

## Приближенные методы

Точные решения уравнений физики могут быть получены только для ограниченного круга задач. Например, в случае скалярного уравнения Гельмгольца метод разделения переменных может быть применен лишь для 11 типов координатных систем (см. по этому поводу § 5.1). Если поверхность, на которой заданы граничные условия, не совпадает ни с одной из соответствующих координатных поверхностей или граничные условия не являются простыми условиями типа Дирихле или Неймана, то метод разделения переменных неприменим. Если рассматривается уравнение Шредингера, то число координатных систем, допускающих разделение переменных, может резко уменьшиться, так как разделение возможно только для частных видов зависимости потенциальной энергии от координат.

Подобное положение вещей имеет место и для интегральных уравнений. Здесь решения могут быть получены — например, при помощи интегральных преобразований — только в случаях, когда ядро интегрального уравнения имеет специальный вид. Так, например, преобразование Фурье применимо, если ядро представляет собой функцию, зависящую от разности двух переменных, а область интегрирования простирается от  $-\infty$  до  $+\infty$  или от 0 до  $\infty$ . Таким образом, очень редко задача относится к классу точно разрешимых, так что обычно мы сталкиваемся с необходимостью развития достаточно сильных приближенных методов. Более того, мы увидим, что даже для задач, допускающих точное решение, иногда удобнее применять приближенные методы, так как вычисление точного решения может оказаться слишком сложным.

Отклонения от задачи, допускающей точное решение, мы будем называть *возмущениями*. *Поверхностными возмущениями* мы будем называть отклонения граничной поверхности, или граничных условий, или того и другого соответственно от поверхности и условий, допускающих точное решение. Например, мы можем пожелать определить резонансные частоты объема с трапецией в поперечном сечении, так что поверхность, ограничивающая этот объем, не является координатной поверхностью ни одной из 11 координатных систем, допускающих разделение переменных в скалярном уравнении Гельмгольца. Или поперечное сечение может быть прямоугольным, но стенки могут быть так акустически обработаны, что граничные условия уже не будут однородными условиями Неймана.

*Объемными возмущениями* мы назовем отклонения внутри объема, которые выводят задачу из класса точно разрешимых. Например, потенциал в уравнении Шредингера может быть таким, что уравнение не допускает разделения переменных. Это, вообще говоря, имеет место в случае, когда две взаимодействующие частицы или большее их число движутся в центральном поле сил, или в частном случае одной частицы, движущейся в поле, порожденном несколькими центрами сил. Уравнение Шредингера для двух электронов, движущихся в поле атомного ядра с зарядом  $Ze$ ,

имеет вид

$$\left\{ \nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \right\} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0,$$

где  $r_1$  и  $r_2$  — расстояния первой и второй частицы от ядра, а  $r_{12}$  — расстояние между самими частицами. Если член  $e^2/r_{12}$  отсутствует, уравнение допускает разделение; член  $e^2/r_{12}$  является объемным возмущением. Объемные возмущения в акустических проблемах могут быть обусловлены наличием областей неоднородности в пространстве, соответствующих переменному показателю преломления, которые могут создаваться такими объектами, как колонны, занавеси или неоднородное распределение температуры в среде.

В этой главе мы рассмотрим три существенно разных метода получения приближенных решений: (1) метод *теории возмущений*, (2) *вариационный* метод и (3) *вариационно-итерационный* (сокращенно В-И) метод. В теории возмущений объемные или поверхностные возмущения предполагаются малыми, и поэтому может быть осуществлено разложение по степеням параметра, измеряющего величину возмущения; главный член разложения является решением при отсутствии возмущения.

Когда возмущения становятся большими, эта процедура неудобна, и тогда более подходит вариационный метод. Как мы показали в гл. 3, уравнения физики могут быть представлены в вариационной форме, т. е. можно найти функционал от неизвестной функции, который должен быть стационарным при варьировании этой функции. На практике употребляются функции, называемые пробными функциями или функциями сравнения, содержащие один или несколько параметров и подставляемые в качестве неизвестной функции в функционал, выражающий вариационный принцип. Вариация функции осуществляется изменением величины этих параметров. Улучшение может быть достигнуто увеличением гибкости пробной функции посредством дополнительных параметров.

Другой способ улучшения исходной пробной функции состоит в ее включении в качестве первого члена в полную систему функций, не обязательно взаимно ортогональных. Ни одна из этих процедур не является столь систематической, как схема, применяемая в В-И методе. Более того, В-И метод дает возможность оценки погрешности для каждой стадии вычислений, что является, по-видимому, его наиболее важным свойством.

Эти методы можно применять ко всем задачам, которые нам встретятся в этой книге. Задача может состоять в определении резонансных частот акустических или электромагнитных колебаний внутри полости. Мы встретимся с задачей определения емкости конфигурации проводников или течения жидкости, обтекающей препятствие. Нас будут интересовать рассеяние и диффракция волн на препятствии или, в квантовой механике, рассеяние потенциальным полем. Все три метода применимы в каждой из этих задач, но, как мы увидим, сильно различаются в деталях.

## 9. 1. Теория возмущений

Теория возмущений особенно хорошо применима, когда рассматриваемая задача очень близка к задаче, которая может быть точно решена. Предполагается, что отличия не носят сингулярного характера, так что изменение от точно разрешимой задачи до рассматриваемой можно произвести непрерывным образом. Аналитически это выражается в требовании, чтобы возмущение было непрерывной функцией параметра  $\lambda$ , измеряющего величину возмущения.

Если это имеет место, то можно вывести формулы, описывающие изменения физического состояния, когда  $\lambda$  изменяется от нуля; при этом чем больше  $\lambda$ , тем больше нужно членов, содержащих все более высокие степени  $\lambda$ , для того чтобы получить результат с нужной степенью точности. Вообще говоря, это будут отрезки бесконечных рядов по степеням  $\lambda$ , сходящихся для  $\lambda$ , меньших  $\lambda_0$ , — радиуса сходимости, для которого мы выясним качественный смысл и получим количественную оценку. Кроме того, можно дать практический метод аналитического продолжения рядов за  $\lambda_0$ , так что оказывается возможным решать задачи как о слабых, так и о сильных возмущениях.

В дальнейшем мы прежде всего рассмотрим те формулы теории возмущений, которые применимы к задачам с дискретным спектром собственных значений и в которых имеют место возмущения объемного типа. Затем мы применим эти результаты к граничным возмущениям в § 9.2 и к вопросам рассеяния и диффракции в § 9.3.

**Обычная формула теории возмущений.** Обычно выводимые формулы теории возмущений получаются, как можно показать, с помощью применения метода последовательных приближений к интегральной формулировке<sup>1)</sup> задачи. Для примера рассмотрим уравнение Шредингера, описывающее квантово-механическое движение частицы в одном измерении под действием потенциала  $\lambda V(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \lambda V(x)\psi = E\psi,$$

где  $E$  — энергия частицы. Вводя сокращенные обозначения

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad U = \frac{2m}{\hbar^2} V,$$

получим

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - \lambda U(x)]\psi = 0. \quad (9.1.1)$$

Мы предположим, что движение ограничено в области  $0 \leq x \leq L$  бесконечно высоким потенциальным барьером (не включенным в  $U$ ) при  $x=0$  и при  $x=L$ . Следовательно,  $\psi$  должна удовлетворять граничным условиям

$$\psi(0) = 0 = \psi(L).$$

Точно разрешимая задача содержит те же самые граничные условия и состоит в решении уравнения

$$\frac{d^2\varphi_n}{dx^2} + k_n^2\varphi_n = 0. \quad (9.1.2)$$

Решения этого уравнения таковы:

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad n - \text{целое}, \quad (9.1.3)$$

$$k_n^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad \int_0^L \varphi_n \varphi_m dx = \delta_{nm}.$$

Интегральную формулировку уравнения (9.1.1) можно получить с помощью соответствующей функции Грина, являющейся решением урав-

<sup>1)</sup> Термин «интегральная формулировка задачи» употребляется как сокращение выражения «формулировка задачи при помощи интегрального уравнения». — Прим. перес.

нения

$$\frac{d^2}{dx^2} G_k(x|x_0) + k^2 G_k(x|x_0) = -\delta(x-x_0)$$

и удовлетворяющей тем же граничным условиям, что и  $\psi$ . Из (7.2.8) имеем

$$\psi(x) = -\lambda \int_0^L G_k(x|x_0) U(x_0) \psi(x_0) dx_0. \quad (9.1.4)$$

Функцию Грина можно выразить через  $\varphi_n$  [см. (7.2.39)] следующим образом:

$$G_k(x|x_0) = \sum_p \frac{\varphi_p(x) \varphi_p(x_0)}{k^2 - k_p^2}. \quad (9.1.5)$$

В одномерном случае  $G_k$  можно выписать в явном виде:

$$G_k(x|x_0) = \frac{1}{k \sin(kL)} \begin{cases} \sin(kx) \sin[k(L-x_0)] & (\text{при } x \leq x_0), \\ \sin(kx_0) \sin[k(L-x)] & (\text{при } x \geq x_0). \end{cases} \quad (9.1.6)$$

Подставляя ряд (9.1.5) в интегральное уравнение (9.1.4), получаем

$$\psi(x) = \lambda \sum_p \frac{\int_0^L \varphi_p(x_0) U(x_0) \psi(x_0) dx_0}{k^2 - k_p^2} \varphi_p(x). \quad (9.1.7)$$

Удобно выделить из ряда тот член, к которому стремится  $\psi$ , когда  $\lambda$  стремится к нулю. Пусть это будет  $\varphi_n$ . Обозначим соответствующее  $\psi$  через  $\psi_n$ , так что

$$\psi_n \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \varphi_n.$$

Перепишем теперь разложение для  $\psi$  следующим образом:

$$\psi_n(x) = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{\int_0^L \varphi_p(x_0) U(x_0) dx_0}{k^2 - k_p^2} \varphi_p(x). \quad (9.1.8)$$

Здесь мы пронормировали  $\psi_n$  так, чтобы коэффициент при  $\varphi_n$  был равен единице. Это всегда возможно, так как функция  $\psi_n$ , будучи умножена на произвольную постоянную, остается решением уравнения (9.1.1). Требование, чтобы коэффициент при  $\varphi_n$  в формуле (9.1.7) равнялся единице, приводит к условию

$$k^2 = k_n^2 + \lambda \int_0^L \varphi_n(x_0) U(x_0) \psi(x_0) dx_0. \quad (9.1.9)$$

Мы можем проверить, что это согласуется с разложением (9.1.8) и дифференциальным уравнением (9.1.1), следующим образом: умножая левую часть (9.1.1) на  $\varphi_n$  и интегрируя от 0 до  $L$ , получим

$$\int_0^L \varphi_n \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx + k^2 \int_0^L \psi \varphi_n dx - \lambda \int_0^L \varphi_n U \psi dx = 0.$$

Первый член можно вычислить двукратным интегрированием по частям. Используя уравнение, которому удовлетворяет  $\varphi_n$ , имеем

$$\int_0^L \varphi_n \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = -k_n^2 \int_0^L \psi \varphi_n dx.$$

Из (9.1.8) и условий ортогональности в (9.1.3) вытекает, что  $\int \psi \varphi_n dx = 1$ . Подставляя эти результаты, немедленно приходим к (9.1.9).

Мы можем теперь применить метод последовательных приближений к уравнению (9.1.8) и, подставляя получающиеся результаты в (9.1.9), находить последовательные приближения для величины  $k^2$ . За нулевое приближение для  $\psi_n$ ,  $\psi_n^{(0)}$  мы примем  $\varphi_n$  и, подставляя его в правую часть уравнения (9.1.8) вместо  $\psi$ , получим первое приближение

$$\psi_n^{(1)} = \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p, \quad (9.1.10)$$

где

$$U_{pn} = \int_0^L \varphi_p(x_0) U(x_0) \varphi_n(x_0) dx_0. \quad (9.1.11)$$

Второе приближение  $\psi_n^{(2)}$  получается подстановкой  $\psi_n^{(1)}$  в (9.1.8):

$$\psi_n^{(2)} = \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)} \varphi_p, \quad (9.1.12)$$

где запись  $pq \neq n$  означает, что члены с  $p = n$  или  $q = n$  в сумме опущены. Вообще

$$\psi_n^{(a)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{\int_0^L \varphi_p U \psi_n^{(a-1)} dx_0}{k^2 - k_p^2} \varphi_p(x),$$

так что

$$\begin{aligned} \psi_n^{(a)} = & \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p + \dots + \\ & + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{pq} U_{qr} \dots U_{zn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2) \dots (k^2 - k_z^2)} \varphi_p. \end{aligned} \quad (9.1.13)$$

Следует отметить, что эти формулы содержат неизвестное  $k^2$ . Его теперь можно определить подстановкой (9.1.13) в (9.1.9). Получаемое таким образом соотношение, определяющее  $k^2$ , имеет вид

$$\begin{aligned} k^2 = & k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k^2 - k_p^2} + \dots + \\ & + \lambda^{a+1} \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} \dots U_{zn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)(k^2 - k_r^2) \dots (k^2 - k_z^2)}. \end{aligned} \quad (9.1.14)$$

Это уравнение можно решить методом последовательных приближений. Если обозначить через  $(k^2)^{(a)}$   $a$ -е приближение, то

$$(k^2)^{(1)} \approx k_n^2 + \lambda U_{nn},$$

$$(k^2)^{(2)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2},$$

$$\begin{aligned}
 (k^2)^{(3)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2} + \\
 &\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)}, \\
 (k^2)^{(4)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{q \neq n} \frac{U_{nq} U_{qn}}{k_n^2 - k_q^2} - k_p^2} + \\
 &\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2)(k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_q^2)} + \\
 &\quad + \lambda^4 \sum_{pqr \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2)}.
 \end{aligned}$$

Вообще

$$\begin{aligned}
 (k^2)^{(a)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{(k^2)^{(a-2)} - k_p^2} + \\
 &\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{[(k^2)^{(a-3)} - k_p^2][(k^2)^{(a-3)} - k_q^2]} + \dots + \\
 &\quad + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} \dots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2) \dots (k_n^2 - k_z^2)}. \quad (9.1.15)
 \end{aligned}$$

Соответствующие волновые функции таковы:

$$\begin{aligned}
 \psi_n^{(1)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2} \varphi_p(x), \\
 \psi_n^{(2)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2} \varphi_p(x) + \\
 &\quad + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)} \varphi_p(x), \\
 \psi_n^{(a)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{(k^2)^{(a-1)} - k_p^2} \varphi_p + \\
 &\quad + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{[(k^2)^{(a-2)} - k_p^2][(k^2)^{(a-2)} - k_q^2]} \varphi_p + \dots + \\
 &\quad + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{pq} U_{qr} \dots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2) \dots (k_n^2 - k_z^2)} \varphi_p. \quad (9.1.16)
 \end{aligned}$$

В каждом случае  $a$ -е приближение берется с точностью до  $\lambda^a$ . Необходимо, однако, обратить внимание на то, что (9.1.15) и (9.1.16) не являются разложениями по степеням  $\lambda$ , так как знаменатели содержат  $\lambda$ . Степенной ряд можно получить разложением знаменателей в ряды по степеням  $\lambda$ . Этот процесс приводит к пертурбационным формулам Рэля — Шредингера<sup>1)</sup>. Ясно, что эти последние выражения не только

<sup>1)</sup> См. любой учебник по квантовой механике, например, Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, стр. 380—388; McGraw-Hill, New York, 1937. [Или Ландау и Лифшиц, *Квантовая механика*, ч. I, стр. 159—162, М.—Л., ГИИТЛ, 1948.—Прим. ред.]

значительно сложнее, чем (9.1.15) и (9.1.16), но и, вообще говоря, имеют меньший радиус сходимости. Заметим также, что при получении (9.1.15) мы подставляли вместо  $k^2$  ровно такое приближение, которое обеспечивает точность порядка  $\lambda^a$ . На практике часто бывает удобно при вычислениях всюду подставлять  $(k^2)^{(a-1)}$  вместо  $k^2$ .

**Сходимость рядов.** Сходимость рядов, которые дают выражения (9.1.16) для  $\psi^{(a)}$  и (9.1.15) для  $(k^2)^{(a)}$ , является, конечно, существенной для их практического применения. Что касается рядов для  $\psi^{(a)}$ , то нас интересует их сходимость в среднем (см. 6.3), для которой требуется сходимость сумм квадратов коэффициентов при  $\varphi_p$  в разложении  $\psi^{(a)}$ . Более точно, если  $\psi^{(a)} = \sum A_p \varphi_p$ , то мы требуем, чтобы ряд

$$\sum |A_p|^2 = \int_0^L |\psi^{(a)}|^2 dx$$

сходил. Мы можем рассматривать прямо равенства (9.1.16), но более удобно использовать само исходное интегральное уравнение (9.1.4), из которого мы видим, что

$$\psi^{(a)} = \varphi_n - \lambda \int_0^L G_k(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)}(x_0) dx_0, \quad (9.1.16a)$$

где штрих у интеграла указывает, что из функции вычитается ее проекция на  $\varphi_n$ . Для сходимости в среднем разложения функции  $\psi^{(a)}$  требуется, чтобы второе слагаемое в выражении для  $\psi^{(a)}$  было интегрируемо с квадратом. В рассматриваемом одномерном случае  $G_k$  является кусочно-непрерывной функцией, хотя имеет разрывную производную. Следовательно, в предположении сходимости разложения для  $\psi^{(a-1)}$  необходимым условием сходимости этого интеграла является интегрируемость  $U$ . Тем не менее мы видим, что  $U$  может иметь особенность, а интеграл все-таки будет сходиться;  $U$  может быть дельта-функцией Дирака или даже ее первой производной. Однако вторая производная дельта-функции слишком сингулярна, так как интеграл в этом случае пропорционален второй производной от функции  $G_k \cdot \psi^{(a-1)}$ , которая сингулярна. (Заметим, что особенность дельта-функции соответствует особенности функции  $1/R$  для одного измерения; в  $n$ -мерном случае она соответствует особенности  $1/R^n$ .)

В терминах элементов  $U_{pn}$  сходимость в среднем для рядов (9.1.16) будет иметь место, если

$$|U_{pn}|^2 \underset{p \rightarrow \infty}{\simeq} k_p^{3-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (9.1.17)$$

Конечно, если  $U$  содержит дельта-функцию или ее производную, сходимость рядов для  $\psi^{(a)}$  будет медленной, что делает решение практических задач утомительным и поглощающим много времени. Сходимость можно ускорить суммированием в замкнутом виде рядов  $\sum B_p \varphi_p$ , где  $B_p$  приближают  $A_p$  все точнее по мере стремления  $p$  к бесконечности. Затем этот ряд вычитается из исходного, а сумма в замкнутом виде прибавляется. Полученный таким образом новый ряд сходится быстрее старого. Процедура образования таких сумм наводит на мысль, что ряды, представляющие  $\int G_k U \psi^{(a)} dx_0$  и  $\int G_0 U \psi^{(a)} dx_0$ , сходятся в точности одинаковым образом, так как медленная сходимость происходит из разрывного характера производной функции  $G_k$ .

Мы приходим таким образом к рассмотрению функции

$$\chi^{(a)} = \lambda \int_0^L G_0(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)} dx_0.$$

Эта функция удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$d^2\chi^{(a)}/dx^2 = \lambda U \psi^{(a-1)}.$$

Тогда функция  $\psi^{(a)}$  представима в виде

$$\begin{aligned} \psi^{(a)} &= \varphi_n - (\chi^{(a)})' - \lambda \int_0^L (G_k - G_0) U(x_0) \psi^{(a-1)} dx_0 = \\ &= \varphi_n - (\chi^{(a)})' - \lambda k^2 \sum_{p \neq n} \frac{\int_0^L \varphi_p U \psi^{(a-1)} dx_0}{k_p^2 (k^2 - k_p^2)} \varphi_p. \end{aligned}$$

Здесь штрих у  $\chi^{(a)}$  и у интеграла означает, что нужно вычесть компоненту, пропорциональную  $\varphi_n$ , т. е.

$$(\chi^{(a)})' = \chi^{(a)} - \varphi_n \int_0^L \chi^{(a)} \varphi_n dx.$$

Важный вывод, вытекающий из этого рассмотрения, состоит в том, что сходимость можно улучшить, если удастся или решить неоднородную задачу с нулевой энергией в замкнутом виде, или получить для нее сходимость, более быструю, чем для (9.1.16).

Сходимость в среднем рядов в (9.1.16) для  $\psi^{(a)}$  не обеспечивает сходимости соответствующих рядов в (9.1.15) для  $(k^2)^{(a)}$ . Чтобы проверить это утверждение, подставим в равенство (9.1.9) для  $k^2$  равенство (9.1.16a) для  $\psi^{(a)}$ . Тогда приближенным значением для  $k^2$  будет

$$k^2 \simeq k_n^2 + \lambda U_{nn} - \lambda^2 \int_0^L dx \int_0^L \varphi_n(x) U(x) G_k(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)}(x_0) dx_0. \quad (9.1.18)$$

Снова необходимым условием сходимости является интегрируемость  $U$ . Функция  $U$  может иметь особенность типа дельта-функции, но в отличие от того, что было в случае рядов для  $\psi$ , она не может иметь особенности типа первой производной от дельта-функции [так как тогда для вычисления интеграла в (9.1.18) функцию  $G_k$  пришлось бы дважды дифференцировать]. Это не делает недействительными наши результаты для  $\psi^{(a)}$ , но указывает на то, что в данном случае, прежде чем подставить ряды в (9.1.9) для получения  $k^2$ , нужно улучшить их сходимость при помощи указанной выше техники.

**Многомерные задачи.** Формулы (9.1.7) — (9.1.15) применимы к более общим задачам, чем (9.1.1). Если, например, мы имеем дело с движением частицы в трехмерном пространстве под действием потенциала  $U_0 + \lambda U$ , то  $\psi$  удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \psi + (k^2 - U_0 - \lambda U) \psi = 0, \quad (9.1.19)$$

где невозмущенная задача с точным решением  $\varphi_n$  и собственным значением  $k_n$  состоит в решении уравнения

$$\nabla^2 \varphi_n + (k_n^2 - U_0) \varphi_n = 0.$$



Если мы рассматриваем две частицы, то необходимо ввести шестимерное пространство (три координаты для каждой частицы). Уравнение будет в этом случае следующее:

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + (k^2 - U_0 - \lambda U) \psi = 0. \quad (9.1.20)$$

Здесь  $\psi$  — функция шести переменных  $x_1, y_1, z_1$  и  $x_2, y_2, z_2$ . В каждом из этих случаев возмущение создается членом  $\lambda U$  и поэтому можно использовать результаты (9.1.7) — (9.1.15), причем теперь

$$U_{pn} = \int \dots \int \bar{\varphi}_p(x_1, x_2, \dots, x_N) U(x_1, x_2, \dots, x_N) \times \\ \times \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_N) dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (9.1.21)$$

где  $N$  — число измерений ( $= 3$  или  $6$  в рассмотренных примерах).

В исследовании сходимости нужно внести некоторые изменения, так как характер особенности функции  $G_k$  зависит от размерности пространства. В одномерном случае  $G_k$  имеет разрывную производную в точке  $x = x_0$ ; в двумерном случае  $G_k$  обладает логарифмической особенностью; в случае трех и более измерений  $G_k \simeq AR^{-N+2}$ , где  $R$  — расстояние от источника до точки наблюдения и  $N$  — число измерений. Поэтому нужно рассмотреть интеграл

$$\int \frac{U(\mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^{N-2}} dv_0, \quad N \geq 3, \\ \int \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| U(\mathbf{r}_0) dv_0, \quad N = 2,$$

где  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}_0$  — векторы  $N$ -мерного пространства.

После интегрирования получится функция (от  $\mathbf{r}$ ), интегрируемая с квадратом в том случае, когда  $U(\mathbf{r}_0)$  имеет особенность в точке  $\mathbf{r}_1$  вида  $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^{N-2} \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1)$  или  $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^{-2}$  для всех  $N$ , кроме  $N = 2$ . В случае  $N = 2$  допустимая особенность имеет вид  $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^\varepsilon \delta(\varepsilon > 0)$ . Эти функции дифференцируемы  $N - 1$  раз. Следующее дифференцирование дает саму  $\delta$ -функцию. Следовательно, эти функции имеют разрывы в своих градиентах  $(N - 1)$ -го порядка. Мы видим, что при возрастании числа измерений допустимая точечная особенность по совокупности всех координат становится все более слабой. Если  $U(\mathbf{r}_0)$  включает только одну из координат, то дело сводится, по существу, к одномерному случаю (это замечание может быть использовано для получения разобранных сейчас результатов).

В терминах элементов  $U_{pn}$  сходимость ряда (9.1.15) в среднем имеет место, если

$$|U_{pn}|^2 \underset{p \rightarrow \infty}{\simeq} k_p^{4-N-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (9.1.22)$$

**Пример.** Мы проиллюстрируем применение формул теории возмущений на уравнении Маттье

$$\frac{d^2 \psi}{d\theta^2} + [b - s \cos^2 \theta] \psi = 0, \quad \psi(0) = \psi(2\pi), \quad \psi'(0) = \psi'(2\pi).$$

Это уравнение было рассмотрено раньше (см. § 5.2), где был применен метод непрерывных дробей для определения значений величины  $b$ , совместимых с периодическими граничными условиями, наложенными на  $\psi$ . Физически уравнение Маттье интересно при рассмотрении вопроса о распространении волн в эллиптических цилиндрических координатах [см. формулу (11.2.70) и дальше]. Невозмущенные собственные функции

имеют вид

$$\varphi_n^\pm = \sqrt{\frac{\varepsilon_n}{2\pi}} \frac{\cos(n\theta)}{\sin(n\theta)}, \quad n=0, 1, 2, \dots; ^1)$$

соответствующие собственные значения равны  $n^2$ . Знак «+» относится к четному решению — косинусу; знак «-» к нечетному — синусу. Эти собственные функции образуют на отрезке  $(0, 2\pi)$  полную ортонормальную систему. Возмущение создается членом  $s \cos^2 \theta$ , где теперь  $s$  — параметр, определяющий величину возмущения, так что в формулах теории возмущений надо положить  $\lambda = s$ ,  $U = \cos^2 \theta$ . Следующий шаг состоит в вычислении элементов  $U_{nm}$  для функции  $\cos^2 \theta$ . Так как  $\cos^2 \theta$  — четная функция, то  $U_{nm}$  отличен от нуля только в том случае, когда  $\varphi_n$  и  $\varphi_m$  либо обе четные, либо обе нечетные. В этом примере мы сосредоточим внимание на четном случае. Тогда

$$U_{nm} = \frac{1}{2} \delta_{mn} + \frac{1}{4} [\delta_{m, n-2} + \delta_{m, n+2}] \quad \text{при } m \text{ и } n \neq 0,$$

$$U_{m0} = U_{0m} = \frac{1}{\sqrt{8}} \delta_{m2}, \quad m \neq 0, \quad U_{00} = \frac{1}{2},$$

Мы рассмотрим два случая, соответствующих невозмущенным собственным функциям  $\varphi_0$  с собственным значением 0 и  $\varphi_6$  с собственным значением  $6^2 = 36$ . Соответствующие значения  $b_n$  выражаются в согласии с формулой (9.1.14) в виде

$$b_n = n^2 + sU_{nn} + s^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{b_n - p^2} + s^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np}U_{pq}U_{qn}}{(b_n - p^2)(b_n - q^2)} + \dots$$

В этом примере мы проведем вычисления с точностью до четвертого порядка включительно. Тогда

$$b_0 = 0 + \frac{s}{2} + \frac{s^2}{8(b_0 - 4)} + \frac{s^3}{16(b_0 - 4)^2} + \frac{s^4}{32(b_0 - 4)^2} \left[ \frac{1}{b_0 - 4} + \frac{1}{4} \frac{1}{b_0 - 16} \right] + \dots$$

Величина  $b_0$  вычислена для нескольких значений  $s$ . Результаты даны в табл. 9.1 вместе с точными значениями. Укажем, что  $b_0^{(a)}$  есть  $a$ -е при-

Таблица 9.1

$s$	$b_0^{(0)}$	$b_0^{(1)}$	$b_0^{(2)}$	$b_0^{(3)}$	$b_0^{(4)}$	Точное
0,2	0	0,10000	0,09875	.....	.....	0,09875
1,0	0	0,50000	0,46430	0,46892	.....	0,46896
2,0	0	1,00000	0,83333	0,89197	0,87367	0,87823
4,0	0	2,00000	1,00000	1,77778	1,15407	1,54486

ближение для  $b_0$ . Как и следовало ожидать, сходимость, которая превосходна для  $s < 1$ , ухудшается при  $s > 1$ . При  $s = 4$  сходимости нет вовсе, последовательные приближения колеблются вокруг точного значения.

Ясно, что эта величина  $s$  больше радиуса сходимости пертурбационных рядов или в лучшем случае только совсем немного меньше его.

Как мы увидим на стр. 28, имеется возможность обеспечить аналитическое продолжение за радиус сходимости и получить выражение,

<sup>1)</sup> Напомним, что по определению  $\varepsilon_0 = 1$ ,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \dots = 2$ . — Прим. ред.

справедливое для всех значений  $s$ . На данной стадии рассмотрения мы можем применить специальную технику преобразования Эйлера [см. равенство (4.3.16)], которая дает для  $b_0$  при  $s=4$  приближенное значение 1,46231.

Для  $b_6$  выражение имеет вид

$$b_6 = 36 + \frac{s}{2} + \frac{s^2}{16} \left[ \frac{1}{b_6 - 16} - \frac{1}{64 - b_6} \right] + \frac{s^3}{32} \left[ \frac{1}{(b_6 - 16)^2} + \frac{1}{(64 - b_6)^2} \right] + \frac{s^4}{64} \left\{ \frac{1}{(b_6 - 16)^2} \left[ \frac{1}{4(b_6 - 4)} + \frac{1}{b_6 - 16} \right] - \frac{1}{(64 - b_6)^2} \left[ \frac{1}{4(100 - b_6)} + \frac{1}{64 - b_6} \right] \right\} + \dots$$

Величины  $s$  и последовательные приближения к  $b_6$  приведены в табл. 9.2.

Таблица 9.2

$s$	$b_6^{(0)}$	$b_6^{(1)}$	$b_6^{(2)}$	$b_6^{(3)}$	Точное
0,5	36	36,25	36,25022	.....	36,25022
2	36	37,00	37,00356	.....	37,00357
30	36	51,00	48,27998	53,28531	51,82897

Сходимость в этом случае аналогична сходимости для случая  $n=0$ , однако радиус сходимости значительно больше. Этого следовало ожидать, так как возмущающий член  $s \cos^2 \theta$  не может приблизиться к невозмущенной величине  $n^2$  до тех пор, пока  $s$  не станет достаточно большим. Позже (на стр. 28) мы разовьем приближенный метод, который основывается на этом соображении. Однако при  $s=30$  пертурбационный ряд уже не сходится; преобразование Эйлера дает величину 48,89, все еще довольно далекую от точного значения.

Из этих примеров ясно, что метод улучшения сходимости ряда по возрастающим степеням  $\lambda$  был бы крайне желателен. Мы рассмотрим два таких метода — метод Фредгольма и метод Финберга. Формула Фредгольма дает выражение, справедливое для всех значений параметра возмущения  $\lambda$ .

**Пертурбационная формула Финберга; вековой определитель.** Финберг заметил, что в предшествующих формулах теории возмущений элемент  $U_{ab}$  в данном порядке возмущения может встречаться более одного раза, так что появляются  $(U_{ab})^2$  и более высокие степени  $U_{ab}$ . Это можно увидеть, анализируя член пятого порядка в (9.1.14):

$$\lambda^5 \sum_{pqrs \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} U_{sn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)(k^2 - k_r^2)(k^2 - k_s^2)}.$$

Ясно, что в процессе суммирования по всем индексам (кроме  $n$ ) оба индекса  $p$  и  $r$  мы можем положить равными  $a$  и в то же время выбрать индексы  $q$  и  $s$  равными  $b$ , так что в этой сумме будет содержаться член  $(U_{ab})^2$ . Финберг затем указал, что можно получить пертурбационные формулы, в которых такого повторения элементов не будет.

Основания для такого замечания можно увидеть из следующего соображения. Пусть мы имеем задачу

$$\mathcal{L}(\psi) + k^2 \psi = \lambda U \psi, \tag{9.1.23}$$

где  $\mathcal{L}$  — некоторый оператор. В уравнении (9.1.1)  $\mathcal{L} = d^2/dx^2$ , в (9.1.19)  $\mathcal{L} = \nabla^2 - U_0$ ; в (9.1.20)  $\mathcal{L} = \nabla_1^2 + \nabla_1^2 - U_0$ . Невозмущенной является задача

$$\mathcal{L}(\varphi_n) + k_n^2 \varphi_n = 0, \tag{9.1.24}$$

где, если  $\mathcal{L}$  предполагается эрмитовым оператором, функции  $\varphi_n$  образуют полную ортонормированную систему:

$$\int \bar{\varphi}_n \varphi_m dv = \delta_{nm}. \quad (9.1.25)$$

Разложим теперь  $\psi$  в ряд по этой системе:

$$\psi = \sum_p c_p \varphi_p.$$

Подставляя этот ряд в уравнение (9.1.23) и используя (9.1.24), мы получим

$$\sum_p c_p (k^2 - k_p^2) \varphi_p = \lambda \sum_p c_p U \varphi_p.$$

Отсюда

$$(k^2 - k_q^2) c_q = \lambda \sum_p c_p \int \bar{\varphi}_q U \varphi_p dv = \lambda \sum_p c_p U_{qp},$$

или

$$\sum_p [(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}] c_p = 0. \quad (9.1.26)$$

Это верно для всех  $q$ , так что мы имеем систему линейных однородных уравнений для коэффициентов  $c_p$ . Такая система имеет ненулевое решение только в том случае, если определитель, образованный из коэффициентов при неизвестных  $c_p$ , равен нулю. Поэтому

$$|(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}| = 0, \quad (9.1.27)$$

или

$$\begin{vmatrix} k^2 - k_0^2 - \lambda U_{00} & -\lambda U_{01} & -\lambda U_{02} & \dots \\ -\lambda U_{10} & k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11} & -\lambda U_{12} & \dots \\ -\lambda U_{20} & -\lambda U_{21} & k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{vmatrix} = 0.$$

Это — уравнение, определяющее  $k^2$ . Определитель слева называется *вековым определителем*. Он был рассмотрен в гл. 4 (стр. 65). Теперь можно видеть, что повторений элемента  $U_{ab}$  при раскрытии определителя не встретится. Предположим, например, что мы имеем дело с задачей, в которой отличны от нуля только те  $U_{ab}$ , для которых  $a \leq 2$ ,  $b \leq 2$ . Тогда определитель после раскрытия и перегруппировки членов, которая нужна для приведения его к виду, аналогичному пертурбационной формуле (9.1.15), запишется следующим образом:

$$k^2 = k_0^2 + \lambda U_{00} + \lambda^2 \left\{ \frac{U_{01} U_{10}}{k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11} - \frac{\lambda^2 U_{21} U_{12}}{k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22}}} + \frac{U_{02} U_{20}}{k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22} - \frac{\lambda^2 U_{21} U_{12}}{k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11}}} \right\} + \lambda^3 \frac{U_{02} U_{21} U_{10} + U_{20} U_{01} U_{12}}{(k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11})(k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22}) - \lambda^2 U_{12} U_{21}}.$$

С другой стороны, если мы напишем равенство (9.1.15) для этого случая, то получим не конечное число членов, а бесконечный ряд. Можно показать, что дополнительные члены появляются в результате разложения

в ряд по степеням  $\lambda$  знаменателей в написанном выше выражении:

$$k^2 = k_0^2 + \lambda U_{00} + \lambda^2 \left[ \frac{U_{01}U_{10}}{k^2 - k_1^2} + \frac{U_{02}U_{20}}{k^2 - k_2^2} \right] + \lambda^3 \left[ \frac{U_{01}U_{11}U_{10}}{(k^2 - k_1^2)^2} + \right. \\ \left. + \frac{U_{01}U_{12}U_{20} + U_{02}U_{21}U_{10}}{(k^2 - k_1^2)(k^2 - k_2^2)} + \frac{U_{02}U_{22}U_{20}}{(k^2 - k_2^2)^2} \right] + \dots$$

Первый и последний члены в скобках при  $\lambda^3$  являются результатами разложения в ряд дробей  $1/(k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11})$  и  $1/(k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22})$ , которые появляются в точном выражении. Все такие разложения уменьшают область применимости пертурбационных формул; обычно полезнее видоизменить развитие теории возмущений так, чтобы обойтись без этих разложений.

Рассмотрим для этой цели уравнения (9.1.26), определяющие неизвестные коэффициенты  $c_p$ . Предположим, что мы рассматриваем то решение, которое приводит к  $\varphi_n$ , если возмущение исчезает, так что  $c_n = 1$ . Тогда

$$(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp})c_p = \lambda U_{pn} + \lambda \sum_{q \neq np} c_q U_{pq}. \quad (9.1.28)$$

(Запись  $q \neq np$  указывает, что в сумме индекс  $q$  не может принимать значений  $n$  и  $p$ .) Для построения метода последовательных приближений мы должны теперь написать уравнение, определяющее  $c_q$ . Во избежание повторов матричных элементов нужно выделить в уравнении для  $c_q$  члены с индексами  $p$  и  $n$ :

$$(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})c_q = \lambda U_{qn} + \lambda c_p U_{qp} + \lambda \sum_{r \neq npq} c_r U_{qr}. \quad (9.1.29)$$

Аналогично для  $c_r$

$$(k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr})c_r = \lambda U_{rn} + \lambda c_p U_{rp} + \lambda c_q U_{rq} + \lambda \sum_{s \neq npqr} c_s U_{rs}. \quad (9.1.30)$$

Пока еще не было сделано никаких приближений. Для конечного векового определителя, содержащего, следовательно, только конечное число членов в разложении  $\psi$ , получится конечное число уравнений вида (9.1.28)–(9.1.30). Если бы мы имели дело, например, с вековым определителем третьего порядка, то уравнение (9.1.29) не содержало бы члена с суммой; для случая определителя четвертого порядка последним уравнением было бы (9.1.30) и оно не содержало бы члена с суммой; и т. д. В каждом случае последнее уравнение не содержит члена с суммой.

Для того чтобы решить уравнения (9.1.28)–(9.1.30) и другие, которые получаются в процессе последовательного выделения коэффициентов, отбросим член с суммой в  $N$ -ом уравнении и найдем из него  $N$ -е  $c$ . Подставив полученный результат в  $(N-1)$ -е уравнение, находим  $(N-1)$ -е  $c$  и т. д. Чтобы получить формулы для бесконечного векового определителя, применим метод полной математической индукции для получения общего решения при любом  $N$ , что позволит осуществить предельный переход при  $N \rightarrow \infty$ .

Мы проиллюстрируем первый шаг этой процедуры, взяв  $N = 3$ . Из (9.1.29) находим

$$(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})c_q = \lambda U_{qn} + \lambda c_p U_{qp}.$$

Подставляя в (9.1.28), получаем формулу

$$\left[ k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{qp}U_{pq}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}} \right] c_p = \\ = \lambda U_{pn} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq}U_{qn}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}}, \quad (9.1.31)$$

дающую  $c_p$  до второго порядка точности включительно.

Уравнение, определяющее  $k^2$ , получается, если положить  $q = n$  в (9.1.26), а вместо  $c_n$  подставить единицу. Тогда

$$k^2 = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda \sum_{p \neq n} c_p U_{np}. \quad (9.1.32)$$

Подставляя значение  $c_p$  из (9.1.31), получаем  $k^2$  с точностью до третьего порядка:

$$k^2 = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{q \neq pn} \frac{U_{pq} U_{qp}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}}} + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq pn}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{\left[ k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{r \neq pn} \frac{U_{pr} U_{rp}}{k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr}} \right] [k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}]}. \quad (9.1.33)$$

Сравнение с приведенным выше точным выражением для векового определителя третьего порядка обнаруживает, что равенство (9.1.33) является точным для этого случая. Для определителей более высокого порядка оно дает точное разложение определителей третьего порядка, содержащих  $k^2 - k_n^2 - \lambda U_{nn}$ , а приближения входят только в алгебраические дополнения.

Легко провести аналогичное рассмотрение для  $N = 4$  или больших значений  $N$  и увидеть, какова должна быть форма решения для бесконечного  $N$ . Мы приведем окончательные результаты.

Пусть

$$(x^2)_{np} = k_p^2 + \lambda U_{pp} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq} U_{qp}}{k^2 - (x^2)_{npq}} + \lambda^3 \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{U_{pq} U_{qr} U_{rp}}{[k^2 - (x^2)_{npq}] [k^2 - (x^2)_{npqr}]} + \dots \\ (x^2)_{npq} = k_q^2 + \lambda U_{qq} + \lambda^2 \sum_{r \neq npq} \frac{U_{qr} U_{rq}}{k^2 - (x^2)_{npqr}} + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{r \neq npq \\ s \neq npqr}} \frac{U_{qr} U_{rs} U_{sq}}{[k^2 - (x^2)_{npqr}] [k^2 - (x^2)_{npqrs}]} + \dots \quad (9.1.34)$$

и т. д. Каждое  $x$ , с постепенно удлиняющимся индексом, имеет постепенно уменьшающееся число членов в каждом ряде, умножаемом на различные степени  $\lambda$ ; все больше матричных элементов опускается, и если имеется только конечное число состояний, то ряды в конце концов сводятся к нулю, так как все нулевые матричные элементы опущены. Можно дать общее выражение для  $c_p$  через эти константы  $(x^2)_{np}, \dots$ :

$$c_p = \lambda \frac{U_{pn}}{k^2 - (x^2)_{np}} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq} U_{qn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}]} + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{U_{pr} U_{qr} U_{rn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}] [k^2 - (x^2)_{npqr}]} + \dots \quad (9.1.35)$$

Подставляя этот результат для  $c_p$  в уравнение (9.1.32) для  $k^2$ , получаем

$$k^2 = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k^2 - (x^2)_{np}} + \lambda^3 \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq pn}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}]} + \\ + \lambda^4 \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq pn \\ r \neq qpn}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}] [k^2 - (x^2)_{npqr}]} + \dots \quad (9.1.36)$$

Ясно, что здесь нет повторения элементов  $U_{ab}$ , ввиду условия суммирования, указанного под каждым знаком суммы и не позволяющего двум разным индексам принимать равные значения. Для любого конечного векового определителя равенство (9.1.36) дает точное разложение.

Чтобы решить уравнение (9.1.36) относительно  $k^2$ , мы должны применить метод последовательных приближений. Это дает следующую формулу для  $a$ -го приближения:

$$(k^2)^{(a)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{[(k^2)^{(a-2)} - (x^2)_{np}^{(a-2)}]} + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{[(k^2)^{(a-3)} - (x^2)_{np}^{(a-3)}] [(k^2)^{(a-3)} - (x^2)_{npq}^{(a-3)}]} + \dots + \\ + \lambda^a \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np \\ r \neq npq \\ z \neq npqz \dots}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} \dots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2) (k_n^2 - k_q^2) (k_n^2 - k_r^2) \dots (k_n^2 - k_z^2)}. \quad (9.1.37)$$

Здесь  $(x^2)_{np \dots}^{(a-2)}$  есть величина  $(x^2)_{np \dots}$  в  $(a-2)$ -м приближении с погрешностью, пропорциональной  $\lambda^{a-1}$ . Применяя формулу (9.1.37), следует двигаться постепенно, образуя желаемый порядок приближения. Можно легко вычислить  $(k^2)^{(2)}$  как

$$(k^2)^{(2)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2}.$$

Затем  $(k^2)^{(3)}$  получится из (9.1.37) и (9.1.34),  $(k^2)^{(4)}$  из (9.1.37) и  $(k^2)^{(3)}$  и т. д. Результаты этих вычислений можно затем подставить в (9.1.35) и определить соответствующие значения коэффициентов  $c_p$ .

Сходимость пертурбационной формулы Финберга (9.1.37) определяется сходимостью соответствующего детерминантного отношения, которое равно

$$\frac{1}{M_{nn}} \left| \frac{(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}}{\delta_{qn} + (1 - \delta_{qn}) [k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}]} \right|. \quad (9.1.38)$$

Здесь  $M_{nn}$  — алгебраическое дополнение элемента с индексами  $(n, n)$ , равного  $(k^2 - k_n^2 - \lambda U_{nn})$ , в определителе (9.1.38). В  $a$ -м приближении все произведения в разложении указанного определителя, которые содержат более чем  $a$  недиагональных элементов  $U_{pq}$  ( $p \neq q$ ), должны быть опущены. Ряды (9.1.37) перестают сходиться, если  $\lambda$  превосходит  $\lambda_0$  — первое значение  $\lambda$ , для которого  $M_{nn}$  обращается в нуль, — или в том случае, когда перестанет сходиться весь определитель. Определитель сходится, если сходится сумма

$$\sum_{p \neq n} \frac{U_{qp}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}}. \quad (9.1.39)$$

Если число измерений  $N$ , то для этой сходимости  $U_{pq}$  должно для больших  $p$  и  $q$  стремиться к нулю по крайней мере со скоростью  $(k_p k_q)^{-N-\varepsilon}$ ,  $\varepsilon > 0$  (если  $U$  — эрмитов оператор, так что  $\overline{U_{qp}} = U_{pq}$ ). Это условие имеет значение для тех  $U(r)$ , у которых  $(2N-1)$ -я производная разрывна, так что  $2N$ -я производная сингулярна. Любая более гладкая зависимость  $U$  от  $r$  приводит, конечно, к сходимости ряда (9.1.39). В одномерном случае, когда  $2N-1$  равно единице,  $U$  должно быть по крайней мере кусочно-гладким. Конечно, условие сходимости в среднем рядов для  $\psi$  менее жестко. Мы можем установить требования относительно поведения элементов  $U_{pq}$  при рассмотрении сходимости рядов  $\sum c_p^2$ , где  $c_p$  выражаются формулой (9.1.35). Такой анализ показывает, что величина  $|U_{pn}|^2$  при увеличении  $p$  должна быть порядка  $k_p^{4-N-\varepsilon}$ ,  $\varepsilon > 0$ , как было получено в (9.1.22) для итерационно-пертурбационной формулы.

Указанные выше условия не зависят от значения  $\lambda$ , и, следовательно, не имеют отношения к сходимости ряда (9.1.36), как ряда по степеням  $\lambda$ . Радиус сходимости этого ряда определяется первым нулем  $M_{nn}$ . На это указывает форма выражения (9.1.38). Более наглядно это можно также показать, вернувшись к вековому определителю (9.1.27) и уравнению (9.1.26) для определения коэффициентов  $c_p$  в предположении, что  $k^2$  известно. Как мы увидим, эти коэффициенты бесконечны, если  $M_{nn}$  равно нулю. Пусть в равенстве (9.1.26)  $c_n = 1$ ; тогда получается линейная неоднородная система уравнений

$$\sum_{p \neq n} [(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}] c_p = -[(k^2 - k_n^2) \delta_{qn} - \lambda U_{qn}].$$

Решения для  $c_p$  обратно пропорциональны определителю, образованному из коэффициентов при  $c_p$ . Этот определитель может быть получен из векового определителя зачеркиванием  $n$ -го столбца и  $n$ -й строки и равен, следовательно, как раз  $M_{nn}$ . Коэффициенты  $c_p$  становятся, таким образом, бесконечными, если  $M_{nn}$  обращается в нуль, и разложение (9.1.35) перестает существовать.

Абсолютная величина  $\lambda_0$  — наименьшего  $\lambda$ , для которого  $M_{nn}$  как функция от  $\lambda$  равно нулю, — есть, следовательно, радиус сходимости ряда (9.1.35) для  $c_p$ . Мы покажем теперь, что  $M_{nn}$  становится равным нулю всякий раз, когда решения задачи (9.1.23) вырождаются. То, что  $M_{nn}$  равно нулю для этих частных значений  $\lambda_0$  и  $k^2$ , означает, что существует решение уравнения (9.1.23), не содержащее функции  $\varphi_n$ . Такое решение можно, конечно, получить, взяв линейную комбинацию двух вырожденных решений, что доказывает теорему. Можно доказать также обратную теорему.

Отсюда мы делаем вывод, что радиус сходимости пертурбационной формулы Финберга определяется наименьшей абсолютной величиной  $\lambda$ , для которого решения становятся вырожденными. Рис. 9.1 иллюстрирует сходящиеся и расходящиеся решения. Линии представляют изменение первых двух собственных значений  $k_0^2$  и  $k_1^2$  с увеличением  $\lambda$  от 0. Радиус сходимости рядов Финберга есть  $\lambda_0$ , потому что именно при  $\lambda = \lambda_0$  наблюдается вырождение. Для  $\lambda < \lambda_0$  ряды будут сходиться, для  $\lambda \geq \lambda_0$  — расходятся.

**Пример.** Применим теперь пертурбационную формулу (9.1.36) к четным периодическим решениям уравнения Матье, рассмотренного выше на стр. 13 с применением итерационно-пертурбационной формулы (которая перестала быть верной при  $s=4$  для  $n=0$  и  $s=30$  для  $n=6$ ).

Для второго порядка (9.1.36) дает ( $b_n$  в знаменателе  $\simeq n^2 + s/2$ )



$$b_n = n^2 + \frac{s}{2} + \frac{s^2}{16} \left[ \frac{1}{b_n - (n-2)^2 - s/2} + \frac{1}{b_n - (n+2)^2 - s/2} \right] + \dots \text{ при } n \neq 0,$$

$$b_0 = \frac{s}{2} + \frac{s^2}{8} \left[ \frac{1}{b_0 - 4 - s/2} \right] + \dots \text{ при } n = 0.$$

Для случая  $n=0, s=4$  в этом порядке получается  $b=2-1/2=1,5$ , что намного ближе к точному значению 1,54486, чем величина 1,00, которая получалась в итерационно-пертурбационном методе на этом этапе аппроксимации. Для случая  $n=6, s=30$  получается 51,8035, что довольно хорошо согласуется с точным значением 51,8290, в то время как итерационно-пертурбационный метод в соответствующем случае дает 48,2800. Различие между двумя формулами возникает из-за предположения, что  $s$  мало, и связанного с этим в итерационно-пертурбационной формуле разложения по степеням  $s$ . Ясно, что в рассматриваемом случае это практически нецелесообразно. Например, в случае  $b_0$  величина  $4 - b_0 = 2$  как раз равна  $s/2$ .

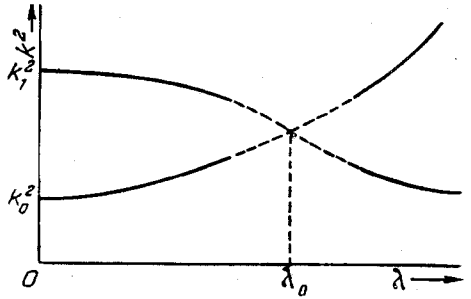


Рис. 9.1. Область сходимости последовательности (9.1.37) к точному значению  $k^2$  имеется только для  $\lambda < \lambda_0$ .

По сути дела, для уравнения Матье ряды Финберга приводят к точным непрерывным дробям (см. т. I, стр. 531), которые и используются для получения точного значения, указанного выше. Члены порядка  $\lambda^3$  и выше в (9.1.36) исчезают. Рассмотрим, например, член с  $\lambda^3$ , который содержит  $U_{np}U_{pq}U_{qn}$  ( $p \neq n, q \neq np$ ). Из общего выражения для  $U_{nm}$  выше на стр. 14 мы видим, что  $p$  должно быть равно  $n \pm 2$ . Следовательно,  $q$  должно быть равно только  $n \pm 4$ , после чего  $U_{qn}$  исчезает, и значит, формула

$$b_n = n^2 + sU_{nn} + s^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{b_n - (x^2)_{np}}$$

является точной. Теперь  $(x^2)_{np}$  в (9.1.34) равно

$$x_{np}^2 = p^2 + sU_{pp} + s^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq}U_{qp}}{b_n - (x^2)_{npq}} = p^2 + sU_{pp} +$$

$$+ s^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq}U_{qp}}{b_n - q^2 - sU_{qq}} - s^2 \sum_{r \neq npq} \frac{U_{qr}U_{rq}}{b_n - r^2 - sU_{rr}} - s^2 \sum_{t \neq npqr} \frac{U_{rt}U_{tr}}{b_n - t^2 - sU_{tt}} - \dots$$

Нам нужно теперь только подставить сюда выражение для  $U_{pq}$ , позволяющее получить непрерывную дробь для  $b_n$ . Например, для  $n=0$

$$b_0 = \frac{1}{2} s + \frac{s^2/8}{b_0 - 4 - \frac{1}{2} s - \frac{s^2/16}{b_0 - 9 - \frac{1}{2} s - \frac{s^2/16}{b_0 - 16 - \frac{1}{2} s - \dots}}$$

Если для  $s=4$  подставить  $b_0=1,5$ , как было получено раньше, и вычислить правую часть, включая члены  $b_0-9-s/2$ , то получится  $b_0=1,545$ , что уже близко к точному значению  $1,54486$ .

**Пертурбационная формула Фредгольма.** Как было показано выше, пертурбационная формула Финберга может иметь конечный радиус сходимости; ряды расходятся, как только  $\lambda$  превосходит величину, при которой появляется вырождение собственных значений. Этот вывод тем более имеет место для итерационно-пертурбационной формулы, поскольку, как это было указано, эта формула может быть получена из формулы Финберга дальнейшими разложениями, что, вообще говоря, приводит к рядам с еще меньшим радиусом сходимости.

В настоящем пункте мы выведем пертурбационную формулу, которую можно применять при всех значениях  $\lambda$ ; тем самым она обеспечит аналитическое продолжение рядов итерационно-пертурбационной формулы и формулы Финберга за их радиусы сходимости. Эти формулы более обозримы, если исследовать возмущения в терминах операторов и векторов в абстрактном векторном пространстве. Кроме того, такое рассмотрение будет общим, допускающим распространение на любые задачи теории возмущений.

Рассмотрим задачу о собственных значениях

$$(\mathfrak{A} - E)e = \lambda \mathfrak{B}e, \quad (9.1.40)$$

где  $E$  — собственное значение, а  $\mathfrak{A}$  и  $\mathfrak{B}$  — эрмитовы операторы. Невозможная задача соответствует оператору  $\mathfrak{A}$  с собственными значениями  $\varepsilon_n$  и собственными векторами  $f_n$

$$\mathfrak{A}f_n = \varepsilon_n f_n. \quad (9.1.41)$$

Возмущающий член выражается оператором  $\lambda \mathfrak{B}$ . Уравнения (9.1.40) и (9.1.41) суть просто уравнения (9.1.1) и (9.1.2), записанные в абстрактном векторном пространстве. В случае более сложной многомерной задачи уравнение (9.1.40) имеет вид (9.1.19) или (9.1.20) и т. п.; как подчеркнуто выше, уравнения (9.1.40) и (9.1.41) применимы также ко многим другим задачам. Аналог интегрального уравнения (9.1.4), из которого были выведены итерационно-пертурбационные формулы, получается здесь введением оператора, обратного к  $\mathfrak{A} - E$ . Уравнение (9.1.40) принимает вид

$$e = \lambda (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B}e. \quad (9.1.42)$$

Мы снова отделяем собственный вектор, к которому стремится  $e$ , когда  $\lambda$  стремится к нулю. Пусть это будет  $f_n$ , а соответствующие  $e$  и  $E$  обозначим через  $e_n$  и  $E_n$ :

$$e_n \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} f_n.$$

Чтобы описать отделение  $f_n$  от остатка правой части в уравнении (9.1.42), необходимо использовать понятие *проекционного оператора*  $\mathfrak{P}_n$ . Этот оператор определен так, что он выделяет ту часть любого вектора, которая пропорциональна  $f_n$ . Он, таким образом, имеет следующие свойства:

$$\mathfrak{P}_n f_n = f_n; \quad \mathfrak{P}_n f_m = 0 \quad \text{при } m \neq n.$$

Его можно представить более конкретно в форме аффинора

$$\mathfrak{P}_n = f_n f_n^*.$$

Следовательно, если  $e = \sum \alpha_p f_p$ , то  $\mathfrak{P}_n e = \alpha_n f_n$ . Таким образом, уравнение (9.1.42) для  $e_n$  мы можем записать в форме

$$e_n = f_n + \lambda (1 - \mathfrak{P}_n) (\mathfrak{A} - E_n)^{-1} \mathfrak{B}e_n. \quad (9.1.43)$$

Для удобства введем обозначение

$$\mathfrak{K} = (1 - \mathfrak{P}_n)(\mathfrak{A} - E_n)^{-1}\mathfrak{B}, \quad (9.1.44)$$

так что теперь (9.1.42) принимает вид неоднородного относительно  $\mathbf{e}_n$  уравнения

$$\mathbf{e}_n = \mathbf{f}_n + \lambda \mathfrak{K} \mathbf{e}_n. \quad (9.1.45)$$

Символическое решение этого уравнения есть

$$\mathbf{e}_n = \frac{1}{1 - \lambda \mathfrak{K}} \mathbf{f}_n = \mathbf{f}_n + \frac{\lambda \mathfrak{K}}{1 - \lambda \mathfrak{K}} \mathbf{f}_n. \quad (9.1.46)$$

Итерационно-пертурбационная формула для вектора  $\mathbf{e}_n$  получится разложением  $1/(1 - \lambda \mathfrak{K})$  в степенной ряд по  $\lambda$

$$\mathbf{e}_n = \mathbf{f}_n + \lambda \mathfrak{K} \mathbf{f}_n + \lambda^2 (\mathfrak{K}^2 \mathbf{f}_n) + \dots \quad (9.1.47)$$

Этот ряд идентичен ряду (9.1.13), так как если мы подставим в разложение оператора  $\mathfrak{K}$  по собственным векторам  $\mathbf{f}_n$

$$\mathfrak{K} = \sum_{pq} \mathbf{f}_p \mathbf{f}_q^* (\mathbf{f}_p^* \mathfrak{K} \mathbf{f}_q)$$

величину скалярного произведения

$$\mathbf{f}_p^* \mathfrak{K} \mathbf{f}_q = \mathbf{f}_p^* (1 - \mathfrak{P}_n)(\mathfrak{A} - E_n)^{-1} \mathfrak{B} \mathbf{f}_q = \frac{\mathbf{f}_p^* \mathfrak{B} \mathbf{f}_q}{\varepsilon_p - E_n}, \quad p \neq n,$$

то это разложение примет вид

$$\mathfrak{K} = \sum_{pq \neq n} \frac{B_{pq}}{\varepsilon_p - E_n} \mathbf{f}_p \mathbf{f}_q^*, \quad B_{pq} = (\mathbf{f}_p^* \mathfrak{B} \mathbf{f}_q).$$

Произведение  $\mathfrak{K} \mathbf{f}_n$  равно  $\sum_{p \neq n} \frac{B_{pn} \mathbf{f}_p}{\varepsilon_p - E_n}$  и совпадает, конечно, с членом первого порядка в (9.1.10). Произведение  $\mathfrak{K}^2 \mathbf{f}_n$  равно

$$\mathfrak{K}^2 \mathbf{f}_n = \sum_{q \neq n} \frac{B_{qn}}{\varepsilon_q - E_n} \mathfrak{K} \mathbf{f}_q = \sum_{pq \neq n} \frac{B_{pq} B_{qn}}{(\varepsilon_p - E_n)(\varepsilon_q - E_n)} \mathbf{f}_p \quad (9.1.48)$$

в согласии с членом второго порядка в (9.1.12) и т. д.

Радиус сходимости дается абсолютным значением той величины  $\lambda$ , для которой однородное уравнение, соответствующее (9.1.45), имеет ненулевое решение, так как, вообще говоря,  $\mathfrak{K}^q \mathbf{f}_n$  не будет ортогональным к такому решению при всех значениях  $q$ . Таким образом, в (9.1.46) особенности сосредоточены в точках  $\lambda_r$ , являющихся собственными значениями уравнения

$$\mathbf{g}_r = \lambda_r \mathfrak{K} \mathbf{g}_r. \quad (9.1.49)$$

Подставляя из (9.1.44) выражение для  $\mathfrak{K}$  и умножая<sup>1)</sup> на  $\mathfrak{A} - E$ , перепишем (9.1.49) в виде

$$(\mathfrak{A} - E) \mathbf{g}_r = \lambda_r (1 - \mathfrak{P}_n) \mathfrak{B} \mathbf{g}_r. \quad (9.1.50)$$

Важно отметить, что  $\lambda_r$  — не обязательно действительное число, так как  $(1 - \mathfrak{P}_n) \mathfrak{B}$  — не обязательно эрмитов оператор. Из (9.1.50) вытекает, что  $\mathbf{f}_n^* \cdot \mathbf{g}_r = 0$ , и, следовательно,  $\mathbf{g}_r$  является тем решением исходной задачи на собственные значения (9.1.40) с  $\lambda = \lambda_r$ , которое не содержит  $\mathbf{f}_n$ . Такое решение можно получить, если  $\lambda$  таково, что уравнение (9.1.40) имеет

<sup>1)</sup> Отметим, что  $\mathfrak{A} \mathfrak{P} = \mathfrak{P} \mathfrak{A}$ . — *Прим. ред.*

вырожденные решения, т. е. существуют по крайней мере два решения с одинаковыми значениями  $E$  и  $\lambda$ , так что можно построить линейную комбинацию этих решений, не содержащую  $f_n$ . Следовательно, как и в случае формулы Финберга, радиус сходимости ряда (9.1.47) определяется наименьшей абсолютной величиной того  $\lambda$ , при котором уравнение (9.1.40) имеет вырожденные решения.

Обратимся теперь к задаче развития теории возмущений в такой форме, которая обеспечила бы аналитическое продолжение решения за указанный радиус сходимости.

Перепишем уравнение (9.1.46) для символического решения  $e_n$ , введя функцию  $\chi(\lambda)$ :

$$e_n = \frac{\chi(\lambda)/(1-\lambda\mathfrak{F})}{\chi(\lambda)} f_n. \quad (9.1.51)$$

Функцию  $\chi(\lambda)$  выберем следующим образом. Она должна быть целой функцией от  $\lambda$ , т. е. не должна иметь особенностей во всей комплексной плоскости  $\lambda$ . Ее нули должны совпадать с полюсами функции  $1/(1-\lambda\mathfrak{F})$  (т. е.  $\lambda = \lambda_r$ ) и иметь тот же самый порядок. Поэтому  $\chi(\lambda)/(1-\lambda\mathfrak{F})$ , так же как и  $\chi(\lambda)$ , будет целой функцией, и ее можно разложить в степенной ряд по  $\lambda$ , имеющий бесконечный радиус сходимости (см. т. I, стр. 361). Таким образом, оператор, связывающий  $e_n$  с  $f_n$ , будет представлен в виде отношения двух выражений, каждое из которых можно разложить в степенной ряд по  $\lambda$  с бесконечным радиусом сходимости. Особенность, которая присутствует в исходном выражении, все еще остается в (9.1.51), так как  $\chi(\lambda)$  обращается в нуль при  $\lambda = \lambda_r$ .

Рассмотрим теперь к определению целой функции  $\chi$ . Аналогичная задача рассмотрена в гл. 4, стр. 364. Процедура, описанная там в общих чертах, включает в первую очередь вычисление логарифмической производной от  $\chi$ ,  $\chi'(\lambda)/\chi(\lambda)$ , где штрих означает дифференцирование. Ясно, что эта функция имеет полюсы в нулях функции  $\chi(\lambda)$ , т. е. при  $\lambda = \lambda_r$ . Таким образом, чтобы получить  $\chi$ , необходимо приравнять  $\chi'/\chi$  функции, имеющей полюсы соответствующего вида в точках  $\lambda = \lambda_r$ . Таких функций много, и мы выберем простейшую из них:

$$\frac{\chi'(\lambda)}{\chi(\lambda)} = \text{Spur} \left[ \frac{-\mathfrak{F}}{1-\lambda\mathfrak{F}} \right] = \sum_r \frac{1}{\lambda - \lambda_r}. \quad (9.1.52)$$

Здесь символ Spur (след) означает сумму диагональных элементов матрицы, стоящей под знаком Spur. Второе равенство вытекает из того, что диагональные элементы  $\mathfrak{F}$  равны  $1/\lambda_r$ . Этот выбор выражения для  $\chi'/\chi$  был сделан потому, что он приводит к Фредгольмовскому решению неоднородного интегрального уравнения второго рода, если  $\mathfrak{F}$  соответствует интегральному оператору, так что (9.1.40) соответствует интегральному уравнению. Наиболее общий выбор функции  $\chi'(\lambda)/\chi(\lambda)$  такой:

$$\frac{\chi'(\lambda)}{\chi(\lambda)} = \text{Spur} \left[ \frac{f(\lambda, \mathfrak{F})}{1-\lambda\mathfrak{F}} \right] = \sum_r \frac{f(\lambda, 1/\lambda_r)}{1-(\lambda/\lambda_r)},$$

где  $f$  — любая целая функция от  $\lambda$ , которая не имеет нулей при  $\lambda = \lambda_r$  и для которой  $f(\lambda_r, 1/\lambda_r) = -1/\lambda_r$ . Различные выборы  $f$  дают возможность выделить разные порядки возмущения.

Возвращаясь к (9.1.52), мы можем проинтегрировать обе части равенства от  $\lambda = 0$  до  $\lambda = \lambda$ , предполагая, что  $\lambda = 0$  не входит в множество  $\{\lambda_r\}$ , т. е. что невозмущенная задача не является вырожденной. Тогда

$$\chi(\lambda) = \exp \left[ - \int_0^\lambda \text{Spur} \left( \frac{\mathfrak{F}}{1-\lambda\mathfrak{F}} \right) d\lambda \right]. \quad (9.1.53)$$

Следующий этап нашей программы — разложение  $\chi(\lambda)$  и  $\chi(\lambda)/(1-\lambda\mathfrak{R})$  в степенные ряды по  $\lambda$ . Нам придется ввести обозначение для следа различных степеней оператора  $\mathfrak{R}$ . Пусть

$$x_p = \text{Spur } \mathfrak{R}^p. \quad (9.1.54)$$

Рассмотрим сначала  $\chi(\lambda)$ . Пусть

$$\chi(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^n, \quad a_0 = 1.$$

Тогда

$$\chi'(\lambda)/\chi(\lambda) = \sum n a_n \lambda^{n-1} / \sum a_n \lambda^n.$$

Но из (9.1.52) и определения (9.1.54) следует, что

$$\chi'(\lambda)/\chi(\lambda) = - \sum x_{n+1} \lambda^n,$$

т. е.

$$\sum n a_n \lambda^{n-1} = - (\sum x_{p-1} \lambda^p) (\sum a_s \lambda^s).$$

Приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях  $\lambda$  в обеих частях этого равенства, мы получаем рекуррентное соотношение для коэффициентов  $a_n$

$$(n+1) a_{n+1} + \sum_{s=1}^n a_s x_{n+1-s} = - x_{n+1}. \quad (9.1.55)$$

Эти равенства образуют систему неоднородных линейных уравнений для  $a_s$ ; ее решение можно представить в форме определителя

$$a_n = - \frac{1}{n!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & x_1 \\ x_1 & 2 & 0 & \dots & 0 & x_2 \\ x_2 & x_1 & 3 & \dots & 0 & x_3 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot \\ x_{n-1} & x_{n-2} & x_{n-3} & \dots & x_1 & x_n \end{vmatrix}. \quad (9.1.56)$$

Первые четыре из этих коэффициентов таковы:

$$\begin{aligned} a_1 &= -x_1, \\ a_2 &= \frac{1}{2}(x_1^2 - x_2), \\ a_3 &= -\frac{1}{6}(2x_3 - 3x_1x_2 + x_1^3), \\ a_4 &= -\frac{1}{24}(6x_4 - 8x_1x_3 + 6x_2x_1^2 - 3x_2^2 - x_1^4). \end{aligned} \quad (9.1.57)$$

Мы можем использовать подобный метод для разложения  $\chi(\lambda)/(1-\lambda\mathfrak{R})$  в степенной ряд по  $\lambda$ . Берем логарифм и дифференцируем. Тогда, если

$$\frac{\chi(\lambda)}{1-\lambda\mathfrak{R}} = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \lambda^n, \quad b_0 = 1, \quad (9.1.58)$$

то

$$-\text{Spur} \left( \frac{\mathfrak{R}}{1-\lambda\mathfrak{R}} \right) + \frac{\mathfrak{R}}{1-\lambda\mathfrak{R}} = \sum \frac{nb_n \lambda^{n-1}}{\sum b_n \lambda^n}.$$

Сравнивая с уравнениями, определяющими  $a_n$ , мы видим, что отличие состоит только в том, что в каждом члене  $x_p$  заменено на  $x_p - \mathfrak{K}^p$ . Следовательно,

$$b_n = -\frac{1}{n!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & x_1 - \mathfrak{K} \\ x_1 - \mathfrak{K} & 2 & 0 & \dots & 0 & x_2 - \mathfrak{K}^2 \\ x_2 - \mathfrak{K}^2 & x_1 - \mathfrak{K} & 3 & \dots & 0 & x_3 - \mathfrak{K}^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{n-1} - \mathfrak{K}^{n-1} & x_{n-2} - \mathfrak{K}^{n-2} & x_{n-3} - \mathfrak{K}^{n-3} & \dots & x_1 - \mathfrak{K} & x_n - \mathfrak{K}^n \end{vmatrix}.$$

Если мы положим  $b_n = b_n(x, \mathfrak{K})$  в знак того, что  $b_n$  есть функция от  $x$  и от следов степеней  $\mathfrak{K}$ , то будем иметь

$$b_n(x, 0) = a_n.$$

Первые три из этих коэффициентов даны ниже:

$$\begin{aligned} b_1 &= \mathfrak{K} + a_1, \\ b_2 &= \mathfrak{K}^2 - \mathfrak{K}x_1 + a_2, \\ b_3 &= \mathfrak{K}^3 - \mathfrak{K}^2x_1 - \frac{1}{2}(x_2 - x_1^2)\mathfrak{K} + a_3, \\ b_n &= \mathfrak{K}^n + a_1\mathfrak{K}^{n-1} + a_2\mathfrak{K}^{n-2} + \dots \end{aligned} \quad (9.1.59)$$

Мы можем теперь раскрыть формулу (9.1.51) и получить таким образом фредгольмовское выражение для  $e_n$ :

$$e_n = f_n + \frac{\sum_{p=1}^{\infty} c_p \lambda^p}{\sum_{p=0}^{\infty} a_p \lambda^p} f_n, \quad c_p = b_p - a_p. \quad (9.1.60)$$

Отсюда с точностью до третьего порядка имеем

$$\dot{e}_n = f_n + \lambda \mathfrak{K} \frac{1 + \lambda(\mathfrak{K} - x_1) + \lambda^2 \left[ \mathfrak{K}^2 - \mathfrak{K}x_1 - \frac{1}{2}(x_2 - x_1^2) \right]}{1 - \lambda x_1 - \frac{1}{2} \lambda^2 (x_2 - x_1^2) - \frac{1}{6} \lambda^3 (2x_3 - 3x_1 x_2 + x_1^3)} f_n. \quad (9.1.61)$$

Соответствующая величина собственного значения  $E_n$  получится из

$$E_n = \varepsilon_n - \lambda (f_n^* \mathfrak{B} e_n). \quad (9.1.62)$$

Если подставить (9.1.61) в это выражение, то получится формула для  $E$  с точностью до пятого порядка.

Для вычисления (9.1.61) мы должны найти величины следов, а также матричные элементы  $(f_p^* \mathfrak{K}^a f_n) = (\mathfrak{K}^a)_{pn}$  для  $a \leq 4$ .

Вспоминая, что  $\mathfrak{K} = (1 - \mathfrak{B}_n)(\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B}$ , имеем:

$$\begin{aligned} (\mathfrak{K})_{pn} &= \frac{B_{pn}}{\varepsilon_p - E_n}, & p \neq n, \\ (\mathfrak{K}^2)_{pn} &= \sum_{q \neq n} \frac{B_{pq} B_{qn}}{(\varepsilon_p - E_n)(\varepsilon_q - E_n)}, & p \neq n, \\ (\mathfrak{K}^3)_{pn} &= \sum_{qr \neq n} \frac{B_{pq} B_{qr} B_{rn}}{(\varepsilon_p - E_n)(\varepsilon_q - E_n)(\varepsilon_r - E_n)}, & p \neq n, \\ (\mathfrak{K}^4)_{pn} &= \sum_{qrs \neq n} \frac{B_{pq} B_{qr} B_{rs} B_{sn}}{(\varepsilon_p - E_n)(\varepsilon_q - E_n)(\varepsilon_r - E_n)(\varepsilon_s - E_n)}, & p \neq n. \end{aligned} \quad (9.1.63)$$

$(\mathfrak{R}^a)_{nn}$  равно нулю из-за оператора  $1 - \mathfrak{P}_n$ , хотя для  $(\mathfrak{R}^a)_{pp}$  это не так. Следы  $\alpha_a$  выражаются формулами

$$\alpha_a = \sum_{p \neq n} (\mathfrak{R}^a)_{pp},$$

так что

$$\alpha_1 = \sum_{p \neq n} \frac{B_{pp}}{\varepsilon_p - E_n}, \quad \alpha_2 = \sum_{pq \neq n} \frac{B_{pq} B_{qp}}{(\varepsilon_p - E_n)(\varepsilon_q - E_n)} \quad \text{и т. д.} \quad (9.1.64)$$

Теперь мы можем написать

$$\begin{aligned} \epsilon_n = f_n + \sum_{p \neq n} f_p \left\{ \lambda (\mathfrak{R})_{pn} + \lambda^2 [(\mathfrak{R}^2)_{pn} - \alpha_1 (\mathfrak{R})_{pn}] + \lambda^3 [(\mathfrak{R}^3)_{pn} - \alpha_1 (\mathfrak{R}^2)_{pn} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} (\alpha_2 - \alpha_1^2) (\mathfrak{R})_{pn}] \right\} \left\{ 1 - \lambda \alpha_1 - \frac{1}{2} \lambda^2 (\alpha_2 - \alpha_1^2) - \frac{1}{6} \lambda^3 (2\alpha_3 - 3\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_1^3) \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (9.1.65)$$

Равенство, определяющее  $E_n$ , как это следует из формулы (9.1.62), в третьем порядке имеет вид:

$$\begin{aligned} E_n = \varepsilon_n - \lambda B_{nn} - \lambda^2 \sum_{p \neq n} B_{np} \left\{ (\mathfrak{R})_{pn} + \lambda [(\mathfrak{R}^2)_{pn} - \alpha_1 (\mathfrak{R})_{pn}] + \lambda^2 [(\mathfrak{R}^3)_{pn} - \right. \\ \left. - \alpha_1 (\mathfrak{R}^2)_{pn} - \frac{1}{2} (\alpha_2 - \alpha_1^2) (\mathfrak{R})_{pn}] \right\} \left\{ 1 - \lambda \alpha_1 - \frac{1}{2} \lambda^2 (\alpha_2 - \alpha_1^2) - \right. \\ \left. - \frac{1}{6} \lambda^3 (2\alpha_3 - 3\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_1^3) \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (9.1.66)$$

Заметим, что энергетическое уравнение не отличается от результата, полученного итерационно-пертурбационным методом, пока не достигается третий порядок относительно  $\lambda$ . Так как  $(\mathfrak{R})_{pn}$  и т. д. в (9.1.66) содержат  $E$ , то (9.1.66) нельзя рассматривать как явное выражение для  $E$ , а нужно рассматривать скорее как уравнение, которое надо решать серийой последовательных приближений, уже использованных для получения равенств (9.1.15) и (9.1.37).

Формулы (9.1.65) и (9.1.66) можно употреблять только в одномерном случае, потому что  $\alpha_1$  обращается в бесконечность для любой задачи с большим числом измерений. По этой причине важно получить формулы, не содержащие  $\alpha_1$ . Этого легче всего достигнуть, если умножить выражение (9.1.53) для  $\chi(\lambda)$  на целую функцию  $e^{\lambda \alpha_1}$ , предполагая на момент, что  $\alpha_1$  конечно, так что

$$\chi(\lambda) = \exp \left\{ - \int_0^\lambda \text{Spur} \left( \frac{\mathfrak{R}}{1 - \lambda \mathfrak{R}} \right) d\lambda + \lambda \alpha_1 \right\}. \quad (9.1.67)$$

Эта новая функция  $\chi(\lambda)$  имеет следующую логарифмическую производную:

$$\frac{\chi'(\lambda)}{\chi(\lambda)} = - \text{Spur} \left( \frac{\mathfrak{R}}{1 - \lambda \mathfrak{R}} \right) + \alpha_1 = - \sum_{p=1}^{\infty} \alpha_{p+1} \lambda^p.$$

Сравнивая с соответствующим уравнением, полученным раньше для  $\chi(\lambda)$  из (9.1.53), мы видим, что данное уравнение получается из прежнего, если положить  $\alpha_1 = 0$ . Мы можем, следовательно, немедленно напи-

сать для коэффициентов в разложении

$$\chi(\lambda) = \sum a_n^1 \lambda^n:$$

$$a_0^1 = 1, \quad a_1^1 = 0, \quad a_n^1 = -\frac{1}{n!} \begin{vmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & \dots & x_2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \dots & x_3 \\ x_2 & 0 & 4 & 0 & \dots & x_4 \\ x_3 & x_2 & 0 & 5 & \dots & x_5 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ x_{n-1} & x_{n-2} & x_{n-3} & x_{n-4} & \dots & x_n \end{vmatrix}. \quad (9.1.68)$$

Аналогично, если

$$\frac{\chi(\lambda)}{1 - \lambda \mathfrak{K}} = \sum b_n^1 \lambda^n,$$

то

$$b_n^1 = -\frac{1}{n!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\mathfrak{K} \\ -\mathfrak{K} & 2 & 0 & \dots & 0 & x_2 - \mathfrak{K}^2 \\ x_2 - \mathfrak{K}^2 & -\mathfrak{K} & 3 & \dots & 0 & x_3 - \mathfrak{K}^3 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot \\ x_{n-1} - \mathfrak{K}^{n-1} & x_{n-2} - \mathfrak{K}^{n-2} & x_{n-3} - \mathfrak{K}^{n-3} & \dots & -\mathfrak{K} & x_n - \mathfrak{K}^n \end{vmatrix}, \quad (9.1.69)$$

так что

$$\begin{aligned} b_1 &= \mathfrak{K}, \\ b_2 &= \mathfrak{K}^2 + a_2, \\ b_3 &= \mathfrak{K}^3 - \frac{1}{2} x_2 \mathfrak{K} + a_3, \\ b_4 &= \mathfrak{K}^4 - \frac{1}{2} x_2 \mathfrak{K}^2 - \frac{1}{3} x_3 \mathfrak{K} + a_4. \end{aligned}$$

Наконец, в формулах (9.1.65) и (9.1.66) мы просто полагаем  $x_1 = 0$ . Выражение для  $E$  теперь согласуется с результатами итерационно-пертурбационного метода до третьего порядка; результаты в методе Фредгольма отличаются в членах пятого порядка и выше.

**Пример.** Рассмотрим снова уравнение Матье. Мы можем установить следующее соответствие:  $-d^2/d\theta^2 \rightarrow \mathfrak{U}$ ,  $b_n \rightarrow E_n$ ,  $s \rightarrow -\lambda$  и  $U \rightarrow \mathfrak{B}$ , так что  $U_{pq} = B_{pq}$ . Мы можем использовать равенство (9.1.66) без изменений, так как рассматриваемая задача одномерная. Для собственного значения  $b_0$ , для которого  $E_n = 0$ ; фредгольмовское выражение дает в четвертом порядке

$$b_0 = \frac{1}{2} s + \left\{ \frac{1}{8} s^2 + \left[ \frac{1}{16} s^3 + \frac{1}{8} x_1 s^3 \right] + \left[ \frac{1}{32} s^4 + \frac{1}{(b_0 - 4)^3} + \frac{1}{128} s^4 + \frac{1}{16} x_1 s^4 - \frac{1}{16} s^4 \frac{x_2 - x_1^2}{b_0 - 4} \right] \right\} \left[ 1 + s x_1 + \frac{1}{2} s^2 (x_2 - x_1^2) \right]^{-1}.$$

Это уравнение можно решить последовательными приближениями. Результаты помещены в таблице ниже для случая  $s=4$  вместе с аналогичными результатами, полученными итерационно-пертурбационным методом.



Таблица 9.3

Метод	$b_0^{(0)}$	$b_0^{(1)}$	$b_0^{(2)}$	$b_0^{(3)}$	Точное
Фредгольма	2,0000	1,0000	1,5553	1,5442	1,5449
И.-П.	2,0000	1,0000	1,7778	1,1541	

Превосходство результатов Фредгольма очевидно; ошибка результата третьего приближения составляет менее чем один процент, четвертое приближение совпадает с точным значением вплоть до четвертой значащей цифры. Можно оценить радиус сходимости итерационно-пертурбационных формул, найдя наименьший нуль знаменателя в последнем выражении для  $b_0$ . Это дает  $s \simeq 5$  для величины корня. Таким образом, не удивительно, что сходимость для  $s=4$  у итерационно-пертурбационных формул получилась такая медленная.

**Вариационно-итерационный метод.** Каждый из рассмотренных выше методов приводит к уравнению, определяющему собственное значение, — уравнению, которое с помощью метода последовательных приближений [см., например, уравнение (9.1.15)] дает формулу пертурбационного типа, в которой собственное значение выражается через параметр взаимодействия  $\lambda$ . Фактически такая зависимость редко бывает явно выраженной, так как получаются очень громоздкие выражения.

Конечно, было бы более удобно получить явное выражение  $E$  как функции  $\lambda$ . Оказывается возможным найти обратную функцию, т. е. представить  $\lambda$  как функцию от  $E$  при ограничениях, которые появятся ниже. При таком методе мы рассматриваем  $\lambda$  как собственное значение, а  $E$  как данную величину, т. е. ищем интенсивность взаимодействия, необходимую для получения данного значения  $E$ . Такое требование соответствует положению, часто встречающемуся в практике, когда  $E$  — величина, известная из опыта, а нас интересует природа взаимодействия. В случае, если желательно определить  $E$  для отдельного значения  $\lambda$ , необходимо при таком методе определить  $\lambda$  как функцию  $E$  в окрестности этого значения  $\lambda$ , а затем воспользоваться методом обратной интерполяции.

Рассмотрим (9.1.40) как уравнение для собственных значений  $\lambda$ . Соответствующее интегральное уравнение дается формулой (9.1.42):

$$e = \lambda (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B} e.$$

Мы будем решать теперь это уравнение итерациями. Эта процедура будет отличаться от использованной в итерационно-пертурбационном методе тем, что мы не будем больше выделять специальный невозмущенный собственный вектор. Предположим снова, что  $\mathfrak{A}$  и  $\mathfrak{B}$  — эрмитовы операторы. Тогда существует собственное значение  $\lambda_0$ , наименьшее по абсолютной величине, соответствующее наименьшей интенсивности взаимодействия, для которой  $E$  является собственной величиной. Большие собственные значения соответствуют интенсивностям взаимодействия, для которых  $e$  является не наименьшим состоянием, а следующим за ним, и т. д.

Пусть нулевым приближением к  $e$  будет  $e^{(0)}$ , за которое мы выберем одно из невозмущенных состояний  $f_n$  для  $E$ , близкого к  $\varepsilon_n$ . Первое приближение  $e^{(1)}$  к  $e$  получится, если в правую часть данного выше интегрального уравнения подставить  $e^{(0)}$  вместо  $e$ , так что

$$e^{(1)} = (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B} e^{(0)}.$$

Заметим, что множитель  $\lambda$  можно опустить ввиду того, что мы интере-

суются только формой  $e$ . Нормировка не имеет значения, так как при умножении на произвольную постоянную решение рассматриваемого линейного однородного уравнения остается решением. Эта возможность опустить  $\lambda$  в итерационном процессе позволяет вывести явную функциональную зависимость  $\lambda$  от  $E$ . Продолжая итерационный процесс дальше, с помощью следующего рекуррентного соотношения между  $(n-1)$ -м и  $n$ -м приближением,

$$e^{(n)} = (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B}e^{(n-1)}, \quad (9.1.70)$$

получаем

$$e^{(n)} = [(\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B}]^n e^{(0)}. \quad (9.1.71)$$

Соответствующие приближения для  $\lambda_0$  получаются из первоначального уравнения

$$\lambda_0 = \frac{e^* (\mathfrak{A} - E) e}{e^* \mathfrak{B} e} \quad (9.1.72)$$

или из интегрального уравнения

$$\lambda_0 = \frac{e^* \mathfrak{B} e}{e^* \mathfrak{B} (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B} e}. \quad (9.1.73)$$

Если теперь подставить  $e^{(n)}$  вместо  $e$  в (9.1.72), получится  $n$ -е приближение для  $\lambda_0$ :

$$\lambda_0^{(n)} = \frac{(e^{(n)})^* (\mathfrak{A} - E) e^{(n)}}{(e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(n)}},$$

или из (9.1.70)

$$\lambda_0^{(n)} = \frac{(e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(n-1)}}{(e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(n)}}. \quad (9.1.74)$$

Если же  $e^{(n)}$  подставить вместо  $e$  в (9.1.73), мы получим  $(n + \frac{1}{2})$ -е приближение (смысл этого обозначения будет выяснен ниже):

$$\lambda_0^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{(e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(n)}}{(e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(n+1)}}. \quad (9.1.75)$$

Очевидно, что удобно ввести обозначение

$$[n, m] = (e^{(n)})^* \mathfrak{B} e^{(m)},$$

так что

$$\lambda_0^{(n)} = \frac{[n, n-1]}{[n, n]}, \quad \lambda_0^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{[n, n]}{[n, n+1]}. \quad (9.1.76)$$

Элементы  $[n, m]$  имеют следующие свойства:

$$[n, m] = [m, n] = [n+p, m-p].$$

Если рассмотренный выше процесс сходится, то цель, к которой мы стремились, достигнута, поскольку правая часть как равенства (9.1.74), так и (9.1.75) зависит только от  $E$ , так что результатом является точная зависимость  $\lambda$  от  $E$ . Обсуждение сходимости относится скорее к § 9.4, посвященному вариационному методу, так как строгое доказательство сходимости существенно основывается на вариационном принципе. В настоящем параграфе мы удовлетворимся формулировкой нужных здесь результатов и поверхностным рассмотрением условий, гарантирующих сходимость; дальнейшие подробности можно найти в уравнениях (9.4.93) – (9.4.110).

Если операторы  $\mathfrak{A} - E$  и  $\mathfrak{B}$  являются *положительно определенными* (и удовлетворяют условиям, указанным ниже на стр. 133), то

$$\lambda_0^{(n)} \geq \lambda_0^{(n+\frac{1}{2})} \geq \lambda_0^{(n+1)} \dots \geq \lambda_0 > 0. \quad (9.1.77)$$

Другими словами, последовательные приближения образуют монотонную последовательность, сходящуюся к  $\lambda_0$  справа [см. формулу (9.4.104)].

Если оператор  $\mathfrak{B}$  положительно определенный, а  $\mathfrak{A} - E$  — нет, то собственные значения  $\lambda_n$  не обязательно положительны. В этом случае справедливы более слабые неравенства. А именно,

$$|\lambda_0^{(n+\frac{1}{2})}| \geq |\lambda_0^{(n)}|, \quad |\lambda_0^{(n+\frac{1}{2})}| \geq |\lambda_0^{(n+\frac{3}{2})}| \dots \geq |\lambda_0|. \quad (9.1.78)$$

Следовательно, *только* полуполные приближения аппроксимируют  $|\lambda_0|$  справа. Целые приближения могут быть как больше, так и меньше  $|\lambda_0|$ .

**Сходимость метода.** Скорость сходимости к точному значению  $\lambda_0$  наиболее сильно зависит от отношения первых двух собственных значений  $\lambda_0$  и  $\lambda_1$  для данного  $E$ . Это можно в общих чертах продемонстрировать следующим образом. Пусть собственное значение  $\lambda_n$  в уравнении (9.1.40) имеет соответствующий собственный вектор  $\mathbf{g}_n$ , т. е.

$$(\mathfrak{A} - E) \mathbf{g}_n = \lambda_n \mathfrak{B} \mathbf{g}_n. \quad (9.1.79)$$

Эти векторы образуют полную систему, по которой мы можем разложить нулевое приближение:

$$\mathbf{e}^{(0)} = \sum a_m \mathbf{g}_m, \quad (9.1.80)$$

где  $a_m$  — числовые коэффициенты. Мы можем теперь вычислить  $\mathbf{e}^{(1)}$  и затем  $\mathbf{e}^{(n)}$ , так как

$$\mathbf{e}^{(1)} = (\mathfrak{A} - E)^{-1} \mathfrak{B} \left( \sum a_m \mathbf{g}_m \right),$$

или

$$\mathbf{e}^{(1)} = \sum \frac{a_m}{\lambda_m} \mathbf{g}_m,$$

и

$$\mathbf{e}^{(n)} = \sum \frac{a_m}{\lambda_m^n} \mathbf{g}_m. \quad (9.1.81)$$

Для положительно определенных эрмитовых операторов величины  $\lambda_m$  образуют монотонную последовательность  $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m, \dots$ . Следовательно, при отсутствии вырождения (т. е. равенства  $\lambda_0 = \lambda_1$ ) отношение амплитуды низшего состояния  $\mathbf{g}_0$  к амплитуде первой гармоники  $\mathbf{g}_1$  возрастает при возрастании порядка приближения: оно равно

$$\frac{a_0}{a_1} \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^n;$$

следовательно, для достаточно высокого порядка итерации разложение  $\mathbf{e}^{(n)}$  будет содержать главным образом  $\mathbf{g}_0$ , и соответствующая величина  $\lambda_0^{(n)}$  будет очень близка к точному значению  $\lambda_0$ . Скорость сходимости последовательности  $\lambda_0^{(n)}$  подобна скорости сходимости последовательности  $\mathbf{e}^{(n)}$ , поскольку, как будет показано в § 9.4 [см. (9.4.106)],

$$\frac{\lambda_0^{(n+1)} - \lambda_0^{(n+\frac{1}{2})}}{\lambda_0^{(n+\frac{1}{2})} - \lambda_0^{(n)}} \simeq \frac{\lambda_0}{\lambda_1}.$$

Если отношение  $\lambda_0/\lambda_1$  близко к единице, сходимость крайне медленная (слабая). Но в этом случае существует специальный прием, который позволяет экстраполировать точное значение, несмотря на медленную сходимость. Этот прием, конечно, можно применять и тогда, когда сходимость удовлетворительная, но обычно это не является необходимым.

Предположим, что процесс итерации продвинул настолько далеко, что остались только собственные векторы  $g_0$  и  $g_1$ . Тогда  $e^{(n)}$ , так же как и другие величины, такие, как  $\lambda_0^{(n)}$ , можно разложить на два члена: точный и ошибку. Если величину, нас интересующую, обозначить через  $F$ , то  $a$ -е приближение выражается формулой

$$F^{(a)} = F + F_1,$$

где  $F_1$  — ошибка. Проведя еще одну итерацию и вычислив  $F^{(a+1)}$ , мы получим

$$F^{(a+1)} = F + \varepsilon F_1,$$

где  $\varepsilon$  — коэффициент сходимости, приблизительно равный  $\lambda_0/\lambda_1$ , когда  $F = \lambda_0$  или  $e$ . Итерируя снова, получим

$$F^{(a+2)} = F + \varepsilon^2 F_1.$$

Из этих трех уравнений можно теперь найти  $F$  и  $\varepsilon$ :

$$F = F^{(a+2)} - \frac{[F^{(a+1)} - F^{(a+2)}]^2}{F^{(a)} - 2F^{(a+1)} + F^{(a+2)}} \quad (9.1.82)$$

и

$$\varepsilon = \frac{F^{(a+1)} - F^{(a+2)}}{F^{(a)} - F^{(a+1)}}. \quad (9.1.83)$$

В большинстве приложений  $\varepsilon$ , данное в (9.1.83), получается подстановкой  $F^{(a)} = \lambda_0^{(n)}$ ,  $F^{(a+1)} = \lambda_0^{(n+1/2)}$  и  $F^{(a+2)} = \lambda_0^{(n+1)}$ . Величина  $\varepsilon$ , полученная таким образом, является оценкой для  $\lambda_0/\lambda_1$  и может быть использована также для экстраполяции других величин, таких, как  $e$ , которые зависят от  $\varepsilon$  аналогичным образом. Если мы обозначим такую величину через  $G$  и ее  $a$ -е приближение через  $G^{(a)}$ , то экстраполированная величина  $G$  будет равна

$$G = G^{(a+2)} - \frac{F^{(a+1)} - F^{(a+2)}}{F^{(a)} - 2F^{(a+1)} + F^{(a+2)}} [G^{(a+1)} - G^{(a+2)}]. \quad (9.1.84)$$

В случае, когда оператор  $\mathfrak{A} - E$  — эрмитов, но не положительно определенный, а  $\mathfrak{B}$  — эрмитов положительно определенный оператор, сходимость последовательности  $\lambda_0^{(n)}$  также зависит от отношения  $\lambda_0/\lambda_1$ . Для операторов этого типа спектр собственных значений  $\lambda_m$  простирается в обе стороны, т. е. от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Это не отражается на форме разложения (9.1.81) и на дальнейших рассуждениях, за исключением того, что в них вместо  $\lambda_0/\lambda_1$  нужно писать абсолютную величину  $|\lambda_0/\lambda_1|$ . Как и в случае положительной определенности, сходимость здесь зависит от распределения собственных значений, детали которого определяются точной структурой операторов  $\mathfrak{A}$  и  $\mathfrak{B}$ . Если  $\lambda_0$  приблизительно равно  $+\lambda_1$  или  $-\lambda_1$ , то сходимость медленная. Способ экстраполяции, рассмотренный выше и приводящий к формулам (9.1.82) — (9.1.84), применяется и тогда, когда положительной определенности нет. Он оказывается вполне пригодным практически, если проведено достаточное число итераций.

Установив сходимость итерационного процесса, мы можем вывести специальные выражения для  $\lambda_0^{(n)}$  и  $e^{(n)}$  пертурбационного типа. Предположим, что мы интересуемся связью между  $\lambda_0$  и  $E$  в окрестности  $E_m$ ,

собственного значения оператора  $\mathfrak{A}$ , с соответствующим собственным вектором  $\mathbf{f}_m$ . Тогда удобно выбрать  $\mathbf{f}_m$  за первое приближение  $\mathbf{e}^{(0)}$ . Однако важно иметь уверенность в том, что соответствующее значение  $\lambda$  является наименьшим по абсолютной величине из тех, для которых можно получить требуемое значение  $E$ , так как именно для этого значения  $\lambda$  итерационный метод сходится. Если  $\mathbf{f}_m$  приближенно равняется собственному вектору для  $\lambda_1$ , итерационный процесс не будет сходиться. Этот недостаток у сходимости выявится в процессе вычисления. Кроме того, результаты (9.1.77) и (9.1.78) больше не будут иметь места.

Часто можно видоизменить операторы  $\mathfrak{A}$  и  $\mathfrak{B}$  так, что новое значение  $\lambda$  будет наименьшим  $\lambda$ , как это будет показано на примере, приведенном ниже. Однако если это невозможно, то для обеспечения сходимости необходимы изменения в самом вариационно-итерационном методе; эти изменения слишком громоздки, чтобы можно было развить здесь формулы теории возмущений.

Предполагая, что за нулевое приближение  $\mathbf{e}^{(0)}$  можно принять  $\mathbf{f}_m$ , легко получить необходимые выражения для вычисления  $\lambda_0^{(n)}$  и  $\lambda_0^{(n+1/2)}$ . Для этого нам нужна общая формула для  $\mathbf{e}^{(n)}$ . Из (9.1.71) имеем

$$\mathbf{e}^{(n)} = [(\mathfrak{A} - E)^{-1}\mathfrak{B}]^n \mathbf{f}_m,$$

так что

$$\mathbf{e}^{(1)} = \sum_p \frac{B_{pm}}{\varepsilon_p - E} \mathbf{f}_p, \quad \mathbf{e}^{(2)} = \sum_{pq} \frac{B_{pq}B_{qm}}{(\varepsilon_p - E)(\varepsilon_q - E)} \mathbf{f}_p. \quad (9.1.85)$$

Отсюда легко вывести и общую формулу. С помощью этих выражений для  $\mathbf{e}^{(n)}$  становится возможным вычислить различные приближения (9.1.74) и (9.1.75). Из (9.1.76) и (9.1.85) имеем

$$\begin{aligned} [0,0] &= B_{mm}, \\ [0,1] &= \sum_p \frac{B_{mp}B_{pm}}{\varepsilon_p - E}, \\ [1,1] &= \sum_{pq} \frac{B_{mq}B_{qp}B_{pm}}{(\varepsilon_q - E)(\varepsilon_p - E)}, \\ [1,2] &= \sum_{pqr} \frac{B_{mr}B_{rq}B_{qp}B_{pm}}{(\varepsilon_r - E)(\varepsilon_q - E)(\varepsilon_p - E)}. \end{aligned} \quad (9.1.86)$$

Следовательно, мы можем теперь получить  $\lambda_0^{(n)}$  и  $\lambda_0^{(n+1/2)}$  по формуле (9.1.76). Например:

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(1/2)} &= \frac{B_{mm}}{\sum_p \frac{B_{mp}B_{pm}}{\varepsilon_p - E}}, \\ \lambda_0^{(1)} &= \frac{\sum_p \frac{B_{mp}B_{pm}}{\varepsilon_p - E}}{\sum_{pq} \frac{B_{mq}B_{qp}B_{pm}}{(\varepsilon_q - E)(\varepsilon_p - E)}} \end{aligned} \quad (9.1.87)$$

и т. д.

**Пример.** Мы возвратимся к уравнению Матье [следующему за формулой (9.1.22)] и рассмотрим случай  $b_0 = 1,54486$  ( $s = 4$ ), для которого итерационно-пертурбационный метод перестает сходиться (см. табл. 9.1).

Оператор  $\mathfrak{B}$  соответствует  $\cos^2 \theta$  и, следовательно, является положительно определенным. Собственное значение  $\lambda = +s$ . Оператор  $\mathfrak{A} - E$  соответствует  $\frac{d^2}{d\theta^2} + b$ . Отметим, что  $\frac{d^2}{d\theta^2}$  — отрицательно определенный оператор, так как

$$\int_0^\pi \psi \frac{d^2 \psi}{d\theta^2} d\theta = - \int_0^\pi \left( \frac{d\psi}{d\theta} \right)^2 d\theta.$$

Следовательно,  $\mathfrak{A} - E$  не является положительно определенным, так как имеются такие функции  $\psi$ , для которых

$$\int \psi \left[ \frac{d^2}{d\theta^2} + b \right] \psi d\theta < 0.$$

Поэтому собственные значения  $\lambda$ , равные  $s$ , могут быть как положительными, так и отрицательными.

Если вычислить  $\lambda_0^{(1/2)}$ ,  $\lambda_0^{(1)}$ ,  $\lambda_0^{(3/2)}$  для  $E = -b_0 = 1,54486$ , то получается

$$\lambda_0^{(1/2)} = 4,5080, \quad \lambda_0^{(1)} = 3,5847, \quad \lambda_0^{(3/2)} = 4,9516.$$

Мы замечаем полную потерю сходимости к точному значению 4,0000 и нарушение неравенств (9.1.78). Это указывает на то, что существует собственное значение, меньшее значения  $\lambda = 4$ , для которого  $b_0 = 1,54486$ . Это утверждение можно проверить исследованием таблицы констант распределения  $b$ . Действительно, принимая  $\lambda_1$  равным 4 и оценивая  $\lambda_1/\lambda_0 = \varepsilon$  (в этом случае) при помощи (9.1.83), мы получим  $\lambda_0 \approx 2,7$ , что недалеко от действительной величины 2,5...

Эту трудность можно преодолеть изменением определения операторов  $\mathfrak{A}$  и  $\mathfrak{B}$ , которое подсказывается следующей формой уравнения Матье:

$$\frac{d^2 \psi}{d\theta^2} + [b - s + s \sin^2 \theta] \psi = 0.$$

Здесь можно принять

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &\rightarrow \sin^2 \theta, & \mathfrak{A} &\rightarrow -\frac{d^2}{d\theta^2}, \\ E &\rightarrow (b - s), & \lambda &\rightarrow s. \end{aligned}$$

Ясно, что собственное значение  $\lambda_0$ , которое меньше 4, дает для величины  $b - s$  значение, большее, чем интересующее нас  $b - s = -2,45514$ . Чтобы получить это значение величины  $b - s$ , требуется поэтому возрастание  $\lambda_0$ , могущее привести к тому, что  $\lambda_0$  превзойдет значение 4.

Для элементов  $B_{pq}$  теперь получаем

$$\begin{aligned} B_{pq} &= \frac{1}{2} \delta_{pq} - \frac{1}{4} (j_{p, q+2} + \delta_{p, q-2}), \\ B_{p0} &= B_{0p} = -\frac{1}{\sqrt{8}} \delta_{p2}, & B_{00} &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Окончательные значения для  $\lambda_0^{(1/2)}$ ,  $\lambda_0^{(1)}$  и  $\lambda_0^{(3/2)}$  получатся такие:

$$\lambda_0^{(1/2)} = 4,1257; \quad \lambda_0^{(1)} = 4,0230; \quad \lambda_0^{(3/2)} = 4,0045.$$

Мы замечаем, что здесь уже наблюдается сходимость. Четвертое приближение ( $\lambda_0^{(0)}$  считается первым) уже имеет относительную точность в одну тысячную. Этот результат можно улучшить, если использовать экстраполяционную формулу (9.1.82), которая дает экстраполированную величину  $\lambda_0$ , равную 4,0004, т. е. с относительной точностью до одной десятичной.

Работа, необходимая для вычисления этой последовательности приближений, одинакова с работой, нужной для вычислений по итерационно-пертурбационной формуле четвертого порядка. Единственная трудность, и мы вновь подчеркиваем ее здесь, связана с требованием, чтобы параметр  $\lambda$  сходил к наименьшей возможной для данного  $E = E_n$  величине  $\lambda$ . Часто это ясно для рассматриваемой задачи из физических соображений. Если это не так, то отсутствие сходимости и нарушение соответствующих неравенств послужит указанием на то, что требование не выполнено. В этом случае следует применить какой-нибудь способ перестановки участвующих величин, как это было сделано в приведенном выше примере.

**Улучшение пертурбационных формул.** Результаты, полученные для итерационно-пертурбационного метода и метода Фредгольма, можно существенно улучшить, применив простое преобразование, приводящее к изменению знаменателей в выражении для энергии, аналогичному тому, которое было сделано Финбергом, хотя и не совсем такому полному. Здесь мы воспользуемся тем фактом, что рассмотренные выше методы дают решения векового уравнения:

$$|(k^2 - k_q^2)\delta_{qp} - \lambda U_{qp}| = 0.$$

Всякое детерминантное уравнение, которое можно представить в такой форме, будет иметь решения, которые, например, для итерационно-пертурбационного метода даны в (9.1.13) и (9.1.14). «Энергетические» знаменатели  $k^2 - k_q^2$ , появляющиеся в этих формулах, заменяются в формулах Финберга на  $k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}$  плюс члены высшего порядка. Диагональные члены  $\lambda U_{qq}$  можно включить в  $k^2 - k_q^2$  при помощи простой перегруппировки членов в данном выше определителе следующим образом:

$$|(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})\delta_{qp} - \lambda U_{qp}(1 - \delta_{qp})| = 0. \quad (9.1.88)$$

Затем в итерационно-пертурбационных формулах комбинацию  $k^2 - k_q^2$  нужно заменить на  $k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}$ , а  $U_{qp}$  на  $U_{qp}(1 - \delta_{qp})$ , чтобы получить решение векового уравнения (9.1.88). Оно получается следующее:

$$\begin{aligned} \psi_n = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp}} \varphi_p + \\ + \lambda^2 \sum_{\substack{pq \neq n \\ q \neq p}} \frac{U_{pq}U_{qn}}{(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp})(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})} \varphi_p + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{pqr \neq n \\ pr \neq q}} \frac{U_{pq}U_{qr}U_{rn}}{(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp})(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})(k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr})} \varphi_p + \dots; \end{aligned} \quad (9.1.89)$$

в то же время уравнение, определяющее  $k^2$ , приобретает вид

$$\begin{aligned} k^2 = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp}} + \\ + \lambda^3 \sum_{\substack{pq \neq n \\ q \neq p}} \frac{U_{np}U_{pq}U_{qn}}{(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp})(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})} + \\ + \lambda^4 \sum_{\substack{pqr \neq n \\ pr \neq q}} \frac{U_{np}U_{pq}U_{qr}U_{rn}}{(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp})(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq})(k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr})} + \dots \end{aligned} \quad (9.1.90)$$

Мы будем называть их *модифицированными итерационно-пертурбационными* формулами; они представляют собой значительное улучшение по сравнению с немодифицированными. Вернемся снова к примеру с функциями Матье, в котором итерационно-пертурбационные формулы для случая  $s=4$  и  $b_0$  (точное) = 1,5449 оказались такими несовершенными; новая формула дает уже во втором порядке  $b_0^{(2)} = 1,500$ , против  $b_0^{(2)} = 1,000$ , полученного по немодифицированным формулам. Выведенные выше формулы не так точны, как ряды Финберга, но значительно более удобны.

Подобные изменения можно внести в пертурбационную формулу Фредгольма. Рассматриваемое там вековое уравнение легко можно записать так:

$$|(E - \varepsilon_q) \delta_{qp} + \lambda B_{qp}| = 0.$$

Мы перегруппируем теперь члены следующим образом:

$$|(E - \varepsilon_q + \lambda B_{qq}) \delta_{qp} + \lambda B_{qp} (1 - \delta_{qp})| = 0. \quad (9.1.91)$$

Формулы (9.1.63), выражающие величины  $(\mathfrak{R}^a)_{pn}$ , можно теперь видоизменить, подставив  $E - \varepsilon_q + \lambda B_{qq}$  вместо  $E - \varepsilon_q$  и  $B_{pq}(1 - \delta_{qp})$  вместо  $B_{qp}$ . Результаты таковы:

$$\begin{aligned} (\mathfrak{R}^1)_{pn} &= \frac{B_{pn}}{\varepsilon_p - E - \lambda B_{pp}}, & p \neq n, \\ (\mathfrak{R}^2)_{pn} &= \sum_{q \neq np} \frac{B_{pq} B_{qn}}{(\varepsilon_p - E - \lambda B_{pp})(\varepsilon_q - E - \lambda B_{qq})}, & p \neq n, \end{aligned} \quad (9.1.92)$$

и т. д. Следы теперь нужно вычислять не по формулам (9.1.64), а по измененным формулам:

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \sum_{\substack{pq \neq n \\ q \neq p}} \frac{B_{pq} B_{qp}}{(\varepsilon_p - E - \lambda B_{pp})(\varepsilon_q - E - \lambda B_{qq})} \quad (9.1.93)$$

и т. д. Эти результаты, (9.1.92) и (9.1.93), надо подставить в (9.1.65) и (9.1.66), чтобы получить выражения для  $e$  и  $E$ . Так как  $x_1 = 0$ , то теперь нет необходимости в дополнительных изменениях, когда число измерений больше единицы.

**Неортогональные функции.** Выше при рассмотрении четырех методов теории возмущений мы всюду разлагали неизвестные собственные функции или собственные векторы по полной ортонормальной системе, членом которой является невозмущенная функция. Часто случается, однако (и мы это увидим на примере в следующем параграфе о граничных возмущениях), что невозмущенная функция является членом не такой системы, а системы, которая не ортогональна, хотя и полна. Конечно, такую систему можно ортогонализировать или биортогонализировать с помощью метода, описанного в гл. 8. Однако наша цель здесь — видоизменить методы теории возмущений таким образом, чтобы их можно было применять к разложениям по неортогональным системам, не прибегая к промежуточному этапу ортогонализации. Так же как и при улучшении пертурбационных формул, мы воспользуемся тем обстоятельством, что пертурбационные формулы дают решения некоторых вековых уравнений. В то же время, как мы увидим, детерминантное уравнение можно получить даже при разложении по неортогональной системе.

Прежде всего выведем только что упомянутое детерминантное уравнение. Пусть членами неортогональной системы будут  $f_p$ . Пусть  $f_n$  —



невозмущенное решение, и пусть, наконец, уравнением, которое мы будем решать, является

$$(\mathfrak{A} - E) \mathbf{e}_n = \lambda \mathfrak{B} \mathbf{e}_n.$$

Пусть

$$\mathbf{e}_n = \sum c_p \mathbf{f}_p.$$

Подставляя этот ряд в уравнение для  $\mathbf{e}_n$ , получаем

$$\sum (\mathfrak{A} - E - \lambda \mathfrak{B}) \cdot c_p \mathbf{f}_p = 0.$$

Умножим теперь это равенство слева на  $\mathbf{f}_q^*$ . В символических обозначениях

$$\begin{aligned} A_{qp} &= (\mathbf{f}_q^* \cdot \mathfrak{A} \cdot \mathbf{f}_p), \\ N_{qp} &= (\mathbf{f}_q^* \cdot \mathbf{f}_p), \\ B_{qp} &= (\mathbf{f}_q^* \cdot \mathfrak{B} \cdot \mathbf{f}_p) \end{aligned} \quad (9.1.94)$$

получается следующая система линейных однородных уравнений:

$$\sum_p c_p (A_{qp} - EN_{qp} - \lambda B_{qp}) = 0 \quad (\text{для каждого } q). \quad (9.1.95)$$

Эта система имеет решения только при условии, что определитель, образованный из коэффициентов при  $c_p$ , равен нулю:

$$|EN_{qp} + (\lambda B_{qp} - A_{qp})| = 0.$$

(При разложении по ортогональным функциям  $N_{qp} = \delta_{qp}$ .) Удобнее будет ввести обозначение

$$H_{qp} = \lambda B_{qp} - A_{qp},$$

так что вековое уравнение примет вид

$$|EN_{qp} - H_{qp}| = 0. \quad (9.1.96)$$

Сравним теперь это уравнение с уравнением (9.1.27), которое получено в случае разложения по ортогональным функциям:

$$|(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}| = 0.$$

Для сравнения перенишем (9.1.96) следующим образом:

$$|(EN_{qq} - H_{qq}) \delta_{qp} - (H_{qp} - EN_{qp})(1 - \delta_{qp})| = 0.$$

Это наводит на мысль, что мы можем использовать итерационно-пертурбационные формулы (9.1.13) и (9.1.14) и в настоящем случае, сделав следующие подстановки:

$$\begin{aligned} k^2 - k_q^2 &\rightarrow EN_{qq} - H_{qq}, \\ \lambda U_{qp} &\rightarrow (H_{qp} - EN_{qp})(1 - \delta_{qp}). \end{aligned} \quad (9.1.97)$$

Итерационно-пертурбационные формулы, справедливые в случае разложения по неортогональной системе  $\mathbf{f}_p$ , будут поэтому иметь вид

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_n &= \mathbf{f}_n + \sum_{p \neq n} \frac{H_{pn} - EN_{pn}}{EN_{pp} - H_{pp}} \mathbf{f}_p + \\ &+ \sum_{\substack{qp \neq n \\ q \neq p}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qn} - EN_{qn})}{(EN_{pp} - H_{pp})(EN_{qq} - H_{qq})} \mathbf{f}_p + \dots, \end{aligned} \quad (9.1.98)$$

тогда как

$$EN_{nn} = H_{nn} + \sum_{p \neq n} \frac{(H_{np} - EN_{np})(H_{pn} - EN_{pn})}{EN_{pp} - H_{pp}} + \\ + \sum_{\substack{pq \neq n \\ q \neq p}} \frac{(H_{np} - EN_{np})(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qn} - EN_{qn})}{(EN_{pp} - H_{pp})(EN_{qq} - H_{qq})} + \dots \quad (9.1.99)$$

Подстановки (9.1.97) можно также использовать и в пертурбационных формулах Финберга (9.1.35) и (9.1.36), чтобы получить соответствующие результаты, когда разложение производится по членам неортогональной системы. Это даст

$$c_p = \frac{H_{pn} - EN_{pn}}{EN_{pp} - H_{pp} - T_{np}} + \sum_{q \neq np} \frac{(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qn} - EN_{qn})}{(EN_{pp} - H_{pp} - T_{np})(EN_{qq} - H_{qq} - T_{npq})} + \\ + \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qr} - EN_{qr})(H_{rn} - EN_{rn})}{(EN_{pp} - H_{pp} - T_{np})(EN_{qq} - H_{qq} - T_{npq})(EN_{rr} - H_{rr} - T_{npqr})} + \dots, \quad (9.1.100)$$

где

$$T_{np} = \sum_{q \neq np} \frac{(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qp} - EN_{qp})}{EN_{qq} - H_{qq} - T_{npq}} + \\ + \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qr} - EN_{qr})(H_{rp} - EN_{rp})}{(EN_{qq} - H_{qq} - T_{npq})(EN_{rr} - H_{rr} - T_{npqr})} + \dots, \quad (9.1.101)$$

$$T_{npq} = \sum_{r \neq npq} \frac{(H_{qr} - EN_{qr})(H_{rq} - EN_{rq})}{EN_{rr} - H_{rr} - T_{npqr}} + \\ + \sum_{\substack{r \neq npq \\ s \neq npqr}} \frac{(H_{qr} - EN_{qr})(H_{rs} - EN_{rs})(H_{sq} - EN_{sq})}{(EN_{rr} - H_{rr} - T_{npqr})(EN_{ss} - H_{ss} - T_{npqrs})} + \dots$$

Уравнение для собственных значений получится соответствующей подстановкой в (9.1.36):

$$EN_{nn} = H_{nn} + \sum_{p \neq n} \frac{(H_{np} - EN_{np})(H_{pn} - EN_{pn})}{EN_{pp} - H_{pp} - T_{np}} + \\ + \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np}} \frac{(H_{np} - EN_{np})(H_{pq} - EN_{pq})(H_{qn} - EN_{qn})}{(EN_{pp} - H_{pp} - T_{np})(EN_{qq} - H_{qq} - T_{npq})}. \quad (9.1.102)$$

Мы можем также видоизменить формулы Фредгольма и вариационно-итерационные формулы для разложения по неортогональным векторам с помощью вышеуказанного процесса. Выражения (9.1.65), (9.1.66) совместно с (9.1.63) представляют решения задачи на собственные значения, приводящей к вековому определителю

$$|(E - \varepsilon_p) \delta_{qp} + \lambda B_{qp}| = 0.$$

Чтобы получить надлежащие формулы для рассматриваемой здесь задачи на собственные значения (9.1.96), нужно сделать следующие подстановки:

$$E - \varepsilon_p \rightarrow EN_{pp} - H_{pp}, \quad \lambda B_{qp} \rightarrow (EN_{qp} - H_{qp})(1 - \delta_{qp}). \quad (9.1.103)$$

Тогда формулы (9.1.63) принимают вид

$$\lambda (\mathfrak{R}^1)_{pn} = (H_{pn} - EN_{pn}) / (EN_{pp} - H_{pp}) \quad \text{при } p \neq n,$$

$$\lambda^2 (\mathfrak{R}^2)_{pn} = \sum_{q \neq np} \frac{(H_{pq} - EN_{pq}) (H_{qn} - EN_{qn})}{(EN_{pp} - H_{pp}) (EN_{qq} - H_{qq})} \quad \text{при } p \neq n$$

и

$$\lambda^3 (\mathfrak{R}^3)_{pn} = \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq}) (H_{qr} - EN_{qr}) (H_{rn} - EN_{rn})}{(EN_{pp} - H_{pp}) (EN_{qq} - H_{qq}) (EN_{rr} - H_{rr})}, \quad p \neq n. \quad (9.1.104)$$

Формулы (9.1.64) принимают вид

$$\lambda x_1 = 0,$$

$$\lambda x_2 = \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq}) (H_{qp} - EN_{qp})}{(EN_{pp} - H_{pp}) (EN_{qq} - H_{qq})}, \quad (9.1.105)$$

$$\lambda x_3 = \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{(H_{pq} - EN_{pq}) (H_{qr} - EN_{qr}) (H_{rp} - EN_{rp})}{(EN_{pp} - H_{pp}) (EN_{qq} - H_{qq}) (EN_{rr} - H_{rr})}$$

и т. д. При использовании формул (9.1.104) и (9.1.105) важно понимать, что  $(\mathfrak{R}^a)_{pn}$  не совпадает с  $(f_p^* \mathfrak{R}^a \cdot f_n)$  и  $x_2$  не является следом  $\mathfrak{R}^2$ . Выражения, определяющие значения этих величин, нужно подставить в формулы (9.1.65) и (9.1.66) для того, чтобы получить разложения  $e_n$  и  $E$ .

Обратимся в заключение к вариационно-итерационному методу. Здесь  $\lambda$  рассматривается как собственное значение, которое нужно найти, а  $E$  предполагается известным, в то время как в формулах, данных выше, предполагается как раз обратное. Это означает, что вариационно-итерационные результаты можно обобщить с помощью простой перегруппировки членов в вековом уравнении только в случае, если величины  $N_{pq}$  и  $A_{pq}$  для  $p \neq q$  пропорциональны  $\lambda$ , как это бывает в задачах с граничными возмущениями (см. § 9.2). Мы удовлетворимся здесь тем, что напишем формулы, вытекающие из этого дополнительного предположения, хотя, по-видимому, вариационно-итерационная формула существует, даже если это предположение становится неверным. Пусть

$$N_{qp} = \lambda n_{qp} \quad \text{при } q \neq p,$$

$$A_{qp} = \lambda a_{qp} \quad \text{при } q \neq p \quad (9.1.106)$$

и

$$En_{qp} + B_{qp} - a_{qp} = c_{qp}.$$

Вековой определитель (9.1.96) в этом случае имеет вид

$$|(EN_{pp} - A_{pp}) \delta_{pq} + \lambda c_{qp}| = 0,$$

подсказывающий следующие подстановки в (9.1.85) и (9.1.87):

$$E - \varepsilon_p \rightarrow EN_{pp} - A_{pp}, \quad B_{qp} \rightarrow c_{qp}.$$

Тогда вариационно-итерационные формулы при разложении по векторам

неортогональной системы и в предположении (9.1.106) имеют вид

$$\begin{aligned} e^{(1)} &= \sum_p \frac{c_{pn}}{A_{pp} - EN_{pp}} f_p, \\ e^{(2)} &= \sum_{pq} \frac{c_{pq}c_{qn}}{(A_{pp} - EN_{pp})(A_{qq} - EN_{qq})} f_p, \end{aligned} \quad (9.1.107)$$

и

$$\begin{aligned} \lambda_0^{(1/2)} &= \frac{c_{00}}{\sum_p \frac{c_{np}c_{pn}}{A_{pp} - EN_{pp}}}, \\ \lambda_0^{(1)} &= \frac{\sum_p \frac{c_{np}c_{pn}}{A_{pp} - EN_{pp}}}{\sum_{pq} \frac{c_{np}c_{pq}c_{qn}}{(A_{pp} - EN_{pp})(A_{qq} - EN_{qq})}} \end{aligned} \quad (9.1.108)$$

и т. д.

Мы закончим этот пункт о разложении по неортогональным функциям выяснением применимости формул возмущения для различных методов. Мы можем ожидать, что эти формулы будут давать быструю сходимость, если недиагональные элементы векового определителя (9.1.96) малы по сравнению с диагональными членами:

$$\frac{EN_{qp} - H_{qp}}{EN_{qq} - H_{qq}} \ll 1, \quad q \neq p. \quad (9.1.109)$$

Это неравенство будет выполнено, если, во-первых,  $\lambda B_{qp}$  мало и, во-вторых, мало отклонение от диагональной формы определителей  $A_{qp}$  и  $N_{qp}$ . Другими словами, для неортогональных функций параметр  $\lambda$  не является больше мерой величины возмущения. Если значения  $N_{qp}$  и  $A_{qp}$  ( $q \neq p$ ) сравнимы с  $N_{qq}$  и  $A_{qq}$ , то мы уже не имеем дела с малыми возмущениями, для которых применяются формулы теории возмущений. В части таких случаев дело можно исправить ортогонализацией системы  $f_p$ , так как тогда недиагональные величины  $N_{qp}$  станут равны нулю. Для малых возмущений следует по-прежнему требовать, чтобы недиагональные элементы  $\lambda B$  и  $A$ , взятые по отношению к ортогональной системе, были малы по сравнению с диагональными элементами.

## 9. 2. Поверхностные возмущения

В этом параграфе мы обратимся к задачам, в которых отклонения от точно разрешимой задачи имеют место на границах, в то время как в предыдущем параграфе рассматривались задачи, в которых возмущения были сосредоточены внутри ограниченной области. Возмущения, являющиеся одновременно и объемными и поверхностными, можно изучать последовательным применением результатов §§ 9.1 и 9.2.

Поверхностные возмущения могут заключаться или в изменении граничных условий, или в изменении формы граничной поверхности, или в том и другом. Мы рассмотрим эти два случая отдельно; когда же встречаются оба типа одновременно, можно применить по очереди результаты исследования этих случаев. При решении задачи мы заменим