Dynamical PT for Eigenvalue Problems

M. Kenmoe et al. arXiv:2002.12872

April 2020

Table of Contents

固有値・固有ベクトル問題

$$M\boldsymbol{z}_n = \varepsilon_n \boldsymbol{z}_n, \tag{1}$$
$$M = D + \lambda\Delta, \quad D = \mathrm{diag}(\epsilon_1, \cdots, \epsilon_N), \tag{2}$$
$$\boldsymbol{z}_n = \sum_{m=1}^{N} z_n^m \boldsymbol{e}_m, \quad z_n^n = 1. \tag{3}$$

(1) の nth 成分 $(M\boldsymbol{z}_n)^n = \varepsilon_n z_n^n$, mth 成分 $(M\boldsymbol{z}_n)^m = \varepsilon_n z_n^m$,
固有値 ε_n を消去して

$$(M\boldsymbol{z}_n)^m z_n^n = (M\boldsymbol{z}_n)^n z_n^m,$$
$$\left(z_n^m \epsilon_m + \lambda \textstyle\sum_l z_n^l \Delta_l^m\right) z_n^n = \left(z_n^n \epsilon_n + \lambda \textstyle\sum_l z_n^l \Delta_l^n\right) z_n^m, \qquad (\Delta\boldsymbol{z}_n)^m = \textstyle\sum_l z_n^l \Delta_l^m$$
$$(\epsilon_n - \epsilon_m) z_n^m = \lambda \left(\textstyle\sum_l z_n^l \Delta_l^m - z_n^m \textstyle\sum_l z_n^l \Delta_l^n\right), \quad m \neq n,$$

固定点としての固有ベクトル

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{z}_n &= F_n(\boldsymbol{z}_n), \\
F_n(\boldsymbol{z}_n)^m &= \delta_n^m + \lambda\,\Theta_n^m \Big(\sum_l z_n^l \Delta_l^m - z_n^m \sum_l z_n^l \Delta_l^n \Big),
\end{aligned} \tag{4}
$$

$$
\Theta_n^m := \begin{cases} (\epsilon_n - \epsilon_m)^{-1} & m \neq n \\ 0 & m = n \end{cases}
$$

N 次行列とその写像

$A := {}^t(\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \ldots, \boldsymbol{z}_N), \qquad A_{nm} = z_n^m$

$F(A) := {}^t(F_1(\boldsymbol{z}_1), F_2(\boldsymbol{z}_2), \ldots, F_N(\boldsymbol{z}_N)).$

F の固定点 $\Rightarrow$ N 個の固有ベクトル

新しい積の導入

$(A \star B)_{nm} := A_{nm} \cdot B_{nm}$ (Hadamard).
$(A \triangleright B)_{nm} := A_{nn} \cdot B_{nm}$ $A \triangleright B = (I \star A)B$.

F の表示

$$F(A) = I + \lambda \Theta \star (A\Delta - (A\Delta) \triangleright A). \tag{5}$$

k 次近似と離散力学系

$$A_D^{(k)} := F^{\circ k}(I) = \overbrace{F \circ F \circ \cdots \circ F}^{k}(I). \tag{6}$$

$$\varepsilon_n^{(k)} = (M\boldsymbol{z}_n^{(k)})^n = \epsilon_n + \lambda(A_D^{(k)}\Delta)_n^n. \tag{7}$$

列 $\{F^{\circ k}(I)\}$ の収束

スペクトル・ノルム $\|\cdot\|$

$\|M\| := \sqrt{\mu_{\mathsf{max}}(M^\dagger M)}$.

性質

- $\|A+B\| \le \|A\| + \|B\|$ (劣加法性/3 角不等式)
- $\|A \cdot B\| \le \|A\| \cdot \|B\|$ (劣乗法性)
- $\|A \star B\| \le \|A\| \cdot \|B\|$ (劣乗法性)
- $\|A \triangleright B\| \le \|A\| \cdot \|B\|$ (劣乗法性)

以下 $\|\Delta\| = 1$ として一般性を失わない.

$$\Delta \mapsto \frac{\Delta}{\|\Delta\|}, \quad \lambda \mapsto \|\Delta\| \cdot \lambda.$$

閉球

$\bar{B}_r(I) := \{A \mid \|A - I\| \leq r\}$.

$A \in \bar{B}_r(I) \Rightarrow \|A\| \leq \|A - I\| + \|I\| \leq 1 + r$.

$\|F(A) - I\| \leq \|\lambda\Theta\|(\|A\| + \|A\|^2) \leq \|\lambda\Theta\|(1 + r + (1 + r)^2)$.

$\therefore \ \|\lambda\Theta\|(1 + r)(2 + r) \leq r \ \Rightarrow \ F : \bar{B}_r(I) \to \bar{B}_r(I)$.

縮小写像

$F(A) - F(B) = \lambda\Theta \star (A' - B' - A' \triangleright A + B' \triangleright B) \quad A' = A\Delta$

$\Rightarrow \|F(A) - F(B)\| \leq \|\lambda\Theta\|(1 + \|A + B\|)\|A - B\|$.

特に $A, B \in \bar{B}_r(I)$

$\Rightarrow \|F(A) - F(B)\| \leq \|\lambda\Theta\|(1 + 2(1 + r))\|A - B\|$.

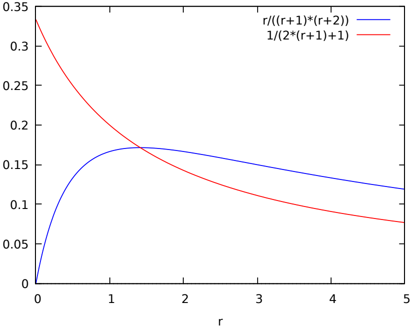
$\therefore$ **更に** $\|\lambda\Theta\|(3 + 2r) < 1$

$\Rightarrow F$ **は縮小写像**.

Banach の不動点定理

$F : \bar{B}_r(I) \to \bar{B}_r(I)$ が縮小写像のとき，$F^{\circ k}(I)$ は $\bar{B}_r(I)$ 内の唯一の固定点に収束する．

許される $\|\lambda\Theta\|$ の範囲



Convergence

$r = \sqrt{2} \Rightarrow |\lambda| < (3-2\sqrt{2})\|\Theta\|^{-1}$ のとき $A_D^{(k)} = F^{\circ k}(I)$ は収束して極限値が固有ベクトル．

Rayleigh-Schrödinger PT

$$(D+\lambda\Delta)\boldsymbol{z}_n = \varepsilon_n \boldsymbol{z}_n, \qquad 1 \le n \le N.$$

設定

$$\varepsilon_n = \sum_{l\ge 0} \lambda^l \varepsilon_n^{(l)}, \qquad \boldsymbol{z}_n = \sum_{l\ge 0} \lambda^l \boldsymbol{z}_n^{(l)},$$

$$\boldsymbol{z}_n^{(l)} = \sum_{m=1}^{N} (a^{(l)})_n^m \boldsymbol{e}_m, \qquad (a^{(0)})_n^m = \delta_n^m,\ (a^{(l>0)})_n^n = 0.$$

λ^l 係数: $(D-\epsilon_n)\boldsymbol{z}_n^{(l)} = \sum_{1\le s\le l} \varepsilon_n^{(s)} \boldsymbol{z}_n^{(l-s)} - \Delta \boldsymbol{z}_n^{(l-1)}.$

Recursion relations

$$(\epsilon_m - \epsilon_n)(a^{(l)})_n^m = \sum_{1\le s\le l} \varepsilon_n^{(s)} (a^{(l-s)})_n^m - (a^{(l-1)}\Delta)_n^m$$

$$\Rightarrow \varepsilon_n^{(l)} = (a^{(l-1)}\Delta)_n^n. \qquad (a^{(s)}\Delta)_n^m = \textstyle\sum_k (a^{(s)})_n^k \Delta_k^m$$

$$(\epsilon_m - \epsilon_n)(a^{(l)})^m_n = \sum_{s=1}^{l}(a^{(s-1)}\Delta)^n_n(a^{(l-s)})^m_n - (a^{(l-1)}\Delta)^m_n,$$

$$\therefore (a^{(l)})^m_n = \Theta^m_n\left((a^{(l-1)}\Delta)^m_n - \sum_{s=1}^{l}(a^{(s-1)}\Delta)^n_n(a^{(l-s)})^m_n\right).$$

行列表示

$$a^{(l)} = \Theta \star \left(a^{(l-1)}\Delta - \sum_{s=0}^{l-1}(a^{(s)}\Delta) \triangleright a^{(l-s-1)}\right). \tag{8}$$

$$A^{(k)}_{RS} := \sum_{l=0}^{k} \lambda^l a^{(l)}.$$

cf. $A^{(l)} = F(A^{(l-1)}) = I + \lambda\Theta \star (A^{(l-1)}\Delta - (A^{(l-1)}\Delta) \triangleright A^{(l-1)})$.

D と RS の関係

$$A_D^{(k)} = A_{RS}^{(k)} + \mathcal{O}(\lambda^{k+1}).$$

Proof

$A_D^{(0)} = A_{RS}^{(0)} = I.$

$A_D^{(k-1)} = A_{RS}^{(k-1)} + \mathcal{O}(\lambda^k) = \sum_{l=0}^{k-1} \lambda^l a^{(l)} + \mathcal{O}(\lambda^k)$ と仮定すると

$A_D^{(k)} = F(A_D^{(k-1)})$

$= I + \lambda \Theta \star \left(\sum_{l=0}^{k-1} \lambda^l a^{(l)} \Delta - (\sum_{l=0}^{k-1} \lambda^l a^{(l)} \Delta) \triangleright \sum_{m=0}^{k-1} \lambda^m a^{(m)} \right) + \mathcal{O}(\lambda^{k+1})$

$= I + \sum_{l=1}^{k} \lambda^l \Theta \star \left(a^{(l-1)} \Delta - \sum_{s=0}^{l-1} (a^{(s)} \Delta) \triangleright a^{(l-s-1)} \right) + \mathcal{O}(\lambda^{k+1})$

$= I + \sum_{l=1}^{k} \lambda^l a^{(l)} + \mathcal{O}(\lambda^{k+1})$

$= A_{RS}^{(k)} + \mathcal{O}(\lambda^{k+1}).$ $\square$

簡単な例

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\varepsilon_\pm = (1 \pm \sqrt{1+4\lambda^2})/2,$$

$${}^t\boldsymbol{z}_1 = (1, \varepsilon_-/\lambda), \quad {}^t\boldsymbol{z}_2 = (-\varepsilon_-/\lambda, 1) \sim (1, \varepsilon_+/\lambda),$$

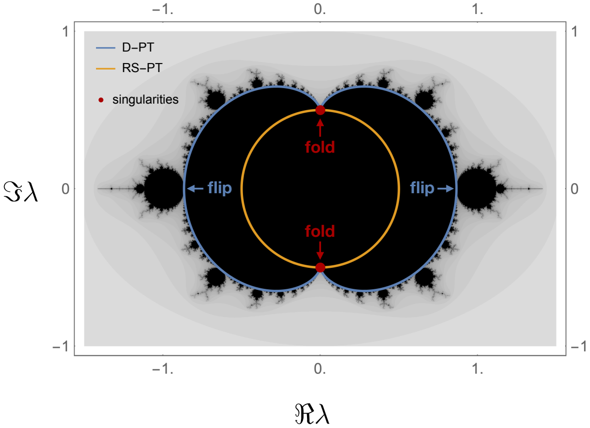
$\Rightarrow$ branch point sing. at $\lambda = \pm i/2$

$\Rightarrow$ **収束半径** $R = 1/2$ for RS PT.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & z_1^2 \\ z_2^1 & 1 \end{pmatrix}, \quad F(A) = \begin{pmatrix} 1 & \lambda((z_1^2)^2 - 1) \\ -\lambda((z_2^1)^2 - 1) & 1 \end{pmatrix},$$

$$\therefore \; A_D^{(k)} = F^{\circ k}(I) = \begin{pmatrix} 1 & f^{\circ k}(0) \\ -f^{\circ k}(0) & 1 \end{pmatrix}, \qquad f(z) := \lambda(z^2 - 1).$$

収束領域



−1.
0.
1.
1
0
−1
D−PT
RS−PT
singularities
fold
fold
flip
flip
$\Im\lambda$
$\Re\lambda$

固定点

$f(z) = \lambda(z^2 - 1) = z \Rightarrow z_\pm^* = \varepsilon_\pm/\lambda.$

安定性

z^* が安定な固定点 $\Leftrightarrow |f'(z^*)| < 1.$ z_+^* は常に不安定

$z = f(z), f'(z) = \mu,$ から z を消去して

$P(\lambda, \mu) = 4\lambda^2 - \mu(2 - \mu) = 0.$ $\mathbb{C}^2$ 内の曲線

収束域の境界

$$\{\lambda \in \mathbb{C} \,|\, P(\lambda, e^{i\theta}) = 0,\ 0 \leq \exists\theta < 2\pi\}.$$

収束の速さ

$$\text{RS: } \sim \mathcal{O}(|2\lambda|^k) \quad \Leftrightarrow \quad \text{D: } |f^{\circ k}(0) - z_-^*| \sim \mathcal{O}(|2\lambda^2|^k).$$

3 次行列の例

行列

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 3 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}.$$

変換 F の具体形

$A = {}^t(\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \boldsymbol{z}_3),\ \ F(A) = {}^t(F_1(\boldsymbol{z}_1), F_2(\boldsymbol{z}_2), F_3(\boldsymbol{z}_3))$

$$\begin{aligned}
{}^tF_1(\boldsymbol{z}_1) &= \left(1, -\lambda(1 + 3z_1^3 - z_1^2(z_1^2 + 2z_1^3)), -\tfrac{1}{3}\lambda(2 + 3z_1^2 - z_1^3(z_1^2 + 2z_1^3))\right), \\
{}^tF_2(\boldsymbol{z}_2) &= \left(\lambda(1 + 2z_2^3 - z_2^1(z_2^1 + 3z_2^3)), 1, -\tfrac{1}{2}\lambda(3 + 2z_2^1 - z_2^3(z_2^1 + 3z_2^3))\right), \\
{}^tF_3(\boldsymbol{z}_3) &= \left(\tfrac{1}{3}\lambda(2 + z_3^2 - z_3^1(2z_3^1 + 3z_3^2)), \tfrac{1}{2}\lambda(3 + z_3^1 - z_3^2(2z_3^1 + 3z_3^2)), 1\right).
\end{aligned}$$

第 1 固有ベクトル

安定な固定点

${}^t\boldsymbol{z}_1 = (1, z_1^2, z_1^3) = (1, z^2, z^3)$ とする.

$$
\begin{aligned}
F_1(1, z^2, z^3) &= \left(1, -\lambda(1 + 3z^3 - z^2(z^2 + 2z^3)), -\tfrac{1}{3}\lambda(2 + 3z^2 - z^3(z^2 + 2z^3))\right) \\
&= (1, f^2(z^2, z^3; \lambda), f^3(z^2, z^3; \lambda)).
\end{aligned}
$$

固定点 (z_*^2, z_*^3) の方程式

$$
z^2 = f^2(z^2, z^3; \lambda), \quad z^3 = f^3(z^2, z^3; \lambda).
$$

安定な固定点の条件:

$$
\mathcal{J} := \begin{pmatrix} \partial f^2/\partial z^2 & \partial f^3/\partial z^2 \\ \partial f^2/\partial z^3 & \partial f^3/\partial z^3 \end{pmatrix}
$$

の (z_*^2, z_*^3) での固有値 $|\mu| < 1$.

同伴する ideal

多項式環 $\mathbb{C}[z^2, z^3, \lambda, \mu]$ の ideal

$$\mathscr{I} := \left\langle z^2 - f^2(z^2, z^3; \lambda), z^3 - f^3(z^2, z^3; \lambda), \det(\mathcal{J} - \mu I) \right\rangle .$$

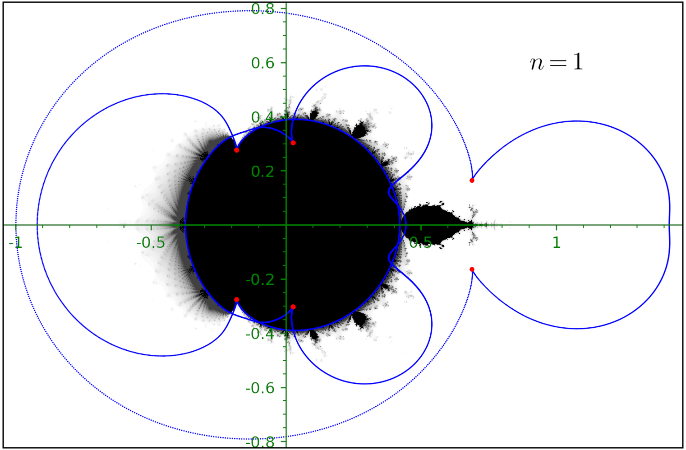
変数 z^2, z^3 の消去　(Gröbner 基底)

$\mathbb{C}[\lambda, \mu] \cap \mathscr{I} = \langle P_1(\lambda, \mu) \rangle,$

$$\begin{aligned} P_1(\lambda, \mu) = {} & 63792\lambda^7 - 28352\lambda^6\mu - 68040\lambda^6 - 29556\lambda^5\mu^2 + 89352\lambda^5\mu \\ & - 13239\lambda^5 + 960\lambda^4\mu^3 + 14516\lambda^4\mu^2 - 39164\lambda^4\mu + 12116\lambda^4 \\ & + 5616\lambda^3\mu^4 - 26658\lambda^3\mu^3 + 29988\lambda^3\mu^2 - 546\lambda^3\mu - 2448\lambda^3 \\ & + 468\lambda^2\mu^5 - 3720\lambda^2\mu^4 + 12820\lambda^2\mu^3 - 17648\lambda^2\mu^2 + 7584\lambda^2\mu \\ & - 1296\lambda^2 - 243\lambda\mu^6 + 1404\lambda\mu^5 - 2619\lambda\mu^4 + 1350\lambda\mu^3 + 432\lambda\mu^2 \\ & + 108\mu^6 - 792\mu^5 + 1980\mu^4 - 1872\mu^3 + 432\mu^2. \end{aligned}$$

marginal curve

$$\lambda : P_1(\lambda, e^{i\theta}) = 0.$$



多価解析関数としての固有値

$$\det\left(D + \lambda\Delta - \varepsilon I\right) = 0$$

$$\Rightarrow \varepsilon^3 - 4\varepsilon^2 + (3 - 14\lambda^2)\varepsilon + 7\lambda^2 - 12\lambda^3 = 0 \quad \text{(代数関数)}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_k\left(\lambda\right) = \omega^k \sqrt[3]{P_3(\lambda) + i\sqrt{P_6(\lambda)}} + \omega^{2k}\sqrt[3]{P_3(\lambda) - i\sqrt{P_6(\lambda)}} + \frac{4}{3}. \tag{9}$$

$P_3(\lambda) = \frac{1}{54}(324\lambda^3 + 315\lambda^2 + 20)$, $P_6(\lambda) = \frac{1}{108}(7088\lambda^6 - 7560\lambda^5 + 1813\lambda^4 - 480\lambda^3 + 448\lambda^2 + 36)$.

$$\varepsilon_1(\lambda) = -\tfrac{7}{3}\lambda^2 + 4\lambda^3 - \tfrac{98}{27}\lambda^4 - \tfrac{56}{9}\lambda^5 + \cdots,$$
$$\varepsilon_2(\lambda) = 1 - \tfrac{7}{2}\lambda^2 - 6\lambda^3 + \tfrac{147}{8}\lambda^4 + 21\lambda^5 + \cdots,$$
$$\varepsilon_3(\lambda) = 3 + \tfrac{35}{6}\lambda^2 + 2\lambda^3 - \tfrac{3185}{216}\lambda^4 - \tfrac{133}{9}\lambda^5 + \cdots.$$

調和振動子の例

delta 関数ポテンシャルによる摂動

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+g\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x).$$

無次元化: $x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}u,\quad E=\hbar\omega\epsilon,\quad g=\sqrt{\frac{\hbar^3\omega}{m}}\lambda,$

$$\Rightarrow\quad\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{du^2}+\frac{1}{2}u^2+\lambda\delta(u)\right)\phi(u)=\epsilon\phi(u). \tag{10}$$

偶奇性

parity odd な固有関数は摂動の影響を受けない.
$\therefore\ \varepsilon_{2l+1}(\lambda)=\epsilon_{2l+1}=2l+1+1/2.$

RS PT の設定

$$
\begin{aligned}
\varphi_n(u) &= \phi_{2n}(u) + \sum_{l\geq 1} \lambda^l \sum_{m\neq n} (a^{(l)})_n^m \phi_{2m}(u), \\
\varepsilon_n &= 2n + \frac{1}{2} + \sum_{l\geq 1} \lambda^l \varepsilon_n^{(l)}, \\
\Delta_n^m &= \phi_{2n}(0)\phi_{2m}(0) = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{\Gamma(n+\frac{1}{2})\Gamma(m+\frac{1}{2})}{\Gamma(n+1)\Gamma(m+1)}}, \\
\Theta_n^m &= \frac{1}{2n-2m}, \quad n \neq m.
\end{aligned}
$$

収束半径

$R \gtrsim 2$ (Kvaal et al. 2010) $\Rightarrow$ $R \approx 2.2$ (authors).

実は摂動に依らず解けること

教科書に載ってない規格化可能解

$$\phi_\epsilon(u) = \left[F\left(\tfrac{1}{4}-\tfrac{\epsilon}{2},\tfrac{1}{2};u^2\right) - 2\frac{\Gamma(\frac{3}{4}-\frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\frac{1}{4}-\frac{\epsilon}{2})}|u|F\left(\tfrac{3}{4}-\tfrac{\epsilon}{2},\tfrac{3}{2};u^2\right)\right]e^{-\frac{1}{2}u^2}, \quad \epsilon-1/2\notin\{0,2,4,6,\dots\}. \tag{11}$$

問題点: • $\phi'_\epsilon(0^+) = -\phi'_\epsilon(0^-) \neq 0.$ • ϵ は連続スペクトル.

delta pot. は両問題点を同時に解決する

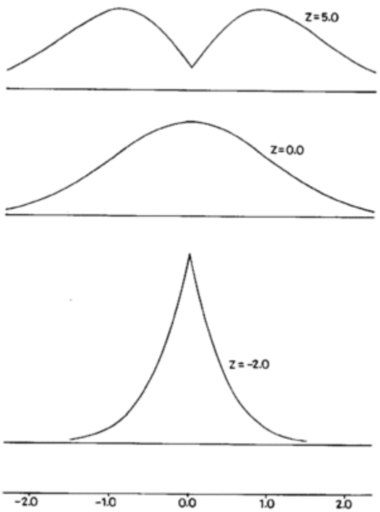
$$-\tfrac{1}{2}[\phi'_\epsilon(s) - \phi'_\epsilon(-s)] + \lambda\phi_\epsilon(0) = \int_{-s}^{s}\left(\epsilon - \tfrac{1}{2}u^2\right)\phi_\epsilon(u)du,$$

$$\Rightarrow -\tfrac{1}{2}[\phi'_\epsilon(0^+) - \phi'_\epsilon(0^-)] + \lambda\phi_\epsilon(0) = 0 \Rightarrow \pm\phi'_\epsilon(0^\pm) = \lambda\phi_\epsilon(0).$$

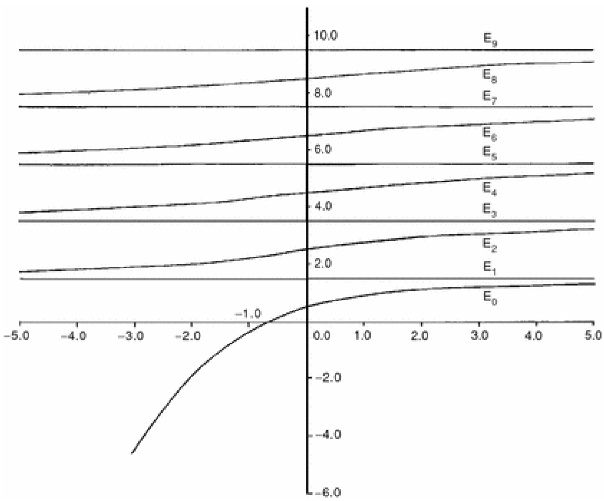
固有値を決める公式

$$-2\frac{\Gamma(\frac{3}{4}-\frac{\epsilon}{2})}{\Gamma(\frac{1}{4}-\frac{\epsilon}{2})} = \lambda. \tag{12}$$

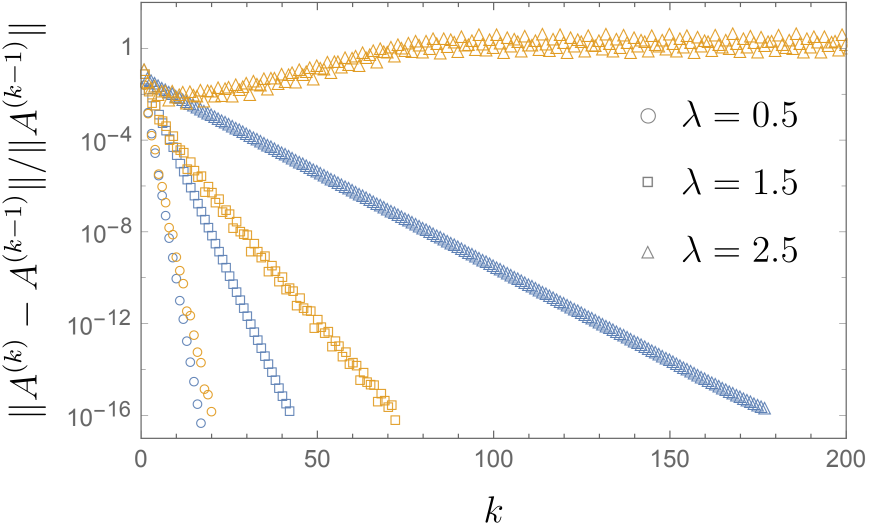
基底状態の波動関数　Patil 2006



$\varepsilon_n(\lambda)$ のプロット　Patil 2006

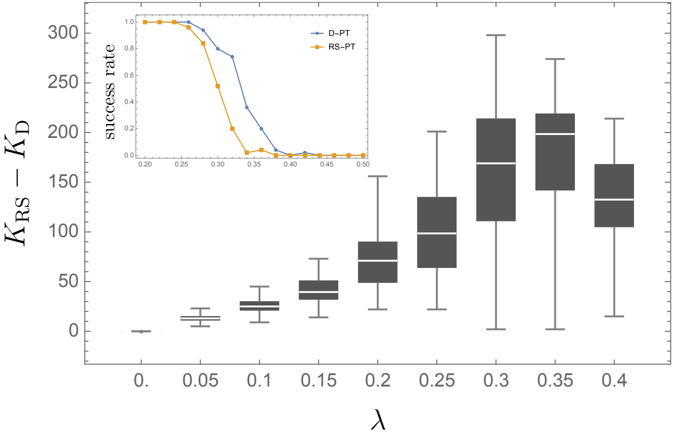


RS vs D PT 調和振動子



RS vs D PT for Random Matrices

$$M = \mathrm{diag}(1, 2, \ldots, N) + \lambda\Delta, \quad N = 100.$$



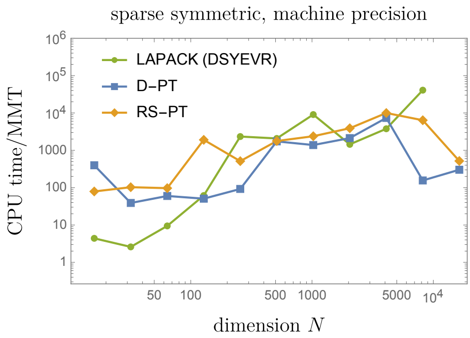
Mathematica vs D PT

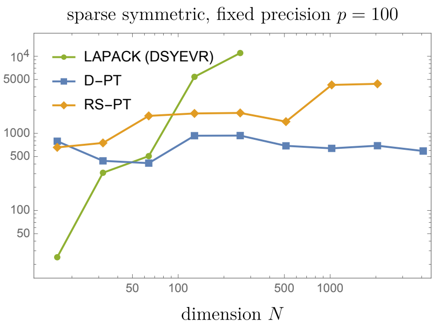
algorithmic complexities

行列の対角化 $\sim \mathcal{O}(N^3) \Leftrightarrow$ 行列の積 $\sim \mathcal{O}(N^{2.373\cdots})$ subcubic

設定: $M = D + \lambda\Delta$, $D = (-d^2/du^2 + u^2)/2$, $\lambda = 0.01$, Δ: sparse symmetric.

$\Rightarrow$ D PT much faster than LAPACK routines (**Eigensystem**)





Discussion

D の RS に対する優位性

- 各 iteration の lower complexity (matrix mult. 1 回)
- 収束が速い
- 収束領域が広い

拡張

- λ が大きいとき

$$M = D + \lambda\Delta \Rightarrow M = D + \frac{\lambda}{Q}\Delta + \frac{(Q-1)\lambda}{Q}\Delta. \qquad Q \gg 1$$

- 最適化

$$M = D + \lambda\Delta = D' + \lambda\Delta' \quad \text{such that} \quad \|\Theta\| \cdot \|\Delta\| > \|\Theta'\| \cdot \|\Delta'\| \ \Rightarrow \ \text{収束域拡大}$$

- 収束半径 $R = 0$ の場合

H.O.$+gx^4$?