

整环上 Möbius 函数与一个逆问题的解*

陈兆斗 申亚男 陈难先^①

(北京科技大学数力系, ①应用物理研究所, 北京 100083)

关键词 晶体结合逆问题、Möbius 函数、Gauss 整环

近年来,数论中著名的 Möbius 反演公式在物理学中得到了重要应用,其中包括黑体辐射逆问题,比热谱反演声子能态密度问题,费米体系与离子晶体中逆问题和由晶体结合能反演原子间对势的逆问题等^[1-4]. 本文运用代数整环上 Möbius 反演公式得出了二维方格子中晶体结合能反演原子间对势的普遍而简洁的表达式,使 Möbius 反演公式的应用有了新的发展.

为叙述方便,本文先介绍 Gauss 整环的单一分解性,并给出相应的具体的 Möbius 函数及其反演公式,得到了比文献[3]中该问题解答的更简洁形式.

1 单一分解半群上的 Möbius 函数

设 S 是有么元 e 且满足消去律的单一分解可换半群, U 是由 S 中所有单位元素构成的子群. 以下假定 S 是可列集且 U 中元素是有限的. 对任何 $a \in S$, $a \notin U$, 则有既约分解

$$a = \varepsilon p_1^{k_1} p_2^{k_2} \cdots p_t^{k_t}, \quad (1)$$

其中 $\varepsilon \in U$, $k_i \geq 1$, p_i 是 S 中互不相伴的既约元 ($i = 1, 2, \dots, t$). 类似于多项式的因式分解,在相伴的意义下分解(1)是唯一的. 定义 S 上的 Möbius 函数为

$$\mu(a) = \begin{cases} 1, & \text{当 } a \in U, \\ (-1)^t, & \text{当 } a \notin U \text{ 且 (1) 中 } k_1 = k_2 = \cdots = k_t = 1, \\ 0, & \text{其它.} \end{cases} \quad (2)$$

性质 1 如果 a, b 相伴,则 $\mu(a) = \mu(b)$. 这是因为 a, b 只相差一个单位因子.

$$\text{性质 2} \quad \sum_{d|a} \mu(d) = \sum_{d|a} \mu(d) = \begin{cases} 0, & \text{当 } 0, a \notin U, \\ N, & \text{当 } a \in U, \end{cases} \quad (3)$$

其中 N 是 U 中元素的个数.

证 若 $a \notin U$, 其分解式为(1). 在这个确定的形式下,决定了 a 的一组因子 $d_1, d_2, \dots, d_L$. 它们互不相伴,形式为

$$\varepsilon p_1^{s_1} p_2^{s_2} \cdots p_t^{s_t}, \text{ 其中 } 0 \leq s_i \leq k_i, (i = 1, 2, \dots, t).$$

如果某个 d_k 含有某一因子 $p_i^{s_i}$ 且 $s_i \geq 2$, 则 $\mu(d_k) = 0$.

$$\begin{aligned} \text{从而} \quad \sum_{k=1}^L \mu(d_k) &= \mu(\varepsilon) + \mu(\varepsilon p_1) + \cdots + \mu(\varepsilon p_t) + \mu(\varepsilon p_1 p_2) + \cdots + \mu(\varepsilon p_{t-1} p_t) \\ &\quad + \mu(\varepsilon p_1 p_2 p_3) + \cdots + \mu(\varepsilon p_{t-2} p_{t-1} p_t) + \cdots + \mu(\varepsilon p_1 p_2 \cdots p_t) \end{aligned}$$

1993-06-06 收稿, 1993-07-06 收修改稿.

* 国家自然科学基金资助项目.

$$= 1 + (-1)C_1^1 + (-1)^2 C_2^2 + (-1)^3 C_3^3 + \cdots + (-1)^r C_r^r \\ = (1 - 1)^r = 0.$$

设 $e_1, e_2, \dots, e_N$ 是 U 中所有单位元素, 则 $e_i d_1, e_i d_2, \dots, e_i d_L, (i = 1, 2, \dots, N)$ 构成 a 的全部不同因子. 注意到对应的相伴性, 由性质 1 得

$$\sum_{d|a} \mu(d) = N \sum_{k=1}^L \mu(d_k) = 0.$$

若 $a \in U$, a 的全部因子恰是 U 的所有单位元素, 则 $\sum_{d|a} \mu(d) = N$. 证毕.

2 单一分解半群上的 Möbius 反演公式

设 S 是如上所述的半群. $g(a, x), f(a, x)$ 是定义在 S 上的函数, 其中 $a \in S, x$ 是某种固定的参量. 如果对任何 $c \in S$ 恒有

$$g(c, x) = \sum_{a \in S} f(ac, x), \quad (4)$$

则有 Möbius 反演公式

$$\sum_{h \in U} f(hc, x) = \frac{1}{N} \sum_{a \in S} \mu(a) g(ac, x), \quad (5)$$

其中 N 是单位集 U 中元素的个数, $\mu(a)$ 是 S 上的 Möbius 函数, 并假定级数 $\sum_{a \in S} \sum_{b \in S} f(abc, x)$ 绝对收敛.

$$\text{证 } \sum_{a \in S} \mu(a) g(ac, x) = \sum_{a \in S} \mu(a) \sum_{b \in S} f(bac, x) = \sum_{h \in S} \left(\sum_{ab=h} \mu(a) \right) f(hc, x) \\ = N \sum_{h \in U} f(hc, x).$$

从而(5)式成立, 这里我们用到了(3)式. 证毕.

特别当 U 中只有么元 e 时, 则有

$$f(c, x) = \sum_{a \in S} \mu(a) g(ac, x), \quad (6)$$

而当 S 是自然数集时, 除在文献[1]中使用的反演公式可看作(6)式的特例.

3 Gauss 整环

设 Z 是整数集, 令 $G = \{m + ni | m, n \in Z, i = \sqrt{-1}\}$, G 关于复数的加法和乘法构成环, 历史上被称为 Gauss 整环, G 中元素称为 Gauss 整数. G 的乘法半群 $G^* = G \setminus \{0\}$ 是单一分解的^[5]. G^* 中的么元 $e = 1$; 单位集 $U = \{\pm 1, \pm i\}$. G^* 满足上述 S 所需的条件, 可定义 G^* 上的 Möbius 函数. 如

$$\mu(1) = \mu(-1) = \mu(i) = \mu(-i) = 1. \quad (7)$$

由于 $1+i$ 与 $1-i$ 在 G^* 中是相伴的既约元, 从而

$$2 = (1+i)(1-i) = -i(1+i)^2, \quad (8)$$

这样 $\mu(2) = 0$. 这与在自然数集中 2 的 Möbius 函数值为 -1 是不同的.

如果 $z \in G^*$, 则 z 的相伴元只有四个, 它们的模相等, 幅角相差 $\pi/2$ 的整数倍. 这样可以把非零的 Gauss 整数的每个既约因子 z 限制在除正虚轴以外的第一象限内, 即 $\operatorname{Im} z \geq 0$, $\operatorname{Re} z > 0$. 这样就能使既约分解的形式唯一, 如(8)式. 有关 G^* 中既约元的判定请参看文献[6].

4 二维晶体的结合能逆问题

有关这个物理问题^[3]的数学模型是求级数

$$V(x) = \sum_{(m,n) \neq (0,0)} \varphi(\sqrt{m^2 + n^2} x), \quad (9)$$

的反演, 其中 m, n 是整数, 即求 $\varphi(x)$. 我们得到了简洁的反演公式

$$\varphi(x) = \frac{1}{16} \sum_{(m,n) \neq (0,0)} \mu(m+ni) V(\sqrt{m^2 + n^2} x) \quad (10)$$

或

$$\varphi(x) = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mu(m+ni) V(\sqrt{m^2 + n^2} x), \quad (11)$$

其中 $\mu(m+ni)$ 是定义在 G^* 上的 Möbius 函数. 根据实际的物理问题可假定, 级数

$$\sum_{(p,q) \neq (0,0)} \sum_{(m,n) \neq (0,0)} \varphi(\sqrt{m^2 + n^2} \cdot \sqrt{p^2 + q^2} x) \quad (12)$$

是绝对收敛的, 其中 $p, q \in \mathbb{Z}$.

证 记 $\alpha = m+ni$, (9)式变为 $V(x) = \sum_{\alpha \in G^*} \varphi(|\alpha|x)$. 再设 $V(|\beta|x) = V(\beta, x)$;

$\varphi(|\alpha|x) = \varphi(\alpha, x)$. 由(12)式知 $\sum_{\beta \in G^*} \sum_{\alpha \in G^*} \varphi(\alpha\beta, x)$ 绝对收敛. 对任何 $\beta \in G^*$, 恒有 $V(\beta, x)$

$= \sum_{\alpha \in G^*} \varphi(\alpha\beta, x)$ 成立. 于是(4)式满足, 由(5)式得

$$\sum_{\varepsilon \in U} \varphi(\varepsilon, x) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha \in G^*} \mu(\alpha) V(\alpha, x).$$

注意到 $U = \{\pm 1, \pm i\}$ 及 $\varphi(1, x) = \varphi(-1, x) = \varphi(i, x) = \varphi(-i, x) = \varphi(x)$, 则有

$$4\varphi(x) = \frac{1}{4} \sum_{\alpha \in G^*} \mu(\alpha) V(|\alpha|x),$$

从而(10)式成立. 考虑到本问题的特点及相伴性即可得(11)式. 证毕.

5 结 束 语

本文使用的 Möbius 函数在相应的二维晶体逆问题求解的推导和计算上都是很方便的, 它类似于主理想整环上的 Möbius 函数^[7]. Möbius 函数与三维晶体逆问题的关系将在另文进一步讨论. 这说明了数论方法在物理中的潜在应用.

致谢 北京大学潘承彪、中国科学院数学研究所王元、北京科技大学解基培对本工作提

出了宝贵意见,作者在此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] Chen, N. X., *Phy. Rev. Lett.*, 1990, **64**: 1193.
- [2] Chen, N. X., Chen, Y., Li, G. Y., *Phys. Lett.*, A, 1990, **149**: 357.
- [3] Chen, N. X., Ren, G. B., *Phys. Rev.*, B, 1992, **45**: 8177.
- [4] Chen, N. X., Ren, G. B., *Phys. Lett.*, A, 1991, **160**: 319.
- [5] Jacobson, N., *Basic Algebra I*, W. H. Freeman, 1974, 142—143.
- [6] Hardy, G. H., Wright, E. M., *An Introduction to the Theory of Numbers*, Oxford University Press, 1981, 219.
- [7] Narkiewicz, W., *Elementary and Analytic Theory of Algebraic Numbers*, 2nd edition, Springer-Verlag, 1989, 325—326.