特征值下界及高效数值算法的若干研究

岳美玲

摘　要

特征值问题是科学与工程计算中的一类重要问题, 在结构力学和电子结构计算等多方面有着广泛应用, 对其进行研究具有重要的理论意义和实用价值. 本文主要研究特征值问题的可计算误差估计, 特征值下界估计和两个实际应用中的特征值问题的高效数值求解方法.

特征值问题的可计算误差估计在自适应方法以及模型误差检验等方面有着重要应用. 本文基于互补能量法, 首先利用第二个特征值的下界给出第一个特征函数逼近的确保上界的可计算误差估计, 然后给出特征函数在一般网格上协调有限元逼近的渐近准确的可计算误差估计. 最后, 利用已得到的特征函数的可计算误差估计和 Rayleigh 商展开式, 得到第一个特征值的确切下界和一般特征值的渐近下界估计.

特征值问题的高效数值求解方法一直是特征值问题的一个重要研究课题. 本文的另外两项工作研究了实际应用中的两个特征值问题的高效数值求解方法. Bose-Einstein 凝聚 (BEC) 是一种重要的物质状态. 本文研究的第一个应用是求解 BEC 基态解. 我们将描述 BEC 的非线性 Gross-Pitaevskii 方程 (GPE) 看作复合空间中的非线性问题, 然后利用牛顿迭代法和边值问题的多重网格法构造了一种求解 BEC 基态解的多重网格方法. 该方法中, 在各层细网格空间上只需要求解一个线性化边值问题, 大大提高求解效率. 通过理论证明得到该方法具有最优收敛阶和线性复杂度. 光子晶体是一种重要的人工合成材料, 因其光子带隙特性而具有广泛应用. 本文研究的第二个应用是求解光子晶体的能带结构. 基于特征值问题的多重校正方法, 给出一种求解光子晶体能带结构的自适应有限元方法. 该方法的主要思想是, 当多重校正过程中边值问题的有限元离散误差大于边值问题近似特征值问题的非线性误差时, 把边值问题的后验误差估计作为特征值问题的后验误差估计子进行自适应加密, 并在加密网格上求解边值问题来降低其离散误差, 从而减少特征值问题的求解次数, 提高求解效率. 最后, 给出该自适应算法的收敛性分析和网格复杂度分析.

关键词： 特征值问题, 有限元方法, 多重网格方法, 多重校正方法, 自适应有限元方法, 可计算误差估计, 特征值上下界, BEC 基态解, 光子晶体能带结构