УДК 530.145.7; 539.194

МЕТОД МОМЕНТОВ СУММИРОВАНИЯ РЯДОВ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

А.Д. Быков, К.В. Калинин

Институт оптики атмосферы им. акад. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск
E-mail: byk@asd.iao.ru

Предложен способ суммирования расходящихся рядов теории возмущений, основанный на подборе функции меры метода моментов. Способ применен для вычисления уровней энергии ангармонического осциллятора, дает достаточно точные значения уровней при различных значениях параметра возмущения.

Ключевые слова:
Теория возмущений, суммирование расходящихся рядов, ряды Стилтьеса, ангармонический осциллятор.
Key words:
Perturbation theory, summation of divergent series, Stiltjes series, anharmonic oscillator.

Введение

Теория возмущений (ТВ) является удобным и сравнительно простым средством вычисления уровней энергии и волновых функций в квантовой механике. Однако в значительном числе задач (например, ангармонические осцилляторы, эффекты Штарка и Зеемана для атома водорода) ряды ТВ имеют нулевой радиус сходимости и расходятся при любом, сколь угодно малом, значении параметра возмущения. Тем не менее, привлечение высоких порядков ТВ и специальных методов суммирования [1, 2] позволяет решить задачу и при быстрой расходимости рядов [3–10]. В качестве примера эффективности этих методов можно указать на вычисление уровней энергии одномерного ангармонического осциллятора: суммирование методом Паде дает значение энергии основного состояния с 20-ю верными значащими цифрами [3].

В данной работе предложен способ суммирования расходящихся рядов, основанный на методе моментов. Как известно, моменты определяются с помощью некоторой меры, которая определяет также и сумму изучаемого ряда. Поэтому, в том случае, когда коэффициенты ряда ТВ есть моменты, задачу можно свести к определению меры, исходя из некоторого количества первых коэффициентов суммируемого ряда. Такая задача является классической проблемой моментов, и предлагаемый способ вычислений заключается в разложении функции плотности по подходящей системе функций и последующем решении системы линейных уравнений, определяющей коэффициенты разложения.

Существенным моментом предлагаемого подхода является привлечение дополнительной информации о характере ряда и типе функции, к которой суммируется ряд. В задачах квантовой механики такая информация может быть получена различными способами, в частности, с помощью квазиклассического приближения. Предлагаемый метод применим, например, в тех случаях, когда рассматриваемый ряд ТВ является рядом типа Стилтьеса, и энергия, рассматриваемая как функция параметра возмущения, имеет вполне определенное интегральное представление.

В заключительной части статьи метод тестируется на примере ангармонического осциллятора. Отметим, что ранее в [11–14] метод моментов применялся для решения различных задач квантовой механики.

1. Метод моментов

В ТВ, энергия $E(\lambda)$ представляется в виде степенного ряда

$$E(\lambda) = e_0 + e_1\lambda + e_2\lambda^2 + \ldots \tag{1}$$

где λ – параметр возмущения, а $e_0, e_1, \ldots$ – коэффициенты. Для рядов типа Стилтьеса эффективным методом суммирования является метод моментов, который заключается в следующем [2]. Пусть

$$\mu_n = \int_0^\infty t^n d\chi(t) = \int_0^\infty t^n \varphi(t)dt \tag{2}$$

– моменты, определяемые мерой

$$\chi(x) = \int_0^x \varphi(t)dt. \tag{3}$$

Функцию $\varphi(t)$ будем называть функцией плотности. Она должна быть непрерывной и убывающей на бесконечности достаточно быстро, так чтобы интегралы (2) сходились для любого целого неотрицательного n.

В методе моментов исходный ряд (1) преобразуется делением каждого члена ряда на соответствующий момент:

$$\frac{e_0}{\mu_0} + \frac{e_1}{\mu_1}\lambda + \frac{e_2}{\mu_2}\lambda^2 + \ldots \Rightarrow g(\lambda). \tag{4}$$

Если преобразованный ряд сходится и соответствует функции $g(\lambda)$, то сумма исходного ряда даётся выражением:

$$E(\lambda) = \int_0^\infty \varphi(t)g(\lambda t)dt.$$

Известно, что метод моментов регулярный [2], т. е. для сходящихся рядов он дает «правильное» значение суммы. Кроме того, если мера представима в виде (3), и функция $\varphi(t)$ – непрерывная, положительная и убывающая, по крайней мере, при $t>t_0$, а ряд (1) сходится при малых λ, то все методы моментов дают одинаковый результат независимо от выбора $\varphi(t)$ [2].

Для определенности предположим, что ряд ТВ является рядом типа Стилтьеса, и коэффициенты ряда являются моментами Стилтьеса некоторой меры. То есть

$$e_n = \int_0^\infty t^n \varphi(t) dt \tag{5}$$

и

$$E(\lambda) = \int_0^\infty \frac{\varphi(t)}{1+\lambda t} dt.$$

Так, например, в [3] показано, что для линейного ангармонического осциллятора ряд ТВ является рядом типа Стилтьеса, если исключить нулевой член e_0. Для таких рядов задача суммирования ряда ТВ может быть сведена к определению функции плотности.

Функцию плотности можно представить в виде разложения по некоторому полному ортонормальному набору базисных функций $\rho_k(t)$, $k=0,\dots$, $0\le t<\infty$,

$$\varphi(t) = \sum_{k=0}^\infty a_k \rho_k(t). \tag{6}$$

Если базисные функции $\rho_k(t)$ можно представить в виде асимптотического разложения

$$\rho_k(t) = \sum_{i=0}^\infty r_{ki} t^i, \tag{7}$$

то формальное (меняется местами интегрирование и суммирование) решение проблемы моментов есть

$$a_k = \int_0^\infty \varphi(t)\rho_k(t)dt = \sum_{i=0}^\infty r_i \int_0^\infty \varphi(t) t^i dt = \sum_{i=0}^\infty r_{ki} e_i, \tag{8}$$

где ряд в правой части также является асимптотическим. В этом случае энергия представляется в виде

$$E(\lambda) = \sum_{k=0}^\infty \sum_{i=0}^\infty e_i r_{ki} \int_0^\infty \frac{\rho_k(t)}{1+\lambda t} dt = \sum_{i=0}^\infty e_i P_i(\lambda). \tag{9}$$

Здесь

$$P_i(\lambda) = \sum_{k=0}^\infty r_{ki} \int_0^\infty \frac{\rho_k(t)}{1+\lambda t} dt \tag{10}$$

– весовые функции, представляемые в виде функционального ряда.

Представление коэффициентов разложения в виде (8) является удобным приемом для разрешимой проблемы моментов [2, 11, 12]. При его реализации необходимо учитывать расходимость рядов в (7–10).

Для определения суммы расходящегося ряда мы используем следующий прием. Если ряд в правой части (6) сходится достаточно быстро, то для приближенного вычисления моментов и суммы ряда можно ограничиться первыми $N+1$ членами

$$\varphi(t) = \sum_{k=0}^N a_k \rho_k(t) \tag{11}$$

и коэффициенты определить так, чтобы выполнялось равенство

$$\mu_n = (-1)^n e_n, \quad n = 0,\dots, N. \tag{12}$$

При этом:

$$\mu_n = \sum_{k=0}^N S_{nk} a_k = (-1)^n e_n, \tag{13}$$

$$S_{nk} = \int_0^\infty t^n \rho_k(t) dt. \tag{14}$$

Соотношения (13) можно рассматривать как систему $N+1$ уравнений для определения $N+1$ неизвестных коэффициентов a_k. Если определитель системы не равен нулю, то:

$$a_k = \sum_{i=0}^N (-1)^k \frac{D_{i+1,k+1}}{\det(S)} e_i. \tag{15}$$

Здесь S – матрица, состоящая из моментов (14), и D_{ik} – алгебраическое дополнение элемента S_{ik} в определителе S. Действуя формально, преобразованный ряд (4) можно теперь представить в виде

$$g(\lambda) = \frac{1}{1+\lambda} + R_N(\lambda),$$

$$R_N()\lambda = \sum_{n=N+1}^\infty \left(\frac{e_n}{\mu_n} - (-1)^n \right) \lambda^n. \tag{16}$$

Если базисные функции выбраны так, что остаток преобразованного ряда сходится к некоторой малой поправке, которой можно пренебречь, то выражение для суммы ряда будет иметь вид:

$$E(\lambda) = \sum_{k=0}^N a_k \int_0^\infty \frac{\rho_k(t)}{1+\lambda t} dt = \sum_{i=0}^N e_i P_i(\lambda),$$

где

$$P_i(\lambda) = \sum_{k=0}^N (-1)^k \frac{D_{i+1,k+1}}{\det(S)} \int_0^\infty \frac{\rho_k(t)}{1+\lambda t} dt.$$

Необходимо отметить, что аналогичный подход, связанный с использованием разложений функции плотности по полному набору функций применялся ранее, например, при определении плотности состояний кристаллов методами ТВ [12].

В том случае, когда вторым слагаемым в правой части (16) пренебречь нельзя, можно повторно использовать описанную выше процедуру для его определения. При этом преобразованный после первого суммирования ряд преобразуется снова описанным выше способом. Процедура применяется далее до получения результата с требуемой точностью. При этом функция меры каждый раз подбирается так, чтобы найденные с ее помощью моменты с учетом множителя $(-1)^n$ совпадали с коэффициентами выбранного отрезка ряда. В итоге сумма ряда определяется следующим образом:

$$E(\lambda)=\int_0^\infty \frac{\varphi^{(1)}(t_1)}{1+\lambda t_1}dt_1+$$

$$+\lambda^{N_1+1}\int_0^\infty\int_0^\infty t_1^{N_1+1}\frac{\varphi^{(1)}(t_1)\varphi^{(2)}(t_2)}{1+\lambda t_1t_2}dt_1dt_2+$$

$$+\lambda^{N_1+N_2+2}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty t_1^{N_1+1}t_2^{N_2+1}\frac{\varphi^{(1)}(t_1)\varphi^{(2)}(t_2)\varphi^{(3)}(t_3)}{1+\lambda t_1t_2t_3}\times$$

$$\times dt_1dt_2dt_3+\ldots+$$

$$+\lambda^{N_1+N_2+\ldots+N_n+n}\int_0^\infty\int_0^\infty\ldots\int_0^\infty t_1^{N_1+1}\ldots t_n^{N_n+1}\times$$

$$\times\frac{\varphi^{(1)}(t_1)\varphi^{(2)}(t_2)\ldots\varphi^{(n+1)}(t_{n+1})}{1+\lambda t_1t_2\ldots t_{n+1}}dt_1\ldots dt_ndt_{n+1}. \qquad (17)$$

Здесь $\varphi^{(n)}(t_n)$ – функции плотности, представляемые в виде разложения (11) и определяемые, как и выше, из системы уравнений типа (13).

Выражение (17) для суммы ряда получено в результате формальных преобразований и оправдывается только в случае, когда каждый последующий остаток ряда является рядом Стилтьеса и определители системы уравнений типа (13) не равны нулю на каждом шаге преобразования ряда. В целом, формулы (15–17) представляют некоторый алгоритм, позволяющий построить выражение, разложение которого возвращает исходный ряд. Вопросы сходимости, регулярности метода здесь не рассматриваются.

2. Функция меры

В представленном способе суммирования рядов основная проблема – выбор «элементарных» функций $\rho_k(t)$. Необходимо заранее определить, к какому классу относится функция плотности $\varphi(t)$. При неудачном выборе базисных функций $\rho_k(t)$, коэффициенты a_k, k=0,...N, определяемые из системы конечного числа уравнений (13), могут не воспроизводить более высокие коэффициенты ряда с $n>N$. Кроме того, матрица S может быть плохо обусловленной и иметь близкий к нулю определитель. Необходимо отметить, что нахождение функции меры, в общем случае, должно рассматриваться как некорректная обратная задача, и необходима ее регуляризация, т. е. привлечение дополнительной априорной информации [11].

Для выбора базисных функций можно использовать оценки высоких порядков ТВ. В [5, 10] предложены методы оценки коэффициентов высокого порядка с помощью квазиклассического приближения. В методе предполагается, что ряд ТВ соответствует функции, аналитической на всей комплексной плоскости с разрезом вдоль отрицательной полуоси. В этом случае коэффициенты исходного ряда ТВ для состояния V можно представить в виде [5]:

$$e_n^V=\frac{(-1)^n}{\pi}\int_0^\infty\left[\frac{\operatorname{Im}E_V(-1/t)}{t}\right]t^n\,dt. \qquad (18)$$

Причем все интегралы (18) существуют. Здесь $\operatorname{Im}E_V(-1/t)/t$ представляет скачок мнимой части энергии на отрицательной полуоси. Данное соотношение показывает, что если функция $\operatorname{Im}E_V(-1/t)/t$ удовлетворяет условиям, накладываемым на функцию плотности, то коэффициенты ряда ТВ являются моментами. Например, для ангармонического осциллятора показано, что все коэффициенты, за исключением нулевого слагаемого e_0, являются моментами, и ряд ТВ является рядом типа Стилтьеса. При этом коэффициенты «стилтьесовой» части ряда представляются в виде

$$\tilde{e}_n^V=e_{n+1}=\int_0^\infty\varphi(t)t^n dt,$$

$$\varphi(t)=\frac{(-1)^n}{\pi}\operatorname{Im}E_V(-1/t),\quad n=0,\ldots \qquad (19)$$

Формула (19) дает «естественное» представление функции плотности. Анализ этого выражения и показывает [5, 7], что в случае ангармонического осциллятора в качестве функций $\rho_k(t)$ можно использовать нормированные функции Лагерра

$$W_k^{(\alpha)}(t)=\left[\Gamma(k+\alpha)\binom{k+\alpha}{k}\right]^{-1/2}e^{-t/2}t^{\alpha/2}L_k^{(\alpha)}(t), \quad (20)$$

которые образуют полную ортонормированную систему квадратично интегрируемых функций, определенных на области 0...∞. При этом все необходимые интегралы (14) вычисляются точно:

$$S_{nk}=\int_0^\infty t^nW_k^{(б)}(t)dt=\frac{1}{\sqrt{\Gamma(k+б)\binom{k+б}{k}}}\times$$

$$\times\sum_{i=0}^k\frac{(-1)^i}{i!}\binom{k+б}{k-i}2^{n+\frac{\alpha}{2}+i+1}\Gamma\left(n+\frac{\alpha}{2}+i+1\right).$$

Мы можем использовать другое условие вместо (13) для определения функции плотности. Например, можно использовать соотношения

$$\mu_n=\int_0^\infty dt\varphi(t)t^n=e_n/g_n,$$

где коэффициенты g_n есть коэффициенты разложения в ряд некоторой известной функции $g(\lambda)$:

$$g(\lambda)=\sum_{n=0}^\infty g_n\lambda^n. \qquad (21)$$

Функция $g(\lambda)$, которую можно назвать «целевой» функцией, может быть произвольной, не обязательно типа Стилтьеса, единственное условие – коэффициенты разложения (21) должны быть ненулевыми. Тогда для суммы ряда можно получить выражение

$$E(\lambda)=\sum_{i=0}^N\frac{e_i}{g_i}P_i(\lambda),$$

где

$$P_i(\lambda) = \sum_{k=0}^{N} (-1)^{i+k} \frac{D_{i+1,k+1}}{\det(S)} \int_0^\infty \rho_k(t) g(\lambda t) dt.$$

Здесь, как и ранее, S – матрица, состоящая из моментов S_{nk} и D_{ik} – алгебраическое дополнение для элемента i,k.

Такой метод суммирования можно применять, когда коэффициенты ряда ТВ не являются в точности моментами некоторой меры, но их можно представить в виде произведения моментов на некоторые коэффициенты.

3. Линейный ангармонический осциллятор

В качестве примера применения метода моментов рассмотрим задачу об одномерном ангармоническом осцилляторе. Гамильтониан имеет вид:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + x^2) + \lambda x^4. \qquad (22)$$

Здесь $p=-i\partial/\partial x$ – оператор импульса. Гамильтониан (22) часто используется для тестирования методов суммирования, он также приближенно описывает колебания атомов в двухатомной молекуле, при этом второе слагаемое соответствует ангармонической части функции потенциальной энергии. Для двухатомных молекул типичные значения параметра λ варьируются от 0,01 для «тяжелых» молекул с малой ангармоничностью, до 1 для молекул с очень сильной ангармоничностью.

Общий анализ задачи показал, что ряд ТВ для гамильтониана (22) имеет нулевой радиус сходимости [3–5]. Также было показано, что ряд, при исключении первого слагаемого, является рядом типа Стилтьеса.

Коэффициенты ряда (1) вычислялись по рекуррентной формуле ТВ Рэлея-Шредингера для значений параметра возмущения λ=0,01; 0,05; 0,1; 0,5; 1,0; 5,0 для первых шести состояний. Во всех вычислениях использовалась разрядность 40. В качестве

Таблица. *Уровни энергии ангармонического осциллятора*

$V \setminus \lambda$		0,01	0,05	0,1
0	Var	0,50725620452460284095	0,53264275477185884442	0,55914632718351957675
	MM	0,50725620452460284095	0,53264275477185884442	0,55914632718351953369
	PB	0,50725620452460284095	0,53264275477185884443	0,55914632718351971066
1	Var	1,53564827829680346290	1,65343600657645675356	1,76950264394905424513
	MM	1,53564827829680346290	1,65343600657645675354	1,76950264394905256115
	PB	1,53564827829680346290	1,65343600657645676872	1,76950264394921161047
2	Var	2,59084579619070266576	2,87397963441678165236	3,13862430849812044456
	MM	2,59084579619070266576	2,87397963441678165241	3,13862430849811296841
	PB	2,59084579619070266576	2,87397963441678171887	3,13862430849859121295
3	Var	3,67109494222579801861	4,17633891289287735612	4,62888280888814199031
	MM	3,67109494222579801861	4,17633891289287735612	4,62888280888812338445
	PB	3,67109494222579801861	4,17633891289287815223	4,62888280889243859547
4	Var	4,77491311865550985124	5,54929781131652150600	6,22030090000652428174
	MM	4,77491311865550985124	5,54929781131652150588	6,22030090000654380106
	PB	4,77491311865550985124	5,54929781131650259833	6,22030089994815301573
5	Var	5,90102667411262297563	6,98496309887139965285	7,89976722787143304229
	MM	5,90102667411262297563	6,98496309887139965285	7,89976722787142014454
	PB	5,90102667411262297563	6,98496309887129890796	7,89976722761205326245
$V \setminus \lambda$		0,5	1,0	5,0
0	Var	0,6961758207	0,8037706512	1,2245874494
	MM	0,6961758206	0,8037705972	1,2244526319
	PB	0,6961758215	0,8037707294	1,2247119169
1	Var	2,3244063521	2,7378922687	4,2995080876
	MM	2,3244063620	2,7378916719	4,2953498495
	PB	2,3244065104	2,7378995539	4,3028206991
2	Var	4,3275249789	5,1792916968	8,3179757567
	MM	4,3275231005	5,1791713478	8,2631338210
	PB	4,3275253343	5,1793075143	8,3248819016
3	Var	6,5784019497	7,9424040035	12,9034930646
	MM	6,5783955979	7,9417651965	12,6223459874
	PB	6,5784035887	7,9424624079	12,9211429034
4	Var	9,0287787259	10,9635844065	17,9470638785
	MM	9,0287847244	10,9624910111	17,6889377150
	PB	9,0287691513	10,9633166408	17,8893390176
5	Var	11,6487207367	14,2031451886	23,3730829963
	MM	11,6487080496	14,2010837547	23,1120621444
	PB	11,6486904036	14,2023522434	23,2080076384

базисных функций использовались функции Лагерра (20), значение N в правой части (11) варьировалось от 10 до 80. Результаты суммирования методом моментов (ММ) для шести нижних состояний, V=0–5, приведены в таблице.

Для сравнения представлены также результаты вариационного расчета уровней энергии (Var) и результат суммирования методом Паде-Бореля (PB) с диагональным аппроксимантом Паде 20-го порядка. В таблице подчеркнуты цифры, отличающиеся от вариационного расчета, который рассматривался как «эталонный».

Из данных, приведенных в таблице видно, что для малых значений параметра возмущения (λ=0,01, слабая ангармоничность) все три расчета совпадают с точностью до 10^{-20}. Для значений параметра ангармоничности между 0,01 и 0,1 метод моментов дает существенно, на порядки, лучший результат, чем обычно используемый метод Паде-Бореля. Для λ=0,5, 1,0 и 1,0, что соответствует экстремально сильной ангармоничности, оба метода суммирования дают примерно одинаковую ошибку, которая возрастает до 1 % при увеличении степени возбуждения.

Заключение

Представлен новый метод суммирования расходящихся рядов теории возмущений, основанный на преобразовании рядов методом моментов. Функция меры определяется так, чтобы точно воспроизводить некоторое количество коэффициентов исходного ряда. Метод протестирован на известной задаче об ангармоническом осцилляторе. Проведено сравнение с результатами суммирования широко используемым методом Паде-Бореля. Из расчетов следует, что метод моментов с адаптируемой мерой дает более точные значения уровней при сильной ангармоничности. Для экстремально больших значений параметра возмущения, которые не реализуются в двухатомных молекулах, новый метод и метод Паде-Бореля дают одинаковые результаты. Задача суммирования расходящихся рядов теории возмущений может рассматриваться и как классическая проблема моментов. Представленный метод суммирования расходящихся рядов перспективен для определения уровней энергии квантовых систем даже при сильной расходимости рядов теории возмущений.

Авторы выражают благодарность Российскому Фонду Фундаментальных Исследований (грант 06-03-39014-ГФЕН_а) за финансовую поддержку работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде. – М.: Мир, 1986. – 502 с.
2. Харди Г. Расходящиеся ряды. – М.: Иностранная литература, 1948. – 504 с.
3. Simon B., Dicke A. Coupling Constant Analyticity for the Anharmonic Oscillator // Annals of Physics. – 1970. – V. 58. – P. 76–136.
4. Bender K.M., Wu T.T. Anharmonic oscillator // Phys. Rev. – 1969. – V. 184. – № 5. – P. 1231–1260.
5. Bender K.M., Wu T.T. Anharmonic oscillator. II A study of perturbation theory in large order // Phys. Rev. D. – 1973. – V. 7. – № 6. – P. 41–57.
6. Graffi S., Grecchi V., Turchetti G. Summation method for the perturbation series of the generalized anharmonic oscillators // Nuovo Cimento. – 1971. – V. 4B. – № 3. – P. 313–340.
7. Arteca G.A., Fernandez F.M., Castro E.A. Large-order perturbation theory and summation method in quantum mechanics. – Berlin: Springer, 1990. – 605 p.
8. Weniger E.J. Nonlinear sequence transformations for the acceleration of convergence and summation of divergent series // Computer Physics Reports. – 1989. – V. 10. – P. 189–371.
9. Суслов И.М. Расходящиеся ряды теории возмущений // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2005. – Т. 127. – № 6. – С. 1350–1402.
10. Липатов Л.Н. Расходимость ряда теории возмущений и квазиклассика // Журнал экспериментальной и теоретической физик. – 1977. – Т. 72. – № 2. – С. 411–414.
11. Scalas E., Viano G.A. The Hausdorff moments in statistic mechanics // J. Math. Phys. – 1993. – V. 34. – № 12. – P. 5781–-5800.
12. Cane E.O. Perturbation – Moment Method: Application to Band Structure of Impure Semiconductors // Phys. Rev. – 1963. – V. 131. – № 4. – P. 1532–1542.
13. Clauder J.R. Constructing coherent states through solution of Stieljes and Hausdorff moment problems // Phys. Rev. A. – 2001. – V. 64. – P. 013817.
14. Verscay E.R., Handy C.R. The perturbed two-dimensional oscillator: eigenvalues and infinite-field limits via continued fractions, renormalized perturbation theory and moment methods // J. Phys. A: Math. Gen. – 1989. – V. 22. – P. 823–834.

Поступила 06.07.2009 г.