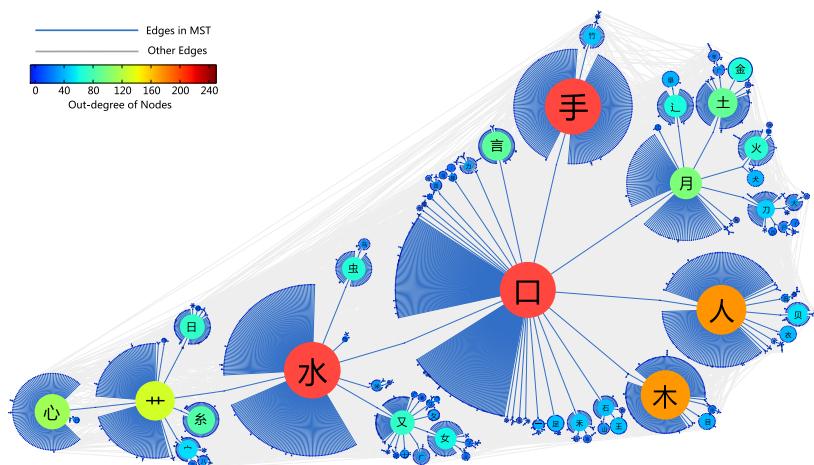

Invitation to Systems Science

系统科学导引

吴金闪



联系¹, 联系², 联系³

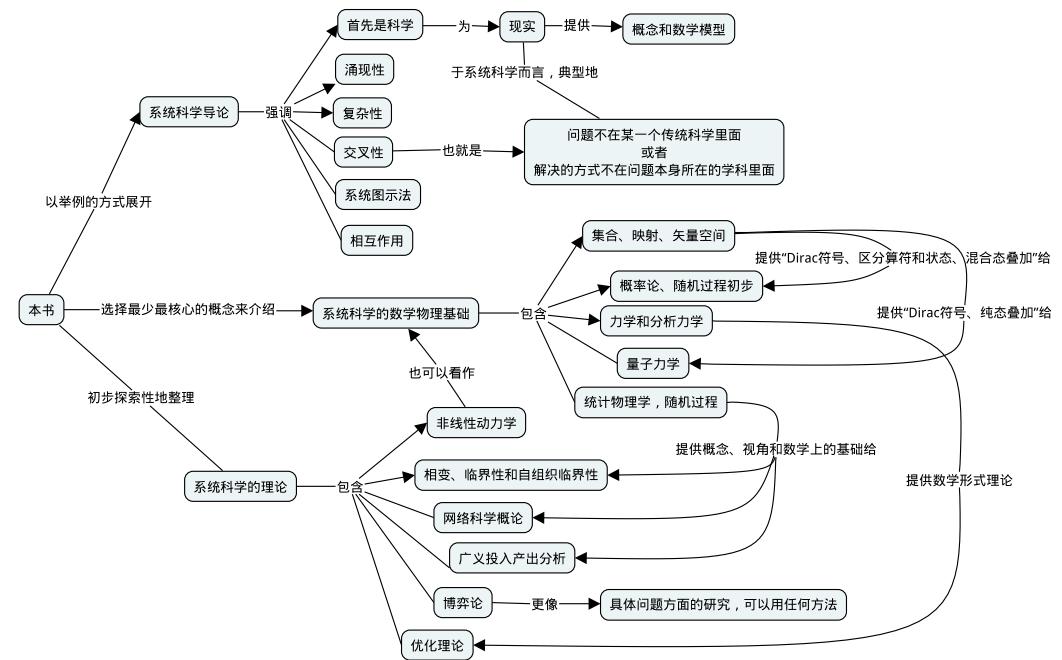
从具体系统中来, 到具体系统中去

从孤立到有联系, 从直接到间接, 从个体到整体

More is Different, More is The Same

一片两片三四片, 构成系统出涌现; 五片六片七八片, 飞入系统都不见

本书整体概念地图



修改清单

1 像	46
2 正是	47
3 到达的位置	51
4 使得	61
5 举	62
6 是	79
8 由	97
9 [1–3]	98
10 [4–7]	98
11 [7], 以及更加复杂一点的 Oregon 模型 (Oregonator) [8]	99
13 反应	100
14 Gleick	176
15 最	187
16 扰动	213
18 绿色的“PR”表示按照公式 (15.140) 算出来的 PageRank 排序。	517

批注清单

2 记得取获取授权。	118
4 Edges in MST: 最小生成树中的边; Other Edges: 其他边; Out-degree of Nodes: 顶点出度	135

6 基因敲除 1, 基因敲除 2	154
8 记得去获取授权。	193
10 记得去获取授权。	196
12 Edges in MST: 最小生成树中的边; Other Edges: 其他边; Out-degree of Nodes: 顶点出度	513

目录

第一部分 系统科学概论	41
第一章 引言：系统科学与科学	45
1.1 抛一块砖：系统科学的思想、目标和定位	46
1.2 整体论和还原论、相互作用	48
1.3 关于科学和科学方法	53
1.4 科学和数学的关系：概念是对现实的抽象，抽象的结果是数学结构	58
1.4.1 矢量，位置、词、量子态	58
1.4.2 熵与信号编码	66
1.4.3 分形几何，海岸线、肺	76
1.5 划分系统和确定考察的因素：热寂问题和量纲分析	79
1.6 力学思想无处不在：状态、状态变化以及状态变化的原因	85
1.7 普适性：一个概念、原理、分析方法或者模型尽可能多地描述现象	89
1.8 作业	90
1.9 本章小结	92
第二章 一些具有系统科学特色的研究实例	95
2.1 热寂说与开放系统结构的产生	95
2.2 整体运动的激发模式，涌现	99
2.3 相变与临界性的例子	111
2.3.1 传统相互作用与相变、临界性：Ising 模型	112
2.3.2 涌现、自组织临界：Bak-Tang-Wiesenfeld 沙堆	117
2.4 相互作用，周期与混沌的例子	120

2.5 再一次用混沌的例子，确定性和随机性	126
2.6 相互作用与网络科学的例子：汉字研究	129
2.7 相互作用与网络科学的例子：PageRank 算法	142
2.8 相互作用与投入产出分析：经济学和科学学	146
2.9 系统生物学和化学反应网络：流平衡分析	151
2.10 博弈与相互作用的例子	156
2.11 约束下定态与动态过程的优化的例子	159
2.11.1 约束下定态优化的例子：项目管理	162
2.11.2 动态过程优化的例子：存款和消费	166
2.12 复杂软件的例子：系统工程和系统科学	170
2.13 作业	175
2.14 本章小结	176
第三章 概念地图与系统图示法	179
3.1 如何描述一个系统：图示举例	179
3.2 一般系统图示法：概念地图	184
3.3 反馈图和可计算反馈图	188
3.4 本体论图	191
3.5 概念地图、理解型学习和理解系统	195
3.6 作业	199
3.7 本章小结	200
第四章 网络作为复杂系统的骨架	203
4.1 之前的举例中的网络视角	203
4.2 网络的精神：几何性和网络效应	204
4.3 作业	209
4.4 本章小结	210
第五章 为什么要学习数学和物理	211
5.1 第一篇总结：全书的结构	211
5.2 数学和物理做为系统科学研究对象和问题的来源	213
5.3 数学和物理做为系统科学思维方式和分析方法的来源	213

5.4 本章小结	214
第二部分 系统科学的数学物理基础	215
第六章 线性代数	219
6.1 集合与映射的语言	220
6.2 从群到线性空间	222
6.2.1 群、半群	223
6.2.2 线性空间的矢量	226
6.2.3 矢量内积	229
6.3 线性算符	234
6.3.1 共轭算符	235
6.3.2 本征值与本征向量	238
6.3.3 线性变换与表象理论	240
6.3.4 矩阵的奇异值分解	243
6.4 数值线性代数	246
6.4.1 矩阵相乘的 Strassen 算法	247
6.4.2 本征值与本征向量	249
6.4.3 线性系统的解	250
6.5 矩阵微扰理论	251
6.5.1 矩阵可对角化的情形	252
6.6 作业	254
6.7 本章小结	254
第七章 概率论	257
7.1 古典模型：离散概率与几何概率	258
7.2 现代概率三元体	262
7.3 条件概率与 Bayesian 公式	263
7.4 分布函数、矩和特征函数	269
7.5 中心极限定理	271
7.6 概率论的 Dirac 符号形式	273
7.7 随机过程初步	276

7.8 Monte Carlo 方法	283
7.9 随机变量的测量	287
7.10 统计学概览	288
7.10.1 统计学的核心任务	288
7.10.2 参数估计举例	289
7.10.3 无参数估计核心	293
7.10.4 假设检验原理	296
7.10.5 Bayesian 学派和频率学派	300
7.10.6 假设检验和科学的发展	301
7.10.7 随机过程估计举例：系综平均和轨道平均	304
7.11 作业	308
7.12 本章小结	309
第八章 力学	311
8.1 力学思想	312
8.2 Newton 力学的基本概念	321
8.3 势函数、保守力与能量守恒	325
8.4 分析力学的技术	328
8.4.1 Lagrangian 力学	328
8.4.2 Hamiltonian 力学	329
8.4.3 Lagrangian 力学与 Hamiltonian 力学等价以及最小作用量原理	331
8.4.4 从单体到多体的分析力学形式	334
8.5 关于什么是科学的进一步讨论	336
8.6 作业	338
8.7 本章小结	339
第九章 统计力学	341
9.1 从力学到统计力学	342
9.2 统计力学的基本理论：系综理论	346
9.3 相变与临界现象	351
9.4 Metropolis 方法	361

目录	9
9.5 在物理学以及其他学科中的熵	367
9.6 从熵最大推导正则分布	368
9.7 作业	369
9.8 本章小结	369
9.9 本章技术性附录	370
9.9.1 连续性方程的说明	370
9.9.2 压强微观公式的说明	371
第十章 量子力学	373
10.1 量子系统的实验	375
10.2 量子系统的基本理论	381
10.2.1 量子系统的静态描述	382
10.2.2 量子系统的演化	389
10.3 写在量子力学后面的话	392
10.4 作业	394
10.5 本章小结	394
第十一章 随机过程	395
11.1 Markov 过程	398
11.2 Langevin 方程: 随机力	402
11.3 Master 方程与 Fokker-Planck 方程	410
11.3.1 连续时间 Markov 过程的 Master 方程	410
11.3.2 从 Master 方程到 Fokker-Planck 方程	411
11.3.3 几个典型的随机过程的 Fokker-Planck 方程	412
11.4 Langevin 方程与 Fokker-Planck 方程的关系	413
11.5 平稳性	414
11.6 随机过程的模拟与计算	415
11.7 作业	416
11.8 本章小结	416

第三部分 系统科学的基本理论	419
第十二章 线性与非线性动力学简论 423	
12.1 线性系统的演化	426
12.2 非线性系统定态的线性稳定性	427
12.3 轨道的线性稳定性分析	431
12.4 初值敏感和混沌	441
12.5 Lyapunov 势函数方法	443
12.6 作业	447
12.7 动力学系统及其定性分析的几个应用	447
12.8 本章小结	452
第十三章 相变、临界性与自组织临界性 455	
13.1 相变的研究方法	456
13.2 关联函数	464
13.3 临界行为	464
13.4 自组织临界性	464
13.5 用互信息来寻找临界点	464
13.6 相变与临界现象的几个应用	465
13.7 作业	465
13.8 本章小结	465
第十四章 网络科学概论 467	
14.1 复杂网络的描述方法	469
14.2 基本静态量与中心性	471
14.3 网络演化	471
14.4 网络上的动力学	471
14.5 多层网络	471
14.6 网络科学应用	471
14.6.1 用网络研究方法增进人类交往，提高创造性和生产力 .	471
14.6.2 用网络研究方法发现容易发生脑退化的人	472
14.6.3 连起来的树木才是森林，用网络研究森林	472

目录	11
----	----

14.6.4 网络用于研究科学学	472
14.7 再论网络的精神	472
14.7.1 几何性	472
14.7.2 网络效应	472
14.8 作业	472
14.9 本章小结	472
第十五章 广义投入产出分析	475
15.1 几种广义投入产出矩阵的定义	476
15.2 传统投入产出	481
15.2.1 需求端投入产出分析	481
15.2.2 需求端投入产出分析小结	484
15.2.3 产出端投入产出分析	485
15.2.4 产出端投入产出分析小结	486
15.3 传统投入产出 HEM	486
15.3.1 假想去掉一个部门的 HEM	486
15.3.2 看假想去掉任意子矩阵 Δ 的新角度	487
15.4 目标外界投入产出	488
15.5 本征向量 HEM	490
15.6 封闭和开放系统的 PageRank 和 CheiRank	491
15.7 用于广义投入产出分析的矩阵微扰论	498
15.7.1 用于简化 HEM 计算的 Dyson 方程	498
15.7.2 矩阵本征向量微扰论	504
15.7.3 本征向量 HEM 和 PageRank 的关系	508
15.8 广义投入产出分析的应用	510
15.8.1 汉字和概念网络学习顺序做为广义投入产出分析	511
15.8.2 系统生物学、化学反应网络的流平衡分析做为广义投 入产出分析	518
15.8.3 广义投入产出分析用于国际贸易	518
15.8.4 广义投入产出分析用于环境科学	524
15.8.5 广义投入产出分析用于科学学	534
15.9 作业	540

15.10 本章小结	542
第十六章 博弈论与演化博弈概论	547
16.1 博弈、博弈论与 Nash 均衡	549
16.2 理论与实际的对比：Nash 均衡的描述能力	549
16.3 演化博弈：均衡实现的问题	549
16.4 新的均衡的问题	550
16.5 更多的具体系统上的研究实例	550
16.6 作业	550
16.7 本章小结	550
第四部分 附录	551
第十七章 计算机语言与工具的学习	553
17.1 Linux 系统中安装、编辑、编译、执行程序	553
17.2 C 语言、Python 与编程风格	558
17.3 BLAS、Lapack 及其实现	560
17.4 并行计算初步与 BLAS、Lapack、Petsc、Slepc	560
17.5 xmds2	565
17.6 SageMath	565
17.7 NetLogo	565
17.8 Swarm	565
17.9 C 与 R 中的 igraph	565
参考文献	583
名词索引	585
人名与常用翻译	593
插图目录	602
举例目录	604

献给

黄云弟、冯倩、吴立心、吴逸兮。

心儿、逸儿，把一个问题想明白的快乐是一种非常大的快乐。

致谢

“系统科学导引”课程开设期间、教材写作期间和 MOOC 建设期间得到了多位老师和同事的帮助，包含方福康、狄增如、李克强、裴寿镛、王有贵、王大辉、樊瑛、袁强、汪明、张鹿等。在此表示感谢。同时，本书在材料选取的原则——关注主线、“教的更少，学得更多”、关注事物之间的联系、教学要带领学生上层次、要讲就讲个明白等，受到了我在物理系的多位老师 Mona Berciu、杨展如、裴寿镛、梁灿彬、漆安慎、喀兴林等的教学和教材的影响。在此一并表示感谢。

感谢我的课堂上的以及“大物理学（Big Physics）”¹研究团队的学生们，你们给我很多的学习、研究和教学上的启发。除了从我的老师们那注重主线的教学、汉字学习的研究工作、Novak 的概念地图学习方法发展而来的关注概念之间联系的思想——系联性思考，在整本书的内容选取上最重要的另一个思想——教的更少学得更多，就是因为要在最短的时间里面让你们具有对系统科学的比较深刻的认识，并且准备一些核心的原则上最少量最必要的但是实际上也为数不少的数学物理的基础，这个目的才发展起来的。因此，你们是我的教学思想的发展的重要动力，尤其是考虑到你们背景学科和目标学科的多样性。还要感谢我测试内容和讲法的小白鼠们——课程的助教和学生。

尽管大部分研究实例都来自于其他研究者的研究工作，本书也有一些我自己的研究工作的例子。大部分这些工作都是在其他合作者，例如闫小勇、沈哲思、李梦辉、Mona Berciu 等，的支持下做出来的研究工作。非常感谢这些以及更多其他正在开展的工作的合作者，并希望将来能够做出来更多可以称为案例的研究工作。

¹<http://www.bigphysics.org>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

感谢我的夫人冯倩对于我做各种探索的支持。感谢我的岳母姚书君对孩子们的悉心照顾，使得我有更多的时间来做这些探索并完成本书。感谢心儿和逸儿，不仅让我更加快乐和努力地工作，还时不时地当我用来尝试讲法和内容选取的小白鼠。例如，Chladeni 斑图和虹吸现象，就是这样个尝试的结果之一。

感谢本书编辑钱俊和他的同事们为本书所做的细致的编辑和排版的工作，以及为了实现我各种 L^AT_EX 格式上的要求所做的额外的付出。

序

看到吴金闪教授这本“系统科学导引”，明显地感觉到与众不同的地方：书名不叫导论，也没有用引言这一类标题，而是用了“导引”这样一种开放性的提法。这个提法明白地告诉读者，本书要通过学习引导你考虑一些系统科学的基本问题，告诉你在哪些科学知识的基础上去思考，如何去思考。从本书的内容和结构来看，很明显的存在着三条主线，即系统科学的发展进程以及其主要内容和成就，然后就是用去本书大量的篇幅论述作为一门科学其发展的理论基础，特别是数学和物理在建立一个理论体系中的作用，再者就是对如何进一步发展系统科学的思考。其实，这一部分发展系统科学的思想是贯穿全书的，因为“导引”的目的就是要引发读者的思考，特别是面对系统科学这一新兴学科所涉及的未知世界。

在一本篇幅有限的教材里，要完成这三项任务是困难的。这里显出吴金闪教授与众不同的地方，他志存高远，宣称要用最少的语言、用最核心的概念来阐明问题。这是一项挑战，考验的是吴金闪教授对系统科学这一学科产生和发展理解的深度，考验的是对于系统科学赖以发展的科学基本理论掌握的程度和高度概括的能力。当我们阅读其力学和量子力学的二章，可以明显地感到吴教授为实现他的诺言所做的努力。至于系统科学的展开和后续发展的内容，则由于这门学科发展的迅速，内容十分广泛，不同学者会有他本人的取向和偏爱，只要把系统科学的特点予以说明就可以了，尽管会具有浓厚的个人色彩。所以，对于吴金闪教授这本“导引”教材，如果仔细体会，无论对于系统科学发展的历程，发展这门学科所需要的理论储备以及如何去发展这门学科，都会受益匪浅，而对于初涉系统科学的青年学子来说，更是能启迪他们的思维，更快更好地进入到系统科学这一广阔的领域。

作为一篇序言，也是对应吴金闪教授“导引”二字的提法，下面，沿着序言中所提出的三个问题，提出一些看法，作为一种意见参与讨论，也可以算作序言的一个延伸部分。

(一)

在 2015 年北京大学的毕业典礼上，有一个著名的演讲，当时身为生命科学学院院长的饶毅教授，代表学校教师向毕业生致词。总共 1500 多字的讲话，获得了多次热烈的掌声。对于我这个读者来说，看重是演讲中的二句话，“从物理学来说，无机的原子逆热力学第二定律出现生物是奇迹”，“从生物学来说，按进化规律产生遗传信息指导组装人类是奇迹”。

一位生物学家，能够对科学的前沿作如此的概括，确实能使人感受到他的功力。实际上，所谈到的第一个奇迹涉及到的是现代系统科学实质性的开始。这里的要点是逆热力学第二定律的提法，当学者们认识到在逆热力学第二定律的后面，还存在着一幅崭新的画卷，此时一个新的科学世界的历程就开始了。在这里有二个学者是需要提到的，一位是 N. Wiener，他最早对逆热力学第二定律的世界有清晰的理念。他指出“我们所做的是在奔向无序的巨流中努力逆流而上，否则它将一切最终陷于热力学第二定律所描绘的平衡和同质的热寂之中…… 我们的主要使命就是建立起一块块具有秩序和体系的独立领地…… 我们只有全力奔跑，才能留在原地”^[1]。另一位要提到的学者是 I. Prigogine，他给出了逆热力学第二定律的物理内容和数学形式。这就是耗散结构理论。这个理论冲破了热力学第二定律的限制，指出对于开放系统，在远离平衡的条件下，能够形成一种相对稳定的结构，称之为耗散结构。Prigogine 先是用实验确切地在流体、化学反应二个系统中让世人看到了这个相对稳定的耗散结构。再者，他证明了在热平衡的线性区是不可能出现这种结构的，一定在远离平衡的非线性区，才会有相对稳定的，称之为耗散结构的出现。然后，在论证和讨论了耗散结构的各种性质特点之后，Prigogine 和他的 Brussels 学派，发展了一套数学理论，来定量地描述耗散结构形成的过程、性质和特点，并将其应用到各具体系统和领域，特别是出现了被称为奇迹的生物。耗散结构的出现，包括实验和他的理论体系，使得突破热力学第二定律的想法从议论变为科学。

在此之后到现在的 40 年间，无论从研究的领域，和理论计算的方法都有很大的发展。研究的领域，从最初 80 年代由 Science 提到的 7 个方向，发展到 21 世纪初，由 Hoker 的归纳，有了 12 大门类，28 个学科领域，涵盖了生命、神经、人类学、社会、经济、军事、管理等一切方面。研究的方法，也从原初的数理方程，展开到应用计算机、网络、大数据等现代信息工具。面对着系统科学这样一个庞大的体系，包括这门学科的兴起、发展的历程、多种数学工具的运用、涵盖内容众多的学科体系、以及这门学科仍在迅猛发展的势头，要在一本篇幅有限的著作里，要诠释这样一件科学事件是不容易的。但在，吴金闪教授这部著作中，可以看到，他以自己独特的风格完成了一个很有特色的答案。

然而系统科学或复杂性研究目前的进展并不令人满意。虽然有众多研究领域的展开，在研究工具上，网络和计算机发挥了强大的威力，应用于各种具体系统也取得令人欣喜的结果，但是对复杂系统基本规律的探索并没有取得实质性的进展，各个研究领域，各种研究成果，还是停留在已有的理论基础上，只是在外延上获得发展和展开。像饶毅教授提出的生物学奇迹的探索，涉及到进化规律、遗传信息、组装人类这样一些实际上是复杂性研究核心理论问题的研究，并没有获得理论上的突破，还有待于系统科学的未来。

(二)

吴金闪教授这本“导引”著作的另一个显著特点是认认真真的讨论了系统科学所涉及的科学基础。系统科学作为 21 世纪的前沿学科，讨论的完全是一堆全新的复杂系统对象，从数理学科的角度来观察，是从未系统地处理过的。而从耗散结构理论开始，复杂系统的研究显然已经进入到了一个新的阶段，即用数理科学的工具和方法，来获得科学的定量化的结果。这样的研究，与早期的系统科学研究如一般系统论那样定性的讨论是完全不同，在这里需要的是实实在在的科学理论概念和处理实际问题的数理方法。因此在教学内容的选择上，既要照顾到在科学历史上那些行之有效，有成功经验的数理科学方法，又要适当地介绍，随着复杂性研究工作的进展，在近些年来新发展起来的工具和方法。这两方面都有丰富的内容，而要在一

个篇幅有限的教材中完成这二项硬任务是考验吴教授的理论基础和学术功力。吴金闪教授没有回避这个矛盾，他宣称要用最少的文字语言来介绍这些最经典的理论，而实际上他是很出色地完成了这个任务。在理论物理学的经典科学库存中，吴教授选择了力学、量子力学、和统计物理三门课程。其中量子力学是最能体现业务实力的，我们可以从吴金闪教授用最少语言的描述中，看看他是如何处理量子力学这门学科的。

量子力学作为微观世界的奠基之作，与相对论一起，被称为 20 世纪巅峰的成就，独领风骚达半个多世纪。但是量子力学的核心内容只不过是少数几条基本原理（常见的提法是 5 条基本原理）。正是在量子力学基本原理的基础上，搭起了处理各类微观客体运动规律的理论框架。不仅如此，在精妙的数学描述下，量子力学的基本内容获得了十分抽象而又十分精确的数学表述。由量子力学的物理内容所揭示的微观粒子的描述，不过是 Hilbert 空间中的一个矢量，或者说是在这个空间中所描述的一个状态，算子作用于矢量，引起状态的变化，而形成运动方程。Hilbert 空间中矢量的变换或描述状态的方式变换，构成了表象理论。用物理语言颇为费力的一些内容，在精巧的数学语言下变得简单、精确。这种深刻的物理思想和精巧的数字语言的结合，正是揭示物质运动基本规律最有力的工具。在吴金闪教授所写的有关量子力学的章节，可以看到他用最少的语言而做的最大的努力，竭力将量子力学的物理抽象和涉及的数学语言传递给读者。类似的，在力学这一部分，在极有限的篇幅中，不仅介绍了牛顿力学，而且要讲到分析力学。综观全书，吴金闪教授始终强调物理观念和数学思想的重要性。这样的强调不仅是为了继承，更是为了发展，为的是建立一个复杂系统所需要的理论，作好必要的理论储备。

(三)

创新，是一门学科成长、壮大、发展的根本之道。系统科学的发展需要创新，而且是不断创新。目前对系统科学最需要的，是对于复杂系统这个未知世界基本规律的掌握，并由此进一步建立起各种运算体系并解决具体课题。吴金闪教授的著作将创新的理念贯彻全书并指出了必须注意的要点，一是要具体化，另一项是联系、联系、再联系。对于具体系统的关注，各家

会有所不同，但是总体上的目标是探索和发掘复杂系统这个未知世界的基本规律。

首先会想到的问题，是世间事物的运动形式和发展规律，不应该只停留在物理世界的物质和能量的理论框架内，特别是涉及生命、神经、人类、社会这样一群复杂系统或更确切的说是复杂适应系统。信息在系统演化和发展过程中的作用已十分明显和重要。所以在理论框架上，应该建立起一个物质、能量、信息的三元素世界，在这个更宽的框架内描述他们的状态，发掘其运动规律。但是在我们的科学宝库中，并没有现成的含有物质、能量、信息三元素世界的理论框架，物理学是 20 世纪影响较大的一门学科，涉及了微观领域的各个部门和高速运行的客体等。但是，在物理学中只讨论物质和能量，不涉及信息。另外一门专门讨论信息的学问——信息论，则是专门研究信息传递过程的，从信息源、信道，到信宿，讨论的是信息如何准确传递，如何解决抗干扰。在信息论中，也没有涉及物质和能量的相互关系。所以在现有的科学库存中，信息与物质没有现成的交集，更谈不到信息与物质相互作用的方式与内容。在这个领域内，无论是理论概念，或是计算方法，目前还没有形成被大家所公认的并可被大家接受的理论成果。

尽管信息与物质的相互作用其规律还没有被充分揭示，但已经有很多学者和实际工作者关注和讨论了信息的重要作用，并做出了许多有意义的启示，为进一步解决这个问题提供了准备。早期有生物学家汤佩松，后来钱学森、徐光宪也有过论述，周光召还提出了信息与物质的相互作用，在社会系统中会起主要的作用。之后，随着对信息的研究展开，徐光宪先生提出了人工信息量的概念，并进行了量值的初步的估算。不同于依靠生物自然进化而形成的自然信息量，人工信息量是指人类由于有了语言以后所生成的信息。徐先生的估算人类自然信息量的总量为 10^{35} 次方 bit 量级，而全球人工信息总量估算为 10^{20} 次方 bit 量级，且每年约以 30% 的速度增长^[2]。徐先生的人工信息量的概念实际上为人类建立了一套完全不同于生物自然进化而形成的信息系统，不妨称之为第二信息系统。这套建立在语言发展基础上的人类所特有的第二信息系统，在人类的发展壮大和人类社会的形成和进步起到了决定性的作用。首先，由于语言的产生和第二信息系统的形成使人类与动物界彻底分离开来，逐步成为自然界的主宰^[3,4]。然后，由于第二信息系统的不断发展与完善，并与物质生产、社会体制相互结合

逐步完善，使得人类从一些弱小的种群，发展壮大成为强大的族群，直到形成社会和国家，成为在地球上目前最为强大的生命体。

信息与物质相互作用的重要性是清楚的，但是迄今为止还没有一个信息与物质相互作用关系的数学表述形式，需要作一些试探。遵循着达尔文所指出的语言对人类发展的关键作用，最近我们讨论了语言作为信息对人脑这类物质的发展过程。在实验数据的支持下，我们得到了这一类包含信息物质运动的数学表达形式，可以用一个非自治的动力方程来描述，其中信息与物质的相互作用是方程中含时间 t 的驱动项。这样的一个计算结果仅是一个单例。它虽然给出了信息与物质相互作用在这个具体问题中的表达式，但并不一定显示出是一种普适的形式，因为信息与物质相互作用是复杂的，存在多种表现形式，现在我们还未能窥测他的全貌。但无论如何，在这里我们找到了一种具体的信息与物质相互作用的数学表述形式及其所反映的科学内容，希望能成为一个好的开始，在探索复杂系统的基本规律上获得进步。

方福康
2018 年 4 月

参考文献

- [1] Norbert Wiener, I Am a Mathematician: The Later Life of a Prodigy, 1964, p.324.
- [2] 徐光宪，化学分子信息量的计算和可见宇宙信息量的估算，中国科学 B 辑：化学，2007 年，第 37 卷，第 4 期：313-317.
- [3] 达尔文，《人类的由来》，第三章，1887.
- [4] Martin A. Nowak, Evolutionary Dynamics, Harvard University Press, 2006.

前言

这是一个非同一般的（长、复杂、混乱）前言，或者更应该看作是整本书的内容和背后的思考的总结。在这里我们先来简要地和不自量力地讨论一下系统科学这个学科的最关键的问题——什么是系统科学，然后说明一下本书的目的和定位。目的是帮助你决定是不是值得真的仔细阅读这本书。

整本书我们都在展现封面上的几句话：

联系¹，联系²，联系³

从具体系统中来，到具体系统中去

从孤立到有联系，从直接到间接，从个体到整体

More is Different, More is The Same

（一片两片三四片，构成系统出涌现；五片六片七八片，飞入系统都不见）

其中最后一句是对那句英文的翻译。在任何一个具体例子的讨论之后，包含这个前言里面的例子，请亲爱的读者你一定要来体会一下这几句话和那些例子的联系。

真的前言

经常听到“这是一个系统工程”，什么什么“是一个系统性问题”这样的说法，来形容某件事情或者某个东西比较复杂，有的时候也意味着这件事情或者这个东西应该用某种适合“系统性问题”的方式来解决。如果这个说法有意义，其实就要求我们就必须先有一些这样的解决方法。我们有吗？甚至，我们有什么样的问题是系统性问题的一个比较科学完整的说法或者定义吗？如果这些都没有，那么，当我们说什么什么是系统工程是系统性问题的时候，也就是我们无能为力，问题太过复杂的代名词。作为科学家，我

们显然不能满足于这样的代名词：系统科学就是实在太复杂的我们没有办法的研究对象的代名词。因此，本书的最主要的目的就是讨论什么是系统科学，系统科学有哪一些比较有自己学科特点的思维方式和分析方法，有哪一些有特点的研究实例。我们也稍微会回答一下，需要哪些数学物理的知识、思维方式和分析方法的基础。

本书是我在北京师范大学开设“系统科学概论”和“系统科学数理基础”两门课的教材。为了能够让学生体会到什么是系统科学，并且从欣赏研究实例和做练习中学会一些系统科学的思维方式和研究方法，我必须自己先有一个反映什么是系统科学的概念体系以及相应的研究实例的体系。这本书就是这样一个不断地挑战我自己对系统科学的认知，不断地整理体系的所得到的一个结果，不能算是这个学科的一个完整的整理。

在本书第一部分还会有关于什么是系统科学的更加详细的讨论。这里仅仅做一个相当粗略的讨论。系统科学目前还不是一门成熟的学科，因此这样的讨论很难，但是却很有必要。我们希望通过阅读本书的前言，读者可以大概了解什么是系统科学，这样看起来后面的部分会有一个更好的整体思路，或者叫做学科大图景：一个学科的典型对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法、和世界以及其他学科的关系。当然，我们梦想中的目标是，就算读者不再去花时间学习本书剩下的章节，你也能明白系统科学大概是什么。不过，我们只能尽力去向着这个目标努力，本书也仅仅是一个这样的尝试。如果能够启发读者来思考这个问题，那么，就不算完全失败了。

在一边编写一边使用这个教材六年之后，我觉得，尽管还是很不成熟，有必要和大家分享，接受大家的批评了，于是就有了本书的出版。本书的电子版以及所用的课堂讲稿可以通过访问“吴金闪的书们”²来获得。课程“系统科学导引”已经录制成 MOOC 课程的形式在网易云课堂和网易公开课³上线。本书、讲稿和视频课程的主要目的真的是给学生们一个什么是系统科学的导引，给专家们一个可以批判的系统科学入门课程。正是由于系统科学还是一个成熟的学科，这样的供批判的体系和材料才更加重要。希望使用本书的专家和学生们能够帮助我一起来把这本书写个更好，这个课

²<http://www.systemsci.org/jinshanw/books>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

³在各自平台上搜索“系统科学导引”或者“吴金闪”就可以找到本课程。

上的更好，这个学科发展得更好。另外，在使用本课程和本书的时候，请一定不要忽略作业。作业之中的很多问题实际上都有明确的设计目标，而且往往是经过多次课堂使用测试，甚至是受实际研究工作的启发所得的。

由于篇幅关系，本书打算按照上中下三卷本的形式来印刷。但是，由于第三卷的内容目前还没有定稿，实际上，本书目录中的第三卷的页码是不对的。具体内容也可能在后续的写作过程中修改，尽管主体结构应该是差不多了。可是，同时考虑到使用方便，我们又希望把第一卷的参考文献、人名索引、专有名词索引、插图目录、例题目录放在了第一卷的后面。将来本书的三卷的正文将采用连续的页码，而不是每一本的页码都重新从 1 开始。

再一次强调，本书仅仅是在说明“系统科学是什么”这个问题上的一个探索，主要为了提供一些例子和观点供研究者进一步讨论，促进这个学科的成熟和发展。

什么是系统科学？

粗略地说，系统科学就是具有系统特征的科学。什么是系统特征，下面会展开讨论。但是，首先，我们要注意，系统科学是科学，不是哲学，不是数学。科学是需要为实际问题提出一个可计算的模型，并且所算出来的答案还要可验证或者至少可证伪⁴。因此，仅仅停留在典型思维方式的层面不会让一个学科成熟，我们必须从对具体对象具体问题的研究中总结出来典型分析方法，甚至找到这些典型分析方法背后的数学结构，更进一步让这个学科来解决实际社会的问题，才是科学。讨论科学，就不能不讨论数学和具体学科的科学的关系的问题。因此，我们把前言分成了如下几个部分：什么是系统科学，系统科学的还原论和整体论、系统科学和数学、物理的关系，系统科学自己的典型分析方法，以及本教材的目的和定位。

实际上本书的整体结构也遵循了同样的逻辑结构。首先是通过具体研究例子来做一个系统科学的导论，然后是通过更多的一些例子来总结和展

⁴科学的可证伪性是指一个论断（命题）——例如“天下乌鸦都是黑的”——可以是错的，如果出现了某个现象的话——例如出现了一只不是黑色的乌鸦，但是实际现象中迄今为止都没有观测到那个可以推翻这个论断的现象——例如如果迄今为止所有能够看到的乌鸦确实都是黑的话，那么这个论断就是科学的。更多关于可证伪性一级什么是科学的讨论可见Popper的《科学发现的逻辑》[9]。

示可以认为是系统科学自己的典型思维方式和分析方法，接着是学习一些数学和物理的分析方法思维方式甚至具体知识，最后是再一次来提炼大概可以算作是系统科学自己的典型分析方法。同时在系统科学导论那一章内部，也是类似的思路：什么是系统科学、系统科学和数学以及物理的关系、系统科学的典型思维方式和典型分析方法以及一些例子。从这个角度看，本书自身就是按照系统科学的思维方式来组织的，例如结构上的自相似性、每一个章节之内和之间的关系。甚至，我们还给本书做了一个主要内容和主要概念的概念地图。在本书的最后，我们还整理了一个整个系统科学的概念地图，仅供读者参考。

传统的学科基本上按照研究对象来分类的，例如物理学学究物理过程，生命科学研究生命体，地理科学研究地理现象，脑科学研究大脑的活动，经济学研究经济行为。有的实际问题可以一定程度上独立出来成为某个学科的研究对象。但是，大量的实际系统的问题，实际上，是多学科的。有的时候有的问题粗粗看起来不是多学科的，但是运用多学科的角度和分析方法可能可以回答得更好。例如决策和对策是经济行为于是也是经济学的基础，但是实际上决策和对策过程本身是脑科学的研究对象。经济学中的简化处理——理想经济个体追求自身经济利益最大化——在很多时候能够给出大致准确的描述，但是大量的问题其实不能够通过这个简单假设来处理。这样的问题就不是单个学科能够解决的问题。当然，对于这个具体的例子，实际上需要进一步研究决策的大脑活动基础。于是，正好就是神经经济学 [10] 的研究对象。也就是说只要建立一个新的交叉学科就可以解决这样的传统学科边界之外的问题了。也就是说，尽管我前面提到的“问题是跨越学科边界的”是对的，但是，仍然我们没必要有一个“系统科学”，只要有一个个的传统学科的交叉学科们就好了。那是我这个例子没有举好。

我们来换几个例子，希望从中看到一些共性。我们来看一个通过广告和身边朋友的选择来影响你买一个什么品牌的手机的问题。如果我们不考虑朋友关系，那么，这个问题就是一个在产品质量、社会风气和广告影响下的个体决策问题。当然，如果你仔细考量，实际上社会风气和广告传播途径的背后有网络和相互作用的因素——社会风气还是通过周围的朋友或者某种其他物理途径才能影响到你，广告传播也必须考虑介质和介质的地理位置等因素。这些因素对于每一个人可能是不一样的。让我们先忽略这个可

能有个体差别的需要考虑相互作用的介质和地点的因素，把社会风气和广告当做作用在每一个潜在购买者身上的平均效应——这个实际上，以后我们会看到，叫做“平均场理论”：忽略相互作用的来源和个体差别，看做所有这些想作用对你的作用的某种平均。现在，剩下的影响你决策的因素就只剩下周围的朋友的选择了。当然，实际上，以后我们还会看到，这些朋友们对你的影响也可以不区分来自于那个朋友而看做某种平均。你的朋友的选择从两个方面影响你的决策：首先，你希望跟你的朋友一样，这样抱团取暖也能相互交流更好；其次，你可能相信你的朋友的决策是考虑过产品的质量的，于是你也认为如果他们选择某个手机越多这个手机的质量也就越好。这两个因素都起到使你更加从众的作用，尽管两者实际上有区别，并且前者仅仅局限在朋友圈之中，后者其实朋友圈之外的其他人也应该考虑。好，有了这个考虑，我们发现，我们相当于在平均场的基础上需要考虑每一个人的朋友圈的结构，并且有的时候不同朋友圈的人也可以通过传播来实现间接相互影响（ A 直接影响在同一个朋友圈的 B ，但是不能直接影响不再同一个朋友圈的 C ，但是可以通过先影响 B 从而影响 C ，如果 B 和 C 属于同一个朋友圈的话）。在产品广告的设计和投放的单位看来，他们就需要把所有的潜在用户的朋友圈的结构都收集整理出来，然后考虑如何在这个朋友圈上设计一个好的广告策略。实际上，这个问题被称为“网络上的社会学习问题”[11]，不仅有学术价值，还有重要的商业价值。顺便，以后我们会提到的一个我们自己的工作[12]给这个模型上提供了一个精确求解的方法，并对模型做了整理和推广。

在这里有几个因素是重要的：平均场或者外场来描述其他人的影响，网络的描述个体有差异的相互作用圈子，基于这个平均场加上网络的模型的计算分析方法，在计算中还可能需要考虑间接影响，同时这个问题牵涉到很多很多个体。更进一步，这样的受环境和邻居影响的模型可能同时也能有描述很多其他现象而这些现象可能来自于传统上不同的学科的。更进一步，求解这个模型的方式，尽管在不同的系统上可能还需要进一步调整，但是可能是具有一般性的。于是，这样的模型和方法，以及把这样的模型用于来自于不限定学科的问题的角度，就很难算到某个具体学科或者某个传统学科的交叉科学里面。在这个意义上，我们说我们需要一个叫做“系统科学”的学科。

下一个例子是森林科学的问题。中文的“木、林、森”告诉我们一大团树就可以看做森林。但是，森林科学家的研究告诉我们，单纯的一大团树不能构成森林，树木之间的相互作用构成森林。不同的植物，甚至包含动物，生长在一起有什么整体的效果或者整体的问题，这些是森林科学和实际生活关心的问题。对于这个森林的场景，局部来说，我们可以把一颗大树和依赖与帮助这个树的其他具有互生关系的动植物放在一起考虑，还可以从平均场的角度来考虑局部环境条件下的森林火灾或者生长加速或抑制的问题。我们也可以考虑从局部到整体的问题——疾病或者害虫在大量的树之间的传播——这个问题就很像上一个需要考虑个体之间的相互影响的社会学习的问题了，不过我们在这个例子里面不在重复谈这一方面。最近，不列颠哥伦比亚大学的森林科学家Simard研究了森林中树和树之间的“对话”[13–15]。她发现，树和树之间通过根菌网络相连，并且这个链接能够作为物质和信息交流的通道，例如通过这个交流通道“母树”能够其他同种或者异种的树输送糖或者防御信号，并且在这个过程中还能够做到给自己的后代输送更多养分。因此，森林之所以构成森林，关键的地方就在于这个能够实现树之间相互交流的根菌网络的存在。有了根菌网络，我们研究一个树木的生长、砍伐、病虫、生态地位等问题的时候，就需要考虑跟她相连的其他的树对这棵树的影响以及这棵树对其他的树的影响，更进一步还需要考虑周围的树和它的邻居之间的相互影响。于是，一个目标对象的问题转化成了一个需要从整体的角度来考虑的问题。甚至，Simard就在研究中明确地提出来了这里有例如间接影响、社团结构、层次结构等复杂系统的一般性问题[13–15]。

于是，有可能森林科学家们需要突破传统的森林科学所准备的分析计算方法来研究这个问题，而且在这个突破中，我们同样很容易看到上一个问题中的强调出来的几点：个体之间的相互影响，以及网络的描述方式，还有网络上的具有整体性的具有间接效应的分析方法。

类似地，Google的PageRank 算法[16] 对网页的排名实际上也考虑了类似的因素：一个网页被很多网页引用就说明这个网页重要，并且如果引用它的网页自己也很重要，那么这个网页就会更重要。另外一个例子是我们后面会详细介绍的汉字之间的结构读音含义上的联系，以及基于这个联系对汉字学习顺序和检测检测顺序的讨论[17]。在那里，首先我们建立汉字之

间相互联系的网络⁵，然后从整体的角度对优化学习顺序和检测算法做了讨论。在这个问题中，同样我们也注意到以下几点：大量的个体、个体之间的相互作用的描述和具有整体性和间接效应的分析方法，以及没有特定领域限制的研究对象。

因此，系统科学不仅仅是交叉科学，而且是具有某种特定的共性的交叉科学：没有特定领域限制的研究对象，包含大量的个体的系统，个体之间存在相互作用，所讨论的问题需要考虑这些相互作用，讨论这些问题的方法也有可能具有一些共性——例如整体性、间接联系、网络的描述方法。将来我们还会看到，不仅分析方法，分析的结果或者系统的行为、系统的组织方式演化方式这些都有可能有共性。

系统科学的基本研究目标有两个层面。第一、如何处理在各种各样的系统之中的多个个体之间的相互作用，讨论其对系统的性质和功能的影响；第二、如何把对一种系统的研究方法抽象出来应用于更多的系统。两者都是方法论层次的目标，前者比后者稍微具体一些。如果我们把相互作用局限在四种基本相互作用（引力、电磁、强、弱）的框架内，那么我们讨论的就是统计物理学与场论的基本对象和目标。系统科学可以包含更广义的相互作用，例如人群之间的意见形成与传播，其相互作用形式就不能直接还原成为四种基本相互作用。沿着这个思路。在每一个层次，有这个层次自己的相互作用，这种形式的相互作用如何从更底层更基本的相互作用中涌现出来，也是系统科学研究的一个研究对象。后者其实是所有的自然科学（以及部分社会科学）的研究目标：想办法处理一个系统，接着抽象一般概念与方法来处理更多的系统。那么为什么要把这个很多其他科学的目标单独提出来作为系统科学的一个有特点的研究目标呢？在这里，我们强调，系统科学的研究对象可以来自于任何一个传统学科，没有领域上的限制，只要这些系统具有前面提到的系统性特征，于是研究方法自然也就会具有系统性。这一点也导致系统科学更像数学（不过我们强调，系统科学必须从具体系统中来到具体系统中去，于是更加接近科学）。例如相变与临界现象原来是来自于物理学，尤其是统计物理学，的研究对象，后来人们发现在地理学、生态学、社会学甚至神经科学中都大量存在这多个体组成的系统整体状态

⁵实际上，这样来理解汉字的方式被称为系联法。首先被陈沣提出来 [18]，后来经过章太炎 [19] 发扬光大，并成为章黄学派汉字研究和教学的核心思想 [20]。

出现定性变化，也就是相变这样的现象，因此从物理学发展起来的临界现象的研究方法（例如序参量、对称破缺、相变点附近的关联函数（Green 函数）分析、重整化群理论、Monte Carlo 方法）自然也就在以上这些学科的相应研究中的到了应用。因此，由于这个一般方法的寻找在系统科学中处于非常中心的地位，我们特意把它提出来作为系统科学的研究目标。

系统科学的还原论和整体论

很多传统学科的分析都是沿着不断深入不断细分的还原论的思想来开展的。例如我们如果尝到了某个东西的味道，就自然会去问，是这个东西里面的什么物质（分子）和我们身体的什么部分的结合产生了这个味道，为什么是这个味道，以及这个分子里面的什么部分（离子、功能团）还是这个分子的整体决定了这样的味道，这个离子或者功能团如何和其他的部分结合形成新的分子是否还有这个味道，如果这个味道还有的话到底是这个离子或者功能团的什么属性（这个问题牵涉到这个例子或者功能团的内部结构）决定了这个味道，等等等等这样的问题。你看我们从一个可能包含很多种物质的东西，一路追问到了离子或者功能团的子结构。如果我们接着问为什么会形成这样的离子或者功能团，实际上，我们就到了原子和核外电子层次的问题。我们甚至还可以深入到比原子更小的层次上去。另外，沿着身体我们也可以类似的一步一步深入，例如，身体的哪一个部分反应出来了味觉，反应的机制是什么，产生的信号如何通过神经回路传播到我们的处理中心，并且把这个信号解释成为味道的，等等。这样一个分析思路是很自然的，也是非常成功的。但是，物理学以及其他科学发展到一定程度之后，发现：第一、微观机制不同的系统可以用类似的分析方法来研究，并且这些系统在某些行为上展现出来相似性；第二、很多时候，从微观上完全清楚的个体，由于个体之间的相互作用的存在，得到这样的个体所构成的整体的行为不是一个简单的问题，如果个体的数量比较多的话。于是，整体行为有相似性有涌现性——不同的微观机制导致类似的行为和分析方法，以及从微观到整体是一个非平庸的问题，这两点，就成了整体论的核心思想。注意到这个问题之后，还原论和整体论就应该是两个相辅相成的思想，一个问题的两个方面。

系统科学就是在突破边界的学科交叉融合越来越普遍，面对的有多个具有相互作用的个体构成的系统的行为的问题和分析方法上可能有共性，整体论和还原论同样重要，这样一个背景下面提出和发展起来的。但是，系统科学还是一个非常成熟的学科，这意味着概念体系尚未完备，概念之间也还没有达到数学、物理学等领域的紧密相联的程度。不过，系统科学这个领域确实已经形成一些有自身特点的概念、研究方法和研究对象。因此，本书编撰的指导思想是通过具体的理论研究工作以及少量的应用性实例来反映这个学科的概念、方法和对象。后者通常做为对前者的观察、评论和总结来体现，同时也是前者的顺序安排和选择上的隐藏线索。

同时，一个没有非常成熟的学科还决定了在这个学科里，概念与方法还没有完全压倒思想和思辨。在本书中，我们尽量把思想思辨与概念方法区分开来，重点放在后者。尽管思想和思辨是很重要的，但是我们采取的方式是：只有当思想和思辨对于理解概念和方法有非常大的好处的时候，我们介绍一下思想和思辨。系统科学的基本的思想源流有几个方面，在合适的地方在具体的例子当中，我们会做进一步的阐述：系统的演化与结构的产生（与经典热力学图景的矛盾）、整体运动与激发模式、临界行为与普适性、网络科学与一般的相互作用。我们会尽量把思想和思辨层次的内容与具体的例子结合，最好能够通过计算体现出来。所有的这些思想有一个共同点就是探讨复杂现象背后的机制，这样的机制有可能是简单的，同时把各种研究方法系统化，形成相互协调的理论体系。借用Anderson[21] 和Kadanoff[22] 的两句话来表达就是：More is different（多了就不一样），more is the same（多了其实一样）。多个个体通过相互作用形成整体运动的复杂的模式和行为，这样的整体运动甚至有可能独立于原始的系统，同时系统科学的研究方法追求用一般的普适的分析方法来研究各种多个个体相互作用的系统。对于对思想和思辨的兴趣大过概念、方法和计算的读者，可能更加适合阅读本书的前半部分——那里，采用了更简单的例子忽略了很多有意义的细节，尽管我们强烈推荐这样的读者也熟悉一下在后半部分里面的具体的例子的分析计算。在具体的例子之中，我们可以很容易地理解系统性思考的角度、整体性思考的角度是什么，当离开具体的例子的时候，我们就很难做一般的讨论。因此，我们在这里再一次强调，系统科学的基本思想的理解和学习不能离开具体的研究工作的例子。这样一门学科的探索者们必须与街头卖

药的区别开来。完全兜售思想和思辨就会沦为伪科学，或者至少被严肃的科学家鄙视的学科。

另外，在这里我们希望对系统科学与系统工程做一个区分。系统科学主要是基础性的科学研究，同时当然也做一些应用性研究，系统工程则是利用来自于数学的、物理学的、系统科学的概念与方法解决实际工程与管理领域的问题，是应用性的研究甚至直接就是应用。控制论、运筹学等属于系统工程的基础性学科，但是却属于系统科学的应用性学科，或者说应用数学学科。当然，这样的应用性学科本身也存在着基础研究的问题，而这部分问题实际上可以看做系统科学的范畴。但是，由于考虑到系统工程的书籍和体系已经比较多，并且学科基本问题已经差不多解决，大部分是应用性研究或者应用，就不在纳入到本书的框架里面了。

系统科学和数学、物理的关系

为了讨论系统科学和数学的关系，我们先来讨论科学和数学的关系。为了讨论科学和数学的关系，我们用物理这个科学的重要代表当例子来讨论。那么，物理和数学到底什么关系呢？

首先，物理的概念和定律的表现形式肯定是数学。例如位置这个物理概念是三维欧氏空间的矢量，如果加上时间，则是四维空间的点。不过这个时候，按照物理现象的表现以后背后的物理定律可以确定实际上是四维度量空间的点，可以存在一般的度规——也就是空间距离不一定符合欧氏空间的平方和再开方的形式，而是可以更加一般，例如 Minkowski 空间的“空间部分取平方和然后减去时间部分的平方再开方”的形式，以及更加一般的弯曲时空的形式。例如，运动状态的改变由受力决定这个物理定律——Newton 运动定律运动定律，就可以表现为 $\vec{F} = m\ddot{\vec{r}}$ 。

于是，接着，把具体问题转化成物理问题之后，用上物理定律，就变成了数学问题的求解，因此也是数学。甚至，我们说这成了应用数学或者计算机科学的问题。

其次，物理学的思维过程中，有很大一部分是逻辑演绎，这也是数学。例如，从方程的某个形式推导出来另一个等价的形式——Newton 方程和Lagrangian 方程、Hamiltonian 方程的相互推导就是这样，热力学和统

计物理学不同势函数下基本热力学量和相应的方程的推导。

那，物理学理论的研究结果是数学、问题的求解是数学、一大重要思维过程是数学，那么，哪里是物理呢？是不是其实物理都是数学呢？其实，有很少一部分的数学家和物理学家，就是这样看的。但是，真的不是的。物理学很数学，但不是数学，就算理论物理学也不是数学。为什么这样说呢？

第一、物理学是科学。科学就需要把理论模型的计算结果和实际观测相比较，能够通过这个比较的才是合理的能够留下来的理论模型。因此，科学和数学最大的不同是正确与否的标准的不同：科学需要和实际观测相比较，数学只需要理论体系本身的内部逻辑没有矛盾。当然，有意思的事情是，就算这样，很多时候数学家从逻辑思辨提出来的概念，会在物理的实际系统上发现对应的应用。这个有可能是巧合，也有可能是从根本上说，数学家在研究数学的时候还是受到数学家的生活经验的启发的，也因此隐含了实际世界的元素在数学里面。

第二、当物理学决定用什么样的数学结构来描述实际对象的时候，物理学的典型思维方式，是起到很大的作用的。当然，这个时候最基本的思维方式是数学和科学通用的批判性思维和系联性思考。但是，除此之外，物理学还强调分析和综合的结合，或者说还原论和整体论的结合。也就是前面提到的把研究对象不断地细分下去直到完全相同的结构，以及，把这些相同的结构按照不同的方式组合起来重新得到每一个层次的具体系统的梦想。在物理学里面，这个梦想甚至有一个名字——“大统一理论”：所有的基本结构和这些基本结构之间的相互作用都完全一样，世界的丰富多彩完全就是不同的组合方式决定的。当然，物理学还有别的典型思维方式和典型分析方法。再举一个例子：最小作用量原理——物理学把一个系统表达成这个系统的元素和相互作用构成的一个作用量，然后通过让作用量取极值或者采用作用量的复指数函数形式的振幅叠加，可以得到所有的经典和量子系统的力学理论。这样一个分析方法本身也不是数学，尽管一旦有了作用量之后推导出来理论的那个过程体现为数学。

第三、物理学还有一个特殊之处：它是有关具体领域的系统的知识的学科，同时，也是研究方法的学科。前者包含“热学”、“电学和磁学”、“声学”、“光学”、“电动力学”、“相对论”，后者包含“统计力学”。“经典力学”和“量子力学”处在两者之间，可以看做属于具体系统的知识的层面，也

可以看做是研究方法的层面。尤其是“统计力学”，它没有特定的研究对象，传统上只要是多粒子系统通过物理的力，甚至假想的力，联系起来的系统，当我们关心从粒子的个体行为到粒子的整体宏观表现的问题的时候，都是统计力学发挥威力的时候。其中的相变等概念甚至在社会经济系统中都具有一定的描述能力。这些具体系统的知识是不在数学的范畴之内的，尽管也往往体现为数学的形式。这些具有实际问题背景的一般的研究方法也是不在数学的范畴之内的。

有了这个物理和数学的关系的铺垫，这个时候，我们来看看系统科学和数学的关系。

首先，系统科学的研究对象不在传统学科的某个领域内，因此，领域内知识就不再是系统科学的核心内涵。当然，具有系统特点（跨传统学科、多个体、相互作用、从直接到间接联系、关心整体性问题、整体行为可能和个体行为不完全一样——也就是涌现性）的系统是系统科学的研究对象。是不是这样的系统也会存在一般的知识呢？现在还不知道，需要等到将来学科更加成熟的时候再来总结。但是，至少，现在我们有这样的系统的典型思维方式和典型分析方法，而且这个世界到处都是这样的系统——不能很好地放到某一个传统学科的之内来解决的，或者可以用其他学科的思维方式和分析方法来解决得更好的问题。因此，我们需要有系统科学。而且，这样的典型思维方式和典型分析方法不是数学，尽管在任何一个具体系统上，这样的方式和方法得到的结果——问题的解答和理论模型的表现形式，可能还是数学，就像物理学一样。从这个意义上说，运筹学、控制论、信息论、非线性动力学、随机微分方程这些都不是系统科学，而是系统科学在某些具体问题上的研究得到的结果的表现形式。在建立这些专门的理论之前，从具体问题中提炼出来这些数学的那个过程，大概可以看做是系统科学，如果这样的具体系统确实具有前面提到的系统性的特征的话。或者，甚至在这些理论建立之后，如果仍然有这样的具有系统性的具体系统的问题，需要发展这些理论来解决的话，也可以算是系统科学。那么，我们现在来问，运筹学、控制论、信息论、非线性动力学、随机微分方程，是处在建立之前的那个阶段呢，还是建立之后，但是需要从具有系统性的具体系统中发展理论的阶段呢？后者有一点点，但是，也仅仅是一点点。绝大多数时候，仅仅是把成形的这些理论用在具体系统上而已。那么，这个时候，就称

为“应用数学”更加合适，而不是系统科学。

等等，这样我就把很多系统科学教材的核心部分运筹学、控制论、信息论、非线性动力学、随机微分方程扔掉了，仅仅当做历史研究提到一下，那，我准备讲什么？先把这个问题留下来。让我们先回到系统科学和数学的关系。

既然扔掉了系统科学的具体学科知识的内涵，那么，剩下的就只能是研究方法的层面的共性规律了。这就好像是把物理学的声光电磁热相对论都扔掉，留下来统计力学和一部分的经典力学和量子力学。当然，这个时候，由于有系统科学的典型思维方式、典型分析方法撑着，尽管我们还不是很明确这些东西是什么，但是，肯定不全是数学。就好像统计物理学也不完全是数学一样。决定什么样的具体系统用什么样的数学结构来描述，永远是不在数学的范畴之内的，尽管再一次强调，很可能描述完了就成了数学方程和数学计算。

也就是说，在系统科学和数学的关系上，前面提到的物理学的三条，除了第三条中的具体领域的知识之外，系统科学都保留了物理学也就是科学的特征。因此，系统科学也不用害怕就成了数学，只要坚持面对实际系统，从具体系统中来到具体系统中去，那么，系统科学就永远是科学而不是数学。

系统科学自己的典型分析方法

现在，我们回到前面留下来的问题，把运筹学、控制论、信息论、非线性动力学、随机微分方程仅仅当做历史和案例而不是核心理论之后，系统科学讲什么？

当然，第一部分，系统科学的研究对象具有系统性，系统科学具有一些有系统性的典型思维方式（没有特定领域限制，包含大量的个体，个体之间存在相互作用，研究问题具有整体性，从直接到间接联系的分析计算方法，网络的描述，甚至将来在系统的行为、系统的组织方式演化等方面可能的共性），也就是，这些肯定是系统科学的核心。但是，这部分，尽管我们会采用以具体研究案例为基础的方式来呈现，还是偏思想偏哲学。那么，有没有更加具体的，在系统科学的典型分析方法层面上的核心内涵呢？因此，

除了前面这个研究对象的系统性和典型思维方式的系统性是本书的核心内涵之外，我还尝试着提炼了其他的一些研究方法层面的核心内涵。例如，系统图示法和概念地图、用于一般系统的相变和临界现象、网络分析、广义投入产出分析等。当然，我不认为这些是最具有代表性的，更加不是穷尽的。但是，我希望把这些东西抛出来之后，后续有更多的人来做类似的提炼和总结。

系统图示法和概念地图大概来说就是把一个系统内部的元素和元素之间关系搞清楚并且用图形的形式呈现出来。很多时候，这样的一个对系统的整理和呈现，就能够告诉我们很多关于这个系统的信息，解决很多关于这个系统的问题，并且成为进一步分析计算的基础。用于一般系统的相变和临界现象就是把平均场理论、关联函数、相变和临界点等概念和分析方法提炼出来，尽量能够适用更多的具体系统，例如社会经济系统。网络分析和广义投入产出分析是实现从直接到间接的分析计算的工具，也是描述复杂系统的基本框架。

系统科学肯定还有其他的典型分析方法，甚至典型分析结果，期待更多研究者的总结。这部分是抛砖的作用，引来更多的砖，或者玉，都算是成功。

本教材的目的和定位

作为教材，尤其是旨在促进一个学科的发展的教材，应该尽可能的来回答这个领域独立成为一个学科的理由是什么，研究对象的共同特点是什么，最基本的概念、方法与核心公式是什么。这也是本书的任务。但是，我们没有把握来回答好这个问题。在这里我们仅仅来抛一块砖。通过本书的例子，多大程度上我们能够回答这个问题，多大程度上我们能够按照这个思路来回答这个问题，只能留待本书使用者的检验了。

由于前面提到的本学科基本概念与方法之间的联系以及方法和思想之间的联系的紧密和一致性程度还不高，我们又希望通过本书能够给出一个比较清晰的系统科学的图像，在本书中我们尝试使用了一个比较新的学习技术：概念地图。概念地图就是把概念与概念之间的连接画成一张图，用来整理制作者的思路，指引学习者对概念的理解。

本书的逻辑体系、内容选取、呈现方式都仅仅是一个尝试，而且是与通常的教材不那么一样的一个尝试。我们希望本书具体内容发挥一定作用的同时，也希望它尽早地被逻辑体系和具体内容都更好的书取代。这样才能表明本学科的成熟度的到了提高，学科取得了发展。另一方面，我们也希望本书的编撰原则和特点，它们是内容来自于研究论文、大量的来自于研究课题的习题、学习方法方面的一定的考虑、技术和概念并重压缩对思想的讨论，得到延续。因此，本书编写过程中尽量遵循如下的原则，尽管不一定就做到了。

本书的特点或者说编写原则：

1. 来自于研究论文的例子，每一个例子都有一个目的传达一个信息
2. 围绕学科大图景展开
3. 简约内容，仅保留最核心的概念以及掌握这些概念必须的基础概念与分析计算技术
4. 例子、概念、逻辑框架、动机、计算分析技术，这几个方面先分开再结合的处理方式
5. 概念地图学习方法和思维方式——系联性思考和批判性思维——的应用：通过概念之间的联系来学习概念，以及概念背后的动机
6. 通过例子来讲解基本概念，逻辑框架和举例并重
7. 系统理论的概念与方法和数学物理基础先分开再结合的处理方式
8. 每一章的前言部分交代这一章的主要思想、主要学习任务、核心概念和技术、推荐阅读材料
9. 包含一定量的例题、习题和实际问题，训练读者从实际问题提炼抽象概念模型的能力

本书也是我们在建设的“教的更少，学得更多（Teach Less, Learn More）”的以概念地图为基础的理解型学习系统的一个例子。在各个章节具体学科的内容选择上，我们企图选择最核心的和最基础的。我们希望做到学习这

些基础与核心的东西之后，读者可以独立地进一步学习，同时看到这个学科的现状和未来，以及应用，看到这个学科的大图景——典型对象、问题、思维方式、分析方法、和世界以及其他学科的关系。为了完成这个目的，实际上，每一门课程，我们都准备了这门课程的概念地图，然后综合考虑这些个课程的概念地图组合而成的大的概念地图来决定内容的取舍。取舍的原则是，每一门课程我们都会非常明确地写下来思想上、概念上、分析方法上的目标，然后按照这个目标来选择尽可能少的能够促进学生理解这个学科是什么的具体例子来阐述，同时选择例子的时候考虑培养和激发学生对这个学科的情感的因素。我们当然希望我们的选择本身是合理的，但是我们更希望其他人看得见我们利用概念地图来依照明确的学习目标选择这些核心和基础内容的方法的合理性，并加以发展和应用。对于这些我们确定为课程学习目标的东西，我们还会进一步追问为什么，也就是“教什么，为什么；学什么，为什么”的问题。然后才是考虑“怎么教，怎么学”的问题。更多的关于“教的更少，学得更多（Teach Less, Learn More）”的讨论请参阅吴金闪的《教的更少，学得更多》[23]。

另一方面，我们也看到，这样的比较简约的集中在核心内容上的学习方式对于想真正掌握这些学科的学生来说，是不够的。一定程度上的重复劳动对于掌握内容来说是必须的。我们提供的练习题和例题的数量是远远不够的。如果读者将进一步掌握好这些内容，我们建议从其他教材中选择一定数量的习题来完成。如果有机会，我也会将来给每一个这样的具体学科出一本相同风格（简约和注重核心，保证理解核心部分的最低要求的基础，尽量让学习者明白每一个概念每一个定理的动机，注重概念与概念之间的联系，体现概念地图的学习方法，包含导论、习题、例题而且导论、习题和例题有一大部分直接来自于研究论文），但是更详细的教材：包含的核心内容稍微多一点点，解释和计算的细节增加一点点，包含的习题的数量多很多很多。

阅读本书的读者，数学方面最好有微积分、线性代数、概率论的基础，了解一点近世代数会很有帮助；物理学方面最好有力学（至少高中阶段的Newton 力学）的基础，了解统计物理学、量子力学也会提高对内容的理解；计算机方面最好有一门语言的编程基础，如果有 Linux 使用基础和科学计算的初步了解也会有帮助；系统科学方面最好什么都不会，尤其是

不能看过很多系统科学的哲学书籍。在实际上课过程中，由于有反馈的存在，这些必要基础的问题都可以解决：大部分内容是自足的，如果学生的理解力和悟性足够好，都可以明白。少部分内容必要的时候可以上课补充或者课后自己阅读相关材料。但是，由于本书对思考问题的深入程度的要求非常高，在此，我们还是想指出来，这本书不是写给所有人看的，很多人不适合看这本书，很多人第一遍看这本书的话，我们保证是看不太懂的。但是，我们相信，就算你不是最合适的读者，就算你很多地方没有看懂，你看了这本书之后也会有很大的收获，尤其是如果你能够坚持多看上几遍。例如，每一章的前言都是这一章的基本思想的总结，对于初次学习这一章内容的读者，这些总结都是天书，但是如果你是第二遍以及以上的读者，你可能就会有更好的体会。如果你看了本书之后，有体会、有感想、有意见、有建议，我们都希望你能够到这本书的网站⁶以及“系统科学导引 MOOC 课程⁷”来参加讨论。同时，我们也尽我们的能力做到这本书的电子版本都会在她自己的网站⁸上免费提供。

本书有一个整体内容的概念地图，还有概念地图的解说和阅读指引。我们推荐读者通过对比概念地图和正文的内容来熟悉概念地图，熟悉之后，自己来制作章节的概念地图，这样会有更好的学习效果。如果需要学习概念地图和理解型学习，可以参考吴金闪的《教的更少，学得更多》[23]。

最后，希望这个非同一般的前言确实能够帮助你了解系统科学并决定是否继续阅读本书。

⁶<http://www.systemsci.org/jinshanw/books>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

⁷例如中国大学 MOOC 平台上的《系统科学导引》。

⁸<http://www.systemsci.org/jinshanw/books>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

第一部分

系统科学概论

概论部分的主要任务就是帮助读者认识什么是系统科学，也就是具有系统特点的科学。为了搞清楚什么是系统科学，我们需要了解什么是科学，什么是“具有系统特点的”。这些都需要既结合系统科学的具体研究实例，尤其是学科发展过程中重要的那些实例，又有一定的理论框架性思考，才能给读者带来更深刻的体会。同时，有的时候，一部分细节还要留待将来后续的学习来补充。因此，这一部分会是一个挑战，对作者和读者都是。但是，我保证，这是一个值得尝试的挑战。

同时，这一部分也会给第二部分中要学习的数学物理做一个动机和学习方向甚至学习方法上的铺垫。第三部分系统科学的基本理论，在读者大概理解了第一部分之后，看起来也会更加有方向感。

顺便，学习的时候，有一个方向感，也就是大概知道每一部分的学习在整个学习中的地位，将来和哪些东西发生联系甚至提供基础，是很重要和很有帮助的一件事情。这就好像一个拿着地图有方向感的人走迷宫（甚至都不需要迷宫，大城市、胡同区域都行）和一个没有地图没有方向感的人走迷宫的区别一样。

第一章 引言：系统科学与科学

这一章我们企图给系统科学做一个定位，讨论其典型研究对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法，和世界以及其他学科的关系。一个学科的这五个方面合起来我称为这个学科的“学科大图景”。然后，我们会用整本书的例子来让大家进一步体会我们对这个学科的这样一个定位。

引言中的很多部分都会在后面的章节中展开阐述，其中我们也会提到很多的应用性研究的例子。实际上，所有的应用性研究的例子，我们都可以把它们放到导言里面来，起到开阔大家眼界的作用。有些例子我们选择放到具体章节中，有可能是它们在技术细节和细节概念上要求更多，不太适宜放在读者学习各个章节的具体概念和技术之前来做一般的讨论。这个基本上就是导言部分的例子和其它章节内部的例子的唯一的区别。所以，从这个意义上说，引言部分就是本书的主题思想所在，本书的核心就是引言部分。当然，不理解后续章节，有可能很难真正理解引言部分。我们推荐本书的读者在浏览完本书之后，来决定怎么看；我们也鼓励看完整本书的读者回过头来，再来看一遍引言部分；读者们也可以把本书的引言部分当作系统科学的普及读物，仅仅阅读本章，然后在后续章节中选择少量合适的例子做进一步的了解。

另外，在前言中我已经提到，整本书是具有内部自相似性的：本书的后面的部分可以看做是引言的展开，引言可以看作是前言的展开，每一个例子的阐述方式也是学科大图景的一个侧面的展示。我希望读者可以多做这些有联系的思考，甚至通过多次反复来欣赏这个内部自相似性。

1.1 抛一块砖：系统科学的思想、目标和定位

任何一门学科，要成熟就必须有自己的研究对象，自己这个学科的目的，核心的概念和分析方法。我们已经提到系统科学还没有成熟到能够把这些内容成体系地整理出来。在这里，我们尝试对这些问题给一个答案，不求精确，不求永恒，但求对这个学科的成熟有一定促进作用。我们认为所谓系统科学，就是把来自于属于具体科学领域，例如物理学、化学、生物学、信息科学、计算机科学等等，的思想和方法抽象和提炼出来——通常这个抽象和提炼的结果是一个数学结构，然后把这些思想和方法应用于更加广泛的其他领域的问题的研究。也就是说，系统科学是一个来自于具体系统，同时以具体系统为最终的研究对象，但是其基本理论又不在具体系统的层次上的科学。这个定位使得这个学科非常像数学。但是，两者不是完全一样：数学，尽管本质上也来自于现实世界，只要逻辑上自洽是可以不接受实践的检验的¹；系统科学是科学，而科学最重要的特征是来源于现实世界，并接受实践的检验。因此，哲学的以及完全从心智来构造的系统科学的理论是不存在的。当然，倒过来，系统科学的哲学思考，当系统科学本身已经比较明确的时候，是可以存在的。

因此，我们把什么是系统科学以及系统科学的基本任务和研究对象、目标总结为下面的列表。

科学性：批判性思维，用数学结构描述现实世界，从现实世界提炼数学结构，并通过实验和实践来检验两者的关系

系统性：系联性思考，融合和跨越学科领域来解决问题、发展科学，促进思维方式、分析方法、概念甚至问题的迁移和创新

典型研究对象：包含多个个体、个体之间存在相互作用相互联系、没有具体领域的限制

典型研究问题：从整体的层面来关心系统的行为

典型思维方式：整体视角和还原视角的融合——从系统内部元素以及元素之间的关系开始，从孤立到有联系，从直接联系到间接联

¹关于数学与现实世界的关系，可以阅读Gowers的《Mathematics: A Very Short Introduction》[24]

系，从个体到整体的角度来研究问题

典型分析方法：科学研究方法（观察、猜想、抽象化模型化、数学化、实验和实践检验），网络科学以及其他对相互作用的计算分析方法（系统图示法、广义投入产出分析），涌现与相变（集体行为、临界性和自组织临界、动力学系统的相变——定态、分支）

和世界以及其他学科的关系：从具体系统中来，提炼一般概念与方法，到其他具体系统中去，促进对具体问题的理解和解决，促进其他学科的发展

其中“整体视角和还原视角的融合”这一条，在本书中有的时候也称作系统性思考。当然，通用的科学思维：批判性思维、实际系统和理论模型之间的可验证或者至少可证伪但是迄今没有被证伪的这个关系，毫无疑问也是系统科学的核心思维方式。在典型分析方法上，还可以列进去一些更通用的分析，例如统计分析、用随机过程建模、计算机数值计算和数值模拟等等。但是，**正是**由于其通用性一般性，就不再列在这里当做系统科学的特点了。可以看到系统科学天生具有交叉学科性。因此，很多学科的研究者开始找系统科学的研究者合作。这当然是很好的事情。但是，要注意，系统科学的研究者第一具有有限的具体领域的知识，第二只能够研究具有前面提到的系统性特征的系统和只会这样的具有系统性的思维方式和研究方法。

在系统科学的目标，也就是和世界以及其他学科的关系，这一点上，Mobus和Kalton的《Principles of Systems Science (系统科学原理)》[25]一书有比较好的论述。在他们的书里面最简洁的总结是“is about understanding”（就是关于理解的事情）。什么是理解？理解就是不断地追问为什么，而且要冲着系统内部的元素之间的关系去问为什么。这样的为什么通常会自动跨过领域的鸿沟，要求你从对一个元素的理解跑到对另外一个元素的理解，要求你从一个子系统看到另外一个子系统，还能够不迷失在大量的子系统的树木之中，还看到森林，看到对你一开始关心的整体问题的理解的促进。见树木又见森林，这是对系统科学目标是“促进理解”的另一个比较好的表述。在Mobus和Kalton的《Principles of Systems Science (系统科学原理)》[25]，Senge的《The Fifth Discipline: The Art & Practice of The Learning Organization》[26]，Sherwood的《Seeing the forest for the trees : a manager's guide to applying systems thinking》[27]，Boardman和Sauser的

《Systemic Thinking: Building Maps for Worlds of Systems》[28] 都有类似的表述。甚至它就是Sherwood书 [27] 的标题。我自己还特别喜欢下面这句话：系统科学洞彻联系 (Systems Science: See Through Connections)。我把它当做了我邮件的签名。它表示了下面三重意思：通过联系来看清楚系统的元素和整体，通过了解系统看清楚这个系统和其他系统的联系，通过把世界看做联系来建立一个理想模型从而洞彻这个世界（的某个方面）。

尽管有了前面我提到的这基本讲什么是系统科学的书，还有本书，但是，系统科学还远远不是一个成熟的学科。因此，我想再强调一遍，本书对什么是系统科学的总结仅仅是一个尝试，一块引玉的砖。实际上，这就是本书对系统科学的认识。在后面的章节中，我们将用大量的例子来促进大家理解对系统科学的这个认识。

1.2 整体论和还原论、相互作用

有的关于系统科学的书籍，大部分是科普书和哲学书，非常强调系统科学“整体大于部分之和”，“ $1 + 1 > 2$ ”的特点，进而批判还原论，高度赞扬整体论。有的甚至认为整体论才是科学的未来。我要说的是，没有还原的整体是空的假的整体，还原和整体思维两者必须结合。这也就是通常所说的分析与综合的结合。

我举一个简单的例子，来说明什么是还原论。例如你电脑坏了，你怎么办？最简单的办法是换一台，主机和显示器一起换。采取这个方案的人大概不用懂得电脑的知识。如果想节省一点点成本，科学和还原论可以帮你忙。大概来说，稍微懂得一点点科学思考方式的话，你就可以识别出来那部分坏了：找到另一台能用的大概型号相同的电脑（假设我们找得到这样的电脑。要是找不到，以下的思想还是适用的就是需要你懂一点电脑模块型号的知识），按照模块，替换一下。例如，更换显示器，看看是不是可以用了。以下假设一个毛病，多个毛病同时出现的情形先不讨论。如果还是不能用，表现一样，就按照模块，替换下一个，例如内存条。如果还不行，复杂一点，显卡、硬盘、主板等等。也就是把能够拆下来模块都试试。知道哪里出问题了，就去更换哪一个模块。当然，如果你懂得电脑，其实，能够从症状直接了解大概哪一个模块的毛病。但是，只要懂得还原论——去考查一个

系统的下一个层次的模块（或者叫做单元，子系统）——和基本的科学思维——这里也就是“换一个好的来对比”的逻辑和“做实验”的方法，那么你就可以用更低的成本来修好的电脑。实际上，我们还可以把这个按照模块来做替换实验的方法用到下一个层次：例如，如果问题出在主板身上（例如，替换型号一致的主板之后，电脑可以运行了），则我们可以直接替换整个主板，或者再来考虑主板上的显卡、声卡、网卡还是主板本身，甚至更进一步，考虑主板本身的电容的问题还是 CMOS 电池的问题，而不需要更换整个主板。从这个例子，你已经看见，还原论的思想，是一个多么自然的解决问题、认识世界的方式。不遵循还原论的科学是不存在的。从这个例子，我们还看见了，可以在不同的层次，逐层递进的方式，来运用还原论。

既然有逐层递进的问题，那么，自然也就有了整体论的问题。实际上，每一个层次的功能模块，都是一个“整体”——我们可以在一定程度忽略这个模块的内部细节而仅仅关注这个层次的整体提供的功能这个整体如何跟其他的子系统联系起来。没有整体的科学，那将是人类完全不可能理解的科学。很多时候，我们需要把一个系统看作一个单元，而不需要考虑其下层细节。这样当考虑这个系统的上层结构的时候，更加方便。因此，还原论和整体论完全没有冲突，完全是相辅相成的。经常说物理学是还原论的科学，为了认识世界，竟然要去认识比原子还小，比原子核还小的东西。可是，你没有注意到的是，物理学关心的这样的问题，实际上和宇宙的起源、碎了的鸡蛋不会自己恢复成好的鸡蛋、光为什么会有不同的颜色甚至形成激光——一种光的协调模式，这样的问题是息息相关的。物理学一直知道，了解粒子物理，仅仅是一个步骤，为了回答物态物性、宇宙的过去现在和未来等问题，总要考虑把各个基本单元重新合起来会怎样，这样的问题的。因此，整体论提供的是这样一个视角：不要认为不断地拆分就能够解决问题，有的时候从已经了解的各个部分再一次合起来不是一件平庸的事情。例如，将来我们会看到，有的独特的在个体的层次不会出现的现象会在整体的层次涌现出来，而且一般来说这样的“再次合起来”的分析计算技术不是那么简单。

我记得小的时候，修理自行车的师傅，给补胎、修飞轮里面的钢珠。现在的师傅经常是换胎、换飞轮。当然，根本原因是经济发展了，导致人工成本提高。不过，我们也注意到，实际上就是以前的师傅和现在的师傅都

懂得还原论和整体论——你看没让你直接换自行车，只不过以前的师傅做到了拆分第二层——虽然他不会一直拆分下去给你用原子物理方法来修一修钢珠然后再放回去，而现在的师傅就停留在只拆分一层。造成这个差别不是说还原层次多少的好坏，而是社会和科学发展阶段等外界条件的不同。那为什么师傅也是懂得整体论的呢？他明白当把各个组建中心组合起来的时候，整体上起到的是另一个各个部分自己并不具有的功能，而且有可能某些结合的部位结构的方式需要得到特殊的照顾，才能使得整体功能更好。因此，修车师傅们是懂得还原论、整体论，懂得相互作用（结合）的重要性的人。

这个问题的另一个侧面，就是了解了各个下一个层次的单元之后，并不表示了解了整体。例如，一堆没有组装成为电脑和自行车的元件，不等于电脑和自行车。这些元件，通过相互作用——在这里这个“相互作用”就是什么地方与什么元件采用什么方式结合——结合起来之后实际上各个部分之间一般还会存在力的相互作用甚至物质或者信息的交流，整合起来之后，形成了其各个部分都不具有的整体的功能。这个就是整体大于部分之和。学习过物理学的人都知道，如果一个系统里面有两个以上的单元，而且这些单元存在相互作用，那么，其能量就绝对不是两者之和，还存在着一个相互作用项。这个就是“整体大于部分之和”的含义。非常的平庸。只不过，在系统科学里面，除了能量，我们还关心其它的东西，例如功能。这个更加广义的关注点，使得整体大于部分之和，显得更加有意义一些。不过，也是仅此而已，整体不等于部分之和在这个意义上说是一件很自然的事情——只要各个部分之间不独立有相互作用。

一句话：还原论是一个自然的认识系统的方式。认知系统的各个层次的单元的同时，需要注意这些单元依赖相互作用合成一个上一个层次的单元的整体性问题。

在上面的讨论中，我们潜藏着另一个主题——“相互作用”。如果一个电脑的各个元器件之间没有通过具体明确独特的相互作用合在一起，仅仅是简单地“堆”在一起，那么，它们不构成电脑（因此，组装电脑在上个世纪 90 年代还是一个技术活，能赚钱养家的）。同样地，这些元器件也是由它们的元器件通过具体明确独特的相互作用合在一起而得到的。甚至，你继续沿着这个思路走下去，就会发现，如果所有的基本粒子都一样的话（现在

的物理学离这个“都一样”的假设还有距离，但是不远了，至少日常所见的材料，其属性基本上就是电子、质子、中子、光子这几样东西决定的），物质之间的不同也就是组合方式——也就是相互作用——的不同的结果。于是，你发现，相互作用不仅仅决定了单元构成怎样的系统，决定了子系统（也就是系统的单元）的单元构成怎样的子系统，甚至决定了单元本身。这就如同说，一个人到底是什么样的人（尽管你会认为是由这个人的自身特质决定的）这个问题，可以更好地用考察这个人与其他人的联系来回答。其它对象可以来如何操作我这个对象，决定了我作为对象的性质。这一点，在面向对象的编程的思想里面，体现的尤其深刻。因此，相互作用，如果称从物理学的四大相互作用推广来说的更加一般的事物之间的联系为相互作用的话，是所有的非平庸的科学的主题。

如果构成系统的单元之间没有相互作用，那会怎样呢？例如，我们来考虑那个著名的伽尔顿（Galton）板：从上方中间位置一个小球开始下落，遇到阻挡的小针，随机决定往左还是往右偏，然后到下方继续遇到阻挡的小针，继续随机选择往左还是往右。最终小球到达的位置 可以表达成为 $X^i = \sum_{j=1}^L x_j^i$ 。这里 i 是小球的编号， j 是第几层的编号。所有的小球都需要经过 L 层才会落到下面的格子里面来。然后我们统计每一个格子里面小球的数量，也就是， X^i 的分布函数。根据独立方差有限的随机变量的中心极限定理，我们知道 X^i 肯定符合正态分布。其中，我们仅仅需要确定平均值和方差两个参数。统计学告诉我们对于这样的分布，如果我们想了解均值和方差这两个参数，我们通常需要一个不太大的随机抽样得到的样本就可以了。估计的准确程度和样本大小的关系也可以得到。在这里，每一个小球是独立的，它们之间没有相互作用；两层之间也是相互独立的，往左往右没有相互影响。

我们用计算机程序“制作”了一个破坏这两个独立性的“伽尔顿（Galton）板”，让上下层之间不独立，让小球之间有相互作用——已经在某个格子里面的小球对新来的小球具有吸引或者排斥作用。这里给出了数值模拟的结果。在程序实现上，我们让在 x 的小球往左偏的几率决定于左端和右端那个盒子的目前已经有的小球的数量 n_{L_i} 和 n_{R_i} （在实际计算中，我们还要对每个盒子里面当前的小球按照扔的小球的总数量取一个归一化。小球的总数量非常大的时候，分布函数才会比较光滑。例如这里， $N = 1000000$ 。

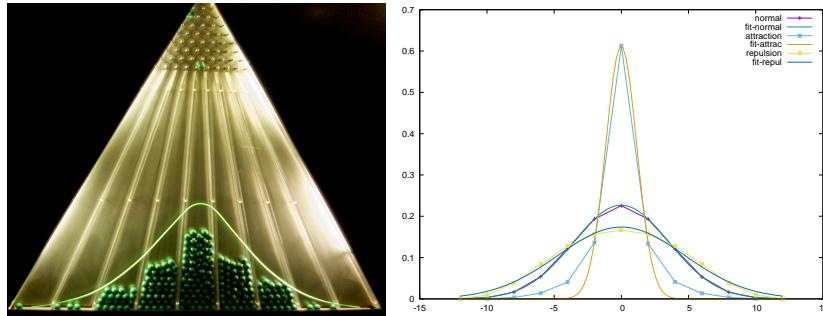


图 1.1: (a) 独立层和独立小球的伽尔顿(Galton)板。这张图来自于 Wikipedia “Bean machine” 词条，由 Antoine Taveneaux 制作。(b) 破坏了独立性的伽尔顿板。其中一条曲线增加了在格子里面的小球对下落的小球的吸引力 (attraction)，一条增加了在格子里面的小球对下落的小球的排斥力 (repulsion)。可以看到三条曲线有区别，并且，吸引力曲线的实际数据和正态分布函数之间的拟合比较差。

模拟中的隔板做了 12 层。于是， $X \in [-12, 12]$ ，取如下的函数形式，

$$q = \frac{e^{\beta n_{L_i}}}{e^{\beta n_{L_i}} + e^{\beta n_{R_i}}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(n_{R_i} - n_{L_i})}} \quad (1.1)$$

在图 1.1 中，参数 β 分别等于 0 (无相互作用)，10 (吸引)，-10 (排斥)。实际上，我们当然也可以把规则制定成左端的所有的小球的数量和右端的所有的小球的数量 $n_{<i}$ 和 $n_{>i}$ 。

我们发现这个时候 X^i 的分布就不再是正态了。可以看到无相互作用、吸引和排斥三条曲线有区别，并且，吸引力曲线的实际数据和正态分布函数之间的拟合比较差。其实，排斥力曲线的实际数据和正态分布函数之间的拟合也比较差，而无相互作用那条曲线的数据点和拟合就非常好。

用这个例子，我们传达这样的一个信息：独立因素（还需要方差有限）合起来作用的效果导致正态分布，从实际样本中了解和估计正态分布也比较简单；可是，如果因素之间存在着相互影响，那么，世界就会丰富多彩很多，通常也更加难以处理。因此，有了相互作用，我们才需要发展物理学、系统科学这样的学科。有的时候，我们也称相互作用为系联，或者联系，来包含更一般的物理的力之外的相互作用。

整体论与还原论在不同层次的交叉混合，关注相互作用，并且正是相

互作用的存在才使得还原的过程和回到整体的过程不平庸，这就是系统科学的思想上的主题。我们后面所有的讨论，本质上，都是这个主题的展开。

这个主题更加强调系统科学的“系统”两个字：系统的层次、子系统和元素之间的关系。系统科学的第二个主题则更加强调“科学”这两个字。上面的思想如何在描述和解决实际问题中发挥作用，就是科学要管的事情。简单地说，科学就是关于现实世界如何运行的一个心智模型，而这个心智模型往往表现为数学模型。

1.3 关于科学和科学方法

既然系统科学首先是科学，那么我们就要了解科学是什么，最主要的特征、思想、方法、技术、概念是什么。科学是运用科学方法得到的来描述和理解、回答和解决现实世界中的问题的心智模型。一套成系统的关于某一类现象的这样的心智模型就被称为科学的一门具体学科。这里有两个关键词：科学方法和心智模型。心智模型指的是你大脑里面关于这个世界这个现象是怎么回事如何运作的描述，一般还要求是可计算可推理的。心智模型必须要能够描述现象，也就是说，这个心智模型得到的结果和实际上发生的系统的行为是相符的²。粗略地来说，通过科学方法得到的与现实世界相符的心智模型就是科学³。那么，什么是科学方法呢？在人类探索对现实世界的问题的解决的过程中，人们形成了一些比较有共识的科学方法和科学思想。关于这个科学方法和科学思想已经有人做了一个比较全面的整理和批判（中性词，critical thinking 的意思）⁴。粗略来说，科学方法就是通过观察和实验对现象的特征做出确定和整理，然后运用**人类思维的逻辑**

²这里有一个科学是否可以验证的问题，见Popper的《The Logic of Scientific Discovery》[9] 和其中的可证伪性的概念。我们暂时不展开讨论

³或者更加宽松地条件下，我们可以认为只要是能够和现实世界相符的目前还没有被证明是错的原则上允许被证明是错的心智模型就是科学，没有必要要求必须是通过科学方法得到的心智模型。

⁴关于这个主题的带有强烈哲学意味的探讨，可以从Popper的《The Logic of Scientific Discovery》[9] 找到。

辑⁵提出关于这个现象发生的原因以及条件等等的猜想，接着运用进一步的实验来检验这些猜想，并在得到验证的猜想的基础上通过逻辑上的推演来构造进一步的理论，然后把进一步的理论再放在观察和实验中检验的这样一个用来回答和解决现实世界的问题的方法。其中包含的观察、实验、猜想、验证、构造理论等等这些步骤，在实际运用中，往往是反复的，没有特定的顺序的。以后我们提到科学方法就是指这个通过观察、实验、猜想、验证、构造理论来回答问题的方式。在整个这个可能往复的过程中，最重要的是遵循人类思维的逻辑——为了保证原则上人人都可以学会和运用这个科学的体系，尽管什么是这样的不变的逻辑体系，这样的逻辑体系的根源是什么，还是一个问题。人们还希望通过这个科学方法得到的问题的答案是客观的真理。至于科学方法得到的答案是不是就是真理的问题，实际上，Popper提出科学知识的本质特征不是通常认为的可以得到验证的真理，而是科学知识的可证伪性：也就是原则上存在被证明是错的可能性的，迄今为止又没有被证明是错的知识。其逻辑是这样的：任何有限多次的验证乌鸦是黑的，都不能从理论上否定白乌鸦的存在，有可能就是一直没看见白乌鸦而已。因此“乌鸦是黑的”，就是科学论断，因为如果有别的颜色的乌鸦，原则上，是可以被看到的，只要看到其他颜色，就可以否定这个命题，只不过迄今为止，还没看到，因此是科学的。按照同样的原则，“上帝是存在的”这个断言不能是科学的。如果它是科学，那么，就应该给出来一个“上帝如果不存在，就会怎样”的断言，然后在现实中检验这个“怎样”是否发生，如果一直没有观察到，那么就可以认为“上帝是存在的”命题为真。可是在这个关于上帝的问题中，“怎样”一直没有人给出来。于是，“上帝是存在的”就成了一个不能用科学的方式来讨论的问题。

除了可检验（实际科学家通常满足于此）或者可证伪（科学哲学，什么是科学这个根本问题的研究者，通常更关注这个）的要求，科学的成系统的理论，也就是学科，还要有普适性：企图用更少的模型来描述更多的现实。例如，电可以解释电闪雷鸣、与头发摩擦后的橡胶棒吸引小纸片使水流弯曲、冬天的黑夜中脱毛衣时候的声音和光点等等等，然而利用雷公电母的理论你就可能需要给脱毛衣的你一个超能力——随时能够召唤小小

⁵ 关于人类思维的逻辑的本质是什么，可以见Popper的《The Logic of Scientific Discovery》[9] 以及数学的逻辑学派，例如Russell和Whiltehead的著作 [29]。

的雷公电母，或者就认为雷公电母只能解释电闪雷鸣，而不能解释脱毛衣——也就是说，你可以不追求一个模型或者理论解释更多的现实。在这样一个企图找到大量的模型的基础或者共性的过程中，有一个叫做系联性思考的思维方式特别重要。系联性思考在这里的体现就是找到模型之间的联系，或者说构成这个模型的概念之间的联系，这样可以建立起来一套基于最少的假设和核心概念的公理化的理论体系。

大致总结一下：以一般性的人类思维的逻辑发展出来的，具有一定普适性和可证伪性的又还没有被证伪（很多时候用更简单的实用主义的可验证性，或者更加通俗的可重复性来代替）的心智模型，就是科学。

按照心智模型是不是“真”，科学可以分为几个层次。第一个层次，科学是对现实的“真”的描述：心智模型怎样现实就是怎样的，而且心智模型给出的结果是可在现实中验证的，可重复的。在科学和现实的关系是这样的世界里面，做科学家，最简单，最有幸福感——你看你提出来或者发展出来的心智模型就是世界本来的模样，而且由于可多次重复可验证，从实用性角度又没有任何问题。无论是对世界的描述和理解的角度，还是实用的角度，科学都是“真”的。例如，物理学家们认为，从高处落下来的小球，真的在做自由落体运动；天体真的在那里转不太圆的圈圈；不管你看不看，月亮都在那里。第二个层次，科学的心智模型可以不真（或者不可理解，但是可以通过运算给出模型的结果。这里所谓可运算，就是运用一般性的人类思维的逻辑能够按照一定的规则进行操作，并得到结果），但是其给出的结果是可多次重复可验证的。这个从实用主义的角度来说，完全没有问题。不过，认为科学就是追求真理的傲慢的科学家们，比如说大部分的物理学家们（包括我），就比较伤心了。例如，当你关心的问题是电子或者光子的时候，你是不是仍然自然地相信：你看或者不看这个电子或者光子，它都在如此运动呢？在社会科学问题中，你的理论你的方程写下来的就是真的是其中的对象——人或者团体——的真实行为甚至思考决策过程的描述呢？

其实按照模型的结果是否可以被重复被验证，我们还可以允许更宽松的科学理论。但是，实际从事科学工作的人，大部分坚持可重复可验证，尽管经济学天文学社会科学等学科的模型由于验证和重复的成本的问题可以稍微松一点。因此，在这里，我们就不讨论是不是把不能验证和重复的模型也当做科学的问题了。总结一下，科学就是以一般性的人类思维的逻辑发

展出来的，具有一定普适性的，可证伪性的又还没有被证伪的，给出来的结果——也就是对现实的行为的描述或者预测——能够跟现实符合的心智模型。其模型的细节可以不真。

在整个定义中，最不明确的部分，就是“一般性的人类思维的逻辑”。狭义来说，就是指可以做数学推导和计算。可是，数学的最底层确实是一般性的人类思维的逻辑吗？关于数学的本质，及其与逻辑的关系，以及是否我们现在理解和接受的逻辑的形式就是一般性的人类思维的逻辑的所有和最终的形式，以及更深入的问题——各不相同的人类的各不相同的思维为什么会具有一般性的逻辑，我们就不讨论了。可以参阅前面提到的Popper[9]、Russell、Whitelock、Gödel等人的著作⁶。但是，至少，在上面的修理电脑和自行车的例子中，很容易理解为什么要做替换和分解，并且为什么通过替换和分解能够找到问题。因此，在实用主义的层次，人类的思维具有这样的一般性，也就是一般性逻辑的存在性不是一个问题（为了使得你的生活更痛苦，我还要问一个问题：这样的一般性难道不是仅仅因为大家都这么做，或者看别人都这么做，学会了，才认为是自然的，而不是对于人类思维来说，本来就是自然的？）。

除了这个替换和分解，还有哪一些是比较一般的科学方法呢？科学家构造和寻找心智模型的一般过程包括观察、实验、猜想、验证、构造理论，而且这些过程是循环往复的。在这里推荐你去看一下Beveridge的 *The Art of Scientific Investigation* (《科学研究的艺术》) [30]。你会发现，这些所谓的科学方法，不过就是人类的思维，人人都可以理解的，一般性的。

除了观察、实验、猜想、验证、构造理论，更大范围上的检验这样的具体的科学方法，科学方法还有一个非常重要的思维的层次的内涵：批判性思维⁷。永远不要相信任何东西，直到你搞清楚为什么你可以相信它。结论是不可信的，就算是看起来通过科学方法获得的结论：如果证据和论证过程你不能理解，那么你就不应该相信它。就算是教科书中的数学定理，在你自己能够证明它们之前，也是不可信的。怀疑一切，明确逻辑和事实的起点，还有得到结论的逻辑过程，是所有的科学的最基本的要求。因此，当你

⁶https://en.wikipedia.org/wiki/Principia_Mathematica, 2019年10月14日访问。

⁷推荐，Descartes的《谈谈方法》[31]，Browne和Keeley的《Asking the right question: A guide to critical thinking》[32]

给其他人呈现你自己的科学研究工作的时候，也需要面对其他人的批判性思考，尽可能完善地呈现你的证据和论证，考虑到可能的逻辑上的漏洞，收集足够有说服力的证据，而且这些证据和论证是通过科学方法获得的。学会怀疑，学会批判，学会问为什么，是每一个科学家首先需要做的事情。批判性思维，也不过就是，一般性的人类思维的一种。

于是，科学就是人类通过一般性的人类思维去构造能够给出与现实相符的（或者是至少可证伪的却一直没有被证伪的）努力和努力的成果——关于某类现象的成系统的成果。所谓成系统的就是内部有联系的一整套概念、模型、分析方法，并且尽可能用最少的假设和概念基础来构建的整套系统。联系到上一小节，系统科学的“系统”的特征：相互作用和还原整体一致论，我们发现，实际上概念、模型、方法之间和之内的联系，实际上也可以看做是“科学”这个系统内部元素之间的相互作用，它们之间的联系。因此，联系在系统科学里面就有了更加重要的地位。

既然系统科学首先是科学，那么科学方法就是我们学习系统科学首先需要学习的东西。有的时候，与系统科学的研究相结合，我们也将科学方法总结成一个过程：提出问题（来自于实际系统的经验），完整地描述问题（数学模型），解决问题（解析或数值计算，借助于其他学科），实践检验，提炼出理论，进一步解决可能是其它学科的问题。实际上，这个过程的任何步骤都可以打乱次序，有反复，不是一个线性的过程。具体的科学研究工作也可以在任何一个步骤上展开，而不一定要完成整个过程。了解了这个科学方法的内涵之后，在本书的例子中，我们会尽量让大家通过具体的研究工作的例子来体会这个科学方法。并且，在这个过程中，注意**批判性思维**，注意最重要的**心智模型**的种类——数学模型的运用，注意一些具有系统科学的思考问题的角度，例如**整体和还原一致论、相互作用（也就是系联性思考）**还有我们在下一节继续介绍的**如何划分系统涌现性**等更多的与系统科学有关的一般的科学思想。

在上一段的关于科学和系统科学的论述里面的所有的黑体的关键词中，除了我们已经讨论过的**整体和还原一致论、相互作用（也就是系联性思考）**，以及不再展开讨论的**批判性思维**，下面我们来稍微讨论一下**心智模型（数学和科学的关系）、如何划分系统和涌现性**，以及力学思想和普适性。同样，我们还是采用通过具体例子来体现思想的方式。可能这些例子来自物

理学的比较多。那是一方面因为物理学仍然是迄今为止最成功的科学，有很多系统科学可以借鉴的地方；另一方面也因为我比较熟悉物理学。

1.4 科学和数学的关系：概念是对现实的抽象，抽象的结果是数学结构

不管是把科学看做一个可重复的描述现实的工具，还是认为科学真的反映了现实如何运作，科学都起到了作为现实世界的心智模型的作用。也就是说，如果给科学家们一个明确的情境，那么通过在头脑里面做演算（实际上可以通过计算机等工具），我们就可以对这个情境下的系统的行为有一个完全的把握。当然，有的时候，这个完全的把握是决定性的；有的时候，这个完全的把握本质上就是概率性的，例如量子力学；有的时候，由于计算分析的精度这个完全的把握是近似的或者看起来具有概率性。于是，科学最重要的特征就是对现实的抽象，而抽象的结果往往是这个问题的最合适、可计算的模型——我们称这样的模型为数学结构。这个抽象——有的时候通俗地说“透过现象看本质”——的过程就是一个研究者最重要的科学的研究能力。在下面的小节里面，我们也选取了一些例子来让大家体会这个抽象的过程。

1.4.1 矢量、位置、词、量子态

第一个例子是矢量作为几个看起来完全不同的对象的数学结构。更多的关于矢量是什么我们后面进一步会学到。这里要求你大概具有大学《力学》课程里面对矢量的理解的水平，当然具有大学数学《线性代数》里面的矢量的理解就更好了。在高中或者大学一年级力学里面我们了解到位置可以通过坐标系来描述，坐标系还需要一个参考系（原点和方向），也够了。我们还了解到位移，也就是两个位置坐标的“差”，是一个矢量：有方向，有大小。我们还了解到矢量可以相加减或者被放大缩小，甚至转动。两个矢量可以计算内积，并且两个单位长度的矢量的内积取决于它们之间的夹角。这个时候内积越大表示两个矢量越相似。总结一下：矢量是能够做数乘、加法、内积这些操作的对象（这些操作要满足一定的性质，具体以后再说）。

了解了矢量的这个性质，那么，自然地，平直的二维（顺便，把地球表面抽象成为一个二维平面这种数学结构是近似的）或者三维空间中的位置和位置的变化——也就是位移——自然就成了矢量了。位移可以讨论大小和方向，前后两个位移可以加起来。这些都和矢量这个抽象数学结构的性质完全符合。于是，我们说位移的数学模型是矢量。同样的道理，我们可以看到速度和加速度的数学模型也是矢量。我们还可以通过速度和位移之间的物理关系 $\vec{v} = \frac{d}{dt}\vec{r}$ 来了解速度是矢量，因为导数计算不过就是矢量的加法和数乘——时间在给定单位的情况下仅仅是一个数或者称为标量，不是一个矢量。顺便，沿着这个思路，我们注意到，如果时间可能不再是单纯的一个数了，例如有一天我们需要把时间能够跟位置合在一起做坐标变换，那位置的数学模型是矢量这一点可能就要改变了——位置和时间合起来的数学模型才是矢量。相对论就是这样。关于这一点，如果有兴趣，可以去看一看《物理学的进化》这本书。矢量作为位移的数学模型非常自然，或者说，有可能矢量的概念就是从那里提炼出来的。下面我们要介绍的两个例子就不是那么直观了。

在自然语言处理这个学科里面，很多时候，我们需要给一句话、一篇文章或者一个词一个数学描述。这个描述就称为表象，而这个过程就被称为表象抽取，或者表象学习。一个简单的做法是这样的：把每一个词都当做独立的单位，给一个记号，当做空间的基矢。这样，一句话或者一篇文章就成了可以用这个基矢来表达的矢量。于是，当两篇文章的相似性这样的问题的时候，我们就可以通过先归一化这两篇文章的矢量然后计算内积来得到。实际上，给文章按照内容分类是一个非常常见的自然语言处理的任务。这样做显然是有道理的，因为我们可以想象相似的词汇构成的文章内容上自然具有相似性。除了计算相似性提示我们可能应该用矢量来描述词和文章之外，我们还希望当我们把文章的一部分和另一部分合起来的时候，其表象也正好就是把之前的两部分的表象用某种方式合起来。也就是说我们需要这个表象的内积和加法。于是，自然地我们想到用矢量。在这里，这个表象显然丢掉了词汇的顺序信息。不过，这个不是我们的重点，我们还丢失了一个重要信息：每一个词其实不是独立的，有的词跟另外一个词可能很相似。也就是说，当做矢量空间基矢的东西可能本身并不相互独立正交，却被当做独立正交了。例如有可能“国王”和“女王”这两个词在含以上是

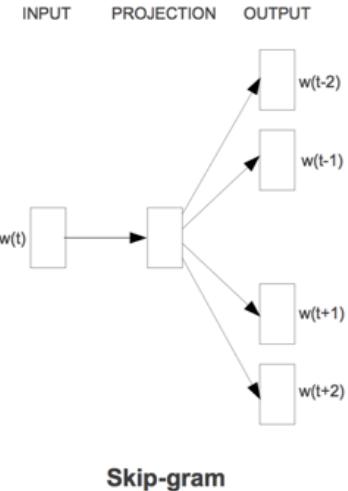


图 1.2: word2vec 算法的 SkipGram 实现的示意图 [33]，希望通过训练每一个词的矢量表示（从例如给每一个词矢量一个随机初始化开始）来实现对于每一个给定的词，其预测得到的其他词的概率满足如下要求：实际文本中出现在这个词周围的词概率大，而其他没有实际出现在这个词周围的词的概率小。其中预测模型的概率则通过计算矢量内积，然后计算指数函数，最后归一化，来得到。

有联系的，甚至我们还有可能可以运用表象来做这样的计算“国王 - 男人 + 女人 = 女王”。于是，Mikolov 等人提出了一种把词转化成向量的技术，称作 word2vec[33, 34]。

word2vec 的目标是把每一个词转化成为一个 V 维向量，并且尽可能地保持词之间的意义联系。当然这个意义联系不是说包含每一个词之间的所有的可能的意义联系，而是基于实际语料的建立在如下假设之上看到的联系：一个词的含义和周围的词的含义有密切的联系。于是，word2vec 构造了一个从目标词开始来计算周围词（例如前后 c 个，于是总共 $2c$ 个周围词）的概率的一个学习机。这个学习机希望通过调整每一个词所对应的向量来保证：给定这个词（所对应的向量 u ）的输入学习机给出来的输出结果和真实语料中的周围的词（所对应的向量 $v_{-c}, \dots, v_{-1}, v_1, \dots, v_c$ ）的概率最大，输出结果和周围词不一样的概率最小。原则上我们还需要一个从输入产生

1.4 科学和数学的关系：概念是对现实的抽象，抽象的结果是数学结构 61

各种输出的概率的机制。word2vec采用了一个简化模型来代替这个模型，

$$P(v) = \frac{e^{v^T u}}{\sum_w e^{w^T u}}. \quad (1.2)$$

然后，通过随着读取文本中的实际词汇——每一个目标词及其周围的词，来冲着使得上面这个概率最大化来更新词矢量的值。关于如何在给定一个最大化的目标函数的条件下更新自变量来寻找最大值的问题，可以参考机器学习的技术，例如线性回归。我们就不讨论这个技术了。通过这个word2vec技术得到的词矢量被证明保留了大量的有意义的词之间的联系 [33]，甚至包含上面从国王到女王的矢量计算。

其实，在把词语和文档转化成为矢量这条道路上，除了word2vec还有另外一个常用的技术，叫做 Latent Semantic Analysis (LSA，翻译为“潜在语义分析”)。在语义检索匹配索引这个领域用的比较多。这个技术的数学结构还是矢量空间，不过这次除了矢量还包含矩阵。具体来说，大概是这样的：首先我们按照语料库里面每一篇文章里面出现了哪些字出现了多少次等信息得到一个共现矩阵——从列来看就是行所代表的这些词一起出现在列所代表的这篇文章中，并且记录它们的频率（或者某种加权过的有效频率，例如 TF-IDF——自己Google或者参考Wikipedia）当做相应行列的矩阵元素，然后对这个矩阵做奇异值展开 (Singular Value Decomposition, SVD)，保留前面几个大的奇异值对应的奇异值向量构成比原始共现矩阵维数小很多的矩阵。然后，这个时候的行矢量或者列矢量就可以用来表示相应的词或者文章。通过这个例子，我们想说明，不仅仅是考虑通过内积来计算相似性的这个理念促使我们考虑使用矢量来描述词，有的时候 SVD 分解这样的降维技术也是我们采用矢量空间作为事物的表象的原因。

从语言对象的表象这个例子，我们看到，由于希望给事物寻找一个可计算的数学模型，这个模型还要能够做加法和内积（相似性），人们尝试了用矢量这个数学结构来描述词，并且找到了一种得到这样的表示的算法。相比于位移矢量，词矢量是一个抽象得多的空间里面的矢量。例如，甚至我们对于最合适的空间维数 V 都没有一个天然的好定义。但是，这样一个思路仍然抓住了词之间的某些本质的有意义的联系，于是，还是能够帮助我们解决问题。类似的技术被发展和应用到了网络上，来描述更一般的个体之间的联系和反映这样的联系的个体的表示。这个技术被称为 node2vec[35]，

并且被用来做网络上顶点的聚类分析，发现具有很好的效果。大概来说就是从网络结构通过某种在网络上行走的机制先来产生一个顺序表达的“文本”，然后把文本当做word2vec的语料来处理。进一步发展这个把网络顶点矢量化的方法，做到更加一般的从网络结构直接来产生矢量表示，来抓住一般网络中的顶点由于有连边的联系造成的矢量关系，是非常重要和有意义的——网络是关系的一种更加自然的表达而不一定是语言，而语言必须是顺序表达的。

关于矢量，由于其非同一般的重要性和普适性，我们还要举下面一个更加抽象的例子：矢量作为量子客体状态的描述。首先，我们来介绍一个量子系统的实验现象——将来正式学习量子力学的时候我们会介绍更多的这样的实验现象：光子过三个偏振片。

偏振片是一个非常有意思的仪器：其内部有一个由制作偏振片的材料和方式决定的特定方向，通过偏振片的光其振动方向必然和这个内部方向一致。那部分振动方向不一致的光，就被完全挡住了。至于如何实现以及实现这样的选择的机理是什么，我们不关心。我们称透过去的光为“透射”光，被挡住的为“反射”光。在物理上，反射透射是什么物理过程，为什么这样，在此我们不讨论。首先，我们通过自然光过一个偏振片就可以了解到——也就是透过一个偏振片看世界然后和不放偏振片的异同，一部分光会损失掉，看起来稍微的暗了一点点。然后，我们通过自然光过两个相互垂直的偏振片就可以了解到——偏振片的内部方向一般会清楚地标在仪器上，光有两个正交的振动方向。用两个偏振片一个挡住一个方向就完全挡住了光。当然，物理知识可以告诉你：光是横波，振动方程和传播方向垂直，因此在三维空间中可以分解成任意两个正交的振动方向。如果我们的实验就到此为止，那么，这个光就可以用两状态的小球来描述：状态 1 的小球被挡住状态 2 的过去，或者反过来。当两个偏振片正交的时候，都被挡住。于是，光的心智模型也就是两状态模型，和硬币一样⁸。

现在，我们来用这个模型解释光过三个偏振片的实验。我先交代“光过三个偏振片”的实验现象，然后来构造一个可能的心智模型，最后简单地大

⁸其实，我们还可以用二维空间（第三维被传播方向占了，不能用了）中的矢量来描述光。这里就不在展开讨论。更多细节可以参考吴金闪的《二维系统上的量子力学》[36] 或者本书后面的量子力学部分

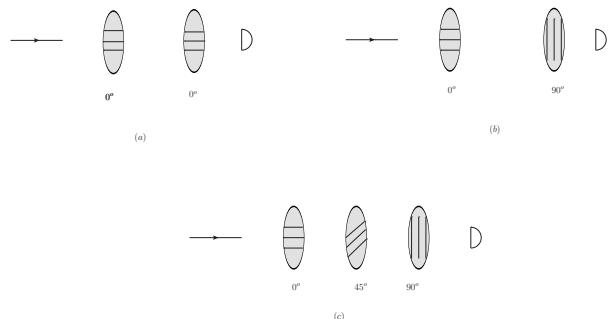


图 1.3: (a) . 单光子过两块平行偏振片 (透过)。(b) . 单光子过两块垂直偏振片 (挡住)。(c) . 单光子过三块偏振片——最前最后两块相互垂直, 中间的偏振片处于前后两者之间的某一角度 (透过)。

致地告诉大家这个模型是什么——Hilbert 空间中的矢量。希望你体会到从比较具体直观的模型到比较抽象的模型, 到非常抽象的模型的过程, 以及在其中矢量的作用。具体知识在量子力学那部分会再一次学习到。

Dirac的光过三块偏振片 [36]: 把两块偏振片垂直地放在面前, 然后接着取出第三块镜片, 以某个角度——与之前的任何一块镜片都不平行——插入到实验它们之间。观察是否能够看到东西, 还是基本不能透光? 实验结果是: 只有两个垂直镜片的时候基本上看不到镜片之后的物体, 但是, 增加一个某个角度的镜片以后, 之前不能看到的镜片之后的物体又能够看到了。大家在家里能够用三个偏振片演示的实验实际上是在自然光下做的, 因此是多光子的现象。实际上, 这个实验是可以在单光子的条件下完成的。现在, 我们假装这个实验就是在单光子的条件下完成的。至于物理上单光子如何实现是另外一个问题 [36]。

用两状态的硬币的心智模型, 我们这样来看这个实验: 经过第一块镜片的光子是状态 1 的, 这样的光子不管经过第二个偏振片的时候发生了什么, 不可能变成状态 2 的——这个就好像是第一道门挡住了所有的男人第三道门挡住了所有的女人, 那么不管中间的第二道门发生了什么, 没有人能够通过着三道门。以上假设这个世界上仅有男人和女人。因此, 把光看做硬币的这个心智模型不能解释上面的现象。实验现象看起来, 好像是, 通过增加了第二道门, 我们就能够看到有人通过这三道门了。这个是不可能的事情。屋子里面的那道门难道可以把男人变成女人, 而且是本质上就

变了而不仅仅是打扮成女人？

好像我们可以把这个实验看做这样一个过程：光的状态好像可以通过一个矢量来描述，例如二维空间矢量 \vec{A} ，然后偏振片的内部方向可以通过一个矢量 \hat{r} 来描述，而光波经过偏振片的过程可以用一个矢量投影或者说状态矢量和仪器矢量的内积来描述 $A_r = \vec{A} \cdot \hat{r}$ ，而且经过镜片之后的偏振状态是 \hat{r} ，强度是 $|A_r|^2$ 。我们先不问这个心智模型是从哪里来的，也不问为什么透过的光的强度和这个投影的计算有关系。于是，经过第一块镜片——记为 x 方向——之后，光子的状态就是 \hat{x} 。如果第二块允许的方向完全与第一块平行，则光子不会再次被挡住—— $1 = \hat{x} \cdot \hat{x}$ ，100% 完全直接通过。如果第二块允许的方向完全与第一块垂直——记为 y 方向，则光子不会再次被挡住—— $0 = \hat{x} \cdot \hat{y}$ ，光子完全被挡住。如果有第三块镜片——记为 xy 平面上的某个角度 θ ($\theta \neq 0, \frac{\pi}{2}$) 的方向，则通过第二块镜片的几率不为零，

$$\hat{x} \cdot \hat{r}_\theta = \cos(\theta) \neq 0. \quad (1.3)$$

过了第二个镜片之后，其状态为 \hat{r}_θ ，于是过第三个镜片的几率也不为零，

$$\hat{r}_\theta \cdot \hat{y} = \sin(\theta) \neq 0. \quad (1.4)$$

我们看到似乎这个矢量的心智模型通过矢量投影或者说矢量内积——通过 \hat{r} 方向的出射光是 \hat{r} 方向的偏振，其强度是 $|A_r|^2$ ，其中 $A_r = \vec{A} \cdot \hat{r}$ ——能够解释这个实验的现象。

上面这个计算可以看做一个单光子的飞行小磁针模型：过了第一片偏振片之后小磁针有一个长度——代表初始的光的强度，例如就记为单位 1，指向 x 方向，于是矢量表示是 \hat{x} ；接着小磁针飞过 \hat{r} 方向的偏振片，按照内积计算透过的光的矢量表示的大小是 $\cos(\theta)$ ，方向是 \hat{r} ，于是矢量表示是 $\cos(\theta)\hat{r}$ ；最后小磁针继续飞行通过 y 方向偏振片，长度是 $\cos(\theta)\sin(\theta)$ ，方向是 \hat{y} ，矢量表示是 $\cos(\theta)\sin(\theta)\hat{y}$ 。在这个单光子小磁针模型的解释下面，我们发现，这个单光子会随着飞行逐渐降低强度，但是每次总是能够通过偏振片的。

但是，这个理解有个问题：由于实际上光的实验是可以通过单光子来做的，单光子具有如下的不可分性：任何时候对一个光子——给定光的频率以后的最小的能量单位——做一个偏振片的实验，这个光子要么完整地

通过偏振片，要么完全被挡住。因此，从个体的角度就用二维空间矢量来描述光子是不合适的：这样的描述导致会出现即使是单光子，光子也能够永远通过偏振片，仅仅光子的强度上有损失。这样的事情我们从来没有观察到过。我们看到光子要么整个过去了，要么整个被挡住了，其能量是固定的一份一份的，强度不会降低。实际上，在用多个光子做实验的时候，我们确实观测到了光强度降低。从单光子角度，其实是过去的光子的数量减少了。从一束光到单光子不是一个简单的跨越，有兴趣的读者可以进一步看一看关于Einstein光电效应的实验。在这里，我们假设其足够的实验证据来证明单光子的存在性，并且这个实验是可以通过单光子来做的。当然，实际上，这些在物理上，确实都是事实而不是假设。

除了单光子问题，这个实验还有另外一个问题：为什么我们能够通过矢量投影来计算。如果我们考虑一个绳子上的波，然后我们想象一下：先激发绳子上某个方向的振动，形成波，并且传播。然后，我们设想给这个绳子做一个“偏振片”，仅仅让某一个方向的振动通过这个片，其垂直方向的振动被完全挡住。那么，显然，上面的矢量投影的数学非常好地描述了这个偏振片的行为。这个时候，我们来考虑为什么这样的矢量投影计算能够描述这里的“偏振片”。绳子上的波的根本的传播机制其实是Newton 第二定律 $\vec{F} = m\vec{a}$ ：一个绳子上的点受到它附近的其他点的振动的影响——附近的点在哪个方向上有振动就会在那个方向上带给我们关心的点一个力的作用，如果这个点周围所有的点受到的合力不为一定零，则这个合力导致速度变化——从而我们关心的点在那个相对运动方向上开始振动。于是，这个“偏振片”抑制了垂直方向的位移的传播，也就抑制了这个方向的振动的产生。那么，我们能不能把光子过偏振片的过程也归结为以上的机械运动的Newton 第二定律呢？把光波看做某种绳子——曾经被称为“以太(aether)”上的集体振动？Michelson-Morley（迈克尔逊-莫雷）实验证明光传播不需要介质。也就是说，周围点的驱动这个图景——它使得矢量投影计算很容易被理解——在光传播这个问题上不适用。

我们看到光子的硬币模型不能处理遇到中间斜着的偏振片的问题，光子的小磁针模型给出来的强度减少但是一直能够通过的结果跟实验不符合，光也不能看做介质上的集体振动——也就是经典波。但是，我们已经看到，把光子看做小磁针的计算给出来的结果，至少在投射光平均光强度上是正

确的。也就是说，我们希望得到一个可以把光子看做一个个的小球的又遵循矢量内积的数学模型。可是这个模型不能是硬币这样的概率论模型，也不能是欧氏空间矢量的模型：不能是经典粒子，也不能是经典波，还必须有某个最小单位，还需要能够做矢量叠加而投影计算。将来我们会进一步学习到，这个可以用来描述单个光子波动性的模型必须是 Hilbert 空间的矢量。一个让单个粒子的行为就具有波性几率性的数学模型，被称为几率幅矢量模型，或者叫做波函数波矢量模型。

word2vec 和量子客体的行为都启发我们可能我们的对象需要做加法、内积和投影计算，因此，其数学结构很可能是矢量。量子力学更加进一步逼迫我们超越位置矢量，思考更加广义的矢量。科学，很多时候，就是在搞清楚事物的特征，然后给这个事物一个反映其特征，或者能够解决相应的问题的表象，而这个表象通常是可计算的，也就是数学结构。

1.4.2 熵与信号编码

这一节，我们来讨论另一个非常普遍的概念——熵，以及它如何用来描述和解决几个看起来完全不同的实际问题。熵的数学基础是概率论，或者说熵是概率论这种数学结构的一部分。将来我们会发现熵在物理学上的描述能力。现在，我们先定义一下什么是熵，然后来展示熵这个概念如何有助于信息编码和信道容量等问题的解决。给定一个离散（其实连续的也可以的）概率分布 p_i ，其中事件 i 构成集合 Ω ，我们定义

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i. \quad (1.5)$$

有的时候，尤其是在信息科学中，其中的自然对数函数可以替换成以 2 为底的对数 \log_2 。在信息科学中，Shannon 熵的含义是一个信号包含的信息的多少，也是这个信号如果用二进制编码的话，需要多少个二进制数。为什么熵具有这个意义，我们了解更多再来讨论。先暂时接受这个，以后再回到这个问题。

现在来考虑电报传输的问题。我们知道电报是通过传递 0, 1 信号——我们可以把下图中的短点看做 0 长条看做 1——来传递信息的。当然，实际上我们还需要加入不同长度的空格来表示短点和长条之间的分隔、字母

之间的分隔还有单词之间的分隔。一会儿我们就会知道为什么电报码这样设计需要额外空格来做分隔⁹。历史上，通过电报来传输一个 0,1 信号的成本比较高。因此，我们希望整体来说，能够用更少的 0,1 来传递信息，也就是希望平均来说编码所需要的位数最少。这里，平均来说的意义是指，把所有的大家说过的要说的话都包含进来。当然，实际上，我们只有通过对已经记录下来的语言的统计来做这个平均，并且认为这样的统计只要样本足够多就具有代表性而且未来不会发生太大的变化。

问题明确以后，我们来考虑一个简单直接的答案：按照顺序给总共 26+10 个字母加数字（我们统称字母）做二进制编码，如果每一个代码的长度一样内容不一样，那么我们需要用 $\log_2 36 < 6$ 位二进制数来编码，然后 $A = 000001, B = 000010, C = 000011$ 这样，怎样？实际上 ASCII 码就采用了这个编码原则。只不过由于还要编码一些特殊符号，实际上 ASCII 码的长度超过 6 位。不过这个不是我们的重点。在这里，我们仅仅想指出来：对于 ASCII 码，平均每一个字母的长度是固定的。例如咱们上面自己编的这个编码体系的长度就是 6。那么，能不能做到比 6 更短呢？如果每一个码不一样长，是不是可以更短？那么，应该让哪个字母用更短的代码呢？一个简单的直觉的答案就是让出现频率最高的字母拥有最短的编码，让出现频率最低的字母拥有最长的代码。这样大多数时候，我们不用真的传输最长的，而是经常在传递这些个比较短的代码。实际上，你可以通过观察 Morse 码看到，确实是这样的，Q, Z 和 X 这样的字母很少出现因此代码很长，E, I, T 这样的字母出现频率很高，因此拥有比较短的代码。

你仔细观察会发现，整个 Morse 码里面每一个字母的代码长度就没有超过 5 的。这个看起来和我们之间的计算——至少需要 6 位编码相矛盾。实际上你再仔细看就会发现，Morse 码重用了代码，例如 E 的代码成了 A 的代码的一部分，A 的代码成了 L、J、P、R 等代码的一部分。这样的代码称为前缀重用的代码，否则称为无前缀代码 (Prefix-free Code)。在后者中，任何一个代码不能成为其他代码的一部分。如果我们想从一串连续代码流中识别出来字母，那么，我们就必须用无前缀代码，否则会产生对代码

⁹如果把空格计算进来，那么，可以把电报的编码方式这样来看：有信号的时间段当做 1，空格当做 0。不过，这个时候，整个编码的问题看起来会复杂一些。这里我们还是主要关注字母和数字本身的编码，而忽略空格。

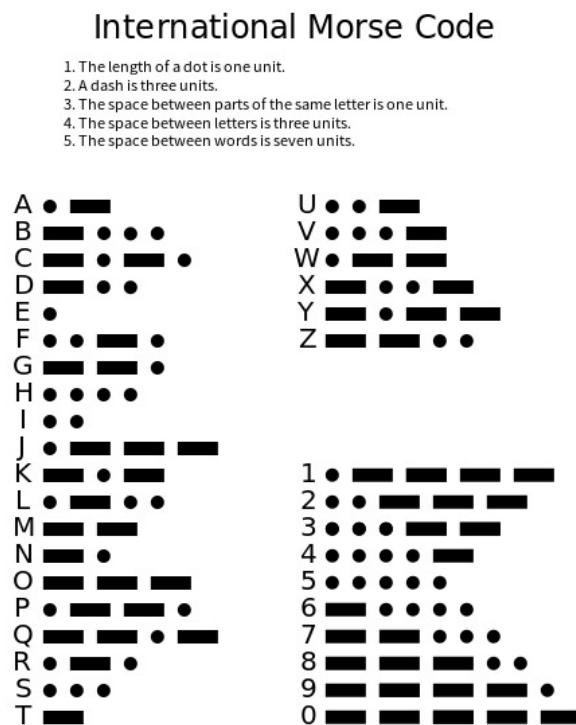


图 1.4: 英文字母的电报码, 注意每一个字母的码长度不一样。由 Rhey T. Snodgrass 和 Victor F. Camp 制作, 本图来自于Wikipedia “Morse code” 词条。

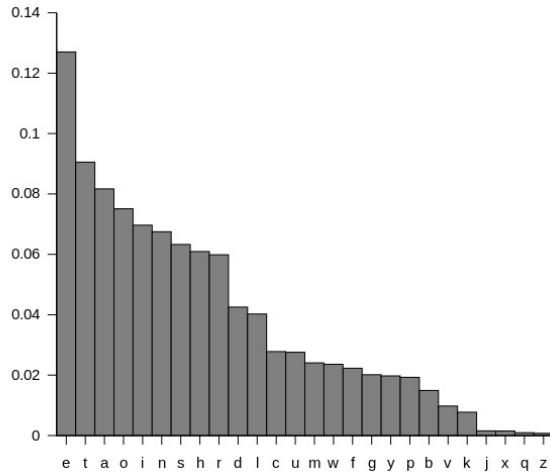


图 1.5: 英文字母出现频率。由 Nandhp 制作, 本图来自于 Wikipedia “Letter frequency” 词条。

流的多个可能的解释, 或者需要从后面的流来计算前面的流所代表的字母。也正是因为这样, Morse 码需要引入好几种不同长度的空格符号来标志字母以及词的结尾。无前缀代码就没有这个问题, 任何时候只要能够识别出来一个代表一个字母的代码, 我们就可以把这个字母写下来, 后面的流不可能是和这个已经找到字母的流合起来表示另一个字母。当然, 固定长度的字母编码构成的流更加简单, 直接按照这个固定长度划分就可以。但是, 这样的话, 字母代码的平均长度也就固定了。因此, 无前缀代码是一个两种因素的好混合。当然, Morse 码可能更希望有信号的部分更加短, 无信号——也就是空格——部分可以很便宜地传输, 就采用了前缀重用的编码。

有没有一个理论, 也就是一个可计算的心智模型, 告诉我们应该如何按照频率(或者还有其他的因素)来给每一个字母编码呢? 这样的编码的平均长度有没有一个极限呢? 我们把这个问题放在脑子里。你可能已经猜到这个问题的答案显然和熵有关, 例如让频率为 p_j 的字母的编码长度为

$$l_j = -\log_2 p_j. \quad (1.6)$$

这个函数满足越大的频率长度越短。一会我们再来证明这个方式实际上是

理论上的极限。这个时候的平均编码长度，

$$\langle l \rangle = \sum_j -p_j \log_2 p_j = S. \quad (1.7)$$

这个刚好就是最短的可能平均长度。但是一般来说，右边的不一定是整数。你可能需要每次找到那个最接近的整数，或者永远用大于等于右边的那个整数。于是，这个编码就不再是真的能够实现而是接近这个极限的编码算法了。当然，如果刚好就是整数那么，自然就刚好实现这个极限。

现在，我们把这个给频率高的字母更短的编码的理念一个实现的方法，并且看一看为什么理论上的极限就是前面定义的Shannon 熵。我们可以考虑从频率大的开始。首先我们准备至少 26 个可以用来编码字母的代码池子。这里我们先忽略数字就看纯字母。由于用二进制来编码，而且采用无前缀编码，所以至少我们需要准备一个 5 ($2^5 = 32 > 26$) 位编码系统。这样的一个五位编码系统可以用一个二叉树来代表。现在我们就需要按照上面的英文字母的相应的使用频率来把这些字母放到合适的分支点上，并且注意：任何一个高层的分支点被一个字母占据以后，这个分支点的下层就不许有其他字母占据了。否则，高层的字母的代码就成了底层的字母的代码的一部分，也就是前缀。当然，你可以给定一个更多位的二叉树来编码，不过，可能就具有更长的平均长度了。我们先考虑这个 5 位的编码系统。

有了这个池子，我们来看如何放置这些字母。我们可以从频率最大的字母开始，让它们先占据最高层，但是我们需要知道什么时候开始需要留下几个第一层的空位，开始往下占据了。否则，我们的编码位置不够用。看起来这是一个需要全局考虑的问题：放置频率最大的字母的时候需要考虑小的那些，放置频率小的那些需要考虑大的那些。如果这样的话，可能是一个很难解决的问题，更不用谈解决方案是不是最优的了。历史上，甚至当Shannon 提出来熵的概念，并且证明熵决定了最优编码的极限之后，都没有找到这个实现或者非常接近最优编码的方式。其中有一种叫做Shannon-Fano 编码的算法能够给出效率比较高（平均长度短）的编码。其算法大致就是从大到小按照频率排序，然后给属于这个当前分支点（刚开始的时候所有的待编码字母属于最顶上的分支点）的待编码字母做一个二分集合——使得这两个集合所包含的总概率相互最接近，然后把这两个集合一个放到左边的分支上一个放到右边的分支上直到每一个分支点上最多一个待编码字母。其思想就

是让每一个第 j 层的分支点下面包含的字母的合起来的概率接近 2^{-j} ，这样整体上平均代码长度的表达式接近信息熵 S 所定义的极限。这个编码其实就是 ZIP 压缩文件背后的算法。但是，遇到可以产生多种划分很概率接近的二分集合的时候，会出现多种划分在这个算法看来都可以但实际上它们得到的编码有较大差别的问题导致算法的效率降低。Shannon-Fano 编码采用了递归来实现把全局问题用局部方法来解决。其中关键一步是做一个集合内元素的使用频率的排序，并在排序以后再来划分下一步的集合，使得划分的左边和右边的频率最接近。Huffman 发现了另一个把上面的全局问题转化成一个局域问题的算法：每次选择频率最低的两个组合起来，然后把合起来的集合当做一个虚拟待编码单位来做下一步。关于这个历史以及这个编码问题的更多细节可以参考麻省理工学院的 Information and Entropy (《信息和熵》) 课程。Huffman 编码的全局问题局域化是非常巧妙的一步。这个思想在网络上顶点的聚类等其他问题上也有应用 [37]。

类似地我们可以尝试从频率最小的开始：让最小的那些占据最底下那一层。不过，我们需要知道到频率大到什么值的时候为止，我们就可以让字母开始占据倒数第二层了。否则，都放在最后一层就是 ASCII 所用的等长度编码了。我们知道等长度编码不是平均编码长度最短的方案。同样的道理，我们希望什么时候可以开始占据倒数第三层了，等等等等。Huffman 的算法是这样的：从频率最小的待编码字母开始（这个时候这个字母已经被放在了某个最低层级的二叉树的叶子上了），去找另外一个频率最小的字母，把这两个字母合起来当做一个分支点的两个分支，并且合起来看做一个虚拟的字母然后把两个字母的频率加起来当做这个虚拟字母的频率，对剩下的没有被连在一起构成同一个根节点出发的二叉树的字母重复这个过程。在这里，整体问题转化成局部问题的技巧值得专门提一下。首先，算法做一个排序。排序是一个可以通过非常好的局域算法例如堆排序和合并排序等来解决的整体问题。其次，合起来当做一个虚拟字母使得算法可以忘记底下更小的结构。这个也很重要。递归，分治 (Divide and Conquer)，以及其中包含的层次性封装的思想对于把全局问题转化为局部问题是很重要的。这也是计算机科学和系统科学联系的一个例子。

下面的图中，为简单计，用了 5 个字母当例子，来展示两种编码。图片和例子都来自于 Wikipedia。我们发现 Huffman 编码在这个例子上具有更高的效率。

表 1.1: 来自于 Wikipedia 的用于展示 Shannon-Fano 编码和 Huffman 编码的例子，理论平均长度和两种编码的实际平均长度分别是：2.1857, 2.2818 和 2.2305。

字母	A	B	C	D	E
计数	15	7	6	6	5
概率	0.3846	0.1795	0.1538	0.1538	0.1282
理论编码长度	1.3786	2.4779	2.7009	2.7009	2.9635
Shannon-Fano	2	2	2	3	3
Huffman	1	3	3	3	3

的效率。由于从频率小的字母开始，实际上 Huffman 编码更加有可能把频率大的字母一个更短的更高层的编码，因此，比 Shannon-Fano 编码具有更高的效率。我们看到理论平均长度、Shannon-Fano 编码和 Huffman 编码的实际平均长度分别是：2.1857, 2.2818 和 2.2305。

现在我们来证明平均代码长度的极限就是信息熵的大小。首先，我们看到任何一个无前缀编码都是在一个拥有足够分叉的二叉树的分支点上放置字母，并且满足：如果一个上层分支点被一个字母占据，则下层分支点不能再给其他字母。于是非常容易验证，每一个字母 j 的代码长度 l_j ，也就是这个字母所在的层数，满足下面的公式，

$$\sum_j 2^{-l_j} \leq 1. \quad (1.8)$$

这是无前缀这个要求的结果：无前缀相当于没有重用，没有重用意味着任何一个无前缀编码最多相当于把对底层的分支点（叶子节点）全部占据，这个时候上面的取和是 1。注意任何一层完全占据其他分支点都空着的话，上面的取和就是 1。当某一层被完全占满的时候，注意，确实其他任何分支点都需要空着，上面层下面层的分支点由于无前缀要求都不许占据。当然，如果待编码字母不够这么多，就会空下来，于是上面的取和就会小于 1。注意对第 n 一层的来自于同一个父亲的两个叉上可能有的一个或者两个字母取和 $\delta_{n0}2^{-n} + \delta_{n1}2^{-n} \leq 2^{-(n-1)}$ 。其中 δ_{n0} (δ_{n1}) 表示左边 (右边) 的叉上有一个字母。这个说明，我们可以把来自于底层的求和放大以后或者相等地放到

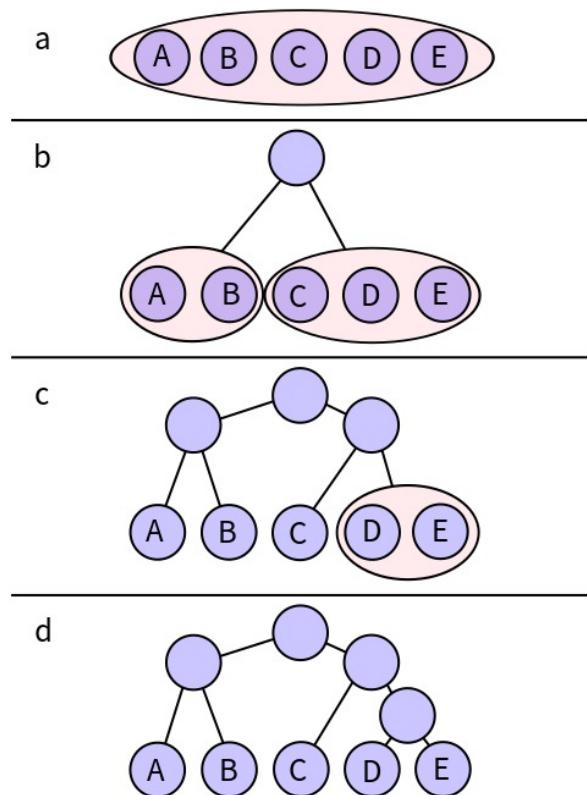


图 1.6: Shannon-Fano 编码举例。每次需要先排序，再在这个排序的基础上在某个点来划分集合。由 Andreas.Roever 制作，本图来自于 Wikipedia “Shannon-Fano coding” 词条。

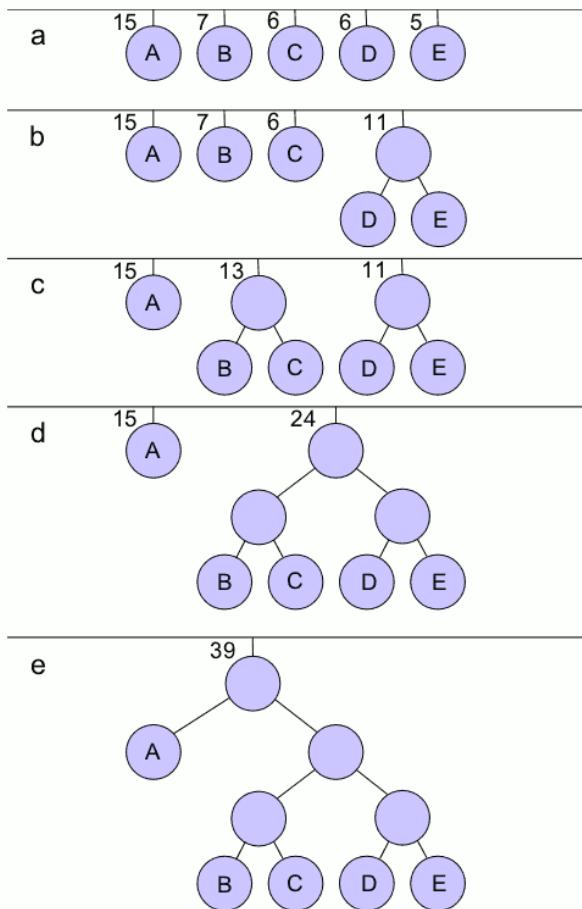


图 1.7: Huffman 编码举例, 从最小的两个开始组合, 组合起来以后当作一个具有合起来的频率的虚拟字母。Andreas.Roever 制作, 本图来自于 Wikipedia “Huffman coding” 词条。

上一层上去，看做上一层被一个合起来的虚拟的字母占据。顺便，Huffman 编码的思想就是这样。于是，我们总是可以继续放大，直到所有的字母和虚拟字母都在某一个共同的层上。然后，按照前面的结论，全部在同一层的话，取和最多就是 1。

接着，我们定义一个概率分布函数

$$q_j = 2^{-l_j}. \quad (1.9)$$

由于满足都是大于等于零并且取和小于等于 1，我们总是可以把这个定义看做概率的。如果 N 个字母的总和小于 1，我们就形式上定义一个不需要传递的字母，让 $q_{N+1} = 1 - \sum_j q_j$ 。

最后我们来证明，

$$-\sum_j p_j \log_2 p_j \leq -\sum_j p_j \log_2 q_j = \sum_j p_j l_j = \langle l \rangle. \quad (1.10)$$

其中最关键的是第一步，被称为Gibbs 不等式，

$$-\sum_j p_j \log_2 p_j \leq -\sum_j p_j \log_2 q_j. \quad (1.11)$$

这个不等式的证明可见Wikipedia。粗略重复在这里。

$$-\sum_j p_j \log_2 \frac{q_j}{p_j} \geq -\sum_j p_j \left(\frac{q_j}{p_j} - 1 \right) = -\sum_j q_j + \sum_j p_j = 0. \quad (1.12)$$

有兴趣的读者可以继续阅读和思考关于信息熵，并且找到信息熵还可以用来解决哪些其他信息科学（信息编码、信息传播等）的问题。

通过这个例子，我们想让你再一次思考什么是科学，以及科学和数学的关系。科学就是从某个现象后者某个问题出发——例如这里的平均编码长度最短，有了某个理念——例如这里的频率最大的字母的编码最短，然后找到某个数学模型——这里的二叉树和无前缀编码，某个数学概念以及相应的定理——例如这里的信息熵和上面证明的最小编码定理，最后找到一个基于这个概念和定理的计算方法——例如这里的Huffman 编码，来解决问题。当然，最后是实践检验。其中，我们看到问题、理念、数学模型、数学概念和定理，还有解决方法，还有检验，缺一不可。科学就是给事物找

到最合适的数学结构。为了这个目的，我们需要学会一些数学结构当做思维的基础，当然，必要的时候我们也可以创造数学结构；我们还需要学会把事物和数学结构联系起来的思维方法——模型化的过程。前者可以通过学习数学来获得，后者需要学习物理和数学来培养。必要的时候，我们也可以通过欣赏一些把物理学的思想数学的结构用于社会科学的研究工作，从中更多地体会模型化的过程。这个也是系统科学作为交叉科学的特征。

1.4.3 分形几何，海岸线、肺

下一个例子是关于分形几何的。很多人可能听说过分形几何。通常的几何体是描述比较规则的形状的，例如方形、圆形，或者至少在足够小的尺度下，你会发现这个形状就没有更加细节的结构了，其边缘就剩下光滑的线条——也就是 1 维的几何形状。当然，也可以人为地构造出来处处连续处处不可微的曲线，例如Weierstrass 函数和Brown 运动的轨迹（自行Google 或者 Wikipedia）。这个时候，这样的曲线的维数就比较难说是 1 维了。那么，类似这种处处连续处处不可微，或者在任何一个小的尺度下都能够看见更小的结构的几何形状，如何精确地定义呢？现实世界中，什么样的东西具有这样的结构呢？有了这样的几何形状的定义能够在什么地方增加我们对现实的理解呢？

这几个问题，在任何一个量的定义上，我们都可以问：如何精确定义，现实（可以是间接的理论模型中的现实）中是否有对应，是否增加我们对现实的理解。现在，我们来试试回答这三个问题，尽管我们的重点是后两个问题。在讨论分形的时候一个经常被使用的例子是海岸线的长度。我们知道对一个国家的海岸线的长度通常是一个数的，例如 Wikipedia 告诉你“中情局世界概况——The CIA World Factbook”记录中国是 14500km ，英国是 12429km 。可是如果你按照地图的比例尺去量一下的话，你会得到跟这个数据差别非常大的值。如果你换一张比例尺不一样的地图，你又会得到另一个值。原因是海岸线不是一条很好的线，你用比较大的尺子的时候就会忽略比较小的折线结构。当然，一般遇到这种情况你总是可以用更小的尺子来得到精确的数值。可是，海岸线这个东西，由于长期的腐蚀现象，你用任何一个小的尺度（只要不比原子分子的尺度更小），你都会发现新的结构——原来看起来是一条直线的东西，现在看起来是折线，甚至更复杂（例如



(a)



(b)

图 1.8: (a) 高压放电产生的分形，本图来自于 Wikipedia “Fractal”（分形）词条，原作者 Bert Hickman。(b) 玻璃上的冰晶形成的分形，本图来自于 Wikipedia “Fractal”（分形）词条，原作者 Schnobby。

孔洞）。这样的几乎可以无限细分下去都有更小的结构的几何图形就称为分形。有的时候更小层次的结构和上层的结构具有相似性或者完全一样。因此，分形的概念一定程度上还意味着子结构和上级结构的相似性——称为自相似。除了海岸线，我们还可以找到很多其他的例子，例如河流分支网络、血管分支网络、闪电或者高压放电、土壤中的孔洞、心电图时间序列、股票价格时间序列。

对于海岸线这样的形状，我们可以定义一个分形维数：我们猜测这个维数肯定大于 1 小于 2——因为像圆形这样的简单曲线是 1 维，而这个形状也不像占满了某个 2 维面的样子。我们先来看看定义，然后看看这样的定义能够如何提高我们对现实的理解。分形维数的一种定义——称为盒子

维数，是通过数盒子来定义的。用一个大小为 r 的盒子，把整个图 C 做一个最小覆盖，所需要的盒子的数量记为 $N(r)$ 。然后用更小的 r 再来做一次得到新的 N ，定义

$$\dim_{box}(C) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\ln N(C, r)}{\ln 1/r}. \quad (1.13)$$

可以验证对于简单的线段， $N \propto r^{-1}$ ，因此其分形维数是 1，和熟悉的维数定义一样。从 Wikipedia 的“List of fractals by Hausdorff dimension”页面我们还可以知道以下生活中遇到的东西的分形维数（这里是 Hausdorff 维数 [38, 39]，跟盒子维数有密切联系）：白花菜 ($d = 2.33$)、花椰菜 ($d = 2.66$)、大脑表面 ($d = 2.79$)、人类肺表面 ($d = 2.97$)。前两者的维数高是否存在生物学上的优势不太清楚，但是后两者，尤其是最后那个人类的肺部的表面要尽可能的接近 3 维是很容易理解的：我们需要非常迅速地交换氧气，一个光滑的表面仅仅是一个 2 维的对象，其效果肯定不如更高维的形状，而且越接近 3 维越好。于是，我们看到分形这个概念和分形维数这个数值可以帮助我们加深对这个世界的理解，而且分形是普遍存在的。有可能在有些问题上，例如表面催化的问题，我们必须考虑分形才能够更好地描述和解决问题。

最近还有研究 [40] 运用分形的概念和分形维数的计算讨论了癌症治疗手段的效果，治疗前后血管分支网络的分形维数的变化。其大致的设想是这样的：在癌症病灶区域（一般正在疯长中），其供血量和其他区域是有差别的，因此研究这个区域的血管分支网络的分析维数可以了解疯长的阶段。如果癌症的阶段和分形维数之间的联系确实建立起来，那么，确实，治疗方式的效果的衡量就可以通过考察分形维数，而不是仅仅依赖于其他生理指标。

关于分形这个主题更多的入门材料可以从阅读 Falconer 的《Fractals: A Very Short Introduction》[38] 或者 Mandelbrot 的《The Fractal Geometry of Nature》[39]。

我们用这个例子是说明，科学的概念是从现实中提炼出来，一般来说数学化的，描述现实的，并且促进我们对现实的理解的。这个分形的例子除了体现从现实的特征中提炼出来数学和科学概念，用来描述现实的特征之外，还有理论上当做现实现象的舞台的意义：某些现象，在整数维的空间上和在分数维的空间上发生可能会有不同的结果。关于后面这一点，可以参

考杨展如的《分形物理学》[41]。这个模型机制和背景舞台合起来决定模型行为的理念在物理学和系统科学里面经常用到。以后我们还会遇到它。

1.5 划分系统和确定考察的因素：热寂问题和量纲分析

系统科学很重要的很基础的一个概念就是系统。系统粗略地说就是一个研究对象的集合。系统是一个可以在具体问题的研究中指代非常明确，但是却很难给一个一般定义的概念。把系统认为是一个包含了研究对象的集合，除了哲学上的讨论，在实际研究工作中我们认为就够用了。那么，如何划分一个系统呢？一个物体的状态显然可以是和另外一个物体的状态相关的，于是整个世界才是一个有天然的定义的系统。那么，是不是所有的问题的研究都需要把整个世界都包含进来呢？如果是这样的话，我们就没有学科之间的区分了。学科之间的边界，尽管这个边界会不断地变化，就是研究者通过把自身所感兴趣的研究对象从整个世界中“隔离”出来形成的。在任何实际问题的研究中，这样的隔离都是必须的。那么，既然这样的隔离是必须的，在实际问题的研究中，又如何划分呢？在这一点上，物理学中，受力分析的训练可以给我们很大的启发。针对同一个情境，有的时候我们会按一种方式来划分系统，有的时候我们又会按照另一种方式。这个经验在将来更一般的系统中的讨论也是有意义的。因此，我们把这个受力分析的训练作为划分系统的一种体验。

先举一个大的不是那么可以动手操作或者计算的例子：整个宇宙作为一个我们关心的系统。这个问题和下面的要讨论的开放系统的问题相关。不过，我们不怕重复，重要的事情要说三遍来着。统计物理学对于没有外界的系统，给出了一个稳定状态——所谓稳定状态就是可以在这个状态上长时间停留，而且处在这个状态附近的系统其状态会趋向这个稳定状态：系统中的各个点的状态一样，也就是均匀状态。至于为什么这样，以后再说。力学系统是允许一个保守系统做周期或者准周期运动而不走向某个特定的演化方向的——例如各向同性的稳定态。至于在这里为什么要对整个宇宙按照统计物理学而不是力学来讨论，我们也以后再说。我们先来关注最主要的问题。



图 1.9：墨水在水中扩散，很容易分出先后，所有人都不会搞错。系统的演化有方向。

现在我们把宇宙看做一个这样的系统，因为其已经包含一切而没有外界。于是，按照之前的说法，这个世界的稳定状态就是均匀状态，如果现在不均匀，那么将来也会均匀。这样的一个图景其实可以通过一些日常生活的例子来理解。例如，在一杯子的水里面滴入一滴墨汁¹⁰，一开始墨汁的分布是不均匀的，后来就会变得均匀；在一杯子的水里面加入一点热水，就算不让这个热水蒸发（例如你可以用一个气球装上热水），过一段时间以后，水温也会变得均匀。下面的讨论中牵涉到的平衡态、熵、孤立系统和绝热系统等问题，我们在后面关于统计物理学的时候都会学习到。其他的跟这个问题有关的非平衡系统的熵、狭义相对论、引力等，了解了什么是物理学和物理学家的思考方式，有了力学、统计物理学、量子力学的基础，都可以学得懂。我们暂时不讨论这些。

如果我们的宇宙的也遵循这个发展变化的过程，那么，我们人类和人类的思想（我猜测随着我们长大，通常一个人的思想是向着更加复杂更加不均匀的方向在发展），这样一个和这个世界的其他东西如此不均匀的东西，是怎么演化出来的呢？更不用说，将来这个宇宙的归宿——均匀的没有任何有结构的地方的一个宇宙——走向一个叫做“热寂”的状态。

当然，以上这个推理本身有一点小小的问题，统计物理学对于绝热系

¹⁰实际上，这个杯子里面的墨汁的系统，或者杯子里面的墨汁加上水的系统，以及大多数看做孤立系统的系统，实际上是正则系综的系统。关于正则系综将来在统计物理学部分会学习到。正则系统实际上不孤立，和外界存在能量交换。



图 1.10: 由于两边水面高低的不同，造成压强不同，于是一边的水就会被推动着向着另一边运动。系统的演化有方向。

统（不能与外界交换热量，但是可以跟对外界做功）给出熵增加——也就是趋向均匀——的演化方向，但是对于完全没有外界的孤立系统仅仅能够给出熵不减少的演化方向。因此，整个宇宙不一定会更加均匀，但是至少不应该出现更多的更复杂的结构。例如，从一个单一颜色的郁金香的物种变成多颜色的甚至混合颜色的郁金香，这样的复杂的结构。例如，从一个个的单细胞草履虫演化成为拥有千万个功能上有差别的细胞的具有自己的思想的人的这样的复杂的结构。于是，这个小小的推理上的问题，不影响主要的结论：我们的宇宙不应该出现更复杂的结构，可是我们天天看见更复杂的结构的出现。

那么，这个问题可以如何来理解呢？一个简单的，但是不解决根本问题的，视角是这样的：尽管整个宇宙可能确实是向着更均匀和没有结构的方向在发展，但是宇宙的各个小部分都是开放系统，而开放系统的熵没有说一定要增加。也就是说，某些部分的熵的减少，更复杂的结构的出现，是以另外的部分的熵的增加为代价的。这样的变化的过程有可能是系统自身的涨落，或者有的时候加上外界的选择。例如培育更加复杂的郁金香这个事情应该是自发的涨落、诱发的涨落，以及选择的结果。这样的诱发和选择，肯定会伴随着一定的代价——例如能量的使用（对于能量的输出单位来说，其结构变得更加“不复杂”了）。因此，只要换一个系统来考虑，就不是问

题。

当然，这个不解决根本问题，是不是宇宙的命运真的就是均匀，我们现在只是“时候未到，不是不报”呢？这仍然是一个问题。一个可能的答案是这样：是不是我们的宇宙可以看作一个开放系统而不是孤立系统呢，尽管我们说过我们定义的宇宙包含一切没有外界。由于我们的宇宙处在一个膨胀的过程中（而且是时间和空间本身在膨胀，不仅是物质，因此不能用在空间中膨胀的气球来直观理解），因此，这个部分的熵会如何变化是一个问题。是否存在这样的情况，这部分提供的负熵的量足以提供我们产生更复杂的结构的需要呢？这个问题还牵涉到引力的问题。在上面的讨论中，我们没有考虑引力。考虑了引力之后，均匀的状态就不一定是熵最大的状态。引力部分的熵如何计算，以及是否足以支持我们更加复杂的结构的产生也是一个问题。

最后，我不得不说，这个问题仍然是一个问题。不过，通过这个例子，我想说的是，选择不同的研究对象——也就是系统的选择，例如是否整个宇宙还是宇宙的一个部分，是否包含引力，是否考虑宇宙膨胀等等，你会看到这个世界不一样的样子。

第二个例子是量纲分析。所谓量纲分析就是指一个公式的左边和右边各个量的单位做一个运算，其最后的单位应该相同。写成一个定理是这样的：一个系统中的量 (x_i) 通过乘除法所构成的所有无量纲表达式 (l_i) 之间必然满足一个函数关系 $f(l_1, l_2, \dots, l_M) = 0$ 。其背后的道理是这个系统中的所有的量存在一个函数关系 $F(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$ 。证明略。有兴趣的可以看看赵凯华的《定性与半定量物理学》[42]。现在，我们用量纲分析来求解单摆的周期的公式，以及证明勾股定理。这些都是《定性与半定量物理学》一书中的例子。

上图是一个单摆的示意图，一个小球通过细线连到天花板上，然后从某个高度的位置放开小球。这个时候小球将做周期性运动，并且从这个位置开始又回到这个位置的这段时间称为这个单摆的周期。以后我们会学到如何运用Newton 力学来求这个周期，原则上我们需要先做受力分析，然后列出运动方程，最后（在一定近似下）求解这个描述小球运动的微分方程。现在，我们来尝试用更简单的方法——量纲分析，避开受力分析和求解微分方程。首先，这个问题里面有如下几个物理量：小球的质量 m （单位是

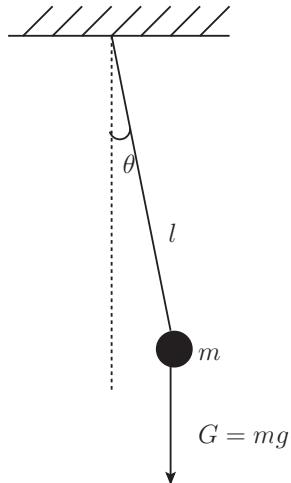


图 1.11: 单摆和决定单摆运动的因素

kg)、重力加速度 g (单位是 m/s^2)、绳子的长度 l (单位是 m)、绳子的初始角度 θ (单位是 1, 纯数)、单摆的周期 T (单位是 s)。因此，能够通过乘除法找到的无量纲量有 θ 、 $T \sqrt{l/g}$ ，于是 $f(\theta, T \sqrt{g/l}) = 0$ ，也就是说

$$T = \sqrt{l/g} \Theta(\theta). \quad (1.14)$$

至于函数 $\Theta(\theta)$ 的形式，量纲分析就不能给出答案了。有了这个公式，我们实际上就能做很多的事情了。例如，我们指导通过调整 l 可以调整周期，我们知道 m 对周期的影响可以忽略不计，甚至通过做实验，一定程度上，我们能够得到 $\Theta(\theta)$ 。看起来，通过这个量纲分析，我们真的是捡了一个大便宜。真的是这样吗？

其实，所有的困难的地方，都被隐藏到了对于相关变量的确定里面。我们对于这些量的选择 (m 、 g 、 l 、 θ 、 T) 实际上是建立在我们对单摆的清楚而深刻的认识的基础上的： m 、 g 、 l 、 θ 决定了这个系统的所有的运动状态， T 是这个运动状态的表现。那么，一个完全不了解单摆的人，如何才能够明白其实 m 、 g 、 l 、 θ 就决定了这个系统的一切行为呢？因此，实际上，量纲分析的工作量在于认识这个系统，确定相关的变量。当然，对于做习题，也就是相关变量基本确定的问题，量纲分析可以给你提供好的分析方向。对于未知的领域，你需要有足够好的直觉（长期经验的结果）才能做好变量的选择这一步。

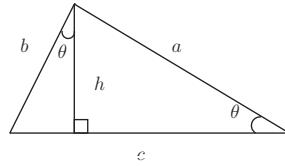


图 1.12：利用斜边上的高把三角形分成两个跟原三角形相似的三角形，然后用整体面积等于两个部分的面积来证明勾股定理。

利用量纲分析证明勾股定理（直角三角形 $a^2 + b^2 = c^2$ ）非常的神奇和方便，至少我在第一次见到这个证明的时候是非常吃惊，并且产生了为什么历史上不是这样证明的呢这样的问题。考虑直角三角形的斜边 c （单位是长度 m）和一个夹角 θ （单位是 1，纯数），由于另外一个夹角完全依赖于这个夹角，我们选择这个夹角就够了。我们来尝试计算这个三角形的面积 S （单位是 m^2 ）。按照量纲分析我们得到

$$S = c^2 \Phi(\theta), \quad (1.15)$$

尽管 $\Phi(\theta)$ 的具体形式未知。

接着在这个直角三角形里面做一条斜边上的高，于是得到两个小三角形，其中有以 a 为斜边的，有以 b 为斜边的，并且都有一个 θ 角。于是，我们得到 $S_a = a^2 \Phi(\theta)$, $S_b = b^2 \Phi(\theta)$ 。两者合起来的面积自然是整体三角形的面积，于是，

$$a^2 \Phi(\theta) + b^2 \Phi(\theta) = c^2 \Phi(\theta). \quad (1.16)$$

只要 $\Phi(\theta) \neq 0$ ，我们就得到了勾股定理。

看起来，这个证明就是运用了直角三角形斜边上的一条高做了一个面积切分，然后合起来。非常简单优雅的证明。但是，如果你真的仔细想，你会问，为什么我们要选择斜边和一个夹角来做为自由变量，把面积当作在这个三角形所考察的变量呢？为什么 c 和 θ 就足以确定这个三角形了呢？这些问题，实际上牵涉到全等三角形的判定条件的问题（接着问，为什么全等三角形的条件就是我们这里确定自由变量的问题的答案呢？）。因此，确定这几个变量的任务实际上就是完全了解直角三角形的过程。

于是，我们再一次发现，解决一个问题的关键，在于确定这个问题的描述变量，最重要的相关因素。也正是在这个意义上，问一个合适的问题，确

定回答这个问题的核心的相关因素，远远比解决这个问题来的更加有意义。对于我们系统科学关心的每一个具体系统，也一样，确定这个系统由哪些因素来描述，是最重要的一步。后面的步骤就是知道这些因素如何相互影响相互作用，以及如何在这样的相互作用的因素下，把状态描述好，把问题解决好。状态描述的问题，通常包含两个方面，描述的数学模型（也就是前面讨论的科学和数学的关系）和力学的世界观。下面我们来讨论力学的世界观。

1.6 力学思想无处不在：状态、状态变化以及状态变化的原因

科学的任务典型的就是对现象的理解、预测和干预。对于理解、预测和干预这些个目的来说，最重要的信息就是关于这个现象中的主体的状态的描述，状态的变化，以及探索状态变化的原因。这个思考状态描述、状态变化和变化的原因的问题的角度，称为力学的世界观。在物理学里面，通常称这样的问题为一个动力学问题，或者说演化的问题。从更一般的意义上说，这个能够把大多数问题归结为一个动力学问题的情况是一个非常让人惊奇的事情。在这里，我们希望给大家展示典型力学问题，以及从力学问题开始到更加一般的动力学问题的这样一个推广。为什么这个描述状态，探讨状态的变化和变化的原因的视角会在科学里面非常的普遍呢？

一方面，很多时候我们看到的事情是静态的或者说是稳定的。例如一杯看起来静止不动的水，一个一直这样转下去的太阳或者月亮，一个稳固的不动的三脚架或者房屋桥梁，一片看起来大小形状不变化的田地。那为什么要用动力学的视角呢？由于我们需要划分、交易田地以及收税收租，自然我们要去提出来描述形状和计算形状的面积这样的数学结构。当然，在那之前还需要发明计数还有单位。但是，从静态的形状、数和单位，过渡到动力学的视角，并且去问为什么，不是显然的。有的时候，我们是为了把更多的现象归结为同样的原因（例如所有太阳系天体的运动主要受太阳引力的影响）在起作用，或者是同样的方程（例如不管天上地下Newton 方程总是能够解释这些状态变化）在起作用。在下一节我们会看到，这是对思维提出了系统性和普适性这个更高的要求——归结到太阳引力甚至万有引

力是在系统性普适性的一大步，归结到Newton 方程是系统性和普适性上更大的一步。在进入系统性和普适性这个主题之前，我们试着这样来看这个从静态到动力学的过渡：其实这些静态和稳态都是演化得来的——这一点下一段再讨论，或者这些静态和稳态需要从一个假想的可能的变化中稳定下来。后者和一个叫做虚位移的概念和一种叫做线性稳定性分析的概念有关。以三脚架或者桥梁的静态结构稳定性分析为例。除了保证某种形状能够在静态存在，我们还要讨论这个形状的稳定性，我们还要用强度和材质合适的材料来保证把这个三脚架或者桥梁做出来。也就是说，我们需要计算这个时候三脚架每一个连接点的受力，还要计算万一产生一个小小的对平衡位置的偏离，是否能够保证这个偏离不会造成一个更加大的偏离以至于产生严重的后果。这个计算就通过一个叫做虚位移和虚功原理的方式 来完成。这个虚功原理把动力学问题和静力学求解各个连接点的力的问题统一成为一个基于势函数的计算。更具体就不在展开了，可以参考分析力学教材 [43]。稳定性分析则是列出来对于任意的给定的偏离，系统的响应，也就是运动方程，然后研究系统下一个时刻的状态是向着减少还是扩大偏离的方向。具体计算的例子我们以后会在线性稳定性分析中看到。其关键就是偏离产生以后的运动方程。因此，我们看到要么静态的问题和动态的问题其实是可以用统一的框架来描述的，要么，静态的问题我们还需要考虑假想地“动起来”会怎样。

当然，另一方面，很多事情本来就是演化的。例如演化的视角来看生物系统就能更好地理顺生物之间的关系，以及和不同年龄的地层里面找到的生物化石证据相符。例如我们讨论一个社会的规范、价值观、共同理念、文化、习俗、人口这些方面的现状，自然就会思考这些现状是怎么来的，也就是哪些历史事件和历史上的思想（和人物）在这些现状的形成的过程中发生了作用。搞清楚了这个历史，会使得我们对现状有更好的认识和理解。那么，是不是一个演化的世界的演化的现象我们就必须通过演化的角度来研究呢？也不是的，如果这个演化实际上并没有带来因果或者关联的话。因此，我前面所说考察关键事件人物思想能够促进对现状的理解有一个前提，就是，前后状态是有联系的，这个联系有可能可以归结到某个其他因素上，例如这里的关键事件人物思想。一旦我们能够把这样的因果关系或者说至少是关联关系找到，如果假设这个关系还对，那么，我们还可能在一定程度

上对系统做出预测和干预。因此，动力学的视角的普遍性的一个理由就是，大量的事情本来就是演化得来的，历史状态和现状之间存在着关联，而且搞清楚导致这个演化的原因，对于理解现状把握将来有意义。

那么，有没有前后状态基本没有联系的情况，这个时候是否还需要关心演化呢？有这样的情况，而且还需要关心。在某些系统里面，相隔一段很短的时间的前后两个状态就基本上看不出来联系了，例如一个盒子里面装着的气体的前后两个状态，一滴墨水进入一个杯子里面的扩散后期的两个时间点的状态。这个时候，我们还是可以构建一个动力学过程来描述这个时候状态的演化。我们要么把这个现象看做从一个静态分布函数中抽样——这个可以看做没有力学的独立抽样，要么构造一个采用基于现象的“伪力学”方程——例如做Ising模型平衡态模拟的时候的基于细致平衡原理的Master方程。如果是某种机制性的力学方程——例如假如我们相信墨水分子的运动实际上来自于它们和水分子之间的相互作用并且由此构建方程的话，我们甚至还需要回答为什么这个时候的关联时间比较短，甚至可以看做独立抽样。也就是说，在力学的世界观的指导下，甚至对于前后状态没有关联的系统，我们也经常通过力学的视角来考察。

一般来说，很多时候我们可以用数量和形状来描述或者近似地描述我们的对象。但是，有的情况下，找到一个对象的状态的数学描述，不是一件容易的事情。很多时候，这个描述是最重要的科学概念上的突破的一步，而不是演化方程，也就是找到状态变化的原因。前面我们已经看到了量子系统的状态和词语的状态矢量的这样不太容易找到数学描述的例子了。

现代科学基本上可以认为从Galileo的实验（让斜面上滚下来的小球在不同摩擦系数的材料上前进，比萨斜塔上扔球）和理想实验、Tycho的天文观察开始，到Newton发明和用数学结构来描述这些观察和实验。当然，中间还有很多其他科学家的非常重要的贡献——例如Kepler对Tycho的观察数据的数学描述，之后还有贡献更加大的科学家——例如Einstein和Bohr等人改变了我们的时间空间几率的观念还有Darwin进化论以及Watson-Crick-Franklin的双螺旋在整个生物学的基本框架的地位，之前也有可以看做科学思想萌芽的思想者。但是，从确立“什么是科学”以及把科学从思辨从哲学中独立出来来说，大概就要数Aristotle（尽管Aristotle的具体物理理论大多数错的）还有Galileo、Tycho和Newton这几位了。由于这个原因，也由于

我对物理学的熟悉程度更高，在这一节和下一节中，我主要用后面这三位的贡献为例来阐述动力学的视角和普适性的要求。

日常经验中，我们扔出去的东西总是要落回到地球上，而且Galileo还展示了这个落到地球上的过程有共性：不管质量多大，一般情况下，从同一个点开始放下，轨迹一样时间一样。这个共性自然就提示，在这个过程中可能有同一个因素决定了这样的运动。同样地，Tycho和Kepler还展示了天体的运动也有共性。它们都是椭圆，不同星体的周期和“半径”存在着一样的关系。于是，自然，它们的运动也可能是同一个因素导致的。为了回答这样的因素有没有，是不是同一个的问题，这我们自然要问，产生这样的运动——也就是状态变化的原因是什么。很多事物在静态状态上就有很多的共性。很多事物在状态的变化上有很多共性。很多事物在变化的原因上有共性。很多事物在原因到变化的联系上有共性。当在前一个层次看不到共性的时候，我们总是尝试看看后一个层次的共性。或者，当在前一个层次看到共性的时候，我们总是希望看看是不是后一个层次的共性导致的。Newton就是沿着这样一个思路考察了地球表面物体的运动，把状态的原因归结为力。然后，把天体的状态变化的原因也归结为力，而且还进一步提出，让地面上的物体落下来的力和让天体转着跑的力是同一种，并且连原因到表现之间的联系——也就是运动方程都是同一个。在这里，统一导致地球上下落的力和导致天体转圈的力，统一运动方程，都是需要巨大的想象力和创造力，以及数学能力¹¹的。这两个统一，在直接实验证据上，当时是不够的。因此，Newton 方程和Newton 万有引力定律都是理论上巨大的跨越，还有为了实现这个跨越提出¹²和发展出来的微积分。因此，从这个角度来说，动力学的视角，可以看做我们认识世界的过程中追求更大程度的普适性的结果。

小结一下：动力学的视角在科学中的普遍性是因为有的时候静态问题也需要动力学分析来简化和讨论稳定性，有的时候是因为很多问题本身是演化的问题，还有的时候是因为我们希望从更高的层次看到共性。这个更高层次的共性，有的时候也叫作普适性。

¹¹指的是从现实中抽象和提出数学结构的能力，还有完成分析计算的能力。主要是前者。

¹²微积分的另外一个提出者是Leibniz。

1.7 普适性：一个概念、原理、分析方法或者模型 尽可能多地描述现象

原则上说，科学只需要给每一种现象都找到一个心智模型，并且通过这个心智模型得到的结果还能够和显示相符就可以。但是，通常科学还有一个潜在的要求：希望用更少的原理和模型来解释更多的现象。有的时候这个也被称为普适性的要求。例如，关于打雷、下雨、闪电原则上我们可以存在一个雷公电母的理论，只要这个理论它能够与现代的基于电荷、气压、温度、湿度等等物理量的气象理论给出大致相当的关于气象的预测、控制和理解就可以。但是，很有可能满足这些要求的雷公电母的理论必须是有户口的，也就是说，他们的脾气（例如生气和高兴的条件）是依赖于他们住在哪里。而反过来，我们却看见作为现代理论的基础的电荷、气压、温度等概念，不仅仅可以用来预测、理解和控制风雨雷电，还可以被用在内燃机的汽缸、电视、电话以及其它各种问题上，而且它们的行为不管什么情况都遵循同一个模型（同一组方程）。

在上一节的Newton 万有引力定律和Newton 方程的例子中，我们就强调了：对普适性的追求是这些理论能够提出来的原因之一。当然，后来证明这个过程中提出来的微积分——我想这个可能当时不是为了追求普适性——其实普遍性一点也不比前两者差。在这个例子中，我们看到了对现象层次的相似性的关注，对状态变化的原因的层次的相似性的关注，对运动方程的相似性的关注，以及对计算分析方法的相似性的关注。这些不同层次的相似性或者说统一，一直是科学的主题。也就是说，科学不仅仅是一个能够描述现实的心智模型的集合，还最好是相互有联系的，能够从最少的假设和概念当中构建起来的成系统的心智模型的集合。

当然，大多数时候，我们需要从表现上的相似性出发。于是，我们才有收集和分类生物或者矿物物种的博物学家，或者像Mendel这样通过实验来检验表观相似性以及探索表观相似性的深层原因的科学家。对于按照表现来得到的分类的进一步的思考，以及这些分类之间的联系的思考，才使得进化论和基于基因上的联系的研究能够被提出和发展起来。普适性就是指，在科学理论体系的构建过程中，追寻理论体系基于更少的原理和假设，追寻理论体系能够用于描述更多的实际现象。

同样，因为系统科学是科学，我们希望系统科学的分析方法，或者方程——如果将来还可能建立一套方程的话（尽管我认为这个可能性很低），也具有普适性，能够用来分析大量的具体系统。甚至，系统科学还能够发现看起来不同的分析方法之间的共性。这个我们称为相似性，以及相似性的相似性。一个好的科学家要善于发现系统之间在结构行为上的相似性，以及基于这个相似性提出来的有普适性的分析方法，甚至分析方法之间的相似性。

关于动力学视角和普适性的要求，我们将来会在具体研究实例中有更深刻的体会。同时，这里也强调一下数学物理的重要性：你可以看到我为了说明这两点，所用的例子大部分都是来自于数学和物理的。当然，一方面是我不太懂其他的学科就懂数学物理，另一方面，也是因为数学和物理在科学中的独特的地位。很多思想、概念、分析计算技术都和这两个学科的发展和具体研究有关系。

以上所有的体现什么是科学的例子，基本上都有对应的现象。这也体现了科学是现实的可证伪但是尚未证伪的可计算的心智模型这一点。也就是说，把理论模型的结果和实际情形作比较是科学研究中心非常重要的一环。而这个比较往往是通过测量、统计来实现的。为了帮助读者更好地体会这一点，请尝试完成习题 1.5。

1.8 作业

习题 1.1. 阅读 Gowers 的 Mathematics: A Very Short Introduction[24]（《数学是什么》），做读书笔记（总结、体会、概念图，体会可以结合自身经验）。

习题 1.2. 阅读 Mobus 的 Principles of Systems Science[25]（《系统科学原理》），做读书笔记。

习题 1.3. 阅读 Beveridge 的 Art of Scientific Investigation[30]（《科学研究的艺术》），做读书笔记。

习题 1.4. 阅读 Einstein 和 Infeld 的 The Evolution of Physics: The Growth of Ideas from Early Concepts to Relativity and Quanta（《物理学的进化》）或者 Feynman 的 The Character of Physical Law（《物理定律的特性》）之一，

做读书笔记。

习题 1.5. 科学中的模型和实际现象的对比（通过实验、测量、统计）。科学中模型和现实的对比是非常重要的，而这个对比往往是通过测量和比较来实现的。现在你来通过如下两项任务体会好科学中的测量以及通过测量做的模型和实际的对比。注意，为了完成这两项作业，可能你需要了解一下物理实验中的测量和测量误差这一部分的知识。

- 观看 Walter Lewin 的公开课 Mechanics 关于钉枪打钢珠的那一节（网易公开课 Walter Lewin 的 Mechanics 之“三维运动 - 自由落体参考系”）和钢球撞 Lewin 那一节（“功、能、及万有引力”）。写一个视频赏析报告，联系测量以及模型和现象的比较这个主题。
- 选择某一个科学的知识、定理、定律，例如通过勾股定理算三角形的斜边长度、自由落体运动的速度时间关系位移时间关系、平抛运动的速度时间关系位移时间关系、三角形平行四边形等多边形或者圆的面积、投针实验求圆周率 π 的值等等，找到相应的实际问题，做一个测量和比较。

习题 1.6. 课程项目：编写一个伽尔顿板的程序，要求实现原始的版本，并且可以调整左右偏的概率。

习题 1.7. 课程项目：阅读 word2vec 文献，搞懂原理，并利用已有工具包实现一下，作报告并展示结果。

习题 1.8. 课程项目：参考上面信息熵和编码长度的例子，请做一个信息熵和信道容量的可以用于教学展示的报告（问题背景、问题数学化、解答、证明、检验或者使用举例、你自己的理解）。

习题 1.9. 课后阅读：

- Popper 的 The Logic of Scientific Discovery[9]（《科学发现的逻辑》）
- Bender 的 An Introduction to Mathematical Modeling[44]（《数学模型引论》）
- Anderson 的 More Is Different[21]

- Haken的 Synergetics. An Introduction[45]
- Nicolis, Nocolis和Prigogine的 Exploring Complexity[46]
- Prigogine的 The End of Certainty[47]
- Holland的 Complexity: A Very Short Introduction[48]
- 赵凯华的《定性和半定量物理学》[42]

1.9 本章小结

系统科学要么是关于系统的科学，要么就是具有系统的特点的科学。因此，在这一章中，我们首先讨论了什么是科学，科学和现实和数学的关系。科学对普适性的追求，科学的演化的动力学的视角，科学的可证伪性。所有的这些讨论，我们都希望通过具体的研究工作的例子来展开，而不是纯粹理念或者哲学上的讨论。这些合起来，我们看到科学就是从现实中提炼数学结构以及把数学结构用于描述现实得到的一个尽可能普适的理论体系。然后，我们讨论了系统——什么是系统的特点。一般的系统是不存在的，因此，尽管系统科学可以看做对一般的系统的科学的追求，但是实际上总是通过对具体的系统的研究来实现的。那么，什么样的研究具有系统科学研究的特点呢？我们提到了相互作用，从直接联系到间接联系，涌现性和整体的视角，学科融合交叉，从具体系统到一般方法再到具体系统这几个特点。整体的视角不是说还原论就是不好的不对的，而是说，还原的分析和重新合起来这两个过程要随时结合起来，没有还原分析我们就不能能了解透彻，同时重新合起来有可能出现涌现性：合起来以后的系统的整体性行为有可能在拆分以后的系统的元素的层次上没有。

由于对具有共性的能够处理很多个具体系统的概念和分析方法的追求，导致系统科学这个学科很像数学。但是，系统科学和数学有非常大的区别，我们需要关心概念和分析方法和现实世界的联系，是否能够描述现实，而不仅仅是概念本身的发展。因此，从这个意义上说，更像物理学。以我自己的角度，我是把系统科学看做一个叫做广义物理学的东西：把数学结构用于描述传统物理学的研究对象之外的更多其他对象的具有系统特点的现象。

这两部分的系统的特点——相互作用导致的多体系统的涌现性和分析方法的一般性——合起来就是来自于Anderson和Kadanoff的合起来的 More is Different, More is the Same。我给它翻译了一下：多了就不一样，多了就会一样。或者更加文艺一点：一片两片三四片，构成系统出涌现；五片六片七八片，飞入系统都不见。

在实际教学中，主要是本章，加上的第一篇其他章节的一部分内容放在一起，其实，是我们《系统科学概论》的课程的主要内容，主要是通过研究实例来展示和帮助学生体会什么是系统科学的。也就是说，就算不再看本书的其他章节，通过这一章，应该也可以大致体会到什么是系统科学。至少，这是我自己的对这一章的要求。

第二章 一些具有系统科学特色的 研究实例

上一章中，我们用研究工作来说明系统科学的系统性和科学性，系统的意味，以及什么是科学，科学和数学的关系。在这一章中，我们继续用系统科学的典型研究案例，其中大部分也可以看做是来自于问题所属的具体学科的研究，来体现什么是系统科学，尤其是整体的视角，相互作用，结构的产生，动力学的视角等。这一章可以说是对上一章在具体研究实例上的补充。

就像学习绘画等艺术，需要在欣赏大量的好的作品的基础上，做理论、思维和技法的总结和学习一样，学习系统科学，也需要在欣赏大量好的研究工作的例子的基础上，做理论、思维和分析方法的总结和学习，做什么是系统科学的思考。

2.1 热寂说与开放系统结构的产生

孤立的物理系统有一个不可逆的演化方向——向着各向同性的均匀的状态演化。这一点将来我们会学习到，我们将来也会学习到在这里问为什么，为什么要问这个为什么¹，以及前人已经做过的回答的尝试。在日常经验上，我们对此有深刻的体会。例如，在一个大水缸里面滴上一滴墨水，墨水就会扩散到整个水缸。把一盒子气体和另一个空盒子放在一起，过一会

¹物理理论里面的经典系统和量子系统的运动方程都是可逆的，不存在一个特定的演化方向，也就是不存在演化终了的某个定态。实际日常生活中感受到的孤立系统大多数时候是正则系综的系统，称为正则系统。正则系统和外界存在能量交换。以后统计物理学学会学习到正则系综的概念。

两个盒子都会有气体，并且基本上均匀分布。反过来，我们从来没有看到过水缸里面的墨水自动聚成一滴，两个盒子里面的气体聚到一个盒子而留下一个空盒子。我的书桌上的书随着我的使用通常只会越来越乱（更均匀），除非我有意整理，不会自动回到我上一次整理完成的状态。当我们把整个太阳系、银河系或者整个宇宙当做这样的一个孤立系统来考察的时候，我们发现，如果上面的这个有方向的演化是对的，我们将向着更加均匀，也就是更加没有结构——结构在这里指的是，例如生命体这样的结构都是和周围的世界相比非常不均匀的东西，星球这个结构也是非常不均匀的东西——的世界演化。于是，宇宙就会进入到一个“寂静”的没有任何有结构的活动的状态，除了偶尔起一两个旋即又平静的波澜。物理学家们称这个说法为“热寂说”。

当然，在什么条件下，系统会向着这样的时间不可逆的方向演化，还是一个问题。我们稍微讨论一下这个问题，尽管这个不是我们在这里讨论这个例子的重点（在这里，我们是用这个例子做对比背景来突出结构的产生这个系统科学的主题之一）。经典或者量子的演化方程本身都是时间可逆的，于是，完全存在着各个气体分子又聚在一起的可能性。研究者们也做了一些尝试，来回答这些问题。其中一个很好的答案是熵——一件事情发生可能性的多少或者说一个状态对应着微观状态的多少，熵大的状态更容易出现。用这个视角我们来看气体重新回到一个盒子：我们需要气体分子们的运动方向相互协调才行。这个协调需要它们的初始速度相互协调，例如集体从右到左，还不能考虑容器壁的碰撞。反过来，基本上任何一种“乱”的初始速度容器壁的反弹甚至气体分子们的碰撞都可能导致两个盒子都有气体。于是，尽管理论上存在聚在一起的可能性，但是这个可能性出现的几率远远小于各向同性的可能性。

那么，好吧。既然如此，结构是如何产生的呢？我们的星体大概是从星云中演化出来的。我们自己大概是从低等生物进化而来的，低等生物有可能是从非生物界中诞生的。这些都是世界出现结构越来越不均匀的演化。按照热寂说，或者说熵变大的方向演化的说法，这些都不应该出现啊。这个问题困扰了一代又一代的物理学家、复杂性和系统科学的研究者甚至哲学家。Haken[45] 和Prigogine[49] 各自的工作提出了一条可能的出路：在局部环境中形成一个开放系统可以使得结构从没有结构中产生。这里我们简

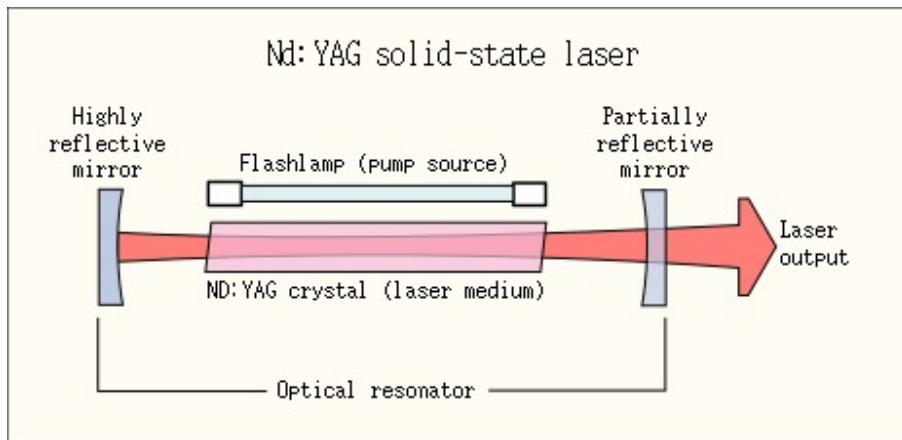


图 2.1: 激光工作原理示意图, 由 Lakkasuo 制作, 来自于 Wikipedia “Laser construction” 词条。英文单词翻译: Nd:YAG (掺钕钇铝石榴石) 固态激光、高反射镜、闪光灯 (泵源)、部分反射镜、Nd:YAG 晶体 (激光介质)、激光输出、光学共振腔。

短地讨论三个典型的例子: 激光、Bénard 流和Belousov-Zhabotinsky 反应。顺便, 强烈推荐阅读上面两本书 [45, 49]。实际上, 本书的目标之一, 就可以看做帮助你能够真的欣赏和理解这两本书。

激光是一束处于同一频率的沿着同样的方向出射的大量光子。一般来说, 像白炽灯这样的光源产生的是处于某个波段范围内各个频率都有的向着各个方向出射的大量光子。大致来说, 白炽灯的光是通过电子跃迁释放光子得来的: 电流使得钨丝发热, 发热的钨丝里面有大量的处于各种不同的高能激发态的电子², 这些电子会向着低能态跃迁, 这些跃迁释放光子。由于到底处于哪一个高能态, 到底跳到哪一个低能态都具有多种可能性, 光的频率和方向就不是一致的。那么, 激光光源是如何实现这个同频率同方向的呢? 激光里面有两样关键的东西——激光材料和激光腔 (例如一对平面镜之间的空间) 和一个关键概念——受激辐射。容易被激发的激光材料保证拥有处于高能态的电子的原子比较多。注意这个时候系统需要外界能量的输入来维持这个高能态的粒子比较多的状态。然后, 这个时候偶然产生的光子们就会向着各个方向出射。其中正对着两面镜子的光子会被反射, 从而在激光腔里面再一次通过。当一个处于高能激发态的电子遇到一个频

²能态的概念可以在量子力学部分学习到, 或者参考其他量子力学书籍 [36]。

率相配（这个高能态电子跃迁到某个低能态释放的光子的频率和这个遇到的光子相同）的光子的时候，电子会倾向于释放和这个遇到电子一样的光子。这就是受激辐射。于是，在两面镜子之间来回反复跑的光子就有可能可以激发更多一样的频率和方向的光子。于是，我们就得到了大量的方向一致频率相同的光子。当然，为了得到出射激光，某一面平面镜需要漏光才行。漏出来的光就是激光。为了平衡这个漏出来的激光，整个系统需要从外界吸收能量。

在激光这个例子中，我们看到，有序——激光器的大量同方向同频率的光子——从无序——白炽灯的各个频率方向的光子，并且在激光中产生光子的原理本身和白炽灯的没有区别——中产生。在这个例子中，受激辐射和外界能量供给，是系统能够出现结构的原因。和外界交换能量或者物质的系统，就称为开放系统³。基于对激光的研究，以及其他结构产生现象的研究，Haken开创了“协同学”，认为局部环境中的开放系统以及这个系统下个体的协同行为——在这里是由于受激辐射和光在激光腔里面来回去地反射形成的一致性——是结构从无结构中产生的原因。

第二个结构产生的例子是Bénard流 [1-3]。对一个容器中的水加热——上下两层都加热（或上层降温，或者上层开放）但是温度不一样，在到达水的沸点之前当温度差达到一定的大小，容器中的水就不在是静止的了，而是形成一定的运动斑图（Pattern）。例如下图中的蜂窝状花样。这些花样的边界实际上是由水的有规律的对流造成的。水在这些边界上上下流动，从而达到更好地从高温端到低温端输运能量的目的。在这里，系统也需要跟外界交换能量。在温度差比较小的时候，通过热传导已经能够比较好地输运能量了。因此，整体上水面保持静止，尽管实际上这个时候水分子还是各自在独立地运动的。当温度差大到一定程度，系统就会发现，实际上，整体协调运动，才是更加有效的输运能量的途径。也正是这个需要系统的各个元素——这里是水分子——协调运动的特征，Haken称之为协同学。

第三个例子是Belousov-Zhabotinsky反应 [4-7]：在稀硫酸水溶液中发生铈催化的丙二酸被溴酸盐氧化的反应。这个反应在一定条件下会出现空间不均匀的斑图，时间上周期性的规律。反应的方程式和动力学方程就不在这里写出来并计算了。具体来说，这个反应动力学可以是不包含空间信息的

³以后在统计物理学中，我们会有更加明确的定义，更加细致的区分。

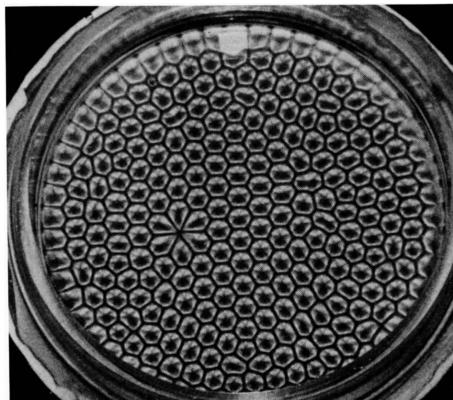


图 2.2: 硅油的 Bénard 流斑图, 来自于 [1]。

平均场的种群动力学形式的方程, 也可以是包含空间信息的反应扩散方程。Prigogine等人对这个反应简化以后的三分子动力学模型, 也称为Brusselator(布鲁塞尔子) [7], 以及更加复杂一点的 Oregon 模型 (Oregonator) [8] 可以用来定性解释这个实验现象。在这里, 反应物需要外界输入或者取出——于是这个系统是一个开放系统——来维持这个时间空间不均匀的斑图。可以证明, 在一定条件下, 空间时间均匀的状态成了这个系统不稳定的定态, 而带有时间空间斑图的状态成了系统稳定的状态。

当然, 这个“局部环境下的开放系统在系统的元素相互协调作用的条件下状态的稳定性发生变化从而导致结构产生”的出路没有解决根本问题: 把整个宇宙当做一个系统来看呢, 是不是还是向着更加均匀的方向演化呢? 我们也没有说, 这个是唯一的出路。结构到底如何从没有结构产生的, 仍然是一个问题。但是, 在局部系统上, 这毕竟给出了一条结构产生的可能的道路。

2.2 整体运动的激发模式，涌现

这一节我们来讨论整体运动的激发模式以及更加一般的涌现性。这一节在思想上受Anderson的文章 “More is different” [21] 很大的影响。

我们先来看看物体的运动形式。一个不计大小和形状的物体的运动形式只能是平动: 任何时候物体上任意两点的运动状态 (速度) 都一样。考虑了形状之后但是形状固定的物体可以做转动: 物体的有一部分可以围绕着



图 2.3: Belousov-Zhabotinsky 反应 空间斑图, 图来自于 Stephen W. Morris 的 Flickr 网页, <https://www.flickr.com/photos/nonlin/4297013382>, 2019 年 10 月 14 日访问。

另外一部分旋转,但是任意两点之间的相对位置不变。如果形状可以变,则还可以振动:物体上各个点的相对位置也可以变化。如果一大堆振动物体放在一起,则还可以出现波这种整体运动。实际上,第一种情况成为质点的运动,第二种情况称为刚体的运动,第三种情况称为弹性介质的运动,第四种称为固体或者流体的波动。实际上这里这些不同的运动形式可以看做一个系统不同的运动模式被激发。一个真实的小球,尽管是固体但不是刚体,可能这四种运动模式都会被激发。当然,有的时候平动最容易被激发,振动最难,能量要求不一样。了解了这个运动模式的激发,或者说涌现之后,我们再来看更一般的涌现,学科的涌现——一个更加上层的学科和它的底层的学科的关系。

绳子上的波我们都见过,拿一根跳绳用的绳子抖动一下就可以看到。当然,你自己观察和尝试会发现,并不是所有的抖动效果都相同:有一些频率的抖动可以更加容易激发波。不过,如果你迅速地没有特定周期规律地抖动绳子,也能看到别的现象,例如绳子上的孤子波:一个小小的鼓包沿着绳子在传播,鼓包的形状不太发生变化。如果另一边还有一个人在抖动绳子产生另一个孤子波,没准你还能够看到两个孤子波如何相互碰撞。一般的波动形状都是要扩散开去的,不一定能够保持很长时间。为什么孤子波会保持形状并且传播而不扩散呢?实际上这个背后的原因是它们所满足的是

非线性波动方程，而不是一般的线性波动方程。如果你想了解更多可以通过检索“KdV 方程和孤子”，或者参看文献 [50]。在这里，我们仅仅讨论线性波动方程，来体现一旦我们关心多个个体的整体运动，那么，我们可能会看到单个个体里面看不到的运动模式。

习题 2.1. 课程项目：观察孤子波。检索和阅读孤子波的一些文献，然后自己想办法产生和观察孤子波，并且录像。如果能够提供一个计算分析的解释就更好了。

首先，我们从最简单的谐振子的运动方程开始。这一节需要用到Newton 力学的知识， $\vec{F} = m\vec{a} = m\ddot{\vec{x}}$ ，还有矩阵本征向量，以及最简单的线性常微分方程的知识。这些知识都可以从相应的教材或者在后面的章节里面找到。

例 2.1 (简谐振子的运动方程). 一个固定长度为 l_0 弹性系数为 k 的轻质（重量忽略不计的意思）弹簧左端固定在墙上右端连着一个质量为 m 的小球。小球先拉开一段距离 A ，不动。松开手以后，小球将如何运动？

以弹簧的左端为原点，指向弹簧的右端为正方向建立一个一维的坐标系，坐标记为 x 。小球在 x 点的时候，受到的力是 $F = -k(x - l_0)$ 。按照Newton 运动定律，其运动方程是 $-k(x - l_0) = m\ddot{x}$ 。做变量替换 $u = (x - l_0)$ ，并用 $\ddot{u} = \ddot{x}$ ，得到 $-ku = m\ddot{u}$ ，也就是 $\ddot{u} = -\frac{k}{m}u$ 。这个微分方程有通解 $u(t) = a \sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + b \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)$ 。考虑到初始条件 $u(0) = A, \dot{u}(0) = 0$ ，我们得到 $u(t) = A \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)$ ，也就是 $x(t) = A \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + l_0$ 。

这个问题的解决和这个方程的求解非常地简单。现在，我们可以考虑一个稍微复杂一点的问题：一根弹簧连着的两个小球的运动。

例 2.2 (两个小球的简谐运动). 一个固定长度为 l_0 弹性系数为 k 的轻质（重量忽略不计的意思）弹簧左右两端都连着一个质量为 m 的小球。两个小球先拉开一段距离 $A + l_0$ ，不动。松开手以后，两个小球将如何运动？

以弹簧的初始时刻的中间位置（也可以选择初始时刻的左端位置，不过将来写起来更复杂）为原点，从弹簧的左端指向右端为正方向建立一个一维的坐标系，坐标记为 x 。左边小球的位置记为 x_1 ，右边小球的位置记为 x_2 。这个时候，两个小球的运动方程是，

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = -\frac{k}{m}(x_1 - x_2 - l_0) \\ \ddot{x}_2 = -\frac{k}{m}(x_2 - x_1 + l_0) \end{cases}$$

做一个变换 $X = x_1 + x_2$, $x = x_1 - x_2 + l$, 我们得到

$$\ddot{X} = 0, \ddot{x} = -2\frac{k}{m}x.$$

于是, X 简单, 匀速运动; 对于 x , 我们回到一个振动小球的情况, 仅仅是典型频率产生了变化 $\sqrt{\frac{2k}{m}}$ 。

也可以用更复杂但是更加具有通用性拓展性的方法。做变量替换 $u_1 = x_1 + \frac{l_0}{2}$, $u_2 = x_2 - \frac{l_0}{2}$, 得到,

$$\begin{cases} \ddot{u}_1 = -\frac{k}{m}(u_1 - u_2) \\ \ddot{u}_2 = -\frac{k}{m}(u_2 - u_1) \end{cases}$$

也就是

$$\begin{bmatrix} \ddot{u}_1 \\ \ddot{u}_2 \end{bmatrix} = \frac{k}{m} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}$$

也可以记为矩阵和向量符号的方程

$$\ddot{u} = Au.$$

接着我们希望把这个矩阵方程变成例 2.1 中的单个小球的运动。我们来做一个线性变化把矩阵分解成两个本征运动模式, 也就是矩阵的本征向量所代表的模式。这个矩阵的本征向量很好求, 分别是本征值为 0 的本征向量是 $\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$, 本征值为 $-2\frac{k}{m}$ 的本征向量是 $\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$ 。于是, 定义变换矩阵

$$U = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

可以验证

$$U^T U = I = U U^T$$

定义

$$\tilde{u} = U u$$

于是,

$$u = U^T \tilde{u}$$

现在把这个代入到矩阵和向量符号的方程中，我们得到

$$\ddot{u} = U^T \ddot{\tilde{u}} = Au = AU^T \tilde{u} \Rightarrow \ddot{\tilde{u}} = UAU^T \tilde{u} = \tilde{A} \tilde{u},$$

其中，由于 U 正好就是使得矩阵 A 对角化的其本征向量构成的矩阵（这其实就是为什么之前需要先求解 A 的本征向量）， \tilde{A} 成了对角矩阵，

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2\frac{k}{m} \end{bmatrix}.$$

于是，在 \tilde{u} 的变量下，方程成了

$$\begin{cases} \ddot{\tilde{u}}_1 = 0 \cdot \tilde{u}_1 \\ \ddot{\tilde{u}}_2 = -2\frac{k}{m} \cdot \tilde{u}_0 \end{cases}$$

于是，我们得到了和例 2.1 类似的方程，也知道了，在本例的另一种解法中为什么需要引入之前的那个线性变换： \tilde{u}_1 就相当于 $x_1 + x_2$ （差一个系数）， \tilde{u}_2 就相当于 $x_1 - x_2 + l_0$ （差一个系数）。

进一步求解并且写下来符合初始条件的解的形式，在此就略过了。

需要注意的事情，就是，之前是一个简谐振动的运动模式，现在成了两个运动模式：一个匀速平动，一个是更高频率的简谐振动。

下面，我们来思考有很多个小球用弹簧连着的情况。考虑一根绳子、一个平板或者一块固体上的可能的运动。我们把绳子看做好多个小球通过介质连在一起形成一个一维的系统，把一块平板看做好多个小球通过介质形成一个二维的系统，把通常的固体看做好多个小球通过介质形成一个三维的系统。当然，在这里，介质就是绳子自己。只不过，用这样的角度来看问题，我们可以借助限个小球的系统来理解无限个小球的系统。在绳子上，我们经常可以看到波——一个个鼓起来的包沿着绳子传播。我们看看是否真的是某种东西在传播。我们很容易在绳子上把波制造出来：把绳子的一端固定，抓住绳子的另一端，别拉得太紧让绳子松弛下来，轻轻地小尺度上下振动。你可以尝试快点或者慢点振动，但是，保持振动尺度比较小。绳子上的每一个小段都在上下振动，没有任何一个点实际上在沿着绳子传播。尽管有的时候，看起好像一个鼓包从一端传递到了另一端。大多数时候，绳子会小幅度不太协调地运动。在合适的条件下，绳子振动的幅度会变的特

别大，而且好像整个绳子在协调一致地运动。如果你亲手尝试一下把这样的协调一致大幅度的振动制造出来，你会更加深刻地体会到什么因素比较关键：你在绳子一端振动的频率也就是快慢最关键。实际上，你是希望绳子上的振动传播到另一端并且被另一端“反弹”回来之后的整个过程是相互加强的而不是相互抵消的。相互加强就会看到整体协调的大幅度振动，相互抵消就会看到绳子比较杂乱的小幅度振动。换一个角度，我们看到：每一个绳子上的小球（或者说绳子上的每一个小段）都在做上下振动，而没有沿着绳子传播，但是有的时候它们相互协调形成了大幅度的“波”，有的时候比较独立地做小幅度运动。从个体的运动到整体的波，这个就叫做整体运动的激发模式，也叫做涌现性。

实际上，我们可以通过计算来对此有更加深刻的体会。通过对绳子上的某一段做受力分析，然后运用Newton 第二定律，我们可以推导出来，绳子上的运动——用处于 x 的一小段在 t 时刻的为止 $u(x, t)$ 来描述，符合波动方程⁴，

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.1)$$

对于这个运动方程，我们可以做Fourier 变换，直接写出来通解，

$$u(x, t) = \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right). \quad (2.2)$$

其中我们已经用了合适的初始条件和边界条件来简化我们的通解。在这里，它们是

$$u(x, 0) = f(x), \quad (2.3)$$

$$\dot{u}(x, 0) = 0, \quad (2.4)$$

$$u(0, t) = 0 = u(L, t). \quad (2.5)$$

第一项表示一开始系统有一个初始位置，其中有的地方不为零。第二项表示任何一个地方的初始速度为零。第三项表示绳子的两端完全被固定，因此位置的值等于零。当然，实际上，我们上面的情景中，只固定了一个端点，另外一个端点实际上被我们在驱动。当然，对于这个情况，我们也能写下方程并求解，不过会复杂很多。在这里，由于在发生协调一致波动的时候，

⁴具体推导见力学部分

振动的幅度远远大于手驱动的幅度，并且我们仅仅关系为什么以及在什么条件下这样的协调一致波动会出现的问题，我们认为驱动端点的振动可以忽略。

我们再来看现在写下来的通解，看起来好像是一群振幅不一样但是相互协调的小球的振动——处于 x 处的小球的振幅是 $c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ 。此外，振动的频率也变成了一系列可能值 $\omega_n = \frac{cn\pi}{L}$ 。我们也可以换一个角度来看这个通解：好像是每一个由 n 所标记的运动模式 $\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)$ 的相互叠加，叠加的比例是 c_n 。后者这个运动的模式不再是在单个小球的层面了，而是一个集体波动的模式，函数形式里面既有 x 还有 t 。这两种视角，对于绳子上的小球的问题来说，都是可以用的，而且没有太大区别。但是，对于将来更加复杂的问题，后者更具有优势：它看起来就是不同频率 ($k_n = \frac{n\pi}{L}, \omega_n = \frac{cn\pi}{L}$) 振动的“小球”——这里的小球就是指这个特定 k_n, ω_n 的模式——的直接相加，而不再看得见真实的用绳子连着的小球了。把看起来有相互作用的问题转化成为一个看起来无相互作用的问题，总是一件令人愉快的事情：无相互作用系统的处理要远远比相互作用系统简单。因为这个原因，我们以后称绳子上的小球的问题为无相互作用系统。这也提示我们，有的时候看起来有相互作用的系统并不是真的有相互作用的，只要你找到合适的看问题的角度。

绳子连着的小球的运动可以用多个独立的振子来描述这个现象——或者说看问题的角度——就称为“准粒子”，从真实的多粒子的系统中涌现出的准粒子。以后我们会介绍精神上和这个例子类似的其他的涌现性的例子。例如上一小节中提到的有结构的状态从 匀状态中出现，也称为涌现性。在更加复杂的系统中，这些代表的基本运动模式的准粒子之间可能还存在着相互作用。以后我们会在Green 函数部分遇到。不管如何，这个用一个系统的基本运动模式的角度来重新看这个系统的角度，是具有一般意义的。例如传统超导理论中的这样的准粒子就是通过交换声子而结合在一起的两个电子构成的近独立波骰子，而超导状态就是这些近独立波骰子的波色爱因斯坦凝聚态，于是才会导致电阻的消失。

在相互连在一起的多体系统中寻找整体运动的基本模式，或者说，总是有一些整体运动的基本模式从相互连在一起的多体系统中出现，就被Anderson称为“More is different”（多了就不一样）[21]：新的模式会在多体问题中涌

现出来。

关于波和振动，我们还可以看到更加丰富多彩的现象。例如图 2.4 中的Chladni 斑图。在整体运动模式 $\sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)\cos\left(\frac{m\pi}{L}t\right)$ 中，除了两个端点， $x = \frac{L}{n}$ 的地方也是不动的。这样的不动的地方就称为“节点”。如果是一个二维平面，那么这样的节点就有可能可以连起来组成节点线，当然也可以是分立的节点。在一个振动的二维平面上撒上沙子，然后沙子聚集的图像就显示了节点线。这样的节点线，根据振动模式的不同，可以展现出来非常震撼的图形。有兴趣的读者可以通过检索“Chladni Pattern”找到这样的图片和视频。网上有很多。例如这个叫做Cymatics 的网站⁵有非常炫的Chladni 斑图和音乐相结合的视频。

在ECHO – Cultural Heritage Online网站⁶上可以找到Chladni的原文[51]，里面有他手绘的斑图。这里选取了其中的一张见图 2.4。Chladni 斑图的解释是这样的。考虑二维空间上波动的一般解，

$$u(x, y, t) = \sum_{mn} A_{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right) \cos\left(\frac{E_{mn}\pi}{L}t\right), \quad (2.6)$$

其中 A_{mn} 就是这个由一对正整数 (m, n) 所标记的整体振动模式前面的比例系数，表示这样的振动模式在最终的振动中占有的成分为多少； E_{mn} 是这个振动对应着的能量是 (m, n) 的对称函数——交换 m 和 n 之后，能量值不变。

在实际观测到的Chladni 斑图中，由某一个能量驱动在某一组初始条件（例如初始速度都是零，初始位置在平面上有一个分布）和边界条件（例如振动盘的四周都固定或者都自由）下产生振动，可以看做是这样的叠加，

$$u(x, y, t) = \sum_{mn} \left(A_{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}y\right) + B_{mn} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{L}y\right) \right) \cos\left(\frac{E_{mn}\pi}{L}t\right). \quad (2.7)$$

相当于把同样的能量 E_{mn} 振动模式合在一起看。物理上的原因是，这个振动的驱动器一般控制这振动频率，也就是能量；给定能量以后，能够激发起来的振动模式都会被激发。于是，要加在一起，当然，按照相应的比例系数 A_{mn}, B_{mn} 。例如，当在某一个能量也就是频率下，仅仅 $m = 3, n = 2$ 激活的

⁵<http://nigelstanford.com/Cymatics/>, 2019 年 10 月 14 日访问。

⁶<http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/MPIWG:EKGK1SP1>, 2019 年 10 月 14 日访问。

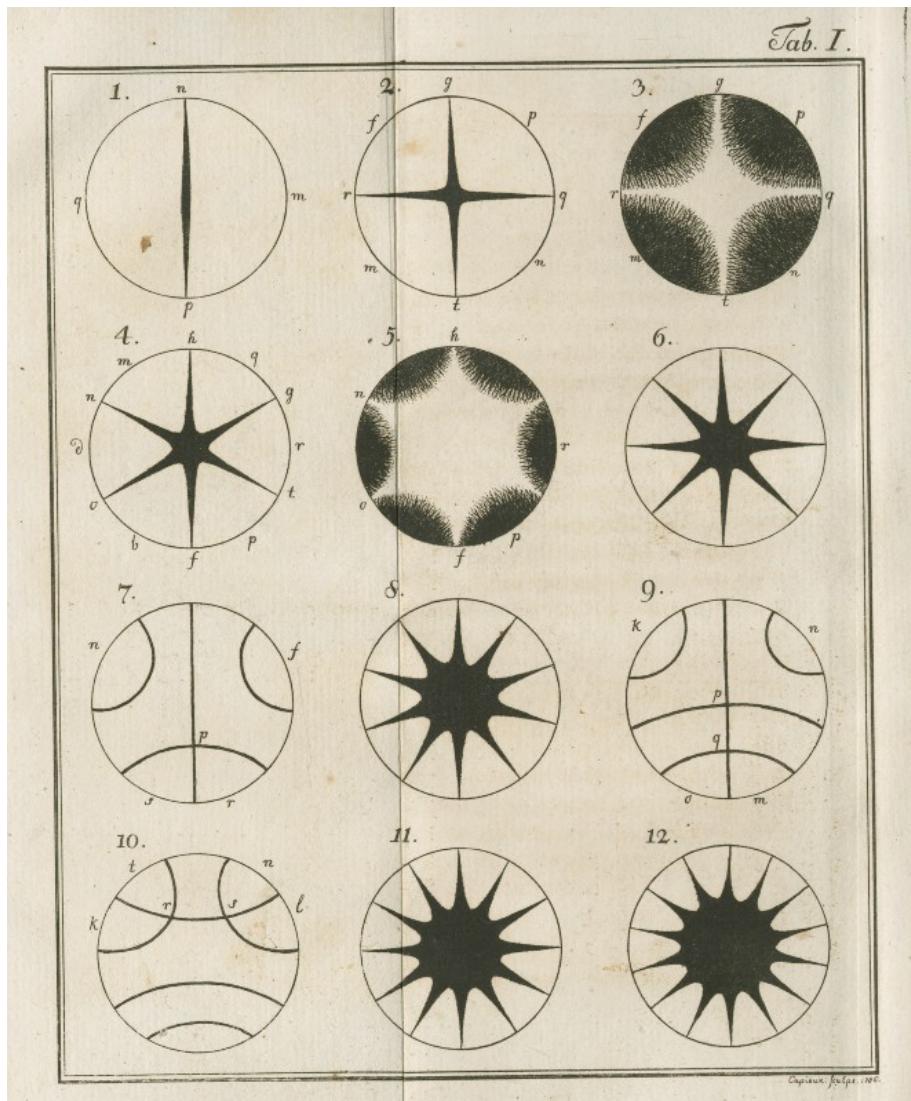


图 2.4: Chladni 手绘的Chladni 斑图, 来自于ECHO – Cultural Heritage Online网站上的原文 [51]。

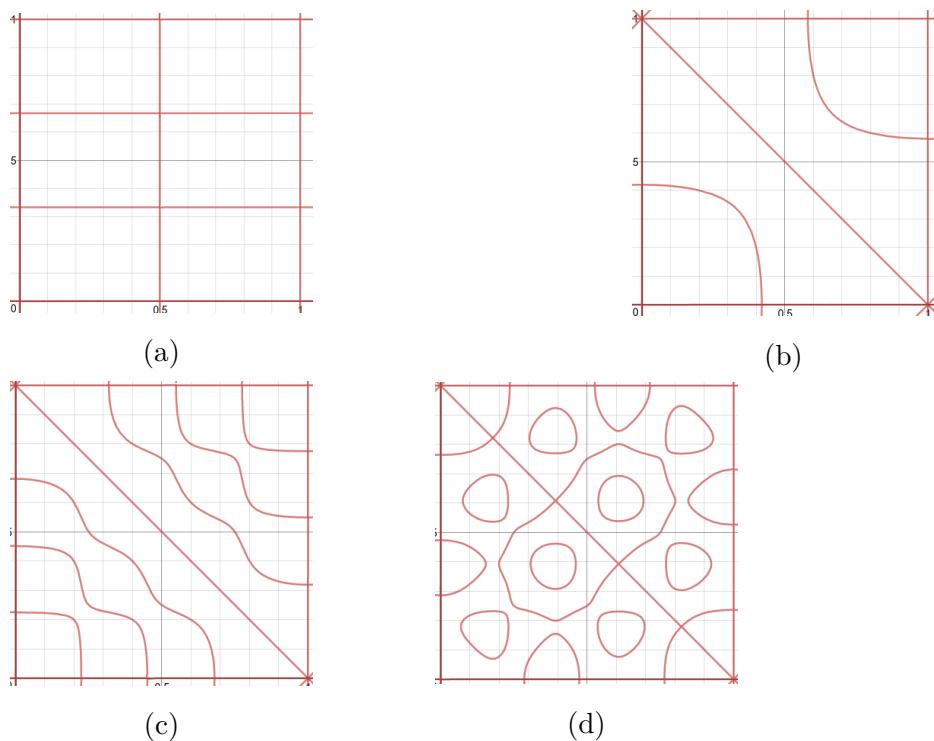


图 2.5: (a) 理论上计算出来的 $A_{32} = 1$ 其他模式的系数都等于零时候的节点线。 (b) $A_{32} = 1, B_{32} = 1$ 。 (c) $A_{54} = 1, B_{54} = 1$ 。 (d) $A_{94} = 1, B_{94} = 1$ 。

时候，对于 $A_{3,2} = 1, B_{2,3} = 0$ 的情况，我们得到节点线方程为，

$$0 = \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right), \quad (2.8)$$

也就是节点线在 $x = \frac{pL}{3}$ 以及 $y = \frac{qL}{2}$ 的地方。它们构成一系列方格线。对于 $A_{3,2} = 0, B_{2,3} = 1$ 的情况类似。对于 $A_{3,2} = 1, B_{2,3} = 1$ 的情况复杂一点，有

$$0 = \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) + \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right), \quad (2.9)$$

我们从图 2.5 看到，这个时候得到的节点线会稍微丰富多彩一点，和上面Chladni的原图就有了一定的相似性。

在Desmos 计算器⁷网站上我给大家做了一个节点线计算器，你可以调整其中的参数来自己观察节点线的变化。在这个Chladni 斑图的计算中，我们实际上仅仅用到了波动方程，用到了波动方程的通解，以及节点线的定义。当然，用波动方程来描述Chladni 斑图是一个简化，更加完整的理论可以参考 [52]。

在初看这个Chladni 斑图的时候，很难想见这么复杂的图形尽然可以通过如此简单的方程（波动方程）和解（不同的基本整体振动模式）来解释⁸。因此，本小节除了说明整体运动模式的涌现之外，还展示数学和科学的关系——科学就是用最简单恰当的数学来描述对象和对象的行为。当然，有的时候这个描述并不唯一。

我们已经通过上面的例子看到当有一群个体放在一起的时候，有可能会出现整体的运动模式，而且这个整体模式有的时候可计算，也给我们提供了一个看问题的更简单的角度。下面我们来用Anderson在“More is different”里面的例子来讨论一下更一般的涌现性。将来，我们还会在临界现象里面再一次讨论涌现性。

我们知道物理学，尤其是粒子物理学，是研究这个世界最最基本的组成单元，也就是基本粒子的。我们的梦想是这样的基本单元越少越好——例如只有一种，不同的物质、物体都是它们的组合方式的效果。最好这个

⁷<https://www.desmos.com/calculator/xhodxpg18r>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

⁸实际上，由于考虑到边界条件和盘子的厚度，还有不均匀性，描述盘子上的波的方程比波动方程复杂，见 [52]

组合方式，也就是相互作用的种类都是越少越好——例如只有一种。当然，现在离这个梦想还有点距离。于是，原则上说，这个世界的一切的丰富多彩的根基都应该是物理学。那么，是不是真的有一天解决了物理学的问题，其他的学科就都没有必要了呢？其他学科可以成为由物理学这个最基本的学科“导出”的学科了呢？当年大学本科的时候，我就是这样想的。例如，化学主要就是核外电子的运动的结果，而核外电子的运动的基础理论当然就是量子力学了。因此，所谓化学这个学科只不过就是“应用量子力学”罢了。我的化学专业的同学总是每每拿我这个大物理学的视角没有办法。学了《系统科学》之后，开始意识到，其实每一次从更基本理论“推导出来”更应用的理论的时候，都存在着一个跳跃。这个跳跃被Anderson称为对称破缺。

例如，可以认为空间本身是旋转对称的，Newton 方程和Schrödinger 方程也是旋转对称的。于是，你可能猜测所有的方程的解，以及系统的状态都是旋转对称的。当你真的开始求解一个例如氢原子的Schrödinger 方程的本征态和任意时刻所处的状态的时候，你会发现违反旋转对称的状态。这个很奇怪，为什么会有以及需要这样的违反空间本身的对称性，还有方程的对称性的状态呢？后来，你接触到电场和磁场中的氢原子就会知道，其实不奇怪，那里的外界电场和外界磁场，会诱导出来那些违反空间和方程对称性的氢原子的状态。而且，你可以想象一下，如果初始状态是空间旋转对称的也没有外界的电场或者磁场来破坏这个对称性，那么，系统将来的状态会一直保持旋转对称。也就是说，旋转对称这种事情在氢原子上是一个守恒量。换句话说，就算某个状态具有某个非对称的状态的分量，那么，同时这个状态就会有一个跟这个非对称的状态具有相反的方向性的状态的分量，于是整体合起来，还是对称的。也就是说，具有破坏对称性的本征态不是问题，需要看最后的组合。当外界条件没有破坏对称性的时候，这些组合会自动平衡，于是保持对称性。这里我们看到了：第一、对称破缺的本征态是存在的。第二、没有外界条件破坏这个对称性的时候，这个本征态上的对称破缺不会导致实际某个时刻的状态违反空间和方程的对称性。于是，看起来，好像空间和方程的对称性，尽管得到了本征态的破坏，但是整体是得到保持的。那么，是不是所有的系统的实际时刻的状态都会保留下来空间和方程的对称性呢？如果是这样，那么，这个世界就会无趣很多，各样东西在没

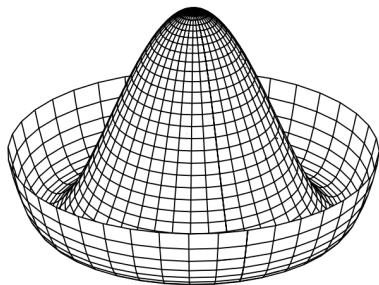


图 2.6: 用墨西哥帽来展示对称破缺: 整体 (环境、运动方程和初始条件) 都是旋转对称的, 但是, 在一个随机扰动下, 每次出现的小球下落的轨迹, 只能是其中的某一个方向。原作者 RupertMillard, 图片来自于Wikipedia “Spontaneous symmetry breaking” 词条。

有外界干扰的情况下, 都长得应该像个“球”。

有一张图能够很好地反映这样的对称破缺: 系统和外界是具有整体对称性的, 但是, 在某些条件下出现了不满足这个对称性的状态。这就是著名的墨西哥帽, 一个图 2.6。想象一个小球放在这个帽子上。这个帽子整体来说是满足旋转对称性——各个方向都一样——的。于是, 小球的运动方程也是旋转对称的。假设小球一开始不动, 于是, 初始条件也是旋转对称的。你可能觉得, 将来出现的运动也应该是满足旋转对称的。实际上可以用一个碗和一个玻璃弹珠就可以演示这个对称破缺。其实, 我们往往会观察到小球从某一个方向上从帽子上滚下来。

小结: 在一个相互影响的多个个体构成的系统中很可能出现整体运动模式。涌现是非常普遍的现象。涌现和对称破缺往往是联系在一起的。对称破缺会使得结构从没有结构 (各向同性) 中产生。

2.3 相变与临界性的例子

相变, 粗糙地说, 就是一个系统的整体状态发生了变化。整体状态可能可以用某一个指标来表示。例如, 水变成冰, 是从液体到固体的变化。液体和固体的整体密度一般来说不一样。实际上, 在固体物理学和统计物理学看来, 不仅仅是整体平均密度不一样, 实际上固体具有长程序——固体有叫做晶格的固定结构知道这个晶格的一部分很容易推断出来这个晶格

的相隔很远的其他部分，液体具有短程序——尽管液体没有晶格但是提起来一部分液体会有其他液体随着这部分液体也被提起来，气体基本没有这种带距离的序——每一个气体分子的行为基本上就是独立的。将来我们还会定义一个更加科学的叫做关联尺度的量。大概来说，关联尺度就是，一个点的振动或者状态变化，多大程度上会引起相距多远的另外一个点的振动或者状态变化。后者在概率论和统计学上叫做关联函数。关联长度大概来说就是关联函数的特征长度——大于这个长度的情况下关联性比较小，小于这个长度的时候关联性比较大。从这里，我们看到了态、序、关联长度、关联函数等几个关键词。这些关键词后面还有相对应的分析方法，甚至一些典型的例子。那么，作为系统科学，我们为什么要来学习这些有关相变的典型概念、典型分析方法和典型例子呢？

因为尽管这些典型例子大多数来自于物理学，其实大量的系统而不仅仅是物理系统中存在这相变这个现象，并且这些概念和分析方法有可能可以用来研究这样的存在这相变的更加一般的系统。例如，集会中人群从相对独立的状态变成一个相互拥挤踩踏的状态或者一个有序地朝着某个方向运动的状态。例如鱼群或者鸟群变换队形，或者从相对比较独立的状态变成有队形的状态。例如，股市中的股民从相对独立决策的状态变成羊群行为严重的状态，或者股票从基本独立地上涨下跌变成大面积同涨同跌的状态。例如，消费者从相对独立地决定购买哪一种手机的状态变成集中购买少数几种手机的状态。例如，砂石从山坡上偶尔滑落到变成大面积滑坡的状态。例如，传染病的感染者从偶尔发现到大规模发现的状态。对于这样的问题，我们希望在更好地了解相变的概念、分析方法和典型的来自于物理学的例子之后，能够有稍微一般点的方法来分析。这就是系统科学：从具体系统中来，到其他领域的具体系统中去，尽可能提炼一般的思维方式和分析方法，可计算，可解释实际现象和解决实际问题。

2.3.1 传统相互作用与相变、临界性：Ising 模型

下面我们来讲一些来自于物理系统的相变的例子。更多的关于相变的概念和分析方法会在统计物理部分来更加详细地学习。

第一个例子是铁磁 - 顺磁相变。为了熟悉这个现象，建议大家回家去

买钐钴磁体（大于在温度高于 300°C 的时候失去磁性⁹。）或者钕磁体（大于在温度高于 140°C 的时候失去磁性）来做做实验：把买回来的磁体加加热，然后在加热之前、之中和之后选取几个时间点（其实是温度点）试试磁体的磁性。这时候就会发现铁磁 - 顺磁相变以及这个相变的转变点。当然，这样粗糙的实验的结果是不太可靠的，但是，从中大概画出来一个给定温度下有没有磁性的曲线总是可以的。更精确的实验可以得到磁性的大小 [53, 54]，而不仅仅是有没有磁性。下图就是一条某种磁性物质的磁矩（先不看磁化率数据）随着温度的变化的实际测量数据和按照二维正方晶格上的Ising 模型精确解 [55] 计算出来的理论结果，以及另一种材料 DyPO_4 的磁矩 - 温度实际测量和理论计算曲线。将来在统计物理学部分我们还会给出 Monte Carlo 方法的计算结果。

在这个例子中，磁体从有磁性变成没有磁性就是相变。这个相变在这里通过外界参数——温度来驱动，温度低的时候有磁性，温度升高磁性消失。用Ising 模型——把系统看成是很多很多个小磁针构成的并且小磁针之间存在这相互联系，磁针之间具体如何联系以后在统计物理学中再说——来看，在有磁性的状态下，大概来说，每个小磁针的方向具有强烈的一致性，而在没有磁性的状态下，每个小磁针的方向基本上是独立的。因此，这个相变实际上也代表了背后长程有序到无序的转变。这个整体磁性在这里就被称为序参量——表示有序的程度的物理量。温度被称为驱动参数。从理论曲线图 2.7(c) 我们还会看到，在无序状态下，平均磁矩为零；在有序状态下，平均磁矩可以是正的也可以是负的，粗糙地说也就是说当磁体从没有磁性变成有磁性的时候，哪一个是磁体的南极和北极是偶然的完全可能是换过来的。实际测量结果都只会出现正负磁矩状态其中的一个。这个看起来好像违反了对称性：外界条件是没有特定的正反方向的、磁体本身的相互作用形式对于对调正反状态也是对称的，但是，实际出现的正反状态仅仅是其中一个。这就是上一节提到的对称破缺的一种表现：具体系统会到哪一个状态上去，有可能是由内部随机性或者外界随机性导致的，但是，到了特定的状态以后很难再一次反过来，同时多个可能的状态合起来还是能够重新满足原始的对称性的。

⁹这个和下一个磁体的转变点问题的数据来自于 Wikipedia “Magnet” 词条：
<https://en.wikipedia.org/wiki/Magnet>

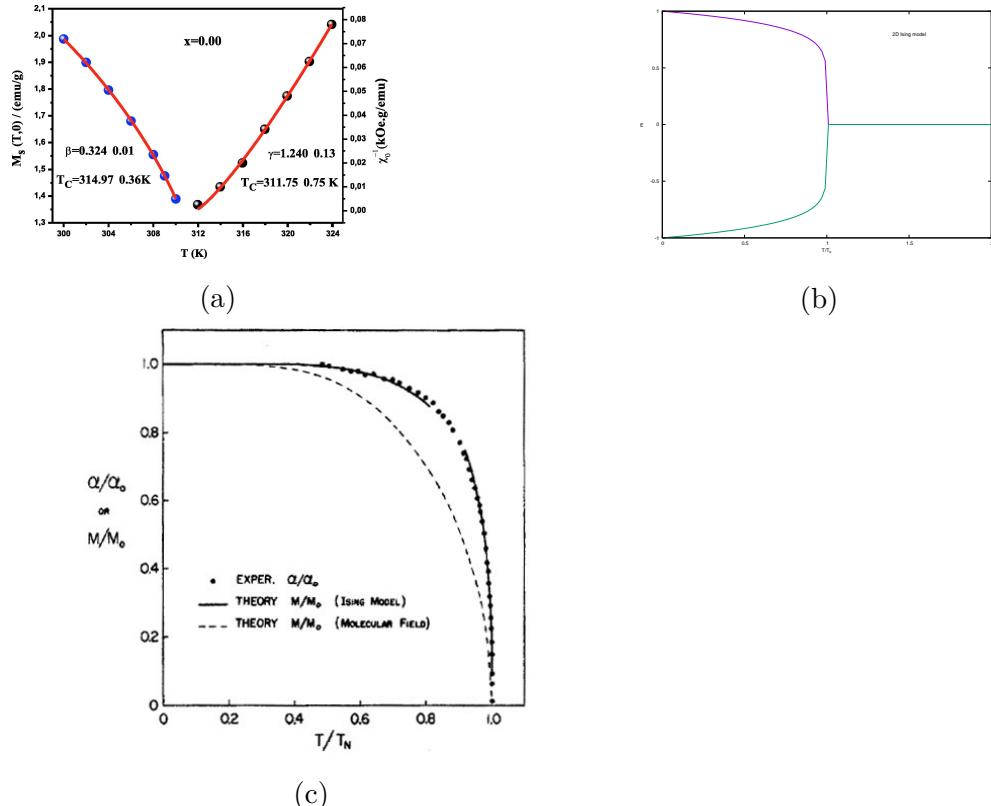


图 2.7: (a) 来自于文献 [54] 的 $La_{0.5}Sm_{0.1}Sr_{0.4}Mn_{1-x}In_xO_3$ 实验测量曲线。在这个图中的样本 $x = 0.00$ 。左侧是磁矩随着温度的变化，右侧是磁化率的倒数随着温度的变化（以后再讨论这个物理量）。(b) 按照二维正方晶格上的 Ising 模型的精确解 [55] 画出来的每个格点的平均磁矩和温度的关系曲线。(c) 转引自 [56] 的 $DyPO_4$ 的实验和理论磁矩 - 温度曲线。横轴是温度 (T) 或者归一化温度 ($\frac{T}{T_c}$)。纵轴是磁矩 (M) 或者平均磁矩 (m 或者 $\frac{M}{M_0}$)。

在这里小磁针之间的相互作用是必须的。例如有的系统倾向于“喜欢”——在物理上就是能量更小的意思——相邻的小磁针方向一致的状态，而有的系统则倾向于“喜欢”相邻的小磁针方向相反的状态。如果各个小磁针独立没有相互作用，则所有小磁针的方向——可以看做一个随机数 $x^i = \pm 1$ ——合起来就是 N 个独立随机变量相加的分布函数，也就是正态分布，不会有上面的相变现象。其实由外界温度驱动的相变就是系统所“偏爱”的状态和温度造成的热涨落——以后会学到一个叫做 Boltzmann 分布的东西来代表这个热涨落——相互竞争的结果：在没有温度来扰动系统的时候，有些系统总是更“偏爱”能量低的状态，例如各个小磁针方向相同的状态，也就是有序相；但是，温度的扰动使得系统以一定的概率处在能量更高的无序状态；因此，系统到底处在有序态还是无序态得看这两个方面的竞争。

另外的值得拿出来讨论一下的相变的附近的现象和概念是在临界点附近的临界慢化和关联长度发散。我们先来看这个现象，见图 2.8：随着对中间容器内的乙烷在水浴中加热到临界点附近然后又离开临界点，中间部分从透明的形态成了有乳白色光芒的形态，接着又变回透明的形态。在乳光形态下，入射乙烷的光被乙烷向着各个方向反射，然后再一次被其他部分的乙烷多次反射，于是看起来就好像是光不容易透过去的状态。这表明一个在一个地方扰动乙烷的其他地方的乙烷也会产生相应的扰动，于是，看起来好像是成片的乙烷在一起运动。以后我们还会学到关联长度如何计算，关联长度的函数形式和特征长度如何在临界点附近和远离临界点的地方有什么样的不同的表现：在临界点表现为幂率函数 (r^{-p}) 衰减比较慢没有特征尺度，在远离临界点区域表现为指数函数 ($e^{-\frac{r}{\xi}}$) 衰减比较快存在特征尺度。

在相变中，序参量、驱动参数、长程序短程序、对称破缺、关联长度是经常出现的概念。某个函数，例如关联函数从指数函数形式到幂率函数形式的变化在相变中也是经常出现的现象。相变现象的分析计算技术我们会等到统计物理学的部分来学习。在这里介绍相变的现象和基本概念主要就是形成一个对相变的认识，希望将来遇到更加一般的相变现象的时候，知道运用相变的典型概念和分析方法来看待和分析这个问题。至于具体的分析方法有直接用解析、数值计算或者数值模拟来求解序参量，或者求解关联函数。除了这些，研究相变的一般方法还有平均场理论和 Wilson-Kadanoff 重

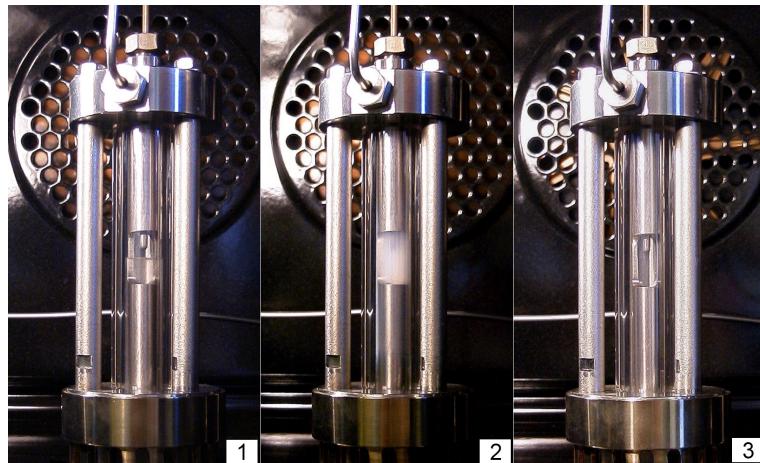


图 2.8: 在临界点附近会出现临界乳光现象。这个现象可以看成是临界点关联长度发散的结果。原作者 Dr. Sven Horstmann[57], 图片来自于 Wikipedia “Critical opalescence” 词条。

整化群理论。其中的某一些我们会在这里以及统计物理学部分来学习，剩下的只有到更加专门的“高级统计物理学”或者说“相变和临界现象”课程中去学习了。

尤其要强调一下关联函数这个概念和分析方法。关联函数 $c(x_1, x_2) = \langle x_1 x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle$, 例如在一个空间 \vec{x} 上分布的量 $s(\vec{x})$ 的空间关联函数,

$$C(r) = \frac{1}{\sum_{\vec{x}} s(\vec{x})} \sum_{\vec{x}} s(\vec{x}) s(\vec{x} + \vec{r}) - \frac{1}{\sum_{\vec{x}} \sum_{\vec{x}}} \sum_{\vec{x}} s(\vec{x}) \sum_{\vec{x}} s(\vec{x} + \vec{r}) \quad (2.10)$$

是变化的一致性，而不仅仅是直接表现（例如均值）的一致性。于是，如果这个变量仅仅是属于在任意一点的取值相同（也就是有长程序），则这个算出来的关联其实等于零。将来我们会发现，大量的问题中，我们可以通过计算这个关联函数来分析系统整体性的状态和行为，例如被称为Green 函数的其实是它，被称为投入产出矩阵的其实还是它，PageRank 算法背后还是它。

除了外界参数驱动的相变，还有一种不需要外界的特意驱动，仅仅依靠自身的演变发展就能够发生的相变，称为自组织相变，或者自组织临界性。

2.3.2 涌现、自组织临界：Bak-Tang-Wiesenfeld 沙堆

下面, 我们来介绍一个自组织临界性的一个例子——Bak-Tang-Wiesenfeld 的沙堆模型[58]。在自然和社会的系统中, 也存在着大量这样的系统自驱动的相变。我们先来介绍一下具体的沙堆模型的机制。在一个有限大小的二维正方晶格上, 按照某种顺序对准格点来撒沙子, 不断地撒下去。可以是固定在中间或者某个位置撒, 也可以在随机点上撒, 也可以沿着某种模式——例如一行行按顺序来撒, 也可以一开始就在每个格点上给定了一定数量的沙子。后来的研究发现, 模型的行为不依赖于这些如何撒沙子的细节。从玩沙子的实际经验我们就知道, 当在某个格点上的沙子积累到一定程度的时候, 就有可能会发生沙子崩塌, 而且这个崩塌一旦发生还有可能会传播。这个崩塌和崩塌传播的现象具有很大的鲁棒性, 基本上无论你怎么玩沙子, 都会发生这样的事情。那么, 沙堆模型, 如果不去看这个例子在理论上的价值, 可以看做是对这个崩塌和崩塌的传播的行为的研究。

那么, 如何给这个崩塌和崩塌的传播建立一个深刻的简单的模型呢? Bak、汤超和Wiesenfeld建立了一个如下的模型。记每一个格点上的沙子数量为 $z(x, y; t) \in \mathbb{Z}$, 当任何一个格点上的沙子大于某个阈值, 例如 4, 的时候 ($z(x, y; t) \geq 4$) ,

$$z(x, y; t + 1) = z(x, y; t) - 4, \quad (2.11a)$$

$$z(x \pm 1, y; t + 1) = z(x \pm 1, y; t) + 1, \quad (2.11b)$$

$$z(x, y \pm 1; t + 1) = z(x, y \pm 1; t) + 1. \quad (2.11c)$$

也就是把在 (x, y) 点的沙子崩塌到它旁边的四个格点上去。如果由于这个崩塌周围的格点的沙子数量也满足了上面的条件, 则会在这个满足条件的格点再次发生以这个格点为中心的崩塌。

当然, 这是一个很大的简化, 在实际沙子崩塌现象中, 还需要考虑周围的格点的沙子有多高, 还需要考虑沙子之间的作用力的情况。但是, 对于有些问题来说, 这样的简化使得问题能够研究了, 还抓住了重要的因素。那么, 这个现象, 在这里指的是什么呢? 一会我们会看到是相变和临界性。

在这样一个模型机制下, Bak等人做了计算机模拟, 统计了每一次崩塌涉及到的格点的规模, 发现了如图 2.9 的结果: 在通常情况下, 仅仅发生小规模崩塌——一个沙子落下来, 仅仅很少的其他沙子会因此而产生运动;

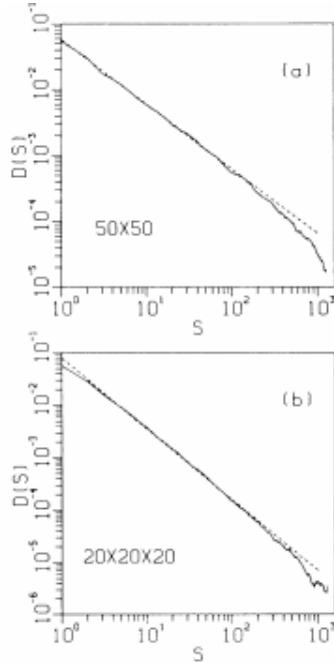


图 2.9: 在临界点附近会沙堆崩塌的规模符合幂律分布, 图片来自于 [58]。(a) 二维格点 50×50 。(b) 三维格点 $20 \times 20 \times 20$ 。这些统计结果是两百次数值模拟结果的平均。[记得取获取授权。](#)

但是, 当不断地重复扔沙子到一定数量, 就会发生大规模崩塌, 这个时候——崩塌规模 (横轴) 和出现这样大小的规模的崩塌的频率 (纵轴), 成幂律关系。在幂律关系出现之前的状态中, 一般来说这个规模的分布函数是正态的——正态分布中大规模事件出现的几率要远远小于幂律分布中大规模事件出现的几率 (高斯函数 $e^{-\alpha x^2}$ 和幂率函数 $x^{-\gamma}$ 的衰减速度的比较)。当年的图中, 沙堆的规模相当小, 分别是 50×50 的二维格点和 $20 \times 20 \times 20$ 的三维格点。这些统计结果是两百次数值模拟结果的平均。顺便, 在统计学上, 要做多次独立并且重复的实验, 然后看这个结果的平均是很重要的。在统计物理学中, 这称为系综平均。这个和在同一次实验中, 扔了很多很多粒沙子, 这个模拟的时长不是一个量。那么, 为什么我们要强调这个幂律的结果呢? 幂律了又如何呢?

我们在前面一小节关于临界现象提到了临界乳光、序参量、长程和短程序以及无序、外界驱动、关联函数和关联长度等概念或者现象。我们也提

到了，将来我们会发现，关联函数和关联长度是一个讨论临界现象的时候非常重要的量。现在，在沙堆模型的现象中，我们发现，这个规模大小幂律分布的出现很可能意味着相变和临界现象：系统从一个整体状态——绝大部分时候崩塌的规模都不大是一个高斯型的分布函数，变成了另一个整体状态——大规模崩塌被观察的几率远远大于前一个状态下的情况是一个幂律分布函数。更重要的是，这里，系统具有自己慢慢走向这个临界状态的性质：只要我们不断地扔沙子，扔足够多的沙子，系统就会到达这个状态——并且数学家的后续工作证明，这个状态是这个模型的稳定状态。也就是说，系统一旦到达了离这个状态不是特别远的状态，则系统就会自动向着这个状态演化，而且一旦落到这个状态上，就会维持很长时间的这个状态。这个和外界驱动的相变有所不同：第一，需要外界驱动；第二，一旦外界条件继续改变，则系统会离开临界状态。在这个意义上，这个沙堆的崩塌规模的相变被称为自组织相变，这个临界性被称为自组织临界性。

实际上，这个崩塌规模还能够在一定程度上，直接和关联函数相联系。关联函数的意思就是一个点的扰动在多大程度上和有一定距离的另一个点的扰动是相关的，或者说导致另一个点的扰动，或者反过来被另一个点的扰动导致。我们说过，在传统相变现象中，临界乳光现象就是这个关联函数的典型关联长度变得很长很长的结果。在沙堆模型中，这个崩塌规模的幂律分布——注意只要幂指数大小合适幂律分布可以没有方差甚至均值，也就是说没有一个典型的崩塌规模，也就是典型崩塌规模发散——正好就是反映了关联长度很大很大，甚至发散。一粒沙子从某个地方落下来，其所导致的崩塌的规模正好就是扰动的影响范围，因此，崩塌的规模和扰动相互影响的范围，也就是关联长度，是有密切联系的。

除了真的用来描述沙堆，以及作为展示自组织临界性的例子，这个模型还可能有更加广泛的描述能力和现实意义，例如在谣言或者观点的积累和传播这样的现象中，例如在地震现象中，例如在股市的个股波动和整体波动中。例如在舆情探测这样的问题中，这个模型和后面的思想和技术也可以有很大的应用。做敏感问题的问卷调研得到的结果是非常不可靠的。这个时候能不能不通过序参量——也就是多少人对某个敏感问题的意见的一致性程度——的测量，而是通过关联函数的测量——去关心大量个体对于一些不敏感的问题的答案的关联程度，而不是答案本身，来探测临界状态

的到来呢？实际上，在大量的问题中，有可能我们很难找出来那个序参量来当做计算分析的对象，这个时候，基于关联性的分析就会尤其重要，有的时候甚至是互信息这种来自于信息科学的关联性 [59, 60]。将来在统计物理学部分，我们会回到这个主题。

2.4 相互作用，周期与混沌的例子

在涌现性和相变这两个小节，我们已经看到了相互作用在影响系统的行为中的重要性。例如，绳子上的小球和小球之间的相互作用，例如小磁针之间的方向的相互影响，例如一个格点上的沙子对附近其他格点上的沙子的影响。由于这个相互影响才导致一个系统的整体状态是什么成为一个需要计算和分析的非平庸的问题。如果系统的各个单元是独立的，那么，我们只需要统计学和正态分布就够了。这一节，我们来看相互作用决定系统状态的另一个例子，以及从那里发展对相互作用的更加深刻的认识。下面的讨论需要一点点线性代数的知识，一点点Hilbert 空间的知识。读者可以去找专门的书来看，也可以看本书后面关于线性代数和Hilbert 空间的相关章节。

首先，我们回顾一下 2.2 节中的两个例子例 2.1 和例 2.2。我们发现两个微分方程都是线性的，也就是具有 $\ddot{u} = Au$ 的形式，或者 $\dot{u} = Au$ 的形式。线性的常微分方程是精确可解的，例如，对于前者，我们有 $u = e^{\sqrt{A}t}u_0$ （至于对一个矩阵开平方如何做，大概来说就是求出来本征值，然后对本征值开平方，再用本征向量合成矩阵，细节以后再说。这里你可以看出来为什么例 2.1 和例 2.2 的解是三角函数）；对于后者我们有 $u = e^{At}u_0$ （至于如何把一个矩阵放到指数上，也以后再说，大概来说就是求出来本征值，然后把本征值放到指数上，再用本征向量合成矩阵）。反正，总而言之，线性微分方程具有解析精确解，并且精确解的形式是实指数函数或者虚指数函数，统称为指数函数，或者有的时候，也用三角函数来指代它们。

接着，在考虑到三角函数级数或者Fourier 变换，我们可以把一大类函数写成三角函数或者说指数函数取和的形式， $f(t) = \sum_n [a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)]$ 或者 $f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) e^{-i\omega t}$ ，我们就可以把一个一般的函数看做是不同的三角函数当做基矢的矢量叠加。也就是把 $\cos(n\omega t)$ 看做基矢，把前面的系

数 a_n 看做整个函数当做矢量的时候在这个基矢上的分量。注意，这些基矢函数叠加起来的一般解都满足原来的线性微分方程。关于把某一类函数看做基矢，其它函数看做这些基矢的叠加，除了三角函数，还可以更一般。

最后，有了这个指数函数当做线性微分方程的基本解，其他更一般的函数可以看做是这些基本函数当做基矢量构成的一般矢量，我们就可以换一个角度来看这个系统的运动：把这些指数函数（或者三角函数）形式的基本解看做这个系统的基本粒子，我们发现，由于系统是线性的，最后，无论在什么时候，这些组合的系数 $a_n, b_n, \tilde{f}(\omega)$ 是不变的。也就是说，一开始系统里面有多大的“比例”或者“成分”是属于第 n 个或者第 ω 个基本粒子的，那么，将来，还是有这么多个这样的基本粒子。于是，系统可以看成是由这一对相互独立的不相互影响的有自己的运动模式——就是以自己的特定频率震荡——的基本粒子构成的。

这个时候，我们看到，有一类看起来有相互作用的系统，由于其相互作用的函数是二阶的（这个在下面会进一步解释），可以从另一个角度看成是一个无相互作用的系统。二阶的含义是，相互作用如果写成能量函数 $V(x)$ 的形式，这个能量函数的形式最高是坐标的二阶函数 ($V(x) \sim x^2$)。在这个条件下，力是势能的导数，于是 $F = -\frac{dV}{dx} \sim x$ ，得到运动方程 $\ddot{x} = \frac{1}{m}F \sim x$ 。这是线性的运动方程。当系统存在多个变量 x_1, x_2, \dots 的时候，这个二阶能量函数导致线性方程的结果是不变的，就是需要表达成一个多维的于是是矩阵形式的方程。

这样的一个视角的转变是非常重要的：二阶能量函数代表了无相互作用系统。还有其他的初看起来是有相互作用的系统但是经过某种变换可以变成无相互作用的系统的例子，例如量子的谐振子、自旋的 XY 模型等。这些都是具有非凡意义的可以精确求解的模型。无相互作用系统的运动方程存在三角函数的基本解。每一个这些三角函数形式的解有一个特定周期，例如例 2.1 和例 2.2 的 $\sqrt{\frac{k}{w}}$ 和 $\sqrt{2\frac{k}{w}}$ 。如果正好只有一个这样的基本解被包含在运动中，那么，整体运动肯定就是周期性的。当然，如果有两个这样的基本解被激活，则看这两个周期是否存在公倍数，如果存在，还是周期性的运动，只不过这个周期是这两个周期的公倍数。如果这两个周期不存在公倍数——例如当这两个周期都是无理数的时候，会出现准周期现象。尽管不能完全回到过去某个时刻的运动，但是，当过了一段非常接近这个周期

乘积的时间以后，系统的行为还是回合某个其他时间比较像的。可以预见，任意个这样的周期函数的叠加，不管多么复杂，就是周期和准周期行为了。为了术语简单，以后我们让准周期包含周期。也就是说，在这样的系统上最最复杂的行为，不过就是准周期行为。

现在来问，有了相互作用会怎样？还有一个问有了相互作用运动会怎样的动机：动力学系统的行为会不会出现和前面遇到的系统那样的相变的行为，也就是从某种动力学状态变成另外一种动力学状态？那动力学系统的状态是什么，怎么定义？周期运动显然是一种动力学状态。如果这个周期运动还能是稳定的，也就是说，稍微偏离开这个周期的运动会变成一个新的周期接近的运动，或者是回到这个周期上来，那就更好了，更加可以称为一种动力学系统的定态了。这个时候，如果在某些条件下，这个定态发生了变化，就可以来研究动力学系统的“相变”——从一个定态到另一个定态的变化了。

为了讨论这个问题，我们转过来用描述时间离散的迭代过程的差分方程。其原理和微分方程是一样的，但是实际计算简单很多。下面的讨论很多部分来自于郝柏林等人的《从抛物线谈起》[61]。其实，大家可以跳过这一段直接去看《从抛物线谈起》。这里仅仅是解读稍有不一样，主体知识上的内容是一样的。

先来把连续的微分方程大概地变成离散的差分方程。考虑 $\dot{x} = Ax$ 取时间间隔为 Δt ，则， $x(t + \Delta t) = x(t) + A\Delta t x(t) = (I + A\Delta t)x(t)$ 。改变时间的标度，把现在的 Δt 当做新的时间单位下的 1，得到

$$x(t+1) = Bx(t). \quad (2.12)$$

我们已经看到线性方程高维的和一维的是一样的，只要把矩阵 B 做一个本征值和本征向量的计算。下面我们就仅仅考虑一维的情况，也就是

$$x(t+1) = bx(t). \quad (2.13)$$

这个方程的通解为 $x(t) = x_0 b^t$ 。当 $|b| > 1$ 的时候系统发散，当 $|b| = 1$ 的时候系统保持原状态或者在两个值之间跳跃，否则系统衰减到 $x = 0$ 的状态。也就是系统的状态非常简单地依赖于 $|b|$ ，分别可以是发散、周期和收敛三个状态。一方面，我们能够知道系统所有的可能状态以及这个状态和参数的完整的关系是很好的。另一方面，这个行为也实在太过无趣。

现在，我们来考察一个稍微现象丰富一点的系统，

$$x(t+1) = 1 - \mu x^2(t). \quad (2.14)$$

后面的函数系统可以由抛物线函数 $ax - bx^2$ 做变量的线性变换而来，因此，这个动力学被称为 [61] 抛物线的迭代动力学。首先，我们来看一下这个迭代的过程。如图 2.10，我们看到有的时候表现出来收敛到不动点，有的时候在不动点附近震荡。在这里不定点的意思就是满足

$$x^* = 1 - \mu(x^*)^2 \quad (2.15)$$

的点。如果系统在某个时刻正好处于这个点，则系统下一个时刻还是处在这个点上。在这个具体方程中，这样的不动点位于 $x^* = \frac{-1 \pm \sqrt{1+4\mu}}{2\mu}$ 。

从图 2.10 我们看到，当 μ 取不同值的时候，这个系统可以从收敛到不动点的行为变成远离不动点的行为，甚至更加复杂的震荡行为。那么，有没有办法直接分析方程来得到参数取值的情况和系统的行为之间的对应关系呢？还有哪些典型的行为呢？这些问题，将来我们在非线性动力学的知识部分都会学习到。大概来说，我们除了讨论不动点，还可以讨论周期解。也就是看一下 $x(t+2) = f(f(x(t)))$ 的不动点。在这里迭代两次回到原来的值就是周期 2。当然，广义地说，其中也包含之前周期 1 的不动点。我们可以想办法求解出来这个周期 2 的不动点，也就是方程

$$x^* = 1 - \mu(1 - \mu(x^*)^2)^2 \quad (2.16)$$

的解。类似地，我们可以讨论周期 4、8、16 的解，甚至其他周期，例如周期 3 的不动点方程的解。我们就不再继续这个演示了。

稍微要再一次提到，并且在下一节会再一次重点来讨论的是后面的这个震荡现象。首先，在这里，系统既不会离开不动点特别远，也不会靠得特别近，每次接近一会儿就会接着远离一会儿。如果你真的去跟踪每次迭代的结果，会发现，还很难跟踪：看起来具有一定的随机性，并且如果初始迭代起点离的很近的话，有的时候迭代过程中又会相距很远，或者反过来。这样的看起来的随机性和初值的敏感性，以及靠近和远离的交替变化就是那个称为混沌现象的核心特征。更多细节将会在下一小节和非线性动力学的章节中继续讨论。

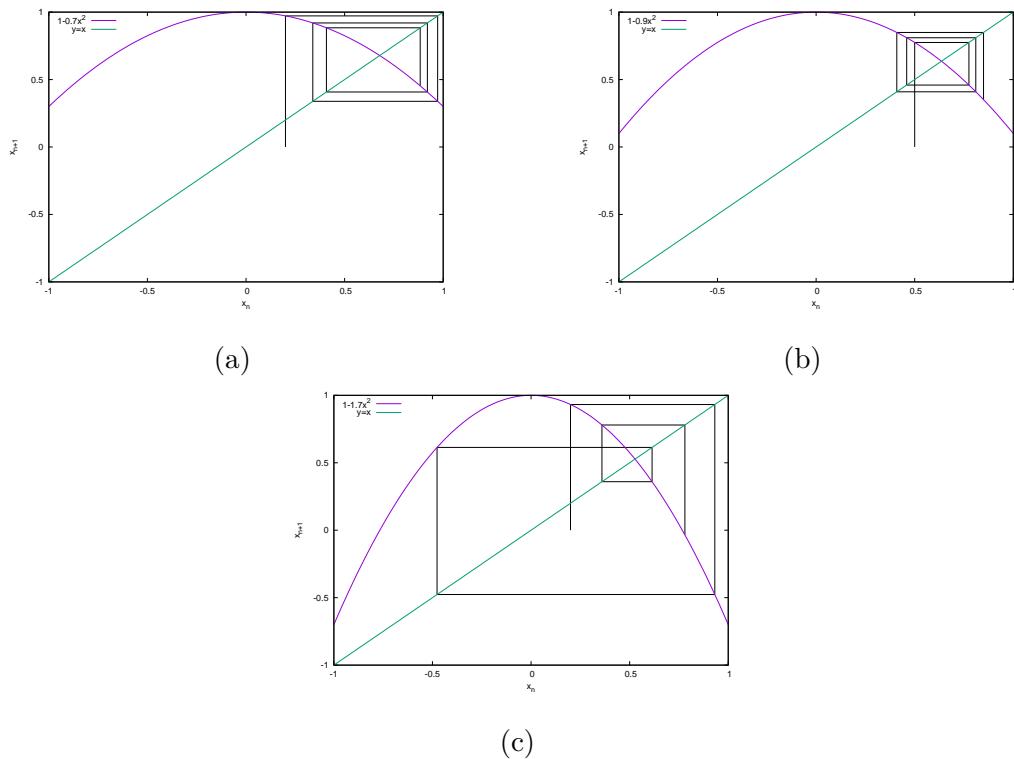


图 2.10: (a) 当 $\mu = 0.7$ 的时候的迭代过程, 系统收敛到一个固定值——不动点。(b) 当 $\mu = 0.9$ 的时候的迭代过程, 系统在远离不动点。(c) 当 $\mu = 1.7$ 的时候的迭代过程, 系统在不动点附近震荡。

现在我们来做个小结，对前面提到的知识和现象做一个梳理，看看哪里系统科学了。记住，我们在看本书的任何时候，都需要问这个“哪里系统科学了”的问题。到此为止，这一小节中，我们先用涌现那一节用过的线性方程的例子得到二阶以下能量函数所代表的系统尽管看起来有相互作用，实际上得到的方程完全可精确求解，并且求出来的解可以看做独立振动的粒子，于是，是无相互作用系统。我们已经知道相互作用是系统科学的核心，因此，了解哪些现象是无相互作用对于理解系统科学也是非常重要的。当然，不是说无相互作用就不是系统科学的研究对象了，只不过是特殊的研究对象：不用我们发明太多的方法来研究就可以——可以精确求解并且多个体系统加起来的量符合正态分布。这是这一小节的系统科学。当然，涌现那一小节用这个例子来体现整体运动模式从底层个体之间相互作用的机制中涌现出来。同一个例子，可以用来说说明不同的问题。

不过，这里就产生了小小的问题了：涌现那一节中用来体现整体模式从相互作用中涌现，这一节用来体现其实二阶能量函数表明系统无相互作用。这个看起来矛盾的地方有两个含义。第一，有的时候换一个角度（换一组变量）来看问题，可以把复杂的问题简化，当然，前提是那个问题本质上本来就简单。第二，将来就算在本来就复杂的具有内秉相互作用的——无论变换什么角度至少目前看来不能简化为无相互作用的——系统中，这样的变成近似无相互作用的整体振动模式，仍然是重要的研究问题的手段和角度。这一点，只有等到将来处理有相互作用的例子的时候再来展开了。

那么，除了这个二阶能量函数代表无相互作用系统，而相互作用是系统科学的核心，因此，促进对系统科学的理解，本小节的内容还有其他具有系统科学含义的地方吗？写下来运动方程，离散的或者连续的，之后，如何求解，不是系统科学，其实是常微分方程或者差分方程求解和定性理论研究的主题。但是，来关注这些方程的也就是原始的系统的定态行为和定态行为的变化的这个角度具有系统科学的特点。实际上，这是动力学系统的相变的问题的研究角度。因此，将来在很多系统——例如传染病的传播、股票和股票的关联、舆论意见谣言的形成和传播等等——的研究中，我们需要借助常微分方程或者差分方程求解和定性理论，而在那里，我们主要关心系统的定性行为和定性行为的变化。当然，为了能够研究这个行为和变化，稍微掌握一点点常微分方程或者差分方程求解和定性理论也是有必要

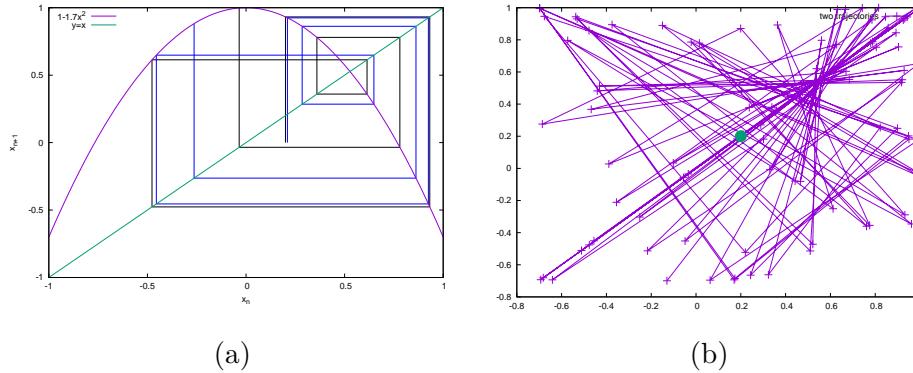


图 2.11: 当 $\mu = 1.7$ 的时候的迭代过程, 系统在不动点附近震荡。(a) 取两条轨迹的初值分别为 $x_0 = 0.2, 0.21$ 来展示 7 次迭代过程。(b) 取两条轨迹的初值分别为 $x_0 = 0.2, 0.200001$ (图中那个蓝色大点) 来展示迭代 100 次过程。其中 x, y 轴分别是两条轨迹每一次迭代的结果。如果两者保持接近, 则, 整体应该在对角线附近。我们看到系统经常偏离对角线很大, 但是, 也经常回到对角线上。

的。这也是为什么在后面的章节中, 我们会学习一点点非线性动力学——勉强算作系统科学的基本理论的一部分。

2.5 再一次用混沌的例子, 确定性和随机性

从图 2.10(c) 我们已经看到了混沌行为的一些特征, 在不动点附近震荡, 时而靠近时而远离, 整体看起来具有随机性。现在, 我们来看初值敏感性: 差不多的起点随着时间的演化, 会出现非常不同的轨迹。图 2.11 展示了当 $\mu = 1.7$ 的时候的迭代过程中两组两条初始条件很相近的轨迹: 一组是 $x_0 = 0.2, 0.21$, 一组是 $x_0 = 0.2, 0.200001$ 。前者做了 7 次迭代后者做了 100 次迭代。后者的图中 x, y 轴分别是两条轨迹每一次迭代的结果。如果两者保持接近, 则, 整体应该在对角线附近。然而, 我们看到初始接近的起点随着迭代会有的时候远离, 有的时候又重新接近: 图 2.11(b) 中偏离对角线和接近对角线的点都比较多。类似的, 初始远离的两个轨迹也可以将来接近以及再次远离。这个性质使得系统的行看起来更加具有随机性, 使得系统的长期行为不可预测——仅仅一个很小的偏离, 会导致完全不可预料的将

来的结果的非常大的区别。好像这个系统会忘记初始条件一样。但是，我们明明是用确定性方程做的迭代，实际上，这个迭代是可以反过来做的——也就是通过逆映射来从现在的轨迹上的后面点恢复到前面的点。这样的初值敏感性、围绕着不动点的震荡的行为、整体历史看起来比较随机的性质，而这些行为又是来源于确定性方程这一点，被称为确定性系统的混沌行为，或者简称混沌。

将来我们还会比较详细地讨论出现混沌行为的判定和参数区间的规定等问题。现在，我们只需要了解确定性的方程也会出现这样的看起来具有一定随机性并且对初值敏感又不会出现跑远了就不回来或者跑近了就不出来的行为。那，其实，这个还是一点点常微分方程或者差分方程求解和定性理论的研究主题，哪里系统科学了？

在对世界的理解中，有一个主题——“到底世界是确定的还是随机的”一直具有重要的位置。如果是确定的，那么为什么有的时候看起来随机；如果是随机的，那么为什么我们大量的运动方程都表现为确定性的方程。并且，很多人相信，只要测量做的足够准，掌握的信息足够多，那么，这个看起来的随机性就会消失。大概来说，这个问题偏哲学和信仰居多，不完全是一个科学问题。不过，仍然，是很多研究者思考和困扰的问题。一方面，基于运动方程的研究给我们研究系统的定态和定态的稳定性、相变等提供了一个角度，这在上一小节已经提到。另一方面，确定性的方程就能够出现看起来随机的，不能做长期预测的，初值敏感的行为，也差不多可以给确定性世界的随机性的起源提供一个解释的角度。这部分是有关系统科学的。

当然，实际上，本质上就是随机的现象也是存在的，将来在量子力学我们会学到：尽管量子系统的演化方程还是确定性的，但是，量子状态的测量会出现哪一个结果，是在各种可能中随机选择出现的。这个随机性的概率还是可以计算出来的。我们不知道的事情，仅仅是，到底哪一个结果在单次实验里面会出现，多次实验来看，其概率是可以计算出来的。将来我们还会看到，能计算的远远不止概率，而是概率幅。从这个意义上说，不学量子力学，人生是不完整的。你看，连世界到底是确定的还是随机的，都没法思考透彻。当然，我没有说，一旦学了，就能够思考透彻了，只能说，用来思考的材料会稍微更多一点，看到的世界会稍微更清楚一点。

将来，在统计物理学中，我们还会学到把经典力学的运动方程，例如Newton 方程，也变成概率分布函数的演化方程的形式。那个时候，世界到底是随机的还是确定性的，就更加是一个问题了。因此，不学统计物理学，人生也是不完整的。

到此为止，我们已经用具体的研究工作的例子给大家铺垫了下面的学科都是要学的：线性代数（矩阵、矢量空间）、统计物理学（相变、平衡态的来源和系综理论、整体系统的运动方程和随机性）、量子力学（内秉随机性、非矢量叠加不可解释的实验）、力学（划分系统、受力分析、运动方程、作用量原理和物理学的统一形式）。你千万不要以为这就很多了，将来我们还会讨论为什么概率论、统计学、经济学、网络科学、生物学和化学，也是需要并且非常值得学的科学，不仅只是从知识内容上，还从分析方法和思维方式上。系统科学本来就是研究对象不受具体学科限制的科学，只要所研究的系统具有系统性——系统的各个部分之间存在相互作用相互联系，关心系统的整体行为和各个部分的相互作用的关系这个主题，或者所使用或者得到的研究方法具有系统性——也就是从具体系统中来能够到更多的尤其是其他领域的系统中去，成为具有一般性的跨具体学科的分析方法和思维方式。

让我们再一次回到本书封面的几句话：

联系¹，联系²，联系³

从具体系统中来，到具体系统中去

从孤立到有联系，从直接到间接，从个体到整体

More is Different, More is The Same

(一片两片三四片，构成系统出涌现；五片六片七八片，飞入系统都不见)

下面，我们再来看，这样的系统科学的研究对象、研究问题的系统性和研究方法的系统性，还能够在哪些其它问题上发挥作用。当然，这里仅仅是举例，还有大量的其他具体系统上的工作没有包含进去，也没有整理出来一个很好的具体系统的角度的体系，而是用了一个研究方法层面的粗糙的分类体系。

另外，到现在为止，你应该很熟悉本书的写作风格了：任何一个观点或者视角，我都尽量通过一个具体的例子来阐述，任何一个具体的例子我都希望阐述一个观点或者视角，或者至少某个跟本书主旨——什么是系统科

学——有关的信息。因此，在看这本书的时候，一定要多思考，这一段企图在说明什么，这个说明的东西和主旨有什么关系，为什么要用这个例子。

2.6 相互作用与网络科学的例子：汉字研究

在汉语的学习中，语言和字的学习是分开的两件事情，两个任务。当然，这两个任务之间有相互促进的关系，但是，大多数时候，是语言在帮助文字的学习，而不是反过来。如果是日语德语那样的纯语音语言，或者至少是英语这样的大部分时候文字可拼读的语言，则学习字词（还有从字词的写法到发音的这个转化规律，称为拼读法）对于学习语言是很有促进意义的。或者反过来，对于那样的母语的语言学习者，原则上只要会了拼读规则，则可以直接从语言转化为文字。基本上也就能写能读了。但是，汉语不是这样啊。对于母语是汉语的语言学习者，还可以通过死记硬背——我见过有人通过笔顺来死记硬背汉字的方式、我也见过有人通过纯粹多次抄写重复来死记硬背汉字——来学习汉字。由于语言本身母语学习者是能够用的，因此，死记硬背来完成字的从形状到读音和含义的学习，也就成了意见还可以接受的事情了。但是，对于非母语者，同时学习基本上是分开两件事情的汉语和汉字是非常痛苦的。我见过把汉字当做画画来记忆和学习的非母语汉语学习者。我也见过不断地追问这个字为什么写成这样，为什么这样就表示这个读音、这个含义的非母语汉语学习者。顺便，在母语汉语学习者中间，追问字形和读音、含义之间的联系的人，反而比较少。这真的是一件神奇而又令人伤心的事情。汉字从字形到读音和含义的联系不是非常明确，并且大多数时候不是老师的教学内容，学生也很难找到合适的学习材料来学到这个联系，一般只能通过不断地死记硬背或者稍微好一点，不断地应用来学到这个非常重要的联系。这已经使得汉语的学习比很多其他语言困难，当然，我们也有简单的地方，例如汉语基本没有语法和形态的变化。不过，系统地比较汉语和其他语言的学习难度不是我们这里的目标。

还有两件事情使得汉语的学习变得更加困难。第一件事情是不同的汉语的发音，在忽略声调之后，大约只有四百来个（新华字典列出来了 412 个发音），而常用汉字的数量有三千五百多个。这个很容易找一本字典出来验证一下。这个时候，“嫣盐演艳”算一个发音。也就是平均来说，一个发音要

代表很多个音调不同的字，甚至音调相同的字。最好的例子就是赵元任¹⁰的《施氏食狮史》[62]。《施氏食狮史》是用同一个读音（声调忽略不计）写成的有意义的一段话。全文在下面。

石室诗士施氏，嗜狮，誓食十狮。氏时时适市视狮。十时，适十狮适市。是时，适施氏适市。氏视是十狮，恃矢势，使是十狮逝世。氏拾是十狮尸，适石室。石室湿，氏使侍拭石室。石室拭，氏始试食是十狮尸。食时，始识是十狮尸，实十石狮尸。试释是事。

这样就使得完全依赖语音来学习汉语非常的困难，语音和字相互配合才能做到事半功倍。第二件事情是汉语拼音是大多数时候不可拼读的。所谓可以拼读就是一个字母发什么音在绝大多数场合下是或者完全就是确定的，学习者只需要掌握每个字母的读音，连起来，就能够把字词的音发出来。例如日语和德语。英语发音有一些变形，但是，也是绝大多数时候来说是有规则的。汉语拼音是很晚的时候人为设计出来的。按道理来说，这样的人为的系统，应该是可以做到可拼读的。再加上，汉语的发音本来也就不多，四百多个。用一个数量比较少的字母表，例如三十多个字母，把四百多个音通过组合这些字母的方式表达出来，应该不难。但是，事实上，我们的汉语拼音系统有 16 个明确标注出来的固定读法。例如“zhi、chi、shi、ri、zi、ci、si”。这些音你可以试试按照拼读规则发音，就会得到类似“鸡、漆、西”这样的读音。也就是说，它们必须整体认读，不能分开来拼读。还有“yuan,xian,mian,feng”这样的，也是拼读不出来的，这是后面的韵母音位不准造成的。对于“点 (dian) 线 (xian) 面 (mian)”其实大概改成“点 (dien) 线 (xien) 面 (mien)”就会比较准。再加上，汉语拼音还有一些神奇的画蛇添足的规则，例如 ü 遇到某些声母要去掉两点，u、i 放在一起声调要标在后面地方（尽管有可以理解的历史的原因）。这些都是的汉语拼音是一个效率很低还不准确的汉字读音的标注方式，不可能当做学习读音的手段，只能当做校准和提示读音的作用。汉语拼音基本上是知道字怎么读以后，然后，再把这个读法和拼音记号结合起来，用来电脑输入或者提示读音用的。再加上，汉语拼音用了英文字母，但是其发音规则有有很大的不一样，例如 q, x 这些。这样就使得非母语汉语学习者更难学习汉语了。

¹⁰顺便，赵元任可是在清华大学教过数学、物理、英文、哲学和语言学的。

于是，我们开始思考一种直接运用汉字的字形、读音、含义之间的联系，还有汉字之间的字形联系来帮助学习者直接地显式地习得汉字的字形、读音、含义之间的联系方式，而不是依赖于先一个个汉字记下来，慢慢悟的方式。

前面关于汉语拼音的讨论，除了当做依靠联系来学习汉字和汉语的引子之外，还有另外一层对系统科学有意义的含义：我们的编码对象是四百多个读音，我们需要构造出来一种编码，用最少的可区分的并且每一个只表示一个音位的发音基本单位，例如字母，来组合而形成对这四百多个读音的编码。这个问题显然是一个需要考虑到四百多个音之间的内部相似性相互联系的问题，于是本来就是一个很好的系统科学的研究对象。你想这个世界有这么多种物质，化学家也仅仅需要一百来种化学元素符号来编码，物理学家也仅仅需要少数几种基本粒子来编码，而且还每一个编码的单位都是可区分的，代表唯一的没有歧义性的实际物质单元的。因此，借助数学的优化和编码，借助物理学和化学的经验，本来，汉字读音编码是一个很有系统科学味道的问题。不过，现在，仅仅能做学术讨论了，再改一个系统已经是不值得的事情了——既然大家已经习惯了一套系统并且行之有效，尽管有问题，那就只能用着这套系统了。当然，就算目前的汉语拼音系统，对于解决汉字的电脑输入问题，还是很有意义的。当然，真想做的话，可以先用国际音标把准确的每一个读音牵涉到的发音单元和音位准确标注出来，然后想办法简化：把经常在一起使用的标书符号合起来成一个，把少数的非常接近的音位粗糙地统一成一个，然后保持可拼读——每一个字母就一个发音，所谓拼读就是直接把这些字母连起来读就行了。实际上，就算在目前的拼音里面，也是有一些可拼读的，例如“un”基本上就是“u-n”合起来的发音，还有“ui”等等等。

好，现在回到我们的主题：能不能找到一个直接利用汉字之间的联系，以及汉字的形状、读音和含义之间的联系，来更好地把汉字和汉语联系起来，实现汉字和汉语的相互帮助学习的一个学习系统？在汉字研究的章黄学派，这被称为系联法 [18–20]。

首先，我们先要搞清楚汉字之间的联系，以及每个汉字自己的形状、读音和含义之间的联系。汉字还有一个好处，很多时候，汉字的含义和读音和汉字的形状，尤其是一个汉字的读音和含义和这个汉字如何拆分成它的下

层结构——更简单的汉字是联系在一起的。也就是说，这两个联系：汉字之间的联系和汉字自己的形音义的联系，基本上是紧密联系在一起的。一个汉字称作有理据的或者说可解释的，如果这个汉字的读音和含义基本上由这个汉字的底层结构——也就是构成它的更简单的汉字——决定。这个原则就好像是拼读语言里面的可拼读性——一个字词的读音是完全由构成这个字的字母的读音直接组合起来决定的，而不需要额外的规则。当然，我们知道就算是语音语言，对这个可拼读的原则也会产生一些偏离。因此，汉字也不是完全有理据的。如果我们假设大概来说还是有理据的，那么，这个汉字之间的联系和汉字自己的形音义联系实际上就是汉字和底层汉字之间的拆分关系。于是，我们把以上两种联系的问题，统一成汉字拆分关系。例如，最简单的“林”是由两个重复的“木”构成的，“森”是由三个重复的“木”构成的，或者看做“林”和“木”的组合。其含义也是遵循这个组合的逻辑，木就是树的象形字，林就是一片木，森就是更大的一片木。于是，搞清楚这三个字的字形上的联系之后，字义上的联系也就清楚了，读音可能需要额外记忆一下，但是，也节省了大量的学习成本，大大提高了学习效率。这当然是极端的例子，如果所有的字都能够找到这样的和其下层结构的联系，那么，学习汉字就成了非常简单的事情了：搞清楚哪一些是“木”这样的基本单位，先学好这些基本单位，然后组合起来，就搞定含义或者读音了，就学会了。实际上，不少量的汉字，其读音、含义并不能由其结构来完全说明，同时也有的汉字如何才能做最合适的拆分也是一个问题。也就是说，汉字不是完全具有理据性的，尽管绝大多数，或者平均来看，还是有理据的。

那么，是不是所有的汉字都可以这样把构形和音义联系起来从而达到帮助实现理解型学习的作用呢？我们就先做了这个拆分工作。在我们呈现我们的拆分之前，我们必须交代，这是我们自己按照收集的资料和自己的理解做的汉字结构的拆分，不是汉字专家汉字研究者的拆分，不能保证都是对的。具体的资料来源见我们的研究论文 [17] 以及里面的参考文献。其次，我们还要指出来其实《说文解字》[63] 做的就是这个结构拆分和用这个拆分来建立字形和本义以及读音的联系。这样的解释本义以及读音和字形之间的联系的研究汉字结构的书籍叫做字书。字书和字典——后者主要列举一个字的读音字形和各种使用场合的含义，以及使用这些含义的例子，不一

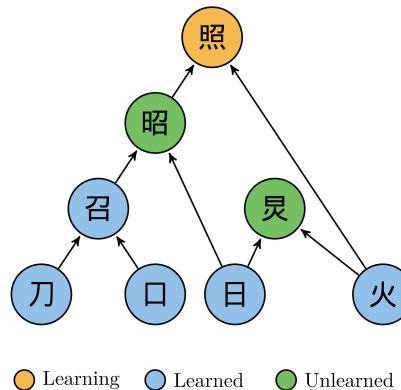


图 2.12: 汉字“照”的逐层字形拆分: 每一个层次, 如果有一个其他的汉字, 我们都独立拆分出来。因此, 我们没有把“照”直接拆分成为“日、刀、口、火”。颜色部分代表的信息, 稍后会用到, 分别代表“在学、已学、未学”。

样。当然, 在那时候, 《说文解字》的对象是篆体字, 并且当时没有甲骨文和金文这些古汉字资料。除了《说文解字》, 其实汉字研究的章(太炎)黄(侃)学派也主张通过考察汉字之间的联系来做学问。这一学派的研究者王宁著有《汉字构形学》[20] 总结和发展了这个思想。听王宁老师说起来她当学生的时候, 她的老师陆宗达先生可是要让她在一个房子里面用红绳子连卡片的。卡片上是一个个的汉字。

下面是我们自己按照文献和自己的理解(再不能查到好的拆分的时候)做的拆分的结果。先举一个例子, 再呈现整体的汉字结构拆分图。

首先, 我们建立的是逐层拆分关系。也就是说, 从任何一个字开始, 我们先做第一层有意义的拆分: 这个字和拆出来的简单字之间存在这读音或者含以上的联系, 并且没有中间字。中间字的含义是这个字是否可以拆分成其他的介于前面拆出来的简单字和这个字之间的字或者非常常用的有明确含义的偏旁部首。如果有, 则先拆分到这个中间字。例如, 在图 2.12 中的“照”字如果直接拆到底, 有“日、刀、口、火”四个简单字。但是, “日、刀、口”可以构成一个中间字“昭”, 并且“日、刀”还可以构成中间字“召”, 因此, 不能把“照”直接拆成“日、刀、口、火”。同样的道理, 也不能把“照”直接拆成“日、召、火”, 因为“日、召”可以构成中间字“昭”。因此, 必须把“照”拆分成“昭、火”。接着继续拆分“昭”。这样的逐层拆分的好处是拆分的理据性比较强, 也就是一个字和它的子结构的联系比较紧密。

例如“照”很容易由“昭、火”来解释，“昭”表音也表意——光亮比较强的意思，同时“火”也是表意单位，于是合起来表示光亮特别强，尤其是火光或者太阳光之类的。但是，“照”和“日、刀、口、火”的直接联系就不强了。因此，拆分完成以后的网络，基本上要代表汉字之间的某种读音和意义上的联系，是最关键的想法和原则。因此，我们就采用了逐层拆分的方式。有的时候，由于字形演化，一个字失去了跟它有直接读音和意义上联系的字的结构联系。这个时候，尽管我们主要按照字形来做拆分，我们就会在能力范围内找到那个原始的有读音和意义上联系的子结构来做拆分。例如“鸡”可以拆分成“又、鸟”两个部分，但是实际上，这里的“又”表示的是“系”的读音（被简化汉字强行简化掉了），和其他地方例如“友”的“又”（表示手的含义，以及“又”的读音），不是一个意思。这个时候，我们还是把“鸡——又、鸟”看做是合理的拆分，只不过“又”在形式上和表示手的含义的那个“又”合在了一起。

好了，现在，我们已经有了基本的系统中的个体或者说元素，以及个体之间的联系或者说相互作用了。我们能够用这个系统来干什么，回答什么问题呢？回到我们的动机，我们想问是不是有了联系考虑了联系可以可以帮助学习者更好地学习汉字。

我们先从局部的层面来看。一开始，汉字是孤立着学习的，通过死记硬背或者稍微好一点重复使用来学习的。现在，我们看到了联系，假设这个联系是基本上对的前提下，我们来做下一步的讨论：这个联系有什么用，可以如何帮助学习，在局部的层面。这个时候，对于学生和老师来说，当学习一个汉字的时候，就可以考虑这个汉字的下层简单汉字和上层复杂汉字，依赖简单的那些来掌握这个汉字的读音和含义，依赖上层那些来启发下一步可能可以先学这些。也就是说，学生老师可以用这个网络当教和学的参考资料，可能可以形成更好的对所学习的字的理解。也就是当做一本字书来用，一条条地检索。

我们再从整体的角度来看。如果我们的网络仅仅是这个用处，那么，它实际上不是一个网络而是一个检索列表：列表的表头就是主检索字，后面跟着的就是这个字的子结构以及关于这些子结构如何合起来构成这个汉字的理据性说明。但是，我们是有系统科学的思想的，我们也是有数学物理计算机的分析技术的，我们可以走的更远更深。我们问：基于这样的网络是不

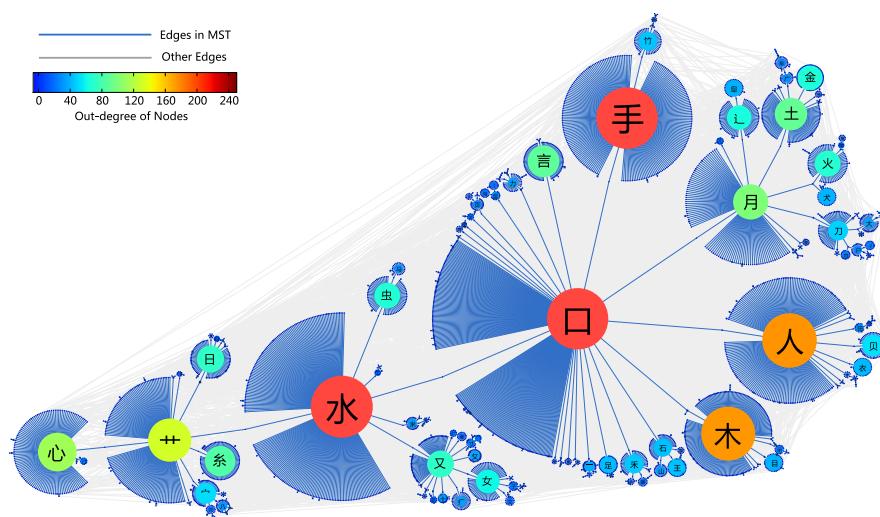


图 2.13: 3500 常用简化字的字形按照逐层拆分的方式得到的网络。其中顶点就是汉字（或者非常常用的汉字偏旁部首，例如“𠂇”），连边就是两个或者几个字可以合起来直接构成一个更加复杂的字。其中顶点的颜色是这个字连出去的边的条数，也就是这个字被用于构造多少个其他的更复杂的字。为了看起来简单一点，我们高亮显示了网络的最小生成树里面保留下来的边，而把其他的连边当做背景。Edges in MST: 最小生成树中的边；Other Edges: 其他边；Out-degree of Nodes: 顶点出度。

是可以来讨论一个最优学习顺序或者算法的问题，以及最优考察顺序或者算法的问题。例如，我们考虑学习者的识字基础，考虑学习者的学习目标，考虑学习者的语言环境，考虑学习者的年龄等因素，来决定一个合适个性化的学习顺序：从哪些字开始学习，效率会比较高。例如，大概来说，我们显然应该优先学习那些底层的字，这样学习上层字的时候，就不用回头再去学习底层的，做好铺垫，做到循序渐进。大概来说，我们还应该优先在学习者的最近认知拓展区域来学习，这样学习者的认知成本低一些。大概来说，我们还应该考虑每个字的使用频率，而且这个使用频率可能还得根据学习者的学习目的（将来主要读和写什么语料）、年龄和语言环境（是不是要考虑儿童语言和儿童文学，还是成年人的口语还是书面语）来做统计。这样的因素用什么样的数学形式来表达，这样的数学形式如何进入某种计算分析的算法和技术，来找到好的学习顺序呢？

我们发现，是否底层，被用于构造多少个其他汉字的信息都在这个汉字字形联系网络里面，于是也就需要一个网络的数学描述——邻接矩阵 A 就可以。其中 $a_j^i = 1$ 就表示字 i 是构成字 j 的一部分。 $a_j^i = 0$ 表示这两个字没关系。考虑了语料、年龄和语环境以后统计得到的每一个字的使用频率，就放在这个网络的每个顶点上记做 W_j 。学习者哪些字已经认得，则可以用一个标志来表示，例如 $L_j = 1$ 表示汉字 j 已经被学过，否则 $L_j = 0$ 。现在，我们就需要设计一个算法，把我们之前讨论过的几个需要优先学习的因素 (A, W, L) 结合起来。将来我们会更进一步地讨论这个具体的计算，在这里，我们先简单写下来我们的算法，然后大概所以下为什么这个算法实现了上面的考虑，进一步还可以怎么做。

具体的计算，我们在这里少的稍微粗糙一点，将来会把这些计算还有下面几个例子里面的分析方法都统一到一个叫做广义投入产出分析的框架下面。那个时候，再来更加详细地讨论这些计算怎么做、为什么这样做、有没有更加快速的可能是近似的计算方式，它们之间的关系等等问题。在下面要写下来的计算公式里面，最主要的思想就是顶点权和顶点权的传递。我们先不考虑 L 的事情。加入 L 的信息之后，算法会更加复杂，尽管原理上是一样的。原始的权重是矩阵 W ，我们把计算完成之后的权重记为 \tilde{W} 。整个简体字网络从最底层的字到最上层的字只有 5 层，并且大部分汉字不再构成其他的汉字，见图 2.14。考虑到这个层次性，我们还可以用层次来标

记权重，记为 \tilde{W}_i^m ，表示在 m 层上的字 i 的最终算出来的权重。

$$\tilde{W}_i^{(m-1)} = W_i^{(m-1)} + b \sum_i a_j^i \tilde{W}_j^{(m)}. \quad (2.17)$$

考虑到矩阵 A 只有从上层到下层的写成矩阵和矢量记号的形式就是，

$$\tilde{W} = W + bA\tilde{W}. \quad (2.18)$$

再做一下变形，得到

$$\tilde{W} = (1 - bA)^{-1} W = W + (bA) W + (bA)^2 W + \dots. \quad (2.19)$$

在这里参数 b 的含义是当从上一层把权重传到下一层的时候，不能把所有的权重都传到这个汉字的子结构，必须做一定的分配。例如，如果一个字有两个子结构，则每个获得一半。实际上，汉字主要的拆分形式基本就是一分为二，于是，实际上在我们的计算中取了 $b = 0.5$ 。我们还讨论了参数 b 的优化的问题，最后也正好发现， $b = 0.5$ 是比较好的选择，也是道理上说得过去的选择。将来在广义投入产出分析中，我们还会看到，我们不需要人为来挑选一个 b ，只需要对 A 做一个归一化。我们先把公式放在这里，将来再来展开讨论。

$$\tilde{a}_j^i = \frac{a_j^i}{\sum_l a_j^l} \quad (2.20a)$$

$$\tilde{W} = (1 - \tilde{A})^{-1} W. \quad (2.20b)$$

注意到公式 (2.19) 的展开形式，我们发现，我们的算法实际上就是考虑了汉字使用频率的传播带来的直接 (W) 和间接效应 ($(bA) W + (bA)^2 W + \dots$) 的结合。

一旦有了这个理论上的顺序，我们就必须来思考，这个顺序的表现，如果用于学习，到底怎样的问题。对于PageRank 算法[16]，有实际的Google搜索引擎的效果来验证。对于我们的汉字学习顺序，原则上，我们也要大概按照这个顺序编出学习材料来做实验才能验证。不过，这是一个比较大的工程。目前，我们完成的比较是基于如下的一个学习成本的计算方式的。注意，这个学习成本的计算是另外一个没有得到验证的猜想。这样的理论验证是不能代替实验检验的。不过，在没有实验结果之前，如果成本计算的理论模型还算合适，则也可以暂时拿来一用。

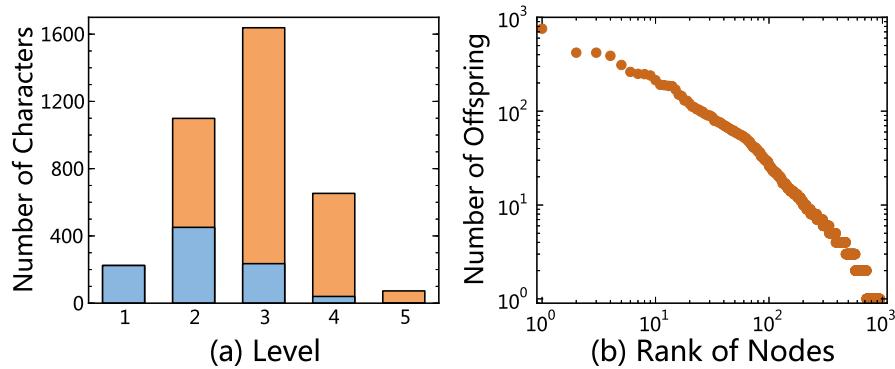


图 2.14: 3500 常用简化字的字形按照逐层拆分的方式得到的网络是具有明显层次性的，网络连接只在下层到上层之间有，表示构成关系：下一层的字用来构成上一层的字。 (a) 每一层的字的数量，其中棕色的表示不再参与构字的字的数量。(b) 把顶点的后代数量排序。其中后代的数量的计算是累计的，也就是说一个字直接或者间接参与构成的字都是这个字的后代。也就是大部分的汉字基本没有后代，只有极少数后代数量很大。例如具有 10 个以上后代的字的数量大于在 100 个。 Rank of Nodes: 按照后代数量降序排列的序号。

这个粗糙的成本的问题表述成这样：从当前已经认识的汉字开始，我们来看如果要学习某一个汉字的话，有多难。计算模型是这样的：如果这个字本身已经认识，难度成本就为 0；如果这个字本身不认识，但是其子结构都认识，则难度成本就为子结构的数量；如果这个字本身不认识，但是其子结构也有不认识的，则难度就为子结构的数量加上不认识的子结构的学习成本。其中，不认识的子结构的成本需要重复刚才的计算，考虑这个字有几个自己的子结构以及这些字结构是否认识，一直到没有子结构为止。例如图 2.12 中，“刀、口、日、火、召”都认识的条件下，我们来看学习“照”的成本。首先，“照”有两个子结构，于是成本先记为 2。接着这两个子结构中“昭”不认识，于是，我们继续计算“昭”的学习成本。“昭”有两个子结构，而且都认识。于是，“昭”的学习成本就是 2。把前后两个成本合起来就是 $2 + 2 = 4$ 。于是在图 2.12 给出的条件下，“照”的学习成本为 4。要注意，可以看到，如果我们先学“照”再学“昭”，成本是 $4 + 2 = 6$ ；如果我们先学“昭”再学“照”，则学习成本为 $2 + 2 = 4$ 。因此，不同的学习顺序有不同的成本，跳跃着学习的成本比较高。

那是不是就应该按部就班不跳跃地学习呢？也不是。如果说“照”的使用频率高很多，那么，先学“照”还是比较好，因为学习完了这个字之后会遇到很多次，会帮助学生进一步学习，或者尽早能够实现中文的使用。于是，学习效果，由累计字数和累计使用频率来度量。现在，我们就准备好了理论上的评价的框架：给定任意一个学习顺序，在这个顺序的每一步，我们能够算出来所面对的这个字的学习成本，于是也就知道了到当前位置的累计的学习成本；同时，我们能够算出来到当前位置的累计的字数和使用频率。

现在我们就用这个理论上的评价框架来比较几种不同的学习顺序的学习效率，也就是在给定成本下的收益，或者在给定收益下的成本。红色的“DNW”是我们按照分配式顶点权算出来的学习顺序，“UFO”是使用频率顺序，“NOO”是从底向上按部就班顺序，“EM1”和“EM2”分别是两本教材上的汉字学习顺序。我们发现：从累计字数来看，NOO 和 DNW 的增长最快；从累计使用频率来看，DNW 和 UFO 最好。其中 NDW 比 UFO 增长更快。这表示 DNW 不管从字数目标还是频率目标来看，都表现优秀。当然，再一次强调，这是理论计算的比较，不能代替实验比较。

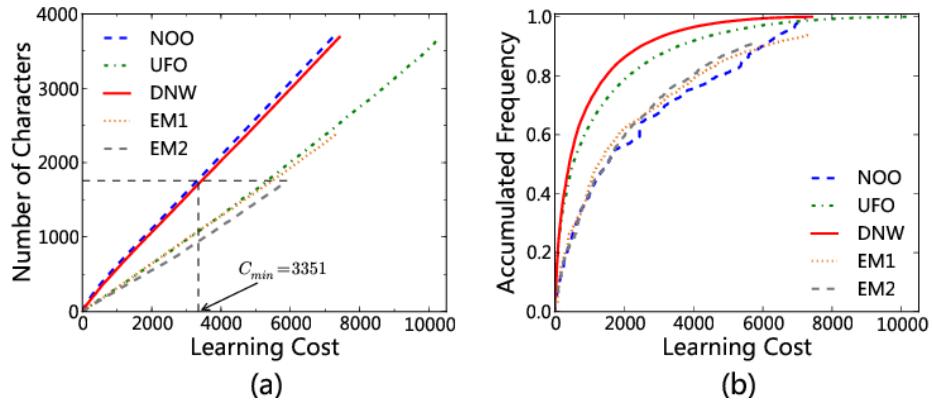


图 2.15: 基于学习成本模型和学习效果的度量——字数和累计使用频率, 我们比较了几种不同的学习顺序。红色的“DNW”是我们按照分配式顶点权算出来的学习顺序, “UFO”是使用频率顺序, “NOO”是从底向上按部就班顺序, “EM1”和“EM2”分别是两本教材上的汉字学习顺序。(a) 从累计字数来看, NOO 和 DNW 的增长最快。(b) 从累计使用频率来看, DNW 和 UFO 最好。其中 NDW 比 UFO 增长更快。

除了学习顺序的问题, 我们还提到了检测顺序或者算法的问题。个性化的学习顺序也需要先把哪些字认得 L 找出来。这个就需要高效率的检测算法。我们不能通过随机抽样或者穷举法来检测汉字得到 L 。如果我们面对的是一箱子灯泡, 那么, 除了随机抽样和穷举法, 我们没有什么好办法。而且, 随机抽样只能给我们一个认得的比例, 而不是哪些字认得, 哪些不认得。那怎么办? 幸好, 我们的汉字之间有联系, 不是基本上独立的灯泡。举一个过分简化的例子, 如果我们的灯泡已经完全通过某种网络连好了, 例如一维链串联, 则我们就可以有比较高效的检测方法。先全部点亮试试, 如果能够点亮 (假设灯泡坏的情况只有一种——断路, 更复杂的情况先不管), 则否是好的。搞定。如果不亮, 则可以在中间点把灯泡分成两部分, 分别点亮试试。能够点亮的就去掉, 不用再检查了。不能点亮的, 继续在中间点检测。这个, 当灯泡好的几率比较大的时候, 是一个非常高效率的方法。因此, 已经连起来的灯泡, 和, 分开的一箱子的灯泡, 相比, 可以找到更加合适的高效的方法。现在, 我们的汉字是已经连起来的, 当然, 不是简单的一维链而是一个网络。我们问, 这个时候, 是不是也可以有类似的高效的检测方法。

其基本思想，和学习顺序一样，还是扩散，或者说间接推断。例如，当我们考察之后，发现被考察的人不认识“木”，那么，我们就可以以非常高的概率推断这个被考察的人也不认识“林、森”。类似的，如果我们发现“森”是认识的，也可以以一定的概率推断“林、木”是认得的。那么，是不是，这样的计算可以在整个网络上算下去，每次推断几步，仅仅在网络上往前走一步还是好几步？概率如何设定？所有的这些问题都是要具体分析的，还要通过做算法和实际检测实验的对比，才能找到真的管用的高效的检测算法。但是，基本的分析思路和背后的思想就这样。

这个从汉字的死记硬背单独抄写，到把汉字的字形上的联系构成的网络用于局域检索、学习顺序和算法、检测顺序和算法的工作，实际上，正好体现了我们系统科学的精神：从孤立（连 A 都没有）到有联系（检索只需要 A ），从直接联系到间接联系（我们的计算用到了 A^2, A^3 等等），一直到整体层面的分析。将来，我们还会看到更大的共性：我们在这里发展出来的思想和分析方法，将来还可以用在更多的其他系统上。我称这个为“联系¹，联系²，联系³”。前者表示直接联系，后者表示各阶的间接联系，最后联系³表示在这个具体问题上提炼出来的思想和方法很可能还能用到对大量的其他系统的分析和研究上。

顺便，用这个汉字的例子来当做系统科学的典型研究工作之一，还强调了系统科学是一个面对和解决实际问题的学科，不是哲学：我们希望前面的分析工作在提高汉字的学习和检测的效率的问题上真的能够发挥作用。目前，我们正在做后续的研究，包含和合作者一起拆分出来更准确的网络结构，给出来更好的理据性解释，研究一个能够对不同群体特征甚至个体特征的学习者给出来一个个性化的学习顺序和自适应的检测算法，以及把这些算法和实际的学习和检测实验相比较，以至于最后按照这个研究结果来开发学习材料和学习材料的实验等工作。

不过，这个工作里面，其实还可以再增加一些其他的联系。将来得看看算法能不能把这些联系也放进去一起来计算。例如，实际上认识相联系的上层的字，也有可能会促进下一层字的认识。例如，还可以在连边上增加权重表示理据性：认识一个底层汉字有的时候并不能很好地帮助认识相联系的上层汉字。比如说，“木 - 禾”之间的联系，显然和“木 - 东”之间的联系，理解起来难度不一样，帮助学习的程度也不一样。当然，加入这些新

的联系或者联系的权重之后，我们的基本分析问题的角度和思想是不变的，就是这样的联系可以帮助回答哪些整体层面的问题，这样的联系如何在网络上扩散起来回答那些合适的问题，以及具体的扩散算法如何设计，到最后，这样的答案是不是能够通过实践的检验。

2.7 相互作用与网络科学的例子：PageRank 算法

下一个体现相互作用与网络科学的例子，并且能够体现开放系统和封闭系统的差别的，是PageRank 算法。

PageRank 算法是为了解决网页搜索结果的排序问题的：当我们通过关键词来匹配网页记录的时候，对于一个给定的关键词，我们可能得到成千上万个出现这个关键词的网页；但是人的注意力有限，一个屏幕的空间也有限，能不能有一个办法能够把跟用户想要找的内容最接近的匹配到的页面放到最前面？这个时候，用户就不用在匹配结果里面去翻找想要的页面了，体验就更好了。当然，为了根本上解决这个问题，我们需要知道用户的一些特征，可能还需要做语义上的推断，但是，有没有一些简单粗糙的方法，不太需要考虑用户行为就可以直接得到一个比较好的排序呢？而且，更进一步，如何需要考虑用户的行为和语义推断，又怎么在这个比较粗糙的方法上做进一步改进呢？

Brin和Page[16] 就遇到了这个问题，并且提供了一种后来称为PageRank 算法（这里可以指“Page 发明的排序”或者“网页的排序”的意思）的算法来解决这个问题。这个算法是这样的。首先，把所有的网页之间的超链接关系看做一个网络——顶点是网页连边是网页之间的超链接。这样就得到网络的邻接矩阵 x ，其中 $x_{j,i}^l = 1$ 表示网页 i 被网页 j 引用，也就是页面 j 上有一个超链接指向 i 。否则， $x_{j,i}^l = 0$ 。接着，对这个邻接矩阵 x 做一个归一化，

$$X_j = \sum_l x_{j,l}^l, \quad (2.21a)$$

$$A_{j,i}^l = \frac{x_{j,i}^l}{X_j}. \quad (2.21b)$$

接着，有了矩阵 A 之后，来计算这个矩阵的最大本征值对应着的本征向量

——以后简称最大本征向量，也就是

$$Ap = p. \quad (2.22)$$

由于矩阵 A 可以看做是概率转移矩阵——元素大于等于零，列和等于 1¹¹，于是这个矩阵的最大本征向量就是上面定义的本征值为 1 的本征向量。

从概率转移矩阵来看，这个本征向量是什么意思呢？ p 转移矩阵 A 的平衡分布。平衡分布的意思就是如果我们让一个粒子按照 A 跑来跑去，那么，扔很多次这样的粒子，并且每次让这个粒子跑很长时间以后，我们来看这个粒子在每一个点上平均停留的时间，就正比于这个 p 。或者用一群粒子的语言，就是扔进去一大群相互之间没有影响的粒子，然后，等很长时间再来看，这群粒子在整个空间每个点上的分布函数就是 p 。

因此，PageRank 算法的基础是概率转移矩阵，是矩阵的本征值和本征向量。不过，考虑到有的时候一个矩阵会出现一个本征值对应着多个本征向量的问题，我们需要对这个矩阵稍微做一个修正，

$$\tilde{A} = \alpha A + (1 - \alpha) E, \quad (2.23)$$

其中 E 是一个所有元素都是 1 的矩阵， α 是一个小于但是比较接近于 1 的数，用来把 A 的每一个元素都变成一个大于零的数。线性代数有一个 Perron–Frobenius 定理¹²保证对于全部都是正数的矩阵，其最大本征向量是唯一的。

按照Brin和Page的解释， α 还有另一个作用：人们浏览网页的时候大多数时候按照 A 在游走，但是，有的时候，会产生随机跳跃，也就是从一个之

¹¹将来线性代数和随机过程的章节会具体讲为什么符合这个性质的就是概率矩阵，并且概率转移矩阵有什么性质。如果现在要了解一下，可以验证下面的事情。第一，这个矩阵具有平凡做本征矢量 $[1, 1, \dots, 1]$ 并且其本征值为 1。于是，这个矩阵的右本征值也有一个是 1。接着，验证所有的本征值都小于等于 1。例如考虑一个本征值为 λ 的左本征向量，取最大的正的分量 u_j ，有 $\lambda u_j = \sum_k u_k A_j^k$ 。由于 A_j^k 都是大于等于零的，为了让右边最大，我们只需要考虑右边取和中那些都是正的，也就是 $\lambda u_j \leq \sum_{k|u_k>0} u_k A_j^k \leq \sum_{k|u_k>0} u_j A_j^k \leq \sum_k u_j A_j^k = u_j$ ，于是 $\lambda \leq 1$ 。这里的关键就是运用一个矩阵的左本征值等于右本征值的结果（这是因为不管是左右本征值，其方程都是行列式方程 $\det(A - \lambda I) = 0$ ），然后把对于这个矩阵来说难算的右本征值和本征向量问题，变成做本征值和本征向量的问题。

¹²见Wikipedia “Perron-Frobenius Theorem”词条。

前的网页上，随机跳到任意的网页上。并且，他们的分析指出来， $\alpha = 0.85$ 是一个比较合适的大小。以上就是用随机游走的观点描绘的PageRank 算法的图景。

Brin和Page还提供了另一个解释，把本征向量的计算公式 (2.22) 写开，

$$p^i = \sum_j A_j^i p^j. \quad (2.24)$$

联系每一个顶点的度的定义，

$$d^i = \sum_j A_j^i \cdot 1. \quad (2.25)$$

于是，我们发现，其实这就是说在PageRank 算法里面，相当于把周围的顶点的重要性 p^j 传递到所关心的点 i 上来，而在如果用度来表示重要性的话，相当于每一个周围的顶点的重要性都看作一样的。前者有传播的效果：每一个周围顶点的重要性 p^j 本身，也是通过 j 的邻居传过来的。而这个传过来的方式就正好就是概率转移分配的方式。因此，PageRank 算法实际上描述了直接和间接重要性的综合。

我们再来提供另外一个解释。把 α 直接写到本征向量方程公式 (2.22) 里面去，

$$[\alpha A + (1 - \alpha) E] p = p \Rightarrow p = (1 - \alpha A)^{-1} (1 - \alpha) e. \quad (2.26)$$

其中 $e = [1, 1, \dots, 1]^T$ 。注意到

$$p = (1 - \alpha A)^{-1} (1 - \alpha) e = (1 - \alpha) [e + (\alpha A) e + (\alpha A)^2 e + \dots], \quad (2.27)$$

正好体现了矢量 e 在整个网络上的传播，也就是直接效应 e ，间接效应 $(\alpha A) e + (\alpha A)^2 e + \dots$ 。系数 $(1 - \alpha)$ 是为了保持 p 还满足归一化可以看做概率分布。这时候，我们的发现，这个公式的形式和公式 (2.20b) 是一模一样的，仅仅是那里的使用频率向量 W 变成了这里的外界浏览的等权重可能性 e 。

按照这个来自于 W 的启发，也就是说，实际上我们可以考虑外界浏览不是完全等权重的某个 p_0 ，而且这个 p_0 可能是依赖于用户特征的，例如网

页浏览的习惯，用户感兴趣的主题等等。于是，我们自然就得到了一个后来被人叫做个性化的PageRank 算法的东西，

$$p = (1 - \alpha A)^{-1} (1 - \alpha) p_0. \quad (2.28)$$

其中个性化信息完全从 p_0 来进入整个排序。

从关键词匹配独立的网页，到把网页和网页之间的超链接看作是网络，到网络上的直接和间接联系，到外界随机跳跃或者个性化跳跃的引入，整个PageRank 算法很好地体现了从孤立到有联系，从直接联系到间接联系，从个体到整体，这个系统科学的核心思维方式。同时，由于汉字学习问题和PageRank 算法问题解决方案和思想上的相似性，我们还看到了从具体系统来到具体系统去，跨学科这个系统科学的另一个特点。

PageRank 算法的数据基础实际上是网页的引用关系。于是，自然，我们可以联系到，是不是同样的分析方法可以用于论文之间的引用关系的分析，从而来给论文的重要性做一个排序呢？当然，实际的科学学的问题有它的自身的特点需要处理，但是，大概来说这样的分析方法是适用的，可能需要修正，例如对论文发表时间新旧的修正。实际上，这个关系，在历史发展中是反过来的。PageRank 算法的提出，除了受到概率转移矩阵的影响，也直接受到了科学学研究的启发。PageRank 算法的专利文档 [64] 中对Pinski和Narin的科学学文章 [65] 的引用。

另外一个要指出来的，为了下一个例子铺垫的，从PageRank 算法和汉字学习这两个例子提炼出来的共性，是从封闭系统走向了开放系统：在仅仅考虑公式 (2.22) 中本征向量形式的定义的时候，实际上，我们只需要考虑重要性在系统内部的传播；当我们来考虑公式 (2.26) 和公式 (2.28) 的时候，实际上，我们引入了外界对每一个网站的需求——前者当做权重相同的需求，后者根据用户的兴趣和访问习惯统计得来。完全在系统内部传播的计算，尽管也同时考虑了直接和间接效应，被称为封闭系统的分析。需要直接引入外界来做传播的计算的，被称为开放系统的分析。在系统科学里面，很多时候，有一个思想后者技术，需要分封闭系统和开放系统来考虑。

2.8 相互作用与投入产出分析：经济学和科学学

在经济学产业结构分析中，也经常要关心哪一个产业对整个经济更加重要的问题；有的时候还要做前瞻——例如，如果下一年我们知道消费者将需要消费更多的汽车，问这个时候整个经济将如何响应来满足这个预期的消费增加；有的时候还要讨论乘数效应——例如，如果某个工种的劳动力投入价格增加，其他产品的价格将发生什么样的变化。这样的问题，有了前面的汉字学习的例子和PageRank 算法的例子，自然就会联想到间接联系：首先，经济需要生产这么多汽车，接着还需要生产用来生产汽车的原材料，接着需要原材料的原材料，等等等等。这样的问题用什么样的数学形式来描述和计算？

在科学学中，有的时候也要问领域之间的相互依赖的问题。例如，为了支持某个领域的研究的发展，需要同时支持哪个对这个领域的发展起到关键支撑作用的领域。例如，倒过来，一旦支持了某个领域的发展，哪些个其他领域的发展也能够得到推动。类似的，在科学和技术的关系中，为了推动某方面的技术的发展，需要支持哪些基础性的科学研究的发展以及相关的支撑性的技术的发展。这样的问题，实际上，和前面的产业结构的问题是很像的。是不是能够用类似的方法来分析？

为了回答前面这个经济学问题，Leontief提出了投入产出分析[66, 67]。假设经济系统有 $N + 1$ 个产业部门，例如金融、工业、农业、居民。每一个产业部门都需要其他产业部门的投入，也把自己的产出提供了其他产业部门。例如，很多工业产品需要农产品当做原材料，还需要居民的产出——劳动力——的投入，而居民呢，则需要消费工业产品和农业产品，同时为其他产业提供劳动力。这个 $N + 1$ 个部门的产业部门关系表就记录了这些产业部门之间的实物或者货币形式的投入关系（同时也是产出关系，所以被称为投入产出分析，不是很多时候说的成本 - 产出分析）。为什么记为 $N + 1$ 呢，最后这个 1 由于我们将要看到的原因是专门留给最终消费者——也就是居民的。当然，政府购买也可以当做最终消费的一部分，或者独立开来增加成为 $N + 2$ 部门的产业结构关系表。这里还有一个假设，假设每一个产业部门只提供一种产品。实际上，不仅产业部门提供不同的产品，甚至有同一个工厂也提供不同的产品的。原则上，这个时候，我们可以把产业部门更加细分，细化到产品。不过，由于数据统计难度的问题，实际上，各个国

家的投入产出表都是部门数量不多的，在这个假设下来完成的。也就是说，本来我们想从产品层次的生产关系¹³来开始我们的研究，也就是

$$lA + mB + nC \xrightarrow{\text{机器、厂房}} qP. \quad (2.29)$$

表示 l 单位的 A ，加上 m 单位的 B ，加上 n 单位的 C （例如劳动力），在“机器、厂房”里面，生产出来 q 单位的 P 。或者把“机器厂房”的部分以某种形式也放到生产关系方程中去，变成

$$lA + mB + nC + pD = qP. \quad (2.30)$$

但是，这个数据的获得比较困难或者说还没有看到很多有了这个数据之后可以回答的新问题的巨大好处，于是，我们就只有先从产业层次的数据开始了。产业层次的数据，原则上，就是把一大堆产品算成一个产业，然后当做合起来仅提供一种产品。于是，我们就有了各个部门之间的投入产出数量 x_j^i ，表示部门 i 的产品投入到部门 j 中的实物形式的数量或者货币形式的总量。为了简单，这个仅考虑货币形式。

有了这个 x 矩阵，我们先来回答前瞻如何计算的问题：假设下一年，我们通过别的渠道知道消费者会产生一个需求上的变化 Δx_{N+1}^i ，整个经济需要如何应对，也就是什么样的 Δx_j^i 或者说 ΔX^i ，才能满足这个变化。回顾我们之前的定义的符号，

$$X^i = \sum_j x_j^i, \quad (2.31)$$

$$X_i = \sum_j x_i^j. \quad (2.32)$$

其中的第二个等式，在实物形式的时候，是不能计算的——单位不一致，不同的产品的数量不能直接加起来。

现在，我们对 X^i 的定义做一个变形，

$$X^i = \sum_j x_j^i = \sum_{j=1}^N x_j^i + x_{N+1}^i = \sum_{j=1}^N \frac{x_j^i}{X^j} X^j + x_{N+1}^i = \sum_{j=1}^N A_j^i X^j + Y^i, \quad (2.33)$$

¹³这里生产关系就是指产品之间什么什么东西用来生产什么的这个关系。

其中

$$A_j^i = \frac{x_j^i}{X^j}, \quad (2.34)$$

$$Y^i = x_{N+1}^i. \quad (2.35)$$

这里要注意， x 是一个 $(N + 1)$ 维的矩阵， A 是一个 (N) 维的矩阵。并且， A 的“归一化”不是一个百分比，而是一个配方：每生产一个 j 产品需要多少个 i 产品的数量。数学形式上，重要的一点是，这个“归一化”下面的分母和上面的分子的上下标是不配套的，如果配套应该是 $\frac{x_j^i}{X^i}$ 或者 $\frac{x_j^i}{X_j}$ 这样的。顺便，如果这样，就回到了 PageRank 算法。

把公式 (2.33) 记做矩阵和矢量的形式，有

$$X = AX + Y. \quad (2.36)$$

于是，得到最终的方程

$$X = (1 - A)^{-1} Y. \quad (2.37)$$

这是一个线性方程，于是自然，

$$\Delta X = (1 - A)^{-1} \Delta Y \triangleq L \Delta Y. \quad (2.38)$$

这里的 L 就被称为 Leontief 矩阵，或者 Leontief 逆。

有了这个 Leontief 逆之后，我们可以来讨论产业部门的重要性，例如

$$z^k = \sum_l L_k^l, \quad (2.39)$$

就度量了最终消费者产生了对 k 部门的一个单位的需求的变化 ($(\Delta Y)^k = 1$ ，其他元素都等于零)，经济的响应总量。其来自于，

$$\sum_l (\Delta X)^l = \sum_l (L \Delta Y)^l = \sum_l L_k^l (\Delta Y)^k. \quad (2.40)$$

这就是乘数：一个小小的变化，有可能引起附带的效果，合起来可能是起始的变化的很多倍。

有了这个数学公式之后，我么来分析这个计算的合理性。首先，把最终消费者部门单独提取出来放到右边是不是合适？在经济系统中，把最终消

费者单独拿出来放到右边去是自然的：经济产品的再生产和劳动力的再生产周期完全不一样；另外，前瞻也就需要一个事先做好的预期，对最终消费者做这样的预期有其他办法。可能还有另一个原因，最终消费部门对其他部门的投入——表现为劳动力和资本的价值——也比较难做直接的统计。合起来，也就是说，最终消费者在经济学里面，确实有不看做经济生产的直接的一部分的理由。其次，我们再来问，把矩阵 A 当做固定的东西，来做前瞻是不是合适的？矩阵 A 的内容是生产配方，是技术水平的表现，在一段短时间内，进入生产的技术变化应该不大，所以，也具有合理性。但是，这也正好说明，我们其实可以开展类似这样的研究：当我们能够改变技术矩阵 A 的时候，什么样的小小的改变带来的效果是最大的。这样的改变可能意味着技术革新，或者对产业结构的破坏等。这个对计算在系统上的实际意义的反思，在系统科学或者说整个科学里面，是非常重要的。以后我们还会回到这个话题。

我们再来看科学领域之间的相互影响的问题。实际上，我们可以把科学领域看做产业部门，于是所有的思考和关系是类似的，于是我们猜测，分析方法甚至最终的数学公式也应该是类似的。可是，一个很大的不同是，前面已经提到。在经济系统中，把最终消费者单独拿出来放到右边去是有一定道理的。但是，对于科学领域，例如考虑数学、物理学、经济学、化学、生物学等领域之间的关系的时候，把什么东西单独拿出来放到外面比较合适呢？如果这些学科加上工程类的学科，还可以有一定的理由拿出来：工程学科对这些基础学科的投入不是很大，这些学科对工程的支持作用倒是有可能比较强，也就是说，这些基础学科内部的相互联系可能远远高于它们和工程之间的相互联系。还不能真的就是没什么联系，真的没有的话那就把工程和基础学科独立出来好了。顺便，在系统科学做系统的划分的时候，很多时候，我们不是考试是不是能够把所有的有联系的元素都包含进来，而是在合适的差不多能够截断的地方截断，让系统内元素之间的相互联系远远比系统内外的联系要紧密。因此，把什么样的东西还放在系统里面，但是又可以拿出来当做系统的外界来研究，是很微妙的问题。

那，也就是说在科学学问题里面，原来经济系统的投入产出分析——需要把某一个部门拿出来放到方程的右边，不能直接使用，尽管分析思想——投入产出关系和直接间接联系的综合——非常一致：一个学科对其他

学科的影响力不能仅仅通过这两个学科之间的引用来看，有的时候这个学科通过第三个学科间接来影响这个学科。那怎么办？

我们自己的工作 [68] 提出来了一个基于矩阵本征值和本征向量的分析方法。从原始的封闭系统的 $(N + 1)$ 维的矩阵 A 开始，考虑去掉任意一个部门 k （于是在矩阵中删除相应的第 k 行第 k 列），计算这个 N 维的矩阵 $A^{(-k)}$ 的最大本征值 $\lambda_{\max}^{(-k)}$ 和相应的右本征向量 $|\lambda_{\max}^{(-k)}\rangle$ 。然后，我们把这个本征值和原始 $(N + 1)$ 维的矩阵 A 矩阵的最大本征值 (1) 的差，当作这个部门 k 的重要性，也就是

$$IOF_k = 1 - \lambda_{\max}^{(-k)}. \quad (2.41)$$

同时，我们也通过相应的本征向量定义了部门 k 和其他部门的来联系。这就等到以后详细介绍“广义投入产出分析”的时候再来讨论了。

那为什么这样定义的量可能是有意义的呢？首先，在原始的 $(N + 1)$ 维的矩阵 A 中，这个最大本征值和本征矢量是有意义的：后者表示投入的配比，前者表示在这个配比下产出正好等于投入，没有任何损失。也就是找到了这个系统的一种最优配方。当我们去掉一个部门的时候，由于这个部门不能再给其他部门提供相应的原材料也不能再处理其他部门过来的原材料，因此，整个生产配比需要发生变化。可以想象，如果我们去掉的部门基本上不参与其他部门的生产，或者具有一个强烈可替代的部门，那么，这个配方就变化很小，整体生产率也变化很小，也就是说， $\lambda_{\max}^{(-k)}$ 会接近于 1。

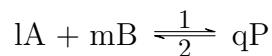
不过，我们后来发现这个通过“封闭系统投入产出分析”计算出来的量实际上和 PageRank 值具有一定的内部联系，甚至在守恒网络——就是每一个点的总投入等于总产出——里面，这个量和这个部门的总产出也是直接联系在一起的。另外一个能做的分析是，从始的 $(N + 1)$ 维的矩阵 A 开始，我们可以把任意一个部门 k 放到右边，而不是像传统投入产出分析中的仅仅把部门 $N + 1$ 放到右边，然后计算矩阵逆。我们称这个方法为“目标外界投入产出分析”。这个关于不同的量之间的联系也等到详细介绍“广义投入产出分析”的时候再来讨论。

现在，除了传统投入产出分析，我们还有封闭系统投入产出分析、目标外界投入产出分析、PageRank 算法（和投入产出分析的数学形式相同，仅仅是定义略有差别）。将来我们会更清楚地看到这些方法其实都可以看做一

个统一的分析方法。这些个方法除了汉字之间的音形义关系、经济生产关系、论文引用关系、科学领域关系，还可以用来分析各种具有投入产出关系的系统，例如科学与技术之间的关系，科学技术和经济的关系，国家之间的贸易或者论文引用关系等等。前面我们把产品生产看做了化学反应。因此，这些方法实际上，也能用于化学反应网络的研究。

2.9 系统生物学和化学反应网络：流平衡分析

对于一个化学反应，



我们可以依靠化学反应速率定律和质量作用定律 [69] 写下来一个各种物质浓度的演化方程，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A &= lk_2P^q - lk_1A^lB^m + b_A \\ \frac{d}{dt}B &= mk_2P^q - mk_1A^lB^m + b_B \\ \frac{d}{dt}P &= qk_1A^lB^m - qk_2P^q + b_P\end{aligned}$$

其中 k_1, k_2 是正反应和逆反应的反应速率常数——单位时间发生了多少次这个化学反应， b_A 是外界输入系统内的 A 的单位时间内的流量，其他外界流量的定义也类似。

更一般地，我们可以把每一种反应物的浓度 (X_i) 的变化都用下面的一般的方程来描述

$$\frac{d}{dt}X_i = \sum_{r=1}^M \kappa_r \prod_{j=1}^N \left(X_j \right)^{\frac{|S_j^r| - S_j^r}{2}} S_i^r + b_i, \quad (2.42)$$

其中 S_j^r 称为反应系数矩阵，表示化学反应 r 发生一次会产生（正值）或者消耗（负值）多少个 j 物质的分子， κ^r 是这个化学反应 r 发生的速率常数。指数 $\frac{|S_j^r| - S_j^r}{2}$ 永远是正的，尽管 S_j^r 有正负。 b_i 表示外界对系统的物质 i 的输入（正值）或者取出（负值）的速率。在这个方程里面，我们发现，系统的系统的行为完全由外界参数 S_j^r, κ_r 和 b_i 决定。如果我们想了解这个反应的动力学，我们只要把上面这个方程，针对给定的初始条件求解出来，就可以了。当然，我们还可以给浓度加上空间的变量——也就是允许各个点的各

物质的浓度不一样, $X_i(\vec{r}, t)$, 而不仅仅是时间变量的函数。于是, 加上扩散项, 就会成为更一般的反应扩散方程。于是, 剩下的事情, 就是求解一下这个方程了。

但是, 第一, 求解这样的方程不是意见容易的事情, 第二, 有些时候可能有的问题不用把这样的方程直接求出来也能够回答, 所以人们就开始寻求不直接求解方程, 而来做更加粗粒化的基于 S'_i 结构的分析。我们来看一看这个分析大概是怎么做的, 系统科学可以从里面吸取什么东西。

定义反应 r 的发生速率

$$v_r = \kappa_r \prod_{j=1}^N (X_j)^{\frac{|S_j^r| - S_j^r}{2}}. \quad (2.43)$$

于是公式 (2.42) 成为如下的方程,

$$\frac{d}{dt} X_i = \sum_{r=1}^M v_r S_i^r + b_i, \quad (2.44)$$

如果我们主要关心稳态, 则方程可以进一步简化

$$\sum_{r=1}^M v_r S_i^r + b_i = 0. \quad (2.45)$$

记做矢量的形式, 对于开放系统和封闭系统 ($b_i = 0$) 分别有

$$vS + b = 0, \quad (2.46)$$

$$vS = 0. \quad (2.47)$$

注意, 这两组线性方程实际上有很大的欺骗性, 看起来, v 好像能够完全由 S 决定, 从而在从这个求解出来的 v 算出来 X 。实际上, 这两点都是有可能不成立的: S 不能唯一决定 v (S 不是正方形的, 未知数和方程的数量不一样), 已知 v 以后, 也不一定能够求出来唯一的 X 。实际上, 对公式 (2.43) 两边求对数, 可以得到另一组线性方程, 而线性方程解的存在和唯一需要满足适当的条件。先不管这个带有欺骗性的表示, 我们至少把问题看起来简化了很多很多。至少, 这时候, 我们就发现了这两组线性方程和前面的投入产出分析的相似性: 相当于求矩阵逆 $v = bS^{-1}$ 或者矩阵 S 的本征值为 0 的本征向量。也就是说, 我们只需要研究矩阵 S 的特征, 就能够解决化学反应的定态的问题。

将来我们还会看到，这个矩阵 S 实际上代表了一个二分网（Bipartite Network）： S_r^i 中的 r 代表了化学反应顶点， i 代表了反应物顶点，而这个具体的数值 S_r^i 当不等于零的时候，代表了两种顶点之间的连接。同时，由于我们规定了正负号，实际上，还是一个有向二分网。这个有向二分网就被称为化学反应网络 [69]。实际上，不仅仅是化学反应，产品生产、基因调控都可以表达成为这样的化学反应。

有了这个二分网，我们没准可以从网络的角度来研究化学反应的定态。例如，是不是什么样的化学反应就对应着什么样的动力学呢？在这里，我们不具体展开化学反应网络的结构和定态之间关系的研究，而是转而讨论化学反应网络上的流平衡分析（Flux Balance Analysis）[70, 71]：假设我们能够用某种方式，例如加上额外的约束 $F(v) = 0$ ，从公式 (2.46) 或者公式 (2.47) 求解出来 X ，那么，是否可以讨论，如何改变 S ，能够得到更加希望得到的 X 的问题。这个更加希望得到的 X 可以表示成为某个 X 的目标函数 $G(v)$ ，希望取得某个极值。这个时候，我们就可以讨论类似这样的问题：在 S 中去掉一个化学反应或者去掉一个反应物，或者去掉几个化学反应或者反应物，会怎样？这样的问题在系统生物学的研究中具有重要的地位，去掉某些基因于是某些化学反应的调控出了问题，或者某些生成物没有了，系统会怎样。如果约束函数 $F(v)$ 和 $G(v)$ 刚好是线性的就更好了，还可以用线性规划的方式来求解这个约束下优化的问题。

来自文献 “What is flux balance analysis?(《流平衡分析简介》)” [72] 的图 2.16 就是这样一个例子：先计算在方程中去掉单个基因的影响，然后计算去掉任意一对合起来的影响，接着对比这个影响。图中蓝色越深表示影响越大。可以看到，对于一大群基因，任意和其他基因的组合都有比较严重的影响——也就是图中的成带状的图。这说明，对于这些基因，组合组合溢出效应基本不用考虑，去掉单独的那个已经影响很大，再去掉另一个基因不会产生严重的多的影响。但是，其中另外一些，只出现在孤立的地方——见图中那些孤立的蓝色点。这说明，单独去掉其中一个基因都没有太大的影响，但是，同时去掉两个则能够有很大的影响。

那，在这个例子里面，哪里系统科学了？首先，在这里，系统的各个单元之间的相互影响用一个矩阵或者网络的形式来描述。其次，当讨论其中一个单元对整体系统的影响力的时候，我们需要同时考虑直接和间接效

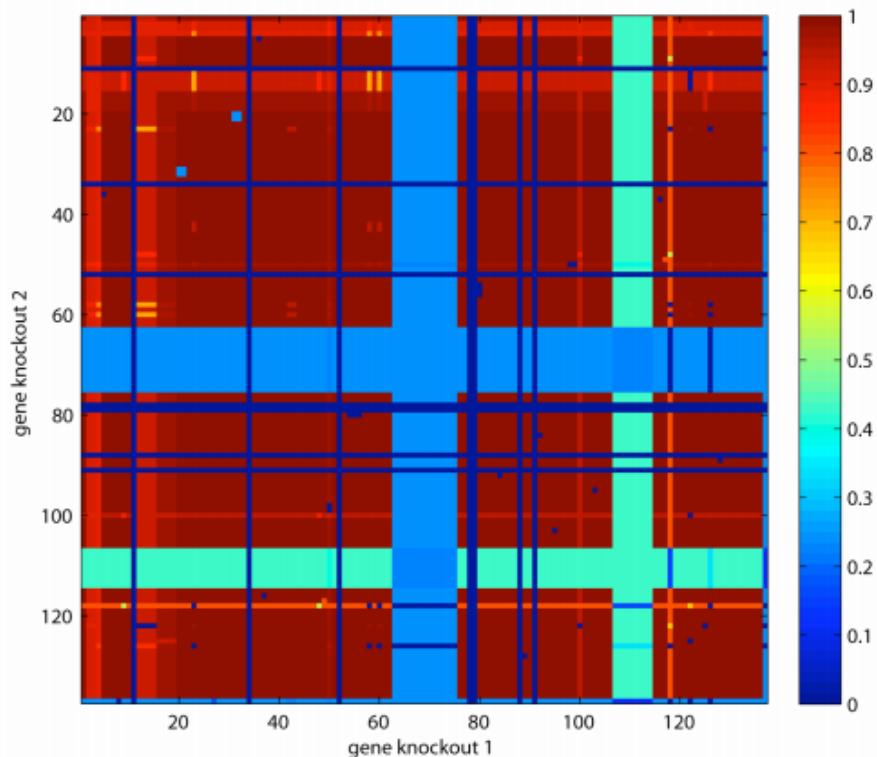


图 2.16: 把 *E.coli* 的 136 种核心基因中的任意两种敲除。注意那些孤立出现的蓝色和深蓝色的点。成带状的蓝色区域对应着去掉一个就有很大影响的基因。孤立出现的那些点表示只有把那两种基因组合起来才会有比较大的影响，单独去掉其中一种影响不大。图来自于 [72]。[基因敲除 1](#), [基因敲除 2](#)

果，也就是计算矩阵逆或者矩阵本征值和本征向量。再次，组合溢出效应典型地体现了相互作用的效果：两个单元同时去掉的影响，不是单独去掉每一个再加起来的效果。最后，分析方法的数学形式上和思维方式的一致性使得我们看到了汉字研究的分布式顶点权算法、PageRank 算法、开放系统投入产出、封闭系统投入产出和化学反应的流平衡分析这些算法的统一性。由于这个统一性，我们把它们合起来称为“广义投入产出分析”。这体现了系统科学从具体系统到一般方法再到具体系统以及研究问题和研究方法的自然的跨学科性。

将来我们会逐个建立起来这些方法中的数学形式上的联系，例如 PageRank 矢量是概率转移矩阵的本征向量实际上和投入产出矩阵的本征矢量其实是一一对应的，例如个性化 PageRank 分析就相当于包含外界的投入产出分析，例如封闭系统的投入产出分析实际上和 PageRank 算法具有内部联系。我们也会发展一些同时适用这些方法的微扰计算和近似计算。并且我们还会把这个微扰和近似计算和传统物理学的 Dyson 方程和 Green 函数相联系。在更高的层次上看到统一性，也是系统科学的典型思维方式之一。

有了这几个例子之后，我们就可以来进一步解释“联系¹，联系²，联系³”的含义了。第一层含义是这样的：“联系¹”指的是通过在具体问题中关注联系，我们可以更好地理解这个问题；“联系²”指的是其实这样的系统经常会存在分析方法上的共性，也就是看到联系的联系；“联系³”的意思是在思维方式的层次，对联系的关注应该成为问题解决、理解世界的一个普遍的角度。第二层含义是在前面几个例子中，我们都看到了，我们所做的计算实际上就是一个矩阵 A 的一次方、二次方、三次方，很多次方甚至无穷多次方。因此，这个“联系¹，联系²，联系³”还代表了这个广义投入产出分析方法的具体公式。在这两层意义上，我们说系统科学就是帮助大家看到不容易看到的但是本来就存在的能够促进问题提出和问题解决的联系。为了强调这个“联系¹，联系²，联系³”的意义，我们把它称为系联性思考，也就是

$$\text{系联} \triangleq \text{联系}^1, \text{联系}^2, \text{联系}^3$$

2.10 博弈与相互作用的例子

以二人博弈（完全信息静态）为例，博弈是两个决策者的收益相互影响的条件下做决策的情景 [73]。博弈者 i 能够选择的行动集合是 $s^i \in S^i$ 。在所有博弈者都选择了行动之后，每一个博弈者会受到一个收益，它是所有行动合起来的函数， $E^i(s^1, s^2)$ 。很多时候 $E^1(s^1, s^2) \neq E^2(s^1, s^2)$ 。博弈理论回答：在这样的情形下，博弈者将如何做出决策。理论需要给出来博弈者的决策，并且计算出来的这个决策还能够与实验或者实际情景相符。

和物理学一样，经济学也很大程度上依赖于数学：从经济学问题中提炼数学概念，把数学概念用于描述和解决经济学问题。在博弈论之前的经济学背后的数学问题，很多时候是优化问题：对于一个自变量 x ，给定约束，给定目标，寻找满足这个约束的目标取极值的 x^* ；如果这样的 x^* 有很多个，还需要解决最优解的精炼的问题，例如通过研究这些最优解的稳定性或者提出更多的其他目标或者约束。从这个意义上说，博弈论使得经济学从一个目标函数的优化问题变成了可能相互冲突的多个主体的多个目标的优化问题。也就是说，当你优化 x_1 (x_2) 的时候，有一个目标函数 $E_1(x_1; x_2)^{14}$ ($E_2(x_2; x_1)$)，并且有它们自己的约束，更加重要的是 $E_1(x_1; x_2) \neq E_2(x_2; x_1)$ ，也不是相容的单调增函数，例如 $E_1(x_1; x_2) = G(E_2(x_2; x_1))$ 。如果是单调增函数，则实际上优化 E_2 就相当于优化 E_1 ，于是还是一个目标函数的优化问题。下面我们还会举例子来说明这个关系。

为什么我们要从这个角度来看博弈论？从共同目标函数或者无关目标函数的优化，变成相关并且不是单调相容的多个主体的多个目标函数的优化，实际上，就引入和主体之间的相互作用。因此，从这个意义上说，从优化的经济学变成博弈的经济学，就是从孤立到有相互作用。因此，就可以看作是系统科学的研究对象。将来，我们还会看到，博弈论不能简单地看作数学理论——从经典的数学化的博弈理论计算出来结果大多数时候和博弈实验的结果不相符。因此，实际上，博弈论还是一个发展中的科学，而不是数学。其根本目标是建立一个能够解释实际观测到的主体的行为的理论模型。从这个意义上来说，博弈理论就更加像系统科学。此外，从单个主体的决策问题，变成两个主体的能够解释其行为的博弈科学模型，再到有相互利益

¹⁴这里，为了强调我们优化的变量是 x_1 ，把 x_2 当作常数，我们中间用了分号 “;”。

冲突的多人的决策模型——也就是多人博弈，博弈就更加像一个系统科学的研究对象了。因此，从这个意义上，我们博弈列为系统科学导论的一小节。

除了这个整体意义上的博弈论学科体现的系统性和科学性，在细节的层面，也有反映跨学科性的例子。例如，博弈论中为了描述博弈者并不是只选择收益最高的选项而是以更大的倾向性选择收益更高的选项，McKelvey和Palfrey提出来一个叫做随机反应均衡（Quantal Response Equilibrium）的概念 [74]，其实就是把最优反应函数——选择收益最高的——变成了一个来自于统计物理学的Boltzmann 分布函数，例如 $\rho(s^1) \propto e^{\beta E^1(s^1; s^2)}$ 。其中 $E^1(s^1; s^2)$ 是博弈者 2 选择 s^2 被固定的情况下，博弈者 1 选择 s^1 获得的收益。当然，McKelvey 和 Palfrey 提出这个概念的背景不是统计物理学的 Boltzmann 分布，而是信息的不确定性等其他因素。但是，也完全可以直接从统计物理学的 Boltzmann 分布来写下来这个定义 [75, 76]。

另外一个稍微大一点的跨学科的结合是博弈论和量子力学的结合，称为量子博弈 [75, 77–79]。当我们把经典博弈看作是对于经典对象的操作的选择——例如猜硬币游戏可以看做是翻转硬币游戏，在那里两个博弈者来翻转或者不翻转一个硬币，硬币的末状态决定两个博弈者的收益，例如正（反）面的时候第一（二）个博弈者赢——的时候，自然，我们就可以问，如果我们来操作一个量子对象，例如自旋，会怎样，理论是否需要修正？我们自己的研究发现，这个时候，需要把经典概率的密度分布函数，变成，量子概率的密度矩阵 [75, 79]。这个变化，就好象从经典力学变成量子力学的时候一样，那时候，也是从经典概率的密度分布函数变成了量子概率的密度矩阵。

除了优化问题的思路，有的时候，还从演化的角度来讨论博弈，称为演化博弈论[80]。一开始，演化的角度是为了解决博弈的解——例如其中一个重要的解的概念叫做Nash 均衡——的求解和精炼的问题。前者是研究怎么把所有的Nash 均衡求出来，后者是讨论如果这样的解有多个，那么，哪一个应该用来描述现实。当然，在演化博弈提出来之前，博弈论研究者也提出了一些解的精炼办法，例如颤抖的手的精炼等。演化博弈提供了另一个思路。它把静态博弈中某一个解的出现和解释能力，看作是这个策略和其他大量的可能解或者甚至不是Nash 均衡解的策略相互竞争的结果：一个能够通

过这个策略相互竞争活下来并且占有很大比例的策略，就是具有现实解释力的策略，而不用去管这个策略是不是Nash 均衡。于是，问题转化为如何描述这个策略相互竞争的动力学，进而，一旦有了这个动力学过程和方程，就可以讨论这个过程的定态和定态的稳定性——就是万一发生了策略的突变这个突变是不是会慢慢消失于是维持这个定态还是这个突变会使得系统跑到另一个定态上去。这样，问题就转化成了前面提到的动力学系统的状态和相变的问题。另一方面，也可以用这样的演化过程，或者说学习过程[81]——因为学习和模仿是这些演化规则背后重要的理念，是比静态解的概念更加基础的概念——从理念上和实际结果上，来在一定程度上解释静态解的出现。例如所谓的演化稳定的解和Nash 均衡之间有非常大的联系。

除了这些把知识、概念和分析方法借鉴到博弈论体现的跨学科性，还有把来自于自然科学的思想和技术与博弈论结合来解决博弈论本身最核心的问题的研究。我们提到了博弈论本身的主要问题是理论的解和实际实验的结果很多时候不相符¹⁵。例如，囚徒困境的理论解是所有人都相互背叛，但是实际实验的结果是还是有很多人选择相互合作。如果考虑重复的囚徒困境，按照反向推理得到的理论解是任何时候两个博弈者都会相互背叛，但是，实际实验还是发现存在大量的相互合作。例如，蜈蚣博弈（Centipede Game）按照反向推理得到的理论解是第一轮就结束游戏，而实际实验的结果是往往游戏可以进行很多轮。例如最后通牒博弈的理论解是提议者给出最少的能够给的不为零的量，接受者都会接受。但是，实际实验发现很多时候，提议者会给出接近 30% 的钱给接受者。除了这些还有很多其他的博弈，理论和实验结果也不相符。作为一门科学，博弈论首先要能够解决这个在简单的少数几个人的博弈的情况下，理论能够和实验不能相符的问题。

解决这个博弈理论的核心问题之后，将来才能够考虑多人的博弈问题，带结构的多人的问题。这里带结构的意思是说，每一个人和周围人的关系并不是完全一样的，有联系人的数量和紧密程度，对于每一个个体可能都是不一样的。一个描述这样的带结构的人群的自然的语言，就是前面我们已经用过的网络。

因此，从这个意义上，我们把旨在描述可能具有结构的多人的实验和

¹⁵当然，就算在目前的博弈的数学理论下，博弈的求解和解的精炼，也是可以进一步研究的问题。

现实中的博弈者行为的博弈论看作是一个具有系统科学特性的学科。当然，我们一直强调，系统科学要能够解决来源学科感兴趣的问题，还要能够从这些问题的解决里面提炼出来一般的分析方法和思维方式，然后用到更多的其他问题中去。在博弈研究上，目前系统科学主要关注前面半句话——先依靠分析问题的视角、思维方式、分析方法和多学科的知识来解决博弈这个学科本身关注的问题然后也可能可以提供一些问新问题的角度，至于后面这个从具体到一般再到具体的升华，那就要靠后续的研究工作了。

2.11 约束下定态与动态过程的优化的例子

前面我们提到了系统科学和数学的关系，说基本上系统科学就是用数学来描述和解决自于非特定领域的具体问题，以及从这些问题中提炼出来数学的概念和分析方法。也就是说，系统科学首先是科学，然后所研究的现象具有系统性（相互作用、从孤立到联系到间接联系、涌现）和跨学科性（问题和方法的内在一致性）。可是，有的时 ，这样的问题一旦自己形成学科，那么，就成了那个学科内部的问题了。或者，有的时候，这些问题本来就在它们自己的学科中。还有的时候，问题提出的时候没有一般性的方法，也不在已经有的传统学科内，那么，就会暂时成为系统科学的研究对象，直到这个问题完全变成一个应用数学的问题，而这个问题的理论完全变成数学的一个分支。在这一章的最后的几个例子——运筹学和控制论，就属于这样的情况：问题提出的时候不在某一个具体学科里面，问题的答案已经找到并且成为数学的一个标准的分支，尽管解决方法本身还有具有一定的跨学科性，那不过就是数学的性质——数学原则上本来就可以用于任何一个具体学科。

这部分已经从系统科学进入到系统工程——也就是系统科学的应用——的层次，或者说，如果有科学问题的话也是在从系统工程里面提出来的科学问题这个层次。这部分不是本书的重点。在此，作为系统科学的典型例子讨论以下，后续就不在展开。当然，如果有一天，从系统工程来的科学问题足以促进系统科学本身的发展的时候，我们还会把这样的内容再一次放到系统科学中来。下面的两个例子一个体现了系统科学的相互依赖关系的直接和间接影响——也就是网络的视角，一个体现了系统科学的交叉学

科特征——来自于物理学的数学结构和概念用于控制问题。在这个意义上，它们是系统科学。

定态优化问题——给定约束 ($C(x; \alpha) \geq 0$ 或者 $C(x; \alpha) = 0$ ，其中 x 是一个或者多个自变量， α 是参数)，给定优化目标函数 ($O(x; \alpha)$)，找到合适的自变量取值 (x^*)，使得目标函数在这个自变量取值点上正好是极值——很多时候也被称为运筹学 (Operations Research) [82]。例如线性规划就是当约束函数和目标函数都是自变量的线性函数的时候，例如 $O(x; \alpha) = \alpha^T \cdot x$ 可以表示 x 中的第 i 个元素代表的那项的价值是 α_i ，于是整个 x 的价值就是两个矢量的内积 $\alpha^T \cdot x$ 。这个时候，我们要问这样的优化问题怎么解决。解决这样的问题的数学理论和计算技术就被称为线性规划。当然，我们还可以研究非线性规划，也就是目标函数或者约束函数存在高阶项的时候。

按照 [82] 的说法，Operations Research 这个名字的来源是因为历史上这个学科发展初期的问题背景基本上是军事项目 (military operations) 的资源分配优化问题。在那里资源有约束，还有目标要满足并且最好优化，然后问，这个时候资源如何分配。例如在有限的钢铁以及有限的负重的条件下，决定把额外的钢铁保护层加在飞机的什么部位才能够更好地保护飞机。当然，也可以把钢铁和负重本身当作优化目标。这就成了多目标优化问题。下面我们要介绍的一个例子可能更适合中文的名字“运筹学”——如何安排任务的顺序，使得任务之间的顺序依赖关系以及其他约束能够满足，并且总时间或者其他成本最小。

动态过程的优化问题——给定系统本身的演化方程 ($\dot{x} = f(x, t)$)，给定外部控制加入的方式（也就是通过加入 u 把系统本身动力学变成了特定的 $\dot{x} = f(x, u, t)$ ），给定优化目标变量 ($y = g(x, u, t)$) 和优化目标函数 ($y(t_f) = y^*$ 或者，或者更一般地 $\int_{t_0}^{t_f} d\tau |y(\tau)|$ 取极小值¹⁶），来问什么样的 $u(t)$ 会使得这个优化目标取极值这样的问题，很多时候也被称为控制论[83, 84]。这样的给定目标函数优化动力学过程的问题，在物理学里面，通常用变分法和Hamiltonian 方程、Lagrangian 方程来解决。这里，我们也会发现，需要用到这样的方法。于是，控制论也是一个把物理学的技术和概念用于更广泛的实际问题的例子。从这个意义上说，也是系统科学的好例子，同时也

¹⁶前一个优化目标也可以从形式上变成后一个优化目标的表示形式，例如取优化后者的目
标函数为 $\int_{t_0}^{t_f} d\tau |y(\tau) - y^*| \delta(\tau - t_f)$ 。

体现为什么要做系统科学好好学习物理学。对于控制论，和运筹学一样，线性系统的问题是解决的最好的：什么样的线性系统能够被控制到期望的状态，如果能够控制的话，控制信号 $u(t)$ 应该怎么加，都已经得到回答，有相应的理论和公式。当然，一个额外的可以研究的问题是，如何加进去这样的 $u(t)$ ，也就是对于给定的动力学 $\dot{x} = f(x, t)$ 和目标 $\int_{t_0}^{t_f} d\tau |y(x, \tau)|$ （这时候，这两个函数都没有自变量 u ），采用什么样的 $\dot{x} = f(x, u, t)$ （这时候加上自变量 u ）会使得系统能够被控制，或者更低成本地被控制。

当然，在学术研究的角度来说，对于非线性系统的优化的研究，不管是定态的还是动态的，还是一个开放问题，也需要具体的来自于实践或者其他学科的问题来推动这个研究。从这个意义上说，运筹学和控制论还是系统科学。而且，按照我们在讨论动力学那一节提出来的线性方程相当于无相互作用系统的视角，实际上，现有的运筹学和控制论理论基本上都是针对无相互作用的系统的，而系统科学的特点就是包含相互作用的单元构成的系统。因此，对于非线性系统的研究就更加符合系统科学的特点。也正是在这个意义上，无论在动力学或者优化的问题的研究上，系统科学总是把非线性当作一个重要研究对象，甚至有的时候称为系统科学的特点。其实，本质上来说，还是因为非线性代表了相互作用。

从这两个分支学科的现状来说，把它们看作数学的分支并且目前主要是在做工程应用层面的研究，也就是应用数学是更加合适的。或者一定要算成系统科学的话，那就是系统科学的应用层面的学科——系统工程。当然，前面提到了，还是有一些问题，例如非线性系统的定态和动态优化的一般理论，例如如何加入控制信号的研究而不是加入什么控制信号的研究，是属于研究层面的问题，而不仅仅是应用。顺便，这一节的目的除了交代一下这两个分支学科和系统科学和数学的关系之外，还想对它们提供一个全景鸟瞰式的描述。在这个基础上，需要的时候，读者再次去学习这它们会更简单。学科的大图景，不管是在学习还是研究中，都是要随时来思考、总结和把握的 [23]。

下面是两个基本上能够反映运筹学和控制论是什么的例子。

2.11.1 约束下定态优化的例子：项目管理

先举一个约束下求极值的简单例子。这个例子的目的就是熟悉一下Lagrangian乘子法。

例 2.3 (周长固定面积最大的长方形). 有一段线长度为 L , 希望拉成一个长方形, 什么样的长方形的面积最大。

假设做出来的长方形的边长分别是 x, y , 把上面的问题写成如下的目标函数和约束

$$\max \{S = xy\}, \quad (2.48)$$

$$2x + 2y = L. \quad (2.49)$$

写下来Lagrangian 乘子法的目标函数

$$\max \{F(x, y, \lambda) = xy + \lambda(L - 2x - 2y)\}. \quad (2.50)$$

优化这样一个函数和优化原始的目标函数是一样的, 只要最后找到的解满足

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} F(x, y, \lambda) = L - 2x - 2y = 0. \quad (2.51)$$

而这个新的目标函数没有了约束, 就可以直接做偏导数来求解了。除了上式, 我们还有

$$\frac{\partial}{\partial x} F(x, y, \lambda) = y - 2\lambda, \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} F(x, y, \lambda) = x - 2\lambda. \quad (2.53)$$

于是, 求得

$$x = 2\lambda = y = \frac{L}{4} \quad (2.54)$$

当然, 实际上, 周长固定面积最大的图形是什么本身也是一个很有意思的问题。

下面的项目管理的例子, 才是真正体现运筹学, 并且有一定的系统科学特点的例子。

有一天我家两孩子要吃手工饼干, 为了下面的分析简单, 我假设只有我一个人能够动手做, 也就是不能同时完成两件需要我注意力的事情, 但是, 不需要我的注意力的事情, 例如融化黄油、烤箱烤制、冰箱冷冻材料等

任务原则上可以同时完成，只要一个我们家里已经有的计时器的帮助。我们先来分析为了“有饼干可以吃”需要完成哪些事情，并且这些事情之间有什么依赖关系。首先，我那天想做两种饼干——蔓越莓饼干和普通曲奇饼干或者两种之一，并且开始动手的时候也没想好到底要做那一种饼干。这是事实，我经常边做边想。假设对于孩子们来说，只要吃到饼干就满足了。蔓越莓饼干需要的原材料有蔓越莓、低筋面粉、鸡蛋、黄油、糖。曲奇饼干需要的原材料有黄油、糖、淡奶油、低筋面粉。大概来说，蔓越莓饼干的制作流程包含：软化黄油（控制好水温隔水加热大约需要 15 分钟）、取出和称量蔓越莓（2 分钟）、取出和称量低筋面粉（4 分钟）、取出和称量糖（1 分钟）、取出和称量黄油（2 分钟）、取出鸡蛋（0.5 分钟）、打发黄油糖（5 分钟）、加入鸡蛋继续打发（1 分钟）、倒入蔓越莓（0.5 分钟）、筛入面粉（2 分钟）、充分混合各种材料并整理面团成形（5 分钟）、在冰箱冷冻面团（60 分钟）、取出冻好的面团并切片（10 分钟）、烤箱预热（5 分钟）、烤箱烤制（20 分钟）、取出放凉（10 分钟）。曲奇饼干的制作流程包含：软化黄油（控制好水温隔水加热大约需要 15 分钟）、取出和称量低筋面粉（4 分钟）、取出和称量糖（1 分钟）、取出和称量黄油（2 分钟）、打发黄油糖（5 分钟）、在打发黄油中加入淡奶油并继续打发（3 分钟）、筛入面粉（2 分钟）、充分混合各种材料并用裱花袋作出饼干形状（10 分钟）、烤箱预热（5 分钟）、烤箱烤制（20 分钟）、取出放凉（10 分钟）。

有了这个过程，我们来关心以下几个问题：大概来说，孩子们要等多久能够吃上饼干？最好的任务顺序安排是什么？哪些任务是最关键的，不能延迟的，哪一些是可以时间上稍微自由一点拖延一点的？哪一些任务如果节省了时间可以大大提高整个等待时间？

实际上，我们还忽略了蔓越莓的生长、蔓越莓干的制作和购买、小麦的生长、面粉的制作和购买等等，以及烤箱、容器、称、刀具等制作用具的购买。为什么我们能够省略这些过程呢？因为在我们所关心的问题中，这些因素可以当作外生变量，可以是很久远之前就准备好的。把问题的边界定在什么地方是一个很重要的问题。在这里，为了回答我们之前问的几个问题，显然这些被忽略的因素都是次要的。

现在，我们问，有了问题，有了任务分解和任务依赖关系，我们如何来回答这个问题呢？我们最好对数据先有一个好的表示：如何来表示任务之

间的关系呢？任务之间有依赖关系——有一些任务只能在其他任务完成之后来完成。任务之间还有替代关系——有的时候，后续任务依赖于前面的几个任务中的一个，只要完成其中的一个，后续任务就可以进行。任务还有消耗时间的属性。其实任务还有需要原材料的属性。不过原材料上的依赖关系基本上已经体现在任务的前后依赖关系中，因此，也先忽略。这样的任务之间的关系，用什么数学结构来表示呢？

网络，依赖关系和替代关系都可以通过网络来表示：任务当作节点，关系当作连边，在节点上加上一个描述任务时间的属性值，如图 2.17。我们注意到所谓的完成任务就是从起点“称黄油”到达重点“有饼干吃”的一个路径。于是，任务的总时间，也就是这样的路径的长度。可是，在这个图中，由于有两种关系“才可能”和“合起来才可能”，不能直接通过路径连起来就算完成任务，有的时候，还不得不把那些“合起来才可能”的任务的时间也算上。这样就导致将来研究计算分析方法的时候比较困难。有一种简单粗暴的近似方法可以解决这个问题：把所有的“合起来才可能”变成“才可能”，通过把同时依赖关系整合到后面的步骤里面去。例如，必须称量好面粉才能把面粉和打发好的油糖混合起来，可以变成，在打发好的油糖的基础上，称量和混合面粉。也就是把称量的步骤和时间算到后续的混合里面去，得到图 2.18。这样做的坏处就是，任务合并了，于是有可能可以省时间的地方省不了了。例如，称量面粉原则上可以在等待某些其他任务完成的期间来完成的，于是不单独消耗时间，但是由于整合到了后续步骤里面，就必须单独消耗时间了。顺便，在这里我们也看到了没有好的分析——细分系统还原论，就没有好的综合——也就是整体论。对于烤箱预热这一点，我们这个近似尤其有值得商榷的地方。本质上，什么时候开始预热是一个需要优化考虑的问题。但是，现在加到后面的烤制的步骤里面，就意味着，每次烤制之前再来预热。这是非常消耗时间的步骤。假如说我们不在乎消耗的能量，那么我们就可以早早地打开，于是，预热的问题，就可以看做系统外的变量，和种小麦、买面粉一样。可是，当我们还关心能量消耗的问题的时候，我们就必须在合适的时间点来预热烤箱。实际上当我们注意到化黄油所需要的时间，我们就会把所有的称量的时间放到化黄油期间来完成，甚至包括预热。可是对于一般的问题，我们是需要把这样的步骤通过优化的算法来发现的，而不是基于我们的直觉和这个任务的简单性。也就是说，

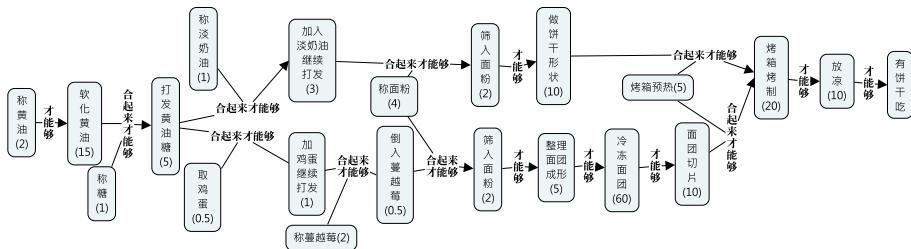


图 2.17: 这个任务分解和关系图是对上面两种饼干制作过程的任务的忠实描述。可是，这里有两种关系——“才可能”和“合起来才可能”。不利于下一步分析。

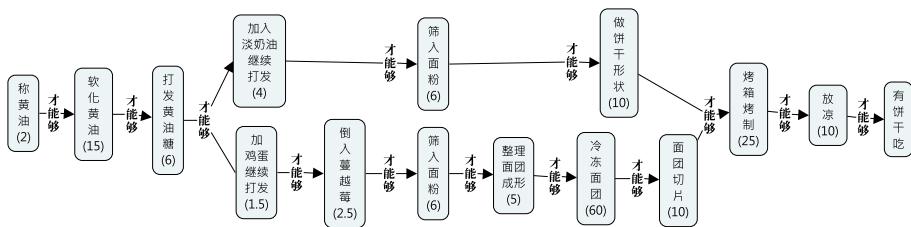


图 2.18: 这个任务分解和关系图是对上图的近似和简化，去掉了“合起来才可能”这个关系变成了单一关系图。把依赖的任务都放到后续任务之前来完成。

上面这个表示还缺乏一种关系，注意力冲突关系：软化黄油、预热烤箱这些事情不和其他任何事情产生注意力冲突。这样的关系，如何体现在上面的网络里面呢？在这里，我们就不再沿着这个方向展开讨论了。我们按照软化黄油期间来做称量和预热烤箱的方案，把任务依赖关系图简化成为图 2.19。

现在，我们再来分析如图 2.19 所示的任务，按照什么顺序来完成最好，什么任务最关键等问题。首先，我们注意到这个从其点“称黄油”到终点“有饼干吃”只有两条路径。其总长度分别为：68 分钟和 131.5 分钟。于是，显然，从时间效率的角度来说，做一般曲奇饼干是更加合适的选择。而且，由于问题本身任务的完成顺序基本上就是确定的，最合适的完成顺序就是图 2.19 中上面那条路径的顺序。实际上，在这里，我们先用网络来表示任务之间的关系，然后用寻找网络特定两点之间的最短距离的方式来分解解决问题。

注意在原图 2.17 中在“烤箱烤制”之前有两个“合起来才可能”两组

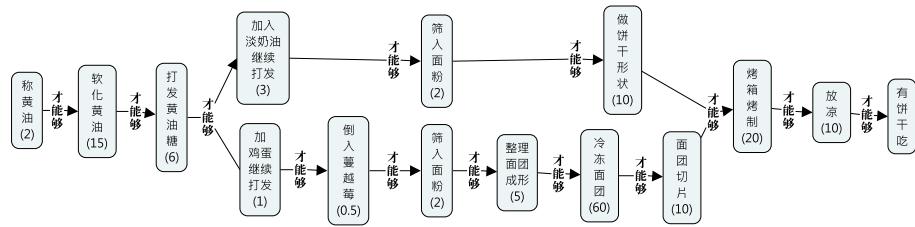


图 2.19: 这个任务分解和关系图是对上图的近似和简化，去掉了“合起来才可能”这个关系变成了单一关系图。例如软化黄油的时间把这些称量和预热搞定，于是其他后续任务时间可以更短了。

关系的时候，并不是一个整体的“合起来才可能”。如果是后者，这表示必须两条路径都完成，再能完成后续任务。现在是前者，表示，两台路径之一完成就可以完成后需任务。这样的关系，也是在做项目管理研究中需要注意的关系。那么，有没有一个表示，能够把注意力可替代，可替代性和同时必要性的区别，都很好地描述起来，并且方便后续的分析呢？接着，有了这个表示，分析方法是什么呢？关于这个问题的进一步展开，可见 [82] 的项目管理章节。

至于单纯形法等更加偏应用数学的运筹学问题，就不在这里展开了。

2.11.2 动态过程优化的例子：存款和消费

前面，我们已经对什么是控制论问提做了一个一般的表述。原则上，现在我们只需要把前面的问题求解出来就行了，而且我们已经知道了大概来说要用到变分法和Hamiltonian 方程、Lagrangian 方程。但是，提到控制论，就得提一下反馈。反馈通俗来说，就是对某个目标量——例如车辆形式速度——做一个观测，当这个量大于（小于）所要控制达到的理想值的情况下，做一个相应的调整——例如减少（增加）燃油进车辆的速率。那么，这个用优化的角度来怎么来看反馈控制呢？实际上，反馈控制的问题表达成为动态系统的优化问题之后，求解出来的形式自然就会成为或者包含反馈控制 [83]。

这里我们举一个简单的动态优化的例子，更多的例子可以看 [84]。

例 2.4 (存款和消费的平衡). 考虑一个拿固定工资 d , 还知道自己还能够活 T 年 (这里把 T 当作给定的数值。当这个量是个变量的时候，也可以讨论，例

如通过完全当作一个外生的和下面要描述的消费问题没有关系的变量，或者通过把生命长短当作和消费有关的但是需要额外机制来解决的内生变量的方式）的工人在消费 ($u(t)$) 和存款——收入减去消费就是存款——之间如何取得平衡的问题。假设每个年（这个可以更细，例如月）存款的利率是固定的 r 。

用变量 $x(t)$ 来描述 t 年开始的时候的财富数量，每年的钱都可以先花掉年底结算，就像信用卡一样，则其动力学为 $x(t+1) = (1+r)x(t) + d - u(t)$ 。

这个例子来自于 [84]，在原书的例子中，还增加了一项遗产带来的收益， $h(T)x(T)$ 。

显然这个工人会希望如下函数取极值， $J(x, u) = \sum_{t=1}^T v(t)u(t) + h(T)x(T)$ 。其中 $v(t)$ 是贴现率，也就是说，接近死亡时间的程度的不同花钱带来的收益或者说效用是不一样的，很可能当前时刻花的钱的效用最大。这个 $v(t)$ 也可以是完全外生的变量。例如最简单地来说，可以是 $v(t) = 1$ 或者，稍微复杂一点 $v(t) = e^{-\frac{t}{T}}$ 。

于是，合起来我们的数学问题就是，给定 $x(0) = x_0, U, T, r, d, h(T), v(t)$ 的条件下，

$$x(t) \geq 0, \quad (2.55a)$$

$$x(t+1) = (1+r)x(t) + d - u(t), \quad (2.55b)$$

$$\max \left\{ J(x, u) = \sum_{t=0}^{T-1} v(t)U[u(t)] + h(T)x(T) \right\}, \quad (2.55c)$$

其中 $U[u(t)]$ 是消费 $u(t)$ 带来的当时的效用。例如，可以取

$$U[u(t)] = \tanh[\alpha(u(t) - U_0)] \quad (2.56)$$

表示每单位时间——这里是年——这个工人的最少消费的额度是 U_0 ，并且超出这个最低额度之后，效用迅速增长，直到超出很多之后，慢慢饱和。或者，更简单的 $U[u(t)] = (u(t) - U_0)^2 \theta(u(t) - U_0)$ 。 θ 是阶跃函数。

或者从离散时间变成连续时间的形式，

$$x(t) \geq 0, \quad (2.57a)$$

$$\dot{x} = rx + d - u, \quad (2.57b)$$

$$\max \left\{ J(x, u) = \int_{t=0}^T dt v(t) U[u(t)] + h(T) x(T) \right\}. \quad (2.57c)$$

这是一个优化问题，并且优化的过程中还牵涉到一个 $x(t)$ 的动力学过程，并且这个动力学过程受到控制变量 $u(t)$ 的影响。这个时候，就必须靠Lagrangian 乘子法把优化目标和动力学过程放到一起，然后用一个最小作用量原理来求解。

这个例子的下面的计算部分，至少需要懂得Lagrangian 乘子法来求约束下的函数极值。如果具有最小作用量原理分析力学的基础就更好了。如果你现在看不懂，那么，只要看看形式上大概怎么做就可以了。以后再回头看这个例子的详细求解。为了这个计算更简单，也更容易和直觉比较，我们还假设 $v(t) = 1$ 并且 $h(T) = 0$, $d = 0$ 。直觉上，这个已经退休、知道寿命、具有长远打算但是又不想留给下一代一分钱的工人，按照设定的目标，应该会把钱能存的都存着，知道最后的时刻都用掉。我们仅仅介绍求解的思路，具体求解，你可以求解出来看看是不是这样。如果不是，为什么。

由于离散的版本完全可以看做是约束——这里的主要约束就是系统状态变量的动力学方程——下的函数极值问题，下面仅仅考虑离散的版本。自变量包含状态 x_1, x_2, \dots, x_T (x_0 是给定的初始条件) 表示每年年初的钱的数量，控制变量 u_0, u_1, \dots, u_{T-1} 表示在下角标 t 年内花掉的前的数量，以及 Lagrangian 乘子 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_T$ ，目标函数成为

$$\tilde{J}(x, u, \lambda) = \sum_{t=0}^{T-1} v_t U[u_t] + h_T x_T + \sum_{t=0}^{T-1} \lambda_{t+1} [(1+r)x_t + d - u_t - x_{t+1}]. \quad (2.58)$$

对目标函数求所有自变量的偏导数有,

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_T} \tilde{J}(x, u, \lambda) = h_T - \lambda_T \quad (2.59a)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_t} \tilde{J}(x, u, \lambda) = (1 + r) \lambda_{t+1} - \lambda_t \quad (2.59b)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial u_t} \tilde{J}(x, u, \lambda) = v_t U' [u_t] - \lambda_{t+1} \quad (2.59c)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial \lambda_t} \tilde{J}(x, u, \lambda) = (1 + r) x_t + d - u_t - x_{t+1} \quad (2.59d)$$

实际求解的时候, 从公式 (2.59a) 先求出来 λ_T , 然后运用公式 (2.59b) 求出来一般的 λ_t , 接着用公式 (2.59c) 求出来 u_t , 最后用公式 (2.59d) 结合 x_0 求出来一般的 x_t 。

这里我们先把每一个自变量 x_t, u_t, λ_t 看作独立变量, 然后再解决约束下的极值问题。对于连续时间问题, 原则上是一样的, 我们把 $x(t), u(t), \lambda(t)$ 看作独立变量, 来求解如下目标函数的优化问题,

$$\begin{aligned} \tilde{J}(x, u, \lambda) &= \int_0^T dt \{ v(t) U[u(t)] \\ &\quad + \lambda(t) [(1 + r)x(t) + d - u(t) - \dot{x}(t)] \} + h(T)x(T). \end{aligned} \quad (2.60)$$

不过, 这里由于需要做积分符号之内的变量的微分, 类似于 $\frac{\partial}{\partial \lambda(t)} \tilde{J}(x, u, \lambda)$ (实际上记做 $\frac{\delta}{\delta \lambda(t)} \tilde{J}(x, u, \lambda)$) 我们需要额外的数学工具——叫做变分法。不过, 直觉上, 通过这两个来自于同一个问题的表达式的对比, 也就知道, 这个变分法需要能够给出来类似 $\frac{\delta}{\delta \lambda(t)} \int_0^T dt a \lambda(t) = a$ 这样的性质。可以从这里开始建立起来变分计算的形式化的定义, 也可以利用定积分的性质把 $\lambda(t)$ 划分成为很多很多小份, 然后就能够回到普通的微分运算。具体的求解就不再给出了。

控制问题是动态过程的优化问题, 实际上也就是有约束的极值问题, 只不过这时候主要约束是系统的动力学方程。求解的方法, 可以说是最小作用量原理或者变分法, 而变分法也可以看做是离散情形——在那里只有普通的带约束的通过Lagrangian 乘子法来求解的函数极值问题——的推广。联系到定态的优化问题实际上也是有约束的极值问题, 只不过那里的约束通常不是系统的动力学过程, 我们发现, 实际上, 这两个数学的分支学科是紧

密联系在一起的。再一次强调，通过联系看到统一性，各个层次的统一性，是非常重要的。

这两个优化问题的一般解决步骤都是：先确定系统内和系统外变量，确定描述问题的数学结构，然后写下来这个数学描述下的优化目标，写下来这个描述下的约束，接着求解这个约束下的优化问题，并且做理论解的实际检验，如果有进一步的理论或者实际价值在考虑深入研究和推广。

2.12 复杂软件的例子：系统工程和系统科学

一个学科的工程往往是这个学科的学科的应用部分，也就是把这个学科的知识、分析方法、思维方式用来解决现实世界中的问题。例如物理学和应用物理学、工程物理的关系。有的时候，也可以是来自于其他更偏应用的理论性学科转移到更加理论性学科中的问题。例如，物理学和应用数学的关系：来自于理论或者应用物理的问题，可以成为应用数学（有的时候也会称为纯数学）的研究问题。

但是，在系统科学的学科体系中，无论是在教学和研究上，系统工程和系统科学都还是两张皮，两张分开的皮。在学科思想的层面两者是有共通的东西的——例如系联和系联导致的整体性，但是，在具体研究问题和分析方法上，基本就是两个学科。传统上上面提到的运筹学和控制论，以及更一般的优化理论，是系统工程的研究和教学核心内容，有的时候也会把某个领域的工程问题，例如软件工程（例如生命周期理论、可检验可测量性）、知识管理（例如本体论、专家系统）等当做系统工程的重要内容。在系统科学方面，更加强调从物理、生物、化学等系统的研究上得到的关于相互作用和整体行为的处理等角度开展更加一般的没有在某个具体学科里面的问题——或者用原本问题所在的具体学科目前的分析方法思维方式还不能研究的问题——的研究。例如，在系统科学里面，我们经常需要问这个系统对于表现出来某些整体行为和功能来说，最核心的最少量的关键元素到底是什么，还是说这些元素的某种组织方式是最关键的。因此，从对物理、生物、化学等领域的相互作用系统的研究以及从这些研究总结出来处理一般的具有相互联系的元素构成的系统的整体行为的方法和思想，就成了系统科学的主要学习内容。研究上，则强调这样得来的方法的一般性而不在乎所研

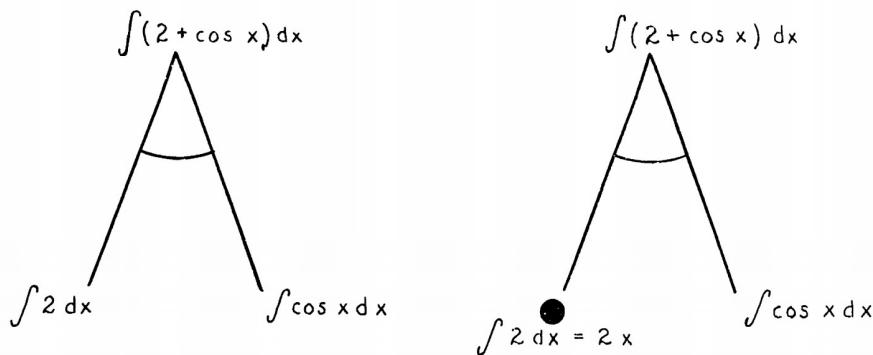


图 2.20：这里展示了目标树用于符号积分的求解：意思是只有把分支出来的下面的两个积分都求解出来，才能求得上面的分支之前的积分。图来自于Slagle关于符号积分器的博士论文 [85] 原图 4.2。

究的系统到底从哪里来。

在这里，我提供一个来自于Winston在《人工智能》课程（MIT6.034）里面用过的例子：Slagle的符号积分系统 [85]。通过学习这个视频课程，以及阅读 Slagle 的原文，我发现并希望在这里传达给大家的是，在软件工程领域，实际上，是有很多的例子能够从具体的软件设计的层次来体会什么是系统科学的，也就是——软件工程实际上确实可以看做系统科学思想在具体问题上的应用。

有一种设计这样的计算器的方法就是收集和整理积分表，然后，依赖用户来做非常简单的变换，例如乘以一个常熟、两个积分式相加减等，来解决用户的问题。只要这个表格足够完善，实际上，这个任务是差不多能够解决的。实在解决不了，出现了一个新的积分，那就把这个积分提交给全世界的积分大师，然后如果积出来的话再添加到这个表里面就完了。这样的软件就不是一个系统，而是一个比较完善的知识集合加上一个检索匹配器。按照我的说法，就是乘法表。有的时候，为了方便人类的记忆和检索，乘法表的外形也可以稍微系统化一下，所以才有顺序。但是，本质上对于计算机，你完全可以一条一条单独来存储和检索。实际上，我们人类的生活之中确实有大量的这样的乘法表。在很久以前，这样的积分表也确实用来帮助人们计算积分。

那么，Winston拿来当例子的Slagle符号积分器是怎么设计的呢？当时的

设计者Slagle问，人类是如何求解符号积分的呢？第一，显然，人类有一些熟悉的积分当做知识基础。那么，这样的知识能不能变成一个生成系统，仅仅通过少数的几条来产生呢？Slagle最后找到了20个左右的基本积分公式当成知识基础，其中包含 $\int dx x^n = \frac{1}{n+1} x^{n+1}$ 等。接着，第二，Slagle说，剩下的就是人类在把各种积分变化成这些基本基本公式来做计算。那么，这样的变换有哪一些是肯定可以用的安全变换呢？例如，乘以一个常数的时候，可以把乘数先去掉先积分，得到结果之后再乘上这个常数，也就是 $\int dx c \cdot f(x) = c \int dx f(x)$ 肯定是安全变换。再例如，一个函数可以看做两个函数的和，则可以拆成两个函数分开积分，也就是 $\int dx [f(x) + g(x)] = \int dx f(x) + \int dx g(x)$ ，或者反过来，这个也肯定是安全变换。Slagle总结了大概10来个这样的安全变换。第三，是不是还有一些不怎么安全的变换，需要一些往前看往前试探的技巧来决定用不用这些变换的。例如，看到的 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 时候就经常可以试试把 x 换成三角函数。Slagle有总结出来了大约10来个这样的不安全但是可尝试变换。

那么，有了这些非常有限的知识基础，包含基本积分公式、安全变换、可尝试变换，是不是就能够用来解决符号积分问题了呢？还不行，有了知识还缺乏运用知识的方法。这个时候，Slagle就用了目标树的分析方法，见图2.20：从一个原积分函数开始，尝试上面的变换们看看能够变成什么样，因为是有限的，所以，每一次变化也就产生有限个分支，整体来看就是一颗树。然后，这个树的目标呢，就是所得到的变换以后的形式已经出现在基本公式里面，而基本公式也是有限个。因此，整体来看，不过就是判断（某个变换是否可用）、分支（如果可用的话）、判断（变换结果是否可以查表）、循环（如果不能查表，则继续变换，做分支和判断）。具体的目标树的搜寻算法当然也还是一个问题，因为有的时候，我们必须沿着某个变换走到底才会意识到这个变换不行，因此我们还需要考虑一些高效率的目标树算法。例如，必要的时候还可以考虑把这棵树做剪枝。但是，总而言之，我们已经把一个问题以及这个问题的演算方法甚至求解方法完整地表示出来，差的仅仅是更高效的算法。这部分我们在这里暂时不再讨论。当然，如果遇到不能求解的，有可能是本来就不能解析求解这个积分，有可能是知识基础有问题，也有可能是分析方法有问题。不过，至少上面这个系统，通过在万不得已的时候增加或者修改知识基础，不用改变分析方法，就能够解决符号

积分的问题了。

从这个系统工程的例子中，我们看到了什么系统科学呢？甚至，我为什么要把这个例子看做是系统工程的例子？首先，Slagle用了分解的思想，来找到知识基础，并且把知识基础系统化——用最少的核心条目来生成所有需要的知识条目而不是直接罗列所有的知识条目。其次，Slagle把整个问题的解决分成了知识基础和分析方法两个部分，这也是非常具有系统性的问题解决方式：尽量把系统的元素孤立出来，然后再通过这些元素的相互联系来解决问题。最后，这个分解以及这个目标树的分析方法，其实在大量的问题中都可以发挥作用，而不仅仅是这个符号积分的问题或者计算机科学的问题。在大量的问题解决中，我们都需要知识基础和分析方法，而不仅仅是知识基础。这一点本身就非常的重要，具有普遍性。其次，知识基础和分析方法不是罗列而成的，一定要去通过不断地分解寻找最基本的，然后把这些得到的最基本的再合起来生成所需要的知识基础和分析方法。这样的通过系联来寻找具有生成能力的核心而不是罗列，并且把事物不断地拆分接着分别解决之后再一次合起来，是系统科学。

因此，一个好的软件，一个处理稍微复杂一点的问题的软件，不是一个提供直接能用来解决每一个问题的工具包，而是一个能够用来解决所有的问题的，按照每一个具体问题再来重新组织的系统化工具包。这就是为什么一个好的软件是系统工程。当然，也可能这个软件提供了基本功能模块，需要用户自己来组织这些模块才能够解决问题，或者这个软件还提供了问题解决分析器来自己根据问题组合这些基本模块来解决问题。但是，无论如何，一个软件系统不是针对每一个具体问题直接来开发功能模块的，而是要找到这些上层功能后面的基础功能模块的。

不断地分解得到更加基本的单元，然后，通过考虑这些单元的联系来不断地综合来解决上层的问题，这就是系统科学的典型思维方式：系联、分解和综合（还原和整体）。

沿着这个路径，其实还可以做大量的系统工程例如软件工程分析，只要某个软件比较复杂，人们总是要通过构建一个系统，做好具体问题的抽象、分解和表示，然后来解决的。因此，系统工程，真的可以看做是系统科学的工程领域。

其实更一般的，教和学，也是一个系统工程，甚至系统科学问题。我为

我提倡的也是本书所遵循的，“以学科大图景为目标的”，“以批判性思维和系联性思考为基础的”，“理解型学习”写下了以下几个要思考的问题：

1. 最好能够成系统的问题。成系统的意思就是其中有少数核心问题，其他的问题可以通过这些核心问题运用系联来生成，或者反过来其他问题可以通过系联归并到核心的问题。
2. 成系统的知识基础。成系统的意思就是其中有一些核心知识，其他的知识可以通过这些核心知识，依靠系联来生成。
3. 运用上面的知识基础来解决上面的问题的思维方式和分析方法，最好也是成系统的，也就是说有联系可生成。
4. 如何提出这些问题，有没有一般的方法？例如抓住联系来发现问题也就是系联性思考，例如批判性思维，例如试验和实践的检验。
5. 如何得到这些知识？可以通过构设这些知识发现的问题场景来从发现知识的过程中学会这些知识。其中从现实到模型的抽象化过程可能特别的重要。逻辑推理和数学计算可能也是重要的一环。
6. 如何掌握这些思维方式分析方法？同样从使用这些方式方法来提出和解决问题的过程中来体验和掌握这些方式方法。
7. 如果以上的问题都有了比较好的回答，是不是存在一个高效率的教和学的方式，例如一个可以个性化的学习顺序，以及一个可以个性化的学习问题发现和解决的系统？

在整理了这张表之后，我发现，实际上，前面三条是软件系统或者是问题解决的关键步骤，加上后面的四条合起来的这七条则是教和学的关键——教和学不仅要让学习者学会知识和方法，还需要学会创造知识、创造方式方法、创造性地运用知识和方式方法。实际上，构建学科概念地图 [23]，就在梳理和解决前三条，并且最好整理出来一个生成的体系。而从概念地图开始，选择具体的例子来体现学科大图景，实际上，就是关注后面的四条。

这一切的一切，都是为了“教的更少，学得更多” [23]，让学习者建立起来一个生成已有的甚至全新的知识和方式方法的体系，而这样的生成系

统的关键就是系统的思想——系统的元素和元素之间的联系，以及具有生成能力的核心的元素。

也就是说，教和学的目标不是知识，知识仅仅是媒介，我们通过这个媒介来习得获取知识的思维方式和分析方法，然后，当我们大概了解了这个学科的研究对象和问题并且形成一定的对这个学科的兴趣和情感之后，把这些方式方法用到对象和问题上，原则上，可以重新把知识和知识体系发展和构建出来。将来，教和学本身甚至也能够发展称为一门科学，例如研究是不是存在这样的分析计算方法能够帮助我们更好地回答上面的七个问题，除了基于个体的课程设计者和讲授者的个人经验来回答之外，基于学科的大图景以及对学习者的学习过程的大脑活动的研究。

2.13 作业

习题 2.2. 阅读哈肯的《协同学——大自然构成的奥秘》[86]，做读书笔记。读书笔记包含总结和体会。总结部分建议运用概念地图。体会部分结合阅读材料和自己的经验，要有具体例子，还要有观点，观点和例子还要能够有联系。

习题 2.3. 课程项目：自学 Ising 模型，编程实现它，然后做一份能够帮助学生学习这些内容的报告，提供代码、磁矩温度曲线、比热曲线，参考 Witthauer 和 Dieterle 的 The Phase Transition of the 2D-Ising Model[87]。

习题 2.4. 课程项目：对于有统计物理学背景的学生，自学 Ising 模型的平均场理论计算，完成关联函数、磁矩 - 温度曲线的计算。

习题 2.5. 课程项目：自学沙堆模型，编程实现它，然后做一份能够帮助学生学习这些内容的报告。

习题 2.6. 课程项目：学习谱分析和自相关函数，收集整理电子乐谱，对电子乐谱的音程差做频谱分析（谱，功率谱），检查是否具有 $\frac{1}{f}$ 噪声。

习题 2.7. 课程项目：用自己看到或者想到的例子，来说明什么是系统科学。这个作业在每一章结束以后，都重新做一下，并且保留各个版本。推荐整理一个“什么是系统科学”的概念地图。

习题 2.8. 课后阅读:

- Bak 的 How Nature Works[88] (《大自然如何工作》)
- Gleick 的 Chaos: Making a New Science[89] (《混沌开创新科学》)
- 于渌, 郝柏林和陈晓松的《相变与临界现象》 [90]
- 郝柏林的《从抛物线谈起》 [61]

2.14 本章小结

这一章的主题还是系统科学是什么。不过相比更宏观的第一章——其中我们关心什么是科学、科学和数学、科学和现实的关系、系统科学的跨学科性质、系统的划分, 在这一章里面我们更加关心这些能够体现系统科学的学科大图景——也就是系统科学的典型对象、问题、思维方式、分析方法和世界以及其他学科的关系——的理念和例子。例如结构从没有结构中如何产生这个系统科学的典型问题、例如整体运动和涌现、相变和临界性这些现象、例如相互作用以及相互作用的各种处理方法等分析方法、尤其是这些处理方法中从孤立到有联系从直接联系到间接联系的思想、例如大量适用于不同领域的问题的具有共性的分析方法。同时, 我们对非线性动力学、运筹学、控制论这些传统系统科学的科学和新内容也做了简短的介绍, 并且讨论了这些学科和系统科学的关系。

科学就是有体系的能够体现这个学科大图景的例子。学习的时候千万不要忽视例子。例如统计物理学只需要学习Brown 运动和Ising 模型两个例子¹⁷。对于系统科学, 上面的这些例子就是我通过实际教学尝试之后, 加上自己的研究工作经验 (所以肯定有偏好), 做出来的选择。你可以不认同其中的任何的例子, 但是, 把例子和学科大图景结合好, 是一门学科的导论教材必须做好的事情。

因此, 在这里, 请读者完成那个作业习题 2.7, 用自己看到或者想到的例子, 来说明什么是系统科学, 而且要不断地多次地去完成它。当然, 我希

¹⁷这句话我是从当年郝柏林的统计物理课堂上学到的, 一直觉得受益匪浅。

望经过这一章的学习，你对封面上的四句话（再次写在这里）有了更加深入的理解，甚至将来有你自己的补充。

联系¹，联系²，联系³

从具体系统中来，到具体系统中去

从孤立到有联系，从直接到间接，从个体到整体

More is Different, More is The Same

（一片两片三四片，构成系统出涌现；五片六片七八片，飞入系统都不见）

第三章 概念地图与系统图示法

前面我们已经通过一些例子展示了大概什么是系统科学，注意到一个系统通常包含多个有相互作用的子系统或者说单元，并且当我们考察一个系统的行为的时候需要从底层结构和模块化功能，也就是还原论和整体论，合起来的角度来思考系统可能涌现出来的整体行为。在这一章，我们来介绍一个从考虑系统内各个元素之间的相互联系的角度来加深我们对系统的认识的比较粗糙的分析方法——系统图示法。

3.1 如何描述一个系统：图示举例

比较粗糙和宽泛地来说，任何包含一个系统的子系统以及子系统之间的相互作用的图示方法都是系统图示法。因此，一个计算机程序的流程图也可以看作是系统——在这里系统是整个的这个计算机程序——图示法：在这里子系统是这整个程序分解出来的每一个步骤的子程序，子程序相互之间的关系就是通过“顺序执行（上行连续执行，还包含跳点，例如 goto）”、“条件判断（if-else-then，还包含分支，例如 switch-case）”和“循环（for, while, do）”构成的子程序之间的前后调用关系。当然，在这里，关系仅仅是有限的几种。一个更具有一般性的更贴近人对事物的认识的系统图示法是面向对象程序设计的对象图。一个对象内部有元素（这些元素本身也可以是对象），有方法——方法一般表现为对对象的操作。有一些方法可以被其他对象调用，这就是这个对象提供的对外接口。元素、方法（包含纯内部方法和接口）就是一个对象最基本的子系统。从这个角度来看一个对象包含一个其方法的集合和元素的集合，以及两个集合之间的相互作用。

例如，一个自行车，从行驶这个最核心的功能的角度粗略地看，接口方

面，也就需要接受外面的能量输入和行驶信号输入，输出呢则是行驶的速度、方向以及跟其他车辆或者设施交互的信息。这些将来可以用来和其他汽车以及其他设施等构成更大的系统。从内部来看，元素上需要脚蹬子、链条、轮子、把手、刹车、喇叭、行驶方向、行驶速度。其他次要结构暂时忽略。从方法上，需要实现用脚蹬子接受外界能量输入，用链条来把能量输入传到轮子决定行驶速度，用把手实现行驶方向的控制，用刹车子系统实现行驶速度的额外控制。图 3.1(a) 就是这个自行车的对象图。其中有外界，外界需要通过接口，也就是自行车这个对象留给外界使用的方法，来影响自行车这个对象，同时自行车也通过接口来影响外界。其中还有封装起来的元素和内部方法。我们先来仔细看这些内部元素。首先，“轮子”有比较多的边，以后我们会知道这个角度“轮子”这个顶点的“度”比较大。更重要的是，这些边中有两条出去的直接连着外界接口：“轮子”——“进入”——“获取速度”，“轮子”——“进入”——“获取方向”。也就是说，外界需要通过方法直接接触轮子，或者轮子通过方法直接影响外界。再来看其中的三条入边。这三条边是三个外界影响自行车的接口，而“轮子”是这三条边的终点。也就是说，轮子是外界影响自行车的最终承担者。于是，很自然地，我们得到一个结论，如果从自行车的内部元素来说的话，最重要的是轮子。其他什么部分没准都可以去掉，但是轮子是首先需要保留的，也是需要很好地来保障其正常功能的。

当然，你会说，这些，就算我不画这个自行车的对象图，我也知道啊。对于自行车这个事情，是这样的。但是，如果我们遇到更加复杂的事情，通过画图来先搞清楚这个系统有哪些内部元素有哪些操作元素的方法，在方法中有哪一些可以跟外界相连也就是成为接口，然后，再通过分析这构建出来的对象图来识别关键元素和关键方法，更进一步对这些关键元素和方法做一些保障，可以很好地指导我们对复杂事物的认识和研究。当然，由于这个用对象——包含元素、方法（包含纯内部方法和接口）和元素方法之间的关系——来对事物做抽象的方法来自于面向对象编程，所以很多时候方法很像一个函数，也就是说这个对象和方法之间的关系就是输入输出。

在图 3.1(b) 中，我们把对象图里面关于刹车功能的实现这一小部分的核心程序画了一个流程图。刹车功能的核心就是一个“条件判断”加上后期的“制动系统”。其他的方法实际上后面也是需要通过面向过程的编程，也

就是流程图，来实现的。这里我们就不再一一画出来了。在这里另外一个技术上比较神奇的问题是：为什么那么多种对象的那么多不同的方法，都可以用“顺序执行”、“条件判断”和“循环”这几种如此简单的流程控制来实现？可以理解对象这样的一个东西具有一定的一般性，也就是说大量的事物可以用对象来抽象来描述，但是，为什么千奇百怪的方法背后都可以归结成这么少数几种流程控制呢？更进一步，实际上计算机本身就会做“与、或、非”三个逻辑运算，为什么这么多的现象能够由这三样东西来实现呢？请我们的读者联系整体论和还原论，联系“涌现性”，联系什么是系统科学，来思考一下这个问题。

对象图和流程图对于加深对事物的认识已经是非常有用的了。但是，注意到对象图在元素之间和方法之间是没有联系的。这个观察启发我们是否可以把方法看做是元素之间的联系，把元素看做是方法之间的连接。如果可能可以把这个图化成更加紧凑更加贴近人的思考的形式。这种把系统内部的元素当做顶点，把元素之间的关系当做顶点之间的连边的图，是另一种普遍使用的系统图示法。有的时候我们把系统的元素叫做概念，这个时候就称这样的图为概念地图。自行车的概念地图见图 3.2。在这个图里面，前面提到的“轮子”的特别重要的地位就表现得更加明显。而且，“链条”的“特别不重要的地位”也表现的非常明显：至少对于外界来说，我们根本不关心这个东西的存在，这个东西是什么做的，如何发挥作用的。顺便，这其实就是系统科学的分析和综合。你仔细想想，确实这样，这样的完全内部的东西，只要封装好了，又没有坏，没有人会去注意和关心，甚至去掉都行，例如独轮自行车。当然，没有链条没有大小不等的棘轮的传动，是不是很费力，那是另外一回事。我们这里没有考虑通过棘轮大小来控制速度的问题。在图 3.2 的最下方，我们还把自行车当做一个整体画了一个自行车和外界的关系的非常简单的概念地图。别小看这个这么简单的概念地图，实际上，我们发现，在这里自行车的作用就是把“骑手的能量和骑行意图”转化成“骑手的速度和方向”。第一，这个确实是自行车的作用啊。第二，既然如此，走路也可以完成这个作用，那么，为什么要自行车呢？所以，从这个角度来说，我们还需要注意到自行车的转化具有什么更好的特征才行，例如效率更高、速度可以更快？因此，画出来这样的系统图示对于加深对系统的认识，对于分析和解决问题是很有意义的。

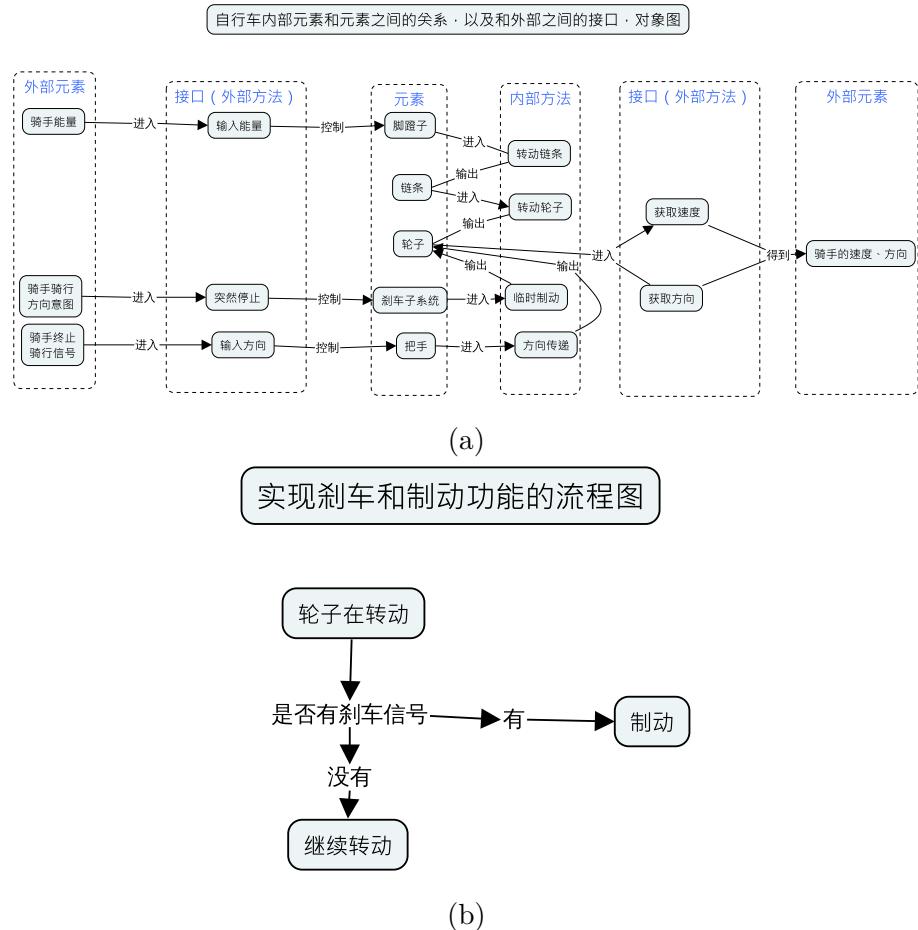


图 3.1: (a) 面向对象程序设计的对象图。在对象图里面方法一般表现为对元素的输入输出，也就是接受某些元素作为输入对某些元素产生一个操作性（例如改变其数值）的输出。因此，元素和方法之间的关系主要就是输入和输出（控制也是输出）。(b) 其中一小部分功能的流程图。流程图里面流程控制的方式主要就是顺序执行、条件判断和循环。

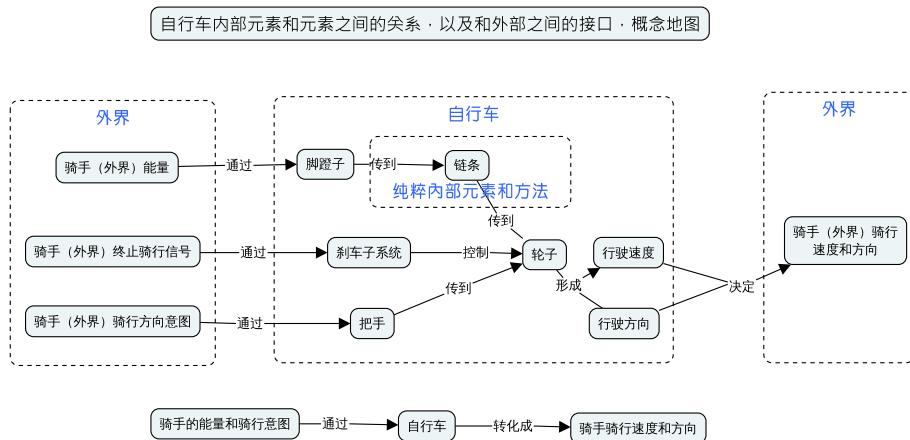


图 3.2: 从对象图到概念地图。在概念地图里面，一般来说对象图的元素还是元素，对象图的方法成了关系连词。因此，代表这些方法的连词就比较丰富。

在本章剩下的小节中，我们还会更加详细地介绍概念地图，以及其他几种系统图示法，包含反馈关系图、本体论关系图以及网络。它们都可以看做把概念地图限定在特定种类的关系下面得到的系统图。其中反馈关系图一般用于能够用程度或者强度等某种数值来描述概念的情况，在这种情况下，关系就成了促进这个数值增加或者使得这个数值减少这样两种。本体论关系图主要考虑概念之间的有限的几种关系，例如包含关系 (is-a)、整体 (is-a-part-of) 部分关系、逻辑因果关系 (lead-to) 等等。网络则是去掉概念地图中的关系连词仅仅保留连边还有概念地图中的概念得到的图。但是，联系到概念地图和对象图之间的关系——两者一致只不过对象图中的方法成了概念图中的连接词，我们可以发现，实际上，概念地图也可以看做是一个网络，只不过这样的网络有两种类型的顶点——对象的元素和方法，而不仅仅是元素。实际上，将来我们会看到，这样的网络叫做二分网，或者二部分图，或者双顶点网络，或者双层网络。为了区分，我们把仅仅保留概念（元素）和概念之间的连边的存在与否的网络叫做单顶点网络。如果我们用“网络”来泛指单顶点网络、双顶点网络，甚至将来更多种类的顶点的网络，那么，在这个意义上，我们说概念地图也是一种网络。于是，本章的标题，或者说主题，就成了“网络，描述系统的骨架”。当然，在这一章，我们还是主要介绍概念地图，然后稍微提一提其他图示法，而把“网络——系

统的骨架”这个主题以及网络本身的讨论，放到下一章以及第十四章。

我们先来介绍概念地图，有的时候也叫作系统图 [28]，它用图的形式描述了系统的内部元素和元素之间的丰富的一般的相互关系。

3.2 一般系统图示法：概念地图

通过前面的自行车的例子，我们看到了包含了元素和方法以及元素和方法之间的比较单一的输入输出关系的对象图、元素作为概念方法作为联系的概念地图，以及完成特定任务的流程图。我们说对象图和概念地图对系统的抽象具有一般性。也就是说，看起来大量的系统可以通过搞清楚系统里面有什么元素（子系统），这些元素之间的关系如何，这个系统和系统外部的更大的系统之间的联系是什么，这样的方式来描述¹。

由于概念地图在元素之间关系上的一般性，其对系统的描述能力非常强大，把系统抽象的难度要比对象小一些，尽管实际上没有小很多，因此，在这里，我们主要介绍概念地图。如果你是特殊的对对象图非常熟悉的读者，例如你是面向对象程序设计的程序员，那么，你只要记住把方法转化成元素之间的标有连词的连边就行。从这个意义上说，对象图和概念地图是一样的。在《Systemic Thinking: Building Maps for Worlds of Systems》[28]里面，作者 Boardman 把概念地图叫做“Systemigram”。我把它翻译成“系统图”，也可以更复杂地叫做“对象在系统性视角下的图示”。其图示的主要结构，除了体现系统对相互关系的关注以及系统帮助我们看到树木又见森林这些思想之外，就是概念和概念之间通过连词明确标注出来的关系。我把这一类的，通过概念（元素）和概念之间明确标注出来的关系来描述系统的图，都叫做概念地图。有的时候为了强调制作这个图后面的系统性思考——也就是对相互作用的关注以及同时对细节和整体大图景，我也把这样的图叫做系统图。实际上在制作的过程中，通过关注相互联系——一定要明确地通过连词和连边标出来——我们主要关注的是系统的整体大图景，也就是系统整体的功能、系统作为整体和外界的联系，但是不能是没有细节的大图景，我们还要关心系统的整体性是如何通过系统的元素和元素之

¹当然，更一般地来说，是不是能够通过任务分解和任务组合的方式来把描述所有的系统，是另外一个问题。完全有可能流程图也是具有一般性的。

间的联系来实现的。

通过上面对概念地图的基本形式——概念和明确用连词标记出来的概念之间的联系——和概念地图的主要目的——看到整体大图景（整体功能、如何和外界联系）的同时看到大图景是如何由元素和元素之间的关系来实现——的了解，实际上，你们就可以直接去尝试制作概念地图了。不过，在这里，我稍微分享一下自己的经验，这样你可以稍微少走一点弯路，稍微快一点掌握这个系统图示法。不过，我强烈推荐你慢慢来，多走走弯路，等到豁然开朗的时候能够得到更好的体会。

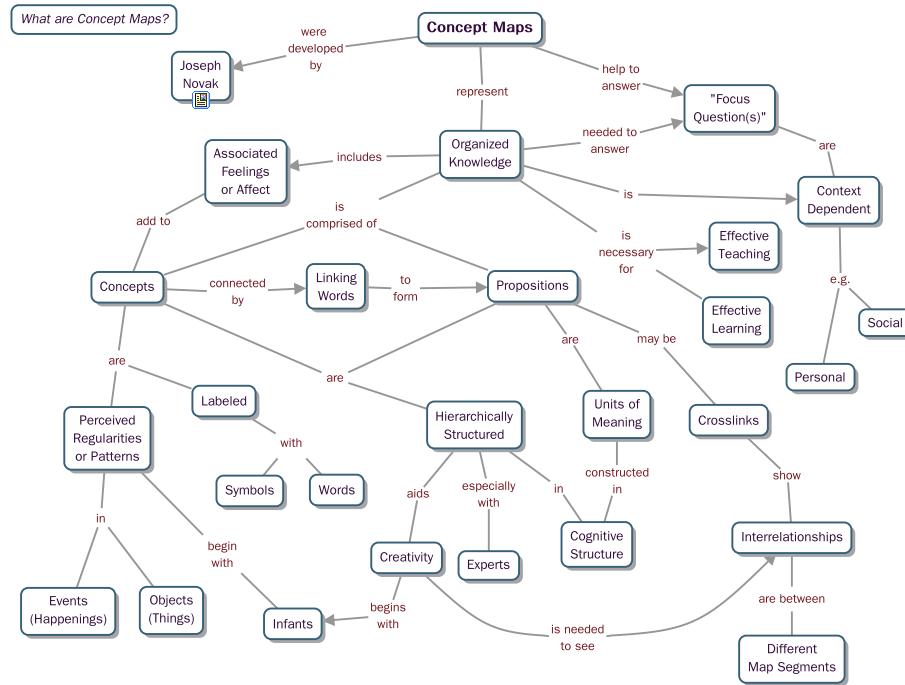
首先，我们需要确定一个描述对象。这个很自然，但是，很不简单。确定一个对象不是说写下来一个名词就可以，还需要确定这个现象的边界：哪些东西当做系统的内部，哪些东西当做系统的外界。我们在把量纲分析用于推导单摆的公式和证明勾股定理的时候，已经体会到了确定一个系统的边界一个系统的内部的主要元素，以及这些主要元素的单位，的重要性了。因此，这个第一步听起来简单，做起来可不容易。

其次，我们需要明确主要关注这个系统的什么，也就是有一个“焦点问题”。例如，下面两张图分别是概念地图的提出者Novak和我自己制作的用来说明“什么是概念地图”的概念地图。Novak的对象更多的是面向搞教育的或者是学习者²。我当时做这个图的对象主要是了解一点系统科学和网络科学的学生。

接着，在在这个焦点问题的指引下，列出来这个对象的主要的概念，或者说用系统科学的语言，这个系统的主要元素。元素之间的关系也要考虑进来，但是可以先不画出来。

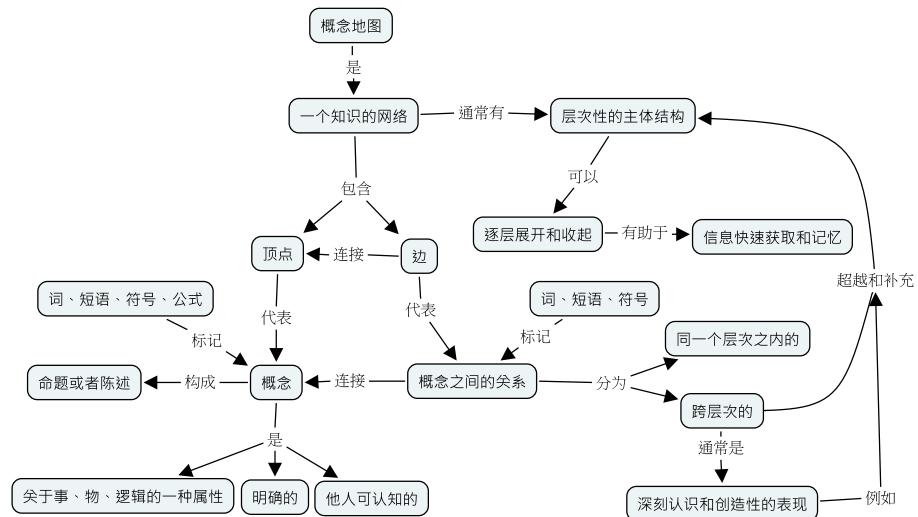
再次，补上概念之间的关系。这个时候对焦点问题心里面应该有一个差不多的答案了。标出来关系的时候，要联系这个答案，体现出来这个答案。也有可能到这一步你会意识到前面的步骤，也就是列出来的主要概念，需要调整。那就去调整。有的时候，你会发现，甚至焦点问题都需要调整。当然，我们希望这个调整大多数时候是细化明确化。这是好的。但是，也有的时候，会出现对焦点问题含义上的修改。

²原图在这里可以找到<http://cmaps.km.ihmc.us/rid=1L2W8S4VP-1T8MH1F-273G/Concept%20Map%20About%20Concept%20Maps.cmap>。2019年10月14日访问。



(a)

焦点问题：什么是概念地图？



(b)

图 3.3: 这是焦点问题都是“什么是概念地图”的两张概念地图。(a) Novak 所做的面向教育者和学习者的概念地图。感谢 Novak 的授权。(b) 吴金闪所做的面向系统科学和网络科学的学生的概念地图。

到这里，剩下的问题，就是调整一下布局了。布局要体现层次性，也就是关系上比较紧密的在一个层次的，要大概显示在一个层次。逻辑上的上位概念要显示在上方（有的人把上位概念放在左方，从左往右读一张概念地图）。除了层次性，还要突出长程连接，也就是联系着比较遥远的两个或者两团概念的连边。很多时候，长程连接往往是一个概念地图在灵魂所在，作者最想表达的东西，**最**体现作者的创造性和深刻认识的地方。

最后，放着这个图放一阵，然后再看几遍，或者去找合适的人聊聊这张图，再来修改。

再来看一下图 3.3 中的两张概念地图。我们发现首先，两张图都具有层次性结构，也就是图的某些部分可以想一个抽屉一样关起来：打开的时候可以看到这个层次以下的内容，关上呢就可以暂时把这个层次下面的细节忘了。其次，两个图都有一些这些抽屉之间的长程连接，例如图 3.3(a) 中的“creativity” - “is needed to see” - “interrelationships”，图 3.3(b) 中的“跨层次的”——“超越和补充”——“层次性主体结构”。并且，在两个图中，“概念之间的关系 (Linking words)” 都特意地被放在了中间的某个沟通图左右两边的地方。如果我的记忆还准确的话，我在制作我这个“什么是概念地图”的概念地图之前，并没有直接看到Novak的这张图。因此，这个相似性表示了两位作者在对内容的理解上，也就是内容的逻辑关系本身上，的内在的相似性。但是，两个图还是有不一样的地方。吴金闪的图里面假设了“知识的网络”可以当做读者的基础概念，从那里开始解释概念地图。Novak的图则更多地关注了认知结构。这个和两张图所假设的读者对象有关。

我建议你来做几张概念地图，然后再回来看看一小节，并且多次反复。例如，第一个概念地图就可以是你自己认为的“什么是概念地图”，或者“制作概念地图的步骤”。你也可以去看看吴金闪写的另外一本关于概念地图和理解型学习的书 [23]。后面还会让大家用概念地图的形式来做书的总结整理，来做读书报告。我建议你为本书的每一章都做一个概念地图。如果你做了，并且想跟我自己做的做个对比。你可以在我们的概念地图服务器 (cmap.systemsci.org³) 上找到。

³上去cmap.systemsci.org网站以后，你找到一个叫做“Jinshan Wu”的目录，里面有一个叫做“Invitation2SS”的子目录，里面有很多本书的概念地图。2019年10月14日访问。

下一节，我们来看几个概念地图的限定关系以后得到的特例。

3.3 反馈图和可计算反馈图

这一节我们来进一步介绍一下反馈图和可计算反馈图。在这里主要关注系统元素之间的“增加”（或者“促进”）和“减少”（或者“抑制”）关系，概念之间的其他关系就不再画在图上。这样的把一般系统图，或者说概念地图，限定在仅考虑“增加”和“减少”关系的图就叫做反馈图。当能有用一个数值来表示这样的反馈图上的概念的时候，这样的图往往就代表了一组动力学方程，离散的差分方程或者连续的微分方程。这个时候，这个图就是可计算的了，称为可计算反馈图。有的时候，我们不能够定量描述图上的概念，那我们说这个图主要反映因果联系。因此，也称为因果关系图。

我们前面举了自行车的对象图和概念地图的例子。现在，我们还是用自行车来讨论一个自行车速度控制的反馈图。我们已经知道自行车主要有两个表现变量，骑行速度和骑行方向。在这里，我们忽略方向，相当于假定就在一条直线上骑行。

对于在一条直线上骑行这样一个现象，我们接着忽略刹车的问题。这样就成了大概在一条直线上自己一个人骑自行车了。这个时候，我们说，什么因素决定了我们的骑行速度呢？假定骑行者也吃饱饭了，没有其他什么约束。这个时候，起到决定性作用的是骑手的主观期望达到的速度。没准出于舒适和安全等等原因的考虑，我们提出以下假设：骑手有一个期望速度 V_{exp} ，希望真实骑行速度在这个期望速度附近。那么，骑手如何来控制真实骑行速度实现在这个期望速度附近变动呢？很简单，跑得太快的时候可以减少点蹬车的力气和速度，太慢的时候增加一点。我们把这个蹬车的力气和速度简化成骑行者对自行车的输入功率 P 。

这个时候，主要概念和主要概念之间的关系就有了。我们需要关注：期望速度，输入功率，实际速度。如果有必要也可以把骑行者当做概念之一。它们之间的关系主要有：输入功率的大小改变实际速度，实际速度和期望速度的差决定输入功率。这也就是图 3.4(a) 中的概念地图所描述的概念和概念之间的关系。我们已经注意到这里有一个环状关系：“输入功率”到“当前速度”，“当前速度”到“输入功率”。如果你仔细问，这个调节都是怎么

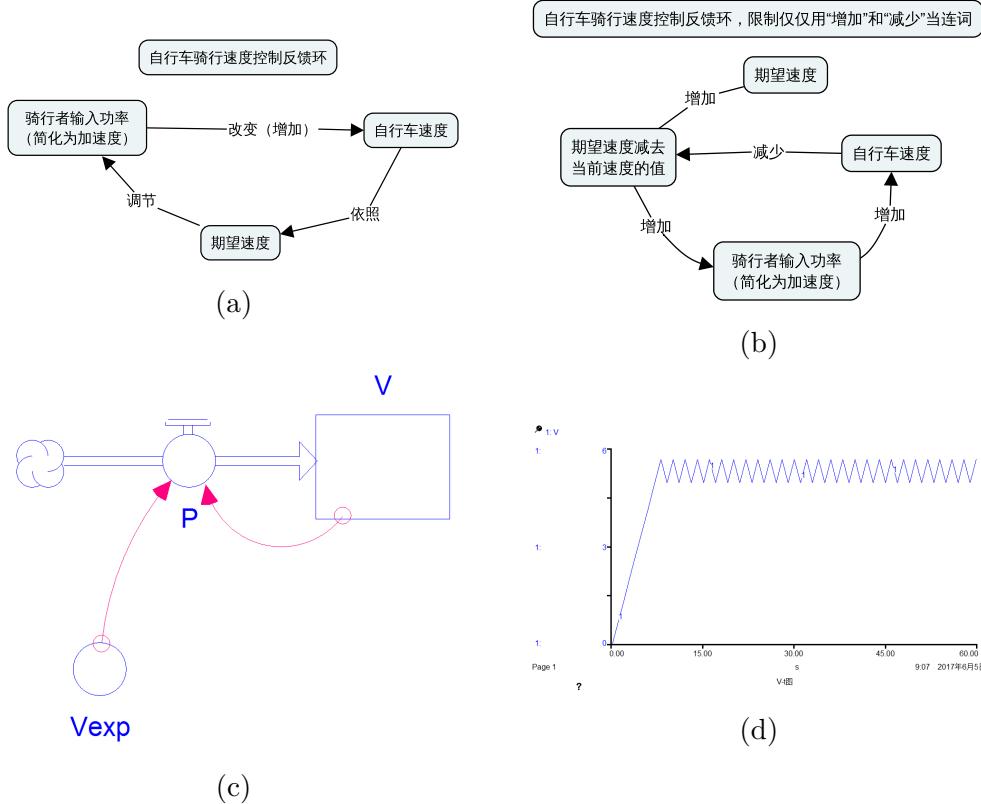


图 3.4: (a) 描述速度输入功率和最大速度之间反馈关系的概念地图。其中“依照”和“调节”两个关系词的内涵比反馈图中的“增加”和“减少”要丰富和模糊。(b) 描述速度输入功率和最大速度之间反馈关系的示意图。这个图实际上用了概念地图软件来制作，但是由于关系限制为仅仅使用“增加”（或者“促进”）和“减少”（或者“抑制”），实际上是一幅反馈图。(c) 可计算的反馈图，由 iThink 软件制作。这里我们非常清楚地看到了从 V 到 P 的反馈，以及反馈的参考点 V_{max} 是外界给定的，外生的变量。(d) iThink 软件输出的速度-时间曲线。其中参数值的设定是 $V_{max} = 5m/s$, $P_0 = \sqrt{2}/2$ 。

实现的啊？那么，我们还必须加入骑行者，他/她自己感受的速度，定下来的期望速度，自己计算的差值，然后决定的输入功率。我们还可以继续问，他/她是如何做以上这些观察、计算、决策的啊？这个时候，我们还需要把讨论深入到感觉、计算甚至神经结果和过程中去。但是，你看，我们在这个图里面，就停留在了目前这个层次。主要是，为了展示反馈关系，我们认为到这个层次就够了。

不过，通过概念地图我们注意到产生了反馈环，还是不太明确这个反馈环哪些是正反馈哪些是负反馈。当然，我们可以把“调节”这个关系连词变得更加具体，也就是描述“如何调节”。这个时候，你就会注意到这个“调节”是一个负反馈，而上面的“改变（增加）”是一个正反馈。于是，当我们特别强调正负反馈的时候，我们稍微改变一下这个概念地图的连词，仅仅使用“增加”和“减少”，我们就有了图 3.4(b) 中的反馈图。其中，“骑行者输入功率”的增加会增加“自行车速度”，因此是正反馈，用“增加”连词来标记；“自行车速度”的增加会减少“期望速度减去当前速度的值”，因此是负反馈，用“减少”来标记；“期望速度”的增加会增加“期望速度减去当前速度的值”，用“增加”来标记；“期望速度减去当前速度的值”一旦变大但还是大于零的时候，说明当前速度离期望速度比较大，因此，会导致“骑行者输入功率”增加。把这些关系都标注出来，我们得到图 3.4(b)。这张图有自身的优势。例如，我们可以把这个环拿来自己看看，发现有两个增加关系一个减少关系，于是合起来，还是减少的关系，也就是整体是一个负反馈。这个整体结论很重要：负反馈对于维持稳定值是很重要的。如果一个系统整体来说是个正反馈，则往往其增长或者减少不可限制，没有稳定值。

有了这个反馈图，我们对于系统整体趋势以及什么样的系统内部元素和元素之间的关系导致了这个整体趋势就有了一定的理解。现在，我们更进一步，把反馈图上的概念定量化，看看定量化能够给我们带来什么。这里我们主要的量有期望速度 V_{exp} ，输入功率 P ，实际速度 V 。它们之间的关系可以写成，

$$V(t+1) = V(t) + P, \quad (3.1)$$

$$P = P_0 \text{sign}(V_{exp} - V). \quad (3.2)$$

其中 $\text{sign}(x)$ 是一个符号函数，当 $x > 0$ 的时候它等于 1， $x < 0$ 的时候它等于 -1， $x = 0$ 的时候它等于 0。我们发现这个方程里面有两个外界参

数“ V_{exp} ”和“ P_0 ”，有两个变量 V 和 P 。按照对方程的这个理解，我们用 iThink⁴画出来一个存量-流量反馈图。其中 P 是 V 这个量在单位时间里面的改变量，因此称 V 为存量， P 为流量。我们还要注意到，两者的关系不仅仅如此， V 还会反过来再作用到 P 上，通过和 V_{exp} 一起。这也就是途中两条带箭头的红色曲线所表示的含义。其中 P 到 V 的流量-存量关系是“增加”关系， V 到 P 的红线上的关系是“减少”关系，合起来构成了负反馈。图 3.4(c) 中的那朵云表示外界，也就是说这个流量的来源是系统的外部。看这个图你会发现，实际上，图 3.4(c) 和图 3.4(a) 在概念选择和关系选择上更加接近。那么，它们和图 3.4(b) 的区别主要在什么地方呢？图 3.4(b) 中期望速度减去当前速度的值 $(V_{exp} - V)$ 被拿出来当做一个概念。它和 P 之间是增加关系，和 V_{exp} 之间是增加关系，和 V 之间是减少关系。因此，实际上，这个可计算反馈图 (c) 和反馈图 (b) 是完全一致的。实际上，你也可以在图 3.4(c) 上增加一个量 $(V_{exp} - V)$ ，甚至增加两个量，一个代表参数 P_0 ，一个代表 $(V_{exp} - V)$ 。

有了可计算反馈图图 3.4(c) 之后，设定参数值，设定各个变量的初始条件，就可以来做计算了。iThink 在软件内部构建了以后动力系统模拟器，可以用合适的计算方法，例如 Euler 方法来对这个图做计算。实际上就是对这图背后的差分或者微分方程做计算。在图 3.4(d) 中我们设定 $V_{exp} = 5m/s = 18km/hour$, $P_0 = \sqrt{2}/2m/s$ 。其中，把 P_0 设成一个无理数的原因是，对于有理数或者更简单的整数，如果刚好某个时刻遇到 $V_{exp} = V$ ，那就会一直处在这个 V_{exp} ，而不会展现出来图 3.4(d) 中的波动了。

我希望通过这个例子，你已经了解什么是反馈，什么是反馈图，什么是可计算反馈图，并且明白反馈图和一般系统图，也就是概念地图之间的关系。

3.4 本体论图

我们再来看另一种概念地图的限定关系的种类以后的特例。在这里主要关注上下级关系。

⁴一个系统动力学软件，可以访问如下网站获取进一步信息：<https://www.iseesystems.com/>, 2019 年 10 月 14 日访问。

在概念地图里面，我们把一个系统里面所有的元素看做概念，把元素之间的相互作用看做概念之间的联系，同时用明确的连词标注出来。我们希望获得或者说建立起来一个包含所有的系统的概念地图，或者至少所有的人类知识的概念地图。这个尽管很有必要，但是，目标稍微大了一点。Miller和他的合作者们 [91, 92] 找到了一个稍微更明确一点的目标：把英语中的所有名词当做概念，看看能否构造一个概念网络。他们称这个网络为“WordNet”（词网）。在这个WordNet里面，有一些联系可能比较基础比较普遍。例如，两个改变表述的意义有重叠的部分，也就是近义词。还有反义词，“is-a”（“之一”，“是一个”、“是一种”）关系，“is-a-part-of”（整体-部分）关系。因此，WordNet首先就把英语的名词按照含义区分开来，例如 Bike 会有多个含义，标注为“Bike#1”（摩托车）和“Bike#2”（自行车）。然后，Bike（自行车）和 Wheel（车轮）应该有“整体-部分”关系，Bike（自行车）还是 Vehicle（车辆）的一种。后来，就有更多的研究者把形容词和动词也放到WordNet里面来，并且做了多语言版的WordNet。可以访问WordNet网站⁵来了解更多的关于WordNet的信息。

下面是来自于文献 [93] 的 Miller 自己画的WordNet名词之间关系的示意图，

搞清楚人类对事物和事物之间的关系的认知，本身已经是非常有意思也非常值得研究的问题。因此，WordNet的价值不需要在其他研究中如何使用来体现。但是，可以想见，在机器翻译、自然语言的算法理解等方面，WordNet具有非常大的作用。所谓翻译，实际上就可以看做一个多语言版本的统一的WordNet上做对应。也就是说，把任何语言的一句话先对应到统一的WordNet上面去，相当于明确了说的什么意思，然后，再按照这个意思转化成另一种的语言，就行了。当然，考虑到不同语言的语法习惯，明白实际意思之后还有很多要做的事情。但是，毕竟，大概看起来，是可以通过算法来做了。有了这个一般语言当中的词汇的相互关系之后，一个自然的想法就是专业学科领域的词汇的关系图。有了这个学科概念关系图，自然可以帮助老师更好地决定选择哪些概念来教，选择怎么教，用大概什么样的逻辑顺序来教，以及学生学什么怎么学，以及科研论文的机器理解自动

⁵ 英语的，<https://wordnet.princeton.edu/>，多语言的，<http://compling.hss.ntu.edu.sg/omw/>。
2019年10月14日访问。

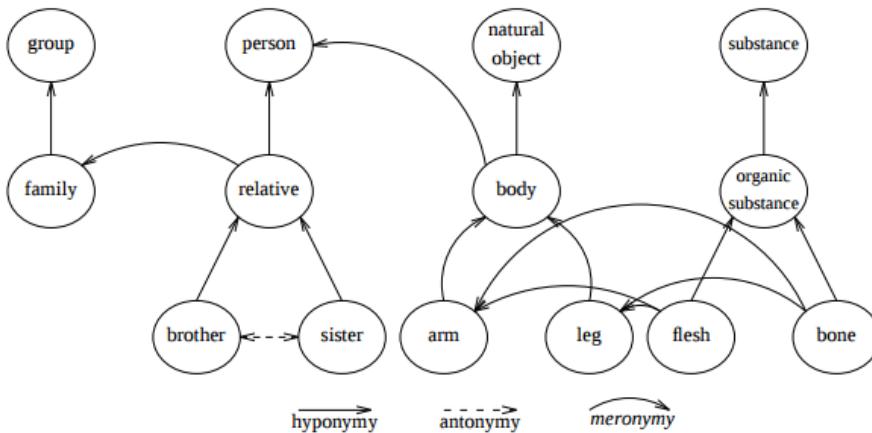


图 3.5: WordNet名词之间的典型关系。其中“hyponymy”表示是一种关系，“antonymy”表示反义词关系，“meronymy”表示整体-部分关系。因此，这个网络的连边上实际上标注了有限的几种连词，属于连词种类受限制的概念地图。Miller 等人认为，这些关系，加上同义词(已经整理在WordNet数据库里面每一个词的层次，没有画在图上)关系，是人类名词关系当中的骨架关系，最主要最普遍的关系。图来自于 [93]。记得去获取授权。

摘要等等。另一部分研究者对这个学科概念关系图感兴趣是想做更好的问答系统。你问一个问题，首先算法先想办法搞清楚你问的问题是什么意思，和哪些其他概念有联系，然后，想办法提供给你一个和你的原始问题最具有相关性的答案。对于问答系统，定位问题和给答案，这两步都是非常重要的。实际上，目前的搜索引擎找到你想要的东西的方法是，先做词汇的匹配，然后推荐给你匹配到的网页里面，某种算法认为价值最高的和你的问题最相关的那些网页。如果你的问题没有问明确，那么，搜索引擎就不太能够帮到你。例如，当你输入“Feynman (费曼)”的时候，一个过得去的搜索引擎会在大多数时候默认你的搜索物理学家Feynman。如果你想更加明确，可以加上“Richard (理查德)”。假如你不知道“Richard”，你可以试试同时搜索“Feynman”和“Physics”，这个时候，一个过得去的搜索引擎应该基本上给你定位到物理学家Feynman，以及“Feynman’s Lecture on Physics (费曼物理学讲义)”[94]。这个时候，搜索引擎实际上就有可能运用了概念之间的联系，通过“Physics”来更好地定位“Feynman”，也就是说那个跟“Physics”联系在一起的“Feynman”，应该差不多就是物理学家

Richard Feynman。当然，也有可能搜索引擎没有利用联系，仅仅是做了两个词的合并匹配搜索。那如果是我家六岁的逸儿来搜索“费曼”就可能不是这个意思了。可以想到，她可能对那个叫做“费曼”的小明星更感兴趣。于是，如果搜索引擎知道逸儿的使用习惯，推测出来逸儿的兴趣点和年龄，就可以用这个信息更好地匹配到小明星“费曼”。或者把“费曼”和“明星”放在一起搜索。实际上，当我在我的电脑上用Google（Google肯定已经知道我的很多使用习惯，经常访问的网站，兴趣点之类的）检索“Feynman”的时候，当然搜索结果已经主要就是我想找的物理学家Feynman，在搜索结果的右侧，出现了一个推荐名单和相关其他人和事物的名单。据Google宣称，这个右侧的推荐名单和相关名单，就是通过考虑事物之间联系得来的。Google称之为“知识图谱（Knowledge Graph）”。

于是，自然地，下一步的问题就是能不能把WordNet这样的日常语言中的词汇的关系网络，做到专业领域里面去。这个就是通常被称为Ontology（本体网络、本体论）的东西。本质上，一个本体论图，就是一个领域（或者称为一个系统）的主要概念和概念之间的关系的图形展示。当然，有的时候不直接是图形展示，而是定义了概念之间关系的等价的语句。例如，“自行车”“是一种”“车辆”，“自行车”“包含”“轮子”。最简单的本体论图可以仅仅包含这样的上下级关系。在更复杂的图里面，还可以允许，例如“凤凰牌自行车”“是一种”“自行车”，“凤凰牌自行车”“生产于上海凤凰自行车厂”，“上海凤凰自行车厂”“位于”“上海”，“上海”“是... 的一个省级单位”“中国”。于是，从前面这些信息，可以推理得到，“凤凰自行车实在中国生产的”。推理经常是本体论图的目标之一。

由于这个关系非常依赖于具体的科学领域，尽管一般来说本体论图还是包含有限的几种关系，但是，已经非常像概念地图这种一般系统图了。我们在这里给出来一个实践中被广泛使用的一个本体论图，医学领域的疾病药物本体网络——Systematized Nomenclature of Medicine – Clinical Terms (Snomed CT⁶，医学系统命名法 - 临床术语)。图 3.6(a) 是 SNOMED CT 的设计框架。对于概念给出了唯一编码、标准名词、推荐使用的名词和建议不使用的名词。对于关系给出了“是一种”以及部分整体关系（没有在途中画出来），以及概念-属性关系。图 3.6(a) 是 SNOMED CT 有关糖尿病的一

⁶<http://snomed.org/sg>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

个例子。“二型糖尿病”“是一种”“糖尿病”，“二型糖尿病”“发现于”“内分泌系统”。这里“发现于”就是医学这个领域比较典型的关系。

目前，各个领域都在建立本领域的本体论图，或者说更一般的概念地图。实际上，研究论文里面描述的科学的研究工作，也可以看做是在学科领域本体论图或者概念地图上的行走。有的时候提出了新的概念顶点，有的时候建立了顶点之间的新的联系，有的时候再一次考察了某个已经有的联系，有的时候给某个概念后者联系提供了一个佐证、应用或者反驳的案例。也就是说，科学的研究工作不是工作在概念上，就是工作在概念之间的联系上。在不久的将来，这样的关于人类知识和人类知识创造过程、理解过程的视角，应该会更好地促进知识本身的发展。这牵涉到对知识的学习和对理解的系统。

3.5 概念地图、理解型学习和理解系统

回到什么是系统科学这个主题。我们曾经提到，系统科学就是为了理解，为了更好地把握系统，为了洞彻联系。现在我们有了概念地图这个一般的系统图示法，我们再来看一看，它是如何帮助我们获得更好的理解的。

首先，对于可计算反馈图来说，实际上背后就是一组演化方程。有了方程，那么，我们就完全地了解了系统。给定参数和初始条件，原则上，通过求解方程，我们可以了解系统的行为，不管是长时间以后演化的稳定态行为，还是演化过程中的状态。当然，实际上，一旦方程比较复杂，如何求解出来是个问题。于是，人们才会找到一些定性的分析方法后者近似的分析方法。不过，本质上，只要有方程，就了解系统，也就是满足了我们说的给世界找到了建立了一个可检验的检验完了还比较符合的心智模型。

其次，对于本体论图来说，上下级关系一般来说对于属性具有继承性，例如生物要有能量输入输出，人也是生物之一，于是可以推理得到人也需要能量的输入输出。也就是说，很多时候，本体论图具有一定的可推理性。

那么，对于一般的概念地图来说，可计算吗，怎么算？由于一般概念地图里面包含的关系太丰富了，没有一定之规，要实现微分方程层次的计算，甚至是属性的逻辑推理，都是比较困难的。那么，是不是就没用了呢？不能促进对系统的理解了吗？不是的。一方面，概念地图也可以做计算分析，当

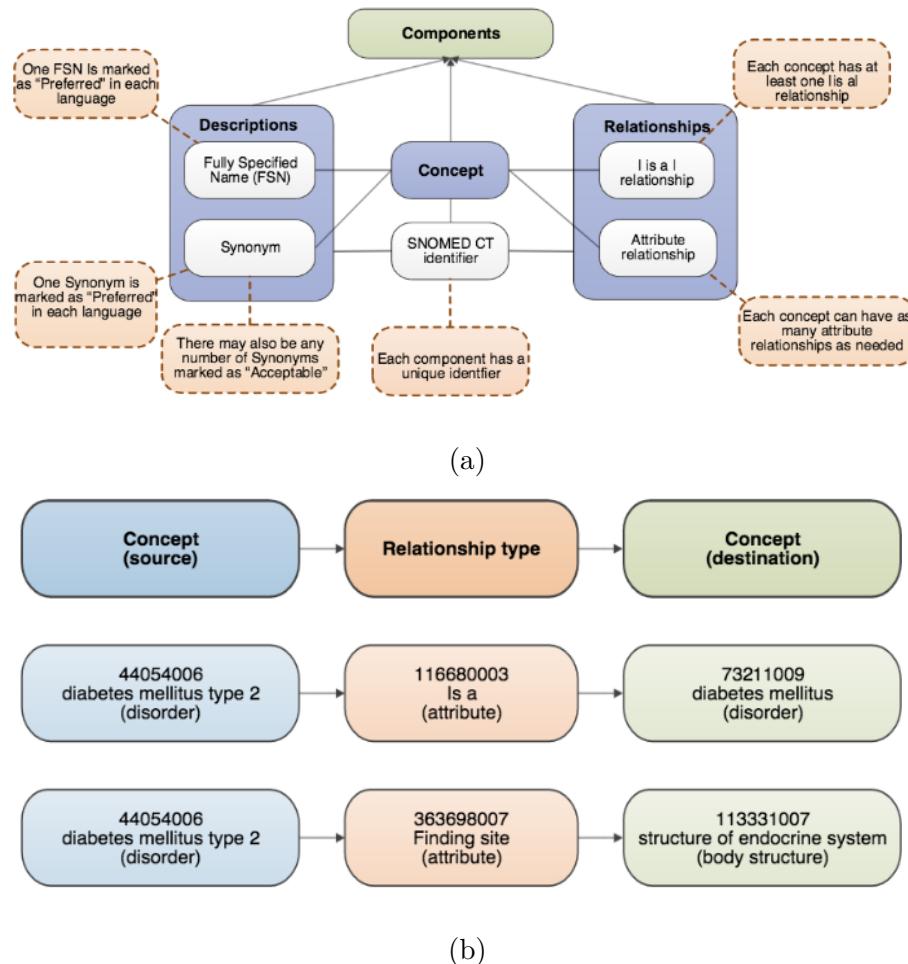


图 3.6: (a) 医学领域的疾病药物本体网络的设计框架。对于概念给出了唯一编码、标准名词、推荐使用的名词和建议不使用的名词。对于关系给出了“是一种”以及部分整体关系（没有在途中画出来），以及概念-属性关系。(b) 医学领域的疾病药物本体网络的有关糖尿病的一个例子：“二型糖尿病”“是一种”“糖尿病”，“二型糖尿病”“发现于”“内分泌系统”。这里“发现于”就是医学这个领域比较典型的关系。图来自于SNOMED CT Starter Guide。[记得去获取授权。](#)

然是比微分方程的分析和推理分析更加粗糙的计算分析，但是仍然是非常有意义的分析。其实，第二章的系统科学的例子里面的汉字网络和学习顺序就是概念地图和概念地图上的计算。更多的细节可以从第十四章和第十五章。另一方面，概念地图使得我们能够看到系统的整体的同时看到系统的细节，也就是见树木又见森林。在这里，我再专门针对概念地图如何促进教学和学习，如何促进对系统的理解和大图景的把握，稍微展开一下。

以科学、课程、和课堂的概念地图为基础，我提出来做“关注学科大图景的学习和教学方法”。做任何事情，都有一个大思路和小技术的问题。在教学和学习上，大思路是如何选择教什么、学什么，小技术上是思考怎么教、怎么学、考什么、怎么考。非常生动活泼的课堂，学生参与度高的课堂，吸引学生注意力的课堂，自然是好的课堂。可是，如果老师没有解决教什么的问题，没有让学生体会到为什么选择这些内容来教，那么，这样的好课堂也仅仅在“课堂”这个技术和细节的层面是好课堂，但是不是好教学，不是好老师。那么，如何来选择教什么呢？这就需要老师从整体上对这个学科有一个把握。把握什么？我提出来，把握学科大图景：这个学科的基本研究对象，典型思维方式，典型分析计算方法和典型应用。如何来把握这个大图景，以及把握了这个大图景之后怎么用？首先，建立一个学科的大概念地图，仅仅包含非常核心的概念。这个图可能很大，可能很难做出来，这都没关系，和下面的课程和课堂概念地图综合起来反复多次来制作，就行。接着，建立一个所教授的课程的概念地图，主要关注知识的逻辑结构，例如从哪一些更基本的知识就可以建立起来整个知识的大厦。最后，建立所教的每一节课的概念地图。在这个层次的概念地图上，主要回答，我这节课要教什么（What），传达什么信息，如何（How）传达这个信息，为什么（Why）要传达这个信息为什么要这样传达，学生知道这个信心以后有什么意义（Meaningful），这四个我称为 WHWM 的问题。在回答这四个问题的时候，自然，你就会回到课程大图和学科大图。例如，当你要回答为什么要传达这个，你可能觉得这个信息是有关典型思考方式的，或者典型计算分析方法的，那自然需要学生有比较好的理解。这样做以后，学生的学习就会有方向感，有目的感，而不是追寻着老师的脚步而已。有了方向感学习就会更有动机，理解也会更透彻。合起来也就会更容易做到“教的更少，学得更多”。把在理解上和知识的组织上需要老师提点的地方提点一下，把更多的

学生通过自学和完成习题可以学的更好的那些部分留给学生自学。

上面讨论了老师教什么怎么教的角度，概念地图如何促进理解型教学，帮助学生把握好学科大图景，促进学生对学科的理解。类似的，学生学的角度，概念地图也可以帮助学生把握好学科大图景，促进学生对学科的理解。学生是通过学习一本书的每一章每一节每一段，或者听老师的每一节课每一句话每一个概念和例子的解释来学习的。如果没有方向感，不去追寻这个学科的大图景：典型问题、典型思维方式、典型计算分析方法和典型应用，就很可能会迷失在这些细节里面。有一些细节，如果不是直接和这些大图景有关的话，就算学过一遍，就算做过一些练习题，也会比较容易被遗忘。因此，学习的目的不是记住所有学过的东西，而是建立起来学科大图景，建立起来知识的组织结构。这样一旦学习新的东西，就通过把这个东西和应建立的结构联系起来学习；一旦解决问题的时候需要某个东西，就通过这个东西和大图景的线索，重新去找回来，或者自己去发明出来。如果把知识本身比作珍珠的话，那么，我们所要学到的东西是把珍珠串起来的线，怎么串的原则和思想。有一些知识单独来看可以是非常漂亮的珍珠，但是，有可能和学科大图景没有什么关系，仅仅是非常漂亮而繁琐的计算，或者把繁琐的计算用一个漂亮的技巧来解决。这样的知识，除非正好解决的技巧和这个学科的大图景有关，充其量也就是一颗漂亮的难得的珍珠，而不应该称为这个学科的核心内容。

学习的目的是为了创造知识和创造性地使用知识。重复性的平庸的使用知识——指的是其他人已经创造性地展示了某知识如何用于解决某问题，而学习者的任务就是学会这个运用——实际上不需要经过历经大学、研究生院、导师这样一个研究性学习的过程来实现。其最好的培养方式是培训，技能型的学习，例如通过职业教育，或者工作以后就接受岗位培训，甚至直接通过在工作实践中的摸索得来。我们这里的学习方法，尽管原则上还是可以在技能型学习中使用的，不包括这样的重复性的使用知识的学习。尽管人类财富的创造需要这样的重复性的运用，但是人类文明的进步是由创造知识和创造性地使用知识来推动的。我们知道，为了创造知识和创造性地使用知识，最关键的是需要理解知识，内化知识。一个学习者、研究者，只有把知识变成自己内在的能够自发运用的工具，才能以此为基础真正创造新的知识，或者把这个知识运用到其他人没有用过的地方，来解决现实

世界的问题。从理解和内化的角度来说，知识的组织，围绕着学科大图景的组织，远远比知识本身要重要。当然，反过来，没有知识本身的细节，没有这些细节图和构成和呈现大图景，那么大图景就是空的。从这个角度来说，一个见树木又见森林的学习方式，也就是以概念地图为基础的学习和理解的方式，是非常有价值的。

关于如何进一步在教学和学习，以及考试中运用概念地图和系统性思维，有兴趣的读者可以看吴金闪的《教的更少，学得更多》[23]。

3.6 作业

习题 3.1. 阅读Boardman和Saurer的 Systemic Thinking: Building Maps for Worlds of Systems (《系统图示法》) [28]，做读书笔记。读书笔记包含总结和体会。内容上，总结和体会主要关注以下四个简称为“WHWM”的问题：主要传达了什么信息 (What)，作者是如何来构建和传达这个信息的 (How)，作者为什么要这样来传达来传达这个 (Why)，对读者我来说这个信息和这样传达有什么意义 (Meaningful)，我喜欢吗？体会部分结合阅读材料和自己的经验，要有具体例子，还要有观点，观点和例子还要能够有联系。形式上，需要运用概念地图和文字相结合的方式。所有的读书笔记的作业都是这个要求。

习题 3.2. 阅读Novak的 Learning, Creating, and Using Knowledge: Concept Maps as Facilitative Tools in Schools and Corporations (《学习、创造和使用知识》) [95]，做读书笔记。

习题 3.3. 阅读Whiltehead的 Aims of Education (《教育的目的》) [96]，做读书笔记。

习题 3.4. 阅读吴金闪的《教的更少，学得更多》[23]，做读书笔记。

习题 3.5. 阅读Adler和van Doren的 How to Read A Book (《如何阅读一本书》) [97]，做读书笔记。

习题 3.6. 阅读Young的 Study Less, Learn More (《如何高效学习》) [98]，做读书笔记。

习题 3.7. 课程项目（可以在得到反馈以后反复做）：选择一门课，按照我的要求（这门课的主要研究对象是什么、主要研究任务是什么、研究方法和思想上有什么特征，按照这些对象、任务、方法和思想哪些概念是不可或缺的，学习了以后有助于理解前面的这些对象、任务、方法和思想，也有助于进一步学习的）来呈现这门课的大图景。利用概念地图的方式来呈现。

习题 3.8. 找一本介绍数学模型的书，选择其中一个模型，最好是微分方程模型，制作反馈图、可计算反馈图、概念地图，并通过 iThink 或者自己编程来计算一下这个模型在某个参数选择下的解，并作图。可以参考本书的图 3.4。

3.7 本章小结

在这一章里面，我们从面向对象程序设计的对象图出发，介绍了以概念地图为基础的系统图示法，以及概念地图在限定关系条件下的几个特例：反馈图、可计算反馈图和本体论图。我们还强调了所谓一个系统的图示，就是对系统内部包含什么元素、元素和元素之间的关系、系统和外界的联系的一个图形化的描述。有的时候，我们也把系统和外界的联系看做系统的整体功能，或者用面向对象程序设计的语言来说是接口。那么，元素和元素之间的关系如何完成这个功能，就是通常所说的结构和功能之间的关系。系统图示法能够促进我们对于这个结构和功能之间的关系的理解，能够促进我们对系统内部结构的理解，能够让我们既见树木又见森林。促进学习和理解，是系统思维的一大目标，而以概念地图为基础的系统图示法，在这一点上有特殊的优势。

搞清楚一个系统内部有哪些元素和元素之间是什么样的相互作用这样的内部结构，很多时候是系统科学的研究的第一步。当然，也可能是需要通过系统和外界的关系这个系统的行为或者功能来猜测这个系统的内部结构，甚至是一个交叉反复的过程，从系统的行为来猜测结构，从结构来推测行为，然后一直到两者相符的比较好。于是，有了系统内部结构的大致描述之后，下一步的问题就成了对于给定的结构，有什么方式可以研究这个系统的行为吗，如果这个给定的结构就是一个系统图示呢？下一章，我们将初步来讨论这个问题。接着，在中间第二卷，我们会插入数学物理部分的

学习。之后，在第三卷，我们会继续回到对这个问题的讨论上：已知某些结构信息，我们如何研究其行为。并且，在绕道去学了数学物理之后，我们新的处理方法会用到很多数学物理的技术和思想。例如，什么叫做给定一个系统的结构？物理学，包括经典力学、统计力学、量子力学，都这样告诉我们，指的是给定这个系统的内部元素和元素之间的相互作用，并且形式上，给定了一个系统的叫做Hamiltonian的能量函数，就相当于给定了一个系统。从这个角度，给定一个系统的网络结构，或者说系统图示，可以看做给出了一个这个Hamiltonian的一个近似。

第四章 网络作为复杂系统的骨架

网络就是一个有顶点和顶点之间的连边构成的图。连边可以存在方向——这时候称为有向网络，可以带上数字和其他标记——这时候称为加权网络。如果连边既有方向又有数字，则被称为加权有向网络。

网络科学近些年比较热，从看起来就很像网络的对象，例如 Internet、电力网络、道路网络、论文引用关系、神经元网络，到初看起来不像网络的对象，例如经济产业结构、科学领域关系、人类交往、学科概念等等，都在使用和发展网络分析。那么，为什么网络具有这么大的普适性？这样的分析能够给这些问题带来什么新的视角或者新的解答，为什么能够带来这些？为什么我们把网络当作复杂系统的骨架，当作系统科学的重要的组成部分，做为思维方式还是分析方法？讨论和尽可能地来回答一下这些问题是一章所要完成的任务。

至于更加具体的网络科学的介绍，见第十四章。当然，本章里面会用到一些网络的概念和分析方法，除了前面的例子中已经提到的，还会有一些在第十四章介绍的内容。因此，本章和第十四章最好交叉起来阅读。不过，我回尽量把自己局限在前面提到的例子里面。

4.1 之前的举例中的网络视角

我们先来看之前的例子中的都有哪些网络。首先，信号编码问题的讨论中，我们用了二叉树，而二叉树是网络的特例：每个节点向下分开两支也就是两条边，从上面来过来一条边，整个网络有根节点有方向，没有回路。为什么要用二叉树呢？因为我们的编码基本代码是 0,1 两个字符，因此，每增加一个字符就会把一个可能的编码变成两个可能的编码，也就是

分成两叉。其次，汉字的例子中，汉字之间的以形为基础的音义的拆分联系也构成网络：汉字是顶点，汉字之间的以形为基础的音义联系是边。再次，PageRank 算法里面的网页之间的超链接引用关系，以及类似的科研论文之间的引用关系，是网络：网页或者论文是顶点，引用关系是连边。接着，经济学的投入产出分析中的经济部门之间的联系也是网络：经济部门是顶点，投入产出关系是边。这个网络不仅有方向还有权重——连边上面带了流量的数字。类似的科学领域之间的投入产出关系和经济部门之间的投入产出关系类似，也是网络。化学反应网络比较特殊，那里有两种顶点：反应物和反应方程，连边也是有向的——如果一个反应物是一个方程的投入端物质则从物质连向方程，如果一个反应物是一个方程的产出端物质则从方程连向物质。在项目管理中，任务分解依赖关系图也是网络：任务是顶点，依赖关系是连边。

可以看到，在我们有限的几个例子中，网络已经占了很大的比例。那么，为什么网络一个这么简单的东西——不过就是顶点和顶点之间的连边——可以描述这么多的现象？用网络来描述这些现象以后又如何呢？能够帮助研究者解决和这些系统相关的问题吗？这些问题的答案和网络的基本精神有关。

4.2 网络的精神：几何性和网络效应

我把网络的几何性和网络效应称为网络的精神。在解释几何性和网络效应之前，我们需要再来讨论一下科学和数学的关系。在这里我们强调表示——也就是用来描述科学对象的数学结构和这个科学对象之间的关系——的忠实地。也就是说，最好能够对这个数学结构做的所有的数学操作，在具体科学对象上都有意义，并且能够对科学对象做的实际操作，都可以表现为对数学对象的数学操作。例如，矢量的加法、数乘（拉伸）、转动、求长度是矢量的基本数学操作。我们来看看当我们用矢量表示位移的时候，这些数学操作对应着实际位移中的什么事情。加法就是前后两个位移合起来，或者把一个位移看作在不同的方向上（通常是在相互正交的方向上）同时做的位移。数乘就是把一个矢量的方向固定长度变化一下。在实际问题中，这个可能是测量单位的变化，也可能是在这个方向上运动了更长的时间。也

就是说，实际问题中，也确实需要数乘这个操作。转动可能是测量的参考系变了，例如测量的人转了一个角度，也可能是某个力拉着一个物体使得这个物体在转动。也就是说，实际情形中，是存在改变位移的方向但是不改变位移的长度的事情的。最后，求长度的数学操作就是测量位移代表的距离，不管方向。因此，矢量和位移真的是存在很好的对应关系的：凡是数学上能做的事情，实际中就能做，反之也然。这就是忠实表示的一个例子。我们说，矢量是位移的忠实表示，或者简单地说，位移是矢量。

那么，我们能不能在用网络来描述问题的时候也做到表示忠实呢？那么，什么是网络这个数学结构里面最重要的最核心的内涵，以及什么是对一个网络的数学操作呢？有了这些才能讨论表示是不是忠实的问题¹。

网络有什么？只有顶点和顶点之间的联系。连顶点上的记号原则上都是没有的。连边上可以有边的种类的记号，以及权重。这就是网络的所有信息。也就是说，从网络的角度来说，一个顶点和另一个顶点的区别，只能通过连着这些顶点的连边来确定。如果边还是无权无向的，则仅仅能够通过这两个顶点的邻居来决定。也就是说，对于无权无向网络来说，如果两个顶点拥有一样的邻居，那么实际上，这两个顶点本身就是不可区分的。这样的不可区分性，就会导致将来用这个数学结构描述的实际问题中，这样的顶点也必须是不可区分的才行，才有可能是忠实表示。当然，如果这一点不满足，还可以考虑加权的或者有向的网络，或者加权有向的网络。但是，同样的问题，如何这个时候，两个顶点它们的邻居一样，而且和邻居之间的连边的方向和权重也一样，则实际上，这两个顶点对应着的实际对象也必须是一样的才行，才有可能是忠实的表示。

于是，一个具有这样的性质的对象来描述实际系统的时候，我们也只能来描述具有这样的性质的系统。也就是说，如果在我们的实际系统中，所有的性质也确实通过对对象和对象之间的联系就能够表示，而且在数学描述中还不能给这些实际对象不同的编号或者名字来区分，也就是说，只能靠和其他对象的关系来定位这个对象的内涵²。我把这个称为网络的几何性：

¹顺便，在面向对象的编程里面，一个对象的内涵叫做内部变量，一个对象的典型操作叫做这个对象的方法。忠实性的意思就是需要把实际对象的各种能够做的操作都在程序世界里面的对象上实现出来

²在面向对象编程的语言中，这样的实际上相同，但是名字不同的东西，都只有通过同一个抽象类来产生不同的这个类的实体

只能通过顶点和顶点之间的联系的方向、种类和上面携带的数值来对实际系统做一个描述。

那么，我们面前的例子中，哪些是具有或者近似具有这个几何性的呢？网页之间的超链接关系实际上对于网页检索排名问题来说，并不是全部的信息，例如忽略了网页上的内容以及内容和用户兴趣的匹配的问题，因此是一个近似的描述。但是这个近似已经比较全面，并且使得计算变得非常容易。更重要的事情是，如果将来在这个超链接网络的基础上，我们用其他的网络来把用户兴趣和内容主题的信息补充回来，没准就能够得到既足够忠实又计算足够简单的表示。化学反应网络是不是一个忠实的表示？从化学反应网络和化学反应动力学的角度来说，还确实是非常接近忠实的表示，只要在连边上加上化学反应系数。一个化学反应确实是由投入物质和产出物质来定义的。一个反应物也确实是由它能够参加的所有的反应来定义的。因此，除了需要额外的一组代表每一个化学反应的反应速率的向量 \vec{k} 之外，实际上，化学反应网络和化学反应动力学，是完全一一对应的。当然，化学反应动力学和实际化学反应是不是一一对应，那是另一个问题。例如，空间不均匀性就没有放到一般的化学反应动力学方程里面去。如果要求我们的化学反应网络也能够描述空间的信息，我们实际上还需要在化学反应网络上再加上另一层代表空间关联的网络。同样的事情也会出现在人群中的六度分离现象的实验中。在实验中，人们要求只能通过给认识的人来传递信件的方式来把随机收到的信件送到正确的收件人手里。如果我们仅仅考虑熟人网络，则，确实也能够算出来一个平均配对距离，但是很难真的实现这些最优的路径。这是因为计算路径的时候，我们采用了全局信息，而每一个实验者只能从他/她的熟人中来找一个人送信，很有可能不是那个理论上知道全局信息以后算出来的最合适的人。这个问题称为网络上的导航。这个时候，我们就有可能需要在这个网络上增加一些信息，例如大概的空间位置的网络，以及原来的熟人网络和空间网络之间的粗糙的或者精确的联系。比如，如果我看名字大概知道是一个德国人，那么我就传给我的德国朋友会比较合适。也就是说，当我们的研究问题需要额外的信息的时候，我们还可以通过增加一层网络的办法来把需要的信息接近忠实地加入到我们的数学结构里面来。当然，也可以简单粗暴地直接把原来的熟人网络嵌入到位置空间中，并且让位置信息可以完整地或者部分地信件被传递者使用。

实际上，这就是 Kleinberg 在网络的导航的工作中做的事情 [99]。

也就是说，我们要把我们关心的系统上的所关注的问题，转化成一个只需要通过顶点和顶点之间的联系就能描述和解决的问题。如果不行，那当然也可以通过增加其他的信息——最好这个信息还是网络的形式——来得到一个忠实或者接近忠实的表示。然后，下一步的事情是，在拥有这些信息的一个网络描述上，我们能够做什么样的数学计算和操作，这些操作是否对应着实际系统上有意义的事情。更多的典型的分析计算方法我们会在专门的章节第十四章来介绍。这里只提一提几个典型的简单的计算。例如，度、平均最短距离、平均集聚系数还有 PageRank 算法及其同类的投入产出分析算法。度就是把每一个顶点的邻居的数量数出来。平均最短距离，就是对每一对顶点之间最短的距离先算出来——原则上要尝试这两点之间所有的路径然后确定最短的那个——然后，对所有的顶点对做等权平均。平均集聚系数就是数一数我的朋友之间是朋友的数量和朋友之间可能是朋友最大数量（如果有 d_i 个朋友，则这个最大可能数量应该是 $\frac{d_i(d_i-1)}{2}$ ）之间的比例，也就是连着我的三角形的数量比例，然后，对每一个顶点的这个比例做平均。广义投入产出算法已经在第二章中介绍过。

那么，为什么要提出来这些量呢？它们具有什么样的一般性呢？比如，在传染病现象中，在接触就能够传播的极端条件下，传染的路径肯定是最短路径。于是，一个网络的最短路径的长短，肯定就反映了这个网络传播疾病的能力。在更加一般的条件下，这个平均最短距离仍然能够比较好地描述网络传播疾病的能力。当然，更加细致的研究发现，平均最短距离、平均集聚系数都是很答程度上决定网络的传染能力的量 [100]。几何性还有一层含义：网络上的分析及算方法通常通过定义和计算网络的某个几何特征来体现，并且研究者希望这样的几何特征在很多网络上的现象中都具有描述能力。类似传染病的问题还有很多，例如谣言和新闻消息的传播、投票现象、购买流行产品或者金融产品的问题等等。那首先对于这些问题，我们必须问，所作的类似于最短距离这样的计算，在实际现象中意味着什么，必须是有意义的才能够做这样的计算。另外，必须问，算了这些能够告诉我们什么别的方法不能告诉我们的东西。

前者就是表示的忠实性的问题。后者就牵涉到网络分析的另一个特点：网络效应。下面我们来谈网络效应。

网络效应主要是在网络分析方法背后的思维方式的层面。先来说反例，不考虑网络效应的分析方法。如果我们不考虑事物之间的联系，完全孤立起来看，没有网络，则是不考虑网络效应的一种表现。例如，汉字也完全可以一个一个地学，不需要联系起来。单独抄写和记忆，也是一个学习方式。不过，我们已经发现，有了联系，我们可以在局部的层次就做的更好：在学习每一个汉字的时候，把这个汉字和它的上下层的连在一起的字联系起来学习，可以促进学生对这个字的理解、记忆和使用。但是，如果拿到一个网络之后，所做的分析就是去看看每一个顶点有几个邻居，也就是统计度和度分布，那么这就是实现了从孤立到有联系而已，还不是运用了网络分析的全部威力。网络分析的全部威力藏在那些运用了“从直接到间接，从个体到局部再到整体”的分析及算方法之中。例如我们提过的广义投入产出分析的例子，例如传染病传播能力的例子。当然，对于网络上的很多现象，研究工作发现，其实了解了度分布之后，就很大程度上，能够知道这个现象的一些特征了。例如，幂律分布的网络上某些传染病的控制不能得到控制 [101]。这个现象的原因需要将来在讨论平均场理论的时候再来进一步说明。在PageRank 算法还有投入产出算法中也存在着类似的现象：综合考虑了直接和间接联系的算法得到的结果和仅仅考虑直接联系得到的结果存在很大的相关性，尽管按照算法的理念上，它们的结构可以有比较大的差别。这个问题也会等到在讨论广义投入产出分析的时候再来展开。

当然，表示的忠实性的问题也不能过于强调。科学永远不是追求实际上的忠实，也就是说，科学不是为了做出来一个和实际一模一样的东西，从而来忠实地描述实际。科学是为了建立一个数学模型，心智模型，这样的模型肯定是对现实的简化，但是，在所感兴趣的问题上，却能够忠实地或者足够忠实地描述这个系统。

再加上我们说过，丰富的现象的根源都来自于相互作用，而网络是描述相互作用的基本的工具，并且网络效应和相应的分析及算方法体现得正好就是系统科学“从无相互作用到有相互作用，从直接联系到间接联系，从个体到整体”的思想，因此，我们把网络看作是描述系统的骨架。

除了网络的精神，以及前面提过的使用网络来描述和解决问题的例子，还有将来要更加详细介绍的关于网络的内容，在这里还想再一次强调一下网络，尤其是多层网络，对实际系统的元素之间的相互作用的描述能力。我

们已经看到了一种顶点的网络和两种顶点的但是只有种类之间有连边的网络的描述能力的例子。更一般地来说，还有两种顶点但是，顶点之间存在着三种联系的网络：第一种顶点之间的联系、第二种顶点之间的联系，以及两种顶点之间的联系。这样的一般的网络被称为多层网络。其实，在网络上的导航问题的讨论中，我们已经悄悄地使用了包含熟人关系、地理位置关系、人和位置对应关系的网络。将来我们还会看到这样的多层网络在其他方面的例子，甚至它可以成为对一个学科的问题的基本的描述。例如，科学计量学的研究可以看作是包含：科学家、论文、学科概念三种顶点的网络的研究，这些顶点存在着例如学术传承关系、作者论文写作关系、论文工作在某概念上的关系等多种关系。一旦我们把研究对象和研究问题都表达成统一的语言，那么，这个学科的后续研究，就可以在这个框架下问，对于这些问题和数据，我们想要解决这样的问题，分析计算的方法有哪一些。当然，有必要的时候还可以拓展这个基本描述的框架。但是，有这样一个统一的描述是可以很大程度上推动这个学科的发展的。在这个意义上，科学计量学也可以看作是系统科学以及数据科学的具体对象领域。

4.3 作业

习题 4.1. 阅读Albert和Barabási的 Statistical mechanics of complex networks[102]，做阅读报告。

习题 4.2. 阅读吴金闪和狄增如的《从统计物理学看复杂网络研究》[103]，做阅读报告。

习题 4.3. 阅读汪小帆、李翔和陈关荣的《网络科学导论》[104]，做阅读报告。

习题 4.4. 阅读Barabási和Pósfai的 Network science[105]，做阅读报告。注意，做读书报告的时候一定要思考网络科学是什么的问题，并且用好 WHWM（主要信息是什么，怎么构建的主要信息，为什么要表达这个为什么这样表达，你觉得如何。更多关于读书的方法见 [23, 97]）方法。推荐用文字结合概念地图的形式来做读书报告。

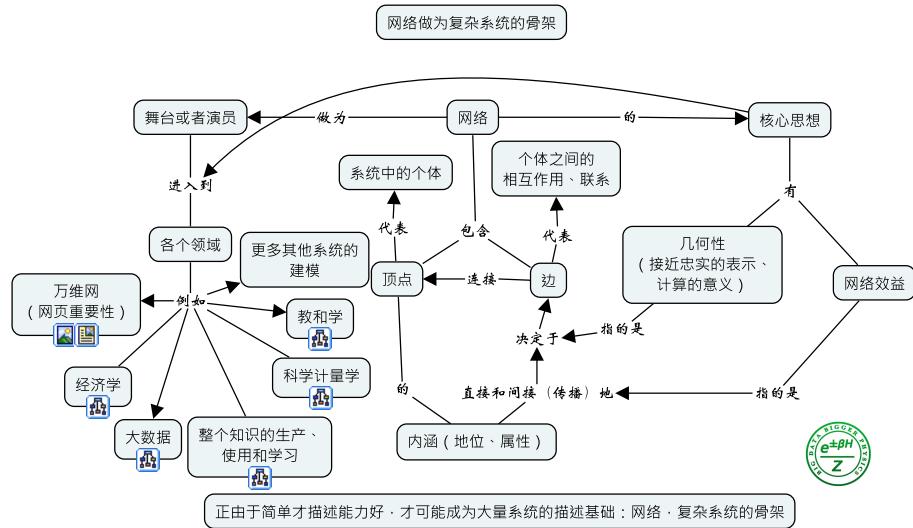


图 4.1: 一张图来体现什么是网络、网络的几何性和网络效应，以及网络在各个具体系统上的应用。

4.4 本章小结

在这一章中，我们学习了一点什么是网络，网络上有哪些典型分析计算方法。但是，其中更重要的是学习到为什么以及怎么样来把系统看作网络：网络一定要尽量通过连接关系来体现网络上的顶点和边的内涵，还要尽量做到是系统的忠实的表示，或者至少是所关心的现象的忠实的表示，网络最核心的精神是用联系来表示相互作用并且用基于这些性质提炼出来的几何量来描述和解决实际系统的问题——也就是网络的几何性，网络分析方法的核心是考虑直接联系和间接联系的综合——也就是网络效应。图 4.1 是对这一章的总结，其中那些具体系统的例子将来会再展开。

如果你仔细看，你会发现，本书的第二章里面有大量的网络，第三章实际上也是网络，将来我们还会有专门介绍网络的一章第十四章。因此，从内容篇幅上，就可以看出来，网络确实是系统科学的核心——体现在描述系统描述数据上，体现在分析方法上，体现在思维方式上。再加上网络描述很多时候是一个简化，扔掉了细节，抓住了主要联系。在这个意义上，我们称网络为复杂系统的骨架。

第五章 为什么要学习数学和物理

这一节的主要任务是对本书的第一篇做一个总结，并且为展开第二篇做一个铺垫。从内容上后者篇幅更多，因此放在第二篇里面其实更加合适。不过，考虑到放在第一篇可以起到吸引读者来看第二篇的作用，或者帮助不会去看第二篇的读者省钱的作用，就还放在第一篇了。那我们就先来总结第一篇，然后来说为什么要学习数学和物理。实际上，这个第一篇中的每一节都会在第二篇或者第三篇中展开一章或几章来论述。

5.1 第一篇总结：全书的结构

图 5.1 是我对全书结构的总结。首先，就像从目录结构中也能看到的一样，我把整本书分成了三个部分：系统科学导论、系统数理基础和系统分析方法。系统科学导论部分我们通过举例子和对例子的总结主要讨论了“什么是系统科学”，也就是系统科学的系统性和科学性。在科学性里面主要讨论了科学和数学的关系、实验和可计算的理论在科学中的地位、批判性思维在科学中的地位、统一性的追求在科学中的地位、系联性思考在科学中的地位。在系统性里面，我们主要关心相互作用的地位和从孤立到有联系从直接联系到间接联系从个体到整体的处理方法、多个个体相互作用导致的涌现性相变等特有的现象。同时，在第一篇里面，还用举例子的方式稍微提到了系统分析方法，例如系统图示法、广义投入产出分析、网络分析、临界现象等。这里要注意，读者在搞清楚每一个例子本身的内容之后，要对这个例子放在这张概念地图的哪个部分做一个思考。例如汉字学习的例子反映了系统科学的典型思维方式和分析方法，也就是系统科学的系统性，也是系统分析方法——广义投入产出分析的一个例子。

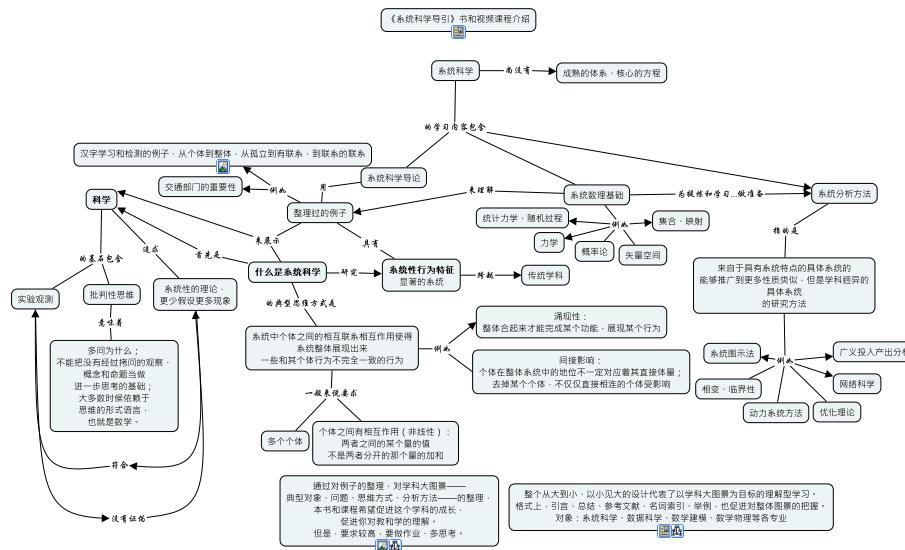


图 5.1: 反映了本书的主要内容和整体设计的概念地图。

在搞清楚每一个例子，例子和整体设计的联系的基础上，还要不断地来问自己，系统科学的学科大图景——也就是典型研究对象、研究问题、思维方式、分析方法、以及这个学科和世界还有其他学科的关系是什么这个学科如何服务于社会如何用于理解世界——到底是什么，每一个答案都有没有合适的理论和例子来说明。

不断地去拷问自己这些问题，同时不断地通过研究、学习甚至教学积累素材，积累对这些问题的思考，才能把这个学科学好、用好、发展好。

那么，问题就来了，系统科学没有自己的特定研究对象——我喜欢称之为横断学科，它的典型对象、问题、思维方式、分析方法从哪里来呢？一个重要的来源就是数学和物理，尤其在思维方式和分析方法上，在基本概念上。有的时候，它们也是系统科学研究对象和问题的来源。我们从这个角度再来看前面的例子。

从根本上说，系统科学是科学，而科学迄今为止最成功的例子是物理学，并且科学可以看作是把数学用于实际以及从实际中提炼和发展数学，因此，数学和物理学自然就是系统科学的基础和源头。不过，这个意义上的基础和源头对于所有的科学都成立。它们是化学的基础、生物学的基础、信息科学的基础、地球科学的基础等等等。在这里我们不再强调这个一般意义上的基础和源头。我们用前面的介绍过的例子来更具体地体现做为系统

科学的研究对象、思维方式和分析方法的源头的数学和物理。

5.2 数学和物理做为系统科学研究对象和问题的来源

系统科学的基本问题之一，结构的产生，就是从物理学的结构的产生，例如激光的产生、对宇宙热寂说的反思，中提炼出来的。见第二章关于热寂说和激光的部分。当然，来自于化学和生物的现象也是这个基本问题的重要来源。系统科学的基本问题，也是分析视角和方法之一，定态和相变，不管是平衡相变还是非平衡相变，还是动力学系统的相变，都是极大程度上来源于物理和数学，或者至少主要受到了数学和物理的推动。见第二章关于相变和动力学系统的部分。

5.3 数学和物理做为系统科学思维方式和分析方法的来源

在前两章的例子中，我们大量使用了矢量、矩阵的描述方法，我们还注意到很多问题需要问状态怎么描述、状态是否会变化、变化的原因是什么。前者是数学，而且是在物理学中大量使用的数学。基本物理学量都是通过矢量矩阵张量，当然还有称为标量的一般的数，来表达的。后者是力学的世界观。就是把任何系统都看作是有系统内部的因素和系统外部的因素作用下的状态的演化和测量的过程。这样的一个世界观在物理学的所有的子学科，例如经典力学、量子力学、电动力学、相对论、统计物理学的基础问题等等，里面都是理论的主线。在相变、投入产出分析、PageRank 算法和流平衡分析里面我们都采用了关联函数——时间空间关联函数、矩阵逆和矩阵本征值本征向量。将来我们还会知道这样的关联函数也被称为Green 函数，讨论的是在某个状态下一个位置一个时刻的**扰动** 如何引起另一个位置另一个时间的扰动。这样的分析技术在处理相互作用上有特殊的重要性和普遍意义。同时，我们也注意到，纯技术上，系统科学也可以从数学和物理学学习到很多，例如定态和动态系统的优化方法实际上就是来自于数学和

物理学的变分法和最小作用量原理或者说离散和连续变量的Lagrangian 乘子法的应用。

总结起来，首先，学习数学和物理是给自己的工具箱里面准备好一些结构，这样需要的时候可以用这些结构来描述世界，也增加一点从实际具体系统中提炼和发展一般数学结构的经验，这样有必要的时候也可以发展自己的工具箱。其次，学习数学和物理也使得自己对某些问题的知识和概念有比较深刻的认识，这样有必要的时候，在研究别的问题的时候，也可以用这些知识和概念。最后，熟悉一些用于物理的数学分析的技术，有的时候也是有帮助的。更何况有的时候在运用这些计算分析技术的时候，还有一些重要的思想，例如相互作用的重要地位和处理技术。领会这些思想，理解物理和数学学科的大图景，在具体系统的研究工作中，也是有帮助的。

5.4 本章小结

本章主要起到一个承上启下的作用，并且企图鼓动你来学一点数学和物理。

敬请期待下篇：系统科学的数学物理基础和系统科学的基本理论。

第二部分

系统科学的数学物理基础

在这一卷中，通过具体的数学物理的知识的学习，我们希望大家体会到：

1. 数学是关于结构的科学，是思维的语言，物理学是在世界与数学结构之间建立起联系。在本书中，具体包含群、线性空间的矢量和矩阵（抽象算符和表象）、概率、统计学、Dirac 符号等，以及通过具体例子——量子力学——来看科学和数学的关系。
2. 物理学除了知识，还有思维方式和分析方法，例如理想化（抓住主要特征、主要问题）、模型化、数学化，追寻产生变化的原因，对统一的形式的追求，例如分析力学的提供了力学的统一和更加方便的形式。
3. 将来在第三卷中我们还会了解到：
 - (a) 物理学关于具体系统的知识可以应用于系统科学。
 - (b) 物理学的数学形式可以应用于系统科学。
 - (c) 物理学的思维方式可以应用于系统科学。
 - (d) 物理学的分析方法，包含数学和物理学问题中发展出来的数值计算和数值模拟方法，可以应用于系统科学。

因此，在这一卷的数学物理的学习过程中，就要注意到这几个方面，注意思考哪些是物理学的具体知识、数学形式、思维方式、分析方法。每一部分的内容，我们都希望给你一点点学什么、怎么学、为什么要学的方向感，通过联系这部分内容和其他部分。其实，这本身也是系统科学：注意一个学科的知识，甚至好多个学科的知识，通过联系，构成了整体，而注意到这个整体有助于学得更好也更轻松。

如果你是数学、物理的学科背景的，那么，这部分内容基本上就是你已经知道的知识的重新组织和重新理解。这已经是一个挑战。如果你的学科背景离数学、物理比较远，甚至可能离经济学等社会科学也比较远，那么，这部分将是一个更大的挑战。你需要学习新的知识的同时，做好对知识的理解和组织。不过，挑战才使得人生更有意思，不是吗？

第六章 线性代数

矢量空间、线性变换和线性算符、线性方程与本征值问题、抽象矢量的Dirac 符号，是我们这本书中所有的内容的基础。从算术计算到代数表达式，从代数表达式到具体的三维空间的变量，从具体的三维空间的变量到抽象的不一定在物理空间中的矢量，我们对于数学对象的描述是一个不断地深入和不断地抽象化、一般化的过程。同时，所有的数学计算到最后确实还需要具体的数字来代表。沟通这个从具体到抽象，再从抽象到具体的桥梁就是矢量空间和线性代数。

前面我们已经在具体研究工作的例子里面看到广义投入产出(包含PageRank 算法)的思想和技术实际上就是逆矩阵和本征值本征向量。在那里，我们通过邻接矩阵或者概率转移矩阵的乘法来表示间接联系。我们还在word2vec的例子里面看到由于我们希望给一个词语一个可计算的数学表象，并且这个表象最好还能够做加减法能够计算两个词语相似程度，我们也用了矢量来表示。我们还会看到用矩阵和矢量来描述操作和状态的例子。例如，数学上如何建立一个计算如下过程的定态的表象：有两个盒子 A, B 里面分别放了红色白色 r, w 两个球，然后，我们每次从每个盒子里面拿出来一个球，以 q 的几率交换，以 $(1 - q)$ 的几率不交换两个球。以后我们会看到这个问题将来会表达成为一个Markov 过程状态转移矩阵的本征向量的问题。大量的现象都可以用矩阵和矢量这个数学结构来表示。

此外，数值线性代数也是其他所有的计算技术的基础之一（另外三个是Monte Carlo 方法、神经网络和 FFT——快速Fourier 变换）。如果你了解过高性能计算，你就会知道所有的高性能计算的软件的基础都是 BLAS 和 Lapack 这两个线性代数包。

这部分推荐阅读材料：Axler的 Linear algebra done right[106]，居余马

《线性代数》[107], 许以超的《线性代数与矩阵论》[108], Artin的 Algebra[109], 吴兆颜的《高等量子力学》 [110], 喀兴林的《高等量子力学》 [111]。

6.1 集合与映射的语言

数学是关于思维和逻辑的学科，是思维和逻辑的语言。我们思考问题的时候，自言自语的时候，需要以我们语言（通常是母语）作为外在的形式。但是，不同国家的个人都可以用自己的语言来思考，说明各种不同的语言实际上都不是最终的形式，而且可以实现更深层次的统一。但是，当我们做逻辑和数学思考的时候就不一样了，我们基本上用同样的语言：数学。在这里，我们没有再一次统一与翻译的过程。这个统一的符号形式、统一的研究的形式，使得我们科学上的交流变得简单。在一个没有数学化的学科里面，很多概念的理解取决于阅读者的再解释。这个再解释，在艺术的层面固然是好的，但是在科学的层面，却不是好事。顺便，这个语言表象背后到底是否也能找到一个数学结构的问题本身，也是一个很有意思的问题。很有可能，这个背后的统一是一个概念网络 [23]。

因此，学习数学，最最基本的目标是学到如何运用这个语言，让她成为所有学习者思考的基本媒介。其次，我们需要学会一些实现这个大目标（把数学作为语言）的一些基石——一些基本的概念和这些概念的表达式、例子、这些概念之间的关系。然后，我们需要学会一些计算技术。我们希望经过这部分数学的学习，除了提供学习以后其它科学的基础之外，还能够使得你对数学的观念有所改变：数学是描述这个世界的结构的语言。

我们先来看看我们最熟悉的自然数：随着描述对象的不同自然数扮演的角色至少分一下几种——记号，排序，距离（数量）。当我们描述的对象之间没有任何关系，仅仅表示它们是一个个体的时候，我们可以说某某东西是 1 号，某某东西是 3 号等等。这个就是给这些东西一个名字。这个功能称为自然数的记号功能。这个时候 3 号的物品和 1 号的物品之间没有其它更深层的关系，例如是否 1 号的重要性大于 3 号，或者 3 号的价格等于 1 号 3 倍。当物品之间确实有额外的关系的时候，他们对应着的自然数的含义也就不一样了，有了可能超过记号的其它功能。例如我们教材上的定理 1 和定理 3，第一当然表示记号功能，第二通常还表示定理 1 需要先讲，

定理 3 在逻辑上有放在定理 1 后面讲的需要。这个时候自然数还起到排序的作用。不过，这个定理 1 和定理 3 之间通常不意味着它们之间的逻辑距离是定理 1 和定理 2 之间的逻辑距离的两倍。因此，记号 1, 2, 3 之间不是等距离的。如果我们的物品之间还可以度量距离而不仅仅是先后关系，那么这个时候，自然数就有了更加丰富的含义，例如当我们描述两地之间的空间距离而且在每一个 10 公里的地方树立一块牌子来供行驶在两地之间的司机估计距离的参考的时候，我们的每一个牌子不仅表示记号，序号，还表示 3 号牌子和 1 号牌子之间确实是 20 公里。

在上面的例子中，我们的集合是相同的：自然数 \mathbb{N} 。但是，当用来描述物品的时候，在每一个对象集合上的含义是不一样的。那么，这个不一样是如何造成的呢？数学的语言告诉我们，这个不同之处在于集合上定义了不同的映射。第一种情况，这个集合的元素之间没有任何映射，也就是通常语言说的没有任何额外的关系。在第二个例子中，集合上定义了一种叫做序的映射（实际上是从 $\mathbb{N} \otimes \mathbb{N}$ 到 $\{1, -1\}$ 的映射，从 $\mathbb{N} \otimes \mathbb{N}$ 中取一个元素 (m, n) ，如果 $m > n$ 大于关系成立则取 1，否则取 -1）。这个时候，集合加上序的映射，就成了有序集，能够用来描述存在更深刻关系的物品了。在第三个例子中，集合上还定义了一种更复杂的映射元素之间的减法，也就是距离。减法这个运算是建立在 $\mathbb{N} \otimes \mathbb{N}$ 到 \mathbb{N} 之间的。以后我们会介绍更多的细节，这里只要体会到集合与映射是数学的基本语言就够了。

集合本身在数学的逻辑框架之中是不能通过其它数学结构来定义的，就是表示一个群体的对象。集合中的对象称为集合的元素。这个群体中的对象需要是明确的，也就是任意一个元素要么属于要么不属于这个集合。一般来说，还要求这个集合的元素是互异的、无序的。将来如果遇到需要描述相同的元素出现多次的情形，以及需要对元素排序的情形，都可以通过集合上的更多的结构也就是映射来描述。有了集合，我们来定义映射。

定义 6.1. 映射：集合 A 与集合 B 之间的关系 f ，如果对于任意一个集合 A 的元素 α 存在一个集合 B 的元素 β ，使得 $f(\alpha) = \beta$ ，就称为集合 A 与 B 之间的映射。

这个关系利用通用的数学符号体系可以表达成 $f|_{A \rightarrow B} : \forall \alpha \in A, \exists \beta \in B \text{ s.t. } f(\alpha) = \beta$ ，其中 $f|_{A \rightarrow B}$ 表示集合 A 与集合 B 之间的关系 f ， \forall 表示任意， \exists 表示存在， \in 表示属于， $s.t.$ 表示于是（英文的 such that）。有

有了集合与映射，我们就可以建立更丰富的数学结构了。

集合的运算，交、并、补，集合的卡氏积，幂集，都是非常重要的概念。我们假定读者已经学过，以后我们用得到的时候不再介绍。读者可以访问Wikipedia的“set”词条，回忆一下这些概念。

第一个我们要定义的映射是示性函数或者称为指示函数(indicator function)，记为 $I_A(x)$ 或者直接 I_A 。定义这个映射需要三个集合大集合 X , X 的某个子集 A , 以及集合 $\{0, 1\}$ 。 I_A 要完成的事情是：给定任何一个 X 中的元素 x , 我们想知道这个 x 是否属于 A 。 I_A 是一个从集合 X 到集合 $\{0, 1\}$ 的由子集 A 所诱导出来的如下映射,

$$I_A(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in A \\ 0 & \text{if } x \notin A \end{cases}. \quad (6.1)$$

将来很多时候我们要用到这个映射。

有了集合与映射的语言，我们才能把很多话说明白。例如，在日常语言中，我们说“一个苹果加上一个苹果是两个苹果”，好像是在做苹果的加法。但是，实际上，我们在做苹果数量的加法。如果是苹果的加法，我们应该得到“一个苹果加上一个苹果等于另一个（更大的或者更小的）苹果”。这样的事物的加法，在经典世界中，实际上，我们根本没有遇到过。我们体验到的都是事物数量的加法。由于集合的语言，我们就容易说明白了：如果操作定义的苹果集合 $A = \{a_1, a_2, \dots\}$ 上，那么加法映射应该是 $f(a_i, a_j) \in A$ ，也就是必须是某一个 $a_k = f(a_i, a_j) \in A$ 。然而，实际上，我们的加法是这样的 $f(n, m) \in \mathbb{N}, \forall n, m \in \mathbb{N}$ ，其中 $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$ 是苹果数量的集合——自然数集，而在苹果集合上不满足这个要求。

集合是我们要学会的，并且能够用来描述事物的第一种数学结构，最没有结构的数学结构。

6.2 从群到线性空间

单纯地一个集合 A 到 A 上的映射是平庸的，最多只能建立集合元素之间的对应关系。一个稍微不平凡一点的映射，能够描述更丰富的现实的映射，是集合自身的卡氏积到集合的映射，或者集合的幂集到自身的映射。

这里我们讨论前者。我们将从这个映射开始构建现代数学的大厦的一部分：线性空间和线性映射。从计算的角度来说，线性空间上的运算是所有的其它数学计算的基础。从数学在其他学科的应用来说，线性代数和微积分是数学成为其他很多科学的基础和基本语言的原因之一。从数学理论的角度来说，线性空间的结构和分析方法是其它现代数学的基础。在这个意义上，微积分，或者说分析，都赶不上线性空间对于数学的重要性。

6.2.1 群、半群

集合 A 与 B 的卡氏积 $A \otimes B$ 是指这样的集合 $A \otimes B \triangleq \{(\alpha, \beta), \forall \alpha \in A, \beta \in B\}$ 。从一个集合 G 开始，考虑一个从 $G \otimes G$ 到 G 的映射 \oplus 。这个映射，记为 $\oplus|_{G \otimes G \rightarrow G}$ 在一些最基本的要求下成了整个数学的基础：群。第一，我们要求封闭性，也就是说 $f \oplus g \in G, \forall f, g \in G$ 。如果封闭性不满足，就连映射都构不成了。当然，实际上在描述现实的时候（以后我们会看到这样的例子），如果某些元素经过 \oplus 运算以后不再属于这个集合，我们经常扩充这个集合 G 使得运算封闭。在这个意义上，运算，也就是关系，比集合的元素重要。关系，也就是运算，才是对现实世界的描述，而不是集合。集合在没有定义运算的时候，是平庸的。第二，我们要求集合与运算满足如下三条。

定义 6.2. 群：集合 G 配上映射 $\oplus|_{G \otimes G \rightarrow G}$ 称为群，如果满足：(1) 结合律， $\forall f, g, h \in G, (f \oplus g) \oplus h = f \oplus (g \oplus h)$; (2) 集合存在单位元 $\underline{0}$ ，s.t. $\underline{0} \oplus g = g, \forall g \in G$; (3) 任何元素 g ($\forall g \in G$) 存在逆元 f ($\exists f \in G$)，s.t. $f \oplus g = \underline{0} = g \oplus f$ 。

这个时候，映射 $\oplus|_{G \otimes G \rightarrow G}$ 称为群乘。如果只有条件 (1) 得到满足，则称 G (配上 \oplus) 为半群。群这个概念是对很多数学运算进行了抽象，寻找这样的运算的最基本的要求，得到的。以后我们会了解更多这个定义的含义。这里，我们先看见我们所熟悉的整数配上加法运算构成了群，有理数去掉 0 以后配上乘法构成了群。除了非常特殊的情况，对现实世界的物体的操作，基本上我们会保留某一个层次的不变性。例如翻转硬币的时候硬币还得是硬币，改变的仅仅是硬币哪一面向上。再例如考察一个天体的运动，改变的是天体的位置而不改变天体的构成。再如考察一个化学反应，我们改变的是电子的构型，而不改变原子核内的结构。再如考察核裂变反应的

时候，我们改变的是核子的构型，而不改变核子自身。如果我们把所有的改变这个物体状态又保持某个层次的不变性的操作看成一个集合，那么这个集合显然对于连续的两个操作的结果是有定义的，也就是说连续两个操作的结果必须是这个集合中的某一个操作。这个就是群乘映射的原型。这也是为什么封闭性是最重要的要求的原因。有了这个封闭性之后，我们就可以把对物体状态的研究转变成为对操作的研究：所谓物体任意时候的状态，就成了从某一个固定的初始状态出发，每次作用一次这些操作算符中的一个。也就是，算符的序列完全定义和替代了物体状态的序列。然后，我们将来总是要作进一步的计算的，例如 g, g^2, g^3, g^4 等等，如果我们没有结合律，那么 g^3 就可以解释成 $g^2 \oplus g$ ，也可以解释成 $g \oplus g^2$ ，两者就有可能不一样。这个时候，这些基本的运算就会变得非常复杂。于是我们看见，封闭性和结合律，是很多运算非常重要的性质。实际上，我们会看见，正是一个对象上的这个操作算符所构成的集合的结构，大多数时候决定了这个物体的行为。在这个意义上说，群论是所有物理理论的基础：所有的物理对象都有一个状态，对状态的操作的集合，都构成群，而这个群的结构决定了这个物理对象的基本行为。

例 6.1 (\mathbb{R} 实数加法群). \mathbb{R} 实数加法群：集合 \mathbb{R} ，群乘定义为实数加法。封闭性，结合律，零元（0）和逆元（ x 与 $-x$ ）都存在。

例 6.2 ($\mathbb{R}/\{0\}$ 实数乘法群). $\mathbb{R}/\{0\}$ 实数乘法群：集合 $\mathbb{R}/\{0\}$ ，群乘定义为实数乘法。封闭性，结合律，零元（1）和逆元（ x 与 $\frac{1}{x}$ ）都存在。

实数集合上的这两个运算是非常重要的。实数集合上由于同时有这两个运算的存在，其结构要比群丰富的多，因此被称为域。这里给出域的定义，但是我们不详细讨论。

定义 6.3. 域：集合 \mathbb{F} 上定义了加法运算 $+|_{F \otimes F \rightarrow F}$ 和乘法运算 $\times|_{F \otimes F \rightarrow F}$ ，其中 $F, +$ 和 $F/\{0\}, \times$ 构成交换群，其中 $\underline{0}$ 是加法运算的单位元，而且加法和乘法之间满足分配律： $(a+b) \times c = a \times c + b \times c$ 。

可以验证有理数、实数、复数都满足这个条件。以后在乘法运算中，我们经常省略乘号 \times 。如果我们把加法运算放在有限大小的整数集合上，例如从 -100 到 100，群乘的封闭性就得不到满足。但是，非常简单地我们就可以扩大这个集合，使得其满足封闭性。例如，通过把上限加上 1，并且不

不停地加下去，把得到的所有的数以及它们的逆元合并上原来的集合构成一个新的集合。如果我们把域关于乘法的要求放在整数集合上，我们就会发现整数乘法运算的逆元不在整数集合之中，于是我们才需要把整数扩大成有理数。

例 6.3 (Z_2 群). Z_2 群：考虑一个理想硬币的状态， $\{\uparrow, \downarrow\}$ ，分别代表正面与反面。从现实经验来说，在不破坏这个硬币的结构的要求下，这个系统的可能操作包含 $\{I, X\}$ 分别代表不翻转和翻转。例如翻转算符满足 $X \uparrow = \downarrow$ ，而且 $X \downarrow = \uparrow$ 。不翻转算符保持硬币的状态。于是，我们可以发现集合 $\{I, X\}$ 存在群乘 $I \oplus I = I, I \oplus X = X, X \oplus I = X, X \oplus X = I$ 。可以验证这个 \oplus 确实满足群乘的要求。这个具有两个元素的群称为 Z_2 群。这个两两元素之间乘法的结果称为乘法表。

在上面的例子中，我们的群的元素是一个一般的操作， I, X ，而不是整数、实数等可计算的对象。目前为止，我们通过查询乘法表可以知道这两个元素之间的所有的运算的结果。但是，我们的每一次运算都必须依赖于查询乘法表，而不能利用我们已经熟悉的整数、实数、复数等等计算规则简单明确的数学对象。由于群的元素的一般性和抽象性，如果有一个关于群的表示，在这个表示下，群的抽象乘法计算，真的就成了我们熟悉的数的乘法，就好了。这就是群的表示理论的任务。群 G 的一个表示，就是为 G 中每的一个群元 g 找到一个矩阵的形式 \hat{g} ，使得 $f \oplus g$ 的矩阵形式正好是矩阵乘法 $\hat{f}\hat{g}$ 。如果有了这个表示，我们抽象的计算就都可以用具体的数学计算（在这里是矩阵运算，注意实数也可以看作是矩阵）来完成了。这个会使我们的研究大大简化。对于已经学习过线性代数的读者，我们布置一道作业题。没有学习过线性代数的读者，请在本章结束以后回过来再来完成这个作业题。

习题 6.1. 一个正三角形 $\triangle ABC$ ，经过 BC 边上的中位线翻转之后成了三角形 $\triangle ACB$ 。同样的，这个三角形还可以围绕另外两条中位线做翻转。然后，可以考虑连续的这样两个翻转组合起来的效果。请找出来这些翻转与这些翻转的所有的组合的集合，并计算出乘法表（任意两个翻转的组合相当于哪一个翻转），然后用矩阵来表示这些翻转。

也许你需要注意，两个翻转合起来的效果和其顺序有关，反过来的效果和原来的效果可能不一样，也就是 $f \oplus g$ 不一定等于 $g \oplus f$ 。如果群乘可

交换，这样的群称为交换群。

为了理解我们下一步要学习的线性空间，我们关于群论的知识只需要这么多，尽管更多一点的群论的知识对于学习数学、物理都是有意义的。

6.2.2 线性空间的矢量

也许矢量对于你来说意味着一个从原点出发到空间某一个位置的位置矢量，或者在力学里面在质点（力学里面把物体去掉形状大小质地颜色等等各种属性之后留下的代表物体位置的质量为 M 的点）上放上一个箭头表示其速度或者受力的矢量，或者是线性代数课程告诉你的一个矢量就是在某一套坐标系下写成各个分量形式的 $v = (v_1, v_2, \dots, v_N)^T$ 。确实，这些都是矢量的表现形式。但是矢量的概念要远远比这些直观的矢量具有一般性。例如，实数域上的函数 $\{f(x)\}$ 配上合适的运算，也可以成为矢量。物体的颜色的集合，配合上合适的运算也可以成为矢量。上面例子中硬币的状态，配上合适的运算，再给运算找到现实物理系统的对应（就是运算出来的结果，例如 $\uparrow \oplus \downarrow$ ，也是某一个物理系统的状态），也可以成为矢量。

那么一个矢量成为矢量的最重要的特征是什么呢？矢量能够表示方向，能够被放大缩小（放大缩小就意味着在这个矢量代表的方向上的长度发生了变化），两个矢量放在一起能够做叠加运算。如果要我们要制作一些矢量的模型的话，只要我们做出来的满足上面两点要求，基本上就能够看成矢量的模型。例如，矢量自身我们用无限可伸缩的电视天线（实际上只能一节一节伸缩，但是我们可以要求节足够小足够密。实际上总长度也有限），矢量的加法可以用头尾相连的方式（也就是平行四边形法则）。当然，这个模型实际上是基于空间矢量的概念的，不够一般性。这里，我们通过这个模型，仅仅想告诉大家，矢量的放大缩小运算和两个矢量的加法，是矢量空间最重要的性质，而如何定义这两个运算使得矢量具有线性性（以后我们会看见，这个线性性就是指矢量的这两个运算之间满足线性分配律）就是整个矢量的概念的核心。

定义 6.4. 数域 F 上的矢量：集合 V 上定义了加法运算 $+|_{V \otimes V \rightarrow V}$ 和数乘运算 $\cdot|_{F \otimes V \rightarrow V}$ 满足下列属性：

(1) 加法运算“+”构成交换群；

- (2) 加法运算“+”与数乘运算“.”满足双向分配律: $a \cdot (\mu + \nu) = a \cdot \mu + a \cdot \nu$,
 $(a + b) \cdot \mu = a \cdot \mu + b \cdot \mu$;
- (3) F 上的乘法单位元与 V 上的运算的统一性 $1 \cdot \mu = \mu, \forall \mu \in V$;
- (4) 混合结合律, $ab \cdot \mu = a \cdot (b \cdot \mu)$, 这实际上是保证矢量与数的数乘和数域上的乘法的一致性。

注意, 在这里“数域”保证了数之间的加法和乘法要满足作为一个“域”的基本要求。这里, 我们用拉丁字母表示数域 F 中的元素, 用希腊字母表示矢量集合 V 中的元素。当我们利用这个约定之后, 数乘运算的符号“.”就可以被省略, 数乘的数既可以被放在左边, 也可以被放在右边。在这个定义中, 双向分配律是很重要的, 是线性性的保证。所谓一个运算的线性性就是当被操作的对象发生了线性的变化, 那么操作结果也相应会发生线性的变化: $\Gamma(a\mu + b\nu) = a\Gamma(\mu) + b\Gamma(\nu)$ 。这里这个 Γ 运算可以是数乘自己。例如 $c \cdot$ 。为了保持数域上的运算和矢量集合上的运算的一致性, 我们还需要保证 F 上的加法零元与 V 上的加法零元的统一性 $0 \cdot \mu = O, \forall \mu \in V$ 。下面我们会证明, 这一条实际上是可以有其它要求推出来的。

例 6.4 (证明举例 $0 \cdot \mu = O, \forall \mu \in V$) 证明 $0 \cdot \mu = O, \forall \mu \in V$: 我们先证明 V 上的加法零元是唯一的。假设有了多个零元, 取其中的任意两个 O_1, O_2 , 我们按照加法构成交换群得到, $O_1 = O_1 + O_2 = O_2$ 。因此, 这些零元都是相同的。接着我们证明 0μ 就是其中一个零元。 $\forall \mu \in V, 0\mu = 0\mu + O = 0\mu + (\mu - \mu) = (0 + 1)\mu - \mu = \mu - \mu = O$ 。

最后一行, 我们首先利用了 V 中加法零元的性质, 然后利用了任何元素和它的逆元的和等于零(逆元的存在性), 然后利用了 V 中的加法结合律, 接着利用了 F 中加法零元的性质, 最后又利用了 V 中加法逆元的性质。可以看到这个简单的证明实际上利用了很多前面给出的矢量空间的定义的性质。实际上, $1 \cdot \mu = \mu, \forall \mu \in V$ 就没法用这些性质证明。鼓励你试试。直观的原因是如果我们强行地将 V 中的所有元素放大 2 倍以后再看成新的集合 V' , 这个集合还是矢量集合, 但是在这个新的矢量集合上, 就没有 $1 \cdot \mu = \mu, \forall \mu \in V'$ 而是 $0.5 \cdot \mu = \mu, \forall \mu \in V'$ 。也就是说数乘这个运算实际上把矢量放大多少倍是无所谓的, 必须强行规定一个。当然, 这个时候一个好的规定的选择就是使得 F 上的乘法单位元的性质得到保持。

习题 6.2. 证明 $aO = O$ 以及 $(-1)\mu = -\mu$ 。

例 6.5 (N 维欧氏空间矢量). N 维欧氏空间中所有从原点出发的位置矢量构成线性空间。其中数乘和加法可以采用分量的形式定义。因为可以写成分量的形式，验证这个空间是矢量空间非常简单。

例 6.6 (2 维欧氏空间可微函数在某点的切线). 2 维欧氏空间中所有经过原点的可微函数在原点的切线所代表的矢量构成线性空间。这个矢量可以写成分量的形式，例如曲线 $(x(t), y(t))$ ，曲线在原点的切线为 $\left(\frac{dx(t)}{dt}, \frac{dy(t)}{dt}\right)$ 在原点取值。验证这个空间是矢量空间也不难。

例 6.7 (1 维欧氏空间的无穷可微函数). 1 维欧氏空间上所有无穷可微函数构成线性空间，其中加法数乘的定义就是通常的加法与数乘。首先，我们来看一看加法的封闭性。取任意两个无穷可微函数 $f(x), g(x)$ 显然 $af(x) + bg(x)$ 还是无穷可微的，所以封闭。然后我们可以简单验证零元和逆元的存在性，加法结合律和双向分配律也不是问题。混合结合律，单位元统一性也很简单。

例 6.8 (1 维欧氏空间的平方可积函数). 1 维欧氏空间上所有平方可积函数构成线性空间，其中加法数乘的定义就是通常的加法与数乘。零元和逆元的存在性，加法结合律和双向分配律、合结合律，单位元统一性都比较简单。我们来看看加法的封闭性。取任意两个平方可积函数 $f(x), g(x)$ ，我们需要证明 $af(x) + bg(x)$ 还是平方可积的，所以封闭。证明过程大致如下 $(af(x) + bg(x))^2 = a^2f^2(x) + b^2g^2(x) + 2abf(x)g(x) \leq 2a^2f^2(x) + 2b^2g^2(x)$ ，后者可积，因此前者也可积。

为了以后可以查阅，我们把域 F 上线性空间 V 的定义中的所有要求重新写在这里。而现在开始，把满足这些要求的集合以及集合上的运算就称为矢量空间或者线性空间。

1. F 本身是一个域：元素的加法乘法有定义，且满足域的要求
2. 加法与数乘的封闭性： $\mu + \nu \in V, a\mu \in V, \forall \mu, \nu \in V, a \in F$
3. 加法交换律： $\mu + \nu = \nu + \mu, \forall \mu, \nu \in V$
4. 零元存在： $\mu + O = \mu, \forall \mu \in V$

5. 逆元存在: $\forall \mu \in V, \exists \nu \in V. \ s.t. \ \mu + \nu = O$
6. 加法结合律: $(\mu + \nu) + \eta = \mu + (\nu + \eta), \forall \mu, \nu, \eta \in V$
7. 双向分配律 $a(\mu + \nu) = a\mu + a\nu, (a + b)\mu = a\mu + b\mu, \forall \mu, \nu \in V, a, b \in F$
8. 数乘单位元一致性: $1\mu = \mu, \forall \mu \in V, \forall \mu \in V$
9. 混合结合律一致性: $(ab)\mu = a(b\mu), \forall \mu \in V, a, b \in F$

我们已经看到，这个线性空间的定义就是一个交换群加上一个数域，然后定义好相容的一致的两者结合的操作：数乘。

到现在为止，我们的矢量之间只能做加法与数乘两种运算，我们所熟悉的矢量之间的夹角和点积（也称作内积），矢量的长度，还没有定义。下面，我们来看一下矢量长度和矢量之间的内积的抽象定义是什么。以后我们会看到，适量的内积非常重要，有了内积我们就可以定义长度和夹角，而长度和夹角往往是我们能够测量的量。一个抽象的矢量，例如一个无穷可维的函数，例如一个平方可积的函数，经常是难以直接测量的。

6.2.3 矢量内积

一个内积的是指从 $V \otimes V$ 到 F 的映射，通常记为 (\cdot, \cdot) ，其中两个“.”就是留给两个矢量的位置，满足以下要求：

1. 封闭性: $(\mu, \nu) \in F, \forall \mu, \nu \in V$
2. 线性性: $(\mu, av + b\eta) = a(\mu, v) + b(\mu, \eta), \forall \mu, v, \eta \in V, a, b \in F$
3. 长度大于等于零: $(\mu, \mu) \geq 0, \forall \mu \in V$, 取等号当且仅当 $\mu = O$
4. 复共轭: $(\mu, \nu) = (\nu, \mu)^*, \forall \mu, \nu \in V$

前面三条的动机很明确，最后一条的目的需要好的反例才能说明白。在我们找到合适的反例之前，只能够先记住了。前面三条之中，线性性是非常重要和独特的。将来我们会在 V 上的线性算符与内积之间建立非常密切的联系，而这些联系的基础都是内积的线性性。当我们把线性性与复共轭结合

之后，我们看到，内积对于左边的矢量的线性性与右边的矢量的线性性不太一样：

$$(av + b\eta, \mu) = (\mu, av + b\eta)^* = a^*(v, \mu) + b^*(\eta, \mu). \quad (6.2)$$

当然，如果数域 F 中， $a^* = a, \forall a \in F$ ，那么实际上内积对左边和右边的矢量的线性性就是相同的。当 F 中一个元素的复共轭不再回到这个元素，这就不一样了。

有了内积这个映射之后，我们来看 (\cdot, μ) 和 (μ, \cdot) 是什么。我们发现，这两个东西都可以看成是一个从 V 到 F 的映射，它需要一个 V 的元素 ξ 的输入，产生一个 $(\mu, \xi) \in F$ 的输出。而且，这个映射与 V 的元素是一一对应的：有一个 $\mu \in V$ 就有一个 (\cdot, μ) 和一个 (μ, \cdot) 。

记所有的这样的 (\cdot, μ) 和 (μ, \cdot) 的集合为 V^{**} 和 V^* （这里符号上有不完全严格的地方）。我们发现 V 与 V^{**} 以及 V^* 之间存在着一一到上的可逆映射，也就是有一个 V^{**} (V^*) 中的元素就有一个 V 中的元素。对于 V^{**} (V^*) 中的元素，我们来看一看保持与 V 中的元素的加法与数乘一致的它自己的加法与数乘是什么样子。

我们说 $a(\cdot, \mu) + b(\cdot, v) = (\cdot, a\mu + bv)$ 。这个定义第一满足所有的线性空间的要求，第二满足与 V 上的加法与数乘的一致性。首先，这个运算是封闭的： $a\mu + bv \in V$ 。其次，我们来检验一下分配律。对于任意 V 中的元素 η ，我们有 $a(\eta, \mu + v) = a(\eta, \mu) + a(\eta, v)$ ，因此， $a(\cdot, \mu + v) = a(\cdot, \mu) + a(\cdot, v)$ ，因此满足一侧的分配律。另外一侧也能类似证明。其它性质就不一一证明了。在这里我们看到，实际上 V^{**} 上的加法和数乘实际上就是 V 的加法和数乘。我们说 V^{**} 不仅与 V 一一对应，连所有的运算都一模一样。于是，我们发现，实际上 (\cdot, μ) 就是 μ 的另一个写法，也就是说 V^{**} 就是 V 。

我们再来看看 V^* 与 V 的关系，如图 6.1。我们定义 V^* 中的加法与数乘： $a(\mu, \cdot) + b(v, \cdot) = (a^*\mu + b^*v, \cdot)$ 。这个定义第一满足所有的线性空间的要求，第二满足与 V 上的加法与数乘的一致性。首先，这个运算是封闭的： $a^*\mu + b^*v \in V$ 。其次，我们来检验一下分配律。对于任意 V 中的元素 η ，我们有 $a(\mu + v, \eta) = a(\mu, \eta) + a(v, \eta)$ ，因此， $a(\mu + v, \cdot) = a(\mu, \cdot) + a(v, \cdot)$ ，因此满足一侧的分配律。另外一侧也能类似证明。其它性质就不一一证明了。其次，我们来看，如果我们把这个 V^* 中的矢量映射回 V 中的矢量，我们看看加法和数乘还是不是就是 V 的加法和数乘。为了解决这个问题，我们考虑

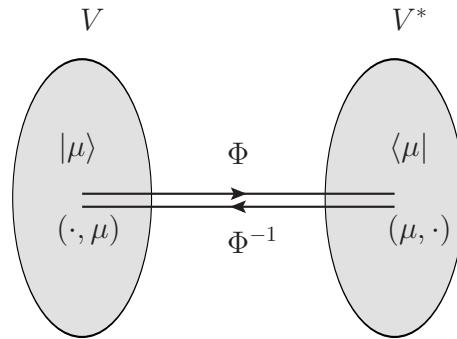


图 6.1: 运用矢量空间的内积, 可以建立一个矢量空间 V 和对偶矢量空间 V^* 之间的一一映射 Φ 。

V^* 与 V^{**} 的关系, 反正 V^{**} 就是 V 。我们发现 $(\mu, \cdot) \in V^*$ 与 $(\cdot, \mu) \in V^{**} = V$ 的关系就是把矢量从放在内积算符的左侧改成放在内积算符的右侧。同时由于这个变换, 矢量空间 V^* 中的元素的数乘需要把数变成复共轭之后再与矢量乘在一起。这个意义上, 我们把 $V^{**} = V$ 中的元素称为右矢量, 而把 V^* 中的元素称为左矢量。为了简化记号, 记右矢量, 左矢量分别为

$$(\cdot, \mu) \triangleq |\mu\rangle, (\mu, \cdot) \triangleq \langle \mu|. \quad (6.3)$$

同时内积的记号也可以相应记为

$$(\nu, \mu) \triangleq \langle \nu | \mu \rangle. \quad (6.4)$$

有了这个记号, 称为 Dirac 符号, 也称为 bra-ket 记号, 之后, 我们发现, 其实抽象矢量与数域 F 中的数的差别更明显了, 数就是通常的记号 a, b, c , 矢量就是加了尖括号的 $|\mu\rangle, |\nu\rangle$ 等等, 而不依赖于拉丁字母和希腊字母的约定。所以, 从现在开始, 我们所有的矢量都用 Dirac 符号来表示。

这种用加括号明确标出矢量符号的方式还有一个好处: 明确区分矢量与矢量在某坐标系下的分量。例如, 以前我们经常以分量的形式来写下面的矢量,

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (6.5)$$

这个时候, 我们默认 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 与 $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 是两个坐标基矢, 然后整体矢量 $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ 是这个两个基矢叠加起来的结果。这当然是对的, 但是, 换一个理解会更好

更明确: $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 与 $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 是两个坐标基矢在某一套坐标系下的投影分量形式, 而 $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ 是这个合起来的矢量在同样的坐标系下的分量形式。例如, 记这个坐标系的两个正交归一 (任意两个基矢 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 之间满足 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$) 基矢分别为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$, 则 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 可以看做是

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow [|0\rangle \quad |1\rangle] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle. \quad (6.6)$$

其中 $[|0\rangle \quad |1\rangle]$ 是两个基矢排成的行矢量。于是, 一般地,

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow [|0\rangle \quad |1\rangle] \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a|0\rangle + b|1\rangle. \quad (6.7)$$

在这个符号系统里面, 矢量就是抽象的矢量, 通常线性代数里面的矢量记号是矢量在某坐标系下的分量形式。例如内积不再是坐标分量之间的运算, 而是矢量之间的运算,

$$\begin{aligned} & (a^* \langle 0 | + b^* \langle 1 |) (a |0\rangle + b |1\rangle) \\ &= a^* a \langle 0 | 0 \rangle + a^* a \langle 0 | 1 \rangle + b^* a \langle 1 | 0 \rangle + b^* b \langle 1 | 1 \rangle \\ &= a^* a + b^* b. \end{aligned} \quad (6.8)$$

也就是说运算不在分量的层次, 而在抽象矢量的层次。这个符号系统还有一个好处: 没有抽象矢量记号之前, 矢量的定义是从坐标变换下的分量的变换形式定义的, 说坐标变换下分量不变叫做标量, 分量如何如何变化的叫作矢量, 如何如何如何变化的叫做张量。这当然, 也是正确的定义。但是, 就好像你识别出一个朋友的脸, 你肯定不是通过他/她的脸如何变化来识别的, 而是通过某些内在特征来识别的。如果通过坐标变换下分量的变换形式来定义矢量, 我们就不能写下一个矢量的等式, 而只能够写下分量的等式, 例如对于新坐标的分量形式 v' 通过某一个相似变换与旧坐标下的形式联系起来,

$$v' = S v. \quad (6.9)$$

而我们现在，抽象矢量的记号告诉你，抽象矢量是有定义的，我们能够写下来矢量的等式

$$\sum_j v'_j |e'_j\rangle = |v\rangle = \sum_i v_i |e_i\rangle, \quad (6.10)$$

于是，自然的我们就有，

$$v'_k = \sum_j v_j \langle e'_k | e_j \rangle, \quad (6.11)$$

于是，

$$S_{kj} = \langle e'_k | e_j \rangle \quad (6.12)$$

而且矢量分量的定义就是矢量与基矢之间的内积，

$$v_k = \langle e_j | v \rangle. \quad (6.13)$$

抽象矢量记号就是那个可以写下矢量等式的内在属性，而分量形式的记号是做不到的。有了这个记号，我们终于可以说：矢量在坐标变换下是不变的，标量和张量在坐标变换下也是不变的，改变的仅仅是分量形式。这个抽象矢量记号对于我们后面的内容非常重要，所有的矢量将来都会写成这个抽象形式。只有这样，我们认为，才能够形成足够深刻的认识：**矢量不是数**，数仅仅是矢量在某坐标系下的分量形式。

有了这个抽象记号以后，我们还可以讨论以下符号的意义：给定 $\mu, \nu \in V$ ，定义

$$\hat{A}_{\mu\nu} = |\mu\rangle \langle \nu|. \quad (6.14)$$

用通常的线性代数的语言，这个东西是一个矩阵， $|\mu\rangle \langle \nu|$ 表示一个列向量（右矢）乘上一个行向量（左矢），得到一个矩阵。按照我们新的记号系统，我们来看如果我们把这个东西作用在 V 的元素上，我们的到什么。

$$\hat{A}_{\mu\nu} |\eta\rangle = |\mu\rangle \langle \nu| \eta \rangle \in V. \quad (6.15)$$

所以， $\hat{A}_{\mu\nu}$ 是 V 到 V 的一个映射。同样的，如果我们把左矢放在这些东西的左边，我们看到 $\hat{A}_{\mu\nu}$ 是 V^* 到 V^* 的一个映射。如果我们考虑把所有的这样的映射放在一起构成的集合 $\{|\mu\rangle \langle \nu|, \forall \mu, \nu \in V\}$ ，我们甚至可以讨论这个集合上的与 V 相一致的加法与数乘。这个就是 V 上的线性算符构成的集合。我们来看一下这个集合的结构。

6.3 线性算符

这一节我们主要解决如何在一个线性空间中选择合适的基矢的问题。这个问题与线性空间上的线性算符是连在一起的。我们先讨论线性算符。

定义 6.5. 线性算符： $\hat{A}|_{V \rightarrow V}$ 是一个从线性空间 V 到 V 的线性映射满足如下线性性要求：

$$\hat{A}(a|\mu\rangle + b|\nu\rangle) = a\hat{A}|\mu\rangle + b\hat{A}|\nu\rangle. \quad (6.16)$$

记所有的这样的线性算符的集合为 $\mathcal{O}(V)$ 。

可以看到上一节末尾提到的算符 $\hat{A}_{\mu\nu} \in \mathcal{O}(V)$ 。如果已经在 V 里面确定一组 N 个（先假设 N 有限，无限的情况另说）正交归一基矢 $\{|j\rangle\}$ ，那么所有的矢量都可以在这一套基矢下展开，那么给定任何一个算符 \hat{A} ，只要知道 \hat{A} 如何作用在所有的基矢上，就知道了 \hat{A} 如何作用在所有的矢量上：

$$\hat{A}|\mu\rangle = \hat{A} \sum_j \mu_j |j\rangle = \sum_j \mu_j \hat{A} |j\rangle. \quad (6.17)$$

也就是说，我们只需要知道 $|A_j\rangle = \hat{A}|j\rangle$ 这个算符。如果我们把这个矢量也做同样基矢下的展开，其分量为，

$$|A_j\rangle = \sum_k A_{kj} |k\rangle. \quad (6.18)$$

由于某些我们将来会明白的原因，这里我们把分量记为 A_{kj} 而不是 A_{jk} 。总结一下，如果知道了所有的 A_{kj} 我们就知道了 $|A_j\rangle$ ，于是相当于知道了 \hat{A} 作用在任何一个矢量上的结果，也就是知道了 \hat{A} 。这个时候，我们把所有的这些 A_{kj} 记录成一个矩阵，

$$A = (A_{kj})_{N \times N}. \quad (6.19)$$

我们发现，如果我们得到了这个矩阵的所有元素，那么我们就实际上知道了算符 \hat{A} 。从这个意义上说，矩阵就是我们的算符在某一套坐标下的表现形式。

这里，我们为了以后计算形式上方面，证明一个恒等式。有了这个恒等式，上面的语言和计算结合的说明可以用一行公式写出来。对于一套完整

的正交归一基矢 $\{|j\rangle\}$,

$$I = \sum_j |j\rangle \langle j|. \quad (6.20)$$

这个利用原来线性代数的语言很好理解，在一套正交归一基矢下，只有对角元的而且对角元素值为 1 的矩阵，必然是单位矩阵。现在证明如下。对任意 V 中的矢量 $|\mu\rangle$ ，我们证明这个 I 作用的结果是 $I|\mu\rangle = |\mu\rangle$:

$$I|\mu\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j| |\mu\rangle = \sum_j \mu_j |j\rangle = |\mu\rangle. \quad (6.21)$$

有了这个等式之后，我们来重新算一下算符 \hat{A} 的分量形式，

$$A = \sum_{kj} |k\rangle \langle k| A |j\rangle \langle j| = \sum_{kj} A_{kj} |k\rangle \langle j|. \quad (6.22)$$

从这个表达式，我们非常清楚地看到矩阵 A 与算符 \hat{A} 的联系：矩阵元素是抽象算符在这一套基矢下的分量形式。进一步，由于任何一个线性算符都可以用这堆 $N \times N$ 个算符 $\{|k\rangle \langle j|\}$ 线性叠加，如果我们定义算符集合 $\mathcal{O}(V)$ 上的加法运算就是这个加法，数乘就是这个数乘（公式 (6.22) 同时代表了加法和数乘的定义）的话，我们可以证明 $\mathcal{O}(V)$ 构成了 $N \times N$ 维的矢量空间。定义要求的各个条件这里就不检验了。我们甚至可以定义这个空间上的内积，例如

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \text{tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B}), \quad (6.23)$$

其中一个算符的共轭 A^\dagger 的定义我们下面会讨论。在定义之后，读者可以检验这个内积满足所有的内积的定义的要求。

6.3.1 共轭算符

\hat{A} 是 V 到 V 的映射，由于我们有 V 到 V^* 存在一到上的映射 Φ ，于是，通过 \hat{A} ，见图 6.2，我们可以构造一个 V^* 到 V^* 的映射，记为 \hat{A} 的共轭算符（对于无限维空间，我们需要区分共轭算符与伴算符。这里不区分） \hat{A}^\dagger

$$\langle \mu | \hat{A}^\dagger = \Phi(\hat{A} |\mu\rangle) = \Phi(\hat{A} \Phi^{-1}(\langle \mu |)) = \langle \mu | \Phi^{-1} \circ \hat{A} \circ \Phi, \quad (6.24)$$

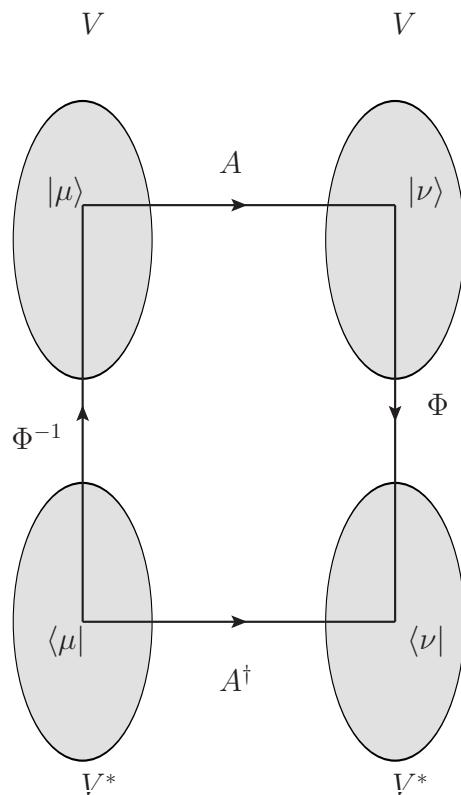


图 6.2: 运用矢量空间的内积, 可以建立一个矢量空间 V 和对偶矢量空间 V^* 之间的一一到上的映射 Φ , 从而定义一个 V 到 V 的线性算符的共轭算符——从对偶矢量空间 V^* 到 V^* 。

也就是

$$\hat{A}^\dagger = \Phi^{-1} \circ \hat{A} \circ \Phi. \quad (6.25)$$

注意，这里的计算顺序是从左边开始的。现在， \hat{A}^\dagger 算符是作用在左边的， V^* 到 V^* 的映射。我们看一看能不能让这个算符也做用在右边。按照线性代数的符号，矩阵可以左乘矢量，也可以右乘矢量。也就是说，我们希望得到 $\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 的定义。

这个矢量的定义稍微有点复杂，我们希望定义完了之后，在回到线性代数的符号的时候，这个运算真的就是把矢量乘在 \hat{A}^\dagger 对应着的矩阵的右边，而不用做其它变换。我们先说有一组基矢的话，这个问题可以怎么处理，然后我们再定义不依赖于基矢的表达式。利用基矢 $\{|j\rangle\}$ ，我们得到

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger |\mu\rangle &= \sum_j |j\rangle \langle j| \hat{A}^\dagger |\mu\rangle = \sum_j |j\rangle (\langle j| \hat{A}^\dagger) |\mu\rangle \\ &= \sum_j |j\rangle (\langle j| \Phi^{-1} \circ \hat{A} \circ \Phi) |\mu\rangle = \sum_j |j\rangle (\langle j| \Phi^{-1} \circ \hat{A} \circ \Phi |\mu\rangle). \end{aligned} \quad (6.26)$$

最后的表达式是一个右矢，于是我们得到了 $\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 的表达式。基本的精神是给 $\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 配一个左矢，然后，利用 \hat{A}^\dagger 如何做用在左矢上，我们就得到了右矢的形式。现在，我们来看一般的定义。

在这之前，我们需要转变一下对左右矢的理解：把左矢当作从右矢空间 V 到数域 F 的映射，把右矢当作从左矢空间 V^* 到数域 F 的映射。一个左矢 $\langle\xi|$ 结合一个右矢 $|\nu\rangle$ 的时候，自然就成了 F 中的数， $\langle\xi| \nu\rangle$ ；同理，一个右矢 $|\eta\rangle$ 结合一个左矢 $\langle\psi|$ 的时候，自然就成了 F 中的数， $\langle\psi| \eta\rangle$ 。所以，等我们需要定义一个右矢的时候，我们只需要给出来一个从左矢空间 V^* 到数域 F 的映射。

现在，我们来看抽象的，不依赖于基矢的 $\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 表达式是什么。给定任意一个左矢 $\langle\xi|$ ，我们希望得到一个 F 中的数，

$$\langle\xi| \hat{A}^\dagger |\mu\rangle = \langle\hat{A}^\dagger \xi| \mu\rangle = \langle\mu| \hat{A}^\dagger \xi\rangle^* = \langle\mu| \hat{A}| \xi\rangle^*. \quad (6.27)$$

注意，在方程的最左边，我们的 \hat{A}^\dagger 实际上是做用在左边的，我们希望定义作用在右边的表达式；在方程的最右边， \hat{A} 是作用在右边的。 \hat{A} 作用在左边还没有定义。上面的表达式就给出了对于任何的左矢 $\langle\xi|$ ，我们通过右矢

$\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 得到了一个 F 中的数。也就是说, $\hat{A}^\dagger |\mu\rangle$ 确实是一个右矢, 于是 \hat{A}^\dagger 就能够作用在右矢上了。同理, 我们可以定义 \hat{A} 如何作用在左矢上: 也就是先配上一个右矢, 然后看这个需要定义的左矢量如何作用于右矢量成为一个 F 中的数,

$$\langle \xi | \hat{A} | \mu \rangle = \langle \xi | (\hat{A} | \mu \rangle). \quad (6.28)$$

现在, \hat{A} 和 \hat{A}^\dagger 都能够既作用在左矢上又作用在右矢上, 这个时候, 我们就能够问它们之间是否相等的问题了。如果 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, 则

$$\langle \xi | \hat{A} | \mu \rangle = \langle \xi | \hat{A}^\dagger | \mu \rangle = \langle \mu | \hat{A} | \xi \rangle^*. \quad (6.29)$$

取这些矢量等于某一套完全的正交归一的基矢, 我们有

$$A_{ij} = A_{ij}^*, \quad (6.30)$$

也就是要求 \hat{A} 的矩阵形式满足转置以后取复共轭得到相同的矩阵元。这个要求被称为 Hermitian (厄米共轭), 记为

$$A^\dagger = A, \quad (6.31)$$

在有限维空间上, 还可以记为

$$(A^*)^T = A. \quad (6.32)$$

也就是先取每个元素的复共轭, 然后再做整个矩阵的转置, 或者反过来先做整个矩阵的转置然后做每个元素的复共轭。

习题 6.3. 证明 $(A, B) = \text{tr}(A^\dagger B)$ 满足 $\mathcal{O}(V)$ 上内积的要求。

6.3.2 本征值与本征向量

有了 Hermitian 算符, 我们来考察这样的算符的本征值和本征向量。这个定理是本小节最重要的结果。

定理 6.1: Hermitian 算符本征向量正交性

Hermitian 算符 \hat{A} 的所有的本征值为实数 $\alpha_j \in \mathcal{R}$, 且不同本征值对应的本征向量相互正交: $\langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = 0$, 其中 $\alpha_1 \neq \alpha_2$ 且 $A |\alpha_j\rangle = \alpha_j |\alpha_j\rangle$ 。

证明 6.1. 大致证明如下：先证明本征值为实数，

$$\begin{aligned}
 \alpha_j \langle \alpha_j | \alpha_j \rangle &= \langle \alpha_j | A | \alpha_j \rangle = \langle A \alpha_j | \alpha_j \rangle^* = \langle \alpha_j | A^\dagger | \alpha_j \rangle^* \\
 &= \langle \alpha_j | A | \alpha_j \rangle^* = \alpha_j^* \langle \alpha_j | \alpha_j \rangle \\
 \implies (\alpha_j - \alpha_j^*) \langle \alpha_j | \alpha_j \rangle &= 0 \\
 \implies \alpha_j &= \alpha_j^* \tag{6.33}
 \end{aligned}$$

假设 $\alpha_1 \neq \alpha_2$,

$$\begin{aligned}
 \alpha_2 \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle &= \langle \alpha_1 | A | \alpha_2 \rangle = \langle \alpha_2 | A^\dagger | \alpha_1 \rangle^* \\
 &= \langle \alpha_2 | A | \alpha_1 \rangle^* = \alpha_1^* \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle^* = \alpha_1 \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle \\
 \implies (\alpha_1 - \alpha_2) \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle &= 0 \\
 \implies \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle &= 0 \tag{6.34}
 \end{aligned}$$

如果算符 \hat{A} 的本征值都不相同，那么只要我们把每一个本征矢量各自归一化，我们就从 Hermitian 算符 \hat{A} 的本征矢量得到了空间 V 的正交归一基矢，于是我们有完全性展开关系，

$$I = \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|. \tag{6.35}$$

存在相同本征值对应不同本征向量，这个称为简并本征值，的问题技术上更复杂（需要在相同本征值对应的本征向量的子空间内正交化矢量），结论是一样的，在此我们不讨论，

如果我们有两个不同的 Hermitian 算符 \hat{A}, \hat{B} ，我们问这个时候它们对应的正交归一基矢是否相同？

定理 6.2: 对易算符

如果 Hermitian 算符 \hat{A}, \hat{B} 对易： $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ ，则 \hat{A}, \hat{B} 存在共同本征向量。

证明 6.2. 同样我们假设本征值没有简并的条件下来讨论。取 \hat{A} 的本征向量 $|\alpha\rangle$ ，

$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle = \hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha\hat{B}|\alpha\rangle \implies \hat{B}|\alpha\rangle = b_\alpha|\alpha\rangle. \tag{6.36}$$

于是 $|\alpha\rangle$ 也是算符 \hat{B} 的本征向量。证毕 ■

反过来，很简单就是可说明，如果两个算符 \hat{A}, \hat{B} 的所有的本征向量都完全一样，则这两个算符必然对易。直观地说，在这个共同本征态所形成的基矢下，这两个算符都只有对角矩阵元，例如

$$\hat{A} = \sum_{\alpha} \hat{A} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{\alpha} \alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (6.37)$$

完全对角。而对角的矩阵永远是相互对易的。

通过这个定理，我们看见，如果我们需要讨论的算符不是所有的都相互对易，那么我们就可以选择不同的 Hermitian 算符所代表的本征矢量来作为基矢。这样，我们就有很多种基矢的选择。于是，一个算符或者一个向量，它们在不同的基矢下就有不同的表现形式。这些不同的表现形式之间有什么样的关系呢？

6.3.3 线性变换与表象理论

在线性算符小节，我们已经看到，矢量空间到矢量空间的线性映射就是线性算符，而且发现这些线性算符总是可以看做是一个右矢量左矢量对——例如 $|\mu\rangle\langle\nu|$ ——的组合：左矢量线性地作用在右矢量上得到一个数，然后右矢量乘上这个数保证线性性的同时得到了一个右矢量。这样的映射可以看做是矢量空间上的线性算符：左矢量 $\langle\nu|$ 作用到的矢量上是线性的，右矢量 $|\mu\rangle$ 只不过做一个矢量和数的数乘，肯定还是线性的。以后在物理课程中我们会学到物理过程对状态的改变。那个时候，物理过程的作用就经常用一个对状态矢量的线性算符来表示。这是线性算符的一个自然的现实世界的对象。在这一节中，我们来看另一个形式上出现线性算符的场景——联系同一个矢量或者矩阵在两套不同的坐标系下的分量形式的数字矩阵。

不加说明的时候，当我们写下来一个矢量或者矩阵，实际上，我们假设这个矩阵总是在一个空间的自然基矢 $\{e^{(j)} = |j\rangle\}$ ，也就是除了第 j 个元素其他分量都是零的矢量，下的分量形式。按照谱定理，任何一个厄米矩阵的本征向量都构成一组完整的基矢，我们可以选择在任意一组这样的基矢下面来定义矢量和矩阵的分量。这样的一组基矢被称为一个表象，这个厄米矩阵被用来指称这个表象。例如一个二维 Hilbert 空间可以用自然基矢（这个时候也称为 σ_z 表象，因为 $\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ 的本征向量正好就是自然基矢），

也可以用 $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ 的本征矢量当做基矢，这个时候称为 σ_x 表象。在欧氏空间中，我们也经常做坐标旋转之类的坐标变换。那个时候，我们也可以看做用了两个不同的矩阵的本征向量集合——也就是两个表象——来当做基矢来表示向量。这个时候，我们也要这两个表象下的矢量是如何相互联起来的。

这个不同的表象之间的关系被称为表象变换。一个线性算符在给定表象下就成了一个矩阵（一堆按照某种顺序排列的数）。因此，借助表象，我们就可以把抽象的算符的讨论变成比较具体的数之间的运算。可是，不同的基矢下，同一个算符对应着的矩阵是不一样的。这些不一样的表现形式对我们的解算结果有影响吗？这些不一样的形式之间有什么关系？这个关系就称为算符在不同基矢，也就是不同表象下的线性变换。我们希望不管这个表象，也就是一个算符的具体矩阵里面的数字如何变换，我们希望得到的能够和实际世界相联系的结果是不变的。这个不变性非常的重要。

运用这个不变性，我们来看一个矢量 ϕ 或者矩阵 A 在两个有厄米矩阵 H_1 和 H_2 表象下的不同形式以及这些形式的联系。记 H_1 的本征矢量为 $|\alpha_j\rangle$ ， H_2 的本征矢量为 $|\beta_j\rangle$ ，都没有简并本征值。我们有，

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_j \phi_j |\alpha_j\rangle, \\ |\phi\rangle &= \sum_j \tilde{\phi}_j |\beta_j\rangle. \end{aligned} \quad (6.38)$$

于是，

$$\sum_j \phi_j |\alpha_j\rangle = \sum_j \tilde{\phi}_j |\beta_j\rangle \Rightarrow \tilde{\phi}_j = \sum_k \langle \beta_j | \alpha_k \rangle \phi_k \quad (6.39)$$

定义

$$S_j^k = \langle \beta_j | \alpha_k \rangle, \quad (6.40)$$

则，

$$\tilde{\phi}_j = \sum_k \phi_k S_j^k. \quad (6.41)$$

类似地，可以证明左矢量的表象之间满足，

$$\tilde{\phi}^i = \sum_k (S^\dagger)_k^i \phi^k. \quad (6.42)$$

于是，矩阵的不同表象的元素之间满足，

$$\tilde{A}_j^i = (S^\dagger)_l^i A_m^l S_j^m. \quad (6.43)$$

注意，这里 $\tilde{\phi}_j$ 和 ϕ_k 不是两个矢量在同一个表象下的分量形式，而是同一个矢量在不同表象下的分量形式。因此，原则上我们不能称以上表达式为矩阵运算表达式：它们不代表两个矩阵或者两个矢量之间的联系。

但是，由于这几个表达式看起来实在太像一个矢量乘以矩阵、一个矩阵乘以矢量，以及一个矩阵乘以一个矩阵然后再乘以一个矩阵，我们有的时候把代表这个表象变换关系的数字矩阵——在强调一下这个矩阵没有自己的基矢不是一个真的矩阵——看做一个真的矩阵，但是，一定要记住这个矩阵没有抽象算符定义。

这个矩阵 S 还可以这么看。令 $\phi_k = \delta_{ik}$ ，则，

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_k \phi_k |\alpha_k\rangle = |\alpha_i\rangle, \\ \tilde{\phi}_j &= \sum_k \phi_k S_j^k = S_j^i \Rightarrow |\phi\rangle = \sum_j S_j^i |\beta_j\rangle, \end{aligned}$$

于是，

$$|\alpha_i\rangle = \sum_j S_j^i |\beta_j\rangle. \quad (6.44)$$

现在，我们看到，这个表象变换矩阵把 H_2 的本征矢量相叠加得到 H_1 的本征矢量。这个观察也可以通过谱定理和完全性关系得到，把 $|\alpha_i\rangle$ 在 H_2 的基矢下展开，我们有

$$|\alpha_i\rangle = \left[\sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j| \right] |\alpha_i\rangle = \sum_j S_j^i |\beta_j\rangle. \quad (6.45)$$

只有我们区分了抽象算符定义和具体表象下的数字矩阵，以及纯粹的数字矩阵，我们才能够从概念上根本搞清楚表象变换和线性算符的区别，尽管形式上它们看起来都是线性变换。注意，这一小节和上一小节需要结合起来看。有的时候，一个动力学过程可以看做对状态的线性变换，也可以看做相当于一个坐标变换——表象变换的一种。这个时候，线性变换到底是作为同一个表象下的算符的作用的表示，还是沟通两个不同表象下的数字矩阵的表象变换，就要注意了。

关于符号的说明：这里我们区分了上下标——右矢量 $|\mu\rangle$ 用上标表示 μ^a ，左矢量 $\langle\mu|$ 用下标表示 μ_a 。于是， $S_b^a \mu^b$ 把右矢量变成一个右矢量， $\mu_b S_a^b$ 把左矢量变成一个左矢量。这个符号习惯和广义相对论Einstein的张量符号体系——上下标分别表示矢量和对偶矢量，重复指标代表求和——是一致的。如果要还原到不区分上下标的符号体系，则下标矢量一般当做行矢量，上标矢量一般当做列矢量，然后对于矩阵来说，上标当做前面的角标，例如 S_j^i 写作 S_{ij} 。区分上下标，也就是区分矢量和对偶矢量，左矢量和右矢量，很多时候是有意义的。

习题 6.4. Einstein 符号：阅读Wikipedia或者其他地方关于Einstein 符号的内容，与这一小节的符号体系做对比。

习题 6.5. 关于共轭变换的思考：左矢量变成右矢量以及反过来的共轭变换是不是一个线性变换？如果是，有没有一个矩阵表达？在Einstein 符号体系里面，这个共轭变换是通过什么东西实现的？

6.3.4 矩阵的奇异值分解

我们已经看到，而且将要看到更多，当我们把一个线性算符算符表示为如下本征向量展开的形式的时候，

$$A = \sum_j \alpha_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|, \quad (6.46)$$

大量的问题就会非常容易的解决：在这个表象下矩阵不存在了，仅仅是一堆排成对角的数。于是，如何把矩阵变形成为对角的形式就成了一个非常重要的问题。前面，我们已经了解一个一般的矩阵不一定能够对角化。那么，是不是一定要是 Hermitian 的矩阵才能够被对角化呢？矩阵的奇异值分解就解决了一般的矩阵的对角化问题。

按照复数域上的多项式解的完全性定理，我们知道对于 n 维矩阵 A ，方程

$$\det |A - \alpha I| = 0 \quad (6.47)$$

必然有 n 个解（允许重根）。因此，一个 n 维矩阵必然存在 n 个本征值，只不过有可能是复数。无限维的算符我们在这里不讨论。那么，是否 n 个本

征值就会对应 n 个本征向量呢？我们来看下面的例子，

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.48)$$

容易求得本征方程为 $\alpha^2 = 0$ ，于是 $\alpha = 0$ 。可是，本征向量的方程

$$A \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = 0 \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (6.49)$$

只有一个非平凡解 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 。那个和这个本征矢量正交的矢量 $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 却不满足本征向量方程。因此，不是每一个矩阵都是可以对角化的，就算允许本征值取复数。实际上数学上这个问题的有充分必要条件，并且还有不满足这个条件的时候我们可以把矩阵变成某种和这个对角形式非常接近的形式——成为 Jordan 标准型。这里，我们不再讨论。

既然如此，有没有一种方法能够把任意的矩阵变成对角的形式，尽管这样的“对角化”可能不一定对应着本征值和本征向量？答案是用奇异值分解代替本征值分解。

定理 6.3: 矩阵奇异值分解

任意矩阵 A 存在 unitary 矩阵 UV ，对角矩阵 Σ ，满足

$$A = U\Sigma V^\dagger. \quad (6.50)$$

其中 Σ 的各个元素非负。

证明 6.3. 在这里我们给出一个直观的解释和构造，证明请参考 Wikipedia 或者其它书籍 [109]。为了讨论简单，我们还是仅仅关心 $n \otimes n$ 的矩阵 A 。取 Hermitian 矩阵 AA^\dagger ，必然存在矩阵 U 和 D 使得

$$AA^\dagger = UDU^\dagger. \quad (6.51)$$

同样对于矩阵 $A^\dagger A$ ，存在矩阵 V 和 D 使得

$$A^\dagger A = VDV^\dagger. \quad (6.52)$$

可以证明 D 只包含正整数，而且从 AA^\dagger 和 $A^\dagger A$ 得到的相同（次序不同的话总是可以通过交换本征值的顺序来重新编号，例如 D 取从大到小的顺序。如果出现简并的情形，需要做相应的处理）。于是，我们定义，

$$\Sigma = \sqrt{D}, \quad (6.53)$$

就是取把对角的相应元素的正根。很容易验证这样定义的 $U\Sigma V^\dagger$ 能够满足上面两式中的 AA^\dagger 和 $A^\dagger A$ 。如果要完善我们的证明，我们还需要进一步证明 $U\Sigma V^\dagger$ 就是 A 。这个证明实际上要比我们的上面的直觉的构造更复杂一些。其原因是，原则上 AA^\dagger 和 $A^\dagger A$ 的本征向量分解是独立完成的，很难恰好满足我们要求的对应关系。不过，假设没有简并本征值，那么，按照本征值的顺序就能够对应起来，从而得到 A 的如上分解。

这个分解就被称为一般矩阵的奇异值分解。与此相关，还有一个矩阵的 Jordan 标准型的概念，在理论上也非常重要。在这里，我们也不讨论了。

要注意，奇异值分解得到的左右矢量不是矩阵的本征向量。按照奇异值的定义，我们有

$$AV = U\Sigma \Rightarrow \sum_k A_{ik} V_{kj} = U_{ij} \sigma_j \Rightarrow \sum_k A_{ik} V_k^{(j)} = U_i^{(j)} \sigma_j. \quad (6.54)$$

如果 $V^{(j)}$ 是右本征矢量的话，我们应该有

$$\sum_k A_{ik} V_k^{(j)} = V_i^{(j)} \sigma_j. \quad (6.55)$$

这个等式仅仅在左奇异值矢量等于右奇异值矢量的时候（在复数域上，这个相等变成左右奇异值矢量相互共轭）是成立的。用左右矢量符号，我们把奇异值分解记为，

$$A = \sum_k \sigma_k |u^{(k)}\rangle \langle v^{(k)}|, \quad (6.56)$$

同时

$$\langle u^{(i)} | u^{(j)} \rangle = \delta_{ij}, \langle v^{(i)} | v^{(j)} \rangle = \delta_{ij}. \quad (6.57)$$

于是，

$$A |v^{(k)}\rangle = \sigma_k |u^{(k)}\rangle, \quad (6.58)$$

也就是说左右奇异值是互为一对的，不像矩阵的左右本征向量——它们各自就是矩阵的左边或者右边的本征向量。

到现在为止，我们把抽象矢量和一般线性算符的运算通过表象变成了矢量和矩阵的运算。我们还把矩阵的运算总结为线性方程的解的运算、矩阵本征值分解，以及矩阵的奇异值分解。而奇异值分解和本征值分解，我们已经看到，密切相关。那么，下面，我们来看一下在实际的计算上，我们可以如何求线性方程的解以及做本征值。

习题 6.6. Jordan 标准型：按照谱定理和完全性关系，当矩阵能够对角化的时候，我们可以把矩阵按照本征向量分解，得到一堆数；当矩阵不能对角化的时候，我们把矩阵按照奇异值分解，得到一堆数。这样的能够把矩阵问题转化为数的问题的技术总是很有用的。但是，我们已经看到了，奇异值分解得到的矢量并不是本征矢量。能不能保持本征矢量这个好性质，来给矩阵做一个分解呢？自己学习 Jordan 标准型。那里的代价是得到的矩阵不一定对角，会比对角多一点点。你还可以思考是不是能够对那些能够对角化的子空间做本征向量分解，然后对剩下的子空间做奇异值分解的问题。

6.4 数值线性代数

很多问题的解决，我们需要依赖数值计算，有的时候还给出来具体的数。而在做数值计算的时候，我们也需要具体的可计算的数，所以，我们总是把抽象矢量和算符在某套坐标系下展开，也就是取某个表象以后再做计算。所以，下面的所有内容都采用一般的线性代数的符号，矢量就是列向量，算符就是矩阵。

数值线性代数能够求解的核心问题有两个：本征值本征向量问题和线性系统的解的问题。其他的重要计算问题还有奇异值和奇异值向量分解、广义本征值和本征向量分解、矩阵的广义逆等。这些问题实际上和前面两个问题具有内在相似性，解决了前两个很大程度上可以帮助解决后面这些，因此，就不再展开讨论后面的问题了。有兴趣的读者可以看 [112–114]。我们先讨论理论上这两个问题的定义和一般形式，然后我们介绍一下数值求解这两个问题的最基本的想法。我们会发现这两个问题的定义形式是不能用来真正计算比较大的矩阵的本征值问题和求解的问题的。实际上，我们将来

还会发现，数值线性代数的计算是整个科学计算的核心（另外一个是Monte Carlo 方法），基本上所有的其他的数值计算的问题，例如数值差分，非线性方程的解，有限元方法等等，都需要把问题转化成为数值线性代数的问题，因此，学会数值线性代数的基本的精神有非常大的意义，是将来利用和发展很多科学计算算法的基础。

在下面所有的介绍中，我们强调对计算方法的基本的理解，在具体实现上，我们只需要学会使用合适的工具包就可以。

6.4.1 矩阵相乘的 Strassen 算法

我们已经知道矩阵相乘就是简单的规则

$$C = AB \iff C_{ij} = \sum_k A_{ik}B_{kj}. \quad (6.59)$$

因此，如果 A, B, C 都是 $N \times N$ 的矩阵，我们计算每一个元素需要完成 N 次乘法（忽略更简单的加法运算的次数），那么整个矩阵的计算就需要完成 N^3 次计算。Strassen提出来说，分块矩阵的计算可以使得计算量更小。初看起来，这是非常神奇的一件事情：就这样一个根本没有什么可以作花样的矩阵乘法的计算，竟然有其他计算方式其效率超过基本定义。我们来看一下这个矩阵相乘的神奇的Strassen 算法[112]¹。

首先，把矩阵分块，为简单记，设 $N = 2^k$ ，这样每次可以分成一半这么大，

$$A = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} \\ C_{2,1} & C_{2,2} \end{bmatrix} \quad (6.60)$$

如果直接按照分开计算，则需要做 8 次矩阵乘法，也就是

$$\begin{aligned} C_{1,1} &= A_{1,1}B_{1,1} + A_{1,2}B_{2,1}, \\ C_{1,2} &= A_{1,1}B_{1,2} + A_{1,2}B_{2,2}, \\ C_{2,1} &= A_{2,1}B_{1,1} + A_{2,2}B_{2,1}, \\ C_{2,2} &= A_{2,1}B_{1,2} + A_{2,2}B_{2,2}. \end{aligned}$$

¹也 可 以 看 Wikipedia 的 “Strassen Algorithm” 词 条：
https://en.wikipedia.org/wiki/Strassen_algorithm。

Strassen 算法说，你这样算，只需要计算 7 矩阵乘法，

$$\begin{aligned} M_1 &= (A_{1,1} + A_{2,2})(B_{1,1} + B_{2,2}), \\ M_2 &= (A_{2,1} + A_{2,2})B_{1,1}, \\ M_3 &= A_{1,1}(B_{1,2} - B_{2,2}), \\ M_4 &= A_{2,2}(B_{2,1} - B_{1,1}), \\ M_5 &= (A_{1,1} + A_{1,2})B_{2,2}, \\ M_6 &= (A_{2,1} - A_{1,1})(B_{1,1} + B_{1,2}), \\ M_7 &= (A_{1,2} - A_{2,2})(B_{2,1} + B_{2,2}). \end{aligned}$$

然后，把它们组合起来，就得到矩阵 C ，

$$\begin{aligned} C_{1,1} &= M_1 + M_4 - M_5 + M_7, \\ C_{1,2} &= M_3 + M_5, \\ C_{2,1} &= M_2 + M_4, \\ C_{2,2} &= M_1 - M_2 + M_3 + M_6. \end{aligned}$$

这样就把矩阵乘法从 8 次变成了 7 次。如果我们不断地分块下去，每一次的分块都会带来这个八次里面少一次的好处，于是，我们的计算量就不再是 N^3 而是 $N^{\log_2 7} \approx N^{2.8}$ 。

当然，实际计算中，是不能一直分下去的。每一个计算机的 CPU 和内存的设置（例如高速缓存的级别和大小）会决定分到多大才是速度最快的。因此，实际矩阵数值计算程序包都有根据计算机来优化的模块。基本线性代数计算包（BLAS）²就是这样的一套高效率做矩阵乘法的标准。

那么，为什么要这么关注矩阵乘法的计算呢？除了这个计算很基本之外，还有一个原因，大量的其他矩阵计算都可以转化成为以矩阵乘法为基础的计算。

²Basic Linear Algebra Subprograms <http://www.netlib.org/blas/>。有参考版的实现，在 AMD 和 Intel 的数学包中也有实现。

6.4.2 本征值与本征向量

本征向量就是满足 $A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ 的非零矢量 $|\alpha\rangle$ 。怎么计算这个本征向量呢？做一下变形，得到

$$(A - \alpha I)|\alpha\rangle = 0. \quad (6.61)$$

这个方程具有非零解 $|\alpha\rangle$ 的条件是，

$$\det(A - \alpha I) = |A - \alpha I| = 0. \quad (6.62)$$

这个方程是关于未知数 α 的 N 阶方程。当然我们直接数值求解这个方程来得到 α 。接着，有了 α 就带回到公式 (6.61) 得到 $|\alpha\rangle$ 。这很可能就是你学习线性代数课程的时候学会的计算方法。实际计算中，这是一个非常难以使用的方法，尤其是当 N 很大的时候。

一个更简单的方法是幂方法。幂方法的基本思想可以从下面这个事实中看出来。记 A 的所有本征向量为 $|\alpha\rangle$ ，则有

$$\begin{aligned} A|\mu\rangle &= A\left(\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|\right)|\mu\rangle, \\ &= \sum_{\alpha} \alpha\mu_{\alpha}|\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (6.63)$$

于是，

$$A^n|\mu\rangle = \sum_{\alpha} \alpha^n\mu_{\alpha}|\alpha\rangle. \quad (6.64)$$

这时候我们发现，那个对应着最大本征值的本征向量实际上就被放大了：每做一次矩阵乘法，相当于把最大本征值对应的本征向量（简称为最大本征向量）放大了一些。为了更好地把大本征向量突出出来，还可以做一次归一化：例如，让所有的分量平方和等于 1。这样保持矢量整体大小一致之后，这个放大的分量的效果更加明显。如果最大本征值对应的本征向量唯一，那么，直接就用这个不断做矩阵乘法的方式就可以把这个最大的找出来。一旦有了本征向量，则计算最大本征值就是简单的算一下放大系数就好。PageRank 算法本征向量的计算用的就是幂方法。

这就是计算最大本征向量和最大本征值的幂方法。有了这个，我们甚至可以考虑求第二大本征向量和本征值。例如定义 $A^{(-\max)} = A - \alpha_{\max}|\alpha_{\max}\rangle\langle\alpha_{\max}|$ ，

然后计算 $A^{(-\max)}$ 的最大本征值和本征向量。如果这样可行的话，我们甚至可以不断地做下去，求出来所有的本征值和本征向量。但是，在实际计算中，这个想法尽管理念上值得参考，是不可行的。只要计算有小小的误差，则最大本征向量不可能被完全从矩阵 A 中扣掉，于是这个矩阵实际上还是 N 维的，求这个时候的最大本征向量就还会得到第一大本征向量。由于误差，也不能保证每次计算出来的本征向量之间是相互正交的。这怎么办？后来的研究者就从幂方法的基础上发展了子空间迭代方法——例如 Krylov 子空间方法 [113]——来计算本征值和本征向量，甚至线性方程的解。在幂方法和迭代方法中，我们只需要做矩阵和矢量的乘法。这一点在有的问题的计算中有特殊的意义，尤其是我们拿不到写成方块状的具体数字的矩阵只能够把矩阵看作吃掉一个矢量得到一个矢量的映射的时候。这种只需要矩阵和矢量的乘法来解决矩阵问题有一个专门的名字——Matrix Free（无矩阵）方法。

在比较通用的线性代数数值计算软件包中，例如 Lapack³, Petsc⁴, Slepc⁵，都有包含这样的子空间迭代方法。

6.4.3 线性系统的解

线性方程的解的定义是，已知矩阵 A 和矢量（或者矩阵） b ，找到 x 满足，

$$Ax = b \quad (6.65)$$

记做，

$$x = A^{-1}b \quad (6.66)$$

这个方程是有解析解的，通过定义矩阵 A 的伴随矩阵 $\text{adj}(A)$ ——具体定义这里就不给出来了——就可以得到矩阵逆，

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \text{adj}(A). \quad (6.67)$$

³Linear Algebra PACKage, <http://www.netlib.org/lapack/>

⁴Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation, <https://www.mcs.anl.gov/petsc/>

⁵Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations, <http://slepc.upv.es/>

但是，伴随矩阵 $\text{adj}(A)$ 的计算是一个很复杂的问题，并且需要直接使用矩阵元素，而不是仅仅依赖于矩阵和矢量的乘法。

有没有其他的类似于子空间迭代的方法呢？有。考虑到我们已经熟悉的， $\frac{1}{1-A} = \sum_n A^n$ ，我们把这里的 A 换成 $1 - A$ ，就得到

$$\frac{1}{1-(1-A)} = \sum_{n=0}^{\infty} (1-A)^n. \quad (6.68)$$

这个时候只要矩阵 A 满足 $(1-A)^n$ 越来越小的条件，上面的取和就是收敛的，就能够直接得到 A^{-1} 。于是，

$$x = \sum_n (1-A)^n b. \quad (6.69)$$

其中的每一次计算就是一个矩阵和矢量的乘法（忽略加法）。当然，这个方法就好象是本征向量问题中的幂方法，理论上行的通，很好用，实际上有的时候也很好用，但是，不够一般，效率也不是足够高。更好的方法也是Krylov 子空间方法 [113]。

当然，数值线性代数还有一些更加传统的方法，例如 LU 分解、Guass 消元法等等，就只好让读者去专门的书 [112, 113] 里面去学习了。我们这一节的主要任务是告诉大家，数值上来计算线性代数问题的方法和通常这些问题的定义式是有区别的，并且高效的方法是存在的，是前人研究的结果，也值得后来人继续研究，尤其是并行的数值线性代数计算，以及可能的话开发数值线性代数的量子算法。还有一个目的是介绍给大家数值线性代数的软件包，有需要的时候，你可以去使用这些包来计算。

6.5 矩阵微扰理论

有的时候，我们关心一系列矩阵它们之间仅仅存在比较小的差别。这个时候，有可能我们不用为每一个矩阵做独立的计算，没准我们可以用某个矩阵已经计算出来的量，例如逆矩阵、对应的线性方程的解、本征值或者本征向量，来计算其他的差别很小的矩阵的相应的量。有的时候不仅仅是数值计算，甚至理论上我们就要对比两个相差很小的矩阵的这些量，例如将来量子力学中一个原子加上磁场的情况。这个时候，我们就希望理论上有一个框架来构建这个两个相差很小的矩阵的量之间的联系。

记原始矩阵为 A_0 , 微扰以后的矩阵为 A , 两者关系是,

$$A = A_0 + \lambda\Delta, \quad (6.70)$$

而且 $\|\lambda\Delta\| \ll \|A_0\|$ 。其中 $\|A_0\|$ 是矩阵的某种范数的意思, 例如取所有元素的平方和。我们希望从 A_0 的本征值, 记为 $\alpha^{(0)}$, 和本征向量, 记为 $|\alpha^{(0)}\rangle$, 以及矩阵逆 A_0^{-1} 来得到 A 的本征值 α 和本征向量 $|\alpha\rangle$ 以及矩阵逆 A^{-1} 。

6.5.1 矩阵可对角化的情形

矩阵 A_0 可以对角化的意思就是, 我们找到了所有的本征值 $\alpha_j^{(0)}$ 和本征向量 $|\alpha_j^{(0)}\rangle$, 满足

$$A_0 = \sum_j \alpha_j^{(0)} |\alpha_j^{(0)}\rangle \langle \alpha_j^{(0)}| \quad (6.71)$$

我们假设 A 矩阵的本征值和本征向量为,

$$\alpha_j = \alpha_j^{(0)} + \lambda\alpha_j^{(1)} + o(\lambda^2), \quad (6.72)$$

$$|\alpha_j\rangle = |\alpha_j^{(0)}\rangle + \lambda|\alpha_j^{(1)}\rangle + o(\lambda^2). \quad (6.73)$$

保留一阶小量。更高阶的微扰可以在得到第一阶以后继续来做。于是,

$$A|\alpha_j\rangle = \alpha_j|\alpha_j\rangle = \alpha_j^{(0)}|\alpha_j^{(0)}\rangle + \alpha_j^{(0)}\lambda|\alpha_j^{(1)}\rangle + \lambda\alpha_j^{(1)}|\alpha_j^{(0)}\rangle + o(\lambda^2), \quad (6.74)$$

$$(A_0 + \lambda\Delta)|\alpha_j\rangle = A_0|\alpha_j^{(0)}\rangle + \lambda\Delta|\alpha_j^{(0)}\rangle + A_0\lambda|\alpha_j^{(1)}\rangle + o(\lambda^2). \quad (6.75)$$

上下两式相等, 忽略高阶小量, 得到,

$$\alpha_j^{(0)}|\alpha_j^{(0)}\rangle + \alpha_j^{(0)}\lambda|\alpha_j^{(1)}\rangle + \lambda\alpha_j^{(1)}|\alpha_j^{(0)}\rangle = A_0|\alpha_j^{(0)}\rangle + \lambda\Delta|\alpha_j^{(0)}\rangle + A_0\lambda|\alpha_j^{(1)}\rangle.$$

接着用左矢量 $\langle \alpha_j^{(0)} |$ 做内积并消去左右两边相同的项, 得到,

$$\langle \alpha_j^{(0)} | \lambda\alpha_j^{(1)} | \alpha_j^{(0)} \rangle = \langle \alpha_j^{(0)} | \lambda\Delta | \alpha_j^{(0)} \rangle \implies \alpha_j^{(1)} = \frac{\langle \alpha_j^{(0)} | \Delta | \alpha_j^{(0)} \rangle}{\langle \alpha_j^{(0)} | \alpha_j^{(0)} \rangle}. \quad (6.76)$$

接着用左矢量 $\langle \alpha_k^{(0)} |$ ($k \neq j$) 做内积并消去左右两边相同的项, 得到,

$$\langle \alpha_k^{(0)} | \alpha_j^{(1)} \rangle = \frac{\langle \alpha_k^{(0)} | \Delta | \alpha_j^{(0)} \rangle}{\alpha_j^{(0)} - \alpha_k^{(0)}}, \quad (6.77)$$

因此，本征矢量的微扰部分为，

$$\left| \alpha_j^{(1)} \right\rangle = \sum_k \left| \alpha_k^{(0)} \right\rangle \frac{\langle \alpha_k^{(0)} | \Delta | \alpha_j^{(0)} \rangle}{\alpha_j^{(0)} - \alpha_k^{(0)}}. \quad (6.78)$$

在我们上面的内积和消去的过程中，我们用了本征向量的正交性 $\langle \alpha_k^{(0)} | \alpha_j^{(0)} \rangle = \delta_{kj}$ 。如果我们关心的本征向量对应的本征值对应着多个本征向量，则上面的正交性并不成立。这个时候，需要单独来处理。量子力学里面，称这个为简并本征矢量的微扰论 [111]。

讨论了本征值和本征向量的微扰之后，我们再来讨论矩阵逆的微扰。记 $G = (A + \lambda\Delta)^{-1}$, $G_0 = A^{-1}$ ，我们来看看 G 和 G_0 的关系。首先，我们有，

$$G_0 A = A G_0 = I, \quad (6.79)$$

$$G(A + \lambda\Delta) = (A + \lambda\Delta)G_0 = I. \quad (6.80)$$

对公式 (6.79) 变形，并运用公式 (6.80)，得到，

$$G = G(A + \lambda\Delta - \lambda\Delta)G_0 = G_0 - G\lambda\Delta G_0, \quad (6.81)$$

$$G = G_0(A + \lambda\Delta - \lambda\Delta)G = G_0 - G_0\lambda\Delta G. \quad (6.82)$$

合起来就是

$$G = G_0 - G\lambda\Delta G_0 = G_0 - G_0\lambda\Delta G, \quad (6.83)$$

或者把 λ 吸收到 Δ 的里面，写成

$$G = G_0 - G\Delta G_0 = G_0 - G_0\Delta G. \quad (6.84)$$

公式 (15.72) 就是著名的Dyson 方程。有了Dyson 方程就能够非常简单地得到微扰结果。保留到一级的话，就是用 G_0 直接代入到方程的右边，得到

$$G \approx G_0 - G_0\Delta G_0. \quad (6.85)$$

更高级就继续迭代。

当矩阵不一定能够对角化的时候，我们就不能基于本征向量分解来讨论微扰了，只能够用奇异值分解。用奇异值，考虑左本征矢量和右本征矢量，可以证明类似的微扰公式。

习题 6.7 (Dyson 方程的运用). 考虑一个矩阵 A_0 去掉了一个元素 $A = A - A_j^i |i\rangle\langle j|$, 计算 G 的解析阶和一级近似, 并生成一个(或者一堆)随机矩阵做得到的解析阶和一级近似的数值检验。

习题 6.8 (Dyson 方程的运用). 考虑一个矩阵 A_0 去掉了一对元素 $A = A - A_j^i |i\rangle\langle j| - A_i^j |j\rangle\langle i|$, 计算 G 的解析阶和一级近似, 并生成一个(或者一堆)随机矩阵做得到的解析阶和一级近似的数值检验。

习题 6.9 (一阶微扰论的运用). 考虑上面两个问题的本征值和本征向量的一级近似, 并生成一个(或者一堆)随机矩阵做得到的解析阶和一级近似的数值检验。

6.6 作业

习题 6.10. 阅读喀兴林的《高等量子力学》[111] 的矢量空间部分, 并做概念地图和文字相结合的读书报告, 并且和本书作对比。

习题 6.11. 下载安装和使用 Lapack, 完成一些网络上的教程, 例如 Example BLAS/LAPACK Programs⁶, 的学习, 并求解一个高维随机矩阵的绝对值最大和绝对值最小的本征值和对应的本征向量。

习题 6.12. 选择一门语言来用为这门语言做好的 Lapack 包。如果你是 C 的程序员, 你可能需要练习从 Fortran 调用 C 的程序, 以及反过来从 C 调用 Fortran 的程序。请自行 google 相应的材料来学习。在写你的第一个程序之前, 请注意取看一下有关编程风格的文档, 变量名、缩进、程序文档, 这些方面的细节要做好。记住: 很可能你或者其他人在几个月甚至几年之后, 再次来看这个程序。

6.7 本章小结

数学是语言, 也是提供用来描述现实和描述思考的结构的工具箱。在这一章里面, 我们从集合和映射的语言开始, 介绍了一些最基本的数学结

⁶<https://www.mitchr.me/SS/exampleCode/blas.html>。

构：群、数域、矢量空间、对偶空间、线性算符、内积、Hilbert 空间。其中对矢量和矩阵的理解尤其重要：排成一行或者一列的数字不是矢量，那仅仅是矢量在某个坐标系下额分量，也就是一堆数，那些坐标对应着的基矢才是真的矢量，所以才需要引入Dirac 符号来明确地表示抽象矢量。同样只有那些基矢对应着的线性变换才是矩阵，那些排成一块块的数字不是矩阵。除了对这些基本数学结构的理解，本书还介绍了数值线性代数——怎么算是个问题，并且是和基于直接定义的计算不一样的问题，需要考虑高效率的算法，并且在这方面已经有了很多其他人的研究工作。微扰论部分的Dyson 方程是非常重要和普适的，我们将来还会多次遇到。它本身是精确的，尽管放到了微扰论这一小节，不仅仅能够用来求近似解，对有些问题还能求出来精确解。

不过，如果这一章有什么东西是非得掌握不可的话，那么，我还是会推荐Dirac 符号。后面会大量采用这个符号。不过，概念是要好好理解的，要不然，随着研究工作的深入，总有一天你还会需要补充基本的核心的概念。数学结构是你的词汇和眼镜，只有借助它们你才能够表达你自己和看到这个世界。

第七章 概率论

我们不讨论这个世界到底是决定性的还是随机的，我们把确定性的事件也看成随机事件的一个特例，服从 δ 分布的一个特例。所谓 δ 分布就是在给定时刻这个“随机”变量仅有一个可能取值。在这个视角下，所有的经典世界都由概率论描述。

在这一章里面，我们要解决的问题是如何描述随机事件。从古典模型，我们已经知道随机事件可以用随机变量来描述，离散随机变量的每一个可能取值对应着一个概率，连续随机变量可以用概率密度分布函数描述，同时离散和连续随机变量都可以用累积概率分布函数来描述。这些还不够，我们要讨论一下随机事件的定义，概率论最核心的性质是什么（将来我们会看到这个核心是概率叠加原理：互斥事件的加法），然后利用上一章学到的矩阵和Dirac 符号来介绍一种新的描述概率的方法——密度矩阵。最后，我们讨论一下离散时间的随机过程。

最后我们会简短地讨论一下Monte Carlo 方法——产生给定分布函数的随机数的样本的一个方法，以及随机变量的测量。后者是一个基本上所有的教材都不讨论的问题。我们认为其实关于这个问题的认识非常重要。例如，我们考虑这样一个事件：扔出骰子并且骰子的某一面——例如 6 这一面——向上之后，观测这个正面的值，然后我们说这个随机事件的概率分布就是 6 这一面 100%，其他取值的概率为零。那么是否意味着在观测之前的概率分布——每一面都是 $\frac{1}{6}$ ——是错误的呢？我们认为，如果认为是错误的，则是对概率论和随机事件非常错误的理解。在原来的这个硬币的状态到后来的这个硬币的状态之间，存在着一个操作：测量。测量的前后，硬币的状态确实原则上可以发生改变的。在测量之后，确实硬币的状态是 100% 取值为 6，但是并不意味着测量之前的状态的描述也发生了改变。大多数经

典客体的状态在测量前后不发生改变。这一点，原则上，没有必要对于随机客体还保持。原则上，我们允许这个世界上存在着真正随机的客体。然而，如果真的存在，那么我非常怀疑，一个没有深刻理解概率论的学者，可以理解这个世界的任何部分。

我们还将简短地介绍一下统计学的学科大图景：典型对象、问题、思维方式、分析方法、和世界以及其他学科的关系。统计学对于系统科学的研究者来说，尤其重要：我们要面对大量的实际数据，我们要从实际数据中发现规律，有的时候还要建立模型来理解数据背后的故事；这些任务，没有对统计学好的理解，就不可能完成。Monte Carlo 和统计学其实一个一个硬币的两面，相反相承。在 Monte Carlo 和统计学中，我们都会注意到系综这个概念的重要性。

这个部分的推荐阅读材料是：Kolmogorov的《概率论导引》[115]，王梓坤的《概率论基础及其应用》[116]，Chung的 A course in Probability Theory[117]，Wasserman的《All of Statistics》[118]。

7.1 古典概型：离散概率与几何概率

古典概型对于随机事件有一个基本的假设：存在着某一个基本的简单事件，其中每一个基本简单事件的概率是明确的甚至是相等的，然后复杂事件的概率总是可以通过分解成基本简单事件的方式来计算出来。在这里，我们先通过两个古典概型的例子，来了解一下概率论。然后，我们会展示这种基于简单基本事件的概率论存在一些问题，于是我们需要构造更加一般的概率论。

例 7.1 (对称骰子的几率问题). 对称骰子：计算两个六面的对称的骰子出现的向上面的数字之和的不同取值的几率。

首先根据每一个骰子 6 面出现的几率一样，我们得到两个骰子的向上面的组合为 (i, j) ，其中 i, j 是任意一个 1 到 6 的数，而且它们都是等几率的。于是，我们得到 $i+j$ 分别是：2, 3, 4, 5, 6, 7; 3, 4, 5, 6, 7, 8; 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10; 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11; 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12。总共有 1 个 2, 2 个 3, 3 个 4, 4 个 5, 5 个 6, 6 个 7, 5 个 8, 4 个 9, 3 个 10, 2 个 11 和 1 个 12。因此这些

数出现的概率分别就是，

$$P_s = \begin{cases} \frac{1}{36} & s = 2 \\ \frac{2}{36} & s = 3 \\ \frac{3}{36} & s = 4 \\ \frac{4}{36} & s = 5 \\ \frac{5}{36} & s = 6 \\ \frac{6}{36} & s = 7 \\ \frac{5}{36} & s = 8 \\ \frac{4}{36} & s = 9 \\ \frac{3}{36} & s = 10 \\ \frac{2}{36} & s = 11 \\ \frac{1}{36} & s = 12 \end{cases} \quad (7.1)$$

例 7.2 (约会问题). 约会问题：Alice 和 Bob 约会，约定三点钟见面，可以这两个人都不太守时，耐心也不太好，会在三点钟的前后 5 分钟随机出现，而且出现以后只等对方 5 分钟。问他们能够实现这个约会的几率是多少？

我们来做一个 Alice 和 Bob 的到达时间图，见图 7.1。在这个图上，按照我们题目给出的信息，每一个点都是等几率的。看相遇的条件是 $|x - y| \leq 5$ 。把这个信息也画在图上，就是图 7.1 的阴影部分。于是，问题就成了求出来阴影部分的面积占整个正方形的面积的比例，我们得到 $P = \frac{100-25}{100} = 0.75$ 。

找出来等概率事件，然后，把所关心的更加复杂的事件看成这些简单的等概率事件的某种运算，就是古典概型问题的核心思想。下面，我们来看一个这个思想所不能解决的问题。

例 7.3 (Bertrand 圆内弦长的概率问题). Bertrand 圆内弦长的概率问题：单位圆内任意取一条弦，其长度大于 $\sqrt{3}$ 的几率是多少？

注意 $\sqrt{3}$ 刚好就是圆内接正三角形（图 7.2 中的灰色三角形）的边长。

我们可以这样来想象一条弦的构造过程：先随机选取一个端点，然后再随机选取另一个端点。由于对称性第一个端点的选择可以是圆上的任意一个点。这个时候，第二个端点的选择可以用圆周上的任意各个点来表示，也就是从第一个端点开始逆时针方向圆周上距离为 $l \in [0, 2\pi]$ 的点。只要满

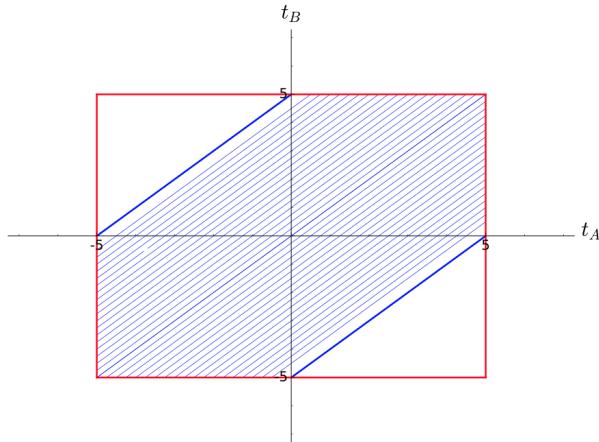


图 7.1: 图中展示了在三点钟的前后 5 分钟到达，并且只等待 5 分钟，能够相遇的条件 $|x - y| \leq 5$ 。

足 $\frac{2\pi}{3} < l < \frac{4\pi}{3}$ ，弦长就大于 $\sqrt{3}$ 。于是，相应的概率就是 $\frac{1}{3}$ 。

我们还可以这样来想象一条弦的构造过程：在圆内首先做任意的一条半径，在半径上的任意一个点上，我们来做有这条半径和这个点唯一决定的一条弦——过这个点垂直于这条半径的弦。反过来，任意一条弦（除了直径弦，但是在连续变量的情况下，某一个或者几个离散的取值点的情况忽略不计一般不影响概率，就像积分中忽略一些离散取值点一样）都可以找到这样的一条半径和半径上的一个点。也就是说，一条半径和半径上的一个点和任意一条弦（除了直径弦）是一一对应的。于是，按照半径的方向完全随机，半径上的点完全随机，就可以得到只有当半径上的点离圆心的距离大于 $\frac{1}{2}$ 的时候，弦长就大于 $\sqrt{3}$ 。于是，相应的概率就是 $\frac{1}{2}$ 。

我们还可以这样来想象一条弦的构造过程：在圆内随机选取一个任意的点，以这个点为中点做一条弦。具体做法稍微复杂一点。可以先连接圆心和这个点，然后做这个连线的垂线。垂线处于其和圆周的两个交点之间的部分就是满足条件的弦。除了这个任意的点刚好在圆心的时候，这样做出来的弦是唯一的，也就是说，任意一个点（除了圆心）都对应着一条且只有一条弦。同样，任意一条弦（除了直径弦）都对应着这样的一个点。当这个点处于图 7.2(c) 中的半径为 $\frac{1}{2}$ 的小圆内的时候，弦长就大于 $\sqrt{3}$ 。于是，相应的概率就是小圆和大圆的面积的比 $\frac{\pi(\frac{1}{2})^2}{\pi} = \frac{1}{4}$ 。

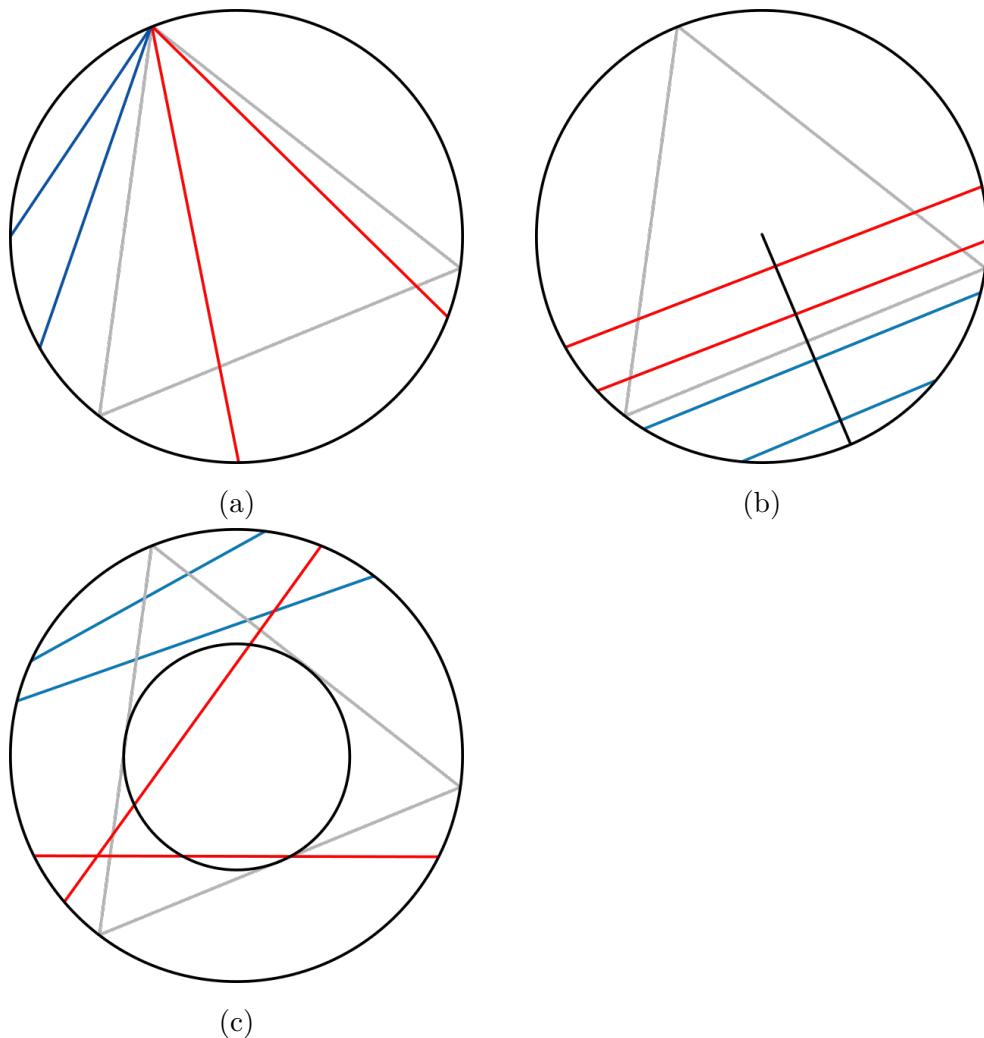


图 7.2: 图中展示了三种计算单位圆内长度大于 $\sqrt{3}$ 的弦的概率的方式。(a) 看作固定一个端点, 另一个端点均匀落在圆周上。 $\frac{1}{3}$ 。(b) 随机选取一条半径, 然后在半径上随机选一个点, 过这个点做垂直于这个半径的弦。 $\frac{1}{2}$ 。(c) 随机选择一个在圆内的点, 做一条弦把这个点当作弦的中点。 $\frac{1}{4}$ 。图片来自于 Wikipedia“Bertrand paradox (probability)”词条, 由 Timecop 上传, 协议 CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=2141731>。

在这个例子中，我们发现存在着多种等概率的基本简单事件的选择。于是，基于基本简单事件的概率或者概率密度的古典概型，就有问题了。现代概率论通过下面的概率公理化定义来解决这个问题。我们先看一下这个公理化定义是什么，然后在做进一步的关于这个样的定义的含义和动机的讨论。

7.2 现代概率三元体

定义 7.1. 概率空间：概率三元体 (Ω, \mathcal{F}, P) ，其中集合 Ω ，集合元素对应简单事件记号 $\omega \in \Omega$ ， Ω 的子集 A 构成集合 \mathcal{F} 是 Ω 上的 σ 代数，即 \mathcal{F} 满足

1. \mathcal{F} 至少包含 Ω : $\Omega \in \mathcal{F}$;
2. 对集合的补集操作封闭: $\bar{A} \in \mathcal{F}$, $\forall A \in \mathcal{F}$;
3. 对可数个集合的并集封闭: $\cup_{j=1}^{\infty} A_j \in \mathcal{F}$, $\forall A_j \in \mathcal{F}$ 。

从 \mathcal{F} 到 $[0, 1]$ 的映射 P ，满足下列条件

1. 完全性:

$$P(\Omega) = 1; \quad (7.2)$$

2. 可列可加性: 对于可数个不相交的集合 (互斥事件, $A_i \cap A_j = \emptyset$, $\forall A_i, A_j$)

$$P\left(\cup_j A_j\right) = \sum_j P(A_j). \quad (7.3)$$

\mathcal{F} 是 σ 代数的要求是为了保证对于任意两个概率有定义的集合，它们的集合操作——交并补——都有定义。因为在概率的意义上，我们从两个集合的概率开始，我们经常需要讨论这两个集合对应着的事件合起来的事件的几率，或者是都发生的几率，或者是一个发生另一个不发生的几率。映射 P 保证在 $[0, 1]$ 之间也是很好理解的，概率最好是大于零的，而且最大就是 1。完全性也很好理解，所有的事件的整体的概率显然应该是 1。也就是说，所有的概率论的定义的核心的一条，就是为了保证“可列可加性”：对于互斥的事件，其整体的概率等于各个互斥部分的概率之和。我们

称这一条为“概率性叠加原理”。也就是说，就是这个概率性叠加原理体现了概率论的所有的意义。以后，我们会有更深刻的体会。

在这里，我们先来展示一下，通过这一条概率性叠加原理来定义一下任意两个集合 A, B 的并的几率，如果这两个集合 A 和 B 已经确定是 \mathcal{F} 的元素的话。我们先来看 $A \cap B$ ，如果它等于空集，则 A 和 B 是互斥事件，于是 $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ ，解决。如果 $A \cap B \neq \emptyset$ ，我们把 $A \cup B$ 分解成三个互斥的集合 $A \cap \bar{B}, \bar{A} \cap B$ 和 $A \cap B$ 。于是， $P(A \cup B) = P(A \cap \bar{B}) + P(\bar{A} \cap B) + P(A \cap B)$ 。也就是说，实际上，如果我们知道每一个互斥的 \mathcal{F} 中的元素的几率，实际上，我们用概率性叠加原理就可以求出所有的 \mathcal{F} 中的元素，也就是任意事件，的几率。

回到古典概型的问题。在那里，等概率或者概率明确的基础事件就相当于一个完备的互斥事件集合，只要更复杂的事件能够表达成这样的基础事件的并，那么，其概率就能够计算出来。在等概率基础事件的情况下，则复杂事件的概率正好就是数一数相当于几个基础事件并起来就行，不管是离散的变量的时候的数数，或者连续的变量的时候的积分。

回到我们的圆内弦长的概率问题，可以证明，从我们前面的任何一种等概率假设都可以构造一个满足上述要求的概率空间。也就是说，三种计算都是合理的。

不过，概率公理化体系的额外好处是，就算我们没有这样的等概率或者概率明确的能够用来构成所有更加复杂的事件的基础事件，我们仍然可以谈概率，只要我们有“概率性叠加原理”。或者说，“概率性叠加原理”就是古典概率的核心思想的推广。

实际上，我们还应该完成这样一件事情：从概率论的公理化定义，找出适当的条件，在这个条件下随机变量的分布函数存在。但是，这个任务超过本书的水平。下面，我们直接就用概率密度分布函数或者累积分布函数来描述概率。

7.3 条件概率与 Bayesian 公式

在整个概率论的框架中，还有一条重要的原理，就是，独立事件的交集的概率等于各自的独立事件的概率相乘。为了讨论这一条，我们定义下面

的条件概率。

定义 7.2. 条件概率：事件 A 已经发生的情况下事件 B 发生的概率称作事件 B 关于事件 A 的条件概率，记为 $P(B|A)$ ，

$$P(B|A) = \frac{P(B \cap A)}{P(A)}. \quad (7.4)$$

根据这个定义，我们有

$$P(B \cap A) = P(B|A)P(A) \quad (7.5)$$

如果

$$P(B|A) = P(B), \quad (7.6)$$

则

$$P(B \cap A) = P(B)P(A). \quad (7.7)$$

满足公式 (7.6) 的事件 A 和 B 被称为独立事件，也就是 B 发生的概率与 A 是否已经发生没有关系。

从条件概率的公式，还可以推导出来一个非常重要的定理：Bayesian 公式。

定理 7.1: Bayesian 公式

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A|B)P(B) + P(A|\bar{B})P(\bar{B})}. \quad (7.8)$$

证明 7.1. 简单证明如下：从公式 (7.5) 我们交换 A 和 B 的位置得到

$$P(B \cap A) = P(A \cap B) = P(A|B)P(B). \quad (7.9)$$

于是

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}, \quad (7.10)$$

而这个分母可以分解成互斥的两个部分 $A = (A \cap B) \cup (A \cap \bar{B})$ ，然后利用互斥事件的概率性叠加原理就可以得到 Bayesian 公式。证毕 ■

至此，概率论的基本理论就完成了。它包含概率的公理化定义，其中最主要的是概率性叠加原理，还包含 Bayesian 公式以及独立事件的概率乘法。在我们进入下面的关于大数定律和中心极限定理的讨论之前，我们通过几个例子来熟悉一下概率性叠加原理和独立事件的概率乘法，以及 Bayesian 公式。然后，我们举例介绍几个典型分布函数和基本数字特征，也就是基本统计量。

例 7.4 (留短头发的男生的概率). 留短头发的男生的概率：在路上看到一个短头发的背影，问这个背影属于男生的概率是多少。在北京师范大学，男女比例接近 4 : 6，假设 30% 的女生留短发，80% 的男生留短发。

这里我们假设这个学校只有男生和女生。下面的符号 S 表示短发， F, M 表示女生和男生。按照 Bayesian 公式，我们有

$$\begin{aligned} P(M|S) &= \frac{P(S|M)P(M)}{P(S|M)P(M) + P(S|F)P(F)} \\ &= \frac{0.8 \times 0.4}{0.8 \times 0.4 + 0.3 \times 0.6} = 0.64 \end{aligned}$$

这个短头发的是男生的概率 0.64 比男生的总概率 0.4 大很多。直观上这是因为短头发这个特征和男生之间存在正相关。这个短头发的是男生的概率比男生是短头发的概率 0.8 小很多，反过来短头发的是女生的概率 0.36 比女生是短头发的概率 0.3 要大，这个结果和这个学校女生偏多是有关系的。例如，当男女比例改成 2 : 8 的时候，我们得到 $P(F|S) = 0.6$ 。也就是说，由于女生总体比例高，就算看到短发的，实际上更大可能还是女生。

这个计算提示我们，如果我们要解决类似的问题，需要从实际样本中统计哪些量——这里有男女比例，男生留短发的概率，女生留短发的概率。这些对于实际问题的解决是非常有意义的。这些计算出来的结论，实际上，如果我们头脑足够清醒，都可以通过直观分析来理解和体会。例如极端的情况，这个学校只有女生，那么，无论看到长发短发，自然就是女生。因此，整体男女比例以及所关注的特征和男女的相关性决定了短头发的女生的概率。还有的问题，有可能直观分析就会更加的困难了。例如下面的两个问题。

例 7.5 (从观测到真值). 从观测到真值：一个未知状态 $s_w = \pm 1$ 以概率为 q 取值为 1，发送到你手上一个信号 s ， s 以概率 $p > 0.5$ 取与 s_w 相同的值。

问，如果你收到信号 $s = 1, s_w = 1$ 的几率是多少？如果你收到 10 个信号都是 1 的时候呢， $s_w = 1$ 的几率是多少？

我们先来计算观测到一个信号 $s = 1$ 的时候， $s_w = 1$ 的几率，也就是，

$$\begin{aligned} & P(s_w = 1 | s = 1) \\ &= \frac{P(s = 1 | s_w = 1) P(s_w = 1)}{P(s = 1 | s_w = 1) P(s_w = 1) + P(s = 1 | s_w = 0) P(s_w = 0)} \\ &= \frac{pq}{pq + (1-p)(1-q)}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

当收到多个信号都是 $s = 1$ 的时候，我们有

$$\begin{aligned} & P(s_w = 1 | s^{1 \dots n} = 1) \\ &= \frac{P(s^{1 \dots n} = 1 | s_w = 1) P(s_w = 1)}{P(s^{1 \dots n} = 1 | s_w = 1) P(s_w = 1) + P(s^{1 \dots n} = 1 | s_w = 0) P(s_w = 0)} \\ &= \frac{p^n q}{p^n q + (1-p)^n (1-q)}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

如果 $p > 0.5 > (1-p)$ ，那么，随着 n 的增加， $P(s_w = 1 | s^{1 \dots n} = 1)$ 肯定会趋近于 1。但是，对于任何有限大小的 n ， q 的影响可能都不能忽略。

例 7.6 (三个门的游戏). 三个门的游戏：你面对三个门，其中一个门后面有一百万现金，其他两个门后面没有钱。现在，你先选择好一个门，然后游戏的主持人打开一个后面没有钱的门，问你：是否想改变你之前的选择？你怎么办？

这个问题的一个典型的思考是这样的：之前三个相同的门里面选一个，选中的概率是 $\frac{1}{3}$ ；现在，在剩下的两个相同的门里面选一个，选中的概率是 $\frac{1}{2}$ 。不管是否改变，选中的概率都是 $\frac{1}{2}$ 。因此，是否改变无所谓。在这个思考里面，看起来，我们选择了一个捷径——我们认为去掉与否那扇空的门，另外两个门的情况是一样的。看起来这好像没有错。

当然，我们可以做多次实验，来看看到底改变和不改变得到一百万的概率是不是一样的。我们可以在计算机上做模拟实验，也可以用实际的门（盒子）来做“真实”（放一百万在盒子里，如果有的话）的实验。为了简化实验，我们假设不管实际上钱在哪一个门后面，我们一开始都选择第一个门 A。当然，我们也可以这样假设，钱就在第三个门 C 后面，但是，一开始的

选择可以是 A, B, C 中任意一个。这两个假设是完全一致的（为什么？），尽管如果真的要所有的情况都考虑到的话，我们应该考虑一下 9 中情形：钱在哪里的三个可能和第一次选择哪个门的三个可能。注意，再一次强调，这样的基于“对称性”的考量，用得好的时候是捷径，用得不好的时候是陷阱。

我们先采用第一种简化假设：一开始就选 A ，钱在那里随机。对于钱在 A 里面的情形 ($\frac{1}{3}$)，将来打开另一个门之后，如果换，则拿不到钱，不换拿到。对于钱在 B 里面的情形 ($\frac{1}{3}$)，将来打开 C 门之后，如果换，则拿到钱，不换则拿不到。对于钱在 C 里面的情形 ($\frac{1}{3}$)，将来打开 B 门之后，如果换，则拿到钱，不换则拿不到。于是，在两种情形下 ($\frac{2}{3}$) 换拿到钱，在一种情形下 ($\frac{1}{3}$)，不换拿到钱。于是，换更好。也就是说，如果我们先选择 A ，主持人打开空门 B 的话，在剩下的 A 两个门里面，实际上 C 门后面有钱的概率更大。这个和我们之前的两个们无论在什么时候都相同的直观捷径不同。这个怎么回事呢？

我们再来用第二种假设：钱在 C 后面，一开始的门随机选。如果一开始选择 A ，则主持人肯定打开 B ，于是换就拿到钱。如果一开始选择 B ，则主持人肯定打开 A ，于是换就拿到钱。如果一开始选择 C ，则主持人肯定打开 A 或者 B 中的一个，于是不换拿到钱。于是，我们还是发现，换得到钱的概率是 $\frac{2}{3}$ ，不换得到钱的概率是 $\frac{1}{3}$ 。

通过前面三个不同的分析，我们已经看到，确实应该换，但是，我们的简化捷径的问题处在哪里，还是不太清楚——为什么不能假设剩下的两个门情况一样呢？

现在，我们来做理论计算，尽管上面的两种“实验”我们也是通过计算来实现的，但是这个计算实际上就是去数一数实际可能发生的情况。这个理论计算需要用到 Bayesian 公式。假设现在我们面对的情形是一开始选择了 A ，主持人打开了 B ，我们要从 A, C 里面来选择。下面，符号 $B = 0^r$ 表示 B 被打开了而且没有钱。 $P(A = 1) = \frac{1}{3}$ 和 $P(A = 0) = \frac{2}{3}$ 都是先验概率。

$$\begin{aligned} P(A = 1|B = 0^r) &= \frac{P(B = 0^r|A = 1)P(A = 1)}{P(B = 0^r|A = 1)P(A = 1) + P(B = 0^r|A = 0)P(A = 0)} \\ &= \frac{\frac{1}{2}\frac{1}{3}}{\frac{1}{2}\frac{1}{3} + \frac{1}{2}\frac{2}{3}} = \frac{1}{3} \end{aligned}$$

通过上面这个表达式，我们清楚地看到，实际上，根本原因是因为 $A = 0$ 的可能性 ($\frac{2}{3}$)，经过打开 B 门这个动作，完全地转变到了 C 上去。主持人打

开门的动作并不是随机的，他必须选择那个没有钱的们来打开。正是有于这一点，就导致了对称性分析的失败。当然，另外那两个 $\frac{1}{2}$ 的因子也是重要的，前者 $P(B = 0'|A = 1)$ 表示 A 有钱的条件下 B 被打开的概率。这时候有两个选择的可能，选中 B 相当于一半的概率。后者 $P(B = 0'|A = 0)$ 表示 A 没钱的条件下 B 被打开并且没钱的概率。这个时候既可能是 B 没钱也可能 C 没钱，支持人选择没钱的打开，占有一半的概率。

通过这两个例子，我们企图展示，第一，Bayesian 公式的威力——它可以代替很多需要巧妙构造的逻辑推理的过程，能够得到很多看起来得不到的信息；第二，Bayesian 公式运用时候的微妙的地方——哪个是确定的条件，哪个是计算概率的对象，以及在每一个计算中这两个东西和实际问题的联系；第三，科学很多时候和简单的直觉不太一样，并且可以通过做实验或者模拟实验的方式来研究，或者通过寻找或者运用更加一般的理论来描述现实；最后，如果新的直觉——在这里就是看到为什么 B 打开之后，其实 A, C 不一样了——能够形成，尽管它也不一定是正确的，对于理解问题有的时候也是有帮助的。将来我们还会发现反证法和归纳法实际上就是 Bayesian 公式，科学的进步也是 Bayesian 公式，同时 Bayesian 公式也是统计学的基础。

习题 7.1. 灯泡厂商的决策：考虑一个灯泡厂商，在考虑雇佣质检人员。灯泡厂商知道自己的工艺水平也就是合格率 q 。质检人员主要技术指标是 $P(\text{pass}|\text{good}) = p^{pg}$ 与 $P(\text{fail}|\text{bad}) = p^{fb}$ ，就是好的产品的通过率，以及坏的产品的检出率。理想的质检人员是两者都是 100%，但是实际上有的人要求严 (harsh 型)，好的也能被看成坏的；还有的人要求松 (easy 型)，坏的也能看成好的。只有质检合格的产品才进入市场。问：消费者考虑的出发点主要是 $P(\text{good}|\text{pass})$ ，也就是检出状态为“好”的产品之中坏产品的可能性，这个与厂商的选择有什么关系？如果你是厂商，为了增强消费者的信心，你应该雇佣什么样的质检人员？如果你是厂商，为了获取最高额的利润，你应该雇佣什么样的质检人员？假设这个产品的卖出价格为 Pr ，成本为 Ct ，如果消费者发现上当受骗，则惩罚为 Fn ，假设进入市场的坏的产品必然能够被消费者检出。如果这个厂商改进工艺水平提高产品合格率，会带来什么变化？

习题 7.2. 死刑犯的问题：有三个待枪决的死刑犯 A, B, C ，法官随机选择了

其中一个人来赦免，但是不能告诉那个被赦免的人。于是，犯人 A 想了一个问题问法官，“如果赦免的不是 A 则请告知是哪一个，如果赦免的是 A 则请随机选择一个答案告诉我”，法官诚实作答并且提供的答案是 B。请问这个时候，A 被赦免的几率大，还是被执行死刑的几率大？这个问题还可以不用 Bayesian 公式，而是通过列出所有可能的情形的方式来回答。请尝试。

7.4 分布函数、矩和特征函数

在这一节，我们只关心有数字特征 x 和分布函数——累积分布函数 $F(x) = P(\xi(\omega) < x)$ 或者密度分布函数 $f(x) = \frac{d}{dx}F(x)$ ——的随机变量 ω 。

注意，对于连续变量，密度分布函数比较自然，而对于离散随机变量，我们需要用到 Dirac δ 函数。有了随机变量和概率分布函数的概念之后，我们来学习随机变量的各阶矩和几个典型的概率分布函数的各阶矩，并且从各阶矩建立特征函数的概念，以及讨论一下特征函数和分布函数之间的关系。

定义随机变量 $x(\omega)$ ——以后经常直接称为随机变量 x ——的均值，或者叫做期望，或者叫做一阶原点矩为，

$$E(x) = \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dF(x) x. \quad (7.13)$$

接着定义各阶原点矩为

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dF(x) x^n, \quad (7.14)$$

和各阶中心矩为

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle)^n f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dF(x) (x - \langle x \rangle)^n. \quad (7.15)$$

中心矩的中心的意思就是从均值开始算起。原点矩的原点的意思就是从原点开始算起。

分布函数的特征函数是分布函数的 Fourier 变换（其实和通常的 Fourier 变换相差一个负号，不过，由于正逆 Fourier 变换完全等价，这个符号完全就是习惯问题，在这里忽略），

$$\tilde{f}(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dF(x) e^{ikx}. \quad (7.16)$$

由于密度分布函数肯定是平方可积函数，所以Fourier 变换必然存在，而且完全可逆，也就是，密度分布函数是特征函数的Fourier逆变换，

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \tilde{f}(k). \quad (7.17)$$

如果我们将特征函数取导数，可以得到

$$\left. \frac{d^n}{dk^n} \tilde{f}(k) \right|_{k=0} = \int_{-\infty}^{\infty} dx (ix)^n e^{ikx} f(x) = i^n \langle x^n \rangle. \quad (7.18)$$

于是，如果 Taylor 级数求和收敛的话，我们有了各阶矩，就有了 $\tilde{f}(k)$ 的各阶导数，接着就有了 $\tilde{f}(k)$ ，根据逆变换，就有了原始的分布函数 $f(x)$ 。因此，从现在开始，我们认同给定的各阶矩的值的集合、给定特征函数和给定的分布函数。已知这三样东西的其中任何一样，就相当于知道了所有。

我们来计算一个正态分布函数的各阶矩和特征函数。

例 7.7 (正态分布函数的矩和特征函数). 正态分布函数 $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ ，计算它的各阶矩和特征函数。

$$\begin{aligned} \tilde{f}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu+ik)^2}{2}} e^{i\mu k} e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2}}. \\ &= e^{i\mu k} e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2}}. \end{aligned}$$

一二阶矩可以计算如下：

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{1}{i} \frac{d}{dk} \tilde{f}(k) = \frac{1}{i} (i\mu - k) e^{-\frac{k^2}{2}} \Big|_{k=0} = \mu, \\ \langle x^2 \rangle &= \frac{1}{i^2} \frac{d^2}{dk^2} \tilde{f}(k) = \sigma^2 + \mu^2, \end{aligned} \quad (7.19)$$

更高阶矩的计算见习题 7.3。

我们发现正态分布的Guass 函数的特征函数还是一个Guass 函数。顺便定义我们也定义一下正态分布的累积分布函数，

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x d\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (7.20)$$

习题 7.3 (正态分布高阶矩). 运用正态分布的特征函数求出来高阶原点矩和高阶中心矩。

例 7.8 (随机变量之和的随机变量). 随机变量 x_1, x_2 同取值于标准正态分布随机数，计算两者之和 $y = x_1 + x_2$ 的密度分布函数。更一般地证明：对于通过对两个取值于独立同分布的随机变量取和所得到的随机变量，其分布函数的特征函数，等于原始的分布函数的特征函数的平方。

$y = x_1 + x_2$ 的累积分布函数和密度分布函数分别是，

$$\begin{cases} G(y) = P(x_1 + x_2 < y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{y-x_1} dx_2 f(x_1) f(x_2), \\ g(y) = \frac{d}{dy} G(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 f(x_1) f(y - x_1). \end{cases}$$

于是，得到特征函数，

$$\begin{aligned} \tilde{g}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{iky} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 f(x_1) f(y - x_1), \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy dx_1 e^{ikx_1} f(x_1) e^{ik(y-x_1)} f(y - x_1), \\ &= \tilde{f}(k) \tilde{f}(k). \end{aligned}$$

7.5 中心极限定理

中心极限定理的含义是多个独立同分布的均值和方差有限的随机变量的和的随机变量符合正态分布。这个定理是大量统计学问题的研究基础。有的时候，也是我们粗糙地理解和把握世界中大量统计数据的基础。比如说，如果某个事件其数字特征可以看成是多个独立的原因造成的事件的数字特征之和，那么这个事件的数字特征就往往可以看作满足正态分布，不管构成它的基础的事件的数字特征满足什么分布。这个结论非常强。它对吗，怎么证明，证明了以后又如何理解为什么会这样？我们现在来讨论这些问题。

例 7.9 (正态分布的实际生活中的例子). 例如一个群体（这是一个微妙的问题：是不是要按照年龄、地域、性别等等分类呢？）的人的身高、体重通常被认为是正态分布的¹。很多时候，物理仪器测量的误差也被认为是正态分

¹也有把生理指标看作对数正态分布的。见 Wikipedia “Normal distribution” 词条：https://en.wikipedia.org/wiki/Normal_distribution。

布的。当学生比较多的时候，考试成绩也被认为是正态分布的。当然，对于给定的实际数据，是不是符合正态分布是统计学解决的问题。

定理 7.2: 中心极限定理

假设 $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ 是独立同分布随机数，其均值和方差分别是 $\langle x_i \rangle = \mu, \langle (x_i - \mu)^2 \rangle = \sigma^2$ 都有限，则，当 $N \rightarrow \infty$ 的时候，随机变量 $S_N = \sum_i x_i$ 满足均值是 $N\mu$ ，方差是 $N\sigma^2$ 的正态分布，

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f(S_N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}\sigma} e^{-\frac{(S_N - N\mu)^2}{2N\sigma^2}}. \quad (7.21)$$

或者说，定义 $s_N = \frac{S_N - N\mu}{\sqrt{N}\sigma}$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f(s_N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{s_N^2}{2}}. \quad (7.22)$$

这个定理相当神奇：一个看起来无害的操作——同分布随机数加起来而已，就能够得到某个特定的分布函数。什么原因使得这个Guass 函数能够凸显出来，跟其他函数不一样呢？为了更好地看到这个函数的特殊性。我们来做一个粗糙的（但是原则上可以严格化的）跟通常的教科书不太一样的证明。

证明 7.2. 首先，按照我们之前证明的两个随机变量取和的特征函数，我们来构造一个函数空间中的动力学过程：定义逐次变换的随机变量序列 $s^{(2)} = \frac{x_1 + x_2 - 2\mu}{\sqrt{2}\sigma}, s^{(3)} = \frac{s^{(2)}_1 + s^{(2)}_2}{\sqrt{2}}, \dots$ ，一直到 $s^{(n)} = \frac{s^{(n-1)}_1 + s^{(n-1)}_2}{\sqrt{2}}$ ，然后我们来计算每一个 $s^{(n)}$ 对应的特征函数和 $s^{(n-1)}$ 的特征函数之间的关系，除了第一个递推关系 $\tilde{f}^{(1)} \rightarrow \tilde{f}^{(2)}$ （这个比较复杂，见习题 7.4）

$$\tilde{f}^{(n+1)}(k) = F(\tilde{f}^{(n)}(k)) = \left(\tilde{f}^{(n)}\left(\frac{k}{\sqrt{2}}\right) \right)^2. \quad (7.23)$$

于是，我们问，上面这个递推公式所代表的特征函数在函数空间中的运动，有没有不动点，而且最好是稳定的不动点。我们把稳定性的问题先放一边，先看看有没有不动点。首先，我们发现，如果把正态分布函数的特征函数

$\tilde{f}^*(k) = e^{-\frac{k^2}{2}}$ 放进这个迭代过程中去，则，确实是不动点，

$$\tilde{f}^*(k) = F(\tilde{f}^*(k)) = \left(e^{-\frac{\left(\frac{k}{\sqrt{2}}\right)^2}{2}} \right)^2 = e^{-\frac{k^2}{2}}. \quad (7.24)$$

严格来说，我们还需要讨论 $F(\tilde{f}(k))$ 还有没有其他不动点，这个正态分布不动点在多大范围内什么条件下是稳定的（实际上进一步的讨论可以发现，只要均值方差有限则必然收敛到正态分布），等等问题。但是，这里为了搞懂为什么会有中心极限定理，目前这些就够了。这个构造的函数空间中的动力学过程实际上就是随机变量相加的过程对应着的特征函数的变化过程。于是，这个动力学过程有“稳定的”（我们还没有讨论稳定性）不动点，则正好说明，随机变量的加法会在特征函数空间定义一个自然的迭代动力学过程，而这个动力学过程有至少一个不动点，这样的不动点只要稳定，应该都会对应着某个中心极限定理 [119]。更加传统的证明，可以看 [116]。

习题 7.4 ($s^{(1)} \rightarrow s^{(2)}$ 的特征函数迭代关系). 推导出来 $s^{(2)} = \frac{x_1+x_2-2\mu}{\sqrt{2}\sigma}$ 导致的特征函数的递推关系。

7.6 概率论的 Dirac 符号形式

结束一般教材上都可以见到的概率论的主体内容（除了中心极限定理的稍微另类一点的证明）之后，我们来呈现我们在这里介绍概率论的真正的目的：概率论的 Dirac 符号形式。让我们从古典概型开始。一个古典概型的分布函数除了一个列表之外，还可以记作，

$$\rho = \sum_j p_j |j\rangle\langle j|, \quad (7.25)$$

其含义完全就是事件 $|j\rangle\langle j|$ 的几率是 p_j 。惟一的不同之处在于，现在，我们可以用加号（“+”，“ Σ ”）了，而以前我们只能够用列表。既然完全表达的一样的信息，为什么要这么做？我们希望把概率性叠加原理强调出来。对于古典概型，我们知道各个基本简单事件本来就是互斥的，也就是 $\langle j | k \rangle = 0$ ，或者记为 $tr((|j\rangle\langle j|)^\dagger |k\rangle\langle k|) = 0$ ，表示与基本简单事件对应的基矢或者矩阵

相互正交。于是，这个密度矩阵反映的正好就是这个概率性叠加原理。例如，我们考虑一个事件 A 的概率，记事件 A 的每一个基本简单事件的元素为 α_j ，则

$$A = \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|, \quad (7.26)$$

从而通过

$$P(A) = \text{tr}(A\rho), \quad (7.27)$$

我们得到

$$P(A) = \sum_{\alpha_j} p_{\alpha_j}. \quad (7.28)$$

如果有一个与 A 互斥的事件 $B = \sum_j |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$ ，满足

$$\text{tr}(A^\dagger B) = 0, \quad (7.29)$$

也就是任意 α_j, β_k 满足

$$\langle\alpha_j|\beta_k\rangle = 0, \quad (7.30)$$

则

$$P(A \cup B) = P(A + B) = P(A) + P(B). \quad (7.31)$$

注意，这个通过把事件 A, B 写成矩阵 A, B 的形式，这个事件集合的加法真的可以表达成加法运算的形式。这个就是我们引入概率论的Dirac 符号的目的。

这个记号还可以表达更进一步的含义。如果我们有一个 Ω 上的函数，例如骰子的正面的读数，或者是这个读数的函数，例如如果这个读数是奇数就输一块钱 ($m = -1$)，否则赢一块钱 ($m = 1$)，那么，我们可以把这个函数写成矩阵形式，例如前者为

$$S = \sum_{j=1}^6 j |j\rangle\langle j|, \quad (7.32)$$

后者为

$$M = \sum_{j=1}^6 (-1)^j |j\rangle\langle j|. \quad (7.33)$$

更一般的随机变量的函数可以记为

$$f_{\Omega} = \sum_{j \in \Omega} f_j |j\rangle \langle j|. \quad (7.34)$$

这个时候，我们仍然可以用公式 (7.27) 的推广形式，

$$\langle f_{\Omega} \rangle = \text{tr}(f_{\Omega} \rho) \quad (7.35)$$

来计算平均值，例如这两者分别为

$$\langle S \rangle = \sum_{j=1}^6 j p_j, \quad (7.36)$$

和

$$M = \sum_{j=1}^6 (-1)^j p_j. \quad (7.37)$$

总结一下，引入概率论的Dirac 符号之后，我们的概率论基本公式成了公式 (7.25)，公式 (7.34) 和公式 (7.35)。以上的符号是以离散古典概型为例引入的，实际上对于连续古典概型也适用，甚至对于一般的概率空间也能够使用。但是，为了记号简单，而且以后也基本上仅仅在离散变量上使用这套符号，更一般的情形我们就不讨论了。

为了熟悉这套符号，学会熟练使用公式 (7.25)，公式 (7.34) 和公式 (7.35)，我们来用这个符号完成之前的一个例题。

例 7.10 (Dirac 符号用于对称骰子问题). Dirac 符号用于对称骰子问题：有一个实验，你扔一个骰子，如果扔出来多少点小于 6，就能够得到多少钱；如果刚好是 6 则不得钱。请用 Dirac 符号来计算一下每一次扔骰子你将平均得到多少钱？

对称骰子的状态就是 $\rho = \frac{1}{6} \sum_{j=1}^6 |j\rangle \langle j|$ ，测量（观察）以后得钱的算符是

$$Q = \sum_{j=1}^5 j |j\rangle \langle j| + 0 |6\rangle \langle 6|, \quad (7.38)$$

于是，平均得钱数量就是，

$$\langle Q \rangle = \text{tr}(Q \rho) = \sum_{j=1}^5 j p_j = 2.5. \quad (7.39)$$

得钱的可能分别是 $q = 1, 2, 3, 4, 5, 0$, 其相应概率分别是

$$\langle P_q \rangle = \text{tr}(\rho |q\rangle \langle q|) = \frac{1}{6}. \quad (7.40)$$

注意其中 $q = 0$ 刚好对应着原来的 $j = 6$ 。

习题 7.5 (Dirac 符号用于对称骰子奇偶性问题). Dirac 符号用于对称骰子奇偶性问题: 把公式 (7.37) 中的奇偶性算符 M 中的 $(-1)^j$ 算出来, 表达成本征值等于 ± 1 的形式, 然后重新计算可能得到的钱的数量, 以及每一种可能的几率。注意, 在这个问题中, 你可能要处理简并本征向量 (一个本征值对应着多个本征向量) 的问题。

7.7 随机过程初步

概率论的基本理论完了之后, 一个自然的进阶内容就是随机过程。随机过程实际上就是高维随机变量的分布函数的问题。这个高维随机变量又可以看成是一个随机变量的时间序列。而这个随机变量的时间序列又可以看成是每一个时刻一个随机变量在其分布函数中抽样的结果。这里, 我们的主要目的是讲清楚什么是随机过程, 对随机过程的描述有哪一些角度。后面我们有专门的章节来讲解随机过程, 介绍典型的随机过程, 随机过程的数学描述和求解。那部分, 我们放到学完物理之后再一次回头来讲。那个时候, 由于力学方程的概念的建立, 我们的随机过程的描述会更具有直观性。

例 7.11 (翻硬币操作的算符形式). 翻硬币操作的算符形式: 硬币的状态和使硬币翻转的操作分别用什么数学形式描述?

硬币的状态是有两个可能状态 (标记为 $S = (1, -1)$) 的一个随机变量, 因此如果以密度矩阵的形式描述硬币的状态, 我们有

$$\rho = p |1\rangle \langle 1| + (1 - p) |-1\rangle \langle -1|. \quad (7.41)$$

硬币翻转的操作使得 p 与 $(1 - p)$ 相互交换, 下面的操作实现这个交换的过程。定义

$$X = |1\rangle \langle -1| + |-1\rangle \langle 1|. \quad (7.42)$$

算符的作用就是把 -1 的状态变成 1 , 把 1 的状态变成 -1 。可以验算, 按照下面的矩阵相乘的方式计算, 这个算符就能实现翻转,

$$\rho = X\rho_0X^\dagger = X\rho_0X. \quad (7.43)$$

最后的等式是因为 $X^\dagger = X$, 一般情况下不成立。实际上, 我们还可以选择 $X \rightarrow iX$, 把 X 算符乘上一个虚数单位 i , 来实现同样的操作。这个时候, 这个最后的等式就不对了。Hermitian 共轭的操作就必须留着。

有了这个关于硬币翻转的算符描述之后, 我们就可以来讨论多次硬币翻转的随机过程了。

例 7.12 (硬币状态演化的随机过程). 硬币状态演化的随机过程: 考虑一个硬币, 初始状态为正面向上, 经过如下的过程, 考察最终状态以及长时间以后多次独立观察出现状态的几率: 扔另一个随机硬币, 此硬币正面 (反面) 向上的几率为 p ($1 - p$), 此时翻转 (不翻转) 之前的硬币。

标记硬币的状态集合为 $S = (1, -1)$ 分别表示正面与反面。记 t 时刻硬币的状态为 $\xi_t \in S$, 则在 $t + 1$ 时刻, 硬币的状态以 p ($1 - p$) 的几率为 $\xi_{t+1} = -\xi_t$ ($\xi_{t+1} = \xi_t$)。按照上一个例子里面的硬币翻转的算符描述, 这个随机翻转的过程也就是

$$\rho_{t+1} = pX\rho_tX^\dagger + (1 - p)I\rho_tI^\dagger = pX\rho_tX + (1 - p)I\rho_tI \triangleq \mathcal{L}\rho_t, \quad (7.44)$$

或者平均值满足

$$\langle \xi_{t+1} \rangle = -p\langle \xi_t \rangle + (1 - p)\langle \xi_t \rangle. \quad (7.45)$$

其中第二式完全由对第一式求平均 $\langle \xi \rangle = \text{tr}(\hat{\xi}\rho)$ 得来。其中 $\hat{\xi}$ 是随机变量 ξ 的算符形式,

$$\hat{\xi} = |1\rangle\langle 1| - |-1\rangle\langle -1|. \quad (7.46)$$

如果回到之前的矢量形式的语言而不是算符的形式, 记 t 时刻硬币的分布函数为 $P_t = (P(1, t), P(-1, t))^T$, 则

$$P_{t+1} = pXP_t + (1 - p)IP_t \triangleq \Gamma P_t, \quad (7.47)$$

也就是

$$\begin{bmatrix} P(1, t+1) \\ P(-1, t+1) \end{bmatrix} = (pX + (1-p)I) \begin{bmatrix} P(1, t) \\ P(-1, t) \end{bmatrix} \quad (7.48)$$

$$= \begin{bmatrix} 1-p & p \\ p & 1-p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(1, t) \\ P(-1, t) \end{bmatrix}, \quad (7.49)$$

或者把这个随机变量的演化过程记为

$$\xi_{t+1} = \eta \xi_t, \quad (7.50)$$

其中

$$\eta = \begin{cases} -1 & \text{with probability } p \\ 1 & \text{with probability } (1-p) \end{cases}. \quad (7.51)$$

方程公式 (7.44), 公式 (7.47), 公式 (7.50) 从不同的角度描述的了相同的信息相同的过程, 但是公式 (7.45) 仅仅描述了平均值的信息。公式 (7.44), 公式 (7.47) 从随机变量的分布函数的角度进行描述, 公式 (7.50) 从随机变量的取值的角度来描述。注意, 公式 (7.44), 公式 (7.47) 都是两个算符取和的形式, 但是公式 (7.50) 不是两个随机变量的值取和的形式。公式 (7.50) 看起来形式简单, 但是所有的奇妙之处都被藏在了公式 (7.51) 引入的随机变量里面。如果我们回到这一章介绍的新的符号体系——用密度矩阵来描述随机变量, 我们会发现公式 (7.50) 完全就是公式 (7.44) 的另外一种写法。

这时候, 我们讨论 ρ_t 的稳态分布是什么, P_t 的稳态分布是什么, 或者 ξ_t 的整个轨道 $\vec{\xi} = (\xi_0, \xi_1, \dots)^T$ 的分布函数是什么, $\langle \xi_{t+1} \rangle$ 的长时行为是什么等问题。实际上, 如果读者已经从这个例子中理解了这几个不同角度的描述方式, 不同层次的描述方式, 那么这些问题的答案对于我们阐述的主体内容已经不重要了。但是, 为了这个例子的完整性, 我们在下一个例子中继续求解这些问题。

从这个例子当中, 我们看到随机过程描述的对象实际上是一个随机变量的演化过程的所有的轨道 $\{\vec{\xi}\}$ 的几率分布 $P(\xi_1, \xi_2, \dots)$, 也可以看成是每一个时刻的随机变量 ξ 的密度矩阵 ρ_t 或者分布函数 $P(\xi, t)$ 的演化过程 (如何由之前的密度矩阵 $\rho_{\tau < t}$ 分布函数 $P(\xi, \tau < t)$ 演化得来), 而且这个分布函数可以用密度矩阵的形式, 也可以采用概率矢量的形式。在特殊情况下

(以后我们会知道，这个例子中的特殊情况是这个过程是一个Markov 过程)，这个演化机制可以是分布函数的线性方程。通常在这个问题中，我们关心分布函数的稳态形式，随机变量的数字特征的长时行为，或者更完整的信息 $\{\xi\}$ 的分布函数。

明白了这个随机过程的一般图景之后，我们下一步要解决的问题就是对于一些常用的随机过程，随机变量的演化方程，随机变量的分布函数的演化方程，有哪一些基本的形式，如何解析与数值求解。这些任务我们将来在有关随机过程的专门章节里来完成。在下一部分，我们仅仅用几种不同方法来解决这个翻硬币的例子。

例 7.13 (硬币状态演化的随机过程, 续). 硬币状态演化的随机过程：续上题，现在我们来求解硬币的长时状态。

让我们从公式 (7.47) 出发，我们已知 P_0 ，那么

$$P_t = \Gamma^n P_0, \quad (7.52)$$

其中

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1-p & p \\ p & 1-p \end{bmatrix}. \quad (7.53)$$

硬币的稳态分布，或者说硬币的长时状态实际上由 $\lim_{t \rightarrow \infty} P_t$ 决定，而这个极限由算符 Γ 的本征向量决定： Γ 最大本征值对应的本征向量会活下来，其它都会消失。可以验证这个最大本征值是 1，其对应的本征向量为

$$P_\infty = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (7.54)$$

因此，这个硬币如果做多次独立测量（多次独立测量的含义是从头开始制备多个这样的硬币，过很长一段时间以后测量，然后记录结果，每次测量完成以后扔掉）的结果是一半的几率看到硬币正面向上，另一半的几率看到硬币反面向上。

这里我们主要采用了把随机分布函数看成向量，然后把随机过程看成这个向量的线性变换的方法，然后求解这个变换的不变向量。以后我们会看到更多其他的方法，但是这个基本的方法还是重要的方法之一。这个线

性变换的过程更加一般地可以写成,

$$P(n, t+1) = \sum_m [W_{m \rightarrow n} P(m, t) - W_{n \rightarrow m} P(n, t)], \quad (7.55)$$

其中 n, m 表示状态的标号, t 是时间, $W_{m \rightarrow n}$ 称为状态 m 到 n 的跃迁几率。以后我们会做关于这个方程的更进一步的研究。

最后, 我们就这个例子作一点点进一步讨论。这个讨论与公式 (7.50)、公式 (7.44) 以及公式 (7.45) 的形式有关, 与将来量子力学的数学形式有关。

例 7.14 (硬币状态演化的随机过程, 续). 硬币状态演化的随机过程, 续: 考虑随机变量的可加性, 也就是一个随机变量如果可能取两个或者多个不同的值, 能把这两个值加起来 (直接加起来, 或者按照概率加起来) 然后, 还是代表这个随机变量吗? 在讨论这个问题的过程中, 我们顺便来介绍描述随机过程随着时间演化的两种方式: 分布函数或者说密度矩阵变化, 描述随机变量自己或者测量变量的算符不变; 或者反过来, 描述随机变量自己或者测量变量的算符变化, 分布函数或者说密度矩阵不变。

前面我们已经用密度矩阵的演化方程公式 (7.44) 描述这个翻硬币的过程 (为了方面对比, 重新写在下面),

$$\rho_{t+1} = pX\rho_t X + (1-p)I\rho_t I \triangleq \mathcal{L}\rho_t, \quad (7.56)$$

其中初始条件,

$$\rho_0 = |1\rangle\langle 1|. \quad (7.57)$$

这个时候算符是不随时间演化的,

$$\hat{\xi} = 1|1\rangle\langle 1| - 1|-1\rangle\langle -1|. \quad (7.58)$$

这个描述下, 算符是不变的, 密度矩阵是变化的。

现在, 我们还可以写下算符形式的方程来描述这个系统的演化,

$$\hat{\xi}_{t+1} = pX\hat{\xi}_t X^\dagger + (1-p)I\hat{\xi}_t I^\dagger \triangleq \mathcal{L}^\dagger\xi_t, \quad (7.59)$$

其中初始条件,

$$\hat{\xi}_0 = 1|1\rangle\langle 1| - 1|-1\rangle\langle -1|. \quad (7.60)$$

与公式 (7.59) 相配套的密度矩阵是

$$\rho = |1\rangle\langle 1|, \quad (7.61)$$

这里算符是变化的，密度矩阵是不变的。这是两套不同的描述方法，前者把分布函数或者说密度矩阵作为演化过程描述的对象，后者把算符作为演化过程描述的对象。我们看一看两者是不是等价的。这里，我们简单地通过对比从两者得到的平均值的演化方程来检验。

结合公式 (7.56) 和公式 (7.58)，利用

$$\langle \xi \rangle = \text{tr}(\rho \hat{\xi}), \quad (7.62)$$

我们得到

$$\langle \xi_{t+1} \rangle = -p \langle \xi_t \rangle + (1-p) \langle \xi_t \rangle. \quad (7.63)$$

在推导上面的等式的过程中，我们用到了

$$X \hat{\xi} X = -\hat{\xi}. \quad (7.64)$$

结合公式 (7.59) 和公式 (7.61)，利用公式 (7.62) 我们也得到公式 (7.63)。这个推导过程稍微有点复杂，详细说明如下。

$$\begin{aligned} \langle \xi_{t+1} \rangle &= \text{tr}(\hat{\xi}_{t+1} \rho) \\ &= \text{tr}(p X \hat{\xi}_t X + (1-p) I \hat{\xi}_t I \rho) \\ &= p \text{tr}(\hat{\xi}_t X \rho X) + (1-p) \text{tr}(\hat{\xi}_t \rho) \end{aligned} \quad (7.65)$$

现在，我们只要证明 $\text{tr}(\hat{\xi}_t X \rho X) = -\langle \xi_t \rangle$ ，我们就完成了整个证明。首先，我们从公式 (7.60) 了解到 $\text{tr}(\hat{\xi}_0) = 0$ ，其次，我们还从公式 (7.59) 看到 $\text{tr}(\hat{\xi}_{t+1}) = 0$ ：

$$\text{tr}(\hat{\xi}_{t+1}) = p \text{tr}(X \hat{\xi}_t X) + (1-p) \text{tr}(I \hat{\xi}_t I) = p \text{tr}(\hat{\xi}_t X X) = 0. \quad (7.66)$$

这也就是说

$$\langle 1 | \hat{\xi}_t | 1 \rangle = -\langle -1 | \hat{\xi}_t | -1 \rangle. \quad (7.67)$$

于是，代入公式 (7.61) 有，

$$\text{tr}(\hat{\xi}_t X \rho X) = \text{tr}(\hat{\xi}_t X |1\rangle\langle 1| X) = \langle -1 | \hat{\xi}_t | -1 \rangle = -\langle 1 | \hat{\xi}_t | 1 \rangle = -\langle \xi_t \rangle. \quad (7.68)$$

实际上，对于更一般的 ρ ，我们也有上面的关系。证毕 ■

实际上可以检验更多的数字特征来验证他们的等价性，但是我们不再一一检验，就认为两个描述等价：状态在变算符不动或者算符在变状态不动的描述是等价的。

注意，算符和密度矩阵都是可以做有意义的加法运算的。但是，我们不能写出随机变量之间的类似的看起来像几个部分相加的等式

$$\xi_{t+1} \neq -p\xi_t + (1-p)\xi_t, \quad (7.69)$$

因为这个等式给出的 ξ_{t+1} 不等于 $1, -1$ 即使 ξ_t 等于 $1, -1$ ，也就是说， $1, -1$ 这个集合对于通常的数的加法这个操作是不封闭的，因此在不改变集合的情况下，这样的加法不能定义。这种**随机变量本身的不可加性，随机变量算符或者是随机变量的密度矩阵的可加性**是概率论的重要特征。

实际上，我们仔细观察还会发现，在这里

$$\mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L}. \quad (7.70)$$

但是，这是由于我们前面提到的 $X^\dagger = X$ 的原因，这个等式在更一般的情况下 ($X^\dagger \neq X$) 是不对的。可以证明更一般的情况下，这两个算符之间的关系正好是 Hermitian 共轭。以后，在量子力学中，我们会回到这个问题。

这个翻硬币的随机过程还可以通过抽取随机数做数值模拟的方式来分析：每一步，选取一个合适的随机数（以概率 p 取值为 1，则我们翻转硬币；以概率 $1-p$ 取值为 -1，则我们不翻转硬币），然后经过很长时间以后我们就得到一条轨道，经过独立的很多次的这样的轨道的模拟，我们就得到了轨道的随机样本，分析这个样本我们就能够得到所有我们要回答的问题的答案。这个方法，实际上叫做Monte Carlo 方法，是我们下一节的内容。

习题 7.6. 概率转移矩阵和 PageRank 拓展阅读：阅读概率转移矩阵和 Perron-Frobenius 定理，以及他们和 PageRank 的关系。然后找一个实际问题中的概率转移矩阵，计算其稳定分布。

7.8 Monte Carlo 方法

Monte Carlo 方法指的是对于给定的一个分布函数（或者随机过程），以 $[0, 1]$ 之间的均匀分布随机数为基础，来产生一个符合这个分布函数或者随机过程的样本。也就是，给定 $\hat{\rho}$ ，需要产生一个集合 $\{x_i\}$ ，使得 $\{x_i\}$ 的经验分布正好就是 $\hat{\rho}$ 。这里有一个问题：如何验证产生出来的样本集合 $\{x_i\}$ 的经验分布正好就符合给定的分布函数 $\hat{\rho}$ 。这个问题留给将来统计学部分再来回答。从样本计算出来经验分布并且和给定的分布函数去比较是统计学的基本任务。这一节我们暂时仅仅关注分布函数到样本的问题。有的时候，为了得到某些比较复杂的分布函数的样本，我们还需要构造随机过程来生成样本。例如将来我们在统计物理学讲到的用 Metropolis 算法来生成 Boltzmann 分布的样本。很多时候，这样的随机过程可以是一个 Markov 过程。那样的基于 Markov 过程的 Monte Carlo 方法也经常被称作 Markov 链 Monte Carlo (MCMC) 方法。在这一章，我们仅仅关注最基本的展示 Monte Carlo 方法思想的 Monte Carlo 方法。

当然 Monte Carlo 的这个基本任务自己可能是从其他问题中产生的，例如来自于高维积分或者不太友好的函数的积分，或者来自于某些随机过程的轨迹的模拟的需要，或者来自于统计物理学的特定的非常不友好的分布函数的统计量的计算等等。一旦有了样本，这样的任务就容易完成，例如统计量的计算就可以直接变成简单的对所有的样本在这个统计量下取和，积分则只需要变成数数 [116]。关于 Monte Carlo 问题的来源和应用，在这里就不再展开了，更加专门的书籍会有更完整的内容 [116, 120, 121]。

我们先来关心一个最简单的产生给定二项分布的样本的问题。

例 7.15 (Bernoulli 分布的 Monte Carlo 方法). 给定分布函数 $\hat{\rho} = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0|$ (者用通常的符号来表示 $\begin{bmatrix} p \\ 1-p \end{bmatrix}$)，以 $[0, 1]$ 之间的均匀分布随机数为基础，得到一个集合 $\{x_i\}$ ，使得 $\{x_i\}$ 的经验分布正好就是 $\hat{\rho}$ 。

从直觉上来说，我们只需要做下面的事情，取一个 $[0, 1]$ 之间的均匀分布随机数 ξ_i ，然后判断如果 $\xi_i < p$ 则，取 $x = 1$ ，否则取 $x_i = 0$ ，就可以得到这个 Bernoulli 分布的样本 $\{x_i\}$ 。由于 ξ_i 是连续变量，因此，我们忽略 $\xi_i = p$ 的情况不会造成有实质概率上的差别。我们也可以来简单粗糙地证明一下。 $\{x_i\}$ 就是一个 $\{0, 1\}$ 构成的集合，我们数一数里面的 0, 1 的数量分

别计为 N_0, N_1 , 则 $N_0 + N_1 = N$ 就是总样本的数量。按照前面的抽样方法显然, 我们有

$$P(x_i = 1) = p, P(x_i = 0) = 1 - p. \quad (7.71)$$

于是, 按照频率趋向概率, 我们自然有

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_1}{N} = p, \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_0}{N} = 1 - p. \quad (7.72)$$

于是, 这样的样本, 自然正好就代表了 Bernoulli 分布。当然, 如果真的需要检验, 例如是不是 $\frac{N_1}{N}$ 足够接近 p 了, 如果需要足够接近 N 至少要多大, 则还需要依靠统计学。

当然, 如果我们一定要在这里算, 也不是不可以。例如, 实际上 $N_1 = \sum_{i=1}^N x_i$, 因此, 我们很容易就可以估计出来对于给定的 N 来说, N_1 的均值为 $\langle N_1 \rangle = Np$ 和方差 $\langle \Delta^2 N_1 \rangle = Np(1-p)$ 。这些 x_i 都是独立同分布, 因此, N_1 的极限分布函数就是正态分布函数。于是, $\left\langle \frac{N_1}{N} \right\rangle = p$, $\left\langle \Delta^2 \frac{N_1}{N} \right\rangle = \frac{p(1-p)}{N}$ 。也就是说, 无论你想 $\frac{N_1}{N}$ 多么接近 p (以概率 1 在 p 的 ϵ 范围内), 你都可以通过采用足够大的 N 来实现 (例如 $N \gg \frac{p(1-p)}{\epsilon}$)。实际上, 我们在这里就通过中心极限定理和正态分布函数做了统计学要完成的工作。将来也会注意到中心极限定理和正态分布函数这些概率论知识也是统计学的重要基础。

现在, 我们有了非常简单的 Bernoulli 分布的 Monte Carlo 方法。上面的这个方法还可以这样来看: 先构造一个 Bernoulli 分布函数的累积分布函数——它是一个阶跃函数 $F(x) = p\theta(x) + (1-p)\theta(x-1)$, 然后, 我们按照抽取的均匀随机数 ξ_i 来画一条水平方向的线条, 找到累积分布函数和这个水平方向线条的交点, 从交点再画一条到 x 轴的垂线, 交点就是对应的样本 x_i 。如图 7.3(a) 所示。对于任何一个离散分布, 只要我们把累积分布函数画出来, 重复这个画水平再画垂直的线条, 就能得到一个样本。

实际上, 我们只需要做一个简单直接的推广就可以得到连续分布函数的样本。如图 7.3(b) 所示。我们也来粗糙证明一下。记目标密度分布函数为 $g(x)$, 相应的累积分布函数记为 $G(x)$ 。我们的做图方法实际上就是 $\eta = G^{-1}(\xi)$ (为了把 x 留给分布函数用, 这里把样本记做 η)。现在我们来看这样得到的 η 的累积分布函数,

$$F(\eta < x) = F(G^{-1}(\xi) < x) = F(\xi < G(x)) = G(x). \quad (7.73)$$

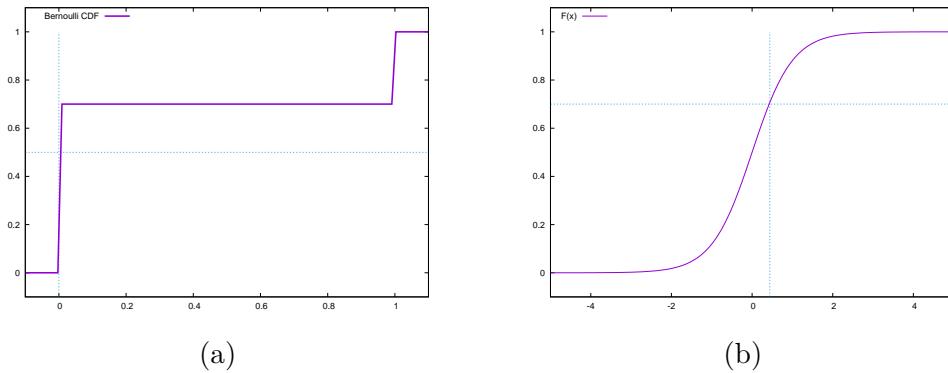


图 7.3: (a) 离散分布的 Monte Carlo 方法原理。(b) 连续分布的 Monte Carlo 方法原理。其中的曲线是累积分布函数。水平方向的线条是按照抽取的均匀随机数 ξ_i 来画的，找到累积分布函数和这个水平方向的交点以后，从交点画一条到 x 轴的垂线，交点就是对应的样本 x_i 。

其中，我们第二步用到了 $G^{-1}(\xi)$ 和 $G(x)$ 都是单调增函数的性质，第三步用到了 ξ 是一个 $[0, 1]$ 之间均匀分布函数的性质。当然，上面的这个证明实际上是在样本数量取无穷大的极限下做的，而更加严格的证明得考虑样本数量。这个可以参考概率论或者 Monte Carlo 方法的书，例如 [116, 120, 121]。

但是，这样的原理性方法有一个很大的缺陷，随机变量很多没有 $G(x)$ 的解析表达式，就算有反解出来也很困难。就算最常见的正态分布都是如此。怎么办？于是，在这个原理之上，我们就要去发明各种其他的方法来解决 Monte Carlo 方法的基本问题。当然，总是有一些聪明人能够找到一些聪明的办法的。其中，最著名的例子就是 Metropolis 算法。这个将来在统计物理学再补充。

在那之前，我们来欣赏两个正态分布的 Monte Carlo 方法。第一个方法很简单，运用中心极限定理，我们一次性产生很多个（例如 12 个） $[0, 1]$ 之间的均匀分布随机数，然后把这些随机数加起来得到一个样本。不断地重复这个过程就能够得到正态分布函数的样本。另一个方法更加巧妙。取一个二维正态分布函数， $f(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}}$ 。前者相当于两个正态分布函数的乘积。只要能够得到一对 (x, y) ，则拿出来那个 x 来用就得到了一维正态分布函数的样本。后者相当于做了一个变量替换 $x = r \cos(\theta)$, $y = r \sin(\theta)$ 。也就是说，只要能够获得 (r, θ) 的样本，则 (x, y) 的样本也就有了。

我们再来看看 (r, θ) 的样本如何获得。先观察在 (r, θ) 坐标下统计量的平均值是如何计算的，

$$\begin{aligned}\langle A(r, \theta) \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} A(r, \theta) e^{-\frac{r^2}{2}} r d\theta dr \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} A(r, \theta) e^{-\frac{r^2}{2}} d\theta d\left(\frac{r^2}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \tilde{A}(\sqrt{R}, \theta) e^{-R} d\theta dR\end{aligned}$$

这样就可以看作是 (R, θ) 两个变量的分布函数的统计量的计算了，而且，这两个变量各自的分布函数是，

$$\begin{aligned}f_R(R) &= e^{-R}, \\ f_\theta(\theta) &= \frac{1}{2\pi}.\end{aligned}$$

而这两个密度分布函数的累积分布函数及其逆函数都是能够解析求解的。求出来以后再把坐标变换回去，就得到

$$x = \sqrt{2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2), \quad (7.74a)$$

$$y = \sqrt{2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2). \quad (7.74b)$$

其中， ξ_1, ξ_2 是一对 $[0, 1]$ 之间的均匀分布随机数。

有了这个一个（子）学科的典型问题、典型思想和典型方法是什么，以后再学习更加具体的内容的时候就会容易很多，就会看得更加清楚。有关Monte Carlo 方法的大图景就介绍到这里。

习题 7.7 (翻过程的 Monte Carlo 模拟). 用 Monte Carlo 方法生成给定概率 p 取正面（将来代表翻转硬币）的随机数，然后用这个随机数实现上一节定义的翻硬币过程。在这个实现的样本的基础上，画出多次独立测量的平均值随着测量时间点的变化曲线。请做多次模拟，并注意区分一条轨道的不同时间点的状态和不同的轨道的状态。你将会得到 $\{(x_1^l, \dots, x_i^l, \dots, x_T^l)\}$ 这样的这个随机过程的记录。每一个 l 代表不同的随机过程的样本，不同的 t 代表同一个随机过程中不同时刻的状态。

7.9 随机变量的测量

通过前面的学习，我们已经知道，在被测量之前，一个纯随机的两面对称的硬币的状态是

$$\rho^b = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (|1\rangle\langle 1| + |-1\rangle\langle -1|). \quad (7.75)$$

在某一次实验测量之后，其状态是

$$\rho^{a_1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = |1\rangle\langle 1|, \quad (7.76)$$

或者

$$\rho^{a_2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = |-1\rangle\langle -1|. \quad (7.77)$$

这两种可能性各自出现的几率是 $\frac{1}{2}$ 。

现在，问题来了，测量到底做了一件什么事情？

经典确定性客体的测量非常简单，理论上，什么都没有做，仅仅是观测到了状态：一个红色的小球被观测到红色，于是意味着其颜色状态是红色，也意味着，如果马上做一次观测，则仍然为红色。于是，如果这个世界上没有纯随机的客体——就算看起来随机，也是由未知信息导致的伪随机——那么，测量的图景非常简单：什么也没干，之前什么状态之后就是什么状态。

可是，对于上面的经典纯随机客体——如果你非得说这样的东西不存在，你就先忍着，跟着我的思路，将来到量子力学的时候会更明白——来说，我们已经看见其测量前状态和测量后状态有区别啊： $\rho^b \neq \rho^{a_{1,2}}$ 。

当然，你可以这样看： ρ^{a_1}, ρ^{a_2} 出现的概率都是 $\frac{1}{2}$ ，于是，其实这个时候的状态（你可以考虑一个大量同质个体构成的系综，也可以考虑一个纯随机硬币的所有可能的将来），其实还是

$$\rho^a = \frac{1}{2}\rho^{a_1} + \frac{1}{2}\rho^{a_2} = \rho^b. \quad (7.78)$$

于是，我们发现，测量好像也确实什么都没有做。

或者说，如果说做了点什么使我们思想上苦恼的事情的话，这样的苦恼只要给我们一个经典纯随机硬币，我们就不得不面对了。再一次强调，你可以通过认为“这个世界不存在纯随机的经典客体”而避开这个问题。不过，对于所有的实验者而言，你拿到的硬币是纯随机还是伪随机，能区分吗？而且，你等着我在量子力学的时候再问你同样的问题吧。现在，你只需要留下一个印象：经典随机客体的测量不是一件那么简单的事情。

7.10 统计学概览

概率论是统计学的基础，于是很多概率论课程都是和统计学开在一起的，例如叫做《概率论与数理统计》。但是，统计学研究的问题是完全和概率论不一样的，仅仅因为概率论是统计学的基础就放在一起，就好像是要把微积分和经典力学放在一起一样。后者绝对不是前者的附属学科或者简单应用而已。统计学有统计学的基本问题、研究对象、典型思维方式、典型分析方法、经典应用案例。在这一小节里面，我将对统计学的这几个方面做一个概览。其目的是，一方面提醒系统科学的研究者重视统计学的学习具有统计学的思考方式，另一方面画一个大概的学科地图等到你自学的时候更加有方向感。

7.10.1 统计学的核心任务

Monte Carlo 方法解决的是从给定分布函数 $F(x)$ (或者随机过程) 得到样本集合 $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ (或者一个系综的样本 $\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\}, l = 1, 2, \dots, L$) 的问题。统计学解决的是对于给定的样本集合，判断这些样本是否符合某个分布函数 (或者随机过程) 的问题。有的时候这些可能的分布函数已经有了带有待定参数的函数形式，统计学只要解决这些参数如何估计出来的问题就行了。这称为参数估计问题。当然，为了给一个这样的估计的准确程度，还要解决拟合得怎么样的问题。也就是说，对于估计出来的参数可能需要给出一个置信区间，或者给出一个更一般的拟合优度的指标。有的时候，我们还需要问“非得用这个分布函数来拟合这些数据吗”这样的问题。为了回答这样的问题，统计学还要提供一个模型选择的定量标准。总结起来，统计学典型地需要给出来参数估计的方法、参数的置信区间或者其他

拟合优度的度量、模型选择的度量。当分布函数不是一个已经给定的具有待定参数的函数的时候，有的时候统计学需要给出来一个这些样本的经验分布函数，并且衡量这样的从实际数据中得到的经验分布的好坏以及从经验分布计算统计量，还有这样计算出来的统计量的可靠性的问题。这叫做无参数估计问题。

不管是参数估计还是无参数估计，我们有的时候都需要解决如下问题：对于给定的两个样本集合，是不是来自于同一个分布函数，还是来自于不同的分布函数。这样的叫做假设检验的问题。或者，从这些样本里面猜出来如果有下一个样本的话下一个样本 $x_{N'}$ （或者 $\{(x_1^{L+1}, \dots, x_{T'}^{L+1})\}$ ）是什么。这个时候我们就需要先估计出来这些样本的分布函数（或者随机过程）。有的时候，我们可能还想知道，这堆样本的某个函数 $g(x_1, \dots, x_N)$ 或者这堆样本对应的分布函数的某个统计量 $Q[F(x)]$ 是多少。这个时候，我们还是想知道分布函数是什么。因此，整个统计学里面的基本问题就是对于给定的样本集合，判断这些样本是否符合某个分布函数（或者随机过程）。当然，一定要注意，对于给出来的最终答案，除了答案本身，我们都要给出来这个答案的好坏的衡量，以及为什么这样做，也就是要回答置信区间、拟合优度以及模型选择的问题。

除了经验分布函数或者带参数的分布函数的估计、拟合优度、模型选择这些基本的任务，统计学有的时候还解决需要这些任务来回答的稍微复杂一点的问题。例如多个随机变量之间的函数关系、相关关系或者因果关系的问题。

我把统计学的基本问题和主要思路，以及统计学和概率论的关系，整理成一张概念地图，见图 7.4。希望这张图能够帮助你把握统计学的学科大图景。一本和这个大图景最接近的统计学教材就是Wasserman的 All of Statistics (《统计学完全教程》) [118]。以下是按照这个大图景做的一个比较粗糙的展开。

7.10.2 参数估计举例

一般的统计学教材都从参数估计开始，先提出针对一个特定函数类型的有待定参数的分布函数 $F(x; \theta)$ ，例如正态分布、Poisson 分布、Bernoulli 分布等，从给定的样本集合中估计出来这些分布的参数，例如正态分布的

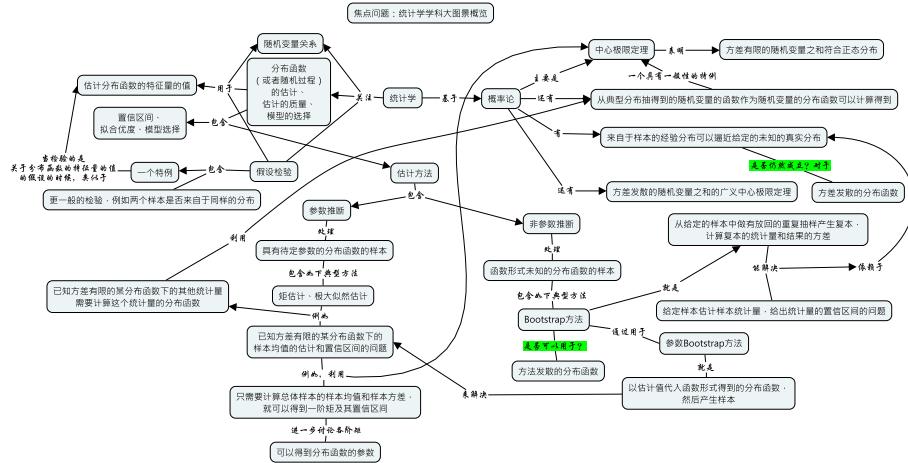


图 7.4: 统计学的基本问题和主要思路, 以及统计学和概率论的关系。

均值 μ 和标准差 σ 、Poisson 分布的 λ 、Bernoulli 分布 p 。然后, 可能会讲一讲这些分布函数的统计量 $Q[F(x; \theta)]$ 的估计, 例如 q 阶矩 $\langle x^q \rangle$ 。接着才会过渡到非参数估计。但是, 实际上, 非参数估计比参数估计的问题更加基本。或者说, 参数估计就是把非参数估计的问题、思想和技术, 用到已经有参数的分布函数上得到的特例。并且, 在非参数估计里面, 获取分布函数是统计学的中心任务之一这一点, 能够得到很好地体现。为了强调这个逻辑上的从一般到具体的关系, [118] 就先讲非参数估计然后再过渡到参数估计。我们这里, 在形式上还是先讲参数估计, 然后是非参数估计, 但是内在逻辑上也遵循 [118] 的先非参数估计再到参数估计的线路。

按照我们之前的统计学的大图景, 我们需要知道如何估计 $F(x; \theta)$ 的参数 θ , 记为 $\hat{\theta}$, 然后给这个估计的质量的一个评估, 以及看看在一大堆模型中, 为什么选择这个函数来做参数拟合, 是不是还可以选更好的其它函数。我们用 Bernoulli 分布来举例回答这些问题。我们先来考虑极大似然估计。

例 7.16 (Bernoulli 分布的极大似然估计). 给定一个样本集合 $\{x_i = 0, 1\}$ 。我们假设这个样本是通过 Bernoulli 分布函数 $\rho = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0|$ 来抽样产生的。问, 这个 p 应该是多少?

我们来看, 在这个假设下, 对于给定的参数 p , 得到这样的样本 $\{x_i\}$ 的概率是多少。由于每一个样本都是孤立得到的, 因此整体样本的概率是,

$$P(\{x_i\}; p) = \prod_{i=1}^N p^{x_i} (1-p)^{1-x_i} = p^{N_1} (1-p)^{N_0}. \quad (7.79)$$

其中 $N_1 = \sum_i x_i$, $N_0 = \sum_i (1 - x_i)$, 两者之和 $N_1 + N_0 = N$ 是样本大小。

极大似然估计的思想是希望找到这样的 p^* , 使得获得样本 $\{x_i = 0, 1\}$ 的几率最大, 也就是说, 求 $P(\{x_i = 0, 1\}; p)$ 的极值, 也就是

$$\frac{\partial}{\partial p} P(\{x_i\}; p) = 0. \quad (7.80)$$

考虑到函数形式是相乘的形式, 实际计算中, 为了方便, 往往取一个对数,

$$0 = \frac{\partial}{\partial p} \ln P(\{x_i\}; p) = \frac{N_1}{p} - \frac{N_0}{1-p} \Rightarrow p^* = \frac{N_1}{N}. \quad (7.81)$$

其中, $P(\{x_i\}; p)$ 往往需要用到概率论, 而求解部分则是简单的通过偏导数或者Lagrangian 乘子法求极大值的应用。

除了极大似然估计, 我们还可以换一个角度, 来考察参数 p 的分布 $P(p | N_1)$ 在给定样本数据 $\{x_i = 0, 1\}$ 也就是 N_1, N_0 的情况下。在这个思路下面, 我们相当于把样本的得来看作是分布函数 $P(N_1 | p)$ 。有了这两个对偶的分布函数, 我们就可以考虑运用 Bayesian 公式 (公式 (7.8)) 了。具体的计算见例 7.18。

对于更一般的通过样本估计分布函数的参数的问题, 我们同样可以通过概率论写下来 $P(\{x_i\}; \theta)$, 然后求这个概率的极大值。这就是参数估计的极大似然法。实际上, 有了估计公式, 这就需要从估计公式, 例如 $p^* = \frac{\sum_i x_i}{N}$, 运用概率论得到 p^* 理论上的概率分布, 然后来计算这个分布函数下 p^* 的方差和置信区间了。有的时候, 这是一个很困难的任务——求给定函数的分布函数常常不是一件简单的事情。其实, 逻辑上, 求方差和置信区间也不是一个简单的问题。我们想知道估计值离 $\hat{\theta}$ 理论值 θ 的距离, 但是理论值 θ 值我们并不知道。更深入的讨论见 [118]。

实际上, 我们还可以通过矩估计来得到 p 的估计。我们还是用 Bernoulli 分布来举例。矩估计的思想非常简单: 给定样本我们可以计算出来这个样本的各阶矩 $\langle x^n \rangle$, 然后和给定分布函数的各阶矩的包含参数 θ 解析表达式来对比, 从而求解出来参数 θ 。

例 7.17 (Bernoulli 分布的矩估计). 给定一个样本集合 $\{x_i = 0, 1\}$ 。我们假设这个样本是通过 Bernoulli 分布函数 $\rho = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0|$ 来抽样产生的。问, 这个 p 应该是多少?

先计算一下给定样本集合的一阶矩,

$$\langle x_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (7.82)$$

再来计算 Bernoulli 分布的理论上的一个阶矩的解析表达式,

$$\langle x \rangle = \sum_x x p_x = 1 \cdot p + 0 \cdot (1 - p) = p. \quad (7.83)$$

于是, 如果理论结果等于实际样本结果则,

$$p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i = \frac{N_1}{N}. \quad (7.84)$$

由于任何一个矩有限的分布函数的各阶矩合起来就代表了整个分布函数(见分布函数的特征函数一节), 于是, 这样的矩估计对于矩有限的分布函数总是可以用的。当然, 实际上, 方程是不是能够比较容易地求解出来是另外一件事情。

除了极大似然法和矩估计, 我们还可以通过 Bayesian 公式来得到 p 的估计。这称为 Bayesian 估计。Bayesian 估计采用了比较不同的思路: 它假设一个把参数看作随机变量的预先知道的分布函数 $g(\theta)$ ——称为先验分布, 然后, 看得到一个样本集合 $\{x_i\}$ 以后, 我们更新这个参数的分布函数 $g(\theta | \{x_i\})$ ——称为后验分布。对于这个得到的参数的后验分布, 我们可以计算参数的均值(典型值)和方差、置信区间等。我们还是用 Bernoulli 分布来举例。

例 7.18. [Bernoulli 分布的 Bayesian 估计] 给定一个样本集合 $\{x_i = 0, 1\}$ 。我们假设这个样本是通过 Bernoulli 分布函数 $\rho = p|1\rangle\langle 1| + (1-p)|0\rangle\langle 0|$ 来抽样产生的。而且我们仅仅了解这个随机数 $p \in [0, 1]$ 。问, 这个 p 的典型值应该是多少?

我们先假设 p 是 $[0, 1]$ 之间均匀分布随机数, 也就是 $g(p) = 1$ 。按照 Bayesian 公式, 我们从先验分布得到后验分布,

$$g(p | \{x_i\}) = \frac{f(\{x_i\} | p) g(p)}{\int dq f(\{x_i\} | q) g(q)}. \quad (7.85)$$

其中, $f(\{x_i\} | p) = \prod_{i=1}^N p^{x_i} (1-p)^{1-x_i} = p^{N_1} (1-p)^{N-N_1}$ 。于是, 参数 p 的均值就是

$$\langle p \rangle = \frac{\int dp p^{N_1+1} (1-p)^{N+1-(N_1+1)}}{\int dq q^{N_1} (1-q)^{N-N_1}}, \quad (7.86a)$$

$$= \frac{N_1 + 1}{N + 2} \quad (7.86b)$$

$$= \frac{N_1}{N} \frac{N}{N+2} + \frac{1}{2} \frac{2}{N+2}. \quad (7.86c)$$

其中, 前一项相当于极大似然估计的结果 $\langle p \rangle = \frac{N_1}{N}$ (乘以系数 $\frac{N}{N+2}$), 后一项相当于初始分布函数的结果 $\langle p \rangle = \frac{1}{2}$ (乘以系数 $\frac{2}{N+2} = 1 - \frac{N}{N+2}$)。随着 N 的增大, 初始分布的效果会逐渐消失。关于这个看起来比较复杂的积分请参考 [118], 或者见习题习题 7.8。

既然有了后验分布, 方差和置信区间可以类似地计算出来。

注意, 极大似然估计和 Bayesian 估计的随机变量是不一样的: 前者参数是常数, 已经给定的只是我们不知道; 后者参数是随机变量, 而且了解样本相当于更新参数这个随机变量的分布函数从而我们了解更多参数的信息。更多的针对不同分布函数的估计方法的细节, 就不再展开了, 其原理是一样的。

习题 7.8 (Beta 函数的计算). 为了计算 $Z(N, N_1) = \int dq q^{N_1} (1-q)^{N-N_1}$, 我们定义函数 $G(x, q; N) = (qx + (1-q))^N = (1 + (x-1)q)^N$ 。于是, $q^{N_1} (1-q)^{N-N_1} = \frac{N_1!}{N!} \frac{\partial^{N_1}}{\partial x^{N_1}} G(x, q; N) |_{x=0}$ 。接着利用对 q 的积分可以和对 x 的微分交换顺序的性质, 可以得到 $Z(N, N_1)$, 并且进而得到 $\frac{Z(N+1, N_1+1)}{Z(N, N_1)}$ 。

7.10.3 无参数估计核心

前面的三种估计方法都会得到一个以样本数据 $\{x_i\}$ 为自变量的参数估计值的函数 $\hat{\theta} = \theta(x_1, \dots, x_N)$ 。有的时候, 我们直接面对的问题, 就是一个分布函数的泛函, 也就是 $Q[F(x)]$, 然后我们企图先从样本数据 $\{x_i\}$ 估计出来 $F(x)$, 然后再来计算这个分布函数的统计量。这个时候, 这个分布函数 $F(x)$ 可以是具有待定参数形式的 $F(x | \theta)$, 也可以是没有参数形式的经验分布函数。那么, 有没有一个直接求出来经验分布函数的方法, 能不能从给定的统计量的公式 $\hat{\theta} = \theta(x_1, \dots, x_N)$ 或者 $\hat{Q} = Q(x_1, \dots, x_N)$ 直接计算出

来这个 $\hat{\theta}$ 和 \hat{Q} 的估计值、方差和置信区间等？

有，这就是无参数估计经验分布函数和统计量的方法。其中最重要的是经验分布的估计和估计量的 Bootstrap 方法。

经验分布的估计就是，对于从累积分布函数 $F(x)$ 得到的样本集合 $\{x_i\}$ ，希望能够估计出来分布函数 $\hat{F}(x)$ ，然后希望在样本数量取极限的情况下 $\lim_{N \rightarrow \infty} \hat{F}(x) = F(x)$ 。直觉上，我们知道只需要先画好自变量的格子，数一数每一个格子里面的样本的数量，就可以得到密度分布函数。因此，累积分布函数 $\hat{F}(x)$ 就是数一数小于 x 的样本的数量就可以，也就是，

$$\hat{F}(x) = \frac{1}{N} |\{x_i < x\}|. \quad (7.87)$$

实际上，也很容易证明，在大样本的情况下，

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \hat{F}(x) \rangle = F(x). \quad (7.88)$$

比我们直觉上认为的多了一重求平均 $\langle \hat{F}(x) \rangle$ ，也就是说，不是任何时候，这个计算都能够给我们 $F(x)$ ，但是，只要做很多次，其平均肯定逼近 $F(x)$ 。我们甚至还可以求出来 $\hat{F}(x)$ 的方差来看看这个方差是不是会随着 N 变小。这个经验分布的估计方法是非常直觉和简单的。

Bootstrap 方法对统计量 $Q = Q(x_1, x_2, \dots, x_N)$ 的计算更加简单：对样本 $\{x_i\}$ 做一个 L 次有放回的重抽样，每一次得到 $\{x'_i\}$ ，然后计算 $Q^l = Q(x'_1, \dots, x'_N)$ ，最后对 $\{Q^l\}$ 统计均值 Q^* 和方差。这个均值就是统计量 Q 的估计，其方差就是统计值的方差可以当作估计量离真值的距离的度量。关于这个方法的结果和参数估计的方法得到的结果的关系的讨论可以见 [118]。

实际上，Bootstrap 方法还可以用于参数估计。我们提到了参数估计的时候，给定估计函数，也就是统计量的计算公式，求均值、方差和置信区间常常不简单。尤其是后者，需要先从 x 的分布函数 $F(x|\theta)$ 求出来这个统计量的理论上的分布函数。这个时候 Bootstrap 方法就可以帮忙。实际上，均值的计算就是从原始样本 $\{x_i\}$ 中重复有放回的抽样 L 次，然后，计算每一次产生的样本的估计公式的值，得到一堆 $\{Q^{(l)}\}$ ，然后计算它们的均值。同样地，方差、置信区间也可以从 $\{Q^{(l)}\}$ 上来算。其实，由于有了分布函数，我们可以做得更好：每次从估计出来的分布函数 $F(x|\hat{\theta})$ ，通过 Monte Carlo 方法产生新的样本 $\{x_i^{(l)}\}$ ，然后再来计算这些样本下的统计量，最后再给出统计量的方差和置信区间。这个过程被称为参数的 Bootstrap 方法。

实际上，Bootstrap 方法还可以用于抽取整体样本中的一部分，例如从 N 个中抽取 n 个，来看 n 个样本的性质和整体 N 个样本的性质的区别和联系。这样可以讨论样本的代表性或者叫做一致性问题——多大的样本规模得到的统计量的性质会和整体的，或者得到某个理论上要求的偏差的大小之内的，性质一样。这个问题在任何用一个群体的均值来代表这个群体，然后用于多个这样的群体相比较的问题中，都非常重要 [122]。例如用一群老师的发表论文数量的均值来代表这个学校的水平然后比较学校，用一群学生对这个老师的教学评价的均值来衡量这个老师的教学水平然后比较老师，用一个期刊发表的所有文章的被引用次数的均值来衡量这个期刊的水平然后比较期刊等等。尤其是后者，这个时候整体分布和正态分布偏差特别大，这样的推广了的 Bootstrap 方法更加重要。

从这里，我们也注意到，两个相反相承的问题——Monte Carlo 方法和统计学，经常是合在一起解决的。或者说，实际上，从原理上说，这两个问题本来就是应该合起来解决的。第一、它们可以相互检验印证。例如给定样本之后，我们先通过统计学得到样本的分布函数，接着通过 Monte Carlo 得到这个分布函数的样本，再来验证两组样本是不是一致（这时候靠统计检验）。例如给定分布函数之后，我们可以通过 Monte Carlo 先得到样本，然后通过统计学得到这个样本的分布函数，再来检验这两个分布函数是不是一致。第二，它们原则上可以用穷举法来相互替代。当然，实际上，由于穷举法的代价太高，我们总是还需要更好的方法的。例如，我们想知道给定样本的分布函数，但是不会统计学的方法，怎么办？我们只需要先随便猜一个分布函数，然后通过 Monte Carlo 去产生这个猜的分布函数的样本，然后通过统计学去比较这个样本和原来的样本是不是一样。如果不一样，就再猜一个分布函数，总能解决问题。这样统计学只需要能够验证两个分布函数是不是来源于同一个就好了。如果我们想给分布函数产生合适的样本，但是不会 Monte Carlo 方法，怎么办？我们随便产生一些样本，然后用统计学的方法来得到这些样本的分布函数数，接着来比较两个分布函数就好了。其实，Monte Carlo 方法和统计学就是一个硬币的两面。

7.10.4 假设检验原理

假设检验的基本问题是判断从给定的数据样本 $D = \{x_i\}$ 来说，某个结论 H_1 是不是对的，也就是算出来 $P(H_1 | D)$ ，给定数据 D 的条件下，结论 H_1 正确的可能性。如果这个可能性特别高，则认为假设检验通过了，否则，就认为没有通过。

例 7.19 (样本均值大于零的检验). 给定一个样本集合 $\{x_i\}$ ，假设符合正态分布并且估计出来的样本均值是 μ^* ，估计出来的样本方差是 σ^* 。问，真实的 μ 大于零的几率是多少？

首先，如果 $\mu^* \gg 0$ 并且 σ 比较小，则，直觉上，我们就可以肯定真实的 $\mu > 0$ 。那么，能不能给一个定量的衡量呢，当 σ 不是这么小， $\mu^* > 0$ 但是没有远大于零的时候呢？

接着，我们来给出来一个这样的度量。我们用估计值 σ^* 来代替理论值 σ 。当然我们可以进一步讨论这个代替引起的误差，但是，由于我们更加关心 $\mu > 0$ 的问题，我们暂时忽略这个代替引起的误差。如果有必要，将来总是可以再补回来的。

有了这个替代以后，我们有估计值离开理论值的偏差的分布函数，

$$P(\hat{\mu} | \mu, \sigma = \hat{\sigma}) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}} e^{-\frac{(\hat{\mu}-\mu)^2}{2\frac{\hat{\sigma}^2}{N}}} \quad (7.89)$$

按照 Bayesian 公式，我们有

$$\begin{aligned}
 P(\mu > 0 | \hat{\mu}) &= \frac{P(\hat{\mu} | \mu > 0) P(\mu > 0)}{P(\hat{\mu} | \mu > 0) P(\mu > 0) + P(\hat{\mu} | \mu < 0) P(\mu < 0)} \\
 &= \frac{\int_0^\infty d\mu P(\hat{\mu} | \mu) P(\mu)}{\int_{-\infty}^\infty d\mu P(\hat{\mu} | \mu) P(\mu)} \\
 &= \frac{\int_0^\infty d\mu P(\hat{\mu} | \mu)}{\int_{-\infty}^\infty d\mu P(\hat{\mu} | \mu)} \\
 &= \int_0^\infty d\mu P(\hat{\mu} | \mu) \\
 &= \int_0^\infty d\mu \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}} e^{-\frac{(\hat{\mu}-\mu)^2}{2\frac{\sigma^2}{N}}} \\
 &= \int_{-\infty}^{\frac{\sqrt{N}\hat{\mu}}{\sigma}} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \\
 &= \Phi\left(\frac{\sqrt{N}\hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right). \tag{7.90}
 \end{aligned}$$

其中，我们用 $P(\mu > 0) = P(\mu < 0)$ 的假设来简化了从第二步到第三步的计算。在我们完全没有 μ 的先验知识的情况下，这是一个可以接受的简化。

因此，如果我们要求这个概率足够大，也就是 $P(\mu > 0 | \hat{\mu}) > 1 - \alpha$ ($\alpha \ll 1$ 是一个很小的数，例如 0.05)，则

$$\Phi\left(\frac{\sqrt{N}\hat{\mu}}{\hat{\sigma}}\right) > 1 - \alpha \Rightarrow \frac{\sqrt{N}\hat{\mu}}{\hat{\sigma}} > \Phi^{-1}(1 - \alpha). \tag{7.91}$$

其中 $\Phi(x)$ 是正态累积分布函数，其逆函数 $\Phi^{-1}(p)$ 是一个完全确定的表格：给定 p 就可以找到唯一的 x 。于是，我们只要检验公式 (7.91) 就可以知道是否很大程度上我们可以肯定 $\mu > 0$ 。

总结起来，我们得到了从估计值 $\hat{\mu}$ 和 $\hat{\sigma}$ 得到真值 $\mu > 0$ 的几率，除了我们假设 $\sigma = \hat{\sigma}$ 来简化了问题。在这个计算中，Bayesian 公式是一个非常重要的一步。更一般地，我如果想知道 $P(H_1 | D)$ ，我们确只有数据 D ，我们可以这样做，

$$P(H_1 | D) = \frac{P(D | H_1) P(H_1)}{P(D | H_1) P(H_1) + P(D | H_0) P(H_0 = \overline{H_1})} \tag{7.92}$$

其中 $H_0 = \overline{H_1}$ 就是结论 H_1 的否命题。如果我们能够了解 $P(D|H_1), P(D|H_0)$, 并且了解 $P(H_1), P(H_0)$ 就可以计算出来 $P(H_1|D)$ 。在实际问题中, 我们经常假设

$$P(H_1) \approx P(H_0), \quad (7.93)$$

从而简化上式为,

$$P(H_1|D) \approx \frac{P(D|H_1)}{P(D|H_1) + P(D|H_0)} \quad (7.94)$$

于是,

$$P(H_1|D) \gg 1 - \alpha \Rightarrow P(D|H_0) \ll \frac{\alpha}{1 - \alpha} P(D|H_1), \quad (7.95)$$

也就是看起来只要

$$P(D|H_0) \ll 1, \quad (7.96)$$

则 $P(H_1|D) \gg 0$ 。于是, 看起来, 假设检验的问题, 我们只要检验 $P(D|H_0) \ll 1$ 是否成立就好。

一般情况下, 这样的简化是可以用的, 尽管不可靠。我们做的假设 $P(H_1) \approx P(H_0)$ 和 $P(D|H_1)$ 不是特别小, 是比较容易满足的。但是, 我们完全可以构造出来这些条件不满足的情形。见 [123] 和习题 7.10。完整的假设检验, $P(D|H_0), P(D|H_1)$ 甚至 $P(H_1), P(H_0)$ 都是要计算的 [123]。

以上对于假设检验的讨论遵循了 Bayesian 公式 (7.92) 的逻辑。这个和通常教科书 [118] 里面对于每一个典型统计检验问题发明自己一套计算概率的方法是不一样的。我们这里是一以贯之的。

习题 7.9 (比较两组正态分布随机数). 有了考察一组正态分布的随机数的理论均值大于零的概率的方法, 我们就可以进一步检验两组正态分布随机数的第一个理论均值是否大于第二个理论均值。请构造一个这样的检验方法, 并且产生样本来尝试一下你构造出来的方法。

提示: 你可以从最简单的情况, 假设两个分布函数的理论方差已知并且相同, 然后过渡到考虑理论方差已知但是不同, 再拓展到理论方差未知的情况。你也可以先检索一下前人的研究, 例如 “Student-t 分布用于比较正态分布” (推荐搜索英文), 或者直接 “正态分布比较” (推荐搜索英文)。如果你还需要提示, 就往下看, 否则, 请盖住下面这句话: 对于解决这个问题

题来说，最重要的是把比较两个样本的问题，和前面的比较一个样本的理论均值和零的问题，联系起来。

习题 7.10 (不能做简化的假设检验的例子). 考虑在大街上遇到一个美国人恰好是一个美国参议院议员的概率 $P(\text{US Senator} | \text{US})$ ，并且把这个概率和遇到一个没有议员身份的美国人 $P(\text{non Senator} | \text{US})$ 做一个对比。然后，计算一下在美国大街上遇到一个美国议员但是这个人不是美国人的几率 $P(\text{non-US} | \text{US Senator})$ 。用简化版本（公式 (7.96)）的和完整版本（公式 (7.92)）的假设检验都做一个计算，对比一下结果，思考一下为什么。

提示：对比这里的 $P(\text{US})$ 和 $P(\text{non-US})$ ，以及 $P(\text{US Senator} | \text{non-US})$ 和 $P(\text{US Senator} | \text{US})$ 。如果需要具体数据，请自行检索。如果美国数据不好获得，也可以把美国换成中国，同时参议员换成中国人大代表，美国人换成中国人。如果采用简化版本的检验，你会发现，这里双向检验 $P(\text{non-US} | \text{US Senator})$ 和 $P(\text{US} | \text{US Senator})$ 都会通过。而这个结果是不可能的，因为美国法律规定，美国参议院议员必须是美国公民。

因此，假设检验的根本原理就是 Bayesian 公式²，而在实际中经常使用的版本经常是简化以后的版本，运用的时候需要谨慎小心。但是，这并不表示假设检验本身有任何内在逻辑上的问题 [123]，仅仅表示是简化版本的使用要谨慎而已。

假设检验还经常处理给定数据分布函数是否相同的问题。例如讨论不同因素——不同的药物或者治疗手段——对结果——通过生理指标来描述的疾病状态是否好转——的影响是否能够造成显著的不同。这个时候，如果是参数估计问题就可以表达成一个前面的假设检验问题。例如，估计出来并且对比两组样本的参数。看一看是否很大的可能这两组参数不一样大。甚至还可以做一组大于另一组的假设检验，也就是相当于讨论 $P(\theta_1 > \theta_2 | D_1, D_2)$ 。对于无参数检验，就需要找到别的方法了。实际上，一个直觉的解决方案就是估计出来两个样本各自的经验分布函数，然后，对比这两个经验分布函数。实际上，Kolmogorov–Smirnov 检验 (KS test)³就是这样的一个方法。

从这个比较两组样本背后对应的分布函数是不是一样，还是哪一组比另一组某种意义上更大（例如估计出来的理论均值更大，例如如果任意从

²也可以从频率的角度而不是 Bayesian 公式的角度来理解假设检验 [118]。

³见例如 Wikipedia “Kolmogorov–Smirnov test” 词条。

这两个分布的每一个分布中随机抽出来一个样本来比较，则来自于其中的某个分布的样本大于另一个的可能性很高）的讨论，我们可以看出来，就算是最简单的比较两组样本的问题，在统计学上，也不是一个平庸的问题。如果我们只关心把来自于函数形式相同（参数可以不一样）的分布函数的样本集合中的样本每次每个集合中拿出来一个来相互比较的时候，我们可以采用 t 检验 [124]、Mann–Whitney–Wilcoxon 检验 [125–127] 检验。有的时候两组样本就算做各自取一个样本的比较可能还是不能区分（例如，当两个样本集合各自的方差都比较大的时候），这个时候我们可以考虑从两个样本中各自取一群 (K_1 和 K_2 个) 来比较。也就是，从一个给定的样本集合中做大小为 K 的重抽样，计算这个抽样的平均值。多次重抽样，把这些得到的平均值当作统计量。这时候这个统计量的方差会随着样本大小 K 的增加而减小。实际上，这也就是随机变量之和的统计分布的问题。对于来自于方差有限的分布函数的随机变量之后，我们甚至知道，它符合正态分布，并且方差正比于 $\frac{1}{K}$ 。由于方差缩小了，重抽样和群体比较可以增加两个样本的区分度 [122]。当然比较出来的含义就不一样了，不能再谈个体比较了，而是一定大小的群体的比较了。例如，任意从北京大学和北京师范大学各抽取一位老师，可能北京大学的老师的影响力比较高的概率不是特别大，由于两个分布函数存在着很大的交叠。但是，可以想见，如果从两个学校各自抽取 100 位的老师，则来自于北京大学的那个一百位的平均影响力，就比较可靠地大于的来自于北京师范大学的那个群体的平均影响力了。

顺便，为什么要把对比两个样本是否来自于同一个分布函数单独拿出来放在这里来呢？因为我们之前已经把这样的检验方法当作讨论的基础，例如在讨论 Monte Carlo 方法和统计学的关系的时候。还因为正好这个可以体现无参数估计那一节中介绍的关于经验分布函数的估计的应用。因此，知识之间逻辑上的联系，是本书选择内容的一个重要依据：如果了解这个联系可以把某些问题看得清楚很多，则这样的联系很有可能会被选择。

7.10.5 Bayesian 学派和频率学派

在参数估计一节中，我们已经对极大似然估计和 Bayesian 估计做了区分。前者把参数看作是确定的待定的常数，把样本看作是要通过挑选参数来符合的目标——在某个要找的参数下得到这些样本的几率最高。后者把

参数看作是随机变量，通过 Bayesian 公式来运用样本信息来更新这个参数随机变量的分布函数。当然，很多时候，可以证明在极限情况下，例如样本量无穷大，两个估计方法得到的结果是一致的。但是，这个结果上一致不能抹杀两者在视角和逻辑上的不一致。例如，两者的置信区间的含义就是不一样的。

在 Bayesian 学派的视角下，任何一个量都可以看作是随机变量，不需要一个类似于基本事件的等概率原理这一类的概念来当作概率论的基础。于是，类似于天气预报的降水概率就是一个有意义的量。然而，在频率学派的视角下，概率实际上对应着某种频率或者说某种频率在事件数量很大的时候的极限。于是，自然，我们就会先去找一个整体事件集合，然后来看看这些事件中，某些满足要求的事件出现的频率。这个在 Bayesian 学派中是不需要的。

在实际研究工作中，到底自己或者他人采用哪一种，很多时候是由问题和研究者的兴趣来共同决定的。无论用哪一种，要做好能够在必要的时候相互转化，并且时时刻刻能够相互区分。

7.10.6 假设检验和科学的发展

以下这一段，受 Feynman 的 The Meaning of It All: Thoughts of a Citizen Scientist (《一切的意义：一个公民科学家的思考》) [128] 的启发而写，旨在更好地帮助我们的读者理解或者至少思考科学是什么。再一次强调，学习科学不仅仅是为了学到科学的知识，更重要的是科学的精神——典型思维方式和典型分析方法。

科学是为了给现实建立一个可计算的模型，并且这个模型通过计算分析给出来的结果和现阶段的观测是符合的比较好的。科学是往前发展的，不是一个固定的集合，其所包含的肯定正确的东西。也就是说，科学是一个不能通过观测来证明自己对，但是一定要允许通过观测来证明自己错可是现在还没有发现这样的错的东西，也就是可证伪性、不可证实性。那么，统计学，尤其是假设检验，如何在这里，帮助更好地理解科学的这个自我纠错，不能证实必须可证伪的性质呢？

记可能科学的理论模型为 M_j ，观测结果为 D_k 。有了模型，我们应该可以通过对各个模型的计算得到 $P(D_k | M_j)$ 。现在，假设我们对我们的理论有

一个初始的信念 $P(M_j)$, 按照 Bayesian 公式, 则

$$P(M_j | D_k) = \frac{P(D_k | M_j) P(M_j)}{\sum_l P(D_k | M_l) P(M_l)}. \quad (7.97)$$

假设, 我们出现了一个理论 M_j 下绝对不会出现的结果 D_k , 也就是 $P(D_k | M_j) = 0$, 则按照这个公式, 我们可以直接拒绝理论 M_j , 因为这个时候, $P(M_j | D_k) = 0$ 。这样我们就证伪了理论 M_j 。因此, 可证伪性就是要求, 对于任何一个可能科学的理论 M_j , 我们都要求存在着至少一个这样的 D_k , 使得

$$P(D_k | M_j) \ll 1 \approx 0. \quad (7.98)$$

这样, 只要我们重复这个实验, 以及重复这个 Bayesian 推断, 我们就会发现, 每次观测到 D_k (假设其他的试验结果 $D_{l \neq k}$ 的出现几率否很低) 都导致 $P(M_j | D_k)$ 和 $P(M_j) = \sum_k P(M_j | D_k) P(D_k)$ 的变小, 以至于将来完全拒绝。

在这样的角度看来, 偶尔某个实验出现了不可靠的结果也没有关系, 只要整体还是可靠的, 这样的偶然结果长期来看不会影响 $P(M_j | D_k)$ 和 $P(M_j)$ 的值。并且, 在这个角度下, 有多个可能的理论也不是问题, 只要这些理论能够给出来 $P(D_k | M_j)$, 经过各种实验现象的选择, 最后得到的各个不同的模型的 $P(M_j)$, 自然就是每个理论的可接受程度。

当然, 当 $P(D_k | M_j) = 0$ 的观测结果 D_k 的出现最简单, 可以直接就否定掉理论 M_j 。

通过把 Bayesian 公式和科学理论本身的发展联系起来, 我们可以发现, 原来, 在科学的发展的过程中, 人们在有意识或者无意识地, 用 Bayesian 公式来进行思考, 或者说概率推断。或者说, 至少, 在这些情形下, 我们的思考可以用 Bayesian 公式来描述。

实际上, 归纳法也可以看做是 Bayesian 推断。当我们看到一只乌鸦并且这只乌鸦是黑的的时候, 我们不会形成“天下乌鸦都是黑的”的认识。但是, 当我们看到十只乌鸦并且这十只乌鸦都是黑的的时候, 就会产生一个猜想是不是“天下乌鸦都是黑的”。如果我们看到一万只乌鸦并且这一万只乌鸦都是黑的的时候, 我们可能就会断定“天下乌鸦都是黑的”。但是, 其实, 这个从有限——尽管可以很大——的观测样本“推断”出来一个命题的“归纳”的过程, 并不是完善的。原则上, 只要有一只乌鸦是白的, 就可以否

定这个命题。而我们不能保证看完了所有的乌鸦。因此，归纳并不是严格的逻辑推理方法。有了 Bayesian 公式，我们就可以真的看清楚“归纳其实就是带概率的演绎”。也就是说，我们之所以看到一万只乌鸦之后觉得非常非常可能甚至就断定“天下乌鸦都是黑的”是有理论基础的，这个猜想错误的可能性已经非常非常低了。现在我们来展示“归纳其实就是带概率的演绎”。

例 7.20 (归纳法, Bayesian 公式用于推断世界的乌鸦是黑的). 假设这个世界只有 3 只乌鸦，并且乌鸦只有黑 (Black) 和白 (White) 两种颜色。由于我们不知道到底乌鸦是黑的还是白的，我们猜测，黑乌鸦是零只 $n_B = 0$, 一只 $n_B = 1$, 两只 $n_B = 2$, 三只 $n_B = 3$ 的几率都是一样的，也就是 $P(n_B = j) = \frac{1}{4}, \forall j = 0, 1, 2, 3$ 。现在，我们来计算看到若干只乌鸦并且它是黑的之后，我们估计出来的所有的乌鸦都是黑的几率 $P(n_B = 3)$ 。

先来看观测到一只黑乌鸦 ($C_1 = B$) 时的情况，由 Bayesian 公式我们有，

$$\begin{aligned} P(n_B = 0 | C_1 = B) &= \frac{P(C_1 = B | n_B = 0) P(n_B = 0)}{\sum_{j=0}^{j=3} P(C_1 = B | n_B = j) P(n_B = j)} \\ &= \frac{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (7.99)$$

同理，

$$P(n_B = 1 | C_1 = B) = \frac{\frac{1}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = \frac{1}{6}, \quad (7.100)$$

$$P(n_B = 2 | C_1 = B) = \frac{\frac{2}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = \frac{1}{3}, \quad (7.101)$$

$$P(n_B = 3 | C_1 = B) = \frac{\frac{3}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = \frac{1}{2}. \quad (7.102)$$

从这个计算出来的概率，我们发现，两只黑乌鸦和三只都是黑乌鸦的概率变高了 ($(\frac{1}{4} \rightarrow \frac{1}{3}), (\frac{1}{4} \rightarrow \frac{1}{2})$)，一黑乌鸦和零只黑乌鸦的概率变成低了 ($(\frac{1}{4} \rightarrow \frac{1}{6}), (\frac{1}{4} \rightarrow 0)$)。

我们接着计算，又看到 1 只黑乌鸦（也就是看到 2 只黑乌鸦），我们估

计算出来的真实的黑乌鸦的数量几率 P_n^B 。计算方法和上面的一样。

$$P(n_B = 0 | C_1C_2 = BB) = \frac{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = 0, \quad (7.103)$$

$$P(n_B = 1 | C_1C_2 = BB) = \frac{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = 0, \quad (7.104)$$

$$P(n_B = 2 | C_1C_2 = BB) = \frac{\frac{1}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = \frac{1}{4}, \quad (7.105)$$

$$P(n_B = 3 | C_1C_2 = BB) = \frac{\frac{3}{3} \times \frac{1}{4}}{\frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{0}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{3}{3} \times \frac{1}{4}} = \frac{3}{4}. \quad (7.106)$$

从这个计算出来的概率，我们发现，三只都是黑乌鸦的概率变得更高了 ($(\frac{1}{3} \rightarrow \frac{3}{4})$)，两只黑乌鸦的几率又退回来了 ($(\frac{1}{3} \rightarrow \frac{1}{4})$)，而一只和零只黑乌鸦的概率都成了零。

可以想见，随着观测到的黑乌鸦数量的增加，我们计算出来的概率一直会展现这个趋势，黑乌鸦数量更少的事件的概率在降低（因为这样的情况下出现看到好多个黑乌鸦的几率很小），黑乌鸦数量大的事件的概率在增加。于是，当我们观测到 10000 只乌鸦都是黑色的时候，我们确实就会“归纳”出来，非常非常可能“所有的乌鸦都是黑的”。这就是归纳法的本质：带有概率的演绎推理。当然，不管观测到多少次黑乌鸦，永远是非常非常可能而已。

习题 7.11 (Bayesian 公式用于推断乌鸦的颜色). 假设这个世界只有 N 只乌鸦，并且乌鸦只有黑 (Black) 和白 (White) 两种颜色。由于我们不知道到底乌鸦是黑的还是白的，我们猜测， $P(n_B = j) = \frac{1}{N+1}, \forall j = 0, 1, 2, \dots, N$ 。现在，我们来计算看到若干只乌鸦 (M 只) 并且它是黑的之后，我们估计出来的所有的乌鸦都是黑的几率 $P(n_B = N)$ 。绘制这个几率如何依赖于参数 M, N 的图。

7.10.7 随机过程估计举例：系综平均和轨道平均

在这一小节里面，我们以Markov 过程的估计为例，主要来介绍和区分一下系综平均和轨道平均的概念。这两个概念的联系和区别在统计学和统

计物理学中都是特别需要注意的，尤其是在做随机过程的模拟和统计分析的时候。

Markov 过程就是当前时刻 (t) 的状态完全由之前一步 ($t - 1$) 的状态决定，也就是，

$$P(x_t | x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_1) = P(x_t | x_{t-1}). \quad (7.107)$$

如果 $x_t = 1, 2, \dots, N$ 是离散的 N 个状态之一，则 Markov 过程可以进一步写成转移矩阵 $W(t)$ ，其中

$$W(t)_j^i = P(x_t = i | x_{t-1} = j), W(t) = \sum_{ij} W(t)_j^i |x_t = i\rangle \langle x_{t-1} = j|, \quad (7.108)$$

于是，从 $t - 1$ 时刻的分布函数得到 t 时刻的分布函数的方法就是，

$$p(t) = W(t)p(t-1). \quad (7.109)$$

当 Markov 过程是时间齐次（也就是 $P(x_t | x_{t-1})$ 不依赖于 t ）的条件下，概率转移矩阵不依赖于 t ， $W(t) = W$ 。注意，数学家的符号习惯是左乘，我们这里是右乘。

当我们从一个给定的随机过程来产生样本的时候，也就是考虑一个 Monte Carlo 问题的时候，我们可能从一个随机的初始条件出发，采用产生随机数的方法来从一个时候的状态 (x_{t-1}) 得到下一个时刻的状态 x_t ：例如当 $x_{t-1} = j$ 的时候，就用 Monte Carlo 生成概率分布函数 W_j^{\cdot} (“ \cdot ”表示允许所有的角标取值) 的样本。例如，前面我们讨论过的翻转或者不翻转硬币的例子和习题 7.7。这个时候，由于每一次都具有随机性，如果我们有两个人在做这个 Monte Carlo，则显然很小很小的几率这两个人产生的轨迹 (x_1^1, \dots, x_T^1) 和 (x_1^2, \dots, x_T^2) 会是一样的。那，从什么意义上，我们说这两个人在做同一个随机过程的 Monte Carlo 模拟呢？这个时候，我们需要让这两个人各自都产生很多条轨迹，而且尽可能每一条轨迹也足够长。这个时候，我们再来比较这两个集合的轨迹——第 i 人有 L_i 条轨迹，每一条轨迹有 T_i 个时间点的状态。不同人的 L_i 和 T_i 不一定相同。 T_i 个点的状态就称为轨迹， L_i 条轨迹合起来就称为系综。当然，严格来说，只有当 $L_i \rightarrow \infty$ 才是一个系综。实际使用中，只要 L_i 足够大，我们都称轨道集合为一个系综。注意：轨道内的时间点之间不一定是独立的——后一个时间点的状态可能

和前一个时间点有关系，例如Markov 过程；轨道之间必然是独立的，也就是系综的一个个系统之间必然是独立的——同样的系统的独立重复。这个概念上的区别是非常重要的。

现在，我们来解决反过来的问题，对于给定的样本集合 $\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\}$, $l = 1, 2, \dots, L$, 如何估计出来Markov 过程的转移矩阵 W 来。我们先从直觉上来猜一下。既然我们想知道转移概率，则我们统计好 $\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\}$ 中所有的一步跃迁的事件，也就是 $(x_{t-1}^l = j \rightarrow x_t^l = i)$, 得到跃迁次数矩阵 n_j^i , 然后大概我们只要做一个归一化就可以得到概率转移矩阵，也就是，

$$\hat{W}_j^i = \frac{n_j^i}{\sum_k n_j^k}. \quad (7.110)$$

我们接着从理论上来看看，是不是能够把上面的估计方式证明。考虑极大似然估计，也就是寻找合适的参数 W 使得样本集合 $\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\}$ 出现的概率最大，也就是

$$\max_W P\left(\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\} \mid W\right), \quad (7.111)$$

其中

$$P\left(\{(x_1^l, \dots, x_T^l)\} \mid W\right) = \prod_{ij} (W_j^i)^{n_j^i} \quad (7.112)$$

加上约束 $\sum_i W_j^i = 1$ 我们用Lagrangian 乘子法得到无约束的优化函数，

$$F(W, \lambda_j) = \sum_{ij} n_j^i \ln(W_j^i) - \lambda_j \left(\sum_i W_j^i - 1 \right) \quad (7.113)$$

对这个函数去偏导数，得到，

$$\hat{W}_j^i = \frac{n_j^i}{\sum_k n_j^k}, \quad (7.114)$$

正好就是我们直觉上猜测的答案。因此，随机过程的估计不过也就是一个统计学的概率分布函数估计的一个应用。

有了这个估计的公式，我们来尝试用一下。我们来考虑一个非常简单的随机过程：两个状态 0, 1，初始条件完全随机，也就是 $P(x_0 = 1) = P(x_0 = 0) = 0.5$ ，下一次的状态也完全随机，也就是 $W_0^1 = W_1^1 = W_1^0 = W_0^0 = 0.5$ 。这个过程其实就是扔一个完全无偏的硬币很多次的过程。

我们先产生数据，然后从数据中把概率转移矩阵 (\hat{W}) 再估计出来，看看是不是能够得到理论上的 W 。在做模拟产生数据的时候，我们取 $T = 3$, $L \gg 1$ 。考虑公式 (7.114) 的可能的应用方式，

$$\hat{W}_j^{tra,i} = \left\langle \frac{n_j^{l,i}}{\sum_k n_j^{l,k}} \right\rangle_l \triangleq \langle \hat{W}_j^{l,i} \rangle_l, \quad (7.115a)$$

$$\hat{W}_j^{en,i} = \frac{n_j^{en,i}}{\sum_k n_j^{en,k}}. \quad (7.115b)$$

其中 $n_j^{l,i}$ 按照给定的 l 来计算， $n_j^{en,i}$ 把所有的轨道放在一起计算。 $\hat{W}_j^{tra,i}$ 称为轨道平均——先做给定轨道 l 上的平均，然后再做所有轨道的平均， $\hat{W}_j^{en,i}$ 称为系综平均——直接把所有的轨道放在一起统计 n_j^i 。注意，为了防止公式 (7.115a) 出现 $\frac{0}{0}$ ，只有那些轨道满足分母不等于零 ($\sum_k n_j^{l,k} > 0$) 的才会进入统计。

按照表7.1，我们得到轨道平均的结果是 $\frac{5}{12}$ ，系综平均的结果是 $\frac{1}{2}$ 。前者小于理论上的条件概率 0.5，后者正好就是理论上的条件概率。对于更一般的一阶Markov 过程，见 [129] 以及习题 7.12 和 习题 7.13，也有

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \hat{W}_j^{tra,i} \neq W_j^i, \quad \lim_{L \rightarrow \infty, T \rightarrow \infty} \hat{W}_j^{tra,i} = W_j^i, \quad (7.116a)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \hat{W}_j^{en,i} = W_j^i. \quad (7.116b)$$

因此，在处理随机过程的问题的时候，系综平均和轨道平均的顺序一定要注意。

习题 7.12 (先轨道平均再系综平均和直接系综平均的差别). 选择一个 0, 1 两状态的Markov 过程转移矩阵 W ，生成长度为 T 的轨迹 L 条。第一，先从一条轨迹上 T 个点来估计 \hat{W} ，然后对 L 条轨迹做平均，得到 \hat{W}_{tra} 。第二，把 L 条轨迹直接放在一起（不同轨迹之间不需要考虑跃迁）来估计 \hat{W}_{en} 。对比这两个估计结果，做 $W \sim T$ 和 $W \sim L$ 的图。

习题 7.13 (NBA 投篮的热手 (hot hand) 效应). NBA 投篮实际上就是一个两状态（投成功了、没有投成功）的Markov 过程，当然可能阶数更高，也就是当前的状态依赖于更早的历史，但是肯定是有限步的历史。假设这个Markov 过程只依赖于前一步，按照先轨道平均再系综平均和直接系综平

表 7.1: 完全随机硬币对应的随机过程估计出来的 $\hat{W}_1^{Tra,1}$ 和 $\hat{W}_1^{En,1}$, 取 $T = 3$ 和 $L \rightarrow \infty$ 。表格取自 [129]。

概率	序列	用来计算 n_j^i 的记录	$\hat{W}_1^{l,1}$
$\frac{1}{8}$	000	-	-
$\frac{1}{8}$	001	-	-
$\frac{1}{8}$	010	10	0
$\frac{1}{8}$	100	10	0
$\frac{1}{8}$	011	11	1
$\frac{1}{8}$	101	10	0
$\frac{1}{8}$	110	11,10	$\frac{1}{2}$
$\frac{1}{8}$	111	11,11	1
从公式 (7.115a), $\hat{W}_1^{tra,1} = \frac{\frac{1}{8}(0+0+1+0+\frac{1}{2}+1)}{\frac{1}{8} \times 1 + \frac{1}{8} \times 1} = \frac{5}{12}$			
从公式 (7.115b), $\hat{W}_1^{En,1} = \frac{4}{4+4} = \frac{1}{2}$			

均的两种方式来计算和比较 \hat{W}_{tra} 和 \hat{W}_{en} 。NBA 投篮数据可以从“大物理学”研究小组网站的数据列表下获得⁴。

7.11 作业

习题 7.14. 阅读Kolmogorov的《概率论导引》[115], 做概念地图和文字结合的读书报告, 并且很本书作对比。

习题 7.15. 阅读王梓坤的《概率论基础及其应用》[116], 做概念地图和文字结合的读书报告, 并且很本书作对比。

习题 7.16. 阅读Wasserman的《All of Statistics》[118], 做概念地图和文字结合的读书报告, 并且很本书作对比。

⁴<http://www.bigphysics.org/index.php/分类: 数据集>, 2019 年 10 月 14 日 访问。

7.12 本章小结

这一章我们主要介绍概率论，运用了线性代数的语言。通过概率的Dirac 符号表示，我们讨论了经典纯随机客体的数学形式、测量的含义。其中，我们看到，如果这样的经典纯随机（而不是伪随机）客体存在，那么，经典的测量似乎干了某件事情，而不仅仅是客观的“测量”。而且这个“某个事情”是理论上的，和实际测量中引起的干扰没有关系。通过介绍概率的公理化定义，我们看到了数学定义都是有动机的，可理解的（为什么基础事件的集合的集合需要满足那些条件），并且，概率定义最核心的思想是把集合操作的加法映射成为几率的加法，也就是互斥事件的可加性。这个互斥事件的加法实际上可以看作概率三元体中 P 映射的线性性。于是，我们看到了，之所以能够运用线性代数的语言来描述概率论实际上是由这个线性性——事件集合加法运算和事件算符运算的统一性。通过特征函数和迭代映射，我们获得了对中心极限定理的不一样的理解。中心极限定理最核心的部分就在于那个“非常无辜”的随机变量的相加——造成了特征函数的平方。我们还看到看似“非常无辜”的 Bayesian 公式的巨大威力。同时，我们还学习了 Monte Carlo 的基本思想、随机过程的大概概念和统计学的大图景。最后，这一章在多处地方都提到了系综平均和轨道平均的概念的联系和区分。这个联系和区分是非常重要的。

这个概率的Dirac 符号形式将来会非常有用。我们也再一次强调从整体上把握一个（子）学科的大图景——典型对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法、和其他学科还有世界的关系，对于学习和创造性地使用，甚至创造这个学科的新的知识的意义。

第八章 力学

经典力学（在这里不包含相对论），作为一个学科分支，基本上已经停止发展，除了个别的理论领域，例如湍流的形成以及多体系统的轨道 [130] 等，以及一些应用领域，例如流体力学、结构力学等。那么，我们为什么还要学习经典力学呢，而且所有的物理以及相关专业学生都要从经典力学开始学起呢？力学，对于物理学来说，除了知识，更重要的是，它也是一门物理学导论课。从思想上，从经典力学我们了解什么是物理学——物理学就是描述物体状态（包含运动状态和结构状态等）的变化，以及寻找导致物体状态变化的原因的科学，以及了解把事物抽象成理想模型的观念；从概念上，我们知道运动的描述，建立位形空间，坐标系，相对性原理，力，能量，保守系统等概念等等；从技术上，我们将学习到最小作用量原理，分析力学的技术——这些技术将来在整个物理学里面都非常重要。

以上是物理学的学生为什么学习力学。那么，系统科学的学生为什么学习力学呢？技术上，分析力学的技术和把一个问题转化为极值优化问题的方式值得我们学习。思想上，力学的思想——从状态的描述到状态发生变化的原因的研究思路以及把事物抽象成理想模型的观念，不仅仅是物理学的思想，而是整个科学的思想。当然，具体概念的层次，倒是有可能不太重要，但是，如果没有这些具体概念，我们的思想和技术就是空中楼阁，或者无皮之毛。

本章推荐参考书：Feynman 的《Feynman 物理学讲义第一卷》[131]，方励之的《力学》[132]，漆安慎和杜婵英的《力学》[133]，Landau 的 Mechanics [134]。

8.1 力学思想

力学的基本研究对象是日常生活所见到的桌子以及桌子在一个推动的力作用下运动起来这个现象，或者一个乒乓球以及这个乒乓球在拍子挥动的条件下发生运动这个现象，或者一个汽车以及这个汽车在发动机驱动下和方向盘的控制下发生运动这个现象，或者天上运动的星星以及它们的运动。对于这个研究对象，宏观的物体以及它们的运动，第一个要解决的问题是如何描述他们的运动状态。在这里，物理学引入了一个理想模型——质点，一个有质量没有体积没有形状没有其他任何属性的点。为什么除了质量以外其他的属性都不重要，这是一个很重要的问题。以后我们会知道，现在暂时先留着这个问题。没有体积和形状就要求我们只关心这个物体作为一个整体的运动，我们暂时不关心这个物体的自转形变等运动形式。这个运动的形式是所有的运动形式里面最简单的一种。我们称为物体的平动，除了平动还有转动、振动等等。后面这些在我们这个精简的课程里面不再涉及。

如果我们把物体看成质点，只考虑其平动，那么这个描述的问题就简单了。一个没有体积和形状的质点，在任何时刻的位置，我们就用空间里的一个点来描述。所谓运动这个现象，就是随着时间这个点的位置发生了变化。于是，我们可以考虑进一步的问题，这个位置什么时候会发生变化呢？我们的生活经验告诉我们，当我们推动桌子的时候桌子会动，我们不推的时候就不动了，我们推的力大一点则运动的速度会变快一点。于是，我们可以建立一个运动的理论：运动需要力来维持，同时不同大小的力可以改变运动的快慢。实际上这个正是Aristotle关于运动的猜想之一。这个理论在很多时候是可以用来解释我们观察到的现实的。如果我们处于一个黏滞流体里面，这个理论更加就是正确的理论。可惜Aristotle没有滑过冰。如果滑过，他就会注意到很多时候，继续走不需要额外的努力，停下来反而需要额外的努力——也就是需要某种力我们才能让自己从运动变成不动。

物理学在这里有一个很重要的思想或者说期望、追求：统一性——用最少的原理解释最多的现象。也就是说，我们希望这个关于运动的理论能够解释非常多的各种各样的运动。这个时候，我们就发现刚才基于直接生活经验的理论就不好用了。例如，一个已经踢出去的小球，基本上可以认为我们的推力已经不存在了，但是小球不会立即停下来。当然，如果你一定要

维持刚才的理论，你可以说推力还存在，甚至说还有一个其他的力作用在小球上，一直到小球停下来，这个力才停止。上面的滑冰的例子也是这样。

这个说法就好像是用雷公电母（或者更多的控制单位）来解释风雨雷电现象一样，我们依赖于雷公电母的情绪来理解什么时候会有风雨雷电，于是，我们需要给他们建立庙宇或者什么的，才能一定程度上影响他们的情绪，于是实现一定程度上对风雨雷电的干预。第一，这个理论个性化非常强，这些神灵或者说控制单位有不同的性格和爱好等等等，基本上不能实现用最少的原理来解释最多的现象的目标；第二，这个理论的可验证性非常差，所以他们需要非常复杂的程序和规范，这样如果祈雨不成功，主持的巫可以把责任推给某个细节上的失败。

在我们这个小球的例子之中，如果我们不能给出来我们的推力在我们的脚离开小球以后，或者额外的力，在什么时候停止，我们就不能对小球的运动有一个有前瞻性/预测性的认识——我们总是可以把这些力的停止的时间定在小球实际运动停止的时间，也就不能用这个理论来理解实际小球的运动，或者说反过来拿小球的实际运动来检验我们的理论。这样的，利用小球实际运动停止的时间来确定力的停止的时间，然后又用力的停止作为导致小球的运动停止的原因，的理论永远是正确的，不能被推翻的。于是，这种理论也是不能够被检验的，不能成为科学。科学理论的基本要求是可证伪性 [9]：一方面，原则上存在着可以用来否定我们的理论的现实；另一方面，如果我们的理论不这样，那么结果会不一样，而这个不一样的结果在现实的世界中没有被观察到。在这个意义上，如果我们的理论具备以上两条，我们说我们的理论是一个科学的理论。实际上，如果有一个基于炼金术或者草裙舞，甚至巫毒娃娃的理论，无论什么时候我们都可以通过观察例如巫毒娃娃的状态来正确地预测风雨雷电，而且这个预测的规则，或者说配方，也就是什么状态对应着什么天气，是事先就确定了的描述，那么，这个巫毒娃娃的理论也将是科学的。尽管这样的理论可能普适性不是很强，也就是说，没准每一个地区需要一个不同的巫毒娃娃或者不同的规则。

物理学的科学性的要求比这个可证伪性的一般的科学要求稍微高一点点：物理定律要求在时间和空间上都是普适的，还追求最少的原则解释最多的现象。此外，如果有两个理论都可以解释一个现象，这个时候物理学偏好简单的。例如地心说也能比较好的解释很多天体现象，但是理论非常复

杂，但是就算只解释同样的现象日心说就简单很多。当然，可证伪性和普适性的要求要比简单性有更高的优先级。

回到我们踢出去以后的小球的运动的例子，让我们尝试如何走得比思辩稍微远一点点。我们已经发现，之前的理论，力是维持运动的原因不是好的理论，不能证伪，也不能像前面描述的天气的巫毒娃娃理论一样管用。那我们来看一看，如何建立一个管用的又能够证伪的理论。其实，基于生活经验，我们也能够知道，力的作用是使运动的状态发生改变。我们知道当我们推一张桌子时候，如果我们希望我们停下来之后桌子动得快一点，我们需要推的时间长一点或者推的力气大一点。甚至在我们推动桌子的过程中，我们也可以通过改变这个推力的大小来达到控制其速度的目的。也就是说，当我们把力作用在一个质点上的时候，我们会改变质点的运动速度。当然，我们还不知道力和速度的改变这两者之间具体的关系是什么，和质点的什么属性相关，例如大小、形状、质地、生产厂家等等。不过，有了这个思想认识上的突破之后，剩下的突破就容易多了。

解决这个具体什么关系的问题是物理学的另一个，也是最重要的思想是：做实验，做侧量。这个来自于Galileo的做实验和做理想实验（逻辑推理）的思想使得物理学真正从思辩的层次独立出来，成为科学。Galileo的实验很简单，把一个物块放在一个斜面上，然后让这个物块滑下来达到一个平面上。接着，改变这个平面的光滑程度。物块从斜面下来以后，我们看看这个物块走得有多远。这个远近是可以测量的。我们发现，随着光滑程度的不同物块运动的距离是不一样的，而且越光滑的表面物块运动的越远。在物块接触到平面之前，所有的过程是一样的，因此（其实你也可以怀疑这个因此），物块刚刚接触到平面上的状态，不管哪一种光滑程度的平面，都是一样的。于是远近不同只能是平面的光滑程度导致的。Galileo根据他的实验猜测，如果有一个无限光滑的平面，则这个物块会永远运动下去。也就是说，光滑程度的不同可以看作是某种力的不同，而这种力使得物块从运动变成静止。对于无限光滑的表面，这种力为零，于是物体的运动状态不发生改变，一直运动下去。现在，我们当然知道这个力就是摩擦力。但是，当时把这个运动状态发生变化的原因归结为摩擦力是革命性的。然后，作为一个好的理论，我们必须至少满足管用的要求。我们跳过历史发展的逻辑，直接给出理论模型。这个管用的理论在滑块的例子之中是这样的：对于任

何表面，经过一个测量（可以是让一个标准物块先运动一下，测一下距离，然后经过一番计算），可以得到一个这个表面的性质的参数，叫做摩擦系数。然后，利用这个测量出来的摩擦系数，我们可以预测滑块的运动距离，而且这个预测的运动距离与实际实验相符合。这个就是管用的要求。这个理论本身其实还是不完备的，因为我们跳过了经过怎样的一番计算。将来我们会或者我们已经知道，实际上这个一番计算就是求解Newton 第二定律对应的微分方程。我们还发现这个定律不仅仅在滑块的例子中管用，在各种各样的许许多多的运动中都管用。而且，这里定律原则上允许不遵循这个定律的现实世界的存在，所以是可证伪的。当然，在经典力学（不包含相对论）所研究的对象的范畴内，这样的反例迄今为止没有被发现。通过实验，我们还可以研究运动状态与哪些因素有关，例如，如果我们能够给力的大小定下一个度量的标尺，我们就可以研究给定大小的力对不同的物体的运动状态的改变的不同，例如这些物体可以有不同的形状、颜色、质地等等。

当然，最后我们发现这个因素仅仅是物体所包含的物质的量的多少的过程，是一个非常非平庸的过程。首先这个物质的量不一定是这个物体的重量，本来的含义是包含的原子（甚至更基本的粒子）的多少。当然，实际上，在我们这个世界中，这个物质的量与这个物体的重量有直接关系。这个关系其实有着非常深刻的含义。广义相对论就是从这个关系出发开始的研究。

在上面的例子中，促进物理学的发展的另一个非常重要的思想——理想实验，或者说与实验现象紧密相连的逻辑推理——也发挥了重要的作用：从更加光滑到无限光滑是一个实验上实现不了的但是理想实验中能够假设的情形。关于逻辑推理再物理学里面的作用还有一个非常著名的例子：Galileo关于重物下落快的理想实验。我们考虑两个重量不一样的物体 M （重）和 m （轻）。我们把它们捆起来组成重物 Mm 。假设重的物体下落的速度快，那么捆起来的物体 Mm 的速度应该比两者分开都快。分开来考虑 Mm 中的 M 和 m ，我们发现由于 M 更快 m 更慢，所以 M 会拉着 m 运动得快一点， m 会拖着 M 运动得慢一点。因此合起来的速度介于两者之间。现在出现了矛盾。因此，我们一开始的假设——重的物体下落得快——是错的。

其实，比起逻辑思辨，批判性思维，是促进科学发展的另一个更加重要

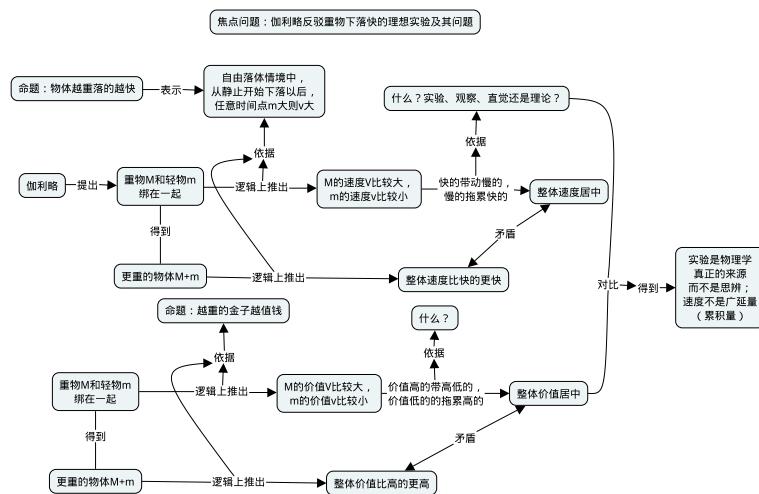


图 8.1: 批判性思维用于 Galileo 关于重物下落快的理想实验

的思维层次的东西。我们就来对上面的Galileo关于重物下落快的理想实验做一个批判性思维, 来说明物理学最最核心的特征: 物理学是实验科学, 来源于实验, 接受实验检验。上面展示的Galileo从纯粹逻辑出发否定“重物落得更快”的思辨过程非常精巧。看起来, “重物落得更快”确实就应该被抛弃。现在, 我们当然知道这个是错的——通过扔两个不一样重的铁球就行。而且, 实际上, 这就是Galileo在比萨斜塔上做过的事情¹。这里的关键问题是, 看球来, 好像从纯粹思辨就可以否定一个关于物理现象的命题一样。下面, 我来展示一下实际上这个纯粹思辨过程的问题。

我们来考虑把速度替换成价值, 假定材料都是金子。我们来看看能否重复整个推理。从图中我们发现, 唯一一个没有依据的可能有问题的地方在于, 对金子的价值而言, “价值高的带动价值低的, 价值低的拖累价值高的”, 是不对的。但是, 形式上, 假设这个地方说得通, 那么, 我们就证明了“越重的金子越值钱”是错的。那么, 现在的问题就成了, 为什么对于速度, “速度高的带动速度低的, 速度低的拖累速度高的”就是对的, 然而对于金子的价值就是错的呢? 你可以认为, 实际生活的经验告诉我们前者是对的, 后者是错的。如果是这样的话, 那么, 我们就看到了, 实际上, Galileo的纯逻辑推理是基于一个生活经验的基础上的。从这个意义上说, 这个推理过程的可靠性并不会比Aristotle同样基于生活经验提出来的“重物落得快”

¹关于这个比萨斜塔实验是否真的做过是一个物理学史研究者讨论的问题。

更可靠啊。也就是说，在这个推理的过程中，我们没有用到任何关于速度的特性使得“速度高的带动速度低的，速度低的拖累速度高的”成为一件正确的事情。当然，实际上，后来物理学的发展使得我们知道，这个情形和两个具有自己的速度的物体合起来很像，而根据动量守恒定律²， $V = \frac{MV_M + mV_m}{M+m}$ ，于是确实处于两者之间。可是，逻辑上，后来发展起来的动量守恒不应该成为这个论证的基础。更深一步，实际上，为什么速度和价值一个符合处于两者之间一个不符合？其原因在于速度是一个强度量，价值是一个广延量。当我们把系统扩大多少倍的时候，一般来说广延量会相应扩大，而强度量不会。也就是说，如果要完善Galileo的论证，我们首先得证明速度是一个强度量，合起来之后介于两者之间（当两者一样的时候，不变）才行。然而，这一点在Galileo的纯逻辑思辨中完全没有体现出来。因此，物理学本质上是实验科学。同时，通过这个例子，我们也想说明：在物理学中，批判性思维非常重要。无论是谁说的，哪本书上说的，在你能够想明白之前，都不应该相信³。同时，这个例子也展示了物理学是实验学科：如果有人宣称仅仅依靠思辨就建立起来了一个能够和实验相符合的物理学理论模型，而没有从什么地方把其所考虑的实际对象的某种属性纳入这个模型，则这个理论肯定不是物理学。

顺便通过运用概念地图的形式来展现这个思辨过程并对比，我还想体现另一点：系联性思考和批判性思维密不可分，概念地图有助于开展系联性思考，展示思考的每一个步骤，于是也有利于做批判性思维。关于批判性思维，在本章结尾部分还有一个Zeno 佯谬的例子。

关于统一性和实验在物理学的地位，数学在物理学里面的作用，我们可以来讨论另外一个例子：Newton 万有引力定律和Newton 第二定律的发现。我下面讲的故事是物理学家脑子里面的物理学史，不一定是真的物理学发展的历史。前面已经提到Galileo通过实验和理想实验（逻辑思辨）证明了“力是维持运动的原因”是错的，正确的是“力是改变物体运动状态的原因”。反过来，改变物体运动状态需要有力的作用。这个是Galileo通过研究地球上小物体的运动得到的。这个表示还不是特别精确，因为还不知道力是如何改变物体的运动状态的。稍后你就会发现，其中最重要的原因是，

²或者更准确地在这个情境下应该叫做质心速度公式。

³注意，你也应该思考这句话是不是值得相信。

那个时候的数学——在这里是微积分，它是Newton后来发明的——还没有为Galileo做好准备。我们把“改变物体运动状态需要有力的作用”放在脑子里面，然后放开地上的运动小物体，转而关心天上的大物体——天体们的运动。

天体们的运动，在Newton之前已经有了地心说——其他容易观测到的天体围绕着地球转圈和日心说——其他容易观测到的天体围绕着太阳转圈。其中地心说的发展程度比较高，通过本轮和均轮的理论，已经可以用于历法等实用的目的以及和天文观测相当符合。在围绕着地球的均轮上套上本轮——他们都是圆形轨道——的原因是，仅仅依靠均轮有的时候和观测到的行星逆行不太符合。除了实用的角度，Tycho认为还是应该更加精细地通过观测记录来检验一下，到底天体的运动是围绕着太阳还是地球的（尽管Tycho他自己不相信日心说）。这个更加精细的实验记录，以及认为需要基于更加精细的记录来构建理论进行思考的理念，使得物理学往前走了一大步。继承了Tycho的观测数据的Kepler对数据做了处理，发现原来按照太阳中心确实更容易描述（太阳系的）天体的运动：它们在一个平面内它们的轨迹是以太阳为其中一个焦点的椭圆，它们单位时间内扫过的面积以太阳为中心来计算相同，它们转一圈所需要的时间和距离太阳的距离有一个特定的关系。注意，这里的三个定律都是所有的太阳系天体都遵循的，具有共性的。任何一个具有共性的行为，都有一定的可能不是偶然的，有背后的原因为。这个时候，正好那个寻找原因的Newton出手了。

首先，Newton按照地上的运动的认识“改变物体运动状态需要有力的作用”，猜测，天体由于速度方向在改变因此运动状态变了，需要力的作用。其实，如果你拿着一根绳子栓个小球转转圈，你也很容易体会到，这个时候需要力的作用。Newton的关键的一步是联系天体和地上的小物体的运动。有了这个之后，从构建理论的角度来说，我们需要知道这个力长什么样，力如何影响运动，我们就有可能可以从理论模型中推导出来Kepler的三大观测定律了。Newton的神奇之处在于，不仅有了天体和地球上物体应该由同样的理论表述的思想，还发明了来解决这个问题需要的数学从而让他的这个思想能够产生可检验的结果。有了微积分，再加上Newton 第二定律和平方反比引力公式，Kepler的观测定律确实就能够从模型中推导出来了。接着，Newton 还把天体之间的引力定律推广到任何物体之间的万有引力。其

中的一个思考就是当把引力定律用于某个天体的卫星之后，得到的结果和实验相符：于是，引力不仅仅存在太阳和太阳系天体之间，还存在别的天体之间。但是，无论如何，从天体之间到任何物体之间，还是一个巨大的跳跃。在这里，其中的一个驱动力就是物理学对普适性统一性的追求，认为“没有什么东西是特殊的”这样的一个信念。在Newton的这个故事中，我们多次看到了对统一性的追求，看到了实验结果对理论的促进和检验的作用，以及物理学家对于现象背后的心智模型的追求，还看到了数学的作用：数学是物理学的语言，数学是物理学家的思考的形式。

关于数学是物理学的语言是物理学家的思考，我再补充一个例子：Coriolis力的推导。在一个加速向前运动的汽车上，你可以感受到很容易到一个向后的拉力。当然，如果你是站在地球上的观察者，你看到的现象是车内的物体在做加速运动，它们实际上收到了一个向前的拉力。那这个车上的人感受到的向后的拉力和地球上的人观察到车上的人实际上收到一个向前的拉力是如何协调的呢？车上的人感受到的力被称为非惯性力——这个名称来源于车整体在做非惯性的加速度不为零的运动。其背后的理念是，车上的人会感觉到自己没有在动，或者以自己为参考系，认为车内的其他人或者车子天花板上垂下来的小球没有在动。既然没有在动，按照经验就会认为受到所有的力的作用合起来是平衡的。这个平衡的假象就导致了感受到的非惯性力的产生：例如对于悬挂的小球，很显然，天花板通过细绳给了小球一个向前的拉力（竖直方向和小球收到的重力平衡掉），因此必然收到一个向后的拉力。这样的感受到的来自于自身处于非惯性参考系的力，除了这个加速平动的参考系带来的，还有加速转动的参考系带来的。后者之中，最容易感受到的是离心力。如果你站在一个转动的大圆盘上保持相对静止，你会发现你需要拉着一条绳子或者脚下用力钉住圆盘，而这个时候你看到你自己被绳子拉着所以收到一个向内的拉力。可是，你觉得自己没动，处于“平衡态”，那么，就必须有一个向外的拉力使得你自己处于“平衡态”。这个感受到的向外的拉力就是离心力。这两个例子都很直观，不需要做数学运算就可以想出来。现在，咱们来看一个在转动的圆盘上做径向运动的物体，除了不动的时候感受到的离心力，如果径向加速运动就会感受到的反向非惯性力之外，还会感受到什么力。这个问题的实际情景跟在地球上流动的海水以及飞行的炮弹的运动有关。

首先，我们写下来任意两个坐标系——记为坐标系 0 和坐标系 1 两个原点之间的矢量为 \vec{r}_{01} ——之间的看到的力的关系。

$$\frac{d^2\vec{r}_{0p}}{dt^2} = \frac{d^2\{\vec{r}_{01} + \vec{r}_{1p}\}}{dt^2} = \frac{d^2\vec{r}_{01}}{dt^2} + \frac{d^2\vec{r}_{1p}}{dt^2} \Rightarrow F_p = F_0 - \frac{d^2\vec{r}_{01}}{dt^2}. \quad (8.1)$$

我们发现，两个坐标系之间感受到的力的差别就来自于 $\frac{d^2\vec{r}_{01}}{dt^2}$.

$$\begin{aligned} \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} &= \frac{d^2r\hat{r}}{dt^2} = \frac{d}{dt}\left(\frac{dr\hat{r}}{dt}\right) \\ &= \frac{d}{dt}\left(\frac{dr}{dt}\hat{r} + r\frac{d\hat{r}}{dt}\right) \\ &= \frac{d^2r}{dt^2}\hat{r} + 2\frac{dr}{dt}\frac{d\hat{r}}{dt} + r\frac{d^2\hat{r}}{dt^2} \end{aligned} \quad (8.2)$$

我们看到第一项就是 $\frac{d^2r}{dt^2}$ 加速平动导致的非惯性力，最后一项 $r\frac{d^2\hat{r}}{dt^2}$ 就是转动导致的离心力，而中间那一项就被称为Coriolis 力——当 $\frac{dr}{dt}$ (径向运动分量不为零) 和 $\frac{d\hat{r}}{dt}$ (转动) 都不为零的时候，这个力才不为零。我不认为除了数学推导还有其他方法把这个非惯性力找出来定义出来。当然，实验现象肯定是可以观察到的。

小结一下，物理学是关于自然界的现像的可计算的可证伪的心智模型。数学是物理学的语言。理想化模型化，实验与测量，理想实验，可计算是物理学几个核心的重要的思想。科学性最低的要求是可证伪性，普适性、简单性是物理学对物理理论的追求。由于做了理想化，忽略了次要因素，尽管总是可以再次包含进来，有的时候物理这个心智模型计算出来的结果通常是有误差的。除了误差，有的时候新的现象会挑战现有的理论，从而迫使我们构造新的心智模型。因此，物理学本身还经常是进化的。关于什么是物理学以及物理学理论的这些特征，在Einstein的《物理学的进化》[135]、Feynman的《物理定律的特性》[136] 这两本书里面有更加详细、深刻和吸引人的论述。关于这些问题，我们在本书的前半部分里面也做了一些讨论。不要认为理解什么是一个学科（基本问题、典型思考方式、典型分析计算方法）没有用。很多时候，科学的研究和探索能够真的提出和解决一个问题，依赖于对这些基本问题的认识。关于这个主题，推荐大家看Beveridge的《科学研究的艺术》[30]。

我说过，力学，不仅仅是知识，还是物理学导论课程：它需要完成启发学生思考什么是物理学什么是科学的责任。在这里，我希望这个力学部分的第一节能够在一定程度上起到这个作用。

8.2 Newton 力学的基本概念

通过质点这个理想模型，我们已经有了用空间位置来描述运动的简单想法。下面，我们把这个想法实现。首先，为了准确地描述这个空间位置，我们需要有一个坐标系：一个原点，三个独立的方向，一个测量单位。通常这个坐标系的原点需要建立在一个参考系上：一个假设不动的东西。确定这个所谓的不动的东西，不是简单的事情。地球在自转和公转，所以在地球上，原则上所有的点都不能作为这个参考系。同样的，太阳系、甚至整个宇宙都在运动，没有一个点是真正意义上不动的。那我们如何选取我们的参考系，然后建立坐标系呢？如果我们的对象是一个在地球表面运动的汽车，那么在汽车的时间尺度上自转和公转造成的影响与汽车的车程相比比较小，于是，地球就是一个好的参考系。以这个汽车出发的时候的地球上的一个点作为原点，是可以接受的。如果我们考虑的是导弹的运动，那么，自转的影响可能就需要考虑。这个时候，参考系可能就要选取地球在某个时刻的点，然后考虑经过这段时间以后地球的运动，或者考虑非惯性参考系的问题。所谓惯性参考系，就是一个“不动”的参考系，或者说一个做匀速运动的参考系。也就是说，这个参考系在相对于另一个参考系运动速度不变或者运动速度为零。所谓非惯性参考系，就是以速度变化的物体为中心建立的坐标系。

在下面的讨论中，我们假设通过对所关心的过程的考察，讨论这个问题所需要的惯性参考系以及相应的坐标系已经建立起来。那么这个时候，我们的运动的轨迹的描述就是一个 $\vec{x}(t)$ 的时间过程。知道这个在 t 时刻质点的位置 $\vec{x}(t)$ 由哪些因素决定，对于给定的问题计算出 $\vec{x}(t)$ 来，就是我们的理论的目标。通过微积分的学习，我们知道这个 $\vec{x}(t)$ 实际上是空间的一条带参数的曲线，如果我们知道这个曲线在任何时候的切线，我们就可以把这些切线连（积分）起来得到这条曲线。也就是说 $\vec{x}(t)$ 和 $\dot{\vec{x}}(t)$ 加上 t_0 时刻的原点 $\vec{x}_0 = \vec{x}(t_0)$ 是完全等价的。这个 $\dot{\vec{x}}(t)$ 被称为这个质点的速度，记为

$\vec{v}(t)$ 。类似地，我们可以定义加速度 $\dot{\vec{v}}(t) = \vec{a}(t)$ ，以及更高阶的时间导数。完整地知道了任何一阶导数时间过程加上初始条件都是完全了解了这个运动。

Newton 力学告诉我们，给定一个力的位置和速度的依赖函数 $\vec{F}(\vec{x}, \vec{v})$ （由于内容上需要超过我们这门课程的知识，这个力可以依赖于位置、速度和时间，但是不能依赖于更高阶的时间导数。为了讨论和记号简单，我们进一步假设力不依赖于时间），运动过程由以下方程决定，

$$\ddot{\vec{x}} = \vec{a} = \frac{\vec{F}(\vec{x}, \vec{v})}{m}. \quad (8.3)$$

这个方程被称为Newton 第二定律。我们还可以把这个方程改写成一阶封闭的微分方程的形式，

$$\dot{\vec{x}} = \vec{v}, \quad (8.4a)$$

$$\dot{\vec{v}} = \frac{\vec{F}(\vec{x}, \vec{v})}{m}. \quad (8.4b)$$

在进一步讨论这个方程之前，我们先来通过几个例子熟悉一下这个方程。

例 8.1. [自由落体运动] 自由落体运动：质量为 m 的小球，在地球表面的高度为 h 的地方落下来，初始速度为 0，问经过多长时间落地。

以地球为参考系，在以小球对应着的地球表面当作原点，竖直方向向上为 x 轴正方向。然后做受力分析并且运用Newton 第二定律可以得到，

$$m\ddot{x} = -mg, \quad (8.5a)$$

$$x(0) = h, \dot{x}(0) = 0. \quad (8.5b)$$

求解这个方程得到，

$$x(t) = h - \frac{1}{2}gt^2. \quad (8.6)$$

当 $t = \sqrt{\frac{2h}{g}}$ 的时候， $x = 0$ ，小球落到地面上。

例 8.2. [经典一维谐振子（连着弹簧的一个小球）] 质量为 m 的小球，连在一根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧上，弹簧的另一端固定在墙上。初始时刻，拉开小球，求之间的距离为 $l + A$ ，求松开以后小球运动的轨迹。

以地球为参考系，以弹簧在墙上的一端为原点，弹簧的从原点到另一端的方向为 x 轴正方向，做受力分析，并且运用Newton 第二定律得到

$$m\ddot{x} = -k(x - l), \quad (8.7a)$$

$$x(0) = l + A, \dot{x}(0) = 0. \quad (8.7b)$$

求解这个方程得到，

$$x(t) = A \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + l. \quad (8.8)$$

习题 8.1 (经典一维谐振子 (连着弹簧的两个小球)). 质量为 m 的两个小球，连在一跟弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧的两端上。初始时刻，拉开两个小球距离为 $l + A$ ，求松开以后两个小球运动的轨迹。

习题 8.2 (两根弹簧连着的三个小球). 质量为 m 的三个小球，它们之间通过两根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧相连，成一条线的形状。写下运动方程，并求出来运动方程的通解。

实际上，在第一个例子中的地球也是这个问题的参与者，地球与小球之间的引力相互作用才是导致这个运动的原因。但是，由于小球的运动对地球的状态产生的影响基本可以忽略不计，所以我们把地球作为参考系，把随着位置变化的引力用方向和大小都不变的与地球状态无关的重力来代替。第二个例子中，弹簧的另一端，也就是墙，实际上也有运动，但是幅度小很多。于是，我们把墙看作参考系，然后把墙与小球之间的相互作用看成与墙的状态无关的弹簧的弹力。在第三个情景（习题 8.1）中，我们把墙替换成另一个小球，这个时候，其运动也成了我们需要考察的对象，两个小球之间的力与两个小球的状态都有关系。从这个角度来看，第一个例子考察的是地球与小球之间的相互作用，第二个例子是小球与墙壁之间的相互作用，第三个情景是两个小球之间的相互作用。实际上，我们相信，各种各样的力，都是物体与物体之间的相互作用造成的。有的时候能够看见相互作用的各个主体有的时候只能看见一个主体或者一部分主体，是我们在考虑问题的时候根据需要划分的系统的不同造成的。让一个系统之外的外界对系统的影响不是很大的时候，或者说倒过来，当这个系统对系统的外界影响不大的时候，我们可以把外界的主体忽略，当成一个不变的影响或者直接忽略。

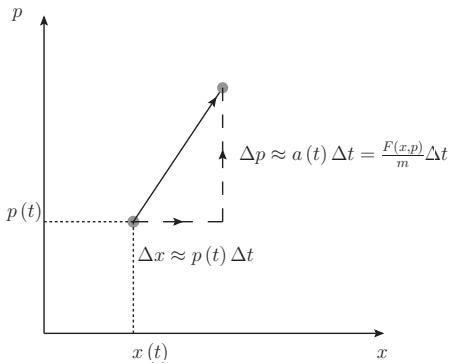


图 8.2: 在相空间中, 在系统确定了也就是给定了 $F(x, p)$ 之后, 下一个时刻的位置是完全由当前时刻的位置决定的。于是, 两条轨道要么完全相同, 要么永远不相交, 不能相交于一点。

这个由一个质点或者多个质点的位置的集合所构成的空间称为一个系统的位形空间。除了位形空间, 我们常常还在相空间里面讨论问题。相空间就是由一个质点或者多个质点的位置加上速度的集合构成的空间。我们可以把公式 (8.3) 看作是位形空间的方程, 把公式 (8.4) 看成是相空间的方程。我们知道两个方程是等价的, 那为什么要引入相空间呢? 因为位形空间的轨道可以相交, 而相空间的轨道不能相交。很容易理解为什么位形空间的轨道可以相交, 撞车就是这样发生的。那为什么相空间的轨道就不会相交呢? 一个相空间的点对应了确定的位置与速度。而速度决定了下一个时刻的位置, 因此, 这个时刻的相空间中的一个点完全决定了下一个时刻这个点在哪里。于是, 如果两个轨道在某一个点相交, 则将来这两个轨道完全一样。同样的道理, 过去也完全一样。于是他们就是同一条轨道。也可以用下面的例子来说明。考察一个一维系统的两条相空间轨道, 如图 8.2。一维系统的相空间是二维的, 我们来证明有两条不同的相空间轨道不可能在某点相交。

公式 (8.4) 是一个确定性微分方程, 在给定初始条件的情况下解是唯一的。于是, 给定相空间上的某一个点, 例如就是这个交点, 由于这个交点给出了两个初始条件, 通过这个交点的轨道只能有一条。因此, 不同轨道不能在一点相交。公式 (8.3) 也是确定性方程, 但是它是二阶方程, 需要两个初始条件来确定一条轨道。给定位形空间的一个点只能给定一个初始条件, 因此存在多条轨道通过这个给定的点。由于相空间的这个很好的性质, 在

以后的讨论中，我们经常使用相空间。相空间是一个很重要的概念。很多时候，速度会替换成动量 $\vec{p} = m\vec{v}$ ，两者相差一个常数（对于给定的系统，质量是一个常数）。所以相空间也经常指由位置和动量坐标联合确定的空间。

作为力学本身来说，主要概念和主要结构就只有这些，空间、时间、参考系、坐标、位置、速度（动量）、加速度、力、位形空间、相空间，还有Newton 第二定律。这些概念描述了运动，把运动与运动变化的原因，也就是力联系起来。但是，什么是力的问题，力学是回答不了的。力学回答的问题是，给定了力，也就是物体之间的相互作用之后，运动将会如何发生。给定的力到底怎样的问题，由研究具体的力的学科来回答，例如电磁学研究电磁力，引力科学研究引力，核物理学研究核力等等。

有一种类型的力称为保守力或者有势力在物理学里面特别重要。我们甚至相信所有的力的背后，如果我们把我们的系统做的足够大，把足够多的外界包含在我们的系统之中，都应该是保守力。

8.3 势函数、保守力与能量守恒

保守力是指满足以下关系的力 $F(\vec{x}, \vec{v})$ ，存在一个函数 $V(\vec{x})$ 满足，

$$\vec{F}(\vec{x}, \vec{v}) = -\vec{\nabla}V(\vec{x}). \quad (8.9)$$

其中 $\vec{\nabla}$ 是位置坐标的导数。所以，这样的力，不能是速度 \vec{v} 的函数，而仅仅是位置 \vec{x} 的函数。

前两个例子中的力，就是保守力，也被称为有势力，也就是可以写成一个势函数然后把力看成是这个势函数的梯度的力；后面的例子中的力，一般看成是来自于相互作用，而这个相互作用的也可以写成势函数的形式。

例 8.3 (前面三个例子中的势函数). 前面三个例子中的势函数： $V_1 = -mgx$, $V_2 = \frac{1}{2}k(x - l)^2$, $V_3 = \frac{1}{2}(x_1 - x_2 - l)^2$ 。验证通过这三个势函数得到与前面的例子中完全相同的方程。

当方程中所有的力都是保守力的时候，我们来看一下方程公式 (8.3) 的

一个变形，

$$\begin{aligned}
 m \frac{d}{dt} \vec{v} &= -\vec{\nabla} V(\vec{x}) \implies \vec{v} \cdot \frac{d}{dt} \vec{v} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{x}) \\
 \implies mv_x \frac{d}{dt} v_x + mv_y \frac{d}{dt} v_y + mv_z \frac{d}{dt} v_z &= -\left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} + v_z \frac{\partial}{\partial z}\right) V(\vec{x}) \\
 \implies \frac{1}{2} m \frac{d}{dt} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) &= -\left(\frac{dx}{dt} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{dz}{dt} \frac{\partial}{\partial z}\right) V(\vec{x}) \\
 \implies \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} mv^2 + V(\vec{x})\right) &= 0
 \end{aligned}$$

也就是

$$\frac{1}{2} mv^2 + V(\vec{x}) = E. \quad (8.10)$$

这里 E 是一个不依赖于时间的常数。这个等式被称为能量守恒，其中第一项被称为动能 T ，第二项被称为势能 V 。

例 8.4 (能量守恒的应用). 能量守恒的应用：利用能量守恒求解例 8.1 中小球落地以后的速度，以及例 8.2 中弹簧被压缩的最大长度。

例 8.1 中的小球，初始时刻的动能是 $T_i = 0$ ，势能是 $V_i = mgh$ （以地面零点为势能零点）。末状态的动能是 $T_f = \frac{1}{2}mv_f^2$ ，势能是 $V_f = 0$ 。根据能量守恒，并且假设这个过程没有其他能量参与，则

$$\frac{1}{2}mv_f^2 + 0 = 0 + mgh \implies v_f = \sqrt{2gh}. \quad (8.11)$$

例 8.2 中的能量也是守恒的表现为

$$E(t) = \frac{1}{2}mv^2(t) + \frac{1}{2}k(x-l)^2 = \frac{1}{2}kA^2 \quad (8.12)$$

我们想知道 $(x-l)$ 的最大值。于是，我们可以直接写下来，当 $v(t) = 0$ 的时候，势能最大，压缩或者拉伸的长度最大，也就是

$$l - x_{\min} = A = x_{\max} - l. \quad (8.13)$$

现在，我们已经完成了Newton 力学的主要内容的学习，我们来试着求解一下下面这个问题。

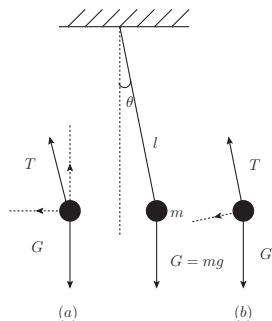


图 8.3: 单摆的受力分析到底怎么做? (a) 合力是水平方向, 还是 (b) 合力是垂直于半径的方向?

例 8.5 (单摆的周期). 单摆的周期: 固定在天花板上的轻质绳子连着一个质量为 m 小球, 拉开绳子一小段距离后松开, 求小球再次回到松开位置的时间。

按照习惯步骤, 我们先来做受力分析, 见图 8.3。我们发现, 这个时候有两种选择, 把合力方向看作是水平方向或者圆的切线方向——垂直于半径。到底我们应该选择哪一个呢? 如果我们是做静态的受力分析, 我们经常选择 (a), 那个时候意味着在水平方向上还需要有一个拉力才能为系统的平衡。甚至, 我们在讨论加速前进的小车里面挂着单摆的时候, 也是选择 (a), 因为那个时候合起来的运动方向可以想到是来自于水平方向上运动的小车的, 因此也是水平方向的。现在, 面对单摆怎么办? 当然, 我们要足够厉害, 也能够看出来, 下一个时刻, 系统将沿着圆周运动, 于是, 确实受力分解可能需要沿着切线方向更合适。于是, 得到那个方向上的合力大小为 $mg \sin \theta$, 接着得到运动方程,

$$ml\ddot{\theta} = -mg \sin \theta. \quad (8.14)$$

其中负号来自于 θ 的默认正方向是逆时针方向。当 $\theta \ll 1$ 的时候, 我们可以进一步简化,

$$\ddot{\theta} \approx -\frac{g}{l}\theta. \quad (8.15)$$

于是, θ 是一个周期函数, 其周期就是

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}. \quad (8.16)$$

有了这个方程公式 (8.14) 自己就可以继续求解, 或者至少求近似解。但是, 关键的问题是, 运动方向本来逻辑上需要靠做受力来了解, 可是, 我们现在面对必须知道运动方向才能做好受力分解的情况。这在逻辑上是一个很大的缺陷。也就是说, 其实, 所谓的受力分析, 大多数时候, 我们都是在简单的运动已经可预期的条件下完成的。如果运动比较复杂, 则受力分析不能解决运动方程是什么的问题。这就很糟糕了。整个力学的理论就经常会遇到解决不了的问题: 要么是受力太多太复杂, 要么是受力分析问题和运动趋势问题纠缠在一起了, 没法做好受力分析。那么, 能不能有一个力学, 我们不需要依靠受力分析。这就是分析力学解决的问题。

如果我们再考虑更复杂一点的平面摆, 多级摆, 这个受力分析就会更困难。一个复杂的机器, 有很多部分构成。这个时候, 受力分析的方法基本上就不能用了。最终合力的方向与运动方向的相互关联。需要对运动形式有一定的前瞻性, 洞察力才能完成受力分析。当然, 原则上也可以尝试各种受力分析方案, 一直到遇到和实际实验相符的。也就是用吓猫撞死耗子的解决方式。那科学理论是不能依赖于这样的死耗子的。Lagrange发明了一个不用做受力分析的求解力学问题的方法。这就是我们下面要介绍的分析力学。

8.4 分析力学的技术

分析力学解决的问题是, 只要我们能够写下动能 T 和势能 V 作为自变量 \vec{x} 以及 $\dot{\vec{x}}$ 的函数, 或者作为自变量 \vec{x} 以及 \vec{p} 的函数, 那么, 所有的力学问题都可以直接变成求解微分方程的技术问题。我们先来看看逻辑上为什么可行, 然后举几个例子学会如何运用, 最后再讨论这个方法的意义。

8.4.1 Lagrangian 力学

对单个质点的守保守力作用的系统定义 Lagrangian,

$$L = T(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) - V(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2}m(\dot{\vec{x}})^2 - V(\vec{x}), \quad (8.17)$$

Newton 方程与下列方程等价,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_j}, \quad (8.18)$$

其中 x_j 是 \vec{x} 的 j 分量的坐标。这个方程被称为Lagrangian 方程。

对于单个质点的系统，我们可以简单验证这个方程确实给出Newton 方程。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_j} \implies \frac{d}{dt} (m \dot{x}_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j} V \implies m a_j = F_j \quad (8.19)$$

例 8.6 (Lagrangian 力学用于单摆). 单摆：固定在天花板上的轻质绳子连着一个质量为 m 小球，写出这个小球的运动方程。用 θ 当作运动状态的描述，以天花板为势能零点，则势能为 $V(\theta) = -mgl \cos \theta$ ，动能为 $T = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2$ ，因此，

$$L(\theta, \dot{\theta}) = T - V = \frac{1}{2}m(l\dot{\theta})^2 + mgl \cos \theta. \quad (8.20)$$

按照Lagrangian 方程我们得到单摆的运动方程为，

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} \right) = ml^2 \ddot{\theta} = \frac{\partial L}{\partial \theta} = -mgl \sin \theta \implies \ddot{\theta} = -\frac{g}{l} \sin \theta. \quad (8.21)$$

习题 8.3 (Lagrangian 力学用于弹簧上的小球). : 质量为 m 的一个小球，连在一根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧的一端，弹簧的另一端固定在墙上。写出这个小球的运动方程。

习题 8.4 (Lagrangian 力学用于弹簧两端的两个小球). : 质量为 m 的两个小球，连在一根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧的两端上。写出这两个小球的运动方程。

8.4.2 Hamiltonian 力学

对单个质点的守保守力作用的系统定义 Hamiltonian,

$$H = T(\vec{x}, \vec{p}) + V(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{2m}(\vec{p})^2 + V(\vec{q}), \quad (8.22)$$

同时记位置坐标 \vec{x} 为 \vec{q} , 把自变量 $\dot{\vec{x}}$ 替换成 \vec{p} . Newton 方程与下列方程等价,

$$\frac{d}{dt}q_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad (8.23a)$$

$$\frac{d}{dt}p_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}. \quad (8.23b)$$

其中 x_j 是 \vec{x} 的 j 分量的坐标。这个方程被称为Hamiltonian 方程。

对于单个质点的系统，我们可以简单验证这个方程确实给出Newton 方程。

$$\frac{d}{dt}x_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \implies \dot{x}_j = \frac{p_j}{m}, \quad (8.24a)$$

$$\frac{d}{dt}p_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \implies \dot{p}_j = -\frac{\partial}{\partial x_j}V = F_j. \quad (8.24b)$$

于是 $m\ddot{x}_j = ma_j = F_j$ 。

例 8.7 (Hamiltonian 力学用于弹簧上的小球). 质量为 m 的一个小球，连在一根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧的一端，弹簧的另一端固定在墙上。写出这个小球的运动方程。用 $q = x$ 和 $p = mv = m\dot{x}$ 当作位置和动量，我们写下来这个系统的 Hamiltonian,

$$H(q, p) = T + V = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}k(q - l)^2. \quad (8.25)$$

则,

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad (8.26a)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -k(q - l). \quad (8.26b)$$

合起来，我们的到

$$\ddot{q} = -\frac{k}{m}(q - l). \quad (8.27)$$

习题 8.5 (Hamiltonian 力学用于弹簧两端的两个小球). : 质量为 m 的两个小球，连在一根弹性系数为 k 原长为 l 的弹簧的两端上。写出这两个小球的运动方程。

8.4.3 Lagrangian 力学与 Hamiltonian 力学等价以及最小作用量原理

如果我们从Lagrangian 力学出发推导Hamiltonian 力学，则我们要做一个变量替换。替换方法是定义

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}(\vec{q}, \vec{\dot{q}}), \quad (8.28)$$

然后反解出 \dot{q} 作为自变量 (\vec{q}, \vec{p}) 的函数，代入 T 和 V ，得到 T 和 V 把 (\vec{q}, \vec{p}) 作为自变量的函数，然后定义

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}) - L(\vec{q}, \vec{p}), \quad (8.29)$$

接着我们就可以运用Hamiltonian 方程了。现在，我们证明这个变量替换确实把Lagrangian 方程变成Hamiltonian 方程。这样的变量替换在统计力学中经常使用有一个专门的名字叫做Legendre 变换。

这是一个非线性变换，我们不仅变化自变量还变化函数的值，同时也改变方程的形式，但是维持全导数关系不变。通常的变量替换维持函数形式不变或者维持函数值不变。我们这里的这个变换比通常的变量替换复杂。既然维持全导数关系不变，那么标准的做法就是利用全导数关系。为了记号简单，下面的推导假设一维的情况，省略下标 j ，整个过程可以直接推广到多维。

$$\begin{aligned} dH &= d(p\dot{q} - L) = pd\dot{q} + \dot{q}dp - \frac{\partial L}{\partial q}dq - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} \\ &= pd\dot{q} + \dot{q}dp - \frac{\partial L}{\partial q}dq - pd\dot{q} \\ &= \dot{q}dp - \dot{p}dq \end{aligned} \quad (8.30)$$

正好留下来的自变量（出现在微分算符后面的变量）是 (q, p) 。于是，

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (8.31a)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (8.31b)$$

正好就是Hamiltonian 方程。同样的方法可以从Hamiltonian 方程推导出Lagrangian 方程。所以两个方程完全等价。这个Legendre 变换的含义是如果我们维持

方程的内涵不变，但是希望改变自变量，新的方程是什么样子。这是一个非常有用的技巧。

到这里我们发现，一个力学系统的全部知识在以位置和速度为自变量的 Lagrangian 中，或者是在以位置和动量为自变量的 Hamiltonian 中。注意，自变量必须是配套的。力学的形式主义的这个发展还可以再深入下去。例如，最小作用量原理把力学纳入到一个极值问题的框架之内。给定一个力学过程的初始位置和末位置（也可以是给定一个力学过程的初始位置和初始速度，推导类似但稍微更复杂一点点 [134]，在这里不再讨论），实际运动遵循使以下函数取极小值的路径，

$$\mathcal{L} = \int_{t_0}^t L(\vec{x}(\tau), \dot{\vec{x}}(\tau)) d\tau, \quad (8.32)$$

其中 $x(t_0) = x_i, x(t) = x_f$ 固定。

现在我们来从最小作用量原理导出运动方程。 \mathcal{L} 是一个函数到数的映射，这个极值问题依赖于一个函数，而不是通常的一个函数的极值问题（这个时候这个极值依赖于一个自变量）。正规的做法是用变分法和泛函微分。这里我们采用物理学家的不严格的做法：把函数 $\vec{x}(t)$ 和 $\dot{\vec{x}}(t)$ 看成是很多很多个从 $t \in [t_0, t]$ 的点，于是，这个函数的函数就成了很多很多个独立自变量的函数，泛函的极值问题就成了多变量函数 $L(\vec{x}(t_0), \vec{x}(t_1), \vec{x}(t_2), \vec{x}(t_3), \dots; \dot{\vec{x}}(t_0), \dot{\vec{x}}(t_1), \dot{\vec{x}}(t_2), \dot{\vec{x}}(t_3), \dots)$ 的极值问题。所以当我们写下类似 $\frac{\partial L}{\partial x_j(\tau)}$ 的时候，实际上我们是把 τ 时刻的变量 $x_j(\tau)$ 当作独立变量来做的偏导数。这个时候所谓的实际轨道（ \mathcal{L} 取极小值的轨道）和围绕这个轨道的无穷小变动可以用下面这个图 8.4 来表示。于是，这个极值问题就是这样一个含义，在实际轨道附近的任意的任何一个时刻的无穷小微扰 $\delta \vec{x}(\tau)$ 以及相应的 $\delta \dot{\vec{x}}(\tau)$ ，只能增加 \mathcal{L} 的值。注意， $\delta \dot{\vec{x}}(\tau)$ 不是独立的，就像给定 $\vec{x}(\tau)$ 之后 $\dot{\vec{x}}(\tau)$ 就给定了，给定 $\delta \vec{x}(\tau)$ 就给定了 $\delta \dot{\vec{x}}(\tau)$ 。也就是说，我们的独立自变量其实仅仅是 $\vec{x}(t_0), \vec{x}(t_1), \vec{x}(t_2), \vec{x}(t_3), \dots$ 而不包含 $\dot{\vec{x}}(t_0), \dot{\vec{x}}(t_1), \dot{\vec{x}}(t_2), \dot{\vec{x}}(t_3), \dots$ 。

有了这个理解之后，我们再来从这个极值问题推导运动方程。为了记号简单，我们仅仅考虑一维系统，整个推导很容易就能够推广到多维。从公式 (8.32) 我们得到，

$$\delta \mathcal{L} = \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial x(\tau)} \delta x(\tau) + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} \delta \dot{x}(\tau) \right) d\tau, \quad (8.33)$$

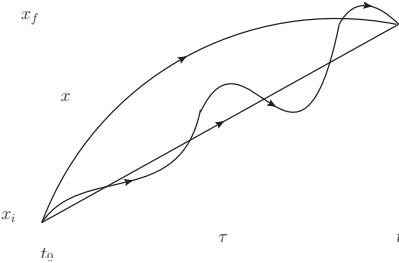


图 8.4: 这个示意图展示了从起点 $x(t_0) = x_i$ 到终点 $x(t) = x_f$ 之间的实际轨道以及围绕这实际轨道的可能的变动。这些无穷小变动就记做 $\delta\vec{x}(\tau)$ 。并且每一条可能的轨道都相当于给出了所有时间点 τ 的 $\delta\vec{x}(\tau)$, 因此实际上 $\delta\dot{\vec{x}}(\tau)$ 也就给定了。

注意这里时间 τ 的积分可以看成是很多很多个不同的时间点的取和, 每一个时间点的取和对象就是这个普通的多元函数的导数乘上一个独立的任意的 $\delta x(\tau)$ 。同时, 我们需要注意 $\delta\dot{x}(\tau)$ 不是独立的, 而 $\delta x(\tau)$ 是。于是,

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L} &= \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial x(\tau)} \delta x(\tau) d\tau + \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} d\delta x(\tau) \\ &= \int_{t_0}^t \frac{\partial L}{\partial x(\tau)} \delta x(\tau) d\tau + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} \delta x(\tau) \right|_{t_0}^t - \int_{t_0}^t \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} \right) \delta x(\tau) d\tau \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial L}{\partial x(\tau)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} \right) \right) \delta x(\tau) d\tau.\end{aligned}\quad (8.34)$$

在最后一步我们用了初始条件的约束, 因此 $\delta x(t_0) = \delta x(t) = 0$ 。由于 $\delta x(\tau)$ 可以独立取值, 所以这个极值条件就相当于

$$\frac{\partial L}{\partial x(\tau)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}(\tau)} \right) = 0 \quad (8.35)$$

以上的方程在泛函极值问题中经常出现, 而且专门有一个名字, 称作 \mathcal{L} 所对应的 Euler 方程。这里, 这个方程正好给出 Lagrangian 方程的形式。于是, 我们从最小作用量原理推导出了 Lagrangian 方程, 而 Lagrangian 方程与 Hamiltonian 方程等价, 进而两者与 Newton 方程等价。于是整个力学就成了最小作用量原理。将来, 也许你还会看到不仅仅是力学, 光学、量子力学、场论、相对论等等所有的物理学都可以表达成作用量的形式。物理学的梦想之一就是把所有的物理学分支全部统一到一个单独的作用量形式里

面来，当然，现在这个梦想还仍然没有实现。但是，这个形式化的威力和普适性是毫无疑问的。

习题 8.6 (Hamiltonian 力学用于单摆). 单摆：固定在天花板上的轻质绳子连着一个质量为 m 小球，写出这个小球的运动方程。注意你决定用什么当作坐标变量决定了你应该用什么当作相应的动量。

8.4.4 从单体到多体的分析力学形式

我们花了大量的篇幅来介绍Lagrangian 方程与Hamiltonian 方程，不仅仅是因为它们可以从受力分析中解脱出来，还因为，它们的形式非常容易推广到多体相互作用的系统。一个质点的动力学完全取决于 $V(\vec{x})$ ，而这个 $V(\vec{x})$ ，我们说过，也是由于和隐藏起来的不在系统之内的物体相互作用产生的。那么，当有多个质点，而且这个多个质点之间存在相互作用的时候，我们的理论的这个形式还能不能用呢？这里，所谓相互作用就是从受力分析的角度，一个质点受到的力不仅仅和这个质点的位置相关，也跟其他的质点的位置相关。从势能的角度来说，就是系统的势能同时依赖于多个质点的位置，而不仅仅是一个依赖于单个质点的位置的势能函数的和。用数学表达式来说明就是，

$$V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \neq V_1(\vec{x}_1) + V_2(\vec{x}_2) \quad (8.36)$$

从Newton 力学来说，单个质点的系统和多个质点的系统没有本质区别，但是受力分析会复杂很多很多，任意两个质点之间的受力都需要考虑，然后最后叠加起来。幸好，分析力学，无论是 Lagrangian 的形式还是 Hamiltonian 的形式，我们都可以直接从单个质点推广到多个质点，仅仅需要包含，以两个质点的系统为例

$$L(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \dot{\vec{x}}_1, \dot{\vec{x}}_2) = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{x}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{x}}_2^2 - V_1(\vec{x}_1) - V_2(\vec{x}_2) - V_{12}(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \quad (8.37)$$

或者

$$H(\vec{q}_1, \vec{q}_2; \vec{p}_1, \vec{p}_2) = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V_1(\vec{q}_1) + V_2(\vec{q}_2) + V_{12}(\vec{q}_1, \vec{q}_2). \quad (8.38)$$

这个方便的形式在处理多体相互作用的系统的时候非常有用。

例 8.8 (Lagrangian 力学用于二级摆). 二级摆：固定在天花板上的轻质硬杆连着另一个轻质硬杆，第二个轻质硬杆连着一个质量为 m 小球，用 Lagrangian 力学写出这个小球的运动方程。

以天花板悬挂点为原点，并且为势能零点，竖直向上方向为 y 轴正方向，水平向右为 x 轴正方向。我们用第一个轻杆和竖直方向的夹角 θ ，还有第二个轻杆和竖直方向的夹角 ϕ 来当作位置变量，则

$$x = l(\sin \theta + \sin \phi), y = -l(\cos \theta + \cos \phi). \quad (8.39)$$

于是

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2}ml^2(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 + 2\dot{\theta}\dot{\phi} \cos(\theta - \phi)), \quad (8.40)$$

$$V = -mgl(\cos \theta + \cos \phi). \quad (8.41)$$

因此，

$$L = T - V = \frac{1}{2}ml^2(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2 + 2\dot{\theta}\dot{\phi} \cos(\theta - \phi)) + mgl(\cos \theta + \cos \phi). \quad (8.42)$$

方程的推导就不展开了。

习题 8.7 (Hamiltonian 力学用于二级摆). 二级摆：固定在天花板上的轻质硬杆连着另一个轻质硬杆，第二个轻质硬杆连着一个质量为 m 小球，用 Hamiltonian 力学写出这个小球的运动方程。

习题 8.8 (Lagrangian 力学用于三根弹簧连着的三个小球). 三根弹簧连着的三个小球：三个小球通过三根弹簧首尾相连，放在一个光滑平面上，用 Lagrangian 力学写下这个系统的运动方程。

习题 8.9 (Hamiltonian 力学用于三根弹簧连着的三个小球). 三根弹簧连着的三个小球：三个小球通过三根弹簧首尾相连，放在一个光滑平面上，用 Hamiltonian 力学写下这个系统的运动方程。

分析力学的形式还能够帮助我们简化约束的处理，例如，考虑一个在曲面或者曲线上运动的物体。这里我们就不再讨论，有兴趣的读者可以去看一下 Dirac 的《约束运动》[137]。

8.5 关于什么是科学的进一步讨论

首先，通过反思Galileo关于重物落得快的思辨，我们已经说明了任何脱离实验和数学的思辨过程都是不可靠的，不管这个思辨看起来多么合理和漂亮。Galileo对于重物下落快的基于纯粹思辨的反驳悄悄地用了一个假设，就是两个物体合起来的速度介于两者分开之间。这个假设实际上包含了对速度（其实是动量）的一个很重要的性质的把握：一定意义上的守恒性，或者说强度量在计算某种和的时候常常意味着求平均。如果我企图用同样的思路来证明越重的金子（质地一样）越值钱是错的，你就会发现，我在这里——两块金子合起来的价值介于两者分开之间——过不去，也就是说金子的价值的守恒性质和速度的守恒性质是不一样的，或者说广延量在计算某种和的时候常常意味着求总数的和。如果我们试着用数学公式来表达就是对于速度我们有，合起来的速度 $v_{mn} = \frac{Mv_M + mv_m}{M+m}$ ，于是 $v_m \leq v_{Mm} \leq v_M$ 。合起来的金子的价值 $V_{mn} = MV_m + mV_M$ ，没有必要介于两者之间。但是，我们看见，整个理想实验的推理过程之中，没有明显地用到任何关于前一个或者后一个守恒律的地方。因此，整个逻辑链条实际上是不完整的。为什么说数学是物理学的语言呢，不仅仅因为数学帮助物理学做计算，还因为数学是逻辑思维的语言。通过这个例子我们还展示了批判性思维的物理学中的作用。

当然，你应该接着问，我怎么知道速度的合成是这样的而金子的合成是那样的呢？我不得不告诉你，这个是实验定律。所以，动量守恒，在整个力学的框架内，是非常重要的实验定律。在漆安慎老师的《力学》[133] 的逻辑线路里面，动量守恒，而不是Newton 第二定律，是整个力学的基础。这是一个很好的逻辑线路，因为力学本身没法定义力：各种各样的力是通过其它具体对象的学科定义的。例如电磁学可以定义电磁力，引力理论可以定义引力等等。当然，在我们分析力学的框架内，我们是不需要力的概念的。所以，我们的力学没有力。分析力学的框架需要的是如何写下各个系统的 T 和 V ，尤其是这个 V ，也是由研究各种相互作用的具体学科决定的，而不是力学的任务。力学处理的问题是，给定 T 和 V 以后的事情，以及为什么给定 T 和 V 就够了的这个框架。

第二，我们想进一步反思一下，科学到底是什么？有一个这样的两个人玩的游戏：一个人 A 在脑子里想一个物体，然后另一个人 B 向前一个人 A

总共 20 个问题， A 只能回答是或者否。通常 20 个问题结束之后， B 都会知道 A 脑子里想的是什么。有一天， A 作弊，他什么也不想，然后回答 B 的所有的问题，但是 A 有能力做到不自相矛盾。于是，20 个问题（甚至可以允许更多的问题）之后， B 还是得到了一个答案。问：这个答案是否正确？因为这个情境下， A 没有事先想好的物体，我们不能说 B 的答案是正确的。完全有可能， B 的答案依赖于 B 的问题是什。有的人觉得科学就是这个 B ，世界就是这个 A ：世界本没有真理，科学的真理仅仅是科学研究中间的问题导致的。

这个思辩是有一定道理的。但是，我强烈鼓励你取玩一下这个游戏，然后你来做这个作弊的 A 。因为实际上允许无穷多次问问题，你需要获得一个不自相矛盾的答案，又没有一个明确的对象在脑子里面是非常非常困难的。如果有一个明确的对象，对于每一个问题， A 只需要按照这个对象的属性来回答，没有对象的话，就必须把所有的之前的问题和答案都记住，然后才能自洽。而且，物理学要求普适性——物理现象和定律不随着操作者的不同而不同（尽管科学原则上不要求可重复性），也就是说，如果另外一个 C 问你相同的顺序的问题甚至不同顺序但是一样的问题，你必须保证你给 B 和 C 的答案是一样的。而且，这样的 C 可以有无穷多个。这是一件非常困难的事情，就算 A 是世界或者上帝。

换一个角度，如果 B 得到了一个关于这个物体的最终答案，这个答案与之前的所有问题都不矛盾，而且还能利用这个答案来回答 B 想问的其他问题，而且这个答案与 A 将要给出的回答一样，那么，这个最终答案是不是 A 事先想好的，又有什么关系呢？我要是 A 的话，就自己也按照 B 的问题推出一个答案，然后我按照这个答案来回答 B 的后续问题。这样，我就简单多了，不用一直维持一个避免自相矛盾的长长的列表。所以，从根本上说，科学到底是不是真理没有意义，只要科学给出的答案与之前的所有科学探索不矛盾，然后还能够用来回答进一步探索中会遇到的问题；从技术上说，能够本来就没有真理还维持所有的答案都不自相矛盾，这个可能性太低了，更可能是本来就有一个真理。

第三，我们举例来看一下佯谬对于科学发展的促进意义。这里，我们讨论 Zeno 佯谬：Achilles 追不上乌龟。Achilles 是一个走得很快的神，假设是乌龟的速度 v 的两倍。乌龟先走距离 L ，然后 Achilles 开始追。我们知道

Achilles 是肯定能够追上乌龟的，时间是 $t = \frac{L}{v}$ 。Zeno 是这样来推理的：我们考虑 Achilles 走到 L 的时候，乌龟在哪里，在 L 前面 $\frac{L}{2}$ 的地方。接着当 Achilles 把这个新的 $\frac{L}{2}$ 走完的时候，乌龟还在前面的 $\frac{L}{4}$ 处。这个过程会继续下去，但是，永远乌龟会在 Achilles 的前面的某个 $\frac{L}{2^n}$ 处，尽管这个距离越来越小。于是，Achilles 永远也追不上乌龟。这个推理没有任何逻辑错误。也许你学过极限，你知道这个距离趋于零，于是在 $n \rightarrow \infty$ 的极限下，Achilles 追上乌龟。但是在任何有限步，Achilles 还是追不上乌龟。而我们不可能等着这个无穷极限完成。那怎么办？其实，根本问题在于这个推理过程中，我们混淆了逻辑时间和实际时间。如果我们计算一下这个切分过程的每一步的实际时间，然后取和，我们就会发现，实际上总的时间是有限的， $t = \frac{L}{2v} + \frac{L}{2^2v} + \frac{L}{2^3v} + \dots = \frac{L}{v}$ 。从这个佯谬，我们了解到极限的概念与计算，还了解到区分逻辑时间和实际时间。将来，我们还会讨论 Gibbs 佯谬，那里，微观粒子的可区分和不可区分会导致不同的计算结果，于是我们需要讨论实际微观粒子的可区分性。因此，这些设计巧妙的佯谬其实都意味着当时的一个理论体系尚不完备的地方。这个 Zeno 佯谬其实有更深刻的含义：如果我们所谓的实际时间实际上也是某个逻辑时间呢？我们凭什么认为我们的时间就不可能是某个过程的逻辑时间，而肯定是物理时间呢？我们的时间都是通过某种周期现象来度量的，这个周期现象的周期，在逻辑时间看来是均匀的，在物理时间看来就不一定是均匀的。实际上这个“时间流逝和状态有关”的现象在接近黑洞视界的时候（或者说考虑任何高速运动的加速运动的物体的时候）就是需要考虑的。

8.6 作业

习题 8.10. 再次阅读 Einstein 和 Infeld 的 *The Evolution of Physics: The Growth of Ideas from Early Concepts to Relativity and Quanta* (《物理学的进化》) [135]，做概念地图和文字相结合的读书笔记。

习题 8.11. 再次阅读 Feynman 的 *The Character of Physical Law* (《物理定律的特性》) [136]，做概念地图和文字相结合的读书笔记。

习题 8.12. 学习 Landau 和 Lifshitz 的 *Mechanics* (《力学》) [134]，做概念地图和文字相结合的读书笔记，并且选择其中的部分习题来完成。

习题 8.13. 再次阅读本书关于控制论的小节，思考力学部分以及其他部分和控制论部分的联系。

8.7 本章小结

通过力学的学习，我们已经了解到物理学的基本思考方式是描述事物的状态，以及探索事物状态发生变化的原因。Newton 力学关心的是物体的时空状态——在任何时间点上物体在什么位置、速度是多少，以及状态发生变化的原因。利用力的概念，Newton 力学把原因与状态联系起来，也就是Newton 第二定律。我们还了解到这个问题完全由物体的Hamiltonian或者Lagrangian描述，从其中我们可以得到运动方程，然后在一定的初始条件下求解运动方程我们可以得到物体任意时刻的状态，不管过去还是未来。最后，作为一个导出所有理论的原理（通常原理不能通过逻辑推导得来，也很难从现实世界中提炼出来），最小作用量原理提供了理解力学的形式的另一个角度。我们还了解到运用受力分析和Newton 第二定律来处理相互作用的多体系统以及受约束的系统是很困难的，但是分析力学的技术使得这个问题更容易处理。

在纯粹的力学的图景内，我们的理论是如何得到检验的呢？假设我们做一个特定系统的测量，我们需要知道这个系统的某一个时候的完整的状态——力学告诉我们可以选择位置和速度，加上这个系统所处的环境——最好这个环境是不变的，如果变化我们有可能需要把这个环境也放到系统之中来，然后过一段时间之后如果我们再进行测量，则观测到的状态应该与我们理论预测的一样。在这个图景里面，我们需要知道某时刻系统的完整的状态。

从纯粹的力学的图景稍微扩大一点点，假设我们做一个系统的测量，但是我们对于这个系统的初始状态了解不够或者并不关心，我们也不太关心某一次测量的结果而是更加关心如果同时有很多个人独立地在完全相同的系统上做测量得到的结果的所有可能性以及主要特征是什么，这个时候，我们怎么办？扔在空中的硬币就是这样一个系统。对它的测量我们关心的是出现人头和字的几率。首先，我们没必要或者不可能完整记录系统的某一时刻或者整个过程的完整状态，其次对于多次完全相同的实验来说初始条件

可能也不是完全一样。这个时候，如果经过一段时间系统的状态和初始状态没有太大的关联，也就是说不同的初始状态可能一段时间以后导致类似的状态，那么我们就可以把时间因素和初始条件的因素去掉，只关心在达成那个类似的状态之后，对这个系统做测量得到的结果。这个时候，力学的问题，从 $\vec{x}(t_0) = \vec{x}_0$ 到 $\vec{x}(t)$ 的问题，就没有了 \vec{x}_0 也没有了 t ，成了 $\vec{x}(t \rightarrow \infty)$ 符合什么分布（这里假设连续变量，采用密度分布函数） $\rho(\vec{x})$ 的问题。这个就是我们下一章要解决的问题，称为统计力学的图景。

第九章 统计力学

在上一章的小结里面，我们提到在某些情景之下，力学问题 $\vec{x}(t_0) \rightarrow \vec{x}(t)$ 可以转化成为长时状态的分布函数（这里假设连续变量，采用密度分布函数）的问题 $\rho(\vec{x}(t \rightarrow \infty))$ 。这一章的基本任务就是讨论在什么样的条件下，物理系统的相应的长时状态的分布函数是什么样子。首先，我们会换一个角度（从分布函数的演化的角度）来重新写一遍力学，然后我们期望这个新的力学形式能够给我们一些长时状态的分布函数的启发。接着，我们会发现这样的启发相当有限。于是，我们从新的假设建立长时状态的分布函数的理论。最后，我们举几个例子学会如何做计算。

为什么系统科学的学生要学会统计力学？统计物理学把系统的描述从确定性运动方程转向了分布函数的演化，更加适合描述多体系统。有的时候，我们也说，统计物理学是从微观到宏观的桥梁。系统科学很多时候要研究多体系统，要从系统的微观机制来讨论系统的整体行为。因此，来自于统计物理学的思维方式和分析方法，甚至某些具体概念和模型，都会在系统科学中发挥重要作用。

这个部分的推荐阅读材料比较多：杨展如的《量子统计物理学》[138]，Chandler的 Introduction to Modern Statistical Mechanics[139]，Plischke和Bergersen的 Equilibrium Statistical Physics[140]，Kadanoff的 Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization[141] 这几本比较基本。Reichl的 A modern course in statistical physics[142]，Kubo的 Statistical Physics I: Equilibrium Statistical Mechanics[143]，Balescu的 Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics[144] 也非常值得推荐，尽管稍微有点专门有点难度。

9.1 从力学到统计力学

由于某些原因，例如初始条件不确定，例如所观测的事物本身就是随机客体，我们不能明确地写出来任意时刻的状态，于是我们利用状态的分布函数来描述这个系统： $\rho(\vec{x}, t)$ 表示在 t 时刻系统的状态符合这个分布。在这里，我们已经从对具体的单一系统的描述转到了对抽象的系综的描述：我们想象在 t 时刻有无穷多个完全相同完全独立的系统，它们合起来看（如果测量其状态的话）符合分布函数 $\rho(\vec{x}, t)$ 。概念上，系综是对概率论的一种很好的理解，假想有无穷多个这样的系统整体来看的状态。在实际计算上，系综也是非常有用的概念：很多时候，对于随机过程（或者随机变量）我们要产生或者收集 L 条轨道每一条轨道都有 T 个时间点，也就是 $\{\vec{x}^l = (x_1^l, \dots, x_t^l, \dots, x_T^l)\}, l = 1, 2, \dots, L$ （对于随机变量的情形， $T = 1$ ）。系综里面的系统的独立性就体现在不同的 l 的 \vec{x}^l 之间完全没有关系，但是，同一个 l 的 x_t^l 和 x_τ^l 可能有关系。从概率论到统计学到统计物理学，这个系综的概念都非常重要。

让我们通过一个类比来理解这个描述方式的转换。考虑一个两面（称为“正反”）完全对称的硬币。如果我们能够记录初始速度的大小方向，考虑重力和空气阻力，桌面的弹性和几何条件等等，我们是完全就可以知道这个硬币在任何时候的状态的。这个就是力学描述。现在我们面对这样一个问题，我站在你面前，你和我都不能用任何辅助的仪器（意味着不仅是你，我自己也基本上不能真正跟踪硬币的力学状态），你来猜测硬币落在桌面上以后的状态。对于完成这个任务，我们发现，如果能够找到一个分布函数（这个分布函数可能是各种原因造成的，例如初始速度、桌面条件等等的不确定性等等，或者这个硬币本身就是随机的），问题就解决了，而不需要知道整个的力学状态的演化过程。这个时候对于这个系统的测量就好像是从一个给定的随机分布中抽样，力学过程完全藏了起来。理论与测量的对比也不再关于某次测量或者过程中某个时间点的状态的某次测量的结果，而是一段时间之后——将来会明白这个“一段时间”（系统趋向平衡的时间，弛豫时间）的更准确的含义——关于多次测量的典型值与偏差。这也是为什么这门物理学被称为统计物理学的原因。

现在，我们用力学的眼光来看一看这个系统，或者说这个由理论上无穷多个完全相同的系统构成的系综，的演化，也就是对于由 $\vec{x}(t) = T(t, t_0) \vec{x}(t_0)$

描述的系统，已知 $\rho(\vec{x}, t_0)$ ，我们会得到什么样子的 $\rho(\vec{x}, t)$ 。为了描述简单，我们已经形式上引入了演化算符 $T(t, t_0)$ 。环境不变的力学系统的演化，从力学部分我们知道，是由不显含时间的 $H(\vec{x})$ 决定的，因此， $T(t, t_0)$ 也肯定是 H 的函数。具体什么样的函数关系我们暂时不关心。我们来看分布函数的演化。

注意，如果回到力学系统，这里的 \vec{x} 实际上包含 q, p ，广义坐标和广义动量。我们把包含了广义坐标和广义动量的描述系统状态的空间叫做相空间。同时，把仅仅包含广义坐标 q 的叫做位形空间。在位形空间上，给定 H 以后，下一个时刻的轨道仍然是不确定的，系统在 q 点可以有多个不同的 p ，于是就有多个不同的 H 的值，这样就导致下一个时刻的位置还依赖于不在空间里面的 p 。相空间就不一样了。每一个点根据这个点上的 x ，也就是 q, p 是完全确定的，于是 $H(\vec{x})$ 也是完全确定的，因此下一个时刻的 q, p 的值也是完全确定的。于是，在相空间里面，不同的轨迹不相交。

在整个相空间 $\{x\}$ 上，想象一下在 t_0 时刻我们按照 $\rho(\vec{x}, t_0)$ 给出了一个系统密度的分布，我们想看看在 t 时刻这个密度会变成什么样。这个很简单，我们来跟踪每一个系统的运动，也就是

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho(T(t, t_0) \vec{x}(t_0), t_0). \quad (9.1)$$

直观地来看，就是在 t_0 时刻处于 $\vec{x}(t_0)$ 的代表点，代表了密度 $\rho(\vec{x}(t_0), t_0)$ ，随着时间演化，这个代表点到了别的地方，同时它代表的密度也跟着跑到了这个新的地方。而 $\rho(\vec{x}, t)$ 的视角是不一样的，它描述的是每一个时刻分布函数 $\rho(\vec{x})$ ， t 是不同时刻的分布函数的一个标记。这两者描述的是同一件事情，但是在图景上的不同是很重要的。前者是跟踪每一个代表点的运动，它到了哪里就把相应的几率密度带到那里；后者是忘了每一个代表点从哪里来，盯住相空间中的某一个点 \vec{x} ，看某个时刻系统落在它这个点上的几率。我们想从 $\vec{x}(t) = T(t, t_0) \vec{x}(t_0)$ 得到 $\rho(\vec{x}, t)$ 的演化方程。前者是力学，后者是随机分布函数描述的力学，有可能可以得到统计力学，也就是 $\rho(\vec{x}, t \rightarrow \infty)$ 的一些特征。前者也称为随体的视角，后者也称为场的视角。

为了得到 $\rho(\vec{x}, t)$ 的演化方程，我们需要一点点经典场的知识，具体来说是场的各种导数算符 $\vec{\nabla}$ 以及连续性方程，

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0. \quad (9.2)$$

连续方程的含义是指在单位时间内在任意体积元内物质的量的增加（方程公式 (9.2) 左端）等于进入这个体积元的物质的流的量（方程公式 (9.2) 右端， $\rho \vec{v}$ 表示进入表面的流， $\vec{\nabla}$ 牵涉到体积分与面积分之间的转换）。具体连续性方程的推导可以参考本章末尾的附录 §9.9.1。以一维系统为例，多维实际上是一样的，利用连续性定理，注意到这个时候 \vec{x} 实际上代表了 q, p 动量和坐标两个部分，我们得到，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \rho &= \frac{\partial}{\partial p} (\rho \dot{p}) + \frac{\partial}{\partial q} (\rho \dot{q}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial p} \left(\rho \frac{\partial H}{\partial q} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\rho \frac{\partial H}{\partial p} \right) \\ &= -\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial \rho}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial \rho}{\partial q} \quad (9.3) \\ &\triangleq -\{H, \rho\} \quad (9.4)\end{aligned}$$

最后写成 $\{H, \rho\}$ 的形式仅仅是一个简单的记号。这个记号称为Poisson 括号。这个方程就是 $\rho(\vec{x}, t)$ 的运动方程，称为Liouville 方程。其中我们用到了力学系统的Hamiltonian 方程和场的连续性方程。后者是一个数学结果。有的时候，也定一个一个 Liouville 算符

$$L = i \{H, \cdot\}, \quad (9.5)$$

把这个方程写成，

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\{H, \rho\} \triangleq i L \rho. \quad (9.6)$$

这是一个线性方程，有一般解，

$$\rho(t) = e^{-iL(t-t_0)} \rho(t_0). \quad (9.7)$$

将来在量子力学，我们还会看到形式上一模一样的方程。

有了这个Liouville 方程之后，我们顺便来证明一下Liouville 定理。这时候，我们要转成随体的视角，放弃场的视角。考察 $\rho(q(t), p(t), t)$ 的全微分，

$$\frac{d}{dt} \rho = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H, \rho\}$$

代入 Liouville 方程公式 (9.4) 到上面的表达式，我们得到，

$$\frac{d}{dt}\rho = 0. \quad (9.8)$$

这个称为Liouville 定理。我们看到Liouville 定理没有用到Liouville 方程之外的任何东西（实际上Liouville 方程加上Hamiltonian 方程，但是 Liouville 方程已经包含Hamiltonian 方程），因此不包含任何新的信息。这也就是说Liouville 定理包含的内容还是力学系统的运动方程加上场的连续性方程。从随体的视角来看，Liouville 定理告诉我们代表点确实带着所代表的概率密度运动，而运动过程本身满足力学方程。

有了Liouville 方程之后，我们就可以研究 $\rho(\vec{x}, t)$ 的演化了。那么，是否存在一个长时极限 $\rho(\vec{x}, t \rightarrow \infty)$ 呢，或者说存在定态分布函数满足下面的定义呢？

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x}, t) = 0. \quad (9.9)$$

Liouville 方程公式 (9.4) 告诉我们如果 ρ 完全是 H 的函数，则上述条件得到满足，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(H) = -\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial \rho(H)}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial \rho(H)}{\partial q} \propto -\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = 0. \quad (9.10)$$

这是我们能够得到的关于定态分布的重要信息。其实，基本上这已经是以为力学为出发点能够得到所有的关于定态分布的信息，力学已经不能给我们更多的信息。这信息还不足以解决定态分布的问题。为了解决统计力学的定态分布的问题，人们提出了新的假设。其中一个思路就是假设微正则系综（具体来说就是如果系统的能量固定，则系统的状态在等能面上均匀分布），然后希望从微正则假设推导出来其他更一般的定态分布。在推导的过程中，再加上态密度（能量等于某个特定值的状态的数量）正比于能量的指数的假设，就可以从微正则分布得到正则分布。在这里，因为态密度正比于能量的指数函数的额外假设经常被大家忽略，我们不采用这样一条看起来好像更有道理更容易接受的道路，而是直接假设正则分布。这样，我们强调这条看起来可行的道路实际上理论上是有问题的（需要态密度的额外假设）。如果有一天，统计物理学基本理论的发展能够用其它的方式证明或者从其他的假设更自然地推导出来正则分布，我们再来修改这一部分。

9.2 统计力学的基本理论：系综理论

上面我们提到我们想得到 $\rho(\vec{x}, t)$ 在给定条件下的稳定分布。现在，我们想象一下我们所面对的系统总能量和总粒子数都固定，那么我们必然在相空间（所有的 \vec{x} 的集合）的等能面上运动。如果我们的系统可以和外界交换能量，称为弛豫过程或者弛豫现象，实际系统很难避免与外界交换能量，那么总能量不是固定的。这里我们假设总粒子数还是固定的，系统与外界不交换粒子。我们想知道这个时候系统分布函数是什么。注意这个分布函数给出的平均值与方差等等统计量将来必须测量结果一致。正则分布假设告诉我们，

$$\rho_{Eq}(\vec{x}, T) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\vec{x})}, \quad (9.11)$$

其中 $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B 称为 Boltzmann 常数, Z 是归一化常数也被称为配分函数,

$$Z = \int d\vec{x} e^{-\beta H(\vec{x})}. \quad (9.12)$$

有很多的理由和假说可以使得这个分布函数看起来更顺眼，更容易接受。这里我们一概不去管它们。我们下面的任务很简单，学会从这里开始如何做计算，展示几个例子这个分布函数给出来的计算结果确实与实验符合。

为了完成这个目的，我们来考虑理想气体。我们假定读者已经学过高中的理想气体定律：封闭在一个空间中的气体满足 $PV = Nk_B T$ （对于封闭气体 Nk_B 就是两个常数），而且做过实验进行了验证。这里我们的目的是从理想气体的 Hamiltonian 出发，利用正则分布证明理想气体定律。

例 9.1 (三维理想气体的统计力学). 三维理想气体 $H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$, 证明气体宏观量满足 $PV = Nk_B T$ 。

首先，我们计算一个气体分子（分子内部没有其他自由度，例如旋转等等，或者我们看成单原子分子）处在体积为 V 温度为 T 的盒子里的配分函数 Z

$$Z_1 = \int d\vec{x} d\vec{p} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = V \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}} \int d\vec{p} e^{-p^2} \propto V \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (9.13)$$

省略的部分完全是一个常数。于是，如果我们有 N 个气体分子，则

$$Z_N = Z_1^N. \quad (9.14)$$

其次，我们来计算物理量，例如平均动能（或者平均速度大小）。为了简单，我们也从一个分子的开始，

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_1} \int d\vec{x} d\vec{p} \frac{p^2}{2m} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = -\frac{1}{Z_1} \frac{\partial}{\partial \beta} \int d\vec{x} d\vec{p} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_1 = \frac{3}{2} k_B T. \quad (9.15)$$

这里我们利用偏导数简化了计算。实际上我们发现绝大多数的物理量都可以通过配分函数间接地算出来。这个背后有更深刻的原因（热力学势函数），我们不再深究。由于这个 $\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$ ，其中参数 β 还可以替换成其他参数，例如 $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ，经常会用到，我们定义 Gibbs 自由能为

$$F = -k_B T \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (9.16)$$

这里我们看到单个分子的平均动能满足

$$U = \langle H \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (9.17)$$

对于 N 个分子的系统，利用 $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$ ，我们得到

$$U = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_1 = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (9.18)$$

在我们计算气体的压强之前，我们需要知道压强的微观物理对应，这里我们直接给出答案 $P = \left\langle \frac{1}{3} n m v^2 \right\rangle$ ，其中 n 为单位体积内的粒子数。我们会在本章附录中 §9.9.2 补充一个说明。有了这个公式，我们看到

$$P = \left\langle \frac{1}{3} n m v^2 \right\rangle = \frac{2}{3} n \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{2}{3} n \frac{3}{2} k_B T = \frac{N}{V} k_B T. \quad (9.19)$$

这个是实验可以验证的理想气体定律。

用附录 §9.9.2 里面的压强的宏观量计算公式公式 (9.87)，也可以得到

$$P = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = \frac{N}{V} k_B T. \quad (9.20)$$

习题 9.1 (一维和二维理想气体的统计力学). 一维和二维理想气体 $H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$ ，求出来配分函数和内能。提示：对于一维和二维注意其中的动量该怎么写。

习题 9.2 (一维、二维和三维谐振子的统计力学). 谐振子 $H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} kx_i^2 \right)$, 求出来配分函数和内能。提示：对于一维、二维和三维注意其中的动量和位置该怎么写。

例 9.2 (一维Ising 模型精确解). 一维Ising 模型 $H = -J \sum_{j=1}^N S_j S_{j+1}$ 的精确解。其中 $S_j = \pm 1$, $S_{N+1} = S_1$ 表示周期边界条件, $S_{N+1} = 0$ 表示自由边界条件, 求出配分函数 Z 。

首先, 对于 $N = 2$ 的自由边界条件的系统, 我们的计算很简单: 总共有四个状态, $|S_1 S_2\rangle = |11\rangle, |1-1\rangle, |-11\rangle, |-1-1\rangle$, 其能量分别为 $E = -J, J, J, -J$, 因此

$$Z_2 = e^{\beta J} + e^{-\beta J} + e^{-\beta J} + e^{\beta J}. \quad (9.21)$$

对于 N 比较小的情况, 我们类似可以通过计算 2^N 个状态及其能量得到。当 N 很大的时候, 2^N 是一个很大的数字, 直接求和计算就不太好用了。

我们观察一下 $N = 3$ 的时候, 状态有

$$\begin{aligned} |S_1 S_2 S_3\rangle &= |111\rangle, |11-1\rangle, |1-11\rangle, |-111\rangle, |1-1-1\rangle, \\ &\quad |-11-1\rangle, |-1-11\rangle, |-1-1-1\rangle \end{aligned} \quad (9.22)$$

能量有

$$E = 2J, 0J, -2J, 0J, 0J, -2J, 0J, 2J. \quad (9.23)$$

配分函数是

$$Z_3 = 2 \left(e^{\beta 2J} + e^{\beta 0J} + e^{\beta 0J} + e^{-\beta 2J} \right) = 2 \left(\frac{Z_2}{2} \right)^2. \quad (9.24)$$

更一般地, 对于 N 格点的情况, 可以证明 (见习题 9.3)

$$Z_N = 2 \left(e^{\beta 2J} + e^{\beta 0J} + e^{\beta 0J} + e^{-\beta 2J} \right) = 2 \left(\frac{Z_2}{2} \right)^{N-1}. \quad (9.25)$$

对于周期边界条件, 我们来用一个来自于Onsager的转移矩阵方法来求解。我们从 $N = 3$ 开始,

$$Z_3 = \sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta S_1 S_2} e^{\beta S_2 S_3} e^{\beta S_3 S_1}. \quad (9.26)$$

把 $e^{\beta S_1 S_2}$ 看作一个矩阵,

$$M_{S_1 S_2} = e^{\beta S_1 S_2} = \begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{bmatrix}. \quad (9.27)$$

于是，

$$Z_3 = \text{tr}(M^3). \quad (9.28)$$

如果我们找到了 M 的本征值 m ，则

$$Z_3 = \sum_m m^3. \quad (9.29)$$

更一般地，

$$Z_N = \sum_m m^N. \quad (9.30)$$

现在，我们来计算 M 的本征值。

$$m_1 = e^{\beta J} + e^{-\beta J}, \quad (9.31a)$$

$$m_2 = e^{\beta J} - e^{-\beta J}. \quad (9.31b)$$

于是，

$$Z_N = (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^N + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^N. \quad (9.32)$$

其中，第二项随着 N 变大，会逐渐消失（参见幂方法）。

有了转移矩阵方法之后，实际上，我们发现，对于开放边界条件，仍然是可以通过转移矩阵来求解的，

$$Z_N = \sum_{ij} M_{ij}^{N-1} = \sum_{ij} (U \hat{M} U^\dagger)_{ij}^{N-1} = \sum_{ij} (U \hat{M}^{N-1} U^\dagger)_{ij}. \quad (9.33)$$

其中， U, \hat{M} 分别是 A 的本征向量和本征值矩阵。也就是说，和周期边界条件相比，我们还是一样要计算 M 的本征值，不过还要留下来本征向量。具体计算留作习题（习题 9.3）。

其实，二维的 Ising 模型的精确解也能够用转移矩阵方法求出来 [145, 146]。以后我们还会发现，基本上所有的概念和分析方法都可以拿 Ising 当例子来用一下，例如相变、关联函数、重整化群、Metropolis 方法等等。因此，Ising 模型是学习统计物理学的一个好例子。

另外，我们这里把配分函数变成矩阵乘积和取和的这个操作，是具有一般性的：大量的配分函数的问题都可以变成矩阵乘积然后求和的问题。这也是为什么我们希望矩阵这个东西要进入你的思维方式进入你的认知结构，而不仅仅是会算。

习题 9.3 (一维 Ising 模型的配分函数). 计算上面的自由边界条件的 Ising 模型的配分函数, $H = -J \sum_{j=1}^{N-1} S_j S_{j+1}$ 。转移矩阵方法或者直接求和的方法。

这里我们用两个例子展示了配分函数的计算。下面一个例子，我们将不做计算，但是利用其他人已经得到的配分函数，转而讨论有了配分函数以后我们可以对系统的性质了解到什么程度。

在这里我们避开了统计力学的基本问题：为什么会有个稳定分布呢，为什么稳定分布是这样的函数形式呢？我们确实知道 $\rho = \rho(H)$ 肯定是一个稳定分布，但是，是什么力量使得系统演化到 $e^{-\beta H}$ 这样的一个稳定分布呢？如果是封闭系统，那么，Liouville 方程本身是可逆的。把 Liouville 方程重新记为，

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = L\rho. \quad (9.34)$$

于是，当 L 本身不显含 t 的时候，形式上，这个方程有解

$$\rho(t) = e^{L(t-t_0)} \rho(t_0). \quad (9.35)$$

显然这个演化算符

$$T(t, t_0) = e^{L(t-t_0)} \quad (9.36)$$

是完全可逆的，

$$T^{-1}(t, t_0) = e^{-L(t-t_0)}. \quad (9.37)$$

从这里，我们顺便搞清楚了前面用的演化算符的真实含义。更重要的是，我们发现，分布函数 $\rho(t)$ 的演化方程是线性的、可逆的。这两点都非常的重要的。那么，如果整个世界的运动都是可以用动力学方程描述的，那怎么会有那些看起来非常自然的不可逆的现象呢？是不是说，实际上，出现这些向着某个定态演化的现象的，都是有了外界的参与呢？例如杯子里面的热气扩散到环境中去了，墨水扩散到了整个杯子，气体从盒子的一半扩散到整个盒子。当然，动力学系统的状态反转演化也不是这么简单的问题，还有一些微妙的问题。例如，大多数时候气体扩散的这种不可逆可以用高概率和低概率来解释：从任意的初始条件，气体都会扩散到另一边去，而只有很少的某些要求所有气体分子的速度相互协调的初始条件，系统才会从整个盒子缩小到一半里面去。并且，更加微妙的事情是，并不是所有的可逆过程都没有定态。它们可以有渐近定态，系统不断地逼近一个定态，而定态本身

确实是不动点。这就好像是可逆Markov 过程的定态一样：从某一个状态开始，系统随着演化会一直在趋近这样的定态，但是不会真的到达这个定态，除非一开始就在这个定态上，同时在任何一个时间点，如果你反过来乘以转移矩阵的逆矩阵，则可以到达那个一开始的状态。因此，可逆和定态的存在性并不是完全矛盾的，也不是完全没有矛盾的。但是，总而言之，我们没有一个合适的方程，甚至没有一个合适的条件，能够给出来Boltzmann 分布 ρ_{Eq} 是系统演化的不变分布。这就是统计物理学的基本问题。到今天为止，这仍然是一个问题。

不过，我们没有企图在这里解决它。先学会用Boltzmann 分布 ρ_{Eq} 来解决问题就够了。而且，由于热力学的测量总是在一段时间里面完成的，相当于对系统做了一个长时平均——例如，测量气体压强就需要放一个类似于气囊的压强计来让大量的粒子打在这个压强计的表面一段时间，热力学测量的准确程度是很高的。这一点得到保证的来源，就是平衡分布下的长时平均等于系综平均。当然，对于没有在平衡分布下的系统，长时平均不一定等于系综平均。也就是说，热力学测量的过程中，就存在着对平衡态的扰动、系统被重新趋向平衡态等微观过程。这样就保证了原则上，我们做的系综平均的计算能够和实验相比。至于真的和实验相比如何，我们已经看到了理想气体定律能够从统计物理推导出来，并且用实验证。更多的关于相变的现象，也能够得到理论和实验相符的结论。如何用Boltzmann 分布 ρ_{Eq} 来研究相变是我们下一节的内容。

9.3 相变与临界现象

在统计物理学和热力学里面，相变就是系统从一个宏观状态变成另一个宏观状态。其中宏观状态由某一个统计平均量所描述。例如，一个材料从液体变成固体或者气体，统计平均量可以是物质的密度。例如，磁铁从有磁性变成没有磁性，统计平均量可以是磁性。这个能够表征不同状态的统计平均量被经常称作序参量。非常粗糙地说，大量粒子构成的系统一般来说分布函数比较集中，例如正态分布（大量气体分子的速度分布），因此，统计平均量和最可几（概率最大的意思）状态可能非常接近。因此，相变也可以看做在不同条件下系统有不同的最可几的状态。因此，这个相变一般来

说不是动力学系统不同状态之间的变化，而是不同条件下的给定分布函数之后，算出来最可几状态或者统计平均量不同，也就是参数空间的不同点导致的系统整体状态的不同。也就是说，我们希望在给定参数例如 Ising 模型的 J, β 的情况下，算出来某个统计平均量，然后，看一看这个统计平均量是不是在不同参数的情况下表现出来了定性的不同。所谓定性的不同不仅仅指的是值有所不一样，还表示如图 2.7 所示的那样：对于参数取值的一侧，这个统计平均量都是零，而一旦参数取值跨过某个点——称为参数取值的相变点，则统计平均量的取值就不等于零。当然，在那里取值为零是有特殊意义的，代表有和没有磁性。不过，这个具体的含义也不是最重要的，最重要的还是，在相变点的一侧，统计平均量具有一种共性——全等于零，在另外一侧具有另一个共性——全都是非零并且有两种可能。也就是，出现了对称破缺是最重要的。当然，在一级相变的例子里面，这个参数取值还会出现不连续。例如，液体变成固体的时候，密度的变化是不连续的，一旦温度低于转变点，密度会迅速降低。不过，这里我们主要关心二级以及以上的相变，就不再专门讨论一级相变了。

我们提到统计平均量，大多数时候，都可以从配分函数中计算出来。那么，从这个意义上来说，所谓的相变，就肯定意味着配分函数的某种不连续：例如某个参数值情况下，这个配分函数的最小值有一个，而另一个参数值的情况下，最小值有两个；或者这个配分函数的某个导数在参数值不同的时候有不同数量或者取值在定性上完全不同最小值或者统计平均量；或者配分函数的更高阶导数有这样的现象。于是，我们就可以更加严格一点来定义统计物理学和热力学的相变：配分函数或者配分函数的对某个参数的某一阶导数不连续。考虑到在上一阶不连续的函数，在下一阶就是不可微的。也可以用不可微来定义相变。习惯上，物理学家这样来规定相变和相变的级数：一级相变的配分函数（也就是等价地热力学函数）连续，但其状态参量的一阶导数不连续。二级相变的配分函数（也就是热力学函数）及其关于状态参量的一阶导数都连续，但其关于状态参量的二阶导数不连续。以此类推。

下面，我们来用配分函数分析几个例子的相变，主要看一下相变点和相图。更加专门的关于分析相变和临界行为的方法，包含平均场理论、重整化群方法、Green 函数方法，在后续第十三章会进一步展开。

例 9.3 (配分函数的计算). 已知一维正方晶格上的周期边界条件 Ising 模型的配分函数 (由于我们在这里主要关心 $N \gg 1$ 的情况, 忽略小本征值项)

$$Z_N = (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^N. \quad (9.38)$$

是否有相变, 有的话求出相变点, 画出相图。

这个配分函数对应的 Gibbs 自由能是,

$$F_N = -k_B T N \ln(e^{\beta J} + e^{-\beta J}). \quad (9.39)$$

这个模型只有一个有效参数 $K = \beta J$, 求哪一个参数 β 或者 J 的导数, 都相当于求 K 的导数。并且, F 中的 N 已经被单独拿出来了, 于是, 不管是哪一个 N , 热力学函数的可微性就是 $(e^K + e^{-K})$ 的可微性, 而这个函数在任何 K 的取值情况下都是可微的。因此, 这个系统没有相变。

当然, 导数在 $K = \infty$ 的时候发散, 这个对应着 $\beta = \infty$, 也就是温度 $T = 0$ 的情况。这个算不算相变点另说。一般来说, 系统在绝对零度的时候都会出现和其他温度不一样的行为。但是, 习惯上, 大家不把这个点看作相变点。有的时候为了精确, 会说, 系统没有有限温度的相变。在第十三章的相变和临界现象部分, 我们会用关联函数也就是 Green 函数方法讨论这个系统在零温的相变。有兴趣的读者可以先看 [55]。

我们再来算一个简单的例子, 熟悉一下配分函数, 并且为了下一步讨论二维 Ising 模型服务。

例 9.4 (星形五格点 Ising 模型的配分函数). 求图 9.1(a) 中星形排布的五个格点 Ising 模型 ($S_j = \pm 1$) 的配分函数,

$$H = -J \sum_{j=1}^4 S_j S_0 - h \sum_{j=1}^4 S_j. \quad (9.40)$$

的配分函数, 并分析是否有相变, 有的话求出相变点, 并画出相图。其中, 我们把 S_0 的外场去掉了, 仅仅保留了其他四个自旋感受到的磁场 h 。这样做的原因到下一个例子中就可以看到。

这个系统的配分函数是,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_j=\pm 1, j=0,1,\dots,4} e^{-\beta H} = \sum_{s_j=\pm 1, j=0,1,\dots,4} e^{\beta(J S_0 + h) \sum_{j=1}^4 S_j}, \\ &= 16 \cosh^4 [\beta(h + J)] + 16 \cosh^4 [\beta(h - J)]. \end{aligned} \quad (9.41)$$

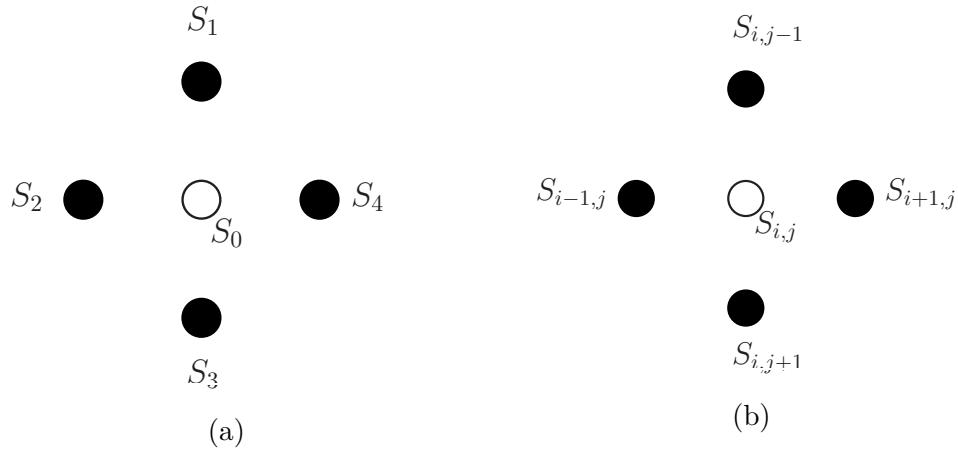


图 9.1: (a) 星形五格点 Ising 模型。(b) 把二维正方晶格的 Ising 模型看作是(a) 中的基本单元的重复。先做这个基本单元统计物理学的计算, 然后再做直接粗暴的拓展。

于是, 根据 $\langle \sum_{j=1}^4 S_j \rangle = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial h}$ 得到, 对于 $j = 1, 2, 3, 4$ 有 $\langle S_j \rangle = \frac{1}{4} k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial h}$,

$$\langle S_j \rangle = \frac{1}{Z} [16 \cosh^3 [\beta(h + J)] \sinh [\beta(h + J)] + 16 \cosh^3 [\beta(h - J)] \sinh [\beta(h - J)]] \quad (9.42)$$

再来计算 $\langle S_0 \rangle$,

$$\langle S_0 \rangle = \frac{1}{Z} [16 \cosh^4 [\beta(h + J)] - 16 \cosh^4 [\beta(h - J)]] \quad (9.43)$$

在这里, $Z, \langle S_j \rangle$ 和 $\langle S_0 \rangle$ 都是参数 β, J, h 的解析函数。因此, 没有相变行为。

在配分函数严格计算很困难的情况下, 我们经常采用一种叫做平均场理论的计算方法, 假设各个粒子的状态取值就等于整体的平均值, 然后, 在这个所有其他格点取平均值的条件下把配分函数和粒子状态的取值再算出来, 最后检查是否自洽——也就是这个假设的平均值是否会等于在假设取平均值的条件下计算出来的平均值。我们用二维 Ising 模型来举例。

例 9.5 (二维 Ising 模型的平均场理论). 用平均场理论分析二维正方晶格上 Ising 模型是否有相变, 有的话求出相变点, 并画出相图。

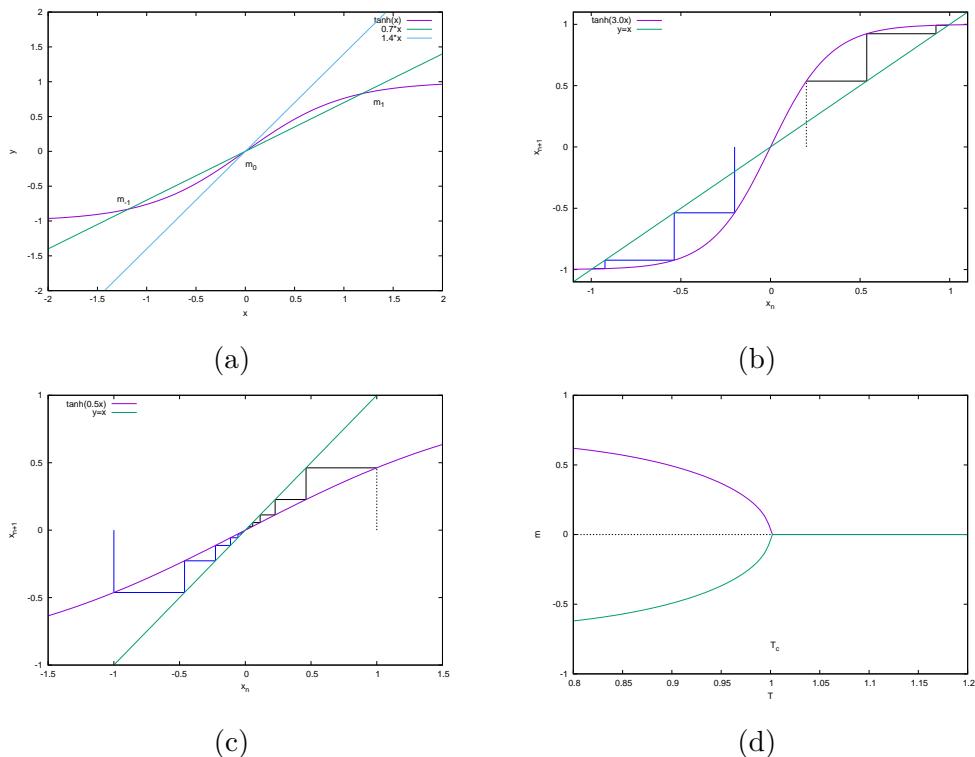


图 9.2: (a) 公式 (9.52) 中两条曲线的交点的情况: 我们发现有的时候有一个交点有的时候有三个交点。(b) 把三个交点的情况取出来, 展示公式 (9.53) 中的迭代过程。(c) 把一个交点的情况取出来, 展示公式 (9.53) 中的迭代过程。(d) 交点的取值随着参数 T 的变化。

假设每个自旋的取值都是最终计算出来的平均值 $\langle S_j \rangle = m$, 则

$$H_{mf} = -J \sum_{i=1,j=1}^N 4mS_{i,j}. \quad (9.44)$$

这个成了 N^2 独立的自旋,

$$H_{mf,i} = -J4mS_i. \quad (9.45)$$

这个系统的配分函数和平均自旋很容易计算出来,

$$Z_{mf} = (e^{\beta J4m} + e^{-\beta J4m}). \quad (9.46)$$

$$\langle S \rangle_{mf} = \frac{e^{\beta J4m} - e^{-\beta J4m}}{e^{\beta J4m} + e^{-\beta J4m}} = \tanh(\beta J4m). \quad (9.47)$$

自洽性条件成为

$$m = \langle S \rangle_{mf} = \tanh(\beta J4m). \quad (9.48)$$

重新定义变量

$$\tilde{m} = \beta J4m = \frac{4J}{k_B T} m, \quad (9.49)$$

我们有

$$\frac{4k_B T}{J} \tilde{m} = \tanh \tilde{m}. \quad (9.50)$$

于是我们发现, 我们实际上就是在求两条曲线的交点,

$$y = \frac{4k_B T}{J} x, \quad (9.51)$$

$$y = \tanh x. \quad (9.52)$$

或者说, 在找如下映射的不动点,

$$x_{n+1} = \tanh \left(\frac{J4}{k_B T} x_n \right). \quad (9.53)$$

我们分别从这两个角度来看看什么参数条件下会有这个自洽的 m 。

从图 9.2 看到, 这个迭代映射总是会有至少一个不动点 $m_0 = 0$ 。有的时候 ($\frac{J4}{k_B T} > 1$) 还会有另外两个, 左边的 m_{-1} 和右边的 m_1 。我们还发现,

当 $\frac{J4}{k_B T} < 1$ 变成了 $\frac{J4}{k_B T} > 1$ 的时候， m_0 从稳定不动点变成了不稳定不动点。于是，我们知道了系统在 $T_c = \frac{J4}{k_B}$ 这个点之前有稳定解 $m_0 = 0$ ，在那之后有两个稳定解 $M_{\pm 1}$ ，并且当 $T \ll T_c$ 的时候，这两个稳定解接近于 ± 1 ，也就是 $m_{\pm 1} \rightarrow \pm 1$ 。

有的时候，我们取 $k_B = 1$ 的单位制，并且把 J 取为 1。这个时候，我们就说，平均场理论得到，

$$T_c = 4. \quad (9.54)$$

我们还可以进一步画出来系统的相图，不同参数取值的时候，整体系统的状态——有序参量描述是什么，见

具体的计算方法是，在 T_c 附近， m 大约等于零，我们就在零附近把方程公式 (9.52) 展开，保留到二阶小量，也就是

$$m = \tanh\left(\frac{J4}{k_B T} m\right) \approx \frac{J4}{k_B T} m - \frac{1}{3} \left(\frac{J4}{k_B T}\right)^3 m^3. \quad (9.55)$$

这个方程有解

$$m_0 = 0, m_{\pm 1} = \pm \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{T_c}{T} - 1}. \quad (9.56)$$

结合这些解的稳定性，我们得到图 9.2(d) 的相图。当 $T > T_c$ 的时候系统没有磁性，当 $T < T_c$ 的时候系统有磁性，方向随机。随着温度降低，系统的无磁性稳定解失稳，产生了两个新的代表有磁性的稳定解。将来我们还会看到这个 $\sqrt{\frac{T_c}{T} - 1}$ 的幂次——这里是 $\frac{1}{2}$ ，也是重要的。

有了这两个例子做铺垫，我们来看二维 Ising 模型的配分函数和相变。

例 9.6 (二维 Ising 模型的配分函数和相变). 求二维正方晶格上的周期边界条件 Ising 模型

$$H = -J \sum_{i=1, j=1}^N (S_{i,j} S_{i+1,j} + S_{i,j} S_{i,j+1}) \quad (9.57)$$

的配分函数，并分析是否有相变，有的话求出相变点，并画出相图。

这是一个不太容易计算出来的量。我们可以继续用转移矩阵方法来求解。实际上，转移矩阵方法就是 Onsager 为了求解这个问题发明出来的。下面的配分函数的数学形式也是 Onsager 算出来，然后杨振宁等人再后续发展

出来继续分析这个配分函数的统计量和相变的 [55, 146, 147]，

$$Z_N = \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{\frac{N}{2}} \left(\cosh^2 \beta J - \cos \frac{2\pi r}{N} \sinh 2\beta J - \cos \frac{2\pi s}{N} \sinh 2\beta J \right) \quad (9.58)$$

无穷大系统的极限下 $N \rightarrow \infty$ ，

$$\ln Z = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \ln \left(\cosh^2 \beta J - \cos \theta \sinh 2\beta J - \cos \phi \sinh 2\beta J \right) \quad (9.59)$$

这个配分函数的研究还启发了杨振宁和李政道等人关于后来称为 Lee-Yang 零点定理的工作 [148, 149]。因此，这个配分函数的解析计算和后续分析是非常重要的。原则上，我们需要先算出来这个配分函数，然后用这个配分函数回答系统是否有相变，有的话求出相变点，并画出相图。我们会在第十三章做更加详细的讨论，同时有兴趣的读者可以去看上面几篇参考文献，尤其是其中的 [55]。任何概念和方法，如果你能够在某些问题上完成解析计算，都能够使得你对这些概念和方法体会得更加深刻。

不过，在这里，我们用一个叫做Bethe近似 [140]。我们把二维正方晶格的 Ising 模型的基本单元看作是如图 9.1(a) 的结构，也就是平面正方晶格看作是图 9.1(b) 的拓展。注意，在拓展以后的晶格无穷大极限下，任何一个格点都可以看作图 9.1(b) 中的那个中心点。当然，原则上，我们还可以把一个包含更多的格点的子结构，例如一个包含最近邻和次近邻的九个格点的子系统，当作基本单元。在这里，我们就取图 9.1(b) 的包含最近邻的五个点的结构当作子系统。也就是说，这个系统就好像是中间的格点呢，好像是感受到了周围的四个格点的直接相互作用，但是，对于周围的四个格点来说，也相当于在感受到和中间格点的相互作用之外，还感受到了一个有效的其他格点合起来形成的强度为 h (大小未知，需要从下面计算出来) 的外场。这样的做法保留了子结构内部和原始模型一样，让子结构的边缘来感受到平均场。因此，假设存在并且确定但是未知的 h 可以看做是图 9.1(b) 中在周围的那四个格点感受到的来自于各自周围的三个格点的合起来的平均场能量项。也正是因此，我们把Bethe近似看作是拓展了的平均场。我们说，一个二维系统能够被这样看的条件就是中间格点和其他格点没有区别，也就是

$$\langle S_{i,j} \rangle = \langle S_{i\pm 1,j} \rangle = \langle S_{i,j\pm 1} \rangle \quad (9.60)$$

于是，运用公式 (9.42) 和公式 (9.43) 的结果，这相当于要求找到合适的 h ——类似于平均场理论这里的 h 也是平均磁矩的含义，使得下式成立

$$\begin{aligned} & \left[16 \cosh^3 [\beta(h+J)] \sinh [\beta(h+J)] + 16 \cosh^3 [\beta(h-J)] \sinh [\beta(h-J)] \right] \\ & = \left[16 \cosh^4 [\beta(h+J)] - 16 \cosh^4 [\beta(h-J)] \right] \end{aligned}$$

化简以后得到，

$$\frac{\cosh [\beta(h+J)]}{\cosh [\beta(h-J)]} = e^{\frac{2}{3}\beta h} \quad (9.61)$$

同样替换为 $k_B = 1$ 的单位，并且取 $J = 1$ ，相当于 $\frac{h}{J} \rightarrow x$ ，则方程变成

$$\frac{\cosh \frac{x+1}{T}}{\cosh \frac{x-1}{T}} = e^{\frac{2}{3}\frac{x}{T}} \quad (9.62)$$

这个方程永远有解 $h_0 = 0$ ，当 $T < T_c = 2 \ln^{-1} 2 \approx 2.885$ 的时候，还会存在另外两个解 h_{-1} 和 h_1 ，如图 9.1 所示。

这相当于讨论如下迭代过程的不动点和不动点的稳定性，

$$x_{n+1} = f(x_n) = \frac{3T}{2} \ln \frac{\cosh \frac{x+1}{T}}{\cosh \frac{x-1}{T}}. \quad (9.63)$$

$f(x)$ 有不动点 $f(0) = 0$ 。我们接着只要讨论这个不动点的稳定性，也就是计算 $f'(x)|_{x=0}$ 。将来在第十二章我们会学到：当这个导数大于 1，解不稳定；当这个导数小于 1，解稳定。临界点就是在这个导数等于 1 的时候。这时候我们发现，临界点就在

$$T_c = 2 \ln^{-1} 2 \approx 2.885. \quad (9.64)$$

在相变点附近 $h(T)$ 的函数形式就不再继续分析了。

将来我们还会在第十三章讨论二维 Ising 模型的精确解。在那里，我们会发现，精确解是 $T_c = 2.269 \dots$ 。相比平均场的结果 $T_c = 4$ ，现在这个拓展了的平均场的结果就好了很多。

从二维 Ising 模型的平均场近似和 Bethe 近似的配分函数开始，我们计算了相变点，画出了相图。从这个铁磁 - 顺磁相变的例子以及你了解的固体 - 液体 - 气体相变的例子，你可以稍微做一下推广，相变就是某个东西在一个状态下是一个值，在另外一个状态下是另外一个值。这两个值存在

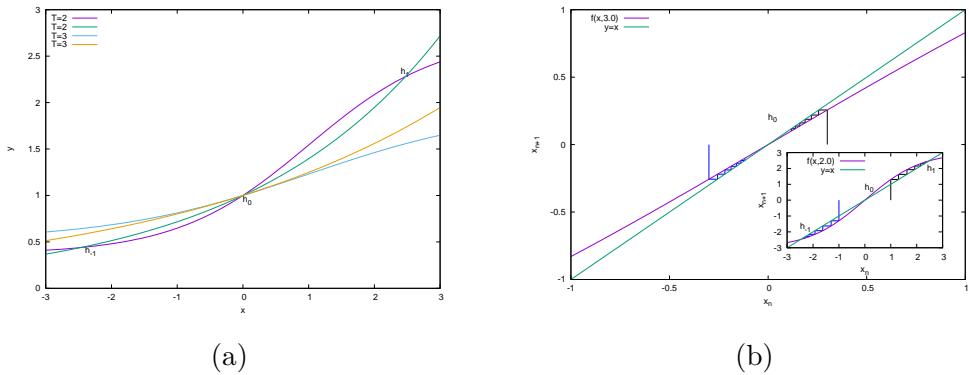


图 9.3: (a) 公式 (9.62) 中两条曲线的交点的情况: 我们发现有的时候有一个交点有的时候有三个交点。(b) 把一个交点和三个交点的情况取出来, 展示公式 (9.63) 中的迭代过程。

定性的差别, 例如一个问稳定的一个是不稳定的。再例如, 一侧这样的值只有一个, 另一侧这样的值有两个或者多个。我们还看到在这个相变点附近, 有一些统计量出现了发散行为。也就是, 这样的统计量可能不再是驱动变量的可微函数了。我们知道, 统计量一般是通过配分函数求导数计算出来的。可是, 配分函数, 也就是热力学函数本身就是通过一个个的解析函数的取和得到的, $Z = \sum_x e^{-\beta H(x)}$ 。只要这个 H 函数是连续的可微的而且一般来说是的, 那么, 自然整体的 Z 看起来就也应该是可微的啊。那么, 为什么会有某些统计量不再是解析函数呢? 这些不连续或者不可微在什么情况下会出现呢? 出现在哪里呢? 李 - 杨零点定理和热力学极限对此给出了一个理论上的非常优雅的回答: 在任意系统大小都是解析函数的配分函数有复平面上的零点, 而在系统大小趋向无穷大的条件下, 这些复平面上的零点在极限下有可能会出现在实数轴上, 而这些实数轴上的零点就是配分函数的某阶导数不可微的地方。不过, 这个只有放到“高级统计物理学”课程 [55, 140] 中去学习了。在第十三章也会稍微遇到这个问题。在这里提一下的意思是, 对于一个学科, 基本问题有哪些, 如何思考如何分析计算, 是要做到心里有数的, 就算不学习某些细节。

9.4 Metropolis 方法

我们已经看到一切的信息都包含在配分函数之中，对于自由度很大的系统，配分函数非常难以计算。我们从Monte Carlo 方法了解到给定一个概率分布函数，我们有办法产生一个符合这个概率分布的样本集合。现在我们问能不能针对给定的Boltzmann 分布，给出一个符合这个分布的样本。这个问题的答案就是 Metropolis 算法。

按照通常的 Monte Carlo 算法，分布函数自身是通过显式函数定义好的，然后我们可以考虑反函数方法、离散化、或者变化的反函数方法，或者中心极限定理等等办法来获得抽样。但是，在Boltzmann 分布中，我们的分布函数本身的定义不是显式的，其中包含归一化常数，也就是配分函数。如果我们能够显式地计算出来配分函数，也就用不着抽样了。看起来这是一个循环的问题，无解。但是 Metropolis 等物理学家提出了一个很巧妙的办法。

以两个能级 ϵ_1, ϵ_2 状态的系统为例。我们知道每一个能级的几率是 $p_1 = \frac{e^{-\beta\epsilon_1}}{e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}}$, $p_2 = \frac{e^{-\beta\epsilon_2}}{e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}}$ 。因此，重复多次一个简单的抽样：每次产生均匀分布随机数 $\xi \in [0, 1]$ ，如果 $\xi < p_1$ 则取样状态 ϵ_1 否则取样状态 ϵ_2 ，就能够得到我们期望的样本集合。

Metropolis 方法说，我们这样来避过求 $e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}$ ：假设系统目前处于状态 ϵ_1 (ϵ_2)，随机选取一个不同的状态，这里只能够是状态 ϵ_2 (ϵ_1)，然后计算这个可能状态到原始状态能量差 $\Delta E = \epsilon_2 - \epsilon_1$ ($\Delta E = \epsilon_1 - \epsilon_2$)，如果 $\Delta E < 0$ ，则系统转变到新的状态，否则系统以概率 $e^{-\beta\Delta E}$ 转变到新的状态。我们按照这个过程计算一下稳态分布函数。假设 $\epsilon_1 > \epsilon_2$ 。

例 9.7 (从转移矩阵求稳态分布). 已知转移矩阵 W 的矩阵元， $W_{11} = 0, W_{12} = e^{-\beta(\epsilon_1 - \epsilon_2)}$, $W_{21} = 1, W_{22} = 1 - e^{-\beta(\epsilon_1 - \epsilon_2)}$ ，求稳态分布。

我们知道这个状态转移的动力学过程可以由 $P_{n+1} = WP_n$ 来描述，其中 W 就是上面的转移矩阵。因此，稳态分布由方程

$$P_{eq} = WP_{eq} \quad (9.65)$$

决定，也就是 W 的本征值为 1 的本征向量。把这个方程整理一下更详细地

写下来,

$$\frac{P_{eq}(\epsilon_1)}{P_{eq}(\epsilon_2)} = \frac{e^{-\beta\epsilon_1}}{e^{-\beta\epsilon_2}}. \quad (9.66)$$

于是我们发现

$$P_{eq} = \left(\frac{e^{-\beta\epsilon_1}}{e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}}, \frac{e^{-\beta\epsilon_2}}{e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}} \right)^T. \quad (9.67)$$

这个与我们期望得到的Boltzmann分布完全一致。于是我们看到Metropolis方法确实不用计算 $e^{-\beta\epsilon_1} + e^{-\beta\epsilon_2}$, 而且也得到了Boltzmann分布。把这个两个状态的过程一般化, 从任意一个状态出发, 随机选择一个不同的状态, 然后计算能量差, 如果大于零则转移到新的状态, 否则按照一定的概率 $e^{-\beta\Delta E}$ 来转移。这个过程的稳定分布就是Boltzmann分布。在整个状态转移过程的设计中, 我们遵循了两条原则: 遍历性——从任何一个状态能够到达系统中的任何状态; 细致平衡条件,

$$\frac{P(S_1)}{P(S_2)} = \frac{e^{-\beta E(S_1)}}{e^{-\beta E(S_2)}}. \quad (9.68)$$

可以说正是细致平衡条件的使用使得我们能够避开求配分函数而直接抽样。保证了这两条, 就相当于我们对于状态空间中的任意两个状态都有细致平衡的成立, 于是, 所有状态按照这个比例归一化一下自然就成了Boltzmann分布了。实际上这个方法, 对于任何定义明确又不能直接显式写出来的分布函数都可以使用。

例 9.8 (二维Ising 模型的Metropolis 方法模拟). 二维Ising 模型的Metropolis方法模拟画出相图, 并展示临界慢化现象和关联长度发散的现象。

按照一般的Metropolis方法的思想, 我们需要制定两个步骤: 第一、如何选择尝试的状态; 第二、选定状态以后转移到这个状态上的几率。第一个不着要注意遍历性, 第二个步骤要注意细致平衡。按照这两个原则, 我们制定如下的模拟方案。Ising 模型的 Monte Carlo 模拟:

1. 从某一状态 \vec{S}_0 出发, 随机或者顺序选取一个自旋 $S_{i,j}$ 。
2. 对自旋 $S_{i,j}$ 尝试翻转, 计算反转的能量 ΔE 。
3. 如果 $\Delta E < 0$, 接受翻转以后的新状态; 不然, 对 $[0, 1]$ 之间均匀随机数抽样 ξ , 如果 $\xi < e^{-\beta\Delta E}$ 接受新状态, 否则拒绝。

4. 选取另一个自选，重复以上过程，直到系统的宏观状态（力学量平均值，热力学量）不发生变化。

其中的第三步可以替换成：按照 $\frac{1}{e^{\beta\Delta E}+1}$ 来抽样，不管 ΔE 大于还是小于 0。或者更一般地，假设系统的末态有 k 种选择，计算各个可能末态的能量差 $\Delta E_k = E_k - E_0$ ，其中 E_0 为初态能量，然后按照分布函数 $\frac{e^{-\beta\Delta E_k}}{\sum_{k'} e^{-\beta\Delta E_{k'}}}$ 来抽样。对于只有两个状态的自旋，这相当于取分布函数

$$\begin{cases} \frac{e^{-\beta\Delta E_\uparrow}}{e^{-\beta\Delta E_\uparrow} + e^{-\beta\Delta E_\downarrow}} = \frac{e^{\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})}}{e^{\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})} + e^{-\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})}} & \text{取 } \uparrow \\ \frac{e^{-\beta\Delta E_\downarrow}}{e^{-\beta\Delta E_\uparrow} + e^{-\beta\Delta E_\downarrow}} = \frac{e^{-\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})}}{e^{\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})} + e^{-\beta(S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1})}} & \text{取 } \downarrow \end{cases} \quad (9.69)$$

可以验证这些选择都满足遍历性与细致平衡。其中最后一个方案是比较特殊的，其转移概率不依赖于这个时刻的 $S_{i,j}$ 本身的状态，而是依赖于和 $S_{i,j}$ 相互作用的其他自旋的状态 [121]。当然，选择的时候包含 $S_{i,j}$ 的所有的可能状态，这里包含 $S_{i,j} = \pm 1$ 。

我们用 Metropolis 方法做了二维 Ising 模型的模拟。取 $N = 32 \times 32, 48 \times 48, 64 \times 64, 80 \times 80$ ，得到了下面的相图图 9.4、有序和无序相下的自旋构型和演化动力学图 9.6。我们发现在靠近 $T = 2.3$ 的地方，系统发生了有磁矩 ($M = \frac{1}{N} \langle \sum_{ij} S_{i,j} \rangle \neq 0$) 到无磁矩 ($M = 0$) 的转变。实际上，我们还可以更精确地确定相变点并且和理论值 $T_c = 2.269 \frac{J}{k_B}$ 作对比 [120, 121]。同时，我们发现，在有序相下各个自旋的方向比较一致，如图 9.5 的左上角 ($T = 1.5$)，在无序相下各个自旋的方向比较独立，如图 9.5 的右下角 ($T = 10.0$)。在这一致和独立两种情况下，自旋的关联都比较小。在相变点附近，如图 9.5 的右上角 ($T = 2.2$) 和左下角 ($T = 2.4$)，每一个连成一片的块比较大，但是又不是整个都连起来。这就是自旋的关联比较大的情况。对于同样的四个温度的情况，我们在图 9.6 给出了 Metropolis 方法下 Ising 模型磁矩的演化动力学。我们发现，远离相变点的时候（图 9.6 的左上角和右下角），磁矩很快达到平衡时候的值，表明系统很快就达到平衡；但是，对于靠近相变点的情况，系统看起来到达某个整体有磁矩的方向以后，还会发生比较大幅度的振荡（图 9.6 的右上角），甚至反过来（图 9.6 的左下角）。

习题 9.4 (验证二维 Ising 模型的 Metropolis 方法满足遍历性和细致平衡).
验证二维 Ising 模型的上述两种 Metropolis 方法满足遍历性和细致平衡。

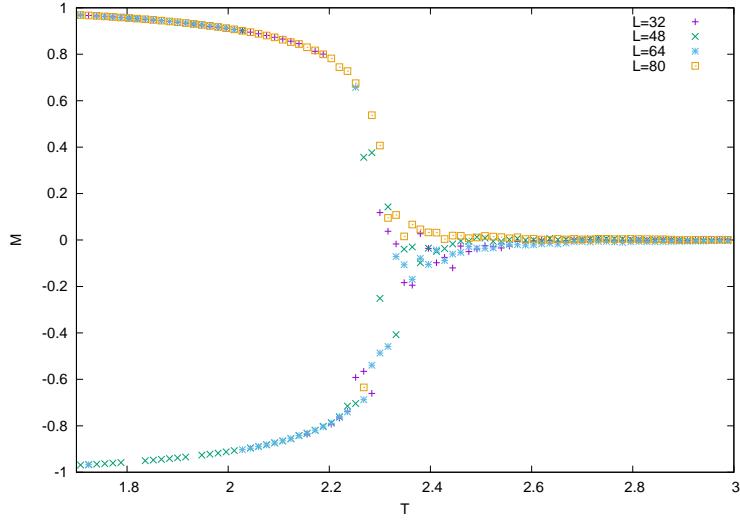


图 9.4: 随着温度 T 的降低, 系统的平均磁矩从 $M = 0$ 变成 $M \neq 0$ 。相变点在 2.2 和 2.4 之间。模拟做了 10^6 步, 系统大小分别为 $L = 32, 48, 64, 80$, $N = L \times L$ 。

习题 9.5 (实现一维、二维和三维 Ising 模型的 Metropolis 方法模拟). 实现一维、二维和三维 Ising 模型的 Metropolis 方法模拟, 并做出来相图、演化动力学, 找到大概的或者比较准确的相变点 [120, 121]。

我们已经从图 9.6 看到, 在接近临界点 T_c 的时候, 系统的演化速度慢了很多, 甚至出现很长一段时间的正方向状态之后, 还会回到反方向的状态的情况。这就是我们在介绍相变的时候提到的临界慢化现象。将来, 在第十三章, 我们还会展示关联长度发散的现象。由于这个临界慢化现象会降低算法的效率——临界点附近需要很长时间的模拟才能看清楚到底系统处于磁矩为零还是非零的状态, 物理学家们, 尤其是计算物理学家们, 统计物理学的研究者们, 提出了很多更有效率的变形 [121]。例如集团翻转算法 [150, 151], 蠕虫算法 [152], 甚至具有类似思想但是方法完全不相同的 Wang-Landau 算法 [153]。尤其是 Wang-Landau 算法的思考方式, 非常有启发性, 值得了解。Metropolis 算法的基本思想是避开配分函数的计算、避开跑遍所有空间, 通过按照 Boltzmann 分布的重要程度来抽样。Wang-Landau 算法也是避开配分函数的计算、避开跑遍所有空间, 但是按照某一个能量下系统的状态个数 (称为态密度或者简并度) 来抽样。也就是说, 态密度越

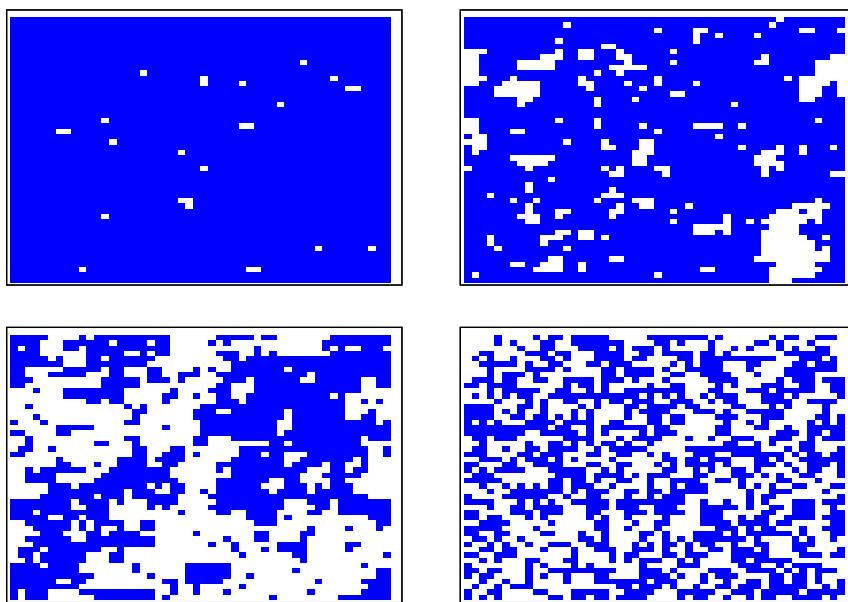


图 9.5: 系统在有序相和无序相的自旋构型。白色点代表 $S_{i,j} = -1$, 蓝色点代表 $S_{i,j} = 1$ 。四个温度分别为左上角 ($T = 1.5$), 右上角 ($T = 2.2$), 左下角 ($T = 2.4$), 右下角 ($T = 10.0$)。模拟做了 10^6 步, 系统大小为 $L = 50$, $N = L \times L$ 。

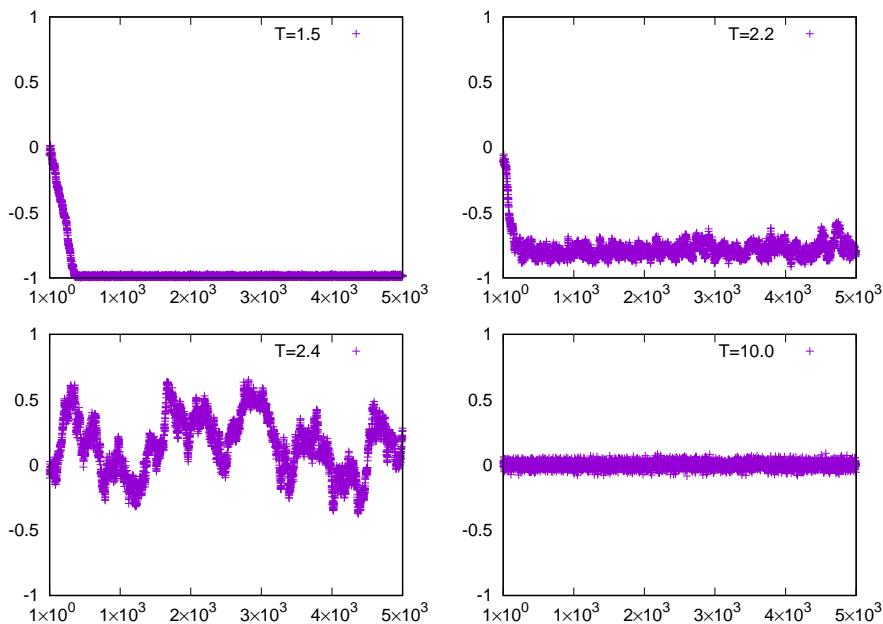


图 9.6: 系统的平均磁矩在同样这四个温度的情况下演化。图中显示的模拟的动力学步长为 5000 步。四个温度分别为左上角 ($T = 1.5$)，右上角 ($T = 2.2$)，左下角 ($T = 2.4$)，右下角 ($T = 10.0$)。模拟做了 10^6 步，系统大小为 $L = 50$ ， $N = L \times L$ 。

大（小）的能量附近样本点更多（少），这样不用跑遍整个状态空间，就可获得相空间的代表点。然后，在每一个代表点上计算物理量还有相应的代表点的几率（这时候原则上需要利用所有代表点来计算配分函数）。

在逻辑上，我们还应该补充上真实的物理世界和这个模型的对比和检验，达到说明这个模型真的能够描述世界，并且计算出来的相变点等结果真的能够和世界相符。当然，从数学的角度来说，建立一个模型的世界，并且能够求解开来，还能发现有意思的现象，已经是一件有意思的事情。但是，科学不一样，科学需要从实际世界里面来，并且到世界世界里面去。模型、计算结果和实际世界的对比可见来自于 [54, 56] 的本书的图 2.7。当然，实际世界中就算比较接近的那些材料 [56] 也要比这里的Ising 模型还模型复杂一些。

9.5 在物理学以及其他学科中的熵

给定分布函数 ρ ，一般的熵的定义如下

$$S = -k_B \langle \ln \rho \rangle. \quad (9.70)$$

对于确定性事件，随机变量只取确定值，于是 $S = 0$ 。对于均匀分布，例如微正则系综，每一个状态上的几率都一样，因此 $\rho = \frac{1}{W}$ ，其中 W 为总的状态数，于是

$$S = -k_B \sum_{j=1}^W \frac{1}{W} \ln \frac{1}{W} = k_B \ln W, \quad (9.71)$$

S 取最大值（给定 W 个状态，均匀分布熵最大。这一点可以证明，见附习题 9.6）。确定性事件表示最有序的情况，均匀分布表示最无序的情况。前者 $S = 0$ ，后者 S 取极大值。所以， S 是无序程度的度量。另外，微正则系综的熵的公式 $S = k_B \ln W$ 被认为是很重要的公式，被刻在 Boltzmann 的墓碑上。

由于熵是针对一般的分布函数定义的，是一个数学的定义，尽管来源于对物理系统的描述，其有物理学之外的更一般的意义。Shannon 把熵做为信息论的基础 [154, 155]。

习题 9.6 (均匀分布熵最大). 给定 W 个状态, 请证明, 在所有的分布函数 ρ ($\rho(W) = p_W$) 中, 均匀分布 (记为 $\bar{\rho}$, 其中 $\bar{p}_W = \frac{1}{W}$) 熵最大, 也就是

$$S[\bar{\rho}] \geq S[\rho], \forall \rho. \quad (9.72)$$

提示: 考虑Lagrangian 乘子法。

9.6 从熵最大推导正则分布

之前, 我们提到Boltzmann 分布的来源是一个尚未解决的问题。现在我们利用微正则系综的熵最大原理来推倒正则分布。我们考虑这样一个问题: 考虑 L 个盒子, 每一个盒子能够容纳 0 到 ∞ 个粒子, 每一个在第 l 个盒子中的粒子具有能量 ϵ_l , 假定总能量固定 $\sum_l n_l \epsilon_l = E$, 总粒子数固定 $\sum_l n_l = N$, 问使得熵最大的粒子在每一个盒子中的个数的分布 n_l 是什么形式?

这里隐含的逻辑是这样的。第一, 熵最大的分布形式表示这个宏观状态的微观状态数最多。给定一系列的 n_l 系统的微观状态仍然没有确定, 可以通过交换两个不同盒子里的粒子来实现相同的分布形式。我们想得到这个宏观状态, 其所对应的微观状态最多, 这样在微观状态等几率的假设下, 这个宏观状态出现的几率最大。第二, 所有的能级上的粒子合起来是一个孤立系统, 但是粒子可以在能级之间转移, 因此把单个的能级看成系统, 则这样的系统构成巨正则系统 (可交换能量和粒子), 把所有的能级合起来看成一个系统, 这样的系统构成一个微正则系综。

首先, 给定 n_l 我们的熵可以表达成 $S = k_B \ln \frac{N!}{\prod_{l=1}^L n_l!}$ 。利用Lagrangian 乘子法, 我们需要最大化的目标函数 (常数 k_B 已经被提出去了) 是

$$F = \ln \frac{N!}{\prod_{l=1}^L n_l!} + \beta \left(\sum_l n_l \epsilon_l - E \right) + \alpha \left(\sum_l n_l - N \right). \quad (9.73)$$

这个函数在 $\frac{\partial F}{\partial n_l} = 0$, $\frac{\partial F}{\partial \beta} = 0$, $\frac{\partial F}{\partial \alpha} = 0$ 的条件下取极值, 得到以下等式

$$n_l = \frac{N}{Z} e^{-\beta \epsilon_l}, \quad (9.74)$$

$$\sum_l n_l \epsilon_l = E, \quad (9.75)$$

$$\sum_l n_l = N. \quad (9.76)$$

其中 Z 与之前引入的待定常数 α 做过变量代换。现在还剩下两个待定常数 Z 和 β , 他们满足上面的方程。通过计算可以进一步简化, 例如我们可以得到 $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$, 待定常数 β 满足 $Z(\beta) = e^{-\beta \frac{E}{N}}$ 。

完成这个推导之后, 我们要指出一些要注意的地方。第一, 熵最大原理能够推出 Boltzmann 分布不表示我们了解了 Boltzmann 分布的来源。第二, 这个推导过程中所有的能级构成的系统被看做一个孤立系统, 所以温度的倒数 β 不是一个外界给定的参数, 而是由约束 E 和 N 给定的等价有效温度。这个与真正的正则分布的概念并不完全一样。当然, 在平均值的意义下, 忽略涨落, 它们的含义是相同的: 平均能量的一种度量。

9.7 作业

习题 9.7 (Petrina 统计力学的阅读). 阅读 Petrina 的 Mathematical Foundations of Classical Statistical Mechanics[156]。这是一本相当数学的物理学书。其中对于统计物理学整个框架的逻辑结构有非常深刻的认识。其基本线路是运动方程和 BBGKY (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon) 链。这对于理解从力学到统计力学非常有帮助。强烈推荐阅读, 如果你的数学还可以的话。

9.8 本章小结

在这一章里面, 我们主要学习了统计物理学的系统理论: 从系统的 Hamiltonian 开始, 状态分布函数是怎样的, 如何计算出来配分函数, 并用配分函数来计算一些统计平均量和讨论相变。同时, 我们也介绍了, 当配分函数难以计算的时候, 为了避开配分函数的计算的 Metropolis 方法, 并用它计算了统计量研究了相变。这些就是统计物理学的核心内容。

除了这些核心内容, 我们也提到了统计物理学的基础问题: 到底平衡态是从哪里来的, 从理论上, 什么条件下系统会处于平衡态, 也就是从力学到统计力学的问题。

熵是来源于热力学或者说统计物理学的另一个非常具有一般意义的概念。实际上, 对于任何分布函数, 熵都是一个重要概念。甚至我们在第一部

分中也看到，熵也是信息科学的基本概念。系综是另一个来自于统计物理学但是实际上对于任何分布函数都是有意义的重要概念。相变是另一个来源于热力学和统计物理，但是具有非常大的一般性概念。

当然，对于系统科学的研究者来说，学习统计物理学最主要的事情学会从微观到宏观的桥梁：当有了系统的微观运动方程，又需要研究系统的宏观性质的时候，往往我们可以借鉴统计力学，尤其是从微观状态的动力学描述，变成分布函数的动力学描述，这个研究角度的转变。很多问题的研究中，可能需要做这样的转换。此外，由于某些神奇的原因，Boltzmann 分布也是系统科学的研究者经常用到的一个分布函数。例如当人们做决策的时候，不一定选择收益最大的策略而是按照 $\rho(s) \sim e^{\beta E_s}$ 来选择策略 s [74–76]。其中 E_s 就是策略 s 的收益。

将来我们还会学习这些基本方法解决不了的问题如何用更加专门的研究临界现象的方法，例如 Green 函数，来处理，见第十三章。

9.9 本章技术性附录

9.9.1 连续性方程的说明

对于任何流，我们定义每个时刻位形 (\vec{r}) 空间中每个点上的流质的密度为 $\rho(\vec{r}, t)$ ，再定义这个位形空间上的一个流的速度场 $\vec{v}(\vec{r}, t)$ 。我们说这两个场内部之间有关系。从逻辑上说，速度场和密度场都是这个空间中的粒子的运动形成的效果——只要例子动了就会产生速度，并且造成密度的重新分布。从数学上，只要这个流质不能凭空产生和消灭，则必然存在一个下面的连续性方程，

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho d\vec{r} + \oint_{\partial V} \rho \vec{v} \cdot dS = 0. \quad (9.77)$$

其中方程的右侧等于零其实包含了一个假设，在这里没有从外界净流入或者净流出系统的质。如果有，则需要把这样的净流量加到方程的右边。这个方程的第一项的意思就是在一个区域 V 内部的质的量的时间变化。第二项是这个区域的边界上流出的量的多少。两者加起来等于零的意思就是这个区域内这种质的变化完全就是从这个区域的边界上流进去导致的。因此，这个方程背后的原因只有一条：这种质所对应的粒子不能跳着在空间跑，必

须是在空间连续运动的。

接着我们来用散度定理¹把面积分换成体积分，

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho d\vec{r} + \iiint_V \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} d\vec{r} = 0. \quad (9.78)$$

这个积分在任何 V 上都成立，于是，

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} = 0. \quad (9.79)$$

注意这个我们交换了 $\iiint d\vec{r}$ 和 $\frac{d}{dt}$ 的顺序，并且在交换顺序以后，我们把 $\frac{d}{dt}$ 变成了 $\frac{\partial}{\partial t}$ 。这是因为在场的视角中， \vec{r} 和 t 是独立的。在交换之前由于 \vec{r} 自由度已经被完全积分掉了，于是，就只能做单变量微分了。当移动到积分号内部的时候，场的观点下 $\frac{d}{dt} \rho$ 实际上是不存在的，其对时间的变化，完全就是 $\rho(\vec{r}, t)$ 函数形式上本身对 t 的依赖造成的。设想一下，如果任何一个时刻 $\rho(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r})$ 也就是不显含 t 的话，自然积分以后的量的时间微分也就等于零了。在随体的视角和场的视角中转换是一件要非常小心的事情。

有的时候，我们也用流量场代替速度场 $\vec{j} = \rho \vec{v}$ ，则

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \quad (9.80)$$

9.9.2 压强微观公式的说明

压强从微观上，是粒子和容器壁的碰撞形成的。我们来计算这个碰撞的力，然后从力得到压强。忽略重力，在容器内各个点感受到的压强都一样。我们仅仅考虑一个方向的计算。为了简单计，我们考虑一个边长为 L 正方形容器，并且只计算某一个面上收到的压力，进一步假设各个粒子可以看做在那个方向上的平均速度运动。记那个方向为 x 方向，平均速度为 v_x 。计算过程中会明白为什么能够做这个简单的假设。我们来计算一个这样的粒子和容器壁的碰撞有多大的压力。粒子遇到容器壁以后以相同的速度反弹回来，因此，其动量改变量是，

$$\Delta p = 2mv_x \quad (9.81)$$

¹ 见 Wikipedia“Divergence theorem”词条：https://en.wikipedia.org/wiki/Divergence_theorem

其往返一次所需的平均意义上的时间是

$$\Delta t = 2 \frac{L}{v_x} \quad (9.82)$$

于是，平均意义上的压力就是

$$F = \frac{\Delta p}{\Delta t} = m \frac{v_x^2}{L}. \quad (9.83)$$

这样的粒子总共有 N 个，考虑到每个面的面积是 L^2 ，

$$P = N \frac{F}{L^2} = Nm \frac{v_x^2}{L^3} = nm v_x^2. \quad (9.84)$$

其中 $n = \frac{N}{V}$ 是平均粒子数。三个面完全等价，于是

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = 3v_x^2. \quad (9.85)$$

合起来，得到

$$P = \frac{1}{3} nm v^2. \quad (9.86)$$

在把这个微观统计量变成宏观量的时候，我们只需要求后面的 v^2 的平均值。更严格的计算，可以不用每一个粒子都走平均速度的假设，而采用每个粒子的可能的速度，算完之后再来求平均。

实际上，压强也可以通过宏观热力学函数计算，

$$P = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V}. \quad (9.87)$$

为什么是体积呢？因为体积和压强是能量函数的两个共轭变量。共轭变量的意思就是两个变量乘起来是能量的量纲，类似于 $\delta W = F dx$ ，则对于压强，做功的表达式是 $\delta W = P dV$ 。这样的能量项会进入 Hamiltonian，也就是说， H 里面好像就有这样一项 $H_0 + PV$ ，也就是配分函数里面有这样一项： $Z = \int dx dp e^{-\beta(H_0 - PV)}$ 。于是，为了把 P 拿到方程下面来求平均，我们需要做一个 V 的偏微分，并且消掉系数 β 。这就是公式 (9.87) 完成的事情。

第十章 量子力学

在学习量子力学之前，我们来看看，对于非物理专业的研究者（把物理系统当作复杂系统研究的除外，把一般复杂系统当作物理对象的拓展的除外），为什么要学量子力学，学量子力学的什么。

首先，量子的世界太神奇了——完全就是另外一个世界啊，不学人生不完整。量子的世界里面你会学会用概率的视角来看问题，而且还要被迫超越概率的视角。在经典的世界里面，概率仅仅是一个工具——在信息不完全的情况下的一种技术描述手段。在量子的世界里面，我们会看到这个技术描述手段所带来的理解上的问题和挑战，以及这个技术手段的必要性。甚至，我们还会看到，用概率也不足以描述量子的世界。量子力学是一扇门，打开你用不同的眼光看世界的一扇门。

其次，从量子力学中数学结构和物理现象的关系上，你能够更加深刻地体会什么是科学。从量子力学能够体会到物理学或者说整个科学就是给现实世界寻找合适的数学结构，不管这样的结构多么不符合来自于经典世界经验的直觉。科学就是把批判性思维、数学和测量用于现实，尊重现实，构建模型，并且注意模型的系统性——尽量少的假设能够解释尽量多的事实，同时模型之间尽量不要有冲突。对科学、数学、现实、批判性思维、测量之间的关系的理解，对于系统科学的研究者是非常有意义的。我们是科学，要提出、面对、理解和解决实际系统的问题的，不是纯粹思辩纯粹理念，尽管我们也提炼一般性的思维方式和分析方法甚至模型和方程。

再次，从量子力学的建立的历史——科学家的逻辑和理论意义上的历史，不一定是时间顺序上的历史——我们能够体验到科学的研究的典范，从不可理解的现象，到凑公式，到理念上的突破，到数学和思想上的真正的突破，到被这个突破的理解问题所困扰。

接着，在哲学上，学习量子力学能够让我们避免“空谈”：观念上的差别必须实验可测，才有意义。

最后，关于量子力学本身，我们要学习到以下三点：一、状态是矢量，可以加起来。与经典的不一样。在经典世界，过程的结果的量和物的量可以相加，但是过程本身物本身不能相加。量子力学物本身可以相加，过程可以相加。二、测量是一个问题。经典随机客体的测量也是一个问题，但是量子客体的测量的问题更大。三、力学的图景——状态的描述、变化、变化的原因在经典力学和量子力学中是一样的。

最后的最后，一个实用主义角度的理由是：我们不知道在什么问题的研究中就会用到量子力学的具体知识。例如，你可能在研究经典计算问题，经典机器学习问题，你可能就会想一想是不是可以推广到量子计算和量子机器学习。例如，你可能在研究经典博弈经典决策问题，你可能就会想一想是不是可以推广到量子博弈和量子决策。由于我们不是完全知道量子和经典世界的边界到底在哪里，尽管做为物理学家的我自己相信世界都是量子的，了解一点量子总是好的，当经典的描述不能很好地解决问题的时候，总是可以试试量子的版本。实际上，量子机器学习 [157] 和量子博弈 [77, 79] 都是已经有人研究的问题。因此，很有可能，将来系统科学的研究问题也会用到量子力学的知识来解决。当然，前面的从对科学和数学的理解的角度来谈学习量子力学的意义是更加重要的更加根本的意义。

下面的具体内容的学习，我们主要就是围绕着以上几个学习目的——我称之为“量子力学的学科大图景（典型对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法、和世界以及其他学科的关系）”——来选择、设计，并且按照以下思路展开的：量子力学的实验经典理论不能解释，能够解释的理论的数学结构，这个数学结构的特殊之处以及所带来的理解上的“问题”。

推荐参考书：Feynman的《物理学讲义第三卷》[158]，吴金闪的《二态系统的量子力学》[36]，喀兴林的《高等量子力学》[111]，吴兆颜的《高等量子力学》[110]，Ballentine的 Morden Quantum Mechanics[159]。

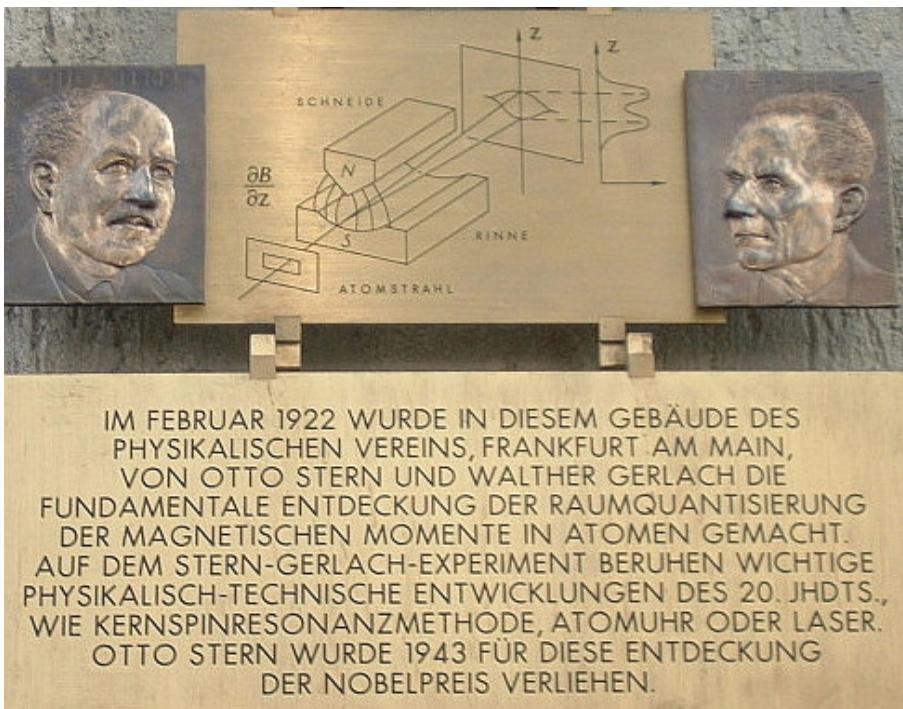


图 10.1: 来自于Stern和Gerlach的自旋 Stern-Gerlach 装置示意图。图片来自于 Wikipedia “Stern-Gerlach experiment” 词条。

10.1 量子系统的实验

我们先来看两个实验，其结果会告诉我们量子系统不能做经典确定性的描述，也不能做经典随机性的描述，也不能做经典波的描述。然后，我们再来构造到底什么样的模型能够描述量子系统的独特行为。我们先来看到底那里独特了。更多实验可见吴金闪的《二态系统的量子力学》[36]。

实验 10.1 (自旋过 Stern-Gerlach 装置实验). : Stern和Gerlach的著名的现在被称为 Stern-Gerlach 实验的装置图 10.1 和示意图 10.2。

Stern和Gerlach原始实验（如图 10.1）中的一个 Stern-Gerlach 装置的实验的结果如下：每一次实验只能接收到一个信号，要么出现上方的斑点，要么出现下方的斑点；多次实验以后两个斑点都出现，并且斑点之间有明显的分离。

从第一个 z 方向的 Stern-Gerlach 装置出来的自旋有两个可能的出射路径。历史上，这个两个出射路径造成的两个斑图启发当时的量子力学研究

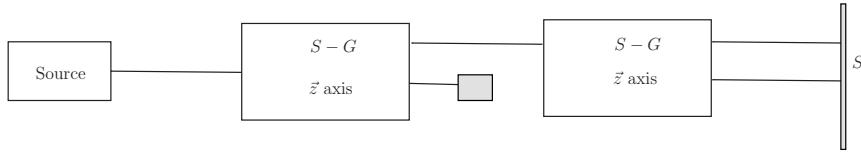


图 10.2: 自旋经过一个 Stern-Gerlach 装置——其内部就是一个磁场——之后挡住向下的输出, 这样从装置出来的状态就是第一个装置的向上方向。接着让这个输出的自旋再一次经过同样方向的装置——得到仅有一个向上的输出结果。图来自于 [36]。

者提出来有些系统的状态是离散的。不过, 现在我们知道, 离散状态变量并不是最重要的事情。一会儿我们还会知道, 仅仅依赖离散变量来构建量子系统的理论模型也是不够的。现在, 我们先确认离散变量的事情。确定这件事情的关键在于在后面再放一个 Stern-Gerlach 装置会怎样。

如图 10.2 所示, 在两个 Stern-Gerlach 装置的实验中, 结果如下: 如果挡住第一个装置的某一个方向, 例如向下的挡住, 让向上的进入下一个 z 方向的 Stern-Gerlach 装置, 则只会观察到一个出射方向, 也就是一个斑点, 并且和没有挡住的方向一致。单次和多次实验都只会出现一个斑点。

这个实验结果只要用状态离散的系统来描述就很好理解。例如我们把自旋看作一个硬币。Stern-Gerlach 装置看作是硬币两面的分离器。从分离器出来以后, 有两个可能, 于是就会观察到两个斑图。如果我们挡住其中的一个可能例如反面的硬币不进入下面的实验, 则, 进入下一次观察, 只能看到正面的硬币, 于是只有一个斑点。也就是说, 自旋过 Stern-Gerlach 装置实验完全可以用两个离散状态的经典随机客体来描述, 数学模型是,

$$\rho_s^c = \rho_{<z_1}^c = p |1\rangle\langle 1| + (1-p) |-1\rangle\langle -1|. \quad (10.1)$$

其中 ± 1 分别表示正反面。这个数学模型也能够解释经过两个 Stern-Gerlach 装置的实验结果: 经过第一个 Stern-Gerlach 装置以后, 下面的被挡住, 也就是经过 z_1 并且被挡住之后

$$\rho_{>z_1}^c = |1\rangle\langle 1|. \quad (10.2)$$

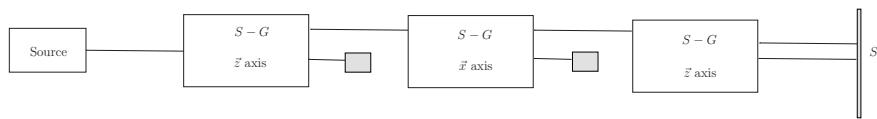


图 10.3: 电子过三个不同方向磁场实验装置示意图, 先过 z 方向, 接着 x 方向, 最后再过 z 方向。其中部分方向上面放了一个障碍物, 表示来到那个方向的自旋被挡住了。图来自于 [36]。

于是, 只能从下一个 Stern-Gerlach 装置的上方的路径出来, 也就是

$$\rho_{<z_2}^c = \rho_{>z_2}^c = |1\rangle\langle 1|. \quad (10.3)$$

现在我们来做几个更加复杂一点的实验, 来证明这个用硬币状态的心智模型来描述量子自旋是不对的。

实验 10.2 (自旋过多个 Stern-Gerlach 装置实验). : 如图 10.3 所示, 一个自旋经过第一面内部方向为 z 的磁场, 只允许向上那条路径的自旋过去, 向下的被完全挡住。然后这个自旋继续经过一个 x 方向的磁场, 并且再一次被挡住这个装置的向下的路径出来的自旋。然后, 被引入到第三个内部方向为 z 的磁场。问: 从最后的磁场出来以后上面的路径还是下面的路径, 还是两者都会有接收到自旋?

如果我们继续用上面的公式 (10.1) 的数学模型 ρ_s^c , 过了第一个 z 方向 Stern-Gerlach 装置并且被挡住下方的路径之后, 就只能有上面路径的状态了。也就是公式 (10.2) 中的 $\rho_{>z_1}^c$ 。那么, 无论我们中间做什么, 到最后再一次经过 z 方向 Stern-Gerlach 装置, 那就只能有向上, 于是, 我们预测最后只能有一个斑点, 并且是对应着向上路径的那个。但是, 实验结果是有两个输出。

这个结果说明, 由于某种原因, 在第一个 z 方向 Stern-Gerlach 装置被消灭的向下路径状态被中间的实验装置恢复了, 可以再一次从最后的那个 z 方向 Stern-Gerlach 装置出现了。也就是, 经过最后的 z 方向 Stern-Gerlach 装置之前的状态应该是

$$\rho_{>x_2}^c = \rho_{<z_3}^c = p^* |1\rangle\langle 1| + (1 - p^*) |{-1}\rangle\langle {-1}|, p^* \neq 0, 1. \quad (10.4)$$

这里面的 $| -1 \rangle \langle -1 |$ 怎么回来的？被消灭掉的东西可以重新出现，这个在经典的世界里面是很不容易做到的。例如，一个玻璃珠子有球体和正方体两种形状，红的和蓝的两种颜色。这时候完整的状态描述是：{球体, 正方体} \otimes {红, 蓝} = {红色球体, 蓝色球体, 红色正方体, 蓝色正方体}。我们先去掉所有的正方体。然后做各种实验，做完了发现，后面正方体再一次出现了。这是很不可思议的，只要我们的实验不改变颜色和形状，只是观察和选择的话。在这里，我们已经发现，Stern-Gerlach 装置和障碍物的作用其实就是观察和选择。因此，自旋的数学模型看起来非常不像一个两种属性的直积态的概率分布函数。那，如何理解这个现象，数学模型是什么？

按照经典态的表达式，我们猜，过了 x 方向的 Stern-Gerlach 装置并且挡住了向下的输出之后，状态差不多是这个，

$$\rho_{>x_2}^c = | 1_x \rangle \langle 1_x |. \quad (10.5)$$

当然，这里我们引入了新的状态和状态记号 $| 1_x \rangle \langle 1_x |$ ，于是之前的那个记号应该顺势修改成 $| 1_z \rangle \langle 1_z |$ 。这么看来，如果需要我们的实验现象能够解释，我们好像必须允许 $| 1_x \rangle \langle 1_x |$ 既有 $| 1_z \rangle \langle 1_z |$ 又有 $| -1_z \rangle \langle -1_z |$ ，也就是大概

$$| 1_x \rangle \langle 1_x | = p^* | 1_z \rangle \langle 1_z | + (1 - p^*) | -1_z \rangle \langle -1_z |, p^* \neq 0, 1. \quad (10.6)$$

可能吗？这是什么意思？我们还要注意一个微妙的地方，不管哪一套状态， $| \pm 1_z \rangle \langle \pm 1_z |$ 也好， $| \pm 1_x \rangle \langle \pm 1_x |$ 也罢，都是完备的：对自旋作无论哪一组状态的测量，自旋的状态必定是这一组中的两个之一。也就是说，我们的系统的状态空间不可能是类似于这样的 $\{ | \pm 1_z \rangle \langle \pm 1_z |, | \pm 1_x \rangle \langle \pm 1_x | \}$ 。后者只有在联合这四个基本状态的测量下才是完备的。也就是说，如果我们仅仅测量 z 方向的两个状态之一，经常我们会发现，自旋不是这两个状态之一。也就是说，经常会遇到实验仪器上观测不到自旋，但是自旋明明已经从制备仪器中送出来的情形。我们发现这样的情况，在实验误差范围内，可以被直接排除。因此， $| \pm 1_z \rangle \langle \pm 1_z |$ 或者 $| \pm 1_x \rangle \langle \pm 1_x |$ 中的任何一组都是完备的状态可能。同时前面我们也说了，看来自旋的状态空间也非常不可能是直积态，也就是 $| \pm 1_z \rangle \langle \pm 1_z | \otimes | \pm 1_x \rangle \langle \pm 1_x |$ 。

这样就使得事情非常奇怪， $| \pm 1_z \rangle \langle \pm 1_z |$ 和 $| \pm 1_x \rangle \langle \pm 1_x |$ 各自是完备的，而且，这两组基本事件之间竟然还有重叠。我们学习过的数学结构里面，唯一

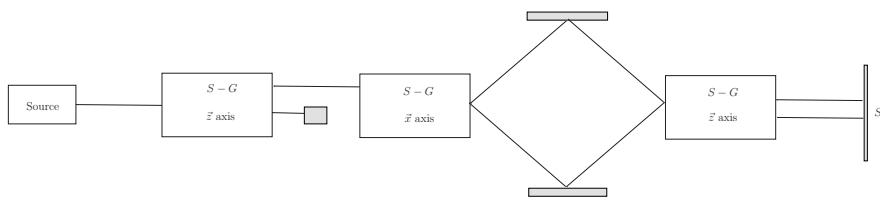


图 10.4: 电子 which-way 实验装置示意图。 S_z 向上方向上出来的自旋进入 x 方向的磁场以后, 有可能走两条路径。接着无论走哪一条, 那个两条臂的仪器都会把自旋送到同一个地点再一次进入最后那个 z 方向的磁场。图来自于 [36]。

一个跟这个比较像的, 不是概率论, 而是矢量空间。一个矢量空间可以存在多套基矢, 而且两套基矢之间可以是不正交的: 选定一套基矢的某个特定元素, 可以相当于另一套基矢的多个元素。

那, 难道, 自旋的数学模型是具有几率含义的矢量? 那, 什么是具有几率含义的矢量呢?

我们再来看另一个实验。

实验 10.3 (电子自旋 which-way 实验).: 我们让 \hat{z} 方向的仪器出来的向上态的电子经过一个内部方向为 \hat{x} 方向的仪器, 再把无论走哪一条路径上的自旋都用额外的磁场保证它折回来到达一个内部方向为 \hat{z} 方向的仪器, 如图 10.4, 打到屏幕上。问: 屏上有一个还是两个斑点?

这个实验的结果¹是只有向上的方向上有自旋到达。那, 怎么解释, 数学模型是什么?

在这里, 我们发现根据实验结果——只有一个斑点并且向上, 最后的状态是

$$\rho_{<z_3}^c = \rho_{>z_3}^c = |1_z\rangle\langle 1_z|. \quad (10.7)$$

可是, 这个实验唯一的和上一个实验不同的地方就在于在上一个实验中, 过了 x 方向的 Stern-Gerlach 装置以后, 向下的被挡住了, 然后在现在的实验

¹这个实验实际上是用光子来代替电子自旋来完成的, 实际的实验在最后一步探测的不是“哪一个方向上有粒子”, 而是探测是否两个路径上过来的粒子“是否会出现干涉条纹”[160, 161]。如果有干涉条纹则表示路径信息消失了, 就不能问“粒子到底从哪一条路上过来”了。

中，向上和向下的都进入到了 z_3 里面。那为什么最后的状态就是完全不一样的呢？如果需要这个结果正确，则看起来，大概，

$$p^{**} |1_x\rangle \langle 1_x| + (1 - p^{**}) |-1_x\rangle \langle -1_x| = |1_z\rangle \langle 1_z|, p^{**} \neq 0, 1. \quad (10.8)$$

这怎么可能呢？这个公式体现的意思其实和公式 (10.6) 是一样的，不过方向变了， z 方向的某个特定状态，可以看作是 x 方向的多个状态的加总。

我们在一次来仔细看看公式 (10.6) 和公式 (10.8)，实际上，就算是用矢量的语言，这也是不可能的。例如，我们取一组基矢

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (10.9a)$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (10.9b)$$

和另一组基矢

$$|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (10.10a)$$

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (10.10b)$$

我们也得到公式 (10.6) 和公式 (10.8)。例如我们来检验一下其中的一个，

$$p^{**} |\leftarrow\rangle \langle \leftarrow| + (1 - p^{**}) |\rightarrow\rangle \langle \rightarrow| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & p^{**} - \frac{1}{2} \\ p^{**} - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (10.11)$$

$$|\uparrow\rangle \langle \uparrow| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, |\downarrow\rangle \langle \downarrow| = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (10.12)$$

它们不可能相等。除非我们修改成这样的表达式，

$$\alpha |1_x\rangle + \beta |-1_x\rangle = |1_z\rangle, |\alpha| \neq 0, 1. \quad (10.13)$$

也就是

$$\alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle = |\rightarrow\rangle, \quad (10.14)$$

则是可能的，而且 $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 。

这样一个从公式 (10.8) 到公式 (10.13) 和公式 (10.14) 的转变都作了什么？我们把状态从概率分布的密度矩阵变成了矢量，同时允许矢量的加法成立。也就是说，如果自旋的状态是矢量，并且走不同路径上的状态矢量可以相加，则我们的实验结果就能够得到解释。可是这样做相当于把自旋看作同时走向上和向下两条路径的客体。这怎么可能呢？任何一个概率事件，都是要么发生这个事情，要么发生那个事情的，从来都没有见过同时发生两个看起来严格互斥的事情的。而且这样的互斥的事件，例如 z 方向向上和向下，加起来还等于另一个简单事件纯粹事件，例如 x 方向上。

看起来，事件本身的矢量加法，而不是事件的概率性相加，是构建自旋的数学模型的核心理念，尽管这个理念在经典的世界中不曾看到。

电子自旋 which-way 实验和电子自旋多个 Stern-Gerlach 装置实验都告诉我们假定粒子选择了哪一条路径来走，加上概率论的互斥事件概率可加性，我们预期看到的现象与实验不符合。但是，第一、粒子确实选择了某一条路径，尽管我们在观测之前不知道走了那一条路径，或者换一个表达方式：在任何时刻任何地方测量粒子，得到的结果都是这个地方测到了或者没有测到一个完整的粒子；第二、粒子在所有路径——而不是某一个路径——上的某种平均或者某种取和，而且这种取和不能是概率性叠加，而必须是矢量叠加。这个时时刻刻走一条路径和所有路径的非概率性叠加的矛盾并不在“一条”和“所有”上面，而是在“一条”和“所有的非概率性却是矢量性叠加”上面。这个就是下面我们要学习和讨论的量子力学的主要假设。

10.2 量子系统的基本理论

在对前面几个实验的分析中，我们已经注意到，量子行为的合适的数学模型有可能需要允许事件做加法，并且还要允许概率性描述。下面就是这样一个数学模型：基于矢量和密度算符的一个理论。在实验中，我们主要讨论了给定状态的测量，也就是静态问题。在这里，我们也从静态描述和系统状态的演化，两个角度来表述量子理论。在经典力学的问题中，静态表述比较简单，也就是位置矢量和动量矢量。因此，在那里，数学模型的主要描述对象是动力学过程。在这里，对于量子系统，两个方面都是数学模型需

要构建的重点，尤其是前者。

10.2.1 量子系统的静态描述

公理 10.1. 量子系统的状态由 Hilbert 空间 \mathcal{H} 上的密度矩阵 ρ 来表示。当 $\rho = |\mu\rangle\langle\mu|$ 的时候，也就是 ρ 只有一个非零本征值的时候，我们称纯由矢量 $|\mu\rangle$ 描述的状态为纯态。

密度矩阵指的是满足下面条件的算符，

$$\rho^\dagger = \rho, \text{tr}(\rho) = 1, \langle\mu|\rho|\mu\rangle \geq 0, \forall \mu \in \mathcal{H}. \quad (10.15)$$

对于不能表达成纯态的 ρ 所代表的状态则称为混合态。

Hilbert 空间矢量存在加法、数乘、内积的操作。我们稍后会看到各个操作在描述量子系统上的意义。

公理 10.2. 量子系统的可观测量由 Hilbert 空间 \mathcal{H} 的 Hermitian 算符矢量 O 表示。

是不是所有的 Hermitian 算符矢量都可以成为量子系统的可观测量是另一个问题。理论上应该可以，但是实际测量过程中，满足要求的仪器不一定能够设计的出来。Hilbert 空间的线性 Hermitian 算符存在算符的加法、数乘，线性变换等操作，我们也需要定义各个操作对于量子系统的含义。

公理 10.3. 对于给定状态 ρ ，测量可观测量 O 的所有可能结果是 O 的本征值 o 的集合，每一个状态 o 出现的几率满足

$$P_o = \langle o|\rho|o\rangle = \text{tr}(\rho|o\rangle\langle o|). \quad (10.16)$$

因此，测量的平均值满足

$$\langle O \rangle = \sum_o o P_o = \text{tr}(O\rho). \quad (10.17)$$

其中我们用到了 $\sum_o o P_o = \sum_o o \langle o|\rho|o\rangle = \sum_o \langle o|O\rho|o\rangle$ ， $\langle o|$ 以及 $|o\rangle$ 是 Hermitian 算符 O 的本征向量。

公理 10.4. 对于给定状态 ρ ，测量可观测量 O 并观测到状态 o ，则测量以后，系统的状态成为特定的观测到的状态 $\rho' = |o\rangle\langle o|$ 。

测量以后的状态就是所测量到的状态。这一点，在经典力学的世界里头不用特别指出：这本来就是测量的含义——测量就是测得系统当时的状态，因此系统在测量之后的当时，必然就是测的结果反映的状态。在量子的世界里面，这一点不是那么平庸。我们把这个公理单独拿出来。通常的教科书把它与上一个公理合在一起。

下面，我们用这三条来解释上面提到的量子力学的实验。所谓解释就是我们给出一张配方（菜谱），在实验的每一个阶段，你会知道如何对状态进行操作，当时的状态是什么，而且这样的配方对所有的量子系统都适用。至于理解这个配方，是以后的事情。

我们先来看一下自旋的一个和多个 Stern-Gerlach 装置的实验。一个装置，记为 z_1 ，的实验可以很容易的用下面这个状态来解释。进入 z_1 之前的状态，是

$$\rho_{\leq z_1} = \frac{1}{2} (|\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|) \quad (10.18)$$

z_1 和屏幕合起来相当于测量了算符

$$O = \sigma_z = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| - |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|. \quad (10.19)$$

为什么是这个状态，我们先不管。为什么装置和屏幕合起来是这个算符，我们也先不问。我们只考虑，如果这些状态和这些算符确实是这样的话，实验现象是不是和按照公理做的理论计算的结果符合。按照公理10.3，得到两个状态 $|\uparrow_z\rangle$ 和 $|\downarrow_z\rangle$ 的几率分别是，

$$P_{\uparrow_z} = \langle\uparrow_z|\rho_{\leq z_1}|\uparrow_z\rangle = \frac{1}{2} = P_{\downarrow_z}. \quad (10.20)$$

也就是有两个斑点，各自的可能性是 $\frac{1}{2}$ ：单次测量仅出现两个结果中的一个，多次测量合起来则出现两个斑点。也就是到达屏幕上的结果看起来就像一个硬币态，

$$\rho_{\text{screen}} = \rho^c = \frac{1}{2} (|\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|). \quad (10.21)$$

这个完全解释了一个 Stern-Gerlach 装置的实验结果。

现在我们来考虑多个 Stern-Gerlach 装置的实验。先来看两个 z 方向的 Stern-Gerlach 装置的实验。过第一个 Stern-Gerlach 装置之前的状态还是公式 (10.18)。过了第一个 Stern-Gerlach 装置又被挡住了下方的状态，相当于

是测量了 z 方向之后，把观测到向上的状态放到进一步的实验里面去，于是按照公理10.4，状态就是²，

$$\rho_{<z_2} = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|. \quad (10.22)$$

于是，结合后面的 z 方向的 Stern-Gerlach 装置和屏幕合起来是公式 (10.19) 中的算符的事实，我们的到，

$$p_{\uparrow} = \langle\uparrow_z|\rho_{<z_2}^c|\uparrow_z\rangle = 1, p_{\downarrow} = \langle\downarrow_z|\rho_{<z_2}^c|\downarrow_z\rangle = 0. \quad (10.23)$$

这个计算结果和实验完全相符。

接着我们看 zxz 三个方向的 Stern-Gerlach 装置连着的实验。我们直接从公式 (10.22) 开始，也就是

$$\rho_{} = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|. \quad (10.24)$$

接着进入一个相当于 x 方向的测量装置，并且只允许 x 方向上向的进入下一步实验。 x 方向的算符是，

$$O = \sigma_x = |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| - |\downarrow_x\rangle\langle\downarrow_x| = |\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z| \quad (10.25)$$

至于这个算符为什么是这样的， $|\uparrow_x\rangle$ 和 $|\uparrow_z\rangle$ 、 $\langle\downarrow_z|$ 的关系为什么是这样的，见 [36]。这是通过进一步的实验事实总结出来的。当然，你也可以认为原则上就是尝试了各种可能的关系以后，保留下来的能够和实验相符的那个关系。

我们先得看看这样的 x 方向上向的状态能不能从 $\rho_{}^c$ 得到，按照10.3，

$$0 < p_{\uparrow_x} = \text{tr}(\rho_{<z_2}^c |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x|) = \text{tr}\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\right) = \frac{1}{2}, \quad (10.26)$$

可能性不为零，确实可以实现。

接着，按照公理10.4，保留下 x 方向上向的状态进入实验就得到状态，

$$\rho_{>x_2} = |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x|. \quad (10.27)$$

²其实在自旋方向和轨道方向之间有一个“负号”——也就是相反的关系：上面的轨道表示自旋的向下态。不过，我们这里就不管这个额外的负号了。

最后一步， $\rho_{>x_2}$ 再一次进入 z 方向 Stern-Gerlach 装置并在屏幕上产生斑图，相当于测量 $O = \sigma_z$ 。分别计算上下两个可能方向的几率，得到

$$p_{\uparrow_z} = \text{tr}(\rho_{>x_2} |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|) = \text{tr}\left(\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\right) = \frac{1}{2}, p_{\downarrow_z} = \frac{1}{2}. \quad (10.28)$$

计算结果和实验完全相符。注意，在这个过程中，我们发现，很自然地在第一个装置之后被消灭的 z 方向向下的状态，在第二个装置之后，有通过 x 方向上向上的状态活过来了。关键之处就是，状态是矢量，可以做不同基矢的表示，也就是矢量叠加。

合起来，解释量子系统的行为的时候，我们只需要用好公理10.4来看状态的制备过程，然后用公理10.3来看状态的测量的过程。公理10.1和公理10.2实际上已经被包含在使用公理10.3和公理10.4的过程中。例如，在 zz 两个 Stern-Gerlach 装置连着的实验中，第一个装置就是通过测量来制备状态，而第二个装置和屏幕合起来就是状态的测量。在 zxz 三个 Stern-Gerlach 装置连着的实验中，第一个装置就是通过测量来制备状态，第二个装置就是通过测量来再一次制备状态或者说改变状态，而第三个装置和屏幕合起来就是状态的测量。

习题 10.1 (计算 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征向量和本征值). $\sigma_z = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| - |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|$, $\sigma_y = -i|\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + i|\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$, $\sigma_x = |\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$ 。取 σ_z 表象（也就是用 σ_z 的本征向量当作基矢量），计算 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征向量和本征值。

习题 10.2 (计算 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征向量和本征值). $\sigma_z = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| - |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|$, $\sigma_y = -i|\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + i|\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$, $\sigma_x = |\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$ 。取 σ_x 表象（也就是用 σ_x 的本征向量当作基矢量），计算 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征向量和本征值。

现在我们再来看自旋的 which-way 实验。在这里，我们需要引入一个两个概率空间的直积的概念。其实为了解释前面的实验中，就需要这个状态空间的直积。不过，不考虑直积也能说的明白。我们就没有用这个直积的语言。现在，我们必须考虑自旋的状态和路径的方向两件事请了。后者我们采用这样的符号：从 Stern-Gerlach 装置出来以后往上走的路径我们记做路径 1，往下走的记做路径 2。于是，经过第一个 z 方向的 Stern-Gerlach 装置被挡住往下走的路径以后的电子的状态是

$$\rho_{<x_2} = |\uparrow_z\rangle|1\rangle\langle\uparrow_z|\langle 1| = |\uparrow_z, 1\rangle\langle\uparrow_z, 1|. \quad (10.29)$$

其中, $|\uparrow_z\rangle|1\rangle\langle\uparrow_z|\langle 1|$ 就是自旋方向和路径方向两个空间直积之后的状态之一。如果我们考虑经典的两个硬币, 我们也会用到类似的状态, 例如两个硬币都向上的状态记为 $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle\uparrow|$ 。

在电子进入第二个 Stern-Gerlach 装置 (x 方向) 并且出来之后, 系统的状态变成 (为什么这样需要用下一小节的量子状态的演化动力学来解释, 见习题 10.5),

$$\rho_{>x_2} = \frac{1}{2}(|\uparrow_x, 1\rangle + |\downarrow_x, 2\rangle)(\langle\uparrow_x, 1| + \langle\downarrow_x, 2|). \quad (10.30)$$

接着自旋进入两面 “反射镜”。其作用就是把路径方向的信息重新抹掉: 不管之前从路径 1 还是 2 过来, 在经过这个反射系统以后到达第三个 Stern-Gerlach 装置的时候的时候, 系统的状态成为

$$\rho_{<z_3} = \frac{1}{2}(|\uparrow_x, 1\rangle + |\downarrow_x, 1\rangle)(\langle\uparrow_x, 1| + \langle\downarrow_x, 1|). \quad (10.31)$$

注意这个状态就是,

$$\rho_{<z_3} = |\uparrow_z\rangle|1\rangle\langle 1|\langle\uparrow_z|. \quad (10.32)$$

最后的 Stern-Gerlach 装置和屏幕合起来是一个测量装置, 所测量的算符还是 $O = \sigma_z$, 于是我们需要用公理 10.3 来得到最后的每一条路径上观测到电子的概率。不过在那之前, 有一个小小的技术问题: 如果我们有两个硬币合起来的状态, 我们只想观测其中一个硬币的状态的时候, 在概率论的语言中, 我们需要怎么做? 我们需要做一个叫做随机变量的边缘分布的计算,

$$\rho(x_1) = \int dx_2 \rho(x_1, x_2) \triangleq \text{tr}^{(-1)}(\rho(x_1, x_2)). \quad (10.33)$$

对于离散变量 \int 需要换成取和 \sum 。后面的记号 $\text{tr}^{(-1)}(\cdot)$ 称为部分迹, 也就是对除了第一号变量之外的其他变量都做积分或者取和。得到的边缘分布还称为约化密度矩阵。在这里, 我们有自旋和路径方向两个变量, 我们仅仅关心自旋的情况, 于是, 类似地, 我们需要做,

$$\rho^{(1)} = \text{tr}^{(-1)}(\rho^{(1,2)}) = \sum_{l=1,2} \langle l | \rho_{<z_3} | l \rangle = |\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|. \quad (10.34)$$

于是,

$$p_{\uparrow_z} = \text{tr}(\rho_1 \langle\uparrow_z|\langle\uparrow_z|) = 1, p_{\downarrow_z} = 0. \quad (10.35)$$

这个结果完全和实验相符。

注意，如果我们对在抹去路径信息之前的状态做 z 方向的测量，则需要从公式 (10.30) 先得到部分迹，

$$\rho_{>x_2}^{(1)} = \text{tr}^{(-1)}(\rho_{>x_2}) = \frac{1}{2}(|\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\downarrow_z|). \quad (10.36)$$

这时候，我们得到

$$p_{\uparrow_z} = \frac{1}{2} = p_{\downarrow_z}. \quad (10.37)$$

将会出现两个斑点。

或者说，如果我们把从第二个 Stern-Gerlach 装置出来的状态从矢量叠加改成概率叠加，

$$\rho_{>x_2}^c = \frac{1}{2}(|\uparrow_x, 1\rangle\langle\uparrow_x, 1| + |\downarrow_x, 2\rangle\langle\downarrow_x, 2|), \quad (10.38)$$

则就算加入了“反射镜”之后，我们得到的状态

$$\rho_{<z_3}^c = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| + |\downarrow_x\rangle\langle\downarrow_x|)|1\rangle\langle 1|, \quad (10.39)$$

所计算出来的边缘分布

$$\rho_{<z_3}^{c,(1)} = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| + |\downarrow_x\rangle\langle\downarrow_x|), \quad (10.40)$$

给出来的实验结果也是，

$$p_{\uparrow_z} = \frac{1}{2} = p_{\downarrow_z}. \quad (10.41)$$

将会出现两个斑点。

这两个和真实实验结果不同的理论结果说明：第一，“反射镜”是起作用的；第二，从 Stern-Gerlach 装置出来的状态不是概率叠加而是矢量叠加；第三，Stern-Gerlach 装置和屏幕合起来才是测量的效果，单独的 Stern-Gerlach 装置仅仅起到把自旋方向的自由度和轨道方向的自由度耦合起来的效果。关于第三点我们再做一点补充。如果单独的 Stern-Gerlach 装置已经起到测量的作用，也就是把矢量叠加态变成了经典概率叠加态，那么，从第二个 Stern-Gerlach 装置 (x 方向) 出来以后系统的状态就应该是公式 (10.38) 中的 $\rho_{>x_2}^c$ ，而这个给出的结果和实验不相符。因此，是 Stern-Gerlach 装置联合屏幕的作用才使得矢量叠加态变成了概率叠加态，而不是 Stern-Gerlach 装置本身。

用量子力学的四条公理，我们解释了电子自旋的一个和多个 Stern-Gerlach 装置实验和 which-way 实验。再一次强调，这里所谓的解释，其实是一个预测量子系统状态的机器，一个数学模型：从一个最开始的状态出发（这个状态本身在给定实验条件的情况下有固定的规则写下来），测量的结果是什么（可观测量原则上由给定的实验仪器与步骤确定），测量以后的状态是什么；然后测量结果与测量以后的状态能够通过进一步的实验检验。物理学的理论，可以认为是对世界如何运行的描述，甚至有的时候可以回答为什么的问题。但是，其基本任务是回答是什么，怎么样的问题。也就是说，如果有一个理论，对于给定的实验条件、实验仪器、实验步骤的系统的实验结果能够给出正确的计算结果，那么这个理论就是这个现象的好的理论。当然，一个更好的理论还要求能够解释更多的同类的现象。但是，只要能够达到以上的目标，一个理论就能够建立起来。其实，我们还会发现，这个用矢量来代表状态，允许状态之间相加的理论是很难理解的，例如会出现纠缠现象并且可以用纠缠实现量子远程传态 [36]，还会出现量子测量的理解的问题 [36]。也就是说，量子测量使得我们的系统看起来做了下面这个变换，

$$\rho^q = \frac{1}{2} (\langle \uparrow_x \rangle + \langle \downarrow_x \rangle) (\langle \uparrow_x | + \langle \downarrow_x |) \xrightarrow{\text{Q Measure}} \rho^c = \frac{1}{2} (\langle \uparrow_x \rangle \langle \uparrow_x | + \langle \downarrow_x \rangle \langle \downarrow_x |). \quad (10.42)$$

回忆我们说的确定性状态的测量和经典随机硬币的测量，

$$\rho^c = |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| \xrightarrow{\text{C Measure}} \rho^c = |\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x|, \quad (10.43)$$

$$\rho^c = \frac{1}{2} (\langle \uparrow_x \rangle \langle \uparrow_x | + \langle \downarrow_x \rangle \langle \downarrow_x |) \xrightarrow{\text{C Measure}} \rho^c = \frac{1}{2} (\langle \uparrow_x \rangle \langle \uparrow_x | + \langle \downarrow_x \rangle \langle \downarrow_x |). \quad (10.44)$$

看起来，量子测量很神奇——测量改变了状态。一般来说，你会认为，测量是客观的，不能改变被测量物体的状态（除了测量仪器引起的微扰）。然而，在量子测量这里，系统的状态完全就改变了，从一个纯态变成了一个混合态。当然，最后呈现出来的测量结果也是一个纯态，是那组经典概率叠加态的本征态之一。而后面这个每次观测结果就是从经典概率叠加态的本征态之一并不奇怪，在经典概率论的世界中也是如此。因此，最最神奇的事情就是：量子测量使得矢量叠加态变成了概率叠加态。在量子力学里面，这个问题被称为测量破坏了相干性——相干性就是指矢量叠加，破坏之后就剩下

概率叠加了。这个量子测量的神奇的性质被称为量子测量问题，被很多人认为是一个迄今为止还没有解决的问题 [36, 162]。

把公式 (10.27) 中的量子状态和公式 (10.38) 中的经典状态做一个对比，

$$\begin{aligned}\rho_{>x_2} &= \frac{1}{2} (|\uparrow_x, 1\rangle\langle\uparrow_x, 1| + |\downarrow_x, 2\rangle\langle\downarrow_x, 2| + |\uparrow_x, 1\rangle\langle\downarrow_x, 2| + |\downarrow_x, 2\rangle\langle\uparrow_x, 1|), \\ &= \rho_{>x_2}^c + \frac{1}{2} (|\uparrow_x, 1\rangle\langle\downarrow_x, 2| + |\downarrow_x, 2\rangle\langle\uparrow_x, 1|).\end{aligned}$$

我们发现，多了

$$\Delta\rho^{qc} = \frac{1}{2} (|\uparrow_x, 1\rangle\langle\downarrow_x, 2| + |\downarrow_x, 2\rangle\langle\uparrow_x, 1|), \quad (10.45)$$

这样的非对角项。这就是量子密度矩阵和经典密度分布函数的区别：前者是一个矩阵有对角元和非对角元，由于包含矢量叠加的操作可以做基矢变换；后者是一个对角的矩阵也就是说实际上是一个密度分布函数，由于不包含矢量叠加只能在给定的基矢上来讨论。从这个角度，我们发现，对于解释量子系统的行为来说，经典的密度矩阵是不够的，我们必须用到量子的密度矩阵，也就是具有非对角元的，包含矢量叠加的。当然，对于具有非对角元的密度矩阵，在合适的变换以后的基矢下，也可以表达成为一个对角的密度矩阵。也正是由于这些额外项的存在，使得量子系统的测量看起来比经典系统的测量神奇很多——这样的非对角项被测量过程抹掉了。因此，这就是经典和量子的最大的区别。

在上面的例子中，我们有一个小小的未完成的步骤，公式 (10.29) 的 $\rho_{<x_2}$ 是如何变成公式 (10.30) 的 $\rho_{>x_2}$ 的呢？这个问题与量子系统的演化有关。在解释它之前，让我们来学习一下量子系统的演化。

10.2.2 量子系统的演化

公理 10.5. 对于给定初始状态 $|\psi(0)\rangle$ 或者 $\rho(0)$ 的系统，系统自身动力学完全由系统的 Hamiltonian (H) 通过如下方程决定，

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (10.46)$$

或者等价地

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H, \rho(t)]. \quad (10.47)$$

这个方程被称为Schrödinger 方程。有时候，后者也被称为Liouville-von Nuemann 方程。如果 H 不显含时间，形式上以上的两个方程可以解开如下，

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle \quad (10.48)$$

或者等价地

$$\rho(t) = e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt}. \quad (10.49)$$

利用 H 的本征值和本征向量（记为 $E_n, |n\rangle$ ），我们还可以得到

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{-iHt} \sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_n e^{-iE_n t} |n\rangle \langle n|. \quad (10.50)$$

也就是说，如果我们能够得到 H 的本征值和本征向量，那么，从给定的初始状态出发，任何一个时刻的状态我们都可以得到。得到新的时间点的状态之后，如果我们需要在这个状态上对某一个可观测量做测量，我们在利用前面的公理10.3来解决测量结果的问题。

例 10.1 (自旋偏转和测量). 经过 x 方向磁场以后，在其正方向出射（反方向完全被挡住）的 $\frac{1}{2}$ -自旋系统，经过 z 方向磁场 B_z 的 Stern-Gerlach 装置中 t 时间以后出射。求在 Stern-Gerlach 装置后面的屏幕上上下两个位置收到自旋的几率。

我们先写下来系统的 Hamiltonian³，

$$H = -\mu B_z \sigma_z, \quad (10.51)$$

和初始状态，

$$\rho(0) = |\uparrow_x\rangle \langle \uparrow_x|. \quad (10.52)$$

根据Schrödinger 方程有演化算符

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{i\mu B_z t} |\uparrow_z\rangle \langle \uparrow_z| + e^{-i\mu B_z t} |\downarrow_z\rangle \langle \downarrow_z|. \quad (10.53)$$

³这个时候 Hamiltonian 怎么写，见例如 [36]。为什么这样写？你也可以理解成经过无数前辈的猜测和努力，最后发现这样写能够解释实验结果，所以就这样写了。

于是，系统在 t 时刻的状态是，

$$\begin{aligned}\rho(t) &= U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{i\mu B_z t} |\uparrow_z\rangle + e^{-i\mu B_z t} |\downarrow_z\rangle \right) \left(e^{-i\mu B_z t} \langle \uparrow_z| + e^{i\mu B_z t} \langle \downarrow_z| \right).\end{aligned}\quad (10.54)$$

于是，计算向上态和向下态的概率分别是，

$$p_{\uparrow_z} = \langle \uparrow_z | \rho(t) | \uparrow_z \rangle = \frac{1}{2}, p_{\downarrow_z} = \langle \downarrow_z | \rho(t) | \downarrow_z \rangle = \frac{1}{2}. \quad (10.55)$$

这个例子的计算，加上以下两道习题习题 10.3 和习题 10.4，相当于说明了为什么一个 z 方向的磁场的 Stern-Gerlach 装置连着一块屏幕可以当作测量自旋处于 z 方向的向上和向下态的几率。

习题 10.3 (自旋偏转和测量 zz). 经过 z 方向磁场以后，在其正方向出射（反方向完全被挡住）的 $\frac{1}{2}$ -自旋系统，经过 z 方向磁场 B_z 的 Stern-Gerlach 装置中 t 时间以后出射到达屏幕，问屏幕上上下两个位置收到自旋的几率。

习题 10.4 (自旋偏转和测量 xzx). 经过 x 方向磁场以后，在其正方向出射（反方向完全被挡住）的 $\frac{1}{2}$ -自旋系统，经过 z 方向磁场 B_z 的 Stern-Gerlach 装置中 t 时间以后出射。在这个装置之后再放一个测量 x 方向自旋的装置——也就是一个 x 方向的磁场的 Stern-Gerlach 装置连着一块屏幕，问屏幕上上下两个位置收到自旋的几率。提示：可以简单把最后的磁场和屏幕看作一个测量仪器，找到合适的测量算符来描述。

习题 10.5 (自旋轨道耦合). 这个习题回答公式 (10.29) 的 $\rho_{<x_2}$ 是如何变成公式 (10.30) 的 $\rho_{>x_2}$ 的。我们已经有了初始状态和末状态，我们来验证，经过下面这个 Hamiltonian 的演化，系统在经过 $\tau = \frac{4\pi}{3}$ 的时间以后变成所希望的末状态。

$$H = \Sigma \otimes \sigma_x, \quad (10.56)$$

其中 $\Sigma = i \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$ 是一个 3 维 Hilbert 空间中的 Hamiltonian。它

的三个基矢 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 分别代表上方向的路径、分开之前的路径和下方向

的路径。 σ_z 是自旋部分的 Hamiltonian。请证明

$$\rho_{>x_2} = U \rho_{} U^\dagger. \quad (10.57)$$

其中的状态分别指的是公式 (10.29) 的 $\rho_{}$ 和公式 (10.30) 的 $\rho_{>x_2}$ 。

原则上上面这个例题和习题的情景是可以做实验简单的：做实验、做理论及算，改磁场强度、相互作用时间，初始状态，等等。实际上，严格地按照建立科学理论体系的逻辑来说，在量子力学的演化部分，我们也应该和静态描述部分一样，先介绍实验结果，然后通过尝试不同的理论模型来找到和实验相符的理论模型。不过，在这里，我们就跳过了演化部分的实验结果的介绍。

到此为止，量子力学的基本框架的内容就有了。跟多的内容我们就留给有兴趣的读者去阅读给物理学专业学生的量子力学教材吧，例如 [36, 110, 111]。另外，强烈推荐阅读一下和我们这个思路有一定相通之处的《Feynman 物理学讲义》第三卷 [158]。我们说过在这里，我们系统科学的研究者主要是从中体会什么是科学，科学和数学、实验的关系。从量子力学的具体知识的角度来说，学多少都没有什么问题。

10.3 写在量子力学后面的话

定义量子系统的 Liouville 算符，

$$L = -i[H, \cdot], \quad (10.58)$$

把量子系统的演化方程写成

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = iL\rho \quad (10.59)$$

的线性方程的形式，称为 Liouville 方程。其解为

$$\rho(t) = \mathcal{L}(t-t_0)\rho(t_0) = e^{iL(t-t_0)}\rho(t_0). \quad (10.60)$$

这里，我们注意到，算符 $\mathcal{L}(t)$ 与 L 之间实际上是 Lie 代数到 Lie 群的关系，也就是指数映射。我们已经知道经典力学的演化方程也可以写成相同的形式的线性方程，有相同形式的解，见公式 (9.6)。我们也通过翻硬币的

例子了解到，随机过程也可以表达成类似的形式。在下一章关于随机过程的讨论中，我们会更清楚地看到这一点。也就是说，确定性的经典力学、随机性的经典力学、量子力学，都可以表达成线性方程的形式，而且演化算符就是某一个代数的算符的指数映射。当然，离散时间的过程就不一定是 Lie 群，但是肯定也是某一个群，以及与这个群的生成元的关系。

于是，我们发现，确定性的经典力学、随机性的经典力学、量子力学的数学结构实际上都是群论。实际上，如果了解多一点群论，我们还可以看到，生成元在群的研究中是非常重要的：生成元之间的对易关系决定了所生成的群的结构。如果了解一点点微分几何，我们还会发现，我们的群元素之间除了有群乘，通常还算有加法运算，而且由于有生成元之间的非对易关系，通常这个加法运算确实可以构成某个矢量空间（其实是切矢量空间，如果现在不明白，跳过这一部分，将来再回来），但是这个空间没有全局的基矢。一个矢量空间，如果有全局基矢，那么在很大程度上它就可以利用坐标来讨论；如果没有全局基矢，则我们需要研究矢量平移、坐标变换与一致性等等问题。这个就是微分几何要研究的问题。于是，在这里，我们说，这些演化过程背后的数学结构都是群论与微分几何，尤其是群论。关于这部分，推荐吴兆麟的《高等量子力学》[110]。

了解了这一点之后，我们就会发现，为什么线性代数在这个理论框架中的重要地位：群的表示理论就是线性代数。在实际计算的层次，我们永远需要通过矩阵、矢量等等计算来表示群，而群是所有这些演化理论的基础。

此外，这个统一的形式，还有一个额外的好处，演化方程都是线性的。当然，这个会产生一个自然的问题，那么非线性动力学研究的是什么？以后我们会看到，如果我们把一个自治（关于一个封闭系统的方程是自治的）的非线性动力学方程所描述的过程转化为密度矩阵形式的描述，它也必然是线性的。只有把密度矩阵的方程变成随机变量的数字特征，也就是各种统计平均量，的演化方程的时候，方程会包含非线性。而且，实际上，当密度矩阵形式的方程中的算符项 L 包含相互作用的时候，这个非线性项才产生。也就是说，非线性实际上代表了相互作用。

关于这个写在后面的话，如果你暂时看不懂，请你不要担心，这个只有理解上的意义，没有任何本书的计算过程实际上需要这些理解。迄今为止，在我自己的研究工作中，也仅仅起到理解上的作用，尽管我一直在寻找

合适的问题，让这些思想以及这些思想相关的技术在实际研究中发挥作用。我只能说，我有一些方向和想法，有待于探索和实现。把一个理论用不同的方式，或者表象，呈现出来，或者把不同的东西用同一个形式呈现出来，都代表了理解上的拓展和深入。看到相似性，以及相似性的相似性，在数学和系统科学中，是非常重要的。

下一章，我们来看一下如何把随机过程的演化方程也写成这个线性方程的形式，而且代数算符 L 决定了演化算符 \mathcal{L} 。

10.4 作业

习题 10.6. 阅读 Feynman 的《Feynman 物理学讲义》[158] 第三卷，做概念地图和文字相结合的读书报告，并和本书做对比。

习题 10.7. 阅读吴金闪的《二态系统的量子力学》[36]，尤其是实验部分，做概念地图和文字相结合的读书报告，并和本书做对比。

10.5 本章小结

在这一章里面，从量子系统的实验结果开始，我们构造了一个基于事件的矢量加法的数学模型来描述量子系统。尽管这个系统和经典世界的经验证有很大的区别，但是，数学简单，而且确实能够给出来和实验相符的计算结果。这就是科学。因此，学习这一章，尤其是系统科学的研究者，最主要的是要从中理解好什么是科学，科学和数学、思想、和现实的关系。

除此以外，量子力学的知识本身也是值得学习的：事件的矢量叠加在经典世界的数学模型中是没有的，学习量子力学就是打开看世界的一扇门。另一方面，也有可能将来对世界的其他系统的描述，会用到事件的矢量叠加性。

同时，看到经典力学、统计力学、随机过程和量子力学的过程动力学都可以统一成 Liouville 方程，也是一件重要的事情。看到事物之间的相似性，相似性的相似性，对于系统科学这样一个没有具体系统的研究对象，但是又极大程度上依赖于具体系统的研究，的学科，是非常重要的。

第十一章 随机过程

通过第七章概率论的“随机过程初步”一节(7.7节)，我们已经了解到离散时间的随机过程可以看成是多变量随机数的联合分布，可以看成是每一个时刻的随机变量的分布函数的演化过程，也可以看成是一个随机变量的演化的历史样本的集合。同时，我们还学会了用密度矩阵、随机变量算符、概率分布“矢量”以及相应的概率转移矩阵，来讨论离散时间的随机过程。这里，我们第一要讨论更多的随机过程的例子，这样我们会对于这几个不同的描述方法更熟悉；第二，我们还要介绍一点点连续时间的随机过程的概念和几个典型的例子，以及处理方法。

本质上，对于离散时间的随机过程，我们可以看作一个分布函数 $P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1)$ ，也就是轨迹 $\vec{x}(t) = (x_1, x_2, \dots, x_t)$ 的分布函数 $P(\vec{x}(t))$ 。在这个意义下，动力学就是从 $P(\vec{x}(t-1))$ 到 $P(\vec{x}(t))$ 。一般地来说，这个演化过程可以表达成为，

$$P(\vec{x}(t)) = F[P(\vec{x}(t-1))], \quad (11.1)$$

或者

$$P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1) = P(x_t | x_{t-1}, \dots, x_1) P(x_{t-1}, \dots, x_1). \quad (11.2)$$

在这里，我们考虑了从 $t-1$ 到 t ，实际上，新的变量只有 x_t ，其他变量已经是决定了的历史。因此，以上两式实际上背后有一个视角的转换：在前者中，我们看作分布函数的演化；在后者中，我们看作很多条轨迹的演化——每一条轨迹都有自己的历史状态的概率，同时有在给定历史状态下的产生某个新状态的概率。拿下面我们就来看看，对于某些这样的过程——例如当

$$P(x_t | x_{t-1}, \dots, x_1) = P(x_t | x_{t-1}, \dots, x_{t-L}), \quad (11.3)$$

也就是仅仅有有限步长的依赖的时候，我们有没有办法知道更多，有没有一般的处理方法。

从离散时间过渡到连续时间，在数学上存在着一个非常大的跃迁：离散时间随机过程的分布函数是很好定义的——多维随机变量而已，但是在连续时间上，我们实际上要讨论某一个连续时间随机轨道——也就是一个时间过程一个函数——的概率分布问题。一个一般的对于连续时间的随机过程的讨论实际上需要一个轨道的分布函数 $P(x(t)), t \in [0, T]$ 或者甚至 $[-\infty, T]$ ，如果我们要做极限和微积分的运算，我们还需要类似于 $d[x(t)]^1$ 的一个量——轨道的微分。一个实数作为自变量的微分我们有清楚的概念——本质上是实数域上的测度的问题但是实际上当作一个小小线段的极限也无伤大雅，但是函数作为自变量的微分，我们就不好定义了（对于学有余力的读者，这个问题相关的概念是“路径积分”——路径做自变量的微积分，独特的物理学家Feynman的重要贡献）。在这里，我们不在抽象的层次来讨论这个问题，而是继续我们物理学家的不太严格的直觉图景，把连续时间的过程的分布函数看成是很多很多个离散变量的联合分布 $P(x(t_1), x(t_2), \dots)$ ，然后把两者认同起来。我们也暂时不讨论用随机变量的分布函数不能描述的问题。

现在，在学习了力学、统计力学和量子力学之后，我们再来看随机过程。物理系统的力学方程不管经典力学还是量子力学都是确定性的。但是，经典力学Liouville 方程描述的是密度分布函数的演化，密度分布函数可以做几率解释；量子力学Schrödinger 方程描述的是密度矩阵的演化，密度矩阵可以做几率解释。那么有没有系统在本质上就需要包含随机性的方程呢？如果有，怎么处理呢？

根本上是否存在随机系统是一个哲学问题，我们不讨论，尽管我们已经看到在量子力学中看起来一旦测量就会带来根本上的随机性。我们讨论在描述的层次，什么时候需要随机描述。考虑一个完全确定的力学系统：一群小分子连着一个大热浴，就像我们在统计物理学中经常见到的正则系综。整体必然满足确定性的力学方程。但是，如果我们只关心这群小分子，而不去测量大热浴的状态，那么这群小分子就好像是处于一个满足正则系综分布的随机个体。我们抛硬币，确实每一次的力学过程都是完全确定的，但是

¹对于时间离散过程， t 就是一个参量。对于每一个给定时刻 t ， $dx(t)$ 就是通常的微分。

初始速度的大小和方向，空气阻力的细节，我们不能完全控制，于是这个硬币离随机个体差不了多远。所以，环境和初始条件不可完全把握，可以造成描述上的随机性。随机性的描述的层次有可能还有一个来源，演化方程对应的轨道存在不稳定性：两条某段时间离的很近的轨道，在其他时间可以离得很远，或者反过来。这样的系统我们也会在下一部分讨论非线性动力学的时候看到。随机性还可能存在别的来源，例如量子力学的测量，每次总是会选择一个被测量算符的本征态，但是选择哪一个是不确定的。这个过程是否存在更深刻的确定性描述我们还不知道，但是至少在描述的层次，这里有随机性的。所有的这些随机性，都会导致我们需要随机性的描述。

换一个思考的角度，我们看到，经典力学可以采用随机描述的框架（Liouville 方程），量子力学可以采用随机的描述（Liouville-von Nuemann 方程），所以随机描述是力学系统的正常的描述。当然这些方程本身都是确定性的，仅仅是方程描述的变量可以做随机解释。在这个意义上，就算在一个非常明确的力场中的确定性的经典力学系统，我们也完全可以用随机描述的讨论它。结合这两个方面的因素，我们说，随机描述才是描述的主要手段，确定性的描述仅仅是一个特例。

我们发现，确定性的力学过程完全可以等价地用相空间分布函数的演化方式来描述，而统计力学的根本问题就是这个相空间分布函数的定态分布的问题，而且统计物理学的Metropolis 方法就是构造某个随机过程然后得到这个随机过程的稳态，进而量子力学也是一个概率意义上的描述（只不过，这个概率的简单事件满足态的直接叠加原理而不是概率论性叠加原理）。因此，我们说力学、统计力学和量子力学就是概率论（以及量子概率论，或者说满足态叠加原理的概率论）。在统计物理学中还有一个很重要的分支我们没有谈到：扩散和输运等非平衡过程的统计力学研究。这样的现象的例子有液体中花粉粒子等悬浮小颗粒的扩散，温度不同的两个热浴连着的一个管道上流动着的热流等等。这些过程也可以通过随机过程来描述。花粉粒子的运动的数学模型就是Brown 运动。这个将是我们这一章的主题之一。郝柏林在有一次课上谈到统计物理学的学习的时候大致说过，第一、具体例子在学习统计物理学的时候很重要；第二、在统计物理学的范畴内，这个例子包含Ising 模型和Brown 运动。这个我完全同意，以问题为中心的学习方法，在了解一定程度的基本理论和基本框架的基础上，是非常好的

学习方法。我也同意，在统计物理学之内，好像其它的问题就用不着了。

回到我们的主题，以上的讨论主要是为了说明，很多物理学实际上就是随机过程，而随机过程也从物理学的研究中获取进一步发展的动力和方向。所以，这一章我们来学习一下随机过程，尤其是Markov 过程。我们主要通过以下几个具体例子：Wiener 过程，Brown 运动，Ornstein-Uhlenbeck 过程，以及这些过程的物理背景，来学习以下几个概念和技术：转移概率，转移速率，稳态分布，Fokker-Planck 方程，随机微分方程，Langevin 方程，Master 方程，Monte Carlo 方法。当然，再一次强调这些例子和方法、方程都不是最重要的，最重要的事情是学会从随机过程的角度去看实际世界的问题，并且意识到随机过程也能能够用解析计算和数值计算以及数值模拟来分析的。

本章推荐参考书是Risken的 Fokker-Planck Equation[163, 164] , Kemeny和Snell的 Finite Markov Chains[165] , Gardiner的 Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences[166, 167] , 以及王梓坤的《随机过程通论》 [168]。

11.1 Markov 过程

当公式 (11.3) 中的 $L = 1$ 的时候，由公式 (11.2) 所描述的过程称为Markov 过程，也就是当前时刻的状态仅仅由前一个时刻（按照概率）来决定，不依赖于更早的时刻的状态。重新写一下就是，

$$P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1) = P(x_t | x_{t-1}) P(x_{t-1}, \dots, x_1). \quad (11.4)$$

继续对前一个时刻 ($t - 1$) 以及更早的时刻用这个性质，我们得到

$$P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1) = P(x_t | x_{t-1}) P(x_{t-1} | x_{t-2}) \cdots P(x_2 | x_1) P(x_1). \quad (11.5)$$

更进一步，如果 $P(x_t | x_{t-1})$ 不依赖于时间，并且状态空间也是离散的，记为 $x = 1, 2, \dots, N^2$

$$P(x_t = i | x_{t-1} = j) = W_j^i. \quad (11.6)$$

²为简单计，这里仅考虑有限的情况，可数无限的情况其实类似。

则公式 (11.4) 可以进一步简化为

$$P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1) = W_{x_{t-1}}^{x_t} W_{x_{t-2}}^{x_{t-1}} \cdots W_{x_1}^{x_2} P(x_1). \quad (11.7)$$

也就是说我们只需要知道初始分布 $P(x_1)$ 和转移矩阵 W 就知道了一切。于是, Markov 过程的研究只需要关注初始分布和转移矩阵。

注意这里转移矩阵的抽象矢量记号是

$$W = \sum_{ij} W_j^i |i\rangle\langle j|, \quad (11.8)$$

其中 $|i\rangle\langle j|$ 含义是把一个 j 状态在下一步变成一个 i 状态。这个记号和通常的Markov 过程的数学书的记号不一样。在那里, 从一个时刻到下一个时刻的演化的数学操作是矢量左乘上转移矩阵, 在这里是右乘。

如果我们只关心末状态的分布函数, 记初状态分布函数为列矢量 $P_1 = [P(x_1 = 1) P(x_1 = 2) \cdots, P(x_1 = N)]^T$,

$$P(x_t) = \sum_{x_{t-1}, \dots, x_1} P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_1) = W^{(t-1)} P_1. \quad (11.9)$$

也就是说, 我们只需要把初始分布函数拿过来, 乘上 $(t - 1)$ 次状态转移矩阵就知道了末状态。在 $t \rightarrow \infty$ 的极限下, 问题会更简单。假设转移矩阵有本征向量 w_1, w_2, \dots, w_N 按照绝对值从大到小排列, 相应的本征向量记为 $|w_i\rangle$, 则

$$P^{(t)} = WP^{(t-1)} \Leftrightarrow |P^{(t)}\rangle = \sum_i w_i |w_i\rangle\langle w_i| P^{(t-1)}\rangle. \quad (11.10)$$

这个矩阵乘法的操作就相当于把状态矢量中 w_1 本征向量占有的比例 $\langle w_1 | P^{(t-1)} \rangle$ 放大了 w_1 倍。由于 w_1 的绝对值最大——一会我们会看到这个 w_1 是多大, 当这个 w_1 是唯一的时候, 经过多次相乘, 留下来的稳定分布函数, 必然就是 $|w_1\rangle$ 。其实这就是矩阵本征值和本征向量中的幂方法的内涵。于是, 末状态直接就是,

$$P_{eq} \triangleq P^{(\infty)} = |w_1\rangle. \quad (11.11)$$

当然, 这要求 $\langle w_1 | P_1 \rangle \neq 0$ 。如果我们任意选择 P_1 的话, 满足这个要求的矩阵远远多余不满足这个要求的矩阵。实际上, 大多数系统中这个收敛的速度非常快, 取决于最大本征值和次大本征值的比 $\frac{|w_1|}{|w_2|}$ 。

下面我们来证明矩阵 W 有本征值 1。根据概率的定义，我们有

$$\sum_i W_j^i = 1, W_j^i \geq 0. \quad (11.12)$$

取左矢量 $\langle \mu | = [1, 1, \dots, 1]$ ，我们有

$$\langle \mu | W = \sum_i \langle \mu | i \rangle \langle i | W = \sum_{i,j} W_j^i | j \rangle = \sum_j | j \rangle = \langle \mu |. \quad (11.13)$$

于是， $\langle \mu |$ 是本征值等于 1 的左本征向量。按照左本征值等于右本征值——它们的方程由同一个行列式定义，所以 W 必定有一个右本征值等于 1。

接着，我们证明本征值 1 对应着至少一个元素非负的本征向量。把这个本征值 1 带入到原始的矩阵来求本征向量，记为 $\vec{x} = [x^1, x^2, \dots, x^N]^T$ ，我们发现，任何一行可以变成如下的形式，

$$(1 - W_j^i) x^j = \sum_{k \neq j} W_k^i x^k. \quad (11.14)$$

这个方程保证了必然存在一个 $x^k \geq 0$ 的解：如果所有的元素都大于等于零，则方程的右边合起来大于等于零，方程的左边 $(1 - W_j^i)$ 也大于等于零（当 $(1 - W_j^i) = 0$ 的时候，可以取 $x^j = 0$ ），于是所有元素都大于零的假设是自洽的；同时对于有限维矩阵，任意本征值必然对应着至少一个本征向量。于是，本征值 1 至少对应着一个各个元素都大于等于零的本征向量。如果各个元素 $W_j^i > 0$ ，还可以推论 $(1 - W_j^i) \neq 0$ ，否则结合 $\sum_i W_j^i = 1$ 可以了解必然有某些其他元素 $W_j^k = 0$ ，于是可以推论这个时候 $x^k > 0$ 都大于零，不能等于零。我们记这个非负元素的本征向量为 $|w=1\rangle$ 。当然，实际上有可能本征值 $w=1$ 对应着多个本征向量。我们这里只需要一个元素非负的本征向量就行。

实际上，用同样的思路可以证明任何一个大于 1 的本征值，如果这样的本征值存在的话，都存在至少一个非负元素的本征向量。

下面我们来证明矩阵 W 本征值 1 是最大的，也就是 $w_1 = 1$ 。我们假设有一个本征值，不妨就认为是 w_1 ，大于 1。取这个本征值对应的非负本征向量 $|w_1\rangle$ ，当作 $P^{(1)} = P_1$ ，则在计算某个时刻 $N \gg 1$ 时刻的分布函数，

$$P^{(N)} = W^N P^{(1)} = w_1^{N-1} |w_1\rangle, \quad (11.15)$$

然而，这个 $P^{(N)}$ 不归一，

$$\sum_j P_j^{(N)} = w_1^{N-1} \sum_j \langle j | w_1 \rangle = w_1^{N-1} \gg 1. \quad (11.16)$$

于是， $P^{(N)}$ 不再是概率分布函数了。矛盾。因此，原假设 $w_1 > 1$ 错误，只能有 $w_1 \leq 1$ 。再加上，我们已经证明 W 至少有本征值 1，以及相应的非负本征向量一个，因此， $w_1 = 1$ ，最大本征值就是 1。是否有其他模为 1 的本征值，还有是否还有其他本征向量对应着模为 1 的本征值，在这里没有回答。更多的讨论，见正元素和非负元素矩阵的 Perron–Frobenius 定理 [114]。

习题 11.1 (Perron–Frobenius 定理). 阅读相关材料，例如 [114] 和 Wikipedia 的“Perron–Frobenius theorem”词条³，搞清楚非负元素矩阵和正元素矩阵的 Perron–Frobenius 定理，并生成随机矩阵来尝试检验这个定理。

有了这个结果——Markov 过程的转移矩阵的最大本征值为 1 并且这个本征值至少对应着一个非负元素的本征向量——之后，关于离散时间和离散状态的Markov 过程的研究，尤其是长时状态或者称为稳定状态，就只需要研究这个转移矩阵的本征向量和本征值了。当然，在Markov 过程的研究中，有可能还研究除了稳定状态之外的其它问题，例如首达时间、吸引态、周期、可逆性等，当然实际上还是研究这个转移矩阵的事情，就只好留给读者取看专门的教材了 [165]。

实际上，不仅仅是一步历史的随机过程可以用 Markov 转移矩阵的语言来描述，任意有限步历史的随机过程，都可以通过定义新的状态变量来变成一步的Markov 过程。例如，定义

$$y_{t-1} = (x_{t-1}, \dots, x_{t-L}), y_t = (x_t, \dots, x_{t-L+1}), \quad (11.17)$$

就可以把公式 (11.3) 重新写成

$$P(y_t | y_{t-1}, \dots, y_1) = P(y_t | y_{t-1}). \quad (11.18)$$

于是，任意一个有限历史的随机过程都可以看作是一个Markov 过程，而Markov 过程的研究主要就关心转移矩阵。有的时候，我们是从机制或者模型得到

³https://en.wikipedia.org/wiki/Perron-Frobenius_theorem, 2019 年 10 月 14 日访问。

转移矩阵然后看系统的行为。这时候就要对转移矩阵做分析，或者从转移矩阵做模拟来获得这个随机过程轨迹的样本。有的时候，我们是从系统的行为的记录，也就是轨迹和轨迹的集合，来看系统的机制和模型。后者就需要从实际数据把转移矩阵估算出来。这个问题我们已经在 7.10.7 节做个讨论。

对于状态和时间连续的Markov 过程，我们不讨论一般的理论。仅仅在下面举一些例子，包含Langevin 方程、Master 方程、Fokker-Planck 方程，以及这些方程所对应的随机过程的模拟。

11.2 Langevin 方程：随机力

我们从纯随机游走开始。

例 11.1 (纯随机游走的小球). 一个小球每一个时刻受到一个随机的冲击，获得一个随机的速度。写下来小球的运动方程。

按照随机的速度的含义，我们有

$$\dot{x} = \xi_t. \quad (11.19)$$

这个随机冲量 ξ_t 的值和统计性质，将来我们还需要了解更多的信息才能知道 $x(t)$ 的长时行为，包含分布函数和各阶矩等。这个过程有一个专门的名字，叫做Wiener 过程。

一个时间离散版本的对应的随机游走可以写做，

$$x(t+1) = x(t) + \xi_t. \quad (11.20)$$

对于这个时间离散的版本，我们知道，假设 $x(0) = 0$ 的话，

$$x(t) = \sum_{\tau=0}^{t-1} \xi_{\tau}. \quad (11.21)$$

于是， $x(t)$ 符合正态分布。这个正态分布的均值和方差由 ξ_t 的统计性质决定。我们希望这个连续版本的情况也类似。

我们再来讨论一个连在弹簧上的小球的Newton 方程。这里弹簧的另一端连着一个做独立自主的随机运动的墙壁。

例 11.2 (与振动墙壁相连的小球). 一个小球通过一根弹性系数为 k 原始长度为 l 的弹簧连着墙壁。墙壁的位置在其平衡点附近振动，位置可以用正态分布描述，幅度为 A 。写下来小球的运动方程。

小球受到弹簧给的回复力大小为 $F = -k(x - e_t - l)$ ，其中 e_t 是墙壁的位置，以墙壁原始位置为坐标原点，以弹簧方向为 x 轴正方向。于是，运动方程就是

$$\ddot{x} = -\frac{k}{m}(x - l) + \frac{k}{m}e_t. \quad (11.22)$$

这就是一个在随机外力作用下的谐振子的运动方程。如果我们想求解这个运动方程，则我们还需要了解更多关于 e_t 的信息。

接下来，我们考察水中的花粉粒子的运动。

例 11.3 (水中的花粉粒子). 花粉粒子在水中会受到睡得粘滞阻力，同时，当花粉粒子比较小的时候，还会收到水分子的随机冲击力，于是运动方程是，

$$m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + \xi_t. \quad (11.23)$$

替换成速度变量，有 $v = \dot{x}$,

$$\dot{v} = -\frac{\gamma}{m}v + \frac{1}{m}\xi_t. \quad (11.24)$$

如果我们想求解这个方程，我们需要了解更多关于随机力 ξ_t 的信息。

差分方程的形式

这样的Newton 方程加上随机力的描述得到的基本力学量——位置和动量——的运动方程，就称为Langevin 方程。Langevin 方程可以数值求解，例如运用确定性微分方程的Euler 方法直接把公式 (11.24) 变成，

$$v(t + \Delta t) = -\frac{\gamma}{m}v(t)\Delta t + \frac{1}{m}\xi_t\Delta t. \quad (11.25)$$

对于其中的 $\xi_t\Delta t$ 直接用从某个分布函数——例如正态分布——中随机产生一个样本，然后乘上 Δt ? 不知道这样做结果怎样，但是至少看起来是可以做的。不仅可以说，这样做可能还有一些道理。为什么要从正态分布中取随机数呢? 我们来分析脏水中的粉尘颗粒收到的随机力的来源。很有可能这

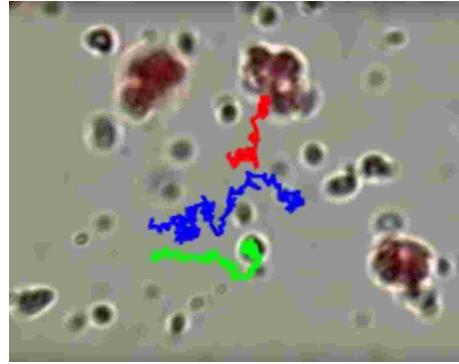


图 11.1: 一杯子脏水显示的粉尘颗粒的 Brown 运动。彩色部分记录了所跟踪的三个粉尘颗粒一段时间的轨迹。图片从 Youtube 视频 “Physics of Life - Brownian Motion and Brownian Motors”⁴ 截取。图 1.9 和图 1.10 实际上也是 Brown 运动。

一个随机力是各个方向的水分子对粉尘颗粒的碰撞形成的。如果这个粉尘比较大，则各个方向遇到水分子的碰撞的可能性差不多。考虑一个最简单的一维的情况，这个碰撞的合力大概就相当于 $\xi = \sum_j \eta_j$ ，每一次碰撞都可能产生一个力，合起来的力就像是好多个独立同分布的碰撞力的叠加。于是，看起来确实可以用正态分布来描述。那么，这个简单朴素的猜测到底对不对呢？

我们来做一点点理论分析。为了简单计，从纯随机游走的小球的运动方程公式 (11.19) 开始。我们暂时把随机力 ξ_t 就当做一个普通的含时变量。这时候，公式 (11.19) 有形式解，

$$x(t) - x(0) = \int_0^t d\tau \xi_\tau, \quad (11.26)$$

我们再假设其中的 $x(0) = 0$ ，并且

$$\langle \xi_{\tau_1} \rangle_\xi = 0. \quad (11.27)$$

按照之前的各个方向的碰撞冲量的解释，我们取这个平均等于零，并且这个碰撞冲量有一个特定的幅度 \sqrt{g} ，于是

$$\langle \xi_{\tau_1} \xi_{\tau_2} \rangle_\xi = g \delta(\tau_1 - \tau_2). \quad (11.28)$$

其中 $\delta(\tau_1 - \tau_2)$ 是 Dirac δ 函数，自变量不为零的时候等于零。更一般的随机数 ξ_t 的情况我们不再讨论。现在，我们来计算 $x(t)$ 的各阶矩。

$$\langle x(t) \rangle_\xi = \int_0^t d\tau \langle \xi_\tau \rangle_\xi = 0, \quad (11.29a)$$

$$\langle x(t_1) x(t_2) \rangle_\xi = \int_0^{t_1} d\tau_1 \int_0^{t_2} d\tau_2 \langle \xi_{\tau_1} \xi_{\tau_2} \rangle_\xi = g \min(t_1, t_2), \quad (11.29b)$$

更一般地

$$\langle x^{2n+1}(t) \rangle_\xi = 0, \quad (11.30a)$$

$$\langle x^{2n}(t) \rangle_\xi = \frac{(2n)!}{2^n n!} (gt)^n. \quad (11.30b)$$

这正好就是正态分布随机数的各阶矩，或者也可以通过先计算分布函数的特征函数然后做 Fourier 变换来得到分布函数，见习题 11.2。也就是说，

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi gt}} e^{\frac{x^2}{2gt}}. \quad (11.31)$$

有了这个 $\langle x^2(t) \rangle_\xi = gt$ 的理论结果之后，我们来回答公式 (11.25) 是否合理的问题。按照公式 (11.25) 我们可以从公式 (11.19) 写下来相应的纯随机游走的小球的可能的差分方程，

$$x(t) = x(t - \Delta t) + \xi_t \Delta t = \sum_{l=0}^{n-1} \xi_l \frac{t}{n}. \quad (11.32)$$

其中，我们取了 $\Delta t = \frac{t}{n}$ 和 $x(0) = 0$ 。按照中心极限定理，我们有

$$\langle x^2(t) \rangle = gn \left(\frac{t}{n} \right)^2 = g \frac{t^2}{n} = gt\Delta t. \quad (11.33)$$

这个结果和理论解 $\langle x^2(t) \rangle_\xi = gt$ 是矛盾的。一个解决方法是，我们把差分方程写作，

$$x(t) = x(t - \Delta t) + \xi_t \sqrt{\Delta t} = \sum_{l=0}^{n-1} \xi_l \sqrt{\frac{t}{n}}. \quad (11.34)$$

这启发我们，当把随机微分方程变成随机差分方程的时候，带有随机数的那一项一定要注意，公式 (11.25) 应该被写成，

$$v(t + \Delta t) = -\frac{\gamma}{m} v(t) \Delta t + \frac{1}{m} \xi_t \sqrt{\Delta t}. \quad (11.35)$$

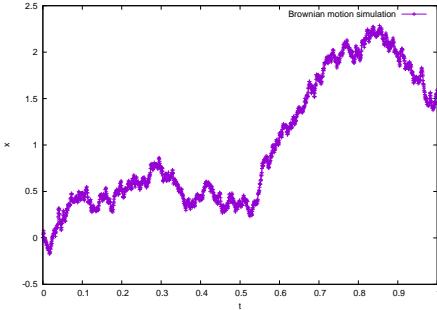


图 11.2: 这是 Brown 运动的一次模拟得到的轨迹。每一条轨道模拟 $n = 2000$ 步。这里末状态的时刻 $t = 1$ 。

或者形式上写作,

$$dv = -\frac{\gamma}{m}v(t)dt + \frac{1}{m}d\xi_t. \quad (11.36)$$

其中, 当写下来对应的差分方程的时候, 例如为了数值计算, 则

$$d\xi_t \sim \xi_t \sqrt{\Delta t}. \quad (11.37)$$

这里的开根号是非常重要的和通常微分方程不同的地方。

我们按照公式 (11.35) 的 $\sqrt{\Delta t}$ 和公式 (11.32) 的 Δt 分别作了 Brown 运动的模拟, 见图 11.2 和图 11.3。可以看到确实按照 $\sqrt{\Delta t}$ 做的模拟给出了理论相符的结果 $\langle x^2(t) \rangle_\xi \propto t$, 但是, 按照 Δt 做的模拟给出了和理论不相符的我们预期到的结果 $\langle x^2(t) \rangle_\xi \propto t^2$ 。

习题 11.2 (Wiener 过程的分布函数). 验算公式 (11.30) 中的各阶矩, 并且从这个各阶矩求出来这个分布函数的特征函数, 最后得到分布函数。

Brown 粒子的各阶矩

有了前面的微分方程、差分方程和纯随机游走的精确解, 我们来考察 Brown 运动粒子的精确解。公式 (11.24) 有形式解,

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} + \frac{1}{m} \int_0^t d\tau e^{-\frac{\gamma}{m}(t-\tau)} \xi_\tau, \quad (11.38)$$

其中 $v_0 = v(0)$ 。

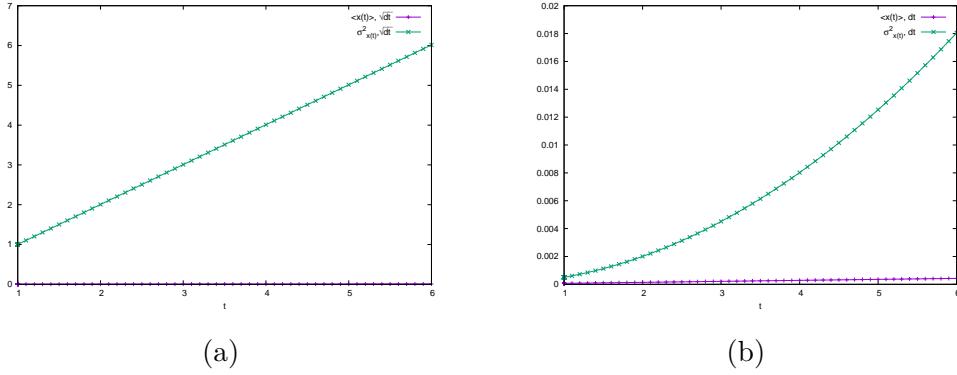


图 11.3: (a) 按照公式 (11.35) 也就是 $\sqrt{\Delta t}$ 做的模拟得到的结果, 可以看到 $\langle x^2(t) \rangle_\xi \propto t$ 。 (b) 按照公式 (11.32) 也就是 Δt 做的模拟得到的结果, 可以看到 $\langle x^2(t) \rangle_\xi \propto t^2$ 。这些统计量的计算我们做了 20000 条轨道的模拟。

我们从这两个方程都来求一下一阶矩 $\langle v(t) \rangle_\xi$ 和关联函数 $\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi$, 其中的求平均是在给定的时间长度内的随机变量的所有可能轨迹 $\xi_{t_0} \cdots \xi_t$ 做的。先从公式 (11.38) 开始, 得到一阶矩

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m} t}. \quad (11.39)$$

和关联函数

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi = v_0^2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} + \frac{1}{m^2} \iint_D d\tau_1 d\tau_2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1-\tau_1+t_2-\tau_2)} \langle \xi_{\tau_1} \xi_{\tau_2} \rangle_\xi \quad (11.40)$$

其中, 我们已经忽略了 $\langle v_0 e^{-\frac{\gamma}{m} t_1} \xi_{\tau_1} \rangle_\xi$ 这样的项: t_1 是一个确定数, v_0 是在零时刻确定的事情, ξ_{τ_1} 是在 $\tau_1 > 0$ 发生的随机数, 只要随机外力和系统的状态是独立的, 则整个 $\langle v_0 e^{-\frac{\gamma}{m} t_1} \xi_{\tau_1} \rangle_\xi$ 的平均就是相当于求随机力本身的平均,

有了这个假设, 我们计算上面的积分, 得到

$$\langle v(t_1) v(t_2) \rangle_\xi = \left(v_0^2 - \frac{g}{2m\gamma} \right) e^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)} + \frac{g}{2m\gamma} e^{-\frac{\gamma}{m}|t_2-t_1|} \quad (11.41)$$

其中, 我们假设了 $t_2 > t_1$, 从而积分的时候需要先做 $d\tau_2$ 的积分——对于任意一个 τ_1 总是能够找到 $\tau_2 = \tau_1$ 使得 Dirac δ 函数 $\delta(\tau_1 - \tau_2)$ 可以直接被积分掉。当 $t_1 > t_2$ 的时候类似, 所以, 得到 $|t_2 - t_1|$.

原则上，我们可以继续这个各阶矩的计算。一般的 t 的计算会稍微复杂一些，我们来看 $t \rightarrow \infty$ 的情形下， $v(t) = V$ 的分布函数。首先，按照公式 (11.39) 和公式 (11.41)，我们得到

$$\begin{aligned}\langle V \rangle_\xi &= 0, \\ \langle V^2 \rangle_\xi &= \frac{g}{2m\gamma}.\end{aligned}\quad (11.42)$$

然后，我们来计算高阶项

$$\begin{aligned}\langle V^{2n+1} \rangle_\xi &= 0, \\ \langle V^{2n} \rangle_\xi &= \frac{(2n)!}{2^n n!} \left(\frac{g}{2m\gamma} \right)^n.\end{aligned}\quad (11.43)$$

这正好就是正态分布函数的各阶矩，于是，

$$\rho(v, t \rightarrow \infty) = \rho(V) = \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{g}{m\gamma}}} e^{-\frac{v^2}{\frac{g}{m\gamma}}}. \quad (11.44)$$

这里的 $\langle V^2 \rangle$ 具有特殊的地位。联系到统计物理学的能均分定理，在温度为 T 的平衡态下，做一维运动的粒子的平均能量为，

$$\frac{1}{2} m \langle V^2 \rangle_\xi = \frac{1}{2} k_B T, \quad (11.45)$$

于是，我们得到，

$$g = 2\gamma k_B T. \quad (11.46)$$

左边是随机冲量的大小，右边是温度和流体的阻尼系数。后者对于给定的系统都是确定的。

有了这个 $v(t)$ 的精确解，按照 $x(t) = \int_0^t v(\tau) d\tau + x_0$ ，我们来计算 $\langle x(t) - x_0 \rangle$ 和 $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle$ 。为了计算后者简单，我们仅仅考虑长时情况 $\frac{\gamma t}{m} \gg 1$ ，并且设 $x_0 = 0$ 。这时候，很显然，前者为

$$\langle x(t) \rangle = \int_0^t d\tau \langle v(\tau) \rangle = \frac{m}{\gamma} v_0 \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m} t} \right). \quad (11.47)$$

也就是，根据 v_0 的大小，粒子会产生一个随着时间推移接近 $\frac{m}{\gamma}v_0$ 的位移。不过，如果我们的初始速度没有限制，是随机的，则还需要对 v_0 做一个平均，于是，整体来看 $\langle x(t) \rangle = 0$ 。对于后者，

$$\langle x^2(t) \rangle = \left\langle \int_0^t v(t_1) dt_1 \int_0^t v(t_2) dt_2 \right\rangle \quad (11.48)$$

我们需要计算公式 (11.41) 中的两项。第一项得到和 $\langle x(t) \rangle$ 的结果，也就是 $(v_0^2 - \frac{g}{2m\gamma}) \frac{m}{2\gamma} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t})$ 。将来我们会在搞清楚 g 的含义以后来证明这一项等于零。第二项为

$$\langle x^2(t) \rangle = 2 \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \frac{g}{2m\gamma} e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2-t_1)} = \frac{g}{\gamma^2} t - \frac{gm}{\gamma^3} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}) \quad (11.49)$$

当 $t \gg 1$ ($\gamma t \gg m$) 的时候，我们有

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{g}{\gamma^2} t = 2 \frac{k_B T}{\gamma} t. \quad (11.50)$$

这里的 $\langle x^2(t) \rangle$ 代表了粒子的扩散，于是，我们得到扩散系数，

$$D = \frac{k_B T}{\gamma}, \langle x^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (11.51)$$

也就是说，扩散系数由液体的温度和粘滞阻力的系数决定。这就是Einstein的著名的关于Brown 运动的工作 [169]。

这个从随机变量的动力学到分布函数的动力学以及稳定态的过程提示我们思考能不能把Langevin 方程公式 (11.24) 变成分布函数的方程，例如 $\rho(x, t), \rho(v, t)$ 或者 $\rho(x, v, t)$ 的演化方程。稍后我们就会来讨论这个问题，这样的方程称为Fokker-Planck 方程，或者更一般的Master 方程。

原则上，我们下一步就需要展示，对于包含随机力的力学变量的运动方程，如何写下来分布函数的演化方程，并且求解，就建立了描述无论是确定性的还是随机性的过程的一般的理论了。如果我们还能够在合适的条件下，通过这样的分布函数的方程把热力学平衡分布推导出来，那就连统计物理学的体系都完整地建立起来了。实际上，针对某些具体的例子，在合适的条件下，确实是可以建立一个分布函数的运动方程，并且把热平衡分布下面从这个方程中推导出来的 [143, 170, 171]。在这里，就某些例子，我们来展示这个从力学变量的运动方程到分布函数的演化方程的过程，更一般的情况留给专门的随机过程的课程来完成。

11.3 Master 方程与 Fokker-Planck 方程

如果一个系统包含了所有的世界，物理学家相信，这个系统必然是由 Hamiltonian 描述的，于是这个系统的演化动力学必然是仅仅取决于这个系统的当前的状态的。所有的相互作用不依赖于历史而仅仅依赖于当前的位置。这样的仅仅依赖系统当前状态，而不依赖这个系统的历史状态的过程就称为 Markov 过程。实际上，我们任何一个系统的选取都是在整个世界中选取了小小的一个部分，然后我们把这个小小的部分看成几乎孤立的，不太受外界影响的。如果，我们的系统真的满足这个要求，那么这个系统的动力学将是 Markov 的，而实际上这一点不一定满足。所以大量的随机过程，不是 Markov 的。另一方面，我们也已经提到实际上，任何一个有限长度记忆的过程，都可以看作记忆长度只有一步的 Markov 过程。因此，实际上，能够看做 Markov 过程的随机过程也不少。在这里，我们仅仅研究 Markov 的随机过程。前面我们已经讨论了离散状态和离散时间的 Markov 过程——其数学形式就是一个转移矩阵的多次相乘。现在，我们来看状态离散时间连续的 Markov 过程的数学形式。

11.3.1 连续时间 Markov 过程的 Master 方程

时间连续 Markov 过程的概率分布函数的演化方程的形式是，

$$\frac{d}{dt} P_i = \sum_j (W_j^i P_j - W_i^j P_i). \quad (11.52)$$

其中 W_j^i 被称为从状态 j 到状态 i 的转移速率。第一项代表从其他状态到达 i 状态的过程，第二项代表从 i 状态到其他状态的过程。我们也可以通过把离散时间的 Markov 过程的运动方程公式 (11.10) 看作一个 $\Delta t = 1$ 的差分方程，来猜测得到以上的微分方程。其中需要考虑到转移速率乘上 Δt 以后变成转移概率，还要考虑整体的归一化，也就是 $\sum_i P_i(t) = 1$ 在任何一个时刻都是对的，见习题 11.3。

习题 11.3 (离散和连续时间 Markov 过程的转换). 对比和联系连续时间和离散时间 Makrov 过程的演化方程，公式 (11.52) 和公式 (11.10)，尤其是思考为什么在公式 (11.52) 有负号，在公式 (11.10) 转移矩阵的所有元素都是非负的。

有了这个方程之后，我们只需要对于任意一个给定的转移速率矩阵 W ，都计算出来稳定态，也就是满足

$$\sum_j (W_j^i P_j - W_i^j P_i) = 0 \quad (11.53)$$

的状态 $P(\infty)$ 就得到了系统的稳定状态。

对于连续状态连续时间的Markov 过程，我们做一个简单的推广，而不去做严格的推导，可以得到，

$$\frac{d}{dt} P(x, t) = \int dx' [W(x' \rightarrow x) P(x', t) - W(x \rightarrow x') P(x, t)]. \quad (11.54)$$

关于Master 方程的应用，我们可以把在 9.4 节的Metropolis 方法看作是一个例子。另外，实际上，我们提到的PageRank 算法也是Master 方程的一个例子。

11.3.2 从 Master 方程到 Fokker-Planck 方程

当转移速率取以下的特殊形式的时候 [163, 164]，

$$W(x' \rightarrow x) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x) \right] \delta(x - x') \quad (11.55)$$

的时候，得到的方程被称为Fokker-Planck 方程，

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x) \right] P(x, t). \quad (11.56)$$

这个转移概率代表了一个点 x 周围的其他点 x' 的概率会通过 D^1 和 D^2 项来影响这个 x 点的概率：对空间的偏导数代表了空间不均匀性的作用。。当然，更一般地说，转移概率还可以受到更高阶的对空间的偏导数的影响。但是，Fokker-Planck 方程就是指在这个特例的形势下的分布函数的演化方程。

有了Master 方程和Fokker-Planck 方程就可以直接讨论相空间分布函数的演化方程了。注意这里的 x 是一般的状态变量，可以是仅仅指 x, v 或者 (x, v) 。

这里有一个小小的细节，从前面几个随机过程的Langevin 方程的讨论，我们注意到，其实，还有一个初始条件的问题。也就是说，实际上 $P(x, t)$ 是

依赖于初始条件的。例如，前面我们取过 $x(0) = 0$, $v(0)$ 不等于零但是看作任意一个大小，于是合起来还是有 $\langle v(0) \rangle = 0$, 不过可以有 $\langle v^2(0) \rangle \neq 0$ 。也就是说，很多时候，我们取了这样的初始条件

$$P(x, 0) = \delta(x - x_0), \quad (11.57)$$

甚至

$$P(x, 0) = \delta(x). \quad (11.58)$$

因此，实际上，这里的 $P(x, t)$ 是 $P(x, t|x_0, 0)$ 或者是 $P(x, t|0, 0)$ 。也就是说，我们真正计算的是Markov 过程的转移概率。在这个意义上，我们在下面的计算都采用初始条件公式 (11.58)。

习题 11.4 (从 Master 方程到 Fokker-Planck 方程). 用公式 (11.55) 和 δ 函数的性质，从 Master 方程公式 (11.54) 推导出来 Fokker-Planck 方程公式 (11.56)。

11.3.3 几个典型的随机过程的 Fokker-Planck 方程

再给出来状态变量的运动方程到分布函数的演化方程的关系之前，我们来看前面用到的一个随机过程的Fokker-Planck 方程。

首先我们来看最简单的Wiener 过程的Fokker-Planck 方程，

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (11.59)$$

也就是相当于 $D^{(1)} = 0, D^{(2)} = D$ 。由于 D 不依赖于 x ，我们可以用分离变量法或者Fourier 变换来求解。例如运用后者，

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk d\omega \tilde{P}(k, \omega) e^{ikx} e^{-i\omega t}, \quad (11.60)$$

$$\tilde{P}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dx dt P(x, t) e^{-ikx} e^{i\omega t}. \quad (11.61)$$

我们得到

$$-i\omega \tilde{P}(k, \omega) = -Dk^2 \tilde{P}(k, \omega) \rightarrow \omega = -iDk^2. \quad (11.62)$$

也就是

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk \tilde{P}(k) e^{ikx} e^{-Dk^2 t}, \quad (11.63)$$

其中函数 $\tilde{P}(k, \omega)$ 由于 k, ω 之间的函数关系，我们发现是一个单变量的函数，做了改写。结合初始条件，我们有

$$\delta(x) = P(x0) = \frac{1}{2\pi} \int dk \tilde{P}(k) e^{ikx} \rightarrow \tilde{P}(k) = 1. \quad (11.64)$$

最后，我们有

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} e^{-Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (11.65)$$

这就是一个均值为零，方差为 $2Dt$ 的正态分布函数。和我们之前从Langevin 方程得到的结果完全一致，并且 $D = \frac{g}{2}$ 。

Brown 运动对应的随机过程被称作Ornstein–Uhlenbeck 过程，其Fokker-Planck 方程为，

$$\frac{\partial}{\partial t} P(v, t) = \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} (v P(v, t)) + \frac{\gamma k_B T}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(v, t). \quad (11.66)$$

这个方程的求解有一定困难，就不展示了 [163, 164]，可以验证，以下表达式是这个方程的解，

$$P(v, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi \frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2\frac{\gamma}{m}t}\right)}} e^{\frac{-\left(v - v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right)^2}{2\frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2\frac{\gamma}{m}t}\right)}}. \quad (11.67)$$

这就是均值为 $v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t}$ ，方差为 $\frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2\frac{\gamma}{m}t}\right)$ 的正态分布，和我们之前通过Langevin 方程得到的稳定状态的结果公式 (11.44) 完全一致。

11.4 Langevin 方程与 Fokker-Planck 方程的关系

根据前面Wiener 过程和Brown 运动的Langevin 方程和Fokker-Planck 方程的例子，我们发现，对于如下形式的Langevin 方程，

$$dx = A(x) dt + B(x) d\xi_t \quad (11.68)$$

我们有相应的Fokker-Planck 方程公式 (11.56)，其中

$$D^{(1)} = A(x), D^{(2)} = \frac{1}{2} B(x) B^T(x). \quad (11.69)$$

其中，对于一维的情况， $B^T(x) = B(x)$ ，对于更高维的情况以及在复数域的情况将会更加复杂一些 [171]。对于更一般的情况，这个结果可以通过Itô随机积分从Fokker-Planck 方程中推导出来 [166, 167]。由于这个对应关系的重要性，我们把相应的Fokker-Planck 方程也单独再一次写下啦，

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x}A(x) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}B(x)B^T(x) \right]P(x,t). \quad (11.70)$$

11.5 平稳性

一般来说，拿到时间序列数据以后，我们是大概想知道这些数据的统计规律以及这些数据的生成机制。对于前者，我们有统计学。对于后者，我们要靠随机过程，以及对随机过程的统计学分析。可是这样做有一个条件，就是，规律或者生成机制本身是稳定的。也就是说，如果我们那当前时刻的一段时间内的数据来分析，得到的结果，和拿某一段时间之前的同样长短的一段记录来分析应该是一样的，也就是

$$(x_t, x_{t-1}, \dots, x_{t-\tau}) \sim (x_{t-t_0}, x_{t-1-t_0}, \dots, x_{t-\tau-t_0}), \quad (11.71)$$

或者更严格来说，联合分布函数是一样的，

$$P(x_t, x_{t-1}, \dots, x_{t-\tau}) = P(x_{t-t_0}, x_{t-1-t_0}, \dots, x_{t-\tau-t_0}). \quad (11.72)$$

在实际问题中，如果有趋势的话，这个假设是不成立的。可是如果没有这个性质，则分析出来的结果是不可靠的，依赖于所选取的数据的时间点。因此，检验给定数据的平稳性和想办法把不平稳的数据做平稳化是重要的。当然，一个平庸的平稳过程就是每一个样本点的产生都来自于独立的对某个给定的分布函数的抽样。一个平庸的不平稳的过程就是给这样的样本增加一个常数项的趋势， $x_t = \xi_t + t$ 。不过后者这样的趋势很容易去掉，例如做差分，则 $y_t = x_t - x_{t-1} = \xi_t - \xi_{t-1} + 1$ 。因此，一阶和高阶差分是平稳化经常用的办法。分析时间序列的关联函数也是一个发现趋势的好办法。去趋势（DFA, de-trended fluctuation analysis）算法也是对非平稳过程的分析常用的一种方法 [172]。更多的关于平稳性的检验和尝试把数据平稳化的方法可以参考时间序列分析或者计量经济学的书籍。

习题 11.5 (DFA 去趋势算法). 阅读 [172], 以及 Wikipedia 的“Detrended fluctuation analysis”词条⁵, 学会去趋势算法, 并用于一组时间序列的分析, 例如股票数据。

11.6 随机过程的模拟与计算

在忽略平稳性问题之后, 随机过程的模拟或者计算就成了对公式 (11.68) 和公式 (11.70) 所代表的两个方程的处理。其中, 公式 (11.68) 中的随机数 ξ 已经把强度系数连带单位一起放到了系数函数 $B(x)$ 中, 因此是一个纯随机数。这个随机数按照问题背景的不同可能有不同的均值和方差, 例如正态分布随机数。对这个方程的模拟通常被叫做分子动力学模拟。我们也在图 11.2 和图 11.3 中做了模拟计算。其中最重要的一条就是

$$d\xi_t \rightarrow \xi_t \sqrt{\Delta t}. \quad (11.73)$$

而不是

$$d\xi_t \rightarrow \xi_t \Delta t. \quad (11.74)$$

公式 (11.70) 有的时候可以求得解析解, 有的时候就不得不依赖偏微分方程的数值求解了——至少在公式 (11.70) 形式上已经没有了随机数, 可以完全按照一般的偏微分方程来求解了。更进一步的求解方法, 可以把这个分布函数的方程转变成随机变量的矩或者称为关联函数的方程, 例如 $\langle x(t) \rangle$, $\langle x(t_1) x(t_2) \rangle$, 等等等等。顺便, 注意这里的 x 是一个一般的变量, 有的时候 x 实际上是 (x, v) , 这个时候, 实际上, 关联函数意味着存在着 $\langle x(t_1) v(t_2) \rangle$ 这样的项。有的时候这样的不同量不同时间的关联函数能够发挥非同一般的作用 [173]。有了这些关联函数, 也就会出现关于这些关联函数的方程, 例如 $\frac{d}{dt} \langle x(t_1) v(t_2) \rangle = \dots$ 。很多时候, 这个方程的右边除了出现同阶矩会出现低阶和高阶矩, 例如 $\langle x(t_1) v(t_2) x(t_3) v(t_4) \rangle$, 于是, 我们从封闭的分布函数的方程得到了一系列的相互耦合的各阶矩的方程。这个耦合方程有一个自己的专门的名字称为 BBGKY 方程 (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–

⁵https://en.wikipedia.org/wiki/Detrended_fluctuation_analysis, 2019 年 10 月 14 日访问。

Yvon hierarchy) [156, 171, 174]。除了解析解、数值解、关联函数方法，还可以考虑相性算符的本征函数展开方法：Fokker-Planck 方程公式 (11.70) 甚至更一般的 Master 方程公式 (11.54) 都是线性方程，都可以看作是方程，

$$\frac{d}{dt}\rho = iL\rho. \quad (11.75)$$

于是，我们只需要知道算符 L 的本征向量和本征值，就能够得到演化算符

$$e^{iLt} = \sum_j e^{iL_j t} |L_j\rangle\langle L_j|. \quad (11.76)$$

并且

$$\rho(t) = e^{iLt}\rho(0). \quad (11.77)$$

在这里我们再一次看到无论是经典力学、统计力学、量子力学还是随机过程，都可以写成统一的线性方程。这也再一次体现了我们强调过的线性和非线性的关系，非线性指的是状态变量的运动方程层面有高阶项，或者说 L 中含有高于二阶的代表相互作用的项，而不是分布函数的演化方程具有非线性。

11.7 作业

习题 11.6 (Brown 运动的模拟). 模拟 Brown 运动，并和 Einstein 关于平均移动距离 $\langle x_t^2 \rangle$ 的理论结果比较。

习题 11.7 (Ornstein–Uhlenbeck 过程的模拟). 模拟 Ornstein–Uhlenbeck 过程，并和精确解的分布函数和统计量相比较。

习题 11.8 (与振动墙壁相连的小球的模拟). 假设墙壁的振动完全就是前面提到的白噪声 ξ_t ，模拟与振动墙壁相连的小球，注意处理好弹力和随机力。

11.8 本章小结

在 7.7 节中我们学习了离散时间随机过程的处理方法，包含概率分布“矢量”以及相应的概率转移矩阵，密度矩阵、随机变量算符等。这一章，我

们继续深化了一下对离散时间离散状态的Markov 过程的理解。通过本章的学习，我们还学会了用连续时间的随机过程的数学方程来描述物理现象。这样的数学方程包含Langevin 方程、Fokker-Planck 方程和Master 方程，这样的典型物理现象包含Brown 运动，Ornstein-Uhlenbeck 过程。我们还了解了Langevin 方程、Fokker-Planck 方程和Master 方程之间的关系，还有这些过程的模拟计算，还了解了状态变量的方程的模拟求解和分布函数的演化方程的精确求解。

对于更加复杂的随机过程，分布函数的演化方程很那精确求解。这个时候，我们就必须用其他的方法来分析和求解这个方程。例如，直接数值求解分布函数的演化方程。或者，研究随机过程还有一个重要方法：生成函数方法或者叫做母函数方法。在我们目前的逻辑框架之内，我没有找到合适的位置。如果以后想好了，会把它加进去。在此之前，请阅读其它随机过程的教材来学习生成函数方法 [166, 167]。随机过程的研究还可以通过把随机方程转化为各阶矩的演化方程来讨论。这个转化为各阶距的方法在物理学里面叫做 BBGKY (Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon hierarchy) 方法 [156, 171, 174]，或者称为Green 函数方法，关联函数方法。这个部分，如果以后有可能会在更加专门的部分，例如高等统计物理学的教材中介绍。在这之前，也只有请读者从专门的物理学教材和研究论文 [156, 171, 174] 中去学习这个方法了。

再一次回到随机过程的一般意义：在随机过程的层面，确定性过程、随机过程、有外界的系统的演化、孤立系统的演化，甚至量子系统的演化 [171, 175]，都得到了统一。这是一个看问题的了不起的角度。

再一次回答学习方法 [23]：用好具体研究的例子来看到各个学科自己的大图景——典型对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法、和其他学科还有世界的关系，同时看到学科之间的联系，并且极可能构建一个相容的比较一致的整体学科体系，从而用来理解世界和解决实际问题，这就是真正的学习。这也是本书写作过程中始终尽力去体现的，尽管不一定就做到了。希望本书的读者不仅学到了一些知识——这个最不重要，还学到了每个学科的大图景——这个比较重要，还建立起来了一个具有成长性的比较一致的学科的体系，并且能够用这个体系去观察世界——这个非常重要，更进一步学会了运用关系来学习和理解，而且是以理解一个学科的大

图景为目标的这样一个学习方法——这个最重要。

用这一章来结束本书的第二部分，正合适。敬请期待本书的第三部分——系统科学的基本理论，也是本书乃至本学科最重要但是却最不完善的部分。在那里，我们会介绍，

1. 非线性动力学：动力学系统的典型行为、线性稳定性分析；
2. 相变和临界现象：这次将比较深入地讨论分析方法，而不仅仅是介绍现象，例如重整化群分析方法、有限大小标度、确定相变点的方法、Green 函数；
3. 网络科学：再一次讨论网络科学的主要思想——联系和网络效应，以及基本概念——静态几何量、类和聚类、多层网络，以及更多的研究实例；
4. 广义投入产出分析：个体之间具有投入产出关系的一个系统，如何来分析个体或者集团的重要性、影响整体效率的关键因素等问题，以及在经济学、科学学、环境科学等多个方面的应用；
5. 博弈：博弈理论的中心问题和研究现状，以及一些典型分析方法，例如 Nash 均衡、演化稳定均衡、实验经济学。

期待将来这一部分会更加完善，更加具有系统科学独一无二的特点和地位。

第三部分

系统科学的基本理论

这一部分的内容是系统科学的核心，也是系统科学最不成熟的部分。甚至，原则上，只要这部分里面的某一个方法足够成熟，足够多地应用于某个具体的学科领域，那么，这个方法就可以算作那个相应的具体学科的内容。不过，无论如何，跨越具体学科的，同时又是深入具体学科的，具有系统特点的（考虑元素之间的相互作用的、还原拆分研究和综合整体分析相结合的）分析方法和思维方式，都是系统科学真正需要发展的。因此，这部分是不可或缺的，尽管最不完善。

目前，按照个人研究经验以及我所熟悉的一些系统科学的研究案例，我总结了以下几个部分：非线性动力学、相变和临界现象、网络科学、广义投入产出分析、博弈。选择这些内容，除了可以看作是系统科学的基本理论之外，还希望体现

1. 物理学关于具体系统的知识应用于系统科学：例如，统计物理学的 Boltzmann 分布可以用于博弈论，量子力学的知识可以应用于博弈论。
2. 物理学的数学形式应用于系统科学：量子力学的数学形式可以用于复杂网络分析和博弈论；
3. 物理学的思维方式和分析方法应用于系统科学：例如，存在相互作用的多体系统——社会经济系统，例如经济物理学和社会物理学——需要考虑采用统计物理学来分析。例如，物理学的普适性的思想——跨越多个时间、空间、领域的系统的普适统计规律往往意味着深层的机制上的相似性——用于研究社会经济现象。例如，数学和物理学问题中发展出来的数值计算和数值模拟方法——动力学以及稳定性分析，Monte Carlo 方法，Metropolis 方法、Green 函数等——应用于系统科学。

随着学科的发展，期待将来能够做更好的关于系统科学的基本理论的总结。

顺便，第一部分的系统图示法和概念地图，也应该计入系统科学的基本分析方法。第二部分的一般的数学物理分析方法和思维方式，当在需要的时候用于数学物理之外的对象的时候，也可以看做是系统科学的分析方法，不过不是系统科学特有的分析方法。

再一次强调，系统科学是方法性学科，不限定在任何具体的研究对象上，但是任何分析方法一定要关注具体研究对象，从具体中来，形成一般方法，再到具体中去。这也同时使得系统科学的发展更加的具有挑战性。

不过，有挑战的生活才有意思，不是吗？

第十二章 线性与非线性动力学简论

我们先来粗糙地讨论一下系统科学和非线性动力学的关系。

我们看到在系统科学的研究中，我们要关系这个系统内元素之间的联系，而关心这个联系很多时候是为了了解这个系统将来会演化到什么样的状态，是否会演化到某个稳定状态这些动力学问题，也可能是为了回答如果系统内部产生了一个扰动或者外界对系统有了一个扰动之后，系统会处于什么状态或者会发生什么响应的问题。这些问题，从根本上说，都是系统的动力学的问题。所谓动力学就是在系统的当前状态和将来的状态之间建立了一种映射，而这个映射本身可能包含系统内部元素之间的以及系统外部的因素和系统内部元素之间的联系。一个典型的例子就是引力作用下的Newton 方程，例如自由落体方程，或者单摆的方程。

对于自由落体来说，系统内部的原子之间的相互作用可以忽略（因为我们关心的是它们的整体位置和速度，假设落体不产生形变。如果形变，则还需要考虑内部相互作用），外部——也就是地球对落体有一个重力的相互作用，而且假设重力的作用形式已知（方向竖直向下，大小是 mg ）。我们也可以把地球和落体合起来做一个系统，这个时候，系统内部的元素包含落体和地球，它们之间有引力相互作用，可以写下来这个时候的系统的Hamiltonian，接着用Hamiltonian 方程就解决问题了。对于单摆，系统内部包含绳子、天花板、小球这几个元素，它们之间的相互作用需要通过受力分析来完成，然后，运用Newton 方程就能够得到系统将来的状态如何依赖于系统目前的状态。当然，我们也可以把地球包含进来，写下来系统的Hamiltonian，然后用Hamiltonian 方程来解决问题。本质上，这里的

考虑问题的思路就是力学的世界观的运用：系统是什么包含哪些元素如何描述其状态，状态是否发生变化，变化的原因是什么。当然，对于更加复杂的系统，甚至非物理系统，我们的方程就不再是Newton 方程或者等价的Hamiltonian 方程了。但是，只要还是这样一个力学的图景，那么，我们就需要考虑从初始状态到想知道的状态之间的映射的问题，也就是动力学的问题。为了解决这样的动力学问题，我们就需要求解各种各样的这些方程。某些方程可能很难求得解析解。那么，我们可以讨论这样的方程的数值解。这样的具体问题具体分析的做法，原则上，就够用了。最多把方程分一下类，给每一类找出来解析和数值解法。这样就行了吗？我们能够在解析解求不出来，数值解由于初始条件和参数空间太大不具有一般性的时候，得到一些关于这个方程以及这个方程的某些状态——例如长时解——的一些认识吗？如果可以，这样的分析方法有没有一定的一般性呢？对于这两个问题的回答就导致了微分方程定性理论或者说非线性动力学这个学科的发展。

这两个名称经常一起用，但是略有差别。动力学系统经常表现为微分方程，但是有的时候也表现为差分方程或者称为映射。动力学理论除了关注微分方程，还研究后面这些更一般的动力学系统。那为什么要加一个“非线性”限定语呢？因为，就像我们将会看到的那样，线性系统非常简单，因此也就不用专门发展理论来研究了，值得研究的问题都是包含非线性的。因此，这两个名词原则上谁也不包含谁，尽管后者可以看做更一般一点。

现在，你看到了，为什么系统科学需要非线性动力学了：系统科学所处理的系统很多时候表现为一个非线性的动力学系统，为了了解这样的系统的演化状态，我们需要能够求得这样的系统的演化的技术。因此，原则上说，非线性动力学不是系统科学本身的一部分，而更像是数学，尤其是应用数学的一部分。但是，如果一门技术经常和这个问题联系在一起，实在太经常了，那就说这个技术就是这个问题所在的学科的一部分，也可以接受。

从非线性动力学这个学科内部的角度来说，这个学科得到发展是因为解析解求不出来，数值解经常出问题，而且不是因为参数空间太大初始条件集合太大等等这样的纯粹算不过来的原因，还因为“混沌理论”的发现和发展。

动力学系统的基本问题是从一个给定的动力学方程开始，这个方程可能是某个物理过程的数学描述，给定的初始状态，我们如何了解将来（或者

过去)任意时刻的状态。这个问题,看起来是一个平庸的技术问题,如果方程能够被精确求解,那我们就用精确解好了。如果不能精确求解,我们就用数值解。微分方程的典型结构如下:

$$\frac{d}{dt}x = f(x, t), \quad (12.1)$$

$f(x, t)$ 可能包含空间导数算符或者其它更复杂的形式,例如空间积分算符。我们原则上只需要把初始条件代 $x(t_0) = x_0$ 进去,用足够小的 Δt ,就可以得到

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + f(x_0, t_0) \Delta t. \quad (12.2)$$

然后,一直继续迭代下去。或者写成离散时间迭代映射的形式,

$$x_{n+1} = g(x_n). \quad (12.3)$$

注意,除了极少数能够得到精确解的方程,其他方程都需要通过合适的数值方法来求解。并且,上面提到的 Euler 方程,也就是基于 $\frac{dx}{dt}$ 的定义的方法之外,还有其它更复杂误差更小收敛更快的迭代方法,例如 Runge-Kutta 方法。在学习下面的内容之前,我们假设,读者已经自行学会这样数值求解方法。

如果这个思路能够解决问题,那么我们关于动力学系统的进一步研究就完全没有必要了,实在不行我们就扫描整个参数空间和所有的初始条件。但是,动力学系统的一般理论,或者说微分方程定性理论,告诉我们说,真实微分方程的行为,跟这个简单的思路相差很远。其中,非常重要的一条就是:某些系统从非常相近的初始条件出发,可以得到相差非常大的轨道。失之毫厘,谬以千里。对于这样的系统,上面提到的计算思路本质上是不能使用的:每一小步的计算都有一些小小的误差,这些误差会带来轨道很大的不同。那么,这个时候,我们怎么办呢?我们也许掌握不了每一个时刻的状态,也许就不用掌握每一个时刻的状态,那么我们有没有办法对这样的系统取得一些有意义的认识呢?动力学系统的一般理论告诉我们说,这个时候,我们看看动力学方程的定性行为。所谓定性行为往往是长时状态:是否很长时间以后系统的状态就是确定的点了,还是说统计意义上就是确定的分布函数了,还是说就是确定的轨道了。有的时候,定性行为还关心参数值和初始条件如何影响这些长时状态。这个时候没准我们还能观察到“相

变”：参数值或者初始条件取某些值的时候系统的长时状态是一类，其他时候是另一类。这个时候系统的长时状态随着参数和初始条件的变化而变化的转变点就会特别重要。

整个非线性动力学学科就是为了帮助我们解决这个动力系统的定性行为的分析方法的问题。在这部分，我们就来介绍一下，有哪些定性行为，如何做这样的定性分析。首先，我们从最简单的线性系统开始，然后进入到非线性动力学系统。通过这个部分的学习，我们要学会使用线性稳定性分析的技术来对动力系统的定性行为做初步的分析，然后需要对典型动力系统的行为，包含不动点、周期轨道、混沌现象、分支行为，有一个了解。其他的更加专门的技术应该在专门的“非线性动力学”的书籍中去学习。我们这一章的目的就是领读者进门，然后铺垫一定的基础，这样读者可以自行进一步学习。

这个部分推荐的阅读材料是Scheinerman的《Invitation to Dynamical Systems》[176]（简称 IDS）。IDS 这本书的写作风格是带领读者一起思考，然后主要通过例子来学习最基本和最核心的内容。完全满足我们推荐的可以采用概念地图学方法习 [23] 的教材的要求。其实，你仔细看的话，你应该会发现，本书的写作风格，正是受了 IDS 的深刻的影响。Strogatz 的《Nonlinear Dynamics and Chaos》[177] 和Wiggins的《Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos》[178] 是两本更加专门的教材。尤其后者，主要是给偏数学的学生用的。这两本书都非常值得当做这部分内容的参考书。另外，推荐科普书是Gleick的《Chaos: Making a New Science》[89]（中文译名《混沌开创新科学》）。

12.1 线性系统的演化

一个一般自治的线性系统定义如下，

$$\frac{d}{dt}x = Ax. \quad (12.4)$$

如果 A 含有 t ，也就是非自治的系统，那么我们可以把 A 本身的动力学也包含进来，例如引入变量 y ，使得新的 $\hat{x} = (x, y)^T$ 的方程满足上面的定义。当然，如果 A 本身的动力学（也就是有关 y 的方程）是非线性的，那么我

们最后的方程也就成了非线性的，成了我们下一节讨论的对象。这里我们只讨论能够表达成自治方程的线性系统。

这个方程的解非常简单：

$$x(t) = e^{A(t-t_0)} x_0 = \sum_m e^{\alpha_m(t-t_0)} |m\rangle \langle m| x_0. \quad (12.5)$$

其中，我们用到了 A 的本征值 α_m 和本征向量 $|m\rangle$ 。我们看到，如果 x_0 有其中一个 $|m\rangle$ 的分量，而且这个分量对应的本征值 $\alpha_m > 0$ ，那么 $x(t)$ 趋向无穷大。如果所有的 $\alpha_m < 0$ ，则系统收敛到 $x(t) = 0$ 。对于某一个 $\alpha_m = 0$ ，其它小于零的情况，系统收敛到对应的状态 $|m\rangle$ 上。

对于差分方程的情况，我们类似得到，

$$x_{n+1} = Ax_n, \quad (12.6)$$

则

$$x_n = A^n x_0 = \sum_m \alpha_m^n |m\rangle \langle m| x_0. \quad (12.7)$$

于是，如果 x_0 有其中一个 $|m\rangle$ 的分量，而且这个分量对应的本征值 $\alpha_m > 1$ ，那么 x_n 趋向无穷大。如果所有的 $\alpha_m < 1$ ，则系统收敛到 $x_n = 0$ 。对于某一个 $\alpha_m = 1$ ，其它小于 1 的情况，系统收敛到对应的状态 $|m\rangle$ 上。

总结一下，对于线性方程，我们只需要知道 A 的本征值和本征向量就够了。而且，对于一般的 x_0 ，我们假设其在各个本征向量上都有分量，于是 A 的本征向量也就不需要真的算出来了，也就是不用去计算 $\langle m| x_0 \rangle$ 了。这样，我们只需要 A 的本征值。有了这个线性系统的认识之后，我们来看一下非线性系统。

12.2 非线性系统定态的线性稳定性

对于非线性自治系统（同样，如果非自治，原则上可以通过引入更多的动力学变量使得系统自治）， $f(x)$ 必须是 x 的高于一阶的多项式。对于这个系统，第一个我们可以把握的特征是定态，也就是满足

$$f(x^*) = 0 \quad (12.8)$$

的状态，或者对于差分方程 $x_{n+1} = g(x_n)$ 满足 $g(x^*) = x^*$ 的状态 x^* 。在这个状态下，

$$x(t) = x^*, \quad (12.9)$$

系统的状态不再发生变化。也就是说在一个系统的所有的变量构成的相空间中（这里相的意思是状态），存在一些特殊的点，系统只要处于这些点上就不再动了。那么自然的一个问题是，如果系统在这些点的附近呢？假设系统在这些点附近就会跑到这些点上去，那么，如果我们把所有的这样的定态点（也称为不动点）的影响力区域画出来，我们就基本上知道了这个系统的行为：在各自的影响力区域之内，系统被吸引到不动点上去。所以，不动点是否是吸引性的，各自的影响力多大，这样的问题就非常重了，甚至超过具体的每一条轨道的重要程度。于是，非线性动力学的研究就关注不动点以及不动点的稳定性。所谓不动点稳定性，就是如果系统的状态在这个不动点附近，系统将来的状态是不是会收敛到这个不动点上去。更一般地，我们可以讨论不变轨道的稳定性。例如，某一条轨道很特殊，只要系统跑到这条轨道的任何点上，系统就会沿着这条轨道一直运动下去。那么，我们就问如果系统处在这个轨道的附近，是不是系统将来的运动就会在这条轨道上运动呢？当然，在我们下面的例子当中，为了计算简单，我们只局限在讨论不动点以及不动点的稳定性上，轨道的稳定性不做讨论。

不动点的稳定性的一种讨论方法是线性稳定性分析。其基本思想是如果系统离不动点足够近， $x_0 = x^* + \delta x$ ，那么，系统的演化方程就可以做线性近似：方程的两端只保留 δx 的一次项，也就是

$$\frac{d}{dt}\delta x = f(x^* + \delta x) = f'(x^*)\delta x. \quad (12.10)$$

而这个是线性方程。其行为前面我们已经了解，非常简单，完全取决于 $f'(x^*)$ 的本征值。注意，有可能 $f'(x^*)$ 的左导数和右导数是不一样的。对于一维的情形，我们只存在三种稳定性的情况，如图 12.1：完全稳定，完全不稳定，临界点（鞍点，一侧稳定另一侧不稳定）。我们还可以把这样的情况结合起来，讨论如果有两个相邻的不动点会怎样。例如，我们组合成图 12.1 中的从 O 到 P ，从 O 到 R ，从 O 到 Q 的流动的情形。很多时候，这个确实被称为相空间的流图，或者矢量场图。对于一维情况（你可以把图 12.1 中的 x 轴或者 y 轴的情形当作一维来看），总共我们也仅有这些基本的结果以

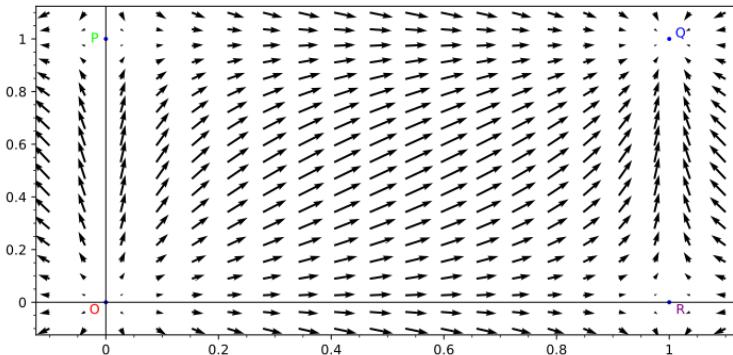


图 12.1: 在图中显示的区域有四个不动点 O, P, Q, R 。其中, O 是不稳定不动点, Q 是稳定不动点, P, R 是临界点 (鞍点, 一侧稳定一侧不稳定)。如果我们仅仅看 x 轴或者 y 轴, 我们还可以看到从 O 到 P 或者从 O 到 R 的流。其实, 我们还可以看到从 O 到 Q 的流。本章中未标明出处的图都是由作者用 SageMath 或者 gnuplot 软件制作。

及它们的组合: 要么跑到无穷大, 要么收敛到某个点上, 要么从某个点离开跑到无穷大或者收敛到其他的点上。

如图 12.1, 在二维平面上, 我们看到了稳定的不动点、不稳定的不动点、单侧稳定的不动点。那么, 更高维的系统有哪一些比较典型的定性行为呢? 其实, 还可以有转着圈趋向不动点的情况, 或者转着圈远离不动点的情况, 甚至还会有不同稳定性的周期解。通过下面的一个例子, 我们从关注不动点转向关注周期轨道。

注意, 如果是高维系统, 则我们的 $f'(x^*)$ 需要拓展成一个矩阵 $\frac{\partial}{\partial x_i} f^i(x^*)$ 。其中 $f^i(x) = \frac{d}{dt} x^i$ 是变量 x^i 的速度项。然后, 方程就成了线性系统, 就可以通过线性系统的分析, 也就是求矩阵本征值的方式, 来讨论系统的稳定性了。

例 12.1 (Logistic 映射). Logistic 映射, 差分形式,

$$x_{n+1} = \gamma x_n (1 - x_n). \quad (12.11)$$

也可以表达成微分方程的形式,

$$\dot{x} = \gamma x \left(1 - \frac{1}{K} x\right). \quad (12.12)$$

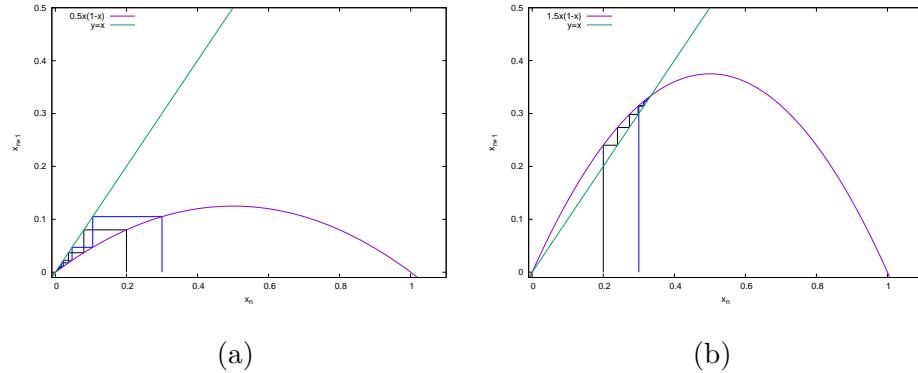


图 12.2: (a) 当 $\gamma = 0.5$ 的时候的迭代过程, 系统收敛到不动点 $x_1^* = 0$ 。 (b) 当 $\gamma = 1.5$ 的时候的迭代过程, 系统收敛到不动点 $x_2^* = \frac{\gamma-1}{\gamma}$ 。

这个方程描述了存在种内竞争时候种群大小的变化。例如连续方程的第一项表示出生的新人口数量和现有的人口成正比, 可是这个比例系数 (出生率) 依赖于人口总量: 当人口总量远远小于 K 的时候, 出生率高; 当人口总量接近 K 的时候, 出生率小; 超过 K 的时候, 出生率为负值。让我们来分析这个动力学过程的定性行为。以差分形式为例。

我们先来看一下这个迭代过程, 见图 12.2。下面的图在 Wikipedia 的 Logistic map 词条¹的网页上有动态版本, 推荐去看看。我们发现对于参数 γ 和初始条件 x_0 的某些取值 ($\gamma = 0.5, x_0 = 0.2$), 迭代过程收敛到不动点 $x_1^* = 0$, 另一些取值 (例如 $\gamma = 1.5, x_0 = 0.2$) 的时候, 迭代过程收敛到不动点 $x_2^* = \frac{\gamma-1}{\gamma}$ 。

有了这个直观的观察, 我们再来计算不动点, 我们得到 $x_1^* = 0$ 以及 $x_2^* = \frac{r-1}{r}$, 计算得到 $g'(x^*) = \gamma - 2\gamma x^*$ 。于是 $g'(x_1^*) = \gamma$, $g'(x_2^*) = 2 - \gamma$ 。于是我们发现, 当 $0 < \gamma < 1$ (出生率, 总是假设大于零, 小于零是平庸的) 的时候, x_1^* 是稳定的, 于是种群消失。这个时候的另一个解 $x_2^* < 0$ 在种群问题中没意义不考虑。当 $1 < \gamma < 2$ 的时候, x_2^* 是稳定的, 于是种群维持一个非零的水平。当 γ 继续增大, 这个不动点也就不稳定了。也就是说, 系统大小非零, 也不是常数。

对于这样的不动点失去了不稳性的动力学系统, 有没有更多的信息能够获取呢? 有, 针对具体的参数和初始条件来完整地求解方程, 或者讨论轨

¹2019 年 10 月 14 日访问。

道的稳定性。但是，我们说了前者在这里不讨论，下面仅仅举例来讨论后者。

12.3 轨道的线性稳定性分析

先接着来讨论上面的 Logistic 映射周期轨道的稳定性。

例 12.2 (Logistic 映射周期轨道的稳定性). 我们来用一个取巧的办法：我们考虑方程 $x_{n+1} = g(y_n)$, $y_n = g(x_{n-1})$, 或者说等价地我们讨论 $x_{n+1} = g(g(x_n))$ 的不动点及其稳定性。这样做的目的，其实是考察原来的动力学系统的周期为二的轨道的稳定性。迭代两次的方程的不动点是原始方程的周期为二的轨道。为了获得一个更直观的感觉，在这个计算之后，我们通过做图来分析原始的方程，见图 12.3(a)。从那里，我们看见了周期二轨道的出现。计算 $g(g(x))$ 的不动点，我们得到四个不动点 ($g(g(x))$ 是四阶方程)。其中的两个不动点就是 $g(x)$ 的不动点（它们在 $\gamma > 3$ 的时候不稳定），多出来的两个不动点是我们关心的对象。再计算 $g(g(x))$ 的导数，讨论其在两个新的不动点的值，我们就可以知道这个周期二的轨道的稳定性。

类似的，我们可以讨论周期三的轨道的稳定性，周期四的轨道的稳定性（见图 12.3(b)），等等。我们得到了下面的分支图图 12.3(c)：某些参数值（横轴）的时候，系统只有一个稳定不动点，有的时候有两个，四个等等，图中显示了稳定不动点的值（纵轴）。有几个稳定的不动点，在相应横轴参数的位置就有几个纵轴的值，于是就得到了我们看见的比较复杂的分支曲线。有一个问题，我们并没有说明，实际上在图中的某些区域，系统有比倍周期分叉更复杂的行为，例如周期三的行为和我们在下一节讨论的混沌行为。这里我们再给出来一个周期三的迭代过程的例子。在图 12.4 中我们展示了参数 $\gamma = 3.7$ 的时候的迭代过程。

对于某些轨道，如果我们能够做一个变量替换，给每一条轨道一个唯一的代表变量，那么，有可能这个轨道稳定性的问题就可以转化成不动点稳定性的问题。这个时候我们就可以通过讨论这个变量的不动点的稳定性来讨论轨道的稳定性了。看下面的平方反比立场中的运动粒子的例子。

例 12.3 (平方反比立场中的粒子). 平方反比立场中的粒子：一个带电粒子 q ，受到位于中心的电荷 Q 的作用， $\vec{F} = \frac{kQq}{r^2}$ 。问带电粒子 q 的典型运动轨

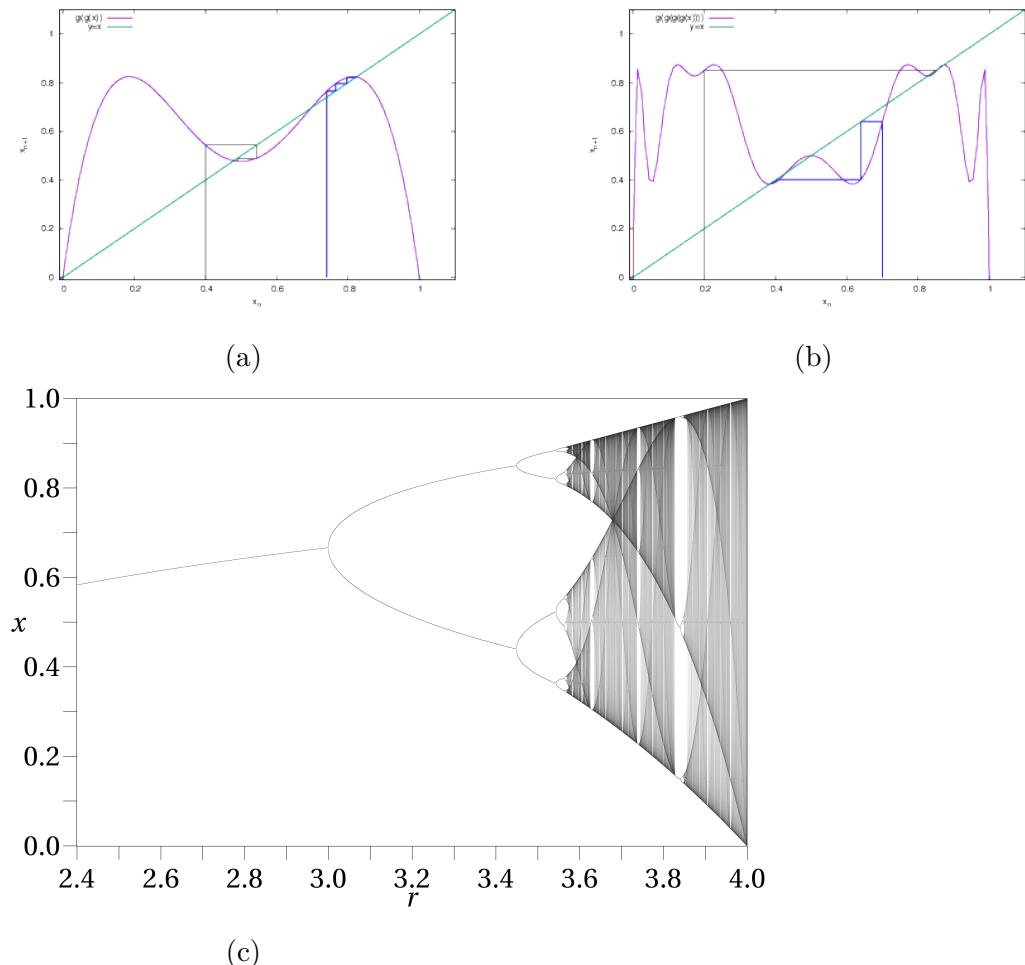


图 12.3: (a) 嵌套两次的 Logistic 映射的迭代过程（取 $\gamma = 3.3$ 当例子），系统收敛到一个新的不动点。这个不动点相当于原始的不嵌套的 Logistic 映射的周期二的行为。(b) 嵌套四次的 Logistic 映射的迭代过程（取 $\gamma = 3.5$ 当例子），系统收敛到一个新的不动点。这个不动点相当于原始的不嵌套的 Logistic 映射的周期四的行为。(c) 不断地重复这个嵌套计算可以找出来任意周期的不动点。这张分支图来自于 Wikipedia 的 Logistic map 词条，由 Jordan Pierce 制作上传。

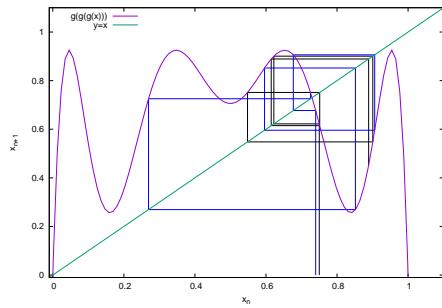


图 12.4: 嵌套三次的 Logistic 映射的迭代过程。取 $\gamma = 3.7$ 当例子。

道是什么，分析其稳定性。

根据Newton 方程，采用极坐标 (r, θ) ，我们有运动方程，

$$\ddot{r} - r\dot{\theta}^2 = \frac{kQq}{r^2}, \quad (12.13)$$

$$r\ddot{\theta} + 2r\dot{\theta}\dot{r} = 0. \quad (12.14)$$

定义新的变量 $(r, v = \dot{r}, \theta, \omega = \dot{\theta})$ 转化成一阶方程，

$$\dot{r} = v, \quad (12.15)$$

$$\dot{v} = r\omega^2 + \frac{kQq}{r^2}, \quad (12.16)$$

$$\dot{\theta} = \omega, \quad (12.17)$$

$$\dot{\omega} = -\frac{2v\omega}{r}. \quad (12.18)$$

当然， $(r_*, 0, \theta_*, 0)$ 是这个方程的不动点，不过是平庸的不动点——就呆着什么也不做。我们跳过这个不动点的稳定性分析。来看看另一组不太平庸的不动点。注意到方程的右边实际上不包含 θ ，于是，我们可以把 $\dot{\theta}$ 那一项先去掉，也就是

$$\dot{r} = v, \quad (12.19)$$

$$\dot{v} = r\omega^2 + \frac{kQq}{r^2}, \quad (12.20)$$

$$\dot{\omega} = -\frac{2v\omega}{r}. \quad (12.21)$$

这个时候，不动点是 $(r_*, 0, \sqrt{-\frac{kQq}{r_*^3}})$ 。这个不动点是一个圆轨道，半径不变，角速度不变，也就是角均匀地变化。这个时候，我们就可以通过讨论这个

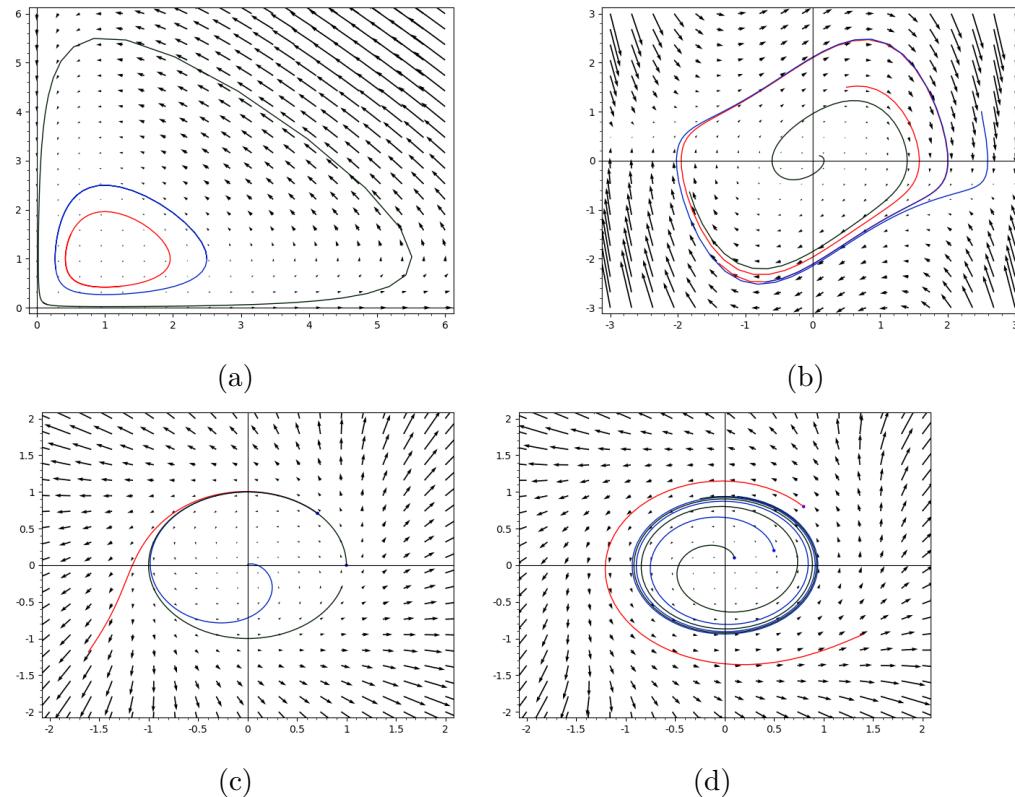


图 12.5: (a) 来自于 Lotka-Volterra 模型 (公式 (12.22)) 的周期行为。 (b) 来自于 Van der Pol 振子 (公式 (12.23)) 的稳定极限环。 (c) 来自于公式 (12.24) 所描述的系统的半 (单侧) 稳定极限环。 (d) 来自公式 (12.25) 所描述的系统的不稳定极限环。

不动点的稳定性来讨论实际上这个圆轨道的稳定性。至于具体的计算我们就不再展开了。留做作业。如果你不在极坐标下讨论这个轨道及其稳定性，那这个问题就会非常复杂。现在，它就成了一个不动点的稳定性问题。

这样的周期轨道，在系统的状态变量是二维以上的连续变量的时候，就成为极限环。以二维系统为例，我们来看极限环的几种情况。

图 12.5 的每一张子图都有一个周期轨道。第一种情形下，所有的轨道都是一条条的周期轨道。第二种情形下，周期轨道之内和之外的轨道都趋向这个周期轨道。因此，这个情形下的周期轨道是稳定的。第三种情形下，周期轨道之内轨道趋向这个周期轨道，周期轨道之外轨道远离这个周期轨

道。因此，这个情形下的周期轨道是半稳定的，仅仅一侧稳定。第三种情形下，周期轨道之内和之外轨道远离这个周期轨道。因此，这个情形下的周期轨道是不稳定的。

图 12.5 那样的，在状态空间的任何一个地方都有一个矢量小箭头。这些小箭头合起来就称为状态空间上的矢量场。由于这些矢量对应着状态变量的对时间的一阶导数，因此也被称为速度矢量场。从图 12.5 我们也可以看出来，轨道就是这些矢量场的积分。因此，绘制常微分方程的矢量场图也是重要的定性行为分析方法。

习题 12.1 (在二维平面上的速度场矢量图和极限环). 考虑以下动力学系统，在二维平面画出来速度场矢量图和极限环。如果可能的话，讨论这些极限环的稳定性：

1. Lotka-Volterra 模型

$$\begin{cases} \dot{x} = x(1 - y), \\ \dot{y} = -y(1 - x), \end{cases} \quad (12.22)$$

2. Van der Pol 振子

$$\begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = -x + \mu y(1 - x^2), \end{cases} \quad (12.23)$$

3. 做极坐标变形以后编出来的动力学系统

$$\begin{cases} \dot{x} = y + x(1 - x^2 - y^2), \\ \dot{y} = -x + y(1 - x^2 - y^2), \end{cases} \quad (12.24)$$

4. 另一个做极坐标变形以后编出来的动力学系统

$$\begin{cases} \dot{x} = -y + 2x(\sqrt{x^2 + y^2} - 1)^2, \\ \dot{y} = x + 2y(\sqrt{x^2 + y^2} - 1)^2. \end{cases} \quad (12.25)$$

习题 12.2 (化轨道稳定性的讨论为不动点的稳定性). 完成平方反比立场中带电粒子的圆轨道的稳定性的讨论。

这种能够把轨道稳定性转变成不动点稳定性的都是比较特殊的情况。在这个情况下我们能够找到好的变量来代表每一个轨道，例如上面例子里面的 r_* 和 ω_* 。对于更加一般的轨道稳定性的问题，我们可能需要先把轨道 $\vec{x}_*(t)$ 找出来，然后再对轨道做微扰 $\vec{x}_*(t) + \Delta\vec{x}(t)$ ，然后讨论这个微扰以后的系统的线性项。或者，实在不行我们就需要采用 Lyapunov 势函数的方法 [176]。这些内容以及对于定态或者轨道如何依赖于参数或者初始条件，定态或者轨道的稳定性如何依赖于参数或者初始条件，就需要读者去看专门的非线性动力学的书籍了。本章的目的是大概展示一下非线性动力学是什么，和系统科学是什么关系，其典型的思考方式和分析方法是什么。

稳定性分析是分析动力学系统定性行为的重要角度和工具。现在我们来看另一个例子。

例 12.4 (一维电场中受到空气阻力的带电粒子). 一个一维电场中受到空气阻力的带电量 q 的粒子，场强为 $\vec{E} = \gamma \frac{1}{x} \hat{x}$ ，空气阻力和速度成正比 $\vec{f} = -\kappa \vec{v}$ ，讨论这个粒子的长时状态。

我们假设这个粒子初始位置在 $x_0 > 0$ (小于零的情况可以类似计算) 初始速度为零。按照受力分析和Newton 方程，我们写下来这个粒子的运动方程，

$$m\ddot{x} = -\kappa\dot{x} + \gamma \frac{1}{x} \quad (12.26)$$

为了分析不动点，我们把这个方程写成两个一阶方程，

$$\dot{x} = y, \quad (12.27)$$

$$\dot{y} = -\frac{\kappa}{m}y + q \frac{\gamma}{m} \frac{1}{x}. \quad (12.28)$$

这个方程的不动点是 $(x = \pm\infty, y = 0)$ 。我们可以进一步分析这个不动点的稳定性发现它是稳定的，也就是说，基本上这个粒子会跑到很远很远去，并且这个事实不太依赖于初始条件和参数。尽管这个是一个有意义的信息，但是信息量太小了。我们还想知道是否在这个粒子往外跑的过程中，遵循某个轨道特征，例如

$$y(x) = v(x) = \frac{q\gamma}{\kappa} \frac{1}{x}, \quad (12.29)$$

也就是速度和位置成反比。这个关系不是一个不动点。其仅仅让公式 (12.28) 的右边等于零，但是公式 (12.27) 的右边不等于零。我们想看看，线性稳定

性分析能不能用在这里。

在进一步分析之前，让我们来做一个量纲分析，然后利用量纲分析来做一个单位变换，尽量把变量变成无量纲的纯数。

$$[x] = m, \quad (12.30)$$

$$[t] = s, \quad (12.31)$$

$$[\kappa] = N \frac{s}{m} = \frac{kg}{s}, \quad (12.32)$$

$$[q\gamma] = N \cdot m = \frac{k g m^2}{s^2}, \quad (12.33)$$

$$[m] = kg. \quad (12.34)$$

得到无量纲量，

$$\tilde{x} = \frac{\kappa}{\sqrt{mq\gamma}} x, \quad (12.35)$$

$$\tilde{t} = \frac{\kappa}{m} t. \quad (12.36)$$

带入原方程并且考虑到 $y = \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{q\gamma}{m}} \tilde{y}$, 得到

$$\dot{\tilde{x}} = \tilde{y}, \quad (12.37)$$

$$\dot{\tilde{y}} = -\tilde{y} + sign(q) \frac{1}{\tilde{x}}. \quad (12.38)$$

我们看到除了 q 的符号会进入方程，剩下的所有的常数都消失了，也就是都统一到了一个方程，一种行为，而不依赖于参数值。这是很好的性质。

下面我们就来讨论这个方程。为了记号方便，重新把 \tilde{x}, \tilde{t} 等看做 x, t ,

$$\dot{x} = y, \quad (12.39)$$

$$\dot{y} = -y + sign(q) \frac{1}{x}. \quad (12.40)$$

我们关心的轨道有这样的性质，

$$y_* = sign(q) \frac{1}{x_*} \quad (12.41)$$

设，

$$x(t) = x_*(t) + \Delta x(t), \quad (12.42)$$

$$y(t) = y_*(t) + \Delta y(t). \quad (12.43)$$

带入原方程保留线性项，得到

$$\dot{\Delta}x = \Delta y, \quad (12.44)$$

$$\dot{\Delta}y = \Delta y - \text{sign}(q) \frac{1}{x_*^2} \Delta x. \quad (12.45)$$

这个线性方程的动力学矩阵的本征值为，

$$\lambda_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4\text{sign}(q) \frac{1}{x_*^2}}}{2}. \quad (12.46)$$

于是我们看到当 $q > 0$ 的时候，稳定。

这个稳定性表明，在这个粒子运动的过程中，其速度和位置遵循一个关系，也就是公式 (12.29)。如果我们真的来想一想这个物理系统的运动过程，这是一件非常神奇的事情。首先，在刚开始的时候，粒子在 r_0 并且速度为零，显然不符合这个公式。接着，电场力使得这个粒子加速，加速过程中空气阻力开始发挥作用阻碍这个粒子加速。设想某个时候，这两个力相等了（一个从零连续增加，一个从某个非零值连续减少，肯定会遇到的）。这个时候，速度和位置确实满足上面的关系。那之后呢，电磁力变小，速度不变的当时阻力没变，于是阻力大于电磁力，于是速度变小。到底会变成多大，由具体这两个力的大小决定，不一定还会遵循公式 (12.29)。那，如何理解我们线性稳定性分析的结果，当 $q > 0$ 的时候，确实这个关系会再一次成立呢？并且，速度要减小到公式 (12.29) 给定的大小是要时间的，如何保证到达下一个点的时候正好减小这么多呢？更进一步，如果这个关系真的保持，那么 $\dot{y} = 0$ ，于是 $\ddot{x} = 0$ ，于是倒过来我们可以推出来这是匀速运动，而这个显然不对。

那如何理解这个计算出来的结果呢？在不动点的稳定性分析中，我们已经看到，稳定的不动点的意思就是任何对这个不动点的偏离，就会有一个力，使得系统的状态向着回到这个不动点的方向去演化。实际上，这就是负反馈：力的效果和偏离之间是相反的。在这里，当到达两个力平衡的状态之后，随着运动， x 变大了，电场力变小了，于是阻力大于动力，于是速度变小了，于是阻力也变小了。这样系统才可能找得到新的平衡点。只要平衡点和负反馈存在，只要时间足够长，那么，系统必然会回到这个平衡点上。于是，出现这个结果就可以理解了，尽管还是存在前面的看起来是结果不合理的问题。

既然通过这个分析，我们得到了好的定性行为的图像： $q > 0$ 的时候，系统只要演化足够长时间以后就会遵循公式 (12.29)。我们就有了作数值计算数值验证的整体思路。下面是不同参数情况下的几组数值计算结果，分别是当 $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 0.01$, $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 1$ 和 $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 10$ 的时候。我们发现，数值结果和我们稳定性分析的结果还是相当符合的。联系前面的量纲分析，参数的所有取值的情况，当 $q > 0$ 的时候，方程都可以变成 $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 1$ 的情形。于是，我们更加深刻地认识到，实际上这些曲线都是对这个情况下标准曲线的变形。在做数值解的时候，通过量纲分析得到无量纲化的方程往往是非常有用的。

注意，这个计算是有缺陷的，如果我们真的要讨论这个推到的稳定性，我们应该先给出来轨道的时间函数形式 $(x_*(t), y_*(t))$ ，然后进一步讨论其稳定性。这里实际上讨论的是 x_* 和 y_* 之间的函数关系的稳定性。另外，我们在这里限定了一维的情况，如果是一个有心力场，那么速度和位置之间的关系对于角度方向（垂直于这个一维系统的维度的方向）的扰动可能是不稳定的。

在这个例子里面，我们看到，运动过程中（或者说关于这个运动轨道的）的某些量的关系也是可以做线性稳定性分析的。我们还看到了参数 q 取大于和小于零的时候对应着整体性质不同的状态。下面，我们来看一个需要直接对轨道做线性稳定性分析的例子。

其实，到目前为止除了我们尚未说明的混沌区域的行为，我们发现，所有的上面的讨论过的系统的 behavior 都可以通过 Runge-Kutta 数值计算来得到，我们仅仅通过跟踪演化轨道，就可以把各个稳定的不动点找到，然后，把所有的稳定不动点画到刚才的坐标上，也能够得到这张图。当然，完全从数值计算的角度来说，也许我们对于某些轨道失去稳定性的图景（在什么地方失稳，为什么失稳）就没有好的了解，但是基本的分支图还是能够画出来的。那我们就又回到了一开始的问题：如果这样，我们研究微分方程定性理论有什么用，直接数值计算好了。

前面，我们已经演示了，从技术上来说，如果能够找到不动点，做稳定性分析，那么我们就可以不做数值计算而了解系统的 behavior，尽管这个不是本质进展和必要性的。下面，我们来看看更复杂的动力系统的现象，看看这个时候，数值计算轨道还不够用，我们需要在数值计算轨道的基础上观

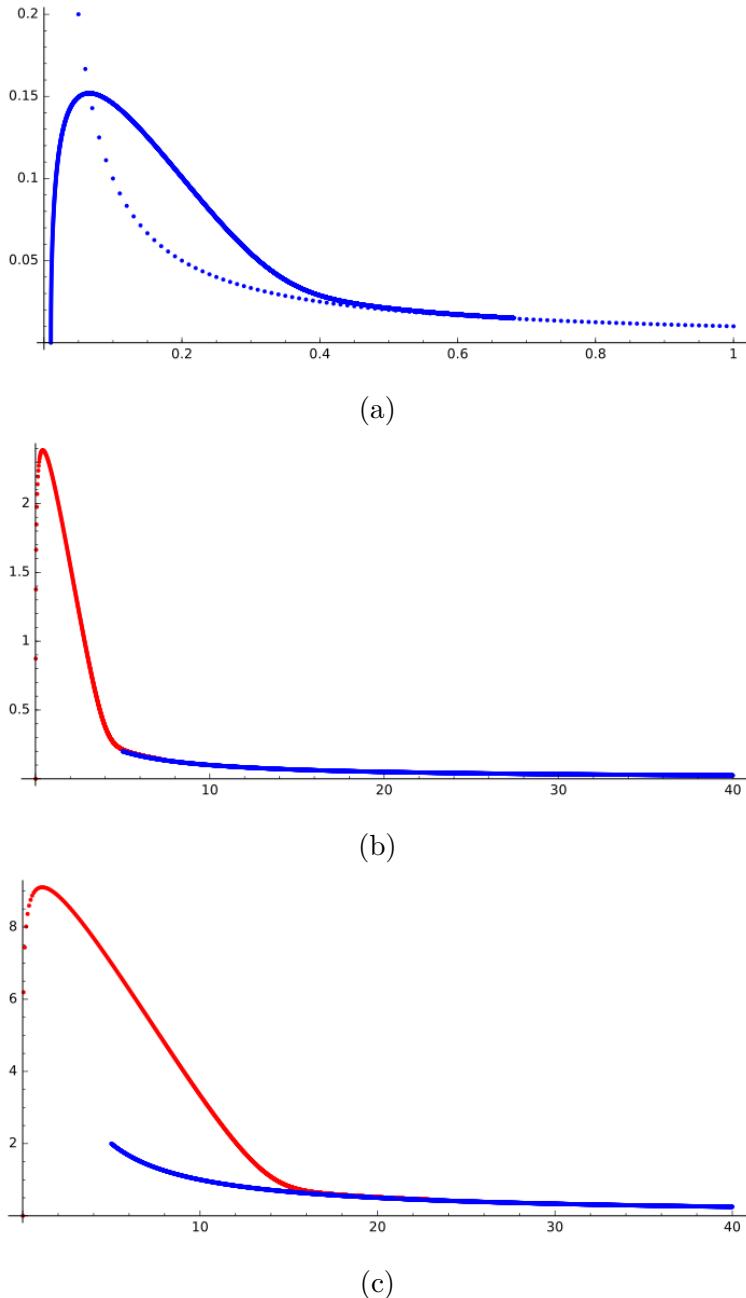


图 12.6: (a) $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 0.01$ 。 (b) $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 1$ 。 (c) $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 10$ 。三种参数情况的长时解都出现数值解和动态平衡解完全相符的现象。通过量纲分析, 我们更加深刻地认识到, 实际上这些曲线都是对 $\frac{\kappa}{m} = 1, q \frac{\gamma}{m} = 1$ 曲线的变形。

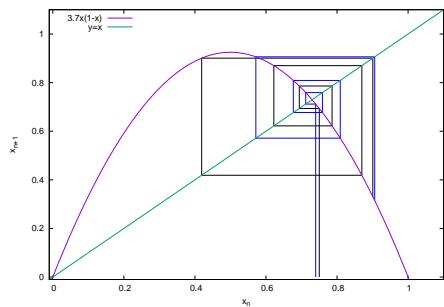


图 12.7: Logistic 映射展示混沌行为的迭代过程 (取 $\gamma = 3.7$ 当例子)。

察哪一些新的量，才能对系统的行为有好的了解。

习题 12.3 (Lorenz 吸引子的线性稳定性分析). 分析由公式 (12.48) 定义的动力学系统——称为 Lorenz 吸引子——在不动点 $(0, 0, 0)$ 附近的线性稳定性。

12.4 初值敏感和混沌

我们首先来观察一个展现混沌行为的简单系统，然后我们来体会一下混沌系统的一些特征。其实，例 12.1 中的 Logistic 映射在 γ 取值为 3.7 的时候就可以用来作为我们的例子。我们通过下一个例子来更加细致地看下一个系统进入混沌的方式。

例 12.5. 差分形式的 Logistic 映射的混沌行为

$$x_{n+1} = \gamma x_n (1 - x_n). \quad (12.47)$$

其中 $\gamma = 3.7$ 。其典型行为见图 12.7。

我们发现，两个一开始比较接近的点，在迭代过程中有的时候会变得离的比较远，有的时候又会变得离的比较近。也就是轨迹对初始条件（和计算误差）非常敏感，一点点小小的偏离，将来都可能造成非常大的区别。同时，也不是对这个差异一直的放大，有的时候，两个在某个时刻相差很大的轨道又会在将来的某个时刻离的很近。也就是说，原始的周期一的不动点是失去了稳定性，可是这个失去了的稳定性，也没有变得完全不稳定，还是有一定的吸引域的，局域不稳定可是全局稳定的。

这样的局域不稳定可是全局稳定的吸引域就叫做奇怪吸引子。很多时候，这样的奇怪吸引子还具有分形结构。

我们再来讨论著名的 Lorenz 吸引子。

例 12.6 (Lorenz 吸引子的轨迹). Lorenz 吸引子的轨迹: 用 Runge-Kutta 方法以及数学计算软件 SageMath, 来计算以下方程通过初始点 $p_1 = (x_0 = 0, y_0 = 1, z_0 = 1)$ 以及 $p_2 = (x_0 = 0.001, y_0 = 1, z_0 = 1)$ 的轨迹,

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x), \quad (12.48a)$$

$$\frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y, \quad (12.48b)$$

$$\frac{dz}{dt} = xy - \beta z. \quad (12.48c)$$

其中 $\rho = 28, \sigma = 10, \beta = \frac{8}{3}$ 。

通过前面的例子我们已经了解到, 不动点最简单, 其实任意阶的周期解 (也就是 $f^k(x)$ 的不动点) 也是一个容易想象的情况。现在, 我们来看一个复杂的多的情况。我们来跟踪一条这个方程决定的轨迹, 我们从 $x_0 = 0, y_0 = 1, z_0 = 1$ 出发, 由于整个方程是决定性的, 我们很容易就能够用 Runge-Kutta 画出这条轨迹。首先, 从图 12.48(a) 中的 (x, y, z) 以及 (b) 中的 y (其他也一样) 的取值来看, 我们发现这条轨迹没有跑到无穷去, 看起来也不像是周期的, 不过粗粗看起来确实有一定的周期的成分在里面。为了更清楚地看到到底有哪些周期行为, 其实我们可以对它做一个 Fourier 变换。现在, 我们来考虑 $x_0 = 0.001, y_0 = 1, z_0 = 1$ 的轨迹。这个点和前面的初始值非常非常接近。然后, 我们观察到, 在 $t > 500$ 之后, 两个轨迹的差别非常大。这个很大的差别表示, 两个非常非常接近的初始条件, 可以导致相差很大的轨迹。这个本质上的很小的初始条件上的差别可以造成将来的轨迹的很大的区别的现象被称为“初值敏感性”, 也被称为“蝴蝶效应”, 是混沌系统的重要特征。这个现象让我们甚至怀疑我们的计算: 我们的数值计算是在有限精度下计算的, 存在舍入误差, 而这个舍入误差可以造成将来的轨迹上的非常大的区别。也就是说, 我们计算出来的轨迹以及不大, 不知道什么地方的舍入误差就让我们的结果远远地离开真实的结果。那么, 能不能依靠提高计算保留的精度来提高计算结果的准确度呢? 对于这个系统, 我们发现只要演化时间足够长, 无论多小的舍入误差, 都可以造成结果上

巨大的区别。另外一个这个例子展现的特征是整体轨迹在有限区域内（不趋向无穷），又不是简单的不动点或者周期运动。也就是不动点局域是不稳定的。但是，整体系统又不会发散到无穷远去。

更进一步的，有关动力学系统如何从不动点、周期行为进入混沌行为的这部分研究就留给大家从专门的动力学系统的书和文献里面去学习了。事实上，周期三和混沌行为具有内在联系 [179]。

12.5 Lyapunov 势函数方法

线性稳定性分析只能在不动点附近的稳定性。而且，由于我们仅仅保留了一阶项，就算局域稳定，我们也很难知道这个吸引域的大小。另外，如果发现了复数本征值，尤其是这个复数的实部为零的时候，线性稳定性也会失效。这个时候，被忽略的高阶小量就有可能起到决定性作用。

如果有一个能够判断全局稳定性，甚至给我们一些关于吸引域的信息的稳定性分析方法就好了。在物理学里面，一般来说一个力学系统是由它对应着的 Hamiltonian——相当于某种能量函数——给定的。按照 Hamilton 方程，我们试试来求一下这个能量函数在系统演化的过程中的变化，

$$\frac{dH(q, p)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = 0. \quad (12.49)$$

于是，我们发现，由 Hamiltonian 描述的动力学系统，其运动轨迹永远限制在一个 $H(x, y) = E$ 等能面上的周期轨道。

受这个 Hamiltonian 的启发，我们来考虑给一般的系统也找一个类似于能量的函数 V 。然后，我们来看是不是随着系统的演化，这个 V 是不是向着某一个特定的方向演化。例如，在某个力学变量 x 区域 D 内， $V \geq 0, \dot{V} \leq 0$ ，我们就可以知道系统在这个区域内是不是稳定了。这个在一个区域上的稳定性叫做全局稳定性。其中一种判对全局稳定性的方法就是通过引入一个势函数来做的。称为 Lyapunov Function 方法。

如果系统在一个区域 D 内满足，

$$\begin{cases} V(x^*) = 0, \\ V > 0, & \forall x \in D - \{x^*\}, \\ \dot{V} \leq 0. \end{cases} \quad (12.50)$$

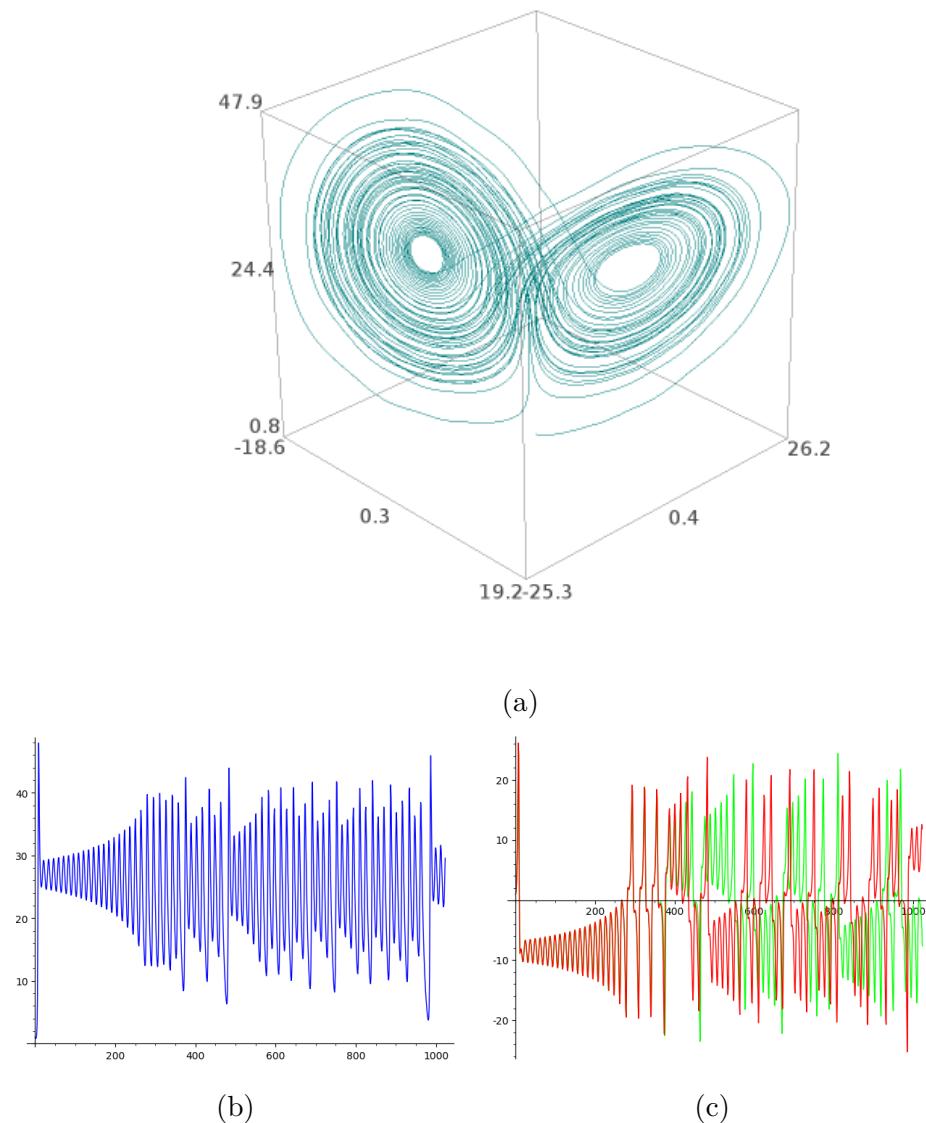


图 12.8: (a) 三个变量随着时间的演化。(b) 其中一个变量 (z) 的演化曲线。
(b) 其中一个变量 (y) 在两个非常接近的初始值的情况下演化曲线。

则系统在区域 D 上是 Lyapunov 稳定的。如果系统在除了 x^* 之外的整个区域 D 上都有 $\dot{V} < 0$, 那么系统还是在 D 上渐近稳定的。相应的还有系统失去稳定性的条件和定义, 例如存在当某个区域内其他条件不变但是 $\dot{V} > 0$ 的时候, 系统就是不稳定的。如果这个区域 D 包含无穷大, 则, 对势函数 V 还有一个额外的要求, 也就是径向无界性 ($\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = \infty$)。这个时候, D 上的稳定性就成了全局稳定性。这是这个势函数方法优越的地方。用 Lyapunov 函数还可以判断系统不稳定。大概来说, 就是在某个区域内, $V > 0$ 的同时 $\dot{V} > 0$ 。更多的讨论见 [177]。

下面我们来做几个例子。首先来看一个线性稳定性分析就能够给出来结果的例子。

例 12.7 (线性稳定性分析和 Lyapunov 函数给出相同结果的系统).

$$\frac{dx}{dt} = -3x, \frac{dy}{dt} = 2x - y. \quad (12.51)$$

在不动点 $(0, 0)$ 附近做线性稳定性分析, 可以发现, 其线性化以后的微分方程的动力学矩阵 $\begin{bmatrix} -3 & 0 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$ 的本征值 ($\lambda_{1,2} = -2 \pm \sqrt{3}$) 都是小于零的, 于是 $(0, 0)$ 是稳定的不动点。

取 $V = x^2 + 3y^2$, 则

$$\frac{dV}{dt} = 2x(-3x) + 6y(2x - y) = -6(x^2 - 2xy + y^2) \leq 0. \quad (12.52)$$

并且, 只有当 $x = 0 = y$ 也就是不动点的时候, $\dot{V} = 0$ 。因此这个系统是 Lyapunov 稳定的, 并且是渐近稳定的。其实在整个二维平面上, 这个不动点对于整个系统都是稳定的。演化过程的一个例子, 可见图 12.9。更进一步, 有了这样 V 函数, 我们可以知道吸引域的大小, 也就是找出来满足稳定性条件的最大的 D , 而不是依靠在不动点的极小领域里面做线性稳定性分析。对于这个例子, 可以看到从 V 上的任何一点出发, 随着时间演化, 系统都会到达其最小值点。

我们再来看一个超越线性稳定性分析就能够给出来结果的例子, 来反映 Lyapunov 函数的优势的例子, 例如从线性稳定性分析得到的是 $\lambda = 0$ 的情况下, Lyapunov 函数可以包高阶项的贡献纳入考量。

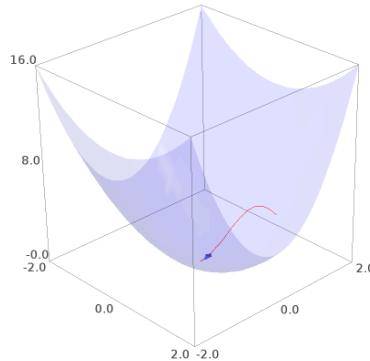


图 12.9: 我们看到从势函数上的某个点开始, 随着时间演化, V 不断趋向其最小值的点也就是不动点。

例 12.8 (Lyapunov 函数给出相同结果超越线性稳定性分析).

$$\frac{dx}{dt} = y - x^3, \frac{dy}{dt} = -x - y^3. \quad (12.53)$$

在不动点 $(0,0)$ 附近做线性稳定性分析, 可以发现, 其线性化以后的微分方程的动力学矩阵 $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ 的本征值 ($\lambda_{1,2} = 0$), 于是我们不能判断 $(0,0)$ 是否线性稳定。

取 $V = x^2 + y^2$, 则

$$\frac{dV}{dt} = 2x(-y + x^3) + 2y(x + y^3) = 2(x^4 + y^4) \leq 0. \quad (12.54)$$

并且, 只有当 $x = 0 = y$ 也就是不动点的时候, $\dot{V} = 0$ 。因此这个系统是 Lyapunov 稳定的, 并且是渐近稳定的。其实在整个二维平面上, 这个不动点对于整个系统都是稳定的。演化过程的一个例子, 可见图 12.10。

习题 12.4 (寻找力学系统的 Lyapunov 函数). 找出来公式 (12.24) 定义的力学系统的合适的 Lyapunov 函数, 并且找出来稳定和不稳定的区间。

很多时候, 给定一个力学系统, 其 Lyapunov 函数是靠猜的。但是, 猜也是有方法的有方向的。例如, 如果是一个实际系统, 则可以考虑运用这个系统的能量函数、效率函数、成本函数等。如果是一个一般的出现在速

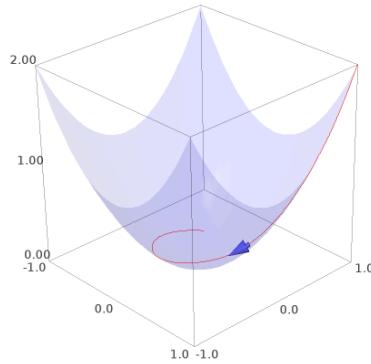


图 12.10: 我们看到从势函数上的某个点开始, 随着时间演化, V 不断趋向其最小值的点也就是不动点。这个结果超越了线性稳定性分析, 其不能判断不动点 $(0,0)$ 的稳定性。

度项中的都是多项式函数的系统, 则考虑用各种平方和函数的组合来当做 Lyapunov 函数。

12.6 作业

习题 12.5 (绘制动力学系统公式 (12.53) 的速度矢量场图). 绘制动力学系统公式 (12.53) 的速度矢量场图, 计算一些轨迹, 找出来稳定区间和不稳定区间, 并做线性稳定性分析。

习题 12.6 (绘制动力学系统的速度矢量场图并做 Lyapunov 稳定性分析). 绘制如下的动力学系速度矢量场图, 计算一些轨迹, 找出来稳定区间和不稳定区间, 并做线性稳定性分析和 Lyapunov 稳定性分析,

$$\frac{dx}{dt} = y + x^3, \frac{dy}{dt} = x + y^3. \quad (12.55)$$

12.7 动力学系统及其定性分析的几个应用

现在, 我们来看看动力学系统及其定态分析有什么用, 我们将来的研究可以如何借鉴。现在我们学习了非线性动力学的概念和分析技术, 就可

以来为这些线性提供数学解释数学描述了。

不过,系统科学的研究总会遇到另一个问题:具体问题的研究中,我们还需要具体问题领域的知识。如果我们真的想完整地构建Bénard 流和Belousov-Zhabotinsky 反应的数学模型,我们就需要学习相应的物理学和化学的知识。在这里,我就粗糙地介绍一下这些知识基础是如何帮助建立起来要分析的动力学系统的方程的,然后,就主要关注方程和方程的定性行为。

其实,我们前面的大多数例子,都有实际问题的背景。例如 Logistic 映射实际上可以看做种群生长模型,公式 (12.12) 第一项代表复制 γx ,也就是出生或者死亡的贡献。第二项 $-\frac{\gamma}{K}x^2$ 代表竞争,或者把 $(1 - \frac{1}{K}x)$ 看作是由于种群的其他个体导致的营养空间等容量的限制。实际上,人口和微生物数量变化过程的描述就是启发 Logistic 映射被提出的原因之一²。再例如, Lotka-Voltara 实际上可以看做是对捕食者-被捕食者关系的描述。其中乘积项 $\pm xy$ 分别表示两个种群的个体相遇就会增加 (+) 或者消灭 (-) 其中的一种个体。一阶项和 Logistic 映射里面的一阶项同样代表出生或者死亡。实际上,对一战期间海洋鱼类的收货的数量的记录,还有加拿大 Hudson's Bay 公司由于需要收购皮毛所做的长时间的兔子和狐狸数量的记录,正好可以用 Lotka-Voltara 模型来解释³。因此,非线性动力学在生物学、生态学上本来就得到了广泛的应用。

更重要的是,通过构建现象的动力学系统模型,以及分析其定性行为,我们还可以了解系统在什么情况下会发生定性行为的转变。这样的转变在实际问题中往往具有重要的意义。在第二章中,我们提到了从某有结构的行为到有时间和空间结构的行为的转变的例子,例如Bénard 流和Belousov-Zhabotinsky 反应。自己去经历一下从提出模型、建立方程开始,到计算出来从没有结构到有结构的转变,是非常有意义和有必要的。但是,从头到尾展示这两个现象的计算过程除了学科知识,还需要学会包含空间变量的动力学方程的稳定性分析,因此超过了本书的范畴。在这里,我们把大概的思想理一理,然后用一个意义上差不多但是数学和知识上简单的多的问题——Brusselator (布鲁塞尔子) 来展示。

Bénard 流的背后是流体运动的方程。流体为什么会产生运动呢,是因

²见Wikipedia “Logistic function” 词条。

³见Wikipedia “Lotka–Volterra equations” 词条。

为上下层以及中间各个点的温度的不同导致了密度的不同，不同的密度在重力的作用下产生流动。当然，就算下层温度高密度小，上层温度低密度大，也不一定会产生整体运动。例如，可以在维持流体整体不动的情况下把热量从下层传到到上一层。这就是没有结构状态的热传导。我们也见过非常不均匀的时候的对流，也就是温度差、密度差特别大的时候，水的沸腾现象，或者空气对流。Bénard 流介于两者之间：产生了整体运动，热量通过对流的方式进行传播，但是，又形成有序的，有样式的，稳定的传播，而不是一般所见的沸腾的水的对流。为了构建这个运动方程，我们需要流体的连续性方程、流体的 Newton 方程（动量方程）、联系着能量和温度的能量运动方程，以及 Boussinesq 近似，

$$\rho = \rho_b [1 - \alpha (T - T_b)], \quad (12.56)$$

也就是每一个点的密度是这个点的温度的线性函数。其中系数 α 称为体积膨胀系数。有了上面的三个方程和这个近似，就可以得到 Bénard 流的流体运动的方程。取合适的边界条件，例如上下界面的温度固定，下界面固定没有运动，但是上界面自由有运动求解这个方程，讨论定态解，就可以得到当参数取某些值的时候，系统会产生有序的运动，另外的参数取值的情况下，流体整体没有运动。更多的细节的计算，见 [1–3] 以及 S. Ghorai 的网页 “Rayleigh-Benard Convection”⁴

Belousov-Zhabotinsky 反应的背后是化学反应动力学——动力学变量是每一种反应物——在任何一个时间点上任何一个空间位置上——的浓度，由于发生化学变化，相互转化得到的依赖关系。这组方程经常被称作反应扩散方程。在忽略空间变量，把反应物的浓度当做空间格点完全均匀的情况下，也被称作反应动力学方程。然后，我们来讨论这组反应扩散方程或者反应动力学方程的定态行为及其稳定性。更详细的讨论可见 [4–7] 和 [8]。

下面，我们来讨论 Brusselator（布鲁塞尔子）——一个由 Prigogine 等人提出来的计算更加简单的，但是展示类似现象的模型。考虑下面的化学反

⁴<http://home.iitk.ac.in/~sghorai/NOTES/benard/benard.html>, 2019 年 10 月 14 日访问。

应,



按照质量作用定律 [69] (或者看做种群动力学的捕食者-被捕食者模型) 得到运动方程,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = k_1 A - k_2 B x - k_4 x + k_3 x^2 y + D_1 \nabla^2 x, \quad (12.58a)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = k_2 B x - k_3 x^2 y + D_2 \nabla^2 y. \quad (12.58b)$$

忽略空间不均匀性以后, 我们有运动方程,

$$\frac{dx}{dt} = k_1 A - k_2 B x - k_4 x + k_3 x^2 y, \quad \frac{dy}{dt} = k_2 B x - k_3 x^2 y. \quad (12.59)$$

这个方程具有不动点

$$x^* = \frac{k_1 A}{k_4}, \quad y^* = \frac{k_2 k_4 B}{k_1 k_3 A}. \quad (12.60)$$

具体讨论稳定性, 我们需要实际参数值。为了给一个直观结果, 我们假设 $k_{1,2,3,4} = 1$, 得到线性系统的矩阵为,

$$\begin{bmatrix} -B - 1 & A^2 \\ -B & A^2 \end{bmatrix} \quad (12.61)$$

可以发现, 当

$$B > 1 + A^2 \quad (12.62)$$

的时候, 系统的不动点失去稳定性, 于是将产生更加丰富的行为。具体行为可以从数值计算的结果图 12.11 看出来, 是一个极限环。如果我们愿意, 还可以继续研究这个极限环的稳定性。

习题 12.7 (Brusselator (布鲁塞尔子) 的定态解和稳定性). 假设 $k_{1,2,3,4} = 1$, 讨论公式 (12.59) 定义的系统的定态解及其稳定性, 对更多的参数取值情况做矢量场图。可以参考 Wikipedia 词条 “Brusselator”⁵

⁵<https://en.wikipedia.org/wiki/Brusselator>, 2019 年 10 月 14 日访问。

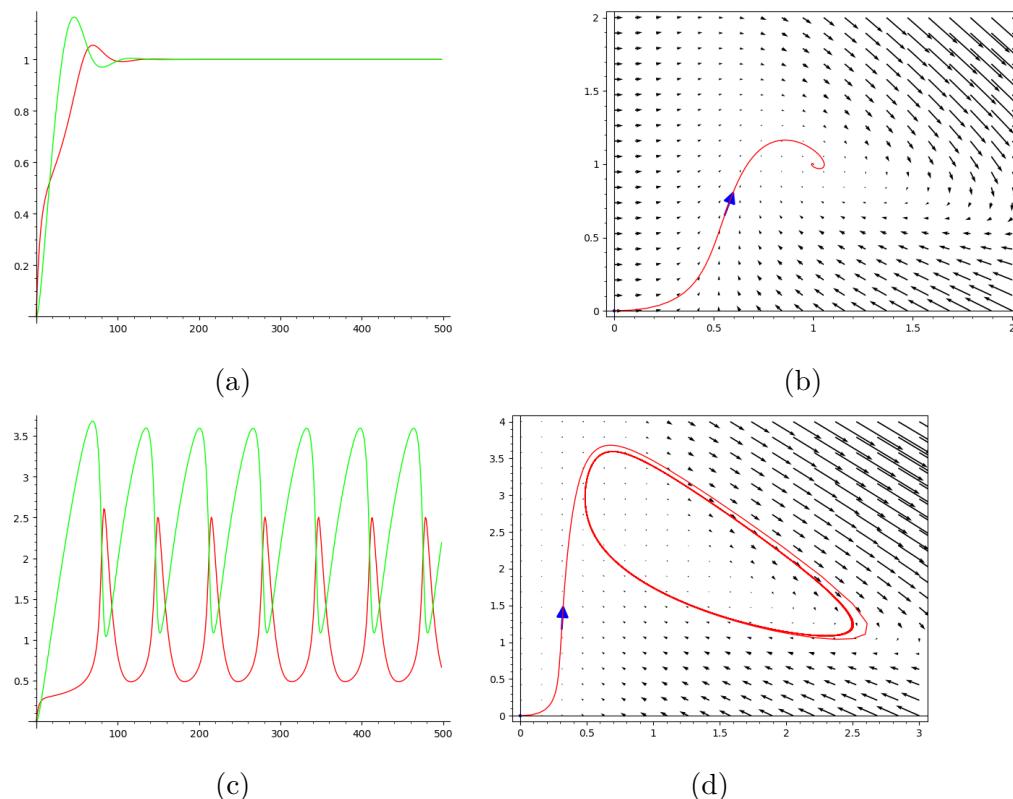


图 12.11: 当 $A = 1.0, B = 1.0$ 的时候 (a) 两个变量随着时间的演化, (b) 速度矢量场图。当 $A = 1.0, B = 2.5 > 1 + A^2$ 的时候 (c) 两个变量随着时间的演化, (d) 速度矢量场图。

这样一个简单的模型，就展示了两种反应物的振荡动力学。如果我们考虑空间相，就有可能会出现时间空间的振荡斑图，也就是Belousov-Zhabotinsky 反应的行为。针对Belousov-Zhabotinsky 反应的模型、计算和结果可以见 [7] 和 [8]。

更一般的角度，通过对非线性动力学尤其是混沌行为的了解——完全确定性的微分方程可以存在对初值和误差敏感的长期不可预测的轨道，更不用说直接包含了随机性的微分方程——我们发现，有一些系统可能是不能做长期预测的。当然，每一个这样的具体系统，我们都必须从现象和模型两个方面来尝试搞清楚，它们会不会是混沌系统，其参数的取值情况会不会正好处于表现出来混沌的区域里面。不过，如果系统的相互作用复杂到一定程度，导致动力学方程存在高阶项，则很有可能会是一个具有混沌行为的系统。例如，地球运动和大气运动就有可能是这样的系统。实际上，Lorenz模型就是受了大气运动和天气预报的启发而提出来的⁶。因此，地震和天气的长期具体预报从机制上就是非常不准确的。当然，统计层面的特征性的预报（例如某个区域经常性降雨或者地震）和短期预报、甚至超短期预警那是可能的。

更多的例子也可以从其他非线性动力学的书 [177, 180] 或者生理学、药理学、社会经济等各种研究工作 [181–185] 里面看到。顺便，[181, 182] 也是把相互作用和网络科学用于生理学尤其是心血管疾病的好例子。

12.8 本章小结

对于微分方程来说，数值积分计算、（低维系统的）速度矢量场的图，尽管依赖于具体参数和具体初始条件，总是可以拿来先看一看系统行为的方法。因此，这些基本的方法是要先掌握的。

除了这些基本方法，在这一章中，我们学习了用不动点、周期、极限环、混沌来概念处理动力学系统的演化，并且用线性稳定性方法以及 Lyapunov 势函数的方法来讨论其稳定性。我们还学习了这些状态随着参数和初始值的变化而得到的不同定性行为的分支图。在更高维的系统上这些行为可以表现为更丰富的组合，甚至出现新的典型行为。这些就是更专门的课程的

⁶见Wikipedia “Lorenz System” 词条。

学习任务了。

当然，为了直观，这一章的大部分例子都是三维一下的，甚至一维、二维的。对于高维系统，针对每一个初始条件、参数值来做数值求解、绘制速度矢量场图，可能就不管用了。这个时候，就会更加依赖于不动点等典型行为和这些典型行为的稳定性分析了。

从系统科学的角度而言，学习这部分的主要目的，除了上面提到的分析系统定性行为的方法这些具体的知识和方法之外，这部分内容的学习还可以让我们注意到，首先，系统的定性行为有的时候是可以不通过针对具体参数和初始状态的取值而是做更一般的讨论的；其次，动力学确实存在着不同的定性行为，尤其是混沌行为。在那里，由于初值和误差敏感性（离的近的将来可能变远，离的远的将来也可能变近），长期预测是不可能的。

这一章的几个关键词是：动力学、定性行为、混沌、稳定性分析、在各个学科上的应用和来自于各个学科的启发。

另外，本章中未标明出处的图都是由作者在 SageMath⁷或者 gnuplot⁸上制作。

⁷<http://www.sagemath.org/>，2019年10月14日访问。

⁸<http://www.gnuplot.info/>，2019年10月14日访问。

第十三章 相变、临界性与自组织 临界性

相变是指一个系统的状态从一种宏观性质转变成了另一种宏观性质。这个宏观性质通常是定性的。例如，考虑一个盒子的气体，我们把气体的某一对分子的位置发生了交换这样的两个状态之间的区别看作是微观上的差别，细小的差别。如果我们通过降低温度的方法把分子之间的平均距离缩小，分子之间的联系加强，直到这个盒子的气体转变为液体，那么这个时候，我们就说这个系统发生了相（就是宏观状态）的变化——相变。更加准确的定义在下文会讨论。在此之前，我们注意到，一个相变通常对应着构成这个系统的微观组成部分之间的联系突然加强或者减弱了。而这样的变化在自然界中非常普遍，而且非常值得关注。在讨论很多物理系统的问题，甚至社会系统的问题的时候，我们不太关心一个系统的状态的细小的变化，但是我们特别关注一个系统的定性的变化。例如，一个人群交往很正常，不太多也不太少的社区，突然之间变成了紧密联系在一起经常聚集在一起的社区，或者是相互忽视的社区，这个必然意味着某种内在的结构发生了变化，而且这种结构变化通常有一个内在或者外在驱动力。在这个例子中，我们自然关注的表面特征的变化，内在结构的变化，以及变化的内在或者外在驱动，就是我们物理学中研究一个相变最关心的问题。他们分别是，以后会定义，序参量、关联函数和相互作用、相变的控制参数。我们还关心在这个控制参数取值为多少的时候，这个系统的相变会发生，也就是相变点的问题。

如果相变问题的研究没有共性，也就是说每一个相变的发生，上面的序参量、关联函数、控制参数和相变点之间的关系，完全依赖于具体的系统，

那么我们也不需要一个关于相变的一般的研究的分支学科。我们完全依赖于研究那个具体系统的学科好了。实际上，我们发现，一旦发生相变的时候，很多共性的现象会发生，很多有共通之处的研究方法可以使用。

我们这一章的主要目的就是讨论几个相变的例子，通过这些例子来了解有哪些有共性的现象以及有哪些有共通之处的研究方法。这些例子包含Ising 模型、沙堆模型；这些现象包括：临界慢化、临界点附近的关联长度发散、标度关系、幂律等；这些研究方法包含Landau的相变的一般理论与平均场、Monte Carlo 方法（尤其是Metropolis 方法以及类似的方法）、重整化群理论方法和计算Green 函数等。

本章推荐阅读材料：Kadanoff 的《Statistical Physics》[141]，于渌、郝柏林和陈晓松的小册子《相变与临界现象》[90]。说明一下，对于熟悉统计物理学的读者，我们这里仅仅讨论二级相变或者与二级相变类似的连续相变。在这一章里，在保证科学性的前提下，我们尽量呈现粗糙的描述而不是定量的计算。这部分内容的更加严格的呈现应该从关于“高等统计力学”的教材中去寻找。例如Plischke和Bergersen的《Equilibrium Statistical Physics》[140]。当然，在粗糙以后就保证不了科学性的情况下，我们还是会做细致的计算。

从系统科学的角度来说，我们需要从这些具体例子的分析中学会将来处理更加一般的系统的整体性质发生变化的现象。

13.1 相变的研究方法

我们在统计物理学一章已经讨论过Ising 模型的相变以及通过 Monte Carlo 模拟来寻找相变点。我们发现，Ising 模型在无外场的情况下有两个相：一个整体磁矩为零的状态，一个整体磁矩不为零的状态。后者又有两个可能的状态，整体磁矩大于零或者整体磁矩小于零。对于磁性材料，我们称后者具有磁性，前者没有磁性。有的磁铁在 $140^{\circ}c$ 左右——这个从一个状态变成另一个状态的温度就称为临界温度，在这个例子中被称为居里温度——就可以失去磁性，所以这个相变的现象是实际生活中也能够观察到的。如果你想寻找这样的材料做一个实验，Google “Curie temperature”（居里温度），然后选择一个居里温度比较低的材料，例如 100 度左右的，来

购买。然后你就可以通过把这个材料放在炉子上加热来感觉其磁性的改变。在做这个实验的时候最好是在两个人在一起。除了增加安全性（这个实验本来就比较安全），有一个不参与操作的观察和保护的实验者通常也是有益的。当然，如果是仅仅为了体验相变的话，完全没有必要做这个实验，我们日常生活中就能够发现，温度降低，水会结成冰，温度升高，水会化成汽。

在这一章，我们来观察这个相变的一些更仔细的性质，以及学习研究这些性质的方法。

例 13.1 (二维Ising 模型临界现象的 Monte Carlo 模拟). 通过 Monte Carlo 模拟分析二维Ising 模型的临界点、关联函数、集团大小分布、比热、磁化率。

在第九章中，我们已经看到相变点（临界点）前后系统整体性质发生改变，也看到了临界慢化现象，还粗略地看到了关联长度随着温度的变化——也就是在温度比较高的情况下每个点的自旋状态比较独立，接近临界点就不是这样。现在，我们来做一下更复杂的计算，例如算一下关联函数、比热、磁化率、集团大小分布等等。

推荐你自己来做一下这个 Ising 模型的 Monte Carlo 模拟。不过，如果你想先大概看看结果，除了本书里面的这些图，你还可以尝试在往上找找“Ising 模型的 Monte Carlo 模拟 (Ising model simulation)”。有很多已经写好的程序，甚至直接在网络也上做好图形和数据下载界面的网页程序，例如这里：<https://mattbierbaum.github.io/ising.js/>¹，或者这里http://www-fcs.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~harada/monte_en.html²。Kotze 在 arXiv 上的这个整理 [186] 也是一个很好的参考。

通过这个例子，我们复习了如何使用Monte Carlo 方法来分析统计力学系统，还看到在临界点附近关联函数和集团大小分布的行为。一般地来说，相变就是一个系统中的某个性质——通常用一个值来描述——从零变成非零或者倒过来的过程。这个时候，这个描述这种性质的值就称为序参量。对相变的研究最基本的方法就是按照这个系统的 Hamiltonian (H) 来计算出这个系统的配分函数 (Z)，然后从这个配分函数计算出序参量随着某个或者某几个控制参数的变化函数，然后识别出来在什么地方这个函数会发生

¹2019 年 10 月 14 日访问。

²2019 年 10 月 14 日访问。

一个从零到非零（或者反之）的变化。然后，原则上我们也能够通过这个配分函数计算出来关联函数等等其它物理量。但是，这样一个方法，我们已经看到，在简单的Ising 模型上都是非常困难的，能够用这种方法求解出来的都是艺术品。科学原则上是希望任何人都能够做这个计算的。于是，我们需要寻找别的方法。Monte Carlo 方法就是其中一种。当然，实际上的Monte Carlo 方法总是在一个比较小的系统上做的计算。而实际的物理系统，其大小通常都远远大于我们模拟计算的系统。我们只能通过模拟计算给出一个系统大小从小到比较大的时候的渐进行为的推测。在物理学中，有对于相变的更加严格的定义，以及发生的条件的研究。在这里，我们仅仅给出定义。相变是热力学函数以及热力学函数的导数不连续。热力学函数自身不连续称为一级相变。热力学导数的不连续称为二级相变。更高级的相变对应着更高级的导数不连续。其实，我们从Ising 模型的讨论已经看到，导数 $\frac{dm}{dT}$ 或者 $\frac{dm}{dh}$ 呈现一个 λ 的形状，而且随着系统大小变大，这个尖峰变尖，趋于无穷大。

然而，我们所作的任何有限系统上的计算，实际上都不会给出这个不连续，只不过越来越陡。在有限系统上，配分函数的每一项都是可微的，很难想象把它们都加起来就不可微了。实际上这个可微性在无限系统上在加起来之后，都是很难想象其发生改变的。Lee 和 Yang 的工作给出了一个非常巧妙的回答：考查配分函数在复平面上的性质，而不仅仅是实轴。他们发现，如果配分函数的零点在复平面上随着系统大小的增加（大小增加，密度不变，称为热力学极限，也就是很多很多同样的系统连接在一起）越来越接近实轴，那么这个时候配分函数存在不连续性。这个结果被称为 Lee-Yang 定理。这个定理从原理上回答了相变在理论上是可以计算和分析的。当然，在实际计算过程中，人们不一定通过算 Lee-Yang 零点来分析相变。

目前为止，我们分析了一个具体的模型，尽管我们交代过这个模型的典型行为：关联函数临界点附近有大的变化，集团大小的分布也发生定性变换，比热出现了 λ 形的转变，是比较普遍的，我们并没有交代任何关于相变的一般理论。我们还是停留在具体系统具体分析的层次。有没有什么更加一般的分析方法和关于相变的一般的理解呢？有了Ising 模型的现象作为基础，我们现在来讨论这个问题。

除了计算配分函数和做 Monte Carlo 模拟，我们要介绍的使得临界现

象的分析一定程度上从统计物理学独立出来的技术是重整化群。这个技术的思想是在临界点附近我们改变系统的大小相当于改变系统的温度或者其它驱动参数，或者说系统的状态离临界点的距离。粗略地来说，当我们把原始系统的几个单位看成一个单位——称作标度变换或者尺度变换（这里其实我们需要同时重新定义这个新的单位的状态以及这个新的状态与旧的状态的联系。暂时，在这个讨论中，我们粗略地使用多数原则），也就是缩小系统的尺寸的时候，每一个这样的变换，都会使得系统离这个相变的临界点。如果系统处于无序态，多数原则只能使得系统更无序。如果我们的系统已经进入到新的有序相当中去，那么这个变换会使得我们的系统越来越走向这个新的相：因为这个新的系统的每一个单元的状态越来越趋同了。在Ising 模型中，前者看起来就好像系统的温度越来越高了，后者看起来好像系统的温度越来越低了。这里，我们利用 Monte Carlo 模拟的到的结果做一个演示：如图，随着这个尺度变换——利用多数原则把原来的 $2 \times 2 = 4$ 个看成 1 个，一样多就随便取一个——确实看起来系统在温度高于临界点的一侧看起来温度在升高，系统在温度低于临界点的一侧温度在升高。也就是说，临界点是不动点——关联长度无穷大，但是是一个不稳定不动点。当然，实际上我们要求我们的尺度变换满足两个要求：第一、保持配分函数的值不变；第二、保持相互作用，也就是 Hamiltonian，的形式不变。我们的这里的这个 4 变成 1 的多数原则的变换实际上不满足这一条。在实际分析中，我们需要更好的变换。不过，对于我们理解为什么临界点是一个不稳定不动点来说，这个例子足以说明问题。

为什么我们要维持配分函数的值不变，还要维持相互作用的形式不变呢？原始的相变的临界点的确定需要讨论配分函数的对数以及配分函数的对数的导数的连续性。现在，我们把这个问题转化成为讨论配分函数的对数或者对数的导数随着标度变换如何变化的问题，然后我们企图通过寻找这些配分函数以及它的导数之中出现的关于这个系统的参数，例如 Ising 模型中的 J 和 T ，来寻找一个参数变化的不稳定不动点的方式来确定临界点。也就是说，我们想知道随着标度变换，这个原来的系统在它的参数 (J, T 等) 取值的情况下性质，相当于一个新的系统在什么样的新的参数取值的情况下状态。于是，我们当然必须保证这两个系统的状态是一样的，而且是可比的。所谓一样的，就是如果我们取计算物理量，这些物理量的取

值应该一样，所谓可比的，就是这个配分函数与各个参量的函数关系也是不变的。也就是说，我们想找到一个标度变换同时保证配分函数这个东西关于系统的参数的函数形式和函数值都不变。如果我们找得到这样的变换，那么，就算我们不能计算出这个函数形式，我们也能够得到这个系统什么时候发生相变的信息。其实，我们还可以得到更多：其实所有的临界行为都可以得到。

这是一个非常聪明的办法。利用变换的不稳定不动点代替求解配分函数。当然，这个变换的逻辑有一点点问题：我们在假设相变点存在的前提下发现，这个相变点就是不稳定不动点。如果我们的变换找不到这样的一个不稳定不动点，不表示相变点不存在，有可能是所用的变换不合适。不过，这个逻辑上的细节在使用重整化群技术的时候常常被忘记。下面，我们来看几个例子。首先，最简单的，一维Ising模型。这个模型是没有相变点的。我们来看看如果我们一定要做一个变换，这个变换告诉我们什么。

例 13.2 (重整化群求解一维Ising 模型的相变点). 一维Ising 模型的重整化群求解相变点： $H = \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1}$ 。

这里，我们用最简单的格点消去法：定义相邻的两个格点我们只保留一个，如何保留呢，假设我们只保留奇数位的那个自旋。其实这个变换和多数原则是基本上一样的，如果两个一样，则留哪一个无所谓；如果不一样反正需要随便选一个，就一直选奇数位的好了。有了这个变换之后，我们希望保证下面的等式

$$\sum_{s_2} e^{-\beta J(s_1 s_2 + s_2 s_3)} = A e^{-\beta' J'(s_1 s_3)}. \quad (13.1)$$

同样的，对于其他的格点，例如 s_3, s_4, s_5 之间，我们也仅仅需要保留 s_3, s_5 形如上式右侧的表达式。只好保证公式 (13.1)，我们就能够保证

$$\sum_{\vec{s}} e^{-\beta H(\vec{s})} = A \sum_{\vec{s}'} e^{-\beta' H(\vec{s}')}. \quad (13.2)$$

其中 \vec{s}' 就是保留下来的奇数位的自旋的状态。这个推理成立是因为 $e^{\beta \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1}}$ 可以展开成两两相乘的形式。其中的常数 A 不依赖于系统的参数，所以将来也不进入物理量的表达式。另外，由于 β 总是和其它参数合在一起的，在讨论重整化群的时候，我们总是把 βJ 看成新的 J ，或者说记 $J = 1$ ，然后

我们出现在以后的等式中的 J 其实就是 β 。公式 (13.1) 实际上就是，

$$e^{-J'} = Ae^{2J} + Ae^{-2J} \quad (13.3a)$$

$$e^{J'} = 2Ae^0 \quad (13.3b)$$

也就是

$$J' = \frac{1}{2} \ln \frac{e^{2J} + e^{-2J}}{2}. \quad (13.4)$$

利用非线性动力学中学习到的线性稳定性分析的方法我们可以来确定这个变换的不动点。我们发现，这个方程除了 $J = 0$ ($J = \infty$ 的稳定性更复杂，这里不讨论) 是不动点而且是稳定不动点之外，没有其它不动点。这个结果与我们的预期：一维Ising 模型没有相变点也是符合的（但是我们要注意我们提到的逻辑上的问题）。

这个例子展示了如何利用某个满足要求的标度变换来寻找不稳定不动点的方法。这是非常神奇的事情。在这个视角下，这个迭代变换是研究相变的核心。从这个迭代变换，我么不仅可以得到不动点，还可以得到临界指数。这是我们下一节的内容。在那之前，我们来看一个稍微复杂一点的重整化群的例子。

例 13.3 (多层级菱形晶格上的Ising 模型). 多层级菱形晶格上的Ising 模型： $H = \sum_{\langle ij \rangle} (s_i s_j)$ ，其中菱形晶格由一个菱形通过理论上的无穷多次迭代生成。每一次迭代把菱形的一条边扩展成一个菱形。

我们还是尝试用格点消去法：去掉一个菱形的中间的两个点，让这个菱形回复到上一级的晶格。由于理论上我们这个晶格通过无穷多次迭代生成，所以这个迭代不改变整个晶格。

通过上面的两个例子，我们看到，从重整化群的角度来看，相变就是一个系统的特征关联长度从有限的变成无限的于是标度变换不变，而不在这个点上的系统在标度变换下不稳定。所以，这个重整化群的方法是一个可以研究出现这种临界现象的相变的一般方法。对于关联长度不出现这个变化的相变系统，这个方法当然也就不适用了。不过，我们在这里考察的都是出现这样的关联长度的变化的相变。

了解了直接求解配分函数、Monte Carlo 模拟和重整化群方法之后，我们再用Ising 模型来讨论平均场的方法。

例 13.4 (一维Ising 模型的平均场). 一维Ising 模型的平均场: $H = J \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1}$ 。

假设 $\langle s_j \rangle = m$ 而且 $s_j = m + \delta_j$, 于是,

$$H = (N - 1) Jm^2 + 2Jm \sum_{j=1}^N \delta_j + o(\delta). \quad (13.5)$$

其中常数系数 $N - 1$ 是考虑到边界条件。如果我们用周期边条件, 则应该是 N 。这个表达式的第一项是常数, 忽略不计, 最后一项高阶小量, 忽略不计。因此, 我们唯一要考虑的是中间一项。然后, 由于一会儿我们会看到的原因, 我们再用原始的 s_j 变量换回来, 我们得到

$$H = 2Jm \sum_{j=1}^N s_j. \quad (13.6)$$

其中, 我们再一次扔掉了常数项。这是一个非常简单的单体问题, 于是

$$m = \langle s_j \rangle = \frac{e^{-\beta 2Jm} - e^{\beta 2Jm}}{e^{-\beta 2Jm} + e^{\beta 2Jm}} = \tanh(\beta 2Jm). \quad (13.7)$$

这个方程除了 $m = 0$ 之外, 根据 $\beta 2J$ 的情况还可能存在着另外两个解或者零个解。这个条件是,

$$\beta_c 2J = 1 \rightarrow T_c = 2k_B J. \quad (13.8)$$

其实, 我们可以把这个例子的自由能算出来, 把忽略掉的常数都加回来, 我们得到

$$F = -k_b \ln Z = Jm^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(2\beta Jm)). \quad (13.9)$$

这个表达式将来在讨论 Landau 的相变的一般理论的时候有用。

如果我们考虑一个稍微复杂一点的例子: 二维Ising 模型, 我们可以类似的地得到平均场近似下的解。

例 13.5 (二维Ising 模型的平均场). 二维Ising 模型的平均场: $H = \sum_{i,j} (s_{i,j} s_{i+1,j} + s_{i,j} s_{i,j+1})$ 。

假设 $\langle s_{i,j} \rangle = m$ 而且 $s_{i,j} = m + \delta_{i,j}$ 。

按照前面的例子, 我们忽略二阶小项采用自由边条件而不是周期边条件, 则

$$H = (L - 1)^2 Jm^2 + 2Jm \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{ij} + o(\delta). \quad (13.10)$$

这个 Hamiltonian 跟一维的情形完全一致，于是所有的下面的讨论也完全一致。相变会发生，而且发生在相同的临界点上。

其实，任意维数的Ising 模型，这个平均场技术给出来的都一样。然而，我们根据 Monte Carlo 的计算以及配分函数的计算，已经知道，一维Ising 模型没有相变现象而二维才有。这一点，是平均场理论描述不了的。那么平均场理论到底是什么层次的描述呢？这个问题，我们会留在专门的课程里面去回答，不过，下面的进一步讨论可以给出一些提示。

最后，我们给出来一个二级相变的唯象理论，这个唯象理论其实可以看作是平均场方法的理论基础：Landau 的二级相变理论。

假设一个物理系统的状态形式上完全由其序参量描述。实际上一个序参量的值可能对应着很多个微观状态，而且不同的序参量的值这个微观状态的个数可能不一样。这个我们一概不管。假设这个序参量仅仅是位置的函数 $\phi(\vec{x})$ 。我们从统计物理学知道一个系统的宏观状态在合适的条件下就是某一个热力学势函数取极值的状态。这里，我们考虑自由能，假设系统的状态就是自由能取极值的状态。于是，我们的任务，给定一个系统就是寻找使得自由能函数取极小值的序参量。对于Ising 模型，我们猜测这个自由能差不多有如下的形式：

$$F = \int dV \left\{ a |\phi(\vec{x})|^2 + b |\phi(\vec{x})|^4 \right\}. \quad (13.11)$$

考虑到我们感兴趣的状态实际上处处均匀的状态，我们让 $\phi(\vec{x}) = \Phi$ ，或者说我们先考虑均匀状态做为零级近似（关于为什么均匀状态是 F 函数的可能极值，其实是有其他的道理的： F 中原则上包含 $|\nabla \phi(\vec{x})|^2$ 而这一项对于非均匀系统总是取大于零的值）。于是，

$$f = \frac{F}{V} = a |\Phi|^2 + b |\Phi|^4. \quad (13.12)$$

没有一次项和三次项的原因是我们的 F 需要关于 $\Phi \rightarrow -\Phi$ 对称（来源于 H 的相同性质，关于所有的自旋翻转不改变 H 的值）。现在，我们来探讨这个函数的最小值。

$$f' = 2a\Phi + 4b\Phi^3. \quad (13.13)$$

于是，这个最小值可能出现在 $\Phi_0 = 0$, $\Phi_0 = \sqrt{\frac{-a}{2b}}$, $\Phi_0 = -\sqrt{\frac{-a}{2b}}$ 处，对应的 $f'' = 2a, -4a, -4a$ 。后面两个点是最小值当且仅当 $a \leq 0$ 。所以，如果我们要

求出现相变这样的现象：在某个温度以上，系统只有一个最小值而且其值为零；在这个温度一下，系统有两个最小值而且其值为非零，则我们需要，

$$a = a_0(T - T_c), \quad (13.14)$$

其中 a_0 是大于零的常数。Landau 就是这样对相变的唯象理论提出的要求。在这个要求下，相变的物理图景非常清楚，见下图：在 $T > T_c$ 的时候，系统只有一个极小值 $\Phi = 0$ ；在 $T < T_c$ 的时候，系统只有两个极小值 $\Phi \neq 0$ 。

这个关于 F 的函数形式的假设看起来很突然，关于系统 a 的要求也好像硬凑起来的。但是，这个理论在很多的具体系统的情况下，可以在一定的近似下被推导出来。超导的研究就是一个这样的例子 [?]。Landau 理论还可以用来讨论一级相变。这个关于 $\phi(\vec{x}) = \Phi$ 的理论，假设系统处处一致，也是平均场方法的基本精神。

其实，如果把公式 (13.9) 做一个 $m = 0$ 附近的展开，我们就会发现，其形式正好满足上面假设的情形，

$$f = 2J(1 - 2\beta J)m^2 + bm^4. \quad (13.15)$$

13.2 关联函数

物理量的关联函数，Green 函数

13.3 临界行为

重整化群与临界指数，普适性，有限大小标度

13.4 自组织临界性

沙堆模型，幂律统计，自组织驱动与外界驱动的对比

13.5 用互信息来寻找临界点

用于 Ising 模型 [59, 60]

13.6 相变与临界现象的几个应用

从生物学、生态学、沙堆模型的引用、传染病、渗流等拿过来一两个例子。评述参考文献的工作即可。

13.7 作业

13.8 本章小结

第十四章 网络科学概论

我们已经强调过相互作用在复杂性研究中的重要性。任何无相互作用的系统，或者是可以通过某些变换变成无相互作用的系统，我们都可以把这个系统的可观测量的演化方程写成一个线性方程，于是这个系统的动力学行为总是简单的。对于相互作用系统，例如经典力学、量子力学、随机过程，尽管用概率层次的描述的话形式上这个系统的状态演化的方程还是线性的，但是如果我们关心这个系统的可观测量的演化方程，这个方程必然是非线性的。于是，如果沿着力学的思想来研究所有的系统，对于包含相互作用的系统的研究就非常复杂。

复杂网络，为研究相互作用系统提供了一条新的思路。举个例子。我们在一个人群中考虑接触传染的传染病现象。如果我们关心整个系统任何时刻的状态，那么，我们需要了解这个人群中每一个人在什么时刻与什么人发生接触，这个接触是什么形式的，因为不同的形式可能传染的概率不一样，这个概率甚至会依赖于这个两个接触的人的身体的进一步情况，甚至精神状况而不仅仅是身体的物理状态。没准，这个还与这个接触发生在哪有关。如是，我们发现，一旦这个人群比较大，这个研究的思路，基本上就是没有希望的。我们首先需要建立描述这个人群的每一个人的合适的变量，然后考虑环境的描述，然后这个疾病与这些变量的关系，然后讨论这个系统的动力学。传统的传染病模型对这个问题做了一个非常简化的研究：个体同质化，忽略环境，于是个体均匀混合。相当于人群中的每一个人都被其他人包围着，人群的密度是一致的，然后与病毒携带者或者病人接触就会以一定的几率染病。在物理学，这个处理方法被称为平均场理论。这个方法获得结果往往能够反映大致的情况，但是细节上的描述能力有所欠缺。复杂网络的研究思路告诉我们，这里存在着一条介于完全的动力学描述和

同质化均匀化的平均场理论的中间道路。这条中间道路说在这个问题中，如果我们能够加上这个一个信息，考虑每一个人的经常接触的人有可能是不一样的，然后忽略什么地方什么时间形成接触，有必要的话，也可以考虑每一个人的体质等健康情况导致传染和被传染的几率不一样，那么这个时候，我们是不是就可以讨论一些比较细节的问题了呢：例如对于这个传染病来说，谁最危险，谁对于整个人群来说最危险（一旦其得病其他人得病的可能就大大升高），谁是控制核心（一旦这个人与其他人的接触切断，整个人群得病的几率就会大大降低）。这些问题，在平均场描述下都是解决不了的问题，而全信息的力学研究又难度太大。而且，实际上，在传染病的这个问题中，精确地掌握每一个个体的信息的重要程度远远比不上之前我们问的几个谁是各种各样的核心的这些问题。

于是，我们发现，在这个角度下面做研究，第一，我们需要一个每一个个体与其他人如何相连——这个被抽象为邻接矩阵，将来会定义；第二，我们需要每一个个体的一个体质的或者是其他的关于转染和被传染几率的一个综合描素——这个被抽象为顶点的权重；第三，我们也可以考虑每一条边可能是异质的——接触频率或者方式不一样导致传染的几率不一样，这个被抽象为变得方向和权重。合起来，我们把这三个数学结构的整体，称为网络。

当然，在有了这个网络之后，我们仍然可以想办法加上其他信息构成完整的动力学描述。但是，网络科学的魅力就是，很多时候，这个结构以及相应的结构信息的分析计算，就能够给我们要解决的问题很好的提示甚至答案。下面，我们就通过一点点基本理论的介绍——也就是分析及算哪些结构和怎么算的问题，然后通过具体的例子来体会如何把网络科学用在描述复杂的一般的相互作用的系统之上。

本章推荐阅读材料：Barabási的《Network Science》[105]，吴金闪和狄增如的《从统计物理学看复杂网络》[103]，汪小帆、李翔和陈关荣的《网络科学导论》[104]，Newman的《Introduction to Networks》[187]。

14.1 复杂网络的描述方法

在上面的复杂网络的描述基本思想之下，复杂网络的研究有几个主题。第一个是网络作为现象发生的舞台在多大程度上如何决定了现象的什么性质，我们称为网络的静态量（有时候也称为集合量或者结构量）的问题。例如，当我们考虑上面疾病传播问题的时候，显然网络的平均最短距离，也就是说平均来看网络上任意两点之间需要经过几次接触才能连到一起。然后，平均来看一个人有多少个有效的一定意义上独立的接触也是一个重要决定疾病传播过程的参数。这个参数实际上可以用两个量来描述：第一，顶点的度；第二、顶点的集聚系数，也就是这个顶点的邻居有多少的比例是直接相连的。当然，实际上，还存在着一些实际上不太能从直觉中体会到的关于这个舞台的描述也对这个过程有很大的影响，例如我们以后会介绍的度分布的指数，也就是说不仅仅是度的均值，这个分布的方差以及其它数字特征也有影响。关于这个第一个主题，我们回顾一下当时复杂网络兴起的初期的一个工作是有意义的。这个工作就是 Strogatz 和 Watts 的小世界网络模型以及小世界网络上振子同步的工作。我们在 14.2 节会把这个工作和欣赏这个工作所需要的基本概念放在一起介绍。

第二个是网络上顶点重要程度的刻画，也称为中心性问题。在一个异质的多体系统中，我们总是希望能够把这些个体的不同意义上的重要程度给一个描述，这样我们可以为了特定的目的把这些顶点区别对待。例如要保护连通性缩短距离我们需要有限保护或者提高哪一些顶点，要破坏连通性增加距离需要有限破坏哪一些，或者在上面的传染病模型中，哪一些对于控制传染病的传播是最关键的顶点等等。这个重要程度的刻画与其他的非网络科学的方式有一个不同之处，我们希望通过一个顶点在网络上的地位的不同来描述其特殊的地位，而不是通过这个顶点的其它不能放在网络上的性质。一定程度上说，我们希望描述一个位高权重者，不是通过这个位高权重者实际在完成的事情或者特有的人格魅力或者独特的学识和魄力，而是通过这个位高权重者如何与其他的顶点所代表的个体发生相互作用的角度来衡量。而且，在这里我们也不是预先就知道其它顶点所代表的个体的地位。整个分析都是基于网络结构以及网络描述本身来讨论的。

静态量和中心性问题这两个方面有的时候是交织在一起的：网络的某一个描述量可以用来解释网络上发生的现象，而这个量有经常能够用来给

网络上的顶点做一个排序。当然，其实这两个问题的角度是完全不一样的。

第三个方面，是问具有某种属性的网络是如何发展演变而来的，也就是网络的演化问题。当然，某些网络是可以通过完全的人工设计而来的，但是绝大多数的网络现象没有一个最终设计部门，是自发演化得来的。那么这个时候，如果我们发现，这些演化得来的网络存在着一些共性和个性，我们就会问这些共性的特征还有这些个性的特征是如何形成的。这个问题的研究主要是满足好奇心的问题，但是如果需要对这样的一个自发演化得来的网络进行干预，那么这个问题的研究的结果也是有益的。

第四个方面，是问有哪些动力学现象在网络上的表现和其它背景舞台上的表现不一样的，也称作网络上的动力学。其实，这个问题和第一个问题在一定程度上是相关的，只不过这个时候我们的关注的重点，也就是研究的对象是动力学过程。之前的问题中关注的主要还是描述背景舞台，也就是网络，的量。

第五个方面，是问有哪些问题是必须通过网络科学的角度和技术来回答的或者说通过网络科学的角度和技术能够回答的更好，是其它的研究方法比不上的，也就是做网络科学的独特的应用的问题。在一个技术、一个思想或者说一门学科成熟的过程中，这个独特的应用问题总是一个非常核心的问题。我们认为，网络科学在这一点上是很有潜力的。

在这五个方面的主题以及简化描述的思想之外，还有一个复杂网络研究的非常重要的思想：直接和间接效应的结合。如果一个现象采用网络这样的数学语言描述之后，其现象以及后续的研究都不超过网络上的直接统计量，也就是顶点的度，这样的不需要考虑网络上的超过两个顶点之间的路径的量，那么，实际上，网络的描述在这个问题中，不发挥任何作用。因此，在网络科学中，综合考虑直接和间接的效应，是一个核心主题。

理解了网络研究的这五个主题和一个思想之后，我们来分别阐述网络研究的这几个方面。其中，我们导论部分已经讨论过的广义投入产出在体现网络分析的核心思想——简化、综合直接和间接效应——这两个方面非常具有代表性。

14.2 基本静态量与中心性

举例：小世界模型举例：K-core 和 K-shell 的原始文章度、集聚系数、介数、K-core、K-shell、平均最短路径、集团结构等等等

14.3 网络演化

BA 模型、局域机制问题和局域机制模型

14.4 网络上的动力学

14.5 多层网络

14.6 网络科学应用

14.6.1 用网络研究方法增进人类交往，提高创造性和生产力

Alex Pentland

14.6.2 用网络研究方法发现容易发生脑退化的人

14.6.3 连起来的树木才是森林，用网络研究森林

14.6.4 网络用于研究科学学

14.7 再论网络的精神

14.7.1 几何性

14.7.2 网络效应

14.8 作业

14.9 本章小结

在这一章里，我们主要讨论了网络研究的思想——把相互作用抽象成存在与否——和研究的主题——网络研究的静态量、中心性、演化、动力学模型和独特应用，捎带着用一些例子讲解了一部分网络研究的概念和技术：度、集聚系数、介数、K-core、K-shell、平均最短路径、集团结构、BA模型等等。网络科学还是一个处在发展阶段的学科，新的概念会继续产生，新的独特的应用也不会不断地被创造出来。这些基本的概念和技术仅仅给读者提供一个在这个领域里面进一步思考和工作的基础。例如，网络的控制 [188]：在网络上放上一个线性的动力学系统，通常每一个顶点一个力学变量，然后讨论使得这些力学变量到达期望的状态的路径的问题，是近几年兴起的一个研究方向。但是，实际应用的背景以及在实际问题中如何控制的问题还有待于进一步的研究。

网络改变世界，网络是系统的骨架，是一般的系统科学描述系统的方法之一，就好像系统图示法。其实，系统图示法也是对系统的一种网络描述。下面这张图总结了我了解的以及我自己的工作中用网络来描述和解决问题的一些工作，并且强调了网络的基本精神——几何性和网络效应。这张图有网络版本。¹

¹纸版图书可以访问如下超链接：<http://cmap.systemsci.org/rid=1RX18SBYK->

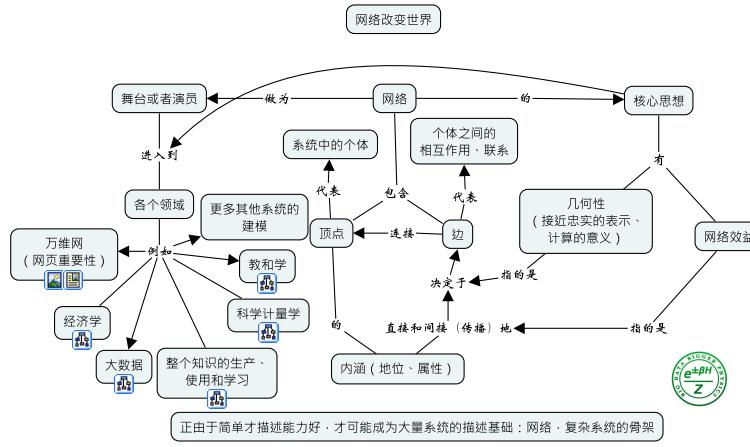


图 14.1: 网络可以用来描述大量的具体系统，并且称为发展一般方法来解决具体系统问题的基础。

第十五章 广义投入产出分析

投入产出分析是经济学家Leontief提出来回答经济系统中衡量哪个部门更重要以及做响应分析的 [66, 67]。所谓响应分析的意思就是，假设整个系统（国家、全球、地区等）的经济生产保持不变的条件下，如果社会增加了对某个产业的需求或者某个产业增加了供给，会产生什么样的后续影响。其重要思想就是联系和联系的传播效应。例如，当讨论一个部门的重要性的时候，这个部分的总产出或者收到的总投入，这两个直接量，可以当做重要性的衡量指标。但是，间接联系进入重要性也是非常自然的。你设想一下， i 和 j 的总产出一样， i 的主要产品进入了将来会造成重要影响的产业，而 j 产品大部分都进入了没什么后续影响力的部门，例如被当做柴火烧掉了（当然，假设我们不是在一个快要冻死饿死就需要柴火的场景之下）。自然 i 的影响力更大。或者更简单的例子， i 和 j 是两个投资人， i 投给了一个发展的很好的项目， j 投给了一个一直没有发展起来的项目。那么，自然 i 的影响力更大。类似的，当衡量 i 所投资的项目的时候，也得看它的直接量和间接量。因此，合起来，考察任何一个部门的影响力的时候，都需要把各阶联系综合考虑。在 2.8 节中我们已经介绍了投入产出分析的这个综合各阶联系的思想、初步的数学以及一些典型的例子。这一章，我们来系统性地学习投入产出分析及其变体，以及各种变体适用于解决什么问题。

为什么把投入产出分析当做系统科学典型分析方法的一部分呢？因为拥有这样的投入产出关系——系统的一个单元从系统的另一个单元接收到物质（能量）和信息等的流然后又在一定的处理加工之后变成产出接着投入系统的另一个单元——的系统非常之多。大量的系统都可以抽象成这样的元素之间具有投入产出关系的系统。例如经济产业部门之间、环境和产业之间、食物链、食物链和产业和环境之间、人体或者动物各个器官之间

的物质和信息流、一个系统内的化学反应之间的依赖关系、论文之间的思想和概念的流动、学科的概念之间的内在逻辑依赖关系、学科之间的依赖关系、科学的研究和技术开发（专利）之间的思想的流动、汉字之间的字形字义关系等等。投入产出分析可以用统一的框架来分析这些具有投入产出关系的系统。因此，这是适用于一般的系统的分析方法，并且由于系统本身可以是任何一个具体的学科的研究对象，这个分析方法本身就是一个跨学科的方法。这样的方法不适合放到任何一个学科的内部。如果强行放到学科的内部会造成人为的壁垒而阻碍这个方法发挥更大的作用。再加上其分析的思想正好体现了“从直接到间接，从个体到整体”的系统科学的典型思维方式，于是，我们把它看做系统科学的典型分析方法之一。

15.1 几种广义投入产出矩阵的定义

考虑一个 N 个部门构成的封闭系统。在某些问题的研究中，由于数据可获得性或者我们专门想看看部门 N 对系统的影响，有的时候需要把例如第 N 个部门拿出来当成外界。这个时候，系统就成了 $(N - 1)$ 个部门的开放系统。或者，反过来，如果我们一开始拿到的数据就是一个 $(N - 1)$ 个部门的开放系统，当我们需要把这个系统当做封闭系统来分析的时候，我们就引入一个第 N 个部门——本来是一开始的系统的外界——来构成一个封闭系统。当然，你可以问，为什么增加一个系统之后就构成封闭系统而不是很多个系统？实际上，这个第 N 个部门是所有的外界的集合。好了有了这个认识之后，我们把所有的系统都看做是一个 N 个部门构成的封闭系统。当我们需要专门研究其中的一部分的时候，我们再把第 N 个部门拿出来当成外界。

在介绍广义投入产出分析之前，我们先来定义几个矩阵，以及讨论一下这几个矩阵之间的关系。 N 封闭系统各个部门之间的投入产出关系有以下矩阵代表

$$x = \left(x_j^i \right)_{N \times N}, \quad (15.1)$$

其中 x_j^i 表示部门 i 到部门 j 的投入。上下指标的区别很重要，上角标是 x_j^i 这个流量的流出部门，下角标是这个流量的流入的部门。

定义部门 i 的总产出量 X^i 和收到的总投入量，简称总投入量， X_i ，

$$X^i = \sum_j x_j^i, \quad (15.2)$$

$$X_i = \sum_j x_i^j. \quad (15.3)$$

注意，由于不同的部门的投入可能对应着不一样的东西的。因此，一般情况下后者不能通过直接相加来定义，必须先转化成某个统一的单位。例如，工业和农业等不同的产业投入到第三产业（例如销售业）的产品一般不相同。这个时候，第三产业的总投入的计算可以通过把来自于工业和农业的投入先计算成货币形式，然后加起来当做总投入， $X_i = \sum_j p_j x_i^j$ 。不过，在这里，我们把 x_i^j 当做已经乘上了相应的 p_j 。如果在有的分析中需要强调 p_j ，我们再明确写出来。

有了投入产出量矩阵，我们定义后向投入产出关系矩阵 B 如下，

$$B_j^i = \frac{x_j^i}{X^i}. \quad (15.4)$$

用经济产业的投入产出分析的语言，这个 B_j^i 的含义是配方：每生产一个单位 j 产品，需要多少个单位的 i 产品。

定义前向投入产出关系矩阵 F 如下，

$$F_j^i = \frac{x_j^i}{X_i}. \quad (15.5)$$

用经济产业的投入产出分析的语言，这个 F_j^i 的含义是转化： i 产业每收到一个单位的来自于其他产业的投入，将会投给 j 产业多少个单位的 i 产品。注意转化端的比配方端的含义要稍微复杂一些：如果 i 接收到的投入不是配套的，原则上，就算增加了投入量， i 产业也不能真的把这些投入变成产品从而投给 j 。

由于矩阵 B 是从需求的角度来看的，而矩阵 F 是从生产的角度来看的，所以前者称为后向投入产出关系矩阵，后者称为前向投入产出关系矩阵。

定义前向概率转移矩阵 \mathcal{F} 如下，

$$\mathcal{F}_j^i = \frac{x_j^i}{X^i}. \quad (15.6)$$

用经济产业的语言，这个 \mathcal{F}_j^i 的含义是产出分配占比： i 部门的总产出当中多少比例（概率）进入了 j 部门。

定义后向概率转移矩阵 Mf 如下，

$$\mathcal{B}_j^i = \frac{x_j^i}{X_j}. \quad (15.7)$$

用经济产业的语言，这个 \mathcal{B}_j^i 的含义是投入占比： j 部门的收到的总投入当中有多少比例（概率）来自于 i 部门。

和矩阵 B 和 F 不同， \mathcal{F} 和 \mathcal{B} 都是概率转移矩阵：每个元素都大于等于零，同时， \mathcal{F} 的下标取和为 1 ($\sum_j \mathcal{F}_j^i = 1$)， \mathcal{B} 上标取和为 1 ($\sum_i \mathcal{B}_j^i = 1$)。由于矩阵 \mathcal{F} 是从产出的角度来看的，而矩阵 \mathcal{B} 是从投入的角度来看的，所以前者称为前向概率转移矩阵，后者称为后向概率转移矩阵。更好的名字其实是， B 为需求端投入产出关系矩阵， F 为产出端投入产出关系矩阵， \mathcal{F} 为产出端概率转移矩阵， \mathcal{B} 为需求端概率转移矩阵。

定义总产出量矩阵 \mathcal{O} 和总投入量矩阵 \mathcal{I} ，

$$\mathcal{O}_j^i = \delta_j^i X^j. \quad (15.8)$$

$$\mathcal{I}_j^i = \delta_j^i X_i. \quad (15.9)$$

也就是把 i 部门的总产出或者总投入放到对角线上得到的矩阵。于是，其逆矩阵就是

$$\mathcal{O}^{-1} = \left(\delta_j^i \frac{1}{X^j} \right)_{N \times N}. \quad (15.10)$$

$$\mathcal{I}^{-1} = \left(\delta_j^i \frac{1}{X_i} \right)_{N \times N}. \quad (15.11)$$

用这两个矩阵可以发现矩阵 B 和矩阵 \mathcal{F} 之间的关系，

$$B = x\mathcal{O}^{-1}, \mathcal{F} = \mathcal{O}^{-1}x \implies B = \mathcal{O}\mathcal{F}\mathcal{O}^{-1}. \quad (15.12)$$

于是，矩阵 B 和 \mathcal{F} 的本征向量一一对应。假设 $|b\rangle$ 是 B 的一个右本征向量，也就是

$$B|b\rangle = b|b\rangle \quad (15.13)$$

则

$$\mathcal{F}(\mathcal{O}^{-1}|b\rangle) = \mathcal{O}^{-1}x\mathcal{O}^{-1}|b\rangle = \mathcal{O}^{-1}B|b\rangle = b(\mathcal{O}^{-1}|b\rangle). \quad (15.14)$$

也就是说，矩阵 B 和 \mathcal{F} 的本征值相同本征向量一一对应，两者的右本征向量之间的关系就是 $|b\rangle$ 和 $\mathcal{O}^{-1}|b\rangle$ 。同理，左本征矢量之间也是一一对应的，而且 F 和 \mathcal{B} 之间也有类似关系，见习题 15.1。

习题 15.1 (矩阵对 B 、 \mathcal{F} 和矩阵对 F 、 \mathcal{B}). 证明矩阵 B 和 \mathcal{F} 的本征值相同本征向量一一对应，两者的右本征向量之间的关系就是 $|b\rangle$ 和 $\mathcal{O}^{-1}|b\rangle$ ，两者的左本征向量之间的关系就是 $\langle b|$ 和 $\langle b|\mathcal{O}$ ；证明矩阵 F 和 \mathcal{B} 的本征值相同本征向量一一对应，两者的右本征向量之间的关系就是 $|f\rangle$ 和 $\mathcal{I}|f\rangle$ ，两者的左本征向量之间的关系就是 $\langle f|$ 和 $\langle b|\mathcal{I}^{-1}$ 。

我们再来讨论一下这些矩阵的左右矢量的可能的形式。首先，对于概率转移矩阵，我们有平庸本征向量。例如， \mathcal{F} 的存在一个本征值为 1 的平凡右矢量 $|q\rangle = [1, 1, \dots, 1]^T$ 。证明如下，

$$\mathcal{F}|q\rangle = \sum_{ij} \frac{x_j^i}{X^i} |i\rangle \langle j|q\rangle = \sum_{ij} \frac{x_j^i}{X^i} |i\rangle = \sum_i \frac{\sum_j x_j^i}{X^i} |i\rangle = \sum_{ij} |i\rangle = |q\rangle. \quad (15.15)$$

于是， B 的也就存在一个本征值为 1 的平凡右矢量 $\mathcal{O}|q\rangle = [X^1, X^2, \dots, X^N]^T$ 。同理， \mathcal{B} 的存在一个本征值为 1 的平凡左矢量 $\langle q| = [1, 1, \dots, 1]$ 。 F 的也就存在一个本征值为 1 的平凡左矢量 $\langle q|\mathcal{I} = [X_1, X_2, \dots, X_N]$ ，见习题 15.2。这里“平凡本征向量”的意思是这些本征向量是不用去求的直接就可以猜出来的。

习题 15.2 (B 、 \mathcal{F} 、 F 、 \mathcal{B} 的平凡本征向量). 证明矩阵 B 和 \mathcal{F} 分别有平凡右本征向量 $\mathcal{O}|q\rangle = [X^1, X^2, \dots, X^N]^T$ 和 $|q\rangle = [1, 1, \dots, 1]^T$ ，矩阵 F 和 \mathcal{B} 分别有平凡左本征向量 $\langle q|\mathcal{I} = [X_1, X_2, \dots, X_N]$ 和 $\langle q| = [1, 1, \dots, 1]$ 。

习题 15.3 (B 、 \mathcal{F} 、 F 、 \mathcal{B} 都只有平凡本征向量的情况). 证明当投入产出矩阵满足 $X^i = X_i$ 的时候，所有的矩阵 B 、 \mathcal{F} 、 F 、 \mathcal{B} 的无论左侧还是右侧最大本征值对应的本征矢量都是平凡的。注意， $X^i = X_i$ 只需要各个部门都有守恒性：总接受的投入等于总产出，而不需要矩阵 x 完全对称。

为什么我们关心概率转移矩阵 \mathcal{F} 和 \mathcal{B} 的本征值为 1 本征向量呢？对于概率转移矩阵（每个元素都非负的方阵），Perron-Frobenius 定理告诉我说，其存在最大本征值（而且可以证明这个最大本征值是 1，见习题 15.4），并且必定存在至少一个各个元素都非负的本征向量对应着这个本征值。对于概率转移矩阵来说，每一次作用到一个矢量上，都代表对这个矢量的重

新分配,

$$\langle p(t+1) \rangle = \langle p(t) \rangle \mathcal{F} \Leftrightarrow p^i(t+1) = p^i(t) \frac{x_j^i}{X^i}, \quad (15.16)$$

$$|p(t+1)\rangle = \mathcal{B}|p(t)\rangle \Leftrightarrow p_i(t+1) = \frac{x_j^i}{X_j} p_j(t). \quad (15.17)$$

于是, 每个元素都非负的本征向量的含义就是这个概率转移矩阵的不变分布。

习题 15.4 (\mathcal{F} 和 \mathcal{B} 的最大本征值). 基于 Perron-Frobenius 定理证明矩阵 \mathcal{F} 和 \mathcal{B} 的最大本征值是 1。(提示: 对概率转移矩阵的本征向量表达式求行和或者列和)

为了理解上的方便, 我们把 Perron-Frobenius 定理写在这里, 而不去证明。证明可以参考詹兴致的《矩阵论》[189] 或者 Wikipedia 上的相应页面。

定理 15.1: Perron 定理

果一个方阵的各个元素都大于零, 则这个矩阵存在一个唯一的绝对值最大的本征值, 其对应的唯一的本征向量各个元素也大于零, 并且只有这个本征向量各个元素都大于零, 其他的本征向量都存在负的元素。

当把每个元素都大于零的要求降低为非负的时候, 我们有如下结论: 非负方阵存在一个绝对值最大的本征值, 其对应的本征向量非负。但是, 这个本征值对应的向量不一定唯一可以多个, 另外也还可以存在其他和这个本征值绝对值一样大的本征值。为了尽可能使得本征值唯一、本征值对应的本征向量唯一、本征向量非负且其他本征向量都有负值, 数学家们发现, 只要增加一个叫做不可约的条件就可以。可约的意思就是一个矩阵可以通过置换矩阵做相似变换变成上三角块的形式。不可约矩阵就是不能置换矩阵做相似变换变成上三角块的形式的矩阵。直观上来说, 矩阵 A 不可约的意思就是从任何一对位置 (i, j) , 如果每走一步就对应着矩阵相乘的话, 都是可达的, 也就是存在某一阶的矩阵的幂使得 $A_{ij}^n \neq 0$ 元素不为零。

定理 15.2: Perron-Frobenius 定理

负不可约方阵存在一个绝对值最大的本征值（注意，不一定唯一，其他本征值的绝对值可能跟这个本征值的绝对值一样大），其对应的唯一的本征向量的各个元素都大于零，且只有这个本征向量各个元素都大于零，其他的本征向量都存在负的元素。

在概率转移矩阵上，这个定理保证了稳定分布的存在：这是一个各个元素都大于零的本征向量，而且正好对应着最大本征值也就是 1，表示不变分布；同时，其他任何本征向量都有负值不能当做概率分布。

有了这些矩阵的定义和数学上的准备，我们就可以开始真正地讨论投入产出分析了。

15.2 传统投入产出

传统的经济学投入产出分析是非常成熟的技术。我们介绍这一部分主要是为了加深对投入产出分析的理解。

15.2.1 需求端投入产出分析

传统经济学的投入产出分析问这样的问题：第 N 部门（其代表消费者、政府、进出口，其他 $(N - 1)$ 个部门属于生产部门，例如农业、矿业、金融业等等），增加了对其他某个 j 部门的需求，整个系统的各个部门的产出会发生什么变化。

我们从 X^i 的定义开始，

$$X^i = \sum_{j=1}^{N-1} x_j^i + x_N^i = \sum_{j=1}^{N-1} x_j^i + Y^i = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{x_j^i}{X^j} X^j + Y^i \quad (15.18)$$

这时候我们用 B 矩阵的定义，得到

$$X^{(-N)} = B^{(-N)} X + Y^{(-N)} \Rightarrow X^{(-N)} = (1 - B^{(-N)})^{-1} Y^{(-N)}. \quad (15.19)$$

其中 $B^{(-N)}$ 就是 B 矩阵去掉 N 行 N 列剩下的矩阵。 $X^{(-N)}$ 和 $Y^{(-N)}$ 也类似。于是，我们就有了从 $Y^{(-N)}$ 得到 $X^{(-N)}$ 的一个线性方程。其中唯一的计算就

是矩阵逆，

$$L_B^{(-N)} = (1 - B^{(-N)})^{-1}, \quad (15.20)$$

称为Leontief 矩阵或者Leontief 逆。根据线性性，对于任何一个 $\Delta Y^{(-N)}$ 我们都有

$$\Delta X^{(-N)} = L_B^{(-N)} \Delta Y^{(-N)}. \quad (15.21)$$

这个公式的含义也非常直观。运用 $(1 - x)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$ ，我们有

$$\Delta X^{(-N)} = \Delta Y^{(-N)} + B^{(-N)} \Delta Y^{(-N)} + B^{(-N)} B^{(-N)} \Delta Y^{(-N)} + \dots. \quad (15.22)$$

这个公式的含义就是，为了满足消费者的需求 $\Delta Y^{(-N)}$ ，产业部门首先需要生产出来这些产品 $\Delta Y^{(-N)}$ ，接着需要生产出来用来生产这些产品的原材料也就是 $B^{(-N)} \Delta Y^{(-N)}$ ，接着需要生产原材料的原材料也就是 $B^{(-N)} B^{(-N)} \Delta Y^{(-N)}$ ，原材料的原材料的原材料，……。因此 $B^{(-N)}$ 也正好就是我们说的直接联系——原材料， $B^{(-N)} B^{(-N)}$ 也正好就是我们说的第二级的联系——原材料的原材料，……，而合起来之后的 $L_B^{(-N)} = (1 - B^{(-N)})^{-1}$ 则综合反映了各阶的联系。顺便，第一项可以看做单位矩阵 I 乘以 $\Delta Y^{(-N)}$ ，而单位矩阵就是没有联系：自己就管自己的意思。

这个公式 (15.21) 可以看做一种响应。对于任意的 $\Delta Y^{(-N)}$ ，例如，根据其他的模型或者经验，我们预期今年的中国消费者会购买更多的汽车，同时会吃掉更多的猪肉，更少的大豆，我们都可以得到相应的产业部门增加或者减少的响应。

这个公式 (15.21) 还可以看做一种分解：当第 N 个部门增加对一个其他部门（记为 j 部门）的需求，也就是取 ΔY 可以是 $e_j = (0, \dots, 1_j, 0, \dots, 0)^T$ 仅仅在第 j 个位置有一个 1 这样的单位矢量，时候计算出来的 $\Delta X^{(-N)}$ 就是各个生产部门为了生产一个被最终消费者消费掉的 j 产品所做的自己部门

的生产的量。于是，如果我们把整个的最终消费 $Y^{(-N)}$ 看作是如下分解的话，

$$\begin{bmatrix} x_N^1 \\ x_N^2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_N^j \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = Y^{(-N)} = \sum_j Y^j e_j = \sum_j x_N^j \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ 1_j \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (15.23)$$

然后，各个产业部门的生产量也就成了下面的分解

$$X^{(-N)} = \sum_j x_N^j (L_B^{(-N)} e_j). \quad (15.24)$$

也就是说，我们怎么来看各个产业部门的生产量呢？可以看做是为了生产出来消费者对每一项产品 j 的需求量 $x_N^j (L_B^{(-N)} e_j)$ 的加总。其中 $x_N^j (L_B^{(-N)} e_j)$ 的含义也特别清楚，就是所有产业部门为了生产出来一个 j 产品所需要的直接和间接生产的总和 $(L_B^{(-N)} e_j)$ “乘以” 消费者对 j 产品的总需求量 x_N^j 。

这个分解的视角非常的有意义。在分解以前，当我们看到 $X^{(-N)}$ 的时候，我们只能了解到这是各个部门的总产出量。在分解以后，我们看到，其实这个总产出量 $X^{(-N)}$ 可以看做很多一定意义上独立的项的加总，每一项分别对应着为了满足消费者对于某个单独的产业的需求整个产业所需要的生产量。也就是说，一定程度上，我们可以度量一个个的单独产业 j 的影响力，而且这个影响力并不是直接就是 x_N^j ，也不直接就是 X^j 或者 X_j ，而是 j 部门的总影响力 $|x_N^j (L_B^{(-N)} e_j)|$ 或者 j 部门的单位影响力 $|(L_B^{(-N)} e_j)|$ 。写成矩阵元素的形式也就是

$$|x_N^j (L_B^{(-N)} e_j)| = \sum_i (L_B^{(-N)})_j^i x_N^j, \quad (15.25)$$

$$|(L_B^{(-N)} e_j)| = \sum_i (L_B^{(-N)})_j^i. \quad (15.26)$$

也就是说， j 部门的单位影响力不过就是Leontief 矩阵第 j 列的列和，而总

影响力是Leontief 矩阵第 j 列的列和乘上总需求 x_N^j 。这些信息都是分解以后才能看到的。

顺便，为什么传统经济学投入产出分析需要把第 N 个部门，也就是消费者，单独拿出来呢？首先，其他都是产业部门，这是最终消费部门，从经济学意义上来说，消费者这个最终需求最终拉动力，就是特殊的。所有产品的生产，尽管很多时候当做中间产品用于生产其他产品，但是最终是为了满足消费者需求。其次，在投入产出表的数据中， $x_j^i, x_N^i (i \neq N)$ ，都比较容易获得而且准确，但是 x_i^N ——消费者投入到每一个产业的“产品”也就是劳动力——非常难以准确衡量和获取数据。注意，这个劳动力实际上包含难以客观度量的创造性投入。当然，你说，是不是能够用每个行业 i 在购买劳动力上支出，也就是工人工资，来当做 x_i^N ？一定程度上是可以的。不过，一定要注意，实际上劳动力这个产品在每个个体劳动者上的差异特别大。由于 x_i^N 的这些问题，不如，就找一个不需要 x_i^N 的分析方法好了。实际上，我们这里的所有的计算，只需要用到 x_j^i 和 $x_N^i (i \neq N)$ 。也就是说，实际上，我们相当于把最终消费者部门 N 当做了产业系统的外生部门， x_j^i 看做了开放系统。不管是问题背景本身的原因（最终消费者和产业分开），还是技术上的原因（ x_i^N 不十分可靠），我们经常会遇到需要把一个或者几个部门当做系统的外界来处理。

15.2.2 需求端投入产出分析小结

在做需求端投入产出分析的时候，我们从投入产出量矩阵 $x = (x_j^i)_{N \times N}$ 开始，先得到投入产出关系矩阵 $B = \left(\frac{x_j^i}{\sum_k x_k^i} \right)_{N \times N}$ ，然后去掉矩阵 B 的第 N 行和第 N 列得到 $B^{(-N)}$ ，最后算出来Leontief 矩阵 $L_B^{(-N)} = (1 - B^{(-N)})^{-1}$ 。得到 $L_B^{(-N)}$ 之后，针对相应的研究问题，来研究响应的问题（Leontief 矩阵乘以一个期望讨论的需求向量，公式 (15.21)) 或者分解的问题（Leontief 矩阵乘以一个单位向量 e_j ，公式 (15.24))，或者衡量某产业重要性的问题（求Leontief 矩阵列和，公式 (15.25)，公式 (15.26))。

Leontief 矩阵还可以用来回答更多的经济学问题，见 [67]。如果看经济学领域的投入产出分析的书籍和文章，要注意，通常它们把产业部门记做部门 $1, 2, \dots, N$ ，把最终消费者部门记为第 $(N + 1)$ 部门，或者没有记号直

接用语言称呼其为“最终消费者”部门。

15.2.3 产出端投入产出分析

有了这个技术，可以回答类似地回答第 N 部门增加了对其他某个 j 部门的投入，整个系统的各个部门的产出会发生什么变化的问题，就需要用 F 矩阵。再一次强调，产出端的研究的逻辑比不上需求端的严密。对于需求端，只要为了满足某个额外的需求，这个需求就会沿着产业链传播，造成各阶的直接和间接需求。对于产出端，实际上仅仅增加某一个部门 k 对另外一个部门 j 的投入，而不是按照比例所有部门一起增加对 j 的投入，不会增加 j 的产出。但是，在这里，我们假设每一份 j 收到的，无论来自于哪一个部门的投入，都会再生产之后，再一次从 j 投入到 i 。这也就是 $F_i^j = \frac{x_i^j}{X_j}$ 的含义。

我们从 i 部门接收到的总投入量¹开始，

$$X_i = \sum_{j=1}^{N-1} x_i^j + x_i^N = \sum_{j=1}^{N-1} x_i^j + V_i = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{x_i^j}{X_j} X_j + V_i, \quad (15.27)$$

写成矩阵的形式就是

$$X^{(-N)} = X F^{(-N)} + V^{(-N)} \Rightarrow X^{(-N)} = V^{(-N)} \left(1 - F^{(-N)}\right)^{-1}. \quad (15.28)$$

由于线性性，对于任何一个微小的投入量上的变化 $\Delta V^{(-N)}$ ，系统都有响应

$$\Delta X^{(-N)} = \Delta V^{(-N)} L_F^{(-N)}, \quad (15.29)$$

其中

$$L_F^{(-N)} = \left(1 - F^{(-N)}\right)^{-1}. \quad (15.30)$$

在经济学上，由于 x_i^N 表示消费者部门 N 对生产部门 i 的劳动力投入，因此也就被称为附加值（Value added），于是用字母 V 来表示。

注意，这里分量为 X^j （上标）的矢量和分量为 X_j （下标）的矢量不一样，前者放在矩阵右边，后者左边。习惯上，我们称前者为列矢量，后者为行矢量。物理上有两种方法对这样的矢量作区分，记作 X^a 和 X_a ，或者记

¹再一次强调，来自不同部门 j 的投入量不能直接相加， $\sum_j x_i^j$ 需要做一个单位转换。

作 $|X\rangle$ 和 $\langle X|$ 。前者的记号来自于Einstein，后者来自于Dirac。这个记号非常方便。我们下面会采用这两套记号。

和 $L_B^{(-N)}$ 的含义类似， $L_F^{(-N)}$ 也可以看作是响应、分解和重要性度量。例如，通过计算第 j 个行和我们就可以度量部门 j 在产出意义上的重要性，也就是，如果对 j 部门增加一个单位的投入，则其会把这个投入的效果放大到 $\sum_i (L_F^{(-N)})_i^j$ 。

15.2.4 产出端投入产出分析小结

在做产出端投入产出分析的时候，我们从投入产出量矩阵 $x = (x_j^i)_{N \times N}$ 开始，先得到投入产出关系矩阵 $F = \left(\frac{x_j^i}{\sum_k x_k^i} \right)_{N \times N}$ ，然后去掉矩阵 F 的第 N 行和第 N 列得到 $F^{(-N)}$ ，最后算出来Leontief 矩阵 $L_F^{(-N)} = (1 - F^{(-N)})^{-1}$ 。得到 $L_F^{(-N)}$ 之后，针对相应的研究问题，来研究响应的问题、分解的问题或者衡量某产业重要性的问题。Leontief 矩阵还可以用来回答更多的经济学问题，见 [67]。

15.3 传统投入产出 HEM

Hypothetical Extraction Method (HEM) 的意思是假想地从系统中去掉一个部门，然后看一看，在这个新的系统中，如果我们还要实现同样的需求（或者提供同样的投入，针对 F ），各个部门的总产出的变化。经济学投入产出分析的研究者用这样的方法来描述那个去掉的部门的重要性：如果去掉以后，为了满足消费者需求整个产业需要产生非常大的变换，则认为这个产业很重要，否则，这个去掉的部门就不太重要。

15.3.1 假想去掉一个部门的 HEM

我们先来讨论通过从矩阵 $B^{(-N)}$ 中再一次去掉整个部门 j 的方式来讨论部门 j 的重要性。定义 $L_B^{(-N-j)}$ ，

$$L_B^{(-N-j)} = (1 - B^{(-N-j)})^{-1}. \quad (15.31)$$

然后, 比较 $L_B^{(-N-j)}$ 和 $L_B^{(-N)}$, 例如通过比较 $X^{(-N-j)} = L_B^{(-N-j)}Y^{(-N-j)}$ 和 $(X^{(-N)})^{(-j)} = (L_B^{(-N)}Y^{(-N)})^{(-j)}$. 前者通过在总需求矢量中去掉第 j 个元素, 然后运用 $L_B^{(-N-j)}$ 来求总产出。后者表示在原来计算出来的总产出矢量 $X^{(-N)}$ 中直接去掉第 j 个元素。为了提供一个数字来相互比较, 当 X 矢量的每一个元素可以相加(不一定可以, 需要统一的单位)的时候, 我们还可以计算上面两个矢量的和来相比。直觉上, 我们可以认为, 如果这个差别非常大, 那么去掉这个部门 j 的影响很大, 于是回答了一开始的部门对系统整体影响力的问题。相互影响的问题也可以通过考察这个差别矢量而不是一个数来讨论。另外, 在产出端 F 矩阵以及其他矩阵 \mathcal{F}, \mathcal{B} 上可以做同样的分析。

除了对部门做 HEM, 我们还可以对联系来做 EHM, 也就是对比 $L_B^{(-N)}$ 和

$$L_B^{(-N-(ij))} = \left(1 - B^{(-N)} + B_j^i\right)^{-1}. \quad (15.32)$$

更进一步, 我们不仅仅可以考虑去掉一个部门或者一个联系, 我们还可以考虑同时去掉两个或者多个部门或者联系, 甚至考虑去掉部门和联系的组合。更进一步, 在讨论组合效应的时候, 我们还可以对比从原始投入产出矩阵中单独地去掉一个部门或者联系的变化之和和同时去掉两个部门的变化, 也就是做下面的对比

$$S(\Delta_1, \Delta_2) = (L_{\Delta_1} - L_0 + L_{\Delta_2} - L_0) - (L_{\Delta_1+\Delta_2} - L_0), \quad (15.33)$$

称作 Δ_1, Δ_2 的叠加 (Superposition) 效应或者相干 (Coherence) 效应。这样的分析, 原则上, 在后面的所有的 HEM 中都可以做一下。

15.3.2 看假想去掉任意子矩阵 Δ 的新角度

为了针对任意子矩阵 Δ 做 HEM, 我们需要把 HEM 换一个角度, 看作是给系统新增加一个部门, 然后把这个部门去掉。如何把 $B - \Delta$ 中的一般的 Δ 看做外界呢? 在原始的投入产出矩阵 x 中, 我们增加一个部门 $(N+1)$, 让这个部门代替 Δ 从系统中接受投入, 同时让这个部门代替 Δ 把其产出给

系统投入

$$x_{(N+1)}^i = \sum_{\forall(i,j) \in \Delta} x_j^i, \quad (15.34a)$$

$$x_j^{(N+1)} = \sum_{\forall(i,j) \in \Delta} x_j^i. \quad (15.34b)$$

也就是凡是从系统中去掉的 Δ 的元素，都改成从系统投入到部门 $(N+1)$ 和反过来从部门 $(N+1)$ 投入到系统。回到去掉整个部门 k 的特殊情形，我们就会发现，这个时候，正好部门 $(N+1)$ 代替了部门 k 。于是，以部门 k 为目标外界的开放系统的研究自然就成了以部门 $(N+1)$ 为目标外界的开放系统的研究。如果计算分析需要的话，相应的外界矢量是

$$(Y)_{1 \times N} = [x_{N+1}^i]_{1 \times N}. \quad (15.35)$$

整理出来这个分析过程就是，

$$((x)_{N \times N}, \Delta) \rightarrow (\bar{x})_{(N+1) \times (N+1)} \rightarrow (\bar{B})_{(N+1) \times (N+1)} \rightarrow (\bar{B}^{(-(N+1))})_{(N) \times (N)}. \quad (15.36)$$

然后，用这个 $(\bar{B}^{(-(N+1))})_{(N) \times (N)}$ 代替原来的 $B - \Delta$ 做后续分析，例如求矩阵逆和本征向量等。注意，这个看一般 HEM 的角度，更多的是一个把各种 HEM 分析统一起来看的角度。从元素值来说， $(\bar{B}^{(-(N+1))})_{(N) \times (N)}$ 完全就是 $B - \Delta$ ，或者比 $B - \Delta$ 多出来一个全等于零的行和列：当去掉一整个部门的时候， $(\bar{B}^{(-(N+1))})_{(N) \times (N)}$ 比 $B - \Delta$ 多一行一列，但是全都清空了。这样多出来的全都是零的行和列不影响矩阵 L 的计算。

例如，当 Δ 就代表去掉一个元素的时候， $\Delta_m^l = B_m^l$ 其他都是零，我们有 $x_{(N+1)}^l = x_m^l$, $x_m^{(N+1)} = x_m^l$ 。于是， $Y = [\dots, 0, x_{N+1}^l, 0, \dots]^T$ 。这个时候，我们计算出来的 $(1 - \bar{B}^{(-(N+1))})Y$ 正好反映了元素 x_m^l 在需求端的直接和间接传播效果。

15.4 目标外界投入产出

以上两个分析方法，主动或者被迫，先把封闭系统看作开放系统——把部门 N 独立出来，然后再来分析。在经济学中，部门 N 是最终消费者，独立出来有很好的理由。其到产业系统的投入 V 非常不容易跟踪。其内部的

再生产时间也远远比产业系统的再生产时间长。在大量的其他系统中，这样的分隔可能是不合适的。我们已经看到，经过这个分隔，实际上，我们讨论了部门 N 对部门 i 增加一个需求或者投入所带来的效果。现在，我们对任意一个部门 k 来运用这个分析。我们相当于问这样的问题：如果部门 k 增加了对某一个部门 j 的需求或者投入，在不改变系统结构的情况下，各个部门的总产出会如何变化。也就是把最终消费者部门 N 用一般的部门 k 来代替。

从任意部门总产出量的定义的一个把部门 k 当外界的拆分开始，

$$X^i = \sum_{j \neq k} x_j^i + x_k^i = \sum_{j \neq k} \frac{x_j^i}{X^j} X^j + x_k^i = \sum_{j \neq k} \frac{x_j^i}{X^j} X^j + (Y^{(-k)})^i. \quad (15.37)$$

我们有

$$X^{(-k)} = B^{(-k)} X^{(-k)} + Y^{(-k)}. \quad (15.38)$$

于是

$$X^{(-k)} = L_B^{(-k)} Y^{(-k)}. \quad (15.39)$$

其中

$$L_B^{(-k)} = (1 - B^{(-k)})^{-1}. \quad (15.40)$$

这个矩阵同样可以看做响应、分解和重要性。例如， $(L_B^{(-k)})_j^l$ 描述了 k 部门对 j 部门的一个单位需求的增加，导致的 l 部门的生产量——也就是谁会对 l 部门的需求——的增加。例如，这个矩阵的列和代表了如果部门 k 增加了对某一个部门 j 的需求，在不改变系统结构的情况下，各个部门的产出之和（在能够取和的情况下，否则就只好直接分析得到的列向量了）。我们把这个和记作

$$z_j^k = \sum_l (L_B^{(-k)})_j^l. \quad (15.41)$$

这个 z_j^k 可以看作是 k 对 j 的需求 x_k^j 的乘数，也就是响应系数。而

$$Z_j^k = \sum_l (L_B^{(-k)})_j^l x_k^j \quad (15.42)$$

可以看作联系 x_k^j 在系统里面传播扩散以后的总量。甚至，从这个矩阵，我们可以得到一个新的影响力矩阵

$$Z_B = (Z_j^k)_{N \times N}. \quad (15.43)$$

F 的问题可以做类似的分析。

15.5 本征向量 HEM

上面的目标外界投入产出方法回答了某个部门 k 增加（或者减少）一个单位的对 j 部门的投入（或者需求）在整个系统内传播的效果。在那里，我们的做法是把整体系统先看做是一个封闭系统，然后，拿出来一个部门当做外界，而把剩下的系统看作是开放系统。现在，如果我们不想拿出来一个部门来当外界，而是还保持封闭系统，我们有没有方法来度量某个部门的重要性？这就是这一节我们要讨论——本征向量 HEM。

对于封闭系统，矩阵 B 的右本征矢量定义是

$$B|1\rangle_B = |1\rangle_B, \quad (15.44)$$

其元素是

$$|1\rangle_B = (X^1, X^2, \dots, X^N)^T. \quad (15.45)$$

这个很容易验证。因此，这个矢量就是由各个部门总产出构成的，平庸的，不用通过计算本征向量来获得。于是，这个右本征矢量看起来就不能给我们的进一步分析带来太多价值。真的是这样吗？

我们注意到这个右本征矢量的另外一个解释：如果我们按照这个比例来投入产业系统的话，所有的原材料都会被用掉，不会浪费；所有的生产所需要的原材料也会得到满足，不会缺。因此我们把这个组合称作最优组合。这个时候，我们来看以下的矩阵 $B^{(-k)}$ 的最大本征值和相应的本征向量（假设本征矢量唯一，其存在性由 Perron-Frobenius 定理保证，唯一性需要矩阵非退化），

$$B^{(-k)} |\lambda_{Max}^{(-k)}\rangle_{B^{(-k)}} = \lambda_{Max}^{(-k)} |\lambda_{Max}^{(-k)}\rangle_{B^{(-k)}}. \quad (15.46)$$

我们发现，最大本征向量基本上可以看做新的去掉部门 k 之后的系统的最优组合，而最大本征值则是这个组合的效率。于是，我们定义

$$(F_{IO})^k = 1 - \lambda_{Max}^{(-k)}, \quad (15.47)$$

解释成 k 部门对系统整体的影响力 (Input-Output Factor, F_{IO})，也称为投入产出影响因子，而把向量 $\left| \lambda_{Max}^{(-k)} \right\rangle_{B^{(-k)}}$ 的 j 元素看做 k 对 j 的影响 (Input-Output Mutual Influences, MI_{IO})，也称为投入产出相互影响，

$$(MI_{IO})_j^k = \left\langle j \mid \lambda_{Max}^{(-k)} \right\rangle_{B^{(-k)}} - \langle j \mid 1 \rangle_B. \quad (15.48)$$

在这里，除了去掉一个或者多个部门，我们也可以考虑去掉一个或者多个联系，或者两者的组合。例如讨论下边的对比，

$$C(\Delta_1, \Delta_2) = \left(1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_1 - \Delta_2)}\right) - \left(1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_1)} + 1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_2)}\right), \quad (15.49)$$

称作 Δ_1, Δ_2 的叠加 (Superposition) 效应或者相干 (Coherence) 效应。

我们将来会用矩阵微扰论来进一步计算这个 F_{IO} ，并讨论它和 PageRank 的关系。

15.6 封闭和开放系统的 PageRank 和 CheiRank

通常的 PageRank 的定义是，从一个投入产出矩阵 $x^{(N-1)}$ 开始，定义一个概率转移矩阵 $\mathcal{B}^{(N-1)} = \begin{pmatrix} x_j^i \\ X_j \end{pmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}$ ，其中 $X_j = \sum_{k=1}^{N-1} x_j^k$ 。然后，做一个迭代过程，

$$P^{(N-1)}(n+1) = \alpha \mathcal{F}^{(N-1)} P^{(N-1)}(n) + (1 - \alpha) e \quad (15.50)$$

其中 $e = \frac{1}{N-1} [1, 1, \dots, 1]$ ，参数 $0 \leq \alpha \leq 1$ 其含义将来我们会更加清楚。在 Google 所用的 PageRank 中，这个参数取为 $\alpha = 0.85$ 。这个迭代过程也可以看作矩阵迭代乘法，

$$P^{(N-1)}(n+1) = (\alpha \mathcal{B}^{(N-1)} + (1 - \alpha) E^{(N-1)}) P^{(N-1)}(n) \quad (15.51)$$

其中 $E^{(N-1)}$ 是一个所有元素都是 1 的 $(N-1) \times (N-1)$ 矩阵。在这些迭代的不动点上，

$$P^{(N-1)} = P^{(N-1)} \alpha \mathcal{B}^{(N-1)} + (1 - \alpha) e, \quad (15.52)$$

其中 $e = \frac{1}{N-1} [1, 1, 1, \dots, 1]$, 或者矩阵本征向量的形式,

$$P^{(N-1)} = (\alpha \mathcal{B}^{(N-1)} + (1 - \alpha) E^{(N-1)}) P^{(N-1)}. \quad (15.53)$$

矩阵 $E^{(N-1)}$ 的引入, 可以看做计算细节上的要求: 按照 Perron–Frobenius 定理, 只有正元素矩阵能够保证最大本征值对应向量的唯一性, 因此, 无论 $\mathcal{F}^{(N-1)}$ 是否满足正元素的要求, 加上 $E^{(N-1)}$ 以后自然就满足正元素要求了。

实际上, 我们还可以从开放系统和封闭系统的角度来看这个矩阵 $E^{(N-1)}$ 的引入, 如图 15.1。定义一个 $N \times N$ 的矩阵 $x^{(N)}$,

$$x^{(N)} = \begin{bmatrix} & \begin{bmatrix} (1-\alpha) \\ \vdots \\ (1-\alpha) \end{bmatrix} \\ \alpha x^{(N-1)} & \\ & \begin{bmatrix} (1-\alpha) X_a & (N-1)\alpha \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (15.54)$$

这其中 $X_a = [X_1, X_2, \dots, X^{(N-1)}]^T$ 。这个矩阵的含义就是给原来的 $(N-1)$ 部门的系统增加一个部门 N , 然后, 原来的部门之间的流量缩小为原来的 α 倍, 从新部门 N 到每一个原来的部门 j 的流量概率是 $x_j^N = (1-\alpha) X_j$ 。注意, 这样做保持了总流量 X_j 不变。最后一列相当于取 $x_N^i = 1-\alpha$, $x_N^N = (N-1)\alpha$, 于是 $X_N = (N-1)(1-\alpha) + (N-1)\alpha = N-1$ 。也可以画出来相应的网络图, 如图 15.1。实际上图中显示为增加了“源”和“汇”两个部门, 实际上“源”和“汇”之间的连线完全可以看做“源”对“源”的投入流, 因此“源”和“汇”可以看做是同一个。在有些问题中, “源”和“汇”分开来看可能会更好一点。对这个补充以后的 $x^{(N)}$ 定义矩阵 $\mathcal{B}^{(N)}$, 我们有

$$\mathcal{B}^{(N)} = \begin{bmatrix} & \begin{bmatrix} \frac{(1-\alpha)}{N-1} \\ \vdots \\ \frac{(1-\alpha)}{N-1} \end{bmatrix} \\ \alpha \mathcal{B}^{(N-1)} & \\ & \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (15.55)$$

定义 $P^{(N)}$ 为 $\mathcal{B}^{(N)}$ 的最大 (值为 1) 右本征矢量, 则

$$P^{(N)} = \mathcal{B}^{(N)} P^{(N)}, \quad (15.56)$$

也就是

$$\begin{bmatrix} P^{(N-1)} \\ P^N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \mathcal{B}^{(N-1)} & \begin{bmatrix} \frac{(1-\alpha)}{N-1} \\ \dots \\ \frac{(1-\alpha)}{N-1} \end{bmatrix} \\ 1 - \alpha & \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P^{(N-1)} \\ P^N \end{bmatrix}. \quad (15.57)$$

这个方程具有唯一（可以乘上一个自由常数）的本征值为 1 的本征向量。我们只要写下来一个，那这个就是唯一解。可以验证，满足下面三个方程的解正好是我们要寻找的本征向量，

$$\sum_{i=1}^{N-1} P^{(N-1)}_i = 1, \quad (15.58a)$$

$$\alpha \mathcal{B}^{(N-1)} P^{(N-1)} + \frac{1-\alpha}{N-1} P^N = P^{(N-1)}, \quad (15.58b)$$

$$P^N = (1 - \alpha) \sum_{i=1}^{N-1} P^{(N-1)}_i + \alpha P^N. \quad (15.58c)$$

其中最核心的方程公式 (15.58) 正好就是公式 (15.52)。其中常数 P^N 会出现在 $P^{(N-1)}$ 的每一项中，因此，对 $P^{(N-1)}$ 的归一化操作就会消去 P^N 。常数 P^N 也可以通过公式 (15.58) 第三式来求解，得到 $P^N = 1$ 。

通过这个构造，我们发现，之前由于技术原因做的操作——给矩阵添加一个矩阵 $(1 - \alpha)E$ ，或者把做一个迭代过程——先矢量和原矩阵相乘再加上一个矢量 e ，可以看做是给原系统增加了一个特定的外界：从原系统获得挤出来的 $(1 - \alpha)$ 倍流量，同时把自身的总流量按照 $(1 - \alpha)$ 和 α 的比例在原系统和自己这个外界之间分配。现在我们把这个加了特定外界的系统看做一个复合系统，来看这个复合系统的定态，也就是其概率转移矩阵的不变分布——通过 $P^{(N)} = \mathcal{B}^{(N)} P^{(N)}$ 来定义的定态。

因此，我们说明了，传统的 PageRank 不过就是把原系统看做开放系统，然后配上一个外界构成封闭的符合系统的不变分布，如图 15.1。也就是说，从现在开始，开放系统的 PageRank 完全可以用合适的封闭系统的 PageRank 来代替。在这个视角下，我们来把一个一般的 N 个部门的封闭系统的 PageRank 分解成 $(N - 1)$ 个部门的开放系统的 PageRank 和一个外界。

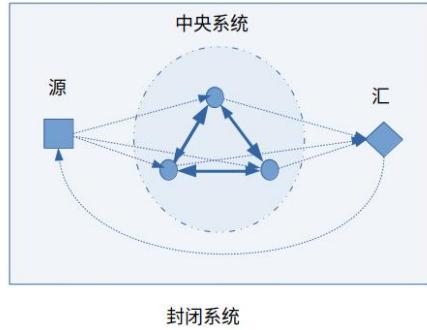


图 15.1: 一个系统可以看做是把一部分元素拿出去当做外界“源”和“汇”而得到的开放系统，也可以是在中央系统之上，增加外界“源”和“汇”而得到的封闭系统。开放系统投入产出分析实际上就是前者：最终消费者部门既是“源”又是“汇”。PageRank 算法实际上就是后者额外增加了一个既是“源”又是“汇”的部门。或者先看做“源”和“汇”两个部门，然后在两个部门之间再建立起来代表流量的连边。

首先，封闭系统的概率转移矩阵和定态分别定义为

$$\mathcal{B}^{(N)} = \begin{bmatrix} \mathcal{B}^{(N-1)} & [\mathcal{B}_N^1, \dots, \mathcal{B}_N^{(N-1)}]^T \\ [\mathcal{B}_1^N, \dots, \mathcal{B}_{(N-1)}^N] & \mathcal{B}_N^N \end{bmatrix}, \quad (15.59)$$

和

$$\mathcal{B}^{(N)} [P^{(N-1)}, P^N]^T = [P^{(N-1)}, P^N]^T. \quad (15.60)$$

我们假设 $\mathcal{B}^{(N)}$ 具有唯一的本征值为 1 的本征向量。也就是说， P^N 是一个确定值。我们来写下来 $P^{(N-1)}$ 满足的方程，

$$\mathcal{B}^{(N-1)} P^{(N-1)} + [\mathcal{B}_N^1, \dots, \mathcal{B}_N^{(N-1)}]^T P_N = P^{(N-1)} \quad (15.61)$$

记

$$e_P = [\mathcal{B}_N^1, \dots, \mathcal{B}_N^{(N-1)}]^T P^N = \frac{P^N}{X_N} [x_N^1, \dots, x_N^{N-1}], \quad (15.62)$$

代表了部门 N 对系统的流量输入，我们有

$$\mathcal{B}^{(N-1)} P^{(N-1)} + e_P = P^{(N-1)}, \quad (15.63)$$

也就是

$$P^{(N-1)} = \left(1 - \mathcal{B}^{(N-1)}\right)^{-1} e_P. \quad (15.64)$$

这就是个性化 PageRank 算法，其中 e_P 就是个性化矢量。在我们这里， e_P 可以看做是外界对系统的流量输入。到现在为止，我们统一了封闭系统的 PageRank（表现为不变分布本征矢量问题），开放系统的 PageRank（表现为平庸外界的矩阵逆问题），个性化 PageRank（表现为非平庸外界的矩阵逆问题）。它们都可以看作是封闭系统的 PageRank 的变体。

在考虑了一个自然的外界 N 之后， \mathcal{B} 的最大本征值就自然小于 1 了，也就使得公式 (15.64) 可解了。不过，如果我们直接从个性化矢量 e_P 开始，就需要想办法改造 \mathcal{B} ，而一般的替换为 $\alpha\mathcal{B}$ 由于 e_P 的每个元素取值不同，就不一定能够保证列和不变这个性质。使用的时候要注意。

基于 \mathcal{F} 的 CheiRank 计算和这里的基于 \mathcal{F} 的 PageRank 完全平行，其定义式是，

$$P^{(N-1)} = P^{(N-1)} \mathcal{F}^{(N-1)} + P_N \left[\frac{1-\alpha}{N-1}, \dots, \frac{1-\alpha}{N-1} \right] \quad (15.65)$$

在此我们就不再展开讨论了，见习题 15.5。

习题 15.5 (基于 \mathcal{F} 的 CheiRank 的封闭系统版本). 尝试构造基于 \mathcal{F} 的 CheiRank 的封闭系统版本，也就是增加一个部门 N 使得包含这个部门 N 的封闭系统本征向量问题 $\langle 1 | \mathcal{F} = \langle 1 | \mathcal{F}$ 和相应的开放系统的 CheiRank 的定义公式 (15.65) 相同。提示 $x^{(N)} = \begin{bmatrix} \alpha x^{(N-1)} & (1-\alpha) X^a \\ (1-\alpha)[1, 1, \dots, 1] & (N-1)\alpha \end{bmatrix}$ 。

最后，我们来讨论一下 PageRank 和投入产出分析的关系。由于和投入产出直接系数矩阵 B 紧密联系的是 CheiRank 的 \mathcal{F} 矩阵，在这里，我们讨论的是 B 和 \mathcal{F} 开放系统和封闭系统分析之间的关系。记

$$\mathcal{L}_{\mathcal{F}^{(N-1)}} = \left(1 - \mathcal{F}^{(N-1)}\right)^{-1}, \quad (15.66)$$

为 CheiRank 逆矩阵。由于我们有 $B = \mathcal{O}\mathcal{F}\mathcal{O}^{-1}$ ，我们发现 CheiRank 的本

征向量和逆矩阵与 Leontief 本征向量和逆矩阵非常相似,

$$|f\rangle = \mathcal{O}^{-1} |b\rangle, \langle f| = \langle b| \mathcal{O}, \quad (15.67)$$

$$L_B = \frac{1}{1-B} = \frac{1}{1-\mathcal{O}\mathcal{F}\mathcal{O}^{-1}} = \mathcal{O} \frac{1}{1-\mathcal{F}} \mathcal{O}^{-1} = \mathcal{O}\mathcal{F}\mathcal{O}^{-1}, \quad (15.68)$$

$$L_{B^{(-N)}} = \mathcal{O}^{(-N)} \mathcal{L}_{B^{(-N)}} (\mathcal{O}^{(-N)})^{-1}. \quad (15.69)$$

于是, 我们发现, CheiRank 和投入产出分析的公式, 不管是本征矢量问题, 还是矩阵逆问题, 都具有相似的结构。也就是说, $B_b^a X^b = X^a$ 可以看做是 $\mathcal{F}_b^a \mathcal{X}^b = \mathcal{X}^a$ (注意, 实际上这里的 $X^a = [X^1, X^2, \dots, X^N]^T$, $\mathcal{X}^a = [1, 1, \dots, 1]^T$)。那么, 自然, 去掉一个部门之后的投入产出分析 $X^{(-N)} = (1 - B^{(-N)})^{-1} Y^{(-N)}$, 就可以看做是 $\mathcal{X}^{(-N)} = (1 - \mathcal{F}^{(-N)})^{-1} \mathcal{Y}^{(-N)}$ (注意, 实际上这里的 $Y^{(-N)} = [x_N^1, x_N^2, \dots, x_N^{(N-1)}]^T$, $\mathcal{Y}^{(-N)} = [\mathcal{F}_N^1, \mathcal{F}_N^2, \dots, \mathcal{F}_N^{(N-1)}]^T$)。

反过来, $P_a \mathcal{F}_b^a = P_b$ 可以看做是 $\tilde{P}_a B_b^a = \tilde{P}_b$ (注意, 实际上这里的 $\tilde{P} = P \mathcal{O}^{-1}$)。那么, 自然, 去掉一个部门之后成了 $P^{(N-1)} = e_P (1 - \mathcal{F}^{(N-1)})^{-1}$, 就可以看做是 $\tilde{P}^{(N-1)} = \tilde{e}_P (1 - B^{(N-1)})^{-1}$ (注意, 实际上这里的 $e_P = \frac{P_N}{X^N} [x_1^N, \dots, x_{N-1}^N]$, $\tilde{e}_P = \frac{P_N}{X^N} [\mathcal{B}_1^N, \dots, \mathcal{B}_{N-1}^N]$)。

合起来, 我们发现, 投入产出分析和 CheiRank 关注的分别是 B 和 \mathcal{F} 的左右最大本征向量, 以及矩阵 $(1 - B^{(-N)})^{-1}$ 和 $(1 - \mathcal{F}^{(-N)})^{-1}$, 并且由于 $B = \mathcal{O}\mathcal{F}\mathcal{O}^{-1}$, $B^{(-N)} = \mathcal{O}^{(-N)} \mathcal{F}^{(-N)} (\mathcal{O}^{(-N)})^{-1}$, 两种分析只要做一种就可以完全知道另一种的结果。

因此, 我们发现, 实际上, PageRank (包含基于 \mathcal{B} 的 PageRank 和基于 \mathcal{F} 的 CheiRank) 和投入产出分析是完全统一的。做其中的一种计算就相当于做相应的矩阵的另一种计算。在这个意义上, 我们把 PageRank 和投入产出分析合起来, 称为广义投入产出。也就是说, 我们只需要做 PageRank 和投入产出两种分析之一, 就相当于做了两种。不过, 运算相对应, 算出来的结果也相对应, 不代表算出来的东西含义相同。因此, 在具体分析中, 由于面对的问题不一样, 需要采用合适的矩阵定义, 以及合适的计算。

之前我们还针对投入产出分析讨论过 HEM, 在这里, 我们也可以同样对 PageRank 来做 HEM, 去掉概率转移矩阵中的相应的行列或者元素。不过, 去掉部门或者元素, 都应该看做把这个部门或者元素当做外界来理解。

在统一了 PageRank 和传统投入产出分析之后, 我们其实会好奇, 那为什么这两个领域会独自发展, 而没有注意到两者其实是一样的? 也就是我

们问在投入产出经济学的研究中，PageRank 和 CheiRank 是否有经济学含义，以及反过来，在网页影响力排序等问题中，传统投入产出分析是否有意义。答案是，基本上都没有意义。从经济学投入产出分析的角度看来，由于经济系统具有守恒性 $X^i = X_i$ ，所有矩阵 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 的最大本征值对应的本征矢量都是平庸的，见习题 15.3。例如，我们来看一下 B 的左右本征矢量，

$$\sum_j B_j^i X^j = \sum_j \frac{x_j^i}{X^j} X^j = \sum_j x_j^i = X^i \Rightarrow BX = X, \quad (15.70)$$

$$\sum_j 1 \times B_j^i = \sum_j \frac{x_j^i}{X^j} = \frac{X_j}{X^j} = 1 \Rightarrow \langle 1 \rangle_B B = \langle 1 \rangle_B. \quad (15.71)$$

既然左右本征矢量都平庸，那就不用去考虑本征矢量的问题了。所以，经济学投入产出分析转而讨论分解和响应的视角。倒过来，我们从 PageRank 的角度来看经济学投入产出分析。你看，本来 PageRank 就是在看矩阵本征矢量，而对于任何一个投入产出系统，甚至都不需要守恒性（一般来说 PageRank 考虑的系统不守恒，不对称）， B 的最大右本征矢量本来就平庸，而左本征矢量刚好就对应着 PageRank 本征矢量。

也就是说，经济学投入产出分析由于注意到本征矢量平庸就不再考虑做本征矢量分析了，而 PageRank 呢由于某一侧的本征矢量平庸，就思考另一侧的本征矢量，另一方面，排序问题也没有需求做分解和响应的分析，只需要排个序。

现在，我们把两者统一了，甚至有了拓展（本征向量 HEM 方法和任意 Δ 以及多个 Δ 的叠加效果的广义投入产出分析），但是，到底在具体问题中，哪一个更加有意义，还依赖于具体问题的情景。统一以后仅有好处，第一是统一的看问题的角度和思路，于是任何投入产出系统的问题总是可以从封闭系统开始来描述然后需要的时候取某个 Δ ；第二是现在可以有意识地把**四种矩阵和五种分析**——封闭系统（左右本征向量问题）、开放系统的分析（左右矩阵逆问题）和本征向量 HEM，在具体问题中都试着寻找一下意义。保留对具体问题有意义的分析，丢弃对具体问题没有意义的分析。这样有意识地去寻找某个分析的意义，毕竟和偶然决定用哪一个不太一样。当然，我们已经注意到，在这 4 个分析中，很多分析是等价的，例如 B 和 \mathcal{F} 之间， F 和 \mathcal{B} 之间，所以，我们也没有真的就需要在任何问题中尝试这 20 个分析方法。到底多少种独立的分析我们会在本章最后来总结。

15.7 用于广义投入产出分析的矩阵微扰论

不管是传统的 HEM，那里我们需要矩阵 $L^{(-N-i)}$ 或者 $L^{(-N-(ij))}$ ，还是目标外界 HEM，那里我们需要矩阵 $L^{(-k)}$ 。对于多次求解一个矩阵去掉一部分之后的逆，我们都可以用 Dyson 方程来简化计算。

同时，在本征矢量 HEM 和封闭系统 PageRank 中，我们需要计算多次矩阵本征值和本征向量。这个时候，我们可以用矩阵矩阵本征值和本征向量微扰论来简化计算。

15.7.1 用于简化 HEM 计算的 Dyson 方程

Dyson 方程来自于物理学关于 Green 函数—— $G(E, H, \eta) = \frac{1}{E - H + i\eta}$ 的计算。说的是，如果我们已知一个矩阵 H_0 对应着的 $G(E, H_0, \eta) = \frac{1}{E - H_0 + i\eta}$ ，而我们要计算 $G(E, H_0 + V, \eta) = \frac{1}{E - H_0 - V + i\eta}$ 的话，我们可以利用已经知道的 $G(E, H_0, \eta)$ ，通过如下的方程，

$$G = G_0 + G_0 V G = G_0 + G V G_0. \quad (15.72)$$

要注意 H, H_0, V, G, G_0 都是算符（矩阵）。这个方程非常容易验证，见习题 15.6。

习题 15.6 (Dyson 方程的验证). 验证公式 (15.72)。提示：例如对方程两边同时乘以 G^{-1} ，或者 G_0^{-1} 。

现在，我们来把这个方程用来简化投入产出分析中逆矩阵的计算，尤其是各种 HEM 方法需要大批量地计算逆矩阵。我们所需要的矩阵的一般形式是，

$$L = L(B - \Delta) = \frac{1}{1 - B + \Delta}, \quad (15.73)$$

其中的 Δ 可以是去掉的 B 中的一行一列 ($B^{(-k)}$)，可以是去掉的 B 中的一个元素 ($B^{(-ij)}$)，可以是它们的组合。例如去掉两行两列，或者两个元素。

Dyson 方程的思路是，把上面的矩阵逆 $\frac{1}{1-B+\Delta}$ 和下面的矩阵逆联系起来，

$$L_0 = L(B) = \frac{1}{1 - B}. \quad (15.74)$$

其联系就是这一节的主题——投入产出分析 Dyson 方程：

$$L = L_0 - L_0 \Delta L = L_0 - L \Delta L_0. \quad (15.75)$$

现在，我们来证明一下这个方程。以第一个等式为例。方程两边都除以 L ，也就是乘以 $1 - B + \Delta$ ，右乘，则公式 (15.75) 的第一个等式的右边成为

$$\frac{1 - B + \Delta}{1 - B} - \frac{\Delta}{1 - B} = \frac{1 - B + \Delta - \Delta}{1 - B} = \frac{1 - B}{1 - B} = I \quad (15.76)$$

刚好等于第一个等式的左边。

注意，在这里我们假设 $(1 - B)$ 可逆。实际上，在投入产出分析中，我们会遇到 $(1 - B)$ 不可逆的问题： B 存在值为 1 的本征值。如何让公式 (15.75) 在 $(1 - B)$ 不可逆的时候还能够用呢？我们引入一个虚数 $i\eta$ ，定义

$$L_0(\eta) = \frac{1}{1 - B + i\eta}. \quad (15.77)$$

加上一个虚数部分 $i\eta$ 之后 $(1 - B)$ 就可逆了。将来在 L_0 的基础上用公式 (15.75) 计算完 L 之后，我们取 $\eta \rightarrow 0$ 的极限就可以去掉 η ，

$$L = \lim_{\eta \rightarrow 0} L(B - \Delta, \eta) \quad (15.78)$$

将来我们会用例子来展示这个虚数部分的作用。从现在开始，我们凡是遇到 $(1 - B)^{-1}$ 都看作 $(1 - B + i\eta)^{-1}$ 。我们假设在经济学问题中这个极限存在。

公式 (15.75) 对于任意的 B 和任意的 $B - \Delta$ 我们都成立，因此，我们的 B 和 $B - \Delta$ ，除了真的对应着 B 和 $B^{(-k)}$ ， B 和 $B^{(-(ij))}$ 之外，还可以对应着 $B^{(-N)}$ 和 $B^{(-N-j)}$ ， $B^{(-N)}$ 和 $B^{(-N-(ij))}$ 。

现在，我们来通过例子展示一下投入产出分析 Dyson 方程如何帮助我们简化 HEM 计算。以 B 和 $B^{(-k)}$ 为例，假设我们已经求得逆矩阵 $L_0(\eta) = \frac{1}{1 - B + i\eta}$ ²。我们下面要展示的事情，就是，无论 k 取哪个部门，我们不再需要计算逆矩阵，而只需要计算几次矩阵乘法。于是，我们用一次矩阵逆运算（求 L_0 ）和几次矩阵乘法代替了 N 次矩阵逆运算。要知道矩阵乘法远远比

²注意由于 B 不可逆，我们需要先加入一个虚部 $i\eta$ 将来再去掉它。由于我们总是可以这样做，我们在下面的数学符号中忽略 $i\eta$

矩阵逆简单，大概来说，一次矩阵逆运算相当于很多很多乃至无穷次矩阵乘法。

对于 B 的第 k 行第 k 列去掉的操作，相应的 Δ 是，

$$\begin{aligned}\Delta^{(k)} &= \sum_j (B_k^j |j\rangle\langle k| + B_j^k |k\rangle\langle j|) - B_k^k |k\rangle\langle k|, \\ &= B |k\rangle\langle k| + |k\rangle\langle k| B - B_k^k |k\rangle\langle k|. \end{aligned} \quad (15.79)$$

第一项表示去掉第 k 行，第二项表示去掉第 k 列，最后一项表示重复去除的要加回来。注意这个定义下， $L^{(k)}, \Delta^{(k)}, B, L_0$ 都是原始矩阵的大小，也就是 $N \times N$ 矩阵。我们原来的 $L^{(k)}$ 是我们现在定义的 $L^{(k)}$ 除去的第 k 行第 k 列之后剩下的部分，而第 k 行第 k 列除了对角元为 1 其他都是零，也就是

$$L^{(-k)} |k\rangle = |k\rangle, \langle k| L^{(-k)} = \langle k|. \quad (15.80)$$

其原因是， $B - \Delta^{(-k)}$ 的第 k 行第 k 列是完全为零的，和这个矩阵的其他部分完全没有联系。也就是说 $B - \Delta^{(-k)}$ 是一个分块矩阵：第 k 行第 k 列自成一块并且全是零。因此， $1 - B + \Delta^{(-k)}$ 也是一个分块矩阵：第 k 行第 k 列自成一块并且在这一行一列除了对角元全是零。于是，单纯从第 k 行第 k 列分出来的块而言，其矩阵就是 $[1]_{1 \times 1}$ 。这是维数为 1 的单位矩阵。分块矩阵的逆矩阵可以分块求。于是，这个第 k 行第 k 列的部分的逆矩阵也就是 $[1]_{1 \times 1} = ([1]_{1 \times 1})^{-1}$ 。上面这个公式 (15.80) 的性质在下面的推导过程中非常的重要。

为了获得一些直觉的感受，在下面的一般证明之前，我们来看一个例子。

$$x = \begin{bmatrix} 8 & 4 & 1 & 0 \\ 8 & 4 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 5 & 5 \\ 0 & 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 0.6154 & 0.3077 & 0.09091 & 0 \\ 0.6154 & 0.3077 & 0 & 0.1000 \\ 0.07692 & 0 & 0.4545 & 0.5000 \\ 0 & 0.07692 & 0.3636 & 0.5000 \end{bmatrix}, \quad (15.81)$$

$$\Delta^{(4)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1000 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5000 \\ 0 & 0.07692 & 0.3636 & 0.5000 \end{bmatrix}, \quad (15.82)$$

$$1 - B - \Delta^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.3846 & -0.3077 & -0.09091 & 0 \\ -0.6154 & 0.6923 & 0 & 0 \\ -0.07692 & 0 & 0.5455 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (15.83)$$

$$L^{(-4)} = (1 - B - \Delta^{(4)})^{-1} = \begin{bmatrix} 10.17 & 4.522 & 1.696 & 0 \\ 9.043 & 5.464 & 1.507 & 0 \\ 1.435 & 0.6377 & 2.072 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (15.84)$$

现在，我们来通过 Dyson 方程来求解 $L^{(-4)}$ ，而不是上面的矩阵逆。中间，我们会用到 $L_0 = \frac{1}{1-B}$ （包含 $i\eta$ ，在下面的例子中 $\eta = 0.000001$ ），我们也写在这里，

$$L_0 = (1 - B + i\eta)^{-1} = \begin{bmatrix} 2.122 + 360800 * I & 0.4575 + 193300 * I & -1.358 + 257700 * I & -1.860 + 296300 * I \\ 1.117 + 360800 * I & 1.467 + 193300 * I & -1.457 + 257700 * I & -1.757 + 296300 * I \\ -1.835 + 305300 * I & -0.9029 + 163500 * I & 2.019 + 218000 * I & 1.337 + 250700 * I \\ -1.717 + 277500 * I & -0.7284 + 148700 * I & 0.8480 + 198200 * I & 2.246 + 227900 * I \end{bmatrix}. \quad (15.85)$$

我们注意到这个矩阵的虚部非常大。不过，我们得等到将来计算完成之后，再来看看这个虚部的大小。

现在，我们把公式 (15.79) 放到公式 (15.75) 里面，来试着求出来 L 。

$$\begin{aligned} L^{(-k)} &= L_0 - L_0 (B |k\rangle\langle k| + |k\rangle\langle k| B - B_k^k |k\rangle\langle k|) L^{(-k)}, \\ &= L_0 - L_0 B |k\rangle\langle k| L^{(-k)} - L_0 |k\rangle\langle k| B L^{(-k)} + L_0 B_k^k |k\rangle\langle k| L^{(-k)}, \\ &= L_0 - L_0 B |k\rangle\langle k| + L_0 B_k^k |k\rangle\langle k| - L_0 |k\rangle\langle k| B L^{(-k)}, \\ &= L_0 + |k\rangle\langle k| + L_0 (B_k^k - 1) |k\rangle\langle k| - L_0 |k\rangle\langle k| B L^{(-k)}. \end{aligned} \quad (15.86)$$

在这中间我们用到了 $L_0 = \frac{1}{1-B} \Rightarrow L_0 B = L_0 - I^3$ 以及公式 (15.80)。唯一的在方程的右边需要计算的项就剩下 $\langle k| B L^{(-k,\eta)}$ 了。现在，我们在公式 (15.86) 两边同时左乘一个 $\langle k|$ 。我得到

$$\langle k| B L = \frac{\langle k| L_0}{\langle k| L_0 |k\rangle} + (B_k^k - 1) \langle k|. \quad (15.87)$$

³注意，这个表达式本来包含 $i\eta$ 。

把这个结果代入公式 (15.86)，恢复去掉第 k 行第 k 列的记号，我们得到最终的逆矩阵

$$L^{(-k)} = L_0 - \frac{L_0 |k\rangle \langle k| L_0}{\langle k| L_0 |k\rangle} + |k\rangle \langle k|. \quad (15.88)$$

如果写成矩阵元素的形式

$$(L^{(-k)})_j^i = (L_0)_j^i - \frac{(L_0)_k^i (L_0)_j^k}{(L_0)_k^k} + \delta_k^i \delta_j^k. \quad (15.89)$$

现在，我们把这个一般公式用于上面的例子。

$$\begin{aligned} L^{(-4)} &= L_0 - \frac{L_0 |4\rangle \langle 4| L_0}{\langle 4| L_0 |4\rangle} + |4\rangle \langle 4| \\ &= \begin{bmatrix} 10.17 + 0.0001 * I & 4.522 & 1.696 & 0 \\ 9.043 + 0.0001 * I & 5.464 & 1.507 & 0 \\ 1.435 & 0.6377 & 2.072 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.000 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (15.90)$$

其中，实部保留了四位有效数字，虚部保留了小数点后面四位。我们发现这个矩阵和公式 (15.84) 中的 $L^{(-4)}$ 完全相符，除了一个小小的虚部。如果我们继续调整 η 的值，例如，取 $\eta = 0.0000001$ ，我们得到，

$$\begin{aligned} L^{(-4)} &= L_0 - \frac{L_0 |4\rangle \langle 4| L_0}{\langle 4| L_0 |4\rangle} + |4\rangle \langle 4| \\ &= \begin{bmatrix} 10.17 + 0.00001 * I & 4.522 & 1.696 & 0 \\ 9.043 + 0.00001 * I & 5.464 & 1.507 & 0 \\ 1.435 & 0.6377 & 2.072 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.000 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (15.91)$$

实部不变，虚部更加小了 $0.0001 * I \rightarrow 0.00001 * I$ 。于是，我们看到，首先公式 (15.88) 也就是公式 (15.75) 成立，并且， η 不需要特别小的时候，实部的准确率就非常高，虚部也很快接近于零。

注意，上面所有的推导，当取 $\eta = 0$ 的时候，完全成立。因此，上面的推导不仅仅适用于 B 和 $B^{(-k)}$ ，对于 $B^{(-N)}$ 和 $B^{(-N-j)}$ ，也完全适用，也就是，

$$L^{(-N-k)} = L^{(-N)} - \frac{L^{(-N)} |k\rangle \langle k| L^{(-N)}}{\langle k| L^{(-N)} |k\rangle} + |k\rangle \langle k|. \quad (15.92)$$

例如，直接求逆矩阵 $L^{(-4-3)} = \frac{1}{1-B^{(-4-3)}}$ 和运用公式 (15.92) 求出来的 $L^{(-4-3)}$ 分别是，

$$\begin{bmatrix} 9.000 & 4.000 & 0 & 0 \\ 8.000 & 5.000 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 9.000 & 4.000 & 0 & 0 \\ 8.000 & 5.000 & 0 & 0 \\ 0 & -1.110 \times 10^{-16} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (15.93)$$

也就是两者在取四位有效数字的条件下完全不可区分。

其实对于 B 和 $B^{(ij)}$ ，以及 $B^{(-N)}$ 和 $B^{(-N-(ij))}$ ，也可以推导出来类似的公式，而且更简单。

习题 15.7 (从 $L^{(-N)}$ 计算 $L^{(-N-k)}$). 用 Dyson 方程，推导出来 $L^{(-N)} = \frac{1}{1-B^{(-N)}}$ 和 $L^{(-N-k)} = \frac{1}{1-B^{(-N-k)}}$ 之间的关系 $L^{(-N-k)} = L^{(-N)} - \frac{L^{(-N)}|k\rangle\langle k|L^{(-N)}}{\langle k|L^{(-N)}|k\rangle} + |k\rangle\langle k|$ 。证明完成之后，用上面的例子来验证这个公式。

习题 15.8 (去掉一个元素的 HEM). 用 Dyson 方程，推导出来 $L_0 = \frac{1}{1-B}$ 和 $L = \frac{1}{1-B^{(ij)}}$ 之间的关系 $L = L_0 - \frac{L_0|i\rangle\langle j|L_0B_j^i}{1-B_j^i\langle j|L_0|i\rangle}$ 。

有了这个去掉一个部门或者一个元素的 HEM 的计算公式，我们甚至可以考虑同时去掉两个部门和分别去掉两个部门的结果的比较，也就是分别计算 $L^{(-m-n)}$ 和 $L^{(-m)}, L^{(-n)}$ ，然后对比 $L^{(-m-n)} - L_0$ 和 $L^{(-m)} + L^{(-n)} - 2L_0$ 之间的差别。如果仅仅考虑直接总产量和总投入量，显然去掉两个部门的效果相当于分别去掉两个部门之和。但是，我们这里的投入产出分析实际上综合考虑了直接和间接影响，因此，可能会得到不同的结论。只要得到不同，这表示，所选择的 m, n 两个部门之间存在着某种相互作用，两个部门同时不存在的效果不等于其分别不存在的效果的加总。

有了这个投入产出 Dyson 方程公式 (15.75) 和这些逆矩阵的关系，例如从 L_0 计算 $L^{(-k)}$ 、 $L^{(-N)}$ 计算 $L^{(-N-k)}$ 、从 L_0 计算 $L^{(ij)}$ ，以及从 $L^{(-N)}$ 计算 $L^{(-N-(ij))}$ 的公式，我们就可以节省大量的矩阵求逆运算了。只要求一次逆，得到 L ，其他的逆矩阵只用计算两次矩阵乘法就可以得到。尤其是，当我们需要批量来接计算 $L^{(-k)}$ 的时候，这是非常大的计算量的节省。

15.7.2 矩阵本征向量微扰论

由于我们在广义投入产出分析中，经常要处理矩阵的本征值和本征向量，尤其是在一个已知本征值和本征向量的矩阵的基础上映入一个小小的变化之后，再来讨论变化之后的矩阵的本征值和本征向量，我们在这里介绍一下矩阵本征值和本征向量的微扰理论。从这个角度来看，15.7.1 节相当于逆矩阵的微扰理论，这一节相当于矩阵本征向量的微扰理论。为了符号和语言的简单，由于我们的问题总是关于一个方形矩阵的，在这里我们也仅仅考虑方阵。

从一个一般的 $N \times N$ 的方形矩阵 A ，我们可以构造 Hermitian 矩阵 $M_U = AA^\dagger$ 和 $M_V = A^\dagger A$ 。然后，我们可以求解出来 Hermitian 矩阵 M_U 和 M_V 的本征值和本征向量，分别记做，

$$M_U |u_k\rangle = m_k |u_k\rangle, \quad (15.94)$$

$$M_V |v_k\rangle = \tilde{m}_k |v_k\rangle. \quad (15.95)$$

我们断言肯定找到得到一个对应，例如按照绝对值从大到小排序，使得 $\tilde{m}_k = m_k$ 。这个结论可以通过证明两者的本征值方程相同来证明。这个证明比较复杂。我们来做一个简化版本的讨论。两者的本征值的方程是，

$$\det(AA^\dagger - \lambda I) = 0, \quad (15.96)$$

$$\det(A^\dagger A - \lambda I) = 0. \quad (15.97)$$

考虑一个特殊情况，例如 A 是可逆矩阵（更一般的证明可以见 [112]），则我们有 $A^{-1}(AA^\dagger - \lambda I)A = (A^\dagger A - \lambda I)$ 。然后按照矩阵行列式的性质， $\det(AB) = \det(A)\det(B)$ ，我们有

$$\det(AA^\dagger - \lambda I) = \det(A^\dagger A - \lambda I). \quad (15.98)$$

于是两个方程实际上一模一样，因此，两者的本征值完全一一对应。

由于 Hermitian 矩阵本征值是实数，并且可以证明 AA^\dagger 的本征值非负，我们把这 N 个本征值（可以允许重复出现，多重根）按照从大到小排列以后，统一记为 $\{m_k\} = \{m_1, m_2, \dots, m_N\}$ 。我们把相应的 M_U 和 M_V 的右本征向量也编号，记为 $\{|u_k\rangle\} = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle\}$ 和 $\{|v_k\rangle\} = \{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_N\rangle\}$ 。

完成这个计算和重编号以后，我们说，矩阵 A 可以表示为

$$A = \sum_k \sigma_k |u_k\rangle \langle v_k|. \quad (15.99)$$

其中

$$\sigma_k = \sqrt{m_k}. \quad (15.100)$$

由于 $|u_k\rangle$ 内部满足正交性， $\langle v_k|$ 内部满足正交性，我们有

$$A |v_k\rangle = \sigma_k |u_k\rangle, \quad (15.101)$$

$$\langle u_k| A = \sigma_k \langle v_k|. \quad (15.102)$$

习题 15.9 (AA^\dagger 的本征值非负). 证明对于任意矢量 $|x\rangle$ ， $\langle x|AA^\dagger|x\rangle$ 的非负，于是， AA^\dagger 的本征值非负。

可以验证，从这样的 A 得到的 AA^\dagger 和 $A^\dagger A$ 确实具有上面的本征值和本征向量。反过来，当两个 Hermitian 矩阵的本征值和本征向量都完全一样的时候，它们肯定完全一样。这样我们就通过 Hermitian 矩阵做本征值和本征向量展开得到了任意方阵 A 的展开表达式公式 (15.99)，称为矩阵的奇异值展开。其中的 D_k 称为奇异值， $|u_k\rangle$ 和 $\langle v_k|$ 称为相应的右奇异值向量和左奇异值向量。注意，当矩阵 A 本身就是 Hermitian 矩阵的时候，我们有 $\langle v_k| = e^{i\theta} \langle u_k|$ ，于是，我们就回到了 Hermitian 矩阵特征值和特征向量展开。其中的 $e^{i\theta}$ 是因为本征向量乘以任何一个常数还会是一个本征向量。同时由于这个 $e^{i\theta}$ 的存在也使得 Hermitian 矩阵的本征值可以取负实数。

在这一节剩下的部分，我们就基于公式 (15.99) 这个矩阵的奇异值分解来讨论矩阵本征值和本征向量的微扰展开。我们假设矩阵 A 的奇异值和左右奇异值向量展开都已经得到。我们来考虑增加了一个微扰的矩阵 $\bar{A} = A + \epsilon \Delta$ 的奇异值和左右奇异值向量。其中 $\epsilon \ll 1^4$ 是一个很小的量。再一次强调，如果 A 本身就是 Hermitian 矩阵，则下面的讨论自然就回到本征值和本征向量展开的微扰理论。

⁴或者说对于 $\bar{A} = A + \Delta$ ，取 $\epsilon = \frac{|\Delta|}{|A|}$ ，并且假设它很小。

我们假设 $\bar{A} = A + \epsilon\Delta$ 的奇异值和奇异值向量具有如下的形式,

$$\bar{D}_k = D_k + \epsilon D_k^{(1)} + \epsilon^2 D_k^{(2)} + \dots, \quad (15.103)$$

$$|\bar{u}_k\rangle = |u_k\rangle + \epsilon |u_k^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |u_k^{(2)}\rangle + \dots, \quad (15.104)$$

$$|\bar{v}_k\rangle = |v_k\rangle + \epsilon |v_k^{(1)}\rangle + \epsilon^2 |v_k^{(2)}\rangle + \dots. \quad (15.105)$$

也就是说, 奇异值和相应的左右奇异值向量, 都可以按照这个小量 ϵ 的幂次来展开。我们来把这个幂次展开带入到公式 (15.102), 并且按照幂次来整理, 得到零次幂的方程和一次幂的方程。更高阶的可以类似得到, 但是更加复杂, 再此不在讨论。我们得到零次幂的方程,

$$A|v_k\rangle = \sigma_k|u_k\rangle, \quad (15.106)$$

$$\langle u_k|A = \sigma_k\langle v_k|. \quad (15.107)$$

这个方程形式上和公式 (15.102) 完全一样, 因此, $\sigma_k, |u_k\rangle, \langle v_k|$ 已经完全定义好, 就是矩阵 A 的相应的奇异值和奇异值向量。我们也同时得到一次幂的方程,

$$A|v_k^{(1)}\rangle + \Delta|v_k\rangle = \sigma_k|u_k^{(1)}\rangle + \sigma_k^{(1)}|u_k\rangle, \quad (15.108a)$$

$$\langle u_k^{(1)}|A + \langle u_k|\Delta = \sigma_k\langle v_k^{(1)}| + \sigma_k^{(1)}\langle v_k|. \quad (15.108b)$$

我们先从这个方程里面, 把奇异值的微扰项 $\sigma_k^{(1)}$ 求出来。对第一式和第二式分别左乘 $\langle u_k|$ 和右乘 $|v_k\rangle$, 我们得到,

$$\sigma_k\langle v_k|v_k^{(1)}\rangle + \langle u_k|\Delta|v_k\rangle = \sigma_k\langle u_k|u_k^{(1)}\rangle + \sigma_k^{(1)}, \quad (15.109a)$$

$$\sigma_k\langle u_k^{(1)}|u_k\rangle + \langle u_k|\Delta|v_k\rangle = \sigma_k\langle v_k|v_k^{(1)}\rangle + \sigma_k^{(1)}. \quad (15.109b)$$

于是,

$$\sigma_k^{(1)} = \frac{1}{2}(\langle u_k|\Delta|v_k\rangle + \langle v_k|\Delta^\dagger|u_k\rangle). \quad (15.110)$$

有了这个奇异值的一阶微扰项的表达式, 我们就可以把奇异值向量的一阶微扰项也算出来了。先对第二式做一个厄米共轭,

$$A|v_k^{(1)}\rangle + \Delta|v_k\rangle = \sigma_k|u_k^{(1)}\rangle + \sigma_k^{(1)}|u_k\rangle, \quad (15.111a)$$

$$A^\dagger|u_k^{(1)}\rangle + \Delta^\dagger|u_k\rangle = \sigma_k|v_k^{(1)}\rangle + \sigma_k^{(1)}|v_k\rangle. \quad (15.111b)$$

然后把第一式左乘 σ_k , 第二式左乘 A , 并相加得到,

$$(AA^\dagger - \sigma_k^2) |u_k^{(1)}\rangle = 2\sigma_k \sigma_k^{(1)} |u_k\rangle - A\Delta^\dagger |u_k\rangle - \sigma_k \Delta |v_k\rangle, \quad (15.112)$$

也就是

$$|u_k^{(1)}\rangle = \frac{1}{(AA^\dagger - \sigma_k^2)} (2\sigma_k \sigma_k^{(1)} |u_k\rangle - A\Delta^\dagger |u_k\rangle - \sigma_k \Delta |v_k\rangle), \quad (15.113)$$

写成元素的形式,

$$|u_k^{(1)}\rangle = \sum_l |u_l\rangle \frac{1}{(\sigma_l^2 - \sigma_k^2)} (2\sigma_k \sigma_k^{(1)} \delta_{lk} - \sigma_l \langle v_l | \Delta^\dagger | u_k \rangle - \sigma_k \langle u_l | \Delta | v_k \rangle). \quad (15.114)$$

同理可得

$$\langle v_k^{(1)} | = \sum_l \langle v_l | \frac{1}{(\sigma_l^2 - \sigma_k^2)} (2\sigma_k \sigma_k^{(1)} \delta_{lk} - \sigma_k \langle u_k | \Delta | v_l \rangle - \sigma_l \langle v_k | \Delta^\dagger | u_l \rangle). \quad (15.115)$$

对于 Hermitian 矩阵 $\Delta^\dagger = \Delta, A^\dagger = A$, 这个奇异值和奇异值向量成为本征值和本征值向量 (没有简并本征值的情况下 $|u_k\rangle$ 和 $|v_k\rangle$ 相同), 其微扰分别表达式简化为,

$$\sigma_k^{(1)} = \langle u_k | \Delta | u_k \rangle. \quad (15.116)$$

$$|u_k^{(1)}\rangle = \sum_{l \neq k} |u_l\rangle \frac{\langle u_l | \Delta | u_k \rangle}{(\sigma_l - \sigma_k)}. \quad (15.117)$$

注意另一种情况, A 不是 Hermitian 矩阵, 但是仍然存在全套或者一部分本征值和本征向量的时候, 我们仍然可以做微扰计算。这个时候左本征向量不再是右本征向量的复共轭, 记做

$$A |a_k\rangle = a_k |a_k\rangle, \quad (15.118)$$

$$\langle \mathbf{a}_k | A = a_k \langle \mathbf{a}_k |. \quad (15.119)$$

注意, 右矢量内部不满足正交性, 左矢量内部也不满足正交性, 只有左右矢量之间满足正交性,

$$\langle \mathbf{a}_k | a_l \rangle = \delta_{k,l}, \quad (15.120)$$

$$I = \sum_k |a_k\rangle \langle \mathbf{a}_k |, \quad (15.121)$$

$$A = \sum_k a_k |a_k\rangle \langle \mathbf{a}_k |. \quad (15.122)$$

注意这个时候，往往本征向量不会和奇异值向量相同。这时候，我们也有相应的微扰论，

$$a_k^{(1)} = \langle \mathbf{a}_k | \Delta | a_k \rangle. \quad (15.123)$$

$$|a_k^{(1)}\rangle = \frac{\Delta}{A - a_k} |a_k\rangle = \sum_{l \neq k} |a_l\rangle \frac{\langle \mathbf{a}_l | \Delta | a_k \rangle}{(a_l - a_k)}. \quad (15.124)$$

其中，公式 (15.124) 的第二个等号只有当 A 的全套本征向量都存在的时候才成立，而其第一个等号永远成立。

习题 15.10 (非 Hermitian 矩阵的本征向量微扰理论的证明). 假设非 Hermitian 矩阵存在所有的或者一部分本征向量（并且为了计算简单假设本征值非简并），证明从公式 (15.120) 到公式 (15.124) 的所有公式。

一般矩阵的一阶微扰论用公式 (15.110)、公式 (15.114) 和公式 (15.115)。由于任何矩阵都存在奇异值和奇异值向量展开，因此，这个一般公式非常有用。Hermitian 矩阵的一阶微扰论用公式 (15.116) 和公式 (15.117)。有的非 Hermitian 矩阵除了奇异值向量展开，还可以做本征向量展开。这个时候我们如果需要做微扰计算，则用公式 (15.123) 和公式 (15.124)。原则上，我们可以用同样的手段推导出来更高阶的微扰计算公式。在此，我们就停留在第一阶的微扰公式。

我们接着用矩阵本征向量微扰论来讨论投入产出分析本征向量 HEM 和 PageRank 的关系。

15.7.3 本征向量 HEM 和 PageRank 的关系

我们前面提到，投入产出本征向量 HEM 是没有坚实的理论基础的，其基本理念就是，如果一个部门 k 很重要，则去掉以后的 B 矩阵，也就是 $B^{(-k)}$ ，的本征值和本征向量应该产生一个比较大的变化。另外，由于去掉之前的 B 矩阵的最大右本征向量对应着最优配方，因此，可以“推断”去掉之后的最大右本征向量也对应着去掉那个部门的之后的系统的最优配方。但是，这一切都是类比，都是理念。这一节，我们给这个投入产出本征向量 HEM 另一个解释：在一级近似范围内，它和 PageRank 等价。

投入产出本征向量 HEM 需要比较 $|1\rangle_B$ 和 $|\lambda^{(-k)}\rangle_{B^{(-k)}}$ ，以及相应的本征向量。我们在这里只关心本征值的变化。本征向量微扰计算就暂时不讨论

了。

下面我们来计算 $|\lambda_{Max}^{(-k)}\rangle_{B^{(-k)}}$ 的微扰展开，仅仅考虑零阶和一阶。由于符号习惯问题，这里的 $\Delta^{(k)}$ 和之前的差一个负号。我们重新写一下，

$$\Delta^{(k)} = \sum_i (-B_k^i |i\rangle\langle k| - B_i^k |k\rangle\langle i|) + B_k^k |k\rangle\langle k|. \quad (15.125)$$

由于矩阵 B 的左最大本征矢量——也就是 PageRank 向量 $\langle 1|_{\mathcal{P}}$ 的变形—— $\langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1}$ 和右最大本征矢量 $|X^a\rangle$ 我们都知道，我们来用本征矢量微扰论公式 (15.123)，也就是

$$\lambda_{Max}^{(-k)} = 1 + \frac{\langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} \Delta |X^a\rangle}{\langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} |X^a\rangle}. \quad (15.126)$$

先处理一下分母，

$$\langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} |X^a\rangle = \sum_j \langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} |j\rangle \langle j| X^a \rangle = \sum_j \langle 1|_{\mathcal{P}} |j\rangle \frac{1}{X^j} X^j = 1. \quad (15.127)$$

再来计算分子，

$$\begin{aligned} & \langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} \Delta |X^a\rangle \\ &= \langle 1|_{\mathcal{P}} \mathcal{O}^{-1} \left[\sum_i (-B_k^i |i\rangle\langle k| - B_i^k |k\rangle\langle i|) + B_k^k |k\rangle\langle k| \right] |X^a\rangle \\ &= \sum_i \left[-B_k^i \langle 1|_{\mathcal{P}} |i\rangle \frac{1}{X^i} X^k - B_i^k \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \frac{1}{X^k} X^i \right] + B_k^k \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \frac{1}{X^k} X^k \\ &= \sum_i \left[-\frac{x_k^i}{X^i} \langle 1|_{\mathcal{P}} |i\rangle - \frac{x_i^k}{X^k} \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \right] + B_k^k \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \\ &= \sum_i [-\langle 1|_{\mathcal{P}} |i\rangle \langle i| \mathcal{F} |k\rangle] - \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle + B_k^k \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \\ &= -2 \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle + B_k^k \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle \end{aligned} \quad (15.128)$$

因此，

$$1 - \lambda_{Max}^{(-k)} = \left(2 - \frac{x_k^k}{X^k} \right) \langle 1|_{\mathcal{P}} |k\rangle. \quad (15.129)$$

首先，我们看到一般来说， $\frac{x_k^k}{X^k} \ll 2$ ，因此可以忽略不计。接着，我们发现，当我们把多个不同的 k 部门比较的时候，前面的统一的常数 2 是没有关系

的。也就是说，

$$1 - \lambda_{Max}^{(-k)} \sim \langle 1 | \mathcal{F} | k \rangle. \quad (15.130)$$

也就是说，在一级近似的条件下，部门 k 的 F_{IO} 投入产出影响因子就是这个部门 k 的 PageRank 值，

$$(F_{IO})^k \sim \langle 1 | \mathcal{F} | k \rangle. \quad (15.131)$$

15.8 广义投入产出分析的应用

总结一下，我们的广义投入产出分析方法的精神就是综合考虑直接和间接影响，考虑的方式就是需求、需求的原材料、原材料的原材料等等加起来，以及投入、投入引起的再投入、再投入的再投入等等加起来。这个方法的局限是，在需求端的分析的假设是完全可靠的，但是在投入端其实是有逻辑上的小问题的，来自于某个部门的对部门 k 的投入的增加，很可能由于不配套，不再会导致生产的增加进而导致再投入的增加。其次，这个方法还有一个更大的局限——线性性：假设需求引起的再需求、投入引起的再投入都是满足线性规律的，并且，这个投入产出系数矩阵还是一个常数矩阵。不过，在接受这些假设的情况下，我们的方法能够用来回答很多有意思的问题。例如，某个部门的重要性（需求端或产出端投入产出、正向或者反向 PageRank），某个部门对另一个部门的影响，去掉某个部门整个系统会怎么样，整个系统如何响应最终消费者或者某个部门 N 对另个部门的一个单位的需求或者投入的增加等等。

在分析方法上，整体来说，我们从投入产出矩阵 x 之上定义了四个矩阵 B, F 和 \mathcal{F}, \mathcal{B} 。以向前广义投入产出分析为例，我们只需要关注 B, \mathcal{F} 。然后，原则上，我们只有一种分析方法，求解 B, \mathcal{F} 的左右本征矢量。并且，我们还发现，其实 B, \mathcal{F} 的左右本征矢量一一对应，也就是说，我们只需要求 B, \mathcal{F} 之一的本征矢量。由于历史发展的原因，我们关注 B 的右最大本征矢量和 \mathcal{F} 的左最大本征矢量。本来，我们的所有分析也就到此为止了。但是，我们发现，其实 B 的右最大本征矢量其实是平庸的总产出矢量 X^a 。不过，如果我们把 B 中的一部分 Δ 拿出去当做外界，剩下的系统看做开放系统的话，我们可以得到很多非平庸的信息。这也就是投入产出分析。另一

方面， \mathcal{F} 的左最大本征矢量本来就有意义，并且，如果也把其中的一部分拿出去，看做开放系统，或者反过来，强行加上一个外界把原来的封闭系统看做开放系统，则我们也能够得到很多非平庸的信息。这就是 PageRank 分析。

唯一在这个开放系统和封闭系统逻辑之外的就是本征向量 HEM 投入产出分析。不过就算这个方法，我们也证明，和 PageRank 有密切联系。

因此，整个合起来，**投入产出分析就是封闭系统的 B 的右最大本征矢量（这个矢量本身是平庸的总产出矢量）和 \mathcal{F} 的左最大本征矢量分析，以及相应的开放系统 $L_\Delta = (1 - B - \Delta)^{-1}$ 和 $\mathcal{L}_\Delta = (1 - \mathcal{F} - \Delta)^{-1}$ 的分析，还有额外的本征向量 HEM ($\lambda_{Max}^{(-\Delta)}$)。**

至于这个 Δ 可以考虑去掉一个部门、一个元素，甚至同时去掉多个部门或者元素——其效果不一定等于单个的效果的相加，也就是比较 $L_{\Delta_1} - L_0 + L_{\Delta_2} - L_0$ 和 $L_{\Delta_1+\Delta_2} - L_0$ ，以及 $(1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_1-\Delta_2)})$ 和 $(1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_1)} + 1 - \lambda_{Max}^{(-\Delta_2)})$ 。

在这一节，我们用这些分析方法来解决一些具体问题。其中一些具体问题其实是启发了上面这些方法的发展的例子，还有一些会迫使我们甚至进一步在具体情境中发展分析方法。

15.8.1 汉字和概念网络学习顺序做为广义投入产出分析

概念和命题是人类知识的基本单位。概念和概念之间的联系构成命题以及构成新的概念。在这个相互联系的概念的网络上，概念是有层次的。和化学反应相类比，简单概念就好像是化学单质，复杂概念就好像是化合物。最基本的单质通过合适的条件发生化学反应得到化合物。同样，最基本的概念通过合适的思维方式得到更加复杂的概念和命题。那么，是不是我们可以把所有学科的概念网络整理出来，成为一个集合的概念、一个集合的思维方式、然后两者相互联系构成的知识网络呢？就好像一个集合的反应物、一个集合的化学反应、然后两者相互联系构成化学反应网络。更进一步，是不是有了这个概念网络我们就可以更好地促进学科的研究、传播、教和学呢？例如，是不是有合适的分析方法能够帮我们找出来最少量的基本概念，然后运用合适的思维方式来在研究和学习中，自己构建新的概念和命题，从而实现“教的更少，学得更多”、“学习更少，学到更多”，而不是通过把每一个概念每一个命题都当做独立的需要通过记忆和重复练习或者应

用才能够学会的东西，从而陷入学得越多，受限越多，越不能创新，乃至题海战术、死记硬背的学习中去呢？其实，这就是吴金闪在《教的更少，学得更多》[23]一书中提出来的“以学科大图景为目标的以批判性思维和系联性思考为指导的以概念地图为技术的理解型学习”企图回答的主要问题⁵。不过，在那里，主要通过例子和逻辑来阐述。而在这里，我们试着用投入产出分析这样的分析方法来回答一下这个问题。

不过，如果要真的实现这个体系，则还需要先给每一个学科甚至所有的人类知识做一个概念网络。目前，这样的概念网络我们只有汉字——每一个汉字如何由更基本的汉字构成，以及所有的构成方式（相当于思维方式、化学反应类型）上大概分成几类。然后，我们在这个汉字网络上问是否存在比较好的汉字学习顺序的问题，以及高效率的汉字检测算法的问题。在第一卷中，我们已经介绍了汉字学习顺序的这个工作，用来体现什么是系统科学：从孤立到有联系，有直接到间接联系，从个体到整体，系联 = 联系¹ + 联系² + 联系³ + …。在这里我们从广义投入产出分析的角度再一次来看汉字学习的工作。为了阅读方便，我们把这个汉字网络再一次呈现在这里。

我们用投入产出矩阵， x 来描述汉字之间的构成关系： $x_{j|i}^i$ 表示汉字 i 用于构建汉字 j 的次数。 x 也可以看作是汉字网络的邻接矩阵 A 。大多数时候，如果 $x_{j|i}^i \neq 0$ ，则 $x_{j|i}^i = 1$ 。在很少的情况下，也会出现 $x_{j|i}^i = 2$ 的情况，例如“木”构成“林”。有了邻接矩阵，我们就可以运用网络分析，来讨论一些网络结构特征。例如，网络上顶点的度可能在一定程度上反映了这个字在结构上的重要性——它用来构成了很多其他的字。例如，网络上的集团结构一定程度上可能会把联系紧密的字放在一起构成集团，这样有助于在学习的时候比较集中地来学习同一个集团内的字。不过，这不是我们这一节的重点。有了投入产出矩阵 x ，我们自然可以定义 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ ，以及运用广义投入产出分析。不过，如果不考虑实际问题的需要而是无脑运用这些

⁵ 在这个理念下，所有的知识的学习都是为了体会好这个学科的大图景——典型对象、典型问题、典型思维方式、典型分析方法、和世界还有其他学科的关系，以及学会最少量的最基础的概念并且进一步用这些基本概念来通过典型思维方式和分析方法来得到更加复杂的处于学科核心位置的反映学科大图景的概念和命题。同时，也学会这个“理解型学习”的分析方法和建立对学科的情感——通过领会这个学科的大图景以及通过这样的能够获得对世界和学科的理解的学习方式。

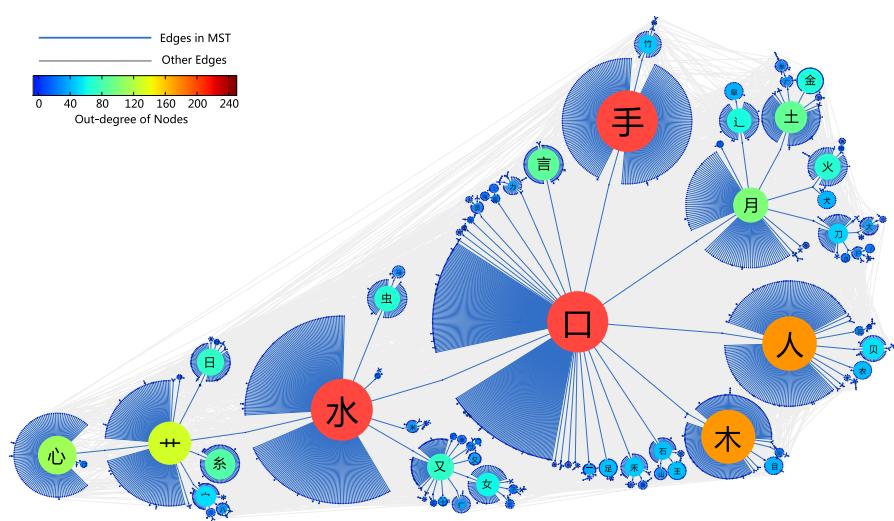


图 15.2: 3500 常用简化字的字形按照逐层拆分的方式得到的网络。其中顶点就是汉字，连边就是两个或者几个字可以合起来直接构成一个更加复杂的字。为了看起来简单一点，我们高亮显示了网络的最小生成树里面保留下来的边，而把其他的连边当做背景。**Edges in MST:** 最小生成树中的边；**Other Edges:** 其他边；**Out-degree of Nodes:** 顶点出度。

方法，则可能得到的结果都不可用不可解释。现在，我们从具体问题——汉字的联系如何用于汉字的学习——出发，把问题和分析方法—— $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 的左右最大本征矢量以及逆矩阵——尽可能地结合起来。

在做具体分析之前，我们对于汉字学习顺序的理念是：底层的基础的汉字优先学习，使用频率高的汉字优先学习，构字多的汉字优先学习。我们来找一种分析方法，正好体现了这个理念。之前的公式 (2.19)（重写在这里，当做公式 (15.132)）是直接按照这几个理念猜出来的，

$$\tilde{W} = (1 - bA)^{-1} W = W + (bA)W + (bA)^2 W + \dots \quad (15.132)$$

现在，我们来从广义投入产出分析的角度来看看能不能写下来含义相近的但是更有理论依据的公式。

首先，我们来看看每一种计算在汉字网络上，代表了什么含义。例如， $P^i = \sum_j \frac{x_j^i}{X^j} P^j = \sum_j x_j^i \frac{P^j}{X^j}$ 表示只要汉字 i 是汉字 j 的组成部分，则某一种影响力或者重要性就会从更复杂的汉字 j 传给更简单的汉字 i ，其传过来的量 $\frac{P^j}{X^j}$ 还会被汉字 j 自身的构字数量 X^j 平均一下。我们知道这正好就是传统经济学的投入产出分析，也就是说，这个计算相当于问：如果某个外界改变了对某个汉字的需求（用的更多了或者更少了），则整体上相当于其他各个汉字的总需求量都将有什么变化。这个问题暂时我们不关心。反过来的投入产出分析， $P_j = \sum_i P_i \frac{x_i^j}{X_i}$ 在这里的含义也类似，就不再讨论了。

再例如， $P_j = \sum_i P_i \frac{x_i^j}{X^i} = \sum_i x_i^j \frac{P_i}{X^i}$ 表示只要汉字 i 是汉字 j 的组成部分，则某一种影响力或者重要性就会从更简单的汉字 i 传给更复杂的汉字 j ，其传过来的量 $\frac{P_i}{X^i}$ 还会被汉字 i 自身的构字数量 X^i 平均一下。我们知道这正好就是 CheiRank，也就是说，这个计算相当于把底层简单汉字的重要性集中到高层复杂汉字。这个问题也暂时我们不关心。

例如， $P^i = \sum_j \frac{x_j^i}{X_j} P^j = \sum_j x_j^i \frac{P^j}{X_j}$ 表示只要汉字 i 是汉字 j 的组成部分，则某一种影响力或者重要性就会从更复杂的汉字 j 传给更简单的汉字 i ，其传过来的量 $\frac{P^j}{X_j}$ 还会被汉字 j 自身的部件数量 X_j 平均一下。也就是说，如果复杂汉字 j 有多个部分，则它的重要性 P^j 就会被按比例分成多份，然后把其中和简单字 i 相应的重要性传给 i 。反过来对于 i 来说，只要连着更多的 j 就会得到更多的传播。同时 i 也会传给它的简单字，因此越底层的汉字会积累更多的重要性。这正好就是我们要寻找的符合上面三条理念的更有依

据的公式。

其次，我们注意到每一个汉字的使用频率对于汉字学习顺序问题来说，提供了很重要的信息。而这个使用频率的信息没有被包含在投入产出矩阵 x 中。于是，很自然，我们需要增加一个外界部门 N ，代表所有的语料文本， $x_N^i = UW^i$ 。其中 U 代表所有汉字在语料中出现的次数， W^i 代表相对频率。至于语料文本的选择、 W^i 的统计这些细节，在此不做讨论。我们假设 W^i 已知。既然如此，我们发现，封闭系统的投入产出分析方法，算左右本征向量的那些，在这里，就不用再考虑了。结合上面对 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 的本征向量在汉字网络上的含义的分析，我们发现只需要考虑 \mathcal{B} 的就可以了。

先补充完成封闭系统的投入产出矩阵，

$$x^{(N)} = \begin{bmatrix} & & \begin{bmatrix} UW^1 \\ \cdots \\ UW^{N-1} \end{bmatrix} \\ \alpha x^{(N-1)} & (1-\alpha) & \\ & & \end{bmatrix}. \quad (15.133)$$

$$\begin{bmatrix} (1-\alpha) X_a & \alpha U \end{bmatrix}$$

在这里我们加上了 $x_N^i = (1-\alpha) UW^i$ 代表语料中汉字 i 的使用频率被缩小到了 $(1-\alpha)$ 倍，剩下的使用频率看作是语料对语料的使用频率 $x_N^N = \alpha U$ ，同时 $x_i^N = (1-\alpha) X_i$ 表示汉字 i 从语料中获取“组件”。将来我们针对这个网络的特性，会让 $\alpha = 1$ 。于是，得到封闭系统的 \mathcal{B} 矩阵，

$$\mathcal{B}^{(N)} = \begin{bmatrix} & & \begin{bmatrix} W^1 \\ \cdots \\ W^{N-1} \end{bmatrix} \\ \alpha \mathcal{B}^{(N-1)} & (1-\alpha) & \\ & & \end{bmatrix}. \quad (15.134)$$

$$\begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha \end{bmatrix}$$

对这个矩阵做封闭系统的计算 $\mathcal{B}^{(N)} W^{(N)} = W^{(N)}$ ，其中 $W^{(N)} = \begin{bmatrix} W^{(N-1)} \\ W^N \end{bmatrix}$ ，我们得到

$$W^N = 1 \quad (15.135)$$

以及

$$W^{(N-1)} = \alpha \mathcal{B}^{(N-1)} W^{(N-1)} + (1-\alpha) W \Rightarrow W^{(N-1)} = \frac{(1-\alpha)}{1-\alpha \mathcal{B}^{(N-1)}} W. \quad (15.136)$$

同时，由于汉字网络是一个有限层有向无环网：一个复杂汉字不会反过来成为一个简单汉字的组成部分，所以，一定存在某个 L 使得 $(\alpha \mathcal{B})^L = 0$ ，也就是从任意一个汉字开始不断地走向其组件简单字，总有一天就会发现走完了，没有更加简单的字了。于是，

$$W^{(N-1)} = (1 - \alpha) \sum_{l=1}^L (\alpha \mathcal{B}^{(N-1)})^l W. \quad (15.137)$$

对于排序来说，前面的常数 $(1 - \alpha)$ 没有影响，丢掉这个常数，

$$W^{(N-1)} = \sum_{l=1}^L (\alpha \mathcal{B}^{(N-1)})^l W. \quad (15.138)$$

由于这个取和是有限个，也就不再需要常数 α 来使得 $(1 - \alpha \mathcal{B})^{-1}$ 可计算了，

$$W^{(N-1)} = \sum_{l=1}^L (\mathcal{B}^{(N-1)})^l W. \quad (15.139)$$

于是， $W^{(N-1)}$ 就是我们前面的 \tilde{W} ， $\mathcal{B}^{(N-1)}$ 就是我们的不包含语料库的 \mathcal{B} ，有

$$\tilde{W} = (1 - \mathcal{B})^{-1} W = W + \mathcal{B}W + \cdots + \mathcal{B}^L W. \quad (15.140)$$

这个结果仅仅对于有向无环网成立。如果不是有向无环网，则我们需要引入 α 回到一般的公式 (15.136) 来计算。

对于大多数汉字，其组件的数量是 2，也就是 $X_j = \sum_i x_j^i = 2$ ，因此，

$$\mathcal{B} \approx 0.5A. \quad (15.141)$$

于是，之前猜测出来的公式 (15.132) 和现在的公式 (15.140) 正好吻合。当然，由于存在极少数 $x_j^i > 1$ 和 $X_j \neq 2$ 的情况，两者的结果不会完全相同。下面就是两种方法得到的学习顺序的比较。

我们发现，猜测出来的公式 (15.132) 和现在的推导出来的广义投入产出分析公式 (15.140) 的结果基本上不可区分，并且都比单纯考虑使用频率的顺序、从简单字到复杂字的层次性顺序、构字数量（出度）顺序要好很多。这相当于给之前猜测出来的方法一个更好的理论依据，并且也再一次展示了统一以后的广义投入产出分析框架的威力：对于任何分析，我们先

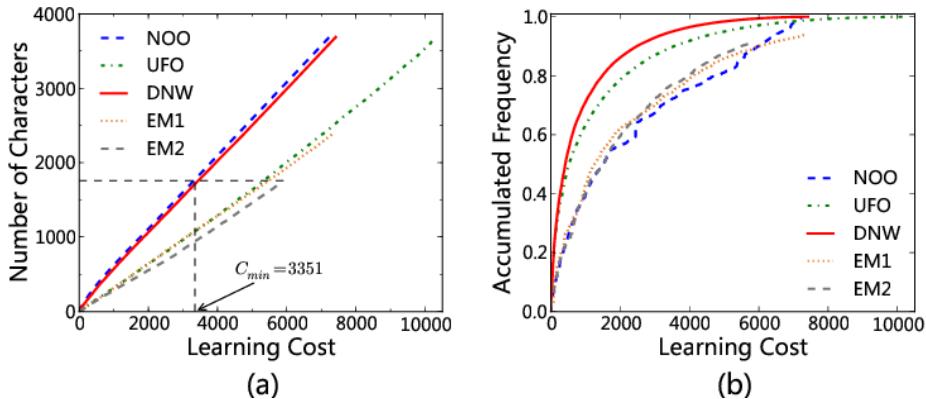


图 15.3: 基于学习成本模型和学习效果的度量——字数和累计使用频率, 我们比较了几种不同的学习顺序。绿色的“PR”表示按照公式(15.140)算出来的 PageRank 排序。红色的“DNW”是我们按照分配式顶点权算出来的学习顺序, “UFO”是使用频率顺序, “NOO”是从底向上按部就班顺序, “EM1”和“EM2”分别是两本教材上的汉字学习顺序。(a) 从累计字数来看, PR, NOO 和 DNW 的增长最快。(b) 从累计使用频率来看, PR, DNW 和 UFO 最好。其中 PR 和 NDW 比 UFO 增长更快。

想办法构造出来相应的封闭系统, 然后考虑 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 四个矩阵的封闭系统的左右本征向量问题和相应的去掉某个 Δ 的开放系统的问题。

再一次提醒注意, 这些分析中, 到底什么样的计算对应着回答了什么问题, 是否适用, 需要在具体问题中具体分析。

在汉字网络中, 每一个汉字的构字类型, 相当于化学反应的反应类型, 其实是可以标注出来的, 例如, 象形、形声、会意、指事等。但是, 在我们目前的分析中并没有用上。目前的分析相当于仅仅考虑了有联系, 而不是什么种类的联系。对于更加一般的概念网络, 很有可能这样的信息, 相当于化学反应条件、思维方式, 对于学习和研究是非常有意义的。因此, 如何更好地表示一般的概念网络, 并且在这个表示上来做投入产出分析以及其他的问题从而更好地来回答这个概念网络上的研究、教和学、甚至语料理解的问题, 都是值得进一步研究的问题。另外, 反过来, 从语料中, 如何构建概念网络, 并且是用最少的基本概念当基础就能够通过思维方式构建起来的概念网络, 而不是任何冗余联系都包含的概念网络, 也是一个非常值得研究的问题。在计算机学科、本体论和自然语言处理的相关研究中, 前者称

为知识图谱的应用，后者称为知识图谱的构建。当然，由于目的并不完全一样，我们这里主要是研究、教和学，它们主要关心把知识图谱用于计算机信息处理，所要构建的概念网络并不完全一样。例如，在它们关心的知识图谱中，用最少概念通过思维方式来构建整个概念大厦，尽量没有冗余联系，并不是其追求的目标。反过来，全面、机器可读、可计算可推理，往往是它们的概念网络的目标。

15.8.2 系统生物学、化学反应网络的流平衡分析做为广义投入产出分析

Flux Balance Analysis

15.8.3 广义投入产出分析用于国际贸易

当存在多个地区或者国家的时候，投入产出矩阵 x 成为分块结构，例如考虑 I, II 两个区域，每个区域有产业 1, 2 和消费者 fd 三个部门，则

$$x = \begin{bmatrix} x_{I,1}^{I,1} & x_{I,2}^{I,1} & x_{I,fd}^{I,1} & | & x_{II,1}^{I,1} & x_{II,2}^{I,1} & x_{II,fd}^{I,1} \\ x_{I,1}^{I,2} & x_{I,2}^{I,2} & x_{I,fd}^{I,2} & | & x_{II,1}^{I,2} & x_{II,2}^{I,2} & x_{II,fd}^{I,2} \\ x_{I,1}^{I,fd} & x_{I,2}^{I,fd} & x_{I,fd}^{I,fd} & | & x_{II,1}^{I,fd} & x_{II,2}^{I,fd} & x_{II,fd}^{I,fd} \\ \hline x_{I,1}^{II,1} & x_{I,2}^{II,1} & x_{I,fd}^{II,1} & | & x_{II,1}^{II,1} & x_{II,2}^{II,1} & x_{II,fd}^{II,1} \\ x_{I,1}^{II,2} & x_{I,2}^{II,2} & x_{I,fd}^{II,2} & | & x_{II,1}^{II,2} & x_{II,2}^{II,2} & x_{II,fd}^{II,2} \\ x_{I,1}^{II,fd} & x_{I,2}^{II,fd} & x_{I,fd}^{II,fd} & | & x_{II,1}^{II,fd} & x_{II,2}^{II,fd} & x_{II,fd}^{II,fd} \end{bmatrix}. \quad (15.142)$$

当然，在具体实际数据中，有的时候地区 I 到地区 II 的出口，也就是地区 II 从地区 I 的进口，有可能不区分去往了地区 II 中的哪个部门，也就是说，仅仅 $x_{II}^{I,i} = x_{II,1}^{I,i} + x_{II,2}^{I,i} + x_{II,fd}^{I,i}$ 是已知的，但是每一项 $x_{II,j}^{I,i}$ 并不知道。类似地， $x_I^{II,i} = \sum_j x_{I,j}^{II,i}$ 是已知的，但是每一项 $x_{I,j}^{II,i}$ 并不知道。但是，在这里，我们假设这些细分数据都是已知的。我们想来看看进出口 $x_{II,j}^{I,i}$ 或者一个单位的这个进出口对地区 I 和 II 经济的影响。按照广义投入产出分析的一般框架，我们也就是要去掉 B 矩阵的 (II, j) 行和 (II, j) 列（或者 F 矩阵的 (I, i) 行和 (I, i) 列），来计算逆矩阵。例如当考虑 $x_{II,fd}^{I,1}$ 的时候，我们关心的问题是，如果第二个地区的消费者多消耗一个单位的来自于第一个地区的

1 产品的时候，两个地区的产业的响应；考虑 $x_{II,1}^{I,fd}$ 的时候，我们关心的问题是，如果第二个地区的产业 1 多雇佣一个单位的来自于第一个地区的劳动力 (I, fd) 的时候，两个地区的产业的响应。

封闭系统的直接投入产出系数矩阵是，

$$B = \left[\begin{array}{ccc|ccc} \frac{x_{I,1}^{I,1}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,1}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,1}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,1}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{I,1}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,1}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{I,2}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,2}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,2}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,2}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{I,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,2}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{I,fd}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,fd}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,fd}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,fd}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{I,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,fd}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{II,1}}{X^{II,1}} & \frac{x_{I,2}^{II,1}}{X^{II,2}} & \frac{x_{I,fd}^{II,1}}{X^{II,fd}} & \frac{x_{II,1}^{II,1}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{II,1}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{II,1}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{II,2}}{X^{II,1}} & \frac{x_{I,2}^{II,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{I,fd}^{II,2}}{X^{II,fd}} & \frac{x_{II,1}^{II,2}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{II,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{II,2}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{II,fd}}{X^{II,1}} & \frac{x_{I,2}^{II,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{I,fd}^{II,fd}}{X^{II,fd}} & \frac{x_{II,1}^{II,fd}}{X^{II,1}} & \frac{x_{II,2}^{II,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{II,fd}}{X^{II,fd}} \end{array} \right]. \quad (15.143)$$

相应的封闭系统本征向量方程是

$$B \begin{bmatrix} X^{I,1} \\ X^{I,2} \\ X^{I,fd} \\ X^{II,1} \\ X^{II,2} \\ X^{II,fd} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X^{I,1} \\ X^{I,2} \\ X^{I,fd} \\ X^{II,1} \\ X^{II,2} \\ X^{II,fd} \end{bmatrix}. \quad (15.144)$$

去掉其中的 $(II, 1)$ 行 $(II, 1)$ 列之后，我们得到，

$$X^{(-(II,1))} = (1 - B^{(-(II,1))})^{-1} Y_{II,1} \triangleq L_{B^{(-(II,1))}} Y_{II,1}. \quad (15.145)$$

其中

$$B^{(-(II,1))} = \left[\begin{array}{ccc|cc} \frac{x_{I,1}^{I,1}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,1}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,1}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,1}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,1}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{I,2}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,2}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,2}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,2}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{I,fd}}{X^{I,1}} & \frac{x_{I,2}^{I,fd}}{X^{I,2}} & \frac{x_{I,fd}^{I,fd}}{X^{I,fd}} & \frac{x_{II,1}^{I,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{I,fd}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{II,2}}{X^{II,1}} & \frac{x_{I,2}^{II,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{I,fd}^{II,2}}{X^{II,fd}} & \frac{x_{II,1}^{II,2}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{II,2}}{X^{II,fd}} \\ \frac{x_{I,1}^{II,fd}}{X^{II,1}} & \frac{x_{I,2}^{II,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{I,fd}^{II,fd}}{X^{II,fd}} & \frac{x_{II,1}^{II,fd}}{X^{II,2}} & \frac{x_{II,fd}^{II,fd}}{X^{II,fd}} \end{array} \right], \quad (15.146)$$

$$X^{(-(II,1))} = \begin{bmatrix} X^{I,1} \\ X^{I,2} \\ \hline X^{I,fd} \\ \hline X^{II,2} \\ X^{II,fd} \end{bmatrix}, \quad (15.147)$$

并且

$$Y_{II,1} = \begin{bmatrix} x_{II,1}^{I,1} \\ x_{II,1}^{I,2} \\ \hline x_{II,1}^{I,fd} \\ \hline x_{II,1}^{II,2} \\ x_{II,1}^{II,fd} \end{bmatrix}. \quad (15.148)$$

例如，当

$$\Delta Y_{II,1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \hline 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (15.149)$$

的时候，我们有

$$\Delta X^{(-(II,1))} = L_{B^{(-(II,1))}} \Delta Y_{II,1} = \begin{bmatrix} (L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{I,1} \\ (L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{I,2} \\ \hline (L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{I,fd} \\ \hline (L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{II,1} \\ (L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{II,fd} \end{bmatrix}. \quad (15.150)$$

其中第一项 $(L_{B^{(-(II,1))}})_{I,fd}^{I,1}$ 表示为了响应 II 地区的 1 产业部门对 I 地区的劳动力 (fd 部门) 的需求的增加，部门 $(I, 1)$ 需要新增加的产出。 II 地区的 1 产业部门对 I 地区的劳动力 (fd 部门) 的需求代表了 I 地区对 II 地区的劳动力出口。我们看到了这样的劳动力出口带来的直接和间接的综合效果。类似地，我们还可以看 II 地区的 1 产业部门对 I 地区的 2 部门的需求——也就是 I 地区对 II 地区的 2 产品的出口——带来的直接和间接效果。这个效果通常被称为进出口的乘数效益。也就是说，为了满足这个出口， I 地区

不仅仅要生产出来这些出口产品，还需要生产出来生产这些出口产品的原材料，甚至间接促进 II 地区的产业生产。于是，一般来说，其直接和间接综合产值大于直接出口产品的产值。这就是为什么叫做乘数。

相比在传统投入产出分析中的多地区多国家的投入产出分析，这里我们可以把任何一个部门拿出来放到方程右边，例如 $(II, 1)$ ，而在那里，一般来说，我们拿出去的是 (I, fd) , (II, fd) 这些最终消费者部门 [67]。

下面我们用一个例子来展示这些计算。

表 15.1: 两地区、两产业部门、一消费者部门的人造系统的投入产出表，以货币为单位，每一行生产的产品投给这一行的每一列。特意设计了没有贸易差额的两个地区的投入产出表。

到 从	I,1	I,2	I,fd	II,1	II,2	II,fd
I,1 (元)	5	20	10	0	0	5
I,2 (元)	10	20	50	0	0	0
I,fd (元)	25	40	0	0	0	0
II,1 (元)	0	0	0	5	10	5
II,2 (元)	0	0	5	10	20	60
II,fd (元)	0	0	0	5	65	0

从投入产出表得到投入产出直接系数矩阵为

$$B = \begin{bmatrix} 0.1250 & 0.2500 & 0.1538 & 0 & 0 & 0.07143 \\ 0.2500 & 0.2500 & 0.7692 & 0 & 0 & 0 \\ 0.6250 & 0.5000 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2500 & 0.1053 & 0.07143 \\ 0 & 0 & 0.07692 & 0.5 & 0.2105 & 0.8571 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2500 & 0.6842 & 0 \end{bmatrix} \quad (15.151)$$

让我们来做两个计算， $L_{B^{(-I,fd)}}$ 和 $L_{B^{(-II,1)}}$ ，

$$L_{B^{(-I,fd)}} = \begin{bmatrix} 1.263 & 0.4211 & 1.263 & 1.263 & 1.263 \\ 0.4211 & 1.474 & 0.4211 & 0.4211 & 0.4211 \\ 0 & 0 & 5.268 & 4.000 & 3.805 \\ 0 & 0 & 18.54 & 19.00 & 17.61 \\ 0 & 0 & 14.00 & 14.00 & 14.00 \end{bmatrix} \quad (15.152)$$

其中, $L_{B^{(-I,fd)}}$ 的第 $(I, 1)$ 行的元素构成的矢量, 就是对一个货币单位的 $x_{I,fd}^{I,1}$ 的相应, 第 $(II, 1)$ 的元素构成的矢量, 就是对一个单位的 $x_{I,fd}^{II,1}$ 的相应, 其他行也如此。我们来计算一个第 $(I, 1)$ 行的前两列的和, 还有后三列的和,

$$\lambda^I(x_{I,fd}^{I,1}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,1}^{I,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,2}^{I,1} = 1.684, \quad (15.153)$$

$$\lambda^{II}(x_{I,fd}^{I,1}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,1}^{I,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,2}^{I,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,3}^{I,1} = 3.789. \quad (15.154)$$

这个结果表示, 为了满足一个货币单位的从 $(I, 1)$ 部门到 (I, fd) 部门的需求 $x_{I,fd}^{I,1}$, 地区 I 各个部门的总产出需要增加 1.684 的单位, 地区 II 各个部门的总产出需要增加 3.789 的单位, 合起来两个地区总共增加 5.474 个货币单位的产出。也就是 $x_{I,fd}^{I,1}$ 的地区内乘数效应为 1.684, 地区间乘数效应为 3.789, 总的放大力度为 5.474。

我们再来看 $L_{B^{(-I,fd)}}$ 的第 $(II, 1)$ 行的前两列的和, 还有后三列的和,

$$\lambda^I(x_{I,fd}^{II,1}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,1}^{II,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,2}^{II,1} = 0, \quad (15.155)$$

$$\lambda^{II}(x_{I,fd}^{II,1}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,1}^{II,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,2}^{II,1} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,3}^{II,1} = 13.07. \quad (15.156)$$

这个结果表示, 为了满足一个货币单位的从 $(II, 1)$ 部门到 (I, fd) 部门的需求 $x_{I,fd}^{II,1}$, 注意这是地区 II 出口到地区 I 的产品, 地区 I 各个部门的总产出需要增加 0 的单位, 地区 II 各个部门的总产出需要增加 13.07 的单位, 合起来两个地区总共增加 13.07 个货币单位的产出。也就是 $x_{I,fd}^{II,1}$ 在地区 I 内乘数效应为 0, 在地区 II 内的乘数效应为 13.07, 总的放大力度为 13.07。

我们再来看 $L_{B^{(-I,fd)}}$ 的第 $(II, 2)$ 行的前两列的和, 还有后三列的和,

$$\lambda^I(x_{I,fd}^{II,2}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,1}^{II,2} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{I,2}^{II,2} = 0, \quad (15.157)$$

$$\lambda^{II}(x_{I,fd}^{II,2}) = (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,1}^{II,2} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,2}^{II,2} + (L_{B^{(-I,fd)}})_{II,3}^{II,2} = 55.15. \quad (15.158)$$

这个结果表示，为了满足一个货币单位的从 $(II, 2)$ 部门到 (I, fd) 部门的需求 $x_{I,fd}^{II,2}$ ，注意这是地区 II 出口到地区 I 的产品，地区 I 各个部门的总产出需要增加 0 的单位，地区 II 各个部门的总产出需要增加 55.15 的单位，合起来两个地区总共增加 55.15 个货币单位的产出。也就是 $x_{I,fd}^{II,2}$ 在地区 I 内乘数效应为 0，在地区 II 内的乘数效应为 55.15，总的放大多效为 55.15。

这部分计算其实是传统经济学投入产出分析就能够算的。下面，我们来看部门 $(II, 1)$ 对其他部门的需求的增加的乘数效应。于是我们从 B 矩阵中去掉 $(II, 1)$ 行 $(II, 1)$ 列，并做逆矩阵，得到

$$L_{B^{(-II,1)}} = \begin{bmatrix} 10.54 & 9.694 & 9.273 & 2.537 & 2.927 \\ 21.07 & 22.13 & 20.65 & 5.073 & 5.854 \\ 17.12 & 17.12 & 17.12 & 4.122 & 4.756 \\ 6.488 & 6.488 & 6.488 & 6.488 & 6.024 \\ 4.439 & 4.439 & 4.439 & 4.439 & 5.122 \end{bmatrix} \quad (15.159)$$

我们分别来求每一行的前两项的和，以及后两项的和。我们先来计算一个 $L_{B^{(-II,1)}}$ 的第 $(I, 1)$ 行的前两列的和，还有后三列的和，

$$\lambda^I(x_{II,1}^{I,1}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{I,1}^{I,1} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,2}^{I,1} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,fd}^{I,1} = 29.50, \quad (15.160)$$

$$\lambda^{II}(x_{II,1}^{I,1}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{II,1}^{I,1} + (L_{B^{(-II,1)}})_{II,2}^{I,1} = 5.463. \quad (15.161)$$

这个结果表示，为了满足一个货币单位的从 $(I, 1)$ 部门到 $(II, 1)$ 部门的需求 $x_{II,1}^{I,1}$ ，注意这是地区 I 出口到地区 II 的产品，地区 I 各个部门的总产出需要增加 29.50 的单位，地区 II 各个部门的总产出需要增加 5.463 的单位，合起来两个地区总共增加 34.97 个货币单位的产出。也就是 $x_{II,1}^{I,1}$ 在地区 I 内乘数效应为 29.50，在地区 II 内的乘数效应为 5.463，总的放大多效为 34.97。

我们再来看 $L_{B^{(-II,1)}}$ 的第 (I, fd) 行的前两列的和，还有后三列的和，

$$\lambda^I(x_{II,1}^{I,fd}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{I,1}^{I,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,2}^{I,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,fd}^{I,fd} = 51.37, \quad (15.162)$$

$$\lambda^{II}(x_{II,1}^{I,fd}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{II,1}^{I,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{II,2}^{I,fd} = 8.878. \quad (15.163)$$

这个结果表示，为了满足一个货币单位的从 (I, fd) 部门到 $(II, 1)$ 部门的需求 $x_{II,1}^{I,fd}$ ，注意这是地区 I 出口到地区 II 的劳动力，地区 I 各个部门的总产出需要增加 51.37 的单位，地区 II 各个部门的总产出需要增加 8.878 的单

位, 合起来两个地区总共增加 60.24 个货币单位的产出。也就是 $x_{II,1}^{I,fd}$ 在地区 I 内乘数效应为 51.37, 在地区 II 内的乘数效应为 8.878, 总的放大效应为 60.24。

我们再来看 $L_{B^{(-II,1)}}$ 的第 (II, fd) 行的前两列的和, 还有后三列的和,

$$\lambda^I(x_{II,1}^{II,fd}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{I,1}^{II,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,2}^{II,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{I,fd}^{II,fd} = 13.32, \quad (15.164)$$

$$\lambda^{II}(x_{II,1}^{II,fd}) = (L_{B^{(-II,1)}})_{II,1}^{II,fd} + (L_{B^{(-II,1)}})_{II,2}^{II,fd} = 9.561. \quad (15.165)$$

这个结果表示, 为了满足一个货币单位的从 (I, fd) 部门到 $(II, 1)$ 部门的需求 $x_{II,1}^{II,fd}$, 注意这是地区 II 劳动力对地区 II 的产业 1 的投入, 地区 I 各个部门的总产出需要增加 13.32 的单位, 地区 II 各个部门的总产出需要增加 9.561 的单位, 合起来两个地区总共增加 22.88 个货币单位的产出。也就是 $x_{II,1}^{I,fd}$ 在地区 I 内乘数效应为 13.32, 在地区 II 内的乘数效应为 9.561, 总的放大效应为 22.88。

我们把以上结果整理成表格 15.2。第一列表示我们关注的流量和在玩具模型中这个流量的实际取值。这告诉我们, 由于贸易的存在, 尽管在这个玩具模型里面贸易很弱——分别只有两个元素不等于零其他的地区间流量都等于零, 但是, 仍然一个地区的需求改变会带来另一个地区的需求改变。甚至, 我们对于那些实际取值为零的流量, 也得到了乘数效应。也就是说, 如果在原来是零的基础上, 增加相应的一个货币单位的流量, 两个地区都会产生相应的响应。同时, 我们也观察到, 地区 1 对 $x_{II,1}^{I,1}$ 和 $x_{II,1}^{I,fd}$ 的响应系数比较大。这说明, 如果增加一个从地区 I 的产业 1 到地区 II 的产业 1 (产品出口), 及建议从地区 I 的产业 fd 到地区 II 的产业 1 (劳动力出口), 的出口, 对于增加地区 I 的总产值来说, 效果明显。这就是分解和响应的分析能够告诉我们的额外信息, 甚至当 $x_{II,1}^{I,1} = 0$ 和 $x_{II,1}^{I,fd} = 0$, 本身还没有实现的情况下。

15.8.4 广义投入产出分析用于环境科学

把投入产出分析用于环境科学主要回答的问题是最终消费者 (部门 N) 对产品 i 的需求 x_N^i 造成的环境压力, 例如废水废气的排放、资源的需求, 有多少。例如, 全球或者全中国、全美国的消费者对衬衣的需求造成的二氧化碳排放有多少, 占所有的二氧化碳排放的相对比例是多少。再例如, 全

表 15.2: 地区内和地区间流量的乘数效应小结

乘数 流量	I	II	合计
$x_{I,fd}^{I,1}(5)$	1.684	3.789	5.474
$x_{I,fd}^{II,1}(0)$	0	13.07	13.07
$x_{I,fd}^{II,2}(5)$	0	55.15	55.15
$x_{II,1}^{I,1}(0)$	29.50	5.463	34.97
$x_{II,1}^{I,fd}(0)$	51.37	9.561	60.24
$x_{II,1}^{II,fd}(5)$	13.32	9.561	22.88

美国或者全中国的消费者对所有产品的需求所造成的二氧化碳排放是多少，占多大比例。这些问题的一个简单答案就是运用传统的投入产出分析，也就是 $X = L_{B^{(-N)}} Y = (1 - B^{(-N)})^{-1}$ ，然后选择 $Y = x_N^i | i\rangle$ ，也就是让 Y 矢量的第 i 个元素等于 x_N^i 其他元素都是零。然后，求出来这个 X 之后，再运用每一个单位的 k 产品的生产过程直接带来的环境压力，例如二氧化碳的排放量， $f_k^{e_j}$ 就可以得到总环境压力，

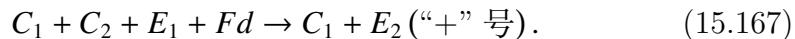
$$X^{e_j} \triangleq f^{e_j} L_{B^{(-N)}} Y = \sum_{ik} f_k^{e_j} (L_{B^{(-N)}})_i^k Y^i. \quad (15.166)$$

这个记录了每一个单位的产品 k 所造成的对 e_j 方面——例如废水、废气、干净水资源——的环境压力的矩阵本身 f^{e_j} ，一般可以通过实验室实验和田野调查来获得。回到我们对 Leontief 逆本身做的解释，我们就知道公式 (15.166) 的含义了：为了满足消费者的需求 Y ，我们首先要生产出来这么多 Y ，这个生产过程的直接环境压力就是 $f^{e_j} L_{B^{(-N)}} Y$ ；然后，我们需要生产出来用来生产 Y 的原材料，这个过程直接的环境压力是 $f^{e_j} B^{(-N)} Y$ ；……。把这些都加起来，自然，我们就得到了公式 (15.166)。

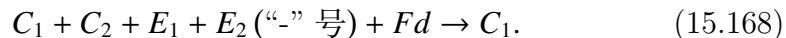
这样看起来就很好地回答了上面的最终消费造成的环境压力总和的问题了。但是，其实，这个方法很有逻辑上的漏洞，尽管也能用，也有人用。漏洞在哪里呢？第一，从理论上说，环境本来也应该看做是生产过程的一个部门，或者多个部门——每一种环境因素一个部门。这样构成的更大的投入

产出系统可能能够更好地帮我们回答上面的问题。第二，其实，在上面的框架中，我们把生产最终消费产品所需要的人类劳动力投入，和人类劳动力再生产过程所产生的环境压力，给忽略了。而且，很有可能，把人类劳动的投入和再生产考虑进来的办法正好就是考虑一个产业部门、劳动力和环境构成的大系统。

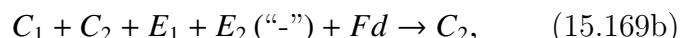
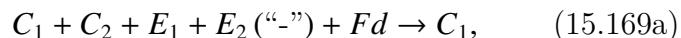
这一节，我们来构造这样的理论。首先，我们来决定一下把环境负担当做经济生产系统的输入还是输出。我们取一个两个产业部门（农业部门 c_1 、工业部门 c_2 ）、一个消费者部门 (fd)、两个环境部门的系统为例（环境中的水资源 e_1 、进入环境中的废水 e_2 ）。然后，我们把农产品 C_1 的生产写成下面的“化学反应方程式”，



其中， E_2 是生产 C_1 的副产品（废水排放）。但是，我们为了后面的记号的方便，把它特意改成了一个系数为负的项，把它移到在方程的左边，



另外，在实际生产中，很有可能一个这样的生产工艺会产出超过两种产品。我们忽略这样的情况，每一个产业部门仅生产一种产品。还有，有的时候，废水也可以是某个生产过程的原材料，例如，废水处理厂。这个时候，废水本身成了资源。也就是说，相当于有另一个资源部门 e'_1 。也就是说，就算是同一种资源，出现在原材料和产物中，我们就当做不同的环境部门。不过，由于我们这里仅仅考虑一个水资源和一个废水两个环境部门，我们就不再把废水当做资源的那个部门包含在我们的系统中了。我们把这个系统的所有的生产关系写在一起就是



除了前两式之外，剩下的分别表示，劳动力的再生产（通过消耗工农业产品、干净水和产生废水，忽略劳动力本身的投入）、水资源的再生产（通过消耗工农业产品、废水和劳动力，或者通过环境自己，忽略干净水本身的消耗）、废水排放（通过消耗工农业产品、干净水和劳动力，忽略废水本身的消耗）。这就是我们所考虑的，正好就是图 15.1 所表示的，生产 - 消费 - 环境封闭系统。注意公式 (15.169d) 把废水变成水资源的过程包含自然净化和工业净化。我们在这里暂时忽略工业净化，将来有必要可以再捡起来。由于忽略了工业净化，所以 $x_{e_1}^{c_1} = 0, x_{e_1}^{c_2} = 0, x_{e_1}^{fd} = 0$ 。我们还忽略了劳动力在生产的过程中劳动力本身的投入。

我们把这个封闭系统的投入产出矩阵 x 写成下面的表格，表15.3。表格中的最后两列中的元素含义特殊，我们特意写成了其他字体。其中，按照上面的仅仅考虑自然净化过程的角度， $\mathfrak{x}_{e_1}^{c_1} = 0, \mathfrak{x}_{e_1}^{c_2} = 0, \mathfrak{x}_{e_1}^{fd} = 0$ 。 $\mathfrak{x}_{e_2}^{c_1}$ 表示产品 C_1 在某个生产过程中直接变成了废水。这样的情况正常生产很少发生，除非我们考虑地质灾害或者生产者直接把产品倾倒到环境这样的情形，并且我们特意研究这样的现象对整个系统的影响。因此，我们取 $\mathfrak{x}_{e_2}^{c_1} = 0$ 。同理， $\mathfrak{x}_{e_2}^{c_2} = 0, \mathfrak{x}_{e_2}^{fd} = 0$ 。接着，我们还忽略水资源到水资源自身的投入 $\mathfrak{x}_{e_1}^{e_1} = 0$ ，废水到废水自身的投入 $\mathfrak{x}_{e_2}^{e_2} = 0$ ，水资源没有经过生产过程直接变成废水的投入 $\mathfrak{x}_{e_2}^{e_1} = 0$ 。于是，左后两列中唯一一个不为零的元素就是 $\mathfrak{x}_{e_1}^{e_2}$ 。

然后，我们进一步假设，在我们所做的环境压力分析中，我们不包含环境本身的净化能力这一项。如果要包含，将来只需要重新把这一项包含进来就可以。因此，我们设 $\mathfrak{x}_{e_1}^{e_2} = 0$ 。这样我们最后两列就全都是零了。

现在，我们来回答每增加一个单位的消费者对 C_1 的需求，会对环境造成多大压力。和之前的把消费者当做外界的开放系统投入产出分析一样，我们这里，既然我们要研究系统对消费者增加需求的相应，则消费者也是外界。我们记 $x_{fd}^{c_1} = Y^{c_1}, x_{fd}^{c_2} = Y^{c_2}$ ，得到如下线性方程组，

$$X^{c_1} = x_{c_1}^{c_1} + x_{c_2}^{c_1} + x_{fd}^{c_1} = B_{c_1}^{c_1} X^{c_1} + B_{c_2}^{c_1} X^{c_2} + Y^{c_1}, \quad (15.170a)$$

$$X^{c_2} = x_{c_1}^{c_2} + x_{c_2}^{c_2} + x_{fd}^{c_2} = B_{c_1}^{c_2} X^{c_1} + B_{c_2}^{c_2} X^{c_2} + Y^{c_2}, \quad (15.170b)$$

$$X^{fd} = x_{c_1}^{fd} + x_{c_2}^{fd} = B_{c_1}^{fd} X^{c_1} + B_{c_2}^{fd} X^{c_2}, \quad (15.170c)$$

$$X^{e_1} = x_{c_1}^{e_1} + x_{c_2}^{e_1} + x_{fd}^{e_1} = B_{c_1}^{e_1} X^{c_1} + B_{c_2}^{e_1} X^{c_2} + B_{fd}^{e_1} X^{fd}, \quad (15.170d)$$

$$X^{e_2} = x_{c_1}^{e_2} + x_{c_2}^{e_2} + x_{fd}^{e_2} = B_{c_1}^{e_2} X^{c_1} + B_{c_2}^{e_2} X^{c_2} + B_{fd}^{e_2} X^{fd} + \mathfrak{x}_{e_1}^{e_2} (\text{强行忽略}) . \quad (15.170e)$$

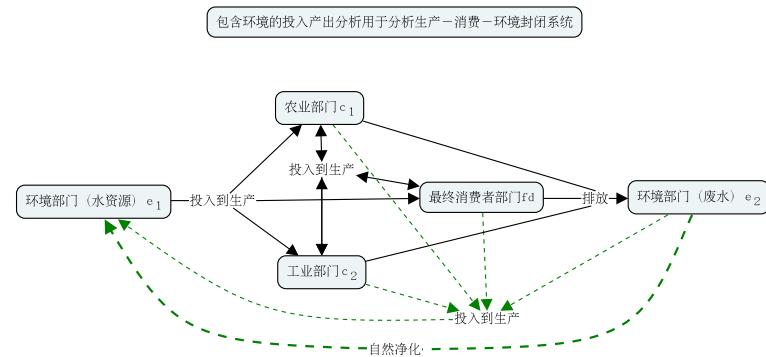
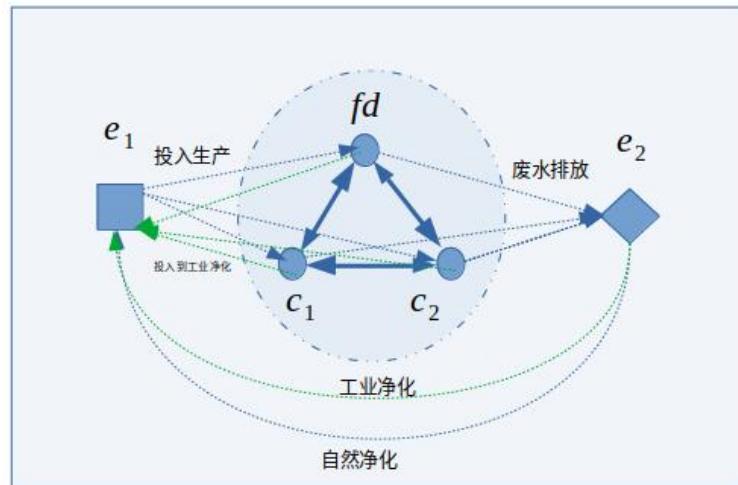


图 15.4: 对于产业 - 消费 - 环境封闭系统，我们也可以运用投入产出分析。这是用概念地图来描述系统。注意，在下面的计算中，我们忽略了工业净化，仅仅考虑自然净化。另外，在产业中我们允许 c_1 部门有到 c_1 部门的投入，但是在环境中我们忽略了 $e_1 \rightarrow e_1$ 和 $e_2 \rightarrow e_2$ 的投入。



生产 - 消费 - 环境封闭系统

图 15.5: 对于产业 - 消费 - 环境封闭系统，我们也可以运用投入产出分析。这是用网络来描述系统。

表 15.3: 生产 - 消费 - 环境封闭系统的投入产出关系

from to	c_1	c_2	fd	e_1	e_2
c_1	$x_{c_1}^{c_1}$	$x_{c_2}^{c_1}$	$x_{fd}^{c_1}$	$\mathfrak{x}_{e_1}^{c_1} = 0$	$\mathfrak{x}_{e_2}^{c_1} = 0$
c_2	$x_{c_1}^{c_2}$	$x_{c_2}^{c_2}$	$x_{fd}^{c_2}$	$\mathfrak{x}_{e_1}^{c_2} = 0$	$\mathfrak{x}_{e_2}^{c_2} = 0$
fd	$x_{c_1}^{fd}$	$x_{c_2}^{fd}$	$x_{fd}^{fd} = 0$	$\mathfrak{x}_{e_1}^{fd} = 0$	$\mathfrak{x}_{e_2}^{fd} = 0$
e_1	$x_{c_1}^{e_1}$	$x_{c_2}^{e_1}$	$x_{fd}^{e_1}$	$\mathfrak{x}_{e_1}^{e_1} = 0$	$\mathfrak{x}_{e_2}^{e_1} = 0$
e_2	$x_{c_1}^{e_2}$	$x_{c_2}^{e_2}$	$x_{fd}^{e_2}$	$\mathfrak{x}_{e_1}^{e_2}$ (强行忽略)	$\mathfrak{x}_{e_2}^{e_2} = 0$

在这里，我们已经把上面讨论过的可以看做零的所有项都去掉了。我们发现，这个方程的分成了三块：前两行、第三个、后两个。通过前两个方程可以得到 Y 到 X^{c_1}, X^{c_2} 的关系，然后通过第三个方程可以得到从 X^{c_1}, X^{c_2} 到 X^{fd} 的关系，最后通过后两个方程可以把 X^{c_1}, X^{c_2}, X^{fd} 转化成环境压力 X^{e_1}, X^{e_2} 。注意，之所以这些线性方程可以分块求解，就是上面去掉的那些零。如果我们不去掉那些零，那么就只能整体求解了。分块求解我们得到

$$X^{c_j} = \sum_{c_k} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k}, \quad (15.171)$$

这里 $L^{(-e-fd)} = (1 - B^{(-e-fd)})^{-1}$ 就是 Leontief 矩阵。 B 就是投入产出直接系数矩阵，也就是从整个封闭系统中去掉环境部门和最终消费者，只留下产业部门，

$$B^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} B_{c_1}^{c_1} & B_{c_2}^{c_1} \\ B_{c_1}^{c_2} & B_{c_2}^{c_2} \end{bmatrix}. \quad (15.172)$$

有了 X^{c_j} 利用第三个方程，我们就得到了劳动力总产出量，

$$X^{fd} = \sum_{c_j} B_{c_j}^{fd} X^{c_j} = \sum_{c_j, c_k} B_{c_j}^{fd} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k}. \quad (15.173)$$

接着我们把 X^{c_1}, X^{c_2}, X^{fd} 都放到公式 (15.170d) 和公式 (15.170e)，就有

$$X^{e_i} = \sum_{c_j, c_k} B_{c_j}^{e_i} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k} + B_{fd}^{e_i} \sum_{c_j, c_k} B_{c_j}^{fd} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k}. \quad (15.174)$$

这就是我们生产 - 消费 - 环境投入产出分析的核心公式。我们把公式 (15.166) 用现在的记号重写一下,

$$X^{e_i} = \sum_{c_j, c_k} B_{c_j}^{e_i} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k}, \quad (15.175)$$

我们发现, 公式 (15.174) 比公式 (15.166) 多了一项,

$$B_{fd}^{e_i} \sum_{c_j, c_k} B_{c_j}^{fd} L_{c_k}^{(-e-fd), c_j} Y^{c_k} = B_{fd}^{e_i} X^{fd}. \quad (15.176)$$

这一项的含义是劳动力总产出量 X^{fd} 带来的环境负担, 而为了满足消费者对产品的需求 Y 这个劳动力产出确实是需要的。当然, 实际数据中, 可能生产单位劳动力带来的环境负担 $B_{fd}^{e_i}$, 相比于生产单位产品的环境负担, 可能很小。因此, 这个公式到底是不是有实际价值, 需要通过实际数据来检验: 把公式 (15.174) 和公式 (15.175) 分别用于实际数据的分析, 然后看一看哪一个更加合理。

理论上, 上面得到包含环境和消费者的投入产出分析公式公式 (15.174) 的推导过程, 再一次证明了“先把系统看做一个封闭系统, 然后再去掉一些目标部门, 来当做开放系统分析相应”这样的一个研究思路的威力。

下面, 我们用一个人造的简单例子, 来展示一下这两个公式的结果的不同。

从投入产出表得到直接投入产出系数矩阵,

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{31} & \frac{20}{80} & \frac{10}{600} \\ \frac{10}{31} & \frac{20}{80} & \frac{50}{600} \\ \frac{200}{31} & \frac{400}{80} & 0 \\ \frac{10}{31} & \frac{20}{80} & \frac{5}{600} \\ \frac{9}{31} & \frac{15}{80} & \frac{4}{600} \end{bmatrix}. \quad (15.177)$$

我们现在来分别用公式 (15.174) 和公式 (15.175) 计算生产某产品的环境负担。

公式 (15.174) 需要 $L^{(-e-fd)} = (1 - B^{(-e-fd)})^{-1}$,

$$B^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{31} & \frac{20}{80} \\ \frac{10}{31} & \frac{20}{80} \end{bmatrix}. \quad (15.178)$$

表 15.4: 两产业部门、一消费者部门和两环境部门的人造系统的投入产出表, 每一行生产的产品投给这一行的每一列。最后一列是本行所代表的产出部门的总产出量。

到 从	农业	工业	消费者	行和
c_1 , 农业 (大米, 吨)	1	20	10	31
c_2 , 工业 (布匹, 卷)	10	20	50	80
fd , 消费者 (劳动力, 小时)	200	400	0	600
e_1 , 水资源 (水, 吨)	10	20	5	35
e_2 , 废水 (水, 吨)	9	15	4	28

因此

$$L^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} \frac{93}{80} & \frac{31}{80} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{bmatrix}. \quad (15.179)$$

注意到

$$Y^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} 10 \\ 50 \end{bmatrix}, \quad (15.180)$$

以及环境压力矩阵

$$B_c^e = \begin{bmatrix} \frac{10}{31} & \frac{20}{80} \\ \frac{9}{31} & \frac{15}{80} \end{bmatrix}, B_{fd}^e = \begin{bmatrix} \frac{5}{600} \\ \frac{4}{600} \end{bmatrix}. \quad (15.181)$$

在实际问题中, 产业对环境的总排放 X^{e_j} (这里的 35 和 28) 不一定能够直接拿到, 但是一般来说环境压力矩阵 B_c^e 和 B_{fd}^e 一般是有数据的, 统计数据或者实验室数据。现在我们把 $L^{(-e-fd)}$, $Y^{(-e-fd)}$ 和 B^e 放到公式 (15.174), 公式 (15.175) 里面去计算某产业的或者生产系统的总产出造成的环境压力, 并且比较两个公式的结果。

通过公式 (15.175) 我们得到

$$\begin{bmatrix} X^{e_1} \\ X^{e_2} \end{bmatrix} = B_c^e L^{(-e-fd)} Y^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} 30 \\ 24 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 35 \\ 28 \end{bmatrix}. \quad (15.182)$$

我们发现算出来的生产系统的总产出造成的环境压力小于我们已知的产业对环境的总排放。

换成公式 (15.174)，增加了一项来自于劳动力再生产过程造成的环境压力，

$$B_{c_1, c_2}^{fd} = \begin{bmatrix} \frac{200}{31} & \frac{400}{80} \end{bmatrix} \triangleq B^{fd}. \quad (15.183)$$

于是

$$X^{e_i} = B_c^e L^{(-e-fd)} Y^{(-e-fd)} + B_{fd}^e B^{fd} L^{(-e-fd)} Y^{(-e-fd)} = \begin{bmatrix} 35 \\ 28 \end{bmatrix}. \quad (15.184)$$

这正好就是我们期待得到的整个生产系统造成的总的环境压力。

有了公式 (15.174) 我们还可以做分解和相应，问如果产业部门 c_1 增加了一个单位的 C_1 的产出来满足消费者的需求，环境压力会增加多少。也就是设

$$\delta Y^{-e-fd} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (15.185)$$

公式 (15.174) 告诉我们相应地增加的环境压力分别是

$$\delta X^{e_i} = \begin{bmatrix} \frac{7}{12} \\ \frac{239}{480} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{7}{12} \\ \frac{221}{480} \end{bmatrix}. \quad (15.186)$$

这个分解式告诉我们为了能够给最终消费者一吨的大米，环境需要承担的负担是 $\frac{7}{12}$ 吨的干净水资源和 $\frac{239}{480}$ 吨的污染水。类似地，为了能够给队中消费者提供一卷纺织品，环境需要提供 $\frac{7}{12}$ 吨的干净水资源，同时接受 $\frac{221}{480}$ 吨的污染水排放。

这个分解还可以进一步重新整合起来，也就是各个单位产品的环境压力乘以相应的这个产品的总产出，加起来，就得到所有产业造成的环境压力，

$$10 \begin{bmatrix} \frac{7}{12} \\ \frac{239}{480} \end{bmatrix} + 50 \begin{bmatrix} \frac{7}{12} \\ \frac{221}{480} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 35 \\ 28 \end{bmatrix}. \quad (15.187)$$

再一次强调，我们从广义投入产出分析的框架来处理生产 - 消费 - 环境系统，就能够自然地得到正确的公式公式 (15.174)，而不是在原始的产业系统的投入产出分析公式的基础之上来自我共识，得到 公式 (15.175)。当然，

公式 (15.174) 比公式 (15.175) 要求更多的数据——劳动力再生产过程中的直接环境压力数据，也就是例如为了生产一个人工作一个小时需要多少干净水排放出多少污染水的数据。更进一步，实际生产系统中，所增加的由劳动力在生产带来的环境压力是否能够和生产系统本身相比，以至于不能忽略，也需要由实际问题的研究来检验。但是，道理上，把一般的广义投入产出分析框架用于环境问题的研究是很有意义的展示一般的广义投入产出分析框架的威力的例子。

除了把最终消费者当做外界，我们还可以把某个产业部门 k 当做外界，问：如果这个产业部门 k 减少了对另一个产业部门 i 的依赖， $\frac{x_k^i}{x^k}$ 变小了，或者这个产业部门 j 对环境的需求或者排放减少了， $x_{e_1}^k$ 或者 $x_{e_2}^k$ 变小了，整个系统造成的环境压力会有什么样的变化。这相当于告诉我们某个技术研究——产品工艺的改进导致原材料消耗变低或者环境排放变小——将会造成什么样的环境后果。这也是非常有意义的问题。这也就是把任意部门的目标外界投入产出分析方法推广到生产 - 消费 - 环境系统上去。

用同样的方法，结合投入产出和国际贸易数据，我们可以讨论，各个国家的消费者的对某产品的消费或者对所有产品的消费造成的总的二氧化碳的排放等其他环境压力的问题。尤其是当考虑到同时存在共享产品（通过国家间的贸易）和共享环境压力（通过流经多个国家的河流、污染通过大气洋流等的输运）的时候，例如， A 国生产比较多的某产品而该产品大量出口至 B 国家，同时 A 国的河流或者大气又可以把 A 国产业排放的污染传递至 B 国的情形，就更加需要我们这样的能够综合考虑直接和间接的环境压力的分析方法了。那个时候环境本身的输运， $x_{e_1}^{e_2}$ ，也要成为我们的系统中不可忽略的变量。不过，只要有数据，我们的广义投入产出分析方法的框架，尽管不是具体公式，仍然适用。

系统科学就是这样的东西，只要新的具体系统的内在关系还是这个分析方法所描述的关系，那么，具体系统变成什么样，没有任务问题。下面，我们甚至要突破生产 - 消费 - 环境系统来考虑一个更加复杂的科学 - 生产 - 消费 - 环境系统。

15.8.5 广义投入产出分析用于科学学

前面我们从生产 - 消费系统的广义投入产出分析拓展到了生产 - 环境系统的广义投入产出分析，现在我们再把这个系统拓展到科学 - 生产 - 消费 - 环境系统。也就是说，我们把整个人类生产过程看做：从环境中获得资源（同时生产和消费部门还给环境废弃物或者其他物质）投给生产系统，生产系统生产产品用来生产劳动力（包含劳动力的投资、对科学和技术的投资），劳动力部门主要生产新的劳动力包含促进科学和技术的发展，科学和技术的发展促进生产系统的生产。其中科学和技术部门自己还可以看作是各个学科的研究和教学两个子系统，研究包含科学和技术开发。科学学就是为了搞清楚科学和技术部门内部的规律，以及科学和技术部门和生产部门的关系，从而促进各个学科的研究和教学。所谓内部规律，可以是各个学科之间有什么样的关系，如果一个发展了另一个会怎样，或者如果我们要促进其中一个的发展，我们要对其他的学科做些什么，还可以是哪一些学科或者某学科内的什么问题是从人类文明发展本身的角度最值得研究的，还可以是对多有的科学的研究工作和工作者做一个某种重要性的排序，然后用来指导教学或者做推荐等等。所谓外部关系，可以是，从整个生产或者生产某产品来说，什么学科或者什么学科的哪些问题是最值得研究的，或者反过来，来自于生产系统对劳动力和科学技术部门的投入产生了某种变化以后，科学技术部门会有怎样的发展。

科学 - 生产 - 消费 - 环境系统投入产出系统示意图

我们看到，科学 - 生产 - 消费 - 环境系统自然是一个投入产出系统，甚至科学技术部门内部也是一个投入产出系统：学科之间的思想和知识的流动、科学 - 技术 - 教学之间的思想和知识的流动。因此，在这一章，我们就用几个例子来展示，广义投入产出分析如何应用于科学学。

同时，在这个过程中，我们也希望再一次体现，当把一般理论用于具体问题的研究的时候，一定要看看这个一般理论所做的分析计算在具体问题里面有什么含义，甚至有什么不足从而依靠具体问题促进一般理论的进一步发展。也希望你能够从中再一次体会到什么是系统科学：系联（联系¹ + 联系² + 联系³ + …）、从孤立到有联系从直接联系到间接联系从个体到整体、对跨越学科领域的一般方法的追求、从实际中来到实际中去。

科学学的投入产出关系网络

我们把科学技术部门内部的主要元素和元素之间的关系的投入产出关系图画出来。可以看到其主要分成两个子部门科学研究和技术开发，同时在每一个子部门之内，有一个三种不同个体构成的投入产出关系：科学家 - 论文 - 科学概念，发明人 - 专利（发明） - 技术概念。其中，科学家创作论文，论文工作在某些科学概念上，科学家之间可以有导师 - 学生等社会关系，论文之间有引用关系，概念之间有逻辑关系；发明人做出发明，发明关注在某些技术概念上，发明人之间可以有社会关系，发明之间有引用关系，技术概念之间有逻辑关系。同时，专利和论文之间也可能存在着引用关系。这个引用关系实际上代表了背后的技术概念和科学概念之间的关系。发明可以用于（有的时候科学也可以直接用于）生产系统中产品的生产，生产系统中生产的产品和获得的利润用于投资科学和技术开发。

科学学的研究可以在这样的一个投入产出关系网络上进行。下面的大部分例子，我们都仅仅考虑中间的论文层，其主要关系就是论文的相互引用关系。这样的研究的主要目标就是给论文或者论文的某种集合，例如学科，做一个某种影响力的排序。

引文网络上的广义投入产出分析

x_j^i 表示 j 引用 i ，也就是 i 对 j 有投入。没有外界的时候，一篇论文 i 的影响力等于所有的施引这篇论文的论文 j 的影响力的某种传播和叠加。如果每篇施引论文传给这篇论文的影响力差别忽略不计，也就是都算成 1，那么，

$$C^i = \sum_j x_j^i \times 1. \quad (15.188)$$

如果每篇文论 j 的总影响力差别忽略不计，算成 1，然后把这个总影响力分配给 j 的所有的参考文献（所以需要除以 j 的参考文献数量 X_j ），则

$$\tilde{C}^i = \sum_j \frac{x_j^i}{X_j} \times 1. \quad (15.189)$$

如果 i 本身的总影响力也是由相同的机制决定的，那么，除了那些没有被引用的论文，所有其他论文的影响力满足

$$P^i = \sum_j \frac{x_j^i}{X_j} \times P^j. \quad (15.190)$$

对于那些没有被引用的论文，我们设置一个等大小的初始权重。同时考虑到这个初始权重如果仅仅给那些没有被引用的论文，则其权重有可能还会超过那些被引用很少的一两篇的论文。因此，我们给所有的论文一个等大小的初始权重。这样相当于我们增加了一篇“论文” N ，然后这篇论文给每一篇文章增加了一个被“虚拟的外界 N ”引用的次数 x_N^i ，

$$P^i = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\tilde{x}_j^i}{X_j} P^j + \frac{x_N^i}{X_N} P^N. \quad (15.191)$$

注意，按照前面的理念，我们希望 $\frac{x_N^i}{X_N} P^N$ 不依赖于 i ，也就是

$$x_N^i = e. \quad (15.192)$$

我们还希望增加了论文 N 以后不改变总的 X_j ，

$$\sum_{j=1}^{N-1} x_j^i = X_j = \sum_{i=1}^{N-1} \tilde{x}_j^i + x_j^N. \quad (15.193)$$

这个只要取 $\tilde{x}_j^i = \alpha x_j^i, x_j^N = (1 - \alpha) X_j$ 就能够满足。合起来，有

$$\begin{aligned} P^i &= \sum_{j=1}^{N-1} \alpha \frac{\tilde{x}_j^i}{X_j} P^j + \frac{e P^N}{X_N} \\ \Rightarrow P &= (1 - \alpha \mathcal{B})^{-1} [1, \dots, 1]^T \frac{e P^N}{X_N}. \end{aligned} \quad (15.194)$$

常数 $\frac{e P^N}{X_N}$ 可以将来依靠归一化 $\sum_{j=1}^{N-1} P^j = 1$ 来消除。在这里我们给出来归一化以后的结果

$$\frac{e P^N}{X_N} = \frac{1 - \alpha}{N - 1}. \quad (15.195)$$

于是，我们从增加了部门 N 之后的封闭系统的 \mathcal{B} 矩阵的有本征向量的方程，得到了开放系统系统的 \mathcal{B} 矩阵矩阵逆计算，

$$P = \frac{1 - \alpha}{1 - \alpha \mathcal{B}} \left[\frac{1}{N - 1}, \dots, \frac{1}{N - 1} \right]^T. \quad (15.196)$$

合起来，我们发现，对于论文引用关系，公式 (15.190) 有意义：如果每一篇文章都至少有一次被引用，则所有文章构成的封闭系统通过公式 (15.190) 来计算刚好能够得到期待的正反馈传播（被重要的论文引用则从施引论文传递回来的被引论文的影响力也增加的多）之后的“影响力”；如果存在一些论文没有被引用，则可以全体论文都增加一个来自于虚拟论文的引用。

其实，忽略所有的还没有被引用的论文构成一个新的论文引用关系集合也是一个办法。但是，一旦我们这样做，就有可能会产生新的没有被引用的论文。于是，需要进一步再次以去掉这样的论文。实际上，这个正好就是我们之前在第十四章网络科学中学习到的网络的 k -核分解。先做 k -核分解，得到 k -核，算出来 k -核中每一篇论文的影响力，也是一个可行的方案。甚至，如果需要，可以从算出来的 k -核的论文的影响力在用某种算法扩散到边缘论文中去。不过，在论文引用关系上，这个 k -核不一定存在：对于一个完全层次性的有向无环图，去掉所有的没人引用的最外层（最新的论文），就意味着之前的次外层成了新的没人引用的最外层。当然，对于其他的网络，这个思路还是有可行性的。

注意，我们可以直接上来就把四种投入产出分析—— B 的本征值本征矢量和逆矩阵、 F 的本征值本征矢量和逆矩阵、 \mathcal{F} 的本征值本征矢量和逆矩阵、 \mathcal{B} 的本征值本征矢量和逆矩阵——在这个问题上用一遍，然后来讨论结果。但是，在这里，我们看到，我们从实际问题的意义出发，先构造出来某种影响力传播的过程及其方程公式 (15.190)，然后，我们再来进一步把这个方程变成标准的广义投入产出方程。在实际问题中，问题的本身内在含义决定了哪一些运算是可行的哪一些是不行的。因此，在使用投入产出分析的时候，一般来说，先要从问题的实际意义出发来构建过程和方程。

公式 (15.190) 代表了某种影响力的传播，只要论文 j 引用了 i ，则论文 j 的影响力也应该分配一点给 i ：一方面因为 j 的工作可能基于 i 所以 i 要获得一点间接贡献点，另一方面反过来看如果 j 的影响力很大则 i 接受 j 传过来的也比较大。现在，我们来思考另一个过程，

$$P_j = \sum_i P_i \times \frac{x_j^i}{X^i}. \quad (15.197)$$

这意味着，如果 j 引用了 i ，则 i 的某种东西会进入 j ，并且其分配方式是按照 X^i 也就是 i 的总被引次数进行分配 ($\frac{P_i}{X^i}$)。这个“某种东西”和过程可能

会是什么呢？比如说， i 是一篇包含了“某种非常珍贵的东西”的论文，如果 j 引用了 i ，则 j 的这总珍贵性也会得到加强。同时，由于 i 被很多文章引用，其传播过来的珍贵性要除以 X^i 。你可以沿着这个思路，注意到，文章的珍贵性也可以有一个外生变量——文章的珍贵性不能完全依赖于引用网络的传播，应该从一个已有的外部珍贵性评价开始来传播。于是，包含一个外界以及外界对系统内个体的评价 e_P 之后，变成

$$P_j = \sum_i \alpha P_i \times \frac{x_j^i}{X^i} + (1 - \alpha) e_P \Rightarrow P = e_P \frac{1 - \alpha}{1 - \alpha \mathcal{F}}. \quad (15.198)$$

但是，考虑到论文无论被引用多少次，其本身的珍贵性往往不会减少，传递出去的珍贵性也不一定就需要按照被引次数来平均分配。因此，公式 (15.197) 在论文引用关系上不一定适用，尽管回到经济生产问题公式 (15.197) 很有道理： i 产品在资源上的珍贵性往往是需要按照分配比例 $\frac{x_j^i}{X^i}$ 来分给下游部门的。那，能不能给公式 (15.197) 找一个科学学上有意义的解释呢？其实可以尝试把这个 P 看做创新性， e_P 看做已经存在的外界创新性度量，公式 (15.197) 就是把 e_P 传递到每一篇论文上去。这个时候，自然引用 i 的论文越多，则传递到施引论文上的创新性就会越少。不过，如果真的要用这个角度讨论创新性，还得考虑时间因素，也就是 i 传递过去的创新性不仅仅是按照 i 的总被引次数平均来算，而且 j 到底属于靠前还是靠后施引（也就是要看目前 i 已经被引用了多少次 $X^i(t)$ ，包含当前 $x_j^i(t)$ 这次引用） i 也会影响 i 传递给 j 的创新性，例如考虑

$$P_j(t) = \sum_i \alpha P_i(t) \times \frac{x_j^i(t)}{X^i(t)} + (1 - \alpha) e_P(t - 1), \quad (15.199)$$

$$e_P(t) = P_j(t), e_P(0) = e_P. \quad (15.200)$$

在这里我们就不展开讨论了。通过这个讨论，我们想要说明的是，**并不是所有的标准广义投入产出分析在具体问题中都是可以无脑使用的，一定要搞清楚这个计算在具体问题中的含义，然后决定是否适用。**你还可以用类似的方式来思考一下 B 和 F 的本征值本征矢量和逆矩阵在引文网络上的可能的含义。很多时候，科学的研究的道路可以是给实际问题找到合适的数学描述，或者给数学描述找到很是的实际意义。

HEM 投入产出分析用于研究学科依赖关系

开放系统投入产出分析用于研究科学 - 技术依赖关系

用开放系统 PageRank 来包含外部数据集的统计信息

绝大多数时候，科学学的研究需要在一个特定的数据集上来开展，而这个数据集肯定是不完整的：没有人有办法收集所有的论文、书籍、专利等全部文献的发表记录和相互引用关系，很多时候也没有必要。这个时候，我们必须回答一个重要问题：在什么意义上，这个发表记录和相互引用关系的数据集是比较完整的？这个问题可以尝试这样来回答：如果我们有进一步信息加入到这个数据集，是不是很大程度上，各种分析结果就会产生很大的改变？如果有很大的改变，则可以认为不太完整，如果改变不大，则可以认为比较完整。这个问题的答案取决于几样因素：数据集本身的大小、额外加入数据集的发表记录和相互引用关系有多少、分析方法是不是尽可能地运用了已有的数据集的信息。也就是说，如果分析方法能够比较好地利用已有的数据集，可能就会让已有的数据集显得更加可靠。

比如说，如果我们的分析方法就是统计被引次数，则很大程度上，这个数据集的可靠性就可以用“数据集内部的平均被引次数和总被引次数”和“额外加入的数据集的内部平均被引次数和总被引次数”、“额外加入的数据集的平均和总的引用原始数据集的次数”来描述。我们可以假设相比于额外增加的数据集，现有数据已经收集了被引次数比较多的论文。实际上，科学学研究的大量数据集一定程度上确实满足这一条：大多数数据集都是按照某种平均被引次数，例如论文所在期刊的平均被引次数，来收集论文的。再例如，我们的分析方法是论文被引关系网络的 PageRank 矢量——这个时候粗糙地说被引次数更多的论文在传递 PageRank 矢量的时候会发挥更大的作用，很可能这个算法会使得现有数据集显得更可靠更完整——反正那些新加进来的论文被引次数比较小，传播 PageRank 值的效果也比较低。那么，是不是这样呢？

另外一个相关的问题是，相比较于有发表记录和相互引用关系的原始数据集上，如果对于额外数据集，我们只能拿到被引次数而没有完整的引用关系网络，有没有什么方法可以比较好地把额外数据集的信息拿来加强原始数据集的分析结果，使其更可靠更完整呢？同样，如果我们的分析方法

就是统计被引次数，那么只要加上来自于额外数据集的被引次数就行。但是，如果我们的分析方法是论文被引关系网络的 PageRank 矢量，有没有什么方法能够得到比较完整的信息呢？能不能把额外数据集的被引次数当做 PageRank 计算的外界，然后把这个外界传播到原始数据集的内部来得到综合考虑额外数据集之后的原始数据集内论文的新的 PageRank 矢量，并且这个新的 PageRank 矢量还能够比较接近真实的 PageRank 值呢？在这里，真实的含义是如果原始数据集和额外数据集的合起来的引用关系网络都知道的话，我们在整个网络上做计算得到的 PageRank 值。

在这一小节，我们就来尝试回答上面的两个问题：相比于被引次数，PageRank 值是不是能够提高原始数据集的可靠性表现，如果这个原始数据集的内部引用确实一定程度上比额外数据集稠密；把来自于额外数据集的被引次数加进来做包含外界的 PageRank 计算，是不是可以比封闭系统的 PageRank 计算更接近真实的 PageRank 值。

封闭系统(先增加一个假想的外界 N 然后去掉)PageRank 公式 (15.196)

开放系统的 PageRank， N 代表所有额外数据集中论文的集合，

$$P^i = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{x_j^i}{X_j} P^j + \frac{x_N^i}{X_N} P^N = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{x_j^i}{X_j} P^j + x_N^i \frac{P^N}{X_N} \Rightarrow P = (1 - \mathcal{B}^{(-N)})^{-1} Y, \quad (15.201)$$

其中 $Y = [x_N^1, \dots, x_N^{N-1}]^T$ 是额外数据集引用原始数据集的每一篇论文的次数。常数 $\frac{P^N}{X_N}$ 将来交给归一化处理。 X_i 是论文 i 的总施引次数，也就是 i 的参考文献数量

$$X_i = \sum_{j=1}^{N-1} x_i^j + x_i^N > \sum_{j=1}^{N-1} x_i^j. \quad (15.202)$$

这个和公式 (15.196) 中的 X_i 并不相同，那里 X_i 就是在原始数据集中的总被引次数，也就是， $X_i = \sum_{j=1}^{N-1} x_i^j$ 。考虑额外数据集之后，这一条就不再满足了。正是破坏了这一条，才使得现在的 $\mathcal{B}^{(-N)}$ 的最大本征值小于 1，于是才可以求 $(1 - \mathcal{B}^{(-N)})^{-1}$ 。

15.9 作业

习题 15.11 (矩阵逆的微扰计算). 以投入产出矩阵

$$x = \begin{bmatrix} 8 & 4 & 1 & 0 \\ 8 & 4 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 5 & 5 \\ 0 & 1 & 4 & 5 \end{bmatrix} \quad (15.203)$$

为例, 计算 $1 - B$ 矩阵的“逆”(注意, 需要加 $i\eta$), 然后运用这个 $L_0 = (1 - B)^{-1}$ 来计算各个 Loentief 逆矩阵 $L_0^{(-k)} = (1 - B^{(-k)})^{-1}$ 。

习题 15.12 (toy-model 产业系统的广义投入产出分析). 以同样的 x 为例, 把向前向后封闭系统和开放系统投入产出分析, 向前向后 PageRank 的封闭系统和开放系统分析都做一下。注意, 对于 PageRank, 封闭系统有两个含义: 第一、把目前的四个部门当做封闭系统, 计算稳定分布; 第二、人为增加一个第 5 个部门, 也就是增加一个 $e = [1, 1, 1, 1]$ 外界需求 (或者供给) 矢量。

习题 15.13 (矩阵奇异值和奇异值向量的微扰计算). 以同样的 x 为例, 增加

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & 0.1 & 1 & 0 \\ 0.2 & 0 & 0.2 & 0 \\ 0 & 0.1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1 \end{bmatrix}, \quad (15.204)$$

计算旧的矩阵和新的矩阵的奇异值和奇异值向量, 然后检验一下微扰计算的结果。你可以只计算最大的那个奇异值和相应的奇异值向量。

习题 15.14 (非 Hermitian 矩阵本征值和本征向量的微扰计算). 以同样的 x 为例, 增加

$$\Delta = \begin{bmatrix} 0 & 0.1 & 1 & 0 \\ 0.2 & 0 & 0.2 & 0 \\ 0 & 0.1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1 \end{bmatrix}, \quad (15.205)$$

计算旧的矩阵和新的矩阵的本征值和本征向量, 然后检验一下微扰计算的结果。你可以只计算最大的那个本征值和相应的本征向量。

习题 15.15 (矩阵本征值和本征向量的微扰计算). 把上面的 x 和 Δ 都改成对称的矩阵，计算旧的矩阵和新的矩阵的本征值和本征向量，然后检验一下微扰计算的结果。你可以只计算最大的那个本征值和相应的本征向量。

15.10 本章小结

按照所处理的矩阵和对矩阵的处理，我们来总结一下这一章的广义投入产出分析方法。首先，是面对的矩阵是 B, F, \mathcal{F} 还是 \mathcal{B} 。前两个称为向前和向后投入产出分析，后两个称为向前和向后 PageRank。其次，对于给定的矩阵，例如 B 我们可以做本征值本征向量分析——也就是，对比 B 矩阵的和去掉一个或者多个部门或者元素之后的 $B^{(-k)}, B^{(-k_1-k_2)}, B-\Delta$ 矩阵的最大本征值以及最大本征值对应的本征向量，或者是矩阵逆计算——也就是讨论矩阵 $L_{B^{(-k)}} = (1 - B^{(-k)})^{-1}, L_{B^{(-k_1-k_2)}} = (1 - B^{(-k_1-k_2)})^{-1}, L_{B-\Delta} = (1 - B + \Delta)^{-1}$ 以及结合相应的外界矢量 $Y = [x_k^i]_{1 \times (N-1)}$ 的各种性质。同样的分析我们还可以做在矩阵 $F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 上，不过考虑到这些矩阵之间的关系，这些分析尽管含义不一样，但是，并不独立。整理起来有，

- 投入产出分析，起点 $x = (x_j^i)_{N \times N}$ ，定义 $X^j = \sum_k x_k^j, X_j = \sum_k x_j^k, \mathcal{O} = (\delta_j^i X^j)_{N \times N}, \mathcal{I} = (\delta_j^i X_i)_{N \times N}$
 1. B 矩阵，定义 $B_j^i = \frac{x_j^i}{X^j}$
 - (a) 封闭系统平凡右最大本征矢量： $B_b^a X^b = X^a$ 。平凡一般不做。
 - (b) 在右最大本征矢量方程的基础上，把部分系统 Δ 看做外界，成为开放系统投入产出： $X^{(-\Delta)} = B^{(-\Delta)} X^{(-\Delta)} + Y^{(\Delta)} \Leftrightarrow X^{(-\Delta)} = (1 - B + \Delta)^{-1} Y^{(\Delta)} \Leftrightarrow X^{(-\Delta)} = L_{B^{(-\Delta)}} Y^{(\Delta)}$ ，响应、分解、影响力。
 - (c) 封闭系统非平凡左最大本征矢量 $\langle 1|_B B = \langle 1|_B$ ，等价于封闭系统 PageRank \mathcal{F} 做最大本征矢量 $\langle 1|_{\mathcal{F}} \mathcal{F} = \langle 1|_{\mathcal{F}}$ （两者关系是 $\langle 1|_{\mathcal{F}} = \langle 1|_B \mathcal{O}$ ）。一般放到封闭系统 PageRank \mathcal{F} 分析来做。
 - (d) 在左最大本征矢量方程的基础上，把部分系统 Δ 看做外界， $\tilde{P}^{(-\Delta)} = \tilde{e}_P L_{B^{(-\Delta)}}$ ，等价于开放系统的 PageRank \mathcal{F} 分析

$P^{(-\Delta)} = e_P L_{\mathcal{F}^{(-\Delta)}}$ (由于 $L_{B^{(-\Delta)}} = \mathcal{O} L_{\mathcal{F}^{(-\Delta)}} \mathcal{O}^{-1}$, 只要我们取 $\tilde{e}_P = e_P \mathcal{O}^{-1}, \tilde{P} = P \mathcal{O}^{-1}$ 两者就完全等价)。一般放到开放系统 PageRank \mathcal{F} 分析来做。

- (e) 把部分系统 Δ 看做外界, 再计算最大本征值和右最大本征向量: $B^{(-\Delta)} |\lambda_{Max}^{(-\Delta)}\rangle = \lambda_{Max}^{(-\Delta)} |\lambda_{Max}^{(-\Delta)}\rangle_{B^{(-\Delta)}}$, 没有坚实的数学基础, 但是和 PageRank 有联系。

2. F 矩阵, 定义 $F_j^i = \frac{x_j^i}{x_i}$

- (a) 封闭系统平凡左最大本征矢量: $X_b F_b^a = X_a$ 。平凡一般不做。
- (b) 在左最大本征矢量方程的基础上, 把部分系统 Δ 看做外界, 成为开放系统投入产出: $X^{(-\Delta)} = Y^{(\Delta)} (1 - F + \Delta)^{-1} = Y^{(\Delta)} L_{F^{(-\Delta)}}$, 响应、分解、影响力。
- (c) 封闭系统非平凡右最大本征矢量: $F |1\rangle_F = |1\rangle_F$, 等价于封闭系统 PageRank \mathcal{B} 分析, $|1\rangle_F = \mathcal{J}^{-1} |1\rangle_{\mathcal{B}}$ 。一般放到封闭系统 PageRank \mathcal{B} 分析来做。
- (d) 在右最大本征矢量方程的基础上, 把部分系统 Δ 看做外界, $\tilde{P}^{(-\Delta)} = L_{F^{(-\Delta)}} \tilde{e}_P$, 等价于开放系统的 PageRank \mathcal{B} 分析 $P^{(-\Delta)} = L_{\mathcal{B}^{(-\Delta)}} e_P$: (由于 $L_{F^{(-\Delta)}} = \mathcal{J}^{-1} L_{\mathcal{B}^{(-\Delta)}} \mathcal{J}$, 只要我们取 $\tilde{e}_P = e_P \mathcal{J}^{-1}, \tilde{P} = P \mathcal{J}^{-1}$ 两者就完全等价)。一般放到开放系统 PageRank \mathcal{B} 分析来做。
- (e) 把部分系统 Δ 看做外界, 再计算最大本征值和左最大本征向量: $\langle \lambda_{Max}^{(-\Delta)} | F^{(-\Delta)} = \lambda_{Max}^{(-\Delta)} \langle \lambda_{Max}^{(-\Delta)} |_{F^{(-\Delta)}}$, 没有坚实的数学基础, 但是和反向 PageRank 有联系。

- PageRank

1. \mathcal{F} 矩阵, 定义 $\mathcal{F}_j^i = \frac{x_j^i}{x_i}$

- (a) 封闭系统平凡右最大本征矢量: $\mathcal{F} |1\rangle_{\mathcal{F}} = |1\rangle_{\mathcal{F}}$, 等价于投入产出分析 $B_b^a X^b = X^a$: $|1\rangle_{\mathcal{F}} = \mathcal{O}^{-1} |1\rangle_B$ 。平凡一般不做。
- (b) 在右最大本征矢量方程的基础上, 把部分系统 Δ 看做外界, 成为开放系统 PageRank: $\mathcal{X}^{(-\Delta)} = L_{\mathcal{F}^{(-\Delta)}} \mathcal{Y}^{(\Delta)}$, 等价于开放系统的投入产出 B 分析: $X^{(-\Delta)} = L_{B^{(-\Delta)}} Y^{(\Delta)}$ 。一般放到投入产出 B 分析来做。

- (c) 封闭系统非平凡左最大本征矢量: $\langle 1 |_{\mathcal{F}} \mathcal{F} = \langle 1 |_{\mathcal{F}}$, 稳定分布。
- (d) 在左最大本征矢量方程的基础上, 把部分系统 Δ 看做外界, 成为开放系统 PageRank: $P^{(-\Delta)} = P^{(-\Delta)} \mathcal{F}^{(-\Delta)} + e^{(\Delta)} \Leftrightarrow P^{(-\Delta)} = e^{(\Delta)} (1 - \mathcal{F} + \Delta)^{-1}$, 有外界需求 $e^{(\Delta)}$ 下的稳定分布。如果没有外界, 则人为设 $e^{(\Delta)}$ 为相同元素值向量。

2. \mathcal{B} 矩阵, 定义 $\mathcal{B}_j^i = \frac{x_j^i}{X_j}$

- (a) 封闭系统平凡左最大本征矢量: $\langle 1 |_{\mathcal{B}} \mathcal{B} = \langle 1 |_{\mathcal{B}}$, 等价于投入产出分析 $X_b F_a^b = X_a$: $\langle 1 |_{\mathcal{B}} = \langle 1 |_F \mathcal{O}$ 。平凡一般不做。
- (b) 在左最大本征矢量方程的基础上, 把部分系统 Δ 看做外界, 成为开放系统 PageRank: $\mathcal{X}^{(-\Delta)} = \mathcal{Y}^{(\Delta)} L_{\mathcal{B}^{(-\Delta)}}$, 等价于开放系统的投入产出 F 分析: $X^{(-\Delta)} = Y^{(\Delta)} L_{F^{(-\Delta)}}$ 。一般放到投入产出 F 分析来做。
- (c) 封闭系统非平凡右最大本征矢量: $\mathcal{B} |1\rangle_{\mathcal{B}} = |1\rangle_{\mathcal{B}}$, 稳定分布。
- (d) 去掉部分系统 Δ 成为开放系统反向 PageRank: $P^{(-\Delta)} = \mathcal{B}^{(-\Delta)} P^{(-\Delta)} + e^{(\Delta)} \Leftrightarrow P^{(-\Delta)} = (1 - \mathcal{B} + \Delta)^{-1} e^{(\Delta)}$, 有外界供给 $e^{(\Delta)}$ 下的稳定分布。如果没有外界, 则人为设 $e^{(\Delta)}$ 为相同元素值向量。

经过这样的整理, 我们发现, 广义投入产出分析就是从投入产出矩阵 x 开始, 定义四个矩阵, 分成前向和后向两对 (B 和 \mathcal{F} , F 和 \mathcal{B}), 然后分别作封闭系统和开放系统的分析。以前向分析为例。对于封闭系统, 我们采用本征矢量计算的方式 $X^a = BX^a$ (等价于 $\mathcal{F} |1\rangle_{\mathcal{F}} = |1\rangle_{\mathcal{F}}$), $\langle 1 |_{\mathcal{F}} \mathcal{F} = \langle 1 |_{\mathcal{F}}$ (等价于 $\langle 1 |_B B = \langle 1 |_B$)。也就是说本来可以做四个本征矢量运算, 由于等价性只能做两个。而且, 更进一步, 这两个之中的其中一个是平庸的。然后, 我们从这个封闭系统中拿出来一个部门或者多个部门或者任意一个子矩阵, 自然本征值本征矢量计算就成了矩阵逆计算, 也就是 $X^{(-\Delta)} = (1 - B + \Delta)^{-1} Y^{(\Delta)}$ 和 $P^{(-\Delta)} = e^{(\Delta)} (1 - \mathcal{F} + \Delta)^{-1}$ 。

因此, 广义投入产出分析不过就是投入产出矩阵的封闭系统本征矢量计算和开放系统的逆矩阵计算, 而且其根本就是矩阵的封闭系统本征矢量计算。

当然, 我们还引入了本征值和本征矢量 HEM 分析, 这个没有严格的逻辑基础的方法。从道理上, 我们只能说, 确实更重要的部门去掉以后, 生产

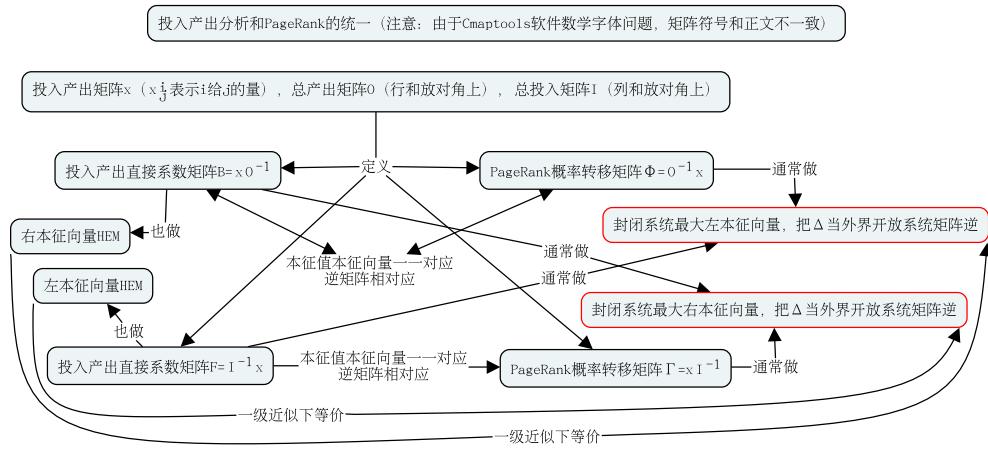


图 15.6：从投入产出矩阵 x 可以定义四种矩阵 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 。对这四个矩阵的每一个可以做两种分析：封闭系统的最大左本征向量和相应的把部分系统 Δ 看做外界的开放系统的矩阵逆（其根本还是前者——最大左本征向量方程），封闭系统的最大右本征向量和相应的把部分系统 Δ 看做外界的开放系统的矩阵逆（其根本还是前者——最大右本征向量方程）。看起来，我们总共要做八种分析。但是，由于这四个矩阵之间存在内部联系， B 和 \mathcal{F} 的分析相互等价， F 和 \mathcal{B} 的分析相互等价。此外，我们还有本征向量 HEM 方法，其在一级近似的条件下等价于相应的 PageRank 矢量。

效率越低，并且本征值和本征矢量综合考虑了直接和间接联系，所以这个方法可能管用。另外，从数学上，我们也证明了这个方法和 PageRank 的联系，使得这个方法有了一定的数学基础。

这样合起来，对于一个具体系统，我们的广义投入产出分析根本上只有一种或者说一个思路——封闭系统的左右最大本征向量计算以及相应的去掉某个 Δ 之后的开放系统逆矩阵计算，具体可以尝试 $B, F, \mathcal{F}, \mathcal{B}$ 四个不同的矩阵。如果再算上本征向量 HEM，看起来，我们有 $4 \times 5 = 20$ 种可能的分析。但是，考虑到 B, \mathcal{F} 等价， F, \mathcal{B} 等价，其中有一些本征矢量平庸 (B, \mathcal{F} 的最大右矢量， F, \mathcal{B} 的最大左矢量)，变成了 $2 \times 5 - 2 = 8$ 种不同的分析： $B^{(-\Delta)}$ 的逆、 $B^{(-\Delta)}$ 右本征向量 HEM、 $F^{(-\Delta)}$ 的逆、 $F^{(-\Delta)}$ 左本征向量 HEM、 $\mathcal{F}^{(-\Delta)}$ 的左本征矢量、 $\mathcal{B}^{(-\Delta)}$ 的右本征矢量、 $\mathcal{F}^{(-\Delta)}$ 的逆（相当于 $B^{(-\Delta)}$ 的逆）和 CheiRank 矢量、 $\mathcal{B}^{(-\Delta)}$ 的逆（相当于 $F^{(-\Delta)}$ 的逆）和 PageRank 矢量。

然后，这一章用统一的概念、视角和数学结构描述了投入产出分析、PageRank 算法、流平衡分析这些分析技术，并把这些分析技术用来讨论具体系统，例如概念网络学习顺序、国际贸易中国家的地位、环境科学中各个部门的污染贡献、科学学中各个学科的重要性和学科之间的依赖关系等。这些问题都来自于完全不同的科学领域：经济学、信息科学、化学、系统生物学、教育和学习科学、环境科学、科学学。我们发现不仅数学结构上它们是一样的，甚至概念上也是一致的，都是关于投入产出关系—— A 的一部分被 B 用了成了 B 的一部分，然后 B 接着把产出投入给 C ——的研究。有可能将来这个方法和应用的列表还会更长。这就是系统科学：跨越和融合学科，寻找不同学科不同系统之间相通的，甚至一致的数学结构和概念；另外，整个计算过程的基本思想就是综合考虑直接和间接联系，同时关注个体和整体层面的问题。这是系统科学典型思维方式的很好的体现。

当然，投入产出分析也可以看做是给网络科学提供了一种分析方法。其实，投入产出分析之一的PageRank 算法本来就是一个在网络上计算顶点综合影响力的分析方法。从这个角度来看，我们只不过就是把PageRank 算法的转移矩阵推广成为同时可以用转移矩阵和投入产出矩阵。此外，我们也说过，网络是描述复杂系统的骨架，本来就可以看做是系统科学的典型分析方法（框架）之一。

第十六章 博弈论与演化博弈概论

博弈论，也叫做对策论，的基本问题是：当有利益冲突的博弈者在做策略选择的时候，有没有一个理论可以预测，以及如何预测，这些博弈者的选择。一个没有利益冲突的策略选择问题是决策问题：在那里每一个决策者的可以选择的策略集合是一样的，利益是共同具有的或者是完全一样的。决策问题是一个约束下的极值问题，因此尽管约束下的极值问题的求解还是有值得进一步研究的地方，理论框架本身是没有问题的。但是，博弈论的问题不是这样：决策者 A 的收益不仅仅取决于 A 的策略选择还依赖于 B 的策略选择，也就是我们所说的相互作用收益或者说能量是两个变量的函数而且不是简单叠加 $V(s^A, s^B) \neq V(s^A) + V(s^B)$ 。如果我们假设这个对策论的问题可以通过下面的方法转化成一个决策问题：固定其它决策者的选择，让某一个决策者按照他自身的目标优化其策略，然后把这个决策者的策略固定考虑另外一个决策者的决策问题，那么看起来，博弈论也就不复存在了。这个思路叫做博弈者的交替的短视的最优反应动力学（Myopic Best Response Dynamics）。但是，研究工作早就发现，这个最优反应动力学理论预测得到的博弈问题的决策经常不能与实际的决策相符合。所以，博弈论需要构建自己的基本理论。

在这里，我们仅仅讨论非合作完全信息静态战略博弈。这个博弈的理论是其他的博弈的理论的基础。在本章中，我们简称“非合作完全信息静态战略博弈”为博弈。Nash所构造的博弈论基本理论试图寻找一种特殊的策略状态，在这个策略状态下，所有的决策者不会产生独自的偏离。也就是说，如果自己独自选择其他的策略，那么这个偏离的博弈者的收益不会增加。这个特殊的策略状态后来就被叫做Nash 均衡。如果一切顺利，那么我们剩下的问题也就是对于给定的博弈如何求解Nash 均衡的问题。但是，这个

世界不想让我们这么轻松这么无趣，某些问题的最终策略确实能够被Nash 均衡解释，但是有很多博弈，其博弈者采取的策略不能由Nash 均衡解释，还有的问题包含了太多个的Nash 均衡于是解释和预测能力不够。于是，现在我们面对的问题是：有没有更好的均衡的定义，它对于给定的博弈给出很少的预测，而且是很准确的与实际博弈过程的结果很相符的预测。目前这个问题还是一个开放的正在得到研究的问题。

同时，博弈论中还有一个基本问题就是如果大家一开始不是处在某个不变的均衡态上，例如对于能够用Nash 均衡解释的问题来说，假设一开始很多博弈者没有经过精确的计算所以没有采取Nash 均衡的策略，随着博弈的进行，大家的状态是如何演化到这个均衡上去的。这个实际上提出了比均衡更高的要求：稳定性。

在这一章中，我们还是主要介绍Nash的理论体系，然后介绍演化博弈理论——一个尝试从许许多多的均衡解中把某些特殊的少量的均衡挑选出来以及回答解的演化和稳定性这两个问题的理论。其他的更多的均衡的定义，以及从一大堆均衡中选择均衡——称作均衡的精炼——的方法就留待读者从专门的博弈论的教材中去学习，或者自己取提出新的定义或者新的精炼方法。

实际上，这个学科是对有主观能动性的决策主体的策略选择过程和选择结果的描述。可以想象，如果我们讨论的是人类或者是人类的集合（例如一个有一群人构成的组织、机构），那么实际上这个决策过程和人的思考、决策的神经营过程是相关的。于是，本质上这些学科成了神经科学的一个应用性学科。那么，是不是在我们解决人类的思维的规律之前，这本学科都不能取得发展了呢？不是的。人类的思维科学如果建立的话，当然对博弈论是一个非常大的促进，但是当这样一个理论没有的时候，我们也是有可能可以解决某些人类决策的行为的。某些决策行为是可以存在在详细思维过程的基础和细节之上的共性的。我们的博弈论研究的正是这部分共性。例如，我从来不期望我们的博弈论的研究可以解决绘画的运笔，作曲的曲调的选择等艺术创作的问题。但是，原则上，这些现象也应该是思维科学的研究对象。一个更基本的层次的学科可以促进上层学科的发展，上层学科依赖于更基本的学科，但是又不是完全由更基本的学科决定，上层学科可以有自身的规律，这个正是系统科学的核心的基本思想之一：涌现性——更高层

次的系统可能涌现出来与底层的系统看起来完全不相关的行为。

我们为什么认为博弈问题是系统科学的重要研究方向呢？系统科学的任务是运用数学概念、自然科学尤其是物理学的概念和方法，来构建自然的或者社会系统的数学模型。这个研究的角度就是各门科学的研究的共性，而研究的结果，也就是所构建的数学模型，体现的，则是各门学科自身的特性。我们也提到过，在这样的数学模型需要考虑的因素中，最主要的，就是对于相互作用的处理。我们认为，社会科学的问题，其根本在于各个主体之间相互作用的描述，以及从如何计算分析这些相互作用产生出来的现象。在这一点上，我们认为，博弈这个问题，博弈论这个学问，是所有其他的牵涉到多个个体的整理行为的社会科学研究的基础。系统科学就是需要研究从少量个体到多个个体的行为，而博弈这个问题正好就是这样的研究或者至少是这样的研究的基础。

本章推荐阅读材料：《Strategic Thinking》

16.1 博弈、博弈论与 Nash 均衡

Nash 均衡理论的基本内容

16.2 理论与实际的对比：Nash 均衡的描述能力

理论与实验的对比

16.3 演化博弈：均衡实现的问题

演化博弈的基本理论，Replicator Dynamics，演化稳定性分析

16.4 新的均衡的问题

16.5 更多的具体系统上的研究实例

16.6 作业

16.7 本章小结

在这一章里，我们从能动性主体之间的相互作用的视角，以及寻找描述这样的决策行为的概念体系和数学结构的角度，也就是系统科学的角度，来介绍了博弈论的核心内容。

第四部分

附录

第十七章 计算机语言与工具的学 习

工具和实践性知识与技能只能通过使用来学习，就好像学习游泳和开车。当然，系统整理也能够有一些作用。不过这个作用往往只局限于提供信息和整理思路。前者帮助学习者进入学习，后者在学习者有一定的经验以后起到提点的作用。附录中的这一章就希望起到这个作用。

17.1 Linux 系统中安装、编辑、编译、执行程序

Linux 系统是一款由爱好者们一起借鉴 Unix 系统开发出来的一般来说免费提供给用户使用的开源的（能够获得原始代码并做修订）操作系统。其在网络功能（例如远程登录服务器、Web 服务等等）、稳定性、编程开发、作为服务器使用方面具有超过其它大多数其他系统的表现。更多的关于 Linux 的历史信息可以参考 Wikipedia 的 Linux 条目。在这里，我们仅仅需要知道以下简单的信息：Linux 的核心是一个完成最基本的操作系统的功能的内核；爱好者们为 Linux 系统开发了各种软件工具，而且大多数开源免费通过应用程序库提供；Linux 系统的软件通常遵循“我只做一件事，并且做好它”（Do one thing, and do it well）的来自于 Unix 的原则；基本上所有能够用图形界面通过鼠标点击做的事情都可以通过命令行来实现，因此需要重复多次的事情最好通过命令行批处理文件来执行；Linux 系统的每一个文件和目录（实际上也是文件）都通过权限来控制——例如每一位用户的文件和目录原则上只有这个用户自己能够访问。

很久以前的 Linux 基本上是爱好者为了爱好者群体开发的，图形界面

以及系统配置的易用性不是其主要考虑的因素。因此，对于非爱好者来说，入门的门槛比较高。现在，大多数发行版本由专门提供整合版本的机构或者公司来提供。这些机构已经把普通用户作为目标，因此，基本上所有的整合版本，称作 Linux 发布版，的 Linux，例如 Ubuntu、Debian、Fedora 等等，已经完全不需要用户来配置，也直接提供直观易用的图形界面。如果你是手机或者平板 Apps 的使用者，你还会发现，从软件库中搜索和安装软件的过程和 Apps 非常接近。实际上，在 Apps 的这种管理方式推出之前，大多数 Linux 系统已经开始使用这样的通过网络来提供的由专门机构进行管理的软件库，通常称作软件中心，的软件管理方式。如果没有这样一个软件中心——一个网上的软件存储、分类、更新的中心，加上用户电脑上的软件中心客户端软件——的话，浩如烟海的 Linux 上的软件会让每一个用户迷失。

由于 Linux 开源免费（因此也没有病毒，所有的开源程序的代码是可以获得的，因此可读的。实际上在 Linux 里面，除了程序的源代码，所有的配置控制文件也都是文本形式的、人类可以读的。这一点对于深入了解 Linux 非常重要）、运行稳定、网络应用基础架构丰富，在 web 服务和高性能计算服务方面，已经具有非常重要的地位。大量的 web 和计算服务器，尤其是 cluster 结构的服务器——有多个电脑通过光纤、网线网络相连——上的占有率更高。另外，高性能计算服务器如果不是 Linux，那么也很有可能是 Unix 服务器。两者在普通用户层次的使用上，基本不可区分。因此，在这里我们学习如何在 Linux 环境下做高性能计算。

Linux 发布版的安装非常简单，搜索并下载一个发布版，例如 Ubuntu。本书写作的时候，Ubuntu 的版本是 14.04。下载的文件通常是一个 ISO 光盘镜像。下载完了之后，按照提示制作一个启动 USB 或者启动光盘，或者下载的时候选择一个在 Windows 下可以直接安装的版本。下载了 ISO 文件之后，你也可以选择在虚拟机中安装。如果你的电脑内存比较高 ($> 2G$) 而且你首次安装和使用 Linux，我推荐你在虚拟机安装。

除了下载完整的 Linux 发布版，还有 Windows 下的软件，提供 Linux 模拟器——不用安装新系统，安装一个软件就行，在这个软件下，编程、配置、操作和 Linux 一样。Cygwin 就是这样的软件。如果你能够拿到 Linux 服务器的帐号，你也可以不在自己的电脑安装 Linux，而选择直接使用 Linux

服务器。通常，我不推荐这个方案，因为在自己的电脑上安装非常简单，而且出错了只影响自己的电脑，而在服务器上出错了可能影响其他人的工作。以下假设你在自己的电脑上安装了 Ubuntu。

如果你是 Mac OS 用户，那么你实际上在运行一个 Unix 的变体，就不用再安装 Linux 系统了。以下介绍的软件编译、执行的过程在 Mac OS 下同样适用。当然，在 Mac 机器上，你也可以独立或者在虚拟机上安装一个 Ubuntu。

对于大多数功能来说，你都能在软件中心找到合适的软件。找到以后，只要简单点击几下鼠标就能够安装好。安装的过程中，有可能让你输入一个能够在本机上安装软件的用户的密码。注意，由于 Linux 系统的管理方式的基础就是权限，所以并不是每一个用户都能够在一个系统上安装软件的。如果是你自己安装的 Ubuntu，在安装过程中你建立的自己的账号和密码，那么，Ubuntu 默认这个用户具有安装软件以及调整其它设置的权利。Ubuntu 把具有安装权限的用户称为 sudoer。如果你想了解更多，例如这个用户可以做什么，如何使用 sudo 命令，如何修改用户权限成为 sudoer，请 Google “sudoer” 或者 “sudo”。现在，我们来更加深入地介绍这个软件安装的过程实际上系统做了什么事情。

现在，我们来看一个从源代码开始的安装程序的过程。有一些软件是不用编译可以直接用解释器执行的，例如 Python 或者 Java 等语言写的软件。这个时候只需要把源程序复制到一个地方，然后设置好路径就行了。有的时候解释语言的程序也会做一个安装包，那么这个安装包实际上就是把文件复制到合适的地方然后设置好路径。

下面，我们以需要编译执行的软件为例。通常情况下，源代码包含一些文本文件，例如 C 语言格式的文件（后缀.c），或者 C++ 格式的文件（后缀.cpp），还有一个非常重要的 makefile 文件（文件名 Makefile 或者 makefile）。有的时候，还会有函数说明文件（例如后缀.h）。把函数说明，或者说函数的形式化定义，把函数的真实实现程序分离开来的好处是，对于大多数软件的用户而言，实现的细节是可以不了解的，只需要知道基本的功能和输入输出就可以了。因此，单独的说明文件在存在多个子程序的代码中使用的非常普遍。

注意，如果你有在 Windows 下通过 Visual Studio 集成环境编写程序

的经验，你是可以直接在一个界面下面实现编辑源程序、编译程序和执行编译所得到的结果的，甚至可以把这几个步骤组合成一个按钮。但是，我们要了解，实际上这个过程是可以分解完成的。编译的步骤，在任何文本编辑器里面都可以完成。很多人喜欢用 Emacs。我自己最近喜欢用 Geany。

下面就是一个简单的 C 语言 HelloWorld 程序。

有了源程序，下一步就是编译。编译的过程的原理和细节就不介绍了。简单来说，就是把源程序给这个语言的编译器来产生这个机器能够运行的机器码，也就是把程序员能够读懂的语句，变成机器能够执行的语句。这个过程通常需要如下形式的语法，例如对于 C 语言，我们可以执行如下的系列命令：

```
$ gfortran -c HWF.o HWF.F (把Fortran源程序编译成为可以供其他程序调用)
$ gcc -c HWC.o HWC.c (把C源程序编译成为可以供其他程序调用)
$ gcc -c HelloWorld.o HelloWorld.c example.h (把C源程序编译成为可以供其他程序调用)
$ gcc -o HelloWorld HelloWorld.o HWF.o HWC.o (把各个O文件链接成为可执行文件)
```

注意，在这里，我特意实现了三种方式来输出 HelloWorld（以后你还会见到并行的版本）：C 语言主函数、C 语言子函数、C 语言调用 Fortran 子函数。这个命令的更多细节稍候再介绍。

通过编译，我们得到了文件名为 HelloWorld 的可执行文件。这个时候，我们就可以通过一个包含完整的路径的文件名的方式来执行这个文件。例如当我们在这个文件所在的目录（/home/jinshanw/Example，在任何目录下通过 cd /home/jinshanw/Example 到达这个目录）下的时候，我们来运行./HelloWorld 就可以看到程序执行的结果。

这个就是一个典型的在 Linux 上编辑、编译、运行程序的过程。如果有安装过程，那么实际上就是把最后得到的编译好的文件复制到合适的地方，然后让系统记住这个程序已经被复制到新的位置。例如 HelloWorld 文件可以被复制到 Installed 子目录下面，然后运行的时候输入命令/home/jinshanw/Example/Installed>HelloWorld 或者修改环境变量 Path 让系统知道在这个目录下寻找 HelloWorld 可执行文件。至于如何修改路径，请 Google 之。

如果我们的源程序包含多个子程序，那么每一次的编译执行我们都需要把所有的以上的命令。为了减少重复劳动，人们引入了 makefile 文件。我们只需要把以上四行命令按照顺序排列好（如下图），然后给这一组命令一个名字，就可以使用这个命令了。

个名字，下次我们只要简单运行 make HelloWorld 就可以执行所有的这个模块的命令了。同时，我们还可以把其他的命令也放到这个 makefile 中去。例如，这里我们把 Makefile 的执行部分当作一个模块，叫做 runHW。你可以试试 make runHW 的结果。使用 makefile 的另外一个好处是程序之间的依赖关系是显性的，有利于后期的修改和维护。

实际上，安装其他人编写的软件的过程也就是跳过了编辑这一步，需要完成编译、复制、设置路径这几步。在编译过程中，有一个依赖性的概念很重要。例如，这里，我们 HelloWorld 程序实际上需要 HWF 来实现一部分功能（C 语言程序调用 Fortran 来完成一部分功能），这个就是 HelloWorld 对 HWF 的依赖性。绝大多数时候，程序开发不是从头开始的，需要使用很多其他人已经开发好的模块，这个时候都需要处理好程序之间的依赖关系。有的时候这样的模块，如果被使用的比较普遍，会专门编译成为库文件（Windows 下的.DLL 文件、Linux 下的.a 文件）。关于如何使用库文件见下一个例子。在上面的例子中，假设我们能够拿得到所依赖的程序的源程序，例如 HWF.F, HWC.c。实际上，在编译 HelloWorld 过程中，我们直接需要的是.o 文件。所以，将来我们会看见，只要能够拿到.a 文件，也就是一大堆.o 文件的集合，我们就可以把这些子程序模块用到我们自己的程序中来。

总结一下，自己编写程序的过程包含编辑、编译、运行等几个步骤；安装他人的程序也需要通过下载源程序（解压缩）、编译、复制、设置路径等几个步骤；以上步骤可以利用 makefile 文件整合，从而可以用一个命令来完成所有的操作。在安装他人程序过程中，需要注意程序之间的依赖性问题。因此，通常在安装他人程序的时候，需要执行一个依赖关系探测的步骤——这个通常通过 configure 命令来完成。因此，一个典型的安装程序的过程是

```
$ ./configure (或者某个路径XX下的：XX/configure)  
$ make  
$ make check (或者make test)  
$ make install
```

中间加入的一步通常是为了验证编译好的可执行文件是否产生期望的结果。

实际上，软件中心完成的事情就是，在服务器端已经有人完成了针对特定版本（也就是你的机器上的版本）的 Linux 的已经编译好的文件（也

就是 make 已经被执行），并且在服务器端已经对软件质量和代码的可获得性做了一定的控制，然后检验依赖关系（相当于运行 configure）并补充必要的依赖软件，接着复制已经编译好的软件到合适的目录下面，修改必要的配置文件和环境变量（运行 make install）。

在实际编写程序的过程中，还有一个重要的步骤：调试。很少有人写一个程序能够一次就写好，不出错的。因此，在程序编写的阶段编译运行程序，测试其功能是一个非常重要的步骤，调试和编辑、编译、运行实际上是一个需要反反复复来执行的过程。关于调试，以及编程风格——为了方便调试和减少错误的总结和发展出来的如何写程序的一些惯例，例如变量名的大小写和长短、子函数的拆分和长度、缩进的长度、标注的方式和详细程度等等，请通过 Google 自己找到更多的参考资料来学习。

除了这个编辑、编译、执行、调试、安装的过程，我们还需要学会简单的操作系统的功能，如何建立、复制、移动、删除、修改文件。这个都可以通过图形界面来完成，但是了解一下这些最基本的功能的命令行实现也是有好处的。Linux 系统的简介以及 Linux 下安装软件就介绍到这里。

17.2 C 语言、Python 与编程风格

任何语言的学习，或者说，任何工具的学习，都是通过使用来实现的。语法规则的总结、例子例句的使用是为了帮助学习者更好地通过是用来学习，或者是作为一种补充提高做中学的系统性。因此，计算机语言的学习首先需要学习一般流程：如何编辑、编译、执行程序，如何调试。然后，学习基本的关键词和语法。最后，通过做一些小例子，以及比较大的程序来真正实现有意义的学习。千万不要追求新、追求全。除了基本的语法，最基本的算法，其他的都可以在工作中用到的时候再学习。而且，最好带着一个问题来学习计算机语言，而不是泛泛地学习。例如，我们可以为了实现网络分析来学 C 语言，也可以为了求解线性方程的解来学习 C 语言，也可以为了图像处理来学习 C 语言。

第一，我们需要大概了解一下 C 语言提供的最基本的数的类型：逻辑型（名义上没有这个类型，实际上有，以及相应的逻辑运算）、整数（int）、长整型（long）、实数（float）、双精度实数（double）、单精度复数（complex）、

双精度复数 (double complex) 与相应的运算, 以及最基本的 C 语言自带的数组——以及与数组相关的指针和内存。当然, C 语言也允许你通过结构体之类的东西来定义由这些基本数据类型构成的自己定义的数据类型。第二, 我们还需要了解 C 语言的基本的语法结构: 条件 (if-else) 与分支 (case-switch)、循环 (for, while, do-while)、跳转 (goto, break, continue, return)。第三, 少量的自带库函数, 例如三角函数对数等数学运算, 输入输出函数等。有了这些就够了。就可以开始用中学了。而且这些基本的内容也是需要了解一下而已, 更多的细节也需要在用中学。这样的话, 所谓 C 语言的学习, 也就是几个小时的事情。

当然, 如果这是你第一次接触编程, 那么, 你需要从其他人的漂亮的程序中学习一些基本的算法。例如, 找一个排序算法 (例如冒泡或者二分) 体会一下, 然后自己动手模仿一下。你还可以尝试把数组这个基本的结构拓展成矩阵 (物理上还是一维的, 逻辑上当作二维来使用), 然后对这个矩阵做基本的矩阵加法乘法运算。你还可以尝试利用数组和链接表来表示一个网络, 然后实现最简单的网络分析功能, 例如计算度、集聚系数等。

有了这些准备, 你就可以开始你的研究工作了。注意, 所谓数学, 就是对心智中的世界的一种抽象; 所谓物理学就是对现实中的关于物体状态和物体运动的那部分世界的抽象化; 所谓计算机科学就是对这个世界能够通过步骤和计算这个方式描述的那部分世界的抽象化。因此, 实际上, 你的研究工作可以是完全和计算机或者计算机语言没有关系的问题。你所要做的就是把所研究的问题转化成为一个可以用明确的步骤来计算的一个问题。如果你还没有合适的问题, 在这里, 我建议你可以考虑一下 Google PageRank 算法的实现。WWW 网络的数据可以从很多地方下载到。其实其他网络的数据也可以拿来用。有了问题, 有了基本的语言单位, 有了算法, 那么剩下的事情就是简单地通过使用增长经验的问题了。

C 语言尽管具有灵活、高效率的特点, 但是其基本的功能模块比较少。例如, 在最基本的 C 语言里面, 也就是不包含各个 C 语言的商业编辑器提供的额外的功能, 链接表——可以看作可变长度的数组——都是需要程序员自己定义的结构。处理字符串的功能也比较少。当然, 这些额外的功能其实都可以通过在基本的 C 语言包上增加额外的库函数来实现, 而不需要 C 程序员重复发明轮子——“C 程序员一直在重复发明轮子”是一种流行

的说法。另外，C 语言本身如果要实现面向对象的编程，尽管时可能的，但是需要程序员在思想上比较重要的转变。因此，实际上更高级（而不是更好地）的语言，提供更多的功能模块的和更多的对象抽象和封装的功能的语言，也是有相当的市场的。对于某些目的来说，可能直接采用更高级的面向对象的语言，甚至有的时候解释语言而不是编译语言是有好处的。由于在网络功能、做图功能、字符串处理功能、扩展程序包、可移植性等方面的优越性，我推荐学习 Python 语言。

有过比较大——几十个子程序几百个小时就行——的程序的开发经验的程序员，就会从最基本的编辑、编译、调试、执行的循环注意到变成风格的问题：当你需要从一个程序跟踪回去检查另一个程序的可能的问题的时候，你就需要两个程序从形式上看起来比较一致，这样才容易阅读。你还需要两个程序都有比较完整的说明，最好每个程序关键的几行也有比较好的说明。你还会希望你的变量名、子程序名称都比较直观，也容易阅读，也就是不太长，名称又具有提示意义的作用。你希望缩进和大括号的运用是一致的，这样可以用你的眼睛就看出结构化的结构，而不是必须依赖于集成开发环境的提示。你希望你的子程序的功能比较单一又相对完整，还要不太长，能够一口气看出来在做什么。而且，你会希望你在所有的这些看起来无关程序内容的小问题上的选择是一以贯之的，也就是不会今天这样选择，明天那样。这些无关内容的小问题的选择就称为“编程风格”。

对一个程序员来说，编程风格是一个非常重要的问题，尽管没有固定的风格也不影响你写出算法上、效率上优秀的程序。更多的关于编程风格的内容可以在“Linux kernel coding style”看到。Brian W. Kernighan 和 Dennis M. Ritchie 的《The C Programming Language》[?] 是一本具有明确、一致和良好的编程风格的 C 语言教材，俗称 K&R。

17.3 BLAS、Lapack 及其实现

17.4 并行计算初步与 BLAS、Lapack、Petsc、Slepc

一个计算机程序抽象地来说，就是一个接受两个输入一个输出的机器。两个输入分别是：指令和数据，一个输出是：数据。在这个过程中完成的事

情就是把接收到的指令作用到接收到的数据上，然后给出新的作用完了之后的数据。所以，一个计算单元的核心就是存储和执行指令的地方，以及一个存储数据的地方。这两个地方分别叫做中央处理器（CPU）和内存。现在 GPU 也可以成为存储以及执行指令的地方。CPU 通常也带着一定量的内存。这些细节，在我们的抽象的计算单元的模型中都忽略不计。

当我们需要的计算任务耗时非常长，或者需要大量的内存的时候，我们可以考虑让多个机算计或者计算单元一起工作来解决这个问题。这个就是并行计算。基本的并行计算可以是把一个需要重复非常多此的任务放在不同的计算单元上计算，然后把计算的结果合起来。Monte Carlo 计算天生适合这个并行计算的思路。大量的独立轨道需要模拟，这样的独立轨道都可以分开有不同的计算单元来完成。不过这个时候，要注意一个问题，各个计算单元的随机数不能是一样的，最好能够通过并行随机数发生器来产生随机数。稍微复杂一点的并行计算是把一个任务分成多个子任务，然后这些子任务之间需要交流数据来完成这个大任务。利用多个计算单元来处理矩阵和矢量相乘就属于后者。例如一个 CPU 对应着的内存存储着这个矩阵以及这个矢量的一部分的元素，另外一个 CPU 对应着的内存存储着这个矩阵以及这个矢量的另一部分元素，假设计算的结果——乘出来的矢量也将会分散地存储在两个 CPU 相应的内存中，那么，计算过程中第一个 CPU 可能需要用到第二个 CPU 对应着的内存中的数据。这个时候，我们就要有办法能够把数据交流过去。这个就是并行计算的基本的抽象模型。

现在，我们来看一下实现这个任务需要哪一些稍微具体一点的结构。第一，我们需要一个相互连起来的计算单元，这样数据才能够在这些计算单元中交流。所以，一个并行计算的物理基础是一堆连在一起的计算单元。由于计算单元之间的连接方式非常多多样，例如通过主板相连，通过光纤、网线相连，甚至通过 Internet 网络相连，如果我们要直接面对这个物理的连接的话，我们的程序需要具体连接具体处理。这个会导致程序的硬件依赖，非常复杂。所以计算机科学家们提出了一个抽象模型：消息传递机制（MPI）。不管底层的物理连接是什么，我们希望得到一个资源（包含 CPU，内存，可用来计算的时间）的池子，在这个池子里面，消息通讯的问题能够统一地解决。这个机制包含两个方面，第一，把物理硬件通过某种方式整合起来成为池子；第二，在这个池子里面，可以根据任务的需要通过计算机

程序来建立一个某个计算任务所需要的资源的整体，然后在这个整体上来做计算。作为并行编程和并行计算的使用者，我们通常只关心第二个层次。第一个层次一般是硬件、软件工程师和系统管理员的事情。但是，我们要了解这样的一个概念：首先需要有一个资源池子，然后我们计算的时候根据需要在这个大池子之中建立一个抽象的超级计算机。然后，我们实际上面对的对象是如何在这个抽象的超级计算机上做计算。

现在，假设我们已经有了一个能够自动根据所获得的资源（CPU、内存的数量，可计算的时间）的多少来自动决定如何做计算的程序。例如下面的 MPIHelloWorld.c 就是一个简单的这样的 MPI 程序。它根据获得的 CPU 的数量来决定打印几个 “Hello World!”，然后还显示少量关于这个抽象的超级计算机的信息（第几个 CPU 总共多少个 CPU 构成这个超级计算机）。实际上在这个程序中，各个计算单元之间没有真正的数据交流，只有两个变量的数据（rank, size）以及一个真正的指令（print）。第一行建立一个抽象的超级计算机。接着获取这个超级计算机的 CPU 数量，以及每一个 CPU 的序号，加上这个 CPU 所在的主机的名字。然后，打印这些信息到屏幕上。

编译并行程序完全和串行程序一样，唯一的不同是编译器需要改成相应的 mpicc 或者 mpif77。mpicc 等实际上还是系统默认的编译器，只不过加上了一些额外的编译参数以用来跟下面的执行程序 mpiexec 配合。在我们的例子中，我们只需要运行：mpicc MPIHelloWorld.c -o MPIHelloWorld。那么，我们如何执行这个程序呢？我们需要根据这个程序的需要以及这个池子的空闲资源来指定这个程序用到的计算资源的数量。假设我们发现这个大池子当中有 4 个计算单元空闲，而且我们的程序无所谓需要多少个计算单元，那么，我们就可以利用如下的命令来执行我们的程序：mpiexec -n 4 ./MPIHelloWorld。典型的运行结果见下图。

这个命令的第一部分表示，后面的程序需要通过一个 mpiexec 的程序来简介运行。这个 mpiexec 做的事情就是从资源池子之中划分出 $n = 4$ 个计算单元来建立一个超级计算机。然后，它在这个超级计算机中运行后面的程序 MPIHelloWorld。所以，其实，在这个 mpiexec 的后面由这很多其他的程序保证它能够完成这个任务。这个就是我们前面说的硬件、软件工程师和系统管理员完成的，我们不需要了解太多的事情。

以上这个情景就是一个并行计算的典型例子：管理员搭建好池子，程序员编号利用了 MPI 的完成一定任务的程序，程序员选择合适大小的资源来运行程序，程序运行之后给出结果。这个典型情形一般被称作分布式并行计算，或者 MPI 并行计算。在实际并行计算过程中，有可能程序员不能也不许要直接运行 mpiexec 来执行其所编辑与编译以后的程序，而是通过一个任务队列管理器来提交的。例如，程序员写一个关于所需要的资源的说明文件，然后这个说明文件会自动被任务队列管理器来阅读和安排什么时候执行。一个典型的这样的说明文件包含所要运行的程序的名字（必要的话还包含路径和所需要的参数），资源的数量（包含 CPU、内存数量，估计运行时间），如下图。那么这个任务队列管理器实际上做了什么事情呢？它寻找合适的机会，按照一定的优先级，把这个任务所需要的资源从池子里面留出来，然后发布一个 mpiexec 命令加上合适的资源数量和所执行的程序来组成一个完成这个任务的超级计算机。

这个是一般的情况，如果我们稍微了解一下这个池子的物理连接方式的话，有可能我们可以更好地利用这个抽象的超级计算机。一般而言，这个池子的连接方式有几种，单个计算单元单个存储单元（见示意图），通过主板相连的多个计算单元单个存储单元（见示意图），通过主板相连的多个计算单元多个存储单元（见示意图），通过网络（包含局域网和 internet）相连的多个计算单元多个存储单元（见示意图），其中最后的情况可以更复杂，例如通过网络相连的处理单元，每一个处理单元包含用主板相连的多个计算单元和多个存储单元。现在的多核 CPU 实际上使得第一种情况也变成了第二种情况。每一种情况的物理连接，我们都可以把它当作一个池子来使用。所以上面的一般情形在大多数情况下都是可以使用的。

但是，如果我们考虑物理连接的实际情况，有可能可以进一步提高计算的效率。例如，我们考虑一个通过网络相连的多个计算单元多个存储单元：8 台电脑，每一台配一个 8 核 CPU16G 内存。如果我们直接把这个系统当作拥有 64 个计算单元 126G 内存的池子，那么有的时候我们需要在本来同属于一台电脑的核心之间交流数据，而且这个数据的交流在我们的程序看来，和不同的电脑之间交流数据是没有差别的。我们知道实际上这个是有差别的：在我们这个情况下，同一个电脑之内的不同核心之间内存是共享的，不用交换；而就算需要交换的话，不同电脑之间的交换速度要远

远低于同一个电脑内部。因此，如果我们能够利用好这个体系的实际物理连接的情况，减少电脑之间的数据交流，增加电脑内部的数据交流，我们就可以提高计算的效率。这种在同一个电脑之内的并行与跨越电脑的并行不一样，称作多线程计算。对于我们的这个物理连接的情形，我们需要混合多线程和 MPI 并行：在同一台电脑上做多线程并行，在电脑之间做 MPI 并行。实际上，只要是共享内存的计算机，我们都可以用多线程来做并行。但是，大规模计算机大部分都是通过网络相连的，分布式内存的计算机。所以，MPI 并行是最普遍的情况。

小结一下，并行计算有多线程并行和 MPI 并行计算，多线程用于共享内存计算机，MPI 用于分布式内存计算机，有的时候，我们需要混合两种并行方式来提高效率，但是 MPI 并行总是可用的。在进行 MPI 并行之前，我们需要一个已经建立起来的资源的池子，然后我们从池子中获取一定量的资源组成一个抽象的超级计算机，然后在这个超级计算机中完成计算。这个获取资源的方式有的时候需要通过向任务队列管理器提需求来实现。有了对并行计算的这个一般认知，我们再来讨论几个实现并行线性代数计算的软件 Petsc 和 Slepc。

编写并行程序最主要的步骤是把算法当中的可以并行的部分并行，然后通过消息传递机制来实现数据交流。例如，在我们之前的矩阵和向量相乘的问题中，我们的两个 CPU 之间就要通过 MPI 来交流数据。这些并行计算线性代数软件实际上就帮我们完成了这两件事情，同时它们的算法本身也是基于数值线性代数的已经被证明的优秀算法的例如 Lapack 和 BLAS 当中包含的一些算法。在我们之用这些软件的时候，我们甚至不需要直接来面对 MPI 数据交流的问题，仅仅需要一个 MPI 数据交流的概念。也就是说，了解在哪些时候，这样的交流会发生，就可以了，而不需要我们自己来写出 MPI 语句。目前，也有研究人员用多线程和 MPI 并行混合的模式的改造数值线性代数软件包 Petsc[190]，而且已经取得一定的效率上的提高。易用性和稳定性上还有待于进一步提高。

17.5 xmds2

17.6 SageMath

17.7 NetLogo

17.8 Swarm

17.9 C 与 R 中的 igraph

参考文献

- [1] Koschmieder E L. Bénard Convection [M] // Prigogine I, Rice S A. In Advances in Chemical Physics. John Wiley & Sons, Inc., 2007: 177–212.
- [2] Koschmieder E L. Bénard Cells and Taylor Vortices [M]. Cambridge University Press, 1993.
- [3] Getling A V. Rayleigh-Bénard Convection [M]. WORLD SCIENTIFIC, 1998.
- [4] Pechenkin A. B P Belousov and his reaction [J]. Journal of Biosciences, 2009, 34 (3): 365–371.
- [5] Belousov B P. Periodicheski deistvuyushchaya reaktsia i ee mekhanism (Periodically acting reaction and its mechanism, in English) [J]. Sbornik referatov po radiotsionnoi meditsine [Collection of abstracts on radiation medicine], 1958: 145–147.
- [6] Zaikin A N, Zhabotinsky A M. Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system [J]. Nature, 1970, 225: 535–537.
- [7] Prigogine I, Nicolis G. Self Organization in Non-Equilibrium Systems (中译本《非平衡系统的自组织》) [M]. New York: J. Wiley and Sons, New York, 1977.

- [8] FIELD R, NOYES R. OSCILLATIONS IN CHEMICAL SYSTEMS .5. QUANTITATIVE EXPLANATION OF BAND MIGRATION IN BELOUsov-ZHABOTINSKII REACTION [J]. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 1974, 96 (7): 2001–2006.
- [9] Popper K. The logic of scientific discovery [M]. London/New York: Routledge, 2005.
- [10] Rustichini A. Neuroeconomics: what have we found, and what should we search for [J]. Current Opinion in Neurobiology, 2009, 19 (6): 672 – 677. Motor systems • Neurology of behaviour.
- [11] Bikhchandani S, Hirshleifer D, Welch I. Learning from the Behavior of Others: Conformity, Fads, and Informational Cascades [J]. Journal of Economic Perspectives, 1998, 12 (3): 151–170.
- [12] Dai W, Wang X, Di Z, et al. Logical Gaps in the Approximate Solutions of the Social Learning Game and an Exact Solution [J]. PLOS ONE, 2015, 9 (12): 1–18.
- [13] Karst J, Erbilgin N, Pec G J, et al. Ectomycorrhizal fungi mediate indirect effects of a bark beetle outbreak on secondary chemistry and establishment of pine seedlings [J]. NEW PHYTOLOGIST: 904–914.
- [14] Gorzelak M A, Asay A K, Pickles B J, et al. Inter-plant communication through mycorrhizal networks mediates complex adaptive behaviour in plant communities [J]. AoB PLANTS, 2015, 7: plv050.
- [15] Filotas E, Parrott L, Burton P J, et al. Viewing forests through the lens of complex systems science [J]. Ecosphere, 2014, 5 (1): 1–23. art1.
- [16] Brin S, Page L. The anatomy of a large-scale hypertextual Web search engine [J]. Computer Networks and ISDN Systems, 1998, 30 (1): 107 – 117. Proceedings of the Seventh International World Wide Web Conference.

- [17] Yan X, Fan Y, Di Z, et al. Efficient Learning Strategy of Chinese Characters Based on Network Approach [J]. PLOS ONE, 2013, 8 (8): 1–7.
- [18] 陈沣. 切韵考 [M]. 广州: 广东高等教育出版社, 2004.
- [19] 章太炎. 文始 [M]. 台北: 中华书局, 1970.
- [20] 王宁. 汉字构形学 [M]. 商务印书馆, 2015.
- [21] Anderson P W. More Is Different [J]. Science, 1972, 177 (4047): 393–396.
- [22] Kadanoff L P. More is the Same; Phase Transitions and Mean Field Theories [J]. Journal of Statistical Physics, 2009, 137 (5): 777.
- [23] 吴金闪. 教的更少, 学得更多 [M]. 人民邮电出版社, 2017.
- [24] Gowers T. Mathematics: A Very Short Introduction [M]. Oxford: Oxford University Press, 2002.
- [25] Mobus G E, Kalton M C. Principles of Systems Science [M]. Springer-Verlag New York, 2015.
- [26] Senge P M. The Fifth Discipline: The Art & Practice of The Learning Organization [M]. Currency and Doubleday, 1994.
- [27] Sherwood D. Seeing The Forest for The Trees : A Manager's Guide to Applying Systems Thinking [M]. Nicholas Brealey Pub., 2002.
- [28] Boardman J, Sauser B. Systemic Thinking: Building Maps for Worlds of Systems [M]. 1st ed. Wiley Publishing, 2013.
- [29] Whitehead A N, Russell B. Principia Mathematica [M]. Cambridge University Press, 1925–1927.
- [30] Beveridge W I B. The art of scientific investigation [M]. Melbourne: Heinemann, 1953.

- [31] Descartes R . 谈谈方法 [M]. 商务印书馆, 2000.
- [32] Browne M N, Keeley S. Asking the Right Questions: A Guide to Critical Thinking [M]. Prentice Hall, 1997.
- [33] Mikolov T, Chen K, Corrado G, et al. Efficient Estimation of Word Representations in Vector Space [J]. CoRR, 2013, abs/1301.3781.
- [34] Mikolov T, Sutskever I, Chen K, et al. Distributed Representations of Words and Phrases and their Compositionality [M] // Burges C J C, Bottou L, Welling M, et al. Advances in Neural Information Processing Systems 26. Curran Associates, Inc., 2013: 2013: 3111–3119.
- [35] Grover A, Leskovec J. node2vec: Scalable Feature Learning for Networks [C]. In ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD), 2016.
- [36] 吴金闪. 二态系统的量子力学 [M]. 科学出版社, 2017.
- [37] Rosvall M, Bergstrom C T. Maps of random walks on complex networks reveal community structure [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2008, 105 (4): 1118–1123.
- [38] Falconer K. Fractals, A Very Short Introduction [M]. Oxford University Press, 2013.
- [39] Mandelbrot B B. The Fractal Geometry of Nature [M]. W. H. Freeman and Co., 1982.
- [40] Jurczyszyn K, Osiecka B J, Ziolkowski P. The Use of Fractal Dimension Analysis in Estimation of Blood Vessels Shape in Transplantable Mammary Adenocarcinoma in Wistar Rats after Photodynamic Therapy Combined with Cysteine Protease Inhibitors [J]. Computational and Mathematical Methods in Medicine, 2012, 2012: 793291.
- [41] 杨展如. 分形物理学 [M]. 上海科技教育出版社, 1996.

- [42] 赵凯华. 定性与半定量物理学 [M]. 高等教育出版社, 2008.
- [43] Goldstein H, Poole C P, Safko J L. Classical Mechanics (3rd Edition) [M]. 3rd ed. Addison-Wesley, 2001.
- [44] Bender E A. An Introduction to Mathematical Modeling [M]. Dover Publications (Educa Books), 2000.
- [45] Haken H. Synergetics. An Introduction. Nonequilibrium Phase Transitions and Self-Organization in Physics, Chemistry, and Biology [M]. Springer-Verlag, 1978.
- [46] Nicolis G, Gregoire and Nocolis, Prigogine I. Exploring Complexity: An Introduction [M]. St. Martin's Press, 1989.
- [47] Prigogine I. The End of Certainty [M]. Free Press, 1997.
- [48] Holland J H. Complexity: A Very Short Introduction [M]. Oxford University Press, 2014.
- [49] Prigogine I. From Being To Becoming [M]. W H Freeman & Co, 1980.
- [50] Fujimoto M. Introduction to the Mathematical Physics of Nonlinear Waves [M]. Morgan & Claypool Publishers, 2014.
- [51] Chladni E F F. Entdeckungen über die Theorie des Klanges [M]. Weidmanns Erben und Reich, 1830.
- [52] Gander M J, Wanner G. From Euler, Ritz, and Galerkin to Modern Computing [J]. SIAM Review, 2012, 54 (4): 627–666.
- [53] Kittel C. Introduction to Solid State Physics [M]. John Wiley & Sons, 1986.
- [54] Dhahri M, Dhahri J, Hlil E. Critical behavior near the ferromagnetic to paramagnetic phase transition temperature in polycrystalline La_{0.5}Sm_{0.1}Sr_{0.4}Mn_{1-x}In_xO₃ (0 x 0.1) [J]. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2017, 434 (Supplement C): 100 – 104.

- [55] Baxter R J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics [M]. Academic Press, 1982.
- [56] Wolf W P. The Ising model and real magnetic materials [J]. Brazilian Journal of Physics, 2000, 30: 794 – 810.
- [57] Horstmann S. Theoretische und experimentelle Untersuchungen zum Hochdruckphasengleichgewichtsverhalten flüssiger Stoffgemische für die Erweiterung der PSRK-Gruppenbeitragszustandsgleichung [M]. Universität Oldenburg, 2000.
- [58] Bak P, Tang C, Wiesenfeld K. Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 59: 381–384.
- [59] Barnett L, Lizier J T, Harré M, et al. Information Flow in a Kinetic Ising Model Peaks in the Disordered Phase [J]. Phys. Rev. Lett., 2013, 111: 177203.
- [60] Deng Z, Wu J, Guo W. Rényi information flow in the Ising model with single-spin dynamics [J]. Phys. Rev. E, 2014, 90: 063308.
- [61] 郝柏林. 从抛物线谈起 [M]. 北京大学出版社, 2013.
- [62] 赵元任. 语言问题 [M]. 商务印书馆, 2000.
- [63] 许慎撰, 徐铉校定. 说文解字 [M]. 中华书局, 2004.
- [64] Page L. Method for node ranking in a linked database [J]. Washington, DC, U.S. Patent and Trademark Office, 2001: US 6,285,999 B1.
- [65] Pinski G, Narin F. Citation influence for journal aggregates of scientific publications: Theory, with application to the literature of physics [J]. Information Processing & Management, 1976, 12 (5): 297 – 312.
- [66] Leontief W. The Structure of American Economy, 1919-1929 [M]. Cambridge: Harvard University Press, 1941.

- [67] Miller R, Blair P. Input-Output Analysis: Foundations and Extensions [M]. 2nd ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2009.
- [68] Shen Z, Yang L, Pei J, et al. Interrelations among scientific fields and their relative influences revealed by an input–output analysis [J]. Journal of Informetrics, 2016, 10 (1): 82 – 97.
- [69] Érdi P, J T. Mathematical models of chemical reactions: Theory and applications of deterministic and stochastic models [M]. Princeton, NJ, USA: Princeton University Press, 1989.
- [70] Palsson B O. Systems Biology: Properties of Reconstructed Networks [M]. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2006.
- [71] Edwards J S, Ibarra R U, Palsson B O. In silico predictions of Escherichia coli metabolic capabilities are consistent with experimental data [J]. Nature Biotechnology, 2001, 19: 125–130.
- [72] Orth J D, Thiele I, Palsson B . What is flux balance analysis? [J]. Nature Biotechnology, 2010, 28: 245–248.
- [73] Dixit A, Skeath S, Reiley D. Games of Strategy [M]. W. W. Norton & Company, 2009.
- [74] McKelvey R D, Palfrey T R. Quantal Response Equilibria for Normal Form Games [J]. Games and Economic Behavior, 1995, 10 (1): 6 – 38.
- [75] Wu J. A new mathematical representation of Game Theory, I & II [J]. arXiv, 2004 (quant-ph/0404159 & quant-ph/0405183).
- [76] Zhuang Q, Di Z, Wu J. Stability of Mixed-Strategy-Based Iterative Logit Quantal Response Dynamics in Game Theory [J]. PLOS ONE, 2014, 9 (8): 1–16.
- [77] Guo H, Zhang J, Koehler G J. A survey of quantum games [J]. Decision Support Systems, 2008, 46 (1): 318 – 332.

- [78] Meyer D A. Quantum Strategies [J]. Phys. Rev. Lett., 1999, 82: 1052–1055.
- [79] Wu J. Hamiltonian formalism of game theory [J]. arXiv, 2005 (quant-ph/0501088).
- [80] Weibull J W. Evolutionary Game Theory [M]. The MIT Press, 1997.
- [81] Fudenberg D, Levine D. The theory of learning in games [M]. The MIT Press, 1999.
- [82] Hillier F S, Lieberman G J. Introduction to Operations Research, 4th Ed. [M]. San Francisco, CA, USA: Holden-Day, Inc., 1986.
- [83] Brogan W L. Modern Control Theory (3rd Ed.) [M]. Upper Saddle River, NJ, USA: Prentice-Hall, Inc., 1991.
- [84] Sethi S P, Thompson G L. Optimal Control Theory: Applications to Management Science and Economics [M]. Springer US, 2000.
- [85] Slagle J R. A Heuristic Program That Solves Symbolic Integration Problems in Freshman Calculus [J/OL]. J. ACM, 1963, 10 (4): 507–520. <http://doi.acm.org/10.1145/321186.321193>.
- [86] Haken H . 协同学——大自然构成的奥秘 [M]. 上海译文出版社, 2013.
- [87] Witthauer L, Dieterle M. The phase transition of the 2d-ising model [J/OL], 2007. <http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekte2007/p1/>.
- [88] Bak P. How Nature Works: The Science of Self-Organised Criticality (大自然如何工作) [M]. Copernicus, 1996.
- [89] Gleick J. Chaos: Making a New Science (《混沌：开创新科学》) [M]. New York, NY, USA: Penguin Books, 1987.

- [90] 于渌, 郝柏林, 陈晓松. 边缘奇迹: 相变和临界现象 [M]. 科学出版社, 2016.
- [91] Miller G A. WordNet: A Lexical Database for English [J]. COMMUNICATIONS OF THE ACM, 1995, 38: 39–41.
- [92] Miller G A, Beckwith R, Fellbaum C, et al. Introduction to WordNet: An On-line Lexical Database [J]. International Journal of Lexicography, 1990, 3 (4): 235–244.
- [93] Miller G A. Nouns in WordNet: A Lexical Inheritance System [J]. International Journal of Lexicography, 1990, 3 (4): 245–264.
- [94] Feynman R P. The Feynman Lectures on Physics [M]. Addison Wesley Longman, 1970.
- [95] Novak J. Learning, Creating, and Using Knowledge: Concept Maps As Facilitative Tools in Schools and Corporations (学习、创造和使用知识: 概念地图促进企业和学校的学习变革) [M]. New York and London: Taylor & Francis, 1998.
- [96] Whitehead A N. The Aims of Education and Other Essays (中译本《教育的目的》) [M]. Free Press; Reissue edition, 1967.
- [97] Adler M, van Doren C. How to Read a Book (《如何阅读一本书》) [M]. New York: Touchstone, a Division of Simon and Schuster, 2011.
- [98] Young S. Learn More, Study Less (如何高效学习) [M]. 北京: 机械工业出版社, 2014.
- [99] Kleinberg J M. Navigation in a small world [J]. Nature, 2000, 406: 845.
- [100] Watts D J, Strogatz S H. Collective dynamics of ‘small-world’ networks [J]. Nature, 1998, 393: 4405.
- [101] Pastor-Satorras R, Vespignani A. Epidemic Spreading in Scale-Free Networks [J]. Phys. Rev. Lett., 2001, 86: 3200–3203.

- [102] Albert R, Barabási A-L. Statistical mechanics of complex networks [J]. Rev. Mod. Phys., 2002, 74: 47–97.
- [103] 吴金闪, 狄增如. 从统计物理学看复杂网络研究 [J]. 物理学进展, 2004, 24 (1): 18–46.
- [104] 汪小帆, 李翔, 陈关荣. 网络科学导论 [M]. 高等教育出版社, 2012.
- [105] Barabási A-L, Pósfai M. Network science [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.
- [106] Axler S. Linear algebra done right [M]. Cham: Springer, 2015.
- [107] 居余马. 线性代数 [M]. 清华大学出版社, 2002.
- [108] 许以超. 线性代数与矩阵论 [M]. 清高等教育出版社, 2008.
- [109] Artin M. Algebra [M]. Pearson, 2010.
- [110] 吴兆颜. 高等量子力学 [M]. 吉林: 吉林大学出版社, 2008.
- [111] 喀兴林. 高等量子力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.
- [112] Golub G H, Van Loan C F. Matrix Computations (3rd Ed.) [M]. Baltimore, MD, USA: Johns Hopkins University Press, 1996.
- [113] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems [M]. 2nd ed. Philadelphia, PA, USA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [114] Meyer C D. Matrix Analysis and Applied Linear Algebra [M]. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.
- [115] Kolmogorov A. 概率论导引 [M]. 哈尔滨工业大学出版社, 2012.
- [116] 王梓坤. 概率论基础及其应用 [M]. 北京师范大学出版社, 2007.
- [117] Chung K L. A course in probability theory [M]. Boston: Academic Press, 1974.

- [118] Wasserman L. All of Statistics: A Concise Course in Statistical Inference [M]. Springer Publishing Company, Incorporated, 2010.
- [119] Mantegna R N, Stanley H E. An Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance [M]. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2000.
- [120] Binder K, Heermann D. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction [M]. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.
- [121] Newman M, Barkema G T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics [M]. Clarendon Press, 1999.
- [122] Shen Z, Yang L, Di Z, et al. Large enough sample size to rank two groups of data reliably according to their means [J/OL]. Scientometrics, 2019, 118 (2): 653–671. <https://doi.org/10.1007/s11192-018-2995-0>.
- [123] Wu J. Is there an intrinsic logical error in null hypothesis significance tests? Commentary on: “Null hypothesis significance tests. A mix-up of two different theories: the basis for widespread confusion and numerous misinterpretations” [J]. SCIENTOMETRICS, 2018, 115 (1): 621–625.
- [124] Welch B L. The Generalization of ‘Student’s’ Problem when Several Different Population Variances are Involved [J]. Biometrika, 1947, 34 (1/2): 28–35.
- [125] Wilcoxon F. Individual Comparisons by Ranking Methods [J/OL]. Biometrics Bulletin, 1945, 1 (6): 80–83. <http://www.jstor.org/stable/3001968>.
- [126] Mann H, Whitney D. On a Test of Whether One of Two Random Variables is Stochastically Larger Than The Other [J]. Annals of Mathematical Statistics, 1947, 18: 50–60.

- [127] Herrnstein R J, Loveland D H, Cable C. Natural concepts in pigeons [J]. *Journal of Experimental Psychology: Animal Behavior Processes*, 1976, 2: 285–302.
- [128] Feynman R P. *The Meaning of It All: Thoughts of a Citizen-Scientist* (《费曼讲演录：一个平民科学家的思想》) [M]. Addison-Wesley, 1998.
- [129] Jiao Y, Shi H, Zhou Y, et al. Justifying Or Not The Gambler's and Hot Hand Fallacies: Distinguishing Intuitive and Mathematical Definitions Is The Key [J]. manuscript in preparation, will be updated later, 2019.
- [130] Šuvakov M, Dmitrašinović V. Three Classes of Newtonian Three-Body Planar Periodic Orbits [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110: 114301.
- [131] Feynman R P, Leighton R B, Sands M. *The Feynman lectures on physics. I* [M]. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1965.
- [132] 方励之, 李淑娴. *力学概论* [M]. 安徽科学技术出版社, 1987.
- [133] *力学* [M]. 高等教育出版社, 2005.
- [134] Landau L D, Lifshitz E M. *Mechanics, Third Edition: Volume 1 (Course of Theoretical Physics)* [M]. Butterworth-Heinemann, 1976.
- [135] Einstein A, Infeld L. *The evolution of physics: the growth of ideas from early concepts to relativity and quanta* [M]. Simon and Schuster, 1938.
- [136] Feynman R P. *The character of physical law* [M]. London: British Broadcasting Corporation, 1965.
- [137] Dirac P. Generalized Hamiltonian Dynamics [J]. *Can. J. Math.*, 1950, 2: 129–148.
- [138] 杨展如. *量子统计物理学* [M]. 高等教育出版社, 2006.
- [139] Chandler D. *Introduction to Modern Statistical Mechanics* [M]. Oxford University Press, 1987.

- [140] Plischke M, Bergersen B. Equilibrium Statistical Physics [M]. World Scientific Publishing Co., 2006.
- [141] Kadanoff L P. Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization [M]. World Scientific Publishing Co., 2000.
- [142] Reichl L E. A modern course in statistical physics [M]. London: Arnold, 1980.
- [143] Toda R, Morikazu and Kubo, Saito N. Statistical Physics I: Equilibrium Statistical Mechanics [M]. Springer, 2004.
- [144] Balescu R C. Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics [M]. Wiley, 1975.
- [145] Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition [J]. Phys. Rev., 1944, 65: 117–149.
- [146] Yang C N. The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model [J]. Phys. Rev., 1952, 85: 808–816.
- [147] Kaufman B. Crystal Statistics. II. Partition Function Evaluated by Spinor Analysis [J]. Phys. Rev., 1949, 76: 1232–1243.
- [148] Yang C N, Lee T D. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation [J]. Phys. Rev., 1952, 87: 404–409.
- [149] Lee T D, Yang C N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model [J]. Phys. Rev., 1952, 87: 410–419.
- [150] Swendsen R H, Wang J-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, 58: 86–88.
- [151] Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems [J]. Phys. Rev. Lett., 1989, 62: 361–364.

- [152] Prokof'ev N, Svistunov B. Worm Algorithms for Classical Statistical Models [J]. Phys. Rev. Lett., 2001, 87: 160601.
- [153] Wang F, Landau D P. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States [J]. Phys. Rev. Lett., 2001, 86: 2050–2053.
- [154] Shannon C. A mathematical theory of communication [J]. Bell system technical journal, 1948, 27.
- [155] Shannon C E, Weaver W. The Mathematical Theory of Communication [M]. Urbana, IL: University of Illinois Press, 1949.
- [156] Petrina D Y, Gerasimenko V, Malyshov P. Mathematical Foundations of Classical Statistical Mechanics [M]. CRC Press, 2002.
- [157] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, et al. Quantum machine learning [J]. Nature, 2017, 549: 19–202.
- [158] Feynman R P, Leighton R B, Sands M. The Feynman lectures on physics. III [M]. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1965.
- [159] Ballentine L E. Quantum mechanics: A modern development [M]. World scientific, 1998.
- [160] Lukishova S G, Carlos R Stroud J, Bissell L, et al. Teaching Experiments on Photon Quantum Mechanics [C]. In Frontiers in Optics 2008/Laser Science XXIV/Plasmonics and Metamaterials/Optical Fabrication and Testing, 2008: SThD3.
- [161] Zeilinger A. Experiment and the foundations of quantum physics [J/OL]. Rev. Mod. Phys., 1999, 71: S288–S297. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.71.S288>.

- [162] Bell J S. Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics: Collected Papers on Quantum Philosophy [M]. 2nd ed. Cambridge University Press, 1982.
- [163] Risken H. The Fokker-Planck Equation [M]. 2nd ed. Berlin: Springer, 1996.
- [164] Risken H, Haken H. The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications Second Edition [M]. Berlin: Springer, 1989.
- [165] Kemeny J G, Snell J L. Finite Markov Chains [M]. Berlin: Springer, 1983.
- [166] Gardiner C W. Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences [M]. 3rd ed. Berlin: Springer, 2004.
- [167] Gardiner C W. Stochastic methods: A handbook for the natural and social sciences [M]. Berlin: Springer, 2009.
- [168] 王梓坤. 随机过程通论 [M]. Berlin: 北京师范大学出版社, 2010.
- [169] Einstein A. Investigations on The Theory of The Brownian Movement [M]. Dover Publications, INC, 1956.
- [170] Kubo R, Toda N, Morikazu and Hashitsume, Saito N. Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics [M]. Springer, 2003.
- [171] Wu J. Quantum Transport Through Open Systems [D]. [S. l.]: The University of British Columbia, 2011.
- [172] Kantelhardt J W, Zschiegner S A, Koscielny-Bunde E, et al. Multi-fractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series [J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2002, 316 (1): 87 – 114.
- [173] Zhang Z, Zheng Z, Niu H, et al. Solving the inverse problem of noise-driven dynamic networks [J/OL]. Phys. Rev. E, 2015, 91: 012814. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.012814>.

- [174] Petrina D Y. Mathematical Foundations of Quantum Statistical Mechanics [M]. Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [175] Walls D, Milburn G. Quantum Optics [M]. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.
- [176] Scheinerman E R. Invitation to Dynamical Systems [M]. Prentice Hall, 1995.
- [177] Strogatz S H. Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering [M]. Westview Press, 2000.
- [178] Stephen W. Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos [M]. Springer-Verlag New York, 2003.
- [179] Li T-Y, Yorke J A. Period Three Implies Chaos [J]. The American Mathematical Monthly, 1975, 82 (10): 985–992.
- [180] Celso Grebogi J A Y. The Impact of Chaos on Science and Society [M]. NEW YORK: United Nations University Press, 1997.
- [181] MacLellan W R, Wang Y, Lusis A J. Systems-based approaches to cardiovascular disease [J]. NATURE REVIEWS CARDIOLOGY, 2012, 9 (3): 172–184.
- [182] Lusis A J, Weiss J N. Cardiovascular Networks Systems-Based Approaches to Cardiovascular Disease [J]. CIRCULATION, 2010, 121 (1): 157–170.
- [183] Tran D X, Sato D, Yochelis A, et al. Bifurcation and Chaos in a Model of Cardiac Early Afterdepolarizations [J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 258103. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.258103>.

- [184] GOLDBERGER A L, WEST B J. Applications of Nonlinear Dynamics to Clinical Cardiology [J]. Annals of the New York Academy of Sciences: 195–213.
- [185] Chen X, Chen J, Shao B, et al. Relationship between cancer mutations and parameter sensitivity in Rb pathway [J]. Journal of Theoretical Biology, 2016, 404: 120 – 125.
- [186] Kotze J. Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet [J]. arXiv, 2008, abs/0803.0217.
- [187] Newman M. Networks: An Introduction [M]. New York, NY, USA: Oxford University Press, Inc., 2010.
- [188] Liu Y-Y, Slotine J-J, Barabási A-L. Controllability of complex networks [J]. Nature, 2011, 473: 167–173.
- [189] 詹兴致. 《矩阵论》 [M]. 高等教育出版社, 2008.
- [190] Lange M, Gorman G, Weiland M, et al. Achieving Efficient Strong Scaling with PETSc Using Hybrid MPI/OpenMP Optimisation [C] // Kunkel J M, Ludwig T, Meuer H W. In Supercomputing, Berlin, Heidelberg, 2013: 97–108.

名词索引

B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | S | T | V | W | X |
Y | Z

B

Benard 流	Rayleigh-Bénard convection. 97, 98, 448, 449
Boltzmann 常数	Boltzmann constant. 344
Boltzmann 分布	Boltzmann distribution. 115, 156, 349, 359, 360, 362, 366, 367
Brown 运动	Brownian Motion. 76, 175, 397, 398, 406, 409, 413, 417
Brusselator	布鲁塞尔子. 99, 448–450, 516
BZ 反应	Belousov-Zhabotinsky reaction. 97, 98, 448, 449, 452

C

Chladni 斑图	Chladni Pattern. 106, 107, 109
重整化群理论	Renormalization Group Theory. 30, 116, 456
Coriolis 力	Coriolis Force. 317, 318

D

Dirac δ 函数	Dirac δ function. 267, 405, 407
-------------------	--

Dirac 符号	Dirac 发明的用于表示矢量、对偶矢量和算符的符号. 215, 217, 229, 253, 255, 271–274, 307, 517
对称破缺	Symmetry breaking. 30, 110, 111, 113, 115
Dyson 方程	Dyson Equation. 154, 251, 253
E	
Einstein 符号	Einstein 发明的用于矩阵和矢量运算的符号——重复指标表示取和, 区分上下角标. 241
二分网	Bipartite Network. 152
Euler 方法	Euler Method. 189, 403
F	
反馈	Feedback. 39, 165, 181, 186, 188, 189, 193
非线性动力学	Nonlinear Dynamics. 123, 126, 175, 393, 397, 423, 424, 426
Fokker-Planck 方程	Fokker-Planck Equation. 398, 402, 409, 411–414, 416, 417
Fourier 变换	Fourier Transform. 104, 120, 217, 267, 268, 405, 412, 442
G	
概念地图	Concept Mapping/Concept Map. 183, 193, 195–198
Gibbs 不等式	Gibbs' inequality. 75
Gibbs 佯谬	Gibbs' paradoxes. 335
Google	http://www.google.com . 28, 61, 76, 137, 192, 456, 485, 486, 488, 489
Green 函数	Green's function. 30, 105, 116, 154, 211, 417, 456
Guass 函数	Gaussian function. 268, 270

H

Hilbert 空间

完备的有内积的矢量空间. 120, 238, 382

还原论

Reductionism. 25, 30, 31, 33, 48–50, 52, 92, 163, 177, 179

Huffman 编码

Huffman Coding. 71, 72, 75

I

Ising 模型

Ising Model. 87, 113, 114, 175, 346, 351, 354, 355, 357, 360, 365, 397, 456–463, 517, 518

J

伽尔顿 (Galton) 板

演示中心极限定理的一个装置. 51, 52

激光

Laser. 97

经典力学

Classical Mechanics.

Hamiltonian 哈密顿量. 199, 336, 423

Hamiltonian 力学 分析力学的 Hamiltonian 形式. 328

Hamiltonian 方程 分析力学 Hamiltonian 形式的方程. 32, 159, 165, 327–329, 331, 342, 343, 423, 424

Lagrangian 拉格朗日量. 336

Lagrangian 力学 分析力学的 Lagrangian 形式. 328

Lagrangian 方程 分析力学 Lagrangian 形式的方程. 32, 159, 165, 326, 328–331

Newton 万有引力定律 $F = G \frac{Mm}{r^2}$. 88, 89, 315

Newton 力学	以 Newton 第二定律 为核心的力学. 38, 82, 101, 320, 324, 331, 336
Newton 方程	Newton 第二定律对应的 数学方程. 32, 85, 86, 88, 89, 110, 128, 326, 327, 331, 402, 403, 423, 424, 433, 436
Newton 运动定律	动力学的 Newton 三 大定律, 尤其是 New- ton 第二定律. 32, 65, 101, 104, 313, 315, 316, 320–322, 333, 336

K

控制论	Control Theory. 158–160, 165, 175
Krylov 子空间	Krylov Subspace. 248, 249

L

Lagrangian 乘子法	Lagrangian Multipliyer. 161, 167, 168, 212, 289, 304, 366
Langevin 方程	Langevin Equation. 398, 402, 403, 409, 411, 413, 417
Legendre 变换	自变量、函数值、函数形式都变化, 维持运动方程不变. 328, 329
Liouville 定理	Liouville theorem. 342, 343
Liouville 方程	Liouville equation. 342, 343, 348, 392, 396, 397
Liouville-von Nuemann 方程	Liouville-von Nuemann equation. 390, 397
流平衡分析	Flux Balance Analysis. 152
Lyapunov 势函数	Lyapunov 势函数. 443

M

Markov 过程

Markov Process. 217, 276, 281, 302–305, 349, 398, 399, 401, 402, 410–412, 417

Master 方程

Master Equation. 87, 398, 402, 409, 411, 417

Metropolis 方法

Metropolis algorithm. 347, 359–361, 368, 397, 411, 456, 518

幂方法

Power Method. 247–249, 347

麻省理工学院

Massachusetts Institute of Technology(MIT)
麻省理工学院. 71

Monte Carlo 方法

Monte Carlo Method. 30, 113, 217, 245, 255, 280–284, 286, 292, 293, 298, 359, 398, 456–458

N

Nash 均衡

Nash Equilibrium. 156, 157, 477, 478

O

Ontology

Ontology, 本体论. 192

Ornstein–Uhlenbeck 过程

Ornstein–Uhlenbeck Process. 398, 413, 417

P

PageRank 算法

Brin 和 Page 提出的一种用于网页排序的算法. 28, 116, 137, 141–145, 147, 149, 154, 202, 205, 206, 211, 217, 247, 411, 476, 489

Poisson 括号

Poisson braket. 342

S

Schroedinger 方程

Schrödinger Equation. 110, 390, 396

沙堆模型

Sandpile model. 117, 456

Shannon 熵

Shannon Entropy. 66, 70

Shannon-Fano 编码

Shannon-Fano Coding. 70–72

Strassen 算法

Strassen Algorithm. 245, 246

随机反应均衡

Quantal Response Equilibrium. 156

T

投入产出分析

Input-Output Analysis. 145

Leontief 矩阵 Leontief Inverse Matrix. 147

Leontief 逆 Leontief Inverse Matrix. 147

V

平均场理论

把个体之间的相互作用当作其他个体合起来的平均的效果作用在个体上的一种方法，也指忽略某些空间不均匀性的条件下的分析. 27, 36, 116, 206, 463, 467, 468

W

网络的几何性

网络上顶点和边的所有的性质来源于几何连接，网络上的描述方法就是定义基于这些几何的量和分析方法来描述现象. 202

() . 202

Weierstrass 函数

Weierstrass Function. 76
理解型学习、阅读和写作过程中要问的四个重要问题：表达什么 (What) , 怎么表达 (How) , 为什么表达、这个为什么这样表达 (Why) , 对读者有什么意义 (Meaningful) . 197

Wiener 过程

Wiener Process. 398, 402, 412, 413

Wikipedia

<https://www.wikipedia.org>. 52, 61, 68, 69, 71–78, 97, 111, 113, 116, 143, 220, 241, 242, 483

word2vec 用矢量来表示词语的一种算法. 60–62, 66, 91, 217

WordNet WordNet, 词网, George Miller (米勒) 等人建立的词汇之间的联系网络. 190–192

X

系统 Ensemble. 118, 256, 285, 286, 302–305, 307, 340

序参量 Order parameter. 30, 113, 115, 118–120, 455, 457, 463

学科大图景 The big picture of a discipline. 24, 37, 45, 175, 195–197, 210

Y

演化博弈论 Evolutionary Game Theory. 156

涌现性 Emergence. 30, 34, 92, 93, 99, 104, 105, 109, 120, 179, 209, 478

约化密度矩阵 Reduced density matrix. 386

运筹学 Operations Research. 158–161, 165, 175

Z

Zeno 佯谬 Zeno’s paradoxes. 315, 335

整体论 Holism. 25, 30, 31, 33, 48–50, 52, 163, 177, 179

质点 用空间的一个点来描述运动物体, 保留质量做为这个点的参数, 忽略其他属性. 224

知识图谱 Knowledge Graph. 192

人名与常用翻译

A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | Q | R | S | T | V
| W | X | Y | Z

A

Adler	Mortimer J. Adler (艾德勒) . 197
Albert	Réka Albert (阿尔伯特) . 207
Anderson	Philip Anderson (安德森) . 31, 91, 93, 99, 106, 109, 110
Aristotle	Aristotle (亚里士多德) . 87, 310, 314
Artin	Michael Artin (阿廷) . 218
Axler	Sheldon Axler (阿克斯勒) . 217

B

Bak	Per Bak (巴克) . 117, 175
Balescu	Radu Balescu (贝勒斯库) . 339
Ballentine	Leslie Ballentine (巴楞廷) . 374
Barabasi	Albert-László Barabási (巴拉巴西) . 207, 468
Bender	Edward Bender (本德) . 91
Bergersen	Birger Bergersen (伯格森) . 339, 456
Bethe	Hans Bethe (贝特) . 356, 357
Beveridge	William Ian Beardmore Beveridge (贝弗里奇) . 56, 90, 318

Boardman	John Boardman (包德曼) . 47, 197
Bohr	Niels Bohr (波尔) . 87
Boltzmann	Ludwig Boltzmann (玻尔兹曼) . 365
Brin	Sergey Brin (布林) . 141, 143
Browne	Neil M. Browne (布朗) . 56
C	
Chandler	David Chandler (钱德勒) . 339
陈关荣	香港城市电子工程系大学教师. 207, 468
陈晓松	中国科学院理论物理所研究员. 175, 456
Chladni	Ernst Chladni (克拉德尼) . 106, 109
Chung	Kai Lai Chung (钟开莱) . 256
D	
Darwin	Charles Darwin (达尔文) . 87
Descartes	René Descartes (笛卡尔) . 56
Dirac	Paul A.M. Dirac (狄拉克) . 63, 333
狄增如	北京师范大学系统科学学院教师. 207, 468
杜婵英	北京师范大学物理系教师. 309
E	
Einstein	Albert Einstein (爱因斯坦) . 65, 87, 90, 241, 318, 335, 409
F	
Falconer	Kenneth Falconer (法尔科内) . 78
方励之	美国亚利桑那大学物理系教师. 309
Feynman	Richard Feynman (费曼) . 90, 191, 192, 299, 309, 318, 336, 374, 394, 396
Fourier	Joseph Fourier (傅立叶) . 268
G	

Galileo	Galileo Galilei (伽利略) . 87, 88, 312–316, 333
Gardiner	Crispin Gardiner (嘉丁纳) . 398
Gerlach	Walter Gerlach (盖拉赫) . 375
Gibbs	Josiah Gibbs (吉布斯) . 345
Gleick	James Gleick (格雷克) . 3, 175, 426
Gödel	Kurt Gödel (哥德尔) . 56
Gowers	Timothy Gowers (高尔斯) . 46, 90

H

Haken	Hermann Haken (哈肯) . 92, 96, 98
郝柏林	复旦大学物理系教师. 122, 175, 397, 456
Holland	John Holland (霍兰德) . 92
Huffman	David Huffman (哈夫曼) . 71

I

Infeld	Leopold Infeld (英菲尔德) . 90, 335
Ito	Kiyosi Itô (伊藤清) . 414

J

居余马	清华大学教师. 217
------------	-------------

K

Kadanoff	Leo Kadanoff (卡达诺夫) . 31, 93, 116, 339
Kalton	Michael Kalton (卡尔顿) . 47
喀兴林	北京师范大学物理系教师. 218, 252, 374
Keeley	Stuart Keeley (基利) . 56
Kemeny	John Kemeny (凯梅尼) . 398
Kepler	Johannes Kepler (开普勒) . 87, 88, 316
Kolmogorov	Andrey Nikolaevich Kolmogorov (柯尔莫戈洛夫) . 256, 306

Kotze Jacques Kotze (考辞) . 457

Kubo Ryogo Kubo (久保) . 339

L

Lagrange Joseph-Louis Lagrange (拉格朗日) . 325

Landau Lev Davidovich Landau (朗道) . 309, 336, 456

Leibniz Gottfried Leibniz (莱布尼兹) . 88

Leontief Wassily Leontief (列昂季耶夫) . 145

Lifshitz Evgeny Mikhailovich Lifshitz (利夫希茨) . 336

李翔 复旦大学电子工程系教师. 207, 468

Lorenz Edward Lorenz (洛伦兹) . 452

M

Mandelbrot Benoit Mandelbrot (曼德布洛特) . 78

McKelvey Richard McKelvey (麦凯尔维) . 156

Mendel Gregor Mendel (孟德尔) . 89

Mikolov Tomas Mikolov (米考洛夫) . 60

Miller George Miller (米勒) . 190

Mobus George Mobus (毛布斯) . 47, 90

N

Narin Francis Narin (那林) . 144

Nash John Nash (纳什) . 477, 478

Newman Mark Newman (纽曼) . 468

Newton Isaac Newton (牛顿) . 87, 88, 316, 317

Nicolis Gregoire Nicolis (尼考里斯) . 92

Nocolis G. Nocolis (诺考里斯) . 92

Novak Joseph Novak (诺瓦克) . 183, 185, 197

O

Onsager Lars Onsager (昂萨格) . 346, 355, 356

P

Page	Lawrence Page (佩奇) . 141, 143
Palfrey	Thomas Palfrey (帕尔弗雷) . 156
Pinski	Gabriel Pinski (平斯基) . 144
Plischke	Michael Plischke (普利施克) . 339, 456
Popper	Karl Popper (波普尔) . 25, 53, 54, 56, 91
Pósfai	Márton Pósfai (波什福) . 207
Prigogine	Ilya Prigogine (普利高津) . 92, 96, 99, 449

Q

漆安慎 北京师范大学物理系教师. 309

R

Reichl	Linda Reichl (瑞秋) . 339
Risken	Hannes Risken (瑞思肯) . 398
Russell	Bertrand Russell (罗素) . 54, 56

S

Sauser	Brian Sauser (萨乌斯) . 47, 197
Scheinerman	Edward R. Scheinerman (施内曼) . 426
Senge	Peter Senge (圣吉) . 47
Shannon	Claude Shannon (香农) . 70, 365
Sherwood	Dennis Sherwood (舍伍德) . 47, 48
Simard	Suzanne Simard (司马德) . 28
Bascones	James Slagle (思莱格) . 170–172
Snell	Laurie Snell (斯内尔) . 398
Stern	Otto Stern (斯特恩) . 375
Strassen	Volker Strassen (施特拉森) . 245
Strogatz	Steven H. Strogatz (斯特罗加茨) . 426

T

汤超

Tycho

北京大学定量生物学中心教师. 117

Tycho Brahe (第谷) . 87, 88, 316

V

van Doren

Charles van Doren (范多伦) . 197

W

王宁

北京师范大学文学院教师. 133

汪小帆

上海交通大学致远学院教师. 207, 468

王梓坤

北京师范大学数学科学院教师. 256, 306, 398

Wasserman

Larry Wasserman (沃瑟曼) . 256, 287, 306

Whitehead

Alfred Whitehead (怀特海) . 54, 56, 197

Wiesenfeld

Kurt Wiesenfeld (威森菲尔德) . 117

Wiggins

Stephen R. Wiggins (威金斯) . 426

Wilson

Kenneth Wilson (威耳逊) . 116

Winston

Patrick Winston (温斯顿) . 170

吴金闪

北京师范大学系统科学学院教师. 38, 197, 207, 374, 375, 394, 468

吴兆颜

吉林大学物理学院教师. 218, 374

X

许以超

中国科学院数学与系统科学研究所、河南大学教师. 218

Y

杨展如

北京师范大学物理系教师. 79, 339

Young

Thomas Young (杨) . 197

于渌

中国科学院理论物理所研究员. 175, 456

Z

Zeno	Zeno of Elea (芝诺) . 335
赵凯华	北京大学物理系教师. 82, 92
赵元任	加州大学柏克莱分校教师. 130

插图

1.1 伽尔顿板	52
1.2 word2vec 算法示意图	60
1.3 Dirac 的光三块偏振片	63
1.4 英文字母的 Mores 电报码	68
1.5 英文字母出现频率	69
1.6 Shannon-Fano 编码	73
1.7 Huffman 编码	74
1.8 分形图	77
1.9 墨在水中的扩散	80
1.10 水的虹吸	81
1.11 单摆示意图	83
1.12 勾股定理的证明	84
2.1 激光工作原理示意图	97
2.2 Bénard 流	99
2.3 BZ 反应花样	100
2.4 Chladni 斑图	107
2.5 Chladni 斑图	108
2.6 墨西哥帽和对称破缺	111
2.7 铁磁 - 顺磁相变实验图	114
2.8 临界乳光	116

2.9 沙堆崩塌规模分布	118
2.10 抛物线映射迭代过程	124
2.11 抛物线映射迭代过程的混沌解	126
2.12 汉字“照”的字形拆分	133
2.13 3500 常用简化字的字形拆分网络	135
2.14 简化字字形拆分网络的层次性	138
2.15 汉字学习顺序比较	140
2.16 基因对敲除的组合溢出效应	154
2.17 做饼干的任务分解和关系图	165
2.18 简化的饼干任务图	165
2.19 简化的饼干任务图	166
2.20 Slagle 关于符号积分器的博士论文原图	171
3.1 自行车的对象图	182
3.2 自行车的概念地图	183
3.3 关于概念地图的概念地图	186
3.4 自行车速度反馈控制图	189
3.5 WordNet 名词关系示意图	193
3.6 医学领域的疾病药物本体网络的一角	196
4.1 网络作为复杂系统的骨架	210
5.1 本书整体概念地图	212
6.1 矢量和对偶矢量	231
6.2 共轭算符的定义	236
7.1 约会问题	260
7.2 Bertrand 圆内弦长的概率问题	261
7.3 Monte Carlo 方法原理示意图	285
7.4 统计学学科大图景概览	290
8.1 批判性思维用于 Galileo 关于重物下落快的理想实验	316
8.2 一维运动相空间示意图	324

插图	601
8.3 单摆受力分析图	327
8.4 实际轨道和在实际轨道附近的变动	333
9.1 Ising 模型的 Bethe 近似	354
9.2 Ising 模型平均场理论的不动点	355
9.3 Ising 模型 Bethe 近似的不动点	360
9.4 Metropolis 方法得到的 Ising 模型相图	364
9.5 Ising 模型的有序和无序相	365
9.6 Metropolis 方法下 Ising 模型磁矩的演化动力学	366
10.1 自旋的 Stern-Gerlach 装置	375
10.2 自旋过 Stern-Gerlach 装置示意图	376
10.3 自旋过三个不同方向磁场	377
10.4 电子 which-way 实验装置示意图	379
11.1 粉尘颗粒的 Brown 运动轨迹	404
11.2 Brown 运动模拟结果	406
11.3 Brown 运动模拟结果	407
12.1 不动点的几种类型和它们之间的流	429
12.2 Logistic 映射迭代过程	430
12.3 嵌套 Logistic 映射迭代过程	432
12.4 Logistic 映射周期三的迭代过程	433
12.5 极限环的几种情况	434
12.6 电场中受阻力的带电粒子数值解	440
12.7 Logistic 映射迭代混沌情形的过程	441
12.8 Lorenz 吸引子的时间演化图	444
12.9 Lyapunov 势函数演化的一个例子	446
12.10 Lyapunov 势函数演化的另一个例子	447
12.11 Brusselator (布鲁塞尔子) 的时间演化图和速度矢量场图 .	451
14.1 网络改变世界	473
15.1 开放和封闭系统	494

15.2 3500 常用简化字的字形拆分网络	513
15.3 加入了 PageRank 排序之后的汉字学习顺序比较	517
15.4 包含环境的投入产出分析	528
15.5 包含环境的投入产出分析	528
15.6 广义投入产出分析总结	545

举例目录

2.1 例 (简谐振子的运动方程)	101
2.2 例 (两个小球的简谐运动)	101
2.3 例 (周长固定面积最大的长方形)	162
2.4 例 (存款和消费的平衡)	166
6.1 例 (\mathbb{R} 实数加法群)	224
6.2 例 ($\mathbb{R}/\{0\}$ 实数乘法群)	224
6.3 例 (Z_2 群)	225
6.4 例 (证明举例 $0 \cdot \mu = O, \forall \mu \in V$)	227
6.5 例 (N 维欧氏空间矢量)	228
6.6 例 (2 维欧氏空间可微函数在某点的切线)	228
6.7 例 (1 维欧氏空间的无穷可微函数)	228
6.8 例 (1 维欧氏空间的平方可积函数)	228
7.1 例 (对称骰子的几率问题)	258
7.2 例 (约会问题)	259
7.3 例 (Bertrand 圆内弦长的概率问题)	259
7.4 例 (留短头发的男生的概率)	265
7.5 例 (从观测到真值)	265
7.6 例 (三个门的游戏)	266
7.7 例 (正态分布函数的矩和特征函数)	270

7.8 例 (随机变量之和的随机变量)	271
7.9 例 (正态分布的实际生活中的例子)	271
7.10 例 (Dirac 符号用于对称骰子问题)	275
7.11 例 (翻硬币操作的算符形式)	276
7.12 例 (硬币状态演化的随机过程)	277
7.13 例 (硬币状态演化的随机过程, 续)	279
7.14 例 (硬币状态演化的随机过程, 续)	280
7.15 例 (Bernoulli 分布的 Monte Carlo 方法)	283
7.16 例 (Bernoulli 分布的极大似然估计)	290
7.17 例 (Bernoulli 分布的矩估计)	291
7.18 例	292
7.19 例 (样本均值大于零的检验)	296
7.20 例 (归纳法, Bayesian 公式用于推断世界的乌鸦是黑的)	303
8.1 例	322
8.2 例	322
8.3 例 (前面三个例子中的势函数)	325
8.4 例 (能量守恒的应用)	326
8.5 例 (单摆的周期)	327
8.6 例 (Lagrangian 力学用于单摆)	329
8.7 例 (Hamiltonian 力学用于弹簧上的小球)	330
8.8 例 (Lagrangian 力学用于二级摆)	335
9.1 例 (三维理想气体的统计力学)	346
9.2 例 (一维Ising 模型精确解)	348
9.3 例 (配分函数的计算)	352
9.4 例 (星形五格点 Ising 模型的配分函数)	353
9.5 例 (二维 Ising 模型的平均场理论)	354
9.6 例 (二维 Ising 模型的配分函数和相变)	357
9.7 例 (从转移矩阵求稳态分布)	361
9.8 例 (二维Ising 模型的Metropolis 方法模拟)	362
10.1 例 (自旋偏转和测量)	390

11.1 例 (纯随机游走的小球)	402
11.2 例 (与振动墙壁相连的小球)	403
11.3 例 (水中的花粉粒子)	403
12.1 例 (Logistic 映射)	429
12.2 例 (Logistic 映射周期轨道的稳定性)	431
12.3 例 (平方反比立场中的粒子)	431
12.4 例 (一维电场中受到空气阻力的带电粒子)	436
12.5 例	441
12.6 例 (Lorenz 吸引子的轨迹)	442
12.7 例 (线性稳定性分析和 Lyapunov 函数给出相同结果的系统) .	445
12.8 例 (Lyapunov 函数给出相同结果超越线性稳定性分析)	445
13.1 例 (二维Ising 模型临界现象的 Monte Carlo 模拟)	457
13.2 例 (重整化群求解一维Ising 模型的相变点)	460
13.3 例 (多层级菱形晶格上的Ising 模型)	461
13.4 例 (一维Ising 模型的平均场)	462
13.5 例 (二维Ising 模型的平均场)	462