Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Локшин, О выпуклости поверхности собственных значений, *Матем. заметки*, 1997, том 61, выпуск 6, 946–949

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm1580>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 13:03:58

О ВЫПУКЛОСТИ ПОВЕРХНОСТИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

А. А. Локшин

В заметке устанавливается результат, принадлежащий к классу теорем типа Гельмана–Фейнмана (см. [1]). Именно, показывается, что для действующего в вещественном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ полуограниченного снизу самосопряженного оператора, линейно зависящего от n вещественных числовых параметров и такого, что нижняя точка его спектра представляет собой изолированное невырожденное собственное значение, это собственное значение оказывается выпуклой вверх функцией упомянутых параметров. В случае $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^k)$ сформулированный результат обобщается на один специальный класс операторов, нелинейно зависящих от числовых параметров.

1. Пусть $\mathcal{H}$ – вещественное гильбертово пространство.

ТЕОРЕМА 1. Пусть H_0 – самосопряженный полуограниченный снизу оператор с областью определения $D(H_0) \subset \mathcal{H}$; V_i , $i = 1, \dots, n$, – ограниченные симметрические операторы, определенные на всем $\mathcal{H}$. Рассмотрим оператор

$$H = H_0 + a_1 V_1 + \dots + a_n V_n, \quad a_i \in \mathbb{R}^1, \quad i = 1, \dots, n.$$

Предположим, что при каждом $a = (a_1, \dots, a_n)$ из достаточно малого шара

$$(a_1^2 + \dots + a_n^2)^{1/2} < \varepsilon, \quad \varepsilon > 0, \quad (1)$$

нижняя грань спектра полуограниченного снизу самосопряженного оператора $H = H(a)$ представляет собой изолированное невырожденное собственное значение $E = E(a)$ (не ограничивая общности, считаем $E(a)$ и соответствующий нормированный собственный вектор $\psi(a)$ вещественно-аналитическими в шаре (1)). Тогда в шаре (1) функция $E(a)$ выпукла вверх.

ЛЕММА. В условиях теоремы 1

$$\frac{\partial \psi(a)}{\partial a_i} \in D(H_0) \quad (2)$$

и, кроме того,

$$\frac{\partial}{\partial a_i} H_0 \psi(a) = H_0 \frac{\partial \psi(a)}{\partial a_i}. \quad (3)$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 95–01–01171а.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим соотношение

$$\frac{\psi(a + \Delta a_i) - \psi(a)}{\Delta a_i} \in D(H_0),$$

где $a + \Delta a_i = (a_1, \dots, a_i + \Delta a_i, \dots, a_n)$. В силу вещественной аналитичности $\psi(a)$ существует сильный предел этого отношения при $\Delta a_i \rightarrow 0$, который мы и обозначим через $\partial\psi/\partial a_i$. Далее имеем

$$\begin{aligned} & H_0 \frac{\psi(a + \Delta a_i) - \psi(a)}{\Delta a_i} \\ &= \frac{1}{\Delta a_i} \{ H(a + \Delta a_i) \psi(a + \Delta a_i) - [a_1 V_1 + \dots + (a_i + \Delta a_i) V_i + \dots + a_n V_n] \psi(a + \Delta a_i) \\ &\quad - H(a) \psi(a) + [a_1 V_1 + \dots + a_i V_i + \dots + a_n V_n] \psi(a) \} \\ &= \frac{1}{\Delta a_i} \{ E(a + \Delta a_i) \psi(a + \Delta a_i) - E(a) \psi(a) - a_1 V_1 [\psi(a + \Delta a_i) - \psi(a)] - \dots \\ &\quad - [(a_i + \Delta a_i) V_i \psi(a + \Delta a_i) - a_i V_i \psi(a)] - \dots - a_n V_n [\psi(a + \Delta a_i) - \psi(a)] \}, \end{aligned}$$

откуда, очевидно, следует существование сильного предела при $\Delta a_i \rightarrow 0$ величины, стоящей в левой части последнего равенства. Теперь утверждения (2) и (3) леммы следуют из замкнутости самосопряженного оператора H_0 .

СЛЕДСТВИЕ. В условиях теоремы 1

$$(H(a)\psi(a))'_{a_i} = V_i \psi + H\psi'_{a_i}. \quad (4)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1. Как это обычно делается при доказательстве теорем типа Гельмана–Фейнмана (см., например, [2]), будем исходить из соотношения

$$\langle \psi(a), (H(a) - E(a))\psi(a) \rangle = 0, \quad a = (a_1, \dots, a_n) \quad (5)$$

($\langle \cdot, \cdot \rangle$ означает скалярное произведение в $\mathcal{H}$). Дифференцируя (5) по a_i , с учетом (4) и самосопряженности оператора $H(a)$ получаем $\langle \psi, (V_i - E'_{a_i})\psi \rangle = 0$. Дифференцируя теперь это соотношение по a_j , с учетом самосопряженности V_i имеем

$$2\langle \psi'_{a_j}, (V_i - E'_{a_i})\psi \rangle - E''_{a_i a_j} \langle \psi, \psi \rangle = 0. \quad (6)$$

Далее, дифференцируя по a_j равенство $(H - E)\psi = 0$, с учетом (4) имеем

$$(H - E)\psi'_{a_j} + (V_j - E'_{a_j})\psi = 0, \quad (7)$$

откуда, в частности, следует, что

$$(V_j - E'_{a_j})\psi \in \{\text{Ker}(H - E)\}^\perp, \quad (8)$$

где через $\{\text{Ker}(H - E)\}^\perp$ обозначено ортогональное дополнение к $\text{Ker}(H - E)$ в $\mathcal{H}$. Из соотношений (7), (8) имеем

$$\psi'_{a_j} = -(H - E)^{-1}(V_j - E'_{a_j})\psi. \quad (9)$$

Здесь $(H - E)^{-1}$ понимается как оператор, действующий на $\{\text{Ker}(H - E)\}^\perp$.

Подставим теперь (9) в (6). Тогда, учитывая нормированность вектора ψ , получим

$$-\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = 2 \langle (H - E)^{-1} (V_j - E'_{a_j}) \psi, (V_i - E'_{a_i}) \psi \rangle. \quad (10)$$

Нетрудно видеть, что ограниченный симметрический оператор $(H - E)^{-1}$ положительно определен (на $\{\text{Ker}(H - E)\}^\perp$). Следовательно, на $\{\text{Ker}(H - E)\}^\perp$ определен и квадратный корень из него, который мы обозначим через $(H - E)^{-1/2}$. Положим

$$\xi_l = \sqrt{2} (H - E)^{-1/2} (V_l - E'_{a_l}) \psi, \quad l = 1, \dots, n.$$

Тогда (10), очевидно, переписывается следующим образом:

$$-\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \langle \xi_j, \xi_i \rangle, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (11)$$

Однако, как хорошо известно, матрица Грама $\|\langle \xi_j, \xi_i \rangle\|$ неотрицательно определена. Следовательно, в силу (11) в шаре (1) неотрицательно определен гессиян функции $-E(a)$, откуда следует выпуклость вверх функции $E(a)$ в упомянутом шаре. Теорема доказана.

2. Перейдем теперь к случаю, когда вещественное гильбертово пространство $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^k)$. Всюду ниже считаем V_s , $s = 1, \dots, m$, операторами умножения на функции от $x = (x_1, \dots, x_k)$. Теперь покажем, что можно определить довольно широкое семейство “потенциалов” V_s , *нелинейным* образом зависящих от параметров $a_1 \geq 0, \dots, a_n \geq 0$ и таких, что справедливо утверждение, аналогичное утверждению теоремы 1.

Итак, пусть

$$\begin{aligned} V_s &= V_s(f_{0s}(x) + a_1 f_{1s}(x) + \dots + a_n f_{ns}(x)), \\ f_{is}(x) &\geq 0, \quad f_{is}(x) \in C^2(\mathbb{R}^k), \quad V_s(y) \in C^2[-1, \infty), \end{aligned} \quad (12)$$

причем

$$\frac{d^2 V_s(y)}{dy^2} \leq 0 \quad \text{при } y \geq -1.$$

Рассмотрим оператор

$$H(a) = H_0 + V_1 + \dots + V_m, \quad (13)$$

где H_0 – некоторый полуограниченный снизу самосопряженный оператор в $L_2(\mathbb{R}^k)$.

ТЕОРЕМА 2. Пусть выполнены ограничения (12) на функции f_{is} и V_s . Предположим, далее, что в некоторой области Ω изменения неотрицательных параметров $a_1, \dots, a_n$ оператор (13) самосопряжен, причем нижняя грань его спектра представляет собой изолированное невырожденное собственное значение $E = E(a)$, $a = (a_1, \dots, a_n)$. Кроме того, предположим, что $E(a)$ в Ω является дважды непрерывно дифференцируемой функцией от a , а соответствующий нормированный собственный вектор $\psi = \psi(a)$ дважды сильно непрерывно дифференцируем по a . Тогда при $a \in \Omega$ функция $E(a)$ выпукла вверх.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Прежде всего, заметим, что утверждения леммы сохраняются и в условиях теоремы 2, а соотношение (4) приобретает вид

$$(H(a)\psi(a))'_{a_i} = H'_{a_i}\psi + H\psi'_{a_i}. \quad (14)$$

Поэтому, дифференцируя (5) по a_i , с учетом самосопряженности оператора H имеем

$$\langle \psi, (H'_{a_i} - E'_{a_i})\psi \rangle = 0.$$

Дифференцируя это соотношение по a_j (что, очевидно, возможно в условиях теоремы) и используя симметричность ограниченного оператора H'_{a_i} , имеем

$$2\langle \psi'_{a_j}, (H'_{a_i} - E'_{a_i})\psi \rangle + \langle \psi, (H''_{a_i a_j} - E''_{a_i a_j})\psi \rangle = 0. \quad (15)$$

Аналогично (9) с помощью (14) имеем

$$\psi'_{a_j} = -(H - E)^{-1}(H'_{a_j} - E'_{a_j})\psi. \quad (16)$$

Подставляя (16) в равенство (15), получаем

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} &= 2\langle (H - E)^{-1/2}(H'_{a_j} - E'_{a_j})\psi, (H - E)^{-1/2}(H'_{a_i} - E'_{a_i})\psi \rangle \\ &+ \sum_{s=1}^m \langle \psi, -V''_s f_{is} f_{js} \psi \rangle, \quad i, j = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (17)$$

Положим теперь

$$\xi_l = \sqrt{2}(H - E)^{-1/2}(H'_{a_l} - E'_{a_l})\psi, \quad \eta_{ls} = f_{ls}\psi\sqrt{-V''_s}, \quad l = 1, \dots, n, \quad s = 1, \dots, m.$$

Тогда (17), очевидно, переписывается следующим образом:

$$-\frac{\partial^2 E}{\partial a_i \partial a_j} = \langle \xi_i, \xi_j \rangle + \sum_{s=1}^m \langle \eta_{is}, \eta_{js} \rangle, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Итак, гессиан функции $-E(a)$ представим в виде суммы $n + 1$ матриц Грама и, тем самым, является положительно определенной матрицей. Теорема доказана.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
26.03.96

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Цюлике Л. Квантовая химия. Т. 1. М.: Мир, 1976. 2. Эпштейн С. Вариационный метод в квантовой химии. М.: Мир, 1977.