系统理论概论与基础

吴金闪

北京师范大学系统科学学院

November 14, 2014

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：每一次找一个志愿者（当此作业满分）做答案，批改，讲授，习题课授课计入表现分数（10分/次/人，属于额外加分）。
- 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（具体内容见下一页）。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。
- 另外，专业基础课可以5选3，不影响毕业。
- 愿意接受挑战、愿意学会学习、愿意学到对核心知识的理解的，留下。

我们学什么?

- 学会研究性学习：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，与系统科学。
- 通过研读研究实例，加深对系统科学的理解。
- 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。
- 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

- 概念地图与概念地图学习方法，1节课。
- 导论：系统科学是什么，实际研究的例子；为什么学习基本的数学物理，例子；关于有用和没有用，2节课。
- 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节课。
- 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，3节课。
- 习题课1节，学生讲解，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，6节课。
- 习题课1节，学生讲解，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，6节课。
- 习题课1节，学生讲解，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，12节课。
- 习题课1节，学生讲解，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，有限大小标度，量子统计初步，12节课。
- 习题课1节，学生讲解，老师点评。
- 中间插入文献阅读报告，小课题报告，或者大作业报告，4-6节课。

我们的学院

1. 2013年9月17日正式成立大会，北京，北京师范大学。1979年，成立了非平衡系统研究所，1985年，创建系统理论专业。
2. 我们不是系统工程学院，我们关心科学问题，与工程问题不一样。
3. 研究领域包含复杂系统的一般理论（平衡与非平衡统计的基本问题，场论、复杂网络等处理相互作用的一般多体方法），经济金融系统、生态系统、计算神经科学、动物群体行为、博弈论、科学学等。
4. 本学院大部分教师毕业于物理系。

关于科学

1. 系统科学首先是科学。科学是在解决现实世界的问题的过程中通过科学方法获得的具体系统的理解。这个理解通常表现为一个数学模型。
2. 典型的科学方法包含观察、实验、抽象、猜想、检验、构造理论、进一步检验等。
3. 科学研究还需要批判性思维：在你能够理解论证过程之前，永远不要相信结论。要问为什么。
4. 科学研究的过程中，通常把把关心的对象一定程度上从整个现实世界中独立出来，称作一个系统。举受力分析的例子。
5. 科学概念大多数时候是从现实中提炼出来，抽象出来的。
6. 通常，科学希望用更少的原理、更少的模型、更少的假设来描述更多的现象。
7. 对事物状态和状态变化的描述，以及探索状态变化的原因，是一个典型的科学问题，称为力学思想。举例力学的问题。

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. 相互作用无处不在。
2. 包含相互作用的系统的整体行为有可能与每一个个体的行为不一样，振动的模、汉字的学习顺序、物理学中的准粒子。
3. 基本思想是高度可行的：More is Different，也称为涌现性，多了就会不一样。
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。
3. 当然，是不是能够把能动个体行为归结为物理系统还是一个问题。至少在目前，以及在表面上（涌现性，不是所有的人的行为的研究都需要直接和电子的运动相关的）还不能。
4. 涌现性也是事实：大量个体（更典型的是具有适应性的主体）所组成的复杂系统，在没有中心控制、非完全信息、仅仅存在局域相互作用的条件下，通过个体之间的非线性相互作用，可以在宏观层次上涌现出一定的微观上不存在的结构和功能。

更一般的复杂系统，续

1. 微观上比物理系统更复杂多样的机制，个体的内部状态是可变的，宏观上比物理系统更丰富多彩的行为，这些可能需要发展新的数学甚至新的物理学来研究。
2. 因此，肯定是一个值得研究的问题和一个有价值的思路。
3. 可惜，目前阶段，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），系统科学基本上就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。
5. 不过，这也是进一步发展的机会。

系统科学研究的线路图

1. 物理学基本问题，尤其是场论、统计物理学等处理相互作用的方法的研究
2. 从具体学科提炼具有系统性、整体性、涌现性的问题。
3. 用处理相互作用的思想、概念和方法来回答和解决这些具体学科的问题
4. 讨论这些问题对具体学科的意义
5. 讨论这些工作的更一般的方法论和思想上的意义

美国科学院前瞻报告The Science of the World Around Us提出的6凝聚态物理学个挑战

1. How Do Complex Phenomena Emerge from Simple Ingredients?
2. How Will the Energy Demands of Future Generations Be Met?
3. What Is the Physics of Life?
4. What Happens Far from Equilibrium and Why?
5. What New Discoveries Await Us in the Nanoworld?
6. How Will the Information Technology Revolution Be Extended?

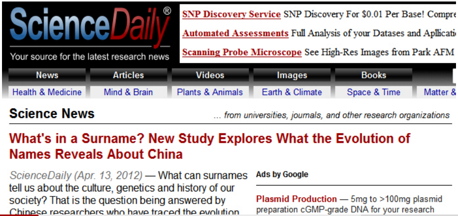
注：凝聚态物理学是物理学中研究多体相互作用系统的学问。

同姓率反映人类历史

1. 2012年，我院陈家伟等人在美国人类学期刊《American Journal of Physical Anthropology》发表论文“A study of surnames in china through isonymy”。
2. 文章主要利用人口普查数据中的姓氏统计了各个地区的同姓率（随便选取两人姓氏相同的几率），然后通过同姓率发现有的空间上不同的地区存在相似的同姓率，例如山东和东北之间等等。这样的超出一般水平的相似性反映了历史事件。在这里是“闯关东“。
3. 文章发表以后引起了很多学术界的和公众的关注。

哪里系统科学了？

1. 当拿到姓氏数据以后，研究方向是已经有的：基因、人类学等方面的问题与姓氏的关系。有一部分基因是通过父亲（也有母亲）与男性（女性）后代的关系传播的。但是具体的研究问题，还不明确。
2. 人类的历史，可以通过文字记录、出土文献、文物等等各种方式加以研究，那么能不能通过其他数据，例如姓氏来研究呢?
3. 这个研究工作表明，从（有的时候不那么直接的）数据来回答其他学科的问题，运用系统科学的思想是可行的。
4. 什么地方系统科学了：从个别地区的同姓率统计分析到整个国家的同姓率的对比，并且从整个姓氏距离关系归纳总结地区的相似性，这个从个体到整体的过程。

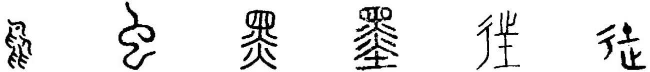


网络分析能够为汉字学习做什么?

1. 汉字是相互联系的：汉字与汉字，字形与字义
2. 什么是汉字地图：拆分，构建，显示
3. 汉字地图的功能：
   1. 指导学习：从个别到整体，学习顺序
   2. 检测已知，从很少知道很多
   3. 学习材料开发和公开：www.learnm.org

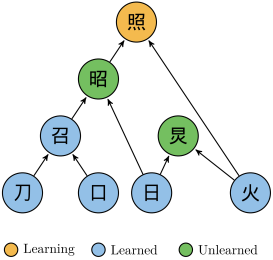
最初的研究动机

- 汉字是可以以字认字的，以字解字的。汉字的字形与字音字义是有联系的，这样的联系可以帮助学习[1,2]。
- 纯粹以拼音为基础的教法容易上手，但是语调与多音字问题，以及语音数量少的问题使得深入学习非常困难。
- 汉字之间结构化联系非常普遍[3,4]。相关实证（采用少数几个字为例在小学生中做教学实验）研究表明利用结构信息确实能够提高小学三年级以上学生的汉字学习效果[4]。
- 一个明显的例子：木，林，森。这样的联系普遍吗？如何利用这样的联系提高汉字教学，甚至汉字研究？这个要靠网络分析。
- 了解汉字之间的、字形与字义之间的联系，有助于学习：举例，“鸟”、“虫”、“黑”、“墨”、“往”、“徒”。

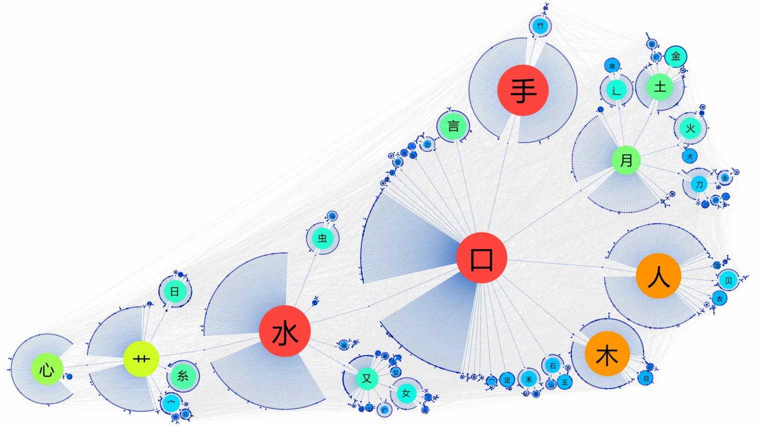


数据与基本结构

- 数据来源：国家语委1988年常用字表，现代汉语单字频率列表，超过99%的使用频率；
- 汉字拆分与网络构建方法：如果一个汉字直接参与了另一个汉字的构成，则在两者之间连接一条有向边。
- 要求最小结构是表意或者表音单位，结构上与语义或者语音有联系
- 得到的网络包含节点3687个，边7025条，是一个有向无环图。它是一个完全的层次网络，这说明汉字倾向于用逐级组合的方式构字。



汉字结构地图



汉字学习顺序的基本考虑

- 目标：通过调整学习顺序，实现以最小的努力认识更多的字数，或者更多的字次（利用来自于语的汉字使用频率的信息）。
- 使用频率最高的要先学。
- 构字能力强（网络上节点的度）的汉字要先学。
- 从底向上，先简单后复杂也值得考虑。
- 理据性强的也要先学（暂时我们没有考虑这个因素）。
- 如何利用汉字网络，通过顶点中心性计算来排序，找到满足以上要求的汉字学习顺序?

顶点权及其传播：distributed node weight

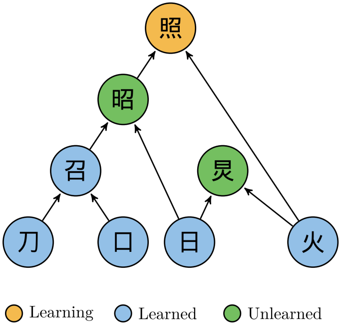
- 我们提出顶点权传播方法来排序：从顶层节点开始，沿着每个节点的入边寻找它的低一层节点，将本节点权重$\tilde{W}_i^{(m)}$加权后累加到低一层节点的权重$W_j^{(m-1)}$上：

$$\tilde{W}_j^{(m-1)} = W_j^{(m-1)} + b \sum_i \tilde{W}_i^{(m)} a_{ji}. \tag{1}$$

- 当$b=0$时，相当于按频率排序；当b越大底层节点累加得到的权重越大，更接近于从底到上的层次排序。实际计算中我们取$b=0.5$，理由一会儿说明。
- 这个顶点权是原始结构网络之外的信息，不能够通过边权、度、介数或者其他的几何量得到。

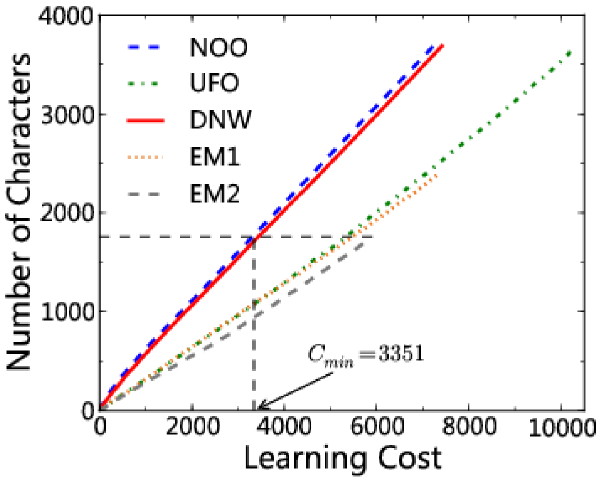
学习成本的计算

- 学习成果：字数或者累积频率
- 学习成本：在汉字网络中，从一个被学习的汉字开始，回溯它的入边：边的数量记为X；所有入边连接的字的总学习成本记为Y（如果一个字已经学过，成本$C=0$，否则递归计算）。计学习一个汉字的总成本为$C=X+Y$。



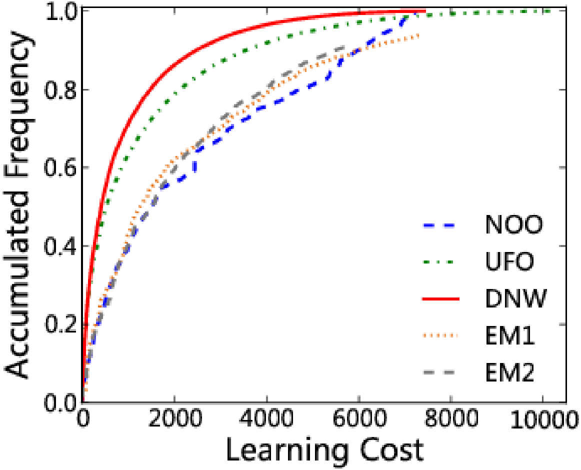
汉字编排顺序的比较，总字数

- 固定成本下，按照学习总字数比较以下五种编排方式：字频、层次、分布式顶点权、人教版小学语文、某对外汉语教材



汉字编排顺序的比较，从使用频率

- 固定成本下，按照学习累积频率比较以下五种编排方式：字频、层次、分布式顶点权、人教版小学语文、某对外汉语教材



BBC对上述工作的报道

- 科普作家Philip Ball的这个工作的评论


BBC | News | Sport | Weather | Travel | Future | Autos | TV | Radio | More...

FUTURE

Home Tech Science Health Columns | EXPLORE: Life: Connected | EXPLORE: Imagineering | WATCH: Power of Nature

UNDER THE RADAR | 18 March 2013

A better way to learn Chinese?

Philip Ball | Science & Environment | Language | Physics | Technology | Computer

(Copyright: Thinkstock)

There's been a rising dissatisfaction with current language teaching methods in China, but scientists think they may have an answer.

Related

Language lessons from Twitter

There's no way round it: learning Chinese is tough. As far as reading goes, what most dismays native speakers of alphabetic languages is that Chinese characters offer so few clues. With virtually no Spanish, I can figure out in the right context that *baño* means *bath*, but that word in Chinese (洗澡) seems to offer no clues about pronunciation, let alone meaning.

There seems no alternative, then, but to slavishly learn the 3,500 or so characters that account for at least 99% of use in written Chinese. This is hard even for native Chinese speakers, usually demanding endless rote copying in school. And even then, it is far more common than is often admitted for Chinese people to forget even quite routine characters, such as 钥匙 (key). As a result, there's been a rising dissatisfaction with current

Top Future Stories

Editor's Picks | Most Recent

1. A better way to learn Chinese?
2. Qwerty: Time for a rethink?
3. Has the internet made us better?
4. Most stunning images of the week
5. Trash talk signals mobile future

Best of Future

How big is space? Scroll through our monster graphic to find out

The quest to recreate the Sun. Will the world's biggest fusion reactor work?

Global resources stock check. When will our most valuable natural resources run out?

Can we travel faster than light? Possibly, but only if you bend the laws of physics

The loneliest job in the world

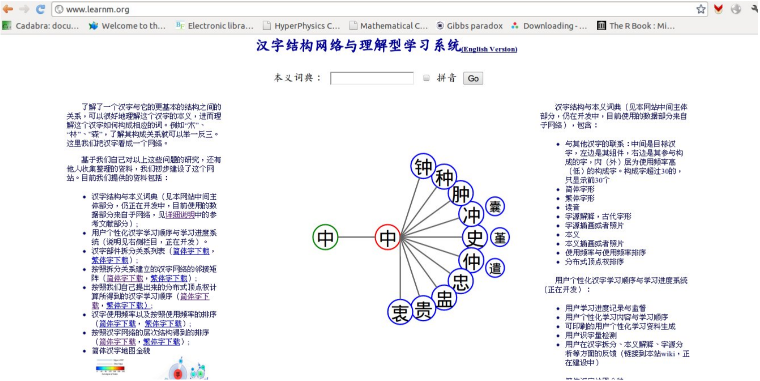
- 基本分析工作的文章已经发表在PLOS ONE

诊断性测量的动机和基本思想

- 分开已认识和未认识的字是个性化的基础
- 如何做诊断性检测：遍历3500个常用字，不现实；随机抽样，不够详细和全面。怎么办?
- 答案：利用汉字网络。最简单的例子，检测了"林"以后绝对不用测“木”。这个原则能推而广之吗?
- 这个问题我们正在研究。
- 我们的所有原始数据和研究结果都公布在网络（www.learnm.org）上。

我们正在建设的网站

- 汉字结构网络与理解型学习系统，www.learnm.org



- 提供了结构拆分、字源解释，将来还会有个性化学习顺序

我们正在建设的网站，续

- 支持这个系统的Wiki站点，systemsci.org/wiki

- 讨论字源解释，目前公内部开发使用，将来开放

哪里系统科学了？

- 从逐个汉字的教学到学习顺序，最优检测顺序的整体性问题；相互作用的处理。
- 正在解决实际汉字学习和检测的问题。
- 提出了新的渗流模型和新的顶点权传播方法。
- 有更一般的应用：例如在物理、数学等学科教学中；更一般地可以在知识管理中使用。

系统与系统思想

1. 系统：一个相互作用的个体构成的集合。这个集合的元素往往表现出在相互作用形式上一定的相似性，做为集合的整体往往表现出一定的结构、功能或者其他整体性质。
2. 系统科学：探讨相互作用的元素构成的系统的研究方法，从具体系统中提炼一般方法，并把一般方法应用于具体系统研究的学问。从具体系统中来，到具体系统中去。
3. 系统思想：系统作为一个整体，其结构与功能往往与每一个组成部分的结构功能不一样。了解系统个体的性质之后，系统整体的性质并没有完全了解，还要重新组合起来，研究整体。
4. 系统理论核心问题：对于无相互作用系统，整体性质就是每一个个体性质和行为的平均；有相互作用怎么处理?

物理学的思想、知识与方法

1. 物理学的思想：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。例如统计物理学应用于博弈论（思想与数学形式方面）。
2. 物理学关于具体学科或者具体系统的知识应用于系统科学：量子力学应用于博弈论（知识与数学形式方面），量子力学与复杂网络（数学形式方面）。
3. 物理学的计算方法，分析手段应用于系统科学：混沌与社会经济系统的可预测性（思想与知识方面），稳定性与演化博弈论（思想、知识与方法），统计物理学与经济物理学（思想方面，普适统计规律意味着深层的机制上的相似性，也有具体模型，具体分析方法方面的借鉴，临界性与自组织临界性，举例。相变在系统科学中的意义，举例）。
4. 物理学问题中发展出来的数值计算和数值模拟方法应用于系统科学：最简单直接的应用，Monte Carlo方法，Metropolis方法，关联函数（包含Green’s function），相变与关联长度，应用于多个体的系统，讨论个体之间的相互作用。

理解型学习与概念地图

1. 老师不以传授完整的学科知识体系为目标，而注重基础（可以用来自学更多），学习方法（怎么学），学科方向（开阔眼界），和品味（自己决定学什么），以及分析计算的技能。
2. 老师要解决哪一些是必要的最重要的最基础的内容，还要思考如何教；学生要明白每一块内容的地位，要把内容联系起来。
3. 怎么做：概念地图。一张概念以及概念之间的关系组成的网络。简单来说，极限与导数之间的关系，速度与位移之间的关系。
4. 减轻记忆负担，快速获取相关信息；发掘事物之间新的联系，梳理概念之间的自然的内在的联系。
5. 今天做一个基本介绍，要自觉地在所有课程中使用。

概念地图教学提纲

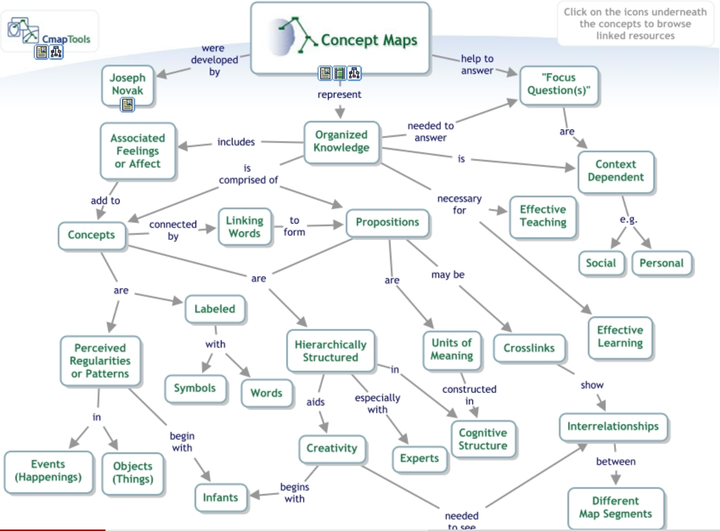
1. 什么是概念地图
2. 学习的目的
3. 知识组织形式
4. Ausubel的同化理论与建构主义认识论
5. 完成这一切的手段：概念地图，举例
6. 手动在黑板上制作概念地图
7. Cmaps工具的介绍与使用
8. 作业

什么是概念地图

1. 一个网络：顶点是概念，边是概念之间的联系，顶点与边合起来就是命题，命题的集合就是知识
2. 严格来说概念地图就是一个带结构的命题的集合，也就是带结构的知识，或者说知识的组织形式
3. 有的时候，有的概念可以不构成命题，所以更一般地来说，是概念以及概念之间关系的集合
4. 动机
   - 学习的目的：掌握知识，以及知识的合理的组织结构以利于高效率的创造性的运动，前者可以依靠google和记忆，后者必须依赖与理解
   - 好的知识组织形式的优势：层次性，减轻负担、快速获取；长程连接，创造性、迁移；形成好的组织形式的过程就是理解型学习思考的过程
5. 理论基础：Ausubel的同化理论与建构主义认识论：教学最主要的因素是了解学生已有的知识结构，然后通过把新的知识与已有的结构联系起来形成新的结构的方式来教学与学习

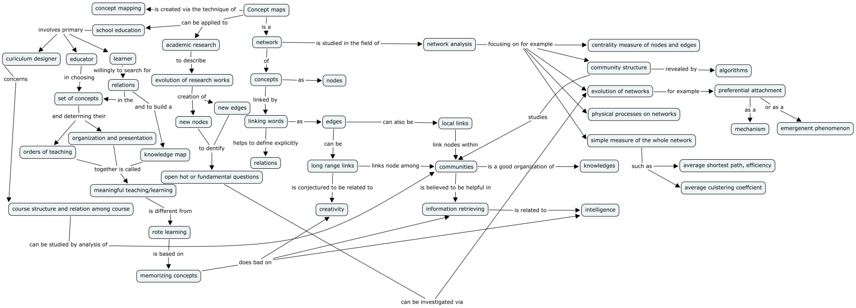
展示：关于概念地图的概念地图

- 观察：核心问题、顶点、连接、命题、层次性、长程连接



展示：关于概念地图的概念地图，续

1. 观察：核心问题、顶点、连接、命题、层次性、长程连接



举例：水有哪些状态，如何转化

1. 核心问题：水有哪些状态，如何转化?
2. 相关概念：水的状态，液态、气态、固态、温度变化
3. 概念之间的关系：如何转化，有何不同，有什么特殊的性质
4. 有血有肉：有例子
5. 重复制作与延拓
6. Cmaps工具的介绍与使用

再举例：力学基本概念，顺便复习

1. 核心问题：力学所研究的基本问题，物体在时空中的状态，以及状态变化的原因
2. 相关概念：力学，物体，典型对象，运动状态（运动学的基本概念），运动状态变化的原因（动力学，牛顿定律），关于力（深入理解发现问题），基本技术手段，典型结论
3. 概念之间的关系：有明显的、有隐藏的
4. 力是什么，关于定理，关注概念地图的底层节点，力、时间、空间、物体
5. 层级与集团结构（运动学、动力学；物理模型、数学技术、实验观测）、长程连接
6. 力学另外的逻辑体系：状态函数、初始条件、演化方程，力——没有了
7. 概念地图引领你的思考：概念的层级的不同，集团与层次结构，长程连接，基本概念的归并，直观性，制作过程就是主动思考的过程

作业

1. 课程小项目（大作业1）：阅读分析力学，构建其概念的关系地图并与牛顿力学的概念体系作比较
2. 课程小项目（大作业2）：阅读The Art of Scientific Investigation by W.I.B. Beveridge、Complexity: A Very Short Introduction by John Holland、Mathematics: A Very Short Introduction by Timothy Gowers，思考什么是科学研究，社么是系统科学，用概念地图加上文字来表达，可以是你自己的思考，也可以是这本书的内容，
3. 课程小项目（大作业3）：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

再举例：数学与物理的关系

1. 核心问题：数学与物理的关系
2. 相关概念：数学公式、数学结构、物理实验、物理理论，对概念的把握程度不够，修改核心问题或者增加对这个领域的了解
3. 概念之间的关系：没有好的把握，草图也可以
4. 例子不太好找：以后的方向
5. 等将来重复制作与延拓

再举例：数学与物理的关系

1. 作业1.1：阅读吴金闪《概念地图学习与教学方法》，并做学习报告，概念地图与文字相结合
2. 作业1.2：用概念地图展示你学习过的一门课程，可以是整个课程，也可以是其中一章或几章
3. 作业1.3：阅读The Art of Scientific Investigation by W.I.B. Beveridge，并用概念地图整理和呈现你的理解
4. 课后阅读：J. D. Novak, Learning, Creating, and Using Knowledge: Concept Maps as Facilitative Tools in Schools and Corporations
5. 课后阅读：Karl Popper，The Logic of Scientific Discovery（中译本：科学发现的逻辑）

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
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
7. 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
8. Dirac记号，完全性关系，正交归一基矢
9. 本征值与本征向量，对角化，不可对角化的矩阵
10. 微分方程组与二次型
11. 指数算符，算符的函数

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。
5. 数学是思维的语言，是对结构的描述，计算是自然的推理。
6. 线性代数是所有数学语言之中描述能力尤其突出的语言。
7. 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。
8. 技术的层面应该与概念的层面分开学习。

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

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
2. 集合、集合上的群运算——矢量加法，集合元素的数乘
3. 运算的线性性
4. 封闭性
5. 加法结合律，零元，逆元，交换律
6. 保持矢量集合与数的集合本身的操作相互协调
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
5. 共轭（实数域与复数域上不相同）

矢量空间，内积空间基本定义运用举例

1. 零元唯一性
2. 逆元唯一性

有限维矢量空间的线性相关性

1. 最大数量的线性无关矢量个数
2. 最小的N，任意大于N个矢量必然线性相关
3. 证明：有限维矢量空间最大线性无关矢量的数量唯一
4. 从线性相关矢量得到基矢，基矢的抽象记号

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4，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

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：
    $$P(\Omega) = 1, \tag{2}$$
    2. 可列可加性：对于可数个不相交的集合（互斥事件，$A_i \cap A_j = \phi$，$\forall A_i, A_j$）
    $$P(\cup_i A_i) = \sum_i P(A_i) \tag{3}$$
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

$$\int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} \rho(\xi)\,d\xi. \tag{4}$$

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

$$\rho(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}}, \tag{5}$$

均值0、方差1.

2. 特征函数

$$\phi(s) = \int dx \rho(x) e^{isx} \tag{6}$$

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。

$$\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu)}{\sqrt{n}\sigma} \longrightarrow \mathcal{N}(0,1). \tag{7}$$

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

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B|A)P(A) + P\left(B|\bar{A}\right)P\left(\bar{A}\right)}. \tag{8}$$

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?

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$P(s_w = 1 | s = 1)$，我们已知$P(s = 1 | s_w = 1) = p$，怎么办？直觉猜还是p，大概来说可以这样想，如果$s_w = -1$那么s更可能是1，所以$s_w = 1$的概率更大。

条件概率：Bayesian公式，续

1. 利用Bayesian公式计算得到

$$P\left(s_w=1|s=1\right)=\frac{P\left(s=1|s_w=1\right)P\left(s_w=1\right)}{P\left(s=1|s_w=1\right)P\left(s_w=1\right)+P\left(s=1|s_w=-1\right)P\left(s_w=-1\right)}=\frac{pq}{pq+\left(1-p\right)\left(1-q\right)} \tag{9}$$

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

$$\langle A\rangle = \int dxA(x)\rho(x) = \frac{\sum_i A(x_i)}{\sum_i}. \tag{10}$$

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

$$x_i = F^{-1}(\xi_i) \Leftrightarrow \xi_i = F(x_i) \tag{11}$$

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

$$\rho(x) = \bar{\rho}(\xi)\frac{d\xi}{dx} = \frac{d\xi}{dx} = \rho(x). \tag{12}$$

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，

$$\xi_1 = (-2\ln\eta_1)^{\frac{1}{2}}\cos 2\pi\eta_2, \tag{13}$$
$$\xi_2 = (-2\ln\eta_1)^{\frac{1}{2}}\sin 2\pi\eta_2, \tag{14}$$

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

$$\xi = \frac{\sum_i \eta_i - \frac{k}{2}}{\sqrt{\frac{k}{12}}}. \tag{15}$$

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. 特征函数与中心极限定理
3. 随机变量的测量
4. Monte Carlo方法

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

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’

物理学的基本思想与学科分类

1. 物理学所研究的基本问题：一个东西的状态发生了变化，先问这个变化怎么描述，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；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。
2. 例如从运动物体到牛顿力学的抽象：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）；Galileo（伽利略）斜面实验告诉我们没有力运动也能维持；那也就是说力的作用只能在于产生运动，也就是运动状态发生变化；于是运动状态（速度，时间），力等于速度的变化。知道这个以后，如果我们了解了各种各样的力是什么，我们就可以理解各种运动，甚至做出预测。这就是力学。首先它是一套方法论，其次它需要通过具体力的研究来运用于实际。
3. 物理学的核心思想就是力学，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

物理学的基本思想与学科分类，续

1. 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
2. 电动力学、广义相对论，具体知识为重点
3. 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
$$F = ma. \tag{16}$$
举例：自由落体，简谐振子
$$m\ddot{z} = -mg \text{ and } m\ddot{x} = -kx \tag{17}$$
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
$$\frac{d}{dt}q = \frac{p}{m} \tag{18}$$
$$\frac{d}{dt}p = f(q, p, t) \tag{19}$$
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。

从牛顿力学到Hamiltonian力学

1. 在这种情况下

$$\frac{d^2}{dt^2}mq + \nabla V = 0 \Rightarrow \dot{q}\left(\frac{d}{dt}m\dot{q} + \nabla V\right) = 0$$
$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V\right) = 0 \tag{20}$$

   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）：

$$\frac{d}{dt}q = \frac{\partial H}{\partial p}$$
$$\frac{d}{dt}p = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{21}$$

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

$$H=T+V=\frac{p^2}{2m}+V^{ext}(q) \tag{22}$$

多体

$$H=\sum_i\left(\frac{p_i^2}{2m}+V_i^{ext}(q_i)\right)+\sum_{ij}V_{ij}(q_i,q_j)\,. \tag{23}$$

利用Hamilton方程得到

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}q_i&=\frac{\partial H}{\partial p_i}\\ \frac{d}{dt}p_i&=-\frac{\partial H}{\partial q_i}\end{aligned} \tag{24}$$

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

$$L=\frac{m\dot{q}^2}{2}-V\left(q\right). \tag{25}$$

力学方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta\dot{q}}-\frac{\delta L}{\delta q}=0. \tag{26}$$

多粒子系统简单推广即可，

$$L=\sum_i\left(\frac{m\dot{q}_i^2}{2}-V_i^{ext}\left(q_i\right)\right)-\sum_{ij}V_{ij}\left(q_i,q_j\right). \tag{27}$$

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

$$S=\int_{t_i}^{t_f} d\tau L(\tau) \tag{28}$$

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$\delta q(\tau)$

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau\left(\frac{\delta L}{\delta q}\delta q(\tau)+\frac{\delta L}{\delta \dot{q}}\delta \dot{q}(\tau)\right)\\ &= \int_{t_i}^{t_f} d\tau\left[\frac{\delta L}{\delta q}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\delta L}{\delta \dot{q}}\right)\right]\delta q(\tau)\end{aligned} \tag{29}$$

3. 由此，我们得到动力学方程

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\delta L}{\delta \dot{q}}\right)=\frac{\delta L}{\delta q} \tag{30}$$

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，

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial q}dq+\frac{\partial H}{\partial p}dp &= dH = d(p\dot{q})-dL \\ &= d(p\dot{q})-\frac{\partial L}{\partial q}dq-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}d\dot{q} = d(p\dot{q})-\dot{p}dq-pd\dot{q} \\ &= -\dot{p}dq+\dot{q}dp \end{aligned} \tag{31}$$

于是

$$\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q} \tag{32}$$

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{33}$$

3. 一句话：Newton方程，Lagrangian方程和Hamilton方程都是等价的，都可以归结为最小作用量原理。后两者用起来更方便

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。

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，方励之《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. 求解方法：分子动力学模拟，Monte Carlo模拟，数值微分方程
4. 牛顿（Newton）时空观与相对速度：方励之《力学概论》P64
5. 因果律

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

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；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），

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho &= \frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial q}\frac{dq}{dt}+\frac{\partial\rho}{\partial p}\frac{dp}{dt}\\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p}-\frac{\partial\rho}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}\\ &= \frac{\partial\rho}{\partial t}+\{H,\rho\}\end{aligned}\tag{34}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho=\frac{\partial}{\partial p}\left(\rho\dot{p}\right)+\frac{\partial}{\partial q}\left(\rho\dot{q}\right)=-\{H,\rho\}\tag{35}$$

于是，

$$\frac{d}{dt}\rho=0.\tag{36}$$

从力学系统到统计力学系统：从微观到宏观

1. 遍历性假说+Liouville定理
2. 宏观状态量A

$$\langle A(t)\rangle = tr\left(A\rho(t)\right) = \int dqdpA(q,p)\rho(q,p,t). \tag{37}$$

注意，这时候$\rho(q,p,t)$是$\rho(q(t),p(t))$（称为随体视角）的场视角。

3. 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？

平衡态统计力学：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，能均分定理
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. 微正则假设
4. 从微正则到正则系综，到巨正则系综$\rho(\epsilon) = \Omega\left(E^T - \epsilon\right)$，$\Omega(E)$的形式？
5. 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
6. 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

平衡态统计力学：系综理论，续

从统计物理学到热力学，以理想气体为例：
从$H=\frac{p^2}{2m}$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，

$$S=-k_B\langle\ln\rho\rangle=-k_B\langle-\beta H-\ln Z\rangle=\frac{U}{T}+k_B\ln Z \tag{38}$$

定义一个新的物理量，自由能$F=U-TS$，我们得到

$$F=-k_BT\ln Z \tag{39}$$

- 其次，我们从热力学第二定律开始了解一下自由能，

$$\begin{aligned}TdS=dU+PdV\Rightarrow d\left(U-TS\right)+SdT&=-PdV\\ \Rightarrow dF&=-PdV-SdT\end{aligned} \tag{40}$$

因此，

$$P=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \tag{41}$$

平衡态统计力学：系综理论，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

$$P = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \tag{42}$$

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。

平衡态统计力学：系综理论，续

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$Z_N = Z^N$，

$$Z = \int dxdpe^{-\beta\frac{p^2}{2m}} = V\int dpDp^{q-1}e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}, \tag{43}$$

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

$$Z = VD\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{q}{2}}\int d\xi\xi^{q-1}e^{-\xi^2} = V\bar{D}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{q}{2}}. \tag{44}$$

- 于是

$$U = -\frac{\partial \ln Z_N}{\partial\beta} = N\frac{q}{2\beta} = \frac{q}{2}Nk_BT. \tag{45}$$

平衡态统计力学：系综理论，续

- 压强

$$P=-k_BT\frac{\partial \ln Z_N}{\partial V}=N\frac{1}{V}k_BT. \tag{46}$$

- 自由能

$$F=-k_BT\ln Z_N=-Nk_BT\ln\left(V\bar{D}\right)-Nk_BT\frac{q}{2}\ln 2m-Nk_BT\frac{q}{2}\ln k_BT. \tag{47}$$

- 熵

$$S=\frac{U-F}{T}. \tag{48}$$

- 现在我们代入热力学定律来做个检验，

$$\begin{aligned}TdS &= Td\frac{U}{T}-Td\frac{F}{T}=Td\left(Nk_B\ln V+Nk_B\frac{q}{2}\ln k_BT\right)\\ &=\frac{Nk_BT}{V}dV+Nk_B\frac{q}{2}dT=PdV+dU.\end{aligned} \tag{49}$$

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。）

平衡态统计力学：系综理论，续

下面我们来讨论混合系统的熵

- 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

$$\Delta S = Nk_B \ln 2, \tag{50}$$

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

$$\Delta S = 2Nk_B \ln 2, \tag{51}$$

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?

平衡态统计力学：系综理论，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

$$S_f = 2S_0 + 2\left(Nk_B \ln 2V - Nk_B \ln V\right), \tag{52}$$

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）

$$Z = \frac{1}{N!}\int dxdpe^{-\beta H}. \tag{53}$$

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

$$\begin{aligned} S_0^T &= 2S_0 - 2Nk_B \ln N, \\ S_f^T &= S_f - 2Nk_B \ln 2N \\ = 2S_0 + 2Nk_B \ln 2 - 2Nk_B \ln 2 - 2Nk_B \ln N &= S_0^T. \end{aligned} \tag{54}$$

平衡态统计力学：系综理论，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$Z=\int dxdpe^{-\beta H}$？

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. 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

$$\langle A\rangle = \int dxA(x)\rho(x) = \frac{\sum_i A(x_i)}{\sum_i}. \tag{55}$$

   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。

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，

$$\rho = \frac{1}{Z}e^{-\beta H}, \tag{56}$$

   配分函数Z是一个非常难以计算的量。下面我们讨论不能直接计算的平衡态分布函数的抽样，然后讨论一个例子：Ising模型。

Metropolis：统计力学中的Monte Carlo方法

1. 要获得状态分布函数的抽样

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \tag{57}$$

还要避开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

$$P_l(t+1) - P_l(t) = \sum_{m \neq l} \left[P_m(t) w_{m \to l} - P_l(t) w_{l \to m} \right] \tag{58}$$

Metropolis方法，续

1. 一个充分的（不一定必要）稳定条件——细致平衡：

$$0 = P_m(\infty)\, w_{m\to l} - P_l(\infty)\, w_{l\to m} \tag{59}$$

也就是说，

$$\frac{w_{m\to l}}{w_{l\to m}} = \frac{P_l}{P_m} = \frac{e^{-\beta E_l}}{e^{-\beta E_m}} \tag{60}$$

2. 一个满足要求的$w_{l\to m}$的选择：

$$w_{m\to l} = \frac{e^{-\beta(E_l - E_m)}}{\sum_n e^{-\beta(E_n - E_m)}} = \frac{e^{-\beta E_l}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \frac{e^{-\beta E_l}}{Z}. \tag{61}$$

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$\Delta E = E_l - E_m$，

$$w_{m\to l} = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E}, & \text{if } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{if } \Delta E \le 0 \end{cases} \tag{62}$$

   可以验算这个选择满足细致平衡。
3. 另一个常用的选择

$$w_{m\to l} = \frac{1}{e^{\beta\Delta E} + 1} \tag{63}$$

   可以验算这个也选择满足细致平衡。
4. 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$S_i = \pm 1$

$$H = -\sum_{j=0}^{N-1} J_j S_j S_{j+1}, \tag{64}$$

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，

$$Z = \sum_{\vec{S}} e^{\beta J \sum_j S_j S_{j+1}}, \tag{65}$$

其中求和要遍历2^N个状态$\vec{S}$。

Ising模型与Metropolis方法，续

1. 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_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
2. 其中的第三步可以替换成：按照$\frac{1}{e^{\beta\Delta E}+1}$来抽样
3. 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

$$\begin{cases} \frac{e^{-\beta\Delta E_\uparrow}}{e^{-\beta\Delta E_\uparrow}+e^{-\beta\Delta E_\downarrow}} = \frac{e^{\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}}{e^{\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}+e^{-\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}} & \text{取} \uparrow \\ \frac{e^{-\beta\Delta E_\downarrow}}{e^{-\beta\Delta E_\uparrow}+e^{-\beta\Delta E_\downarrow}} = \frac{e^{-\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}}{e^{\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}+e^{-\beta(S_{l-1}+S_{l+1})}} & \text{取} \downarrow \end{cases} \tag{66}$$

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

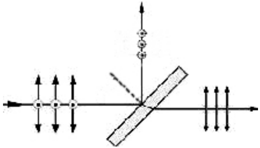
1. 相变，临界点、临界指数
2. 平均场理论，等价的几个方法
3. 重整化群
4. 统计物理学中的随机过程，随机微分方程，主方程
5. 渗流与生成函数方法
6. 关联系数、Green函数方法

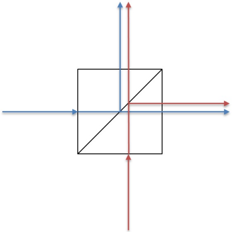
量子力学基本概念

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





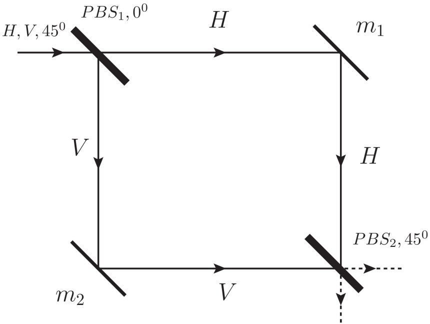
2. 偏振的数学描述，二维矢量；

$$\vec{E} = E_H \hat{H} + E_V \hat{V} \tag{67}$$

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$E_{/\!/} = \vec{E} \cdot \hat{r}$，另一个是竖直分量$E_{\perp}$。
4. 偏振的波动力学图景：经典波的叠加原理，多粒子同时到达的的话要做矢量叠加。

展开，单光子which-way实验

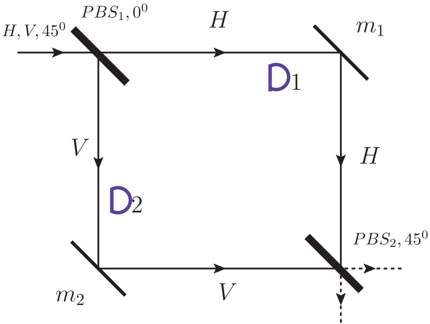
1. 实验装置



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原理的失败
4. 开放其中一条光路的结果：两个输出
5. 两条都开放：只有一个输出，为什么？经典粒子性加上概率性叠加原理的失败

展开，单光子which-way实验加上路径探测器

1. 实验装置



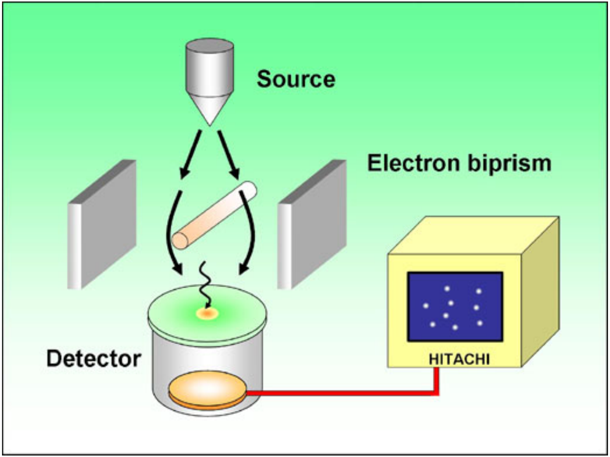
2. 问观测到几个方向上的输出？
3. 以后会教大家怎么算（将来主要教大家怎么算），这里给出结果：

$$\rho = 0.5 \sum_j \left\langle D_j \right| (|H,1\rangle + |V,2\rangle)(\langle H,1| + \langle V,2|) \left| D_j \right\rangle$$

$$= 0.5\,(|H\rangle\langle H| + |V\rangle\langle V|)\,. \qquad (68)$$

双缝干涉实验

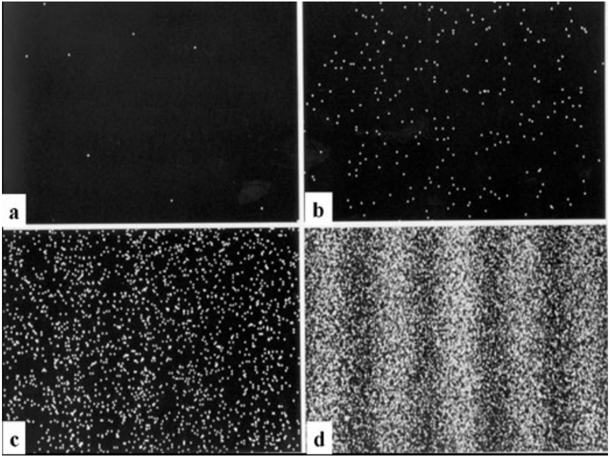
1. 实验装置



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

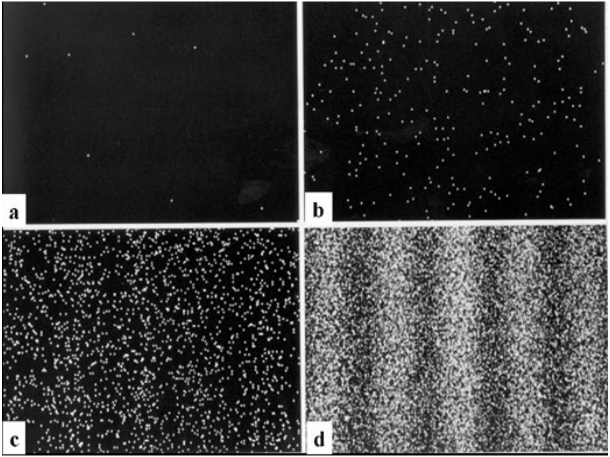
1. 实验记录录像



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

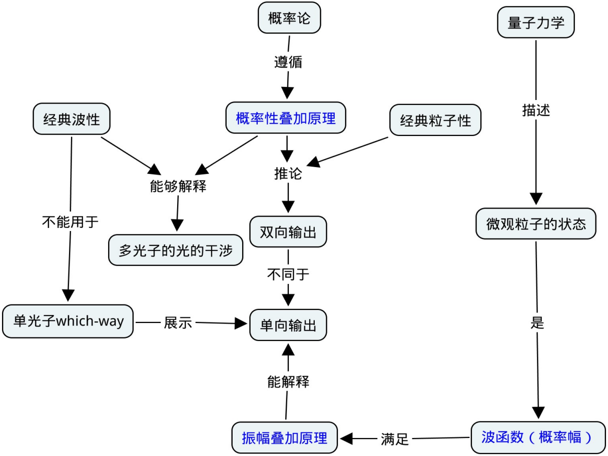
1. 录像截图



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

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

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）

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$\hat{\rho}^{cD}=\sum_x \delta\left(x-x^*\right)|x\rangle\langle x|$。
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$\hat{\rho}^{cR}=p_+\left|+\right\rangle\left\langle+\right|+p_-\left|-\right\rangle\left\langle-\right|$。
3. 一个完全对称的硬币（$\pm$），有三种不同的颜色（RGB），也就是说

$$\hat{\rho}^{cR}=\left(p_+\left|+\right\rangle\left\langle+\right|+p_-\left|-\right\rangle\left\langle-\right|\right)\left(p_R\left|R\right\rangle\left\langle R\right|+p_G\left|G\right\rangle\left\langle G\right|+p_B\left|B\right\rangle\left\langle B\right|\right) \tag{69}$$

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$\hat{\rho}^{cR,\theta}=p_{+,\theta}\left|+,\theta\right\rangle\left\langle+,\theta\right|+p_{-,\theta}\left|-,\theta\right\rangle\left\langle-,\theta\right|$，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

$$\hat{\rho}^Q = \begin{bmatrix} p_+ & q \\ q^* & p_- \end{bmatrix}. \tag{70}$$

   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，

$$p_+ = \left\langle+\right|\rho^Q\left|+\right\rangle = p_+, \tag{71}$$

   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：

$$H = h\hat{r}\cdot\vec{\sigma} \tag{72}$$

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

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sum_k \epsilon_{ijk}\sigma_k = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{73}$$

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

$$A=diag\left(\left[\alpha_1,\cdots,\alpha_\mu,\cdots\alpha_N\right]\right),B=diag\left(\left[\beta_1,\cdots,\beta_\mu,\cdots\beta_N\right]\right). \quad (74)$$

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?

$$P_\mu=\langle\mu|\rho|\mu\rangle=\langle\mu|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|\mu\rangle=\delta_{1\mu}, \quad (75)$$

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
$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| . \tag{76}$$
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
$$\rho^c = 0.5\,|+\rangle\langle+| + 0.5\,|-\rangle\langle-| . \tag{77}$$
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
$$\rho_1^Q = \frac{1}{2}\left(|1\rangle + |2\rangle\right)\left(\langle 1| + \langle 2|\right), \tag{78}$$
还是
$$\rho_2^Q = 0.5\,|1\rangle\langle 1| + 0.5\,|2\rangle\langle 2|? \tag{79}$$
有区别吗？

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

$$P_{z,1} = \langle z|\rho_1^Q|z\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle z|1\rangle\langle 1|z\rangle + \langle z|2\rangle\langle 2|z\rangle\right) \tag{80}$$

$$+\frac{1}{2}\left(\langle z|1\rangle\langle 2|z\rangle + \langle z|2\rangle\langle 1|z\rangle\right), \tag{81}$$

而

$$P_{z,2} = \langle z|\rho_2^Q|z\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle z|1\rangle\langle 1|z\rangle + \langle z|2\rangle\langle 2|z\rangle\right). \tag{82}$$

2. Eq. (81)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. (81)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：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = H\left|\psi(t)\right\rangle; \tag{83}$$

或者Liouville方程：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H, \rho(t)]. \tag{84}$$

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

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = HU(t,t_0), \tag{85}$$

形式解

$$U(t,t_0) = e^{-i\frac{1}{\hbar}H(t-t_0)} \tag{86}$$

满足

$$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I. \tag{87}$$

这个形式解可以展开成

$$U(t,t_0) = \sum_n e^{-i\frac{1}{\hbar}E_n(t-t_0)}\left|n\right\rangle\left\langle n\right|. \tag{88}$$

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：

$$\left|\psi(t)\right\rangle^{H} = e^{iHt}\left|\psi(t)\right\rangle^{S}, \tag{89}$$

诱导变换

$$A^{H}(t) = e^{iHt}A^{S}(t)e^{-iHt}. \tag{90}$$

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

$$ddtA^{H}(t) = i\left[H, A^{H}(t)\right]. \tag{91}$$

举例

1. 谐振子，$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$，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

$$\int_0^t \xi(\tau)\, d\tau = W(t), \tag{92}$$

其中高斯随机数满足

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \tag{93}$$

$$\langle \xi(t)\, \xi(\tau) \rangle = \delta(t-\tau). \tag{94}$$

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

$$\langle W(t)\, W(\tau) \rangle = \left\langle \int_0^t \xi(t_1)\, dt_1 \int_0^\tau \xi(t_2)\, dt_2 \right\rangle \tag{95}$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^\tau dt_2 \delta(t_1 - t_2) \tag{96}$$

$$= min\{t, \tau\} \tag{97}$$

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
$$dW(t) = \xi(t)\, dt \tag{98}$$
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
$$\Delta W(t) = \xi(t)\, \Delta t, \tag{99}$$
也就是
$$W(t+\Delta t) = W(t) + \xi(t)\, \Delta t. \tag{100}$$
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

$$\frac{\partial}{\partial t}P\left(w,t|w_0,t_0\right)=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial w^2}P\left(w,t|w_0,t_0\right), \tag{101}$$

初始条件

$$P\left(w,t_0|w_0,t_0\right)=\delta\left(w-w_0\right). \tag{102}$$

2. 可以计算出定态

$$P\left(w,t|w_0,t_0\right)=\left[2\pi\left(t-t_0\right)\right]^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{\left(w-w_0\right)^2}{2\left(t-t_0\right)}}. \tag{103}$$

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，

$$\dot{v} = -\gamma v + d\xi(t). \tag{104}$$

2. 其差分计算过程，

$$v(t+\Delta t) = v(t) - \gamma v \Delta t + d\xi(t)\Delta t. \tag{105}$$

3. 其分布函数$\rho(v,t)$满足的方程，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \gamma \frac{\partial v\rho}{\partial v} + D\frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2}. \tag{106}$$

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

$$dX = Adt + BdW \tag{107}$$

2. 其计算过程，

$$X(t+\Delta t) = X(t) + A\Delta t + B\xi(t)\Delta t. \tag{108}$$

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）

$$\dot{\xi}_i = h_i\left(\vec{\xi}\right) + g_{ij}\left(\vec{\xi}\right) w_j\left(t\right), \tag{109}$$

2. 定义矩阵G向量A分别为

$$G_{ij}\left(\vec{\xi}\right) = g_{ij}\left(\vec{\xi}\right), \tag{110}$$

$$h_i\left(\vec{\xi}\right) = \mathscr{A}_i\left(\vec{\xi}\right). \tag{111}$$

定义矩阵D

$$\mathscr{D}\left(\vec{\xi}\right) = G\left(\vec{\xi}\right) G^{\dagger}\left(\vec{\xi}\right), \tag{112}$$

一般的Fokker-Planck方程

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

$$\frac{\partial}{\partial t}P\left(\vec{\xi},t\right)=\left[-\sum_j\frac{\partial}{\partial\xi_j}\mathscr{A}_j\left(\vec{\xi}\right)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{\partial^2}{\partial\xi_i\partial\xi_j}\mathscr{D}_{ij}\left(\vec{\xi}\right)\right]P\left(\vec{\xi},t\right). \quad (113)$$

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$\mathscr{D}_{ij}\left(\vec{\xi}\right)$

$$\mathscr{A}\left(\vec{\xi}\right) = -\Gamma\vec{\xi}, \text{ and } \mathscr{D}\left(\vec{\xi}\right) = D \tag{114}$$

2. 以一维为例

$$\frac{\partial}{\partial t}P = \gamma\frac{\partial xP}{\partial x} + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \tag{115}$$

3. Fourier变换，初始条件

举例：OU过程，续

1. OU过程的Langevin方程

$$\dot{x} = -\gamma x + \sqrt{D}\xi(t), \tag{116}$$

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

$$\langle \dot{x}\rangle = -\gamma\langle x\rangle, \tag{117}$$

$$\langle \dot{x^2}\rangle = -2\gamma\left\langle x^2\right\rangle + 2D. \tag{118}$$

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

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} = \sum_m \left[w(m \to n) W_m - w(n \to m) W_n \right], \tag{119}$$

如果定义了转移概率$w(m \to n)$。

2. 一般的连续Master方程

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \int dx' \left[w(x' \to x) W(x',t) - w(x \to x') W(x,t) \right], \tag{120}$$

3. 从FPE到Master方程：

$$w(x' \to x) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} \mathscr{A}(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathscr{D}(x) \right] \delta(x - x') \tag{121}$$

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

$$X+A\to 2X \tag{122}$$
$$X\to A \tag{123}$$
$$E\to X \tag{124}$$

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

$$\dot{x}=k_1ax-k_2x+k_3e=0.9x-1.0x+0.1. \tag{125}$$

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,

$$\frac{d}{dt}P_n = d(n+1)P_{n+1} + mP_{n-1}$$
$$+b(n-1)P_{n-1} - d(n)P_n - mP_n - b(n)P_n. \tag{126}$$

2. Stationary state is defined by $\frac{d}{dt}P_n = 0$.
3. 生成函数方法$G(z,t) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n P_n(t)$。
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$P(n_X)$

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

$$x_{n+1} = (1+\alpha)\, x_n \tag{127}$$

给定初始条件x_0，我们有

$$x_n = (1+\alpha)^n\, x_0. \tag{128}$$

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：

$$x_{n+1} = (1+\alpha)\, x_n - \beta x_n^2, \tag{129}$$

重新整理一下形式，定义新的参数，我们可以得到

$$x_{n+1} = \gamma x_n\,(1 - x_n)\,. \tag{130}$$

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

$$\dot{x} = \alpha x \tag{131}$$

给定初始条件x_0，我们有

$$x(t) = e^{\alpha t} x_0. \tag{132}$$

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：

$$\dot{x} = \alpha x - \beta x^2, \tag{133}$$

重新整理一下形式，定义新的参数，我们可以得到

$$\dot{x} = \gamma x \left(1 - \frac{1}{K} x\right). \tag{134}$$

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：

$$x_{n+1} = g(x_n, \mu) \tag{135}$$

2. 连续系统：

$$\dot{x} = f(x(t), \mu) \tag{136}$$

3. 微分方程差分化：

$$x(t+\Delta t) = x(t) + f(x(t), \mu)\Delta t \tag{137}$$

   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^*：
$$x^* = g(x^*, \mu). \tag{138}$$
2. 引入小偏移$x = x^* + \delta x$，我们得到δx的方程，
$$\delta x_{n+1} = g'(x^*, \mu)\,\delta x_n + \mathfrak{o}\left(\delta^2 x_n\right). \tag{139}$$
3. 或者连续时间系统
$$f(x^*, \mu) = 0. \tag{140}$$
4. 引入小偏移$x = x^* + \delta x$，我们得到δx的方程，
$$\dot{\delta x} = f'(x^*, \mu)\,\delta x + \mathfrak{o}\left(\delta^2 x\right). \tag{141}$$

   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

$$\dot{x}=f(x,u,t) \tag{142}$$

$$y=g(x,u,t) \tag{143}$$

选择合适的$u(t)$使得$y(t)$的一个泛函

$$S=S[y(t)] \tag{144}$$

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

$$\dot{x} = Ax + Bu \tag{145}$$
$$y = Cx + Du \tag{146}$$

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

$$S = (y(t_f) - y^*)^T [y(t_f) - y^*] \tag{147}$$

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/C
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）