

BSpecRProblem Notes

Shuang Hu

2022 年 9 月 25 日

注: 如无特殊说明, 本文中的公式编号均为文档 BSpecRProblem.pdf 中的编号, “文档” 也特指 BSpecRProblem.pdf。

1 文档中的一些小问题

- 图 1 上面的叙述中, $x_i = ih$ 存在误导, 文档所述算法的空间离散是在区间中点处进行而非区间端点。
- (11) 式的上标应当为 $n+1$, 而不是 n 。
- (25) 式中, 矩阵 $B = (I + rA)^{-1}(I + rS)$ 。后面关于 B^{-1} 的讨论也有同样的问题。
- (35) 和 (36) 式的符号都有小问题, 应当是 $|\rho(B)| \leq 1$, $|\lambda(B^{-1})| = |1 + \lambda(Q)| \geq 1$ 。

2 关于算法的一些疑问

- 注意到, 本次采用的虽然也是有限差分 MOL 算法, 但取点的方案却和经典的有限差分算法有较大区别。记 n 为小区间段个数, $h = \frac{1}{n}$ 是每一段小区间的长度, 之前我们学过的有限差分算法求解的是 $x_i = ih$ 处函数的近似值, 在处理边界条件时为方便起见, 往往取 $x_{-1} = -h$ 和 $x_{n+1} = (n+1)h$ 为 Ghost Cell。但在本问题的算法中, 我们关心的是每段小区间中点处函数的近似取值, 即 $x_i = (i + \frac{1}{2})h$ 。相应的, Ghost Cell 取为 $x_{-1} := -\frac{1}{2}h$ 和 $x_n := 1 + \frac{1}{2}h$ (文中列方程时实际上消去了 Ghost Cell)。这种处理方案, 相比于传统的有限差分方法, 有哪些优势? 在本问题中为何要采用这种处理方案?
- 按照设定, x_I 点左侧为较快的物理过程, 而 x_I 右侧较慢。那么, 针对两种不一样的物理过程, 为什么采用同样的数值算法进行处理? 可能在 x_I 左侧采用中心差分和向后欧拉, 在 x_I 右侧采用中心差分和向前欧拉, 会是更合理的处理方式。
- 注意到, 式 (24) 的矩阵 A 并非一个分块对角矩阵, 这也就意味着 x_I 的左右两侧并没有完全解耦。这或许是稳定性分析的主要难点?
- 如果考虑到 x_I 左侧和右侧 ν 的显著区别, 那么 $r := \frac{kv}{h^2}$ 至少需要分两段讨论, 即 x_I 左侧和 x_I 右侧的 r 会存在显著区别, 问题会更为复杂一些。

3 稳定性分析问题简述

假设 A 和 S 分别按 (24), (23) 式定义, 记 $B := (I + rA)^{-1}(I + rS)$, 文档中所述算法数值稳定等价于式 (31) 成立, 即序列 $b_n := \|B^n\|_\infty$ 为一个有界序列。而该问题可以转化为证明矩阵 B 的谱半径 $\rho(B) < 1$ 。

由于 B 的表达式较难给出, 因此我们把问题转化为研究 B^{-1} 的模最小特征值。如果能证明 B^{-1} 的模最小特征值的模长大于 1, 那么也就说明了 B 的谱半径小于 1。按文中 (16) 式, 取 $a_{11} = 3, a_{12} = -1$, 可得 $B^{-1} = I + Q$, 其中

$$Q = r \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & -1 & 1 + \frac{1}{1+r^2} & \frac{2r^2-1}{1+r^2} & \frac{-3r^2}{1+r^2} & \frac{r^2}{1+r^2} & \\ & & & -\frac{1}{1+r^2} & 1 + \frac{1-2r^2}{1+r^2} & \frac{2r^2-1}{1+r^2} & -\frac{r^2}{1+r^2} & & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

推导过程见文中等式 (34)。按这种方式, 问题可以转化为证明矩阵 Q 的所有特征值实部大于 0。但这只是一个充分而非必要的条件, 事实上, 只要 Q 的所有特征值 $\lambda(Q)$ 满足:

$$|1 + \lambda(Q)| \geq 1, \quad (2)$$

即可说明稳定性结论成立。

4 参考思路的可行性分析

文档第二部分给了一些参考思路, 在本部分中, 我对这些思路的可行性进行分析和评述。

4.1 秩 1 校正思路

该部分的主要思想是把待分析的矩阵 Q 分解为 $Q = Q_1 + Q_2$, 其中 Q_1 是三对角正定矩阵, Q_2 是秩 1 矩阵, 它们的表达式分别为:

$$Q_1 = r \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, Q_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & & \\ & Q_{4 \times 4} & \\ & & \mathbf{0} \end{bmatrix}, Q_{4 \times 4} = \frac{r^3}{1+r^2} \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

(同文档中式 (37))。由于我们只关心矩阵 Q 的特征值实部是否大于 0，且参数 $r > 0$ ，我们可以把公因子 r 提取出来，转化为分析矩阵 $P := P_1 + \frac{r^2}{1+r^2}P_2$ 的特征值。 P_1, P_2 的表达式分别为：

$$P_1 = \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, P_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & & \\ & P_{4 \times 4} & \\ & & \mathbf{0} \end{bmatrix}, P_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

P_1 的形式比较接近离散拉普拉斯算子的形式，分析其特征值相对比较容易，而 P_2 是一个秩 1 矩阵，也比较易于分析。对于 $P = P_1 + \frac{r^2}{1+r^2}P_2$ ，主要的难点在于 P_2 前面的系数与参数 r 相关。但在分析 P 的特征值时，我们依旧可以利用 P_1 和 P_2 的一些比较好的性质。该思路是我目前的首选思路，下一节的叙述中也会围绕这一条展开。

4.2 利用 Sherman-Morrison 公式给出矩阵 B 的表达式

我认为这一条思路可行性较低。如 (40) 式所示， B 的表达形式过于复杂，且涉及到求两个较复杂矩阵减法的过程，以至于我们很难对矩阵 B 的特征多项式进行分析。

4.3 矩阵的半正定分解

如果我们可以把矩阵 Q 分解为两个半正定矩阵的和，则问题即刻得到解决。但这条思路目前也不是我的首选，原因如下：

- Q 非对称矩阵，而一般讨论正定矩阵都需要在对称阵的框架下进行。在这种情况下，我们需要分解的矩阵不是 Q ，而是更为复杂的 $\frac{Q+Q^t}{2}$ 。
- 数学问题中“举例说明存在”很多时候并非一件容易的事情，特别是在该问题中， Q 的大小，矩阵块 $Q_{4 \times 4}$ 的位置和 r 的取值都是需要考虑的变量。

4.4 考虑其他 (易于计算的) 矩阵范数

文档中表 1 已经表明了直接计算矩阵 B 的 ∞ 范数不可行，而矩阵范数除了 ∞ 范数和 1 范数外都并不易于计算。所以这条思路也不太可行。

5 我的思路

由于 $r \in (0, \infty)$ ，记 $t = \frac{r^2}{1+r^2}$ ，可知 $t \in (0, 1)$ ，我们需要分析的矩阵 $P(t) = P_1 + \frac{r^2}{1+r^2}P_2 = P_1 + tP_2$ 。

首先我们讨论实特征值。分析 $P(t)$ 的特征多项式 $f(\lambda, t) := \det(\lambda I - P(t))$ 。为方便讨论，考虑多项式 $g(\lambda, t) := \det(P(t) - \lambda I)$ ，该多项式的根和 $f(\lambda, t)$ 相同。由于 $\text{rank}(Q_2) = 1$ ，由行列式的性质可知 $g(\lambda, t)$ 关于 t 是一次多项式，从而 $\frac{\partial g}{\partial t} = C(\lambda)$ ， $C(\lambda)$ 仅与 λ 相关。这意味着对于给定的 $\lambda \in \mathbb{R}$ ， $g(\lambda, t)$ 关于 t 单调。

Theorem 1. 给定 $\lambda_0 \in \{\omega \in \mathbb{R} : C(\omega) \neq 0\}$, 存在 $t_0 \in (0, \tau)$ ($\tau > 0$) 使得 λ_0 为 $P(t_0)$ 的特征值, 当且仅当 $g(\lambda_0, 0)g(\lambda_0, \tau) < 0$ 。

证明. ” \Leftarrow ”: 由于 $h(t) := g(\lambda_0, t)$ 为连续函数, 且 $h(0)h(\tau) < 0$, 由零点存在定理, $\exists t_0 \in (0, \tau)$ s.t. $h(t_0) = 0$, 即 $g(\lambda_0, t_0) = 0$, 从而 λ_0 是 $P(t_0)$ 的特征值。

” \Rightarrow ”: 由于 $\frac{\partial g(\lambda_0, t)}{\partial t} = C(\lambda_0)$, $h(t)$ 是一次函数。且由于 $C(\lambda_0) \neq 0$, 可知 h 非常值函数。故 $h(t) = C(\lambda_0)(t - t_0)$, 计算可得:

$$g(\lambda_0, 0)g(\lambda_0, \tau) = C(\lambda_0)^2(\tau - t_0)(-t_0) < 0. \quad (5)$$

最后一步不等式的依据是 $0 < \tau < t_0$ 。 \square

Theorem 2. 给定 $\lambda_0 \in \{\omega \in \mathbb{R} : C(\omega) = 0\}$, 存在 $t_0 \in (0, \tau)$ ($\tau > 0$) 使得 λ_0 为 $P(t_0)$ 的特征值, 当且仅当 $g(\lambda_0, 0) = g(\lambda_0, \tau) = 0$ 。

证明. 记 $h(t) := g(\lambda_0, t)$, 当 $C(\lambda_0) = 0$ 时,

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{\partial g(\lambda_0, t)}{\partial t} = C(\lambda_0) = 0, \quad (6)$$

从而 $h(t) \equiv h(0)$ 。因此, 在这种情况下, $h(t_0) = 0 \Leftrightarrow h(0) = h(\tau) = 0$, 即 $g(\lambda_0, 0) = g(\lambda_0, \tau) = 0$ 。 \square

Remark.

$$g(\lambda, 0) = g(\lambda, 1) \Leftrightarrow C(\lambda) = 0. \quad (7)$$

Corollary 3. 给定 $\tau > 0$, 如果 $P(\tau)$ 的所有实特征值都大于 0, 那么 $\forall t \in [0, \tau]$, $P(t)$ 的所有实特征值都大于 0。

证明. 由于 $P(0) = P_1$ 为对称正定矩阵, $\forall \lambda \leq 0$, $g(\lambda, 0) > 0$ 。根据 $g(\lambda, t)$ 的定义, $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} g(\lambda, \tau) = +\infty$, 且 $g(\lambda, \tau)$ 关于 λ 连续。又根据已知条件, $\forall \lambda \leq 0$, $g(\lambda, \tau) \neq 0$, 由零点存在性定理可知:

$$\forall \lambda \leq 0, g(\lambda, \tau) > 0. \quad (8)$$

结合定理 1 和定理 2, $\forall \lambda \leq 0, t \in [0, \tau]$, $g(\lambda, t) > 0$ 。即 $P(t)$ 的所有实特征值均大于 0。 \square

由推论 3 可知, 如果我们可以验证 $P(1)$ 的所有实特征值均大于 0, 则说明 $\forall t \in [0, 1]$, $P(t)$ 的所有实特征值均大于 0。

如果 $P(1)$ 存在非正特征根, 则利用二分查找算法寻找 t_0 , 使得 $\forall t \in (0, t_0)$, $P(t)$ 不存在非正特征根。算法流程大致如下:

1. 设定 $t_0 = 0$, $t_e = 1$, 最小查询区间长度 ϵ 。
2. 如果 $|t_e - t_0| < \epsilon$, 终止程序并返回 t_0 。
3. 计算 $mid = \frac{t_0 + t_e}{2}$ 。
4. 判断多项式 $g(\lambda, mid)$ 是否存在非正实数根。如果存在, 设定 $t_e = mid$; 如果不存在, 设定 $t_0 = mid$, 返回第二步。

推论 3 保证了二分法输出的 t_0 满足: $\forall t \in [0, t_0]$, $P(t)$ 不存在非正的特征根。

这样我们可以保证在 $\frac{r^2}{1+r^2} \in [0, t_0]$ 的条件下矩阵 B 不存在绝对值大于等于 1 的实特征根。

6 存在问题和研究展望

目前这个思路可能存在下面的这些难点：

- 给定 $\tau \in (0, 1]$ ，不容易计算出 $P(\tau)$ 特征值的解析表达式，如果找不到合适的估计，则需要考虑数值求解矩阵特征值。
- $P(\tau)$ 的最小实特征值与矩阵 P 的大小 N ，以及矩阵块 $P_{4 \times 4}$ 的装配位置 M 有关。
- 由于复数域并非有序域，且第五部分所述方案高度依赖零点存在定理，这个方案不能直接用于解决复特征根的问题。 $P(0)$ 是实对称矩阵，特征根均为实数，但对于 $\tau \neq 0$ ， $P(\tau)$ 可能出现实部非正的复特征根，这是目前的方案无法探测的。

研究展望：

- 试着给出 $P(1)$ 特征值的一个下界估计。
- 检查 $P(1)$ 是否存在非实数特征根。如果存在，则设计一组方案处理之。
- 完成该算法求解热方程的稳定性分析后，尝试对区域耦合的扩散方程进行稳定性分析。