Дискретная и непрерывная матфизика…

или как и что считают…

План

- **Что считают, или какие уравнения обычно решают «численно»**
  - Уравнение Пуассона (эллиптические краевые задачи)
  - Диффузионное уравнение (параболические начально-краевые задачи)
  - Волновое и «телеграфное» уравнения (гиперболические начально-краевые задачи)
  - Проблема аппроксимации
- **Что общего и какая разница между дискретным и непрерывным миром**
  - Среда обитания: просто множества и множества с «близостью»
  - Обитатели: функции и операторы
  - Что такое «интегрирование» в дискретном мире?
  - Что такое дифференцирование и почему его *нет* в дискретном мире?
- **Более внимательный взгляд на дискретный мир**
  - Что вместо «близости» (графы и соседи)
  - Что вместо дифференцирования (градиент, дивергенция и теорема Остроградского)
  - Оператор Лапласа и граничные условия
  - Еще более внимательный взгляд: «Ячейки», ротор и теорема Стокса
- **Откуда дискретный мир «знает», что существует непрерывный? (И наоборот…)**
- **О пользе аналогий: «Теория возмущений «по размерности»»**

Что считают, или какие уравнения обычно решают «численно»

- **Уравнение Пуассона (эллиптические краевые задачи):**

$$\Delta u + \lambda u = f, \quad \alpha(\xi)u(\xi) + \beta(\xi)\frac{\partial u}{\partial n(\xi)} = 0, \ \xi \in \partial\Omega, \ \Omega \subset \mathrm{R}^n$$

- **Диффузионное уравнение (параболические начально-краевые задачи)**

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + f, \quad u(x,0) = u_0(x), \ \alpha(\xi)u(\xi,t) + \beta(\xi)\frac{\partial u(\xi,t)}{\partial n(\xi)} = 0, \ \xi \in \partial\Omega, \ \Omega \subset \mathrm{R}^n$$

- **Волновое и «телеграфное» уравнения (гиперболические начально- краевые задачи)**

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2\Delta u + f, \quad u(x,0) = u_0(x), \quad u_t(x,0) = u_1(x)$$

$$\alpha(\xi)u(\xi,t) + \beta(\xi)\frac{\partial u(\xi,t)}{\partial n(\xi)} = 0, \ \xi \in \partial\Omega, \ \Omega \subset \mathrm{R}^n$$

Или так:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au + f, \quad u(x,0) = u^{(0)}(x), \ u = \begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \ A = \begin{pmatrix} 0 & \nabla_n^T \\ \nabla_n & 0_{n\times n} \end{pmatrix}$$

$$\alpha(\xi)u_0(\xi,t) + i\beta(\xi)\left(\hat{u}(\xi,t), n(\xi)\right) = 0, \ \xi \in \partial\Omega, \ \Omega \subset \mathrm{R}^n$$

Что считают, или какие уравнения обычно решают «численно»: проблема аппроксимации

- **Конечномерные аналоги задач «непрерывной матфизики»**
  - Эллиптические уравнения: $Au - \lambda u = f,\ u, f \in \mathrm{R}^N$, A – эрмитова и положительно определена
  - Параболические уравнения: $\frac{\partial u}{\partial t} = Au + f,\ u, f : \mathrm{R} \to \mathrm{R}^N,\ u(0) = u^{(0)},\ A$ – эрмитова и положительно определена
  - Гиперболические уравнения: $\frac{\partial u}{\partial t} = iAu + f,\ u, f : \mathrm{R} \to \mathrm{R}^N,\ u(0) = u^{(0)},\ A$ – эрмитова
- **Проблема аппроксимации: как найти «правильную» матрицу** A?
  - Надо искать не одну матрицу, а много – свою для каждого N
  - Надо определить, что такое сходимость (чего и куда?)
  - Хорошо бы уметь эту сходимость доказывать – раз и навсегда или в каждом конкретном случае
  - Хорошо бы иметь оценки сходимости, но этого не бывает практически никогда – увы!
- **Какие бывают аппроксимации:**
  - Разложение по (собственным) функциям – вариационные методы
  - Табличные, или сеточные аппроксимации – «дискретный» мир!

Что общего и какая разница между дискретным и непрерывным миром

- **Среда обитания:**

  Непрерывный мир – множество с «близостью», т.е., определено расстояние между точками, которое может быть как угодно малым

  Дискретный мир – множество… и только?

- **Обитатели:**

  Непрерывный мир: непрерывные функции и «непрерывные» операторы (интегральные, дифференциальные, и т.п…)

  Дискретный мир: «просто» функции (векторы) и «просто» операторы (матрицы)

- **Пример: Интегрирование в дискретном мире**

$$f : M \to \mathrm{R},\ \int f d\mu \equiv \sum_{x \in M} \mu(x) f(x)$$

  Почему? – Теория интеграла Римана

- **Еще пример: Что такое дифференцирование и почему его *нет* в дискретном мире**

$$X : C(M) \to C(M),\quad X(fg) = fXg + gXf$$

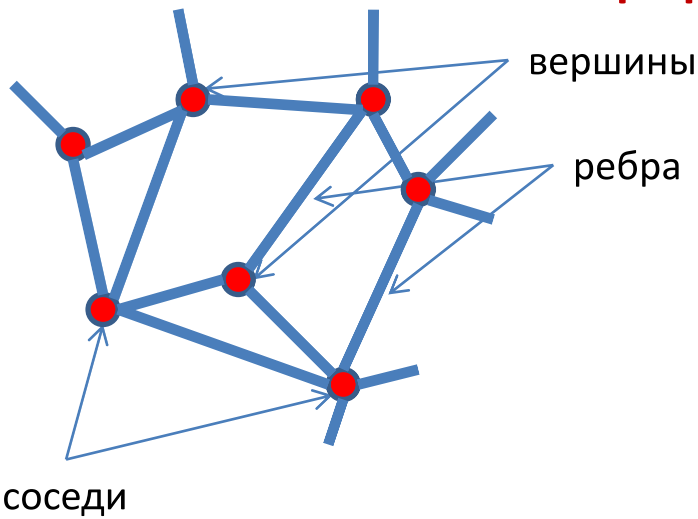
Теорема: В непрерывном мире

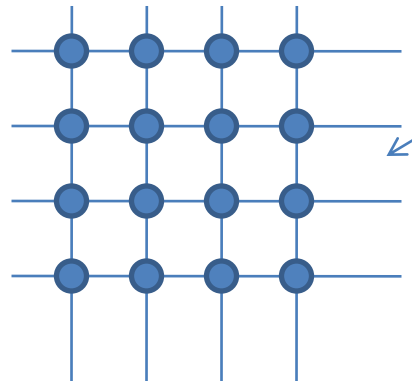
$$\boxed{X \doteq a^i(x) \frac{\partial}{\partial x^i}}$$

В дискретном мире X=0!

Более внимательный взгляд на дискретный мир…

- **Что вместо близости: графы и соседство**





Дискретный мир – это не просто множество V (вершин), а еще и множество E ребер… и еще кое что… Обитатели дискретного мира – это не только функции на V, но и функции на E, и операторы (матрицы) которые, вообще говоря, их перепутывают…

- **Зачем все это нужно, или как дифференцировать, если нельзя но очень хочется…**

Более внимательный взгляд на дискретный мир…

- **Как же все-таки дифференцировать, если нельзя но очень хочется…**

  – Оператор ∇ (градиент): $\nabla: C(V) \to C^a(E), \quad C^a(E) = \{ f : f(ab) = -f(ba) \}$

  где ab - ребро с *началом* в вершине a и *концом* в вершине b:

$$(\nabla f)(ab) = (f(b) - f(a)) / l(ab)$$

  Основное свойство: $\nabla(fg) = <f> \nabla g + <g> \nabla f, \quad <f>(ab) = \dfrac{f(a) + f(b)}{2}$

  (похоже, правда?)

  – Оператор div (дивергенция): $\operatorname{div}: C^a(E) \to C(V)$

$$(\operatorname{div} f)(a) = \frac{1}{\mu(a)} \sum_{b,\, b - \text{сосед } a} f(ab)$$

  Основное свойство (***Теорема Остроградского***):

$$\sum_{a \in \Omega} \mu(a)(\operatorname{div} f)(a) = \sum_{a \in \partial\Omega} \sum_{b \notin \Omega,\, b - \text{сосед } a} f(ab), \quad \partial\Omega = \{ a \in \Omega : \exists b \in V \setminus \Omega, b - \text{сосед } a \}$$

  (не очень похоже, правда?)

Более внимательный взгляд на дискретный мир…

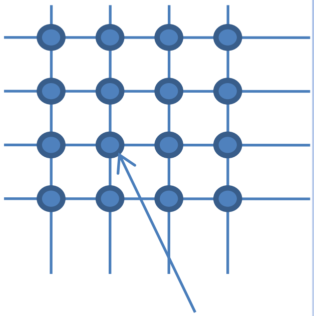
Дискретная матфизика: эллиптические краевые задачи

Оператор Лапласа: $$(\Delta u)(a) = (\mathrm{div}\nabla u)(a) = \frac{1}{\mu(a)} \sum_{b,\, b-\text{сосед } a} \frac{u(b)-u(a)}{l(ab)}$$

Прямоугольные сетки и периодические условия

$$(\Delta u)(i,j) = \frac{u(i-1,j)-2u(i,j)+u(i+1,j)}{h_1^2} + \frac{u(i,j-1)-2u(i,j)+u(i,j+1)}{h_2^2}$$

$$0 \le i \le N_1 - 1,\ \ 0 \le j \le N_2 - 1,\ \ u(-1,j) = u(N_1-1,j), \ldots$$



$a=(i,j)$

Преобразование Фурье в дискретном мире

$$\hat{f}(q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} e^{-i\frac{2\pi}{N}qj} f(j),\ \ q = 0,\ldots,N-1$$

Граничные условия

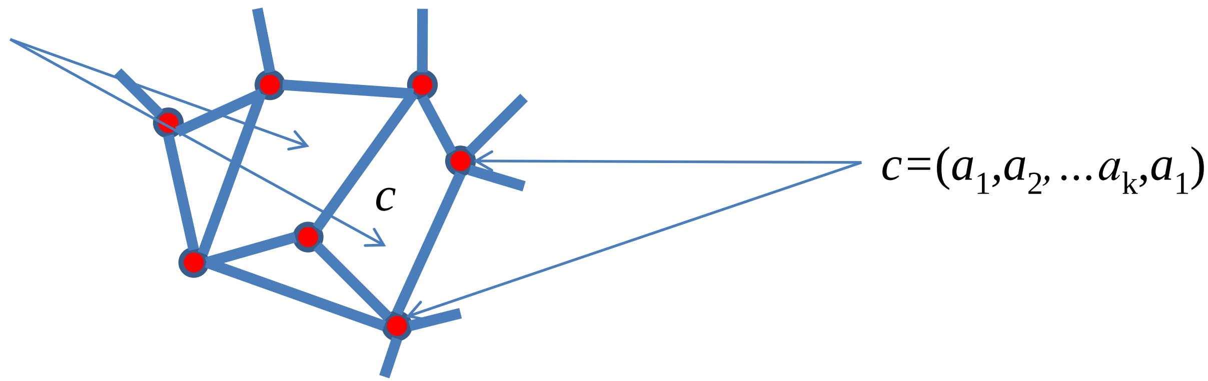
Дирихле $\quad u_{ext} = u_{in}$

Нейман $\quad u_{ext} = -u_{in}$

Третий род $\quad u_{ext} = \alpha u_{in}$

Еще более внимательный взгляд на дискретный мир…

Среда обитания: ячейки



Обитатели: Ротор

$$(\mathrm{rot} f)(c) = \frac{1}{\nu(c)}\left(f(a_1a_2)l(a_1a_2) + f(a_2a_3)l(a_2a_3) + \ldots + f(a_ka_1)l(a_ka_1)\right), \quad f \in C^a(E)$$

Основное свойство: $\mathrm{rot}\nabla f = 0$

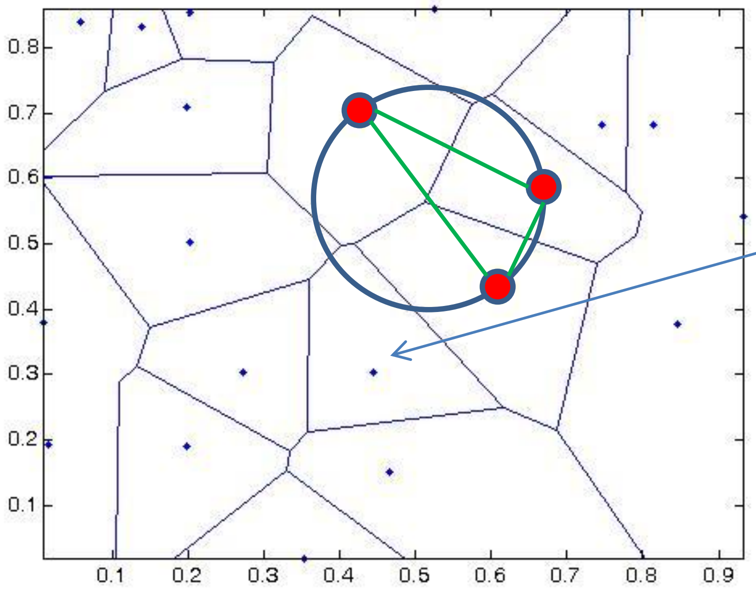
Теорема Стокса: $K = \{c_1, \ldots, c_N\}, \quad \partial K = \{e : \exists!\, j \in \{1, \ldots, N\},\ e \in \partial c_j\}$

$$\sum_{c \in K} \nu(c)(\mathrm{rot} f)(c) = \sum_{e \in \partial K} \varepsilon(e) l(e) f(e)$$

Из непрерывного мира - дискретный

Создание среды обитания:

Диаграммы Вороного и триангуляция Делоне



Для пары точек (a,b), $\Pi(a,b) = \{c\colon d(a,c)<d(b,c)\}$

Для набора точек $Q(a_i) = \bigcap_{k \neq i} \Pi(a_i, a_k)$

Если никакие четыре точки набора не лежат на одной окружности, окружности с центрами в вершинах «многоугольника» Вороного содержат ровно по три точки

Создание обитателей:

«Таблицы» скалярных и векторных функций

$$f(x) \to \{ f_i \equiv f(x_i),\ x_i \in V \} \qquad \vec{a}(x) \to \{a(e) \equiv \frac{1}{l(e)} \int_e (\vec{a}(x), d\vec{l}),\ e \in E\}$$

Коэффициенты: длины ребер, площади ячеек, площади «дуальных ячеек», …

Из дискретного мира - непрерывный

- **Аппроксимация функций**

$$V \xrightarrow{T_n} V_n, \quad \|T_n f\|_n \xrightarrow{n\to\infty} \|f\|$$

- **Аппроксимация операторов**

$$A : V \to V, \;\; A_n : V_n \to V_n$$

$$\|A_n T_n f - T_n A f\|_n \xrightarrow{n\to\infty} 0$$

- **Устойчивость и сходимость**

Теорема. Если A_n аппроксимирует обратимый оператор A и $\|A_n^{-1}\|_n$ равномерно ограничены, то A_n^{-1} аппроксимирует A^{-1}

- **Можно ли «создать» непрерывный мир из дискретных (Исаак Ньютон и нестандартный анализ)**

Если имеется последовательность V_n, можно ли найти V и T_n? И такой же вопрос про операторы…

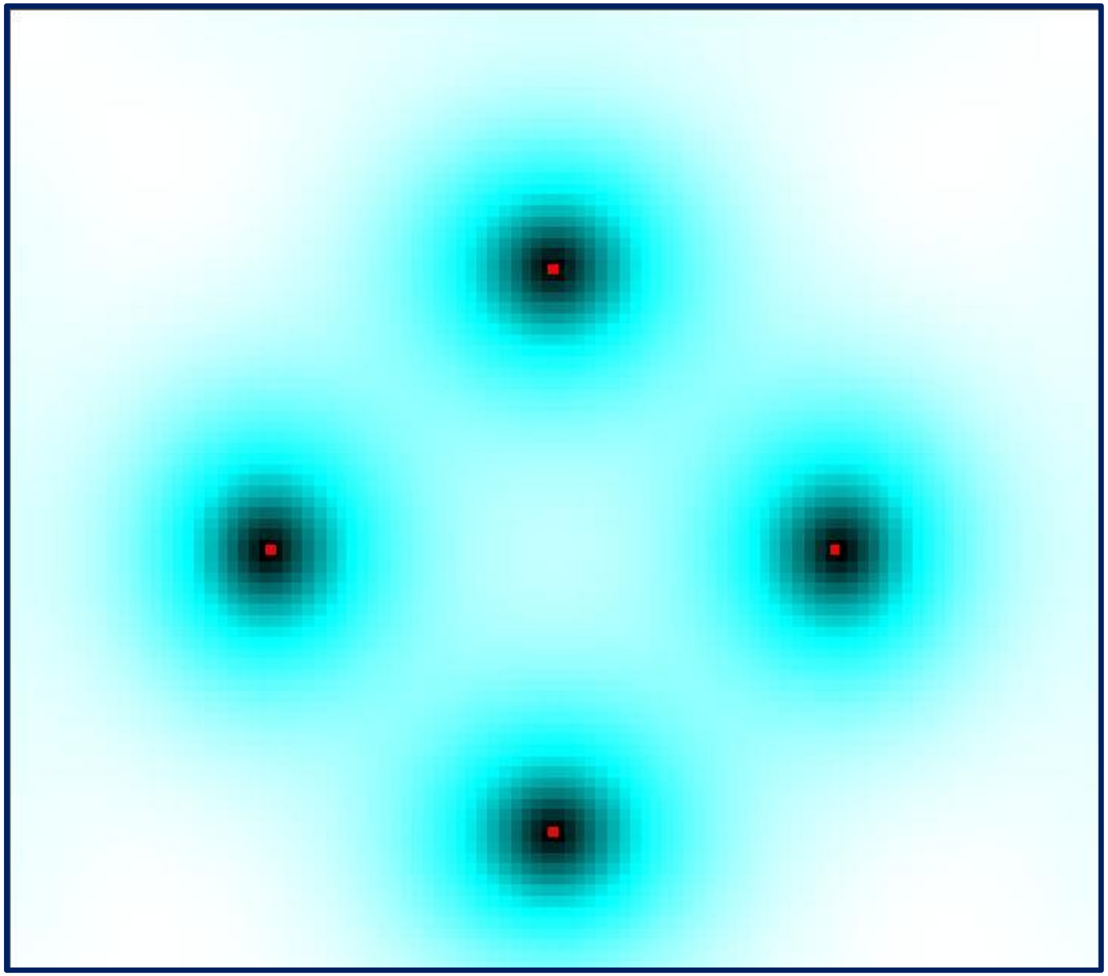
- **«Спонтанное появление симметрий»**

Оператор Лапласа на плоскости инвариантен относительно сдвигов и поворотов.

Оператор Лапласа на прямоугольной сетке инвариантен относительно дискретных сдвигов… и аппроксимирует «настоящий» Лапласиан!!

Из дискретного мира - непрерывный

«Спонтанное появление симметрий»



Вихри в сверхпроводящей пленке: результат решения *разностного* уравнения Гинзбурга-Ландау.

Цвет обозначает модуль параметра порядка, красные точки отмечают положения вихрей.

Откуда вихри знают, что они ***круглые****, если сетка –* ***квадратная****?!*

Appendix: Теория возмущений «по размерности»

- **Хорошие и плохие матрицы**

  Типичное время обращения матрицы $O(N^3)$, поэтому типичная матрица – плохая

  Бывают (редко) хорошие матрицы: терхдиагональные ($O(N)$) или разностный периодический лапласиан ($O(N\log N)$)

- **Возмущения малой размерности**

  Как правило, возмущения ($A \to A+V$) превращают хорошую матрицу в плохую, но если $\dim \mathrm{Im} V = M << N$ то оказывается полезной

- **Формула Шермана-Морисона-Крейна**

$$(A+V)^{-1} = A^{-1}(E-(E+VA^{-1})^{-1}VA^{-1})$$

  Время вычислений – время обращения «хорошей» матрицы A плюс $O(M^3)$

- **Краевые задачи в сложной геометрии**

  Возмущения малой размерности в непрерывной матфизике – это «точечные» потенциалы (это относительно просто) и… изменения граничных условий (и это довольно сложно)

  В дискретной матфизике изменения граничных условий (или даже формы области) можно *просто* свести к возмущениям малой размерности

Спасибо за внимание!