2. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений

2.1. Собственные векторы и собственные значения

Вспомним определения. В векторном (линейном) пространстве V над полем K задан линейный оператор $A : V \to V$. Требуется найти множество скаляров $\lambda \in K$ и множество соответствующих векторов $\boldsymbol{v} \in V$, которые удовлетворяют соотношению

$$A\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{v}. \tag{2.1}$$

Подходящие значения λ называют собственными значениями (СЗ) оператора. Множество собственных значений образует *спектр оператора* A. Соответствующие векторы $\boldsymbol{v}$ называются собственными векторами (СВ) или, если V это линейное пространство функций, собственными функциями (СФ).

Задача поиска собственных векторов и собственных значений встречается во многих математических приложениях. Некоторые из них:

- *Метод разделения переменных (Фурье)* для уравнений в частных производных требует поиска СФ и СЗ задачи Штурма – Лиувилля, а решение представляется в виде ряда по собственным функциям.

- *Спектральный метод* является дискретным аналогом метода разделения переменных. В численной методике СФ и СЗ ищутся численно, а эволюция отдельных мод рассчитывается как решение ОДУ.

- В рамках *спектральной теории графов* исследуется спектр матрицы смежности графа, собственные значения которой являются важными инвариантами графа.

- *Цепи Маркова* строятся на основе матриц переходных вероятностей. Спектры матриц переходов позволяет классифицировать марковские процессы.

- *Анализ вибраций/резонансных частот* конструкций необходим при оценке динамической прочности. Резонансные частоты напрямую связаны с собственными значениями.

- *Метод главных компонент* требует поиска СВ и СЗ ковариационной матрицы. Спектральная декомпозиция матриц в целом имеет большое значение во многих задачах.

- При решении *систем гиперболических уравнений* собственные векторы показывают характеристические направления.

Во многих прикладных задачах не требуется нахождение полного спектра оператора. Часто достаточно найти только несколько максимальных (или минимальных) по модулю собственных значений, в некоторых задачах необходимо знать только нижнюю и верхнюю оценки спектра оператора. В рамках курса, посвященного итерационным методам решения систем линейных уравнений, самым важным фактом для нас является то, что спектр матрицы СЛАУ напрямую влияет на скорость сходимости различных итерационных методов. Также спектр матрицы позволяет определить оптимальные итерационные параметры для обеспечения самой быстрой сходимости.

Степенной метод позволяет найти максимальное по модулю собственное значение (спектральный радиус матрицы) и соответствующий ему собственный вектор. Зададим случайный вектор $\boldsymbol{v}^{(0)}$ и рассмотрим следующую итерационную процедуру:

$$\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)} = A\boldsymbol{v}^{(k)}, \qquad \boldsymbol{v}^{(k+1)} = \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}}{||\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}||}, \tag{2.2}$$

вторым действием выполняется простая нормировка вектора $||\boldsymbol{v}|| = \sqrt{(\boldsymbol{v},\, \boldsymbol{v})}$. Итерации сходятся к собственному вектору, который соответствует максимальному по модулю собственному значению матрицы A. Почему это работает?

Пусть собственные значения матрицы A равны $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$, а соответствующие собственные векторы $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$. Для любого начального приближения $\boldsymbol{v}^{(0)}$ существует разложение по собственным векторам оператора:

$$\boldsymbol{v}^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{w}, \qquad \boldsymbol{w} \in \mathrm{Ker}A,$$

независимо от того, является ли матрица вырожденной и является ли исходная система собственных векторов полной. Перед СВ в сумме даже не нужны коэффициенты, поскольку СВ можно отмасштабировать. Тогда если многократно подействовать оператором A на начальное приближение $\boldsymbol{v}^{(0)}$, то получим

$$A^k\boldsymbol{v}^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \lambda^k \boldsymbol{v}_i.$$

При стремлении k к бесконечности в данной сумме быстрее всего растет слагаемое, соответствующее максимальному собственному значению, к нему и сходятся итерации. Текущее приближение для собственных значений можно получить по формуле

$$\lambda^{(k)} = \frac{\left(A\boldsymbol{v}^{(k)},\, \boldsymbol{v}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{v}^{(k)},\, \boldsymbol{v}^{(k)}\right)}. \tag{2.3}$$

Итерации можно завершить после достижения необходимой точности по $\lambda^{(k)}$, когда отличия $\lambda^{(k)}$ между итерациям становятся меньше некоторого порогового значения $\varepsilon \ll 1$.

Обратный степенной метод позволяет найти собственное значение, наиболее близкое к наперед заданному значению μ. Пусть собственные значения матрицы A равны $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$, а соответствующие собственные векторы $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$. Рассмотрим матрицу $A_1 = A - \mu E$, где E — единичная матрица. Легко убедиться, что матрица A_1 имеет тот же набор собственных векторов $\boldsymbol{v}_i$, но им соответствуют собственные значения $\lambda_i - \mu$. Возьмем обратную матрицу $A_2 = A_1^{-1} = (A - \mu E)^{-1}$, для матрицы A_2 собственные векторы остались прежними, а собственные значения стали обратными $\frac{1}{\lambda_i - \mu}$. Применим теперь обычный степенной метод к матрице A_2:

$$\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)} = (A - \mu E)^{-1}\boldsymbol{v}^{(k)}, \qquad \boldsymbol{v}^{(k+1)} = \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}}{||\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}||}. \tag{2.4}$$

Метод сходится к собственному вектору, соответствующему максимальному по модулю собственному значению из набора $\frac{1}{|\lambda_i - \mu|}$, или, что эквивалентно, минимальному из набора $|\lambda_i - \mu|$, то есть самому близкому к значению μ. Оценка собственных значений на каждой итерации получается по формуле (2.3). Критерий остановки аналогичен предыдущему пункту.

Метод итераций Рэлея улучшает обратный степенной метод путем использования нового приближения к собственному значению на каждой итерации. Путь, как и ранее, задан случайный вектор $\boldsymbol{v}^{(0)}$, и известно начальное приближение для собственного значения $\lambda^{(0)}$. Итерационная процедура выглядит следующим образом:

$$\begin{gathered} \tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)} = \left(A - \lambda^{(k)} E\right)^{-1}\boldsymbol{v}^{(k)}, \qquad \boldsymbol{v}^{(k+1)} = \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}}{||\tilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}||}, \\ \lambda^{(k+1)} = \frac{\left(A\boldsymbol{v}^{(k+1)},\, \boldsymbol{v}^{(k+1)}\right)}{\left(\boldsymbol{v}^{(k+1)},\, \boldsymbol{v}^{(k+1)}\right)}. \end{gathered} \tag{2.5}$$

За счет обновления приближения в ходе итераций, метод итераций Рэлея имеет более быструю сходимость по сравнению с обратным степенным методом.

Важная заметка! Если в формулах встречается запись $A^{-1}\boldsymbol{v}$, то в коде не нужно вычислять обратную матрицу. Это очень дорогостоящая операция, и не всегда осуществимая. Выражение $A^{-1}\boldsymbol{v}$ означает «найти решение системы линейных уравнений $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}$». Поэтому вместо выражений вроде `x := A.inverse() * v` следует писать `x := solve(A, v)`.

Если матрица A трёхдиагональная, то матрица $A - \mu E$ также является трёхдиагональной. Соответственно, вектор $(A - \mu E)^{-1}\boldsymbol{v}$ является решением системы с трёхдиагональной матрицей. Таким образом, самый оптимальный метод вычисления — метод прогонки.

Сеточные операторы. Методы поиска собственных векторов и собственных значений рассмотрим на примере дифференциальных операторов, которые встречаются в уравнениях математической физики. Численно мы может работать только с конечномерными пространствами, поэтому сначала необходимо провести дискретизацию области, а затем выписать сеточные (дискретные) аппроксимации дифференциальных операторов.

Далее рассматриваются одномерные задачи, дискретизация проводится методом конечных объемов. Разобьем отрезок $[0,\, l]$ на n сегментов равной длины, которые будем называть ячейками. Длину ячейки обозначим как $h = l/n$. Ячейки будем нумеровать целыми индексами $i = \overline{1,\, n}$. Центры ячеек обозначим как x_i, а границы ячеек полуцелыми индексами $x_{i\pm\frac{1}{2}}$. Внутри каждой ячейки задано значение сеточной функции u_i, которое можно рассматривать как усредненное значение некоторой гладкой функции $u(x)$ внутри ячейки.

1. Рассмотрим классический дифференциальный оператор, который встречается в курсе уравнений математической физики при решении задачи Штурма – Лиувилля:

$$\mathcal{L}u = -\frac{d^2}{dx^2}u, \qquad\qquad u(x) : \quad \begin{cases} \alpha_L\, u\big|_{x=0} - \beta_L\, u_x\big|_{x=0} = 0, \\ \alpha_R\, u\big|_{x=l} + \beta_R\, u_x\big|_{x=l} = 0. \end{cases} \tag{2.6}$$

Дифференциальный оператор $\mathcal{L}$ является самосопряженным и положительно-определенным, то есть все его собственные значения положительны (кроме случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$, когда оператор вырожден и имеется нулевое собственное значение).

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{h^2}\left[\begin{array}{ll} \dfrac{2\alpha_L h}{2\beta_L + \alpha_L h}\, u_1 + (u_1 - u_2), & i = 1, \\ (u_i - u_{i-1}) + (u_i - u_{i+1}), & i = \overline{2,\, n-1}, \\ (u_n - u_{n-1}) + \dfrac{2\alpha_R h}{2\beta_R + \alpha_R h}\, u_n, & i = n. \end{array}\right. \tag{2.7}$$

Сеточный оператор можно представить в виде трёхдиагональной матрицы. Сеточный оператор L, также как $\mathcal{L}$, является самосопряженным (матрица симметрична) и положительно-определенным (за исключением случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$), поэтому все его собственные значения являются положительными.

2. Полиномы Лежандра являются собственными функциями оператора

$$\mathcal{L}u = -\frac{d}{dx}\big(1 - x^2\big)\frac{d}{dx}, \qquad\qquad \lim_{x\to\pm1}\, \big(1 - x^2\big)\, u_x = 0. \tag{2.8}$$

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{h^2}\begin{cases}\left(1-h^2\right)(u_1-u_2), & i=1,\\ \left(1-x^2_{i-\frac{1}{2}}\right)(u_i-u_{i-1})+\left(1-x^2_{i+\frac{1}{2}}\right)(u_i-u_{i+1}), & i=\overline{2,\, n-1},\\ \left(1-(1-h)^2\right)(u_n-u_{n-1}), & i=n.\end{cases} \tag{2.9}$$

Оба оператора $\mathcal{L}$ и L являются является самосопряженным и положительно-определенным, все собственные значения положительны.

3. Рассмотрим радиальную часть оператора Лапласа в полярных координатах. Линейный дифференциальный оператор $\mathcal{L}$ определен на множестве ограниченных функций $u(r)$ на отрезке $r \in [0,\, R]$, удовлетворяющих однородным граничным условиям:

$$\mathcal{L}u = -\frac{1}{r}\frac{d}{dr}r\frac{du}{dr}, \qquad u(r): \quad \begin{cases}\lim\limits_{r\to 0} ru_r = 0,\\ \alpha u\big|_{r=R}+\beta u_r\big|_{r=R}=0.\end{cases} \tag{2.10}$$

Оператор $\mathcal{L}$ является положительно определенным, кроме случая $\alpha = 0$, когда имеется нулевое собственное значение. Также оператор $\mathcal{L}$ является самосопряженным при интегрировании с весом $\rho(r) = r$.

Для дискретизации воспользуемся методом конечных объемов. Разобьем круг $r < R$ на n концентрических колец, которые будем называть ячейками. Ячейки нумеруем целыми индексами, а границы ячеек полуцелыми, $r_{i\pm\frac{1}{2}}$ — границы i-ой ячейки. Толщину каждой ячейки можно выбрать одинаковой $h = R/n = r_{i+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}}$. Введем «объем ячейки» υ_i и «центр ячейки» r_i через интегралы по кольцу:

$$\upsilon_i = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r\,dr = \frac{1}{2}\left(r^2_{i+\frac{1}{2}} - r^2_{i-\frac{1}{2}}\right), \qquad r_i = \frac{1}{\upsilon_i}\int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^2\,dr = \frac{1}{3\upsilon_i}\left(r^3_{i+\frac{1}{2}} - r^3_{i-\frac{1}{2}}\right). \tag{2.11}$$

Сеточная функция, как и ранее, задается путем усреднения по ячейке:

$$u_i = \frac{1}{\upsilon_i}\int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} u(r)r\,dr. \tag{2.12}$$

Легко заметить, что при линейной реконструкции функции внутри ячейки её следует представлять в форме $u_j(r) = u_j + s\cdot(r - r_j)$, где s — произвольный наклон (производная). В этом случае усреднение по j-ой ячейке будет давать значение u_j, независимо от наклона. При оценке производной на границе ячейки $r_{j+\frac{1}{2}}$ требуем, чтобы наклоны в соседних ячейках j и $j+1$ совпадали, тогда $s = u'\left(r_{j+\frac{1}{2}}\right) = (u_{j+1} - u_j)/(r_{j+1} - r_j)$. На границе области требуем выполнения граничных условий.

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{v_i}\begin{cases} r_{1+\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_1-u_2}{r_2-r_1}, & i=1,\\ r_{i-\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_i-u_{i-1}}{|r_i-r_{i-1}|}+r_{i+\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_i-u_{i+1}}{|r_{i+1}-r_i|}, & i=\overline{2,\,n-1},\\ r_{n-\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_n-u_{n-1}}{|r_n-r_{n-1}|}+\dfrac{\alpha R\,u_n}{\beta+\alpha(R-r_n)}, & i=n. \end{cases} \tag{2.13}$$

Сеточный оператор L является положительно определенным, кроме случая $\alpha = 0$, когда имеется нулевое собственное значение. Оператор L является самосопряженным относительно скалярного произведения, введенного с билинейной формой $V = \mathrm{diag}(v_1,\, v_2,\, \dots, v_n)$. То есть матрица оператора L не является симметричной, но матрица VL является симметричной.

Для интересующихся. Это хорошо, что задачу удалось свести к работе с симметричными/самосопряженными матрицами. Многие алгоритмы гораздо эффективнее работают именно с самосопряженными матрицами. В данном случае, вместо решения классической задачи на собственные значения $Lu = \lambda u$, где L — матрица общего вида, а спектр матрицы ищется в поле комплексных чисел, можно перейти к обобщенной задаче на собственные значения вида:

$$Au = \lambda V u, \qquad \text{где } A = VL. \tag{2.14}$$

В обобщенной задаче на собственные значения матрицы A и V являются симметричными, а значит спектр является вещественным. Если говорить о практическом применении данных знаний: модуль scipy.sparse.linalg содержит отдельные функции для поиска собственных значений для матриц общего вида (функция eigs) и для поиска собственных значений для самосопряженных матриц, в том числе для обобщенной задачи на собственные значения (функция eigsh). При известных ограничениях на матрицу и её спектр лучше использовать специализированную функцию eigsh.

4. Рассмотрим радиальную часть оператора Лапласа в сферических координатах. Линейный дифференциальный оператор $\mathcal{L}$ определен на множестве ограниченных функций $u(r)$ на отрезке $r \in [0,\, R]$, удовлетворяющих однородным граничным условиям:

$$\mathcal{L}u = -\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{du}{dr}, \qquad\qquad u(r): \quad \begin{cases} \lim\limits_{r\to 0} r u_r = 0,\\ u\big|_{r=R} = 0. \end{cases} \tag{2.15}$$

Оператор $\mathcal{L}$ является положительно определенным и самосопряженным при интегрировании с весом $\rho(r) = r^2$.

Дискретизацию проводим на ячейки в виде сферических слоев. Аналогично плоскому случаю в полярных координатах вводим «объем ячейки» υ_i и «центр ячейки» r_i:

$$\upsilon_i = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^2\,dr = \frac{1}{3}\Big(r^3_{i+\frac{1}{2}} - r^3_{i-\frac{1}{2}}\Big), \qquad r_i = \frac{1}{\upsilon_i}\int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^3\,dr = \frac{1}{4\upsilon_i}\Big(r^4_{i+\frac{1}{2}} - r^4_{i-\frac{1}{2}}\Big). \tag{2.16}$$

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{\upsilon_i}\begin{cases} r^2_{1+\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_1-u_2}{r_2-r_1}, & i=1,\\ r^2_{i-\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_i-u_{i-1}}{|r_i-r_{i-1}|} + r^2_{i+\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_i-u_{i+1}}{|r_{i+1}-r_i|}, & i=\overline{2,\,n-1},\\ r^2_{n-\frac{1}{2}}\,\dfrac{u_n-u_{n-1}}{|r_n-r_{n-1}|} + \dfrac{\alpha R^2\,u_n}{\beta+\alpha(R-r_n)}, & i=n. \end{cases} \tag{2.17}$$

Сеточный оператор L является положительно определенным и самосопряженным относительно скалярного произведения, введенного с билинейной формой $V = \mathrm{diag}(\upsilon_1,\,\upsilon_2,\,\ldots,\upsilon_n)$. Аналогично случаю полярных координат можно поставить обобщенную задачу на собственные значения (2.14).

Лабораторная работа.

В лабораторной работе требуется численно найти 5 – 6 собственных функций для дифференциального оператора, которые соответствуют минимальным собственным значениям. Для поиска использовать итерационный метод Рэлея, начальные приближения собственных значений подбираются вручную. При выполнении работы допускается использование встроенных решателей систем линейных уравнений на python для вычисления векторов $A^{-1}b$.

За выполнение лабораторной можно получить от 5 до 9 баллов. 5 баллов дается за базовое выполнение: каким-то образом для какой-то сетки получены собственные функции и собственные значения. Собственные функции, найденные численно, построены рядом с аналитическими, и вроде как они похожи. Дополнительные баллы:

1 балл	Вычислены погрешности и показан порядок аппроксимации.
1 балл	Были использованы разреженные матрицы и решение найдено на сетке с размером от 5 тысяч ячеек.
1 балл	За «быстрое заполнение» разреженных матриц (без циклов).
1 балл	Собственные функции также получены с помощью встроенной функции `eigsh`.
3 балла	Для отбитых, если задача решена без использования разреженных матриц и встроенных решателей систем линейных уравнений на python, то есть используется самописный алгоритм прогонки.

Задачи к лабораторной работе.

1.1. Левый конец струны закреплен, а правый конец может перемещаться свободно в перпендикулярном направлении. Линейная плотность струны равна ρ, а на свободном конце подвешена бусина массы m. Масса бусины равна четверти веса всей струны $m = \frac{1}{4}\rho l$. Определить форму стоячих волн струны. *Горюнов, Том 1, задача 2.11.*

$$\begin{cases} X'' = -\lambda\tilde{\rho}(x)X, \quad 0 < x < l, \\ X(0) = 0, \quad X'(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + \dfrac{m}{\rho}\delta(x - l). \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни} \quad \mu \operatorname{tg} \mu = \frac{\rho l}{m}.$$

1.2. В центре струны, закрепленной за два конца, подвешена бусина массы m. Линейная плотность струны равна ρ, а масса бусины равна половине веса всей струны $m = \frac{1}{2}\rho l$. Определить форму стоячих волн струны. *Горюнов, Том 1, задача 2.8.*

$$\begin{cases} X'' = -\lambda\tilde{\rho}(x)X, \quad -l < x < l, \\ X(-l) = X(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + \dfrac{m}{\rho}\delta(x). \end{cases}$$

Решение задачи распадается на две серии:

$$\begin{aligned} &X_k(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}(l - |x|), \qquad && \lambda_k = \left(\frac{\mu_k}{l}\right)^2, \qquad && \mu_k \text{ — корни} \quad \mu \operatorname{tg} \mu = \frac{2\rho l}{m}, \\ &X_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}x, && \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, && n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Собственные значения из двух серий чередуются начиная с $\lambda_{k=1}$.

1.3. Концы неоднородной струны ($0 < x < l$) зафиксированы. Плотность левой половины струны ($x < l/2$) в 4 раза меньше плотности правой половины ($x \geq l/2$). Определить форму стоячих волн струны. *Горюнов, Том 1, задача 2.7.1.*

$$\begin{cases} X'' = -\lambda\tilde{\rho}(x)X, \quad 0 < x < l, \\ X(0) = X(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + 3\eta(2x - l). \end{cases}$$

Общий вид собственных функций задачи:

$$X(x) = \begin{cases} \sin\sqrt{\lambda}x, & x < \dfrac{l}{2}, \\ B(\lambda)\sin\Big(2\sqrt{\lambda}(l-x)\Big), & x \geq \dfrac{l}{2}. \end{cases}$$

Собственные значения λ разделяются на три серии:

$$\sqrt{\lambda_k} = \frac{(2k-1)\pi \mp \arccos\frac{1}{3}}{l}, \qquad k \in \mathbb{N}, \qquad B(\lambda_k) = \frac{1}{2\cos\frac{\sqrt{\lambda_k}l}{2}},$$
$$\sqrt{\lambda_n} = \frac{2\pi n}{l}, \qquad n \in \mathbb{N}, \qquad B(\lambda_n) = \frac{(-1)^{n+1}}{2}.$$

Собственные значения возрастают при чередовании значений из трех серий. Сначала идут значения из серии λ_k с минусом, потом λ_k с плюсом, затем λ_n.

1.4. Разложение в классические ряды Фурье осуществляется по собственным функциям, которые являются решением краевой задачи с периодическими граничными условиями.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, \quad -l < x < l, \\ X(-l) = X(l). \end{cases}$$

Положительные собственные значения λ_n вырождены и имеет кратность равную двум. Таким образом, каждому собственному значению $\lambda_n > 0$ соответствует пара линейно-независимых собственных функций $X_n^{(1)}$ и $X_n^{(2)}$. В качестве пары таких функций удобно выбрать одну четную (косинус) функцию и одну нечетную (синус):

$$X_n^{(1)}(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}\,x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N},$$
$$X_n^{(2)}(x) = \cos\sqrt{\lambda_n}\,x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Пусть для произвольного начального приближения метод Рэлея сходится к собственному значению λ_n. Метод не гарантирует сходимости к конкретной функции $X_n^{(1)}$ или $X_n^{(2)}$, в результате итераций, вероятнее всего, будет получена некоторая линейная комбинация этих функций $X_n(x)$. Восстановить $X_n^{(1)}$ и $X_n^{(2)}$ можно путем симметризации:

$$X_n^{(1)}(x) \sim \frac{X_n(x) - X_n(-x)}{2}, \qquad X_n^{(2)}(x) \sim \frac{X_n(x) + X_n(-x)}{2}.$$

1.5. Края круглой мембраны радиуса r_0 могут свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{dR}{dr} = -\lambda R(r), \quad 0 < r < r_0, \\ R'(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} rR'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$R_n(r) = J_0\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad J_1(\mu) = 0.$$

1.6. Края круглой мембраны радиуса r_0 закреплены через пружину. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{dR}{dr} = -\lambda R(r), \quad 0 < r < r_0, \\ 20R(r_0) + r_0R'(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} rR'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$R_n(r) = J_0\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad 20J_0(\mu) = \mu J_1(\mu).$$

1.7. В точке $x = 0$ одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы $(-l < x < l)$ находится полупроницаемая потенциальная перегородка с коэффициентом проницаемости $\alpha = 50/l$. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в таком поле. *Горюнов, Том 1, задача 2.63.*

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x)\right]\psi = \lambda\psi(x), \quad -l < x < l, \\ \psi(-l) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи распадается на две серии:

$$\begin{aligned} &\psi_k(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}(l - |x|), && \lambda_k = \left(\frac{\mu_k}{l}\right)^2, && \mu_k \text{ — корни } \quad \mu\operatorname{ctg}\mu = -\frac{\alpha l}{2}, \\ &\psi_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}x, && \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, && n \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Собственные значения из двух серий чередуются начиная с $\lambda_{k=1}$.

1.8. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме $(-l < x < l)$. В части ямы $x > l/3$ потенциал равен $U_0 = 900/l^2$. Определить первые уровни энергии частицы, которые превышают значения U_0. Найти соответствующие волновые функции стационарных состояний частицы с такими энергиями.

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0\,\eta(3x-l)\right]\psi = \lambda\psi(x), \quad 0 < x < l, \\ \psi(0) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи для $\lambda > U_0$:

$$\lambda_n = \left(\frac{3\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \psi_n(x) = \begin{cases} \sin\dfrac{2\sqrt{\lambda_n - U_0}\,l}{3}\sin\sqrt{\lambda_n}x, & x < \dfrac{l}{3}, \\ \sin\dfrac{\sqrt{\lambda_n}l}{3}\,\sin\left(\sqrt{\lambda_n - U_0}\,(l-x)\right), & x \geq \dfrac{l}{3}, \end{cases}$$

где μ_n — корни $\quad \sqrt{\mu^2 - p^2}\,\operatorname{tg}\mu + \mu\operatorname{tg}\left(2\sqrt{\mu^2-p^2}\right) = 0, \quad p = \dfrac{l\sqrt{U_0}}{3} = 10.$

Последнее уравнение имеет бесконечное число положительных корней $\mu_n > p$, что эквивалентно условию $\lambda_n > U_0$.

1.9. В центре круговой потенциальной ямы ($r < r_0$) задан потенциал $V(r) = 4/r^2$. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в таком поле.

$$\begin{cases} \left(-\dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{d}{dr} + V(r)\right)\psi(r) = \lambda\psi(r), \quad 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} r\,\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решения выражаются через функции Бесселя 2-го порядка:

$$\psi_n(r) = J_2\!\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad J_2(\mu) = 0.$$

1.10. Частица находится в потенциальной яме с потенциалом $U = +\infty$ при $x < 0$ и постоянным потенциалом $U_0 = 400/l^2$ при $x > l$. Найти уровни энергии связанных состояний частицы и соответствующие волновые функции. *Горюнов, Том 1, задача 2.64.*

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0\,\eta(x-l)\right]\psi = \lambda\psi(x), \quad 0 < x, \\ \psi(0) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty}\psi(x) = 0. \end{cases}$$

В связанном состоянии находятся частицы, которые нельзя обнаружить на бесконечности, в данной задаче это частицы с энергиями $\lambda < U_0$. Вообще говоря, для произвольного потенциала U_0 не очевидно, что такие состояния есть. Численное моделирование провести в области $x \in [0,\, 2l]$ с заданием нулевого условия на правой границе.

Точное решение задачи:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,l}\,\sin\sqrt{\lambda_n}x, & x < l, \\ \sin\left(\sqrt{\lambda_n}\,l\right)e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,x}, & x \geq l. \end{cases}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \sin\mu = \pm\frac{\mu}{\mu_0}, \text{ такие что } \operatorname{tg}\mu < 0, \quad \mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20,$$

Уравнение на константы μ имеет конечное число корней до $\mu < \mu_0$, что эквивалентно условию связанного состояния $\lambda < U_0$.

1.11. В неглубокой потенциальной яме ($-l < x < l$) находится частица. Потенциал вне ямы равен $U_0 = 400/l^2$. Найти уровни энергии связанных состояний частицы и соответствующие волновые функции. Задачу решать в ограниченной области $[-2l,\, 2l]$ с заданием нулевых граничных условий. *Горюнов, Том 1, задача 2.65.*

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0\,\eta(|x| - l)\right]\psi = \lambda\psi(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \lim\limits_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

В решении чередуются квантовые состояния с четными

$$\psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,l}\,\cos\sqrt{\lambda_n}x, & x < l, \\ \cos\left(\sqrt{\lambda_n}\,l\right)e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,|x|}, & x \geq l. \end{cases}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \cos\mu = \pm\frac{\mu}{\mu_0}, \text{ такие что } \operatorname{tg}\mu > 0, \quad \mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20,$$

и нечетными волновыми функциями:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,l}\,\sin\sqrt{\lambda_n}x, & x < l, \\ \sin\left(\sqrt{\lambda_n}\,l\right)e^{-\sqrt{U_0-\lambda_n}\,|x|}\,\operatorname{sgn}(x), & x \geq l. \end{cases}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \sin\mu = \pm\frac{\mu}{\mu_0}, \text{ такие что } \operatorname{tg}\mu < 0, \quad \mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20,$$

1.12. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в треугольной потенциальной яме $U(x > 0) = \alpha^3\,x$, где α — характеристика наклона.

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + \alpha^3\,x\right]\psi = \lambda\psi(x), & 0 < x, \\ \psi(0) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

Задачу следует моделировать в ограниченной области $x \in [0,\, l]$ с заданием нулевого условия на правой границе. Использовать $l \gg 1/\alpha$, к примеру, $l = 15/\alpha$. Точное решение:

$$\psi_n(x) = \mathrm{Ai}(\alpha x - \mu_n), \qquad \lambda_n = \alpha^2 \mu_n, \qquad \mu_n \text{ — корни } \ \mathrm{Ai}(-\mu) = 0,$$

где Ai — функция Эйри.

1.13. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы внутри параболической потенциальной ямы (гармонический осциллятор). Потенциал $U(x) = \omega^2 x^2$.

$$\begin{cases} \left[-\dfrac{d^2}{dx^2} + U(x)\right]\psi = \lambda\psi(x), \quad x \in \mathbb{R}, \\ \lim\limits_{x\to\infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

Задачу следует моделировать в ограниченной области $x \in [-l,\, l]$ с заданием нулевых условий на границах. Использовать $l \gg 1/\omega$, к примеру, $l = 8/\omega$. Точное решение:

$$\psi_n(x) = \exp\left(-\frac{\omega^2 x^2}{2}\right) H_n\big(\sqrt{\omega} x\big), \qquad \lambda_n = (2n+1)\,\omega.$$

где H_n — полиномы Эрмита.

1.14. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме ($r < r_0$).

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r^2}\dfrac{d}{dr} r^2 \dfrac{d\psi}{dr} = -\lambda\psi(r), \quad 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} r\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$\psi_n(r) = \frac{\sin\sqrt{\lambda_n} r}{r}, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{r_0}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.15. Полиномы Лежандра встречаются при решении задач математической физики в сферических координатах. Найти первые полиномы Лежандра как решение задачи на собственные функции:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dx}\big(1 - x^2\big)\dfrac{du}{dx} = -\lambda u(x), \quad -1 < x < 1, \\ \lim\limits_{x\to\pm 1} \big(1 - x^2\big) u'(x) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи через полиномы Лежандра $P_n(x)$:

$$u_n(x) = P_n(x), \qquad \lambda_n = n(n+1), \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.16. Присоединенные функции Лежандра встречаются при решении задач математической физики в сферических координатах. В частности, через них вводятся сферические функции. Присоединенные функции Лежандра являются ограниченными решениями следующей задачи на собственные функции:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dx}\big(1-x^2\big)\dfrac{du}{dx} - \dfrac{m^2}{1-x^2} = -\lambda u(x), \quad -1 < x < 1, \\ \lim\limits_{x\to\pm 1} \big(1-x^2\big)u'(x) = 0. \end{cases}$$

Найти присоединенные функции Лежандра P_n^m для $m = 1$ как решение задачи на собственные функции и собственные значения.

$$u_n(x) = P_n^m(x), \quad \lambda_n = n(n+1), \quad n \in \mathbb{N}, \quad n \geq m.$$

Относительно простые задачи.

1.17. Струна длины l зафиксирована с двух концов. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, \quad 0 < x < l, \\ X(0) = X(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}\, x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.18. Концы струны длины l могут свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам. *Итерационный метод Рэлея без модификаций не позволяет найти нулевое собственное значение, его можно проигнорировать.*

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, \quad 0 < x < l, \\ X'(0) = X'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \cos\sqrt{\lambda_n}\, x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.19. Левый конец струны зафиксирован, а правый может свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, \quad 0 < x < l, \\ X(0) = 0, \quad X'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}\,x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi(2n+1)}{2l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.20. Левый конец струны зафиксирован, а правый конец струны закреплен через пружину. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, \quad 0 < x < l, \\ X(0) = 0, \quad 3X(l) + lX'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}\,x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad \mu + 3\operatorname{tg}\mu = 0.$$

1.21. Круглая мембрана радиуса r_0 закреплена по краю. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{dR}{dr} = -\lambda R(r), \quad 0 < r < r_0, \\ R(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} rR'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$R_n(r) = J_0\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad J_0(\mu) = 0.$$

1.22. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ($0 < x < l$).

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} = -\lambda\psi(x), \quad 0 < x < l, \\ \psi(0) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Волновые функции:

$$\psi_n(x) = \sin\sqrt{\lambda_n}\,x, \qquad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.23. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой круглой потенциальной яме ($r < r_0$).

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{d\psi}{dr} = -\lambda\psi(r), \quad 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} r\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$\psi_n(r) = J_0\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad J_0(\mu) = 0.$$

1.24. Функции Бесселя 1-го порядка встречаются при решении задач математической физики в полярных координатах. К примеру, задача о колебаниях закрепленной мембраны. Найти собственные функции, соответствующие наименьшим собственным значениям.

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}r\dfrac{d}{dr}R(r) - \dfrac{1}{r^2}R(r) = -\lambda R(r), \quad 0 < r < r_0, \\ R(r_0) = 0, \qquad \lim\limits_{r\to 0} rR'(r) = 0. \end{cases}$$

Решения выражаются через функции Бесселя 1-го порядка:

$$R_n(r) = J_1\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \qquad \mu_n \text{ — корни } \quad J_1(\mu) = 0.$$