EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatok iterációs megoldása

BSc Szakdolgozat

Lados Bálint István

Matematika BSc
Alkalmazott matematikus szakirány

Témavezető:
Karátson János

Alkalmazott Analízis és
Számításmatematikai Tanszék

Budapest, 2023

Tartalomjegyzék

Bevezetés

A folyadékok áramlásának egyik általános modelljét a Navier–Stokes-egyenletek írják le. Ezek linearizált változatának alapvető építőköveként tekinthetünk a konvekció-diffúziós egyenletekre, melyek lehetnek például egy szennyezőanyag koncentrációjának vagy egy folyadék hőmérsékletének modelljei egy áramló közegben. Erről bővebben az [1] könyvben olvashatunk.

A szakdolgozatom célja, hogy az ezeket is magában foglaló nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatok megoldhatóságát vizsgáljam, majd a konjugált gradiens-módszer (KGM) segítségével iterációs módszert dolgozzak ki a feladat megoldására. Ehhez a [2]-ben szereplő eredményeket használtam fel. A dolgozat részét képezi még az algoritmus számítógépes megvalósítása, példákon való tesztelése és numerikus vizsgálata.

A dolgozat négy részre tagolódik. Először a funkcionálanalízis eszközeivel operátoregyenletek és bilineáris formák megoldhatósági tételeit és az ezzel kapcsolatos alapvető fogalmakat ismertetjük, majd a dolgozat fő alanyaként szolgáló nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatok bemutatása után közvetlenül alkalmazzuk az eredményeket a gyenge megoldás létezésének és egyértelműségének bizonyítására.

Ezután az operátoregyenletek megoldására szolgáló konjugált gradiens-módszer ismertetése következik, melynek felépítését és konvergenciáját részletesen tárgyaljuk. Ennek általánosabb változata a KGN-módszer, melynek a peremérték-feladatoknál jól alkalmazható prekondicionált változatával ér véget ez a szakasz.

A két elmélet ötvözésével először általános nem korlátos, nem szimmetrikus operátorokra alkalmazzuk a prekondicionált KGN-módszert egy megfelelő korlátos operátorra való visszavezetéssel, majd ugyanezt elvégezzük a nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot meghatározó operátor esetén is. Az így kapott iterációs megoldási módszert több változatban is ismertetjük.

Végül az algoritmust véges differenciás diszkretizációval megvalósítjuk, majd a számítógépes programot kidolgozott példákon teszteljük. A program futása során tapasztalt konvergenciát összehasonlítjuk az idevonatkozó elméleti eredményekkel. A dolgozat végén megoldunk egy egyszerű fizikai modellből származó konvekció-diffúziós egyenletet.

A dolgozathoz készített MATLAB programkódokat a függelék tartalmazza.

1. Megoldhatósági tételek

A dolgozat során operátoregyenletekkel és iterációs megoldási módszereikkel foglalkozunk, melyhez elengedhetetlen a megoldás létezésének és egyértelműségének vizsgálata. Megmutatjuk, hogy az olyan $A\colon H \to H$ Hilbert-térbeli leképezésekre, amelyekre $A \in B(H)$, azaz A folytonos (korlátos) és lineáris, milyen megoldhatósági tételek teljesülnek koercivitási feltételek mellett. Ezután hasonló keretek között vizsgáljuk a $H \times H$ szorzattéren értelmezett bilineáris formákat és a velük kapcsolatos megoldhatósági tételeket. Az eredményeket valós és komplex értékű függvényekre egyaránt ismertetjük, azonban a későbbi fejezetekben leginkább valós Hilbert-terekben dolgozunk. A párhuzamos tárgyalás során $\mathbb{K}$-val jelöljük, ha $\mathbb{R}$ vagy $\mathbb{C}$ esetén is igaz az állítás.

1.1. Operátoregyenletek megoldhatósága

Legyen H valós vagy komplex Hilbert-tér. Azt a kérdést szeretnénk vizsgálni, hogy egy $A \in B(H)$ operátor mikor *bijekció*, azaz teljesül-e, hogy bármely $b \in H$ esetén létezik egyértelműen olyan $x^* \in H$, amire $Ax^* = b$. Erre adunk elégséges feltételeket, de előtte néhány fontos alapfogalmat definiálnunk kell.

1.1. Definíció. Egy $A \in B(H)$ operátor *önadjungált*, ha $\langle Ax, y\rangle = \langle x, Ay\rangle$, $\forall x, y \in H$.

1.2. Állítás. *Ha H komplex Hilbert-tér, akkor egy $A \in B(H)$ operátor pontosan akkor önadjungált, ha $\langle Ax, x\rangle$ valós értékű, $\forall x \in H$.*

1.3. Definíció. Egy $A \in B(H)$ önadjungált operátor

- *pozitív*, ha $\langle Ax, x\rangle \geq 0$, $\forall x \in H$;
- *szigorúan pozitív*, ha $\langle Ax, x\rangle > 0$, $\forall x \in H$ és $x \neq 0$;
- *egyenletesen pozitív*, ha $\exists m > 0\colon\ \langle Ax, x\rangle \geq m\|x\|^2$, $\forall x \in H$.

1.4. Megjegyzés. Az itt definiált operátorok komplex esetben mind önadjungáltak, mert $\langle Ax, x\rangle$ valós értékű, így alkalmazható az 1.2 állítás. Ha H valós Hilbert-tér, akkor külön megköveteljük, hogy az operátorok önadjungáltak legyenek.

1.5. Definíció. Egy $A \in B(H)$ operátor *koercív*, ha $\exists m > 0\colon\ \mathrm{Re}\,\langle Ax, x\rangle \geq m\|x\|^2$, $\forall x \in H$.

1.6. Megjegyzés. Ha H valós Hilbert-tér, akkor a definícióban $\mathrm{Re}\,\langle Ax, x\rangle$ helyett $\langle Ax, x\rangle$-t nézzük. Ekkor $A \in B(H)$ pontosan akkor egyenletesen pozitív, ha koercív és önadjungált.

1.7. Definíció. Legyen $A \in B(H)$ szigorúan pozitív operátor. Az $\langle x, y\rangle_A := \langle Ax, y\rangle$ skalárszorzatot az A operátorhoz tartozó *energia-skalárszorzatnak*, az $\|x\|_A = \sqrt{\langle Ax, x\rangle}$ indukált normát *energianormának* nevezzük.

1.8. Állítás. *Ha $A \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor, akkor $(H, \|\cdot\|_A)$ is Hilbert-tér.*

Bizonyítás. Az egyenletes pozitivitással $\|x\|_A$ alulról becsülhető, a Cauchy–Schwarz-egyenlőtlenséggel és A korlátosságával pedig felülről becsülhető a következő módon:

$$m\|x\|^2 \leq \langle Ax, x\rangle = \|x\|_A^2 \leq \|Ax\|\,\|x\| \leq \|A\|\,\|x\|^2, \quad \forall x \in H.$$

A két norma ekvivalenciájából következik az állítás. $\square$

Idézzük fel a funkcionálanalízisből jól ismert Riesz-féle reprezentációs tételt, melynek a megoldhatósági tételekben fontos szerepe lesz.

1.9. Tétel (Riesz reprezentációs tétele). *Legyen H Hilbert-tér. Ekkor minden $\phi : H \to \mathbb{K}$ folytonos lineáris funkcionálhoz létezik egyértelműen $y \in H$, hogy*

$$\phi x = \langle x, y \rangle, \quad \forall x \in H.$$

1.10. Tétel. *Ha $A \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor, akkor A bijekció.*

Bizonyítás. Mivel A egyenletesen pozitív, így az 1.8 állítás szerint $(H, \|\cdot\|_A)$ is Hilbert-tér. Ebben a térben rögzített $b \in H$ esetén a $\phi : H \to \mathbb{K}$, $\phi v := \langle v, b \rangle$ funkcionál lineáris a skalárszorzat első változóbeli linearitása miatt, és folytonos is:

$$|\phi v| = |\langle v, b \rangle| \le \|v\|\|b\| \le \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \|b\| \right) \|v\|_A, \quad \forall v \in H,$$

ahol először a Cauchy–Schwarz-egyenlőtlenséget használtuk, majd az A operátor egyenletes pozitivitását: $\|v\|_A^2 = \langle Av, v \rangle \ge m\|v\|^2 \quad \Rightarrow \quad \|v\| \le \frac{1}{\sqrt{m}} \|v\|_A$.

Az 1.9 Riesz-féle reprezentációs tétel szerint $\exists! x^* \in H$, amire $\phi v = \langle v, x^* \rangle_A$, $\forall v \in H$ esetén, azaz:

$$\langle v, b \rangle = \phi v = \langle v, x^* \rangle_A = \langle Av, x^* \rangle = \langle v, Ax^* \rangle, \quad \forall v \in H.$$

A fenti egyenlőség pontosan akkor teljesül $\forall v \in H$-ra, ha $Ax^* = b$. Ezért $\forall b \in H$ esetén $\exists! x^* \in H$, amire $Ax^* = b$, tehát A bijekció. □

1.11. Tétel. *Ha $A \in B(H)$ koercív operátor, akkor A bijekció.*

Bizonyítás. Az A operátor koercivitása miatt:

$$m\|x\|^2 \le \operatorname{Re} \langle Ax, x \rangle \le |\langle Ax, x \rangle| \le \|Ax\|\|x\|, \quad \forall x \in H$$

$$\Rightarrow \quad m\|x\| \le \|Ax\|, \quad \forall x \in H$$

Ebből következik, hogy A injektív. Indirekt tegyük fel, hogy A nem injektív, azaz $\exists x, y \in H$, $x \ne y$, amire $Ax = Ay \ \Rightarrow \ 0 = \|A(x-y)\| \ge m\|x-y\| \ge 0 \ \Rightarrow \ \|x-y\| = 0.$ ↯

Megmutatjuk, hogy az A^* operátor is koercív:

$$\operatorname{Re} \langle A^* x, x \rangle = \operatorname{Re} \overline{\langle x, A^* x \rangle} = \operatorname{Re} \langle x, A^* x \rangle = \operatorname{Re} \langle Ax, x \rangle \ge m\|x\|^2, \quad \forall x \in H.$$

Ezért az A^* operátorra is igaz, hogy minden $x \in H$ esetén $m\|x\| \le \|A^* x\|$, így A^* is injektív.

Tekintsük az $Ax = b$ operátoregyenlet szimmetrizáltját: $A^*Ax = A^*b$. Erre teljesül, hogy

(i) A^*A önadjungált: $\langle A^*Ax, y \rangle = \langle Ax, Ay \rangle = \langle x, A^*Ay \rangle$, $\forall x, y \in H$.

(ii) A^*A egyenletesen pozitív: $\langle A^*Ax, x \rangle = \langle Ax, Ax \rangle = \|Ax\|^2 \ge m^2\|x\|^2$, $\forall x \in H$.

Az 1.10 tételt az A^*A operátorra alkalmazva következik, hogy A^*A bijekció, ezért van olyan $x^* \in H$, hogy $A^*Ax^* = A^*b$. Ebből A^* injektivitása miatt következik, hogy x^* megoldása az $Ax = b$ egyenletnek, és A injektivitása miatt más megoldás nem létezhet, vagyis A bijekció. □

1.2. Bilineáris formák, Lax–Milgram-lemma

Legyen H valós vagy komplex Hilbert-tér. Ebben a fejezetben az előzőekhez hasonló megoldhatósági tételeket szeretnénk megfogalmazni kétváltozós leképezésekre.

1.12. Definíció. Egy $B\colon H \times H \to \mathbb{R}$ leképezés

(a) *bilineáris*, ha mindkét változójában lineáris;

(b) *szimmetrikus*, ha $B(x,y) = B(y,x)$, $\forall x,y \in H$;

(c) *korlátos*, ha $\exists M > 0\colon |B(x,y)| \le M\|x\|\|y\|$, $\forall x,y \in H$;

(d) *koercív*, ha $\exists m > 0\colon B(x,x) \ge m\|x\|^2$, $\forall x \in H$.

1.13. Definíció. Egy $B\colon H \times H \to \mathbb{C}$ leképezés

(a) *konjugáltan bilineáris*, ha első változójában lineáris, második változójában konjugáltan lineáris;

(b) *konjugáltan szimmetrikus*, ha $B(x,y) = \overline{B(y,x)}$, $\forall x,y \in H$;

(c) *korlátos*, ha $\exists M > 0\colon |B(x,y)| \le M\|x\|\|y\|$, $\forall x,y \in H$;

(d) *koercív*, ha $\exists m > 0\colon \operatorname{Re} B(x,x) \ge m\|x\|^2$, $\forall x \in H$.

1.14. Megjegyzés. A (konjugáltan) bilineáris leképezéseket gyakran (konjugáltan) bilineáris formáknak nevezzük.

1.15. Tétel (Korlátos formák Riesz-reprezentációja). *Legyen $B\colon H \times H \to \mathbb{K}$ korlátos, (konjugáltan) bilineáris forma. Ekkor létezik egyetlen olyan $A \in B(H)$ operátor, amelyre*

$$B(x,y) = \langle Ax, y\rangle, \quad \forall x,y \in H.$$

Bizonyítás. Legyen $y \in H$ rögzített, és $\phi_y\colon H \to \mathbb{K}$, $\phi_y x := B(x,y)$. Ez a funkcionál lineáris, mivel B az első változójában lineáris, és korlátos is B korlátossága miatt:

$$|\phi_y x| = |B(x,y)| \le (M\|y\|)\|x\|, \quad \forall x \in H.$$

Tehát $\|\phi_y\| \le M\|y\|$. A ϕ_y-ra alkalmazható az 1.9 Riesz-féle reprezentációs tétel, ezért $\exists! y^* \in H$, melyre $\phi_y x = \langle x, y^*\rangle$, $\forall x \in H$. Ha bevezetjük a $Cy := y^*$ jelölést, akkor $B(x,y) = \langle x, Cy\rangle$, $\forall x \in H$. Ebből adódik, hogy $C \in B(H)$, mert B és a skalárszorzat (konjugáltan) bilineáris, illetve C korlátos:

$$\|Cy\| = \|y^*\| = \|\phi_y\| \le M\|y\|,$$

ahol az utóbbi egyenlőség azért teljesül, mert egyrészt $|\phi_y x| = |\langle x, y^*\rangle| \le \|x\|\|y^*\| \Rightarrow \|\phi_y\| \le \|y^*\|$, másrészt $x = \frac{y^*}{\|y^*\|}$-ra $\phi_y x = \|y^*\|$. Ezért az $A := C^*$ operátorra teljesül a tétel állítása. $\square$

1.16. Megjegyzés. Az A operátort gyakran a B forma *Riesz-reprezentánsának* hívjuk.

1.17. Állítás. *Legyen $B\colon H \times H \to \mathbb{K}$ korlátos, (konjugáltan) bilineáris forma, és $A \in B(H)$ a B forma Riesz-reprezentánsa.*

(i) B pontosan akkor (konjugáltan) szimmetrikus, ha A önadjungált.

(ii) B pontosan akkor koercív, ha A koercív.

Bizonyítás. Az 1.1 és 1.5 definíciókban szereplő fogalmak egybeesnek az 1.12 és 1.13-ban definiáltakkal, ha $B(x,y) = \langle Ax, y\rangle$, $\forall x, y \in H$. $\square$

Most már minden eszköz a rendelkezésünkre áll, hogy bizonyítsuk a Lax–Milgram-lemmát, amely alapvető fontosságú lesz a nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladat gyenge megoldásának vizsgálatánál.

1.18. Tétel (Lax–Milgram-lemma). *Legyen H valós Hilbert-tér, $B\colon H \times H \to \mathbb{R}$ korlátos, koercív bilineáris forma. Ekkor minden $\phi : H \to \mathbb{R}$ korlátos lineáris funkcionálhoz létezik egyetlen olyan $u \in H$, amelyre*

$$B(u,v) = \phi v, \quad \forall v \in H.$$

Bizonyítás. B-re teljesülnek az 1.15 tétel feltételei. Legyen $A \in B(H)$ a B Riesz-reprezentánsa:

$$B(u,v) = \langle Au, v\rangle, \quad \forall u, v \in H.$$

Hasonlóan, rögzített ϕ-re teljesülnek az 1.9 Riesz-féle reprezentációs tétel feltételei. Legyen $b \in H$ a ϕ Riesz-reprezentánsa:

$$\phi v = \langle v, b\rangle, \quad \forall v \in H.$$

B koercív, ezért az 1.17 állítás szerint A is koercív. Az 1.11 megoldhatósági tétel miatt létezik egyértelműen $u \in H$, amelyre $Au = b$. Ekkor erre az u-ra és b-re:

$$B(u,v) = \langle Au, v\rangle = \langle b, v\rangle = \langle v, b\rangle = \phi v, \quad \forall v \in H. \qquad \square$$

2. Peremérték-feladatok gyenge megoldása

Ebben a szakaszban bemutatjuk a nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot és a megoldhatóságával kapcsolatos eredményeket. Először bevezetjük a Szoboljev-tereket, majd ismertetjük a dolgozatban vizsgált többdimenziós peremérték-feladatot, végül megmutatjuk a gyenge megoldás létezését és egyértelműségét.

2.1. Szoboljev-terek

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ Lebesgue-mérhető halmaz. Definiáljuk a peremérték-feladatok vizsgálatához szükséges függvénytereket, melyek közül esetünkben a $H_0^1(\Omega)$ Szoboljev-tér lesz a legfontosabb. Ezután kimondunk néhány tételt és állítást, melyeket a későbbiekben gyakran fogunk használni.

2.1. Definíció. Az $L^2(\Omega)$ tér elemei azok a Lebesgue-mérhető függvények, melyekre $\|f\|_{L^2} := \sqrt{\int_\Omega |f|^2}$ véges. Két függvényt azonosnak tekintünk, ha majdnem mindenütt (m. m.) egyenlőek.

2.2. Definíció. Az $L^\infty(\Omega)$ tér elemei azok a Lebesgue-mérhető függvények, melyekre $\|f\|_{L^\infty} := \operatorname{ess\,sup}(f) = \inf\{\sup_{\Omega\setminus N} |f| : N \subset \Omega \text{ nullmértékű}\}$ véges. Két függvényt azonosnak tekintünk, ha majdnem mindenütt (m. m.) egyenlőek.

2.3. Megjegyzés. Az L^∞-normát gyakran *lényeges szuprémumnak* is nevezik.

2.4. Definíció. Ha $\mathbf{b}\colon \Omega \to \mathbb{R}^n$ egy vektorértékű leképezés, akkor $\|\mathbf{b}\|_{L^\infty} := \operatorname{ess\,sup}|\mathbf{b}|$, azaz $\mathbf{b}$ L^∞-normáját úgy számíthatjuk ki, hogy a $|\mathbf{b}|$ számértékű leképezésnek vesszük a lényeges szuprémumát.

2.5. Tétel. $\big(L^2(\Omega), \|\cdot\|_{L^2}\big)$ *és* $(L^\infty(\Omega), \|\cdot\|_{L^\infty})$ *Banach-terek.*

2.6. Állítás. $L^2(\Omega)$ *Hilbert-tér az* $\langle f, g\rangle_{L^2} := \int_\Omega fg$ *skalárszorzattal, ha* f, g *valós értékű négyzetesen Lebesgue-integrálható függvények. Az indukált norma a korábban bevezetett* $\|\cdot\|_{L^2}$.

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány szakaszonként sima peremmel.

2.7. Definíció. A $H_0^1(\Omega)$ *Szoboljev-tér* elemei azon $u \in L^2(\Omega)$ függvények, melyeknek minden elsőrendű disztribúciós parciális deriváltja létezik és $L^2(\Omega)$-beli, illetve $u_{|\partial\Omega} = 0$ is teljesül nyomértelemben.

2.8. Definíció. Legyen $u\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenciálható függvény. Az *u gradiense* az az n-dimenziós oszlopvektor, melynek i. eleme az u i. változó szerinti parciális deriváltja. Jele: ∇u.

2.9. Tétel. $H_0^1(\Omega)$ *Hilbert-tér az* $\langle u, v\rangle_{H_0^1} := \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v$ *skalárszorzattal.*

2.10. Definíció. Legyen $v\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ differenciálható függvény. A v Jacobi-mátrixának főátlóbeli összegét a *v divergenciájának* nevezzük, és $\operatorname{div}(v)$-vel jelöljük.

2.11. Definíció. Az $u\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ kétszer differenciálható függvény esetén legyen $\Delta u := \operatorname{div}(\nabla u)$, ahol Δ-t *Laplace-operátornak* nevezzük.

2.12. Tétel (Green-formula). *Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány, melyre $\partial\Omega \in PC^1$, és $p \in C^1(\overline{\Omega})$. Ekkor minden $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$ és $v \in C^1(\overline{\Omega})$ függvényre teljesül, hogy*

$$\int_\Omega - \operatorname{div}(p\nabla u)\, v = \int_\Omega p\nabla u \cdot \nabla v - \int_{\partial\Omega} p\, \partial_\nu u\, v\, d\sigma.$$

2.13. Következmény. *Ha a Green-formula feltételei mellett $v_{|\partial\Omega} = 0$ is teljesül, akkor*

$$\int_\Omega - \operatorname{div}(p\nabla u)\, v = \int_\Omega p\nabla u \cdot \nabla v.$$

2.14. Állítás (Poincaré–Friedrichs-egyenlőtlenség). *Ha λ_1 a $-\Delta$ operátor legkisebb sajátértéke Ω-n a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett, akkor:*

$$\|u\|^2_{H^1_0} \geq \lambda_1 \|u\|^2_{L^2}, \quad \forall u \in H^1_0(\Omega).$$

2.15. Megjegyzés. A $-\Delta$ operátor sajátértékei az $u_{|\partial\Omega} = 0$ peremfeltétel mellett pozitívak. Legyen ugyanis λ sajátérték. Ekkor $\exists u \neq 0$ sajátfüggvény, amire $-\Delta u = \lambda u$. Az egyenletet u-val szorozva és Ω-n integrálva kapjuk a Green-formulát és a peremfeltételt felhasználva, hogy

$$\int_\Omega -u\Delta u = \int_\Omega |\nabla u|^2 = \lambda \int_\Omega u^2.$$

Mivel nemnegatív, nem azonosan nulla függvényeket integrálunk, az egyenlőség csak $\lambda > 0$ esetén teljesülhet.

2.2. Szimmetrikus elliptikus peremérték-feladat

A nem szimmetrikus eset előtt felvázoljuk a szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot, amely az előbbi egy speciális esete. Ezért külön nem is igazoljuk a megoldhatóságát, hiszen a nem szimmetrikus eset eredményei közvetlenül átvihetők ezekre a feladatokra is.

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány szakaszonként sima peremmel. Tekintsük az alábbi *szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot* a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett:

$$\begin{cases} Lu := -\operatorname{div}(p\nabla u) = f, \\ u_{|\partial\Omega} = 0. \end{cases}$$

Feltesszük azt is, hogy $p \in L^\infty(\Omega)$ és $p(x) \geq m > 0$ (m. m. $x \in \Omega$).

Tegyük fel, hogy $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$ klasszikus megoldása a feladatnak. Az egyenlet mindkét oldalát egy $v \in C^1_0(\Omega)$ *tesztfüggvénnyel* megszorozva, majd integrálva és a Green-formulát felhasználva kapjuk, hogy

$$\int_\Omega p\nabla u \cdot \nabla v = \int_\Omega f v.$$

Ezáltal egy másik gyengébb megoldásfogalomhoz jutunk, mivel u-nak nem kell kétszer folytonosan differenciálhatónak lennie, hogy értelmesek legyenek a képletben szereplő kifejezések. A fenti eredmények alapján bevezethetjük az alábbi skalárszorzatot:

$$[u,v] := \int_\Omega p\nabla u \cdot \nabla v.$$

A feladat szimmetrikus elnevezése abból adódik, hogy a tesztfüggvény segítségével kapott kifejezés szimmetrikus bilineáris formát határoz meg. Ez a megoldhatósággal kapcsolatos vizsgálatokat nagyban leegyszerűsíti a nem szimmetrikus esethez képest, amit a következő fejezetben részletesen tárgyalunk.

2.3. Nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladat

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány szakaszonként sima peremmel. Tekintsük az alábbi *nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot* a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett:

$$\begin{cases} Lu := -\operatorname{div}(p\nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u = f, \\ u_{|\partial\Omega} = 0. \end{cases} \tag{1}$$

Az alábbi feltételeket követeljük meg:

$$\begin{cases} p \in L^\infty(\Omega),\ p(x) \geq m > 0 \text{ (m. m. } x \in \Omega); \\ \mathbf{b} \in C^1(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^n),\ \operatorname{div} \mathbf{b} = 0. \end{cases} \tag{2}$$

Az $Lu = f$ másodrendű lineáris parciális differenciálegyenletnek nem minden esetben van $u \in C^2(\Omega)$ klasszikus megoldása, például ha p nem folytonos vagy az Ω tartomány speciális alakú. Ez motiválja a gyenge megoldás fogalmát, amely a Green-formula miatt $\forall u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$ klasszikus megoldásra is teljesül, tehát kiterjeszti megoldásfogalmat. A feladat megoldhatóságát most valós értékű függvények között vizsgáljuk a $H_0^1(\Omega)$ Szoboljev-térben.

2.16. Definíció. Az $u \in H_0^1(\Omega)$ függvény *gyenge megoldása* az (1) peremérték-feladatnak, ha

$$\int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla v + (\mathbf{b} \cdot \nabla u)v) = \int_\Omega fv, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \tag{3}$$

2.17. Megjegyzés. A szimmetrikus esettel ellentétben most az egyenlőség bal oldalán álló bilineáris forma nem szimmetrikus, sőt az összeg második tagja antiszimmetrikus, amit később a 4.18 állításban igazolunk.

2.18. Tétel. *Ha teljesülnek a (2)-ben előírt feltételek, akkor az (1) peremérték-feladatnak bármely $f \in L^2(\Omega)$ esetén létezik egyértelműen $u^* \in H_0^1(\Omega)$ gyenge megoldása.*

Bizonyítás. Legyen $B\colon H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \to \mathbb{R}$ az a bilineáris forma, melyre:

$$B(u,v) = \int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla v + (\mathbf{b} \cdot \nabla u)v).$$

A bilinearitás következik a gradiens, a skalárszorzat és az integrálás linearitásából. Először megmutatjuk, hogy B korlátos, majd azt is, hogy koercív, végül alkalmazzuk a Lax–Milgram-lemmát.

$$|B(u,v)| = \left| \int_\Omega (p\nabla u \cdot \nabla v + (\mathbf{b} \cdot \nabla u)v) \right| \leq \int_\Omega |p\nabla u \cdot \nabla v| + \int_\Omega |(\mathbf{b} \cdot \nabla u)v| = I_1 + I_2$$

Az integrál abszolút értékét úgy becsültük, hogy vettük az integrálandó függvény abszolút értékét, majd a háromszög-egyenlőtlenség segítségével egy kéttagú összeget kaptunk, amit tagonként tovább becsülünk.

$$I_1 = \int_\Omega |p||\nabla u \cdot \nabla v| \leq \|p\|_{L^\infty} \int_\Omega |\nabla u \cdot \nabla v| \leq \|p\|_{L^\infty} \int_\Omega |\nabla u||\nabla v| \leq \|p\|_{L^\infty} \|u\|_{H_0^1} \|v\|_{H_0^1}$$

Itt felhasználtuk, hogy feltevésünk szerint $p \in L^\infty(\Omega)$. Utána a becsléseknél először az $\mathbb{R}^2$-beli, majd az L^2-beli Cauchy–Schwarz-egyenlőtlenséget használtuk azzal az észrevétellel, hogy $\|\nabla u\|_{L^2} = \|u\|_{H_0^1}$.

$$I_2 = \int_\Omega |\mathbf{b} \cdot \nabla u||v| \leq \int_\Omega |\mathbf{b}||\nabla u||v| \leq \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} \int_\Omega |\nabla u||v| \leq \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} \|u\|_{H_0^1} \|v\|_{L^2} \leq$$
$$\leq \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} \|u\|_{H_0^1} \|v\|_{H_0^1}$$

A becsléseknél sorban használtuk: $\mathbb{R}^2$-beli Cauchy–Schwarz, $|\mathbf{b}| \in L^\infty(\Omega)$, L^2-beli Cauchy–Schwarz, végül a Poincaré–Friedrichs-egyenlőtlenség.

$$\Rightarrow |B(u,v)| \leq (\|p\|_{L^\infty} + \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty}) \|u\|_{H_0^1} \|v\|_{H_0^1}, \quad \forall u,v \in H_0^1(\Omega).$$

A koercivitás bizonyításánál felhasználjuk a $\operatorname{div} \mathbf{b} = 0$ feltételből és két függvény szorzatának deriválási szabályából adódó alábbi azonosságot:

$$\operatorname{div}(\mathbf{b}u^2) = (\operatorname{div} \mathbf{b})u^2 + \mathbf{b} \cdot \nabla(u^2) = \mathbf{b} \cdot \nabla(u^2) = 2(\mathbf{b} \cdot \nabla u)u \tag{4}$$

Az (1) peremérték-feladat kitűzésénél Ω-ra tett feltevések mellett a Gauss–Osztrogradszkij-tétel alkalmazható $\mathbf{b}u^2$-re, mely az $u_{|\partial\Omega} = 0$ peremfeltétel mellett

$$0 = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{b}u^2) \cdot \nu = \int_\Omega \operatorname{div}(\mathbf{b}u^2) = \int_\Omega 2(\mathbf{b} \cdot \nabla u)u. \tag{5}$$

Ebből könnyen adódik a B koercivitása arra az $m > 0$ számra, melyre a feltételezésünk szerint $p(x) \geq m > 0$ (m. m. $x \in \Omega$).

$$B(u,u) = \int_\Omega (p|\nabla u|^2 + (\mathbf{b} \cdot \nabla u)u) = \int_\Omega p|\nabla u|^2 \geq m\|u\|_{H_0^1}^2, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega).$$

Legyen $f \in L^2(\Omega)$ rögzített és $\phi : H_0^1(\Omega) \to \mathbb{R}$, $\phi v := \int_\Omega fv = \langle f, v \rangle_{L^2}$. Ekkor

(i) ϕ lineáris a skalárszorzat linearitása miatt.

(ii) ϕ korlátos: $|\phi v| = |\langle f, v \rangle_{L^2}| \leq \|f\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq \left(\lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|f\|_{L^2} \right) \|v\|_{H_0^1}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$

Ezért a Lax–Milgram-lemma szerint $\exists! u^* \in H_0^1(\Omega)$, amely teljesíti (3)-at. □

2.19. Megjegyzés. Az általunk bevezetett peremérték-feladat konvekció-diffúziós állapotot ír le, azonban általánosabb alakban is tárgyalható, hasonló eredmények mellett.

(a) A differenciálegyenletben szerepelhet nulladrendű cu tag is, ahol $c \in L^\infty(\Omega)$ és $c \geq 0$. A $\operatorname{div} \mathbf{b} = 0$ és $c \geq 0$ feltétel együtt enyhíthető a $c - \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{b} \geq 0$ egyenlőtlenséggel.

(b) A p függvény helyett állhat egy $K \colon \Omega \to \mathbb{R}^{n \times n}$ leképezés, ahol a mátrix elemei mint $k_{ij} \colon \Omega \to \mathbb{R}$ függvények $L^\infty(\Omega)$-ban vannak, és van olyan $k_0 > 0$ szám, hogy majdnem minden $x \in \Omega$ esetén
$$\sum_{i,j=1}^n k_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq k_0 |\xi|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n.$$

Az általános feladat és megoldhatósága megtalálható a [4] könyv 3.2 fejezetében.

3. A konjugált gradiens-módszer

A következőkben az operátoregyenletek megoldását visszavezetjük a kvadratikus funkcionál minimalizálási problémájára, majd egyenletesen pozitív operátorok esetén ezt felhasználva a konjugált gradiens-módszerrel iterációs lépésekkel közelítjük a megoldást, ami lineáris konvergenciát eredményez. Ha az operátor nem önadjungált, akkor a KGN-módszerrel visszavezetjük az önadjungált esetre. Bevezetjük a KGN prekondicionált változatát is, amely növeli a konvergencia sebességét, és jól alkalmazható a peremérték-feladatok megoldásánál.

3.1. Kvadratikus funkcionál, Gâteaux-derivált

Legyen H valós vagy komplex Hilbert-tér, $A\colon H \supset\!\!\to H$ szigorúan pozitív operátor, $f \in H$ adott vektor. Itt $A\colon H \supset\!\!\to H$ azt jelöli, hogy $D(A) \subset H$ altér.

3.1. Definíció. Az $Au = f$ operátoregyenlethez tartozó $\phi\colon H \to \mathbb{R}$ *kvadratikus funkcionál*

(a) komplex esetben: $\phi(u) := \langle Au, u\rangle - 2\mathrm{Re}\,\langle f, u\rangle$;

(b) valós esetben: $\phi(u) := \langle Au, u\rangle - 2\,\langle f, u\rangle$.

3.2. Állítás. *Ha az $Au = f$ egyenletnek létezik $u^* \in D(A)$ megoldása, akkor az egyenlethez tartozó ϕ kvadratikus funkcionálnak u^* minimumhelye, és* $\min\phi = \phi(u^*)$ *csak itt vétetik fel.*

Bizonyítás. Legyen $u \in D(A) \setminus \{u^*\}$.

$$\begin{aligned}\phi(u) &= \langle Au,u\rangle - 2\mathrm{Re}\,\langle f,u\rangle = \langle Au,u\rangle - \langle f,u\rangle - \overline{\langle f,u\rangle} = \langle Au,u\rangle - \langle f,u\rangle - \langle u,f\rangle = \\ &= \langle Au,u\rangle - \langle Au^*,u\rangle - \langle u,Au^*\rangle = \langle A(u-u^*),u\rangle - \langle u,Au^*\rangle = \\ &= \langle A(u-u^*),u-u^*\rangle + \langle A(u-u^*),u^*\rangle - \langle u,Au^*\rangle = \\ &= \langle A(u-u^*),u-u^*\rangle + \langle Au,u^*\rangle - \langle Au^*,u^*\rangle - \langle u,Au^*\rangle = \langle A(u-u^*),u-u^*\rangle - \langle Au^*,u^*\rangle\end{aligned}$$

Az utolsó egyenlőség az A szimmetrikus tulajdonsága miatt igaz: $\langle Au,u^*\rangle = \langle u,Au^*\rangle$, $\forall u \in D(A)$.

$$\begin{aligned}\phi(u^*) &= \langle Au^*,u^*\rangle - \langle Au^*,u^*\rangle - \langle u^*,Au^*\rangle = -\langle Au^*,u^*\rangle \\ \Rightarrow \quad \phi(u) &= \langle A(u-u^*),u-u^*\rangle + \phi(u^*) > \phi(u^*),\end{aligned}$$

mivel $u - u^* \neq 0$ és A szigorúan pozitív. □

3.3. Következmény. *Az $Au = f$ egyenlet megoldásához elég a hozzá tartozó ϕ kvadratikus funkcionált minimalizálni.*

3.4. Definíció. Legyenek X, Y normált terek. Az $F\colon X \to Y$ operátor *Gâteaux-deriválható* az $u \in X$ pontban, ha

(i) minden $v \in X$ esetén létezik az alábbi határérték:

$$\partial_v F(u) := \lim_{t\to 0} \frac{F(u+tv) - F(u)}{t};$$

(ii) az $F'(u)\colon X \to Y$, $F'(u)v := \partial_v F(u)$ leképezés folytonos lineáris operátor X-ből Y-ba.

Legyen H valós Hilbert-tér és $\phi : H \to \mathbb{R}$ funkcionál. Ekkor a Gâteaux-deriválhatóság definíciójában $X = H$ és $Y = \mathbb{R}$, ezért $\phi'(u)$ korlátos lineáris funkcionált határoz meg H-ból $\mathbb{R}$-be. A Riesz-féle reprezentációs tétel szerint minden rögzített $u \in H$ vektorhoz létezik egyetlen olyan $\Phi'(u) \in H$ vektor, amire

$$\phi'(u)v = \left\langle v, \Phi'(u) \right\rangle, \quad \forall v \in H.$$

3.5. Állítás. *Legyen H valós Hilbert-tér, ϕ az $Au = f$ operátoregyenlethez tartozó kvadratikus funkcionál. A ϕ Gâteaux-deriváltja tetszőleges $u \in H$ esetén:*

$$\phi'(u)v = 2 \langle Au - f, v \rangle, \quad \forall v \in H.$$

Bizonyítás. Először meghatározzuk $\phi(u)$-t és $\phi(u + tv)$-t.

$$\begin{aligned} \phi(u) &= \langle Au, u \rangle - 2 \langle f, u \rangle, \\ \phi(u + tv) &= \langle A(u + tv), u + tv \rangle - 2 \langle f, u + tv \rangle = \\ &= \phi(u) + 2t \langle Au - f, v \rangle + t^2 \langle Av, v \rangle, \quad \forall u, v \in H, \ \forall t \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Ezért a Gâteaux-deriválhatóság fogalmában szereplő határérték:

$$\begin{aligned} \phi'(u)v = \partial_v \phi(u) = \lim_{t \to 0} \frac{\phi(u + tv) - \phi(u)}{t} &= \lim_{t \to 0} \frac{2t \langle Au - f, v \rangle + t^2 \langle Av, v \rangle}{t} = \\ &= \lim_{t \to 0} (2 \langle Au - f, v \rangle + t \langle Av, v \rangle) = 2 \langle Au - f, v \rangle. \end{aligned}$$

Ez rögzített $u \in H$ esetén $\forall v \in H$-ra létezik, és a skalárszorzat tulajdonságai alapján folytonos lineáris funkcionált definiál, így ϕ valóban Gâteaux-deriválható. □

3.6. Következmény. *A ϕ kvadratikus funkcionál Gâteaux-deriváltjának Riesz-reprezentánsa:*

$$\Phi'(u) = 2(Au - f), \quad \forall u \in H.$$

3.2. A gradiens-módszerről általában

A véges dimenzióban ismert iterációs megoldási módszereket szeretnénk a funkcionálanalízis eszközeivel a végtelen dimenziós esetre kiterjeszteni. Először ismertetjük a gradiens-módszer alapgondolatát, majd alkalmazzuk a kvadratikus funkcionál minimalizálására.

Legyen X Banach-tér, $\phi : X \to \mathbb{R}$ funkcionál. Egy olyan iterációt konstruálunk a ϕ lokális minimalizálására, amely egy kezdeti $u_0 \in X$ pontból minden lépésben a legnagyobb csökkenés irányába lép tovább, melynek meghatározásához a korábban ismertetett Gâteaux-deriváltat fogjuk használni. Tegyük fel tehát, hogy a ϕ funkcionál $\forall u \in X$ pontban Gâteaux-deriválható.

- Legyen $u_0 \in X$ tetszőleges.
- Ha $n \in \mathbb{N}$ és u_n-t már ismerjük, akkor $u_{n+1} := u_n + t_n v_n$, ahol $t_n > 0$ konstans és $v_n \in X$ a legnagyobb csökkenés iránya $\forall n \in \mathbb{N}$.

3.7. Állítás. *Ha $X = H$ Hilbert-tér és ϕ Gâteaux-deriválható, akkor $-\Phi'(u_n)$ számszorosa a leggyorsabb ereszkedés iránya.*

Bizonyítás. Minden $n \in \mathbb{N}$-re olyan v_n-t szeretnénk találni, amely minimalizálja a $\phi'(u_n)v = \partial_v \phi(u_n)$ Gâteaux-deriváltat. A Cauchy–Schwarz-egyenlőtlenséget felhasználva

$$|\langle \Phi'(u_n), v \rangle| \leq \|\Phi'(u_n)\| \|v\| \Rightarrow$$
$$\partial_v \phi(u_n) = \langle \Phi'(u_n), v \rangle \geq -\|\Phi'(u_n)\| \|v\|.$$

Feltehető, hogy $\Phi'(u_n) \neq 0$, mert különben ϕ konvexitása miatt (3.17 állítás) ez azt jelentené, hogy $u_n = u^*$, vagyis megtaláltuk a pontos megoldást. A fenti egyenlőtlenség akkor teljesül egyenlőséggel, ha $v_n = -\frac{\Phi'(u_n)}{\|\Phi'(u_n)\|}$, azaz v_n minimalizálja $\phi'(u_n)$-t. □

3.8. Következmény. *Az általános iterációs lépés:* $u_{n+1} := u_n - t_n \Phi'(u_n)$, *ahol* $t_n > 0$ *állandó.*

Legyen H valós Hilbert-tér, $A \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor és $f \in H$ tetszőleges. Keressük az $Au = f$ operátoregyenlet megoldását, amely az 1.10 megoldhatósági tétel szerint egyértelműen létezik. A 3.3 következmény alapján az $u^* \in H$ megoldás meghatározásához az egyenlethez tartozó ϕ kvadratikus funkcionált kell minimalizálni, amit a gradiens-módszerrel szeretnénk megvalósítani.

Korábban már meggondoltuk (3.6), hogy kvadratikus funkcionál esetében $\Phi'(u) = 2(Au - f)$, ezért a leggyorsabb ereszkedés iránya $-(Au - f)$ számszorosa. Az iterációs lépés tehát:

$$u_{n+1} := u_n - t_n(Au_n - f) = u_n - t_n r_n.$$

3.9. Definíció. Az $r_n := Au_n - f$ vektort *reziduális hibavektornak* nevezzük.

3.10. Megjegyzés. Természetes módon azt várjuk, hogy az r_n hibavektor a 0-hoz tartson, de az iteráció konvergenciáját nem bizonyítottuk. Nem adtuk meg a $t_n > 0$ lépésköz-sorozatot sem, de a következő fejezetekben az eddigi eredményekre épülő konjugált gradiens-módszert részletesebben is tárgyaljuk.

3.3. A KGM egyenletesen pozitív operátorra

Legyen H valós Hilbert-tér, $A \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor és $f \in H$ tetszőleges. Most az iterációban a korábban bevezetett r_n reziduális hibavektorok helyett a p_n, úgynevezett *konjugált irányok* rendszere szerint közelítjük a megoldást, ahol a konjugált tulajdonság azt jelenti, hogy bármely két különböző $i \neq j$ indexre p_i és p_j A-ortogonálisak, azaz $\langle Ap_i, p_j \rangle = 0$. Legyen $H_n := \operatorname{span}\{p_0, p_1, \ldots, p_n\}$ az első n konjugált irány által kifeszített vektortér.

A konjugált gradiens-módszer (KGM) algoritmusa, első változat:

- Legyen $u_0 \in H$ tetszőleges kezdővektor és $p_0 := r_0 = Au_0 - f$.
- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} u_{n+1} := u_n - \alpha_n p_n, \text{ ahol } \alpha_n = \dfrac{\langle r_n, p_n \rangle}{\langle Ap_n, p_n \rangle}; \\ p_{n+1} := r_{n+1} - \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\langle Ar_{n+1}, p_n \rangle}{\langle Ap_n, p_n \rangle}. \end{cases}$$

3.11. Állítás. *Az iterációban szereplő α_n és β_n együtthatók mellett a következők teljesülnek:*

(i) $r_{n+1} = r_n - \alpha_n A p_n$,

(ii) $\langle r_{n+1}, p_n \rangle = 0$,

(iii) $\langle A p_{n+1}, p_n \rangle = 0$.

Bizonyítás.

(i) Alkalmazzuk az A operátort u_{n+1}-re, majd vonjuk ki belőle f-et.

$$Au_{n+1} = Au_n - \alpha_n A p_n \quad \Rightarrow \quad r_{n+1} = Au_{n+1} - f = (Au_n - f) - \alpha_n A p_n = r_n - \alpha_n A p_n.$$

(ii) Írjuk át r_{n+1}-et az előző eredmény szerint, majd helyettesítsük α_n-t a definíciója alapján.

$$\langle r_{n+1}, p_n \rangle = \langle r_n - \alpha_n A p_n, p_n \rangle = \langle r_n, p_n \rangle - \alpha_n \langle A p_n, p_n \rangle =$$

$$= \langle r_n, p_n \rangle - \frac{\langle r_n, p_n \rangle}{\langle A p_n, p_n \rangle} \langle A p_n, p_n \rangle = 0.$$

(iii) Használjuk fel p_{n+1} rekurzióját, majd β_n definícióját.

$$\langle A p_{n+1}, p_n \rangle = \langle A(r_{n+1} - \beta_n p_n), p_n \rangle = \langle A r_{n+1}, p_n \rangle - \beta_n \langle A p_n, p_n \rangle =$$

$$= \langle A r_{n+1}, p_n \rangle - \frac{\langle A r_{n+1}, p_n \rangle}{\langle A p_n, p_n \rangle} \langle A p_n, p_n \rangle = 0.$$ □

3.12. Definíció. A $K_n := \operatorname{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^n r_0\}$ vektorteret *Krylov-altérnek* nevezzük.

3.13. Állítás. *Legyen $n \in \mathbb{N}$, ekkor $r_n \in K_n$ és $p_n \in K_n$.*

Bizonyítás. Teljes indukcióval bizonyítjuk az állítást. Ha $n = 0$, akkor $p_0 = r_0 \in K_0 = \operatorname{span}\{r_0\}$. Legyen $n \in \mathbb{N}$ tetszőleges, és tegyük fel, hogy $(n-1)$-ig teljesül az állítás.

Az $r_n = r_{n-1} - \alpha_{n-1} A p_{n-1}$ rekurziót felhasználva $r_n \in K_n$, mivel az indukciós feltevés szerint $r_{n-1} \in K_{n-1} \subset K_n$ és $A p_{n-1} \in A(K_{n-1}) \subset K_n$, így a két tag lineáris kombinációja is K_n-beli. Hasonlóan $p_n \in K_n$ is teljesül, hiszen a $p_n = r_n - \beta_{n-1} p_{n-1}$ rekurzióban $r_n \in K_n$ az előző meggondolás miatt, és $p_{n-1} \in K_{n-1} \subset K_n$ az indukciós feltevés szerint. □

3.14. Tétel. *Legyen $n \in \mathbb{N}$, ekkor*

(i) $\langle r_{n+1}, p_i \rangle = 0,\ i = 0, 1, \ldots, n$ *(ortogonális tulajdonság)*

(ii) $H_n = K_n$

(iii) $\langle r_{n+1}, A p_i \rangle = 0,\ i = 0, 1, \ldots, n-1$

(iv) $\langle A p_{n+1}, p_i \rangle = 0,\ i = 0, 1, \ldots, n$ *(konjugált tulajdonság)*

Bizonyítás. A négy állítást egyszerre bizonyítjuk teljes indukcióval. Az $n = 0$ esetet mindegyiknél külön megmutatjuk. Legyen $n \in \mathbb{N}$ tetszőleges, és tegyük fel, hogy $(n-1)$-ig teljesülnek az 1., 2., 4. állítások. A 3. állítás indukció nélkül következik a többiből.

(i) Ha $n = 0$, akkor $\langle r_1, p_0 \rangle = 0$ a 3.11 állítás második pontja szerint. Ugyanezért minden n-re $\langle r_{n+1}, p_n \rangle = 0$, tehát elég $i = 0, \ldots, n-1$-re vizsgálni. Az indukciós feltevés szerint ezekre az indexekre $\langle r_n, p_i \rangle = 0$ és $\langle A p_n, p_i \rangle = 0$.

$$\langle r_{n+1}, p_i \rangle = \langle r_n - \alpha_n A p_n, p_i \rangle = \langle r_n, p_i \rangle - \alpha_n \langle A p_n, p_i \rangle = 0$$

(ii) Ha $n=0$, akkor $H_0 = \operatorname{span}\{p_0\} = \operatorname{span}\{r_0\} = K_0$. A 3.13 állítás miatt $p_i \in K_i \subset K_n$, ha $i = 0,\dots,n$, ezért $H_n \subset K_n$, ahol K_n a definíciója szerint legfeljebb $n+1$ dimenziós. Ha a $\{p_i \colon i = 0,\dots,n\}$ vektorrendszer független, akkor készen vagyunk, hiszen H_n $n+1$ dimenziós altere K_n-nek, vagyis $H_n = K_n$.

Feltehetjük, hogy $p_0 = Au_0 - f \neq 0$, mert egyébként ez azt jelentené, hogy u_0 megoldása az operátoregyenletnek. Tegyük fel, hogy $\{p_i \colon i = 0,\dots,n\}$ független vektorrendszer. Mivel $p_{n+1} = r_{n+1} - \beta_n p_n$, és az első rész szerint $r_{n+1} \perp H_n$, ezért $p_{n+1} \notin H_n$, azaz $\{p_i \colon i = 0,\dots,n+1\}$ továbbra is független rendszer minden $n \in \mathbb{N}$-re.

(iii) Az első rész szerint $r_{n+1} \perp H_n$, mert minden báziselemére merőleges, és a második rész szerint $H_n = K_n$, tehát $r_{n+1} \perp K_n$. Ha $i \leq n-1$, akkor $Ap_i \in A(K_i) \subset K_{i+1} \subset K_n$.

(iv) Ha $n=0$, akkor $\langle Ap_1, p_0\rangle = 0$ a 3.11 állítás harmadik pontja szerint. Ugyanezért minden n-re $\langle Ap_{n+1}, p_n\rangle = 0$, tehát elég $i = 0,\dots,n-1$-re vizsgálni. Az indukciós feltevés szerint ezekre az indexekre $\langle Ap_n, p_i\rangle = 0$, és az előbb bizonyított harmadik állításból $\langle Ar_{n+1}, p_i\rangle = \langle r_{n+1}, Ap_i\rangle = 0$.

$$\langle Ap_{n+1}, p_i\rangle = \langle A(r_{n+1} - \beta_n p_n), p_i\rangle = \langle Ar_{n+1}, p_i\rangle - \beta_n \langle Ap_n, p_i\rangle = 0 \qquad \square$$

3.15. Következmény. *Az iterációban szereplő α_n és β_n együtthatókat egyszerűbb alakban is felírhatjuk:*

$$\alpha_n = \frac{\|r_n\|^2}{\langle Ap_n, p_n\rangle}; \quad \beta_n = -\frac{\|r_{n+1}\|^2}{\|r_n\|^2}.$$

Bizonyítás. Az α_n esetében felhasználjuk a $p_n = r_n - \beta_{n-1} p_{n-1}$ és $\langle r_n, p_{n-1}\rangle = 0$ összefüggéseket.

$$\alpha_n = \frac{\langle r_n, p_n\rangle}{\langle Ap_n, p_n\rangle} = \frac{\|r_n\|^2 - \beta_{n-1}\langle r_n, p_{n-1}\rangle}{\langle Ap_n, p_n\rangle} = \frac{\|r_n\|^2}{\langle Ap_n, p_n\rangle}$$

Az így kapott új összefüggésből $\langle Ap_n, p_n\rangle = \dfrac{\|r_n\|^2}{\alpha_n}$.

$$\beta_n = \frac{\langle Ar_{n+1}, p_n\rangle}{\langle Ap_n, p_n\rangle} = \frac{\langle Ar_{n+1}, p_n\rangle}{\|r_n\|^2}\alpha_n = \frac{\langle r_{n+1}, \alpha_n Ap_n\rangle}{\|r_n\|^2} = \frac{\langle r_{n+1}, r_n - r_{n+1}\rangle}{\|r_n\|^2} = -\frac{\|r_{n+1}\|^2}{\|r_n\|^2}$$

Itt felhasználtuk, hogy $\alpha_n Ap_n = r_n - r_{n+1}$ és $\langle r_{n+1}, r_n\rangle = 0$, mivel $r_n \in K_n$ és $r_{n+1} \perp K_n$. $\square$

A konjugált gradiens-módszer (KGM) algoritmusa, második változat:

- Legyen $u_0 \in H$ tetszőleges kezdővektor és $p_0 := r_0 = Au_0 - f$.
- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n Ap_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\|r_n\|^2}{\langle Ap_n, p_n\rangle}; \\ p_{n+1} := r_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\|r_{n+1}\|^2}{\|r_n\|^2}. \end{cases}$$

3.16. Megjegyzés. Az α_n és β_n előjelét megváltoztattuk a korábbiakhoz képest, hogy a korrekciós tagok pozitív előjellel szerepeljenek az iterációban.

A gradiens-módszer alapgondolata az volt, hogy minden lépésben a legnagyobb csökkenés irányába lépünk, hogy minimalizáljuk a ϕ kvadratikus funkcionált. Megmutatjuk, hogy a konjugált gradiens-módszer esetén is minden lépéssel egyre nagyobb halmazon minimalizáljuk a ϕ funkcionált.

3.17. Állítás. *A $\phi(u) = \langle Au, u\rangle - 2\langle f, u\rangle$ kvadratikus funkcionál konvex.*

Bizonyítás. A konvexitás elégséges feltétele, hogy ϕ' monoton operátor, azaz $\forall u, v \in H$-ra:

$$\left\langle \Phi'(v) - \Phi'(u), v-u \right\rangle = \langle 2Av - 2f - 2Au + 2f, v-u\rangle = 2\langle A(v-u), v-u\rangle \geq 2m\|v-u\|^2 \geq 0.$$

3.18. Állítás. $\phi(u_{n+1}) = \min \phi_{|u_0+K_n}$.

Bizonyítás. Elég megmutatni, hogy $\phi(u_{n+1}) = \min \phi_{|u_0+H_n}$ minden $n \in \mathbb{N}$-re, hiszen korábban már bizonyítottuk, hogy $H_n = K_n$. Mivel $u_{n+1} = u_n + \alpha_n p_n$ és $H_n = \operatorname{span}\{p_0, p_1, \ldots, p_n\}$, ezért a rekurzióból látszik, hogy $u_{n+1} \in u_0 + H_n$. A ϕ konvexitása miatt a minimalizálás ekvivalens azzal, hogy

$$0 = \partial_p \phi(u_{n+1}) = \left\langle \Phi'(u_{n+1}), p \right\rangle = 2\langle Au_{n+1} - f, p\rangle = 2\langle r_{n+1}, p\rangle, \quad \forall p \in H_n.$$

Ez pedig teljesül az $r_{n+1} \perp H_n$ ortogonalitási tulajdonság miatt. □

3.19. Tétel (A KGM minimalizáló tulajdonsága). *Legyen u^* az $Au = f$ operátoregyenlet megoldása és $e_n = u_n - u^*$ az iteráció hibavektora. Jelölje $\mathbb{P}_n^1$ azoknak a legfeljebb n-edfokú egyváltozós p_n polinomoknak a halmazát, amelyekre $p_n(0) = 1$. Ekkor*

$$\|e_n\|_A = \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1} \|p_n(A)e_0\|_A.$$

Bizonyítás. A 3.2 állítás bizonyításánál megmutattuk, hogy $\phi(u) = \langle A(u-u^*), u-u^*\rangle + \phi(u^*)$ $= \|u-u^*\|_A^2 + \phi(u^*)$, ezért az u_n minimalizáló tulajdonsága miatt $\|u_n - u^*\|_A^2 = \phi(u_n) - \phi(u^*) =$ $\min\limits_{u \in u_0+K_{n-1}} \|u-u^*\|_A^2 + \phi(u^*) - \phi(u^*) = \min\limits_{u \in u_0+K_{n-1}} \|u-u^*\|_A^2$, azaz

$$\|e_n\|_A = \min_{u \in u_0+K_{n-1}} \|u-u^*\|_A = \min_{e \in e_0+K_{n-1}} \|e\|_A.$$

Mivel a hibavektorral felírva $r_0 = Au_0 - f = Au_0 - Au^* = A(u_0 - u^*) = Ae_0$, így definíció szerint $K_{n-1} = \operatorname{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \ldots, A^{n-1}r_0\} = \operatorname{span}\{Ae_0, A^2e_0, \ldots, A^ne_0\}$. Ebből már látszik, hogy $e_0 + K_{n-1} = \{p_n(A)e_0 \colon p_n \in \mathbb{P}_n^1\}$, és

$$\|e_n\|_A = \min_{e \in e_0+K_{n-1}} \|e\|_A = \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1} \|p_n(A)e_0\|_A.$$ □

A konjugált gradiens-módszer konvergenciáját abban az esetben bizonyítjuk, amikor A-nak létezik teljes ortonormált sajátvektorrendszere. Ehhez felhasználjuk az alábbi nevezetes tételt és állítást:

3.20. Tétel (Fourier-sorok főtétele). *Legyen H Hilbert-tér, $(v_n) \subset H$ teljes ortonormált rendszer. Ekkor $\forall x \in H$ esetén $x = \sum\limits_{i=1}^{\infty} \langle x, v_i\rangle v_i$.*

3.21. Állítás. *Legyen H Hilbert-tér, $(v_n) \subset H$ teljes ortonormált rendszer. Ekkor $\forall x \in H$ esetén:*

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} d_i v_i \quad \Rightarrow \quad \|x\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |d_i|^2.$$

3.22. Tétel (Lineáris konvergencia). *Ha $A \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor megfelelő $M \geq m > 0$ állandókkal, hogy $m\|u\|^2 \leq \langle Au, u \rangle \leq M\|u\|^2$ $(\forall u \in H)$, akkor a KGM iterációs lépéseiben az e_n hibavektorokra teljesül, hogy*

$$\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} \leq 2\left(\frac{\sqrt{M}-\sqrt{m}}{\sqrt{M}+\sqrt{m}}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy A-nak létezik teljes ortonormált sajátvektorrendszere. Legyenek λ_k az A sajátértékei, $\{u_k\} \subset H_A$ pedig a hozzájuk tartozó sajátvektorok sorozata, amely a feltevés szerint teljes ortonormált rendszert alkot. Ha az e_0 hibavektorra alkalmazzuk a Fourier-sorok főtételét a H_A energiatérben, akkor

$$e_0 = \sum_{k=1}^{\infty} \langle e_0, u_k \rangle_A u_k.$$

A sajátértékek és sajátvektorok között fennálló $Au_k = \lambda_k u_k$ összefüggés miatt tetszőleges $p_n \in \mathbb{P}_n^1$ polinomra is teljesül, hogy $p_n(A)u_k = p_n(\lambda_k)u_k$.

$$\Rightarrow \quad p_n(A)e_0 = \sum_{k=1}^{\infty} \langle e_0, u_k \rangle_A p_n(A)u_k = \sum_{k=1}^{\infty} \langle e_0, u_k \rangle_A p_n(\lambda_k)u_k$$

A 3.21 állítást $p_n(A)e_0$ fenti alakjára alkalmazva:

$$\|p_n(A)e_0\|_A^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\langle e_0, u_k \rangle_A p_n(\lambda_k)|^2 \leq \max_{\lambda_k} |p_n(\lambda_k)|^2 \sum_{k=1}^{\infty} |\langle e_0, u_k \rangle_A|^2 = \max_{\lambda_k} |p_n(\lambda_k)|^2 \|e_0\|_A^2.$$

Az A egyenletes pozitivitásából tudjuk, hogy $\lambda_k \in [m, M]$, ugyanis

$$\lambda_k \|u_k\|^2 = \langle \lambda_k u_k, u_k \rangle = \langle Au_k, u_k \rangle \geq m\|u_k\|^2 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_k \geq m;$$
$$\lambda_k \|u_k\|^2 = \langle \lambda_k u_k, u_k \rangle = \langle Au_k, u_k \rangle \leq M\|u_k\|^2 \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_k \leq M.$$

A KGM minimalizáló tulajdonságát és a kapott egyenlőtlenséget felhasználva:

$$\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} = \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1} \frac{\|p_n(A)e_0\|_A}{\|e_0\|_A} \leq \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1} \left\{ \max_{\lambda_k} |p_n(\lambda_k)| \right\} \leq \min_{p_n \in \mathbb{P}_n^1} \left\{ \max_{\lambda \in [m,M]} |p_n(\lambda)| \right\} =: q(m, M).$$

Abban az esetben, ha A-nak nincs teljes sajátvektorrendszere, a $\sigma(A)$ spektrumról az előzőhöz hasonlóan megmutatható, hogy $\sigma(A) \subset [m, M]$. Ebből ugyanúgy az $\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} \leq q(m, M)$ becslést kapjuk a konvergenciára, azonban a bizonyítás részleteit most nem tárgyaljuk, de megtalálható a [2] könyv 16.2.2 fejezetében.

A $q(m, M)$ approximációelméleti feladat megoldása ismert (lásd [5] 1.6.7 fejezet):

$$q(m, M) = \frac{1}{T_n\left(\frac{M+m}{M-m}\right)} = \frac{2\left(\frac{\sqrt{M}-\sqrt{m}}{\sqrt{M}+\sqrt{m}}\right)^n}{1+\left(\frac{\sqrt{M}-\sqrt{m}}{\sqrt{M}+\sqrt{m}}\right)^{2n}} \lessapprox 2\left(\frac{\sqrt{M}-\sqrt{m}}{\sqrt{M}+\sqrt{m}}\right)^n,$$

ahol T_n az n-edfokú elsőfajú Csebisev-polinom. $\square$

3.4. A KGN korlátos, nem önadjungált operátorra

Az eddig tárgyalt konjugált gradiens-módszert szeretnénk kiterjeszteni arra az esetre, amikor az operátor nem egyenletesen pozitív. Legyen $A \in B(H)$ nem önadjungált operátor. Tegyük fel azt is, hogy A bijekció. Az $Au = f$ egyenlet közvetlen megoldása helyett tekintsük az alábbi normálegyenletet:

$$A^*Au = A^*f.$$

Megmutatjuk, hogy a normálegyenlet megoldására visszavezethető az eredeti operátoregyenlet megoldása. Ehhez felhasználjuk az alábbi két tételt:

3.23. Tétel (Banach-féle homeomorfizmus-tétel). *Legyenek X, Y Banach-terek és $A \in B(X,Y)$ bijekció. Ekkor $A^{-1} \in B(Y,X)$.*

3.24. Tétel (Operátorokra vonatkozó ortogonális felbontás). *Legyen $A \in B(H)$, ekkor*

$$H = \overline{R(A)} \oplus \ker(A^*).$$

3.25. Állítás. *Az $A^*Au = A^*f$ normálegyenletnek létezik egyértelműen $u^* \in H$ megoldása, és ez kielégíti az $Au = f$ egyenletet.*

Bizonyítás. Mivel $A \in B(H)$ bijekció, így a Banach-féle homeomorfizmus-tétel szerint A^{-1} folytonos, ezért $\exists \tilde{m} > 0$, hogy $\|A^{-1}v\| \le \tilde{m}\|v\| = \frac{1}{m}\|v\|$, ha $m := \frac{1}{\tilde{m}}$. Speciálisan, ha $v = Au$, akkor $\|u\| = \|A^{-1}Au\| \le \frac{1}{m}\|Au\|$. Ez pontosan akkor igaz, ha $m\|u\| \le \|Au\|$. Ebből és a korlátosságból következik, hogy léteznek olyan $M \ge m > 0$ állandók, amire

$$m\|u\| \le \|Au\| \le M\|u\|, \quad \forall u \in H.$$

Négyzetre emelés után az $\|Au\|^2 = \langle Au, Au\rangle = \langle A^*Au, u\rangle$ egyenlőséget felhasználva

$$m^2\|u\|^2 \le \langle A^*Au, u\rangle \le M^2\|u\|^2, \quad \forall u \in H.$$

Ebből és az A^*A operátor önadjungáltságából következik, hogy A^*A egyenletesen pozitív. Ekkor az 1.10 megoldhatósági tétel szerint A^*A is bijekció, azaz a normálegyenletnek egyértelműen létezik $u^* \in H$ megoldása.

Az A feltevésünk szerint bijekció, ezért $R(A) = H$. Az ortogonális felbontási tétel szerint ekkor $\ker(A^*) = \{\mathbf{0}\}$, vagyis A^* injektív. Tehát u^* megoldása az $Au = f$ egyenletnek is. $\square$

Ezzel visszavezettük a nem önadjungált esetet egy megfelelő egyenletesen pozitív operátorra, amelyre már alkalmazhatjuk a KGM algoritmusát. Ezt KGN-módszernek nevezzük.

A korábbi jelölések és szereposztás úgy módosul, hogy az A operátor és f jobboldal helyét a normálegyenletnek megfelelő A^*A és A^*f veszi át. Az $r_n = Au_n - f$ jelölést fenntartjuk az eredeti egyenlet reziduális hibavektorának, az algoritmusban eddig szereplő r_n-t pedig az $s_n = A^*Au_n - A^*f = A^*(Au_n - f) = A^*r_n$ hibavektorral helyettesítjük. Emellett bevezetjük a $z_n = Ap_n$ jelölést is, és ennek megfelelően az α_n együttható nevezőjébe $\langle A^*Ap_n, p_n\rangle = \|Ap_n\|^2 = \|z_n\|^2$ kerül.

A KGN-módszer algoritmusa:

- Legyen $u_0 \in H$ tetszőleges kezdővektor, $r_0 := Au_0 - f$ és $p_0 := s_0 = A^* r_0$.
- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} z_n := Ap_n; \\ u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\|s_n\|^2}{\|z_n\|^2}; \\ s_{n+1} := A^* r_{n+1}; \\ p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\|s_{n+1}\|^2}{\|s_n\|^2}. \end{cases}$$

A KGM konvergenciájából adódik az $\|e_n\|_{A^*A} = \|Ae_n\| = \|r_n\|$ maradékvektorra a KGN konvergenciája az $M^2 \geq m^2 > 0$ állandókkal:

$$\frac{\|r_n\|}{\|r_0\|} \leq 2\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

3.26. Megjegyzés. Mivel A^{-1} folytonossága miatt $m\|e_n\| \leq \|Ae_n\| = \|r_n\|$, ezért az $\|e_n\|$ hibavektorokra az alábbi konvergenciát kapjuk:

$$\frac{\|e_n\|}{\|r_0\|} \leq \frac{\|r_n\|}{m\|r_0\|} \leq \frac{2}{m}\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

3.5. A prekondicionált KGN-módszer

Ha az A operátorhoz tartozó m és M állandókkal az $\frac{M}{m}$ hányados túl nagy, akkor a konvergencia lassan megy végbe. A gyorsaság növelése érdekében bevezetjük a KGN prekondicionált változatát. Legyen $B \in B(H)$ egyenletesen pozitív operátor. A prekondicionálás akkor eredményes, ha a B operátorral az A-hoz képest hatékonyabban oldhatóak meg az operátoregyenletek, és a B-normával közelebb kerülnek az $\tilde{m}$ és $\tilde{M}$ határok, azaz

$$\tilde{m}\|u\|_B^2 \leq \langle Au, u\rangle \leq \tilde{M}\|u\|_B^2, \quad \forall u \in H,$$

$$\frac{\tilde{M}}{\tilde{m}} \ll \frac{M}{m}.$$

Ekkor $\langle Au, u\rangle = \left\langle B^{-1}Au, u\right\rangle_B$, és a 4.11 tétel bizonyításához hasonlóan következik, hogy

$$\tilde{m}\|u\|_B \leq \|B^{-1}Au\|_B \leq \tilde{M}\|u\|_B, \quad \forall u \in H.$$

Alkalmazzuk az $Au = f$ egyenlettel ekvivalens $B^{-1}Au = B^{-1}f$ egyenletre a KGN-módszert a B energiaterében! Az algoritmus során felhasználjuk, hogy a B energiaterében $\left(B^{-1}A\right)^* = B^{-1}A^*$, mivel $\left\langle B^{-1}Au, v\right\rangle_B = \langle Au, v\rangle = \langle u, A^*v\rangle = \left\langle u, B^{-1}A^*v\right\rangle_B$, $\forall u, v \in H$, ahol A^* a H-beli adjungált.

A prekondicionált KGN-módszer algoritmusa:

- Legyen $u_0 \in H$ tetszőleges kezdővektor.

$$\begin{cases} r_0 := B^{-1}Au_0 - B^{-1}f \quad \Leftrightarrow \quad Br_0 = Au_0 - f; \\ p_0 := s_0 = B^{-1}A^*r_0 \quad \Leftrightarrow \quad Bs_0 = A^*r_0. \end{cases}$$

- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} z_n := B^{-1}Ap_n \quad \Leftrightarrow \quad Bz_n = Ap_n; \\ u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\|s_n\|_B^2}{\|z_n\|_B^2}; \\ s_{n+1} := B^{-1}A^*r_{n+1} \quad \Leftrightarrow \quad Bs_{n+1} = A^*r_{n+1}; \\ p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\|s_{n+1}\|_B^2}{\|s_n\|_B^2}. \end{cases}$$

3.27. Megjegyzés. A B operátor inverzét nem szükséges közvetlenül meghatározni, mert ez az iteráció során a $Bx = y$ alakú segédfeladatok megoldásával helyettesíthető, mint ahogy ezt az algoritmusban jelöltük.

A konvergencia sebességét továbbra is a maradékvektorra kapott egyenlőtlenség határozza meg, azonban most a B-normában a javított $\tilde{m}$ és $\tilde{M}$ állandókkal:

$$\frac{\|r_n\|_B}{\|r_0\|_B} \leq 2\left(\frac{\tilde{M} - \tilde{m}}{\tilde{M} + \tilde{m}}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

4. Peremérték-feladatok iterációs megoldása

A 2.3 fejezetben bevezetett nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot definiáló L operátor nem korlátos és nem szimmetrikus. Ahhoz, hogy alkalmazni tudjuk a KGN-módszert a feladat megoldására, egy megfelelő S prekondicionáló operátor segítségével visszavezetjük a H_S energiatérben egy korlátos L_S operátorral való egyenletmegoldásra. Ennek megvalósítását ismertetjük a következő fejezetekben.

4.1. Gyenge megoldás nem szimmetrikus operátor esetén Hilbert-térben

Legyen H valós Hilbert-tér, és $L\colon H \supset\!\!\to H$ nem szimmetrikus, nem korlátos operátor. Tekintsük az $Lu = g$ operátoregyenletet! A korábbiakhoz hasonlóan szeretnénk értelmezni az egyenlet gyenge megoldását a $g \notin R(L)$ esetben. Ehhez a feladatot egy szimmetrikus S operátor energiaterére vezetjük vissza.

4.1. Definíció. Egy $S\colon H \supset\!\!\to H$ nem korlátos lineáris operátor *egyenletesen pozitív*, ha

(i) szimmetrikus, azaz $\langle Su, v\rangle = \langle u, Sv\rangle, \quad \forall u, v \in D(S)$;

(ii) $\exists q > 0$, amire $\langle Su, u\rangle \geq q\|u\|^2, \quad \forall u \in D(S)$.

4.2. Definíció. Legyen $S\colon H \supset\!\!\to H$ egyenletesen pozitív operátor. Az $\langle u, v\rangle_S := \langle Su, v\rangle$ bilineáris forma az S-hez tartozó *energia-skalárszorzat*, az S *energiatere* pedig $H_S := [D(S), \langle\cdot,\cdot\rangle_S]$, ami $D(S)$ teljessé tétele az energia-skalárszorzattal.

4.3. Definíció. Legyen $S\colon H \supset\!\!\to H$ egyenletesen pozitív operátor. Az $L\colon H \supset\!\!\to H$ lineáris operátor *S-korlátos* és *S-koercív*, ha

(i) $D(L) \subset H_S$, és $D(L)$ sűrű H_S-ben;

(ii) $\exists M > 0$ állandó, hogy $|\langle Lu, v\rangle| \leq M\|u\|_S\|v\|_S, \quad \forall u, v \in D(L)$;

(iii) $\exists m > 0$ állandó, hogy $\langle Lu, u\rangle \geq m\|u\|_S^2, \quad \forall u \in D(L)$.

4.4. Definíció. Legyen $L\colon H \supset\!\!\to H$ S-korlátos és S-koercív. Ekkor $L_S \in B(H_S)$ az az operátor, amelyre

$$\langle L_S u, v\rangle_S = \langle Lu, v\rangle, \quad \forall u, v \in D(L).$$

4.5. Állítás. *Az L_S operátor jóldefiniált.*

Bizonyítás. Legyen $B\colon D(L) \times D(L) \to \mathbb{R}$, $B(u, v) := \langle Lu, v\rangle$ bilineáris forma, amely az S-korlátosság definíciója szerint folytonos a H_S-normára nézve. Mivel $D(L)$ sűrű H_S-ben, ez egyértelműen kiterjeszthető a $\overline{D(L)} = H_S$ térre úgy, hogy $\tilde{B}(u, v) := \lim_{n\to\infty} B(u_n, v_n)$, ahol $(u_n), (v_n) \subset D(L)$ olyan sorozatok, amelyekre $u_n \to u$ és $v_n \to v$. Megmutatható, hogy ez a kiterjesztés folytonos, megtartja az M-korlátot, és nem függ az $(u_n), (v_n)$ sorozat megválasztásától.

A $\tilde{B}$ bilineáris forma korlátos a H_S térben, ezért az 1.15 korlátos formák Riesz-reprezentációja szerint létezik egyetlen olyan $L_S \in B(H_S)$ operátor, amelyre $\tilde{B}(u, v) = \langle L_S u, v\rangle_S$. □

4.6. Megjegyzés.

(a) A bizonyításban alkalmazott sűrűségi érv miatt határátmenettel következik, hogy

$$|\langle L_S u, v\rangle_S| \leq M\|u\|_S\|v\|_S, \qquad \langle L_S u, u\rangle_S \geq m\|u\|_S^2, \qquad \forall u, v \in H_S.$$

(b) Ha $R(L) \subset R(S)$, akkor

$$\langle L_S u, v\rangle_S = \langle Lu, v\rangle = \left\langle SS^{-1}Lu, v\right\rangle = \left\langle S^{-1}Lu, v\right\rangle_S, \quad \forall u, v \in D(L).$$

Ekkor tehát a $D(L)$ sűrű altéren $L_S|_{D(L)} = S^{-1}L$.

4.7. Definíció. Legyen $L\colon H \supset\!\!\rightarrow H$ S-korlátos és S-koercív. Az $Lu = g$ egyenlet *gyenge megoldása* az $u \in H_S$ vektor, ha

$$\langle L_S u, v\rangle_S = \langle g, v\rangle, \quad \forall v \in H_S.$$

4.8. Tétel. *Bármely $g \in H$ esetén egyértelműen létezik gyenge megoldása az $Lu = g$ egyenletnek.*

Bizonyítás. Legyen $B\colon H_S \times H_S \to \mathbb{R}$, $B(u,v) := \langle L_S u, v\rangle_S$, amely korlátos és koercív a 4.6 megjegyzés (a) pontja szerint. Legyen továbbá $\phi\colon H_S \to \mathbb{R}$, $\phi v := \langle g, v\rangle$ korlátos lineáris funkcionál, ahol a ϕ korlátossága az 1.10 tétel bizonyításával analóg módon az S operátor egyenletes pozitivitásából következik. A Lax–Milgram-lemmát ezekre alkalmazva létezik egyetlen olyan $u^* \in H_S$, ami teljesíti a gyenge megoldás feltételét. □

4.2. KGN-módszer az energiatérben

Legyen az $L\colon H \supset\!\!\rightarrow H$ nem szimmetrikus, nem korlátos lineáris operátor S-korlátos és S-koercív, és $g \in H$ tetszőleges. Szeretnénk közelítőleg meghatározni az $Lu = g$ egyenlet gyenge megoldását. Ehhez a KGN-módszert fogjuk alkalmazni az L_S operátorra az S energiaterében.

4.9. Állítás. *Egyértelműen létezik $g_S \in H_S$, hogy az $L_S u = g_S$ egyenlet megoldása és az $Lu = g$ gyenge megoldása egybeesik.*

Bizonyítás. Az $L_S u = g_S$ egyenlőség pontosan akkor teljesül, ha $\langle L_S u, v\rangle_S = \langle g_S, v\rangle_S$, $\forall v \in H_S$. Legyen $\phi\colon H_S \to \mathbb{R}$, $\phi v := \langle g, v\rangle$ funkcionál, amely lineáris a skalárszorzat linearitása miatt, és korlátos az S operátor egyenletes pozitivitása miatt:

$$\exists \tilde{m} > 0\colon \|v\|_S^2 \geq \tilde{m}\|v\|^2 \quad \Rightarrow \quad |\phi v| = |\langle g, v\rangle| \leq \|g\|\|v\| \leq \left(\frac{1}{\sqrt{\tilde{m}}}\|g\|\right)\|v\|_S, \quad \forall v \in H_S.$$

A Riesz-féle reprezentációs tételt alkalmazva létezik egyértelműen $g_S \in H_S$, amire $\phi v = \langle g, v\rangle = \langle g_S, v\rangle_S$, $\forall v \in H_S$. □

4.10. Megjegyzés. Ha $g \in R(S)$, akkor $\langle g_S, v\rangle_S = \langle g, v\rangle = \left\langle SS^{-1}g, v\right\rangle = \left\langle S^{-1}g, v\right\rangle_S$ teljesül minden $v \in H_S$-re, tehát $g_S = S^{-1}g$.

Az L_S operátorról már megmutattuk, hogy $L_S \in B(H_S)$. Mivel ez a H_S térben koercív is, ezért alkalmazható az 1.11 megoldhatósági tétel, amely garantálja, hogy L_S bijekció. Ez a két tulajdonsága az operátornak már lehetővé teszi, hogy a KGN-módszerrel meghatározzuk az $L_S u = g_S$ operátoregyenlet megoldását a H_S térben.

- Legyen $u_0 \in H_S$ tetszőleges kezdővektor, $r_0 := L_S u_0 - g_S$ és $p_0 := s_0 = L_S^* r_0$.
- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} z_n := L_S p_n; \\ u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\|s_n\|_S^2}{\|z_n\|_S^2}; \\ s_{n+1} := L_S^* r_{n+1}; \\ p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\|s_{n+1}\|_S^2}{\|s_n\|_S^2}. \end{cases}$$

Abban az esetben, ha a 4.6 megjegyzés (b) pontja szerint $R(L) \subset R(S)$, akkor $L_S|_{D(L)} = S^{-1}L$. Ekkor $D(L)$-beli vektorok esetén z_n és s_{n+1} meghatározása a 3.5 fejezetben ismertetett prekondicionált módszerhez hasonlóan az S operátorral való egyenletmegoldásra vezethető vissza. Így kapjuk az $Sz_n = Lp_n$ és $Ss_{n+1} = L^* r_{n+1}$ segédfeladatokat.

4.11. Állítás. *Az L operátor S-korlátosságának és S-koercivitásának definíciójában használt m és M állandókra teljesül a KGN-módszer konvergenciájában szereplő becslés a hibavektorokra.*

Bizonyítás. A 4.6 megjegyzés (a) pontjában szereplő eredményeket felhasználva:

(i) $m\|u\|_S^2 \le \langle L_S u, u\rangle_S \le \|L_S u\|_S \|u\|_S, \quad \forall u \in H_S \quad \Rightarrow \quad m\|u\|_S \le \|L_S u\|_S, \quad \forall u \in H_S.$

(ii) $|\langle L_S u, v\rangle_S| \le M\|u\|_S\|v\|_S, \quad \forall u, v \in H_S \quad \Rightarrow \quad \|L_S\|_S \le M.$

A kettőt egybevéve kapjuk, hogy

$$m\|u\|_S \le \|L_S u\|_S \le M\|u\|_S, \quad \forall u \in H_S. \qquad \square$$

4.12. Következmény. *A KGN-módszer konvergenciája az energiatérben:*

$$\frac{\|r_n\|_S}{\|r_0\|_S} \le 2\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

4.3. A KGN-módszer alkalmazása elliptikus peremérték-feladatokra

Tekintsük a 2.3 fejezetben definiált (1) nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatot a megfelelő feltételek mellett:

$$\begin{cases} Lu := -\operatorname{div}(p\nabla u) + \mathbf{b}\cdot\nabla u = f, \\ u_{|\partial\Omega} = 0. \end{cases}$$

A 2.18 tételben megmutattuk, hogy bármely $f \in L^2(\Omega)$ esetén létezik egyértelműen $u^* \in H_0^1(\Omega)$ gyenge megoldása a feladatnak. Szeretnénk közelítőleg meghatározni u^*-ot a KGN-módszer segítségével. Ehhez választunk egy megfelelő S prekondicionáló operátort, amelyre L S-korlátos és S-koercív, majd az S energiaterében alkalmazzuk a korábban ismertetett iterációs módszert.

Legyen $H = L^2(\Omega)$, és $S\colon H \supset\!\!\to H$ az a nem korlátos lineáris operátor, amelyre $D(S) = C^2(\Omega) \cap C_0^1(\overline{\Omega})$, és

$$Su := -\Delta u.$$

4.13. Állítás. *Az S operátor egyenletesen pozitív.*

Bizonyítás. Az S szimmetrikus, mivel a Green-formulát alkalmazva:

$$\langle -\Delta u, v\rangle_{L^2} = \int_\Omega -\Delta u \cdot v = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v = \int_\Omega -\Delta v \cdot u = \langle u, -\Delta v\rangle_{L^2}, \quad \forall u, v \in D(S).$$

Az egyenletes pozitivitáshoz szükséges $q := \lambda_1 > 0$ állandót a Poincaré–Friedrichs-egyenlőtlenséget felhasználva kapjuk:

$$\langle -\Delta u, u\rangle_{L^2} = \int_\Omega |\nabla u|^2 = \|u\|_{H_0^1}^2 \ge q\|u\|_{L^2}^2, \quad \forall u \in D(S). \qquad \square$$

4.14. Következmény. *Az S energiatere $H_S = H_0^1(\Omega)$, és az energianorma $\|u\|_S^2 = \langle -\Delta u, u\rangle_{L^2}$.*

4.15. Állítás. *Minden $u \in D(S)$-re $\|u\|_S = \|u\|_{H_0^1}$.*

Bizonyítás.

$$\|u\|_{H_0^1}^2 = \int_\Omega |\nabla u|^2 = \int_\Omega -\Delta u \cdot u = \langle -\Delta u, u \rangle_{L^2} = \|u\|_S^2, \quad \forall u \in D(S). \qquad \square$$

4.16. Következmény. *Az L operátor S-korlátos és S-koercív.*

Bizonyítás. A 2.18 tétel bizonyításában bevezetett $B(u,v)$ bilineáris forma éppen az $\langle Lu, v\rangle_{L^2}$ skalárszorzat, ha $u, v \in D(L)$ teljesül és alkalmazzuk a Green-formulát. Ezért a B korlátosságánál és koercivitásánál használt konstansok jók lesznek az L S-korlátosságához és S-koercivitásához is. A bizonyításban a becsléseket ugyan H_0^1-normában kaptuk, de a 4.15 állítás szerint ez S-normában is igaz.

(i) $D(L) := C^2(\Omega) \cap C_0^1(\overline{\Omega}) \subset H_S$, és $D(L)$ sűrű H_S-ben.

(ii) Az $M := \|p\|_{L^\infty} + \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty}$ választással $|\langle Lu, v\rangle_{L^2}| \leq M \|u\|_S \|v\|_S, \quad \forall u, v \in D(L)$.

(iii) Ha m az a szám, amire $p(x) \geq m > 0$ (m. m. $x \in \Omega$), akkor $\langle Lu, u\rangle_{L^2} \geq m\|u\|_S^2$, $\forall u \in D(L)$. $\square$

4.17. Megjegyzés. A feladathoz tartozó gyenge megoldás, ami a 2.16 definícióban szerepel ugyanaz, mint amit a 4.7 definícióban általánosan a nem szimmetrikus, nem korlátos operátorokra értelmeztünk. Ennek oka, hogy a 2.18 tételben szereplő $B(u,v)$ bilineáris formát (és hasonlóan a gyenge megoldás definíciójában szereplő feltételt) úgy választottuk meg, hogy bármely $u, v \in D(L)$-re $B(u,v) = \langle Lu, v\rangle_{L^2}$ teljesüljön, ezért $B(u,v) = \langle L_S u, v\rangle_S$, $\forall u, v \in H_S$.

1. Algoritmus. *Általános felírás.*

A 4.2 fejezetben bemutatott általános iterációs eljárást most felírhatjuk az L elliptikus operátorra az $S = -\Delta$ prekondicionáló operátorral a $H_S = H_0^1(\Omega)$ térben. A peremérték-feladatot meghatározza az $Lu = g$ operátoregyenlet, ahol most a feladat jelöléseinek megfelelően $g := f$.

- Legyen $u_0 \in H_0^1(\Omega)$ tetszőleges kezdőfüggvény, $r_0 := L_S u_0 - g_S$ és $p_0 := s_0 = L_S^* r_0$.
- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} z_n := L_S p_n; \\ u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\|s_n\|_{H_0^1}^2}{\|z_n\|_{H_0^1}^2}; \\ s_{n+1} := L_S^* r_{n+1}; \\ p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\|s_{n+1}\|_{H_0^1}^2}{\|s_n\|_{H_0^1}^2}. \end{cases}$$

Ha m az a szám, amire $p(x) \geq m > 0$ (m. m. $x \in \Omega$), és $M = \|p\|_{L^\infty} + \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty}$, ahol λ_1 a $-\Delta$ operátor legkisebb sajátértéke Ω-n a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett, akkor

$$\frac{\|r_n\|_{H_0^1}}{\|r_0\|_{H_0^1}} = \sqrt{\frac{\int_\Omega |\nabla r_n|^2}{\int_\Omega |\nabla r_0|^2}} \leq 2\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \tag{6}$$

2. Algoritmus. *Tesztfüggvényes felírás a normák és skalárszorzatok kifejtésével.*

Az algoritmusban bármely két vektor között pontosan akkor áll fenn egyenlőség, ha tetszőleges $v \in H_0^1(\Omega)$ tesztfüggvénnyel vett skalárszorzatuk is megegyezik a $H_0^1(\Omega)$ térben. A normákat és skalárszorzatokat a definíciónak megfelelő integrálképlettel átírjuk, illetve felhasználjuk a 4.9 állításban szereplő $\langle g_S, v\rangle_{H_0^1} = \langle g, v\rangle_{L^2}$ azonosságot és a 4.17 megjegyzésben szereplő $\langle L_S u, v\rangle_{H_0^1} = B(u,v)$ összefüggést. Az $\left\langle L_S^* u, v\right\rangle_{H_0^1}$ kiszámításához először határozzuk meg L^*-ot.

4.18. Állítás. *Minden $v \in D(L)$ esetén $L^* v = -\operatorname{div}(p\nabla v) - \mathbf{b}\cdot\nabla v$.*

Bizonyítás. A (4) azonossághoz hasonlóan $\operatorname{div}(\mathbf{b}uv)$-t átírjuk másik alakba, majd alkalmazzuk a Gauss–Osztrogradszkij-tételt, mint az (5) egyenlőségnél.

$$\operatorname{div}(\mathbf{b}uv) = \operatorname{div}(\mathbf{b})uv + \mathbf{b}\cdot\nabla(uv) = \mathbf{b}\cdot\nabla(uv) = (\mathbf{b}\cdot\nabla u)v + (\mathbf{b}\cdot\nabla v)u$$

$$0 = \int_{\partial\Omega}(\mathbf{b}uv)\cdot\nu = \int_\Omega \operatorname{div}(\mathbf{b}uv) = \int_\Omega(\mathbf{b}\cdot\nabla u)v + \int_\Omega(\mathbf{b}\cdot\nabla v)u.$$

A kapott eredményt és a Green-formulát felhasználva adódik, hogy

$$\langle Lu, v\rangle_{L^2} = \int_\Omega -\operatorname{div}(p\nabla u)v + \int_\Omega(\mathbf{b}\cdot\nabla u)v = \int_\Omega p\nabla u\cdot\nabla v - \int_\Omega(\mathbf{b}\cdot\nabla v)u = \langle u, L^* v\rangle_{L^2}. \qquad \square$$

Ekkor az alábbi algoritmushoz jutunk:

- Legyen $u_0 \in H_0^1(\Omega)$ tetszőleges kezdőfüggvény, és r_0, s_0, p_0 olyan, amire

$$\begin{cases} \langle r_0, v\rangle_{H_0^1} = \langle L_S u_0, v\rangle_{H_0^1} - \langle g_S, v\rangle_{H_0^1}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \\ \quad \Leftrightarrow \quad \int_\Omega \nabla r_0\cdot\nabla v = \int_\Omega (p\nabla u_0\cdot\nabla v + (\mathbf{b}\cdot\nabla u_0)v) - \int_\Omega gv, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega); \\ \langle s_0, v\rangle_{H_0^1} = \left\langle L_S^* r_0, v\right\rangle_{H_0^1}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \\ \quad \Leftrightarrow \quad \int_\Omega \nabla s_0\cdot\nabla v = \int_\Omega (p\nabla r_0\cdot\nabla v - (\mathbf{b}\cdot\nabla r_0)v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega); \\ p_0 := s_0. \end{cases}$$

- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} \langle z_n, v\rangle_{H_0^1} = \langle L_S p_n, v\rangle_{H_0^1}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \\ \quad \Leftrightarrow \quad \int_\Omega \nabla z_n\cdot\nabla v = \int_\Omega (p\nabla p_n\cdot\nabla v + (\mathbf{b}\cdot\nabla p_n)v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega); \\ u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\dfrac{\int_\Omega |\nabla s_n|^2}{\int_\Omega |\nabla z_n|^2}; \\ \langle s_{n+1}, v\rangle_{H_0^1} = \left\langle L_S^* r_{n+1}, v\right\rangle_{H_0^1}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \\ \quad \Leftrightarrow \quad \int_\Omega \nabla s_{n+1}\cdot\nabla v = \int_\Omega (p\nabla r_{n+1}\cdot\nabla v - (\mathbf{b}\cdot\nabla r_{n+1})v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega); \\ p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \dfrac{\int_\Omega |\nabla s_{n+1}|^2}{\int_\Omega |\nabla s_n|^2}. \end{cases}$$

3. Algoritmus. *Felírás erős alakban, segédfeladatok bevezetésével.*

Ha $R(L) \subset R(S)$ teljesül, akkor $L_S|_{D(L)} = S^{-1}L = (-\Delta)^{-1}L$. Ebből kapjuk „erős” alakban z_n-re a $-\Delta z_n = Lp_n$ és s_{n+1}-re a $-\Delta s_{n+1} = L^* r_{n+1}$ segédfeladatokat.

Az algoritmus tehát az alábbi alakban írható fel:

- Legyen $u_0 \in D(L)$ tetszőleges kezdőfüggvény. Legyen $p_0 := s_0$, és r_0, s_0 megoldása az alábbi feladatoknak:

$$\begin{cases} -\Delta r_0 = Lu_0 - g = -\operatorname{div}(p\nabla u_0) + \mathbf{b}\cdot\nabla u_0 - g \\ r_0|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\Delta s_0 = L^* r_0 = -\operatorname{div}(p\nabla r_0) - \mathbf{b}\cdot\nabla r_0 \\ s_0|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

- Minden $n \in \mathbb{N}$-re, ha már u_n, p_n, r_n, s_n-t ismerjük:

$$\begin{cases} -\Delta z_n = Lp_n = -\operatorname{div}(p\nabla p_n) + \mathbf{b}\cdot\nabla p_n \\ z_n|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

$$u_{n+1} := u_n + \alpha_n p_n \text{ és } r_{n+1} := r_n + \alpha_n z_n, \text{ ahol } \alpha_n = -\frac{\int_\Omega |\nabla s_n|^2}{\int_\Omega |\nabla z_n|^2};$$

$$\begin{cases} -\Delta s_{n+1} = L^* r_{n+1} = -\operatorname{div}(p\nabla r_{n+1}) - \mathbf{b}\cdot\nabla r_{n+1} \\ s_{n+1}|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

$$p_{n+1} := s_{n+1} + \beta_n p_n, \text{ ahol } \beta_n = \frac{\int_\Omega |\nabla s_{n+1}|^2}{\int_\Omega |\nabla s_n|^2}.$$

Ezzel a nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladat megoldását a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett sikerült visszavezetni Poisson-egyenletek megoldására, amely az eredetinél egyszerűbb feladat.

5. Véges differenciás megvalósítás

Szeretnénk közelítőleg meghatározni néhány konkrét nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladat gyenge megoldását a prekondicionált KGN-módszerrel. A gyakorlatban ezt úgy lehet megvalósítani, hogy a végtelen dimenziós feladatot diszkretizáljuk, azaz véges dimenzióban közelítjük, majd az így kapott lineáris egyenletrendszerre alkalmazzuk az iterációs megoldási módszert. A feladat diszkretizálását véges differenciák segítségével valósítjuk meg, melyhez a [3] szerinti közelítéseket használjuk. Ehhez készítünk számítógépes programokat, melyek megoldják a feladatot és ábrázolják a megoldást, összehasonlítják az elméleti és a gyakorlatban tapasztalt konvergencia sebességét, és megvizsgálják az iterációk számát többféle rácsfinomságra vonatkozóan. Először olyan kétdimenziós peremérték-feladatokat nézünk meg, ahol ismerjük a feladat pontos megoldását, majd megoldunk egy egyszerű fizikai modellből származó problémát is.

5.1. Numerikus közelítés

Legyen $k,l \in \mathbb{R}$ és $k < l$. Tekintsük az $\Omega := [k,l]^2 \subset \mathbb{R}^2$ négyzeten az alábbi peremérték-feladatot:

$$\begin{cases} Lu = a\,\partial_{xx}u + b\,\partial_{yy}u + c\,\partial_x u + d\,\partial_y u = f \\ u_{|\partial\Omega} = 0 \end{cases} \tag{7}$$

Legyenek $a,b,c,d,f\colon \Omega \to \mathbb{R}$ olyan függvények, amelyekre teljesülnek az (1) peremérték-feladat (2) feltételei. Osszuk fel az Ω négyzetet $(n+1)^2$ rácspontra úgy, hogy a négyzet csúcsaitól kezdve minden szomszédos rácspont között ugyanakkora távolság legyen, azaz $h := \frac{l-k}{n}$, és

$$w_h := \{(x_i,y_j)\colon x_i = k+ih,\ y_j = k+jh,\ i,j = 0,1,\dots,n\}.$$

5.1. Definíció. A $w_h' = \{(x_i,y_j)\colon x_i = k+ih,\ y_j = k+jh,\ i,j = 1,\dots,n-1\}$ a felosztás *belső pontjai*, $w_h \setminus w_h'$ pedig a felosztás *perempontjai*.

Jelölje $u_{i,j}$ a megoldás közelítő értékét a w_h szerinti felosztás (x_i,y_j) pontjában.

A rácspontokon szeretnénk minél jobban közelíteni a megoldás értékét. A peremfeltétel miatt a perempontokon azonosan nulla lesz a függvényérték, míg a belső pontokon a megoldást az alábbi *centrális differenciahányadosokkal* közelíthetjük $O(h^2)$ nagyságrendben:

$$\partial_x u_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} \qquad \partial_y u_{i,j} \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h}$$

$$\partial_{xx} u_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \qquad \partial_{yy} u_{i,j} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

A parciális differenciálegyenletbe behelyettesítve a közelítéseket tetszőleges $1 \le i,j \le n-1$ indexekre az alábbi összefüggéseket kapjuk:

$$a(x_i,y_j)\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + b(x_i,y_j)\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} +$$

$$c(x_i,y_j)\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + d(x_i,y_j)\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h} = f(x_i,y_j)$$

Ezt átrendezve minden belső pont és a vele szomszédos négy rácspont között a következő kapcsolat áll fenn:

$$\begin{gathered} u_{i+1,j}\cdot[2\cdot a(x_i,y_j)+h\cdot c(x_i,y_j)]+u_{i-1,j}\cdot[2\cdot a(x_i,y_j)-h\cdot c(x_i,y_j)]+ \\ u_{i,j+1}\cdot[2\cdot b(x_i,y_j)+h\cdot d(x_i,y_j)]+u_{i,j-1}\cdot[2\cdot b(x_i,y_j)-h\cdot d(x_i,y_j)]+ \\ u_{i,j}\cdot[-4\cdot a(x_i,y_j)-4\cdot b(x_i,y_j)]=2h^2\cdot f(x_i,y_j) \end{gathered} \tag{8}$$

Ez meghatároz egy $(n-1)^2$ egyenletből és ugyanennyi ismeretlenből álló lineáris egyenletrendszert, aminek a mátrixa öt átlótól eltekintve mindenhol nulla, amennyiben megfelelő sorrendben írjuk fel az egyenleteket. A számítógépes programban ez úgy lett megvalósítva, hogy az i,j indexekhez tartozó egyenleteket második index szerint csökkenő sorrendbe és ezen belül első index szerint növekvő sorrendbe rendeztem. Az átlók elemeit a (8) egyenletben szereplő együtthatók határozzák meg.

A lineáris egyenletrendszert a 3.5 fejezetben ismertetett prekondicionált KGN-módszerrel oldjuk meg. A Hilbert-tér, amiben dolgozunk, az $\mathbb{R}^{(n-1)^2}$ vektortér az $\langle u,v\rangle=\sum_{i=1}^{(n-1)^2}u_iv_i$ skalárszorzattal. A prekondicionálást a $-\Delta u=-\partial_{xx}u-\partial_{yy}u$ operátorhoz tartozó S mátrixszal végezzük, amit ugyanúgy a most ismertetett diszkretizációval kapunk. Kezdővektornak a nullvektort választjuk. Az algoritmus akkor áll le, ha $\|r_i\|_S=\sqrt{\langle Sr_i,r_i\rangle}<\text{eps}$, ahol eps $\approx 10^{-16}$ elegendően kicsi szám. A prekondicionálással feltételezzük, hogy az S mátrixszal hatékonyan tudjuk megoldani az egyenletrendszereket, ezért a segédfeladatoknál a MATLAB beépített egyenletmegoldóját használjuk.

5.2. Tesztfeladatok

A program működésének ellenőrzése érdekében kidolgozunk néhány tesztfeladatot, ahol ismert a pontos megoldás, és ezzel össze tudjuk vetni az algoritmusból kapott közelítő megoldást.

Ha $p\in C^1(\Omega)$, akkor az (1) peremérték-feladat átírható a következő alakba:

$$\begin{aligned} Lu=-\operatorname{div}(p\nabla u)+\mathbf{b}\cdot\nabla u&=-\partial_x(p\partial_x u)-\partial_y(p\partial_y u)+b_1\partial_x u+b_2\partial_y u= \\ &=-p\Delta u+(b_1-\partial_x p)\partial_x u+(b_2-\partial_y p)\partial_y u=f \end{aligned}$$

Tehát adott $p(x,y)$ függvény és $\mathbf{b}(x,y)=(b_1(x,y),b_2(x,y))$ vektormező esetén a (7) feladatbeli jelölésekkel:

$$\begin{aligned} a(x,y)=b(x,y)&:=-p(x,y) \\ c(x,y)&:=b_1(x,y)-\partial_x p(x,y) \\ d(x,y)&:=b_2(x,y)-\partial_y p(x,y) \end{aligned}$$

5.2. Példa. Tekintsük a szokásos peremérték-feladatot az $\Omega=[0,1]^2$ négyzeten az alábbi függvényekkel:

$$p(x,y)=1+\frac{x^2+y^2}{2},\quad \mathbf{b}(x,y)=\left(y-\frac{1}{2},-x-\frac{1}{2}\right)$$

Legyen $f(x,y)$ olyan, hogy a feladat megoldása $u(x,y)=x(1-x)y(1-y)$ legyen.

A megadott p függvény parciális deriváltjai $\partial_x p = x$ és $\partial_y p = y$, ezért ezekkel a függvényekkel a következő differenciálegyenlethez jutunk:

$$Lu = -\left(1+\frac{x^2+y^2}{2}\right)\Delta u + \left(-x+y-\frac{1}{2}\right)\partial_x u + \left(-x-y-\frac{1}{2}\right)\partial_y u = f$$

A példában szereplő függvényekre teljesülnek a (2) feltételek. Könnyen látható, hogy $\|p\|_{L^\infty} = 2$, és $m = 1$-re $p(x,y) \geq m > 0$ minden $(x,y) \in \Omega$ esetén. Emellett $\mathbf{b}$ folytonosan differenciálható és $\operatorname{div}\mathbf{b} = 0$. Tudjuk, hogy bármely $f \in L^2(\Omega)$ függvényhez létezik egyetlen gyenge megoldása a feladatnak. Legyen a feladat (gyenge) megoldása

$$u(x,y) = x(1-x)y(1-y).$$

5.3. Állítás. *A megadott $u(x,y)$ függvényre teljesül, hogy $u \in H_0^1(\Omega)$.*

Bizonyítás. Ha $x = 0$, $x = 1$, $y = 0$ vagy $y = 1$, akkor $u(x,y) = 0$, ezért $u_{|\partial\Omega} = 0$. Mivel $u \in C^1(\Omega)$, ezért u és parciális deriváltjai négyzetesen integrálhatók, vagyis $L^2(\Omega)$-beliek. □

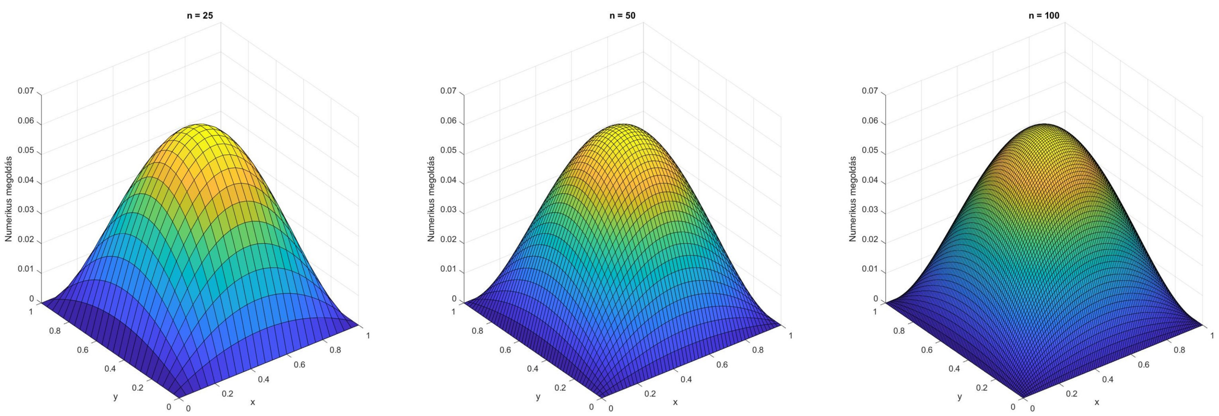
Határozzuk meg u első- és másodrendű parciális deriváltjait!

$$\partial_x u = (1-2x)y(1-y) \qquad \partial_y u = (1-2y)x(1-x)$$

$$\partial_{xx} u = -2y(1-y) \qquad \partial_{yy} u = -2x(1-x)$$

Ezeket a differenciálegyenletbe behelyettesítve megkapjuk a kívánt $f(x,y)$ függvényt:

$$f(x,y) = -\left(1+\frac{x^2+y^2}{2}\right)(-2y(1-y)-2x(1-x)) + \left(-x+y-\frac{1}{2}\right)(1-2x)y(1-y) + \\ + \left(-x-y-\frac{1}{2}\right)(1-2y)x(1-x).$$



1. ábra. Az 5.2 példa numerikus megoldása $n = 25,\ 50,\ 100$ rácsfinomság mellett.

n	5	10	25	50	100	200	400
$\|e\|_\infty$	2.08e-17	4.16e-17	9.02e-17	1.67e-16	1.73e-16	4.79e-16	7.22e-16
h^2	0.04	0.01	0.0016	4e-04	1e-04	2.5e-05	6.25e-06

1. táblázat. A numerikus és pontos megoldás közti legnagyobb eltérés a rácspontokon ($\|e\|_\infty$) és h^2 értéke különböző n-ekre az 5.2 példában.

5.4. Példa. Tekintsük a szokásos peremérték-feladatot az $\Omega = [0,1]^2$ négyzeteten az alábbi függvényekkel:

$$p(x,y) = 1 + \frac{x^2+y^2}{2}, \quad \mathbf{b}(x,y) = (1,1)$$

Legyen $f(x,y)$ olyan, hogy a feladat megoldása $u(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ legyen.

A példában szereplő függvények most az alábbi differenciálegyenletet határozzák meg:

$$Lu = -\left(1 + \frac{x^2+y^2}{2}\right)\Delta u + (1-x)\partial_x u + (1-y)\partial_y u = f$$

Mivel az előző példához képest p változatlan, így most hasonlóan $m = 1$ és $\|p\|_{L^\infty} = 2$. A $\mathbf{b}$ vektormező konstans, ezért teljesülnek rá a szükséges feltételek. Legyen a feladat (gyenge) megoldása

$$u(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y).$$

Az 5.3 állításban szereplő megfontolásokhoz hasonlóan $u \in H_0^1(\Omega)$. Határozzuk meg u első- és másodrendű parciális deriváltjait!

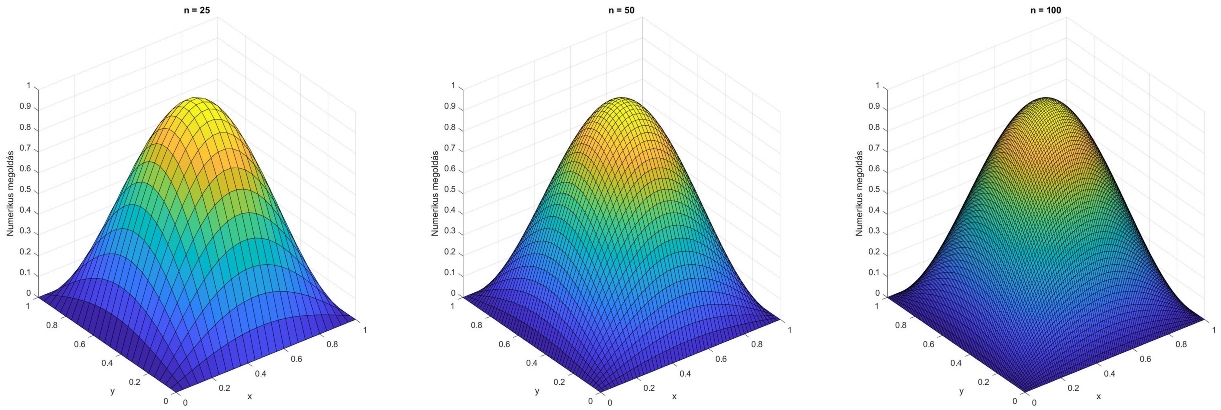
$$\partial_x u = \pi\cos(\pi x)\sin(\pi y) \qquad \partial_y u = \pi\sin(\pi x)\cos(\pi y)$$

$$\partial_{xx} u = -\pi^2\sin(\pi x)\sin(\pi y) \qquad \partial_{yy} u = -\pi^2\sin(\pi x)\sin(\pi y)$$

Ezeket a differenciálegyenletbe behelyettesítve megkapjuk a kívánt $f(x,y)$ függvényt:

$$f(x,y) = -\left(1 + \frac{x^2+y^2}{2}\right)(-2\pi^2\sin(\pi x)\sin(\pi y)) + (1-x)\pi\cos(\pi x)\sin(\pi y) + \\ +(1-y)\pi\sin(\pi x)\cos(\pi y).$$

Az 1. és 2. táblázat adatai azt mutatják, hogy a véges differenciás közelítés jól működik ezekre a tesztfeladatokra. Az 1. táblázat arra enged következtetni, hogy az 5.2 példa polinom-megoldását a felosztás finomságától függetlenül nagy pontossággal meg tudjuk közelíteni a rácspontokon, míg a 2. táblázat szerint az 5.4 példa közelítő megoldása a várt $O(h^2)$ nagyságrendű hibát mutatja.



2. ábra. Az 5.4 példa numerikus megoldása $n = 25,\ 50,\ 100$ rácsfinomság mellett.

n	5	10	25	50	100	200	400
$\|e\|_\infty$	0.0321	0.00856	0.00137	3.41e-04	8.54e-05	2.13e-05	5.34e-06
h^2	0.04	0.01	0.0016	4e-04	1e-04	2.5e-05	6.25e-06

2. táblázat. A numerikus és pontos megoldás közti legnagyobb eltérés a rácspontokon ($\|e\|_\infty$) és h^2 értéke különböző n-ekre az 5.4 példában.

5.3. A konvergencia vizsgálata

Meg szeretnénk vizsgálni, hogy a tesztfeladatok megoldása során a prekondicionált KGN-módszerben az $\|r_i\|_S$ valódi értéke és a (6)-ban kapott elméleti felső korlát hogyan viszonyul egymáshoz. Megnézzük azt is, hogy ez különböző rácsfelosztások mellett hogyan változik.

5.5. Állítás. *Legyen $\Omega_1 = [0,a] \times [0,b]$ téglalap adott a és b paraméterekkel. Ezen a tartományon a $-\Delta$ operátor sajátértékei a homogén Dirichlet-peremfeltétel mellett:*

$$\lambda_{n,m} = \pi^2 \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} \right), \quad \forall n,m \in \mathbb{N}^+.$$

5.6. Következmény. *A $-\Delta$ operátor legkisebb sajátértéke az $\Omega = [0,1]^2$ négyzeten:*

$$\lambda_1 := \lambda_{1,1} = 2\pi^2.$$

Az 5.2 és 5.4 példákban szereplő $p(x,y)$ függvényre teljesül, hogy bármely $(x,y) \in \Omega$ esetén $1 \le p(x,y) \le 2$, ezért $m = 1$ és $\|p\|_{L^\infty} = 2$.

Számítsuk ki az 5.2 példában $\|\mathbf{b}\|_{L^\infty}$-t és a konvergenciához tartozó M állandót!

$$\|\mathbf{b}\|_{L^\infty} = \max_{(x,y)\in\Omega} \sqrt{\left(y - \frac{1}{2}\right)^2 + \left(-x - \frac{1}{2}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{9}{4}} = \frac{\sqrt{10}}{2}$$

$$M = \|p\|_{L^\infty} + \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} = 2 + \frac{\sqrt{10}}{2\sqrt{2}\pi} = 2 + \frac{\sqrt{5}}{2\pi}$$

Ezekkel az állandókkal a (6) szerinti becslés:

$$\frac{\|r_n\|_S}{\|r_0\|_S} \leq 2\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n = 2\left(\frac{1+\frac{\sqrt{5}}{2\pi}}{3+\frac{\sqrt{5}}{2\pi}}\right)^n = 2\left(\frac{2\pi+\sqrt{5}}{6\pi+\sqrt{5}}\right)^n \approx 2\cdot(0.4040)^n =: K_n^{(1)}, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Végezzük el ugyanezt a számolást az 5.4 példában szereplő függvényekre is!

$$\|\mathbf{b}\|_{L^\infty} = \sqrt{1^2+1^2} = \sqrt{2}$$

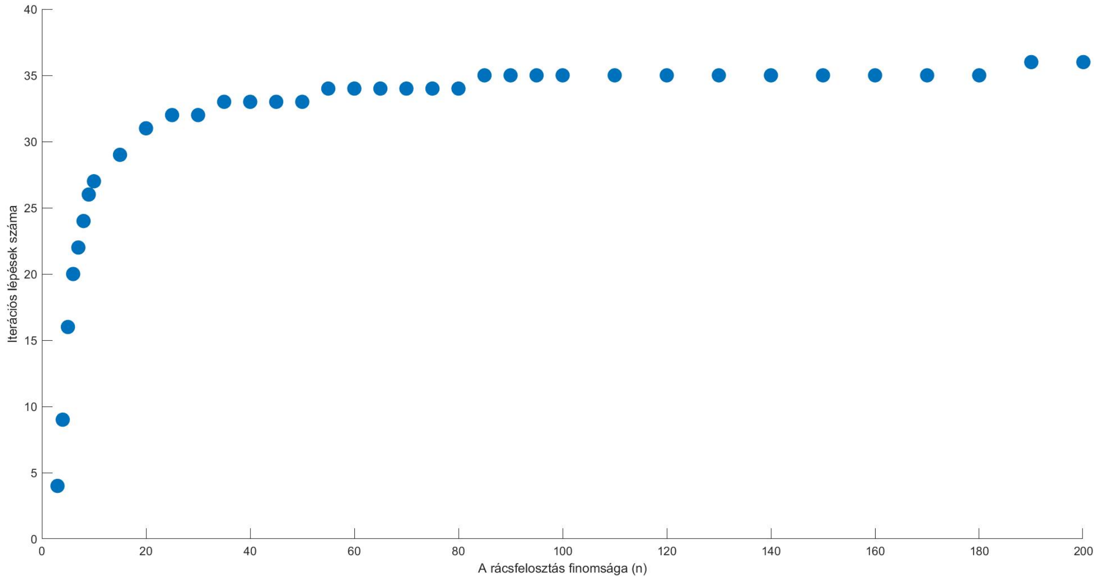
$$M = \|p\|_{L^\infty} + \lambda_1^{-\frac{1}{2}} \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} = 2 + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}\pi} = 2 + \frac{1}{\pi}$$

Ezekkel az állandókkal a (6) szerinti becslés:

$$\frac{\|r_n\|_S}{\|r_0\|_S} \leq 2\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^n = 2\left(\frac{1+\frac{1}{\pi}}{3+\frac{1}{\pi}}\right)^n = 2\left(\frac{\pi+1}{3\pi+1}\right)^n \approx 2\cdot(0.3973)^n =: K_n^{(2)}, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Vezessük be a $t_i = \frac{\|r_i\|_S}{\|r_0\|_S}$ és $q_i = \frac{\|r_i\|_S}{\|r_{i-1}\|_S} = \frac{t_i}{t_{i-1}}$ jelöléseket. Ezeket a számokat az 5.2 példa numerikus megoldása során a 3. táblázat, az 5.4 példa esetén pedig az 5. táblázat szemlélteti. Megfigyelhető, hogy a t_i hányadosok a fentebbi becsléseknek megfelelően végig a K_i felső korlát alatt maradnak, és a 4. és 6. táblázat szerint az egymást követő reziduális hibavektorok S-normájának aránya nagyobb rácsfinomságok esetén közel kerül az $\frac{M-m}{M+m} \approx 0.4$ számhoz.

A táblázatok adatai azt mutatják, hogy a rácsfelosztás finomításával az iteráció hasonlóan megy végbe, és nagy rácsfinomságok esetén a konvergenciát meghatározó számok közel kerülnek egymáshoz, nem mutatnak jelentős eltérést. A 3. és 4. ábra szerint az iterációk száma eleinte gyorsan növekszik, majd egy ponton túl a felosztás finomításával az algoritmus lépésszáma már nem nő számottevően. Mindez azt igazolja, hogy a konvergencia *rácsfüggetlen*, azaz a konvergencia hányadosa korlátos marad a diszkretizáció finomítása során, és az elméleti eredmények jól jellemzik az iterációs módszer aszimptotikus viselkedését.



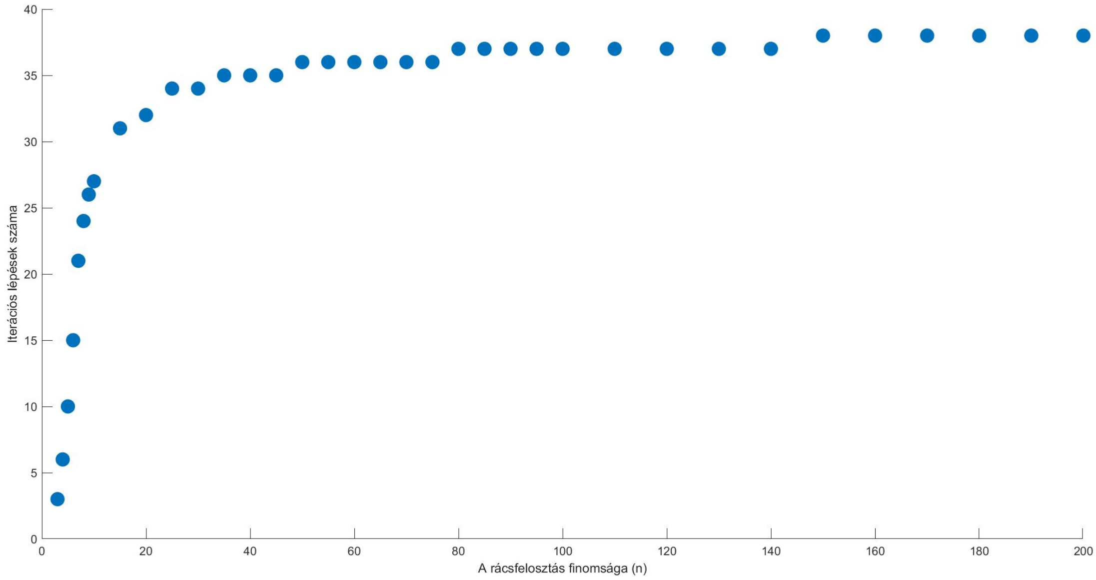
3. ábra. Az algoritmus lépésszáma az 5.2 példában különböző n-ekre.

i	$K_i^{(1)}$	$n=25$		$n=50$		$n=100$	
		t_i	q_i	t_i	q_i	t_i	q_i
1	0.808	0.228	0.228	0.229	0.229	0.229	0.229
2	0.326	0.0630	0.276	0.0633	0.277	0.0633	0.277
3	0.132	0.0186	0.295	0.0188	0.297	0.0188	0.297
4	0.0533	0.00570	0.306	0.00577	0.308	0.00579	0.308
5	0.0215	0.00177	0.311	0.00181	0.314	0.00182	0.314
6	0.00870	0.000558	0.315	0.000576	0.318	0.000580	0.319
7	0.00351	0.000176	0.316	0.000185	0.320	0.000187	0.321
8	0.00142	5.58e-05	0.316	5.95e-05	0.322	6.04e-05	0.324
9	0.000573	1.76e-05	0.315	1.93e-05	0.323	1.96e-05	0.325
10	0.000232	5.53e-06	0.314	6.25e-06	0.324	6.40e-06	0.326

3. táblázat. Az 5.2 példában az első tíz iterációs lépés során tapasztalt számok (t_i, q_i) és az elméleti felső korlát ($K_i^{(1)}$) $n=25,\ 50,\ 100$ rácsfinomság mellett.

n	5	10	25	50	100	200	400
$\overline{q}$	0.139	0.246	0.300	0.313	0.321	0.323	0.324
$D(q)$	0.0817	0.0315	0.0178	0.0181	0.0191	0.0196	0.0198

4. táblázat. Az algoritmus futása során tapasztalt q_i számok átlaga ($\overline{q}$) és szórása ($D(q)$) az 5.2 példában különböző rácsfinomságokra.



4. ábra. Az algoritmus lépésszáma az 5.4 példában különböző n-ekre.

i	$K_i^{(2)}$	$n=25$		$n=50$		$n=100$	
		t_i	q_i	t_i	q_i	t_i	q_i
1	0.795	0.215	0.215	0.215	0.215	0.216	0.216
2	0.316	0.0564	0.262	0.0565	0.262	0.0565	0.262
3	0.125	0.0162	0.288	0.0163	0.288	0.0163	0.289
4	0.0498	0.00487	0.300	0.00491	0.301	0.00492	0.302
5	0.0198	0.00150	0.308	0.00152	0.310	0.00153	0.310
6	0.00787	0.000469	0.312	0.000480	0.315	0.000482	0.316
7	0.00313	0.000148	0.315	0.000153	0.319	0.000154	0.319
8	0.00124	4.66e-05	0.316	4.91e-05	0.321	4.96e-05	0.322
9	0.000493	1.47e-05	0.316	1.58e-05	0.323	1.61e-05	0.324
10	0.000196	4.64e-06	0.315	5.13e-06	0.324	5.23e-06	0.325

5. táblázat. Az 5.4 példában az első tíz iterációs lépés során tapasztalt számok (t_i, q_i) és az elméleti felső korlát ($K_i^{(2)}$) $n = 25,\ 50,\ 100$ rácsfinomság mellett.

n	5	10	25	50	100	200	400
$\overline{q}$	0.160	0.230	0.295	0.312	0.319	0.322	0.323
$D(q)$	0.0816	0.0401	0.0194	0.0205	0.0218	0.0224	0.0224

6. táblázat. Az algoritmus futása során tapasztalt q_i számok átlaga ($\overline{q}$) és szórása ($D(q)$) az 5.4 példában különböző rácsfinomságokra.

5.4. Egy fizikai modell

Megoldjuk az [1] könyv 6.1.4 példáját.

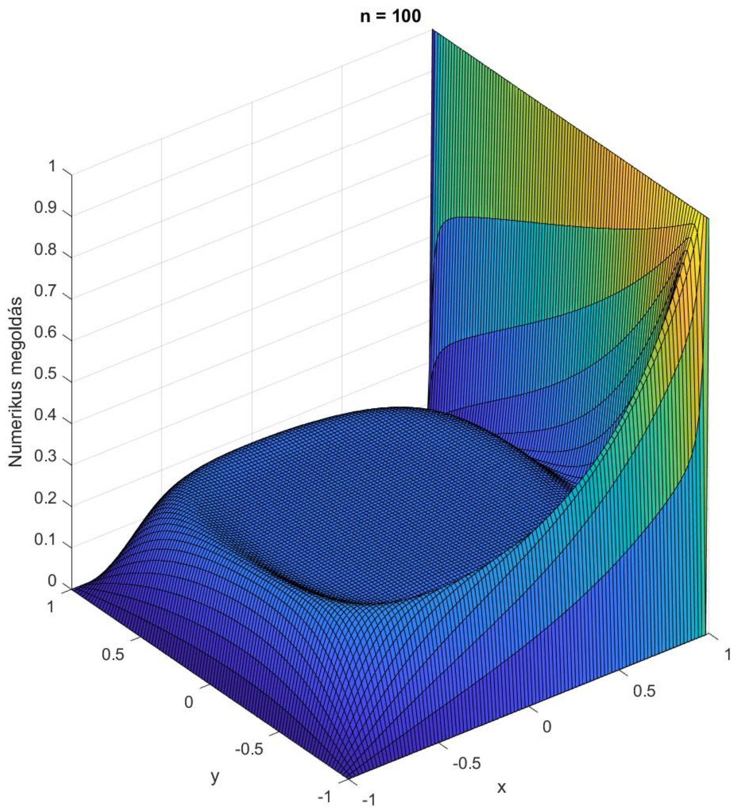
Legyen $\Omega = [-1,1]^2$, és tekintsük azt a peremérték-feladatot, hogy

$$-\frac{1}{200}\Delta u + 2y(1-x^2)\partial_x u - 2x(1-y^2)\partial_y u = 0.$$

Az ennek megfelelő függvények: $p(x,y) = \frac{1}{200}$, $\mathbf{b}(x,y) = (2y(1-x^2), -2x(1-y^2))$, $f(x,y) = 0$. A feladathoz tartozó Dirichlet-peremfeltétel most nem homogén: a négyzet három oldalán nulla, a negyedik oldalon $u(1,y) = 1$ bármely $y \in [-1,1]$-re.

Ez a feladat egy üreg (pl. kétrétegű üveg belseje) hőmérséklet-eloszlásának egyszerű modellje, ahol az egyik külső fal melegebb a többihez képest. A $\mathbf{b}$ vektormező egy forgó áramlást határoz meg. Mivel a megadott konvekció-diffúziós egyenletben $\|p\|_{L^\infty}$ nagyon kicsi, ezért a folyamatban a konvekció dominál, míg a diffúzió csak kis mértékben jelentkezik.

Az inhomogén Dirichlet-peremfeltétel miatt a numerikus közelítés annyiban változik, hogy a megoldandó lineáris egyenletrendszer jobb oldalán az f függvény értékeit módosítani kell a peremfeltételnek megfelelően. A homogén esetnél ezzel azért nem kellett foglalkozni, mert a perempontokon azonosan nulla volt a függvényérték, most viszont a (8) egyenletben szereplő nem nulla perempontokat tartalmazó tagokat ki kell vonni az egyenlet jobb oldalából. Az így kapott egyenletrendszert az eddigiekkel megegyező módon a prekondicionált KGN-módszerrel oldjuk meg.



5. ábra. A fizikai modell numerikus megoldása $n = 100$ rácsfinomság mellett.

6. Függelék

6.1. Program. Az 5.2 és 5.4 tesztfeladatok numerikus megoldása véges differenciás diszkretizációval és prekondicionált KGN-módszerrel, majd a megoldás ábrázolása (1. és 2. ábra).

```
function [iter, fact, diff, h] = fdm(n, show)
% n: rácsfinomság; show: ábrázolja-e a megoldást. fdm(100, true)

%% A megfelelo függvények beállítása
% a*u_xx + b*u_yy + c*u_x + d*u_y = f; sol: pontos megoldás

% ---------- 5.2 példa ----------
% a0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2);
% b0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2);
% c0 = @(x,y) (y-(1/2)-x);
% d0 = @(x,y) (-x-(1/2)-y);
% f0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2)*((-2)*x*(1-x)+(-2)*y*(1-y))+(y
    -0.5-x)*(1-2*x)*...
%                y*(1-y)+(-x-0.5-y)*(1-2*y)*x*(1-x);
% sol0 = @(x,y) x*(1-x)*y*(1-y);

% ---------- 5.4 példa ----------
a0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2);
b0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2);
c0 = @(x,y) 1-x;
d0 = @(x,y) 1-y;
f0 = @(x,y) -(1 + (x^2 + y^2)/2)*(-2*pi^2*sin(pi*x)*sin(pi*y)) + ...
    (1-x)*(pi*cos(pi*x)*sin(pi*y)) + (1-y)*(pi*cos(pi*y)*sin(pi*x));
sol0 = @(x,y) sin(pi*x)*sin(pi*y);

%% Elemenkénti kiértékelés beállítása
a = @(x,y) arrayfun(a0,x,y);
b = @(x,y) arrayfun(b0,x,y);
c = @(x,y) arrayfun(c0,x,y);
d = @(x,y) arrayfun(d0,x,y);
f = @(x,y) arrayfun(f0,x,y);
sol = @(x,y) arrayfun(sol0,x,y);

%% A rácsfinomság és a [k,l]^2 tartomány beállítása
% n = 200;
k = 0;
l = 1;
h = (l-k) / n;
row = n-1;

%% Az (X,Y) rácspontok létrehozása
x = linspace(k, l, n+1);
x = x(2:end-1);
X = repmat(x, 1, row)';
Y_a = repmat(x, row, 1);
Y = flip(Y_a(:));
```

```
%% A mátrix átlóinak létrehozása vektorként
B = f(X, Y);
main_diag = -4*a(X, Y) - 4*b(X, Y);
up_diag_1 = 2*a(X, Y) + h*c(X, Y);
up_diag_1 = up_diag_1(1:end-1);
for i=row:row:((row^2)-1)
    up_diag_1(i)=0;
end
up_diag_2 = 2*b(X, Y) - h*d(X, Y);
up_diag_2 = up_diag_2(1:end-row);
low_diag_1 = 2*a(X, Y) - h*c(X, Y);
low_diag_1 = low_diag_1(2:end);
for i=row:row:((row^2)-1)
    low_diag_1(i)=0;
end
low_diag_2 = 2*b(X, Y) + h*d(X, Y);
low_diag_2 = low_diag_2(row+1:end);

%% Az átlókat egy ritka mátrixba rendezzük
A = sparse(row^2, row^2);
A = spdiags([[low_diag_1;0] main_diag [0;up_diag_1]], -1:1, A);
A = spdiags(low_diag_2, -row, A);
A = spdiags([(1:row)';up_diag_2], row, A);
A = 1/(2*(h^2)) * A;

%% Megoldjuk az Au=B lineáris egyenletrendszert
[u, iter, V] = precgn(A, B);
fact = V(:,4);

%% Ábrázoljuk a megoldást, ha show = true
[XX,YY] = meshgrid([k x 1],[1 flip(x) k]);
res = reshape(u, [row row])';
ZZ = zeros(row+2);
ZZ(2:row+1, 2:row+1) = res;
sol_val = sol(XX,YY);
diff = max(max(abs(ZZ-sol_val)));
disp("Legnagyobb eltérés: " + diff)
disp("h^2: " + h^2)
if show
    figure
    subplot(1,2,1)
    surf(XX, YY, ZZ);
    view(3);
    xlabel('x')
    ylabel('y')
    zlabel('Numerikus megoldás')
    % zlim([0 1])
    title("n = " + n)
end
```

6.2. Program. A prekondicionált KGN-módszer algoritmusa, és táblázat készítése az algoritmus futásáról (3. és 5. táblázat).

```
function [u, counter, V] = precgn(A, b)

%% Prekondicionáló mátrix
d = size(A, 1);
S = gen(round(d^0.5)+1);

%% Kezdovektorok, segédváltozók
u = zeros(d, 1);
r = S\(A*u-b);
s = S\(A'*r);
p = s;
r0_s = dot(S*r, r)^0.5;
counter = 1;          % Lépésszám
V = zeros(1,4);       % Táblázat
% q = 0.4040;         % Elméleti konvergencia az 5.2 példában
q = 0.3973;           % Elméleti konvergencia az 5.4 példában

%% Iteráció
while dot(S*r, r)^0.5 > eps
    z = S\(A*p);
    alpha = (-1) * dot(S*s, s) / dot(S*z, z);
    u = u + alpha * p;
    r_p = r;
    r = r + alpha * z;
    s_p = s;
    s = S\(A'*r);
    beta = dot(S*s, s) / dot(S*s_p, s_p);
    p = s + beta * p;
    V(counter,1) = counter;
    V(counter,2) = (dot(S*r, r)^0.5) / r0_s;
    V(counter,3) = 2*(q^counter);
    V(counter,4) = (dot(S*r, r)^0.5) / (dot(S*r_p, r_p)^0.5);
    counter = counter + 1;
end

counter = counter - 1;
T = array2table(V,...
    'VariableNames',{'iter','||r_n||s','bound','ratio'});
disp(T);
```

6.3. Program. Az S prekondicionáló mátrix létrehozása.

```
function A = gen(n)
%% A megfelelo függvények beállítása
a0 = @(x,y) -1;
b0 = @(x,y) -1;
c0 = @(x,y) 0;
d0 = @(x,y) 0;

%% Elemenkénti kiértékelés beállítása
a = @(x,y) arrayfun(a0,x,y);
b = @(x,y) arrayfun(b0,x,y);
c = @(x,y) arrayfun(c0,x,y);
d = @(x,y) arrayfun(d0,x,y);

%% A rácsfinomság és a [k,l]^2 tartomány beállítása
k = 0;
l = 1;
h = (l-k) / n;
row = n-1;

%% Az (X,Y) rácspontok létrehozása
x = linspace(k, l, n+1);
x = x(2:end-1);
X = repmat(x, 1, row)';
Y_a = repmat(x, row, 1);
Y = flip(Y_a(:));

%% A mátrix átlóinak létrehozása vektorként
main_diag = -4*a(X, Y) - 4*b(X, Y);
up_diag_1 = 2*a(X, Y) + h*c(X, Y);
up_diag_1 = up_diag_1(1:end-1);
for i=row:row:((row^2)-1)
    up_diag_1(i)=0;
end
up_diag_2 = 2*b(X, Y) - h*d(X, Y);
up_diag_2 = up_diag_2(1:end-row);
low_diag_1 = 2*a(X, Y) - h*c(X, Y);
low_diag_1 = low_diag_1(2:end);
for i=row:row:((row^2)-1)
    low_diag_1(i)=0;
end
low_diag_2 = 2*b(X, Y) + h*d(X, Y);
low_diag_2 = low_diag_2(row+1:end);

%% Az átlókat egy ritka mátrixba rendezzük
A = sparse(row^2, row^2);
A = spdiags([[low_diag_1;0] main_diag [0;up_diag_1]], -1:1, A);
A = spdiags(low_diag_2, -row, A);
A = spdiags([(1:row)';up_diag_2], row, A);
A = 1/(2*(h^2)) * A;
```

6.4. Program. Grafikon készítése az iterációk számáról (3. és 4. ábra).

```
X = [3:10, 10:5:100, 100:10:200];
Y = X;
counter = 1;
for i = X
    [num, fact, diff, h] = fdm(i, false);
    Y(counter) = num;
    counter = counter + 1;
    disp(i)
end
scatter(X,Y,150,"filled")
xlabel("A rácsfelosztás finomsága (n)")
ylabel("Iterációs lépések száma")
```

6.5. Program. Táblázat készítése a reziduális hibavektorok normájának átlagos csökkenéséről (4. és 6. táblázat).

```
X = [5, 10, 25, 50, 100, 200, 400];
Y = X;
Z = X;
counter = 1;
for i = X
    [num, fact, diff, h] = fdm(i, false);
    Y(counter) = mean(fact);
    Z(counter) = std(fact);
    counter = counter + 1;
    disp(i)
end
T = array2table([X' Y' Z'],...
    'VariableNames',{'n','mean','std'});
disp(T);
```

6.6. Program. Táblázat készítése a véges differenciás közelítés hibájáról (1. és 2. táblázat).

```
X = [5, 10, 25, 50, 100, 200, 400];
Y = X;
Z = X;
counter = 1;
for i = X
    [num, fact, diff, h] = fdm(i, false);
    Y(counter) = diff;
    Z(counter) = h^2;
    counter = counter + 1;
    disp(i)
end
T = array2table([X' Y' Z'],...
    'VariableNames',{'n','max_diff','h^2'});
disp(T);
```

6.7. Program. A fizikai modell numerikus megoldása (5. ábra).

```
a0 = @(x,y) -1/200;
b0 = @(x,y) -1/200;
c0 = @(x,y) 2*y*(1-x^2);
d0 = @(x,y) -2*x*(1-y^2);
f0 = @(x,y) 0;
up0 = @(x,y) 0;
down0 = @(x,y) 0;
left0 = @(x,y) 0;
right0 = @(x,y) 1;

%% Elemenkénti kiértékelés beállítása
a = @(x,y) arrayfun(a0,x,y);
b = @(x,y) arrayfun(b0,x,y);
c = @(x,y) arrayfun(c0,x,y);
d = @(x,y) arrayfun(d0,x,y);
f = @(x,y) arrayfun(f0,x,y);
up = @(x,y) arrayfun(up0,x,y);
down = @(x,y) arrayfun(down0,x,y);
left = @(x,y) arrayfun(left0 ,x,y);
right = @(x,y) arrayfun(right0 ,x,y);

%% A rácsfinomság és a [k,l]^2 tartomány beállítása
n = 100;
k = -1;
l = 1;
h = (l-k) / n;
row = n-1;

%% Az (X,Y) rácspontok létrehozása
x = linspace(k, l, n+1);
x = x(2:end-1);
X = repmat(x, 1, row)';
Y_a = repmat(x, row, 1);
Y = flip(Y_a(:));

%% A mátrix átlóinak létrehozása vektorként
B = 2*(h^2)*f(X, Y);
main_diag = -4*a(X, Y) - 4*b(X, Y);
up_diag_1 = 2*a(X, Y) + h*c(X, Y);
up_diag_1 = up_diag_1(1:end-1);
for i=row:row:((row^2)-1)
    up_diag_1(i)=0;
end
up_diag_2 = 2*b(X, Y) - h*d(X, Y);
up_diag_2 = up_diag_2(1:end-row);
low_diag_1 = 2*a(X, Y) - h*c(X, Y);
low_diag_1 = low_diag_1(2:end);
for i=row:row:((row^2)-1)
    low_diag_1(i)=0;
end
```

```
low_diag_2 = 2*b(X, Y) + h*d(X, Y);
low_diag_2 = low_diag_2(row+1:end);

%% Az átlókat egy ritka mátrixba rendezzük
A = sparse(row^2, row^2);
A = spdiags([[low_diag_1;0] main_diag [0;up_diag_1]], -1:1, A);
A = spdiags(low_diag_2, -row, A);
A = spdiags([(1:row)';up_diag_2], row, A);
A = 1/(2*(h^2)) * A;

%% Módosítjuk a B vektort a peremfeltételek szerint
for i=1:row
    B(i) = B(i) - (2*b(X(i), Y(i)) + h*d(X(i), Y(i)))*up(X(i), 1);
end
for i=((row^2)-row+1):(row^2)
    B(i) = B(i) - (2*b(X(i), Y(i)) - h*d(X(i), Y(i)))*down(X(i), k);
end
for i=row:row:(row^2)
    B(i) = B(i) - (2*a(X(i), Y(i)) + h*c(X(i), Y(i)))*right(1, Y(i));
end
for i=1:row:(row^2)
    B(i) = B(i) - (2*a(X(i), Y(i)) - h*c(X(i), Y(i)))*left(k, Y(i));
end
B = 1/(2*(h^2)) * B;

%% Megoldjuk az Au=B lineáris egyenletrendszert
[u, iter , V] = precgn(A, B);

%% Ábrázoljuk a megoldást
[XX,YY] = meshgrid([k x 1],[1 flip(x) k]);
res = reshape(u, [row row])';
ZZ = zeros(row+2);
ZZ(2:row+1, 2:row+1) = res;

up_val = up(XX,YY);
down_val = down(XX,YY);
left_val = left(XX,YY);
right_val = right(XX,YY);
ZZ(1, 1:end) = up_val(1, 1:end);
ZZ(row+2, 1:end) = down_val(row+2, 1:end);
ZZ(1:end, row+2) = right_val(1:end, row+2);
ZZ(1:end, 1) = left_val(1:end, 1);

figure
subplot(1,2,1)
surf(XX, YY, ZZ);
xlabel("x");
ylabel("y");
zlabel("Numerikus megoldás");
view(3);
title("n = " + n);
```

Hivatkozások

[1] ELMAN, H. C. ; SILVESTER, D. J. ; WATHEN, A. J.: *Finite Elements and Fast Iterative Solvers: With Applications in Incompressible Fluid Dynamics*. Oxford University Press, 2014

[2] KARÁTSON, J. : *Numerikus funkcionálanalízis*. Typotex, 2014

[3] KARÁTSON, J. ; HORVÁTH, R. : *Numerical Methods for Elliptic Partial Differential Equations*. https://kajkaat.web.elte.hu/pdnmell-ang-2022.pdf

[4] KNABNER, P. ; ANGERMANN, L. : *Numerical Methods for Elliptic and Parabolic Partial Differential Equations*. Springer, 2021

[5] STOYAN, G. ; TAKÓ, G. : *Numerikus módszerek 1.* Typotex, 2021

[6] THE MATHWORKS, INC.: *MATLAB version 9.11.0.2022996 (R2021b) Update 4*. Natick, Massachusetts, 2021. https://www.mathworks.com/help/matlab/

NYILATKOZAT

Név: Lados Bálint István

ELTE Természettudományi Kar, szak: Matematika BSc

NEPTUN azonosító: BC26UA

Szakdolgozat címe:
Nem szimmetrikus elliptikus peremérték-feladatok iterációs megoldása

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló szellemi alkotásom, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2023.05.30.

Lados Bálint

a hallgató aláírása