ДОБАВЛЕНИЕ

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Точное вычисление собственных значений и собственных векторов самосопряженного линейного преобразования часто наталкивается на значительные вычислительные трудности. Одним из распространенных методов приближенного вычисления собственных значений в квантовой механике и во многих задачах теории колебаний является так называемый метод возмущений. Этот метод, применимый к линейным преобразованиям как в вещественном, так и в комплексном пространстве, грубо говоря, состоит в следующем: пусть известны собственные значения и собственные векторы некоторого самосопряженного линейного преобразования A. Рассмотрим преобразование $A + \varepsilon B$, где B — произвольное самосопряженное преобразование. Тогда собственные значения $A+\varepsilon B$ суть функции от ε. Можно показать, что при $\varepsilon \longrightarrow 0$ собственные значения и векторы $A+\varepsilon B$ стремятся к собственным значениям и векторам A. Задача состоит в нахождении «поправок» к собственным значениям и векторам при замене преобразования A на $A+\varepsilon B$.

§ 1. Случай некратных собственных значений

Пусть A имеет различные собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ и пусть $e_1, e_2, \ldots, e_n$ — соответствующие им нормированные собственные векторы. Пусть, далее, B — какое-либо другое самосопряженное линейное преобразование. Собственные значения преобразования $A+\varepsilon B$ обозначим через $\lambda_1(\varepsilon), \lambda_2(\varepsilon), \ldots, \lambda_n(\varepsilon)$, а соответствующие собственные векторы — через $e_1(\varepsilon)$, $e_2(\varepsilon), \ldots, e_n(\varepsilon)$. Можно доказать, что $\lambda_k(\varepsilon)$ и $e_k(\varepsilon)$ являются непрерывными и дифференцируемыми функциями от ε, причем $\lambda_k(0)=\lambda_k$, а $e_k(0)=e_k$. Представим эти функции в виде

$$\lambda_k(\varepsilon)=\lambda_k+\varepsilon\lambda_k^{(1)}+\ldots$$

и

$$e_k(\varepsilon)=e_k+\varepsilon e_k^{(1)}+\ldots \quad {}^{*})$$

и будем сначала искать $\lambda_k^{(1)}$ и $e_k^{(1)}$, т. е. «главную часть» поправки к $e_k=e_k(0)$ и $\lambda_k=\lambda_k(0)$. Мы имеем

$$(A+\varepsilon B)e_k(\varepsilon)=\lambda_k(\varepsilon)e_k(\varepsilon),$$

т. е.

$$(A+\varepsilon B)(e_k+\varepsilon e_k^{(1)}+\ldots)=(\lambda_k+\varepsilon\lambda_k^{(1)}+\ldots)(e_k+\varepsilon e_k^{(1)}+\ldots).$$

Сравним члены первой степени относительно ε в обеих частях равенства. Мы получим

$$Ae_k^{(1)}+Be_k=\lambda_k e_k^{(1)}+\lambda_k^{(1)}e_k. \tag{1}$$

Умножим обе части (1) скалярно на e_k:

$$(Ae_k^{(1)},e_k)+(Be_k,e_k)=\lambda_k(e_k^{(1)},e_k)+\lambda_k^{(1)}(e_k,e_k).$$

Так как, в силу самосопряженности преобразования A,

$$(Ae_k^{(1)},e_k)=(e_k^{(1)},Ae_k)=\lambda_k(e_k^{(1)},e_k),$$

---

*) Многоточие здесь и дальнейшем означает, что отброшено слагаемое порядка выше первого по сравнению с ε. Мы не пишем вместо многоточия $o(\varepsilon)$, чтобы не загромождать изложения.

то

$$(Be_k, e_k) = \lambda_k^{(1)}(e_k, e_k) = \lambda_k^{(1)}.$$

Отсюда

$$\lambda_k^{(1)} = (Be_k, e_k), \tag{2}$$

и первая половина нашей задачи таким образом решена.

Вычислим теперь главный член поправки к собственному вектору $e_k(\varepsilon)$, т. е. $e_k^{(1)}$. Для этого умножим скалярно обе части равенства (1) на e_i, где $i \neq k$. Так как векторы e_k и e_i ортогональны, т. е. $(e_k, e_i) = 0$ при $i \neq k$, то мы получим

$$(Ae_k^{(1)}, e_i) + (Be_k, e_i) = \lambda_k(e_k^{(1)}, e_i).$$

Но, аналогично предыдущему, мы имеем

$$(Ae_k^{(1)}, e_i) = (e_k^{(1)}, Ae_i) = \lambda_i(e_k^{(1)}, e_i),$$

поэтому

$$(e_k^{(1)}, e_i) = \frac{(Be_k, e_i)}{\lambda_k - \lambda_i}, \quad i \neq k. \tag{3}$$

Совокупность этих равенств и определяет вектор $e_k^{(1)}$.

Запишем формулы (2) и (3) в координатной форме. Для этого удобнее всего выбрать в качестве базиса собственные векторы $e_1, \ldots, e_k$ «невозмущенного» преобразования A. Матрицу преобразования B в этом базисе обозначим через b_{ij}, т. е. $Be_j = \sum b_{jk}e_k$ и, следовательно,

$$(Be_j, e_i) = b_{ij}.$$

Координаты вектора $e_k^{(1)}$ — главного члена «поправки» — обозначим через $\xi_1, \ldots, \xi_k, \ldots, \xi_n$, т. е.

$$e_k^{(1)} = \xi_1 e_1 + \ldots + \xi_n e_n \tag{4}$$

и, значит,

$$\xi_i = (e_k^{(1)}, e_i).$$

Формулы (2) и (3) приобретут вид

$$\lambda_k^{(1)} = b_{kk}, \tag{2'}$$

$$\xi_i = \frac{b_{ik}}{\lambda_k - \lambda_i}. \tag{3'}$$

Сам вектор $e_k^{(1)}$ определяется числами $\xi_i = (e_k^{(1)}, e_i)$ по формуле (4). У нас осталась неопределенной k-я координата ξ_k. Она определяется из условия нормировки собственного вектора, т. е. из условия, чтобы длина вектора $e_k + \varepsilon e_k^{(1)} + \ldots$ была равна единице. Мы имеем

$$(e_k + \varepsilon e_k^{(1)} + \ldots,\ e_k + \varepsilon e_k^{(1)} + \ldots) = 1,$$

т. е.

$$(e_k, e_k) + \varepsilon[(e_k^{(1)}, e_k) + (e_k, e_k^{(1)})] + \ldots = 1.$$

Сравнивая члены при первых степенях ε, имеем $(e_k^{(1)}, e_k) + (e_k, e_k^{(1)}) = 0$. Этому условию можно удовлетворить, полагая *)

$$\xi_k = (e_k^{(1)}, e_k) = 0. \tag{5}$$

Окончательно имеем

$$\lambda_k^{(1)} = b_{kk}, \tag{I}$$

$$e_k^{(1)} = \sum_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n} \frac{b_{ik}}{\lambda_k - \lambda_i} e_i, \tag{II}$$

где $b_{ik} = (Be_k, e_i)$, а λ_k — собственные значения «невозмущенного» преобразования A.

*) В комплексном случае $(e_k^{(1)}, e_k) + (e_k, e_k^{(1)}) = 2\,\mathrm{Re}(e_k^{(1)}, e_k)$, и мы могли бы считать $(e_k^{(1)}, e_k)$ не только нулем, но и произвольным чисто мнимым числом. Это связано с тем, что нормировка собственного вектора определяет его в комплексном случае с точностью до множителя, по модулю равного единице.

Для получения формул (I) и (II) мы выбрали базис, состоящий из собственных векторов преобразования A. При произвольном базисе формулы (2) и (3) также определяют $\lambda_k^{(1)}$ и $e_k^{(1)}$. Чтобы получить формулы, аналогичные (I) и (II) в произвольном ортогональном базисе, надо знать только координаты векторов e_k и матрицу преобразования B в этом базисе. Пусть матрица B есть $\|\beta_{\mu\nu}\|$, а $e_k^{(1)} = (c_1^{(k)}, \ldots, c_n^{(k)})$. Тогда из (2) получаем

$$\lambda_k = \sum_{\mu,\nu=1}^{n} \beta_{\mu\nu} c_\mu^{(k)} c_\nu^{(k)},$$

а из (3) получаем систему уравнений для определения координат $\zeta_1, \ldots, \zeta_n$ вектора $e_k^{(1)}$:

$$\zeta_1 c_1^{(i)} + \zeta_2 c_2^{(i)} + \ldots + \zeta_n c_n^{(i)} = \\ = \frac{\sum\limits_{\mu,\nu} \beta_{\mu\nu} c_\mu^{(i)} c_\nu^{(k)}}{\lambda_k - \lambda_i} \quad (i = 1, 2, \ldots, k-1, k+1, \ldots, n).$$

Недостающее уравнение снова получаем из условия (5) нормировки вектора $e_k(\varepsilon)$:

$$\zeta_1 c_1^{(k)} + \zeta_2 c_2^{(k)} + \ldots + \zeta_n c_n^{(k)} = 0.$$

Так как векторы $e_1, \ldots, e_n$ линейно независимы, то определитель этой системы отличен от нуля, и числа $\zeta_1, \zeta_2, \ldots, \zeta_n$ определяются из нее однозначно.

Найдем теперь собственные значения во втором приближении, т. е. с точностью до членов порядка ε^2.

Мы видели, что, для того чтобы найти собственное значение в первом приближении [формула (2)], достаточно было знать собственный вектор в нулевом приближении. Аналогично, для того чтобы найти второе приближение к собственному значению, нам достаточно будет знать собственные векторы в первом приближении. Мы имеем

$$(A + \varepsilon B) e_k(\varepsilon) = \lambda_k(\varepsilon) e_k(\varepsilon).$$

Подставим в это равенство:

$$e_k(\varepsilon) = e_k + \varepsilon e_k^{(1)} + \varepsilon^2 e_k^{(2)} + \ldots,$$
$$\lambda_k(\varepsilon) = \lambda_k + \varepsilon \lambda_k^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda_k^{(2)} + \ldots$$

и сравним члены при ε^2. Получим

$$Be_k^{(1)} + Ae_k^{(2)} = \lambda_k^{(2)} e_k + \lambda_k^{(1)} e_k^{(1)} + \lambda_k e_k^{(2)}. \tag{6}$$

Для того чтобы найти $\lambda_k^{(2)}$, умножим скалярно обе части этого равенства на e_k. Учитывая, что $(Ae_k^{(2)}, e_k) = (e_k^{(2)}, Ae_k) = \lambda_k (e_k^{(2)}, e_k)$, мы получим

$$(Be_k^{(1)}, e_k) = \lambda_k^{(2)} + \lambda_k^{(1)} (e_k^{(1)}, e_k).$$

Так как, в силу (5) $(e_k^{(1)}, e_k) = 0$, то

$$\lambda_k^{(2)} = (Be_k^{(1)}, e_k).$$

Но $e_k^{(1)} = \sum \xi_i e_i$. Подставляя, получаем в силу формулы (3) для первого приближения

$$\lambda_k^{(2)} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i (Be_i, e_k) = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(Be_k, e_i)(Be_i, e_k)}{\lambda_k - \lambda_i},$$

а так как $(Be_k, e_i) = \overline{(Be_i, e_k)}$, то окончательно имеем

$$\lambda_k^{(2)} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} \frac{|(Be_k, e_i)|^2}{\lambda_k - \lambda_i},$$

где e_k — собственные векторы, а λ_k — собственные значения преобразования A, или

$$\lambda_k^{(2)} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} \frac{|b_{ik}|^2}{\lambda_k - \lambda_i}.$$

З а д а ч а. Найти поправки для собственного вектора во втором приближении, умножая скалярно обе части равенства (6) на e_i.

Ответ.

$$e_k^{(2)} = \sum_{i\neq k}\sum_{j\neq k} \frac{b_{ij}b_{jk}}{(\lambda_i-\lambda_k)(\lambda_j-\lambda_k)}e_i - \\ - \sum_{i\neq k}\frac{b_{kk}b_{ik}}{(\lambda_i-\lambda_k)^2}e_i - \sum_{i\neq k}\frac{|b_{ik}|^2}{(\lambda_i-\lambda_k)^2}\frac{e_k}{2}.$$

Кроме указанных уравнений надо воспользоваться также условием нормировки, т. е. равенством

$$(e_k+\varepsilon e_k^{(1)}+\varepsilon^2 e_k^{(2)}+\ldots,\ e_k+\varepsilon e_k^{(1)}+\varepsilon^2 e_k^{(2)}+\ldots)=1.$$

§ 2. Случай кратных собственных значений

Рассмотрим теперь случай, когда λ есть r-кратное собственное значение преобразования A. Обозначим через

$$f_1, f_2, \ldots, f_r \tag{1}$$

какие-либо r попарно ортогональных собственных векторов преобразования A, отвечающих этому собственному значению λ. Заметим, что, так как e_i $(i=1,2,\ldots,r)$ отвечают одному и тому же собственному значению λ, то линейная комбинация этих векторов также будет собственным вектором, отвечающим этому собственному значению. Этими линейными комбинациями исчерпываются все собственные значения преобразования A, отвечающие собственному значению λ.

При замене преобразования A на $A+\varepsilon B$ собственное значение перестанет, вообще говоря, быть кратным, и вместо λ мы получим r различных собственных значений $\lambda_1(\varepsilon), \lambda_2(\varepsilon), \ldots, \lambda_r(\varepsilon)$. Соответствующие нормированные собственные векторы обозначим через $e_1(\varepsilon), e_2(\varepsilon), \ldots, e_r(\varepsilon)$.

Например, если A — единичное преобразование, т. е. $A=E$, в n-мерном пространстве, а B — произвольное самосопряженное преобразование с попарно различными собственными значениями $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, то $A = E$ имеет n-кратное собственное значение 1, а $A+\varepsilon B = E+\varepsilon B$ имеет n различных собственных значений $1+\lambda_1\varepsilon$, $1 + \lambda_2\varepsilon$, $\ldots$, $1 + \lambda_n\varepsilon$.

Аналогично случаю простых собственных значений $\lambda_i(\varepsilon)$ и $e_i(\varepsilon)$ являются непрерывными и дифференцируемыми функциями от ε. При $\varepsilon \longrightarrow 0$ $\lambda_i(\varepsilon)$ стремятся к собственному значению A, т. е. к λ_i. Мы имеем

$$\lambda_i(\varepsilon) = \lambda_i + \varepsilon\lambda_i^{(1)} + \varepsilon^2\lambda_i^{(2)} + \ldots \tag{2}$$

Для собственных векторов $e_i(\varepsilon)$ преобразования $A+\varepsilon B$ мы имеем аналогичное равенство

$$e_i(\varepsilon) = e_i + \varepsilon e_i^{(1)} + \varepsilon^2 e_i^{(2)} + \ldots, \tag{3}$$

$e_i = \lim\limits_{\varepsilon\to 0} e_i(\varepsilon)$, и значит, e_i есть собственный вектор преобразования A, отвечающий собственному значению λ. Следовательно, e_i есть какая-то, заранее нам неизвестная, линейная комбинация векторов (1). Таким образом, в отличие от случая некратных собственных значений, сами e_i также подлежат определению. Подставим в равенство $(A + \varepsilon B)e_i(\varepsilon) = \lambda_i(\varepsilon)e_i(\varepsilon)$ выражения (2) и (3). Сравнивая, как и в предыдущем случае, коэффициенты при ε, получаем

$$Be_i + Ae_i^{(1)} = \lambda e_i^{(1)} + \lambda_i^{(1)} e_i, \quad i = 1, \ldots, r. \tag{4}$$

Здесь вектор e_i является, как было указано, линейной комбинацией собственных векторов $f_1, \ldots, f_r$:

$$e_i = \eta_1 f_1 + \eta_2 f_2 + \ldots + \eta_r f_r.$$

Наша цель — найти число $\lambda_i^{(1)}$ и вектор e_i, т. е. числа $\eta_1, \ldots, \eta_r$.

Умножая обе части (4) скалярно на f_k, получим

$$(Be_i, f_k) + (Ae_i^{(1)}, f_k) = (\lambda e_i^{(1)}, f_k) + \lambda_i^{(1)}(e_i, f_k),$$

или, так как $(Ae_i^{(1)}, f_k) = (e_i^{(1)}, Af_k) = \lambda_k(e_i^{(1)}, f_k)$,

$$(Be_i, f_k) = \lambda_i^{(1)}(e_i, f_k).$$

Подставляя в левую часть этого равенства вместо e_i его выражение и замечая, что $(e_i, f_k) = \eta_k$, получим

$$\sum_{p=1}^{r}(Bf_p, f_k)\eta_p = \lambda_i^{(1)}\eta_k, \tag{5}$$

или

$$\sum_{p=1}^{r} b_{kp}\eta_p = \lambda_i^{(1)}\eta_k, \tag{I}$$

где

$$(Bf_p, f_k) = b_{kp}.$$

Итак, числа $\lambda_i^{(1)}$ являются собственными значениями матрицы $\|b_{kp}\|$, $k, p = 1, 2, \ldots, r$, т. е. определяются из уравнения

$$\mathrm{Det}\,\|b_{ik} - \lambda\sigma_{ik}\| = 0,$$

а вектор e_i определяется формулой

$$e_i = \eta_1 f_1 + \ldots + \eta_r f_r,$$

где числа η_i находятся из уравнений (I).

Аналогично можно было бы найти поправки к собственным векторам, т. е. $e_k^{(1)}, e_k^{(2)}$, и следующие поправки к собственным значениям, т. е. $\lambda_i^{(2)}$.