Лекция №6

Задачи на собственные значения

Существуют задачи на собственные значения - краевые задачи с параметром. Параметр обычно называют λ.

Каждому λ соответствует решение - $u(x)$. Имеем пару $(\lambda, u(x))$ - собственное значение и собственная функция.

Очевидно, что добавление S параметров требует такого же числа доп. условий.

Примеры

1) Струна

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}\left(q(x)\frac{du}{dx}\right) - r(x)u(x) + \lambda u(x) = 0 \\ x \in [0; a] \\ u(0) = 0; \ u(a) = 0 \end{cases}$$

два условия, а надо три!

Заметим, что если $u(x)$ - решение, то и $cu(x)$ - тоже решение. Фиксация этого коэффициента (в жизни амплитуды колебаний) - третье недостающее условие.

Если $q(x) = const = 1$, $r(x) = const = 0$, легко проверить, что задача имеет следующее

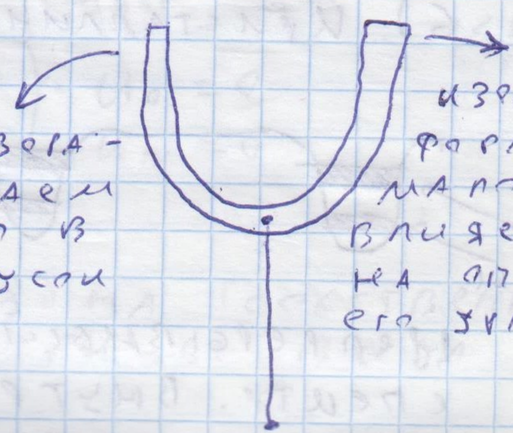
Решение:

$$\left.\begin{aligned} u_k(x) &= \sin(\pi k x/a) \\ \lambda_k &= \pi^2 k^2/a^2 \end{aligned}\right\}$$ это <u>спектр</u> — совокупность

всех собственных значений и функций.

г) брусок (камертон)

$$\begin{cases} u_{xxxx} = \lambda u \\ u(0) = 0 \\ u_{xx}(0) = 0 \\ u(a) = 0 \\ u_{xx}(a) = 0 \end{cases}$$



В чём отличие этих примеров от аналогичных из прошлой лекции? — раньше была правая часть $f(x)$, а теперь её нет. Значит $u(x)$ и $Cu(x)$ ~~это~~ являются решениями однородного уравнения, а значит нет единственности решения.

Как видим условие $f(x) \equiv 0$ привело к смене типа задачи.

Решение задачи о бруске

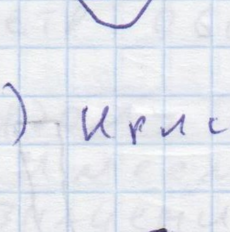
$$u_k(x) = \sin \frac{\pi k x}{a}$$

$$\lambda_k = \left(\frac{\pi k}{a}\right)^4, \quad k = 1, 2, 3 \ldots$$

~~Рост частоты гораздо быстрее => слышен лишь основной тон.~~

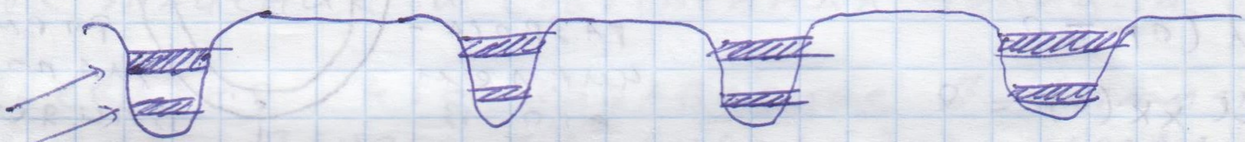
3) Задачи квантовой механики.

а) Частица в потенциальной яме



дискретный спектр
(уровни энергии)

б) Кристаллическая решётка – набор ям.



полосы

Непрерывный исполосенный спектр. Внутри полос λ меняется непрерывно, а вне их уровней нет совсем.

в) Многоэлектронное уравнение Шрёдингера.

МУШ ⟹ приближ. уравнение
прямо не Хартри, Хартри-Фока,
решается Хартри-Фока-Слэтера
найти

Каждый электрон имеет свою собственную функцию и своё собственное значение. Тут множество λ, а само уравнение нелинейно относительно u(x).

Сеточный метод

Решаем аналогично тому, как мы делали для краевых задач. Отличие в том, что появляется ещё λ.

Пример струна

$$\begin{cases} u_{xx} + \lambda u = 0 \\ u(0) = 0 \\ u(d) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} u_{n-1} - (2 - h^2\lambda)u_n + u_{n+1} = 0 \quad 1 \le n \le N-1 \\ u_0 = 0 \\ u_N = 0 \end{cases}$$

Получилась задача на собственные значения для матрицы вида

$$A\vec{u} = \lambda\vec{u}$$

В данном случае задача принимает вид

$$A\vec{u} + \underbrace{h^2\lambda}_{\text{новое } \lambda \text{ (точнее } -\lambda)}\vec{u} = 0$$

размер матрицы $(N-1)\times(N-1)$ по числу регулярных уравнений

$$\cancel{A = \begin{matrix} -2 & 1 & & \\ +1 & -2 & +1 & \\ 0 & 1 & -2 & 1 \end{matrix}}$$

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ +1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & \ddots & \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Решение этой задачи

$$u_n^k = \sin \frac{\pi k x_n}{a}, \quad 0 \le n \le N$$

$$\lambda_k = \left(\frac{2N}{a}\right)^2 \sin^2 \frac{\pi k}{2N}, \quad 1 \le k \le N-1$$

При малых k:

$$\lambda_k \simeq \frac{(2N)^2}{a^2} \frac{(\pi k)^2}{(2N)^2} = \left(\frac{\pi k}{a}\right)^2 \text{ - точное с.з.}$$

При больших k нет соответствия.

$\Rightarrow$ имеет смысл искать только первые с.з. и с.ф.

Пример: брусок

$$\begin{cases} u_{xxxx} = \lambda u \\ u(0) = u(a) = 0 \\ u_{xx}(0) = u_{xx}(a) = 0 \end{cases}$$

Схема:

$$\begin{cases} \dfrac{u_{n-2} - 4u_{n-1} + 6u_n - 4u_{n+1} + u_{n+2}}{h^4} = \lambda u_n \quad 1 \le n \le N-1 \\ u_0 = 0, \; u_{-1} - 2u_0 + u_1 = 0 \\ u_N = 0, \; u_{N-1} - 2u_N + u_{N+1} = 0 \end{cases}$$

Избавляемся от последних 4 уравнений и оставляем только уравнения с λ.

Получаем 5-диагональную матрицу.

Получаем задачу на С.З. для матрицы.

Её решение:

$$u_k(x_n) = \sin\left(\frac{\pi k x_n}{a}\right)$$

$$\mu_k = \left(\frac{16}{h^4}\right)\sin^4\left(\frac{\pi k h}{2a}\right), \quad h = \frac{a}{N}, \quad k = 1, 2, 3 \ldots$$

При малых k – похоже на точное, потом – нет.

Обратные итерации

|| Все вычисления надо выполнять в комплексной арифметике ||

1) берём начальное приближение $\lambda^{(1)}, \{u_n^{(1)}\}$

2) $(A - \lambda^{(s)}E)\vec{u}^{(s+1)} = \vec{u}^{(s)}$, $\vec{u} = \{u_n\}$ – собственно это и есть обратная итерация

3) Уточняем собственное значение

$$\lambda^{(s+1)} = \lambda^{(s)} + \frac{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s)})}{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s+1)})}$$

4) Крутим итерации, ставя критерий останова по $\lambda^{(s)}$.

Как и почему это работает?

Пусть $\vec{v}_k$ и μ_k – собственные векторы и собств. значения матрицы A.

Разложим $\vec{u}^{(s)}$ по ним:

$$\vec{u}^{(s)} = \sum_k a_k^{(s)} \vec{v}_k$$

$$\vec{u}^{(s+1)} = \sum_k a_k^{(s+1)} \vec{v}_k$$

По определению $A\vec{v}_k = \mu_k \vec{v}_k$

Подставим...

$$(A - \lambda^{(s)} E) \sum_k a_k^{(s+1)} \vec{v}_k = \sum_k a_k^{(s)} \vec{v}_k$$

$$(A - \lambda^{(s)} E) \vec{v}_k = \mu_k \vec{v}_k - \lambda^{(s)} \vec{v}_k =$$

$$= (\mu_k - \lambda^{(s)}) \vec{v}_k$$

$$\sum_k \left(a_k^{(s+1)} (\mu_k - \lambda^{(s)}) - a_k^{(s)}\right) \vec{v}_k = 0$$

В силу линейной независимости $\vec{v}_k$ имеем:

$$a_k^{(s+1)} = \frac{a_k^{(s)}}{\mu_k - \lambda^{(s)}}$$

При μ_k близком к $\lambda^{(s)}$ сильно растёт именно k-тая компонента

Сдвиг:

Выберем $\lambda^{(s+1)}$ так, чтобы

$$(A - \lambda^{(s+1)} E)\vec{u}^{(s+1)} \to \min$$

значит

$$\left((A - \lambda^{(s+1)} E)\vec{u}^{(s+1)}, (A - \lambda^{(s+1)} E)\vec{u}^{(s+1)}\right) \to \min$$

дифференцируем это по $\lambda^{(s+1)}$

$$2\left(-\vec{u}^{(s+1)}, (A - \lambda^{(s+1)} E)\vec{u}^{(s+1)}\right) = 0$$

$$\left(\vec{u}^{(s+1)}, (A - \lambda^{(s)} E)\vec{u}^{(s+1)} + (\lambda^{(s)} - \lambda^{(s+1)}) E \vec{u}^{(s+1)}\right) = 0$$

$$\left(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s)} + (\lambda^{(s)} - \lambda^{(s+1)})\vec{u}^{(s+1)}\right) = 0$$

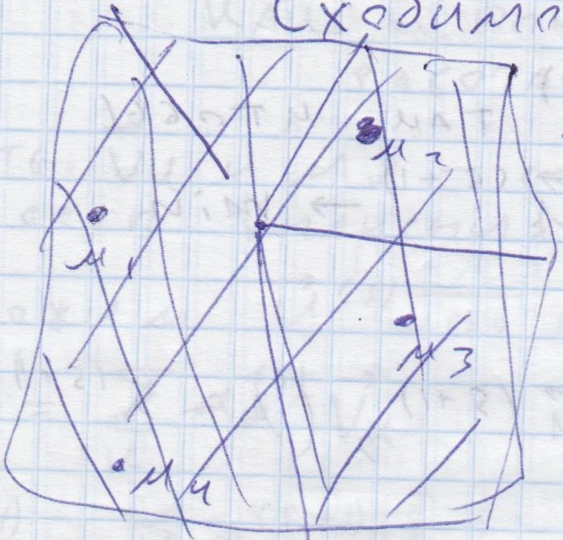
$$(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s)}) + (\lambda^{(s)} - \lambda^{(s+1)})(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s+1)}) = 0$$

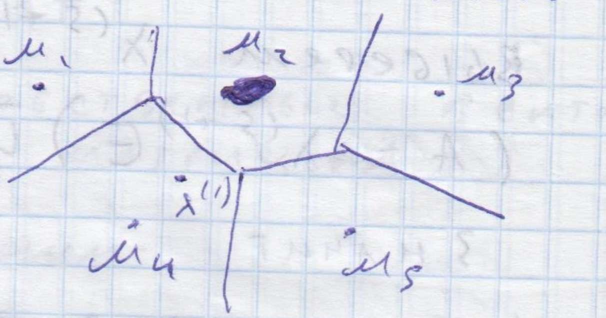
$$\frac{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s)})}{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s+1)})} = \lambda^{(s+1)} - \lambda^{(s)}$$

$$\boxed{\lambda^{(s+1)} = \lambda^{(s)} + \frac{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s)})}{(\vec{u}^{(s+1)}, \vec{u}^{(s+1)})}}$$

Сходимость

Комплексная плоскость





Многоугольники Вороного

Итерации сходятся (в каждой ячейке ровно по 1 с.з. и границы равноуд. от других) к тому с.з., в ячейку которого оно ($\lambda^{(1)}$) попало

Вблизи решения – квадратическая сходимость, а если с.з. образуют ортог. базис – кубическая (для эрмитовых матриц). Число итераций 3-5.

Выбор $\vec{u}^{(1)}$ слабо влияет на сходимость, но лучше в качестве его компонент брать псевдослуч. числа.

Нелинейные задачи.

Дополненный вектор

- Струна с коэффициентом упругости, зависящем от деформации

$$k(u) = k_0 + k_1 u^2$$

$$0 < k_1 \ll k_0$$

Это реальная задача: если струна натянута вся на $u(x)$, то её длина увеличивается на $\underline{O}(u^2)$, что можно интерпретировать как эффективное увелич. коэффициента упругости

Итак:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dx}\left(\left(k_0 + k_1 \underline{\underline{u^2}}\right)\dfrac{du}{dx}\right) + \lambda u = 0 \\ x \in [0; a] \\ u(0) = 0 \\ u(a) = 0 \end{cases}$$

Нелинейная задача.

Схема: (равномерная сетка)

$$\begin{cases} \left(k_0 + k_1\left(u_{n+1}^2 + u_n^2\right)/2\right)\left(u_{n+1} - u_n\right) - \\ - \left(k_0 + k_1\left(u_n^2 + u_{n-1}^2\right)/2\right)\left(u_n - u_{n-1}\right) + \\ + \lambda h^2 u_n = 0 \\ u_0 = 0 \\ u_N = 0 \end{cases}$$

Это не задача на с.з. матрицы!

Решаем задачу как нелинейную по переменным $\underbrace{u_0 \ldots u_N \text{ и } \lambda}_{N+2}$

У нас $N+2$ уравнений.

Имеем $f(\vec{u}, \lambda) = 0$

$\vec{V} = (\vec{u}, \lambda)$ — дополненный вектор.

Решаем многосеточным вариантом Ньютона.

На прошлой лекции перепутали: уточнять по Ричардсону на каждом шаге вовсе не обязательно.

Важно, чтобы при сгущении сетки решение сходилось к тому же с.з.

Метод дополненного вектора применим к линейным задачам также.

Метод стрельбы

Идея: свести к задаче Коши.

$$\begin{cases} u_{xx} + \lambda u = 0 \\ u(0) = 0 \\ u(a) = 0 \end{cases}$$

убираем

Вместо него $u_x(0)$ берём произвольны (кажется всё-таки лучше $\neq 0$)

Берём любое λ и считаем...

$u(a)$ скорее всего $\neq 0$

$u(a) = f(\lambda)$.

Решаем это уравнение.

Плохо, когда стрельба многопараметрич.