Доклады Академии Наук СССР
1937. Том XIV, № 2

МАТЕМАТИКА

В. РОМБЕРГ

МЕТОД ДЛЯ ОДНОВРЕМЕННОГО ПРИБЛИЖЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННОЙ ФУНКЦИИ*

(*Представлено академиком С. Н. Бернштейном 24 XI 1936*)

Для нахождения низшего собственного значения (с. з.) E° линейного самосопряженного дифференциального уравнения

$$H(\psi) - E\cdot\chi(q_i)\cdot\psi = 0 \tag{1}$$

успешно применяется приближенный метод Ритца. Однако только в специальных случаях доказано, что и аппроксимирующие функции ψ_N сходятся к собственной функции (с. ф.)

В настоящем сообщении предлагается метод, обладающий тем же преимуществом быстрой сходимости, как и метод Ритца, но не только для с. з., а и для с. ф. Мы должны только предположить, что известно некоторое число $-S$, лежащее ниже с. з. E°, т. е.

$$-S < E^\circ. \tag{2}$$

Сначала превратим (1) в дифференциальное уравнение, обладающее только положительными с. з.:

$$h(\psi) - e\cdot\chi(q_i)\cdot\psi = 0, \tag{3}$$

обозначая

$$h(\psi) = H(\psi) + S\cdot\chi(q_i)\cdot\psi \tag{4}$$

и

$$e = E + S.$$

С. ф. уравнения (1)—те же, что и (3); низшее с. з. $e^\circ = E^\circ + S$ согласно (2) всегда положительно.

Рассмотрим две вариационные задачи:

$$e(f, f) = \frac{\int f\cdot h(f)\,d\tau}{\int f^2\chi\,d\tau} = \min \quad \text{и} \quad \eta(g, g) = \frac{\int\left[\frac{h(g)}{\chi}\right]^2\cdot\chi\,d\tau}{\int g^2\cdot\chi\,d\tau} = \min. \tag{5}$$

$$d\tau = \chi\underset{i}{d}q_i).$$

---

* Настоящая статья печатается с запозданием, так как рукопись, посланная на отзыв академику С. Н. Бернштейну, была затеряна.

Краевые условия такие же, как и для (1). Как будет видно из дальнейшего, первая вариационная задача есть та, к которой обычно применяется метод Ритца. Мы же будем исходить из второй задачи.

В самом деле, представим вариационные задачи (5) в следующем виде:

$$\lambda(f,f)=\frac{\int F(f)\,d\tau}{\int f^2\chi\,d\tau}=\min.$$

Требование $\delta\lambda(f,f)=0$ приводит—в предположении, что $\int f^2\chi d\tau \neq 0$— к соотношению

$$\delta\int F(f)\,d\tau-\frac{\int F(f)\,d\tau}{\int f^2\chi\,d\tau}\cdot\delta\int f^2\chi\,d\,\tau=0$$

или

$$\delta\int F(f)\,d\tau-\lambda(f,f)\cdot\delta\int f^2\chi\,d\tau=0. \qquad (6)$$

Найдем теперь эйлеровы дифференциальные уравнения, соответствующие вариационным задачам (5); для первой на основании (6) получается:

$$0=\delta\int f\cdot h(f)\,d\tau-e(f,f)\cdot\delta\int f^2\chi\,d\tau=$$
$$=2\cdot\int(\delta f)\cdot[h(f)-e(f,f)\cdot\chi\cdot f]\,d\tau+\int[f\delta h(f)-(\delta f)\cdot h(f)]\,d\tau.$$

Второй интеграл обращается в нуль, потому что из линейности H следует линейность h относительно f и поэтому $\delta h(f)=h(\delta f)$; заменив h на $H+S\cdot\chi$, получим:

$$\int[f\cdot H(\delta f)-\delta f\cdot H(f)]\,d\tau+\int[f\cdot S\chi\delta f-\delta f\cdot S\chi f]\,d\tau=0,$$

так как, по предположению, H—самосопряженный оператор. Из

$$\int(\delta f)\,[h(f)-e(f,f)\cdot\chi\cdot f]\,d\tau=0$$

вытекает эйлерово уравнение $h(f)-e(f,f)\cdot\chi\cdot f=0$.

Данное дифференциальное уравнение и представляет собою эйлерово уравнение нашей вариационной задачи; таким образом $e=\min$ представляет собой ту вариационную задачу, к которой всегда применяется метод Ритца.

Одновременно мы получили экстремальное свойство с. з.; e^0 есть наименьшее из всех $e(f,f)$.

Вторая вариационная задача дает согласно (6)

$$0=\delta\int[h(f)]^2\cdot\frac{1}{\chi}\,d\tau-\eta(f,f)\cdot\delta\int f^2\chi\,d\tau=$$
$$=2\int(\delta f)\cdot\left[h\left(\frac{1}{\chi}\cdot h(f)\right)-\eta(f,f)\cdot\chi\cdot f\right]d\tau+$$
$$+2\int\left[\frac{1}{\chi}h(f)\cdot\delta h(f)-(\delta f)\cdot h\left(\frac{1}{\chi}\cdot h(f)\right)\right]d\tau.$$

Благодаря тому что $\delta h = h\delta$, получаем для второго интеграла из самосопряженности H:

$$\int \left[\left(\frac{h(f)}{\chi} \right) \cdot H(\delta f) - (\delta f) \cdot H \left(\frac{h(f)}{\chi} \right) \right] d\tau +$$
$$+ \int \left[\frac{h(f)}{\chi} \cdot S\chi\delta f - \delta f \cdot S\chi \cdot \frac{h(f)}{\chi} \right] d\tau = 0.$$

Эйлерово дифференциальное уравнение второй вариационной задачи сводится поэтому к

$$h\left(\frac{1}{\chi} \cdot h(\psi) \right) - \eta(\psi, \psi) \cdot \chi \cdot \psi = 0. \qquad (7)$$

Где лежит низшее η° всех $\eta(\psi, \psi)$?

Из неравенства Шварца

$$\int \left[\frac{h(\varphi)}{\chi} \right]^2 \cdot \chi \, d\tau \cdot \int \varphi^2 \chi \, d\tau \geqslant \left[\int \varphi \cdot h(\varphi) \, d\tau \right]^2$$

для любой функции φ следует

$$\eta(\varphi, \varphi) \geqslant [e(\varphi, \varphi)]^2. \qquad (8)$$

$e^\circ > 0$ было наименьшим из всех $e(\varphi, \varphi)$: поэтому η°, наименьшее из всех $\eta(\varphi, \varphi)$, во всяком случае не меньше $(e^\circ)^2$.

С другой стороны, существует с. ф. ψ°, для которой

$$h(\psi^\circ) - e^\circ \cdot \chi\psi^\circ = 0.$$

Вычислив $\eta(\psi^\circ, \psi^\circ)$ с помощью ψ°, получим:

$$\eta(\psi^\circ, \psi^\circ) = (e^\circ)^2;$$

для $\varphi = \psi^\circ$ η принимает это значение $(e^\circ)^2$; таким образом минимум всех $\eta(\varphi, \varphi)$ есть $\eta^\circ = (e^\circ)^2$.

Легко убедиться, что, вообще, любая с. ф. (1) является с. ф. (7).

Предлагаемый метод сводится к тому, что мы применяем метод Ритца не как обычно к $\delta e(f, f) = 0$, а к $\delta\eta(f, f) = 0$. Приближенные значения η_N при возрастании N сходятся, как всегда в методе Ритца, монотонно (сверху) к η°, и корни квадратные из этих величин — к e°.

Однако и соответствующие аппроксимирующие функции ψ_N сходятся к с. ф. ψ°.

В интеграле от квадратичной ошибки [1]

$$\int (F_N)^2 d\tau = \int \frac{1}{\chi} [H(\psi_N) - E_N \chi \psi_N]^2 d\tau =$$
$$= \int \frac{1}{\chi} [h(\psi_N) - e(\psi_N \cdot \psi_N) \cdot \chi\psi_N]^2 d\tau =$$
$$= \left\{ \eta(\psi_N, \psi_N) - [e(\psi_N, \psi_N)]^2 \right\} \cdot \int \psi_N^2 \chi \, d\tau$$

функцию ψ_N мы можем нормировать:

$$\int \psi_N^2 \chi \, d\tau = 1.$$

Множитель $\{\ \}$ на основании (8) всегда $\geqslant 0$; с другой стороны, он всегда меньше $\eta(\psi_N, \psi_N) - (e^\circ)^2$, так как $e(\psi_N, \psi_N) > e^\circ > 0$.

С возрастанием N $\eta(\psi_N, \psi_N)$ сходится к $(e^\circ)^2$; таким образом для достаточно большого N интеграл от квадратичной ошибки будет сколь угодно мал, функции ψ_N будут все лучше удовлетворять заданному дифференциальному уравнению, и им будут соответствовать все лучшие приближенные значения $E(\psi_N, \psi_N)$.

Так как низшее с. з. не вырождено, то ψ_N сходятся к с. ф. ψ°.

Выводы

Для решения краевой задачи $H(\psi) - E \cdot \chi\psi = 0$ с самосопряженным оператором H, все с. з. E^n которой лежат выше, чем $-S$, $E^n \geqslant E^\circ > -S$, метод Ритца применяется к вариационной задаче:

$$\delta \int \frac{1}{\chi} \cdot [H(\psi_N) + S \cdot \chi \cdot \psi_N]^2 d\tau - \eta_N \cdot \delta \int \chi \psi_N^2 d\tau = 0.$$

Тогда наименьший из N корней η_N с возрастанием N стремится сверху к $(E^\circ + S)^2$, а соответствующая ему функция ψ_N стремится к с. ф. ψ°, так что $H(\psi^\circ) - E^\circ \chi\psi^\circ = 0$.

Днепропетровский физико-технический институт.

Поступило 20 VI 1936.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] J. H. Bartlett, J. J. Gibbons и C. C. Dunn, Phys. Rev., **47**, 679 (1935).