数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2019 年 4 月 23 日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.
参考：教材一第6章，教材二第4章。

6 代数方程模型和差分方程模型

From a drop of water a logician could infer the possibility of an Atlantic or a Niagara without having seen or heard of one or the other. So all life is a great chain, the nature of which is known whenever we are shown a single link of it.

—Sherlock Holmes, *A Study in Scarlet.*

本章中，我们研究代数方程模型和差分方程模型。在代数方程部分，我们重点讲述量纲分析的思想和无量纲化的步骤。对于差分方程，我们会选讲差分方程的一些解析方法。对于代数方程和差分方程，还有一系列数值的方法，有兴趣的同学可以去学习数值代数和数值分析。

6.1 量纲分析

量纲分析（dimensional analysis）是20世纪提出的在物理和工程等领域建立数学模型的一种方法，它在经验和实验的基础上利用物理定律的量纲齐次原则，确定各物理量之间的关系。

许多物理量是有量纲的。在物理研究中，我们把若干物理量的量纲作为**基本量纲**，它们是相互独立的。另外一些物理量的量纲则可以根据定义或者物理定律有基本量纲推导出来，称为**导出量纲**。例如在研究力学问题的时候，通常将长度l，质量m，时间t的量纲作为基本量纲，记以相应的大写字母L，M和T。（这也叫 MKS 系统，指Meters、Kilograms，Seconds。）

在量纲分析中，物理量q的量纲记作$[q]$。于是我们有

$$[l] = L, \quad [m] = M, \quad [t] = T.$$

而速度v和加速度a的量纲可以按照其定义表示为

$$[v] = LT^{-1}, \quad [a] = LT^{-2}.$$

力的量纲则应该根据牛顿第二定律得出

$$[f] = LMT^{-2}.$$

有些物理常数也有量纲，如在万有引力定律

$$f = k\frac{m_1 m_2}{r^2}$$

中的引力常数$k = f r^2 (m_1)^{-1}(m_2)^{-1}$。 k的量纲计算得到

$$[k] = LMT^{-2}L^2M^{-2} = L^3M^{-1}T^{-2}.$$

对于无量纲的量λ，我们记 $[\lambda] = L^0M^0T^0 = 1$。

用数学公式表示一些物理量之间的关系时，公式等号两端必须有相同的量纲，成为量纲齐次性（dimensional homogeneity）。

我们立刻得到如下的推论：含物理量的数学公式中，任何非单项式的复杂函数，例如 sin, exp, tan, log 等，必须有无量纲的自变量。例如，在指数函数 e^X 中，由 Taylor series，我们知道

$$e^X = 1 + X + \frac{1}{2}X^2 + \cdots + \frac{1}{n!}X^n + \cdots$$

如果 X 不是无量纲的，那么 Taylor 展开中的各项的量纲必然不同，因此也违反了量纲齐次性。所以，根据量纲齐次性，X^n 和 1 有相同的量纲，即 X 是无量纲的。

例子：匀加速运动。 我们考虑一个竖直发射的导弹，y 为导弹的高度，初始高度为 y_0，t 为时间，v_0 为初始速度，a_0 为常值加速度，那么，导弹的轨迹方程可以表达成

$$y = y_0 + v_0 t + \frac{1}{2}a_0 t^2.$$

从量纲的角度，我们也能看出，方程的每一项有相同的量纲：

$$[\text{length}] = [\text{length}] + \left[\frac{\text{length}}{\text{time}}\right][\text{time}] + \left[\frac{\text{length}}{\text{time}^2}\right][\text{time}^2].$$

例子：单摆运动。质量为m的小球，系在长度为l的线的一端，稍偏离平衡位置后，在重力mg作用下作往复运动。忽略阻力，求摆动周期T的表达式。

问题中的出现的物理量有t, m, l, g。设他们之间的关系是

$$t = \lambda m^{\alpha_1} l^{\alpha_2} g^{\alpha_3},$$

这里，$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$是待定常数，$\lambda$是无量纲的比例系数。它的量纲表达式为

$$[t] = [m]^{\alpha_1}[l]^{\alpha_2}[g]^{\alpha_3}.$$

讲$[t] = T, [m] = M, [l] = L, [g] = LT^{-2}$代入得

$$T = M^{\alpha_1}L^{\alpha_2+\alpha_3}T^{-2\alpha_3}.$$

按照量纲其次原则，我们得到解为

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_3 = -\frac{1}{2}.$$

于是我们得到

$$t = \lambda\sqrt{\frac{l}{g}}.$$

这和我们用物理知识得到结果$2\pi\sqrt{l/g}$是一致的，不过我们无法通过量纲分析得到$\lambda = 2\pi$，因为2π是无量纲的。

我们注意，这个结果可以写成

$$t^2 l^{-1} g = \pi_1.$$

这里，π_1是一个无量纲量。

我们将上述的过程一般化，就是著名的白金汉 π 定理 (Buckingham Pi theorem)。

π 定理 设m个有量纲的的物理量 $q_1, q_2, \cdots, q_m$之间存在与量纲单位的选取无关的物理规律，数学上可以表示为

$$f(q_1, \cdots, q_m) = 0. \tag{6.1}$$

若基本量纲记作$X_1, \cdots, X_n$（我们假设$n \leq m$），而$q_1, q_2, \cdots, q_m$的量纲可表示为

$$[q_j] = \Pi_{i=1}^{n} X_i^{a_{ij}}, \quad j = 1, \cdots, m.$$

矩阵$A = (a_{ij})_{n\times m}$ 称为量纲矩阵。若A的秩Rank$A = r$，设其次方程组

$$Ay = 0, \quad y = (y_1, \cdots, y_m)^T$$

的$m-r$个基本解记作 $y^{(s)}, s = 1, \cdots, m-r$，则存在$m-r$个相互独立的无量纲量

$$\pi_s = \Pi_{j=1}^{m} q_j^{y_j^{(s)}}, \quad s = 1, \cdots, m-r. \tag{6.2}$$

且存在未定的函数关系

$$F(\pi_1, \cdots, \pi_{m-r}) = 0. \tag{6.3}$$

事实上，(6.2),(6.3)与(6.1)等价。不过，我们并不关注π定理的证明，而是关心它的应用。我们先来讨论 π 定理的一些数学上的推论：

1. 为了方便分析，我们会对数学模型进行无量纲化（下一节会详细介绍）。经过无量纲化的系统的解，只会依赖于无量纲化的自变量和 $m-r$ 个相互独立的无量纲量。

2. 如果 π_j 是无量纲的话，那么他的任意函数，例如 $h(\pi_1)$，$g(\pi_1, \pi_2)$ 也是无量纲的。由此可见，无量纲参数是高度不唯一的。

3. 对于未定的函数关系，$F(\pi_1, \cdots, \pi_{m-r}) = 0$，很多时候隐函数定理是适用的，也就是说，我们可以局部的把一个无量纲量写成其他无量纲量的函数，比如

$$\pi_1 = f(\pi_2, \cdots, \pi_{m-r}).$$

例子：匀加速运动。 回顾之前例子的分析，我们知道，轨线方程是关于时间 t 的二次函数，我们不妨将它设为

$$at^2 + bt + c = 0.$$

之前我们已经知道了

$$[t] = T, \quad [a] = L/T^2, \quad [b] = L/T, \quad [C] = L.$$

由于，这里只有两个基本量纲，我们容易验证，这个系统中有2个相互独立的无量纲量。

在选取无量纲量时，我们可以令期中一个跟时间有关，而另一个与时间无关。比如

$$\pi_1 = at/b, \quad \pi_2 = ac/b^2.$$

根据 π 定理，我们知道，这些无量纲量可以被某种函数关系联系在一起

$$F(\pi_1, \pi_2) = 0.$$

假设可以使用隐函数定理，那么上式关系也可以记为

$$\pi_1 = f(\pi_2),$$

因而，我们得到了

$$t = \frac{b}{a} f\left(\frac{ac}{b^2}\right).$$

这样，我们就把时间用其他几个参数表达了出来。

为了验证上述表达是否正确，我们考虑用二次函数的求根公式，得

$$t = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{b}{a}\left(-\frac{1}{2} \pm \sqrt{1 - 4\frac{ac}{b^2}}\right).$$

所以，我们使用 π 定理得到的结论的确是对的，但是我们无法通过量纲分析得到 $f(\pi_2)$ 的具体形式。

例子：原子弹爆炸的能量估计。 根据爆炸时间t和蘑菇云半径r的多组观测来估计原子弹的能量。

相关物理量：半径r，时间t，能量E，空气密度ρ，大气压P。

要寻求的关系:

$$f(r, t, E, \rho, P) = 0.$$

取长度L，质量M和时间T作为基本量纲。上述各物理量的量纲为

$$[r] = L, \quad [t] = T, \quad [E] = L^2 M T^{-2}, \quad [\rho] = L^{-3} M, \quad [P] = L^{-1} M T^{-2}.$$

于是我们得到量纲矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & -2 \end{bmatrix}.$$

易知，$\mathrm{Rank}A = 3$，存在2个无量纲量。我们通过求解“选取”下面两个无量纲量

$$\pi_1 = r\left(\frac{\rho}{t^2 E}\right)^{\frac{1}{5}}, \quad \pi_2 = \left(\frac{t^6 P^5}{E^2 \rho^3}\right)^{\frac{1}{5}},$$

且存在某种函数关系使得$F(\pi_1, \pi_2) = 0$。

如果我们假设，$\pi_1 = \psi(\pi_2)$，则可以推出

$$r = \left(\frac{t^2 E}{\rho}\right)^{\frac{1}{5}} \psi\left(\frac{t^6 P^5}{E^2 \rho^3}\right)^{\frac{1}{5}}.$$

但是，ψ的形式需要采取其他方式确定。

下面我们考虑短时大爆炸近似：原子弹爆炸的时间短，能量大。于是我们近似的有

$$\pi_2 = \left(\frac{t^6 P^5}{E^2 \rho^3}\right)^{\frac{1}{5}} \approx 0.$$

所以，如果我们记$\psi(0) = \lambda$，则我们近似于的有

$$r = \lambda\left(\frac{t^2 E}{\rho}\right)^{\frac{1}{5}}.$$

借助一些小型爆炸试验，我们取$\lambda = 1$。于是我们得到能量的近似估计

$$E = \frac{\rho r^5}{t^2}.$$

最后我们指出，量纲分析的数学模型是有局限的，不彻底的

- 无量纲量之间的关系无法用量纲分析得出。
- 存在多个无量纲量的时候，恰当的选择无量纲量是关键。
- 需要正确的选择物理量和基本量纲。

6.2 无量纲化

我们通过一个例子来介绍这种方法。

例子：抛射问题 在星球表面以初速v竖直向上发射火箭，记星球半径为r，星球表面的重力加速度为g，忽略阻力，讨论发射高度随时间t的变化规律。

设x轴竖直向上，在发射时刻$t=0$火箭高度$x=0$（星球表面）。火箭和星球的质量分别是m_1和m_2，则由牛顿第二定律和万有引力定律可得

$$m_1\ddot{x} = -k\frac{m_1 m_2}{(x+r)^2}.$$

以$x=0$时，$\ddot{x}=-g$代入，得到抛射问题满足如下方程

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\dfrac{r^2 g}{(x+r)^2}, \\ x(0)=0, \quad \dot{x}(0)=v. \end{cases} \tag{6.4}$$

它的解可以表示为 $x = x(t; r, v, g)$。即发射高度x是以r, v, g为参数的时间t的函数。

这个发射高度的表达包含了3个独立参数。用无量纲化的方法可以减少独立参数的个数，达到简化模型的效果。无量纲化是指：对于变量x和t分别构造具有相同量纲的参数组合x_c和t_c，使新变量

$$\bar{x} = \frac{x}{x_c}, \quad \bar{t} = \frac{t}{t_c}$$

为无量纲量。x_c称特征长度，t_c称特征时间，统称特称尺度（Characteristic Scale）或参考尺度。

特征尺度x_c和t_c由参数r, v, g构成，并与x和t有相同的量纲。这样的x_c和t_c有多种构造方法。

下面举两个例子：

- 令$x_c = r,\ t_c = r v^{-1}$，则

  $$\bar{x} = \frac{x}{r}, \quad \bar{t} = \frac{t}{r v^{-1}}.$$

  于是我们得到

  $$\begin{cases} \varepsilon\ddot{\bar{x}} = -\dfrac{1}{(\bar{x}+1)^2}, \quad \varepsilon = \dfrac{v^2}{rg} \\ \bar{x}(0)=0, \quad \dot{\bar{x}}(0)=1. \end{cases} \tag{6.5}$$

  他的解可以表示为$\bar{x} = \bar{x}(\bar{t}; \varepsilon)$，它只含一个独立参数$\varepsilon$，易证明$\varepsilon$是无量纲的。

- 令$x_c = v^2 g^{-1},\ t_c = v g^{-1}$，于是我们得到

  $$\begin{cases} \ddot{\bar{x}} = -\dfrac{1}{(\varepsilon\bar{x}+1)^2}, \quad \varepsilon = \dfrac{v^2}{rg} \\ \bar{x}(0)=0, \quad \dot{\bar{x}}(0)=1. \end{cases} \tag{6.6}$$

我们会发现，由于特征尺度不同，两种无量纲化的方程有不同的“渐进”行为。

我们假设火箭发射的初速度v满足

$$v \ll \sqrt{rg} \approx 8000 m/s.$$

所以，$\varepsilon = v^2/rg \ll 1$。既然，$\varepsilon$如此之小，能不能舍弃$\varepsilon$的高阶项，从而得到方程的近似解呢？

在方程(6.5)中，令$\varepsilon = 0$，则我们的得到

$$0 = -\frac{1}{(\bar{x}+1)^2}, \quad \bar{x}(0) = 0, \quad \dot{\bar{x}}(0) = 1.$$

显然我们的得到的方程无解，因此不能在方程(6.5)中直接舍弃含ε的项。

在方程(6.6)中，令$\varepsilon = 0$，则我们的得到

$$\ddot{\bar{x}} = -1, \quad \bar{x}(0) = 0, \quad \dot{\bar{x}}(0) = 1.$$

显然我们得到的解为

$$\bar{x}(\bar{t}) = -\frac{\bar{t}^2}{2} + \bar{t}.$$

带回原变量x和t，上述式子等价于

$$x(t) = -\frac{1}{2}gt^2 + vt. \tag{6.7}$$

不难看出，如果原抛射问题中假定：火箭发射过程中所受的星球引力$m_1 g$不变，那么微分方程简化为

$$\ddot{x} = -g, \quad x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = v. \tag{6.8}$$

不难看出方程(6.8)的解就是(6.7)。通过对比(6.4)和(6.8)，我们得到，因为发射高度≪星球半径,所以(6.8)是(6.4)的近似方程。

但是，通过比较(6.5)和(6.6)，我们发现，只有选择了正确的特征尺度，我们才能够忽略含ε的项，成功得到原方程的近似解。

注意，无量纲化是用数学工具研究物理问题时常用的方法。恰当的选择特征尺度不仅可以减少独立参数的个数，而且可以帮助人们决定舍弃哪些次要因素。无量纲化的话的关键是，选择合适的特征尺度，而这也需要物理知识，经验和一定的数学分析。

Example 薛定谔方程的无量纲化。

考虑带有物理量纲的薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\psi + V(x)\psi.$$

我们定义特征长度为x_c,特征时间为t_c,则新变量

$$\bar{x} = \frac{x}{x_c}, \quad \bar{t} = \frac{t}{t_c}$$

为无量纲量。令$\bar{\psi}(\bar{x},\bar{t}) = \psi(x,t)$,那么，原方程可以改写成

$$i\hbar\frac{1}{t_c}\partial_{\bar{t}}\bar{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2mx_c^2}\partial_{\bar{x}\bar{x}}\bar{\psi} + V(x)\bar{\psi}.$$

如果等式两边乘以$(t_c)^2(x_c)^{-2}m^{-1}$,我们得到

$$i\left(\frac{\hbar t_c}{mx_c^2}\right)\partial_{\bar{t}}\bar{\psi} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar t_c}{mx_c^2}\right)^2\partial_{\bar{x}\bar{x}}\bar{\psi} + \frac{t_c^2}{mx_c^2}V(\bar{x}x_c)\bar{\psi}.$$

容易验证

$$\bar{V}(\bar{x}) = \frac{t_c^2}{mx_c^2}V(\bar{x}x_c)$$

是无量纲的势能函数，而（$\hbar = 1.05\times10^{-34}m^2kg/s$）

$$\varepsilon = \frac{\hbar t_c}{mx_c^2}$$

也是无量纲的，称为semi-classical parameter。于是，我们最终推出无量纲的薛定谔方程（为了简便，我们扔掉所有的"bar"）

$$i\varepsilon\partial_t\psi = -\frac{\varepsilon^2}{2}\partial_{xx}\psi + V\psi.$$

6.3 差分方程 (Difference equations)

对于微分方程模型，出于计算或者应用上的考虑，将微分方程离散化就得到了差分方程。而也有一些实际的问题，直接建立差分方程模型更为方便。

差分方程常出现在数值分析中，跟微分方程的有相似也有不同。差分方程的解定义在整数集上；很多微分方程的解析方法也可以用在差分方程上。本节中，我们只简单介绍差分方程的一些解析方法。更多的差分方程的理论同学可以在应用数学、计算数学等相关课程中学到。

我们先介绍一些（一元）离散微积分（discrete calculus）的符号。一个定义在整数集合的函数将每个整数n映射到一个另外一个数$a(n)$，或者表示为a_n。方程a_n的离散导数（discrete derivative）定义为

$$Da_n \equiv a_{n+1} - a_n.$$

二阶导数$D^2 a_n$是导数的导数，定义为

$$D^2 a_n = (a_{n+2} - a_{n+1}) - (a_{n+1} - a_n) = a_{n+2} - 2a_{n+1} + a_n.$$

其他高阶导数也可以类似的定义出来。

方程a_n的离散积分b_n定义为（类似于变上限积分）

$$b_n = \sum_{j=n_0}^{n} a_j.$$

Example 1. 对应连续方程$f(x) = x^k$的整数方程是

$$f_n = n(n+1)\cdots(n+k-1).$$

注意，$f(x)$和f_n都有k个因子。连续函数的$f(x)$的导数是$f'(x) = kx^{k-1}$。而f_n的离散导数是

$$Df_n = f_{n+1} - f_n = (n+1)\cdots(n+k) - (n)\cdots(n+k-1) = k(n+1)\cdots(n+k-1).$$

注意$f'(x)$和Df_n除了系数k，都有$k-1$个因子。

Example 2. 假设$k \neq -1$。方程$f(x) = x^k$的积分是$\frac{x^{k+1}}{k+1} + c_0$，这里$c_0$是一个积分常量。而$f_n = (n)\cdots(n+k-1)$的离散积分是

$$\begin{aligned}
b_n = \sum_{j=n_0}^{n} f_j &= \sum_{n_0}^{n} j\cdots(j+k-1) \\
&= \sum_{j=n_0}^{n} (j)\cdots(j+k-1)\frac{(j+k)-(j-1)}{k+1} \\
&= \frac{1}{1+k}\sum_{j=n_0}^{n}\left[(j)\cdots(j+k)-(j-1)\cdots(j+k-1)\right] \\
&= \frac{1}{1+k} n\cdots(n+k) - \frac{1}{1+k}(n_0-1)\cdots(n_0+k-1).
\end{aligned}$$

注意，在计算过程中，我们把被求和项写成了一个离散导数。事实上，如果$f_n = g_{n+1} - g_n$，那么我们得到

$$\sum_{j=n_0}^{n} f_j = g_{n+1} - g_{n_0}.$$

这类比于微积分中的$\int_a^b g'(x)dx = g(b) - g(a)$。

如果我们用$a_n^{(j)}$表示a_n的j阶离散导数，我们可以将第N阶离散导数$a_n^{(N)}$表示为一个N阶的差分方程。我们一般将一个N阶的差分方程记为

$$a_{n+N} = G[n, a_n, a_{n+1}, a_{n+2}, \cdots, a_{n+N-1}].$$

N阶的差分方程的通解依赖于N个独立的参数$c_1, c_2, \cdots, c_N$。这些参数以求和常数的形式出现。

Example 3. 阶乘函数。下面这个一阶线性齐次差分方程

$$a_{n+1} = n a_n$$

的通解为 $a_n = c_1(n-1)!$。这里，c_1是一个求和常数。

Example 4. 一阶线性齐次差分方程的一般形式。方程

$$a_{n+1} = p(n) a_n$$

的解可以表示为

$$a_n = a_1 \Pi_{j=1}^{n-1} \frac{a_{j+1}}{a_j} = a_1 \Pi_{j=1}^{n-1} p(j).$$

这里，a_1是一个任意常数。

Example 5. 一阶线性非齐次差分方程的一般形式。类似于微分方程的积分因子法，我们用“求和因子法”来求解下面的差分方程

$$a_{n+1} = p(n) a_n + q(n).$$

根据Exmaple 4，我们可以推测出求和因子是$(\Pi_{j=1}^n p(j))^{-1}$。事实上，如果我们将方程两边同时乘以$(\Pi_{j=1}^n p(j))^{-1}$，我们可以得到

$$\frac{a_{n+1}}{\Pi_{j=1}^n p(j)} - \frac{a_n}{\Pi_{j=1}^{n-1} p(j)} = \frac{q(n)}{\Pi_{j=1}^n p(j)}.$$

如果我们将等式两边从1到$n-1$加起来，就得到

$$\frac{a_n}{\Pi_{j=1}^{n-1} p(j)} - a_1 = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{q(k)}{\Pi_{j=1}^k p(j)}.$$

于是，经过化简我们得到

$$a_n = \Pi_{j=1}^{n-1} p(j) \left[\sum_{k=1}^{n-1} \frac{q(k)}{\Pi_{j=1}^k p(j)} + a_1 \right].$$

对于非线性的差分方程，一般直接求解更加困难。但是对于有些例子，我们还是得到解的。下面举两个例子。

Example 6. 考虑$a_{n+1} = (a_n)^2$，通过两边取对数函数，我们可以递推得到$\ln a_n = 2^{n-1} \ln a_1$。所以，我们得到，

$$a_n = (a_1)^{2^n - 1}.$$

Example 7. 考虑$a_{n+2} = (a_{n+1})^2 / a_n$。通过两边取对数函数，我们得到

$$\ln a_{n+2} - 2 \ln a_{n+1} + \ln a_n = 0.$$

于是$\ln a_n$的二阶离散导数是0。我们可以两次求和得到，

$$\ln a_n = c_1 n + c_2.$$

这里，c_1和c_2是任意数。于是我们得到差分方程的解

$$a_n = e^{c_1 n + c_2}.$$

关于差分方程的更多解析方法，有兴趣的同学可以参看下面这本教材：

`https://www.amazon.com/Advanced-Mathematical-Methods-Scientists-Engineers/dp/0387989315/ref=la_B001IQUJ56_1_1?s=books&ie=UTF8&qid=1522077321&sr=1-1`