

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

Р. В. МУРАТОВ

ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ
РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ
АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ (?)

Конспект лекций

Москва 2024

УДК ... - проверить!!!
ББК ... - проверить!!!
Авторский знак

Фамилия И.О.. **Название пособия: Конспект лекций [Электронный ресурс].** М.: НИЯУ МИФИ, 2024. — 89 с.

Текст аннотации

Подготовлено в рамках Проекта по созданию и развитию Международного научно-методического центра НИЯУ МИФИ.

Рецензент уч. степень, уч. звание, И.О. Фамилия

Рекомендовано к изданию ...
«????????????????» НИЯУ МИФИ

ISBN ...

© Национальный исследовательский
ядерный университет «МИФИ», 2024
© И.О. Фамилия, 2024

Содержание

Предисловие	5
Лекция 1. Задача на собственные векторы и собственные значения	6
1.1. Итерационные методы поиска СВ и СЗ	7
1.2. Сеточные операторы	9
1.3. Обобщенная задача на собственные значения.	13
1.4. Спектр трёхточечного оператора второй производной .	15
1.5. Лабораторная работа	17
Лекция 2. Аппроксимация уравнения Пуассона	28
2.1. Периодические граничные условия	31
2.2. Граничные условия Неймана.	32
2.3. Граничные условия Дирихле.	35
2.4. Пример	37
2.5. Задачи на эллиптические уравнения.	39
Лекция 3. Итерационные методы решения СЛАУ	46
Лекция 4. Простейшие явные методы	52
4.1. Метод простой итерации	52
4.2. Метод минимальных невязок	54
4.3. Лабораторная работа	55
Лекция 5. Простейшие неявные методы	56
5.1. Метод Якоби	56
5.2. Метод Зейделя	59
5.3. Лабораторная работа	60
Лекция 6. Разреженные матрицы	61
6.1. Разреженные и плотные матрицы	61
6.2. Форматы хранения разреженных матриц	62
6.3. Пример	64
6.4. Лабораторная работа	70

Лекция 7. Уравнения параболического типа	71
7.1. Двумерное уравнение теплопроводности	71
7.2. Двумерное уравнение Шрёдингера	72
7.3. Лабораторная работа	75
Лекция 8. Итерационный метод с чебышёвским набором параметров	80
8.1. Многочлены Чебышёва	81
8.2. Многочлены Чебышёва на отрезке $[a, b]$	83
8.3. Итерации с чебышёвским набором параметров	86
8.4. Скорость сходимости и устойчивость	88
Литература	89

Предисловие

Текст предисловия

Лекция 1. Задача на собственные векторы и собственные значения

Вспомним определения. Пусть в векторном (линейном) пространстве V над полем K задан линейный оператор $A : V \rightarrow V$. Требуется найти множество скаляров $\lambda \in K$ и множество соответствующих векторов $v \in V$, которые удовлетворяют соотношению

$$Av = \lambda v.$$

Подходящие значения λ называют собственными значениями (СЗ) оператора. Множество собственных значений образует *спектр оператора* A . Соответствующие векторы v называются собственными векторами (СВ) или, если V это линейное пространство функций, собственными функциями (СФ).

Задача поиска собственных векторов и собственных значений встречается во многих приложениях. Некоторые из них:

- *Метод разделения переменных (Фурье)* для уравнений в частных производных требует поиска СФ и СЗ задачи Штурма – Лиувилля, а решение представляется в виде ряда по собственным функциям.
- *Спектральный метод* является дискретным аналогом метода разделения переменных. В численной методике СФ и СЗ ищутся численно, а эволюция отдельных мод рассчитывается как решение обыкновенных дифференциальных уравнений.
- В рамках *спектральной теории графов* исследуется спектр матрицы смежности графа, собственные значения которой являются важными инвариантами графа.
- *Цепи Маркова* строятся на основе матриц переходных вероятностей. Спектры матриц переходов позволяет классифицировать марковские процессы.
- *Анализ вибраций/резонансных частот* конструкций необходим при оценке динамической прочности. Резонансные частоты напрямую связаны с собственными значениями.

- *Метод главных компонент* требует поиска СВ и СЗ ковариационной матрицы. Спектральная декомпозиция матриц в целом имеет большое значение во многих задачах.
- При решении *систем гиперболических уравнений* собственные векторы показывают характеристические направления.

Во многих прикладных задачах не требуется нахождение полного спектра оператора. Часто достаточно найти только несколько максимальных (или минимальных) по модулю собственных значений, в некоторых задачах необходимо знать только нижнюю и верхнюю оценки спектра оператора. В рамках курса, посвященного итерационным методам решения систем линейных уравнений, самым важным фактом для нас является то, что спектр матрицы СЛАУ напрямую влияет на скорость сходимости различных итерационных методов. Также спектр матрицы позволяет определить оптимальные итерационные параметры для обеспечения самой быстрой сходимости.

1.1. Итерационные методы поиска СВ и СЗ

Степенной метод позволяет найти максимальное по модулю собственное значение (спектральный радиус матрицы) и соответствующий ему собственный вектор. Зададим случайный вектор $\mathbf{v}^{(0)}$ и рассмотрим следующую итерационную процедуру:

$$\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)} = A\mathbf{v}^{(k)}, \quad \mathbf{v}^{(k+1)} = \frac{\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}}{\|\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}\|}, \quad (1.1)$$

вторым действием выполняется нормировка вектора, $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{(\mathbf{v}, \mathbf{v})}$. Если начальное приближение $\mathbf{v}^{(0)}$ не оказалось ортогонально собственному вектору матрицы A , соответствующему максимальному по модулю собственному значению, тогда итерации сходятся к этому собственному вектору. Почему это работает?

Пусть собственные значения матрицы A равны $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, а соответствующие собственные векторы $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. Система собственных векторов может быть неполной, а число n может быть меньше размерности линейного пространства V . Для любого начального приближения $\mathbf{v}^{(0)}$ существует разложение по собственным векторам оператора A :

$$\mathbf{v}^{(0)} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbf{v}_i + \mathbf{w}, \quad \mathbf{w} \in \text{Ker} A,$$

Предполагаем, что в данном разложении присутствует слагаемое с искомым собственным вектором (по условию, начальное приближение $\mathbf{v}^{(0)}$ имеет ненулевую компоненту в направлении искомого собственного вектора). Тогда, если многократно подействовать оператором A на начальное приближение $\mathbf{v}^{(0)}$, получим:

$$A^k \mathbf{v}^{(0)} = \sum_{i=1}^n \lambda^k c_i^k \mathbf{v}_i.$$

При стремлении k к бесконечности в данной сумме быстрее всего растет слагаемое, соответствующее максимальному собственному значению, к нему и сходятся итерации. Текущее приближение для собственных значений можно получить по формуле

$$\lambda^{(k)} = \frac{(A\mathbf{v}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)})}{(\mathbf{v}^{(k)}, \mathbf{v}^{(k)})}. \quad (1.2)$$

Итерации можно завершить после достижения необходимой точности по $\lambda^{(k)}$, когда отличия $\lambda^{(k)}$ между итерациями становятся меньше некоторого порогового значения $\varepsilon \ll 1$.

Обратный степенной метод позволяет найти собственное значение, наиболее близкое к наперед заданному значению μ . Пусть собственные значения матрицы A равны $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, а соответствующие собственные векторы $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. Рассмотрим матрицу $A_1 = A - \mu E$, где E — единичная матрица. Легко убедиться, что матрица A_1 имеет тот же набор собственных векторов \mathbf{v}_i , но им соответствуют собственные значения $\lambda_i - \mu$. Возьмем теперь обратную матрицу $A_2 = A_1^{-1} = (A - \mu E)^{-1}$, для матрицы A_2 собственные векторы остались прежними, а собственные значения стали обратными $\frac{1}{\lambda_i - \mu}$. Применим теперь обычный степенной метод к матрице A_2 :

$$\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)} = (A - \mu E)^{-1} \mathbf{v}^{(k)}, \quad \mathbf{v}^{(k+1)} = \frac{\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}}{\|\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}\|}. \quad (1.3)$$

Метод сходится к собственному вектору, соответствующему максимальному по модулю собственному значению из набора $\frac{1}{|\lambda_i - \mu|}$, или, что эквивалентно, минимальному из набора $|\lambda_i - \mu|$, то есть самому близкому к значению μ . Оценка собственных значений на каждой итерации получается по формуле (1.2). Критерий остановки аналогичен предыдущему пункту.

Метод итераций Рэлея улучшает обратный степенной метод путем использования нового приближения к собственному значению на каждой итерации. Путь, как и ранее, задан случайный вектор $\mathbf{v}^{(0)}$, и известно начальное приближение для собственного значения $\lambda^{(0)}$. Итерационная процедура выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)} &= \left(A - \lambda^{(k)} E\right)^{-1} \mathbf{v}^{(k)}, & \mathbf{v}^{(k+1)} &= \frac{\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}}{\|\tilde{\mathbf{v}}^{(k+1)}\|}, \\ \lambda^{(k+1)} &= \frac{(A\mathbf{v}^{(k+1)}, \mathbf{v}^{(k+1)})}{(\mathbf{v}^{(k+1)}, \mathbf{v}^{(k+1)})}.\end{aligned}\tag{1.4}$$

За счет обновления приближения $\lambda^{(k)}$ в ходе итераций, метод итераций Рэлея имеет более быструю сходимость по сравнению с обратным степенным методом.

Важное замечание! Когда в формулах встречается запись $A^{-1}\mathbf{v}$, в программе не следует вычислять обратную матрицу. Вычисление обратной матрицы крайне дорогостоящая операция, и не всегда осуществимая. Выражения вида $A^{-1}\mathbf{v}$ следует понимать как «найти решение системы линейных уравнений $A\mathbf{x} = \mathbf{v}$ ». Поэтому вместо выражений вроде `x := inverse(A) * v` следует писать `x := solve(A, v)`.

Если матрица A трёхдиагональная, тогда матрица $A - \mu E$ также является трёхдиагональной. Следовательно, вектор $(A - \mu E)^{-1}\mathbf{v}$ является решением системы уравнений с трёхдиагональной матрицей. Таким образом, самым оптимальным способом вычисления выражения является *метод прогонки*.

1.2. Сеточные операторы

Методы поиска собственных векторов и собственных значений рассмотрим на примере дифференциальных операторов, которые встречаются в уравнениях математической физики. Численно можно работать только с конечномерными пространствами, поэтому сначала необходимо провести дискретизацию области, а затем выписать сеточные (дискретные) аппроксимации дифференциальных операторов.

Далее рассматриваются одномерные задачи, дискретизация проводится методом конечных объемов. Разобьем отрезок $[0, l]$ на n сегментов равной длины, которые будем называть ячейками. Длину ячейки обозначим как $h = l/n$. Ячейки будем нумеровать целыми индексами $i = \overline{1, n}$. Центры ячеек обозначим как x_i , а границы ячеек полуцелыми индексами $x_{i \pm \frac{1}{2}}$. Внутри каждой ячейки задано значение сеточной

функции u_i , которое можно рассматривать как усредненное значение некоторой функции $u(x)$ внутри ячейки.

Пример 1.1. Рассмотрим дифференциальный оператор \mathcal{L} отрицательной второй производной, который встречается в курсе уравнений математической физики при решении задачи Штурма – Лиувилля:

$$\mathcal{L}u = -\frac{d^2}{dx^2}u, \quad u(x) : \begin{cases} (\alpha_L u - \beta_L u_x)|_{x=0} = 0, \\ (\alpha_R u + \beta_R u_x)|_{x=l} = 0. \end{cases}$$

Дифференциальный оператор \mathcal{L} является самосопряженным и неотрицательно определенным, все его собственные значения положительны, за исключением случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$, когда оператор имеет нулевое собственное значение.

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{h^2} \begin{cases} \frac{2\alpha_L h}{2\beta_L + \alpha_L h} u_1 + (u_1 - u_2), & i = 1, \\ (u_i - u_{i-1}) + (u_i - u_{i+1}), & i = \overline{2, n-1}, \\ (u_n - u_{n-1}) + \frac{2\alpha_R h}{2\beta_R + \alpha_R h} u_n, & i = n. \end{cases}$$

Сеточный оператор можно представить в виде трёхдиагональной матрицы. Оператор L , также как \mathcal{L} , является самосопряженным (матрица симметрична) и неотрицательно определенным. Все собственные значения L являются положительными, за исключением случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$, когда есть нулевое собственное значение.

Пример 1.2. Полиномы Лежандра являются собственными функциями оператора \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}u = -\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{du}{dx}, \quad \lim_{x \rightarrow \pm 1} (1-x^2)u_x = 0.$$

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{h^2} \begin{cases} (1 - (1-h)^2)(u_1 - u_2), & i = 1, \\ \xi_{i-\frac{1}{2}}(u_i - u_{i-1}) + \xi_{i+\frac{1}{2}}(u_i - u_{i+1}), & i = \overline{2, n-1}, \\ (1 - (1-h)^2)(u_n - u_{n-1}), & i = n. \end{cases}$$

Здесь введено обозначение $\xi_{i \pm \frac{1}{2}} = 1 - x_{i \pm \frac{1}{2}}^2$. Оба оператора \mathcal{L} и L являются самосопряженными и неотрицательно определенными. Все

собственные значения кроме одного положительны. Легко убедиться, что существует нулевое собственное значение, которому соответствует константный вектор.

Пример 1.3. Рассмотрим радиальную часть оператора Лапласа в полярных координатах. Дифференциальный оператор \mathcal{L} определен на множестве ограниченных функций $u(r)$ на отрезке $r \in [0, R]$, удовлетворяющих однородным граничным условиям:

$$\mathcal{L}u = -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{du}{dr}, \quad u(r) : \begin{cases} \lim_{r \rightarrow 0} r u_r = 0, \\ (\alpha u + \beta u_r)|_{r=R} = 0. \end{cases}$$

Оператор \mathcal{L} является положительно определенным, кроме случая $\alpha = 0$, когда имеется нулевое собственное значение. Также оператор \mathcal{L} является самосопряженным при интегрировании с весом $\rho(r) = r$.

Для дискретизации воспользуемся методом конечных объемов. Разобьем круг $r < R$ на n концентрических колец, которые будем называть ячейками. Ячейки нумеруем целыми индексами, а границы ячеек полуцелыми, $r_{i \pm \frac{1}{2}}$ — границы i -ой ячейки. Ширину каждого кольца можно выбрать одинаковой $h = R/n = r_{i+\frac{1}{2}} - r_{i-\frac{1}{2}}$. Введем «объем ячейки» v_i и «центр ячейки» r_i через интегралы по кольцу:

$$v_i = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r dr = \frac{1}{2} (r_{i+\frac{1}{2}}^2 - r_{i-\frac{1}{2}}^2),$$

$$r_i = \frac{1}{v_i} \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^2 dr = \frac{1}{3v_i} (r_{i+\frac{1}{2}}^3 - r_{i-\frac{1}{2}}^3).$$

Интегрирование по углу $\int_0^{2\pi} d\varphi$ можно опустить — множитель 2π сокращается во всех выражениях. Сеточная функция, как и ранее, задается путем усреднения по ячейке:

$$u_i = \frac{1}{v_i} \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} u(r) r dr.$$

При линейной реконструкции функции внутри ячейки её следует представлять в форме $u_j(r) = u_j + s \cdot (r - r_j)$, где s — произвольный наклон. В этом случае усреднение по j -ой ячейке будет давать значение u_j , независимо от наклона s . При оценке производной на границе ячейки $r_{j+\frac{1}{2}}$ требуем, чтобы наклоны в соседних ячейках j и $j+1$

совпадали, тогда $s = u'(r_{j+\frac{1}{2}}) = (u_{j+1} - u_j)/(r_{j+1} - r_j)$. В ячейках на границе области требуем выполнения граничных условий.

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{v_i} \begin{cases} r_{1+\frac{1}{2}} \frac{u_1 - u_2}{r_2 - r_1}, & i = 1, \\ r_{i-\frac{1}{2}} \frac{u_i - u_{i-1}}{|r_i - r_{i-1}|} + r_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_i - u_{i+1}}{|r_{i+1} - r_i|}, & i = \overline{2, n-1}, \\ r_{n-\frac{1}{2}} \frac{u_n - u_{n-1}}{|r_n - r_{n-1}|} + \frac{\alpha R u_n}{\beta + \alpha(R - r_n)}, & i = n. \end{cases}$$

Сеточный оператор L является положительно определенным, кроме случая $\alpha = 0$, когда имеется нулевое собственное значение. Также оператор L является самосопряженным относительно скалярного произведения, введенного с билинейной формой $B = \text{diag}(v_1, v_2, \dots, v_n)$. Для оператора естественным образом ставится обобщенная задача на собственные значения (1.5).

Пример 1.4. Рассмотрим радиальную часть оператора Лапласа в сферических координатах. Дифференциальный оператор \mathcal{L} определен на множестве ограниченных функций $u(r)$ на отрезке $r \in [0, R]$, удовлетворяющих однородным граничным условиям:

$$\mathcal{L}u = -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{du}{dr}, \quad u(r) : \begin{cases} \lim_{r \rightarrow 0} r u_r = 0, \\ (\alpha u + \beta u_r)|_{r=R} = 0. \end{cases}$$

Оператор \mathcal{L} является неотрицательно определенным и самосопряженным при интегрировании с весом $\rho(r) = r^2$.

Дискретизацию проводим на ячейки в виде сферических слоев. Аналогично плоскому случаю в полярных координатах вводим «объем ячейки» v_i и «центр ячейки» r_i через объемные интегралы по сферическому слою (угловой интеграл опускается):

$$v_i = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^2 dr = \frac{1}{3} (r_{i+\frac{1}{2}}^3 - r_{i-\frac{1}{2}}^3)$$

$$r_i = \frac{1}{v_i} \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} r^3 dr = \frac{1}{4v_i} (r_{i+\frac{1}{2}}^4 - r_{i-\frac{1}{2}}^4).$$

Сеточный аналог оператора:

$$(Lu)_i = \frac{1}{v_i} \begin{cases} r_{1+\frac{1}{2}}^2 \frac{u_1 - u_2}{r_2 - r_1}, & i = 1, \\ r_{i-\frac{1}{2}}^2 \frac{u_i - u_{i-1}}{|r_i - r_{i-1}|} + r_{i+\frac{1}{2}}^2 \frac{u_i - u_{i+1}}{|r_{i+1} - r_i|}, & i = \overline{2, n-1}, \\ r_{n-\frac{1}{2}}^2 \frac{u_n - u_{n-1}}{|r_n - r_{n-1}|} + \frac{\alpha R^2 u_n}{\beta + \alpha(R - r_n)}, & i = n. \end{cases}$$

Сеточный оператор L является положительно определенным, кроме случая $\alpha = 0$, когда имеется нулевое собственное значение. Также оператор L является самосопряженным относительно скалярного произведения, введенного с билинейной формой $B = \text{diag}(v_1, v_2, \dots, v_n)$. Для оператора естественным образом ставится обобщенная задача на собственные значения (1.5).

1.3. Обобщенная задача на собственные значения

Пример 1.5. Рассмотрим дифференциальный оператор \mathcal{P} отрицательной второй производной с весовой функцией $\rho(x) > 0$:

$$\mathcal{P}u = -\frac{1}{\rho(x)} \frac{d^2}{dx^2} u, \quad u(x) : \begin{cases} (\alpha_L u - \beta_L u_x)|_{x=0} = 0, \\ (\alpha_R u + \beta_R u_x)|_{x=l} = 0. \end{cases}$$

Помимо классической задачи на собственные значения $\mathcal{P}u = \lambda u$ можно поставить также эквивалентную ей *обобщенную задачу на собственные значения*:

$$\mathcal{L}u = \lambda \rho u,$$

где \mathcal{L} — дифференциальный оператор второй производной, введенный в примере 1.1. Обобщенная постановка корректна, даже если $\rho(x)$ это обобщенная функция, к примеру, если весовая функция $\rho(x)$ включает δ -функцию Дирака. Дифференциальный оператор \mathcal{P} является самосопряженным при интегрировании с весовой функцией $\rho(x)$ и положительно определенным, кроме случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$, когда существует нулевое собственное значение.

Построим сеточный аналог оператора \mathcal{P} . Усредним весовую функцию $\rho(x)$ в ячейках

$$\rho_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \rho(x) dx.$$

Теперь поделим каждую строку оператора второй производной L из примера 1.1 на плотность ρ_i :

$$(Pu)_i = \frac{1}{\rho_i h^2} \begin{cases} \frac{2\alpha_L h}{2\beta_L + \alpha_L h} u_1 + (u_1 - u_2), & i = 1, \\ (u_i - u_{i-1}) + (u_i - u_{i+1}), & i = \overline{2, n-1}, \\ (u_n - u_{n-1}) + \frac{2\alpha_R h}{2\beta_R + \alpha_R h} u_n, & i = n. \end{cases}$$

При более строгом выводе все функции и уравнения следует интегрировать с весом $\rho(x)$. Тогда в формулах появятся центры масс ячеек $x_i = \frac{1}{h} \int x \rho(x) dx$. Но не будем чрезмерно усложнять. Оператор P неотрицательно определен, все его собственные значения положительны, за исключением случая $\alpha_L = \alpha_R = 0$, когда имеется нулевое собственное значение.

Введем матрицу с весами на диагонали: $B = \text{diag}(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n)$. Тогда матрица оператора $P = B^{-1}L$, где L — сеточный оператор второй производной из примера 1.1. Матрица L симметричная и неотрицательно определенная. Обобщенная задача на собственные значения для сеточного оператора:

$$Lu = \lambda Bu. \quad (1.5)$$

Матрица B симметричная и положительно определенная, это позволяет использовать матрицу B как билинейную форму и ввести скалярное произведение: $(x, y)_B = x^T B y$. В пространстве с таким скалярным произведением оператор P является самосопряженным $(Px, y)_B = (x, Py)_B$. Собственные значения оператора P вещественны и неотрицательны, а собственные векторы, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны $(x, y)_B = 0$.

Это хорошо, что задачу удалось свести к работе с симметричными матрицами. Многие алгоритмы эффективнее работают с симметричными матрицами. В данном случае, вместо решения классической задачи на собственные значения $Pu = \lambda u$, где P — матрица общего вида, а спектр матрицы ищется в поле комплексных чисел, можно перейти к обобщенной задаче на собственные значения. Для обобщенной задачи с симметричными матрицами спектр является вещественным.

Если говорить о практическом применении данных знаний: модуль `scipy.sparse.linalg` содержит отдельные функции для поиска собственных значений для матриц общего вида (функция `eigs`) и для

поиска собственных значений для эрмитовых матриц, в том числе для обобщенной задачи на собственные значения (функция *eigsh*). При известных ограничениях на матрицу и её спектр целесообразно использовать специализированную функцию *eigsh*.

1.4. Спектр трёхточечного оператора второй производной

Рассмотрим задачу на СВ и СЗ для трёхточечного сеточного оператора отрицательной второй производной $\mathcal{L} = -d^2/dx^2$. Полагаем, что сеточный оператор L получен методом конечных объемов на равномерной сетке в области $0 \leq x \leq l$. Область разделена на n ячеек длины $h = l/n$. Ячейки пронумерованы целыми индексами $i = \overline{1, n}$, центры ячеек $x_i = (i - \frac{1}{2})h$, а значения сеточной функции v_i соответствуют ячейкам.

На границах области заданы граничные условия одного из трёх типов: условия Дирихле (D), условия Неймана (N) или периодические (P) граничные условия. Матрица оператора L имеет размер $n \times n$ и для различных типов граничных условий принимает вид:

$$L_D = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}, \quad L_N = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$L_P = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

При действии любым из перечисленных операторов на сеточную функцию для внутренних ячеек получаем аппроксимацию отрицательной второй производной на трёх точках:

$$(Lv)_i = -\frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{h^2}, \quad i = \overline{2, n-1}.$$

Все три матрицы являются симметричными. Матрица L_D — положительно определенная. Матрицы L_N и L_D неотрицательно определены, константный вектор соответствует нулевому собственному значению. Для всех трех матриц можно выписать полный набор собственных значений и собственных векторов.

СВ и СЗ для задачи Дирихле (для матрицы L_D):

$$\lambda_k = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi k h}{2l}, \quad v_i^{(k)} = \sin \frac{\pi k x_i}{l}, \quad k = \overline{1, n}. \quad (1.6)$$

Если дискретизация содержит хотя бы три ячейки ($n \geq 3$), тогда минимальное собственное значение λ_{\min} можно оценить снизу, а для спектра оператора справедливы оценки:

$$\lambda_{\min} = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi h}{2l}, \quad \frac{9}{l^2} \leq \lambda_{\min} \leq \lambda_k \leq \lambda_{\max} = \frac{4}{h^2}. \quad (1.7)$$

СВ и СЗ для задачи Неймана (для матрицы L_N):

$$\lambda_k = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi k h}{2l}, \quad v_i^{(k)} = \cos \frac{\pi k x_i}{l}, \quad k = \overline{0, n-1}. \quad (1.8)$$

Если дискретизация содержит хотя бы три ячейки ($n \geq 3$), тогда минимальное положительное собственное значение λ_1 можно оценить снизу, а для спектра справедливы оценки:

$$\lambda_0 = \lambda_{\min} = 0, \quad \frac{9}{l^2} \leq \lambda_1 \leq \lambda_k \leq \lambda_{\max} < \frac{4}{h^2}. \quad (1.9)$$

СВ и СЗ для задачи с периодическими граничными условиями (для матрицы L_P):

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi(k + k \div 2)h}{2l}, \\ v_i^{(k)} &= \cos \left(\frac{\pi x(k + k \div 2)}{l} - \frac{\pi(k \div 2)}{2} \right), \end{aligned} \quad (1.10)$$

где $k = \overline{0, n-1}$, и $k \div 2$ — остаток от деления на два. Положительные собственные значения имеют кратность равную двум, а среди собственных векторов чередуются «четные» (\cos) и «нечетные» (\sin) функции. Использование операции $k \div 2$ позволяет объединить две серии собственных векторов.

Если дискретизация содержит хотя бы три ячейки ($n \geq 3$), тогда минимальное положительное собственное значение λ_1 можно оценить снизу, а для спектра оператора справедливы оценки (1.9). В целом, независимо от граничных условий спектры трёх операторов практически полностью совпадают. Для вырожденных операторов L_N и L_P добавляются нулевые собственные значения.

1.5. Лабораторная работа

В лабораторной работе требуется численно найти 5 – 6 собственных функций для дифференциального оператора, которые соответствуют минимальным собственным значениям. Для поиска использовать итерационный метод Рэлея, начальные приближения собственных значений подбираются вручную. При выполнении работы допускается использование встроенных решателей систем линейных уравнений для вычисления векторов $A^{-1}b$. Построить на одном графике приближенные собственные функции и аналитические.

Не обязательно, но почётно:

- Вычислить погрешность и оценить порядок аппроксимации.
- Использовать разреженные матрицы и найти решение на сетке с размером от 5 тысяч ячеек.
- Создать разреженные матрицы без циклов.
- Получить собственные функции и собственные значения с использованием встроенной функции `eigsh`.
- Решить задачу без использования разреженных матриц и встроенных решателей систем уравнений, использовать собственный код для метода прогонки.

Задачи к лабораторной работе

В задачах используются следующие обозначения: $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, $\eta(x)$ — функция Хевисайда, $J_n(x)$ — функция Бесселя первого рода порядка n .

1.1. Левый конец струны закреплен, а правый конец может перемещаться свободно в перпендикулярном направлении. Линейная плотность струны равна ρ , на свободном конце подвешена бусина массы m . Масса бусины равна четверти веса всей струны $m = \frac{1}{4}\rho l$. Определить форму стоячих волн струны. Горюнов, Том 1, задача 2.11.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda \tilde{\rho}(x)X, & 0 < x < l, \\ X(0) = 0, & X'(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + \frac{m}{\rho}\delta(x-l). \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l} \right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } \mu \operatorname{tg} \mu = \frac{\rho l}{m}.$$

1.2. В центре струны, закрепленной за два конца, подвешена бусина массы m . Линейная плотность струны равна ρ , а масса бусины равна половине веса всей струны $m = \frac{1}{2}\rho l$. Определить форму стоячих волн струны. Горюнов, Том 1, задача 2.8.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda \tilde{\rho}(x) X, & -l < x < l, \\ X(-l) = X(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + \frac{m}{\rho} \delta(x). \end{cases}$$

Собственные функции распадаются на две серии:

$$X_k(x) = \sin \sqrt{\lambda_k} (l - |x|), \quad \lambda_k = \left(\frac{\mu_k}{l} \right)^2, \quad \mu_k - \text{корни } \mu \operatorname{tg} \mu = \frac{2\rho l}{m},$$

$$X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l} \right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Собственные значения из двух серий чередуются начиная с $\lambda_{k=1}$.

1.3. Концы неоднородной струны ($0 < x < l$) зафиксированы. Плотность левой половины струны ($x < l/2$) в 4 раза меньше плотности правой половины ($x \geq l/2$). Определить форму стоячих волн струны. Горюнов, Том 1, задача 2.7.1.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda \tilde{\rho}(x) X, & 0 < x < l, \\ X(0) = X(l) = 0, \\ \tilde{\rho}(x) = 1 + 3\eta(2x - l). \end{cases}$$

Общий вид собственных функций задачи:

$$X(x) = \begin{cases} \sin \sqrt{\lambda} x, & x < \frac{l}{2}, \\ B(\lambda) \sin \left(2\sqrt{\lambda}(l - x) \right), & x \geq \frac{l}{2}. \end{cases}$$

Собственные значения λ разделяются на три серии:

$$\sqrt{\lambda_k} = \frac{(2k-1)\pi \mp \arccos \frac{1}{3}}{l}, \quad k \in \mathbb{N}, \quad B(\lambda_k) = \frac{1}{2 \cos \frac{\sqrt{\lambda_k} l}{2}},$$

$$\sqrt{\lambda_n} = \frac{2\pi n}{l}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad B(\lambda_n) = \frac{(-1)^{n+1}}{2}.$$

Собственные значения возрастают при чередовании значений из трех серий. Сначала идут значения из серии λ_k с минусом, потом λ_k с плюсом, затем λ_n .

1.4. Разложение в классические ряды Фурье осуществляется по собственным функциям, которые являются решением краевой задачи с периодическими граничными условиями.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, & -l < x < l, \\ X(x) = X(x + 2l). \end{cases}$$

Положительные собственные значения λ_n вырождены и имеет кратность равную двум. Таким образом, каждому собственному значению $\lambda_n > 0$ соответствует пара линейно независимых собственных функций $X_n^{(1)}$ и $X_n^{(2)}$. В качестве пары таких функций удобно выбрать одну четную (косинус) функцию и одну нечетную (синус):

$$\begin{aligned} X_n^{(1)}(x) &= \sin \sqrt{\lambda_n} x, & \lambda_n &= \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, & n &\in \mathbb{N}, \\ X_n^{(2)}(x) &= \cos \sqrt{\lambda_n} x, & \lambda_n &= \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, & n &\in \mathbb{N}_0. \end{aligned}$$

Пусть для произвольного начального приближения метод Рэлея сходится к собственному значению λ_n . Метод не гарантирует сходимости к конкретной функции $X_n^{(1)}$ или $X_n^{(2)}$. В результате итераций, вероятнее всего, будет получена линейная комбинация этих функций $X_n(x)$. Восстановить $X_n^{(1)}$ и $X_n^{(2)}$ можно путем симметризации:

$$X_n^{(1)}(x) \sim \frac{X_n(x) - X_n(-x)}{2}, \quad X_n^{(2)}(x) \sim \frac{X_n(x) + X_n(-x)}{2}.$$

1.5. В точке $x = 0$ одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы ($-l < x < l$) находится полупроницаемая потенциальная перегородка с коэффициентом проницаемости $\alpha = 50/l$. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в таком поле. Горюнов, Том 1, задача 2.63.

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \alpha \delta(x) \right] \psi = E \psi(x), & -l < x < l, \\ \psi(-l) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи распадается на две серии:

$$\begin{aligned}\psi_k(x) &= \sin \sqrt{\lambda_k}(l - |x|), \quad E_k = \left(\frac{\mu_k}{l}\right)^2, \quad \mu_k - \text{корни } \mu \operatorname{ctg} \mu = -\frac{\alpha l}{2}, \\ \psi_n(x) &= \sin \sqrt{\lambda_n}x, \quad E_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.\end{aligned}$$

Собственные значения из двух серий чередуются начиная с $E_{k=1}$.

1.6. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме $0 < x < l$. В части ямы $x > l/3$ потенциал равен $U_0 = 900/l^2$. Определить первые уровни энергии частицы, которые превышают значения U_0 . Найти соответствующие волновые функции стационарных состояний частицы с такими энергиями.

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + U_0 \eta(3x - l) \right] \psi = E\psi(x), & 0 < x < l, \\ \psi(0) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи для $E > U_0$:

$$E_n = \left(\frac{3\mu_n}{l}\right)^2, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \sin \frac{2\sqrt{E_n - U_0}l}{3} \sin \sqrt{E_n}x, & x < \frac{l}{3}, \\ \sin \frac{\sqrt{E_n}l}{3} \sin \left(\sqrt{E_n - U_0}(l - x) \right), & x \geq \frac{l}{3}, \end{cases}$$

где μ_n — корни уравнения $\sqrt{\mu^2 - p^2} \operatorname{tg} \mu + \mu \operatorname{tg} \left(2\sqrt{\mu^2 - p^2} \right) = 0$, параметр $p = \frac{l\sqrt{U_0}}{3} = 10$. Последнее уравнение имеет бесконечное число положительных корней $\mu_n > p$, что эквивалентно условию $E_n > U_0$.

1.7. Частица находится в потенциальной яме с потенциалом $U = +\infty$ при $x < 0$ и постоянным потенциалом $U_0 = 400/l^2$ при $x > l$. Найти уровни энергии связанных состояний частицы и соответствующие волновые функции. *Горюнов, Том 1, задача 2.64.*

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + U_0 \eta(x - l) \right] \psi = E\psi(x), & 0 < x, \\ \psi(0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

В связанном состоянии находятся частицы, которые нельзя обнаружить на бесконечности, в данной задаче это частицы с энергиями

$E < U_0$. Вообще говоря, для произвольного потенциала U_0 не очевидно, что такие состояния есть. Численное моделирование провести в области $x \in [0, 2l]$ с заданием нулевого условия на правой границе.

Точное решение задачи:

$$E_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-E_n}l} \sin \sqrt{E_n}x, & x < l, \\ \sin(\sqrt{E_n}l) e^{-\sqrt{U_0-E_n}x}, & x \geq l. \end{cases}$$

где μ_n — корни $\sin \mu = \pm \frac{\mu}{\mu_0}$, такие что $\operatorname{tg} \mu < 0$, $\mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20$. Уравнение на константы μ имеет конечное число корней до $\mu < \mu_0$, что эквивалентно условию связанного состояния $E < U_0$.

1.8. В неглубокой потенциальной яме ($-l < x < l$) находится частица. Потенциал вне ямы равен $U_0 = 400/l^2$. Найти уровни энергии связанных состояний частицы и соответствующие волновые функции. Задачу решать в ограниченной области $[-2l, 2l]$ с заданием нулевых граничных условий. Горюнов, Том 1, задача 2.65.

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + U_0 \eta(|x| - l) \right] \psi = E\psi(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

В решении чередуются квантовые состояния с четными

$$E_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-E_n}l} \cos \sqrt{E_n}x, & |x| < l, \\ \cos(\sqrt{E_n}l) e^{-\sqrt{U_0-E_n}|x|}, & |x| \geq l. \end{cases}$$

μ_n — корни $\cos \mu = \pm \frac{\mu}{\mu_0}$, такие что $\operatorname{tg} \mu > 0$, $\mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20$,

и нечетными волновыми функциями:

$$E_n = \left(\frac{\mu_n}{l}\right)^2, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} e^{-\sqrt{U_0-E_n}l} \sin \sqrt{E_n}x, & |x| < l, \\ \sin(\sqrt{E_n}l) e^{-\sqrt{U_0-E_n}|x|} \operatorname{sgn}(x), & |x| \geq l, \end{cases}$$

μ_n — корни $\sin \mu = \pm \frac{\mu}{\mu_0}$, такие что $\operatorname{tg} \mu < 0$, $\mu_0 = l\sqrt{U_0} = 20$.

1.9. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в треугольной потенциальной яме $U(x > 0) = \alpha^3 x$, где $\alpha > 0$ — характеристика наклона.

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \alpha^3 x \right] \psi = E\psi(x), & 0 < x, \\ \psi(0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

Задачу следует моделировать в ограниченной области $x \in [0, l]$ с заданием нулевого условия на правой границе. Использовать $l \gg 1/\alpha$, к примеру, $l = 15/\alpha$. Точное решение:

$$\psi_n(x) = \text{Ai}(\alpha x - \mu_n), \quad E_n = \alpha^2 \mu_n, \quad \mu_n — \text{корни } \text{Ai}(-\mu) = 0,$$

где Ai — функция Эйри.

1.10. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы внутри параболической потенциальной ямы (гармонический осциллятор). Потенциал $U(x) = \omega^2 x^2$.

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi = \lambda \psi(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

Задачу следует моделировать в ограниченной области $x \in [-l, l]$ с заданием нулевых условий на границах. Использовать $l \gg 1/\omega$, к примеру, $l = 8/\omega$. Точное решение:

$$\psi_n(x) = \exp\left(-\frac{\omega x^2}{2}\right) H_n(\sqrt{\omega}x), \quad E_n = (2n + 1)\omega.$$

где H_n — полиномы Эрмита.

1.11. В центре круговой потенциальной ямы ($r < r_0$) задан потенциал $U(r) = 4/r^2$. Определить уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в таком поле.

$$\begin{cases} \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} + U(r) \right) \psi(r) = \lambda \psi(r), & 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} r \psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решения выражаются через функции Бесселя:

$$\psi_n(r) = J_2\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \quad E_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } J_2(\mu) = 0.$$

1.12. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме ($r < r_0$).

$$\begin{cases} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d\psi}{dr} = -E\psi(r), & 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, & \lim_{r \rightarrow 0} r\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$\psi_n(r) = \frac{\sin \sqrt{\lambda_n} r}{r}, \quad E_n = \left(\frac{\pi n}{r_0}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.13. Найти волновые функции и уровни энергий электрона в атоме водорода без учета углового момента. Рассмотреть модель атома с кулоновским потенциалом $U(r) = -2/(a_0 r)$, где a_0 — боровский радиус:

$$\begin{cases} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{2}{a_0 r}\right) \psi = E\psi(r), & 0 < r, \\ \psi(r_0) = 0, & \lim_{r \rightarrow 0} r\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Моделирование проводить в ограниченной области $r < r_0$, с заданием нулевых условий на границе. Использовать $r_0 \gg a_0$, для получения первых энергетических уровней достаточно выбрать $r_0 = 100a_0$.

Точное решение:

$$\psi_n(r) = \exp\left(-\frac{r}{a_0 n}\right) L_n^1\left(\frac{2r}{a_0 n}\right), \quad E_n = -\frac{1}{(an)^2}, \quad n \in \mathbb{N},$$

где L_n^1 — обобщенные полиномы Лагерра. Построить графики плотности вероятности $p(r) = |\psi(r)|^2 r^2$ для самых низких уровней энергии. Какое положение является наиболее вероятным для электрона в основном состоянии?

1.14. Найти волновые функции и уровни энергии связанных состояний частицы в потенциале Пёшль — Теллера:

$$\begin{cases} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right] \psi = E\psi(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0. \end{cases}$$

Использовать потенциал $U(x) = U_0 \tanh^2(ax)$, который на константу отличается от оригинального. Задачу следует моделировать в ограниченной области $|x| < l$ с заданием нулевого условия на правой границе. Использовать $l \gg 1/a$, к примеру, $l = 6/a$. Если потенциал $U_0 = n(n+1)a^2$, тогда существует $n+1$ связанное состояние ($E < U_0$) в потенциальной яме:

$$\psi_k(x) = P_n^k(\tanh(ax)), \quad E_k = U_0 - (ak)^2, \quad k = \overline{0, n}.$$

Здесь P_n^k — присоединенные функции Лежандра. Собственные значения нумеруются начиная с высоких энергий.

1.15. Полиномы Лежандра встречаются при решении задач математической физики в сферических координатах. Найти численно первые полиномы Лежандра как решение задачи на собственные функции:

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{du}{dx} = -\lambda u(x), & -1 < x < 1, \\ \lim_{x \rightarrow \pm 1} (1-x^2)u'(x) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи через полиномы Лежандра $P_n(x)$:

$$u_n(x) = P_n(x), \quad \lambda_n = n(n+1), \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.16. Присоединенные функции Лежандра встречаются при решении задач математической физики в сферических координатах. В частности, через них вводятся сферические функции. Присоединенные функции Лежандра являются ограниченными решениями следующей задачи на собственные функции:

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{du}{dx} - \frac{m^2}{1-x^2}u = -\lambda u(x), & -1 < x < 1, \\ \lim_{x \rightarrow \pm 1} (1-x^2)u'(x) = 0. \end{cases}$$

Приближенно найти присоединенные функции Лежандра P_n^m для $m = 1$ как решение задачи на собственные функции и собственные значения.

$$u_n(x) = P_n^m(x), \quad \lambda_n = n(n+1), \quad n \in \mathbb{N}, \quad n \geq m.$$

1.17. Струна длины l зафиксирована с двух концов. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, & 0 < x < l, \\ X(0) = X(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l} \right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.18. Концы струны длины l могут свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, & 0 < x < l, \\ X'(0) = X'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \cos \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l} \right)^2, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.19. Левый конец струны зафиксирован, а правый может свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, & 0 < x < l, \\ X(0) = 0, & X'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi(2n+1)}{2l} \right)^2, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

1.20. Левый конец струны зафиксирован, а правый конец струны закреплен через пружину. Определить моды колебаний струны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} X'' = -\lambda X, & 0 < x < l, \\ X(0) = 0, & 3X(l) + lX'(l) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$X_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu_n}{l} \right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } \mu + 3 \operatorname{tg} \mu = 0.$$

1.21. Круглая мембрана радиуса r_0 закреплена по краю. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{dR}{dr} = -\lambda R(r), & 0 < r < r_0, \\ R(r_0) = 0, & \lim_{r \rightarrow 0} r R'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$R_n(r) = J_0 \left(\frac{\mu_n r}{r_0} \right), \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0} \right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } J_0(\mu) = 0.$$

1.22. Края круглой мембраны радиуса r_0 могут свободно смещаться в перпендикулярном направлении. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{dR}{dr} = -\lambda R(r), & 0 < r < r_0, \\ R'(r_0) = 0, & \lim_{r \rightarrow 0} r R'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи (J_n — функции Бесселя первого рода):

$$R_n(r) = J_0 \left(\frac{\mu_n r}{r_0} \right), \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0} \right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } J_1(\mu) = 0.$$

1.23. Края круглой мембраны радиуса r_0 закреплены через пружину. Определить моды колебаний мембраны, которые соответствуют самым низким собственным частотам.

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{dR}{dr} = -\lambda R(r), & 0 < r < r_0, \\ 20R(r_0) + r_0 R'(r_0) = 0, & \lim_{r \rightarrow 0} r R'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи (J_n — функции Бесселя первого рода):

$$R_n(r) = J_0 \left(\frac{\mu_n r}{r_0} \right), \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0} \right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } 20J_0(\mu) = \mu J_1(\mu).$$

1.24. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\lambda\psi(x), & 0 < x < l, \\ \psi(0) = \psi(l) = 0. \end{cases}$$

Волновые функции:

$$\psi_n(x) = \sin \sqrt{\lambda_n} x, \quad \lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \quad n \in \mathbb{N}.$$

1.25. Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой круглой потенциальной яме:

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d\psi}{dr} = -\lambda\psi(r), & 0 < r < r_0, \\ \psi(r_0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} r\psi'(r) = 0. \end{cases}$$

Решение задачи:

$$\psi_n(r) = J_0\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } J_0(\mu) = 0.$$

1.26. Функции Бесселя 1-го порядка встречаются при решении задач математической физики в полярных координатах. К примеру, задача о колебаниях закрепленной мембраны. Найти собственные функции, соответствующие наименьшим собственным значениям.

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{dR}{dr} - \frac{1}{r^2} R(r) = -\lambda R(r), & 0 < r < r_0, \\ R(r_0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} rR'(r) = 0. \end{cases}$$

Решения выражаются через функции Бесселя:

$$R_n(r) = J_1\left(\frac{\mu_n r}{r_0}\right), \quad \lambda_n = \left(\frac{\mu}{r_0}\right)^2, \quad \mu_n - \text{корни } J_1(\mu) = 0.$$

Лекция 2. Аппроксимация уравнения Пуассона

Уравнение Пуассона в n -мерной области D имеет вид

$$-\Delta u = f(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in D \subseteq \mathbb{R}^d,$$

где Δ — оператор Лапласа (или Лапласиан). Важный частный случай $f(\mathbf{r}) = 0$ носит собственное название — уравнение Лапласа. Уравнение Пуассона или Лапласа обычно дополняется тем или иным условием на границе области D , которую будем обозначать как ∂D . К классическим граничным условиям можно отнести условие Дирихле, когда на границе задано значение функции, и условие Неймана, когда на границе задана производная функции.

Уравнение Пуассона встречается в различных областях физики. Собственно, уравнение Пуассона в электростатике, стационарные задачи теплопроводности, диффузии и фильтрации. Уравнение Пуассона также описывает натяжение двумерной мембраны, потенциальное течение несжимаемой жидкости. Общность всех этих физических процессов проявляется в интегральной формулировке уравнения

$$-\oint_{\partial D} \frac{\partial u}{\partial n} dS = \int_D f(\mathbf{r}) dV, \quad (2.1)$$

которая выражает фундаментальные законы сохранения. Поверхностный интеграл равен «потoku» некоторой величины через границы области, а объемный интеграл — «источникам» этой величины внутри области. Интегральное соотношение описывает баланс между генерацией некоторой величины внутри области и потоком этой величины через границы.

Для электростатики $-\nabla u$ это поток электрической индукции, а источниками $f(\mathbf{r})$ являются электрические заряды. Для теплопроводности $-\nabla u$ это поток тепла (закон Фурье). Для диффузии и фильтрации — поток вещества (закон Дарси). Для движения несжимаемой жидкости это скорость $\mathbf{v} = -\nabla u$, то есть поток жидкости.

Уравнение Пуассона относится к дифференциальным уравнениям эллиптического типа. Численная аппроксимация краевых задач для

уравнения Пуассона приводит к системам линейных уравнений. Если задача Коши для эволюционных гиперболических или параболических уравнений допускает решение по явным схемам, то есть численное решение можно находить последовательно продвигаясь по временным слоям, то численное решение краевых задач для эллиптических уравнений описывается исключительно неявными схемами.

Выпишем конечно-объемную аппроксимацию уравнения Пуассона в прямоугольной области:

$$-\Delta u = f(x, y), \quad 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y. \quad (2.2)$$

Разобьем вычислительную область на одинаковые прямоугольные ячейки: n_x ячеек вдоль оси x и n_y ячеек вдоль оси y , общее число ячеек $n = n_x \times n_y$. Размеры ячеек обозначим как $h_x = l_x/n_x$ и $h_y = l_y/n_y$. Для обозначения ячеек и значений в них введём двумерную индексацию, индекс ячейки по оси x обозначим как $i = \overline{1, n_x}$, вдоль оси y как $j = \overline{1, n_y}$. Координаты центров ячеек обозначим как x_{ij} и y_{ij} , а координаты границ ячеек будем обозначать полуцелыми индексами $x_{i \pm \frac{1}{2}}$ и $y_{j \pm \frac{1}{2}}$.

Интегральное соотношение (2.1) справедливо для любой подобласти области D , поэтому его можно выписать отдельно для каждой ячейки построенной сетки:

$$-\oint_{S_{ij}} \frac{\partial u}{\partial n} dS = \int_{V_{ij}} f(x, y) dV,$$

здесь V_{ij} — объем ячейки, S_{ij} — поверхность ячейки ij , а производные вычисляются по направлению внешней нормали к границе ячейки. В нашем случае каждая ячейка имеет ровно по четыре грани, выпишем поверхностный интеграл отдельно для каждой грани:

$$-\int_{S_{ij}^L} \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_{S_{ij}^R} \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_{S_{ij}^B} \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_{S_{ij}^T} \frac{\partial u}{\partial n} dS = \int_{V_{ij}} f(x, y) dV. \quad (2.3)$$

В данной формуле S_{ij}^L , S_{ij}^R , S_{ij}^B и S_{ij}^T — поверхности левой, правой, нижней и верхней граней ячейки соответственно. Уравнение (2.3) выполняется **точно**, на данном этапе никакие приближения не использовались.

Введём операцию проекции функции $u(x, y)$ на сетку. Сеточным значением функции u_{ij} в ячейке будем считать усредненное значение

функции в объеме ячейки V_{ij} , то есть:

$$u_{ij} = \frac{1}{V_{ij}} \int_{V_{ij}} u(x, y) dV.$$

Такой способ проекции со вторым порядком точности совпадает с выбором значений сеточной функции в центре ячейки, то есть

$$u_{ij} = u(x_{ij}, y_{ij}) + O(h^2),$$

где h — характерный линейный размер ячейки. Для ячеек произвольной формы значение функции выбирается в барицентре ячейки. Таким образом, при использовании схем с порядком точности не выше второго, можно считать оба варианта проекции эквивалентными: значения u_{ij} можно рассматривать как значение функции в центре ячейки или как усредненное по ячейке. После введения сеточной функции можно заменить объемный интеграл в правой части (2.3) на значение $h_x h_y f_{ij}$, где $h_x h_y$ — объем ячейки.

Далее необходимо аппроксимировать потоковые интегралы в левой части уравнения (2.3). Для примера, рассмотрим поток через левую грань ячейки:

$$\int_{S_{ij}^L} \frac{\partial u}{\partial n} dS = \frac{u_{i-1,j} - u_{ij}}{h_x} h_y + O(h^2),$$

здесь аппроксимация производной на грани умножается на длину грани h_y . После записи всех интегралов получаем следующую формулу для внутренних ячеек области:

$$\begin{aligned} \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x} h_y + \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x} h_y + \\ + \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y} h_x + \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y} h_x = h_x h_y f_{ij}. \end{aligned}$$

После преобразований получаем формулу, в которой без труда различимы аппроксимации вторых производных в разных направлениях:

$$-\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h_x^2} - \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h_y^2} = f_{ij}. \quad (2.4)$$

Формула (2.4) справедлива для внутренних ячеек области $1 < i < n_x$, $1 < j < n_y$. Для записи уравнений в граничных ячейках требуется задание граничных условий.

2.1. Периодические граничные условия

Уравнение Пуассона задано в прямоугольной области, левая граница связана с правой, а нижняя граница замыкается на верхнюю, будто уравнение решается в бесконечной области.

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \\ u(x + l_x, y) = u(x, y), \\ u(x, y + l_y) = u(x, y). \end{cases}$$

Решение уравнения Пуассона с периодическими граничными условиями существует при выполнении условия:

$$\int_D f(x, y) dx dy = 0.$$

Чтобы в этом убедиться, достаточно проинтегрировать уравнение по всей области. Потоки через левую и правую границу области различаются по знаку и взаимно вычитаются, аналогично потоки через верхнюю и нижнюю границы. Отсюда следует, что сумма источников внутри области должна быть равна нулю. Если решение уравнения Пуассона с периодическими граничными условиями существует, то оно определено с точностью до произвольной аддитивной постоянной.

Конечно-объемная аппроксимация для всех ячеек определяется по формуле (2.4). Необходимо только учесть, что индексы ячеек также требуется периодически замкнуть. К примеру, справа от самой правой ячейки $u_{n_x, j}$ располагается ячейка с левой границы $u_{1, j}$. Снизу от нижнего ряда ячеек $u_{i, 1}$ располагаются ячейки с верхнего ряда u_{i, n_y} .

Итоговую систему линейных уравнений можно представить в операторном виде $Lu = F$, где L — сеточный оператор, а F — вектор правых частей. Количество уравнений в системе равно числу ячеек n , соответственно размер оператора L в матричном представлении $n \times n$. Оператор L является вырожденным, поскольку константный вектор удовлетворяет однородной системе уравнений $Lu = 0$, в этом смысле оператор L повторяет свойства дифференциального оператора.

Условие совместности для систем линейных уравнений (теорема Кронекера – Капелли) гласит, что решение системы существует в том случае, когда ранг матрицы совпадает с рангом расширенной матрицы. Поскольку ранг матрицы L меньше числа неизвестных n , для разрешимости должно быть наложено условие и на правую часть системы — на вектор F . По невероятному стечению обстоятельств условие

совместности полученной системы уравнений совпадает с условием существования решения у дифференциальной задачи¹:

$$h_x h_y \sum_{i,j} F_{ij} = \sum_{i,j} f_{ij} h_x h_y = 0.$$

Если значения сеточной функции f_{ij} получены путем усреднения в ячейках, тогда условие совместности для системы уравнений полностью совпадает с условием разрешимости дифференциальной задачи. Но чаще используется аппроксимация $f_{ij} = f(x_i, y_j)$, в этом случае вектор правых частей требуется отнормировать, чтобы сумма стала равна нулю, иначе система уравнений не будет иметь решения. Для этого достаточно вычесть среднее значение:

$$\tilde{F}_{ij} = F_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i,j} F_{ij}.$$

Поскольку решение определяется с точностью до произвольной постоянной, решение также рекомендуется нормировать аналогичным образом, в том числе в ходе итераций, при использовании итерационных методов решения систем уравнений.

2.2. Граничные условия Неймана

В задаче Неймана для уравнения Пуассона на границах области задаются потоки:

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \\ u_x(0, y) = -\varphi_L(y), & u_x(l_x, y) = \varphi_R(y), \\ u_y(x, 0) = -\varphi_B(x), & u_y(x, l_y) = \varphi_T(x). \end{cases}$$

В данной постановке перед функцией φ_L указан знак минус, поскольку на левой границе производная по внешней нормали равна $-u_x$, по аналогичной причине минус стоит перед функцией φ_B . Решение задачи Неймана существует при выполнении условия:

$$\int_D f dV + \oint_{\partial D} \varphi dS = 0,$$

¹Константный вектор удовлетворяет однородной системе уравнений \Rightarrow сумма столбцов матрицы равна нулю. Матрица симметрична \Rightarrow сумма строк матрицы равна нулю \Rightarrow сумма строк расширенной матрицы должна быть равна нулю, то есть $\sum_{i,j} F_{ij} = 0$

то есть сумма источников плюс сумма потоков через границу области должна быть равна нулю. Условие совместности имеет самую наглядную интерпретацию для задачи движения *несжимаемой* жидкости. Если источники жидкости в области отсутствуют, то сумма втекающих и вытекающих потоков жидкости должна быть равна нулю. Если в области есть источники жидкости, то вся создаваемая жидкость должна вытекать через границу. Решение задачи Неймана определено с точностью до аддитивной постоянной.

Выпишем точное равенство (2.3). Пусть теперь одна из сторон ячейки располагается на границе области, в этом случае условия Неймана напрямую определяют поток через внешнюю границу. К примеру, пусть левая сторона ячейки лежит на границе области

$$\int_{S_{ij}^L} \frac{\partial u}{\partial n} dS = \int_{S_{ij}^L} \varphi_L dS = \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \varphi_L(y) dy = \varphi_{Lj} h_y.$$

Опять же, по умолчанию величину φ_{Lj} вводим как усредненное значение функции φ_L на грани ячейки, то есть, по определению:

$$\varphi_{Lj} = \frac{1}{h_y} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \varphi_L(y) dy = \varphi_L(y_j) + O(h_y^2),$$

но при работе со схемами не выше второго порядка можно ограничиться аппроксимацией функции φ_L на центре грани.

Выпишем полученную схему целиком:

$$\begin{aligned} & [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x} h_y - [i = 1] \varphi_{Lj} h_y + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x} h_y - \\ & - [i = n_x] \varphi_{Rj} h_y + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y} h_x - [j = 1] \varphi_{Bi} h_x + \\ & + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y} h_x - [j = n_y] \varphi_{Ti} h_x = h_x h_y f_{ij}. \end{aligned}$$

Здесь использовано обозначение $[\cdot]$ — скобка Айверсона. Если в скобках указано истинное выражение, то скобка принимает значение 1, иначе — 0. Такая запись справедлива для всех ячеек и позволяет учесть граничные условия для ячеек, для которых они существуют.

Перенесем неоднородность в правую часть и поделим выражение

на объем ячейки $h_x h_y$:

$$\begin{aligned}
& [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x^2} + \\
& + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y^2} + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y^2} = \\
& = f_{ij} + [i = 1] \frac{\varphi_{Lj}}{h_x} + [i = n_x] \frac{\varphi_{Rj}}{h_x} + [j = 1] \frac{\varphi_{Bi}}{h_y} + [j = n_y] \frac{\varphi_{Ti}}{h_y}.
\end{aligned}$$

Здесь в левой части формулы записан результат действия сеточного оператора Лапласа на сеточную функцию, справа — сумма всех неоднородностей уравнения. Можно заметить, что потоки с границы входят в уравнение также, как объемные источники.

Итоговую систему линейных уравнений представим в операторном виде $Lu = F$, где L — сеточный оператор, а F — вектор правых частей. Количество уравнений в системе равно числу ячеек n , соответственно размер оператора L в матричном представлении $n \times n$. Оператор L является вырожденным, поскольку константный вектор удовлетворяет однородной системе уравнений $Lu = 0$, в этом смысле оператор L повторяет свойства дифференциального оператора.

Условие совместности для систем линейных уравнений (теорема Кронекера – Капелли) гласит, что решение системы существует в том случае, когда ранг матрицы совпадает с рангом расширенной матрицы. Поскольку ранг матрицы L меньше числа неизвестных n , для разрешимости должно быть наложено условие и на правую часть системы — на вектор F . По невероятному стечению обстоятельств условие совместности полученной системы уравнений совпадает с условием существования решения у дифференциальной задачи

$$\begin{aligned}
h_x h_y \sum_{i,j} F_{ij} &= \sum_{i,j} f_{ij} h_x h_y + \sum_j \varphi_{Lj} h_y + \sum_j \varphi_{Rj} h_y + \\
&+ \sum_i \varphi_{Bi} h_x + \sum_i \varphi_{Ti} h_x = 0.
\end{aligned}$$

Если значения сеточной функции f_{ij} получены путем усреднения в ячейках, а значения φ_{Lj} , φ_{Rj} и другие путем усреднения потоков на гранях, тогда условие существования решения для системы линейных уравнений полностью совпадает с условием разрешимости дифференциальной задачи. Но чаще используется аппроксимация в центрах ячеек и граней, поэтому перед решением СЛАУ правую часть

следует отнормировать, чтобы сумма правых частей была равна нулю, иначе система уравнений не будет иметь решения. Для этого достаточно вычесть среднее значение:

$$\tilde{F}_{ij} = F_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i,j} F_{ij}.$$

Поскольку решение определяется с точностью до произвольной постоянной, решение также рекомендуется нормировать аналогичным образом, в том числе в ходе итераций, при использовании итерационных методов решения систем уравнений.

2.3. Граничные условия Дирихле

В задаче Дирихле на границе области задаются точные значения функции:

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \\ u(0, y) = \mu_L(y), & u(l_x, y) = \mu_R(y), \\ u(x, 0) = \mu_B(x), & u(x, l_y) = \mu_T(x). \end{cases}$$

Вернемся к точному равенству (2.3), требуется оценить производные на гранях, которые являются границей области. Пусть значение в самой ячейке равно u_k , значение на грани в соответствии с условием Дирихле задано и равно μ_k , тогда производную по внешней нормали можно оценить по формуле:

$$\frac{\partial u}{\partial n} \approx \frac{\mu_k - u_k}{h/2} = \frac{2\mu_k - 2u_k}{h},$$

здесь $h/2$ — расстояние от центра ячейки до соответствующей грани. Подставим выражения в аппроксимации производных и получим формулу:

$$\begin{aligned} & [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x} h_y + [i = 1] \frac{u_{ij} - \mu_{Lj}}{h_x/2} h_y + \\ & + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x} h_y + [i = n_x] \frac{u_{ij} - \mu_{Rj}}{h_x/2} h_y + \\ & + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y} h_x + [j = 1] \frac{u_{ij} - \mu_{Bi}}{h_y/2} h_x + \\ & + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y} h_x + [j = n_y] \frac{u_{ij} - \mu_{Ti}}{h_y/2} h_x = h_x h_y f_{ij}. \end{aligned}$$

Разделим выражение на объем ячейки $h_x h_y$, также перенесем все неоднородные слагаемые в правую часть, итоговая аппроксимация:

$$\begin{aligned}
& [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x^2} + [i = 1] \frac{2u_{ij}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x^2} + [i = n_x] \frac{2u_{ij}}{h_x^2} + \\
& + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y^2} + [j = 1] \frac{2u_{ij}}{h_y^2} + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{2u_{ij}}{h_y^2} = \\
& = f_{ij} + [i = 1] \frac{2\mu_{Lj}}{h_x^2} + [i = n_x] \frac{2\mu_{Rj}}{h_x^2} + [j = 1] \frac{2\mu_{Bi}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{2\mu_{Ti}}{h_y^2}.
\end{aligned}$$

Как и в прошлых задачах уравнение можно представить в операторном виде $Lu = F$, где L — сеточный оператор, а F — вектор правых частей. Количество уравнений в системе равно числу ячеек n , соответственно размер оператора A в матричном представлении $n \times n$. Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона всегда существует и единственно. Система линейных уравнений для аппроксимации также всегда совместна, то есть матрица оператора L не вырождена.

Несколько слов о том, как понимать постановки выше. Введем n -мерное линейное пространство сеточных функций $\mathbb{U} = \mathbb{R}^n$. Размерность пространства совпадает с числом ячеек нашей сетки. Все операции в линейном пространстве \mathbb{U} можно определить стандартным образом, сеточные функции можно складывать, умножать на число, считать их скалярное произведение и норму. Выше мы записывали дискретные задачи в «операторной» форме $Lu = F$. Здесь u и F это сеточные функции из \mathbb{U} , а L — линейный оператор на пространстве сеточных функций $L : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{U}$.

В матричном представлении сеточные функции это просто векторы длины n , а оператор L — квадратная матрица $n \times n$. Для перевода уравнения $Lu = F$ в матричное представление требуется всего лишь пронумеровать ячейки сетки. В дискретных уравнениях выше используется двойная индексация u_{ij} и F_{ij} для сеточной функции в прямоугольнике, если же для ячеек определить единственный индекс, тогда уравнения будут в точности выглядеть как система линейных уравнений. Понятно, что свойства оператора L не меняются при различной нумерации, сеточный оператор для $-\Delta$ останется самосопряженным и неотрицательно определенным, а в матричном представлении матрица L будет симметричной.

2.4. Пример

Рассмотрим уравнение Пуассона в прямоугольнике со всеми видами граничных условий: условие Дирихле слева, условие Неймана справа, периодическое замыкание снизу/сверху:

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \\ u(0, y) = \mu(y), \quad u_x(l_x, y) = \varphi(y), \\ u(x, y + l_y) = u(x, y). \end{cases}$$

Разобьем расчетную область на ячейки, наиболее близкие к квадратам со стороной h_0 . Тогда число ячеек по осям должно быть равно $n_x = \text{round}(l_x/h_0)$, $n_y = \text{round}(l_y/h_0)$, размеры получившихся ячеек $h_x = l_x/n_x$, $h_y = l_y/n_y$. Ячейки нумеруем парой индексов (i, j) , координаты центров ячеек:

$$x_{ij} = (i - \frac{1}{2})h_x, \quad y_{ij} = (j - \frac{1}{2})h_y, \quad i = \overline{1, n_x}, \quad j = \overline{1, n_y}. \quad (2.5)$$

Создание двумерной сетки с использованием функций `numpy` приведено в Листинге 2.1. Функция `np.meshgrid` создает из пары одномерных массивов двумерные массивы X и Y , которые соответствуют x_{ij} и y_{ij} в математической записи выше.

```
1 import numpy as np
2
3 # characteristic size
4 h0 = 0.01
5
6 # mesh sizes
7 nx = int(np.round(l_x / h0))
8 ny = int(np.round(l_y / h0))
9
10 # cell sizes
11 hx = l_x / nx
12 hy = l_y / ny
13
14 # cell centers
15 x = np.linspace(0.5 * hx, l_x - 0.5 * hx, nx)
16 y = np.linspace(0.5 * hy, l_y - 0.5 * hy, ny)
17 X, Y = np.meshgrid(x, y, indexing='ij')
```

Листинг 2.1: Создание двумерной сетки X, Y .

Выпишем конечно-объемную аппроксимацию уравнения в форме $Lu = F$. Оператор L имеет следующую форму:

$$\begin{aligned} (Lu)_{ij} = & [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x^2} + \\ & + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y^2} + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y^2} + \\ & + [i = 1] \frac{2u_{ij}}{h_x^2} + [j = 1] \frac{u_{ij} - u_{i,n_y}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,1}}{h_y^2}, \quad (2.6) \end{aligned}$$

последние два слагаемых отвечают за периодическое замыкание. Сеточная функция F :

$$F_{ij} = f_{ij} + [i = 1] \frac{2\mu_j}{h_x^2} + [i = n_x] \frac{\varphi_j}{h_x}. \quad (2.7)$$

Пусть сеточные функции в программе задаются в виде двумерных `numpy` массивов $n_x \times n_y$. В Листинге 2.2 приведены две функции: функция `RHS` (right-hand side) возвращает сеточную функцию правых частей F , функция `OpL` возвращает результат действия оператора L на сеточную функцию u . Отметим, что в коде индексация массивов начинается с нуля.

```

1 def RHS(X, Y):
2     res = f(X, Y)
3     res[ 0, :] += 2*mu (Y[ 0, :]) / hx**2
4     res[-1, :] += phi(Y[-1, :]) / hx
5     return res
6
7 def OpL(u):
8     res = np.zeros_like(u)
9     res[+1:, :] += (u[+1:, :] - u[:-1, :]) / hx**2
10    res[:-1, :] += (u[:-1, :] - u[+1:, :]) / hx**2
11    res[:, +1:] += (u[:, +1:] - u[:, :-1]) / hy**2
12    res[:, :-1] += (u[:, :-1] - u[:, +1:]) / hy**2
13
14    # Dirichlet boundary condition
15    res[0, :] += 2.0 * u[0, :] / hx**2
16
17    # Periodic boundary condition
18    res[:, 0] += (u[:, 0] - u[:, -1]) / hy**2
19    res[:, -1] += (u[:, -1] - u[:, 0]) / hy**2
20    return res

```

Листинг 2.2: Правые части F . Действие оператора L на сеточную функцию u .

2.5. Задачи на эллиптические уравнения

2.1. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле в прямоугольнике:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < 1, \quad 0 < y < \sqrt{2}, \\ u(0, y) = 0, & u(1, y) = \sin(5) \cos \frac{\pi y^2}{2}, \\ u(x, 0) = \sin 5x, & u(x, \sqrt{2}) = -\sin 5x, \end{cases}$$
$$f(x, y) = \sin 5x \cdot \left((25 + \pi^2 y^2) \cos \frac{\pi y^2}{2} + \pi \sin \frac{\pi y^2}{2} \right).$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin 5x \cdot \cos \frac{\pi y^2}{2}.$

б) Квадратную металлическую пластинку достаточно долго нагревают точечным лазерным излучением с постоянной мощностью. Края пластинки поддерживаются при нулевой температуре. Построить распределение температуры в пластинке.

2.2. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Неймана по оси y и периодическими условиями вдоль оси x :

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = (9y - 10) \sin 4x e^{-5y}, & 0 < x < \pi, \quad 0 < y < 1, \\ u(x + \pi, y) = u(x, y), \\ u_y(x, 0) = \sin 4x, & u_y(x, 1) = -\frac{4}{e^5} \cdot \sin 4x. \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin 4x \cdot y e^{-5y}.$

б) В доме сделан водяной теплый пол. Трубки с горячей водой имеют радиус r_0 , они расположены параллельно друг другу на расстоянии L и залиты бетонной стяжкой толщиной H . Трубки создают постоянный источник тепла Q в толще бетона. Полагаем, что нижняя часть стяжки хорошо теплоизолирована, а полученное от труб тепло равномерно рассеивается с поверхности пола. Найти равновесное распределение температуры в толще бетона.

2.3. Решить задачу Дирихле в прямоугольнике для экранированного уравнения Пуассона:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u - 4u = 0, & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u(-1, y) = u(1, y) = \sinh(1 - y) \sinh(1 + y), \\ u(x, -1) = u(x, 1) = \sinh(x + 1) \sinh(x - 1). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sinh(x + y) \sinh(x - y)$.

б) На прямоугольный пружинный матрас кладут тонкое тяжелое кольцо массы M . Пружины матраса распределены равномерно и имеют жесткость k . Построить поверхность матраса, считая, что края матраса закреплены.

2.4. Решить задачу Неймана для уравнения Пуассона:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = -6, & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u_x(-1, y) = -12, & u_x(1, y) = 4, \\ u_y(x, -1) = 14, & u_y(x, 1) = -14. \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = (1 - 2x)^2 - 7y^2$.

б) По трубе с сечением S течет несжимаемая жидкость. Жидкость поступает в трубу слева через отверстие с сечением $S_1 = 0.5S$ со скоростью v_1 и вытекает справа через два отверстия с сечениями $S_2 = 0.05S$ со скоростью v_2 . Построить векторное поле скорости жидкости в трубе.

2.5. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле по оси x и периодическими условиями по оси y :

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = 4 - 29 \sin(5x + 2y), & -1 < x < 1, \quad 0 < y < \pi, \\ u(-1, y) = 2 + \sin(2y - 5), & u(1, y) = 2 + \sin(2y + 5), \\ u(x, y + \pi) = u(x, y). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = 2x^2 + \sin(5x + 2y)$.

б) Между обкладками бесконечного конденсатора (моделируется периодическими граничными условиями) помещены два заряда q_1 и q_2 . Построить линии напряженности электростатического поля.

2.6. Решить задачу Неймана для экранированного уравнения Пуассона в прямоугольнике:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u - 4u = 12(1 - 2x^2), & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u_x(-1, y) = 2 \cosh 2 - 12, & u_x(1, y) = 2 \cosh 2 + 12, \\ u_y(x, -1) = 2 \sinh 2, & u_y(x, 1) = -2 \sinh 2. \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = 6x^2 + \sinh 2x - \cosh 2y$.

б) В прямоугольную камеру через точечное отверстие с постоянной скоростью поступает газ, который содержит радиоактивный

изотоп с коэффициентом распада β . Через некоторое время в камере устанавливается стационарное распределение изотопа. Построить его концентрацию.

2.7. Найти решение уравнения Пуассона в прямоугольной периодически замкнутой области:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = -25 \sin(3x + 4y) - 32 \cos 4y, & 0 < x < 2\pi, \quad 0 < y < \pi, \\ u(x + 2\pi, y) = u(x, y), & u(x, y + \pi) = u(x, y). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin(3x + 4y) + 2 \cos 4y$.

б) В узлах квадратной решетки расположены в шахматном порядке положительно и отрицательно заряженные ионы. Ионы имеют одинаковый по модулю заряд, то есть решетка является электронейтральной. Построить эквипотенциальные линии электростатического поля, которое создает решетка.

2.8. Найти решение уравнения Пуассона с условиями Дирихле и Неймана на границах:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = \left[6 - 72 \left(4(1 - 2x)^2 + (1 - 3y)^2 \right) \theta(x, y) \right] (1 - \theta^2(x, y)), \\ \theta(x, y) = \tanh \left(3(1 - 2x)^2 - (1 - 3y)^2 \right), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < y < 1, \\ u(0, y) = u(1, y) = \tanh \left(3 - (1 - 3y)^2 \right), \\ u_y(x, 0) = 6 \left(1 - \tanh^2 \left(3(1 - 2x)^2 - 1 \right) \right), \\ u_y(x, 1) = -12 \left(1 - \tanh^2 \left(3(1 - 2x)^2 - 4 \right) \right). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \theta(x, y)$.

б) На подвешенный гамак кладут тяжелое тонкое кольцо массы M . Построить поверхность гамака. Предполагается, что два противоположных края гамака зафиксированы, а другие два свободны.

2.9. Найти решение экранированного уравнения Пуассона в квадратной периодически замкнутой области:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u - u = -f(x, y), & 0 < x < \pi, \quad 0 < y < \pi \\ u(x + \pi, y) = u(x, y), & u(x, y + \pi) = u(x, y), \end{cases}$$

$$f(x, y) = \sin 2x e^{-\cos 2y} (2 \cos 2y - 1)^2.$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin 2x e^{-\cos 2y}$.

б) В узлах квадратной решетки расположены в шахматном порядке положительно и отрицательно заряженные ионы. Положительные ионы имеют заряд q_1 , отрицательные — q_2 . Предполагаем, что решетка создает электростатическое поле, которое удовлетворяет экранированному уравнению Пуассона. Построить эквипотенциальные линии поля.

2.10. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле в прямоугольнике:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < \sqrt{2}, \quad 0 < y < 1, \\ u(0, y) = \sin 5y, & u(\sqrt{2}, y) = -\sin 5y, \\ u(x, 0) = 0, & u(x, 1) = \sin(5) \cos \frac{\pi x^2}{2}. \end{cases}$$

$$f(x, y) = \sin 5y \cdot \left((25 + \pi^2 x^2) \cos \frac{\pi x^2}{2} + \pi \sin \frac{\pi x^2}{2} \right)$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin 5y \cdot \cos \frac{\pi x^2}{2}$.

б) Эластичный тент натянут на четыре параболических опоры $f(x) = x(3 - x)$, расположенных по сторонам квадрата 3×3 метра. Построить поверхность получившегося шатра.

2.11. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Неймана по оси x и периодическими условиями вдоль оси y :

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = (9x - 10) \sin 4y e^{-5x}, & 0 < x < 1, \quad 0 < y < \pi, \\ u_x(0, y) = \sin 4y, & u_x(1, y) = -\frac{4}{e^5} \cdot \sin 4y, \\ u(x, y + \pi) = u(x, y). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = x e^{-5x} \sin 4y$.

б) Бесконечная металлическая пластина имеет множество прямых параллельных прорезей, расположенных с периодом L , ширина прорезей равна αL . Рядом на расстоянии H расположена точно такая же пластина. Смоделировать движение несжимаемой жидкости через такую систему из двух решеток. Построить векторное поле скорости.

2.12. Решить задачу Дирихле для экранированного уравнения Пуассона в прямоугольнике:

$$а) \quad \begin{cases} \Delta u - 4u = 0, & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u(-1, y) = u(1, y) = \sinh(y+1) \sinh(y-1), \\ u(x, -1) = u(x, 1) = \sinh(1-x) \sinh(1+x). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sinh(x+y) \sinh(y-x)$.

б) Прямоугольную камеру заполняют газом, который содержит радиоактивный изотоп с коэффициентом распада β . Газ поступает в камеру через 12 форсунок, расположенных по окружности. Мощность всех форсунок одинакова и постоянна. Концентрация изотопа на границе камеры поддерживается равной нулю. Построить распределение изотопа в камере, которое установится спустя некоторое время.

2.13. Решить задачу Неймана для уравнения Пуассона:

$$а) \quad \begin{cases} \Delta u = -6, & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u_x(-1, y) = 14, & u_x(1, y) = -14, \\ u_y(x, -1) = -12, & u_y(x, 1) = 4. \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = -7x^2 + (1-2y)^2$.

б) Прямоугольная камера размера $[0, l_x] \times [0, l_y]$ заполнена несжимаемой жидкостью. Жидкость втекает с постоянной скоростью через левую границу камеры $x \in [x_1, l_x]$ и вытекает с постоянной скоростью через нижнюю границу $y \in [y_1, l_y]$. Построить векторное поле скорости жидкости в камере.

2.14. Найти решение уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле по оси y и периодическими условиями по оси x :

$$а) \quad \begin{cases} \Delta u = 4 - 29 \sin(2x + 5y), & 0 < x < \pi, \quad -1 < y < 1, \\ u(x + \pi, y) = u(x, y), \\ u(x, -1) = 2 + \sin(2x - 5), & u(x, 1) = 2 + \sin(2x + 5). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \sin(2x + 5y) + 2y^2$.

б) Имеется бесконечная пластина толщины H , то есть $y \in [0, H]$. В пластине случайным образом расположено большое количество точечных источников тепла с постоянной мощностью. Для охлаждения

пластину помещают в теплоемкую среду, которая охлаждает поверхность пластины до температуры T_0 . Построить стационарное распределение тепла в пластине, задача моделируется с периодическими граничными условиями по оси x .

2.15. Решить задачу Неймана для экранированного уравнения Пуассона в прямоугольнике:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u - 4u = 12(1 - 2y^2), & -1 < x < 1, \quad -1 < y < 1, \\ u_x(-1, y) = 2 \sinh 2, & u_x(1, y) = -2 \sinh 2, \\ u_y(x, -1) = 2 \cosh 2 - 12, & u_y(x, 1) = 2 \cosh 2 + 12. \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = -\cosh 2x + \sinh 2y + 6y^2$.

б) На прямоугольный пружинный матрас кладут тонкое тяжелое кольцо массы M . Пружины матраса распределены равномерно и имеют жесткость k . Построить поверхность матраса.

2.16. Найти решение уравнения Пуассона в периодически замкнутой области:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = -32 \cos 4x - 25 \sin(4x + 3y), & 0 < x < \pi, \quad 0 < y < 2\pi, \\ u(x + \pi, y) = u(x, y), & u(x, y + 2\pi) = u(x, y). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = 2 \cos 4x + \sin(4x + 3y)$.

б) В узлах квадратной решетки расположены в шахматном порядке положительно и отрицательно заряженные ионы с зарядами q_1 и q_2 . Предполагаем, что решетка создает электростатическое поле, которое удовлетворяет экранированному уравнению Пуассона. Построить линии напряженности поля.

2.17. Найти решение уравнения Пуассона с условиями Дирихле и Неймана на границах:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u = \left[6 - 72 \left((1 - 3x)^2 + 4(1 - 2y)^2 \right) \theta(x, y) \right] (1 - \theta^2(x, y)), \\ \theta(x, y) = \tanh \left(3(1 - 2y)^2 - (1 - 3x)^2 \right), & 0 < x < 1, \quad 0 < y < 1, \\ u_x(0, y) = 6 \left(1 - \tanh^2 \left(3(1 - 2y)^2 - 1 \right) \right), \\ u_x(1, y) = -12 \left(1 - \tanh^2 \left(3(1 - 2y)^2 - 4 \right) \right), \\ u(x, 0) = u(x, 1) = \tanh \left(3 - (1 - 3x)^2 \right). \end{cases}$$

Точное решение: $u_0(x, y) = \theta(x, y)$.

б) Имеется прямоугольный блок. Левую и правую поверхности блока нагревают постоянным тепловым потоком q . Верхняя и нижняя поверхности блока поддерживаются при температурах T_1 и T_2 . Построить стационарное распределение температуры в блоке.

2.18. Найти решение экранированного уравнения Пуассона в квадратной периодически замкнутой области:

$$\text{а) } \begin{cases} \Delta u - u = -f(x, y), & 0 < x < \pi, \quad 0 < y < \pi, \\ u(x + \pi, y) = u(x, y), & u(x, y + \pi) = u(x, y), \end{cases}$$

$$f(x, y) = e^{-\cos 2x} \sin 2y (2 \cos 2x - 1)^2.$$

Точное решение: $u_0(x, y) = e^{-\cos 2x} \sin 2y$.

б) В узлах квадратной решетки расположены в шахматном порядке положительно и отрицательно заряженные ионы с зарядами q_1 и q_2 . Предполагаем, что решетка создает электростатическое поле, которое удовлетворяет экранированному уравнению Пуассона. Построить линии напряженности поля.

Лекция 3. Итерационные методы решения СЛАУ

Данная глава носит исключительно теоретический характер. Данную лекцию можно прочитать студентам ближе к концу курса, после лекций 4 и 5, которые содержат прямые указания к выполнению лабораторных работ.

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в матричной форме:

$$Ax = f. \quad (3.1)$$

Будем полагать, что x и f — векторы длины n , а матрица A — квадратная невырожденная матрица $n \times n$.

Прямые методы решения СЛАУ позволяют получить решение системы за конечное количество арифметических операций, при этом если все операции выполняются точно (без ошибок округления), то решение системы также получается точным. К прямым методам решения СЛАУ относятся методы Крамера, Гаусса, Холецкого, метод прогонки и другие. Большинство прямых методов подобны методу Гаусса и основаны на приведении матрицы A к треугольному виду. Многие методы адаптированы или содержат оптимизации для матриц специального вида, к примеру, разложение Холецкого применяется к симметричным положительно определенным матрицам, а метод прогонки — к трёхдиагональным матрицам.

К недостаткам прямых методов относится большая вычислительная сложность. Так, для решения системы n уравнений классическим методом Гаусса требуется выполнить $O(n^3)$ арифметических операций. Другие прямые методы имеют сопоставимую вычислительную сложность. Также прямые методы могут быть вычислительно неустойчивыми. При последовательном исключении переменных из большой системы уравнений могут накапливаться значительные погрешности.

Итерационные методы решения СЛАУ позволяют приблизиться к точному решению системы уравнений с некоторой точностью, путем выполнения некоторой итерационной процедуры. *Одношаговый итерационный метод* при вычислении нового приближения использует

только значение предыдущего приближения. *Канонической формой одношагового итерационного метода* для системы (3.1) является его запись в форме:

$$B_{k+1} \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (3.2)$$

где τ_{k+1} — итерационный параметр, B_{k+1} — невырожденная матрица, задающая тот или иной итерационный метод. Предполагается, что задано начальное приближение x_0 , тогда формула (3.2) позволяет последовательно вычислять новые приближения x_{k+1} . Для определения x_{k+1} по известным x_k и f достаточно решить систему уравнений:

$$B_{k+1}x_{k+1} = F_{k+1}, \quad F_{k+1} = (B_{k+1} - \tau_{k+1}A)x_k + \tau_{k+1}f.$$

Итерационный метод (3.2) называют *явным (неявным)*, если $B_k = E$ ($B_k \neq E$), где E — единичная матрица. Как правило, неявные итерационные методы имеет смысл применять лишь в том случае, когда каждую матрицу B_k обратить легче, чем исходную матрицу A . К примеру, легко обратить диагональную матрицу или треугольную. Неявные методы позволяют ускорить сходимость.

Итерационный метод (3.2) называют *стационарным*, если $B_{k+1} = B$ и $\tau_{k+1} = \tau$ не зависят от номера итерации, и *нестационарным* — в противоположном случае. Приведем некоторые примеры итерационных методов.

Метод простой итерации:
$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} + Ax_k = f, \quad (3.3)$$

— явный стационарный метод, существует способ выбора оптимального параметра τ .

Метод Рундсона:
$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (3.4)$$

— явный нестационарный метод, для метода существует способ выбора оптимальных итерационных параметров τ_{k+1} , которые минимизируют погрешность на k -ой итерации.

Метод Якоби:
$$D(x_{k+1} - x_k) + Ax_k = f, \quad (3.5)$$

здесь D — диагональ матрицы A . Неявный стационарный метод, поскольку матрица D диагональная, выражения $D^{-1}y$ легко вычисляются.

$$\text{Метод верней релаксации: } (D + \omega L) \frac{x_{k+1} - x_k}{\omega} + Ax_k = f, \quad (3.6)$$

здесь D — диагональ матрицы A , матрица L — часть матрицы A ниже диагонали, $\omega > 0$ — скалярный параметр. Неявный стационарный метод, матрица $D + \omega L$ — нижняя треугольная матрица, поэтому выражения $(D + \omega L)^{-1}y$ легко вычисляются. При значении параметра $\omega = 1$ метод переходит в метод Зейделя.

При исследовании различных итерационных методов нас интересует два основных вопроса: при каких условиях итерационная процедура сходится и какова скорость сходимости. Выпишем несколько теорем о сходимости стационарных итерационных методов.

Теорема 1. Необходимое и достаточное условие сходимости стационарных итерационных методов. Стационарный итерационный метод сходится при любом начальном приближении x_0 тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы перехода $S = E - \tau B^{-1}A$ по модулю меньше единицы.

Примерная суть доказательства в следующем. При выполнении итераций новое приближение x_{k+1} вычисляет по формуле $x_{k+1} = Sx_k + \tau B^{-1}f$. Пусть x — точное решение системы линейных уравнений (3.1), тогда $z_k = x_k - x$, — вектор отклонений (погрешность) на k -ой итерации. При итерациях вектор отклонений изменяется как $z_{k+1} = Sz_k$. Оценка погрешности на k -ой итерации:

$$\|x_k - x\| \leq \|S\|^k \|x_0 - x\| \leq q^k \|x_0 - x\|.$$

Постоянное убывание погрешности $\|x_k - x\|$ со скоростью геометрической прогрессии с показателем q для любых начальных данных x_0 гарантируется только в том случае, когда норма матрицы перехода меньше единицы, или что эквивалентно — спектральный радиус $\rho(S)$ меньше единицы. При этом скорость сходимости метода q пропорциональна $\rho(S)$. Самая быстрая сходимость достигается при $\rho(S) \ll 1$.

Данная теорема имеет принципиальное теоретическое значение и накладывает минимальные ограничения на матрицы A и B . Однако на практике её результаты редко применимы, поскольку оценка спектра матрицы S является очень сложной задачей. При некоторых ограничениях на матрицы A и B удается получить более простые условия сходимости.

Теорема 2. Пусть A — симметричная положительно определенная матрица, параметр $\tau > 0$, и пусть выполнено неравенство:

$$B - \frac{1}{2}\tau A > 0,$$

тогда стационарный итерационный метод сходится. Матричное неравенство $M > 0$ понимается в том смысле, что матрица M — положительно определена. Теорема имеет следствия, которые позволяют получить простые условия сходимости для некоторых методов.

Следствие 1. Пусть A — симметричная положительно определенная матрица, а λ_{\max} — максимальное собственное значение матрицы. Тогда метод простой итерации (3.3) сходится при выборе итерационного параметра $\tau < 2/\lambda_{\max}$.

Следствие 2. Пусть A — симметричная положительно определенная матрица с диагональным преобладанием, то есть для каждого диагонального элемента $a_{ii} \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$, где по крайней мере одно неравенство строгое, тогда метод Якоби (3.5) сходится.

Следствие 3. Пусть A — симметричная положительно определенная матрица, тогда метод верхней релаксации (3.6) сходится при выборе итерационного параметра $0 < \omega < 2$. В частности, метод Зейделя ($\omega = 1$) сходится.

При выполнении условий теоремы 1, для погрешности справедлива оценка

$$\|x_k - x\| \leq q^k \|x_0 - x\|, \quad q < 1.$$

В этом случае говорят, что метод сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q . На каждой итерации погрешность уменьшается в q раз. Зная показатель q можно найти количество итераций, требуемое для достижения заданной точности. Пусть требуется уменьшить погрешность до значения ε от изначальной, тогда необходимое число итераций:

$$k > k_0(\varepsilon) = \frac{\ln(1/\varepsilon)}{\ln(1/q)} = \log_{1/q} \frac{1}{\varepsilon}.$$

После k_0 -ой итерации погрешность $\|x_k - x\| < \varepsilon \|x_0 - x\|$. Выражение в знаменателе $\ln(1/q)$ называется *скоростью сходимости итерационного метода*. Скорость сходимости не зависит от начального приближения x_0 , от правых частей f и от номера итерации. Скорость сходимости определяется используемым итерационным методом и матрицей A .

Теорема 3. О скорости сходимости стационарных методов для симметричных положительно определенных матриц. Пусть A и B — симметричные положительно определенные матрицы, для которых справедливы соотношения

$$\gamma_1 B \leq A \leq \gamma_2 B, \quad (3.7)$$

где γ_1, γ_2 — положительные постоянные, $\gamma_1 < \gamma_2$. При

$$\tau = \frac{2}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

стационарный итерационный метод сходится и для погрешности справедлива оценка

$$\begin{aligned} \|x_k - x\|_A &\leq q^k \|x_0 - x\|_A, \\ \|x_k - x\|_B &\leq q^k \|x_0 - x\|_B, \end{aligned} \quad q = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2},$$

где $\|v\|_A = \sqrt{(Av, v)}$, $\|v\|_B = \sqrt{(Bv, v)}$. Самая быстрая сходимость (минимум q) достигается при выборе максимального значения параметра ξ . Таким образом, для достижения наилучшей сходимости необходимо выбрать максимальную из возможных оценку параметра γ_1 и минимальную из возможных оценку параметра γ_2 .

Рассмотрим обобщенную задачу на собственные значения

$$Av = \lambda Bv,$$

если для матриц A и B выполнены неравенства (3.7), то для любого собственного вектора v выполнены неравенства

$$\gamma_1 (Bv, v) \leq (Av, v) = \lambda (Bv, v) \leq \gamma_2 (Bv, v),$$

откуда следует, что $\gamma_1 \leq \lambda_{\min}(B^{-1}A) < \lambda_{\max}(B^{-1}A) \leq \gamma_2$, где $\lambda_{\min}(B^{-1}A)$ и $\lambda_{\max}(B^{-1}A)$ — минимальное и максимальное собственные значения для обобщенной задачи на собственные значения. Эти оценки являются самыми строгими для γ_1 и γ_2 . При использовании таких оценок мы получаем оптимальный шаг τ для стационарных итерационных методов:

$$\tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}(B^{-1}A) + \lambda_{\max}(B^{-1}A)}.$$

Следствие. Если A — симметричная положительно определенная матрица, то метод простой итерации (3.3) с оптимальным параметром τ_{opt} сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q , параметры определяются как:

$$\tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(A)}, \quad q = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}.$$

Число $\kappa(A) = \xi^{-1} = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$ называется числом обусловленности матрицы A . Если число обусловленности $\kappa \gg 1$ (при этом $\xi \ll 1$), тогда матрицу называют плохо обусловленной. Системы уравнений с плохо обусловленными матрицами часто встречаются в приложениях. Для таких матриц $q \approx 1$, а значит явные итерационные методы сходятся медленно. Этим объясняется выбор неявных итерационных схем. Добавление матрицы B позволяет увеличить параметр $\xi = \lambda_{\min}(B^{-1}A)/\lambda_{\max}(B^{-1}A)$, а значит и скорость сходимости.

Лекция 4. Простейшие явные методы

В лекции рассматриваются простейшие одношаговые явные итерационные методы решения СЛАУ: метод простой итерации/метод установления и метод минимальных невязок. Перед прочтением главы желательно, но не обязательно, ознакомиться с лекцией 3, которая содержит теоретические основы методов.

Для записи абстрактных систем линейных уравнений в данной главе, как и в лекции 3, используются обозначения $Ax = f$. Аппроксимации уравнения Пуассона записываются в форме $Lu = F$.

4.1. Метод простой итерации

Метод простой итерации — явный стационарный одношаговый метод решения системы линейных уравнений $Ax = f$. Итерационная процедура в каноническом виде:

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} + Ax_k = f.$$

Пусть A — симметричная положительно определенная матрица, тогда метод простой итерации сходится при выполнении условия на параметр $\tau < 2/\lambda_{\max}$, где λ_{\max} — спектральный радиус матрицы A . Для метода простой итерации также известен оптимальный шаг τ_{opt} , при котором достигается максимальная скорость сходимости:

$$\tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}},$$

где λ_{\min} и λ_{\max} — минимальное и максимальное собственные значения матрицы A .

В разделе 1.4 приведены собственные значения для трёхточечного оператора второй производной, формулы (1.6), (1.8), (1.10). Пусть L — пятиточечная аппроксимация оператора Лапласа $-\Delta$ на прямоугольной сетке. Оператор L включает граничные условия, которые могут различаться по разным осям. Для оператора L также можно получить точные выражения для собственных значений и собственных векторов. Собственные значения L получаются в виде сумм СЗ

для трёхточечных операторов по каждой оси координат. Собственные векторы L получаются в виде произведения СВ для трехточечных операторов по каждой оси координат.

К примеру, пусть решается задача Дирихле для уравнения Пуассона в прямоугольной области $l_x \times l_y$. Область разбита на прямоугольные ячейки $n_x \times n_y$, размеры ячеек $h_x \times h_y$. Собственные значения трехточечного оператора вдоль каждой оси определяются формулой (1.6). Количество собственных значений пятиточечного оператора равно $n_x \cdot n_y$, пронумеруем собственные значения парой индексов:

$$\lambda_{ij} = \frac{4}{h_x^2} \sin^2 \frac{\pi i h_x}{2l_x} + \frac{4}{h_y^2} \sin^2 \frac{\pi j h_y}{2l_y}, \quad i = \overline{1, n_x}, \quad j = \overline{1, n_y},$$

Минимальное и максимальное собственные значения для задачи Дирихле в прямоугольнике:

$$\lambda_{\min} = \frac{4}{h_x^2} \sin^2 \frac{\pi h_x}{2l_x} + \frac{4}{h_y^2} \sin^2 \frac{\pi h_y}{2l_y}, \quad \lambda_{\max} = \frac{4}{h_x^2} + \frac{4}{h_y^2}.$$

Оценка сверху $\lambda_{\max} \leq \frac{4}{h_x^2} + \frac{4}{h_y^2}$ справедлива для произвольных граничных условий. Тогда условие сходимости метода простой итерации:

$$\tau < \frac{h_x^2 h_y^2}{2(h_x^2 + h_y^2)} \sim \frac{h^2}{4}. \quad (4.1)$$

Пусть u и F — сеточные функции, а L — линейный самосопряженный положительно определенный сеточный оператор. И пусть требуется решить уравнение на сеточную функцию u : $Lu = F$. Для использования метода простой итерации нет необходимости задавать оператор L в матричном виде. Достаточно определить действие оператора на сеточную функцию Lu . Пример действия оператора на сеточную функцию приведен в Листинге 2.2.

Метод установления основан на том, что решение стационарных задач часто можно рассматривать как решение динамических задач на бесконечности. К примеру, распределение тепла $u(x, y)$ в области под действием стационарных источников тепла описывается уравнением Пуассона $\Delta u = -f(x, y)$. Решение данного уравнения можно получить, если устремить к бесконечности решение уравнения теплопроводности:

$$v_t - \Delta v = f(x, y), \quad u(x, y) = \lim_{t \rightarrow \infty} v(x, y, t).$$

Получается, численное решение стационарной задачи можно получить, решая уравнение теплопроводности. Если выполнить достаточно много шагов по времени для уравнения теплопроводности, то можно приблизиться к решению стационарной задачи. Пусть L — сеточная аппроксимация оператора $-\Delta$, F — аппроксимация неоднородности в уравнении, u_k — сеточная функция, где k — временной слой, а τ — шаг интегрирования по времени. Выпишем явную схему для уравнения теплопроводности:

$$\frac{u_{k+1} - u_k}{\tau} + Lu_k = F,$$

это ни что иное, как метод простой итерации для уравнения $Lu = F$. При $k \rightarrow +\infty$ решение u_k уравнения теплопроводности стремится к решению стационарной задачи. Получается, условие сходимости (4.1) это условие устойчивости явной схемы для двумерного уравнения теплопроводности. Таким образом, метод установления и метод простой итерации эквивалентны.

4.2. Метод минимальных невязок

Пусть требуется решить систему линейных уравнений $Ax = f$, где A — симметричная положительно определенная матрица. Рассмотрим класс явных нестационарных итерационных методов:

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f.$$

Введем обозначение для невязки на k -ой итерации $r_k = Ax_k - f$. Метод минимальных невязок заключается в том, чтобы минимизировать невязку на новой итерации, при известных значениях x_k и r_k на предыдущей итерации. Выпишем невязку r_{k+1} на новой итерации:

$$r_{k+1} = Ax_{k+1} - f = A(x_k - \tau_{k+1}(Ax_k - f)) - f = r_k - \tau_{k+1}Ar_k.$$

Введем норму векторов через скалярное произведение. Квадрат нормы невязки:

$$||r_{k+1}||^2 = ||r_k||^2 - 2\tau_{k+1}(Ar_k, r_k) + \tau_{k+1}^2 ||Ar_k||^2.$$

Это квадратичная функция от переменной τ_{k+1} , которая достигает минимума при значении:

$$\tau_{k+1} = \frac{(Ar_k, r_k)}{||Ar_k||^2}.$$

Параметр $\tau_{k+1} > 0$, поскольку матрица A — положительно определена. Метод минимальных невязок сходится со скоростью метода простой итерации с оптимальным параметром τ_{opt} .

Пусть u и F — сеточные функции, а L — линейный самосопряженный положительно определенный сеточный оператор. И пусть требуется решить уравнение на сеточную функцию u : $Lu = F$. Для решения уравнения можно применить метод минимальных невязок, при этом нет необходимости задавать оператор L в матричном виде. Достаточно определить действие оператора на сеточную функцию Lu , а также ввести операцию скалярного произведения в пространстве сеточных функций. Пример действия оператора на сеточную функцию приведен в Листинге 2.2.

4.3. Лабораторная работа

Найти приближенное решение уравнения Пуассона в прямоугольной области. Для решения системы линейных уравнений использовать метод простой итерации (группа Б21-215) или метод минимальных невязок (группа Б21-205). Список задач приведен в разделе 2.5. Решить задачу из пункта (а), построить рядом точное решение, численное и погрешность. Не нужно использовать разреженные матрицы и встроенные решатели СЛАУ.

Не обязательно, но почётно:

- Выполнить пункт (б) для задачи, постановка в обоих пунктах совпадает.
- Сравнить приближенное решение с аналитическим, построить график погрешности, оценить порядок аппроксимации.
- Построить зависимость погрешности от номера итерации.
- Оценить параметр q , с которым убывает погрешность при итерациях.
- Для метода простой итерации. Решить задачу при различных значениях τ . Убедиться, что метод расходится при $\tau > \tau_{max}$. Также проверить, что максимальная скорость достигается с оптимальным параметром τ_{opt} .
- Ответить на фундаментальный вопрос: сколько итераций требуется для достижения максимальной точности? Во сколько раз увеличится требуемое число итераций при увеличении числа ячеек в m раз по каждой оси координат?

Лекция 5. Простейшие неявные методы

В лекции рассматриваются простейшие одношаговые неявные итерационные методы решения СЛАУ: метод Якоби и метод Зейделя. Перед прочтением главы желательно, но не обязательно, ознакомиться с лекцией 3, которая содержит теоретические основы методов.

Для записи абстрактных систем линейных уравнений в данной главе, как и в лекции 3, используются обозначения $Ax = f$. Аппроксимации уравнения Пуассона записываются в форме $Lu = F$.

5.1. Метод Якоби

Выпишем систему уравнений $Ax = f$ в развернутом виде:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = f_i, \quad i = \overline{1, n}.$$

Пусть диагональные коэффициенты в системе уравнений отличны от нуля ($a_{ii} \neq 0$). В этом случае можно из каждого i -ого уравнения системы выразить неизвестную x_i :

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j \right), \quad i = \overline{1, n}.$$

Будем выполнять итерации по такой схеме, на каждой итерации будем пересчитывать переменную x_i из i -го уравнения системы. Пусть $x_i^{(0)}$ — начальное приближение. Тогда итерации метода Якоби можно записать в следующем виде:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = \overline{1, n}. \quad (5.1)$$

Рассмотрим метод Якоби на примере задачи Дирихле для уравнения Пуассона:

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \\ u(0, y) = \mu_L(y), & u(l_x, y) = \mu_R(y), \\ u(x, 0) = \mu_B(x), & u(x, l_y) = \mu_T(x). \end{cases}$$

Чтобы окончательно всех запутать, в этот раз выпишем конечно-разностную аппроксимацию, то есть никаких ячеек. Введем равномерную сетку в прямоугольнике, для простоты полагаем, что прямоугольник можно разбить на в точности квадратные ячейки со стороной $h = l_x/n_x = l_y/n_y$, где n_x и n_y — число отрезков разбиения по сторонам прямоугольника (количество узлов на единицу больше). Пронумеруем узлы сетки, начиная с нуля:

$$x_{ij} = h \cdot i, \quad y_{ij} = h \cdot j, \quad i = \overline{0, n_x}, \quad j = \overline{0, n_y},$$

значения сеточной функции u_{ij} будем относить к узлам сетки. Значения u_{ij} на границах прямоугольника известны и задаются условиями Дирихле, к примеру, $u_{i,0} = \mu_B(x_{i,0})$. Для внутренних узлов сетки ($0 < i < n_x, 0 < j < n_y$) получаем уравнения:

$$\frac{-u_{i+1,j} + 2u_{ij} - u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{-u_{i,j+1} + 2u_{ij} - u_{i,j-1}}{h^2} = f_{ij}.$$

В такой записи каждое уравнение соответствует одному узлу сетки, а каждому узлу соответствует значение u_{ij} . Чтобы получить итерационный метод Якоби необходимо выразить значение u_{ij} в узле через значения в соседних узлах:

$$u_{ij}^{(k+1)} = \frac{1}{4} \left(u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)} \right) + \frac{h^2}{4} f_{ij},$$

то есть на каждой итерации для узла (i, j) усредняются значения в соседних узлах и прибавляется величина пропорциональная f_{ij} .

При решении уравнения Лапласа, то есть при $f(x, y) = 0$, получается итерационная процедура

$$u_{ij}^{(k+1)} = \frac{u_{i+1,j}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i,j-1}^{(k)}}{4},$$

которая называется сглаживанием Лапласа. Пусть на границах прямоугольника заданы произвольные (возможно разрывные) функции,

тогда сглаживание Лапласа позволяет получить функцию, которая гладким образом связывает функции на сторонах прямоугольника (Рис. 5.1). Такую форму принимает эластичная мембрана, натянутая на некоторую форму. Очень красиво.

Выразить переменную x_i из i -го уравнения звучит очень хитро, особенно это кажется целесообразно для систем уравнений, в которых коэффициенты на диагонали преобладают. Матрицей с диагональным преобладанием называют матрицу, диагональные элементы которой удовлетворяют условиям:

$$\forall i \quad |a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|.$$

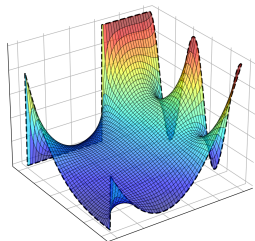


Рис. 5.1: Решение 3. Дирихле для уравнения Лапласа.

При этом если все неравенства строгие, тогда говорят, что матрица обладает *строгим диагональным преобладанием*, в обратном случае — *слабым диагональным преобладанием*. Матрицы для сеточного оператора Лапласа, которые мы рассматриваем, имеют ненулевые диагональные элементы и обладают, по крайней мере, слабым диагональным преобладанием. Метод Якоби сходится для матриц со строгим диагональным преобладанием¹. Это достаточное условие сходимости, но не необходимое, метод может сходиться и при более слабых условиях на матрицу. Так, в лабораторной будет предложено применить метод Якоби к вырожденным матрицам, которые получаются при дискретизации уравнения Лапласа с периодическими граничными условиями или условиями Неймана.

Пусть необходимо решить уравнение $Lu = F$ на сеточную функцию u , где L — сеточный оператор, F — сеточная функция. Для использования метода Якоби достаточно определить результат действия оператора $\tilde{L} = L - D$ на произвольную сеточную функцию, а также матрицу диагональных элементов D . Выпишем действие оператора \tilde{L} для Примера 1 из раздела 2.4. Для этого достаточно вычеркнуть из

¹Также метод Якоби сходится для irreducibly diagonally dominant матриц. Это более слабое условие по сравнению со строгим диагональным преобладанием. Как раз этому условию удовлетворяют матрицы оператора для задачи Дирихле.

формулы (2.6) все слагаемые с u_{ij} :

$$\begin{aligned} \left(\tilde{L}u \right)_{ij} = & [i > 1] \frac{-u_{i-1,j}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{-u_{i+1,j}}{h_x^2} + [j > 1] \frac{-u_{i,j-1}}{h_y^2} + \\ & + [j < n_y] \frac{-u_{i,j+1}}{h_y^2} + [j = 1] \frac{-u_{i,n_y}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{-u_{i,1}}{h_y^2}. \end{aligned}$$

Если u и F это двумерные массивы $n_x \times n_y$, тогда D также можно представить в виде матрицы $n_x \times n_y$, которая содержит коэффициенты оператора L при u_{ij} :

$$D_{ij} = [i > 1] \frac{1}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{1}{h_x^2} + [i = 1] \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}.$$

Исходная система уравнений $(Lu)_{ij} = D_{ij}u_{ij} + (\tilde{L}u)_{ij} = F_{ij}$. Выражаем отсюда u_{ij} и получаем метод Якоби:

$$u_{ij}^{(k+1)} = D_{ij}^{-1} \cdot \left(F_{ij} - \left(\tilde{L}u^{(k)} \right)_{ij} \right),$$

здесь D_{ij}^{-1} это обращение скалярной величины D_{ij} .

5.2. Метод Зейделя

Если в итерационной процедуре (5.1) вычислять значения x_i в строгом порядке и при пересчете использовать значения $x_{j < i}$ с нового приближения, то получится метод Зейделя:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right).$$

Метод Зейделя имеет более слабые условия сходимости по сравнению с методом Якоби. Метод Зейделя (как и метод Якоби) сходится для матриц со строгим диагональным преобладанием, но он также сходится для симметричных положительно определенных матриц. Метод Зейделя сходится быстрее метода Якоби, но имеет существенный недостаток: его сложнее распараллелить. Метод Якоби легко реализуется на массово-параллельной архитектуре, в многопоточном режиме и на системах с распределенной памятью. Метод Зейделя в классической версии не поддается параллелизации, поскольку требует последовательного вычисления значений $x_i^{(k+1)}$. По этой же причине метод Зейделя не получится изящно реализовать на срезах в `numpy`.

5.3. Лабораторная работа

Численно решить уравнение Пуассона в прямоугольнике с использованием метода Якоби для решения системы линейных уравнений. Список задач приведен в разделе 2.5. Решить задачу из пункта (а), построить рядом точное решение, численное и погрешность. В решении избежать использования циклов, разреженных матриц и матриц с размерами больше числа ячеек. Пример действия оператора на сеточную функцию приведен в Листинге 2.2.

Не обязательно, но почётно:

- Выполнить пункт (б) для задачи, постановка в обоих пунктах одинакова.
- Сравнить приближенное решение с аналитическим, построить график погрешности, оценить порядок аппроксимации.
- Для конкретной сетки построить зависимость погрешности от номера итерации.
- Оценить параметр q , с которым убывает погрешность при итерациях.
- Ответить на фундаментальный вопрос: сколько итераций требуется для достижения максимальной точности? Во сколько раз увеличится требуемое число итераций при увеличении числа ячеек в m раз по каждой оси координат?

Лекция 6. Разреженные матрицы

6.1. Разреженные и плотные матрицы

Разре́женная/разрежённая матрица — матрица, в которой преобладают нулевые элементы. В противном случае, если бо́льшая часть элементов матрицы ненулевая, матрица считается *плотной*.

Условия, при которых матрица считается разреженной, можно ввести по-разному. В рамках курса численных методов разреженной можно считать матрицу $n \times n$, число ненулевых элементов которой $O(n)$. То есть при изменении размера задачи число ненулевых элементов изменяется линейно. Другое близкое определение: считаем матрицу разреженной, если число ненулевых элементов в строке/столбце матрицы меньше некоторой небольшой константы m .

Системы уравнений с разреженными матрицами часто возникают при численном решении уравнений в частных производных. Для метода конечных разностей, для метода конечных объемов, для метода конечных элементов — во всех случаях неявные схемы приводят к возникновению систем уравнений с разреженными матрицами.

Пусть матрица A возникает при написании неявной схемы второго порядка методом конечных объемов. Тогда элементы $A_{kl} \neq 0$, если $k = l$ или если ячейки k и l смежные через грань. В этом случае число ненулевых элементов в k -ой строке равно числу соседей k -ой ячейки плюс один (элемент на диагонали). Для схем более высокого порядка ячейки могут быть связаны не только с соседними ячейками, но и с ячейками в большей окрестности.

Хорошо знакомый пример разреженной матрицы: трёхдиагональная матрица, которая возникает при решении одномерных краевых задач. При размере $n \times n$ трёхдиагональная матрица содержит около $3n$ ненулевых элементов. При размере задачи $n = 100$ такая матрица содержит 97% нулей, при размере задачи $n = 10^5$ такая матрица содержит 99.97% нулевых элементов. Для хранения и операций с разреженными матрицами целесообразно использовать специальные форматы, которые игнорируют нулевые элементы.

6.2. Форматы хранения разреженных матриц

Существует несколько форматов и соответствующих структур данных для хранения разреженных матриц. Разные форматы отличаются эффективностью выполнения различных операций: добавление нового элемента матрицы, добавление новой строки/столбца, проход по строке/столбцу матрицы, умножение матрицы на вектор, сложение двух матриц и так далее.

DOK — Dictionary of Keys, словарь по ключам. Матрица хранится в виде ассоциативного массива, где ключ это пара индексов (строка, столбец), а значение — непосредственно значение элемента матрицы. Разреженные матрицы в dok-формате предоставляют удобный интерфейс, который позволяет работать с ними как с обычными двумерными массивами. Создание dok-матрицы 12×12 и инициализация двух элементов на диагонали:

```
import scipy.sparse as sp

A = sp.dok_matrix((12, 12))
A[3, 3] = 10.0
A[4, 4] += 2.0
```

Очевидно, для хранения dok-матриц используются хэш-таблицы. Хэш-таблицы обеспечивают быстрый доступ к элементам матрицы по индексам, быстрое добавление элементов, в среднем за $O(1)$.

К недостаткам формата относится относительная дороговизна выполнения операций, которые требуют прохода по строкам или столбцам матрицы. Неэффективно выполняются операции сложения двух dok-матриц, умножения dok-матрицы на вектор и другие.

Матрицы в dok-формате подходят для создания и инициализации разреженных матриц. После полного заполнения dok-матрицы её следует преобразовать в один из сжатых типов хранения, которые более эффективно реализуют матричные операции.

LIL — List of Lists, список списков. Разреженная матрица хранится в виде списка строк, для каждой строки хранится список пар (номер столбца, значение). Каждая строка поддерживается отсортированной по номеру столбца.

Для lil-матриц относительно быстро выполняется добавление новых элементов, быстро осуществляется доступ к элементу по индексам. Эффективно выполняются срезы по строкам, умножение матрицы на вектор-столбец. Поскольку каждая строка отсортирована

по номеру столбца, добавление нового элемента в строку выполняется в худшем случае за $O(m)$, а поиск значения по номеру столбца за $O(\log m)$, где m — число элементов в строке. Поскольку m это небольшая константа, можно считать, что эти операции выполняются за константное время. `lil`-матрицы поддерживают синтаксис срезов и списков индексов. Создание `lil`-матрицы 12×12 , инициализация трех элементов около диагонали в 5-ой (с нуля) строке:

```
import scipy.sparse as sp

A = sp.lil_matrix((12, 12))
A[5, [4, 5, 6]] = [-1.0, 2.0, -1.0]
```

Также допускается обращение к элементам по паре индексов аналогично `dok`-матрицам, `A[3, 3] = 10.0`.

Матрицы в `lil`-формате подходят для создания и инициализации разреженных матриц. После полного заполнения `lil`-матрицы её следует преобразовать в один из сжатых типов хранения, которые более эффективно реализуют матричные операции.

COO — Coordinate List, список координат. Разреженная матрица хранится в виде трех массивов равной длины: индексы строк r_k , индексы столбцов c_k и значения v_k . Тройка (r_k, c_k, v_k) описывают ненулевой элемент разреженной матрицы. Допускается хранение троек с одинаковыми парами индексов (r_k, c_k) . После приведения к канонической форме значения с одинаковыми индексами складываются, а индексы сортируются сначала по строкам, а затем по столбцам.

Преимущества формата: матрицы в `coo`-формате удобно использовать при построении, такие матрицы допускают хранение одинаковых элементов, что полезно при реализации различных численных методов, `coo`-матрицы эффективно (за линейное время) преобразуются в сжатые форматы хранения.

Недостатки: формат не поддерживает срезы и арифметические операции. После создания и инициализации матрицу следует преобразовать в сжатый формат данных.

CSR — Compressed Sparse Row. Сжатый формат хранения разреженных матриц по строкам. Фактически `lil`-матрица, у которой зафиксировали структуру, выбросили всё ненужное и записали данные в сплошной блок памяти.

Для `csc`-матриц эффективно реализованы поэлементные арифметические операции `CSR + CSR`, `CSR * CSR`, и так далее. Эффективно выполняются срезы по строкам. Быстрое произведение матрицы на

вектор-столбец.

Недостатки. Дорогая операция среза по столбцам. Дорогостоящее изменение структуры матрицы (по сравнению с LIL или DOK). Понятно, что добавление элемента в csr-матрицу требует полностью перелопатить структуру данных. Библиотека `scipy.sparse` позволяет выполнять операции вида $A[3, 3] = 10.0$ для csr-матриц, но при этом выводит предупреждение.

CSC — Compressed Sparse Column. Формат аналогичен CSR с заменой строк на столбцы. Соответственно, эффективнее выполняются срезы по столбцам, умножение матрицы слева на вектор-строку. Быстро выполняются поэлементные операции $CSC + CSC$, $CSC * CSC$ и так далее. Добавление элементов является дорогой операцией.

Библиотека `scipy` включает ещё несколько дополнительных форматов разреженных матриц. **DIA** — Diagonal Storage, используется для хранения матриц из диагоналей. **BSR** — Block Sparse Row, используется для хранения блочных матриц с плотными блоками.

В целом `scipy` свободно жонглирует форматами для максимальной эффективности. По умолчанию чаще всего используется csr-формат. В этот формат конвертируется результат большинства арифметических операций. Рассмотрим следующий пример:

```
import scipy.sparse as sp

rows = [0, 1, 2]
cols = [1, 2, 3]
vals = [0.1, 0.2, 0.3]

A = sp.coo_matrix((vals, (rows, cols)), shape=(5, 5))
B = A + A.T
C = B + B.T
```

В программе создается соо-матрица A размера 5×5 с тремя ненулевыми элементами. Матрица после транспонирования $A.T$ также имеет соо-формат, при этом результат сложения (матрица B) имеет csr-формат. Матрица после транспонирования $B.T$ приобретает csc-формат, а результат сложения (матрица C) снова имеет csr-формат.

6.3. Пример

Рассмотрим пример из раздела 2.4. Требуется решить уравнение Пуассона в квадратной области $[0, l]^2$ с несколькими видами гранич-

ных условий: условие Дирихле слева, условие Неймана справа, периодическое замыкание снизу/сверху:

$$\begin{cases} \Delta u = -f(x, y), & 0 < x < l, \quad 0 < y < l, \\ u(0, y) = \mu(y), \quad u_x(l, y) = \varphi(y), \\ u(x, y + l) = u(x, y). \end{cases}$$

Разобьем расчетную область на квадратные ячейки со стороной h . Число ячеек по осям равно, $n_x = n_y = l/h$. Выпишем конечно-объемную аппроксимацию уравнения в форме $Lu = F$. Если ячейки и значения сеточных функций нумеруются парой индексов (i, j) , тогда для правых частей F получается выражение (2.7), а действие оператора L на сеточную функцию записывается в виде:

$$\begin{aligned} (Lu)_{ij} = & [i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h^2} + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h^2} + \\ & + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h^2} + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h^2} + \\ & + [i = 1] \frac{2u_{ij}}{h^2} + [j = 1] \frac{u_{ij} - u_{i,n_y}}{h^2} + [j = n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,1}}{h^2}, \end{aligned}$$

где два последних слагаемых отвечают за периодическое замыкание. Как будет выглядеть матрица оператора L , если ввести нумерацию ячеек единственным индексом?

Каждая строка матрицы соответствует уравнению на одну ячейку, k -ая строка матрицы содержит коэффициенты, связывающие k -ую ячейку с её соседями. В k -ой строке матрицы ненулевые элементы содержатся в столбцах с индексами, которые равны индексам соседей k -ой ячейки. Также ненулевые элементы располагаются на диагонали матрицы. Пусть k -ая ячейка имеет четырех соседей с индексами m_1, m_2, m_3, m_4 , тогда k -ая строка матрицы будет содержать 5 ненулевых элементов в столбцах с индексами m_1, m_2, m_3, m_4 и k .

На диагонали матрицы L располагаются положительные числа. Элемент на диагонали будет равен числу соседей + 2, если у ячейки с одной из сторон задано условие Дирихле, и всё поделить на h^2 . В данной задаче для ячеек у левого края (условие Дирихле) на диагонали задается число $5h^{-2}$, для ячеек у правого края (условие Неймана) задается $3h^{-2}$, остальные ячейки имеют ровно по четыре соседа, поэтому соответствующий им диагональный элемент будет равен $4h^{-2}$.

Недиагональный элемент матрицы L_{km} отличен от нуля только в том случае, если ячейки с индексами k и m являются смежными.

В данном конкретном случае, все ненулевые элементы матрицы совпадают, $L_{km} = L_{mk} = -h^{-2}$. Для ячеек у левой и правой границы число соседей равно трем, значит соответствующие строки матрицы содержат по три отрицательных элемента (плюс положительная диагональ), остальные ячейки имеют по четыре соседа, а значит соответствующие строки матрицы содержат по четыре отрицательных элемента (плюс положительная диагональ).

Матрица оператора L симметрична и обладает слабым диагональным преобладанием. Для строк матрицы, которые соответствуют ячейкам у левой границы области (условие Дирихле), есть строгое преобладание диагональных элементов. В целом это всё, что можно однозначно сказать о матрице оператора L . Конкретная форма матрицы зависит от введенной нумерации ячеек.

Рассмотрим матрицу L на примере небольшой сетки 6×6 ячеек. Индексация ячеек введена снизу вверх и слева направо, то есть от левой нижней ячейки сетки. На рисунке 6.1 приведена матрица $h^2 L$. Матрица имеет размер 36×36 . На осях рисунка подписаны номера строк и столбцов матрицы, цветами показаны значения элементов матрицы. Нулевым значениям соответствует белый цвет.

Ячейки с индексами 1–6 располагаются у левого края области, соответствующие диагональные элементы равны 5, в соответствующих строках по три элемента со значениями -1 . Ячейки с индексами 31–36 располагаются у правого края области, соответствующие диагональные элементы равны 3, в соответствующих строках по три элемента со значениями -1 . Во всех остальных строках на диагонали стоит 4, и имеется по 4 элемента со значениями -1 .

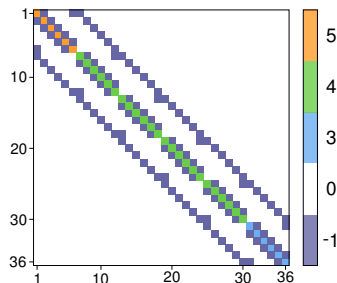


Рис. 6.1: Разреженная матрица.

Введём нумерацию ячеек двумерной сетки. Пусть координаты x_{ij} и y_{ij} , сеточные функции u_{ij} и F_{ij} хранятся в двумерных `numpy` массивах размера $n_x \times n_y$. Самая «естественная» нумерация ячеек получается при разворачивании сеточных функций в одномерные массивы. Это можно сделать с помощью функций `np.ravel()` или `np.flatten()` (функция `flatten` создает копию данных, а `ravel` позволяет ссылаться на исходные данные). Обратной операцией является

`np.reshape((nx, ny))`, которая приводит развернутый одномерный массив в исходную форму двумерного массива. Используем следующий лайфхак для нумерации ячеек в прямоугольнике:

```
k = np.arange(nx * ny, dtype=int).reshape((nx, ny))
```

В результате получим двумерный массив `k` размера $n_x \times n_y$, элемент массива `k[i, j]` равен индексу ячейки (i, j) . Если $i > 1$, то индекс соседа слева равен `k[i - 1, j]`. Нижняя и верхняя границы периодически замыкаются, поэтому индекс ячейки сверху равен `k[i, (j + 1) % ny]`, а индекс ячейки снизу — `k[i, (j - 1) % ny]`. Теперь мы можем пройти в цикле по ячейкам и заполнить матрицу оператора, код приведен в Листинге 6.1.

```

1  import numpy as np
2  import scipy.sparse as sp
3
4  # Cells indexing
5  k = np.arange(nx * ny, dtype=int).reshape((nx, ny))
6
7  # L = sp.dok_matrix((nx * ny, nx * ny))
8  L = sp.lil_matrix((nx * ny, nx * ny))
9
10 for i in range(nx):
11     for j in range(ny):
12         if i == 0:
13             # Has no left neighbor, Dirichlet
14             L[k[i, j], k[i, j]] += 3.0 / hx ** 2
15             L[k[i, j], k[i + 1, j]] = -1.0 / hx ** 2
16         elif i == nx - 1:
17             # Has no right neighbor
18             L[k[i, j], k[i, j]] += 1.0 / hx ** 2
19             L[k[i, j], k[i - 1, j]] = -1.0 / hx ** 2
20         else:
21             # Left and right neighbors
22             L[k[i, j], k[i, j]] += 2.0 / hx ** 2
23             L[k[i, j], k[i - 1, j]] = -1.0 / hx ** 2
24             L[k[i, j], k[i + 1, j]] = -1.0 / hx ** 2
25
26         # Bottom and top neighbors
27         L[k[i, j], k[i, j]] += 2.0 / hy ** 2
28         L[k[i, j], k[i, (j - 1) % ny]] = -1.0 / hy ** 2
29         L[k[i, j], k[i, (j + 1) % ny]] = -1.0 / hy ** 2
30
31 L = L.tocsr()
```

Листинг 6.1: Инициализация разреженной LIL-матрицы.

В Листинге 6.1 используется `lil`-матрица, но точно таким же образом можно инициализировать `dok`-матрицу (раскомментировать строку 7 и вычеркнуть строку 8). Синтаксис доступа к элементам для `lil`-и `dok`-матриц совпадает. В тесте на производительность заполнение `lil`-матриц оказалось эффективней. Заполнение матрицы L для сетки из 6 миллионов ячеек заняло 141 секунду для `lil`-матрицы против 344 секунд для `dok`-матрицы.

```

1  import numpy as np
2  import scipy.sparse as sp
3
4  # Cells indexing
5  k = np.arange(nx * ny, dtype=int).reshape((nx, ny))
6
7  # Pair of indices (I, J)
8  I, J = np.meshgrid(np.arange(nx), np.arange(ny))
9  I, J = I.flatten(), J.flatten()
10
11 iC = k[I, J].flatten() # has bottom and top neighbors
12 iB = k[I, (J - 1) % ny].flatten() # bottom neighbors
13 iT = k[I, (J + 1) % ny].flatten() # top neighbors
14
15 iHR = k[:, -1, :].flatten() # has right neighbors
16 iR = k[1:, :].flatten() # right cells for iHR
17
18 iNL = k[0, :, :].flatten() # has no left neighbors
19 iHL = k[1:, :, :].flatten() # has left neighbors
20 iL = k[:, -1, :].flatten() # left neighbors for iHL
21
22 R1, C1, V1 = iC, iC, np.full(iC.size, +2.0/hy**2)
23 R2, C2, V2 = iC, iB, np.full(iC.size, -1.0/hy**2)
24 R3, C3, V3 = iC, iT, np.full(iC.size, -1.0/hy**2)
25
26 R4, C4, V4 = iHL, iHL, np.full(iHL.size, +1.0/hx**2)
27 R5, C5, V5 = iHL, iL, np.full(iHL.size, -1.0/hx**2)
28
29 R6, C6, V6 = iHR, iHR, np.full(iHR.size, +1.0/hx**2)
30 R7, C7, V7 = iHR, iR, np.full(iHR.size, -1.0/hx**2)
31
32 R8, C8, V8 = iNL, iNL, np.full(iNL.size, +2.0/hx**2)
33
34 row = np.concatenate((R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7, R8))
35 col = np.concatenate((C1, C2, C3, C4, C5, C6, C7, C8))
36 val = np.concatenate((V1, V2, V3, V4, V5, V6, V7, V8))
37
38 L = sp.csr_matrix((val, (row, col)))

```

Листинг 6.2: Инициализация разреженной CSR-матрицы.

Вероятно, самый быстрый вариант инициализации разреженной матрицы получается через соо-формат. Массивы индексов строк, столбцов и значений можно задать без использования циклов, но для этого придется попотеть со всякими индексами и срезами. Пример приведен в Листинге 6.2. Инициализация матрицы таким способом для сетки из 6 миллионов ячеек занимает 1.7 секунд, то есть в 80 раз быстрее, чем при использовании `lil`-матриц и в 200 раз быстрее, чем при использовании `dok`-матриц.

После построения матрицы оператора L можно воспользоваться существующими решателями систем линейных уравнений. Пример приведен в Листинге 6.3. Здесь используются два решателя: прямой решатель `spsolve` и приближенный решатель — стабилизированный метод сопряженных градиентов `bicgstab`. Помимо метода `bicgstab` модуль линейной алгебры содержит и другие итерационные методы, к примеру, уже известный нам метод минимальных невязок `gmres` (generalized minimal residual).

```
1 import scipy.sparse as sp
2 import scipy.sparse.linalg
3
4 L = spL() # csr-matrix
5 F = RHS(X, Y).flatten() # right-hand side
6
7 # Direct solver
8 u1 = sp.linalg.spsolve(L, F)
9 u1 = u1.reshape((nx, ny))
10
11 # Iterative solver
12 u2, b = sp.linalg.bicgstab(L, F)
13 u2 = u2.reshape((nx, ny))
```

Листинг 6.3: Решение СЛАУ встроенными решателями.

В Листинге 6.3 подразумевается, что функция `spL` возвращает заполненную матрицу в `csr`-формате. Также полагаем, что функция `RHS` возвращает неоднородность в виде двумерного массива F_{ij} , поэтому его необходимо развернуть в одномерный. Массивы `u1` и `u2` изначально одномерные, а затем приводятся к двумерным.

6.4. Лабораторная работа

Численно решить уравнение Пуассона в прямоугольнике с использованием существующих прямых решателей систем линейных уравнений. Список задач приведен в разделе 2.5. Решить задачу из пункта (а), построить рядом точное решение, численное и погрешность. Решить задачу из пункта (б), постановка в обоих пунктах одинакова.

Не обязательно, но почётно:

- Сравнить приближенное решение с аналитическим, построить график погрешности, оценить порядок аппроксимации.
- Протестировать несколько приближенных решателей СЛАУ, сравнить их эффективность и погрешности. Также провести сравнение с прямым решателем.

Лекция 7. Уравнения параболического типа

7.1. Двумерное уравнение теплопроводности

Рассмотрим двумерное уравнение теплопроводности в прямоугольнике в довольно общей постановке. На границах области используются граничные условия разных типов: условие Дирихле слева, условие Неймана справа, периодическое замыкание снизу/сверху.

$$\begin{cases} c\rho u_t = \operatorname{div}(\kappa \nabla u) + f(x, y, t), & 0 < x < l_x, 0 < y < l_y, 0 < t, \\ u(0, y, t) = \mu(y, t), & \kappa u_x(l_x, y, t) = \varphi(y, t), \\ u(x, y + l_y, t) = u(x, y, t). \end{cases}$$

Обратим внимание на коэффициент κ в правом граничном условии, производная указана с коэффициентом теплопроводности κ , поскольку поток тепла пропорционален κ . Введем дифференциальный оператор $\mathcal{L}u = -\operatorname{div}(\kappa \nabla u)$, который включает также граничные условия. Тогда уравнение можно записать в форме:

$$c\rho u_t + \mathcal{L}u = f.$$

Выпишем конечно-объемную аппроксимацию для оператора \mathcal{L} и для неоднородности. Подобные выражения уже неоднократно встречались, с такими же граничными условиями, к примеру (2.6) и (2.7). В данной задаче необходимо только верно учесть коэффициент κ .

Сеточный оператор обозначим как L :

$$\begin{aligned} (Lu)_{ij} = \kappa \cdot & \left([i > 1] \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{u_{ij} - u_{i+1,j}}{h_x^2} + \right. \\ & + [j > 1] \frac{u_{ij} - u_{i,j-1}}{h_y^2} + [j < n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,j+1}}{h_y^2} + \\ & \left. + [i = 1] \frac{2u_{ij}}{h_x^2} + [j = 1] \frac{u_{ij} - u_{i,n_y}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{u_{ij} - u_{i,1}}{h_y^2} \right). \end{aligned}$$

Сеточная функция F зависит от времени:

$$F_{ij}(t) = f_{ij}(t) + [i = 1] \frac{2\kappa\mu_j(t)}{h_x^2} + [i = n_x] \frac{\varphi_j(t)}{h_x}.$$

В обоих выражениях предполагается, что коэффициент κ является константой, в противном случае необходимо аппроксимировать значение κ на гранях ячеек. Также обратим внимание на наличие коэффициента κ перед $\mu_j(t)$ в неоднородности.

Выпишем теперь схему Кранка – Николсон для уравнения. Временной шаг обозначим как τ . Номер временного шага обозначим верхним индексом n , нижние индексы с указанием ячейки опустим.

$$P \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} + (1 - \nu)Lu^n + \nu Lu^{n+1} = F(t^n + \nu\tau), \quad \nu \in [0, 1].$$

Здесь P — диагональная матрица коэффициентов $c\rho$ в ячейках. Если c и ρ это константы, тогда P это тоже просто константа $P = c\rho$. При $\nu = 0$ получается явная схема, условие устойчивости для явной схемы с точностью до констант (4.1). При $\nu = 1$ получается чисто неявная схема. Приведем запись к системе линейных уравнений на u^{n+1} :

$$(E + \tau\nu P^{-1}L)u^{n+1} = (E - \tau(1 - \nu)P^{-1}L)u^n + \tau P^{-1}F(t^n + \nu\tau).$$

Если параметры c , ρ и κ не зависят от времени, тогда матрицы при u^{n+1} и u^n являются постоянными, их достаточно вычислить один раз. Введем для них обозначения A и B :

$$A = E + \tau\nu P^{-1}L, \quad B = E - \tau(1 - \nu)P^{-1}L.$$

После этого система уравнений

$$Au^{n+1} = Bu^n + \tau P^{-1}F(t^n + \nu\tau)$$

решается в основном цикле программы в пару строк.

Матрица A лучше обусловлена по сравнению с матрицей оператора L , поэтому для решения целесообразно использовать итерационные методы решения СЛАУ. Кроме того, значение u^n на предыдущем временном слое является хорошим начальным приближением для u^{n+1} . Также, если матрица A постоянная, то можно единственный раз в начале программы найти для неё предобуславливатель, и использовать его в итерационном методе, тогда расчет будет просто летать.

7.2. Двумерное уравнение Шрёдингера

Рассмотрим нестационарное уравнение Шрёдингера в прямоугольной области. На границах используются различные виды граничных

условий: условие Дирихле слева, условие Неймана справа, периодическое замыкание снизу/сверху. Ограничимся рассмотрением только однородного уравнения с однородными граничными условиями.

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi, & 0 < x < l_x, \ 0 < y < l_y, \ 0 < t, \\ \psi(0, y, t) = 0, \quad \psi_x(l_x, y, t) = 0, \\ \psi(x + l, y, t) = \psi(x, y, t). \end{cases}$$

Здесь введен гамильтониан

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y),$$

где $U(x, y)$ — потенциал. Выпишем конечно-объемную аппроксимацию для гамильтониана, сеточный оператор обозначим как H :

$$\begin{aligned} (H\psi)_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot & \left([i > 1] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i-1,j}}{h_x^2} + [i < n_x] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i+1,j}}{h_x^2} + \right. \\ & + [j > 1] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i,j-1}}{h_y^2} + [j < n_y] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i,j+1}}{h_y^2} + [i = 1] \frac{2\psi_{ij}}{h_x^2} + \\ & \left. + [j = 1] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i,n_y}}{h_y^2} + [j = n_y] \frac{\psi_{ij} - \psi_{i,1}}{h_y^2} \right) + U_{ij}. \end{aligned}$$

После этого выписываем схему Кранка – Николсон:

$$i\hbar \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\tau} = (1 - \nu)H\psi^n + \nu H\psi^{n+1}, \quad \nu \in [0, 1].$$

Схема будет устойчивой при преобладании неявной части $\nu \geq \frac{1}{2}$. В квантовой механике гамильтониан является самосопряженным оператором, при корректной аппроксимации матрица H должна быть эрмитовой. В этом случае при $\nu = \frac{1}{2}$ матрица перехода на новый временной слой по схеме Кранка – Николсон будет унитарной. Таким образом, в численном решении будет сохраняться величина равная суммарной вероятности $\int \psi \bar{\psi} dV$, то есть $(\psi^{n+1}, \psi^{n+1}) = (\psi^n, \psi^n)$.

Соберем слагаемые при ψ^n и ψ^{n+1} , получим:

$$\left(E + i \frac{\tau \nu}{\hbar} H \right) \psi^{n+1} = \left(E - i \frac{(1 - \nu)\tau}{\hbar} H \right) \psi^n.$$

Матрицы при ψ^{n+1} и ψ^n являются постоянными. Введем для них обозначения A и B . Матрицы достаточно вычислить один раз, после чего система уравнений решается в основном цикле программы в несколько строк.

$$A\psi^{n+1} = B\psi^n, \quad A = E + i\frac{\tau\nu}{\hbar}H, \quad B = E - i\frac{(1-\nu)\tau}{\hbar}H.$$

Матрица A лучше обусловлена по сравнению с матрицей оператора H , поэтому для решения целесообразно использовать итерационные методы решения СЛАУ. Кроме того, значение ψ^n на предыдущем временном слое является хорошим начальным приближением для ψ^{n+1} . Также, если матрица A постоянная, то можно единственный раз в начале программы найти для неё предобуславливатель, и использовать его в итерационном методе, тогда расчет будет просто летать.

Красивые формулы для маленьких любителей математики. Схему Кранка – Николсон для уравнения Шрёдингера можно получить другим оригинальным способом. Пусть мы провели пространственную дискретизацию уравнения Шрёдингера, далее считаем значения в ячейках зависящими только от времени $\psi_j(t)$. Тогда получаем систему ОДУ в матричной форме:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi,$$

Решение системы ОДУ можно представить через матричную экспоненту, формула такая же, будто ψ и H скаляры:

$$\psi(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H}\psi(0),$$

а формула продвижения на один временной шаг τ :

$$\psi^{n+1} = e^{-i\frac{\tau}{\hbar}H}\psi^n.$$

Если аппроксимация гамильтониана H выполнена корректно, тогда матрица H эрмитова. В этом случае матричная экспонента $U = \exp(-i\frac{\tau}{\hbar}H)$ это унитарная матрица, а значит и преобразование волновой функции $\psi^n \rightarrow \psi^{n+1}$ унитарное, как и должно быть. Разложим матричную экспоненту в ряд Тейлора по малому параметру и получим различные аппроксимации уравнения.

$$\psi^{n+1} = e^{-i\frac{\tau}{\hbar}H}\psi^n \quad \Rightarrow \quad \psi^{n+1} = \left(E - i\frac{\tau}{\hbar}H\right)\psi^n - \text{явная схема.}$$

$$e^{i\frac{\tau}{\hbar}H}\psi^{n+1} = \psi^n \Rightarrow (E + i\frac{\tau}{\hbar}H)\psi^{n+1} = \psi^n - \text{ неявная схема.}$$

Для данных двух схем матрица перехода $\psi^n \rightarrow \psi^{n+1}$ не является унитарной. Из теории конформных отображений нам известно дробно-рациональное отображение Кэли:

$$e^{-iz} = \frac{e^{-i\frac{z}{2}}}{e^{+i\frac{z}{2}}} \approx \frac{1 - i\frac{z}{2}}{1 + i\frac{z}{2}}, \quad e^{-i\frac{\tau}{\hbar}H} \approx \left(E + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)^{-1} \left(E - \frac{i\tau}{2\hbar}H\right).$$

Отображение Кэли для эрмитовых матриц является унитарным, как исходная матричная экспонента. Такая замена матричной экспоненты дает схему Кранка – Николсон:

$$\left(E + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)\psi^{n+1} = \left(E - \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)\psi^n.$$

7.3. Лабораторная работа

Провести численное моделирование уравнения параболического типа. В условиях встречаются три варианта: уравнение теплопроводности, уравнение диффузии с распадом, уравнение Шрёдингера. В постановках для уравнения Шрёдингера встречается понятие волнового пакета, поэтому несколько слов об этом.

Волновой пакет — совокупность волн с разными частотами, которые описывают обладающую волновыми свойствами формацию, в общем случае ограниченную во времени и пространстве.

Пусть α — угол под которым распространяется волновой пакет, единичный вектор $\mathbf{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$ — направление распространения. Обозначим волновое число как $\mathbf{k} = k \cdot \mathbf{n}$, где k — модуль волнового числа. Обозначим как \mathbf{r} радиус-вектор, а как \mathbf{r}_0 — точку, на которую приходится максимум плотности вероятности в начальный момент времени. Амплитуду волнового пакета в начальный момент времени будем описывать функцией $a(r; \varepsilon)$.

В качестве амплитуды $a(r; \varepsilon)$ можно выбрать произвольную гладкую куполообразную функцию, которая имеет максимум в нуле и обращается в ноль при значениях $|r| \geq \varepsilon$, к примеру:

$$a(r; \varepsilon) = \eta(\varepsilon - |r|) \cdot \cos^3\left(\frac{\pi r}{2\varepsilon}\right), \quad r \in \mathbb{R}, \quad (7.1)$$

где $\eta(x)$ — функция Хевисайда.

Локализованный волновой пакет:

$$\psi(\mathbf{r}) = a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|; \varepsilon) \cdot e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})}. \quad (7.2)$$

Плоский волновой пакет:

$$\psi(\mathbf{r}) = a((\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{n}); \varepsilon) \cdot e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})}. \quad (7.3)$$

Волновой пакет, вообще говоря, состоит из суммы множества плоских волн с различными волновыми числами. При движении волновой пакет неизбежно будет распадаться, поскольку слагаемые с разными волновыми числами имеют различные энергии и скорости распространения. Волновое число свободной частицы связано с её энергией по формуле $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Эта формула позволяет сделать оценки высоты потенциального барьера, который сможет преодолеть волновой пакет.

Задачи к лабораторной работе

7.1. Прямоугольная область разделена посередине потенциальным барьером с потенциалом U_0 , смоделировать прохождение локализованного волнового пакета (7.2) через потенциальный барьер.

7.2. Имеется бесконечная (периодическое замыкание вдоль x) металлическая пластина $0 < y < H$. Круглая область в центре пластины $r_0 = 0.2H$ имеет теплоемкость c в несколько раз выше окружающей. Верхняя граница пластины теплоизолирована, а нижнюю границу нагревают точечным тепловым потоком q в точке x_0 . Смоделировать распространение тепла в пластине.

7.3. Прямоугольную камеру заполняют газом, который содержит радиоактивный изотоп с коэффициентом распада β . Газ поступает в камеру через 12 форсунок, расположенных по окружности. Мощность всех форсунок одинакова и постоянна. Концентрация изотопа на границе камеры поддерживается равной нулю. Построить распределение концентрации изотопа в камере в различные моменты времени, если в начальный момент времени концентрация равна нулю.

7.4. Прямоугольная комната обогревается системой теплый пол. Предполагаем, что стены комнаты хорошо теплоизолированы, а теплый пол равномерно прогревает комнату по всей площади. Когда средняя температура в комнате достигает отметки T_{\max} , хозяин открывает форточку для проветривания. С освежающим зимним воздухом тепло из комнаты уходит с постоянным потоком тепла q . Когда

средняя температура в комнате опускается до T_{\min} , хозяин закрывает форточку. Рассчитать распределение тепла в комнате при таком режиме проветривания, если начальная температура равна T_{\min} .

7.5. В прямоугольной периодически замкнутой (по оси y) области расположен круглый потенциальный барьер $U(r) = U_0\eta(r_0 - r)$. Смоделировать прохождение плоского (7.3) волнового пакета через барьер, волновой пакет движется вдоль оси x .

7.6. Прямоугольную камеру заполняют газом, который содержит радиоактивный изотоп с коэффициентом распада β . Газ поступает в камеру через 12 форсунок, расположенных по три штуки на каждой границе камеры. Мощность всех форсунок одинакова и постоянна. Построить распределение концентрации изотопа в камере в различные моменты времени, если в начальный момент времени концентрация изотопа равна нулю.

7.7. Локализованный волновой пакет (7.2) распространяется под углом в периодически замкнутой квадратной области.

7.8. Имеется прямоугольный блок $|x| < l_x$, $0 < y < l_y$. Основной материал блока имеет теплоемкость c_0 , в то время как небольшой внутренний слой $|x| < H$ обладает высокой теплоемкостью $c_1 \gg c_0$. Плотность материала блока ρ и теплопроводность κ постоянны. Слева и справа от блока отводят тепло, поэтому температура на боковых поверхностях равна нулю. Нижнюю поверхность блока подогревают постоянным тепловым потоком, а верхняя поверхность блока теплоизолирована. Смоделировать распространение тепла в блоке.

7.9. Имеется бесконечная (периодическое замыкание) композитная пластина (Рис. 7.1). Основной материал пластины (матрица) имеет теплоемкость c_0 , дополнительный материал (наполнитель) в форме небольших гранул имеет очень высокую теплоемкость $c_1 \gg c_0$. Плотность ρ и теплопроводность κ двух материалов совпадают. Начальная температура пластины однородна и равна T_0 . Затем пластина охлаждается при контакте со средой с нулевой температурой, теплообмен со средой происходит по закону Ньютона. Смоделировать процесс охлаждения пластины.

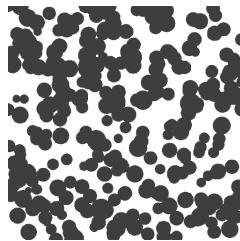


Рис. 7.1: Композит.

7.10. Численно смоделировать рассеяние локализованного волнового пакета (7.2) на клиновидном потенциальном барьере. Пример потенциального барьера, клин с вершиной в точке (x_0, y_0) :

$$U(x, y) = U_0 \eta(x - x_0) \eta(3(x_0 - x) + (y_0 - y)).$$

7.11. Имеется бесконечная (периодическое замыкание вдоль y) композитная пластина (Рис. 7.1). Основной материал пластины (матрица) имеет теплоемкость c_0 , дополнительный материал (наполнитель) в форме небольших гранул имеет очень высокую теплоемкость $c_1 \gg c_0$. Плотность ρ и теплопроводность κ двух материалов совпадают. Левая граница пластины теплоизолирована, а правую границу пластины нагревают постоянным тепловым потоком, равномерно распределенным по границе. Смоделировать распространение тепла в пластине.

7.12. Прямоугольную камеру заполняют газом, который содержит радиоактивный изотоп с коэффициентом распада β . Газ поступает в камеру с постоянной скоростью через форсунку, которая перемещается по камере по траектории:

$$x(t) = 16a \sin^3 t, \quad y(t) = a(13 \cos t - 5 \cos 2t - 2 \cos 3t - \cos 4t).$$

На границах камеры поддерживается нулевая концентрация изотопа. Построить распределение концентрации изотопа в камере в различные моменты времени, если в начальный момент времени концентрация изотопа равна нулю.

7.13. Прямоугольная комната обогревается печкой с постоянной мощностью Q , которая расположена в центре комнаты. Система умный дом связывает работу обогревателя с показаниями термометра на стене комнаты. Обогреватель включается, когда температура на термометре опускается до значения T_{\min} и снова выключается при достижении температуры T_{\max} . Теплотери в комнате вызваны двумя «холодными» стенами, которые являются внешними стенами дома, они и обеспечивают постоянный отток тепла q из комнаты. Рассчитать распределение тепла в комнате при таком режиме работы обогревателя, если начальная температура в комнате равна T_{\min} .

7.14. В прямоугольной периодически замкнутой (по оси x) области расположен потенциальный барьер с щелью $U(x) = U_0 \eta(|x| - \varepsilon)$. Смоделировать прохождение плоского волнового пакета (7.3) через щель, волновой пакет движется вдоль оси y .

7.15. Прямоугольную камеру заполняют газом, который содержит радиоактивный изотоп с коэффициентом распада β . Газ поступает в камеру с постоянной скоростью через форсунку, которая перемещается по камере по траектории:

$$x(t) = \frac{a \cos \omega t}{1 + \sin^2 \omega t}, \quad y(t) = \frac{a \sin \omega t \cos \omega t}{1 + \sin^2 \omega t}.$$

Границы камеры изолированы. Построить распределение концентрации изотопа в камере в различные моменты времени, если в начальный момент времени концентрация изотопа равна нулю.

7.16. В центре квадратной периодически замкнутой области расположен гладкий куполообразный потенциальный барьер. Смоделировать рассеяние плоского волнового пакета (7.3) на данном потенциале. В качестве потенциала можно выбрать знакомую функцию (7.1):

$$U(x, y) = U_0 \cdot a(\sqrt{x^2 + y^2}; \varepsilon).$$

7.17. Имеется квадратный блок $|x| < H$, $|y| < H$. Основной материал блока имеет теплоемкость c_0 , в то время как круглая область в центре $r < r_0$ обладает высокой теплоемкостью $c_1 \gg c_0$. Плотность материала блока ρ и теплопроводность κ постоянны. Левая и правая границы блока теплоизолированы, верхняя поверхность поддерживается при нулевой температуре. Нижняя поверхность блока нагревается по линейному закону до некоторого предельного значения T_0 , то есть $T_B(t) = \min(\alpha t, T_0)$. Смоделировать распространение тепла в блоке, если начальная температура равна нулю.

7.18. Имеется бесконечная (периодическое замыкание) композитная пластина (Рис. 7.1). Основной материал пластины (матрица) имеет теплоемкость c_0 , дополнительный материал (наполнитель) в форме небольших гранул имеет очень высокую теплоемкость $c_1 \gg c_0$. Плотность ρ и теплопроводность κ двух материалов совпадают. Пластина по всей поверхности контактирует со средой, теплообмен с которой происходит по закону Ньютона. В начальный момент времени пластина и среда находятся в равновесии при нулевой температуре, затем среда начинает нагреваться по линейному закону $T(t) = \alpha t$. Смоделировать процесс нагревания пластины.

Лекция 8. Итерационный метод с чебышёвским набором параметров

Пафну́тий Льво́вич Чебышёв (1821 — 1894 гг.) — «величайший, наряду с Н.И. Лобачевским, русский математик XIX века» [?, с. 216]. Чебышёв получил фундаментальные результаты в теории чисел (распределение простых чисел) и теории вероятностей (центральная предельная теорема, закон больших чисел), построил общую теорию ортогональных многочленов, теорию равномерных приближений функций и многие другие.

В течение 40 лет, начиная с публикации статьи «Теория механизмов, известных под названием параллелограммов» в 1854 году, ученый занимался теорией наилучшего приближения функций. Теория приближений постепенно охватывала более широкий круг связанных с ней вопросов — теорию ортогональных многочленов, оценки интегралов, квадратурные формулы, интерполирование [?, с. 218]. То есть многие темы, лежащие в основе современных численных методов. Чебышёв разработал метод аппроксимации функций полиномами и рациональными дробями, который без существенных изменений используется в современных компьютерах [?].

Система ортогональных полиномов, носящих имя Чебышёва, появляется в различных разделах численных методов. Новые оригинальные применения многочленов Чебышёва были обнаружены в 1950-х годах при решении систем линейных уравнений. Об этом красивом математическом методе речь пойдет в следующих параграфах.

Фамилию учёного — по его собственному указанию — следует произносить Чебышёв. Различные словари [?, ?] и профильные академические издания [?], последовательно использующие букву ё при передаче имён и названий, фиксируют в качестве нормы написание и произношение Чебышёв. Не дадим в обиду букву ё, господа!

8.1. Многочлены Чебышёва

В данной главе рассматриваются пространства непрерывных на отрезке функций $C[a, b]$. Норма функций в пространстве $C[a, b]$ вводится следующим образом:

$$\|f(x)\| = \max_{x \in [a, b]} |f(x)|,$$

эту норму также называют *нормой Чебышёва* или *равномерной нормой*, поскольку сходимость по этой норме эквивалентна равномерной сходимости.

Многочлены Чебышёва $T_n(x)$ степени n определяются по формуле:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)). \quad (8.1)$$

Многочлены введены Чебышёвым при исследовании полиномов, наименее отклоняющихся от нуля на отрезке $[-1, 1]$. Это ключевое свойство полиномов $T_n(x)$ будет доказано ближе к концу параграфа.

Сначала покажем, что тригонометрическая формула (8.1) действительно определяет полиномы. Первые два полинома, очевидно: $T_0(x) = 1$ и $T_1(x) = x$. Для поиска следующих полиномов выпишем рекуррентную формулу:

$$\begin{aligned} \cos((n+1) \arccos(x)) + \cos((n-1) \arccos(x)) &= \\ = 2 \cos(n \arccos(x)) \cos(\arccos(x)) = 2x \cos(n \arccos(x)) &\Rightarrow \\ T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2xT_n(x). \end{aligned}$$

Следовательно, $T_{n+1}(x)$ также является полиномом. Далее докажем некоторые свойства многочленов Чебышёва.

1. Многочлены Чебышёва чётной степени являются чётными функциями, нечётной — нечётными:

$$\begin{aligned} T_n(-x) &= \cos(n \arccos(-x)) = \cos(\pi n - n \arccos(x)) = \\ &= \cos(\pi n) \cdot \cos(n \arccos(x)) = (-1)^n T_n(x). \end{aligned}$$

2. Коэффициент при старшей степени многочленов Чебышёва равен 2^{n-1} (при $n \geq 1$). Выпишем рекуррентную формулу:

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x).$$

Из формулы следует, что при увеличении n коэффициент при старшей степени x^n увеличивается в два раза (при $n \geq 1$).

3. Корни x_k многочленов Чебышёва действительные и располагаются на интервале $(-1, 1)$:

$$\begin{aligned} \cos(n \arccos(x)) = 0 &\Rightarrow n \arccos(x) = \frac{(2k+1)\pi}{2} \Rightarrow \\ &\Rightarrow x_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n}, \quad k = \overline{0, n-1}. \end{aligned}$$

4. Экстремумы \tilde{x}_k многочленов Чебышёва располагаются на отрезке $[-1, 1]$, значения в экстремумах равны по модулю и чередуются по знаку:

$$\begin{aligned} T'_n(x) = \frac{n}{\sqrt{1-x^2}} \sin(n \arccos(x)) = 0 &\Rightarrow \tilde{x}_j = \cos \frac{\pi k}{n}, \\ T_n(\tilde{x}_k) = \cos \left(n \arccos \left(\cos \frac{\pi k}{n} \right) \right) &= (-1)^k, \quad k = \overline{0, n}. \end{aligned}$$

Следовательно, норма $\|T_n(x)\| = 1$.

Лемма. Рассмотрим множество полиномов $Q_n(x)$ степени n с фиксированным коэффициентом при старшей степени равным некоторой константе C_n . Пусть существует упорядоченный набор точек \tilde{x}_k на отрезке $[-1, 1]$:

$$-1 \leq \tilde{x}_n \leq \tilde{x}_{n-1} \leq \dots \leq \tilde{x}_1 \leq \tilde{x}_0 \leq 1,$$

в которых полином $Q_n(x)$ принимает максимальные по модулю значения, то есть $|Q_n(\tilde{x}_k)| = \|Q_n\|$, при этом знаки $Q_n(\tilde{x}_k)$ чередуются. Тогда полином $Q_n(x)$ является наименее отклоняющимся от нуля, то есть имеет минимальную норму.

Докажем лемму от противного. Пусть полином $Q_n(x)$ удовлетворяет условиям леммы. Существует упорядоченный набор точек $\tilde{x}_k \in [-1, 1]$, в которых $Q_n(x)$ достигает экстремумов, и при этом знаки $Q_n(\tilde{x}_k)$ чередуются. Без ограничения общности можно считать, что $Q_n(\tilde{x}_k) = (-1)^k \|Q_n\|$, $k = \overline{0, n}$.

Предположим, что существует отличный от него полином $\tilde{Q}_n(x)$, такой что $\|\tilde{Q}_n\| < \|Q_n\|$. Рассмотрим разность $R(x) = Q_n(x) - \tilde{Q}_n(x)$, это полином степени $n-1$. Рассмотрим значения $R(x)$ в узлах \tilde{x}_k :

$$R(\tilde{x}_k) = (-1)^k \|Q_n\| - \tilde{Q}_n(\tilde{x}_k), \quad k = \overline{0, n}.$$

При четных k значение $R(\tilde{x}_k) > 0$, при нечетных $R(\tilde{x}_k) < 0$, то есть значения функции $R(x)$ в узлах \tilde{x}_k чередуются. Отсюда следует, что на отрезке $[-1, 1]$ полином $R(x)$ n раз меняет знак, то есть имеет n корней. Приходим к противоречию, поскольку $R(x)$ это полином степени $n - 1$. Лемма доказана.

Следствие. Среди полиномов со старшим коэффициентом равным единице наименее отклоняются от нуля полиномы $P_n(x)$, которые отличаются от многочленов Чебышёва только множителем:

$$P_0(x) = 1, \quad P_n(x) = \frac{T_n(x)}{2^{n-1}}, \quad n \geq 1. \quad (8.2)$$

Полиномы $P_n(x)$ и $T_n(x)$ удовлетворяют всем условиям леммы \Rightarrow следствие доказано. Норма полиномов: $\|P_n(x)\| = \frac{1}{2^{n-1}}$, при $n \geq 1$. На полиномы $P_n(x)$ также будем ссылаться как на многочлены Чебышёва.

Теорема Чебышёва (1854 г). Для того, чтобы некоторый многочлен $P(x)$ степени не выше n был многочленом, наименее уклоняющимся от функции $f \in C[a, b]$, необходимо и достаточно, чтобы на отрезке $[a, b]$ нашлась по крайней мере одна система из $n + 2$ точек $x_i : a \leq x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_{n+1} \leq b$, в которых разность $f(x) - P(x)$:

- 1) поочередно принимает значения разных знаков,
- 2) достигает по модулю наибольшего на $[a, b]$ значения.

Советский математик Яков Евгеньевич Ремез в 1934 году ввел термин «чебышёвский альтернанс» (от французского *alternance* – чередование) для обозначения такой системы точек, а также предложил итерационный алгоритм поиска этого самого альтернанса [?]. Алгоритм Ремеза позволяет построить лучшую полиномиальную аппроксимацию для произвольной непрерывной функции. В дальнейшем данная теорема нам не понадобится, я привел её просто, потому что мне нравится теория аппроксимации [?].

8.2. Многочлены Чебышёва на отрезке $[a, b]$

Многочлены Чебышёва $P_n(t)$ были определены как полиномы степени n со старшим коэффициентом равным единице, которые наименее отклоняются от нуля на отрезке $t \in [-1, 1]$. Аналогичным образом можно ввести полиномы, которые наименее отклоняются от нуля на

произвольном отрезке $x \in [a, b]$. Для этого достаточно линейно отобразить отрезок $[-1, 1] \rightarrow [a, b]$:

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t, \quad t = \frac{2x - (b+a)}{b-a}.$$

Чтобы сохранить коэффициент при старшей степени равный единице необходимо выбрать полиномы $P_n(x)$ следующим образом:

$$T_n(x) = \cos \left(n \arccos \frac{2x - (a+b)}{b-a} \right), \quad P_n(x) = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}} T_n(x).$$

Корни многочленов Чебышёва линейно отображаются на произвольный отрезок $[a, b]$:

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n}, \quad k = \overline{0, n-1},$$

а норма многочленов равна коэффициенту перед косинусом:

$$\|T_n\| = 1, \quad \|P_n\| = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}}.$$

Среди полиномов со старшим коэффициентом равным единице $P_n(x)$ имеют наименьшее отклонение от нуля.

Предположим, что отрезок $[a, b]$ расположен на положительной полуоси, то есть $0 < a < b$. Рассмотрим систему полиномов \tilde{P}_n с другой нормировкой. Поскольку все корни полиномов $T_n(x)$ располагаются на интервале (a, b) , значение $T_n(0) \neq 0$, поэтому можем потребовать выполнения условия $\tilde{P}_n(0) = 1$:

$$\tilde{P}_n(x) = \frac{P_n(x)}{P_n(0)} = \frac{T_n(x)}{T_n(0)}.$$

Найдем $\tilde{P}_n(x)$ и отклонение $\|\tilde{P}_n\|$. Фактически, требуется вычислить значение $T_n(0)$, введем величину $\xi = a/b$, значение $\xi \in (0, 1)$.

$$T_n(0) = \cos \left(n \arccos \left(-\frac{a+b}{b-a} \right) \right) = (-1)^n \cos \left(n \arccos \frac{1+\xi}{1-\xi} \right).$$

Величина под \arccos больше единицы.

Воспользуемся формулой Эйлера, а также выражением для арккосинуса через натуральный логарифм $\arccos z = -i \ln(z + \sqrt{z^2 - 1})$. Получим формулу

$$\cos(n \arccos z) = \frac{(z + \sqrt{z^2 - 1})^n + (z - \sqrt{z^2 - 1})^n}{2}.$$

Формула справедлива для комплексных z , а также для действительных $z > 1$. Применим формулу для вычисления $T_n(0)$:

$$T_n(0) = \frac{(-1)^n}{2} \left[\left(\frac{1+\xi}{1-\xi} + \sqrt{\left(\frac{1+\xi}{1-\xi} \right)^2 - 1} \right)^n + \left(\frac{1+\xi}{1-\xi} - \sqrt{\left(\frac{1+\xi}{1-\xi} \right)^2 - 1} \right)^n \right].$$

Поскольку $0 < \xi < 1$, при раскрытии выражений можно не заду-
мываться о комплексных числах и ветвлениях:

$$\frac{1+\xi}{1-\xi} \pm \sqrt{\left(\frac{1+\xi}{1-\xi} \right)^2 - 1} = \frac{1+\xi}{1-\xi} \pm \sqrt{\frac{4\xi}{(1-\xi)^2}} = \frac{1 \pm 2\sqrt{\xi} + \xi}{1-\xi} = \frac{(1 \pm \sqrt{\xi})^2}{(1-\sqrt{\xi})(1+\sqrt{\xi})}.$$

В результате получаем выражение:

$$T_n(0) = \frac{(-1)^n}{2} \left[\left(\frac{1+\sqrt{\xi}}{1-\sqrt{\xi}} \right)^n + \left(\frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}} \right)^n \right].$$

Введем величину $\rho_1 = \frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}}$, $0 < \rho_1 < 1$, тогда

$$T_n(0) = \frac{(-1)^n}{2} \left(\rho_1^n + \frac{1}{\rho_1^n} \right) = \frac{(-1)^n (1 + \rho_1^{2n})}{2\rho_1^n}.$$

Выражение для полиномов \tilde{P}_n :

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n(x) &= (-1)^n q_n \cos \left(n \arccos \frac{2x - (a+b)}{b-a} \right), \\ q_n &= \frac{2\rho_1^n}{1 + \rho_1^{2n}}, \quad \rho_1 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{a}{b}. \end{aligned} \tag{8.3}$$

Корни многочленов $\tilde{P}_n(x)$ определяются как и ранее, поскольку изменен только множитель. Среди полиномов $Q_n(x)$ степени n для которых $Q_n(0) = 1$, полиномы $\tilde{P}_n(x)$ наименее отклоняются от нуля на отрезке $[a, b]^1$, это отклонение равно $\|\tilde{P}_n\| = q_n$.

¹У Самарского и Гулина написано, что это очевидно. На самом деле ни разу не очевидно. По сути нужно доказывать аналог леммы из этой главы, но только для фиксированной константы в полиноме. Доказательство похожее, получается $R(x) = Q_n(x) - \tilde{Q}_n(x) = xQ_{n-1}^*$ имеет n корней на отрезке $[a, b]$, при том что Q_{n-1}^* — полином степени $n-1$.

Задача 1. Пусть полином $\omega(x)$ задан в форме:

$$\omega(x) = (x - x_1) \cdot (x - x_2) \cdot \dots \cdot (x - x_n),$$

требуется минимизировать отклонение $\omega(x)$ от нуля на отрезке $[a, b]$ путем выбора параметров x_1, x_2, \dots, x_n . Старший коэффициент в полиноме равен единице, а значит это задача для полиномов $P_n(x)$. В качестве параметров x_k следует выбрать корни многочлена Чебышёва, тогда отклонение составит $\|\omega(x)\| = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}}$.

Задача 2. Пусть полином $f(\lambda)$ задан в форме:

$$f(\lambda) = (1 - \tau_1 \lambda) \cdot (1 - \tau_2 \lambda) \cdot \dots \cdot (1 - \tau_n \lambda),$$

требуется минимизировать отклонение $f(\lambda)$ на отрезке $\lambda \in [a, b]$ путем выбора параметров $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$. Заметим, что $f(0) = 1$, то есть это задача для многочленов $\hat{P}_n(x)$. Выбираем $\tau_k = x_k^{-1}$, где x_k — корни многочлена Чебышёва на отрезке $[a, b]$, тогда отклонение $\|f(\lambda)\|$ будет определяться по формуле (8.3). Чуете к чему идет?

8.3. Итерации с чебышёвским набором параметров

Пусть требуется решить систему линейных уравнений $Ax + f$, где A — симметричная положительно определенная матрица. Рассмотрим явный нестационарный итерационный метод в канонической форме:

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f. \quad (8.4)$$

Каким образом выбрать итерационные параметры $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$, чтобы на n -ой итерации погрешность $\|x_n - x\|$ была минимальна?

Теорема. Пусть $A = A^T > 0$, $\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$ — минимальное и максимальное собственные значения A . Среди явных нестационарных итерационных методов решения СЛАУ, минимальную погрешность $\|x_n - x\|$ на n -ом шаге имеет метод с набором параметров:

$$\xi = \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}, \quad \rho_0 = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \tau_0 = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}},$$

$$\tau_k = \frac{\tau_0}{1 + \rho_0 t_k}, \quad t_k = \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n}, \quad k = \overline{1, n}.$$

При этом для погрешности справедлива оценка:

$$\|x_n - x\| \leq q_n \|x_0 - x\|, \quad q_n = \frac{2\rho_1^n}{1 + \rho_1^{2n}}, \quad \rho_1 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}}.$$

Доказательство. Для погрешности $z_k = x_k - x$ итерационная процедура имеет вид $z_{k+1} = (E - \tau_{k+1}A)z_k$, следовательно

$$z_n = (E - \tau_n A) \cdot (E - \tau_{n-1} A) \cdot \dots \cdot (E - \tau_1 A) z_0 = R_n z_0.$$

Матрица R_n симметрична, а значит $\|R_n\| = |\nu|$, где $|\nu|$ — спектральный радиус R_n и оценка не улучшаема.

$$\|z_n\| \leq \|R_n\| \cdot \|z_0\| = |\nu| \cdot \|z_0\|,$$

Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ — собственные значения матрицы A , а v_k — соответствующие собственные векторы. Они же являются СВ для матрицы R_n :

$$\begin{aligned} R_n v_k &= (E - \tau_n A) \cdot (E - \tau_{n-1} A) \cdot \dots \cdot (E - \tau_1 A) v_k = \\ &= (E - \tau_n \lambda_k) \cdot (E - \tau_{n-1} \lambda_k) \cdot \dots \cdot (E - \tau_1 \lambda_k) v_k. \end{aligned}$$

В последней строке приведено СЗ матрицы R_n , которое соответствует v_k . Тогда спектральный радиус матрицы R_n :

$$\begin{aligned} |\nu| &= \max_{\lambda_k} |(E - \tau_n \lambda_k) \cdot (E - \tau_{n-1} \lambda_k) \cdot \dots \cdot (E - \tau_1 \lambda_k)| \leq \\ &\leq \max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} |(E - \tau_n \lambda) \cdot (E - \tau_{n-1} \lambda) \cdot \dots \cdot (E - \tau_1 \lambda)|. \end{aligned}$$

Требуется минимизировать величину $|\nu|$. Решение такой задачи нам известно. Для этого в качестве τ_k^{-1} следует выбрать корни многочлена Чебышёва на отрезке $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$:

$$\tau_k^{-1} = \frac{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}}{2} + \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{2} \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n}, \quad k = \overline{1, n}.$$

При этом будет справедлива оценка:

$$|\nu| \leq \frac{2\rho_1^n}{1 + \rho_1^{2n}}, \quad \rho_1 = \frac{1 - \sqrt{\xi}}{1 + \sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}.$$

После минимальных преобразований получается выражение из условия теоремы.

Рассмотрим простейший случай $n = 1$. В этом случае мы получаем метод простой итерации с оптимальным параметром:

$$\tau = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}}.$$

То есть метод простой итерации с оптимальным параметром обеспечивает минимальную погрешность на каждом шаге. Показатель геометрической прогрессии, с которым убывает погрешность, равен:

$$\begin{aligned} q = \frac{2\rho_1}{1 + \rho_1^2} &= \frac{2(1 - \sqrt{\xi})}{(1 + \sqrt{\xi})\left(1 + \frac{(1 - \sqrt{\xi})^2}{(1 + \sqrt{\xi})^2}\right)} = \frac{2(1 - \sqrt{\xi})}{1 + \sqrt{\xi} + \frac{(1 - \sqrt{\xi})^2}{1 + \sqrt{\xi}}} = \\ &= \frac{2(1 - \xi)}{(1 + \sqrt{\xi})^2 + (1 - \sqrt{\xi})^2} = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \end{aligned}$$

данная формула уже была получена ранее другим способом.

8.4. Скорость сходимости и устойчивость

Оценка скорости сходимости.

Погрешность на промежуточных итерациях.

Численная неустойчивость метода.

Литература
