BSpecRProblem Notes

Shuang Hu

2022年9月22日

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 $x_n:=1+\frac{1}{2}h$ 。这样处理之后,方便了 **Neumann 边值条件**的处理,但与此同时对 **Dirichlet 边值条件**的处理造成了不便。这种处理方式和我们常用的处理方式相比较,优势和劣势分别体现在何处?
- 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,这样等式 (19) 则不成立,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

$$Q = r \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 1 + \frac{1}{1+r^2} & \frac{2r^2 - 1}{1+r^2} & \frac{-3r^2}{1+r^2} & \frac{r^2}{1+r^2} \\ & & -\frac{1}{1+r^2} & 1 + \frac{1-2r^2}{1+r^2} & \frac{2r^2 - 1}{1+r^2} & -\frac{r^2}{1+r^2} \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$
 (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))。 Q_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,主要难点在于提出 Q_1 和 Q_2 的公因子 r 后, Q_2 的形式仍旧与参数 r 相关。但在分析 Q 的特征值时,我们依旧可以利用 Q_1 和 Q_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一般。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

按文档中的参考思路 1,由于我们只关心 $Q=Q_1+Q_2$ 的特征值实部与 0 的关系,且 r>0,故我们可以把 Q_1 和 Q_2 的公因子 r 提出来,讨论 $P=P_1+\frac{r^2}{1+r^2}Q_2$ 的特征值。其中 $P_1=\frac{1}{r}Q_1$ 。由于 r>0,不妨设 $t=\frac{r^2}{1+r^2}$,则有 $t\in(0,1)$, $P(t)=P_1+tQ_2$ 。

下面分析 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 $r(Q_2)=1$,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 $g(\lambda,t)$ 关于 t 单调。

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

证明. " \Leftarrow ": 由于 $h(t) := g(\lambda, t)$ 为连续函数,且 h(0)h(1) < 0,由零点存在定理, $\exists t_0 \in (0, 1)$ s.t. $h(t_0) = 0$,即 $g(\lambda, t_0) = 0$ 。

" ⇒ ": 由上面的分析可知,h(t) 是线性函数,且由于 $C(\lambda) \neq 0$,h 非常值函数。故 $h(t) = C(\lambda)(t-t_0)$,计算可知:

$$g(\lambda, 0)g(\lambda, 1) = C(\lambda)^{2}(1 - t_{0})(-t_{0}) < 0.$$
(4)

Theorem 2. 设 $\lambda \in \{\omega \in \mathbb{R} : C(\omega) = 0\}$, 存在 $t_0 \in (0,1)$ 使得 λ 为 $P(t_0)$ 的特征值, 当且仅当 $g(\lambda,0) = g(\lambda,1) = 0$ 。

证明. 记 $h(t) := g(\lambda, t)$, 由前面的分析知, 当 $C(\lambda) = 0$ 时, $h(t) \equiv h(0)$ 。因此, 在这种情况下, $h(t) = 0 \Leftrightarrow h(0) = h(1) = 0$, 即 $g(\lambda, 0) = g(\lambda, 1) = 0$ 。

Remark.

$$g(\lambda, 0) = g(\lambda, 1) \Leftrightarrow C(\lambda) = 0.$$
 (5)

已知 P(0) 是正定矩阵,即: $\forall \lambda < 0$, $P(\lambda,0) > 0$ 。综合上述定理 1,定理 2 和 remark,如果 P(1) 不存在负特征根,即可说明 P(t) 无小于 0 的实根。

如果 P(1) 存在负特征根,则利用二分法查找 t_0 ,使得 $\forall t \in (0, t_0)$,P(t) 不存在负特征根。二分法中输入的函数 $f(t) := \inf\{\lambda \in \mathbb{R} : g(\lambda, t) = 0\}$,具体算法和数值分析讲义的算法 1.1 一致。

目前这个思路可能存在下面的这些难点:

- P(1) 的特征值可能并不容易计算和估计。
- P(1) 的最小实特征值可能与矩阵 Q 的大小 n, 以及矩阵块 $Q_{4\times 4}$ 的装配位置有关。
- 目前这套方案可以解决实特征根的问题,但针对复特征根的问题则暂时无能为力。