

目录

第一部分 数学基础	3
第一章 集合论基础	5
1.1 集合	5
1.2 关系	8
1.3 映射	12
第二章 测度论基础	17
第三章 概率论基础	21
3.1 正态分布的随机向量	21
第四章 随机过程基础	23
第五章 分布函数和傅里叶变换	25
5.1 Fourier 变换的引入	25
5.2 狄拉克 delta 函数	26
第六章 拉普拉斯变换	29
第七章 常微分方程	31
第八章 偏微分方程	33
8.1 一阶偏微分方程	34
8.2 二阶偏微分方程	35
第九章 随机微分方程基础	37
第十章 朗之万方程	39
第十一章 广义朗之万方程	41
第十二章 时间序列分析基础	43
第十三章 朗之万方程的离散化	45
第十四章 广义朗之万方程的离散化	47

第二部分 胶体粒子的布朗运动	49
第三部分 简单液体理论	51
第十五章 刘维尔方程	53
15.1 引入	53
15.2 动力学量的变化方程	55
15.3 系综平均	57
第十六章 液体涨落性质的时间相关函数	59

第一部分

数学基础

第一章 集合论基础

1.1 集合

集合是近代数学的基本语言。用集合论重述人的直观经验,是近世数学和基于其构建的理论物理的普遍特点。连续介质力学中的大量概念都是依赖集合和映射来引入的。如果不熟悉集合和映射的语言和符号,就很难读懂后面的内容。

一般资料中常见的对集合的定义方式如下:

定义 1. 集合(*set*)是具有某种特性的事物的整体。构成集合的事物或对象称为元素(*element*)。集合还必须满足:

- 无序性:一个集合中,每个元素的地位是相同的,元素之间是无序的
- 互异性:一个集合中,任何两个元素都不相同,即每个元素只出现一次
- 确定性:给定一个集合及一个事物,该事物要么属于要么不属于该集合,不允许模棱两可。

定义1的“确定性”,其实是逻辑学的排中律。具体地,若 A 是集合, x 是 A 的一个元素,则记 $x \in A$; 若 y 不是 A 的元素,则记为 $y \notin A$ 。记号“ $x \in A$ ”规定了“ A 是集合且 x 是 A 的元素”。

如果只要有 $x \in A$ 就有 $x \in B$,则称 A 是 B 的子集(*subset*),或称 A 包含于 B 、 B 包含 A ,记为 $A \subset B$ 。显然,任一集合都是它自己的子集。

如果 $A \subset B$ 且 $B \subset A$,则集合 A 就是(*is identical to*) B ,记为 $A = B$ ²。如果集合 A 与 B 的元素都相同,则 A 与 B 就是同一个集合。一个集合由其所有元素唯一确定。这是集合论的外延公理(*axiom of extension*)。

如果 $A \subset B$ 且 $A \neq B$,则称 A 是 B 的真子集(*proper subset*),或称 A 真包含于 B 、 B 真包含 A ,记作 $A \subsetneq B$ 。

没有元素的集合称为空集(*empty set*),记作 \emptyset 。空集是唯一的。简要证明:若 \emptyset_1 和 \emptyset_2 都是空集且 $\emptyset_1 \neq \emptyset_2$,则由空集的上述定义,要么存在 $x \in \emptyset_1$ 且 $x \notin \emptyset_2$,要么存在 $y \in \emptyset_2$ 且 $y \notin \emptyset_1$;无论哪种情况与 \emptyset_1 和 \emptyset_2 是空集相矛盾。因此要么 \emptyset_1 和 \emptyset_2 有一个不是空集,要么它们是同一个集合,即“空集是唯一的”。

给定一个集合 A ,我们可以根据 A 的元素所需要满足的附加要求,构建出 A 的子集。例如,设 A 是所有偶数的集合,附加的要求是“比 1 大、比 9 小”,我们就从 A 中找出了 2、4、6、8 这四个元素组成的集合 B 。一般地,我们将此记作:

$$\{x \in A | x \text{ 需要满足的条件} \}$$

注意,预先给定一个基本集合 A 这一步原则上是不可省略的;“ $|$ ”后的语句形式是对 A 的元素 x 的规定,而不能是其他意义。这是集合论的分类公理(*axiom of specification*)。

给定两个集合 A 和 B ,总存在唯一一个这样的集合 V :只要 $x \in V$,就有 $x \in A$ 且 $x \in B$;反之,若 $x \in A$ 且 $x \in B$,则有 $x \in V$ 。这样的集合 V 的存在性来自分类公理; V 可表示成:

$$V = \{x \in A | x \in B\}$$

²此处等号“=”的意义应理解为:等号两边的字母是同一集合的不同代号。若写 $A = B$,那么 A 就是 B 。相应地,不等号“ \neq ”两边的字母是不同集合的代号。若写 $A \neq B$,那么 A 不是 B 。

V 的唯一性简证如下: 若另有一 $V' = \{x \in A | x \in B\}$ 且 $V' \neq V$, 则由外延公理必存在 $x \in V'$ 且 $x \notin V$ 。若 $x \in V'$, 则 $x \in A$ 且 $x \in B$; 若 $x \notin V$, 则 $x \notin A$ 或 $x \notin B$, 这两个推论相互矛盾¹。因此 $V' = V$ 或 V' 不存在, 即 V 是唯一的。我们把这样的集合 V 称作集合 A 与 B 的交集(*interset*), 记作 $V = A \cap B$ 。

我们经常还要讨论“集合的集合”, 从而有“元素的元素”。

设 \mathcal{C} 是集合的集合, 且 $\mathcal{C} \neq \emptyset$ 。设 $A \in \mathcal{C}$, 则由分类公理存在以下集合

$$V = \{x \in A | x \in X \Leftrightarrow X \in \mathcal{C}\}$$

其中 \Leftrightarrow 是当且仅当(*if and only if, iff*)的意思。这一集合 V 的唯一性可类似上一段那样得证, 此略²。我们称 V 是 \mathcal{C} 的元素的交集, 记作

$$V = \bigcap_{X \in \mathcal{C}} X$$

集合的交集有如下性质:

1. $A \cap \emptyset = \emptyset$
2. $A \cap B = B \cap A$ (交换律)
3. $A \cap (B \cap C) = (A \cap B) \cap C$ (结合律)
4. $A \cap A = A$ (幂等)
5. $A \subset B \Leftrightarrow A \cap B = A$

如果集合 A 和 B 的交集是空集, 即 $A \cap B = \emptyset$, 则称 A 与 B 是不相交的(*disjoint*)。比如, 我们有时会说, 某集合的集合 \mathcal{C} 中的元素两两不相交(*pair-wise disjoint*)。

分类公理只允许我们“收窄”一个给定的集合。以下规定的原则将允许我们从已有集合构建出“更大的”集合。

我们可以把任意两个集合 a, b 组成一对, 变成一个新的集合, 记作 $\{a, b\}$, 并规定这样的集合可以存在。这是集合论的配对公理(*axiom of pairing*)。于是有 $a \in \{a, b\}$ 和 $b \in \{a, b\}$ 。特别地, 一个集合 a 可与其自身“成对”, 得到“ $\{a, a\}$ ”, 但由于集合的元素要满足互异性, 故实际所得到的集合应是 $\{a\}$ 。这种只有一个元素的集合, 称为单元素集(*singleton*)。注意理解以下事实: $\emptyset \in \{\emptyset\}$, $\{\emptyset\} \neq \emptyset$ 。

我们可以让若干个集合形成并集。具体地, 我们规定对任意集合的集合 \mathcal{C} , 总存在一个集合 U , 它含有 \mathcal{C} 的至少一个元素的所有元素³。这样规定存在的集合 U , 还可能包含不属于 \mathcal{C} 中任一集合的元素。但是我们总是可以再利用分类公理, 把 U 收窄为恰好只包含 \mathcal{C} 中的所有元素的所有元素。具体地, 给定一个集合的集合 \mathcal{C} , 由并集公理必存在上述的 U , 利用分类公理构建以下集合⁴

$$\{x \in U | \exists X (X \in \mathcal{C} \wedge x \in X)\}$$

使得对每一 $x \in U$, 当且仅当 x 属于 \mathcal{C} 的某个元素 X , x 属于上列集合。因此上列集合包括且仅包括 \mathcal{C} 中的所有元素的所有元素。我们称上列集合为 \mathcal{C} 的所有元素的并集(*union*), 记作

$$\bigcup_{X \in \mathcal{C}} X$$

这是集合论的并集公理(*axiom of unions*)。特别地, 若 $\mathcal{C} = \emptyset$, 则 $\bigcup_{X \in \mathcal{C}} X = \emptyset$, 简单证明: 由并集的定义, 若存在 $a \in \bigcup_{X \in \mathcal{C}} X$, 则至少存在一个 $X \in \mathcal{C} = \emptyset$ 满足 $a \in X$, 但是显然不存在属于空集的元素 X , 因此不存在所述的 a , 即 $\bigcup_{X \in \mathcal{C}} X$ 是空集。

¹由集合定义1中的“确定性”。

²下文构建的集合的唯一性, 不作说明时, 都由外延公理保证。

³ \mathcal{C} 的元素是集合。

⁴符号 \exists 表示“存在一个”或“给定一个”的意思。符号 \wedge 表示“且”的意思。

如果 \mathcal{C} 是由两个集合 A 和 B 配对而成, 即 $\mathcal{C} = \{A, B\}$, 则 \mathcal{C} 的元素的并集常以中缀的记法写成:

$$\bigcup_{X \in \{A, B\}} X = A \cup B$$

集合的并集有如下性质:

1. $A \cup \emptyset = A$
2. $A \cup B = B \cup A$ (交换律)
3. $A \cup (B \cup C) = (A \cup B) \cup C$ (结合律)
4. $A \cup A = A$ (幂等)
5. $A \subset B \Leftrightarrow A \cup B = B$

我们利用并集操作把若干个单元素集结合成一个含有限个元素的集合。例如,

$$\{a, b, c\} = \{a\} \cup (\{b\} \cup \{c\}) = (\{a\} \cup \{b\}) \cup \{c\} = \bigcup_{X \in \{\{a\}, \{b\}, \{c\}\}} X$$

依此类推, 任意有限个元素的集合都可由此方法构建¹。

给定集合 A 和 B , 集合 $C = \{x \in A | x \notin B\}$ 称 B 在 A 中的相对补集 (*relative complement of B in A*), 记为 $C = A \setminus B$ 。注意, 此处 B 不必包含于 A 。

我们常在给定一个全集 E 之下讨论其子集在 E 中的相对补集。如果默认这一前提, 则可简称任一 E 的子集 $A \subset E$ 在 E 中的相对补集为 A 的补集, 记为 $A^c \equiv E \setminus A$ ²。

给定全集 E 下集合的补集有如下性质:

1. $(A^c)^c = A$
2. $\emptyset^c = E$
3. $E^c = \emptyset$
4. $A \cap A^c = \emptyset$
5. $A \cup A^c = E$
6. $A \subset B \Leftrightarrow B^c \subset A^c$

关于集合的并集、交集, 以及给定全集下的补集还有一条重要定律——德摩根定律 (*De Morgan's Laws*): 对任意集合 A, B , 有

$$\begin{aligned} (A \cup B)^c &= A^c \cap B^c \\ (A \cap B)^c &= A^c \cup B^c \end{aligned}$$

给定一个集合 A , 我们规定存在一个集合, 暂记作 $\mathcal{P}'(A)$, 它包含所有 A 的子集。这是集合论的幂集公理 (*axiom of powers*)。我们于是可遵守分类公理给出恰好包括 A 的所有子集 (包括空集和集合 A 本身), 而不包括其他元素的集合:

$$\mathcal{P}(A) = \{X \in \mathcal{P}'(A) | X \subset A\}$$

我们称 $\mathcal{P}(A)$ 为集合 A 的幂集 (*power set*)。

为什么把这样的集合称为“幂集”呢? 若 $A = \emptyset$, 则 $\mathcal{P}(A) = \{\emptyset\}$, 有 $1 = 2^0$ 个元素; 若 $A = \{a\}$, 则 $\mathcal{P}(A) = \{\emptyset, \{a\}\}$, 有 $2 = 2^1$ 个元素; 若 $A = \{a, b\}$, 则 $\mathcal{P}(A) = \{\emptyset, \{a\}, \{b\}, \{a, b\}\}$, 有 $4 = 2^2$ 个元素; ……

¹至此, 我们可以回过头来重新理解集合的定义 1 中的“无序性”、“互异性”和“确定性”。头两个规定, 其实是外延公理的推论。例如, 若集合 $A = \{a, b, c\}$, $B = \{c, b, a\}$, 则由外延公理 $A = B$ (无序性)。若集合 $A = \{a, a\}$, $B = \{a\}$, 则由外延公理 $A = B$ (互异性)。最后, 定义 1 中的“确定性”, 只是逻辑上排中律的要求。

²有时, 我们使用恒等号“ \equiv ”来表示新引入的符号或者记法代表什么表达式。

注意到, 若 $X \in \mathcal{P}(E)$, 则有 $X^c \in \mathcal{P}(E)$ 。于是, 默认以 E 为全集时, 我们不必逐个讨论 E 的子集的补集。设 $\mathcal{C} \subset \mathcal{P}(E)$, 则 \mathcal{C} 中的元素的补集的集合为

$$\mathcal{D} = \{X \in \mathcal{P}(E) | X^c \in \mathcal{C}\}$$

这时, 德摩根定律有如下更一般的形式:

$$\begin{aligned} \left(\bigcup_{X \in \mathcal{C}} X \right)^c &= \bigcap_{X \in \mathcal{C}} X^c \\ \left(\bigcap_{X \in \mathcal{C}} X \right)^c &= \bigcup_{X \in \mathcal{C}} X^c \end{aligned}$$

其中我们引入了以下记法惯例:

$$\bigcap_{X \in \mathcal{C}} X^c \equiv \bigcap_{X \in \mathcal{D}} X, \quad \bigcup_{X \in \mathcal{C}} X^c \equiv \bigcup_{X \in \mathcal{D}} X$$

由集合的定义¹所要求的无序性, 给定两个集合 a, b , 它们的配对集合 $\{a, b\}$ 是不表示顺序的。我们可以用 a 的单元集 $\{a\}$ 和 $\{a, b\}$ 这两个集合, 配对得到集合 $\{\{a\}, \{a, b\}\} \equiv (a, b)$, 来表示有序对 (ordered pair)。在 (a, b) 的元素中, $\{a, b\}$ 表明我们讨论哪两个元素的有序对, 而 $\{a\}$ 表明哪一个元素放在前面。所以, $(a, b) \neq (b, a)$ 。

给定两个集合 A, B , 是否可以给出所有 $a \in A$ 且 $b \in B$ 的有序对 (a, b) 的集合? 我们留意到, 对任意 $a \in A$ 和 $b \in B$ 有 $\{a\} \subset A$, $\{b\} \subset B$, $\{a, b\} \subset A \cup B$, $\{a\} \subset A \cup B$ 。可见, $\{a\}$ 和 $\{a, b\}$ 都是集合 $A \cup B$ 的子集, 故 $(a, b) \in \mathcal{P}(A \cup B)$, $(a, b) \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(A \cup B))$ 。换言之, 只要 $a \in A$ 且 $b \in B$, 就有 $(a, b) \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(A \cup B))$ 。于是我们可以遵循分类公理, 把所有 $a \in A$ 且 $b \in B$ 的有序对 (a, b) 的集合规定出来, 且其唯一性由外延公理保证¹。故我们可定义由集合 A 和 B 形成的所有满足 $a \in A$ 且 $b \in B$ 的有序对的集合为 A 与 B 的笛卡尔积 (Cartesian product), 记为 $A \times B$ 。

以下是与笛卡尔集有关的一些性质:

1. $(A \cup B) \times X = (A \times X) \cup (B \times X)$
2. $(A \cap B) \times (X \cap Y) = (A \times X) \cap (B \times Y)$
3. $(A \setminus B) \times X = (A \times X) \setminus (B \times X)$
4. $A = \emptyset$ 或 $B = \emptyset \Leftrightarrow A \times B = \emptyset$
5. $A \subset X$ 且 $B \subset Y \Rightarrow A \times B \subset X \times Y$ ²
6. $A \times B \subset X \times Y$ 且 $A \times B \neq \emptyset \Rightarrow A \subset X$ 且 $B \subset Y$

不难留意到, 笛卡尔积运算不满足交换律和结合律。

多于两个集合的笛卡尔集的严格定义, 需要在介绍完映射的概念后才能给出。

1.2 关系

一个集合的元素可与另一个集合的元素形成对应关系。例如, 设 A 是所有成年公民的集合, 那么“婚姻”就是定义在 A 的任意两个不同元素之间的关系。每对夫妻都是一个有序对 $(a, b) \in A \times A$ 。在实际社会生活中,

¹用分类公理、并集公理、配对公理和幂集构建集合 A 与 B 的笛卡尔集的过程, 用自然语言描述将十分繁琐。以下是采用合式公式 (well-formed formula) 表达的结果, 仅供熟悉此知识的读者参考。

$$A \times B = \{X \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(A \cup B)) | \varphi(X)\}$$

其中, $\varphi(X)$ 表示关于 X 的语句,

$$\varphi(X) = \exists U \exists V \exists W \exists Y (U \in A \wedge V \in B \wedge \phi(W, U, U) \wedge \phi(Y, U, V) \wedge \phi(X, W, Y))$$

而关于 X, U 和 V 的语句

$$\phi(X, U, V) = \forall Z (Z \in X \leftrightarrow ((X = U) \vee (X = V)))$$

其中, 记号 $\forall a$ (关于 a 的语句) 表示“对每一/任一满足关于 a 的语句规定的 a ”。注意到, 语句 $\phi(X, U, V)$ 表示的就是 $X = \{U, V\}$ 这件事, 故语句 $\varphi(X)$ 就是让 $X = \{U, V\}$ 。

²符号 \Rightarrow 的意义: (语句 1) \Rightarrow (语句 2) 表示“若 (语句 1), 则 (语句 2)。”

我们是先用其他概念对婚姻关系进行定义（例如当地的《婚姻法》），再辨别任意两个公民之间是否具有婚姻关系的。但是在集合论中，我们没有超出集合论的其他概念以供我们独立地定义元素间的一种关系。我们只能视符合某关系的所有有序对的集合为这一关系的定义。例如，我们不采用既有的《婚姻法》来定义何谓婚姻关系，而是把所有具有合法婚姻关系的公民对全部列出来组成一个集合，作为关于“何谓婚姻关系”的一种完整的界定。要辨认 $a, b \in A$ 是否婚姻关系，就只看有序对 (a, b) 是否属于上述集合。这种定义关系的方法才是集合论可以普适地采用的。

正式地，若集合 R 的元素都是有序对，则集合 R 就是一个关系 (relation)。若有序对 $(x, y) \in R$ ，则记为 xRy 。习惯上，一般的关系常用符号“ \sim ”表示，各种特殊的关系会用特定的符号表示。设 \sim 是一个关系，若 $(x, y) \in \sim$ ，则 $x \sim y$ ；若 $(x, y) \notin \sim$ ，则记为 $x \not\sim y$ 。关系的定义告诉我们：

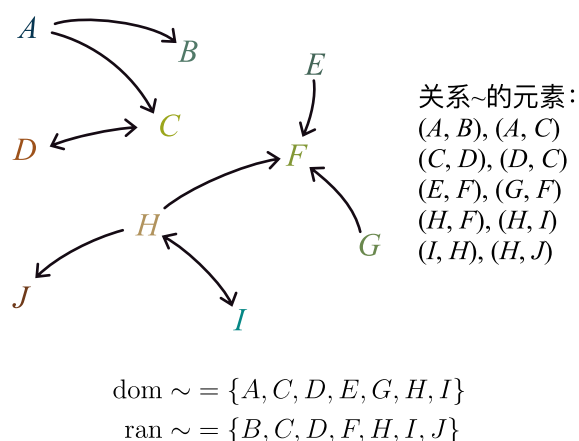


图 1.1: 图中展示了一个关系 \sim 。箭头表示一个有序对中两个元素的先后次序。

1. 关系 \sim 是一个有序对的集合。图1.1的箭头表示法可协助我们把“有序对的集合”联系到“关系”一词的日常意义。
2. 任一关系 \sim 总可以写成两个集合的笛卡尔积的子集。证明的方法：验证关系 \sim 至少可以是下列笛卡尔积

$$\left(\bigcup_{X \in \bigcup_{X' \in \sim} X'} X \right) \times \left(\bigcup_{X \in \bigcup_{X' \in \sim} X'} X \right)$$

的子集¹

3. 关系的元素未必是同一个集合与其自身的笛卡尔集。两个不同集合 X 与 Y 之间也可以定义某关系 $\sim \subset X \times Y$ 。只要 $x \in X, y \in Y, (x, y) \in \sim$ ，则 $x \sim y$ 。若 $\sim \subset X \times X$ ，则称“ \sim 是集合 X 上的关系”；若 $\sim \subset X \times Y$ ，则称“ \sim 是从集合 X 到集合 Y 的关系”。

例 1. 设 $A = \{a, b\}, B = \{1, 2\}$ ，则 $A \times B = \{(a, 1), (a, 2), (b, 1), (b, 2)\}$ 。设关系 $\sim = \{(a, 1), (b, 2)\}$ 。我们不难留意到， $\sim \subset A \times B$ 。按照关系 \sim 的定义，我们可以写 $a \sim 1, a \not\sim 2$ 。

留意到， $A \times B$ 本身就是一个关系。若 $\sim = A \times B$ ，则 A 的任一元素与 B 的任一元素之间都有 \sim 关系，即 $\forall a \in A \forall b \in B, a \sim b$ 。

¹提示：回顾有序对的定义 $(a, b) \equiv \{\{a\}, \{a, b\}\}$ ，把表达式

$$\bigcup_{X \in \bigcup_{X' \in \sim} X'} X$$

所形成的集合写出来，可以发现它是关系 \sim 的所有有序对中的元素的集合。读者可以尝试以图1.1的例子写出图中关系的 $\bigcup_{X \in \bigcup_{X' \in \sim} X'} X$ ；它就是 $\{A, B, C, D, E, F, G, H, I, J\}$ 。

等于“=”关系是任一集合与其自身的笛卡积的子集。具体地, 设 X 是一个非空集合, 则 $X \times X$ 中所有满足 $x = y$ 的有序对 (x, y) 的集合就是等于关系。

属于“ \in ”也是一个关系。具体地, 它是 $X \times \mathcal{P}(X)$ 满足 $x \in A$ 的所有有序对 (x, A) 的集合。

空集是有序对的集合(因为空集是集合, 且空集不含有任何不是有序对的元素), 因此空集也可以是一个关系。

接上列的第 2 条, 给定一个关系 \sim , 记 $U_{\sim} \equiv \bigcup_{X \in \bigcup_{x' \in \sim} X'} X$, 遵循分类公理所构建的集合

$$\{a \in U_{\sim} | \exists b (b \in U_{\sim} \wedge a \sim b)\}$$

为关系 \sim 的定义域(*domain*), 记作 $\text{dom } \sim$ 。集合

$$\{b \in U_{\sim} | \exists a (a \in U_{\sim} \wedge a \sim b)\}$$

为关系 \sim 的值域(*range*), 记作 $\text{ran } \sim$ 。图 1.1 给出了所示关系的定义域和值域。不难留意到, 对于任一集合上的等于关系, 有 $(\text{dom } =) = (\text{ran } =)$; 对于任一集合上的属于关系, 若 $(\text{dom } \in) = X$, 则 $(\text{ran } \in) = \mathcal{P}(X) \setminus \{\emptyset\}$ ¹。

定义 2 (等价关系). 设 \sim 是集合 X 上的一个关系。若

1. 对任一 $x \in X$ 都有 $x \sim x$, 则称关系 \sim 是自反的(*reflexive*)。
2. 对任意 $x \in X$ 和 $y \in X$, 只要 $x \sim y$ 就有 $y \sim x$, 则称关系 \sim 是对称的(*symmetric*)。
3. 对任意 $x \in X, y \in X$ 和 $z \in X$, 只要 $x \sim y$ 且 $y \sim z$ 就有 $x \sim z$, 则称关系 \sim 是传递的(*transitive*)。

若集合 X 上的一个关系 \sim 同时满足上述 3 个性质, 则称 \sim 是 X 上的一个等价关系(*equivalent relation*)。

以图 1.1 为例, 如果图 1.1 中的每个元素都有一个从自己回到自己的箭头, 那么图中的关系就是自反的; 如果图 1.1 中的所有箭头都是双向箭头, 那么图中的关系就是对称的。读者可尝试把图 1.1 的关系修改成非自反、非对称, 但传递的关系²。

例 2. 设 $X = \{a, b, c\}$ 。 X 上的等于关系是 X 上的等价关系。它是集合

$$\{(a, a), (b, b), (c, c)\}$$

这一集合共有 3 个元素。同时, $X \times X$ 也是 X 上的等价关系, 它有 $2^3 = 8$ 个元素。

一般地, 任一非空集合 X 上的等于关系是 X 上的(除空集外)“最小”的等价关系, $X \times X$ 是 X 上的最大等价关系。

不等于 \neq 只满足对称性。

任意集合的包含关系具有自反性和传递性, 但集合的包含关系没有对任意集合均成立的对称性。事实上, 在上一节关于外延公理的段落中已经介绍过, 具有对称性的包含关系就是集合的等于关系。

显然, “婚姻”不是“全体成年公民”集合上的等价关系。“婚姻”只满足对称性。

此时我们回过头讨论集合论最基本的关系——从属关系的自反性、对称性和传递性。从属关系的自反性是指, 一个集合 A 属于它自己, $A \in A$ 。从属关系的对称性是指, $A \in B \Leftrightarrow B \in A$ 。从属关系的传递性是指, $A \in B \wedge B \in C \Rightarrow A \in C$ 。直觉上, 这三种性质都不令人舒适, 但它们未被直至目前的讨论所禁止。若想禁止上述性质, 需要正则公理(*axiom of regularity*): 给定任一非空集合 X , 则 X 中必含有一个元素 $y \in x$ 满足 $y \cup X = \emptyset$, 用符号表述为 $X \neq \emptyset \Rightarrow \exists y (y \in X \wedge y \cup X = \emptyset)$ 。正则公理同时禁止了三种性质(证明从略)。本讲义所使用的集合论遵循正则公理。

¹因为 $\emptyset \in \mathcal{P}(X)$, 但没有元素能够属于 \emptyset 。

²注意这几条定义所要求的“对任意……”, 只要有一个例外就可以失效。

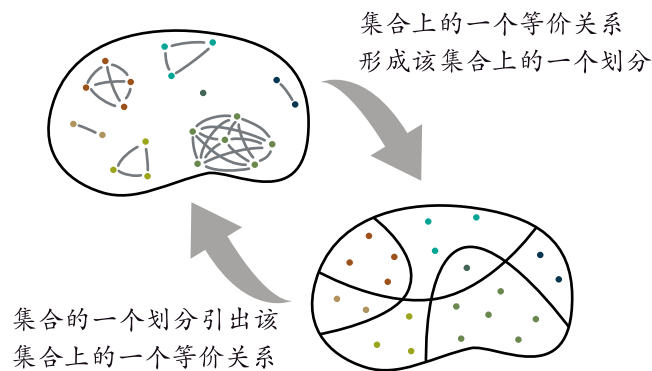


图 1.2: 集合的划分与集合上的等价关系

回到等价关系的讨论。如果集合 X 的非空子集的集合 \mathcal{C} 满足 $\bigcup_{Y \in \mathcal{C}} Y = X$ 且 \mathcal{C} 的元素两两不相交, 则称集合 \mathcal{C} 是 X 的一个划分 (partition)。换言之, 如果 X 的若干个非空子集两两不相交, 但它们的并集又恰好得到 X , 那么这些子集就好像对集合 X 进行“切蛋糕”所得到结果 (如图 1.2 右下的情况)。

若集合 \mathcal{C} 是集合 X 的一个划分, 我们可以由此定义一个关系 $\sim \equiv X/\mathcal{C}$ ¹, 使得当且仅当 X 的元素 x, y 属于 \mathcal{C} 的同一个元素时, $x \sim y$ 。正式地,

$$X/\mathcal{C} = \{(x, y) \in X \times X \mid \exists A (A \in \mathcal{C} \wedge \{x, y\} \subset A)\} \quad (1.1)$$

图 1.2 中, 将右下所示的集合的划分中同属一个子集的元素两两连线, 就能得到左上所示的关系。这一关系在给定划分 \mathcal{C} 下的唯一性由外延公理保证。

可以证明, 这一关系是等价关系:

证明. 验证关系 $\sim \equiv X/\mathcal{C}$ 是等价关系, 需一一验证其自反性、对称性和传递性。

1. 自反性: 需证明对任意 $x \in X$, 有序对 $(x, x) \in \sim$ 。这需要:

(a) $(x, x) \in X \times X$ 。由 $x \in X$ 这显然满足。

(b) $\exists A \in \mathcal{C}, x \in A$ 。由并集的定义 (式 (1.1)), \mathcal{C} 作为一个集合的集合, 对任一 $x \in \bigcup_{A \in \mathcal{C}} A$ 必存在 $A \in \mathcal{C}$ 满足 $x \in A$ 。现在 \mathcal{C} 是集合 X 的一个划分, 即 $\bigcup_{A \in \mathcal{C}} A = X$, 故对任一 $x \in X$ 必存在 $A \in \mathcal{C}$ 满足 $x \in A$ 。自反性证毕。

2. 对称性: 需证明 $(x, y) \in \sim \Leftrightarrow (y, x) \in \sim$, 其中 $x, y \in X, x \neq y$ 。显然, 由于 $x, y \in X$, $(x, y) \in X \times X$ 且 $(y, x) \in X \times X$ 。若 $(x, y) \in \sim$, 则由 \sim 的定义 $\exists A \in \mathcal{C}, \{x, y\} \subset A$, 故自然有 $(y, x) \in \sim$; 反之亦然。对称性证毕。

3. 传递性: 需证明 $(x, y) \in \sim \wedge (y, z) \in \sim \Rightarrow (x, z) \in \sim$, 其中 $x, y, z \in X, x \neq y, x \neq z, y \neq z$ 。显然, 由于 $x, z \in X$, $(x, z) \in X \times X$ 。由 \sim 的定义, $x \sim y \Rightarrow \exists A \in \mathcal{C}, \{x, y\} \subset A$, $y \sim z \Rightarrow \exists A' \in \mathcal{C}, \{y, z\} \subset A'$ 。由于 \mathcal{C} 是 X 的一个划分, 由划分的定义, 要么 $A = A'$, 要么 $A \cap A' = \emptyset$, 故 $A = A'$, 即 $\{x, y, z\} \subset A$ 。再由关系 \sim 的定义有 $x \sim z$ 。传递性证毕。

□

因此我们称式 (1.1) 定义的等价关系是由集合 X 的划分 \mathcal{C} 引出的等价关系 (equivalent relation induced by the partition \mathcal{C} of X)。

上一段介绍的是图 1.2 右下到左上的定理, 下面我们将介绍相当于图 1.2 中从左到右上的定理。

¹该记法与刚刚介绍完的 X/\sim 无关, 是符号“/”的滥用。

设关系 \sim 是集合 X 上的一个等价关系, 则集合 $[x]_{\sim} \equiv \{y | y \in X \wedge (\exists x \in X, y \sim x)\}$ 称 x 关于 \sim 的等价类 (equivalent class)¹。 X 的元素关于 \sim 的所有等价类的集合, 记作 X / \sim ², 称为集合 X 在等价关系 \sim 下的商集 (quotient set)³。如图1.2左上的情况所示, 在一个集合上定义了等价关系。每个元素, 都能通过这一等价关系的传递性联系若干个共同关联的元素, 而形成 X 的一个子集。每个这样的子集, 都是 X 关于这一等价关系的等价类。

定理 1 (等价关系基本定理). 设 $\sim \subset X \times X$ 是集合 X 上的一个等价关系, 则 X 在 \sim 下的商集 S / \sim 是 S 的一个划分。

证明. 根据划分的定义, 要使 S / \sim 是 S 的一个划分, 以下 3 条必须同时满足:

1. S / \sim 的元素都不是空集, 即 $\forall [x]_{\sim} \in S / \sim, [x]_{\sim} \neq \emptyset$;
2. S / \sim 的元素两两不交, 即 $[x]_{\sim} \neq [y]_{\sim} \Leftrightarrow [x]_{\sim} \cap [y]_{\sim} = \emptyset$;
3. 所有 S / \sim 的元素并集得到集合 S , 即 $\bigcup_{Y \in S / \sim} Y = S$ 。

具体证明过程暂略⁴。 □

推论 1.1. 由 X / \sim 引出的等价关系就是 \sim 。

证明. 证明过程是十分直接的, 暂略。提示: 利用外延公理, 即集合相等的概念。 □

由等价关系基本定理及其推论, 我们可以写

$$\sim = X / \mathcal{C} \Leftrightarrow \mathcal{C} = X / \sim$$

可见, 符号 $/$ 的用法使得等价关系、划分和商集之间有类似“集合的除法”的意义 (故称“商集”)。

1.3 映射

定义 3 (映射). 设 X 和 Y 是集合, 如果由 X 到 Y 的关系 f 同时满足:

1. $\text{dom} f = X$;
2. 对每一 X 的元素 $x \in X$, 有且只有一个 Y 的元素 $y \in Y$ 满足 $(x, y) \in f$,

则称 f 是由 X 到 Y 的映射 (mapping), 记作 $f : X \rightarrow Y$ ⁵。对每一 $(x, y) \in f$, 称 y 是 x 在映射 f 下的值 (value), 记作 $f(x)$ 。

映射定义的第 1 条要求如果违反了, 可通过对集合 X 的改动重新得到满足, 而无需改动关系 f 本身。例如若 $\text{dom} f \subsetneq X$, 则令 $X' = \text{dom} f$ 并改为讨论由 X' 到 Y 的关系 f , 就可通过映射定义的第 1 条。然而映射定义的第 2 条如果违反了, 想要重新满足就不得不对关系 f 本身进行改动。图1.3中的第一个例子就只是一个关系, 而不是一个映射, 除非我们从这一关系中拿掉一个有序对。

给定映射 $f : X \rightarrow Y$, 我们继续以下讨论:

¹“类”与“集合”在概念上无实质区别。

²注意与相对补集的符号相区别。

³正式地,

$$X / \sim \equiv \{A \in \mathcal{P}(X) | \forall x (x \in A \wedge [x]_{\sim} = A)\}$$

⁴证明过程

⁵记号 $f : X \rightarrow Y$ 包含的信息是:

1. X, Y 是集合;
2. f 是由 X 到 Y 的映射。

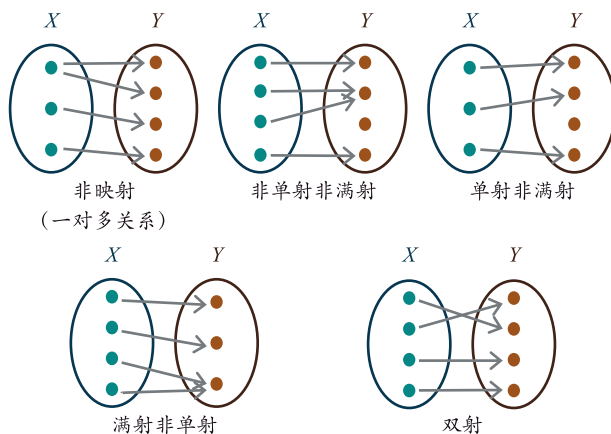
由集合 X 到集合 Y 的关系

图 1.3: 映射的不同概念示意图。

- 一般地, Y 未必等于 $\text{ran} f$, 集合 Y 称映射 f 的陪域(codomain)。
- 若 E 是 X 的一个子集, 若由 E 到 Y 的映射 $f|_E : E \rightarrow Y$ 满足 $f|_E(x) = f(x), \forall x \in E$, 则称映射 $f|_E$ 是映射 f 在 E 上的限制(restriction)(记法亦已表明)¹。
- 若 $\text{ran} f = Y$ 则称映射 f 是满射(surjective mapping)。图1.3中的第4和第5个例子都是满射。
- 若 $A \subset X$, 则集合 $\{y \in Y | \forall x (x \in A \wedge y = f(x))\}$ 称集合 A 在映射 f 下的像(image), 简记为 $f(A)$ 。这一集合可用语言描述为: 由集合 A 的所有元素在映射 f 下的值组成的集合。易证它是 Y 的子集。
- 若对任意 $x_1, x_2 \in X, f(x_1) = f(x_2) \Rightarrow x_1 = x_2$, 则称 f 是单射(injective mapping)。可用语言描述为, “单射的输出唯一地确定其输入”。图1.3中的第3和第5个例子都是单射。
- 如果 f 既是满射又是单射, 则称 f 是一个双射(bijective mapping)。图1.3中的第5个例子是双射。
- 若另一映射 $g : Y \rightarrow Z$, 可与映射 f 构成从 X 到 Z 的映射 $g \circ f : X \rightarrow Z$, 且

$$g \circ f(x) = g(f(x)), \forall x \in X$$

则称 $g \circ f$ 是 f 和 g 的复合映射(composite mapping)。

- 如果 $f(x) = x, \forall x \in X$, 则称映射 f 是恒等映射(identity mapping)。
- 如果映射 $g : Y \rightarrow X$ 使得复合映射 $g \circ f$ 是恒等映射, 则称映射 f 是可逆的(invertible), 映射 g 是 f 的逆映射(inverse mapping)。常将 f 的逆映射记作 f^{-1} 。

关于逆映射, 有一条重要的定理——

定理 2. 双射必存在唯一逆映射。双射的逆映射也是双射。

证明. 为了证明这一定理, 我们首先证明一个引理: 任一单射非满射均存在逆映射。

设 $f : X \rightarrow Y$ 是一个单射非满射, 即 $\exists y \notin \text{ran} f, y \in Y$ 。由集合的相关定义此处必有 $\{y | y \in \text{ran} f\} \cup \{y | y \notin \text{ran} f, y \in Y\} = Y$ 。

现定义 $g : Y \rightarrow X$, 为使 g 为一个映射, 它必须对 $y \in \text{ran} f$ 和 $y \notin \text{ran} f, y \in Y$ 均有定义。现将其定义为:

$$g(y) = \begin{cases} x | f(x)=y, & y \in \text{ran} f \\ \text{任一 } x \in X, & y \notin \text{ran} f, y \in Y \end{cases}$$

则有如下几条结论:

¹通俗说 f 在 A 上的限制跟 f 是同一个映射, 只不过定义在了“更小的”一个集合 A 上罢了。

1. $g(y)$ 是映射。因为它对每一 $y \in Y$ 均有定义且一个 $y \in Y$ 只对应一个 $x \in X$ 。
2. g 是满射。因为, 仅 $y \in \text{ran} f$ 情况的定义式就已决定了 $\text{rang} = X$ 。
3. g 是非单射。因为 g 是满射, 再考虑 $y \notin \text{ran} f, y \in Y$ 情况的定义式, 就可知 $\exists x \in X$ 满足 $x = g(y) = g(y')$, 其中 $y \neq y', y \in \text{ran} f, y' \notin \text{ran} f, y' \in Y$ 。
4. g 是 f 的逆映射。因为, 对于任一 $x \in X$ 均有 $g \circ f(x) \equiv g(f(x)) = x$, 即 $g \circ f = \text{id}_X$ 。
5. 一般地, g 是不唯一的。因为 $y \notin \text{ran} f, y \in Y$ 的情况可定义 $g(x)$ 等于任一 $x \in X$, 故只要集合 X 不是只有一个元素, 那么 g 都不唯一。

该引理证毕。

现在正式证定理2。从上面定义的这个 g 继续, 如果 g 是双射, 则 g 不仅是满射, 还是单射。由刚刚证完的引理, 可用类似方法给 g 找一个逆映射 $f' : X \rightarrow Y$ 。而且, 由于 $\text{rang} = X$, 我们无需像定义 g 那样为 f' 分出 $x \notin \text{rang}, x \in X$ 的情况, 因为不存在这种情况。故

$$f'(x) = y|_{g(y)=x}$$

是 g 的逆映射, 且 f' 是满射。而且, 把 g 的定义代入上式有 $f'(x) = y|_{g(y)=x} = y|_{x|_{f(x)=y}} = f(x)$, 即 f' 不是别的映射而恰为 $f(x)$ 。即 g 的逆映射是唯一的。因 f' 是满射故 f 是满射, 而 f 本身就是单射, 故 f 是双射。□

我们常把映射写成另一种形式, 并给以另一个名称。具体地, 当我们把由 I 到 X 的映射 $x : I \rightarrow X$ 改称为索引族(indexed family)时, 定义域 I 就称为索引集(indexing set), 其元素 $i \in I$ 称为索引(indexes)。映射 x 的关于 $i \in I$ 的值, 记作 x_i , 称为该索引族的一项(term)。映射 x 的值域, 称作由 I 索引的集合(set indexed by I), 或笼统地称其为一个索引集(indexed set)。我们经常不加分辨地直接把 $\{x_i\}_{i \in I}$ 称为一个由 I 索引的族(I -indexed family)。可见, 我们无非把映射原有概念的名称换了一套新的名称。我们经常讨论的是以集合为项的族, 称为集合的索引族(indexed family of sets)。

设 \mathcal{C} 是集合的集合。如果有 \mathcal{C} 恰好还是一个由集合 I 索引的集合, $\mathcal{C} = \{X_i\}_{i \in I}$, 那么第一节介绍的 \mathcal{C} 的元素的交集和并集就相应应有新的表示方式:

$$\bigcap_{X \in \mathcal{C}} X = \bigcap_{i \in I} X_i, \quad \bigcup_{X \in \mathcal{C}} X = \bigcup_{i \in I} X_i$$

下面我们介绍多于两个集合的笛卡尔集的定义¹

定义 4 (笛卡尔积). 设 $\{S_i\}_{i \in I}$ 是由 I 索引的族, 且它是集合的索引族, $\{s_i\}_{i \in I}$ 也是由 I 索引的族, 且 $s_i \in S_i, \forall i \in I$ 。我们称 $\{S_i\}_{i \in I}$ 的笛卡尔积是由 $\{S_i\}_{i \in I}$ 得出的所有族 $\{s_i\}_{i \in I}$ 的集合, 记为

$$\prod_{i \in I} S_i$$

若 $S_i = S, \forall i \in I$, 则记 $\prod_{i \in I} S_i \equiv S^I$ 。

例 3. 设 $I = \{a, b\}, X_a = \{a_\alpha, a_\beta\}, X_b = \{b_\alpha, b_\beta\}$, 则按照笛卡尔积的老定义,

$$X_a \times X_b = \{(a_\alpha, b_\alpha), (a_\alpha, b_\beta), (a_\beta, b_\alpha), (a_\beta, b_\beta)\}$$

其中按照有序对的老定义, $(x, y) = \{\{x\}, \{x, y\}\}$ 。

¹第一节中引入的两个集合的笛卡尔集定义, 无法推广至不可数无穷多个集合间的笛卡尔积。所以, 我们在介绍了映射之后, 在族的基础上可重新定义笛卡尔集。这个新的定义, 在集合个数为两个的情况下, 也导致一种与老定义不同的“有序对”, 但是新定义和老定义得出有序对之间总是一一对应的, 因此无所谓从哪种定义去理解有序对。虽然笛卡尔积的新定义既兼容两个集合间的情况(甚至把“一个集合的笛卡尔集”也定义了), 又能够推广到不可数无穷个集合间的笛卡尔集, 但是它却不能从一开始就采用, 因为它依赖映射的定义, 而映射是一种关系, 关系的定义依赖有序对的定义。所以我们至少需要先以老定义获得有序对的概念, 才能走到现在这一步。

按照新定义4的要求,我们要在 X_a 和 X_b 中各选一个元素组成由 $\{a, b\}$ 索引的族 $\{x_i\}_{i \in \{a, b\}}$ 。例如,令 $x_a = a_\beta, x_b = b_\alpha$ 所形成的族 $\{x_i\}_{i \in \{a, b\}} = \{x_a, x_b\} = \{a_\beta, b_\alpha\}$ 就是其中一个符合要求的族。所有这样的族,一共有 4 个。因此有

$$\prod_{i \in \{a, b\}} X_i = \{\{a_\alpha, b_\alpha\}, \{a_\alpha, b_\beta\}, \{a_\beta, b_\alpha\}, \{a_\beta, b_\beta\}\}$$

笛卡尔积的老定义与新定义是不冲突的。一般地,老定义下的笛卡尔积 $X_a \times X_b$ 和新定义下的笛卡尔集 $\prod_{i \in \{a, b\}} X_i$ 之间总可以定义一个映射 $f: \prod_{i \in \{a, b\}} X_i \rightarrow X_a \times X_b, f(z) = (z_a, z_b), \forall z \equiv \{z_i\}_{i \in \{a, b\}} \in \prod_{i \in I} X_i$ 。记 $z = \{z_i\}_{i \in \{a, b\}}$, 则按定义4有 $z_i \in X_i, \forall i \in \{a, b\}$ 。可以证明 f 是双射:

证明. 设 $z = \{z_i\}_{i \in \{a, b\}}, z' = \{z'_i\}_{i \in \{a, b\}}$ 且 $z_a, z'_a \in X_a, z_b, z'_b \in X_b$ 。若 $z \neq z'$ 。由映射 f 的定义, $f(z) = (z_a, z_b), f(z') = (z'_a, z'_b)$ 。由集合相等的定义, $z \neq z' \Rightarrow (z_a, z_b) \neq (z'_a, z'_b)$, 即 $f(z) \neq f(z')$, 即 f 是非单射。

设 $(u, v) \in X_a \times X_b$ ¹, 则以 $\{a, b\}$ 索引的族 $x \equiv \{x_i\}_{i \in \{a, b\}}, x_a = u, x_b = v$ 满足 $x_a \in X_a, x_b \in X_b$ (按照笛卡尔积的老定义), 按照定义4, 有 $x \in \text{dom} f$ 。由于所选取的 $X_a \times X_b$ 的元素 (u, v) 是任意的, 上述性质对任一 $X_a \times X_b$ 的元素都成立, 故 f 是满射。

由双射的定义, f 是双射。 □

因此, 笛卡尔集的新定义4在集合数为 2 的情况下所得到的集合, 跟笛卡尔集的老定义所得到的集合, 它们的元素之间是一一对应的。在此情况下老定义和新定义没有本质差别。根据笛卡尔积的新定义, “有序对”又可以定义成索引集有两个元素的族。即 $(x, y) = \{z_i\}_{i \in \{a, b\}}, z_a = x, z_b = y$ 。这时“序”的性质仍被保留, 因为 $(y, x) = \{z_i\}_{i \in \{a, b\}}, z_a = y, z_b = x$ 是不同的族, 故有 $(x, y) \neq (y, x)$ 。而且, 按照新定义, 仅通过改变索引集元素的个数, 就可方便地推广出“有序三元组”、“有序四元组”……的定义, 这是比老定义更有利的地方。从今以后, 笛卡尔积就不再采用老定义, 而采用定义4。就算若干个两两不同的集合 X, Y, \dots 尚未成为一个索引族, 由于易验任一集合的非空集合 \mathcal{C} 均可充当其自己的索引集而成为一个索引族, 故由 X, Y, \dots 组成的集合 $\{X, Y, \dots\}$ 总能成为一个索引族, 从而它们的笛卡尔集仍可通过定义4得到定义。更一般地, 给定任一集合的集合 \mathcal{C} , 若 $\mathcal{C} \neq \emptyset$, 则它的元素的笛卡尔积可由定义4记为

$$\prod_{X \in \mathcal{C}} X \equiv \prod_{i \in \mathcal{C}} A_i, \quad A_i = i, \forall i \in \mathcal{C}$$

我们常讨论索引集 I 为自然数集 \mathbb{N} 的子集²的族, 即 $I \subset \mathbb{N}$ 。具体地, 若

$$I = \{a, a+1, a+2, \dots, b-2, b-1, b\}, a, b \in \mathbb{N}, a < b$$

则由 I 索引的族可记为 $\{X_i\}_{i=a}^b$ 。相应地, 若该族是集合的族, 则该族的交集、并集和笛卡尔积可分别记为:

$$\bigcap_{i=a}^b X_i, \quad \bigcup_{i=a}^b X_i, \quad \prod_{i=a}^b X_i$$

特别地, 若 $X_i = X, \forall i \in I$, 令 $n = b - a + 1, \{X_i\}_{i=a}^b$ 的笛卡尔积可记为 X^n 。例如, \mathbb{R}^n 是所有有序实数 n 元组 $(x_1, \dots, x_n), x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ 的集合。在数学中我们常常会称 \mathbb{R}^n 是“ n 维”的。因此, 定义4的好处是它可以支持各种无穷维空间的构造。

¹此处我们需要规定, 只要集合 X 和 Y 都是非空集合, 那么它们的笛卡尔集 $X \times Y$ 也是非空集合, 即必存在一 $(x, y) \in X \times Y, x \in X, y \in Y$ 。这是集合论的选择公理 (axiom of choice)。

²本讲习默认读者常识上理解各种数集, 而不再介绍它们的集合论引入。

第二章 测度论基础

我们希望集合能有“大小”的概念,最好是一个集合总比它的子集大,几个子集的并集比这些子集都大。怎么严格定义出这样的概念呢?

一个大概的思路就是构建一个映射 $\mu: \mathcal{P}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}^+$, 其中 Ω 是一个非空集合, $\mathcal{P}(\Omega)$ 是 Ω 的所有子集的集合, 称 Ω 的幂集(power set)。映射 μ 把一个集合对应为一个非负实数。

像 μ 这样, 把一个集合对应为一个数的函数, 叫做集合函数(set function)。我们准备用这样的函数来表征 Ω 的任何一个子集的“大小”。表征集合的“大小”, 对于有限集来说, 并不是什么特别的问题; 集合的元素个数就能作为它的“大小”的一个表征。但是许多集合是无穷集。比如, 实数轴上的连通区间 $[a, b]$ 上有无穷多个点。我们已经知道, 可以用绝对值 $|b - a|$ 来表征这种连通区间的长度。但是这并非唯一可行的定义。比如我们可以用任意正整数 n 的 $(b - a)^n$ 表达式来表征连通区间的长度。但是, 我们不接受“负值”的长度, 我们也不接受, 若 $b' > b$, $[a, b]$ 的长度小于 $[a, b']$ ……等等。

实数 \mathbb{R} 或 n 维欧几里得空间都已经配备了运算性质, 使得我们可以方便的定义无穷点集的大小。但一般的集合, 并不一定是数集或点集, 我们仍然希望定义关于一般集合的集合函数, 并满足我们直观上关于“大小”的概念。比如, 就映射 μ 的定义而言, 空集 \emptyset 也是 Ω 的子集, 我们希望空集的“大小”为零, 即 $\mu(\emptyset) = 0$ 。集合 Ω 本身也是它自己的子集, 我们希望它应该比所有其他子集都“大”。更一般地, 如果有两个 Ω 的子集 A 和 B , 我们无法通过计数它们的元素个数来知道它们谁更“大”, 但我们至少可以说, $C = A \cup B$ 肯定不能小于 A 或 B 。因此我们希望 $\mu(A \cup B) \geq \mu(A)$ 。如果 $A_1 \subset A_2 \subset \dots \subset A_k$, 那么最好能有 $\mu(A_1) \leq \mu(A_2) \leq \dots \mu(A_k)$ ……等等。但是, 严格的讨论将会发现, 以上想法太粗糙, 将会碰到很多奇怪的特例。我们先按目前的想法定义相应的集合函数, 它将被称作“外测度”。

定义 5 (外测度). 如果集合函数 $\mu^*: \Omega \rightarrow [0, \infty]$ 满足:

1. $\mu^*(\emptyset) = 0$;
2. 单调性(monotonicity): $A \subset B \subset \Omega \Rightarrow \mu^*(A) \leq \mu^*(B)$;
3. 可数个²子集的次可加性(countable subadditivity): $\mu^*\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \mu^*(A_i)$

则称函数 μ^* 是定义在集合 Ω 上的一个外测度(outer measure)。

所谓“次可加性”, 就是指定义中只敢用“ \leq ”号。为啥我们不直接定义可加性(additivity), 即 $\mu^*\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu^*(A_i)$ 呢? 因为我们没有规定这些 A_i 是两两不交(pairwise disjoint)的。如果 $\mu^*(A) = \mu^*(A')$ 、 $\mu^*(B) = \mu^*(B')$, $A \cap B = \emptyset$ 、 $A' \cap B' \neq \emptyset$, 那么我们确实不希望 $A \cup B$ 的“大小”等于 $A' \cup B'$ 的“大小”; 前者应该“大”于后者。但如果我们给集合函数 μ^* 定义了严格的可加性, 那就只会得到 $\mu^*(A \cup B) = \mu^*(A' \cup B')$, 不符合我们的意图。

²可数(countable)包括有限个和可数无穷个两种情况。可数无穷(countably infinite)是集合论中的一个概念, 用来描述某种类型的无穷集合的大小。一个集合如果是可数无穷的, 意味着它的元素可以与自然数集 $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ 之间建立一个一一对应(即双射)的关系。换句话说, 可数无穷集合的元素可以被排列成一个无限的序列, 每个元素都有一个唯一的自然数与之对应。例如, $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ 是最典型的可数无穷集合。整数集 $\mathbb{Z} = \{\dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots\}$ 也是可数无穷的, 尽管它既包含正数也包含负数, 但可以通过一种特殊的排列方式(如先列举 0, 然后列举 1 和 -1, 接着是 2 和 -2, 以此类推)来与自然数集建立一一对应关系。有理数集 \mathbb{Q} , 即所有可以表示为两个整数之比的数的集合, 也是可数无穷的。尽管有理数在实数线上是稠密的(即在任意两个实数之间都有无穷多个有理数), 但可以通过一种巧妙的排列方式(如 Cantor 的对角线论证)来证明它们是可数无穷的。实数集 \mathbb{R} 不是可数无穷的, 它是不可数无穷(uncountably infinite)。Cantor 通过对角线论证展示了无法将实数集与自然数集之间建立起一一对应的关系, 因此实数集的势(cardinality)大于自然数集的势。

既然如此,我们直接要求不交子集的并集上的可加性就好了。为什么只敢要求一般子集并集上的次可加性?这是因为,并不是随便定义一个集合函数(哪怕它还已满足外测度的要求),就一定能在一个集合的所有子集上具备不交子集之间的可加性的。以下是一个例子:

例 4. 设 $\Omega = \{1, 2, 3\}$, 定义 $\mu^*(\emptyset) = 0, \mu^*(\Omega) = 2$, 且对 Ω 的所有其他子集 $E, \mu^*(E) = 1$ 。易验 μ^* 是 Ω 上的一个外测度。考虑集合 $A = \{1\}$ 和 $B = \{2\}$, 发现

$$\mu^*(A \cup B) = \mu^*(\{1, 2\}) = 1 \neq 2 = \mu^*(A) + \mu^*(B)$$

对于一般的集合 Ω 的任一子集,也许最多只能定义出外测度的性质了。如果想要有不交集之间的严可加性,我们就需要对 Ω 的子集进行挑选,而不能讨论 Ω 的任一子集。我们把符合不交集间的严可加性质的子集称作“可测集”。严格地——

定义 6 (可测集). 设 μ^* 是定义在集合 Ω 上的一个外测度。如果 Ω 的子集 $A \subset \Omega$ 满足

$$\mu^*(E) = \mu^*(E \cap A) + \mu^*(E \setminus A), \quad \forall E \subset \Omega$$

则称集合 A 是 μ^* -可测的(*measurable*)。

我们在“可测的”三个字前面加上“ μ^* -”,是想强调,一个子集 $A \subset \Omega$ 不可测,依赖 Ω 上的 μ^* 的具体定义。设 μ_1^* 和 μ_2^* 是 Ω 上定义的两个不同的外测度,那么 Ω 的子集 A 有可能是 μ_1^* -可测的,却是 μ_2^* -不可测的。

从定义的直接意义可知, Ω 的一个 μ^* -可测(子)集 A , 能把 Ω 任一子集 E 切分成 μ^* 值可加的两个不交的集合。因此,虽然对 Ω 的任意子集, μ^* 只有次可加性,但用 μ^* -可测的子集 A 分割 Ω 及其任一子集,在所得到的两个集合上 μ^* 具有可加性。

但是,这一性质更重要的效果是使 μ^* 在一个 μ^* -可测集 A 上的行为就是严格可加的。假设 $A, B \subset \Omega$, 且 A 是 μ^* -可测的,那么就有

$$\begin{aligned} \mu^*(B) &= \mu^*(B \cap A) + \mu^*(B \setminus A) \\ &= \mu^*(A) + \mu^*(B \setminus A) \\ &= \mu^*(A) + \mu^*(B \setminus A) \end{aligned}$$

换言之,只要 Ω 的两个子集 A, B 其中一个是 μ^* -可测的,且它们是不交的,就能有 $\mu^*(A \cup B) = \mu^*(A) + \mu^*(B)$, 因为对任意两个不交集 A 和 B , 总有 $A \subset (A \cup B)$ 及 $B = (A \cup B) \setminus A$ 。我们进一步提出以下引理。

引理 1. 给定集合 Ω , 若 $A_1, \dots, A_i, \dots \subset \Omega$ 是 Ω 上的一个外测度 μ^* 下的 μ^* -可测集, 且它们两两不交, 则有

$$\mu^*\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu^*(A_i)$$

证明. 待补充。 □

有了可测集的定义,我们朝着“不交集上的可加性”迈了一步。我们于是期望,每当我们为一个集合 Ω 定义了一个外测度 μ^* 后,我们就只讨论 Ω 的所有 μ^* -可测子集 A_1, A_2, \dots 。可是,我们经常还会对集合进行运算,比如若干个集合的交集或并集、一个集合相对另一集合的补集……等等。如果我们辛辛苦苦挑出了 Ω 的一堆 μ^* -可测的子集,但是它们的交集或并集等运算得出的新集合却是 μ^* -不可测的,那也很麻烦。因此我们进一步希望,不仅 A_1, A_2, \dots 要满足 μ^* -可测,它们的集合运算结果也得满足 μ^* -可测。换句话说,我们希望拥有一个,在 μ^* -可测性质上,对集合运算封闭的 Ω 的子集的集合 $\mathcal{F}(\Omega)$ 。如果说, μ^* -可测集有可能交、并、补出 μ^* -不可测集来的,那我们就甚至不讨论所有 μ^* -可测集,而只讨论那些,交、并、补结果仍然 μ^* -可测的 μ^* 可测集。

这使得我们又要进一步筛选。但幸运的是,以下引理保证了,一个集合 Ω 的所有 μ^* -可测集的集合就是一个对集合运算封闭的集合了,换言之, μ^* -可测集的交、并、补运算结果总也是 μ^* -可测的。如果我们把具有上述封闭性的子集的集合称作“ σ -代数”,那么也就可以说由所有 μ^* -可测集形成的集合是一个 σ -代数。

定义 7 (σ -代数). 给定集合 Ω , 如果 Ω 的子集的集合 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 满足:

1. 自洽性: $\emptyset \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$;
2. 补集的封闭性: $A \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega) \Rightarrow A^c \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$;
3. 可数个并集的封闭性: $A_i \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega) \Rightarrow \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$

则称 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 是 Ω 的一个 σ -代数 (σ -algebra)¹。

例 5. 实数上的 Borel 空间

引理 2. 给定集合 Ω 和在其上定义的一个外测度 μ^* , Ω 的所有 μ^* -可测集的集合 \mathcal{M} 是 Ω 的一个 σ -代数。

证明. 待补充。 □

值得注意的是,在一个集合 Ω 的所有子集中,可以圈出不同范围的子集的集合,各自都满足 σ -代数的要求。特别地, Ω 的一个 σ -代数 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$, 也可以有一个子集 $\mathcal{Q}_\sigma(\Omega)$ 自己也是 Ω 的一个 σ -代数,可称为 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 的一个“子 σ -代数”。同一个集合的 Ω 的 σ -代数的交集仍是 Ω 的 σ -代数。但它们的并集却未必是一个集合域,遑论是一个 σ -代数了。所幸的是,从若干 σ -代数的并集至少总能约束出一个 σ -代数来,但这要涉及到 Dynkin 系统的知识,这里不作介绍了。

回到 σ -代数的定义,由定义可直接推出的基本性质还包括:

4. $\Omega \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$;
5. $A_i \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega) \Rightarrow \bigcap_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$

最后一条,即可数无穷个集合的交集的封闭性,是由德摩根定律得到的。1 至 5 条一齐构成了 σ -代数最基本的性质。

小结一下我们的成果,我们通过两个引理知道,在 μ^* -可测集上,我们很好的对集合运算封闭的可加性质。外测度在其可测集上,就能自洽地具备我们直观理解的“大小”、“面积”、“体积”等概念的性质。此时我们就敢于把具有这种性质的集合函数以“测度”作为名称进行定义了,因为我们已经清楚,我们的要求是可以实现的。

定义 8 (测度和测度空间). 设 Ω 是一个集合, $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 是 Ω 的一个 σ -代数,若映射 $\mu: \mathcal{P}_\sigma(\Omega) \rightarrow [0, \infty)$ 满足:

1. $\mu(\emptyset) = 0$;
2. $\mu(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i)$,

则称 μ 是测度空间 (measure space) $(\Omega, \mathcal{P}_\sigma(\Omega), \mu)$ 上的一个测度 (measure)。若集合 Ω 与它的一个 σ -代数 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 上有一个测度,就称 $(\Omega, \mathcal{P}_\sigma(\Omega))$ 是一个可测空间 (measurable space)。

我们留意到,测度的定义是假定我们先给定了集合 Ω 的一个 σ -代数 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$ 的,因此我们面临的问题是,已知一个集合的一个 σ -代数,怎么安全地定义出一个测度来。这时我们就发现,之前的两个引理并不够用。因为按照这两个引理,我们只能先给定一个外测度 μ^* 的情况下,通过从 Ω 圈出所有 μ^* -可测集的集合得到一个关于这个外测度 μ^* 的 σ -代数 $\mathcal{P}_\sigma^*(\Omega)$, 此时这个外测度才升级为一个测度,并与 $\mathcal{P}_\sigma^*(\Omega)$ 一齐形成一个测度空间 $(\Omega, \mathcal{P}_\sigma^*(\Omega), \mu^*)$ 。因此我们需要回答:如果我们先给定一个集合 Ω 的一个 σ -代数 $\mathcal{P}_\sigma(\Omega)$, 是否总有一个 (甚至是否会有多个) 外测度 μ^* , 使得恰好 $\mathcal{P}_\sigma^*(\Omega) = \mathcal{P}_\sigma(\Omega)$? 如果答案是肯定的,那我们只需要有一个办法从一个给定的 σ -代数找到这样的外测度 μ^* 就可以了。这种思路及其可行性的证明,在数学上叫卡拉西奥

¹比“ σ -代数”更一般的概念叫“集合域 (field of sets)”,又叫“集合代数 (set algebra)”,定义比 σ -代数宽容些,只要求满足有限个并集的封闭性。“ σ ”在这里表示“可数个”的更严格要求。比如,在外测度定义中的第三条,也可称为“ σ -次可加性”。

多里延拓定理 (Carathéodory's extension theorem)¹, 详见专门的测度论教材。在这里, 我们只介绍对当前讨论有用的结论。

事实上, 只有在特定条件下, 我们才能从一个 σ -代数找出具有上述意义的相应的、唯一的外测度 μ^* 来。这一特定的条件需要用两个关于测度性质的术语, 一是完备性, 二是 σ -有限性。

定义 9 (测度的完备性). 如果一个测度空间 $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$ 的测度 μ 满足: 若 $B \in \mathcal{M}$ 、 $\mu(B) = 0$ 且 $A \subset B$, 则有 $A \in \mathcal{M}$, 则称 μ 是完备的 (complete)。

测度的完备性定义要求一个完备的测度下, 零测度集的子集必须也是零测度。这里打个不太严谨的比方, 来说明“完备的好处”。我们知道, 按照通常的面积概念, 二维欧几里得空间的线段面积为零 (但未必长度为零)。如果面积是我们在二维欧几里得空间上定义的测度, 那么所有不同长度的线段的面积都必须为零。我们不接受说, 有一根线段面积为零, 但这根线段的某一截的面积却大于零。事实上, 这样奇怪的“面积”未必不是一个测度——只要我们小心地圈定好我们所讨论的二维形状范围; 但这样的“面积”是不完备的。因此可以说, 通常的面积概念是一个完备的测度。以下是一个不完备测度的简单例子。

例 6. 设 $\Omega = \{1, 2, 3\}$, $\mathcal{M} = \{\emptyset, \{1\}, \{2, 3\}, \Omega\}$ 。首先可验, \mathcal{M} 是 Ω 的一个 σ -代数。若定义一个测度 μ , $\mu(\emptyset) = 0$, $\mu(\{1\}) = 1$, $\mu(\{2, 3\}) = 0$, 以及 $\mu(\Omega) = 1$, 则可验证 μ 不违反测度的定义, 但由于 $\{2, 3\} \in \mathcal{M}$ 且 $\mu(\{2, 3\}) = 0$ 但 $\{2\} \notin \mathcal{M}$, 故测度 μ 是不完备的。

我们可以看到, 这种不完备性似乎应该怪罪于 \mathcal{M} 的残缺性上, 但我们却用该词去形容 μ 。我们总能通过恰当地扩大 \mathcal{M} 来使同一定义的测度在新的测度空间上变得完备起来。这件事情可被严格证明, 此略。我们只需要知道测度不完备也不是什么无法修复的问题就可以了。

定义 10 (σ -有限测度). 一个测度空间 $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$ 上的测度 μ 如果 Ω 可以被可数个测度值有限大的可测集覆盖, 即 $\exists A_1, A_2, \dots \in \mathcal{M}$ 满足: $\bigcup_i A_i = \Omega$ 且 $\mu(A_i) < \infty, \forall i$, 则称测度 μ 是 σ -有限的 (σ -finite), 以及称 $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$ 是一个 σ -有限的测度空间。

例如问: 整条实数轴能被可数个长度有限的连通闭区间完全覆盖吗? 如果区间 $[a, b]$ 的长度的定义就是通常的 $|b - a|$, 那么答案是肯定的。我们于是称区间长度是 \mathbb{R} 的连通闭区间上的 σ -有限测度。

¹这个定理有很多相似但不同的陈述, 也有很多不同的名字组合, 例如卡拉西奥多里-弗雷歇 (Carathéodory-Fréchet)、卡拉西奥多里-霍普夫 (Carathéodory-Hopf)、卡拉西奥多里-哈恩 (Carathéodory-Hahn)、卡拉西奥多里-柯尔莫哥洛夫 (Carathéodory-Kolmogorov)、柯尔莫哥洛夫-哈恩 (Kolmogorov-Hahn) 等。

第三章 概率论基础

本章是在华南理工大学编写的概率论与数理统计教材^[1](以下简称本科教材)基础上的补充。

3.1 正态分布的随机向量

在本科教材的例 3.3.4、例 3.3.5 已经介绍过 n 维正态分布, 在这里我们正式地给出定义。设 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)^T$ 是一个随机向量。如果存在一个向量 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ 和一个对称、半正定 $n \times n$ 矩阵 Σ , 使得 \mathbf{X} 的特征函数是

$$\varphi_{\mathbf{X}}(\mathbf{u}) = \exp\left(i\mathbf{u}^T \boldsymbol{\mu} - \frac{1}{2}\mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}\right)$$

则称随机向量 \mathbf{X} 满足 n 维正态分布, 记作 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 。如果 Σ 是非奇异的, 就称这种情况为非退化情况 (nondegenerate case), 反之则称为退化情况 (degenerate case)。在退化情况下, \mathbf{X} 没有普通意义的概率密度函数。我们只讨论非退化情况并不再说明, 此时要求定义中的 Σ 是正定的。

从上述定义可以推出, \mathbf{X} 的概率密度函数、期望、和协方差矩阵如下

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \left[(2\pi)^n \det \Sigma\right]^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right]$$
$$\mu_i = E[X_i], \quad \Sigma_{ij} = \text{Cov}[X_i, X_j], \quad i, j = 1, \dots, n$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ 。 $f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ 也称作随机向量 \mathbf{X} 的联合概率密度函数, 它就是 n 个随机变量 X_1, \dots, X_n 的联合概率密度函数 $f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n)$ 。

定理 3. 若 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 则 $\mathbf{Ax} + \mathbf{b} \sim \mathcal{N}(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{A}\Sigma\mathbf{A}^T)$

高斯分布的随机向量的线性 (仿射) 变换结果还是一个高斯分布的随机向量。具体地,

第四章 随机过程基础

第五章 分布函数和傅里叶变换

5.1 Fourier 变换的引入

对于周期为 $2L$ 的周期函数,或定义在 $[-L, L]$ 上的函数 $f(x)$,其 *Fourier 级数* (*Fourier series*) 展开^[2]§11.5, §11.6 形如

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (5.1)$$

其中

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx, \\ b_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

利用欧拉公式²

$$\begin{aligned} \cos(x) &= \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix}) \\ \sin(x) &= \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix}) \end{aligned}$$

式 (5.1) 可表示为

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/L}, \quad c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-in\pi x/L} dx \quad (5.2)$$

其中 $c_0 = \frac{1}{2}a_0$, $c_n = (a_n - ib_n)/2$, $c_{-n} = (a_n + ib_n)/2 = \overline{c_n}$ 。

函数可作 Fourier 展开 (或说式 (5.1) 或式 (5.2) 等号右边的 Fourier 级数收敛) 的条件——狄利克雷条件 (*Dirichlet conditions*), 请自行回顾^[2]定理 11.6.1, p.301。

若 $f(x)$ 定义在 \mathbb{R} 上, 则至少可考虑 f 限制在在区间 $(-L, L)$ 上的函数 $f_L : (-L, L) \rightarrow \mathbb{R}$, $f_L(x) = f(x)$ 的 Fourier 级数, 它将形如式 (5.2)。我们进一步进行如下处理:

$$\begin{aligned} f_L(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{-in\pi x/L} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2L} \int_{-L}^L f_L(x') e^{-in\pi x'/L} dx' \right) e^{in\pi x/L} \\ \left(\frac{n}{2L} \equiv y_n, \Delta y = y_{n+1} - y_n = \frac{1}{2L} \right) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-L}^L f_L(x') e^{-i2\pi y_n x'} dx' \right] e^{i2\pi x y_n \Delta y} \end{aligned}$$

² 正体小写字母 i 专门用于表示虚数 $i \equiv \sqrt{-1}$ 。

让 $L \rightarrow \infty$, 与此同时 $\Delta y \rightarrow 0$, 在黎曼积分可积条件下, 上式可记作以下积分

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-i2\pi yx} \right] e^{i2\pi xy} dy \quad (5.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy \tilde{f}(y) e^{i2\pi xy} \quad (5.4)$$

其中

$$\tilde{f}(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-i2\pi yx}$$

称 $f(x)$ 的 Fourier 变换 (Fourier transform), $f(x)$ 称 $\tilde{f}(y)$ 的反 Fourier 变换 (inverse Fourier transform), 记为

$$\tilde{f}(y) = \mathcal{F}\{f(x)\}, \quad f(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}(y)\}$$

函数 $f(x)$ 存在 Fourier 变换的充份条件 (需同时满足):

1. $f(x)$ 绝对可积, 即 $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty$
2. $f(x)$ 在 \mathbb{R} 的任一有限区间上具有有限个极值
3. $f(x)$ 在 \mathbb{R} 的任一有限区间上具有有限个不连续点, 且在那些点上 $f(x)$ 取有限函数值。

等价地, 可以说连续函数或具有有限个不连续点的有界函数存在 Fourier 变换。

定义在 \mathbb{R}^n 上的函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 的 Fourier 变换形如:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{k} \tilde{f}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (5.5)$$

其中

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$$

f 的 Fourier 变换存在的条件与上述 $n=1$ 的条件相似。

以下是一些常用的 Fourier 变换性质:

1. 线性。若 $h(x) = \alpha f(x) + g(x)$ 则 $\tilde{h}(k) = \alpha \tilde{f}(k) + \tilde{g}(k), \forall \alpha \in \mathbb{R}$
2. 时移。若 $h(x) = f(x - x_0)$, 则 $\tilde{h}(k) = e^{-ikx_0} \tilde{f}(k), \forall x_0 \in \mathbb{R}$ 。
3. 频移 (调制)。若 $h(x) = e^{-ik_0x} f(x)$, 则 $\tilde{h}(k) = \tilde{f}(k - k_0), \forall k_0 \in \mathbb{R}$ 。
4. 时域标度。若 $h(x) = f(\alpha x)$, 则 $\tilde{h}(k) = |\alpha|^{-1} \tilde{f}(k), \forall \alpha \neq 0$ 。
5. 微分。 $\mathcal{F}\left\{\frac{d}{dx} f(x)\right\} = ik \mathcal{F}\{f(x)\}$, $\mathcal{F}\left\{\frac{d^n}{dx^n} f(x)\right\} = (ik)^n \mathcal{F}\{f(x)\}$
6. 卷积。若 $h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(x')} g(x+x') dx'$ 称为 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的卷积 (convolution), 则 $\tilde{h}(k) = \tilde{f}(k) \tilde{g}(k)$ 。

常见函数的 Fourier 变换对, 可查 Fourier 变换表。

5.2 狄拉克 delta 函数

狄拉克 δ 函数 (Dirac's δ -function) $\delta(x)$ (简称 δ 函数) 是一个广义函数 (generalized function)¹。设定义在 \mathbb{R} 上的任一实值函数 $f(x)$ 任意整数阶可微, 且在 \mathbb{R} 的某一有界闭集外处处为零, 则 $\delta(x)$ 必须满足性质

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (5.6)$$

特别地, 若取 $f(x) = 1$, 则有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (5.7)$$

¹ 本讲义不对广义函数进行正式的定义。读者只需要了解 δ 函数的基本性质就可以了。广义函数在数学上又称作分布 (distributions), 可参考^[3]。

在狭义定义下的函数当中,是不存在满足上述性质的函数的。但 $\delta(x)$ 可通过常规函数序列引入。考虑以下函数序列(图5.1)

$$f_n(x) = \left(\frac{n}{\pi}\right)^{1/2} e^{-nx^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

则

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) \quad (5.8)$$

确实,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f_n(x) = 1, \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

故由式 (5.8) 和极限与积分的相关性质有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

满足 (5.7)。

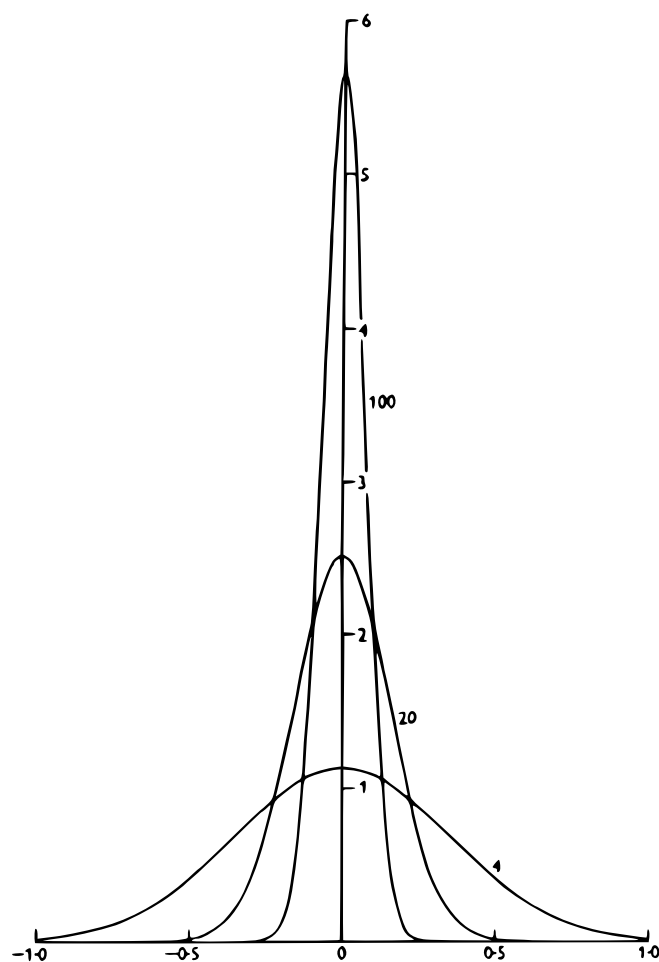


图 5.1: 函数序列 $f_n(x) = e^{-nx^2} \left(\frac{n}{\pi}\right)^{1/2}$ 在 $n = 4, 20, 100$ 时的图像^[4]。

要验证式 (5.8) 还一般地满足 (5.6), 我们需要证明

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f_n(x) f(x) = f(0)$$

对 $f(x)$ 关于 $x=0$ 进行泰勒展开¹:

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} x^m$$

故

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f_n(x) f(x) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f_n(x) x^m \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} [1 + (-1)^m] \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2\sqrt{\pi}} \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-m/2} \\ &= f(0) \end{aligned}$$

上式只有 $m=0$ 项不为零, 故 (5.6) 得验。

利用式 (5.6) 和式 (5.7), 还可得到 δ 函数的以下基本性质:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(u+a) \delta(u) du = f(a) \quad (5.9)$$

以及 δ 函数的导数的性质 (分部积分):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \delta(x) f(x) dx &= f(x) \delta(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x) \delta(x) dx \\ &= -f'(0) \end{aligned} \quad (5.10)$$

其中由于前面提到 $f(x)$ 在 \mathbb{R} 的某一有界闭集外处处为零故 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$, 上式的第一个等号右边的第一项为零 (利用 δ 函数与 f_n 的关系可验)。

以上仅以某一个函数序列在 $n \rightarrow \infty$ 的极限规定了 δ 函数, 使得我们能够推导很多 δ 函数的性质, 但具有同样性质 (式 (5.6) 和 (5.7)) 的 δ 函数可由不止一组函数序列来得到, 这些函数序列在得出同一个 δ 函数这件事上是等价的。只要一个函数序列 $f_n(x)$ 对每一 $n \in \mathbb{N}$ 满足:

1. 关于 $x=0$ 对称;
2. 在 $n \rightarrow \infty$ 时变得“无限高”和“无限窄”;
3. 在 $n \rightarrow \infty$ 时积分面积恒为 1,

则 $\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x)$ 就是狄拉克 δ 函数。例如, 另一个可得到 δ 函数的等价函数序列是

$$g_n(x) = \begin{cases} n, & -\frac{1}{2n} \leq x \leq \frac{1}{2n} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

在 \mathbb{R}^n 上, 可定义 n 维 δ 函数 $\delta(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n \delta(x_i)$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ 。此时, 对任一定义在 \mathbb{R}^n 上的无穷阶可微且在 \mathbb{R}^n 的某有界闭集外处处为零的函数 $f(\mathbf{x})$ 有

$$\int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{x} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{a}) f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a}) \quad (5.11)$$

¹ 函数 f 满足的性质使其必可进行泰勒展开。

第六章 拉普拉斯变换

第七章 常微分方程

第八章 偏微分方程

在物理问题中经常碰到的情况是, 物理量 f 随空间位置和时间变化, 故 f 是空间位置向量 \mathbf{r} 和时间 t 的函数 $f(\mathbf{r}, t)$ 。在直角坐标系 (x, y, z) 下可写作 $f(x, y, z, t)$ 。在一维问题中写作 $f(x, t)$ 。因此, 主导这一物理量 f 的变化规律的方程, 既需要规定 f 随时间变化的规律—— f 的时间偏导数 $\partial f/\partial t, \partial^2 f/\partial t^2, \dots$, 又要规定 f 随空间位置变化的规律—— f 的梯度和更高阶的空间导数 $\nabla f = (\partial f/\partial x, \partial f/\partial y, \partial f/\partial z), \dots$, 因此将含有 f 的偏导数。

偏微分方程(*partial differential equation, PDE*)是这样的一类方程:

- 它含有两个或两个以上独立自变量(例如 x, y, z, t);
- 一个依赖这些变量的未知函数(例如 $f = f(x, y, z, t)$);
- 以及该函数对这些变量的偏导函数(例如 $\partial f/\partial t, \partial f/\partial x, \partial^2 f/\partial x^2, \dots$)。

微分方程的基本术语^{[2]§10}, 可以自动适用于偏微分方程。例如, 方程所含有的偏微分的最高阶数, 称作该偏微分方程的阶。如果某个函数及其各阶偏导函数代入偏微分方程能使后者成为恒等式, 则称这个函数为偏微分方程的一个解。如果一个偏微分方程所有解可以用一个通式表示出来, 这个通式就叫做这个偏微分方程的通解。

一个关于某物理过程的偏微分方程, 只有给定了初始条件(*initial condition, IC*)和边界条件(*boundary conditions, BCs*), 才能得到具体的、不偏待定参数的解, 以对应于一个具体的物理问题的预测。初始条件是指未知函数 $f(x, y, z, t)$ 限制在时间 $t = 0$ 时的函数 $f(x, y, z, 0) \equiv f_0(x, y, z)$ 及其偏导函数的性质。边界条件是在未知函数 $f(\mathbf{r}, t)$ 限制在这一物理问题所关心的空间区域 Ω 的边界 $\partial\Omega$ (也需指明) 上的函数 $f(\mathbf{r}, t), \mathbf{r} \in \partial\Omega$ 及其偏导函数的性质²。在具体的初始条件和边界条件规定下, 仍满足偏微分方程的解, 称为该偏微分方程在给定初始条件和边界条件下的特解。

例 7 (传热方程). 关于温度 $u(\mathbf{r}, t)$ 的方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \nabla^2 u, \quad k = \text{常数}$$

称为传热方程(*heat equation*)。其中 $\nabla^2 u(x, y, z, t) \equiv \partial^2 u/\partial x^2 + \partial^2 u/\partial y^2 + \partial^2 u/\partial z^2$ 。规定了如下例所示的初始条件和边界条件之后, 可理解为如图 8.1 所示的物理问题。

$$\text{方程: } \frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0$$

$$\text{边界条件: } u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad \forall t \geq 0$$

$$\text{初始条件: } u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

其中 $u_0(x)$ 是某个给定表达式的函数。例如, 当 $u_0(x) = \sin(\pi x)$ 时, 上述边界条件和初始条件规定下方程的特解是 $u(x, t) = e^{-\pi^2 k t} \sin(\pi x)$ 。它在 $k = 0.01$ 时的图像如图 8.1 所示。

²在偏微分方程的数学理论中, 由于不区分自变量是时间还是空间位置等物理意义, 故一律都称作边界条件。

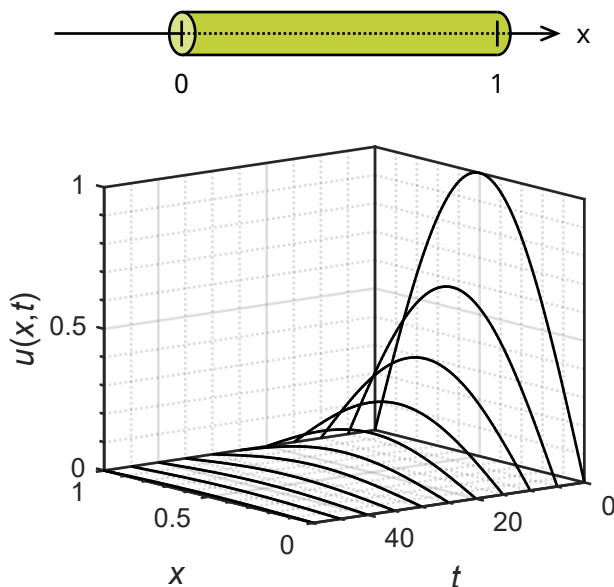


图 8.1: 一根长为 1、左端置于原点处的一维直棒, 在 $t = 0$ 时、温度在棒上的分布是 $u_0(x) = \sin(\pi x)$ 。若棒的两端温度恒定为 0, 即 $u(0, t) = u(1, t) = 0 \forall t \geq 0$, 传热系数 $k = 0.01$, 那么棒上的温度分布如何随时间演变?

8.1 一阶偏微分方程

一阶偏微分方程的一般形式是:

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n; f; \frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right) = 0, \quad n > 1$$

在具体问题中, 函数 F 的形式是给定的, 函数 f 是未知函数。为简化考虑, 以下以维数 $n = 2$ 为例继续讨论, 即未知函数 $f = f(x, y)$ 。如果一个一阶偏微分方程可以具体写成形如

$$P(x, y, f) \frac{\partial f}{\partial x} + Q(x, y, f) \frac{\partial f}{\partial y} = R(x, y, f) \quad (8.1)$$

的形式, 则为一阶拟线性 (quasilinear) 偏微分方程; 当函数 P, Q 不依赖未知函数 f 时, 则为一阶半线性 (semilinear) 偏微分方程; 当函数 P, Q, R 都不依赖特征函数 f 时, 则为一阶线性 (linear) 偏微分方程。如果上式符合一阶线性偏微分方程要求且 $R = 0$, 则称方程是齐次的 (homogeneous), 否则称其为非齐次的 (nonhomogeneous)。下面我们专门讨论一阶线性偏微分方程。

常微分方程组

$$\frac{dx}{P(x, y, f)} = \frac{dy}{Q(x, y, f)} = \frac{df}{R(x, y, f)}$$

称方程 (8.1) 的特征方程组。它很有用。解第 1 个等号得 $x/P = y/Q + C_1$, 解第二个等号得 $y/Q = f/R + C_2$ 。消去 y/Q 并整理至可验证, 给定任意函数 $\Psi(u)$, $C_2 = \Psi(C_1)$ 是方程 (8.1) 的通解, 即

$$\frac{y}{Q} - \frac{f}{R} = \Psi\left(\frac{x}{P} - \frac{y}{Q}\right) \Leftrightarrow f = \frac{Ry}{Q} - R\Psi\left(\frac{x}{P} - \frac{y}{Q}\right) \quad (8.2)$$

是方程 (8.1) 的通解。所以, 只要我们通过解一个偏微分方程的特征方程组, 再用 C_1 表示出 C_2 (即获得了函数 Ψ 的形式), 那么就立刻得出了原方程的通解式 (8.2)。

给定方程的边条件

$$x = g_1(t), \quad (8.3)$$

$$y = g_2(t), \quad (8.4)$$

$$f = g_3(t), t \in [a, b] \quad (8.5)$$

找出方程 (8.1) 的解的问题, 称为柯西问题 (*Cauchy problem*)。柯西问题的几何意义是, 找出由方程 (8.1) 定义的曲面集中经过由 (8.3) 定义的曲面的一束。

特别地, 给定边条件 $f = g(y), x = 0$ 的柯西问题称经典柯西问题。写回其参数形式: $g_1(t) \equiv 0, g_2(t) = t, g_3(t) = g(t)$ 。

8.2 二阶偏微分方程

第九章 随机微分方程基础

第十章 朗之万方程

第十一章 广义朗之万方程

第十二章 时间序列分析基础

第十三章 朗之万方程的离散化

第十四章 广义朗之万方程的离散化

第二部分

胶体粒子的布朗运动

第三部分

简单液体理论

第十五章 刘维尔方程

15.1 引入

经典统计力学旨在从构成宏观物质的 N 个微观质点的经典力学运动出发,解释并预测宏观热力学现象。然而,我们面临着世大的挑战:体系中的粒子数量 N 通常量级为 $O(10^{23})$ 。在如此庞大的体系下,即便我们能获得一个高精度、瞬时的微观状态(所有粒子的精确位置和动量),也无法按照经典力学的传统方法对所有粒子进行精确追踪和计算,更遑论完成宏观热力学状态函数的预测。

从经典力学的角度看,如果能够确定体系在某一参考时刻 $t = 0$ 的微观状态,那么根据经典力学的因果律和时间演化的可逆性(时间反演对称性),体系在过去($t < 0$)和未来($t > 0$)任一时刻的微观状态原则上都可以由基本运动方程精确预测。然而,实际操作中,这种计算量是天文数字,根本无法实现。更重要的是,在实际物理场景中,我们甚至无法精确观测或控制体系在 $t = 0$ 时刻处于何种微观状态。我们通常只能观测体系的宏观热力学状态量(这些量是特定时长内的平均值,我们将在后续章节详述),以及控制施加在体系上的宏观约束(例如体系的体积、外形、压强、温度等)。在这些宏观约束下,体系内部的微观运动依然持续不断。

因此,为了解决这一困境,我们需要引入一种能够描述体系微观状态不确定性的方法——概率统计描述。

在经典力学假定下,一个由 N 个质点组成的系统的运动状态在任一时刻都可以由所有粒子的痊置矢量集合 $\mathbf{r}^N \equiv (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ 和动量矢量集合 $\mathbf{p}^N \equiv (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ 所确定。其中,每个粒子 i 有三维位置 \mathbf{r}_i 和三维动量 \mathbf{p}_i 。这意味着,系统的状态可由一个包含 $6N$ 个实数($3N$ 个位置坐标和 $3N$ 个动量坐标)的矢量来描述。我们将这个 $6N$ 维实数空间称为相空间(*phase space*),并用相空间中的一个点 $\Gamma \in \mathbb{R}^{6N}$ 来表示系统的微观状态,即 $\Gamma \equiv (\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ 。

由于我们无法精确确定系统在任何时刻的微观状态,我们转而采用概率论的方法,为系统在相空间中可能占据的每一个微观状态赋予一个概率。具体地,我们考虑由相空间 \mathbb{R}^{6N} 及其上的博雷尔 σ -代数 \mathcal{B} 构成的可测空间 $(\mathbb{R}^{6N}, \mathcal{B})$ 。博雷尔 σ -代数包含了相空间中所有可测子集,即我们可以为其定义概率的区域。

设 $\mu_t : \mathcal{B} \rightarrow [0, 1]$ 是定义在这个可测空间上的概率测度,它描述了系统在 t 时刻的微观状态在相空间某个区域内的概率。对于相空间中的任意一个可测区域 $X \in \mathcal{B}$, $\mu_t[X]$ 表示系统在 t 时刻微观状态处于区域 X 内的概率。

我们可以用一个概率密度函数 $f(\Gamma, t)$ 来描述这个概率测度。即,系统在 t 时刻微观状态处于相空间区域 X 内的概率可以表示为:

$$\mu_t[X] \equiv \int_X f(\Gamma, t) d\Gamma \quad (15.1)$$

其中, $f(\Gamma, t) d\Gamma$ 表示系统在 t 时刻微观状态处于以 Γ 为中心、体积为 $d\Gamma$ 的无穷小相空间体积元内的概率。这里的 $d\Gamma$ 是相空间中的勒贝格测度(即体积元)。

允许这样一个密度函数 $f(\Gamma, t)$ 的存在,在数学上意味着所需的概率测度 μ_t 相对于 \mathbb{R}^{6N} 上的勒贝格测度是绝对连续的。这在物理上体现了经典力学中的相空间状态的连续性,即任何有限的相空间区域都包含着无穷多的微观状态,且这些状态不是离散分布的,而是连续分布的。因此,可以用一个连续函数 f 来描述其概率分布。概率密度函数 $f(\Gamma, t)$ 必须满足归一化条件:

$$\int_{\mathbb{R}^{6N}} f(\Gamma, t) d\Gamma \equiv 1 \quad (15.2)$$

在经典力学中,给定系统的运动方程,一个时刻 t 的确定微观状态 Γ_t 将被唯一地映射为另一时刻 t' 的确定微观态 $\Gamma_{t'}$ 。这种演化过程可以用一个相空间流映射来表示。

具体地,我们可以定义一个映射 $\chi_{t \rightarrow t'} : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}^{6N}$, 它将 t 时刻的相空间点 Γ_t 映射到 t' 时刻的相空间点 $\Gamma_{t'}$:

$$\Gamma_{t'} = \chi_{t \rightarrow t'}(\Gamma_t) \quad (15.3)$$

由于经典力学运动方程的确定性和可逆性,这个映射 $\chi_{t \rightarrow t'}$ 是一个连续双射,故其把开集映射为开集,同时它是可测映射。

设 $\omega_t \in \mathcal{B}$ 是 t 时刻相空间中的一个可测区域,那么它在 t' 时刻演化为区域为 $\omega_{t'} = \chi_{t \rightarrow t'}(\omega_t)$, 且 $\omega_{t'}$ 也是可测的。因此我们有 $\omega_t = \chi_{t \rightarrow t'}^{-1}(\omega_{t'})$ 。如果记 $\mu_{t'}$ 为 μ_t 在映射 $\chi_{t \rightarrow t'}$ 下的前推测度(pushforward measure),即对于相空间中任意一个在 t' 时刻的可测区域 $\omega_{t'}$,

$$\mu_{t'}(\omega_{t'}) \equiv \mu_t(\chi_{t \rightarrow t'}^{-1}(\omega_{t'})) \quad (15.4)$$

由 $\chi_{t \rightarrow t'}$ 的双射性,我们可知:若 $\omega_t \in \mathcal{B}$ 是时刻 t 的一个可测区域,且 $\omega_{t'} = \chi_{t \rightarrow t'}(\omega_t)$ 是其演化到时刻 t' 的区域,那么 $\omega_t = \chi_{t \rightarrow t'}^{-1}(\omega_{t'})$ 。将此关系代入 (15.4),则有:

$$\mu_{t'}(\omega_{t'}) = \mu_t(\omega_t) \quad (15.5)$$

此等式表明,对于任意一个随相空间流演化的可测区域,其概率值在时间演化过程中是保持不变的。这个结论对任意时刻 t, t' 以及任意一对由流映射相互关联的可测区域 ω_t 和 $\omega_{t'}$ 都成立。

由此,我们得到:

$$\frac{d}{dt} \mu_t[\omega_t] = \frac{d}{dt} \int_{\omega_t} f(\Gamma, t) d\Gamma = 0 \quad (15.6)$$

需要强调的是,这里的积分区域 ω_t 是一个随时间变化的区域,它沿着相空间流而运动。

为了处理对随时间变化的积分区域进行的求导,我们借助雷诺传输定理,可以得到关于概率密度 $f(\Gamma, t)$ 的连续性方程,亦即刘维尔方程(Liouville equation):

$$\boxed{\dot{f} + \nabla \cdot (f \dot{\Gamma}) = 0} \quad (15.7)$$

这里的“速度” \mathbf{v} 是系统在相空间位置 Γ 变化的运动速度。

使用“物质导数”表示,则刘维尔方程又可写成

$$\frac{D}{Dt} f = -\nabla \cdot \mathbf{v} \quad (15.8)$$

其中 $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ 。可见,刘维尔方程 (15.7) 作为相空间中的流体的连续性方程,并不一般地保证“不可压缩性”。我们把 $\nabla \cdot \mathbf{v}$ 展开可以写成

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{6N} \frac{\partial}{\partial \Gamma_i} v_i = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial}{\partial r_j} \dot{r}_j + \frac{\partial}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) \quad (15.9)$$

如果体系是哈密顿系,即满足

$$\dot{r}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial r_j} \quad (15.10)$$

代入上式可得出 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ 。也就是说,哈密顿系的相空间流体是“不可压缩的”。在物理化学的语境中,说一个系统(在微观层面上)是哈密顿系,就是说它(在热力学层面上)是孤立系统。一个系统在微观层面上是非哈密顿系的情况包括:体系与环间之间存在摩擦力或粘性力、与热源交换能量、体系是开放系统。这三种情况中,第一种情况仍然能用非哈密顿版的刘维尔方程 (15.7) 描述,前提是我们能把环境对系统的“耗散力”作用描述成一种非保守力。此时体系仍然可以用一套确定性的微观动力学方程描述,只是它不再是哈密顿方程。

但是第二、三种情况没办法直接用式 (15.7)。第二种情况是因为系统的粒子与环境的粒子在系统边界的碰撞没被纳入原系统的运动方程中,也无法简单等价成一个非保守力。想要精确描述这些碰撞,除非把环境也纳入一个新的大孤立体系一起讨论。第三种情况,粒子数 N 在变化,无法用固体维数的相空间描述问题。更多讨论见“统计力学中的约束”一文。

回到基于式 (15.7) 的讨论。我们采用算符语言,将式 (15.7) 写成

$$\dot{f} = -\mathbf{i}\mathcal{L}f \quad (15.11)$$

其中

$$\mathbf{i}\mathcal{L}f = \nabla \cdot (f\mathbf{v}) \quad (15.12)$$

$$= \mathbf{v} \cdot \nabla f + (\nabla \cdot \mathbf{v})f \quad (15.13)$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{i}\mathcal{L} = \mathbf{v} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (15.14)$$

称关于概率密度的刘维尔算符(f -Liouvillian)。方程 (15.7) 可写出预解式(resolvent)

$$f(\Gamma, t) = e^{-\mathbf{i}\mathcal{L}t} f(\Gamma, 0) \quad (15.15)$$

利用泰勒展开,传播子(propagator) $\exp(-\mathbf{i}\mathcal{L})$ 可写成

$$\exp(-\mathbf{i}\mathcal{L}t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} (\mathbf{i}\mathcal{L})^n \quad (15.16)$$

因此刘维尔方程的解又可表示成级数

$$f(\Gamma, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} f(\Gamma, 0) \quad (15.17)$$

其中用到了

$$(-\mathbf{i}\mathcal{L})^n f(\Gamma, 0) = (-\mathbf{i}L)^{n-1} (-\mathbf{i}\mathcal{L}) f(\Gamma, 0) = (-\mathbf{i}\mathcal{L})^{n-1} \frac{\partial}{\partial t} f(\Gamma, 0) = \dots = \frac{\partial^n}{\partial t^n} f(\Gamma, 0) \quad (15.18)$$

15.2 动力学量的变化方程

动力学量(dynamic variable)是体系微观状态的函数,即体系的某性质 B 是映射 $B: \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathcal{F}$, 其中 \mathcal{F} 根据物理量 B 的具体定义可以是标量、向量或张量值空间。映射 $B(\Gamma)$ 可给出任一微观状态 Γ 所对应的物理性质取值。

体系的运动过程是相空间中的一条轨迹 $\Gamma(t)$, 则性质 B 的变化就是 $B(\Gamma(t))$ 。为了区分,我们把这种随微观状态变化的即时性质记为 $\hat{B}(t) = B(\Gamma(t))$ 。对 $\hat{B}(t)$ 求时间导数:

$$\frac{d}{dt} \hat{B}(t) = \frac{d}{dt} B(\Gamma(t)) = \mathbf{v} \cdot \nabla B \quad (15.19)$$

其中对 B 的梯度是在 $\Gamma(t)$ 处求的,所以是沿着轨迹 $\Gamma(t)$ 变化的。我们引入新的算符:

$$\mathbf{i}L = \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (15.20)$$

称关于动力学量的刘维尔算符(p -Liouvillian)。

这种“跟着轨迹变化”的表达形式,类似于流体力学中的拉格朗日描述。状态点 Γ 就是流体的物质点。概率密度 $f(\Gamma, t)$ 就是流体的密度场。如果采用欧拉描述, Γ 不再用来描述系统某次运动在相空间中的轨迹,而用于表示 \mathbb{R}^{6N} 欧几里得空间的位置向量。这时,我们也不再讨论某次运动中系统处于 t 时刻的性质 B 的取值

\hat{B} , 而是假想系统从每一个初条件 (即 $t = 0$ 时处于相空间的每一点) 出发, 运动到当前时刻 t 就达到不同的相空间当前位置。这将发出一束而不是一根相空间运动轨迹, 相当于一团相空间流体在 \mathbb{R}^{6N} 空间中的流动过程。这时 t 时刻空间位置 Γ 处, 关于状态点的性质 B 就是欧拉描述, 为区别记为 $\tilde{B}(\Gamma, t)$ 。依照流体力学的知识, 如果由 \tilde{B} 而不是 \hat{B} 求性质 B 的变化率 (的欧拉描述), 就需要对 \tilde{B} 作物质导数:

$$\frac{D}{Dt} \tilde{B}(\Gamma, t) = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{B}(\Gamma, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla \tilde{B} = \mathbf{v} \cdot \nabla B \quad (15.21)$$

注意到, 由状态计算性质 B 的方法, 就是根据物理性质 B 的物理定义, 这个定义 (即映射) 是不随时间变化的。因此上式中的第一个偏导数必为零 (记得此时 Γ 表示固定的某状态)。上式的速度 \mathbf{v} 也应是欧拉描述, 对 B 的梯度也是在固定点 Γ 处的梯度。如此一来, $D\tilde{B}/Dt$ 和 $d\hat{B}/dt$ 形式相同, 只差一个欧拉描述与拉格朗日描述变换——正如其所应当。

比较 L 与 \mathcal{L} 可知, 当且仅当系统是哈密顿系 (即 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) 时 $L = \mathcal{L}$, 可不加区分。

不管采用欧拉还是拉格朗日描述, 都是在阐述关于系统的动力学量 B 的变化率的方程, 因此我们省去两种描述区别的记法, 把 B 的变化率记作:

$$\frac{d}{dt} B = \frac{d}{dt} \hat{B} = \frac{D}{Dt} \tilde{B} = iLB \quad (15.22)$$

这就是系统的动力学量的变化方程。它的预解式是

$$B(t) = \exp(iLt) B(0) \quad (15.23)$$

我们将简短证明, \mathcal{L} 与 L 互为伴随算符, 即

$$\int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) iLB(0) = - \int_{\Lambda_0} d\Gamma B(0) i\mathcal{L}f(\Gamma, 0) \quad (15.24)$$

其中我们把两个动力学量的内积定义为

$$(A|B) = \int_{\Lambda_0} \overline{A}(\Gamma, t) B(\Gamma, t) d\Gamma \quad (15.25)$$

其中上划线表示取复数共轭。因此需证明的等式其实就是

$$(f|iLB) = -(i\mathcal{L}f|B) \Leftrightarrow (f|LB) = (\mathcal{L}f|B) \quad (15.26)$$

用文字说就是 L 与 \mathcal{L} 互为伴随算符: $L = \mathcal{L}^\dagger$ 。

证明.

$$\begin{aligned} lhs &= \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) \mathbf{v} \cdot \nabla B(0) d\Gamma \\ &= - \int_{\partial\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) B(0) \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma + \int_{\Lambda_0} d\Gamma B(0) \nabla \cdot (f(\Gamma, 0) \mathbf{v}) \\ &= - \int_{\Lambda_0} d\Gamma B(0) i\mathcal{L}f(\Gamma, 0) = rhs \end{aligned}$$

其中第二个等号第一项因在 Λ_0 的边界上总有 $f(\Gamma, 0) \rightarrow 0$ 而为零, 因为物理上我们常进一步要求 f 满足狄利克雷条件, 因此 f 绝对可积, 结合它是恒正且满足归一化条件的要求, 充分地它在 Λ_0 的边界上总有 $f(\Gamma, 0) \rightarrow 0$ 。剩下的第二项变到第三个等号时用到了 $-i\mathcal{L}f(\Gamma, 0) = \nabla \cdot (f(\Gamma, 0) \mathbf{v})$ 。□

作为显然的推论, 当前仅当系统是哈密顿系时 \mathcal{L} (或 L) 是厄米算符。

15.3 系综平均

我们引入非平衡态下的“系综平均”。对体系的动力学量 B 作 t 时刻的系综平均,就是用 t 时刻的概率密度 $f(\Gamma, t)$ 对 $B(\Gamma)$ 求期望,即

$$\langle B \rangle_S(t) = \int_{\Lambda_t} d\Gamma f(\Gamma, t) B(\Gamma) \quad (15.27)$$

下标“S”表示这个定义是薛定谔绘景(*Schrödinger picture*)。另一方面我们可以假想以 $t = 0$ 时刻的初始概率密度 $f(\Gamma, 0)$ 对 $B(\Gamma)$ 求期望,再让系统以这些初状态运动到 t 时刻,即

$$\langle B \rangle_H(t) = \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) \exp(iLt) B(\Gamma) \quad (15.28)$$

下标“H”表示这个定义是海森堡绘景(*Heisenberg Picture*)。

我们马上证明,两种绘景定义的系综平均是等价的。

证明.

$$\begin{aligned} \langle B \rangle_H(t) &= \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) \exp(iLt) B(\Gamma) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) (t\mathbf{v} \cdot \nabla)^n B(\Gamma) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, 0) iL [(t\mathbf{v} \cdot \nabla)^{n-1} B(\Gamma)] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda_0} d\Gamma (-i\mathcal{L} f(\Gamma, 0)) [(t\mathbf{v} \cdot \nabla)^{n-1} B(\Gamma)] \\ &\vdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda_0} d\Gamma (-i\mathcal{L})^n f(\Gamma, -) B(\Gamma) \\ &= \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, t) B(\Gamma) \end{aligned}$$

区域 Λ_t 是由 Λ_0 经过相空间流演化而来的,即 $\Lambda_t = \chi_{0 \rightarrow t}(\Lambda_0)$ 。记 J 为系统的运动映射 $\chi_{0 \rightarrow t}$ 的雅可比行列式。则 $Jd\Gamma = d\Gamma'$ 。由于系统运动的保测性,定义在 Λ_0 上的 $f(\Gamma)$ 和定义在 Λ_t 上的 $f(\Gamma')$ 之间满足保测条件,即

$$f(\Gamma) d\Gamma = f(\Gamma') d\Gamma' \Leftrightarrow f(\Gamma) = Jf(\Gamma')$$

因此可得

$$\langle B \rangle_H(t) = \int_{\Lambda_0} d\Gamma f(\Gamma, t) B(\Gamma) = \int_{\Lambda_t} d\Gamma' f(\Gamma', t) B(\Gamma') = \langle B \rangle_S(t)$$

□

因此不加区分时可统一记为 $\langle B \rangle(t)$ 。

统计力学公理性地认为, $\langle B \rangle(t)$ 就是体系宏观性质 B 的真值时间变化。

我们进行宏观实验时,总是无法精确测得性质的真值的。在实际测量中,体系只发生某一次演化过程,表现为相空间中的某条轨迹 $\Gamma(t)$ 。我们测得的是 $B(\Gamma(t))$ 。我们认为,第时刻 t 下,系统恰好处于 $\Gamma(t)$ 状态,是从概率密度函数 $f(\Gamma, t)$ 取样得到的随机值。如果我们可以大量重复完全相同的实验,则有望使多次实验在每个时刻 t 的状态(由于随机性次次不同)遍历相空间,从而对这个多次实测的 $B(t)$ 直接平均就能等于 $\langle B \rangle(t)$,也就得到了宏观性质真值。但实际上我们重复测量次数是有限的,各次重复实验就有随机涨落,其方差 $\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 > 0$ 。这里,我们实际视 $\{B(t), t \in \mathbb{R}\}$ 为一个随机过程。

我们看到, $\langle B \rangle(t)$ 的时间依赖性其实是来自概率密度函数 $f(\Gamma, t)$ 的时间依赖性。我们常常看到, 体系的宏观性质在外界条件恒定的情况下, 假以时日总是达到稳态, 这反映 $f(\Gamma, t)$ 在 $t \rightarrow \infty$ 时失去时间依赖性, 从而有

$$f_{\text{st}}(\Gamma) = f(\Gamma, t \rightarrow \infty) \quad (15.29)$$

故

$$\langle B \rangle_{\text{st}} = \int_{\Lambda} d\Gamma f_{\text{st}}(\Gamma) B(\Gamma) \quad (15.30)$$

此时, 我们可以像平衡态统计力学那样讨论以下时间平均

$$\langle B \rangle_t = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau^{-1} \int_{t_0}^{t_0 + \tau} dt B(t) \quad (15.31)$$

其中下标 t 表示这是一个时间平均, 而非系综平均。对于稳态下的体系, 如果有 $\langle B \rangle_t = \langle B \rangle$, 就称这个系统是遍历的 (*ergodic*)。在一般平衡态统计力学书中, 系统的遍历性是公理化规定的。但是在非平衡态统计力学与动力学系统的交叉领域, 人们倾向于不直接规定遍历性, 而希望从微观动力学出发得出系统是否遍历或何时遍历左边。相关的话题不在此展开。

第十六章 液体涨落性质的时间相关函数