

数学模型 Lecture Notes

Zhennan Zhou

2023 年 3 月 12 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：平衡/扩散/运动

Science is a differential equation. Religion is a boundary condition.

—Alan Turing

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程的方式给出。

微分方程，简言之，是一种用来描述函数与其导数之间关系的数学方程。而偏微分方程是一种含有未知函数及其两个或多个自变量的导数的方程，常用来描述物理系统的时空变化。方程的形式不同，方程的解的行为也各不相同。在本章节中，我们将重点讨论平衡，扩散和运动这三类现象。

为了确定方程的解，我们需要给出方程的初值条件(I.C.)或边值条件(B.C.)。简单的说，微分方程的初值条件是指给出未知函数及其导数在某一点的值，微分方程的边值条件是指给出未知函数及其导数在某一区间的端点的值。

本章节对于初学者来说学习难度较大。需要提醒大家的是，本章有一明一暗两条线索：明线是不同方程的基本形式和解的基本行为，暗线是初边值条件对方程的影响。

3.1 连续性假设

在对很多系统的研究中，除了关心整个系统随时间演化的过程，我们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域和空间上的微小区域平均后的性质。我们隐性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 $f(\mathbf{x}, t)$ 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在区域 Ω 积分，那么

$$\mathcal{F}(t) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

描述的就是这个群体在区域 Ω 内的累计特性随时间变化。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、动量、能量，等等。我们注意，这个推广的密度函数可以是标量，也可以是向量。例如，如果 $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ 是动量密度函数，那么

$$\mathcal{P}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

表示区域 Ω 内的物质的总动量，它是一个向量。

本章中，另外一些状态变量也是时空坐标的函数，但是更适合把他们理解成一种平均性质。例如，一种连续介质（例如水、空气、弹性材料等）的速度 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ，可以理解成该物质在时间 t ，位置 $\mathbf{x}$ 的平均速度。

本章中，我们将重温守恒律，通量函数、源函数等概念，特别是关注其蕴含的平衡、扩散、运动等现象，我们也将学习一些解析技巧。

3.2 引例：反应扩散方程、初边值问题和边值问题

回顾一维的守恒律模型。令 $\rho(x, t): \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 为密度函数，通量函数 $J = -k\rho_x$ (k 是扩散系数)，源函数 $\Psi = f(x)$ ，则守恒律模型表现为一个反应扩散方程

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

有时候，我们需要在一个有限区域内考虑这个反应扩散过程。而为了确定方程的解，我们不仅需要给出初值条件，也要给出边值条件，这样我们就得到一个初边值问题。

例1. 令 $\rho \geq 0$ 表示某种物种的数量密度，我们考虑 $k = 1, f = 0$ 的情况，且我们只关心 $0 < x < L$ 内的该物种的密度的演化，那么我们需要考虑

$$\rho_t - \rho_{xx} = 0, \quad 0 < x < L, \quad t > 0.$$

也就是说，我们关心在一个有限宽度（空间），单向无限延申（时间）的区域上有定义的状态函数 $\rho(x, t)$ ，且这个状态函数在区域内部逐点满足微分方程。那么如果确定方程的解呢？

我们注意到，该区域有三个边。在 $t = 0, 0 < x < L$ 时，我们可以定义系统的初始状态，即给出初值条件

$$\rho(x, 0) = \rho_0(x), \quad 0 < x < L.$$

而在 $x = 0, L, t > 0$ 时，我们需要定义系统在空间区域边界上的状态，即给出边值条件。

边值条件的含义往往依赖于具体的模型。我们以此模型为例展开讨论。

第一种常见的边值条件是 $\rho(0, t) = \rho(L, t) = 0$ 。这个条件在微观上可以理解为当一个自由扩散的粒子穿越边界 $x = 0$ 或 $x = L$ 时就再也不回来了。（对这个微观过程的具体解释需要更多的概率知识，我们在本课程中就不再深究了。）而在宏观上，由于 $\rho(x, t) \geq 0$ ，我们可以推断出， $\rho_x(0, t) \geq 0$ ， $\rho_x(L, t) \leq 0$ 。由守恒律模型的含义，我们知道

$$\frac{d}{dt} \int_0^L \rho(x, t) dx = -\rho_x(0, t) + \rho_x(L, t) \leq 0.$$

也就是说，我们一直在边界处损失质量（通量在边界处只出不进）。

第二种常见的边值条件是 $\rho_x(0, t) = \rho_x(L, t) = 0$ 。这个条件在微观上可以理解为当一个自由扩散的粒子遇到边界的时候被反弹回去。（对这个微观过程的具体解释需要更多的概率知识，我们在本课程中就不再深究了。）而在宏观上，我们知道

$$\frac{d}{dt} \int_0^L \rho(x, t) dx = -\rho_x(0, t) + \rho_x(L, t) = 0.$$

也就是说，系统的总质量守恒（通量在边界处为 0）。

这个例子中，微分方程、初值条件和边值条件构成了一个**初边值问题**。当我们需要考虑一个高维空间中的演化问题时，我们可以类似地定义一个初边值问题。我们在本课程中就不再展开讨论高维问题了。

例2. 我们假设 $\rho(x, t)$ 表示一个一维导热杆 $0 < x < L$ 的温度，它的时间演化满足如下的热传导方程

$$\rho_t = k\rho_{xx} + f(x), \quad t > 0, \quad 0 < x < L, \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x).$$

这里 k 是导热系数， $f(x)$ 是热源函数。除了初值条件之外，在 $x = 0, L$ 这两处，我们还需要给出边值条件，从而这个完整的问题是一个初边值问题。这里，我们以 $x = 0$ 这端为例，来讨论热传到模型中一些具体的边值条件：

- **给定温度, Prescribed temperature at $x = 0$.** $u(0, t) = u_B(t)$.
- **绝热条件, Insulated boundary at $x = 0$.** 有时我们可以限定通量函数 $-ku_x(0, t) = \phi(t)$. 特别的，当这一端是完美绝热的时候，我们有 $u_x(0, t) = 0$.
- **牛顿冷却定律: Newton's law of cooling at $x = 0$.** 如果我们假设在 $x = 0$ 处的热通量正比于这一端的温度和环境温度的差别，那么就有 $-ku_x(0, t) = -H[u(0, t) - u_B(t)]$ ，这里 H 是传热系数。

特别地，如果 B.C. 是不依赖于时间的（time independent）或称作是稳定的（steady），那么方程的解“也许”会渐进地趋向一个平衡态（稳态）。那么对于平衡态，显然我们有 $u_t = 0$ 。

例如，如果我们给出如下的 B.C.:

$$\rho(0, t) = T_1, \quad \rho(L, t) = T_2.$$

那么，平衡解 $\rho(x, t) = \rho(x)$ 就满足

$$-k\rho_{xx} = f(x), \quad \rho(0) = T_1 \quad \rho(L) = T_2.$$

我们注意到，这是一个关于 $\rho(x)$ 的二阶常微分方程，并且我们规定了解在定义域区域边界点上的条件，这里的微分方程和边值条件构成了一个（两点）**边值问题** (Boundary Value Problem, BVP)。

我们需要注意的是，这个 BVP 的确描述了一种平衡现象，扩散项和源项达到了一种动态平衡，使得系统中的温度处处不随时间改变。

例3. 另外一种得到 BVP 的情况是通过分离变量法（method of separation of variables）。我们会在偏微分方程等课程中系统学习该方法，这里只做简单的讨论。考虑一维扩散方程的初边值问题，

$$\begin{cases} \rho_t = k\rho_{xx}, & 0 < x < L, \quad t > 0 \\ \text{B.C.: } \rho(0, t) = 0, \quad \rho(L, t) = 0, \\ \text{I.C.: } \rho(x, 0) = f(x). \end{cases}$$

我们考虑一种特殊的解的形式，分别依赖于 x 和 t 的两个一元函数的乘积，

$$\rho(x, t) = \phi(x)h(t).$$

代入方程, 我们得到

$$\frac{1}{k} \frac{1}{h} \frac{dh}{dt} = \frac{1}{\phi} \frac{d^2\phi}{dx^2} := -\lambda.$$

注意到, 上式的左端是一个 t 的函数, 中间是一个 x 的函数, 所以, 这个等式成立的唯一可能是, 它们都是常值函数。我们设这个常数叫做 $-\lambda$, 再通过匹配 B.C.'s 我们得到下面的 BVP

$$\phi_{xx} + \lambda\phi = 0, \quad \phi(0) = 0, \quad \phi(L) = 0.$$

这样我们得到了第二种 BVP。在接下来的学习中, 我们会发现这两类 BVP 分别可以类比成线性代数中的线性方程组问题和矩阵特征值问题

$$Ax = b, \quad Av = \lambda v.$$

3.3 初值问题和边值问题

在微分方程模型中, 一个初值问题由一个微分方程

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y}(t) = f(t, \mathbf{y}(t)) \quad \text{with} \quad f: \Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

和初值条件 $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ 组成。这里, 变化率函数的定义域 Ω 是 $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ 中的一个开集, 而初值条件可以看作是这个定义域中的一个点, 即 $(t_0, \mathbf{y}_0) \in \Omega$ 。

例 1. 考虑方程 $\phi'' + \lambda\phi = 0$, 和初值条件 $\phi(0) = a$ and $\phi'(0) = b$ 。如果我们令 $y_1 = \phi$, $y_2 = \phi'$, 则我们有

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\lambda y_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

边值问题 (Boundary value problems, BVP) 和初值问题有相似之处, 他们都包含一个微分方程。但是, 一个边值问题的条件是在自变量的定义域边界上给出的, 而初值问题的条件都在自变量的同一点给出。

在本章中, 我们只考虑一维的二阶微分方程的边值问题。

例 2. 考虑下面的边值问题

$$\begin{cases} \phi'' + \lambda\phi = 0, & 0 < x < L, \\ \text{B.C. (边值条件): } & \phi(0) = 0, \quad \phi(L) = 0. \end{cases}$$

显然, 方程有一个满足边值条件的解 $\phi(x) \equiv 0$, 这个解是平凡解。下面我们希望寻找非平凡解。

这个方程的特征方程为 (这类方程的通解的形式为 e^{cx}): $c^2 + \lambda = 0$ 。

- 当 $\lambda < 0$ 时, 通解可以表示为 $\phi = c_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + c_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}$ 。而由边界条件知 $c_1 = c_2 = 0$ 。(这时候只有平凡解。)
- 当 $\lambda = 0$ 时, 通解可以表示为 $\phi = c_1 x + c_2$ 。而由边界条件知 $c_1 = c_2 = 0$ 。(这时候只有平凡解。)
- 当 $\lambda > 0$ 时, 通解可以表示为 $\phi = c_1 \sin(\sqrt{\lambda}x) + c_2 \cos(\sqrt{\lambda}x)$ 。有边界条件知, $c_2 = 0$ 和 $c_1 \sin(\sqrt{\lambda}L) = 0$ 。于是我们得到一族非平凡解和他们对应的 λ 的值

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad \phi_n = c_1 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

这个 BVP 其实是一个 Sturm-Liouville 特征值问题 (见下一节)。

我们假设 ϕ 在区间 (a, b) 上满足某个二阶的微分方程, 在边界上, 我们一般有如下几类的边界条件:

- $\phi = c$, first kind / Dirichlet (第一类/狄利克雷).
- $\phi' = c$, second kind / Neumann (第二类/诺伊曼).
- $g\phi' + h\phi = c$, third kind / Robin (第三类).
- $\phi(a) = \phi(b)$ and $\phi'(a) = \phi'(b)$, periodic (周期).

特别地, 对于前三类 B.C., 当 $c = 0$ 时, 我们称 B.C. 是齐次的 (homogeneous)。

3.4 Sturm-Liouville Problems (施图姆-刘维尔, S-L)

本节中, 我们介绍 (两点) 边值问题的基本理论, 并讨论一般边值问题的求解方法。

定义. S-L 微分方程

$$\mathcal{L}\phi + \lambda\sigma\phi = 0, \quad \text{where} \quad \mathcal{L}\phi = \frac{d}{dx} \left(p \frac{d\phi}{dx} \right) + q\phi.$$

定义. Regular S-L 特征值问题: 求满足 S-L 微分方程的非平凡解 ($\phi \equiv 0$ 是平凡解), 使得它们满足下面的 B.C.'s

$$\beta_1\phi(a) + \beta_2\phi'(a) = 0, \quad \beta_3\phi(b) + \beta_4\phi'(b) = 0,$$

这里, β_i 是实数, q, p 和 σ 是实值连续函数, 并且在 $[a, b]$ 这个闭区间上 $p > 0$, $\sigma > 0$ 。

注意,

1. 这里考虑的边界条件都是齐次的。
2. 这里的 λ 是未指定的。事实上, 只有对一些特殊的 λ , 这个边值问题才有非平凡的解。我们把这些存在非平凡解的 λ 称为特征值, 记为 λ_n , 而这些非平凡的解称为特征函数, 记为 $\phi_n(x)$ 。

注意, 一般来说, $\phi_n(x)$ 可以是复数值的, 但是为了简化分析, 本章中, 我们只考虑 $\phi_n(x)$ 是实数值的情况。

Sturm-Liouville 问题的数学理论是常微分方程的重要内容之一。我们来总结一些 Regular S-L 特征问题的基本性质:

性质 1. 特征值 λ_n 都是实的。

性质 2. 特征值序列满足 $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < \dots$, 并且当 $n \rightarrow \infty$ 时, $\lambda_n \rightarrow \infty$ 。

性质 3. $\phi_n(x)$ 构成一组“完备”的集合, 即对于定义在 $[a, b]$ 上的满足边值条件的“充分好”的任意函数 $f(x)$, 我们有

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x).$$

(“完备”和“充分好”的具体定义超出了本课程的范围。)

性质 4. 属于不同特征值的特征函数关于权函数 σ 正交, 即

$$\int_a^b \phi_n \phi_m \sigma dx = 0, \quad \text{if } \lambda_n \neq \lambda_m.$$

第3、4条性质结合在一起, 我们可以利用正交性求解系数 c_n , 即

$$\int_a^b \phi_n f \sigma dx = c_n \int_a^b \phi_n \phi_n \sigma dx.$$

我们回忆知, 在上一节的例 2 中, $\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$, $\phi_n = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ 。于是上面这些性质都可以轻松检验。而此时的级数展开式正是一种正弦级数。

这些性质的证明我们会在《常微分方程》中学习, (所以本课就不再给出细节了,) 它们主要依赖于 regular S-L 微分算子的自伴性。注意, 正如边值问题包括微分方程和边界条件两部分, 我们一般说的 regular S-L 微分算子或者 regular S-L (特征值) 问题是包括微分公式和边界条件两部分的。

我们容易直接验证如下的格林公式 (Green's formula)。

Green's formula. 对于任意的光滑函数 $u(x), v(x)$, 我们有

$$\int_a^b [u\mathcal{L}v - v\mathcal{L}u]dx = p(uv' - vu')|_a^b.$$

如果我们进一步假设 u, v 满足 regular S-L eigenvalue problem 的边值条件, 那么就有

$$\int_a^b [u\mathcal{L}v - v\mathcal{L}u]dx = 0.$$

有时候, 人们更习惯把上式写成内积的形式 $\langle u, \mathcal{L}v \rangle = \langle \mathcal{L}u, v \rangle$, 并且称算子 $\mathcal{L}$ 是自伴的, 但是自伴的严格定义超出了本课程的范围, 我们就不具体讨论了。

基于性质 3、4, 下面介绍特征函数展开法 (the method of eigenfunction expansions), 它给出了两点边值问题的一般求解方法。

我们考虑一个由微分方程 $\mathcal{L}u = f$ 和某些齐次边值条件给出的边值问题 (BVP)。这里, 微分算子 $\mathcal{L}$ (含边界条件) 满足 Regular S-L 的假设。

我们先求解满足相同边界条件的特征值问题

$$\mathcal{L}\phi_n + \lambda_n \sigma \phi_n = 0,$$

并利用特征函数将方程的解展开成级数的形式

$$u(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x).$$

由 $\mathcal{L}$ 的线性, (并假设 $\mathcal{L}$ 和级数的求和可以交换顺序) 可得

$$\mathcal{L}u = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \mathcal{L}\phi_n = - \sum_{n=1}^{\infty} a_n \lambda_n \sigma \phi_n.$$

再由正交性, 我们有

$$a_n = \frac{\int_a^b f \phi_n dx}{-\lambda_n \int_a^b \phi_n^2 \sigma dx} = \frac{\int_a^b f \phi_n dx_0}{-\lambda_n \int_a^b \phi_n^2 \sigma dx'}.$$

注意, 解可以被写成一个定积分的形式

$$u(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) = \int_a^b f(x_0) G(x, x_0) dx_0,$$

这里

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

3.5 Green's function (格林函数)

上节中, 我们使用了特征函数展开法求解了两点边值问题。[a, b] 区间上的两点边值问题: $\mathcal{L}u = f$ 加上某些边界条件。我们最终把解表示为了

$$u(x) = \int_a^b f(x_0) G(x, x_0) dx_0.$$

可以对这个解的表示形式做如下的解读:

- $u(x)$ 是解在 x 处的值;
- 我们把 $f(x)$ 看作源 (source), $f(x_0)$ 是源在 x_0 处的值;
- $G(x, x_0)$ 是 x_0 处的源对于 x 处的解的影响大小 (这种影响可正可负);
- 这种解的表示说明, 解在 x 处的值受整个区间 $[a, b]$ 内所有源的影响, 这种影响在汇总过程 (积分) 中又被影响函数 $G(x, x_0)$ 所加权修正。

从上个例子来看, 这种影响函数只跟微分算子 $\mathcal{L}$ 和边界条件有关, 而跟源函数 f 无关。如果能求出来 $G(x, x_0)$, 对于方程的求解和分析都有很大的好处。我们把 $G(x, x_0)$ 叫做格林函数 (Green's function)。

为了介绍 Green's function, 我们需要先引入 Dirac-delta function (或者简称 delta function)。Delta function 是一种广义函数, 我们这里不研究它的严格数学定义, 而是直观地做一个理解。

首先我们定义一个一维的示性函数

$$\chi_{x_i, \Delta x}(x) = \begin{cases} 1, & x_i < x < x_i + \Delta x; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

如果我们将 $[a, b]$ 区间以 Δx 为间隔剖分成 N 份, 令剖分格点为 x_i , 于是

$$x_i = a + i\Delta x, \quad i = 0, \dots, N, \quad \Delta x = \frac{b-a}{N}.$$

这样, 我们就可以对 $[a, b]$ 区间上的函数 $f(x)$ 做分片常数的逼近

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \chi_{x_i, \Delta x}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \frac{\chi_{x_i, \Delta x}(x)}{\Delta x} \Delta x.$$

注意, 上述最右端是一个黎曼和的形式, 而且我们自然地期待

$$\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \frac{\chi_{x_i, \Delta x}(x)}{\Delta x} \Delta x \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} f(x).$$

同时我们也期待上式的左端可以表达成一个 (广义) 积分的形式。于是我们形式上定义

$$\frac{\chi_{x_i, \Delta x}(x)}{\Delta x} \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \delta(x - x_i) = \begin{cases} \infty, & x = x_i; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases},$$

同时我们要求

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x - x') dx'.$$

这样我们就完成了 Dirac-delta function 的形式定义。

现在我们介绍一些 Dirac-delta function 的性质。

- 我们有 $1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') dx'$. 事实上, $\forall \varepsilon > 0, 1 = \int_{x-\varepsilon}^{x+\varepsilon} \delta(x - x') dx'$.
- 我们有 $\delta(c(x - x')) = \frac{1}{|c|} \delta(x - x')$. 特别的, $\delta(x - x') = \delta(x' - x)$.
- 定义: Heaviside step function

$$H(x - x') = \begin{cases} 0, & x < x', \\ 1, & x > x'. \end{cases}$$

显然我们有,

$$H(x - x') = \int_{-\infty}^x \delta(x_0 - x') dx_0.$$

于是, 在一种 “弱” 的意义下, 我们有

$$\frac{d}{dx} H(x - x') = \delta(x - x').$$

- 考虑 $[a, b]$ 上的两点边值问题 $\mathcal{L}u = f$ 加一定的齐次边界条件。我们希望问题的解可以表示为

$$u(x) = \int_a^b f(x') G(x, x') dx'. \quad (3.1)$$

特别的, 如果我们令 $f(x) = \delta(x - x_s)$, 它可以解读为是聚集在 $x = x_s \in (a, b)$ 的源。那么,

$$u(x) = \int_a^b \delta(x' - x_s) G(x, x') dx' = G(x, x_s).$$

于是, 我们推出了格林函数满足如下的 BVP

$$\begin{cases} \mathcal{L}G(x, x_s) = \delta(x - x_s), & a < x < b, \\ G(x, x_s) \text{ 满足和原问题相同的 (齐次) 边值条件.} \end{cases} \quad (3.2)$$

事实上, 我们可以把(3.2)看作格林函数的等价定义。接下来, 我们用(3.2)和原 BVP 来反向推导(3.1)。

我们回忆可知, 如果 u, v 满足相同的齐次边界条件, 那么根据 Green's formula

$$\int_a^b [u \mathcal{L}v - v \mathcal{L}u] dx = 0.$$

于是, 如果我们令

$$v = G(x, x'), \quad \text{then} \quad \mathcal{L}v = \delta(x - x'),$$

于是我们得到

$$\int_a^b [u(x) \delta(x - x') - G(x, x') \mathcal{L}u(x)] dx = 0.$$

如果 $u(x)$ 是 BVP 的解, 那么 $\mathcal{L}u(x) = f(x)$, 于是, 我们推出了

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

事实上, 我们还可以证明格林函数是对称的, $G(x, x') = G(x', x)$ 。(思考提示: 可以通过(3.2)来证明。)于是, 最终我们证明了

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

我们通过一个例子来实践通过 (3.2) 直接求解一个 BVP 的格林函数。

例 1. 考虑如下的 BVP

$$u'' = f(x), \quad u(0) = 0, \quad u(L) = 0.$$

利用 (3.2) 的定义方式直接求解 Green's function $G(x, x')$ 。

$G(x, x')$ 满足

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dx^2} G(x, x') = \delta(x - x'), & 0 < x < L, \\ G(0, x') = 0, & G(L, x') = 0. \end{cases}$$

当 $x \neq x'$ 时, 我们有 $G'' = 0$, 于是

$$G(x, x') = \begin{cases} a + bx, & 0 < x < x', \\ c + dx, & x' < x < L. \end{cases}$$

由边界条件，我们得

$$G(x, x') = \begin{cases} bx, & 0 < x < x', \\ d(x-L), & x' < x < L. \end{cases}$$

易知 $\frac{d}{dx}G(x, x')$ 在 $x = x'$ 处有一个高度为 1 的跳跃，而 $G(x, x')$ 在 $x = x'$ 处是连续的，于是我们有

$$d = \frac{x'}{L}, \quad b = \frac{x' - L}{L}.$$

最终我们得到了

$$G(x, x') = \begin{cases} -\frac{x(L-x')}{L}, & 0 < x < x', \\ -\frac{x'(L-x)}{L}, & x' < x < L. \end{cases}$$

在求解完成之后，我们可以直接验证 $G(x, x')$ 的确是关于 x 和 x' 是对称的。

3.6 Fredholm alternative (弗雷德霍姆二择一)

我们似乎已经推导出了一套完整的理论方法。但事实上，这套方法中尚有一个明显的“不足”。为了认清这个不足，我们考虑下面两个例子：

例 1. $u'' = e^x$, $u'(0) = 0$, $u'(L) = 0$. 我们会发现，这个BVP无解。

例 2. $u'' = \cos(x)$, $u'(0) = 0$, $u'(\pi) = 0$. 我们会发现，这个BVP至少有一个解 $u = -\cos(x)$ 。

那么这两个例子有什么本质不同呢？我们回顾一下特征函数展开法（the method of eigenfunction expansions）。考虑一个由微分方程 $\mathcal{L}u = f$ 和某些齐次边值条件给出的边值问题（BVP）。我们求解满足相同边界条件的特征值问题

$$\mathcal{L}\phi_n + \lambda_n \sigma \phi_n = 0,$$

并利用特征函数将方程的解展开成级数的形式

$$u(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x).$$

于是我们得到

$$-\sum_{n=1}^{\infty} a_n \lambda_n \sigma \phi_n = f.$$

之前我们利用 ϕ_n 正交性算出了所有的系数 a_n 。但是如果对于某个 n' , $\lambda_{n'} = 0$ 呢？

利用正交性，我们可以得到

$$-a_{n'} \lambda_{n'} = \frac{\int_a^b f \phi_{n'} dx}{\int_a^b \phi_{n'}^2 \sigma dx}.$$

这里我们注意到两个事实。

- 因为 $\lambda_{n'} = 0$ ，那么：如果 $\int_a^b f \phi_{n'} dx \neq 0$ ，则 $a_{n'}$ 无解，进而BVP无解；如果 $\int_a^b f \phi_{n'} dx = 0$ ，则任意 $a_{n'}$ 都是解，进而BVP有无穷多解。
- 存在 $\lambda_{n'} = 0$ ，可以等价表述为 $\mathcal{L}\phi = 0$ （加上相应的边界条件）有了非平凡的解。

我们总结一下一维BVP的 Fredholm Alternative (FA., 弗雷德霍姆二择一)。

我们考虑一个在区间 $[a, b]$ 上，由微分方程 $\mathcal{L}u = f$ 和某些齐次边值条件给出的边值问题（BVP）。令 ϕ_0 为齐次问题的解，即 $\mathcal{L}\phi_0 = 0$ ，且 ϕ_0 满足同样的边界条件。

那么

1. 如果齐次问题不存在非平凡解 ϕ_0 , 则这个 BVP 有唯一的解。
2. 如果齐次问题存在非平凡解 ϕ_0 , 那么
 - (a) 如果 $\int_a^b f\phi_0 dx \neq 0$, 此 BVP 没有解。
 - (b) 如果 $\int_a^b f\phi_0 dx = 0$, 则此 BVP 有无穷多个解。

最后我们看一个例子。

例 3. 求使得下面的 BVP 有解的 β 的值

$$u''(x) + (\pi/L)^2 u(x) = \beta + x, \quad u(0) = 0, \quad u(L) = 0.$$

考虑齐次问题

$$\phi''(x) + (\pi/L)^2 \phi(x) = 0, \quad \phi(0) = 0, \quad \phi(L) = 0.$$

通过求解, 我们得到如下的通解

$$\phi(x) = c \sin(\pi x/L).$$

如果原来的 BVP 有解, 那么根据 EA. (弗雷德霍姆二择一), 我们有

$$\int_0^L (\beta + x) \sin(\pi x/L) dx = 0.$$

最终, 我们推出 $\beta = -L/2$ 。

其实遇到无穷多解的情况, 我们也能稍作修改的求出更一般的格林函数, 不过这门课中我们就不再深究了。有兴趣的同学可以参看下面这本教材:

https://www.amazon.com/Differential-Equations-Boundary-Problems-Featured/dp/0321797051/ref=asap_bc?ie=UTF8

3.7 分离变量法和柯西 (Cauchy) 问题*

特征函数展开法对于理解和求解 PDE 模型也有着举足轻重的作用, 最常见的应用方式就是分离变量法。

回到 3.2 节的例 3, 我们已经在 3.3 节的例 2 中求解了特征值问题, 得到了基底函数 $\{\phi_n(x), n = 1, 2, \dots\}$ 。那么由于 $\rho(x, t)$ 也满足边值条件, 我们可以按照特征函数展开,

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(x).$$

利用特征函数的正交性和初值条件, 我们可得

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-k\lambda_n t}, \quad c_n(0) = \frac{\int_0^L f(x) \phi_n(x) dx}{\int_0^L \phi_n(x) \phi_n(x) dx}.$$

很多时候, 一些含时的 PDE 模型的状态变量是很难给出有物理意义的边界条件的, 或者天真地给出边界条件很容易造成数学上的不相容。有时候, 为了避开有限区间的边值条件问题, 我们会考虑全空间的柯西问题, 这种柯西问题可以看作是 ODE 模型中, 初值问题的推广。比如一维的含时薛定谔方程

$$i\hbar u_t = Hu = -\frac{\hbar^2}{2m} u_{xx} + V(x)u, \quad x \in (-\infty, \infty), \quad u(x, 0) = u_0(x).$$

虽然缺少在无穷远初边界条件, 但是我们希望势能函数 $V(x)$ 在无穷远附近增长地足够快, 而使得方程的解在无穷远附近下降到 0 的速度足够快。

我们也可以考虑相应的特征值问题，即不含时的薛定谔方程，

$$H\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x).$$

并且规定特征函数 $\Psi_n(x)$ 在无穷远附近下降到 0 的速度足够快。这样的特征函数也叫做束缚态。可惜的是，只有在极少数的情况，人们才能解析的求出这些特征值和特征函数。最著名特例之一就是量子谐振子问题，这时候势能项是一个二次函数， $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ，这时候的特征值和特征函数为

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right).$$

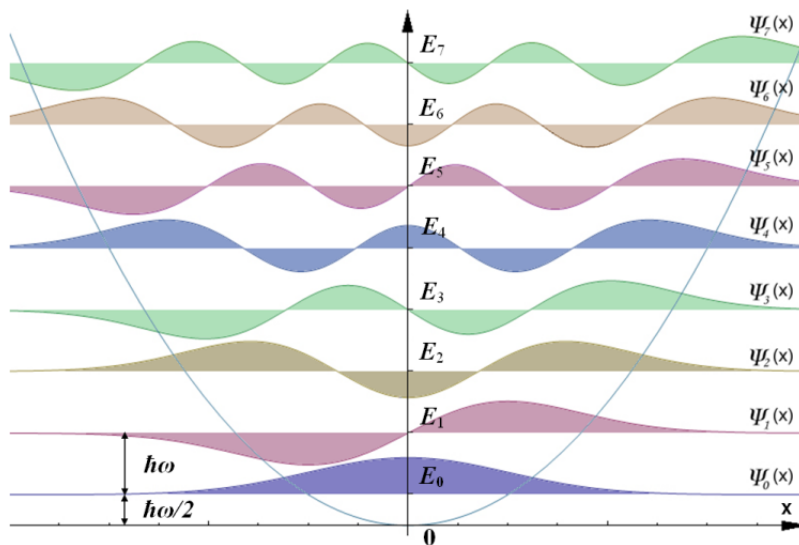
这里， H_n 是 Hermite 多项式，而 Ψ_n 是 Hermite 函数， $\{\Psi_n\}$ 形成了 $L^2(\mathbb{R})$ 的一组规范正交基（见下图）。

对于量子谐振子问题，我们也可以使用特征函数展开法求解含时的薛定谔方程，令

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)\Psi_n(x).$$

利用初值条件和 $\{\Psi_n\}$ 的规范正交性，我们可得

$$c_n(t) = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \int_{\mathbb{R}} u_0(x)\Psi_n(x)dx.$$



3.8 反应扩散方程中的行波解

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，于是该领域的基本数学模型之一是反应扩散方程。

上一节中，我们对一个反应扩散方程的初边值问题使用了分离变量法求解，我们观察到这个反应扩散方程的解会指数型地收敛到平衡态。事实上，在有限区域的反应扩散方程中，即使反应项是非线性的，我们也常见初边值问题的解会指数型地收敛到稳态（除非非线性效果足够强）。那么，反应扩散方程中是否还蕴含着更有趣的现象呢？

我们这节将介绍行波解，一种常见于全空间的反应扩散方程的特殊解。事实上，反应扩散方程中还可能出现奇妙的斑图形成现象（例如图灵斑图，脉冲，斑点等等），我们在此课程就不再展开了。感兴趣的同学可以阅读 Benoît Perthame 教授的教材《Parabolic equations in Biology》（我们可以在北大图书馆下载到这本书的电子版）。

3.8.1 引例：肿瘤生长模型*

作为引例，我们选讲一种肿瘤生长模型，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

- $\rho(\mathbf{x}, t)$ 肿瘤细胞的密度函数；
- $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 细胞的运动速度；
- $p(\mathbf{x}, t)$ 细胞组织中的压力；
- $c(\mathbf{x}, t)$ 营养物的浓度
- $G(c, p)$ 生长因子。

密度函数的演化方程为

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

压力和速度之间通过 Darcy's law 建立关系，

$$\mathbf{u} = -\nabla_{\mathbf{x}} p(\rho).$$

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

$$p(\rho) = \frac{m}{m-1} \rho^{m-1} \quad (m > 1), \quad \text{or} \quad p = \log \rho. \quad (3.3)$$

大家注意，这其实是一个平衡率模型。通量函数是 $\rho \mathbf{u}$ ，而源函数是 ρG 。

如果我们选择 $p(\rho) = \frac{m}{m-1} \rho^{m-1}$ 就会得到广义的多孔介质方程

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

这是一类退化的抛物方程。例如当 $m = 2$ 且 $G \equiv 0$ 时，我们可以将方程改写为

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = 2\rho \Delta \rho + 2|\nabla \rho|^2.$$

注意到，当 $\rho \neq 0$ 时，方程中有变系数的扩散项 $2\rho \Delta \rho$ 。但是当 $\rho \rightarrow 0$ 时，扩散的效果趋于退化，此时方程在形式上可简化成 $\frac{\partial}{\partial t} \rho \sim 2|\nabla \rho|^2$ ，这种方程被称为 *eikonal equation*，是一阶非线性双曲方程中的一种。

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。

3.8.2 Traveling wave solutions (行波解)

方程的解的结构往往是复杂的（即使最简单的一元二次方程都需要按情况讨论）。对于微分方程来说，求解过程不仅复杂，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。

人们对行波解的研究可以追溯到1930年：Fisher第一次提出了基因优势的波形传播模型。而在1937年，Kolmogorov、Petrovski和Piskunov对第一次对这个模型做了数学上的分析。后来，人们在生态学中的物种入侵（例如北美麝鼠在布拉格农场的逃逸和扩散）、瘟疫扩散（例如欧洲14世纪黑死病的传播）、燃烧波、物质的相变甚至神经科学等各种领域找到了行波解的应用。

需要强调的是，反应扩散方程的行波解其实是一种有点“反直觉”的特解，因为一般的扩散现象是和保持形状不变是相矛盾的。可是，对于行波解来说，方程的扩散作用和反应的增损作用达到了一种平衡，使得解能够保持固定的形状按照固定的速度平移。

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，

$$\rho(x, t) = v(x - ct), \quad c \in \mathbb{R}, \quad v(-\infty) = 1, \quad v(+\infty) = 0.$$

这里， $v(x)$ 刻画了解的形状，而 c 给出了波速。

我们考虑几个具体的例子。第一个例子中，我们令

$$f(\rho) = \rho(1 - \rho).$$

显然，从变化率的角度看，平衡态 $\rho = 1$ 是稳定的， $\rho = 0$ 是不稳定的，如果把 $\rho = 1$ 理解成占据态， $\rho = 0$ 理解成未占据态的话，我们期待行波解的波速 $c > 0$ ，表示一种优势种群占据态的扩张或者入侵。第二个例子中，我们考虑

$$f(\rho) = \rho(1 - \rho)(\rho - \theta), \quad \theta \in (0, 1).$$

这是一个我们接触过的双稳态模型， $\rho = 0$ 和 $\rho = 1$ 都是稳定的平衡态，这时候波速的符号待定。

易知，行波解满足

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

对于一些相对简单的变化率模型，我们有可能找到行波解的解析形式。

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

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

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 $v(+\infty) = 0$, 我们得到下面的解

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

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)。更多关于反应扩散方程行波解的知识, 可以参考《Parabolic equations in Biology》的第四章。

3.9 Eulerian 描述和 Lagrangian 描述

从这一小节开始, 我们关心另外一种普遍的现象, 运动 (或者输运)。由它诱导出的数学模型和我们使用的模型分析技巧都跟前几节有显著的不同。

由于我们关心的状态变量的时间演化与物质的运动有关, 我们需要对运动有更全面的描述。我们首先考虑所谓的**被动运输**,

- 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 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, 它给出了一个粒子在时间 t 空间 $\mathbf{x}$ 的情况下, 运动的速度大小和方向。这种对某个状态 (这里指速度场) 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

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{X}, t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0. \quad (3.4)$$

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 $\mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0$, 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 $\mathbf{X}_0$ 的粒子, 它的拉格朗日速度为

$$\mathbf{V}(t; \mathbf{X}_0) = \mathbf{v}(\mathbf{X}(t; \mathbf{X}_0), t).$$

而粒子的轨 (迹) 线问题的拉格朗日描述为

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V}(t; \mathbf{X}_0), \quad \mathbf{X}(0; \mathbf{X}_0) = \mathbf{X}_0.$$

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 $f(\mathbf{x}, t)$ 和相应的拉格朗日描述 $F(t) = F(t; \mathbf{X}_0)$ ，它们的关系为

$$F(t; \mathbf{X}_0) = f(\mathbf{X}(t; \mathbf{X}_0), t).$$

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

$$f_{\text{part}}(t) = F(t; \mathbf{X}_0) = f(\mathbf{X}(t; \mathbf{X}_0), t).$$

我们可以用 Eulerian 描述下的方程 f 来表示这个拉格朗日导数

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

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时，是直接用的 Eulerian 的形式。而很多时候，因为 Lagrangian 描述更加直观，所以我们可以先用 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。

为了用公式表达连续性模型，特别是为了推导状态变量 $f(\mathbf{x}, t)$ 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，或者水中的一个小气泡。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。

我们设想这个一个场景，这个物质滴随着时间会运动，会膨胀，会压缩，其密度函数一直在随时空发生变化，但是在运动过程中这个物质滴的总质量是守恒的，那么它的密度函数是否遵循某种演化规律呢？

一维的时候，这个区域就是一个跟时间有关的区间， $a(t) \leq x \leq b(t)$ 。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 (3.4)，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，我们需要假设 blob 的时间演化满足质量守恒原理：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

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

3.10 欧拉方程*

我们回忆第一章的内容知，如果多维空间的密度函数为 $u(\mathbf{x}, t)$ ， $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ ，通量函数为 $\mathbf{J}(u) \in \mathbb{R}^m$ ，那么守恒律模型为

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

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 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d)^T \in \mathbb{R}^d$ ，每个状态标量都是时间 t 和空间 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ 的函数，于是

$$\mathbf{u}: \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad \mathbf{J}_i \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, m.$$

此时，守恒律方程如下

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

有时，我们令 $\mathbf{J} = (\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_m) \in \mathbb{R}^{d \times m}$ ，并把守恒律写成一个更紧凑的形式

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

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

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \mathbf{j} \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{j}^T \\ \frac{1}{\rho} \mathbf{j} \otimes \mathbf{j} + p \mathbf{I} \\ (E + p) \frac{1}{\rho} \mathbf{j}^T \end{pmatrix},$$

这里

- 自变量为时间 $t \in \mathbb{R}$ ，空间 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ ，其余都是状态变量.
- $\rho \in \mathbb{R}$ 是（质量）密度;
- $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ 是动量（列向量），而 $\mathbf{v}$ 是速度;
- $p \in \mathbb{R}$ 是压强， $E \in \mathbb{R}$ 是能量密度， $\mathbf{I}$ 是单位矩阵;
- 欧拉系统需要补充一个状态方程来联系状态变量 $p = p(\rho, \mathbf{j}, E)$.

另外，对于两个（列）向量 $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ 来说， $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u} \mathbf{v}^T$ 表示向量的张量积。

我们回顾一下第一章守恒律的结果，如果 $\rho(\mathbf{x}, t)$ ($\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$) 表示质量密度， $D \subset \mathbb{R}^3$ 是有界闭区域，那么区域内的质量为

$$m(t) = \int_D \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}.$$

令 ∂D 表示区域的外侧， $\hat{\mathbf{n}}$ 为单位外法向量。区域 D 内质量的变化只跟运动有关，那么质量密度的通量函数为 $\rho \mathbf{v} = \mathbf{j}$ ，则区域 D 内质量的变化满足

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = - \int_{\partial D} \rho \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS.$$

由高斯公式，我们得到

$$\int_D (\rho_t + \nabla \cdot \mathbf{j}) d\mathbf{x} = 0.$$

再由区域 D 的任意性，我们推导了欧拉方程中的质量守恒方程。

类似的，考虑区域 D 内物质的总动量

$$\mathbf{P}(t) = \int_D \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x},$$

我们假设区域 D 内动量改变的原因有两个：一个是由于运动（物质的流入流出伴随着一些动量的增加和减少），一个是由于受力（根据牛顿第二定律）。

为了简化讨论，我们只讨论压力对区域内物质动量的影响。注意，区域表面的受力会改变区域内物质的动量，但是区域内部的压力并不会。于是，我们有如下带运动的牛顿第二定律：

$$\frac{d}{dt} \mathbf{P}(t) = \frac{d}{dt} \int_D \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = - \int_{\partial D} \mathbf{j} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \int_{\partial D} p \mathbf{I} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS.$$

最后，我们利用高斯公式，就得到了欧拉方程中的动量守恒方程

$$\mathbf{j}_t + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{1}{\rho} \mathbf{j} \otimes \mathbf{j} + p \mathbf{I} \right) = 0.$$

类似的，我们也可以得到能量守恒方程，但是模型的建立（通量函数的构造）需要对能量的输运做额外的物理假设，我们在本课中就不太讨论了。

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通量函数（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，我们可以研究这类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 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ 。这样，质量守恒方程简化为

$$\rho_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0.$$

请大家思考一下为什么这可以解读为“流体是不可压缩的”。

于是，我们得到不可压流体的欧拉方程

$$\begin{cases} \rho_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho = 0, \\ \mathbf{v}_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho}, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \end{cases}$$

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

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

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

$$\begin{cases} \mathbf{v}_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho_0} + \mu \Delta \mathbf{v}, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \end{cases}$$

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。

3.11 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。注意，我们在反应扩散方程中也讨论了行波解。

下面我们考虑半线性（或准线性，semilinear）的一阶波方程

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

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 X_0 ，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 (3.5) 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。

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

这个初值问题对应的特征问题是

$$\frac{dX}{dt} = 2X, \quad X(0) = X_0, \quad (3.6)$$

$$\frac{dP}{dt} = X P^2, \quad P(0) = 2 + \sin(X_0). \quad (3.7)$$

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 $X = X_0 e^{2t}$ ，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

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

下面我们考虑拟线性 (quasilinear) 问题。回到刚才的一维波方程，

$$\frac{\partial}{\partial t} p + c(x, t, p) \frac{\partial}{\partial x} p = r(x, t, p), \quad p(x, 0) = f(x). \quad (3.8)$$

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

$$p_t + p p_x = 0, \quad p(x, 0) = f(x).$$

我们引入特征线方程

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

令 $P(t; X_0) = p(X(t; X_0), t)$ ，则

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

于是，我们推导出了如下的特征方程

$$\frac{dX}{dt} = P, \quad X(0) = X_0, \quad (3.9)$$

$$\frac{dP}{dt} = 0, \quad P(0) = f(X_0). \quad (3.10)$$

注意到，由于 P 的方程里面不含 X ，我们可以先解 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

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

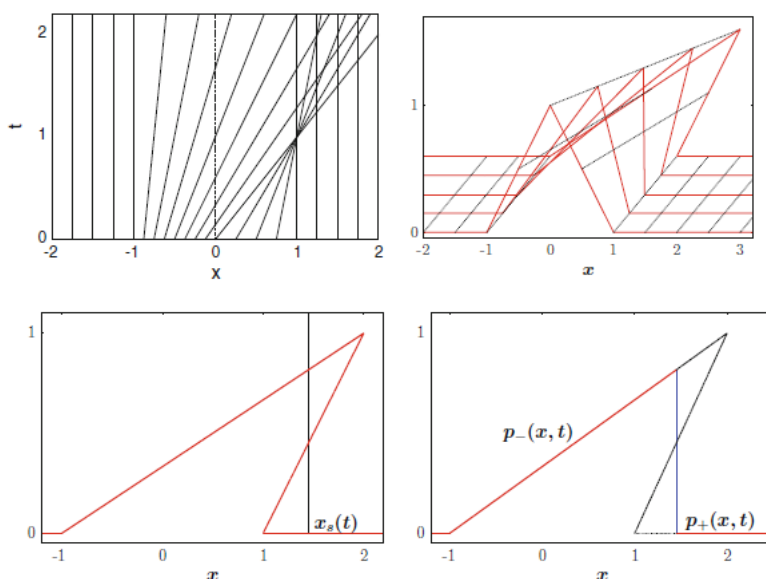
于是，我们可以分段求解，得到 Lagrangian 解

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

我们亦可以把他们写回 Eulerian 的形式

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

通过观察特征线，我们发现特征线会在 $t = 1$ 时出现相交，也就是说，当 $t > 1$ 时，这种分片定义的解会出现重复定义的区域（如图所示）。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，我们只介绍一种在一定应用范围内（比如，流体，交通流等）有物理意义的解：激波解。但是请注意，在其他应用领域中，可能激波解并不是有物理意义的解。



我们下面介绍空间一维时的激波解的构造：我们希望插入一个激波 $x = x_s(t)$ ，使得它能够“合理地”分割特征线重合的区域，从而得到一个良定义的单值解。

考虑一个关于 $p(x, t)$ 的平衡率模型，通量函数 $q = q(p)$ ，即

$$\frac{\partial}{\partial t} p + \frac{\partial}{\partial x} q(p) = 0.$$

在一固定的区间 $[a, b]$ 上，我们对上式积分得

$$\frac{d}{dt} \left(\int_a^b p dx \right) + q(p) \Big|_{x=a}^{x=b} = 0. \quad (3.11)$$

假设我们需要在这个区间里插入一个激波 $x = x_s(t)$ ，使得我们有如下分片定义的解

$$p(x, t) = \begin{cases} p_-(x, t), & a \leq x < x_s(t); \\ p_+(x, t), & x_s(t) < x \leq b. \end{cases}$$

于是，我们将 (3.11) 中的项按照激波的左右分开成

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

我们计算时间导数（注意 $x_s(t)$ 是时间的函数）得

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

我们可以进一步整理得

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

注意，上式中，第一行的两个括号内的项由于守恒律的积分形式分别相互抵消了。于是我们推导出了 Rankine-Hugoniot 波速条件

$$\frac{dx_s}{dt} = \frac{q(p_+(x_s, t)) - q(p_-(x_s, t))}{p_+(x_s, t) - p_-(x_s, t)}.$$

例如，在 inviscid Burgers equation 中， $q = \frac{1}{2} p^2$ ，此时 R-H 波速条件为

$$\frac{dx_s}{dt} = \frac{\frac{1}{2} (p_+(x_s, t))^2 - \frac{1}{2} (p_-(x_s, t))^2}{p_+(x_s, t) - p_-(x_s, t)} = \frac{1}{2} (p_+(x_s, t) + p_-(x_s, t)).$$

回到刚才的例子，我们可以容易得到激波满足的方程

$$\frac{dx_s}{dt} = \frac{1 + x_s}{2(1 + t)}, \quad x_s(1) = 1.$$

通过求解，我们得到激波的表达式

$$x_s(t) = \sqrt{2(1+t)} - 1 \quad \text{for } t \geq 1.$$

于是最终，我们得到当 $t \geq 1$ 时，这个 inviscid Burgers equation 的解为

$$p(x, t) = \begin{cases} 0 & x < -1 \\ (1+x)/(1+t) & -1 \leq x < x_s(t) \\ 0 & x > x_s(t) \end{cases}$$

关于激波解的更多知识，感兴趣的同学们会在偏微分方程或者流体力学相关的课程中学习。

总结来看，在本章中我们以守恒律模型为视角讨论了平衡、扩散、运动等现象，学习了相应的数学模型和解析技巧。这种“速成”的视角当然是非常片面的，但是希望它对于刚接触偏微分方程的同学来说是有所帮助的。我们在后面的章节也会接触到新的微分方程模型，例如，在第 4 章中，一个优化问题的最优解会满足一类微分方程，在第 5 章中，一个随机过程的概率密度函数会满足另一类微分方程。希望这些后续章节会进一步打开你的“方程宇宙”的视野和世界观。