系统理论基础

吴金闪

北京师范大学系统科学学院

April 4, 2018

成绩怎么算？

- 作业：40%，基本上每两周布置一次作业，作业布置完以后的下周上课时间交。逾期，过一天扣当次作业总分数的20%。雷同算作弊。
- 考试：40%，可以用**自己**的作业，任何**自己**带入考场的书籍，电脑与网络（但是不能与他人通过网络交流），考卷提供公式。雷同算作弊。
- 小课题或者大作业：20%，雷同（包含同学、老师、google、百度、wikipedia、CNKI等）算作弊。
- 课堂表现：积极参与讨论，开展课后阅读，0-10，额外奖励。
- 意见与建议，例如纠正老师的错误：0-10分，额外奖励。
- 习题课的组织形式：助教批改和讲解
- 最终成绩：总成绩低于60分的，按60分计，除非出现以下情况：作弊。总成绩高于60低于75的，放大到75以上。

选择这门课的收获和代价

- 吴金闪的自我介绍（课程节奏快，与学生交流丰富，不容忍剽窃，接受不同意见，可能会跟学生争论，有问题要及时问，什么时候都可以打断）。
- 通过大量的练习，解析的与数值的，增强解决问题的能力，为什么要多做练习？练习与二胡理论。举例：网络与图的谱理论。10-20小时每周。
- 大量的学习内容。上课主要交代主要思路，大量细节需要自学。
- 强调学习能力、思维方式的培养——理解型学习：学会系联性思考，对核心知识的理解。
- 愿意接受挑战。

我们学什么?

- 学会理解型学习：有比较好的进一步学习的基础（尤其是数学、物理、编程）、有大图景并了解很多东西、按照研究需要自学的兴趣和方法。
- 科学方法、科学思想，什么是系统科学（《概论》部分）。
- 通过研读研究实例，加深对系统科学的理解（《概论》部分）。
- 通过对基本数学物理学科的学习和梳理，建立坚实的系统理论的物理数学基础，更好的理解《概论》部分。
- 通过在实际研究中应用所学到的方法或者欣赏他人在实际工作中对这些方法的应用，提高对系统理论的兴趣。

课程大纲以及大概时间安排

- 如何在服务器上做计算：ssh, Lapack, make, gcc, 单机上安装这些软件（cygwin, xygwin X, petsc –with-blas etc., slepc），1学时。
- 线性代数: 线性空间，线性变换，矩阵，本征值、本征向量，Dirac记号，内积，对偶矢量，二次型，指数算符，数值线性代数，5学时。
- 习题课1学时，助教讲解，老师点评。
- 概率论：古典概型、简单事件、复合事件、频率与概率、系综的概念，有限事件空间上的概率论，概率三元体，概率论的矩阵表示，Monte Carlo方法简介，5学时。
- 习题课1学时，助教讲解，老师点评。

课程大纲，续

- 分析力学：状态与状态空间、动力学过程、Hamilton方程、Lagrange方程，2学时。
- 习题课1学时，助教讲解，老师点评。
- 量子力学：双缝干涉实验，光子偏振实验，二维系统的量子力学，态矢量、算符、Schroedinger方程、测量，密度矩阵，5学时。
- 习题课1学时，助教讲解，老师点评。
- 统计力学：状态空间、系综理论、配分函数，相变，Metropolis方法，5学时。
- 习题课1学时，助教讲解，老师点评。
- 大作业课堂报告（志愿、鼓励）3学时

关于系统科学

1. 物理学处理包含"物理"相互作用的系统(物理系统),包含场论、统计物理学等处理多体的技术
2. 这种处理相互作用的概念、思想、技术能够用于处理更加一般的系统吗?例如经济(主体、利益、环境,多个体决策),金融,科学家,产品等等
3. 进一步,对于各个领域的系统,能够回答其领域本身的基本问题,这个领域自身的研究者关心的问题吗?
4. 甚至提出新的问题?
5. 更进一步,各个系统的研究能够给我们处理其他系统的启发吗?也就是一般系统的概念、处理方法和理论
6. 这样的从具体系统中来,超越具体的系统的,又能解决具体系统,甚至迁移到其它具体系统的,一般的方法、概念、理论、思想存在吗?

系统科学核心思想

1. 科学性——用数学结构去描述这个世界：普适，理想化，抽象化，模型，可以计算。实用主义和可证伪性，力学的思想）
2. 系统性：相互作用、整体视角，涌现性，相变
3. 具体系统和一般理论，学科交叉融合
4. 能够从这个思想中诞生一门科学吗？

更一般的复杂系统

1. 物理系统已经能够体现基本的思想：相互作用无处不在，整体行为和涌现性
2. 包含能动性个体（有决策、有思想的个体）的系统往往具有比物理系统更多样和复杂的相互作用，更丰富的现象。能够有一般的处理方法吗?
3. 可惜，目前除了在运筹和控制方面（基本上已经从基本理论到达工程的层次，不再是系统科学理论研究的核心，当年应该是的，举例运筹），系统科学基本上还在这个值得研究的问题和有价值的思路的层次
4. 还不能称为一门科学，也是进一步发展的机会

系统科学研究的线路图

1. 学习一些数学结构，学习提炼数学结构的抽象化过程（物理或者其他具体科学）
2. 学习一些物理学，尤其是场论、统计物理学等处理相互作用的方法的研究
3. 从具体学科提炼具有系统性、整体性、涌现性的问题
4. 用处理相互作用的整体视角、概念和方法，来回答和解决这些问题
5. 讨论这些问题对具体学科的意义
6. 讨论这些工作的更一般的方法论和思想上的意义

像物理学家、计算机科学家、数学家一样思考

1. 本质上，科学就是一套描述世界的数学模型
2. 数学提供了数学结构，以及抽象化过程的经验
3. 物理学是目前来说把数学概念和现实世界结合的最好的科学
4. 物理学在相互作用整体视角方面有一些经验和武器
5. 学会像计算机一样思考问题：明确、流程化、对象（对象的元素和方法）、化成最基本的操作单元
6. 课外阅读：可以再去读一遍《Mathematics：A Very Short Introduction》和《An Introduction to Mathematical Modeling》
7. 课外阅读：听一听MIT的《计算机科学导论》、《图灵传》
8. 课外阅读：读一读《物理学的进化》、《物理定律的特性》、《光和物质奇异性》，以及Feynman系列的其他书

教学目标

1. 像数学家一样地思考，抽象思维的能力：数学是对现实世界以及思维过程的结构的抽象描述，现实世界的对象的某些特性使得其对应于一定的数学结构
2. 矢量空间，矢量与矩阵的抽象表示方法
3. 数值线性代数

线性代数提纲

1. 导论：从随机过程的稳定分布到矩阵，从Google Page Rank算法到矩阵
2. 集合，映射，数学的本质——结构，集合加上映射就能表达结构：只有一个集合的时候的映射（群），两个不同集合的时候的映射
3. 3维矢量空间：加法，数乘，基矢，转动，正交基矢
4. n维实矢量空间：加法，数乘，基矢，线性变换; n维复矢量空间：为什么用复数表示
5. 内积——增加的映射，对偶矢量
6. 表象，矢量的抽象形式与在某一组基矢下的表示，内积运算的抽象定义及其表示

线性代数提纲，续

1. 线性变换的表示，矩阵，对称矩阵，正交矩阵，厄米（Hermitian）矩阵，酉（Unitary）矩阵
2. Dirac记号，完全性关系，正交归一基矢
3. 本征值与本征向量，对角化，不可对角化的矩阵
4. 微分方程组与二次型
5. 指数算符，算符的函数
6. 有限维复矢量空间再探：矢量、内积、对偶矢量、线性算符、线性算符构成的矢量空间

线性代数导论

1. 讨论下列操作的末状态：两个小球,红的r在盒子A里,一个蓝的b在盒子B里。每一步，我们随机地从盒子A选取一个球,与盒子B的球交换。
2. 第一步：如何表示这些状态；第二步：状态的变化如何描述；第三步：转化成数学问题并解决问题。
3. 在一个连通的所有页面构成的Internet网络上，思考这样一个问题：哪一个页面最重要，或者说用户检索某个词的时候，可能存在许多不能够匹配的网页，最先推荐的应该是哪些网页？
4. 第一步：页面的连接与内容是否有关系；第二步：连接如何表示；第三步：原始问题转化成怎样的一个数学问题并解决问题。

线性代数导论，续

1. 数学是思维的语言，是对结构的描述，计算是自然的推理。
2. 线性代数是所有数学语言之中描述能力尤其突出的语言。
3. 技术的层面：线性方程的解，线性系统的演化，微分方程的数值解，等等等等。我们最主要关注语言的部分，但是我一直强调的，“怎么拉二胡”首先不应该成为问题。
4. 技术的层面应该与概念的层面分开学习。
5. 这部分，教材《系统科学导引》已经比较完整。

前面课程的总结

1. 课程信息，考试、作业、大致内容
2. 和《系统科学概论》的关系
3. 为什么学习数学和物理
4. 矢量部分的导论
5. 数学物理这部分，教材《系统科学导引》已经比较完整。

关于学习方法的再次提醒

1. 这个课程的整体就是大量的例子和例子里面体现出来的思想和思考，甚至概念、分析技术
2. 每一个例子搞清楚：具体研究什么问题，问题包含哪些子系统，如何相互联系，如何分析的
3. 这个例子在传达什么信息
4. 这个信息是如何传达的——信息和例子之间的关系是什么
5. 老师为什么选择这个例子，为什么这样来传达这个信息
6. 老师为什么传达这个信息，如何促进我认识世界
7. 这些所有的信息合起来说明一个什么信息，相互什么关系

集合与映射导言

1. 考虑如下计算：

$$1(\text{苹果}) + 1(\text{苹果}) = 2(\text{苹果}) \tag{1}$$

2. 这是在计算苹果的加法吗?
3. 一个苹果加上一个苹果等于另一个苹果?
4. 还是苹果数量的加法?
5. 苹果本身是一个不能够被加起来的东西
6. 也就是说，加法是定义在“苹果的数量”这个集合上的运算，而不是“苹果”这个集合上的运算
7. 依靠集合和映射的语言，我们就能够非常准确地描述上面的理解的问题所在
8. 学点真正的数学吧，要不然，太傻

集合与映射

1. 最基本的数学结构：集合（完全没有结构，就是一堆对象的整体）
2. 集合上最少最少的结构：映射，封闭性，唯一性，单射、满射
3. 举例：到自身的映射（过于平庸），到自身子集的集合的映射（拓扑），从自身的直积集合到自身的映射（群，半群）
4. 举例：自然数能够用来标记事物（记号，没有结构），对事物排序（序数，涉及到事物的某种特性之间的距离，不一定均匀，有序集这一映射），能够对事物的属性做运算（比较距离等，加法和减法这一映射，序数之间的距离也有意义，必须相同，基数）

最基本的映射：群，半群

1. 描述对象：对一个事物的操作，分解成为基本的操作，以及连续完成基本操作所实现的操作，操作是否可逆，操作是否可交换
2. 封闭性，结合律（指定序列就指定了操作，不存在另外的含义），单位元（不变操作），逆元（群与半群）
3. 举例：正整数加上零与加法，整数与加法，整数与乘法（？），实数加法，实数乘法，三角形翻转
4. 作业2.1：三角形沿三个轴翻转的操作的矩阵表示

域：两个协调一致的群

1. 加法运算$+|_{F\otimes F\rightarrow F}$构成交换群
2. 乘法运算$\times|_{F\otimes F\rightarrow F}$在$F/\{0\}$构成交换群
3. 加法和乘法之间满足分配律：$(a+b)\times c=a\times c+b\times c$
4. 举例：实数、复数是，整数不是

比群多一点点的结构：矢量空间

1. 描述对象：事物的状态，例如3维空间的位置，更一般的**可叠加**的状态，可伸长，可计算相似
2. 集合、集合上的群运算——交和并，集合元素的数乘?

比群多一点点的结构：矢量空间

1. 一个域F，数的来源，基础
2. 集合V上定义加法，$F \otimes V$上定义数乘
3. 加法交换群：封闭性，结合律，零元，逆元，交换律
4. 数乘双向线性性：$a \cdot (\mu + \nu) = a \cdot \mu + a \cdot \nu$，$(a + b) \cdot \mu = a \cdot \mu + b \cdot \mu$
5. F上的乘法单位元与V上的运算的统一性$1 \cdot \mu = \mu, \forall \mu \in V$
6. 混合结合律一致性：$(ab)\,\mu = a\,(b\mu)$

矢量空间基本定义运用举例

1. 保持矢量集合与数的集合本身的操作相互协调，例如$0\mu = \underline{0}$，$-1 \cdot \mu = -\mu$，但是不需要额外给出
2. 证明$0\mu = \underline{0}$
3. 证明$-1 \cdot \mu = -\mu$
4. 数学定义的每一条，需要结合实际描述的对象，来了解动机
5. 以及数学理论体系本身的动机
6. 欧氏空间矢量、可微函数的切线、无穷可微函数、平方可积函数
7. 作业2.2：证明几个定理（定理可以来自于任何一本线性代数教科书的相关部分，证明部分不能抄教材），熟悉一下这些基本性质

更多的结构：内积

1. 描述对象：矢量的长度，不同状态之间差别的大小
2. 集合自身的直积集合到数（到自身呢？）的映射
3. 大于等于零
4. 对数乘与加法的操作，线性性
5. 共轭（实数域与复数域上不相同）
6. 内积的另一个意义，矢量和对偶矢量
7. 矢量的另一个意义

右矢与左矢：从记号到内涵

1. 内积，正交归一基矢，抽象记号
2. 右矢与左矢：映射语言
3. 大于等于零
4. 完全性关系

线性算符

1. 定义：封闭性，线性性
2. 抽象记号形式
3. 表象理论，通常线性代数课程学到的形式
4. 共轭算符，厄米算符

本征向量问题

1. 本征向量与本征值，正交性
2. 相容算符集，相容算符完全集，基矢
3. 表象理论，幺正矩阵
4. 实空间与动量空间的微分方程
5. Schrödinger方程的解，二维Hilbert空间的自旋与三维实空间上的自由粒子（无穷维Hilbert空间）
6. 二次型的正规化

线性代数小结

1. 矢量有抽象形式，不需要在特定的表象（也就是某一套固定基矢）下表达
2. 给定表象下，一切都是矩阵，谱展开（抽象的或者表示形式的）跟矩阵完全等价
3. Dirac记号要熟练，我们整合下面所有科目的基础

数值线性代数

1. 矩阵乘法的Strassen算法，分块计算，最合适的块的大小
2. 迭代算法，幂方法，子空间方法
3. 线性系统的解
4. 本征值问题
5. 奇异值问题

数值线性代数软件

1. 矩阵加法、乘法运算(BLAS)
2. 线性方程(Lapack)
3. 本征值问题(Lapack)
4. 以上运算的并行程序(Petsc, Slepc)

BLAS和Lapack

1. 分三层：第一层矢量运算（加法，数乘，内积，长度），第二层矩阵与矢量的运算（矩阵乘以矢量，矢量外积），第三层矩阵运算（矩阵乘法）
2. BLAS的命名规则：S, D, C, Z
3. 从C语言程序调用BLAS，下划线，外部函数申明，C矩阵与Fortran矩阵转化，传地址与传值
4. Lapack基本运算：线性方程的解，最小二乘问题，本征值问题，奇异值问题
5. 延续BLAS的命名规则：SDCZ，矩阵的类型：GE，HE，SY，TR（三角形的），算法类型：例如本征值问题包含简单的（simple driver:：-SV），专家的（expert driver：-EVX），分解与征服（divide-and-conquer: -EVD），鲁棒表象（relatively robust representation -EVR）。举例：ZHEEV，ZHEEVR，ZHEEVX，ZHEEVR
6. 猜如下程序的功能：DGESV，ZGESV，DGESVX，ZGESVX （提示：线性方程）

Petsc和Slepc

1. 并行计算简介，以矩阵加法为例，同样的划分方式把矩阵元素分布在几个计算单元（CPU或者GPU，内存）上，然后同步进行，不用相互等候
2. 矩阵乘法：需要不同计算单元之间相互传递数据，必须要设计合理的算法，降低数据传输量，矩阵非常大的时候不得不并行来满足内存需求
3. Monte Carlo或者分子动力学模拟可以简单地并行化，同时计算多个独立的轨迹
4. MPI，线性系统并行包Petsc（矩阵运算、线性方程组）和Slepc（本征值问题）
5. 幂方法，最大本征值对应的本征向量

课后作业

1. 作业2.3：独立地（不看笔记，不看书或者看完笔记看完书以后）用Dirac记号证明实对称矩阵不同本征值对应着的本征向量相互正交
2. 作业2.4：独立地（不看笔记，不看书或者看完笔记看完书以后）用Dirac记号证明复对称矩阵（Hermitian Matrices）不同本征值对应着的本征向量相互正交
3. 作业2.5：用本征向量、本征值表示矩阵的迹
4. 作业2.6：手动和数值求解二维Pauli Matrices本征值，本征向量，google之
5. 作业2.7：数值求解$N \times N$元素取值$0, 1$之间的随机矩阵的本征值，先做串行计算，后做并行计算，并作图（本征值的分布函数）分析结果
6. 大作业1，专题阅读报告：阅读随机矩阵理论（Random Matrix，google之），实现几种典型高斯随机矩阵（Gaussian ensembles），并用数值方法验证本征值的分布函数公式。（20'+5'，如果口头报告的话）

习题课，大作业并讲解

1. 作业中的典型问题
2. 大作业2：用sage完成矩阵本征值求解，常微分方程（Lorenz吸引子）求解，随机过程（Brownian motion）求解
3. 大作业3：用xmds2完成常微分方程（Lorenz吸引子）求解，随机过程（Brownian motion）求解

补充证明迹不依赖于基矢选择

1. 有$|\mu_i\rangle$和$|\nu_i\rangle$满足$\left\langle \mu_i \mid \mu_j \right\rangle = \delta_{ij} = \left\langle \nu_i \mid \nu_j \right\rangle$并且$I = \sum_i |\nu_i\rangle \langle \nu_i|$
2. 证明：$tr\,(A) = \sum_i \langle \mu_i| A |\mu_i\rangle = \sum_i \langle \nu_i| A |\nu_i\rangle$
3. 证明过程：

$$tr\,(A) = \sum_i \langle \mu_i| A |\mu_i\rangle = \sum_i \langle \mu_i| \sum_l (|\nu_l\rangle \langle \nu_l|)\, A \sum_m (|\nu_m\rangle \langle \nu_m|)\, |\mu_i\rangle\,. \tag{2}$$

概率论提纲

1. 有限简单事件集合上的概率论（古典概型）：简单事件、复合事件、频率与概率、系综的概念，概率论的矩阵表示
2. Dirac δ 函数，Kronecker δ，离散变量和连续变量概率分布函数（概率密度分布函数），累积分布函数
3. 古典概率的问题：圆周上长于圆内接正三角形边长的弦的几率，概率三元体：简单事件集合Ω，事件（集合的子集）$\mathcal{F}$，事件到$[0,1]$的映射P
4. 大数定律（应该是定理）与统计物理学基础
5. 中心极限定理，有限方差随机数，无限方差随机数，随机过程的基础
6. Monte Carlo方法：从均匀随机数产生符合给定分布函数的随机数

古典概型

1. 古典概型：能够找到所有的简单事件，并给每一个简单事件赋予一定的几率，进而运用这些简单事件计算复合事件的几率
2. 离散随机变量与古典概型，离散点集$\Omega = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$，单一事件（或者称为简单事件）记号$X_i \equiv \{x_i\}$，对应着概率$P(X_i) = p_i$，然后任意$\Omega$的子集$A$，都可以定义一个概率（$[0,1]$之间的数）$P(A) = \sum_{j;x_j \in A} p_j$。
3. 离散型古典概型的例子：六面骰子，$\Omega = 1,2,3,4,5,6$，$p_i = \frac{1}{6}$，A可以是例如奇数，则$P(A) = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6}$。随机变量的函数是$f(x)$从$\Omega$到$\mathbb{R}$的映射，例如可以是奇数赢钱偶数输钱1。
4. 我们可以讨论f的期望，方差等统计量，还可以计算f的可能取值的统计分布，计算此例。
5. 更多的例子：均匀六面色子和为7的几率，M盒子放N个球的方式（球可分辨，球不可分辨，盒子能装多个球，盒子只能装一个球）

古典概型，续

1. 连续随机变量与古典概型，连续点集$\Omega = \{\omega\}$，简单事件，记号$\omega \in \Omega$，对应着概率密度$\rho(\omega)$，然后任意Ω的子集A，都可以定义一个概率（$[0,1]$之间的数）$P(A) = \int_{\omega \in A} d\omega \rho(\omega)$。
2. 连续型古典概型（几何概率）的例子：约会等候男女朋友。

古典概型的矩阵形式——Dirac符号表示与Dirac-δ函数

1. 分布函数，密度矩阵
2. 古典概率的矩阵表示：离散点集$\hat{\rho} = \sum_\omega p_\omega |\omega\rangle \langle\omega|$；连续点集$\hat{\rho} = \int d\omega\rho(\omega) |\omega\rangle \langle\omega|$
3. 求平均，以及其他统计量，联合分布，部分积分，部分迹
4. 简单事件之间的内积：离散情形$\langle i | j\rangle = \delta_{ij}$，连续情形$\left\langle x | x' \right\rangle = \delta^{\frac{1}{2}}\left(x, x'\right)$
5. 连续变量分布函数$\rho(x)$，离散变量分布函数（δ函数，θ函数）

古典概型的问题

1. 古典概率的问题：圆周上长于圆内接正三角形边长的弦的几率

概率空间

1. 概率空间：概率三元体$(\Omega, \mathcal{F}, P)$
2. 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$\mathcal{T}$是Ω上的σ代数，满足，$\Omega \in \mathcal{F}$, 对可数个集合的交集封闭，对集合的补集封闭。
3. 从$\mathcal{F}$到$[0, 1]$的映射P，满足
   1. 完全性：
   $$P(\Omega) = 1, \tag{3}$$
   2. 可列可加性：对于可数个不相交的集合（互斥事件，$A_i \cap A_j = \phi$，$\forall A_i, A_j$）
   $$P(\cup_i A_i) = \sum_i P(A_i) \tag{4}$$
4. 为什么定义一般的概率论体系？没有简单事件的概率，没有密度分布函数的概率。在随机过程中，研究这样的更加一般的概率。

概率空间，续

1. 例如$\mathbb{R}$上的正态分布$\rho(x)$，x点的几率没有意义，通常我们会说x点附近dx大小的邻域的概率是$\rho(x)\,dx$。严格地说，这是不对的，dx不是任何有限大小的长度。我们真正能够说的是，对于无论多大的Δx，在x点附近的这样大的区域，概率都有很好的定义那就是

$$\int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} \rho(\xi)\,d\xi. \tag{5}$$

2. 因此，通常的能够用概率密度函数所表达的概率，都能够符合这个一般的体系。
3. 还有更一般的，不能写出实数域上的概率分布函数的概率，这个新的定义可以描述更一般的度量空间上的概率（测度论）。

典型分布与特征函数

1. 高斯分布

$$\rho(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \tag{6}$$

均值0、方差1.

2. 特征函数

$$\phi(s) = \int dx \rho(x) e^{isx} \tag{7}$$

可以证明$|\phi(s)|$是$[0,1]$之间的数。

3. 两个独立随机变量之和得到的随机变量的分布函数的特征函数，等于两个特征函数的乘积：$\phi_2(s) = \phi^2(s)$。

4. 中心极限定理：给定N个独立同分布方差有限的随机变量，这些随机变量取和得到的随机变量，随着N变大，趋向高斯分布。

$$\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu)}{\quad} \longrightarrow N(0,1) \tag{8}$$

中心极限定理

1. 计算两个独立同分布随机数之和的方差，然后正确归一化。
2. 定义从原始随机变量的特征函数，到随机变量取和得到的随机变量的特征函数的映射：$\phi_1 \to \phi_2\left(\sqrt{2}s\right) = \phi_1^2(s)$。
3. 上面这个映射的不动点，稳定性分析。由此证明中心极限定理。
4. 不是完全不动，可以平移，可以缩放，建议google“stable distribution”。
5. 思考，这个映射还有别的不动点吗，方差发散的情形呢？大作业之一。注意：不能抄袭，可以看懂以后用自己的话来表达

条件概率：Bayesian公式

1. 事件A,B条件概率定义为$P(A|B) \triangleq \frac{P(A\cap B)}{P(B)}$。
2. 同时$P(A\cap B) = P(B|A)P(A)$
3. 考虑事件B的几率，$P(B) = P(B|A)P(A) + P\left(B|\bar{A}\right)P\left(\bar{A}\right)$，因此

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B|A)P(A) + P\left(B|\bar{A}\right)P\left(\bar{A}\right)}. \tag{9}$$

4. 这是一个很强大的公式，把条件概率$P(A|B)$的计算转化成了条件概率$P(B|A)$。其推导过程只用了全概率公式，和条件概率的定义。非常平凡。平凡公式有不平凡之处。
5. 人群中看到一个长辫子就判断是女的的正确率。极端的情况，假设男的都不留辫子。假设女的都留辫子呢?

做一个实验

1. 有两个盒子，里面有红色和黑色豆子分别是20 : 30和30 : 20。咱们从这些盒子里面随便先选一个拿来做实验。
2. 每个人从选出来的盒子里抓出来一颗豆子，自己看一下颜色不能被其他人看见，看完之后放回去。然后再黑板上写下来你认为这个盒子里面红豆多（写下来“R”）还是黑豆多（写下来“B”）。
3. 推测正确的人从我这里可以赚走5元，错误的给我1元。
4. 我们来重复5次这个实验。

做一个实验

1. 有两个盒子，里面有红色和黑色豆子分别是20 : 30和30 : 20。咱们从这些盒子里面随便先选一个拿来做实验。
2. 每个人从选出来的盒子里抓出来一颗豆子，自己看一下颜色不能被其他人看见，看完之后放回去。然后再黑板上写下来你认为这个盒子里面红豆多（写下来“R”）还是黑豆多（写下来“B”）。
3. 推测正确的人从我这里可以赚走5元，错误的给我1元。
4. 我们来重复5次这个实验。
5. 现在改一下：有三个盒子，两个红豆多，一个黑豆多。从里面选择一个盒子，咱们再来做实验。

做一个实验

1. 有两个盒子，里面有红色和黑色豆子分别是20 : 30和30 : 20。咱们从这些盒子里面随便先选一个拿来做实验。
2. 每个人从选出来的盒子里抓出来一颗豆子，自己看一下颜色不能被其他人看见，看完之后放回去。然后再黑板上写下来你认为这个盒子里面红豆多（写下来“R”）还是黑豆多（写下来“B”）。
3. 推测正确的人从我这里可以赚走5元，错误的给我1元。
4. 我们来重复5次这个实验。
5. 现在改一下：有三个盒子，两个红豆多，一个黑豆多。从里面选择一个盒子，咱们再来做实验。
6. 你有没有利用其他人的猜想的记录?
7. 前后两个实验你的决策过程有没有变化?

条件概率：Bayesian公式，续

1. 考虑这样一个问题：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呢？
2. 问的是$P(s_w = 1|s = 1)$，我们已经知道$P(s = 1|s_w = 1) = p$。直觉猜还是p，大概来说是这样想的：如果$s_w = 1$那么信号s更可能是1，所以既然信号是$s = 1$则$s_w = 1$的概率更大。在这里，好像我们可以忽略上面的信息q一样。

条件概率：Bayesian公式，续

1. 利用Bayesian公式计算得到

$$
\begin{aligned}
P\left(s_w = 1 | s = 1\right) = \\
\frac{P\left(s = 1 | s_w = 1\right) P\left(s_w = 1\right)}{P\left(s = 1 | s_w = 1\right) P\left(s_w = 1\right) + P\left(s = 1 | s_w = -1\right) P\left(s_w = -1\right)} \\
= \frac{pq}{pq + (1-p)(1-q)}
\end{aligned}
\tag{10}
$$

2. 当$q = 1 - q$的时候，确实$P\left(s_w = 1 | s = 1\right) = p$，否则不然。
3. 这是一个非常常见的统计推断问题，已知信号，未知真值，需要得到真值的统计分布。这个转化条件概率的思路，在这种问题中都会用得着。

条件概率：Bayesian公式，续

1. 作业3.1：假设收到两个信号$s^1=1, s^2=1$，计算$P\left(s_w=1|s^1=1, s^2=1\right)$.
2. 作业3.2：假设收到两个信号$s^1=1, s^2=1$，而且$P\left(s=1|s_w=1\right)=p_{++}\neq P\left(s=-1|s_w=-1\right)=p_{--}$，计算$P\left(s_w=1|s^1=1, s^2=1\right)$.

测量与系综理论

1. 对随机变量的测量
2. 系综理论的思想
3. 真的随机还是信息不完全，我们在乎吗?

经典Monte Carlo方法

1. 积分转化为抽样计算，一般理论，一般方法。给定分布函数$\rho(x)$，我们要计算平均值$A(x)$。显然直接解析或者数值积分是一个办法，另外的办法就是获得一个样本集合$\{x_i\}$，这个集合的统计性质正好就由$\rho(x)$所描述，那么我么就可以直接在这个集合上计算

$$\langle A\rangle = \int dx A(x)\rho(x) = \frac{\sum_i A(x_i)}{\sum_i}. \tag{11}$$

Monte Carlo方法就是利用$[0,1]$之间均匀分布随机数，从给定分布函数获得抽样的方法。

经典Monte Carlo方法，续

1. 一般方法：取[0, 1]之间均匀随机数的集合$\{\xi_i\}$，然后利用累积分布函数的逆函数$F(x) = \int_{-\infty}^{x} d\eta\rho(\eta)$，求得

$$x_i = F^{-1}(\xi_i) \Leftrightarrow \xi_i = F(x_i) \tag{12}$$

证明利用随机变量（这里是ξ）的分布函数与随机变量的函数（这里是x）的分布函数的关系，我们得到

$$\rho(x) = \bar{\rho}(\xi)\frac{d\xi}{dx} = \frac{d\xi}{dx} = \rho(x). \tag{13}$$

这个方法简单直接，但是F和F^{-1}不一定能计算。不过，从思想上来说，很多方法都基于这个一般公式。

2. 例子：离散随机变量的模拟

经典Monte Carlo方法，续

1. 例子：正态分布，

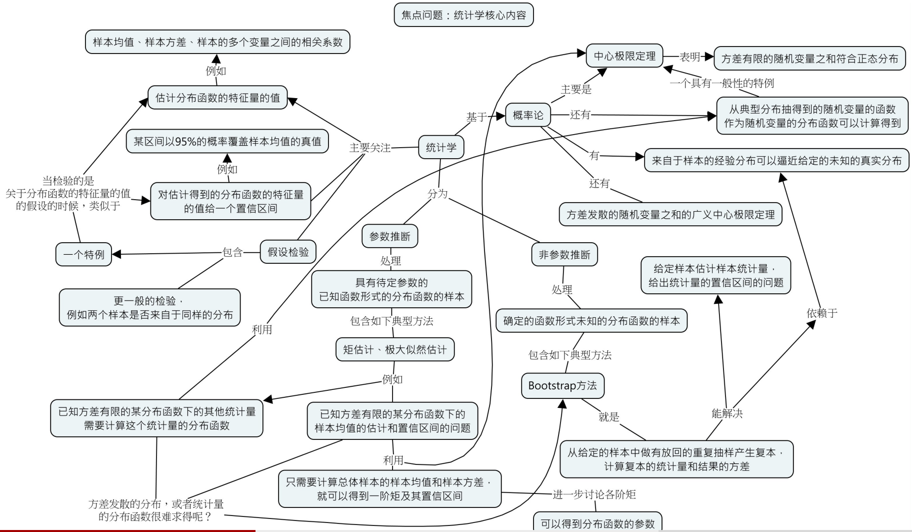
$$\xi_1 = (-2\ln\eta_1)^{\frac{1}{2}}\cos 2\pi\eta_2, \tag{14}$$

$$\xi_2 = (-2\ln\eta_1)^{\frac{1}{2}}\sin 2\pi\eta_2, \tag{15}$$

其中$\eta_{1,2}$是零一之间均匀随机数。或者利用中心极限定理，取k个均匀随机数，计算

$$\xi = \frac{\sum_i \eta_i - \frac{k}{2}}{\sqrt{\frac{k}{12}}}. \tag{16}$$

统计学概貌


焦点问题：统计学核心内容
样本均值、样本方差、样本的多个变量之间的相关系数
例如
估计分布函数的特征量的值
某区间以95%的概率覆盖样本均值的真值
例如
对估计得到的分布函数的特征量
的值给一个置信区间
当检验的是
关于分布函数的特征量的值
的假设的时候，类似于
一个特例
包含
假设检验
更一般的检验，
例如两个样本是否来自于同样的分布
主要关注
统计学
基于
概率论
主要是
中心极限定理
表明
方差有限的随机变量之和符合正态分布
一个具有一般性的特例
还有
从典型分布抽得到的随机变量的函数
作为随机变量的分布函数可以计算得到
有
来自于样本的经验分布可以逼近给定的未知的真实分布
还有
方差发散的随机变量之和的广义中心极限定理
分为
参数推断
处理
具有待定参数的
已知函数形式的分布函数的样本
包含如下典型方法
矩估计、极大似然估计
例如
已知方差有限的某分布函数下的其他统计量
需要计算这个统计量的分布函数
已知方差有限的某分布函数下的
样本均值的估计和置信区间的问题
利用
只需要计算总体样本的样本均值和样本方差，
就可以得到一阶矩及其置信区间
进一步讨论各阶矩
可以得到分布函数的参数
方差发散的分布，或者统计量
的分布函数很难求得呢？
利用
非参数推断
处理
确定的函数形式未知的分布函数的样本
包含如下典型方法
Bootstrap方法
就是
从给定的样本中做有放回的重复抽样产生复本，
计算复本的统计量和结果的方差
能解决
给定样本估计样本统计量，
给出统计量的置信区间的问题
依赖于

课后作业

1. 作业3.3：考虑一个单能级（能量为ϵ）的系统，可以放入任意个数的不可分辨粒子。假设放入n个粒子的几率正比于$e^{-\beta n\epsilon}$，求平均粒子数，写出密度矩阵的表达式
2. 作业3.4：重复以上计算：考虑一个单能级（能量为ϵ）的系统，可以放入最多一个不可分辨粒子。假设放入n个粒子的几率正比于$e^{-\beta n\epsilon}$
3. 作业3.5：重复以上计算（每一个能级上的平均粒子数）：考虑l个能级（能量为ϵ_l）的系统，每一个能级上可以放入任意个数的不可分辨粒子。假设放入n_l个粒子的在第l个能级上的几率正比于$e^{-\beta n_l \epsilon_l}$
4. 作业3.6：重复以上计算：考虑l个能级（能量为ϵ_l）的系统，每一个能级上可以放入最多一个的不可分辨粒子。假设放入n_l个粒子的在第l个能级上的几率正比于$e^{-\beta n_l \epsilon_l}$
5. 作业3.7：计算圆周率，用Monte Carlo方法实现在圆内投点的方法
6. 作业3.8：用Monte Carlo方法实现正态随机数的抽样并检验，与C的标准程序结果对比，均匀随机数可以用C的或者别的（推荐后者）

课后作业，续

1. 作业3.9：用概念地图加上必要的文字来总结你自己对《线性代数》和《概率论》这两部分内容的理解
2. 大作业5：广义中心极限定理，数学理论，在其他学科中的应用，实际应用
3. 课后阅读：All of Statistics（统计学完全教程）, Larry A. Wasserman

习题课

1. 批改以上习题，并讲解难点，10’（两人，每人5’）
2. 报告以上大作业，完成作业20’，口头报告5’

概率论小结

1. 古典概型的Dirac记号表示，简单事件之间的内积
2. 映射语言下的概率论
3. 互斥事件的概率相加（线性性）
4. 特征函数与中心极限定理
5. Bayesian公式
6. 随机变量的测量
7. Monte Carlo方法
8. 统计学研究的基本问题和整体框架

经典力学部分的目的

1. 复习或者学习经典力学（Newtonian，Lagrangian, Hamiltonian）为后续课程做准备
2. 了解一点什么是物理学，并且联系《概论》部分关于“什么是科学”的讨论
3. 梳理力学的概念和理论体系，尤其是关于“力”的定义

物理学的基本思想

1. 物理学所研究的基本问题：一个东西的状态怎么描述，会变化吗，有什么规律；再问这个变化产生的原因是什么，怎么在这个原因和结果之间建立定量的联系
2. 了解了这个现象之后，对这个现象本身的理解和掌控有什么帮助，在这个问题上提炼出来的认识问题的方法有没有一般的意义，得到的知识有没有一般的意义
3. 物理学的核心思想就是力学

物理学的基本思想，举例

1. 例如万有引力和牛顿定律，对统一性的追求
2. 首先，我们的直觉告诉我们“力是产生和维持运动的原因”（Aristotle，没有数学模型，状态的概念已经有但尚不明确），但是力学的思想已经在了
3. 可惜没有考虑做系统性实验和抽象理想模型
4. Galileo斜面实验告诉我们没有力运动也能维持；进一步说明力的作用是使得运动状态发生变化

物理学的基本思想，举例，续

1. 同时，从Tycho的观察和Kepler的计算，Newton知道天梯的运动状态在改变，有力？
2. 微分计算的发明使得牛顿定律的猜想加上平方反比的引力能够推出来天体运动规律
3. 顺便：为了突出“数学作为语言”，一会儿给一个例子
4. 这里有从地上到天上的推广
5. 接着，Newton反过来推广天体引力到万有引力

什么是物理学

1. “物理世界”的可计算可证伪的心智模型
2. 实验和观察
3. 理想模型，可以进一步统一和改进
4. 数学作为定律的形式和思考的语言
5. 思辨和批判性也很重要

几个补充的地方

1. $\vec{F}=m\vec{a}$加上具体的“力”就可以理解各种运动，甚至做出预测。
2. 力学不给出具体的力。
3. 数学计算的威力，语言和思考

$$\frac{d^2\vec{x_{0p}}}{dt^2}=\frac{d^2\left\{\vec{x_{01}}+\vec{x_{1p}}\right\}}{dt^2}=\frac{d^2\vec{x_{01}}}{dt^2}+\frac{d^2\vec{x_{1p}}}{dt^2}$$

$$F_p=F_0-\frac{d^2\vec{x_{01}}}{dt^2}.$$

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}=\frac{d^2r\hat{r}}{dt^2}=\frac{d}{dt}\left(\frac{dr\hat{r}}{dt}\right)$$

$$\frac{dr\hat{r}}{dt}=\frac{dr}{dt}\hat{r}+r\frac{d\hat{r}}{dt}$$

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}=\frac{d^2r}{dt^2}\hat{r}+2\frac{dr}{dt}\frac{d\hat{r}}{dt}+r\frac{d^2\hat{r}}{dt^2} \tag{17}$$

物理学的分类

1. 物理学分为方法论性的和有关具体研究系统的知识性的两种学科
2. 经典力学、量子力学、统计力学、狭义相对论，一般方法论为重点
3. 电动力学、广义相对论，具体知识为重点
4. 在这里，我们主要学习经典力学、量子力学、统计力学

力学提纲

1. 牛顿力学
2. 力学系统的状态，位形空间、相空间
3. 从有力到没有力的力学：能量函数、相互作用
4. Hamiltonian力学，Lagrangian力学

牛顿力学

1. 牛顿力学：微观状态（$x, \dot{x}, \ddot{x}$位形空间）与演化方程

$$\vec{F} = m\vec{a}. \tag{18}$$

举例：自由落体，简谐振子

$$m\ddot{z} = -mg \text{ and } m\ddot{x} = -kx \tag{19}$$

初始条件$x(0), \dot{x}(0)$，唯一确定了方程的解。需要做受力分析。考虑单摆的独特的受力分析。

2. 一个一般的力学系统：微观状态（p, q或者$x, \dot{x}$）与微观状态的演化方程

$$\frac{d}{dt}q = \frac{p}{m} \tag{20}$$

$$\frac{d}{dt}p = f(q, p, t) \tag{21}$$

一般我们假设自治系统：$f(q, p, t) = f(q, p)$和保守系统，系统内部有势力的相互作用：$f = -\nabla V$，也就是只有q的函数。

力学基本概念

1. 运动学：参考系与坐标系，位置坐标，速度，加速度，动量，能量，角动量，时间（芝诺佯谬，Zeno's paradoxes，《力学概论》P10），空间
2. 动力学：力（什么是力？$F = ma$是定律吗，或者定理？Feynman《Feynman物理学讲义第一卷》或者漆安慎《力学》），相互作用，运动方程，初始条件，解的存在唯一性
3. 牛顿（Newton）时空观与相对速度：《力学概论》P64
4. 因果律

从牛顿力学到Hamiltonian力学

1. 在这种情况下

$$\frac{d^2}{dt^2}mq + \nabla V = 0 \Rightarrow \dot{q}\left(\frac{d}{dt}m\dot{q} + \nabla V\right) = 0$$
$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V\right) = 0 \tag{22}$$

也就是$\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V = const.$ 鉴于这个常数非常普遍，我们取一个名字：能量（H）

2. 与牛顿方程**等价**的哈密顿方程，相空间（变量q, p）：

$$\frac{d}{dt}q = \frac{\partial H}{\partial p}$$
$$\frac{d}{dt}p = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{23}$$

3. 相空间的好处：轨道不相交，一个点唯一确定一条轨道。与位形空间中的轨迹不同。

Hamiltonian力学

1. 直接从Hamiltonian出发，单体

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V^{ext}(q) \tag{24}$$

多体

$$H = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_i^{ext}(q_i) \right) + \sum_{ij} V_{ij}(q_i, q_j) . \tag{25}$$

利用Hamilton方程得到

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{d}{dt} p_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \tag{26}$$

方程的推导下一节再说。

2. 举例：单摆、平面摆（单摆加上水平运动的悬挂点，朗道，《力学》，P11）的运动

从牛顿力学到Lagrangian力学

1. 另一个与牛顿方程等价的方程：拉格朗日方程$L = T - V$，以单粒子系统为例

$$L = \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q). \tag{27}$$

力学方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta \dot{q}} - \frac{\delta L}{\delta q} = 0. \tag{28}$$

多粒子系统简单推广即可，

$$L = \sum_i \left(\frac{m\dot{q}_i^2}{2} - V_i^{ext}(q_i) \right) - \sum_{ij} V_{ij}(q_i, q_j). \tag{29}$$

2. 举例：单摆、平面摆

Lagrangian力学，最小作用量原理

1. 从最小作用量原理导出运动方程

$$S = \int_{t_i}^{t_f} d\tau L(\tau) \tag{30}$$

2. 设确定的初始和结束位置：$q(t_i) = q_i, q(t_i) = q_f$，在经典轨道上作用量$S$取极小值。记经典轨道维$q^*(\tau)$，我们要找到$q^*(\tau)$满足的方程。记围绕经典轨道的微扰为$\delta q(\tau)$

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left(\frac{\delta L}{\delta q} \delta q(\tau) + \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \delta \dot{q}(\tau) \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau \left[\frac{\delta L}{\delta q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \right) \right] \delta q(\tau) \end{aligned} \tag{31}$$

Lagrangian力学，最小作用量原理，续

1. 由此，我们得到动力学方程

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\delta L}{\delta \dot{q}}\right)=\frac{\delta L}{\delta q} \tag{32}$$

对于我们的单粒子系统，这个方程成为牛顿方程

从Lagrangian方程到Hamilton方程

1. 从$L(q,\dot{q},t)$到$H(q,p,t)$，其中$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$。自变量发生了变化，函数也发生了变化$H=p\dot{q}-L$，我们希望找到等价的方程。
2. 考虑H的全微分，

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial q}dq+\frac{\partial H}{\partial p}dp &= dH = d(p\dot{q})-dL \\
= d(p\dot{q})-\frac{\partial L}{\partial q}dq-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} &= d(p\dot{q})-\dot{p}dq-pd\dot{q} \\
&= -\dot{p}dq+\dot{q}dp \qquad (33)
\end{aligned}
$$

于是

$$\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q} \qquad (34)$$

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p} \qquad (35)$$

例题：已知Hamiltonian就知道一切

1. 自由粒子的Hamiltonian，运动方程，初始条件，过去与将来
2. 一个谐振子的Hamiltonian，运动方程，初始条件，过去与将来
3. 作业4.3：两个耦合谐振子的Hamiltonian，运动方程，初始条件，过去与将来
4. 长时行为、系综（多个假想的独立的系统合起来看，实际测量的理想模型）行为与分布函数
5. 已知Lagrangian也就知道一切

举例与作业

1. 例题：平面双摆，朗道，《力学》，P10，Hamiltonian 和Lagrangian，运动方程
2. 例题：N个耦合谐振子系统，$L=\sum_{j=0}^{N}\left[\frac{m}{2}\dot{q}_j^2-\frac{k}{2}\left(q_j-q_{j+1}\right)^2\right]$，其中$q_0=q_{N+1}=0$（Kerson Huang 《量子场论：从算符到路径积分》P1）。正则动量，正则坐标。对于$N=2$，给定初始条件，求解轨道
3. 作业4.1：转摆朗道，《力学》，P11，习题4，Hamiltonian 和Lagrangian，运动方程。自己设定初始条件，求解轨道。推荐Runge-Kutta方法，需要的话可以用maple、matlab等做对比。
4. 作业4.2：N个耦合谐振子系统，对于$N=10$，Hamiltonian 和Lagrangian，运动方程。自己设定初始条件，求解轨道。推荐Runge-Kutta方法，需要的话可以用maple、matlab等做对比。

统计力学：提纲与绪论

1. 要求的基础：力学（经典与量子），概率论，Monte Carlo方法
2. 内容：从力学变量到分布函数，再到状态变量；统计物理学的基本问题；系综理论；相变；Metropolis方法
3. 实例：理想气体、谐振子、Ising模型

从力学系统到统计力学系统：从微观到宏观

1. 从力学的角度来解决问题，宏观状态量A

$$\langle A(t) \rangle = tr\left(A\rho(t)\right) = \int dqdpA(q,p)\,\rho(q,p,t)\,. \tag{36}$$

2. 问题：q,p很多很多的时候，不依赖于特定初始条件的时候，怎么办?

从力学系统到统计力学系统：Liouville定理

1. 从微观状态$q(t),p(t)$到分布函数$\rho(q(t),p(t))$（自治系统，本身不显含t），

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial p}\frac{dp}{dt} \\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial\rho}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} \\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t} + \{H,\rho\} \end{aligned} \tag{37}$$

2. 连续性方程$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\cdot\left(\rho\vec{v}\right) = 0$ 因此

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial p}\left(\rho\dot{p}\right) + \frac{\partial}{\partial q}\left(\rho\dot{q}\right) = -\{H,\rho\} \tag{38}$$

于是，

$$\frac{d}{dt}\rho = 0. \tag{39}$$

线性方程

1. 线性微分方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\{H,\rho\} = L\rho \tag{40}$$

2. 其解

$$\rho(t) = e^{-Lt}\rho(0) \tag{41}$$

3. 可逆

$$\rho(0) = e^{Lt}\rho(t) \tag{42}$$

平衡态

1. 如果我们能够测量和计算整个系统（例如全宇宙）的ρ，那么我们就知道了一切。然而，第一能不能测？第二，就算能测，能不能描述下面的系统：平衡态？
2. 什么是平衡态？杯子里面的水，什么原因导致趋向平衡态？
3. 破碎的碗怎么没有见过合起来？
4. 结构从没有结构中产生？

系综理论

1. 微观状态$q(t),p(t)$在相空间中的动力学运动，依赖于初始条件，可逆，没有稳态。例子，理想气体、单个谐振子，两个耦合谐振子
2. 平衡态，封闭系统，孤立系统，开放系统，态的宏观性质不变
3. 遍历性假说+Liouville定理：微正则假设：等能面上的各个微观状态几率相同
4. 从微正则到正则系综（其实还有巨正则系综）：$\rho(\epsilon)=\Omega\left(E^T-\epsilon\right)$，$\Omega(E)$的形式

系综理论

1. 简单系统的系综理论的计算：态密度，理想气体，单个谐振子，两个耦合谐振子，能均分定理
2. 从动力学到统计力学，从微观到宏观，统计力学的最终问题，从非平衡到平衡

热力学（没学过没关系）

- 目标：从$H=\frac{p^2}{2m}$（理想气体）到$PV=Nk_BT$，$U=\frac{q}{2}Nk_BT$以及热力学定律$TdS=dU+PdV$。
- 首先，我们从统计物理学来计算熵，

$$S=-k_B\langle\ln\rho\rangle=-k_B\langle-\beta H-\ln Z\rangle=\frac{U}{T}+k_B\ln Z \tag{43}$$

定义一个新的物理量，自由能$F=U-TS$，我们得到

$$F=-k_BT\ln Z \tag{44}$$

- 其次，我们从热力学第二定律开始了解一下自由能，

$$\begin{aligned} TdS=dU+PdV &\Rightarrow d(U-TS)+SdT=-PdV \\ &\Rightarrow dF=-PdV-SdT \end{aligned} \tag{45}$$

因此，

$$P=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right) \tag{46}$$

热力学，续

- 接着，我们看一看能不能直接从统计物理学得到P的上述定义。压强是体积的对偶量，也就是说PV差不多相当于能量。一个类似的关系是力与距离，Fx大约是能量。如果系统的哈密顿量中出现了形式如$H = Fx$的项，而我们想求得$\langle F \rangle$，那么可以想见我们要计算形如$\frac{\partial \ln Z}{\partial x}$。因此，压强的定义就是

$$P = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \tag{47}$$

在这个偏微分的计算中，我们把系统的其他参量m, β等等当成常量。我们之所以这么做是按照前面热力学公式的提示。

系综理论，举例

- 现在我们要从哈密顿量出发推导出一切：内能，熵，自由能，压强，热力学定律
- 首先计算配分函数，利用N个气体分子的配分函数Z_N是单个气体配分函数的乘积$Z_N = Z^N$，

$$Z = \int dxdpe^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = V \int dpDp^{q-1} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}, \tag{48}$$

其中Dp^{q-1}是q维球的面积。引入变量代换$\xi = p\sqrt{\frac{\beta}{2m}}$，我们得到

$$Z = VD\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{q}{2}} \int d\xi \xi^{q-1} e^{-\xi^2} = V\bar{D}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{q}{2}}. \tag{49}$$

- 于是

$$U = -\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \beta} = N\frac{q}{2\beta} = \frac{q}{2}Nk_BT. \tag{50}$$

系综理论，举例，续

- 压强

$$P = -k_B T \frac{\partial \ln Z_N}{\partial V} = N \frac{1}{V} k_B T. \tag{51}$$

- 自由能

$$F = -k_B T \ln Z_N = -N k_B T \ln\left(V \bar{D}\right) - N k_B T \frac{q}{2} \ln 2m - N k_B T \frac{q}{2} \ln k_B T. \tag{52}$$

- 熵

$$S = \frac{U - F}{T}. \tag{53}$$

- 现在我们代入热力学定律来做个检验，

$$\begin{aligned} TdS &= Td\frac{U}{T} - Td\frac{F}{T} = Td\left(N k_B \ln V + N k_B \frac{q}{2} \ln k_B T\right) \\ &= \frac{N k_B T}{V} dV + N k_B \frac{q}{2} dT = PdV + dU. \end{aligned} \tag{54}$$

作业

1. 作业5.1：二维理想气体的统计力学：给定温度和总粒子数下计算内能、熵、压强（正则系综）
2. 作业5.2：单个量子谐振子的统计力学：给定温度下计算内能、熵、每一个能级上的平均粒子数，平均总粒子数（正则系综，谐振子能级能量$E_l = \left(l + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$）
3. 作业5.3：一维链上2个耦合谐振子的统计力学：给定温度下计算内能、熵（正则系综，相当于2个频率不同的独立的谐振子，频率需要通过经典力学先算出来，也就是通过坐标变化把耦合系统的Hamiltonian变成独立系统的Hamiltonian。独立之后就简单了。）
4. 作业5.4：两个能量分别为ϵ_1和ϵ_2的能级，给定温度和总粒子数下计算内能、熵（正则系综），给定温度和化学势下计算内能、熵（巨正则系综）（提示：最关键的问题是思考状态到底是什么。）

混合系统的熵

- 计算一个盒子的气体在体积为V与2V的熵，其他状态参量温度、粒子质量，粒子数都一样

$$\Delta S = Nk_B \ln 2, \tag{55}$$

统计力学计算与热力学计算都一样。

- 计算两个一样大的盒子，中间隔板抽掉前后的熵的变化，其他状态参量温度、粒子质量都一样

$$\Delta S = 2Nk_B \ln 2, \tag{56}$$

按照前面的计算结果。那假想我们把“隔板”再插回去，注意这时候的隔板是假的，按照我们的计算熵应该再降回来，可是我们什么也没做呀。而且，完全一样的粒子，前后状态没有变化，为什么熵增加?

混合系统的熵，续

我们来看看问题在哪里

- 记初状态半个盒子的熵为S_0，末状态的熵为

$$S_f = 2S_0 + 2\left(Nk_B \ln 2V - Nk_B \ln V\right), \tag{57}$$

后一项应该为零，但是计算结果不是零。所以，肯定是S的表达式错了。错在哪里?
在分布函数和配分函数的定义中引入全同粒子的考虑：（考虑了全同性以后宏观状态对应的微观状态数不一样）

$$Z = \frac{1}{N!}\int dxdpe^{-\beta H}. \tag{58}$$

这会改变自由能的表达式，并因此也改变熵的表达式，具体来说，就是要减去$Nk_B \ln N$。这样初状态的熵就成了

$$\begin{aligned} S_0^T &= 2S_0 - 2Nk_B \ln N, \\ S_f^T &= S_f - 2Nk_B \ln 2N \\ &= 2S_0 + 2Nk_B \ln 2 - 2Nk_B \ln 2 - 2Nk_B \ln N = S_0^T \end{aligned} \tag{59}$$

合系统的熵，续

1. 问题看起来是解决了。那么是不是统计力学的基本公式改成$Z=\frac{1}{N!}\int dxdpe^{-\beta H}$了呢，还是继续用$Z=\int dxdpe^{-\beta H}$？

单个测量和系统平均

1. 系综理论的背后假设了无穷多个一模一样的系统，实际测量结果是大量的这样的平均
2. 实际上，每一次我们的测量都在单个的系统上，怎么理解
3. 微观无穷小和宏观无穷小的区别，例如压强温度的测量

系综理论的相关计算

1. 系综理论的计算问题：无相互作用多体系统$Z_N = Z^N$，相互作用多体系统，有的看起来有相互作用的系统经过表象变换成为无相互作用系统（例如一维自旋系统的Jordan - Wigner变换，有的二维系统也可以用，还有Kiteav模型）
2. 场论多体技术，Green函数，Feynman图展开，动理学方程，BBGKY与集团展开，随机过程，主方程，速率方程，Langevin（朗之万）方程，重整化群方法，密度矩阵重整化，经典与量子Monte Carlo方法
3. Monte Carlo方法：随机分布的抽样，积分转化为抽样计算，一般理论，一般方法
4. Ising模型，Metropolis方法，主方程
5. 相变，临界点，相变的物理图像与重整化群的思想与简单例子
6. 统计物理的模型、技术与思想在物理学之外的应用，多个体相互作用的系统

经典Monte Carlo方法与统计物理学

1. Monte Carlo方法，取得一个给定分布函数的样本，从而

$$\langle A\rangle = \int dx A(x)\rho(x) = \frac{\sum_i A(x_i)}{\sum_i}. \tag{60}$$

2. 统计物理学平衡态分布函数与Metropolis方法。处于平衡态的系统符合Boltzmann分布，能不能获得这个分布函数的样本，

$$\rho = \frac{1}{Z}e^{-\beta H}, \tag{61}$$

Metropolis：统计力学中的Monte Carlo方法

1. 要获得状态分布函数的抽样

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \tag{62}$$

配分函数Z是一个非常难以计算的量。要避开Z的计算。

2. 考虑一个L个离散状态$\{l\}$（对应能量E_l）的系统，我们要得到其平衡分布的样本。我们现在构造一个分布函数的动力学过程，让它的末状态（长时演化以后的样本）正好就是平衡分布。

3. 分布函数$\{P_l(t)\}$，离散（也可以写成连续的形式）演化动力学

$$P_l(t+1) - P_l(t) = \sum_{m \neq l} \left[P_m(t) w_{m \to l} - P_l(t) w_{l \to m} \right] \tag{63}$$

Metropolis方法，续

1. 一个充分的（不一定必要）稳定条件——细致平衡：

$$0 = P_m(\infty)\, w_{m\to l} - P_l(\infty)\, w_{l\to m} \tag{64}$$

也就是说，

$$\frac{w_{m\to l}}{w_{l\to m}} = \frac{P_l}{P_m} = \frac{e^{-\beta E_l}}{e^{-\beta E_m}} \tag{65}$$

2. 一个满足要求的$w_{l\to m}$的选择：

$$w_{m\to l} = \frac{e^{-\beta(E_l - E_m)}}{\sum_n e^{-\beta(E_n - E_m)}} = \frac{e^{-\beta E_l}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \frac{e^{-\beta E_l}}{Z}. \tag{66}$$

这个选择却是满足细致平衡，但是，我们还是要计算Z，没有用。

Metropolis方法，续

1. 在$w_{m\to n}$中只考虑很小的一部分的状态n，而不是所有的状态，这样就避免了对所有的状态取和求Z的问题。
2. Metropolis方法，取m的一个近邻状态（在具体问题上可以定义“近邻”的具体含义）l，计算能量差$\Delta E = E_l - E_m$，

$$w_{m\to l} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E}, & \text{if } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{if } \Delta E \leq 0 \end{cases} \tag{67}$$

可以验算这个选择满足细致平衡。

3. 另一个常用的选择

$$w_{m\to l} = \frac{1}{e^{\beta\Delta E} + 1} \tag{68}$$

可以验算这个也选择满足细致平衡。

Metropolis方法，续

1. 仔细体会如何避免Z的计算又能够得到分布函数的
2. 还有很多别的选择。参阅M. Newman, Monte Carlo Methods in Statistical Physics，或者P. Young, Monte Carlo simulations in statistical physics。我们也会在Ising模型中再讲一个。

Ising模型与Metropolis方法

1. Ising模型，经典自旋，取值$S_i = \pm 1$

$$H = -\sum_{j=0}^{N-1} J_j S_j S_{j+1}, \tag{69}$$

其中$J_N = J_0$周期边条件，J_j可以不同，但是在我们以下的计算中取相同。

2. Ising模型的统计物理，

$$Z = \sum_{\vec{S}} e^{\beta J \sum_j S_j S_{j+1}}, \tag{70}$$

其中求和要遍历2^N个状态$\vec{S}$。

Ising模型与Metropolis方法，续

1. 从某一状态$\vec{S}_0$出发，随机或者顺序选取一个自旋S_l
2. 对自旋S_l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

Ising模型与Metropolis方法，续

1. 其中的第三步可以替换成：按照$\frac{1}{e^{\beta\Delta E}+1}$来抽样
2. 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

$$\begin{cases} \frac{e^{-\beta\Delta E_{\uparrow}}}{e^{-\beta\Delta E_{\uparrow}}+e^{-\beta\Delta E_{\downarrow}}} = \frac{e^{\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}}{e^{\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}+e^{-\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}} & \text{取} \uparrow \\ \frac{e^{-\beta\Delta E_{\downarrow}}}{e^{-\beta\Delta E_{\uparrow}}+e^{-\beta\Delta E_{\downarrow}}} = \frac{e^{-\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}}{e^{\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}+e^{-\beta\left(S_{l-1}+S_{l+1}\right)}} & \text{取} \downarrow \end{cases} \tag{71}$$

Ising模型与Metropolis方法，续

1. 从化简的表达式我们发现，这与S_l的初状态实际上没有关系。
2. 作业5.5：按照这个方法（Motropolis、ΔE公式，新公式任何一个），写出一维Ising模型的Monte Carlo模拟程序，并计算$M = \langle S \rangle$随着温度、系统大小变化而产生的变化
3. 作业5.6：二维或者三维Ising模型，计算并计算$M = \langle S \rangle$随着温度、系统大小变化而产生的变化

相变与临界现象简介：以后有专门课程

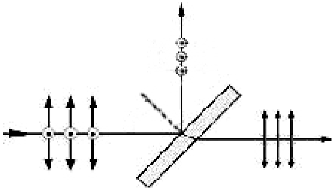
1. 相变，临界点、临界指数
2. 平均场理论，等价的几个方法
3. 重整化群
4. 统计物理学中的随机过程，随机微分方程，主方程
5. 渗流与生成函数方法
6. 关联系数、Green函数方法

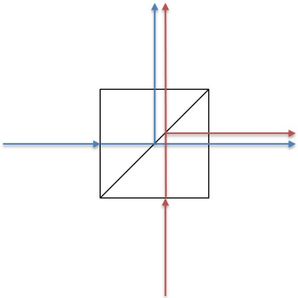
量子力学基本概念

1. 波函数、密度矩阵、算符
2. 态、物理量、测量
3. 实验：单电子干涉实验、单光子偏振实验（偏振分波器）、电子自旋的Stern–Gerlach实验
4. 演化方程
5. 不可克隆定理（Non-cloning Theorem）、量子远程传输（Quantum Teleportation）
6. 参考书：R. Feynman，Feynman物理学讲义；喀兴林，高等量子力学

背景物理知识：光子的偏振与偏振分光器

1. 偏振分波器





2. 偏振的数学描述，二维矢量；

$$\vec{E} = E_H \hat{H} + E_V \hat{V} \tag{72}$$

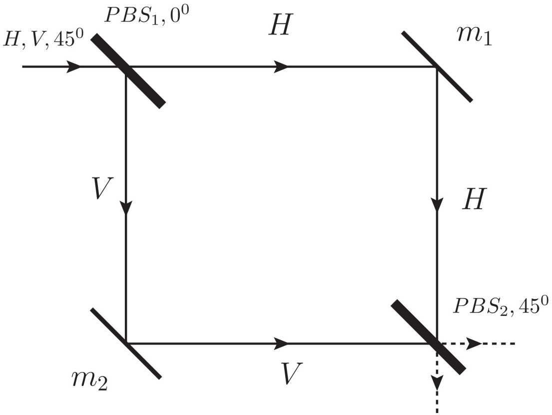
3. 线偏振光子过偏振片（$\hat{r}$方向半反半透镜）的多粒子概率性图景：二维矢量在偏振方向上的分解，水平分量强度 $E_H = \vec{E} \cdot \hat{r}$，另一个是竖直分量$E_V$

豆子和绳子过三道门和光过三篇偏振片

1. 豆子三道门的描述和预测，为什么
2. 绳子上的波过三个狭缝
3. 光过一片和两片偏振片的演示
4. 光过三个偏振片的描述和预测
5. 光过三个偏振片的结果和讨论

展开，单光子which-way实验

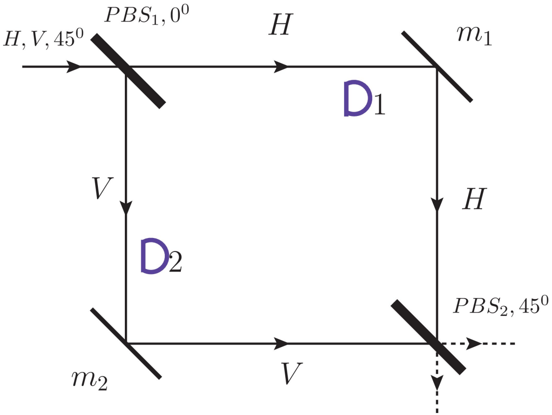
1. 实验装置



2. 问观测到几个方向上的输出？
3. 多光子图景，部分与部分相干，相互抵消，但是单光子呢？经典波性加上概率性叠加

展开，单光子which-way实验加上路径探测器

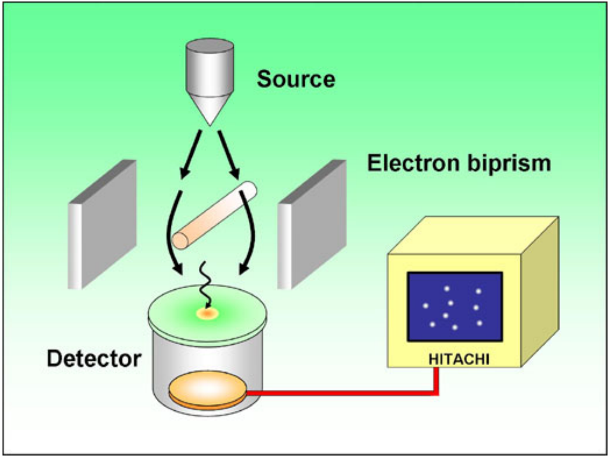
1. 实验装置



2. 问观测到几个方向上的输出?
3. 以后会教大家怎么算（将来主要教大家怎么算），这里给出结果：

双缝干涉实验

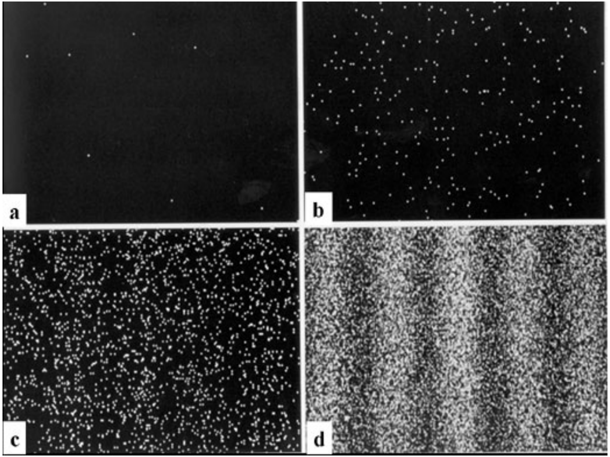
1. 实验装置



单电子过一个很窄的障碍物，打到屏幕上，然后位置信息转化成电信号

双缝干涉实验，续

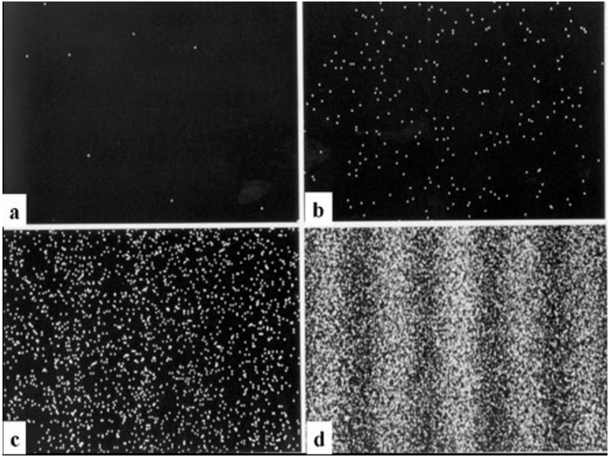
1. 实验记录录像



注意：电子一个一个的出射，一个一个的捕获

双缝干涉实验，续

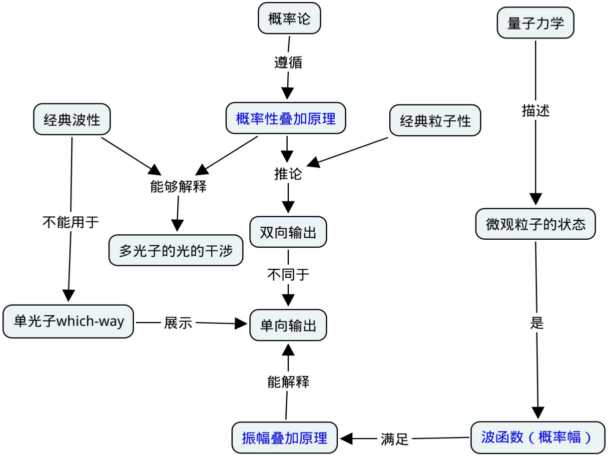
1. 录像截图



观察到干涉图样，试想打开一个缝会怎样？

小结：概念地图形式

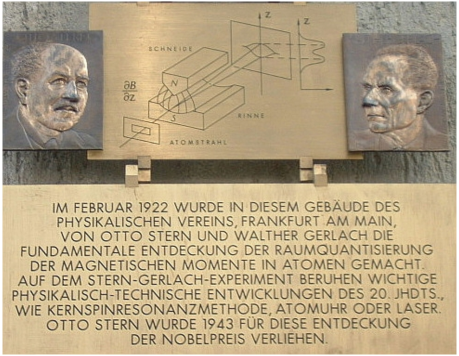
1. 本节课主体内容，相关概念以及概念之间的关系



2. 光子（电子）既是粒子又是波，既不是粒子也不是波，由概率幅的态叠加原理所描述

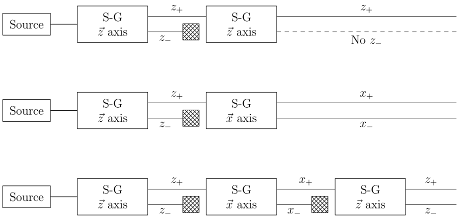
电子的自旋状态：Stern-Gerlach实验的变体

1. Stern-Gerlach装置：一个能够使电子按照某种内部方向分开其轨迹的仪器



电子的自旋状态：Stern-Gerlach实验的变体，续

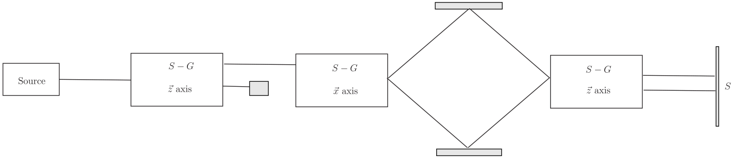
1. 现在让我们把一个出射口挡住，然后再问出来的电子的方向



2. 这里的电子的内部方向状态的三个方向之间存在着一些联系，不是很简单的联系

电子的自旋状态：Stern-Gerlach实验的变体，续

1. 假设我们把以上的实验当作事实，先接受，然后我们来做一个一个电子的which-way理想实验：把x正方向的电子拿过来，通过z方向的装置，然后再合起来，接着通过x方向的装置，问：屏幕上一个斑点还是两个?



2. 思考经典概率的情形

量子客体的数学模型的要求

1. 要求：表象变换（对同一个东西可以在各各不同的方向做测量），概率性测量结果
2. 确定性的系统不行
3. 经典随机性（密度分布函数）的系统不行
4. 有一种可能：密度矩阵
5. 还有别的可能，更复杂，物理学家不喜欢，科学也不喜欢，除非别的实验要求非这样不可

针对自旋的配方

1. 仪器（某方向的磁场）对应着一个算符（$\sigma_r = \hat{r} \cdot \vec{\sigma}$）
2. 经过这个仪器之后从其上下方向出来的自旋的状态是相应的算符的上下本征态$|\uparrow_{\hat{r}}\rangle, |\downarrow_{\hat{r}}\rangle$
3. 经过某方向$\hat{r}_m$测量仪器以后做投影：

$$\begin{aligned} P_{\uparrow_m} &= |\langle\uparrow_{\hat{r}}|\,\psi\rangle|^2 \\ &= \langle\uparrow_{\hat{r}}|\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)|\uparrow_{\hat{r}}\rangle \\ &= tr\left(|\uparrow_{\hat{r}}\rangle\langle\uparrow_{\hat{r}}|\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)\right) \\ &= tr\left(\hat{P}_{\uparrow_m}\hat{\rho}\right) \end{aligned} \tag{74}$$

   其中$\hat{P}_{\uparrow_m} = |\uparrow_{\hat{r}}\rangle\langle\uparrow_{\hat{r}}|$，$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$。
4. 光子实验的配方就不重复了，关键就是算符、算符的本征态、测量就是计算$P_\alpha = tr\left(\hat{P}_\alpha\hat{\rho}\right)$、测量后状态

实验现象和初步模型的小结

1. 按照“要么，要么”得到的推理结果和实验不相符
2. 加了探测器能够知道到底走哪条路之后结果就变了（一会儿会用模型和数学语言来解释）
3. “波”的矢量分解和合成能够给出正确的结果
4. 但是，“经典波”一般用于振动状态的传播，或者一群粒子的行为，它们会分开两（多个）部分再合起来
5. 单个粒子的实验不符合经典波的图景
6. 模型：让单个粒子的行为符合矢量叠加，例如

$$|\psi\rangle = |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle . \tag{75}$$

7. 针对自旋的配方：实验仪器是算符、算符的本征态、测量就是计算概率——系统状态处于某本征态的几率、测量之后系统处于测量得到的状态

剩下两个问题

1. 这样一套数学模型是多么难以理解
2. 量子系统的演化：状态变化，变化的原因，数学模型
3. 顺便还有部分迹的问题

态、物理量与测量

1. 物理学家总是假设一个客观的态的存在，测量之前，它的存在性和状态不依赖于物理学家所作的测量，是否测量
2. 当然，测量之后，它的状态可以根据测量结果的不同而不同
3. 测量预期的物理量需要相应的仪器，不同的物理量可能要求不同的仪器
4. 把仪器作用于状态，会产生一个测量结果，可以记录下来
5. 测量一个硬币的重量，测量一个完全随机的硬币（假设有这样的硬币）的正面值，测量一个量子自旋（Stern–Gerlach实验，制备的方向与测量的方向可以不同）

经典态的测量

1. 确定性经典态：一个硬币的重量在某一时刻，没有测量之前不知道（为简单计，假设只有两个可能的重量），但是肯定是一个确定值例如1，也就是说$\hat{\rho}^{cD}=\sum_{x=1,2}\delta_{x,1}|x\rangle\langle x|$
2. 一个完全随机的色子的正面值，没有测量之前不知道，但不是一个确定值而是±1之一，也就是说$\hat{\rho}^{cR}=p_{+}|+\rangle\langle +|+p_{-}|-\rangle\langle -|$
3. 重量测量仪器，计算其中某状态1的几率，$P_{1}=tr\left(|1\rangle\langle 1|\hat{\rho}^{cD}\right)=1$，测量得到结果是确定的1，测量之后，系统还是处于1态
4. 正反面测量仪器，计算其中某状态$+1$的几率，$P_{+1}=tr\left(|+\rangle\langle +|\hat{\rho}^{cR}\right)=p_{+}$，测量得到结果可能是±1中的一个，按照$p_{\pm}$的几率，测量之后，系统要么处于$+1$态，要么处于$-1$态
5. 这个时候系统的状态改变了吗？测量前后

量子态的测量

1. 一个x方向向上态的自旋，没有测量之前状态是$\hat{\rho}^{q} = |+\rangle\langle+| = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\right)\left(\langle\uparrow| + \langle\downarrow|\right)$
2. x方向正反面测量仪器，简单
3. z方向正反面测量仪器，计算其中某状态$\uparrow_{z}$的几率，$P_{\uparrow_{z}} = tr\left(|\uparrow_{z}\rangle\langle\uparrow_{z}|\hat{\rho}^{q}\right) = \frac{1}{2}$，测量得到结果可能是$\uparrow, \downarrow$中的一个，按照$\frac{1}{2}$的几率，测量之后，系统要么处于$\uparrow$态，要么处于$\downarrow$态
4. 这个时候系统的状态改变了吗？测量前后
5. 怎么理解？一会联系演化之后再次来思考

测量中的部分迹，经典

1. 联合分布函数：用一个大硬币（例如你的眼睛）来测一个小硬币，$\rho^{cm} = p_+ \left|++\right\rangle\left\langle++\right| + p_- \left|--\right\rangle\left\langle--\right|$
2. 边缘分布函数：积分掉小硬币，$\hat{\rho}^{m} = p_+ \left|+\right\rangle\left\langle+\right| + p_- \left|-\right\rangle\left\langle-\right|$

测量中的部分迹，量子

1. 联合分布函数：用一个大自旋（还不知道什么，以后再说）来测一个小自旋，$\rho^{qm} = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\uparrow\rangle + \langle\downarrow\downarrow|\right)\left(\langle\uparrow\uparrow| + \langle\downarrow\downarrow|\right)$
2. 边缘分布函数：积分掉小自旋，$\rho^{m} = \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right)$
3. 对比量子和经典的情形
4. 状态变了吗？怎么变的？量子态的演化吗？

态、物理量与测量的数学模型

1. 一个硬币的重量：没有测量之前不知道，但是肯定是一个确定值x^*，也就是说$\hat{\rho}^{cD} = \sum_x \delta(x - x^*) |x\rangle\langle x|$。
2. 一个完全随机的色子的正面值，没有测量之前不知道，但不是一个确定值而是± 1之一，也就是说$\hat{\rho}^{cR} = p_+ |+\rangle\langle +| + p_- |-\rangle\langle -|$。
3. 一个完全对称的硬币（±），有三种不同的颜色（RGB），也就是说

$$\hat{\rho}^{cR} = (p_+ |+\rangle\langle +| + p_- |-\rangle\langle -|)(p_R |R\rangle\langle R| + p_G |G\rangle\langle G| + p_B |B\rangle\langle B|) \tag{76}$$

4. 一个量子自旋，没有测量之前不知道，不是一个确定值而是任意方向的± 1之一，也就是说对于任意θ方向的测量，看起来都是$\hat{\rho}^{cR,\theta} = p_{+,\theta} |+,\theta\rangle\langle +,\theta| + p_{-,\theta} |-,\theta\rangle\langle -,\theta|$，而且$p_{\pm,\theta}$对于不同的$\theta$不独立。这是一个很不好的理论，看起来形式上各个参数是独立的，实际上呢又不独立。我们问，要确定这个系统的状态到底要几个自由度？

态、物理量与测量的数学模型，续

1. 先让一个自旋通过z方向磁场，假设测得之后z方向向上（或者向下）之后，再通过x方向磁场，记录测量结果是向上还是向下，多次平均以后，我们发现几率相等。类似的，我们可以测量$\hat{r}$方向，而不仅仅是x方向。结果是$\hat{r}$的函数。也就是说，已知$p_{+,z}=1$也就确定了所有其它的$p_{\pm,\theta}$。
2. 测量S_z之后还可以测量S_x甚至$S_{\hat{r}}$，而且结果是相互关联的（决定性的关联）。这一点非常重要。这表明自旋系统的自由度非常有限。在经典系统中，这样的重复测量是不可能的，除非测量的是两个独立的自由度。
3. 基于这一点，我们的数学模型要能够做表象变换，还要有几率性的描述。

态、物理量与测量的数学模型，续

1. $\hat{\rho}^Q = p_+ \left|+\right\rangle\left\langle+\right| + q\left|+\right\rangle\left\langle-\right| + q^* \left|-\right\rangle\left\langle+\right| + p_- \left|-\right\rangle\left\langle-\right|$，矩阵形式

$$\hat{\rho}^Q = \begin{bmatrix} p_+ & q \\ q^* & p_- \end{bmatrix}. \tag{77}$$

这个矩阵的默认表象是σ_z的本征矢量，也就是$\left|+\right\rangle = [1,0]^T$，$\left|-\right\rangle = [0,1]^T$。

2. 如果我们测量的正好就是z方向（也就是利用z方向的磁场），那么我们可以按下面的方法来计算几率分布，

$$p_+ = \left\langle+\right|\rho^Q\left|+\right\rangle = p_+, \tag{78}$$

其中$\left|+\right\rangle$为测量物理量对应着的算符的本征值。更一般地说，**测量物理量A（有对应本征值α和本征向量$\left|\alpha\right\rangle$），对状态$\rho$做测量，则所得到的测量值符合如下概率分布**：$p_\alpha = \left\langle\alpha\right|\rho\left|\alpha\right\rangle$。这一点对确定性、随机性、量子客体都成立。

作业

1. 一个自旋（电子）经过x方向磁场，选取在向上方向（与$\hat{x}$方向相同）的自旋，问这个自旋的状态是什么密度矩阵（ρ，任意表象都行，通常取S_z表象）？这个密度矩阵在S_y表象的形式是什么（$\tilde{\rho}$）？这时候如果测量S_z得到什么概率分布函数，测量S_x呢?

外场中的量子系统

1. 外场中的经典系统由Hamiltonian描述，例如谐振子场中的粒子：$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0 x^2$
2. 外场中的量子自旋，$\hat{r}$方向的强度为h的磁场：

$$H=h\hat{r}\cdot\vec{\sigma} \tag{79}$$

其中$\vec{\sigma}=\left[\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z\right]^T$，称为Pauli矩阵，遵循

$$[\sigma_i,\sigma_j]=2i\sum_k \epsilon_{ijk}\sigma_k=2i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{80}$$

ϵ_{ijk}为反称张量（$\epsilon_{123}=1$，交换任意两个角标值变号）。$[A,B]=AB-BA$称为A、B的对易子。

算符的非对易性

1. 考虑对易的有限维（维数为N）算符$[A,B]=0$，则A、B存在共同本征向量集合，记为$\{|\mu\rangle\}$，在这个表象（一套基矢量的集合）下，A、B只有对角元素。为简单计，假设没有简，也就是每一个本征值都不同，那么

$$A = diag\left(\left[\alpha_1, \cdots, \alpha_\mu, \cdots \alpha_N\right]\right), B = diag\left(\left[\beta_1, \cdots, \beta_\mu, \cdots \beta_N\right]\right). \tag{81}$$

假设系统的状态已经被制备到算符A的某一个本征态$|\alpha_1\rangle$上，那么测量物理量B我们的到什么？

$$P_\mu = \langle \mu|\rho|\mu\rangle = \langle \mu|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|\mu\rangle = \delta_{1\mu}, \tag{82}$$

也就是说我们仍然得到状态$|\alpha_1\rangle$，测得值β_1。注意状态$|\alpha_1\rangle$就是状态$|\beta_1\rangle$。

2. 如果我们所有的物理量对应着的算符都对易，那么我们可以找到这些算符的共同本征态，在这个表象下，算符和状态都是对角矩阵，量子力学成为经典概率论。

纯态与混合态，量子叠加原理

1. 量子态ρ的一个特例：只有一个非零本征值（这个值必须为1），其他全是零，这样的状态称为纯态，记相应的本征矢量为$|\psi\rangle$，则
$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| . \tag{83}$$
在这个意义上，有两个以及两个以上的非零本征值的量子态称为混合态。
2. 经典叠加原理（概率性叠加）：完全随机的硬币的状态为，0.5的几率正面，0.5的几率反面，因此
$$\rho^{c} = 0.5\,|+\rangle\langle+| + 0.5\,|-\rangle\langle-| . \tag{84}$$
3. 量子叠加原理（相干叠加）：光子过缝1还是过缝2完全无偏，则
$$\rho^{Q}_{1} = \frac{1}{2}\left(|1\rangle + |2\rangle\right)\left(\langle 1| + \langle 2|\right), \tag{85}$$
还是
$$\rho^{Q}_{2} = 0.5\,|1\rangle\langle 1| + 0.5\,|2\rangle\langle 2|? \tag{86}$$

纯态与混合态，量子叠加原理，续

1. 有区别：观察光子落在某一个点z上的几率

$$P_{z,1} = \langle z|\rho_1^Q|z\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle z\,|\,1\rangle\langle 1\,|\,z\rangle + \langle z\,|\,2\rangle\langle 2\,|\,z\rangle\right) \tag{87}$$

$$+\frac{1}{2}\left(\langle z\,|\,1\rangle\langle 2\,|\,z\rangle + \langle z\,|\,2\rangle\langle 1\,|\,z\rangle\right), \tag{88}$$

而

$$P_{z,2} = \langle z|\rho_2^Q|z\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle z\,|\,1\rangle\langle 1\,|\,z\rangle + \langle z\,|\,2\rangle\langle 2\,|\,z\rangle\right). \tag{89}$$

2. Eq. (88)只出现在$P_{z,1}$中。我们需要这一项吗?
3. 我们需要，这是在我们的量子客体的数学模型中干涉花样产生的机制。
4. 回过头来，我们再来看算符的非对易性。如果所有算符都对易，那么密度矩阵永远对角，也就是说Eq. (88)的项永远也不会出现，我们只能做概率叠加，也就是没有量子相干性。

量子客体的数学模型，小结

1. 量子现象展现了相干性，相干性要求相应的状态的数学模型是一个矩阵，可以存在非对角元
2. 量子物理量不能完全对易，也就是说他们必须是矩阵算符；如果完全对易，总存在着一组基矢使得密度矩阵和物理量都完全对角，因而没有相干性
3. 由于非对角元的存在导致状态之间两种不同的叠加：概率性相加与量子叠加，后者保留相干性，通常简单称为叠加原理
4. 量子力学的核心概念被很多人认为是："叠加原理"，"算符非对易关系"等等，也没有错
5. 更准确地说就是：量子实验要求量子事件之间存在着加法，而经典事件之间不存在这样的代数运算；记住一句话：**事件之间的加法运算导致了量子性**

量子态的演化

1. 在t时刻系统的状态由态矢量（纯态）$\left|\psi(t)\right\rangle$或者密度矩阵（混合态）$\rho(t)$描述；
2. 外场对系统的相互作用由Hamiltonian（哈密顿量）H描述；
3. 问：从一个初始状态$\left|\psi(0)\right\rangle$或者$\rho(0)$开始，$t$时刻系统处于什么状态?
4. Shrödinger方程：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = H\left|\psi(t)\right\rangle; \tag{90}$$

或者Liouville方程：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]. \tag{91}$$

当$\rho(t) = \left|\psi(t)\right\rangle\left\langle\psi(t)\right|$两者等价。

演化算符

1. 定义演化算符$\left|\psi(t)\right\rangle = U(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle$，则$\rho(t) = U(t,t_0)\rho(t_0)U^{\dagger}(t,t_0)$，且$U(t|_{t=t_0},t_0) = I$.
2. 假设哈密顿量H不依赖于t，则

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = HU(t,t_0), \tag{92}$$

形式解

$$U(t,t_0) = e^{-i\frac{1}{\hbar}H(t-t_0)} \tag{93}$$

满足

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I. \tag{94}$$

这个形式解可以展开成

$$U(t,t_0) = \sum_n e^{-i\frac{1}{\hbar}E_n(t-t_0)}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|. \tag{95}$$

3. 所以问题转变成如何求得H的本征向量和本征值

举例

1. 自旋，$H=\mu B_x S_x$，$\rho_0=|\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$，求$t$时刻做$\sigma_y$测量得到的结果。
2. 作业，自旋，$H=\mu\vec{B}\cdot\vec{S}$，$\rho_0=|\uparrow_z\rangle\langle\uparrow_z|$，求$t$时刻做$\sigma_y$测量得到的结果。

表象变换与绘景变换

1. 物理量集合，相容物理量集合，力学量完全集，好量子数，表象
2. 表象变换：$\left|\tilde{\psi}\right\rangle = S\left|\psi\right\rangle$必须同时做变换$\tilde{A} = SAS^{-1}$，才能保持观测量不变
3. 绘景变换：

$$\left|\psi(t)\right\rangle^{H} = e^{iHt}\left|\psi(t)\right\rangle^{S}, \tag{96}$$

诱导变换

$$A^{H}(t) = e^{iHt}A^{S}(t)e^{-iHt}. \tag{97}$$

好处：$\left|\psi(t)\right\rangle^{H}$不依赖于时间，不用求解，但是要求解$A^{H}(t)$。

4. Heisenberg方程

$$ddtA^{H}(t) = i\left[H, A^{H}(t)\right]. \tag{98}$$

举例

1. 谐振子，$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$，Heisenberg方程的解，经典Hamilton的解，以及代数解法，对易关系的核心地位。
2. 作业，谐振子量子态能级能量$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$，两个谐振子的两种统计力学计算：(1)可分辨谐振子的量子态；(2)不可分辨谐振子的量子态。

量子力学小结

1. 概念地图的概念，应用，举例
2. 量子力学的概念地图

随机微分方程：实例与导论

1. Langevin方程
2. Fokker-Planck方程，与Langevin方程的关系
3. 主方程，Markov过程，转移矩阵，生成函数方法
4. 速率方程

维纳过程，随机微分方程形式

1. 维纳过程做为高斯随机变量的积分

$$\int_0^t \xi(\tau)\, d\tau = W(t), \tag{99}$$

其中高斯随机数满足

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \tag{100}$$

$$\langle \xi(t)\, \xi(\tau) \rangle = \delta(t-\tau). \tag{101}$$

2. 计算$\langle W(t)\, W(\tau) \rangle$,

$$\langle W(t)\, W(\tau) \rangle = \left\langle \int_0^t \xi(t_1)\, dt_1 \int_0^\tau \xi(t_2)\, dt_2 \right\rangle \tag{102}$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^\tau dt_2 \delta(t_1 - t_2) \tag{103}$$

$$= min\{t, \tau\} \tag{104}$$

维纳过程，随机微分方程形式，续

1. 独立高斯过程的积分是布朗运动，那么是不是说布朗运动的微分是独立高斯过程呢？布朗运动的轨迹处处连续处处不可微。如果要定义微分，那也是完全不同的微分。
2. 随机微分，形式上记为

$$dW(t) = \xi(t)\,dt \tag{105}$$

3. 数值上，我们如果要模拟布朗运动，那么我们就可以近似地用

$$\Delta W(t) = \xi(t)\,\Delta t, \tag{106}$$

也就是

$$W(t + \Delta t) = W(t) + \xi(t)\,\Delta t. \tag{107}$$

4. 问$W(t)$的分布函数$P(W,t)$是什么？各阶距呢？这个可以利用中心极限定理简单分析，也可以问$W(t)$的分布函数的演化方程是什么。这个过程与经典力学的动力学方程形式到密度分布函数的方程之间的转换是一样的。

维纳过程，Fokker-Planck方程

1. 维纳过程的Fokker-Planck方程

$$\frac{\partial}{\partial t} P\left(w, t | w_0, t_0\right) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} P\left(w, t | w_0, t_0\right), \tag{108}$$

初始条件

$$P\left(w, t_0 | w_0, t_0\right) = \delta\left(w - w_0\right). \tag{109}$$

2. 可以计算出定态

$$P\left(w, t | w_0, t_0\right) = \left[2\pi\left(t - t_0\right)\right]^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\left(w-w_0\right)^2}{2\left(t-t_0\right)}}. \tag{110}$$

布朗运动的随机微分方程，与分布函数的演化方程

1. 花粉粒子受阻力以及随机碰撞，

$$\dot{v} = -\gamma v + d\xi(t). \tag{111}$$

2. 其差分计算过程，

$$v(t+\Delta t) = v(t) - \gamma v \Delta t + d\xi(t)\Delta t. \tag{112}$$

3. 其分布函数$\rho(v,t)$满足的方程，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \gamma \frac{\partial v\rho}{\partial v} + D\frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2}. \tag{113}$$

4. 求解后者

一般的布朗运动

1. 以白噪声为基础的一般的随机过程，可以写成如下形式

$$dX = Adt + BdW \tag{114}$$

2. 其计算过程，

$$X(t + \Delta t) = X(t) + A\Delta t + B\xi(t)\Delta t. \tag{115}$$

随机微分方程与Fokker-Planck方程的对应关系

1. 标准Langevin方程（多变量，换一个写法）

$$\dot{\xi}_i = h_i\left(\vec{\xi}\right) + g_{ij}\left(\vec{\xi}\right) w_j\left(t\right), \tag{116}$$

2. 定义矩阵G向量A分别为

$$G_{ij}\left(\vec{\xi}\right) = g_{ij}\left(\vec{\xi}\right), \tag{117}$$

$$h_i\left(\vec{\xi}\right) = \mathscr{A}_i\left(\vec{\xi}\right). \tag{118}$$

定义矩阵D

$$\mathscr{D}\left(\vec{\xi}\right) = G\left(\vec{\xi}\right) G^{\dagger}\left(\vec{\xi}\right), \tag{119}$$

一般的Fokker-Planck方程

1. 给定函数$\mathscr{A}_j\left(\vec{\xi}\right)$和$\mathscr{D}_{ij}\left(\vec{\xi}\right)$

$$\frac{\partial}{\partial t}P\left(\vec{\xi},t\right)=\left[-\sum_j\frac{\partial}{\partial \xi_j}\mathscr{A}_j\left(\vec{\xi}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2}{\partial\xi_i\partial\xi_j}\mathscr{D}_{ij}\left(\vec{\xi}\right)\right]P\left(\vec{\xi},t\right). \tag{120}$$

   其中$P\left(\vec{\xi},t\right)$是随机变量$\xi_i$的分布函数。

2. 有的时候可以直接求解FPE。有的时候要转化为Langevin方程求解。

举例：OU过程

1. 给定函数$\mathscr{A}_j\left(\vec{\xi}\right)$和$\mathscr{D}_{ij}\left(\vec{\xi}\right)$

$$\mathscr{A}\left(\vec{\xi}\right) = -\Gamma\vec{\xi}, \text{ and } \mathscr{D}\left(\vec{\xi}\right) = D \tag{121}$$

2. 以一维为例

$$\frac{\partial}{\partial t}P = \gamma\frac{\partial xP}{\partial x} + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \tag{122}$$

3. Fourier变换，初始条件

举例：OU过程，续

1. OU过程的Langevin方程

$$\dot{x} = -\gamma x + \sqrt{D}\xi(t), \tag{123}$$

2. 平均值的方程$\langle x(t)\rangle = \int xP(x,t)\,dx$

$$\langle \dot{x} \rangle = -\gamma \langle x \rangle, \tag{124}$$

$$\langle \dot{x^2} \rangle = -2\gamma \left\langle x^2 \right\rangle + 2D. \tag{125}$$

3. 从分布函数的方程（或者是动力学方程）到平均值的方程，关联函数，更复杂的情况，BBGKY

Master方程

1. 一般的离散Master方程

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} = \sum_m \left[w\left(m \to n\right) W_m - w\left(n \to m\right) W_n\right], \tag{126}$$

如果定义了转移概率$w\left(m \to n\right)$。

2. 一般的连续Master方程

$$\frac{\partial W\left(x,t\right)}{\partial t} = \int dx' \left[w\left(x' \to x\right) W\left(x',t\right) - w\left(x \to x'\right) W\left(x,t\right)\right], \tag{127}$$

3. 从FPE到Master方程：

$$w\left(x' \to x\right) = \left[-\frac{\partial}{\partial x}\mathscr{A}\left(x\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathscr{D}\left(x\right)\right]\delta\left(x - x'\right) \tag{128}$$

Master方程与生成函数、速率方程

1. 给定转移矩阵$W = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 0 & 1 \\ 0 & 0.5 & 0 \end{bmatrix}$，求稳态分布，迭代，本征值为1的本征向量
2. Birth rate $b(n) = 0.9n$ and death rate $d(n) = n$, rate of immigration 0.1

$$X + A \to 2X \tag{129}$$

$$X \to A \tag{130}$$

$$E \to X \tag{131}$$

with proper k_1, k_2, k_3 such that rate equation becomes

$$\dot{x} = k_1 a x - k_2 x + k_3 e = 0.9x - 1.0x + 0.1. \tag{132}$$

Thus $x(\infty) = 1.0$, and it is a stable fixed point.

Master方程与生成函数、速率方程，续

1. In terms of master equation,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}P_n &= d\left(n+1\right)P_{n+1} + mP_{n-1} \\ &+ b\left(n-1\right)P_{n-1} - d\left(n\right)P_n - mP_n - b\left(n\right)P_n.\end{aligned} \tag{133}$$

2. Stationary state is defined by $\frac{d}{dt}P_n = 0$.
3. 生成函数方法$G\left(z,t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n P_n\left(t\right)$。
4. 速率方程（Rate Equation）与化学反应，浓度或者相对浓度x，考虑一个简单的化学反应，与分布函数的联系$P\left(n_X\right)$

动力学系统：提纲与绪论

1. 要求的基础：线性代数及其数值计算方法，微积分，微分方程及其数值计算方法
2. 内容：动力学系统定性理论的基本概念，分岔理论，稳定性分析，迭代映射，场与流线图，混沌，Lyaponov指数
3. 实例：logistic 映射，种群动力学，Lorentz振子，smale马蹄
4. 目标：动力系统是什么，离散与连续动力系统，定性行为，稳定性分析，混沌
5. 与专门课程的区别：专门课程不仅要求知道是什么、为什么，还要掌握大量的计算技术；我们只要求前者以及最基本的计算技术
6. 导论：在经济系统分析中使用动力学系统分析的思想与技术，生理、代谢、基因调控过程中使用动力系统的技术，复杂网络上的动力系统：计算神经科学
7. 推荐阅读：《混沌：开创新科学》（又译为《混沌学传奇》），《从抛物线谈起——混沌动力学引论》，《随机力与非线性系统》，《Invitation to Dynamical Systems》(Edward R. Scheinerman)

离散动力学系统：从Malthus模型到logistic模型

1. 简单虫口模型（Malthus），静出生率α

$$x_{n+1} = (1+\alpha)\, x_n \tag{134}$$

给定初始条件x_0，我们有

$$x_n = (1+\alpha)^n\, x_0. \tag{135}$$

因此，长期行为非常简单，x_n趋于无穷如果$\alpha > 0$，否则趋于零。

2. 种内竞争：

$$x_{n+1} = (1+\alpha)\, x_n - \beta x_n^2, \tag{136}$$

重新整理一下形式，定义新的参数，我们可以得到

$$x_{n+1} = \gamma x_n\, (1 - x_n)\,. \tag{137}$$

3. 我们来研究这个动力学过程：曲线、映射，简单周期，倍周期，混沌，从手动计算到计算机数值计算，分支图

连续动力学系统：从Malthus模型到logistic模型

1. 简单虫口模型（Malthus），静出生率α

$$\dot{x} = \alpha x \tag{138}$$

给定初始条件x_0，我们有

$$x(t) = e^{\alpha t} x_0. \tag{139}$$

因此，长期行为非常简单，$x(t)$趋于无穷如果$\alpha > 0$，否则趋于零。

2. 种内竞争：

$$\dot{x} = \alpha x - \beta x^2, \tag{140}$$

重新整理一下形式，定义新的参数，我们可以得到

$$\dot{x} = \gamma x \left(1 - \frac{1}{K} x\right). \tag{141}$$

3. 我们来研究这个动力学过程：从计算机数值计算到定性分析

什么是动力系统

1. 离散系统：

$$x_{n+1} = g(x_n, \mu) \tag{142}$$

2. 连续系统：

$$\dot{x} = f(x(t), \mu) \tag{143}$$

3. 微分方程差分化：

$$x(t + \Delta t) = x(t) + f(x(t), \mu)\Delta t \tag{144}$$

   或者更高阶的近似，例如Runge–Kutta方法。不能完全对应。

4. 动力系统的解：给定参数、给定初始条件，求得所有的演化行为
5. 首先，实际上多粒子系统求解很困难，而且有时候没有必要知道细致演化，定性行为更重要。其次，初始条件敏感的系统实际上长时解没有意义。
6. 更一般的动力系统：外生变量的随机化，参数化，高阶方程或者历史依赖通过增加变量的方法变成一阶不依赖于历史的方程，某些连续系统延迟方程的特殊性

什么是动力系统，续

1. 动力系统的定性理论：流线，场，积分曲线，定性行为（不动点，周期，源，汇，鞍点，极限环）及其稳定性，混沌（初始敏感，拓扑混合），重点讲授
2. 微分方程数值计算方法，线性代数，自己学习或者复习
3. 根本理论在：常微分方程定性理论，符号动力学，随机微分方程，专门课程讲授
4. 从线性系统的定性行为到非线性系统

线性系统：矩阵运算

1. $g(x,\mu) = A(\mu)x, f(x,\mu) = B(\mu)x$
2. 解：$x_n = A^n x_0$，$x(t) = e^{Bt}x(0)$。
3. 定性行为：对于大多数初始条件，A存在大于1的本征值则发散，后者B存在大于0的本征值则发散。其中“大多数”是指x_0包含A大于1的本征值对应着的本征矢量。
4. 举例：谐振子$\dot{x}_1 = \frac{x_2}{m}, \dot{x}_2 = -m\omega^2 x_1$，为了计算简单，我们取$m = 1, \omega = 1$。我们可以得到$e^{Bt}$的解析表达式。
5. 举例：Malthus模型，一维，只要看α。

微分方程数值解法

1. Euler方法，自己编，与matlab, maple, mathematica, sage, gsl比较
2. 4阶Runge-Kutta方法，自己编，与matlab, maple, mathematica, sage, gsl比较
3. 非线性方程求根，Newton弦截法，自己编，与matlab, maple, mathematica, sage, gsl比较

简单定性分析：不动点及其稳定性

1. 不动点x^*：
$$x^* = g\left(x^*, \mu\right). \tag{145}$$
2. 引入小偏移$x = x^* + \delta x$，我们得到δx的方程，
$$\delta x_{n+1} = g^{'}\left(x^*, \mu\right)\delta x_n + \mathfrak{o}\left(\delta^2 x_n\right). \tag{146}$$
3. 或者连续时间系统
$$f\left(x^*, \mu\right) = 0. \tag{147}$$
4. 引入小偏移$x = x^* + \delta x$，我们得到δx的方程，
$$\dot{\delta x} = f^{'}\left(x^*, \mu\right)\delta x + \mathfrak{o}\left(\delta^2 x\right). \tag{148}$$
对于多维系统$g^{'}, f^{'}$实际上是一个矩阵。
5. 作业：取$g(x) = \cos x$，做迭代图，发现不动点，求解不动点，讨论不动点稳定性

中心流形与分支

1. 中心流形定理
2. 线性系统的分支，P66，IDS

迭代映射与分形

1. $z_{n+1} = z^n + c$产生的分形图，自相似性。
2. 折叠，Cantor集，分形
3. 作业：取$z_{n+1} = z^n + c$，做Mandelbrot图。

运筹学与控制论基本问题的描述

1. 运筹学：静态系统的约束下的优化极值问题
2. 数学模型：
3. 控制论的基本问题：动态系统的约束下的优化极值问题
4. 数学模型：给定动力学系统（演化方成与初态），研究以某种方式驱动系统达到所期望的状态的方法。系统的状态变量$x(t)$及其初始条件$x(t_0)=x_0$，输出变量$y(t)$，控制变量$u(t)$，满足

$$\dot{x} = f(x, u, t) \tag{149}$$

$$y = g(x, u, t) \tag{150}$$

选择合适的$u(t)$使得$y(t)$的一个泛函

$$S = S[y(t)] \tag{151}$$

取极值。系统的末状态可以使给定的或者是自由的，由约束$h(x_f)=0$和$h(t_f)$决定，或者两者同时确定。如果存在期望状态$y^*(t)$或者$y^*(t_f)$，则S通常是$y-y^*$的泛函。

运筹学的一般技术简介

1. 线性规划的问题与解答
2. 项目管理的问题与解答

控制论举例

1. 举例，基金问题，变分法：某基金初始60万元，假设年利率0.1，80年后基金结清需手续费0.5万元。若每年取款在5到10万之间，问每年去多少能够使得总取出量最大。（提示：80个变量或者变分法）

线性系统控制论

1. 线性系统的控制

$$\dot{x} = Ax + Bu \tag{152}$$

$$y = Cx + Du \tag{153}$$

给定初状态$x(t_0) = x_0$和结束时间t_f，选择合适的$u(t)$使得$y(t)$到达期望状态$y^*(t_f)$，也就是

$$S = (y(t_f) - y^*)^T [y(t_f) - y^*] \tag{154}$$

取极小值。

2. 举例，给定B
3. 问题：反馈如何进入这个框架，B不定呢?

最优控制的基本思想和例子

1. Hamilton方法
2. 举例

在Linux下编译运行C程序，make文件

1. 工具、形式与内容（永远不用花心思在工具和形式上的工具和形式才是好的工具和形式）
2. gcc编译器，gfortran编译器
3. make文件的基本格式与规则
4. 编译与运行
5. C、Fortran之间的调用

科学计算库

1. 通用程序，解析与数值计算，线性代数、统计、积分、微分方程、优化、数论、高等代数：Sage包含R，Maxima
2. 数值线性代数：BLAS，LAPACK，Petsc, Slepc，gsl，库函数的调用
3. 随机数生成器、FFT，FFTW
4. 作图、拟合、数据处理：gnuplot，grace

Linux简介

1. Linux系统的安装：下载Linux系统安装盘，制作USB系统盘，安装，注意选择合适的软件源服务器（清华、科大等提供镜像服务）
2. Linux系统的使用，视窗界面基本与Windows没有区别，命令行是Linux的精华所在，可以从学会这门课程之中用得到的东西开始
3. 开源，无病毒，不用找软件，编程的好平台，不适用于广大“用户”（不思考，不开发的使用者）

C简介

1. C语言程序的编辑，编译，运行：举例，helloworld.c, makefile, 头文件（*.h）。不要用集成编译环境。调用外部函数时候的编译方法
2. C语言程序的基本结构：头文件声明，宏定义，全局变量定义（想尽一切办法不用去用它），结构体或者其他数据结构声明，外部函数声明，内部函数声明，主程序（只呈现逻辑结构），各级子程序
3. C语言基本数据类型：字符（字符串）、整数（整形数组）、单精度浮点、双精度浮点、复数，各种内建数值运算，内建函数
4. C语言基本语法：if, for (switch, while)
5. 数组、指针，C语言函数间传递信息，动态内存分配与管理
6. GNU C基本的包：google GNU C，字符串操作，输入输出
7. 科学计算包：线性代数系统（lapack），积分差分插值（gsl），Monte Carlo方法

gnuplot简介

1. 交互模式：数据文件已经存在，企图做图形化的数据分析工作，基本命令：plot, 基本参数：using, title, with，调整坐标轴，给图形命名等，拟合
2. 脚本程序模式：举例，理解每一个命令，学习资源gnuplot in Action，系统科学人之吴金闪
3. 在C里调用gnuplot：举例
4. 从文档、例子里学习，之后需要看看书做一个系统的整理

latex简介

1. 所有的作业报告，要求用latex生成PDF以后提交，手写的，word版本的，不批改直接零分
2. 找一个例子，修改成自己的就行
3. 与所见即所得系统最根本的区别：不要决定怎么调整外形，只要告诉latex系统写的是什么，哪一部分，与html、xml语言类似
4. 好处：自动协调编号，写作期间只关心内容，学会结构化地创作和思考
5. 同样，从文档、例子里学习，之后需要看看书做一个系统的整理

BLAS, lapack简介

1. 数值线性代数系统，矩阵运算（算术运算，求逆、求本征值与本征向量）
2. 本身由Fortran编写，Fortran、C、Python都可以调用
3. 作业：写一个Fortran的Hello World程序，在C里调用，完成C的Hello World一样的功能。程序交电子版源文件一份，再加上makefile打包以后发给助教，同时也用Latex生成一份PDF文档，包含程序，程序说明，作业的相关说明，标题、作者、单位等等。
4. 非常完整的文档与例子，Fortran和C的区别（传值与传址，列优先与行优先，大小写，数组起始编号）
5. 举例，调用lapack的程序的编译方法，安装
6. Linux系统安装软件的一般方法：简单选择软件库的已编译软件或者从源文件编译安装：先configure（探测环境），后make（编译源文件），然后install（复制库和可执行文件）

gsl简介

1. gsl与基本科学计算：差分、积分、求根、极值、插值
2. 举例
3. 作业1.3：写一个基于gsl积分计算程序的C语言程序计算圆面积（可以假定周长已知计算一维积分，或者计算二维积分）；然后对于不同的半径计算输出结果得到数据，按照数据用gnuplot作图。可以直接用gnuplot独立作图，也可以直接在C程序中调用。得到的图，以及计算的简单原理要包含在提交的PDF报告文档中
4. 非常完整的文档与例子

gdb，valgrind简介

1. 遵循一定的编程风格，稳定而常用的风格可以减少错误。google: C code style 或者访问http://www.jetcafe.org/jim/c-style.html，http://www.cas.mcmaster.ca/ carette/SE3M04/2004/slides/CCodingStyle.html，h
2. 风格的问题包含：程序的基本结构的安排顺序，注释的写法，Indentation，对齐方式
3. 运用gdb来调试程序，google gdb或者gdb实例
4. 举例：http://fanqiang.chinaunix.net/program/other/2006-07-14/4834.shtml
5. 作业1.4：调试你上一次作业中出现错误的某一个版本，发现并修正错误

sage简介

1. 在一个机器上安装，可在网络上使用
2. 符号计算
3. 数值线性代数
4. 基本科学计算
5. 常微分方程求解
6. 可编程（Python）
7. 举例，矩阵运算
8. 好处：简单迅速地实现算法原型或者模型机制的实现

我系HPC简介

1. 服务器地址：hpc.systemsci.org，或者直接用210.31.77.19
2. 服务器系统：Linux
3. 服务器支持语言：C(gcc), C++(g++), Fortran(gfortran), Python, Perl, Linux shell脚本
4. 服务器计算管理：PBS
5. 服务器支持计算软件：BLAS，Lapack, Petsc, Slepc, FFTW, ATLAS, GSL
6. 服务器安装的其他软件：vi, emacs, gedit, make, gnuplot
7. 发布计算任务的大致程序：
    1. 在自己的机器上编好程序并测试成功（尽量保证没有内存漏洞，Linux下可以用软件检测你的程序，Windows下我不知道）
    2. 创建或者修改我提供的make文件，通过sftp上传程序和make文件到服务器
    3. 用ssh登录服务器运行make XXX(你的程序名)编译你的程序
    4. 用qsub（我会提供模版）提交任务。任务完成的话，系统会给你发邮件（目前，邮件服务器还没有配置好。暂时你就自己手动查看算没算完）