

杰出青年人才发展专项计划年度进展报告书
(2010 年度)

姓名	李会元	课题名称	计算科学中的若干关键数学问题研究	
资助金额	150 万元	课题起止时间	2009 年 9 月-2014 年 8 月	
资助类别	基础研究	所在部门	并行软件与科学计算实验室	
研究工作主要进展和阶段性成果（含论文、研究生培养等）				
项目组在晶格傅立叶变换、三角形区域新的谱与谱元方法研究以及谱与谱元方法总体刚度矩阵条件数估计等方向获得了重要研究成果。具体内容有以下方面： - 对Laplace、Helmholtz等椭圆型方程在经由三角形或单纯形谱/谱元离散后得到的刚度矩阵和质量矩阵的特征值进行探讨，估计了总体刚度矩阵的条件数。特别是就总体刚度矩阵的迹（矩阵对角元素之和，也即其全部特征值的和）进行了详细研究，得出了其上、下界的紧致估计，揭示它们了同网格几何量与基函数代数量之间的关系。一方面，它为我们今后谱元的自适应方法研究提供了方向和思路，另一方面，它为三角形和单纯形等基本区域上的Laplace特征方程的迹（前n个特征值之和）的上界估计提供了方法和结果。该部分合作研究成果已整理成文。 - 应用Sturm-Liouville 特征微分方程及广义Koornwinder 正交多项式，得到了三角形区域上的代数多项式L^2 和H^1 正交投影逼近的最佳误差估计，并构造了Laplace 方程和双调和方程的Koornwinder谱方法逼近格式，得到了其收敛性的最佳估计。相应论文已发表。				

- 构造了从矩形到三角形的一种新的坐标变换，它把矩形的一个顶点变成三角形的一个中点；由此建立了三角形上一种全新的谱方法，并发展了其对应的三角形谱元方法；我们从理论上证实了该变换为一类对称变换，它在正交多项式及相应Gauss求积公式的构造研究上有着十分重要的价值；证明这种新的谱方法的谱收敛性质；在实现上，只需对矩形上传统的张量积Legendre拟谱方法稍加修改即可得到三角形上新的谱方法求解格式，因而新方法具备了极大的便利性。 部分先期工作已经发表。
- 把完全张量积基底的有理谱和谱元素方法推广到四面体区域上，证明了该方法的谱逼近性质及其最优收敛阶，并用于Laplace 方程、Helmoltz 方程等偏微分方程的高效数值求解。相应论文已发表 。
- 研究了二维平面上基于时间-频率域上各类晶格组合及其相应对称性的傅立叶分析及离散傅立叶变换理论，特别得到了30-60-90度三角形上的特征函数系，发现了新的Chebyshev多项式和相应的新求积公式，拓展了Gauss求积公式的概念和理论。相应论文已发表。
- 利用Lattice（晶格）和DFT（离散傅立叶变换） 方法深入研究了高维区域Lattice 基本区域上的离散傅立叶变换、求积公式和差值，并通过对称群及齐次坐标等工具建立了维单纯形上的求积公式和差值；通过类似于一维情况下的坐标变换，把三角函数变成曲面单纯形区域上的代数(广义Chebyshev)多项式，并由此建立了代数多项式的Gauss 和Gauss-Lobatto 求积公式及其相应的差值理论，并给出了插值基函数的紧致表达公式。相应论文已发表。

学术交流情况学术报告与会议组织

- Numerical issues in the simulations of complex fluids. 美国南卡罗来纳大学数学系 Xiaofeng Yang 博士, 2010年5月24日。
- Centroidal Voronoi Tessellations and Optimal Triangulations. 宾夕法尼亚州立大学数学系杜强教授, 2010年6月23日。
- Preconditioning on the PDE Eigen Problems. 中国科学院软件研究所 孙家昶研究员, 2010年8月16日。
- Some Thoughts on Cubature Formulas. 俄勒冈大学数学系 Yuan Xu教授, 2010年8月16日。
- Sparse Spectral Methods for High-Dimensional Problems. 普渡大学数学系 Jie Shen教授, 2010年8月16日。
- Stochastic implicit interface method for fluid-structure interactions. 宾夕法尼亚州立大学数学系杜强教授, 2010年9月3日。
- Approximation on the Voronoi Cells of the A_d Lattice. 密苏里州立大学数学系 Xingping Sun教授, 2010年8月26日。
- Construction and applications of Loop subdivision wavelets and frames. 吉林大学数学学院李强 副教授, 2010年8月26日。

受邀报告

A Legendre Spectral Method for the Electromagnetic Scattering from a Cavity. The First Cross-strait Workshop on Computational Mathematics (海峡两岸2010年计算数学学术研讨会), 2010年8月3-6日, 厦门大学。

A New Triangular Spectral Element Method. International Conference On Scientific Computing in Aerodynamics, 2010年11月26-28日, 北京航空航天大学。

研究生培养:

在读研究生二名, 新招收博士生一名。

发表论文:

- Discrete Fourier analysis on fundamental domain of Ad lattice and on simplex in d-variables, Huiyuan Li and Yuan Xu. Journal of Fourier Analysis and its Applications, 16(3), 383-433, 2010. doi: 10.1007/s00041-009-9106-9.
- Optimal error estimates in Jacobi-weighted Sobolev spaces for polynomial approximations on the triangle, Huiyuan Li and Jie Shen. Mathematics of Computation, 79, 1621-1646, 2010. doi: 10.1090/S0025-5718-09-02308-4.
- Discrete Fourier analysis with lattices on planar domains, Huiyuan Li, Jiachang Sun and Yuan Xu. Numerical Algorithm, 55(2-3), 279-300, 2010. doi: 10.1007/s11075-010-9388-7.
- A new spectral method on triangles, Youyun Li, Li-Lian Wang, Heping Ma and Huiyuan Li. In Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 237-246, 2010.
- A spectral method on tetrahedra using rational basis functions, Huiyuan Li and Li-Lian Wang, International Journal of Numerical Analysis and Modelling. 7(2): 330-355, 2010.
- 一类非张量积区域快速傅里叶变换算法在国产并行机上的可扩展性测试, 余元、张云泉、李会元. 数值计算与计算机应用, 31(2), 123-130, 2010.

以下是2009年发表论文（补充部分）

- A triangular spectral element method using fully tensorial rational basis functions, Jie Shen, Li-Lian Wang, Huiyuan Li. SIAM Journal on Numerical Analysis, 47(3), 1619-1650, 2009. doi: 10.1137/070702023.
- Cubature formula and interpolation on the cubic domain, Huiyuan Li, Jiachang Sun, and Yuan Xu. Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications. 2(2), 119-152, 2009.
- Discrete Fourier analysis on a dodecahedron and a tetrahedron, Huiyuan Li and Yuan Xu. Mathematics of Computation, 78(266), 999-1029, 2009. doi: 10.1090/S0025-5718-08-02156-X.
- Chebyshev-Legendre spectral method for solving the two-dimensional vorticity equations with homogeneous Dirichlet conditions, Hua Wu, Heping Ma and Huiyuan Li. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 25(3), 740 -755, 2009. doi: 10.1002/num.20371.
- 平行六边形区域非均匀节点快速傅立叶变换, 李明亮, 李会元, 孙家昶. 数值计算与计算机应用, 30(1), 58-69, 2009.

下一年度工作计划，包括国内外合作与交流计划

2011年项目组计划在以下方面开展研究工作：

- 高维各向异性稀疏网格方法。针对高维区域各向异性周期问题研究相应的傅立叶稀疏网格—双曲截面方法，设计稀疏网格上快速傅立叶变换算法、非线性项的反混叠误差计算方法、以及Boltzmann方程等的谱方法逼近求解格式与算法，并编制相应的程序；研究各向异性傅立叶稀疏网格—双曲截面方法的稳定性、误差估计等数值理论分析；
- 晶格傅立叶分析。发展晶格离散傅立叶变换及其基于矩阵基的 Cooley-Tukey 快速傅立叶变换（FFT）算法的一般数学理论，在物理和频率空间中具体选择几类具有应用价值的典型晶格，发展相应的晶格快速傅立叶变换的算法、编制相应程序和软件；把晶格快速傅立叶变换和Gauss求积公式结合起来发展代数信号处理中的多项式变换；发展三维晶格傅立叶分析与正交多项式理论、构造相应的求积公式和插值算法。
- 谱方法研究。探索保持一定物理特性的谱方法与谱元方法，发展基于多项式三角元的间断Galerkin方法，研究刚度矩阵条件数同离散网格的几何参量及多项式基底的代数参量间的定量关系，研究高效的预条件子迭代求解算法；发展Allen-Cahn与Cahn-Hilliard等应用偏微分方程求解的谱方法的MPI并行算法和程序。

拟开展的合作

- 继续与本部门孙家昶研究员、美国俄勒冈大学徐源教授合作，开展傅立叶分析、正交多项式、求积公式和插值的研究。
- 保持与本部门孙家昶研究员、美国宾夕法尼亚州立大学杜强教授的合作，深入开展椭圆型偏微分方程离散格式总体刚度矩阵条件数与网格几何量以及基函数代数数量间的定量分析。
- 与美国南卡大学XiaofengYang博士合作开展流体力学谱/谱元方法的MPI可扩展性并行算法和程序研究。
- 加强同美国普度大学沈捷教授以及新加坡南洋理工大学王立联博士在谱/谱元方法和稀疏网格方面的合作研究。