

含参数高阶厄米矩阵求解本征值问题

华保盈 江少林

(北京工业大学应用物理系, 100022)

【摘要】 基于群论原理, 提出一种求解含参数高阶厄米矩阵本征值的有效方法. 该方法已用于 C_{60} 振动谱的计算, 并显示出优越性.

【关键词】 厄米矩阵, 含参数, 本征值

【中图分类号】 O411.1

0 引言

在物理学中经常遇到下述求解含参数高阶厄米矩阵的本征值问题:

设 F 是一个含参量 S_1, S_2, \dots, S_l 的高阶厄米矩阵, 它可以写成

$$F = \sum_{k=1}^l S_k F_k \quad (1)$$

其中 F_k 是常数厄米矩阵, 阶数为 n .

又设 $\{D(R)\}$ 是所有满足

$$D(R) F D^{-1}(R) = F \quad (2)$$

的 n 阶满秩幺正矩阵的集合, 并且 $\{D(R)\}$ 与某一已知有限群 $G = \{g(R)\}$ 同构.

如果已知 F 矩阵部分本征值 $f_\lambda (\lambda=1, 2, \dots, m, m > k, m \ll n)$ 以及对应于这些本征值的本征矢的对称性质—在一个物理问题中, 常常可以通过实验, 特别是光谱学实验得到.

现在问要选择怎样一组参数 S_1, S_2, \dots, S_l , 使 F 矩阵对角化后与已知的本征值拟合得最好并求出全部其它本征值^[1, 2].

如果不采用群论方法处理, 那么典型的方法是把 f_λ 逐一代入 F 的特征行列式, 得到 m 个方程:

$$|F_{ij} - \delta_{ij} f_\lambda| = 0 \quad (\lambda=1, 2, \dots, m)$$

因为 F_{ij} 是 S_1, S_2, \dots, S_l 的线性式, 所以每个方程都是 S_1, S_2, \dots, S_l 的 n 次幂的方程式. 对于这 m 个方程再用非线性的最小二乘法求出最佳的 S_1, S_2, \dots, S_l , 然后代回 F 矩阵, 求出全部本征值. 这样的计算量常常是非常大的.

可以用群论中的投影算符求出对称化基矢再通过相似变换使 F 矩阵分块对角化, 从而达到降价的目的, 但这种计算也是非常冗长的^[3].

本文在有限群论表示理论^[4]的基础上, 提出一种计算方法. 我们的工作表明, 在 F 矩

收稿日期: 1994-03-27.

北京工业大学科研基金资助课题.

阵阶数很高而又有较强对称性的情况下, 这种方法是非常有效的.

1 计算方法

1) 用群论中不可约表示分解公式:

$$m_{\alpha_i} = \frac{1}{g} \sum_R X^{(\alpha_i)^*}(R) X^{(D)}(R) \quad (4)$$

求出在 $\{D(R)\}$ 表示中各个不可约表示出现的次数 m_{α_i} , 其中 α_i 是不可约表示的标号, g 是群元的个数, $X^{(\alpha_i)}(R)$ 、 $X^{(D)}(R)$ 分别是对应于群元 R , 在不可约表示 α_i 中及可约表示 $\{D(R)\}$ 中的特征标.

2) 任给一组参数 S_1, S_2, \dots, S_l 的值, 用计算机算出 F 矩阵的本征值及正交归一化的本征矢. 群论理论指出, 对于同一本征值的本征矢, 可以构成群 G 的某个不可约表示的基矢. 为了使计算误差不影响本征矢的对称性质, 计算时要采用双精度运算.

3) 根据对应于同一本征值的本征矢的个数可以确定所属不可约表示的维数, 再根据该组本征矢在 $\{D(R)\}$ 作用下的变换性质, 可以确定各本征值所对应的本征矢分别属于群 G 的哪个不可约表示, 从而对计算机算出的全部本征矢, 用群 G 的不可表示进行分类. 现用 $\vec{A}_{\alpha_i}^j(k)$ 表示第 j 个 α_i 表示的第 k 个基矢, 其中 $j=1, 2, \dots, m_{\alpha_i}$, $k=1, 2, \dots, l_{\alpha_i}$, l_{α_i} 是 α_i 这个不可约表示的维数. 显然有

$$\sum_{\alpha_i} m_{\alpha_i} l_{\alpha_i} = n \quad (5)$$

4) 对于属于 α_i 不可约表示的 m_{α_i} 组本征矢, 要通过不同的 l_{α_i} 维幺正变换, 使之转变为同变基矢, 即令

$$\vec{A}_{\alpha_i, s}^j(r) = \sum_{k=1}^{l_{\alpha_i}} a_{r,k}^j \vec{A}_{\alpha_i}^j(k) \quad (r=1, 2, \dots, l_{\alpha_i}) \quad (6)$$

寻找合适的组合系数 $a_{r,k}^j$, 使 $D(R) \vec{A}_{\alpha_i, s}^j(r)$ 与 $\vec{A}_{\alpha_i, s}^j(r)$ 之间, 对于所有的 j 有相同的幺正变换矩阵, 式中下标 s 意指同变.

5) 对于 α_i 这个不可约表示, 计算

$$\begin{aligned} F_{\alpha_i}(jj') &= \vec{A}_{\alpha_i, s}^{j+}(1) F \vec{A}_{\alpha_i, s}^{j'-}(1) \\ &= \sum_{k=1}^{l_{\alpha_i}} S_k A_{\alpha_i}^{j+}(1) F_k \vec{A}_{\alpha_i, s}^{j'-}(1) \quad (j, j'=1, 2, \dots, m_{\alpha_i}) \end{aligned} \quad (7)$$

从而得到一个与不可约表示 α_i 相联系的 m_{α_i} 阶的矩阵. 对于不同的 α_i 分别求出矩阵, 这样 F 矩阵的对角化问题就简化为 F_{α_i} 矩阵的对角化问题.

6) 把已经测得的 F 矩阵的本征值 f_λ 分别代入该本征值所属的不可约表示矩阵的特征行列式中去, 就得到 m 个方程:

$$|F_{\alpha_i}(jj') - \delta_{jj'} f_\lambda| = 0 \quad (\lambda=1, 2, \dots, m) \quad (8)$$

对于不同的不可约表示, 方程的幂次 m_{α_i} 不同. 由于 (8) 式比 (3) 式 S_1, S_2, \dots, S_l 的幂次已大大下降, 因此, 用最小二乘法来求最佳 S_1, S_2, \dots, S_l 就要容易许多.

特别是在拟合时, 首先可以利用公式

$$X(F_{\alpha_i}) = \sum_{j=1}^{m_{\alpha_i}} f_{\alpha_i}^j \quad (9)$$

其中 $X(F_{\alpha_i})$ 是矩阵 F_{α_i} 的特征标, $f_{\alpha_i}^j$ 是已经测得的 f_{λ} 按不可约表示划分后, 属于 α_i 这种不可约表示的第 j 个本征值. 显然只要对于群 G 的某个不可约表示 α_i 有 $m_{\alpha_i} \neq 0$, 就有几个方程.

(9) 式是 $S_k (k=1, 2, \dots, l)$ 的线性方程. 这样就得到了一个线性方程组. 如果此线性方程组中方程的个数比参数的数目要大, 那么对此方程组用线性最小二乘法就可以定出 S_1, S_2, \dots, S_l 的最佳值. 如果方程数比参数的数目少, 或是希望拟合有更高的精度, 那么除了 (9) 式外, 还要结合 (8) 式来进行拟合.

上述方法已成功地用于 C_{60} 分子振动谱的计算. 把一个含有 8 个参数的 180 阶矩阵的本征值问题, 比较容易地转化为求解一个 8 阶、一个 4 阶、一个 2 阶这 3 个矩阵的本征值问题, 从而使计算大大简化.

参 考 文 献

- 1 Feldman J L, Brouthton J Q, Boyer L L, et al. Intramolecular-force-constant model for C_{60} . Phys Rev, 1992, B45(19): 12731 ~ 12736
- 2 Jishi R A, Mirie R M, Dresselhaus M S. Force-constant model for the vibrational modes in C_{60} . Phys Rev, 1992, B45(23): 13685 ~ 13689
Adams G B, Page J B, Sankey O F, et al. First-principles quantum-molecular-dynamics study of C_{60} . Phys Rev, 1991, B44(8): 4052 ~ 4055
- 4 Elliott J P. Symmetry in Physics, Macmillan Press LTD, 1979

Eigenvalue Problem of a High Rank Hermitian Matrix Containing Parameters

Hua Baoying Jiang Shaolin

(Department of Applied Physics, Beijing Polytechnic University, 100022)

【Abstract】 An effective method, based on group theory, is proposed to solve the eigenvalue problem of a high rank Hermitian matrix containing several parameters. This method has been used in the calculation of the vibrational spectra of C_{60} , which shows superiority to others methods.

【Key words】 hermitian matrix, containing parameters, eigenvalue