left(2\left\|e^1\right\|_{-1,(2),h}^2+\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2\right)\\
&+2\alpha\tau\left(49\eta_0\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell-1}\right\|_{-1,(2),h}^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_0}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\nabla_h e^{\ell}\right\|^2+49\eta_0\left(3\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2+2\left\|e^1\right\|_{-1,(2),h}^2\right)\right)\\
&+2A\tau^3\left(\left(144\eta_1+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\right)\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2+36\eta_1\left(3\|\nabla_h e^2\|^2+2\|\nabla_h e^1\|^2\right)\right)+\frac{1}{\eta_2}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2\\
=&\tau\eta_3\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_{-1,(2),h}^2+\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3}+49\eta_0\tau+\frac{1}{\eta_2}\right)\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2\\
&+\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3}+\frac{1}{\eta_2}\right)\|e^n\|_{-1,(2),h}^2+\left(\frac{2\alpha\tau\tilde{C}_1}{\eta_0}+2A\tau^3\left(144\eta_1+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\right)\right)\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2+\bar{C}_1,
\end{aligned}\tag{5.32}
$$

其中常数$\bar{C}_1$满足:

$$
\bar{C}_1=(294\alpha\tau\eta_0+2C_2\eta_2)\left(3\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2+2\left\|e^1\right\|_{-1,(2),h}^2\right)+72A\tau^3\eta_1\left(3\|\nabla_h e^2\|^2+2\|\nabla_h e^1\|^2\right).\tag{5.33}
$$

合并同类项可得:

$$
\begin{aligned}
&\left(1-\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3}-\frac{1}{\eta_2}\right)\|e^n\|_{-1,(2),h}^2+2\left(\varepsilon^2\tau C_1-\frac{\alpha\tau\tilde{C}_1}{\eta_0}-A\tau^3\left(144\eta_1+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_1}\right)\right)\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2\\
\leqslant&\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2+\tau\eta_3\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_{-1,(2),h}^2+\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3}+49\eta_0\tau+\frac{1}{\eta_2}\right)\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2+\bar{C}_1.
\end{aligned}\tag{5.34}
$$

选取如下的η_0，η_1，η_2，η_3: $\eta_0=\frac{3\alpha\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}$，$\eta_1=\sqrt{\frac{\tilde{C}_1}{144}}$，$\eta_2=3$, $\eta_3=3\tilde{C}_1$, 当$\tau\leqslant\sqrt{\frac{C_1\varepsilon^2}{72A\sqrt{\tilde{C}_1}}}$ 时, 有:

$$
\begin{aligned}
\|e^n\|_{-1,(2),h}^2+2\varepsilon^2\tau C_1\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^{\ell}\|^2\leqslant&3\left\|e^2\right\|_{-1,(2),h}^2+3\tau\eta_3\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_{-1,(2),h}^2\\
&+3\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_3}+49\eta_0\tau+\frac{1}{\eta_2}\right)\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^{\ell}\right\|_{-1,(2),h}^2+3\bar{C}_1.
\end{aligned}\tag{5.35}
$$

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:

$$\|e^n\|_{-1,(2),h} + \left(\varepsilon^2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^\ell\|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leqslant C(\tau^3+h^2), \tag{5.36}$$

其中$C>0$是与τ, h和N无关的常数. 定理证毕. □

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)-(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$\tau$足够小且满足$c_1h\leqslant\tau\leqslant c_2h$ 时, 有下面的收敛性估计:*

$$\|e^n\|_2 \leqslant C\left(\tau^{\frac{11}{4}}+h^{\frac{7}{4}}\right), \tag{5.37}$$

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

$$\|\phi^n\|_\infty \leqslant 1-\delta, \tag{5.38}$$

证明. 由定理 5.2的证明可得:

$$\|e^n\|_{-1,(2),h} \leqslant C(\tau^3+h^2), \qquad \sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^\ell\|_2^2 \leqslant C(\tau^6+h^4). \tag{5.39}$$

因为$\tau\geqslant c_1h$,

$$\|\nabla_h e^n\|_2 \leqslant C(\tau^{\frac{5}{2}}+h^{\frac{3}{2}}). \tag{5.40}$$

根据离散的插值不等式可得:

$$\|e^n\| \leqslant \|e^n\|_{-1,(2),h}^{\frac{1}{2}}\|\nabla_h e^n\|_2^{\frac{1}{2}} \leqslant C(\tau^{\frac{3}{2}}+h^1)(\tau^{\frac{5}{4}}+h^{\frac{3}{4}}) \leqslant C(\tau^{\frac{11}{4}}+h^{\frac{7}{4}}). \tag{5.41}$$

又因为$\tau\leqslant c_2h$, 且$h<1$, 由逆不等式:

$$\|e^n\|_\infty \leqslant Ch^{-\frac{3}{2}}\|e^n\|_2 \leqslant Ch^{-\frac{3}{2}}(\tau^{\frac{11}{4}}+h^{\frac{7}{4}}) \leqslant C(\tau^{\frac{5}{4}}+h^{\frac{1}{4}}) \leqslant Ch^{\frac{1}{4}}. \tag{5.42}$$

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

$$\|\phi^n\|_\infty \leqslant \|\Phi^n-\phi^n\|_\infty + \|\Phi^n\|_\infty = \|e^n\|_\infty + \|\Phi^n\|_\infty \leqslant 1-\delta. \tag{5.43}$$

定理证毕. □

注5.1. *类似于定理 5.2的证明, 在四阶格式下, 我们可以得到*

$$\|e^n\|_{-1,(4),h} + \left(\varepsilon^2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\|\nabla_h e^\ell\|_2^2\right)^{\frac{1}{2}} \leqslant C(\tau^3+h^4). \tag{5.44}$$

参照本小节的定理, 由于更高阶的误差估计, 我们仍然可以得到在τ足够小时, 数值解的严格分离性以及误差的一个粗估计:

$$\|e^n\|_2 \leqslant C\left(\tau^{\frac{11}{4}}+h^{\frac{15}{4}}\right). \tag{5.45}$$

注5.2. *注意到, 网比条件$c_1h\leqslant\tau\leqslant c_2h$中的$c_1h\leqslant\tau$可以通过使用高阶渐进展开的方法 [12, 54, 55]去掉, 具体的进展见 [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)-(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$\tau$ 和h满足$c_1 h \leqslant \tau \leqslant c_2 h$, 且$\tau$充分小时, 数值解有下面的收敛性估计:

$$\|e^n\|_2 + \left(\varepsilon^2 \tau \sum_{\ell=3}^{n} \|\Delta_h e^\ell\|^2\right)^{\frac{1}{2}} \leqslant C(\tau^3 + h^2), \tag{5.46}$$

其中C, c_1和c_2是与τ, h和N无关的正常数.

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

$$2\sum_{\ell=3}^{n} \left\langle e^\ell - e^{\ell-1}, e^\ell \right\rangle_\Omega = -2\sum_{\ell=3}^{n} \left\langle e_I^{(\ell)}, e^\ell \right\rangle_\Omega + 2\tau \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\mathcal{J}^j, e^\ell \right\rangle_\Omega + 2\tau \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j} R^j, e^\ell \right\rangle_\Omega. \tag{5.47}$$

右边第二项:

$$2\tau \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\mathcal{J}^j, e^\ell \right\rangle_\Omega = 2\tau(J_1 + J_2 + J_3 + J_4 + J_5), \tag{5.48}$$

其中,

$$J_1 = \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\Delta_h(\ln(1+\Phi^j) - \ln(1+\phi^j)), e^\ell \right\rangle_\Omega, \tag{5.49}$$

$$J_2 = -\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\Delta_h(\ln(1-\Phi^j) - \ln(1-\phi^j)), e^\ell \right\rangle_\Omega, \tag{5.50}$$

$$J_3 = -\alpha \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\Delta_h \left(3e^{j-1} - 3e^{j-2} + e^{j-3}\right), e^\ell \right\rangle_\Omega, \tag{5.51}$$

$$J_4 = -\varepsilon^2 \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\Delta_h^2 e^j, e^\ell \right\rangle_\Omega, \tag{5.52}$$

$$J_5 = -A\tau^3 \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\Delta_h^2 D_3 e^j, e^\ell \right\rangle_\Omega. \tag{5.53}$$

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

$$\begin{aligned} J_1 &= \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \left\langle \theta_{\ell-j}\left(\frac{1}{1+\xi}\left(\Phi^j - \phi^j\right)\right), \Delta_h e^\ell \right\rangle_\Omega \leqslant \sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell} \theta_{\ell-j} \left\|\frac{1}{1+\xi}\right\|_\infty \|e^j\|_2 \|\Delta_h e^\ell\|_2 \\ &\leqslant \eta_4 \sum_{\ell=3}^{n} \|e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_4} \sum_{\ell=3}^{n} \|\Delta_h e^\ell\|_2^2. \end{aligned} \tag{5.54}$$

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

$$J_2 \leqslant \eta_5 \sum_{\ell=3}^{n} \|e^\ell\|_2^2 + \frac{\tilde{C}_1}{\eta_5} \sum_{\ell=3}^{n} \|\Delta_h e^\ell\|_2^2. \tag{5.55}$$

对于J_3, 结合引理 2.4:

$$\begin{aligned} J_3 \leqslant & \alpha\left(\eta_6 \sum_{\ell=3}^{n}\left\|\left(3e^{j-1}-3e^{j-2}+e^{j-3}\right)\right\|_2^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_6}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^{\ell}\right\|_2^2\right) \\ \leqslant & \alpha\left(49\eta_6\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^{\ell}\right\|_2^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_6}\left\|\Delta_h e^{n}\right\|_2^2+49\eta_6\left(3\left\|e^2\right\|_2^2+2\left\|e^1\right\|_2^2\right)\right). \end{aligned} \tag{5.56}$$

对于J_4, 同理利用引理 2.3 有:

$$J_4=-\varepsilon^2\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\Delta_h^2 e^j,e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}=\varepsilon^2\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\Delta_h e^j,\Delta_h e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}\leqslant\varepsilon^2 C_1\left(\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^{\ell}\right\|_2^2\right). \tag{5.57}$$

对于J_5, 类似上面的分析, 并运用引理 2.4, 有

$$\begin{aligned} J_5 = & -A\tau^2\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}\Delta_h\left(\frac{11}{6}e^j-3e^{j-1}+\frac{3}{2}e^{j-2}-\frac{1}{3}e^{j-3}\right),\Delta_h e^{\ell}\right\rangle_{\Omega} \\ \leqslant & A\tau^2\left(\eta_7\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\tau\Delta_h D_3 e^{\ell}\right\|_2^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_7}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^{\ell}\right\|_2^2\right) \\ \leqslant & A\tau^2\left(\left(\eta_7+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_7}\right)\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^{\ell}\right\|_2^2+C_3\eta_7\left(3\left\|\Delta_h e^2\right\|_2^2+2\left\|\Delta_h e^1\right\|_2^2\right)\right). \end{aligned} \tag{5.58}$$

对于误差项$e_I^{(\ell)}$, 我们有:

$$\begin{aligned} -2\sum_{\ell=3}^{n}\left\langle e_I^{(\ell)},e^{\ell}\right\rangle_{\Omega} \leqslant & \eta_8\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\sum_{k=1}^{2}\nabla_\tau e^k\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}b_{j-k}\right\|_2^2+\frac{1}{\eta_8}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_2^2 \\ \leqslant & C_2\eta_8\left(\left\|\nabla_\tau e^1\right\|_2^2+\left\|\nabla_\tau e^2\right\|_2^2\right)+\frac{1}{\eta_8}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_2^2 \\ \leqslant & C_2\eta_8\left(\left\|e^1\right\|_2^2+2\left\|e^2\right\|_2^2\right)+\frac{1}{\eta_8}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_2^2. \end{aligned} \tag{5.59}$$

对于截断误差项R^j, 结合引理 2.4:

$$2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\left\langle\theta_{\ell-j}R^j,e^{\ell}\right\rangle_{\Omega}\leqslant 2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\sum_{j=3}^{\ell}\theta_{\ell-j}\left\|R^j\right\|_2\left\|e^{\ell}\right\|_2\leqslant\tau\Big(\eta_9\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_2^2+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_9}\sum_{\ell=3}^{n}\left\|e^{\ell}\right\|_2^2\Big). \tag{5.60}$$

将(5.54)-(5.60)代入(5.47), 并利用极化恒等式, 我们有:

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

其中常数$\bar{C}_2$满足$\bar{C}_2=(98\tau\alpha\eta_6+C_2\eta_8)\left(3\left\|e^2\right\|_2^2+2\left\|e^1\right\|_2^2\right)+2A\tau^3C_3\eta_7\tau\left(3\left\|\Delta_h e^1\right\|_2^2+2\left\|\Delta_h e^2\right\|_2^2\right)$. 合并同类项可得:

$$\begin{aligned}&\left(1-\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_9}-\frac{1}{\eta_8}-2\tau\left(\eta_4+\eta_5\right)\right)\left\|e^n\right\|_2^2\\&\quad+\left(\varepsilon^2\tau C_1-2\alpha\tau\frac{\tilde{C}_1}{\eta_6}-2A\tau^3\left(\eta_7+\frac{\tilde{C}_1}{\eta_7}\right)-2\tau\tilde{C}_1\left(\frac{1}{\eta_4}+\frac{1}{\eta_5}\right)\right)\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^\ell\right\|_2^2\\&\leqslant\left\|e^2\right\|_2^2+\tau\eta_9\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_2^2+\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_9}+98\alpha\tau\eta_6+\frac{1}{\eta_8}+2\tau\left(\eta_4+\eta_5\right)\right)\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^\ell\right\|_2^2+\bar{C}_2.\end{aligned}\tag{5.62}$$

选取如下的$\eta_4,\ldots,\eta_9$: $\eta_4=\eta_5=\frac{16\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}$, $\eta_6=\frac{8\alpha\tilde{C}_1}{C_1\varepsilon^2}$, $\eta_7=\sqrt{\tilde{C}_1}$, $\eta_8=2$, $\eta_9=\frac{1}{64}\varepsilon^2\tilde{C}_1$. 当$\tau$满足$\tau\leqslant\min\left(\sqrt{\frac{\varepsilon^2C_1}{8A\sqrt{\tilde{C}_1}}},\frac{C_1\varepsilon^2}{256\tilde{C}_1}\right)$时,

$$\begin{aligned}\left\|e^n\right\|_2^2+\varepsilon^2\tau C_1\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_h e^\ell\right\|_2^2\leqslant&4\left\|e^2\right\|_2^2+4\tau\eta_9\sum_{\ell=3}^{n}\left\|R^j\right\|_2^2+4\bar{C}_2\\&+4\left(\frac{\tilde{C}_1\tau}{\eta_9}+98\alpha\tau\eta_6+\frac{1}{\eta_8}+2\tau\left(\eta_4+\eta_5\right)\right)\sum_{\ell=3}^{n-1}\left\|e^\ell\right\|_2^2.\end{aligned}\tag{5.63}$$

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:

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

其中$C>0$是与τ, h和N无关的常数. 定理证毕. □

注5.3. *仿照上面的证明方法, 对于四阶格式, 我们也可以得到相应的结论. 感兴趣的读者可以参见 [48].*

定理5.4. *给定初值$\Phi^0\in H^7(\Omega)$, 假设方程(1.3)-(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$\tau$和$h$ 满足$c_1h\leqslant\tau\leqslant c_2h$, 且$\tau$充分小时, 对于四阶格式, 数值解有下面的收敛性估计:*

$$\left\|e^n\right\|_2+\left(\varepsilon^2\tau\sum_{\ell=3}^{n}\left\|\Delta_{h,(4)}e^\ell\right\|^2\right)^{\frac{1}{2}}\leqslant C(\tau^3+h^4),\tag{5.65}$$

其中C, c_1和c_2是与τ, h和N无关的正常数.

6 数值算例

6.1 收敛阶测试

本节我们展示上述提及的三阶精度的BDF格式的数值算例. 我们取计算区间是$\Omega=(0,1)^2$, 设置精确的相位变量为

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

表 1: 空间二阶时间三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		1.968×10^{-1}		1.968×10^{-1}
9	2.941	1.812×10^{-2}	2.941	1.812×10^{-2}
16	3.018	3.193×10^{-3}	3.018	3.192×10^{-3}
25	3.002	8.361×10^{-4}	3.002	8.361×10^{-4}
36	3.001	2.799×10^{-4}	3.001	2.800×10^{-4}
49	3.000	1.110×10^{-4}	3.000	1.111×10^{-4}
64	3.000	4.982×10^{-5}	3.000	4.981×10^{-5}

表 2: 空间二阶时间三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		1.119×10^{-1}		1.120×10^{-1}
16	2.157	2.678×10^{-2}	2.159	2.677×10^{-2}
32	2.016	6.600×10^{-3}	2.016	6.620×10^{-3}
64	2.004	1.700×10^{-3}	2.004	1.650×10^{-3}
128	2.001	4.122×10^{-4}	2.001	4.122×10^{-4}
256	2.000	1.030×10^{-4}	2.003	1.030×10^{-4}
512	2.000	2.576×10^{-5}	2.000	2.576×10^{-5}

为了使ϕ满足原始的PDE(1.3)-(1.4), 我们增加一个时间依赖的修正项. 接着, 用上述提出的三阶BDF格式求解(2.46)-(2.47). 时间网格取为N_T, 为了证明时间方向的精确性, 我们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$\ln|e|=\ln(CT^3)-k\ln N_T$, 因此下面我们画图都以$\ln N_T$ 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 空间二阶精度

对于空间网格二阶精度格式, 我们取时间方向步长为$\tau=\frac{1}{(k+1)^2}$, 空间网格数为$h=\frac{1}{(k+1)^3}$, $k=1,\ldots,7$. 表 1中的左子图是验证时间精度的结果. 接着, 我们固定时间步长$\tau=\frac{1}{1000}$, 空间步长取$h=\frac{1}{2^{k+2}}$, $k=1,\ldots,7$. 表 2是验证空间精度的结果. 从表1和表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的相近.

表 3: 空间四阶时间三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		9.813×10^{-3}		9.821×10^{-3}
81	2.978	7.842×10^{-5}	2.977	7.859×10^{-5}
256	2.997	2.492×10^{-6}	2.997	2.498×10^{-6}
625	2.999	1.714×10^{-7}	2.999	1.718×10^{-7}
1296	3.000	1.922×10^{-8}	3.000	1.927×10^{-8}
2401	2.994	3.034×10^{-9}	2.994	3.041×10^{-9}
4096	2.976	6.189×10^{-10}	2.976	6.204×10^{-10}

表 4: 空间四阶时间三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		8.263×10^{-3}		8.272×10^{-3}
16	3.949	5.351×10^{-4}	3.947	5.363×10^{-4}
32	3.986	3.378×10^{-5}	3.985	3.387×10^{-5}
64	3.996	2.117×10^{-6}	3.996	2.123×10^{-6}
128	3.999	1.324×10^{-7}	3.999	1.328×10^{-7}
256	3.999	8.281×10^{-8}	3.999	8.304×10^{-8}
512	3.984	5.235×10^{-8}	3.983	5.250×10^{-8}

6.1.2 空间四阶精度

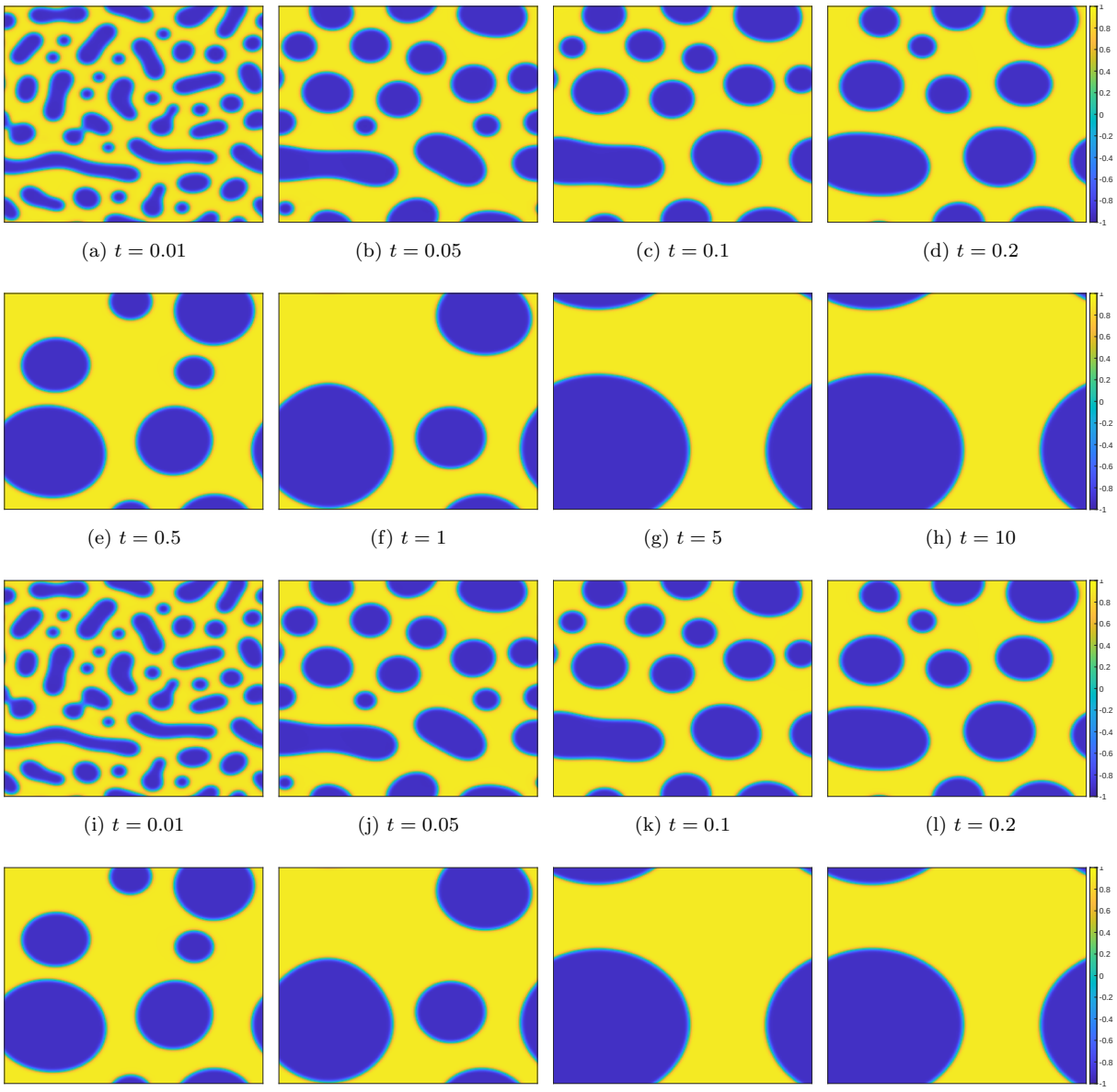
对于空间网格四阶精度, 我们取时间方向步长为$\tau=\frac{1}{(k+1)^4}$, 空间网格数为$h=\frac{1}{(k+1)^3}$, $k=1,\ldots,7$. 表 3是验证时间精度的结果. 接着, 我们固定时间步长$\tau=\frac{1}{10000}$, 空间步长取$h=\frac{1}{2^{k+2}}$, $k=1,\ldots,7$. 表 4是验证空间精度的结果. 从表3和表4中可以看出, 随着网格的加细, 时间方向的收敛阶一直维持在3左右, 空间方向的收敛阶一直维持在4左右. 且在ℓ^2范数和ℓ^∞范数意义下测试的收敛阶结果非常的相近.

6.2 粗化过程

6.2.1 二阶四阶空间格式对比

下面取$A=10000,\ \alpha=3.4,\ \tau=10^{-4},\ \varepsilon=0.01,\ T=10s$, 对于二阶空间网格, 相场随时间的变化如图 1所示: 从图1中可以看出, 二阶和四阶格式的相场变化基本没有差别.

接着画出上述二阶和四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常数, 使得能量为正, 见图 2. 其中蓝色实线代表空间二阶格式, 红色的圈代表空间四阶格式. 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



(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) $t = 10$

图 1: 二阶和四阶格式相场随时间的演化图. 其中前两行是二阶格式的相场演化图, 后两行是四阶格式的相场演化图.

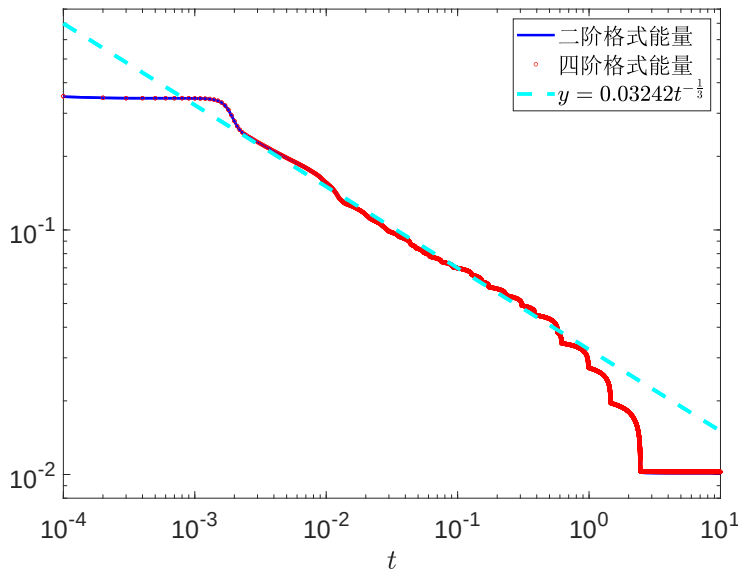


图 2: 空间二阶和四阶格式下, 能量随时间的变化图. 表面扩散系数$\varepsilon = 0.01$, $\alpha = 3.4$, 稳定化系数$A = 10000$.

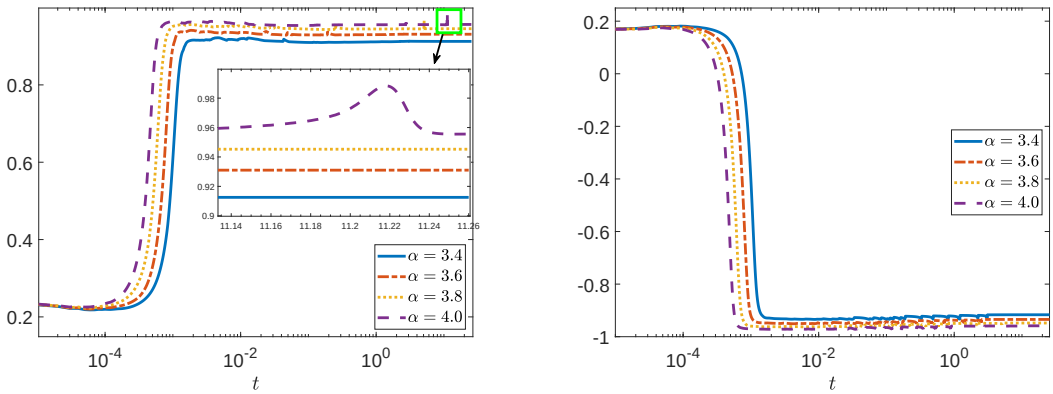
时, 下降速度减缓, 在$t = 1$秒后趋于稳定. 在一定时间范围内, 能量的下降曲线接近$O(t^{-\frac{1}{3}})$的下降速率.

6.2.2 不同α对比

本小节我们主要考虑不同的参数α中解的最大值和最小值的变化情况, 以观察数值解是否具有严格分离性. 其它的参数分别选取$\varepsilon = 0.01$, $h = 1/256$, 以及$A = 10000$. 这里选取$\alpha = 3.4$, 3.6, 3.8, 4, 并在同一个随机初值下进行模拟. 在时间方向, 我们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$\tau = 2 * 10^{-5}$的步长进行模拟, 以此类推, 每计算10000 个时间步后使时间步长增大两倍, 并最终计算到$T = 25.5s$以及$\tau = 1.28 * 10^{-3}$.

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, 其严格分离性是比较好的. 但当$\alpha = 3.8$和4 时, 数值解在某些时刻会突然出现最大值的跳跃. 我们以$\alpha = 4$ 为例子, 在$T = 12.22s$附近数值解的最大值出现了明显的增大, 此时对应的时间步长为$\tau = 6.4 * 10^{-4}$. 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$T = 10.9s$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.

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, 尤其是当解本身就比较靠近-1和1的时候. 对这类方程, 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.



(a) ϕ最大值的变化图　　(b) ϕ最小值的变化图

图 3: 不同的α下相参数的最大值(左图)和最小值(右图)随时间的变化关系.

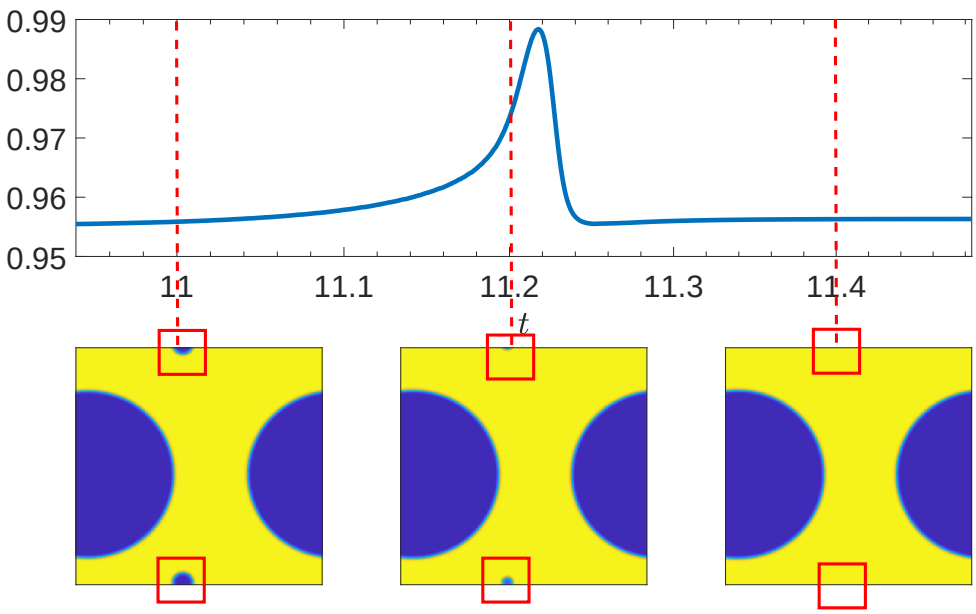


图 4: $\alpha = 4$时相参数最大值在$T = 11.2s$附近的变化图, 步长$\tau = 6.4 * 10^{-4}$. 图中分别给出了$T = 11s$, $T = 11.2s$ 以及$T = 11.4s$ 三个时刻的相图. 相变在这个时间段发生, 并且相参数最大值显著增大, 相变结束后又迅速下降回到正常值.

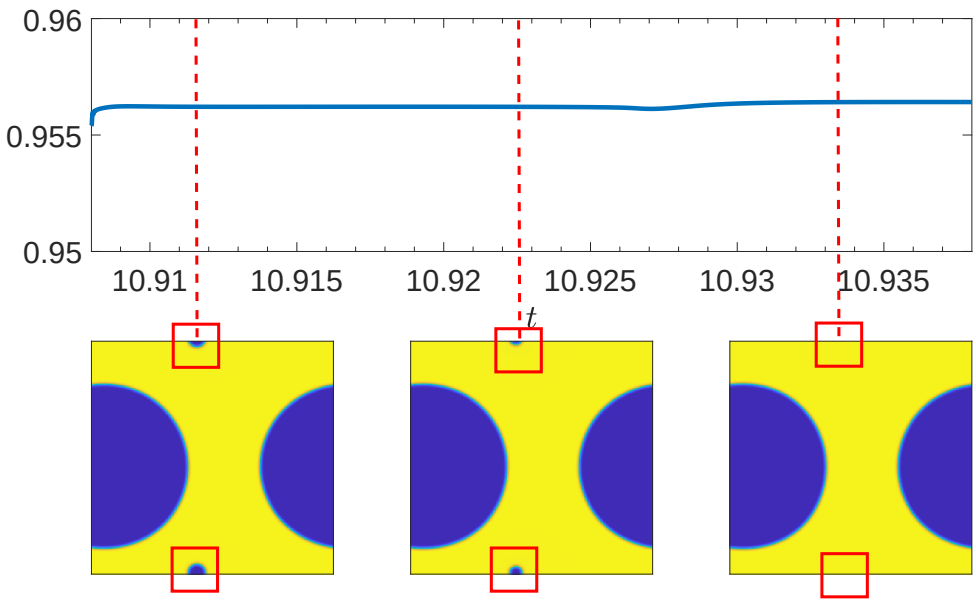


图 5: $\alpha = 4$时相参数最大值在$T = 10.923s$附近的变化图, 步长$\tau = 10^{-5}$. 图中分别给出了$T = 10.911s$, $T = 10.923s$ 以及$T = 10.933s$这三个时刻的相图. 相变在这个时间段发生, 并且相参数最大值并没有显著增大.

7 总结

本文给出了对数位式Cahn-Hilliard方程的BDF3有限差分格式. 在空间方向, 分别引入二阶和四阶两种差分网格, 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以及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 Abel H. On a diffuse interface model for two-phase flows of viscous, incompressible fluids with matched densities. Arch Ration Mech Anal, 2009, 194(2): 463-506

2 Abel H, Wilke M. Convergence to equilibrium for the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. Nonlinear Anal, 2007, 67(11): 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(6): A3703-A3727

4 Allen S M, Cahn J W. A microscopic therory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. Acta Metallurgica, 1979, 27(6): 1085-1095

5 Boettinger W J, Francfort G A, Marigo J J. Numerical experiments in revisited brittle fracture. J Mech Phys Solid, 2000, 48(4): 797-826

6 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. J Chem Phys, 1958, 28(2): 258-267

7 Cahn J W. Free energy of a nonuniform system. II. Thermodynamic basis. J Chem Phys, 1959, 30(5): 1121-1124.

8 Chen R, ji G H, Yang X F, et al. Decoupled energy stable schemes for phase field vesicle membrane mode. 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 Differ Equ, 2022, 38(6): 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(1): 60-93

11 Chen W B, Jing J Y, Wang C, et al. A positivity preserving, energy stable finite difference scheme for the Flory-Huggins-Cahn-Hilliard-Navier-Stokes system. J Sci Comput, 2022, 92(2): 1-24

12 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(3): 75-119

13 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(3): 1-27

14 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 Comput, 2016, 85(301): 2231-2257

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 C, Wang S F, et al. Energy stable numerical schemes for ternary Cahn-Hilliard system. J Sci Comput, 2020, 84(2): 1-36

17 Chen W B, Wang X, Yan Y, et al. A second order BDF numerical scheme with variable steps for the Cahn–Hilliard equation. SIAM J Numer Anal, 2019, 57(1): 495-525

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, 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 & Applications, 2022, 15(2)

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(3): 970-998

22 Cherfils L, Miranville A, Zelik S. The Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials. Milan J Math, 2011, 79(2):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(1): 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(3): 495-534

26 Doi M. Soft Matter Physics. Oxford University Press, Oxford, UK, 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, 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(2): 450-468

31 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(3): 537-538

32 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(2): 875-898

33 Du Q, Ju L, Li X, et al. Maximum bound principles for a class of semilinear parabolic equations and exponential time-differencing schemes. SIAM Rev, 2021, 63(2): 317-359

34 Elliott C M, Garcke H. On the Cahn-Hilliard equation with degenerate mobility. SIAM J Math Anal, 1996, 27: 404.

35 Feng L X, Tang T, Yang J. Stabilized Crank – Nicolson/Adams – Bashforth schemes for phase field models. East Asian J Appl Math, 2013, 3: 59 – 80

36 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(3): 1938-1967
37 Giorgini A, Grasselli M, Miranville A. The Cahn-Hilliard-Oono equation with singular potential. Math Models Methods Appl Sci, 2017, 27(13): 2485-2510
38 Giorgini A, Grasselli M, Miranville A, et al. The Cahn-Hilliard-Hele-Shaw system with singular potential. Ann Inst H Poincarë Anal Non Linëaire, 2018, 35(4): 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. 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(5): 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 Comput, 2023, 92(339): 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 Applied Sci, 2020, 30(12): 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 Applied Sci, 2022, 32(03): 457-495
48 Li Y H. A Third Order BDF Numerical Scheme For The Cahn-Hilliard Equation With Logarithmic Potential. MA.Sc 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(2): 1-26
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, 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(2): 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(3): 679-709
57 Miranville A, Zelik S. Robust exponential attractors for Cahn-Hilliard type equations with singular potentials. Math Methods Appl Sci, 2004, 27(5): 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 preprint 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(1): 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(8): 2788-2832
68 Xu J C, 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(2): 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(3): 1-28
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(6): 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(2):A1248 – A2172

A Third Order Positivity-Preserving And Energy Stable Numerical Schemes For The Cahn-Hilliard Equation With Logarithmic Potential

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

Abstract In this note, we propose and analyze a finite difference BDF3 scheme of Cahn-Hilliard equation with logarithmic Flory-Huggins potential. The second order and fourth order spatial grid are introduced in the same time and existence, uniqueness as well as positivity-preserving property are proved for both of the two spatial spaces. Unconditional energy stability is given via a new type of a 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, provided with linear CFL condition $c_1h\leqslant\tau\leqslant c_2h$. 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(2010) **35K35, 35K55, 65K10, 65M06, 65M12**

doi: 10. 1360/012011-XXX