BSpecRProblem Notes

Shuang Hu

2022 年 9 月 24 日

注: 如无特殊说明,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, 后面的空间离散算法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 $B = (I + rA)^{-1}(I + rS)$ 。同理, 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 $|\rho(B)| \le 1$, $|\lambda(B^{-1})| = |1 + \lambda(Q)| \ge 1$.

2 关于算法的一些疑问

- 注意到,本次采用的虽然是熟悉的有限差分 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 $r := \frac{k\nu}{\hbar^2}$ 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 $B:=(I+rA)^{-1}(I+rS)$,文中所述算法稳定等价于式 (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

$$Q = r \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 1 + \frac{1}{1+r^2} & \frac{2r^2 - 1}{1+r^2} & \frac{-3r^2}{1+r^2} & \frac{r^2}{1+r^2} \\ & & -\frac{1}{1+r^2} & 1 + \frac{1-2r^2}{1+r^2} & \frac{2r^2 - 1}{1+r^2} & -\frac{r^2}{1+r^2} \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$
 (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。但这是一个充分而非必要的条件,事实上,只要 Q 的所有特征值满足:

$$|1 + \lambda(Q)| \ge 1,\tag{2}$$

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:

$$Q_{1} = r \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, Q_{2} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & & & \\ & Q_{4\times4} & & \\ & & \mathbf{0} \end{bmatrix}, Q_{4\times4} = \frac{r^{3}}{1+r^{2}} \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
(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:

$$P_{1} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}, P_{2} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & & & \\ & P_{4\times4} & & \\ & & \mathbf{0} \end{bmatrix}, P_{4\times4} = \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

 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 $P(t) = P_1 + \frac{r^2}{1+r^2} P_2 = P_1 + t P_2$ 。 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 $\operatorname{rank}(Q_2) = 1$,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。

" ⇒ ":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:

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

最后一步不等式的依据是 $0 < \tau < t_0$ 。

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,

$$\frac{\mathrm{d}h(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial g(\lambda_0, t)}{\partial t} = C(\lambda_0) = 0,\tag{6}$$

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.

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

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

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, $\lim_{\lambda \to -\infty} g(\lambda, \tau) = +\infty$,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:

$$\forall \lambda < 0, q(\lambda, \tau) > 0. \tag{8}$$

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。

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。 这样我们可以在实根的框架下解决稳定性分析问题。

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。