

数学模型

主讲人: [周珍楠](#)

打字人: [龚诚欣](#)

1 前言

• 变化率模型

给定初始状态, 状态变量(随时间)变化;

自变量: 时间

模型: 状态变量关于时间的变化速率

令 $\mathbf{x}(t)=(x_1(t), \dots, x_n(t)) \in \mathbb{R}^n$ 为状态变量, 则 $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0$, $\mathbf{f}=(f_1, \dots, f_n)$ 称为

变化率函数

• 守恒律模型

偏微分方程模型

自变量: 时间 t , 空间 \mathbf{x} 或其他

状态变量: 多元函数

考虑密度函数 $u(\mathbf{x}, t)$, $\mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 在时间 t 时, 位于 X_1, X_2 两点之间的质量

$m = \int_{x_1}^{x_2} u(x, t) dx$; 若忽略运动, 可提出变化率模型: $\frac{dm}{dt} = f(m, t)$

考虑水流, 假设这段质量 $m(t)$ 随时间变化的原因:

1° 在边界点 x_1, x_2 的通量 J ; 2° 在区间 $[x_1, x_2]$ 内的源 ψ ;

从 $\frac{d}{dt} m(t) = J|_{x_1} - J|_{x_2} + \int_{x_1}^{x_2} \Psi dx$ 可以推出 $\int_{x_1}^{x_2} (u_t + J_x - \Psi) dt = 0$ 。进而有

1° 平衡律: $u_t + \nabla \cdot \mathbf{J} - \psi = 0$;

2° 守恒律: $u_t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ 。

高维空间考虑 $u(\mathbf{x}, t)$ 为质量密度, 通量 $\mathbf{J} = u\mathbf{v}$, 则 $u_t + \nabla \cdot (u\mathbf{v}) = 0$

• 哈密顿力学和相空间密度

正则坐标: $\mathbf{r}(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$, $\mathbf{q}(t)$ 表示位置, $\mathbf{p}(t)$ 表示动量。

哈密顿力学方程: $\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$, $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}$, $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ 是哈密顿量。

考虑经典力学系统 $H = T + V$, 动能 $T = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m}$, 势能 $V = V(\mathbf{q})$;

成立: $\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}$, $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{q}) := \mathbf{F}(\mathbf{q})$

称 $\mathbf{r} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{2d}$ 所处空间为相空间, 考虑密度函数 $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ 。在时间 t 时, $\mathbf{q} \in S_1$,

$\mathbf{p} \in S_2$ 内所有粒子总质量, 则 $m(t) = \int_{S_1} \int_{S_2} f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p} d\mathbf{q}$

考虑守恒律方程: $f_t + \nabla \cdot (f \cdot \mathbf{r}') = 0$, 可以推导出:

刘维尔方程： $\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{q}) = 0$ 。对于一般的哈密顿量，刘维尔方程仍然成立。

2 变化率模型和稳定性的应用分析

考虑变化率模型 $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}, t)$ ， $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ 。若 f 不显含时间 t ，则得

自治系统： $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x})$ ， $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ 。本章只考虑自治系统。

• 化学反应中的动力学模型

质量作用定律：对于反应物与生成物； $\text{reactants} \xrightarrow{k} \text{products}$ ，生成物产生率和反应物浓度和反应常数 k 有关。

用 $A(t)$ 表示 A 的浓度，则有：

$$\frac{d}{dt} A(t) = \sum_n (\text{creation rate})_n - \sum_m (\text{consumption rate})_m, \text{ 且变化率由物质浓度的多项}$$

式给出。

注：只适用于基元反应（只经过一个暂态的反应）

1. Constant supply. A 被以恒定速率加入系统， $(\text{source}) \rightarrow k \rightarrow A$ ， $dA/dt = k$ ，称为零阶反应，即是 $k = k[A]^0$ 。（不是化学反应）

2. Decay. A 以恒定速率被消耗， $A \rightarrow k \rightarrow (\text{waste})$ ， $dA/dt = -kA$ ， $A(t) = A(0)e^{-kt}$ ，称为一阶反应。

3. Transformation. 1 个 A 分子转化成 1 个 B 分子， $A \rightarrow k \rightarrow B$ ， $dA/dt = -kA$ ， $dB/dt = +kA$ 。

4. Reversible transformation. 1 个 A 分子和 1 个 B 分子相互转化，可分成正向、逆向反应： $A \xrightarrow{k_1} B$ ， $B \xrightarrow{k_2} A$ ， $dA/dt = -k_1A + k_2B$ ， $dB/dt = k_1A - k_2B$ 。

5. Compound formation. 1 个 A 分子和 1 个 B 分子转化成 1 个 C 分子， $A + B \xrightarrow{k} C$ ， $dA/dt = -kAB$ ， $dB/dt = -kAB$ ， $dC/dt = kAB$

注：反应率正比反应物浓度乘积，基于相互独立分子碰撞的概率表述

注意下面这个特殊情况。若 A 与 B 相同，即 2 个 A 分子转化成 1 个 C 分子， $A + A = 2A \xrightarrow{k} C$ ，若 $dC/dt = kA^2$ ，则 $dA/dt = -kA^2$ 是错的！（重复计算）

6. Multiple products. m 个 A 分子与 n 个 B 分子生成 p 个 C 分子与 q 个 D 分子， $mA + nB \xrightarrow{k} pC + qD$ ，为避免重复计算，定义：

reaction rate = -rate of consuming one unit of reactant = + rate of creating one unit of product.

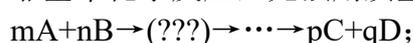
$$\text{于是 } \text{rate} = -\frac{1}{m} \frac{dA}{dt} = -\frac{1}{n} \frac{dB}{dt} = \frac{1}{p} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{q} \frac{dD}{dt}$$

又由相互独立分子碰撞假设， $\text{rate} = kA^m B^n$

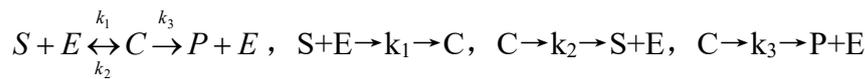
回到 case 5，我们知道 $dA/dt = -2kA^2$ ， $dC/dt = kA^2$ ，因此 $d(A+2C)/dt = 0$ 。

米氏酶动力学简介：

非基本化学反应，无法用质量作用定律



考虑酶促化反应：底物 S，最终产物 P，酶 E，中间产物 C，即是



$dP/dt = k_3 C$, $dC/dt = k_1 SE - k_2 C - k_3 C$, $dE/dt = -k_1 SE + k_2 C + k_3 C$, $dS/dt = -k_1 SE + k_2 C$
 设初值 $S=S(0)$, $E=E(0)$, $C(0)=0$, $P(0)=0$, 注意到 $d(C+E)/dt=0$, 则 $E(t)=E(0)-C(t)$ 。
 这就将 4 维动力系统转化为 3 维动力系统。

• 稳定性理论简介

种群生长的 logistic 模型和一维系统的稳定性简介：

考虑方程 $\frac{dx}{dt} = rx \left(1 - \frac{x}{N}\right)$, x 是种群数量, r 是固有增长率, N 是最大容纳量

- 1° 当 $x(0)=0$ 或 N 时, $x(t) \equiv x(0)$;
- 2° 0 附近的轨道 $x(t)$ 远离 0 , N 附近的轨道 $x(t)$ 靠近 N 。

引入定义：对于自治系统 $\frac{dx}{dt} = f(x)$ (*):

- 1° $f(x)=0$ 的根 $x=x_0$ 称为方程的平衡解;
- 2° 若存在 x_0 的邻域使得若 $x(0)$ 在此邻域内则 $\lim_{t \rightarrow +\infty} x(t) = x_0$, 则称平衡点是(渐近)稳定的; 否则称为不稳定的。

对于一维系统, 在平衡点附近做 Taylor 展开, 有 $x'(t) = f(x) = f'(x_0)(x-x_0) + o(x-x_0)$ 。
 忽略 Peano 余项, 对于近似线性方程 $x'(t) = f'(x_0)(x-x_0)$ (**), 我们有:

- 1° 若 $f'(x_0) < 0$, 则 x_0 对于(*)和(**)是稳定的;
- 2° 若 $f'(x_0) > 0$, 则 x_0 对于(*)和(**)是不稳定的;
- 3° 若 $f'(x_0) = 0$, 则 x 是退化的平衡点, 需看第一个非 0 的高阶导数。

在很多问题中, 系统的解依赖于一个参数。平衡点的个数和性质随着参数的变化发生了改变, 这种解的结构定性改变叫做分岔。

• 相互竞争模型和二维系统的稳定性简介

$$x_1'(t) = r_1 x_1 \left(1 - \frac{x_1}{N_1} - \sigma_1 \frac{x_2}{N_2}\right), \quad x_2'(t) = r_2 x_2 \left(1 - \sigma_2 \frac{x_1}{N_1} - \frac{x_2}{N_2}\right), \quad \sigma_1, \sigma_2 \text{ 是相对阻滞系数。}$$

我们考虑 $t \rightarrow +\infty$, $x_1(t)$ 和 $x_2(t)$ 如何变化? 令 $x_1'(t) = x_2'(t) = 0$, 得到四个平衡解:

$$(N_1, 0), (0, N_2), (0, 0), \left(\frac{N_1(1-\sigma_1)}{1-\sigma_1\sigma_2}, \frac{N_2(1-\sigma_2)}{1-\sigma_1\sigma_2}\right).$$

考虑最后一个解, 知 σ_1, σ_2 同时

> 1 或 < 1 时, P_4 在第一象限。

• 二维常微分方程稳定性理论

设 $\mathbf{x}=(x_1, x_2)$, $d\mathbf{x}/dt=(f(x_1, x_2), g(x_1, x_2))$ (*), 令 $P_0=(x_1^0, x_2^0)$ 为平衡点。在 P_0 点做 Taylor

展开, 得到近似线性方程 $\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 - x_1^0 \\ x_2 - x_2^0 \end{pmatrix}$ (**), A 是 Jacobi 矩阵。

设 $p = -(f_{x_1} + g_{x_2})|_{P_0}$, $q = \det(A) = |A|$, 则有结论:

- 1° 若 A 特征值实部 $\neq 0$, 则 P 对(*)和(**)的稳定性相同; a) $p > 0$ 且 $q > 0$, 则 P_0 稳定; b) $p < 0$ 或 $q < 0$, 则 P_0 不稳定;
- 2° 临界情况: (*)和(**)稳定性不同 ($p > 0, q = 0$)

• 种群的相互依存模型

$$\frac{dx_1}{dt} = r_1 x_1 \left(1 - \frac{x_1}{N_1} + \sigma_1 \frac{x_2}{N_2} \right); \quad \frac{dx_2}{dt} = r_2 x_2 \left(-1 + \sigma_2 \frac{x_1}{N_1} - \frac{x_2}{N_2} \right)$$

系统的平衡点是 $P_1(N_1, 0)$, $P_2\left(\frac{N_1(1-\sigma_1)}{1-\sigma_1\sigma_2}, \frac{N_2(\sigma_2-1)}{1-\sigma_1\sigma_2}\right)$, $P_3(0, 0)$ 。

只有 P_2 和两个种群的相互依存有关。 P_2 有实际意义且稳定的条件是 $\sigma_1 < 1, \sigma_2 > 1, \sigma_1\sigma_2 < 1$ 。

• 食饵-捕食者模型

$$\frac{dx}{dt} = rx - axy, \quad \frac{dy}{dt} = -dy + bxy, \quad \text{平衡点是 } P_1=(d/b, r/a), P_2=(0, 0)$$

令 $f(x) = x^d e^{-bx}$, $g(y) = y^r e^{-ay}$, 求出极值点 $x_0 = d/b$, $y_0 = r/a$, 恰好是平衡点。

解 ode 方程, 知通解为 $x^d e^{-bx} y^r e^{-ay} = c$ 。当 $c = f(x_0)g(y_0)$ 时, 相轨线退化为平衡点 P_1 ; 当 c 减小时, 相轨线是一族从 P_1 向外扩张的封闭曲线 (P_1 是中心)。实际上, $\bar{x} = \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt = \frac{d}{b}$, $\bar{y} = \frac{r}{a}$ 。

3 微分方程模型选讲: 输运/运输/运动

只考虑时空区域, 系统性质随时间变化

连续性假设: 微观的平均~宏观的局部

• Eulerian 描述和 Lagrangian 描述

引例: 被动运输

1. 单个粒子按外加的速度场运动; 2. 自己的存在并不影响速度场

A. 欧拉描述: 在固定的坐标系下表示 $v(x, t)$, $dx/dt = v(x, t)$, $x(0) = x_0$ 。

B. 拉格朗日描述: 给定一个粒子的运动, 将其他状态变量描述成时间的函数。

关联: $V(t, X_0) = v(x(t), t)$ 。

一般地, 跟粒子运动 $x(t)$ 相关的状态变量也有其欧拉描述 $f(x, t)$ 和拉格朗日描述 $F(t, X_0)$ 。

考虑物质滴, 目标: 已知 $dx/dt = v(x, t)$, 推导 $f(x, t)$ 的模型。考虑一维情形。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x, t) dx &= \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(x, t) dx + f(b, t) \frac{db}{dt} - f(a, t) \frac{da}{dt} = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(x, t) dx + f(x, t) v(x, t) \Big|_{x=a}^{x=b} \\ &= \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) v(x, t) dx \quad (\text{Reynolds Transport Theorem}) \end{aligned}$$

由物质滴的任意性立即得到守恒律方程。

• 欧拉方程*

是一种特殊的守恒律方程。

守恒律: $\mathbf{u}_t + \nabla_x \cdot \mathbf{J} = 0$, 取 $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \mathbf{j} \\ E \end{pmatrix}$, $\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{j}^T \\ \frac{1}{\rho} \mathbf{j} \cdot \mathbf{j}^T + p\mathbf{I} \\ (E+p)\frac{1}{\rho} \mathbf{j}^T \end{pmatrix}$ 得欧拉方程。

自变量是 $t \in \mathbb{R}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, 其余都是状态变量。

其中 $\rho \in \mathbb{R}$ 是密度, $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ 是动量, p 是压强, E 是能量密度。

简化: 流体不可压缩, 即是 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, 则方程转为 $\begin{cases} \rho_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0 \\ \mathbf{v}_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} \end{cases}$ 。进一步简化, $\begin{cases} \rho_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{cases}$

设 ρ 不随时间空间发生变化, 得到 $\begin{cases} \mathbf{v}_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho_0} + \mu \Delta \mathbf{v} \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \end{cases}$, 其中 $\mu \Delta \mathbf{v}$ 是粘性项,

μ 是粘性系数。

• 一阶双曲方程的特征线法

半线性一阶波方程: $\frac{\partial}{\partial t} p + c(x,t) \frac{\partial}{\partial x} p = r(x,t,p), p(0,x) = f(x)$, 其中 $c(x,t)$ 是速度,

$r(x,t,p)$ 是变化率函数。这是欧拉描述, 可以转化为拉格朗日描述:

$$\frac{dX}{dt} = c(X(t), t), X(0) = X_0, \quad \frac{dP}{dt} = p_t + p_x \frac{dx}{dt} = p_t + p_x c = r(t, X, P), P(0, X_0) = f(X_0)$$

这个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。解出拉格朗日描述后代回即得欧拉描述。

拟线性一阶波方程: $\frac{\partial}{\partial t} p + c(x,t,p) \frac{\partial}{\partial x} p = r(x,t,p), p(0,x) = f(x)$, 转化为拉格朗日

描述: $\frac{dX}{dt} = c(X(t), t, P(t)), \frac{dP}{dt} = r(t, X(t), P(t))$ 。一般无法依次求解, 特征线可能相交。

特例: Burgers' equation: $P_t + PP_x = 0$ 。引入特征线: $\frac{dX}{dt} = P(t), \frac{dP}{dt} = 0$ 。注意到特

征线在 $t > 1$ 时相交, 引入激波解 (有时是物理解、单值解、积分意义下满足守恒律)。利用 p 的守恒律有 $p_t + (q(p))_x = 0$, 其中 $q(p)$ 是 p 的通量函数。

在 $[a,b]$ 上对 x 积分有 $\frac{d}{dt} \left(\int_a^b p dx \right) + q(p) \Big|_{x=a}^{x=b} = 0$ 。我们希望引入激波解 $x_s(t)$ 将两个

$$\text{解分开, 即是 } \left[\frac{d}{dt} \left(\int_a^{x_s} p_- dx \right) - q(p_-(a,t)) \right] + \left[\frac{d}{dt} \left(\int_{x_s}^b p_+ dx \right) + q(p_+(b,t)) \right] = 0$$

进一步变换得到

$$\left(\int_a^{x_s} \partial_t p_- dx + q(p_-(x_s, t)) - q(p_-(a, t)) \right) + \left(\int_{x_s}^b \partial_t p_+ dx + q(p_-(b, t)) - q(p_-(x_s, t)) \right) - q(p_-(x_s, t)) + q(p_+(x_s, t)) + [p_-(x_s, t) - p_+(x_s, t)] \frac{dx_s}{dt} = 0。$$

前面由于守恒律是 0，这就得出了激波解 $\frac{dx_s}{dt} = \frac{q(p_+(x_s, t)) - q(p_-(x_s, t))}{p_+(x_s, t) - p_-(x_s, t)}$ 。

• 反应扩散方程的行波解

考虑一维反应扩散方程 $\rho_t - \rho_{xx} = f(\rho)$ ，其中 ρ 是密度， $f(\rho)$ 表示反应率函数， $f(0) = f(1) = 0$ 。我们希望解出 $\rho(x, t) = v(x - ct)$ ， $c \in \mathbb{R}$ ， $v(-\infty) = 1$ ， $v(+\infty) = 0$ 。

代入知 $-cv' - v'' = f(v)$ 。考虑点燃温度模型 $f(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \rho < \theta \\ \mu(1 - \rho), & \theta < \rho \leq 1 \end{cases}$ ，并且希望

$v(0) = \theta$ （为了唯一解而选取的可解性条件），得到解 $v(x) = 1 - (1 - \theta)e^{\lambda_+ x}$ ， $x < 0$ ，其中 $\lambda_+ = \frac{1}{2}(-c + \sqrt{c^2 + 4\mu})$ ； $v(x) = \theta e^{-c x}$ ， $x > 0$ 。利用 v' 在 $x=0$ 处连续可解出 c 。

4 变分原理与优化简介

• 微积分中的极值问题和泛函

泛函：把函数映成标量的映射。本章只考虑形如一个函数及其导数的定积分 $J(y) = \int_a^b L(x, y, y', \dots) dx$ 。把 L 称为拉格朗日量。考虑目标泛函的极小化问题。

• 波动现象

哈密顿变分原理：考虑力学系统，自变量 t ，状态变量 $q, v \in \mathbb{R}^s$ ，设动能为 $T(t, q, v)$ ，势能为 $V(t, q)$ 。质点在 t_1 时刻始于 q_1 ，在 t_2 时刻始于 q_2 。拉格朗日量为 $L = T - V$ ，则运动轨迹取作用量积分 $S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, q, v) dt$ 的极值。

泛函导数：考虑一个元素为函数 $\rho: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^s$ 的空间 M ， J 为定义在 M 上的泛函， $J: M \rightarrow \mathbb{R}$ ， J 的方向导数如下定义： \forall 可容许 $h(x)$ ， $\int_a^b \frac{\delta J}{\delta \rho}(x) \cdot h(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(\rho + \varepsilon h) - J(\rho)}{\varepsilon}$

$= \frac{d}{d\varepsilon} J(\rho + \varepsilon h) \Big|_{\varepsilon=0}$ 。回到 $S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, q(t), q'(t)) dt$ ，扰动满足 $h(t_1) = h(t_2) = 0$ 且光滑。

则 $\int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta S}{\delta q} \cdot h dt = \frac{d}{d\varepsilon} S(q + \varepsilon h) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q} \cdot h + \frac{\partial L}{\partial q'} \cdot h' dt = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial q'} \right) \right) \cdot h dt$ 。因此，

$\frac{\delta S}{\delta q} = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial q'} \right)$ 。由最小作用量原理得 Euler-Lagrange： $\frac{\delta S}{\delta q} = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial q'} \right) = 0$ 。

推广: $\frac{\partial L}{\partial q} - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{x_j}} \right) = 0$ 。

绳索的微小振动: $u(x,t)$ 是偏移平衡位置的量。模型假设: 振动过程满足最小作用量原理, 且 $(t,x) \in [0,T] \times [a,b]$; 2° $\rho(x)$ 线密度, 动能 $\frac{1}{2} \rho u_t^2$; 3° 形变 $ds - dx =$

$\frac{1}{2} u_x^2 dx$, 势能 $V = \frac{1}{2} \mu u_x^2$ 。欧拉方程: $\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right)$, 进而得到一阶波

方程 $\rho(x) u_{tt} = \mu u_{xx}$ 。

推广: 若有外力, 得到受迫振动方程: $\rho(x) u_{tt} = \mu u_{xx} + f(x,t)$ 。

微小膜振动, $u(t,x,y)$, 则得到 $\rho(x,y) u_{tt} = \mu(u_{xx} + u_{yy}) + f(x,y,t)$ 。

极小曲面问题: 考虑边界固定的膜 $(x,y,u(x,y))$, 膜表面积 $A = \iint_D \sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2} dx dy$,

极小曲面: A 达到极值, 拉格朗日量 $L = \sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2}$, 化简弃高阶项得到 $u_{xx} + u_{yy} = 0$,

$u(x,y) = g(x,y)$ 在边界上 (laplace 方程)。

• 边界条件的影响: 自然边界条件

回顾最小作用量原理 $S = \int_{t_1}^{t_2} L(t, q, \dot{q}) dt$, 边界作用: 1° 对 E-L 方程给出边界作用; 2° 给出扰动 h 的边界条件; 3° 求变分中边界项消失。称为第一类边界条件。

有一个变化边界的问题: $(0,0)$ 到 $y=f(x)$ 的最佳路径问题, 弧长 $\int_a^b \sqrt{1 + y'^2} dx$, 引入

扰动 $y_0 = y + \varepsilon h$, $b_0 = b + \varepsilon c$, 其中 $h(0) = 0$, 扰动后泛函 $J = \int_0^{b+\varepsilon} \sqrt{1 + (y' + \varepsilon h')^2} dx$, 计算

得到自然边界条件 $y'(b) = -\frac{1}{f'(b)}$ 。总结来看, 最优解满足 $-\left(\frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} \right)' = 0, y(0) = 1$

$y(b) = f(b), y'(b) = -\frac{1}{f'(b)}$ 。

• 带约束的优化问题

等周问题: 给定解的积分条件;

完整系统: 给定解逐点满足的条件;

优化控制: 给定解逐点满足的微分方程。

等周问题: $\max_y J = \int_a^b L(x, y, y') dx, s.t. G = \int_a^b g(x, y, y') dx = 0$, 增广目标 $I = J - \lambda G$ 。

增广的拉格朗日函数: $L_0 = L - \lambda g$, 则 $I = \int_a^b L_0(x, y, y') dx$ 。引入扰动, 假设由边界

条件变分中边界消失, 得到带约束的 E-L 方程 $\frac{\partial L_0}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L_0}{\partial y'} \right) = 0$ 。

微分方程约束: 优化控制

希望最小化泛函 $J = \int_0^T L(t, x(t), u(t)) dt$ 使得 x, t 满足 $\frac{dx}{dt} = f(t, x, u)$

初值条件 $x(0)=x_0$, 终止条件 $x(T)=x_1$, T 自由。其中 x 状态函数, u 控制函数。

寻找控制函数 $u(t)$ 使得 1° 目标可达: $x(t)$ 能在某时 T 达到 x_1 ; 2° 在所有可行控制中, 对应花费 J 最小。待求: $u(t), x(t), T$ 。

引入含时的拉格朗日乘子 $\lambda(t)$, 增广的拉格朗日函数 $L_1=L-\lambda(t)[x'(t)-f]$, 增广泛函

$I = \int_0^T L_1(x, u, x', \lambda) dt$ 。引入扰动:

$$\tilde{x}(t) = x^*(t) + \varepsilon h(t), \quad \tilde{u}(t) = u^*(t) + \varepsilon v(t), \quad \tilde{\lambda}(t) = \lambda^*(t) + \varepsilon \gamma(t), \quad \tilde{T} = T^* + \varepsilon S。$$

变分, 得到 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\tilde{I} - I}{\varepsilon} = \int_0^T \left[\frac{\partial L_1}{\partial x} h + \frac{\partial L_1}{\partial x_1} h' + \frac{\partial L_1}{\partial u} v + \frac{\partial L}{\partial \lambda} \gamma \right] dt + L_1|_{t=T^*} S$

$$= \int_0^T \left[\left\{ \frac{\partial L_1}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_1}{\partial x'} \right) \right\} h + \frac{\partial L_1}{\partial u} v + \frac{\partial L}{\partial \lambda} \gamma \right] dt + \left(L_1 S + \frac{\partial L_1}{\partial x} h \right) \Big|_{t=T^*}$$

对终止条件 $x^*(T^* + \varepsilon S) + \varepsilon h(T^* + \varepsilon S) = x_1$ 做泰勒展开, 代入变分的边界项, 得到

$$\left(L_1 - x' \frac{\partial L}{\partial x'} \right) \Big|_{t=T^*} S。定义哈密顿量 $H = L_1 - x' \frac{\partial L_1}{\partial x'} = L + \lambda f$, 由扰动任意, 得到$$

$$\frac{\partial L_1}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_1}{\partial x'} \right) = 0, \quad \frac{\partial L_1}{\partial u} = 0, \quad \frac{\partial L_1}{\partial \lambda} = 0, \quad H(T^*) = 0。其中(3)是状态方程, (1)是协态方程$$

$$\text{可改写为 } \frac{\partial L}{\partial x} + \lambda \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{d\lambda}{dt} = 0, \quad (2) \text{ 可看成几何约束 } \frac{\partial L}{\partial u} + \lambda \frac{\partial f}{\partial u} = 0。$$

5 边值问题及其应用

• 初值问题和边值问题

边值条件: 在自变量定义域边界给出

边值问题: 微分方程+边值条件

本章只考虑一维二阶方程的边值问题。

考虑边值问题: $f'' + \lambda f = 0, f(0) = 0, f(L) = 0$ 。当 $\lambda \leq 0$ 时, 只有平凡解。 $\lambda > 0$ 时, 通

解为 $f = c_1 \sin(\sqrt{\lambda} x) + c_2 \cos(\sqrt{\lambda} x)$, 根据边界条件, 知 $c_2 = 0, c_1 \sin(\sqrt{\lambda} L) = 0$,

$$\text{记 } \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2, \text{ 相应地 } f_n = c_1 \sin\left(\frac{n\pi x}{L} \right)。$$

边值条件的分类: 第一类 Dirichlet: $f=c$; 第二类 Neumann: $f'=c$; 第三类 Robin: $gf'+hf=c$; 周期: $f(a)=f(b), f'(a)=f'(b)$ 。前三类 $c=0$ 时称为齐次条件。

• 初边值问题

热传导问题: u 一维杆的温度, k 导热系数, u 满足 $u_t = ku_{xx}$, 初值条件 $u(x, 0) = u_0(x)$,

边值条件: 在 $x=0, L$ 给出 $t > 0$ 。一些具体边值条件: 给定温度: $u(0, t) = u_B(t)$; 绝

热条件: $-ku_x(0, t) = f(t)$; 牛顿冷却定律: 散热速率正比于温度差, $-ku_x(0, t) = -H[u(0, t) - u_a]$

$-u_B(t)$], H 是传热系数。

弹性波动问题: $u_{tt}=c^2u_{xx}$, I.C.: $u(x,0)=f(x)$, $u_t(x,0)=g(x)$; B.C. $u(0,t)=0$, $u(L,t)=0$ 。

考虑一种特殊的解: $u(x,t)=m(x)k(t)$, 得到 $m_{xx}+\lambda m=0$, $m(0)=m(L)=0$ 。

• Sturm-Liouville Problems

S-L 方程: $Lf+\lambda\sigma f=0$, 其中 $Lf=\frac{d}{dx}\left(p\frac{df}{dx}\right)+qf$ 。

S-L 特征值问题: $Lf+\lambda\sigma f=0$, B.C.: $\beta_1f(a)+\beta_2f'(a)=0$, $\beta_3f(b)+\beta_4f'(b)=0$, 其中 $\beta_i\in\mathbb{R}$, $q,p,\sigma\in C[a,b]$, 且 $p,\sigma>0$ 。

若存在非平凡解, 对应的 λ 称为特征值, 对应的非平凡解称为特征函数。本章只考虑 $f_n(x)\in\mathbb{R}$ 。

性质: 1° 特征值都是实数, 2° $\lambda_1<\lambda_2<\dots<\lambda_n<\dots$; 3° f_n 完备; 4° 属于不同特征值的特征函数关于权函数 σ 正交, 即是 $\int_a^b f_n f_m \sigma dx = 0$, 于是可以求出 c_n 。

特征函数展开法: $Lu=f$, $u(a)=u(b)=0$, 求 $u(x)$ 。考虑 Regular S-L 特征值问题 $Lf_n+\lambda_n\sigma f_n=0$, $f_n(a)=f_n(b)=0$ 。假设已求解 λ_n, f_n , 令 $u(x)=\sum_n c_n f_n(x)$ 。LHS= $L\sum_n c_n f_n(x)=\sum_n c_n Lf_n(x)=-\sum_n c_n \lambda_n \sigma f_n$ 。再利用 σ 正交性即可。

注意, 这里解可以写成 $u(x)=\int_a^b f(x_0)G(x,x_0)dx_0$, 其中

$$G(x,x_0)=\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{\phi_n(x)\phi_n(x_0)}{-\lambda_n\int_a^b\phi_n^2(x')\sigma(x')dx'}$$
 称为 Green 函数。

• 格林函数和弗雷德霍姆二选一

将区间 $[a,b]$ 以 Δx 剖分为 N 份, 剖分格点为 x_i , 则

$$f(x)\approx\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\chi_{x_i,\Delta x}(x)=\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\frac{\chi_{x_i,\Delta x}(x)}{\Delta x}\Delta x$$
。形式定义 $\delta(x-x_i)=\lim_{\Delta x\rightarrow 0}\frac{\chi_{x_i,\Delta x}(x)}{\Delta x}$ 且

$$f(x)=\int_R f(x')\delta(x-x')dx'$$
。

性质: 1° $\int_R \delta(x-x')dx'=1$; 2° $\delta(c(x-x_0))=\frac{1}{|c|}\delta(x-x_0)$; 3° Heaviside Step

$$H(x-x')=\begin{cases} 0, & x < x' \\ 1, & x > x' \end{cases}$$
 是 δ 的原函数。

回顾 $Lu=f$ 的解 $u(x)=\int_a^b f(x_0)G(x,x_0)dx_0$, 令 $f(x_0)=\delta(x_0-x_s)$, 那么

$$u(x)=\int_a^b \delta(x_0-x_s)G(x,x_0)dx_0=G(x,x_s)$$
, 从而满足 $LG(x,x_s)=\delta(x-x_s)$ 。

格林公式: $Lu=\frac{d}{dx}\left(p\frac{du}{dx}\right)+qu$, 则 $\int_a^b uLv-vLudx=p(uv'-u'v)|_a^b$ 。

引理: 若 u,v 满足齐次 B.C., 则 $\int_a^b uLv-vLudx=0$ 。

取 $v(x)=G(x,x')$, $u(x)$ 是 BVP 的解, 则 $\int_a^b u(x)\delta(x-x')-G(x,x')f(x)dx=0$, 得到

$$u(x') = \int_a^b f(x)G(x',x)dx.$$

回到特征函数展开法, 得到 $-a_n\lambda_n = \frac{\int_a^b f\phi_n dx}{\int_a^b \phi_n^2 \sigma dx}$ 。若某个 $\lambda_n = 0$:

case 1: $\int_a^b f\phi_n \neq 0$, 则 BVP 无解; case 2: $\int_a^b f\phi_n = 0$, 则 BVP 无穷多解。

注: 存在 $\lambda_n=0$, 即 $L\Phi=0$ 有非平凡解;

a: BVP: $Lu=f$ +齐次 B.C.; b: 齐次特征问题: $L\Phi=0$ +齐次 B.C.;

1° 若 b 只有平凡解, 则 a 有唯一解;

2° 若 b 有非平凡解, 则回到上面两个 case。

6 代数方程模型和差分方程模型

• 量纲分析

研究力学问题, 将长度 l , 质量 m , 时间 t 作为基本量纲, 记以大写字母 L, M, T 。物理量 q 的量纲记为 $[q]$ 。

数学公式表示物理量之间的关系, 等式两边量纲应相同。

白金汉 π 定理: 设 m 个有量纲的物理量 q_1, \dots, q_m 之间存在物理定律 $f(q_1, \dots, q_m)=0$,

取 $q_1^{y_1} \dots q_m^{y_m} = \lambda$ 。基本量纲 X_1, \dots, X_n , 不妨设 $n \leq m$, 设 q_1, \dots, q_m 的量纲 $[q_j] = \prod_{i=1}^n X_i^{a_{ij}}$,

矩阵 $A=(a_{ij})_{n \times m}$ 称为量纲矩阵, $Ay=0$ 。设 A 的秩 $\text{rank}A=r$, 则 $Ay=0$ 有 $m-r$ 个基

本解, 记为 $y^{(s)}$, 则存在 $m-r$ 个相互独立的无量纲量 $\pi_s = \prod_{j=1}^m q_j^{y_j^{(s)}}$, 且理论上存在

$F(\pi_1, \dots, \pi_{m-r})=0$ 。(无量纲化、无量纲参数不唯一、隐函数存在定理常应用)

• 无量纲化

考虑抛射问题:
$$\begin{cases} \ddot{x} = -\frac{r^2 g}{(x+r)^2} \\ x(0) = 0, \dot{x}(0) = v \end{cases}$$
, 目标: 无量纲化, 降低参数个数。

相同量纲的参数组合: x_c, t_c , 新变量 $\bar{x} = \frac{x}{x_c}, \bar{t} = \frac{t}{t_c}$ 是无量纲的。

构造 1: $x_c=r, t_c=r/v$, 则
$$\begin{cases} \bar{\varepsilon} \bar{x}'' = -\frac{1}{(\bar{x}+1)^2} \\ \bar{x}(0) = 0, \bar{x}'(0) = 1 \end{cases}, \bar{\varepsilon} = \frac{v^2}{rg}$$
, 解 $\bar{x}(\bar{t}; \bar{\varepsilon})$ 只含一个独立参数。

构造 2: $x_c = v^2 g^{-1}, t_c = v g^{-1}$, 则
$$\begin{cases} \bar{x}'' = -\frac{1}{(\varepsilon \bar{x} + 1)^2}, \varepsilon = \frac{v^2}{rg} \\ \bar{x}(0) = 0, \bar{x}'(0) = 1 \end{cases}$$

若 ε 很小, 我们发现构造 1 不能省去 ε , 而构造 2 可以省去 ε 。
无量纲参数反映了各种物理效果的相对重要性。

7 微扰法和渐进分析简介

• 渐近展开

定义在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时: 1° $\lim f(\varepsilon)/g(\varepsilon) = 1$, 记作 $\varepsilon \rightarrow 0, f \sim g$; 2° $f = O(g)$: 存在 $A > 0$, 当 ε 充分小时, $|f| < A|g|$; 3° $f = o(g), \lim f(\varepsilon)/g(\varepsilon) = 0$ 。

考虑函数 $x(t, \varepsilon)$, 有分离变量类型的级数展开 $x(t, \varepsilon) = \delta_0(\varepsilon)x_0(t) + \delta_1(\varepsilon)x_1(t) + \dots$, 且 $x_n(t) = O(1)$ (t 在一定范围内), 度规函数满足 $\delta_0(\varepsilon) \gg \delta_1(\varepsilon) \gg \dots$, 称为渐近展开的基本形式。渐近展开中的级数有可能是发散的, 但是在 $\varepsilon \ll 1$ 时, 其部分和仍然可能提供了很精确的近似。

• 渐近展开的计算

代数方程 $F(x, \varepsilon) = 0, \varepsilon \ll 1$, AE 的基本形式: $x(\varepsilon) = \delta_0(\varepsilon)x_0 + \delta_1(\varepsilon)x_1 + \dots$ 。

非奇异: $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} x = x_0$, 若 $x_0 \neq 0$, 则 $\delta_0 = 1$;

Vanishing solution: $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} x = 0$, 约定 $\delta_0 \ll 1$;

奇异解: $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} |x| = \infty$, 约定 x_0 有限, $\delta_0 \gg 1$ 。

考虑方程 $x^2 - x + \varepsilon/4 = 0$, 观察: 1° 令 $\varepsilon = 0$, 得到 $x = 0, 1$; 2° ε 小且有限, 前两项决定了解的大体位置, 第 3 项作了解的修正; 3° $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, 只有非奇异解。

非奇异围绕问题: 方法一: 直接展开法, 假设解非奇异且 $\delta_n = \varepsilon^n, x = x_0 + \varepsilon x_1 + \varepsilon^2 x_2 + \dots$; 代入上述方程, 匹配 ε^n 项, 可以解得 x_0, x_1, \dots 。

方法二: 迭代法。度规函数 δ_n 与系数 x_n 依次待定。

主项平衡原理: 方程中有主项和次要项, 主项: 其平衡给出领阶方程; 次要项: 主项的高阶小量。

仍以上述为例, 将 $x \sim x_0 \delta_0$ 代入, 得到 $x_0^2 \delta_0^2 - x_0 \delta_0 + \varepsilon/4 = 0$ 。先保证阶数匹配。

case 0: 主项有 1 项或有 3 项, 无解或平凡解。

case a: 主项(1)(2), $\delta_0^2 = \delta_0, \delta_0 = 1$, 此时第 3 项 $\varepsilon \ll 1$, 满足主项平衡原理。

case b: 主项(1)(3), $\delta_0^2 = \varepsilon$, 此时 $\delta_0 \gg \varepsilon$, 不满足主项平衡。

case c: 主项(2)(3), $\delta_0 = \varepsilon$, 此时 $\delta_0^2 = \varepsilon^2$, 满足主项平衡原理原理。

• ODE 问题的非奇异展开

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{1}{(1 + \varepsilon x)^2}, x(0) = 0, x'(0) = \alpha, \text{ 展开法: } O(\varepsilon^0): x_0'' = -1, x_0(0) = 0, x_0'(0) = \alpha,$$

$$O(\varepsilon^1): x_1'' = 2x_0, x_1(0) = 0, x_1'(0) = 0, O(\varepsilon^2): x_2'' = 2x_1 - 3x_0^2, x_2(0) = 0, x_2'(0) = 0, \text{ 可}$$

依次解出。当 $t = O(1/\sqrt{\varepsilon})$ 时, $x_0 = O(1/\varepsilon)$, 违反 AE 的基本假设。

• 奇异微扰问题

在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, 问题至少有一个解奇异。

举例: 代数方程, $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, N 阶多项式方程退化为 M 阶多项式方程; 微分方程, $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, 高阶导数消失。

尺度调节法：奇异问题→引入新变量→非奇异问题

x 老尺度，X 新尺度。

1. 令 $x=\delta_0(\varepsilon)X$ ，代入原问题；
2. 由主项平衡定 $\delta_0(\varepsilon)$ ；
3. 解关于 X 的非奇异问题；
4. 由 δ_0 得到 X 的渐近展开。

• ODE 奇异扰动问题的例子

考虑米氏酶动力学模型，经过无量纲化，得到

$$\frac{ds}{dt} = -s(1-c) + \lambda(c), \varepsilon \frac{dc}{dt} = s(1-c) - \mu c, \frac{dp}{dt} = (\mu - \lambda)c, s(0) = 1, c(0) = 0, p(0) = 0$$

其中 $\varepsilon = \frac{E_0}{S_0} \ll 1, \lambda = \frac{k_2}{k_1 S_0} = O(1), \mu = \frac{k_2 + k_3}{k_1 S_0} = O(1)$ 无量纲。下面只考虑 s 和 c 的方

程。这是奇异微扰问题。非奇异展开会发生矛盾。

拟稳态条件： $c_0 = \frac{s_0}{s_0 + \mu}$ ，得到米氏酶动力学方程： $\frac{ds_0}{dt} = -\frac{(\mu - \lambda)s_0}{s_0 + \mu}$ ，初值应修

正 $s_0(0^+) = 1, c_0(0^+) = 1/(1 + \mu)$ 。在 $t \approx 0$ 时拟稳态不成立。

尝试：捕捉反应初期快尺度动力学形态。

令 $\sigma = t/\varepsilon$ ， $S(\sigma) = s(\sigma\varepsilon)$ ， $C(\sigma) = c(\sigma\varepsilon)$ 得到

$$\frac{dS}{d\sigma} = \varepsilon(-S(1-C) + \lambda C), \frac{dC}{d\sigma} = S(1-C) - \mu C, S(0) = 1, C(0) = 0$$

做非奇异渐近展开，得到 $S_0(\sigma) = 1, C_0(\sigma) = \frac{1 - e^{-(1+\mu)\sigma}}{1 + \mu}$ 。

内部解：以 σ 为时间尺度；外部解：以 t 为时间尺度， $\lim_{\sigma \rightarrow \infty} S_0 / C_0(\sigma) = s_0 / c_0(0)$ 。

8 概率、随机模型

• 果壳中的概率

随机过程： $\{x(t), t \in T\}$ ， $\{x_t, t \in Y\}$ 。

• 初等概率模型举例：随机人口模型

时刻 t 的人口数量用 $X(t) \in N$ 表示，记 $P_n(t) = \Pr(X(t) = n), n = 1, 2, \dots$ 。

模型假设：

1° 出生 1 个概率为 $b_n \Delta t$ ， $b_n = \lambda n$

2° 出生 2 人以上概率 $o(\Delta t)$

3° 死亡 1 人概率 $d_n \Delta t$ ， $d_n = \mu n$

4° 死亡 2 人以上概率 $o(\Delta t)$

5° 出生死亡独立

$P_n(t + \Delta t) = P_{n-1}(t)b_{n-1}\Delta t + P_{n+1}(t)d_{n+1}\Delta t + P_n(t)(1 - b_n\Delta t - d_n\Delta t) + o(\Delta t)$ ，令 $\Delta t \rightarrow 0$ ，得到

$$\frac{dP_n}{dt} = \lambda(n-1)P_{n+1} + \mu(n+1)P_{n+1} - (\lambda + \mu)nP_n$$

初值： $X(0) = n_0$ ， $P_{n_0}(0) = 1$ ， $P_n(0) = 0, n \neq n_0$ 。

令 $E(t) = \sum_{n=0}^{+\infty} nP_n(t)$ ，从而 $\frac{dE(t)}{dt} = (\lambda - \mu)E(t)$ ，从而 $E(t) = n_0 e^{(\lambda - \mu)t}$ ，类似得到

$$D(t) = n_0 \frac{\lambda + \mu}{\lambda - \mu} e^{(\lambda - \mu)t} [e^{-(\lambda - \mu)t} - 1].$$

• 马氏链模型和数学理论

考虑随机过程 $\{x_t\}$, 时间离散, $x_t \in S$, S 至多可数。若 $\Pr(x_{n+1}=j|x_n=i, \dots, x_0=i_0) = \Pr(x_{n+1}=j|x_n=i)$, 则称离散时间马氏链。

记 $P_{ij}(n) = \Pr(x_{n+1}=j|x_n=i)$, $P(n) = (P_{ij}(n))$ 为时刻 n 时的转移概率矩阵, 若与 n 无关则称是时齐的。

• 马氏链选讲

以下只考虑 S 只有 k 个元素, 马氏链时齐。令 $a_j(n) = \Pr(x_n=j)$, 则 $\sum_j a_j(n) = 1$ 。

马氏链基本方程 $a_i(n+1) = \sum_{j=1}^k a_j(n) P_{ji}$, 其中 $P_{ij} \geq 0$, $\sum_{j=1}^k P_{ij} = 1$ 。

记状态概率向量 $\mathbf{a}(n) = (a_1(n), \dots, a_k(n))$, 则 $\mathbf{a}(n+1) = \mathbf{a}(n)P$, $\mathbf{a}(n) = \mathbf{a}(0)P^n$ 。

不变分布: \mathbf{F} , 满足 $\mathbf{F} = \mathbf{F}P$, 且 $\|\mathbf{F}\|_1 = 1$ 。则 $P^T \mathbf{F}^T = \mathbf{F}^T$, 即 P^T 对应特征值是 1 的特征向量。

考虑转移矩阵 $(1-a, a; b, 1-b)$, 则:

case A: $a+b \in (0, 2)$, 则 $\mathbf{a}(n) = \mathbf{a}(0)P^n \rightarrow (b/a+b, a/a+b)$ 是不变分布。

case B: $a=b=0$, 则 $P^n = P$ 单位阵。

case C: $a=b=1$, 则 $P^{2k} = I$, $P^{2k+1} = P$ 。 P^n 极限不存在, 但 $\lim \Sigma P^k/n = 1/2 I$ 。

Ehrenfest 模型: 共 $2a$ 个例子, x_0 是初始时 A 中粒子。 $\{x_n\}$ 马氏链, $x_n = \{0, 1, \dots, 2a\}$ 。转移概率 $P_{ij} = (2a-i)/2a (j=i+1); i/2a (j=i-1)$ 。若不变分布 \mathbf{F} 存在, 求之。

一般形式: $F_i = F_{i-1}P_{i-1,i} + F_{i+1}P_{i+1,i}$ 。可以归纳得到 $F_i = C_{2a}^i \left(\frac{1}{2}\right)^{2a}$ 。这是一个二项分布。

等级结构: $\mathbf{n}(t)$, $n_i(t)$ 是第 t 年从属于等级 i 的人数, $\mathbf{a}(t)$ 是相应比例, $Q = (p_{ij})_{k \times k}$ 是等级 i 转移到等级 j 的人口比例(占等级 i 中), \mathbf{w} 是退出的人口比例(占等级 i 中), \mathbf{r} 是每年调入人口比例(占总人口)。

$N(t+1) = N(t) + R(t) - W(t)$, $\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)Q + R(t)\mathbf{r}$, 用 $M(t)$ 表示净增长量, 则 $R(t) = W(t) + M(t) = \mathbf{n}(t)\mathbf{w}^T + M(t)$, 从而 $\mathbf{n}(t+1) = \mathbf{n}(t)(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}) + M(t)\mathbf{r}$ 。定义 $O = Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}$, 则 Q 是概率转移矩阵。

(a1) 进一步假设 $M(t) = 0$, 则 $\mathbf{a}(t+1) = \mathbf{a}(t)O$ 。

(a2) 将调入比例 \mathbf{r} 看成参数, 给定 \mathbf{r} , (a1) 模型相应的不变分布改变。

(a3) 对某个等级结构 \mathbf{a} , 存在调入比例 \mathbf{r} , 且 $\mathbf{a} = \mathbf{a}O$, 则称 \mathbf{a} 是一个稳定的结构。

稳定结构的条件 $\mathbf{r} = \frac{\mathbf{a} - \mathbf{a}Q}{\mathbf{a}\mathbf{w}^T}$, 此时 $\sum_{i=1}^k r_i = 1$ 自动满足。稳定结构的范围: $\mathbf{a} \geq \mathbf{a}Q$ 。

设有一个理想比例 \mathbf{a}^* , 已知 $\mathbf{a}(0)$, 求 \mathbf{r} , 使得 $\mathbf{a}(1)$ 尽可能接近 \mathbf{a}^* , $\mathbf{a}(2)$ 同理。

引入距离 $D(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \sum_{i=1}^k \lambda_i (a_{1,(i)} - a_{2,(i)})^2$ 。

问题 E1: $\min_{\mathbf{r}} D(\mathbf{a}^*, \mathbf{a}(1)), s.t. \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0)(Q + \mathbf{w}^T\mathbf{r}), r_i \geq 0, \sum_{i=1}^k r_i = 1$ 。

注意到 $\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(1) = \mathbf{a}(0) \mathbf{w}^T \frac{\mathbf{a}^* - \mathbf{a}(0) \mathbf{Q}}{\mathbf{a}(0) \mathbf{w}^T} - \mathbf{r} := \mathbf{y}$, 则问题转化为

$$\min_r \sum_{i=1}^k \lambda_i (y_i - r_i)^2, s.t. \sum_{i=1}^k r_i = 1, r_i \geq 0.$$

• 随机微分方程模型

$\frac{dX}{dt} = b(t, X) + \sigma(t, X)\eta(t)$ 。噪声 $\eta(t)$ 是一个随机过程, 假设: 1° $E\eta(t)=0$; 2° $\eta(t)$

平稳; 3° $E\eta(t)\eta(s)=0$, if $t \neq s$ 。这种噪声也叫白噪声。 $\eta(t)$ 无连续路径。

考虑离散时间 $t_0 < t_1 < \dots$, $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, 记 $x_k = x(t_k)$ 。

离散形式 $x_{k+1} - x_k = b(t_k, x_k)\Delta t_k + \sigma(t_k, x_k) \int_{t_k}^{t_{k+1}} \eta(s) ds$ 。 $\int_{t_k}^{t_{k+1}} \eta(s) ds = V(t_{k+1}) - V(t_k) := \Delta V_k$ 。易指

$E V(t) = 0$, 若进一步要求 $V(t)$ 有连续路径, 则 $V(t)$ 只能是布朗运动 W_t 。

性质: 1° $E W_t = 0$; 2° $E W_t W_s = \min(s, t)$; 3° $t > s$ 时, $W_t - W_s \sim N(0, t-s)$ 。

$$x_k = x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} b(t_j, x_j)\Delta t_j + \sigma(t_j, x_j)\Delta W_j, \text{ 即 } x_t = x_0 + \int_0^t b(s, X_s) ds + \int_0^t \sigma(s, X_s) dW_s$$

微分形式 $dX_t = b(t, X_t)dt + \sigma(t, X_t)dW_t$ 。

定义: Ito integral: 黎曼和中被积函数左端点取值的极限, 记作 $\int_0^t f(s, w) dW_s$ 。

性质: 1° $E \int_0^t f(s, w) dW_s = 0$; 2° Ito isometry: $E \left(\int_0^t f(s, w) dW_s \right)^2 = E \int_0^t f^2(s, w) ds$;

3° Ito lemma: 令 X_t 满足 $dX_t = b(t, w)dt + \sigma(t, w)dW_t$, 又有 $g(t, x)$ 连续, 则 $Y_t = g(t, X_t)$,

$$dY_t = \frac{\partial g}{\partial t} dt + \frac{\partial g}{\partial x} dX_t + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right) (dX_t)^2。 \text{ 计算规则: } dt dt = dt dW_t = dW_t dt = 0, (dW_t)^2 = dt。$$

• Fokker-Planck 方程

若 $\sigma=0$, 则 $dX_t = b dt$, 由守恒律 $\rho_t + (\rho b)_x = 0$ 。

$$\text{任意光滑函数 } g(x), dg(X_t) = \frac{\partial g}{\partial x} b dt + \frac{\partial g}{\partial x} \sigma dW_t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \sigma^2 dt。$$

两边取期望, 得 $\frac{dEg(X_t)}{dt} = E \left(\frac{\partial g}{\partial x} b + \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right)$ 。固定 t , 由 $X_t \sim \rho(t, x)$, 从而两边

$$\text{写开, 分部积分, 得到 } \frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) = -\frac{\partial}{\partial x} (b(x)\rho(t, x)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma^2(x)\rho(t, x))。$$