数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2019年4月7日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考: 教材二第3章。

拓展:教材四第2章。(拓展材料除了讲义中包含的内容之外,不属于作业、考试范围。)

4 微分方程选讲: 变分原理简介

For since the fabric of the universe is most perfect, and is the work of a most wise Creator, nothing whatsoever takes place in the universe in which some relation of maximum and minimum does not appear.

---Leonhard Euler

皮埃尔·德·费马(Pierre de Fermat)于1662年发表了费马原理。这原理阐明:光传播的正确路径,所需的时间必定是极值。这原理在物理学界造成了很大的震撼。不同于牛顿运动定律的机械性,现今,一个物理系统的运动拥有了展望与目标。

1744年,皮埃尔·莫佩尔蒂发表了最小作用量原理:光选择的传播路径,作用量最小。他定义作用量为移动速度与移动距离的乘积。用这原理,他证明了费马原理:光传播的正确路径,所需的时间是极值;他也计算出光在反射与同介质传播时的正确路径。莱昂哈德·欧拉(Leonhard Euler)在同年发表了一篇论文,表明物体的运动遵守某种物理量极值定律。

微分方程时常被用来表述物理定律。微分方程指定出,随着极小的时间、位置、或其他变数的变化,一个物理变数如何改变。总合这些极小的改变,再加上这物理变数在某些点的已知数值或已知导数值,就能求得物理变数在任何点的数值。

4.1 引言:微积分中的极值问题和泛函

我们回忆一下微积分中的极值问题,对于光滑的目标函数 $f(x) \in \mathbb{R}$, $x \in \mathbb{R}^n$,它在 x = x* 取到 极值点,则存在一个 x* 的邻域 $U(x^*)$,使得

 $f(x) \le (\ge) f(x^*), \quad \forall x \in U(x^*).$

它的必要条件是,

$$\nabla f(x*) = \mathbf{0}.\tag{4.1}$$

而充分性则需要考虑目标函数的高阶导数等其他条件。

那么,如果自变量是一个函数呢?或者说,目标仍然是一个标量,而我们需要在一个元素为函数的集合中挑选出一些特殊的函数,使得目标达到极值呢?为了做这个推广,我们首先引入泛函

的概念。简单的说,泛函就是把函数映成标量的映射。一些泛函是以积分的形式给出的。例如,对于任意一个给定的函数 y(x), $0 \le x \le 1$,曲线下面面积和曲线的弧长,

$$A(y) = \int_0^1 y(x) dx, \quad S(y) = \int_0^1 \sqrt{1 + (y'(x))^2} dx.$$

我们主要考虑如下形式的泛函,它是一个函数及其导数的定积分,

$$J(y) = \int_{a}^{b} L(x, y(x), y'(x), y''(x), \cdots) dx.$$
 (4.2)

这里,被积函数称为拉格朗日量(named after Joseph Lagrange (1736–1813))。

现在,考虑目标泛函的极小化问题: 泛函 J(y) 对于函数 $y_*(x)$ 取极小值,如果对于 $\epsilon \to 0$ 和所有"可容许的"扰动函数 h(x),总有

$$J(y_*(x)) \le J(y_*(x) + \varepsilon h(x)).$$

这里,h(x) 仍是未指明的用来刻画最优解 $v_*(x)$ 的在函数空间中的邻域。

4.2 波动现象

4.2.1 欧拉-拉格朗日方程(Euler-Lagrange equation)

哈密顿变分原理或最小作用量原理(least action principle): 一个力学系统中,设动能为T(t,q,v),势能为U(t,q),质点在 t_1 时刻始于 q_1 ,在 t_2 时刻止于 q_2 ,则运动轨迹取作用量积分

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, \boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{v}(t)) dt$$

的极值。其中,(在常见的经典系统里面)L(t,q,v) = T - U 为系统的拉格朗日量(Lagrangian function)。这里,t表示时间, $q = (q_1, \cdots, q_s)$ 表示系统指点的坐标, $v = \dot{q} := dq/dt$ 表示速度。

注意,运动轨迹是S的极值和经典系统里面L(t,q,v) = T - U是两个模型假设,我们不需要了解原因。但是我们接下来会做一些数学演算,之后大家会发现这背后的数学思想其实是一个全体到局部的过程(或者说积分到微分的过程)。

为了求作用量S的极值,我们学习一下泛函导数(functional derivative)的基本知识:

考虑一个元素为函数 ρ 的空间 M (也就是说空间的每一个元素是一个函数,我们不妨假设 $\rho: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^s$),和定义在上面的泛函

$$J: M \to \mathbb{R}$$
 or \mathbb{C} .

需要提醒大家的是,我们不讨论一般泛函的定义,虽然泛函可以很抽象,但是在很多具体的问题中,泛函其实就是一个函数在某一点的赋值,一个函数的积分,或者函数的函数的积分。

 $J(\rho)$ 的泛函导数,表示为 $\delta J/\delta \rho$,是如下定义的

$$\int_{a}^{b} \frac{\delta J}{\delta \rho}(x) \cdot h(x) dx = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{J[\rho + \varepsilon h] - J[\rho]}{\varepsilon} = \left[\frac{d}{d\varepsilon} J[\rho + \varepsilon h] \right]_{\varepsilon \to 0},$$

这里,我们取 $h(x) \in \mathbb{R}^s$ 是在端点为 0 的任意函数(对应了在最小作用量原理中,初态和终态中位置的确定),而 εh 称为 ρ 的变分。在形式演算中,我们可以通过泰勒展开来求泛函导数。

注意到 $S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, \boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) dt$,那么

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta S}{\delta q}(t) \cdot h(t) dt = \left[\frac{d}{d\varepsilon} S[q + \varepsilon h] \right]_{\varepsilon=0}$$

$$= \left[\frac{d}{d\varepsilon} \int L(t, q + \varepsilon h, \dot{q} + \varepsilon \dot{h}) dt \right]_{\varepsilon=0}$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \cdot h + \frac{\partial L}{\partial v} \cdot \dot{h} \right) dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \cdot h - \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right)_t \cdot h \right) dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right)_t \right) \cdot h dt.$$

这里,分部积分的边界项消失了,因为 h 在边界处为0。最终,我们通过最小作用量原理和变分函数的任意性(Fundamental Lemma of the Calculus of Variations),推导出了著名的 Euler-Lagrange equation

$$\frac{\partial L}{\partial a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial v} \right) = 0.$$

注意,这里 $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^s$ 是t的一元向量值函数。

如果自变量也是多维的,我们也可以类似的推导 Euler-Lagrange 方程。基于之前的假设,如果把 $q \in \mathbb{R}^s$ 改为是 $x = (x_1, \dots, x_d)$ 的函数,即 $q : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^s$,那么对应的 Euler-Lagrange 方程为

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \sum_{j=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}_{x_j}} \right) = 0.$$

注意,这里的 $q_{x_i} = \partial q/\partial x_j$.

我们先看两个泛函导数相关的例子:

Example 1 考虑连接 (0,0) (1,*b*) 两点的最短路径。令 v(x), $0 \le x \le 1$ 满足

$$y(0) = 0, \quad y(1) = b.$$

我们考虑弧长

$$J(y) = \int_0^1 \sqrt{1 + (y')^2} dx$$

的极值。我们求变分易得

$$\int_0^1 \frac{\delta J}{\delta y} h dx = \int_0^1 -\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)' h dx.$$

令 $\frac{\delta J}{\delta y}=0$,我们得到 y' 恒等于一个常数。最后,由边界条件,我们得到,连接 (0,0) (1,b) 两点的最短路径是 y=bx 上的线段。

Example 2. For the classical part of the electron-electron interaction, Thomas and Fermi employed the Coulomb potential energy functional

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr'.$$

From the definition of the functional derivative,

$$\begin{split} \int \frac{\delta J}{\delta \rho} \phi dr &= \left[\frac{d}{d\varepsilon} J[\rho + \varepsilon h] \right]_{\varepsilon = 0} \\ &= \left[\frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{2} \int \int \frac{(\rho(r) + \varepsilon h(r))(\rho(r') + \varepsilon h(r'))}{|r - r'|} dr dr' \right]_{\varepsilon = 0} \\ &= \frac{1}{2} \int \int \frac{h(r)\rho(r')}{|r - r'|} dr dr' + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r)h(r')}{|r - r'|} dr dr' \\ &= \int \left(\int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' \right) h(r) dr. \end{split}$$

Thus,

$$\frac{\delta J}{\delta \rho} = \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr'.$$

4.2.2 绳索的微小振动

考虑在时间t距离平衡位置x的位移u=u(x,t)的微分方程。这里, $x \in \mathbb{R}$ 。我们仅考虑微小振动,u(x,t)及其导数的高阶项将被忽略。

 $\phi \rho(x)$ 表示绳索的线密度,在时间t在位置x的动能密度为

$$T = \frac{1}{2}\rho(x)u_t^2.$$

微积分我们知道绳索微元长度 $ds = \sqrt{1 + u_x^2} dx$, 所以形变长度为

$$ds - dx = (\sqrt{1 + u_x^2} - 1)dx \approx \frac{1}{2}u_x^2 dx.$$

所以(with some elasticity theory)势能密度的表达式是

$$U=\frac{1}{2}\mu u_x^2,$$

这里 μ 是弹性系数。势能模型的建立需要更多的物理知识,所以我们只是把它当作一个模型假设。 绳索的作用积分为

$$S = \int Ldt dx = \int (T - U)dt dx = \int \left(\frac{1}{2}\rho(x)u_t^2 - \frac{1}{2}\mu u_x^2\right)dt dx.$$

对应的 Euler-Lagrange equation 为

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \left(\frac{\partial L}{\partial u_t}\right)_t - \left(\frac{\partial L}{\partial u_x}\right)_x = 0.$$

经过计算,我们得到

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial u_t} = \rho(x)u_t, \quad \frac{\partial L}{\partial u_x} = -\mu u_x,$$

$$\left(\frac{\partial L}{\partial u_t}\right)_t = \rho(x)u_{tt}, \quad \left(\frac{\partial L}{\partial u_x}\right)_x = -\mu u_{xx}.$$

于是我们得到一维波动方程

$$\rho(x)u_{tt}=\mu u_{xx}.$$

如果绳索收到外力f(x,t),那么动能密度不变,势能密度变为

$$U = \frac{1}{2}\mu u_x^2 - f(x, t)u,$$

(势能模型的建立需要更多的物理知识,所以我们只是把它当作一个模型假设。)于是,我们可以得到一维受迫振动方程

$$\rho(x)u_{tt} = \mu u_{xx} + f(x,t).$$

4.2.3 极小曲面

考虑一个膜(x, y, u(x, y)), $(x, y) \in V$, 当这个膜的表面积

$$\int_{V} \sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2} dx dy$$

有最小值的时候,极小曲面问题需要确定所有可能的膜外形。这个问题对应的拉格朗日量

$$L = \sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2}.$$

为了得到对应的Euler-Lagrange equation,我们计算

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial u_x} = \frac{u_x}{\sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2}}, \quad \frac{\partial L}{\partial u_y} = \frac{u_y}{\sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2}}.$$

于是我们得到

$$\left(\frac{u_x}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}\right)_{x} + \left(\frac{u_y}{\sqrt{1+u_x^2+u_y^2}}\right)_{y} = 0,$$

或者化简为

$$(1 + u_y^2)u_{xx} - 2u_xu_yu_{xy} + (1 + u_x^2)u_{yy} = 0.$$

我们可以线性化此方程(扔掉高阶项),得到拉普拉斯方程(Laplace equation):

$$u_{xx} + u_{yy} = 0.$$

4.3 边界条件的影响: 自然边界条件

我们回顾一下,在用变分法推导 Euler-Lagrange 方程的时候,边界条件所产生的作用。例如,在最小作用量原理中,我们考虑的泛函和边界条件是,

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt, \quad q(t_1) = q_1, \quad q(t_2) = q_2.$$

边界条件的影响主要表现在下面三个方面

- 给出了 Euler-Lagrangian 方程的边界条件。($q(t_1) = q_1$, $q(t_2) = q_2$)
- 给出了扰动函数 h(t) 的边界条件。 $(h(t_1) = 0, h(t_2) = 0)$
- 在求变分的过程中, 使分部积分中产生的边界项消失。

其中,第三条尤为关键,否则我们不能由变分推出微分方程。

我们在上面的例子中考虑的边界条件被称为 Dirichlet 边界条件(第一类边界条件)。下面我们考虑一些其他的边界条件,和它们产生的效应。

4.3.1 有一个自由边界的问题

我们考虑一个稍微修改后的最短路径问题: 寻找从原点 (0,0) 出发, 到达竖直直线 x=1 的最短路径。令 y(x), $0 \le x \le 1$ 为连接 (0,0) 和 x=1 的曲线, 我们仍然要考虑弧长

$$J(y) = \int_0^1 \sqrt{1 + (y')^2} \, dx$$

的极值。但是,根据题目,我们只有在 x = 0 处的边值条件 y(0) = 0,而我们在 x = 1 处,我们没有对 y 有具体的要求,所以这一端称为被自由边界。相应的,我们得到对扰动函数的约束 h(0) = 0,而 h(x) 在 x = 1 处是无限制的。

在这些条件下,通过变分,我们得到

$$\int_0^1 \frac{\delta J}{\delta y} h dx = \frac{y'(1)h(1)}{\sqrt{1 + (y'(1))^2}} + \int_0^1 -\left(\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}}\right)' h dx.$$

为了令边界项的贡献完全消失, 我们令

$$\frac{y'(1)h(1)}{\sqrt{1+(y'(1))^2}}=0.$$

由于 h(1) 的任意性,我们推导出来最优解需要满足一个 **自然边界条件**: v'(1) = 0。

总结来看,最优解满足 Euler-Lagrange 方程和边值条件

$$-\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'=0, \quad y(0)=0, \quad y'(1)=0.$$

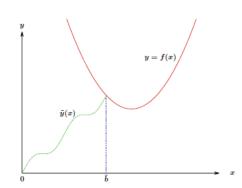
而我们可以求解得到,最优解为 y(x) = 0。

4.3.2 有一个变化边界的问题

另一个版本的最短路径问题是,寻找从原点到曲线 y = f(x) 的最短路径。对于连接路径,在 x = 0 处的边界条件 y(0) = 0 依然成立,但是另外一个端点可能是落在 y = f(x) 的任意一点。我们设 这个未知的端点在 x = b 处,因而,这里的边界条件为

$$y(b) = f(b). (4.3)$$

Fig. 3.3 A trial solution, $\tilde{y}(x)$ on $0 \le x \le \tilde{b}$, for the "shortest path to a given *curve*" variable endpoint problem (3.26)



我们的目标泛函仍然为

$$J(y) = \int_{0}^{b} \sqrt{1 + (y')^{2}} dx,$$

但是,现在y和b都是未知量。于是,我们需要对每一个未知量引入相应的扰动

$$\tilde{y}(x) = y(x) + \varepsilon h(x), \quad \tilde{b} = b + \varepsilon c.$$

这里, h(x) 满足 h(0) = 0, 而 c 是一个待定的常数。于是, 经过扰动的目标泛函是

$$J^{\varepsilon} = \int_{0}^{b+\varepsilon c} \sqrt{1 + (y' + \varepsilon h')^2} dx,$$

通过计算我们得到

$$\frac{dJ^{\varepsilon}}{d\varepsilon}|_{\varepsilon=0} = c\sqrt{1 + (y'(b))^2} + \frac{y'(b)h(b)}{\sqrt{1 + (y'(b))^2}} + \int_0^b -\left(\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}}\right)' h dx.$$

注意到,现在有两个边界项,其中一个是由于变动边界得来的。我们仍然希望选取最优解使得边界项消失,然后通过积分项推出 Euler-Lagrange 方程。

这时候,我们考虑对边界条件(4.3)的扰动

$$y(b+\varepsilon c) + \varepsilon h(b+\varepsilon c) = f(b+\varepsilon c),$$

通过 Taylor 展开, 匹配 O(1) 项, 我们得到 y(b) = f(b)。再通过匹配 $O(\varepsilon)$ 项, 我们得到,

$$y'(b)c + h(b) = f'(b)c,$$

于是求解得到

$$c = \frac{h(b)}{f'(b) - \gamma'(b)}.$$

于是,代入泛函导数中,我们得到边界项化简为

$$\left(\frac{y'(b)}{\sqrt{1+(y'(b))^2}} + \frac{\sqrt{1+(y'(b))^2}}{f'(b)-y'(b)}\right)h(b).$$

由于 h(b) 的任意性, 我们令上式中括号内的部分为 0, 并化简得到如下的自然边界条件

$$y'(b) = -\frac{1}{f'(b)}.$$

这也说明, 最短路径与给定曲线 y = f(x) 垂直相交。

总结来看,最优解满足 Euler-Lagrange 方程和边值条件

$$-\left(\frac{y'}{\sqrt{1+(y')^2}}\right)'=0, \quad y(0)=1, \quad y(b)=f(b), \quad y'(b)=-\frac{1}{f'(b)}.$$

看起来,二阶方程配有三个边界条件并不自然,而实际上这个问题不是超定的(overdetermined),因为 b 也是一个待求解的未知量。

4.4 带约束的优化问题简介

4.4.1 Lagrange Multiplier 和带约束的优化

现实问题中,我们常需要求满足约束条件的最优解。对于一些约束条件,我们可以之间将它代入目标函数中,而对于另外一些约束条件,我们会用到 Lagrange Multiplier。变分学中的 Lagrange Multiplier 方法可以看作是微积分中 Lagrange Multiplier 方法的拓展。它主要适用于如下几类的问题

- 等周问题(Isoperimetric problem): 给定解的积分的条件,优化目标泛函。
- 完整系统(Holonomic systems): 给定解逐点满足的几何条件,优化目标泛函。
- 优化控制(Optimal Control):给定解逐点满足的微分方程,优化目标泛函。

在约束优化问题中,可行解只属于所有可能解的一个子集。 Lagrange Multiplier 方法引入了增广目标函数(augmented objective function) \mathcal{L} ,它包含了原目标函数和约束条件,而所有的关键点依然通过如下的梯度条件给出

$$\nabla \mathcal{L} = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \text{all critical point solutions.}$$

我们这里只讨论等周问题中 Lagrange Multiplier 方法的使用,感兴趣的同学可以参考教材二的3.7,3.8等章节学习其他两类问题。

4.4.2 等周问题

我们考虑如下的优化问题

$$\max_{y} \left(J = \int_{a}^{b} L(x, y, y') dx \right), \quad \text{subject to} \quad G \equiv \int_{a}^{b} g(x, y, y') dx = 0.$$

这类问题之所以被称为等周问题,是因为它来源于古老的几何问题:在固定周长的情况下,如何使得曲线包围的面积最大。

在约束 $G \equiv 0$ 的条件下,求泛函 I 的极值,可以表示成一个如下的增广泛函的的极值问题

$$I(\gamma, \lambda) = J - \lambda G$$

而这里的常数 λ 即为 Lagrange Multiplier。我们也可以相应的引入增广的 Lagrangian 函数 \mathcal{L} ,满足

$$I = \int_{a}^{b} \mathcal{L} dx, \text{ where } \mathcal{L}(x, y, y', \lambda) = L(x, y, y') - \lambda g(x, y, y').$$

这样,我们就可以按照之前的方法,对所有的未知量引入扰动

$$\tilde{y}(x) = y(x) + \varepsilon h(x), \quad \tilde{\lambda} = \lambda + \varepsilon \gamma.$$

这里我们假设由于边界条件的选取,泛函导数中的边界项都已经消失,因为令泛函导数为**0**,我们得到

$$\int_{a}^{b} \left[\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial y'} \right) - \lambda \left(\frac{\partial g}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial g}{\partial y'} \right) \right) \right] h dx + \gamma \int_{a}^{b} g(x, y, y') dx = 0.$$

由于 h(x) 和 γ 的任意性,我们得到 Euler-Lagrange 方程和约束条件

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \right) = 0, \quad \int_a^b g(x, y, y') dx = 0.$$

下面我们考虑一个具体的例子: 寻找函数 y(x)>0, 0< x<1,满足边界条件 y(0)=0 和 y(1)=0,其对应的弧长 $S=\int_0^1 \sqrt{1+(y')^2}dx$ 为固定值,而曲线和坐标轴包围的面积 $A=\int_0^1 ydx$ 达到最大值。

这里的弧长约束为

$$G \equiv \int_0^1 g \, dx = 0$$
, where $g = \sqrt{1 + (y')^2} - S$.

所以,相应的增广的目标泛函和 Lagrange 函数为

$$I = A - \lambda G = \int_0^1 \mathcal{L} dx$$
, where $\mathcal{L} = y - \lambda g = y - \lambda \left(\sqrt{1 + (y')^2} - S \right)$.

于是,我们得到 Euler-Lagrange 方程和约束条件

$$1 + \lambda \left(\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2}} \right)' = 0, \quad \int_0^1 \left(\sqrt{1 + (y')^2} - S \right) dx = 0.$$

通过求解方程,并结合边界条件 $\nu(0) = 0$ 和 $\nu(1) = 0$,我们得到

$$y = \sqrt{\lambda^2 - (x - \frac{1}{2})^2} - \sqrt{\lambda^2 - \frac{1}{4}}.$$

此时,相应的面积和弧长为

$$A = \lambda^2 \arcsin\left(\frac{1}{2\lambda}\right) - \sqrt{\lambda^2 - \frac{1}{4}}, \quad S = 2\lambda \arcsin\left(\frac{1}{2\lambda}\right).$$

最终,为了完成求解,我们先通过弧长的式子算出 λ ,就可以得出最优解y(x)的表达式和此时的面积A。