arXiv:2302.02743v2 [math.NA] 9 Oct 2023

有理函数消解奇点

ASTRID HERREMANS *、DAAN HUYBRECHS *、和 LLOYD N. TREFETHEN †

摘要。 本文介绍了关于含奇点函数的有理逼近结果。我们在 Trefethen 及其合作者最近提出的“闪电方法”基础上进一步开展研究。该方法通过将极点指数级地聚集在奇点附近来实现逼近。我们通过在闪电逼近集上增添低次多项式基，或增添极点向无穷远聚集的部分分式，获得了这些结果，从而能够稳健地逼近函数的光滑部分。这显著提高了可达到的精度，也提升了数值方案的收敛速度。对于 x^α 在 $[0,1]$, 上的逼近，现仅通过最小二乘拟合便能达到 Stahl 于 1993 年证明的最优收敛速度。

关键词。 有理函数、逼近理论、复分析、最小二乘、病态-
c条件数

MSC 分类号。41A20, 65E05, 65F20

1. 引言。近年来，人们提出了针对具有分支点奇点的解析函数的“闪电逼近” [7] 。通过具有预先指定极点的有理函数对该函数进行逼近，从而实现根指数收敛。计算有理逼近是一个非线性问题，而预先固定极点可将其线性化，因此可通过矩阵最小二乘计算求得逼近函数。这一数值方案促成了二维拉普拉斯方程和亥姆霍兹方程 [3, 6, 15]的“闪电求解器”的开发，近期还用于双调和方程，具体而言，用于二维斯托克斯流 [5]。这些偏微分方程的解在计算区域的角点附近表现出奇异行为。通过用解析函数逼近这些奇点，可以有效地对其进行解析。

一般而言，可以将定义域 E 上函数 f 的有理逼近 r 表示如下:

$$f(z) \approx r(z) = \frac{p(z)}{q(z)} = \sum_{j=1}^{N_1} \frac{a_j}{z - p_j} + \sum_{j=0}^{N_2} b_j z^j, \tag{1.1}$$

假设 r 的有限极点均为简单极点。有理函数 r 有 N_1 个有限极点 p_j 和 N_2 个无穷远极点，这些极点可由一个次数为 N_2的多项式$b(z) = \sum_{j=0}^{N_2} b_j z^j$ 描述。将 r 表示为部分分式，即可明确写出这一点。 r 的总次数为 $N = N_1 + N_2$。有理函数逼近克服了多项式逼近的两个重要问题。一方面，对于在 E上含有奇点的函数，有理函数能够实现根指数收敛，而多项式逼近则只能实现代数收敛。另一方面，有理函数适用于在无界域上逼近函数。

闪电方法 [7]旨在高效逼近在已知位置 $\{z_i\}$具有分支点奇点的函数。为此，通过预先固定 r 的极点，将有理逼近问题 (1.1) 线性化。具体而言，固定一

*鲁汶大学计算机科学系，比利时鲁汶 3001（astrid.herremans@kuleuven.be, daan.huybrechs@kuleuven.be）。
†牛津大学数学研究所，英国牛津 OX2 6GG（tre-fethen@maths.ox.ac.uk）。

列有限个简单极点，使其在每个奇点附近指数聚集，以逼近局部奇异行为。因此，N_1 有限极点 $\{p_j\}$ 可以划分为若干子集，每个子集分别对应于 f的一个奇点 $\{z_i\}$。此外，还可以将一个多项式 $b(z)$ 加入逼近集。随后对该问题进行过采样，并求解最小二乘系统，以确定离散最佳逼近的系数 a_j 和 b_j。采样点数量至少按极点数量进行线性过采样，并使采样点向奇点指数聚集。

针对有限个“闪电极点”的最优分布和收敛行为，已有深入研究。对于任何指数聚集分布，只要其按 $n \to \infty$ 的方式随 $n^{-1/2}$ 缩放（其中 n 是聚集到某个奇点的极点数量），就能保证有理逼近函数达到根指数收敛 [7]。因此，距离奇点最近的极点满足 $\mathcal{O}(\exp(-\sigma\sqrt{n}))$。参数 σ 控制极点之间的间距，因而决定它们趋近奇点的速度。[16] 的进一步研究表明，与“均匀”指数聚集相比，“渐缩”指数聚集可使收敛速度加倍。我们将仅使用有限个指数聚集极点的逼近称为“闪电逼近”。除非另有明确说明，我们讨论的闪电极点均按渐缩方式分布。

相比之下，本文关注的是逼近问题中光滑的部分，而这部分此前尚未得到广泛研究。我们考察加入 N_2 无穷远极点的影响，即在逼近集合中加入次数为 N_2 的多项式。使用 N_1 个闪电极点和 $N_2 = \mathcal{O}$个（$\sqrt{N_1}$）无穷远极点进行的逼近,—称为“闪电 $+$ 多项式逼近”。

1.1. 主要结果。三十年来，人们已知，在 $[0,1]$ 上对 x^α 进行的极小极大有理逼近以 $\mathcal{O}(\exp(-2\pi\sqrt{\alpha N}))$ [9]的速率收敛。本文证明，通过闪电 $+$ 多项式逼近，即预先指定极点并求解一个最小二乘问题，可以达到这一最优速率。我们针对 $\alpha = 1/2$ 推导了这一结果（第2节），并通过数值计算展示了其他 α 取值下的情况（第3节）。

我们证明，加入这一低次多项式项对数值稳定性也至关重要。加入该项后，系数向量的大小适中，最小二乘拟合能够迅速计算至接近机器精度。若不加入该项，系数向量会呈指数增长，且收敛会停滞在低得多的精度水平（第4节）。

对于这个模型问题的最优收敛速率，我们证明使用渐缩极点时，聚集参数应为 $\sigma = 2\pi/\sqrt{\alpha}$；对于 $\alpha = 1/2$，该值为 $2\pi\sqrt{2} \approx 8.9$。然而，通过分析与带角区域中的偏微分方程相关的模型问题，我们解释了为什么较小的值 $\sigma = 4$ 在许多情况下被证明是有效的（第5节）。

不使用次数为 $\mathcal{O}$（$\sqrt{N}$）的多项式项（即无穷远极点），而是可以通过增加 $\mathcal{O}$（$\sqrt{N}$）个“在无穷远处渐缩”的有限极点，达到极小极大收敛速率。第2节还介绍了此类大极点在逼近 $\sqrt{x}$ 于 $[0,1]$，时的渐近行为结果，但我们认为，简单的多项式项可能更适用于实际应用。

2. 逼近 $\sqrt{x}$ 于 $[0,1]$。</style}有理逼近 $\sqrt{x}$ 具有历史意义 [8, 10, 18],，同时也是其他分支点奇点的参考情形。请注意，通过代换 $x = u^2$，在 $[0,1]$ 上逼近 $\sqrt{x}$ 等价于在 $[-1,1]$ 上逼近 $|u|$。

2.1. 与先前结果的比较。关于在 $[0,1]$ 上对 $\sqrt{x}$ 进行有理逼近，且预先指定指数聚集

在 $[-C,0]$ 上的极点，最新结果见 [16], ；其中对均匀指数聚集极点进行了比较，按（1.1）中的记号，即:

$$p_j = -C\exp(-\sigma j/\sqrt{N_1}), \qquad 0 \le j \le N_1 - 1, \tag{2.1}$$

以及渐缩指数聚集极点:

$$p_j = -C\exp(-\sigma(\sqrt{N_1} - \sqrt{j})), \qquad 1 \le j \le N_1. \tag{2.2}$$

对于这两种聚集方式，最小极点的大小为 $\mathcal{O}(\exp(-\sigma\sqrt{N_1}))$。逼近集中还包含一个常数项。

在 [16]、$\sigma = \pi$ 和 $\sigma = \sqrt{2\pi}$ 中，分别采用均匀聚集和渐缩聚集。这里，我们通过在（2.1）和（2.2）中设置 $C = 2$，对这些极点进行缩放。随后，将这些结果与闪电 $+$ 多项式逼近进行比较；后者通过加入次数为 $N_2 = \text{ceil}(1.3\sqrt{N_1})$ 的多项式构造而成。1.3 的精确取值并不重要，即使将其增大，也不会对结果产生太大影响。此外，与 [16], 相比，参数 σ 增大了 2 倍，从而得到更稀疏的均匀聚集和渐缩聚集，其 $\sigma = 2\pi$ 和 $2\sqrt{2\pi}$ 分别为相应取值。图 1 比较了不同有理逼近的误差随总次数 N 变化的情况。注意，对于闪电逼近，$N = N_1$；而对于闪电 $+$ 多项式逼近，则有 $N = N_1 + N_2$。该图还将这些逼近方法与最佳有理逼近进行了比较，后者基于求解具有自由极点的非线性逼近问题。Vyacheslavov 研究了这一问题，并证明了在 $[0,1]$ 上对 $\sqrt{x}$ 的最佳有理逼近以 $\mathcal{O}(\exp(-\pi\sqrt{2N}))$ [18] 的形式收敛。

从图 1 可以看出，正如 [16] 中所述，渐缩使闪电逼近和闪电 +多项式逼近的收敛速度均提高了 2 倍。不过，添加多项式项并增大聚集参数 σ 的影响更大。对于均匀聚集和渐缩聚集，收敛速度均提高了约 3 倍。因此，渐缩闪电 + 多项式逼近的渐近收敛速度与最佳有理逼近相同！

采样后得到的系统矩阵严重病态，但仍能获得精确结果。第 4 节将对此现象作出解释。请注意，与闪电逼近相比，闪电 +多项式逼近的收敛水平更接近机器精度。这一现象与系数向量的范数有关。

2.2. 闪电的构造 + 多项式逼近。本节将说明如何构造在 $[0,1]$ 上的 $\sqrt{x}$ 闪电 + 多项式逼近，使其以最佳有理逼近的速度收敛。然而在实践中，通常通过数值计算离散最佳逼近来获得精确逼近。第 4 节将说明，精确逼近的存在如何帮助我们理解数值方法的精度。此构造带来了一些见解，可用于考察第 3 节和第 5 节中更一般的逼近问题。

该构造受 [14, 第 25], 章中所述有理逼近的启发，其源自 [12]。这种逼近从 $\sqrt{x}$ 的如下积分表示出发：

$$\sqrt{x} = \frac{2x}{\pi}\int_0^\infty \frac{1}{t^2+x}dt = \frac{2x}{\pi}\int_{-\infty}^\infty \frac{e^s}{e^{2s}+x}ds,$$

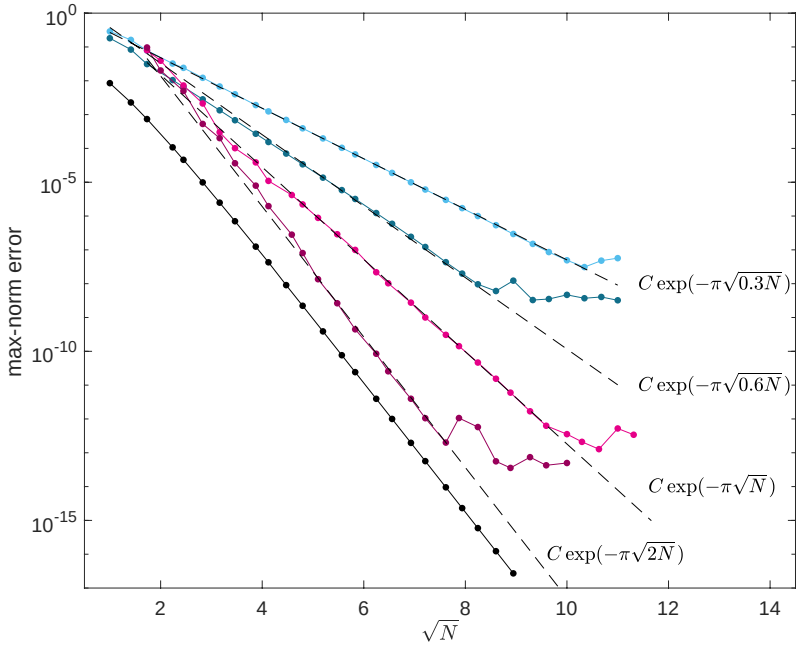

FIG. 1. *Max-norm errors of the lightning approximations and rational minimax approximation for $\sqrt{x}$ on $[0,1]$. The convergence rates for the upper two curves are empirical.*

其中 $t=e^s$。可以使用求积公式对该积分进行逼近，从而得到一个关于 x 的有理函数，用来逼近 $\sqrt{x}$。在 [14, 第 25] 章中，这是通过将积分截断于 $\pm T$来实现的：

$$\sqrt{x} \approx \frac{2x}{\pi}\int_{-T}^{+T} \frac{e^s}{e^{2s}+x}ds, \tag{2.3}$$

随后使用梯形法则对积分进行离散化。现在，我们通过引入代换 $s+T=\sqrt{u}$，调整这一构造，从而得到一种具有渐缩极点的逼近：

$$\sqrt{x} \approx \frac{2x}{\pi}\int_{0}^{4T^2} \frac{1}{2\sqrt{u}}\left(\frac{e^{\sqrt{u}-T}}{e^{2(\sqrt{u}-T)}+x}\right)du. \tag{2.4}$$

在 N_t 个求积点上使用步长为 h 的梯形法则进行离散化，

$$u=jh, \qquad 1\le j\le N_t,$$

其中 $T=\sqrt{N_t h/4}$，从而得到对 $\sqrt{x}$ 的以下有理逼近：

$$\sqrt{x} \approx r_t(x) = \frac{xh}{\pi}\sum_{j=1}^{N_t}\frac{1}{\sqrt{jh}}\left(\frac{e^{\sqrt{jh}-\sqrt{N_t h/4}}}{e^{2\sqrt{jh}-2\sqrt{N_t h/4}}+x}\right). \tag{2.5}$$

这种有理逼近的误差由两部分组成：一是截断误差，源于式 (2.3) 中的截断；二是离散化误差，源于用梯形法则逼近式 (2.4) 中的截断积分。截断误差的大小为

$\mathcal{O}(\exp(-T)) = \mathcal{O}(\exp(-\sqrt{N_t h/4}))$。相比之下，离散化误差会随着 h 的增大而增大。理想情况下，这两种误差应达到平衡。由下述定理可知，当步长为 $h = 2\pi^2$ 时，正好满足这一条件。

THEOREM 2.1. </style}有理逼近 (2.5) 在 $h = 2\pi^2$ 下收敛到 $\sqrt{x}$，其逼近误差为：

$$|r_t(x) - \sqrt{x}| < 20\, e^{-\sqrt{N_t h/4}} = 20\, e^{-\pi\sqrt{N_t/2}}$$

当 $N_t \to \infty$ 时，对于 $x \in [0,1]$ 一致收敛，假设猜想 A.7 中提出的界成立。

证明。见附录 A，其中基于将 $r_t(x) - \sqrt{x}$ 表示为围道积分给出了一个论证。 □

(2.5) 的大极点可以通过低次数多项式以指数收敛的方式逼近。由此得到一种闪电多项式逼近，其结果接近梯形法则逼近，但次数实际上低约 4 倍。

LEMMA 2.2. </style}存在系数，满足，以及一个次数为 $(\sqrt{N_1})$ 的多项式 $b(x)$，使得具有渐缩闪电极点 (2.2) 且满足 $\sigma = 2\sqrt{h}$ 的闪电多项式逼近 $+\, r(x)$ (1.1) 满足：

$$|r_t(x) - r(x)| = \mathcal{O}\left(e^{-\sqrt{N_t h/4}}\right)$$

如 $N_t \to \infty$，对 $x \in [0,1]$ 一致成立。也就是说，误差的量级与定理 2.1 中所涉及的逼近误差相同。

证明。将 (2.5) 写成部分分式形式，同时代入 $N_t = 4N_1$：

$$r_t(x) = \sum_{j=1}^{4N_1} \frac{a_j}{x - p_j} + C.$$

经过一些计算，可确定极点、留数和常数项：

$$\begin{aligned}
&\text{poles:} && p_j = -\exp(-2\sqrt{h}(\sqrt{N_1} - \sqrt{j})), && 1 \le j \le 4N_1, \\
&\text{residues:} && a_j = \frac{\sqrt{h}}{\pi}\, p_j \sqrt{\frac{|p_j|}{j}}, && 1 \le j \le 4N_1, \\
&\text{constant term:} && C = \frac{\sqrt{h}}{\pi} \sum_{j=1}^{4N_1} \sqrt{\frac{|p_j|}{j}}.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

这个有理逼近的前 N_1 个极点恰好是满足 $\sigma = 2\sqrt{h}$ 的渐缩闪电极点 (2.2)。其余 $3N_1$ 个极点从 $|p_j| > 1$ 的意义上说是“大”的。这些大极点和常数项可以用次数为 N_2 的多项式 $b(x)$ 逼近：

$$b(x) = \sum_{j=0}^{N_2} b_j x^j \approx \sum_{j=N_1+1}^{4N_1} \frac{a_j}{x - p_j} + C. \tag{2.7}$$

由于右端项在一个定义域内解析，且 $[0,1]$ 位于其内部，因此多项式逼近可能呈指数收敛 [14, 第 8]章。收敛速率

取决于将问题变换到区间 $[-1,1]$ 后，函数在哪个伯恩斯坦椭圆 E_ρ 内解析。该区域由最近极点的位置决定，即 $p_{N_1+1} = -\exp(-2\sqrt{h}(\sqrt{N_1}-\sqrt{N_1+1})) < -1$。极点位于 -1 时，函数在伯恩斯坦椭圆 E_ρ 内解析，且 $\rho = 3+2\sqrt{2}$。因此可以得出，存在一个多项式 $b(x)$，其逼近误差为 $\mathcal{O}(\rho^{-N_2}) = \mathcal{O}(\exp(-N_2 \log \rho))$，其中 $\rho > 3+2\sqrt{2}$。

总之，存在一种具有所提形式 (1.1) 的闪电 + 多项式逼近 r，其中 a_j、p_j 和 $b(x)$ 如上所定义。若取

$$N_2 \geq \sqrt{N_t h/4}/\log\rho = \mathcal{O}(\sqrt{N_1}),$$

$|r_t(x) - r(x)| = \mathcal{O}(\exp(-\sqrt{N_t h/4}))$ 成立。 ∎

请注意，式 (2.4) 中引入的变量代换 $s+T = \sqrt{u}$ 取决于截断变量 T。因此，闪电极点的渐缩分布 (2.6) 与数值截断内在相关。这种联系以及截断误差的概念，也出现在 Stahl [10] 以及 Trefethen 和合作者 [16] 的分析中。

现在可以断言，具有 $\sigma = 2\sqrt{2\pi}$ 的闪电 +多项式逼近收敛到 $\sqrt{x}$，其速率为最佳有理逼近的速率。

THEOREM 2.3. 存在系数 $\{a_j\}_{j=1}^{N_1}$ 和一个次数为$N_2 = \mathcal{O}(\sqrt{N_1})$ 的多项式 $b(x)$，使得次数为 N 的闪电 + 多项式逼近 $r(x)(1.1)$ 具有渐缩闪电极点 (2.2)，且

$$\sigma = 2\sqrt{2\pi} \tag{2.8}$$

满足：

$$|r(x) - \sqrt{x}| = \mathcal{O}\left(e^{-\pi\sqrt{2N}}\right)$$

当 $N \to \infty$ 时，对于 $x \in [0,1]$ 一致成立，条件与定理 2.1 相同。

证明。 根据定理 2.1 和引理 2.2，可知存在一个形如所述的闪电+ 多项式逼近 r，满足：

$$|r(x) - \sqrt{x}| = \mathcal{O}\left(e^{-\pi\sqrt{2N_1}}\right).$$

此外， r 的总次数为 $N = N_1 + N_2 = \mathcal{O}(N_1)$，由此得到所给出的收敛行为。

∎

2.3. 两端渐缩。 除了低次数多项式（即无穷远极点）之外，还可以加入额外的“向无穷远聚集”的有限极点。Stahl 运用位势理论和渐近分析 [10] 研究了 $[-1,1]$ 上对 $|x|$ 的最佳有理逼近，其所有极点都是有限的。如前所述，注意到该问题等价于在 $[0,1]$ 上对 $\sqrt{x}$ 进行逼近。远离 0 的极点的渐近分布由 [10, 定理 2.2]明确给出。根据这些结果，我们可以明确得到最大极点本身的渐近估计。

THEOREM 2.4. 设 $p_{j,N}$, $j = 1, \ldots, N$ 为 $\sqrt{x}$ 在 $[0,1]$, 上的 N 次最佳有理逼近的极点，并按绝对值递增排列。对于固定的 $k \geq 0$，最大的几个极点满足

$$p_{N-k,N} \sim -\frac{8N}{(2k+1)^2\pi^2}, \qquad N \to \infty. \tag{2.9}$$

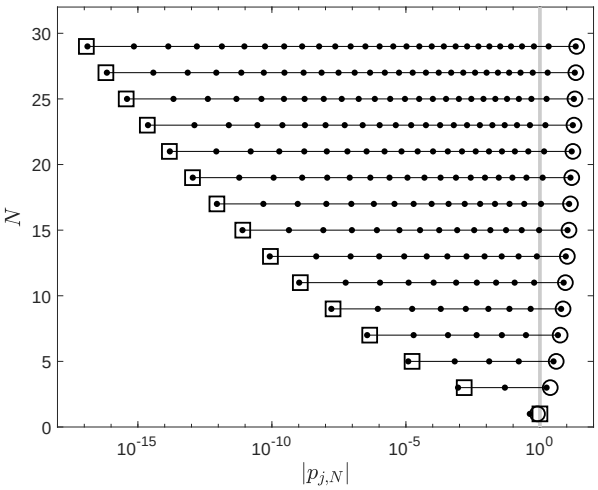

FIG. 2. *for various N. Circles: $8N/\pi^2$ 2 9 squares: $-2\sqrt{2\pi}\sqrt{N-1}$ 2 2* (.) exp(( )) (.) *. The grey line at $|p|=1$ emphasizes how few "large poles" there are with $|p|>1$.*

特别地，最大的极点满足 $p_{N,N}\sim-\frac{8N}{\pi^2}$。 —

证明。 参见附录 B。 □

文中给出了 [10], 中小极点的界，但未确定它们的分布。后续参考文献 [11] 中关于 x^α 的结果，不如 [10, 定理 2.2] 中关于 $\sqrt{x}$ 的结果具体。不过，从 [10], 中仍能学到更多内容，例如可以估算模大于 1 的极点数量。

THEOREM 2.5. 满足 $|p_{j,N}|>1$ 的极点数量 $p_{j,N}$ 的尺度变化类似于 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$。特别是，它们的总数约为 $0.4\sqrt{N}$。

证明。 参见附录 C。 □

图 2 展示了 $\sqrt{x}$ 在 $[0,1]$ 上的最佳逼近的极点。我们使用 Chebfun 的极小极大算法，计算了 $|x|$ 在 $[-1,1]$ 上的次数为 $2N$ 的最佳有理逼近，并将所得极点平方，从而得到这些极点。可以清楚地辨认出渐缩闪电极点。大极点也呈渐缩分布，即使在这个对数尺度下，随着我们趋近无穷远处的奇点，它们之间的间距也会增大。注意，尽管极小极大逼近有 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ 个模大于 1 的有限极点，但如第 2.2 小节所述，将它们替换为位于 $-\infty$ 的极点后，仍可得到相同的渐近收敛速率。

3. x^α 和 x^α 对数 x 在 $[0,1]$ 上的逼近。 我们不知道存在何种 x^α 的积分表示，能够导出类似的有理逼近。然而，第 2 节讨论的原理适用于一般分支点奇点的逼近。本节将数值讨论在 $[0,1]$ 上对 x^α （ $\alpha>0$ 为非整数时）以及 $x^\alpha\log(x)$（ $\alpha>0$ 时）的逼近。

为此，请看图 3，其中展示了使用 N_1 个闪电极点和 N_2 个无穷远极点对 $x^{\pi/10}$ 在 $[0,1]$ 上进行最小二乘逼近的误差。对 $[-1,0]$ 使用了具有 $\sigma=2\sqrt{10\pi}$ 的渐缩指数聚集 (2.2)。 x 轴上显示的是聚集极点数量 $\sqrt{N_1}$ 的平方根。 y 轴显示附加多项式的次数。可以观察到，在 N 中最快收敛出现在

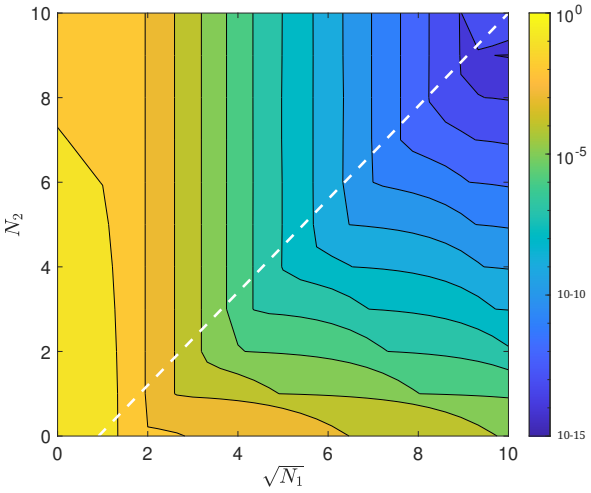

FIG. 3 *Max-norm error of the tapered lightning + polynomial approximation of* $x^{\pi/10}$ *on* $[0,1]$ *。using* $\sigma = 2\sqrt{10\pi}$. *The dashed white line marks* $N_2 = 1.1\sqrt{N_1} - 1$ *and illustrates the regime of fastest convergence in* N.

$N_2 \approx 1.1\sqrt{N_1} - 1$。这表明，添加次数为 $N_2 = \mathcal{O}(\sqrt{N_1})$ 的多项式仍然是最优的。添加次数更高的多项式并不能改善误差。

图 4 展示了 $x^{\pi/10}$ 在 $[0,1]$上的闪电逼近误差随聚集参数 σ变化的情况。我们在 $[-1,0]$上使用 10 个带渐缩闪电极点的部分分式（2.2），并加入常数项，还可选择加入一个三次多项式。对于闪电 + 多项式逼近，该曲线清晰地展示了第 2.2 小节推导中指出的误差。当极点间距较小时，误差主要由截断误差决定，而截断误差与最小极点有关。在这种情况下，闪电逼近的误差几乎完全相同。闪电 + 多项式逼近呈现出明显的 V 形曲线，表明通过优化聚集参数 σ可以显著加快计算速度。

由于我们不知道 x^α 的积分表示，无法据此推导类似的有理逼近，因此无法区分“离散化误差”，也无法像第 2.2 小节那样进行类似的误差分析。不过，实验发现，采用最小二乘法的渐缩闪电多项式逼近 $+ x^\alpha$ 时，对于间距参数 σ的某个最优值，其收敛速度同样达到极小极大逼近的收敛速度。通过令截断误差（与最小极点的大小有关）等于极小极大误差，可以推导出 σ 的这个最优值。截断误差的概念以及将其与最佳逼近误差相等的思路，源自 Stahl [9, 10, 11]的工作：

$$\text{Accuracy:} \qquad \varepsilon^\alpha \approx \exp(-\pi\sqrt{4\alpha N}), \tag{3.1}$$

其中 ε 是最小极点的大小。对于渐缩聚类（2.2），我们有$\varepsilon \approx \exp(-\sigma\sqrt{N})$。因此，假设该逼近达到最佳收敛速度，可以推断出最优聚类参数 $\sigma \approx 2\pi/\sqrt{\alpha}$。数值实验表明，对于$\sigma = 2\pi/\sqrt{\alpha}$，确实能够达到最佳逼近速度。

CONJECTURE 3.1. 存在系数 $\{a_j\}_{j=1}^{N_1}$ 和多项式 $b(x)$，使得

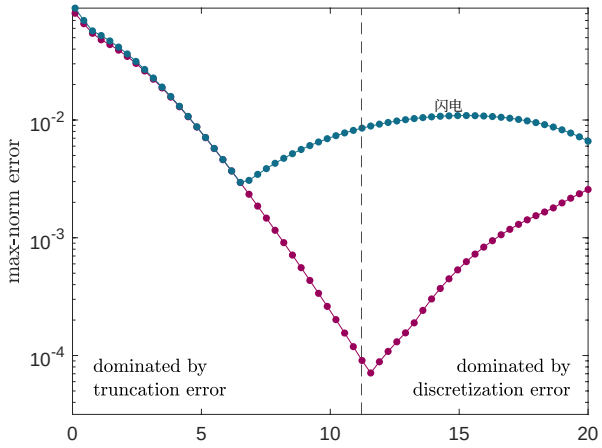

FIG. 4。 *Max-norm error of the tapered lightning approximations as a function of the clustering parameter σ for the approximation of $x^{\pi/10}$ on $[0,1]$. The dashed line shows the conjectured result* $\sigma = 2\pi/\sqrt{\alpha} = 2\sqrt{10\pi}$ 3 2 (

— ——

. *The error regimes for the lightning + polynomial approximation follow*）。
from the derivation of subsection 2 2.

$N_2 = \mathcal{O}(\sqrt{N_1})$，闪电 + 多项式逼近 $r(x)$ (1.1) 具有渐缩闪电极点 (2.2)，其

$$\sigma = 2\pi/\sqrt{\alpha}, \tag{3.2}$$

满足：

$$|r(x) - x^{\alpha}| = \mathcal{O}\left(e^{-2\pi\sqrt{\alpha N}}\right)$$

当 $N \to \infty$ 时，对 $x \in [0,1]$ 一致成立。

图 4 中所示 V 形曲线的极小值可以通过数值方法估算。图 5 显示了逼近 x^{α} 在 $[0,1]$，上的 σ 的这一经验最优值，它是奇点类型 α 的函数。这里使用了 10 个渐缩闪电极点和一个 10 次多项式。图中显示，经验最优聚类参数 σ 近似等于猜测值 (3.2)。类似实验表明，对于类型为 $x^{\alpha}\log x$ ($\alpha > 0$) 的对数奇点，最优聚类参数 σ 的表现类似。

4. 病态性与系数大小。闪电方法使用最小二乘拟合来求得精确的有理逼近函数：

$$A\boldsymbol{c} \approx \boldsymbol{f}, \qquad A_{ij} = \phi_j(t_i),\ \boldsymbol{f}_i = f(t_i), \tag{4.1}$$

其中，$\{t_i\}_{i=1}^{M}$ 是定义域 Ω 中的采样点，逼近集 $\{\phi_j\}_{j=0}^{N}$由 N_1 个含有闪电极点 $\{\frac{p_j}{z-p_j}\}_{j=1}^{N_1}$ 的部分分式以及一个次数为 N_2的多项式基组成。请注意，闪电基函数经过缩放，使其在 $[0,1]$上的最大范数为 1。我们发现，最小二乘系统 (4.1) 通常具有严重的病态性。不过，使用线性过采样和标准正则化，仍能得到精确的逼近。

这一数值现象与逼近集中的冗余有关，近期在 $[1,2]$ 中对此进行了研究。这些工作的主要结论是：如果对基函数进行足够精细的采样，并且以 $[1,2]$ 级别的有效正则化求解最小二乘问题

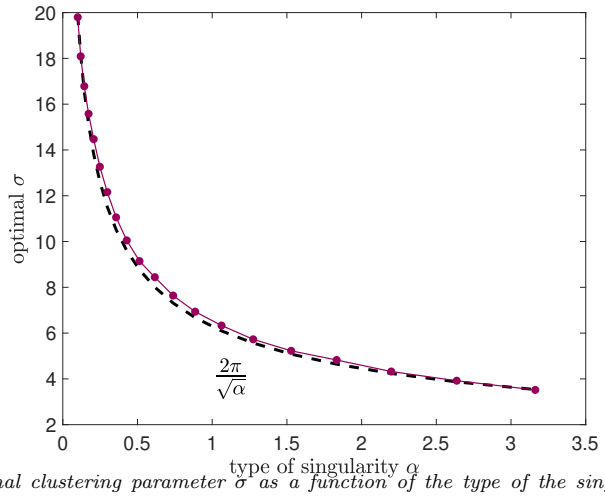

Fig. 5. *Optimal clustering parameter σ as a function of the type of the singularity for the approximation of x^α on $[0,1]$. The dots display the value for each σ that minimizes the max-norm error of the lightning + polynomial approximation using $N_1 = N_2 = 10$. The dashed line shows the conjectured value $\frac{2\pi}{\sqrt{\alpha}}$.*

，那么计算得到的拟合其残差超出数学上的最小残差，其超出量主要由 $\epsilon \|\mathbf{c}\|_2$ 阶的项所支配，其中 $\|\mathbf{c}\|_2$ 是展开系数向量的 2-范数。对于在 [2,Theorem 1.3] 中通过截断奇异值分解（TSVD）进行的正则化，该理论可精确表述为：

$$\left\|f - P^{\epsilon}_{M,N} f\right\|_{\mathcal{H}} \leq \inf_{\mathbf{c}\in\mathbb{C}^{N+1}} \left(\left\| f - \sum_{j=0}^{N} c_j \phi_j \right\|_{\mathcal{H}} + \kappa^{\epsilon}_{M,N} \|A\mathbf{c} - \mathbf{f}\|_2 + \epsilon \lambda^{\epsilon}_{M,N} \|\mathbf{c}\|_2 \right) \tag{4.2}$$

其中$\kappa^{\epsilon}_{M,N}$ 和 $\lambda^{\epsilon}_{M,N}$ 是系数；如果采样点足够密集，可以证明它们不会很大。在闪电拉普拉斯代码中 [13], ，采用 3 倍的线性过采样，采样点以与闪电极点类似的方式指数聚集。为简单起见，本文中针对 $[0,1]$ 的数值实验采用固定的指数渐变网格（ logspace(-16,0,2000)）。

理论表明，除了检查误差之外，检查系数向量的范数也很有意义。第2.2小节中的梯形法则构造表明，存在一种准确的闪电 +多项式逼近$\sqrt{x}$ ，且其系数有界。对于分支点奇点的逼近，通常也是如此：将闪电极点与足够数量的光滑基函数结合即可。当光滑基函数对应的系数也有界时，由此可知，尽管系统矩阵具有病态性，仍能通过最小二乘拟合找到准确的逼近。在闪电拉普拉斯代码 [13], 中，采用了通过 Vandermonde 与 Arnoldi 算法 [4]构造的离散正交化多项式基。对于本文中涉及有界区间的模型问题，我们可以使用缩放到该区间上的正交多项式基。

在图 6 中，对 $\sqrt{x}$ 在 $[0,1]$上的渐缩闪电逼近，比较了其收敛行为以及系数向量的 2-范数。

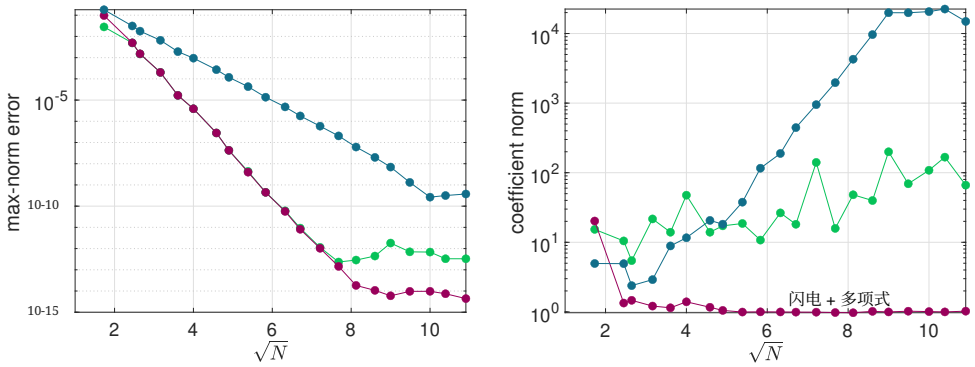

FIG. 6 *Comparison of the lightning approximations of* $\sqrt{x}$ *on* $[0,1]$. *The lightning poles are . ,. augmented with a polynomial term or poles clustering towards infinity as described in subsection* 2 2. ,

Left: max-norm error right: 2*-norm of the coefficient vector.*

闪电极点通过添加多项式项或向无穷聚集的极点得到扩展，具体讨论见第 2.3 小节。多项式的次数以及大极点的数量均固定为 $N_2 = \text{ceil}(1.3\sqrt{N_1})$。向无穷聚集的极点按照与定理 2.4 中所述渐近行为类似的方式构造：

$$p_i = -8N/((2i+1)^2\pi^2),\ 1 \le i \le N_2.$$

这种逼近也以最佳速率收敛。对于此实验，使用阈值为 2e-14 的截断奇异值分解求解器，可达到的误差阶为 $\mathcal{O}(\epsilon\,\|\mathbf{c}\|_2)$，正如 (4.2) 所预测的那样。由于闪电 +多项式逼近的系数向量的 2-范数最小，因此它具有最高精度。请注意，对于具有更复杂光滑行为的函数，我们不知道大极点的最优分布，也不知道它们是否会产生有界系数。我们认为，包含闪电极点和正交多项式基的逼近集是一种简单而稳健的选择。

5. 更一般的逼近与偏微分方程问题。一般来说，闪电方法可用于逼近在复平面曲线上含有分支点奇点的函数。这一思路推动了“闪电求解器”的发展，它们用于逼近定义域位于平面内、边界由带角点的分段光滑约旦曲线构成（例如多边形 [7]）的偏微分方程的解。这些解在角点附近呈现奇异行为。图 7（左）展示了这类定义域的一个例子。以红点标出的闪电极点沿角平分线在角点附近呈指数聚集。此外，逼近集中还加入了一个复变量的全局多项式项。

Trefethen 和 Gopal 最先为拉普拉斯方程开发了闪电方法，并提供了 MATLAB [13] 实现。根据数值实验，他们为角点附近聚集极点的渐缩分布提出了参数值 $\sigma = 4$ in (2.2)。后来，这一参数值 σ 也用于 [16], 对渐缩极点分布的深入分析，以及 [5], 用于二维斯托克斯流的闪电方法。这一参数值出奇地难以超越。本节将分析这一现象，并由此解释该参数值对于偏微分方程角点奇异性的$\sigma = 4$ 近乎最优性。

5.1. 对 x^α 在 V 形区域上的逼近。图 7（左）所示的一般逼近问题可以分解为多个角点附近的局部逼近问题，以及一个全局光滑问题。

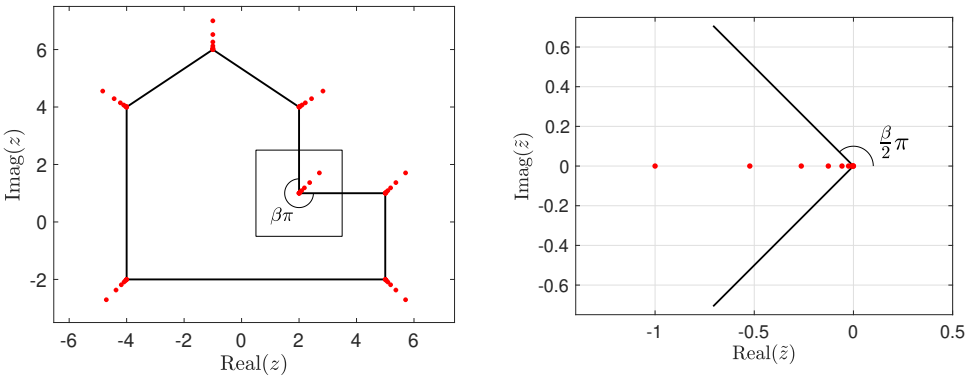

FIG. 7. *A more general approximation problem in the complex plane (left) and the local approximation problem near the reentrant corner (right). The red dots mark the locations of the poles clustered near the corners of the computational domain. The local problem consists of an approximation domain composed of two unit intervals rotated by the angles $\beta\pi/2$ and $-\beta\pi/2$ in the plane, referred to as a V-shaped domain.*

要了解如何通过柯西积分使这些分解严谨化，请参阅 [7, 定理 2.3 和图 3]。图 7（右）展示了与原定义域的再入角 $\beta\pi$ 相关的局部问题。使用局部复变量后，聚集于角点的极点仍被置于负实轴上。若忽略聚集于其他角点的极点的影响，仅考虑靠近该角点的采样点，问题便会大大简化。请注意，逼近区间现在旋转成了两段更靠近极点的区间。这对可达到的精度有显著影响。

图 7（右）中的问题与前几节研究的单位区间上的问题相似。不过，现在逼近定义域由两个在平面内分别旋转了 $\beta\pi/2$ 和 $-\beta\pi/2$ 的单位区间组成。我们将这种类型的逼近定义域称为“V 形区域”。同样，我们首先分析根据第 2.2 小节介绍的构造得到的 $\sqrt{z}$ 的闪电 + 多项式逼近，该构造基于将梯形法则应用于 (2.4)。

THEOREM 5.1. </style有理逼近 (2.5) 满足 $h = (2-\beta)\pi^2$:

$$|r_t(z) - \sqrt{z}| = \mathcal{O}(e^{-\sqrt{N_t h/4}}) = \mathcal{O}(e^{-\pi\sqrt{(2-\beta)N_t/4}})$$

当 $N_t \to \infty$ 时，对于 $z \in [0,1]e^{\pm i\beta\pi/2}$，$\beta \in [0,2)$，一致成立，假设数值 l 附录 *D.6* 中引入的界成立。

证明。 参见附录 D。 □

与定理 2.3 类似，这可以与闪电 + 多项式逼近的收敛行为联系起来。

THEOREM 5.2. 存在系数 $\{a_j\}_{j=1}^{N_1}$ 以及一个次数为$N_2 = \mathcal{O}(\sqrt{N_1})$的多项式 $b(z)$, 使得 具有渐缩闪电极点 (2.2) 的闪电 + 多项式逼近 $r(z)$ (1.1)，其

(5.1) $$\sigma = 2\sqrt{2-\beta}\pi$$

满足:

$$|r(z) - \sqrt{z}| = \mathcal{O}(e^{-\pi\sqrt{(2-\beta)N}})$$

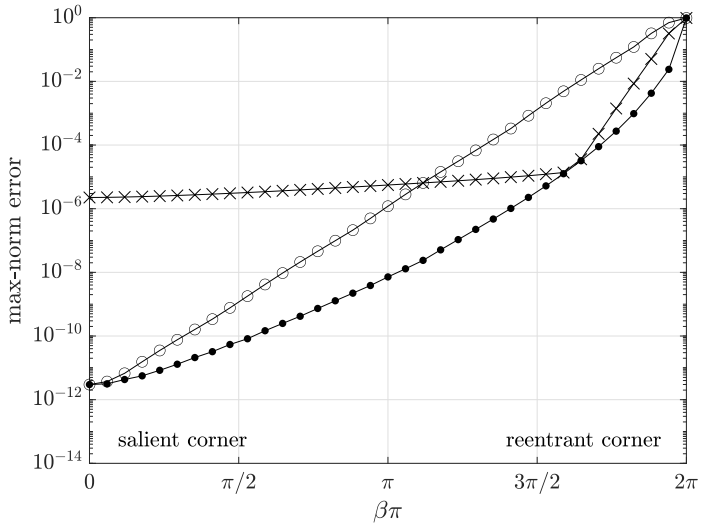

FIG. 8。 *Max-norm errors of the tapered lightning + polynomial approximations ($N_1 = 40$, $N_2 = 10$) of $\sqrt{z}$ as functions of the corner of the V-shaped domain. Circles: $\sigma = 2\sqrt{2\pi}$ (2.8) dots: $\sigma = 2\sqrt{2-\beta\pi}$ (5.1) crosses: $\sigma = 4$.*

当 $N \to \infty$ 时，一致成立于 $z \in [0,1]e^{\pm i\beta\pi/2}$，$\beta \in [0,2)$，条件与定理 5.1 相同。

经实证发现，定理 5.2 描述了闪电 + 多项式逼近 $\sqrt{z}$的最优收敛速度。作为说明，固定次数的闪电 + 多项式逼近（$N_1 = 40$、$N_2 = 10$）$\sqrt{z}$的误差在图 8 中显示为 V 形区域角度 $\beta\pi$ 的函数。渐缩闪电极点位于 $[-1,0]$ 上，并分别计算了 $\sigma = 2\sqrt{2\pi}$ (2.8)（圆圈）、$\sigma = 2\sqrt{2-\beta\pi}$ (5.1)（圆点）和 $\sigma = 4$（叉号）的结果。使用 $\sigma = 2\sqrt{2\pi}$ 进行的逼近仅在 $\beta = 0$时达到最优，即在单位区间上进行逼近。然而，对于 V 形区域，发现使用 $\sigma = 2\sqrt{2-\beta\pi}$ (5.1)时的误差是最优的。该图表明，随着 $\beta\pi$ 增加，可达到的精度会迅速下降。

这些关于$\sqrt{z}$ 的结果使人怀疑，下文（5.2）给出的值是用于在 V 形区域上逼近 z^α 的 σ 的最优选择。数值实验确实表明，这些结果还可以再次从 $\sqrt{z}$ 推广到 z^α。

CONJECTURE 5.3. 存在系数$\{a_j\}_{j=1}^{N_1}$ 和一个多项式 $b(z)$，其次数为 $N_2 = \mathcal{O}(\sqrt{N_1})$，使得具有渐缩闪电极点(2.2)的闪电 + 多项式逼近 $r(z)$ (1.1)满足

$$\sigma = \sqrt{2(2-\beta)}\pi/\sqrt{\alpha} \tag{5.2}$$

满足

$$|r(z) - z^\alpha| = \mathcal{O}(e^{-\pi\sqrt{2(2-\beta)\alpha N}})$$

当 $N \to \infty$时，对 $z \in [0,1]e^{\pm i\beta\pi/2}$，$\beta \in [0,2)$一致成立。

σ 的最优值再次呈现出与逼近$z^\alpha \log z$类似的行为。

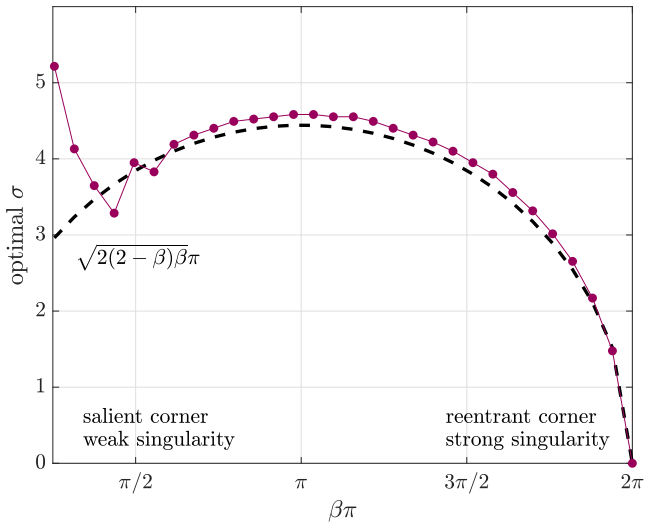

FIG. 9 *Optimal clustering parameter σ for the approximation of $x^{1/\beta}$ on a V-shaped domain . with corner βπ. This problem models the local Laplace problem near a corner. The dots display the values for σ that minimize the error of the tapered lightning + polynomial approximation using $N_1 = N_2 = 20$. The dashed line marks the conjectured value 5 3 .* (.)

5.2. Lightning 偏微分方程求解器。对于拉普拉斯偏微分方程，角点奇异性 z^α 的类型与角点 $\beta\pi$ 的角度之间的联系见 [19]。根据 [19, 定理 5], ，角点附近的主导渐近行为可描述为：当 $1/\beta$ 非整数时为 $\mathcal{O}(z^{1/\beta})$，当 $1/\beta$ 为整数时为 $\mathcal{O}(z^{1/\beta}\log z)$，其中 $\beta \in (0,2)$。因此，角点 $\beta\pi$ 附近的局部拉普拉斯问题等价于在 V 形区域上对 z^α 或 $z^\alpha \log z$ 进行逼近的问题，其中 $\alpha = 1/\beta$。猜测值 (5.2) 给出了 σ的最优值：

$$\sigma = \sqrt{2(2-\beta)\beta}\pi, \tag{5.3}$$

其中 $\beta \in (0,\ 2)$。

图 9 将这一结果与 σ 的经验最优值进行了比较。图中给出了使固定次数闪电 + 多项式逼近 ($N_1 = N_2 = 20$) 在带有角点 $\beta\pi$ 的 V 形区域上逼近 $z^{1/\beta}$ 时误差最小的 σ 值。对于 $\beta\pi \to 0$，即凸角点，奇点 z^α 逐渐减弱，因为 $\alpha \to \infty$。此外，V 形逼近区域靠近正实轴，远离闪电极点。在这种情况下，逼近迅速收敛到接近机器精度的水平。对于 $\beta\pi \to 2\pi$，即再入角，区域收敛到一个包含裂隙的区域。奇点 z^α 逐渐增强，因为$\alpha \to 0$，而 V 形区域则靠近负实轴上的极点。在这种情况下，逼近收敛得非常缓慢。对于介于这两个极端之间的广泛角度范围$\beta\pi$ ，可知 $\sigma = 4$ 是最优 σ 的良好逼近。因此，在 $[5, 7, 16]$ 中使用的值 $\sigma = 4$ ，使角点奇异性实现近乎最优速率的根指数收敛。

附录 A. 定理 2.1 的证明。我们参考以下公式：

$$f(u,x) = \frac{x}{\pi}\frac{1}{\sqrt{u}}\frac{e^{\sqrt{u}-T}}{e^{2(\sqrt{u}-T)}+x}. \tag{A.1}$$

$$I(x) = \frac{2x}{\pi} \int_{-T}^{T} \frac{e^s}{e^{2s} + x}\, ds = \int_0^{4T^2} f(u, x)\, du \tag{A.2}$$

$$S(x) = h \sum_{j=1}^{N_t} f(jh, x). \tag{A.3}$$

因此，我们选择 $T = \sqrt{N_t h/4}$。

LEMMA A.1. $T > 0$ 的截断误差对于任意 $x \in [0, 1]$ 均满足

$$|\sqrt{x} - I(x)| < \frac{4}{\pi} e^{-T} < \frac{3}{2} e^{-T}.$$

证明。我们有

$$\sqrt{x} - I(x) = \frac{2x}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^s}{e^{2s} + x}\, ds - \frac{2x}{\pi} \int_{-T}^{T} \frac{e^s}{e^{2s} + x}\, ds.$$

对于 $s \geq T$，从分母中省略 x ；对于 $s \leq -T$，从分母中省略 e^{2s} ，即可对被积函数进行估计。远离 $\pm T$ 时，两个方向上的指数衰减表明，两个尾积分均有上界，即端点 $\pm T$处被积函数的值。此外，注意到 $x \leq 1$，即可得到结论。 □

对于较小的 x，我们直接计算求积误差。

LEMMA A.2. 对于 $x \in [0, e^{4-2T}]$ ，求积误差满足

$$|I(x) - S(x)| < 2e^{2-T} < 15e^{-T}.$$

证明。由于其积分表示中的被积函数为正，通过截断可得 $I(x) < \sqrt{x}$。因此，对于 $x \in [0, e^{4-2T}]$ ，有 $I(x) < e^{2-T}$。对于$S(x)$，直接但冗长的计算表明，被积函数 $f(u, x)$ 关于固定的 x ，作为 $u \in [0, \infty)$ 的函数单调递减，只要 $x \leq x^* = e^{2\sqrt{2}-2T} \frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} \approx e^{4.59-2T}$成立。因此，在本引理的 x 范围内， $S(x)$ 是基于每个矩形右端采样点的 $I(x)$ 的黎曼和近似。由于被积函数为正且单调递减，这意味着 $S(x) < I(x)$。 □

接下来，我们用围道积分来精确表示求积误差。为此，按照 [17], ，我们定义函数

$$\delta(u) = \mu(u) - m(u), \tag{A.4}$$

with

$$\mu(u) = \begin{cases} -\frac{1}{2} & \operatorname{Im} u \geq 0, \\ \frac{1}{2} & \operatorname{Im} u < 0, \end{cases}$$

and

$$m(u) = -\frac{i}{2} \cot\left(\frac{\pi u}{h}\right).$$

这些公式与 [17] 中表 13.1 和表 13.2 所列的公式相对应。

首先，我们考察被积函数可能存在的极点。

LEMMA A.3. 对于 $x \in (0,1]$, 作为 u 函数的函数 $f(u,x)$ 在以下位置有极点

$$\pi_{\pm,k} = \left(T + \frac{1}{2}\log x\right)^2 - \pi^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2 \pm i\pi\left(T(2k+1) + \left(k+\frac{1}{2}\right)\log x\right).$$

对于 $k=0$，最靠近实轴的极点 $\pi_\pm = \pi_{\pm,0}$ 的留数为 $r_\pm = \frac{\mp i\sqrt{x}}{\pi}$。

证明。这些极点对应于 $f(u,x)$ 分母的根。由此得到 $2(\sqrt{u}-T) = \log(-x)$。考虑到 $\log(-x)$ 的所有对数分支，$\log x \pm (2k+1)\pi i, k = 0, 1, 2, \ldots$，即可得出结果。通过进一步计算，很容易得到 $k=0$ 的留数。

□

THEOREM A.4. 对于 $x \in [e^{4-2T}, 1]$，求积误差为

$$I(x) - S(x) = \int_{\Gamma_1\cup\Gamma_2} f(u,x)\,du + \int_\Gamma f(u,x)\delta(u)\,du - 2\pi i(r_+\delta(\pi_+) + r_-\delta(\pi_-)),$$

其中 $\Gamma_1 = [0,1]$、$\Gamma_2 = [4T^2+1, 4T^2]$ 和 Γ 对应于正向矩形 $[1, 4T^2+1]\times[-ai, ai]$，其上有 $a = 2\pi(T + \frac{1}{2}\log x)$。最后，根据引理 *A.3*，$r_\pm$ 和 $\pi_\pm$–分别是 $f(u,x)$ 的极点和留数。

证明。首先，我们证明由 Γ 界定的矩形内恰有两个极点，且它们正是 $\pi_\pm$。事实上，根据引理 A.3，对于 $x \in [e^{4-2T}, 1]$，极点 $\pi_\pm$ 的实部大于 $4 - \pi^2/4 \approx 1.53$ 且小于 $T^2 - \pi^2/4$。它们的虚部为 $\pm a/2$。除非可能是 $x < e^{4-2T}$，否则所有其他极点的虚部（绝对值）对于任意 $k \neq 0$都大于 a。这两种情况都位于矩形之外。

我们可以将 $I(x)$ 写成 f 在 $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ 上的积分与

$$I_{\text{mid}}(x) = \int_1^{4T^2+1} f(u,x)du = \int_\Gamma f(u,x)\mu(u)du - 2\pi i(r_+\mu(\pi_+) + r_-\mu(\pi_-)).$$

后一个等式源于 $\mu(u)$ 的构造：它是一个有界区间的示性函数，参见 [17, §13]，；并减去变形到 Γ后在两个极点处取得的留数。

对于 $S(x)$，也有类似的表达式，其中涉及 $m(u)$，而非 $\mu(u)$。然而，函数 $m(u)$ 在实数轴上的 $j \in \mathbb{Z}$ 处也有极点，这组点包含端点 0 和 $4T^2$。为避开这些点，积分区间从$[0, 4T^2]$移至 $[1, 4T^2+1]$。注意，m在 Γ 内的其余极点恰好对应于求积点，其留数之和等于对 f 应用梯形法则的结果，参见 [17, §13]。最终表达式由 $\delta(u) = \mu(u) - m(u)$ 得出。

□

由于被积函数 $f(u,\ x)$ 在 $[0, 4T^2]$ 的端点附近较小，因此当 N_t 较小时，留数的大小是离散化误差的主导因素。这便导出了 h 的以下最优选取，由此可获得对 $\sqrt{x}$ 的最佳有理逼近的收敛速度。

为此，我们首先希望量化复平面中 $\delta(u)$ 的大小。

LEMMA A.5. 对于任意满足 $|\mathrm{Im}\, u| \geq h/(2\pi)$ 的 $u \in \mathbb{C}$，

$$|\delta(u)| \leq \frac{3}{2}e^{-2\pi|\mathrm{Im}\, u|/h}.$$

证明。 我们需要证明，对于 $|\mathrm{Im}\, u| \geq h/(2\pi)$,

$$\left| -\frac{1}{2} + \frac{i}{2} \cot\left(\frac{\pi u}{h}\right) \right| \leq \frac{3}{2} e^{-2\pi |\mathrm{Im}\, u|/h}.$$

等价地，我们必须证明，对于 $\mathrm{Re}\, u \geq \frac{1}{2}$，

$$|\coth(u) - 1| \leq 3e^{-2\mathrm{Re}\, u}.$$

这可由以下计算得出

$$\coth(u) = \frac{e^u + e^{-u}}{e^u - e^{-u}} = 1 + \frac{2e^{-2u}}{1 - e^{-2u}}.$$

□

THEOREM A.6. 定理 *A.4* 中的截断误差 $\sqrt{x} - I(x)$ 和留数的大小$r_\pm \delta(\pi_\pm)$ 在 N_t 中以相同速率衰减，且该速率与 $x \in [0,1]$ 无关，选择

$$h = 2\pi^2$$

衰减速率为 $e^{-T} = e^{-\pi\sqrt{N_t/2}}$。

证明。 只需计算 $\delta(u)$在极点 π_+ 处的留数。由引理 A.3 可知 $r_+ = -i\sqrt{x}/\pi$。根据引理 A.5，$|\delta(\pi_+)| \leq \frac{3}{2} e^{-2\pi \mathrm{Im}\, \pi_+/h}$。因此，由于$e^{\frac{1}{2}\text{对数}\, x} = \sqrt{x}$,

$$|r_+ \delta(\pi_+)| \leq \frac{3}{2\pi}\sqrt{x} e^{-2\pi^2(T + \frac{1}{2}\log x)/h} = \frac{3}{2\pi}\sqrt{x} e^{-2\pi^2 T/h} (\sqrt{x})^{-2\pi^2/h}.$$

这与 e^{-T} 截断误差的收敛速率相符，当 $h = 2\pi^2$时，该速率与x无关。

□

当 $h = 2\pi^2$时，定理 A.4 中的最后一项可以估计为

$$|2\pi i (r_+ \mu(\pi_+) + r_- \mu(\pi_-))| \leq 6\, e^{-T}.$$

为完成证明，还需对定理 A.4 中引入的积分进行估计。容易证明

$$\left| \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_2} f(u,x)\, du \right| < \frac{3}{2} e^{-T}.$$

此外，强有力的数值证据表明，剩余积分可以按以下方式估计。

CONJECTURE A.7. 对于 $x \in [e^{4-2T}, 1]$

$$\left| \int_{\Gamma} f(u,x)\delta(u)\, du \right| < 12\, e^{-T}$$

其中， Γ 对应于正向矩形 $[1, 4T^2+1] \times [-ai, ai]$，其中$a = 2\pi(T + \frac{1}{2}\text{对数}\, x)$。

我们通过数值计算验证了 x in $[0,1]$ 中 N_t 取较小值和较大值时积分的大小。要对其中涉及的不同区域进行完整的解析理解，篇幅就太长了。

附录 B. 定理 2.4 的证明。

证明。π_j最佳逼近函数的极点,N 在 $[-1,1]$ 上对 $|x|$ 的最佳逼近函数的极点，在 [10, 定理 2.2]，中以函数表示，并对较大的 N 给出渐近描述

$$H_N(y) = \frac{N+1}{2} - \frac{1}{\pi}\int_y^\infty \left[\frac{\sqrt{N}}{t\sqrt{1+t^2}} + \frac{1}{\pi t}\log\left(\frac{t}{1+\sqrt{1+t^2}}\right)\right] \mathrm{d}t. \tag{B.1}$$

当 $y>0$ 和 N 足够大时，此函数可逆，且极点满足

$$\pi_{j,N} \sim iH_N^{-1}(j).$$

它们全都位于虚轴上，并关于实轴对称。$p_{j,\ N}$ 最佳逼近函数的极点是 $\sqrt{x}$ 的极点的平方，因此位于负实轴上。用 $\overline{[10]}$, 的记号，精确对应关系为$p_{j,\ N} = \pi^2_{j,\ 2N}$，$1 \le j \le N$。在证明中，只需估计 $H_N(y)$ 在大 N时取整数值的逆函数。

首先，在参数 y较大时，估计 $H_N(y)$ 本身。记

$$H_N(y) = \frac{N+1}{2} - \sqrt{N}F_1(y) - F_2(y),$$

with

$$F_1(y) = \frac{1}{\pi}\int_y^\infty \frac{1}{t\sqrt{1+t^2}}\,\mathrm{d}t \tag{B.2}$$

and

$$F_2(y) = \frac{1}{\pi^2}\int_y^\infty \frac{1}{t}\log\left(\frac{t}{1+\sqrt{1+t^2}}\right)\mathrm{d}t. \tag{B.3}$$

注意， $F_2(y)$ 与 N无关，因此 $H_N(y) \sim \frac{N+1}{2} - \sqrt{N}F_1(y) + \mathcal{O}(1)$。

我们对 $F_1(y)$ 在 y较大时作展开。将被积函数展开为

$$\frac{1}{t\sqrt{1+t^2}} = \frac{1}{t^2} + \frac{1}{2t^2} + \mathcal{O}(t^{-6})$$

逐项积分可得

$$F_1(y) = \frac{1}{\pi y} - \frac{1}{4\pi y^3} + \mathcal{O}(y^{-5}).$$

因此，取首阶项可得

$$H_N(y) \sim \frac{n+1}{2} - \frac{\sqrt{N}}{\pi y}$$

其近似逆为

$$H_N^{-1}(x) \sim \frac{\sqrt{N}}{\pi}\left(\frac{N+1}{2} - x\right)^{-1}.$$

在 $j = N-k$ 处求值可得表达式

$$\pi_{N-k,N} \sim i\frac{2\sqrt{N}}{(2k+1)\pi}.$$

由于极点随着 N 增大，上述关于 y 较大的假设是合理的。最后，通过平方并用 N 替换 $2N$ ，即可得到 $\sqrt{x}$ 对应的极点。由此得出结果。

□

附录 C。定理 2.5 的证明。

证明。我们首先注意到，式（2.9）仅在极点较大时才准确（也就是说，k 足够小），因为在分析显式密度（B.1）时，我们假设 y 较大，即极点较大。不过，只要 $H_N(y)$ 可逆，式（B.1）对于较小的 y 也成立。对于任意 $y>0$，只要 N 足够大，情况都是如此。

由于 $p_{j,N}=\pi_{j,2N}^2$，我们正在寻找满足 $\pi_{j,N}\approx i$ 的指标 j。特别地，我们希望找到满足 $i^{-1}\pi_{N-k,2N}>1$ 的最大 k，其对应于 $p_{N-k,N}<-1$。由 $\pi_{j,N}\sim iH_N^{-1}(j)$ 可知，$H_N(i^{-1}\pi_{j,k})=j$。因此，只需估计 $H_N(1)$。

表达式 (B.1) 完全明确，我们得到

$$H_N(1)=\frac{N+1}{2}-\sqrt{N}F_1(1)-F_2(1).$$

将 $N-k$ 与 $H_{2N}(1)\sim N-\sqrt{2N}F_1(1)$ 对应起来，立即可得 $k=\mathcal{O}(\sqrt{N})$。通过计算 $F_1(1)$ 的积分表达式 $=\frac{1}{\pi}\int_1^\infty \frac{1}{t\sqrt{1+t^2}}\mathrm{d}t\approx 0.28$，可以得到其数值。这给出 $H_{2N}(1)\approx N-0.4\sqrt{N}$。□

附录 D. 定理 5.1 的证明。我们简要陈述附录 A 中针对 V 形曲域 $z=r\exp(\pm\beta\pi i/2)$（$\beta\in[0,2$固定）和 $r\in[0,1]$ 所给证明的一般化版本。公式 (A.1)、(A.2)、(A.3) 和 (A.4) 的定义完全相同，只需将 x 替换为复变量 z。这些结论的证明与较简单情形 $\beta=0$ 的证明类似，不过在技术上更为复杂。参数 β 会影响极点的位置，因此积分路径也略有不同。在所有这些表达式中，极限 $\beta\to 0$ 与先前结果一致，但极限 $\beta\to 2$ 并不可行。后一极限对应于角度为 2π 的退化情形。

Lemma D.1. $T>\frac{1}{2}\log 2\approx 0.35$ 以及 $z=r\exp(\pm\beta\pi i/2)$（$\beta\in[0,2)$ 固定）和 $r\in[0,1]$ 的截断误差满足

$$|\sqrt{z}-I(z)|=\mathcal{O}(e^{-T}).$$

Lemma D.2. $z=r\exp(\pm\beta\pi i/2)$ 在固定的 $\beta\in[0,2)$和 $r\in[0,e^{4+2\beta-2T}]$ 条件下的求积误差满足

$$|I(z)-S(z)|=\mathcal{O}(e^{-T}).$$

Lemma D.3. 对于 $r\in(0,1]$ 和 $z^+=r\exp(i\beta\pi/2)$（固定 $\beta\in[0,2)$），作为 u 的函数，函数 $f(u,z^+)$ 的极点位于

$$\pi_{\pm,k}^+=\left(T+\frac{1}{2}\log r\right)^2-\frac{\pi^2}{4}\left(\pm(2k+1)+\frac{\beta}{2}\right)^2+i\pi\left(\pm(2k+1)+\frac{\beta}{2}\right)\left(T+\frac{1}{2}\log r\right).$$

最接近实轴的极点 $\pi_\pm^+=\pi_{\pm,0}^+$ 的留数为 $r_\pm^+=r_{\pm,0}^+=\mp\frac{i}{\pi}\sqrt{z^+}$。对于 $r\in(0,1]$ 和 $z^-=r\exp(-i\beta\pi/2)$（固定 $\beta\in[0,2)$），作为 u 的函数，函数 $f(u,z^-)$ 的极点位于

$$\pi_{\pm,k}^-=\left(T+\frac{1}{2}\log r\right)^2-\frac{\pi^2}{4}\left(\pm(2k+1)-\frac{\beta}{2}\right)^2+i\pi\left(\pm(2k+1)-\frac{\beta}{2}\right)\left(T+\frac{1}{2}\log r\right).$$

最接近实轴的极点 $\pi_\pm^-=\pi_{\pm,0}^-$ 的留数为 $r_\pm^-=r_{\pm,0}^-=\mp\frac{i}{\pi}\sqrt{z^-}$.

THEOREM D.4. 对于固定的 $z = r\exp(\pm\beta\pi i/2)$ $\beta \in [0,2)$和 $r \in [e^{4+2\beta-2T}, 1]$，其求积误差为

$$I(z) - S(z) = \int_{\Gamma_1\cup\Gamma_2} f(u,z)\,du + \int_{\Gamma} f(u,z)\delta(u)\,du - 2\pi i(r_+\delta(\pi_+) + r_-\delta(\pi_-)),$$

其中，$\Gamma_1 = [0, 1-\beta/2]$、$\Gamma_2 = [4T^2+1-\beta/2, 4T^2]$和 Γ 分别对应正向矩形 $[1-\beta/2, 4T^2+1-\beta/2]\times[-ai, ai]$，且 $a = 2\pi(T+\frac{1}{2}$对数 $r)$。最后，根据引理 ***D.3***，$r_\pm$和 $\pi_\pm$是 $f(u,x)$ 的极点和留数（对于$z = z^+ = r\exp(i\beta\pi/2)$，有 $\pi_\pm = \pi_\pm^+$；对于 $z = z^- = r\exp(-i\beta\pi/2)$，有$\pi_\pm = \pi_\pm^-$）。

THEOREM D.5. 定理 ***D.4*** 中的截断误差 $\sqrt{z^-} - I(z)$ 以及留数$r_+\delta(\pi_+)$ 和 $r_-\delta(\pi_-)$ 的大小，关于 N_t以相同速率衰减，与$z = re^{\pm i\beta\pi/2}$ 无关，其中 $r \in [0,1]$，取如下选择

$$h = (2-\beta)\pi^2$$

且该速率为 $e^{-T} = e^{-\pi\sqrt{(2-\beta)N_t/4}}$。

为完成证明，还需对定理 D.4 中的积分进行界定。容易证明

$$\left|\int_{\Gamma_1\cup\Gamma_2} f(u,x)\,du\right| = \mathcal{O}(e^{-T}).$$

此外，强有力的数值证据表明，剩余的积分同样可以得到界定。

CONJECTURE D.6. 对于 $z = r\exp(\pm\beta\pi i/2)$，其中 $r \in [e^{4+2\beta-2T}, 1]$ 且 $\beta \in [0, 2$ 固定)

$$\left|\int_{\Gamma} f(u,x)\delta(u)\,du\right| = \mathcal{O}(e^{-T})$$

其中 Γ 对应于正向矩形 $[1-\beta/2, 4T^2+1-\beta/2]\times[-ai, ai]$，且 $a = 2\pi(T+\frac{1}{2}\log r)$。

同样地，我们通过数值方法验证了 $[0,1]$, 中 N_t和 r取小值和大值时，以及 $\beta \in [0,2$取不同值时积分的大小。要获得完整的解析理解，甚至比理解 (A.7) 更为复杂。

致谢。 作者谨向 Nick Hale 致谢，感谢他进行了富有成效的讨论。

参考文献

[1] B. ADCOCK AND D. HUYBRECHS, *Frames and numerical approximation*, SIAM 评论，61 (2019)，第 443–473 页。[2] B. ADCOCK AND D. HUYBRECHS, *Frames and numerical approximation II: Generalized sampling* 26 2020 87 114 , J. Fourier Anal. Appl., ( )，第 – 页。[3] P. J. BADDOO, *Lightning solvers for potential flows*, Fluids，5 (2020)，第 1–17 页。[4] P. D. BRUBECK, Y. NAKATSUKASA, AND L. N. TREFETHEN, *Vandermonde with Arnoldi*, SIAM 评论，63 (2021)，第 405–415 页。[5] P. D. BRUBECK AND L. N. TREFETHEN, *Lightning Stokes solver*, SIAM J. Sci. Comput., 44 (2022)，第 A1205–A1226 页。
[6] A. GOPAL AND L. N. TREFETHEN, *New Laplace and Helmholtz solvers*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 116 (2019)，第 10223–10225 页。

[7] A. Gopal and L. N. Trefethen, *Solving Laplace problems with corner singularities via rational functions* 57 2019 2074 2094 , SIAM 数值分析期刊, ( ), 第 – 页。[8] D. J. Newman, *Rational approximation to |x|*, 密歇根数学杂志, 11 (1964), 第 11–14 页。[9] H. Stahl, *Best uniform rational approximation of x^α on $[0,1]$*, 美国数学会通报, 28 (1993), 第 116–122 页。[10] H. R. Stahl, *Poles and zeros of best rational approximants of |x|*, 构造逼近, 10 (1994), 第 469–522 页。[11] H. R. Stahl, *Best uniform rational approximation of x^α on $[0,1]$*, 数学学报, 190 (2003), 第 241–306 页。[12] F. Stenger, *Explicit nearly optimal linear rational approximation with preassigned poles*, 数学计算, 47 (1986), 第 225–252 页。[13] L. N. Trefethen, *Lightning Laplace Solver*。https://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/ lightning.html。[14] L. N. Trefethen, *Approximation Theory and Approximation Practice, Extended Edition*, 工业与应用数学学会, 费城, 2019。[15] L. N. Trefethen, *Numerical conformal mapping with rational functions*, 计算方法与函数理论, 20 (2020), 第 369–387 页。[16] L. N. Trefethen, Y. Nakatsukasa, and J. A. C. Weideman, *Exponential node clustering at singularities for rational approximation quadrature and PDEs* 147 , , , 数值数学, (2021), 第 227–254 页。[17] L. N. Trefethen and J. A. C. Weideman, *The exponentially convergent trapezoidal rule*, SIAM 评论, 56 (2014), 第 385–458 页。[18] N. Vyacheslavov, *Approximation of the function |x| by rational functions*, 数学札记, 16 (1974), 第 680–685 页。[19] W. Wasow, *Asymptotic development of the solution of Dirichlet's problem at analytic corners*, 杜克数学杂志, 24 (1957), 第 47–56 页。