从对称矩阵谈起

陈木法

(北京师范大学)

四川大学数学学院

2018 年 7 月 13 日 [redacted]

0. 问题

哪种矩阵的特征值都是实数?

实对称矩阵.

更大的类: 相似阵. 存在实非异 H:

$B = HAH^{-1}$. B: 实对角阵.

接地气? H =?

0. 问题

哪种矩阵的特征值都是实数?

实对称矩阵.

更大的类: 相似阵. 存在实非异 H:

$B = HAH^{-1}$. B: 实对角阵.

接地气? H =?

注:

$$Ag = \lambda g \Rightarrow [HAH^{-1}](Hg) = \lambda(Hg)$$
$$(A + mI)g = \lambda g \Rightarrow Ag = (\lambda - m)g$$

例．生灭 Q 矩阵

三对角矩阵：$\boldsymbol{E}=\{\boldsymbol{k}\in\mathbb{Z}_+\colon \boldsymbol{0}\leqslant \boldsymbol{k}<\boldsymbol{N}+\boldsymbol{1}\}$

$$\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix} -c_0 & b_0 & & & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & & \\ & a_2 & -c_2 & b_2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & a_N & -c_N \end{pmatrix},$$

此处 $a_k>0,\ b_k>0,\ c_k=a_k+b_k,\ c_N\geqslant a_N.$

例. 生灭 Q 矩阵

最重要的一类随机过程—生灭过程. 有极广泛应用, 理论研究起点, 根据地最长文章[137 页; 2010]. 含 (c_k): 2014. 综述报告.

C.(2016). "Unified speed estimation of various stabilities", Chin. Appl. Prob. Statis. 2016, 32(1): 1–22 $\boxed{1\leqslant \delta_1'^{-1}/\delta_1^{-1}\leqslant 2}$

$$(4\delta)^{-1}\leqslant \delta_n^{-1}\uparrow\leqslant\lambda_0(-Q)\leqslant\downarrow\delta_n'^{-1}\leqslant\delta^{-1}, \forall n$$

生灭 Q 矩阵可配称[与对角元无关]

Q 对称: $a_{k+1} = b_k$.

a_{k+1} 与 b_k 可不同, 但同为正.

定义 (μ_k): $\mu_0 = 1$,

$$\mu_k = \mu_{k-1}\frac{b_{k-1}}{a_k}.$$

则 $\mu_k a_k = \mu_{k-1} b_{k-1}$. 改记 $Q = (q_{ij})$

则 $\mu_k q_{k,k-1} = \mu_{k-1} q_{k-1,k}$. 等价地

$\mu_i q_{ij} = \mu_j q_{ji}$. $m_{ij} := \mu_i q_{ij}$,

Q 非对称但 (m_{ij}) 对称.

1. 概率. 可配称 Q 矩阵. $E=\{i,j,\ldots\}$

Q 矩阵: 非对角线元素非负, 行和 $\leqslant 0$

$\boxed{\exists(\mu_k>0)\text{ 使得 } \mu_i q_{ij}=\mu_j q_{ji},\ i,j\in E.}$

矩阵形式: $\text{Diag}(\mu)Q = Q^*\text{Diag}(\mu)$

$\hat{Q} := \text{Diag}(\mu)^{1/2}Q\,\text{Diag}(\mu)^{-1/2}$,

对称$\Rightarrow$实谱 $\boxed{\text{零同性}}$:

Q 与 $\hat{Q}$ 同谱 $\Rightarrow$实谱 $\boxed{q_{ij}>0\Leftrightarrow q_{ji}>0}$

$\mu_k\equiv 1 \Rightarrow$ 可配称 $=$ 对称.

$\mu_k\not\equiv 1 \Rightarrow$ 可配称 $\supset_{\text{部分}}$ 对称.

有势场. 路 $i_0 \to i_1 \to \cdots \to i_n$, $q_{i_k, i_{k+1}} > 0$

$$\mu_{i_0} \frac{q_{i_0 i_1}}{q_{i_1 i_0}} = \mu_{i_1}$$

$\boxed{\text{Schrödinger}^{1931}.\ \text{学、做}}$

$$\mu_{i_0} \frac{q_{i_0 i_1}}{q_{i_1 i_0}} \cdot \frac{q_{i_1 i_2}}{q_{i_2 i_1}} = \mu_{i_1} \frac{q_{i_1 i_2}}{q_{i_2 i_1}} = \mu_{i_2}$$

$$\mu_{i_0} \frac{q_{i_0 i_1}}{q_{i_1 i_0}} \frac{q_{i_1 i_2}}{q_{i_2 i_1}} \cdots \frac{q_{i_{n-1} i_n}}{q_{i_n i_{n-1}}} = \mu_{i_n} \boxed{i_n = i_0?}$$

Kolmogorov 圈形定理 (1936): 对每一闭路 $i_0 \to i_1 \to \cdots \to i_{n-1} \to i_n = i_0$,

$$q_{i_0 i_1} q_{i_1 i_2} \cdots q_{i_{n-1} i_0} = q_{i_0 i_{n-1}} q_{i_{n-1} i_{n-2}} \cdots q_{i_1 i_0}$$

有势场

$$\sum_{k=0}^{n-1}\log\frac{q_{i_k i_{k+1}}}{q_{i_{k+1} i_k}}=\log\frac{\mu_{i_n}}{\mu_{i_0}}=\log\mu_{i_n}-\log\mu_{i_0}$$

路 $i_0 \to i_1 \to \cdots \to i_n$. 参考点$\mu_{i_0}=1$

沿 $i_k \to i_{k+1}$ 所做的功:

$$w_{i_k i_{k+1}} = \log\frac{q_{i_k i_{k+1}}}{q_{i_{k+1} i_k}}$$

既约分数

在 i_k 处的势(能): $V_{i_k} = \log\mu_{i_k}$.

$$\sum_{k=0}^{n-1} w_{i_k i_{k+1}} = V_{i_n} - V_{i_0}.$$

有势场

上式左方: 场沿路

$$i_0 \to i_1 \to \cdots \to i_n \text{ 所做的功.}$$

右方: 在 i_n 处和 i_0 处的势差.

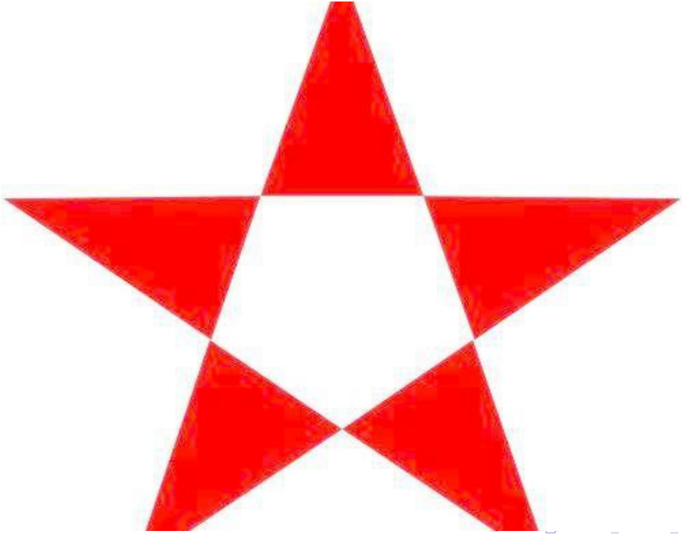
路径无关性 $\boxed{i_n = i_0}$

$\Leftrightarrow$ 沿每一闭路所做的功为零

$\Rightarrow$ 计算(μ_k).

“每一闭路”的可行性？

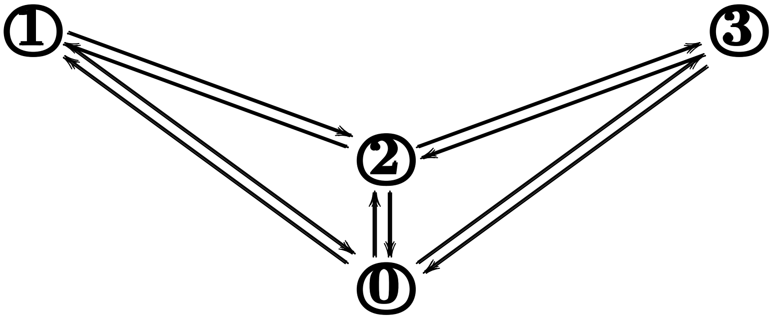
以五角星为例，闭路可能有很多.



Theorem (侯振挺与陈(1979))

一个场成为势场(等价地，相应的 Q 矩阵可配称)的充要条件是它满足零同性，而且沿每一闭路(等价地，非往返最小闭路)所做的功为零．此时配称测度 (μ_k) 可用势函数表出．

"马尔科夫过程与场论"，收入钱敏、侯振挺等 (1979):《可逆马尔科夫过程》．古典分析场论+图上作业法 $\boxed{\text{遗憾}}$



$$w(0\to 3\to 2\to 0)=0,\ \ w(0\to 2\to 1\to 0)=0,$$
$$w(0\to 3\to 2\to 0\to 2\to 1\to 0)=0,$$
$$w(0\to 3\to 2\to 1\to 0)=0.$$

往返路 $w(2\to 0\to 2)=\log\dfrac{a_{20}}{a_{02}}+\log\dfrac{a_{02}}{a_{20}}=0.$

2 统计物理

矩阵 $Q=(q_{ij})$: $i \to j$ 的速率 q_{ij}. 图结构. 三对角阵: $k-1 \xleftarrow[a_k]{} k \xrightarrow{b_k} k+1$

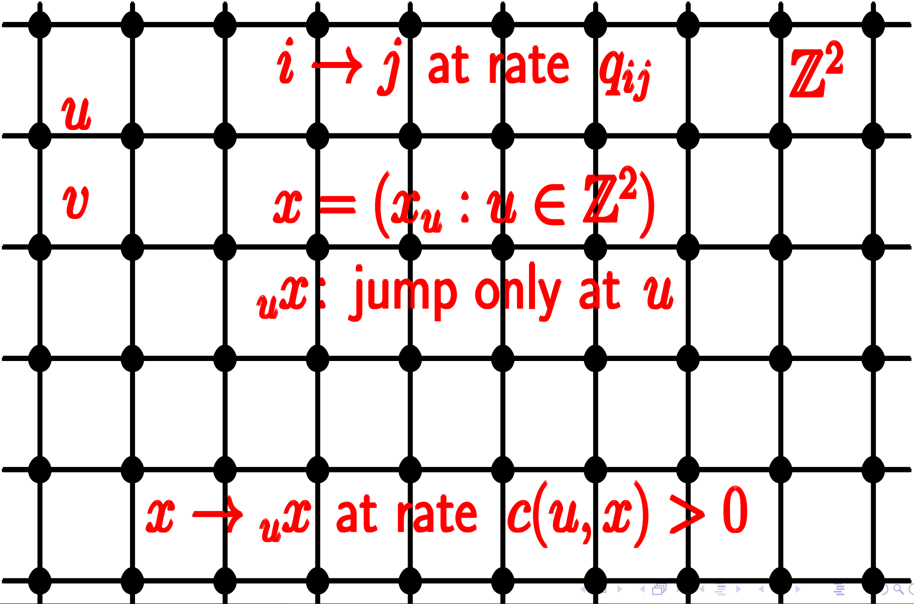
2 统计物理

矩阵 $Q=(q_{ij})$: $i \to j$ 的速率 q_{ij}. 图结构. 三对角阵: $k-1 \xleftarrow[a_k]{} k \xrightarrow{b_k} k+1$

40 多年前, 部分数学家离开公理化路线, 回归自然. 开始探索统计力学的数学基础, 形成随机场的概率与统计物理的交叉学科. 平衡态与非平衡态.

严士健, 陈& 丁万鼎 (1982a, b), 唐守正(1982), 李世取(1983), 曾文曲等

自旋空间 $\{-1,+1\}$, $\quad E=\{-1,+1\}^{\mathbb{Z}^d}$



自旋系统的四边形条件

$$
\begin{tikzcd}
\boxed{{}_v x} \arrow[rr, shift left, "c(u,{}_v x)"] \arrow[d, shift left, "c(v,{}_v x)"] & & \boxed{{}_{vu} x} \arrow[ll, shift left, "c(u,{}_{vu} x)"] \arrow[d, shift left, "c(v,{}_{vu} x)"] \\
\boxed{x} \arrow[u, shift left, "c(v,x)"] \arrow[rr, shift left, "c(u,x)"] & & \boxed{{}_u x} \arrow[ll, shift left, "c(u,{}_u x)"] \arrow[u, shift left, "c(v,{}_u x)"]
\end{tikzcd}
$$

1982→1987, H. Rost. 1'st. RD 过程

Theorem (陈 (2004); 定理 11.2 (1))

以有限集 S 代替 $\mathbb{Z}^{\boldsymbol{d}}$. 则此自旋系统属平衡态当且仅当下述四边形条件成立

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{c}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{x})\boldsymbol{c}(\boldsymbol{v},{}_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{x})\boldsymbol{c}(\boldsymbol{u},{}_{\boldsymbol{uv}}\boldsymbol{x}))\boldsymbol{c}(\boldsymbol{v},{}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x})\\ &=\boldsymbol{c}(\boldsymbol{v},\boldsymbol{x})\boldsymbol{c}(\boldsymbol{u},{}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x})\boldsymbol{c}(\boldsymbol{v},{}_{\boldsymbol{vu}}\boldsymbol{x}))\boldsymbol{c}(\boldsymbol{u},{}_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{x}),\\ &\qquad \boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in\boldsymbol{S},\qquad \boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{u}}:\boldsymbol{u}\in\boldsymbol{S}).\end{aligned}$$

结论对于 $\mathbb{Z}^d$ 也对, 此时闭路有无穷多

著名的 Ising 模型. $\{-1,+1\}^{\mathbb{Z}^d}$

$$c(u,x)=\exp\left[-\beta\sum_{v:|u-v|=1}x_u x_v\right],\quad \beta\geqslant 0.$$

当 $d=2$ 时, 我们有 $\boxed{\beta_c^{(2)}\approx 0.44}$

$$|\mathscr{I}|=1,\ \text{若}\beta<\frac{1}{2}\log\left(1+\sqrt{2}\right)=:\beta_c^{(2)}$$

$$|\mathscr{I}|>1,\ \text{若}\beta>\frac{1}{2}\log\left(1+\sqrt{2}\right).$$

当 $d\geqslant 3$ 时, $\beta_c^{(d)}=?$

非平衡统计物理. 反应扩散过程[陈1985]

非局部紧空间 $\mathbb{Z}_+^{\mathbb{Z}^d}$. 16 种典型模型.

较系统的理论.

C. “From Markov Chains to Nonequilibrium Particle Systems”, $\mathbf{1}^{\text{st}}$ 1992; $\mathbf{2}^{\text{nd}}$ 2004. World Sci, Singapore

场论⇒区分平衡态与非平衡态模型

探索非平衡态统计物理的数学基础
发展或开发出新的数学工具

非对角线非负的实方阵→复方阵

(实)对称 (symmetric) $\Rightarrow$ 实谱,

复对称阵谱不必实的, 如

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda = \pm i.$$

(实)对称⟶Hermite: $a_{ij} = \bar{a}_{ji} \Rightarrow$ 实谱. 如

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda = \pm 1.$$

3 复可配称矩阵. 意义：代数，量子力学

(实)可配称 (symmetrizable),

$\exists(\mu_k > 0)$: $\mu_i a_{ij} = \mu_j a_{ji}, \quad i, j \in E$

复可配称 (Hermitizable) $\boxed{[a_{ii}\ \text{为实}]}$

$\exists(\mu_k > 0)$: $\mu_i a_{ij} = \mu_j \bar{a}_{ji}, \quad i, j \in E$

矩阵 $A = (a_{ij})$ 复可配称的必要条件:

- 零同性: 对于任意的 i, j,

  $a_{ij} = 0 \Leftrightarrow a_{ji} = 0$.
- 正比值: 如 $a_{ji} \neq 0$, 则$a_{ij}/\bar{a}_{ji} > 0$.

3 复可配称矩阵(Complex symmetrizable)

Theorem (陈(2018))

复矩阵 $A=(a_{ij})$ 复可配称的充要条件是下述两条件同时成立.

- 对于任意的 i,j, 或者 a_{ij} 和 a_{ji} 同时为零, 或者 $a_{ij}a_{ji}>0$.
- 它所导出的场是有势场(即沿任一闭路(最小闭路) 所做的功为零).

$$w(2\to 0\to 2)=\log\frac{a_{20}}{\bar{a}_{02}}+\log\frac{a_{02}}{\bar{a}_{20}}=0.$$

三对角复矩阵: $A \sim (a_k, -c_k, b_k)$

Theorem

三对角复矩阵 $A \sim (a_k, -c_k, b_k)$ 复可配称的充要条件是下述两条件同时成立.

- (c_k) 为实的.
- 或 a_{i+1} 和 b_i 同时为零, 或 $a_{i+1}b_i > 0$.

注 a_{i+1} 和 b_i 同时为零, 则此矩阵可分块处理. 故常省略此条件.
$a_{i+1}b_i > 0 \Rightarrow \frac{b_i}{\bar{a}_{i+1}} > 0$. 如 $\bar{a}_{i+1} \neq 0$, 反隐含也对

复可配称矩阵有实谱

复可配称: $\exists(\mu_k)$,使得$\boldsymbol{\mu_i a_{ij} = \mu_j \bar{a}_{ji}}$ $\forall \boldsymbol{i, j}$.

$\mathrm{Diag}(\boldsymbol{\mu})\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^H \mathrm{Diag}(\boldsymbol{\mu})$, $\boldsymbol{A}^H := \bar{\boldsymbol{A}}^*$.

$\boldsymbol{A} = \mathrm{Diag}(\boldsymbol{\mu})^{-1} \boldsymbol{A}^H \mathrm{Diag}(\boldsymbol{\mu})$.

$\boldsymbol{A}$ 等谱于 $\boldsymbol{A}^H$, 后者等谱于 $\bar{\boldsymbol{A}}$

(因为 $\boldsymbol{A}^*$ 等谱于 $\boldsymbol{A}$)

$\Longrightarrow$ $\boldsymbol{A}$ 有实谱

复可配称 $\supset$ 实可配称 $\supset$ 对称

复可配称矩阵之例

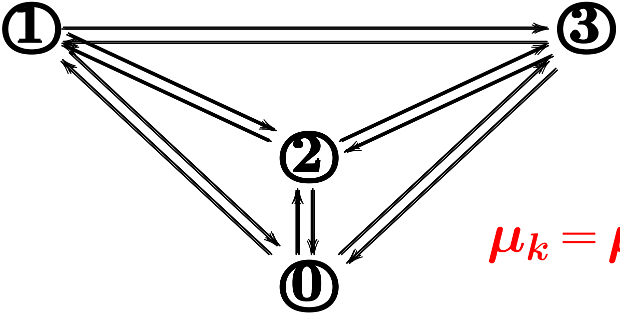
$$A=\begin{bmatrix} -6 & \frac{8-6\,i}{5} & \frac{8+14\,i}{13} & \frac{18+4\,i}{17} \\ 3+\frac{9\,i}{4} & -\frac{55}{4} & \frac{-5+40\,i}{13} & \frac{30+35\,i}{17} \\ \frac{12-21\,i}{5} & \frac{-4-32\,i}{5} & -13 & \frac{60-66\,i}{17} \\ \frac{63-14\,i}{10} & \frac{84-98\,i}{15} & \frac{70+77\,i}{13} & -16 \end{bmatrix}$$

复可配称, 从而有实特征值:

$$-21.3806,\ -17.7581,\ -9.44576,\ -.165558.$$

配称测度 μ: $\mu_0=1,\ \mu_1=\frac{8}{15},\ \mu_2=\frac{10}{39},\ \mu_3=\frac{20}{119}.$

复可配称矩阵之例



$$r_{ij} = \frac{a_{ij}}{\bar{a}_{ji}},$$

$$\mu_0 = 1,$$

$$\mu_k = \mu_{k-1} r_{k-1,k}$$

$$r_{01} = \frac{8}{15}, \quad r_{12} = \frac{25}{52}, \quad r_{20} = \frac{39}{10},$$

$$r_{03} = \frac{20}{119}, \quad r_{32} = \frac{119}{78}, \quad r_{31} = \frac{238}{75}.$$

复可配称三对角矩阵的等谱变换

Theorem (Algorithm)

假定 $c_k \geqslant |a_k|+|b_k|$,并设 $u_k = a_k b_{k-1}$ 及$\tilde{c}_k = c_k$,$0 \leqslant k < N+1$. 定义 $\tilde{b}_0 = c_0 > 0$,

$$\begin{cases} \tilde{b}_k = c_k - u_k \big/ \tilde{b}_{k-1},\quad \tilde{a}_k = c_k - \tilde{b}_k, \\ \qquad 1 \leqslant k < N \\ \tilde{a}_N = u_N \big/ \tilde{b}_{N-1} \quad \text{如 } N < \infty. \end{cases}$$

则 $\tilde{a}_k,\ \tilde{b}_k > 0$; $c_N \geqslant |a_N|$ 如 $N < \infty$.

$A \sim (a_k, -c_k, b_k)$等谱于$\tilde{A} \sim (\tilde{a}_k, -\tilde{c}_k, \tilde{b}_k)$.

$\tilde{b}_k =$ 显式 $u_k = a_k b_{k-1} = |a_k b_{k-1}|$

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

来自不易 2014–2018/2/1-2

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

4 最大特征对子的计算

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

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

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

$$g_0(j) = 2^{-(j+1)/2}\sin\frac{(j+1)\pi}{N+2}, \quad j \in E.$$

算法

给定初值 $(v_0, z_0) \approx (g_0, \lambda_0(-Q))$.
当 $k \geqslant 1$ 时, 已有 (v_{k-1}, z_{k-1}).
命 w_k 为下述线性方程的解

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

再命 $v_k = w_k/\|w_k\|, \quad z_k = {\delta_k}^{-1}$

则 $(v_k, z_k) \to \big(\tilde{g}_0, \lambda_0(-Q)\big)$, $k \to \infty$.

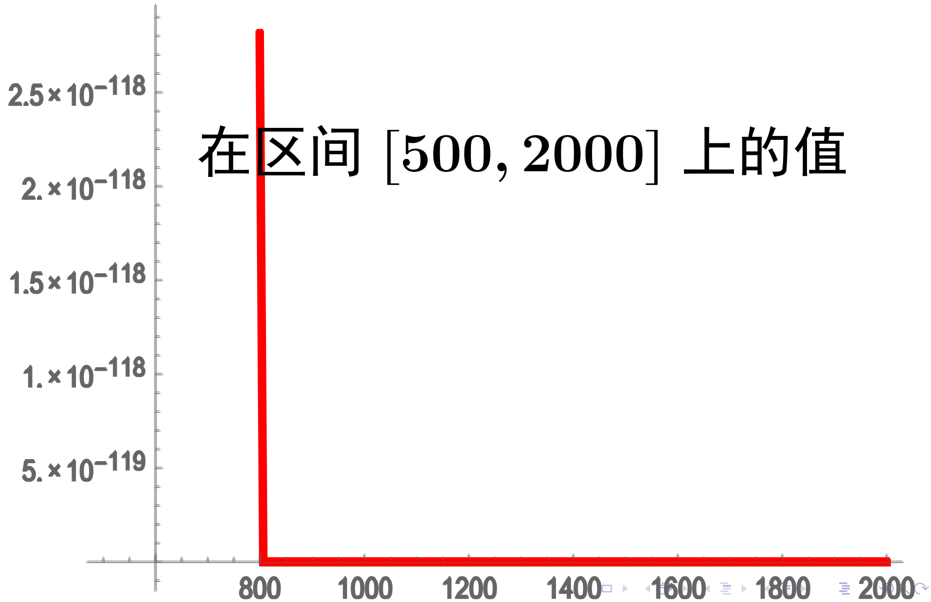
等谱变换　　第 $k\,(< N)$ 行和为零

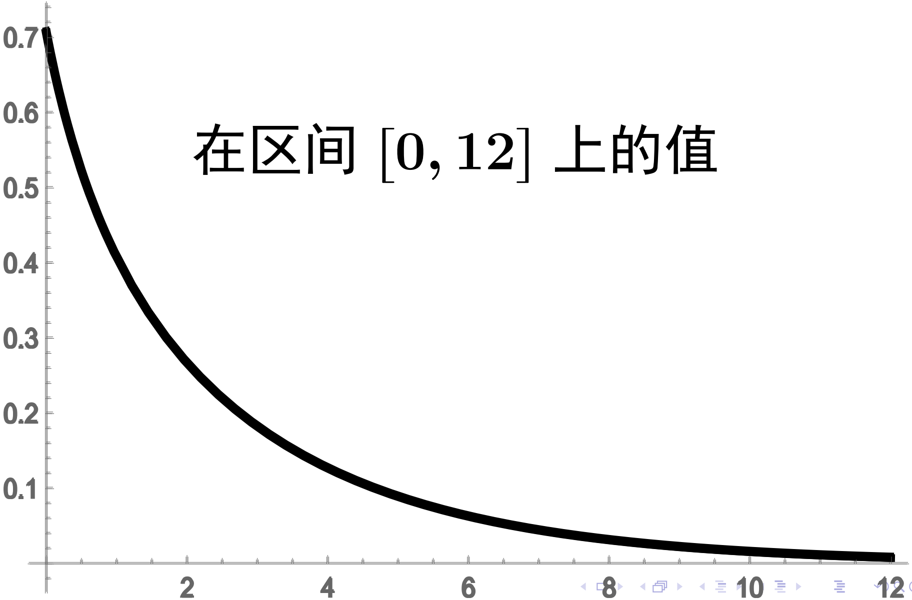
$$E = \{k \in \mathbb{Z}_+ : 0 \leqslant k < N+1\}.$$

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} -3 & \frac{2^2-1}{2-1} & & & 0 \\ \frac{2^2-2}{2^2-1} & -3 & \frac{2^3-1}{2^2-1} & & \\ & \frac{2^3-2}{2^3-1} & -3 & \frac{2^4-1}{2^3-1} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \frac{2^{N+1}-2}{2^{N+1}-1} & -3 \end{pmatrix},$$

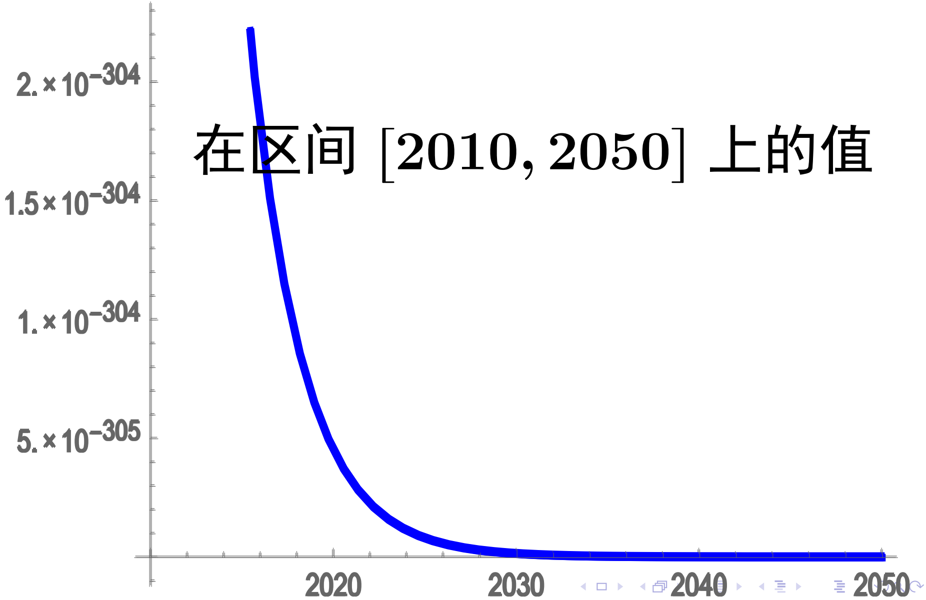
$$\lambda_0 + 3 = 2\sqrt{2}\cos\frac{2\pi}{N+2} \approx 2.82843, \quad N \geqslant 2562.$$

使用 $\tilde{Q}$ 计算的初向量　下降极快




0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
2
4
6
8
10
12
在区间 [0, 12] 上的值

使用 $\tilde{Q}$ 计算的初向量　下降极快 0.7 ↓



$\widetilde{Q}$ 的对称化 $\widehat{Q}$

$$\widehat{Q} = \begin{pmatrix} -3 & \sqrt{2} & & & 0 \\ \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{2} & -3 \end{pmatrix},$$

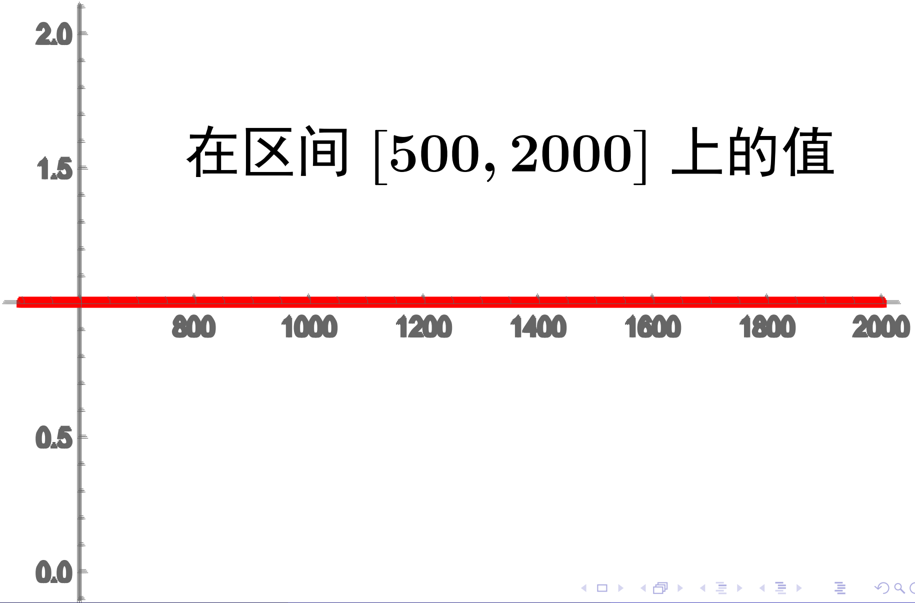
每一行都非保守, 功夫全废. 等谱变换⇒非对称. 陷入循环.

$\widetilde{Q}$ 的对称化 $\widehat{Q}$

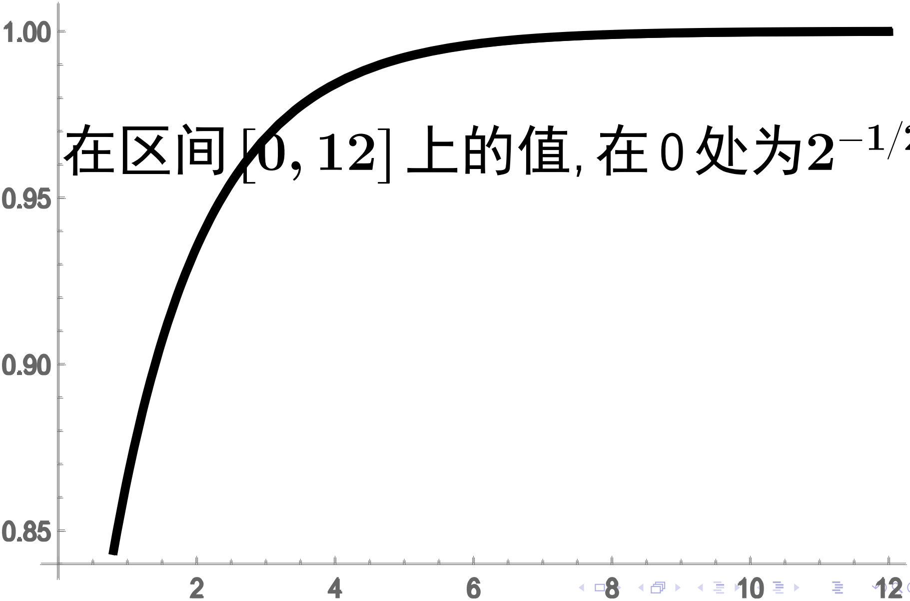
$$\widehat{Q} = \begin{pmatrix} -3 & \sqrt{2} & & & 0 \\ \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & -3 & \sqrt{2} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \sqrt{2} & -3 \end{pmatrix},$$

每一行都非保守，功夫全废. 等谱变换⇒非对称. 陷入循环. 2018/3/13

使用 $\hat{Q}$ 计算的初向量, 几乎稳定在 1 处

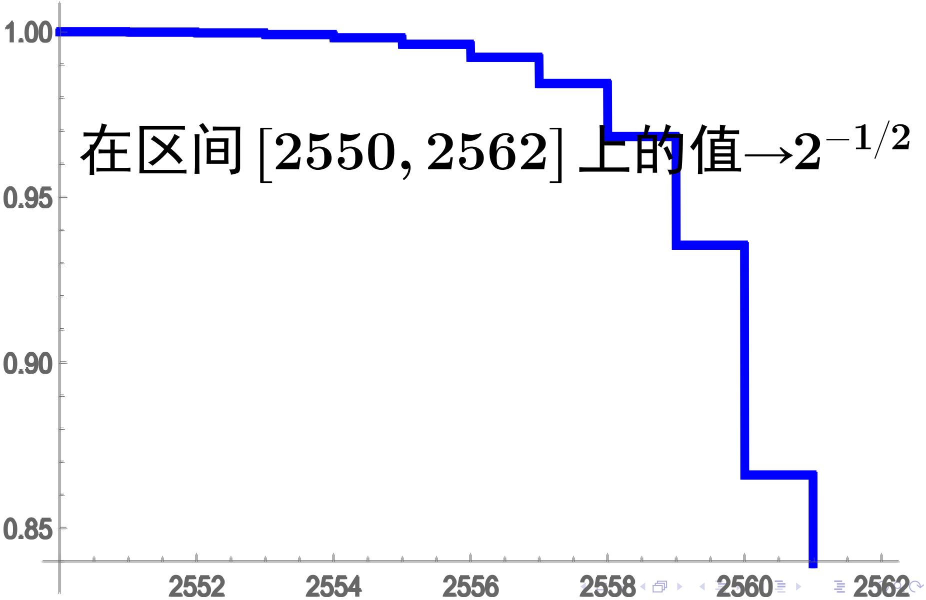


使用 $\hat{Q}$ 计算的初向量, 从 0.7 上升到 1



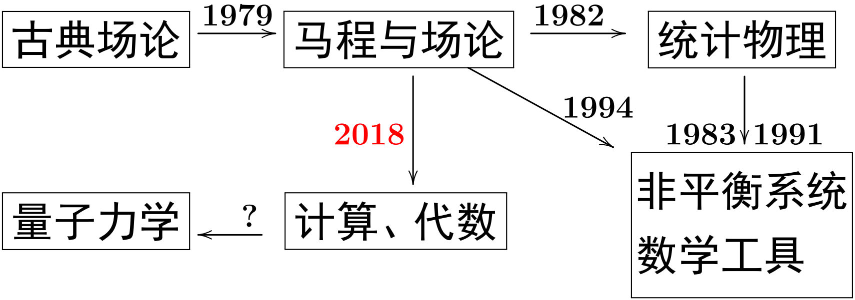
在区间 $[0, 12]$ 上的值, 在 0 处为 $2^{-1/2}$

使用 $\hat{Q}$ 计算的初向量，尾部下降到 0.7



在区间 $[2550, 2562]$ 上的值→$2^{-1/2}$

小结



C. (2005) “Eigenvalues, Inequalities, and Ergodic Theory”. Springer

本人主页中间的 4 本论文集

交叉：概率+统计物理、数学其它分支

- 非平衡数学基础：反应扩散过程较系统理论
- 相变数学工具：稳定性速度估计(4卷本)

基础：宏伟；随机：细腻；物理：直觉；分析：精巧；代数：高雅；计算：大气；应用：迷人

感悟 科研的 4 种境界，学科交叉渗透

华罗庚科普著作选集, 第二部分末文

- 研究要攻得进去，还要打得出来.
- 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.
- 学科之间实际上无不可逾越的鸿沟.
- 做学问需要有绅士风度，新思想，打个洞. 根据地，"漫"而非跳.

For Further Reading I

- 陈. 一维算子两个谱问题的判别准则. 中国科学: 数学 (庆贺侯振挺教授 80 华诞专辑), 2015, 45: 429–438
- 陈. 源自统计物理的数学论题(一). 中国科学: 数学 (庆贺严士键教授 90 华诞专辑), 2019

For Further Reading II

- 陈. 源自统计物理的数学论题(二). 中国科学: 数学 (庆贺王梓坤教授 90 华诞专辑), 2019

科学传承

http//math0.bnu.edu.cn/˜chenmf
科普作品 22, 演讲视频 9 (55G)

Ludyk, G. (2018).
Quantum Mechanics in Matrix Form.
Undergraduate Lecture Notes in Physics,
Springer

Ludyk, G. (2018).
Quantum Mechanics in Matrix Form.
Undergraduate Lecture Notes in Physics,
Springer

The end!

Thank you, everybody!

谢谢大家!

47