



دانشگاه سیستان و بلوچستان
تحصیلات تکمیلی

پایان نامه کارشناسی ارشد ریاضی کاربردی

عنوان:

روشهای عددی برای تعیین مقدار ویژه معادلات
دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم

استاد راهنما:

دکتر پرویز سرگلزائی

تحقیق و نگارش:

نرگس کیخاکهن

خرداد ۱۳۹۲

چکیده

برای بدست آوردن مقدار ویژه معادلات دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم، روش های مختلف عددی وجود دارد از جمله می توان به روش های تک گامی، چندگامی خطی و روش پرتابی اشاره کرد. در این پایان نامه به بررسی برخی روش های عددی می پردازیم و با کمک این روش ها به حل معادله شرودینگر که یک معادله ی دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم می باشد، خواهیم پرداخت و با مقایسه ی روش ها، روش دقیق تر ارائه و معرفی می شود.

یک روش دقیق برای حل عددی مسئله مقدار ویژه ی معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم استفاده از روش پرتابی می باشد، که این روش دو گام دارد، در گام اول مقادیر اولیه برای مقدار ویژه و بردار ویژه در بازه ی داده شده توسط استفاده از روش مقدار ویژه ماتریس گسسته ساز بدست می آید. در گام دوم مسئله مقدار اولیه مربوط به این معادله با روش های چندگامی خطی دقیق حل می شود. در نهایت به ارائه گام سوم می پردازیم که اصلاح روش پرتابی را معرفی می کند.

واژگان کلیدی: مقدار ویژه عددی، روش چندگامی خطی، روش پرتابی، نوسانگر هارمونیک.

پیشگفتار

امروزه شاهد کاربردهای گسترده‌ی معادلات دیفرانسیل و مسئله مقدار ویژه در زمینه‌های مختلف همچون توصیف حرکت سیارات، حرکت موشکها، واپاشی رادیواکتیو، قانون سرمایه‌ش نیوتن و... هستیم و بنابراین تحلیل و بکار بردن روشهای عددی برای به دست آوردن جواب‌های دقیق تر ضروری خواهد بود. مسئله مقدار ویژه در معادلات دیفرانسیل معمولی یکی از روندهای اساسی در حوزه‌ی مسائل مقدار مرزی در مکانیک و ریاضی فیزیک و حوزه‌های مهمی از مکانیک کوانتوم می باشد.

یکی از روش‌ها برای حل مسئله مقدار ویژه و بردار ویژه روش پرتابی می باشد. روش دیگر برای حل در مسئله مقدار-مرزی دونقطه‌ای، روش مقدار ویژه‌ی ماتریس گسسته شده DM ^۱ می باشد. در واقع پایان نامه حاضر یک روش با دقت مناسب برای حل مسائل مقدار ویژه ارائه می دهد، البته تا وقتی که شرایط خوبی از روش مقدار ویژه DM را حفظ کند [۳، ۸].

روش‌های عددی برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی به دو دسته تقسیم می شود:

۱- روش‌های تک گامی که توسط روش رانگ - کوتا معرفی می شوند.

۲- روش‌های چندگامی خطی.

در مسائل کاربردی همچون فیزیک کوانتوم برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی، اغلب روش‌های چندگامی دقیق تر از روش‌های تک گامی می باشند و هرچه عدد گام بیشتر باشد دقت بالاتر خواهد بود [۴].

در پایان نامه حاضر، در فصل اول به معرفی و تعریف مفاهیمی که در پایان نامه مورد نیاز می باشد، می پردازیم و در فصل دوم به بیان و اثبات برخی از قضایا و روشها می پردازیم. در فصل سوم روش‌های مورد استفاده در روند پایان نامه معرفی و بررسی خواهد شد. در فصل چهارم به نتایج عددی و مثال مورد نظر می پردازیم و در نهایت نیز نتیجه گیری و ارائه پیشنهادات را خواهیم داشت.

^۱ discretized matrix eigenvalue method

فهرست مندرجات

ک	فهرست شکل ها	۱
ل	فهرست جداول	۱
۱	تعاريف و مقدمات	۱
۲	مقدمه	۱-۱
۱۳	مسائل مقدار اوليه براي دستگاه های معادلات ديفرانسیل معمولی مرتبه اول	۲-۱
۱۴	رابطه ی بين مکانیک کوانتوم و محاسبات عددی	۳-۱
۱۵	معرفی و تحلیل روش ها	۲
۱۶	مقدمه	۱-۲
۱۶	روشهای رونگ-کوتا	۲-۲
۲۰	روشهای چندگامی	۳-۲
۲۱	فرمول آدامز-بشفورث	۱-۳-۲

۲۲ فرمول آدامز-مولتن ۲-۳-۲	
۲۴ تحلیل روشهای چندگامی خطی ۴-۲	
۳۱ روش پرتابی (تیراندازی) ۵-۲	
۳۶ دنباله استورم و روش تنصیف ۶-۲	
۴۱ تبدیل معادلات دیفرانسیل مرتبه بالاتر به دستگاه مرتبه اول ۷-۲	
۴۴ روشهای عددی و روند حل ۳	
۴۵ مقدمه ۱-۳	
۴۵ حدس مقدار اولیه برای مقدار ویژه و تابع ویژه ۲-۳	
۴۵ حل مسئله مقدار ویژه ODE توسط استفاده روش مقدار ویژه DM ۱-۲-۳	
۴۷ حل عددی با استفاده از روش چندگامی خطی ۳-۳	
۵۰ اصلاح روش پرتابی ۴-۳	
۵۳ نتایج عددی ۴	

۵۴	مقدمه	۱-۴
۵۴	برنامه نویسی	۲-۴
۵۴	تعیین مقدار ویژه با روش تنصیف	۱-۲-۴
۵۵	الگوریتم تعیین بردار ویژه با روش تکرار معکوس	۲-۲-۴
۵۶	الگوریتم روش های تک گامی و چندگامی	۳-۲-۴
۵۸	الگوریتم روش پرتابی خطی	۴-۲-۴
۵۹	الگوریتم روش پرتابی غیرخطی	۵-۲-۴
۶۱	مثال عددی	۳-۴
۷۰	نتیجه گیری و پیشنهادات	۴-۴
۷۱		واژه نامه	A
۷۵		مراجع	B

فهرست شکل ها

- شکل ۱-۲ : خاصیت یک درمیانی ۳۸
- شکل ۲-۲: تعیین علامت چندجمله‌ایی های مشخصه ۳۹
- شکل ۱-۴ : نمودار نوسانگر هارمونیک با عدد کوانتوم یک تا شش ۶۶
- شکل ۲-۴: نمودار مقایسه ای روش های بکار برده شده ۶۹

فهرست جداول

- جدول ۱-۳: ضرایب α_μ و خطای C_{k-i} در روش چندگامی ۴۹
- جدول ۲-۳: ضرایب β_μ و خطای C_{k-i} در روش چندگامی ۵۰
- جدول ۱-۴: نتایج بدست آمده از چند روش بکار برده شده ۶۸
- جدول ۲-۴: مقادیر ویژه محاسبه شده ۶۹

فصل ۱

تعاريف و مقدمات

۱-۱ مقدمه

امروزه ریاضیات و روابط حاکم بر آن، آنچنان با سایر علوم درآمیخته که امکان مطالعه و تحقیق در هیچ زمینه‌ای بدون استفاده از اصول و قواعد ریاضی امکان پذیر نیست. در این میان بحث معادلات دیفرانسیل از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است، زیرا علوم مختلف نیاز به تعیین تابعی از طریق معادلات دیفرانسیل دارند. در این فصل ابتدا مختصری پیرامون معادلات دیفرانسیل و تعاریف وابسته به آن می‌پردازیم و بعد از آن به معرفی اصطلاحات دیگر مورد نیاز در این پایان نامه می‌پردازیم.

تعریف ۲.۱ (تعریف معادله دیفرانسیل): اگر $y = f(x)$ یک تابع باشد، معادلاتی که شامل تابع f و مشتقات آن نسبت به متغیر x باشد را یک معادله دیفرانسیل می‌نامیم.

تعریف ۳.۱ (معادلات دیفرانسیل معمولی): فرض کنید تابع مجهول به یک متغیر بستگی داشته باشد در معادلات دیفرانسیل تنها مشتقات معمولی ظاهر می‌شوند و این معادلات، معادلات دیفرانسیل معمولی نامیده می‌شود.

تعریف ۴.۱ (مرتبه معادله دیفرانسیل): در یک معادله دیفرانسیل، بزرگترین مرتبه‌ی مشتق موجود در آن، مرتبه‌ی معادله دیفرانسیل نامیده می‌شود.

به عنوان مثال:

$$y'' - 2y' + 3 = 0 \quad (1.1)$$

$$4y(y^{(3)})^2 + 3y'' + 4x = 0 \quad (2.1)$$

معادله شماره (۱.۱) یک معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه ۲ است و معادله شماره (۲.۱) یک معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه ۳ می‌باشد.

تعریف ۵.۱ (معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه n): اگر Y تابعی دلخواه از X باشد و F تابعی از $n + 2$ متغیر X و Y و Y' و $Y'' \dots$ و $Y^{(n)}$ باشد، آنگاه معادله دیفرانسیل $F(X, Y, Y', \dots, Y^{(n)}) = 0$ یک معادله دیفرانسیل مرتبه n نامیده می‌شود.

به عنوان مثال معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم دارای شکل $y'' = f(x, y, y')$ می باشد که در آن f یک تابع مفروض است. نکته قابل ذکر این است که به دلیل کاربردهای متفاوت این معادلات در زمینه‌های ریاضی فیزیک، مکانیک سیالات، مکانیک کوانتوم و... بیشتر از متغیر مستقل t به عنوان زمان، به جای x استفاده می شود.

تعریف ۶.۱ (جواب معادله دیفرانسیل): جواب یک معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه n در بازه I تابع $y = f(x)$ است، بطوری که مشتقات مرتبه اول تا مرتبه n تابع $y = f(x)$ در این بازه موجود باشند و در معادله $F(x, f(x), f'(x), \dots, f^{(n)}(x))$ صدق کنند.

تعریف ۷.۱ (مساله‌ی مقدار اولیه): مساله‌ی مقدار اولیه‌ی متناظر با معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه n معادله‌ایست با n شرط بطوری که بتوانیم با این n شرط، جواب خصوصی را از جواب عمومی بدست آوریم.

تعریف ۸.۱ (مسائل مقدار اولیه برای معادله دیفرانسیل مرتبه دوم): مساله‌ی مقدار اولیه‌ی برای معادلات دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم را به شکل:

$$y'' = f(t, y, y').$$

به ازای $a \leq t \leq b$ و با شرایط اولیه $y(a) = \alpha_0$ و $y'(a) = \alpha_1$ معرفی می کنیم.

تعریف ۹.۱ (معادله شرودینگر): معادله شرودینگر، معادله‌ای است که چگونگی تغییر حالت کوانتومی یک سامانه فیزیکی با زمان را توصیف می کند.

این معادله یک معادله جبری ساده نیست ولی (عموماً) یک معادله دیفرانسیل می باشد که همانند قانون دوم نیوتن، از لحاظ ریاضی می تواند به فرمولبندی های دیگر تبدیل شود.

معادله شرودینگر یک معادله موج ریاضی است که براساس حرکت های موج پاسخ داده شده است. در حالت عادی معادله موج در فیزیک، می تواند از قوانین دیگر فیزیکی، مشتق گیری شود. معادلات شرودینگر براساس انرژی مواد و قیاس منطقی جداگانه در مکانیک کوانتومی هستند. این معادله می تواند وابسته به زمان و یا مستقل از زمان باشد.

تعریف ۱.۹.۱ (معادله وابسته به زمان): عمومی ترین شکل آن به صورت زیر می باشد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi .$$

که ψ "تابع موج سیستم کوانتومی، i واحد موهومی، \hbar ثابت کاهنده پلانک و \hat{H} عملگر هامیلتونی است که انرژی کل به ازای هر تابع موج داده شده را مشخص می کند و شکل های مختلفی را بسته به شرایط به خود می گیرد.

تعریف ۲.۹.۱ (معادله مستقل از زمان): معادله مستقل از زمان شرودینگر که به شکل $E\psi = \hat{H}\psi$ می باشد، پیش بینی می کند که توابع موج می توانند امواج ایستاده تشکیل دهند که حالت های ثابت نامیده می شوند.

در واقع این معادله حالت های پایا را توصیف می کند. وقتی عملگر هامیلتونی به روی تابع موج ψ عمل می کند، نتیجه ممکن است با همان تابع موج ψ متناسب باشد. اگر اینگونه باشد، ψ یک حالت پایا است و ثابت تناسب است، E انرژی آن حالت ψ است. این معادله در اصطلاح جبرخطی یک معادله مقدار ویژه است.

تعریف ۱۰.۱ (ماتریس هامیلتونی): فرض کنید $J_n = \begin{pmatrix} \circ & I_n \\ -I_n & \circ \end{pmatrix}$ باشد که I_n ماتریس همانی در R^n است. وابسته به این J_n چند نوع ماتریس را تعریف خواهیم کرد. از تعریف I_n به آسانی نتیجه می شود که $J_n^{-1} = J_n^T = -J_n$. بنابراین ماتریس $M \in R^{2n \times 2n}$ همیلتونی نامیده می شود، اگر $MJ_n = (MJ_n)^T$ باشد. هر ماتریس همیلتونی به شکل زیر است:

$$M = \begin{pmatrix} F & G \\ H & -F^T \end{pmatrix} .$$

که $F, G, H \in R^{n \times n}$ و $G = G^T$ و $H = H^T$ می باشد.

مجموعه ماتریس های $2n \times 2n$ همیلتونی حقیقی را بصورت $H = \{M \in R^{2n \times 2n} | MJ_n = (MJ_n)^T\}$ نمایش می دهیم .

اگر M هامیلتونی و λ یک مقدار M باشد، آنگاه $-\bar{\lambda}$ و λ و $\bar{\lambda}$ نیز مقادیر ویژه ماتریس M می باشند. بنابراین طیف ماتریس هامیلتونی نسبت به هر دو محور حقیقی و موهومی متقارن است، ماتریس همیلتونی

$M \in R^{2n \times 2n}$ که مقادیر ویژه موهومی محض ندارد باید دقیقا n مقدار ویژه در نیم صفحه چپ و n مقدار ویژه در نیم صفحه راست داشته باشد.

تعریف ۱۱.۱: اگر در ماتریس همیلتونی $M = \begin{pmatrix} F & G \\ H & -F^T \end{pmatrix}$ ، H صفر و F شبه بالا مثلثی باشد، آنگاه گفته می شود ماتریس به شکل همیلتونی مثلثی می باشد.

تعریف ۱۲.۱: ماتریس $N \in R^{2n \times 2n}$ پاد همیلتونی نامیده می شود، اگر $NJ_n = -(NJ_n)^T$. هر ماتریس پاد همیلتونی به شکل $N = \begin{pmatrix} F & G \\ H & -F^T \end{pmatrix}$ است که $F, G, H \in R^{n \times n}$ و $G = G^T$ و $H = H^T$ می باشند.

فرض کنید $M^2 = \begin{pmatrix} F & G \\ H & -F^T \end{pmatrix}^2 = N = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{pmatrix}$ که $H = H^T, G = G^T$ آنگاه داریم:

$$\begin{aligned} N_{11} &= F^2 + GH = N_{22}^T \\ N_{21} &= HF - F^T G = -N_{12}^T \\ N_{12} &= FG - GF^T = -N_{21}^T. \end{aligned}$$

که نشان می دهد N خواص ماتریس پاد همیلتونی را دارد.

بنابراین اگر M همیلتونی باشد، آنگاه M^2 پاد همیلتونی است. مجموعه ماتریس های مربع همیلتونی را با H^2 نشان می دهیم. یعنی:

$$H^2 = \{N \in R^{2n \times 2n} | N = M^2, M \in H\}.$$

H^2 خاصیت مهمی دارد و آن این است که اگر $M \in H$ باشد و مجموعه مقادیر ویژه برابر

$$\lambda(M^2) = \{\lambda_1^2, \lambda_1^2, \dots, \lambda_n^2, \lambda_n^2\} \text{ آنگاه } \lambda(M) = \{\lambda_1, -\lambda_1, \dots, \lambda_n, -\lambda_n\}$$

برای مثال حالت $n = 1$ را بررسی می کنیم.

$$\text{فرض کنید } M = \begin{pmatrix} a & g \\ f & -a \end{pmatrix}, \text{ آنگاه:}$$

$$M^2 = \begin{pmatrix} a & g \\ f & -a \end{pmatrix}^2 = \text{diag}(a^2 + fg, a^2 + fg).$$

بوضوح مقادیر ویژه M ، دوریسه $a^2 + fg$ می باشد.

تعریف ۱۳.۱ (عملگر همیلتونی): برای به دست آوردن معادله شرودینگر، عملگر همیلتونی برای

سیستم جهت محاسبه انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی ذرات تشکیل دهنده سیستم و جایگذاری در معادله شرودینگر تنظیم شده است.

به بیان ساده تر پایستگی انرژی که انرژی کل ذرات متشکل از جمع انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل است، این جمع معادل هامیلتونی در مکانیک کلاسیک است.

تعریف ۱۴.۱ (مکانیک کوانتوم): مکانیک کوانتوم شاخه ای بنیادی از فیزیک نظری است که در مقیاس اتمی و زیر اتمی بکار برده می شود.

تعریف ۱۵.۱: گوئیم تابع $f(t, y)$ با متغیر y بر مجموعه $D \subset R^2$ در شرط لیپ شیتس صدق می کند در صورتی که یک ثابت مانند $L > 0$ با این خاصیت وجود داشته باشد که به ازای هر $(t, y_1), (t, y_2) \in D$.

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L |y_1 - y_2| .$$

ثابت L را یک ثابت لیپ شیتس برای f گوئیم.

تعریف ۱۶.۱: گوئیم مجموعه $D \subset R^2$ محدب است اگر به ازای هر $(t, y_1), (t, y_2) \in D$ ، نقطه ی $((1 - \lambda)t_1 + \lambda t_2, (1 - \lambda)y_1 + \lambda y_2)$ نیز به ازای هر λ ، که $0 \leq \lambda \leq 1$ ، متعلق به D باشد.

تعریف ۱۷.۱: گوئیم مسئله مقدار اولیه:

$$dy/dx = f(t, y) .$$

با شرط $a \leq t \leq b$, $y(a) = \alpha$ یک مسئله خوش وضع است اگر:

(اولاً) یک جواب منحصر بفرد، مثل $y(t)$ ، برای این مسئله وجود داشته باشد.

(ثانیاً) عددی مانند $\epsilon > 0$ با این خاصیت باشد که جواب منحصر بفرد $z(t)$ برای مسئله

$$dz/dt = f(t, y) + \delta(t) .$$

با شرط $a \leq t \leq b$, هرگاه $|\epsilon_0| < \epsilon$ و به ازای هر $a \leq t \leq b$, $|\delta(t)| < \epsilon$ وجود داشته باشد.

(ثالثاً) ثابتی مانند $k > 0$ با این خاصیت باشد که به ازای هر $a \leq t \leq b$.

$$|z(t) - y(t)| < k\varepsilon.$$

مسئله ایی که با معادله مشخص شده است را اغلب یک مسئله منحرف شده وابسته به مسئله ی اصلی می نامند.

تعریف ۱۸.۱ (فضای ضرب داخلی): فرض کنید U یک فضای خطی باشد، آنگاه ضرب داخلی (u, v) برای $u, v \in U$ یک مقدار حقیقی است که به ازای هر $u, v, w \in \psi$ و $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ در اصول زیر صدق می کند:

$$۱) (u, v) = (v, u), \quad \text{تقارن}$$

$$۲) (\alpha u + \beta v, w) = \alpha(u, w) + \beta(v, w), \quad \text{خطی بودن}$$

$$۳) (u, v) \geq 0, \quad (u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0. \quad \text{معین مثبت}$$

فضای خطی U با یک ضرب داخلی تعریف شده روی آن یک فضای ضرب داخلی نامیده می شود.

تعریف ۱۹.۱ (فضای نرم دار کامل): زیر مجموعه U از یک فضای نرم دار V کامل است اگر هر دنباله کوشی در U همگرا به یک عنصر U باشد.

تعریف ۲۰.۱ (فضای هیلبرت^۱): فضای نرم دار کامل، فضای باناخ نامیده می شود. همچنین فضای ضرب داخلی کامل یک فضای هیلبرت نامیده می شود.

فضای هیلبرت l_2 ، توسط مجموعه ای از دنباله ها تولید شده و به صورت زیر تعریف می شود:

$$l_2 = \left\{ (x_1, x_2, \dots), x_i \in \mathbb{R} \text{ یا } \mathbb{C} : \sum_{i=1}^{\infty} |x_i|^2 < \infty \right\}$$

تعریف ۲۱.۱ (رتبه ماتریس): حداکثر تعداد سطرها یا ستون های مستقل خطی ماتریس $A_{m \times n}$ رتبه آن نامیده می شود و با $rank(A)$ نمایش داده می شود.

تعریف ۲۲.۱ (رتبه کامل): ماتریس $A_{m \times n}$ را رتبه کامل گوئیم اگر یا دارای رتبه سطری کامل (سطرهای آن مستقل خطی باشند) یا دارای رتبه ستونی کامل (ستون های آن مستقل خطی باشند) باشد. در غیر این

^۱Hilbert space

صورت آن را رتبه ناقص گوئیم.

تعریف ۲۳.۱ (برد و فضای پوچ): برای هر ماتریس از مرتبه $m \times n$ دوزیر فضای وابسته مهم وجود دارد: برد A که توسط $R(A)$ و فضای پوچ A که توسط $N(A)$ نمایش داده می‌شوند به قسمی که:

$$R(A) = \{b \in \mathbb{R}^m \mid b = Ax, x \in \mathbb{R}^n\},$$

$$N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}.$$

تعریف ۲۴.۱ (نرم برداری): تابع حقیقی مقدار $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ که دارای خواص زیر می باشد را یک نرم برداریا به طور ساده نرم بر \mathbb{R}^n می نامند.

(۱) اگر $x \neq 0$ آنگاه $\|x\| > 0$ و $\|x\| = 0$ اگر $x = 0$.

(۲) به ازای هر $\alpha \in \mathbb{R}$ ، $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$.

(۳) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

تعریف ۲۵.۱ (نرم ماتریس): برای هر ماتریس $A_{m \times n}$ ، نرم ماتریسی A به صورت تابع $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ که دارای خواص زیر است تعریف می‌شود:

(۱) اگر $A \neq 0$ آنگاه $\|A\| > 0$ و $\|A\| = 0$ اگر و تنها اگر $A = 0$.

(۲) به ازای هر اسکالر $\alpha \in \mathbb{R}$ ، $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$.

(۳) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$.

تعریف ۲۶.۱ (P -نرم): با مفروض بودن ماتریس A و نرم برداری $\|\cdot\|$ ، عدد نامنفی $\|A\|_P$ که به صورت زیر تعریف می‌شود و در همه خواص نرم ماتریسی صدق می‌کند:

$$\|A\|_P = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_P}{\|x\|_P}.$$

P -نرم ماتریس A می‌نامند.

تعریف ۲۷.۱ (چند جمله‌ای مشخصه): یک چند جمله‌ای بر حسب λ و از درجه n به صورت

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

چند جمله‌ای مشخصه ماتریس A نامیده می‌شود. بنابراین n مقدار ویژه A ، n ریشه چندجمله‌ای مشخصه آن هستند.

تعریف ۲۸.۱ (مسئله مقدار ویژه): مسئله پیدا کردن n اسکالر λ و بردارهای مخالف صفر x برای

$$Ax = \lambda x$$

یک مسئله مقدار ویژه نامیده می‌شود که A یک ماتریس $n \times n$ است. اگر ماتریس A متقارن باشد، آنگاه مسئله مقدار ویژه به یک مسئله مقدار ویژه متقارن تبدیل می‌شود.

تعریف ۲۹.۱ (فضای ویژه): فرض کنید A یک ماتریس $n \times n$ و λ عددی ثابت باشد. مجموعه همه n -تایی‌های X که در معادله $AX = \lambda X$ صدق می‌کند را فضای ویژه A وابسته به λ نامند و با δ_λ نمایش می‌دهند.

تعریف ۳۰.۱ (الگوریتم): یک مجموعه مرتب از اعمال منطقی و حسابی است که هنگامی که بر یک مسئله محاسباتی تعریف شده از یک مجموعه داده، که داده‌های ورودی نامیده می‌شوند، اعمال می‌گردد یک جواب برای مسئله تولید می‌کند. یک جواب شامل یک مجموعه داده است که داده‌های خروجی نامیده می‌شوند.

تعریف ۳۱.۱ (کارایی یک الگوریتم): یک الگوریتم حاوی ماتریس‌های مرتبه n کارا است اگر برای پیاده سازی به اعمال متمیز شناور بیشتر از مرتبه n^3 نیاز نداشته باشد.

تعریف ۳۲.۱ (روش تکراری): روشی است که جواب مسئله را با شروع از یک تقریب اولیه از جواب، بعد از تعدادی تکرار محاسبه می‌کند. معمولاً وقتی که روند تکرار پیش می‌رود تقریب‌ها به جواب اصلی مسئله نزدیکتر می‌شوند.

از جمله روش‌های تکراری برای حل مسائل ویژه می‌توان به روش‌های توانی، روش‌های توانی معکوس و روش هوس هولدار اشاره کرد.

تعریف ۳۳.۱ (روش توانی معکوس): روش تکراری برای پیدا کردن یک بردار ویژه با مفروض بودن یک تقریب نسبتاً خوب از مقدار ویژه ای می‌باشد که بردار ویژه آن باید محاسبه شود. روش توانی معکوس به

تکرار معکوس نیز معروف است.

تعریف ۳۴.۱ (روش تک گامی): روشی که در آن تقریب نقطه ی شبکه ای x_{i+1} فقط مستلزم اطلاع از یکی از نقاط شبکه ای قبلی، یعنی x_i است و این روش اطلاعات محاسبات تابعی را در نقاط بین x_{i+1} و x_i بکار می برد. برای نمونه می توان به روش های رانگ-کوتا اشاره کرد.

تعریف ۳۵.۱ (روش چند گامی): روش هایی که در بیشتر از یک نقطه ی شبکه ای قبلی را جهت تعیین تقریب در نقطه ای بعدی بکار می گیرند، روش های چند گامی نامیده می شوند.

تعریف ۳۶.۱ (روش تنصیف): روشی که با توجه به روابط بازگشتی موجود بین چند جمله ای های مشخصه یک ماتریس کاهش ناپذیر و سه قطری متقارن، قادر است مقادیر ویژه ماتریس را بدست آورد.

تعریف ۳۷.۱ (روش پرتابی): روشی که برای حل مسأله ی مقدار مرزی (خطی یا غیرخطی) بکار می رود و اساس کار آن این است که مسأله را از حالت مرزی خارج کرده و به صورت مسأله مقدار اولیه تبدیل می کند و مسأله مقدار اولیه ی وابسته به مسأله ی اصلی را با حدس اولیه برای مقدار اولیه مناسب حل می کند تا جواب تقریبی مرزی بدست آید. این روش را بخاطر شباهت با تیراندازی اشیایی که هدف ثابتی هستند، روش پرتابی (تیراندازی) نامیده اند.

قضیه ۳۸.۱ (قضایای وجود و یکتایی جواب):

قضیه وجود - مسئله مقادیر اولیه و مسئله مقادیر مرزی

فرض می کنیم $F(x, y, y', \dots, y^n)$ تابعی از متغیرهای x, y, y', \dots, y^n بوده و در دو شرط زیر صدق می کند:

الف - در ناحیه $|y^{(n-1)} - y_0^{(n-1)}| < h, \dots, |y - y_0| < h, |x - x_0| < h$ معین و پیوسته باشد.

ب - در این ناحیه دارای مشتقات نسبی مرتبه اول پیوسته نسبت به $x, y, y', \dots, y^{(n-1)}$ باشد، در این صورت

معادله $y^n = F(x, y, y', \dots, y^{(n-1)})$ دارای جوابی مانند $y = f(x)$ خواهد بود که خواص زیر را خواهد داشت:

۱- تابع $y = f(x)$ در فاصله $|x - x_0| < h$ معلوم بوده و در شرایط اولیه $x = x_0, y = y_0, y' = y_0', \dots, y^{(n-1)} = y_0^{(n-1)}$ صدق می کند.

۲- این جواب منحصر بفرد می باشد. یعنی اگر $y = g(x)$ جواب معادله $y^n = F(x, y, y', \dots, y^{(n-1)})$

باشد، باید در شرایط اولیه $y^{(n-1)} = y_0^{(n-1)}, \dots, y' = y_0', \dots, y = y_0, x = x_0$ صدق کند. در نقاطی که توابع $f(x), g(x)$ معلوم هستند $g(x) = f(x)$.

قضیه ۳۹.۱ (قضیه وجود و یکتایی برای مسائل اولیه و مرزی):

مسئله مقدار مرزی $y(b) = \beta, y(a) = \alpha$ $a \leq x \leq b$ $y'' = f(x, y, y')$

و مسئله مقدار اولیه $y'(a) = t, y(a) = \alpha$ $a \leq x \leq b$ $y'' = f(x, y, y')$

به ازای یک پارامتر دلخواه t و بر $[a, b]$ جوابهای منحصر بفرد دارند، اگر

$$D = \{(x, y, y') | a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty, -\infty < y' < \infty\}$$

الف - f و $\frac{\partial f}{\partial y}$ و $\frac{\partial f}{\partial y'}$ پیوسته باشد.

ب - ثابت M وجود داشته باشد بطوری که $L < \frac{\partial f}{\partial y} < L$ ، که L ثابت لیب شیتس می باشد.

قضیه ی زیر شرایط کلی که اطمینان می دهد جواب یک مسئله مقدار مرزی مرتبه دوم وجود دارد و منحصر بفرد است را معرفی می کند.

قضیه ۴۰.۱ (قضیه وجود و یکتایی برای مسائل مرزی): فرض می کنیم تابع

f در مسئله مقدار مرزی $y(b) = \beta, y(a) = \alpha$ $a \leq x \leq b, y'' = f(x, y, y')$ بر مجموعه ی

$D = \{(x, y, y') | a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty, -\infty < y' < \infty\}$ پیوسته بوده و $\frac{\partial f}{\partial y}$ و $\frac{\partial f}{\partial y'}$ بر D پیوسته باشند و

هرگاه به ازای هر $(x, y, y') \in D$ ، $|\frac{\partial f}{\partial y'}(x, y, y')| \leq M$ ، آنگاه مسئله مقدار مرزی فوق جواب منحصر بفرد دارد.

قضیه ۴۱.۱ (قضیه اول خوش وضعی): فرض کنیم $D = \{(t, y) | a \leq t \leq b, -\infty < y < \infty\}$ و $f(t, y)$

بر D پیوسته باشد. هرگاه f نسبت به متغیر y بر D در شرط لیب شیتس صدق کند، آنگاه مسئله مقدار اولیه

$y(a) = \alpha$ ، $a \leq t \leq b$ ، $y' = f(t, y)$ دارای جواب منحصر بفرد $y(t)$ به ازای $a \leq t \leq b$ خواهد بود.

قضیه ۴۲.۱ (قضیه دوم خوش وضعی): فرض می کنیم $D = \{(t, y) | a \leq t \leq b, c < y < d\}$ مسئله

مقدار اولیه $y(a) = \alpha$ $a \leq t \leq b, \frac{\partial y}{\partial t} = f(t, y)$ خوش وضع است اگر f پیوسته و نسبت به متغیر y بر مجموعه

ی D در شرط لیب شیتس صدق کند.

قضیه ۴۳.۱ (قضیه گریشگورین): فرض کنیم A یک ماتریس $n \times n$ بوده و R_i نمایشگر دایره ای در

صفحه‌ی مختلط به مرکز a_{ii} و شعاع $\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|$ باشد یعنی :

$$R_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|\}$$

مقادیر ویژه‌ی A در $R = \bigcup_{i=1}^n R_i$ قرار دارند و اجتماع هر k تا از این دایره‌ها که $(n - k)$ تای دیگر را قطع نکند باید دقیقاً شامل k (باشمارش مرتبه تکرار) مقدار ویژه باشد.

(برهان در صفحه ۴۸ [۷]).

قضیه ۴۴.۱ (مثلث سازی شور): فرض کنید A یک ماتریس مختلط $n \times n$ ماتریس یکایی باشد، آنگاه

ماتریس یکانی U وجود دارد بطوری که $U^*AU = T$ که T یک ماتریس بالامثلثی است و عناصر قطری T مقادیر ویژه A می باشند.

حال فرض کنید A یک ماتریس حقیقی $n \times n$ باشد. آنگاه ماتریس متعامد $Q_{n \times n}$ وجود دارد، بطوری که:

$$Q^T A Q = R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1k} \\ \circ & R_{22} & \cdots & R_{2k} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \circ & \cdots & \circ & R_{kk} \end{pmatrix}.$$

که هر R_{ii} یک اسکالر و یا یک ماتریس 2×2 می باشد. عناصر قطری اسکالرها برابر مقادیر ویژه حقیقی می باشند و هر ماتریس 2×2 روی قطر، یک جفت مقدار ویژه مزدوج دارد. برهان: [۵] را ببینید.

قضیه ۴۵.۱ (کاربرد قضیه مثلثی سازی شور):

فرض کنید A یک ماتریس هرمیتی باشد. آنگاه:

(۱) یک ماتریس یکانی U وجود دارد به طوری که:

$$U^H A U = D$$