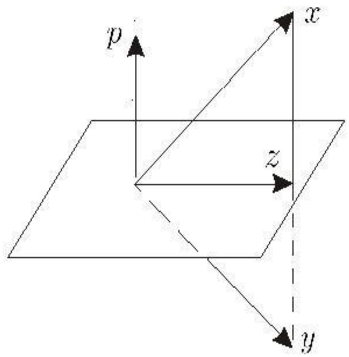
Метод ортогональных исключений

Ортогональные отражения



Отражение вектора x относительно гиперплоскости $(z,p)=0$.

$$y = x - 2\frac{(x,p)}{\|p\|^2}p = Px$$

$$P_{ij} = \delta_{ij} - \frac{2p_i p_j}{\|p\|^2} \qquad (i,j = 1,\ldots,N)$$

$$P^*P = PP^* = P^2 = I$$

Задача $\|x\| = \|y\|$,

$x \to y$

Ответ $p = y - x$,

$y = Px$

Двухдиагонализация, $A - N \times N$

Найти ортогональные P и Q:

$PAQ = D$, где

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & d_{N-1} & b_N \\ 0 & & & d_N \end{pmatrix}$$

Алгоритм решения.

$A^{(0)} = A$, $P^{(1)}$, $A^{(1)} = P^{(1)} A^{(0)}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{N1}^{(1)} \end{pmatrix} = P^{(1)} \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} \\ \vdots \\ a_{N1}^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow A^{(1)} = \begin{pmatrix} d_1 & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

$Q^{(1)}$:

$$(a_{11}^{(2)}, a_{12}^{(2)}, \dots, a_{1N}^{(2)}) = (a_{11}^{(1)}, a_{12}^{(1)}, \dots, a_{1N}^{(1)}) Q^{(1)} = (d_1, b_2, 0, \dots, 0).$$

$$Q^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & * & \dots & * \\ . & . & \ddots & . \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix} \Rightarrow A^{(2)} = A^{(1)} Q^{(1)} = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & * & * & \dots & * \\ . & . & . & \ddots & . \\ 0 & * & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

Симметрическая спектральная задача

$$Av = \lambda v, \quad A = A^*$$

Теорема [Вейль]
$A = A^*$, $\triangle A = \triangle A^*$, $\widetilde{A} = A + \triangle A$

$$\left.\begin{aligned} &\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_M \quad \text{– с.зн.А,} \\ &\widetilde{\lambda}_1 \leq \widetilde{\lambda}_2 \leq \cdots \leq \widetilde{\lambda}_M \quad \text{– с. зн. } \widetilde{A} \end{aligned}\right. \implies |\widetilde{\lambda}_n - \lambda_n| \leq \mathbf{1}\|\triangle A\|$$

Вариационный принцип Фишера-Куранта

$A = A^*$

$$\lambda_{n-k} = \min_{\substack{\|q_i\| = 1, \\ i = 1,\dots,k}} \max_{\substack{\|x\| \neq 0 \\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

$$\lambda_{k+1} = \max_{\substack{\|q_i\| = 1, \\ i = 1,\dots,k}} \min_{\substack{\|x\| \neq 0 \\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

Следствие вариационного принципа

$A = A^*$, $B = B^*$, $(Ax, x) \geq (Bx, x) \quad \Longrightarrow \lambda_j(A) \geq \lambda_j(B)$

Доказательство теоремы Вейля

$$(\widetilde{A}x, x) = ((A + \Delta A)x, x) = (Ax, x) + (\Delta Ax, x) \leq (Ax, x) + (||\Delta A||x, x)$$

$$\implies \quad \widetilde{\lambda}_j \leq \lambda_j + ||\Delta||$$

аналогично $\widetilde{\lambda}_j \geq \lambda_j - ||\Delta||$

Упрощение

$$PAP^* = S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

$$Sw = SPv = PAP^*Pv = \lambda Pv = \lambda w$$

$$T = \begin{pmatrix} d_1 & c_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}, \quad b_j c_j > 0$$

$$D_M(\lambda) = \det(T - \lambda I) = 0.$$

Полагаем

$c_{M+1} = 1$, $D_0(\lambda) = 1 \Longrightarrow D_k(\lambda) = (d_k - \lambda) D_{k-1}(\lambda) - b_k c_k D_{k-2}(\lambda)$

Лемма Нули $D_k(\lambda)$ вещественны и различны.

Между двумя соседними нулями $D_{j+1}(\lambda)$ есть в точности один нуль $D_j(\lambda)$

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_j < \mu_j < \lambda_{j+1}$$

Доказательство по индукции:

$D_1(\lambda) \Longrightarrow \lambda = \lambda^* = d_1$

Коэффициент при старшей степени D_2 положителен $\Rightarrow$ ветви параболы направлены вверх.

$$D_2(\lambda) = \lambda^2 + \dots$$

$$D_2(\lambda^*) = (d_1 - \lambda^*)(d_2 - \lambda^*) - b_2c_2 = -b_2c_2 < 0$$

– парабола пересекает ось абцисс –основание для индукции

Пусть для $D_j(\lambda)$ $(j \leq k-1)$ лемма доказана.

1)$\lambda < 0$, $|\lambda| >> 1 \Longrightarrow D_j(\lambda) > 0$, т.к. $D_j(\lambda) = (-\lambda)^j + \ldots$

2)Пусть $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_{k-2} < \lambda_{k-1}$ – корни $D_{k-1}(\lambda) \quad \Rightarrow \forall \ (\lambda_i, \ \lambda_{i+1}) \ \exists!$ нуль $D_{k-2}(\lambda)$:

$$D_{k-2}(\lambda_1) > 0$$

$$D_{k-2}(\lambda_i) D_{k-2}(\lambda_{i+1}) < 0$$

Вычисляем $D_k(\lambda_1)$, разлагая по k-ой строке (k-му столбцу)

$$D_k(\lambda_1) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_1) + d_k D_{k-2}(\lambda_1) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_1) < 0$$

$$\Rightarrow \quad D_k(-\infty) > 0$$

$\Longrightarrow$ на интервале $(-\infty,\ \lambda_1)$ есть хотя бы один корень $D_k(\lambda)$.

$$D_k(\lambda_i) = -b_k c_k D_{k-2}(\lambda_i),\ \ D_{k-2}(\lambda_i) D_{k-2}(\lambda_{i+1}) < 0 \quad \Longrightarrow \quad D_k(\lambda_i) D_k(\lambda_{i+1}) < 0$$

Значит между точек λ_i D_k меняет знак $\Rightarrow$ имеем $n-1$ корень.

При $\lambda \to \infty \quad D_k(\lambda) D_{k-2}(\lambda) > 0$, т.к. $(-\lambda)^k (-\lambda)^{k-2} = \lambda^{2k-2}$

Но $D_k(\lambda_{k-1}) D_{k-2}(\lambda_{k-1}) < 0 \Longrightarrow$ на интервале (λ_{k-1}, ∞) есть хотя бы один корень полинома $D_k(\lambda)$.

Лемма доказана

Определение последовательности Штурма

$$D_k(\lambda) = (d_k - \lambda)D_{k-1}(\lambda) - b_k c_k D_{k-2}(\lambda)$$

$$\frac{|c_{k+1}|D_{k-1}(\lambda)}{D_k(\lambda)} = \frac{|c_{k+1}|}{d_k - \lambda - |b_k||c_k|D_{k-2}(\lambda)/D_{k-1}(\lambda)}$$

$$\mathcal{P}_k(\lambda) = \frac{|c_{k+1}|D_{k-1}(\lambda)}{D_k(\lambda)} \quad (1 \le k \le M)$$

Последовательность Штурма

$$\mathcal{P}_1(\lambda) = \frac{|c_2|}{d_1 - \lambda}$$

$$\mathcal{P}_k(\lambda) = \frac{|c_{k+1}|}{d_k - \lambda - |b_k|\mathcal{P}_{k-1}(\lambda)}$$

Теорема (Штурм)

$\forall\ \lambda_0$ число $\lambda < \lambda_0 : D_M(\lambda) = 0$ (с.зн. T) = числу $\mathcal{P}_j(\lambda_0) \leq 0,\ j = 1, \ldots, M$

Задача: вычислить $\lambda_j(S)$

Метод бисекций:

1) $\lambda_j(S) \in [X^-, X^+]$

2) $y = \dfrac{X^+ - X^-}{2}, \mathcal{P}_j(y)$

$+ - - + \cdots + - + \Rightarrow l$ минусов

3) if $l \geq j \Longrightarrow X^+ := y$

if $l < j \Longrightarrow X^- := y$

Доказательство теоремы Штурма

$\mathcal{P}_1(\lambda),\ \mathcal{P}_2(\lambda),\ \dots,\ \mathcal{P}_M(\lambda) \Leftrightarrow + - - + \cdots - - +$

$$\mathcal{P}_j(\lambda) = |c_{j+1}|\frac{D_{j-1}(\lambda)}{D_j(\lambda)}, \qquad D_j(\lambda) = (-\lambda)^j + \dots$$

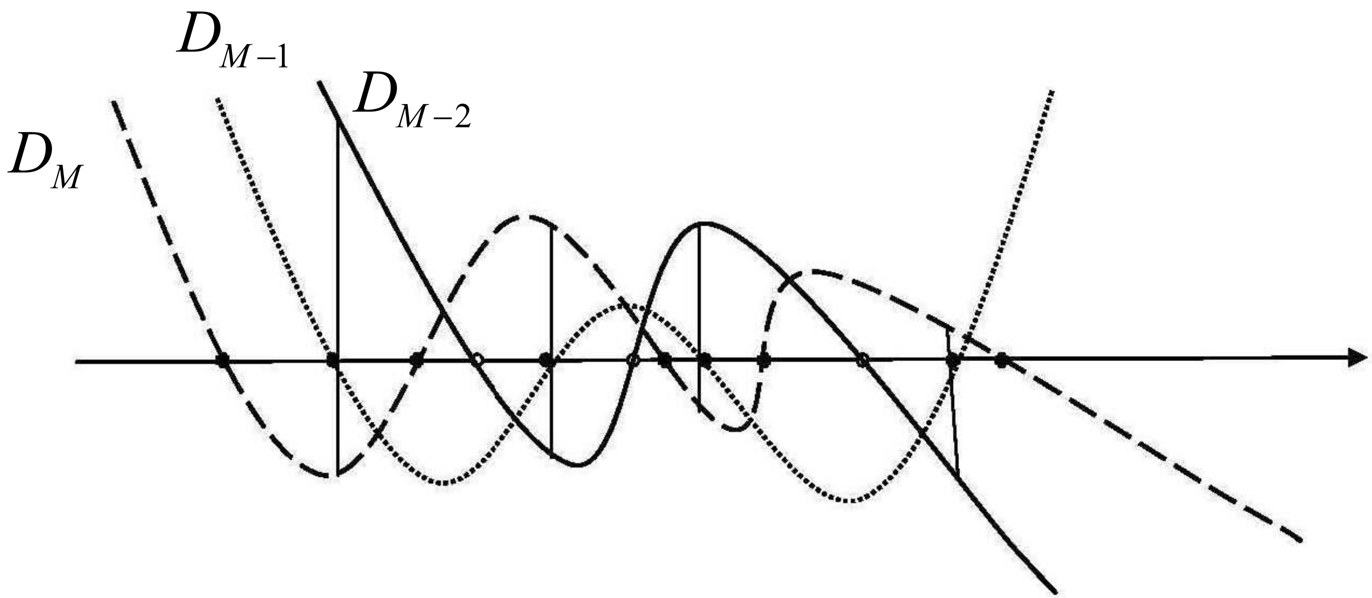
If $\lambda_0 < 0,\ |\lambda_0| >> 1 \Longrightarrow +,\ +,\ \dots,\ +$

If $\lambda_0 > 0,\ |\lambda_0| >> 1 \Longrightarrow -,\ -,\ \dots,\ -$

$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M$ – корни $D_M(\lambda)$, $\quad (\lambda_k,\ \lambda_{k+1}] \qquad (\lambda_{k-1},\ \lambda_k]$

$\lambda^* \in (\lambda_{k-1},\ \lambda_k]$ – один из корней полиномов $D_1(\lambda),\ D_2(\lambda),\ \dots,\ D_M(\lambda)$

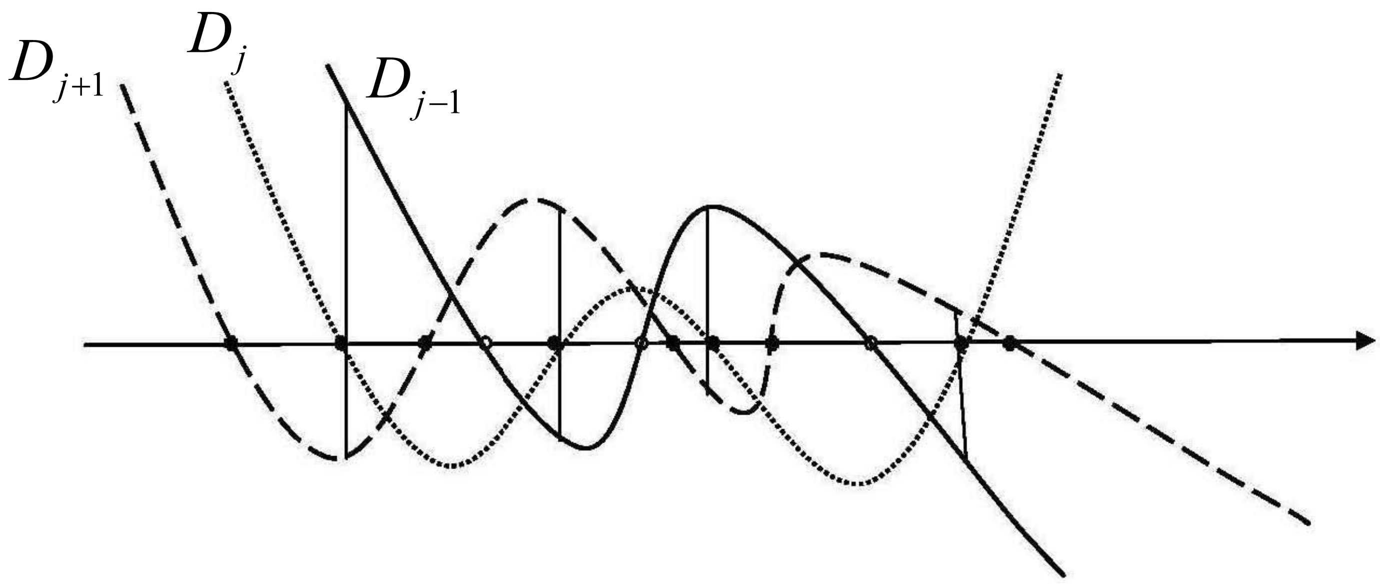
1. λ^* корень $D_M(\lambda)$ и не корень $D_j(\lambda)$ $(1 \le j \le M-1) \Longrightarrow$
в λ^* $\mathcal{P}_M(\lambda)$ меняет знак с "+"на "– $\mathcal{P}_j(\lambda)$ $(1 \le j \le M-1)$ сохраняют знаки



2. λ^* корень $D_j(\lambda)$ $(j < M)$ и не корень $D_k(\lambda)$ для $k \neq j$.

$$\mathcal{P}_j(\lambda) = |c_{j+1}|\frac{D_{j-1}(\lambda)}{D_j(\lambda)}, \qquad \mathcal{P}_{j+1}(\lambda) = |c_{j+2}|\frac{D_j(\lambda)}{D_{j+1}(\lambda)}$$

в λ^*: $\mathcal{P}_j(\lambda) \qquad + \longrightarrow -, \qquad \mathcal{P}_{j+1}(\lambda) \qquad - \longrightarrow +$



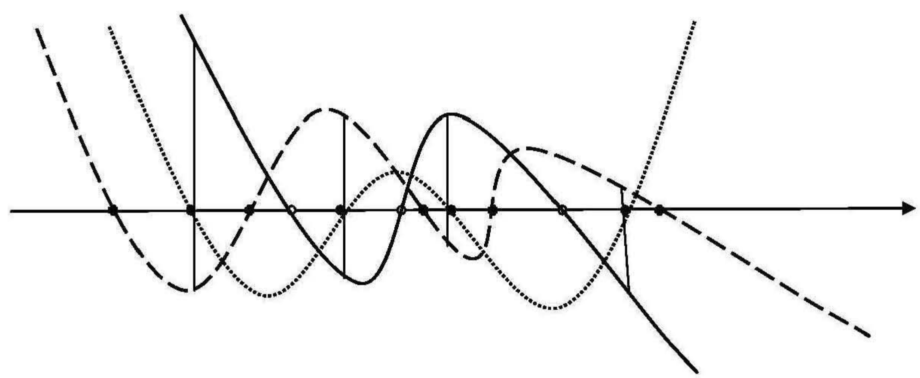
3. λ^* корень двух полиномов $D_j(\lambda)$ и $D_k(\lambda)$ при $j < k$ ($\Longrightarrow k \neq j+1$)

If $k = M$, то правее λ^*: на M-м месте добавляется "$-$" $(j+1)$-й на j-ю позицию "$-$"сдвигается.

If $k < M$, то рассматриваем две пары функций

$$\mathcal{P}_j(\lambda), \quad \mathcal{P}_{j+1}(\lambda), \qquad \qquad \mathcal{P}_k(\lambda), \quad \mathcal{P}_{k+1}(\lambda)$$

$\Rightarrow$ два "$-$"сдвигаются влево с $(j+1)$-й на j-ю, с $(k+1)$-й на k-ю.



Вычисление последовательности Штурма

$$S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_1^{[c]}(\lambda) &= |b_2| \oslash (d_1 \ominus_0 \lambda),\\
\mathcal{P}_j^{[c]}(\lambda) &= |b_{j+1}| \oslash (d_j \ominus_0 \lambda \ominus_0 |b_j| \otimes \mathcal{P}_{j-1}^{[c]}(\lambda)),\\
\mathcal{P}_M^{[c]}(\lambda) &= 1 \oslash (d_M \ominus_0 \lambda \ominus_0 |b_M| \otimes \mathcal{P}_{M-1}^{[c]}(\lambda)).
\end{aligned}$$

$[c]$ – "computation"

$$a \ominus_0 b = \begin{cases} a \ominus b & \text{при } a \ominus b \neq 0, \\ \dfrac{\varepsilon_1}{\gamma} \max\{|a|, |b|\} & \text{при } a \ominus b = 0, \end{cases}$$

Лемма. Пусть

$$\varepsilon_1 \geq 2\gamma \max\left\{ \sqrt[4]{\varepsilon_0}\,,\ \sqrt[4]{\frac{2}{\varepsilon_\infty}} \right\},$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |d_i| \leq 1, \quad \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |b_j| \leq 1,$$

$$-3 \leq \lambda \leq 3$$

$\Rightarrow$ нет ПЕРЕПОЛНЕНИЙ:

$$\varepsilon_0 < \frac{\varepsilon_1^4}{2\gamma^4} \leq \left|\mathcal{P}_j^{[c]}\right| \leq \frac{\gamma^3}{\varepsilon_1^3} < \varepsilon_\infty.$$

Замечание. If S удовл. усл. леммы

$$\frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |d_i| \leq 1, \quad \frac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |b_j| \leq 1,$$

$\Rightarrow ||S|| \leq \mathcal{M}(S) \leq 3 \Rightarrow -3 \leq \lambda \leq 3$

Моделирование погрешностей

$$a \otimes b = ab(1+\psi) + \xi.$$

$$a \oslash b = \frac{a}{b}(1+\varphi), \quad |\varphi| \le \varepsilon_1,$$

$$a \ominus_0 b = (1+\alpha)a - (1+\overline{\alpha})b,$$

где $|\alpha| \le \varepsilon_1, \quad |\overline{\alpha}| \le \varepsilon_1, \quad |(1+\alpha)/(1+\overline{\alpha}) - 1| \le \varepsilon_1/\gamma.$

$$\mathcal{P}_1^{[c]} = \frac{|\overline{c}_2|}{\overline{d}_1 - \lambda},$$
$$\mathcal{P}_j^{[c]} = \frac{|\overline{c}_{j+1}|}{\overline{d}_j - \lambda - |\overline{b}_j|\mathcal{P}_{j-1}^{[c]}},$$
$$\mathcal{P}_M^{[c]} = \frac{|\overline{c}_{M+1}|}{\overline{d}_M - \lambda - |\overline{b}_M|\mathcal{P}_{M-1}^{[c]}}.$$

$$\overline{S} = \begin{pmatrix} \overline{d}_1 & \overline{c}_2 & & 0 \\ \overline{b}_2 & \overline{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \overline{c}_M \\ 0 & & \overline{b}_M & \overline{d}_M \end{pmatrix}$$

$$\overline{S} = \begin{pmatrix} \overline{d}_1 & \overline{c}_2 & & 0 \\ \overline{b}_2 & \overline{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \overline{c}_M \\ 0 & & \overline{b}_M & \overline{d}_M \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{S} = \begin{pmatrix} \widetilde{d}_1 & \widetilde{b}_2 & & 0 \\ \widetilde{b}_2 & \widetilde{d}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \widetilde{b}_M \\ 0 & & \widetilde{b}_M & \widetilde{d}_M \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{d}_i = \overline{d}_i \qquad \widetilde{b}_j = \mathrm{sign}(b_j)\sqrt{|\overline{b}_j \overline{c}_j|}$$

$$\overline{D}_M(\lambda) = \widetilde{D}_M(\lambda)$$

$$\Delta S = S - \widetilde{S} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \eta_2 & & 0 \\ \eta_2 & \beta_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \eta_M \\ 0 & & \eta_M & \beta_M \end{pmatrix}$$

$$|\eta_j| \le \varepsilon_1 \frac{3 - \varepsilon_1}{1 - 2\varepsilon_1}, \quad |\beta_i| \le \frac{\varepsilon_1}{\gamma} + \frac{\varepsilon_0}{1 - 2\varepsilon_1} \Rightarrow \|\triangle S\| \le \mathcal{M}(\triangle S) \le 7\varepsilon_1$$

1)нормировать S:

$$\rho = \gamma^k, \qquad \frac{1}{\gamma} \le \max_{i,j} \left\{ |\rho d_i| \ , \ |\rho b_j| \right\} < 1 \qquad \Rightarrow \ S_1 = \rho S, \qquad ||S_1|| \le 3$$

2) “возмутить"матрицу $S_1 \to S_2$,
т. е. if $|\rho d_i| \ , \ |\rho b_j| < \varepsilon_1/\gamma \ \rho d_i \ , \ \rho b_j \ \longrightarrow \ \pm\varepsilon_1/\gamma$

3)метод бисекций для S_2

Теорема. Пусть в $\{\mathcal{P}_j^{[c]}(\lambda)\}$ $(j = 1, \ldots, M)$ p неположительных $\Longrightarrow$

$$\lambda_p(S_2) < \lambda + 7\varepsilon_1, \qquad \lambda - 7\varepsilon_1 \le \lambda_{p+1}(S_2).$$

Критерий остановки итераций

$\lambda_n \in [X^-, X^+]$, $X^+ - X^- \leq \varepsilon$

$|\widetilde{\lambda}_n - \lambda_n| \leq ||\widetilde{S}_2 - S_2|| \Longrightarrow \varepsilon \approx ||\widetilde{S}_2 - S_2|| \Rightarrow \varepsilon = 3 \cdot 7\varepsilon_1 = 21\varepsilon_1$

$\lambda_n^{[c]}(S_2) = (X^+ - X^-)/2 \Rightarrow \lambda_n(S_2) \in [\lambda_n^{[c]}(S_2) - \delta, \lambda_n^{[c]}(S_2) + \delta]$ $\delta = 10.5\varepsilon_1$

Примеры

$$S_k = \begin{pmatrix} d & b & & & 0 \\ b & d & b & & \\ & b & d & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b \\ 0 & & & b & d \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} &D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ &D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2, \\ &\dots \\ &D_k(\lambda) = (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda). \end{aligned}$$

Разностные уравнения

$$D_k(\lambda) - (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda) = 0$$

начальные значения:

$$\begin{aligned} &D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ &D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2. \end{aligned}$$

Решение уравнений

$$au_{k+1} + bu_k + cu_{k-1} = 0$$

имеет вид

$$u_k = \alpha q_1^k + \beta q_2^k,$$

$\alpha, \beta = const$; q_1 и q_2 – корни характ. ур-я

$$aq^2 + bq + c = 0.$$

В нашем случае характ. ур-е:

$$q^2 - (d - \lambda)q + b^2 = 0,$$

его корни

$$q_{1,2} = |b|\left[(d-\lambda)/2|b| \pm i\sqrt{1 - ((d-\lambda)/2|b|)^2}\right]$$

Ищем λ – с.зн. $S_k \Rightarrow d - 2|b| \le \lambda \le d + 2|b| \Rightarrow |d - \lambda|/2|b| \le 1$

$\Rightarrow q_{1,2} = |b|(\cos\varphi \pm i\sin\varphi)$, где $\cos\varphi = (d-\lambda)/2|b| \Rightarrow$

$$D_k = (\alpha+\beta)|b|^k\cos k\varphi + i(\alpha-\beta)|b|^k\sin k\varphi$$

Из начальных условий

$$\begin{array}{lcl} D_1 = d - \lambda = 2|b|\cos\varphi, & \Rightarrow & \left\{\begin{array}{l} \alpha+\beta = 1, \\ i(\alpha-\beta) = \cos\varphi/\sin\varphi. \end{array}\right. \\ D_2 = (d-\lambda)^2 - b^2 = b^2(4\cos^2\varphi - 1), & & \end{array}$$

$$D_k = |b|^k(\cos k\varphi + \cos\varphi\sin k\varphi/\sin\varphi) = |b|^k\sin(k+1)\varphi/\sin\varphi.$$

λ с.зн. $S_k \Leftrightarrow D_k(\lambda) = 0$, т. е. $\varphi = n\pi/(k+1)$ $(n = 1, 2, \ldots, k)$

Из $D_1 = d - \lambda = 2|b|\cos\varphi \Rightarrow (d-\lambda)/2|b| = \cos n\pi/(k+1)$.

$$\lambda_n = d - 2|b|\cos\frac{n\pi}{k+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, k)$$

При $d = 0, b = 1/2$ $D_k(-\lambda)$ – полиномы Чебышева второго рода

n	$\lambda_n^{[c]}(S_{10})$	$\lambda_n(S_{10})$	δ
1	-0.959492973614496	-0.959492973614497	10^{-16}
2	-0.841253532831179	-0.841253532831181	10^{-15}
3	-0.654860733945285	-0.654860733945285	10^{-16}
4	-0.415415013001885	-0.415415013001886	10^{-15}
5	-0.142314838273284	-0.142314838273285	10^{-16}
6	0.142314838273284	0.142314838273285	10^{-16}
7	0.415415013001885	0.415415013001886	10^{-15}
8	0.654860733945286	0.654860733945284	10^{-15}
9	0.841253532831180	0.841253532831181	10^{-16}
10	0.959492973614496	0.959492973614497	10^{-16}
ϵ_λ	$5.77316 \cdot 10^{-15}$		

Пример: с.зн. оператора Лапласа

$D = [0 \le x, y \le 1]$ $\triangle u = \lambda u, \qquad u|_{\Gamma_D} = 0$. Дискретная модель:

$U = R^s$; $s = (M-1) \times (N-1), \qquad u_{mn} = u\left(\frac{m}{M}, \frac{n}{N}\right)$

$u_{0n} = 0$, $u_{m0} = 0$, $u_{Mn} = 0$, $u_{mN} = 0$ – гр. усл.

$L : U \to U$

$$v_{mn} = Lu_{mn} = \frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{h_x^2} + \frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{h_y^2},$$

$$h_x = \frac{1}{M}, \qquad h_y = \frac{1}{N}$$

Ортонормированный базис

$$u^{(k,l)} = 2\sin\frac{k\pi m}{M}\sin\frac{l\pi n}{N}, \qquad (1 \le k \le M-1,\ \ 1 \le l \le N-1)$$

$$Lu^{(k,l)} = \left(-4M^2\sin^2\frac{k\pi}{2M} - 4N^2\sin^2\frac{l\pi}{2N}\right)u^{(k,l)}$$

$u^{(k,l)}$ – с.ф. оператора L

с.зн. $\lambda^{(k,l)} = -4M^2\sin^2\frac{k\pi}{2M} - 4N^2\sin^2\frac{l\pi}{2N}$

Пусть $M = N$, $\triangle = h_x = h_y = 1/N \Rightarrow$ аппроксимация ур-я

$$\frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{\triangle^2} + +\frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{\triangle^2} = \lambda u_{m,n}$$

$1 \le m \le M-1,\ 1 \le n \le N-1.$

$$Au = \lambda u,$$

$$A = \begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ C_1 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & C_{N-3} & B_{N-2} & C_{N-2} \\ & & & C_{N-2} & B_{N-1} \end{pmatrix}$$

$$B_n = \begin{pmatrix} \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} \end{pmatrix}, \qquad C_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{\triangle^2} & & & & \\ & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \\ & & & & \frac{1}{\triangle^2} \end{pmatrix}$$

n	$\lambda_n^{[c]}(A)$	$\lambda_n(A)$	δ
1	-372.5898981088739	-372.5898981088741	10^{-16}
2	-345.3969496365928	-345.3969496365929	10^{-16}
3	-345.3969496365928	-345.3969496365929	10^{-16}
4	-318.2040011643115	-318.2040011643117	10^{-16}
5	-306.1020005821561	-306.1020005821559	10^{-16}
6	-306.1020005821561	-306.1020005821559	10^{-16}
7	-278.9090521098751	-278.9090521098746	10^{-16}
8	-278.9090521098744	-278.9090521098746	10^{-16}
9	-262.4878975267180	-262.4878975267182	10^{-16}
10	-262.4878975267180	-262.4878975267182	10^{-16}
11	-239.6141030554378	-239.6141030554376	10^{-16}
12	-235.2949490544369	-235.2949490544370	10^{-16}
13	-235.2949490544369	-235.2949490544370	10^{-16}
14	-223.1929484722815	-223.1929484722812	10^{-15}
15	-223.1929484722815	-223.1929484722812	10^{-15}
16	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
17	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
18	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
19	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
20	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
21	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
22	-168.8070515277184	-168.8070515277188	10^{-15}
23	-168.8070515277184	-168.8070515277188	10^{-15}

6

$$(M-1) = (N-1) =$$

24	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
25	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
26	-152.3858969445621	-152.3858969445623	10^{-15}
27	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
28	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
29	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
30	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
31	-85.89799941784440	-85.89799941784410	10^{-15}
32	-85.89799941784374	-85.89799941784410	10^{-15}
33	-73.79599883568837	-73.79599883568822	10^{-15}
34	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
35	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
36	-19.41010189112606	-19.41010189112585	10^{-14}
ϵ	$1.91265\,10^{-11}$		

Уравнение Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - U(x,y,z))\psi = 0,$$

$\hbar$ – постоянная Планка,

μ – масса частицы,

$U = U(x,y,z)$ – потенциальная энергия.

Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2)\psi = 0$$

Условие нормировки

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$$

ω_0^2 – собственная частота

Аналитическое решение

Обозначения:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}, \qquad \xi = \frac{x}{x_0}, \quad \varphi(\xi) = \psi(x_0\xi)$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi = 0, \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\xi)|^2\, d\xi = \frac{1}{x_0}$$

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}, \qquad \lambda_n = 2n+1, \quad n = 0, 1, 2\ldots$$

Исходные переменные:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}, \qquad E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2\ldots$$

Дискретная модель

$$u_k = \varphi(k\,\Delta), \qquad \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} \approx \frac{u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}}{\Delta^2}.$$

$$\frac{u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}}{\Delta^2} + (\lambda - (k\Delta)^2)u_k = 0$$

Нормировка$\Rightarrow$

$$v_k = \begin{cases} u_k, & |k| \le N, \\ 0, & |k| > N, \end{cases}, \quad u_k \approx v_k$$

$$\frac{-2v_{(-N)} + v_{(-N+1)}}{\Delta^2} + (\lambda - (N\Delta)^2)v_{(-N)} = 0,$$

$$\frac{v_{k-1} - 2v_k + v_{k+1}}{\Delta^2} + (\lambda - (k\Delta)^2)v_k = 0, \qquad |k| < N - 1,$$

$$\frac{v_{(N-1)} - 2v_N}{\Delta^2} + (\lambda - (N\Delta)^2)v_N = 0.$$

При достаточно большом N ошибка дискретизации $\approx \Delta^2$

Матричный вид системы

$$Sv = \lambda v$$

$$s_{ij} = s_{ji} == \begin{cases} 0, & j > i+1, \\ -1/\Delta^2, & j = i+1, \\ 2/\Delta^2 + (j - N + 1)^2\Delta^2, & j = i, \end{cases}$$

$$\mathcal{M}(S) \leq \frac{3}{\Delta^2} + (N+1)^2\Delta^2.$$

$$|\lambda_n(S) - \lambda_n(S)^{[c]}| \leq 10.5\varepsilon_1 \mathcal{M}(S) \approx \varepsilon_1/\Delta^2$$

$$\begin{array}{lll} \Delta = 10^{-4} & \epsilon \approx 10^{-8}, & \delta_\Delta \approx 10^{-8}, \\ \Delta = 10^{-6} & \epsilon \approx 10^{-4}, & \delta_\Delta \approx 10^{-12}, \\ \Delta = 10^{-8} & \epsilon \approx 1, & \delta_\Delta \approx 10^{-16}, \end{array}$$

Сингулярные числа

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & & & 0 \\ & d_2 & b_3 & & & \\ & & d_3 & b_4 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & d_{N_0-1} & b_{N_0} \\ 0 & & & & & d_{N_0} \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ D^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{ll} \lambda_1(\mathcal{D}) = -\sigma_{N_0}(D), & \lambda_{N_0+1}(\mathcal{D}) = \sigma_1(D), \\ \lambda_2(\mathcal{D}) = -\sigma_{N_0-1}(D), & \lambda_{N_0+2}(\mathcal{D}) = \sigma_2(D), \\ \ldots & \\ \lambda_{N_0}(\mathcal{D}) = -\sigma_1(D), & \lambda_{2N_0}(\mathcal{D}) = \sigma_{N_0}(D) \end{array}$$

$$\Pi \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} = \Pi \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N_0} \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ \vdots \\ u_{N_0} \\ v_{N_0} \end{pmatrix},$$

$$\Pi \mathcal{D} \Pi^* = S = \begin{pmatrix} 0 & d_1 & & & & 0 \\ d_1 & 0 & b_2 & & & \\ & b_2 & 0 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{N_0} & 0 & d_{N_0} \\ 0 & & & & d_{N_0} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} &\sigma_1(D) = \lambda_{N_0+1}(S), \\ &\sigma_2(D) = \lambda_{N_0+2}(S), \\ &\dots \\ &\sigma_{N_0}(D) = \lambda_{2N_0}(S). \end{aligned}$$

$d_i = 1$, $b_i = 2$

M	σ_1	σ_M	$\mu(D_M)$	ϵ_μ
6	$2.34619\,10^{-2}$	2.91846	$1.24392\,10^{2}$	$7.23906\,10^{-13}$
12	$3.66211\,10^{-4}$	2.97841	$8.13304\,10^{3}$	$4.69590\,10^{-11}$
18	$5.72205\,10^{-6}$	2.99022	$5.22579\,10^{5}$	$3.01693\,10^{-9}$
24	$8.94070\,10^{-8}$	2.99445	$3.34923\,10^{7}$	$1.93356\,10^{-7}$
30	$1.39699\,10^{-9}$	2.99643	$2.14493\,10^{9}$	$1.23832\,10^{-5}$
36	$2.18336\,10^{-11}$	2.99750	$1.37324\,10^{11}$	$7.93427\,10^{-4}$

Кососимметрические матрицы

$$A^* = -A$$

$$a_{ii} = -a_{ii} = 0$$

Упрощение

$$PAP^* = B = \begin{pmatrix} 0 & b_2 & & 0 \\ -b_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & -b_M & 0 \end{pmatrix}$$

$$Bw = BPv = PAP^*Pv = \lambda Pv = \lambda w$$

Пусть $\lambda = a + ib$

$$\lambda(x, x) = (\lambda x, x) = (Ax, x) = (x, A^* x) = (x, -Ax) = (x, -\lambda x) = -\bar{\lambda}(x, x)$$

$$\Rightarrow \quad Re\, \lambda(A) = 0$$

$$\lambda(A) = \pm i|\lambda|$$

Сведение к симметрическим матрицам: $B(u+iv) = i\mu(u+iv)$

$$b_2(u_2 + iv_2) = i\mu(u_1 + iv_1)$$

$$-b_2(u_1 + iv_1) + b_3(u_3 + iv_3) = i\mu(u_2 + iv_2)$$

$$-b_k(u_{k-1} + iv_{k-1}) + b_{k+1}(u_{k+1} + iv_{k+1}) = i\mu(u_k + iv_k)$$

$$-b_n(u_{n-1} + iv_{n-1}) = i\mu(u_n + iv_n)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & b_2 & & 0 \\ -b_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & -b_M & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & b_2 & & 0 \\ -b_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & -b_M & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$$

$$Bv = \mu u, \qquad -Bu = B^* u = \mu v$$

$$Bv = \mu u, \qquad -Bu = B^* u = \mu v$$

$$\mathcal{B}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^* & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}^*$$