СИММЕТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРАЛЬНАЯ ПРОБЛЕМА

Бибердорф Элина Арнольдовна

Симметрическая спектральная задача

$$Av = \lambda v, \quad A = A^*$$

Theorem (Вейль)

Пусть $A = A^*$, $\triangle A = \triangle A^*$, $\widetilde{A} = A + \triangle A$. Тогда

$$\begin{array}{ll} \lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_M & \text{– с.зн.} A, \\ \widetilde{\lambda}_1 \le \widetilde{\lambda}_2 \le \dots \le \widetilde{\lambda}_M & \text{– с. зн. } \widetilde{A} \end{array} \implies |\widetilde{\lambda}_n - \lambda_n| \le \|\triangle A\|$$

Симметрическая спектральная задача

$$Av = \lambda v, \quad A = A^*$$

Theorem (Вейль)

Пусть $A = A^*$, $\triangle A = \triangle A^*$, $\widetilde{A} = A + \triangle A$. Тогда

$$\left.\begin{array}{ll} \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_M & \text{– с.зн.} A, \\ \widetilde{\lambda}_1 \leq \widetilde{\lambda}_2 \leq \dots \leq \widetilde{\lambda}_M & \text{– с. зн. } \widetilde{A} \end{array}\right. \implies \quad |\widetilde{\lambda}_n - \lambda_n| \leq \mathbf{1}\|\triangle A\|$$

Вариационный принцип Фишера-Куранта

$A = A^*$

$$\lambda_{n-k} = \min_{\substack{\|q_i\| = 1,\\ i = 1,\dots,k}} \max_{\substack{\|x\| \neq 0\\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

$$\lambda_{k+1} = \max_{\substack{\|q_i\| = 1,\\ i = 1,\dots,k}} \min_{\substack{\|x\| \neq 0\\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

Следствие вариационного принципа

$A = A^*,\ B = B^*,\ (Ax, x) \geq (Bx, x) \qquad \Longrightarrow \lambda_j(A) \geq \lambda_j(B)$

Доказательство теоремы Вейля.

Из определения матричной нормы

$$\|\Delta A\| = \sup \frac{(\Delta A x, x)}{(x, x)}$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A x, x) \le \|\Delta A\|(x, x) = (\|\Delta A\| x, x).$$

Используя это, получаем

$$(\widetilde{A} x, x) = ((A + \Delta A)x, x) = (Ax, x) + (\Delta A x, x) \le$$

$$\le (Ax, x) + \|\Delta A\|(x, x) = ((A + \|\Delta A\| \cdot I)x, x)$$

Применим следствие принципа Фишера-Куранта к матрицам $\widetilde{A}$ и $A + \|\Delta A\| \cdot I$:

$$\widetilde{\lambda}_j \le \lambda_j + \|\Delta A\|, \qquad j = 1, \dots, n.$$

Упражнение. Доказать оценку снизу

$$\widetilde{\lambda}_j \ge \lambda_j - \|\Delta A\|,$$

используя аналогичный подход.

Упрощение

$$\mathrm{PAP^* = S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}}$$

Если

$$\mathrm{Av = \lambda v},$$

то

$$\mathrm{AP^*Pv = \lambda v}$$

Упрощение

$$PAP^* = S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

Если

$$Av = \lambda v,$$

то

$$PAP^*Pv = \lambda Pv$$

Упрощение

$$PAP^* = S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

Если

$$Av = \lambda v,$$

то

$$SPv = PAP^*Pv = \lambda Pv$$

Упрощение

$$PAP^* = S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

Если

$$Av = \lambda v,$$

то

$$Sw = SPv = PAP^*Pv = \lambda Pv = \lambda w$$

Лемма о нулях главных миноров

$$T = \begin{pmatrix} d_1 & c_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}, \quad b_j c_j > 0$$

$$D_M(\lambda) = \mathsf{det}(T - \lambda I) = 0.$$

Полагаем
$c_{M+1} = 1$, $D_0(\lambda) = 1 \implies D_k(\lambda) = (d_k - \lambda)D_{k-1}(\lambda) - b_k c_k D_{k-2}(\lambda)$

Lemma (о перемежаемости)

Нули $D_k(\lambda)$ вещественны и различны.
Между двумя соседними нулями $D_{j+1}(\lambda)$ есть в точности один нуль $D_j(\lambda)$

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_j < \mu_j < \lambda_{j+1}$$

Лемма о нулях главных миноров

Доказательство по индукции:
$D_1(\lambda) = d_1 - \lambda = 0 \Longrightarrow \lambda^* = d_1$

$$D_2(\lambda) = (d_1 - \lambda)(d_2 - \lambda) - b_2c_2 =$$

$$= \lambda^2 - \lambda(d_1 + d_2) + d_1d_2 - b_2c_2$$

Коэффициент при старшей степени D_2 положителен $\Rightarrow$ ветви параболы направлены вверх.

$$D_2(\lambda^*) =$$

$$= (d_1 - \lambda^*)(d_2 - \lambda^*) - b_2c_2 = -b_2c_2 < 0$$

– парабола пересекает ось абсцисс – основание для индукции

Лемма о нулях главных миноров

Доказательство по индукции:
$D_1(\lambda) = d_1 - \lambda = 0 \Longrightarrow \lambda^* = d_1$

$$D_2(\lambda) = (d_1 - \lambda)(d_2 - \lambda) - b_2c_2 =$$

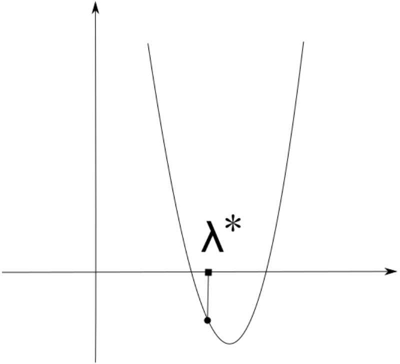
$$= \lambda^2 - \lambda(d_1 + d_2) + d_1d_2 - b_2c_2$$

Коэффициент при старшей степени D_2 положителен $\Rightarrow$ ветви параболы направлены вверх.

$$D_2(\lambda^*) =$$

$$= (d_1 - \lambda^*)(d_2 - \lambda^*) - b_2c_2 = -b_2c_2 < 0$$

– парабола пересекает ось абсцисс – $\boxed{\text{основание для индукции}}$



Лемма о нулях главных миноров

Пусть для $D_j(\lambda)$ $(j \leq k-1)$ лемма доказана:

1)$\lambda < 0$, $|\lambda| >> 1 \Longrightarrow D_j(\lambda) > 0$, т.к. $D_j(\lambda) = (-\lambda)^j + \dots$

2)Пусть $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{k-2} < \lambda_{k-1}$ – корни $D_{k-1}(\lambda)$ $\Rightarrow \forall\ (\lambda_i,\ \lambda_{i+1})\ \exists!$ нуль $D_{k-2}(\lambda)$:

$$D_{k-2}(\lambda_1) > 0$$

$$D_{k-2}(\lambda_i) D_{k-2}(\lambda_{i+1}) < 0$$

Лемма о нулях главных миноров

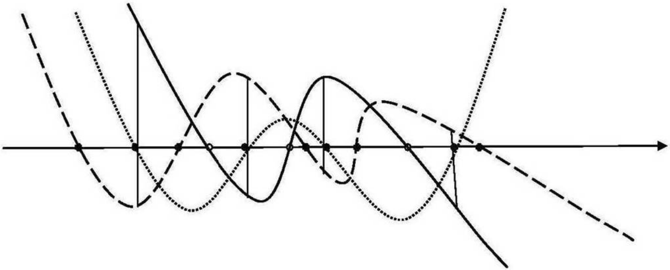
Переходим к k-му минору.

Вычисляем $D_k(\lambda_1)$, разлагая по k-ой строке (k-му столбцу)

$$D_k(\lambda_1) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_1) + d_k D_{k-1}(\lambda_1) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_1) < 0$$

$$\Rightarrow \quad D_k(-\infty) > 0$$

$\Longrightarrow$ на интервале $(-\infty,\ \lambda_1)$
есть хотя бы один корень $D_k(\lambda)$.

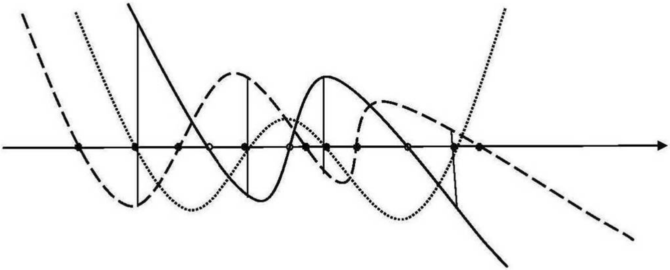


Лемма о нулях главных миноров

Сравниваем знаки D_k в соседних нулях D_{k-1}:

$$D_k(\lambda_i) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_i), \;\; D_{k-2}(\lambda_i) D_{k-2}(\lambda_{i+1}) < 0 \implies D_k(\lambda_i) D_k(\lambda_{i+1}) < 0$$

Значит между точек λ_i D_k меняет знак $\Rightarrow$ имеем $n-1$ корень.

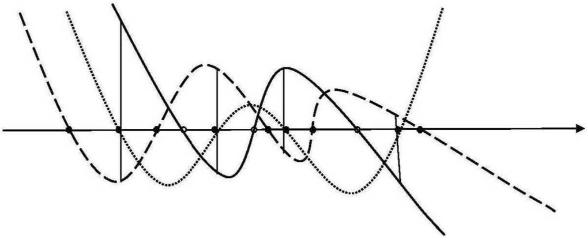


Лемма о нулях главных миноров

При $\lambda \to \infty$ $\quad D_k(\lambda)D_{k-2}(\lambda) > 0,$ $\quad$ т.к. $(-\lambda)^k(-\lambda)^{k-2} = \lambda^{2k-2}$

Но $D_k(\lambda_i) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_i) \Longrightarrow D_k(\lambda_{k-1})D_{k-2}(\lambda_{k-1}) < 0$

$\Longrightarrow$ на интервале $(\lambda_{k-1},\ \infty)$ есть хотя бы один корень полинома $D_k(\lambda)$.



Лемма доказана

Определение последовательности Штурма

$$D_k(\lambda) = (d_k - \lambda)D_{k-1}(\lambda) - b_k c_k D_{k-2}(\lambda)$$

$$\frac{|c_{k+1}|D_{k-1}(\lambda)}{D_k(\lambda)} = \frac{|c_{k+1}|}{d_k - \lambda - |b_k||c_k|D_{k-2}(\lambda)/D_{k-1}(\lambda)}$$

$$\boxed{\mathcal{P}_k(\lambda) = \frac{|c_{k+1}|D_{k-1}(\lambda)}{D_k(\lambda)} \qquad (1 \le k \le M)}$$

Последовательность Штурма

Рекуррентные соотношения:

$$\mathcal{P}_1(\lambda) = \frac{|c_2|}{d_1 - \lambda}$$

$$\mathcal{P}_k(\lambda) = \frac{|c_{k+1}|}{d_k - \lambda - |b_k|\mathcal{P}_{k-1}(\lambda)}$$

Метод бисекций

Theorem (Штурм)

$\forall\ \lambda_0$ число $\lambda < \lambda_0 : D_M(\lambda) = 0$ (с.зн. T) $=$ числу $\mathcal{P}_j(\lambda_0) \le 0,\ j = 1, \dots, M$

Задача: вычислить $\lambda_j(S)$

1) $\lambda_j(S) \in [X^-, X^+]$

2) $y = \dfrac{X^+ - X^-}{2}$, $\mathcal{P}_j(y)$
$+ - - + \cdots + -+ \Rightarrow l$ минусов

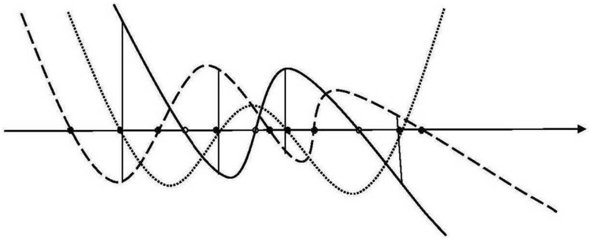
3) if $l \ge j \implies X^+ := y$
if $l < j \implies X^- := y$

Доказательство теоремы Штурма

$\mathcal{P}_1(\lambda),\ \mathcal{P}_2(\lambda),\ \ldots,\ \mathcal{P}_\mathrm{M}(\lambda) \Leftrightarrow + - - + \cdots - -+$

$$\mathcal{P}_\mathrm{j}(\lambda) = |c_{\mathrm{j}+1}|\frac{\mathrm{D}_{\mathrm{j}-1}(\lambda)}{\mathrm{D}_\mathrm{j}(\lambda)}, \qquad \mathrm{D}_\mathrm{j}(\lambda) = (-\lambda)^\mathrm{j} + \ldots$$

If $\lambda_0 < 0,\ |\lambda_0| >> 1 \Longrightarrow +,\ +,\ \ldots,\ +$
If $\lambda_0 > 0,\ |\lambda_0| >> 1 \Longrightarrow -,\ -,\ \ldots,\ -$
$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_\mathrm{M}$ – корни $\mathrm{D}_\mathrm{M}(\lambda)$,



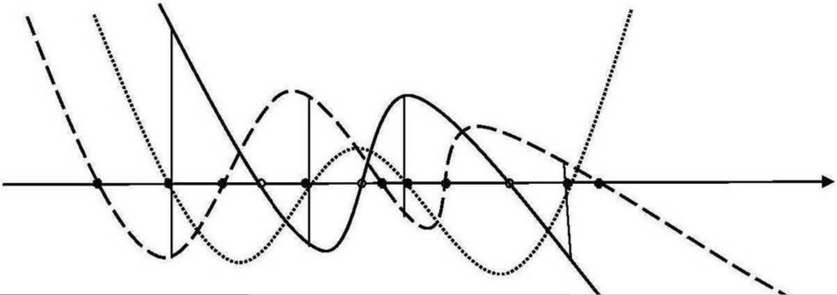
Доказательство теоремы Штурма

1. λ^* корень $\mathrm{D_M}(\lambda)$ и не корень $\mathrm{D_j}(\lambda)$ $(1 \leq \mathrm{j} \leq \mathrm{M} - 1) \Longrightarrow$ в λ^*

$\mathcal{P}_\mathrm{M}(\lambda) = \dfrac{|\mathrm{c_{M+1}}|\mathrm{D_{M-1}}(\lambda)}{\mathrm{D_M}(\lambda)}$ меняет знак с "+" на "−",

$\mathcal{P}_\mathrm{j}(\lambda) = \dfrac{|\mathrm{c_{j+1}}|\mathrm{D_{j-1}}(\lambda)}{\mathrm{D_j}(\lambda)}$ $(1 \leq \mathrm{j} \leq \mathrm{M} - 1)$ сохраняют знаки.

В последовательности появляется дополнительный "−"



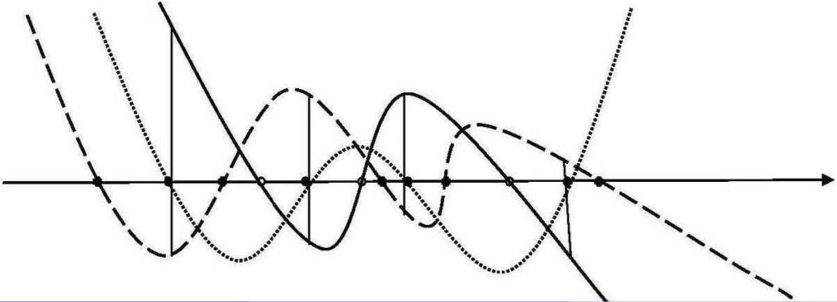
Доказательство теоремы Штурма

2. λ^* корень $\mathrm{D_j}(\lambda)$ $(\mathrm{j} < \mathrm{M})$ и не корень $\mathrm{D_k}(\lambda)$ для $\mathrm{k} \neq \mathrm{j}$.

$$\mathcal{P}_\mathrm{j}(\lambda) = |\mathrm{c_{j+1}}| \frac{\mathrm{D_{j-1}}(\lambda)}{\mathrm{D_j}(\lambda)}, \qquad \mathcal{P}_\mathrm{j+1}(\lambda) = |\mathrm{c_{j+2}}| \frac{\mathrm{D_j}(\lambda)}{\mathrm{D_{j+1}}(\lambda)}$$

в λ^*: $\mathcal{P}_\mathrm{j}(\lambda) \quad + \longrightarrow -, \qquad \mathcal{P}_\mathrm{j+1}(\lambda) \quad - \longrightarrow +$

Число знаков в последовательности НЕ меняется

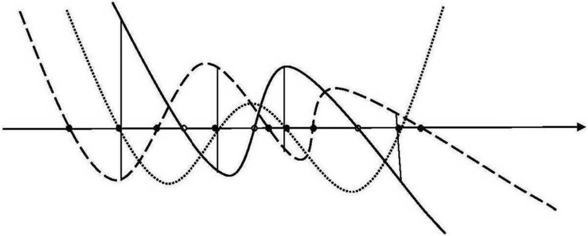


Доказательство теоремы Штурма

3. λ^* корень двух полиномов $D_j(\lambda)$ и $D_k(\lambda)$ при $j < k$ ($\Longrightarrow k \neq j+1$)
If $k = M$, то правее λ^*: на M-м месте добавляется
"$-$" $(j+1)$-й на j-ю позицию "$-$"сдвигается.
If $k < M$, то рассматриваем две пары функций

$$\mathcal{P}_j(\lambda), \quad \mathcal{P}_{j+1}(\lambda), \qquad\qquad \mathcal{P}_k(\lambda), \quad \mathcal{P}_{k+1}(\lambda)$$

$\Rightarrow$ два "$-$"сдвигаются влево с $(j+1)$-й на j-ю, с $(k+1)$-й на k-ю.



Безаварийное вычисление

$$S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{P}_1^{[c]}(\lambda) = |b_2| \oslash (d_1 \ominus_0 \lambda),$$
$$\mathcal{P}_j^{[c]}(\lambda) = |b_{j+1}| \oslash (d_j \ominus_0 \lambda \ominus_0 |b_j| \otimes \mathcal{P}_{j-1}^{[c]}(\lambda)),$$
$$\mathcal{P}_M^{[c]}(\lambda) = 1 \oslash (d_M \ominus_0 \lambda \ominus_0 |b_M| \otimes \mathcal{P}_{M-1}^{[c]}(\lambda)).$$

[c] – "computation"

$$a \ominus_0 b = \begin{cases} a \ominus b & \text{при } a \ominus b \neq 0, \\ \dfrac{\varepsilon_1}{\gamma} \max\{|a|, |b|\} & \text{при } a \ominus b = 0, \end{cases}$$

Безаварийное вычисление

Lemma

Пусть

$$\varepsilon_1 \geq 2\gamma \max\left\{\sqrt[4]{\varepsilon_0}\,,\ \sqrt[4]{\frac{2}{\varepsilon_\infty}}\right\},$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{d_i}| \leq 1, \quad \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{b_j}| \leq 1,$$

$$-3 \leq \lambda \leq 3$$

$\Rightarrow$ нет ПЕРЕПОЛНЕНИЙ:

$$\varepsilon_0 < \frac{\varepsilon_1^4}{2\gamma^4} \leq \left|\mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{[\mathrm{c}]}\right| \leq \frac{\gamma^3}{\varepsilon_1^3} < \varepsilon_\infty.$$

Безаварийное вычисление

Lemma

Пусть

$$\varepsilon_1 \geq 2\gamma \max\left\{ \sqrt[4]{\varepsilon_0}\ ,\ \sqrt[4]{\frac{2}{\varepsilon_\infty}} \right\},$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{d_i}| \leq 1, \quad \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{b_j}| \leq 1,$$

$$-3 \leq \lambda \leq 3$$

$\Rightarrow$ нет ПЕРЕПОЛНЕНИЙ:

$$\varepsilon_0 < \frac{\varepsilon_1^4}{2\gamma^4} \leq \left| \mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{[\mathrm{c}]} \right| \leq \frac{\gamma^3}{\varepsilon_1^3} < \varepsilon_\infty.$$

Замечание. If S удовл. усл. леммы

$$\frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{d_i}| \leq 1, \quad \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |\mathrm{b_j}| \leq 1,$$

$\Rightarrow \|\mathrm{S}\| \leq \mathcal{M}(\mathrm{S}) \leq 3 \Rightarrow -3 \leq \lambda \leq 3$

Обратный анализ погрешностей

$$a \otimes b = ab(1+\psi) + \xi.$$

$$a \oslash b = \frac{a}{b}(1+\varphi), \quad |\varphi| \le \varepsilon_1,$$

$$a \ominus_0 b = (1+\alpha)a - (1+\overline{\alpha})b,$$

где $|\alpha| \le \varepsilon_1, \quad |\overline{\alpha}| \le \varepsilon_1, \quad |(1+\alpha)/(1+\overline{\alpha}) - 1| \le \varepsilon_1/\gamma.$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1^{[c]} &= \frac{|\overline{c}_2|}{\overline{d}_1 - \lambda}, \\ \mathcal{P}_j^{[c]} &= \frac{|\overline{c}_{j+1}|}{\overline{d}_j - \lambda - |\overline{b}_j|\mathcal{P}_{j-1}^{[c]}}, \\ \mathcal{P}_M^{[c]} &= \frac{|\overline{c}_{M+1}|}{\overline{d}_M - \lambda - |\overline{b}_M|\mathcal{P}_{M-1}^{[c]}}. \end{aligned}$$

$$\overline{S} = \begin{pmatrix} \overline{d}_1 & \overline{c}_2 & & 0 \\ \overline{b}_2 & \overline{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \overline{c}_M \\ 0 & & \overline{b}_M & \overline{d}_M \end{pmatrix}$$

Обратный анализ погрешностей

$$\overline{S} = \begin{pmatrix} \overline{d}_1 & \overline{c}_2 & & 0 \\ \overline{b}_2 & \overline{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \overline{c}_M \\ 0 & & \overline{b}_M & \overline{d}_M \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{S} = \begin{pmatrix} \widetilde{d}_1 & \widetilde{b}_2 & & 0 \\ \widetilde{b}_2 & \widetilde{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \widetilde{b}_M \\ 0 & & \widetilde{b}_M & \widetilde{d}_M \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{d}_i = \overline{d}_i \qquad \widetilde{b}_j = \mathrm{sign}(b_j)\sqrt{|\overline{b}_j \overline{c}_j|}$$

$$\overline{D}_M(\lambda) = \widetilde{D}_M(\lambda)$$

$$\Delta S = S - \widetilde{S} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \eta_2 & & 0 \\ \eta_2 & \beta_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \eta_M \\ 0 & & \eta_M & \beta_M \end{pmatrix}$$

$$|\eta_j| \le \varepsilon_1 \frac{3 - \varepsilon_1}{1 - 2\varepsilon_1}, \quad |\beta_i| \le \frac{\varepsilon_1}{\gamma} + \frac{\varepsilon_0}{1 - 2\varepsilon_1} \Rightarrow \|\triangle S\| \le \mathcal{M}(\triangle S) \le 7\varepsilon_1$$

Алгоритм Штурма с гарантированной оценкой точности

1)нормировать S:

$$\rho = \gamma^{k}, \qquad \frac{1}{\gamma} \le \max_{i,j} \{|\rho d_i| \ , \ |\rho b_j|\} < 1 \qquad \Rightarrow \ S_1 = \rho S, \qquad \|S_1\| \le 3$$

2) “возмутить “матрицу $S_1 \to S_2$: if $|\rho d_i| \ , \ |\rho b_j| < \varepsilon_1/\gamma \ \rho d_i \ , \ \rho b_j \ \longrightarrow \ \pm\varepsilon_1/\gamma$
3)метод бисекций для S_2

Theorem

Пусть в $\{\mathcal{P}_j^{[c]}(\lambda)\}$ $(j = 1, \dots, M)$ p неположительных $\Longrightarrow$

$$\lambda_p(S_2) < \lambda + 7\varepsilon_1, \qquad \lambda - 7\varepsilon_1 \le \lambda_{p+1}(S_2).$$

Критерий остановки итераций:
$\lambda_n \in [X^-, X^+]$, $X^+ - X^- \le \varepsilon$
$|\widetilde{\lambda}_n - \lambda_n| \le \|\widetilde{S}_2 - S_2\| \Longrightarrow \varepsilon \approx \|\widetilde{S}_2 - S_2\| \Rightarrow \varepsilon = 3 \cdot 7\varepsilon_1 = 21\varepsilon_1$
$\lambda_n^{[c]}(S_2) = (X^+ - X^-)/2 \Rightarrow \lambda_n(S_2) \in [\lambda_n^{[c]}(S_2) - \delta, \lambda_n^{[c]}(S_2) + \delta]$ $\delta = 10.5\varepsilon_1$

Пример 1

$$S_k = \begin{pmatrix} d & b & & & 0 \\ b & d & b & & \\ & b & d & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b \\ 0 & & & b & d \end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{l} D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2, \\ \dots \\ D_k(\lambda) = (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda). \end{array}$$

Разностные уравнения

$$D_k(\lambda) - (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda) = 0$$

начальные значения:

$$\begin{array}{l} D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2. \end{array}$$

Решение разностных уравнений

$$au_{k+1} + bu_k + cu_{k-1} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_k = \alpha q_1^k + \beta q_2^k,$$

α, $\beta = \mathrm{const}$; q_1 и q_2 – корни характ. ур-я

$$aq^2 + bq + c = 0.$$

В нашем случае характ. ур-е:

$$q^2 - (d - \lambda)q + b^2 = 0,$$

его корни

$$q_{1,2} = |b| \left[(d - \lambda)/2|b| \pm i\sqrt{1 - ((d - \lambda)/2|b|)^2} \right]$$

Т.к. λ – с.зн. $S_k \quad \Rightarrow \quad d - 2|b| \leq \lambda \leq d + 2|b| \quad \Rightarrow \quad |d - \lambda|/2|b| \leq 1 \quad \Rightarrow$

$$q_{1,2} = |b|(\cos\varphi \pm i \sin\varphi)$$

Решение разностных уравнений

$$u_k = \alpha q_1^k + \beta q_2^k, \qquad q_{1,2} = |b|(\cos\varphi \pm i\sin\varphi),$$

где $\cos\varphi = (d-\lambda)/2|b| \Rightarrow$

$$D_k = (\alpha+\beta)|b|^k \cos k\varphi + i(\alpha-\beta)|b|^k \sin k\varphi$$

Из начальных условий

$$\begin{array}{l} D_1 = d-\lambda = 2|b|\cos\varphi, \\ D_2 = (d-\lambda)^2 - b^2 = b^2(4\cos^2\varphi - 1), \end{array} \qquad \Rightarrow \qquad \left\{ \begin{array}{l} \alpha+\beta = 1, \\ i(\alpha-\beta) = \cos\varphi/\sin\varphi. \end{array} \right.$$

$$D_k = |b|^k(\cos k\varphi + \cos\varphi \sin k\varphi/\sin\varphi) = |b|^k \sin(k+1)\varphi/\sin\varphi.$$

λ с.зн. $S_k \Leftrightarrow D_k(\lambda) = 0$, т. е. $\varphi = n\pi/(k+1)$ $(n = 1, 2, \ldots, k)$
Из $D_1 = d-\lambda = 2|b|\cos\varphi \Rightarrow (d-\lambda)/2|b| = \cos n\pi/(k+1)$.

$$\lambda_n = d - 2|b|\cos\frac{n\pi}{k+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, k)$$

Численный пример

При $d = 0, b = 1/2$ $D_k(-\lambda)$ – полиномы Чебышева второго рода

n	$\lambda_n^{[c]}(S_{10})$	$\lambda_n(S_{10})$	δ
1	-0.959492973614496	-0.959492973614497	10^{-16}
2	-0.841253532831179	-0.841253532831181	10^{-15}
3	-0.654860733945285	-0.654860733945285	10^{-16}
4	-0.415415013001885	-0.415415013001886	10^{-15}
5	-0.142314838273284	-0.142314838273285	10^{-16}
6	0.142314838273284	0.142314838273285	10^{-16}
7	0.415415013001885	0.415415013001886	10^{-15}
8	0.654860733945286	0.654860733945284	10^{-15}
9	0.841253532831180	0.841253532831181	10^{-16}
10	0.959492973614496	0.959492973614497	10^{-16}
ϵ_λ	$5.77316 \cdot 10^{-15}$		

Пример2: оператор Лапласа

Задача на собственные значения оператора Лапласа с уловиями Дирихле

$$\triangle u = \lambda u, \qquad u|_{\Gamma_D} = 0$$

в области $D = [0 \leq x, y \leq 1]$
Дискретная модель:

$$U = R^s, \;\; s = (M-1) \times (N-1), \;\; u_{mn} = u\left(\frac{m}{M}, \frac{n}{N}\right)$$

Шаги дискретизации: $h_x = \dfrac{1}{M}, \qquad h_y = \dfrac{1}{N}$

Дискретный оператор Лапласа $L : U \to U$

$$v_{mn} = Lu_{mn} = \frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{h_x^2} + \frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{h_y^2},$$

Граничные условия:

$$u_{0n} = 0, \;\; u_{m0} = 0, \;\; u_{Mn} = 0, \;\; u_{mN} = 0.$$

Ортонормированный базис собственных функций

Собственные значения

$$\lambda^{(k,l)} = -4M^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2M} - 4N^2 \sin^2 \frac{l\pi}{2N}$$

Собственные функции

$$u^{(k,l)} = 2 \sin \frac{k\pi m}{M} \sin \frac{l\pi n}{N}, \qquad (1 \le k \le M-1, \;\; 1 \le l \le N-1)$$

Упражнение: проверить равенство

$$Lu^{(k,l)} = \left(-4M^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2M} - 4N^2 \sin^2 \frac{l\pi}{2N} \right) u^{(k,l)}$$

Задача в векторно-матричной форме

Пусть $M = N$, $\triangle = h_x = h_y = 1/N \Rightarrow$ аппроксимация ур-я

$$\frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{\triangle^2} + \frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{\triangle^2} = \lambda u_{m,n}$$

$$Au = \lambda u, \qquad A = \begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ C_1 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & C_{N-3} & B_{N-2} & C_{N-2} \\ & & & C_{N-2} & B_{N-1} \end{pmatrix}$$

$$B_n = \begin{pmatrix} \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} \end{pmatrix}, \qquad C_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{\triangle^2} & & & & \\ & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \\ & & & & \frac{1}{\triangle^2} \end{pmatrix}$$

Результаты счета

n	$\lambda_n^{[c]}(A)$	$\lambda_n(A)$	δ
1	−372.5898981088739	−372.5898981088741	10^{-16}
2	−345.3969496365928	−345.3969496365929	10^{-16}
3	−345.3969496365928	−345.3969496365929	10^{-16}
4	−318.2040011643115	−318.2040011643117	10^{-16}
5	−306.1020005821561	−306.1020005821559	10^{-16}
6	−306.1020005821561	−306.1020005821559	10^{-16}
7	−278.9090521098751	−278.9090521098746	10^{-16}
8	−278.9090521098744	−278.9090521098746	10^{-16}
9	−262.4878975267180	−262.4878975267182	10^{-16}
10	−262.4878975267180	−262.4878975267182	10^{-16}
11	−239.6141030554378	−239.6141030554376	10^{-16}
12	−235.2949490544369	−235.2949490544370	10^{-16}
13	−235.2949490544369	−235.2949490544370	10^{-16}
14	−223.1929484722815	−223.1929484722812	10^{-15}
15	−223.1929484722815	−223.1929484722812	10^{-15}
16	−196.0000000000003	−196.0000000000000	10^{-15}
17	−196.0000000000003	−196.0000000000000	10^{-15}
18	−196.0000000000003	−196.0000000000000	10^{-15}
19	−195.9999999999996	−196.0000000000000	10^{-15}
20	−195.9999999999996	−196.0000000000000	10^{-15}
21	−195.9999999999996	−196.0000000000000	10^{-15}
22	−168.8070515277184	−168.8070515277188	10^{-15}
23	−168.8070515277184	−168.8070515277188	10^{-15}

$$(M-1) = (N-1) = 6$$

Результаты счета

24	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
25	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
26	-152.3858969445621	-152.3858969445623	10^{-15}
27	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
28	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
29	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
30	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
31	-85.89799941784440	-85.89799941784410	10^{-15}
32	-85.89799941784374	-85.89799941784410	10^{-15}
33	-73.79599883568837	-73.79599883568822	10^{-15}
34	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
35	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
36	-19.41010189112606	-19.41010189112585	10^{-14}
ϵ	$1.91265\,10^{-11}$		

Уравнение Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\mathrm{E} - \mathrm{U}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}))\psi = 0,$$

$\hbar$ – постоянная Планка,
μ – масса частицы,
$\mathrm{U} = \mathrm{U}(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z})$ – потенциальная энергия.
Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2} + (\mathrm{E} - \frac{\mu\omega_0^2}{2}\mathrm{x}^2)\psi = 0$$

Условие нормировки

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathrm{x})|^2\,\mathrm{dx} = 1$$

ω_0^2 – собственная частота

Уравнение Шредингера: аналитическое решение

Обозначения:

$$\lambda = \frac{2\mathrm{E}}{\hbar\omega_0}, \quad \mathrm{x}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}, \qquad \xi = \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{x}_0}, \quad \varphi(\xi) = \psi(\mathrm{x}_0\xi)$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi = 0, \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\xi)|^2 \, \mathrm{d}\xi = \frac{1}{\mathrm{x}_0}$$

$$\varphi_\mathrm{n}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{x}_0}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\mathrm{H}_\mathrm{n}(\xi)}{\sqrt{2^\mathrm{n}\mathrm{n}!\sqrt{\pi}}}, \qquad \lambda_\mathrm{n} = 2\mathrm{n} + 1, \quad \mathrm{n} = 0, 1, 2\ldots$$

Исходные переменные:

$$\psi_\mathrm{n}(\mathrm{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{x}_0}} \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{x}_0}\right)^2}\mathrm{H}_\mathrm{n}\left(\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{x}_0}\right)}{\sqrt{2^\mathrm{n}\mathrm{n}!\sqrt{\pi}}}, \qquad \mathrm{E}_\mathrm{n} = \hbar\omega_0\left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right), \quad \mathrm{n} = 0, 1, 2\ldots$$

Уравнение Шредингера: дискретная модель

$$u_k = \varphi(k\,\Delta), \qquad \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} \approx \frac{u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}}{\Delta^2}.$$

$$\frac{u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}}{\Delta^2} + (\lambda - (k\Delta)^2)u_k = 0$$

Нормировка$\Rightarrow$

$$v_k = \begin{cases} u_k, & |k| \le N, \\ 0, & |k| > N, \end{cases}, \qquad u_k \approx v_k$$

$$\frac{-2v_{(-N)} + v_{(-N+1)}}{\Delta^2} + (\lambda - (N\Delta)^2)v_{(-N)} = 0,$$

$$\frac{v_{k-1} - 2v_k + v_{k+1}}{\Delta^2} + (\lambda - (k\Delta)^2)v_k = 0, \qquad |k| < N - 1,$$

$$\frac{v_{(N-1)} - 2v_N}{\Delta^2} + (\lambda - (N\Delta)^2)v_N = 0.$$

Уравнение Шредингера

При достаточно большом N ошибка дискретизации $\approx \Delta^2$
Матричный вид системы

$$\mathrm{S}\mathrm{v} = \lambda \mathrm{v}$$

$$\mathrm{s}_{\mathrm{ij}} = \mathrm{s}_{\mathrm{ji}} = \begin{cases} 0, & \mathrm{j} > \mathrm{i}+1, \\ -1/\Delta^2, & \mathrm{j} = \mathrm{i}+1, \\ 2/\Delta^2 + (\mathrm{j}-\mathrm{N}+1)^2\Delta^2, & \mathrm{j} = \mathrm{i}, \end{cases}$$

$$\mathcal{M}(\mathrm{S}) \le \frac{3}{\Delta^2} + (\mathrm{N}+1)^2\Delta^2.$$

$$|\lambda_{\mathrm{n}}(\mathrm{S}) - \lambda_{\mathrm{n}}(\mathrm{S})^{[\mathrm{c}]}| \le 10.5\varepsilon_1\mathcal{M}(\mathrm{S}) \approx \varepsilon_1/\Delta^2$$

$$\begin{array}{lll} \Delta = 10^{-4} & \epsilon \approx 10^{-8}, & \delta_\Delta \approx 10^{-8}, \\ \Delta = 10^{-6} & \epsilon \approx 10^{-4}, & \delta_\Delta \approx 10^{-12}, \\ \Delta = 10^{-8} & \epsilon \approx 1, & \delta_\Delta \approx 10^{-16} \end{array}$$