

國立中央大學

數學研究所

碩士論文

Helmholtz 方程與 Wavelet 迭代法

研究生：邱淑惠

指導教授：單維彰

中華民國九十一年六月二十日



國立中央大學圖書館 碩博士論文授權書

(91年5月最新修正版)

本授權書所授權之論文全文與電子檔，為本人於國立中央大學，撰寫之碩/博士學位論文。(以下請擇一勾選)

() **同意** (立即開放)

() **同意** (一年後開放)，原因是：_____

() **同意** (二年後開放)，原因是：_____

() **不同意**，原因是：_____

以非專屬、無償授權國立中央大學圖書館與國家圖書館，基於推動讀者間「資源共享、互惠合作」之理念，於回饋社會與學術研究之目的，得不限地域、時間與次數，以紙本、光碟、網路或其它各種方法收錄、重製、與發行，或再授權他人以各種方法重製與利用。以提供讀者基於個人非營利性質之線上檢索、閱覽、下載或列印。

研究生簽名： 邱淑惠

論文名稱： Helmholtz 方程與 Wavelet 迭代法

指導教授姓名： 單維彰 博士

系所： 數學研究 所 博士 碩士班

學號： 88221006

日期：民國 91 年 6 月 20 日

備註：

1. 本授權書請填寫並親筆簽名後，裝訂於各紙本論文封面後之次頁（全文電子檔內之授權書簽名，可用電腦打字代替）。
2. 請加印一份單張之授權書，填寫並親筆簽名後，於辦理離校時交圖書館（以統一代轉寄給國家圖書館）。
3. 讀者基於個人非營利性質之線上檢索、閱覽、下載或列印上列論文，應依著作權法相關規定辦理。

論文摘要

第一章我們簡介本論文的動機。

在第二章中利用傳統的有限元素法，以分片一階基底函數將 Helmholtz 方程轉變為線性聯立方程式 $Au = b$ ，然後討論其條件數與其網格尺度的關係。並且藉由推導剛度矩陣與質量矩陣的特徵值和特徵向量，解釋矩陣條件數的增長狀況。同時我們也發現，剛度矩陣與質量矩陣對應相同特徵向量的特徵值 $(\lambda_k, \tilde{\lambda}_k)$ 有下面的關係：

$$h\lambda_k + \frac{6}{h}\tilde{\lambda}_k = 6$$

最後討論隨著網格尺度增加，數值解逼近真解前的誤差震盪現象。

第三章我們先簡略介紹 Daubechies 凌波函數，造出提昇後的凌波函數與其 DWT 分解矩陣，然後藉由特徵值討論矩陣 A 的特性。依照矩陣特性利用區塊 Gauss-Seidel 法、傳統的多重網格 (Multigrid) 法、共軛梯度 (Conjugate Gradient) 法以及區塊 Gauss-Seidel 和共軛梯度分別配合 Multigrid 法等多種方法進行數值迭代實驗。其中，除了傳統 Multigrid 法以外，在其他迭代法配合 Multigrid 法中，我們使用了凌波轉換的方式降層與還原。我們發現，普通的 Gauss-Seidel 法與 Jacobi 法並不一定導致數值收斂。而區塊 Gauss-Seidel 法在某些限制條件下，迭代的數值收斂情形是良好的，而此限制條件並不影響表現 Helmholtz 方程的真解。但是若同時運用區塊 Gauss-Seidel 法和 Multigrid 法時，會發現 Multigrid 法是徒勞無功的。而共軛梯度法的數值收斂情形在低維度時表現不錯，高維度時的收斂情形受到計算誤差影響，收斂緩慢。若將共軛梯度法同時配合 Multigrid 法，在高維度則有不錯的改善。

誌謝

感謝指導老師單維彰教授給予論文上的教導，他是一位興趣廣泛而又忙碌的老師，使我從他的身上學到了很多東西。感謝口試委員黃文良教授及吳維漢教授在百忙之中抽空審閱本文，並提出許多寶貴的意見，使得本文更臻完美。還有教育學程的張佩芬老師，如果不是她那近誇張式的讚美，我不能重拾自己的自信。

能在美麗的中大校園唸書是一件很棒的事。特別感謝從大學時期直到研究所的同窗—宜軒和中興，他們陪我走過初到陌生環境時的日子，不論是在課業上或是生活上都彼此相互扶持，尤其宜軒又身負室友之責，承擔了我的諸多不順遂。其次是一起工作與合作的學妹佳萍，她是我見過課業與工作最繁重卻又能做到最好的人，透過她我能看見自己不足之處，和她合作是一次相當愉快的經驗。還有曾經在論文和電腦上給過我幫助的同學曾譯醇和紀良育。謝謝每一位認識我和我認識的人，因為他們豐富了我研究所的生活。

最後感謝雨利，陪我渡過許多快樂和沮喪的日子，並且適時地給我許多幫助。還有一直在背後默默支持我的雙親，他們像一般父母一樣給我厚愛與期望，卻從不干涉我的任何決定。

目錄

論文摘要	I
1 動機	1
2 一維 Helmholtz 方程	2
2.1 Galerkin 方法	2
2.2 條件數	8
2.3 剛度矩陣與質量矩陣的特徵性質	11
2.4 應用特徵性質處理 Helmholtz 方程的矩陣系統	16
2.5 條件數的收斂	18
2.6 誤差估計	21
2.7 有限元解的震盪現象	21
3 Helmholtz 方程的數值迭代解法	30
3.1 提昇自格函數與凌波函數	30
3.2 矩陣分解	34
3.3 矩陣特徵性質	36
3.4 區塊 Gauss-Seidel 迭代	39
3.5 傳統多重網格法 (Multigrid Method)	43
3.6 區塊 Multigrid 方法	45
3.7 共軛梯度法 (Conjugate Gradient Method)	49
3.8 C.G. Multigrid 法	52

4 結論	55
參考文獻	57

第 1 章 動機

在曾譯醇的論文 [4] 中，是以提昇以後的自格函數為基底，利用 Galerkin 方法來處理一維 Helmholtz 方程 $u'' + k^2u = -f$ 的剛度矩陣與質量矩陣。然後利用凌波轉換處理影像分解與合成的方法，造出一組分解矩陣 \mathcal{W} ，將剛度矩陣與質量矩陣降數層後，可獲得降低矩陣條件數與計算量的好性質。但是為了確保 Helmholtz 方程解的唯一性和存在，通常將矩陣的最後兩列換上確保唯一解的離散條件，造成轉換上的負擔。隨著轉換次數的增加，不僅條件數會倍增，計算量也增加了數倍。

為了得到足夠近似的解，當 k 值愈大，我們需要的矩陣維度 N 也就愈大。在論文 [4] 中，隨著凌波轉換的一層層分解雖可降低條件數，但是在計算上依然使用直接反矩陣運算。如此一來，在反矩陣運算的高斯消去法過程中，可能將原來稀疏矩陣填滿，造成空間上的負擔。

我們發現，若選用三角帽函數 (hat function) 為基底函數，所造出來的剛度矩陣與質量矩陣類似於以提昇後的自格函數為基底所造出的矩陣。因此，我們就直接以三角帽函數 (hat function) 為基底，希望在處理 Helmholtz 方程上，仍有降低矩陣條件數與計算量的性質。同時我們也使用不同的迭代法求解，避免直接運算大維度矩陣時在計算量與空間上的負擔。

第 2 章 一維 Helmholtz 方程

這一章我們利用傳統的有限元素法，以分片一階基底函數將 Helmholtz 方程轉變為線性聯立方程式 $Au = b$ ，然後討論其條件數與其網格尺度的關係。並且藉由推導剛度矩陣與質量矩陣的特徵值和特徵向量，解釋矩陣條件數的增長狀況。最後討論隨著網格尺度增加，數值解逼近真解前的誤差震盪現象。

2.1 Galerkin 方法

考慮一維的 Helmholtz 方程，選取週期化的邊界條件，利用傳統的 Galerkin 方法，將微分方程化為弱解型式，轉變為線性聯立方程式。

考慮一維的 Helmholtz 方程，給定 $\Omega = (0, 1)$

$$u'' + k^2 u(x) = -f(x), \quad x \in \Omega \quad (2.1)$$

$u(x)$ 是 1 週期函數

我們將一維的區間 $\bar{\Omega} = [0, 1]$ 用 $N + 1$ 個點等分成 N 份，

$$X_h = \{x_j = \frac{j}{N} \mid j = 0, 1, \dots, N\} \subset [0, 1]$$

每一等份的寬度 $h = \frac{1}{N}$ ， x_j 稱為節點。令基底函數 $\phi_i \in H^1(\Omega)$ ， $i = 0, 1, \dots, N$ 是在 $[0, 1]$ 區間內階數小於等於 p 的多項式，則 $S_h^p(\Omega) = \text{span}\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\} \subset H^1(\Omega)$ 稱為有限元空間。令

$$V_h^p := \{v \in S_h^p(\Omega) \mid v(x) \text{ 符合週期化的邊界條件}\}$$

定義在 V_h^p 上的函數稱為網格函數 (mesh function)。而此時，因為週期性的關係， ϕ_0 與 ϕ_N 兩個基底函數首尾相連，我們視為同一個函數，因此基底函數為 $\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N-1}\}$ 。

如果考慮網格空間 V_h^p ，則 (2.1) 可以和以下敘述等價：求 $u \in V_h^p$ 使得

$$\begin{aligned} B(u, v) &= \int_0^1 (u'(x)\bar{v}'(x) - k^2 u(x)\bar{v}(x)) dx = F(v), \\ F(v) &= \int_0^1 f(x)\bar{v}(x) dx, \quad \forall v \in V_h^p, v(0) = v(1) \end{aligned} \quad (2.2)$$

現在，我們以 $V_h^1 = V_h$ 一階網格空間為基底空間，定義其基底函數

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \\ 0 & \text{if } i \neq j \end{cases} \quad i, j = 0, \dots, N-1$$

對於 $u_h \in V_h$ 即有 u_i ，使得

$$u_h = \sum u_i \phi_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (2.3)$$

則我們可以把 (2.2) 改寫成：求 $u_h \in V_h$ 使得

$$\int_0^1 (u_h' \bar{v}_h' - k^2 u_h \bar{v}_h) dx = \int_0^1 f \bar{v}_h dx, \quad \forall v_h \in V_h$$

因為 $\dim V_h = N$ ，所以上式又等價於

$$\int_0^1 (u_h' \bar{\phi}_i' - k^2 u_h \bar{\phi}_i) dx = \int_0^1 f \bar{\phi}_i dx, \quad \forall i = 0, 1, \dots, N-1$$

現在將 (2.3) 代入可得

$$\sum_{i=0}^{N-1} u_i \left(\int_0^1 \phi_i' \phi_j' dx - k^2 \int_0^1 \phi_i \phi_j dx \right) = \int_0^1 f \phi_j dx, \quad \forall j = 0, 1, \dots, N-1$$

剛度矩陣 (stiffness matrix) S 的元素

$$S_{ij} = \int_0^1 \phi_i' \phi_j' dx, \quad 0 \leq i, j \leq N-1$$

令質量矩陣 (mass matrix) M 的元素

$$M_{ij} = \int_0^1 \phi_i \phi_j dx, \quad 0 \leq i, j \leq N-1$$

負載向量 (load vector) b 的元素

$$b_j = - \int_0^1 f \phi_j dx, \quad 0 \leq j \leq N-1$$

即可將方程式轉變為矩陣系統

$$\begin{aligned} A &= (-S + k^2 M) \\ Au &= b \end{aligned} \tag{2.4}$$

其中 u 為 u_i 組成的未知向量, A 是一個 $N \times N$ 的矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 & T(k) \\ T(k) & 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & & T(k) & 2S(k) & T(k) & \\ 0 & & & & \ddots & \\ T(k) & 0 & \cdots & 0 & T(k) & 2S(k) \end{pmatrix}$$

其中, $S(k) = -\frac{1}{h} + \frac{1}{3}hk^2$; $T(k) = \frac{1}{h} + \frac{1}{6}hk^2$ 。矩陣 A 的元素 $A_{1,N}$ 與 $A_{N,1}$ 是因為基底週期化所造成的。

我們選取

$$(P1) \quad u''(x) + k^2 u(x) = 0$$

$u(x)$ 是1週期函數, $k = 2n\pi$, $n \in \mathbb{N}$, 則方程式的通解為

$$u(x) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx), \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}$$

利用前述方式將微分方程化為矩陣型式，右端項的負載向量為

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

此時，經過矩陣的運算後，僅只能解出 $u_h = 0$ 這個無聊解 (trivial solution)，我們希望加一些限制條件，使得非無聊的解能顯現出來。

選取

$$(P2) \quad u''(x) + k^2 u(x) = 0, \quad u(0) = u(1) = 1$$

$u(x)$ 是 1 週期函數， $k = 2n\pi$ ， $n \in \mathbb{N}$ ，則方程式的通解為

$$u(x) = \cos(kx) + b \sin(kx), \quad b \in \mathbb{C}$$

同樣地，以一階分片多項式為基底函數，可造出如 (2.4) 的矩陣系統。但是因為在 (P2) 中附加了週期性的邊界條件 $u(0) = 1$ ，也就是使得

$$u_h = 1 \cdot \phi_0 + \sum u_i \phi_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1$$

此時，未知數 u_i 的個數減少為 $N-1$ 個，因此我們無需 (P1) 問題中的 $N \times N$ 矩陣，而將前述 (2.4) 矩陣系統中的 A 矩陣去掉第一行與第一列，並且將刪去的數值補回右端的負載向量中，以保持原來的線性關係。

而 (P2) 方程依然轉變為矩陣系統

$$A_2 u = b$$

其中, A_2 為 $(N-1) \times (N-1)$ 的矩陣

$$A_2 = \begin{pmatrix} 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ T(k) & 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & & T(k) & 2S(k) & T(k) & \\ 0 & & & & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & T(k) & 2S(k) \end{pmatrix}$$

而右端項的負載向量則變為

$$b = \begin{pmatrix} \frac{1}{h} + \frac{1}{6}hk^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{h} + \frac{1}{6}hk^2 \end{pmatrix}$$

經過矩陣運算後, 我們可以解出近似真解 $\cos(kx)$ 的有限元解。

若選取

$$(P3) \quad u''(x) + k^2u(x) = 0, \quad u(0) = 1, u'(0) = 1$$

$u(x)$ 是1週期函數, 其中 $k = 2n\pi$, $n \in \mathbb{N}$, 則方程式的解為

$$u(x) = \cos(kx) + \frac{1}{k} \sin(kx)$$

仿照前述步驟, 並且因為

$$u'(0) \approx \frac{u(h) - u(-h)}{2h}$$

所以

$$\begin{aligned} 1 &= u'(0) \approx \frac{u(h) - u(-h)}{2h} \\ &= \frac{u_1 - u_{N-1}}{2h} \\ \implies u_{N-1} &= u_1 - 2h \end{aligned} \tag{2.5}$$

未知數 u_i 的個數減少為 $N-2$ 個, 得到矩陣系統

$$A_3 u = b$$

此時, A_3 為 $(N-2) \times (N-2)$ 的矩陣

$$A_3 = \begin{pmatrix} 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ T(k) & 2S(k) & T(k) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & & T(k) & 2S(k) & T(k) & \\ 0 & & & & \ddots & \\ T(k) & 0 & \cdots & 0 & T(k) & 2S(k) \end{pmatrix}$$

右端項的負載向量則變為

$$b = \begin{pmatrix} \frac{1}{h} + \frac{1}{6}hk^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (\frac{1}{h} + \frac{1}{6}hk^2)(-2h) \end{pmatrix}$$

經過矩陣運算後, 我們可以解出近似真解 $\cos(kx) + \frac{1}{k} \sin(kx)$ 的有限元解。

2.2 條件數

我們選擇 2-norm 的條件數 (Condition Number) 定義:

$$\text{矩陣 } A \text{ 的條件數} = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$$

有時爲了計算上的快速方便, 我們使用下列定理來計算條件數: 假設 A 爲對稱正定矩陣, 令

$$|\lambda|_{\max} = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ 是矩陣 } A \text{ 的特徵值}\}$$

與

$$|\lambda|_{\min} = \min\{|\lambda| : \lambda \text{ 是矩陣 } A \text{ 的特徵值}\}$$

則矩陣 A 的條件數爲

$$\frac{|\lambda|_{\max}}{|\lambda|_{\min}} \quad (2.6)$$

在 (P2) 問題中, 我們計算矩陣 A_2 的條件數, 實驗結果如下:

n		1	2	4	8	16	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	5.17e+05	3.23e+04	2.03e+03	1.30e+02	5.37e+01	2.32e+02
7	$\frac{1}{128}$	8.27e+06	5.17e+05	3.24e+04	2.03e+03	4.39e+02	3.32e+02
8	$\frac{1}{256}$	1.32e+08	8.27e+06	5.17e+05	3.24e+04	2.03e+03	4.39e+02
9	$\frac{1}{512}$	2.12e+09	1.32e+08	8.27e+06	5.17e+05	3.24e+04	2.03e+03
10	$\frac{1}{1024}$	3.39e+10	2.12e+09	1.32e+08	8.27e+06	5.17e+05	3.24e+04
11	$\frac{1}{2048}$	5.42e+11	3.39e+10	2.12e+09	1.32e+08	8.27e+06	5.17e+05
12	$\frac{1}{4096}$	8.67e+12	5.42e+11	3.39e+10	2.12e+09	1.32e+08	8.27e+06

爲了清楚顯示上表數據的變化情形, 我們將每個條件數除以 N^4 , 結果如下:

n		1	2	4	8	16	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	0.0308	0.0019	1.21e-04	7.74e-06	3.20e-06	1.38e-05
7	$\frac{1}{128}$	0.0308	0.0019	1.21e-04	7.57e-06	1.64e-06	1.24e-06
8	$\frac{1}{256}$	0.0308	0.0019	1.20e-04	7.53e-06	4.73e-07	1.02e-07
9	$\frac{1}{512}$	0.0308	0.0019	1.20e-04	7.52e-06	4.71e-07	2.98e-08
10	$\frac{1}{1024}$	0.0308	0.0019	1.20e-04	7.52e-06	4.70e-07	2.95e-08
11	$\frac{1}{2048}$	0.0308	0.0019	1.20e-04	7.52e-06	4.70e-07	2.94e-08
12	$\frac{1}{4096}$	0.0308	0.0019	1.20e-04	7.52e-06	4.70e-07	2.94e-08

由以上實驗顯示，對不同 k 值的 Helmholtz 方程，當網格愈切愈小時，其矩陣條件數以 N^4 的速度成長。

同樣地，在 (P3) 問題中，計算矩陣 A_3 的條件數：

n		1	2	4	8	16	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	6.28e+03	1.53e+03	3.54e+02	1.08e+02	9.91e+01	3.64e+02
7	$\frac{1}{128}$	5.16e+04	1.27e+04	3.00e+03	6.22e+02	5.52e+02	3.64e+03
8	$\frac{1}{256}$	4.19e+05	1.04e+05	2.51e+04	5.55e+03	9.93e+02	1.05e+04
9	$\frac{1}{512}$	3.37e+06	8.40e+05	2.06e+05	4.81e+04	9.54e+03	1.66e+03
10	$\frac{1}{1024}$	2.71e+07	6.76e+06	1.67e+06	4.03e+05	8.83e+04	1.48e+04

將條件數除以 N^3 ，得到以下結果：

n		1	2	4	8	16	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	0.024	0.0058	0.0014	4.12e-04	3.78e-04	1.40e-03
7	$\frac{1}{128}$	0.025	0.0061	0.0014	2.97e-04	2.63e-04	1.70e-03
8	$\frac{1}{256}$	0.025	0.0062	0.0015	3.31e-04	5.92e-05	6.26e-04
9	$\frac{1}{512}$	0.025	0.0063	0.0015	3.58e-04	7.11e-05	1.24e-05
10	$\frac{1}{1024}$	0.025	0.0063	0.0016	3.75e-04	8.22e-05	1.38e-05

顯示對不同的 k 值, 當網格愈切愈小時, 其矩陣條件數以 N^3 的速度成長, 但是 A_3 為非對稱性矩陣。

上述兩個實驗的矩陣系統為

$$A = (-S + k^2M)$$

其中 k 值皆為 $2n\pi$, $n \in \mathcal{N}$ 的形式。我們試著將矩陣 A_2 中的 k 值代入隨意的整數, 並且計算其條件數, 得到下表:

k		1	2	3	4	5	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	1.85e+03	2.08e+03	2.38e+03	2.79e+03	3.36e+03	2.18e+03
7	$\frac{1}{128}$	7.39e+03	8.33e+03	9.54e+03	1.12e+04	1.35e+04	8.75e+03
8	$\frac{1}{256}$	2.96e+04	3.33e+04	3.82e+04	4.47e+04	5.38e+04	3.50e+04
9	$\frac{1}{512}$	1.18e+05	1.33e+05	1.53e+05	1.79e+05	2.15e+05	1.40e+05
10	$\frac{1}{1024}$	4.73e+05	5.33e+05	6.11e+05	7.15e+05	8.61e+05	5.61e+05

將條件數除以 N^2 , 得到下表:

k		1	2	3	4	5	32
l	$\frac{1}{N}$						
6	$\frac{1}{64}$	0.4508	0.5080	0.5820	0.6811	0.8208	0.5328
7	$\frac{1}{128}$	0.4509	0.5082	0.5822	0.6814	0.8213	0.5344
8	$\frac{1}{256}$	0.4510	0.5083	0.5823	0.6815	0.8214	0.5347
9	$\frac{1}{512}$	0.4510	0.5083	0.5823	0.6815	0.8214	0.5348
10	$\frac{1}{1024}$	0.4510	0.5083	0.5823	0.6815	0.8214	0.5349

由此可看出，在 (P2) 情況下的矩陣 A_2 ，當 $k = 2n\pi$ ， $n \in \mathcal{N}$ 的形式時，矩陣條件數以 N^4 的速度成長；當 $k \neq 2n\pi$ 的形式時，矩陣條件數以 N^2 的速度成長。爲什麼不同形式的 k 值會造成這樣的結果呢？我們將在下面幾節中進一步討論。

2.3 剛度矩陣與質量矩陣的特徵性質

爲更進一步探討 (P2) 情況下的矩陣 A_2 的性質，先分別來看剛度矩陣及質量矩陣的特徵值與特徵向量。我們發現剛度矩陣與質量矩陣擁有相同的特徵向量，而剛度矩陣與質量矩陣對應同一特徵向量的特徵值有一定的關係。

假設 S_N 爲 $N \times N$ 的剛度矩陣

$$S_N = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & & & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

先求 $h \cdot S_N$ 之特徵多項式

$$\det \begin{pmatrix} \lambda - 2 & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & \lambda - 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \ddots & & \\ \vdots & & 0 & 1 & \lambda - 2 & 1 \\ 0 & & \cdots & 0 & 1 & \lambda - 2 \end{pmatrix}$$

令 $x = \lambda - 2$, $B_N(x)$ 是 $N \times N$ 矩陣的特徵多項式

$$B_N(x) = \det \begin{pmatrix} x & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \ddots & & \\ \vdots & & 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & & \cdots & 0 & 1 & x \end{pmatrix}$$

上式化簡後得到

$$B_N(x) = xB_{N-1}(x) - B_{N-2}(x), \quad B_0(x) = 1, \quad B_1(x) = x$$

由三角公式

$$\begin{aligned} \sin(n\theta) &= \sin((n+1)\theta - \theta) \\ &= \sin((n+1)\theta) \cos \theta - \cos((n+1)\theta) \sin \theta \end{aligned}$$

得到

$$\cos((n+1)\theta) \sin \theta = \sin((n+1)\theta) \cos \theta - \sin(n\theta)$$

因此

$$\begin{aligned}
 \sin((n+2)\theta) &= \sin((n+1)\theta + \theta) \\
 &= \sin((n+1)\theta) \cos \theta + \cos((n+1)\theta) \sin \theta \\
 &= 2 \cos \theta \sin((n+1)\theta) - \sin(n\theta)
 \end{aligned}$$

令 $B_N(x) = \sin((N+1)\theta) \cdot g(x)$, 且 $x = 2 \cos \theta$, 則 $\theta = \cos^{-1} \frac{x}{2}$

$$\begin{aligned}
 B_0(x) &= 1, & B_0(x) &= \sin \theta \cdot g(x) = 1 \\
 \implies g(x) &= \frac{1}{\sin \theta} & \theta &\in (0, \pi) \\
 &= \frac{1}{\sin(\cos^{-1} \frac{x}{2})}
 \end{aligned}$$

因此, 特徵多項式

$$B_N(x) = \frac{\sin((N+1) \cos^{-1} \frac{x}{2})}{\sin(\cos^{-1} \frac{x}{2})}$$

接下來, 我們想要計算其特徵值。當 $N \geq 1$ 時, $B_N(x) = 0$, 也就是說

$$\begin{aligned}
 \sin((N+1) \cos^{-1}(\frac{x}{2})) &= 0 \\
 \implies (N+1) \cos^{-1} \frac{x}{2} &= k\pi, \quad k \in \mathbb{Z} \\
 \implies x &= 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}, \quad k = N, N-1, \dots, 1
 \end{aligned}$$

因此, $h \cdot S_N$ 的特徵值是

$$\begin{aligned}
 \lambda_k &= 2 + x \\
 &= 2 + 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}, & k &= N, N-1, \dots, 1 \\
 &= 2 - 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}, & k &= 1, 2, \dots, N \\
 &= 2(1 - \cos \frac{k\pi}{N+1}) \\
 &= 4 \sin^2(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}), & k &= 1, \dots, N
 \end{aligned}$$

然後我們令 $w_{k,j} = (w_j)$ 為剛度矩陣對應特徵值 λ_k 之特徵向量, 則

$$w_{j-1} + (\lambda_k - 2)w_j + w_{j+1} = 0$$

這就是標準的差分等式 (difference equation) 型式, 用標準的解法: 若我們令

$w_j = \alpha x^j$, 上式就可簡化為

$$x^2 + (\lambda_k - 2)x + 1 = 0$$

$$\begin{aligned} \implies x &= \frac{(2 - \lambda) \pm \sqrt{(\lambda - 2)^2 - 4}}{2} \\ &= 1 - 2 \sin^2\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right) \pm \frac{\sqrt{16 \sin^4\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right) - 16 \sin^2\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right)}}{2} \\ &= 1 - 2 \cdot \frac{1 - \cos\left(\frac{k}{N+1} \cdot \pi\right)}{2} \pm 2 \sqrt{\sin^2\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right) [\sin^2\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right) - 1]} \\ &= \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \pm i \sin\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \\ &= e^{\frac{k\pi}{N+1}i} \text{ or } e^{-\frac{k\pi}{N+1}i} \end{aligned}$$

得到

$$w_j = \alpha(e^{\frac{k\pi}{N+1}i})^j + \beta(e^{-\frac{k\pi}{N+1}i})^j$$

又因 $w_0 = 0$, $w_0 = \alpha + \beta = 0$, 所以 $-\alpha = \beta$ 。因此

$$w_j = \alpha(2i \sin\left(\frac{k\pi j}{N+1}\right))$$

α 可為非0的任意常數, 所以我們可以取 $\alpha = -\frac{i}{2}$, 得到

$$w_j = \sin\left(\frac{k\pi j}{N+1}\right), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

總結而言, $N \times N$ 的剛度矩陣 S_N 的特徵值為

$$\lambda_k(S) = \frac{4}{h} \sin^2\left(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right), \quad k = 1, 2, \dots, N$$

而 λ_k 所對應的特徵向量為

$$w_{k,j}(S) = \sin\left(\frac{k\pi j}{N+1}\right), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

再來, 我們看看質量矩陣。同樣地, M_N 為 $N \times N$ 的質量矩陣

$$M_N = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & 0 & 1 & 4 & 1 & \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

同樣先求 $\frac{6}{h} \cdot M_N$ 之特徵多項式

$$\det \begin{pmatrix} 4 - \tilde{\lambda} & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & 4 - \tilde{\lambda} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \\ \vdots & 0 & 1 & 4 - \tilde{\lambda} & 1 & \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 4 - \tilde{\lambda} \end{pmatrix}$$

令 $x = 4 - \tilde{\lambda}$, 得到的特徵多項式與前面剛度矩陣的情況完全相同, 因此可以得

到 $\frac{6}{h}M_N$ 的特徵值

$$\begin{aligned}
 \tilde{\lambda}_k &= 4 - x \\
 &= 4 - 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}, \quad k = N, N-1, \dots, 1 \\
 &= 4 + 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}, \quad k = 1, 2, \dots, N \\
 &= 4 + 2(1 - 2 \sin^2(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2})) \\
 &= 6 - 4 \sin^2(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2}), \quad k = 1, \dots, N
 \end{aligned}$$

和剛度矩陣一樣的方法，我們也可以計算出：質量矩陣的特徵向量和剛度矩陣的特徵向量是一樣的。

總結而言， $N \times N$ 的質量矩陣 M_N 的特徵值為

$$\tilde{\lambda}_k = \frac{h}{6} (6 - 4 \sin^2(\frac{k}{N+1} \cdot \frac{\pi}{2})), \quad k = 1, \dots, N$$

而 $\tilde{\lambda}_k$ 所對應的特徵向量和剛度矩陣的相同：

$$w_{k,j} = \sin(\frac{k\pi j}{N+1}), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

同時我們也發現，剛度矩陣與質量矩陣對應相同特徵向量的特徵值有下面的關係：

$$h\lambda_k + \frac{6}{h}\tilde{\lambda}_k = 6 \quad (2.7)$$

2.4 應用特徵性質處理 Helmholtz 方程的矩陣系統

在 Galerkin 方法中，我們將 Helmholtz 方程轉變為矩陣系統

$$\begin{aligned}
 A &= (-S + k^2 M) \\
 Au &= b
 \end{aligned} \quad (2.8)$$

在 (P2) 問題的狀況下，轉變為矩陣系統後因為去掉一行一列，因此矩陣 $A \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ 。根據前一節的推演，剛度矩陣的特徵值為

$$\lambda_\ell = \frac{4}{h} \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right), \quad \ell = 1, 2, \dots, N-1$$

質量矩陣的特徵值為

$$\tilde{\lambda}_\ell = \frac{h}{6} \left(6 - 4 \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right)\right), \quad \ell = 1, 2, \dots, N-1$$

現在我們知道剛度矩陣和質量矩陣具有相同的特徵向量，又發現

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_\ell}{\tilde{\lambda}_\ell} &= \frac{4}{h} \cdot \frac{6}{h} \cdot \left(\frac{\sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right)}{6 - 4 \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right)}\right) \\ &= \frac{6}{h^2} \cdot \left(\frac{2 - 2 \cos \frac{\ell\pi}{N}}{4 + 2 \cos \frac{\ell\pi}{N}}\right) \\ &= \frac{6}{h^2} \cdot \left(\frac{1 - \cos \frac{\ell\pi}{N}}{2 + \cos \frac{\ell\pi}{N}}\right), \quad \ell = 1, 2, \dots, N-1 \end{aligned}$$

一方面，應用 $\cos \theta$ 的泰勒展開式，得知

$$\cos \frac{\ell\pi}{N} = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\ell\pi}{N}\right)^2 + O\left(\frac{1}{N^4}\right)$$

所以

$$\frac{\lambda_\ell}{\tilde{\lambda}_\ell} = \frac{6}{h^2} \cdot \left(\frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\ell\pi}{N}\right)^2 - O\left(\frac{1}{N^4}\right)}{3 - \frac{1}{2} \left(\frac{\ell\pi}{N}\right)^2 + O\left(\frac{1}{N^4}\right)}\right)$$

也就是說，當 ℓ 遠小於 N 時

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_\ell}{\tilde{\lambda}_\ell} &= \frac{6}{h^2} \cdot \left(\left(\frac{\frac{1}{2} \left(\frac{\ell\pi}{N}\right)^2}{3}\right) + O(h^4)\right) \\ &= (\ell\pi)^2 + O(h^2) \end{aligned} \tag{2.9}$$

另一方面, 當 $k^2 = \frac{6}{h^2} \cdot \left(\frac{1-\cos\frac{\ell\pi}{N}}{2+\cos\frac{\ell\pi}{N}}\right)$ 且 $1 \leq \ell \leq N-1$ 是一個整數時, 矩陣 A 就會變成 singular。但是當 $k^2 = (\ell\pi)^2$ 而 w_ℓ 是剛度矩陣和質量矩陣共同的特徵向量時, 因為

$$\begin{aligned}\|Aw_\ell\| &= \|(-S + k^2M)w_\ell\| \\ &= O(h^2)\end{aligned}$$

就會使得矩陣 A 是接近 singular。不幸的很, 在我們的 Helmholtz 方程實驗問題中, k 值就是 π 的整數倍, 而使得 $-S + k^2M$ 接近 singular, 這是 Helmholtz 方程困難的來源。

由數值實驗也可以驗證上述情況。以 (P2) 問題為例, 我們分別計算剛度矩陣的特徵值 λ_ℓ 與質量矩陣的特徵值 $\tilde{\lambda}_\ell$, 並且確定 λ_ℓ 與 $\tilde{\lambda}_\ell$ 是對應相同的特徵向量, 然後令

$$v_\ell = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\lambda_\ell}{\tilde{\lambda}_\ell}}$$

接著計算 v_ℓ 的值, 得到表 2.1。觀察表 2.1 的計算結果, 可見 (2.9) 式的推論: 當 ℓ 遠小於 N 的時候, λ_ℓ 與 $\tilde{\lambda}_\ell$ 的比值幾乎是 $(\ell\pi)^2$ 。這也表明了, 在此情況下, 若 $k^2 = (\ell\pi)^2$, 則 $(-S + k^2M)$ 是接近 singular 的矩陣。

2.5 條件數的收斂

以 (P2) 情況下的矩陣 A 為實驗對象, 我們利用前兩節所得知的剛度矩陣與質量矩陣的特徵性質, 來解釋矩陣 A 條件數的成長速度。

假設 w_ℓ 是剛度矩陣和質量矩陣共同的特徵向量, 則

$$\begin{aligned}Aw_\ell &= (-S + k^2M)w_\ell \\ &= (-\lambda_\ell + k^2\tilde{\lambda}_\ell)w_\ell\end{aligned}$$

N	2^2 $\ell = 1..3$	2^3 $\ell = 1..7$	2^4 $\ell = 1..15$	2^5 $\ell = 1..31$	2^6 $\ell = 1..63$
v_ℓ	1.0259	1.0064	1.0016	1.0004	1.0001
	2.2053	2.0517	2.0129	2.0032	2.0008
	3.5837	3.1749	3.0435	3.0109	3.0027
		4.4106	4.1034	4.0257	4.0064
		5.7674	5.2024	5.0503	5.0126
		7.1675	6.3499	6.0871	6.0217
		8.3402	7.5543	7.1384	7.0345
			8.8213	8.2069	8.0515
			10.1512	9.2949	9.0734
			11.5348	10.4048	10.1007
			12.9462	11.5390	11.1341
			14.3349	12.6998	12.1742
			\vdots	\vdots	\vdots
			17.3913	35.1580	70.5064

表 2.1:

那麼矩陣 A 的特徵值就是 $\{-\lambda_\ell + k^2 \tilde{\lambda}_\ell | \ell = 1, \dots, N-1\}$ 。我們利用 (2.6) 來推導矩陣的條件數。假設 $\mu_\ell = -\lambda_\ell + k^2 \tilde{\lambda}_\ell$, 則

$$\begin{aligned}\mu_\ell &= -\frac{4}{h} \cdot \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right) + k^2 h \left(1 - \frac{2}{3} \cdot \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right)\right) \\ &\approx -\frac{4}{h} \cdot \left(\frac{\ell^2 \pi^2}{4N^2}\right) + k^2 h \left(1 - \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{\ell^2 \pi^2}{4N^2}\right)\right) \\ &= -\left(\frac{1}{N} + \frac{k^2}{6N^3}\right) \pi^2 \ell^2 + k^2 h, \quad \ell = 1, 2, \dots, N-1\end{aligned}$$

令

$$|\mu|_{\min} = \min\{|\mu_\ell| : \mu_\ell \text{ 是矩陣 } A \text{ 的特徵值}\}$$

$$|\mu|_{\max} = \max\{|\mu_\ell| : \mu_\ell \text{ 是矩陣 } A \text{ 的特徵值}\}$$

可見

$$|\mu|_{\min} = |\mu_1| = O(h) = O\left(\frac{1}{N}\right)$$

而且

$$|\mu|_{\max} = |\mu_{N-1}| = O(N) + O(h) = O(N)$$

但是如果 $k^2 = (\ell\pi)^2$ 時,

$$\begin{aligned}\mu_\ell &= -\lambda_\ell + k^2 \tilde{\lambda}_\ell \\ &= \tilde{\lambda}_\ell \cdot \left(\frac{-\lambda_\ell}{\tilde{\lambda}_\ell} + k^2\right) \\ &= \tilde{\lambda}_\ell \cdot \left(-(\ell\pi)^2 + O(h^2) + k^2\right) \\ &= \tilde{\lambda}_\ell \cdot O(h^2)\end{aligned}$$

所以此時

$$|\mu|_{\min} = O(h) \cdot O(h^2) = O\left(\frac{1}{N^3}\right)$$

而

$$|\mu|_{\max} = O(N)$$

也就是說, 當 $k = 2n\pi$ 時, 矩陣 A 的條件數是

$$\frac{|\mu_\ell|_{\max}}{|\mu_\ell|_{\min}} = \frac{O(N)}{O(\frac{1}{N^3})} = O(N^4)$$

若 $k \neq 2n\pi$ 時, 矩陣 A 的條件數是

$$\frac{|\mu_\ell|_{\max}}{|\mu_\ell|_{\min}} = \frac{O(N)}{O(\frac{1}{N})} = O(N^2)$$

驗證了之前在第 2 節所做的實驗: 對於不同的 k 值形式, 矩陣 A 條件數的成長狀況是不同的。

2.6 誤差估計

令 $\|\cdot\|_2$ 代表 $\Omega = [0, 1]$ 上的 L^2 -norm

$$\|u\|_2 = \left(\int_0^1 |u|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

以 (P2) 問題為實驗對象, 其數值解趨近 $u(x) = \cos(kx)$, $k = 2n\pi$, $n \in \mathcal{N}$, 而假設其有限元解為 $u_h(x)$ 。我們以 1024 個點值來描繪 $u_h(x)$ 和 $u(x)$, 然後以 1024 點的梯形數值積分法來估計誤差 $\|u_h - u\|_2$, 得表 2.2。為顯示表 2.2 誤差的收斂情形, 我們將誤差除以 h^2 , 得表 2.3。

顯示有限元解的 L^2 誤差是以 h^2 的速度收斂, 這個結果與所有同類型問題的數值表現相同。

2.7 有限元解的震盪現象

在表 2.3 的數據中, 我們發現誤差的 L^2 -norm 總是先經過一個暴增階段 (加底線處), 然後才以 $O(h^2)$ 的速度收斂。接下來, 我們試圖找出其原因。

表 2.4 顯示與表 2.3 相對應數據下的矩陣條件數 (除了 $n=7$ 和 $n=8$ 因為受限於篇幅而省略了)。為更清楚顯示表 2.4 條件數的成長狀況, 我們將條件數除以

n		1	2	3	4	5	6	7	8
	N	$\ u_h - u\ _2$							
2^2	4	0.164	0.399	0.794	0.804	0.794	0.776	0.798	0.802
2^3	8	0.051	0.226	1.570	1.341	0.726	0.750	0.756	0.757
	9	0.041	0.187	0.866	1.478	0.603	0.733	0.747	0.751
	10	0.034	0.158	0.592	2.116	0.947	0.713	0.737	0.745
	11	0.028	0.135	0.449	4.817	0.973	0.585	0.721	0.737
	12	0.024	0.117	0.362	10.159	1.069	0.830	0.708	0.727
	13	0.021	0.102	0.303	2.313	1.236	0.844	0.572	0.713
	14	0.018	0.090	0.260	1.275	1.526	0.876	0.805	0.709
	15	0.016	0.080	0.228	0.873	2.097	0.926	0.822	0.593
2^4	16	0.014	0.071	0.201	0.662	3.605	0.997	0.828	0.996
	17	0.012	0.064	0.180	0.532	16.602	1.100	0.840	1.030
	18	0.011	0.057	0.162	0.445	5.832	1.248	0.862	0.952
	19	0.010	0.052	0.147	0.382	2.413	1.472	0.896	0.889
2^5	32	0.004	0.019	0.057	0.126	0.256	0.604	3.831	1.805
2^6	64	8.76e-04	0.005	0.015	0.034	0.064	0.109	0.176	0.287
2^7	128	2.18e-04	0.001	0.004	0.009	0.016	0.028	0.044	0.065
2^8	256	5.26e-05	3.06e-04	9.45e-04	0.002	0.004	0.007	0.011	0.017
2^9	512	7.41e-06	6.31e-05	2.15e-04	5.12e-04	0.001	0.002	0.003	0.004

表 2.2:

n		1	2	3	4	5	6	7	8
N		$\ u_h - u\ _2 / h^2$							
2^2	4	2.62	6.37	12.71	12.9	12.7	12.42	12.8	12.8
2^3	8	3.28	14.43	<u>100.49</u>	85.8	46.5	48.01	48.4	48.5
	9	3.34	15.15	70.14	119.7	48.8	59.33	60.5	60.9
	10	3.38	15.79	59.15	211.6	94.7	71.32	73.7	74.5
	11	3.42	16.35	54.33	582.9	117.7	70.81	87.3	89.1
	12	3.45	16.83	52.14	<u>1462.9</u>	153.9	119.47	101.9	104.7
	13	3.47	17.25	51.23	390.8	208.8	142.68	96.7	120.6
	14	3.49	17.60	51.03	250.0	299.1	171.74	157.8	139.0
	15	3.50	17.91	51.19	196.4	471.8	208.26	185.0	133.5
2^4	16	3.51	18.17	51.56	169.3	922.8	255.31	212.0	254.8
	17	3.52	18.40	52.04	153.7	<u>4798.0</u>	317.79	242.7	297.7
	18	3.53	18.60	52.57	144.1	1889.6	404.37	279.3	308.5
	19	3.54	18.77	53.11	137.8	871.0	531.43	323.4	321.0
2^5	32	3.58	19.85	58.15	128.8	262.2	617.95	<u>3920.7</u>	<u>1847.3</u>
2^6	64	3.59	20.35	61.43	137.8	260.3	444.26	721.5	1174.8
2^7	128	3.59	20.46	62.37	141.5	269.5	458.10	719.3	1067.3
2^8	256	3.57	20.44	62.52	142.4	272.4	464.84	731.9	1085.8
2^9	512	3.45	20.10	62.01	141.8	272.2	465.58	734.6	1091.8

表 2.3:

n		2	3	4	5	6
	N			$\kappa(A)$		
2^2	4	9.91	3.16	2.58e	2.38	2.28
2^3	8	8.34	<u>23.11</u>	30.79	8.84	5.22
	9	13.28	12.93	23.17	27.67	7.35
	10	20.11	9.21	30.26	32.02	13.01
	11	29.27	7.60	68.96	22.92	74.32
	12	41.25	8.68	<u>151.08</u>	15.71	6804.7
	13	56.58	11.80	36.26	16.42	741.39
	14	75.84	15.71	21.18	20.68	89.13
	15	99.64	20.53	16.81	29.62	39.34
2^4	16	128.67	26.38	15.97	53.65	24.07
	17	163.64	33.41	15.82	<u>261.68</u>	17.19
	18	205.30	41.77	16.07	97.47	16.68
	19	254.47	51.62	16.96	48.35	20.64
	20	312.01	63.14	20.67	36.35	27.15
	21	378.81	76.49	24.96	31.28	39.24
	22	455.82	91.86	29.90	28.78	70.55
	23	544.04	109.46	35.54	27.53	<u>271.86</u>
2^5	32	2.03e+03	4.05e+02	1.30e+02	5.41e+01	4.09e+01
2^6	64	3.23e+04	6.40e+03	2.03e+03	8.36e+02	4.05e+02
2^7	128	5.17e+05	1.02e+05	3.24e+04	1.33e+04	6.41e+03

表 2.4:

n		2	3	4	5	6
	N	$\kappa(A) / N^4$				
2^2	4	0.0387	0.0123	0.0101	0.0093	0.0089
2^3	8	0.0020	<u>0.0056</u>	0.0075	0.0022	0.0013
	9	0.0020	0.0020	0.0035	0.0042	0.0011
	10	0.0020	0.0009	0.0030	0.0032	0.0013
	11	0.0020	0.0005	0.0047	0.0016	0.0051
	12	0.0020	0.0004	<u>0.0073</u>	0.0008	0.3282
	13	0.0020	0.0004	0.0013	0.0006	0.0260
	14	0.0020	0.0004	0.0006	0.0005	0.0023
	15	0.0020	0.0004	0.0003	0.0006	0.0008
2^4	16	0.0020	0.0004	0.0002	0.0008	0.0004
	17	0.0020	0.0004	0.0002	<u>0.0031</u>	0.0002
	18	0.0020	0.0004	0.0002	0.0009	0.0002
	19	0.0020	0.0004	0.0001	0.0004	0.0002
	20	0.0020	0.0004	0.0001	0.0002	0.0002
	21	0.0019	0.0004	0.0001	0.0002	0.0002
	22	0.0019	0.0004	0.0001	0.0001	0.0003
	23	0.0019	0.0004	0.0001	0.0001	<u>0.0010</u>
2^5	32	0.0019	0.0004	0.0001	5.16e-05	3.90e-05
2^6	64	0.0019	0.0004	0.0001	4.98e-05	2.42e-05
2^7	128	0.0019	0.0004	0.0001	4.94e-05	2.39e-05

表 2.5:

N^4 , 得到表 2.5。從表 2.5 條件數的成長狀況看來, 實驗數據結果是屬於正常表現, 因此條件數並不足以解釋有限元解誤差起初震盪情形的原因。

在 (P2) 的問題中, 其方程式的通解為

$$u(x) = \cos(kx) + b \sin(kx), \quad b \in \mathcal{C}$$

而我們解得的是近似 $\cos(kx)$ 的有限元解。因此, 懷疑有誤差暴增現象的數值解是否偏去了某個特殊解 (即 $\cos(kx) + b \sin(kx)$, b is a constant)。我們以 $n = 4$ 與 $n = 5$ 為實驗對象, 用 512 個點值來描繪數值解, 然後畫出數值解與 $\cos(kx)$ 之差的圖形, 藉以觀察這些暴增的誤差是否隱含著 sine 函數。結果如圖 2.1。

經觀察發現: 圖形呈穩定的波形, 分別有 $3\frac{1}{2}$ 和 $4\frac{1}{2}$ 個週期, 只是振幅有所改變, 圖形本身亦非 $\sin(2n\pi x)$ 函數。從改變 N 的圖形變化看來, 亦沒有接近正弦函數的趨勢。

其次, 我們試著找出有誤差暴增現象的數值解的奇函數部份。即假設數值解為函數 $f(x)$, 則其奇函數部份 $o(x)$ 為

$$o(x) = \frac{1}{2}(f(x) - f(-x))$$

同樣以 $n = 4$ 和 $n = 5$ 為實驗對象, 經過數值計算, 得到它們的奇函數部份的絕對值皆不超過 10^{-13} , 可以視為 0。也就是說, 有誤差暴增現象的數值解並不含有正弦函數。因此, 有限元解起初的震盪現象並非因為偏去了某個特殊解。

我們將表 2.3 劃分得更詳細, 藉以尋找對不同的 n 值, 何時會發生誤差暴增現象, 而得到表 2.6 (加底線處為誤差發生暴增時)。令 N_0 是發生誤差暴增時的線性空間維度, 然後對誤差發生暴增現象時的 n 值與 N_0 值繪圖, 得到圖 2.2 中

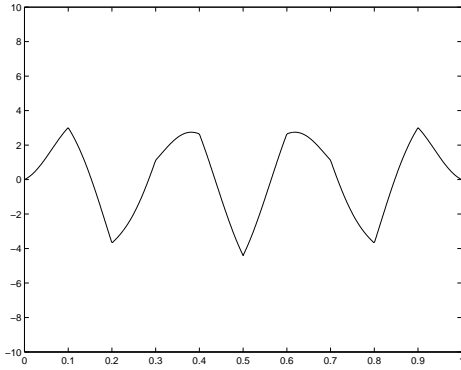


圖 1-1: $n = 4$, $N = 10$

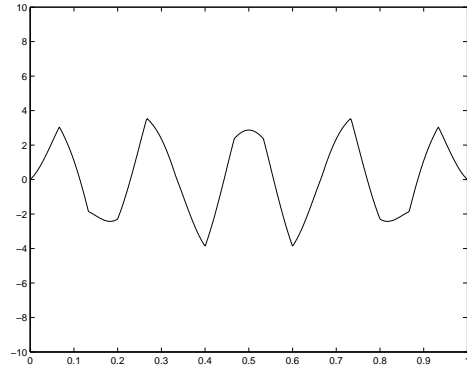


圖 2-1: $n = 5$, $N = 15$

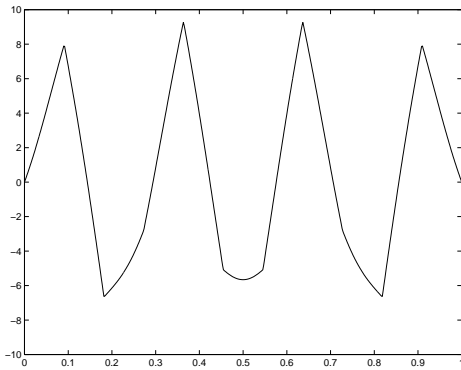


圖 1-2: $n = 4$, $N = 11$

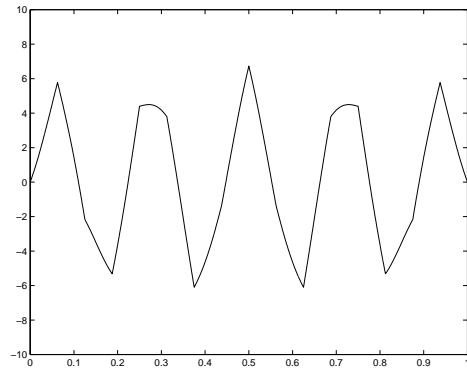


圖 2-2: $n = 5$, $N = 16$

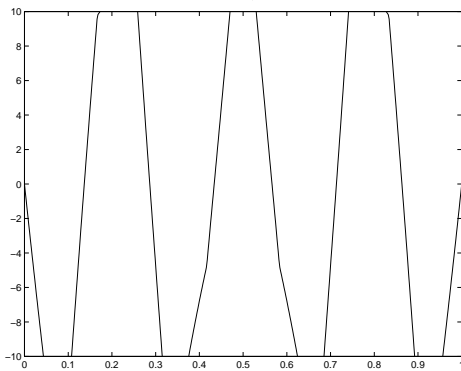


圖 1-3: $n = 4$, $N = 12$

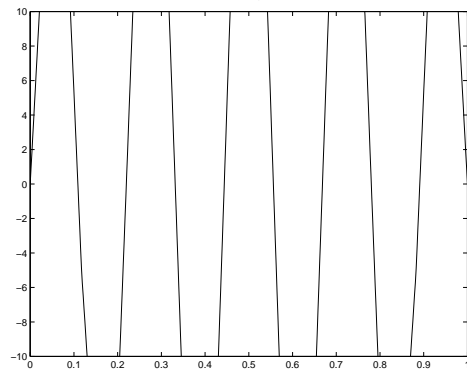


圖 2-3: $n = 5$, $N = 17$

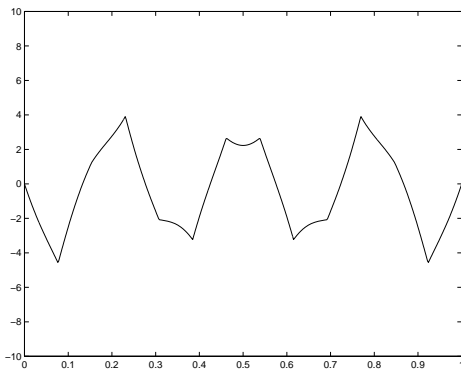


圖 1-4: $n = 4$, $N = 13$

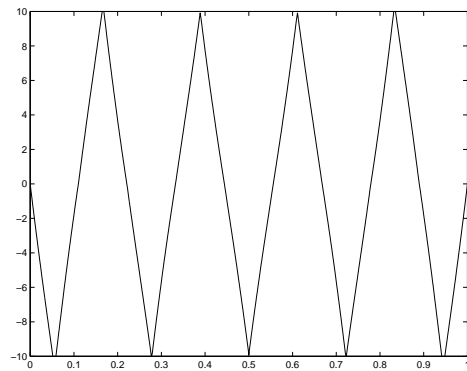


圖 2-4: $n = 5$, $N = 18$

圖 2.1: 數值解與真解之差的圖形

n		3	4	5	6	7	8	9
N		$\ u_h - u\ _2 / h^2$						
2^2	4	12.71						
2^3	8	<u>100.49</u>						
	9	70.14	119.7					
	10	59.15	211.6					
	11	54.33	582.9	117.7				
	12	52.14	<u>1462.9</u>	153.9				
	13	51.23	390.8	208.8				
	14	51.03	250.0	299.1				
	15	51.19	196.4	471.8				
2^4	16		169.3	922.8				
	17		153.7	<u>4798.0</u>	317.79			
	18			1889.6	404.37			
	19			871.0	531.43			
	20				734.72			
	21				1108.6			
	22				2011.4			
	23				<u>7134.3</u>			
	24				5741.1			
	25				2219.9			
	26				1443.4	1286.8		
	27					1785.1		
	28					2751.4		
	29					5402.2		
	30					<u>42531.0</u>		
	31					8144.1		
2^5	32					3920.7	1847.3	
	33					2669.3	2364.2	
	34					2072.6	3189.6	
	35						4708.5	
	36						8.40e+03	
	37						<u>3.06e+04</u>	
	38						2.13e+04	
	39						8.30e+03	2.87e+03
	40						5.31e+03	3.55e+03
	41						3.99e+03	4.57e+03
	42							6.23e+03
	43							9.46e+03
	44							1.84e+04
	45							<u>1.58e+05</u>
	46							2.59e+04

表 2.6: 數值解與真解的誤差

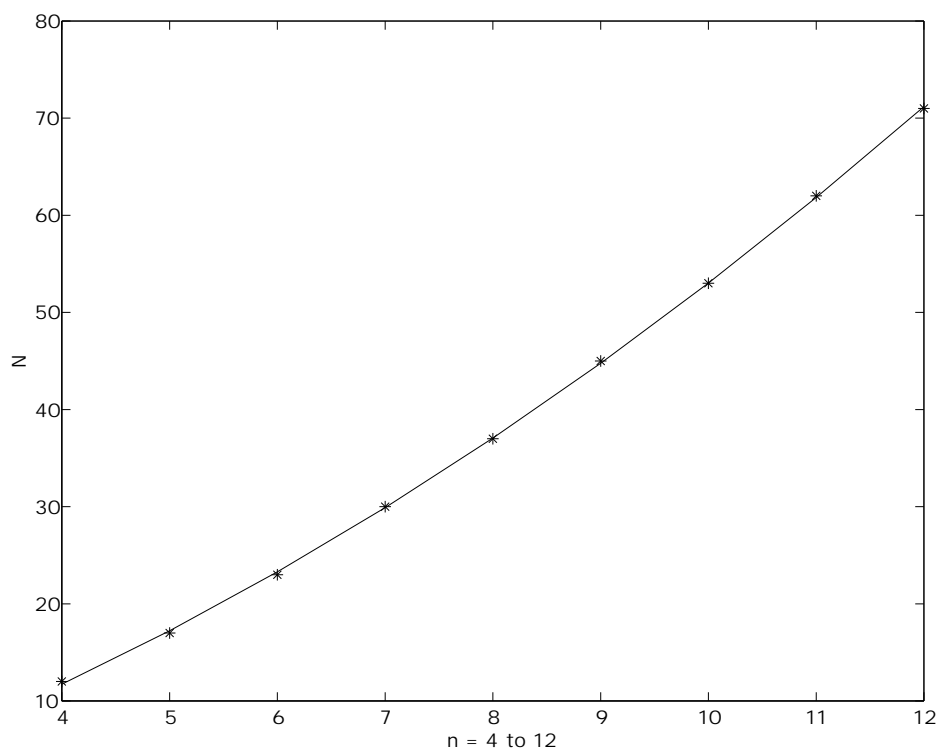


圖 2.2: 數值解誤差發生暴增時 n 與 N 關係之圖形

的 * 節點。以 least square 方法求出一條最佳估計二次多項式, 如下:

$$N_0 = 0.2749n^2 + 3.0351n - 4.8173 \quad (2.10)$$

只要 $N > N_0$, 數值解的頻率就會正確, 然後隨著 N 的漸次遞增, 數值解就會開始逼近真解。

第 3 章 Helmholtz 方程的數值迭代解法

這一章我們先簡略介紹 Daubechies 凌波函數，造出提昇後的凌波分解矩陣，然後藉由矩陣的特徵值討論矩陣 A 的特性。依照矩陣特性利用區塊 Guass-Seidel 法、傳統的多重網格 (Multigrid) 法、共軛梯度 (Conjugate Gradient) 法以及區塊 Guass-Seidel 和 共軛梯度 分別配合 Multigrid 法等的多種方法進行數值迭代。其中，除了傳統 Multigrid 法以外，在其他迭代法配合 Multigrid 法中，我們使用了凌波轉換的方式降層與還原。

3.1 提昇自格函數與凌波函數

我們先粗略地了解 Daubechies 凌波函數，然後再進入提昇後的凌波函數，藉以造出提昇後的凌波分解矩陣。

令 $\phi(x)$ 滿足自格等式 (scaling equation)

$$\phi(x) = \sum_k c_k \phi(2x - k)$$

是有限涵蓋的。其中，當 $k \notin \{0, \dots, 2p - 1\}$ 時， $c_k = 0$ 。而且 $\phi(x)$ 滿足以下的條件

$$\begin{aligned} \sum_k c_k &= 2 \\ \sum_k (-1)^k k^m c_k &= 0, \text{ for } 0 \leq m \leq p - 1 \\ \sum_k c_k c_{k-2m} &= 2\delta_{0m} \end{aligned}$$

其中 p 是一個正整數，稱為 Daubechies 的凌波函數的階數。

定義

$$\phi_{j,k}(x) = \sqrt{2^j} \phi(2^j x - k), \quad j, k \in \mathbb{Z}$$

$$V_j = \text{span}\{\phi_{j,k}(x) : k \in \mathbb{Z}\}$$

則在 $\phi(x)$ 組成的 V_0 空間中包含了在有限區間內 p 階以下的多項式。

相對於自格函數 $\phi(x)$ ，令 $d_k = (-1)^k c_{1-k}$ ，稱

$$\psi(x) = \sum_k d_k \phi(2x - k)$$

是一個凌波函數。同樣定義

$$\psi_{j,k}(x) = \sqrt{2^j} \psi(2^j x - k), \quad j, k \in \mathbb{Z}$$

$$W_j = \text{span}\{\psi_{j,k}(x) : k \in \mathbb{Z}\}$$

則 $\{\psi_{jk}\}_{k=-\infty}^{\infty}$ 形成一組正則集合，而且

$$V_j = V_{j-1} \oplus W_{j-1}$$

可以得到

$$\langle x^m, \psi(x) \rangle = 0, \quad 0 \leq m \leq p-1$$

接下來我們定義

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \phi(t) - \phi(t-1) dt$$

稱 $\Phi(x)$ 是 $\phi(x)$ 的提昇。我們可以在曾正男的論文 [1] 中證明 $\Phi(x)$ 也是自格函數。然後選取最簡單的方法來造相對的凌波函數 $\Psi(x)$ ，即

$$g_k = (-1)^k h_{1-k}$$

其中 (h_k) 是 $\Phi(x)$ 的自格係數， (g_k) 是 $\Psi(x)$ 的凌波係數。因為提昇後的 $\Phi(x)$ 和 $\Psi(x)$ 不再具有正交性，因此還需要造出另一組對偶基底 $\{\tilde{\Phi}(x), \tilde{\Psi}(x)\}$ ，形成

雙正交系統，以便於我們在 V_{j+1} 與 $V_j + W_j$ 間作快速凌波轉換。

分別令 (\tilde{h}_k) 與 (\tilde{g}_k) 是 $\tilde{\Phi}(x)$ 與 $\tilde{\Psi}(x)$ 的自格係數與凌波係數，可以得到以下關係：

$$h_k = \frac{c_{k-1} + c_k}{2} \quad (3.1)$$

$$\tilde{h}_k = 2c_k - \tilde{h}_{k+1} \quad (3.2)$$

$$g_k = (-1)^k \tilde{h}_{1-k} \quad (3.3)$$

$$\tilde{g}_k = (-1)^k h_{1-k} \quad (3.4)$$

如此我們便造出新的雙正交系統 $\{\Phi, \Psi, \tilde{\Phi}, \tilde{\Psi}\}$ 。

利用凌波轉換處理影像分解與合成的方法，造出分解矩陣 (decomposition) \mathcal{W} 。若 $x \in V_{j+1}$ 是一個 N 維向量 (N 是偶數)，則 \mathcal{W} 是 $N \times N$ 方陣，

$$\mathcal{W} = \begin{pmatrix} H \\ G \end{pmatrix}$$

H 與 G 的維度為 $\frac{N}{2} \times N$ ，分別為自格係數 h_k 與凌波係數 g_k 所組成的矩陣

$$H = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & \cdots & h_{2p} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & \cdots & h_{2p-1} & h_{2p} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ h_{2p} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_0 & \cdots & h_{2p-1} \\ & & & & \vdots & & & & \\ h_2 & h_3 & \cdots & h_{2p} & 0 & \cdots & 0 & h_0 & h_1 \end{pmatrix}$$

$$G = \begin{pmatrix} g_0 & g_1 & g_2 & \cdots & g_{2p-2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & \cdots & g_{2p-2} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & & & \\ g_{2p-2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & g_0 & \cdots & g_{2p-3} \\ & & & & \vdots & & & \\ g_2 & \cdots & g_{2p-2} & 0 & \cdots & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix}$$

並且滿足

$$\frac{1}{2}\mathcal{W}\widetilde{\mathcal{W}}^T = I \quad (3.5)$$

此處的 $\widetilde{\mathcal{W}}$ 稱為合成矩陣，其形式為

$$\widetilde{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} \widetilde{H} \\ \widetilde{G} \end{pmatrix}$$

\widetilde{H} 與 \widetilde{G} 分別為對偶自格係數 \tilde{h}_k 與對偶凌波係數 \tilde{g}_k 所組成的矩陣。

$$\widetilde{H} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{h}_0 & \tilde{h}_1 & \cdots & \tilde{h}_{2p-2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{h}_0 & \cdots & \tilde{h}_{2p-2} & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & & & \\ \tilde{h}_{2p-2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{h}_0 & \cdots & \tilde{h}_{2p-3} \\ & & & & \vdots & & & \\ \tilde{h}_1 & \tilde{h}_2 & \cdots & \tilde{h}_{2p-2} & 0 & \cdots & 0 & \tilde{h}_0 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} \tilde{g}_1 & \tilde{g}_2 & \cdots & \tilde{g}_{2p} & 0 & \cdots & 0 & \tilde{g}_0 \\ 0 & \tilde{g}_0 & \tilde{g}_1 & \cdots & \tilde{g}_{2p} & 0 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & & & \\ \tilde{g}_{2p} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{g}_0 & \cdots & \tilde{g}_{2p-1} \\ & & & & \vdots & & & \\ \tilde{g}_3 & \cdots & \tilde{g}_{2p} & 0 & \cdots & \tilde{g}_0 & \tilde{g}_1 & \tilde{g}_2 \end{pmatrix}$$

3.2 矩陣分解

在上一節中，我們得到了凌波分解矩陣，就可以將 (2.8) 式中的矩陣 A 進行分解。然後比較分解後低頻部份的矩陣與相同維度的矩陣 A 的條件數。

回到前一章 (P2) 狀況下的 Helmholtz 方程，

$$\begin{aligned} \text{(P2)} \quad u''(x) + k^2 u(x) &= 0, \quad k = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{N} & (3.6) \\ u(0) = u(1) &= 1 \end{aligned}$$

我們利用 Galerkin 方法將方程轉變為 (2.8) 式。而在前一節中，我們得到了分解矩陣 \mathcal{W} ，就可以利用凌波轉換處理影像分解與合成的方法，將 (2.8) 中的矩陣 A 降層

$$\tilde{A} = \mathcal{W}A\mathcal{W}^T$$

因此，原本解聯立方程 $Au = b$ 可以轉變為解

$$\tilde{A}\tilde{u} = \tilde{b}$$

其中， $\tilde{b} = \mathcal{W}b$ ，而 $u = \mathcal{W}^T\tilde{u}$ 。

我們只對矩陣 A 做一次的分解，並且以 (3.6) 式中的 $n = 2$ 和 $n = 3$ 為例，比較矩陣 A 和矩陣 \tilde{A} 的條件數，如下表。其中 N 為 $[0,1]$ 區間內等分的份數，且在 (P2) 狀況下，矩陣 A 和 \tilde{A} 的大小改變為 $(N - 1) \times (N - 1)$ 。

N	$n = 2$		$n = 3$	
	A	\tilde{A}	A	\tilde{A}
9	13.28	10.31	12.93	25.90
11	29.27	29.93	7.60	9.03
13	56.58	59.47	11.80	10.13
15	99.64	105.43	20.53	21.93
17	163.64	173.08	33.41	36.19
19	254.47	268.33	51.62	56.00
21	378.81	397.81	76.49	82.78
23	544.04	568.90	109.46	117.99
25	758.29	789.71	152.14	163.24

我們發現矩陣 A 經過凌波轉換分解後，矩陣條件數並無顯著的變化。

矩陣 A 經過一次的凌波轉換後，可以表示為

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} U & W_x \\ W_y & W \end{pmatrix}$$

其中，四塊子矩陣 U , W_x , W_y , W 的維度都是 $\frac{N-1}{2} \times \frac{N-1}{2}$ 。子矩陣 U 是降一層後的結果，相當於訊號處理中低頻的部份。因此，我們直接以矩陣 U 來求解，並且和相同維度的矩陣 A 所得的解比較。

圖 3.1 是以 $N = 17$ 的矩陣 A (維度 16) 所得的解，和 $N = 33$ 的矩陣 \tilde{A} (維度 32) 的子矩陣 U (維度 16) 所得的解的比較。可以看出，經過凌波轉換分解後

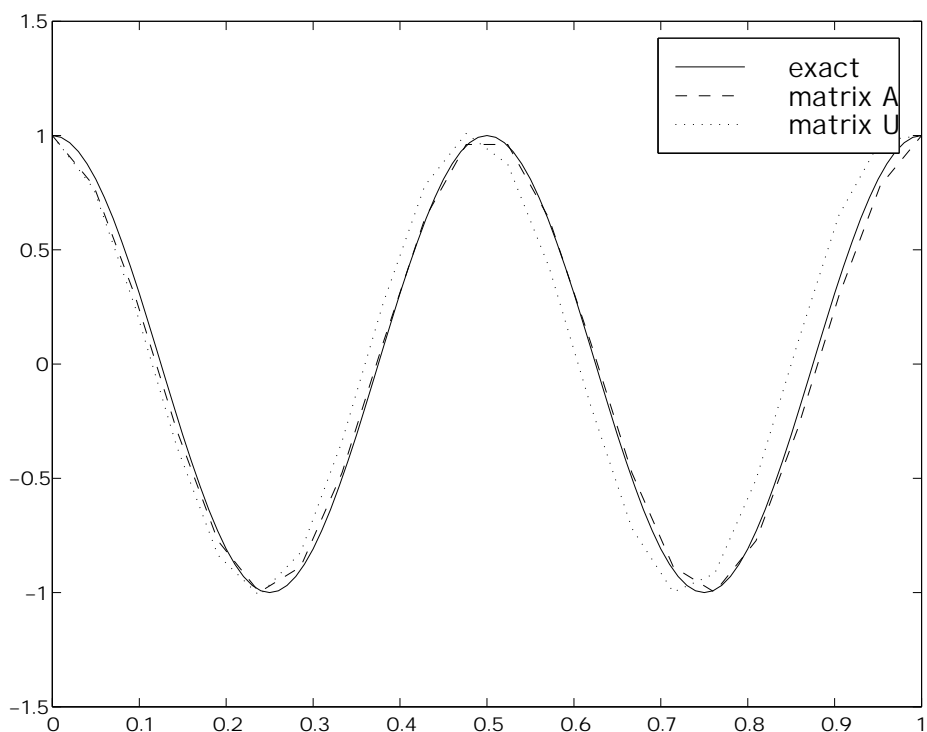


圖 3.1: 利用矩陣 A 與矩陣 U 所得之解的比較

所求得之解，產生了平移的現象。

接下來，我們比較相同維度下的矩陣 A 與矩陣 U 的條件數。以 $n = 2$ 和 $n = 3$ 為例，如表 3.1。其中，矩陣的維度皆為 $(N - 1) \times (N - 1)$ 可以看到，在相同的維度下，兩種矩陣條件數是相當的。

3.3 矩陣特徵性質

我們希望使用不同的迭代手法，以求得 (2.8) 式中的數值解，因此首先討論矩陣的特徵性值。

由前章可知道矩陣 A 是由剛度矩陣和質量矩陣所組成的，

$$A = -S + k^2 M$$

N	$n = 2$		$n = 3$	
	A	U	A	U
9	13.28	13.15	12.93	6.99
10	20.11	20.99	9.21	5.73
11	29.27	31.86	7.60	7.01
12	41.25	46.24	8.68	10.32
13	56.58	64.68	11.80	14.78
14	75.84	87.69	15.71	20.58
15	99.64	115.78	20.53	27.93
16	128.67	149.45	26.38	37.07
17	163.64	189.20	33.41	48.20
18	205.30	235.50	41.77	61.56

表 3.1: 矩陣 A 與矩陣 U 的條件數比較

其中 S 是剛度矩陣, M 是質量矩陣, $k = 2n\pi, n \in \mathbb{N}$ 。且因為剛度矩陣與質量矩陣的特徵值對應相同的特徵向量, 因此矩陣 A 的特徵值 $\hat{\lambda}_\ell$ 可由 (2.7) 推得

$$\begin{aligned}\hat{\lambda}_\ell &= -\lambda_\ell + k^2 \tilde{\lambda}_\ell \\ &= -\lambda_\ell + k^2 \left(\frac{1}{N} - \frac{1}{6N^2} \lambda_\ell \right) \\ &= -\left(1 + \frac{k^2}{6N^2}\right) \lambda_\ell + \frac{k^2}{N}\end{aligned}$$

因為

$$\lambda_\ell = \frac{4}{h} \sin^2\left(\frac{\ell\pi}{2N}\right), \quad \ell = 1, 2, \dots, N-1$$

可以知道

$$0 < \lambda_\ell < \frac{4}{h} = 4N$$

所以, 矩陣 A 的特徵值 $\hat{\lambda}_\ell$

$$\begin{aligned}-\left(\frac{k^2}{6N^2} + 1\right)4N + \frac{k^2}{N} &< \hat{\lambda}_\ell < \frac{k^2}{N} \\ \Rightarrow \frac{k^2}{3N} - 4N &< \hat{\lambda}_\ell < \frac{k^2}{N}\end{aligned}$$

假如左端項

$$\begin{aligned}\frac{k^2}{3N} - 4N &> 0 \\ \Rightarrow k^2 &> 12N^2\end{aligned}$$

即可保證矩陣 A 的所有特徵值 $\hat{\lambda}_\ell$ 皆為正數, 同時也能保證矩陣 A 是對角線主控 (diagonally dominant)。此時, A 為對稱正定矩陣 (SPD), 我們就可以使用 Jacobi、Gauss-Seidel 或 Conjugate-Gradient 等迭代方法來求解。但是, 由 (2.10) 可知, 若 N 值不夠大, 數值解並不能抓到真解的頻率, 得到的解也就毫無意義。

然而, 若使 N 值夠大到可以抓到真解的頻率, 卻又不能保證矩陣 A 的所有特徵值皆為正數 (由實驗也確知, 矩陣 A 有負數特徵值) 或對角線主控, 因此矩陣 A

就不會是對稱正定矩陣，上述的迭代法都不能保證會收斂。

對稱正定矩陣雖只是上述迭代法的充分條件，未必必要，但對於我們的問題，可以看見，一般說來，應該要是必要的。我們以 $n = 3$ 和 $n = 4$ 為例，當 N 值分別為 8 和 13 時，數值解可以抓到真解的頻率。然後分別以 Jacobi 法和 Gauss-Seidel 法來求解，計算其相對誤差，得到表 3.2。其中 m 為迭代次數。我們可以看出，Jacobi 和 Gauss-Seidel 都是發散的情況。

3.4 區塊 Gauss-Seidel 迭代

矩陣經過一次凌波轉換後，將原矩陣分成四塊。我們使用區塊的 Gauss-Seidel 迭代法，討論其數值收斂的情況。

我們將矩陣 A 經過一次的凌波轉換後，可以得到

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} U & W_x \\ W_y & W \end{pmatrix}$$

於是我們改變原問題

$$Au = b \tag{3.7}$$

為

$$\tilde{A}\tilde{u} = \tilde{b}$$

其中 $\tilde{b} = Wb$, $u = W^T\tilde{u}$ 。但是， \tilde{A} 依然是非對稱正定矩陣。我們利用 Block 方式的 Gauss-Seidel 法，得到迭代的矩陣形式為

$$\begin{pmatrix} U & 0 \\ W_y & W \end{pmatrix} x^k = \begin{pmatrix} 0 & -W_x \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x^{k-1} + \tilde{b} \tag{3.8}$$

m	$n = 3$		$n = 4$	
	Jacobi	Gauss-Seidel	Jacobi	Gauss-Seidel
		$N = 8$		$N = 13$
1	0.87	1.01	0.85	1.39e+05
2	0.79	4.39	1.44	1.68e+07
3	0.81	24.66	6.11	1.27e+09
4	1.17	1.23e+02	31.43	7.74e+10
5	2.20	5.73e+02	172.48	4.19e+12
6	4.51	2.60e+03	982.55	2.11e+14
7	9.39	1.16e+04	5.72e+03	1.00e+16
8	19.62	5.15e+04	3.38e+04	4.63e+17
9	41.03	2.27e+05	2.02e+05	2.08e+19
10	85.80	9.97e+05	1.22e+06	9.16e+20
11	179.44	4.37e+06	7.36e+06	3.98e+22
12	375.25	1.91e+07	4.49e+07	1.71e+24
13	784.75	8.38e+07	2.75e+08	7.27e+25
14	1.64e+03	3.67e+08	1.69e+09	3.07e+27
15	3.43e+03	1.60e+09	1.05e+10	1.29e+29

表 3.2: Gauss-Seidel 法與 Jacobi 法

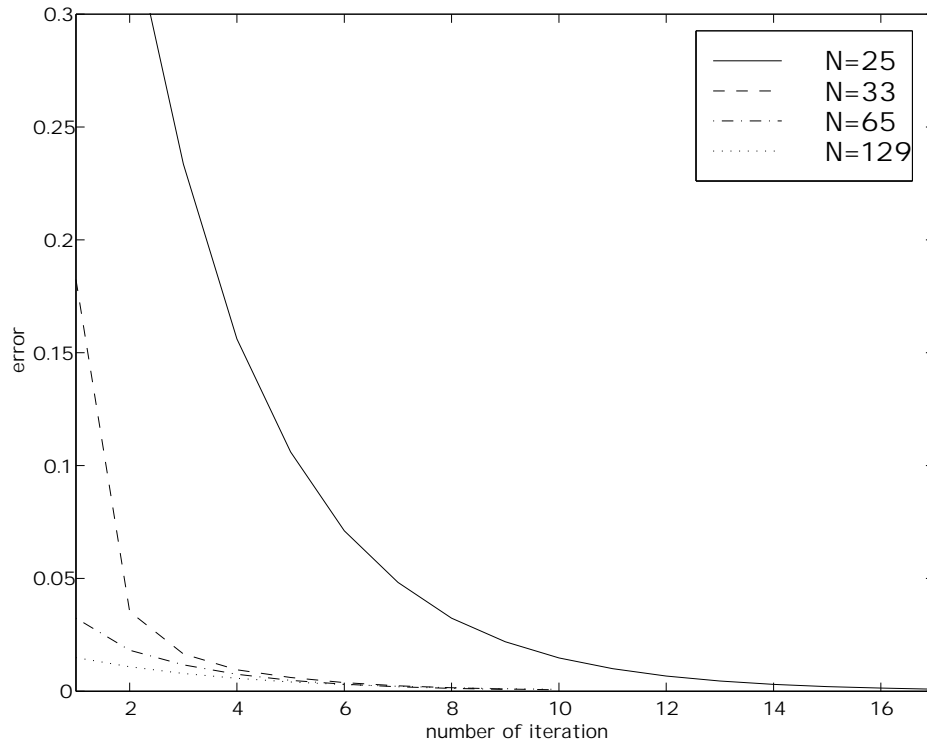


圖 3.2: 區塊 Gauss-Seidel 法與直接法的相對誤差

此時，當 N 夠大時數值解是會收斂的。表3.3 顯示對不同的 n 值，當 $N > \tilde{N}$ 時，Gauss-Seidel 迭代的數值解會收斂。而通常此時， N 值已經夠大到可以抓到真解的頻率，因此數值解是有意義的。

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
\tilde{N}	11	17	25	33	43	55	65	77	89	103	115

表 3.3:

接下來我們實驗 $n = 4$ 和 $n = 5$ 迭代解與直接數值解 ($A^{-1}b$) 的相對誤差，得到表3.4，其中 m 為迭代次數。同時將表 3.4 中 $n = 4$ 的部份繪製成圖 3.2。可以看到， N 愈大時，收斂速度愈快。

$n = 4$				$n = 5$			
N	25	33	65	N	33	65	129
m				m			
1	0.5551	0.1899	0.0333	1	0.7917	0.0555	0.0183
2	0.3482	0.0365	0.0187	2	0.7095	0.0188	0.0117
3	0.2385	0.0173	0.0120	3	0.6656	0.0112	0.0076
4	0.1590	0.0099	0.0077	4	0.6196	0.0067	0.0049
5	0.1082	0.0064	0.0050	5	0.5790	0.0040	0.0032
6	0.0725	0.0040	0.0032	6	0.5400	0.0024	0.0021
7	0.0492	0.0026	0.0021	7	0.5042	0.0015	0.0013
8	0.0330	0.0016	0.0013	8	0.4705	8.69e-04	8.64e-04
9	0.0224	0.0010	8.58e-04	9	0.4392		
10	0.0151	6.56e-04		10	0.4099		
11	0.0102			11	0.3826		
12	0.0069			12	0.3571		
13	0.0046			13	0.3333		
14	0.0031			14	0.3111		
15	0.0021			⋮	⋮		
16	0.0014			⋮	⋮		
17	9.63e-04			98	9.49e-04		

表 3.4: 區塊 Gauss-Seidel 法與直接法的相對誤差

3.5 傳統多重網格法 (Multigrid Method)

使用 Galerkin 方法求解 Helmholtz 方程時，若將區間切割得愈細 (意即 N 值愈大)，所得到的解就愈接近真解。但是如此一來，我們就有一個大維度的矩陣運算。在數值迭代的求解過程中，當矩陣維度較大時，經過一次次的迭代，消散的誤差是屬於較高頻的部份。Multigrid 方法就是為了增加數值計算收斂的速度，在迭代的過程中透過求解低維度的系統方程式，以期快速消散較低頻的誤差。目前多重網格法已被肯定是大型運算迭代法中，求解的最佳加速收斂法。

前面曾經提過，在求解 (3.7) 式時，我們不能保證矩陣 A 為對稱正定矩陣，許多的迭代法都不能使用，於是改變問題為解

$$Tu = f$$

其中 $T = A^T A$, $f = A^T b$ 。此時，就能保證矩陣 T 是對稱正定矩陣。然後我們就可以使用普通的 Jacobi 或是 Gauss-Seidel 法配合 Multigrid 方法，進行數值的迭代。但是如此一來，矩陣條件數就會變成原來的平方，影響迭代的收斂速度，在以後的表格中都可以看到。

首先定義線性內插算子 \mathcal{I}_{2h}^h ，可將數值由粗網格向量轉為細網格向量：

$$\mathcal{I}_{2h}^h v^{2h} = v^h$$

其中

$$\begin{aligned} v_{2j}^h &= v_j^{2h} \\ v_{2j+1}^h &= \frac{1}{2}(v_j^{2h} + v_{j+1}^{2h}) \end{aligned}$$

可寫成矩陣形式:

$$\mathcal{I}_{2h}^h v^{2h} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & \\ & 2 & & & & & & \\ & & 1 & 1 & & & & \\ & & & 2 & & & & \\ & & & & 1 & 1 & & \\ & & & & & 2 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{2h} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \end{bmatrix}_h = v^h$$

同樣可以定義由細網格轉為粗網格向量的算子 \mathcal{I}_h^{2h} :

$$\mathcal{I}_h^{2h} v^h = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & & & & & \\ & & 1 & 2 & 1 & & & \\ & & & & 1 & 2 & 1 & \\ & & & & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \end{bmatrix}_h = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}_{2h} = v^{2h}$$

如此一來，我們就可以將迭代的數值在粗細網格間任意轉換。

首先使用 Gauss-Seidel 或 Jacobi 法迭代 3 次後 (x^k) 計算殘量 r (residue), 然後轉換為低維度 (粗網格) 數值求解後, 再轉換回高維度 (細網格), 改良了低

頻的誤差後,再繼續下一次的迭代。

$$r = f - Tx_k$$

$$r_1 = \mathcal{I}_h^{2h} r$$

$$A_1 e_1 = r_1$$

$$e = \mathcal{I}_{2h}^h e_1$$

$$x_{k+1} = x_k + e$$

其中 A_1 為原來矩陣 A 維度的一半。

表 3.5 是以 $n = 4$ 為例,使用 Gauss-Seidel 配合 Multigrid 法,所得到的迭代數值解與直接數值解 ($A^{-1}b$) 的相對誤差,其中 m 為迭代次數。

3.6 區塊 Multigrid 方法

前面曾經提過,在求解 (3.7) 式時,我們不能保證矩陣 A 為對稱正定矩陣,因此一般的迭代法都不能保證數值解一定收斂。但是在 3.4 節中發現,若將矩陣凌波轉換後再使用區塊的 Gauss-Seidel 迭代,就可以使得數值收斂,唯一的限制是 $N > \tilde{N}$, 而此限制條件並不影響表現 Helmholtz 方程的真解。因此,我們採用區塊 Gauss-Seidel 迭代配合 Multigrid 方法。在本節中若無特別聲明,所提到的 Gauss-Seidel 迭代都是指區塊 Gauss-Seidel 迭代。

在 Multigrid 方法中,需要求解低維度的矩陣,我們使用的是將原矩陣 A 做凌波轉換後的低頻部份,也就是

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} U & W_x \\ W_y & W \end{pmatrix}$$

$$n = 4$$

m	N		
	32	64	128
1	0.3977	0.4994	0.4975
2	0.2682	0.2702	0.2553
3	0.1914	0.1516	0.1340
4	0.1414	0.0883	0.0744
5	0.1082	0.0538	0.0462
6	0.0859	0.0352	0.0333
7	0.0705	0.0250	0.0268
8	0.0593	0.0194	0.0227
9	0.0509	0.0160	0.0197
10	0.0442	0.0137	0.0172
⋮	⋮	⋮	⋮
31	⋮	8.98e-04	9.83e-04
40	9.92e-04		

表 3.5: 傳統 Multigrid 法與直接法的相對誤差

中的矩陣 U 。而因為凌波轉換矩陣 W 的維度必為偶數的關係，這裡我們只能做 N 是奇數情況。

首先進行一次區塊 Gauss-Seidel 迭代，數值解 x^k 可分成低頻 x_1^k 與高頻 x_2^k 兩部份，由 (3.8) 式可得到：

$$x_1^k = U^{-1}[\tilde{b}_1 - W_x x_2^{k-1}] \quad (3.9)$$

$$x_2^k = W^{-1}[\tilde{b}_2 - W_y x_1^k] \quad (3.10)$$

然後只求低頻部份的殘量 (residue)，

$$r = \tilde{b}_1 - U x_1^k - W_y x_2^k$$

求解低維度矩陣

$$Ue = r$$

得到新的低頻數值解 $x_1 = x_1^k + e$ ，而高頻部份仍為 $x_2 = x_2^k$ ，再進行第二次迭代。

我們發現使用區塊 Gauss-Seidel 的迭代方式，Multigrid 法是徒勞無功的。因為 Gauss-Seidel 的新低頻部份 (x_1^k) 計算需要前次的高頻 (x_2^{k-1})；新高頻部份 (x_2^k) 計算只需要新低頻 (x_1^k)，而 Multigrid 法改良的卻是低頻部份的誤差 (參見 (3.9) 式與 (3.10) 式)。因此，一旦數值進行第二次迭代，前次進行的 Multigrid 法的部份就形同虛設。

以 $n = 4$, $N = 25$ 為例，比較兩次迭代的區塊 Gauss-Seidel 法和 Multigrid 法的相對誤差，得到表 3.6。右欄 Multigrid 法的兩列誤差分別代表做完 Gauss-Seidel 後和做完 Multigrid 法後的相對誤差。我們可以看到，第一次做完 Gauss-Seidel 迭代後，再進行低頻部份的改良，可以得到不錯的結果 (誤差降低了一半)。但是一旦進入第二次迭代，先前的好結果完全派不上用場。由上表可

$$n = 4, N = 25$$

m	區塊 Gauss-Seidel	區塊 Multigrid
1	0.5433	0.5433
		0.2891
2	0.3417	0.3417
		0.1993

表 3.6:

以看出, 只做 Gauss-Seidel 迭代 2 次的誤差與曾做過一次 Multigrid 法再進行 Gauss-Seidel 迭代的誤差結果完全一樣。

若我們改以區塊 Jacobi 法代替 Gauss-Seidel 法, 得到迭代的矩陣形式為:

$$\begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & W \end{pmatrix} x^k = \begin{pmatrix} 0 & -W_x \\ -W_y & 0 \end{pmatrix} x^{k-1} + \tilde{b}$$

數值解 x^k 一樣可分成低頻 x_1^k 與高頻 x_2^k 兩部份:

$$x_1^k = U^{-1}[\tilde{b}_1 - W_x x_2^{k-1}]$$

$$x_2^k = W^{-1}[\tilde{b}_2 - W_y x_1^{k-1}]$$

因為新高頻 (x_2^k) 計算需要舊低頻 (x_1^{k-1}), 可讓 Multigrid 法改良後的低頻派上用場, 不會讓 Multigrid 法失去效用。但是如此一來, 所得的結果卻與單純只用 Gauss-Seidel 法完全一樣。因為由 (3.9) 式可推出, $x_1^k = x_1^{k-1} + e$ 。也就是說, 每做一次 Multigrid 方法, 就相當於低頻的部份做了一次 Gauss-Seidel 迭代。因此, Jacobi 法配合 Multigrid 方法雖可以有效地加速收斂, 但是卻不過只是與 Gauss-Seidel 結果一樣。

3.7 共軛梯度法 (Conjugate Gradient Method)

考慮下列形式最小化 (minimization) 問題的數值解

$$\text{Min} f(\eta), \quad \eta \in \mathbb{R}^N$$

其中 $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ 是二次函數。解這個問題的標準方法是有一個初始值, 然後由迭代公式向前得到一個改進的近似值:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k, \quad \text{for } k = 0, 1, 2, \dots$$

向量 d^k 表示搜索方向 (search direction), 純量 $\alpha_k > 0$ 決定在這個方向上需要多大的步距 (step length)。選擇步距 α_k 使得

$$f(x^k + \alpha_k d^k) = \min f(x^k + \alpha d^k)$$

可以讓函數在目前的方向上得到最大的降低誤差。共軛梯度法取前次方向的組合得到更逼近最佳值的新方向,

$$d^{k+1} = -r^{k+1} + \beta_k d^k$$

其中 $r^k = \nabla f(x^k)$ 。所以, 新搜索方向為新的負梯度值加上前次搜索方向乘上係數 β_k 。因為要求逐次搜索方向為共軛關係, 可得到

$$\beta_k = \frac{\langle r^{k+1}, d^k \rangle}{\langle d^k, d^k \rangle}$$

應用共軛梯度法解最小化正定二次函數 (positive definite quadratic function), 標準形式為

$$f(\eta) = \frac{1}{2} \eta \cdot A \eta - b \cdot \eta$$

其中 η 和 b 是 N 個元素的行向量, 而 A 是 $N \times N$ 的對稱正定矩陣。 $f(\eta)$ 的最小值將使 $f(\eta)$ 的梯度為零。而梯度可以由直接微分輕易求得:

$$\nabla f(\eta) = A\eta - b = 0$$

所以求 $f(\eta)$ 的最小值就等於解線性聯立方程式系統

$$A\eta = b$$

於是我們就可以利用此方法來解 (3.7) 式。

同樣地, 因為不能保證矩陣 A 是 SPD, 因此還是需要改變問題為:

$$Tu = f$$

其中 $T = A^T A$, $f = A^T b$ 。我們仍以 $n = 4$ 為例, 使用共軛梯度法求得的數值解與直接解的相對誤差, 得到表 3.7, 其中 m 為迭代次數。

將表 3.7 繪製成圖形, 如圖 3.3。可以看見共軛梯度法特別的收斂情形。

欲計算 $x = T^{-1}f$, 先給予初始條件:

$$x_0 = 0, \quad r_0 = d_0 = f, \quad d_{-1} = 0$$

然後開始進行數次迭代:

$$\alpha_k = \frac{\langle r_k, d_k \rangle}{\langle d_k, Td_k \rangle}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Td_k$$

$$d_{k+1} = Td_k - \frac{\langle Td_k, Td_k \rangle}{\langle d_k, Td_k \rangle} d_k - \frac{\langle Td_k, Td_{k-1} \rangle}{\langle d_{k-1}, Td_{k-1} \rangle} d_{k-1}$$

$$n = 4$$

m	N			
	25	33	65	129
1	0.9170	0.9310	0.9640	0.9819
2	0.8956	0.9182	0.9595	0.9799
3	0.8719	0.9051	0.9555	0.9782
4	0.8461	0.8912	0.9517	0.9767
5	0.8194	0.8765	0.9481	0.9752
6	0.7924	0.8608	0.9445	0.9739
7	0.7595	0.8442	0.9410	0.9726
8	0.5963	0.8270	0.9375	0.9714
9	0.4752	0.8092	0.9340	0.9702
10	0.4184	0.7880	0.9305	0.9691
11	0.2578	0.7410	0.9270	0.9680
12	1.01e-09	⋮	⋮	⋮
16		1.78e-05	⋮	⋮
50			5.62e-04	⋮
178				3.96e-04

表 3.7: Conjugate Gradient 法與直接法的相對誤差

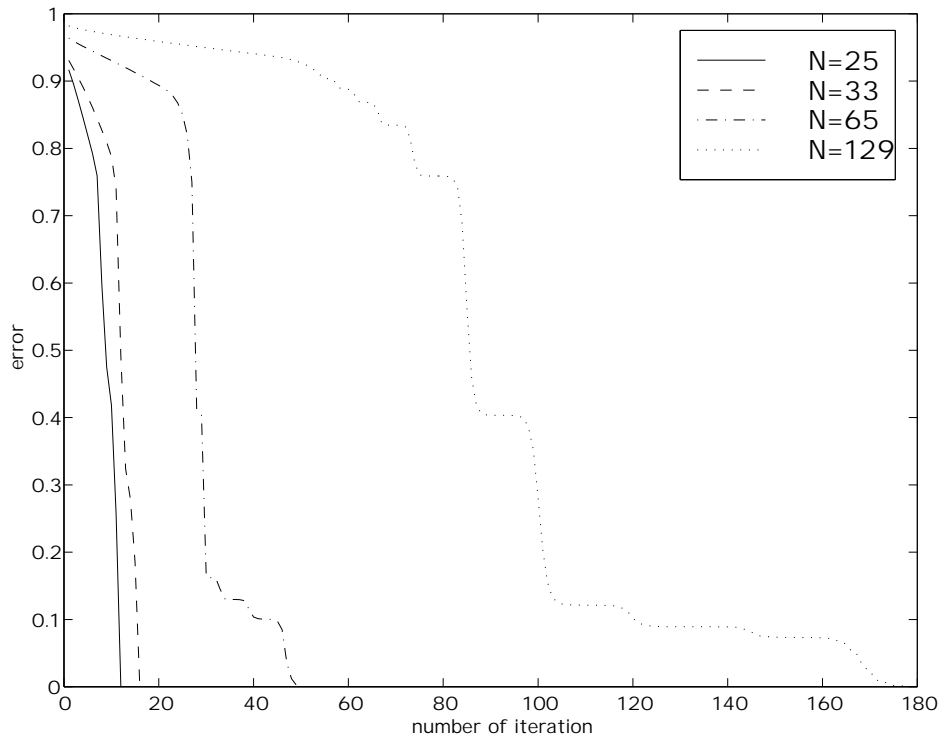


圖 3.3: Conjugate Gradient 法與直接法的相對誤差

3.8 C.G. Multigrid 法

我們使用共軛梯度法配合 Multigrid 方法，希望加快數值收斂的速度。

在 Multigrid 法的部份，我們使用凌波轉換將數值分解為低頻與高頻兩部份，經過低頻部份的求解後，在高頻部份補零再轉換回來。由 (3.5) 式可知，我們無需計算凌波轉換矩陣的反矩陣。首先使用共軛梯度法迭代 2 次後 (x^k)，計算殘量 r (residue)。然後轉換為低維度 (低頻) 數值求解後，再轉換回原來的高維度，改良

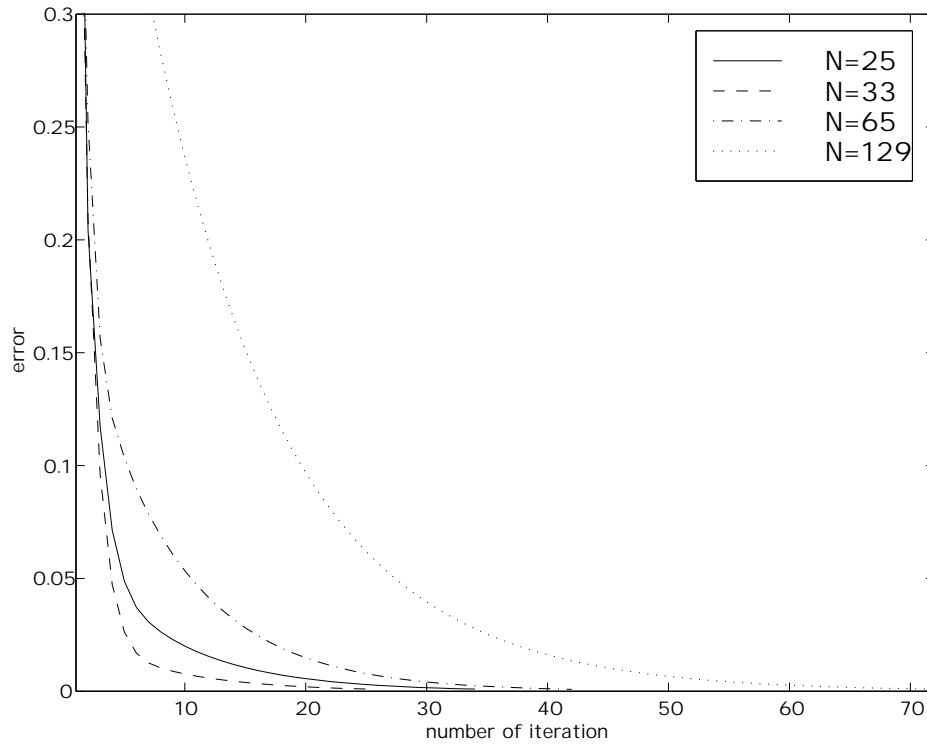


圖 3.4: C.G. Multigrid 法與直接法的相對誤差

了低頻的誤差後，再繼續下一次的迭代。

$$r = b - Ax_k$$

$$\tilde{r} = \mathcal{W}r$$

$$Ue_1 = r_1$$

$$e = \frac{1}{2} \widetilde{\mathcal{W}}^T \tilde{e}$$

$$x_{k+1} = x_k + e$$

其中 r_1 為 \tilde{r} 的上半部，也就低頻的部份；而 \tilde{e} 上半部為 e_1 ，下半部補零。

同樣以 $n = 4$ 為例，計算 C.G. Multigrid 法與直接數值法的相對誤差，如表 3.8。再將表 3.8 繪製成圖 3.4。比較圖 3.3 和圖 3.4，可以看到，Multigrid 使得共軛梯度法失去”直接法”的特色，而真的成為迭代法。

$$n = 4$$

m	N			
	25	33	65	129
1	0.5589	0.4933	0.4899	0.5263
2	0.2045	0.2093	0.2521	0.4085
3	0.1171	0.0959	0.1562	0.3970
4	0.0714	0.0474	0.1210	0.3876
5	0.0488	0.0262	0.1035	0.3647
6	0.0372	0.0169	0.0896	0.3355
7	0.0307	0.0126	0.0785	0.3083
8	0.0264	0.0103	0.0690	0.2826
9	0.0229	0.0089	0.0607	0.2588
10	0.0200	0.0077	0.0534	0.2368
25	⋮	9.98e-04	⋮	⋮
34	9.65e-04		⋮	⋮
42			8.83e-04	⋮
72				9.23e-04

表 3.8: C.G. Multigrid 法與直接法的相對誤差

第 4 章 結論

我們利用傳統的分片線性有限元將 Helmholtz 方程 $u''(x) + k^2u(x) = -f(x)$ 轉變為線性聯立方程式 $Au = b$ 後，藉由推導剛度矩陣與質量矩陣的特徵值和特徵向量，解釋了矩陣條件數的增長狀況。同時我們也發現，隨著網格尺度的增加，矩陣 A 愈接近 singular，成為 Helmholtz 方程困難的來源。

我們造出提昇後的凌波函數與其 DWT 分解矩陣後，將矩陣 A 分解。應用在區塊 Gauss-Seidel、區塊 Multigrid 和 C.G. Multigrid 等幾種不同的迭代法。同時也實驗了傳統的 Multigrid 法和共軛梯度法。

我們發現，區塊 Gauss-Seidel 的迭代法其實隱含著 Multigrid 方法，因此它在高維度的收斂情形較其他的迭代法良好。若區塊 Gauss-Seidel 法同時應用 Multigrid 法，會發現 Multigrid 法是徒勞無功的。

因為一般的迭代法並不一定導致數值收斂，所以我們改變問題為

$$A^T Au = A^T b$$

但是如此一來就影響了矩陣條件數，使得傳統的 Multigrid 法收斂情形不如區塊 Gauss-Seidel 法。而共軛梯度法的數值收斂情形在低維度時表現不錯，高維度時的收斂情形受到計算誤差影響，收斂緩慢。若將共軛梯度法同時配合 Multigrid 法，在高維度則有不錯的改善。

總結而言, 對非對稱正定矩陣來說, 區塊 Gauss-Seidel 迭代法的收斂情形是最好的, 而 C.G. Multigrid 法其次。但是除了已知區塊 Gauss-Seidel 法隱含著 Multigrid 方法外尚欠理論基礎。

參考文獻

- [1] 曾正男, 《一套提昇凌波函數逼近能力與平滑度的方法》, 中央大學數學研究所碩士論文, 1997。
- [2] 蘇寄穎, 《Helmholtz 方程的凌波-有限元素數值解與穩定性分析》, 中央大學數學研究所碩士論文, 1998。
- [3] 單維彰, 《凌波初步》, 全華科技圖書, 1999。
- [4] 曾譯醇, 《提昇後的凌波函數與數值計算》, 中央大學數學研究所碩士論文, 2001。
- [5] Claes Johnson, *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, Cambridge University Press, 1987。
- [6] William L. Briggs, *A Multigrid Tutorial*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1991。
- [7] John Penny and George Lindfield, *Numerical methods using MATLAB*, New York : Ellis Horwood, 1995。
- [8] Richard L. Burden and J. Douglas Faires, *Numerical analysis*, Brooks Cole Publishing Company, 1997。
- [9] Stéphane Mallat, *a Wavelet Tour of Signal Processing*, Second ed., Academic Press, 1999。