数学研究及评论

Mathematical Research with Reviews

Issue 1 (2019) Art.6

Shao, Meiyue (邵美悦); da Jornada, Felipe H.; Yang, Chao (杨超); Deslippe, Jack; Louie, Steven G.

Structure preserving parallel algorithms for solving the Bethe-Salpeter eigenvalue problem

Linear Algebra Appl. 488 (2016), 148–167.

评论员： Professor Nescio (南开大学，天津)

收稿日期：2019年8月25日

这篇文章考虑形如

$$H = \begin{pmatrix} A & B \\ -\overline{B} & -\overline{A} \end{pmatrix}$$

的特征值与特征向量的计算问题, 其中A为n阶埃尔米特矩阵, B为n阶对称矩阵。文中把这个问题称作Bethe–Salpeter特征值问题。这个矩阵H可以写成

$$H = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & -I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}.$$

在实际问题中，所考虑的矩阵$\begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}$往往是埃尔米特正定的。物理学研究人员在考虑Bethe–Salpeter特征值问题的时候通常用矩阵$\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & -\overline{A} \end{pmatrix}$来代替$H$, 这种方法一般称作Tamm–Dancoff逼近。本文的一个理论结果表明在$\begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}$为正定的情况下，用Tamm–Dancoff逼近求出的特征根要比原矩阵H的特征根大。

如果方阵M的特征根全是实数，按从大到小排列，记$\lambda_j(M)$为M的第j个特征根。确切地说，作者证明了以下结果（文中定理4）

定理： 如果$\begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}$是$2n$阶埃尔米特正定矩阵，那么

$$\lambda_j(H) \le \lambda_j(A), \qquad j = 1, 2, \ldots, n.$$

原文的证明主要依赖下述事实（文中引理1）

引理： 假设M, N为n阶埃尔比特半正定矩阵，那么

$$\sqrt{\lambda_j(MN)} \le \lambda_j\left(\frac{M+N}{2}\right), \qquad j = 1, 2, \ldots, n.$$

这里我给出另一个证明，只用到几个常用的事实

1. 假设M, N为两个方阵，那么MN的特征根（集合）与NM的特征根相同；
2. 如果M为埃尔米特半正定矩阵，则存在M的唯一一个半正定平方根，记作$M^{\frac{1}{2}}$;
3. 假设M, N为两个n阶埃尔米特矩阵，如果$N - M$是半正定的(记作$M \le N$)，则$\lambda_j(M) \le \lambda_j(N)$, $j = 1, 2, \ldots, n$.

第三条称为外尔(Weyl)特征值单调性定理（参见[1, Corollary 4.3.12]). 下面是定理的证明：

很明显

$$M := \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & -I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}^{\frac{1}{2}} \le \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix}^{\frac{1}{2}} := N,$$

那么根据外尔特征值单调性定理得到$\lambda_j(M) \le \lambda_j(N)$, $j = 1, 2, \ldots, 2n$. 现在N的特征根等于$\begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ \overline{B} & \overline{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$的特征根，于是$\lambda_j(N) = \lambda_j(A)$, $j = 1, 2, \ldots, n$. 又$\lambda_j(M) = \lambda_j(H)$, $j = 1, 2, \ldots, 2n$. 定理得证。

References

[1] R. A. Horn, C. R. Johnson, Matrix Analysis, 2nd ed. Cambridge University Press, Cambridge, 2013.