偏微分方程数值解法

任课教师：黄忠亿

清华大学数学科学系

目录 I

加权残量法的基本思想

设微分方程边值问题为:

$$\mathcal{L}u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^n, \tag{6.1}$$

$$\mathcal{B}u(\mathbf{y}) = 0, \quad \mathbf{y} \in \partial D. \tag{6.2}$$

这里 $\mathcal{L}, \mathcal{B}$ 是两个线性微分算子.

问: 什么是问题 (6.1)–(6.2) 好的数值解?

答: 如果有一个函数 $\bar{u}$ 满足边界条件 (6.2) 且使得下面残量

$$R = \mathcal{L}\bar{u} - f$$

尽可能 "小", 则说 $\bar{u}$ 是一个好的近似解.

加权残量法的基本思想

那么如何衡量残量的大小呢?

我们在加权残量法 (method of weighted residuals, MWR) 的框架下来考虑:

在一个 Hilbert 空间 H 的一个有限维子空间 Φ 中找一个近似解 u_N:

$$u_N = \sum_{i=1}^{N} a_i \phi_i, \tag{6.3}$$

这里 $\vec{a} = (a_1, \cdots, a_N)^T$ 为待定系数组成的向量, $\phi_1, \cdots, \phi_N$ 为子空间 Φ 的一组基函数, 一般也称为试验函数.

加权残量法的基本思想

残量 $R(\mathbf{x};\vec{a})$ 为

(6.4) $$R(\mathbf{x};\vec{a}) = \mathcal{L}u_N(\mathbf{x};\vec{a}) - f(\mathbf{x}),$$

假设我们考虑的边值问题 (6.1)–(6.2) 是适定的, 那么显然只有在 u_N 是原问题的精确解时, 残量 R 才会为零.

而加权残量法的思想是：希望适当选取系数 $\vec{a}$ 使得残量与一组测试函数 $\{\psi_j, j=1,\cdots,N\}$ 在 Hilbert 空间内积意义下正交:

(6.5) $$(\psi_j, R) = 0, \quad j = 1,\cdots,N.$$

亦即说明残量在测试空间上的正交投影为零.

加权残量法的基本思想

小结一下，加权残量法 (MWR) 的步骤为:

1. 选取一组满足要求的基函数 $\{\phi_j\}_{j=1}^N \subset H$;
2. 构造试验函数 $u_N = \displaystyle\sum_{i=1}^N a_i\phi_i$;
3. 选取一组权函数 (一般也称为测试函数) $\{\psi_j\}_{j=1}^N$;
4. 运用 MWR 原则, 要求 $(\psi_j, R) = 0,\ j = 1, \cdots, N$;
5. 求解上面得到的关于系数 a_i 的代数方程组, 得到近似解 $u_N = \displaystyle\sum_{i=1}^N a_i\phi_i$.

加权残量法的分类

其实我们可以根据试验函数 ϕ_i 的不同选取对离散化方法做一个分类:

1. 有限差分方法: 试验函数为支集有重叠的局部低阶多项式;
2. 有限元方法: 试验函数为紧支集的光滑函数 (一般为分片低阶多项式);
3. 谱方法: 试验函数一般为整体光滑的函数.

谱方法的分类

注意：谱方法里的试验函数为整体光滑函数.

根据测试函数 ψ_j 的不同选取方式, 可以对谱方法分类如下:

1. Galerkin 方法: 测试函数 = 试验函数，且每个基函数 ϕ_i 都满足边界条件 (6.2);
2. Tau 方法: 测试函数 =(极大部分) 试验函数，此时基函数 ϕ_i 都满足边界条件 (6.2)，还需要增加条件以让 u_N 满足边界条件 (6.2);
3. 配置法或也称拟谱方法: 测试函数为在某些特定点定义的 $\delta-$ 函数, 这些点称为配置点, $\psi_j = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)$.

谱方法-Galerkin 方法

下面简要说明一下如何用三类谱方法来求解问题 (6.1)–(6.2):

对 Galerkin 方法, $\psi_j = \phi_j$, 且 ϕ_i 满足(6.2), 我们希望:

$$
\begin{aligned}
(\phi_j, R) = 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad (\phi_j, \mathcal{L}u_N - f) = 0 \\
&\Longleftrightarrow \quad (\phi_j, \mathcal{L}\sum_{i=1}^{N} a_i\phi_i) = (\phi_j, f) \\
&\Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{N} a_i(\phi_j, \mathcal{L}\phi_i) = (\phi_j, f) \\
(\text{令} L_{ji} = (\phi_j, \mathcal{L}\phi_i)) \quad &\Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{N} L_{ji}a_i = (\phi_j, f), \quad j = 1, \cdots, N
\end{aligned}
$$

这样转化为求一个线性方程组 $L\vec{a} = F$.

谱方法-Tau 方法

对 Tau 方法，也有 $\psi_j = \phi_j$，但是一般来说构造 ϕ_i 满足 (6.2) 很困难，即可能有 $\mathcal{B}\phi_i \neq 0$. 这时候我们需要额外增加一些约束以让近似解 u_N 满足边界条件 (6.2).

假设 $\{g_k\}_{k=1}^M$ 是一些定义在 ∂D 上的正交基函数，我们把 $\mathcal{B}\phi_j(\mathbf{y})$ 表示为

$$\mathcal{B}\phi_j(\mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{M} b_{kj} g_k(\mathbf{y}).$$

这样如果令 $u_N = \sum_{j=1}^{N+M} a_j \phi_j$，边界条件 (6.2) 变为

$$\mathcal{B}u_N(\mathbf{y}) = 0 \Longleftrightarrow \sum_{j=1}^{N+M} a_j \sum_{k=1}^{M} b_{kj} g_k(\mathbf{y}) = 0$$

谱方法-Tau 方法

也就是说，边界条件成为

$$\sum_{j=1}^{N+M} b_{kj}a_j = 0, \quad k = 1, \cdots, M. \tag{6.6}$$

因此，由

$$(\phi_j, R) = 0 \Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{N+M} L_{ji}a_i = (\phi_j, f), \quad j = 1, \cdots, N$$

这样转化为求线性方程组:

$$\begin{pmatrix} L \\ B \end{pmatrix} \vec{a} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}$$

谱方法-配置法 (拟谱方法)

对配置法，我们有 $\psi_j = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)$, 这里 $\mathbf{x}_j$ 是一些配置点. 极小化残量的办法使得:

$$
\begin{aligned}
(\psi_j, R) = 0 \quad &\Longleftrightarrow \quad (\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \mathcal{L}u_N - f) = 0 \\
&\Longleftrightarrow \quad \mathcal{L}u_N(\mathbf{x}_j) = f(\mathbf{x}_j) \\
&\Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{N+M} \big(\mathcal{L}\phi_i(\mathbf{x}_j)\big) a_i = f(\mathbf{x}_j)
\end{aligned}
$$

类似于 Tau 方法中处理边界条件，我们有最后转化为求一个线性方程组

$$
\begin{pmatrix} L \\ B \end{pmatrix} \vec{a} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}
$$

谱方法-基函数 $\phi_i(\mathbf{x})$ 的选取

如何选取基函数 (试验函数) $\phi_i(\mathbf{x})$ 呢?

一般来说,

- 对于周期问题: ϕ_i 取成三角多项式;
- 对于非周期问题: ϕ_i 取成正交多项式.

目录 I

Fourier Galerkin 方法求解波动方程

考虑如下形式时间发展问题:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{M}(u), \quad x \in (0, 2\pi), \ t > 0 \tag{6.7}$$

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad x \in [0, 2\pi], \tag{6.8}$$

简单起见给以周期边界条件. 使用谱方法离散, 即假设近似解写成

$$u_N(x,t) = \sum_{k=-N/2}^{N/2} a_k(t)\phi_k(x), \tag{6.9}$$

为极小化残量 $\frac{\partial u_N}{\partial t} - \mathcal{M}(u_N)$, 选取测试函数 $\{\psi_k\}_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}}$ 使得,

$$\int_0^{2\pi} \left[\frac{\partial u_N}{\partial t} - \mathcal{M}(u_N)\right] \psi_k(x) dx = 0, \quad -\frac{N}{2} \le k \le \frac{N}{2}. \tag{6.10}$$

Fourier Galerkin 方法求解波动方程

应用 Galerkin 谱方法思想, 即取

(6.11) $$\phi_k(x) = \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx},$$

我们有如下正交性 $$\int_0^{2\pi} \phi_k(x)\bar{\psi}_l(x)dx = \delta_{kl}.$$

上面 (6.9) 式其实就是 $u(x,t)$ 的截断 Fourier 级数，其中系数

(6.12) $$a_k(t) = \int_0^{2\pi} u(x,t)\bar{\psi}_k(x)dx.$$

当然 $u(x,t)$ 还是未知，所以我们需要由 (6.10) 来确定系数.

Fourier Galerkin 方法求解波动方程

举例来说，考虑标量双曲问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

i.e. $\mathcal{M}(u) = \frac{\partial u}{\partial x}$. 这样 (6.10) 式变成 (对 $-\frac{N}{2} \leq k \leq \frac{N}{2}$)

(6.13) $$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \sum_{l=-N/2}^{N/2} a_l(t) e^{\mathrm{i}lx} \right] e^{-\mathrm{i}kx} dx = 0.$$

即系数 $a_k(t)$ 满足常微分方程组

(6.14) $$\frac{da_k}{dt} - \mathrm{i}k a_k(t) = 0, \quad k = -N/2, \cdots, N/2.$$

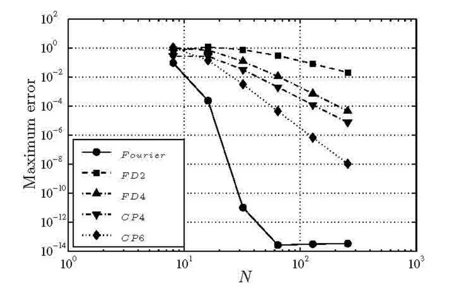
当然我们应该有初值条件 $a_k(0) = \int_0^{2\pi} u(x,0)\bar{\psi}_k(x) dx.$

Fourier Galerkin 方法求解波动方程

假如初值条件为 $u(x,0)=\sin(\pi\cos x)$, 那么精确解为

$$u(x,t)=\sin[\pi\cos(x+t)]. \tag{6.15}$$

u 的 Fourier 展开系数为 $a_k(t)=\sin(\frac{k\pi}{2})J_k(\pi)e^{ikt}$, 这里 $J_k(t)$ 为 k 阶 Bessel 函数. 由 Bessel 函数性质有 $\forall m\in\mathbb{N},\ k^m a_k(t)\to 0,\ k\to\infty$.



Chebyshev 配置法求解热传导方程

Fourier 级数的办法处理周期边界条件是很方便的，但是实际问题很多情形都不是周期边界条件，要复杂很多.

这时使用 Chebyshev 多项式是一个很好的选择. 即在 $[-1,1]$ 上定义

$$T_k(x) = \cos(k \arccos x), \quad k = 0, 1, \cdots \tag{6.16}$$

这一小节考虑求解热传导方程初边值问题 (*i.e.* $\mathcal{M}(u) = u_{xx}$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in (-1,1),\ t > 0, \tag{6.17}$$

$$u(-1,t) = u(1,t) = 0, \quad t > 0, \tag{6.18}$$

$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad x \in [-1,1]. \tag{6.19}$$

Chebyshev 配置法求解热传导方程

我们此时取 $\phi_k(x) = T_k(x)$, $k = 0, 1, \cdots$

这样近似解写成

$$u_N(x,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(t)\phi_k(x).$$

配置法即要求残量方程(6.5)在一些配置点 $\{x_j\}_{j=1}^{N-1} \subset (-1,1)$ 上严格满足，即

$$\left(\frac{\partial u_N}{\partial t} - \mathcal{M}(u_N)\right)\Big|_{x=x_j} = 0, \tag{6.20}$$

然后再结合初边值条件离散:

$$u_N(-1,t) = u_N(1,t) = 0, \quad u_N(x_k,0) = u_0(x_k), k = 0, \cdots, N$$

即可求解关于 $a_k(t)$ 的常微方程组.

Chebyshev 配置法求解热传导方程

一个方便的选取方法是令

$$x_j = \cos\frac{j\pi}{N}, \quad j = 0, \cdots, N$$

注意到此时有

$$\phi_k(x_j) = \cos\frac{kj\pi}{N}. \tag{6.21}$$

这种选取不仅可以计算便捷 (在计算 $\mathcal{M}(u_N)$ 时可以用离散快速 Fourier 变换)，而且计算精度高.

如果我们取初值条件为 $u(x,0) = \sin\pi x$, 那么精确解为

$$u(x,t) = e^{-\pi^2 t}\sin\pi x. \tag{6.22}$$

Chebyshev 配置法求解热传导方程

我们可以得到 $u(x,t)$ 的广义 Chebyshev 展开级数为

$$u(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k(t) T_k(x), \tag{6.23}$$

其中

$$b_k(t) = c_k \sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) J_k(\pi) e^{-\pi^2 t}, \quad c_k = \begin{cases} 1, & k = 0, \\ 2, & k \geq 1. \end{cases}$$

同样由 $J_k(\pi)$ 的渐近性质可知, 上述截断级数是指数收敛到 u 的.

注意到前面的 Chebyshev 配置法不是简单地 Chebyshev 截断级数, 因此 $a_k(t)$ 与 $b_k(t)$ 一般不等.

Chebyshev 配置法求解热传导方程

另一种方便地做法是计算 u_N 的节点值 $u_j(t) = u_N(x_j, t)$, 即

(6.24) $$u_N(x,t) = \sum_{j=0}^{N} u_j(t)\phi_j(x),$$

这时 $\phi_j(x)$ 是一些离散 $\delta-$ 函数, 即为 $N-$ 阶多项式且满足

$$\phi_j(x_i) = \delta_{ij}, \quad 0 \le i, j \le N.$$

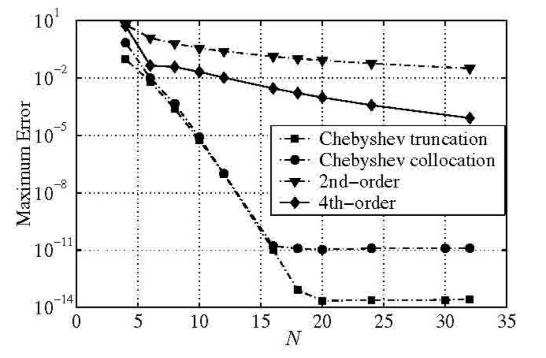
类似地推导，我们可以得到 $u_j(t)$ 满足的常微方程组 (注意由边界条件此时有 $u_0 = u_N = 0$):

$$\frac{du_j}{dt}(t) = \sum_{l=0}^{N} (D_N^2)_{jl} u_l(t), \quad j = 1, \cdots, N-1$$

(D_N^2) 为通过计算 $\mathcal{M}(u_N)$ 得到的一个常系数矩阵.

Chebyshev 配置法求解热传导方程

下图给出了 $t = 1$ 时 Chebyshev 配置法与几种差分格式的对比. Chebyshev 截断级数图线作为参考.



Chebyshev 配置法求解拟线性热传导方程

如果考虑一个更一般情形热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial u}{\partial x}\right)=0,$$

这里 κ 可能是变化的函数、甚至是 u 的函数, 此时我们无法直接由 (6.20) 得到关于系数的常微分方程组, 因为那样我们需要得到热通量 $\mathcal{F}(u_N)=\kappa\frac{\partial u_N}{\partial x}$ 的精确微分.

一个做法是, 记节点值 $F_l(t)=\mathcal{F}(u_N)(x_l)$, $l=0,\cdots,N$. 然后我们利用热通量 $\mathcal{F}(u_N)$ 的节点值做一个 N-阶插值:

$$\mathcal{F}_N(u_N)=I_N(\mathcal{F}(u_N)).$$

这里 I_N 为一个插值算子.

Chebyshev 配置法求解拟线性热传导方程

这样配置法即为

$$\left[\frac{\partial u_N}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} I_N\left(\kappa \frac{\partial u_N}{\partial x}\right)\right]_{x=x_j} = 0, \quad j = 1, \cdots, N-1. \tag{6.25}$$

或者说我们得到等价的常微分方程组为

$$\frac{du_j}{dt} = \sum_{k=0}^{N} (D_N)_{jk} F_k(t), \quad j = 1, \cdots, N-1. \tag{6.26}$$

这里 (D_N) 为 Chebyshev 配置法的微分矩阵.

Legendre Tau 方法求解 Poisson 方程

这里考虑用谱方法来求解定常问题:

$$\mathcal{M}(u) = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y),\ (x,y) \in D = (-1,1)^2, \tag{6.27}$$

$$\mathcal{B}(u) = u|_{\partial D} = 0. \tag{6.28}$$

当然 Legendre 和 Chebyshev 多项式都可以用于求解此问题. 我们这里用张量积形式多项式:

$$\phi_{kl}(x,y) = L_k(x)L_l(y), \quad k,l = 0,\cdots,N, \tag{6.29}$$

其中 $L_k(x)$ 为 k-阶 Legendre 多项式. 这样近似解可写成

$$u_N(x,y) = \sum_{k,l=0}^{N} a_{kl} L_k(x) L_l(y). \tag{6.30}$$

Legendre Tau 方法求解 Poisson 方程

由于试验函数 ϕ_{kl} 不满足齐次边界条件，因此我们需要额外的条件以使得 u_N 满足边界条件 (6.28). 我们可以取测试函数为

(6.31) $$\psi_{kl}(x,y) = Q_k(x)Q_l(y), \quad k,l = 0,\cdots,N-2,$$

其中 $Q_k(x) = \frac{2k+1}{2}L_k(x)$. 在四条边上分别取测试函数为

(6.32) $$\chi_k^{1/2}(x) = Q_k(x), \quad \chi_k^{3/4}(y) = Q_k(y), \quad k = 0,\cdots,N.$$

这样约束条件为

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \mathcal{M}(u_N)(x,y)\psi_{kl}(x,y)dxdy = 0, \quad k,l = 0,\cdots,N-2;$$

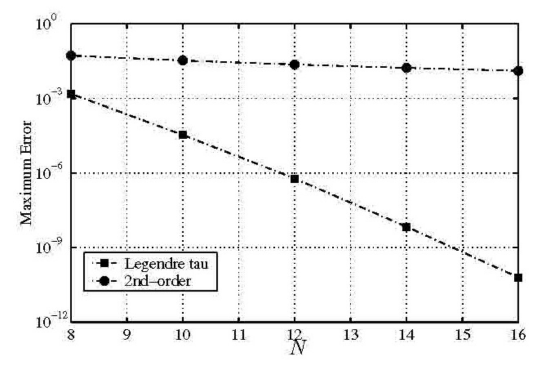
$$\int_{-1}^{1} u_N(x,\pm 1)\chi_k^{1/2}(x)dx = 0, \quad \int_{-1}^{1} u_N(\pm 1,y)\chi_k^{3/4}(y)dy = 0,$$

$$0 \le k \le N.$$

Legendre Tau 方法求解 Poisson 方程

注意到四个角点处边界条件其实用了两次.

取 $f(x,y) = 2\pi^2 \sin\pi x \sin\pi y$, 有 $u(x,y) = \sin\pi x \sin\pi y$. 下图给出了 Legendre Tau 方法与二阶五点差分格式的对比.



Legendre Galerkin 方法 + 数值积分

继续考虑用谱方法来求解一维定常问题:

$$\mathcal{M}(u) = \frac{d\mathcal{F}(u)}{dx} + \gamma u(x) = f(x),\ x \in D = (-1,1), \tag{6.33}$$

$$\mathcal{B}(u) = \begin{cases} u(-1) = 0, \\ \mathcal{F}(u)(1) + g = 0. \end{cases} \tag{6.34}$$

这里:

$$\mathcal{F}(u) = -\nu\frac{du}{dx} + \beta u, \tag{6.35}$$

ν, β, γ, f 都是 x 的函数, 且 $\nu(x) \geq \nu_0 > 0$.

考虑使用 Legendre 多项式来定义试验函数和测试函数.

Legendre Galerkin 方法 + 数值积分

设 $L_N(x)$ 为 N 阶 Legendre 多项式, 它有 $N-1$ 个极点:

$$L_N'(x_j) = 0, \quad j = 1, \cdots, N-1.$$

再补上两个边界点 $x_0 = -1$, $x_N = 1$.

我们知道 Gauss-Lobatto 求积公式

$$\int_{-1}^{1} p(x)dx \sim \sum_{j=0}^{N} A_j p(x_j) \tag{6.36}$$

对于阶 $\leq 2N-1$ 的多项式是准确成立的. 这样我们令

$$\psi_j(x) = \frac{1}{N(N+1)} \frac{1-x^2}{x_j - x} \frac{L_N'(x)}{L_N(x_j)}, \quad j = 0, \cdots, N \tag{6.37}$$

有 $\psi_j(x_k) = \delta_{jk}$, $j, k = 0, \cdots, N$.

Legendre Galerkin 方法 + 数值积分

考虑到边界条件，我们可以设近似解为

$$u_N(x) = \sum_{j=1}^{N} u_j \psi_j(x). \tag{6.38}$$

我们有 $u_j = u_N(x_j)$. 将方程 (6.33) 乘以测试函数 ψ_j 再积分有

$$\int_{-1}^{1} \left(\frac{d\mathcal{F}(u)}{dx} \psi_j + \gamma u \psi_j \right) dx = \int_{-1}^{1} f \psi dx, \quad j = 1, \cdots, N. \tag{6.39}$$

分部积分后有

$$\begin{aligned} &\int_{-1}^{1} \left(\nu \frac{du}{dx} \frac{d\psi_j}{dx} - \beta u \frac{d\psi_j}{dx} + \gamma u \psi_j \right) dx \\ = &\int_{-1}^{1} f \psi dx + g \delta_{jN}, \quad j = 1, \cdots, N. \end{aligned} \tag{6.40}$$

Legendre Galerkin 方法 + 数值积分

将上面的 u 换成 u_N 结合 (6.38) 便可以得到数值格式.

但是一般来说只有特殊情形上述积分可以得到准确值，一般而言需要数值积分来得到. 因此我们需要借助数值积分公式 (6.36) 来计算:

$$\begin{aligned}(6.41)\qquad &\sum_{k=0}^{N} A_k\left(\nu\frac{du_N}{dx}\frac{d\psi_j}{dx}-\beta u_N\frac{d\psi_j}{dx}+\gamma u_N\psi_j\right)(x_k)\\ =\ &\sum_{k=0}^{N} A_k(f\psi)(x_k)+g\delta_{jN},\quad j=1,\cdots,N.\end{aligned}$$

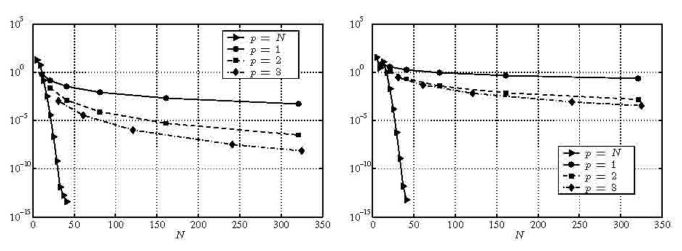
结合 (6.38) 便得到关于系数 $U=(u_l)_{l=1}^N$ 的方程组 $KU=F$.

Legendre Galerkin 方法 + 数值积分

考虑一个例子: $\nu = 1$, $\beta(x) = \cos(\frac{\pi}{4}(1+x))$, $\gamma = 1$. 准确解为

$$u(x) = \cos(3\pi(1+x))\sin(\frac{\pi}{5}(x+0.5)) + \sin(\frac{\pi}{10}).$$

下图给出了 Legendre Galerkin 方法结合数值积分 ($p = N$) 与有限元方法 ($p = 1, 2, 3$) 的对比.



左图为解的误差，右图为在 $x = 1$ 处的通量误差.

目录 I

广义正交函数展开

我们看到，谱方法求解 PDE 就是寻求解函数 u 的一个正交函数展开

$$u=\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\hat{u}_k\phi_k, \quad \text{或者} \quad u=\sum_{k=0}^{+\infty}\hat{u}_k\phi_k. \tag{6.42}$$

显然，逼近的精度和方法的有效性会决定这些方法在科学计算中的适用性.

最常见的当然是对于周期函数的 Fourier 展开:

$$u(x)=\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\hat{u}_k e^{ikx} \quad \text{或者} \quad u(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{+\infty}(a_k\cos kx+b_k\sin kx).$$

如果 u 充分光滑, 那么上面的截断级数可以谱精度收敛.

广义正交函数展开

当然如果函数 u 不是周期的，但足够光滑的话，上面正交函数展开依然可以有谱精度.

函数 u 越光滑，系数 $u_k \to 0$ 的速度越快.

对于周期函数的 Fourier 展开式，我们有 FFT 快速算法来计算 u 的节点值与展开系数 $\hat{u}_k$ 之间的变换.

对于一般正交多项式 (如 Chebyshev 多项式)，我们也可以有快速离散变换来计算.

Fourier 展开

我们先来回顾一下 Fourier 展开的情形.

我们知道 $\phi_k(x) = e^{ikx}$ 构成了 $(0, 2\pi)$ 上的正交函数

$$\int_0^{2\pi} \phi_k(x)\overline{\phi_l(x)}dx = 2\pi\delta_{kl}, \quad k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

对于可积函数 $u(x)$ 我们可以定义其 Fourier 系数为

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u(x)e^{-ikx}dx, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{6.43}$$

由 u 来计算系数 $\hat{u}_k$ 的过程 (6.43) 称为 Fourier 变换. u 的 Fourier 级数定义为

$$Su = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k \phi_k. \tag{6.44}$$

Fourier 展开

我们也可以引入 Fourier Cosine 变换和 Fourier Sine 变换:

(6.45) $$a_k = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u(x)\cos kx dx, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

(6.46) $$b_k = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u(x)\sin kx dx, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

定义 Fourier 级数为

(6.47) $$su = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty}(a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

为了使上述展开严格化，我们有以下几个问题需解决:

1. 什么时候、在什么意义下上述级数收敛？收敛速度如何？
2. 上述级数与函数 u 之间有什么关系？

Fourier 展开

一个基本问题就是研究下面三角级数的部分和序列

$$P_N u(x) = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{u}_k e^{\mathrm{i}kx}, \tag{6.48}$$

随着 $N \to \infty$ 收敛到 u 的情况 (上面部分和正好有 N 个自由度，大部分计算机程序也是采用类似的记号).

当然上面的几个问题已经被很多数学家研究过，我们下面简要回顾一下与谱方法求解 PDE 相关的结论.

Fourier 展开

定理 6.1 (Zygmund(1959))

1. 如果 u 是 $[0,2\pi]$ 上的连续周期函数 (即 $u(0^+)=u(2\pi^-)$), 且全变差有限，那么 (6.44) 式定义的 Fourier 级数 Su 一致收敛到 u, *i.e.*

$$\max_{x\in[0,2\pi]}|u(x)-P_N u(x)|\to 0,\ \text{当} N\to\infty.$$

2. 如果 u 是 $[0,2\pi]$ 上的全变差有限函数，那么 $\forall x\in[0,2\pi]$, $P_N u(x)$ 逐点收敛到 $\frac{u(x^+)+u(x^-)}{2}$, 这里 $u(0^-)=u(2\pi^-)$.
3. 如果 u 只是 $[0,2\pi]$ 上的连续周期函数, 那么 Fourier 级数未必 $\forall x\in[0,2\pi]$ 每点都收敛.

Fourier 展开

当然，有时候解函数 u 没有那么光滑. 我们没法达到逐点收敛, 这时我们可以在平方可积意义下讨论其收敛性. 即我们说 Su 在 $L^2(0,2\pi)$ 意义下收敛到 u, 是指

$$\int_0^{2\pi} |u(x) - P_N u(x)|^2 dx \to 0, \quad \text{当} N \to \infty.$$

我们定义 $L^2(0,2\pi)$ 中的内积为

$$(u,v) = \int_0^{2\pi} u(x)\overline{v(x)}dx, \quad \forall u,v \in L^2(0,2\pi). \tag{6.49}$$

并记 $S_N = \mathrm{span}\{e^{ikx} | -\frac{N}{2} \le k \le \frac{N}{2} - 1\}$ 为阶不超过 $N/2$ 的三角多项式组成的子空间, 利用三角函数正交性有

$$(P_N u, v) = (u,v), \quad \forall v \in S_N. \tag{6.50}$$

Fourier 展开

这也就是说 $P_N u$ 是 u 在 S_N 空间上的正交投影.

这样对于 $u \in L^2(0, 2\pi)$, 我们有以下 Parseval 等式

(6.51) $$\|u\|^2 = (u, u) = 2\pi \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |\hat{u}_k|^2,$$

这里 $\hat{u}_k$ 由 (6.43) 定义. 反过来，任给一组复数 $\{c_k\}_{k\in\mathbb{Z}}$ 使得 $\sum_{k\in\mathbb{Z}} |c_k|^2 < +\infty$, 我们知道一定存在函数 $u \in L^2(0, 2\pi)$ 使得其 Fourier 展开系数为 $\{c_k\}$. 这样 $\forall u \in L^2(0, 2\pi)$, 我们可以写成

(6.52) $$u = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k \phi_k,$$

这里等式是在 $L^2(0, 2\pi)$ 意义下成立.

Fourier 展开

如果我们记
$$\sum_{|k|\gtrsim N/2} \equiv \sum_{\substack{k<-N/2\\ k\geq N/2}}$$
那么由 Parseval 等式有
$$\|u-P_Nu\| = \left(2\pi \sum_{|k|\gtrsim N/2} |\hat{u}_k|^2\right)^{1/2}. \tag{6.53}$$
另一方面, 只要 u 充分光滑, 我们有
$$\max_{x\in[0,2\pi]} |u(x)-P_Nu(x)| \leq \sum_{|k|\gtrsim N/2} |\hat{u}_k|. \tag{6.54}$$
这说明 Fourier 级数逼近的误差取决于 Fourier 系数衰减的速度.

Fourier 展开

如果 u 在 $(0,2\pi)$ 上为连续可微的函数，那么对于 $k\neq 0$，有

$$\begin{aligned} 2\pi\hat{u}_k &= \int_0^{2\pi} u(x)e^{-\mathrm{i}kx}dx \\ &= \frac{-1}{\mathrm{i}k}[u(2\pi^-)-u(0^+)]+\frac{1}{\mathrm{i}k}\int_0^{2\pi} u'(x)e^{-\mathrm{i}kx}dx \end{aligned}$$

即 $\hat{u}_k=\mathcal{O}(\frac{1}{k})$. 如果 u' 在 $(0,2\pi)$ 上连续可微且 u 为周期函数, 那么有 $\hat{u}_k=\mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$.

所以如果 $u\in C^{(m)}(0,2\pi)$ $(m\geq 1)$ 且所有 $u^{(j)}$ $(j\leq m-1)$ 在 $[0,2\pi]$ 上为周期函数, 那么

$$\hat{u}_k=\mathcal{O}\left(\frac{1}{k^m}\right). \tag{6.55}$$

离散 Fourier 变换

上述计算函数的连续 Fourier 展开级数的过程在实际应用中存在一些困难:

- 一般函数的 Fourier 系数表达式无法准确得到，通常都需要近似计算;
- 有了 Fourier 系数后，如何计算物理空间每个点上的函数值仍需要快速算法;
- 所有（哪怕是简单的）非线性情形都会计算非常复杂.

因此人们常常用离散 Fourier 变换来克服以上困难.

离散 Fourier 变换

任给 $N \in \mathbb{N}$, 令

(6.56) $$x_j = \frac{2\pi j}{N}, \quad j = 0, \cdots, N-1.$$

对于 $[0, 2\pi]$ 上的复值函数 u 可以定义其离散 Fourier 变换系数为

(6.57) $$\tilde{u}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j) e^{-\mathrm{i}kx_j}, \quad k = -\frac{N}{2}, \cdots, \frac{N}{2} - 1.$$

利用正交性

(6.58) $$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\mathrm{i}px_j} = \begin{cases} 1, & p = Nm, \ m = 0, \pm 1, \cdots \\ 0, & \text{其他情形} \end{cases}$$

我们有以下离散 Fourier 反变换

(6.59) $$u(x_j) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_k e^{\mathrm{i}kx_j}, \quad j = 0, \cdots, N-1.$$

离散 Fourier 变换

因此，三角多项式

(6.60) $$I_N u(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{u}_k e^{\mathrm{i}kx}$$

就是 u 在节点 $\{x_j\}_{j=0}^{N-1}$ 上的 $N/2$ 阶三角插值多项式. 即

$$I_N u(x_j) = u(x_j), \quad j = 0, \cdots, N-1.$$

$I_N u(x)$ 也称为函数 u 的离散 Fourier 级数.

离散 Fourier 变换 (DFT)(6.57)和反变换 (IDFT)(6.59)给出了 N 个函数值 $u(x_j)$ 与 N 个复值系数 $\tilde{u}_k$ 之间的关系. 实际计算上可以用快速 Fourier 变换来实现.

注意 $\tilde{u}_k$ 可以看成是用复化梯形公式来计算 $\hat{u}_k$ 得到的近似值.

离散 Fourier 插值

如果把 (6.57) 代入 (6.60) 式可以得到

(6.61) $$I_N u(x) = \sum_{j=0}^{N-1} u(x_j)\psi_j(x),$$

这里

(6.62) $$\psi_j(x) = \frac{1}{N}\sum_{k=-N/2}^{N/2-1} e^{\mathrm{i}k(x-x_j)}, \quad j = 0, \cdots, N-1.$$

显然 $\psi_j(x) \in S_N$ 为阶低于 $N/2$ 的三角多项式且满足

(6.63) $$\psi_j(x_l) = \delta_{jl}, \quad j, l = 0, \cdots, N-1.$$

它们是在节点 $\{x_j\}_{j=0}^{N-1}$ 上的离散 Delta 函数，也是这些节点上的 Lagrange 插值基函数.

离散 Fourier 插值

插值算子 I_N 可以看成 $L^2(0,2\pi)$ 到 S_N 上的正交投影算子.

事实上如果定义离散内积

$$(u,v)_N = \frac{2\pi}{N}\sum_{j=0}^{N-1} u(x_j)\overline{v(x_j)}, \tag{6.64}$$

由正交性 (6.58) 可知

$$(u,v)_N = (u,v), \quad \forall u,v \in S_N.$$

即 $\forall u \in S_N$ 可定义范数为 $\|u\|_N = \sqrt{(u,u)_N} = \sqrt{(u,u)} = \|u\|$.

插值算子 I_N 满足性质: 对于连续函数 u,

$$(I_N u, v)_N = (u,v)_N, \quad \forall v \in S_N.$$

离散 Fourier 插值- Aliasing 误差

我们也可用连续 Fourier 变换系数 $\hat{u}_k$ 来表示离散 Fourier 变换系数 $\widetilde{u}_k$: 假设 Fourier 级数 Su 在节点 $\{x_j\}_{j=0}^{N-1}$ 上都收敛到 u, 那么

(6.65) $$\widetilde{u}_k = \hat{u}_k + \sum_{0\neq m\in\mathbb{Z}} \hat{u}_{k+Nm}, \quad k = -N/2, \cdots, N/2-1.$$

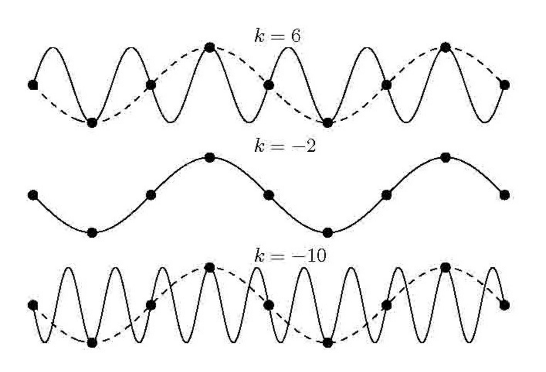
由于 $\phi_{k+Nm}(x_j) = \phi_k(x_j)$, 我们在节点上无法分辨 $k_N m$-阶的波数三角函数与 k-阶波数的三角函数.

举例来说, 取 $N=8$, 下面三个 Sine 函数:

$$\sin 6x, \quad \sin(-2x), \quad \sin(-10x)$$

在节点 $x_j = \frac{2\pi j}{N}$ 上就无法分辨.

离散 Fourier 插值- Aliasing 误差



如上图所示, 在节点 $\frac{2\pi j}{8}$ $(j=0,\cdots,8)$ 上就没法分辨 $\sin 6x$, $\sin(-2x)$, $\sin(-10x)$ 这三个函数.

离散 Fourier 插值- Aliasing 误差

(6.65) 式也可以写成

$$I_N u = P_N u + R_N u, \tag{6.66}$$

这里

$$R_N u = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \sum_{0\neq m\in\mathbb{Z}} \hat{u}_{k+Nm}\phi_k. \tag{6.67}$$

插值函数与 Fourier 截断级数之间的误差 $R_N u$ 称为 aliasing (混淆) 误差. 它与 Fourier 截断级数误差 $u - P_N u$ 是正交的, 因此有

$$\|u - I_N u\|^2 = \|u - P_N u\|^2 + \|R_N u\|^2 .$$

即插值误差总是不小于 Fourier 截断级数的误差.

离散 Fourier 插值- Aliasing 误差

已有不少工作在讨论 Aliasing 误差问题. Kreiss 与 Oliger (1979) 证明了 aliasing 误差与截断误差是同一个量级的. 因此可以说插值多项式与截断级数有同样的收敛性, 而且连续和离散 Fourier 系数也有同样的渐近性质.

1. 如果 u 是 $[0, 2\pi]$ 上的连续、全变差有界的周期函数, 那么 $I_N u$ 一致收敛到 u.
2. 如果 u 是 $[0, 2\pi]$ 上的全变差有界的函数, 那么 $I_N u$ 一致有界且在 u 的连续点上收敛.
3. 如果 u 是可积函数, 那么 $I_N u$ 也在积分意义下收敛到 u.
4. 如果 u 是无穷次可微函数, 离散 Fourier 变换系数衰减到零比任何多项式速度衰减都快.

去除混淆误差-填充或截断

要想去除混淆误差，一个办法就是在离散 Fourier 变换中不是用 N 个点，而是用 $M \geq 3N/2$ 个点. 令

$$y_j = \frac{2\pi j}{M}, \quad \bar{u}_j = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \breve{u}_k e^{iky_j}, \quad \bar{v}_j = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \breve{v}_k e^{iky_j},$$

$$\bar{s}_j = u_j v_j, \quad \breve{u}_k = \begin{cases} \hat{u}_k, & |k| \lesssim N/2 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

这里 $\breve{u}_k$ 相当于对 $\hat{u}_k$ 做了一些零填充. $\bar{u}_j(\bar{v}_j)$ 是 $u(v)$ 在 y_j 上的值, $u_j(v_j)$ 是 $u(v)$ 在 x_j 上的值.

去除混淆误差-填充或截断

类似地令

$$\breve{s}_k = \frac{1}{M}\sum_{j=0}^{M-1} \bar{s}_j e^{-\mathrm{i}ky_j}, \quad k = -\frac{M}{2}, \cdots, \frac{M}{2} - 1$$

那么有

$$\breve{s}_k = \sum_{m+n=k} \breve{u}_m \breve{v}_n + \sum_{m+n=k\pm M} \breve{u}_m \breve{v}_n.$$

我们只关心 $|k| \lesssim N/2$ 的 $\breve{s}_k$, 因此只要使得上面右边第二项为零即可, 那么 $M \geq 3N/2$ 即可.

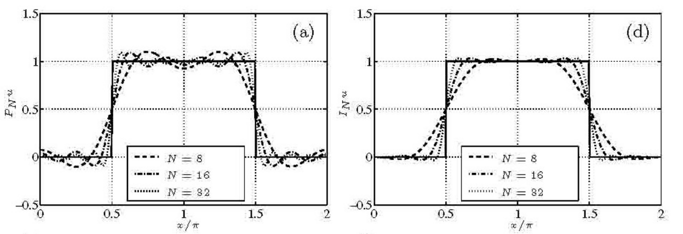
这样我们就可以得到去除混淆误差的系数

$$\hat{s}_k = \breve{s}_k, \quad k = -N/2, \cdots, N/2 - 1.$$

还可以用相位平移等办法去除混淆误差.

离散 Fourier 插值- Gibbs 现象

Gibbs 现象描述了全变差有限的函数的截断 Fourier 级数或者离散 Fourier 级数在间断点处的振荡现象.



如上图所示, 无论是截断连续级数还是离散级数 (插值多项式) 都有振荡现象.

一般可以在系数前面乘上一些所谓光滑滤波因子来抑制振荡现象, 这里就不详述了.

有界区间上的 Sturm-Liouville 问题

我们已经知道谱方法来求解微分方程其实就是用适当边界条件下 Sturm-Liouville 问题的特征函数的有限展开来逼近问题的解.

回顾一下一般的 Sturm-Liouville 问题:

$$-(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) = \lambda\omega(x)u(x), \qquad x \in (-1,1),$$
$$\text{对}u\ \text{给以适当的边界条件}$$

这里 $p(x) > 0$ 是 $(-1,1)$ 上连续可微函数, 且在 $[-1,1]$ 上连续. $q(x) \geq 0$ 是 $(-1,1)$ 上连续有界函数, 权函数 $\omega(x) \geq 0$ 是 $(-1,1)$ 上连续可积函数 (允许有奇点).

谱方法中感兴趣的 Sturm-Liouville 问题是何时用其特征函数展开具有谱精度. 即其广义 Fourier 系数衰减速度超过特征值的负幂次. 当然不是所有此类问题的特征函数展开都具有谱精度.

有界区间上的 Sturm-Liouville 问题

举例来说, 以下特征值问题

$$-u''(x) = \lambda u(x), \qquad x \in (-1,1)$$
$$u'(-1) = u(1) = 0$$

的特征函数为 $\phi_k(x) = \cos\frac{k\pi}{2}(x+1)$, 相应特征值为 $\lambda_k = \frac{k^2\pi^2}{2}$.

区间 $(-1,1)$ 上的光滑函数用这些函数展开要具有谱精度当且仅当其奇次导数在边界点处为零. 这里原因在于函数 $p(x)$ 在端点处不为零, 这称为*正则的* Sturm-Liouville 问题.

相反的, 如果问题是*奇异的*, *i.e.* p 在端点处为零, 那么特征函数展开具有谱精度.

这里最重要的一类情形就是多项式特征函数.

正交多项式-广义 Fourier 级数

之前在《数值分析》课程里我们已经讲过如何构造区间 $[-1,1]$ 上的带权 $\omega(x)$ 正交多项式 $p_k(x)$:

(6.68) $$\int_{-1}^{1}\omega(x)p_k(x)p_l(x)dx=\delta_{kl}.$$

因此如果引入内积和范数

(6.69) $$(u,v)_\omega=\int_{-1}^{1}\omega(x)u(x)v(x)dx,\quad \|u\|_\omega=\sqrt{(u,u)_\omega}.$$

我们可以类似于 Fourier 级数那样定义广义 Fourier 级数展开:

(6.70) $$Su=\sum_{k=0}^{\infty}\hat{u}_k p_k,\quad \hat{u}_k=(u,p_k)_\omega/(p_k,p_k)_\omega.$$

如果令 $P_N u=\sum_{k=0}^{N}\hat{u}_k p_k$, 显然有 $\|u-P_N u\|_\omega\to 0$, 当 $N\to\infty$.

正交多项式-多项式插值

类似地，如果给了离散点 x_j 即相应的权 ω_j $(0 \le j \le N)$, 在配置法中我们也可以同样引入 N 次插值多项式 $I_N u$:

(6.71) $$I_N u(x_j) = u(x_j), \quad 0 \le j \le N.$$

当我们也可以将 $I_N u$ 写成

(6.72) $$I_N u = \sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}_k p_k.$$

利用 $u(x_j) = \sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}_k p_k(x_j)$, $0 \le j \le N$, 可以解出

(6.73) $$\widetilde{u}_k = \frac{1}{\gamma_k} \sum_{k=0}^{N} \omega_j u(x_j) p_k(x_j), \quad \gamma_k = \sum_{j=0}^{N} \omega_j p_k^2(x_j).$$

离散正交多项式插值

类似地我们可以定义离散内积

(6.74) $$(u,v)_N = \sum_{j=0}^{N} \omega_j u(x_j) v(x_j),$$

根据 Gauss 型插值多项式 (固定 0,1,2 个节点) 的性质有

(6.75) $$(u,v)_N = (u,v)_\omega, \quad \forall uv \in \mathbb{P}_{2N+\sigma}, \quad \sigma = 1, 0, -1.$$

我们也可以引入范数 $\|u\|_N = \sqrt{(u,u)_N}$,
显然有

(6.76) $$(I_N u, v)_N = (u,v)_N, \quad \forall v \in C[0,2\pi].$$

即 $I_N u$ 是 u 在 $\mathbb{P}_N$ 上的正交投影.

离散正交多项式插值

利用正交性 $(p_k, p_l) = \gamma_k \delta_{kl}$ 我们有 (对 $0 \le k \le N$)

(6.77) $$(u, p_k)_N = (I_N u, p_k)_N = \sum_{m=0}^{N} \widetilde{u}_m (p_m, p_k) = \gamma_k \widetilde{u}_k.$$

利用 (6.70) 和 (6.73), 我们有

(6.78) $$\widetilde{u}_k = \hat{u}_k + \frac{1}{\gamma_k} \sum_{l>N} (p_l, p_k)_N \hat{u}_l, \quad k = 0, \cdots, N.$$

即也可以写成

(6.79) $$I_N u = P_N u + R_N u,$$

这里

(6.80) $$R_N u = \sum_{k=0}^{N} \left(\frac{1}{\gamma_k} \sum_{l>N} (p_l, p_k)_N \hat{u}_l \right) p_k.$$

离散正交多项式插值

上面 $R_N u$ 可以看成由于插值带来的 aliasing (混淆) 误差 (参见前面的 (6.67)).

由于这个混淆误差与截断级数误差 $u - P_N u$ 正交, 因此有

$$\|u - I_N u\|_\omega = \|u - P_N u\|_\omega + \|R_N u\|_\omega .$$

一般来说 $(p_l, p_k)_N \neq 0, \forall l > N$. 因此 u 的离散多项式插值的 $k-$ 项系数不仅依赖于 u 的广义多项式展开级数的 k-项系数, 还会依赖于所有 $l > N$ 项的系数.

Legendre 多项式

Legendre 多项式 $L_k(x)$ 可以看成以下奇异 Sturm-Liouville 问题的特征函数

$$((1-x^2)L_k'(x))' + k(k+1)L_k(x) = 0,$$

即相当于 $p(x) = 1 - x^2$ (它在 $x = \pm 1$ 处为零), $q(x) = 0$, $\omega(x) = 1$. 如果归一化为 $L_k(1) = 1$, 那么有

$$L_k(x) = \frac{1}{2^k} \sum_{j=0}^{[k/2]} (-1)^j \begin{pmatrix} k \\ j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2k-2j \\ k \end{pmatrix} x^{k-2j}.$$

这里 $[k/2]$ 表示 $k/2$ 的整数部分.

Chebyshev 多项式

Chebyshev 多项式 $T_k(x)$ 可以看成以下 Sturm-Liouville 问题的的特征函数

$$(\sqrt{1-x^2}T_k'(x))' + \frac{k^2}{\sqrt{1-x^2}}T_k(x) = 0,$$

即相当于 $p(x) = \sqrt{1-x^2}$ (它在 $x = \pm 1$ 处为零), $q(x) = 0$, $\omega(x) = (1-x^2)^{-1/2}$. 如果归一化为 $T_k(1) = 1$, 那么有

$$T_k(x) = \cos k\theta, \quad \theta = \arccos x.$$

也可以写成

$$T_k(x) = \frac{k}{2}\sum_{j=0}^{[k/2]}(-1)^j \frac{(k-j-1)!}{j!(k-2j)!}(2x)^{k-2j}.$$

Jacobi 多项式

Jacobi 多项式 $P_k^{(\alpha,\beta)}(x)$ (其中 $\alpha, \beta > -1$) 是以下 Sturm-Liouville 问题的的特征函数

$$\left(p(x)(P_k^{(\alpha,\beta)})'(x)\right)' + q(x)P_k^{(\alpha,\beta)}(x) = \lambda_k \omega(x) P_k^{(\alpha,\beta)}(x),$$

这里 $p(x) = (1-x)^{1+\alpha}(1-x)^{1+\beta}$, $q(x) = 0$, $\omega(x) = (1-x)^{\alpha}(1-x)^{\beta}$. 相应的特征值为 $\lambda_k = k(k+\alpha+\beta+1)$.

如果归一化为 $P_k^{(\alpha,\beta)}(1) = \begin{pmatrix} k+\alpha \\ k \end{pmatrix}$, 我们有

$$P_k^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{1}{2^k} \sum_{j=0}^{k} \begin{pmatrix} k+\alpha \\ j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k+\beta \\ k-j \end{pmatrix} (x-1)^j (x+1)^{k-j}.$$

Jacobi 多项式

也可以写成以下 Rodriguez 公式

$$P_k^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^k}{2^k k!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{d^k}{dx^k}\left((1-x)^{k+\alpha}(1+x)^{k+\beta}\right).$$

Jacobi 多项式满足以下递推关系

$$P_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1, \quad P_1^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{1}{2}[(\alpha-\beta)+(\alpha+\beta+2)x],$$

$$a_{1,k}P_{k+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = a_{2,k}P_k^{(\alpha,\beta)}(x) - a_{3,k}P_{k-1}^{(\alpha,\beta)}(x),$$

这里

$$\begin{aligned} a_{1,k} &= 2(k+1)(k+\alpha+\beta+1)(2k+\alpha+\beta), \\ a_{2,k} &= (2k+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2)+x\frac{\Gamma(2k+\alpha+\beta+3)}{\Gamma(2k+\alpha+\beta)}, \\ a_{3,k} &= 2(k+\alpha)(k+\beta)(2k+\alpha+\beta+2). \end{aligned}$$

无界区域上的多项式逼近

对于定义在无界区域 (例如:$[0,+\infty)$ 或者 $(-\infty,+\infty)$) 上的函数, 我们有三种办法来逼近:

1. 用 Laguerre 或者 Hermite 多项式展开;
2. 把无界区域映射到有界区域, 然后用 Jacobi 多项式逼近;
3. 把区域截断成 $[0, X_{max}]$ 或者 $[X_{min}, X_{max}]$, 然后用 Jacobi 多项式展开.

Laguerre 多项式

对 $\alpha > -1$, 可以定义 Laguerre 多项式 $l_k^{(\alpha)}(x)$ 为如下 $(0,+\infty)$ 上 Sturm-Liouville 问题的特征函数:

$$\left(x^{\alpha+1}e^{-x}\left(l_k^{(\alpha)}\right)'(x)\right)' + kx^{\alpha}e^{-x}l_k^{(\alpha)}(x) = 0. \tag{6.81}$$

Laguerre 多项式在 $(0,+\infty)$ 上关于权函数 $\omega(x) = x^{\alpha}e^{-x}$ 正交. 确切些说, 如果归一化为 $l_k^{(\alpha)}(0) = \begin{pmatrix} k+\alpha \\ k \end{pmatrix}$, 那么有

$$\int_0^{+\infty} l_k^{(\alpha)}(x)l_m^{(\alpha)}(x)x^{\alpha}e^{-x}dx = \Gamma(\alpha+1)\begin{pmatrix} k+\alpha \\ k \end{pmatrix}\delta_{km}. \tag{6.82}$$

也可以用类似的 Rodriguez 公式定义

$$l_k^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{k!}x^{-\alpha}e^{-x}\frac{d^k}{dx^k}(x^{k+\alpha}e^{-x}).$$

Laguerre 多项式

Laguerre 多项式满足如下递推公式:

$$l_{k+1}^{(\alpha)}(x) = (2k+\alpha+1-x)l_k^{(\alpha)}(x) - (k-\alpha)l_{k-1}^{(\alpha)}(x),$$

其中 $l_0^{(\alpha)}(x) = 1$, $l_1^{(\alpha)}(x) = \alpha+1-x$.

$\forall v \in L_\omega(0,+\infty)$, 可以展开成 Laguerre 级数 $v = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{v}_k^{(\alpha)} l_k^{(\alpha)}$. 如果 v 的任意阶导数都在 $L_\omega(0,+\infty)$ 中, 那么上面级数会指数收敛. 但由于 $l_k^{(\alpha)}(x)$ 在 $x \to +\infty$ 时会无界, 因此截断在 $k = N$ 时的级数近似会在 $x \to +\infty$ 时变坏, 比如可能会产生振荡.

Laguerre 函数

为了避免上述逼近在无穷远处趋于零的函数的不好结果, 可以用 Laguerre 函数 $\mathcal{L}_k(x) = e^{-x/2} l_k^{(0)}(x)$ 来逼近.

由 (6.82) 可知

$$\int_0^{+\infty} \mathcal{L}_k(x)\mathcal{L}_m(x)dx = \delta_{km}. \tag{6.83}$$

即 Laguerre 函数构成了 $L^2(0, +\infty)$ 空间的一组正交基.

对于无穷光滑函数 $v \in L^2(0, +\infty)$, 仅当 $v(x)$ 在 $x \to +\infty$ 指数快地趋于零时, 才有 v 用 Laguerre 函数展开的级数有谱精度收敛.

Hermite 多项式

Hermite 多项式 $H_k(x)$ 是以下 Sturm-Liouville 问题的特征函数

$$\left(e^{x^2}H_k'(x)\right)' + 2ke^{-x^2}H_k(x) = 0.$$

它们构成了 $L^2_\omega(-\infty,+\infty)$ 上一组正交基 $(\omega(x) = e^{-x^2})$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_k(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}2^k k!\delta_{km}, \quad k,m \geq 0.$$

也可以用式子 $H_k(x) = (-1)^k e^{x^2}\dfrac{d^k}{dx^k}e^{-x^2}$ 来定义 Hermite 多项式. Hermite 多项式满足递推关系:

$$H_{k+1}(x) = 2xH_k(x) - 2kH_{k-1}(x), \quad k \geq 1,$$

这里 $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$.

类似地可以定义 Hermite 函数 $\mathcal{H}_k(x) = e^{-x^2/2}H_k(x)$.

直积展开

前面讲的都是一维正交函数的构造. 最自然地构造高维正交函数的做法就是利用直积. 例如给了 d 族定义在 (a_l,b_l) 上的一维正交函数 $\{\phi_{k_l}^{(l)}\}_{k_l}$, 可以定义 $\Omega=\prod_{l=1}^{d}[a_l,b_l]$ 上的正交基 $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\}_{\mathbf{k}}$ 为

(6.84) $$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})=\prod_{l=1}^{d}\phi_{k_l}^{(l)}(x_l),\quad \mathbf{k}=(k_1,\cdots,k_d),\ \mathbf{x}=(x_1,\cdots,x_d).$$

权函数为 $\omega(\mathbf{x})=\prod_{l=1}^{d}\omega_l(x_l)$.

类似地对于张量形式分布的求积节点, 如果 ψ_k 为 Lagrange 插值基函数, 可以定义直积形式的 Lagrange 插值基函数为

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})=\prod_{l=1}^{d}\psi_{k_l}(x_l).$$

目录 I

Fourier 逼近

令

(6.85) $$S_N = \text{span}\{e^{\text{i}kx} | -N \le k \le N\}.$$

引入范数

(6.86) $$\|u\|_{L^p(0,2\pi)} = \left(\int_0^{2\pi} |u(x)|^p dx\right)^{1/p}, \quad 1 \le p < +\infty,$$

(6.87) $$\|u\|_{L^\infty(0,2\pi)} = \sup_{x\in[0,2\pi]} |u(x)|, \quad p = +\infty.$$

如果 $1 \le p \le q \le +\infty$, 那么如果 $u \in L^q(0, 2\pi)$, 那么 $u \in L^p(0, 2\pi)$, 且 $\|u\|_{L^p(0,2\pi)} \le C \|u\|_{L^q(0,2\pi)}$, 这里 C 依赖于 p 和 q.

Fourier 逼近-反不等式

但是如果 $u \in S_N$, 那么有以下 Nikolski 不等式

(6.88) $$\|\phi\|_{L^q(0,2\pi)} \leq CN^{1/p-1/q}\|\phi\|_{L^p(0,2\pi)}.$$

另一类反不等式是关于 S_N 中函数与其导数之间范数的 Bernstein 不等式. $\forall p,\ 1 \leq p \leq +\infty, \forall k \in \mathbb{N}$, 有

(6.89) $$\left\|\phi^{(k)}\right\|_{L^p(0,2\pi)} \leq N^k\|\phi\|_{L^p(0,2\pi)}, \quad \forall \phi \in S_N,$$

这里 $\phi^{(k)}$ 表示 ϕ 的 k 阶导数.

级数截断和最佳逼近误差

设 $P_N : L^2(0,2\pi) \to S_N$ 为正交投影:

$$(u - P_N u, v) = 0, \quad \forall v \in S_N.$$

由 S_N 的定义 (6.85) 可知, $P_N u$ 是截断 Fourier 级数, *i.e.*

$$P_N u = P\left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{u}_k \phi_k\right) = \sum_{k=-N}^{N-1} \hat{u}_k \phi_k,$$

这里 $\phi_k = e^{ikx}$.

如果我们引入 Sobolev 空间范数

(6.90) $$\|u\|_{H^m(0,2\pi)} = \left(\sum_{k=0}^{m} \int_0^{2\pi} \left|u^{(k)}(x)\right|^2 dx\right)^{1/2}.$$

这些范数有界的函数构成了一个 Hilbert 空间 $H^m(0,2\pi)$.

级数截断和最佳逼近误差

考虑其中的周期函数, 利用 Fourier 展开, 可用以下等价范数

$$\|u\|_m = \left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left(1 + |k|^{2m}\right) |\hat{u}_k|^2 \right)^{1/2}. \tag{6.91}$$

即存在 $C_1, C_2 > 0$, s.t. $\forall u \in H_p^m(0, 2\pi)$ (周期函数)

$$C_1 \|u\|_{H^m(0,2\pi)} \le \|u\|_m \le C_2 \|u\|_{H^m(0,2\pi)}.$$

可以知道, $H_p^m(0, 2\pi)$ 中的函数 u 的不超过 m 阶导数的 Fourier 级数是收敛到 u 的相应导数的. 即有

$$u' = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \mathrm{i} k \hat{u}_k \phi_k, \quad \forall u \in H_p^1(0, 2\pi).$$

和

$$(P_N u)' = P_N u', \quad \forall u \in H_p^1(0, 2\pi).$$

级数截断和最佳逼近误差

利用 Parseval 等式可以得到

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\|u-P_N u\|_{L^2(0,2\pi)}=\left(\sum_{|k|\gtrsim N}|\hat{u}_k|^2\right)^{1/2}$$

$$=\left(\sum_{|k|\gtrsim N}\frac{1}{|k|^{2m}}|k|^{2m}|\hat{u}_k|^2\right)^{1/2}$$

$$\leq\quad N^{-m}\left(\sum_{|k|\gtrsim N}|k|^{2m}|\hat{u}_k|^2\right)^{1/2}\leq CN^{-m}\left\|u^{(m)}\right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

即有 $\forall m\geq 0,\ \forall u\in H_p^m(0,2\pi)$

(6.92) $$\|u-P_N u\|_{L^2(0,2\pi)}\leq CN^{-m}\left\|u^{(m)}\right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

级数截断和最佳逼近误差

当然我们还可以得到更高阶的 Sobolev 范数下误差估计

(6.93) $$\|u - P_N u\|_{H^l(0,2\pi)} \leq CN^{l-m} \left\|u^{(m)}\right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

$\forall m \geq 0,\ 0 \leq l \leq m$. 这个利用等价范数定义 (6.91) 马上可得.

利用截断投影与微分的可交换性, 可知在任意 Sobolev 范数(6.90)意义下, $P_N u$ 是 u 在 S_N 上的最佳逼近. 但是对于一般 L^p-范数 $(1 \leq p \leq +\infty)$ 就不一定了.

利用 Jackson's 定理可以得到 (假设 $u^{(m)} \in L^p(0, 2\pi)$)

(6.94) $$\inf_{\phi \in S_N} \|u - \phi\|_{L^p(0,2\pi)} \leq CN^{-m} \left\|u^{(m)}\right\|_{L^p(0,2\pi)}.$$

级数截断和最佳逼近误差

对于 L^p-范数下的截断级数误差 $u - P_N u$, 如果 $1 < p < +\infty$, 我们有

(6.95) $$\|u - P_N u\|_{L^p(0,2\pi)} \le C \inf_{\phi \in S_N} \|u - \phi\|_{L^p(0,2\pi)} ,$$

即 $P_N u$ 逼近 u 的 L^p-范数下的误差与最佳逼近误差是一个量级的.

如果 $p = 1$ 或者 $p = +\infty$, 那么有

(6.96) $$\|u - P_N u\|_{L^p(0,2\pi)} \le C(1 + \ln N) \inf_{\phi \in S_N} \|u - \phi\|_{L^p(0,2\pi)} .$$

三角函数插值误差估计

假设 $I_N u \in S_N$ 是 u 在节点 $x_j = \frac{j\pi}{N}$, $j = 0, \cdots, 2N-1$ 上的三角插值函数.

我们有以下插值误差 $(\forall m \geq 1,\ \forall u \in H_p^m(0,2\pi))$

(6.97) $$\|u - I_N u\|_{L^2(0,2\pi)} \leq CN^{-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

无穷范数意义下的插值误差为

(6.98) $$\|u - I_N u\|_{L^\infty(0,2\pi)} \leq C(\ln N)N^{-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^\infty(0,2\pi)}.$$

上面 (6.97) 式可以用来估计混淆误差 $R_N u = I_N u - P_N u$. 利用前面结论 $\|R_N u\|_{L^2(0,2\pi)} \leq \|u - I_N u\|_{L^2(0,2\pi)}$, 即有

(6.99) $$\|R_N u\|_{L^2(0,2\pi)} \leq CN^{-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

三角函数插值误差估计

利用前面的(6.99), (6.93) 和 Bernstein 不等式 (6.89) 可以得到高阶 Sobolev 范数意义下插值误差估计

$$\|u - I_N u\|_{H^l(0,2\pi)} \le \|u - P_N u\|_{H^l(0,2\pi)} + \|R_N u\|_{H^l(0,2\pi)}$$
$$\le \quad CN^{l-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(0,2\pi)} + CN^l \|R_N u\|_{L^2(0,2\pi)}$$
$$\le \quad CN^{l-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(0,2\pi)}.$$

即 $\forall 0 \le l \le m$,

$$\|u - I_N u\|_{H^l(0,2\pi)} \le CN^{l-m} \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(0,2\pi)}. \tag{6.100}$$

正则 Sturm-Liouville 问题

考虑以下正则 Sturm-Liouville 问题

$$-(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) = \lambda\omega(x)u(x), \quad x \in (-1,1), \tag{6.101}$$

其中 $p(x) \geq p_0 > 0$, $\int_{-1}^{1} \omega^{-1}(x)dx < +\infty$, 并给以适当边界条件

$$\begin{aligned} \alpha_1 u(-1) + \beta_1 u'(-1) = 0, \quad \alpha_1^2 + \beta_1^2 \neq 0, \\ \alpha_2 u(1) + \beta_2 u'(1) = 0, \quad \alpha_2^2 + \beta_2^2 \neq 0, \end{aligned} \tag{6.102}$$

α_j, β_j 是一些常数, $\alpha_1\beta_1 \leq 0$, $\alpha_2\beta_2 \geq 0$. Courant 和 Hilbert 1953 年就证明了上述特征值问题 (6.101)–(6.102) 存在非负特征值

$$0 \leq \lambda_0 < \lambda_1 < \cdots < \lambda_k < \lambda_{k+1} < \cdots$$

相应特征函数 $\phi_k(x)$ 恰好在 $(-1,1)$ 上有 k 个零点.

正则 Sturm-Liouville 问题

上述问题的特征值 λ_k 在 $k \to \infty$ 时的渐近性质为

(6.103)
$$\lim_{k\to\infty} \frac{k^2}{\lambda_k} = \frac{\pi^2}{4} \int_{-1}^{1} \sqrt{\frac{\omega}{p}}(x)dx.$$

特征函数的渐近行为取决于边界条件的选取. 例如对于 Neumann 边界条件 $u'(-1) = u'(1) = 0$, 那么有

$$\phi_k(x) = A_k \cos \frac{\pi}{2} k(x+1) + \frac{\mathcal{O}(1)}{k}, \quad k \to \infty.$$

在带权内积意义下上述特征函数是正交的

(6.104)
$$(\phi_k, \phi_m)_\omega = \int_{-1}^{1} \omega(x)\phi_k(x)\phi_m(x)dx = \delta_{km}.$$

更进一步的, $\{\phi_k\}_{k\geq 0}$ 构成了 $L^2_\omega(-1,1)$ 空间的一组完备正交基.

正则 Sturm-Liouville 问题

假设 ϕ_k 归一化为 $\|\phi\|_{L^2_\omega(-1,1)} = 1$. $\forall u \in L^2_\omega(-1,1)$, 定义其广义 Fourier 系数为

$$\hat{u}_k = (u, \phi_k)_\omega, \quad k = 0, 1, \cdots$$

对 $N \in \mathbb{N}$, 令

$$P_N u = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k \phi_k,$$

那么有

$$\lim_{N\to+\infty} \|u - P_N u\|_{L^2_\omega(-1,1)} = 0.$$

即级数 $\sum_{k\geq 0} \hat{u}_k \phi_k$ 在 $L^2_\omega(-1,1)$ 中收敛到 u.

局部收敛性需要 u 更高的正则性. 例如, 如果 u 在 $[-1,1]$ 上全变差有限, 那么 $P_N u(x)$ 逐点收敛到 $\frac{u(x^-)+u(x^+)}{2}$.

正则 Sturm-Liouville 问题

$u \in L^2_\omega(-1,1)$ 的广义 Fourier 系数的衰减速度不仅依赖于 u 的正则性, 也依赖于边界条件情况. 由定义并通过分部积分可以得到

$$
\begin{aligned}
\hat{u}_k &= (u,\phi_k)_\omega = \frac{1}{\lambda_k}\int_{-1}^{1} u[-(p\phi_k')' + q\phi_k]dx \\
&= \frac{1}{\lambda_k}\int_{-1}^{1}[-(pu')' + qu]\phi_k dx - \frac{1}{\lambda_k}[p(\phi_k' u - \phi_k u')]_{-1}^{1} \\
&= \frac{1}{\lambda_k}\left(\frac{1}{\omega}\mathcal{L}u, \phi_k\right)_\omega - \frac{1}{\lambda_k}[p(\phi_k' u - \phi_k u')]_{-1}^{1}. \qquad (6.105)
\end{aligned}
$$

这里需要 $u_{(1)} = \frac{1}{\omega}\mathcal{L}u \in L^2_\omega(-1,1)$. 由椭圆算子 $\mathcal{L}$ 的正则性, 在此条件下有 u 和 u' 会连续到边界.

正则 Sturm-Liouville 问题

假设 u 满足边界条件 (6.102), 式子 (6.105) 中的边界项为零, 因而有

$$\hat{u}_k = \frac{1}{\lambda_k}(u_{(1)}, \phi_k)_\omega.$$

重复下去就有对 $m \geq 2$, $\hat{u}_k = \frac{1}{\lambda_k^m}(u_{(m)}, \phi_k)_\omega$, 只要有 $u_{(m-1)}$ 满足边界条件 (6.102), $u_{(m)} = \frac{1}{\omega}\mathcal{L}u_{(m-1)} \in L^2_\omega(-1,1)$. 因而可以得到

$$|\hat{u}_k| \leq Ck^{-2m} \left\| u_{(m)} \right\|_{L^2_\omega(-1,1)}.$$

因而如果对某个 m, $u_{(m)}$ 不满足边界条件 (6.102), 那么 $\hat{u}_k$ 衰减的速度不会超过 k^{-2m}, 哪怕 $u \in C^\infty[-1,1]$.

在此情形, u 无法由 $\{\phi_k\}_{k\geq 0}$ 实现谱逼近.

奇异 Sturm-Liouville 问题

如果 $p(x)$ 至少在一个边界点为零称为奇异 Sturm-Liouville 问题. 我们这里仅考虑 $p(-1)=p(1)=0$.

这样边界条件需要修改, 一般我们需要如下条件

$$p(x)u'(x) \to 0, \quad \text{当} x \to \pm 1. \tag{6.106}$$

我们假设 u 关于权 ω 和 q 都平方可积, u' 关于权 p 平方可积, 即

$$u \in X = \{v \in L^2_\omega(-1,1) \cap L^2_q(-1,1) | v' \in L^2_p(-1,1)\}.$$

X 为 Hilbert 空间, 范数为 $\|v\|^2 = \int_{-1}^2 \left(v^2(\omega+q) + |v'|^2 p\right) dx$. 这样可以考虑以下变分形式

$$\int_{-1}^{1} \left(pu'v' + quv\right) dx = \lambda \int_{-1}^{1} \omega uv dx, \quad \forall v \in X. \tag{6.107}$$

奇异 Sturm-Liouville 问题

与正则 Sturm-Liouville 问题类似, 问题 (6.107) 有无穷多非负特征值 $0 \le \lambda_0 \le \lambda_1 \le \cdots \le \lambda_k \le \lambda_{k+1} \le \cdots$ 且可能会是 (有限) 重根. 相应的特征函数 $\{\phi_k\}_{k\ge 0}$ 构成了 $L^2_\omega(-1,1)$ 的一组正交基.

为了研究 $L^2_\omega(-1,1)$ 中函数 u 的广义 Fourier 展开系数 $\hat{u}_k = (u, \phi_k)_\omega$ 的性质, 我们可以类似于 (6.105) 得到:

$$
\begin{aligned}
\hat{u}_k &= \frac{1}{\lambda_k}\int_{-1}^{1}(p\phi_k' u' + q\phi_k u)dx \quad (\text{由}(6.107)) \\
&= \frac{1}{\lambda_k}\int_{-1}^{1}[-(pu')' + qu]\phi_k dx + \frac{1}{\lambda_k}[p\phi_k u']_{-1}^{1} \\
&= \frac{1}{\lambda_k}\left(\frac{1}{\omega}\mathcal{L}u, \phi_k\right)_\omega + \frac{1}{\lambda_k}[p\phi_k u']_{-1}^{1}. \qquad (6.108)
\end{aligned}
$$

奇异 Sturm-Liouville 问题

当然上面式子也需要 $u_{(1)} = \frac{1}{\omega}\mathcal{L}u \in L^2_\omega(-1,1)$. 在这个假设下, 有 pu' 连续到边界, 因为

$$
\begin{aligned}
\left|(pu')(x_1) - (pu')(x_2)\right| &= \left|\int_{x_1}^{x_2} (pu')' dx\right| \\
&\le \left(\int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{\omega}|(pu')'|^2 dx\right)^{1/2} \left(\int_{x_1}^{x_2} \omega dx\right)^{1/2}
\end{aligned}
$$

这样边界条件 (6.106) 就合乎情理, 它也蕴含了 (6.107) 式中边界项为零. 需要强调的是, 不同于正则 Sturm-Liouville 问题情形, 条件 (6.106) 只是 u 在闭区间 $[-1,1]$ 上的一个正则性假设. 容易验证, 例如 $\frac{p}{\omega}u'' \in L^2_\omega(-1,1)$, 就可以保证 (6.106) 式成立.

奇异 Sturm-Liouville 问题

同样地, 如果对 $m \geq 2$, 有 $u_{(m-1)}$ 满足边界条件 (6.106), 且 $u_{(m)} = \frac{1}{\omega}\mathcal{L}u_{(m-1)} \in L^2_\omega(-1,1)$, 那么有 $\hat{u}_k = \frac{1}{\lambda_k^m}(u_{(m)}, \phi_k)_\omega$. 因而可以得到

$$|\hat{u}_k| \leq Ck^{-2m} \left\| u_{(m)} \right\|_{L^2_\omega(-1,1)}.$$

因而只要有 u 无穷阶光滑, 就有 $\hat{u}_k$ 衰减到零的速度比任何多项式阶都快. 但是如果 q 在 $[-1,1]$ 上无界的话则未必如此. 例如考虑 Bessel 方程

$$-(xu')' + \frac{n^2}{x}u = \lambda xu, \quad 0 < x < 2,$$
$$u(2) = 0, \quad u \text{ 在0 附近有界}$$

只要 $n \neq 0$, $u_{(m)} \in L^2_\omega$ 就会要求 $u_{(m)}$ 在 $x = 0$ 处为零, 因为 $\frac{q^2}{\omega}$ 不可积. 此时要想达到谱精度, 就需要满足无穷多边界条件.

奇异 Sturm-Liouville 问题

我们可以看到奇异 Sturm-Liouville 问题唯一的多项式特征函数是 Jacobi 多项式.

事实上, 如果 $\phi_k = \frac{1}{\lambda_k \omega_k}\mathcal{L}\phi_k$ 是多项式 $(k = 0, 1, \cdots)$ 那么取 $k = 0, 1, 2$ 就可以发现 q/ω 就应该是零阶多项式, 即 $q = q_0\omega$, 且 p/ω 和 p'/ω 分别是二阶和一阶多项式.

由于 $p(x)$ 在端点为零, 因而必须有

$$\omega(x) = c_1(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}, \quad p(x) = c_2(1-x)^{1+\alpha}(1+x)^{1+\beta}.$$

最后由 ω 的可积性得到 $\alpha, \beta > -1$.

离散内积与范数

前面我们引入过离散内积(6.74): $(u,v)_N = \sum_{j=0}^{N} \omega_j u(x_j)v(x_j)$, 对于前面引入的正交多项式, 这当然是加权内积(6.69)

$$(u,v)_\omega = \int_{-1}^{1} \omega(x)u(x)v(x)dx$$

的一个高精度逼近. 对于 $\mathbb{P}_N$ 中的多项式,

$$\|v\|_N = (v,v)_N^{1/2} \tag{6.109}$$

定义了一个由离散内积诱导出来的离散范数.

如果求积节点 $\{x_j\}_{j=0}^N$ 是 Gauss 或者 Gauss-Radau 型积分节点, 那么有 $\|\phi\|_N = \|\phi\|_\omega$, $\forall \phi \in \mathbb{P}_N$. 如果是 Gauss-Lobatto 型积分节点, 那么有 $\|\phi\|_N = \|\phi\|_\omega$, $\forall \phi \in \mathbb{P}_{N-1}$, 此时对 $\phi \in \mathbb{P}_N$ 一般 $\|\phi\|_N \neq \|\phi\|_\omega$.

离散内积与范数

当然, 在 $\mathbb{P}_N$ 上 $\|\cdot\|_N$ 是一个与 $\|\cdot\|_\omega$ 等价的范数, 即存在常数 $C_1, C_2 > 0$ 不依赖于 N, 使得

(6.110) $$C_1 \|\phi\|_{L^2_\omega(-1,1)} \le \|\phi\|_N \le C_2 \|\phi\|_{L^2_\omega(-1,1)}, \quad \forall \phi \in P_N.$$

对于 Legendre 和 Chebyshev 多项式有

$$1 \le \frac{\|p_N\|_N}{\|p_N\|_{L^2_\omega(-1,1)}} = \begin{cases} \sqrt{2}, & \text{Chebyshev} \\ \sqrt{2+\frac{1}{N}}, & \text{Legendre} \end{cases}$$

即上面常数可以取 $C_1 = 1$, $C_2 = \sqrt{3}$. 这些范数等价性在稳定性与收敛性估计上会用到. 一个显然的推论就是 $\forall v \in C[-1,1]$, 有

(6.111) $$\|v\|_N \le C_2 \|I_N v\|_{L^2_\omega(-1,1)}.$$

离散内积与范数

离散内积与加权 L^2 内积之间的差通常可以由截断误差和插值误差来控制, 这些也在收敛性估计中用到.

设 $u \in C[-1,1]$, $\phi \in \mathbb{P}_N$. 对于 Gauss 和 Gauss-Radau 积分公式, 我们有

$$|(u,\phi)_\omega - (u,\phi)_N| \le \|u - I_N u\|_{L^2_\omega(-1,1)} \|\phi\|_{L^2_\omega(-1,1)} . \tag{6.112}$$

事实上由 (6.75) 和 (6.76) 有

$$(u,\phi)_\omega - (u,\phi)_N = (u,\phi)_\omega - (I_N u,\phi)_\omega,$$

然后由 Cauchy-Schwarz 不等式即得 (6.112).

离散内积与范数

对于 Gauss-Lobatto 积分, 如果 (6.110) 成立, 那么存在常数 $C > 0$ 不依赖于 N 使得

$$(6.113) \quad |(u,\phi)_\omega - (u,\phi)_N| \leq C\left(\|u - P_{N-1}u\|_{L^2_\omega(-1,1)} + \|u - I_N u\|_{L^2_\omega(-1,1)}\right)\|\phi\|_{L^2_\omega(-1,1)}.$$

事实上我们有

$$\begin{aligned}
|(u,\phi)_\omega-(u,\phi)_N| &= |(u,\phi)_\omega-(P_{N-1}u,\phi)_\omega+(P_{N-1}u,\phi)_\omega-(I_Nu,\phi)_N| \\
(\text{由}(6.75)) \quad &\leq |(u,\phi)_\omega-(P_{N-1}u,\phi)_\omega| + |(P_{N-1}u,\phi)_N-(I_Nu,\phi)_N| \\
(\text{由}(6.112)) \quad &\leq C\left(\|u-P_{N-1}u\|_\omega + \|P_{N-1}u - I_Nu\|_N\right)\|\phi\|_\omega \\
(\text{由}(6.112)) \quad &\leq C\left(2\|u-P_{N-1}u\|_\omega + \|u - I_Nu\|_\omega\right)\|\phi\|_\omega
\end{aligned}$$

然后即得 (6.113).

Sobolev 空间范数与半范

我们对 Sobolev 空间 $H^m(-1,1)$ 定义范数

(6.114) $$\|u\|_{H^m(-1,1)} = \left(\sum_{k=0}^{m} \left\| u^{(k)} \right\|^2_{L^2(-1,1)} \right)^{1/2},$$

及以下半范:

(6.115) $$|u|_{H^{m;N}(-1,1)} = \left(\sum_{k=\min(m,N+1)}^{m} \left\| u^{(k)} \right\|^2_{L^2(-1,1)} \right)^{1/2},$$

注意到, 只要 $N \geq m-1$, 就有

$$|u|_{H^{m;N}(-1,1)} = \left\| u^{(m)} \right\|_{L^2(-1,1)} = |u|_{H^m(-1,1)} .$$

Legendre 多项式截断与最佳逼近误差

如果 $P_N u = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k L_k$ 是 $u \in H^m(-1,1)$ 的截断 Legendre 级数, 那么截断级数误差为

$$\|u - P_N u\|_{L^2(-1,1)} \leq C N^{-m} |u|_{H^{m;N}(-1,1)} . \tag{6.116}$$

这里 C 依赖于 m. 从这里马上可以看到, 如果 $u \in \mathbb{P}_N$ 为不超过 N 阶的多项式, 那么取 $m = N+1$ 有

$$|u|_{H^{m;N}(-1,1)} = \left| u^{(N+1)} \right|_{L^2(-1,1)} = 0, \quad \textit{i.e.} \quad u = P_N u.$$

我们知道截断 Legendre 级数是 u 在 L^2-范数意义下的最佳逼近. 我们也可以考虑在其他范数意义下的最佳逼近: 求 $\phi^* \in \mathbb{P}_N$ *s.t.*

$$\|u - \phi^*\|_{L^p(-1,1)} = \int_{\phi \in \mathbb{P}_N} \|u - \phi\|_{L^p(-1,1)} , \quad 1 \leq p \leq \infty.$$

Legendre 多项式截断与最佳逼近误差

对 $2 < p \le \infty$, 最佳逼近误差与 L^2 中截断级数误差同阶, *i.e.* $\forall u \in W^{m,p}(-1,1)$

$$\inf_{\phi\in\mathbb{P}_N} \|u-\phi\|_{L^p} \le CN^{-m}\left(\sum_{k=\min(m,N+1)}^{m} \left\|u^{(k)}\right\|_{L^p}^{p}\right)^{1/p}. \tag{6.117}$$

如果 $p > 2$, 那么截断级数误差就会比最佳逼近误差的阶低一些. 例如, 如果 u 是一个 m 阶导数都是全变差有限的函数, 那么有

$$\|u-P_N u\|_{L^\infty} \le CN^{1/2-m}V(u^{(m)}), \tag{6.118}$$

这里 $V(u^{(m)})$ 是 $u^{(m)}$ 的全变差. 即 $p=\infty$ 时截断级数误差比最佳逼近误差至少低了半阶.

Legendre 多项式截断级数高阶导数误差

考虑截断级数的高阶导数误差 (将 (6.116) 推广到高阶导数):

(6.119) $$\|u - P_N u\|_{H^l(-1,1)} \leq CN^{2l-m-1/2} |u|_{H^{m;N}(-1,1)},$$

对 $u \in H^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, 对 $1 \leq l \leq m$ 成立.

注意 $l = m = 1$ 时说明截断级数的导数没有收敛性.

我们如果令 $P_N^l u \in \mathbb{P}_N$ 为 u 在 $H^l(-1,1)$ 上的正交投影, 那么对 $u \in H^m(-1,1)$, $l \leq m$, $0 \leq k \leq l$ 有

(6.120) $$\left\|u - P_N^l u\right\|_{H^k(-1,1)} \leq CN^{k-m} |u|_{H^{m;N}(-1,1)}.$$

Legendre 多项式插值误差

设 $\{x_j\}_{j=0}^{N}$ 为 Gauss 或 Gauss-Radau 或 Gauss-Lobatto 积分节点, $I_N u$ 为在上述节点上的插值多项式.

如果 $u \in H^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, 那么

$$\|u - I_N u\|_{L^2(-1,1)} \leq C N^{-m} |u|_{H^{m;N}(-1,1)}, \tag{6.121}$$

即插值误差与截断级数误差的渐近收敛阶相同. 类似地有

$$\|u - I_N u\|_{H^l(-1,1)} \leq C N^{2l-m-1/2} |u|_{H^{m;N}(-1,1)}, \tag{6.122}$$

对 $u \in H^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, 对 $1 \leq l \leq m$ 成立, 与截断级数误差情形一样. 不过对于 Gauss-Lobatto 积分有以下最优估计

$$\|u - I_N u\|_{H^1(-1,1)} \leq C N^{1-m} |u|_{H^{m;N}(-1,1)}. \tag{6.123}$$

Chebyshev 多项式逼近

我们对 Sobolev 空间 $H_\omega^m(-1,1)$ 定义范数

(6.124) $$\|u\|_{H_\omega^m(-1,1)} = \left(\sum_{k=0}^{m} \left\|u^{(k)}\right\|_{L_\omega^2(-1,1)}^2\right)^{1/2},$$

及以下半范:

(6.125) $$|u|_{H_\omega^{m:N}(-1,1)} = \left(\sum_{k=\min(m,N+1)}^{m} \left\|u^{(k)}\right\|_{L_\omega^2(-1,1)}^2\right)^{1/2},$$

注意到, 只要 $N \geq m-1$, 就有

$$|u|_{H_\omega^{m:N}(-1,1)} = \left\|u^{(m)}\right\|_{L_\omega^2(-1,1)} = |u|_{H_\omega^m(-1,1)}.$$

Chebyshev 多项式截断误差

如果 $P_N u = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k L_k$ 是 $u \in H^m(-1,1)$ 的截断 Chebyshev 级数, 那么截断级数误差为

(6.126) $$\|u - P_N u\|_{L^2_\omega(-1,1)} \le C N^{-m} |u|_{H^{m;N}_\omega(-1,1)}.$$

$\forall u \in H^m_\omega(-1,1)$, $m \ge 0$.

这是以下一般加权 L^p-范数下误差估计的特例:

(6.127) $$\|u - P_N u\|_{L^p_\omega(-1,1)} \le C\sigma_p(N) N^{-m} \sum_{k=\min(m,N+1)}^{m} \left\| u^{(k)} \right\|_{L^p_\omega(-1,1)},$$

对所有 m 阶导数属于 $L^p_\omega(-1,1)$ 的函数 u 都成立. 这里

$$\sigma_p(N) = \begin{cases} 1, & 1 < p < \infty \\ 1 + \ln N, & p = 1, \infty. \end{cases}$$

Chebyshev 多项式最佳逼近及导数误差

类似于前面 Legendre 多项式情形, 可以得到 Chebyshev 多项式的带权最佳逼近误差与前面同阶.

同样地有

(6.128) $$\|u - P_N u\|_{H^l_\omega(-1,1)} \le C N^{2l-m-1/2} |u|_{H^{m;N}_\omega(-1,1)},$$

对 $u \in H^m_\omega(-1,1)$ $(m \ge 1)$, 对 $1 \le l \le m$ 成立.

为了定义 $H^1_\omega(-1,1)$ 上的最佳逼近, 我们定义内积

(6.129) $$((u,v))_\omega = \int_{-1}^{1} (uv + u'v')dx, \quad \forall u, v \in H^1_\omega(-1,1).$$

定义 $P^1_N u$ 为 u 在 $\mathbb{P}_N$ 上的最佳逼近 (正交投影):

(6.130) $$((P^1_N u, \phi))_\omega = ((u,\phi))_\omega, \quad \forall \phi \in \mathbb{P}_N.$$

Chebyshev 多项式最佳逼近及导数误差

这样对 $u \in H_\omega^m(-1,1)$ ($m \geq 1$, $k = 0, 1$) 有以下误差估计

(6.131) $$\left\| u - P_N^1 u \right\|_{H_\omega^k(-1,1)} \leq CN^{k-m} \left| u \right|_{H_\omega^{m;N}(-1,1)}.$$

对于高阶 Sobolev 范数, 对 $u \in H_\omega^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, $0 \leq k \leq l \leq m$, 存在 $u^N \in \mathbb{P}_N$ (可以定义为 H_ω^l 内积意义下的正交投影) s.t.

(6.132) $$\left\| u - u^N \right\|_{H_\omega^k(-1,1)} \leq CN^{k-m} \left| u \right|_{H_\omega^{m;N}(-1,1)}.$$

对于其次边界条件情形可以有类似结论.

Chebyshev 多项式插值误差

设 $\{x_j\}_{j=0}^N$ 为 Chebyshev Gauss 或 Gauss-Radau 或 Gauss-Lobatto 积分节点, $I_N u$ 为在上述节点上的插值多项式.

如果 $u \in H_\omega^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, 那么

$$\|u - I_N u\|_{L_\omega^2(-1,1)} \leq C N^{-m} |u|_{H_\omega^{m;N}(-1,1)}, \tag{6.133}$$

即插值误差与截断级数误差的渐近收敛阶相同. 类似地有

$$\|u - I_N u\|_{H_\omega^l(-1,1)} \leq C N^{2l-m} |u|_{H_\omega^{m;N}(-1,1)}, \tag{6.134}$$

对 $u \in H_\omega^m(-1,1)$ $(m \geq 1)$, 对 $1 \leq l \leq m$ 成立, 与截断级数误差情形一样. 不过对于 Gauss-Lobatto 积分有以下最优估计

$$\|u - I_N u\|_{H_\omega^1(-1,1)} \leq C N^{1-m} |u|_{H_\omega^{m;N}(-1,1)}. \tag{6.135}$$

三种谱方法-Galerkin, Tau, 配置法

下面先回顾一下三种谱方法的定义.

考虑求解微分方程边值问题:

$$\begin{cases} \mathcal{L}u(x) = f(x), & x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \\ \mathcal{B}u(y) = 0, & y \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{6.136}$$

用谱方法来求解, 即考虑以下形式:

$$\begin{cases} \text{求} u \in X, \ \textit{s.t.} \\ (\mathcal{L}u, v) = (f, v), & \forall v \in Y. \end{cases} \tag{6.137}$$

其中 X, Y 是合适的函数空间. 一般还会有

$$(\mathcal{L}u, u) \geq \alpha \|u\|_X^2, \quad \forall u \in X, \tag{6.138}$$

$$(\mathcal{L}u, v) \leq C \|u\|_X \|v\|_Y, \quad \forall u \in X, \ v \in Y. \tag{6.139}$$

三种谱方法-Galerkin, Tau, 配置法

Galerkin 方法即

$$\begin{cases} \text{求} u_N \in X_N, \ \textit{s.t.} \\ (\mathcal{L}u_N, v) = (f, v), \quad \forall v \in X_N. \end{cases} \tag{6.140}$$

其中 X_N 是 X 的某个有限维子空间.

结合数值积分公式的 Galerkin 方法即

$$\begin{cases} \text{求} u_N \in X_N, \ \textit{s.t.} \\ (\mathcal{L}u_N, v)_N = (f, v)_N, \quad \forall v \in X_N. \end{cases} \tag{6.141}$$

这里 $(\cdot,\cdot)_N$ 即把积分换成了在求积节点上的数值积分.

三种谱方法-Galerkin, Tau, 配置法

Tau 方法即测试函数在另一个有限维子空间 Y_N 中,

$$\left\{\begin{array}{l}\text{求} u_N \in X_N, \ \textsf{s.t.} \\ (\mathcal{L}u_N, v) = (f, v), \quad \forall v \in Y_N. \end{array}\right. \tag{6.142}$$

配置法 (有时也称为拟谱方法) 即

$$\left\{\begin{array}{l}\text{求} u_N \in X_N, \ \textsf{s.t.} \\ (\mathcal{L}_N u_N, v)_N = (f, v)_N, \quad \forall v \in Y_N. \end{array}\right. \tag{6.143}$$

这里算子 $\mathcal{L}_N$ 是 $\mathcal{L}$ 的一个近似, 通常是把求导近似为了插值求导, $(\cdot,\cdot)_N$ 为定义在配置点上的离散内积.

谱方法的收敛性分析

对于 Galerkin 方法, 我们可以得到 (对于加权 L^2_ω 范数)

$$\|u - u_N\| \leq C \inf_{v \in X} \|u - v\| . \tag{6.144}$$

这里 C 是依赖于 N 的一个常数. Tau 方法结论与之类似.

配置法和结合数值积分的 Galerkin 方法的误差还会包含离散内积的逼近误差, 如果我们选取了适当的插值 (求积) 节点, 那么还是可以得到与最佳逼近同阶的误差估计.

对于 L^∞ 范数通常会降半阶 (或者乘上一个 $\ln N$).