2. 高维空间的重积分

SDS 高数小班课 (2025 春)

崔畅
北京大学化学与分子工程学院
CuiChang2022@stu.pku.edu.cn

2025.3.15

1 三重积分的计算

1.1 直角坐标系

定理 1.1 (曲顶柱体: 外层为二重积分)**.** 设积分区域 $\Omega = \{(x,y,z)|(x,y) \in D, z_1(x,y) \leq z \leq z_2(x,y)\}$, 其中 $z_1(x,y), z_2(x,y)$ 为 D 上的连续函数. 若 $u = f(x,y,z)$ 为 Ω 上的连续函数, 则

$$\iiint_D f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \iint_D \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} f(x,y,z)\,\mathrm{d}z. \tag{1}$$

定理 1.2 (平面夹层: 外层为一元积分)**.** 设积分区域 Ω 介于平面 $z=a, z=b$ 之间 (a,b 为常数), 且对于任意 $z_0 \in [a,b]$, 平面 $z = z_0$ 与 Ω 的交集是一个闭区域 D_{z_0}. 若 $u = f(x,y,z)$ 为 Ω 上的连续函数, 则

$$\iiint_D f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \int_a^b \mathrm{d}z \iint_{D_z} f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y. \tag{2}$$

例题 1.1 (地位对等的变量)**.** 设 V 是由平面 $x=0, y=0, z=0, x+y+z=1$ 所围成的四面体. 求三重积分

$$I = \iiint_V \frac{1}{(1+x+y+z)^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z. \tag{3}$$

例题 1.2 (积分次序: 几何视角)**.** 计算三重积分 $I = \iiint_V xy^2z^3\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, 其中 V 是曲面 $z = xy$ 与平面 $y = x, x = 1, z = 0$ 所围的区域.

例题 1.3 (积分次序: 代数视角)**.** 计算三重积分 $I = \iiint_\Omega (1-y)\mathrm{e}^{-(1-y-z)^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, 其中 Ω 是平面 $x+y+z=1$ 和三个坐标平面围成的四面体.

注记 1.1. 三重积分的计算难度, 取决于累次积分中二重积分的计算难度. “好” 的积分次序应尽可能简化二重积分部分的计算, 这通常包括两方面的考虑:

- 几何角度看, 应尽可能满足内层变量积分限的连贯统一与简洁易算;
- 代数角度看, 应将其它变量置于内层以规避不可积函数.

1.2 柱坐标系与球坐标系

定理 1.3 (柱坐标系下的三重积分)**.** 记

$$\Omega' \equiv \{(\rho,\theta,z)|(\rho\cos\theta, \rho\sin\theta, z) \in \Omega\}, \tag{4}$$

则

$$\iiint_\Omega f(x,y,z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \iiint_{\Omega'} f(\rho\cos\theta, \rho\sin\theta, z)\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}z. \tag{5}$$

例题 1.4 (柱坐标变换)**.** 计算三重积分

$$I = \iiint_{\Omega} (y^2 + z^2)\,\mathrm{d}V, \tag{6}$$

其中 $\Omega : 0 \le z \le x^2 + y^2 \le 1$.

定理 1.4 (球坐标系下的三重积分)**.** 记

$$\Omega' \equiv \{(\rho, \phi, \theta) | (\rho \sin\phi \cos\theta, \rho \sin\phi \sin\theta, \rho \cos\phi) \in \Omega\}, \tag{7}$$

则

$$\iiint_{\Omega} f(x, y, z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = \iiint_{\Omega'} f(\rho \sin\phi \cos\theta, \rho \sin\phi \sin\theta, \rho \cos\phi) \times \rho^2 \sin\phi\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\theta\,. \tag{8}$$

例题 1.5 (球坐标变换)**.** 设 $R > 0$. 计算三重积分 $I = \iiint_{\Omega} z^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$, 其中 Ω 是两个球 $x^2 + y^2 + z^2 \le R^2$ 与 $x^2 + y^2 + z^2 - 2Rz \le 0$ 围成的区域.

2 重积分的物理意义

2.1 曲面的表面积

定理 2.1 (平面闭区域的面积)**.** 平面闭区域 D 的面积可表示为被积函数为 1 的二重积分

$$\sigma(D) = \iint_{D} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y. \tag{9}$$

- 对于空间曲面 $\Sigma : z = f(x, y), (x, y) \in D$, 由几何关系知:

$$\sigma(\Sigma) = \iint_{D} \sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y. \tag{10}$$

例题 2.1 (平面闭区域的面积)**.** 设 $a > 0$, 计算曲线 $(x^2+y^2)^2 = 2a^2(x^2-y^2), x^2+y^2 \ge a^2$ 所围区域的面积.

例题 2.2 (空间曲面的表面积)**.** 设 $a > 0$, 计算曲面 $az = xy$ 在圆柱面 $x^2 + y^2 = a^2$ 以内的部分的表面积.

2.2 几何体的体积

定理 2.2 (空间闭区域的体积)**.** 空间闭区域 Ω 的体积

$$V(\Omega) = \iiint_{\Omega} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z. \tag{11}$$

例题 2.3 (直角坐标系)**.** 计算曲面 $z=x+y, z=xy, x+y=1, x=0, y=0$ 围成的几何体的体积.

注记 2.1. "曲顶柱体法" 的二重积分区域由 Ω 在特定坐标平面上的投影得到, 从而是固定的. 也因此, 它可以是我们计算几何体体积时优先考虑的积分次序.

例题 2.4 (柱坐标系与球坐标系)**.** 计算曲面 $x^2+y^2+z^2=2az, x^2+y^2\le z^2$ 所围区域的体积.

3 变量代换的一般理论

定理 3.1 (变量代换定理)**.** 给定平面闭区域 $U\subset\mathbb{R}^n$ 具有连续偏导数的可逆映射 $\phi: U\to\mathbb{R}^n$, 其中 $\frac{\partial\phi(\mathbf{u})}{\partial\mathbf{u}}\neq 0$ 对任意 $\mathbf{u}\in U$ 都不为零. 则函数 $f(\mathbf{v})$ 在区域 U 上的 n 重积分 (若可积) 满足

$$\int_{\phi(U)} f(\mathbf{v})\,\mathrm{d}\mathbf{v} = \int_U f(\phi(\mathbf{u}))\left|\det\left\{\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{u}}\right\}\right|\mathrm{d}\mathbf{u}. \tag{12}$$

- (广义) 体积元变换:

$$\mathrm{d}\mathbf{v} = \left|\det\left\{\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial\mathbf{u}}\right\}\right|\mathrm{d}\mathbf{u}\,. \tag{13}$$

例题 3.1 (椭球坐标系)**.** 设 r 是正实数, $f:(-r,r)\to\mathbb{R}$ 连续, $f(0)=0$, f 在 0 点可导, 对于每个 $t>0$, 定义

$$V(t)=\left\{(x,y,z)\in\mathbb{R}^3\,\middle|\,x^2+16y^2+\frac{z^2}{25}\le t^2\right\}, \tag{14}$$

证明

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{t^5}\iiint_{V(t)} f\left(x^2+16y^2+\frac{z^2}{25}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z=\pi f'(0). \tag{15}$$

注记 3.1. 若积分区域或被积函数与椭球体

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1 \tag{16}$$

有密切的联系 (这里 $a,b,c>0$), 则变量代换

$$\begin{cases} x=a\rho\sin\phi\cos\theta,\\ y=b\rho\sin\phi\sin\theta,\\ z=c\rho\cos\phi \end{cases} \tag{17}$$

将是有益的. 根据 Jacobian 行列式, 容易得到如下的体积元变换关系

$$\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z=\left(abc\rho^2\sin\phi\right)\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\theta\,. \tag{18}$$

例题 3.2 (变量代换与化简)**.** 计算二重积分 $I=\iint_D\left(\sqrt{\frac{y}{x}}+\sqrt{xy}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$, 其中 D 是由

四条曲线 $xy=1, xy=9, y=x, y=4x$ 在第一象限围成的区域.

Snacks

相空间中的动力学 [Phys]

我们已经非常熟悉 (非显含时的) Newtonian 力学定律

$$-\boldsymbol{\nabla} U(\mathbf{r}_t) \equiv \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) = m\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{r}_t}{\mathrm{d}t^2}, \tag{19}$$

即: 在给定的外力条件 $\mathbf{F}(\mathbf{r}_t)$ 下, 可以由初值条件 $(\mathbf{r}_0, \dot{\mathbf{r}}_0)$ 唯一地确定质点的空间位置 $\mathbf{r}_t$. 物理学中, 用以描述 $\mathbf{r}_t$ 的 n 维坐标空间也常称为*位形空间* (configurational space).

但作为关于高维向量 (而非一维标量) 的 (微分) 方程, 其求解与应用可能会较为繁琐. 若我们将位形 $\mathbf{r}$ 与动量 $\mathbf{p}$ 看成两组独立变量, 并将体系的 "能量" (动能与势能之和) 定义为 *Hamiltonian 函数*:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r},\mathbf{p}) \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \tag{20}$$

则根据偏导数法则以及动量、速度的正比关系, 容易导出 Newtonian 方程的等价形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{p}_t} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}_t}{\mathrm{d}t} \equiv \dot{\mathbf{r}}_t, \\ \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{r}_t} = -\frac{\mathrm{d}\mathbf{p}_t}{\mathrm{d}t} \equiv -\dot{\mathbf{p}}_t. \end{cases} \tag{21}$$

由 $(\mathbf{r},\mathbf{p})$ 张成的 $2n$ 维空间称为*相空间* (phase space). 选用相空间描述某个系统的动力学的一个重要动机在于*相体积的守恒性*.

设由 $\mathcal{H}$ 表征的某一维系统, 其演化起点 (r_0,p_0) 的所有可能取值构成了相空间区域 Γ_0, 而在时刻 t 下的相点 (r_t,p_t) 的所有可能取值构成 Γ_t. 我们证明: $V(\Gamma_0)=V(\Gamma_t)$, 也即:

$$\int_{\Gamma_0} \mathrm{d}r\,\mathrm{d}p = \int_{\Gamma_t} \mathrm{d}r\,\mathrm{d}p. \tag{22}$$

为此, 我们将含时演化过程 $(r_0,p_0)\mapsto(r_t(r_0,p_0),p_t(r_0,p_0))$ 看作变量代换, 其 Jacobian 行列式关于时间的导数

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\det\left\{\frac{\partial(r_t,p_t)}{\partial(r_0,p_0)}\right\}\right) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial r_t}{\partial r_0}\frac{\partial p_t}{\partial p_0} - \frac{\partial r_t}{\partial p_0}\frac{\partial p_t}{\partial r_0}\right) \\
&= \left(\frac{\partial \dot{r}_t}{\partial r_0}\frac{\partial p_t}{\partial p_0} + \frac{\partial r_t}{\partial r_0}\frac{\partial \dot{p}_t}{\partial p_0}\right) - \left(\frac{\partial \dot{r}_t}{\partial p_0}\frac{\partial p_t}{\partial v_0} + \frac{\partial r_t}{\partial p_0}\frac{\partial \dot{p}_t}{\partial r_0}\right) \\
&= \frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial r_0\partial p_0}\left(\frac{\partial p_0}{\partial p_t}\frac{\partial p_t}{\partial p_0} - \frac{\partial r_t}{\partial r_0}\frac{\partial r_0}{\partial r_t}\right) - \left(\frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial p_0^2}\frac{\partial p_0}{\partial p_t}\frac{\partial p_t}{\partial v_0} - \frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial r_0^2}\frac{\partial r_0}{\partial r_t}\frac{\partial r_t}{\partial p_0}\right) \\
&= \frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial r_0\partial p_0} - \frac{\partial^2\mathcal{H}}{\partial r_0\partial p_0} \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{23}$$

且 $t=0$ 时的值显然为 1. 所以, 任意时刻 t 均满足 $\det\{J_t\}=1$.

归一化流 [AI]

现实世界的许多问题都与高维数据的某种概率密度 $q(\mathbf{x})$ 有关. *深度生成模型* (deep generative models, DGMs) 旨在利用深度学习方法实现 $q(\mathbf{x})$ 下的高效抽样. 当然, 从某种简单分布 $p(\mathbf{z})$ (例如 Gaussian 分布) 中进行抽样总是容易的. 随后, 若我们计算深度神经网络 $\mathbf{x} = \mathbf{f}_\theta(\mathbf{z})$ 的输出值 $\mathbf{x}$, 则由概率密度的定义可知

$$q(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = p(\mathbf{z})\,\mathrm{d}\mathbf{z}\,, \tag{24}$$

$$q(\mathbf{x}) = p(\mathbf{z})\left|\det\left\{\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}}\right\}\right| = p(\mathbf{z})|\det\{\mathbf{f}_\theta\}|^{-1}. \tag{25}$$

当变量被作了代换时, 概率密度将按上式进行变换. 在*归一化流* (normalizing flow, NF) 模型中, 通过特定的结构设计, 神经网络的 Jacobian 行列式能够得到显式的计算. 于是, 我们既可以根据*极大似然估计*等原则对模型进行有效的训练, 也可以实现对给定样本 $\mathbf{x}$ 的概率密度值的精确计算 (这在分子科学等领域应用极为广泛).