

# 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  $\psi$ ;

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：

$\frac{d}{dt} A(t) = \sum_n (\text{creation rate})_n - \sum_m (\text{consumption rate})_m$ ，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.

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

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

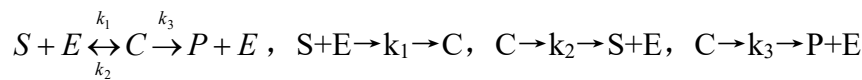
回到 case 5，我们知道  $dA/dt = -2kA^2$ ， $dC/dt = kA^2$ ，因此  $d(A+2C)/dt = 0$ 。

### 米氏酶动力学简介：

非基本化学反应，无法用质量作用定律

$mA + nB \rightarrow (\text{???}) \rightarrow \dots \rightarrow pC + qD$ ;

考虑酶促化反应：底物 S，最终产物 P，酶 E，中间产物 C，即是



$$dP/dt = k_3 C, \quad dC/dt = k_1 SE - k_2 C - k_3 C, \quad dE/dt = -k_1 SE + k_2 C + k_3 C, \quad dS/dt = -k_1 SE + k_2 C$$

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：

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

>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  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ,  $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ 。

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:  $V(t, \mathbf{X}_0) = \mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t)$ 。

一般地, 跟粒子运动  $\mathbf{x}(t)$  相关的状态变量也有其欧拉描述  $f(\mathbf{x}, t)$  和拉格朗日描述  $F(t, \mathbf{X}_0)$ 。

考虑物质滴, 目标: 已知  $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ , 推导  $f(\mathbf{x}, t)$  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  $\rho$  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,

$\mu$  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  $\rho$  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

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

可改写为  $\frac{\partial L}{\partial x} + \lambda \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{d\lambda}{dt} = 0$ , (2)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  $c_2 = 0, c_1 \sin(\sqrt{\lambda} L) = 0$ ,

记  $\lambda_n = \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2$ , 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  $\lambda$  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  $\sigma$  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  $\lambda_n, f_n$ , 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  $\sigma$  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  $\Delta x$  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  $\delta$  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  $\pi$  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  $\varepsilon$  很小, 我们发现构造 1 不能省去  $\varepsilon$ , 而构造 2 可以省去  $\varepsilon$ 。  
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  $\varepsilon$  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°  $\varepsilon$  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  $\varepsilon^n$  项, 可以解得  $x_0, x_1, \dots$ 。

方法二: 迭代法。度规函数  $\delta_n$  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  $\delta_0$  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  $\sigma$  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,  $x_n \in \{0, 1, \dots, 2a\}$ 。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

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