量子力学的数学基础初步

——主要参考《微分几何入门与广义相对论》中册附录 B

黄景龙

B 站账号：我真的不懂微分几何

目录

前言 1

1 Hilbert 空间初步 2

1.1 Hilbert 空间及其对偶空间 2
1.1.1 内积空间 2
1.1.2 内积空间的对偶空间 4
1.1.3 内积空间的完备性与 Hilbert 空间 7
1.1.4 * 拓展阅读——δ 函数面面观 10
1.1.4.1 传统观点——“一元函数”及其缺点 10
1.1.4.2 现代观点 1——连续线性泛函 12
1.1.4.3 现代观点 2——广义函数的弱极限 14
1.2 Hilbert 空间的正交归一基 17
1.3 Hilbert 空间上的（有界）线性算符 20
1.3.1 对偶算符 20
1.3.2 伴随算符、自伴（厄米）算符 22
1.4 "bracket" 与完备性关系 24
1.5 态矢与射线 25

2 无界算符及其自伴性 26

2.1 算符的定义域 26
2.2 算符的有界性 27
2.3 伴随算符的重新定义 28
2.4 厄米算符、自伴算符的重新定义 29
2.5 位置、动量算符的自伴性 30
2.6 对量子力学中物理提法的评述 31
2.7 * 拓展阅读——自伴算符的谱理论初探 32
2.7.1 算符用投影算符展开 32
2.7.2 算符的谱与谱族 33
2.7.3 自伴算符的谱分解定理及其简单应用 34
2.7.4 对量子力学中物理提法的再评述 35

3 附录 36

A 若干补充知识 36
A.1 （复）矢量空间的直和 36

A.2 线性泛函的连续性 39
A.3 内积的连续性 42
B 投影定理（正交分解定理）与 Riesz 表现定理 44
B.1 投影定理（正交分解定理） 44
B.2 Riesz 表现定理 47
C Riemann-Lebesgue 引理 50
D Dirichlet 积分 54

前言

众所周知，量子力学的数学基础主要是泛函分析，而**许多量子力学的教材对此介绍得非常不够**. 另外，坊间早有传言：“**实变函数学十遍，泛函分析心泛寒!**”可见其难度之深，特别是对于笔者这种数学上的“门外汉”而言. 为了试图弥补这一遗憾，笔者认真学习了梁灿彬先生主编的《微分几何入门与广义相对论》中册的附录 B，虽仍有许多不懂之处，但受益匪浅，遂打算将之整理成讲义，并适当补充一些内容进去. 像1.1.4.3小节就是笔者补充的，还有该讲义的 3（附录）部分也是如此，前者是在学习数学物理方程的过程中积累的素材，后者是对正文的部分定理（或结论）给出的证明. 本还想在附录证明更多涉及的定理（或结论），然学识有限，力有不逮矣！

笔者还在 B 站的 up“蔻享学术”录的，梁灿彬先生讲中册附录 B 的视频处学到了许多，然上苍并未给梁先生最后一点时间录完“无界算符及其自伴性（续 2）”，春节过后梁先生便驾鹤西去，斯人已逝，长歌当哭，呜呼哀哉！**谨以此篇纪念梁先生**.

除去3（附录）部分，本讲义分两大章：1 Hilbert 空间初步和2无界算符及其自伴性.

前一章主要介绍 Hilbert 空间的初步内容，再用这样的语言重新考察量子力学中常见的线性算符以及所谓“形式理论”中的 Dirac 左右矢（bracket）记号，最后再讲讲与物理现实紧密相关的“态矢与射线”. 值得一提的是，拓展阅读的1.1.4.3小节从另一个角度剖析了 δ 函数的数学实质，这是梁先生书中没有的.

后一章则是最精彩同时亦是最难的部分，**试图将量子力学中把“有界”与“无界”算符混为一谈的情况澄清，指出自伴算符的要求强于厄米算符，二者不可混淆**. 在拓展阅读中，尝试介绍泛函分析中的谱理论来加深对自伴算符优越性的理解. 笔者坦白讲，囿于学识，即便是对着梁先生的书，也难以从容下笔讲述之，但尽力将能学到的写出来.

感谢梁先生的书和视频（虽未录完）的讲解，没有它们，这份讲义是不可能完成的！同时也要感谢微信公众号“与 Celeio 同行”的“我的笔记 LaTeX 模板分享兼使用说明”一文的无私分享，这份讲义就是使用该模板完成的，该模板的清晰度和美观性都很高，堪称上乘之作.

然错误或不妥之处一定诸多，还望读者不吝赐教，笔者必及时改之.

黄景龙

壬寅年四月初十（2022.5.10）于书桌前

第 1 章

Hilbert 空间初步

1.1 Hilbert 空间及其对偶空间

在线性代数中，我们已经学过矢量空间（vector space）[①]的定义，这里不再详述. 简单说来，在某数域下，对于一个集合自然地定义加法和数乘（还有零元），并且里面的元素在这种线性运算下是封闭的，那么这个集合就成了矢量空间.

然而，我们以前所见的矢量空间大都是实的（real），即涉及的数域是实数域 $\mathbb{R}$，现在我们要讨论复的（complex）矢量空间，只需要将上述定义的 $\mathbb{R}$ 改为 $\mathbb{C}$ [②] 就可以了.

下面在此基础上定义**内积空间（inner product space）**.

[①] *vector* 可译为“矢量”或“向量”，均是形象之名，故又叫“向量空间”.

[②] $\mathbb{C}$ 代表复数域，粗略地说，它是全体复数的集合. 具体地，里面的每一个元素关于加法和乘法封闭，且都有加法逆元；对于任一非零元都有乘法逆元. 这是可以证明的.

1.1.1 内积空间

定义 1.1.1. 复矢量空间 V 称为内积空间，若存在内积映射 $(\cdot,\cdot): V\times V\to\mathbb{C}$，对任意 $f,g,h\in V$ 和任意 $c\in\mathbb{C}$ 满足
(a)$(f,g+h)=(f,g)+(f,h)$；
(b)$(f,cg)=c(f,g)$；
(c)$(f,g)=\overline{(g,f)}$，其中 $\overline{(g,f)}$ 代表复数 (g,f) 的共轭；
(d)$(f,f)\geqslant 0$，且 $(f,f)=0\Longleftrightarrow f=0$.

注记. 1. 内积映射 $(\cdot,\cdot)$ 中前后两个实心点代表第一槽（slot）和第二槽，把它想象成机器的话，在两槽里输入 $f,g\in V$，就会出一个复数 $c\in\mathbb{C}$.
2. 上述定义的 (a),(b) 和 (c) 表明，内积映射对第二槽是线性的，而对第一槽是**反线性的**，即 $(f+g,h)=(f,h)+(g,h),(cf,g)=\bar{c}(f,g)$.
3. 上述定义的 (d) 表明，$(f,g)=0,\forall g\in V\Longrightarrow f=0$.
4. 原则上说，只含零元也可以成为内积空间，但这里讨论的是维数 $\dim V>0$ 的内积空间.
对 2、3 的证明留作习题.

例 1.1.1. 记 $C[a,b]\equiv\{[a,b]\subset\mathbb{R}$上的连续复值函数$f(x)\}$，则 $C[a,b]$ 是无限维复矢量空间. 故可在其上定义内积

$$(f,g):=\int_a^b\overline{f(x)}g(x)\mathrm{d}x,\forall f,g\in C[a,b]. \tag{1.1.1}$$

读者不难验证，上述定义确实满足定义1.1.1，因而真是内积.

上面已经在矢量空间的基础上定义了内积，现在不妨再加一些拓扑结构，考虑一下两元素的**“距离（distance）”**.

定义 1.1.2. 内积空间 V 中任意两元素 f,g 的“距离”是

$$d(f,g):=\sqrt{(f-g,f-g)}. \tag{1.1.2}$$

注记. 易见：
1.$d(f,g)\geqslant 0$.
2.$d(f,g)=d(g,f)$.

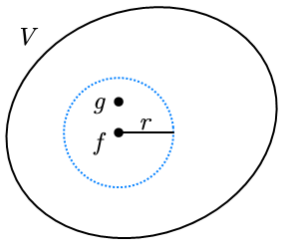

图 1.1.1. 开球的定义示意

对 2 的证明留作习题.

在“距离”的基础上可以定义**开球（open ball）**.

定义 1.1.3. 设 $f \in V, r > 0$, 则以 f 为中心、以 r 为半径的开球是

$$B(f,r) := \{g \in V | d(g,f) < r\}.$$

它的形象示意如图1.1.1所示.
还可以用开球给 V 定义自然拓扑：

$$\mathscr{T} := \{\text{空集或}V\text{中能表为开球之并的子集}\}. \tag{1.1.3}$$

这样，内积空间 V 就自然成了一个拓扑空间（topological space），今后所指的 V 上的拓扑均是此自然拓扑.

习题 1.1. 证明定义1.1.1中注记的 2、3.

习题 1.2. 证明定义1.1.2中注记的 2.

习题 1.3. 设 $V \equiv \{\mathbb{R}\text{上的连续实值函数}f(x)\}$，则它是无限维实矢量空间.
请用式1.1.1所定义的内积证明三角函数系

$$\{1, \sin x, \cos x, \cdots, \sin nx, \cos nx\}$$

内的每个元素彼此线性无关.（提示：考虑用三角函数系的元素作基底展开 $f(x)$，并命 $f(x) = 0$，这样只需证基底前的每个系数都为 0，而这用式1.1.1所示的内积是很好完成的.）

1.1.2 内积空间的对偶空间

我们早在线性代数（高等代数）里就已接触过实矢量空间 V 的**对偶空间 (dual space)** V^*，它是全体由 V 到 $\mathbb{R}$ 的线性映射的集合：

$$V^* := \{\omega : V \to \mathbb{R} | \omega\text{为线性的}\}.$$

例 1.1.2. 设 $V = \mathbb{R}^{(n)}$ 是由 n 维的列矢量全体构成的空间，$V' = \mathbb{R}^n$ 是行矢量空间. $\forall a = (a_1, \cdots, a_n) \in V'$，定义线性映射 $f_a : V \to \mathbb{R}$：

$$f_a(x) := ax \equiv (a, x) = a_1x_1 + \cdots + a_nx_n \equiv A \in \mathbb{R}, \forall x = (x_1, \cdots, x_n)^T \in V.$$

其中第二个等号成立是因为它满足内积的定义1.1.1. 不难看出，f_a 就是 V 的对偶空间 V^*.

对于复矢量空间 V，我们也可以类似定义 V^*，只需把 $\mathbb{R}$ 改成 $\mathbb{C}$ 即可. 那对于内积空间 V 又如何呢？

在上一小节末，我们让内积空间有了自然拓扑，那么很自然地就要讨论映射 $\eta : V \to \mathbb{C}$ 是否连续的问题. 为此，先介绍连续的概念.

一般地说，所谓映射 $f : X \to Y$ 是**连续的 (continuous)**，意思是 Y 中的开集在 f 下之逆像仍为开. 可以证明，这样对映射连续性的刻画包容了在微积分中关于连续的刻画：

$$\begin{aligned} &\forall x \in \mathbb{R}, \text{一元函数} f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}\text{是连续的.} \\ \iff &\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0, \text{s.t.} |x' - x| < \delta \implies |f(x') - f(x)| < \epsilon. \end{aligned}$$

更具体地，下面给出拓扑语境下对映射连续性的定义.

定义 1.1.4. 设 $(X, \mathscr{T})$ 和 $(Y, \mathscr{S})$ 是拓扑空间. 映射 $f : X \to Y$ 为连续的，若 $f^{-1}[O] \in \mathscr{T}, \forall O \in \mathscr{S}$.

注记. 1. 上述定义中的 $f^{-1}[O]$ 是关于集合的“逆像”，而不是我们熟知的元素的逆像（如 $\sin^{-1}x \equiv \arcsin x, x \in [-1, 1]$ 是关于 x 的逆像）. 其中 $O \subset Y$，其“逆像”也是子集，只不过是 X 中的：

$$f^{-1}[O] := \{x \in X | f(x) \in O\} \subset X.$$

因而可看做是传统“逆映射”的推广.
2. 请读者根据式1.1.3和定义1.1.3验证：如此定义的“连续”正是上述所讲的“Y 中的开集在 f 下之逆像仍为开”，留作习题.

对于上述的映射 $\eta : V \to \mathbb{C}$，其连续性就是通过 定义1.1.4来刻画的. 但是，事情没有这么简单. $\mathbb{C}$ 作为内积空间，自然也需要讨论其拓扑. 不过，这时定义 $\mathbb{C}$ 上的拓扑是很自然的，先定义“距离”，就有了开球，于是有了拓扑.

对于 $\forall z_1 = a_1 + \mathrm{i}b_1, z_2 = a_2 + \mathrm{i}b_2 \in \mathbb{C}$（$\forall a_1, a_2, b_1, b_2 \in \mathbb{R}$），它们间的“距离”是这么定义的：

$$d(z_1, z_2) := \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + (b_1 - b_2)^2}.$$

这样，开球的定义就可以仿照定义1.1.3，从而定义了 $\mathbb{C}$ 的拓扑.

在泛函分析中，每个连续的线性映射 $\eta : V \to \mathbb{C}$ 称为 V 上的一个**连续线性泛函 (continuous linear functional)** . 我们关心 V 上全体连续线性泛函的集合（它有许多好的性质），于是有如下定义.

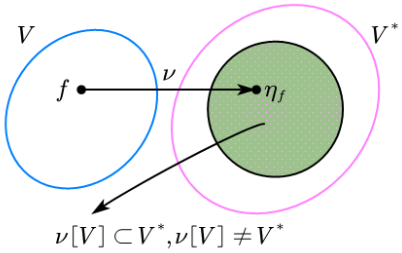

图 1.1.2. V^* 可能“比 V 更大”

定义 1.1.5. 内积空间 V 的**对偶空间**（又称**共轭空间**）V^* 定义为

$$V^* := \{\eta : V \to \mathbb{C} | \eta \text{为连续的线性映射}\}.$$

注记. V^* 同时也可看做复矢量空间，只需自然地定义线性运算：
(a) **加法** $(\eta_1 + \eta_2)(f) := \eta_1(f) + \eta_2(f), \forall \eta_1, \eta_2 \in V^*, f \in V$；
(b) **数乘** $(c\eta)(f) := c\eta(f), \forall \eta \in V^*, f \in V, c \in \mathbb{C}$.
这样做以后，V^* 中的零元也获得定义了，它作用于 $f, \forall f \in V$ 都得零.

到目前为止，我们已经有了内积空间 V 和其对偶空间 V^*. 学过量子力学的读者可能会自然地联想到 Dirac 的左矢和右矢空间. 然而事情稍微复杂些.Dirac 的左右矢记号可谓**得心应手、左右逢源**，即左、右矢空间应该“完全对等”，也就是说，$g : V \to V^*$ 应该 **一一到上 (one-one onto)** [①]. 但由于量子力学里的许多内积空间是无限维的，使得上述映射未必“到上（onto）”，形象地说，V 和 V^*“不一样大”.

[①] 即它是双射（*bijection*）.

关于 Dirac 的左右矢记号，留到1.4节来讨论，先看下面的命题.

命题 1.1.1. 内积映射 $(\cdot, \cdot)$ 自然地诱导出一个一一的、反线性的映射 $\nu : V \to V^*$.

注记. 1.“一一的”是指这个映射是单射（injection），即

$$\nu(f) = \nu(h) \Longrightarrow f = h, \ \forall f, h \in V.$$

2.“反线性的”是指

$$\nu(f + h) = \nu(f) + \nu(h), \ \nu(cf) = \bar{c}\nu(f), \ \forall f, h \in V, c \in \mathbb{C}.$$

证明. $\forall f \in V$, 令 $\eta_f \equiv (f, \cdot)$，则 $\forall g \in V$，使得 $\eta_f(g) \equiv (f, g) \in \mathbb{C}$. 那么它是 V^* 中的元素吗？即它是连续线性映射吗？
实际上，内积的存在保证了线性性，还可以证明它是连续的【因为证明连续性需要动用 $\mathbb{C}$ 的拓扑，已超出本讲义的范围（笔者也不能很好地掌握），故略去. 有兴趣的读者请参看任一泛函分析教材和点集拓扑学教材，对于前者笔者比较推荐孙炯等人编的《泛函分析》（第二版）】. 这样，$\eta_f \in V^*$，定义 $\nu(f) := \eta_f$，易见 $\nu : V \to V^*, f \mapsto \eta_f$. 映射 ν 的一一性和反线性性的证明留作习题. □

要指出的是，若 V 是有限维的，则 V^* 和 V 的维数相同，即 $\dim V^* = \dim V$. 但是，若 V 是无限维的，那么 V^* 也是无限维的，这时 $\nu : V \to V^*$ 不一定到上. 直观地说，V^* 可能“比 V 更大”，如图1.1.2所示.

然而，为了使得 Dirac 的左右矢运算能正确，需要 V^* 和 V“一样大”，即 $\nu[V] = V^*$. 下一节将看到，其实 V^* 最多只比 V“**多一层皮**”，只要给 V 适当“添上这层皮”，$\nu : V \to V^*$ 就可以到上，V^* 与 V 就“一样大”了.

习题 1.4. 验证定义1.1.4中注记的 2.

习题 1.5. 证明命题1.1.1中映射 ν 的一一性和反线性性.

1.1.3　内积空间的完备性与 Hilbert 空间

上一节讲到了内积空间及其对偶空间，并在末尾指出 V^* 和 V “不一样大”，而这会给 Dirac 的左右矢记号带来麻烦. 为了解决之，我们需要对内积空间 V 完备化，即为之“添上一层皮”.

为此，先引入一些概念.

定义 1.1.6. 设 V 是内积空间，$f \in V$，$\{f_n\}$ 是 V 中的一个序列.
我们说 $\{f_n\}$ **收敛于**f，若 $\lim\limits_{n\to\infty} d(f, f_n) = 0$. 同时，$f$ 称为序列 $\{f_n\}$ 的**极限**，记作 $f = \lim\limits_{n\to\infty} f_n$.

有了内积空间（带拓扑）中极限的定义，就可以讨论一个重要的序列——**Cauchy 序列 (Cauchy sequence)** 了.

为了帮助读者更好地接受，先来简要回顾一下在数学分析的 Cauchy 收敛准则：

$$\begin{aligned} &\mathbb{R}\text{上的序列}\{a_n\}\text{收敛} \\ \Longleftrightarrow\ &\forall \epsilon > 0, \exists N > 0, \text{使得当} n, m > N \text{时，有} |a_n - a_m| < \epsilon. \end{aligned}$$

注记. 1. 满足该条件的序列 $\{a_n\}$，也称为 Cauchy 序列. 因而上述命题可重新表为：序列 $\{a_n\}$ 收敛，当且仅当它是一个 Cauchy 序列.
2. 不难看出，Cauchy 收敛准则的表述中使用了 $\epsilon - N$ 语言，学过微积分（或数学分析）的读者应对此不感到陌生.

下面，将其推广至内积空间 V 中，有如下定义.

定义 1.1.7. 设内积空间 V 中的序列 $\{f_n\}$ 为 Cauchy 序列，若 $\forall \epsilon > 0, \exists N > 0$, 使得当 $n, m > N$ 时，总有

$$d(f_n, f_m) < \epsilon.$$

注记. 可以证明，收敛于任一 $f \in V$ 的序列一定是 Cauchy 序列，反之不然. 这与刚刚看到的数学分析中的 Cauchy 收敛准则不一样，那里的条件是互为充要的.

通过 Cauchy 序列，我们可以刻画内积空间 V 的完备性.

定义 1.1.8. 内积空间 V 是**完备的 (complete)**，若其中任一 Cauchy 序列收敛.

让我们考察一下例1.1.1中 $C[a,b]$ 的完备性 [①] .

例 1.1.3. $C[a,b]$ 作为内积空间，是不完备的.
如图1.1.3所示，(a),(b),(c) 代表 $C[a,b]$ 中的某一连续实值函数序列 $\{f_n(x)\}$ 的三个元素（其序号 n 依次增大）. 则序列 $\{f_n(x)\}$ 不收敛于 $C[a,b]$ 中的任何元素，如果一定要谈收敛，那么它收敛于 (d) 代表的函数 $f(x) \notin C[a,b]$（因其不连续）. 这就表明 $C[a,b]$ 不完备.

为使之完备化，只好被迫“放弃”连续的要求，转而将 $C[a,b]$ 中虽不连续但**平方可积**的复值函数（如图1.1.3中的 (d)）包含进去，扩大后的空间记作 $L^2[a,b]$，即 [②]

$$L^2[a,b] \equiv \left\{ f : [a,b] \to \mathbb{C} \,\middle|\, \int_a^b |f(x)|^2 \mathrm{d}x < \infty \right\}. \tag{1.1.4}$$

仍用式1.1.1定义内积，则可以证明扩大后的 $L^2[a,b]$ 是完备的.

内积空间 $C[a,b]$ 的这一完备化过程很有启发性. 事实上，任何不完备的内积空间 V 都

① 为易于理解，下面的例子取了里面的实值函数.

② 严格地说，式*1.1.4*中的积分应是 *Lebesgue* 积分，$f(x)$ 还应具有“可测性”. 但可喜的，是物理上绝大部分的函数都满足这一要求.
还应指出，如果两个函数只在测度为 *0* 的集上不同，就该被视为 $L^2[a,b]$ 中的同一元素.$L^2(\mathbb{R}^n)$ 继承这一要求.

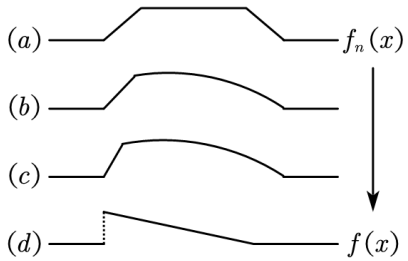

图 1.1.3. $C[a,b]$ 不完备之例

可以完备化，只需把它略加扩大——把所有的 Cauchy 序列“应有的极限点”都补入其中. 可以证明[③]，对任何不完备的内积空间 V，总可以找到完备的内积空间 $\tilde{V}$，使得 $V\subset\tilde{V},\overline{V}=\tilde{V}$（其中 $\overline{V}$ 是把 $\tilde{V}$ 看作用内积定义的拓扑空间时，其子集 V 的闭包[④]）. 直观地说，$\tilde{V}$ 比 V **“最多只多一层皮”**.

可见，内积空间不一定完备，不妨给完备的内积空间赋予专名.

定义 1.1.9. 完备的内积空间叫 **Hilbert 空间 (Hilbert space)**，记作 $\mathscr{H}$.

注记. 可以证明，有限维的内积空间一定完备，换句话说一定是 Hilbert 空间. 量子力学中的多数 Hilbert 空间是无限维的，这是复杂的根源.

下面看个量子力学中常用的 Hilbert 空间.

例 1.1.4. 与 $L^2[a,b]$ 相仿，

$$L^2(\mathbb{R}^n)\equiv\left\{f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{C}\middle|\int|f(\mathbf{x})|^2\mathrm{d}^nx<\infty\right\}\tag{1.1.5}$$

也是 Hilbert 空间. 若取 $n=3$，即 $L^2(\mathbb{R}^3)$ 是量子力学常用的**波函数空间**.

由于完备性的“加持”，Hilbert 空间具有许多很好的性质，其中一个对量子力学的严格性非常有用的就是，$\mathscr{H}$ 与其对偶空间 $\mathscr{H}^*$ “一样大”. 用命题1.1.1的语言，$\nu[\mathscr{H}]=\mathscr{H}^*$. 这件事情由下面这个极其重要的命题（泛函分析中重要的定理）保证：

命题 1.1.2 (Riesz 表现定理)**.** 设 $\mathscr{H}$ 是 Hilbert 空间，$\mathscr{H}^*$ 是其对偶空间，则 $\forall\eta\in\mathscr{H}^*$，存在唯一的 $f_\eta\in\mathscr{H}$，使得 $\eta(g)=(f_\eta,g),\forall g\in\mathscr{H}$.

证明. 这个命题十分重要，本讲义没有略去其证明，但因篇幅过大，只好将之写在附录部分. 先给出投影定理（正交分解定理），再用它证明这个命题，请读者移步至附录B阅读之. 若对相关数学语言不太熟悉的读者，可以连同附录A一起阅读，那里补充了一些初学者可能不熟悉的知识. □

注记. 命题1.1.2表明，对 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$，命题1.1.1 提到的映射 $\nu:\mathscr{H}\to\mathscr{H}^*$ 是一一到上的反线性映射，这就保证了 $\mathscr{H}$ 与其对偶空间 $\mathscr{H}^*$ “一样大”，如图1.1.4.

下面要进一步说明，$\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^*$ 是“像得不能再像”的.

利用映射 $\nu:\mathscr{H}\to\mathscr{H}^*$ 可以给 $\mathscr{H}^*$ 赋予内积：$\forall\eta,\xi\in\mathscr{H}^*$，由上述命题可知，存在唯一的 $f_\eta,f_\xi\in\mathscr{H}$ 使得 $\eta=\nu(f_\eta),\xi=\nu(f_\xi)$. 不妨定义

$$(\eta,\xi):=(f_\xi,f_\eta),\tag{1.1.6}$$

则不难验证它满足内积的定义（留作习题），因而 $\mathscr{H}^*$ 称为内积空间. 还可以证明它是完备的，因而成为 Hilbert 空间.

[③] 读者可以去《微分几何入门与广义相对论》中册的附录 *B*-选读 *[B-1-1]* 阅读更详细的说明.

[④] 这里介绍闭包（*closure*）的概念，为此，先用拓扑定义闭集（*closed set*），一定条件下的闭集之交即闭包.
1.$C\subset X$ 叫闭集，若 C 的补是 X 的拓扑的元素，即 $-C\in\mathscr{T}$.
2.$C\subset X,C$ 的闭包记作 $\overline{C}$，它是所有包含 C 的闭集之交，即 $\overline{C}:=\bigcap_\alpha C_\alpha, C\subset C_\alpha$，且 C_α 为闭集.

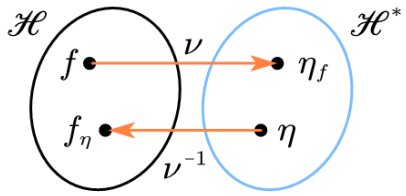

图 1.1.4. $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^*$ “一样大”

正是由于这个原因，量子力学里的左矢和右矢空间才能“**大行其道**”，我们将在小节1.4进行更深入的讨论.

习题 1.6. 验证式1.1.6所定义的内积的确满足内积的定义.

习题 1.7. 阅读附录B（还可以连同附录A一起阅读）.

1.1.4 * 拓展阅读——δ 函数面面观

Laurent Schwartz（1915-2002）是法国科学院院士，第二代布尔巴基学派（school of Bourbaki）[①]的重要成员，广义函数（generalized function/distribution）理论的奠基人.

20 世纪 40 年代左右，他在力作 *Théorie des distributions* （《广义函数论》）中指出，50 多年前，英国工程师 Heaviside 引入的 Heaviside 函数（在工程上，又称阶跃函数）：

$$H(t) := \begin{cases} 1, & t \geqslant 0, \\ 0, & t < 0 \end{cases}$$

成了一种**“虽不严格但却很成功的”技巧**，原因是它在电工学方面的用处：设在电路上有一个断开的开关，而在 $t = 0$ 时刻将其闭合使电路有电流为 1，用此来描述电流的变化. 后来

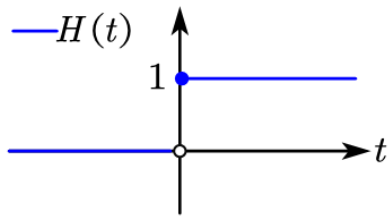

图 1.1.5. Heaviside 函数示意

Dirac 提出了 δ 函数的概念[②] 并用它成功地解决了许多物理问题（尤其在量子力学上），它与 Heaviside 函数有着密切联系（下面会提到，但本节不会严格探讨之）.

1.1.4.1 传统观点——“一元函数”及其缺点

按照 Dirac 的想法，δ 函数是满足如下条件的所谓“一元函数”：

(a) 它在 $x = 0$ 以外处处为零而在 $x = 0$ 处为无穷，即

$$\delta(x) := \begin{cases} 0, & x \neq 0, \\ \infty, & x = 0; \end{cases} \tag{1.1.7}$$

(b) 它有所谓的“筛选性质”，即对 $\mathbb{R}$ 上的任意函数 $\varphi(x)$ 有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\varphi(x)\mathrm{d}x = \varphi(0). \tag{1.1.8}$$

由 (b) 立刻得到如下推论：

推论 1.1.1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1. \tag{1.1.9}$$

Heaviside 指出，$\delta(x)$ 的不定积分即为 $H(t)$，即

$$H(t) = \int_{-\infty}^{t} \delta(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 1, & t \geqslant 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

至于这样做严格与否，也需要用广义函数的理论加以检验（至少要涉及“广义导数”的概念），这里从略.

让我们回到 Dirac 意义下的 δ 函数 $\delta(x)$. 它显然不是一般意义下的一元函数[③]，原因有

[①] 这是由一些法国数学家所组成的数学结构主义团体. 他们只关心各种数学对象之间的内在联系，其中代数结构、拓扑结构和序结构是最基本的结构，称为母结构. 对于此，修习过数学分析中的实数理论的读者应该不会感到陌生.

[②] 事实上，*Heaviside* 已经引进了它.

[③] 尽管如此，它的物理意义还是很明确的.
设在 x 轴原点处有一个质量为 *1* 的质点，其它位置则没有质量，这种情形的质量分布密度函数即 $\delta(x)$. 这是因为：*(1)* 式*1.1.7*表明其质量集中于原点；*(2)* 式*1.1.9*显示其总质量为 *1*.

二：

- 一元函数应是 $f : D \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，然式 1.1.7与此并不符；
- 条件 (a) 表明 $\delta(x)$ 几乎处处为零，按 Lebesgue 积分只能有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 0,$$

然式1.1.9与此并不符.

这就需要用广义函数理论将 δ 函数置于严格的数学基础之上了.

可能有读者会问，上面给出了 Heaviside 函数的图示（图1.1.5），那么 $\delta(x)$ 长什么样呢？应该说，对于 Dirac 意义下的 $\delta(x)$，还是很难直接画出图像的，这时我们需要从另一种观点看它，找些与之很“像”的函数，或者是它的“逼近”，留到小节1.1.4.3讨论.

一开始数学界拒绝接受 δ 函数，而随着 δ 函数 **“屡战屡捷”**，越来越多数学家开始研究如何对其严格化的问题.

1.1.4.2 现代观点 1——连续线性泛函

在介绍第一个现代的观点之前，先补充一个拓扑学概念.

定义 1.1.10. 设 $(X,\mathscr{T})$ 是拓扑空间，f 是定义在 X 上的函数，集合

$$\overline{\{x\in X|f(x)\neq 0\}}$$

称为 f 的**支集（support set）**，记作 $\mathrm{supp}(f)$.

注记. 1. 这里特取 $X=\mathbb{R}$;
2. 从上述定义不难看出，定义在 $\mathbb{R}$ 上的函数 $f(x)$ 的支集就是子集 $\{x\in X|f(x)\neq 0\}$ 之闭包（我们在小节1.1.3 的旁注里已经介绍过闭包的概念）;
3. 粗略地从图像上看，函数的那些不为零的值离 x 轴有一定“距离”，就像是“支撑起”该函数一样，“支集”由此得名.

为了了解像 $\delta(x)$ 这样的函数，不妨先寻找一种“足够好”的函数空间. 为何？让我们回到式1.1.8.

观察式1.1.8不难发现，

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)(\cdot)\mathrm{d}x$$

就像是一部有一个输入槽的机器，输入任一函数 $\varphi(x)$，就能产生出一个（实的或复的）数 $\varphi(0)$，这就至少启发我们：$\delta(x)$ 的实质是某个函数空间上的线性泛函.

因而我们粗略地有以下定义，用以刻画所输入的 $\varphi(x)$ 所在的“位置”:

定义 1.1.11. 基本函数空间（fundamental function space） K 定义为

$$K:=\{\varphi:\mathbb{R}\to\mathbb{C}|\varphi\text{为}C^{\infty},\varphi\text{的支集有界}\}$$

并配上合适的拓扑（这里从略）.

注记. 1. 这样配上拓扑以后，对于 K 上的线性泛函便可有是否连续之说;
2. 不难看出，这对 $\varphi(x)$ 提出了较强的要求，而不再是式1.1.8 仅要求的“任意”函数了.

为了加深对“支集有界”的理解，下面举一个很平凡的反例.

例 1.1.5. 容易看出，定义在 $\mathbb{R}$ 上的指数函数 $f(x)=e^x$ 的支集是无界的，像这样的函数就不在基本函数空间里面，也就不能将之“放进” $\delta(x)$ 这部“机器”里了.

可以证明，$\delta(x)$ 即基本函数空间 K 上的连续线性泛函，示意如图1.1.6.

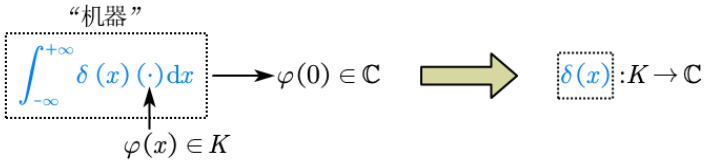

图 1.1.6. $\delta(x)$ 的实质

于是自然地有**广义函数（generalized function）**的定义.

定义 1.1.12. 基本函数空间 K 上的每个连续线性泛函称为一个广义函数，亦称一个**分布 (distribution)**.

进一步地，还可以讨论**函数型的广义函数**和**非函数型的广义函数**，限于笔者水平和篇幅，恕不详述[①].

总之，Dirac 把记号 $\delta(x-x_0)$【当 $x_0=0$ 时，就是 $\delta(x)$】看作函数虽然不对，但他从来都是将之置于积分号内使用，即他只用它把函数映为（实的或复的）数，

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x_0)\varphi(x)\mathrm{d}x=\varphi(x_0),$$

实际上正是把它当作泛函使用，这就是他成功的原因.

注记. 初学者往往认为 δ 函数是 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上的连续线性泛函，这是一个误解.

① 读者可以在梁灿彬先生主编的《微分几何入门与广义相对论》中册 *P201∼P202* 找到它们的概述.

上一节讲基本函数空间 K 时并未认真考察其拓扑；遗留的第二个问题是，能否找到“具体的”δ 函数并观察之？

1.1.4.3　现代观点 2——广义函数的弱极限

俗话说，一分钱买一分货. 我们现在往函数空间中引入最简单的拓扑结构——极限关系，看看能带来什么收获.

定义 1.1.13. 设有属于某一基本函数空间 K_0 的广义函数列 $\{T_k\}$，
1° 称 T_k **弱收敛（weakly convergence）于** 0，或简称 T_k **收敛**于 0，若

$$\langle T_k,\varphi\rangle:=\int_{-\infty}^{+\infty}T_k(x)\varphi(x)\mathrm{d}x\to 0,\ \ \forall\varphi\in K_0.$$

2° 称 T_k 的极限是 T，记为 $T_k\to T$，若 T_k-T 收敛于 0，即

$$\langle T_k-T,\varphi\rangle\to 0,\ \ \forall\varphi\in K_0.$$

注记. 1. 定义中 1° 出现的 $\langle,\rangle$ 看起来很像定义1.1.1 的内积. 实际上若仅涉及 $\mathbb{R}$，那么这确实是内积；但若涉及 $\mathbb{C}$，那它就不符合定义1.1.1，因而不是内积.
2. 为简单起见，讨论所涉及的数域仅为 $\mathbb{R}$. 这样，它却是连续线性泛函，$\langle,\rangle:K_0\times K_0\to\mathbb{R}$.

下面先看一个平凡的例子.

例 1.1.6. 若 $\{\delta_h(x)\}$ 是按如下定义的函数列（如图1.1.7）：

$$\delta_h(x):=\begin{cases}\frac{1}{h}, & -\frac{h}{2}\leqslant x\leqslant\frac{h}{2},\\ 0, & -\infty<x<-\frac{h}{2},\frac{h}{2}<x<+\infty,\end{cases}\tag{1.1.10}$$

则当 $h\to 0$ 时，δ_h 弱收敛于 δ，即 $\delta_h\to\delta$.

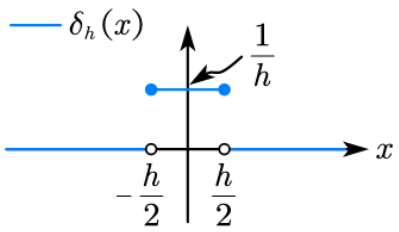

图 **1.1.7**. $\delta_h(x)$ 示意

分析 由定义1.1.13的 2°，只需证 $\langle\delta_h-\delta,\varphi\rangle\to 0\Longleftrightarrow\langle\delta_h,\varphi\rangle-\langle\delta,\varphi\rangle\to 0\Longleftrightarrow\langle\delta_h,\varphi\rangle\to\langle\delta,\varphi\rangle\ (h\to 0)$.

证明. 先看 $\langle\delta_h,\varphi\rangle$. $\forall\varphi\in K_0$,

$$\langle\delta_h,\varphi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_h(x)\varphi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{h}\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}}\varphi(x)\mathrm{d}x,$$

再利用积分中值定理，上式成为

$$\frac{1}{h}\int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}}\varphi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{h}\cdot h\varphi(\xi)=\varphi(\xi),\ \ \xi\in\left(-\frac{h}{2},\frac{h}{2}\right),$$

并注意到，当 $h \to 0$ 时，$\varphi(\xi) \to \varphi(0)$，故有

$$\lim_{h\to 0} \langle \delta_h, \varphi \rangle = \varphi(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\varphi(x)\mathrm{d}x \equiv \langle \delta, \varphi \rangle ,$$

此即 $\langle \delta_h, \varphi \rangle \to \langle \delta, \varphi \rangle \, (h \to 0)$. □

这个例子告诉我们，δ 函数可视为式1.1.10所给出的函数族之极限.
让我们再来看一个典型的例子.

例 1.1.7. 设

$$f_n(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\sin nx}{x},$$

则在 $n \to +\infty$ 时有 $f_n \to \delta$.

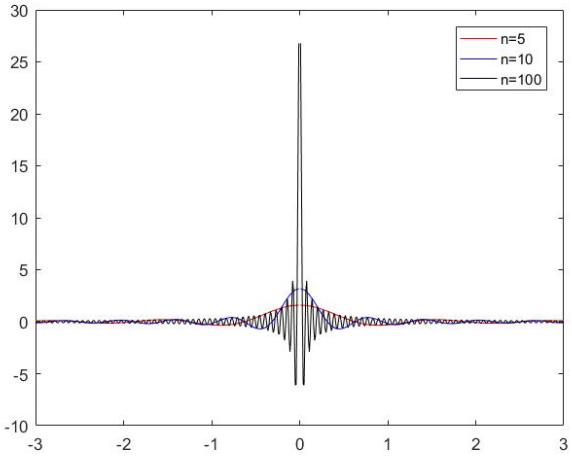

图 1.1.8. $f_n(x)$ 在 n 逐步增大时的行为

分析 与上例类似，只需证 $\langle f_n, \varphi \rangle \to \langle \delta, \varphi \rangle \, (n \to +\infty)$.

证明. 先看 $\langle f_n, \varphi \rangle$. $\forall \varphi \in K_0$,

$$\begin{aligned}\langle f_n, \varphi \rangle &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin nx}{x}\varphi(x)\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\pi}\left(\int_{-\infty}^{-\epsilon} + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} + \int_{\epsilon}^{+\infty}\right)\frac{\sin nx}{x}\varphi(x)\mathrm{d}x,\end{aligned}$$

根据 Riemann-Lebesgue 引理（见附录C），上式中头一项和尾一项均为零，仅剩第二项.
对于第二项，结合积分中值定理，有

$$\begin{aligned}\frac{1}{\pi}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{\sin nx}{x}\varphi(x)\mathrm{d}x &= \frac{1}{\pi}\cdot 2\epsilon\frac{\sin n\xi}{\xi}\cdot\varphi(\xi) \\ &= \frac{1}{\pi}\varphi(\xi)\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{\sin nx}{x}\mathrm{d}x, \quad \xi \in (-\epsilon, \epsilon).\end{aligned}$$

再命 $nx \equiv u$，

$$\frac{1}{\pi}\varphi(\xi)\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{\sin nx}{x}\mathrm{d}x = \frac{1}{\pi}\varphi(\xi)\int_{-\epsilon n}^{\epsilon n}\frac{\sin u}{u}\mathrm{d}u,$$

此时让 $n \to +\infty$，即有

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{1}{\pi}\varphi(\xi)\int_{-\epsilon n}^{\epsilon n} \frac{\sin u}{u}\mathrm{d}u = \frac{1}{\pi}\varphi(\xi)\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin u}{u}\mathrm{d}u.$$

其中，$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin u}{u}\mathrm{d}u$ 是个著名的广义积分——Dirichlet 积分的自然推论（见附录D），它的值刚好是 π.
如此一来，便有

$$\lim_{n\to+\infty} \langle f_n, \varphi\rangle = \varphi(\xi),\ \ \xi \in (-\epsilon, \epsilon),$$

只需再令 $\epsilon \to 0$，就有 $\xi \to 0$，这样

$$\lim_{n\to+\infty,\epsilon\to 0} \langle f_n, \varphi\rangle = \varphi(0) \equiv \langle \delta, \varphi\rangle .$$

此即 $\langle f_n, \varphi\rangle \to \langle \delta, \varphi\rangle\,(n \to +\infty)$. □

类似地，读者也可以验证，如下的函数列在 n 充分大时，就收敛于 δ，这就在广义函数弱极限的意义下，丰富了 δ 函数的内涵.

例 1.1.8. (a)

$$\frac{n}{\sqrt{\pi}}e^{-n^2x^2};$$

(b)

$$\frac{n}{\pi}\frac{1}{1+n^2x^2}.$$

读者可试着用计算机画出 (a)、(b) 的图像，它们的行为与图1.1.8所示的极为相似.

在本节里，我们见识了形形色色的“δ 函数”，可谓收获不小. 严格说来，它们的弱极限才是 δ 函数（或者说，它们都是 δ 函数的**逼近序列**）. 这里就不得不提到充当**“临时帮手”**的函数 φ 了[①]. 笔者愿强调，它是在某个基本函数空间 K_0 里的，这就对 φ 有了不小的约束（见定义1.1.11），这是使用 δ 函数时必须要注意的.

[①] 因此它又名“检验函数”.

1.2 Hilbert 空间的正交归一基

在介绍了泛函分析的初步知识后，我们希望能用它重新考察量子力学里的各种算符. 作为预备，本节欲将线性代数中的**基（basis）**的语言推广到无限维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中去.

在线性代数中，基又叫基底，先简单回顾一下.

N 维矢量空间 V 的一个基底无非是由 N 个元素组成的一个序列 $\{e_1,\cdots,e_N\}$，并满足如下两个条件：

- $\{e_1,\cdots,e_N\}$ 线性独立
- V 中的任一元素 f 可由 $\{e_1,\cdots,e_N\}$ 线性表出

那么，在 Hilbert 空间中的基又如何呢？

为此，我们先关注上面的第一个条件——**线性独立（linear independence）**.

定义 1.2.1. $\mathscr{H}$ 中的有限子集 $\{f_1,\cdots,f_N\}$ 称为线性独立的，若

$$\sum_{n=1}^{N} c_n f_n = 0 \Longrightarrow c_n = 0 (n = 1,\cdots,N).$$

定义 1.2.2. $\mathscr{H}$ 的任一子集 $\{f_\alpha\}$ 称为线性独立的，若

$$\{f_\alpha\}\text{的任一非空有限子集线性独立.}$$

这样，就可以考虑 Hilbert 空间中的基了.

定义 1.2.3. $\mathscr{H}$ 中的无限序列 $\{e_n\}$ 构成 $\mathscr{H}$ 的一个基底，若
(a)$\{e_n\}$ 线性独立；
(b)$\mathscr{H}$ 中的任一元素 f 可由 $\{e_n\}$ 线性表出：

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e_n,\ \ c_n \in \mathbb{C}. \tag{1.2.1}$$

注记. 1. 上式中的

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e_n$$

实为

$$f = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} c_n e_n$$

的简写；
2. 这里的极限涉及 $\mathscr{H}$ 的拓扑.

在 $\mathscr{H}$ 的许多基当中，有一类基最为重要——正交归一基.

先介绍**正交归一（orthogonal normalization）序列**.

定义 1.2.4. $\mathscr{H}$ 中的序列 $\{f_n\}$ 叫正交归一的，若

$$(f_m, f_n) = \delta_{mn}. \tag{1.2.2}$$

注记. 1. 其中的 δ_{mn} 是 Kronecker 记号，不要和前面讲的 δ 函数混淆了. 它非零则一：

$$\delta_{mn} := \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases}$$

2. 易见，$\mathscr{H}$ 中的任一正交归一序列线性独立（留作习题）.

现在的问题是，$\mathscr{H}$ 中的正交归一序列何时称为基呢？这就不得不考察 $\{f_n\}$ 中的元素是否“选够”的问题了.

若 $\mathscr{H}$ 是有限维的，这个问题不复存在；但当 $\mathscr{H}$ 无限维时，它要想从正交归一序列成为正交归一基，还必须满足如下条件.

定义 1.2.5. $\mathscr{H}$ 中的正交归一序列 $\{f_n\}$ 叫**完备的 (complete)**，若

$\mathscr{H}$中除零元外，不存在与每个f_n都正交的元素.

注记. 此即不能通过给 $\{f_n\}$ 添加更多新的元素而得到“更大”的正交归一序列.

正是 $\{f_n\}$ 的完备性保证了 $\mathscr{H}$ 中的任一元素都可由它线性表出，同时有如下命题：

命题 1.2.1. $\mathscr{H}$ 的任一完备的正交归一序列（如果存在的话）都是 $\mathscr{H}$ 的正交归一基.

证明. 见 Roman(1975) 的定理 10.4(4). □

一个很自然的问题是，若 $\{e_n\}$ 是正交归一基，那么对任一 $f \in \mathscr{H}$ 如何用它线性表出呢？

先来看系数. 结合式1.2.1和式1.2.2，

$$\begin{aligned} &(e_n, f) \\ =&\left(e_n, \sum_{m=1}^{\infty} c_m e_m\right) \\ =&\sum_{m=1}^{\infty} c_m (e_n, e_m) \\ =&\sum_{m=1}^{\infty} c_m \delta_{nm} \\ =&c_n. \end{aligned}$$

因而 f 可表为

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot e_n = \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, f) e_n. \tag{1.2.3}$$

这是一点也不奇怪的. 若 $\mathscr{H} = \mathbb{R}^3$，由解析几何知，此时里面任意两元素的内积应为 $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) := |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$.[①] 则容易看出

$$\mathbf{x} = (e_x, \mathbf{x}) e_x + (e_y, \mathbf{x}) e_y + (e_z, \mathbf{x}) e_z (\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3),$$

其中 e_x, e_y, e_z 代表 $\mathbb{R}^3$ 中的基矢. 而这与 $f \in \mathscr{H}$ 的表示是 **“异曲同工”** 的.

注记. 1. 对于 $\mathscr{H}$ 的正交归一基 $\{e_n\}$，若 n 为自然数，则表明它是**可数的 (countable)** . 但 $\mathscr{H}$ 里还有不可数的正交归一基 $\{e_\alpha\}$（它代表不可数子集，其中的 α 只用于识别子集中的元素，而非自然数）；

① 这是因为如此定义的内积确实满足定义1.1.1. 诚然，从数学的发展来看，解析几何语境下的内积是先出现的，进而能导出定义1.1.1的几条要求，之后干脆将之抽象出来当作内积的定义，这就是数学的公理化.

2. 通过拓扑可以定义最一般的 Hilbert 空间的基（详见梁灿彬主编的《微分几何入门与广义相对论》中册 P203）；
3. 对每一 Hilbert 空间而言，可谈论其**可分性 (separability)**；
4. 可喜的是，不论 Hilbert 空间是否可分，其任一元素 f 仍能用基矢表为可数项之和，即式1.2.3仍成立.

习题 1.8. 证明定义1.2.4的注记 2.

1.3 Hilbert 空间上的（有界）线性算符

现在我们来通过泛函分析的语言重新考察量子力学里的算符. 本节先介绍对偶算符、伴随算符和自伴（厄米）算符.

值得注意的是，算符有有界算符和无界算符之分，本节只涉及有界的算符（其定义见2.2节）.

1.3.1 对偶算符

先来认识一下什么是**算符（operator）**[①]. 粗略地说，算符就是从集合本身到其本身的映射. 具体地，下面来看 $\mathscr{H}$ 意义下的算符.

[①] *operator* 的重音在前，许多人读成重音在后的情况. 而其另一形式 *operation* 的重音则在后. 另，*operator* 也译作“算子”，常见于数学书中.

定义 1.3.1. 映射 $A:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ 称为 $\mathscr{H}$ 上的算符.A 作用于 $f\in\mathscr{H}$ 的结果记为 Af.

注记. Af 是 $A(f)$ 之简写.

一般地，我们讨论的算符都是**线性算符（linear operator）**，它的定义是很自然的：

定义 1.3.2. $\mathscr{H}$ 上的算符 A 称为线性的，若

$$A(c_1f_1+c_2f_2)=c_1Af_1+c_2Af_2,\ \ \forall f_1,f_2\in\mathscr{H},c_1,c_2\in\mathbb{C}.$$

记号 1.3.1. $\mathscr{H}$ 上的全体线性算符的集合记为 $\mathscr{L}(\mathscr{H})$.

注记. 易见，$\mathscr{L}(\mathscr{H})$ 也是复矢量空间，只需如下自然地定义加法、数乘和零元：
加法 $(A_1+A_2)f:=A_1f+A_2f,\ \ \forall A_1,A_2\in\mathscr{L}(\mathscr{H}),f\in\mathscr{H}$;
数乘 $(cA)f:=c(Af),\ \ \forall A\in\mathscr{L}(\mathscr{H}),f\in\mathscr{H},c\in\mathbb{C}$;
$\mathscr{L}(\mathscr{H})$ 的零元（也叫**零算符**）：它作用于 $\forall f\in\mathscr{H}$ 都得 $\mathscr{H}$ 的零元.

就像定义数一样，要考虑序关系（大于、小于和等于），这里我们可以定义两个算符何时“相等”.

定义 1.3.3. 算符 $A:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ 和 $B:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ 称为**相等的（equivalent）**，若

$$Af=Bf,\ \ \forall f\in\mathscr{H}.$$

注记. 其中的 $Af=Bf\Longrightarrow A=B$ 不可理解为是“约去”f 的后果，因为 $f\in\mathscr{H}$，我们从未定义过 Hilbert 空间的元素之间的乘（除）法. 这样写只是关注算符作用于同一对象之后的效果，若效果相同，不妨就认为这两算符相等.

由 $A:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ 可以自然诱导出 $\mathscr{H}^*$ 上的一个线性算符：

定义 1.3.4. $A^*:\mathscr{H}^*\to\mathscr{H}^*$ 称为算符 A 的**对偶算符（dual operator）**，具体地，

$$(A^*\eta)(f):=\eta(Af),\ \ \forall f\in\mathscr{H},\eta\in\mathscr{H}^*.$$

注记. 1.A^* 是通过 A 来定义的，换句话说，正是“借用”了 $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^*$ 的联系. 具体地说，欲定义的对偶算符 A^* 是从 $\mathscr{H}^*$ 到 $\mathscr{H}^*$ 的映射，先从定义号左端看起，由于 $\eta\in\mathscr{H}^*$，我们希望 $A^*\eta$ 也在 $\mathscr{H}^*$ 里. 若果真如此，应该用 $A^*\eta$ 作用一个 $\mathscr{H}$ 的元素，比如 f，后出一个复数. 但这个动机需要用已知的语言写出来. 注意到 $Af\in\mathscr{H}$，那么再用左端的 η 去作用它，自然完成了从 $\mathscr{H}$ 到 $\mathbb{C}$ 的映射. 这样，将右端作为左端的定义就是很自然的；

2. 易见 $A^*\eta : \mathscr{H} \to \mathbb{C}$ 是线性的，还可以证明它是连续的，因此才能确定 $A^*\eta \in \mathscr{H}^*$. 这样，$A^*$ 才是从 $\mathscr{H}^*$ 到 $\mathscr{H}^*$ 的映射（如图1.3.1）；
3. 需要注意，A 和 A^* 是两个不同的 Hilbert 空间上的算符，即 $A : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$，$A^* : \mathscr{H}^* \to \mathscr{H}^*$；
4. 请读者验证（留作习题）：
(a)A^* 的确是线性的；
(b)A^* 与 A 的对应关系也是线性的，即

$$(A_1 + A_2)^* = A_1^* + A_2^*, \ \ (cA)^* = cA^*, \ \ \forall c \in \mathbb{C}.$$

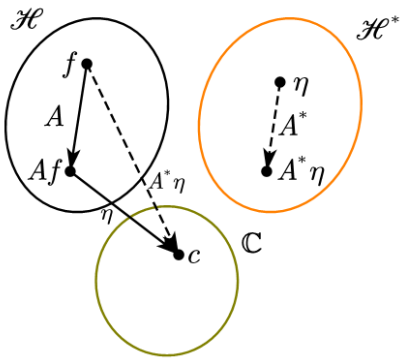

图 1.3.1. 对偶算符 A^* 的定义

现在，我们已经有了对偶算符 $A^* : \mathscr{H}^* \to \mathscr{H}^*$，下一节将用它定义其他的算符.

习题 1.9. 证明定义1.3.4的注记 4.

1.3.2　伴随算符、自伴（厄米）算符

$\mathscr{H}$ 上的任一线性算符 A 的对偶算符 A^* 又可自然地诱导出 $\mathscr{H}$ 上的一个线性算符 $A^\dagger$[①]：

[①] $\dagger$ 上标是“†”，读作 *dagger*，可译为匕首、短剑. 切忌写成“+”.

定义 1.3.5. $A^\dagger : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ 称为算符 A 的**伴随算符 (adjoint operator)**，结合图1.3.2，它被定义为

$$A^\dagger := \nu^{-1} \circ A^* \circ \nu, \tag{1.3.1}$$

$$A^\dagger f := h. \tag{1.3.2}$$

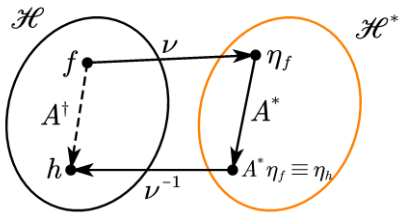

图 1.3.2. 用对偶算符 A^* 和 ν 定义伴随算符 $A^\dagger$

注记. 1. 式1.3.1所示的“$\circ$”是复合映射的记号，如 $g[f(x)] \equiv (g \circ f)x$；
2. 这里借用了1.1.3讲过的一个一一到上的反线性映射 $\nu : \mathscr{H} \to \mathscr{H}^*$. 则由图1.3.2所示的映射“路径”可知有唯一的 $h \in \mathscr{H}$ 与 $f \in \mathscr{H}$ 对应；
3.ν 的反线性性导致 ν^{-1} 的反线性性，再加上 A^* 的线性性，可知 $A^\dagger$ 也是线性的；
4. 请读者验证：$A^{\dagger\dagger} = A$，留作习题.

总结一下，A 和 $A^\dagger$ 都是 $\mathscr{H}$ 上的算符，而 A^* 则是 $\mathscr{H}^*$ 上的算符. 这是很好记忆的，因为 $A^\dagger$ 叫 A 的伴随算符，自然与 A 在同一 Hilbert 空间上.

下面看一个很重要的命题，它提供了另一种刻画 $A^\dagger$ 的视角.

命题 1.3.1. 设 $A^\dagger$ 是 A 的伴随算符，则

$$(f, Ag) = (A^\dagger f, g), \ \forall f, g \in \mathscr{H}; \tag{1.3.3}$$

反之，若 $\exists B : \mathscr{H} \to \mathscr{H}$ 使得

$$(f, Ag) = (Bf, g), \ \forall f, g \in \mathscr{H}, \tag{1.3.4}$$

则 $B = A^\dagger$.

注记. 可见，式1.3.3可作为 $A^\dagger$ 的等价定义.

证明. 第一步 先证命题的前半部分.

$$(f, Ag) = \eta_f(Ag) = (A^*\eta_f)(g) \equiv \eta_h(g) = (h, g) = (A^\dagger f, g),$$

其中第一、二个等号成立是分别由于 η_f 和 A^* 的定义，第三个等号无非将 $A^*\eta_f$ 记为 η_h，而第五个等号用到了 $A^\dagger$ 的定义，式1.3.2.
第二步 再证命题的后半部分. 这是很简单的，留作习题. □

上一节讲对偶算符 A^* 时，考察了它与 A 的对应关系，这里也要做类似的事情.

命题 1.3.2. $A^\dagger$ 与 A 的对应关系是反线性的，即

$$(A_1+A_2)^\dagger = A_1^\dagger + A_2^\dagger, \tag{1.3.5}$$
$$(cA)^\dagger = \bar{c}A^\dagger,\ \forall c\in\mathbb{C}. \tag{1.3.6}$$

证明. 对式1.3.5的证明留作习题，这里只证式1.3.6.
根据 $A^\dagger$ 的定义，式1.3.1，

$$A^\dagger f = (\nu^{-1}\circ A^*\circ\nu)f \tag{1.3.7}$$
$$\Longrightarrow (cA)^\dagger f = [\nu^{-1}\circ(cA)^*\circ\nu]f = \bar{c}(\nu^{-1}\circ A^*\circ\nu)f = \bar{c}A^\dagger f(\forall c\in\mathbb{C}), \tag{1.3.8}$$

其中式1.3.8的第二个等号成立是 ν^{-1} 的反线性性导致的. □

最后，我们借用命题1.3.1的形式引出如下算符的定义：

定义 1.3.6.（有界）线性算符 $A:\mathscr{H}\to\mathscr{H}$ 是**自伴的 (self-adjoint)** 或**厄米的 (hermitean)**，若 $A=A^\dagger$，即

$$(f,Ag) = (Af,g),\ \forall f,g\in\mathscr{H}. \tag{1.3.9}$$

注记. 1.hermitean 又译作“埃尔米特的”，常见于数学书；
2. 所谓“厄米算符就是自伴算符”的说法仅对有界算符成立. 在2.4节我们将看到，对无界算符来说，自伴性强于厄米性.

习题 1.10. 证明定义1.3.2的注记 4.

习题 1.11. 证明命题1.3.1的后半部分.

习题 1.12. 证明命题1.3.2的式1.3.5.

1.4 "bracket" 与完备性关系

本节将看到，Dirac 的左右矢记号是如何 **"左右逢源"** 的[①].

介绍的顺序如下：先介绍 Dirac 记号，再用它改写 A^* 的定义并给出算符的本征方程[②]的左矢形式，最后介绍量子力学中的完备性关系.

首先，将 Dirac 记号的要点罗列如下.

记号 1.4.1. 1. 每一 $f\in\mathscr{H}$ 记为 $|f\rangle$，称为**右矢 (ket)**；
2. 每一 $\eta\in\mathscr{H}^*$ 记为 $\langle\eta|$，称为**左矢 (bra)**；
3.$\langle\eta|$ 作用于 $|f\rangle$ 所得的复数记为 $\langle\eta|f\rangle$，即 $\langle\eta|f\rangle\equiv\eta(f)=(g_\eta,f)[g_\eta\equiv\nu^{-1}(\eta)]$；
4. 若在映射 $\nu:\mathscr{H}\to\mathscr{H}^*$ 下，有对应关系 $\mathscr{H}\ni f\longleftrightarrow\eta_f\in\mathscr{H}^*$，则将原本应记为的 $\langle\eta_f|$ 简记为 $\langle f|$，这样就有 $\langle f|\longleftrightarrow|f\rangle$；
5. 设 $\eta_f(g)=(f,g)$，原本应将其记为 $\langle\eta_f|g\rangle$，现在简记为 $\langle f|g\rangle$；
6. 设 $|\psi\rangle\in\mathscr{H},c\in\mathbb{C}$，易见 $c|\psi\rangle\in\mathscr{H}$，则记 $c|\psi\rangle\equiv|c\psi\rangle$；
7.1. 设 $|\psi\rangle\in\mathscr{H}$，易见 A 作用于 $|\psi\rangle$：$A|\psi\rangle\in\mathscr{H}$，则记 $A|\psi\rangle\equiv|A\psi\rangle$；
7.2. 设 $\langle\eta|\in\mathscr{H}^*$，将 A^* 作用于 $\langle\eta|$ 的结果记为 $A^*\langle\eta|$.

注记. 1. 对于记号1.4.1中的 3 所示的 $\langle\eta|f\rangle$，物理学家常称之为 $\langle\eta|$ 和 $|f\rangle$ 的“内积”，实际上由泛函分析知道，它应是 g_η 与 f 的内积；
2. 记号 $\langle\cdot|\cdot\rangle$ 中的 $\langle\rangle$ 可看作一个尖括号，而括号的英文是 bracket，Dirac“灵机一动”，干脆按对称性将之从字母 c 处“一刀两断”，将左一半 $\langle\cdot|$ 称为 bra，而将右一半 $|\cdot\rangle$ 称为 ket；
3. 对于记号1.4.1中的 4 所说的，将 $\langle\eta_f|$ 简记为 $\langle f|$，这是合理的，因为 ν 是一一到上的映射，而 $\langle f|\longleftrightarrow|f\rangle$ 更能体现 $\langle f|$ 是 $|f\rangle$ 在 ν 映射下的对应物，不会产生混淆；
4. 以往习惯用英文字母 $f,g,\cdots$ 代表 $\mathscr{H}$ 中的元素，而用希腊字母 $\eta,\xi,\cdots$ 代表 $\mathscr{H}^*$ 中的元素. 有了 Dirac 记号后，则对此无需注意了.

泛函分析语言	Dirac 记号
$f\in\mathscr{H}$	$\|f\rangle$
$\eta\in\mathscr{H}^*$	$\langle\eta\|$
$\mathscr{H}\ni f\longleftrightarrow\eta_f\in\mathscr{H}^*$	$\langle\eta_f\|\equiv\langle f\|$（简记）
$\eta_f(g)=(f,g)$	$\langle\eta_f\|g\rangle\equiv\langle f\|g\rangle$（简记）

表 1.1. 泛函分析语言与 Dirac 记号

这样，由定义1.1.1不难知

$$\begin{aligned}\langle\psi|\phi\rangle&=\overline{\langle\phi|\psi\rangle},\\ \langle\psi|c\phi\rangle&=c\langle\psi|\phi\rangle,\\ \langle c\psi|\phi\rangle&=\bar{c}\langle\psi|\phi\rangle,\quad\forall c\in\mathbb{C}.\end{aligned}$$

其中 $\langle c\psi|$ 代表 $|c\psi\rangle$ 在 ν 下的像，即 $\langle c\psi|\longleftrightarrow|c\psi\rangle$. 且容易看出（留作习题），$\nu$ 的反线性性体现为

$$\langle c\psi|=\bar{c}\langle\psi|\equiv\langle\psi|\bar{c},$$

亦即

$$c|\psi\rangle\longleftrightarrow\bar{c}\langle\psi|\equiv\langle\psi|\bar{c}.\tag{1.4.1}$$

现在，让我们重新考察对偶算符 A^* 的定义.

① *I do not believe that God is a weak left-hander and would be prepared to bet a high amount that the experiment will show a symmetric angular distribution of the electrons (mirror symmetry). For I cannot see a logical connection between the strength of an interaction and its mirror symmetry* (*January 17, 1957*).【我不相信上帝是个软弱的左撇子，我可以跟任何人打赌，做出来的结果（电子的角动量分布）一定是左右对称的. 我看不出相互作用的强度和镜面对称性之间有什么逻辑联系（*1957* 年 *1* 月 *17* 日）.】——*Pauli* 写给 *Weisskopf* 的信中的话

② “本征(的)”还可译为“特征(的)”，都是描述同一对象，只不过前者译自 *eigen*，德文词；后者译自 *characteristic*，英文词. 在一般数学书里都叫成“特征”.

1.5 态矢与射线

第 2 章

无界算符及其自伴性

2.1 算符的定义域

2.2 算符的有界性

2.3 伴随算符的重新定义

2.4 厄米算符、自伴算符的重新定义

2.5 位置、动量算符的自伴性

2.6 对量子力学中物理提法的评述

2.7 * 拓展阅读——自伴算符的谱理论初探

2.7.1 算符用投影算符展开

2.7.2 算符的谱与谱族

2.7.3 自伴算符的谱分解定理及其简单应用

2.7.4 对量子力学中物理提法的再评述

第 3 章

附录

A 若干补充知识

作为附录的第一部分，先介绍一些补充知识，主要为附录B 提供知识准备. 欲介绍的知识大体是：

- （复）矢量空间（或线性空间）→（线性）子空间 → 直和
- 赋范空间（范数）→ 由内积生成范数 → 赋范空间的子空间 → 线性泛函连续的充分必要条件（只证必要性）
- 度量 → 度量的连续性 → 范数有界的充分条件 → 内积的连续性

下面就按照这个思路展开.

A.1 （复）矢量空间的直和

先介绍 **（复）矢量空间（complex vector space）** [①] .

[①] 凡不加声明，今后所指的矢量空间都是复的.

定义 A.1 （（复）矢量空间). 复数域 $\mathbb{C}$ 上的一个矢量空间是一个集合 V 配以两个映射，即 $V\times V\to V$【加法（addition）】及 $\mathbb{C}\times V\to V$【数乘（scalar multiplication）】，并满足如下 5 个条件：
(a) **交换性（commutativity）** $v_1+v_2=v_2+v_1,\ \forall v_1,v_2\in V$；
(b) **结合性（associativity）** $(v_1+v_2)+v_3=v_1+(v_2+v_3)$
及 $\alpha_1(\alpha_2v)=(\alpha_1\alpha_2)v,\ \forall v,v_1,v_2,v_3\in V,\ \alpha_1,\alpha_2\in\mathbb{C}$；
(c) **分配性（distributive properties）** $(\alpha_1+\alpha_2)v=\alpha_1v+\alpha_2v$
及 $\alpha(v_1+v_2)=\alpha v_1+\alpha v_2,\ \forall v,v_1,v_2\in V,\alpha,\alpha_1,\alpha_2\in\mathbb{C}$；
(d) **加法单位元（additive identity）** $\exists 0\in V,\text{s.t. }0+v=v,\ \forall v\in V$；
(f) **乘法单位元（multiplicative identity）** $1\cdot v=v,\ \forall v\in V$.

注记. 1. 上面的“$\times$”是笛卡尔积（Cartesian product，又叫卡氏积、直积），是集合之间的操作. 若 X 和 Y 是任意的两个集合，则 $X\times Y:=\{(x,y)|(x\in X)\wedge(y\in Y)\}$，例如，$\mathbb{R}^2\equiv\mathbb{R}\times\mathbb{R}$，就是欧氏平面上所有点之集.
2. 请读者根据上述 5 个条件 (a)~(f) 证明以下推论（留作习题）：
(1)$0\cdot v=0\in V,\forall v\in V$；
(2) 存在**加法逆元（additive inverse）** $\exists u\in V,\text{s.t. }v+u=0\in V,\ \forall v\in V$.
3.(d) 中的 $0\in V$ 又叫零元. 在不同语境下，“0”可能代表 $0\in\mathbb{R}$，也可能代表 $0\in V$. 前者是一个实数，后者是一个矢量（矢量空间里的元素）.
4. 矢量空间又叫线性空间.

例 A.1. 定义 $\mathbb{C}^\infty$ 为复数域 $\mathbb{C}$ 中的所有无限序列构成的集合：

$$\mathbb{C}^\infty:=\{(x_1,x_2,\cdots)|x_i\in\mathbb{C},i=1,2,\cdots\}.$$

如果自然地定义 $\mathbb{C}^\infty$ 中的加法和数乘，

$$(x_1,x_2,\cdots)+(y_1,y_2,\cdots):=(x_1+y_1,x_2+y_2,\cdots),$$
$$\alpha(x_1,x_2,\cdots):=(\alpha x_1,\alpha x_2,\cdots).$$

那么它就成了矢量空间（零元就是每个元素都为 0 的无限序列）.

特殊地，$\mathbb{R}^3$ 也构成矢量空间，其中矢量的加法和数乘与我们熟知的平行四边形法则紧密相关.

从上面的例子，不难看出，我们以往学过的牛顿力学里对力的处理——把它当作矢量，其实只是定义A.1的一种特例. 其中诸如“方向”、“大小（长度）”等概念都是不必须的[①].

有了矢量空间，就可以定义其**子空间 (subspace)** 了，这是很自然的.

定义 A.2 (子空间). $U \subset V$ 是矢量空间 V 的子空间，若 U 也是矢量空间.

注记. 1. 简单来说，矢量空间 V 的子空间 U，保持和 V 一样的加法和数乘（当然也须有零元）.
2. 子空间又叫线性子空间.

例 A.2. $\{(x_1, x_2, 0) | \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}\}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的子空间.

在介绍“直和”之前，先来看子集之和（sum of subsets）的概念.

定义 A.3 (子集之和). 设 $U_1, \cdots, U_m \subset V$，则 $U_1, \cdots, U_m$ 之和定义为 $U_1, \cdots, U_m$ 中元素的所有可能的和之集，

$$U_1 + \cdots + U_m := \{u_1 + \cdots + u_m | u_j \in U_j, j = 1, \cdots, m\}.$$

这个定义比较显然，就不举例了.

我们比较关心 V 的子空间 $U_1, \cdots, U_m$ 之和（作为子空间，自然有 $U_j \subset V, j = 1, \cdots, m$，因而其和可以写成上述定义的样子）能否唯一地表示的问题. 若能，不妨赋予专名：**直和 (direct sum)** .

定义 A.4 (直和). 设 $U_1, \cdots, U_m$ 都是 V 的子空间.
和 $U_1 + \cdots + U_m$ 称为直和，若其中的每一个元素都可以唯一地表为

$$u_1 + \cdots + u_m, u_j \in U_j, j = 1, \cdots, m.$$

直和 $U_1 + \cdots + U_m$ 记作 $U_1 \oplus \cdots \oplus U_m$.

注记. “$\oplus$”代表此处的和是一个直和.

读者不必畏惧 $\oplus$ 这个记号，实际上，在我们熟知的解析几何中就有个现成的、极好的例子——3 维欧氏空间 $\mathbb{R}^3$ 就是由一个平面和一条与之垂直的直线的直和“拼起来的”.

例 A.3. 设 U 是 $\mathbb{R}^3$ 中第一个坐标为 0 的那些矢量组成的子空间，W 是 $\mathbb{R}^3$ 中后两个坐标为 0 的那些矢量组成的子空间，即

$$U \equiv \{(0, x, y) | \forall x, y \in \mathbb{R}^3\}, W \equiv \{(z, 0, 0) | \forall z \in \mathbb{R}^3\}.$$

请读者验证（留作习题）：$\mathbb{R}^3 = U \oplus W$，即 $\mathbb{R}^3$ 里的每个元素（点）都只能写为 $U + W$ 的形式（见图A.1）.

其实关于直和，有个更强的定理，它保证了上例的正确性. 这个定理指出若两个子空间的和是直和，那么它们之间“共有的”元素几乎没有，少得可怜，只有零元，反之也成立.

下面不加证明地给出这个定理[②].

定理 A.1 (两个子空间的直和). 设 U 和 W 都是 V 的子空间，则

$$U + W \equiv U \oplus W \iff U \cap W = \{0\}.$$

[①] 笔者以为，将“矢量”说成是有“大小”又有“方向”的量，是极为不负责任的说法，虽形象实用却极具误导性.

[②] 不加证明的原因是它太过琐碎，但并不难.

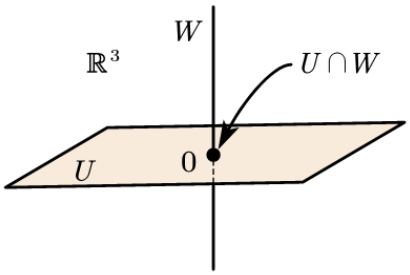

图 **A.1**. $\mathbb{R}^3 = U \oplus W$

证明. 从略. 可见任一线性代数（高等代数）教材，比如 Sheldon Axler 的 *Linear Algebra Done Right,3ed* P23. □

习题 3.1. 证明定义A.1的注记 2.

习题 3.2. 验证例A.3的结论.

A.2　线性泛函的连续性

上面谈到牛顿力学里的力，往往在人们的脑海中以有“长度”的“箭头”出现. 其实这些结构（structure）是有了矢量空间之后再添加的. 从简单的结构，循序渐进地增添更多的结构，就像盖房子一样，这是数学发展的一种重要思想，而抽象，正是抽象，使得这样的推广成为可能[①].

先介绍从度量“长度”[②]抽象出来的概念，**范数（norm）**.

定义 A.5 (范数). 设 V 是复数域 $\mathbb{C}$ 上的矢量空间，映射 $\|\cdot\|:V\to\mathbb{R}$ 称为 V 上的一个范数，若它满足如下 4 个条件：
(a) **非负性（nonnegativity）** $\|v\|\geqslant 0,\ \forall v\in V$；
(b) **正定性（positive definiteness）** $\|v\|=0\Longleftrightarrow v=0,\ \forall v\in V$；
(c) **正齐性（homogeneity）** $\|\alpha v\|=|\alpha|\|v\|,\ \forall v\in V,\alpha\in\mathbb{C}$；
(d) **三角不等式（triangle inequality）** $\|u+v\|\leqslant\|u\|+\|v\|,\ \forall u,v\in V.$

注记. 1. 定义了范数的矢量空间称为**赋范空间（normed space）**，记为 $(V,\|\cdot\|)$，在不引起混淆的情况下，也可记为 V.
2. 赋范空间也叫赋范线性空间.

引入了范数之后，我们希望它能与在定义1.1.1中的内积联系起来，形象地说，就是为内积空间中的元素赋上“长度”.

定义 A.6 (由内积生成的范数). 设 V 是内积空间，由内积可以自然生成范数：

$$\|x\|:=\sqrt{(x,x)},\ \forall x\in V.$$

这时我们自然要问，这样通过内积定义的范数真的符合定义A.5 吗[③]？那就是要逐一验证定义A.5的 4 个条件. 不难看出，前三个条件 (a)~(c) 是自然满足的（为什么？验证之，留作习题），那么条件 (d) 如何呢？

为验证条件 (d)，先来看一个引理. 注意，这里还没有涉及范数的概念，全在内积的语境下完成.

引理 A.1 (Cauchy-Schwarz 不等式). 设 V 是内积空间，总有

$$|(x,y)|^2\leqslant(x,x)(y,y),\ \forall x,y\in V. \tag{A.1}$$

注记. 实际上，上述引理配以例1.1.1，就立刻得到了微积分中常用的 Cauchy-Schwarz 不等式（当且仅当 f 和 g 线性相关时等号成立）：

$$\left(\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x\right)^2\leqslant\int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x\int_a^b g^2(x)\mathrm{d}x.$$

此举可谓**不费吹灰之力、易如反掌**！这也启示我们：
1. 像定义1.1.1那样定义内积确实极为合理；
2. 从纷繁的现象中抽取深层的本质（往往是某种结构），并推广之，这种做法的效果往往是惊人的，“威力”往往是巨大的，而数学的发展正离不开此.

证明. 先考虑最平凡的情形.1° 若 $y=0$, 根据定义1.1.1的 (d)，不等式A.1自然成立，因为

$$(y,y)=(x,y)=0,\ \forall x\in V.$$

① 抽象的，才易于推广. 抽象往往比真实更为真实. ——曹则贤（中科院物理所研究员）

② 几何学，*geometry*. *geo-*，大地；*metry* 化自 *metric*，测量. 故古时几何学又名测地之学. 笔者以为，任何一个概念的形成都有其源头，都经历了发展的过程.

③ 笔者认为，对于定义，虽严格的推导无从谈起，但好的定义是可以与已知的知识相容的，所谓良定的（*well-defined*）即为此意. 因此，我们可以谈论一个定义是否合理.

2° 若 $y \neq 0, \forall x, y \in V, \lambda \in \mathbb{C}$,

$$
\begin{aligned}
(x+\lambda y, x+\lambda y) &= (x+\lambda y, x) + (x+\lambda y, \lambda y) && \text{(A.2)}\\
&= (x,x) + (\lambda y, x) + (x, \lambda y) + (\lambda y, \lambda y) && \text{(A.3)}\\
&= (x,x) + \overline{\lambda}(y,x) + \lambda(x,y) + |\lambda|^2 (y,y) \geqslant 0. && \text{(A.4)}
\end{aligned}
$$

以上等号成立是因为内积映射对第一槽的反线性性和对第二槽的线性性，而不等号成立是由于定义1.1.1的 (d).
现命 $\overline{\lambda} = -\frac{(x,y)}{(y,y)}$，将其代入上式，

$$
\begin{aligned}
&(x,x) - \frac{(x,y)}{(y,y)}(y,x) - \frac{\overline{(x,y)}}{(y,y)}(x,y) + \frac{|\overline{(x,y)}|^2}{|(y,y)|^2}(y,y)\\
=&(x,x) - \frac{(x,y)}{(y,y)}\overline{(x,y)} - \frac{\overline{(x,y)}}{(y,y)}(x,y) + \frac{|(x,y)|^2}{(y,y)}\\
=&(x,x) - 2\frac{|(x,y)|^2}{(y,y)} + \frac{|(x,y)|^2}{(y,y)} \geqslant 0\\
\Longrightarrow&(x,x)(y,y) - |(x,y)|^2 \geqslant 0\\
\Longrightarrow&|(x,y)|^2 \leqslant (x,x)(y,y).
\end{aligned}
$$

其中第一个等号成立是由于定义1.1.1的 (c). 等号成立，当且仅当 x 和 y 线性相关，这从式A.4可看出端倪. □

现在来正式验证定义A.5的条件 (d).

在式A.4中取 $\lambda = 1$，则有

$$
\begin{aligned}
&\|x+y\|^2 && \text{(A.5)}\\
=&(x+y, x+y) && \text{(A.6)}\\
=&(x,x) + (y,x) + (x,y) + (y,y) && \text{(A.7)}\\
=&(x,x) + \overline{(x,y)} + (x,y) + (y,y) && \text{(A.8)}\\
=&\|x\|^2 + 2|\mathrm{Re}(x,y)| + \|y\|^2 && \text{(A.9)}\\
\leqslant&\|x\|^2 + 2|(x,y)| + \|y\|^2. && \text{(A.10)}
\end{aligned}
$$

其中，不等式成立是因为复数的性质.

再考虑 Cauchy-Schwarz 不等式A.1，

$$
\begin{aligned}
&|(x,y)|^2 \leqslant (x,x)(y,y) && \text{(A.11)}\\
\Longleftrightarrow&|(x,y)| \leqslant \sqrt{(x,x)}\sqrt{(y,y)} && \text{(A.12)}\\
\Longleftrightarrow&|(x,y)| \leqslant \|x\|\|y\|. && \text{(A.13)}
\end{aligned}
$$

只需将式A.13代入式A.10，就有

$$
\|x+y\|^2 \leqslant \|x\|^2 + 2\|x\|\|y\| + \|y\|^2 = (\|x\| + \|y\|)^2,
$$

和前面一样，等号成立，当且仅当 x 和 y 线性相关（为什么?）.

对它两边开方就得到了三角不等式——定义A.5的条件 (d)，从而**维护**了定义A.6 [①] . 即由内积确实可以生成范数.

[①] 在泛函分析教材中，往往将其当成定理.

在讲清了范数和内积的关系后，给一个很自然的定义.

定义 A.7 (赋范空间的子空间). 设 $(V, \|\cdot\|)$ 是赋范空间，V_1 是 V 的一个子空间，则 $(V_1, \|\cdot\|)$ 也是一个赋范空间，称为 $(V, \|\cdot\|)$ 的子空间.

这样，就可以有一个定理.

定理 A.2 (线性泛函连续的充分必要条件). 设 V 是赋范空间，$\eta : V \to \mathbb{C}$ 是 V 上的线性泛函. 那么 η 是连续的当且仅当 η 的 **零空间 (null space)**

$$\mathscr{N} := \{x \in V | \eta(x) = 0\} \tag{A.14}$$

为 V 中的闭子空间.

证明. 只证必要性（“$\Longrightarrow$”）.
设 η 是连续线性泛函. 任取 $\mathscr{N}$ 中的一个序列 $\{x_n\}$，当 $x_n \to x$ 时，由 η 的连续性，有

$$\eta(x) = \lim_{n\to\infty} \eta(x_n).$$

又由于 $x_n \in \mathscr{N}$，

$$\lim_{n\to\infty} \eta(x_n) = 0.$$

结合以上二式，

$$\eta(x) = 0 \Longrightarrow x \in \mathscr{N}.$$

而 $\mathscr{N}$ 中的序列 $\{x_n\}$ 是任取的，都能得到其极限收敛于 $\mathscr{N}$ 当中而“不出界”，故 $\mathscr{N}$ 是闭集. 显然 $\mathscr{N}$ 又是赋范空间 V 的子空间，必要性得证.
关于充分性（“$\Longleftarrow$”）的证明，请参看任一泛函分析教材，例如夏道行等编的《实变函数论与泛函分析 • 下册 • 第二版修订本》P115. □

下面即将看到，上述定理A.2对于 Riesz 表现定理的证明极其重要.

习题 3.3. 验证定义A.6（由内积生成的范数）自然满足定义A.5（范数）的前三个条件 (a)~(c).

习题 3.4. * 请有兴趣的读者查阅泛函分析的教材，完成对定理A.2（线性泛函连续的充分必要条件）充分性的证明.

A.3 内积的连续性

在进入附录B之前，还需要介绍最后一部分的补充知识.

其实早在小节1.1.1的定义1.1.2，我们就介绍了有内积结构的集合（内积空间）中任意两元素的“距离”，现在更进一步，需要在没有其它结构的集合中做类似的事情.

定义 A.8 (度量). 设 X 是一个非空的集合. 映射 $\rho(\cdot,\cdot): X\times X\to\mathbb{R}$ 称为该集合中两元素之间的**度量（metric）**，若它满足如下 2 个条件：
(a) **非负性（nonnegativity）** $\rho(x,y)\geqslant 0$ 且 $\rho(x,y)=0\Longleftrightarrow x=y,\ \forall x,y\in X$；
(b) **三角不等式（triangle inequality）** $\rho(x,y)\leqslant\rho(x,z)+\rho(y,z),\ \forall x,y,z\in X.$

注记. 1. 按上述定义的集合 X 称，X 依度量 $\rho(\cdot,\cdot)$ 成为**度量空间**，又叫距离空间（此处的“距离”和定义1.1.2 中的“距离”不会混淆，因为记号不同）.
2. 请读者自证（留作习题）：
(a) 度量具有**对称性**：

$$\rho(x,y)=\rho(y,x),\ \forall x,y\in X.$$

(b)$\|x\|=\rho(x,0),\ \forall x\in(V,\|\cdot\|)$.

下面给出一个引理，它指出度量对两个变元是连续的.

引理 A.2 (度量的连续性). 设 $\{x_n\},\{y_n\}$ 是度量空间 X 中的任意两个序列. 若 $x_n\to x_0, y_n\to y_0$, 则

$$\lim_{n\to\infty}\rho(x_n,y_n)=\rho(x_0,y_0),\ \forall x_0,y_0\in X.$$

分析 只需证 $\lim\limits_{n\to\infty}|\rho(x_n,y_n)-\rho(x_0,y_0)|=0.$

证明. 由定义A.8的 (b) 得

$$\begin{aligned}&\rho(x_n,y_n)\leqslant\rho(x_n,x_0)+\rho(y_n,y_0)+\rho(x_0,y_0)\\ \Longrightarrow\ &\rho(x_n,y_n)-\rho(x_0,y_0)\leqslant\rho(x_n,x_0)+\rho(y_n,y_0).\end{aligned}$$

类似地有

$$\begin{aligned}&\rho(x_0,y_0)\leqslant\rho(x_0,x_n)+\rho(y_0,y_n)+\rho(x_n,y_n)\\ \Longrightarrow\ &\rho(x_0,y_0)-\rho(x_n,y_n)\leqslant\rho(x_0,x_n)+\rho(y_0,y_n).\end{aligned}$$

结合以上二式，就有

$$|\rho(x_n,y_n)-\rho(x_0,y_0)|\leqslant\rho(x_0,x_n)+\rho(y_0,y_n),$$

上式运用了度量的对称性. 再命 $n\to\infty$，不等号右端可以任意小，这样就如引理所愿了. □

借助度量的连续性（引理A.2），可以引出关于范数有界的一个结论.

引理 A.3 (范数有界的充分条件). 若 $\{x_n\}$ 是赋范空间中的收敛序列，则它们的范数是有界的.

证明. 由于取法的任意性，只需在引理A.2中取

$$y_n=y_0=0,$$

结合定义A.8的注记 2 的 (b)，就有

$$\|x_n\| = \rho(x_n, 0) \to \rho(x_0, 0) = \|x_0\| < \infty.$$

□

有了以上的铺垫，就可以来到最后一个补充知识了.

定理 A.3 (内积的连续性). 设 V 是内积空间，则内积 $(\cdot,\cdot)$ 是关于两个变元的连续映射. 即当 $x_n \to x, y_n \to y$ 时，有

$$\lim_{n\to\infty} (x_n, y_n) = (x, y).$$

分析 只需证 $\lim\limits_{n\to\infty} |(x_n, y_n) - (x, y)| = 0.$

证明. 为使用 Cauchy-Schwarz 不等式（式A.1），需做缩放：

$$\begin{aligned} |(x_n, y_n) - (x, y)| &= |(x_n, y_n) - (x_n, y) + (x_n, y) - (x, y)| \\ &\leqslant |(x_n, y_n) - (x_n, y)| + |(x_n, y) - (x, y)| \\ &= |(x_n, y_n - y)| + |(x_n - x, y)|, \end{aligned}$$

其中第二个等号成立是运用了内积映射对第一、二槽的（反）线性性. 再应用 Cauchy-Schwarz 不等式，即得

$$\begin{aligned} |(x_n, y_n) - (x, y)| &\leqslant |(x_n, y_n - y)| + |(x_n - x, y)| \\ &\leqslant \sqrt{(x_n, x_n)}\sqrt{(y_n - y, y_n - y)} + \sqrt{(x_n - x, x_n - x)}\sqrt{(y, y)} \\ &= \|x_n\|\|y_n - y\| + \|x_n - x\|\|y\|. \end{aligned}$$

其中第二个等号成立是由于定义A.6. 由上式不难看出，由于序列 $\{x_n\}$ 收敛，根据引理A.3知 $\{\|x_n\|\}$ 有界，而 $\|y\|$ 自然是有界的，这样不等号右端可以任意小，即

$$\lim_{n\to\infty} |(x_n, y_n) - (x, y)| = 0.$$

□

我们将看到，这个看似直观的定理，在正文和下面的结论中都会用到.

习题 3.5. 证明定义A.8的注记 2.

B 投影定理（正交分解定理）与 Riesz 表现定理

有了前面附录A介绍的知识作支撑，现在正式来介绍投影定理（正交分解定理）与 Riesz 表现定理.

B.1 投影定理（正交分解定理）

先来回顾一下定义A.2，我们定义了矢量空间的子空间，它须满足：

- 是更大集合的子集；
- 也是矢量空间（与那个更大的集合保持相同的线性运算律）.

现在要面对的不仅是矢量空间那样简单——只有线性结构，而是 Hilbert 空间，它不仅是矢量空间，还是在此基础上被赋予了内积的内积空间，同时还是完备的（即拥有拓扑）. 那么一个很自然的问题是，Hilbert 空间的子空间如何定义呢？

一个很自然的想法，就是必须还要在此前的基础上加上关于拓扑的要求.

定义 B.1 (Hilbert 空间的子空间). Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的子集 $M \subset \mathscr{H}$ 称为 $\mathscr{H}$ 的子空间，若

- M 在线性运算（加法和数乘）下自身封闭；
- 用 $\mathscr{H}$ 的拓扑衡量，M 是闭集.

对于此，这里只是粗略地介绍，不做太多纠缠，再介绍一个概念.

定义 B.2 (正交补). 设 M 是 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的任一子集，则子集

$$M^{\perp} := \{f \in \mathscr{H} | (f, g) = 0, \forall g \in M\}$$

称为 M 的**正交补集（orthogonal complement）**，简称正交补.

注记. 1. 简单地说，作为 $\mathscr{H}$ 的子集，M 的正交补就是那些在 $\mathscr{H}$ 的元素的集合，满足它（里的元素）跟 M 的任一元素“正交”（通过内积为 0 来刻画）. 读者可以回顾一下解析几何中是如何判断“正交”的（比如何时两直线正交），这里的“正交”只是一个推广.
2. 请读者证明（留作习题）：正交是相互的，即 $(f, g) = 0 \Longleftrightarrow (g, f) = 0, \forall f, g \in \mathscr{H}$.

有了 Hilbert 空间的子空间和正交补的概念，下面给出一个引理，它对于稍后介绍的两个定理有帮助.

引理 B.1. 若 M 是 $\mathscr{H}$ 的子空间，则
(a)$M^{\perp}$ 也是 $\mathscr{H}$ 的子空间；
(b)$M \cap M^{\perp} = \{0\}$;
(c) 只要 $M \neq \mathscr{H}$，那么 $M^{\perp}$ 必含非零元.

注记. 1. 对于上述引理的 (a)，证明的关键在于须用到 $\mathscr{H}$ 的拓扑，具体来说是内积的连续性；
2. 上述引理的 (b) 配上定理A.1将立刻得到：$\mathscr{H} = M \oplus M^{\perp}$.

证明. 先证 (a). 分为两步，根据定义B.1, 先证 $M^{\perp}$ 是矢量空间，再证它是闭的.
第一步 $\forall f_1, f_2 \in M^{\perp}$，由定义B.2自然有

$$(g, f_1) = (g, f_2) = 0, \forall g \in M,$$

这里用到了上面提到的正交的相互性.

再由内积映射对第二槽的线性性，结合上式有

$$(g, \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 (g, f_1) + \alpha_2 (g, f_2) = 0,\ \forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}.$$

这就表明，$\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2$ 与任一 $g \in M$ 正交，即 $\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 \in M^\perp$，故有了线性结构的 $M^\perp$ 是矢量空间.

第二步 再证 $M^\perp$ 是闭的. 跟证明定理A.2的必要性类似，取 $M^\perp$ 里的任一序列 $\{f_n\}$，考虑趋向过程 $f_n \to f,\ \forall f \in \mathscr{H}$. 现在只需证 $f \in M^\perp$（即此极限“不出界”）. 有这等好事吗？有的.

根据内积的连续性（定理A.3），

$$(f, g) = \lim_{n\to\infty} (f_n, g).$$

再由定义B.2，

$$\lim_{n\to\infty} (f_n, g) = 0.$$

结合以上二式，

$$(f, g) = 0,$$

即 $f \in M^\perp$，因此 $M^\perp$ 是闭的. 至此，(a) 证毕.

再证 (b). 根据内积的定义定义1.1.1 和定义B.2不难看出，留作习题.

对于 (c)，可以考虑其逆否命题，证明的依据同上，留作习题. □

终于，现在来到了泛函分析里的一个**“重磅的”**定理.

定理 B.1 (投影定理（正交分解定理）). 设 $\mathscr{H}$ 是 Hilbert 空间，M 是其子空间，则存在唯一的 $f_1 \in M, f_2 \in M^\perp$，使得

$$f = f_1 + f_2,\ \forall f \in \mathscr{H}.$$

注记. 1. 其中 f_1 称为 f 在 M 上的**投影 (projection)**（见图B.1），“投影定理”因此得名.

2. 投影定理又叫正交分解定理，这个名字也是很自然的，因为涉及正交补和 f 的“分解”.

3. 一个具体的情形是，若 $\mathscr{H} = \mathbb{R}^3$，由解析几何知上述定理自然成立.

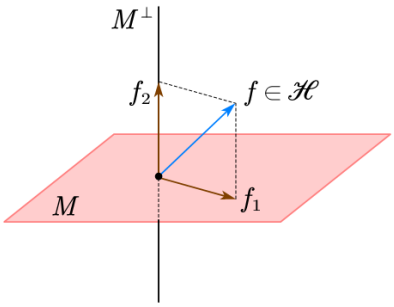

图 B.1. 投影定理示意

证明. 从略. 原因是证明之需要许多泛函分析的知识，比如“最佳逼近”的技术. 而若介绍它们则需要很长的篇幅，差不多相当于讲一遍一般泛函分析教材的前几章，这对于本讲义来说是不可能的（也超出了笔者的水平）.

> 请读者参看任一泛函分析教材，比如孙炯等编的《泛函分析》（第二版）P99、P100 或夏道行等编的《实变函数论与泛函分析・下册・第二版修订本》P225∼P227. □

关于这个定理，在小节2.7.3会进一步探讨. 这里介绍它，主要是用它证明下面的 Riesz 表现定理.

习题 3.6. 证明定义B.2的注记 2.

习题 3.7. 证明引理B.1的 (b)、(c).

B.2 Riesz 表现定理

在小节1.1.3我们已经接触过 Riesz 表现定理，它也是泛函分析中的一个**重磅的**定理，对量子力学的严格性很有帮助. 当时没有证明，现在证明之.

先回顾一下这个定理.

定理 B.2 (Riesz 表现定理)**.** 设 $\mathscr{H}$ 是 Hilbert 空间，$\mathscr{H}^*$ 是其对偶空间，则 $\forall \eta \in \mathscr{H}^*$, 存在唯一的 $f_\eta \in \mathscr{H}$, 使得 $\eta(g) = (f_\eta, g), \forall g \in \mathscr{H}$.

注记. 1. 它表明 $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^*$ “一样大”, 即存在一一到上的映射 $\nu : \mathscr{H} \to \mathscr{H}^*$（见图B.2）.
2.Riesz 表现定理又叫 Riesz 表示定理，因为它显示 $\mathscr{H}$ 上的任一连续线性泛函（$\mathscr{H}^*$ 中的元素）都有一个简单的表示.

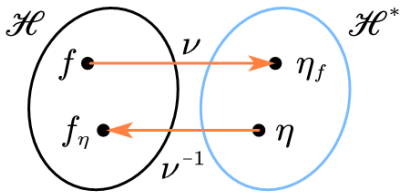

图 B.2. $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^*$ “一样大”

分析 由于 $g \in \mathscr{H}$ 取法的任意性，不妨考虑投影定理（定理B.1）. 关键在于找出 M 和 $M^\perp$.

证明. 先考虑平凡的情形.1° 若 $\eta = 0$,
第一步 先证存在性.
不妨取 $f_\eta = 0 \in \mathscr{H}$，则自然满足 $\eta(g) = (f_\eta, g) = 0,\ \forall g \in \mathscr{H}$.
第二步 进一步地，易证这样选取的 f_η 是唯一的（留作习题）.
2° 若 $\eta \neq 0$,
第一步 先证存在性.
由于 $\eta \in \mathscr{H}^*$，根据定理A.2有 η 的零空间

$$\mathscr{N}(\eta) = \{x \in \mathscr{H} | \eta(x) = 0\}$$

是 $\mathscr{H}$ 的一个子空间.
不妨命 $M \equiv \mathscr{N}(\eta)$，则由引理B.1的注记 2 知 $\mathscr{H} = M \oplus M^\perp$.
又 $\eta \neq 0 \Longrightarrow M \neq \mathscr{H}$，再由引理B.1 的 (c) 知 $M^\perp \neq \{0\}$，则不妨取

$$y \in M^\perp \wedge \|y\| = 1,$$

再命

$$h \equiv g - \frac{\eta(g)}{\eta(y)} y,\ \forall g \in \mathscr{H}, \tag{B.1}$$

就有

$$\eta(h) = \eta(g) - \frac{\eta(g)}{\eta(y)}\eta(y) = \eta(g) - \eta(g) = 0$$
$$\Longrightarrow h \in M \Longrightarrow (h, y) = 0.$$

于是按式B.1, 就有满足投影定理（定理B.1）的分解

$$g = h + \frac{\eta(g)}{\eta(y)}y,\ \forall h \in M, y \in M^{\perp}.$$

再让等号两边同时与 y 作内积

$$\begin{aligned}(g,y) &= (h,y) + \left(\frac{\eta(g)}{\eta(y)}y, y\right)\\ &= 0 + \frac{\overline{\eta(g)}}{\overline{\eta(y)}}(y,y)\\ &= \frac{\overline{\eta(g)}}{\overline{\eta(y)}}\|y\|^2\\ &= \frac{\overline{\eta(g)}}{\overline{\eta(y)}}\\ \Longrightarrow &\overline{\eta(g)} = \overline{\eta(y)}(g,y)\\ \Longrightarrow &\eta(g) = \eta(y)(y,g) = (\overline{\eta(y)}y, g),\ \forall g \in \mathscr{H}.\end{aligned}$$

其中第二个等号和最后一个等号成立都是由于内积映射对第一槽的反线性性，而第三个等号成立是因为定义A.6，倒数第二个等号成立是按 定义1.1.1的 (c).
易见，只需再命 $f_\eta \equiv \overline{\eta(y)}y$，就如定理所愿了（至少在形式上存在），至此存在性证毕.
第二步再证唯一性.
设 $\exists f_\varphi \in \mathscr{H}$ s.t. $\eta(g) = (f_\varphi, g),\ \forall g \in \mathscr{H}$. 这就意味着

$$\begin{aligned}&(f_\varphi, g) = (f_\eta, g)\\ \Longrightarrow &(f_\varphi, g) - (f_\eta, g) = 0\\ \Longrightarrow &(f_\varphi - f_\eta, g) = 0\\ \Longrightarrow &f_\varphi - f_\eta = 0\\ \Longrightarrow &f_\varphi = f_\eta.\end{aligned}$$

其中第二个“$\Longrightarrow$”成立也是因为内积映射对第一槽的反线性性，而第三个“$\Longrightarrow$”成立是按定义1.1.1的注记 3.
至此唯一性得证. □

上面讲过，此定理由于可以保证映射 ν“一一到上”而对量子力学十分重要. 为帮助读者理解，下面举一个具体的例子.

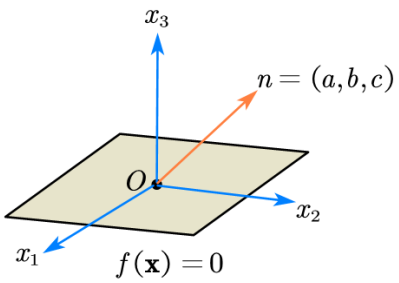

图 B.3. 平面 $f(\mathbf{x}) = 0$ 及其法矢 n

例 B.1. 当 $\mathscr{H} = \mathbb{R}^3$ 时，它的几何意义是很直观的（见图B.3）.
考虑映射

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^3 &\to \mathbb{R} \\ : \mathbf{x} &\mapsto ax_1 + bx_2 + cx_3 \equiv (n, \mathbf{x}), \end{aligned}$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3, n = (a, b, c)$.
将其与 Riesz 表现定理对比立刻知 $f_\eta = n$，它是平面 $f(\mathbf{x}) = 0$ 的法矢. 事实上，平面 $f(\mathbf{x}) = 0$ 决定了存在唯一属于它的法矢 n，这就是在该情形下的几何意义.

习题 3.8. 将定理B.2的证明中 1° 情形下 f_η 的唯一性证明补充完成.

C Riemann-Lebesgue 引理

在一般的数学分析书中，讲到 Fourier 分析初步的时候，都会涉及这个定理，这里简要回顾它.

定理 C.1 (Riemann-Lebesgue 引理). 若 $f\in\mathscr{R}[a,b]$（这里的 a 可以是 $-\infty$，b 也可以是 $+\infty$），则

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t=0.$$

记号 C.1. 1. 这里的 $e(-\lambda t)\equiv e^{-2\pi\mathrm{i}\lambda t}$；
2.$\mathscr{R}[a,b]$ 是一个集合，具体地，

$$\mathscr{R}[a,b]\equiv\{\text{在}[a,b]\text{上可积，或者有有限多个奇点且绝对可积的函数}\}.$$

注记. 1.“可积”的含义是积分

$$\int_a^b f(t)\mathrm{d}t$$

收敛；
2.“绝对可积”的含义是积分

$$\int_a^b |f(t)|\mathrm{d}t$$

收敛，包含了 $f(t)$ 存在奇点和 $[a,b]$ 是无限区间的情形. 显然“绝对可积”比“可积”的要求更高（因为函数可积却未必绝对可积）.

图C.1给出了这个定理较简单的情形：取 $f(t)=t$，可见随着 λ 的增大，函数 $f(t)\cos\lambda t$ 在横轴上方和下方的面积逐渐趋于相等——这就是 Riemann-Lebesgue 引理的几何意义.

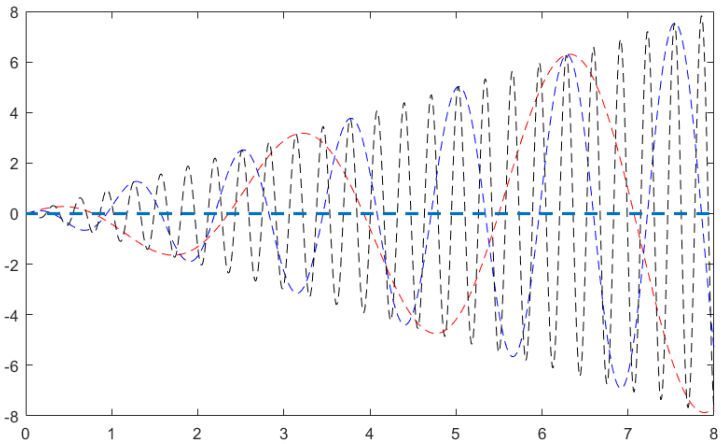

图 C.1. Riemann-Lebesgue 引理简单示意

分析 根据定理的条件 $f\in\mathscr{R}[a,b]$，分成两种情形来证明：先设区间 $[a,b]$ 有限，再设 $[a,b]$ 是无限区间. 在前者中又分两步：先考虑 f 可积，再考虑“更坏”的情形，f 绝对可积.

证明. 1° 首先设 $[a,b]$ 是有限区间.
第一步 若 f 在 $[a,b]$ 上可积，则 f 在 $[a,b]$ 上有界，不妨设 $|f(x)|\leqslant M(\forall M>0)$.
现取 $[a,b]$ 的一组划分，将其分成 m 个“小块”，$a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$，其中

$x_j = a + \frac{b-a}{m} j$. 再设 f 在 $[x_{j-1}, x_j]$ 上的振幅为 ω_j.
这样，就可对定理中的积分进行估计：

$$\left|\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| = \left|\sum_{j=1}^m \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \leqslant \sum_{j=1}^m \left|\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \tag{C.1}$$

$$\leqslant \sum_{j=1}^m \left|\int_{x_{j-1}}^{x_j} [f(t)-f(x_j)]e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| + \sum_{j=1}^m \left|\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x_j)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right|. \tag{C.2}$$

接下来，先估计式C.2不等号右边的第一项.
由于 $|e(-\lambda t)| \leqslant 1$，

$$\sum_{j=1}^m \left|\int_{x_{j-1}}^{x_j} [f(t)-f(x_j)]e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \leqslant \sum_{j=1}^m \omega_j \Delta x_j. \tag{C.3}$$

再估计式C.2不等号右边的第二项.

$$\sum_{j=1}^m \left|\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x_j)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| = \sum_{j=1}^m \left|f(x_j)\int_{x_{j-1}}^{x_j} e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \tag{C.4}$$

$$= \sum_{j=1}^m \left|f(x_j)\cdot\frac{e(-\lambda x_j)-e(-\lambda x_{j-1})}{-2\pi \mathrm{i}\lambda}\right| \tag{C.5}$$

$$\leqslant m|f(x_j)|\left|\frac{e(-\lambda x_j)-e(-\lambda x_{j-1})}{-2\pi\mathrm{i}\lambda}\right| \tag{C.6}$$

$$\leqslant m\cdot M\cdot\frac{2}{2\pi|\lambda|} = \frac{mM}{\pi|\lambda|}. \tag{C.7}$$

结合式C.3、C.7，就有

$$\left|\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \leqslant \sum_{j=1}^m \omega_j\Delta x_j + \frac{mM}{\pi|\lambda|},$$

此时，不妨设 $|\lambda| > 1$，并取 $m = \left[\sqrt{|\lambda|}\right]$，代入上式，

$$\left|\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \leqslant \sum_{j=1}^m \omega_j\Delta x_j + \frac{M}{\pi\sqrt{|\lambda|}}.$$

容易看出，当 $\lambda \to \infty$ 时，上式右端可以任意小，即

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t = 0.$$

第二步 若 f 在 $[a,b]$ 上绝对可积，不妨设其在 $[a,b]$ 上的唯一奇点为 a，这意味着

$$\forall\epsilon > 0, \exists\delta > 0, \text{s.t.} \int_a^{a+\delta} |f(t)|\mathrm{d}t < \epsilon.$$

类似地，就可估计

$$\begin{aligned}\left|\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| &\leqslant \left|\int_a^{a+\delta} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| + \left|\int_{a+\delta}^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \\ &\leqslant \epsilon + \left|\int_{a+\delta}^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right|,\end{aligned}$$

而据第一步知，当 $\lambda \to \infty$ 时，上式右侧可以任意小，进而知

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t = 0.$$

2° 其次设 $[a,b]$ 是无限区间.
不妨设 $b = +\infty$. 有了 1° 的经验，可直接考虑“较坏”的情况——f 在 $[a,+\infty)$ 上绝对可积，换句话说，

$$\forall \epsilon > 0, \exists A > 0, \text{s.t.} \int_A^{+\infty} |f(t)|\mathrm{d}t < \epsilon.$$

这样，

$$\begin{aligned}\left|\int_a^{+\infty} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| &\leqslant \left|\int_a^{A} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| + \left|\int_A^{+\infty} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| \\ &\leqslant \left|\int_a^{A} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| + \int_A^{+\infty} |f(t)|\mathrm{d}t \\ &\leqslant \left|\int_a^{A} f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t\right| + \epsilon,\end{aligned}$$

又据第一步知，当 $\lambda \to \infty$ 时，上式右侧可以任意小，此即

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)e(-\lambda t)\mathrm{d}t = 0.$$

□

从上述证明过程，我们可以感受到数学的思维：**先易后难，先粗糙后精细**. 这是人类智慧的结晶，也是有效处理许多问题的“灵丹妙药”. 如此一来，再复杂的思绪也会变得清晰明了，思维更是张弛有度.

下面直接给出两个自然的推论.

推论 C.1. 若 $f \in \mathscr{R}[a,b]$（这里的 a 可以是 $-\infty$，b 也可以是 $+\infty$），则

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)\cos\lambda t\,\mathrm{d}t = 0.$$

证明. 留作习题. □

推论 C.2. 若 $f \in \mathscr{R}[a,b]$（这里的 a 可以是 $-\infty$，b 也可以是 $+\infty$），则

$$\lim_{\lambda\to\infty}\int_a^b f(t)\sin\lambda t\,\mathrm{d}t = 0.$$

证明. 留作习题. □

注记. 正文的例1.1.7之证明就是用了推论C.2.

习题 3.9. 证明推论C.1、推论C.2.

D Dirichlet 积分

Dirichlet 积分是一个著名的广义积分，有许多方法（如 Fourier 分析方法、复分析方法、重积分方法等等）可以得到其值. 由于上一节附录介绍了 Riemann-Lebesgue 引理，遂本节附录就利用之.

首先，看一个引理.

引理 D.1. 在区间 $\left(0, \frac{\pi}{2}\right]$ 上定义

$$D_n(x) := \frac{\sin(2n+1)x}{\sin x},$$

则

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} D_n(x)\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}.$$

证明. 第一步 先证该积分存在.
显然 $D_n(x)$ 在 $x=0$ 处无定义. 但

$$\lim_{x\to 0^+} D_n(x) = 2n+1,$$

故 $D_n(x)$ 在 $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ 上可积.
第二步 再确定该积分的值.
记

$$I_n \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} D_n(x)\mathrm{d}x,$$

则

$$\begin{aligned}
I_n &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{\sin x}\mathrm{d}x \\
\Longrightarrow I_{n+1} - I_n &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+3)x}{\sin x}\mathrm{d}x - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{\sin x}\mathrm{d}x \\
&= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+3)x - \sin(2n+1)x}{\sin x}\mathrm{d}x \\
&= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{2\sin x\cos(2n+2)x}{\sin x}\mathrm{d}x \\
&= \int_0^{\frac{\pi}{2}} 2\cos(2n+2)x\mathrm{d}x \\
&= 0 \\
\Longrightarrow I_n = I_{n-1} = \cdots = I_0 &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} 1\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}.
\end{aligned}$$

□

注记. 这里的 $D_n(x)$ 有时也叫 Dirichlet 核（Dirichlet kernel），在 Fourier 分析中有不小的作用. 它的图像与图1.1.8极为相似.

下面正式介绍 Dirichlet 积分.

定理 D.1 (Dirichlet 积分)**.**

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}.$$

证明. 第一步 先证该积分存在.
$\forall A>1$,

$$\int_0^A \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x+\int_1^A \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x,$$

上式右端头一项显然收敛，而第二项

$$\begin{aligned}\int_1^A \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x&=-\int_1^A \frac{1}{x}\mathrm{d}(\cos x)\\&=-\frac{\cos x}{x}\Big|_1^A+\int_1^A \cos x\mathrm{d}\left(\frac{1}{x}\right)\\&=-\frac{\cos x}{x}\Big|_1^A-\int_1^A \frac{\cos x}{x^2}\mathrm{d}x,\end{aligned}$$

易见，当 $A\to+\infty$，上式右端收敛，则该积分收敛.
第二步 再确定该积分的值.
不妨考虑辅助函数

$$f(x)\equiv\begin{cases}\frac{1}{\sin x}-\frac{1}{x}, & x\neq 0,\\ 0, & x=0.\end{cases}$$

不难看出，$f(x)$ 是 $\left[0,\frac{\pi}{2}\right]$ 上的连续函数，从而在 $\left[0,\frac{\pi}{2}\right]$ 上可积.
于是由 Riemann-Lebesgue 引理（推论C.2）得

$$\begin{aligned}&\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{\pi}{2}} f(x)\sin(2n+1)x\mathrm{d}x=0\\\Longrightarrow&\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{x}\mathrm{d}x=\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{\sin x}\mathrm{d}x(x\neq 0),\end{aligned}$$

上式配合引理D.1就有

$$\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{x}\mathrm{d}x=\frac{\pi}{2}.$$

另一方面，作变换 $(2n+1)x\equiv t$ 后，

$$\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin(2n+1)x}{x}\mathrm{d}x=\lim_{n\to\infty}\int_0^{\frac{(2n+1)\pi}{2}} \frac{\sin t}{t}\mathrm{d}t=\int_0^{+\infty} \frac{\sin t}{t}\mathrm{d}t.$$

即知

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\frac{\pi}{2}.$$

□

自然地，有如下推论.

推论 D.1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\pi.$$

注记. 正文的例1.1.7就是用了这个结论.

证明. 留作习题. □

另外，还有一个更一般的“版本”.

定理 D.2 (Dirichlet 积分之推广). 当 $a \neq 0$ 时，

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin ax}{x}\mathrm{d}x = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & a > 0, \\ -\frac{\pi}{2}, & a < 0. \end{cases}$$

证明. 请参看顾樵《数学物理方法》P37∼P38，那里是用 Fourier 变换得到的. □

利用 Dirichlet 积分可以解决一些看似复杂的广义积分，下面看一个例子.

例 D.1. 计算广义积分

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2}\mathrm{d}x.$$

解 由分部积分

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2}\mathrm{d}x &= \int_0^{+\infty} \sin^2 x \mathrm{d}\left(-\frac{1}{x}\right) \\ &= -\frac{\sin^2 x}{x}\bigg|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} -\frac{1}{x}\mathrm{d}(\sin^2 x) \\ &= -\frac{\sin^2 x}{x}\bigg|_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} \frac{\sin 2x}{x}\mathrm{d}x, \end{aligned}$$

对于等式右端第一项，

$$-\frac{\sin^2 x}{x}\bigg|_0^{+\infty} = \lim_{x\to 0^+} \frac{\sin^2 x}{x} - \lim_{x\to+\infty} \frac{\sin^2 x}{x} = 0.$$

而第二项，作变换 $2x \equiv t$ 后，

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin 2x}{x}\mathrm{d}x = \int_0^{+\infty} \frac{\sin t}{t}\mathrm{d}t = \frac{\pi}{2}\text{（据 Dirichlet 积分）}.$$

从而

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2}\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}.$$

习题 3.10. 证明推论D.1.

习题 3.11. * 请有兴趣的读者查阅相关资料，完成定理D.2（Dirichlet 积分之推广）的证明.

习题 3.12. 利用 Dirichlet 积分计算下列广义积分.

(a)

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin^4 x}{x^2}\mathrm{d}x;$$

(b)

$$\int_0^{+\infty} \frac{\sin^3 x}{x(1+\cos x)}\mathrm{d}x.$$

参考文献

参考文献