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 calculational 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 behaviours (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 behaviour 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 behaviours 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 ≤ **Math Problem** ≤ **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）。
2. 反问题（Inverse problems）。
3. 控制优化问题（Control and optimization problems）。

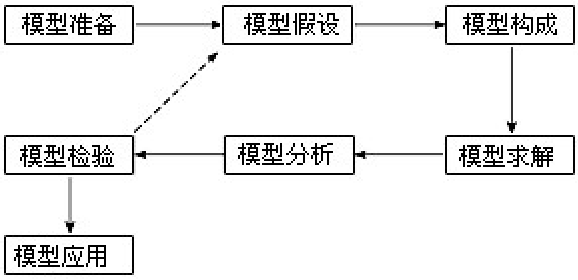
而建模过程也可以大体分为被分成两个阶段：模型的形成（formulation phase）和模型的求解（solution phase）。这也构成了我们这学期学习的主要两个方面。

1.2 中文教材中的一些核心概念

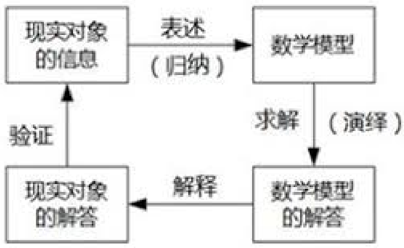
我们对比的参考《数学模型》教材对这些核心概念的表述：

- 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。

- 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，这里我们只举一个例子。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 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{X},\boldsymbol{P}) \in \mathbb{R}^6$, 我们也可以把这个系统改写成一个一阶常微分方程组

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},t), \quad \text{where} \quad \boldsymbol{f} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{P}/m \\ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},\boldsymbol{P}) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^6.$$

- 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 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$ 或者其他空间坐标的函数。

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

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

我们假设，这段质量的随时间变化的原因有下面两个

– 通量 flux/flow at x_1, x_2. $J(u)$, 通量函数（the flux function）.

– 源 source/sink within $[x_1,x_2]$. $\psi(u)$, 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: $u_t + (J)_x = 0$.

守恒律有时候也被称作连续性方程。

注意，在空间坐标为多维的时候，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$, 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，

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

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，椭圆）.
- $J = au - \beta u_x$, $u_t + au_x = \beta u_{xx}$, 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.

前两个例子很简单，但是道理还是很深刻的。如果flux是u的线性函数，那么我们的守恒律对应的是一个传送过程（速度为a），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）。
经典力学系统的状态变量为正则坐标（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。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 $\mathscr{H} = \mathscr{H}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ 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（事实上有很多课程会研究这类方程）。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。

例如, 若

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

则有

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

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 $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 满足的速率方程复合，我们可以得到 $f(\boldsymbol{q}(t), \boldsymbol{p}(t), t)$, 于是，我们得到

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

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，我们可以证明，如果 $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ 满足哈密顿方程，则有

$$\frac{df}{dt} = 0.$$

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

$$f_t + \nabla_{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{J} = 0.$$

由于 f 代表一种质量密度，所以我们有

$$\boldsymbol{J} = f\dot{\boldsymbol{r}}.$$

所以，我们有

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \cdot (f\dot{\boldsymbol{q}}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} \cdot (f\dot{\boldsymbol{p}}) = 0.$$

通过运算，我们有

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \cdot (\dot{\boldsymbol{q}}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} \cdot (\dot{\boldsymbol{p}}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \cdot \frac{\boldsymbol{p}}{m} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}} (-\nabla_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{q})) = 0.$$

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）。

  Let $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ be the density function (of e.g. dilute gas) on the phase space (相空间). The variable $\boldsymbol{q}$ stands for the position and the variable $\boldsymbol{p}$ stands for the momentum. The general equation can be written as

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

  In particular, the Boltzmann equation (玻尔兹曼方程) takes the following form

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

  （注意，这里我们把$\boldsymbol{v}$理解成了动量。）The collision terms describes interactions between $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ and $f(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}', t)$. Due to the collision term, the Boltzmann equation is not time reversible. 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）。

  在量子力学的领域，我们可以用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，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）。这里我们不讲解具体的原因，但是我们下面演算一下一些这种数学模型的几个简单推论。

  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。

  在所谓的位置表象下，我们形式上有 $\hat{\boldsymbol{k}} = -i\hbar\nabla$，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，而 $\hbar$ 叫做约化普朗克常数。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

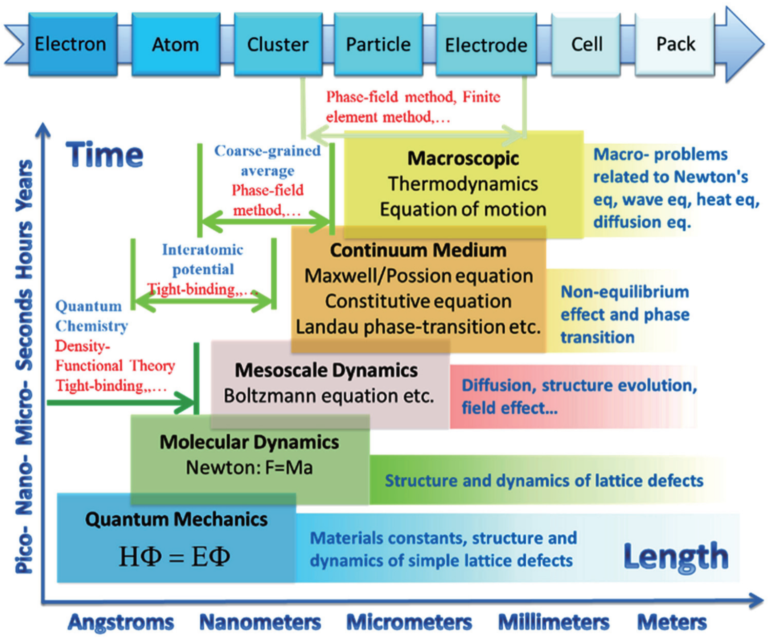


图 2: Chinese Physics B , 2016, 25(1): 018212

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, $\rho(\boldsymbol{x},t) = |u(\boldsymbol{x},t)|^2$ 被解读成是空间密度函数。

- 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。

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？