

非线性常微分方程组特征值和特征向量的数值计算方法*

张 锁 春

(中国科学院应用数学研究所)

A NUMERICAL COMPUTATION METHOD OF THE EIGENVALUE AND EIGENVECTOR OF NONLINEAR ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS

Zhang Suo-chun

(Institute of Applied Mathematics, Academia Sinica)

Abstract

In this paper, we describe the complete algorithm for numerical computation of the eigenvalue and eigenvector of nonlinear ordinary differential equations. It includes algorithm formulation and example analysis.

一、问题提出

在科学研究和工程问题中常遇到非线性常微分方程组特征值和特征向量的问题。例如,对一般的反应扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + f(u), \quad (1.1)$$

其中 $u \in R^n$, D 是 $n \times n$ 矩阵, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$, $f: R^n \rightarrow R^n$. 要求它的行波解:

$$u(\theta, t) = u(\xi), \quad \xi = \theta - \rho t,$$

ρ 是行波速度。问题就归结为寻找常微分方程组

$$-\rho u = Du'' + f(u) \quad (1.2)$$

的特征值 ρ 和特征向量 $u(\xi)$ 的问题了。困难在于一是非线性,二是有 $N+1$ 个未知数 $(u(\xi), \rho)$, 但只有 N 个方程。如何求得此解不得不求助于数值计算。那末进一步要问采

用什么数值方法来进行计算呢? 据作者了解大致有两种类型的方法: 一是对离散化后所得到的非线性方程组进行整体迭代, 在其迭代过程中临时固定某一个未知量(除 ρ 外), 而固定的分量最好是知道在解曲线上的^[1]; 二是将常微分方程组的边值问题转化成初值问题, 采用打靶法来试验^[2]。这两种方法在实际进行数值计算时都遇到如何控制和调整的困难。本文提出的方法可算是第三种类型的方法。此方法的基本想法是直接从常微分方程组的边值问题出发, 增加一个“合理”的方程, 以保证未知数个数和方程个数相一致。

为了清楚起见, 我们以 Brusselator 在周期边界条件下求行波解为例来说明。问题可归结为^[3]:

$$\begin{cases} D_1 x'' + (B-1)x + A'y + H(x, y) = -\rho x', \\ D_2 y'' - Bx - A^2 y - H(x, y) = -\rho y', \end{cases} \quad (1.3)$$

其中

$$H(x, y) = \frac{B}{A}x^2 + xy(2A + x), \quad x' = \frac{d}{d\xi}, \quad A, B, D_1 \text{ 和 } D_2 \text{ 是给定的正常数.}$$

周期边界条件为

$$\begin{pmatrix} x(\xi) \\ y(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x(\xi + 2\pi) \\ y(\xi + 2\pi) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x'(\xi) \\ y'(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x'(\xi + 2\pi) \\ y'(\xi + 2\pi) \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

二、数值方法

将区间 $[0, 2\pi]$ 离散, 取 N 等分, $h = \frac{2\pi}{N}$ 。近似地取 $x_i \approx x(ih)$, $y_i \approx y(ih)$ 。用中心差商代替微商, 则对 (1.3) 离散化后所得的差分方程为

$$\begin{aligned} D_1 \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2} + (B-1)x_i + A^2 y_i + H(x_i, y_i) &= -\rho \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h}, \\ D_2 \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - Bx_i - A^2 y_i - H(x_i, y_i) &= -\rho \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$(i = 1, 2, \dots, N).$$

边界条件 (1.4) 化为

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_N \\ y_N \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{N+1} \\ y_{N+1} \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

令 $\tilde{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, $\tilde{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)$, 由 (2.1)–(2.2) 联立组成 $2N$ 个方程组:

$$\begin{aligned} F_i(\tilde{x}, \tilde{y}, \rho) &= \left(D_1 + \frac{\rho}{2}h\right)x_{i+1} - (2D_1 + h^2 - Bh^2)x_i + \left(D_1 - \frac{\rho}{2}h\right)x_{i-1} \\ &\quad + h^2 H(x_i, y_i) + A^2 h^2 y_i = 0, \\ G_i(\tilde{x}, \tilde{y}, \rho) &= \left(D_2 + \frac{\rho}{2}h\right)y_{i+1} - 2D_2 y_i - A^2 h^2 y_i + \left(D_2 - \frac{\rho}{2}h\right)y_{i-1} \\ &\quad - h^2 H(x_i, y_i) - Bh^2 x_i = 0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$i = 1, 2, \dots, N.$$

(2.3) 是含有 $2N + 1$ 个未知量 $x_1, x_2, \dots, x_N, y_1, y_2, \dots, y_N, \rho$ 的 $2N$ 个非线性方程组, 必须迭代求解. 为此首先要作线性化处理. 我们试验了三种不同的线性化方法, 采用追赶迭代形式. 先从 $F_i(\tilde{x}, \tilde{y}, \rho) = 0$ 中求出 x_i , 后从 $G_i(\tilde{x}, \tilde{y}, \rho) = 0$ 中求出 y_i , 再由 ρ 来控制整体的迭代修正. 为了保证和加速收敛速度, 采用增加附加项的技巧^[4], 详细说明如下:

1° 线性化处理

对 (2.3) 作三种不同的线性化处理:

$$a) \begin{cases} \left(D_1 + \frac{\rho}{2} h \right) x_{i+1}^{(s+1)} - (2D_1 + h^2 - Bh^2)x_{i+1}^{(s+1)} + \left(D_1 - \frac{\rho}{2} h \right) x_{i-1}^{(s+1)} \\ \quad = -h^2 H(x_i^{(s)}, y_i^{(s)}) - A^2 h^2 y_i^{(s)}, \\ \left(D_2 + \frac{\rho}{2} h \right) y_{i+1}^{(s+1)} - (2D_2 + A^2 h^2)y_{i+1}^{(s+1)} + \left(D_2 - \frac{\rho}{2} h \right) y_{i-1}^{(s+1)} \\ \quad = h^2 H(x_i^{(s+1)}, y_i^{(s)}) + Bh^2 x_i^{(s+1)}, \end{cases} \quad (2.4)$$

$$b) \begin{cases} \left(D_1 + \frac{\rho}{2} h \right) x_{i+1}^{(s+1)} - \left\{ 2D_1 + h^2 - h^2 \left[B + \frac{B}{A} x_i^{(s)} + y_i^{(s)}(2A + x_i^{(s)}) \right] \right\} x_{i+1}^{(s+1)} \\ \quad + \left(D_1 - \frac{\rho}{2} h \right) x_{i-1}^{(s+1)} = -h^2 A^2 y_i^{(s)}, \\ \left(D_2 + \frac{\rho}{2} h \right) y_{i+1}^{(s+1)} - \left\{ 2D_2 + h^2 [A^2 + x_i^{(s+1)}(2A + x_i^{(s+1)})] \right\} y_{i+1}^{(s+1)} \\ \quad + \left(D_2 - \frac{\rho}{2} h \right) y_{i-1}^{(s+1)} = h^2 x_i^{(s+1)} \left(B + \frac{B}{A} x_i^{(s+1)} \right), \end{cases} \quad (2.5)$$

$$c) \begin{cases} \left(D_1 + \frac{\rho}{2} h \right) x_{i+1}^{(s+1)} - \left\{ 2D_1 + h^2 - h^2 \left[B + 2 \frac{B}{A} x_i^{(s)} + y_i^{(s)}(2A + x_i^{(s)}) \right. \right. \\ \quad \left. \left. + x_i^{(s)} y_i^{(s)} \right] \right\} x_{i+1}^{(s+1)} + \left(D_1 - \frac{\rho}{2} h \right) x_{i-1}^{(s+1)} = -h^2 \left(A^2 y_i^{(s)} - \frac{B}{A} x_i^{(s)} - x_i^{(s)} y_i^{(s)} \right), \\ \left(D_2 + \frac{\rho}{2} h \right) y_{i+1}^{(s+1)} - \left\{ 2D_2 + h^2 [A^2 + x_i^{(s+1)}(2A + x_i^{(s+1)})] \right\} y_{i+1}^{(s+1)} \\ \quad + \left(D_2 - \frac{\rho}{2} h \right) y_{i-1}^{(s+1)} = h^2 x_i^{(s+1)} \left(B + \frac{B}{A} x_i^{(s+1)} \right) \end{cases} \quad (2.6)$$

其中 (s) ——表示迭代次数.

2° 追赶迭代形式

将 (2.4)–(2.6) 写成统一的追赶迭代形式

$$W_i^{(s+1)} = P_i^{(s)} - Q_i^{(s)} W_{i+1}^{(s)} \quad (i = N, \dots, 1), \quad (2.7)$$

而

$$\begin{cases} P_i^{(s)} = \frac{\bar{D}_i^{(s)} - \bar{A}_i^{(s)} P_{i-1}^{(s)}}{\bar{B}_i^{(s)} - \bar{A}_i^{(s)} Q_{i-1}^{(s)}}, \\ Q_i^{(s)} = \frac{\bar{C}_i^{(s)}}{\bar{B}_i^{(s)} - \bar{A}_i^{(s)} Q_{i-1}^{(s)}} \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (2.8)$$

这甲 $\bar{A}_i^{(s)} = A_i^{(s)}$, $\bar{B}_i^{(s)} = B_i^{(s)} - I_i$, $\bar{C}_i^{(s)} = C_i^{(s)}$, $\bar{D}_i = D_i^{(s)} - I_i$. 迭代过程中增加的附加项为 $I_i(W_i^{(s+1)} - W_i^{(s)})$, $I_i = R^i$, R 是个特定的试验常数, W 表示 x 或 y . 考虑到周

期边界条件, 则 $A_i^{(s)}$, $B_i^{(s)}$, $C_i^{(s)}$ 和 $D_i^{(s)}$ 分别对 x 和 y 表示为

$$\text{对 } x: \begin{cases} \bar{A}_1^{(s)} = 0, \\ \bar{A}_i^{(s)} = D_1 - \frac{\rho^{(s)}}{2} h, \quad i = 2, \dots, N, \\ \bar{B}_i^{(s)} = B_i^{(s)} - I, \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ \begin{cases} \bar{C}_i^{(s)} = D_1 + \frac{\rho^{(s)}}{2} h, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \\ \bar{C}_N^{(s)} = 0, \end{cases} \\ \begin{cases} \bar{D}_1^{(s)} = D_1^{(s)} - \left(D_1 - \frac{\rho^{(s)}}{2} h\right) x_N^{(s)} - I, x_1^{(s)}, \\ \bar{D}_i^{(s)} = D_i^{(s)} - I, x_i^{(s)}, & i = 2, \dots, N-1, \\ \bar{D}_N^{(s)} = D_N^{(s)} - \left(D_1 + \frac{\rho^{(s)}}{2} h\right) x_1^{(s)} - I, x_N^{(s)}, \end{cases} \end{cases} \quad (2.9)$$

其中 $B_i^{(s)}$ 和 $D_i^{(s)}$ 如下表所示:

方法	$B_i^{(s)}$	$D_i^{(s)}$
a	$-(2D_1 + h^2 - Bh^2)$	$-h^2 H(x_i^{(s)}, y_i^{(s)}) - A^2 h^2 y_i^{(s)}$
b	$-\left\{2D_1 + h^2 - h^2 \left[B + \frac{h}{A} x_i^{(s)} + y_i^{(s)}(2A + x_i^{(s)})\right]\right\}$	$-h^2 A^2 y_i^{(s)}$
c	$-(2D_1 + h^2) + h^2 \left[B + 2\frac{B}{A} x_i^{(s)} + y_i^{(s)}(2A + x_i^{(s)}) + x_i^{(s)} y_i^{(s)}\right]$	$-h^2 \left(A^2 y_i^{(s)} - \frac{B}{A} x_i^{(s)^2} - x_i^{(s)} y_i^{(s)}\right)$

$$\text{对 } y: \begin{cases} \bar{A}_1^{(s)} = 0, \\ \bar{A}_i^{(s)} = D_2 - \frac{\rho^{(s)}}{2} h, \quad i = 2, \dots, N, \\ \bar{B}_i^{(s)} = B_i^{(s)} - I, \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ \begin{cases} \bar{C}_i^{(s)} = D_2 + \frac{\rho^{(s)}}{2} h, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \\ \bar{C}_N^{(s)} = 0, \end{cases} \\ \begin{cases} \bar{D}_1^{(s)} = D_1^{(s)} - \left(D_2 - \frac{\rho^{(s)}}{2} h\right) y_N^{(s)} - I, y_1^{(s)}, \\ \bar{D}_i^{(s)} = D_i^{(s)} - I, y_i^{(s)}, \quad i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \bar{D}_N^{(s)} = D_N^{(s)} - \left(D_2 + \frac{\rho^{(s)}}{2} h\right) y_1^{(s)} - I, y_N^{(s)}, \end{cases} \end{cases} \quad (2.10)$$

其中 $B_i^{(s)}$ 和 $D_i^{(s)}$ 如下表所示:

方法	$B_i^{(s)}$	$D_i^{(s)}$
a	$-(2D_1 + A^2h^2)$	$h^2H(x_i^{(s+1)}, y_i^{(s)}) + Bh^2x_i^{(s+1)}$
b	$-\{2D_1 + h^2[A^2 + x_i^{(s+1)}(2A + x_i^{(s+1)})]\}$	$h^2x_i^{(s+1)}\left(B + \frac{B}{A}x_i^{(s+1)}\right)$
c	$-\{2D_1 + h^2[A^2 + x_i^{(s+1)}(2A + x_i^{(s+1)})]\}$	$h^2x_i^{(s+1)}\left(B + \frac{B}{A}x_i^{(s+1)}\right)$

3° 被增加的“合理”方程

由(1.3), 被增加的“合理”方程可取为

$$\rho = \frac{\int_0^{2\pi} \{ [D_1x'' + (B-1)x + A^2y + H(x,y)]x' + [D_2y'' - Bx - A^2y - H(x,y)]y' \} d\xi}{\int_0^{2\pi} [(x')^2 + (y')^2] d\xi} \quad (2.11)$$

利用数值积分公式可求得 $\rho^{(s)}$ 。

4° 算法过程

(i) 给出迭代初值 $x_i^{(0)}, y_i^{(0)}$ ($i = 1, 2, \dots, N$), $\rho^{(0)}$, $s > 0$ 进行

(ii) 由 $(x_i^{(s)}, y_i^{(s)}, \rho^{(s)})$, 利用公式(2.7)、(2.8)和(2.9)计算得出 $x_i^{(s+1)}$ 。若

$$|x_i^{(s+1)} - x_i^{(s)}| < \varepsilon_1, \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

转 (iii), 否则转 (ii);

(iii) 由 $(x_i^{(s+1)}, y_i^{(s)}, \rho^{(s)})$, 利用公式(2.7)、(2.8)和(2.10)计算得出 $y_i^{(s+1)}$ 。若 $|y_i^{(s+1)} - y_i^{(s)}| < \varepsilon_2$, ($i = 1, 2, \dots, N$) 转 (iv), 否则转 (iii);

(iv) 由 $(x_i^{(s+1)}, y_i^{(s+1)}, \rho^{(s)})$, 利用公式(2.11)数值积分得出 $\rho^{(s+1)}$ 。若

$$|\rho^{(s+1)} - \rho^{(s)}| < \varepsilon_3,$$

转 (v), 否则转 (ii),

(v) 验证: $\max_i \left| \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}_i^{(s+1)} - \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}_i^{(s)} \right| < \varepsilon_4$, 满足则停止迭代, $(x_i^{(s+1)}, y_i^{(s+1)}, \rho^{(s+1)})$ 就是所求的解, 否则转 (ii)。

注: $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ 和 ε_4 为适当选取的迭代控制常数。

三、数值试验

取 $A = 2, B = 6, D_1 = 1.6 \times 10^{-5}, D_2 = 8 \times 10^{-3}, \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}, \varepsilon_3 = 10^{-4}, \varepsilon_4 = 2.6 \times 10^{-2}, m = 1$, 取第二种线性化法作试验。

1° 初始条件取 $x_i^{(0)} = y_i^{(0)} = \sin \xi_i, \xi_i = ih, \rho^{(0)} = 1.99$, 试验区间分点数 N 的大小。在完全相同的条件下, 分别计算 $N = 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160$ 。经比较发现 $N = 120$ 时, 计算结果就相对稳定了。为保险起见, 在下面的数值试验中都取 $N = 140$ 。

2° 附加项中的因子 $I, = R'$ 的选取。若取 $R \leq 1$, 迭代不收敛或收敛速度很慢,

若取 $R = 1, 2$, 一般 $s \leq 9$ 就能满足迭代控制条件. 此时由附加项的引进而带来的最大误差大约是 0.0005.

3° 若初始条件分别取 $x_i^{(0)} = y_i^{(0)} = \sin \xi_i$ 和 $x_i^{(0)} = y_i^{(0)} = \cos \xi_i$, 在完全相同的条件下作并行计算, 所得的结果相当于作适当的平移.

4° 若边界条件取固定值, 例如取 $x_0^{(0)} = y_0^{(0)} = 0$, 则在边界附近会出现小的振荡现象.

5° 为了防止因初值给得不合理, 由公式 (2.11) 数值计算所得的 ρ 值过大. 规定若

$$\rho^{(s)} > \rho^{(0)},$$

则仍取 $\rho^{(0)}$ 作为迭代值.

6° 取 $\varepsilon_3 = 10^{-6}$, 将三种线性化迭代方法的计算结果进行比较, ρ 值和波形见图 1.

显然, 其结果是符合得相当好的. 由于方法 (a) 省计时, 故正式计算时是采用第一种线性化法进行的.

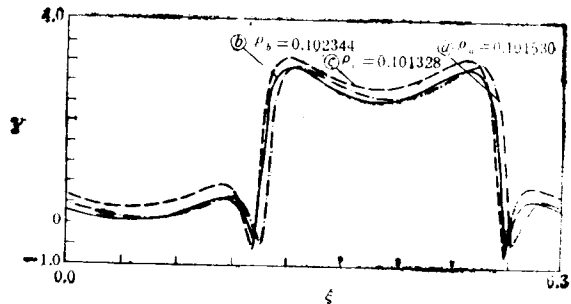


图 1 三种线性化法比较

四、结果分析

1° 行波解不同于定态解, 波形与行波速度 ρ 的取值有关. 若限定 ρ 的迭代取值范围, 它可以稳定在一种波形上. 例如, 若 $|\rho^{(s)} - \rho^{(s+1)}| < 10^{-4}$, 则 $\rho = 0.13$; 若

$$|\rho^{(s)} - \rho^{(s+1)}| < 10^{-6},$$

则 $\rho = 0.11$; 若 $|\rho^{(s)} - \rho^{(s+1)}| < 10^{-8}$, 则 $\rho = 0.01$. 其波形见图 2.

2° 取 $m = 1$, 当 B 取不同值时, 看其行波解随参数 B 的变化情形. 见图 3.

3° 取 $B = 5$, 当 m 取不同值时, 看其行波解随参数 m 的变化情形. 见图 4.

最后指出本算法用 Fortran 语言写成专用程序, 计算工作是在美国休斯顿 (Houston) 大学的 VAX 机上进行的. 试算表明本算法是可行的.

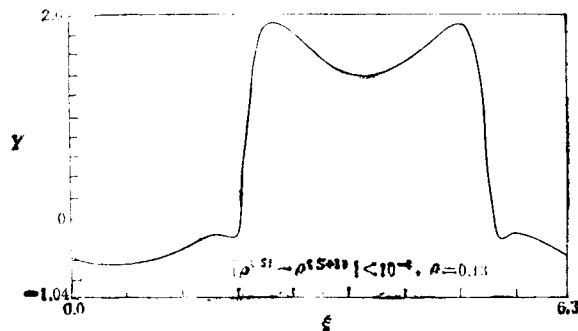


图 2-1

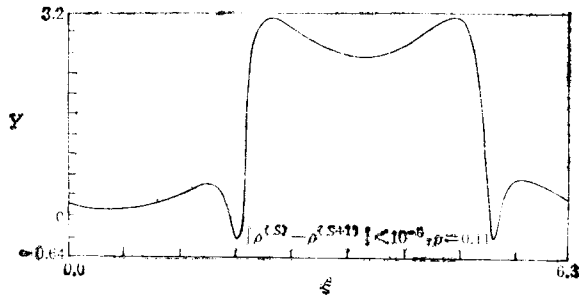


图 2-2

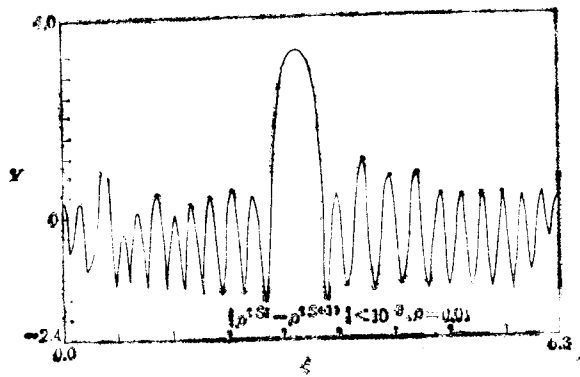


图 2-3

图 2 不同 rho 值的波形图

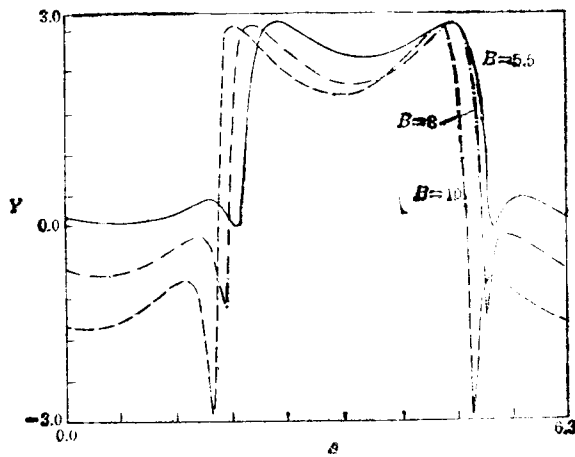


图 3 m = 1, 行波解随参数 B 的变化图

致谢： 作者十分感谢美国休斯顿大学数学系 G. Auchmuty 教授的指导，并感谢 Welch 基金会的部分资助。

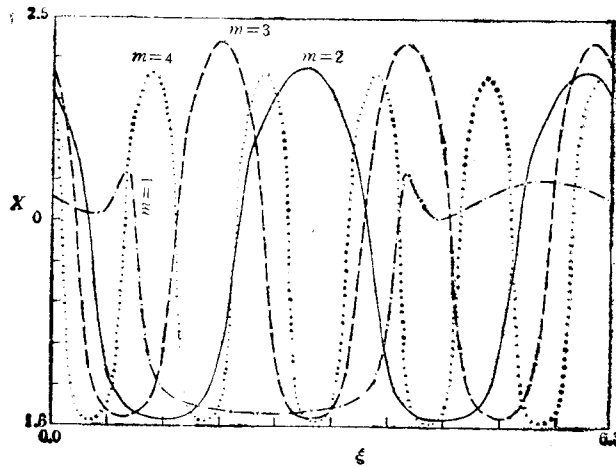


图 4 $B = 5$, 行波解随参数 m 的变化图

参 考 文 献

- [1] L. O. Chua, P. M. Lin, *Computer Aided Analysis of Electronic Circuits, Algorithms and Computational Techniques*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1975.
- [2] M. Kubiček, M. Marek, *Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures*, Springer-Verlag New York Inc. 1983.
- [3] G. Nicolis, J. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, Wiley, New York, 1977
- [4] J. Rubin, *Theoretical Analysis of Two-Dimensional Transient Flow of Water in Unsaturated and Partly Unsaturated soils*, *Soil. Sci. Soc. Amer. Proc.* 32, 5(1968) 607.