Fermi 体系逆问题的一种新解法

陈难先　刘　刚
清华大学物理系，北京 100084；北京科技大学应用物理研究所，北京 100083

摘要　利用加性 Möbius 级数反演方法，提出了解决 Fermi 体系逆问题的一类新方法；介绍了加性 Möbius 反演和一维差分方程之间的联系．

关键词　Möbius 反演　Fermi 体系　逆问题

数论中的 Möbius 反演方法近年来在物理学中得到了一系列的应用，例如 Bose 体系逆问题(包括黑体辐射逆问题和晶格比热逆问题)，晶格结合能逆问题[1~8]．而对于本文着重讨论的 Fermi 体系逆问题，则没有简便易用的 Möbius 反演公式和反演步骤，已有的两种解法为 δ 函数展开法[9]和最大熵法[10]．

类似于 Bose 体系逆问题的求解，本文明确提出加性 Möbius 级数反演公式及直接用它来解决 Fermi 体系逆问题的方法和步骤．另外，还将加性 Möbius 反演公式和一维差分方程求解直接联系起来．

在多数数论的书中对加性 Möbius 反演均无陈述[11]，实际上它就相当于组合论中的幂级数的系数反演[12]．

1　加性 Möbius 级数反演公式及其应用

1.1　公式表述及证明

加性 Möbius 级数反演公式可表述如下：

$$P_m(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a(n) Q_{n+m}(x)$$
$$\Leftrightarrow Q_m(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{\oplus}^{-1}(n) P_{n+m}(x), \tag{1}$$

其中 $a(0) \neq 0$ 且 $a(n)$，$a_{\oplus}^{-1}(n)$满足

$$\sum_{m=0}^{n} a(m) a_{\oplus}^{-1}(n-m) = \delta_{n,0}, \tag{2}$$

这里 $\delta_{m,n}$是 Kronecker 符号，

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1, 若\ m = n \\ 0, 若\ m \neq n \end{cases},$$

对反演公式(1)的证明如下：
先证“⇒”，

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{\oplus}^{-1}(n) P_{n+m}(x) =$$
$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{\oplus}^{-1}(n) \sum_{k=0}^{\infty} a(k) Q_{n+m+k}(x) =$$
$$\sum_{s=0}^{\infty} \left[\sum_{k=0}^{s} a(k) a_{\oplus}^{-1}(s-k)\right] Q_{m+s}(x) =$$
$$\sum_{s=0}^{\infty} \delta_{s,0} Q_{m+s}(x) = Q_m(x),$$

证毕．证明过程中交换了求和次序，其前提是

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left| a_{\oplus}^{-1}(n) a(k) Q_{n+m+k}(x) \right| < \infty$$

即级数绝对收敛，同理可证“⇐”．

1.2　Fermi 体系逆问题求解

给定卷积方程如下：

$$P(x) = \int_{-\infty}^{\infty} Q(y) \Phi(y-x) \mathrm{d}y, \tag{3}$$

如果其中积分核 $\Phi(x)$具有类似于 Fermi 分布的形式或者可以转化为类似形式，即 $1/(1+e^x)$的形式，

2002-11-22 收稿，2003-01-10 收修改稿
E-mail：nanxian@mail.tisinghua.edu.cn

则称之为 Fermi 积分方程，Fermi 体系逆问题指的是已知 $P(x)$和 $\Phi(x)$，要从 Fermi 积分方程中求解出 $Q(x)$.

下面以

$$\Phi(x)=\frac{1}{1+e^{x}},\tag{4}$$

的情形为例介绍直接利用反演公式(1)来求解 $Q(x)$的方法、步骤.

第1步，利用 Taylor 展开将(3)式等价变成加性 Möbius 级数反演公式能够处理的形式.

将(4)式代入(3)式可得

$$P(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Q(y)}{1+e^{y-x}}dy,\tag{5}$$

$Q(y)$在 x 处的 Taylor 展开为

$$Q(y)=\sum_{n=0}^{\infty}Q^{(n)}(x)\frac{(y-x)^{n}}{n!},\tag{6}$$

这里 $Q^{(n)}(x)$是 $Q(x)$的 n 次导函数，将(6)式代入(3)式中可得

$$P(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\sum_{n=0}^{\infty}Q^{(n)}(x)\frac{(y-x)^{n}}{n!}\right]\Phi(y-x)dy=$$
$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}(y-x)^{n}\Phi(y-x)dy\right]Q^{(n)}(x)=$$
$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}t^{n}\Phi(t)dt\right]Q^{(n)}(x),$$

记

$$a(n)=\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}t^{n}\Phi(t)dt,\tag{7}$$

则有

$$P(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a(n)Q^{(n)}(x),\tag{8}$$

为了保证从(5)式到(8)式的变形有意义，(7)式中的积分必须收敛，而当积分核为 $\Phi(t)=1/1+e^{t}$ 时，该积分发散，为解决这个问题，对(5)式两边求导得到

$$P_{1}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{y-x}}{[1+e^{y-x}]^{2}}Q(y)dy,\tag{9}$$

其中 $P_1(x)$为 $P(x)$的一阶导函数，考察(9)式中的积分方程，其积分核为

$$e^{y-x}/[1+e^{y-x}]^{2},$$

这样将(6)式代入(9)式可得

$$P_{1}(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a(n)Q^{(n)}(x),\tag{10}$$

其中

$$a(n)=\frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{t^{n}e^{t}}{(1+e^{t})^{2}}dt,\tag{11}$$

这个积分是收敛的. 一般可以认为物理上的函数 $P_1(x)$的可微性质足够好，由(10)式有

$$P_{1}^{(m)}(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a(n)Q^{(n+m)}(x).\tag{12}$$

第2步，反演并求出 $a(n)$，$a_{\oplus}^{-1}(n)$.

由加性 Möbius 级数反演公式(1)可得

$$Q^{(m)}(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_{\oplus}^{-1}(n)P_{1}^{(n+m)}(x),$$

当 $m=0$ 时有

$$Q(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_{\oplus}^{-1}(n)P_{1}^{(n)}(x),$$

由上式和 $P_1(x)$为 $P(x)$的一阶导函数可得

$$Q(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_{\oplus}^{-1}(n)P^{(n+1)}(x).\tag{13}$$

由于$\frac{e^{t}}{(1+e^{t})^{2}}$是偶函数，因此

$$a(2n+1)=0\quad(n=0,1,2,\ldots),\tag{14}$$

下面讨论 n 为偶数的情况：

$n=0$ 时，

$$a(0)=\frac{1}{0!}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{t}}{(1+e^{t})^{2}}dt=1,\tag{15}$$

$n\geqslant 2$ 时，

$$a(n)=\frac{2}{n!}\int_0^\infty t^n\Big[\sum_{m=1}^\infty(-1)^{m+1}m\mathrm{e}^{-mt}\Big]\mathrm{d}t=$$
$$2\sum_{m=1}^\infty\Big\{(-1)^{m+1}m\Big[\frac{1}{n!}\int_0^\infty t^n\mathrm{e}^{-mt}\mathrm{d}t\Big]\Big\}=$$
$$2\sum_{m=1}^\infty\Big[(-1)^{m+1}m\frac{1}{n!}n!m^{-n-1}\Big]=$$
$$2\sum_{m=1}^\infty\frac{(-1)^{m+1}}{m^n}=2(1-2^{1-n})\zeta(n),$$

由于 $n\geqslant0$ 时

$$\zeta(2n)=\frac{(-1)^{n+1}2^{2n-1}\pi^{2n}}{(2n)!}B_{2n},\qquad(16)$$

因此，$n\geqslant1$ 时

$$a(2n)=2(1-2^{1-2n})\zeta(2n)=\frac{(-1)^{n+1}(2^{2n}-2)\pi^{2n}}{(2n)!}B_{2n}.\qquad(17)$$

由 $a(0)=1$，$B_0=1$ 可知上式当 $n=0$ 时恰好也成立，综上

$$a(n)=\begin{cases}\dfrac{(-1)^{m+1}(2^{2m}-2)\pi^{2m}}{(2m)!}B_{2m},\text{若 } n=2m\\0,\text{若 } n=2m+1\end{cases},\qquad(18)$$

其中 $m=0,1,2,\ldots$，由

$$B_1=-1/2,B_2=1/6,B_4=-1/30,$$
$$B_6=1/42,B_8=-1/30,B_{10}=5/66,\ldots\qquad(19)$$

可得

$$a(2)=\pi^2/6,a(4)=7\pi^4/360,$$
$$a(6)=31\pi^6/15120,$$
$$a(8)=127\pi^8/604800,$$
$$a(10)=73\pi^{10}/3421440,\ldots\qquad(20)$$

再由(2)式中的递推关系便可以得到

$$a_\oplus^{-1}(0)=1,a_\oplus^{-1}(2)=-\pi^2/6,$$
$$a_\oplus^{-1}(4)=\pi^4/120,a_\oplus^{-1}(6)=-\pi^6/5040,$$
$$a_\oplus^{-1}(8)=\pi^8/362880,$$
$$a_\oplus^{-1}(10)=-\pi^{10}/39916800,\ldots\qquad(21)$$

及

$$a_\oplus^{-1}(2n+1)=0\quad(n=0,1,2,\ldots).\qquad(22)$$

将求出的反演系数代入(13)式便最终解出了 $Q(x)$.

以上便是利用加性 Möbius 反演公式的一般步骤，适用于大多数 Fermi 体系逆问题.

不过对于上面讨论的具体问题，可以求出 $a_\oplus^{-1}(n)$的通式，由(2)式可知

$$\sum_{n=0}^\infty\Big(\sum_{m=0}^n a(m)a_\oplus^{-1}(n-m)\Big)t^n=\sum_{n=0}^\infty\delta_{n,0}t^n=t^0=1,\qquad(23)$$

由(23)式可得

$$\Big(\sum_{n=0}^\infty a(n)t^n\Big)\cdot\Big(\sum_{n=0}^\infty a_\oplus^{-1}(n)t^n\Big)=1.\qquad(24)$$

根据(18)式有

$$\sum_{n=0}^\infty a(n)t^n=\sum_{m=0}^\infty\frac{(-1)^{m+1}(2^{2m}-2)\pi^{2m}}{(2m)!}B_{2m}t^{2m},$$

再由余割函数展开式[13,14]

$$t\csc t=\sum_{m=0}^\infty\frac{(-1)^{m+1}(2^{2m}-2)\pi^{2m}}{(2m)!}B_{2m}t^{2m}(|t|<\pi)$$

可知

$$\sum_{n=0}^\infty a(n)t^n=t\csc t=t/\sin t,\qquad(25)$$

由(24)和(25)式有

$$\sum_{n=0}^\infty a_\oplus^{-1}(n)t^n=\frac{\sin t}{t},\qquad(26)$$

将 $\sin t$ 的 Taylor 展开代入到上式中，比较两边幂级数的系数可得

$$a_\oplus^{-1}(n)=\begin{cases}(-1)^m\pi^{2m}/(2m+1)!,\text{若 } n=2m\\0,\text{若 } n=2m+1\end{cases}.\qquad(27)$$

2 加性 Möbius 反演公式及其应用

除了上述无穷级数反演公式以外，这里再介绍另一种加性 Möbius 反演公式及其应用.

2.1 加性 Möbius 反演公式及其证明

加性 Möbius 反演公式可以表述如下：

$$g(n)=\sum_{m=0}^{n}a(m)f(n-m)$$

$$\Leftrightarrow f(n)=\sum_{m=0}^{n}a_{\oplus}^{-1}(m)g(n-m),\qquad(28)$$

其中

$$\sum_{m=0}^{n}a(m)a_{\oplus}^{-1}(n-m)=\delta_{n,0}.\qquad(29)$$

对公式(28)证明如下：

先证"⇒",

$$\sum_{m=0}^{n}a_{\oplus}^{-1}(m)g(n-m)=$$
$$\sum_{m=0}^{n}a_{\oplus}^{-1}(m)\sum_{k=0}^{n-m}a(k)f(n-m-k)=$$
$$\sum_{s=0}^{n}\Big[\sum_{k=0}^{s}a(k)a_{\oplus}^{-1}(s-k)\Big]f(n-s)=$$
$$\sum_{s=0}^{n}\delta_{s,0}f(n-s)=f(n),$$

同理可证"⇐".

2.2 线性时不变离散系统问题

常用的求解一维差分方程的方法有迭代法，Z 变换法等等[15]，这里我们利用加性 Möbius 反演公式来求解.

考查一个线性时不变的离散系统，其输入输出满足如下的常系数差分方程：

$$\sum_{m=0}^{N}a(m)y(n-m)=\sum_{m=0}^{N}b(m)x(n-m),\qquad(30)$$

给定如下初始条件：

$$y(n)=x(n)=0,(若\ n<0),$$

则(30)式变成

$$\sum_{m=0}^{n}a(m)y(n-m)=\sum_{m=0}^{n}b(m)x(n-m),\qquad(31)$$

引入 $w(n)$，使得

$$\sum_{m=0}^{n}a(m)y(n-m)=w(n)$$
$$=\sum_{m=0}^{n}b(m)x(n-m),$$

由加性 Möbius 反演公式(28)可得

$$y(n)=\sum_{m=0}^{n}a_{\oplus}^{-1}(m)w(n-m)=$$
$$\sum_{m=0}^{n}a_{\oplus}^{-1}(m)\sum_{k=0}^{n-m}b(k)x(n-m-k)=$$
$$\sum_{s=0}^{n}\Big[\sum_{k=0}^{s}a_{\oplus}^{-1}(s-k)b(k)\Big]x(n-s),$$

记

$$h(s)=\sum_{k=0}^{s}a_{\oplus}^{-1}(s-k)b(k)=(a_{\oplus}^{-1}*b)(s),\qquad(32)$$

则

$$y(n)=\sum_{s=0}^{n}h(s)x(n-s)=(h*x)(n),\qquad(33)$$

可见 $h(n)$ 就是所讨论的离散系统的单位取样响应，将输入序列和它作卷积便得到输出序列，而 $h(n)$ 可由(32)式求得.

例如，考察差分方程

$$y(n)+0.2y(n-1)-0.24y(n-2)$$
$$=x(n)+x(n-1),\qquad(34)$$

$$x(n)=\begin{cases}1,若\ n\geqslant 0\\ 0,若\ n<0,\end{cases}\qquad(35)$$

它对应于

$$\{a(n)\mid n=0,1,2,\ldots\}=$$
$$\{1,0.2,-0.24,0,0,\ldots\},\qquad(36)$$
$$\{b(n)\mid n=0,1,2,\ldots\}=\{1,1,0,0,\ldots\},\qquad(37)$$

由(36)和(29)式中的递推关系可以求出

$$\{a_{\oplus}^{-1}(n) \mid n = 0,1,2,\ldots\} = \{1,0.2,0.28,-0.104,0.88,\ldots\}, \quad (38)$$

由(32)，(37)和(38)式可得

$$\{h(n) \mid n = 0,1,2,\ldots\} = \{1,0.8,0.08,0.176,-0.016,\ldots\}, \quad (39)$$

由(33)，(35)和(39)式可以求出差分方程(34)的解为

$$\{y(n) \mid n = 0,1,2,\ldots\} = \{1,1.8,1.88,2.056,2.04,\ldots\}.$$

上面介绍的方法将加性 Möbius 反演和差分方程求解联系了起来，这在电路分析、信号处理、弹性力学等领域均有潜在应用.

3 总结与讨论

以上介绍了一种新的 Fermi 体系逆问题的解法，这在介电弛豫谱[10]和表面吸附[16]等逆问题上也有用处. 这里的加性 Möbius 反演不如数论中积性 Möbius 反演那样普及，以至于在作者所看到的数论书中没有明确提到，可能是由于积性 Möbius 反演所对应的乘法半群(N, ×)中有无穷多个素元，如 2，3，5 等等，更有趣. 但数学上的简单并不等于物理应用上的无用，实际上，这类反演在组合论中讨论幂级数系数反演时早已有之. 本文说明，这是一类有重要应用的反演，且可归结为 Möbius 反演. 例如，利用它可以使 Fermi 体系逆问题的求解变得简便直观，另外，还可以使用它来讨论界面间原子(离子)相互作用势和设计新型多路模拟通信系统等新问题.

致谢 感谢清华大学 985 计划的支持和北京科技大学 863 材料模拟设计实验室提供了有利的工作条件.

参 考 文 献

1 Maddox J. Möbius and problems of inversion. Nature, 1990, 344: 377

2 Hughes B D. Some applications of classical analysis in physics and physical chemistry. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 1997, 129-130: 185

3 Bazant M Z. Möbius series inversion rediscovered. Report, Department of Physics, Harvard University, Cambridge, MA , February 11, 1998

4 Xie T L, et al. A new method for analyzing IRAS data to determine the dust temperature distribution. Astrophys J, 1991, 371: L31

5 Rosu H C. Möbius inverse problem for distorted black holes. II. Nuovo Cimento, 1993, 108B(12): 1333

6 Wang J M, et al. Temperature distributions of accretion disks in active galactic nuclei. Astrophys J, 1996, 469: 564

7 Chen N X, et al. Unified solution of the inverse capacity problem. Phys Rev E, 1998, 57 (2): 1302

8 Chen N X, et al. Atomistic analysis of the field-ion microscopy image of Fe_3Al. Phys Rev B, 1998, 57 (22): 14203

9 Chen N X, et al. Closed-form solution for inverse problems of Fermi systems. Phys Rev E, 1993, 48 (2): 1558

10 Ligachev V A, et al. A new method for calculating relaxation time spectra, and its application to the study of a-Si: H. Fizika Tverdogo Tela (Russia), 1991, 33(11): 3292

11 Schroeder M R. Number Theory in Science and Communication. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 1990

12 van Lint J H, et al. A Course in Combinatorics. 2nd ed. United Kingdom : Cambridge, 2001

13 王竹溪，等. 特殊函数概论. 北京：科学出版社，1965. 6

14 Gradshteyn I S, et al. Table of Integrals, Series, and Products. New York: Academic Press, 1980

15 Oppenheim A V, et al. Signals & Systems. 2nd ed. New Jersey : Prentice-Hall Inc, 1997

16 Landman U, et al. Adsorption on heterogeneous surfaces . 1. Evaluation of energy-distribution function via Wiener and Hopf method. J Chem Phys, 1976, 64 (4): 1762