

В (1) и (1') элементы A_{ij} образуют матрицу A ; U_{ij}^* — приведенные коэффициенты влияния, т. е. комбинации искоемых коэффициентов влияния k_{ij}^* . Если вследствие симметрии в первой из молекул (a) осуществляется N_1 типов колебаний, во второй (b) — N_2 и в третьей молекуле N_3 , то всего будет $N = N_1 + N_2 + N_3$ независимых симметризованных систем уравнений (1'). Из тех или иных разумных соображений находим ориентировочные величины коэффициентов влияния: часть из них берется в готовом виде или с некоторыми поправками из систем постоянных для родственных им молекул; ориентировочные значения других можно найти из уравнений (1'), пренебрегая членами $(U_{ij}^* \lambda - A_{ij}) Q_j$ при $i \neq j$; подставив их в системы уравнений (1') и решив описанным ниже способом, получим вычисленные частоты колебаний для каждой из выбранных молекул a, b, c . Сравниваем вычисленные частоты с соответствующими наблюдаемыми и, если нужно, изменяем исходные коэффициенты влияния в разумных пределах, используя расчетную схему для того, чтобы оценить, как сказывается изменение того или иного коэффициента влияния на вычисляемые частоты. Такое использование расчетной схемы значительно сокращает всю работу. Могут быть приняты во внимание и иные соображения. С уточненной системой коэффициентов влияния снова решаем системы уравнений (1') и т. д., пока не получим системы постоянных влияния, дающей хорошее согласие соответствующих вычисленных и наблюдаемых частот всех молекул a, b, c, d, e, f . Так как при определении коэффициентов влияния, как, впрочем, и при расчете динамических постоянных, приходится неоднократно пользоваться симметризованными системами (1'), то умение сравнительно быстро и точно решать последние играет решающую роль. Существующие методы решения их или неприменимы (5) или мало эффективны. (6). Поэтому для решения (1') ниже предлагается метод комбинированного наискорейшего спуска.

Не ограничивая общности, положим $Q_1 \neq 0$ и $U_{11}^* \neq 0$ и представим (1') в векторной форме

$$\lambda = \frac{A - (\vec{v}', \vec{x})}{U_{11}^*}, \quad \mathbf{B}\vec{x} = -\vec{v}, \quad (2)$$

где \mathbf{B} — линейный оператор с вещественной и симметричной матрицей ранга $n - 1$

$$B(\lambda) = \left\| \begin{array}{cccc} U_{22}^* \lambda - A_{22} & U_{23}^* \lambda - A_{23} & \dots & U_{2n}^* \lambda - A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_{n2}^* \lambda - A_{n2} & U_{n3}^* \lambda - A_{n3} & \dots & U_{nn}^* \lambda - A_{nn} \end{array} \right\|, \quad (3)$$

являющейся функцией собственного значения λ ; \vec{x} , \vec{v} и \vec{v}' — $(n - 1)$ -мерные векторы с составляющими Q_i / Q_1 (при $i \neq 1$), $U_{i1}^* \lambda - A_{i1}$, $U_{1i}^* \lambda - A_{1i}$ соответственно; оператор \mathbf{B} и векторы, очевидно, образуют вещественное n -мерное пространство, что вытекает из условий для уравнений (1'). Поскольку операция \mathbf{B} имеет обратную \mathbf{B}^{-1} , второе из уравнений (2) будет иметь решение

$$\vec{x} = -\mathbf{B}^{-1} \vec{v}. \quad (4)$$

Взяв в качестве ориентировочного собственного значения, например, $\lambda = \lambda_0 = A_{11} / U_{11}^*$ и подставив в (3), мы получим начальное значение матрицы $B(\lambda): B(\lambda_0) = B_0$; аналогично найдутся начальные значения векторов $\vec{v} \equiv \vec{v}(\lambda_0) = \vec{v}_0$, $\vec{v}' \approx \vec{v}'(\lambda_0) = \vec{v}'_0$, после чего из (4) и (2) имеем

первые приближения для \vec{x} и λ :

$$\vec{x}^{(1)} = -\mathbf{B}_0^{-1}\vec{v}_0, \quad (5)$$

$$\lambda_1 = \frac{A_{11} - (\vec{v}_0, \vec{x}^{(1)})}{U_{11}^*}. \quad (6)$$

При этом весьма удобно пользоваться сокращенным первым циклом несколько упрощенной астрономической схемы (4). Таким образом, в первом приближении матрица $B(\lambda) \cong B(\lambda_1) = B_1$ и векторы $\vec{v} \approx \vec{v}_1$, $\vec{v}' \approx \vec{v}'_1$ не зависят от λ ; обозначив соответствующий матрице B_1 оператор через \mathbf{B}_1 , второе уравнение (2) можно переписать в виде:

$$\mathbf{B}_1\vec{x} + \vec{v}_1 = 0. \quad (7)$$

Решение уравнений типа (7) сводится к нахождению минимума квадратного функционала (5)

$$D(\vec{x}) = (\mathbf{B}\vec{x}, \vec{x}) + 2(\vec{v}, \vec{x}). \quad (8)$$

В самом деле, пусть вектор \vec{x} принимает некоторое значение $\vec{x} = \vec{x}^{(1)} + \varepsilon\vec{z}$, где \vec{z} — пока неопределенный вектор того же n -мерного пространства Гильберта, ε — некоторый вещественный параметр; тогда (8) запишется в виде

$$D(\vec{x}^{(1)} + \varepsilon\vec{z}) = D(\vec{x}^{(1)}) + 2\varepsilon(\mathbf{B}\vec{x}^{(1)} + \vec{v}, \vec{z}) + \varepsilon^2(\mathbf{B}\vec{z}, \vec{z}). \quad (9)$$

Если при некотором значении \vec{x}^* вектора \vec{x} функционал (8) обращается в минимум, то, по (9),

$$(\mathbf{B}\vec{x}^{(1)} + \vec{v}, \vec{z}) = 0$$

при любом \vec{z} , принадлежащем к пространству Гильберта, и, следовательно,

$$\mathbf{B}\vec{x}^* + \vec{v} = 0,$$

откуда \vec{x}^* — решение уравнения (7). Для отыскания минимума функционала (8) или (9) положим

$$\vec{z}^{(1)} = \mathbf{B}_1\vec{x}^{(1)} + \vec{v}_1$$

и ищем \vec{z} из условия, чтобы

$$\frac{d}{d\varepsilon} [D(\vec{x}^{(1)} + \varepsilon\vec{z})]_{\varepsilon=0} = 2(\vec{z}^{(1)}, \vec{z}) \quad (10)$$

было максимальным, причем $\|\vec{z}\| = \sqrt{(\vec{z}, \vec{z})} = \text{const}$. На основании неравенства Буняковского $(\vec{x}, \vec{y})^2 \leq (\vec{x}, \vec{x})(\vec{y}, \vec{y})$ (10) достигает максимума при

$$\vec{z} = \vec{z}^{(1)} = \mathbf{B}_1\vec{x}^{(1)} + \vec{v}_1. \quad (11)$$

ε найдется из условия минимума (9); для этого дифференцируем его по ε и результат приравняем нулю; тогда

$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} = -\frac{(\vec{z}^{(1)}, \vec{z}^{(1)})}{(\mathbf{B}\vec{z}^{(1)}, \vec{z}^{(1)})}. \quad (12)$$

Итак, вторые приближения для \vec{x} и λ запишутся в виде

$$\vec{x}^{(2)} = \vec{x}^{(1)} + \varepsilon^{(1)} \vec{z}^{(1)}, \quad (13)$$

$$\lambda_2 = \frac{A_{11} - (\vec{v}_1, \vec{x}^{(2)})}{U_{11}^*}. \quad (14)$$

Этим заканчивается второй цикл метода комбинированного наискорейшего спуска.

Далее, по (13) и (14) находим матрицу (3) — $B(\lambda_2) = B_2$ и векторы \vec{v}_2, \vec{v}_2' и, значит, (7) запишется в виде

$$\mathbf{B}_{(2)} \vec{x} + \vec{v}_{(2)} = 0. \quad (15)$$

Для решения (15) снова повторяем операции (8) — (14), т. е., беря в качестве следующих приближений для \vec{z} и ε

$$\vec{z}^{(2)} = \mathbf{B}_2 \vec{x}^{(2)} + \vec{v}_{(2)}, \quad (11')$$

$$\varepsilon^{(2)} = - \frac{(\vec{z}^{(2)}, \vec{z}^{(2)})}{(B \vec{z}^{(2)}, \vec{z}^{(2)})}, \quad (12')$$

получаем третье приближение для собственного вектора \vec{x} и собственного значения λ :

$$\vec{x}^{(3)} = \vec{x}^{(2)} + \varepsilon^{(2)} \vec{z}^{(2)} = \vec{x}^{(1)} + \varepsilon^{(1)} \vec{z}^{(1)} + \varepsilon^{(2)} \vec{z}^{(2)}, \quad (13')$$

$$\lambda_{(3)} = \frac{A_{11} - (\vec{v}_2, \vec{x}^{(3)})}{U_{11}^*}. \quad (14')$$

Таким образом, имеем последовательности $\vec{x}^{(s)}$ и $\lambda_{(s)}$, которые сходятся к пределу, как нетрудно показать⁽⁵⁾, с быстротой геометрической прогрессии весьма малого знаменателя. Быстрота процесса сходимости может быть повышена за счет одновременного выполнения нескольких спусков сразу.

Рассмотренный метод решения уравнений (1'), в сравнении с методами итерации и наискорейшего спуска, является более эффективным. Достаточно сказать, что, если для решения (1') методом итерации или наискорейшего спуска надо совершать по 3—4 цикла, то методом комбинированного спуска, кроме сокращенного цикла, фактически достаточно произвести лишь один цикл спуска при меньшем количестве вычислительных операций и более простых числах. Все вычисления могут быть расположены в весьма удобную расчетную схему.

В заключение считаю приятным долгом выразить свою искреннюю благодарность проф. М. А. Ельяшевичу за ценные советы.

Ленинградский военномеханический институт

Поступило
28 I 1950

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ П. Г. Маслов, ДАН, 67, 819 (1949). ² М. А. Ельяшевич, Усп. физ. наук, 28, 4, 65 (1946). ³ П. Г. Маслов, Уч. зап. ЛГИ, 24, в. 3 (1949). ⁴ М. В. Волькенштейн, М. А. Ельяшевич и Б. И. Степанов, Колебания молекул, 1949, стр. 338. ⁵ Л. В. Канторович, Усп. матем. наук, 3, в. 6 (1948). ⁶ Л. С. Маянц, ДАН, 50, 121 (1945).