

冯·诺伊曼——公理化量子力学的人

曹则贤[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2025-02-15 收到

[†] email: zxciao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20250408

CSTR: 32040.14.wl20250408

Brains, speed, and hard work produced results.

—Paul R. Halmos, *The legends of John von Neumann*

So a Hilbert space is defined by the existence of the inner product...

Operator theory deals with linear operations in a Hilbert space.

—John von Neumann, *Unsolved Problems in Mathematics*

摘要 冯·诺伊曼是罕有的天才，对数学、逻辑学、量子力学、气象学、博弈论、高速计算机、经济学等领域都做出了杰出的贡献。冯·诺伊曼在1927—1929年间公理化量子力学的努力，为量子力学打下了坚实的数学基础。冯·诺伊曼对量子力学的贡献，包括希尔伯特空间、算子理论、测量理论等，在其本人那里不过是撙草打兔子式的副业，但单凭那些成就就足以确立他在当代数学物理领域的杰出地位。

关键词 量子力学，概率诠释，希尔伯特空间，算子理论，密度算符，熵，量子测量

0 神童冯·诺伊曼

约翰·冯·诺伊曼 (John von Neumann, 1903—1957) 是人类历史上杰出得极为独特的、学化工出身的数学家、物理学家、气象学家和计算机科学家。冯·诺伊曼 1903 年出生于匈牙利布达佩斯一户有钱人家，匈牙利文名字为 Neumann János Lajos。冯·诺伊曼天资聪颖 (图 1)，拥有过目不忘 (eidetic memory) 和过目成诵 (quote it back verbatim) 的本领，8 岁学习微积分，12 岁即阅读法国数学家 Emile Borel (1871—1956) 的 *Sur quelques points de la théorie des fonctions* (函数论略论)，当然是法文原文的。冯·诺伊曼 1914 年前在家读私塾 (home-schooled)，然后进入布达佩斯的德语教会中学 (Lutheran Gymnasium) 直至 1921 年。冯·诺伊曼很早就表现出了无与伦比的数学天分，16 岁就发表了集合论方面的论文。匈牙利的数学家们看出了他的数学天才，并对他大加鼓励。

冯·诺伊曼喜欢数学而其父希望其投身赚钱

事业，根据冯·卡门的建议，作为双方妥协的结果，中学毕业的冯·诺伊曼进大学学习化工。冯·诺伊曼 1921 年进入德国的柏林大学学化学，1923 年到瑞士联邦理工 (Eidgenössische Technische Hochschule, ETH) 接着学化学，因为仍然对数学感兴趣，他同时还在布达佩斯大学注册为数学专业的博士生，导师为 Lipót Fejér (1880—1959)，最后在 1926 年凭借题为“集合论的公理化构造”的论文获得博士学位，差不多同时从 ETH 的化工专



图1 冯·诺伊曼于1910年

业毕业。在柏林大学学化工期间，冯·诺伊曼一直没有停止集合论方面的研究，此外还选修了物理课，包括爱因斯坦老师的统计物理课(!)在ETH学化工的同时，冯·诺伊曼跟外尔老师学习希尔伯特的一致性理论，也上过数学大神波利亚 (George Pólya, 1887—1985) 的课。{我好像明白为什么有些大学的数学系办不好了，因为化工系没招到有数学天分的学生} 如此看来，冯·诺伊曼的学习是非常高效的。据信冯·诺伊曼的最常见的动机是不管当时脑子里在干什么都要让下一分钟是最高产的。

冯·诺伊曼在柏林和ETH学化工期间的数学成就引起了德国数学界的高度重视 {看来数学是一门供天才自学的学科}。1926年，冯·诺伊曼申请一份美国基金会的基金，资助他到哥廷恩去进修数学。在申请表上，冯·诺伊曼在“能说的语言”一栏里填上了母语匈牙利语、德语、英语、法语和意大利语，在“能读的语言”一栏里添加了拉丁语(图2)。令人震惊的是，三封推荐信分别来自希尔伯特、库朗和外尔，这得是当时德国数学界能凑出的最强阵容了。1926年秋，获得资助的冯·诺伊曼到哥廷恩，跟着希尔伯特研究集合论的基础。

Personal History Record Submitted in Connection
with Application for a Fellowship

International Education Board
41 Broadway, New York, N. Y. U. S. A.

Date: 5-11-26

Name in full: John von Neumann, a Hungarian
Present Position: Professor of Mathematics (Mathematics)

Present address: Zurich, Switzerland
Permanent address: Budapest, Hungary
Place of birth: Budapest, Hungary
Date of birth: 28 Jan 1903
Single, Married, Widowed, Divorced: Single

Wife's name: _____
Wife's address: _____
Name and address of nearest kin if married: _____
Age and sex of children: _____
Have you any constitutional disorder or physical defects: No

What languages do you speak: Hungarian, German, English, French, Italian
What languages do you read: Latin, as well as the above mentioned

图2 冯·诺伊曼1926年申请去哥廷恩进修数学的表格

碰巧的是，哥廷恩是量子力学的诞生地。1926年秋，薛定谔分四部分的“量子化作为本征值问题”{当作数学论文看也许更恰当一些}一文已经发表完毕，量子力学有了矩阵力学和波力学两种形式，故而量子力学研究变得格外热乎，对数学的要求也变高了。数学强一些的研究者如约当、狄拉克、泡利、冯·诺伊曼和福克站到了量子力学研究的前台。量子力学需要表示理论，还要拓展，还要公理化。冯·诺伊曼瞄上了量子力学研究，迅速认识到抽象的、公理化的希尔伯特空间与线性算符的理论提供了一个非常自然的框架(a much more natural framework was provided by the abstract, axiomatic theory of Hilbert spaces and their linear operators)，遂将部分精力投入对量子力学形式框架(formal framework of quantum mechanics)的研究中。

有人夸奖冯·诺伊曼有深刻的洞见，明白希尔伯特空间的几何同量子力学系统状态的结构形式上具有同样的性质(that the geometry of the vectors in a Hilbert space have the same formal properties as the structure of the states of a quantum mechanical system)，这是冯·诺伊曼有能力对量子力学做贡献的关键。

1 冯·诺伊曼的量子力学著作

冯·诺伊曼的量子力学研究，笔者总觉得是属于撙草打兔子型的，反正他才华横溢也费不了什么事。作为一个独特的天才型实干学者，冯·诺伊曼在物理方面的研究，虽然比不了他在数学方面的成就，但也算得上成果丰硕且著述颇丰。就物理学著述而言，在量子力学方面当然首推他1932年的 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (量子力学的数学基础) 一书(图3)，这是和两年前问世的狄拉克的《量子力学原理》并驾齐驱的奠基性经典。冯·诺伊曼1928年申请柏林大学私俸讲师位置所需提交的论文(Habilitationsschrift)，题目为 *Allgemeine Eigenwerttheorie symmetrischer Funktionaloperatoren* (对称泛函算符的一般本征值理论) 也极具参考价

值。此外，两卷本的 *Functional operators* (vol.1, Measures and integrals, Princeton University Press (1950); vol.2, *The geometry of orthogonal spaces*, Princeton University Press (1951)) 也可作为量子力学的基础读物。

冯·诺伊曼在量子力学方面的研究论文大致罗列如下：

(1) D. Hubert, J. von Neumann, L. Nordheim, Über die Grundlagen der Quantenmechanik (论量子力学的基础), *Math. Ann.* 98, 1—30 (1927).

(2) John von Neumann, Mathematische Begründung der Quantenmechanik (量子力学的数学筑基), Königliche Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-physikalische Klasse, Nachrichten 1—57(1927).

(3) John von Neumann, Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik (量子力学的概率论构造), Königliche Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-physikalische Klasse, Nachrichten 245—272(1927).

(4) John von Neumann, Thermodynamik quantenmechanischer Gesamtheiten (量子系综的热力学), Königliche Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-physikalische Klasse, Nachrichten 273—291(1927).

(5) John von Neumann, Einige Bemerkungen zur Diracschen Theorie des Drehelektrons (关于转动电子的狄拉克理论的几点说明), *Zeitschrift für Physik* 48, 868—881 (1928).

(6) John von Neumann, Eugene Wigner, Zur Erklärung einiger Eigenschaften der Spektren aus der Quantenmechanik des Drehelektrons (对源自转动电子量子力学之谱性质的几点解释), *Zeitschrift für Physik*, I. 47, 203—220 (1928); II. 49, 73—94 (1928); III. 51, 845—888 (1928).

(7) John von Neumann, Allgemeine Eigenwerttheorie Hermitescher Funktionaloperatoren (厄米特泛函算符的一般本征值理论), *Mathematische Annalen* 102, 49—131(1929).

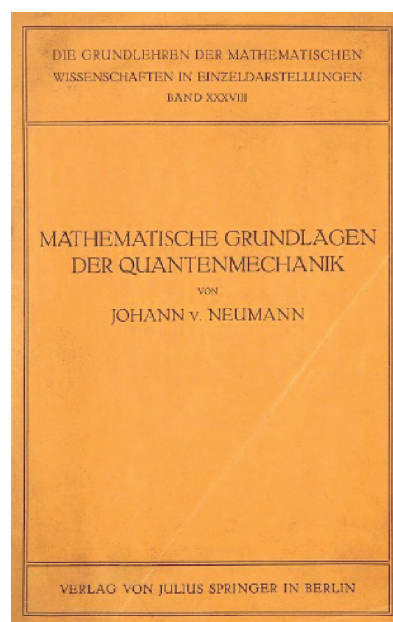


图3 冯·诺伊曼的 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, 1932)

(8) John von Neumann, Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik (新力学中遍历定律和H-定理的证明), *Zeitschrift für Physik* 57, 30—70(1929).

(9) John von Neumann, Eugene Wigner, Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen (论非渡越过程中本征值的行为), *Physikalische Zeitschrift* 30, 467—470 (1929).

(10) John von Neumann, Zur Theorie der unbeschränkten Matrizen (无限矩阵理论), *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 161, 208—236 (1929).

(11) John von Neumann, Eugene Wigner, Über merkwürdige diskrete Eigenwerte (论宜关照的分立本征值), *Physikalische Zeitschrift* 30, 465—467 (1929).

(12) John von Neumann, Zur Algebra der Funktionaloperationen und Theorie der normalen Operatoren (泛函算符代数与正规算符理论), *Mathematische Annalen* 102, 370—427 (1930).

(13) John von Neumann, Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren (薛定谔算符的唯一

性), *Mathematische Annalen* 104, 570—578(1931) .

(14) John von Neumann. Proof of the quasi-ergodic hypothesis, *PNAS* 18, 70—82 (1932).

(15) John von Neumann, Über adjungierte Funktionaloperatoren (论伴随函数算子), *Annals of Mathematics* 33(2), 294—310 (1932).

(16) John von Neumann, Physical applications of the ergodic hypothesis, *PNAS* 18, 263—266 (1932).

(17) John von Neumann, Zur Operatorenmethode in der klassischen Mechanik (经典力学中的算子理论), *Annals of Mathematics* 33(3), 587—642 (1932); Zusätze zur Arbeit “Zur Operatorenmethode in der klassischen Mechanik” (补充), 789—791 (1932).

(18) B. O. Koopman, J. von Neumann, Dynamical systems of continuous spectra, *PNAS* 18, 255—263 (1932).

(19) P. Jordan, J. von Neumann, E. Wigner, On an algebraic generalization of the quantum mechanical formalism, *Annals of Mathematics* 35(1), 29—64 (1934).

(20) A. H. Taub, O. Veblen, J. von Neumann, The Dirac equation in projective relativity, *PNAS* 20, 383—388 (1934).

(21) P. Jordan and J. von Neumann, On inner products in linear, metric spaces, *Annals of Mathematics* 36(3), 719—723 (1935).

(22) John von Neumann, Representations and ray-representations in quantum mechanics, *Bulletin of the American Mathematical Society* 41, 305 (1935).

(23) John von Neumann, On an algebraic generalization of the quantum mechanical formalism I, *Rec. Math. Moscou, n. Ser.*, 1, 415—482 (1936).

(24) Garrett Birkhoff, John von Neumann, The logic of quantum mechanics, *Annals of Mathematics* 37, 823—843 (1936).

(25) John von Neumann, Some matrix-

inequalities and metrization of matrix-space, *Tomskii Univ. Rev.* 1, 286—300 (1937).

(26) Paul R. Halmos, John von Neumann, Operator methods in classical mechanics, *Annals of Mathematics* 43, 332—350 (1942).

(27) John von Neumann, Eine Spektraltheorie für allgemeine Operatoren eines unitären Raumes (酉空间中一般算符的谱理论), *Mathematische Nachrichten* 4, 258—281 (1951).

(28) Eugene P. Wigner, John von Neumann, Significance of Loewner's theorem in the quantum theory of collisions, *Annals of Mathematics* 59, 418—433 (1954).

(29) A. Devinatz, A. E. Nussbaum, J. von Neumann, On the permutability of self-adjoint operators, *Annals of Mathematics* 62, 199—203 (1955).

冯·诺伊曼的量子力学论文,一方面深挖老力学之为新力学提供的基础,一方面努力构造新力学的公理化结构,这当然得益于他超凡的数学能力。当时有此能力的前辈还有希尔伯特与外尔,但那两位志不在此,于是这重任就历史地落在了冯·诺伊曼的肩上。看得出,冯·诺伊曼还是蛮善于同同事合作的,但这种合作却丝毫不会引起人们对其本人能力的怀疑。冯·诺伊曼在物理方面的主要合作者如维格纳等也都用其他的成就证明了各自的能力。论及冯·诺伊曼对量子力学的贡献,维格纳的评价是,仅凭此就可以确立他(冯·诺伊曼)在当代理论物理领域的杰出地位(…would have secured him a distinguished position in present day theoretical physics)。

2 冯·诺伊曼对创立量子力学的贡献

冯·诺伊曼对量子力学的贡献一来是偏数学的,公式很多,二来文章又多又长,限于篇幅,本文只能对选取的几篇文章作简要介绍,感兴趣的读者请参阅冯·诺伊曼的文集(*John von Neumann: Collected Works*)。

2.1 量子力学的数学基础

冯·诺伊曼甫一接触量子力学，就迅速对量子力学做出了无可替代的奠基性工作，在1927年和其他人合作了“论量子力学的基础”一文，独自发表了“量子力学的数学筑基”一文。{这会做科学的人做科学，结果就不一样。Grundlage是名词，基础；Begründung，是动名词，意思是筑基这活儿，那可是干科学之最高层面的活儿。笔者对这两者故意作了区分}。

量子力学要求新的概念构造与问题确立。原子的行为同本征值问题联系起来了，特别地，描述系统的特征量的值就是本征值自身(insbesondere sind die Werte der das System beschreibenden charakteristischen Größen die Eigenwerte selbst)；本征值谱有分立部分和连续部分，经典与量子的融合在原子世界里实现；量子力学有迹象表明，基本定律可能只能概率地表达；本征值问题可以出现于无穷矩阵，也可以出现于微分方程中，两者是等价的。两者各有困难。矩阵形式总要求能量矩阵的对角化，而这只当没有连续谱的情形才可能，为此可能要用到连续矩阵知识；微分方程方法则不可避免地遭遇非真的自身函数(uneigentliche Eigenfunktionen)。{Eigenfunktion，本征函数，被算符作用后还是自身的函数}在约当的理论那里，不只是要计算变换算符，还要计算变量的取值范围；两种量子力学方法有一个共同的缺陷，其在计算中原则上总会代入不可观测的、物理无意义的因子，即波函数的相因子 $e^{i\phi}$ 是不确定的(unbestimmt bleiben)，在 χ 维退化 {entartet, degenerate 简并} 的情形下互相之间只能决定到差一个 χ 维正交变换。

这篇文章包括如下小节：导言(Eingleitung)，希尔伯特空间(der Hilbertsche Raum)，算符算法(Operatorenkalkül)，本征值问题(das Eigenwertproblem)，算符的绝对值(der Absolutwert eines Operators)，量子力学的统计假设(der statistische Ansatz der Quantenmechanik)，应用(Anwendung)，

总结(Zusammenfassung)。从这些小节的字名字可以大概了解量子力学所需的数学基础。在p.25页上冯·诺伊曼定义了Einzeloperator {笔者不知道怎么翻译}，即满足关系 $EE = E$ 的算符 E 。显然 $1 - E$ 也是这样的算符。一般对称算符的本征值问题可以借助Einzeloperator表示，对连续谱情形也有效。这一点很重要。

冯·诺伊曼的这篇文章是他在这个方向上的研究的序曲。

2.2 量子力学概率论

在1927年的“量子力学的概率论构造”一文中，冯·诺伊曼提出了密度算符的概念。朗道(Лев Давидович Ландау, 1908—1968)也独立提出过这个概念[A system cannot be uniquely defined in wave mechanics; we always have a probability ensemble (statistical treatment). 见 The damping problem in wave mechanics, in D. ter Haar (ed.), *Collected Papers of L. D. Landau*, Gordon and Breach (1965) pp. 8—18]，而迟至1946年布洛赫又重新提出一回[Felix Bloch, Nuclear induction, *Phys. Rev.* 70, 460 (1946)]。密度矩阵同经典统计力学里的相空间概率测度(位置、动量的概率分布)相对应，是维格纳1932年提出的[E. Wigner, On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium, *Phys. Rev.* 40, 749—759(1932)]，这篇文章与冯·诺伊曼的热系综一文有关。

冯·诺伊曼指出，量子力学有两套理论，波理论和变换理论也即统计理论。统计理论是由玻恩、泡利和伦敦(Fritz London, 1900—1954)开启，由狄拉克和约当完成的。它要回答的问题是，对于给定的物理系统，某个物理量取哪些值？这些值的先验概率是多少？在别的量的值给定的前提下，这个概率如何改变？

构造量子的概率理论时，我们假设通常的概率计算无条件成立(Wir machen dabei die Annahme der unbedingt Gültigkeit der gewöhnlichen Wahrscheinlichkeitsrechnung)。{笔者借机强调一

遍, 量子力学相对于经典物理没有革命}根据量子力学, (作用于波函数上的)线性对称泛函算符 (linearer symmetrischer Funktionaloperator) 是可赋予物理量的数学对象。一个算符, 只当它的本征值问题至少是可解的, 它才是对量子力学有用的 (Ein Operator ist aber für die Quantenmechanik nur dann brauchbar, wenn sein “Eigenwertproblem” gelöst, oder zum mindesten lösbar ist)。这样的算符称为正规的。很可能所有的线性对称算符都是正规的。

接下来, 冯·诺伊曼探讨量子测量, 为此引入了密度矩阵 $S_{\mu\nu}$, 系综 {Gesamtheit, ensemble。请一定记住系综、集合是同一个词!} 的期望值总可表示为 $E(S) = \sum_{\mu\nu} S_{\mu\nu} u_{\nu\mu}$, 而矩阵 $u_{\nu\mu}$ 属于一个线性对称算符。限于篇幅, 此处无法多介绍密度矩阵理论, 感兴趣的读者请参阅相关专著[比如 J. J. Sakurai, Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (2011)]。简单提取冯·诺伊曼这篇论文的结论如下。通常的概率计算同量子力学之间不止是自洽的, 而且考虑到量子力学的前提, 它还是唯一可能的答案 (sogar die einzig mögliche Lösung ist)。所谓的量子力学前提就是量子测量假设, 有以下三点:

(1) 每一个测量都改变被测对象。两个测量总互相干扰, 除非可以用单一的测量替代;

(2) 测量所造成的改变是这样的, 此一测量总是有效的, 即如果此后直接重复测量会得到同样的结果;

(3) 物理量用泛函算符描述。

这些原则让量子力学同它的统计相洽 (Diese

Prinzipien bringen bereits die Quantenmechanik und ihrer Statistik unweigerlich mit sich)。

此后冯·诺伊曼多次发表相关文章, 最后集中体现在1932年的专著中。

冯·诺伊曼的“量子力学系综的热力学”一文是接着前述两篇文章的, 讨论的问题也互有交叉。系综 G 唯一、可逆地对应算符 U , 在这样的系综中, $E(R) = \text{Spur}(UR)$ {Spur, trace, 迹}。为了研究有限温度的系综, 要引入熵和温度。量子力学系综的热力学考察方式是这样的: 当系综处于纯态 φ , 它按照时间依赖的薛定谔方程严格按照因果律传播, 在所有部分传播是可逆的。如果测量一个在态 φ 中非明锐的物理量 α {意思是 φ 不是 α 的本征态}, 它会分裂为无数个别的纯态 (对应 α 的本征态), 这一步是不可逆的。两个系综的熵差可以这样确定。当将系综 G_1 可逆地改变为系综 G_2 (当然两者由同样多的系统组成的), 唯一的补偿是温度为 T 的热库获得了热量, 则系综 G_2 的熵比系综 G_1 的熵多 $S = -\frac{Q}{T}$ 。所有纯(态)的系综相互之间的熵差为0, 其他的系综熵就多出来了 (Dabei zeigt sich, daß alle reinen Gesamtheiten gegeneinander den Entropieunterschied 0 aufweisen, und von allen anderen Gesamtheiten an Entropie übertroffen werden)。因此, 可以将纯(态)系综的熵归一为0, 则对一个确定算符 U 的系综, 熵为 $S = -Nk \text{Spur}(U \ln U)$ (图4), 其中 $\text{Spur}(U) = 1$ 。{用当下的表示, $S = -Nk \text{Tr}(U \ln U)$, $\text{Tr}(U) = 1$ 。这就是后来的所谓冯·诺伊曼熵。} 这样的熵定义与温度无关 (In unserem Ausdruck für die Entropie S geht aber die Temperatur T garnicht ein)。在辅助条件 $\text{Spur}(U) = 1$, $\text{Spur}(UH) = E$ 下要求熵最大, 必有 $U = ae^{\beta H}$, $U = e^{-H/kT} / \text{Spur}(e^{-H/kT})$ 。

2.3 希尔伯特空间

如果要给量子力学指定几个关键词, 希尔伯特空间肯定位列前茅。1929年, 在玻恩造出量子力学一词的第六个年头, 冯·诺伊曼提出了抽象希尔伯特空间这个概念。

und $\mathcal{G}$, bestimmen. Dabei zeigt sich, daß alle reinen Gesamtheiten gegeneinander den Entropieunterschied 0 aufweisen, und von allen anderen Gesamtheiten an Entropie übertroffen werden. Es erweist sich daher als zweckmäßig, ihre Entropie als 0 zu normieren; dann ergibt sich die Entropie der Gesamtheit $\mathcal{G}$ mit dem definiten Operator U als

$$S = -Nk \text{Spur}(U \ln U)$$

(N ist die Anzahl der Elemente von $\mathcal{G}$, k die Boltzmannsche Konstante). Dabei ist $\text{Spur } U = 1$ angenommen, d. h. daß die Erwartungswerte von $\mathcal{G}$ absolute Erwartungswerte sind, denn im Gegensatz zu W. A. Q. ist hier diese Annahme nicht zu vermeiden¹⁵⁾).

图4 冯·诺伊曼的“量子力学系综的热力学”一文p.277上的截图

希尔伯特空间是定义了内积的函数矢量空间。希尔伯特空间概念的提出是线的代数(linear algebra)、矢量空间、泛函分析等数学领域的自然发展。冯·诺伊曼1929年造了抽象希尔伯特空间(der abstrakte Hilbertsche Raum)一词,从此“希尔伯特空间”就成了量子力学施展拳脚的舞台。在冯·诺伊曼之前,外尔和维纳(Norbert Wiener, 1894—1964)都曾从物理角度研究过希尔伯特空间。在量子力学语境中提及的希尔伯特空间,大约就是平方可积函数空间(space of square-integrable functions)。据说冯·诺伊曼在报告中提到希尔伯特空间时,希尔伯特就坐在下面。希尔伯特说“希尔伯特空间?我怎么不知道。”

抽象希尔伯特空间是冯·诺伊曼在从柏林发出的文章“厄米特泛函算符的一般本征值理论”(收稿日期为1928年12月15日)中提出的。我们的函数空间,如果以分立空间 $1, 2, \dots$ 为基础,乃所谓的(复)希尔伯特(即无穷维欧几里得)空间:所有具有有限 $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ 的序列 $(x_1, x_2, \dots)$ 的集合(Unser Funktionenraum ist, wenn wir den diskreten Raum $1, 2, \dots$ zugrunde legen, der sogenannte (komplexe) Hilbertsche (d. h. unendlichvioldimensionale Euclidische) Raum: die Menge aller Folgen $(x_1, x_2, \dots)$ mit endlichem $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$)。

所有的函数流形都是同构的(alle unsere Funktionen Mannigfaltigkeiten isomorph sind)。它们都应作为一般抽象希尔伯特空间的特殊实现来看待,其仅由“内禀”性质 A - E 表征(Und sie alle sollen als spezielle Verwirklichungen des allgemeinen abstrakten Hilbertschen Raumes angesehen werden, der durch die “inneren” Eigenschaften A bis E allein charakterisiert ist)。我们用如下五个性质表征抽象(复)希尔伯特空间[Wir charakterisieren den abstrakten (komplexen) Hilbertschen Raum durch fünf Eigenschaften...]:

(A) 希尔伯特空间 H 是线性空间(H ist ein linearer Raum)。也就是空间中有元素 0 ,有元素(矢量)间的加减, $f+g, f-g$;此外对元素还有

乘法, af ,其中 a 是复数;

(B) 在希尔伯特空间 H 中存在内积,同矢量计算的內积可相类比,其产生一个度规(Es gibt in H ein, zu dem der Vektorrechnung analoges, inneres Produkt, das eine Metrik erzeugt);

(C) 在 $|f-g|$ 度规下希尔伯特空间 H 是可分割的,即一些可数的集合在 H 中处处是稠的(In der Metrik $|f-g|$ ist H separabel. D.h.: eine gewisse abzählbare Menge ist in H überall dicht);

(D) 希尔伯特空间 H 拥有任意(有限)多的线性独立元素 [H besitzt beliebig (endlich!) viele lin. unabh. Elemente];

(E) 希尔伯特空间 H 是完备的。

这样的关于希尔伯特空间的表述,当然还有更多的细节内容,如果在学习量子力学时多少了解一点,估计会觉得量子力学还蛮可亲的。

在1929年的“无限矩阵理论”一文中(收稿日期是1928年10月22日。诡异的是,这一篇文章引用了收稿日期为1928年12月15日“厄米特泛函算符的一般本征值理论”的发表版),冯·诺伊曼在这篇文章中把算符理论移植到了矩阵上(die Theorie von den Operatoren auf die Matrizen zu übertragen)。在有限维空间情形,算符—矩阵关系是简单明了的(ein einfaches und zwar ein eindeutiges ist)。但是在无界算符情形,算符与矩阵的关系就不那么简单了。算符的矩阵表示 $a_{\mu\nu} = (\varphi_\mu, R\varphi_\nu)$ 只当所有的 $R\varphi_1, R\varphi_2, \dots$ 有意义时才有意义,即便如此,在这些矩阵的变换理论中也会出现一系列的收敛困难与限制(treten in der Transformationstheorie dieser Matrizen eine Reihe von Konvergenzschwierigkeiten und Beschränkungen auf)。

冯·诺伊曼说,相关研究同新的量子理论有密切联系,因为所谓的矩阵理论和变换理论之数学工具就是无限厄米特矩阵的酉变换。最独特的是,厄米特矩阵相对来说行为是足够理性的,病态的本质源头是酉变换。这篇关于厄米特算符矩阵表示的文章,同前述关于抽象希尔伯特空间的论述放到一起,就能获得关于矩阵表示

的大致基础。具体细节，有兴趣的读者请参阅原文。{关于矩阵力学，请参阅海森堡/玻恩—约当/玻恩—海森堡—约当/泡利/狄拉克的文章，薛定谔证明与波动力学等价性的文章，冯·诺伊曼关于希尔伯特空间—矩阵表示的文章，以及外尔将群论引入量子力学表示(群的矩阵表示)的文章，就能有个大概感觉了。}

顺带说一句，希尔伯特空间和厄米特线性算符(Hermitesche linear Operatoren)相联系。厄米特(Charles Hermite, 1822—1901)是法国著名的数学家，其在代数、数论、不变理论、正交多项式、二次型等方面的成果给其后的数学、物理都留下了深刻的个人烙印，特别地，在量子力学语境中我们必然会遇到 Hermite polynomials, Hermitian operators等概念。我不知道把法文的 Hermite 译成“厄米、厄密”是出于什么考量，我记得以前有过“厄米特”的正确译法。本人在此后文章中会使用“厄米特”的译法，如厄米特多项式、厄米特算符、非厄米特矩阵等。所谓的厄米特算符，即 self-adjoint operator，满足关系 $(\hat{O}g, f) = (g, \hat{O}f)$ ，这是能表达物理量的算符。冯·诺伊曼的说法是 self-adjungiert oder Hermitesch，德语动词 jungieren，大意是结合。

2.4 量子力学的数学基础

1932年，冯·诺伊曼的《量子力学的数学基础》一书正式出版，其可看作是对他此前几年关于量子力学工作的总结。全书262页，分为十章，分别是

I. 导言

1. 变换理论的缘起
2. 量子力学的最初表述
3. 两个理论之等价性：变换理论
4. 两个理论之等价性：希尔伯特空间

II. 抽象希尔伯特空间通论

1. 希尔伯特空间的特征
2. 希尔伯特空间的几何
3. 条件A-E的说明

4. 闭合线性流形

5. 希尔伯特空间的算符

6. 本征值问题

7. (本征值问题) 续

8. 本征值问题的定向考察

9. 本征值问题唯一性与可解性说明

10. 对易算符

11. 迹

III. 量子统计

1. 量子力学的统计表示

2. 统计意义

3. 同时可测量性与一般的可测量性

4. 不确定性关系

5. 作为表示的投影算符

6. 光的理论

IV. 理论的推论构造

1. 统计理论的原理性基础

2. 统计公式证明

3. 实验的推论

V. 一般性探讨

1. 测量与可逆性

2. 热力学视角下的考察

3. 可逆性与平衡问题

4. 宏观测量

VI. 测量过程

1. 问题的表述

2. 耦合系统

3. 测量问题讨论

注释

此书的内容基于冯·诺伊曼自己此前研究的内容，后继的量子力学文献都会提及，此处不多讨论。有一点区别是，提及希尔伯特空间、算符理论时一般不对思想来源作交待，但提及量子力学的测量公设时则会强调是“冯·诺伊曼的测量公设”。一般文献论及冯·诺伊曼的测量公设就简单几句，我们看到此书中冯·诺伊曼可是专门拿出来两章讨论这个问题的。测量，对于量子力学和经典物理都一样，从来就不是一个简单的事情。

冯·诺伊曼把测量过程分成三个部分：待测系

统 I, 测量设备 II, 观察者 III。数学任务是给出 I 的正交归一函数集 $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, 给出 II 的正交归一函数集 $\xi_1, \xi_2, \dots$ 还得找出一个状态 ζ , 找出关于 $I + II$ 的能量算符 H 描述它们的时间演化过程。接下来有很复杂的讨论, 但是人们就记住了对系统关于算符 A 所对应的物理量的测量让系统随机地落入了 A 的某个本征态, 紧接着的同样测量得到相同的结果。冯·诺伊曼考虑了能想到的自然的三个不同程度之因果性或者非因果性 (drei Stufen der Kausalität oder Akausalität denkbar): (1) 完全统计的 (ganz statistisch)。第一次测量结果是统计的、有分布的, 紧接着的第二次测量还是统计的、有分布的; (2) 第一次测量结果是统计的、有分布的, 紧接着的第二次测量的结果强制性地 (gezwungen ist) 与第一次测量相同; (3) 从一开始就是遵从因果律的。可能性 1 可以认为是被康普顿实验给反驳了的, 可能性 3 不具有量子力学的特点, 所以选择是 2。

冯·诺伊曼的测量理论在后世引起了很多讨论, 也被挖掘出了很多弱点来。比如, 冯·诺伊曼的分析只考虑理想测量, 要求待测量系统的本征态同测量设备的指示变量 (pointer observable) 的本征态要严格关联。也有人啥也不管, 仪器说啥就是啥, 哪管什么仪器指示变量的本征态。有趣的是, 冯·诺伊曼的测量理论, 薛定谔在 1952 年说他是最近才被人告知的。1952 年啊, 那时候冯·诺伊曼的《量子力学的数学基础》已经出版 20 年了。薛定谔的观点是, 我就不信真有这样的测量设备 (I do not believe any real measuring device is of this kind)。[Erwin Schrödinger, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Woodbridge (1995) p.83]。懂量子力学妨碍了薛定谔相信有这样的测量设备。

冯·诺伊曼的测量公设, 从其试图建立的量子力学数学基础来看, 有其合理性。然而, 现实的世界要复杂得多, 把它当作实际的量子测量应遵从的法则有些勉强。一个尴尬的局面是, 很多量子测量我称其是灭迹式测量 (trace-demolishing measurement), 比如用光电倍增管测光子 (我们假

设光存在光子态), 一次测量后那光子就没了, 不会留下一个处于某个被测量选择的本征态的光子。所谓光子的性质, 取决于我们关于光—物质相互作用这个难题的理解, 而且似乎没见到可用来修正我们理解的其他途径。

3 多余的话

冯·诺伊曼是少年天才 (child prodigy), 是那类 geek and nerd, 即性格古怪的人、不通人情世故的人, 这在讲究人情世故的地方是致命的缺点。读化工的冯·诺伊曼凭借数学成就得到希尔伯特这样的数学大神的青睐, 这让我倾向于认为真正的大家还是期望看到少年天才脱颖而出的。韩愈老师说“千里马常有, 而伯乐不常有”, 感慨有伯乐这种水平和人品的专业人士的缺乏。神童培养与相马不同, 世间神童常有, 能看出神童是神童的人也不缺, 但是能让神童成长为大才的 MacTutor 却罕有。能看出冯·诺伊曼的数学天才的, 不光有隔壁村的张屠户, 还得有哥廷恩的希尔伯特, 这才是关键。

冯·诺伊曼在 1914—1921 年间就读于布达佩斯的路德教会中学, 和西拉德 (在校时间: 1908—1916)、泰勒 (在校时间: 1918—1926) 和维格纳 (在校时间: 1913—1921) 有交叠, 他们四人都优秀得被称为“火星人”。西拉德 (Leo Szilard, 1898—1964) 就是鼓动爱因斯坦写信督促美国开始原子弹工程的那位, 泰勒 (Edward Teller, 1908—2003) 是后来的氢弹项目首席科学家, 维格纳 (Eugene Wigner, 1902—1995) 也是量子力学奠基人之一。这四个人的共同特点是, 都是在匈牙利读的德语中学, 在德国大学学会的物理——其中冯·诺伊曼和维格纳、泰勒出自哥廷恩, 用德语发表论文成名的, 还有他们都是曼哈顿工程的干将。

冯·诺伊曼的事迹让笔者更加关注强记忆和多语言能力对学者的意义。强记忆力的意义不必多说, 在我们这里博闻强记已是成语, 苏轼和王安石的“如意君安否?” 是流传千年的机锋。但是, 由于我国幅员辽阔、文化一统, 对多语言能

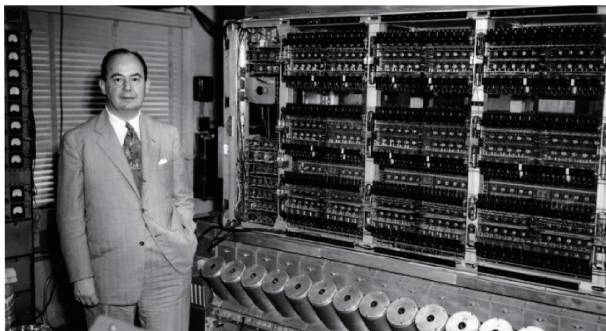


图5 冯·诺伊曼在普林斯顿高等研究院的计算机旁

力的意义可能认识不足。就数学、物理的学习而言，使用单一语言让我们吃亏不少。试分析冯·诺伊曼的句子 *logics corresponds to set theory and probability theory corresponds to measure theory*，我们把它翻译成“逻辑对应集合论，概率论对应测度论”一点问题没有，但是少会意了很多。虽然英文里的集合是 *set*，系综是 *ensemble*，但是在法语里都是 *ensemble*，在德语里都是 *Gesamtheit* (全体)，你读冯·诺伊曼的量子统计论述，会发现人家把物理系统的系综和系综之某物理量本征值的集合自然地关联到一起，因为它就是同一个词。知道这一点，再回头看冯·诺伊曼的熵公式 $S = -Nk \text{Tr}(U \ln U)$ ，会不会能多看出点什么。用汉语读到测度论，谁会以为这和量子力学的测量公设有关系呢，可在冯·诺伊曼那里 *measure theory and measurement postulate of quantum mechanics* 就是一回事儿啊。

冯·诺伊曼拥有过目不忘和逐字逐句过目成诵的本领，这值得说道说道。过目不忘、博览群书以待将来融会贯通，这应该成为培养少年的程式。清末福州马尾学堂梳着长辫子的中国少年也是读法文的高等数学书的。我们的社会要提倡读根本读不懂的书的理念，也要提倡万不得已才读译文的理念。如果吃个肉夹馍我们都追求原汁原味，那么对于知识，尤其是那些带思想的高品质的知识，原汁原味就是起码要求。关于人才培养，笔者觉得有必要提倡过目不忘、过目成诵、一学就会、一做就成的优良作风！

数学和物理在有些地方被污蔑为枯燥无趣的学科，也可以理解。审美，驻足在智力的边界上。

人们不欣赏自己看不懂的事物。其实，自然之道是简单的，简单性是自然科学的指导原则，已经简单到不能更简单的地步。冯·诺伊曼说，“If people do not believe that mathematics is simple, it is only because they do not realize how complicated life is.” 如果对简单而美的事物，比如数学，提不起兴趣，那是真没有兴趣了。

在一般的物理学家那里，数学只是不成套、不顺手的工具。在冯·诺伊曼那里，他为量子力学奠定了数学基础，他也开启了从量子论出发做精确数学的路子，他受新颖物理概念的启发更加深入广泛地研究关于无穷维空间及作用于其上的算符的纯粹数学。如前所述，这里的基本直觉 (*insight*，内视、内视而来的觉悟)是，希尔伯特空间中的矢量几何同量子力学系统的状态之结构形式上具有相同的性质。冯·诺伊曼的研究套路佐证了笔者的观点，即数学不止是物理的表示语言与研究工具，它也可以是物理的研究结果。计算机应该是数学与物理结合的成果。冯·诺伊曼后来成了计算领域，包括硬件设计、理论计算科学到计算科学哲学等方面的奠基人 (*founding figure*，图5)，就不令人奇怪了。

参考文献

- [1] Bhattacharya A. *The Man From the Future: The Visionary Life of John Von Neumann*. Allen Lane, 2021
- [2] Goldstein H. *The Computer from Pascal to von Neumann*. Princeton University Press, 1980
- [3] Taub A H (ed.). *John von Neumann: Collected Works*, Vol. I: *Logic, Theory of Sets and Quantum Mechanics*; Vol. II: *Operators, Ergodic Theory and Almost Periodic Functions in a Group*. Pergamon Press, 1961
- [4] Gallone F. *Hilbert Space and Quantum Mechanics*. World Scientific, 2015
- [5] Rédei M, Stöltzner M (eds.). *John von Neumann and the Foundations of Quantum Physics*. Springer, 2001
- [6] Macrae N. *John von Neumann*. Pantheon, 2017
- [7] Hove L V. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 1959, 64(3): Part 2, 95—99
- [8] Glimm J, Impagliazzo J, Singer I (eds.). *The legacy of John von Neumann*. American Mathematical Society, 1990
- [9] Halmos P R. *American Mathematical Monthly*, 1973, 80(4): 382
- [10] Fano U. *Rendiconti Lincei*, 1995, 6(2): 123
- [11] Fano U. *Reviews of Modern Physics*, 1957, 29 (1): 74