数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2019年3月25日

PRELIMINARY DRAFT. NOT FOR WIDE CIRCULATION.

参考: 教材二第2章。

拓展: 教材三第12章。(拓展材料不属于作业、考试范围。)

3 微分方程模型选讲:输运/运输/运动

To every action there is always opposed an equal reaction.

—Isaac Newton

从某种意义上说,微分方程在17世纪80年代已经出现在微积分创立者的著作中了。微分方程一词首次出现在Leibniz给Newton在1676年写的信中,并在1684年后被用于他的著作中。牛顿的《自然哲学的数学原理》中包含了很多微分方程,这些方程用于构造并集成于初等几何框架中。从那时起,基本的自然规律和技术问题在严格数学模型下的公式频繁地甚至很普遍地,以微分方式给出。

本章中, 我们主要研究运动现象。

3.1 Eulerian 描述和 Lagrangian描述

我们对很多系统的研究,除了关心整个系统随时间演化的过程,也会对随着空间发生变化的性质感兴趣。在第一章中,我们了解到,对于整个群体的演化过程,我们可以用基于个体的模型,也可以用"连续介质模型"(比如,空间的质量密度函数,相空间的概率密度函数等)。为了方便讨论,这一章中,我们都只在时空区域内讨论,而不考虑动量坐标或者其他广义坐标了。

连续性理论导出的方程反映了在时间上的微小区间和空间上的微小区域平均后的性质。我们隐 形地做了如下的连续性假设:

合理平均后的个体(微观)的行为可以被 局部的群体(宏观)的行为 预测。

我们下面建立一般的连续性模型,描述密度函数 f(x,t) 随时间演化的偏微分方程模型,它刻画了在给定时间和空间之后,群体的某种特征或状态。如果我们对空间坐标积分,那么

$$\mathscr{F}(t) = \int f(x,t) dx$$

描述的就是整个群体的随时间变化的状态。我们之前接触的质量密度函数就是一个例子。但是密度函数也可以指其他的状态,比如温度、速度、能量,等等。本章中,我们将换个角度重温守恒律,通量函数、源函数等概念,也将学习一些解的技巧。

我们首先考虑所谓的**被动运输**,单个粒子按照外加的速度场运动,而自己的存在不会影响流向。我们设,这个外加的速度场为 v(x,t),它给出了一个粒子在时间 t 空间 x 的情况下,运动的

速度大小和方向。这种对某个状态在固定坐标系下的表示,称为**欧拉描述(Eulerian Description)**。 显然,粒子的运动满足如下的初值问题

$$\frac{dX}{dt} = v(X, t), \quad X(0) = X_0. \tag{3.1}$$

这样的初值问题也被称为粒子的轨(迹)线问题。

另外一种角度是,如果先确定了粒子的初始位置 $X(0) = X_0$,那么对整个速度场的欧拉描述就变得不再必要,而我们只需要知道粒子轨线上的速度。所谓的**拉格朗日描述(Lagrangian Description)**给出了跟一个给定粒子的运动相关的状态,将这个状态描述为了一个时间的函数。例如,上个例子中,对于初始位置为 X_0 的粒子,它的拉格朗日速度为

$$V(t; X_0) = v(X(t; X_0), t).$$

而粒子的轨 (迹)线问题的拉格朗日描述为

$$\frac{dX}{dt} = V(t; X_0), \quad X(0; X_0) = X_0.$$

一般的,跟粒子相关的状态变量(比如质量密度、温度、动量等)也都有他们的欧拉描述 f(x,t) 和相应的拉格朗日描述 $F(t) = F(t; X_0)$,它们的关系为

$$F(t; X_0) = f(X(t; X_0), t).$$

为了表述这个状态变量的时间演化,我们需要定义给定粒子时,这个状态的变化率,如果我们记

$$f_{\text{part}}(t) = F(t; X_0) = f(X(t; X_0), t).$$

我们可以用 Eulerian 描述下的方程 f 来表示这个拉格朗日导数

$$\frac{df_{\text{part}}(t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f \cdot \frac{dX}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f \equiv \frac{Df}{Dt}.$$

这个Eulerian形式的拉格朗日导数被称为 convective derivative 或者 material derivative (随体导数),我们记作 $\frac{Df}{Dt}$ 。

用现在Eulerian和Lagrangian的角度来看,在第一章中,我们推导守恒律模型,是直接用的Eulerian的形式。而很多时候,因为Lagrangian描述更加直观,所以我们先用Lagrangian描述完成模型的推导,再把模型用Eulerian形式写出来。教材二用 Reynolds Transport Theorem 推导了守恒律模型就是一种典型的例子。讲义中,我们只考虑一维的例子,高维的情况请大家自己阅读教材(作业)。

为了用公式表达连续性模型,特别是为了推导状态变量 f(x,t) 的变化率模型,我们考虑一个"物质滴"(material blob),它在初始时刻占据了一个区间 D,比如,我们可以想象流体中的一个水滴。这个物质滴(以下都只称 blob)随着时间移动,变形,我们把 blob 的占据的区域用 D(t) 表示。

一维的时候,这个区域就是一个跟时间有关的区间, $a(t) \le x \le b(t)$ 。那么这个状态变量在这个blob 中的累积值可以表示为

$$f_{\text{blob}}(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx.$$

根据 Leibniz 公式, 我们得到

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(x,t) dx + f(b,t) \frac{db}{dt} - f(a,t) \frac{da}{dt}.$$

利用例子运动的欧拉描述 (3.1), 我们可以推导出一维的 Reynolds Transport Theorem

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} f + \frac{\partial}{\partial x} (f v) \right] dx$$

我们需要强调的是,这里的状态变量 f(x,t) 可以是跟微观粒子有关的任意宏观状态变量。为了推导具体的输运方程,我们需要结合特定状态变量的守恒原理。比如,考虑物质的密度函数 $\rho(x,t)$,那么它在一个 blob 上的累积值是这一个 blob 的质量

$$m_{\text{blob}}(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} \rho(x, t) dx.$$

这时候,为了推导质量守恒方程,我们需要质量守恒原理:质量不生不灭,或者说,每一个blob的质量不随时间发生变化。即有,

$$\frac{d}{dt}m_{\text{blob}}(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) \right] dx = 0.$$

再由 blob 的任意性,我们推出(教材二中使用了 *du Bois- Reymond Lemma*)一维空间的连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0.$$

3.2 欧拉方程*

回顾一下,在第一章中,如果多维空间的密度函数为 u(x,t), $x \in \mathbb{R}^m$,通量函数为 $J(u) \in \mathbb{R}^m$,那么我们推出了

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

注意,这个版本中 u 仍为标量,或者说,只有一个状态变量。

事实上,我们可以进一步推广守恒律模型。考虑系统中有 d 个状态变量 $u=(u_1,\cdots,u_d)^T\in\mathbb{R}^d$,每个状态标量都是时间 t 和空间 $x\in\mathbb{R}^m$ 的函数,于是

$$u: \mathbb{R}^{m+1} \to \mathbb{R}^d, \quad J_i \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, m.$$

此时, 守恒律方程如下

$$\boldsymbol{u}_t + \sum_{i=1}^m (\boldsymbol{J}_i)_{x_i} = 0.$$

有时,我们令 $J = (J_1, \dots, J_m) \in \mathbb{R}^{d \times m}$,并把守恒律写成一个更紧凑的形式

$$\boldsymbol{u}_t + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{J} = 0.$$

欧拉方程是最常研究的流体方程,是守恒律的一种特例,其状态变量和通量函数为

$$oldsymbol{u} = egin{pmatrix}
ho \ oldsymbol{j} \ E \end{pmatrix}, \quad oldsymbol{J} = egin{pmatrix} oldsymbol{j} \ rac{1}{
ho} oldsymbol{j} \otimes oldsymbol{j} + p \mathbf{I} \ (E+p) rac{1}{
ho} oldsymbol{j} \end{pmatrix},$$

这里

- 自变量为时间 $t \in \mathbb{R}$, 空间 $x \in \mathbb{R}^3$, 其余都是状态变量.
- ρ∈ℝ是(质量)密度;

- $j = \rho v \in \mathbb{R}^3$ 是动量, 而 v 是速度;
- $p \in \mathbb{R}$ 是压强, $E \in \mathbb{R}$ 是能量密度;
- 欧拉系统需要补充一个状态方程来联系状态变量 $p = p(\rho, j, E)$.

另外,对于两个向量 u,v 来说, $u \otimes v = uv^T$ 表示向量的外积。

这里我们不需要理解为什么动量、能量的通量函数是怎么得来的。事实上,不同的流体方程的 建模重点就是给出一个流体相对应的flux function,这需要反复的力学实验和数学修正。很多科学 家、工程师终生的工作就是在流体模型的建立和修正上。

幸运的是,作为数学人,反而可以研究这个模型在抽象形式下的数学结构。不幸的是,这个模型的分析求解实在太难了!接下来,我们介绍一些这个模型的简化和改变。

简化的欧拉方程系统中,我们只考虑质量守恒和动量守恒方程而且,有时我们会进一步假设流体是不可压缩的,即 $\nabla \cdot v = 0$ 。回忆一下散度的意义(利用多元微积分中的高斯散度定理),想想为什么。

于是,我们得到不可压流体的欧拉方程

$$\left\{ egin{array}{l}
ho_t + oldsymbol{v} \cdot
abla
ho = 0, \ oldsymbol{v}_t + oldsymbol{v} \cdot
abla oldsymbol{v} = -rac{
abla p}{
ho}. \ . \
abla \cdot oldsymbol{v} \cdot oldsymbol{v} = 0. \end{array}
ight.$$

如果我们进一步假设,质量密度是个常数,不随空间时间发生变化,即 $\rho \equiv \rho_0$,那么我们得到

$$\begin{cases} v_t + v \cdot \nabla v = -\frac{\nabla p}{\rho_0}. \\ \nabla \cdot v = 0. \end{cases}$$

另外,我们可以通过加粘性项(扩散项)的方法从欧拉方程得到 Navier–Stokes 方程。比如,对于均匀质量密度,不可压的 Navier–Stokes 方程可以写成

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{v}_t + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \boldsymbol{v} = -\frac{\nabla p}{\rho_0} + \mu \Delta \boldsymbol{v}. \\ \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0. \end{array} \right. .$$

这里, μ是粘性系数。

为什么人们对流体方程感兴趣呢?这个答案也许太多了。我们这里只选择一个小的侧面去探究。考虑如下的一维的无粘 Burgers' equation

$$u_t + uu_x = 0.$$

我们通过这里例子来研究一些(非线性)一阶双曲方程的解法。

3.3 一阶双曲方程的特征线法

我们只学习**空间一维** 的双曲方程的特征线法。我们先考虑最简单的一类一阶双曲方程,一阶常系数的 advection equation

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + c\frac{\partial}{\partial x}\rho = 0, \quad \rho(x,0) = P(x).$$

容易验证 (也回顾一下守恒律中的通量),这个方程的解是将初值形状不变地按照速度 c 向右平移 (如果 c > 0),

$$\rho(x,t) = P(x-ct).$$

这种形状不变地按照一个固定的速度平移的解被称为"行波解"。教材二中在第2.3,2.4节对行波解有对"行波解"有一些扩充介绍,请大家自行阅读。

下面我们考虑半线性(或准线性,semilinear)的一阶波方程

$$\frac{\partial}{\partial t}p + c(x,t)\frac{\partial}{\partial x}p = r(x,t,p), \quad p(x,0) = f(x). \tag{3.2}$$

这里,速度函数 c(x,t) 跟空间位置和时间有关,但是跟方程的解本身无关。右端 r(x,t,p) 称为变化率函数,或者反应率函数,它可能依赖于空间位置、时间和解本身。这是一个 Eulerian 的 PDE 初值问题,但是可以转化成 Lagrangian 的ODE 问题。

对于每一个初值时刻的空间坐标 X₀,考虑特征线方程初值问题(即之前定义的轨迹问题),

$$\frac{dX}{dt} = c(X(t), t), \quad X(0; X_0) = X_0.$$

那么,波方程的解 p(x,t) 的 Lagrangian 描述为

$$P(t, X_0) = p(X(t; X_0), t), \quad X(0; X_0) = X_0.$$

根据连锁法则, 我们有

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}p + \frac{\partial}{\partial x}p\frac{dX}{dt}.$$

于是,我们得到,波方程 (3.2) 可以转化成 Lagrangian 变量的演化方程,即特征方程

$$\frac{dP}{dt} = r(X(t), t, P(t)), \quad \frac{dX}{dt} = c(X(t), t).$$

而这些方程的初值也跟原 Eulerian 变量做如下的匹配

$$P(0, X_0) = f(X_0), \quad X(0; X_0) = X_0.$$

这个 X 方程的轨线初值问题定义了 (x,t) 平面的一条曲线,这样的曲线被称为特征线,可以看作是一种广义的轨线。一旦 X(t) 确定了,可以代入 P 的方程,并求解 P(t)。

这就是所谓的 **特征线法**,把 Eulerian PDE的初值问题转化成了一组 Lagrangian ODE 的初值问题。这些 Lagrangian 解($X(t;X_0)$, $P(t;X_0)$)依赖于初值位置 X_0 ,有时候,我们可以把 Lagrangian 解再转化为 Eulerian 的解 p(x,t)。

我们来演算一个例子。

$$\frac{\partial}{\partial t}p + 2x\frac{\partial}{\partial x}p = xp^2$$
, $p(x,0) = 2 + \sin(x)$.

这个初值问题对应的特征问题是

$$\frac{dX}{dt} = 2X, \quad X(0) = X_0,$$
 (3.3)

$$\frac{dP}{dt} = XP^2, \quad P(0) = 2 + \sin(X_0).$$
 (3.4)

解 X 方程,我们容易得到 $X = X_0 e^{2t}$,我们将它代入 P 的方程,就得到

$$\frac{dP}{dt} = X_0 e^{2t} P^2.$$

结合初值求解 P 方程, 我们得到

$$P(t; X_0) = \left(\frac{X_0}{2}(1 - e^{2t}) + \frac{1}{2 + \sin(X_0)}\right)^{-1}.$$

求出 Lagrangian 解之后,我们想把它转化成 Eulerian 解 p(x,t)。注意到,由 $X=X_0e^{2t}$,我们得出 $X_0=e^{-2t}X$,我们将它代入上式,再将 X 换成 x,就得到了

$$p(x,t) = \left(\frac{x}{2}(e^{-2t} - 1) + \frac{1}{2 + \sin(xe^{-2t})}\right)^{-1}.$$

下面我们考虑拟线性(quasilinear)问题。回到刚才的一维波方程,

$$\frac{\partial}{\partial t}p + c(x, t, p)\frac{\partial}{\partial x}p = r(x, t, p), \quad p(x, 0) = f(x). \tag{3.5}$$

我们现在令速度函数 c(x,t,p) 也依赖于方程的解 p。这使得特征ODE出现了耦合

$$\frac{dP}{dt} = r(X(t), t, P(t)), \quad \frac{dX}{dt} = c(X(t), t, P(t)).$$

我们对比半线性问题,就会发现在半线性问题中,X 方程是跟P 无关的,我们可以先对X(t)求解。而且,如果c(x,t) 满足一些条件(ODE课上大家会学习),从不同点出发的特征线不会相交。不幸的是,对于拟线性问题,可能会出现特征线相交的情况。

我们以一维的 Burgers' equation 为例

$$p_t + pp_x = 0$$
, $p(x,0) = f(x)$.

我们引入特征线方程

$$\frac{dX}{dt} = p(X(t), t), \quad X(0) = X_0.$$

$$\frac{d}{dt}P = \frac{d}{dt}p(X(t), t) = \frac{dX}{dt}p_x + p_t = pp_x + p_t = 0.$$

于是,我们推导出了如下的特征方程

$$\frac{dX}{dt} = P, \quad X(0) = X_0,$$
 (3.6)

$$\frac{dP}{dt} = 0, \quad P(0) = f(X_0).$$
 (3.7)

注意到,由于P的方程里面不含X,我们可以先接P方程,再反过来解X方程。

我们先天真的求解如下, 由P(t) = P(0)

$$P(t; X_0) = p(X(t), t) = p(X(0), 0) = p(X_0, 0) = f(X_0),$$

于是,再解 X 方程,我们得到

$$X(t) = f(X_0)t + X_0.$$

但事实上,在有限时间内,Lagrangian 解可能会出现特征线相交的情况。

例如,我们考虑下面的初值条件

$$p(x,0) = \begin{cases} 1 - |x|, & |x| \le 1, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

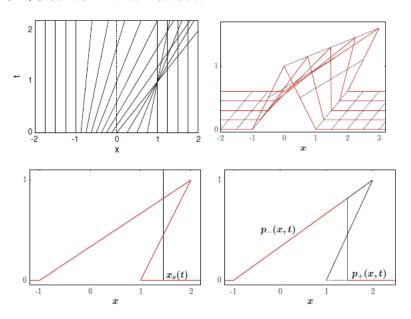
于是,我们可以分段求解,得到 Lagrangian 解

$$\begin{cases} X = X_0, & P = 0, & X_0 < -1. \\ X = (1 + X_0) t + X_0, & P = 1 + X_0, & -1 \le X_0 \le 0, \\ X = (1 - X_0) t + X_0, & P = 1 - X_0, & 0 \le X_0 \le 1, \\ X = X_0, & P = 0, & X_0 > 1. \end{cases}$$

我们亦可以把他们写回Eulerian的形式

$$p(x,t) = \begin{cases} 0, & x < -1\\ \frac{1+x}{1+t}, & -1 \le x \le t,\\ \frac{1-x}{1-t}, & t \le x \le 1,\\ 0, & x > 1. \end{cases}$$

通过观察特征线,我们发现特征线会在 t=1 时出现相交。那么特征线相交之后呢? 人们一般认为会出现激波(shock)解或者多值解。本讲义中,我们只介绍特征线相交之前的解析技巧。感兴趣的同学可以参考教材二第2.6节的后部分内容。



3.4 反应扩散方程中的行波解

作为本章节的结束,我们简单介绍一下另外一类方程的行波解现象。在生物数学中,很多群体动力学的表现是以扩散和反应为主,人们因此建立的数学模型是反映扩散方程。感兴趣的同学可以阅读法国大数学家Benoît Perthame院士的教材《Parabolic equations in Biology》(我们也可以在北大图书馆下载到这本书的电子版)。

3.4.1 引例: 肿瘤增长模型

作为引例,我们选讲Benoît Perthame在2014年国际数学家大会上一小时报告的部分内容,感兴趣的同学们请参考

https://www.ljll.math.upmc.fr/perthame/cours_M2.pdf

为了建立固态肿瘤的演化过程, 我们引入以下变量

- $\rho(x,t)$ 肿瘤细胞的密度函数;
- u(x,t) 细胞的运动速度;
- p(x,t) 细胞组织中的压力;

- *c*(*x*, *t*) 营养物的浓度
- *G*(*c*, *p*) 生长因子。

密度函数的演化方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho u) = \rho G(c, p), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \ t \ge 0.$$

压力和速度之间通过 Darcy's law 建立关系,

$$u = -\nabla_x p(\rho)$$
.

为了使得模型完整,我们需要给出压力 p 和密度 ρ 的关系,即本构关系(Constitutive law)。常见的选择有

$$p(\rho) = \frac{m}{m-1} \rho^{m-1} \ (m > 1), \quad \text{or} \quad p = \log \rho.$$
 (3.8)

大家注意,这其实是一个平衡率模型。通量函数是 ρu , 而源函数是 ρG . 如果我们选择 $p = \log \rho$,那么就得到如下的反应扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \Delta \rho + \rho G.$$

下一步,为了刻画肿瘤细胞的生长对于压力和营养物浓度的依赖关系,我们可以进一步对生长因子 G(c,p) 进行建模,我们这里就不展开了。

3.4.2 Traveling wave solutions (行波解)

很多时候方程的解是有很多个(比如一元二次函数就有两个解)。对于微分方程来说,我们知道求解往往非常复杂,甚至不可实现。但是,我们与其把通解(甚至是弱解的集合)找出来,再挑一个跟应用相关的,有时候,我们不如直接去找一个跟应用相关的特解。下面介绍的行波解就是这么一个例子。

考虑简化了的一维的反应扩散方程

$$\rho_t - \rho_{xx} = f(\rho).$$

这里, $\rho(x,t) \in [0,1]$ 表示密度, $f(\rho)$ 表示(绝对)反应率函数,它满足

$$f(0) = f(1) = 0.$$

注意,这仍然是一个平衡率模型。

为了寻找行波解,我们希望解出满足如下条件的特解, $\rho(x,t)=v(x-ct),\ c\in R\ v(-\infty)=1,$ $v(+\infty)=0.$ 这里,v(x) 刻画了解的形状,而 c 给出了波速。

易知, 行波解满足

$$-cv'-v''=f(v),\quad v(-\infty)=1,\quad v(+\infty)=0.$$

我们考虑如下的点燃温度模型(ignition temperature model): For $\theta \in (0,1)$, and $\mu > 0$,

$$f(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 \le \rho < \theta \\ \mu(1-\rho), & \theta < \rho \le 1. \end{cases}$$

我们下面证明,存在唯一的解 (c^*, v) ,使得 v(x) 是一个递减函数, $v(0) = \theta$,而且 $c^* > 0$ 。这里, $v(0) = \theta$ 可以理解为,为了找到唯一解而选取的可解性条件。

当 x < 0 时,我们有 $\rho > \theta$,所以方程约化为

$$cv' + v'' + \mu(1 - v) = 0.$$

由于 $v(-\infty)=1$ (蕴含有界性),我们得到下面的解

$$v(x) = 1 - (1 - \theta)e^{\lambda_+ x}, \quad x < 0,$$

其中,

$$\lambda_{+} = \frac{1}{2}(-c + \sqrt{c^2 + 4\mu}).$$

而当x>0时,我们有 $\rho<\theta$,所以方程约化为

$$cv' + v'' = 0.$$

由于 $\nu(+\infty)=0$,我们得到下面的解

$$v = \theta e^{-cx}, \quad x \ge 0.$$

注意到,由于 f 在 θ 处不连续,所以v'' 在 0 处有一个间断跳跃(这蕴含了v'在 0 处连续),所以我们得到

$$(1-\theta)\lambda_+ = \theta c.$$

再利用一些简单的微积分方法,我们可以证明满足条件的波速 $c^* > 0$ 可以被唯一确定。而且,v(x) 的表达式可以看出,v 的确是一个单调递减函数(作业)。