# Numerical PDEs

Shen Zhirui

# 1 热方程 $u_t = Ku_{xx}$

## 1.1 前向差分

考虑方程

$$u_t = Ku_{xx},\ t \in [0, T],\ x \in [a, b].$$

并给出 Dirichlet 边界条件.

分别以步长 $h, k$ 均分 $[a, b], [0, T]$. 对二阶导数使用差分 (省略 $t$ 不写)

$$u_{xx} \to h^{-2}(u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)),$$

对一阶导使用**前向**差分

$$u_t \to k^{-1}(u(t+k) - u(t)).$$

这样就给出递推公式

$$w(i, j+1) = w(i, j) + \frac{kK}{h^2}(w(i+1, j) - 2w(i, j) + w(i-1, j)).$$

记 $w_j := (w(1, j), \cdots, w(m, j))$, 则上式可简写为

$$w_j = Aw_{j-1} + b,$$

其中 $w(\cdot, \star)$ 表示在 $[a, b] \times [0, T]$ 上的格点.

**定理 1.1.** *前向差分法稳定的充要条件是 $kK < 2h^2$, 局部截断误差为 $O(h^2) + O(k)$.*

## 1.2 后向差分

与前向差分的区别是表示 $u_t$ 的方式不同:

$$u_t \to k^{-1}(u(t) - u(t-k)).$$

这样导致递推的不同, 变为

$$w_j = A^{-1}w_{j-1} + A^{-1}b.$$

这里 $A, b$ 表示与前向差分的递推公式相同.

**定理 1.2.** *后向差分对热方程 $(K > 0)$ 无条件稳定, 局部截断误差为 $O(h^2) + O(k)$.*

### 1.3 Crank-Nicolson 方法

使用后向差分近似 $u_t$, 使用混合差分近似 $u_{xx}$:

$$u_{xx} \to \frac{w(i+1,j)-2w(i,j)+w(i-1,j)}{2h^2} + \frac{w(i+1,j-1)-2w(i,j-1)+w(i-1,j-1)}{2h^2}.$$

如此得到递推关系

$$w_j = A^{-1}Bw_{j-1} + c.$$

**定理 1.3.** *CN 方法对热方程 ($K>0$) 无条件稳定, 局部截断误差为 $O(h^2)+O(k^2)$*

## 2 波方程 $u_{tt} = c^2u_{xx}$

用二阶中心差分代替二阶偏导数得到

$$w(i,j+1) = (2-2\sigma^2)w(i,j) + \sigma^2 w(i-1,j) + \sigma^2 w(i+1,j) - w(i,j-1).$$

其中 $\sigma = ck/h$.

由于计算 $w(i,1)$ 需要 $w(i,0)$ 和 $w(i,-1)$ 的值而后者无定义, 所以采用三点中心差分公式先处理 $w(i,1)$, 详细过程见 [Sauer, 2nd, 8.2.1].

**定理 2.1** (CFL 条件)**.** *如果 $\sigma \le 1$, 有限差分方法对波方程稳定, 局部截断误差为 $O(h^2)+O(k^2)$.*

## 3 FFT

**定理 3.1.** *设 $\{t_0, t_1, \cdots, t_{n-1}\}$ 是区间 $[a,b]$ 的均分, 现给出数据 $(x_i, t_i)_{i=1}^{n-1}$, 则:*

- *离散 Fourier 变换*

$$\mathcal{F}(x) = \mathcal{F}(x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}) = (y_0, y_1, \cdots, y_{n-1}).$$

- *复函数*

$$Q(t) = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n-1} y_k \exp(2\pi k\lambda)$$

  *满足 $Q(t_i) = x_i$, 其中 $\lambda = \frac{t-a}{b-a}$.*

★ Fourier 变换 $\mathcal{F}$ 将数据变换为插值系数.

**引理 3.1.** *设 $f_0, f_1, \cdots, f_{n-1}$ 是关于 $t$ 的函数, 若 $A = (f_i(t_j))_{n\times n}$ 是正交阵, $y = Ax$, 则*

$$F(t) = \sum_{k=0}^{n-1} y_k f_k(t)$$

*满足 $F(t_j) = x_j$, $j = 0, 1, \cdots, n-1$.*

**定理 3.2.** *设 $m \le n$, $y = Ax$, $A$ 正交. 则样本点 $(t_i, x_i)_{i=0}^{n-1}$ 在基函数 $f_0, f_1, \cdots, f_{n-1}$ 上的插值多项式为*

$$F_n(t) = \sum_{k=0}^{n-1} y_k f_k(t),$$

*用 $f_{i1}, f_{i2}, \cdots, f_{im}$ 进行最小二乘拟合的结果是*

$$G_m(t) = \sum_{k=1}^{m} y_{ik} f_{ik}(t).$$

# 4 A SECOND-ORDER LOW-REGULARITY..

- $W^{\pm m,p}, H^{\pm m}$ 和 $W_0^{m,p}, H_0^m$
- $(-\Delta)^{-\frac{1}{2}}$
  - `mathoverflow.net/questions/96268/square-roots-of-the-laplace-operator`
  - `math.stackexchange.com/questions/1138573inverse-of-laplacian-operator`
- Lie Splitting
- Sobolev 不等式和 Sobolev 嵌入
- Variation-of-constants formula
  - 因为
    $$\frac{d}{dt}\left(e^{-tL}x(t)\right) = -Le^{-tL}x(t) + e^{tL}x'(t),$$
    故
    $$-Le^{-tL}x(t) + e^{-tL}x'(t) = -Le^{-tL}x(t) + e^{-tL}(Lx(t) + f(t)).$$
    因为 $Le^{-tL} = e^{-tL}L$, 所以
    $$\frac{d}{dt}\left(e^{-tL}x(t)\right) = e^{-tL}f(t).$$
    对上式两侧同时积分得
    $$e^{-tL}x(t) - e^{-t_0L}x_0 = \int_{t_0}^{t} e^{-sL}f(s)ds,$$
    这说明
    $$x(t) = e^{(t-t_0)}x_0 + \int_{t_0}^{t} e^{(t-s)L}f(s)ds.$$
  - 在 $F$ 是 Lipschitz 的情况下, 将 (4.1) 转化为积分方程
    $$U(t) = e^{tL}U^0 + \int_0^t e^{(t-s)L}F(U(s))ds.$$
  - 算子
    $$T:\ f \longmapsto e^{tL}U^0 + \int_0^t e^{(t-s)L}F(f(s))ds$$
    压缩, 故存在唯一解.
- Duhamel formula

# 5 $L^p(\Omega)$

- 设 $m(\Omega) < \infty$, $1 \le p \le q \le \infty$, 则 $L^q(\Omega) \subset L^p(\Omega)$, 进一步有
  $$||f||_p \le m(\Omega)^{\frac{1}{p}-\frac{1}{q}}||f||_q.$$

# 6 卷积和正规化子

Ref: 1. Brezis, Section 4.4.
2. Adult Rudin, Chapter 6.

## 6.1 卷积

- 卷积条件: $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, $g \in L^p(\mathbb{R}^n)$, $p \in [1, \infty]$. 那么 $f * g \in L^p$.
- 基本性质: 交换、结合 (对数乘也对)、对加法的分配律.
- Young Inequality-1:
$$||f * g||_p \leq ||f||_1 ||g||_p.$$
- Young Inequality-2: 设 $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$, $g \in L^q(\mathbb{R}^n)$, $\frac{1}{r} = \frac{1}{p} + \frac{1}{q} - 1 \geq 0$, 则 $f * g \in L^r(\mathbb{R}^n)$ 且
$$||f * g||_r \leq ||f||_p ||g||_q.$$
- 支集的关系:
$$\mathrm{supp}(f * g) \subset \overline{\mathrm{supp}\ f + \mathrm{supp}\ g}.$$

## 6.2 正规化子

- 磨光函数 (Mollifier in $\mathbb{R}^d$): 满足 $\mathrm{supp}\ \rho \subset \overline{B(0,1)}$, $\int_{\mathbb{R}^d} \rho = 1$ 的 $C_0^\infty$ 函数. 再令 $\rho_n(x) = C_n n^d \rho(nx)$ 就得到了一列支集分别在 $\overline{B(0, 1/n)}$ 中的磨光函数.
- 光滑化: $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$, $p \in [1, \infty)$, 则依 $L^p$ 范数, $\rho_n * f \to f$.
- $C_0^\infty(\Omega) \subset L^p(\Omega)$ 稠密, 其中 $p \in [1, \infty)$, $\Omega \subset_{\text{open}} \mathbb{R}^n$.
- $p = \infty$ 时上述关系失效: 考虑 $\mathrm{sgn}(x) \in L^\infty(\mathbb{R})$.

# 7 Sobolev 嵌入

符号: $\Omega \subset_{\text{open}} \mathbb{R}^n$, $W^{k,p}(\Omega)$, $L^p(\Omega)$, $C^{k,\alpha}(\Omega)$.

# 8 Fourier 变换

严格的 Fourier 变换所在空间按

$$C_0^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \to L^1 \text{ and } L^2 \text{ space} \to L^p(\mathbb{T}^n).$$

讨论.

## 8.1 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

Schwartz 空间的两个等价定义: 设 $\alpha$, $\beta$ 是正的 (多重) 指标,

$$\begin{aligned}\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) :=&\{f \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}) : \sup_{\alpha > 0, \beta \succ 0} |x^\alpha \partial^\beta f| < \infty\} \\ :=&\{f \in C^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{C}) : \ \forall n \in \mathbb{N}_+, \ \exists C_{\beta,n} > 0 \text{ s.t. } |(\partial^\beta f)(x)| \le C_{\beta,n}(1+|x|)^{-n}\}.\end{aligned}$$

都说明了 $f$ 的任意阶导数比多项式下降的速度还快. 因为 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^p(\mathbb{R}^n)$, 所以 $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ 在 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 中稠密.

在 $\mathcal{S}$ 上定义 Fourier 变换

$$\widehat{f}(x) := \int_{\mathbb{R}^n} f(\xi) e^{-ix\cdot\xi} d\xi.$$

则 $\widehat{(\cdot)}$ 是 $\mathcal{S}$ 上的 (线性) 同构, 这意味着:

- 若 $f \in \mathcal{S}$, $\widehat{f} \in \mathcal{S}$.
- 可定义 Fourier 逆变换: $f^\vee(x) = (\widehat{f})^{-1}(x) := \widehat{f}(-x)$, 且逆变换后的函数仍在 $\mathcal{S}$ 中.
- Inverse formula: $(\widehat{f})^\vee = f = \widehat{f^\vee}$.
- Convolution: $\widehat{f * g} = \widehat{f}\widehat{g}$.
- Parseval's relation:
$$\int_{\mathbb{R}^n} f\bar{g} = \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}\,\widehat{\bar{g}}.$$
- Plancherel's identity: 若 $f \in \mathcal{S}$,
$$(2\pi)^{\frac{n}{2}} ||f||_{L^2} = ||\widehat{f}||_{L^2} = ||f^\vee||_{L^2}.$$

  这说明 $(2\pi)^{-\frac{n}{2}}\widehat{(\cdot)} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ 是等距.

## 8.2 $L^p(\mathbb{R}^n)$, $1 \le p \le 2$

**Step 1. Fourier transform on $L^1$**

对 $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, 有

$$||\widehat{f}||_{L^\infty} \le ||f||_{L^1},$$

所以我们总能定义 $\widehat{(\cdot)} : L^1 \to L^\infty$. 关于逆变换, 有下面的结论:

- 若 $f \in L^1$, $\widehat{f}$ 在 $\mathbb{R}^n$ 上一致连续.
- Parseval's relation: 若 $f, g \in L^1$, 则
$$\int_{\mathbb{R}^n} f\bar{g} = \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}\,\widehat{\bar{g}}.$$
- Inverse formula: 若 $f$ 和 $\widehat{f}$ 都在 $L^1$ 中, 则
$$(\widehat{f})^\vee = f = \widehat{f^\vee} \quad \text{a.e.}$$

**Step 2. Fourier transform on $L^2$**

任给 $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, 当 $N \to \infty$ 时, 有 $||f \cdot \chi_{[-N,N]^n} - f||_{L^2} \to 0$. 所以 $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ 是 $L^2(\mathbb{R}^n)$ 的稠密子空间.

**定理 8.1** (Plancherel)**.** [1] 设 $f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, 则

$$(2\pi)^{\frac{n}{2}}||\widehat{f}||_{L^2} = ||f||_{L^2}.$$

对于 $L^2$ 中的 $f$, 逐点定义

$$\widehat{f}(\xi) = \lim_{N\to\infty} \widehat{f_N}(\xi),\ \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

其中 $\{f_N\} \subset L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ 是任意一个按 $L^2$ 范数逼近 $f$ 的函数列. 由 Fourier 变换的线性性和 Plancherel 定理, $\widehat{f}$ 的值和 $f_N$ 的选取无关.

**Step 3. Fourier transform on $L^p$, $1 < p < 2$**

任一 $f \in L^p$ 总能分解为 $f = g + h$, 其中 $g \in L^1$, $h \in L^2$. 比如其中一种分解方式是

$$g := f\chi_{|f|>1}, \quad h = f\chi_{|f|\leq 1}.$$

(这是因为 $||g||_1 \leq ||f||_p(m(\{|f| > 1\}))^{1/q} < \infty$, $|f\chi_{|f|\leq 1}|^2 \leq |f|^p$.)

定义

$$\widehat{f} = \widehat{g} + \widehat{h},$$

容易验证 $\widehat{f}$ 的值与 $g, h$ 的选取无关.

**定理 8.2.** [2] 对 $f \in L^p(\mathbb{R}^n)$, $p \in [1, 2]$, 有

$$||\widehat{f}||_{p'} \leq ||f||_p.$$

其中 $\frac{1}{p'} + \frac{1}{p} = 1$. 所以 *Fourier* 变换是 $L^p$ 到 $L^{p'}$ 的有界线性变换.

**定理 8.3** (Riemann-Lebesgue lemma)**.** 设 $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, 当 $|\xi| \to \infty$ 时, $|\widehat{f}(\xi)| \to 0$.

# 9 $H^s(\mathbb{R}^n)$

对于实数 $s$, 定义 $||\cdot||_{H^s}$ 为

$$||f||_{H^s} := ||(1 + |\xi|^2)^{\frac{s}{2}}\hat{f}(\xi)||_{L^2}.$$

等价定义:

$$J^s f := (I - \Delta)^{\frac{s}{2}} f = (1 + |\xi|^2)^{\frac{s}{2}}\hat{f}.$$

记

$$H^s(\mathbb{R}^n) := \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) :\ ||f||_{H^s} < \infty\} = H^s.$$

其上指定内积

$$\langle f, g\rangle_{H^s} := \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |\xi|^2)^s \widehat{f(\xi)}\widehat{\overline{g}(\xi)} d\xi.$$

## 9.1 $H^s$ 的性质

- $H^s$ 是 Hilbert 空间.
- 若 $s > r$, 则 $H^s \hookrightarrow H^r$.

[1] 证明 (必须) 不需要使用稠密性

[2] Loukas Grafakos. Classical Fourier Analysis. 2.2.4.

## 9.2 稠密性

对任意 $s \in \mathbb{R}$,

- $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset H^s(\mathbb{R}^n)$ 且稠密. 进一步, 有 $\mathcal{S} \hookrightarrow H^s$, $H^s \hookrightarrow \mathcal{S}'$.
- $C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subset H^s(\mathbb{R}^n)$ 且稠密.

## 9.3 不等式和工具

一个基础的事实是: $(1+|\xi|^2)^{\frac{s}{2}} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ 当且仅当 $s < -\frac{n}{2}$.

- Kato-Ponce Inequality-1[3]: 对 $s > n/2$, $f, g \in H^s$, 则 $fg \in H^s$ 且

$$||fg||_{H^s} \leq C_n ||f||_{H^s} ||g||_{H^s}.$$

- Kato-Ponce Inequality-2: 对 $r > 0$, $s > n/2$, $f \in H^{r+s}$, $g \in H^r$,

$$||fg||_{H^r} \leq \widetilde{C}_n ||f||_{H^{r+s}} ||g||_{H^r}.$$

- Sobolev Lemma: 对 $s > \frac{n}{2}$, $u \in H^s$, 有

$$||u||_{L^\infty} \leq K_n ||u||_{H^s}$$

证明. 因为 $2s > n$, $||(1+|x|^2)^{-s/2}||_{L^2} < \infty$, 且 $\hat{u} \in L^1$, 故

$$||\hat{u}||_{L^1} \leq \|u\|_{H^s}^2 ||(1+|x|^2)^{-s/2}||_{L^2} \leq K\|u\|_{H^s}^2.$$

由 Fourier 逆变换公式,

$$|u(x)| \leq \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} |e^{ix\cdot\xi}||\hat{u}(\xi)| d\xi \leq K\|u\|_{H^s}^2$$

□

上述不等式中常数均只依赖于维数 $n$.

## 9.4 嵌入

- $H^s \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^n)$, $s \in [0, \frac{n}{2})$, $\frac{1}{2} \geq \frac{1}{p} \geq \frac{1}{2} - \frac{s}{n}$.
- $H^s \hookrightarrow L^p(\mathbb{R}^n)$, $s = \frac{n}{2}$, $p \in [2, \infty)$.
- $H^s \hookrightarrow L^\infty(\mathbb{R}^n)$, $s > \frac{n}{2}$. (Sobolev's Lemma)
- $H^s \hookrightarrow C^{k,\alpha}$, $s = k + \alpha + \frac{n}{2}$, $\alpha \geq 0$. 反之, 倘 $H^s \hookrightarrow C^k$, 则 $s > k + \frac{n}{2}$.[4]

[3] Kato, T., Ponce, G.: Commutator estimates and the Euler and Navier-Stokes equations. Commun. Pure Appl. Math. 41, 891-907 (1988).

[4] G. B. Folland. Introduction to Partial Differential Equations. pp. 195.

# 10 $C_0$ 半群

半群理论肇始于发展方程 (Evolution equations) 的研究: 含时 PDE, 设其可以写成如下形式:

$$\partial_t u = Au, \quad u(0) = u_0, \quad t \geq 0.$$

- 如果等式左端是关于 $t$ 的高阶导数, 则作变换

$$V = (v_0, v_1, \cdots, v_n) := (u, \partial_t u, \cdots, \partial_t^n u)$$

可化为关于 $V$ 的 ODE 组. 比如 KG 方程的一阶形式:

$$\partial_t U = LU + F(U) \quad \text{in } \Omega \times (0, T]. \tag{10.1}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} u \\ \partial_t u \end{pmatrix}, \quad U(0) = U^0 = \begin{pmatrix} u^0 \\ v^0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad F(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ f(u) \end{pmatrix},$$

且

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \Delta & 0 \end{pmatrix} : [H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)] \times H^1(\Omega) \to H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega).$$

若 $A$ 是有界线性算子, 则有 $u(t) = e^{tA} u_0$. 问题是当 $A$ 无界时 (一般都是如此), 是否还能把解抽象地写为 $u(t) = T(t) u_0$ (这样写意在表明解对初值的依赖).

$C_0$ 半群, 意指一族复 Banach 空间 $X$ 上的有界线性算子 $\{T(t)\}_{t \geq 0}$, 满足

- $T(0) = I$,
- $T(t) \circ T(s) = T(s) \circ T(t) = T(t+s)$,
- 对任意 $x \in X$, 映射 $t \mapsto T(t)x$ 连续.

$C_0$ 半群的性质:

- 存在 $M \geq 1$ 和 $\omega \geq 0$ 使得
$$||T(t)|| \leq M e^{\omega t}, \ \forall t \in [0, \infty).$$
- 无穷小生成元唯一决定 $C_0$ 半群. 即如果无穷小生成元相同, 则半群相等.
- 无穷小生成元是稠定 ($D(A)$ 在 $X$ 中稠密) 闭算子.

## 10.1 Hille-Yosida 定理

预解集 $\rho(A)$: 设 $A : D(A) \to X$ 是线性闭算子.

$$\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{R} : \ \lambda I - A \text{ is bijective}\}.$$

预解式 (Resolvent): $R(\lambda, A) := (\lambda I - A)^{-1}$.
预解式的性质:

- $R(\lambda, A) : D(A) \to X$ 是有界线性算子.
- 对 $u \in D(A)$, $AR(\lambda, A)u = R(\lambda, A)Au$,

- $R(\lambda, A)R(\mu, A) = R(\mu, A)R(\lambda, A)$,
- 对于压缩半群 $T(t)$, 其预解式就是半群的 Laplace 变换, 即 $(0, \infty) \subset \rho(A)$ 且

$$R(\lambda, A)u = \int_0^\infty e^{-\lambda t} T(t)u, \ \forall u \in D(A).$$

**定理 10.1** (Hille-Yosida)**.** *设 $C_0$ 半群 $T(t)$ 满足 $||T(t)|| \leq e^{\omega t}(\omega \geq 0)$, 则线性算子 $A$ 是 $T(t)$ 的无穷小生成元当且仅当*

- *$A$ 是稠定闭算子,*
- *$\{\lambda \in \mathbb{C} : \ \mathrm{Im}\,\lambda = 0, \ \lambda > \omega\} \subset \rho(A)$,*
- *$||R(\lambda, A)|| \leq \frac{1}{\lambda - \omega}$.*

# 11 Laplacian: $\Delta$

对 $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, 有

$$\widehat{(-\Delta f)}(\xi) = |\xi|^2 \widehat{f(\xi)},$$

依此定义

$$(-\Delta)^{\frac{s}{2}} f(x) := (|\xi|^s \widehat{f}(\xi))^\vee(x).$$

- Diffusion semigroups: 由 $\Delta$ 生成的半群, 定义在 $L^p(\mathbb{R}^n)$ 上,

$$e^{t\Delta} f(x) := ((4\pi t)^{-d/2} e^{-|x|^2/(4t)}) * f(x).$$

- Schrodinger semigroups: 由 $i\Delta$ 生成的半群, $f \in H^s$, $D(i\Delta) = H^{s+2}$,

$$e^{it\Delta} f(x) := (e^{-it|\xi|} \widehat{f}(\xi))^\vee(x).$$