

自然科学基金项目进展专栏

# 偏微分方程特征值计算的上下界分析与高精度格式构造

献给林群教授 80 华诞

孙家昶\*, 曹建文, 张娅

中国科学院软件研究所并行软件与计算科学实验室, 北京 100190  
E-mail: jiachang@iscas.ac.cn, jianwen@iscas.ac.cn, zhangya@iscas.ac.cn

收稿日期: 2014-10-29; 接受日期: 2015-03-30; \* 通信作者  
国家自然科学基金(批准号: 61170075, 91230109 和 11301507)资助项目

**摘要** 本文指出协调有限元给出偏微分方程(PDE)特征值上界的本质等价于不等式  $(u_h, u_h) \leq (u, u_h) \leq (u, u)$ , 由此推导出同精度的下界格式; 进而当  $a(u - u_h, u_h) = O(\lambda \|u - u_h\|_{L^2}^2)$  时, 构造同样精度的高阶格式, 如  $\lambda_H := \frac{2a(u_h, u_h)}{(u, u) + (u_h, u_h)}$ . 本文分别以矩形、三角形和六面体均匀网格上的线性元和多线性元为例, 分析相应高阶格式成立的两个关键条件: 能量内积投影空隙  $a(u - u_h, u_h) = O(\|u - u_h\|_{L^2}^2)$  和特征函数真解的  $L^2$  范数  $(u, u)$  在离散网格中  $l^2$  的保范逼近. 所附数值例子中的计算与文中证明的理论相吻合, 对某些区域上的二维、三维 Laplace 问题列出若干高阶格式(六阶、八阶、十阶)的前几十个特征值计算结果, 表明所提出的高精度格式对于奇异特征函数及高频特征值的计算也有效.

**关键词** PDE 特征值计算 上下界分析 高阶格式构造 高精度并行计算

**MSC (2010) 主题分类** 65F15, 65N06, 65N25, 65N30

## 1 引言

PDE 特征值计算  $\mathbf{L}u = \lambda u$  和解方程  $\mathbf{L}u = f$  理论上都有 Ritz-Galerkin 弱解, 离散格式都用差分法、有限元法、有限体积法和广义 Fourier 方法(如平面波法), 特点是 PDE 特征值有 Rayleigh 商理论, 计算上则要求解矩阵的广义特征值  $K^h u_h = \lambda_h M^h u_h$ . 协调有限元理论严密, 应用灵活, 使用面广, 能确保离散解作为上界收敛  $\lambda_h \geq \lambda$ . Strang 和 Fix 在经典文献 [1] 中提出的质量集中法(lumping)能给出特征值下界, 其力学解释是, 用单位矩阵代替质量矩阵使系统结构变柔, 从而使特征值变小; 他们同时担心质量集中会使系统结构变得过柔, 并给出反例: 对于三次 Hermite 元, 特征值误差会从  $O(h^6)$  增加到  $O(h^2)$ , 导致严重的精度损失, 进而对于  $m$  次有限元计算  $2m$  阶椭圆方程的特征值给出了著名的先验估计式  $\lambda_j^h - \lambda_j \sim Ch^{2m} \lambda_j^2$ . Weinberger [2] 则对二维有界域上用矩形均匀网格求解 Laplace 特征值差分格式给出了上下界理论估计.

林群先生 20 世纪 60 年代起就关注 PDE 特征值计算的研究方向(参见文献 [3]), 他与他的学生们从理论上证明了基于非协调有限元计算特征值下界的条件(参见文献 [4, 5]). 这个方向近年来继续受到国际上学者们的关注, 如文献 [6].

**英文引用格式:** Sun J C, Cao J W, Zhang Y. An analysis on lower bound and upper bound construction of high accuracy schemes in PDE eigen-computation (in Chinese). Sci Sin Math, 2015, 45: 1169~1191, doi: 10.1360/N012014-00226

为满足应用中计算精度需要, 可采用各种算法, 如自适应网格加密技术 ( $h$ -version), 计算重点转向如何高效并行求解超大规模代数广义特征值; 也可利用插值外推<sup>[7]</sup>、后处理技巧<sup>[8]</sup> 或重构法提高计算精度<sup>[9, 10]</sup>, 或引入高次元 ( $p$ - $h$  version) 提高刚度矩阵  $K$  的精度. 但由于  $K$  病态, 要区别出高次多项式有可能出现的伪 (spurious) 特征值. 对于二维 Laplace 特征值, 文献 [11] 提出了组合五点公式和九点公式以提高精度的算法, 我们尚未看到证明. Rayleigh 商加速是矩阵特征值计算中的一个基本方法, 如文献 [12–15]. 我们也曾提出了计算特征值的一些预变换方法, 如文献 [16–20].

本文的目的是要从一个新的角度探索计算 PDE 特征值的高精度格式. 主要思想是, 从 PDE 椭圆方程的一般协调有限元出发, 分析其格式给出特征值上界的内在性质, 直接推导出误差与该上界同阶的下界格式, 进而基于这一对上、下界格式构造一系列的高精度格式.

根据 Rayleigh 商理论, 协调有限元总是给出 PDE 特征值的上界, 这是由极大极小的变分原理决定的. 我们研究发现, 从逼近论角度, 其本质等价于不等式  $(u_h, u_h) \leq (u, u_h) \leq (u, u)$ ,  $u$  和  $u_h$  分别对应了 PDE 特征函数真解和有限元近似解; 由此我们直接推导出相应的下界格式, 两者的精度均为  $O(\lambda \|u - u_h\|_{L^2})$ ; 进而, 如果  $a(u - u_h, u_h) = O(\|u - u_h\|_{L^2}^2)$ , 第 2 节基于这一对相应的上、下界格式构造出一组比原始协调元高阶的离散格式, 精度均为  $O(\lambda \|u - u_h\|_{L^2}^2)$ . 第 3 和 4 节分别以矩形、六面体的线性元与多线性元及三角形均匀网格上的线性元为例, 分析相应高阶格式成立的两个关键条件: 能量内积投影空隙  $a(u - u_h, u_h) = O(\|u - u_h\|_{L^2}^2)$  和特征函数真解  $u$  的  $L^2$  范数在离散网格中  $l^2$  的保范逼近. 由于特征函数呈现出波的特性, 我们把积分的离散公式 (如梯形公式) 直接用于  $u^2$ , 这等价于采用先平方后逼近算法, 以代替传统的先逼近后平方算法. 矩形网格上的算法可以平行推广到六面体网格, 以及更一般的高维超立方体网格. 第 5 节所附的数值例子验证了本文提出的高阶格式的精度. 第 5.1 小节找到了文献 [1] 中提到的用质量集中法计算三次 Hermite 元特征值精度从六阶下降到二阶的原因, 我们改为分块矩阵质量集中保持了六阶精度. 对一维重调和问题, 精度提高到了八阶. 第 5.2 和 5.3 小节给出二维问题包括  $L$ -型区域和方环的奇异解及重特征值计算. 第 5.4 小节对于三角形网格给出八阶公式. 第 5.5 小节对于三维立方体网格给出十阶下界公式. 本文的分析与计算表明, 超高精度的算法往往与 PDE 特征值的多向频率有关, 这给我们实现基于频率的高效并行本性计算提供了算法基础.

## 2 基本理论框架

设  $(\lambda, u)$  是椭圆型 PDE 特征值问题的一组特征对,

$$a(u, v) = \lambda(u, v), \quad \forall v \in V, \quad (2.1)$$

而  $(\lambda_F, u_h)$  是相应协调有限元问题的一组特征对,

$$a(u_h, v_h) = \lambda_F(u_h, v_h), \quad \forall v^h \in V^h, \quad (2.2)$$

特别地, 在离散计算时,

$$\lambda_F = \frac{a(u_h, u_h)}{(u_h, u_h)}. \quad (2.3)$$

众所周知文献 [21], 这两组特征对之间有下面的基本关系式:

$$0 \leq \lambda_F - \lambda = \frac{a(u_h - u, u_h - u)}{(u_h, u_h)} - \lambda \frac{(u_h - u, u_h - u)}{(u_h, u_h)}. \quad (2.4)$$

由于  $a(u_h, u_h) = a(u, u_h) - a(u - u_h, u_h) = \lambda(u, u_h) - a(u - u_h, u_h)$ ,

$$\lambda_F - \lambda = \frac{\lambda}{(u_h, u_h)} \left( (u - u_h, u_h) - \frac{a(u - u_h, u_h)}{\lambda} \right).$$

由此, 有下面的引理:

**引理 2.1** 如果  $a(u - u_h, u_h) \geq 0$ , 则有

$$(u_h, u_h) \leq (u, u_h) \leq (u, u). \quad (2.5)$$

**证明** 不等式 (2.5) 左边显然, 右边是因为

$$(u - u_h, u) = (u - u_h, u_h) + (u - u_h, u - u_h) \geq (u - u_h, u_h) \geq 0.$$

引理证毕.  $\square$

定义

$$\lambda_D = \frac{a(u_h, u_h)}{(u, u)}. \quad (2.6)$$

因为

$$\lambda - \lambda_D = \frac{\lambda(u, u - u_h) + a(u - u_h, u_h)}{(u, u)} = \frac{\lambda((u - u_h, u - u_h) + (u - u_h, u_h)) + a(u - u_h, u_h)}{(u, u)},$$

于是, 我们得到了计算 PDE 特征值问题上下界的一组算法.

**定理 2.1** 如果  $a(u - u_h, u_h) \geq -\lambda(u - u_h, u_h)$ , 则

$$\lambda_D \leq \lambda \leq \lambda_F, \quad (2.7)$$

其中等号当且仅当  $\lambda = 0$  时成立, 且当  $a(u - u_h, u_h)$  与  $O(\|u - u_h\|)$  同阶时, 其上下界的逼近精度均与  $O(\lambda \|u - u_h\|)$  同阶.

为构造高阶格式, 我们令

$$\lambda_{H,\gamma} := \frac{a(u_h, u_h)}{\left(\frac{1}{2} + \gamma\right)(u, u) + \left(\frac{1}{2} - \gamma\right)(u_h, u_h)}, \quad (2.8)$$

其中  $|\gamma| \leq \frac{1}{2}$  为待定参数. 易见  $\lambda_D \leq \lambda_{H,\gamma} \leq \lambda_F$ , 且

$$\lambda - \lambda_{H,\gamma} = \frac{\lambda\left(\frac{1}{2}(u - u_h, u - u_h) + \gamma((u, u) - (u_h, u_h))\right) + a(u - u_h, u_h)}{\left(\frac{1}{2} + \gamma\right)(u, u) + \left(\frac{1}{2} - \gamma\right)(u_h, u_h)}.$$

从而, 我们证明了下面的定理:

**定理 2.2** 若取  $\gamma = -\frac{a(u - u_h, u_h)}{\lambda((u, u) - (u_h, u_h))}$ , 则有

$$\lambda - \lambda_{H,\gamma} = \frac{\lambda\left(\frac{1}{2}(u - u_h, u - u_h)\right)}{\left(\frac{1}{2} + \gamma\right)(u, u) + \left(\frac{1}{2} - \gamma\right)(u_h, u_h)},$$

即 (2.8) 为逼近精度与  $O(\lambda \|u - u_h\|^2)$  同阶的高阶格式.

**推论 2.1** 当  $a(u - u_h, u_h)$  与  $O(\lambda \|u - u_h\|^2)$  同阶时, 例如,  $a(u - u_h, u_h) = 0$ , 则

$$\lambda_H := \frac{2 a(u_h, u_h)}{(u, u) + (u_h, u_h)} \quad (2.9)$$

和

$$\lambda_G := \frac{a(u_h, u_h)}{\sqrt{((u, u)(u_h, u_h))}} \quad (2.10)$$

均为高阶下界格式:  $\lambda_H \leq \lambda_G \leq \lambda$ , 且逼近精度均与  $O(\lambda \|u - u_h\|^2)$  同阶.

事实上,  $\lambda_H$  和  $\lambda_G$  此时分别可视为  $\lambda_D$  和  $\lambda_F$  的调和平均值及几何平均值. 类似可建立相当于  $\lambda_D$  和  $\lambda_F$  的算术平均值格式

$$\lambda_A := \frac{a(u_h, u_h)}{(u_h, u_h)} \frac{(u, u) + (u_h, u_h)}{2(u, u)}. \quad (2.11)$$

易见  $\lambda_H \leq \lambda_G \leq \lambda_A$ , 且不等式  $\lambda_A \geq \lambda$  成立的充要条件是  $(u, u_h) \geq \frac{2}{(u, u)^{-1} + (u_h, u_h)^{-1}}$ , 且逼近精度也与  $O(\lambda \|u - u_h\|^2)$  同阶, 与原始的有限元格式 (2.3) 的精度  $O(\lambda \|u - u_h\|)$  相比, 均属于高阶格式. 类似, 我们也可采用更广一类的广义平均值 (如文献 [22, 23]) 构造更精确的格式.

值得指出, 对于给定的协调有限元, 我们在构造高阶格式及算法实现时有两个问题需要回答, 一是如何估计我们定义的能量内积投影空隙量  $a(u - u_h, u_h)$ ; 二是如何在离散格式中体现出  $(u, u)$ , 因为特征函数本身也未知. 我们将在下面结合具体问题, 利用 PDE 特征函数的波函数特性深入研究. 本节是基本理论框架, 不限于特定网格, 下两节具体讨论矩形、六面体的线性元与多线性元及三角形均匀网格上的线性元.

### 3 矩形均匀网格特征值计算中的能量内积投影空隙与范数逼近

先以常微分方程特征值模型为例:  $-u''(x) = \lambda u(x)$ , 两端边界条件可在下面的四种任取,  $u(0) = u(1) = 0$ ,  $u(0) = u'(1) = 0$ ,  $u'(0) = u(1) = 0$ ,  $u'(0) = u'(1) = 0$ . 相应法正交特征函数真解  $u_m(x)$  分别为

$$u_m(x) = \sqrt{2} \sin m\pi x, \quad \sqrt{2} \sin \left(m - \frac{1}{2}\right)\pi x, \quad \sqrt{2} \cos \left(m - \frac{1}{2}\right)\pi x, \quad \sqrt{2} \cos m\pi x.$$

给定网格  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = 1$ , 所有网格点上的分片一次插值函数构成  $n+1$  维的线性空间  $S_1(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n)$ .

对任给  $u, g \in H$ ,  $H$  为该网格上分片一阶光滑的连续函数空间, 其能量内积定义为

$$a(u, g) := \sum_{j=1}^n \int_{x_{j-1}}^{x_j} (u'(x)g'(x))dx. \quad (3.1)$$

特别地, 当  $s_I := s_I[u] \in S_1$  时,

$$a(u, u) = a(s_I, s_I) + a(u - s_I, u - s_I). \quad (3.2)$$

此时分片一次插值函数  $s_I$  恰为  $u$  在能量内积定义下的投影:  $a(u - s_I, s_I) = 0$ . 而且在该特征值模型中 Ritz 特征函数 (有限元解) 恰为特征函数真解的分片一次插值函数  $s_I$ , 记  $h_j = x_j - x_{j-1}$ ,  $j = 1, \dots, n$ ,

$h = \max h_j$ , 这时  $u_I^h(x_j) = u_I(x_j)$ , 且  $a(u - u^h, u^h) = 0$ . 为直接应用上节的高阶格式, 需要将特征函数  $u$  的  $L^2$  范数在离散网格中用  $l^2$  范数表示. 记

$$\langle u, u \rangle := \int_0^1 u^2(x) dx, \quad [u, u]_{\Delta_n} := \frac{u^2(0) + u^2(1)}{2n} + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n-1} u^2\left(\frac{j}{n}\right).$$

**命题 3.1** 对于上面常微分方程特征值模型提到的四种边界条件,  $a(u_m - u_m^h, u_m^h) = 0$ . 且只要均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m$ ) 时, 用梯形公式求法正交特征函数真解  $u_m(x)$  在  $L^2[0, 1]$  的范数积分是精确的, 即

$$\int_0^1 u_m^2(x) dx = \frac{u_m^2(0) + u_m^2(1)}{2n} + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n-1} u_m^2\left(\frac{j}{n}\right) = 1. \quad (3.3)$$

**证明** 事实上, 当  $n > m$  时, 分别有恒等式

$$\begin{aligned} \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n-1} \sin^2\left(\frac{mj\pi}{n}\right) &= 1, \quad \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n-1} \sin^2\left(\frac{(m-\frac{1}{2})j\pi}{n}\right) + \frac{1}{n} = 1, \\ \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n-1} \cos^2\left(\frac{(m-\frac{1}{2})j\pi}{2n}\right) + \frac{1}{n} &= 1, \quad \frac{2}{n} \sum_{j=1}^{n-1} \cos^2\left(\frac{mj\pi}{n}\right) + \frac{2}{n} = 1. \end{aligned}$$

命题证毕.  $\square$

一般可有积分表示

$$\langle u, u \rangle - [u, u]_{\Delta_n} = \frac{1}{n^2} \int_0^1 G_n(u; t) \left(\frac{1}{2} - t\right) dt, \quad (3.4)$$

其中

$$G_n(u; t) = \sum_{j=0}^{n-1} (u^2)' \left(\frac{t+j}{n}\right) \left(\frac{1}{2} - t\right) dt.$$

由此不难验证, 对于有限 Fourier 级数

$$u_m(x) := \frac{b_0}{2} + \sum_{k=1}^m (b_k \cos k\pi x + a_k \sin k\pi x),$$

只要均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m$ ), 均有  $\langle u_m, u_m \rangle = [u_m, u_m]_{\Delta_n}$ , 即  $u_m$  在离散网格中的  $l^2$  范数与  $L^2(0, 1)$  范数相等.

### 3.1 二维矩形均匀网格 Laplace 特征值计算中的能量内积投影空隙

对于矩形均匀网格, 设  $x_{n,j} = \frac{j}{n}$ ,  $y_{n,k} = \frac{k}{n}$ ,  $j, k = 0, 1, \dots, n$ .

该网格上的分片双线性插值函数可写成

$$S[u](x, y) = \sum_{j,k=0}^n u_{jk} \psi_{j,k}(x, y),$$

其中以节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的分片双一次插值函数

$$\psi_{j,k}(x, y) = \begin{cases} ((j+1)-nx)((k+1)-ny), & \frac{j}{n} \leq x \leq \frac{j+1}{n}, \quad \frac{k}{n} \leq y \leq \frac{k+1}{n}, \\ (nx-(j-1))((k+1)-ny), & \frac{j-1}{n} \leq x \leq \frac{j}{n}, \quad \frac{k}{n} \leq y \leq \frac{k+1}{n}, \\ (nx-(j-1))(ny-(k-1)), & \frac{j-1}{n} \leq x \leq \frac{j}{n}, \quad \frac{k-1}{n} \leq y \leq \frac{k}{n}, \\ ((j+1)-nx)((k+1)-ny), & \frac{j}{n} \leq x \leq \frac{j+1}{n}, \quad \frac{k-1}{n} \leq y \leq \frac{k}{n}, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (3.5)$$

考虑该网格上特征值问题的波函数形式基本解

$$U_m(x, y) = \omega^{m_1 x + m_2 y}, \quad \frac{j-1}{n} \leq x \leq (j+1)n, \quad \frac{k-1}{n} \leq y \leq \frac{k+1}{n},$$

其特征值  $\lambda_{m_1, m_2} = -(m_1^2 + m_2^2)\pi^2 \log^2(\omega)$ .

通过直接积分容易验证该波函数在以节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的子矩形域上质量函数  $b(U_m, \psi_{jk})$  和刚度函数  $a(U_m, \psi_{jk})$  分别等于如下的引理 3.1 和 3.2.

### 引理 3.1

$$\begin{aligned} b(U_m, \psi_{jk}) &:= \int_{\frac{j-1}{n}}^{\frac{j+1}{n}} \int_{\frac{k-1}{n}}^{\frac{k+1}{n}} U_m(x, y) \psi_{jk}(x, y) dx dy \\ &= \frac{n^2 U_m(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})(\omega^{\frac{m_1}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1}{2n}})^2 (\omega^{\frac{m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_2}{2n}})^2}{m_1^2 m_2^2 \log^4(\omega)}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

### 引理 3.2

$$\begin{aligned} a(U_m, \psi_{jk}) &:= \int_{\frac{j-1}{n}}^{\frac{j+1}{n}} \int_{\frac{k-1}{n}}^{\frac{k+1}{n}} \nabla U_m(x, y) \nabla \psi_{jk}(x, y) dx dy \\ &= \frac{1}{3} \left( 8U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - \left( U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \\ &\quad \left. \left. + U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right) \right) \\ &= \frac{4}{3} U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) \left( 2 - \frac{\omega^{-\frac{m_1}{n}} + \omega^{\frac{m_1}{n}}}{2} \frac{\omega^{-\frac{m_2}{n}} + \omega^{\frac{m_2}{n}}}{2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\omega^{-\frac{m_1-m_2}{2n}} + \omega^{\frac{m_1-m_2}{2n}}}{2} \frac{\omega^{-\frac{m_1+m_2}{2n}} + \omega^{\frac{m_1+m_2}{2n}}}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

以节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的子矩形网格上 Laplace 能量投影的相对空隙可定义为

$$\delta_{U_m, \psi_{jk}}(n) := \frac{\lambda_m b(U_m, \psi_{jk}) - a(U_m, \psi_{jk})}{U_m(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})}. \quad (3.8)$$

由上面引理可知,

$$\delta_{U_m, \psi_{jk}}(n) = -\frac{n^2(m_1^2 + m_2^2)(\omega^{\frac{m_1}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1}{2n}})^2 (\omega^{\frac{m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_2}{2n}})^2}{m_1^2 m_2^2 \log^2(\omega)}$$

$$-\frac{4}{3} \left( 2 - \frac{\omega^{-\frac{m_1}{n}} + \omega^{\frac{m_1}{n}}}{2} \frac{\omega^{-\frac{m_2}{n}} + \omega^{\frac{m_2}{n}}}{2} - \frac{\omega^{-\frac{m_1-m_2}{2n}} + \omega^{\frac{m_1-m_2}{2n}}}{2} + \frac{\omega^{-\frac{m_1+m_2}{2n}} + \omega^{\frac{m_1+m_2}{2n}}}{2} \right).$$

(3.8) 表明该相对空隙只依赖于波函数的频率  $(m_1, m_2)$ , 而与子矩形的位置  $(j, k)$  无关.

**引理 3.3** 对于均匀网格, 利用 Taylor 展开可得单波函数  $U_m(x, y) = \omega^{m_1 x + m_2 y}$  的 Laplace 能量投影的相对空隙的量级为  $O(n^{-4})$ ,

$$\delta_{U_m, \psi_{jk}}(n) = \frac{1}{6} m_1^2 m_2^2 \log^4(\omega) n^{-4} + \frac{13}{720} m_1^2 m_2^2 (m_1^2 + m_2^2) \log^6(\omega) n^{-6} + O(n^{-8}). \quad (3.9)$$

**推论 3.1** 波函数空隙公式 (3.9) 适用于以下四个波函数:

$$U_m(x, y) = (\omega^{m_1 x} \pm \omega^{-m_1 x})(\omega^{m_2 y} \pm \omega^{-m_2 y}), \quad U_m(x, y) = (\omega^{m_1 x} \pm \omega^{-m_1 x})(\omega^{m_2 y} \mp \omega^{-m_2 y}), \quad (3.10)$$

它们分别对应于矩形公式上 Laplace 零边界和零法向边界的特征波函数.

**推论 3.2** 当  $m_1 m_2 = 0$  时, 公式 (3.9) 中的空隙消失, 此时沿  $(x, y)$  至少有一个方向的特征函数为常数.

同样, 对于均匀网格上的线性插值有  $S[u](x, y) = \sum_{j,k=0}^n u_{jk} \phi_{j,k}(x, y)$ , 其中屋顶函数  $\phi_{j,k}(x, y)$  分为 6 个子三角域,

$$\phi_{j,k}(x, y) := \begin{cases} \phi_{NE}(x, y) = (j+k+1) - nx - ny, & \frac{j}{n} \leq x \leq \frac{j+1}{n}, \quad \frac{k}{n} \leq y \leq \frac{j+k+1-nx}{n}, \\ \phi_N(x, y) = (k+1) - ny, & \frac{j-1}{n} \leq x \leq \frac{j}{n}, \quad \frac{j+k-nx}{n} \leq y \leq \frac{k+1}{n}, \\ \phi_{NW}(x, y) = nx - (j-1), & \frac{j-1}{n} \leq x \leq \frac{j}{n}, \quad \frac{k-1}{n} \leq y \leq \frac{j+k-nx}{n}, \\ \phi_{SW}(x, y) = nx + ny - (j+k-1), & \frac{j-1}{n} \leq x \leq \frac{j}{n}, \quad \frac{j+k-1-nx}{n} \leq y \leq \frac{k}{n}, \\ \phi_S(x, y) = ny - (k-1), & \frac{j}{n} \leq x \leq \frac{j+1}{n}, \quad \frac{k-1}{n} \leq y \leq \frac{j+k-nx}{n}, \\ \phi_{SE}(x, y) = (j+1) - nx, & \frac{j}{n} \leq x \leq \frac{j+1}{n}, \quad \frac{j+k-nx}{n} \leq y \leq \frac{k}{n}, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (3.11)$$

通过直接积分容易验证该波函数在以节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的子六边形域上的质量函数和刚度函数分别等于引理 3.4 中的  $b(U_m, \phi_{jk})$  和  $a(U_m, \phi_{jk})$ .

**引理 3.4**

$$\begin{aligned} b(U_m, \phi_{jk}) &:= b_{NE}(U_m, \phi_{jk}) + b_N(U_m, \phi_{jk}) + b_{NW}(U_m, \phi_{jk}) + b_{SW}(U_m, \phi_{jk}) + b_S(U_m, \phi_{jk}) \\ &\quad + b_{SE}(U_m, \phi_{jk}) \\ &= \frac{n(\omega^{\frac{m_1}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1}{2n}})(\omega^{\frac{m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_2}{2n}})}{m_1 m_2 \log^3(\omega)} \times \frac{(\omega^{\frac{m_1-m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1-m_2}{2n}})U_m(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})}{m_1 - m_2}, \\ a(U_m, \phi_{jk}) &:= \int_{\frac{j-1}{n}}^{\frac{j+1}{n}} \int_{\frac{k-1}{n}}^{\frac{k+1}{n}} \nabla U_m(x, y) \nabla \phi_{jk}(x, y) dx dy \\ &= 4U_m\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - \left( U_m\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U_m\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U_m\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U_m\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) \\ &= U_m\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) (4 - \omega^{\frac{m_1}{n}} - \omega^{-\frac{m_1}{n}} - \omega^{\frac{m_2}{n}} - \omega^{-\frac{m_2}{n}}). \end{aligned} \quad (3.12)$$

同样得到, 以节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的子六边形网格上 Laplace 能量投影的相对空隙为

$$\begin{aligned}\delta_{U_m, \phi_{jk}}(n) &:= \frac{\lambda_m b(U_m, \phi_{jk}) - a(U_m, \phi_{jk})}{U_m(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})} \\ &= -\frac{(m_1^2 + m_2^2)n(\omega^{\frac{m_1}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1}{2n}})(\omega^{\frac{m_1-m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1-m_2}{2n}})(\omega^{\frac{m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_2}{2n}})}{m_1(m_1 - m_2)m_2 \log(\omega)} \\ &\quad - (4 - (\omega^{-\frac{m_1}{n}} + \omega^{\frac{m_1}{n}} + \omega^{-\frac{m_2}{n}} + \omega^{\frac{m_2}{n}})).\end{aligned}$$

**引理 3.5** 对于均匀网格, 利用 Taylor 展开可得单波函数  $U_m(x, y) = \omega^{m_1x+m_2y}$  的 Laplace 能量投影的相对空隙的量级为  $O(n^{-4})$ ,

$$\begin{aligned}\delta_{U_m, \phi_{jk}}(n) &:= \frac{\lambda_m b(U_m, \phi_{jk}) - a(U_m, \phi_{jk})}{U_m(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})} \\ &= \frac{1}{12}m_1(m_1 - m_2)^2m_2 \log^4(\omega)n^{-4} + \frac{1}{180}m_1(m_1 - m_2)^2 \\ &\quad \times m_2(m_1^2 + m_2^2) \log^6(\omega)n^{-6} + O(n^{-8}).\end{aligned}\tag{3.13}$$

**推论 3.3** 当  $m_1m_2(m_1 - m_2) = 0$  时, (3.13) 中的空隙消失, 此时沿  $(x, y)$  至少有一个方向的特征函数为常数或者为单波函数  $U_m(x, y) = \omega^{m(x+y)}$ .

由 (3.9) 和 (3.13) 知,

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \delta_{U_m, \psi_{jk}}(n) &= \frac{1}{6}m_1^2m_2^2 \log^4(\omega)n^{-2} + O(n^{-4}), \\ \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \delta_{U_m, \phi_{jk}}(n) &= \frac{1}{12}m_1(m_1 - m_2)^2m_2 \log^4(\omega)n^{-2} + O(n^{-4}).\end{aligned}$$

因此, 我们得到如下命题.

**命题 3.2** 在有界区域上用矩形均匀网格计算 Laplace 特征值, 无论采用线性元或双线性元, 能量内积空隙  $a(u - u_h, u_h)$  均非负且量级为  $O(n^{-2})$ , 这时不等式 (2.5) 和 (2.7) 成立, 此外当  $m_1m_2 = 0$  时, (3.9) 中的空隙消失,  $m_1m_2(m_1 - m_2) = 0$  时, (3.13) 中的空隙消失.

为减少这类空隙, 我们提出以下的一个新格式:

$$\delta_{U_m, \varphi_{jk}}(n) := \lambda_m b(U_m, \psi_{jk}) - \frac{1}{2}(a(U_m, \psi_{jk}) + a(U_m, \phi_{jk})).\tag{3.14}$$

直接计算表明,

$$\begin{aligned}\delta_{U_m, \varphi_{jk}}(n) &= -U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right)\left(\frac{n^2(m_1^2 + m_2^2)(\omega^{\frac{m_1}{2n}} - \omega^{-\frac{m_1}{2n}})^2(\omega^{\frac{m_2}{2n}} - \omega^{-\frac{m_2}{2n}})^2}{m_1^2m_2^2 \log^2(\omega)}\right. \\ &\quad \left.- \frac{1}{6}\left(20U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - 4\left(U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right)\right)\right.\right. \\ &\quad \left.\left.- \left(U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k-1}{n}\right)\right)\right)\right) \\ &= \frac{1}{240}m_1m_2(m_1 + m_2)^2 \log^6(\omega)n^{-6} + O(n^{-8}),\end{aligned}\tag{3.15}$$

且波函数空隙公式 (3.15) 适用于 (3.10) 中的四个波函数.

例如, 对于  $[0, 1]^2$  上的零边界问题, 特征函数真解  $u_{m_1, m_2} = \sin m_1 \pi x \sin m_2 \pi y$ . 记  $h = \frac{1}{n}$ ,

$$\begin{aligned} a(u - u_h, u_h) &= \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} \delta_{u_{m_1, m_2}, \varphi_{jk}}(n) = \frac{1}{240} m_1 m_2 (m_1 + m_2)^2 \log^6(\omega) n^{-4} + O(n^{-6}) \\ &=: C_{m_1, m_2} (u - u_h, u - u_h). \end{aligned}$$

因为此时  $(u - u_h, u - u_h) = O(h^4)$ .

因而, 在用均匀矩形网格求解 2D 有界域 Laplace 特征值时, 我们实际上在内点采用了如下的九点差分格式:

$$\begin{aligned} a_{U_m, \varphi_{jk}}(n) &:= \frac{1}{6h^2} \left( 20U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - 4 \left( U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) - \left( U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

和九点积分格式:

$$\begin{aligned} b_{U_m, \psi_{jk}}(n) &:= \frac{1}{36} \left( 16U\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) + 4 \left( U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + U\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) + \left( U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + U\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + U\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) \right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

由此, 我们得到如下的结论.

**定理 3.1** 在用均匀矩形网格求解 2D 有界域 Laplace 特征值时, 存在唯一的九点格式使得能量内积投影空隙为  $O(n^{-4})$ , 这时差分格式 (3.16) 是线性元与双线性元的平均, 积分格式 (3.17) 保留双线性插值.

为在离散格式中表示  $u_{m_1, m_2}$  按  $L^2([0, 1]^2)$  的范数, 我们只需将一维时的结论作平行推广.

**定理 3.2** 设  $[0, 1]^2$  上 Laplace 特征值问题四边分别满足零边界或零法向边界条件, 只要每个方向均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m = \max(m_1, m_2)$ ) 时, 二维矩形求积公式对于特征函数真解  $u_{m_1, m_2}(x, y) = u_{m_1}(x)u_{m_2}(y)$  的  $L^2[0, 1]$  范数用  $l^2$  表示也是精确的, 即  $\langle u, u \rangle = [u, u]_{\Delta_n}$ , 此时,

$$\begin{aligned} \langle u, u \rangle &:= \int_0^1 \int_0^1 u^2(x, y) dx dy, \\ [u, u]_{\Delta_n} &:= \frac{1}{4n^2} (u_{m_1, m_2}^2(0, 0) + u_{m_1, m_2}^2(1, 0) + u_{m_1, m_2}^2(0, 1) + u_{m_1, m_2}^2(1, 1)) \\ &\quad + \frac{1}{2n^2} \left( \sum_{j=1}^{n-1} \left( u_{m_1, m_2}^2\left(\frac{j}{n}, 0\right) + u_{m_1, m_2}^2\left(\frac{j}{n}, 1\right) \right) \right) + \sum_{k=1}^{n-1} \left( u_{m_1, m_2}^2\left(0, \frac{k}{n}\right) \right. \\ &\quad \left. + u_{m_1, m_2}^2\left(1, \frac{k}{n}\right) \right) + \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} u_{m_1, m_2}^2\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right). \end{aligned}$$

与一维时类似, 对于二维有限 Fourier 级数

$$u_{m_1, m_2}(x, y) := \left( \frac{b_0}{2} + \sum_{k=1}^{m_1} (b_k \cos k \pi x + a_k \sin k \pi x) \right) \left( \frac{c_0}{2} + \sum_{l=1}^{m_2} (c_l \cos l \pi y + d_l \sin l \pi y) \right),$$

只要每个方向均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m = \max(m_1, m_2)$ ), 均有  $u_{m_1, m_2}$  在离散网格中的  $l^2$  范数与  $L^2[0, 1]^2$  范数相等, 即  $\langle u_{m_1, m_2}, u_{m_1, m_2} \rangle = [u_{m_1, m_2}, u_{m_1, m_2}]_{\Delta_n}$ .

在第 2 节的基础上, 利用矩形网格和 Laplace 算子的特性, 我们可构造更高精度的格式. 注意到质量矩阵是具有好条件数的良态压缩矩阵, 其矩阵多项式也良态. 记

$$KU = \tilde{\lambda}_H \left( \frac{1}{2}(D + M) \right) U := \lambda_H \phi_1(M) U.$$

进而可令

$$\phi_{m-1}(M) K U = \tilde{\lambda}_h \tilde{\phi}_m(M) U, \quad (3.18)$$

其中  $\phi_m(M)$  和  $\tilde{\phi}_m(M)$  为  $M$  的两组  $m$  次矩阵多项式, 参见文献 [23, 24].

适用矩形网格的算法可以平行推广到六面体网格以及更一般的高维超立方体网格.

对于出现非函数节点基底, 如 Hermite 元中包含导数基底, 需要把格式写成矩阵块形式, 按主对角块施行优化算法.

### 3.2 六面体网格上计算 Laplace 特征值的若干超高精度格式

从广义矩阵特征值角度, 矩形网格双线性元和六面体网格三线性元形成的刚度矩阵和质量矩阵均可为一维相应矩阵的 Kronecker 乘积,

$$A_2 = A \otimes B + B \otimes A, \quad B_2 = B \otimes B, \quad A_3 = A_2 \otimes B + B_2 \otimes A, \quad B_3 = B_2 \otimes B,$$

矩形网格和六面体网格线性元的刚度矩阵和质量矩阵则为

$$\tilde{A}_2 = A \otimes I + I \otimes A, \quad \tilde{B}_2 = B \otimes I, \quad \tilde{A}_3 = A_2 \otimes I + I_2 \otimes A, \quad \tilde{B}_3 = \tilde{B}_2 \otimes I.$$

从差分方程角度, 刚度矩阵和质量矩阵对应于差分格式.

矩形网格适用的算法可以平行推广到六面体网格以及更一般的高维超立方体网格. 作为二维九点格式 (3.16) 和 (3.17) 的推广, 对于三维立方体区域  $[0, 1]^3$ , 三维六面体网格形成能量投影算子的刚度矩阵和质量矩阵分别对应于内点  $(x, y, z)$  处步长为  $h$  的 27 点差分格式. 在以三维内节点  $(x, y, z)$  为中心、长度为  $2h$  的六面体中, 记

$$\begin{aligned} F_6(x, y, z) &= f(x, y, z - h) + f(x, y, h + z) + f(x, y - h, z) + f(x, h + y, z) + f(x - h, y, z) \\ &\quad + f(h + x, y, z), \\ F_8(x, y, z) &= f(x - h, y - h, z - h) + f(x - h, y - h, h + z) + f(x - h, h + y, z - h) \\ &\quad + f(x - h, h + y, h + z) + f(h + x, y - h, z - h) + f(h + x, y - h, h + z) \\ &\quad + f(h + x, h + y, z - h) + f(h + x, h + y, h + z), \\ F_{12}(x, y, z) &= f(x, y - h, z - h) + f(x, y - h, h + z) + f(x, h + y, z - h) + f(x, h + y, h + z) \\ &\quad + f(x - h, y, z - h) + f(x - h, y, h + z) + f(x - h, y - h, z) + f(x - h, h + y, z) \\ &\quad + f(h + x, y, z - h) + f(h + x, y, h + z) + f(h + x, y - h, z) + f(h + x, h + y, z), \end{aligned}$$

且对于三维有限 Fourier 级数

$$f_{m_1, m_2, m_3}(x_1, x_2, x_3) := \prod_{j=1}^3 \left( b_{j0} + \sum_{k=1}^{m_j} (b_{jk} \cos k\pi x_j + a_{jk} \sin k\pi x_j) \right),$$

只要每个方向均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m = \max(m_1, m_2, m_3)$ ), 均有  $f_{m_1, m_2, m_3}$  在离散网格中的  $l^2$  范数与  $L^2[0, 1]^3$  范数相等, 即  $\langle f_{m_1, m_2, m_3}, f_{m_1, m_2, m_3} \rangle = [f_{m_1, m_2, m_3}, f_{m_1, m_2, m_3}]_{\Delta_n}$ .

值得注意的是, 三维立方体等距网格 Laplace 特征值四阶计算格式不是唯一的. 事实上, 若把三维六面体网格上三线性元刚度函数的 21 点格式

$$K_{Tri}^h[f] = \frac{1}{12h^2} \{32 f(x, y, z) - 2 F_{12}(x, y, z) - F_8(x, y, z)\}$$

和线性元刚度函数的 7 点格式

$$K_7^h[f] = \frac{1}{h^2} \{6 f(x, y, z) - F_6(x, y, z)\}$$

做算术平均作为新刚度函数的 27 点格式

$$K_{27}^h[f] = \frac{1}{2} (K_{Tri}^h[f] + K_7^h[f]) = \frac{1}{24h^2} \{104 f(x, y, z) - 12 F_6(x, y, z) - 2 F_{12}(x, y, z) - F_8(x, y, z)\},$$

同时保留三线性元的质量函数的 27 点格式,

$$M_{27}^h[f] = M_{Tri}^h[f] = \frac{1}{144} \{40 f(x, y, z) + 12 F_6(x, y, z) + 2 F_{12}(x, y, z) + F_8(x, y, z)\},$$

同样可得到四阶计算格式.

更一般地, 对于刚度函数和质量函数均可分别引入单参数的 27 点格式如下:

$$\begin{aligned} A_{27}^h[f](a) &= \frac{1}{h^2} \left\{ \frac{2}{3} (5 + 3a) f(x, y, z) - a F_6(x, y, z) - \frac{1}{12} (3a - 1) F_8(x, y, z) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{6} (2 - 3a) F_{12}(x, y, z) \right\}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} B_{27}^h[f](b) &= \frac{2}{9} (2 - 9b) f(x, y, z) + b F_6(x, y, z) + \frac{1}{72} (18b - 1) F_8(x, y, z) \\ &\quad - \frac{1}{18} (1 - 9b) F_{12}(x, y, z). \end{aligned} \quad (3.20)$$

作为特例, 三线性元的质量函数  $M_{27}^h[f] = A_{27}^h[f](\frac{1}{12})$ , 而  $K_{27}^h[f] = A_{27}^h[f](\frac{1}{2})$ .

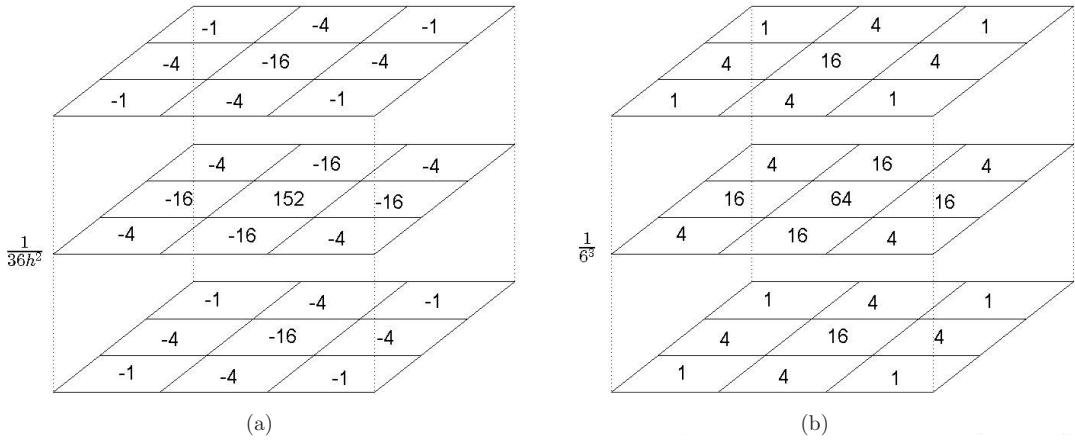
图 1 所示的是另一组常用格式

$$A_{27}^h[f] \left( \frac{4}{9} \right) = \frac{1}{36h^2} \{152 f(x, y, z) - 16 F_6(x, y, z) - 4 F_{12}(x, y, z) - F_8(x, y, z)\} \quad (3.21)$$

和 27 点积分格式

$$B_{27}^h[f] \left( \frac{2}{27} \right) = \frac{1}{216} \{64 f(x, y, z) + 16 F_6(x, y, z) + 4 F_{12}(x, y, z) + F_8(x, y, z)\}, \quad (3.22)$$

我们已将这组格式推广到任意维超立方体网格.

图 1 (a) 差分格式: 3 维 27 点 ( $27 = 3^3$ ); (b) 积分格式: 3 维 27 点 ( $27 = 3^3$ )

于是可建立一般六面体等距网格 Laplace 特征值计算在内节点上带双参数  $(a, b)$  的高精度格式

$$\lambda_H = \frac{A_{27}^h[f]}{\frac{1}{2}(B_{27}^h[f] + f)}. \quad (3.23)$$

事实上, 对于光滑的函数, 双参数格式 (3.19) 和 (3.20) 满足

$$\frac{A_{27}^h[f]}{\frac{1}{2}(B_{27}^h[f] + f)} = -\frac{\Delta[f]}{f} + \frac{h^2(\Delta[f]^2 - f\Delta^2[f])}{12f^2} + O(h^4).$$

特别地, 对于 Laplace 特征函数,

$$-\Delta[f] = \lambda f, \quad \frac{A_{27}^h[f]}{\frac{1}{2}(B_{27}^h[f] + f)} = \lambda + O(h^4).$$

进一步地分析和计算表明, 不同参数对于特征值计算 (3.23) 的影响很小, 理论上只限于影响误差  $O(h^4)$  中  $f^{(2,2,2)}$  项的系数.

在此基础上同样可构造基于格式 (3.19) 和 (3.20) 的六阶、八阶直至十阶超高精度格式, 数值计算结果见第 5 节.

## 4 三角形均匀网格特征值计算中的能量内积投影空隙

为避免与三角域重心坐标记号  $(u, v, w)$  混淆, 本节的特征函数记号改用  $f$  和  $g$ .

### 4.1 三角形均匀网格 Laplace-like 特征值计算中的能量内积投影空隙

本小节讨论重心坐标  $(u, v, w = 1 - u - v)$  下的 PDE 特征值计算问题  $\mathbf{L}[g] = \lambda g$ , 这里 Laplace-like 算子

$$\mathbf{L}[g] := \frac{4}{3}(g^{(1,1)}(u, v) - g^{(0,2)}(u, v) - g^{(2,0)}(u, v)). \quad (4.1)$$

于是, 对给定的一组实数对  $(\mu, \nu)$ , 函数

$$g_{\mu,\nu}(u, v) = \omega^{v(-2\mu-\nu)+(-u-v)(\mu-\nu)+u(\mu+2\nu)} \quad (4.2)$$

是重心坐标下带双参数的 Laplace-like 特征函数的一个基本解, 即

$$\lambda_{\mu,\nu} = \frac{\mathbf{L}[g]}{g} := \frac{4}{3g(u,v)}(g^{(1,1)}(u,v) - g^{(0,2)}(u,v) - g^{(2,0)}(u,v)) = -12(\mu^2 + \mu\nu + \nu^2) \log^2(\omega). \quad (4.3)$$

同时, 下面六个波函数:

$$\begin{aligned} g_1(\mu, \nu) &= \omega^{3uv-3v\mu} = g_{\mu,\nu}(u,v), & g_2(\mu, \nu) &= \omega^{3u\mu+3v(\mu+\nu)}, & g_3(\mu, \nu) &= \omega^{-3(v\nu+u(\mu+\nu))}, \\ g_4(\mu, \nu) &= \omega^{-3(v\mu+u(\mu+\nu))}, & g_5(\mu, \nu) &= \omega^{3u\mu-3v\nu}, & g_6(\mu, \nu) &= \omega^{3u\nu+3v(\mu+\nu)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

具有相同特征值 (4.3).

特别地, 对单位正三角形,  $\omega = e^{\frac{2\pi i}{3}}$ ,  $\mathbf{L}[g]$  为 Laplace 算子,  $\lambda_{\mu,\nu} = \frac{16\pi^2}{3}(\mu^2 + \mu\nu + \nu^2)$ . 故对于一般三角形区域,  $\mathbf{L}[g]$  可称为 Laplace-like 算子.

在三角形均匀网格上以重心坐标  $(u, v, w = 1 - u - v)$  表示的分片线性插值基函数 (见图 2) 为

$$\phi_{jk}(u, v) = \begin{cases} \phi_{NE}(u, v) = nu - (j-1), & \forall \frac{j+k-nu}{n} \leq v \leq \frac{k}{n}, \frac{j-1}{n} \leq u \leq \frac{j}{n}, \\ \phi_N(u, v) = n(u+v) - (j+k-1), & \forall \frac{j+k-1-nu}{n} \leq v \leq \frac{k}{n}, \frac{j-1}{n} \leq u \leq \frac{j}{n}, \\ \phi_{NW}(u, v) = nv - (k-1), & \forall \frac{j}{n} \leq u \leq \frac{j+k-nv}{n}, \frac{k-1}{n} \leq v \leq \frac{k}{n}, \\ \phi_{SW}(u, v) = 1 + j - nu, & \forall \frac{k+j-nu}{n} \leq v \leq \frac{k}{n}, \frac{j}{n} \leq u \leq \frac{j+1}{n}, \\ \phi_S(u, v) = j + k + 1 - n(u+v), & \forall \frac{k+j-1-nu}{n} \leq v \leq \frac{k}{n}, \frac{j-1}{n} \leq v \leq \frac{j}{n}, \\ \phi_{SE}(u, v) = 1 + k - nv, & \forall \frac{j+k-nu}{n} \leq v \leq \frac{k+1}{n}, \frac{j-1}{n} \leq u \leq \frac{j}{n}. \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (4.5)$$

通过积分可直接计算出以内节点  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的质量函数

$$\begin{aligned} (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}) &= (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_{NE} + (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_N + (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_{NW} \\ &\quad + (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_{SW} + (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_S + (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})_{SE} \\ &= \frac{n(\omega^{\frac{3\mu}{2n}} - \omega^{-\frac{3\mu}{2n}})(\omega^{\frac{3\nu}{2n}} - \omega^{-\frac{3\nu}{2n}})(\omega^{\frac{3(\mu+\nu)}{2n}} - \omega^{-\frac{3(\mu+\nu)}{2n}})}{27\mu\nu(\mu+\nu)\log^3(\omega)} g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

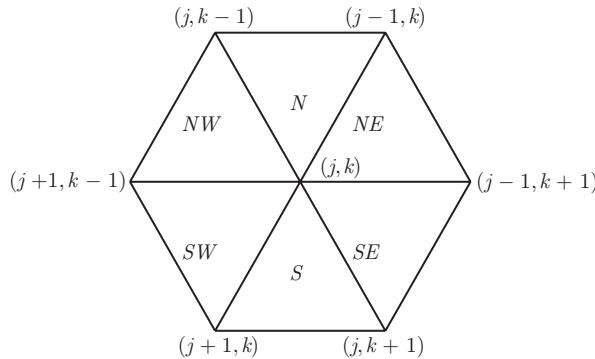


图 2 以重心坐标  $(\frac{j}{n}, \frac{k}{n})$  为中心的六片三角形域

和刚度函数

$$\begin{aligned} (\nabla g_{\mu,\nu}, \nabla \phi_{jk}) &= \frac{2}{3} \left( 6g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - \left( g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right) \right) \\ &= \frac{16}{3} \left( 1 - \frac{1}{8} (\omega^{-\frac{3\mu}{2n}} + \omega^{\frac{3\mu}{2n}})(\omega^{-\frac{3\nu}{2n}} + \omega^{\frac{3\nu}{2n}})(\omega^{-\frac{3(\mu+\nu)}{2n}} + \omega^{\frac{3(\mu+\nu)}{2n}}) \right) g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right). \end{aligned} \quad (4.7)$$

因而, 在用均匀三角形网格求解 2D 有界域 Laplace-like 特征值时, 我们实际上在内点采用了如下的七点差分格式:

$$\begin{aligned} a(g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}) &= (\nabla g_{\mu,\nu}, \nabla \phi_{jk}) \\ &= \frac{2}{3} \left( 6g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) - \left( g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right) \right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

和七点积分格式:

$$\begin{aligned} b(g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}) &= (g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}) \\ &= \frac{1}{12} \left( \left( g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k+1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j-1}{n}, \frac{k}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k-1}{n}\right) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k-1}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j+1}{n}, \frac{k}{n}\right) + g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k+1}{n}\right) \right) \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

由此, 我们得到如下的结论.

**定理 4.1** 在用均匀三角形网格求解 2D 有界域 Laplace-like 特征值时, 存在唯一的七点格式使得能量内积投影空隙为  $O(n^{-4})$ , 这时相应的差分格式为 (4.8), 积分格式为 (4.9).

**证明** 由 (4.6) 和 (4.7),

$$\begin{aligned} \delta_{g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}}(h) &:= \frac{\lambda_{\mu,\nu}(g_{\mu,\nu}, \phi_{jk}) - a(g_{\mu,\nu}, \phi_{jk})}{g_{\mu,\nu}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right)} \\ &= -\frac{4n(\mu^2 + \nu\mu + \nu^2)(\omega^{\frac{3\mu}{2n}} - \omega^{-\frac{3\mu}{2n}})(\omega^{\frac{3\nu}{2n}} - \omega^{-\frac{3\nu}{2n}})(\omega^{\frac{3(\mu+\nu)}{2n}} - \omega^{-\frac{3(\mu+\nu)}{2n}})}{9\mu\nu(\mu + \nu)\log(\omega)} \\ &\quad - \frac{2}{3}(8 - (\omega^{-\frac{3\mu}{2n}} + \omega^{\frac{3\mu}{2n}})(\omega^{-\frac{3\nu}{2n}} + \omega^{\frac{3\nu}{2n}})(\omega^{-\frac{3(\mu+\nu)}{2n}} + \omega^{\frac{3(\mu+\nu)}{2n}})) \\ &= \frac{81}{20}\mu^2\nu^2(\mu + \nu)^2\log^6(\omega)n^{-6} + \frac{891}{560}\mu^2\nu^2(\mu + \nu)^2(\mu^2 + \nu\mu + \nu^2)\log^8(\omega)n^{-8} \\ &\quad + O(n^{-10}). \end{aligned} \quad (4.10)$$

因而, 对于能用均匀三角形网格围成的 2D 有界域, 其节点个数为  $O(n^2)$ , 此时  $a(g - g^h, g^h) = O(n^{-4}) = O(\|g - g^h\|^2)$ . 其唯一性可用待定系数法直接证明.  $\square$

**推论 4.1** 特别地, 当  $\mu\nu(\mu + \nu) = 0$ ,  $g_{\mu,\nu}$  可称为主特征函数, 这时 (4.10) 所对应的七点线性插值恰为 Laplace-like 算子的能量投影,

$$a(g_{\mu,\nu} - g_{\mu,\nu}^h, g_{\mu,\nu}^h) = 0. \quad (4.11)$$

作为特例，在单位正三角形均匀网格上，零边界和零法向边界的 Laplace 特征函数的真解分别是（参见文献 [18]）

$$\text{TSin}_{\mu,\nu} = g_1(\mu, \nu) + g_2(\mu, \nu) + g_3(\mu, \nu) - g_4(\mu, \nu) - g_5(\mu, \nu) - g_6(\mu, \nu) \quad (4.12)$$

和

$$\text{TCos}_{\mu,\nu} = g_1(\mu, \nu) + g_2(\mu, \nu) + g_3(\mu, \nu) + g_4(\mu, \nu) + g_5(\mu, \nu) + g_6(\mu, \nu). \quad (4.13)$$

例如，对于零边界，

$$\begin{aligned} a(\text{TSin}_{\mu,\nu} - (\text{TSin}_{\mu,\nu})_h, (\text{TSin}_{\mu,\nu})_h) &= \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-j-1} \delta_{\text{TSin}_{\mu,\nu}, \phi_{jk}}(n) \\ &= \frac{1}{240} \mu \nu (\mu + \nu)^2 \log^6(\omega) n^{-4} + O(n^{-6}) \\ &=: C_{m_1, m_2}(f - f_h, f - f_h). \end{aligned}$$

因为此时  $(\text{TSin}_{\mu,\nu} - (\text{TSin}_{\mu,\nu})_h, \text{TSin}_{\mu,\nu} - (\text{TSin}_{\mu,\nu})_h) = O(h^4)$ .

(4.10) 对于 (4.4) 中的其他五类波函数同样成立，因此，格式 (4.8) 和 (4.9) 对于任意的有界凸区域恒有  $a(f - f_h, f_h) = O(\|f - f_h\|^2)$ .

## 4.2 三角形格式中 $L^2(\mathbb{T})$ 范数的离散范数表示

现在讨论 Laplace 零边界特征函数真解  $\text{TSin}_{\mu,\nu}$  和零法向边界特征函数真解  $\text{TCos}_{\mu,\nu}$  的  $L^2(\mathbb{T})$  范数在三角形格式中离散范数表示.

**定义 4.1** 两个复函数在三角域  $\mathbb{T}$  上的  $L^2$  内积定义为

$$\langle f, g \rangle := \int_0^1 \int_0^{1-u} f(u, v) \bar{g}(u, v) dv du, \quad (4.14)$$

而在三角域  $\mathbb{T}$  均匀网格上的  $l^2$  内积为

$$\begin{aligned} [f, g] &:= \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} f\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) \bar{g}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{j=1}^{n-1} f\left(\frac{j}{n}, 0\right) \bar{g}\left(\frac{j}{n}, 0\right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{n-1} f\left(0, \frac{k}{n}\right) g\left(0, \frac{k}{n}\right) + \sum_{j=1}^{n-1} f\left(\frac{j}{n}, \frac{n-j}{n}\right) \bar{g}\left(\frac{j}{n}, \frac{n-j}{n}\right) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{6} (f(0, 0) \bar{g}(0, 0) + f(1, 0) \bar{g}(1, 0) + f(0, 1) \bar{g}(0, 1)). \end{aligned} \quad (4.15)$$

特别地，对于零边界函数， $l^2$  内积公式简化成

$$[f, g]_{0,n} := \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} f\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right) \bar{g}\left(\frac{j}{n}, \frac{k}{n}\right). \quad (4.16)$$

**定理 4.2** [25] 设 Laplace 特征值问题  $\mathbb{T}$  上三条边同时满足零边界或零法向边界条件，只要均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > \max(\mu, \nu)$ )，用求解特征函数真解  $\text{TSin}_{\mu,\nu}$  和  $\text{TCos}_{\mu,\nu}$  在  $L^2[\mathbb{T}]$  范数的广义梯形积分公式是精确的，即对于任意整数对  $(\mu, \nu)$ ,  $\text{TSin}_{\mu,\nu}$  满足

$$\langle \text{TSin}_{\mu,\nu}, \text{TSin}_{\mu,\nu} \rangle = [\text{TSin}_{\mu,\nu}, \text{TSin}_{\mu,\nu}]_0, \quad (4.17)$$

零法向边界函数特征函数  $\text{TCos}_{\mu,\nu}$  则满足

$$\langle \text{TCos}_{\mu,\nu}, \text{TCos}_{\mu,\nu} \rangle = [\text{TCos}_{\mu,\nu}, \text{TCos}_{\mu,\nu}]. \quad (4.18)$$

**证明** 为书写方便, 记  $\tilde{\omega} = e^{2i\pi}$ , 下面的证明要用到如下积分公式:

$$\int_0^1 \int_0^{1-u} \tilde{\omega}^{u\mu+v\nu} dv du = \begin{cases} 0, & (\mu, \nu) \in \mathbb{Z}, \quad \mu^2 + \nu^2 > 0, \\ 1, & \mu = \nu = 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

和求和公式:

$$\sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} \tilde{\omega}^{\frac{\mu j + \nu k}{n}} = \begin{cases} 1, & (\mu, \nu) \in \mathbb{Z}_+, \quad n > \mu > \nu > 0, \\ \frac{2-n}{2} + i \frac{n \cos \frac{\mu \pi}{n}}{2 \sin \frac{\mu \pi}{n}}, & (\mu, \nu) \in \mathbb{Z}, \quad n > \mu > \nu = 0, \\ \frac{1}{2}(n-1)(n-2), & \mu = \nu = 0. \end{cases} \quad (4.20)$$

由于  $\tilde{\omega} = e^{2i\pi}$ , 积分公式 (4.19) 显然, 只需验证求和公式 (4.20). 事实上,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} \tilde{\omega}^{\frac{(\mu k + \nu j)}{n}} &= \sum_{j=1}^{n-2} \frac{\tilde{\omega}^{\frac{j(\nu-\mu)}{n}} (\tilde{\omega}^\mu - \tilde{\omega}^{\frac{(j+1)\mu}{n}})}{\tilde{\omega}^{\frac{\mu}{n}} - 1} = 1, \quad \forall (\mu, \nu) \in \mathbb{Z}_+, \quad n > \mu > \nu > 0, \\ \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} (\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} + \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) &= \sum_{j=1}^{n-2} (n-1-j)(\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} + \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) = \sum_{j=1}^{n-2} (j-1)(\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} + \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) \\ &= \frac{n-2}{2} \sum_{j=1}^{n-1} (\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} + \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) = 2-n, \\ \sum_{j=1}^{n-2} \sum_{k=1}^{n-1-j} (\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} - \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) &= \sum_{j=1}^{n-2} (n-1-j)(\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} - \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) = - \sum_{j=1}^{n-2} (j-1)(\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} - \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) \\ &= \sum_{j=1}^{n-1} (n-2j)(\tilde{\omega}^{\frac{\mu j}{n}} - \tilde{\omega}^{-\frac{\mu j}{n}}) = i n \frac{\cos \frac{\mu \pi}{n}}{\sin \frac{\mu \pi}{n}}. \end{aligned}$$

由 (4.12) 和 (4.13) 可知,

$$|\text{TSin}_{\mu,\nu}|^2 = 6 - \text{TSm}_{\mu,\nu} + \text{TSp}_{\mu,\nu}, \quad |\text{TCos}_{\mu,\nu}|^2 = 6 + \text{TSm}_{\mu,\nu} + \text{TSp}_{\mu,\nu},$$

其中

$$\begin{aligned} \text{TSm}_{\mu,\nu} &= \tilde{\omega}^{u(\mu-\nu)} + \tilde{\omega}^{v(\mu-\nu)} + \tilde{\omega}^{(u+v)(\mu-\nu)} + \tilde{\omega}^{u(2\mu+\nu)} + \tilde{\omega}^{(-u-v)(2\mu+\nu)} + \tilde{\omega}^{v(2\mu+\nu)} \\ &\quad + \tilde{\omega}^{u(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{(-u-v)(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{-v(\mu+2\nu)}, \\ \text{TSp}_{\mu,\nu} &= \tilde{\omega}^{-v(\mu-\nu)-u(2\mu+\nu)} + \tilde{\omega}^{v(\mu-\nu)+u(2\mu+\nu)} + \tilde{\omega}^{-u(\mu-\nu)-v(2\mu+\nu)} + \tilde{\omega}^{u(\mu-\nu)+v(2\mu+\nu)} \\ &\quad + \tilde{\omega}^{v(\mu-\nu)-u(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{-v(2\mu+\nu)-u(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{v(\nu-\mu)+u(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{v(2\mu+\nu)+u(\mu+2\nu)} \\ &\quad + \tilde{\omega}^{u(\mu-\nu)-v(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{-u(2\mu+\nu)-v(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{u(\nu-\mu)+v(\mu+2\nu)} + \tilde{\omega}^{u(2\mu+\nu)+v(\mu+2\nu)}, \end{aligned}$$

直接计算易得

$$\int_0^1 \int_0^{1-u} \text{TSm}_{\mu,\nu} dv du = \int_0^1 \int_0^{1-u} \text{TSp}_{\mu,\nu} dv du = 0.$$

因此, 利用 (4.19) 和 (4.20), 我们得

$$\begin{aligned}\langle \text{TSin}_{\mu,\nu}, \text{TSin}_{\mu,\nu} \rangle &= \int_0^1 \int_0^{1-u} 6dvdu = 3, \\ [\text{TSin}_{\mu,\nu}, \text{TSin}_{\mu,\nu}]_0 &= \frac{1}{n^2}(3(n-1)(n-2) + 9(n-2) + 12) = 3\end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned}\langle \text{TCos}_{\mu,\nu}, \text{TCos}_{\mu,\nu} \rangle &= \int_0^1 \int_0^{1-u} 6dvdu = 3, \\ [\text{TCos}_{\mu,\nu}, \text{TCos}_{\mu,\nu}]_0 &= \frac{1}{n^2}(3(n-1)(n-2) - 9(n-2) + 12) = \frac{3}{n^2}(12 - 6n + n^2), \\ \sum_{j=1}^{n-1} \left( 6 + \text{TSm}_{\mu,\nu} \left( \frac{j}{n}, \frac{k}{n} \right) + \text{TSp}_{\mu,\nu} \left( \frac{j}{n}, \frac{k}{n} \right) \right) &= 12(n-3), \quad \text{TCos}_{\mu,\nu}(0,0) = 36, \\ [\text{TCos}_{\mu,\nu}, \text{TCos}_{\mu,\nu}] &= \frac{1}{n^2} \left( 3(12 - 6n + n^2) + \frac{1}{2} \times 12(n-3) + \frac{1}{6} \times 3 \times 36 \right) = 3.\end{aligned}$$

从而得证 (4.17) 和 (4.18).  $\square$

与二维矩形网格时类似, 对于三角域上有限个形如 (4.4) 波函数组成的广义 Fourier 级数

$$u_{m_1, m_2}(u, v) := \sum_{\mu=1}^{m_1} \sum_{\nu=1}^{m_2} \sum_{l=1}^6 b_{l,\mu,\nu} g_l(\mu, \nu),$$

只要均匀网格点数超过特征函数的频率 ( $n > m = \max(m_1, m_2)$ ), 均有  $u_{m_1, m_2}$  在离散网格中的  $l^2$  范数与  $L^2[\mathbb{T}]$  范数相等, 即  $\langle u_{m_1, m_2}, u_{m_1, m_2} \rangle = [u_{m_1, m_2}, u_{m_1, m_2}]$ .

本节的推导和算法可以推广到高维蜂窝型区域, 如三维四面体. 这是因为在几何上三维蜂窝型四面体分割可视为二维一致三角形分割的自然推广, 只是公式要复杂得多.

## 5 数值算例

### 5.1 一维重调和方程计算

对一维 Laplace 特征值问题, 图 3(a) 给出采用三次 Hermite 插值和第 3.1 小节中提到的矩阵分块质量集中方法计算前 10 个特征值的六阶收敛阶 (网格尺寸分别为  $\frac{1}{16}$  和  $\frac{1}{32}$ ), 简单的质量集中特征值误差会从  $O(h^6)$  增加到  $O(h^2)$  (参见文献 [1]), 从表 1 可以看出, 分块矩阵质量集中方法是下界, 且比原来的三次 Hermite 元精度高.

对一维重调和问题, 采用二次元得到二阶上界, 刚度矩阵为  $A$ , 质量矩阵为  $B = [B_{11}, B_{12}; B_{21}, B_{22}]$ , 这里采用八阶公式, 刚度矩阵不变, 质量矩阵改为

$$\hat{B} = \left[ 2h(1-a)I + aB_{11}, bB_{12}; bB_{21}, cB_{22} + \frac{h^3}{60}(1-c)I \right],$$

其中  $h$  为网格尺寸, 参数

$$a = \frac{483 - 4\sqrt{3885}}{588}, \quad b = \frac{28a+3}{26}, \quad c = \frac{13+42a}{36}.$$

数值收敛阶见图 3(b), 图形中 err8, err16, err32, err64 分别为  $h = \frac{1}{8}, \frac{1}{16}, \frac{1}{32}, \frac{1}{64}$  时的相对误差.

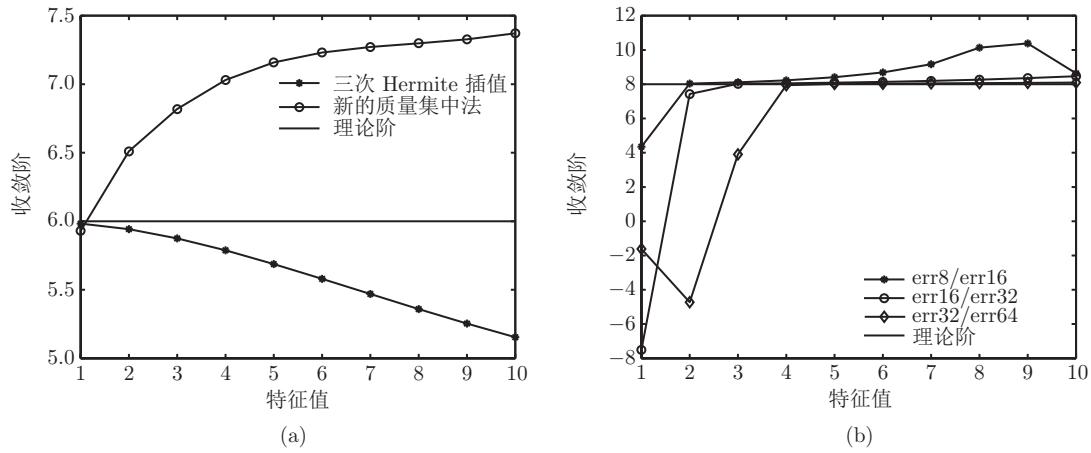


图 3 (a) 一维 Laplace 问题前 10 个特征值的误差收敛阶; (b) 一维重调和问题前 10 个特征值在不同网格尺寸下的误差收敛阶

表 1 一维 Laplace 特征值问题前 8 个特征值的相对误差:  $h = \frac{1}{16}$

误差	特征值指标							
	1	2	3	4	5	6	7	8
三次 Hermite 插值 (上界)	1.87e-9	1.15e-7	1.23e-6	6.35e-6	2.20e-5	5.88e-5	1.32e-4	2.61e-4
分块矩阵质量集中方法 (下界)	-6.95e-11	-6.34e-9	-1.05e-7	-8.29e-7	-4.19e-6	-1.58e-5	-4.89e-5	-1.30e-4
提高精度倍数	26.88	18.13	11.65	7.66	5.24	3.71	2.69	1.99

## 5.2 L-型区域 Laplace 前 105 个特征值计算

考虑以  $(-1, 1)$ ,  $(-1, -1)$ ,  $(1, -1)$ ,  $(1, 0)$ ,  $(0, 0)$  和  $(0, 1)$  为顶点的 L-型区域, 图 4(a) 给出了分别用有限元方法 (FEM) 和有限差分方法 (FD) 第一个特征值随网格尺寸减小的误差变化.

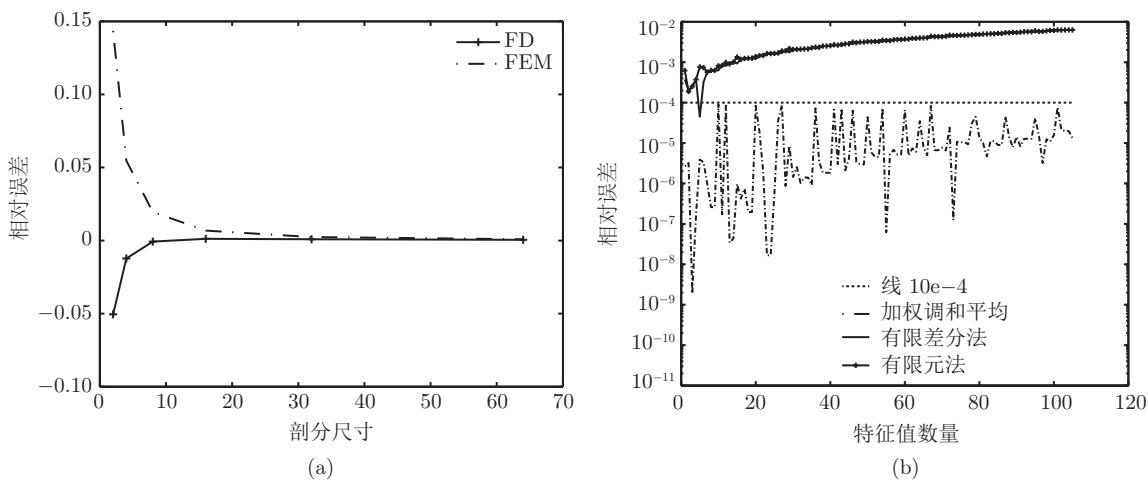


图 4 (a) 第一个特征值在不同网格剖分下的相对误差; (b) 前 105 个特征值在不同方法下的相对误差

我们采用误差补偿算法<sup>[24]</sup> 计算前 105 个特征值, 从图 4(b) 可以看出, 以  $10^{-4}$  作为误差界限, 此时有限元方法和有限差分方法的误差要比加权的调和平均高两个数量级. L- 型区域的第 3 个特征值为光滑解, 其真解对应于方形区域  $[0, 1]^2$  的第一个特征值  $2\pi^2$ , 对此我们可以构造高阶格式, 这里我们记刚度矩阵为  $A$ , 质量矩阵为  $B$ ,  $I_N$  为  $N$  阶单位矩阵, 10 阶下界公式对应的刚度矩阵  $K_{10}$  和质量矩阵  $M_{10}$  如下:

$$K_{10} = A((1 - b_1 - b_2)I_N + b_1 B + b_2 B^2),$$

$$M_{10} = B(1 - a_1 - a_2)I_N + a_1 B + a_2 B^2,$$

这里

$$a_1 = \frac{32857}{54040}, \quad a_2 = \frac{36023}{108080}, \quad b_1 = \frac{36889}{54040}, \quad b_2 = \frac{4971}{108080}.$$

计算前 6 个特征值的误差对于  $h = \frac{1}{8}$  为

$$[0.089871, -0.0040264, -5.5432e-9, -0.0030634, 0.21466, 0.15719],$$

而当  $h = \frac{1}{16}$  为

$$[0.0384, -0.00070722, -9.7167e-12, -0.00039359, 0.092937, 0.07].$$

其中第三个特征值的收敛阶为 9.16.

### 5.3 方环区域 (ring square) 前 10 个特征值计算

考虑在单位正方形  $[0, 1]^2$  中去掉正方形  $[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}]^2$  的方环区域, 文献 [26, 27] 讨论了方环区域适用于第一对重特征值 (第二和三个特征值) 的自适应网格. 图 5 给出有限元方法、调和平均 (2.9) 和带权重的调和平均公式 (2.8) 下前 10 个特征值在网格尺寸  $h = \frac{1}{36}$  的相对误差.

求解前 10 个特征值的对应权重为  $\gamma = \{0.3, 0.25, 0.25, 0.2, 0.1, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0\}$ .

图 6 给出前 10 个特征值对应的特征向量示意图.

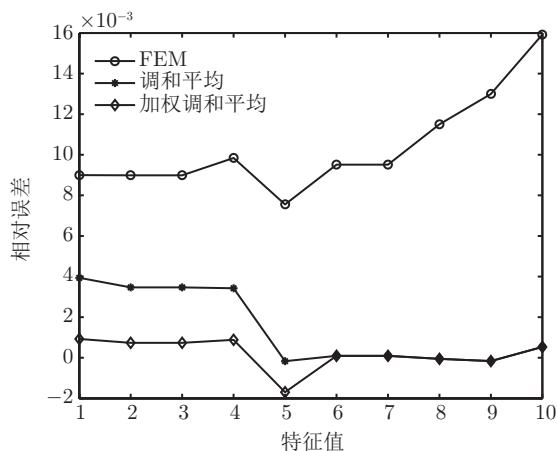


图 5 前 10 个特征值的相对误差

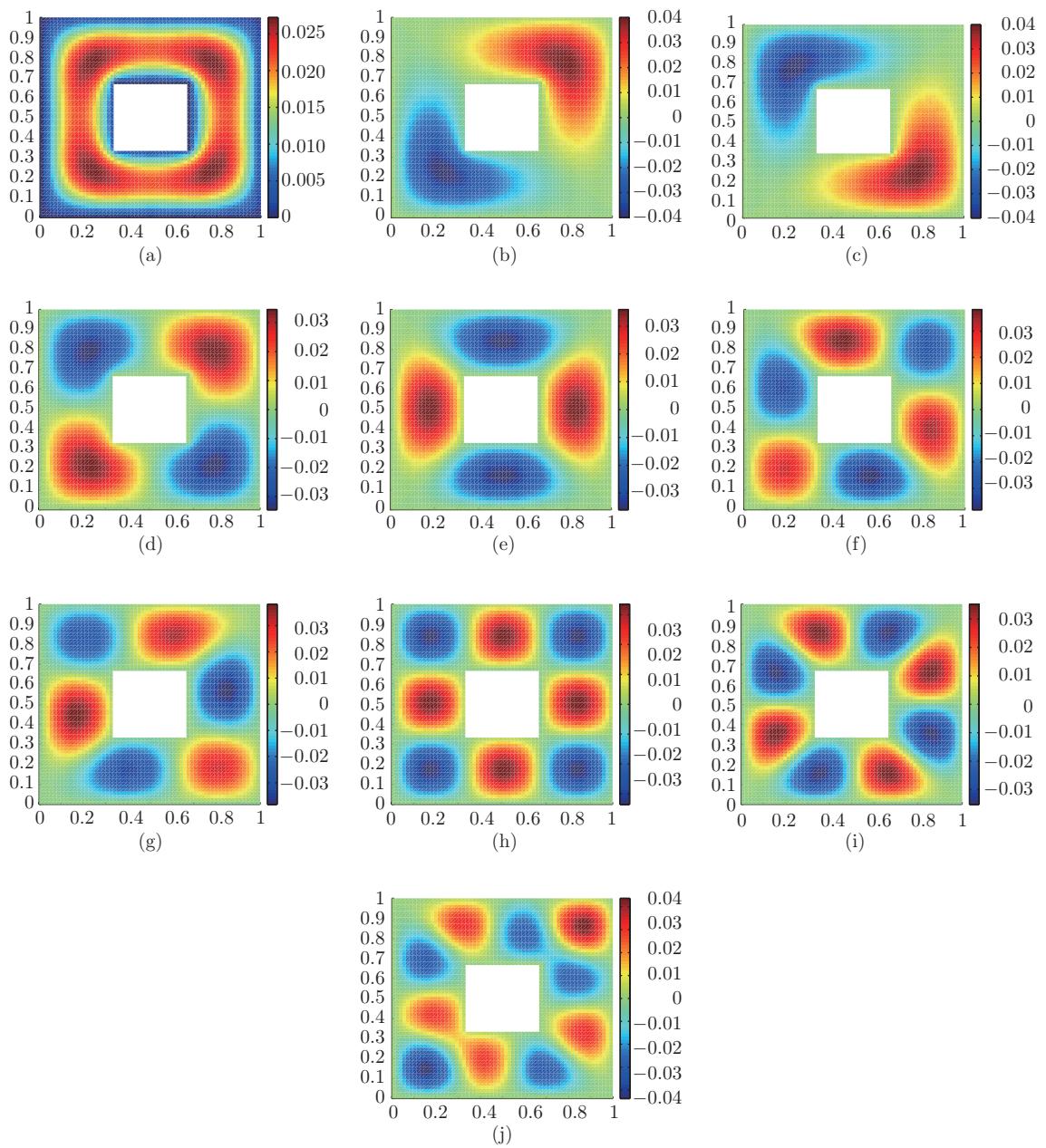


图 6 方环区域 Laplace 前 10 个特征值的特征向量

#### 5.4 单位正三角形与平行六边形域

首先考虑三边都是零边界的情形, 把 (3.18) 中的高阶公式形式运用到三角形的八阶公式如下:

$$\begin{aligned}\phi(M) &= (1 - b_1 - b_2)I + b_1 M + b_2 M^2, \\ \tilde{\phi}(M) &= \left(\frac{3}{2} - b_1 - 2b_2\right)M + \frac{-1 + 2b_1 + 4b_2}{2}M^2,\end{aligned}\quad (5.1)$$

其中

$$\begin{aligned} b_{20} &= 521m^6 - 1563m^5n + 3315m^4n^2 - 4025m^3n^3 + 3315m^2n^4 - 1563mn^5 + 521n^6, \\ b_{21} &= 22m^6 - 66m^5n + 105m^4n^2 - 100m^3n^3 + 105m^2n^4 - 66mn^5 + 22n^6, \\ b_{22} &= \frac{(m-2n)^2(2m-n)^2(m+n)^2}{(m^2-mn+n^2)^3}, \\ b_1 &= \frac{7}{10} + \frac{b_{22}}{90}, \\ b_2 &= -\frac{1}{315} + \frac{b_{22}b_{20}}{1260b_{21}}; \end{aligned}$$

我们给出不同网格尺寸下的误差 (如 err8 为  $h = \frac{1}{8}$  的相对误差) 比较, 数值结果是八阶的 (见图 7(a)).

对于两边为零边界、第三边为零法向边界, 对于这种边界条件问题没有解析解, 我们以较细网格下的高阶公式解作为精确解. 运用调和平均公式 (2.9), 我们得到四阶的收敛结果 (见图 7(b)).

表 2 给出六边形的前 10 个特征值运用调和平均下界公式 (2.9) 的四阶数值结果.

## 5.5 单位立方体 Laplace 零边界

对于单位立方体, 我们分别给出有限元方法的二阶上界数值结果 (见表 3) 和公式 (3.21)–(3.23) 的四阶下界结果 (见表 4), 把 (3.18) 中的高阶公式形式运用到立方体, 对于不同频率得到相关的十阶下界格式, 其计算结果在表 5 中列出.

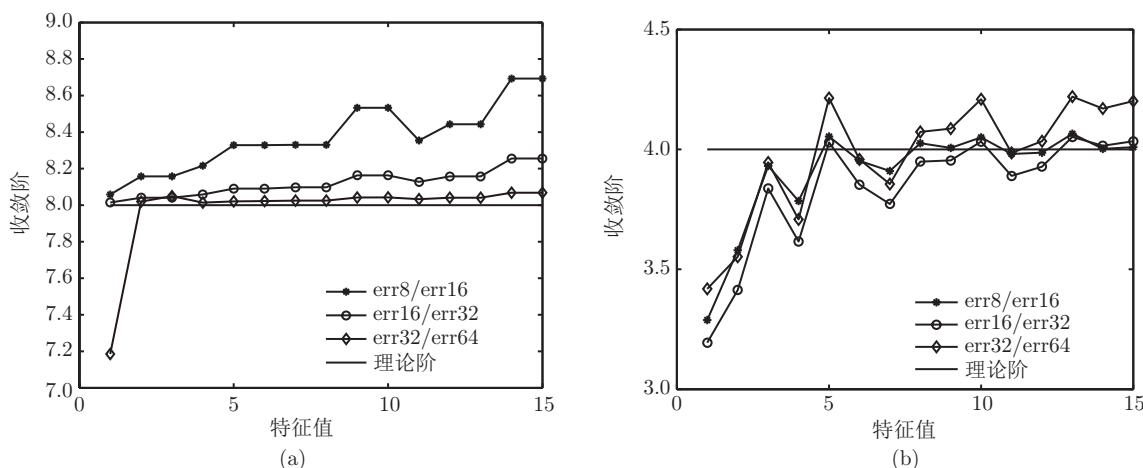


图 7 (a) 零边界: 前 15 个特征值的误差收敛阶; (b) 混合边界条件 (两边零边界、第三边零法向边界)

表 2 六边形前 10 个特征值的相对误差: 调和平均

网格尺寸	特征值指标 (重数)							
	1(1)	2(2)	4(2)	6	7	8	9(2)	
$h = 1/8$	-4.66e-4	-7.77e-4	-1.60e-3	-1.83e-3	-3.35e-3	-2.79e-3	-4.19e-3	
$h = 1/16$	-4.11e-5	-5.79e-5	-1.01e-4	-1.12e-4	-2.11e-4	-1.29e-4	-2.31e-4	
收敛阶	3.51	3.75	3.99	4.03	3.99	4.43	4.18	

表 3 前 32 个特征值的相对误差: 有限元方法

网格尺寸		特征值除以 $\pi^2$ (重数)									
		3(1)	6(3)	9(3)	11(3)	12(1)	14(6)	17(3)	18(3)	19(3)	21(6)
$h = 1/8$		0.013	0.039	0.048	0.10	0.05	0.09	0.088	0.17	0.13	0.16
$h = 1/16$		3.2e-3	9.68e-3	1.18e-2	2.45e-2	1.29e-2	2.27e-2	2.16e-2	4.69e-2	2.79e-2	4.25e-2
收敛阶		2.01	2.02	2.02	2.04	2.02	2.03	2.03	1.91	2.22	1.92

表 4 前 32 个特征值的相对误差: 4 阶下界公式

网格尺寸		特征值除以 $\pi^2$ (重数)									
		3(1)	6(3)	9(3)	11(3)	12(1)	14(6)	17(3)	18(3)	19(3)	21(6)
$h = 1/8$		-5.4e-4	-2.49e-3	-5.1e-3	-9.85e-3	-8.58e-3	-1.34e-2	-1.8e-2	-2.9e-2	-2.3e-2	-3.37e-2
$h = 1/16$		-3.37e-5	-1.55e-4	-3.19e-4	-6.05e-4	-5.40e-4	-8.34e-4	-1.14e-3	-1.77e-3	-1.46e-3	-2.09e-3
收敛阶		4.00	4.01	4.00	4.03	3.99	4.00	3.99	4.05	3.98	4.01

表 5 前 32 个特征值的相对误差: 10 阶下界公式

网格尺寸		特征值除以 $\pi^2$ (重数)									
		3(1)	6(3)	9(3)	11(3)	12(1)	14(6)	17(3)	18(3)	19(3)	21(6)
$h = 1/8$		-5.23e-9	-2.65e-7	-1.46e-6	-9.64e-06	-5.27e-6	-1.79e-5	-2.47e-6	-1.66e-4	-6.55e-5	-2.10e-4
$h = 1/16$		-5.12e-12	-2.54e-10	-1.42e-9	-8.61e-9	-5.23e-9	-1.69e-8	-3.45e-7	-1.34e-7	-6.43e-8	-1.84e-7
收敛阶		9.99	10.03	10.0	10.13	9.97	10.04	9.48	10.28	9.99	10.15

致谢 感谢审稿人的有益建议.

## 参考文献

- 1 Strang G, Fix G. An Analysis of the Finite Element Method. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall Inc, 1973
- 2 Weinberger H F. Variational methods for eigenvalue approximation. Philadelphia: SIAM, 1974
- 3 Lin Q. Lower bound for all eigenvalues of the neutron transport equation. Scientia Sinica, 1964, 13: 2009–2010
- 4 Hu J, Huang Y Q, Lin Q. Lower bounds for eigenvalues of elliptic operators: By nonconforming finite element methods. J Sci Comput, 2014, 61: 196–221
- 5 Luo F, Lin Q, Xie H. Computing the lower and upper bounds of Laplace eigenvalue problem: By combining conforming and nonconforming finite element methods. Sci China Math, 2012, 55: 1069–1082
- 6 Liu X F, Oishi S. Verified eigenvalue evaluation for the Laplacian over polygonal domains of arbitrary shape. SIAM J Numer Anal, 2013, 51: 1634–1654
- 7 Lin Q, Xie H. Asymptotic error expansion and Richardson extrapolation of eigenvalue approximations for second order elliptic problems by the mixed finite element method. Appl Numer Math, 2009, 59: 1884–1889
- 8 Hu J, Huang Y Q, Shen Q. A high accuracy post-processing algorithm for the eigenvalues of elliptic operators. J Sci Comput, 2012, 52: 426–445
- 9 Naga A, Zhang Z, Zhou A. Enhancing eigenvalue approximation by gradient recovery. SIAM J Sci Comput, 2006, 28: 1289–1300
- 10 Fang J, Gao X, Zhou A. A finite element recovery approach to eigenvalue approximations with applications to electronic structure calculations. J Sci Comput, 2013, 55: 432–454
- 11 Lyashenko I N, Embergenov A, Meredov K M. A combination difference scheme for the eigenvalue problem of the laplace operator. J Math Sci, 1994, 72: 3091–3094

- 12 杨一都. 特征值问题有限元方法. 北京: 科学出版社, 2012
- 13 Sloan I H. Iterated Galerkin method finite for eigenvalue problems. SIAM J Numer Anal, 1976, 13: 753–760
- 14 Xu J, Zhou A. A two-grid discretization scheme for eigenvalue problems. Math Comp, 1999, 70: 881–909
- 15 林群, 谢干权. 本征值问题的有限元方法的加速. 科学通报, 1981, 26: 449–452
- 16 孙家昶, 邓健新, 曹建文, 等. 广义矩阵本征问题并行算法及在晶体能带中的应用. 科学通报, 1997, 42: 818–821
- 17 孙家昶. 求解非线性 Schrödinger 方程本征值部分和的新算法. 计算数学, 2002, 24: 461–468
- 18 孙家昶. 非规则区域 Fourier 变换与正交多项式. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2009
- 19 孙家昶. 特征值的预变换方法 (I): 杨辉三角阵变换与二阶 PDE 特征多项式. 中国科学: 数学, 2011, 41: 701–724
- 20 孙家昶. 特征值的预变换方法 (II): 任意三角形域 Laplace 特征值的计算分析. 计算数学, 2012, 34: 1–24
- 21 Babuska I, Osborn J E. Finite element-Galerkin approximation of the eigenvalues and eigenvectors of selfadjoint problems. Math Comp, 1989, 52: 275–297
- 22 Sun J C. Generalization of the mean values and their inequalities. Chin Ann Math Ser B, 1983, 4: 493–500
- 23 Sun J C. Multi-Neighboring Grids Schemes for solving PDE eigen-problems. Sci China Math, 2013, 56: 2677–2700
- 24 Sun J C. New schemes with fractal error compensation for PDE eigenvalue computations. Sci China Math, 2014, 57: 221–244
- 25 Li H, Sun J, Xu Y. Discrete Fourier analysis, cubature and interpolation on a hexagon and a triangle. SIAM J Numer Anal, 2008, 46: 1653–1681
- 26 Boffi D, Duran R, Gardini F, et al. A posteriori error analysis for non-conforming approximation of multiple eigenvalues. ArXiv:1404.5560, 2014
- 27 Dari E, Duran R, Padra C. A posteriori error estimates for non conforming approximation of eigenvalue problems. Appl Numer Math, 2012, 62: 580–591

## An analysis on lower bound and upper bound and construction of high accuracy schemes in PDE eigen-computation

SUN JiaChang, CAO JianWen & ZHANG Ya

**Abstract** Any conforming finite element scheme always gives an upper bound for elliptic eigenvalue problem. We point out that it is essentially equal to  $(u_h, u_h) \leq (u, u_h) \leq (u, u)$ , and a lower bound scheme which is called a dual scheme with the finite element projection is proposed. If  $a(u - u_h, u_h) = O(\lambda \|u - u_h\|_{L^2}^2)$ , a series of high order schemes with the same accuracy have been obtained, such as harmonic means  $\lambda_H^h := \frac{2a(u_h, u_h)}{(u, u) + (u_h, u_h)}$ . For the linear and multi-linear element of rectangle, triangle and parallelepiped domains, two key conditions are investigated:  $a(u - u_h, u_h) = O(\lambda \|u - u_h\|_{L^2}^2)$  and the distance between the  $L^2$  norm  $(u, u)$  and  $l^2$  norm in the discrete grid of the eigen-functions. The numerical experiments are carried out to validate the theoretical results. For Laplace problem in 2D/3D we give some high order schemes (6th, 8th and up to 10th order) to compute the first dozens of eigen-values. They are efficient to the singular eigen-functions and high frequency eigen-values too.

**Keywords** PDE eigen-computation, lower bound and upper bound, high-order schemes, high accuracy parallel computation

**MSC(2010)** 65F15, 65N06, 65N25, 65N30

**doi:** 10.1360/N012014-00226