Min-max定理

塩崎　謙

July 30, 2024

Hを$n \times n$エルミート行列とする．まず簡単のため，固有値に縮退はないものとする． Hの固有値を

$$E_1 < \cdots < E_n \tag{1}$$

と並べる．明らかに

$$E_1 = \min_{v, ||v||=1} \langle v|H|v\rangle\,, \tag{2}$$

$$E_n = \max_{v, ||v||=1} \langle v|H|v\rangle\,, \tag{3}$$

が成立．他の固有値についてもこのような変分的な特徴づけを与えるのがmin-max定理．

$E = E_1$（基底状態）なる固有空間をV_1，その直交補空間（励起状態の空間）を$V_1^{\perp}$と書く．$E = E_k$なる固有空間も同様にV_kと書く． 2番目の固有値（第一励起状態）については以下が成立．

$$E_2 = \min_{v \in V_1^{\perp}, ||v||=1} \langle v|H|v\rangle\,. \tag{4}$$

これを$n-1$次元部分空間を探索する変分問題に書き換えることができる．任意の状態$v \in V, ||v|| = 1$を

$$v = \alpha v_1 + \beta v_{\perp}, \quad v_1 \in V_1, \quad v_{\perp} \in V_{\perp}, \quad ||v_1|| = ||v_{\perp}|| = 1, \tag{5}$$

と展開すると，

$$\langle v|H|v\rangle = |\alpha|^2 E_1 + \sqrt{1-|\alpha|^2}\,\langle v_{\perp}|H|v_{\perp}\rangle \tag{6}$$

である．これを最小化すると$v = v_1$が選ばれるが，$v \in V_1^{\perp}$において最小化すると，E_2が得られる．部分空間$V' \in V$の選び方に依存して，

$$\min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v\rangle = \begin{cases} E_1 & (V' \cap V_1 \neq \{0\}) \\ E_2 & (V' \cap V_1 = \{0\} \&\& V' \cap V_2 \neq \{0\}) \\ > E_2 & (V' \subset (V_1 \oplus V_2)^{\perp}) \end{cases} \tag{7}$$

が成立する． 3番目の可能性$V' \subset (V_1 \oplus V_2)^{\perp}$は$\dim V' > n-2$とすると排除できる．よって

$$\dim V' \geq n-1 \quad \Rightarrow \quad \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v\rangle \leq E_2. \tag{8}$$

ここで，$V' = V_1^{\perp} (\dim V_1^{\perp} = n-1)$のときに等号成立条件が満たされるため，

$$\max_{V' \subset V, \dim V' \geq n-1} \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v\rangle = E_2. \tag{9}$$

等号成立条件は$\dim V' = n-1$で満たされるため，探索する範囲を$\dim V' = n-1$に制限して良いから，結局以下を得た．

$$\max_{V' \subset V, \dim V' = n-1} \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v\rangle = E_2. \tag{10}$$

同様に，k番目の固有値E_kについても

$$\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=\begin{cases}\leq E_k & (V'\cap(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)\neq\{0\}),\\ > E_k & (V'\subset(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)^{\perp},\end{cases}\tag{11}$$

である．

$$V'\cap(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)=\{0\}\quad\Leftrightarrow\quad V'\in(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)^{\perp}\tag{12}$$

に注意． $\dim V'>n-k$であれば$V'\in(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)^{\perp}$は成立しないから，

$$\max_{V'\subset V,\dim V'\geq n-k+1}\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=E_k.\tag{13}$$

ここで，等号は$V'=(V_1\oplus\cdots\oplus V_{k-1})^{\perp}$のとき成立． $\dim V'=\dim(V_1\oplus\cdots\oplus V_{k-1})^{\perp}=n-k+1$に制限して良いから，

$$\max_{V'\subset V,\dim V'=n-k+1}\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=E_k\tag{14}$$

を得る．

固有値に縮退が存在する場合は，固有空間V_kの次元のみを考慮すれば良い．

$$d_k=\dim V_k\tag{15}$$

とする． (11)は同様に成立． $V'\subset(V_1\oplus\cdots\oplus V_k)^{\perp}$を排除する条件は

$$\dim V'>n-\sum_{i=1}^{k}d_i\tag{16}$$

であり，また

$$\dim V'>n-\sum_{i=1}^{k-1}d_i=\dim(V_1\oplus\cdots\oplus V_{k-1})^{\perp}\tag{17}$$

であれば必ず$V'\cap(V_1\oplus\cdots\oplus V_{k-1})\neq\{0\}$となり$\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=E_{k-1}<E_k$であるので，

$$\dim V'\leq n-\sum_{i=1}^{k-1}d_i\tag{18}$$

を仮定して良い． よって，

$$\max_{V'\subset V,n-\sum_{i=1}^{k-1}d_i\geq\dim V'>n-\sum_{i=1}^{k}d_k}\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=E_k.\tag{19}$$

次元の範囲

$$n-\sum_{i=1}^{k-1}d_i\geq\dim V'>n-\sum_{i=1}^{k}d_k\tag{20}$$

については，この範囲であればどの次元に固定しても等号成立条件

$$V'\cap V_k\neq\{0\}\tag{21}$$

を満たすV'が存在するため，結局，

$$\max_{V'\subset V,\dim V'=d}\min_{v\in V',||v||=1}\langle v|H|v\rangle=E_k,\quad d=n-\sum_{i=1}^{k}d_k+1,\ldots,n-\sum_{i=1}^{k-1}d_i.\tag{22}$$

が成立する．よって，固有値の重複も含めて，固有値を

$$E_1 \leq E_2 \leq \cdots \leq E_n \tag{23}$$

と並べると，結局

$$\max_{V' \subset V, \dim V' = n-k+1} \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v \rangle = E_k \tag{24}$$

が成立する．

$-H$についても同様の議論を行うと，$E'_k = -E_{n-k+1}$として，

$$\max_{V' \subset V, \dim V' = n-k+1} \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v \rangle = E'_k, \tag{25}$$

つまり，

$$\max_{V' \subset V, \dim V' = n-k+1} \min_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v \rangle = -E_{n-k+1} \tag{26}$$

が得られる． $k \mapsto n-k+1$として以下を得る．

$$\min_{V' \subset V, \dim V' = k} \max_{v \in V', ||v||=1} \langle v|H|v \rangle = E_k. \tag{27}$$

Min-max定理. $n \times n$エルミート行列Hの固有値を

$$E_1 \leq \cdots \leq E_n \tag{28}$$

と並べる．このとき，

$$E_k = \max_{\dim V = n-k+1} \min_{v \in V} \frac{\langle v|H|v \rangle}{\langle v|v \rangle} \tag{29}$$

$$= \min_{\dim V = k} \max_{v \in V} \frac{\langle v|H|v \rangle}{\langle v|v \rangle}. \tag{30}$$

固有値を逆に並べた場合の表現も書いておく．

Min-max定理. $n \times n$エルミート行列Hの固有値を

$$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n \tag{31}$$

と並べる．このとき，

$$\lambda_k = \max_{\dim V = k} \min_{v \in V} \frac{\langle v|H|v \rangle}{\langle v|v \rangle} \tag{32}$$

$$= \min_{\dim V = n-k+1} \max_{v \in V} \frac{\langle v|H|v \rangle}{\langle v|v \rangle}. \tag{33}$$

特異値についても同様の変分公式を導出することができる．行列$A \in \mathrm{Mat}_{n,m}(\mathbb{C})$の特異値を大きいものから順に

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \tag{34}$$

と並べると，Aの特異値の自乗はエルミート行列$A^\dagger A$の固有値に他ならない．自明な不等式

$$\sqrt{\langle v|A^\dagger A|v \rangle} \geq \sqrt{\langle v'|A^\dagger A|v' \rangle} \Leftrightarrow \langle v|A^\dagger A|v \rangle \geq \langle v'|A^\dagger A|v' \rangle \tag{35}$$

に注意すると，

$$\sigma_k = \max_{\dim V = k} \min_{v \in V, ||v||=1} \sqrt{\langle v|A^\dagger A|v\rangle} = \max_{\dim V = k} \min_{v \in V, ||v||=1} ||Av||. \tag{36}$$

特異値に関するMin-max定理.　$n \times m$行列Aの特異値を

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \tag{37}$$

と並べる．このとき，

$$\sigma_k = \max_{\dim V = k} \min_{v \in V, ||v||=1} ||Av|| \tag{38}$$

$$= \min_{\dim V = n-k+1} \max_{v \in V, ||v||=1} ||Av||. \tag{39}$$