连续问题的离散化与数学规划表述

刘红英

北京航空航天大学，数学与系统科学学院, 北京 100191，中国

摘要 本报告给出了边界值问题和变分问题的一种离散化过程. 利用优化算法求解离散后得到的问题可以得到原始问题的近似解. 同时提供了一个具体的边界值问题和几个典型的变分问题.

关键词 常微分边界值问题，最小化问题， $k-$ 阶段配置法，有限元法.

I. 边界值问题

考虑一般的**边界值问题**(Boundary Value Problems). 这里采用Ascher等[[2]，p.7]的表述，即确定在区间 (a,b) 上 m 阶可微的函数 $u(t)$ ，使其满足

$$u^{(m)}(t)=F(t,u(t),\cdots,u^{(m-1)}(t)),t\in(a,b) \tag{1}$$

及在 $t=a$ 和 $t=b$ 给定的 m 个完整的边界条件.

A. k *阶段配置法*

下面考虑用分段多项式逼近无限维问题(1). 具体考虑 k **阶段配置法**($k-$ stage collocation method). 令 $a=t_1<t_2<\cdots<t_{n+1}=b$ 是区间 $[a,b]$ 的一个分割， $h_i=t_{i+1}-t_i$. k 阶段配置法是通过 k 个点

$$0<\rho_1<\rho_2<\cdots<\rho_k<1$$

来定义的. 具体地，我们选 ρ_i 是 $k(\geq m)$ 阶 Legendre多项式的根[1]. 这样选取是为了保证是超收敛的. k 阶段配置法利用分段多项式 u_π 来逼近边界值问题的解，即 u_π 在子区间 $[t_i,t_{i+1}]$ 上是 $m+k$ 阶的多项式. 这样，用 $n(m+k)$ 个参数即可确定 u_π . 为了确定这些参数，我们要求近似函数 u_π 满足

(i) $u_\pi\in C^{m-1}[a,b]$,

(ii) u_π 满足 m 个给定的边界条件，且

(iii) u_π 在配置点

$$\xi_{ij}=t_i+h_i\rho_j,\ 1\leq i\leq n,1\leq j\leq k \tag{2}$$

通信作者. 电子邮件: liuhongying@buaa.edu.cn

[1]需要注意的是：若利用的是区间 $[-1,1]$ 上的 k阶 Legendre多项式，需要将这些根从 $[-1,1]$ 由映射 $\frac{x+1}{2}$ 映到区间 $[0,1]$ 上

满足微分方程(1).

对 $1\leq i\leq n$ ，这里的分段多项式近似 u_π 在区间 $[t_i,t_{i+1}]$ 上形如

$$\sum_{j=1}^{m}v_{ij}\frac{(t-t_i)^{j-1}}{(j-1)!}+h_i^m\sum_{j=1}^{k}w_{ij}\phi_j\big(\frac{t-t_i}{h_i}\big), \tag{3}$$

其中 v_{ij} 和 w_{ij} 是待定系数，Ascher等选基([2],pp.247-249)

$$\phi_j(t)=\frac{t^{m+j-1}}{(m+j-1)!},\ 1\leq j\leq k. \tag{4}$$

经过简单计算，得到

$$v_{ij}=u_\pi^{(j-1)}(t_i),1\leq i\leq n,1\leq j\leq m,$$

和

$$w_{ij}=h_i^{j-1}u_\pi^{(m+j-1)}(t_i),1\leq i\leq n,1\leq j\leq k.$$

这样，为 v_{ij} 和 w_{ij} 指定上下界相当于为近似函数 u_π 在 t_i 处的导数设定了变化范围.

这样，强迫 u_π 的各阶导数在内部分割点连续以保证条件(i)成立，即需要系数向量 $\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}$ 满足

$$u_\pi^{(l-1)}(t_i^-)=u_\pi^{(l-1)}(t_i^+),\ 1\leq l\leq m,1<i\leq n. \tag{5}$$

条件(iii)即需要系数向量 $\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}$ 满足配置方程

$$\begin{aligned}u_\pi^{(m)}(\xi_{ij})=F(\xi_{ij},u_\pi'(\xi_{ij}),\cdots,u_\pi^{(m-1)}(\xi_{ij})),\\ 1\leq i\leq n,1\leq j\leq k.\end{aligned} \tag{6}$$

由方程(5), (6)和 m 个边界条件，可以得到一个具有 $n(m+k)$ 个未知数和 $n(m+k)$ 个方程的方程组.

由特定映射 $\boldsymbol{r}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ 确定的非线性方程组的解指的是满足 $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ 的向量 $\boldsymbol{x}$. 求解非线性方程组的算法通常用问题

$$\min\{\|\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})\|:\boldsymbol{l}\leq\boldsymbol{x}\leq\boldsymbol{u})\} \tag{7}$$

的解来逼近方程组的解，其中 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{u}$ 是解的上下界向量， $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的某种范数. 大部分算法使用 2 范数. 有意思的是非线性方程组的代码通常不能处理变量的界约束(或者更一般的约束).

基于上述思想，可以将方程组的求解转化为最小二乘问题(利用 2 范数)，可以利用高斯－牛顿法或者 Levenberg-Marquardt 算法求解.

B. 管道中的流

将流体注入一根长的竖直管道，将产生**管道中的流**(Flow in a Channel)问题，即

$$u'''' = R(u'u'' - uu'''), 0 < t < 1, \tag{8a}$$

$$u(0) = u'(0) = 0, u(1) = 1, u'(1) = 0, \tag{8b}$$

其中 u 是势能函数， u' 是流体的切速度， R 是参数，称为雷诺数(Reynolds number). 该问题很有趣，因为它对小的雷诺数易于求解，但是随着 R 的增大，问题的求解会越来越难.

问题(8)是边界值问题，其中 $m = 4$. 请选取 $k = 4$ 和 $n = 40$ 进行计算. 基于上一小节的分析，得到一个有 320 变量的非线性方程组(具体而言，有160个线性方程和160个二次方程). 请依次取雷诺数 $R_0 = 0, R_1 = 10^2, R_2 = 10^3, R_3 = 5 \times 10^3$ 和 $R_4 = 10^4$ 进行以下计算.

(a) 当 $R_0 = 0$ 时，问题的解是线性的；将该解作为雷诺数为 R_1 时问题的初始近似解. 用这种方式依次进行下去，即以雷诺数为 R_i 时问题的解作为雷诺数为 R_{i+1} 时问题的初始近似解. 针对以上四种情况划出不同雷诺数时所得到的切速度 u' 的图形.

(b) 以雷诺数为 R_0 时问题的解作为初值求解雷诺数为 R_4 时的问题，结果怎样？

II. 变分问题

变分问题(variation probelm)指在一个函数集合中求(实值)泛函的极大或者极小的问题. 这里的泛函指的是将普通函数映到实数的映射，即将函数的定义域由有限维空间 $\mathbb{R}^n$ 扩充到无穷维的函数空间，比如弧长

$$f(v(t)) = \int_a^b \sqrt{1 + v'(t)}\mathrm{d}t$$

是定义在区间 $[a, b]$ 上的可微曲线 $v(t)$ 形成的集合上的泛函.

设 $D \subset \mathbb{R}^2$ 是有界开集. 令 $C_0^1(D)$ 是定义在 D 上的连续可微且具有紧支集的函数空间. 定义 H_0^1 是 $C_0^1(D)$ 关于 H^1 范数的完备化. 这里 H^1 是 Sobolev 空间 $W^{(1,2)}$ ，即 $v \in H^1$ 当且仅当 $v, v_{x_1}, v_{x_2} \in L_2(D)$ ，且

$$\|v\|_{H_1} = (\|v\|_2^2 + \|v_{x_1}\|_2^2 + \|v_{x_2}\|_2^2)^{\frac{1}{2}},$$

其中 v_{x_1}, v_{x_2} 分别表示函数 v 关于变元 x_1 和 x_2 的偏导数.

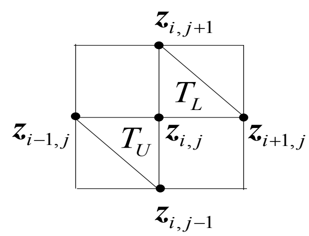

Fig. 1. 三角剖分：三角形单元 T_L 和 T_U

A. 二次变分问题的有限元近似

我们讨论

$$\min_{v \in K} q(v) = \frac{1}{2}\int_D w_q(\boldsymbol{x})\|\nabla v(\boldsymbol{x})\|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} - \int_D w_l(\boldsymbol{x})v(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{9}$$

其中 $K \subset H_0^1$ 是凸集， w_q 和 w_l 是定义在区域 D 上的函数.

下面考虑问题的有限元近似. 为了表述方便，假设 $D = (\xi_{1,l}, \xi_{1,u}) \times (\xi_{2,l}, \xi_{2,u})$. 然后对区域 D 进行三角剖分. 为此选择网格步长 h_1 和 h_2 ，并定义网格点

$$\boldsymbol{z}_{i,j} = (\xi_{1,l} + ih_1, \xi_{2,l} + jh_2), 0 \le i \le n_1 + 1, 0 \le j \le n_2 + 1,$$

使得 $\boldsymbol{z}_{n_1+1,n_2+1} = (\xi_{2,l}, \xi_{2,u})$. 由此得 D 的三角剖分的顶点 $\boldsymbol{z}_{ij} \in \mathbb{R}^2$. 三角剖分由顶点为 $\boldsymbol{z}_{i,j}, \boldsymbol{z}_{i+1,j}$ 和 $\boldsymbol{z}_{i,j+1}$ 的三角形单元 T_L ，和顶点为 $\boldsymbol{z}_{i,j}, \boldsymbol{z}_{i-1,j}$ 和 $\boldsymbol{z}_{i,j-1}$ 的三角形单元 T_U 组成. 考虑在 $\boldsymbol{z}_{ij}$ 处取值为 v_{ij} 的逐段线性函数组成的空间，在此函数空间上极小化 $q(\cdot)$ ，即得问题(9) 的有限元近似解.

具体地，在三角形 T_L 上，用线性函数

$$l(\boldsymbol{x}) = ax_1 + bx_2 + c$$

来近似 $v(\boldsymbol{x})$ ，由插值条件

$$l(\boldsymbol{z}_{i,j}) = v_{i,j}, l(\boldsymbol{z}_{i+1,j}) = v_{i+1,j}, l(\boldsymbol{z}_{i,j+1}) = v_{i,j+1}$$

解得

$$a = \frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{h_1},\ b = \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{h_2}.$$

从而在三角形 T_L 上用

$$\|\nabla l\|^2 = a^2 + b^2$$

代替 $\|\nabla v(\boldsymbol{x})\|^2$ ，用

$$\tfrac{1}{3}(w_q(\boldsymbol{z}_{i,j}) + w_q(\boldsymbol{z}_{i+1,j}) + w_q(\boldsymbol{z}_{i,j+1}))$$

近似 $w_q(\boldsymbol{x})$ ，从而得积分

$$\int_D w_q(\boldsymbol{x})\|\nabla v(\boldsymbol{x})\|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{10}$$

在单元 T_L 上的近似(三棱柱的体积)是二次函数

$$q_{ij}^L(\boldsymbol{v}) = \mu_{ij}\Big\{\big(\tfrac{v_{i+1,j}-v_{i,j}}{h_1}\big)^2 + \big(\tfrac{v_{i,j+1}-v_{i,j}}{h_2}\big)^2\Big\},$$

其中

$$\mu_{ij} = \tfrac{h_1 h_2}{6}\{w_q(\boldsymbol{z}_{i,j}) + w_q(\boldsymbol{z}_{i+1,j}) + w_q(\boldsymbol{z}_{i,j+1})\}.$$

类似地，在单元 T_U 上积分(10)的近似为

$$q_{ij}^U(\boldsymbol{v}) = \lambda_{ij}\Big\{\big(\tfrac{v_{i-1,j}-v_{i,j}}{h_1}\big)^2 + \big(\tfrac{v_{i,j-1}-v_{i,j}}{h_2}\big)^2\Big\},$$

其中

$$\lambda_{ij} = \tfrac{h_1 h_2}{6}\{w_q(\boldsymbol{z}_{i,j}) + w_q(\boldsymbol{z}_{i-1,j}) + w(\boldsymbol{z}_{i,j-1})\}.$$

基于上述讨论，得到问题(9)的有限元近似，即二次规划

$$\min_{\boldsymbol{v}\in\Omega} q(\boldsymbol{v}) = \tfrac{1}{2}\sum_{i,j}(q_{ij}^L(\boldsymbol{v}) + q_{ij}^U(\boldsymbol{v})) - h_1 h_2 \sum_{i,j} w_l(\boldsymbol{z}_{i,j}) v_{i,j}. \tag{11}$$

需要注意的是，在上述表述中，二次函数 $q_{i,j}^L$ 仅当 $0 \le i \le n_1$ 和 $0 \le j \le n_2$ 时有定义，而 $q_{i,j}^U$ 仅当 $1 \le i \le n_1+1$ 和 $1 \le j \le n_2+1$ 时有定义.

B. 弹塑性扭转(Elastic-Plastic Torsion)

弹塑性扭转问题源于确定无线长圆柱杆上的压力场问题. 该问题的无限维描述为

$$\min_{v\in K} q(v) = \tfrac{1}{2}\int_D \|\nabla v(\boldsymbol{x})\|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} - c\int_D v(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{12}$$

其中 c 是给定的常数， D 是具有光滑边界的有界区域. 凸集 k 是定义在 D 上的一个函数集，定义为

$$K = \{v \in H_0^1(D) : |v(\boldsymbol{x})| \le \mathrm{dist}(\boldsymbol{x}, \partial D), \boldsymbol{x} \in D\},$$

其中 $\mathrm{dist}(\cdot, \partial D)$ 是到 D 的边界的距离函数. 该表述和扭转问题的物理解释见[[3], pp.41-55].

在(9)中，令 $w_q \equiv 1, w_l \equiv c$ ，即得扭转问题(12). 此外，对于扭转问题离散后得到的二次规划问题(11)而言， 可行集

$$\Omega = \{\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^{(n_1+2)(n_2+2)} : |v_{i,j}| \le d_{ij}, \forall i, j\},$$

其中 d_{ij} 是 $\mathrm{dist}(\cdot, \partial D)$ 在 $\boldsymbol{z}_{ij}$ 处的值. 请针对弹塑性扭转问题，完成以下计算

(a) 对于 $D = (0,1) \times (0,1)$ 及 $c = 5$ 计算弹塑性扭转问题. 给出最优值，统计出计算目标值和梯度的次数，统计出计算时间. 并画出扭转问题的有限维近似解.
(b) 对 $D = (0,1) \times (0,1)$ 及 $c = 20$ 重复上述工作.
(c) 对 $D = (0,1) \times (0,1)$ 及 $c = 100$ 重复上述工作.

请对不同的参数 c 所得结果进行分析. 可以得到什么样的结论吗？

C. 径向轴承的压力分布

当确定两个圆柱体之间的润滑剂薄膜上的压力分布时，会出现**径向轴承上的压力分布**(Pressure Distribution in a Journal Bearing)问题. 该问题的无限维表述形如(9)，其中

$$w_q(\xi_1, \xi_2) = (1 + \epsilon\cos\xi_1)^3,\ w_l(\xi_1, \xi_2) = \epsilon\sin\xi_1,$$

这里 $\epsilon \in (0,1)$ 是常数， $D = (0, 2\pi) \times (0, 2b)$ ，其中 $b > 0$ 是参数. 凸集 K 定义为

$$K = \{v \in H_0^1(D) : v(\boldsymbol{x}) \ge 0, \forall \boldsymbol{x} \in D\}.$$

径向轴承问题的有限元近似类似于弹塑性扭转问题，离散后得到的近似问题是形如(11)的二次规划问题，这里的可行集

$$\Omega = \{\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^{(n_1+2)(n_2+2)} : v_{i,j} \ge 0, \forall i, j\}$$

请针对径向轴承的压力分布问题，完成以下计算

(a) 对于 $b = 10, \epsilon = 0.1$ 求解问题(11)，给出最优值，统计出计算目标值和梯度的次数，统计出计算时间. 并画出问题的有限维近似解.
(b) 对 $b = 10, \epsilon = 0.4$ 重复上述工作.
(c) 对 $b = 10, \epsilon = 0.8$ 重复上述工作.

请对不同的参数 ϵ 所得结果进行分析. 可以得到什么样的结论吗？

D. 最小曲面

数学上, **最小曲面问题**(Minimal Surface problem)也称**普拉图问题**(Plateau problem)， 因为比利时物理学家普拉图曾对这个题目作出了有趣的实验. 这个问题的最简单形式如下：在空间中给定一闭合曲线，求以这条曲线为边界，具有最小面积的曲面. 表述为变分问题，即

$$\min_{v\in K} f(v)=\int_D (1+\|\nabla v(\boldsymbol{x})\|^2)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \qquad (13)$$

其中 D 是具有光滑边界的有界区域，凸集

$$K=\{v\in H^1(D): v(\boldsymbol{x})=v_D(\boldsymbol{x}),\forall \boldsymbol{x}\in\partial D\},$$

这里 $v_D:\partial D\to\mathbb{R}$ 是给定的边界函数，它确定了最小表面问题的唯一解.

通过在 $\boldsymbol{z}_{ij}$ 处取值为 $v_{i,j}$ 的逐段线性函数空间上极小化 f 可以得到最小曲面问题的有限元近似， 其中 $\boldsymbol{z}_{ij}\in\mathbb{R}^2$ 是以 h_1 和 h_2 为网格步长的三角剖分的顶点. 令 $\Omega=\mathbb{R}^{(n_1+2)(n_1+2)}$ ，类似于II-A，求解极小化问题

$$\min_{\boldsymbol{v}\in\Omega} q(\boldsymbol{v})=\sum_{i,j}(f_{ij}^L(\boldsymbol{v})+f_{ij}^U(\boldsymbol{v})) \qquad (14)$$

可以得到最小曲面问题的有限元近似，其中函数

$$f_{ij}^L(\boldsymbol{v})=\tfrac{h_1h_2}{2}\left\{1+\left(\tfrac{v_{i+1,j}-v_{i,j}}{h_1}\right)^2+\left(\tfrac{v_{i,j+1}-v_{i,j}}{h_2}\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$f_{ij}^U(\boldsymbol{v})=\tfrac{h_1h_2}{2}\left\{1+\left(\tfrac{v_{i-1,j}-v_{i,j}}{h_1}\right)^2+\left(\tfrac{v_{i,j-1}-v_{i,j}}{h_2}\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}}.$$

需要注意的是，在上述表述中，二次函数 $f_{i,j}^L$ 仅当 $0\le i\le n_1$ 和 $0\le j\le n_2$ 时有定义，而 $f_{i,j}^U$ 仅当 $1\le i\le n_1+1$ 和 $1\le j\le n_2+1$ 时有定义.

Enneper 得到一个有趣的最小表面问题，其中 $D=(-1/2,1/2)\times(-1/2,1/2)$ ，

$$v_D(\xi_1,\xi_2)=u^2-v^2,$$

其中 u 和 v 是方程组

$$\begin{aligned}\xi_1&=u+uv^2-\tfrac{1}{3}u^3\\ \xi_2&=-v-u^2v+\tfrac{1}{3}v^3\end{aligned}$$

在区域$[-1,1]\times[-1,1]$上的唯一解. 利用优化软件求出该最小曲面问题的有限元近似，给出最优值，统计出计算目标值和梯度的次数，统计出计算时间. 并画出该最小曲面问题的有限元近似解.

E. 带障碍物的最小曲面

普拉图的一个问题是：给定一条三维空间的闭合曲线，确定以此为边界，在某些障碍物之上，并且面积最小的空间曲面. 称此为**带障碍物的最小曲面**(Minimal Surfaces with Obstacle)问题. 我们假定曲面用非参数形式 $v:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}$ 表示，针对某障碍物 v_{O} 增加要求 $v\ge v_{\mathrm{O}}$. 障碍物问题的无限维表述类似于最小曲面问题(13)，但是其中的凸集 K 增加了障碍物约束，即为

$$\begin{aligned}K=\{v\in H^1(D): v(\boldsymbol{x})=v_D(\boldsymbol{x}),\forall \boldsymbol{x}\in\partial D,\\ v(\boldsymbol{x})\ge v_{\mathrm{O}}(\boldsymbol{x}),\forall \boldsymbol{x}\in D\ \}.\end{aligned}$$

现在取 $D=(0,1)\times(0,1)$ ，边界

$$v_D(x,y)=\begin{cases}1-(2x-1)^2, & y=0,1\\ 0, & \text{否则}\end{cases}$$

障碍物

$$v_{\mathrm{O}}(x,y)=\begin{cases}1, & |x-x_0|\le\frac{1}{4},|y-y_0|\le\frac{1}{4},\\ 0, & \text{否则}\end{cases}$$

其中 $(x_0,y_0)=(0.5,0.5)$. 给出障碍物圆心 (x_0,y_0) 在区域内移动时，各个最小曲面面积可以取到的最大值. 对这些结果进行分析，能得到什么样的结论吗？

References

[1] B.M.Averick, Richard G. Carter, Jorge J. Moré. The Minipack-2 test problem collection. Argonne Nation Laboratory. 1991.

[2] U.M. Ascher, R. M. M. Mattheij, and R. D. Russell, Numerical solution of boundary value problems for ordinary differential equations, Prentice Hall, 1988.

[3] R. Glowinski, Numerical method for nonlinear variation problem, SpaingerVerlag, 1984

[4] 刘红英，夏勇，周水生. 数学规划基础. 北京：北京航空航天大学出版社，2012.10.