arXiv:2302.02361v1 [math.NA] 5 Feb 2023

具有斜率选择的分子束外延模型的隐式变步长 BDF2 方法的误差分析

赵璇[1,],张海峰[1] 和孙红[1,2]

[1] 东南大学数学学院，南京 *210096*，中国[2] 南京工程学院数学与物理系，南-京 *211167*

摘要。我们推导出一种无条件稳定且收敛的变步长 BDF2 格式，用于求解具有斜率选择的 MBE 模型。近年来，变步长 BDF2 方法的离散正交卷积核常用于求解相场模型。本文进一步证明了关于这些核的若干新的向量形式不等式，尤其针对斜率选择模型中的非线性项。我们证明，在变时间步长设置下，全离散格式在时间和空间上的收敛阶均为二，且误差采用L^2 范数度量。通过在原自由能泛函的离散形式中添加一个小项构造修正能量，我们严格证明了能量耗散律。最后给出两个数值算例，其中包括一种自适应时间步进策略，以验证收敛阶和能量耗散律。

AMS 学科分类：35Q92, 65M06, 65M12, 74A50**关键词**：分子束外延生长、斜率选择、变步长 BDF2 格式、能量稳定性、收敛性。

1. 引言

过去几十年来，分子束外延（MBE）模型的动力学引起了化学、材料科学、数学等领域的广泛关注。外延生长过程提供了一种可控的方法，可为制造更小型晶体管所需的一些有吸引力的材料制备具有原子级锐利界面的横向异质结 [1,2]。来自不同尺度的原子模型、连续模型和混合模型被用于研究外延生长过程中表面形貌的演变。MBE 是生长半导体晶体和金属材料薄外延层最广泛使用的技术 [3]。此外，Nair 等人 [4]介绍了通过 MBE 在 (110)$NdGaO_3$ 衬底上生长超导Sr_2RuO_4 薄膜，其转变温度最高可达 1.8 K。

*通讯作者。电子邮箱： xuanzhao11@seu.edu.cn (X. Zhao), 220211744@seu.edu.cn(H. F. Zhang), sunhongzhal@126.com(H. Sun)

本文研究二维区域 $\Omega = (0, L)^2 \subset \mathrm{R}^2$ 上具有斜率选择的MBE模型。设$u(\mathbf{x},t)$ 为外延表面高度，空间变量为$\mathbf{x} \in \Omega$，时间变量为$t \geq 0$，则高度演化方程 [5] 表示如下

$$u_t + \delta \Delta^2 u - \nabla \cdot f(\nabla u) = 0, \ \ \mathbf{x} \in \Omega, \ 0 < t \leq T, \tag{1.1}$$

满足周期边界条件和初始数据 $u(\mathbf{x}, 0) = \varphi_0(\mathbf{x})$。其中，$\delta > 0$ 是一个常数，表示具有晶面的晶体薄膜上圆化棱角的宽度。向量 f 是非线性体力，定义为

$$f(\mathbf{v}) = (|\mathbf{v}|^2 - 1)\mathbf{v}. \tag{1.2}$$

当 $t \to \infty$ 时，可得 $|\nabla \phi| \to 1$，因此称其为斜率选择模型。还有一种对应模型，其中f ($\mathbf{v}) = -\mathbf{v}/(1+|\mathbf{v}|^2)$，称为无斜率选择的MBE模型，因为在粗化过程中，$|\nabla \phi|$ 不会收敛到常数。对于任意 $u \in H^1(\Omega)$，能量函数定义为

$$E(t) = \int_0^t \|u_t(\cdot, \cdot, s)\|^2 ds + \frac{\delta}{2}\|\Delta u(\cdot, \cdot, t)\|^2 + \frac{1}{4}\iint_{\Omega} (|\nabla u(x, y, t)|^2 - 1)^2 dx dy.$$

以下能量耗散律成立

$$\frac{dE(t)}{dt} = 0, \ \ t > 0.$$

模型（1.1）已用于模拟具有斜率选择的外延生长中的界面粗化动力学，其中四阶项描述表面扩散，非线性二阶项描述著名的 Ehrlich-Schowoebel效应，进而导致生长表面形成丘状结构和金字塔状结构。Gyure等人 [6] 进行了实验，展示了粗糙表面上薄膜的不稳定生长。该实验在 InAs(001)衬底上进行 InAs缓冲层的分子束外延，随着缓冲层厚度增加，观察到波长呈现大—小—大的振荡。这种粗糙—平滑—粗糙模式中的形貌不稳定性，根本上是由 Ehrlich-Schwoebel效应导致的。

King等人 [7]研究了具有斜率选择的生长方程在不同边界条件下的适定性。Li和 Liu [8] 证明了初边值薄膜外延模型的适定性和解的正则性。Galerkin谱方法被用于求解该模型（无论是否具有斜率选择）的数值解。此外，数值结果显示了能量和粗糙度在不同时间阶段的衰减。Li 等人 [9] 分析了在物理维数下描述具有斜率选择的薄膜外延生长的梯度流。他们建立了具有临界正则性的解的改进局部和整体适定性，并得到了梯度的若干上下界。

由于高阶导数和非线性项的存在，MBE 模型的动力学过程需要很长时间才能达到稳态。众所周知，线性化

格式可以避免求解大型非线性系统，但通常需要在格式中加入稳定化项，以保证格式的稳定性。然而，计算成本较高的非线性格式通常是稳定的。如何对非线性项进行适当的时间离散，是在时间离散层面保持能量稳定性并平衡计算成本的关键问题。分裂格式适用于快速模拟。此外，变时间步长方法也被证明是有效的技术，但在长时间模拟的分析中存在根本性的困难。

目前已有研究致力于采用线性化格式求解具有斜率选择的MBE模型。文献 [10]推导了线性化后向欧拉差分格式和线性化 Crank–Nicolson 差分格式。Yang 等人 [11] 基于不变能量二次化方法，提出了一阶和二阶时间推进格式，其中所有非线性项均采用半显式处理。此外，也有一些格式能够在每个时间步长上导出线性系统（例如，参见 [12,13]）。对于不含斜率选择的MBE模型，关于线性化格式的专著可参见 [14–20] 。通常采用稳定化项来保持线性化格式的稳定性。Xu 和 Tang [21] 构造了添加稳定化项的线性化格式，这些稳定化项与时间离散的阶数相匹配；他们还证明，与标准的隐显式方法相比，这些格式允许使用大得多的时间步长。Li 等人 [22] 证明了稳定化半隐式时间推进方法具有无条件能量稳定性，且无需对非线性项作 Lipschitz 假设。Chen 等人 [13] 利用正则化项，为具有斜率选择的MBE模型提出了一种全离散格式，该格式保持能量耗散性质。在长时间模拟中，该格式捕捉到了粗糙度增长和有效能量衰减的标度律。关于稳定化项对求解具有斜率选择的MBE模型所产生影响的其他情形，可参见 [23,24]。关于不含斜率选择的MBE模型中稳定化项的研究，也请读者参阅其中的参考文献 [14–17,25,26] 。

另一方面，由于非线性格式在长时间计算中具有保持稳定性的优势，因此也被用于数值求解MBE模型。Chen 和 Wang [27] 针对具有斜率选择的薄膜外延问题，提出了一种结合混合有限元方法与后向欧拉格式的半隐式非线性格式。通过引入适当的对偶变量（这些变量由方程中的非线性项自然定义），该混合形式只需使用C^1 单元。Feng 等人 [23] 针对具有斜率选择的外延薄膜方程，研究了一种采用二阶后向差分公式（BDF2）并包含常系数稳定化项的隐式非线性有限差分格式。他们采用高效的预条件最速下降算法和预条件非线性共轭梯度算法求解相应的非线性系统。文献 [24]提出并分析了一种用于具有斜率选择的薄膜外延生长模型的能量稳定非线性混合有限元格式。借助一些辅助技巧，该格式在三角形单元上达到了最优收敛率。文献 [28,29]介绍了非线性格式的其他理论框架。此外，关于无斜率选择的MBE模型的非线性格式，可参见文献 [25,30,31] 及其中的参考文献。

在MBE模型中存在非线性项时，实现快速模拟的一种有效方法是分裂方法。Cheng 等人 [32] 针对具有斜率选择的薄膜外延问题，分别为一维和二维非线性扩散方程提出了快速显式算子分裂方法。文献 [33]针对具有斜率选择的外延生长模型，提出了一种快速显式算子分裂方法，将原问题拆分为线性子问题和非线性子问题，并从理论上分析了该算法在离散L^2 范数下的收敛阶。Lee 等人 [34] 针对有斜率选择和无斜率选择的外延薄膜生长，开发了一种算子分裂傅里叶谱方法，该方法放宽了对时间步长的限制。文献 [35–39] 介绍了具有斜率选择的MBE模型分裂方法的不同形式。此外，无斜率选择的MBE模型所用的分裂方法可参见文献 [25, 40–43] 。

避免长时间模拟中产生巨大计算开销的一种高效方法是采用自适应技术。Qiao 等人 [44] 将时间自适应策略应用于若干无条件能量稳定的有限差分格式，并表明这些格式能够准确、高效地解析稳态解和解的动态变化。Luo 等人 [29] 提出了两种自适应时间步进方法，通过在时间方向上对物理量进行均匀分布来控制模拟误差。Liao 等人 [45] 为无斜率选择的MBE模型引入了变步长二阶后向差分公式格式，并在改进的步长比约束下建立了其L^2 范数稳定性和严格的误差估计。详细综述所有相关文献超出了本文的范围。因此，我们仅讨论上述论文及其引用的文献。

过去20年来，众多研究推动了MBE模型数值计算的发展。在当前工作中，我们着重分析斜率选择模型的变步长 BDF2 格式。我们借鉴了文献 [46]中针对 Cahn–Hilliard 模型的变步长 BDF2 格式分析。特别地，对于文献 [46], 中推导的核和时间步长比，我们证明了引理 3.2、引理 3.3 和引理 3.4，这些引理涉及处理非线性项的向量形式，可用于分析所提出格式的收敛性质并推导误差估计。在相同的温和时间步长比限制下，利用卷积系数的性质证明了该格式的唯一可解性和能量稳定性。

本文其余部分安排如下。第 2 节建立隐式变步长 BDF2 格式，并介绍若干预备引理，以便证明该差分格式的唯一可解性和能量耗散律。第 3 节介绍离散正交卷积（DOC）核的若干基本性质及离散卷积不等式，这些结果有助于证明所提出格式的误差估计。第 4 节给出并讨论典型数值算例，以验证理论结果。

2. 离散能量耗散律

本节基于布劳威尔不动点定理，研究差分格式（2.2）的唯一可解性。利用卷积系数的性质，我们证明

了该格式的能量稳定性。首先介绍一些记号。

对于空间方向离散，令 M 为正整数， $\Omega = (0,L)^2$ and $x_i = ih$, $y_j = jh$，其中空间长度 $h_x = h_y = h := L/M$。定义离散空间网格$\Omega_h := \{(x_i, y_j) \mid 1 \le i, j \le M\}$and $\bar{\Omega}_h := \{(x_i, y_j) \mid 0 \le i, j \le M\}$。考虑 L-周期函数空间

$$\mathbb{V}_h := \{v_h = v(x_h) \mid x_h = (x_i, y_j) \in \bar{\Omega}_h \text{ and } v_h \text{ is } L\text{-periodic in each direction}\}.$$

给定网格函数 $v \in V_h$，引入以下记号 $\delta_x v_{i+\frac{1}{2},j} = (v_{i+1,j} - v_{ij})/h$,$\Delta_x v_{ij} = (v_{i+1,j} - v_{i-1,j})/(2h)$，以及 $\delta^2 x\, v_{ij} = (\delta_x v_{i+\frac{1}{2},j} - \delta_x v_{i-\frac{1}{2},j})/h$。离散记号$\delta_y v_{i,j+\frac{1}{2}}$, $\Delta_y u_{ij}$ 和 $\delta^2 y\, v_{ij}$ 可类似定义。此外，定义离散拉普拉斯算子 $\Delta_h v_{ij} = \delta^2 x\, v_{ij} + \delta^2 y\, v_{ij}$，以及离散梯度向量 $\nabla_h v_{ij} = (\Delta_x v_{ij}, \Delta_y v_{ij})^T$。

对于任意网格函数 v、w $\in V_h$，定义内积 $\langle v, w\rangle := h^2 \sum v_h w_h$、$x_h \in \Omega_h$对应的 L^2 范数 $\|v\| := \sqrt{\langle v, v\rangle}$，以及离散 L^q 范数 $\|v\|_{l^q} := \sqrt[q]{h^2 \sum_{x_h \in \Omega_h} |v_h|^q}$。离散半范数 $\|\nabla_h v\|_{l^q}$ 和 $\|\Delta_h v\|_{l^q}$ 的定义类似。此外，将 $\|\delta_x v\|$ 和 $\|\delta_y v\|$ 记作

$$\|\delta_x v\| = \sqrt{h^2 \sum_{x_h \in \Omega_h} \left(\delta_x v_{i-\frac{1}{2},j}\right)^2},\ \|\delta_y v\| = \sqrt{h^2 \sum_{x_h \in \Omega_h} \left(\delta_y v_{i,j-\frac{1}{2}}\right)^2}.$$

离散 H^1-半范数定义为 $|v|_1 = \sqrt{\|\delta_x v\|^2 + \|\delta_y v\|^2}$。此外，具有周期边界条件的离散 Green 公式给出$\langle -\Delta_h v, w\rangle = \langle \Delta_h v, \Delta_h w\rangle$ and$\langle -\nabla_h \cdot \nabla_h v, w\rangle = \langle \nabla_h v, \nabla_h w\rangle$。在后续分析中，我们需要常用的离散 Sobole夫嵌入不等式

$$\|\nabla_h v\|^2 \le \|\Delta_h v\| \cdot \|v\|. \tag{2.1}$$

对于时间离散，取时间层 $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N = T$，时间步长为 $\tau_n = t_n - t_{n-1}$，其中 $1 \le n \le N$。令相邻时间步长比为 $r_n := \tau_n/\tau_{n-1}$，其中 $2 \le n \le N$。对于任意网格函数 $v^n = v(t_n)$，记 $\ddot{\imath}_\tau v^n := v^n - v^{n-1}$，且$\partial_\tau v^n := \ddot{\imath}_\tau v^n/\tau_n$。众所周知的变步长 BDF2 公式为

$$D_2 v^n := \frac{1 + 2r_n}{\tau_n(1 + r_n)} \nabla_\tau v^n - \frac{r_n^2}{\tau_n(1 + r_n)} \nabla_\tau v^{n-1} \quad \text{for } n \ge 2.$$

通常需要一种起始格式来计算第一级解v^1，因为两步二阶后向差分公式需要两个初始值。为了提高时刻$t = t_1$,的时间精度，我们采用一种二阶精度方法

$$D_2 v^1 := \frac{2}{\tau_1}\left[v^1 - \left(v(t_0) + \frac{\tau_1}{2} v_t(t_0)\right)\right]$$

利用以下事实：$\frac{1}{2}[v_t(t_1)+v_t(t_0)]=\frac{1}{\tau_1}(v^1-v(t_0))+O(\tau_1^2)$。

我们将 MBE问题 (1.1) 的隐式变步长 BDF2 格式写为

$$D_2u_h^n+\delta\Delta_h^2u_h^n-\nabla_h\cdot f(\nabla_h u_h^n)=0\quad \text{for } x_h\in\Omega_h,\ 1\le n\le N \tag{2.2}$$

初始数据为 $u^0h=\varphi_0(x_h)-\frac{\tau_1}{2}\varphi_1(x_h)$，其中 $x_h\in\bar{\Omega}_h$，且 $\varphi_1:=\nabla\cdot f(\nabla\varphi_0)-\delta\Delta^2\varphi_0$，适用于光滑数据 $\varphi_0\in H^4(\Omega)$。空间算子采用有限差分法进行近似。我们从将上述 BDF2公式视为离散卷积求和 $D_2v^n:=\sum^n k=1\, b^{(n)}\, n-k\ddot{I}\ \tau v^k$（$n\ge1$）开始分析，其中离散卷积核 $b^{(n)}\, n-k$ 定义为 $b_0^{(1)}:=2/\tau_1$，当 $n\ge2$ 时，

$$b_0^{(n)}:=\frac{1+2r_n}{\tau_n(1+r_n)},\quad b_1^{(n)}:=-\frac{r_n^2}{\tau_n(1+r_n)}\quad\text{and}\quad b_j^{(n)}:=0\quad\text{for}\quad 2\le j\le n-1. \tag{2.3}$$

近期，[46,47] 从一个新视角研究了变步长 BDF2 时间步进，利用了 BDF2 卷积核$b^{(n)}{}_{n-k}$的正定性。在相邻时间步长比$r_k\le r_s<4.864$（$2\le k\le N$）的条件下，针对线性扩散方程，建立了简洁的L^2 范数稳定性与变步长 BDF2 格式收敛性理论。与之对应的离散工具称为 DOC 核，定义如下：

$$\theta_0^{(n)}:=\frac{1}{b_0^{(n)}}\quad\text{and}\quad \theta_{n-k}^{(n)}:=-\frac{1}{b_0^{(k)}}\sum_{j=k+1}^{n}\theta_{n-j}^{(n)}b_{j-k}^{(j)}\quad\text{for } 1\le k\le n-1, \tag{2.4}$$

由以下离散正交恒等式推导得出

$$\sum_{j=k}^{n}\theta_{n-j}^{(n)}b_{j-k}^{(j)}\equiv\delta_{nk}\quad\text{for } 1\le k\le n, \tag{2.5}$$

其中，δ_{nk} 是克罗内克δ符号。交换求和次序并利用恒等式 (2.5)，不难验证

$$\sum_{j=1}^{n}\theta_{n-j}^{(n)}D_2v^j=\nabla_\tau v^n\quad\text{for } \{v^j\,|\,0\le j\le n\}. \tag{2.6}$$

这一等式 (2.6) 将在后续分析中发挥重要作用。DOC 核 $\theta^{(n)}{}_{n-k}$ 的详细性质参见引理 3.1。引理 2.2 表明，只要相邻时间步长比r_k 满足充分条件 $r_k\le r_s$，则二阶后向差分公式卷积核 $b^{(n)}{}_{n-k}$ 对于 $2\le k\le N$ 是正定的。

2.1. 唯一可解性

为了证明唯一可解性，我们需要以下引理。

引理 2.1. 对于任意向量 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v}$ 和$\boldsymbol{z}$： $=\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}$，有

$$(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})^T f(\boldsymbol{u}) \geq \frac{1}{4}(|\boldsymbol{u}|^4-|\boldsymbol{v}|^4)-\frac{1}{2}(|\boldsymbol{u}|^2|-|\boldsymbol{v}|^2)-\frac{1}{2}|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|^2,$$
$$\boldsymbol{z}^T[f(\boldsymbol{u})-f(\boldsymbol{v})] \geq \frac{1}{2}|\boldsymbol{v}|^2|\boldsymbol{z}|^2+\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{z})^2-|\boldsymbol{z}|^2.$$

证明。 注意到$u^T(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})=\frac{1}{2}(|\boldsymbol{u}|^2-|\boldsymbol{v}|^2+|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|^2)$，略去非负项 $|\boldsymbol{u}|^2|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|^2$，再由中值不等式可得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})^T f(\boldsymbol{u}) &= (|\boldsymbol{u}|^2-1)\boldsymbol{u}^T(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})\\ &= \frac{1}{2}(|\boldsymbol{u}|^2-1)(|\boldsymbol{u}|^2-|\boldsymbol{v}|^2+|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|^2)\\ &\geq \frac{1}{4}(|\boldsymbol{u}|^4-|\boldsymbol{v}|^4)-\frac{1}{2}(|\boldsymbol{u}|^2-|\boldsymbol{v}|^2)-\frac{1}{2}|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}|^2.\end{aligned}$$

由杨氏不等式可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{z}^T[f(\boldsymbol{u})-f(\boldsymbol{v})] &= \left[|\boldsymbol{u}|^2\boldsymbol{u}-|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v}-\boldsymbol{z}\right]^T\boldsymbol{z}\\ &= \left[(|\boldsymbol{u}|^2-|\boldsymbol{v}|^2)\boldsymbol{u}+|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{z}\right]^T\boldsymbol{z}-|\boldsymbol{z}|^2\\ &= \left[(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{z}+\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{z})\boldsymbol{u}\right]^T\boldsymbol{z}+|\boldsymbol{v}|^2|\boldsymbol{z}|^2-|\boldsymbol{z}|^2\\ &= |\boldsymbol{v}|^2|\boldsymbol{z}|^2+(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{z}+\mathbf{v}^T\boldsymbol{z})\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{z}-|\boldsymbol{z}|^2\\ &\geq \frac{1}{2}|\boldsymbol{v}|^2|\boldsymbol{z}|^2+\frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{z})^2-|\boldsymbol{z}|^2.\end{aligned}$$

证明完毕。

定理 2.1。 假设时间步长比满足 $r_k \leq r_s$ （对 $2 \leq k \leq N$），且时间步长 $\tau_n < {}^{4\delta(1+2}r_{1+}{}^{n)}r_n$ ~~（对 $1 \leq n \leq N$）~~。差分格式 *(2.2)* 存在唯一解。

证明。 应用布劳威尔不动点定理证明差分格式 (2.2) 的可解性。对于任意固定指标 $n \geq 1$，我们构造映射 $\Pi_n : \mathrm{V}_h \to \mathrm{V}_h$ 如下

$$\Pi_n(w_h) := b_0^{(n)}w_h - g_h^{n-1} + \delta\Delta_h^2 w_h - \nabla_h \cdot f(\nabla_h w_h), \quad \mathrm{x}_h \in \bar{\Omega}_h. \tag{2.7}$$

其中 $g^{n-1}{}_h = b_0^{(n)}u^{n-1}{}_h - b_1^{(n)}\ddot{\mathrm{I}}_\tau u^{n-1}{}_h$，对于 $n \geq 2$ 以及 $g^0{}_h = b_0^{(1)}u^0{}_h$。

假设 u^{n-1}、u^{n-2} 已确定，对 $\Pi_n(w)$ 与 w 取内积，得到

$$\langle \Pi_n(w), w\rangle = b_0^{(n)}\langle w, w\rangle + \delta\left\langle \Delta_h^2 w, w\right\rangle - \langle \nabla_h \cdot f(\nabla_h w), w\rangle - \left\langle g^{n-1}, w\right\rangle.$$

结合嵌入不等式 (2.1) 和杨氏不等式，可得

$$\begin{aligned}\langle \Pi_n(w), w\rangle &\geq b_0^{(n)}\|w\|^2 + \delta\|\Delta_h w\|^2 + \|\nabla_h w\|_{l^4}^4 - \|\nabla_h w\|^2 - \|g^{n-1}\| \cdot \|w\|\\ &\geq b_0^{(n)}\|w\|^2 + \delta\|\Delta_h w\|^2 - \left(\delta\|\Delta_h w\|^2 + \frac{1}{4\delta}\|w\|^2\right) - \|g^{n-1}\| \cdot \|w\|\\ &= \left(b_0^{(n)} - \frac{1}{4\delta}\right)\|w\|^2 - \|g^{n-1}\| \cdot \|w\|.\end{aligned}$$

当 $\tau_n < \frac{4\delta(1+2r_{1+}{}^{n})}{r_n}$ 且 $\|w\| = 4\delta\|g^{n-1}\|/(4\delta b_0^{(n)}-1)$ 时，我们得到

$$\langle \Pi_n(w), w\rangle \geq 0.$$

借助布劳威尔不动点定理，存在一个$w^*{}_h$ 使得 $\Pi_n(w^*{}_h) = 0$这表明变步长 BDF2 格式 (2.2) 是可解的。

接下来，我们证明解的唯一性。假设w_h 和v_h 都是差分格式 (2.2) 的解。记差值为 $\rho_h = w_h - v_h$。于是可得

$$b_0^{(n)}\rho_h + \delta\Delta_h^2\rho_h - \nabla_h\cdot\Big(f(\nabla_h w_h) - f(\nabla_h v_h)\Big) = 0. \tag{2.8}$$

对 (2.8) 与 ρ 取内积，得到

$$b_0^{(n)}\|\rho\|^2 + \delta\|\Delta_h\rho\|^2 + \langle f(\nabla_h w) - f(\nabla_h v), \nabla_h\rho\rangle = 0.$$

利用引理 2.1，并取$\mathbf{u} = \nabla_h u$、$\mathbf{v} = \nabla_h v$ 和$\mathbf{z} = \nabla_h\rho$，可得

$$b_0^{(n)}\|\rho\|^2 + \delta\|\Delta_h\rho\|^2 + \frac{1}{2}h^2\sum_{\mathbf{x}_h\in\Omega_h}\Big(|\nabla_h v_h|^2|\nabla_h\rho_h|^2 + (\nabla_h u_h\cdot\nabla_h\rho_h)^2\Big) \leq \|\nabla_h\rho\|^2.$$

注意到左端第三项非负，借助嵌入不等式 (2.1)，可得

$$b_0^{(n)}\|\rho\|^2 + \delta\|\Delta_h\rho\|^2 \leq \delta\|\Delta_h\rho\|^2 + \frac{1}{4\delta}\|\rho\|^2.$$

当 $\tau_n < \frac{4\delta(1+2r_{1+}{}^{n})}{r_n}$ 时，上述不等式意味着 $\|\rho\| = 0$。证明完毕。

2.2. 能量耗散律

现在我们给出格式 (2.2) 的能量稳定性。下面的引理表明，当时间步长比满足 $r_k \leq r_s$（对于 $2 \leq k \leq N$）时，卷积核 $b^{(n)}{}_{n-k}$ 是正定的。

引理 2.2. [46] 设时间步长比满足 $r_k \leq r_s$（对于 $2 \leq k \leq N$）。对于任意具有 n 个元素的实数序列$\{w^k\}^n{}_{k=1}$，有

$$2w_k\sum_{j=1}^{k} b_{k-j}^{(k)} w_j \geq \frac{r_{k+1}^{\frac{3}{2}}}{1+r_{k+1}}\frac{w_k^2}{\tau_k} - \frac{r_k^{\frac{3}{2}}}{1+r_k}\frac{w_{k-1}^2}{\tau_{k-1}} + R_L(r_k, r_{k+1})\frac{w_k^2}{\tau_k} \quad for \quad k \geq 2,$$

其中 $R_L(z, s) = \frac{2+4z}{1+} - \frac{3}{2}z\, z - \frac{s^{\frac{3}{2}}}{1+}s$， $0 < z, s < r_s$。因此，离散卷积核 $b^{(n)}n-k$ 是正定的

$$\sum_{k=1}^{n} w_k\sum_{j=1}^{k} b_{k-j}^{(k)} w_j \geq \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} R_L(r_k, r_{k+1})\frac{w_k^2}{\tau_k} \quad for\ n \geq 1.$$

我们定义离散能量 $E^n=\frac{\delta}{2}\left\|\Delta_h u^n\right\|^2+\frac{1}{4}\left\||\nabla_h u^n|^2-1\right\|^2$，其中 $n\geq 0$。此外，修正离散能量定义为 $\mathrm{E}^n=E^n+r^{\frac{3}{2}}{}_n 2(1+r_{n+1})\tau_n\left\|\ddot{\mathrm{I}}_\tau u^n\right\|^2$，其中 $n\geq 1$，且 $\mathrm{E}^0=E^0$。

The引理 2.2. 若时间步长比满足 $r_k\leq r_s$，对 $2\leq k\leq N$ 成立，且时间步长

$$\tau_n<4\delta\min\left\{R_L(r_n,r_{n+1}),\frac{2+r_2}{1+r_2}\right\},\tag{2.9}$$

则变步长 *BDF2* 格式 (2.2) 的解满足

$$E^n\leq\mathscr{E}^n\leq\mathscr{E}^{n-1}\leq E^0,\quad 1\leq n\leq N.$$

证明。 我们将 (2.2) 与 $\ddot{\mathrm{I}}_\tau u^n$ 作内积来开始证明，得到

$$\langle D_2u^n,\nabla_\tau u^n\rangle+\delta\left\langle\Delta_h^2u^n,\nabla_\tau u^n\right\rangle-\langle\nabla_h\cdot f(\nabla_h u^n),\nabla_\tau u^n\rangle=0.\tag{2.10}$$

对于 $n\geq 2$，在引理 2.2 的第一个不等式中取 $w_n=\ddot{\mathrm{I}}_\tau u^n$，可得到 (2.10) 左端第一项的估计，

$$\begin{aligned}\langle D_2u^n,\nabla_\tau u^n\rangle\geq&\frac{r_{n+1}^{\frac{3}{2}}}{2(1+r_{n+1})\tau_n}\|\nabla_\tau u^n\|^2-\frac{r_n^{\frac{3}{2}}}{2(1+r_n)\tau_{n-1}}\|\nabla_\tau u^{n-1}\|^2\\&+\frac{1}{2\tau_n}R_L(r_n,r_{n+1})\|\nabla_\tau u^n\|^2.\end{aligned}$$

利用分部求和以及等式 $2a(a-b)=a^2-b^2+(a-b)^2$，可将扩散项改写为

$$\left\langle\Delta_h^2u^n,\nabla_\tau u^n\right\rangle=\frac{1}{2}(\|\Delta_h u^n\|^2-\|\Delta_h u^{n-1}\|^2+\|\Delta_h(\nabla_\tau u^n)\|^2).$$

应用引理 2.1 可得非线性部分的一个下界：$\mathbf{u}=\nabla_h u^n$ 和 $\mathbf{v}=\nabla_h u^{n-1}$

$$\begin{aligned}&-\langle\nabla_h\cdot f(\nabla_h u^n),\nabla_\tau u^n\rangle=\langle f(\nabla_h u^n),\nabla_\tau(\nabla_h u^n)\rangle\\\geq&\frac{1}{4}(\|\nabla_h u^n\|_{l^4}^4-\|\nabla_h u^{n-1}\|_{l^4}^4)-\frac{1}{2}(\|\nabla_h u^n\|^2-\|\nabla_h u^{n-1}\|^2)-\frac{1}{2}\|\nabla_h(\nabla_\tau u^n)\|^2\\\geq&\frac{1}{4}\||\nabla_h u^n|^2-1\|^2-\frac{1}{4}\||\nabla_h u^{n-1}|^2-1\|^2-\frac{1}{2}\|\nabla_h(\nabla_\tau u^n)\|^2.\end{aligned}$$

将上述处理代入 (2.10)，即可得到整个不等式中的修正离散能量 E^n

$$\begin{aligned}&\mathscr{E}^n+\frac{1}{2\tau_n}R_L(r_n,r_{n+1})\|\nabla_\tau u^n\|^2+\frac{\delta}{2}\|\Delta_h(\nabla_\tau u^n)\|^2\\\leq&\mathscr{E}^{n-1}+\frac{1}{2}\|\nabla_h(\nabla_\tau u^n)\|^2\\\leq&\mathscr{E}^{n-1}+\frac{\delta}{2}\|\Delta_h(\nabla_\tau u^n)\|^2+\frac{1}{8\delta}\|\nabla_\tau u^n\|^2,\quad 2\leq n\leq N,\end{aligned}$$

其中使用了嵌入不等式 (2.1)。随后由 (2.9) 可得 $\mathrm{E}_n \le \mathrm{E}_{n-1}$, $2 \le n \le N$。对于 $n = 1$，由杨氏不等式可得

$$\left\langle D_2 u^1, \nabla_\tau u^1 \right\rangle \ge \frac{r_2}{2(1+r_2)\tau_1}\|\nabla_\tau u^1\|^2 + \frac{2+r_2}{2(1+r_2)\tau_1}\|\nabla_\tau u^1\|^2.$$

于是，当 $\tau_1 < \frac{4\delta(2+r_1+r_2)}{r_2}$，时，我们有 $\mathrm{E}^1 \le \mathrm{E}^0$。因此，显然有 $E^n \le \mathrm{E}_n \le \mathrm{E}^0 = E^0$。

引理 2.3。 若时间步长比满足 $r_k \le r_s$ （对于 $2 \le k \le N$），且条件 *(2.9)* 成立，则变步长 *BDF2* 格式 *(2.2)* 的数值解满足

$$\max\{\|\nabla_h u^n\|, \|\nabla_h u^n\|_{l^4}, \|\Delta_h u^n\|\} \le C_0,$$

*whe*其中 C_0 是一个常数，与空间长度 h 和时间步长无关 τ_n.

证明。 利用$a^4 \ge 4a^2 - 4$ 这一事实，并应用定理 2.2，可得 t

$$\begin{aligned} 4E^0 \ge 4E^n &= 2\delta\|\Delta_h u^n\|^2 + \|\nabla_h u^n\|_{l^4}^4 - 2\|\nabla_h u^n\|^2 + |\Omega_h| \\ &\ge 2\delta\|\Delta_h u^n\|^2 + \frac{1}{4}\|\nabla_h u^n\|_{l^4}^4 + \frac{3}{4}(4\|\nabla_h u^n\|^2 - 4|\Omega_h|) - 2\|\nabla_h u^n\|^2 + |\Omega_h| \\ &\ge 2\delta\|\Delta_h u^n\|^2 + \frac{1}{4}\|\nabla_h u^n\|_{l^4}^4 + \|\nabla_h u^n\|^2 - 2|\Omega_h|. \end{aligned}$$

取$K_0 = \min\{2\delta, 1/4\}$，可得

$$\|\Delta_h u^n\|^2 + \|\nabla_h u^n\|_{l^4}^4 + \|\nabla_h u^n\|^2 \le (4E^0 + 2|\Omega_h|)/K_0 =: K_1.$$

于是，得到所需的估计 $C_0 = \max\{\sqrt{K1}, \sqrt[4]{K1}\}$。

3. 收敛性分析

本节中，我们推导隐式变步长 BDF2 格式 (2.2) 的误差估计。首先介绍 DOC 核的一些基本性质以及若干离散卷积不等式。为方便起见，我们先引入记号$\sum_{k,l}^{n} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{k}$。

引理 3.1。 [47] 若 (2.3) 中定义的离散卷积核 $b^{(n)}$ n–k 为正定，则 (2.4) 中定义的 *DOC* 核 $\theta^{(n)}$ n–l 满足：

(I) 离散核 $\theta^{(n)}$ n–l 是正定的；

(II) $\sum_{l=1}^{n} \theta_{n-l}^{(n)} \le \tau_n$ *such that* $\sum_{k,l}^{n,k} \theta_{k-l}^{(k)} \le t_n$ *for* $n \ge 1$.

以下三个引理是证明 BDF2 格式 (2.2) 收敛性、处理非线性项的关键。下面将详细阐述这些引理，但为简洁起见，将证明放在附录中。

引理 3.2。 假设时间步长比满足 $r_k \le r_s$，对 $2 \le k \le N$，任意向量序列 $\{\boldsymbol{v}^k\}^n k{=}1 \in \mathbb{R}^2,,$ 以下不等式成立

$$\frac{\mathfrak{m}_1}{2\mathfrak{m}_2}\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\boldsymbol{v}^k)^T\boldsymbol{v}^k \le \sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}(\boldsymbol{v}^l)^T\boldsymbol{v}^k \le \frac{\mathfrak{m}_3}{2}\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\boldsymbol{v}^k)^T\boldsymbol{v}^k,$$

其中 $\mathfrak{m}_1, \mathfrak{m}_2, \mathfrak{m}_3$ 为正数常量。

引理 3.3。 若时间步长比满足 $r_k \le r_s$，对 $2 \le k \le N$，任意向量序列$\{\boldsymbol{v}^k, \boldsymbol{w}k\}^n k{=}1,$其中 $\boldsymbol{v}k, \boldsymbol{w}k \in \mathbb{R}^2,,$，则有

$$\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}(\boldsymbol{v}^l)^T\boldsymbol{w}^k \le \epsilon\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\boldsymbol{v}^k)^T\boldsymbol{v}^k + \frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\epsilon}\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\boldsymbol{w}^k)^T\boldsymbol{w}^k \quad for\ \forall\epsilon > 0.$$

引理 3.4。 假设时间步长比满足 $r_k \le r_s$，考虑网格函数 u^k 及任意向量序列 $\{\boldsymbol{z}^k, \boldsymbol{w}^k\}^n k{=}1,$ 其中 $\boldsymbol{z}^k, \boldsymbol{w}k \in \mathbb{R}^2,,$ 且存在常数 C_u 使得

$$C_u = \max_{1\le j\le n}\|u^j\|_{l^3}.$$

于是有

$$\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle u^l\boldsymbol{z}^l, \boldsymbol{w}^k\rangle \le \varepsilon\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\nabla_h\boldsymbol{z}^k\|^2 + \|\boldsymbol{z}^k\|^2) + \frac{C_\Omega C_u^2\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\boldsymbol{w}^k\|^2.$$

以下关于 $\mathrm{k}\nabla_h\nu\mathrm{k}_{l^4}$ 和 $\mathrm{k}\nabla_h\nu\mathrm{k}_{l^6}$ 的嵌入不等式，用于控制 BDF2 格式 (2.2) 收敛性分析中的范数。

引理 3.5. 对于网格函数 $v_h \in \mathbb{V}h, \mathrm{x}_h \in \Omega_h,$，有

$$\|\nabla_h\nu\|_{l^4} \le K_1\|\nabla_h\nu\|^{\frac{1}{2}}\Big(2\|\Delta_h\nu|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h\nu\|^2\Big)^{\frac{1}{4}} \tag{3.1}$$

and

$$\|\nabla_h\nu\|_{l^6} \le K_2\|\nabla_h\nu\|^{\frac{1}{3}}\Big(16\|\Delta_h\nu\|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h\nu\|^2\Big)^{\frac{1}{3}}, \tag{3.2}$$

其中 K_1 和 K_2 是两个常数。

根据引理 2.3 和引理 3.5，存在一个常数 K 使得

$$\|\nabla_h u^n\|_{l^6} \le K. \tag{3.3}$$

接下来，我们通过以下两个引理，说明 BDF2 时间推进的误差如何随时间步长变化。

引理 3.6. [47]对于相容性误差 $\xi^j = D_2 u(tj) - \partial_t u(tj)$ at $t = tj$，令 P^k 为卷积相容性误差，其定义为 $P^k := \sum_{j=1}^{k} \theta^{(k)}_{k-j}\xi^j$。</style>若时间步长比满足 $r_k \le r_s$，其中 $2 \le k \le N$，则卷积相容性误差 P^k 满足

$$\sum_{k=1}^{n} \left|P^k\right| \le 3t_n \max_{1\le j\le n}\left(\tau_j \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left|u'''(s)\right| \mathrm{d}s\right) \quad for\ 2 \le n \le N.$$

引理 3.7. [47] 设 $\lambda \ge 0$, 数列 $\{\xi_j\}_{j=0}^{N}$ 和 $\{V_j\}_{j=1}^{N}$ 均为非负数。若

$$V_n \le \lambda \sum_{j=1}^{n-1} \tau_j V_j + \sum_{j=1}^{n} \xi_j \quad for\ 1 \le n \le N,$$

则有

$$V_n \le \exp(\lambda t_{n-1}) \sum_{j=1}^{n} \xi_j \quad for\ 1 \le n \le N.$$

现在，我们着手证明变步长 BDF2 格式 (2.2) 的收敛性。设 $C_1 = \max_{(x,y,t)\in\Omega\times[0,T]}\{|u(x, y, t)|, |\nabla u(x, y, t)|, |\Delta u(x, y, t)|\}$。记 $e^n_h = U^n_h - u^n_h$, $\mathrm{x}_h \in \Omega_h$, $0 \le n \le N$，可得如下误差方程

$$D_2 e^n_h + \delta\Delta_h^2 e^n_h - \nabla_h \cdot \left(f(\nabla_h U^n_h) - f(\nabla_h u^n_h)\right) = \xi^n_h + \eta^n_h, \ \mathrm{x}^n_h \in \Omega_h,\ 1 \le n \le N, \tag{3.4}$$

其中 $\xi^n{}_h$、$\eta^n{}_h$ 分别表示时间和空间上的局部相容性误差。

定理 3.1. 假设问题 *(1.1)* 存在唯一光滑解，且 $u^n\ h \in \mathbb{V}_h$ 是差分格式 *(2.2)* 的解。若时间步长比满足 $r_k \le r_s$，对 $2 \le k \le N$ 均成立，且最大时间步长为 $\tau \le \tau_0$, 其中 τ_0 为常数，则变步长 *BDF2* 格式 *(2.2)* 在 L^2 范数下收敛。

$$\|e^n\| \le C(\tau^2 + h^2), \ 1 \le n \le N.$$

证明。在（3.4）中用 l 替换 n，将（3.4）两边乘以 DOC 核 $\theta^{(k)}{}_{k-l}$，并对 l 从 1 到 k 求和，得到

$$\sum_{l=1}^{k} \theta^{(k)}_{k-l} D_2 e^l_h + \delta \sum_{l=1}^{k} \theta^{(k)}_{k-l} \Delta_h^2 e^l_h - \sum_{l=1}^{k} \theta^{(k)}_{k-l} \nabla_h \cdot \left(f(\nabla_h U^l_h) - f(\nabla_h u^l_h)\right) = \sum_{l=1}^{k} \theta^{(k)}_{k-l} (\xi^l_h + \eta^l_h). \tag{3.5}$$

将式 (3.5) 与 e^k 作内积，并对 k 从 1 到 n 求和，得到

$$\begin{aligned} &\sum_{k,l}^{n,k} \langle \theta^{(k)}_{k-l} D_2 e^l, e^k\rangle + \delta \sum_{k,l}^{n,k} \theta^{(k)}_{k-l} \langle \Delta_h^2 e^l, e^k\rangle + \sum_{k,l}^{n,k} \theta^{(k)}_{k-l} \langle f(\nabla_h U^l) - f(\nabla_h u^l), \nabla_h e^k\rangle \\ &= \sum_{k,l}^{n,k} \theta^{(k)}_{k-l} \langle \xi^l + \eta^l, e^k\rangle. \end{aligned} \tag{3.6}$$

注意到等式 (2.6) 处理的是 BDF2离散化，因此有等式$\sum_{l=1}^{k}\theta_{-kl}^{(k)}D_{2}e^{l}_{h}=\ddot{I}_{\tau}e^{k}_{h}$。利用等式$a(a-b)=\frac{1}{2}[a^2-b^2+(a-b)^2]$，式 (3.6) 左端的第一项满足以下结果

$$\sum_{k=1}^{n}\langle\nabla_{\tau}e^{k},e^{k}\rangle=\frac{1}{2}(\|e^{n}\|^2-\|e^{0}\|^2)+\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}\|\nabla_{\tau}e^{k}\|^2. \tag{3.7}$$

利用分部求和和引理 3.2，扩散项可得

$$\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\Delta_h^2e^{l},e^{k}\rangle=\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\Delta_he^{l},\Delta_he^{k}\rangle\geq\frac{\mathfrak{m}_1}{2\mathfrak{m}_2}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_he^{k}\|^2. \tag{3.8}$$

对于非线性项，利用恒等式

$$\begin{aligned}f(\nabla_hU_h^l)-f(\nabla_hu_h^l)&=|\nabla_hU_h^l|^2\nabla_he_h^l+(|\nabla_hU_h^l|^2-|\nabla_hu_h^l|^2)\nabla_hu_h^l-\nabla_he_h^l\\&=|\nabla_hU_h^l|^2\nabla_he_h^l+(\nabla_hU_h^l\cdot\nabla_he_h^l+\nabla_he_h^l\cdot\nabla_hu_h^l)\nabla_hu_h^l-\nabla_he_h^l,\end{aligned} \tag{3.9}$$

于是，可得

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle f(\nabla_hU^l)-f(\nabla_hu^l),\nabla_he^{k}\rangle\\=&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle|\nabla_hU^l|^2\nabla_he^{l},\nabla_he^{k}\rangle+\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_hU^l\cdot\nabla_he^{l})\nabla_hu^{l},\nabla_he^{k}\rangle\\&+\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_hu^l\cdot\nabla_he^{l})\nabla_hu^{l},\nabla_he^{k}\rangle-\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\nabla_he^{l},\nabla_he^{k}\rangle.\end{aligned} \tag{3.10}$$

接下来，我们估计上述等式右侧的各项。对于（3.10）右侧的第一项，注意到$\|\nabla_hU\|^2_{l^3}\leq C_1^4|\Omega|^{\frac{2}{3}}:=C_2$，并借助引理 3.4，对于任意 $\varepsilon_1>0$，可得以下不等式

$$\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle|\nabla_hU^l|^2\nabla_he^{l},\nabla_he^{k}\rangle\leq\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\Delta_he^{k}\|^2+\|\nabla_he^{k}\|^2)+\frac{C_\Omega C_2^2\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_he^{k}\|^2. \tag{3.11}$$

直接利用引理 3.3，可得到式 (3.10) 右端第二项的以下估计

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_hU^l\cdot\nabla_he^{l})\nabla_hu^{l},\nabla_he^{k}\rangle\\\leq&\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|(\nabla_hU^k\cdot\nabla_he^{k})\nabla_hu^{k}\|^2+\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_he^{k}\|^2.\end{aligned} \tag{3.12}$$

根据柯西-施瓦茨不等式、引理 2.3 和不等式 (3.1)，上式右端第一项满足以下估计

$$\begin{aligned}\|(\nabla_h U^k\cdot\nabla_h e^k)\nabla_h u^k\|^2 &\le h^2\sum_{\mathbf{x}_h\in\Omega_h}|\nabla_h U_h^k|^2|\nabla_h e_h^k|^2|\nabla_h u_h^k|^2\\ &= C_1^2\|\nabla_h u^k\|_{l^4}^2\cdot\|\nabla_h e^k\|_{l^4}^2\\ &\le C_0^2C_1^2K_1^2\|\nabla_h e^k\|\Big(2\|\Delta_h e^k\|^2+\frac{1}{L^2}\|\nabla_h e^k\|^2\Big)^{\frac{1}{2}}\\ &\le C_3(\|\nabla_h e^k\|^2+\|\Delta_h e^k\|^2),\end{aligned}$$

其中 $C_3=C_0^2C_1^2K_1^2\max\{\frac{1}{2}+\frac{1}{2L^2},1\}$。然后，将上述不等式代入 (3.12)，即可得到 (3.10) 右端第二项的最终估计

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_h U^l\cdot\nabla_h e^l)\nabla_h u^l,\nabla_h e^k\rangle\\ \le& C_3\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\nabla_h e^k\|^2+\|\Delta_h e^k\|^2)+\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2.\end{aligned}\tag{3.13}$$

对于 (3.10) 右端的第三项，由引理 3.3 可容易得到

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_h u^l\cdot\nabla_h e^l)\nabla_h u^l,\nabla_h e^k\rangle\\ \le&\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k\Big\|(\nabla_h u^k\cdot\nabla_h e^k)\nabla_h u^k\Big\|^2+\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2.\end{aligned}\tag{3.14}$$

利用柯西-施瓦茨不等式，由 (3.3) 和 (3.2) 可得

$$\begin{aligned}\Big\|(\nabla_h u^k\cdot\nabla_h e^k)\nabla_h u^k\Big\|^2 \le& h^2\sum_{\mathbf{x}_h\in\Omega_h}|\nabla_h u_h^k|^4|\nabla_h e_h^k|^2\\ \le& K^4\|\nabla_h e^k\|_{l^6}^2\\ \le& K^4K_2\|\nabla_h e^k\|^{\frac{2}{3}}\Big(16\|\Delta_h e^k\|^2+\frac{1}{L^2}\|\nabla_h e^k\|^2\Big)^{\frac{2}{3}}\\ \le& K^4K_2\Big[\frac{1}{3}\|\nabla_h e^k\|^2+\frac{2}{3}\Big(16\|\Delta_h e^k\|^2+\frac{1}{L^2}\|\nabla_h e^k\|^2\Big)\Big]\\ \le& C_4\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\Delta_h e^k\|^2+\|\nabla_h e^k\|^2),\end{aligned}\tag{3.15}$$

其中 $C_4=\max\{32K^3,\frac{1}{3}+\frac{2}{3L^2}\}$。将 (3.15) 代入 (3.14)，可得最终估计

(3.10) 右端第三项的

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle(\nabla_h u^l\cdot\nabla_h e^l)\nabla_h u^l,\nabla_h e^k\rangle\\ \le& C_4\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\Delta_h e^k\|^2+\|\nabla_h e^k\|^2)+\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2.\end{aligned}\tag{3.16}$$

应用引理 3.2，可得式 (3.10) 右端第四项的结果

$$\Big|-\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\nabla_h e^l,\nabla_h e^k\rangle\Big|\le\frac{\mathfrak{m}_2}{2}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2.\tag{3.17}$$

将 (3.11)、(3.13)、(3.16) 和 (3.17) 代入 (3.10)，可得到非线性项的估计

$$\begin{aligned}&\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle f(\nabla_h U^l)-f(\nabla_h u^l),\nabla_h e^k\rangle\\ &\le C_5\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|^2+\Big(\frac{C_6}{\varepsilon_1}+C_5\varepsilon_1+\frac{\mathfrak{m}_3}{2}\Big)\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2,\end{aligned}\tag{3.18}$$

其中 $C_5=1+C_3+C_4$, $C_6=\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1}(C_\Omega C_2^2+2)$。

将 (3.7)、(3.8) 和 (3.18) 相加，再由 (3.6) 可得

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\|e^n\|^2+\frac{\delta\mathfrak{m}_1}{2\mathfrak{m}_2}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|^2\\ \le&\frac{1}{2}\|e^0\|^2+C_5\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|^2+\Big(\frac{C_6}{\varepsilon_1}+C_5\varepsilon_1+\frac{\mathfrak{m}_3}{2}\Big)\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\nabla_h e^k\|^2\\ &+\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\xi^l+\eta^l,e^k\rangle\\ \le&\frac{1}{2}\|e^0\|^2+C_5\varepsilon_1\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|^2+\Big(\frac{C_6}{\varepsilon_1}+C_5\varepsilon_1+\frac{\mathfrak{m}_3}{2}\Big)\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|\|e^k\|\\ &+\sum_{k,l}^{n,k}\theta_{k-l}^{(k)}\langle\xi^l+\eta^l,e^k\rangle\\ \le&\frac{1}{2}\|e^0\|^2+\Big(C_5\varepsilon_1+\Big(\frac{C_6}{\varepsilon_1}+C_5\varepsilon_1+\frac{\mathfrak{m}_3}{2}\Big)\varepsilon_2\Big)\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\Delta_h e^k\|^2+\sum_{k=1}^{n}\|e^k\|(\|P^k\|+\|Q^k\|)\\ &+\frac{1}{4\varepsilon_2}\Big(\frac{C_6}{\varepsilon_1}+C_5\varepsilon_1+\frac{\mathfrak{m}_3}{2}\Big)\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|e^k\|^2\quad\text{for any }\varepsilon_2>0,\end{aligned}\tag{3.19}$$

其中用到了嵌入不等式 (2.1) 以及 $P^k{}_h = \sum_{k=1}^{k} \theta^{(k)}{}_{k-l}\xi^l{}_h$ 和 $Q^k{}_h = \sum_{k=1}^{k} \theta^{(k)}{}_{k-l}\eta^l{}_{h.l}$ 取 $\varepsilon_1 = \frac{\delta \mathfrak{m}_1}{4 C_5 \mathfrak{m}_2}$ 和 $\varepsilon_2 = \delta^2 \mathfrak{m}_1^2 / \left(16 \mathfrak{m}_2^2 C_5 C_6 + \delta^2 \mathfrak{m}_1^2 + 2\delta \mathfrak{m}_1 \mathfrak{m}_2 \mathfrak{m}_3\right)$，由 (3.19) 可得

$$\|e^n\|^2 \le \|e^0\|^2 + C_7 \sum_{k=1}^{n} \tau_k \|e^k\|^2 + 2 \sum_{k=1}^{n} \|e^k\| (\|P^k\| + \|Q^k\|),$$

其中 $C_7 = \frac{1}{2\varepsilon_2}\left(\frac{C_6}{\varepsilon_1} + C_5 \varepsilon_1 + \frac{\mathfrak{m}_3}{2}\right)$。选取一个适当的整数 $n_0 (0 \le n_0 \le n)$，使得 $\mathrm{k} e^{n_0} \mathrm{k} = \max_{1 \le k \le n} \mathrm{k} e^k \mathrm{k}$，然后在上述不等式中取 $n = n_0$，可得

$$\|e^{n_0}\|^2 \le \|e^0\| \cdot \|e^{n_0}\| + C_7 \sum_{k=1}^{n_0} \tau_k \|e^k\| \cdot \|e^{n_0}\| + 2 \sum_{k=1}^{n_0} (\|P^k\| + \|Q^k\|) \cdot \|e^{n_0}\|,$$

由此可得

$$\|e^n\| \le \|e^{n_0}\| \le \|e^0\| + C_7 \sum_{k=1}^{n} \tau_k \|e^k\| + 2 \sum_{k=1}^{n} (\|P^k\| + \|Q^k\|).$$

当 $\tau_n \le \frac{1}{2 C_7} := \tau_0$ 时，由引理 3.7 可知

$$\|e^n\| \le 2 \exp(C_7 t_{n-1}) \left(\|e^0\| + 2 \sum_{k=1}^{n} (\|P^k\| + \|Q^k\|) \right). \tag{3.20}$$

根据引理 3.1 和引理 3.6，由式 (3.20) 可得所需估计。证明完毕。

4. 数值实验

本节给出两个数值算例，以验证时间方向的收敛阶和能量耗散。在每个时间层，仅使用简单迭代求解非线性代数方程，容差设为 10^{-12}，并将前一层的解作为初始猜测。第一个算例中，我们在分级网格上测试收敛阶。

例 4.1. 考虑 MBE 模型 $u_t + \delta \Delta^2 u + f(\nabla_h u) = g(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in \Omega = (0, 2\pi)^2, 0 < t \le 1$，其中 $\delta = 0.1$。取函数 $g(\mathbf{x},t)$，使其具有精确解 $u(\mathbf{x},t) = \cos t \sin x \sin y$。

该算例旨在展示变步长 BDF2 格式 (2.2) 在分级网格上的时间精度。设 r 为正整数，$t_k = T\left(\frac{k}{N}\right)^r$ 且 $\tau_k = t_k - t_{k-1}$。记离散 L^2 范数误差为 $e(N) := \mathrm{k} U^N - u^N \mathrm{k}$，时间方向的收敛阶定义为 $\mathrm{Order} = \log_2(e(N)/e(2N))$。空间网格的数量

表 1：变步长 BDF2 格式（2.2）的误差和收敛阶

N	$e(N)$	阶
40	1.03e-04	–
80	2.82e-05	1.87
160	6.74e-06	2.06
320	1.60e-06	2.07

点数固定为 $M = 3000$。我们列出数值结果，包括L^2 范数误差$e(N)$以及时间方向的收敛阶。从表 1 可以很容易地验证，变步长 BDF2 格式 (2.2) 达到了定理 3.1 所证明的时间二阶精度。

接下来，在变步长 BDF2 格式的实现中，我们采用自适应时间步进策略来计算 MBE 模型 (1.1)，该策略旨在捕捉梯度流的多尺度行为。我们采用常用的时间自适应策略 [[48]Algorithm 1] 来获取时间步长的变化。具体而言，时间步长 τ_{ada} 根据当前步的信息 τ_{cur}，通过公式$\tau_{ada}(e, \tau_{cur}) = \min\{\sqrt{容差/e}\rho\tau_{cur}\}$进行自适应更新，其中 ρ 为默认安全系数，~~参考容差为~~参考容差，相对误差 为每个时间层的相对误差。此外，$\tau_{\max}$ 和 $\tau_{\min}$ 分别为预先设定的最大和最小时间步长。在接下来的模拟中，我们将安全系数设为 $\rho = 0.9$，参考容差 参考容差 $= 10^{-3}$，最大时间步长 $\tau_{\max} = 0.1$，最小时间步长 $\tau_{\min} = 10^{-4}$。

算法 4.1自适应时间步进策略

要求： 设定 $\tau_1 := \tau_{\min}$。给定 u^n 和时间步长 τ_n

使用时间步长 τ_n，通过 BDF2 格式计算 u^{n+1}。

计算$e_{n+1} = \|u^{n+1} - u^n\|/\|u^{n+1}\|$.

如果 $e_n < tol$ 或 $\tau_n \le \tau_{\min}$ **则**

    if $e_n < tol$ **则**

        更新时间步长 $\tau_{n+1} \leftarrow \min\{\max\{\tau_{\min}, \tau_{ada}\}, 2.414\tau_n, \tau_{\max}\}$。

    else

        更新时间步长 $\tau_{n+1} \leftarrow \tau_{\min}$。

    结束如果

否则

    使用时间步长 $\tau_n \leftarrow \max\{\tau_{\min}, \tau_{ada}\}$ 重新计算。

    转到 1

结束 if

此外，我们使用文献 [36] 中定义的粗糙度测量函数$R(t)$：

$$R(t)=\sqrt{\frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega}\left(u(x,y,t)-\overline{u}(x,y,t)\right)^2\,\mathrm{d}\mathbf{x}},$$

其中 $u(\underline{x}、y、t)=\frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega}u(x、y、t)\mathrm{d}\mathbf{x}$。下一个例子中也将对其进行测试。

例 4.2。取 $\Omega=(0,2\pi)^2$。考虑问题 (1.1)，其初始条件如下

$$u(x,y,0)=0.1(\sin 3x\sin 2y+\sin 5x\sin 5y).$$

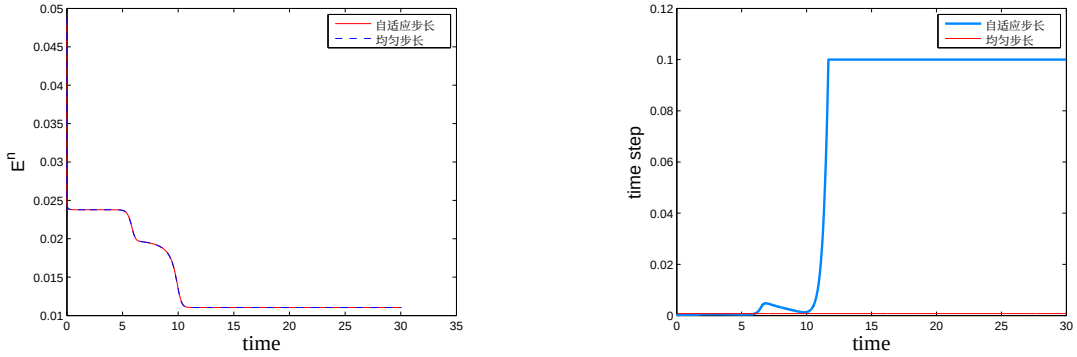

图 1：采用固定时间步长和自适应时间策略的 BDF2 格式 (2.2) 的能量（左）和时间步长（右）对比。

我们取参数 $\delta=0.1$，并采用 128×128 均匀网格对空间区域 $\Omega=(0,2\pi)^2$进行离散。为了进行比较，我们分别在固定时间步长 $\tau=10^{-3}$ 的均匀时间网格和自适应时间网格（如算法 1 所述）上模拟 MBE 模型，直至$T=30$。图 1 展示了离散能量随时间的演化（左）以及相应的时间步长（右）。从图 1 可以看出，自适应时间步长下的离散能量曲线与采用较小恒定步长得到的曲线一致。此外，图 1 还表明，自适应 BDF2 格式 (2.2) 在计算上更高效：能量快速衰减时选取较小的时间步长，而能量缓慢耗散时则自动选取较大的时间步长。

图 2 展示了粗糙度测量函数 $R(t)$随时间的演化。$R(t)$ 的时间演化曲线表明，偏差短暂下降后，便持续增大，直至达到稳态。图 3 展示了通过自适应 BDF2 格式（2.2）得到的数值解 u，直至达到稳态。

致谢

我们谨此感谢国家自然科学基金委员会（项目编号：11701229、11701081、11861060）以及江苏省网络化重点实验室的支持

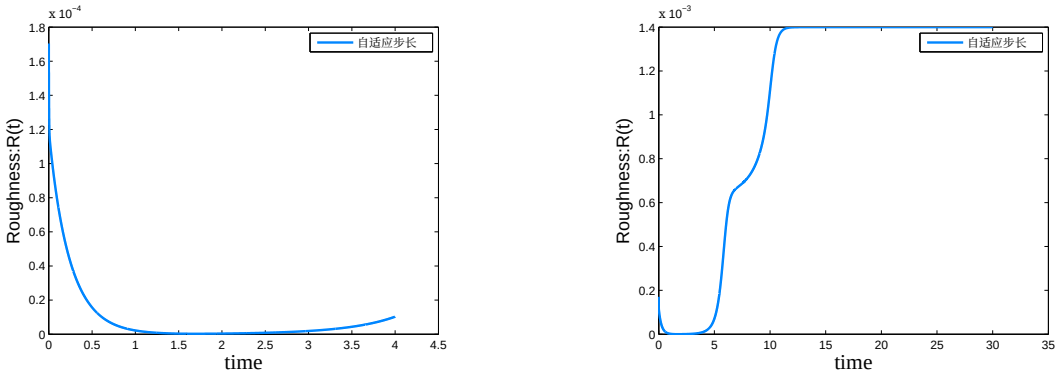

图 2：分子束外延模型的粗糙度演化，$t = 4$ (左)和$t = 30$ (右)。

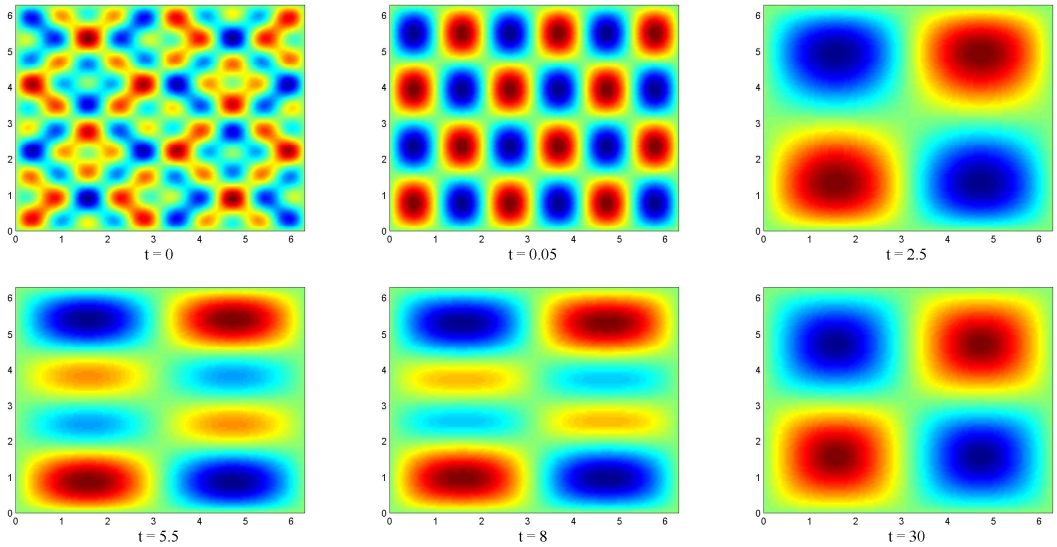

图 3：使用自适应时间策略的 BDF2 格式 (2.2) 得到的解在$t = 0$、0.05、2.5、5.5、8、30 时的演化。

集体智能（No. BM2017002）、国家自然科学基金重点项目（No. 61833005）、东南大学至善青年学者计划、中国博士后科学基金（No. 2019M651634）以及南京工程学院高层次科研人才引进基金（No. YKL201856）。

附录

我们在附录中给出引理 3.2 至引理 3.5 的详细证明。为展示这些证明，我们给出时间离散系数的两个基本性质。首先引入以下两个矩阵

$$\mathbf{B_2} = \begin{pmatrix} b_0^{(1)} & & & \\ b_1^{(2)} & b_0^{(2)} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & b_1^{(n)} & b_0^{(n)} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_2, \quad \mathbf{\Theta_2} = \begin{pmatrix} \theta_0^{(1)} & & & \\ \theta_1^{(2)} & \theta_0^{(2)} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \theta_{n-1}^{(n)} & \cdots & \theta_1^{(n)} & \theta_0^{(n)} \end{pmatrix} \otimes \mathbf{I}_2,$$

其中，元素 $b^{(n)}{}_{n-k}$ 和 $\theta^{(n)}{}_{n-k}$ 分别由（2.3）和（2.4）定义，$\mathbf{I}_2$ 是 2×2单位矩阵，$\otimes$ 是张量积。根据离散正交恒等式（2.5），可得 $\mathbf{\Theta_2} = \mathbf{B_2^{-1}}$。记 $\mathbf{B} = \mathbf{B_2} + \mathbf{B_2^T}$ 和 $\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta}_2 + \mathbf{\Theta}_2^T$，则由引理 2.2 和引理 3.1 可知，矩阵 $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{\Theta}$ 是对称正定的。将 $\mathbf{\Theta}$ 替换为 $\mathbf{B}_2$，可得

$$\mathbf{\Theta} := \mathbf{B}_2^{-1} + (\mathbf{B}_2^{-1})^T = (\mathbf{B}_2^{-1})^T \mathbf{B} \mathbf{B}_2^{-1}. \tag{A.1}$$

此外，我们定义对角矩阵 $\mathbf{\Lambda}_\tau = \mathrm{diag}(\mathrm{p}\tau_1, \mathrm{p}\tau_2, \cdots, \mathrm{p}\tau_n) \otimes \mathbf{I}_2$ 并记作

$$\widetilde{\mathbf{B}}_2 := \mathbf{\Lambda}_\tau \mathbf{B_2} \mathbf{\Lambda}_\tau = \widetilde{B}_2 \otimes \mathbf{I}_2 \quad \text{and} \quad \widetilde{\mathbf{\Theta}}_\mathbf{2} := \widetilde{\mathrm{B}}_2^{-1} \otimes \mathbf{I}_2,$$

$$\text{where } \widetilde{B}_2 = \begin{pmatrix} \tilde{b}_0^{(1)} & & & \\ \tilde{b}_1^{(2)} & \tilde{b}_0^{(2)} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \tilde{b}_1^{(n)} & \tilde{b}_0^{(n)} \end{pmatrix} \text{ and } \widetilde{\Theta}_2 := \widetilde{B}_2^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{\theta}_0^{(1)} & & & \\ \tilde{\theta}_1^{(2)} & \tilde{\theta}_0^{(2)} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \tilde{\theta}_{n-1}^{(n)} & \tilde{\theta}_{n-2}^{(n)} & \cdots & \tilde{\theta}_0^{(n)} \end{pmatrix}.$$

容易验证，$\tilde{b}_0^{(1)} = 2$, $\tilde{b}_0^{(k)} = \frac{1+2r_k}{1+r_k}$ 以及 $\tilde{b}_1^{(k)} = -\frac{r_k^{\frac{3}{2}}}{1+r_k}$，$2 \le k \le n$。由引理 3.1 可得

$$\tilde{\theta}_{k-j}^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{\tau_k \tau_j}} \theta_{k-j}^{(k)} = \frac{1+r_j}{1+2r_j} \prod_{i=j+1}^{k} \frac{r_i^{\frac{3}{2}}}{1+2r_i}, \quad 1 \le j \le k \le n. \tag{A.2}$$

定义对称矩阵 $\widetilde{\mathbf{B}} := \widetilde{\mathbf{B}}_2 + \widetilde{\mathbf{B}}_2^T = \Lambda_\tau \mathbf{B} \Lambda_\tau$。我们通过 $|||\boldsymbol{u}||| = \mathrm{p}\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{u}$ 定义向量范数 $|||\cdot|||$，相应的矩阵范数为 $|||\mathbf{A}||| := \sqrt{\rho(\mathbf{A^T A})}$。

引理 3.2 的证明 $\widetilde{\mathbf{B}}_2$ 先于 $\widetilde{\mathbf{B}}_2$ 我们上界。设 λ 的矩阵 $\widetilde{\mathbf{B}}$ 的特征值。利用

Gerschgorin 圆盘定理，可得 $|\lambda-2\tilde{b}_0^{(k)}|\le|\tilde{b}_1^{(k)}|+|\tilde{b}_1^{(k+1)}|$，$2\le k\le n-1$。由此可得

$$\lambda_{\min}(\widetilde{\mathbf{B}})\ge\min_{1\le k\le n}\left\{\frac{2+4r_k-r_k^{\frac{3}{2}}}{1+r_k}-\frac{r_{k+1}^{\frac{3}{2}}}{1+r_{k+1}}\right\}\ge\frac{2+2r_s(2-\sqrt{r_s})}{1+r_s}:=\mathfrak{m}_1. \tag{A.3}$$

利用 Kronecker 张量积的性质 $(A\otimes B)^T=A^T\otimes B^T$ 和$(A\otimes B)(C\otimes D)=AC\otimes BD$，可得 $\tilde{\mathbf{B}}_2^T\tilde{\mathbf{B}}_2=(\tilde{B}_2^T\tilde{B}_2)\otimes\mathbf{I}_2$。利用 Gerschgorin 圆盘定理，可得

$$\lambda_{\max}(\widetilde{B}_2^T\widetilde{B}_2)\le\max_{2\le k\le n}\{\mathfrak{R}(r_k,r_{k+1}),3+\mathfrak{R}(r_1,r_2)\}\le3+\mathfrak{R}(r_s,r_s):=\mathfrak{m}_2,$$

其中 $r_1=0$，函数 $\mathfrak{R}(u,v)$ 定义为

$$\mathfrak{R}(u,v)=\frac{(1+2u)(1+2u+u^{\frac{3}{2}})}{(1+u)^2}+\frac{v^{\frac{3}{2}}(1+2v+v^{\frac{3}{2}})}{(1+v)^2},\quad 0\le u,v\le r_s.$$

于是可得

$$\lambda_{\max}(\widetilde{\mathbf{B}}_2^T\widetilde{\mathbf{B}}_2)\le\mathfrak{m}_2. \tag{A.4}$$

记 $\tilde{\boldsymbol{\nu}}=((\boldsymbol{\nu}^1)^T,(\boldsymbol{\nu}^2)^T,\cdots,(\boldsymbol{\nu}_n)^T)^T$。不等式 (A.3) 表明，对称矩阵 $\tilde{\mathbf{B}}$ 为正定矩阵。存在一个非奇异上三角矩阵 $\mathbf{U}$，使得$\tilde{\mathbf{B}}=\tilde{\mathbf{U}}^T\tilde{\mathbf{U}}$。于是可得

$$\boldsymbol{\nu}^T\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\nu}=\boldsymbol{\nu}^T(\boldsymbol{B}_2^{-1})^T\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_2^{-1}\boldsymbol{\nu}=\boldsymbol{\nu}^T(\boldsymbol{B}_2^{-1})^T\boldsymbol{\Lambda}_\tau^{-1}\widetilde{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{\Lambda}_\tau^{-1}\boldsymbol{B}_2^{-1}\boldsymbol{\nu}=|||\widetilde{\mathbf{U}}\boldsymbol{\Lambda}_\tau^{-1}\boldsymbol{B}_2^{-1}\boldsymbol{\nu}\,|||^2.$$

因此，可得

$$\begin{aligned}|||\boldsymbol{\Lambda}_\tau\boldsymbol{\nu}\,|||^2&=|||\boldsymbol{\Lambda}_\tau\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{\Lambda}_\tau\widetilde{\mathbf{U}}^{-1}\widetilde{\mathbf{U}}\boldsymbol{\Lambda}_\tau^{-1}\boldsymbol{B}_2^{-1}\boldsymbol{\nu}\,|||^2\\&\le|||\widetilde{\boldsymbol{B}}_2\widetilde{\mathbf{U}}^{-1}\,|||^2\,|||\widetilde{\mathbf{U}}\boldsymbol{\Lambda}_\tau^{-1}\boldsymbol{B}_2^{-1}\boldsymbol{\nu}\,|||^2\\&\le|||\widetilde{\boldsymbol{B}}_2\,|||^2\,|||\widetilde{\mathbf{U}}^{-1}\,|||^2\,\boldsymbol{\nu}^T\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\nu}\\&=\lambda_{\max}(\widetilde{\boldsymbol{B}}_2^T\widetilde{\boldsymbol{B}}_2)\lambda_{\max}(\widetilde{\boldsymbol{B}}^{-1})\boldsymbol{\nu}^T\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\nu}.\end{aligned}$$

由 (A.3) 和 (A.4) 可得

$$\boldsymbol{\nu}^T\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\nu}\ge\frac{\mathfrak{m}_1}{\mathfrak{m}_2}. \tag{A.5}$$

令 $\widetilde{\Theta}=\widetilde{\Theta}_2+\widetilde{\Theta}_2^T$。注意到 $0<\frac{x^{3/2}}{1+2x}<m_*:=\frac{r_s^{3/2}}{1+2r_s}<1$ 对任意 $x\in[0,r_s)$，我们有

$$\mathfrak{R}_{n,k}:=\sum_{j=1}^{k}\widetilde{\theta}_{k-j}^{(k)}+\sum_{j=k}^{n}\theta_{j-k}^{(j)}\le\sum_{j=1}^{k}m_*^{k-j}+\sum_{j=k}^{n}m_*^{j-k}<\frac{2}{1-m_*},\quad 1\le k\le n.$$

利用 Gerschgorin 圆盘定理，可得 $\lambda_{\max}(\widetilde{\Theta}) \le \max_{1\le k\le n} \mathfrak{R}_{n,k} < \mathfrak{m}_3 := {}^{2}_{1-}{}_{m_*}$。因此，对任意 $\boldsymbol{w}$，有 $\boldsymbol{w}^T\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}\boldsymbol{w} \le \mathfrak{m}_3 \|\boldsymbol{w}\|^2$，其中 $\widetilde{\boldsymbol{\Theta}} := \widetilde{\Theta} \otimes \boldsymbol{I}2$。取 $\boldsymbol{w} := \boldsymbol{\Lambda}_\tau \boldsymbol{v}$，可得

$$\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{v} \le \mathfrak{m}_3 \|\boldsymbol{\Lambda}_\tau \boldsymbol{v}\|^2 . \tag{A.6}$$

结合 (A.5) 和 (A.6)，并利用$\boldsymbol{v}_T \ \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{v} = 2_{n,k}\sum \theta^{(k)}{}_{k-l}(\boldsymbol{v}_k)^T \boldsymbol{v}_l$这一事实，即可得到所需的$_{k,l}$结果。

引理 3.3 的证明 设$\boldsymbol{w} = ((\boldsymbol{w}^1)^T, (\boldsymbol{w}^2)^T, \cdots, (\boldsymbol{w}_n)^T)^T$。[46] 中的引理 A.3 的证明类似，可得

$$\sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} (\boldsymbol{v}^j)^T \boldsymbol{w}^k \le \varepsilon \sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} (\boldsymbol{v}^j)^T \boldsymbol{v}^k + \frac{1}{2\varepsilon} \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{w} \text{ for any } \varepsilon > 0.$$

容易得到$\boldsymbol{B}^{-1} = \boldsymbol{\Lambda}_\tau \widetilde{\boldsymbol{U}}^{-1} (\boldsymbol{\Lambda}_\tau \widetilde{\boldsymbol{U}}^{-1})^T$。因此

$$\begin{aligned} \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{w} &= \|(\widetilde{\boldsymbol{U}}^{-1})^T \boldsymbol{\Lambda}_\tau \boldsymbol{w}\|^2 \le \|(\widetilde{\boldsymbol{U}}^{-1})^T\|^2 \|\boldsymbol{\Lambda}_\tau \boldsymbol{w}\|^2 \\ &= \lambda_{\max}(\widetilde{\boldsymbol{B}}^{-1}) \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{\Lambda}_\tau^2 \boldsymbol{w} \le \mathfrak{m}_1^{-1} \sum_{k=1}^{n} \tau_k (\boldsymbol{w}^k)^2. \end{aligned}$$

因此，我们有

$$\sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} (\boldsymbol{v}^j)^T \boldsymbol{w}^k \le \varepsilon \sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} (\boldsymbol{v}^j)^T \boldsymbol{v}^k + \frac{1}{2\mathfrak{m}_1 \varepsilon} \sum_{k=1}^{n} \tau_k (\boldsymbol{w}^k)^2 \text{ for any } \varepsilon > 0.$$

在上述不等式中取 $\varepsilon = 2\epsilon/\mathfrak{m}_3$，并利用 (A.6)，可得

$$\sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} (\boldsymbol{v}^j)^T \boldsymbol{w}^k \le \epsilon \sum_{k=1}^{n} \tau_k (\boldsymbol{v}^k)^T \boldsymbol{v}^k + \frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1 \epsilon} \sum_{k=1}^{n} \tau_k (\boldsymbol{w}^k)^T \boldsymbol{w}^k.$$

引理 3.4 的证明对于固定的时间指标n，在引理 3.3 中取$\boldsymbol{v}_j := u^j \boldsymbol{z}_j$和 $\varepsilon := \varepsilon_1$，可得

$$\sum_{k,j}^{n,k} \theta_{k-j}^{(k)} \langle u^j \boldsymbol{z}^j, \boldsymbol{w}^k \rangle \le \varepsilon_1 \sum_{k=1}^{n} \tau_k \|u^k \boldsymbol{z}^k\|^2 + \frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1 \varepsilon_1} \sum_{k=1}^{n} \tau_k \|\boldsymbol{w}^k\|^2.$$

利用霍尔德不等式，有 $\|u^k \boldsymbol{z}^k\| \le \|u^k\|_{l^3} \|\boldsymbol{z}^k\|_{l^6}$. 嵌入不等式

ity $\|\boldsymbol{z}^k\|_{l^6} \le C_\Omega(\|\nabla_h \boldsymbol{z}^k\|^2 + \|\boldsymbol{z}^k\|^2)$ 给出

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|u^k\boldsymbol{z}^k\|^2 &\le \sum_{k=1}^{n}\tau_k\|u^k\|_{l^3}^2\|\boldsymbol{z}^k\|_{l^6}^2\\ &\le C_\Omega\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|u^k\|_{l^3}^2(\|\nabla_h\boldsymbol{z}^k\|^2+\|\boldsymbol{z}^k\|^2)\\ &\le C_u^2C_\Omega\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\nabla_h\boldsymbol{z}^k\|^2+\|\boldsymbol{z}^k\|^2).\end{aligned}$$

由上述不等式可得

$$\sum_{k,j}^{n,k}\theta_{k-j}^{(k)}\langle u^j\boldsymbol{z}^j,\boldsymbol{w}^k\rangle \le \varepsilon_1C_u^2C_\Omega\sum_{k=1}^{n}\tau_k(\|\nabla_h\boldsymbol{z}^k\|^2+\|\boldsymbol{z}^k\|^2)+\frac{\mathfrak{m}_3}{4\mathfrak{m}_1\varepsilon_1}\sum_{k=1}^{n}\tau_k\|\boldsymbol{w}^k\|^2. \tag{A.7}$$

取 $\varepsilon = \varepsilon_1C^2{}_uC\ \ \Omega$，即可得到所述不等式。

引理 3.5 的证明 对于任意整数 $1 \le s \le m \le M$，有

$$\begin{aligned}&|\Delta_x u_{mj}|^3-|\Delta_x u_{sj}|^3=\sum_{i=s}^{m-1}\left(|\Delta_x u_{i+1,j}|^3-|\Delta_x u_{ij}|^3\right)\\ =&\sum_{i=s}^{m-1}\left(|\Delta_x u_{i+1,j}|-|\Delta_x u_{ij}|\right)\left(|\Delta_x u_{i+1,j}|^2+|\Delta_x u_{ij}|\cdot|\Delta_x u_{i+1,j}|+|\Delta_x u_{ij}|^2\right)\\ \le&2h\sum_{i=s}^{m-1}\left|\frac{\Delta_x u_{i+1,j}-\Delta_x u_{ij}}{h}\right|\cdot\left(|\Delta_x u_{i+1,j}|^2+|\Delta_x u_{ij}|^2\right)\\ =&h\sum_{i=s}^{m-1}\left|\delta_x^2u_{i+1,j}+\delta_x^2u_{ij}\right|\cdot\left(|\Delta_x u_{i+1,j}|^2+|\Delta_x u_{ij}|^2\right)\\ \le&4\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\delta_x^2u_{ij}\right|^2\Big)^{\frac12}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\Delta_x u_{ij}\right|^4\Big)^{\frac12}.\end{aligned}$$

容易验证上述不等式对$m \le s$也成立。因此可得

$$|\Delta_x u_{mj}|^3 \le 4\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\delta_x^2u_{ij}\right|^2\Big)^{\frac12}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\Delta_x u_{ij}\right|^4\Big)^{\frac12}+|\Delta_x u_{sj}|^3,\ \ 1\le m,s\le M.$$

将上述不等式乘以h，并对s 从 1 到M求和，可得

$$L|\Delta_x u_{mj}|^3 \le 4L\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\delta_x^2u_{ij}\right|^2\Big)^{\frac12}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\Delta_x u_{ij}\right|^4\Big)^{\frac12}+h\sum_{i=1}^{M}|\Delta_x u_{ij}|^3.$$

上述不等式对$m = 1$、2、……、M均成立，因此可得

$$\max_{1\le m\le M}|\Delta_x u_{mj}|^3 \le 4\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\delta_x^2u_{ij}\right|^2\Big)^{\frac12}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\left|\Delta_x u_{ij}\right|^4\Big)^{\frac12}+\frac{1}{L}h\sum_{i=1}^{M}|\Delta_x u_{ij}|^3.$$

将上述不等式乘以h，并对j 从 1 到M求和，可得

$$h\sum_{j=1}^{M}\max_{1\le m\le M}|\Delta_x u_{mj}|^3 \le 4h\sum_{j=1}^{M}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\big|\delta_x^2 u_{ij}\big|^2\Big)^{\frac{1}{2}}\Big(h\sum_{i=1}^{M}\big|\Delta_x u_{ij}\big|^4\Big)^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|_3^3$$
$$\le 4\Big(h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\big|\delta_x^2 u_{ij}\big|^2\Big)^{\frac{1}{2}}\Big(h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\big|\Delta_x u_{ij}\big|^4\Big)^{\frac{1}{2}}+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|_3^3. \quad \text{(A.8)}$$

由柯西-施瓦茨不等式，得到

$$\|\Delta_x u\|_3^3 \le \Big(h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\big|\Delta_x u_{ij}\big|^2\Big)^{\frac{1}{2}}\cdot\Big(h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\big|\Delta_x u_{ij}\big|^4\Big)^{\frac{1}{2}}=\|\Delta_x u\|\cdot\|\Delta_x u\|_4^2.$$

将上述不等式代入 (A.8)，得到

$$h\sum_{j=1}^{M}\max_{1\le m\le M}|\Delta_x u_{mj}|^3 \le \|\Delta_x u\|_4^2\Big(4\|\delta_x^2 u\|+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|\Big). \quad \text{(A.9)}$$

此外，以下结论也成立

$$|\Delta_x u_{im}|^3-|\Delta_x u_{is}|^3=\sum_{j=s}^{m-1}\Big(|\Delta_x u_{i,j+1}|^3-|\Delta_x u_{ij}|^3\Big).$$

与前面的推导过程类似，可得

$$h\sum_{j=1}^{M}\max_{1\le m\le M}|\Delta_x u_{mj}|^3 \le \|\Delta_x u\|_4^2\Big(4\|\delta_x\delta_y u\|+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|\Big). \quad \text{(A.10)}$$

现在估计 $\|\Delta_x u\|_6$。利用柯西-施瓦茨不等式，得到

$$h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}|\Delta_x u_{ij}|^6 = h\sum_{i=1}^{M}\Big(h\sum_{j=1}^{M}|\Delta_x u_{ij}|^3\cdot|\Delta_x u_{ij}|^3\Big)$$
$$\le h\sum_{i=1}^{M}\Big(\max_{1\le j\le M}|\Delta_x u_{ij}|^3\cdot h\sum_{j=1}^{M}|\Delta_x u_{ij}|^3\Big)$$
$$\le\Big(h\sum_{i=1}^{M}\max_{1\le j\le M}|\Delta_x u_{ij}|^3\Big)\Big(h\sum_{j=1}^{M}\max_{1\le i\le M}|\Delta_x u_{ij}|^3\Big)$$

将（A.9）和（A.10）代入上述不等式，可得

$$\|\Delta_x u\|_6^6 \le \|\Delta_x u\|_4^4\Big(4\|\delta_x^2 u\|+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|\Big)\Big(4\|\delta_x\delta_y u\|+\frac{1}{L}\|\Delta_x u\|\Big)$$
$$\le 5\|\nabla_h u\|_4^4\Big(4\|\Delta_h u\|^2+\frac{1}{L^2}\|\nabla_h u\|^2\Big).$$

类似地，可得

$$\|\Delta_y u\|_6^6 \le 5\|\nabla_h u\|_4^4\Big(4\|\Delta_h u\|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h u\|^2\Big).$$

由此可得

$$\begin{aligned}\|\nabla_h u\|_6^6 &= h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\Big(|\Delta_x u_{ij}|^2 + |\Delta_y u_{ij}|^2\Big)^3 \\ &\le 4h^2\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}\Big(|\Delta_x u_{ij}|^6 + |\Delta_y u_{ij}|^6\Big) \\ &\le 40\|\nabla_h u\|_4^4\Big(4\|\Delta_h u\|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h u\|^2\Big).\end{aligned}$$

接下来按照证明 $\mathrm{k}\nabla_h u\mathrm{k}_6$，的相同步骤，我们得到 $\mathrm{k}\nabla_h u\mathrm{k}_4$ 的估计

$$\|\nabla_h u\|_4 \le C_2\|\nabla_h u\|^{\frac{1}{2}}\Big(2\|\Delta_h u\|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h u\|^2\Big)^{\frac{1}{4}},$$

其中 C_2 是一个常数。上述两个不等式意味着存在一个常数 K，使得

$$\|\nabla_h u\|_6 \le K\|\nabla_h u\|^{\frac{1}{3}}\Big(4\|\Delta_h u\|^2 + \frac{1}{L^2}\|\nabla_h u\|^2\Big)^{\frac{1}{3}}.$$

参考文献

[1] M. Y. Li, Y. M. Shi, C. C. Cheng 等人，具有原子级锐利界面的单层 *WSe2-MoS2* 横向 *p-n* 结的外延生长，《科学》，**349**，524–528（2015）。[2] L. Wang, X. Z. Xu, L. N. Zhang 等人，在铜上外延生长面积达 *100* 平方厘米的单晶六方氮化硼单层，《自然》，**570**，91–95（2019）。[3] B. Jenichen, M. Hanke, S. Gaucher 等人，固相外延过程中形成的 *FeGe2* 有序结构，《物理评论材料》，**2**，051402（2018）。[4] H. P. Nair, J. P. Ruf, N. J. Schreiber 等人，揭示超导 *Sr2RuO4* 薄膜的生长机制，《应用物理快报：材料》，**6**，101108 （ 2018 ）。[5] D. Moldovan 和 L. Golubovic，斜率选择外延生长中的界面粗化动力学，《物理评论 E》（3），**61**，6190–6214（2000）。[6] M. F. Gyure, J. J. Zinck, C. Ratsch, D. D. Vvedensky，粗糙表面上的不稳定生长，《物理评论快报》，**81**，4931–4934（2003）。[7] B. B. King, O. Stein 和 M. Winkler，一种描述外延薄膜生长的四阶抛物型方程，第 94 号预印本，亚琛大学数学系 C，（2000）。[8] B. Li 和 J. G. Liu，有无斜率选择的薄膜外延，《欧洲应用数学杂志》，**14**，713–743（2003）。[9] D. Li, Z. H. Qiao 和 T. Tang，薄膜外延方程的梯度界，《微分方程杂志》，**262**，1720–1746（2017）。

[10] *Z. H. Qiao, Z. Z. Sun* 和 *Z. R. Zhang*，非线性外延生长模型的两种线性化有限差分格式的稳定性与收敛性，《数值方法与偏微分方程》，*28*，*1893–1915*（*2012*）。[11] *X. F. Yang, J. Zhao* 和 *Q. Wang*，基于不变能量二次化方法的分子束外延生长模型数值近似，《计算物理学杂志》，*333*，*104–127*（*2017*）。[12] *L. Z. Chen, J. Zhao* 和 *X. F. Yang*，斜率选择分子束外延模型的正则化线性格式，《应用数值数学》，*128*，*139–156*（*2018*）。[13] *L. Z. Chen, J. Zhao* 和 *Y. Z. Gong*，斜率选择分子束外延模型的一种新型二阶格式，《计算物理通讯》，*25*，*1024–1044*（*2019*）。[14] *W. J. Li, W. B. Chen, C. Wang, Y. Yan* 和 *R. J. He*，一种无斜率选择薄膜模型的二阶能量稳定线性格式，《科学计算杂志》，*76*，*1905–1937*（*2018*）。[15] *K. L. Cheng, Z. H. Qiao* 和 *C. Wang*，一种具有能量稳定性的无斜率选择外延薄膜模型三阶指数时间差分数值格式，《科学计算杂志》，*81*，*154–185*（*2019*）。[16] *W. B. Chen, W. J. Li, C. Wang* 等人，梯度流的能量稳定高阶线性 *ETD* 多步方法：在薄膜外延中的应用，《数学科学研究》，*7*，*13*（*2020*）。[17] *W. B. Chen, W. J. Li, Z. W. Luo, C. Wang* 和 *X. M. Wang*，一种用于无斜率选择薄膜生长模型的稳定化二阶指数时间差分多步方法，《*ESAIM*数学建模与数值分析》，*54*，*727–750*（*2020*）。[18] *H. Zhang, X. F. Yang* 和 *J. Zhang*，无斜率分段分子束外延模型的稳定化不变能量二次化（*S-IEQ*）方法，《国际数值分析与建模杂志》，*18*，*642–655*（*2021*）。[19] *D. Li, C. Y. Qian* 和 *W. Yang*，勘误：无斜率选择 *MBE* 的 *BDF3/EP3* 格式是稳定的，《科学计算杂志》，*89*，*62*（*2021*）。[20] *Y. H. Hao, Q. M. Huang* 和 *C. Wang*，一种用于无斜率选择薄膜模型的三阶 *BDF* 能量稳定线性格式，《计算物理通讯》，*29*，*905–929*（*2021*）。[21] *C. J. Xu* 和 *T. Tang*，外延生长模型大时间步长方法的稳定性分析，《*SIAM* 数值分析杂志》，*44*，*1759–1779*（*2006*）。[22] *D. Li, Z. Qiao* 和 *T. Tang*，刻画相场方程半隐式傅里叶谱方法的稳定化尺度，《*SIAM* 数值分析杂志》，*54*，*1653–1681*（*2016*）。[23] *W. Q. Feng, C. Wang, S. M. Wise* 和 *Z. R. Zhang*，一种用于斜率选择外延薄膜方程的二阶能量稳定后向差分公式方法，《数值方法与偏微分方程》，*34*，*1975–2007*（*2018*）。[24] *S. F. Wang, W. B. Chen, H. S. Pan* 和 *C. Wang*，斜率选择薄膜模型二阶格式的最优阶收敛性分析，《计算与应用数学杂志》，*377*，*112855*（*2020*）。[25] *W. B. Chen, C. Wang, X. M. Wang* 和 *S. M. Wise*，一种用于无斜率选择薄膜模型二阶能量稳定格式的线性迭代算法，《科学计算杂志》，*57*，*574–601*（*2014*）。[26] *W. B. Chen, Y. C. Zhang, W. J. Li, Y. Q. Wang* 和 *Y. Yan*，无斜率选择薄膜模型二阶格式的最优收敛性分析，《科学计算杂志》，*80*，*1716–1730*（*2019*）。[27] *W. B. Chen* 和 *Y. Q. Wang*，薄膜外延的混合有限元方法，《数值数学》，*122*，*771–793*（*2012*）。[28] *Z. H. Qiao, T. Tang, H. H. Xie*，分子束外延模型混合有限元方法的误差分析，《*SIAM* 数值分析杂志》，*53*，*184–205*（*2015*）。[29] *F. S. Luo, H. H. Xie, M. T. Xie* 等人，分子束自适应时间步进算法

外延：基于能量或粗糙度，《应用数学快报》，*99*，*105991*（*2020*）。[30] *Z. H. Qiao*、*Z. Z. Sun* 和 *Z. R. Zhang*，《无斜率选择非线性外延生长模型二阶格式的稳定性与收敛性》，《数学计算》，*84*，*653–674*（*2015*）。[31] *Y. Y. Kang* 和 *H. L. Liao*，《无斜率选择分子束外延模型中最高五阶 *BDF* 方法的能量稳定性》，《科学计算杂志》，*91*，*47*（*2022*）。[32] *Y. Z. Cheng*、*A. Kurganov*、*Z. L. Qu* 和 *T. Tang*，《相场模型的快速稳定显式算子分裂方法》，《计算物理学杂志》，*303*，*45–65*（*2015*）。[33] *X. Li*、*Z. H. Qiao*、*H. Zhang*，《斜率选择外延生长模型中快速显式算子分裂方法的收敛性》，《*SIAM* 数值分析杂志》，*55*，*265–285*（*2017*）。[34] *H. G. Lee*、*J. Shin* 和 *J. Y. Lee*，《外延薄膜生长模型的二阶算子分裂傅里叶谱方法》，《科学计算杂志》，*71*，*1303–1318*（*2017*）。[35] *X. L. Feng*、*T. Tang* 和 *J. Yang*，《使用 *p* 自适应谱延迟校正方法对相场问题进行长时间数值模拟》，《*SIAM* 科学计算杂志》，*37*，*A271–A294*（*2015*）。[36] *C. Wang*、*X. M. Wang* 和 *S. M. Wise*，《薄膜外延方程的无条件稳定格式》，《离散与连续动力系统 *A*辑》，*28*，*405–423*（*2010*）。[37] *J. Shen*、*C. Wang*、*X. Wang* 和 *S. M. Wise*，《具有 *Ehrlich–Schwoebel* 型能量的梯度流二阶凸分裂格式：在薄膜外延中的应用》，《*SIAM* 数值分析杂志》，*50*，*105–125*（*2012*）。[38] *Z. H. Qiao*、*C. Wang*、*S. M. Wise* 等，《斜率选择外延薄膜模型有限差分格式的误差分析及改进的收敛常数》，《国际数值分析与建模杂志》，*14*，*283–305*（*2017*）。[39] *Q. Cheng*、*J. Shen* 和 *X. F. Yang*，《使用 *SAV* 方法求解外延薄膜生长模型的高效高精度数值格式》，《科学计算杂志》，*78*，*1467–1487*（*2019*）。[40] *W. B. Chen*、*S. Conde*、*C. Wang*、*X. M. Wang* 和 *S. M. Wise*，《无斜率选择薄膜模型的线性能量稳定格式》，《科学计算杂志》，*52*，*546–562*（*2012*）。[41] *Y. H. Xia*，《无斜率选择薄膜外延问题的全离散稳定间断伽辽金方法》，《计算物理学杂志》，*280*，*248–260*（*2015*）。[42] *L. L. Ju*、*X. Li*、*Z. H. Qiao* 和 *H. Zhang*，《无斜率选择外延生长模型指数时间差分格式的能量稳定性与误差估计》，《数学计算》，*87*，*1859–1885*（*2018*）。[43] *J. Shin* 和 *H. G. Lee*，《无斜率选择外延薄膜生长模型的线性、高阶、无条件能量稳定格式》，《应用数值数学》，*163*，*30–42*（*2021*）。[44] *Z. H. Qiao*、*Z. R. Zhang* 和 *T. Tang*，《分子束外延模型的自适应时间步进策略》，《*SIAM* 科学计算杂志》，*33*，*1395–1414*（*2011*）。[45] *H. L. Liao*、*X. H. Song*、*T. Tang* 和 *T. Zhou*，《无斜率选择分子束外延模型变步长二阶 *BDF* 格式的分析》，《中国科学：数学》，*64*，*887–902*（*2021*）。[46] *H. l. Liao*、*B. Q. Ji*、*L. Wang* 和 *Z. M. Zhang*，《*Cahn–Hilliard* 模型变步长能量稳定 *BDF2* 格式的网格鲁棒性》，《科学计算杂志》，*92*，*52*（*2022*）。[47] *H. L. Liao*、*Z. Zhang*，《扩散方程自适应 *BDF2* 格式的分析》，《数学计算》，*90*，*1207–1226*（*2021*）。[48] *H. Gomez*、*T. Hughes*，《相场模型中可证明无条件稳定、二阶时间精确的混合变分方法》，《计算物理学杂志》，*230*，*5310–5327*（*2011*）。