《应用概率统计》36 卷1 期，pp. 86–110, 2020 年 2 月,
doi: 10.3969/j.issn.1001-4268/2020/01.007

综述报告

# 交叉研究的感悟*

## 陈木法

(北京师范大学数学科学学院, 100875;
北京师大数学与复杂系统教育部重点实验室;
江苏师范大学数学研究院, 221116)

**摘要** 本文是基于北京大学“许宝騄讲座” (2019/3/22) 及随后在各地的报告扩充而成. 开头是受惠于许宝騄先生的一些回忆; 末尾是感谢北京大学一批老师几十年来的支持和帮助. 中间的主题部分先给出个人交叉研究的概述. 然后从来自计算的挑战, 进入一年多来笔者关于具有实谱的复矩阵理论的研究. 这涉及计算、概率、统计力学和量子力学等领域. 随后介绍算法方面的最新进展, 此乃概率论与计算交叉的又一案例. 作为结束, 也略述交叉研究的感悟.

**关键词**: 交叉研究; 概率论; 统计物理; 量子力学; 可厄米矩阵; 最大特征对子; 算法.

**中国分类号**: O211; O414.2; O413.3; O171.7

---

**英文引用格式**: CHEN M F. Interpretation of cross-disciplinary research [J]. Chinese J Appl Probab Statist, 2020, 36(1): 86–110. (in Chinese)

---

非常感谢陈大岳院长的邀请和精心安排这次讲座, 也感谢任艳霞教授提议我再来做个报告. 很感动张(恭庆)先生再一次前来坐镇, 过去二、三十年来, 每次我取得稍好点的成果, 都获得张先生的全力支持. 所以感激不尽. 同时感谢大家前来捧场.

## §1 受惠于许宝騄先生的论著

我对今天的讲座深感荣幸, 不仅在于对许先生的景仰, 还在于我直接受惠于他的研究工作. 我自认为对马氏链或更一般的跳过程的三、五项

*本项目获自然科学基金 (项目编号: 11771046), 教育部双一流大学建设项目和江苏省高校优势学科建设工程项目资助.

Email: mfchen@bnu.edu.cn

主要成果之一是“转移概率函数关于时间的可微性”(见图 1), 最终的文章发表于我校学报上, 同时写入我的第一本研究专著. 此成果当然很基础,

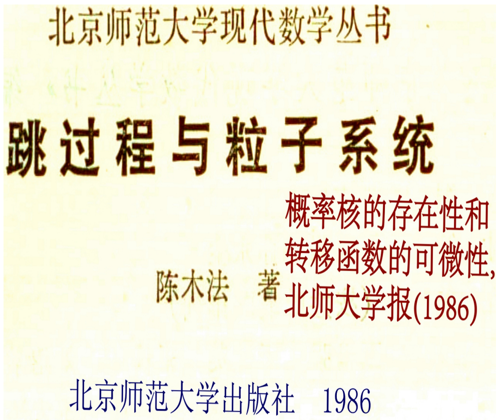
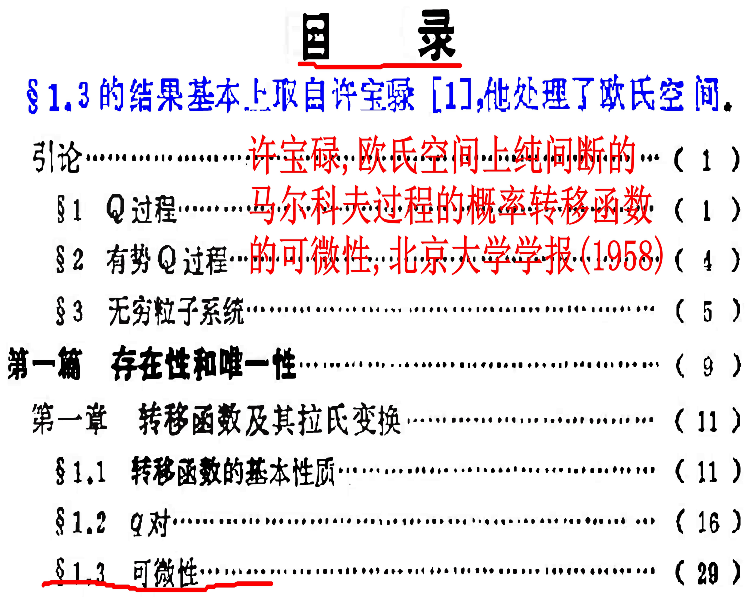



图 1 出版于 1986 年的研究专著及一篇论文

写在书的最前面: §1.3 (见图 2). 其研究的起点就是源于许先生的一篇论文: “欧氏空间上纯间断的马尔科夫过程的概率转移函数的可微性”. 我在后面注记(图 2 第二行)中, 将主要功劳归功于许先生.


目 录

§1.3 的结果基本上取自许宝騄 [1],他处理了欧氏空间.

许宝騄, 欧氏空间上纯间断的马尔科夫过程的概率转移函数的可微性, 北京大学学报(1958)



图 2 1986 年专著的目录及许先生的一篇论文

两年后的 1988 年, 我研究经济最优化, 需要用到随机矩阵, 这是华罗庚先生提出的问题. 很吃惊, 许先生是此分支学科的最早的奠基人之一,

在图 3 所示的名著的第一版中, 一开头就写了(见图 4). 我这时才明白殷涌泉老师和白志东等为何会走上这条道路(殷老师参加过许先生的讨论班). 所以我从读研究生开始, 最初十年的研究, 多次回到许先生那里.

**RANDOM MATRICES**

**Third Edition**

许宝騄,陈家鼎,
郑忠国.
随机矩阵的
重合性质.
《北大学报》
1979 年 1 期

2004

***Madan Lal Mehta***

图 3　随机矩阵的第一本专著及许先生等的一篇论文

很神奇, 在 图 3 中. 许先生、陈家鼎、郑忠国三人关于随机矩阵的论文, 以前我未认真读过, 误认为这页上的两个随机矩阵是同一个. 其实这里的"随机矩阵"是非概率专业(例如矩阵论或统计)的术语, 用概率论语言, 它是离散时间马尔可夫链的转移概率矩阵, 而这里的"重合性质"乃是

**PREFACE TO THE FIRST EDITION**

1967　　殷涌泉,白志东等

Hsu, P.L.(1939). On the distribution of roots of certain determinantal equations, Ann. Eugenics 9, 250-258.

Though random matrices were first encountered in mathematical statistics by Hsu, Wishart, and others, intensive study of their properties in connection with nuclear physics began with the work of Wigner in the 1950s. Much material has accumulated

图 4　上一专著的序言及所引许先生的奠基性论文

我们现时所讲的" 成功耦合". 我从 80 年代开始大干的耦合理论研究, 其实许先生他们五十年代就开始了. 今天重读这篇文章, 我发现其中有些结果依然是前所未有的. 许先生无愧为我们的先贤先哲.

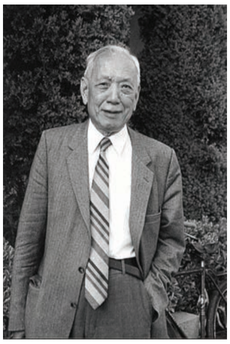
2010 年是華羅庚和許寶騄的百年誕辰。"数学的进步". 数学通报(2012): 第51卷第9期
数學傳播(2013): 37卷1期

華羅庚

許寶騄

图 5　华先生与许先生

2011 年是陳省身的百年壽辰。華羅庚、許寶騄和陳省身堪稱爲我們的民族英雄。他們幾乎從平地而起, 經歷了戰爭等我們無法想像的艱難困苦, 逐步奮鬥成爲頂天立地的第一批華裔數學家。



陳省身

James Simons

图 6　陈先生与 J. Simons 先生

本世纪初, 在我做过八次科普报告“数学的进步”之后, 2012 年在《数学通报》、次年在《数学传播》(台北中研院)发表了此文. 期间正值华先生和许先生的百年诞辰, 第二年是陈先生的百年诞辰. 我情不自禁地写下这几句话: 华罗庚、许宝騄和陈省身堪称为我们的民族英雄. 他们几乎从平地而起, 经历了战争等我们无法想像的艰难困苦, 逐步奋斗成为顶天立地的第一批华裔数学家. 这里的“平地”是指当他们三人年青的时候, 中国的数学尚末上档次; 而“顶天立地”不仅指达到世界一流, 还指他们的骨气. 记得许先生说过“ 我不希望自己的文章因为登在有名的杂志上而出名; 我希望一本杂志因为刊登了我的文章而出名.” 何等豪言壮志!

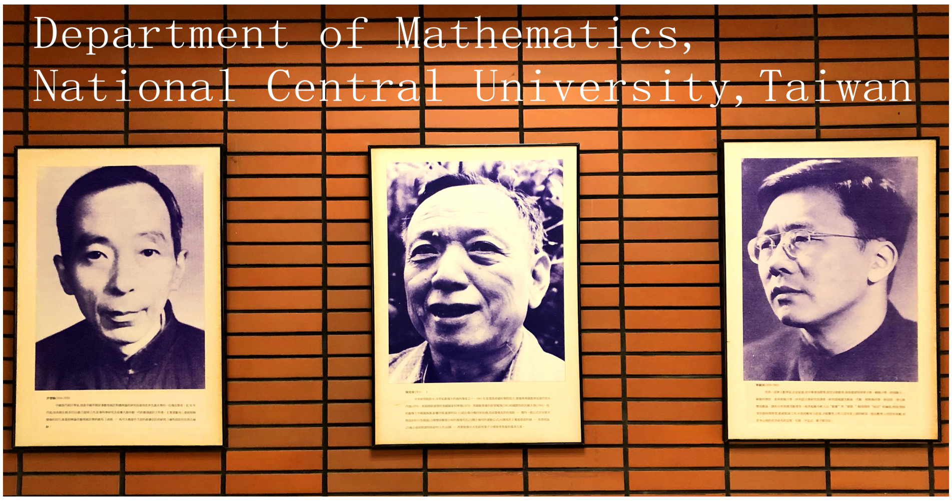



图 7　许先生、陈先生、华先生像

2017 年, 当我再次访问台湾中央大学、走进他们的数学系时, 迎面悬掛的是华、陈、许三位前辈的肖像(见图 7). 这是我前不久(2019/01/28)请该系的一位年青教师(須上苑)拍的照片. 我深为感动. 因为这是我至今所知唯一的单位悬挂他们三位肖像的(现在, 笔者所在学院已于 2019 年 5 月悬挂了一批国内、外数学家肖像), 我衷心希望能有更多的单位也这么做. 因为只有坚持学术传承, 才可能赢得真正的未来.

## §2　交叉研究概述

现在回到本次讲座的主题. 标题中的"交叉研究"容易引起误解, 以为此人是"打酱油"的. 其实那正是笔者一辈子最不喜欢的. 如果在标题前再加五个字"糊里糊涂的", 那就很准确了. 所走过的这样一条或许有些奇怪的研究路线, 决非预先设置的, 而是以前常说的"摸着石头过河".

回想起来很惭愧, 一辈子没做成几件事, 主要醉心于寻找或发展研究无穷维数学的工具. 具体讲有两方面: 一是探讨非平衡统计物理的数学基础; 二是针对相变现象, 探讨各种稳定性的速度估计. 以时间为序, 可分为如下几个阶段.

1)　1978–1992 (15 年): **概率论与统计物理的交叉**.

上一世纪 60 年代, 数学开始重新回归自然, 即从公理化运动的 Hilbert 时代回归 Poincaré 时代. 最早的是概率论与(平衡态)统计力学交叉的前苏联的 R.L. Dobrushin 学派以及随后( 70 年代)美国的 F. Spizter 学派. 另一背景是 1977 年将诺贝尔奖授予非平衡统计物理, 这些因素促使我们

去探索非平衡统计物理的数学基础. 没有想到, 即使局部有限维情形随机过程(乃马尔可夫链)的唯一性, 也没有现成结果可用. 我们竟然摸索了 5 年时间才找到解答. 尽管起步时手无寸铁, 但大家无知无畏、心无旁骛、群策群力、集体攻坚, 以不足 10 人的小集体, 逐步建立了跳过程与(无穷维)反应扩散过程的系统理论. 大部分成果总结在研究专著 [1] 之中. 此书第二版序中, 我们特别指出: 事实上, 全书 600 页, 只是围绕着一个典型的非平衡统计物理模型展开的.

在完成此书前后，逐步转入统计物理的中心课题—相变现象.

2) 1988–(30 多年): **基础数学**.

在完成了上条的基本理论之后, 留下的最重要、做得最不够的是相变. 因为是无穷维数学, 我们再一次陷入手无寸铁的境地. 于是访问了数学中的计算方法、谱理论、黎曼几何、调和分析等多个分支学科, 四处流浪. 所走过的路子基本雷同: 例如发现黎曼几何的特征值估计做得很好, 想学学、借鉴. 大约半年后发现用概率方法也能做, 走上了反向道路. 然后想做得更好, 就需要发展、完善已有的概率工具, 这样获得螺旋式进步. 这常常给两方面都带来新的东西. 老实说, 从未设计过什么原创、领先之类的名堂, 我们也真不懂, 真不会吹牛, 只是这样一步一步摸索而已.

至 2004 的研究成果, 已大体上总结在另一本研究专著 [2] 之中.

3) 2015–(4 年多): **计算数学**. 后面再详细讲.

为完整起見, 还需概述之前的两个短期研究.

4) 1972–1978: 优选法, 属**运筹学**. 优选法是改变笔者一生命运、也是贯穿笔者一辈子研究的一门数学. 在笔者主页上, 有一篇科普文章 [4] 及视频.

5) 1988–1991: 追随华罗庚先生的**经济最优化数学理论**, 我们证明: 即使在微小的随机干忧下, 如不及时调整, 经济也会以概率 1 走向崩溃, 而且速度为指数式. 华先生在系列文章的小结文 [9] 中写道:“在六十年代我们研究数学为国民经济服务的问题时，我们得到‘一论双法’，一论就是本系列摘要中所谈到的内容，双法就是统筹方法、优选法．我们有一个打算就是建立一整套为社会主义经济服务的，有纵深的方法．” “ 全部手稿在‘文化大革命’ 中遭到了‘ 一拿，二抄，三盗窃’的命运，已经荡然无存了, 当然培养人材的计划也完全落空了. 虽然‘ 一论’落空，但和我共同搞‘双法’ 的同志们(工人、农民、科学技术人员)，却已遍布全国了．” “‘一论’手稿的遗失，始终是我大伤脑筋的事．十二大的召开，发出了信号，我六十年代所写的手稿可能要用得上了．失稿追不回来怎么办？原以为旧地

重游，手到拿来，但焉知苦思力索就是想不出来了，证不出来了．火从心发，一病几殆，幸亏医务人员的帮助，谢绝探视者三个月，才使我思路重通，理出个头绪来，写出了这系列摘要的前七篇来．这是我七十岁以后的三年呀！这是由于颈锥病卧床仰写的三年呀！”

华先生将他经历了二、三十年所摸索出来的方法概括为“一论双法”. 当年“双法”可谓家喻户晓, 可惜新一代所知者不多了. 更令人遗憾的是他的“一论”未能得以实践、普及. 我们所研究的随机情形, 源于当年华先生分别写给钟开莱先生和侯振挺老师的信. 幸运的是, 近些日子我们刚完成非随机情形这个理论的算法(参见 [8; §7]).

后两条应隶属于**应用数学**.

大概一年多以前, 有一天笔者突然醒悟到, 尽管多数是浅尝辄止, 但数学中的五个二级学科笔者都走到了. 于是就开始反省, 有没有走错路? 所以今天才大胆讲点感悟.

如果想用一本书来写今天所讲的故事，也许刚才所讲的可作为摘要. 此书引言可用随后马上给出的四篇贺寿文章. 而正文部分大多可从 [1, 2] 和笔者主页中的四卷本论文集 (1993–) 里找到. 所述四篇文章(共 48 页, 也見笔者的主页. 文中所涉及的大多文献这里不再重述):

- 源自统计物理的数学论题(一)—庆贺严士键教授 90 华诞专辑.
- 源自统计物理的数学论题(二)—庆贺王梓坤教授 90 华诞专辑.
- 一维算子两个谱问题的判别准则—庆贺侯振挺教授 80 华诞专辑.
- 生灭矩阵重构三弦乐谱—庆贺杨向群教授 80 华诞.

这些文章概述了我们 40 多年的交叉研究历程, 充满了曲折与艰难. 下面, 我们以具体问题的探索展现学科之间的交叉.

**源自计算的挑战**　在进入我们的第一个主题之前, 让我们先看看一个来自计算的挑战. 我们希望通过带推移的逆迭代(详见后面的 §5), 找到一个 7 阶复矩阵的实部最大的特征对子(即特征值及其特征向量). 周知, 这类迭代法本质上都是特征向量的迭代, 例如依次记为 $\{v_n\}_{n=0}^{12}$, 然后由它导出特征值的近似序列 $\{z_n\}_{n=0}^{12}$.

此题中, 实部最大的特征值为 $5+i$, 记其特征向量为 $g_{\max}$. 我们从初向量 $v_0 = 62 + 6.2\,i$ 出发, 由图 8 可見, 从第 8 步开始, 由 $v_j$ 所导出的 $\mathrm{Re}(z_j)$ 已經非常接近于 $\max_j \mathrm{Re}\,(\lambda_j) = 5$ 了(其中 $\lambda_j$ 为特征值), 因此, 我们必定有 $v_n \to g_{\max}$. 否则, 如上所述, 不可能有 $\mathrm{Re}(z_j) \to \max_j \mathrm{Re}\,(\lambda_j)$.

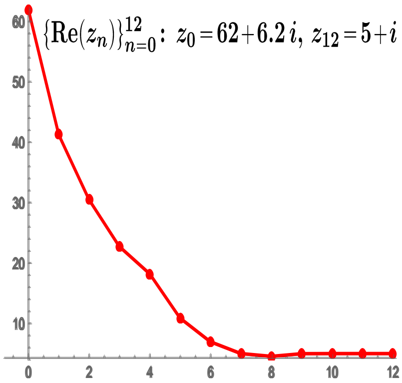



图 8 特征值实部的逼近

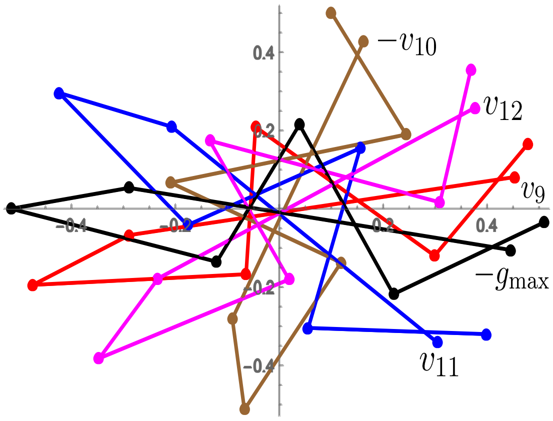



图 9 特征向量的逼近

诸向量 $\{v_j\}_{j=9}^{12}$ 及 $g_{\max}$ 如图 9 所示. 其中若干向量变号是让它们的出发点都放到第一卦限. 每个向量都有 7 个点的连线所构成. 从图上看, $v_9$ 已经离 $-g_{\max}$ 很近了, 但 $v_{10}$, $v_{11}$, $v_{12}$ 反而一个个都跑远了, 完全看不出 $\{v_j\}_{j=9}^{12}$ 的收敛性. 我们知道, 这是复特征值带来的麻烦. 在实情形没有这事.

于是问: 何种矩阵的谱为实? 下面进入本文的第一个主题

## §3 可厄米矩阵

这个标题与下一节的等谱矩阵属矩阵论还是谱理论? 与统计力学、量子力学、概率论有关吗? 我们准备介绍一下摸索的过程, 并展示多学科的交叉, 有些是完全预料之外的.

何种矩阵的谱为实? 易问不易答. 事实上也并无现成的答案. 熟知的仅有实对称矩阵和复厄米矩阵. 先限于非对角线非负的实矩阵 $A = (a_{ij} : i, j \in E)$, 此处 $E$ 为给定的可数集. 此时我们早年做过**可配称**矩阵, 即存在正数列 $(\mu_i : i \in E)$ 使得

$$\mu_i a_{ij} = \mu_j a_{ji}, \qquad i, j \in E. \tag{1}$$

可配称意味着: 虽然 $(a_{ij})$ 本身非对称, 但配上一个配称列 $(\mu_i)$ 之后, 矩阵 $(\mu_i a_{ij})$ 就变成对称的了. 事实上, 这等价于: 作为算子, $A$ 在 $L^2(\mu)$ 上自共轭(当 $E$ 无限时, 还需留心其定义域). 讲到此, 有些人会觉得, 我们当年学泛函分析的时候早就学过了. 其实不然, 我还没见到过有什么泛函的论著告诉你怎么判定这样的 $\mu$ 是否存在, 而在存在时如何把它算出

来. 留意由 (1) 立知, 为使 $A$ 可配称, 它必须满足**零同性**:

$$a_{ij}=0 \Longleftrightarrow a_{ji}=0, \qquad i,j\in E. \tag{2}$$

现在进入核心问题: 如何判定可配称性? 如何算出 $\mu$?

无妨先处理一个很基础的特殊情形: 非对角线元素非负. 当然, 此时起作用的是其正元素. 如 $a_{i_k i_{k+1}}>0$, 则记 $i_k\to i_{k+1}$. 进一步, 我们可定义从 $i_0$ 到 $i_n$ 的一条路:

$$i_0\to i_1\to\cdots\to i_n. \tag{3}$$

先看第一步 $i_0\to i_1$, 将可配称条件 $\mu_{i_0}a_{i_0i_1}=\mu_{i_1}a_{i_1i_0}$ 改写为

$$\mu_{i_0}\frac{a_{i_0i_1}}{a_{i_1i_0}}=\mu_{i_1} \qquad (\text{由零同性 (2)}).$$

我们把此式认真读一遍, 从 $\mu_{i_0}$ 出发, 因为向前走了一步 $i_0\to i_1$, 所以要乘以分数 $a_{i_0i_1}/a_{i_1i_0}$, 然后到达 $\mu_{i_1}$. 接着走第二步 $i_1\to i_2$, 这需要在上式两边同乘以分数 $a_{i_1i_2}/a_{i_2i_1}$, 得出

$$\mu_{i_0}\frac{a_{i_0i_1}}{a_{i_1i_0}}\cdot\frac{a_{i_1i_2}}{a_{i_2i_1}}=\mu_{i_1}\frac{a_{i_1i_2}}{a_{i_2i_1}}=\mu_{i_2}.$$

这里的第二个等号源于刚证过的单步曲. 现在, 让我们忘掉中间一项, 得出

$$\mu_{i_0}\frac{a_{i_0i_1}}{a_{i_1i_0}}\cdot\frac{a_{i_1i_2}}{a_{i_2i_1}}=\mu_{i_2}.$$

这是双步曲: 从 $\mu_{i_0}$ 出发, 因为向前走了两步 $i_0\to i_1\to i_2$, 所以要乘以两个分数 $a_{i_0i_1}/a_{i_1i_0}$ 和 $a_{i_1i_2}/a_{i_2i_1}$, 方可到达 $\mu_{i_2}$. 如此继续, 依 (3) 中的路走到底, 得出

$$\mu_{i_0}\frac{a_{i_0i_1}}{a_{i_1i_0}}\frac{a_{i_1i_2}}{a_{i_2i_1}}\cdots\frac{a_{i_{n-1}i_n}}{a_{i_ni_{n-1}}}=\mu_{i_n}.$$

等价地,

$$\frac{a_{i_0i_1}}{a_{i_1i_0}}\frac{a_{i_1i_2}}{a_{i_2i_1}}\cdots\frac{a_{i_{n-1}i_n}}{a_{i_ni_{n-1}}}=\frac{\mu_{i_n}}{\mu_{i_0}}. \tag{4}$$

虽然仅仅三步论证，我们已经得出很重要结果.

1) 首先，命 $i_n=i_0$, 则 (3) 中的路就成为一条闭路, 即成了一个圈. 我们由 (4) 立即得出如下的

**Kolmogorov 圈形定理** 一个非对角线元素非负的矩阵 $A=(a_{ij})$ 可配称当且仅当是下述圈形条件成立: 对于形如 (3) 的每一条闭路, $i_n=i_0$,

(4) 式成立. 即沿此路的前进方向的诸项的连成积等于沿反方向的诸项的连乘积:

$$a_{i_0 i_1} a_{i_1 i_2} \cdots a_{i_{n-1} i_n} = a_{i_n i_{n-1}} a_{i_{n-1} i_{n-2}} \cdots a_{i_1 i_0}, \qquad i_n = i_0.$$

这是 A.N. Kolmogorov 最早 (1936) 就有限状态离散时间的转移概率矩阵证明的. 对于一般的非对角线元素非负的矩阵, 是 1979 年笔者跟候振挺老师证明的. 当年, 我们对于柯氏的工作一无所知. 俗话说, 无知者无畏, 所以得到更多结果.

再看一次 (4) 式, 如固定起点 $i_0$ 和终点 $i_n$, 此式表明比值 $\mu_{i_n}/\mu_{i_0}$ 与该式左方所选择的路无关(尽管路的长度可能不同, 也许终点的标号是另一个 $i_m$). 换言之, 我们得出圈形条件的另一种等价、但更强有力的描述, 即

2) **路径无关性**.

作为此性质的直接应用, 我们得到测度 $(\mu_k)$ 的算法. 取定参考点 $i_0$, 并命 $\mu_{i_0} = 1$. 那么, 对于任选的从 $i_0$ 到 $i_n$ 的路, 由 (4) 式可算出 $\mu_{i_n}$. 还是因为此性质, 自然可选最短路或最方便于计算的路. 当然, 在一般情况下, 可能需要分块处理.

仔细想想, 还有一个大问题, 如无穷图, 闭圈常有无穷多, 要一一查证, 当然不现实. "路径无关性"让我们想起古典的保守场论. 那里的这一性质有一等价描述: **沿任何闭路所做的功等于零**. 这样, 我们也可以将圈形条件改述为刚才的断言. 这只需在 (4) 两边取对数, 左方定义为场沿那条路所做的功; 右方解释为在两端点的势差. 既然有"沿闭路做功为零的观念", 这就启发我们如下原则: 检查最小闭路.

3) **可配称性等价于沿每一最小闭路所做的功等于零**. 或可用"最小圈形条件"代替上述的"圈形条件". 以后将看到, 这甚至引导我们去处理不可数无穷维模型的可配称性.

前两年讲算法时, 常有做计算的老师问, 不要"非对角线元素非负"条件, 你的算法能行吗? 我每次都要检讨, 说如果去掉这一条件, 我就手无寸铁了. 因为这是做概率的人所使用的自然条件. 我心里真担心走不出去. 直到遇到开头所述的计算挑战, 我才认真思考这个问题. 运气在于, 笔者 2017 年在讲一门短课时(已整理出前述的两篇 90 大寿的祝寿文章), 已找到刚刚介绍的非常简单的三步处理. 我先考查实矩阵, 看看需要什么条件. 当然, "零同性"保留. 定义"路"时, 可把条件"$a_{ij} > 0$"换成"$a_{ij} \neq 0$"以示"$i \to j$". 此时, 除法"$a_{ij}/a_{ji}$" 有意义, 但显然需要求这个比值是正的, 以

保证能够算出正测度 $\mu$. 然后“圈形条件”的判准照旧. 所以从原先的“非负”延拓到“ 实数”情形, 用不到几分钟就完成了.

有了这个成功之后, 自然就有胆量试试复矩阵. 老实说, 这还是我第一次研究复矩阵. 首先, 实对称矩阵往复的走, 并非复对称矩阵. 例如下面的矩阵

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix},$$

左边为复对称矩阵, 其特征值为 $\pm i$, 非实. 而右方为厄米 (Hermitian) 阵, 特征值为 $\pm 1$, 为实的. 所以实**可配称 (symmetrizable)** 到复的推广应是**可厄米 (Hermitizable)**: 存在正的 $(\mu_i)$, 使得

$$\mu_i a_{ij} = \mu_j \bar{a}_{ji}, \qquad i, j \in E, \tag{5}$$

此处 $\bar{a}$ 为 $a$ 的共轭. 从实到复, 当然有差别. 对于实的 (1) 式, 对角线元素随意, 但对复的 (5) 式, 对角线元素 $a_{ii}$ 必须为实. 可厄米条件 (5) 等价于复 $L^2(\mu)$ 上的自共轭性, 所以其谱自然为实. 下面是使用矩阵论给出的直接证明, 具有独立价值.

$$\begin{aligned} &\mathrm{Diag}(\mu)A = A^H \mathrm{Diag}(\mu) \qquad\qquad \boxed{A^H := (\bar{A})^*} \\ &\Leftrightarrow \mathrm{Diag}(\mu) A\, \mathrm{Diag}(\mu)^{-1} = A^H \\ &\Leftrightarrow \mathrm{Diag}(\mu)^{1/2} A\, \mathrm{Diag}(\mu)^{-1/2} = \mathrm{Diag}(\mu)^{-1/2} A^H \mathrm{Diag}(\mu)^{1/2}. \end{aligned} \tag{6}$$

这里的 $\mathrm{Diag}(\mu)$ 表示以数列 $\mu$ 为对角线元素的对角矩阵. 第一式是 (5) 的改写. 将其右方的对角阵移到左方, 得出第二式. 它表明 $A^H$ 为 $A$ 的相似变换, 自然等谱. 因为矩阵的转置与自身等谱, 此式也表明 $\bar{A}$ 与 $A$ 等谱, 故 $A$ 的谱为实. 如再走一步, 得出末行. 这表明末行左方为厄米矩阵, 称之为 $A$ 的**厄米化**. 它作为 $A$ 的相似变换, 再次导出 $A$ 有实谱. 我们注意, 对于实矩阵情形, 由第二行只得出 $A$ 与 $A^*$ 等谱, 还得不到 $A$ 有实谱. 此时 (6) 式第三行就是必须的. 其左方称为 $A$ 的**对称化**. 我们留意: 这里证明的每一步都是可逆的, 因此, 矩阵 $A$ 可以厄米化(相应地, 可以对称化)当且仅当 $A$ 是可厄米阵(相应地, 可配称阵).

由 (6) 式可以看出, 关于厄米阵的理论和算法可直接移植到可厄米阵. 毋庸赘言, 此结论也适用于实可配称情形.

现在, 关于可厄米判准等, 对于图结构(路), 条件‘$a_{ij} \neq 0$”不变, 主要变动是因子

$$\frac{a_{ij}}{a_{ji}} \quad \text{替换为} \quad \frac{a_{ij}}{\bar{a}_{ji}}.$$

例如 (4) 式, 现在成为

$$\frac{a_{i_0 i_1}}{\bar{a}_{i_1 i_0}} \frac{a_{i_1 i_2}}{\bar{a}_{i_2 i_1}} \cdots \frac{a_{i_{n-1} i_n}}{\bar{a}_{i_n i_{n-1}}} = \frac{\mu_{i_n}}{\mu_{i_0}}. \tag{7}$$

**可厄米判准**

我们现在可陈述第一个判准.

**定理 1.** 复矩阵 $A = (a_{ij})$ 可厄米当且仅当下述两条件同时成立.

(1) 对每一对 $i, j$, 或者 $a_{ij}$ 与 $a_{ji}$ 同时为 0, 或者$a_{ij}a_{ji} > 0$ ($\Leftrightarrow a_{ij}/\bar{a}_{ji} > 0$).

(2) 对于每一条无往返的最小闭路, 圈形条件成立.

自此以后, 我们将多次用到三对角矩阵. 命

$$E = \{k \in \mathbb{Z}_+ : 0 \leqslant k < N+1\}.$$

定义

$$\begin{matrix} T \\ Q \end{matrix} = \begin{pmatrix} -c_0 & b_0 & & & \text{\huge 0} \\ a_1 & -c_1 & b_1 & & \\ & a_2 & -c_2 & b_2 & \\ & & \ddots & \ddots & b_{N-1} \\ \text{\huge 0} & & & a_N & -c_N \end{pmatrix},$$

这里有两种情形: 当 $(a_k), (b_k), (c_k)$ 均为复数时, 乃一般三对角阵, 记为 $T$. 也简写为 $T \sim (a_k, -c_k, b_k)$. 特别地, 如 $a_k > 0, b_k > 0, c_k = a_k + b_k\, (k < N)$ 及 $c_N \geqslant a_N$, 那么它就是概率论中常用的生灭 $Q$ 矩阵, 所以也写成 $Q \sim (a_k, -c_k, b_k)$.

三对角情形的每一条闭路必定往返, 从而无需是理 1 中的条件 (2), 可厄米判准更简单.

**定理 2.** 三对角阵 $T$ 可厄米当且仅当下述两条件同时成立.

(1) 对角线元素 $(c_k)$ 为实数.

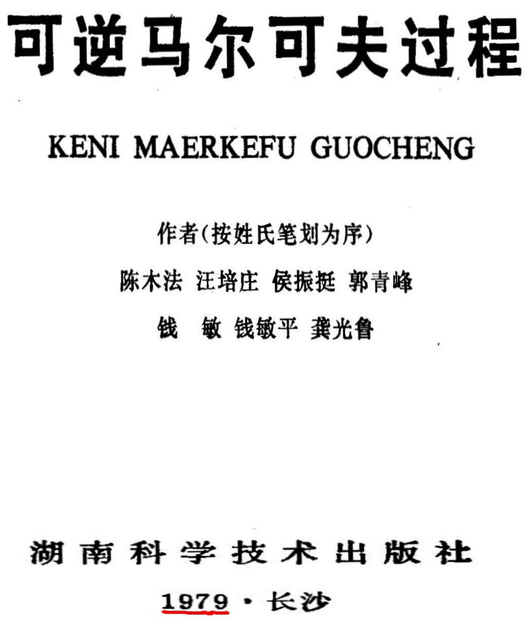
(2) 或者 $a_{i+1}$ 与 $b_i$ 同时为 0, 或者 $a_{i+1}b_i > 0$ ($\Leftrightarrow b_i/\bar{a}_{i+1}>0$).

留心当 $a_{i+1}$ 与 $b_i$ 同时为 0 时, 矩阵可分块处理. 自此以后, 我们略去这种情形不提. 然后, 因为仅有一条通路, 可立即写出配称测度:

$$\mu_0 = 1,\ \mu_k = \mu_{k-1}\frac{b_{k-1}}{\bar{a}_k}, \qquad k \geqslant 1. \tag{8}$$

2018 年元旦前后做到这里的时候, 感到一切都顺风顺水. 也有些懊脑, 为什么 40 年前那么笨, 没有想到要处理复的情形. 后来反过来一想, 如果当初直接写复矩阵, 说不定在概率界会被骂死, 有何用? 从 Kolmogorov 1936 开始的故事, 80 多年过去, 设有人离开过"非对角线元素非负"的假设条件. 而且这些成果, 好像也从未走出概率界. 你要问做线性代数的、做泛函的、做计算的、做物理的, 几乎没有遇到什么人了解我们的成果. 要不是因为计算的多次撞击, 本人也根本想不到要做这个题目.

在深入下一个论题之前, 让我们回顾一点历史, 以了解当年这项研究的价值. 图 10-1 是我们 7 位于 1979 年出版的一本研究专著. 其中的"可逆"就是我们此刻所讲的"可配称"加上"配称测度可和"(即 $\sum_k \mu_k < \infty$)条件. 书中第 6 章(有 47 页)就是我跟侯老师写的"马尔可夫过程与场论". 此章共分 13 节, 研究了各种情形的更详细的判准. 包括了离散时间的马氏链和连续时间的 $Q$ 过程等诸多内容(见图 10-2).


可逆马尔可夫过程

KENI MAERKEFU GUOCHENG

作者(按姓氏笔划为序)

陈木法 汪培庄 侯振挺 郭青峰

钱 敏 钱敏平 龚光鲁

湖南科学技术出版社

1979 · 长沙

图 10-1 研究专著《马尔可夫过程》

pp. 194--242
47 pages

图 10-2 上书的第六章 马尔可夫过程与场论

1980 年前后, 我们, 在严士健老师领导下的北师大概率论群体, 应用上述场论的工具, 进一步研究了以 $\{-1,1\}^{\mathbb{Z}^d}$ 或以 $\mathbb{Z}_+^{\mathbb{Z}^d}$ 为状态空间(无穷维, 不可数)的平衡态或非平衡态统计物理模型, 得到一批可逆性的极简单、方便的判准(称为“四边形条件”或“三角形条件”等). 这些成果无疑是“北师大概率论群体”走上国际的第一步(参见 [1; 第 7、11 章及第 14.5 节]). 我们所处理的模型甚至允许测度 $\mu$ 非唯一(即存在相变).

## §4 等谱矩阵

**等谱变换** 我们现在进入可厄米研究的一个戏剧性阶段：等谱问题. 事情开始于计算一个 4 阶生灭矩阵, 上面已讲过, 如果对称元素同时变号, 相应的 $\mu$ 不动. 我们想看看谱会发生何种变化. 结果是“不变”. 即便多个对子同时变号也如此. 因为我们相信一种哲学: 如果随便抓出来的例子为真, 那么必定存在一条定理, 那怕是给点条件. 下述结果可称为“大喜过望”.

**定理 3.** 对于给定的可厄米三对角阵 $T\sim(a_k,-c_k,b_k)$, 如 $c_k\geqslant|a_k|+|b_k|$ (更一般地, 可以 $c_k+m$ 代替 $c_k$). 则存在一个显式生灭阵 $\widetilde{Q}\sim(\tilde{a}_k,-\tilde{c}_k,\tilde{b}_k)$ 使得 $T$ 与 $\widetilde{Q}$ 等谱.

一般地讲, 所构造的 $\widetilde{Q} \sim (\tilde{a}_k, -\tilde{c}_k, \tilde{b}_k)$ 满足 $\tilde{c}_N \geqslant \tilde{a}_N$. 为简单计, 这里假定 $\tilde{c}_N > \tilde{a}_N$. 为写出 $\widetilde{Q}$, 简记 $u_k = a_k b_{k-1} > 0$, 并命 $\tilde{c}_k = c_k$. 均为显式. 则所求的 $(\tilde{b}_k,\ \tilde{a}_k)$ 如下.

$$\tilde{b}_k = c_k - \cfrac{u_k}{c_{k-1} - \cfrac{u_{k-1}}{c_{k-2} - \cfrac{u_{k-2}}{\ddots\, c_2 - \cfrac{u_2}{c_1 - \cfrac{u_1}{c_0}}}}}$$

$$\tilde{a}_k = c_k - \tilde{b}_k,\ k < N; \quad \tilde{a}_N = u_N \big/ \tilde{b}_{N-1} \ \text{如}\ \ N < \infty.$$

这个连分式也可写得短点: $\tilde{b}_k = c_k - u_k \big/ \tilde{b}_{k-1},\ k \geqslant 1,\ \tilde{b}_0 = c_0$. 当然, 还需要验证两序列 $(\tilde{b}_k,\ \tilde{a}_k)$ 的正性, 并非显然.

留下来需要说明等谱为何意? 对于有限矩阵, 即是有相同的特征值. 更具体些, 我们有相似变换

$$\widetilde{Q} = \mathrm{Diag}(h)^{-1} T\, \mathrm{Diag}(h),$$

所以 $T$ 与 $\widetilde{Q}$ 等谱. 问题是: 何为 $h$? 答案: 它差不多是 $T$ 的调和函数, 即在 $[0, N)$ 上(右端点除外), $Th = 0$. 因为 $T$ 是三对角阵, 此调和方程是二阶差分方程. 如同变系数的二阶常微分方程无通解一样, 差分方程也无通解, 唯一指望的是某种可以写出来的特解. 为此, 我们经历了 4 年. 或许是仙人相助, 竟然写下了一个解:

$$h_0 = 1,\ h_n = h_{n-1} \frac{\tilde{b}_{n-1}}{b_{n-1}}, \qquad 1 \leqslant n \leqslant N.$$

因为 $\{\tilde{b}_n\}$ 是显式, 所以 $\{h_n\}$ 也是, 只是若展开写出来, 远非可以突发灵感猜得出来的.

**数学方法: $h$ 变换(陈、张旭, 2014)**

**例** 我们把 Schrödinger 算子 $L = \Delta + V$ 中的位势项换成梯度项, 即把 $L$ 换成 $\widetilde{L} = \Delta + \tilde{b}^h \nabla$, 这里, 梯度项的系数 $\tilde{b}^h$ 是由 $h$ 找出来的函数，而 $h$ 是调和函数: $Lh = 0$. 那么, $L^2(\mathrm{d}x)$ 的算子 $L$ 等谱于 $L^2(\tilde{\mu}) := L^2(|h|^2 \mathrm{d}x)$ 的算子 $\widetilde{L}$.

若将 $h$ 视为乘法算子, 粗略地讲, 与上段的矩阵情形平行, 也可将 $\widetilde{L}$ 表成

$$\widetilde{L} = h^{-1}Lh,$$

这是笔者与张旭于 2014 年找到的 $h$ 变换方法. 正是此法, 在上述矩阵情形, 我们才能允许对角线元素任意, 才能处理稍一般的三对角线矩阵, 也才有勇气做计算. 因为三对角线矩阵是计算的核心. 利用此法, 已得出一维情形谱离散判准.

研究 Schrödinger 算子的传统方法是使用 Feynman-Kac 半群: 对于给定的实算子 $L = \Delta + V$, 所述半群 $\{T_t\}_{t\geqslant 0}$ 定义为

$$T_t f(x) = \mathbb{E}_x \left\{ f(w_t) \exp\left[ \int_0^t V(w_s)\mathrm{d}s \right] \right\}.$$

但未见由此导出的稍许完整的谱结果.

通常, 许多人瞧不上三对角矩阵. 但我们前面说过, 在计算领域, 此乃核心之一. 我们现在要排除“三对角”条件. 为简便起见, 只陈述不可约情形.

**不可约可厄米阵等谱于生灭阵** 证明分三步:

$$\text{可厄米阵} \Longleftrightarrow \mathrm{Diag}(\mu)^{1/2} A\, \mathrm{Diag}(\mu)^{-1/2} \text{ 为厄米阵}$$

$$\text{厄米阵} \xrightarrow{\text{酉变换}} \text{三对角、实对称阵}$$

$$\text{厄米三对角阵} \longrightarrow \text{生灭阵}.$$

这里的第一步和第三步前面都已讲过, 仅有第二步是新的, 称为 Householder 变换. 这是很有名的一种算法. 在 2000 年时, 有两杂志评选 20 世纪的 10 个 Top 算法, 依时间为序, 第一个是 Monte Carlo 方法, 第二个是关于线性规划的单纯形法. 关于矩阵特征(值)问题被选上的算法有三个, 其一即是 Householder (1951) 的“decompositional approach to matrix computations”, 其代表即是刚谈到的以他的名字命名的变换. 矩阵特征问题始于 C.G.J. Jacobi (1846), 已有 173 年的历史, 应当说, 任何进步都是不易的. 严格地讲，第二步所得到的三对角阵可能是分块的，但此处略去这个细节.

**量子力学** 到目前为止, 量子力学的公理假设都是把厄米矩阵作为基本物理对象. 近些年开始摸索扩展的对象, 研究非厄米的量子力学. 但这又太广, 所以也提出了一些限制, 例如所谓 $\mathscr{PT}$ 对称, 这蕴涵时间反演对

称性. 在统计物理中, 这种对称性恰是平衡态统计物理与非平衡态统计物理的分界. 对应于数学, 即是自共轭与非自共轭(矩阵)或算子. 因为量子力学有两大特征, 一是波动性(所以要使用复矩阵), 二是谱必需是实的, 所以厄米矩阵成为首选. 我们的研究说明, 可厄米矩阵更合理(须知数学界、更不用说物理学界, 从未有过"可厄米"的概念). 这里有几个理由. 一是可厄米阵拥有量子力学的两条基本要求; 二是它恰好为自共轭与非自共轭的分界; 三是相对于厄米阵, 那基于均匀介质(使用 Lebesgue 测度), 可厄米适用于非均匀介质; 四是使用我们的等谱定理, 每一可厄米阵的谱都可用生灭阵的谱来计算, 前者是复算子, 具有波动性(有上帝是否掷子之问), 后者完全是实的. 五是关于量子力学的计算, 有计算物理、量子化学等, 著名的 MatLab 软件最早就是为它开发的, 可见不易. 显然, 一旦使用我们的等谱定理, 计算必有大简化. 事实上, 使用 MatLab 的软件包也已挂到网上(计划再加细).

关于"均匀介质"与"非均匀介质", 它们之间有巨大差别. 例如生灭矩阵, 在概率论中对应于生灭过程. 它与布朗运动一起, 构成了随机过程的基石. 如限于均匀介质, 在通常研究的无穷状态空间(即无穷矩阵), 它对应的模型必定灭绝. 因此该模型就没有多少用处. 生灭过程之所以非常有用, 正是因为它可以存活, 有平稳分布, 因此必定处于非均匀介质. 要总结现今生灭过程研究成果, 我相信 1000 页的大书未必够. 因为本人这辈子最长的一篇论文, 专论生灭过程, 发表出来有 137 页.

关于这项研究成果与量子力学的联系, 在笔者主页上可找到专门的视频"A Mathematical View on Quantum Mechanics", 此处不再详述. 两年前见到 Kolmogorov 文集之后, 才获悉我们做了几十年、由他开始的可逆马尔可夫过程的研究, 原来源于他与 Schrödinger 的交流, 与量子力学有关. 在完成文 [6] 之后, 又见到 G. Ludyk 关于矩阵力学的新著 (见 [6] 中文献), 才开始学一点量子力学.

## §5 最大特征对子的计算: 三对角矩阵

**本文开头挑战问题的解答** 在开始这一部分的主题之前, 我们先回答开始所提出的来自计算的挑战问题. 这里, 关键是通常使用范数的归一化在复数情形不够细密, 因为模 1 的复常数因子(即旋转)不起作用: $\|e^{i\theta}x\| \equiv \|x\|$. 我们使用更方便的归一化: $\tilde{v} = v/v(0)$. 将每一向量除以它的第一个分量. 这样, 每个向量的第一个分量(起点)都固定在 1 处(归一化), 而其

它分量的幅角换成原此分量的幅角与原第一分量的幅角之差. 这样, 我们做了一次滤波.

从图 11 中可以看出, 诸向量 $\tilde{v}_{10}, \tilde{v}_{11}, \tilde{v}_{12}$ 和 $\tilde{g}$ 几乎重叠在一起, 唯独 $\tilde{v}_9$ 稍许偏离一点. 这说明序列 $\tilde{v}_k$ 确实收敛于 $\tilde{g}_{\max}$. 这些向量近乎都是保角变换. 十分有趣.

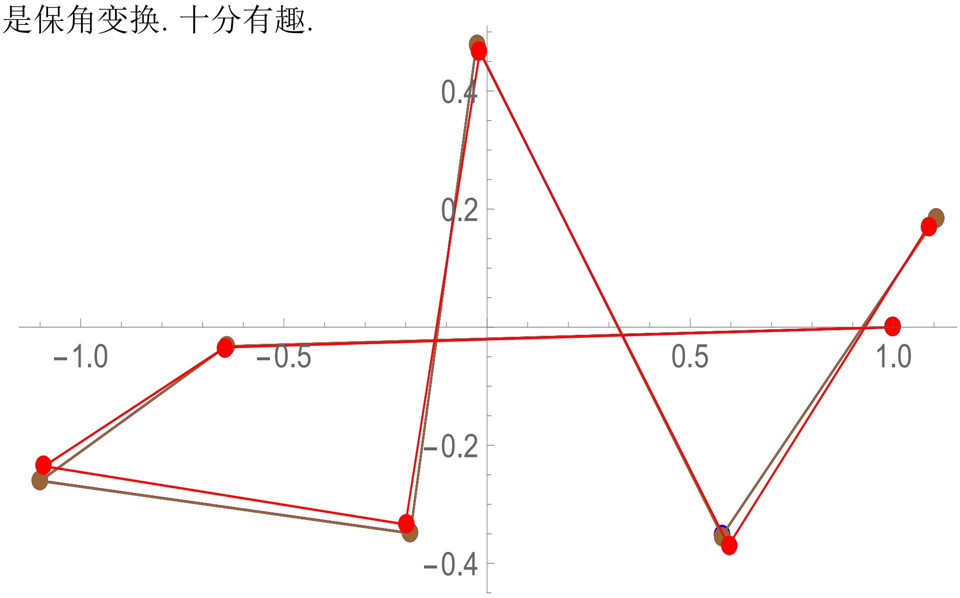



图 11　滤波后的诸向量 $\{\tilde{v}_k\}_{k=9}^{12}$ 与 $\tilde{g}_{\max}$

**三对角阵的特例**　讲到主特征对子的计算, 我们还是从三对角阵开始. 命 $E=\{k\in\mathbb{Z}_+: 0\leqslant k<N+1\}$. 取

$$Q=\begin{pmatrix} -3 & 2 & & & \text{\Large 0} \\ 1 & -3 & 2 & & \\ & 1 & -3 & 2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ \text{\Large 0} & & & 1 & -3 \end{pmatrix},$$

在讨论计算时, 常假定 $N<\infty$. 此时因为是常系数, 最大特征对子 $(\lambda_0, g_0)$ 可显式解出来.

$$\lambda_0+3=2\sqrt{2}\cos\frac{2\pi}{N+2}, \qquad g_0(j)=2^{-(j+1)/2}\sin\frac{(j+1)\pi}{N+2}, \qquad j\in E.$$

**推移逆迭代算法**　分两步.

1) 选取最大特征对子 $(g_0, \lambda_0(-Q))$ 的一个近似 $(v_0, z_0)$ 作为初值. 此处把向量 $g_0$ 排在前是因为这个算法本质上是特征向量迭代, 而特征值逼近乃是其副产品.

2) 在第 $k$ 步, 假定已有 $(v_{k-1}, z_{k-1})$, 设 $w_k$ 为方程

$$\big(-Q - z_{k-1}I\big)w_k = v_{k-1}$$

的解. 命 $v_k = w_k/\|w_k\|$ 及 $z_k = \delta_k^{-1}$. 则当 $k \to \infty$ 时, $(v_k, z_k) \to \big(g_0, \lambda_0(-Q)\big)$.

这里所用到的 $\delta_k$ 是我们早年完成的 (2010), 而第一步初值的选取在我们的文章 [3] 中已给出. 除非另有声明, 随后总假定两者都是已知的. 在后面的应用中, 常把 $v_k$, $z_k$, $w_k$ 中的下标改写为上标, 例如 $v^{(k)}$, 想必不会发生混淆.

留心 $Q$ 的第一行的行和非零, 使用上述的 $h$ 变换(等谱)将除末行之外的各行变为零, 得出

$$\widetilde{Q} = \begin{pmatrix} -3 & \dfrac{2^2-1}{2-1} & & & \text{\Large 0} \\ \dfrac{2^2-2}{2^2-1} & -3 & \dfrac{2^3-1}{2^2-1} & & \\ & \dfrac{2^3-2}{2^3-1} & -3 & \dfrac{2^4-1}{2^3-1} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ \text{\Large 0} & & & \dfrac{2^{N+1}-2}{2^{N+1}-1} & -3 \end{pmatrix},$$

回忆

$$\lambda_0 + 3 = 2\sqrt{2}\cos\frac{2\pi}{N+2} \approx 2.82843,$$

仅当 $N \geqslant 2562$ 时可达到此 6 位精度.

因为 $\widetilde{Q}$ 是 $Q$ 的 $h$ 变换, 我们可把 $Q$ 的特征对子的计算化归结为 $\widetilde{Q}$ 的特征对子的计算. 以下只做后者.

这个简单例子是汤涛提供的, 力图说明: 即便是如此简单的非对称, 也会给计算带来很大困扰. 使用我们的方法, 对于 $\widetilde{Q}$ 的初值如图 12–14.

这是使用 Mathematica 所作的图. 在作图时, 软件可自找精度, 所以这里的显示达到非常高的 $10^{-306}$. 在做数值计算时, 通常 $10^{-25}$ 时就归零了. 用 Mathematica 的 'Eigensystem' 计算此例的最大特征对子时, 只能算到 $N \leqslant 81$. 问题就在于非对称带来的麻烦. 另一方面, 若要将 $\widetilde{Q}$ 对称

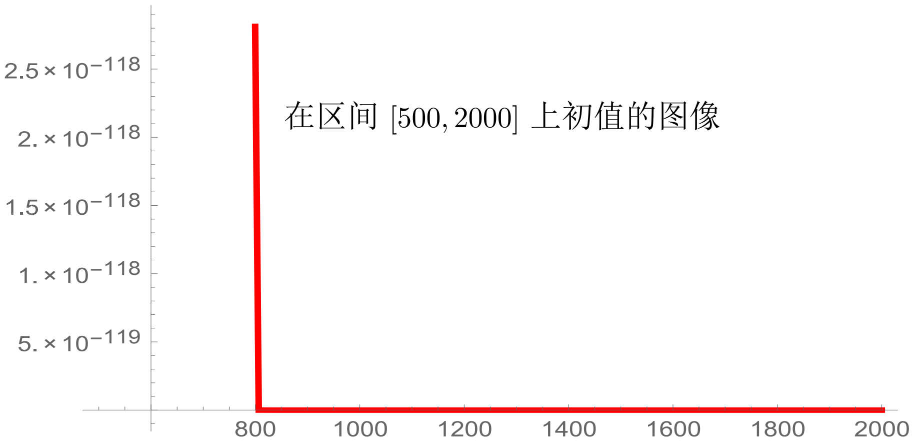



图 12 初值在区间 $[500, 2000]$ 上直线坠落

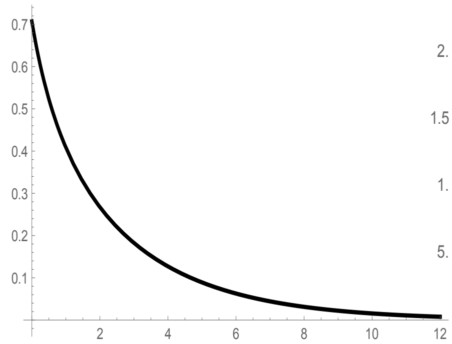



图 13 在 $[0, 12]$ 上从 0.7 下降到近乎零

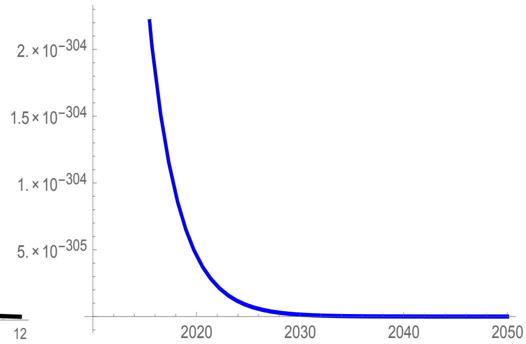



图 14 在 $[2010, 2050]$ 上从 $10^{-304}$ 下降到 $10^{-306}$

化, 使用 (8) 式及前面的对称化(即实情形的厄米化), 很容易写出来:

$$Q^{\text{sym}} = \begin{pmatrix} -3 & \sqrt{2} & & & \text{\huge 0} \\ \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ \text{\huge 0} & & & \sqrt{2} & -3 \end{pmatrix},$$

对此对称化了的矩阵, “除末行而外, 其它各行的行和均为零”的条件不再成立, 因而我们的武功全废, 即所设计的初值以及所用到的 $\delta_k$ 都不适用了. 也许, 有人会建议再用一次 $h$ 变换, 不就会得到符合条件的新矩阵了, 可惜这样是回到原先的、非对称的 $\widetilde{Q}$ 而非“新矩阵”. 所以我们事实上陷入无解的死循环, 处于走投无路的绝境. 有时候, 人给逼急了之后, 倒可能突发奇思妙想, 绝地逢生.

让我们先看看新算法的初值 $w^{(0)}$.

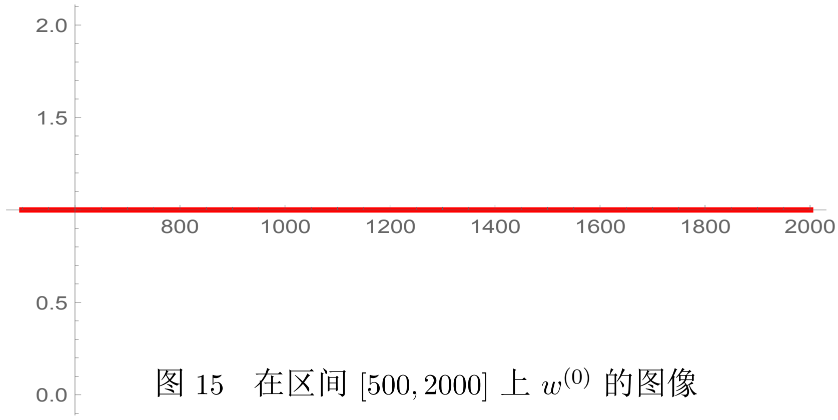



图 15　在区间 $[500, 2000]$ 上 $w^{(0)}$ 的图像

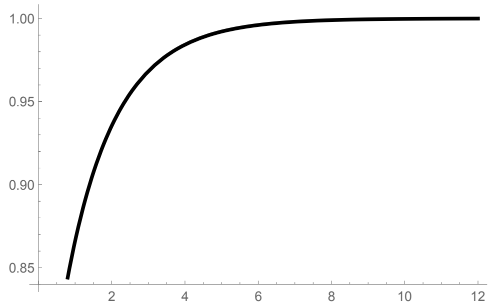



图 16　在区间 $[0, 12]$ 上的 $w^{(0)}$

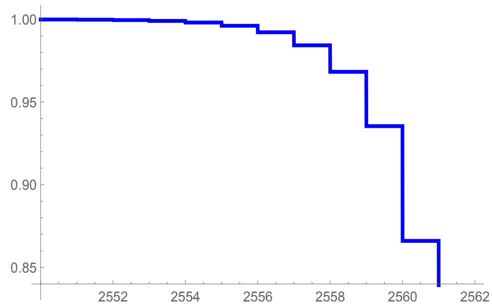



图 17　在区间 $[2550, 2562]$ 上的 $w^{(0)}$

从图 15 看出, 新的初值向量近乎为常数 1. 结合图 16、17, 得知这个初向量的振幅等于 $\sqrt{2}$. 真不知道该如何与原算法的振幅 $10^{306}$ 相比较.

下面是使用新算法, 在普通的笔记本电脑上的计算结果.

| $N+1$ | $z^{(0)}$ | $z^{(1)}$ | $z^{(2)}$ | $z^{(3)}$ |
|---|---|---|---|---|
| $10^2$ | 0.171573 | 0.172686 | 0.172934 | 0.172941 |
| $5\times 10^2$ | 0.171573 | 0.171628 | 0.171618 | |
| $10^3$ | 0.171573 | 0.171584 | 0.171587 | |
| $5\times 10^3$ | 0.171573 | 0.171573 | (1.597s) | |
| $10^4$ | 0.171573 | 0.171573 | (6.578s) | |
| $1.5\times 10^4$ | .171573 | 0.171573 | (29.16s) | |

表中的 $\#s$ 是算法自动记录的用时: $\#$ 秒. 也许 1 万 5 千阶时, 因为内存限制, 会有较大失真. 我们看到: 对于 1 万 阶矩阵, 仅使用了 6.578 秒, 应当说是令人吃惊地神速了.

现在可以回头来讲讲新算法. 事实上, 这也是 2018 年的主要进展之一. 详见综述报告[7].

在图 18 中, 中间的竖线是文 [3] 提出的算法, 图中有 5 处标记了 2018, 是当年所作出的改进. 其中左上角将复可厄米阵(不论是否三对角归结为生灭阵). 问题的核心部分是中间的迭代方程这个框. 我们所遇到的麻颂是

- 在方程中, 若用 $\widetilde{Q}$ 去迭代并用它的最大特征估计 $\zeta_k^{-1}$ (图 18 右方中部)作为推移 $z^{(k-1)}$, 这是通常带推移的逆迭代. 这对于小矩阵可行、但对大矩阵失效.
- 在方程中, 若用 $Q^{\rm sys}$ 去迭代(这对计算而言非常好), 但无法直接用它估计最大特征值(作为推移量).

如前所述，两者打架，我们在此处陷入死胡同. 在十分无奈的情况下, 只好反复琢磨这两条信息. 下面是一个简化版.

| 矩阵类型 | 迭代算法 | 用于 $z^{(k-1)}$ 的估计 |
|---|---|---|
| 非对称 $\widetilde{Q}$ | 差 | 好 |
| 对称 $Q^{\rm sym}$ | 好 | 无直接可用估计 |

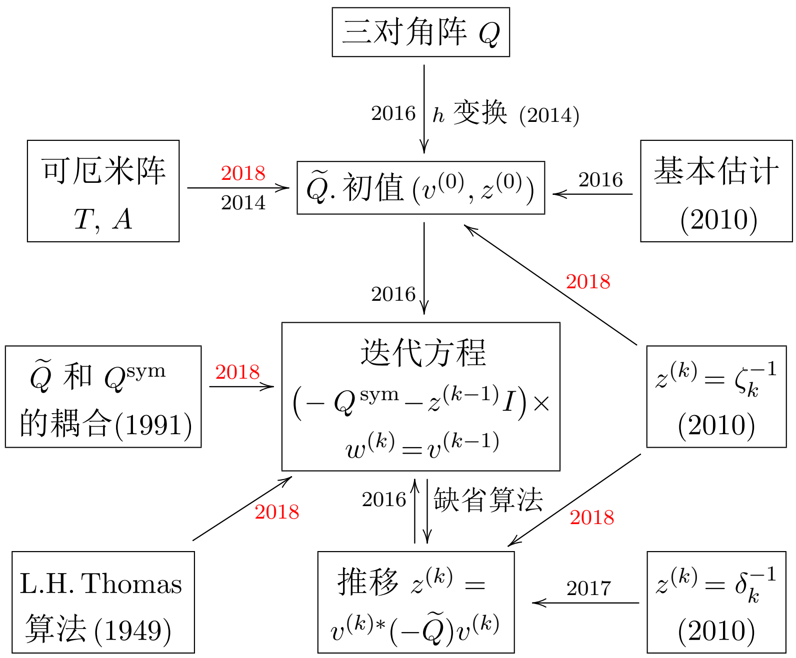



图 18　三对角阵最大特征对子算法发展的路线图

从这个简表中, 我们看到唯一的活路就是使用 $Q^{\rm sym}$ 作迭代计算、而同时使用 $\widetilde{Q}$ 来计算用于 $z^{(k-1)}$ 的估计. 这恰好适用于我们当前的情况: 因为

$Q^{\rm sym}$ 为 $\widetilde{Q}$ 的对称化, 乃相似变换, 从而等谱. 换言之, 我们让 $\widetilde{Q}$ 与 $Q^{\rm sym}$ 成親(即耦合), 从此有了共同的人生道路, 每一步都一起走. 这就图 18 中间的"迭代方程"及其左边的"耦合"的含义. 更进一步, 即使已给的矩阵是对称的(如 $Q^{\rm sym}$), 只要不满足上述的"行和为零"条件, 就应当使用 $h$ 变换, 构造出如同 $\widetilde{Q}$ 的辅助矩阵, 然后使用我们的新算法. 相信这里的耦合算法, 对计算而言是新的.

## §6 最大特征对子的计算: 非对角线元素非负的矩阵

我们期望将上节的想法尽可能地拓广到非对角线元素非负的矩阵, 以期改进文 [5] 的通用算法. 本节材料取自 [8].

下述矩阵称为**单死 $Q$ 矩阵**, 因为对角线以下仅有"单死"的下次对角线非零. $Q=(q_{ij})_{i,j=1}^N$:

$$Q=\begin{pmatrix} -\frac{7}{3^2} & \frac{2}{3^3} & \frac{2}{3^4} & \cdots & \frac{2}{3^N} & \frac{1}{3^N} \\ \frac{2}{3} & -\frac{7}{3^2} & \frac{2}{3^3} & \cdots & \frac{2}{3^{N-1}} & \frac{1}{3^{N-1}} \\ & \frac{2}{3} & -\frac{7}{3^2} & \cdots & \frac{2}{3^{N-2}} & \frac{1}{3^{N-2}} \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & \text{\Large 0} & & \frac{2}{3} & -\frac{7}{3^2} & \frac{1}{3^2} \\ & & & & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

显然, 它不满足零同性, 从而不可配称. 基于此, 我们将代之以

$$A=(a_{kj}):=(-Q)^{-1}.$$

文末引理 5 将说明, 这个逆矩阵是正的. 事实上, 张余辉已经把这个逆矩阵给算出来了:

$$A=(a_{kj})_{N\times N},\quad a_{kj}=\frac{2^{k\wedge j}-1}{2^j}+\mathbb{1}_{\{j\leqslant k\}}.$$

虽然此时 $A$ 也不可配称(等同于 $Q$ 的可配称性), 但保证了零同性满足, 前进了一步. 使用 Mathematica (v. 11.3), 当且仅当 $N\leqslant 39$ 时, 可算出其最大特征向量. 如略去 $\mathbb{1}_{\{j\leqslant k\}}$, 则当且仅当 $N\leqslant 11$ 时, Mathematica 可用. MatLab 适用性大一些: $N\leqslant 45$.

此模型很有趣.

**例 4.** 设 $A=(a_{kj})_{N\times N}$. 分两种情况.

- 可配称情形.

$$a_{kj}=\frac{2^{k\wedge j}-1}{2^j}.\qquad \text{配称测度：} \mu_k=\frac{1}{2^k}.$$

- 不可配称情形.

$$a_{kj}=\frac{2^{k\wedge j}-1}{2^j}+\mathbb{1}_{\{j\leqslant k\}},\quad \text{拟配称测度选为：} \mu_k=\frac{1}{2^k\times 10^{2k/39}}.$$

第一种情形是偶然碰上的, 它成了原模型(即第二种情形)的简化模型. 容易看出它关于 $(\mu_k=2^{-k})$ 可配称, 从而

$$\widehat{A}:=\mathrm{Diag}(\mu^{1/2})A\,\mathrm{Diag}(\mu^{-1/2}). \tag{9}$$

就成为对称矩阵. 对于原模型的 $A$, 这个结论就不对了, 因为它根本不可配称. 此时, 我们改称 $\widehat{A}$ 为 $A$ (关于个 $\mu$ 的)**拟对称化**. 当然, 这样拟对称化比较粗糙, 我们再对 $(\mu_k=2^{-k})$ 作些优化处理, 便得出上例中的拟配称测度 $\mu_k=2^{-k}\times 10^{-2k/39}$. 采用这个拟配称测度, 使用 Mathematica, 可算到 1700 阶矩阵, 远大于开头所说、使用缺省方法所能得到的 39 阶. 输出结果如下表

| $N$ | 523 | 800 | 1000 | 1500 | 1700 |
|---|---|---|---|---|---|
| $z^{(1)}$ | 8.96625 | 8.97632 | 8.98126 | 8.98993 | 8.99111 |
| | 8.99793 | 8.99911 | 8.99943 | 8.99975 | 8.9998 |
| $z^{(2)}$ | 8.99734 | 8.99885 | 8.99926 | 8.99967 | 8.99974 |
| | 8.99746 | 8.99891 | 8.9993 | 8.99969 | 8.99976 |
| $z^{(3)}$ | 8.99744 | 8.9989 | 8.9993 | 8.99969 | 8.99976 |
| | 8.99744 | 8.9989 | 8.9993 | 8.99969 | 8.99976 |

表中的 $z^{(k)}$ 表示第 $k$ 步迭代输出的最大特征值估计的下/上界.

对于大矩阵, 我们只输出特征值、而非特征向量的近似解. 其实, 画个图还是不难的. 对于上例中的可配称情形, 它乃是生灭矩阵的逆: $(-Q)^{-1}=A$, 此处 $Q\sim(2,-3,1)$, $c_N=2$. 因此, 可使用上节的算法来计算 $A$ 的特征对子. 但这里我们直接计算 $A$ 的对称化的最大特征向量的近似解 $(N=2043)$; 类似地, 我们计算不可配称情形 $A$ 的拟对称化的最大特征向量的近似解 $(N=1700)$, 两个计算结果如图 19 和 20 所示.

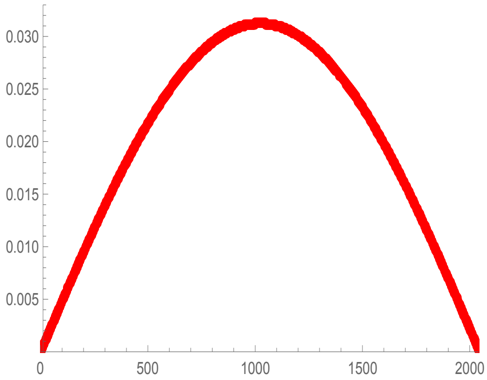



图 19 $(-Q)^{-1}=\left[\frac{2^{k\wedge j}-1}{2^j}\right]_{k,j=1}^N$

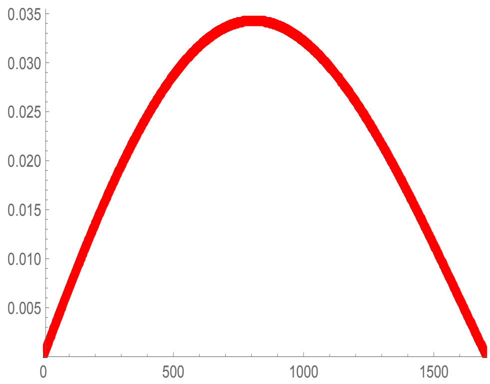



图 20 $(-Q)^{-1}=\left[\frac{2^{k\wedge j}-1}{2^j}+\mathbb{1}_{\{j\leqslant k\}}\right]_{k,j=1}^N$

简直难于置信, 两个输出几乎一样. 这充分说明: 我们的拟对称技术不但可行，而且高效.

为提供更多算例, 我们需要避免上例中的苦寻拟配称测度, 这就是我们要介绍的一种可配称性的验证算法.

**可配称性的计算验证** 假定 $a_{ij}\geqslant 0,\ i\neq j$.

- 求不变/调和测度 $\mu$. 先定义一个 $Q$ 矩阵:

$$Q=A-\mathrm{Diag}(A\mathbb{1})\Rightarrow Q\mathbb{1}=\mathbb{0},$$

此处 $\mathbb{1}$ 为元素恒等 1 的列向量而 $\mathrm{Diag}(u)$ 是以向量 $u$ 为对角线元素的对角矩阵, 然后由方程

$$\mu Q=0,\qquad \mu_0=1$$

解出所求的测度 $\mu$. 我们注意, 若 $A$ 不可约, 则此解唯一.

- 拟对称化 (用"拟"字, 因为此刻尚不知 $A$ 是否可配称):

$$\widehat{A}:=\mathrm{Diag}(\mu^{1/2})A\,\mathrm{Diag}(\mu^{-1/2}).$$

- 可配称性判准. $A$ 关于 $\mu$ 可配称当且仅当 $\widehat{A}$ 对称: $\widehat{A}^*=\widehat{A}$.

**随机测试** 下面是博士生李月爽完成的随机测试.

使用普通笔记本电脑和 MatLab, 从 $(0,10)$ 随机抽选矩阵 $A$ 的元素 $a_{ij}$. 共做了两次测试.

- $N=5000$. 用了 7 个小时, 算了 2,326 个例子, 平均用时 11 秒/个. 均一步迭代完成. 未出错.

- $N = 1000$. 用了 2 小时, 算了 36,448 个例子, 平均用时 0.2 秒/个. 均一步迭代完成. 未出错.

至此, 我们已说明了改进后的通用算法 [8] 的有效性. 余下只需再证明

**$A = (-Q)^{-1}$ 的正性** 这基于马尔可夫链的如下结果.

**引理 5.** 给定可数集 $E$ 上的 $Q$ 矩阵 ($Q\mathbb{1} \leqslant \mathbb{0}$), 它导出半群 $\{P_t\}_{t\geqslant 0}$. 则 $G := \int_0^\infty P(t)dt \in [0, \infty]$ (逐点, 但可以无穷). 如果 $Q$ 还是不可约的、$\{P_t\}_{t\geqslant 0}$ 满足两个柯氏方程并非常返, 则 $(-Q)^{-1} = G$ 为有限正矩阵[对已发文略有修改].

证明 使用弱预解算子 $R(\lambda)$ 与其半群之间的关系式:

$$R(\lambda) = (\lambda I - Q)^{-1} = \int_0^\infty e^{-\lambda t} P_t \mathrm{d}t.$$

于此式中命 $\lambda \downarrow 0$ 得出 $G$ 的性质. 为证 $(-Q)^{-1} = G$, 使用两柯氏方程及非常返性: $\lim_{\lambda \downarrow 0} R(\lambda) = 0$. □

**感悟** 如同开头所说, 一路稀里糊涂流浪过来, 究竟有没有走错路? 带着这样的疑问, 我去复习《华罗庚科普著作选集》的第二部分的末文:"学习和研究数学的一些体会"(对中国科技大学研究生的讲话)("数学通报" 1979 年 1 期). 下面摘录几段华先生的看法.

- 研究要攻得进去，还要打得出来. 攻进去需要理论，真正深入到所搞专题的核心需要理论，这是人所共知的. 可是要打得出来，并不比钻进去容易. 世界上有不少数学家攻是攻进去了，但是进了死胡同就出不来了，这种情况往往使其局限在一个小问题里，而失去了整个时间. 这种研究也许可以自娱，而对科学的发展和社会主义的建设是不会有作用的.
- 鉴别一个学问家，要看广度和深度. 单是深，可成为不错的专家，但对整个科学的发展不足道. 单是广, 可欺外行, 难有实质性成就.
- 数学各个分支之间，数学与其它学科之间实际上没有不可逾越的鸿沟.

我已经不记得从哪位先哲那里听到"做学问需要有绅士风度", "不能随便去抢占别人的地盘". 我的做法是：除非有新思想, 能够打个洞, 就去做；那是帮忙而非占便宜. 否则不做. 要做到这一点, 必须要有自己的根据地.

还是像华先生所说, 要像水那样“漫”出去、而不是跳过去. 从一个山头跳到另一个山头, 如果跳不过去, 可能就摔死到山沟里.

当年学习华先生的讲话时, 对这部分教导未能留下多少记忆. 此次重读, 多少能够体会前辈以亲身经历所留下的万分宝贵的经验. 这里所讲的是个人经历了几十年后的一点心得体会, 对他人未必有用. 特别是对于初入道者, 首要的是要脚踏实地、步步深入地建立自己的根据地, 否则地基不稳, 往后的发展很可能就建在沙滩上, 经不起风浪.

**感恩之语** 在过去的几十年里, 每当出现新奇想法, 我就会觉得是“超水平”的发挥, 是有仙人相助. 所以, 我曾写过“感谢老师”(包括海内、外)的文章, 但至今还没有机会郑重地感谢一下北大的老师们. 所以请容许我利用这个机会, 讲几句感恩之语. 这里, 我依时间顺序列出北大的 12 位老师和两位相关的外国教授.

胡迪鹤、<br>
钱敏平、龚光鲁、钱敏、Martin L. Silverstein, 1979.<br>
Masatoshi Fukushima, Conference in 2014.<br>
陈家鼎、江泽培、<br>
陈大岳, 1990's, 讨论班, 重点项目, 1997–98 中、俄合作项目, 2002.<br>
张恭庆、姜伯驹、<br>
耿直、文兰、丁伟岳......

胡迪鹤老师是粉碎四人帮之后、受候振挺老师的委托我拜访的第一位. 大家知道, 他是许先生的弟子之一. 每位老师都有一段故事. 这里, 我只讲两段. 1979 的一天, 钱敏平等三位老师带着美国华盛顿大学的 Silverstein 教授到北师大, 让我向他报告我和候振挺老师关于可逆马尔可夫链的研究成果. 可能你们会骂我, 为什么不是我到北大来报告. 坦白讲, 我当时是在读研究生, 应当不是我安排的. 反过来讲, 这三位老师的为人为学的风范是不是很值得我们学习. 令我非常惊呀的是, 当年我就收到日本 Fukushima 第一本专著的预印中. 之前我根本不知道他. 我猜想是 Silverstein 教授把我介绍给他的. 在那个时代, 他们两人是国际上狄氏型理论研究的领头人. 几十年来, 我收到 Fukushima 的著作应当有 6 本. 2014 年, 我有幸应邀到日本参加庆贺他 80 大寿的国际会议, 并作邀请报告(见图 21). 所以, 对钱老师他们的栽培, 我是感激不尽的.

要讲的第二段是大岳的帮助. 在 1990 年代, 大概有 8 年时间, 他一直参加我们的讨论班. 他教会我们许多东西, 例如重整化技术, 接触过程在

临界点的行为等. 他参加我们好多个主要科研项目, 国家基金委的重点项目, 教育部的, 还有 1997-1998 我们和俄罗斯 Dobrushin 研究组的国际合作项目. 唯一中断的是 2001 年我们申请创新团队, 不让外校参加, 很可惜. 他现在又恢复与我们群体的李增沪他们合作重点项目. 总之, 我觉得北师大概率论群体的成长, 有大岳一份功劳, 不应忘记. 另外, 我这辈子流浪中经历过两次惊险. 其中的第二次是 2002 年在日本, 多亏大岳在身边, 让我免去一劫. 请允许我郑重地谢谢帮过我的这里的各位老师.

## Conference Schedule

August 25, 2014 Monday

**Location:** Room 3401, 4th floor of 3rd Bld., **Chair:** S. Aida

| Time | Speaker | Title |
|---|---|---|
| 08:30 - 09:40 | Registration (The registration will take place in front of the ROOM 3401) | |
| 09:40 - 09:50 | Opening remarks by Yutaka Maeda, the vice president of Kansai University | |
| 09:50 - 10:30 | Mu-Fa Chen | Progress on Hardy-type Inequalities |
| 10:30 - 10:50 | COFFEE BREAK | |

图 21 庆贺 M. Fukushima 教授 80 大寿国际会议的第一节程序

## 参考文献


[1] Chen, M.F. (2004). From Markov Chains to Nonequilibrium Particle Systems, $2^{\text{nd}}$ ed. World Sci, Singapore.

[2] Chen, M.F. (2005). Eigenvalues, Inequalities, and Ergodic Theory. Springer.

[3] Chen, M.F. (2016). *Efficient initials for computing the maximal eigenpair*. Front. Math. China 11(6), 1379–1418.

[4] 陈木法 (2017a). 最优搜索问题—从马航失联谈起. 數學傳播 41 卷 3 期, 13-25.

[5] Chen, M.F. (2017b) *Global algorithms for maximal eigenpair*. Front. Math. China 12(5), 1023–1043

[6] Chen, M.F. (2018) *Hermitizable, isospectral complex matrices or differential operators*. Front. Math. in China 13(6): 1267-1311.

[7] Chen, M.F., Li, Y.S. (2019a) *Development of powerful algorithm for maximal eigenpair*. Front Math. China 14(3): 493-519.

[8] Chen, M.F., Li, Y.S. (2019b) *Improved global algorithms for maximal eigenpair*. Preprint.

[9] 华罗庚 (1985). 计划经济大范围最优化的数学理论(XI). 科学通报 24, 1841–1844 (该文写于 1985 年 4 月 20 日, 他于当年 6 月 12 日仙逝, 编辑部于当年 7 月 25 日收到此稿).

**后记** 记得两年前在一次"数学文化"的会仪上, 笔者提议数学家应当学点" 生态学". 这门科学的核心是"物种共存". 如世界上那种物种最厉害, 比如说老虎, 那么大家都来养老虎, 这个世界会成何体统? 记得澳洲曾经因为袋鼠繁殖太多，他们通过法律，杀掉一批; 又如美国，据说某种亚洲鱼繁殖太凶, 他们搞了电击捕鱼. 在数学乃至物理的大家庭里, 本是一个统一体, 各分支学科互相依存, 没有贵贱之分. 其实, 早在 1900 年 Hilbert 的世纪报告中就非常强调数学的整体性, 他的 23 个问题中, 基本上是数学，但也包含物理. 1960 年代, 华先生在科大开课时, 倡导了一条龙教学方法，明确反对将数学的各部分割裂. 好像 1990 年代, 陈省身先生在有一次演讲中说, 数论也是应用数学, 比如 Fermat 大定理可视为代数几何在整数理论中的应用. 可见他也不赞成"纯数学"与"应用数学"的人为的分割. 想起日本的 K. Itô, 他对自己荣获首届应用数学的最高奖(高斯奖)深感意外，因为人们认为他所研究的随机分析属于理论数学. 至少当年他建立随机积分的基本公式时, 决不会想到半个世纪后会有那么多(特别是金融方面)的应用.

这些事实都说明数学、乃至部分物理的高度统一. 笔者并不知道, 在我们这块土地上，是否存在真正学科交叉的土壤? 能够容纳各种学科、各种学派的共存?

**致谢**: 笔者以此题应邀在以下单位报告过：山东大学数学学院"珠峰讲坛"(2018/12), 北京大学"许宝騄讲座" (2019/3) (视频已放到笔者主页), 中国科学院随机复杂结构与数据科学重点实验室学术报告 (2019/3), 上海交通大学 (2019/4), 宁夏大学数学统计学院 (2019/5), 北方民族大学数学与信息科学学院 (2019/5), 天元数学东北中心"天元名家系列讲座" (2019/7), 大连理工大学"大工讲坛" (2019/7), 第三届江苏师范大学概率统计青年学者会议 (2019/10), 天津大学"北洋数学讲堂" (2019/10), 南开大学"百年南开大讲坛" (2019/10)，中南大学数统院"数韵中南" (2019/11), 北京师大教育部重点实验室年会(2019/12). 笔者衷心感谢下述各位教授：彭实戈、陈增敬、陈大岳、任艳霞、马志明、董昭、严加安、韩东、杨叙、李星、陈夏、曹延昭、卢玉峰、雷逢春、柳振鑫、谢颖超、苗正科、刘伟、王凤雨、邵景海、王兆军、侯振挺、李俊平、焦勇、刘源远、李增沪、王凯顺、唐仲伟等的邀请和热情接待. 同时感谢以上各单位的资助.

# Interpretation of Cross-disciplinary Research

**Mu-Fa Chen**

(School of Math. Sci., Beijing Normal Univ., 100875;
Key Lab. Math. & Complex Sys., Ministry Edu., BNU;
Research Inst. Math. Sci., Jiangsu Normal Univ., 221116)

**Abstract**: This paper is based on "Pao-Lu Hsu's lecture" (2019/3/22) at Peking University and the subsequent expansion of his reports. It begins with some recollections benefited of the author from Professor Hsu, and ends with thanking to a group of professors at Peking University for their support and help over the past decades. The middle part is the theme of the talk. It gives first an overview of personal cross research. Then, from a challenge of computing, the author reports on the study looking for a larger class of complex matrices which have real spectrum. This was done mainly in the last year. It involves the fields of computation, probability, statistical mechanics and quantum mechanics Next, the paper introduces the latest development of algorithms, which is another illustration of the intersection between probability theory and computational mathematics. As the end, it also outlines the understanding of the cross study.

**Keywords**: Cross study; probability theory; statistical physics; quantum mechanics; Hermitizable matrix; maximal eigenpair; algorithm.

**2010 Matheamtics Subject Classification**: 60Gxx; 81xx; 35Pxx; 82Bxx.