arXiv:2304.01637v1 [math.NA] 4 Apr 2023

抛物型方程二阶时间离散化最大范数后验误差估计的统一方法

托尔斯滕·林斯* 马丁·奥萨德尼克* 戈兰·拉多耶夫†

2023年4月5日

摘要

本文考虑一类线性抛物型方程。我们推导出一个通用框架，用于分析若干二阶时间离散化与空间有限元离散化相结合时的后验误差。具体而言，我们研究 Crank-Nicolson 方法、外推欧拉方法、二阶后向差分公式（BDF-2）、Lobatto IIIC 方法以及一种两阶段 SDIRK 方法。我们采用椭圆重构的思想，并利用抛物算子格林函数的若干界。

关键词：抛物型问题、最大范数后验误差估计、后向欧拉、外推、BDF-2、Crank-Nicolson 方法、有限元法、Lobatto IIIC、SDIRK、椭圆重构、格林函数。
AMS 主题分类（2000）：65M15，65M60。

1 引言

给定空间区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$（其边界为 Lipschitz 边界）上的二阶线性椭圆算子 $\mathcal{L}$，我们考虑线性抛物型方程：

$$\mathcal{K}u := \partial_t u + \mathcal{L}u = f, \qquad \text{in} \quad Q := \Omega \times (0,T], \tag{1a}$$

满足初始条件

$$u(x,0) = u^0(x), \quad \text{for} \quad x \in \bar{\Omega}, \tag{1b}$$

以及齐次 Dirichlet 边界条件

$$u(x,t) = 0, \qquad \text{for} \quad (x,t) \in \partial\Omega \times [0,T]. \tag{1c}$$

关于抛物型问题数值逼近方法的研究文献十分丰富。一个经典例子是 Thom´ee 的专著 [22]，其中全面概述了用于方程（1）及相关方程的有限元法。该主题也在各种教材中有所阐述，例如 [10, 16]。这些出版物大多关注先验误差估计，即根据网格尺寸和精确解的正则性给出的收敛结果。

最近，后验误差界的推导吸引了许多研究者的关注。这种方法根据计算得到的数值解给出误差界，因此能够计算出误差的界。

*哈根远程大学数学与计算机科学系，德国哈根市大学街 11 号，邮编 58095，[torsten.linss,martin.ossadnik]@fernuni-hagen.de
†诺维萨德大学理学院数学与计算机科学系，塞尔维亚诺维萨德市特尔格·多西泰亚·奥布拉多维察街 4 号，邮编 21000，goran.radojev@dmi.uns.ac.rs。GR 感谢德国学术交流中心（DAAD）和哈根远程大学提供的访问资助。

迄今为止，大多数出版物研究的是 L_2-范数中的误差，或由该问题的变分形式自然诱导的能量范数中的误差，例如参见 [1, 2, 11]。相比之下，我们关注的是最大范数中的后验误差界。此类结果最早可能见于 [8], ，然而证明被推迟到后来的一篇论文中，而该论文似乎从未发表。

一篇重要的论文是 [20] Makridakis 和 Nochetto 的论文，他们提出了椭圆重构的概念。这一思想被用于多篇论文中，研究有限元法结合各种时间离散化的方法：后向欧拉法、Crank–Nicolson 方法、不连续 Galerkin 方法和外推 [5, 6, 13, 19]。这些论文中的技术都针对所研究的特定方法量身定制，因此在一定程度上有所不同。此外，研究中还采用了不同但相互关联的稳定性结果。本研究的首要目标是为二阶时间离散化建立一个统一的后验误差分析框架。此外，抛物型误差估计器中出现的所有常数都将明确给出。

本文组织如下。在第 2 节中，我们明确问题 (1) 的数据所满足的假设，并回顾存在性理论的某些方面。在第 3 节中，我们为一族离散化的后验误差分析建立框架。我们在 §3.1 中（关于椭圆问题的误差估计器的存在性）以及 §3.2 中（关于抛物型问题的格林函数的界）提出分析所需的假设。在 §3.3 中引入椭圆重构的概念，而主要结果定理 1 则在 §3.4 中推导出来。在第 4 节中，将这些结果应用于多种时间离散化方法：后向欧拉法、Crank–Nicolson 法、外推法、二阶后向差分公式、Lobatto IIIC 方法以及两阶段 SDIRK 方法，其中后三者是新的结果。最后，在第 5 节中给出数值结果，以说明我们的理论发现。

2 弱形式与离散化

我们将以标准变分形式研究（1），参见 [10, §5.1.1]。相应的 Gelfand 三元组由以下空间构成

$$V = H_0^1(\Omega), \quad H = L_2(\Omega) \quad \text{and} \quad V^* = H^{-1}(\Omega).$$

此外，我们用 $a(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{R}$ 表示与椭圆算子 $\mathcal{L}$相关的双线性形式，而$\langle\cdot,\cdot\rangle : V^* \times V \to \mathbb{R}$ 表示对偶配对，$(\cdot,\cdot) : H \times H \to \mathbb{R}$ 表示 H 中的内积。此外，我们用 $\|\cdot\|_{q,\,\Omega}$ 表示 $L_q(\Omega)$, $q \in [1,\infty]$中的标准范数。

方程（1）的解 u 可视为映射 $[0,T] \to V : t \mapsto u(t)$，其（时间）导数记为 u'（以及 $\partial_t u$）。令

$$W_2^1(0,T;V,H) := \{v \in L_2(0,T;V) : v' \in L_2(0,T;V^*)\}.$$

方程（1）的变分形式如下：给定 $u^0 \in H$ 和 $F \in L_2(0,T;V^*)$，求 $u \in W_2^1(0,T;V,H)$，使得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(u(t),\chi) + a(u(t),\chi) = \langle F(t),\chi\rangle \quad \forall \chi \in V,\ t \in (0,T], \tag{2a}$$

and

$$u(0) = u^0. \tag{2b}$$

该问题存在唯一解。

接下来我们将假设源项 F 具有更高的正则性，并且可以表示为$\langle F(t),\chi\rangle = (f,\chi)$, $\forall v \in V$，其中函数 $f \in L_2(0,T;H)$

由于我们关注最大范数误差估计，因此必须对数据作进一步假设，以确保可以逐点求解。为此，我们假设初始数据和边界数据满足零阶相容条件，即 $u^0 = 0$ on $\partial\Omega$，并且 u^0 在 Ω 中是 H¨older¯连续的。在对 f 和 $\mathcal{L}$作出标准假设的条件下，问题 (1) 存在唯一解，且该解在 Q 上¯连续；见 [15, §5，定理 6.4]。

现在我们转向对（2）进行离散化。为此，设时间网格为

$$\omega_t : 0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_M = T,$$

具有网格区间

$$I_j := (t_{j-1}, t_j) \quad \text{and step sizes} \quad \tau_j := t_j - t_{j-1},\ j = 1, 2, \ldots, M.$$

对于任意在时间上连续的函数 $v : \Omega \times [0,T] \to \mathbb{R}$，定义 $v_j := v(\cdot, t_j)\ j = 0, 1, \ldots, M$。我们还定义

$$\delta_t v^j := \frac{v^j - v^{j-1}}{\tau_j},\ \ j = 1, 2, \ldots, M.$$

设 V_h 为 V 的有限维（有限元）子空间，并设 $a_h(\cdot,\cdot)$ 和 $(\cdot,\cdot)_h$ 分别为双线性型 $a(\cdot,\cdot)$ 和 H 中内积 $(\cdot,\cdot)$ 的近似。例如，这些近似可以涉及数值求积。

我们将考虑任意一种时间推进过程，它生成近似解序列 $u^j{}_h \in V_h, j = 0, 1, \ldots, M$，用以近似式 (1) 的解 u 在时刻 t_j的值，即 $u_{jh} \approx u(t_j)$。

3 后验误差分析

我们的分析采用三个主要要素:

- 椭圆问题的后验误差界 $\mathcal{L}y = g$，见 §3.1,
- 与抛物算子 $\mathcal{K}$ 相关的格林函数的界，参见 §3.2 和
- Makridakis 和 Nochetto 引入的椭圆重构思想 [20], 见 §3.3。

回顾这些概念后，我们将在§3.4中为式(1)的二阶时间离散化（以及空间上的有限元法）推导一个统一的事后误差估计框架。

3.1 椭圆问题的后验误差估计

给定 $g \in H$，考虑寻找 $y \in V$ 的椭圆边值问题，使得

$$a(y, \chi) = (g, \chi)\ ,\ \ \forall \chi \in V, \tag{3}$$

及其离散化问题：求 $y_h \in V_h$，使得

$$a_h(y_h, \chi) = (g, \chi)_h\ ,\ \ \forall \chi \in V_h. \tag{4}$$

假设1. 存在一个后验误差估计子 η，用于有限元法 (4) 求解椭圆问题 (3)，且

$$\|y_h - y\|_{\infty,\Omega} \le \eta(y_h, g).$$

文献中已有一些此类误差估计器。下面列举其中几种。

- Nochetto 等人 [21] 研究了 $-\Delta u + g(\cdot,u) = 0$ 在最多三个空间维数中的半线性问题。他们针对准一致三角剖分上的任意阶有限元法给出了后验误差界。
- Demlow & Kopteva [4] 也考虑准一致三角剖分上的任意阶有限元法，但针对奇异摄动方程 $-\varepsilon^2\Delta u + g(\cdot,u) = 0$，建立了关于摄动参数一致稳定的后验误差估计。此外，在 [12] 中，还研究了同一问题上的各向异性网格 P1-有限元法。
- 对于 [17, 18] 线性问题 $-\varepsilon^2 u'' + ru = g$（定义在 (0,1) 上），其中 $u(0) = u(1) = 0$，本文考虑 [17, 18] 任意阶有限元法。与上述工作不同，误差估计器中出现的所有常数均给出了明确表达式。

3.2 格林函数

令与 $\mathcal{K}$ 相关、对应于任意点 $x \in \Omega$ 的格林函数记为 $\mathcal{G}$，则对所有$\varphi \in W_2^1(0, T; V, H)$

$$\varphi(x,t) = (\varphi(0), \mathcal{G}(t)) + \int_0^t \langle (\mathcal{K}\varphi)(s), \mathcal{G}(t-s) \rangle \mathrm{d}s, \quad \text{see [9].} \tag{5}$$

¯格林函数 $\mathcal{G}$: $\Omega \times [0,T] \to \mathbb{R}$, $t \in (0, T]$。对于固定的 x，它满足，

$$\partial_t \mathcal{G} + \mathcal{L}^* \mathcal{G} = 0, \ \text{in } \Omega \times \mathbb{R}^+, \ \mathcal{G}\big|_{\partial\Omega} = 0, \ \mathcal{G}(0) = \delta_x = \delta(\cdot - x).$$

假设 2. 存在非负常数 κ_0、 κ_1、 κ_1' 和 γ，使得

$$\|\mathcal{G}(t)\|_{1,\Omega} \le \kappa_0 \, \mathrm{e}^{-\gamma t} =: \varphi_0(t), \quad \|\partial_t \mathcal{G}(t)\|_{1,\Omega} \le \left(\frac{\kappa_1}{t} + \kappa_1' \right) \mathrm{e}^{-\gamma t} =: \varphi_1(t), \tag{6}$$

¯对所有 $x \in \Omega$, $t \in [0,T]$。

在 §5 中，我们将给出一个满足这些假设的示例测试问题的数值结果。关于可获得此类结果的问题类别的更详细讨论见 [14, §2], 另请参见 [13] 中的附录 A。

3.3 椭圆重构

给定 u 的近似值 $u_{jh} \in V_h$，我们将 $\psi^j \in V_h$ 定义为

$$\left(\psi^j, \chi\right)_h = a_h\left(u_h^j, \chi\right) - \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h, \ j = 0, \ldots, M. \tag{7}$$

这可以写成一个“椭圆型”问题:

$$a_h\left(u_h^j, \chi\right) = \left(f^j + \psi^j, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h, \ j = 0, \ldots, M. \tag{8}$$

接下来，将 $R^j \in H_0^1(\Omega)$ 定义为

$$a\left(R^j, \chi\right) = \left(f^j + \psi^j, \chi\right) \quad \forall \chi \in H_0^1(\Omega), \ j = 0, \ldots, M, \tag{9}$$

或简写为:

$$\mathcal{L} R^j = f^j + \psi^j, \ j = 0, \ldots, M. \tag{10}$$

函数 R^j称为 u_{jh}, [20] 的椭圆重构。

现在，u_{jh}可视为由 (8) 得到的 R^j 的有限元近似，而误差 $E_j := R^j - u_{jh}$可使用 §3.1 中的椭圆估计量进行界定:

$$\left\|E^j\right\|_\infty = \left\|u_h^j - R^j\right\|_\infty \le \eta_{\mathrm{ell}}^j := \eta\left(u_h^j, f^j + \psi^j\right), \ j = 0, \ldots, M. \tag{11}$$

由于线性性，我们有

$$\left\|\delta_t E^j\right\|_\infty = \left\|\delta_t (u_h - R)^j\right\|_\infty \le \eta_{\mathrm{ell},\delta}^j := \eta\left(\delta_t u_h^j, \delta_t (f + \psi)^j\right), \ j = 1, \ldots, M. \tag{12}$$

3.4 抛物型问题的后验误差估计——一般框架

现在我们可以推导出本文的主要结果。我们希望使用将 φ 替换为误差 $u - u_h$ 的格林函数表示 (5)。首先，我们必须将 $u^j{}_h$、j = 0、1、.....、M 扩展为 a

定义在整个 $[0,\mathrm{T}]$ 上的函数。我们使用分段线性插值：对于定义在 ω_t 上的任意函数 φ，$\mathrm{t}_j \mapsto \varphi^j$，我们定义

$$\hat{\varphi}(\cdot,t) \coloneqq \frac{t_j - t}{\tau_j}\,\varphi^{j-1} + \frac{t - t_{j-1}}{\tau_j}\,\varphi^{j} \quad \text{for } t \in [t_{j-1}, t_j], \quad j = 1,\dots,M. \tag{13}$$

公式（5）给出了终止时刻 T 处的误差，并且对任意 $\mathrm{x} \in \Omega$:

$$\left(u - u_h^M\right)(x) = (u - \hat{u}_h)(x,T) = (u^0 - u_h^0, \mathcal{G}(T)) + \int_0^t \langle (\mathcal{K}(u - \hat{u}_h)(s), \mathcal{G}(t-s)\rangle \mathrm{d}s. \tag{14}$$

对于微分方程中$\hat{\mathrm{u}}_h$的残差，我们有如下表示。

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(u - \hat{u}_h)(t) &= f(t) - \mathcal{L}\hat{u}_h(t) - \partial_t \hat{u}_h(t)\\ &= (f - \hat{f})(t) + \mathcal{L}\left(\hat{R} - \hat{u}_h\right)(t) - \hat{\psi}(t) - \partial_t \hat{u}_h(t),\end{aligned}$$

由式（10）给出。将其代入式（14），并注意到 $\mathrm{E} = \mathrm{R} - \mathrm{u}_h$，即可得到

$$\begin{aligned}(u - \hat{u}_h)(x,T) = \left(u^0 - u_h^0, \mathcal{G}(T)\right) &+ \int_0^T \left((f - \hat{f})(t), \mathcal{G}(T-t)\right)\mathrm{d}t\\ &+ \int_0^T \left\langle \mathcal{L}\hat{E}(t), \mathcal{G}(T-t)\right\rangle \mathrm{d}t - \int_0^T \left\langle \left(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h\right)(t), \mathcal{G}(T-t)\right\rangle \mathrm{d}t.\end{aligned} \tag{15}$$

定理 1. 设 $\mathrm{u\,j\,h} \in \mathrm{V}_h$，$\mathrm{j} = 0,\ 1,\ \dots,\ \mathrm{M}$，是 $\mathrm{u}(\mathrm{t}j)$ 的任意近似序列。那么，对于任意 $\mathrm{K} \in \{0,\dots,\mathrm{M}-1\}$，有。

$$\left\|u(T) - u_h^M\right\|_{\infty,\Omega} \le \eta^{M,K} \coloneqq \eta_{\mathrm{init}} + \eta_{\mathrm{ell}}^{M,K} + \eta_f + \eta_{\delta\psi} + \eta_\Psi,$$

其中误差估计器 $\eta^{M,K}$ 的各分量是

$$\eta_{\mathrm{init}} \coloneqq \kappa_0\sigma_0 \left\|u^0 - u_h^0\right\|_{\infty,\Omega}, \quad \eta_f \coloneqq \sum_{j=1}^M \sigma_j\kappa_0 \int_{I_j} \left\|(f - \hat{f})(s)\right\|_{\infty,\Omega}\mathrm{d}s, \quad \eta_{\delta\psi} \coloneqq \sum_{j=1}^M \sigma_j\chi_j \left\|\delta_t\psi^j\right\|_{\infty,\Omega},$$

$$\eta_\Psi \coloneqq \kappa_0 \sum_{j=1}^M \sigma_j\tau_j \left\|\Psi^j\right\|_{\infty,\Omega} \quad with \quad \Psi^j \coloneqq \frac{\psi^j + \psi^{j-1}}{2} + \delta_t u_h^j,$$

and

$$\eta_{\mathrm{ell}}^{M,K} \coloneqq \kappa_0\left(\eta_{\mathrm{ell}}^M + \sigma_K\eta_{\mathrm{ell}}^K + \sum_{j=K+1}^M \sigma_j\tau_j\eta_{\mathrm{ell},\delta}^j\right) + \sum_{j=1}^K \sigma_j\mu_j \max\left\{\eta_{\mathrm{ell}}^j, \eta_{\mathrm{ell}}^{j-1}\right\}.$$

权重由 $\sigma_j \coloneqq \mathrm{e}^{-\gamma(T-t_j)}$,

$$\mu_j \coloneqq \int_{I_j}\left(\frac{\kappa_1}{T-s} + \kappa_1'\right)\mathrm{d}s \quad and \quad \chi_j \coloneqq \min\left\{\frac{\kappa_0\tau_j^2}{4}, \int_{I_j}\frac{(t_j - s)(s - t_{j-1})}{2}\left(\frac{\kappa_1}{T-s} + \kappa_1'\right)\mathrm{d}s\right\}.$$

椭圆估计量 $\eta^j{}_{\mathrm{ell}}$ 和 $\eta^j{}_{\mathrm{ell},\delta}$ 已在（11）和（12）中定义。

证明。我们需要对（15）右端进行界定，并分别考察各项。为此，将反复使用H¨lder不等式和（6）。

(i) 首先,

$$\left|\left(u^0 - u_h^0, \mathcal{G}(T)\right)\right| \le \kappa_0\mathrm{e}^{-\gamma T}\eta_{\mathrm{init}} \tag{16}$$

and

$$\left|\int_0^T \left((f - \hat{f})(s), \mathcal{G}(T-s)\right)\mathrm{d}s\right| \le \kappa_0 \sum_{j=1}^M \mathrm{e}^{-\gamma(T-t_j)}\eta_f^j. \tag{17}$$

(ii) 对于（15）右端的第三项，我们有

$$\int_0^T \left(\mathcal{L}(\hat{R}-\hat{u}_h)(s), \mathcal{G}(T-s)\right) \mathrm{d}s = \int_0^T \left(\partial_t \mathcal{G}_t(T-s), (\hat{R}-\hat{u}_h)(s)\right) \mathrm{d}s,$$

因为 $\mathcal{L}^*\mathcal{G} = \partial_t \mathcal{G}$。对于任意 $\mathrm{K} \in \{0, \ldots\ldots, \mathrm{M}-1\}$，在 $(\mathrm{t}_K, \mathrm{T})$ 上分部积分，得到

$$\begin{aligned}
&\int_0^T \left(\partial_t \mathcal{G}(T-s), (\hat{R}-\hat{u}_h)(s)\right) \mathrm{d}s \\
&\quad = -\left(\mathcal{G}(0), (R-u_h)^M\right) + \left(\mathcal{G}(T-t_K), (R-u_h)^K\right) + \sum_{j=K+1}^{M} \int_{I_j} \left(\mathcal{G}(T-s), \delta_t (R-u_h)^j\right) \mathrm{d}s \\
&\qquad + \sum_{j=1}^{K} \int_{I_j} \left(\partial_t \mathcal{G}(T-s), (\hat{R}-\hat{u}_h)(s)\right) \mathrm{d}s
\end{aligned}$$

应用 H¨older 不等式、(6)、(11) 和 (12)，得到

$$\begin{aligned}
&\left| \int_0^T \left\langle \mathcal{L}(\hat{R}-\hat{u}_h)(s), \mathcal{G}(T-s) \right\rangle \mathrm{d}s \right| \\
&\quad \le \kappa_0 \left(\eta_{\mathrm{ell}}^M + \mathrm{e}^{-\gamma(T-t_K)} \eta_{\mathrm{ell}}^K + \sum_{j=K+1}^{M} \mathrm{e}^{-\gamma(T-t_j)} \tau_j \eta_{\mathrm{ell},\delta}^j \right) + \sum_{j=1}^{K} \int_{I_j} \varphi_1(T-s) \mathrm{d}s \ \max\left\{ \eta_{\mathrm{ell}}^j, \eta_{\mathrm{ell}}^{j-1} \right\}.
\end{aligned} \tag{18}$$

(iii) 对于 (15) 中的最后一项，有

$$\left(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h\right)(t) = \Psi^j + (t - t_{j-1/2}) \delta_t \psi^j, \quad t \in \left(t_{j-1}, t_j\right), \quad j = 1, \ldots, M.$$

利用分部积分，得到

$$\begin{aligned}
&\int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\langle \left(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h\right)(t), \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t \\
&\quad = \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\langle \Psi^j, \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t + \int_{t_{j-1}}^{t_j} (t - t_{j-1/2}) \left\langle \delta_t \psi^j, \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t \\
&\quad = \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\langle \Psi^j, \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t + \frac{1}{2} \int_{t_{j-1}}^{t_j} (t - t_j)(t - t_{j-1}) \left\langle \delta_t \psi^j, \partial_t \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t
\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\langle \left(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h\right)(t), \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t \right| \\
&\quad \le \tau_j \left\| \Psi^j \right\|_{\infty,\Omega} \varphi_0(T-t_j) + \min\left\{ \frac{\tau_j}{4} \varphi_0(T-t_j), \frac{1}{2} \int_{t_{j-1}}^{t_j} (t_j - t)(t - t_{j-1}) \varphi_1(T-t_j) \mathrm{d}t \right\} \cdot \left\| \delta_t \psi^j \right\|_{\infty,\Omega}.
\end{aligned}$$

由此得到

$$\left| \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\langle \left(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h\right)(t), \mathcal{G}(T-t) \right\rangle \mathrm{d}t \right| \le \kappa_0 \tau_j \sigma_j \left\| \Psi^j \right\|_{\infty,\Omega} + \chi_j \left\| \delta_t \psi^j \right\|_{\infty,\Omega} \tag{19}$$

最后，将 (16)–(19) 应用于 (15)，即可完成证明。 □

注 1. (i) 一般而言，η_{init} 中涉及的上确界范数无法精确求得，而需要进行近似。例如，可以使用比有限元网格更细的网格。

(ii) 需要对 $\eta^j \mathrm{f}$ 中的积分进行近似。一种方法是采用四阶的辛普森法，得到

$$\int_{I_j} \left\| (f - \hat{f})(s) \right\|_{\infty,\Omega} \mathrm{d}s \approx \frac{\tau_j}{3} \left\| f^j - 2 f^{j-1/2} + f^{j-1} \right\|_{\infty,\Omega} \approx \frac{\tau_j^3}{12} \left\| \partial_t^2 f(t_{j-1/2}) \right\|_{\infty,\Omega}.$$

这里同样需要对上确界范数进行近似。

4 应用于各种时间离散化方法

前一节推导出的框架并未采用任何特定的时间离散化。定理 1 并未对它们加以区分。在分析 (7), 即 ψ_j 的定义时，差异便显而易见。这也揭示了计算 ψ^j、$j > 0$ 的其他公式；与 (7) 不同，这些公式无需对质量矩阵求逆。

4.1 后向欧拉方法

该方法如下：给定初始数据的一个近似值 $u^0{}_h$，求 $u^j{}_h \in V_h$，$j = 1, \ldots, M$，使得

$$\left(\frac{u_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + a_h\left(u_h^j, \chi\right) = \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h. \tag{20}$$

将该方程与 (7) 比较可知，$\psi^j = -\delta_t u_{jh}$，$j = 1, \ldots, M$，且

$$(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h)(t) = \frac{\psi^{j-1} - \psi^j}{2} + (t - t_{j-1/2})\delta_t \psi^j = -\frac{\tau_j}{2}\delta_t \psi^j + (t - t_{j-1/2})\delta_t \psi^j, \quad j = 1, \ldots, M.$$

因此，$\Psi^j = -\frac{\tau_j}{2}\delta_t \psi_j$，$j = 1, \ldots, M$。

4.2 Crank-Nicolson 方法

给定 $u^0{}_h \approx u^0,$，求 $u^j{}_h \in V_h$，$j = 1, \ldots, M$，使得

$$\left(\frac{u_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + a_h\left(\frac{u_h^j + u_h^{j-1}}{2}, \chi\right) = \left(\frac{f^j + f^{j-1}}{2}, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h. \tag{21}$$

该方法也可视为 Runge-Kutta-Lobatto-IIIA 方法 [7]。它是 A-稳定的，但不是 L-稳定的。与 (7) 比较可知，$(\psi_j + \psi^{j-1})/2 = -\delta_t u_{jh}$。因此，

$$(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h)(t) = (t - t_{j-1/2})\delta_t \psi^j, \quad j = 1, \ldots, M.$$

特别地，$\Psi^j = 0$，$j = 1, \ldots, M$，并且项 $\eta_j \Psi$ 从误差估计器中消失。

4.3 基于后向欧拉方法的外推

从 $u_h^0 \approx u^0,$ 出发，生成如下三组近似序列。单步欧拉法：令 $v^0{}_h = u^0{}_h$，并求 $v^j{}_h \in V_h$，$j = 1, \ldots, M$，使得

$$\left(\frac{v_h^j - v_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + a_h\left(v_h^j, \chi\right) = \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h. \tag{22a}$$

两步欧拉法：令 $w^0{}_h = u^0{}_h$，并求 $w_{j-1/2\,h}$，$w^j{}_h \in V_h$，$j = 1, \ldots, M$，使得

$$\left(\frac{w_h^{j-1/2} - w_h^{j-1}}{\tau_j/2}, \chi\right)_h + a_h\left(w_h^{j-1/2}, \chi\right) = \left(f^{j-1/2}, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h, \tag{22b}$$

$$\left(\frac{w_h^j - w_h^{j-1/2}}{\tau_j/2}, \chi\right)_h + a_h\left(w_h^j, \chi\right) = \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall \chi \in V_h. \tag{22c}$$

外推：集合

$$u_h^j := 2w_h^j - v_h^j, \quad j = 1, \ldots, M. \tag{22d}$$

对于该方法，公式 (7)、(22a) 和 (22c) 得出

$$\psi^j = -4\frac{w_h^j - w_h^{j-1/2}}{\tau_j} + \frac{v_h^j - v_h^{j-1}}{\tau_j}, \quad j = 1, \ldots, M.$$

4.4 后向差分公式（BDF-2）

我们简要回顾一下 BDF-2方法的构造。给定 u(t$_{j-2}$) 和 u(t$_{j-1}$) 的近似 U$_{j-2}$ 和 U$_{j-1}$，j ≥ 2，我们寻求 u(t$_j$) 的近似 U$_j$，使其满足

$$U_2'(t_j) + \mathcal{L}U_2(t_j) = f^j,$$

其中，U$_2$ 是唯一确定的二次插值多项式，满足 U$_2$(t) = U$^\iota$，对于 $\iota \in$ {j − 2、j − 1、j}。这一思路给出了时间推进过程

$$D_t U^j + \mathcal{L}U^j = f^j, \quad j = 2, \ldots, M,$$

其中

$$D_t v^j := \alpha_j \delta_t v^j + \beta_j \delta_t v^{j-1}, \quad \alpha_j = \frac{2\tau_j + \tau_{j-1}}{\tau_j + \tau_{j-1}}, \quad \beta_j = -\frac{\tau_j}{\tau_j + \tau_{j-1}}, \quad j = 2, \ldots, M.$$

差商 D$_t$ 也可以表示为

$$D_t v^j = \delta_t v^j + \tau_j \delta_t^2 v^j, \quad \delta_t^2 v^j := \frac{\delta_t v^j - \delta_t v^{j-1}}{\tau_j + \tau_{j-1}}, \quad j = 2, \ldots, M.$$

BDF-2时间推进过程需要两个初始值。一个由初始条件自然给出。另一个通过在第一个时间区间上应用一步后向欧拉方法得到。该方法的局部误差为 2，因此与 BDF-2方法的形式阶数相匹配。

形式上令 δ_t^2v^1 := 0。那么，BDF-2离散化如下：求 u$^j{}_h \in$ V$_h$，j = 1, . . .，使得 , M,

$$\left(D_t u_h^j, \chi\right)_h + a_h\left(u_h^j, \chi\right) = \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall\, \chi \in V_h. \tag{23}$$

对于此方法，方程 (7) 和 (23) 得出 ψ_j= −δ_tu $_{jh}$ − $\tau_j \delta_t^2$u $_{jh}$ 以及

$$(\hat{\psi} + \partial_t \hat{u}_h)(t) = -\frac{\tau_j}{2}\delta_t \psi^j - \tau_j \delta_t^2 u_h^j + (t - t_{j-1/2})\delta_t \psi^j, \quad j = 1, \ldots, M,$$

即，Ψj = $-\frac{\tau_j}{2}\delta_t \psi$j − $\tau_j \delta_t^2$u j h, j = 1, . . . , M。

4.5 两阶段 Lobatto-IIIC 方法

这种龙格–库塔方法——在 [3] 中提出——由以下 Butcher表 给出

0	1/2	−1/2
1	1/2	1/2
	1/2	1/2

与 Crank-Nicolson 方法 相比，它同时具有 A-稳定性和 L-稳定性。其表述如下。给定 u$_h^0 \approx$u^0,，求 v$^j{}_h$, u $_{jh} \in$V$_h$，j = 1, . . . , M，使得

$$\left(\frac{v_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + \frac{1}{2}a_h\left(v_h^j - u_h^j, \chi\right) = \frac{1}{2}\left(f^{j-1} - f^j, \chi\right)_h \quad \forall\, \chi \in V_h, \tag{24a}$$

$$\left(\frac{u_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + \frac{1}{2}a_h\left(v_h^j + u_h^j, \chi\right) = \frac{1}{2}\left(f^{j-1} + f^j, \chi\right)_h \quad \forall\, \chi \in V_h. \tag{24b}$$

将这两个方程相减，得到

$$\left(\frac{u_h^j - v_h^{j-1}}{\tau_j}, \chi\right)_h + a_h\left(u_h^j, \chi\right) = \left(f^j, \chi\right)_h \quad \forall\, \chi \in V_h.$$

与式（7）比较可得

$$\psi^j = \frac{v_h^j - u_h^j}{\tau_j}, \quad j = 1, \ldots, M.$$

4.6 两阶段 SDIRK 方法

由以下 Butcher表 给出的单对角隐式龙格–库塔方法

$$\begin{array}{c|cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1-\gamma & 1-2\gamma & \gamma \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \qquad \text{with} \quad \gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$$

也同时具有 A-稳定性和 L-稳定性；参见 [23]。它可表述如下。给定 $\mathrm{u}^0{}_h \approx \mathrm{u}^0,$，求 k_1^j、$\mathrm{k}_2^j \in \mathrm{V}_h$、$\mathrm{j} = 1, \ldots, \mathrm{M}$，使得

$$\left(k_1^j, \chi\right)_h + \gamma\tau_j a_h\left(k_1^j, \chi\right) = \left(f^{j-1+\gamma}, \chi\right)_h - a_h\left(u^{j-1}, \chi\right), \quad \forall\, \chi \in V_h, \tag{25a}$$

$$\left(k_2^j, \chi\right)_h + \gamma\tau_j a_h\left(k_2^j, \chi\right) = \left(f^{j-\gamma}, \chi\right)_h - a_h\left(u^{j-1}, \chi\right) - (1-2\gamma)\tau_j a_h\left(k_1^j, \chi\right), \quad \forall\, \chi \in V_h, \tag{25b}$$

并令

$$u^j = u^{j-1} + \tau_j \frac{k_1^j + k_2^j}{2}. \tag{25c}$$

这里，对于任意 $\kappa \in [0,1]$，$\mathrm{f}_{j^{-1+\kappa}} := \mathrm{f}\,(\mathrm{t}_{j-1} + \kappa\tau_j)$。

所提出的 由 (25) 定义的过程不涉及在网格点 t_j 处对 f 的任何求值。因此，在
与迄今考虑的 方法不同，必须使用 (7) 计算 ψ^j。

ˆ 然而，如果在 (25) 中用 f 的分片插值函数替换函数 f，则有

$$\psi^j = \frac{1-2\gamma}{2\gamma}k_1^j - \frac{1}{2\gamma}k_2^j = \frac{k_1^j - k_2^j}{2\gamma} - k_1^j.$$

为验证这一点，将 (25a) 乘以 $(1 - 1/2\gamma)$，将 (25b) 乘以 $1/2\gamma$，然后将两个方程相加。

注 2. 在上述论述中，我们隐含地假设 (20)-(25) 都存在唯一解。例如，当双线性型 $\mathrm{a}_h(\cdot,\cdot)$ 强制且有界，并且 $(\cdot,\cdot)_h$ 是 V_h 上的内积时，这一条件即可得到保证。后一种情况在 $(\zeta,\chi)_h = (\zeta,\chi)\ \forall \zeta,\chi \in \mathrm{V}_h$ 时成立，或者在采用集总处理时成立。这是抛物型偏微分方程有限元离散化中的两种标准选择。

5 一个数值算例

考虑如下反应扩散方程

$$\partial_t u - u_{xx} + (5x+6)u = \mathrm{e}^{-4t} + \cos(\pi(x+t)^2), \quad \text{in} \quad (-1,1)\times(0,1], \tag{26a}$$

满足初始条件

$$u(x,0) = \sin\frac{\pi(1+x)}{2}, \qquad \text{for} \quad x \in [-1,1], \tag{26b}$$

以及狄利克雷边界条件

$$u(x,t) = 0, \qquad \text{for} \quad (x,t) \in \{-1,1\}\times[0,1]. \tag{26c}$$

该问题的格林函数满足

$$\|\mathcal{G}(t)\|_{1,\Omega} \le \mathrm{e}^{-t/2}, \quad \|\partial_t\mathcal{G}(t)\|_{1,\Omega} \le \frac{3}{2^{3/2}}\frac{\mathrm{e}^{-t/2}}{t}, \ \text{see [13, §12]}. \tag{27}$$

该问题的精确解是未知的。为了计算一个参考解，我们在空间上采用谱方法，并结合时间上的 dG(2) 方法，该方法具有 5 阶精度。由此得到的近似解具有接近机器精度的准确性。

在我们的实验中，我们使用了 [17] 中分析的 P_1-有限元法空间离散化以及其中推导出的后验估计量。该方法为二阶方法。由于我们的时间离散化（欧拉方法除外）也为二阶，因此我们通过 $h = \tau$ 将空间和时间网格尺寸联系起来。

需要近似误差的最大范数。我们通过在每个网格区间内七个均匀分布的点上计算误差来实现：

$$\left\|u(T) - U^M\right\|_{\infty,\Omega} \approx e_M := \max_{i=1,\dots,N} \max_{r=0,\dots,7} \left|\left(u(T) - U^M\right)(x_{i-1} + rh/7)\right| ,$$

其中，x_i、$i = 0$、. . .、N 是均匀空间网格的节点，h 为网格尺寸。

表 1(a-f) 展示了测试计算的结果。每个表格的第一列给出网格区间数 M（其中 $h = \tau = 1/M$），后面依次为终止时刻的误差 e_M、实验收敛阶 p_M、误差估计器 $\eta^{M,0}$ 以及效率 χ_M：

$$p_M := \frac{\ln e_{M/2} - \ln e_M}{\ln 2} \quad \text{and} \quad \chi_M := \frac{e_M}{\eta^{M,0}}.$$

这些方法以预期的阶数收敛：欧拉法为 1 阶，其余方法均为 2 阶。误差估计器给出的上界高于实际误差，且二者均呈相关性。根据具体方法的不同，误差被高估了 100 到 150 倍。部分高估可归因于式 (27) 中的界不够紧。较小的常数会自动带来效率更高的误差估计器。§3.1 中椭圆误差估计器 η 的常数也是如此；该估计器是定理 1 的一个构件。

值得研究误差估计器的各个组成部分。表 2 展示了 BDF-2离散化的结果。尽管对于全部四种方法，η_{init} 和 η_f 这几项显然完全相同，但值得注意的是，$\eta^{M,0}$ ell 和 $\eta_{\delta\psi}$ 也非常相似（相差最多 4^{th} 位数字）。只有 η_Ψ 这一项在不同方法之间存在显著差异。对于 Crank-Nicolson 方法，它恒等于零。对于欧拉方法，它的变化规律为 $O(1/M)$，$M \to \infty$。

在我们的测试计算中，项 $\eta^{M,0}$ ell 主导了误差估计器。该项包含来自椭圆误差估计器的贡献。尤其值得注意的是，项 η_Ψ 和 $\eta_{\delta\psi}$ 的行为不像 $O(1/M^2)$。步长似乎存在某种对数依赖关系。其他后验误差估计中也已知此类依赖关系，参见例如 [21]。

可在 GitHub 上找到复现本文表格的 Matlab/Octave 程序：
https://github.com/TorstenLinss/LOR2023。

参考文献

[1] M. Bieterman 和 I. Babuˇska。抛物型方程的有限元方法。I. 后验误差估计。Numer. Math., 40(3):339–371, 1982。[2] M. Bieterman 和 I. Babuˇska。抛物型方程的有限元方法。II. 后验误差估计与自适应方法。Numer. Math., 40(3):373–406, 1982。[3] F. H. Chipman。A-稳定 Runge-Kutta 过程。Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT), 11:384–388, 1971。[4] A. Demlow 和 N. Kopteva。奇异摄动椭圆反应-扩散问题的最大范数后验误差估计。Numer. Math., 133(4):707–742, 2016。[5] A. Demlow、O. Lakkis 和 C. Makridakis。抛物型问题最大范数下的后验误差估计。SIAM J. Numer. Anal., 47(3):2157–2176, 2009。[6] A. Demlow 和 Ch. Makridakis。抛物型问题的尖锐局部点态后验误差估计。Math. Comp., 79(271):1233–1262, 2010。[7] B. L. Ehle。用于数值求解微分方程组的高阶 A-稳定方法。Nordisk Tidskr. Informationsbehandling (BIT), 8:276–278, 1968。

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	5.977e-4	1.39	5.528e-2	1/92
128	2.512e-4	1.25	2.357e-2	1/94
256	1.137e-4	1.14	1.073e-2	1/94
512	5.387e-5	1.08	5.095e-3	1/95
1024	2.619e-5	1.04	2.479e-3	1/95
2048	1.291e-5	1.02	1.223e-3	1/95
4096	6.409e-6	1.01	6.071e-4	1/95
8192	3.193e-6	1.01	3.025e-4	1/95
16384	1.594e-6	1.00	1.510e-4	1/95

(a) 欧拉

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	2.006e-4	1.93	1.680e-2	1/84
128	5.068e-5	1.98	4.301e-3	1/85
256	1.269e-5	2.00	1.088e-3	1/86
512	3.174e-6	2.00	2.736e-4	1/86
1024	7.935e-7	2.00	6.863e-5	1/86
2048	1.984e-7	2.00	1.720e-5	1/87
4096	4.959e-8	2.00	4.307e-6	1/87
8192	1.240e-8	2.00	1.078e-6	1/87
16384	3.093e-9	2.00	2.700e-7	1/87

(b) Crank-Nicolson 方法

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	1.986e-4	1.92	1.873e-2	1/94
128	5.024e-5	1.98	4.849e-3	1/97
256	1.259e-5	2.00	1.240e-3	1/99
512	3.148e-6	2.00	3.155e-4	1/100
1024	7.871e-7	2.00	8.002e-5	1/102
2048	1.968e-7	2.00	2.026e-5	1/103
4096	4.919e-8	2.00	5.126e-6	1/104
8192	1.231e-8	2.00	1.296e-6	1/105
16384	3.033e-9	2.02	3.276e-7	1/108

(c) 外推欧拉

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	2.092e-4	1.94	2.495e-2	1/119
128	5.261e-5	1.99	6.621e-3	1/126
256	1.314e-5	2.00	1.719e-3	1/131
512	3.285e-6	2.00	4.415e-4	1/134
1024	8.209e-7	2.00	1.126e-4	1/137
2048	2.052e-7	2.00	2.862e-5	1/139
4096	5.129e-8	2.00	7.256e-6	1/141
8192	1.282e-8	2.00	1.837e-6	1/143
16384	3.205e-9	2.00	4.648e-7	1/145

(d) BDF-2

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	2.426e-4	1.85	2.120e-2	1/87
128	6.392e-5	1.92	5.612e-3	1/88
256	1.649e-5	1.95	1.462e-3	1/89
512	4.201e-6	1.97	3.773e-4	1/90
1024	1.061e-6	1.98	9.669e-5	1/91
2048	2.669e-7	1.99	2.467e-5	1/92
4096	6.692e-8	2.00	6.278e-6	1/94
8192	1.676e-8	2.00	1.595e-6	1/95
16384	4.185e-9	2.00	4.044e-7	1/97

(e) Lobatto IIIC

M	e_M	p_M	$\eta^{M,0}$	χ_M
64	2.112e-4	1.92	1.924e-2	1/91
128	5.354e-5	1.98	4.949e-3	1/92
256	1.344e-5	1.99	1.257e-3	1/94
512	3.363e-6	2.00	3.175e-4	1/94
1024	8.412e-7	2.00	7.996e-5	1/95
2048	2.103e-7	2.00	2.011e-5	1/96
4096	5.259e-8	2.00	5.053e-6	1/96
8192	1.315e-8	2.00	1.269e-6	1/97
16384	3.287e-9	2.00	3.190e-7	1/97

(f) SDIRK

表 1：误差、估计量和效率，测试问题 (26)

M	η_{init}	η_f	$\eta^{M,0}_{\text{, ell}}$	η_Ψ	$\eta_{\delta\psi}$
64	1.789e-4	1.392e-3	1.496e-2	8.159e-3 (1.71)	2.677e-4 (1.89)
128	4.474e-5	3.474e-4	3.836e-3	2.321e-3 (1.81)	7.175e-5 (1.90)
256	1.118e-5	8.677e-5	9.704e-4	6.313e-4 (1.88)	1.913e-5 (1.91)
512	2.796e-6	2.168e-5	2.440e-4	1.680e-4 (1.91)	5.082e-6 (1.91)
1024	6.990e-7	5.419e-6	6.117e-5	4.400e-5 (1.93)	1.345e-6 (1.92)
2048	1.748e-7	1.355e-6	1.531e-5	1.142e-5 (1.95)	3.550e-7 (1.92)
4096	4.369e-8	3.386e-7	3.831e-6	2.949e-6 (1.95)	9.343e-8 (1.93)
8192	1.092e-8	8.466e-8	9.581e-7	7.590e-7 (1.96)	2.453e-8 (1.93)
16384	2.731e-9	2.116e-8	2.396e-7	1.949e-7 (1.96)	6.424e-9 (1.93)

表 2：BD F-2：误差估计器的组成，测试问题 (26)

[8] K. Eriksson 和 C. Johnson. 抛物型问题的自适应有限元方法。II. $L_\infty L_2$ 和 $L_\infty L_\infty$ 中的最优误差估计。SIAM J. Numer. Anal., 32(3):706–740, 1995.[9] A. Friedman. 抛物型偏微分方程。Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1964.[10] Ch. Grossmann, H.-G. Roos 和 M. Stynes. 偏微分方程的数值处理。Universitext. Springer, Berlin, 2007.[11] C. Johnson, Yi Yong Nie 和 V. Thom´ee. 抛物型问题后向欧拉离散化的后验误差估计与自适应时间步控制。SIAM J. Numer. Anal., 27(2):277–291, 1990.[12] N. Kopteva. 各向异性网格上奇异摄动反应扩散问题的最大范数后验误差估计。SIAM J. Numer. Anal., 53(6):2519–2544, 2015.[13] N. Kopteva 和 T. Linß. 利用椭圆重构对抛物型问题进行最大范数后验误差估计。SIAM J. Numer. Anal., 51(3):1494–1524, 2013.[14] N. Kopteva 和 T. Linß. 线性与半线性抛物方程的改进最大范数后验误差估计。Adv. Comput. Math., 43(5):999–1022, 2017.[15] O.A. Ladyzhenskaya, V.A. Solonnikov 和 N.N. Ural'tseva. 线性与拟线性抛物型方程。American Mathematical Society, 1968.[16] M. G. Larson 和 F. Bengzon. 有限元法：理论、实现与应用，计算科学与工程丛书第 10 卷。Springer, Heidelberg, 2013.[17] T. Linß. 奇异摄动反应扩散问题中非单调有限元法的最大范数误差分析。BIT, 47(2):379–391, 2007.[18] T. Linß. 应用于奇异摄动一维反应扩散问题的任意阶有限元法的后验误差估计。Appl. Math., 59(3):241–256, 2014.[19] T. Linß 和 G. Radojev. 抛物方程外推欧拉/有限元离散化的最大范数后验误差界。arXiv, (2208.08153), 2022.[20] Ch. Makridakis 和 R. H. Nochetto. 抛物型问题的椭圆重构与后验误差估计。SIAM J. Numer. Anal., 41(4):1585–1594, 2003.[21] R. H. Nochetto, A. Schmidt, K. G. Siebert 和 A. Veeser. 单调半线性方程的逐点后验误差估计。Numer. Math., 104(4):515–538, 2006.[22] V. Thom´ee. 抛物型问题的 Galerkin 有限元方法，Springer 计算数学丛书第 25 卷。Springer-Verlag, Berlin, 第二版，2006.[23] G. Wanner. 单隐式 RK 或 Rosenbrock 方法中 γ 的选择。BIT, 20(1):102–106, 1980.