arXiv:2304.00337v1 [math.NA] 1 Apr 2023

采用布洛赫边界条件计算麦克斯韦特征模

Steffen B¨orm * Ralf K¨ohl † Nahid Talebi ‡

2023年4月4日

我们的目标是预测光子晶体的能带结构。为此，需要根据所选的布洛赫边界条件，计算时谐麦克斯韦算子的若干个最小非零特征值。

我们提出采用经过适当改进的几何多重网格法预条件的块逆迭代。由于我们只关注非零特征值，因此通过结合提升算子和辅助多重网格法来消除庞大的零空间。为了获得适合迭代的初始猜测，我们采用一种基于瑞利商最小化的广义外推技术。该技术可显著减少迭代步数，使我们能够高效处理一系列规模极大的特征值问题。

关键词：时谐麦克斯韦方程、光子晶体、多重网格、预条件块逆迭代、边元

数学主题分类：65N25,65N55, 35Q61,78M10

1 引言

周期性光学介质可以呈现为光栅、多层边缘结构、图案化薄膜或更一般的三维构型，在调控光的性质方面具有多种应用。特别是，类比于晶体材料的电子性质，光波的能带结构，即光子晶体中各个光学模式的色散图，备受关注，因为它为研究光学态密度以及光在

*基尔克里斯蒂安-阿尔布雷希特大学数学研讨班¨（boerm@math.uni-kiel.de，网站：https://www.math.uni-kiel.de/scicom）
†基尔克里斯蒂安-阿尔布雷希特大学数学研讨班¨（koehl@math.uni-kiel.de）
‡基尔克里斯蒂安-阿尔布雷希特大学实验与应用物理研究所¨（talebi@physik.uni-kiel.de）

晶格中的传播性质提供了可能。由于该结构在实空间和倒易空间中都具有高度对称性，能带结构通常在沃罗诺伊胞，即布里渊区内进行分析。特别是，为实现光子腔、慢光波导以及若干增强光与物质相互作用的平台，寻找能够提供全局带隙的光子晶体构型颇具吸引力。此外，调控光波在晶格上的相位，也有助于探索其拓扑性质。

晶格中的光波呈现所谓的布洛赫波形式，即由周期函数调制的平面波，其中后者保持晶格的周期性。因此，要数值计算布洛赫波，只需考虑晶格的一个晶胞，并结合适当的边界条件。

本文聚焦于二维情形，即我们要寻找最小的非零特征值 λ 及其对应的特征向量 $u \in H(\mathrm{curl},\ \Omega)$，使其满足二维麦克斯韦方程

$$\mathbf{curl}\,\frac{1}{\epsilon(x)}\,\mathrm{curl}\,u(x) = \lambda u(x) \qquad \text{for all } x \in \mathbb{R}^2. \tag{1}$$

这里，标量值和向量值旋度算子定义如下

$$\mathrm{curl}\,u(x) = \partial_2 u_1(x) - \partial_1 u_2(x), \qquad \mathbf{curl}\,\varphi(x) = \begin{pmatrix} -\partial_2\varphi(x) \\ \partial_1\varphi(x) \end{pmatrix}$$

对于 $u \in H(\mathrm{curl},\ \Omega)$ 和 $\varphi \in H^1(\Omega)$。我们假设介电常数 ϵ 在第一个坐标方向上的周期为 $a \in \mathbb{R}_{>0}$，在第二个坐标方向上的周期为 $b \in \mathbb{R}_{>0}$，即

$$\epsilon(x_1 + a, x_2) = \epsilon(x_1, x_2) = \epsilon(x_1, x_2 + b) \qquad \text{for all } x \in \mathbb{R}^2. \tag{2}$$

Du根据布洛赫定理 [2], ，特征向量可表示为因式分解形式

$$u(x) = \exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x) \qquad \text{for all } x \in \mathbb{R}^2,$$

其中 $k \in \mathbb{R}^2$ 是布洛赫参数，而 $\hat{}u$ 是周期性的，即

$$\hat{u}(x_1 + a, x_2) = \hat{u}(x_1, x_2) = \hat{u}(x_1, x_2 + b) \qquad \text{对于所有 } x \in \mathbb{R}^2.$$

应用这些恒等式可得

$$\begin{aligned} u(x_1 + a, x_2) &= \exp(\iota k_1 a)\exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x_1 + a, x_2) \\ &= \exp(\iota k_1 a)\exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x_1, x_2) = \exp(\iota k_1 a)u(x_1, x_2), \qquad (3a) \\ u(x_1, x_2 + b) &= \exp(\iota k_2 b)\exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x_1, b) \\ &= \exp(\iota k_2 b)\exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x_1, x_2) = \exp(\iota k_2 b)u(x_1, x_2) \qquad (3b) \end{aligned}$$

对于所有 $x \in \mathbb{R}^2$。利用这种“相移周期性”，我们可以将关注范围限制在相对于平移的基本区域内

$$\Omega := [0, a] \times [0, b]$$

满足布洛赫边界条件

$$u_1(x_1, b) = \exp(\imath k_2 b)\, u_1(x_1, 0) \qquad \text{for all } x_1 \in [0, a], \tag{4a}$$
$$u_2(a, x_2) = \exp(\imath k_1 a)\, u_2(0, x_2) \qquad \text{for all } x_2 \in [0, b], \tag{4b}$$

其中布洛赫参数为 $k \in [-\pi/a, \pi/a] \times [-\pi/b, \pi/b]$。因此，我们采用子空间

$$H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) := \{u \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^2) \ : \ \mathrm{curl}\, u \in L^2(\Omega, \mathbb{C}),\ u \text{ satisfies } eq.\ (4)\}$$

H(curl，Ω)。由于式 (4) 仅涉及 $u \in H$(curl，Ω) 的切向迹，因此这是希尔伯特空间的一个闭子空间，故其本身也是希尔伯特空间。

将式 (1) 乘以检验函数 $v \in H_{\mathrm{Bloch}}$(curl，Ω k)，并分部积分（参见式 (8)），得到变分形式

$$a(v, u) = \lambda\, m(v, u) \qquad \text{for all } v \in H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) \tag{5}$$

其中半双线性型为

$$a\colon H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) \times H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) \to \mathbb{C}, \quad (v, u) \mapsto \int_\Omega \frac{\overline{\mathrm{curl}\, v(x)}\, \mathrm{curl}\, u(x)}{\epsilon(x)}\, dx,$$
$$m\colon H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) \times H_{\mathrm{Bloch}}(\mathrm{curl}, \Omega, k) \to \mathbb{C}, \quad (v, u) \mapsto \int_\Omega \langle v(x), u(x) \rangle\, dx.$$

我们采用伽辽金格式进行离散化，使用双线性 N´ed´elec 试探函数和检验函数[8]，从而得到有限维特征值问题

$$Ae = \lambda M e \tag{6}$$

其中刚度矩阵为 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$，质量矩阵为 $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$。由于式 (5) 的双线性型是厄米的，矩阵 A 和 M 是自伴的，A 是半正定的，而 M 是正定的。这些性质表明，我们可以找到一个双正交基，其由矩阵 A 和 M 的特征向量组成。

对这一特征值问题进行数值求解时，我们面临两项挑战：一方面，半线性形式 a 具有一个很大的零空间，其中包含$\nabla\varphi$ 标量函数 φ的梯度。这个零空间与我们的应用无关，因此我们希望数值方法聚焦于正特征值。另一方面，我们要解决的不只是一个特征值问题，还要针对不同的布洛赫参数 k求解大量特征值问题：为了找到带隙，我们必须以足够精细的分辨率对可能的布洛赫参数所构成的整个矩形区域
$[-\pi/a, \pi/a] \times [-\pi/b, \pi/b]$ 进行采样。

第一个挑战可以通过使用离散亥姆霍兹分解 [4]来解决：如果双线性边元函数是梯度 $\nabla\varphi$，则相应的势函数 φ 是双线性节点函数，即它可以由标准 Q_1 节点基表示。我们仍需解决边界条件的问题：如果 $\nabla\varphi \in H_{\mathrm{Bloch}}$(curl，Ω k)

成立，那么 $\varphi \in H^1(\Omega)$ 的适当边界条件是什么？定理 2 给出了这个问题的答案。

针对第二个挑战，我们将基于瑞利商的外推技术与预条件分块逆迭代相结合。对于大多数布洛赫参数 k，该方法仅需少量迭代步数，即可计算出最小的非零特征值以及相应的特征向量双正交基。

本文的组织结构如下：下一节第 2 节研究布洛赫边界条件对变分形式（参见定理 1）和亥姆霍兹分解（参见定理 2）的影响。在获得变分形式后，我们在第 3 节中讨论采用最低阶、经过调整以处理布洛赫边界条件的 N´ed´elec 双线性基函数进行离散化。离散化得到一个广义矩阵特征值问题，我们选择使用第 4 节所述的预条件分块逆迭代求解该问题，并进行适当修改以处理零空间。在第 5 节中，我们描述实现中所采用的几何多重网格方法，用于为特征值迭代提供预条件子，并从迭代向量中移除零空间。由于需要求解大量特征值问题以覆盖参数域，我们采用第 6 节所述的简单外推技术，为特征值迭代获取良好的初始值。我们的实验表明，通过计算比严格要求数量更多的特征向量，可以显著改善预条件逆迭代的收敛性；第 7 节将介绍这一方法。最后，第 8 节专门介绍数值实验，结果表明我们的方法达到了预期效果。

2 布洛赫边界条件

布洛赫边界条件（4）对特征值问题的性质有着显著影响。一方面，我们必须验证变分表述（5）与原问题（1）等价，尤其要确认不会出现额外的边界项。另一方面，麦克斯韦型问题的高效数值方法依赖于亥姆霍兹分解，即将$u \in H(\mathrm{curl},\ \Omega)$分解为一个梯度 $u_0 := \nabla\varphi$ 和一个无散函数 u_1。如果我们对 u施加布洛赫边界条件，就必须研究对于亥姆霍兹分解的势函数 φ，哪些边界条件是合适的。

我们首先考察布洛赫边界条件如何影响分部积分。为此，我们需要布洛赫边界条件（4）的标量对应形式：对于函数 $\psi \in C^1(\mathbb{R}^2)$，我们考虑以下条件

$$\psi(x_1, b) = \exp(\imath k_2 b)\, \psi(x_1, 0) \qquad \text{for all } x_1 \in [0, a], \tag{7a}$$
$$\psi(a, x_2) = \exp(\imath k_1 a)\, \psi(0, x_2) \qquad \text{for all } x_2 \in [0, b]. \tag{7b}$$

对于满足边界条件式 (4) 的函数 v 以及满足标量边界条件式 (7) 的函数 ψ，我们可以进行分部积分，而不会引入额外的边界项。

引理1（分部积分）设 $\psi \in C^1(\Omega)$ 满足标量布洛赫边界条件式 (7)，设 $v \in C^1(\Omega\ \mathbb{R}^2)$ 满足向量布洛赫边界条件式 (4)。则有

$$\int_\Omega \langle v(x), \mathbf{curl}\,\psi(x)\rangle\,dx = \int_\Omega \operatorname{curl}\bar{v}(x)\psi(x)\,dx.$$

证明： 利用高斯定理，我们得到

$$\begin{aligned}\int_\Omega \langle v(x), \mathbf{curl}\,\psi(x)\rangle\,dx &= \int_\Omega (\bar{v}_2(x)\partial_1\psi(x) - \bar{v}_1(x)\partial_2\psi(x))\,dx \\ &= -\int_\Omega (\partial_1\bar{v}_2(x)\psi(x) - \partial_2\bar{v}_1(x)\psi(x))\,dx \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} (n_1(x)\bar{v}_2(x)\psi(x) - n_2(x)\bar{v}_1(x)\psi(x))\,dx \\ &= \int_\Omega \operatorname{curl}\bar{v}(x)\psi(x)\,dx + \int_{\partial\Omega}\langle v(x), t(x)\rangle\psi(x)\,dx,\end{aligned}$$

其中 $n : \partial\Omega \to \mathbb{R}^2$ 是单位外法向量，并且

$$t(x) := \begin{pmatrix} -n_2(x) \\ n_1(x)\end{pmatrix} \qquad \text{for all } x \in \partial\Omega$$

是逆时针单位切向量。利用边界条件式 (4) 和式 (7)，我们得到

$$\begin{aligned}\int_{\partial\Omega}\langle v(x), t(x)\rangle\psi(x)\,dx &= \int_0^a \bar{v}_1(x_1,0)\psi(x_1,0)\,dx_1 - \int_0^a \bar{v}_1(x_1,b)\psi(x_1,b)\,dx_1 \\ &\quad + \int_0^b \bar{v}_2(a,x_2)\psi(a,x_2)\,dx_2 - \int_0^b \bar{v}_2(0,x_2)\psi(0,x_2)\,dx_2 \\ &= \int_0^a \bar{v}_1(x_1,0)\psi(x_1,0)\,dx_1 \\ &\quad - \int_0^a \exp(-ik_2b)\bar{v}_1(x_1,0)\exp(\iota k_2 b)\psi(x_1,0)\,dx \\ &\quad + \int_0^b \exp(-ik_1a)\bar{v}_2(0,x_2)\exp(\iota k_1 a)\psi(0,x_2)\,dx_2 \\ &\quad - \int_0^b \bar{v}_2(0,x_2)\psi(0,x_2)\,dx_2 = 0.\end{aligned}$$

□ 为了推导变分形式（5），我们必须将此恒等式应用于 $\psi =$ 旋度 u，其中 u 是偏微分方程的解。再次利用布洛赫定理，我们可得一个周期函数 $\hat{u}$，使得

$$u(x) = \exp(\iota\langle k, x\rangle)\hat{u}(x) \qquad \text{对所有 } x \in \mathbb{R}^2.$$

应用链式法则可得

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \operatorname{curl} u(x) = \partial_2 u_1(x) - \partial_1 u_2(x)\\ &= ik_2 \exp(\iota\langle k,x\rangle)\hat{u}_1(x) + \exp(\iota\langle k,x\rangle)\partial_2\hat{u}_1(x)\\ &\quad + ik_1 \exp(\iota\langle k,x\rangle)\hat{u}_2(x) + \exp(\iota\langle k,x\rangle)\partial_1\hat{u}_2(x)\\ &= \exp(\iota\langle k,x\rangle)\big(ik_2\hat{u}_1(x) - ik_1\hat{u}_2(x) + \operatorname{curl}\hat{u}(x)\big) \quad \text{for all } x\in\mathbb{R}^2.\end{aligned}$$

利用该方程，我们可以验证布洛赫边界条件式 (7) 成立：利用 $\hat{}u$ 的周期性，我们得到

$$\begin{aligned}\psi(x_1,b) &= \exp\big(\iota(k_1x_1+k_2b)\big)\big(ik_2\hat{u}_1(x_1,b) - ik_1\hat{u}_2(x_1,b) + \operatorname{curl}\hat{u}(x_1,b)\big)\\ &= \exp(\iota k_2 b)\exp(\iota k_1 x_1)\big(ik_2\hat{u}_1(x_1,0) - ik_1\hat{u}_2(x_1,0) + \operatorname{curl}\hat{u}(x_1,0)\big)\\ &= \exp(\iota k_2 b)\,\psi(x_1,0) \quad \text{for all } x_1\in[0,a],\\ \psi(a,x_2) &= \exp\big(\iota(k_1a+k_2x_2)\big)\big(ik_2\hat{u}_1(a,x_2) - ik_1\hat{u}_2(a,x_2) + \operatorname{curl}\hat{u}(a,x_2)\big)\\ &= \exp(\iota k_1 a)\exp(\iota k_2 x_2)\big(ik_2\hat{u}_1(0,x_2) - ik_1\hat{u}_2(0,x_2) + \operatorname{curl}\hat{u}(0,x_2)\big)\\ &= \exp(\iota k_1 a)\,\psi(0,x_2) \quad \text{for all } x_2\in[0,b].\end{aligned}$$

由于介电常数函数 ϵ 具有周期性，边界条件式 (7) 对 $\psi = \frac{1}{\epsilon}\operatorname{curl} u$ 也成立，因此分部积分中出现的边界项相互抵消，我们得到

$$\int_\Omega \langle v(x), \frac{1}{\epsilon(x)}\operatorname{curl} u(x)\rangle\, dx = \int_\Omega \frac{\operatorname{curl}\,\bar{v}(x)\operatorname{curl} u(x)}{\epsilon(x)}\, dx \quad \text{对所有 } v\in C^1(\Omega,\mathbb{R}^2)。(8)$$

旋度

由于配备了布洛赫边界条件式（4）的 $C^1(\Omega,\mathbb{R}^2)$ 是 $H_{\mathrm{Bloch}}(\operatorname{curl},\Omega,k)$ 的稠密子空间，因此我们发现，式（1）的每个解也是变分问题式（5）的解。

现在我们可以探讨布洛赫边界条件带来的第二个问题：它们会如何影响亥姆霍兹分解?

引理2（势函数）设 $\varphi\in C^1(\Omega)$ 且满足 $\nabla\varphi\in H_{Bloch}(\operatorname{curl},\Omega,k)$。若 $k\neq 0$，则存在常数 $m\in\mathbb{C}$，使得 $\hat{}\varphi := \varphi - m$ 满足标量布洛赫边界条件式（7）。

否则，也就是说，在特殊情形 $k=0$ 下，存在一个线性多项式 μ，使得$\hat{}\varphi := \varphi-\mu$ 满足这些条件。

证明：令 $\alpha := \exp(\iota k_1 a)$ 和 $\beta := \exp(\iota k_2 b)$。根据微积分基本定理和式 (4)，我们有

$$\begin{aligned}\varphi(x_1,b) - \varphi(0,b) &= \int_0^{x_1}\partial_1\varphi(t,b)\,dt = \int_0^{x_1} u_1(t,b)\,dt = \beta\int_0^{x_1} u_1(t,0)\,dt\\ &= \beta\int_0^{x_1}\partial_1\varphi(t,0)\,dt = \beta\big(\varphi(x_1,0)-\varphi(0,0)\big) \qquad (9a)\end{aligned}$$

对所有 $x_1 \in [0,a]$ 均成立。为了满足式 (7a)，我们必须确保

$$\beta\,\varphi(x_1,0) = \varphi(x_1,b) = \beta\big(\varphi(x_1,0) - \varphi(0,0)\big) + \varphi(0,b)$$

对于所有 $x_1 \in [0,a]$，即 $\beta\varphi(0,\ 0) = \varphi(0,\ b)$。通过相同的推理，我们得到

$$\begin{aligned}\varphi(a,x_2) - \varphi(a,0) &= \int_0^{x_2} \partial_2\varphi(a,s)\,ds = \int_0^{x_2} u_2(a,s)\,ds = \alpha\int_0^{x_2} u_2(0,s)\,ds \\ &= \alpha\int_0^{x_2} \partial_2\varphi(0,s)\,ds = \alpha\big(\varphi(0,x_2) - \varphi(0,0)\big) \qquad (9b)\end{aligned}$$

对于所有 $x_2 \in [0,b]$，满足方程 (7b) 等价于

$$\alpha\varphi(0,x_2) = \varphi(a,x_2) = \alpha\big(\varphi(0,x_2) - \varphi(0,0)\big) + \varphi(a,0)$$

对于所有 $x_2 \in [0,b]$，即 $\alpha\varphi(0,\ 0) = \varphi(a,\ 0)$。现在，我们的任务是证明可以同时满足 $\alpha\varphi(0,\ 0) = \varphi(a,\ 0)$ 和 $\beta\varphi(0,\ 0) = \varphi(0,\ b)$。将 $x_1 = a$ 代入方程 (9a)，并将 $x_2 = b$ 代入方程 (9b)，可得

$$\varphi(a,b) = \beta\big(\varphi(a,0) - \varphi(0,0)\big) + \varphi(0,b), \qquad (10a)$$
$$\varphi(a,b) = \alpha\big(\varphi(0,b) - \varphi(0,0)\big) + \varphi(a,0). \qquad (10b)$$

我们区分三种情况：$\alpha \neq 1$、$\beta \neq 1$和 $\alpha = \beta = 1$。

情况 *1*：我们假设 $\alpha \neq 1$，并令

$$m := \frac{\varphi(a,0) - \alpha\varphi(0,0)}{1-\alpha}, \qquad \hat{\varphi} := \varphi - m.$$

这一选择意味着

$$\alpha\hat{\varphi}(0,0) = \alpha\varphi(0,0) - m + (1-\alpha)m = \varphi(a,0) - m = \hat{\varphi}(a,0).$$

方程（10）对 $\hat{}\varphi$ 也成立，因此我们得到

$$\begin{aligned}\alpha\hat{\varphi}(0,b) = \hat{\varphi}(a,b) &= \beta\big(\alpha\hat{\varphi}(0,0) - \hat{\varphi}(0,0)\big) + \hat{\varphi}(0,b), \\ (\alpha-1)\hat{\varphi}(0,b) &= \beta(\alpha-1)\hat{\varphi}(0,0),\end{aligned}$$

由此可得 $\beta\hat{}\varphi(0,\ 0) = \hat{}\varphi(0,\ b)$。

情况 *2*：我们假设 $\beta \neq 1$，并令

$$m := \frac{\varphi(b,0) - \beta\varphi(0,0)}{1-\beta}, \qquad \hat{\varphi} := \varphi + m.$$

这一选择意味着

$$\beta\hat{\varphi}(0,0) = \beta\varphi(0,0) - m + (1-\beta)m = \varphi(0,b) - m = \hat{\varphi}(0,b).$$

同样，我们利用方程（10）对 $\hat{\varphi}$ 也成立这一点来求得

$$\begin{aligned}\beta\hat{\varphi}(a,0) = \hat{\varphi}(a,b) &= \alpha\big(\beta\hat{\varphi}(0,0) - \hat{\varphi}(0,0)\big) + \hat{\varphi}(a,0),\\ (\beta-1)\hat{\varphi}(a,0) &= \alpha(\beta-1)\hat{\varphi}(0,0),\end{aligned}$$

这意味着 $\alpha\hat{\varphi}(0,0) = \hat{\varphi}(a,0)$。

情形 *3*：我们假设 $\alpha = \beta = 1$，即 $k = 0$，并定义

$$\mu(x) := \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2a}(2x_1 - a) + \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2b}(2x_2 - b) \qquad \text{for all } x \in \mathbb{R}^2.$$

令 $\hat{\varphi} := \varphi - \mu$。我们得到

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}(a,0) &= \varphi(a,0) - \mu(a,0) = \varphi(a,0) - \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2} + \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2}\\ &= \frac{\varphi(a,0)+\varphi(0,0)}{2} + \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2}\\ &= \varphi(0,0) + \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2} + \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2}\\ &= \varphi(0,0) - \mu(0,0) = \hat{\varphi}(0,0),\\ \hat{\varphi}(0,b) &= \varphi(0,b) - \mu(0,b) = \varphi(0,b) + \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2} - \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2}\\ &= \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2} + \frac{\varphi(0,b)+\varphi(0,0)}{2}\\ &= \varphi(0,0) + \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{2} + \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{2}\\ &= \varphi(0,0) - \mu(0,0) = \hat{\varphi}(0,0).\end{aligned}$$

现在我们可以使用公式 (9a) 和 $\beta = 1$ 来求得

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}(x_1,b) - \hat{\varphi}(0,b) &= \varphi(x_1,b) - \varphi(0,b) - \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{a}x_1\\ &= \varphi(x_1,0) - \varphi(0,0) - \frac{\varphi(a,0)-\varphi(0,0)}{a}x_1\\ &= \hat{\varphi}(x_1,0) - \hat{\varphi}(0,0) = \hat{\varphi}(x_1,0) - \hat{\varphi}(0,b),\end{aligned}$$

对于所有 $x_1 \in [0,a]$，同样使用公式 (9b) 和 $\alpha = 1$ 可得

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}(a,x_2) - \hat{\varphi}(a,0) &= \varphi(a,x_2) - \varphi(a,0) - \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{b}x_2\\ &= \varphi(0,x_2) - \varphi(0,0) - \frac{\varphi(0,b)-\varphi(0,0)}{b}x_2\\ &= \hat{\varphi}(0,x_2) - \hat{\varphi}(0,0) = \hat{\varphi}(0,x_2) - \hat{\varphi}(a,0)\end{aligned}$$

对于所有 $x_2 \in [0,b]$，即 $\hat{\varphi}$ 满足标量布洛赫边界条件式（7）。 □

我们可以得出结论：布洛赫边界条件可以发挥与广泛使用的狄利克雷边界条件类似的作用：在推导变分形式时，它们消除了分部积分过程中出现的边界项；在应用亥姆霍兹分解时，当 $k \neq 0$ 时，它们确保梯度的唯一性，而在特殊情况 $k = 0$下，则确保解在一个显式已知的二维子空间意义下唯一，即线性多项式的梯度。

3 离散化

我们在规则的矩形网格上对变分特征值问题式 (5) 进行离散化，$\mathcal{T}$使用 N´ed´elec 的双线性边元 [8]：我们选取 $n,\ m \in \mathbb{N}$ 并将区域 Ω 划分为 $n \times m$ 个宽度为 $h_1 := a/n$、高度为 $h_2 := b/m$ 的矩形网格单元，其定义为

$$\Omega_i := [(i_1 - 1)h_1, i_1 h_1] \times [(i_2 - 1)h_2, i_2 h_2] \qquad \text{for all } i \in \mathcal{I} := [1:n] \times [1:m].$$

我们修改 N´ed´elec 的边元基函数的标准定义，使其包含式 (4) 中的布洛赫边界条件：顶部水平边上的基函数支撑集延伸至底部边，而顶部边上的取值等于底部边上的取值乘以 $\exp(\imath k_2 b)$。

$$b_{x,i}(x) := \begin{cases} \frac{1}{h_1}(x_2/h_2 - i_2 + 1, 0) & \text{if } x \in \Omega_i,\ i_2 < m, \\ \frac{1}{h_1}(i_2 + 1 - x_2/h_2, 0) & \text{if } x \in \Omega_{i_1, i_2+1},\ i_2 < m \\ \frac{\exp(\imath k_2 b)}{h_1}(x_2/h_2 - i_2 + 1, 0) & \text{if } x \in \Omega_i,\ i_2 = m, \\ \frac{1}{h_1}(1 - x_2/h_2, 0) & \text{if } x \in \Omega_{i_1,1},\ i_2 = m \\ (0,0) & \text{otherwise} \end{cases}$$

对于所有 $i \in \mathcal{I}$, $x \in \Omega$。对于对应于垂直边的基函数，我们通过将左侧垂直边上的取值乘以 $\exp(\imath k_1 a)$，来纳入布洛赫边界条件，从而设定右侧垂直边上的取值。

$$b_{y,i}(x) := \begin{cases} \frac{1}{h_2}(0, x_1/h_1 - i_1 + 1, 0) & \text{if } x \in \Omega_i,\ i_1 < n, \\ \frac{1}{h_2}(0, i_1 + 1 - x_1/h_1) & \text{if } x \in \Omega_{i_1+1, i_2},\ i_1 < n \\ \frac{\exp(\imath k_1 a)}{h_2}(0, x_1/h_1 - i_1 + 1) & \text{if } x \in \Omega_i,\ i_1 = n, \\ \frac{1}{h_2}(0, 1 - x_1/h_1) & \text{if } x \in \Omega_{1,i_2},\ i_1 = n \\ (0,0) & \text{otherwise} \end{cases}$$

对于所有 $i \in \mathcal{I}$, $x \in \Omega$。满足布洛赫边界条件的 N´ed´elec 空间定义为

$$V_h := \operatorname{span}\{b_{x,i},\ b_{y,i}\ :\ i \in \mathcal{I}\}.$$

为了处理旋度算子的零空间，我们还需要在同一网格上构造满足标量布洛赫边界条件式（7）的标量双线性函数空间。

基函数由一维帽函数定义

$$\phi_{x,i}(x) := \begin{cases} x/h_1 - i + 1 & \text{if } x \in [(i-1)h_1, ih_1],\ i < n, \\ i + 1 - x/h_1 & \text{if } x \in [ih_1, (i+1)h_1],\ i < n, \\ \exp(\iota k_1 a)(x/h_1 - i + 1) & \text{if } x \in [(i-1)h_1, ih_1],\ i = n, \\ 1 - x/h_1 & \text{if } x \in [0, h_1],\ i = n, \end{cases}$$

$$\phi_{y,j}(y) := \begin{cases} y/h_2 - j + 1 & \text{if } y \in [(j-1)h_2, jh_2],\ j < m, \\ j + 1 - y/h_2 & \text{if } y \in [jh_2, (j+1)h_2],\ j < m, \\ \exp(\iota k_2 b)(y/h_2 - j + 1) & \text{if } y \in [(j-1)h_2, jh_2],\ j = m, \\ 1 - y/h_2 & \text{if } y \in [0, h_2],\ j = m \end{cases}$$

定义为 $x \in [0, a]$、$y \in [0, b]$、$i \in [1 : n]$ 以及 $j \in [1 : m]$，并考虑一维布洛赫边界条件公式 (7) 的对应形式。双线性节点基函数定义为张量积

$$\varphi_i(x) := \phi_{x,i_1}(x_1)\phi_{y,i_2}(x_2) \qquad \text{for all } i \in \mathcal{I},\ x \in \Omega$$

并且根据定义满足公式 (7)。具有布洛赫边界条件公式 (7) 的节点空间给出为

$$W_h := \operatorname{span}\{\varphi_i \ :\ i \in \mathcal{I}\}.$$

我们可以看到

$$\nabla\varphi_i = b_{x,i} - b_{x,(i_1,i_2+1)} + b_{y,i} - b_{y,(i_1+1,i_2)} \qquad \text{for all } i \in \mathcal{I}, \tag{11}$$

也就是说，节点基函数的梯度可以用四个边基函数精确且明确地表示。利用亥姆霍兹分解、N´ed´elec 单元的众所周知的性质以及定理 2，我们可以证明，在 $k \neq 0$ 的情况下，对于每个 $u_h \in V_h$（其旋度为 $\operatorname{curl} u_h = 0$），存在一个 $\varphi_h \in W_h$，使得 $u_h = \nabla\varphi_h$。该性质使我们能够在算法中消除双线性型 $a(\cdot,\cdot)$ 的零空间。

在特殊情形 $k = 0$ 下，我们仍然可以消除零空间，仅保留一个显式已知的二维余项。

由标准的 Galerkin 离散化得到的矩阵 A_{xx}、A_{xy}、A_{yy}、M_{xx}、M_{xy}、M_{yy}、$G \in \mathbb{C}^{\mathcal{I}\times\mathcal{I}}$ 如下:

$$\begin{gathered} a_{xx,ij} := a(b_{x,i}, b_{x,j}), \quad a_{xy,ij} := a(b_{x,i}, b_{y,j}), \quad a_{yy,ij} := a(b_{y,i}, b_{y,j}), \\ m_{xx,ij} := m(b_{x,i}, b_{x,j}), \quad m_{xy,ij} := m(b_{x,i}, b_{y,j}), \quad m_{yy,ij} := m(b_{y,i}, b_{y,j}), \\ g_{ij} := m(\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j) \end{gathered}$$

对于所有 $i,\ j \in \mathcal{I}$。此外，我们引入提升矩阵 $L_x,\ L_y \in \mathbb{C}^{\mathcal{I}\times\mathcal{I}}$ 使得

$$\nabla\varphi_j = \sum_{i\in\mathcal{I}} \begin{pmatrix} \ell_{x,ij} b_{x,i} \\ \ell_{y,ij} b_{y,j} \end{pmatrix} \qquad \text{for all } j \in \mathcal{I}.$$

这些矩阵由式 (11) 保证存在。为简化记号，我们引入块矩阵

$$A := \begin{pmatrix} A_{xx} & A_{xy}^* \\ A_{xy} & A_{yy} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times\mathcal{J}}, \quad M := \begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy}^* \\ M_{xy} & M_{yy} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times\mathcal{J}}, \quad L := \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times\mathcal{I}}$$

与 $\mathcal{J} = \mathcal{I} \times \{1, 2\}$ 和 $|\mathcal{J}| = 2nm$ 结合，以得到离散特征值问题所需的形式，即式 (6)。

4 预条件分块逆迭代

我们关注如何计算若干个最小的非零特征值及其对应的特征向量。我们的方法基于预条件逆迭代（PINVIT） [9, 3, 6]: 为了求解式 (6) 的一个特征向量，我们考虑由 $\mathbb{C}^{\mathcal{J}} \setminus \{0\}$ 中的序列 $(e^{(m)})_{m=0}^{\infty}$ 定义为

$$e^{(m+1)} = e^{(m)} - B(Ae^{(m)} - \lambda_m Me^{(m)}) \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0,$$

其中 B 是 A^{-1} 的一个近似，且

$$\lambda_m := \frac{\langle e^{(m)}, Ae^{(m)} \rangle}{\langle e^{(m)}, Me^{(m)} \rangle} \qquad \text{对所有 } m \in \mathbb{N}_0$$

是广义瑞利商。我们可以看到，广义特征值问题 (6) 的任一解都是该迭代的一个不动点；当 $B = A^{-1}$ 时，它与标准逆迭代完全相同（相差一个缩放因子）。

在我们的应用中，需要做一些调整：标量势的每个梯度都属于旋度算子的零空间，而我们并不关心无穷重数的零特征值。幸运的是，N´ed´elec 边元提供了一个优雅的解决方案：一方面，它们避免了困扰标准节点有限元方法的“伪模态”；另一方面，离散零空间中的所有元素都是同一网格上的分片标量多项式函数的梯度。

利用引理2，我们可以消去零空间中的元素：给定一个函数$u \in H_{\text{Bloch}}(\text{curl}, \Omega\ k)$，对于 $k \neq 0$，我们可以通过求解来找到一个满足式（7）标量布洛赫边界条件的势函数 $\varphi \in H^1(\Omega)$

$$m(\nabla v, \nabla\varphi) = m(\nabla v, u) \qquad \text{for all } v \in H^1(\Omega) \text{ with } eq.\ (7).$$

显然，这 φ 将满足

$$m(\nabla v, u - \nabla\varphi) = 0 \qquad \text{for all } v \in H^1(\Omega) \text{ with } eq.\ (7),$$

即， $u - \nabla\varphi$ 将与所有梯度垂直，因此也与旋度算子的零空间垂直。由于 N´ed´elec 元素具有特殊性质（公式 (11)），离散情形下同样如此，即我们有 $AL = 0$，通过求解方程

$$L^*ML\varphi_h = L^*Mu_h$$

并计算 $u_h' := u_h - L\varphi_h$，我们可以确保向量 u_h' 与 A 的零空间垂直，即消除零特征值。在特殊情形 $k = 0$ 下，我们可以显式消除剩余的二维子空间，也可以直接忽略零特征值。

由于我们通常不仅要计算一个，而是要计算对应于最小非零特征值的多个特征向量，因此采用块方法：迭代量是矩阵 $E^{(m)} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times p}$，其中 $p \in \mathbb{N}$ 表示同时计算的特征向量数量。为了避免所有列都收敛到同一个特征子空间，我们确保这些列相对于质量矩阵 M构成正交归一基，即对于所有 $m \in \mathbb{N}_0$，都必须满足 $(E^{(m)})^* M E^{(m)} = I$。预条件逆迭代的一步形式如下：

$$\widehat{E}^{(m+1)} = E^{(m)} - B(AE^{(m)} - ME^{(m)}\Lambda_m), \qquad \Lambda_m := (E^{(m)})^* AE^{(m)},$$

其中，$(E^{(m)})^* M E^{(m)} = I$使我们能够简化广义瑞利商 Λ_m。遗憾的是，$\widehat{E}^{(m+1)}$通常不满足我们的 M-正交归一假设，因此必须对其进行正交归一化。为保证数值稳定性，我们对 $\widehat{E}^{(m+1)}$进行广义豪斯霍尔德分解：首先选取一个给定的 M-正交归一基$P \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times p}$，即 $P^* M P = I$；在我们的情形中，可选取一组适当的典范 M-单位向量，使其支撑集互不相交；然后求出豪斯霍尔德向量 v_1、.....、 $v_p \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}} \setminus \{0\}$ 及其广义反射

$$Q_i := I - 2v_i \frac{v_i^* M}{v_i^* M v_i}$$

使得 $Q_p Q_{p-1} \dots Q_2 Q_1 \widehat{E}^{(m+1)} = PR$，其中 $R \in \mathbb{C}^{p\times p}$是一个右上三角矩阵。这些广义反射满足 $Q_i^2 = I$，并且

$$\begin{aligned}\langle x, MQ_i y\rangle &= \langle x, My\rangle - 2\langle x, Mv_i\rangle \frac{\langle v_i, My\rangle}{\langle v_i, Mv_i\rangle} = \langle x, My\rangle - 2\langle \frac{\overline{\langle x, Mv_i\rangle}}{\langle v_i, Mv_i\rangle} v_i, My\rangle \\ &= \langle x - 2v_i \frac{\langle v_i, Mx\rangle}{\langle v_i, Mv_i\rangle}, My\rangle = \langle Q_i x, My\rangle \qquad \text{for all } x, y \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}}\end{aligned}$$

表明它们也是 M-自伴的。

如果 R 可逆，则可得

$$Q_p Q_{p-1} \dots Q_2 Q_1 \widehat{E}^{(m+1)} R^{-1} = P, \qquad \widehat{E}^{(m+1)} R^{-1} = Q_1 Q_2 \dots Q_{p-1} Q_p P,$$

并且右侧 $E^{(m+1)} := Q_1 Q_2 \dots Q_{p-1} Q_p P$按构造是 M-正交归一的，因此我们可以将其用于下一次迭代。

如果 R 不可逆，则 $\widehat{E}^{(m+1)}$ 不可能满秩，即我们以不合适的初始猜测开始了迭代。幸运的是，在这种情况下，我们选择的 $E^{(m+1)}$ 仍然是M-正交归一的，并且其值域将包含 $\widehat{E}^{(m+1)}$的值域，因此该算法通过隐式扩展基来纠正这一问题，并保证我们始终可以使用一个M-正交归一基。

所得修改版块预条件逆迭代的一个简单形式如下：

Find $E^{(0)} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times p}$ with $(E^{(0)})^* M E^{(0)} = I$.
$\Lambda_0 \leftarrow (E^{(0)})^* A E^{(0)}$
$m \leftarrow 0$
`while` $\|AE^{(m)} - E^{(m)}\Lambda_m\|$ too large
  $\widehat{E}^{(m+1)} \leftarrow E^{(m)} - B(AE^{(m)} - ME^{(m)}\Lambda_m)$
  Solve $L^* M L \Phi_{m+1} = L^* M \widehat{E}^{(m+1)}$
  $\widehat{E}^{(m+1)} \leftarrow \widehat{E}^{(m+1)} - L\Phi_{m+1}$
  Generalized Householder factorization $E^{(m+1)} R^{(m+1)} = \widehat{E}^{(m+1)}$
    with $(E^{(m+1)})^* M E^{(m+1)} = I$
  $\Lambda_{m+1} \leftarrow (E^{(m+1)})^* A E^{(m+1)}$
  $m \leftarrow m + 1$
`end`

我们对 $E^{(m)}$ 的每一列执行一步预条件逆迭代，通过确保所有迭代向量都与梯度空间正交来消除零空间，并将所得向量转换为正交归一基。

通过计算*Ritz* 向量和特征值（即 p 维舒尔分解），我们可以显著加快收敛速度

$$U_{m+1}^* \Lambda_{m+1} U_{m+1} = D_{m+1}, \qquad D_{m+1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_p \end{pmatrix}, \ \lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_p \tag{12}$$

，其酉矩阵为 $U_{m+1} \in \mathbb{C}^{p\times p}$，实对角矩阵为 $D_{m+1} \in \mathbb{C}^{p\times p}$，并用 $E^{(m+1)}U_{m+1}$ 替换 $E^{(m+1)}$。后一个矩阵的列仍然是 M-正交归一的，但现在这些列是 A 和 M 的特征向量近似值，而 $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$ 则是相应特征值的近似值。

由于 p 个最小特征值是瑞利商的 p 个最小局部极小值，因此，我们可以通过寻找局部极小值来提高收敛速度，而且搜索范围不仅限于 $\widehat{E}^{(m+1)}$ 的值域，还可以扩展到更大的子空间；该子空间由 $E^{(m)}$ 的值域构成，甚至在 $m > 1$ 时也可以纳入 $E^{(m-1)}$ 的值域。第一种情况，即计算广义豪斯霍尔德分解时，

$$E^{(m+1)} R^{(m+1)} = \begin{pmatrix} \widehat{E}^{(m+1)} & E^{(m)} \end{pmatrix},$$

我们得到了用于最小化瑞利商的 梯度法。在第二种情况下，也就是说，如果我们计算广义豪斯霍尔德分解

$$E^{(m+1)} R^{(m+1)} = \begin{pmatrix} \widehat{E}^{(m+1)} & E^{(m)} & E^{(m-1)} \end{pmatrix}$$

如果 $m > 1$，我们得到用于最小化任务的局部最优块预条件共轭梯度（*LOBPCG*）方法 [5] 。

求解满足 $(E^{(0)})^* M E^{(0)} = I$的 $E^{(0)} \in \mathbb{C}^{\mathcal{J}\times p}$。

$\Lambda_0 \leftarrow (E^{(0)})^* A E^{(0)}$
$m \leftarrow 0$
`while` $\|AE^{(m)} - E^{(m)}\Lambda_m\|$ too large
  $\widehat{E}^{(m+1)} \leftarrow E^{(m)} - B(AE^{(m)} - ME^{(m)}\Lambda_m)$
  Solve $L^* M L \Phi_{m+1} = L^* M \widehat{E}^{(m+1)}$
  $\widehat{E}^{(m+1)} \leftarrow \widehat{E}^{(m+1)} - L\Phi_{m+1}$
  Householder factorization $E^{(m+1)}R^{(m+1)} = \begin{pmatrix} \widehat{E}^{(m+1)} & E^{(m)} \end{pmatrix}$
    or $E^{(m+1)}R^{(m+1)} = \begin{pmatrix} \widehat{E}^{(m+1)} & E^{(m)} & E^{(m-1)} \end{pmatrix}$
    with $(E^{(m+1)})^* M E^{(m+1)} = I$
  Solve eq. (12), i.e., $(E^{(m+1)})^* A E^{(m+1)} = U_{m+1} D_{m+1} U_{m+1}^*$
  $E^{(m+1)} \leftarrow (E^{m+1}U_{m+1})|_{\mathcal{J}\times p}$
  $\Lambda_{m+1} \leftarrow D_{m+1}|_{p\times p}$
  $m \leftarrow m + 1$
`end`

根据构造， $E^{(m)}$ 的列将是双正交的，也就是说，相对于 M 内积正交归一，并且相对于 A 内积正交。如果 $E^{(m)}$ 的值域是不变子空间的良好近似，那么 $E^{(m)}$的列就是张成该子空间的特征向量的良好近似。

5 几何多重网格法

预条件逆迭代需要一个高效的预条件子，能够充分逼近 A^{-1} 。在我们的情形中， A 仅为半正定，因此我们将其替换为正定矩阵 $A + \mu M$，其中 $\mu > 0$ 为正则化参数。这只会使特征值偏移 μ ，不会改变特征向量。

我们采用适当调整后的标准麦克斯韦方程组几何多重网格法：按照 [1], ，我们使用分块高斯-赛德尔平滑器，其中每个重叠块对应于与网格某个节点相连的所有边，并考虑周期性。各个块对应的四维线性方程组均为自伴正定系统，且有一个特征值远小于其他特征值，导致条件数较大，因而原始实现的数值稳定性较差。这个问题特征值对应于当前网格节点的节点基函数的梯度，因此我们可以采用正交变换，将该特征子空间与其正交补分离。使用标准乔列斯基分解求解由此得到的分块对角系统，可获得数值稳定的算法。

粗网格层次结构通过简单的二分构造。该方法使我们能够使用简单的恒等嵌入作为自然延拓，将粗网格映射到下一级细网格，并可以使用标准 Galerkin 方法构造相应的粗网格矩阵：最细网格必须足够精细，以解析介电常数参数 ϵ 的跳变，因此相应的质量矩阵和刚度矩阵

可以通过标准求积构造。对于粗网格，我们使用自然嵌入作为延拓，将试探与检验基函数映射到下一级细网格，并在那里计算双线性型。通过这种方式，可以在线性复杂度下为所有网格构造精确的质量矩阵和刚度矩阵。

为了处理零空间，我们必须求解带有自伴矩阵 $P := L^*ML$ 的线性方程组，该矩阵对应于具有布洛赫边界条件的离散拉普拉斯算子，见式 (7)。如果 $k \neq 0$, P 为正定矩阵，则在特殊情况下 $k = 0$ 它是半正定的，其零空间由离散化线性多项式张成。整个网格层次结构的矩阵 P 同样可以通过 Galerkin 方法构造，我们可以使用相应的标准多重网格迭代来近似零空间投影。我们的实验表明，只需进行几次多重网格迭代，就足以阻止特征向量近似收敛到零空间；无需等待多重网格迭代计算出精确投影。

6 外推

由于瑞利商 Λ_m 的非线性影响，预条件逆迭代是非线性的，因此必须为其提供良好的特征向量初始猜测。

对于所考虑的第一个布洛赫参数 k，我们采用一种简单的嵌套迭代：在最粗的网格上，用直接法求解特征值问题。当网格层级 ℓ 上的特征向量达到足够精度后，我们利用延拓将其映射到更细一级的网格层级 $\ell + 1$，并将其作为该层级迭代的初始猜测。

此过程仅用于第一个布洛赫参数。

对于所有其他布洛赫参数，我们采用一种与外推相关的算法：假设在之前的步骤中，已针对与当前参数 k“接近”的布洛赫参数计算出特征向量基 E_1，E_2，……，E_e、$e \in \mathbb{N}$。对于标准的多项式外推，我们需要构造多项式 p_i，使得 $p_i(E_1$，E_2，……，$E_e)$ 能够很好地近似第 i 个特征向量。幸运的是，我们可以再次利用 Courant-Fischer 定理来避免这项工作：我们不显式构造多项式 p_i，而是在由 E_1、……、E_e 的值域张成的空间中，寻找瑞利商最小的 p 个非零极小值。相应的向量构成该子空间的一个 M-正交归一基，可作为当前布洛赫参数对应特征向量的初始猜测。

根据 Courant-Fischer 定理，以这种方式构造的向量至少与最佳多项式近似一样好，也就是说，至少与最佳外推方案一样好。

我们的实验表明，二次一维外推足以为特征向量迭代提供良好的初始猜测。将采样的布洛赫参数记为

$$k_{ij} := (\tfrac{\pi}{a}(2\tfrac{i}{\kappa-1} - 1), \tfrac{\pi}{b}(2\tfrac{j}{\kappa-1} - 1) \qquad \text{for all } i, j \in [0 : \kappa - 1],$$

我们按如下方式进行外推：直接计算 k_{00}。使用 k_{00}对 k_{10} 进行“水平方向”外推。使用 k_{00} 和 k_{10}对 k_{20} 进行“水平方向”外推。对所有 $i \in [3: \kappa - 1]$，使用$k_{i-3,\,0}$、 $k_{i-2,\,0}$和$k_{i-1,\,0}$ 对 k_{i0} 进行“水平方向”外推。

k_{01}、 k_{11}和 k_{21} 分别使用 k_{00}、 k_{10}和 k_{20}在“垂直方向”进行外推。k_{02}、 k_{12}和 k_{22} 分别使用 k_{00} 和 k_{01}、 k_{10} 和 k_{11}以及 k_{20}和 k_{21}在“垂直方向”进行外推。 k_{0j}、 k_{1j}和 k_{2j} 分别使用 $j \geq 3$的三个点进行“垂直方向”外推。 k_{ij} 使用$k_{i-3、\,j}$、 $k_{i-2、\,j}$和$k_{i-1、\,j}$ 对 i进行 $j \geq 3$“水平方向”外推。

7 弃置特征向量

我们发现，通过不仅对实际感兴趣的 p 向量执行预条件逆迭代，还对另外几个仅用于提高收敛速度的“弃置特征向量”执行预条件逆迭代，可以显著提高收敛速度。

为说明这种方法的动机，我们考虑基本的块逆迭代

$$E^{(m+1)} = A^{-1}E^{(m)} \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0,$$

其中， $E^{(m)} \in \mathbb{C}^{n\times p}$ 和 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是自伴正定矩阵。由于 A是自伴矩阵，我们可以找到一个酉矩阵 $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 和特征值 $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq .. \leq \lambda_n$，使得

$$Q^*AQ = D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

对于变换后的迭代序列

$$\widehat{E}^{(m)} := Q^*E^{(m)} \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0$$

我们有

$$\widehat{E}^{(m+1)} = D^{-1}\widehat{E}^{(m)} \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0.$$

我们定义

$$\begin{pmatrix} F \\ R \end{pmatrix} = \widehat{E}^{(0)}, \qquad F \in \mathbb{C}^{p\times p},\ R \in \mathbb{C}^{(n-p)\times p},$$

$$\begin{pmatrix} D_p & \\ & D_\perp \end{pmatrix} = D, \qquad D_p \in \mathbb{C}^{p\times p},\ D_\perp \in \mathbb{C}^{(n-p)\times(n-p)}$$

并观察

$$\widehat{E}^{(m)} = D^{-m}\widehat{E}^{(0)} = \begin{pmatrix} D_p^{-m}F \\ D_\perp^{-m}R \end{pmatrix} \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0.$$

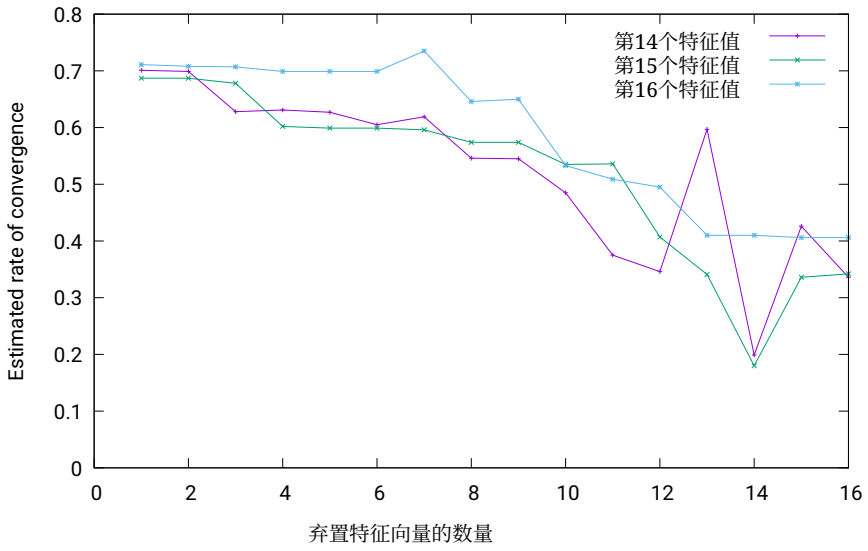


图1：实验观察到的第14、15和16个非零特征值的收敛速率与弃置特征向量数量之间的关系

由于我们希望近似由前 p 个特征向量张成的不变子空间的一组基，因此必须假设 F 满秩，也就是说，它必须可逆。这个假设可得

$$\widehat{E}^{(m)} F^{-1} = \begin{pmatrix} D_p^{-m} \\ D_\perp^{-m} R F^{-1} \end{pmatrix} \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0.$$

令 $i \in [1 : p]$，并将这些矩阵的第 i 列记为 $e_i^{(m)}$，将第 i 个标准单位向量记为 δ_i。由于 $\|D_\perp^{-m}\| \le |\lambda_{p+1}|^{-m}$，我们的方程意味着

$$\tan \angle(e_i^{(m)}, \delta_i) \le C \left(\frac{|\lambda_i|}{|\lambda_{p+1}|} \right)^m \qquad \text{for all } m \in \mathbb{N}_0,$$

也就是说，$\widehat{E}^{(m)}$ 的第 i 列以 $|\lambda_i|/|\lambda_{p+1}|$ 的速率收敛到 D 的第 i 个特征向量，因此 $E^{(m)}$ 的第 i 列以相同的速率收敛到 A 的第 i 个特征向量。这意味着，增大 p 后，收敛速率有望提高。

在我们的实现中，我们使用预条件块逆迭代，并在每一步后对迭代向量进行正交归一化。图1展示了一个关于介电常数的实验结果

$$\epsilon(x) = \begin{cases} 100 & \text{if } \|x - (1/2, 1/2)\| \le 1/3, \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases} \qquad \text{for all } x \in [0,1] \times [0,1],$$

在这里，我们的目标是计算前 16 个非零特征值，并额外加入 1 到 16 个用于舍弃的特征向量，以加快收敛。可以看到，实验观察到的收敛速度确实会随着加入更多特征向量而提高。

当然，计算更多特征向量会增加计算工作量（对于 $p \ll n$，我们预计需要进行 $\mathcal{O}(np^2)$ 次运算），但实验表明，如果我们仅根据相关特征向量的收敛情况来设定停止准则，那么迭代步数的减少带来的收益足以抵消这一影响。

8 数值实验

由于我们可以预期特征值随布洛赫参数平滑变化，因此可以用足够精细的等距网格替代整个布洛赫参数集 $[-\pi/a, \pi/a] \times [-\pi/b, \pi/b]$。在本次实验中，我们选择 $a = b = 1$，并使用包含 30×30 个点的网格

在区域 $[0,1] \times [0,1]$ 上的粗网格上离散麦克斯韦方程：最粗网格包含 16×16 个正方形单元，最细网格包含 1024×1024 个正方形单元。因此，在最细网格上，我们有 2 097 152 个 N´ed´elec 基函数。

我们选择分片常数介电率函数

$$\epsilon(x) = \begin{cases} 11.56 & \text{if } \|x - (0.5, 0.5)\| \le 0.18, \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases} \qquad \text{对于所有 } x \in [0,1] \times [0,1]$$

由 [7] 引入。

我们使用块预条件逆迭代计算前 16 个特征值。当所有特征向量近似的缺陷 $\|Ae^{(m)} - Me^{(m)}\lambda_m\|_2$ 都低于 10^{-2}时，我们便停止迭代。考虑到谱范数随网格细化而变化的缩放特性，这一精度在我们的实验中已足够。

为了提高收敛速度，我们额外计算了 8 个“弃用”的特征向量近似，但它们仅用于加快收敛，并使算法能够从一个 24 维空间中选出前 16 个特征向量的近似；它们不用于停止准则。图 2 展示了第一个和第二个特征值随布洛赫参数 k 的变化，图 3 展示了第三个和第四个特征值的变化。我们观察到，特征值随布洛赫参数平滑变化。对于所有特征向量，均达到了停止准则，因此计算所得的向量是精确特征向量的良好近似。

当然，我们关注本方法的数值表现。图4展示了不同布洛赫值所需的迭代次数。可以看出，我们的外推法效果很好：在相邻布洛赫值之间进行外推，为预条件逆迭代提供初始猜测，可使大多数情况下所需的迭代步数降至4步以下。只有在接近特殊情形 $k = 0$ （图示的四个角落）时，算法所需的步数才会显著增加。

致谢

我们谨向基尔纳米与界面科学倡议（KiN-SIS）表示感谢。

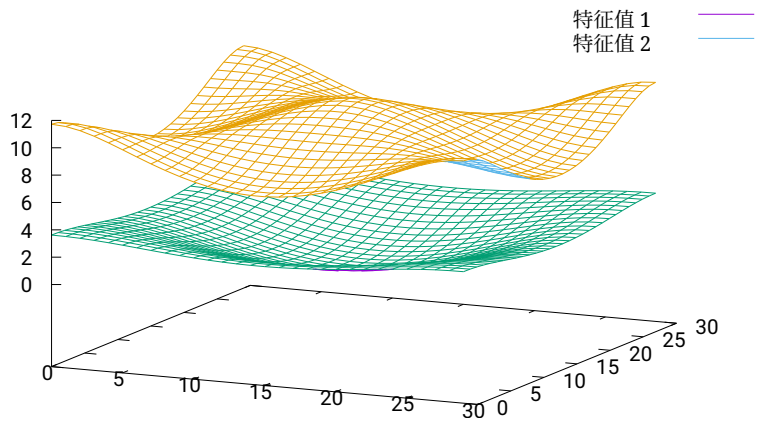


图 2：随布洛赫参数变化的第一和第二特征值

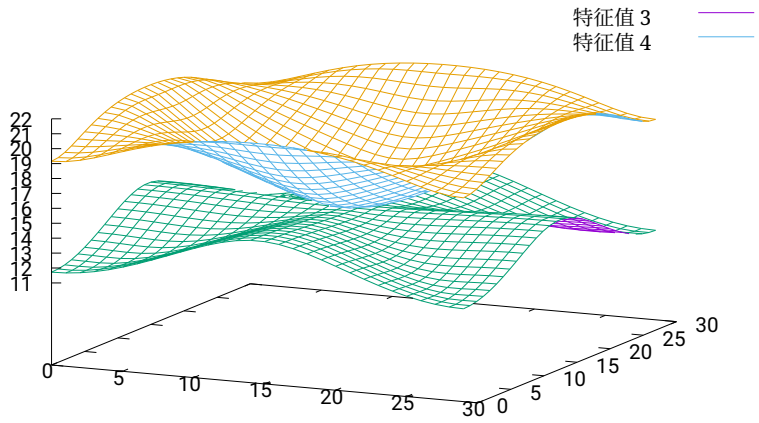


图 3：随布洛赫参数变化的第三和第四特征值

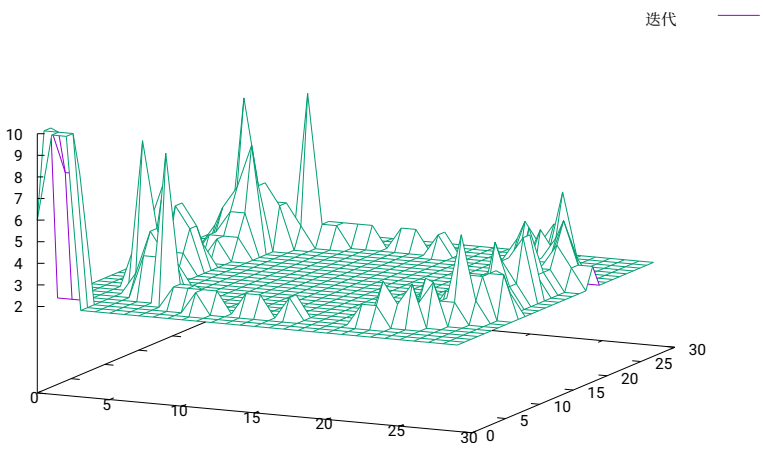


图4：获得低于 10^{-2} 的残差范数所需的迭代次数

参考文献

[1] D. N. Arnold、R. S. Falk 和 R. Winther。 H(div) 和 H(curl) 中的多重网格。*Numer.Math.*，85:197–217，2000年。.[2] F. Bloch。《晶格中电子的量子力学》。*Zeitschriftf¨ur Physik*，52(7):555–600，1929年。[3] J. H. Bramble、J. E. Pasciak 和 A. V. Knyazev。用于特征向量/特征值计算的子空间预条件算法。*Adv. Comp. Math.*，6:159–189，1996年。[4] R. Hiptmair。麦克斯韦方程组的多重网格方法。*SIAM J. Num. Anal.*，36(1):204–225，1998年。[5] A. Knyazev。迈向最优预条件特征值求解器：局部最优块预条件共轭梯度法。*SIAM J. Sci. Comp.*，23(2):517–541，2001年。[6] A. V. Knyazev 和 K. Neymeyr。预条件逆迭代的几何理论 III：广义特征值问题的简明且精确的收敛估计。*Lin. Alg. Appl*，358:95–114，2003年。[7] S. F. Mingaleev 和 Y. S. Kivshar。二维光子晶体和波导中的非线性局域模式，收录于*Springer*光子学丛书第10卷，第351–369页。Springer，2003年。

[8] J. C. N´ed´elec. 在 $\mathbb{R}^3$ 中的混合有限元。*Numerische Mathematik*，35:315–341，1980。

[9] B. A. Samokish。半有界算子特征值问题的最速下降法。高等教育机构学报·数学，5:105–114，1958。（俄语）。