



信息与计算机科学丛书 — 33

非线性微分方程多解计算的 搜索延拓法

陈传森 谢资清 著

 科学出版社
www.sciencep.com

信息与计算科学丛书 33

非线性微分方程多解计算的 搜索延拓法

陈传淼 谢资清 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

非线性微分方程的解与非线性结构的稳定性紧密相关,它可能有一个解,多个解,甚至无穷多个解,呈现复杂图景.本书提出一种新的计算方法——搜索延拓法(SEM)即搜索+延拓.对若干典型非线性情形,用SEM计算了许多解,分析了多解个数和结构,还提出某些猜想.此法简明易懂,能为物理、力学和工程学同行所接受.实践证明,它是强有力的方法.

本书前10章是用通俗易懂方式写的,有高等数学基础就可读懂.绪论包含多解问题的几个实例,搜索延拓法简介,所得结果的综述,想快速了解本书读绪论即可;第1~4章为准备知识,微分方程解的特征逼近,非线性方程组求解和非线性有限元方法,是准备知识;第5章介绍搜索延拓法;第6~9章分别研究奇非线性、一般非线性、偶非线性和有界非线性情形;第10章介绍计算研究1+3维(球对称)激光孤波,是物理、力学家所关心的内容.第11~12章介绍搜索延拓法的理论分析和非线性问题的变分学,是为计算数学和应用数学同行写的.

本书适合从事科学计算、应用数学、物理和力学及工程设计等人员阅读,对理工科研究生及高年级大学生也可作参考书.

图书在版编目(CIP)数据

非线性微分方程多解计算的搜索延拓法/陈传森,谢资清著. —北京:科学出版社, 2005

(信息与计算科学丛书, 33)

ISBN 7-03-015109-7

I. 非… II. ①陈… ②谢… III. 非线性方程:微分方程-计算方法 IV. O175

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第031990号

责任编辑:陈玉琢/责任校对:朱光光

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005年7月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2005年7月第一次印刷 印张: 13 1/2

印数: 1—3 000 字数: 250 000

定价: 34.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

《信息与计算科学丛书》序

20 世纪 70 年代末, 由已故著名数学家冯康先生任主编、科学出版社出版了一套《计算方法丛书》, 至今已逾 30 多册. 这套丛书以介绍计算数学的前沿方向和科研成果为主旨, 学术水平高、社会影响大, 对计算数学的发展、学术交流及人才培养起到了重要的作用.

1998 年教育部进行学科调整, 将计算数学及其应用软件、信息科学、运筹控制等专业合并, 定名为“信息与计算科学专业”. 为适应新形势下学科发展的需要, 科学出版社将《计算方法丛书》更名为《信息与计算科学丛书》, 组建了新的编委会, 并于 2004 年 9 月在北京召开了第一次会议, 讨论并确定了丛书的宗旨、定位及方向等问题.

新的《信息与计算科学丛书》的宗旨是面向高等学校信息与计算科学专业的高年级学生、研究生以及从事这一行业的科技工作者, 针对当前的学科前沿、介绍国内外优秀的科研成果. 强调科学性、系统性及学科交叉性, 体现新的研究方向. 内容力求深入浅出, 简明扼要.

原《计算方法丛书》的编委和编辑人员以及多位数学家曾为丛书的出版做了大量工作, 在学术界赢得了很好的声誉, 在此表示衷心的感谢. 我们诚挚地希望大家一如既往地关心和支持新丛书的出版, 以期为信息与计算科学在新世纪的发展起到积极的推动作用.

石钟慈

2005 年 7 月

前 言

现代科学技术中出现了大量的非线性微分方程,构成了非线性科学和非线性数学研究的核心内容之一,它向人们提出了一个重要而困难的问题:这些非线性方程可能有一个解,也可能有多个解,这些解有何种结构和分布,如何有效地数值计算这些解.这也是数学家、物理学家、力学家和科技工作者们共同关心的问题.

本书以较通俗易懂的方式介绍一种计算非线性微分方程多解(当然对惟一解情形也适用)的新方法——搜索延拓法.对若干典型的非线性方程具体计算研究了它们的多解,首次系统展示了这些多解的多姿多彩的曲线曲面图形,并对其结构和分布做了分析,提出了若干猜想.还特别详细地计算研究了1+3维球对称激光孤波(激光弹)的形状和解按指数衰减的特性,这是物理学、力学家特别关注的问题.对于那些想粗览本书的读者,只要阅读本书的绪论即可.本书最后两章介绍现代变分学(临界点理论)和搜索延拓法的理论分析,它们是为应用数学和科学计算的同行们而写的,跳过它们,对阅读本书前10章没有影响.

现代变分学(临界点理论)为研究非线性方程多解存在性提供了一种强有力的理论工具,由此也出现了3种相关的计算方法,但似乎有效性不强,很难为一般人所掌握.本书提出的搜索延拓法与这种理论无关,基本思想是一种分层逼近,方法是由两个部分组成:搜索+延拓.首先是用微分方程线性主部的特征基的有限组合,(用长方体法)搜索所有解的较好初值;然后在更多基的空间中用延拓法(也称同伦法)迭代得到更准确的解.具体计算时常采用(插值系数)有限元法完成.实践表明,搜索延拓法求解非线性方程是有效的、强有力的.由于此方法及其实现可部分地纳入数学物理中的Fourier级数展开(或称为谱逼近),故容易为科技工作者所理解和接受.作为准备知识,本书第2~4章介绍了特征展开,非线性方程组求解和有限元法,其中包含了许多实质的新内容,如长方体搜索法、(多启动)延拓法和插值系数有限元法等,它们是掌握新方法所必需的.特别是求解一般非线性方程组的多方体搜索法,当未知数不太多时(如3~8个),能搜索所有的实根,是非常有用的工具,就像人们有了放大镜一样,能观察到许多非线性的细微结构.我们常采用3基搜索(个别时候用4基搜索),在多数较简单情形对我们已基本上够用了.

本书第一作者研究有限元方法及其应用,特别是研究有限元的超收敛性已20多年.1998年与谢资清教授商议(她先学习有限元,后攻读非线性微分方程多解),研究多解计算这个难题.1999年作者进入国家基础研究发展规划项目(“973”)“大规模科学计算研究项目”时,就将多解计算确定为主要研究内容之一.经过5年努力,从新算法设计与完善、系统地计算大量的结果,到建立新方法的理论基础,经历了无数的酸甜苦辣.多解的多重性和不稳定性给计算带来了重重困难,的确很难为人所

知. 又由于此前面对要计算的多解是什么样子一无所知, 而计算中经常会发散或收敛到别的解, 有时感到无计可施. 然而也正是由于对科学的强烈好奇心, 驱使着我们不屈的努力探索, 才得以完成这本拙作.

当完成本书稿时, 我们心里满怀感激. 首先应该感谢国家自然科学基金委员会达近 20 年的资助, 感谢国家科技部重点基础研究计划给我们提供了现代的舞台. 我们也特别感谢“973”项目“大规模科学计算研究”项目组集体的鼓励和帮助, 团结共事 5 年, 从他们那里受益匪浅. 最后我们还应感谢湖南师范大学“211”重点学科和省校重点学科给予的巨大资助.

回忆几年的探索, 我们应感谢许多同行专家们热情帮助和鼓励, 这里首先有石钟慈院士、张恭庆院士、李大潜院士、林群院士和洪家兴院士等, 对我们的研究提出过宝贵意见的还有曹道民教授、张锁春教授、杜强教授、顾永耕教授、沈尧天教授和李亦教授等. 还要感谢两位年轻的物理学家郭弘教授和钱列加教授向我们介绍高维激光孤波的研究.

我们也应感谢一批批研究生对此项研究做出的努力, 他们有熊之光、雷丹、赵新中、潘青、肖春霞、吕勇、汤琼和黄灿等, 特别是徐云、陈妮两位女士出色的工作, 没有他们的辛勤劳动, 本书内容定将减色不少.

最后还要感谢科学出版社编辑陈玉琢女士为积极出版本书所做的巨大努力.

由于多解计算研究是一项探索性的工作, 撰写本书旨在抛砖引玉, 错误与疏漏之处定所难免, 祈望读者指正.

陈传森 谢资清

2004 年 10 月于长沙岳麓山

湖南师范大学

目 录

第 1 章 绪论	1
§1 若干多解实际问题	1
§2 计算多解的搜索延拓法	6
§3 本书主要计算研究结果的综述	10
第 2 章 微分方程解的特征逼近	17
§1 正交系与正交展开	17
§2 两点边值问题的特征逼近	22
§3 矩形域上的 Poisson 方程	25
§4 一般区域上的 2 阶椭圆问题	30
第 3 章 非线性方程组求解	33
§1 线性方程组 Gauss 消元法和共轭梯度法	33
§2 Newton 法及其变体	37
§3 延拓法(EM)	39
§4 多启动延拓法(MSEM)	41
§5 数例、解的吸引域	43
§6 搜索所有解的新算法——长方体法	46
第 4 章 有限元方法及其高精度计算	53
§1 解变分问题的 Ritz 法	53
§2 有限元法及高精度	56
§3 矩形元	61
§4 三角形元	65
§5 半线性问题的有限元和插值系数有限元法	69
§6 特征问题	72
第 5 章 计算多解的搜索延拓法	76
§1 国外 3 种算法概述	76
§2 搜索延拓法(SEM)	78
§3 使用 SEM 的若干注意和说明	82
第 6 章 单增奇非线性的计算研究	87
§1 正方形域上立方非线性情形	87

§2 三角形区域上立方非线性	97
§3 L 形区域上立方非线性	100
第 7 章 有无穷多解的一般情形	103
§1 混合三次五次非线性情形	103
§2 带参数的变号奇非线性	107
§3 主项为奇的非线性情形	111
§4 含奇异系数的立方非线性问题	116
第 8 章 偶非线性和变号情形	121
§1 2 次偶非线性 $f(u)=u^2-p$	121
§2 4 次偶非线性 $f(u)=u^2(u^2-p)$	127
§3 分叉点和重解的结构与计算	137
第 9 章 有界非线性情形	141
§1 奇有界 $f(u)=p^2\sin u$ 情形	141
§2 压杆弯曲的 Euler 问题	144
§3 偶有界 $f(u)=p^2\cos u$ 情形	147
第 10 章 激光传输与孤波计算研究	150
§1 常微分方程初值问题的有限元法	150
§2 非线性 Schrödinger 方程的两个守恒律	155
§3 1+3 维球对称激光的孤波与传输	157
第 11 章 搜索延拓法的理论分析	165
§1 Sobolev 空间和边值问题解的正则性	165
§2 线性非强制情形的研究	170
§3 半线性非凸情形解的正则性	173
§4 非凸情形有限元的收敛性和超收敛性	175
§5 半线性问题的插值系数有限元法	177
§6 临界点 Morse 指标的计算研究	182
第 12 章 非线性问题的变分学	187
§1 临界点问题研究的一般方法	187
§2 一般情形的多解结果	194
§3 奇非线性情形有无穷多解	198
§4 偶非线性情形	200
参考文献	202

第1章 绪 论

计算不仅仅只是作为验证理论模型的正确性的手段,大量的事实表明它已成为重大科学发现的一种重要手段……所有这一切都充分说明,科学计算和实验及理论三足鼎立,相辅相成,成为当今科学活动的三大方法.

石钟慈:“第3种科学方法——计算机时代的科学计算”

§1 若干多解实际问题

现代科学技术中出现的各种非线性微分方程,向非线性数学提出了严峻的问题:这些方程可能有一个解,也可能有多个解,它们的结构相当复杂.这些解具有何种性质和结构,如何数值上求解它们,尤其是用数值方法求非平凡解,这是具有挑战性的重要课题.它不仅帮助我们了解解的多重性问题,且有助于我们对其稳定性作出某些推测.关于物理学中的多种非线性方程,可参考文献 [45], [48].

本书主要讨论半线性椭圆边值问题

$$\Delta u + f(u) = 0 (\text{在 } \Omega \text{ 内}), \quad u = 0 (\text{在 } \Gamma \text{ 上}) \quad (1)$$

的多解(当然可以只有1个解,将简单些)及其数值计算,这里 $\Delta = D_x^2 + D_y^2$ 是 Laplace 算子, Γ 是区域 Ω 的边界.

首先简要地解释线性与非线性的重大差别,分析方程的差异和产生多解的原因.回忆熟知的特征问题

$$v'' + \lambda v = 0, \quad v(0) = v(\pi) = 0.$$

当 $\lambda = -k^2 < 0$ 时,方程有通解 $v = A \sinh kx + B \cosh kx$, 由边界条件 $v(0) = 0$ 确定 $B = 0$. 而边界条件 $v(\pi) = A \sinh(k\pi) = 0$, 因 $\sinh k\pi > 0$, 必有 $A = 0$, 即问题只有零解. 若 $\lambda = k^2 > 0$, 情形就不一样了. 这时方程的通解为 $v = A \sin kx + B \cos kx$, 由边界条件 $v(0) = 0$ 推出 $B = 0$, 而边界条件 $v(l) = A \sin kl = 0$. 为了得到非零解,充分必要条件是参数 $k = n = 1, 2, 3, \dots$, 这时特征值和特征函数分别为 $\lambda_n = n^2, \phi_k = A \sin nx$. 而对其他的 $k \neq n$, 仍只能得到零解.

现在考虑以下两个反号的立方非线性问题(带相同的边值 $u(0) = u(\pi) = 0$):

$$P_1: \quad u'' - u^3 = 0; \quad P_2: \quad u'' + u^3 = 0.$$

重写 $u^3 = (u^2)u$, 并与上述特征问题类比可知:两个方程只一个符号之差,问题 P_1 只有零解,而问题 P_2 却有无穷多个解(当然,如果限制此解为正,则仍只有1个

解). 为了解释后者有无穷多解的现象, 我们能够设想, 如果这里的 u^2 在某种平均的意义下接近某个整数 n^2 , 就有可能产生正反两个非零解. 由于 $|u|$ 可以变化到无穷, 就可能产生无穷多个非零解. 我们在第 2 章能具体计算这些多解, 从而证实此想法的合理性. 这种直觉加深了我们对多解的理解, 开拓了思路. 这段说明既解释了为什么会产生多解, 同时也提示了我们将提出的新的计算方法——搜索延拓法 (SEM).

在现代非线性科学中这种分叉和多解现象广为出现. 下面简要介绍几个实际问题.

1.1 结构的稳定性. 压杆弯曲的 Euler 问题

细杆受压是材料力学中最简单而重要的问题. 早在 200 多年前 Euler 提出了细杆纵向受压的稳定性问题. 设杆在 x 轴的 $(0, l)$ 上, 一端固定, 另一端加纵向压力 P . 此力不大时, 杆只有微小压缩变形, 不会弯曲. 当 P 大到一定程度时, 会发生戏剧性变化. 设杆有微小横向位移 $u \neq 0$, 而成为挠曲轴, 其弧长为 s , 挠曲轴的切线与 x 轴的交角是 θ , 挠曲轴的曲率为 $\mu = \frac{d\theta}{ds}$. 在压力 P 作用下产生弯矩 Pu , 细杆弯曲变形与其曲率 $\mu = \frac{d\theta}{ds}$ 成正比, 则细杆的弯曲方程为

$$EI\mu(s) + Pu = 0, \quad u(0) = u(l) = 0, \quad k = \sqrt{P/EI}. \quad (2)$$

若讨论小形变 $u_x \approx 0$, 则曲率 $\mu = u''(1 + u_x^2)^{-3/2} \approx u''$, 它简化为线性方程 $EIu'' + Pu = 0$, 其通解为 $u = B \cos(kx) + C \sin(kx)$, 由满足边界条件 $u(0) = u(l) = 0$ 可知, $B = 0$, 且 $C \neq 0$ 的充分必要条件是 $kl = n\pi (n = 1, 2, \dots)$, 即要求 $P = P_n = EI(n\pi/l)^2$, 这里最小的 $P_c = P_1$ 称为 (第 1) 临界压力, 常数 C 可正可负 (不能确定其大小), 故有 3 种可能的解: 正解、负解和零解. 我们在现实生活中常能看到这种不稳定导致弯曲的现象 (如 $n = 1$). 但是实际观察到的情形是: 1) 即使压力 $P > P_1$, 这种弯曲仍存在, 是稳定的; 2) 弯曲线的拱高 C 是惟一确定的, 不可能任意, 它随着 P 的增大而逐渐增加. 这两种现象均为上述线性模型所不能解释的.

为了消除这两个不合理, 我们应该回到原来的非线性问题. 上式对弧长 s 微分一次, $\frac{d\mu}{ds} = \frac{d^2\theta}{ds^2}$, 并利用 $u'(s) = \sin \theta$ 得到一个半线性方程 (限于考虑两端简支情形)

$$\theta''(s) + k^2 \sin \theta = 0, \quad \theta'(0) = \theta'(l) = 0, \quad (3)$$

这里边界端点是简支, 由方程 (2) 知其曲率为 $\mu = \frac{d\theta}{ds} = 0$. 利用 $\theta(s)$, 从等式 $x'(s) = \cos \theta$, $u'(s) = \sin \theta$ 可积出 $\{u, x\}$. 准确求解此问题较复杂, 要用到第 1 类椭圆积分, 其结果是: 当 $P > P_1$ 时, 它仍有两个非零解, 其幅度的大小是确定的, 与 P 有关. 这就解决了压杆的弯曲问题, 因此 Euler 提出的细杆轴向受压的弯曲不稳

定问题是历史上第 1 个多解的典型例子, 它也是因参数 P 的变化使解的个数发生改变的一种分叉现象.

但是我们在第 9 章对此问题的数值计算表明, 当 P 继续增大时, 此非线性方程还有多波的变号解, 它们可能很不稳定, 但毕竟是存在的. 在实际生活中, $n > 1$ 的多波弯曲现象似乎难以理解, 但它在很特定的条件下存在, 可能更不稳定. 在 20 世纪对薄壁圆筒所做的轴向加压的破坏试验中, 就观察到薄壁圆筒产生的多波皱折型变形, 很像是形如 $\sin nx (n > 1)$ 的解.

在各种复杂的力学结构设计中, 这种分叉和多解现象更是广泛出现. 许多现代结构, 如高层建筑、飞机、轮船等, 都是以框架为承载主体的复杂结构, 框架本身是由许多杆件连接而成, 因此它们也存在因受压或部分受压而导致失稳, 这是设计者特别关心的问题. 对那些由非线性本构关系而建立的结构问题, 情形更为复杂.

1.2 天体物理中的微分方程

天体物理中出现 3 维空间 $\mathbb{R}^3$ 中的半线性椭圆问题

$$\Delta u + K(x)f(u) = 0 \text{ (在 } \mathbb{R}^3 \text{ 内)}, \quad u(\infty) = 0. \quad (4)$$

早在 1869 年 H. Lane 计算太阳表面的温度和质量密度时导出了此方程, 这里 $K = 1$, $f(u) = |u|^{p-1}u$, u 是引力位势, p 是多方指数, 称为 Lane-Emden 方程. 它是研究星球内部结构在自由磁场作用下的磁流体动力学方程. 为考虑星球团的动力学, A. S. Eddington(1915) 和 T. Matukuma(1930) 先后分别改进为

$$K(x)f(u) = e^{2u}/(1 + |x|^2), \quad K(x)f(u) = |u|^{p-1}u/(1 + |x|^2).$$

星球总质量为 $M = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} K(x)f(u)dx.$

为了简化, 考虑球对称情形, 在球坐标变换下化为具奇异系数的 2 阶常微分方程

$$u'' + 2r^{-1}u' + K(r)f(u) = 0, \quad u(0) = a > 0, \quad u'(0) = 0, \quad (5)$$

许多学者寻求它的解析解. 对 Lane-Emden 方程, Chandrasekhar(1967) 发现了 3 种可解情形: $p = 0, 1, 5$. 以后人们还发现了其他情形. 对 Matukuma 方程, 1938 年 Matukuma 本人对 $p = 3$ 和初值 $a = \sqrt{3}$ 的情形找到了一个特解 $u = \sqrt{3/(1+r^2)}$. 他还提出了以下 3 个猜想 (对任意的 $a > 0$):

- 1) 若 $p < 3$, 解 $u(x)$ 有有限的零点 (即解在有限远处将变号);
- 2) 若 $p = 3$, 解 $u(x)$ 是整体正解, 总质量有限;
- 3) 若 $p > 3$, 解 $u(x)$ 是整体正解, 总质量无限.

数十年后, 才出现 W. M. Ni-S. Yotsutani^[52], Y. Li(李亦)-W. M. Ni^[44] 等人的一系列数学研究工作. 他们首先证明了 Eddington 方程没有任何整体正解, 显然

是非线性项按指数增长坏了事. 注意对 $d = 3$ 维情形, Sobolev 临界指标是 $p = (d+2)/(d-2) = 5$. 他们对 Matukuma 方程及 $a > 0$, 在某些限制下证明了上述猜想 (由此看来 Matukuma 方程是更好的物理模型):

- 1) 若 $1 < p < 5$, 对充分大 $a > 0$, 解 $u(x)$ 有有限的零点 (即有变号解);
- 2) 若 $1 < p < 5$, 则存在一个 $a^* > 0$, 解 $u(x)$ 在 $[0, \infty)$ 中为正, 在无穷远处快速衰减 $u(r) = O(r^{-1})$, 且总质量有限;
- 3) 若 $1 < p < 5$, 对任意充分小的 $a > 0$, 解 $u(x)$ 是整体正解, 在无穷远处很慢衰减 $u(r) = O((\ln r)^{-1/(p-1)})$, 且总质量无限;
- 4) 若 $p \geq 5$, 对每个充分小的 $a > 0$, 解 $u(x)$ 整体为正, 很慢衰减如 3), 且总质量无限.

此外, 在各种不同的假设下, 许多作者还研究了正解、变号解、多个 (甚至无穷多个) 正解等问题, 得到了许多有趣的结果, 这里不再赘述.

1.3 超导中的 Ginzburg-Landau 方程

设 Ω 是 3 维有界域, 具有边界 Γ . 记 ψ 是复值序 (order) 参数, A 为磁位势, $\text{curl } A$ 是磁场, α, β 是与空间变量 x 无关的常数, e_s 和 m_s 分别是电子的电荷与质量 (超导的电荷载体). 在应用场 H_0 的作用下, Gibbs 自由能写为

$$E(\psi, A) = \int_{\Omega} \left(f_n + \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 \right) dx \\ + \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2m_s} \left| \left(i\hbar \nabla + \frac{e_s A}{c} \right) \psi \right|^2 + \frac{|\text{curl } A|^2 - 2\text{curl } A H_0}{8\pi} \right\} dx,$$

这里 c 是光速, $2\pi\hbar$ 是 Planck 常数. 引进因次常数后, 它变形为

$$E(\psi, A) = \int_{\Omega} \left\{ |(\nabla - iA)\psi|^2 + \frac{k^2}{2} (1 - |\psi|^2)^2 + |\text{curl } A - h_0|^2 \right\} dx, \quad (6)$$

这里 k 是 Ginzburg-Landau 参数, 它表示磁场渗透深度与相关长度之比, h_0 是应用磁场. 利用变分极小原理, 其相应的 Euler 方程就是著名的 Ginzburg-Landau 方程组 (1950)

$$-(\nabla - iA)^2 \psi = k^2 \psi (1 - |\psi|^2),$$

$$-\text{curl curl } A = |\psi|^2 A + \frac{i}{2} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (7)$$

并在 Γ 上补充边界条件 (n 为边界 Γ 的外法线方向)

$$(\nabla \psi - iA\psi) \cdot n = 0, \quad \text{curl } A = h_0,$$

规范 (gauge) 和约束条件

$$\operatorname{div} A = 0 (\text{在 } \Omega \text{ 内}), \quad A \cdot n = 0 (\text{在 } \Gamma \text{ 上}).$$

此问题的解一般有 $0 \leq |\psi| \leq 1$. G-L 模型有几种特殊的解族:

- 1) 正常解 $\psi = 0, \operatorname{curl} A = h_0$, 超导性被破坏了 (没有超导性);
但按照参数 k, d 和 h_0 的不同, G-L 方程还可能有其他的解;
- 2) 超导解, $\psi \neq 0$. 这是最吸引人的情形, 特别是 Meissner 状态 $|\psi| = 1$;
- 3) 涡旋解, ψ 孤立为零.

自从发现一系列材料在远高于绝对零度的温度下具有超导性以来, 科学家对超导问题进行了积极热情的研究. Ginzburg 和 Abrikosov 因提出超导 G-L 模型和研究涡旋态理论而获 2003 年度诺贝尔物理奖, 因此 G-L 理论对物理学有深远影响. 当然本书作者无力介绍这些研究. 但按本书论题应该提到的是, 超导性中也出现了多解问题. 对不同的 k, d , 分叉图可分为 4 个不同类型的区域. 对固定的参数 k, d, h_0 而言, 问题可能有多个解, 其中有些解是稳定的 (全局的和局部的), 有些解可能不稳定. 用科学计算作为第 3 种科学研究方法, 我国学者杜强 (Du Qiang), Gunzburger 和 Aftalion 等 [3, 28~30] 做了一系列出色的探索工作.

1.4 量子力学中的非线性 Schrödinger 方程

在量子物理中最基本的方程是著名的 Schrödinger 方程组

$$i w_t = \Delta w + |w|^{p-1} w - a(x)w, \quad (8)$$

这里 $w = u + vi$ 是电场强度 (复函数), 它描述例如非线性光学、晶体、凝聚态物质等现象, 这里用非线性项模拟了多质点间的相互作用. 本书具体讨论了激光孤波 (光弹).

仿照文献 [58], 讨论 1(时间)+3(空间) 维激光自由传输问题. 激光的电场强度 $E = E_1 + iE_2$ 满足非线性 Schrödinger 方程

$$2iK \left(D_z + \frac{1}{c} D_t \right) E + D_x^2 E + D_y^2 E - K D_\omega^2 K D_t^2 E + 2K^2 \frac{n_2}{n_0} |E|^2 E = 0, \quad (9)$$

其中折射指数 $n = n_0 + n_2 |E|^2$, 光速 c , 振动频率 $\omega, K = K(\omega)$ 是与 ω 有关的参数. E 是复函数, 但只有模 $|E|$ 才有物理意义.

在奇异散射情形, $b^2 = -D_\omega^2 K > 0$, 上式乘 $\sqrt{n_2/n_0}$, 并取未知数 $U = \sqrt{n_2/n_0} E$ 作变数代换 $\tau = (t - z/c) \sqrt{K/b}$, $(\xi, \eta, \zeta) = (Kx, Ky, Kz)$, 两端除以 K^2 , 原方程变为规范形式 (无因次) 的 Schrödinger 方程

$$iU_\zeta + \frac{1}{2}(U_{\xi\xi} + U_{\eta\eta} + U_{\tau\tau}) + |U|^2 U = 0, \quad (10)$$

其中 τ 代表相对时间. 当 $\tau = 0$ 时, $z = ct$. 表明相对坐标系沿着 z 轴以光速 c 做平移运动. 考虑球对称解, 取 $r^2 = \xi^2 + \eta^2 + \tau^2$, 上式化为球对称形式 (含奇异系数)

$$iU_{\zeta} + \frac{1}{2}\left(U_{rr} + \frac{2}{r}U_r\right) + |U|^2U = 0, \quad U(r, 0) = U(r). \quad (11)$$

容易直接验证, 解有如下一个非常重要的变换性质: 若 $U(r, \zeta)$ 是此方程的解, 则 $aU(ar, a^2\zeta)$ 仍是此方程的解. 在计算中我们多次使用了这个性质. 为了规范化计算, 总可选择此常数 a , 使得 $U(0, 0) = 1$.

仿照 Silberberg 寻找谐波型特解 $U = U(r) \exp(-i\lambda\zeta + i\epsilon_0)$, 这里可认为 $U(r) \geq 0$ 是非负函数, 它满足如下非线性具奇异系数的特征常微分方程

$$U_{rr} + \frac{d-1}{r}U_r - 2\lambda U + 2U^3 = 0, \quad U(0) = 1, U(\infty) = 0. \quad (12)$$

为计算此问题, 我们面临 5 大困难: 非线性、无界域、奇异系数、未知的特征值, 还要求解非负, 并在无穷远为零, 因此在如此多的限制下, 问题求解很不容易. 本书第 10 章第 3 节详细研究此问题, 准确计算了孤波曲线, 它是按指数函数快速衰减的, 我们很准确地计算了这个衰减指数, 这是科技工作者很感兴趣的问题.

这种立方非线性方程本来是产生多解的重要来源之一, 但激光需要解的模 $U = |w|$, 它是惟一的正解. 在沈尧天和严树森的专著^[56]中还列举了物理中产生多解的其他几个实际例子.

§2 计算多解的搜索延拓法

为了按变分法思想研究, 我们应将半线性问题 (1) 写为弱形式. 对区域 Ω 上函数 u 及其所有 1 阶偏导数都平方可积的函数类, 规定其内积和范数分别为

$$(u, v)_1 = \int_{\Omega} (uv + DuDv)dx, \quad \|u\|_{1, \Omega} = \left\{ \int_{\Omega} (u^2 + |Du|^2)dx \right\}^{1/2},$$

则构成 Sobolev 空间 $H^1(\Omega)$. 若函数还在 Ω 的边界 Γ 上为零, 则组成了子类 (子空间)

$$u \in S_0 = \{v \in H^1(\Omega), u = 0 \text{ 在 } \Gamma \text{ 上}\}.$$

对非线性问题 (1), 考虑相应的非线性泛函 (能量)

$$E(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |Du|^2 - F(u) \right) dx, \quad F(u) = \int_0^u f(t) dt, \quad (13)$$

若 $u \in S_0$, 使得 $E(u)$ 的 1 阶变分为零, 即满足如下变分方程:

$$\left. \frac{dE(u + tv)}{dt} \right|_{t=0} = DE(u, v) \equiv (Du, Dv) - (f(u), v) = 0, \quad v \in S_0, \quad (14)$$

称为 $E(u)$ 的临界点, u 称为问题 (1) 的 (弱) 解, 这里 $v \in S_0$ 是任意函数. 若用任意 $v \in S_0$ 乘方程 (1) 后并在 Ω 上积分, 利用 Green 公式, 也可得到此方程. 但这是一种弱形式, 只要求 $u \in S_0$ 即可, u 可以没有 2 阶导数. 减弱这种要求在理论上和计算上都大有好处.

为了研究非线性方程的解 (包括多解), 在过去 30 多年, 现代变分学 (临界点理论) 中发展了一种抽象的强有力的理论方法, 极大极小方法或爬山定理, 并证明了许多重要的结果, 见 M.Struwe 的著作 [59]. 当然理论研究并不能具体给出这些解, 但却隐含着一种逼近的思路. 基于这种思路, 在近 10 年出现了 3 种相关的计算方法:

- (i) 山路算法 (MPA) [23,24].
- (ii) 高环绕算法 (HLA) [27].
- (iii) 最大最小算法 (MNA) [43].

在某些限制下它们都能计算出若干个多解. 但对于非奇非线性情形, 看来没有人计算超过 4 个解, 似乎方法的有效性并不很高, 也难为一般人所接受. 由于高 Morse 指标临界点的多重性和不稳定性, 多解的计算遇到了本质的困难.

我们首次提出一种新的搜索延拓法 (Search-Extension Method, SEM) [10], 它与上述理论和算法无关. 要寻找非线性方程的多解就像大海捞针. 但是经过许多计算和分析, 发现多解常常是孤立的或成片集结的, 这就有可能将大问题分层地化为许多局部的小问题来解决, 即分而治之, 因此我们做如下

基本假定 设方程 (14) 的解 u 是孤立的, 即在 $u \in S_0$ 的某半径为 δ 的邻域

$$N_\delta(u) = \{w: w \in S_0, \|w - u\|_1 < \delta\}$$

中, 问题 (14) 再没有别的解.

搜索延拓法的思路很简明朴素: 首先用若干个基的组合搜索到近似解 $u_0 \in S_0$, 它能落在此孤立解的邻域 $N_\delta(u)$ 内, 然后在更多基张成的空间中用延拓法迭代逼近得到更准确的解. 思路是简明的, 但实现却并非易事, 要克服很多困难. 我们简述其做法如下:

首先引进方程 (1) 的线性主部 $-\Delta\phi$ 的特征问题: 寻求特征对 $\{\lambda_j, \phi_j\}$ 满足

$$-\Delta\phi_j = \lambda_j\phi_j \text{ (在 } \Omega \text{ 内)}, \quad \phi_j \in S_0. \quad (15)$$

假定特征值为 $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots \rightarrow \infty$, 相应的特征函数 $\{\phi_j\}_1^\infty$ 组成完备的规范化正交系, 即

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}, \quad A(\phi_i, \phi_j) = \lambda_j\delta_{ij},$$

这里 δ_{ij} 是 Kronecker 符号, 当 $i \neq j$ 时 $\delta_{ij} = 0$, $\delta_{jj} = 1$. 记有限个特征基张成有限维子空间

$$S_N = \text{span}\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}, \quad S = S_\infty.$$

众所周知, 对任何函数 $u \in S_0$ (当然可以是解) 总能用特征基的有限级数逼近

$$u^{(N)}(x) = \sum_{j=1}^N a_j \phi_j(x) \in S_N. \quad (16)$$

为求方程的解 u , 即确定这些 Fourier 系数 $a = a(N) = \{a_1, a_2, \dots, a_N\}$, 将 (16) 式代入 (14) 式中, 取 $v = \phi_i$ 得到

$$F_i(a) = \lambda_i a_i - g_i(a) = 0, \quad g_i(a) = (f(u^{(N)}), \phi_i), \quad i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (17)$$

这是一个非常复杂的非线性方程组. 当 N 很大时, 要求得此方程组的所有根是非常困难的, 目前几乎不可能. 我们只能取若干个基, 然后用长方体算法 (Cuboid Algorithm) 搜索得到它的所有根. 实际计算表明, 对每个固定的解而言, 只要用少数几个基或参数就能得到解的较好近似值, 能抓住解的基本形状, 因此用若干个基的组合搜索初值作为新算法的第 1 步是非常合适的 (但无法预先判断是否已进入了此孤立解的邻域). 但是当增加很多的基时, (由于高频分量) 计算变得不稳定, 精度的改进也缓慢下来. 为了进一步逼近某个解, 必须采用别的方法 (如有限元法).

大量的实际计算表明, 这里存在着相互制约的困难和矛盾: 一方面, 为了搜索到较好的初值, 应尽量使用较多的基, 但是目前没有好的算法. 用长方体法在微机上只能搜索 3~5 个未知数, 因此对有些复杂的问题, 这样提供的初值未必已经进入了孤立解的小邻域; 另一方面, 由于初值可能不好, 给精确化的计算带来了极大困难, 迭代计算常常发散或收敛到其他的解. 我们不得不使用延拓法 (EM), 甚至将它改进为多启动延拓法 (MSEM). 但是这两者相比, 如何做好第 1 步是最本质最重要的.

基于这些考虑, 我们提出搜索延拓法 (SEM)^[17,18], 它由三层子空间 $S_{n_0} \subset S_n \subset S_N$ 上的 3 种算法组成如下:

第 1 步 在小 $n_0 < n$ 的子空间 S_{n_0} 中搜索所有的初值.

若 λ_l 是 k 重特征值, 用 $S_k^* = \text{span}\{\phi_l, \phi_{l+1}, \dots, \phi_{l+k-1}\}$ 记相应的特征函数张成的子空间. 要求 $S_k^* \subset S_{n_0}$, 在最简单的情形可取最少的基, $n_0 = k$. 我们将第 l 层水平的逼近解 $u_l = \sum_{j=l}^{l+k-1} a_j \phi_j \in S_k^*$, 由 (17) 式得到 k 个未知数 $a(k) = \{a_l, a_{l+1}, \dots, a_{l+k-1}\}$ 的非线性代数方程组

$$\lambda_i a_i = g_i(a(k)), \quad i = l, l+1, \dots, l+k-1. \quad (18)$$

因为 k 不大, 它的所有非零根 $a^0(k) = \{a_l^0, a_{l+1}^0, \dots, a_{l+k-1}^0\}$ 能用简单算法搜索得到 (多方体搜索法, 见第 2 章). 于是我们对每个根 $a^0(k)$ 得到一个粗糙的初值 $u_l \approx \sum_{j=l}^{l+k} a_j^0 \phi_j \in S_k^*$. 在某些困难情形应当增加基的数目, $n_0 > k$, 以便搜索出更多更

好的初值. 这是整个计算中关键的一步. 其目的是分离出所有第 l 层水平的解, 并确定它们的粗糙位置.

第 2 步 用延拓法 (甚至多启动延拓法) 进一步逼近某个所需的解 $u_l \in S_n$.

我们取更多的待定参数 $a = a(n) = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, 并由 (17) 式得到另一个非线性方程组

$$F_i(a) = \lambda_i a_i - g_i(a) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (19)$$

以第 1 步得到的 $a^0(n) = \{0, \dots, 0, a_l^0, a_{l+1}^0, \dots, a_{l+k-1}^0, 0, \dots, 0\}$ 作为初值. 它能用大范围收敛的迭代 $a^{j+1} = T(a^j)$ 近似地 (不必准确地) 解决, 例如用延拓 Newton 迭代. 设 $F(a) = \{F_1(a), F_2(a), \dots, F_n(a)\}^T$ 和 $DF(a)$ 分别表示矢量函数和它的导数矩阵. 我们构造一个延拓方程

$$H(a, a^0; t) \equiv tF(a) + (1-t)DF(a^0)(a - a^0)^T = 0, \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (20)$$

用 $a(t)$ 表示它的延拓解. 显然 $a(0) = a^0$ 满足 $t = 0$ 时的方程 (20), 并且 $a(1)$ 设想为原方程 (19) 的解. 为求解此方程, 用节点 $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_m = 1$ 剖分区间 $(0, 1)$, 并在 S_n 中用 Newton 迭代法逐个求解以下子问题:

$$P_i: H(a^i; t_i) = t_i F(a^i) + (1 - t_i) DF(a^{i-1})(a^i - a^0)^T = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (21)$$

以后取子问题 P_i 的解 a^i 作为下一个子问题 P_{i+1} 的解 a^{i+1} 的初值, 最后得到所需的解是 $a(1) = a^m$.

我们看到, 第 2 步类似在 n 维子空间 S_n 中沿着一条从 a^0 到某个临界点 a^* 的特定道路的爬山法.

第 3 步 在最大的子空间 S_N 中, 用 Newton 法求解目标方程组 (17), 以第 2 步得到的解作为初值 $a^0(N) = \{a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*, 0, \dots, 0\}$.

应当指出, 如果 Ω 是一般区域, 特征问题 (15) 能用较粗网格上的 2 次有限元求解, 在 Matlab 中有专门的语句 `eig(A)` 得到特征值和特征向量. 应当强调, 在第 2 和 3 步中我们宁愿分别用粗网和细网格上的插值系数 2 次有限元求解, 它不仅是解半线性问题最经济的算法, 而且在节点上可获得高精度的节点值 (超收敛性).

上述 SEM 是强有力的和实用的. 我们计算了许多问题, 对不同的方程 (主要是 $f(u)$ 不同) 和区域, 得到较丰富的数值结果. 我们分析了这些结果, 发现若干有趣的现象和性质. 基本的认识是: 非线性问题的多解的分布与结构是非常复杂的, 它所产生的多解 (甚至无穷多解) 比现有的理论上得到的成果 (指在 Struwer 的专著 [59] 中综述的结果) 更丰富多彩. 根据对计算结果的分析, 我们提出了几个重要的猜想以供进一步的计算研究和理论分析. 我们希望本研究能对非线性问题的多解和结构勾画出一幅较清晰的图景, 以促进非线性数学和非线性科学的研究.