Methods of Mathematical Physics

§1 Review

Lecturer: 黄志琦

http://zhiqihuang.top/mmp

Outline

微积分回顾

$$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!}x^3 + \dots$$

五个展开公式（前三个）

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots$$

这三个公式无条件成立

五个展开公式(后两个)

$$(1+x)^{\alpha} = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!}x^3 + \dots$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

这两个公式适用于$|x| < 1$; 你也可以在$|x| = 1$时浪一下，一般不会出问题。但是，在$|x| > 1$的情况下一定不能浪，在$|x| > 1$的情况下一定不能浪，在$|x| > 1$的情况下一定不能浪——重要的事情说三遍。

思考题

e^{π}和π^{e}哪个大?

含参量的积分：固定上下界

设f是已知的二元函数，a, b是常数，可以用含参量的积分来定义函数

$$F(x) = \int_a^b f(x, t) dt.$$

当积分收敛性和光滑性很好时，可以交换积分和求导的次序

$$F'(x) = \int_a^b \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt.$$

含参量的积分:变上下界

设α, β是已知的一元函数，f是已知的二元函数，定义函数

$$F(x) = \int_{\alpha(x)}^{\beta(x)} f(x,t)dt.$$

当积分收敛性和光滑性很好时，

$$F'(x) = \int_{\alpha(x)}^{\beta(x)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} dt + \beta'(x) f(x, \beta(x)) - \alpha'(x) f(x, \alpha(x)).$$

(上面的结果有非常简单的几何解释，你能给出来吗？)

思考题

在$x \in (0, \infty)$上定义Γ函数

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt.$$

试证明$-1 < \Gamma'(1) < 0.$

线性代数回顾

厄米矩阵本征值都是实数；本征矢可以取成正交归一化。

共轭与共轭转置(conjugate transpose)

复数取共轭是指令其虚部反号:

$$(a+bi)^* \equiv a - bi, \ \ a, b \in \Re$$

把一个复数矩阵A每个元素都取共轭，然后再把整个矩阵取转置，就得到A的**共轭转置矩阵**，简单记作$A^\dagger$。当然，你也可以先转置，再取共轭。

$$A^\dagger \equiv (A^*)^T = (A^T)^*$$

显然，对实数矩阵而言，共轭转置就是转置。

例子

$$A = \begin{pmatrix} 1+i & 2+i & i \\ 3-i & -4-2i & 0 \end{pmatrix}$$

取共轭转置后为

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 1-i & 3+i \\ 2-i & -4+2i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

共轭转置的基本性质

容易证明:

- 乘积的共轭转置等于共轭转置的倒序乘积

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger,$$

$$(ABC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger A^\dagger,$$

$$\ldots$$

- 共轭转置矩阵的行列式是原矩阵的行列式的共轭

$$\det\left(A^\dagger\right) = (\det A)^*$$

内积

- 实向量（看成$n \times 1$实元素矩阵）u, v的内积可以用矩阵乘法简洁地写成$\mathrm{u}^T\mathrm{v}$.

  (它恒等于$\mathrm{v}^T\mathrm{u}$，所以实向量内积满足交换律)
- 复向量（看成$n \times 1$复元素矩阵）u, v的内积则定义为 $\mathrm{u}^\dagger\mathrm{v}$.

  (它一般不等于$\mathrm{v}^\dagger\mathrm{u}$，复向量内积只有当内积为实数时才满足交换律)
- 复向量的模定义为它和自己的内积的平方根 $\|\mathrm{u}\| \equiv \sqrt{\mathrm{u}^\dagger\mathrm{u}}$

  （即它的每个分量的模的平方和再开平方根）
- 如果两个向量内积为零，则说它们正交。
- 如果一个向量的所有元素为零，则称它为零向量

酉矩阵(Unitary Matrix)

如果一个方阵和自己的共轭转置互逆($AA^\dagger = A^\dagger A = I$)，就称它为**酉(Unitary)矩阵**。

$n \times n$的酉矩阵的所有列（或行）构成n维复空间的一组完备的正交归一化的基。反过来，如果有n维复空间的一组完备的正交归一化的基，以它们为列（或行）可以得到一个酉矩阵。

当然，实正交矩阵是酉矩阵的特例。

幺正矩阵(Unitary Matrix)的行列式的模为1

对幺正矩阵U,

$$|\det U|^2 = \det(U^\dagger)\det(U) = \det(U^\dagger U) = 1$$

所以$\det U$是模为1的复数。

复向量的“旋转”

酉矩阵可以看成复向量空间的旋转操作，具有保内积不变的特点：

$$(U\mathrm{x})^\dagger(U\mathrm{y}) = \mathrm{x}^\dagger U^\dagger U\mathrm{y} = \mathrm{x}^\dagger\mathrm{y}.$$

特别地，当酉矩阵U作用到一个复向量上x时，复向量的模不变。这符合我们对“旋转”的直观理解。

厄米矩阵(Hermitian Matrix)

如果一个方阵的共轭转置等于自身($A^\dagger = A$)，就称它为**厄米(Hermitian)矩阵**。

例如

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2+i \\ 2-i & -4 \end{pmatrix}$$

就是厄米矩阵。

当然，实对称矩阵是厄米矩阵的特例。

厄米矩阵的本征值和本征矢

- 设A是$n \times n$厄米矩阵，通过求解方程

$$\det(\lambda I - A) = 0$$

  可以得到n个本征值（m重根视为m个），这些本征值一定是实数。
- 只出现$m = 1$次的本征值对应的本征矢方向确定（但允许乘-1)，且和其他本征值的本征矢都正交。
- 重复$m > 1$次的本征值的所有本征矢构成（和其他本征值的本征矢都正交的）m维线性子空间。可以取一组正交基，人为地使这些本征矢也两两正交；这样的取法当然有无穷多种。

证明参见附录B

厄米矩阵的酉对角化

根据前述讨论，对厄米矩阵A总是可以取一组正交归一化的本征矢，令它们为列向量就得到一个酉矩阵U。容易根据本征矢的定义直接验证 $U^\dagger AU$是一个以A的所有本征值为对角元的对角矩阵。

题外话：一般地，对一个方阵S，如果存在一个酉矩阵U使得$U^\dagger SU$是对角矩阵，则称S可以酉对角化。在矩阵论中有一个深奥的定理：一个矩阵S可以酉对角化的充分必要条件是它和自己的共轭矩阵对易(也就是$SS^\dagger = S^\dagger S$) —— 这样的矩阵叫正规矩阵(Normal Matrix)。显然，酉矩阵和厄米矩阵都是正规矩阵，所以都能酉对角化。

思考题

计算厄米矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

的所有本征值，并写出一组正交归一化的本征矢。

厄米矩阵和二次型

设$n\times n$的厄米矩阵本征值分别为$\lambda_1\le\lambda_2\le\ldots\le\lambda_n$.把对应的本征矢取为正交归一化的基$\mathrm{u}_1,\mathrm{u}_2,\ldots,\mathrm{u}_n$。考虑任意非零复矢量

$$\mathrm{x}=x_1\mathrm{u}_1+x_2\mathrm{u}_2+\ldots+x_n\mathrm{u}_n.$$

那么，x的二次型

$$\frac{\mathrm{x}^\dagger A\mathrm{x}}{\mathrm{x}^\dagger\mathrm{x}}=\frac{\lambda_1|x_1|^2+\lambda_2|x_2|^2+\ldots+\lambda_n|x_n|^2}{|x_1|^2+|x_2|^2+\ldots+|x_n|^2}$$

也就是说二次型$\frac{\mathrm{x}^\dagger A\mathrm{x}}{\mathrm{x}^\dagger\mathrm{x}}$是$A$的本征值的加权平均（权重均为非负实数）。显然，当x取遍所有非零复矢量时，$\frac{\mathrm{x}^\dagger A\mathrm{x}}{\mathrm{x}^\dagger\mathrm{x}}$可以取遍$[\lambda_1,\lambda_n]$区间内的所有实数。

思考题

设x, y为复变量，满足$|x|^2+|y|^2=1$。证明下述表达式

$$2|x|^2+3|y|^2+(1+i)x^*y+(1-i)xy^*$$

一定是实数。并计算这个表达式的最大可能取值。

双曲函数

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$$

双曲正弦和双曲余弦

双曲正弦函数sinh和双曲余弦函数cosh分别定义为：

$$\sinh x \equiv \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\cosh x \equiv \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

此外还有双曲正切$\tanh x \equiv \frac{\sinh x}{\cosh x}$，双曲余切$\coth \equiv \frac{\cosh x}{\sinh x}$，双曲正割$\mathrm{sech}\, x \equiv \frac{1}{\cosh x}$，双曲余割$\mathrm{csch}\, x \equiv \frac{1}{\sinh x}$等。

双曲函数公式和三角函数公式对比

$$
\begin{aligned}
\cos^2 x + \sin^2 x &= 1 \\
\frac{d}{dx}\sin x &= \cos x \\
\frac{d}{dx}\cos x &= -\sin x \\
\frac{d}{dx}\tan x &= \sec^2 x \\
\frac{d}{dx}\cot x &= -\csc^2 x \\
\sin(2x) &= 2\sin x\cos x \\
\cos(2x) &= 2\cos^2 x - 1
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
\cosh^2 x - \sinh^2 x &= 1 \\
\frac{d}{dx}\sinh x &= \cosh x \\
\frac{d}{dx}\cosh x &= \sinh x \\
\frac{d}{dx}\tanh x &= \mathrm{sech}^2 x \\
\frac{d}{dx}\coth x &= -\mathrm{csch}^2 x \\
\sinh(2x) &= 2\sinh x\cosh x \\
\cosh(2x) &= 2\cosh^2 x - 1
\end{aligned}
$$

思考题

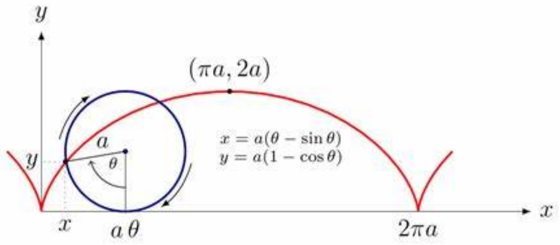
计算积分 $\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx$

滚轮线(Cycloid)

$$x = a(\theta - \sin\theta), \ \ y = a(1 - \cos\theta)$$

滚轮线(Cycloid)

当一个轮子在平地上滚动时，轮子边上的固定点走过的轨迹就是滚轮线 (cycloid)。滚轮线又叫摆线。



设轮子半径为a，y对x的依赖关系可以通过中间变量（滚过的角度）θ间接确定。

$$x = a(\theta - \sin\theta), \;\; y = a(1 - \cos\theta).$$

思考题

半径为1的轮子在平地上滚一圈，轮子边缘上的固定点的轨迹的长度是多少?

Homework

- 求极限
$$\lim_{x\to 0}\frac{1}{x^2}\ln\frac{\pi x}{\sin(\pi x)}.$$
- 思考题中介绍了Γ函数并估算了$-1<\Gamma'(1)<0$。请证明更强的结果: $-\frac{29}{36}<\Gamma'(1)<\frac{1}{e}-\frac{3}{4}$。
- 已知A为厄米矩阵。如果对任意非零矢量u，$\mathrm{u}^\dagger A\mathrm{u}$都为正实数，则称$A$正定。证明：$A$正定的充分必要条件是它的本征值全部为正实数。
- 计算积分
$$\int_0^1\frac{1}{(1+x^2)^{3/2}}dx.$$
- 有滚轮线
$$x=\theta-\sin\theta,\ \ y=1-\cos\theta.$$
在$0\le x\le 2\pi$范围内，曲线下方围的面积$\int_0^{2\pi}ydx$是多少?

附录A

线性变换的本质

线性变换

设A为线性算符；x为矢量；c为普通的数，则

$$A(c\mathrm{x}) = c(A\mathrm{x})$$

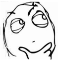
$$A(\mathrm{x}+\mathrm{y}) = A\mathrm{x} + A\mathrm{y}$$

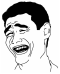
线性变换⇒

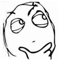
$(x \Rightarrow Ax)$

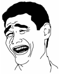
非线性变换⇒

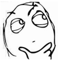
$(x \Rightarrow \#\$\%\&)$

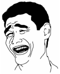

什么是线性变换?


拉升+旋转


什么是拉升?


缩放坐标


什么是旋转?


换一组基

奇异值分解（SVD）定理（证明略）

如果一个给定的线性算符A把n维“原始空间”的矢量映射到m维“目标空间”，那么一定存在原始空间的一组正交归一化的基$\mathrm{u}_1, \mathrm{u}_2, \ldots, \mathrm{u}_n$，在目标空间的一组正交归一化的基$\mathrm{v}_1, \mathrm{v}_2, \ldots, \mathrm{v}_m$，以及一组缩放系数$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_p$ (这里$p = \min(m, n)$)；使得

$$A(x_1\mathrm{u}_1 + x_2\mathrm{u}_2 + \ldots + x_n\mathrm{u}_n) = (\lambda_1 x_1)\mathrm{v}_1 + (\lambda_2 x_2)\mathrm{v}_2 + \ldots + (\lambda_p x_p)\mathrm{v}_p.$$

对任意$x_1, x_2, \ldots, x_n$成立.

找出正交归一化基以及缩放系数的操作称为A的**奇异值分解（Single Value Decomposition，简称SVD)**。

SVD存在符号可交换性（例如可以把u_1换成$-\mathrm{u}_1$，同时把λ_1换成$-\lambda_1$)、次序可交换性（例如把下标1和2互换）、以及简并可重组性（当两个$\lambda_i = \lambda_j$，可以把$\mathrm{u}_i, \mathrm{u}_j$以及$\mathrm{v}_i, \mathrm{v}_j$进行同样方式的线性重组）；从这些意义上讲，SVD不是唯一的。

附录B

厄米矩阵的本征值和本征矢

厄米矩阵的本征值都是实数

设A是厄米矩阵，λ是A的本征值，则存在非零向量x(本征矢)使得

$$Ax = \lambda x. \tag{1}$$

左边乘以$x^\dagger$，得到：

$$x^\dagger A x = \lambda x^\dagger x. \tag{2}$$

然后两边取共轭转置，并利用$A^\dagger = A$，得到：

$$x^\dagger A x = \lambda^* x^\dagger x. \tag{3}$$

比较(2)和(3)立刻得到$\lambda = \lambda^*$。

不同本征值对应的本征向量正交

设A是厄米矩阵，$\lambda_1 \neq \lambda_2$是A的不同本征值（根据前面讨论，它们都是实数）。分别取它们各自的一个本征矢量x_1, x_2

$$Ax_1 = \lambda_1 x_1. \tag{4}$$

$$Ax_2 = \lambda_2 x_2. \tag{5}$$

(4)取共轭转置，得到

$$x_1^\dagger A = \lambda_1 x_1^\dagger. \tag{6}$$

(6)右乘x_2，减去(5)左乘$x_1^\dagger$，得到

$$0 = (\lambda_1 - \lambda_2) x_1^\dagger x_2.$$

由于$\lambda_1 \neq \lambda_2$，上式就说明 $x_1^\dagger x_2 = 0$.

同一个本征值对应的本征向量构成线性子空间

设A是厄米矩阵，x_1, x_2都是本征值λ的本征向量

$$A\mathrm{x}_1 = \lambda \mathrm{x}_1, \quad A\mathrm{x}_2 = \lambda \mathrm{x}_2.$$

显然x_1,x_2的任意非零线性组合都是A对应于λ的本征向量。

$$A(c_1\mathrm{x}_1 + c_2\mathrm{x}_2) = \lambda(c_1\mathrm{x}_1 + c_2\mathrm{x}_2).$$

也就是说对应λ的所有本征向量构成一个线性子空间，这个子空间的维数称为本征值λ的简并度。简并度实际上就是方程

$$\det(\lambda I - A) = 0$$

的根的重数。 在λ对应的本征向量空间可以取一组正交基，只要简并度大于1，正交基的取法就有无穷多种。

从SVD定理的角度理解本征矢和本征值

对$n \times n$的厄米矩阵A，设其本征值$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$对应的正交归一化本征矢分别为$\mathrm{v}_1, \mathrm{v}_2, \ldots, \mathrm{v}_n$。根据本征矢的定义，容易看出，对任意$x_1, x_2, \ldots, x_n$均有

$$A(x_1\mathrm{v}_1 + x_2\mathrm{v}_2 + \ldots + x_n\mathrm{v}_n) = (\lambda_1 x_1)\mathrm{v}_1 + (\lambda_2 x_2)\mathrm{v}_2 + \ldots + (\lambda_n x_n)\mathrm{v}_n.$$

和SVD定理对比可以发现，这时原始空间和目标空间重合，原始空间里“合适的基”也和目标空间里“合适的基”重合：它们就是本征矢$\mathrm{v}_1, \mathrm{v}_2, \ldots, \mathrm{v}_n$。坐标分量的缩放比例就是本征值$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$。矩阵的厄米性导致了这些特殊的性质。