数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

1 前言

It can scarcely be denied that the supreme goal of all theory is to make the irreducible basic elements as simple and as few as possible without having to surrender the adequate representation of a single datum of experience.

——Albert Einstein

1.1 我们来谈一下如何理解数学模型

我们开篇提到了爱因斯坦的名言，虽然原文是讨论的理论，但是他的这句话有一个被近似过的更接地气的版本：

Everything Should Be Made as Simple as Possible, But Not Simpler.

这样，我们也可以用这句话来思考数学模型了。事实上，一直以来科学家们深知数学建模重要性和数学模型的局限性。我们不妨现在欣赏几句名家名言:

This [mathematical] model will be a simplification and an idealisation, and consequently a falsification. It is to be hoped that the features retained for discussion are those of greatest importance ···

——Alan Turing

···all models are wrong, but some are useful.

——George Box

Models are, for the most part, caricatures of reality, but if they are good, they portray some features of the real world.

——Mark Kac

Witelski 和 Bowen 在教材的前言中提出了一个具有操作性的定义：

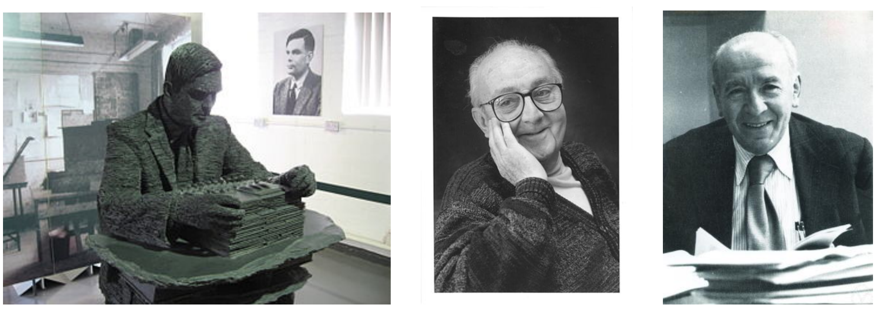


图 1: Pictures taken from Wiki. From left to right: Alan Turing, George Box and Mark Kac.

Model: a useful, practical description of a real-world problem, capable of providing systematic mathematical predictions of selected properties

我们注意以下的一些伴随着这个定义的观点：

- （平衡论）Models allow researchers to assess balances and trade-offs in terms of *levels of calculation details* versus *limitations on predictive capabilities.*
- （对错论）Concerns about models being “wrong” or “false” or “incomplete” are actually criticisms of the levels of physics, chemistry or other scientific details being *included or omitted* from the mathematical formulation.
- （结果论）
  - Once a well-defined mathematical problem is set up, its mathematical study can be an important step in understanding the original problem. This is particularly true if the model predicts the observed behaviors (a positive result).
  - However, even when the model does not work as expected (a negative result), it can lead to a better understanding of which (included or omitted) effects have significant influence on the system ‘s behavior and how to further improve the accuracy of the model.

对于这些观点，我是是需要学习批判接受的。基于这些观点，我们可以形成一个对模型的一个比较辨证的认识：

Models are expressions of the hope that aspects of complicated systems can be described by simpler underlying mathematical forms.

那么又怎么理解建模呢？Witelski 和 Bowen 把数学建模描述为一个如下的过程：

Modelling: a systematic mathematical approach to formulation, simplification and understanding of behaviors and trends in problems.

要了解建模的话，我们其实需要在基于上述对于模型的抽象认识上，对模型及其相关概念进行一些具体的分类和讨论。

按照复杂性和完整性，我们可以对模型的等级有如下的描述

"Toy" Problem $\leq$ **Math Problem** $\leq$ **Complete System**.

数学模型离不开实际问题。粗略的来说，实际问题可以被分成一下几类。

1. 正问题（Forward problems）。如果已知关于目标系统所有必要的信息，我们是否可以定量的预测该系统的其他性质，或者预测该系统将如何运作？例子：一辆车的最大可达速度是多少？一种疾病将多快地在某个城市的人群中传播？
2. 反问题（Inverse problems）。如果某个“黑箱”系统的某些信息不能够直接得到，是否可以通过某种“反向工程”的方式来找到这些缺失的参数？例子：是否可以通过医学图像的数据来估计肿瘤的位置？我们是否可以通过一个振子的时间序列数据来确定它的阻尼（衰减）系数？（can you hear the shape of a drum？）
3. 控制优化问题（Control and optimization problems）。我们是否能创造（设计）出一个系统的解，来满足一个给定的目标？例子：什么形状的纸飞机可以飞得最远？如果给一个药丸设计糖衣，使得药物可以在一整天内按照一个恒定的速率释放？

而建模过程也可以大体分为被分成两个阶段：

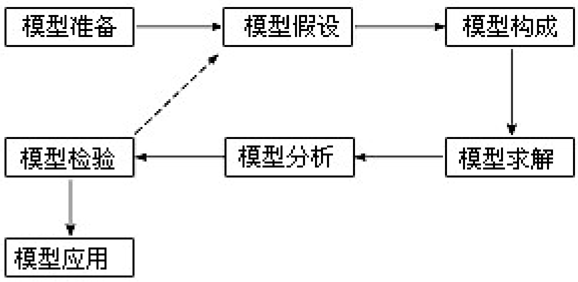
- 模型的形成（formulation phase）；
- 模型的求解（solution phase）。

这也构成了我们这学期学习的主要两个方面。

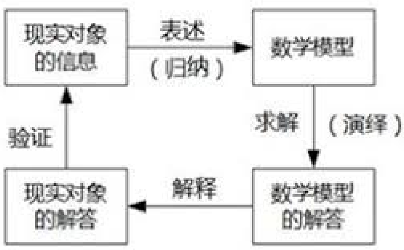
1.2 中文教材中的一些核心概念

我们对比的参考《数学模型》教材对这些核心概念的表述：

- 原型（Prototype）：人们在现实世界里关心、研究或者从事生产管理的实际对象。
- 模型（Model）：为了某个特定目的将原型的一部分信息简缩、提炼而构造的原型替代物。
- 数学模型（Mathematical Model）：对于现实世界的一个特定对象，为了一个特定目的，根据特有的内在规律，做出一些必要的简化假设，运用适当的数学工具，得到一个特定的数学结构。
- 数学建模，或者建模（Mathematical Modeling）：建立数学模型的全过程。
- 数学建模的一般步骤



- 数学建模的全过程



1.3 科学/工程中常用模型的举例

我们现来了解一些科学/工程中常见的数学模型。对于其中一些模型，我们也会在接下来的章节中深入学习。在下面的例子中，希望大家特别注意涉及函数的自变量和因变量，特别是描述了目标系统的状态的变量，即状态变量。

- 变化率模型（Rate equations）。

很多实际问题可以表述为在给定**初始状态**之下，**状态变量**的变化过程。而最简单的模型经常是用常微分方程（初值问题）给出的，这些模型中，状态变量被看作是时间的函数，而模型给出了这些变量关于时间的**变化速率**。

一般的，令 $\boldsymbol{x}(t)=(x_1(t),\cdots,x_n(t))\in\mathbb{R}^n$ 为某个系统的状态变量向量, 这个系统的问题由下面的数学模型给出

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0. \tag{1.1}$$

这里，每个变量 x_i 的变化率函数为 $f_i(\boldsymbol{x},t)$, 即

$$\frac{dx_i}{dt}=f_i(\boldsymbol{x},t),$$

而我们记 $\boldsymbol{f}=(f_1,\cdots,f_n)$。注意，每个 f_i 可能依赖于所有状态变量和时间。

我们将在第二章具体学习变化率模型，这里我们只举两个例子。

例子1。一个质点的运动方程可能是最经典的动力系统的例子了。为了刻画质点的状态，我们需要给出它的位置 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^3$ 和动量 $\boldsymbol{P}\in\mathbb{R}^3$。另外，我们记质点的质量为 m，速度为 $\boldsymbol{V}\in\mathbb{R}^3$，作用力为 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{P})\in\mathbb{R}^3$。根据微积分和牛顿第二定律，我们知道

$$\frac{d\boldsymbol{X}}{dt}=\boldsymbol{V},\quad \frac{d\boldsymbol{P}}{dt}=\boldsymbol{F}.$$

利用 $\boldsymbol{P}=m\boldsymbol{V}$ 我们可以得到一个二阶常微分常微分方程组

$$m\frac{d^2\boldsymbol{X}}{dt^2}=\boldsymbol{F}.$$

这时候，如果我们定义 $\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{X},\boldsymbol{P})\in\mathbb{R}^6$, 我们也可以把这个系统改写成一个一阶常微分方程组

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}),\quad \text{where}\quad \boldsymbol{f}=\left(\frac{\boldsymbol{P}}{m},\,\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{P})\right)\in\mathbb{R}^6.$$

例子2。考虑由 N 个成员（可以是飞鸟，游鱼，甚至是无人机）组成的一个自我组织的系统。其中第 i 个成员的状态由它的位置 $\mathbf{x}_i\in\mathbb{R}^3$ 和速度 $\mathbf{v}_i\in\mathbb{R}^3$ 决定。著名的 Cucker-Smale 模型给出了如下的时间演化过程

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt}=\mathbf{v}_i,\quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}=\frac{\alpha}{N}\sum_{j\neq i}^{N}a_{ij}(\mathbf{x})\left(\mathbf{v}_j-\mathbf{v}_i\right),\quad i=1,\cdots,N.$$

这里，α 表示成员之间的交流强度，$a_{ij}(\mathbf{x})=I(|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)$ 表示成员 j 对成员 i 的校准影响强度。而 Cucker-Smale 模型是描述簇拥（flocking）等社会现象的基本模型。但是研究这个系统的数学理论已经远远超出本课程的内容范围，欢迎感兴趣的同学主动探索。

- 守恒律模型（Conservation Law）。

下面我们介绍一类简单的偏微分方程模型。这时候系统的状态变量 $\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^d$ 不仅是时间 t 的函数，还是空间坐标 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^m$ 或者其他坐标的函数。我们注意到，这时候，状态变量是一个多元（向量值）函数。在下面的建模过程中提醒大家注意两件事：

  - 模型中的方程中含有偏导数（偏微分方程模型名称的由来）。
  - 我们对时间变量和空间变量在建模过程中的处理方式往往有本质差异。

我们先考虑一个简单的情况：空间坐标$x \in \mathbb{R}$, 而我们把 $u(x,t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 看作一个（广义的）密度函数。在时间 t 时，位于 x_1 和 x_2 这两点之间的总质量由如下的定积分给出

$$m(t) = \int_{x_1}^{x_2} u(x,t)\,dx.$$

如果我们忽略空间上的运动而只关心这个质量随时间的变化，那我们就会得到形如上一小节的变化率模型

$$\frac{dm}{dt} = f(m,t), \quad m(0) = m_0.$$

一些情况下，我们可以得到一个合理的模型，比如杯中的水的缓慢蒸发过程。但是如果是要描述一段河流中水量的变化，反应率模型就不够用了，因为我们需要将空间上的流体的运动考虑进去。

我们假设，**这段质量** $m(t)$ 的随时间变化的原因有下面两个

- 在边界点 x_1, x_2 的通量 flux/flow. $J(u)$: 通量函数（the flux function）.
- 在区间 $[x_1, x_2]$ 内的源 source/sink. $\psi(u)$: 源函数（the source function）.

于是，我们得到

$$\frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2} u(x,t)\,dx = J|_{x=x_1} - J|_{x=x_2} + \int_{x_1}^{x_2} \psi\,dx = -\int_{x_1}^{x_2} (J)_x\,dx + \int_{x_1}^{x_2} \psi\,dx,$$

这可以化简为

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(u_t + (J)_x - \psi\right) dx = 0.$$

这样，我们推导出了

- 平衡率 Balance law: $u_t + (J)_x = \psi$.
- 守恒律 Conservation law: $u_t + (J)_x = 0$.

关于（广义）密度函数的守恒律有时候也被称作 **连续性方程**。以上是我们对守恒律方程的一种推导方式。在第三章的时候，我们会从另外一个角度去推导守恒律方程。

注意,（如果状态变量 u 仍为标量,）在空间坐标为多元变量的时候，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$, $m > 1$, 这时候通量函数 $\boldsymbol{J} \in \mathbb{R}^m$是一个向量值函数, 而源函数 ψ 仍为标量。守恒律方程变成了

$$u_t + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = u_t + \sum_{n=1}^{m} (J_n)_{x_n} = 0.$$

特别的，如果 u 表示质量密度，取 $\boldsymbol{J} = u\boldsymbol{v}$，而 $\boldsymbol{v}$ 表示速度场，

$$u_t + \nabla \cdot (u\boldsymbol{v}) = 0 \tag{1.2}$$

表示的是比较狭义的关于质量的连续性方程。

再给大家一些具体的例子（前四个例子中，$x \in \mathbb{R}$）

- $J = au$, $u_t + au_x = 0$, advection equation （对流，传送，双曲）.
- $J = -\beta u_x$, $u_t = \beta u_{xx}$, diffusion (heat) equation （扩散，热传导，抛物）.
- $J = au - \beta u_x$, $u_t + au_x = \beta u_{xx}$, advection-diffusion equation.
- $J = \frac{1}{2}u^2$, $u_t + uu_x = 0$, (inviscid) Burgers' equation （非线性双曲）.

– Euler equations (欧拉方程), etc.

上面的几个例子中，前两个例子虽然形式上很简单，但是蕴含了深刻的道理。如果通量 flux 是 u 的线性函数，那么我们的守恒律对应的是一个速度为 a 的运动（输运）过程，而如果通量是 u_x 的线性函数，那么我们的守恒律对应的是一个扩散过程（这个比例系数 β 也常被我们成为扩散系数）。

- 哈密顿力学方程（Hamiltonian Mechanics）和相空间密度的演化

  经典力学中，一个系统的状态变量常为正则坐标（canonical coordinates ）$\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$，而这里 $\boldsymbol{q}$ 常可以理解为位置，$\boldsymbol{p}$ 常可以理解为动量。在一个时间演化过程中，系统的正则坐标随时间发生变化。

  我们这里忽略推导过程，而直接得到：系统的状态变量的时间演化遵循的是哈密顿方程。

  $$\frac{d\boldsymbol{q}}{dt} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{p}}, \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{q}},$$

  这里 $\mathscr{H} = \mathscr{H}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 叫做哈密顿量（Hamiltonian）,对应的是这个力学系统的总能量。对于封闭系统来说，它是动能和势能之和。

  可以看出，哈密顿方程可以看作是一类特殊的变化率方程。这里，我们不去推导或者验证或者研究哈密顿方程（事实上这是一个很基础的问题，是经典力学等学科的理论核心之一）。但是我们会在接受了这个模型构成的基础上继续做一些数学上的演绎推导。

  考虑如下形式的哈密顿量

  $$\mathscr{H} = T + V, \quad T = \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{2m}, \quad V = V(\boldsymbol{q}).$$

  则有

  $$\frac{d\boldsymbol{q}}{dt} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}, \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\nabla V(\boldsymbol{q}) =: \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q}).$$

  这里 T 表示动能，而 V 是势能（函数）。而这里作用力 $\boldsymbol{F}$ 等于势能函数的负梯度，我们在数学分析（场论）中称这样的力是一个保守力。

  我们注意，正如函数关系中，自变量和因变量其实是相对的概念，特别在复合函数中，而空间坐标可以在变化率模型中是状态变量，而在守恒律模型中就变成了自变量。那么怎么去理解在数学模型的角度去理解函数的复合呢？这其实是第三章我们重点研究的问题之一，不过我们先看一个简单的例子。

  现在，我们假设有一个经典粒子的密度分布函数 $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$, 通过和 $\boldsymbol{r}(t) = (\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t))$ 满足的速率方程复合，我们可以得到 $f(\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t), t)$。我们注意，这个复合函数是关于时间 t 的一元函数，如果我们关于 t 求导，可以得到

  $$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\boldsymbol{q}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{q}} + \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}}.$$

  这种随着一个移动框架产生的变化率有很多名字，比如拉格朗日导数（Lagrangian derivative），随体导数（material derivative），convective derivative等。特别的，我们可以用守恒律（特别地，质量的连续性方程）证明，如果 $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 满足哈密顿方程，则有

  $$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{q}} + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = 0.$$

  首先，我们按照守恒律（连续性方程）写出相空间的密度函数 f 满足的方程

  $$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{J} = 0.$$

由于 f 代表一种质量密度（类比上文中的质量的连续性方程），所以我们有

$$\boldsymbol{J} = f\dot{\boldsymbol{r}} = f\left(\frac{\boldsymbol{p}}{m}, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q})\right) = \left(f\frac{\boldsymbol{p}}{m}, f\boldsymbol{F}(\boldsymbol{q})\right).$$

所以，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \cdot \left(f\frac{\boldsymbol{p}}{m}\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} \cdot \left(f\boldsymbol{F}(\boldsymbol{q})\right) = 0.$$

通过运算，我们有

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{p}}{m}\right) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{q})) = 0.$$

于是我们推导出了刘维尔方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{q}} + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = 0,$$

这个方程也被称作 the collisionless Boltzmann equation (Vlasov equation).

- 动理学方程*（Kinetic equation）。
  令 $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ 为一个相空间上的密度函数。这里，跟上一小节一样， $\boldsymbol{q}$ 可以理解为位置，$\boldsymbol{p}$ 可以理解为动量。一般的，动理学方程有如下的形式

  $$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{drift/force}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{diffusion}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}}.$$

  特别的，the Boltzmann equation (玻尔兹曼方程) 的一般形式为

  $$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m} \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} f + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}}.$$

  上述玻尔兹曼方程中 diffusion 项，但是跟刘维尔方程比的话，右端多了碰撞（collision）项。这种碰撞项描述了相同位置不同动量之间的粒子的相互相互作用，即 $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ 和 $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}', t)$ 的相互作用。由于碰撞项的出现，玻尔兹曼方程在时间演化上不在可逆，这在数学和物理上都是很不平凡的结果。动理学方程广泛应用于非平衡态的统计力学模型、航空航天研究等众多领域中。

- 薛定谔方程*（ Schrödinger equation）。
  在之前的例子中，自变量和状态变量都是有明确的（至少直观的）物理含义的。在量子力学的领域，我们可以用空间位置和动量这两个变量来表示一个量子状态（量子态），但是由于所谓的测不准原理等原因，我们不能同时把位置和动量选作自变量了。

  在量子学的数学基本假设下，我们把位置变量和动量变量替换为位置算符和动量算符（或称算子）并且引入波函数的概念。有些人把这个过程称为一次量子化（有争议）。而这里的波函数，就是我们关心的状态变量，但是我们需要花些力气去理解这里的

  在量子力学中，（量子）哈密顿量被替换成了一个算符

  $$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad \hat{T} = \frac{|\hat{\boldsymbol{k}}|^2}{2m}, \quad \hat{V} = V(\hat{\boldsymbol{x}}),$$

  这里 $\hat{\boldsymbol{x}}$ and $\hat{\boldsymbol{k}}$ 分别是位置算符和动量算符，m 是粒子的质量。

  在所谓的位置表象下，我们形式上有 $\hat{\boldsymbol{k}} = -i\hbar\nabla$ （$\hbar$ 是约化普朗克常数），而哈密顿量可表示为

  $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x}).$$

这里，势能函数 $V(\boldsymbol{x})$ 和经典力学中的情形一样是一个实值标量函数。也就是说在位置表象（或者叫位置空间）下，位置 $\boldsymbol{x}$ 可以理解成自变量，但是动量算符就变成了一个微分算子。

另外一个和经典力学不同的地方是，哈密顿算符以另外一种方式对应着能量：它的特征值被看作是能量。这些特征值由不含时的薛定谔方程决定

$$\hat{H}\psi_n(\boldsymbol{x}) = E_n\psi_n(\boldsymbol{x}).$$

有趣的是，虽然$\psi_n(\boldsymbol{x})$可以是复数值的，但是E_k都是实数值的。其背后的原因是，这里的$\hat{H}$是一个自伴算子，可以被理解成一个Hermitian matrix（埃尔米特矩阵）的无限维推广。大家会在泛函分析等课程中系统学习算子的谱理论，我们在这学期只会零散的接触到一些自伴算子的应用和形式演算（也就是说，大家不用关心严格的定义和证明）。

在位置表象里，一个量子态可以被一个的波函数表示 $u(x,t)$，而它的时间演化是由含时的薛定谔方程决定

$$i\hbar u_t = \hat{H}u.$$

这个波函数是复数值的，而且容易证明

$$\frac{d}{dt}\int |u(\boldsymbol{x},t)|^2 d\boldsymbol{x} = 0.$$

于是, 不妨令 $\int |u(\boldsymbol{x},t)|^2 d\boldsymbol{x} \equiv 1$，于是 $\rho(\boldsymbol{x},t) = |u(\boldsymbol{x},t)|^2$ 可以被解读成是空间密度函数。

总之，我们得到了量子态随时间演化的一种数学模型：自变量是时间和空间位置，状态变量是波函数，而波函数的模的平方可以被解读成空间密度函数。

（而事实上，量子力学中的数学模型非常丰富，但是想要管窥蠡测都不是件容易的事。上述这个简单的数学模型已经让波尔、波恩、薛定谔、海森堡、爱因斯坦他们争论不休了。感兴趣的同学可以自己去了解一下“薛定谔的猫”，“上帝掷骰子”这些历史上有名的典故。）

- 在固体物理（solid state physics）、电磁学（electromagnetism）、统计力学（statistical mechanics），弹性力学等学科中还有很多有趣的数学模型。
- 生物、化学等自然科学也是数学模型的源泉和宝库。特别地，这些学科中实验和理论的突破往往伴随着原有数学模型的改进或者新的数学模型的提出。
- 在社会科学中，也有丰富的数学模型。这些数学模型跟自然科学中的数学模型有很多相似之处，但是也有很多特殊的模型假设，所以模型的形式和模型解的理论也会不同。

需要注意的是，对于同样的对象，数学模型也会不同，其原因往往是时间空间尺度（scale）的不同。然而更有挑战性的往往是，一个问题中，有多个不同的尺度。这样的问题往往是不错的科研问题。

另外，希望同学们这学期学习过程中能够思考一个问题：数学家和科学家、工程师相比，有什么相同和不同呢？

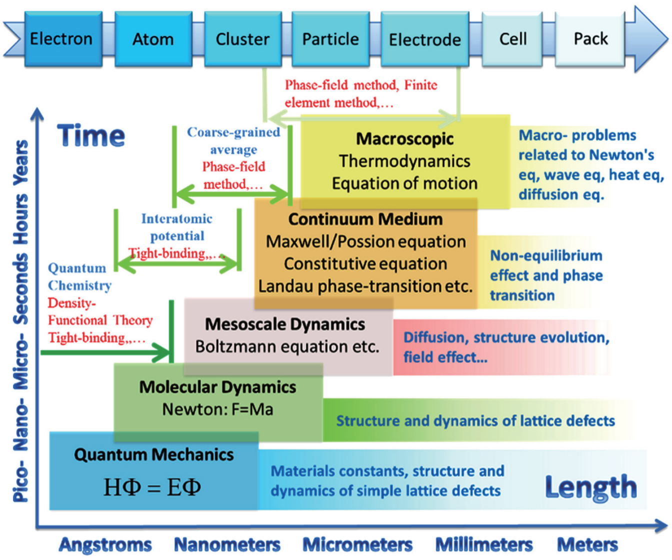


图 2: Chinese Physics B , 2016, 25(1): 018212